



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Aug 30, 2020 – 01:07 PM BST

PDB ID : 4CG3
Title : Structural and functional studies on a thermostable polyethylene terephthalate degrading hydrolase from *Thermobifida fusca*
Authors : Roth, C.; Wei, R.; Oeser, T.; Then, J.; Foellner, C.; Zimmermann, W.; Straeter, N.
Deposited on : 2013-11-20
Resolution : 1.55 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

MolProbity : 4.02b-467
Mogul : 1.8.5 (274361), CSD as541be (2020)
Xtriage (Phenix) : 1.13
EDS : 2.13
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Refmac : 5.8.0158
CCP4 : 7.0.044 (Gargrove)
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.13

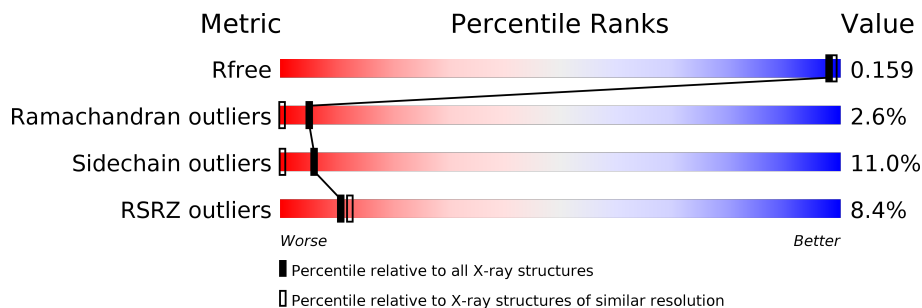
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 1.55 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
R_{free}	130704	1483 (1.56-1.56)
Ramachandran outliers	138981	1498 (1.56-1.56)
Sidechain outliers	138945	1495 (1.56-1.56)
RSRZ outliers	127900	1465 (1.56-1.56)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments on 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 $\leq 5\%$. The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the electron density. The numeric value is given above the bar.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	1-A	313	 8% 72% 8% •• 16%
1	10-A	313	 8% 74% 8% • 16%
1	11-A	313	 8% 72% 11% • 16%
1	12-A	313	 8% 73% 9% •• 16%
1	13-A	313	 8% 74% 9% • 16%
1	14-A	313	 8% 72% 10% •• 16%
1	15-A	313	 8% 75% 5% •• 16%

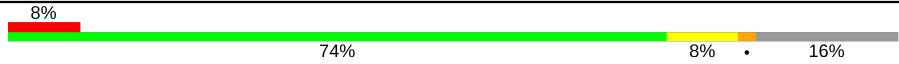
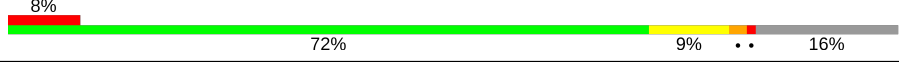



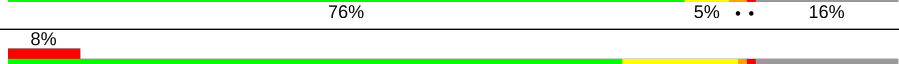
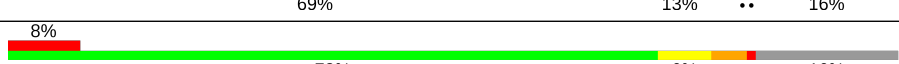
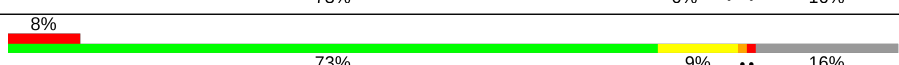
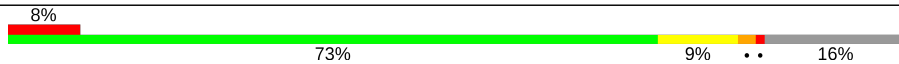


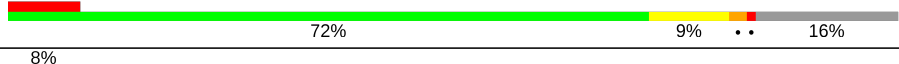

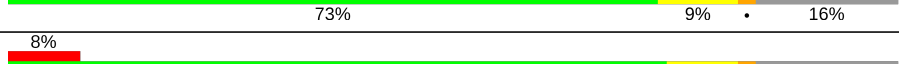
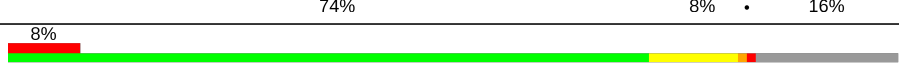










Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	16-A	313	
1	17-A	313	
1	18-A	313	
1	19-A	313	
1	2-A	313	
1	20-A	313	
1	21-A	313	
1	22-A	313	
1	23-A	313	
1	24-A	313	
1	25-A	313	
1	26-A	313	
1	27-A	313	
1	28-A	313	
1	29-A	313	
1	3-A	313	
1	30-A	313	
1	31-A	313	
1	32-A	313	
1	33-A	313	
1	34-A	313	
1	35-A	313	
1	36-A	313	
1	37-A	313	
1	38-A	313	

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	39-A	313	
1	4-A	313	
1	40-A	313	
1	41-A	313	
1	42-A	313	
1	43-A	313	
1	44-A	313	
1	45-A	313	
1	46-A	313	
1	47-A	313	
1	48-A	313	
1	49-A	313	
1	5-A	313	
1	50-A	313	
1	51-A	313	
1	52-A	313	
1	53-A	313	
1	54-A	313	
1	55-A	313	
1	56-A	313	
1	57-A	313	
1	58-A	313	
1	59-A	313	
1	6-A	313	
1	60-A	313	

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Length	Quality of chain			
1	61-A	313	8%	74%	7%	16%
1	62-A	313	8%	72%	8%	16%
1	63-A	313	8%	76%	6%	16%
1	64-A	313	8%	75%	7%	16%
1	65-A	313	8%	73%	9%	16%
1	66-A	313	8%	73%	9%	16%
1	67-A	313	8%	75%	6%	16%
1	68-A	313	8%	77%	6%	16%
1	69-A	313	8%	77%	6%	16%
1	7-A	313	8%	74%	7%	16%
1	70-A	313	8%	73%	9%	16%
1	71-A	313	8%	76%	5%	16%
1	72-A	313	8%	72%	9%	16%
1	73-A	313	8%	71%	10%	16%
1	74-A	313	8%	75%	7%	16%
1	75-A	313	8%	72%	10%	16%
1	76-A	313	8%	73%	9%	16%
1	77-A	313	8%	73%	9%	16%
1	8-A	313	8%	75%	7%	16%
1	9-A	313	8%	72%	10%	16%

The following table lists non-polymeric compounds, carbohydrate monomers and non-standard residues in protein, DNA, RNA chains that are outliers for geometric or electron-density-fit criteria:

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
2	SO4	1-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	10-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	11-A	1001	-	-	-	X

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
2	SO4	12-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	13-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	14-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	15-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	16-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	17-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	18-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	19-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	2-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	20-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	21-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	22-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	23-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	24-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	25-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	26-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	27-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	28-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	29-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	3-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	30-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	31-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	32-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	33-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	34-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	35-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	36-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	37-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	38-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	39-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	4-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	40-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	41-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	42-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	43-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	44-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	45-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	46-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	47-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	48-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	49-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	5-A	1001	-	-	-	X

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
2	SO4	50-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	51-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	52-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	53-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	54-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	55-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	56-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	57-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	58-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	59-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	6-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	60-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	61-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	62-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	63-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	64-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	65-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	66-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	67-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	68-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	69-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	7-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	70-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	71-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	72-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	73-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	74-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	75-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	76-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	77-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	8-A	1001	-	-	-	X
2	SO4	9-A	1001	-	-	-	X

2 Entry composition

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 314292 atoms, of which 151613 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 CUTINASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace	
			Total	C	H	N	O				S
1	1-A	263	3980	1269	1969	352	385	5	0	0	0
1	2-A	263	3980	1269	1969	352	385	5	0	0	0
1	3-A	263	3980	1269	1969	352	385	5	0	0	0
1	4-A	263	3980	1269	1969	352	385	5	0	0	0
1	5-A	263	3980	1269	1969	352	385	5	0	0	0
1	6-A	263	3980	1269	1969	352	385	5	0	0	0
1	7-A	263	3980	1269	1969	352	385	5	0	0	0
1	8-A	263	3980	1269	1969	352	385	5	0	0	0
1	9-A	263	3980	1269	1969	352	385	5	0	0	0
1	10-A	263	3980	1269	1969	352	385	5	0	0	0
1	11-A	263	3980	1269	1969	352	385	5	0	0	0
1	12-A	263	3980	1269	1969	352	385	5	0	0	0
1	13-A	263	3980	1269	1969	352	385	5	0	0	0
1	14-A	263	3980	1269	1969	352	385	5	0	0	0
1	15-A	263	3980	1269	1969	352	385	5	0	0	0
1	16-A	263	3980	1269	1969	352	385	5	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace	
1	17-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	18-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	19-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	20-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	21-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	22-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	23-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	24-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	25-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	26-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	27-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	28-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	29-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	30-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	31-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	32-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	33-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	34-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	35-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	36-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	37-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace	
1	38-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	39-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	40-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	41-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	42-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	43-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	44-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	45-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	46-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	47-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	48-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	49-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	50-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	51-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	52-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	53-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	54-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	55-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	56-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	57-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			
1	58-A	263	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			3980	1269	1969	352	385	5			

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace	
			Total	C	H	N	O				S
1	59-A	263	Total 3980	C 1269	H 1969	N 352	O 385	S 5	0	0	0
1	60-A	263	Total 3980	C 1269	H 1969	N 352	O 385	S 5	0	0	0
1	61-A	263	Total 3980	C 1269	H 1969	N 352	O 385	S 5	0	0	0
1	62-A	263	Total 3980	C 1269	H 1969	N 352	O 385	S 5	0	0	0
1	63-A	263	Total 3980	C 1269	H 1969	N 352	O 385	S 5	0	0	0
1	64-A	263	Total 3980	C 1269	H 1969	N 352	O 385	S 5	0	0	0
1	65-A	263	Total 3980	C 1269	H 1969	N 352	O 385	S 5	0	0	0
1	66-A	263	Total 3980	C 1269	H 1969	N 352	O 385	S 5	0	0	0
1	67-A	263	Total 3980	C 1269	H 1969	N 352	O 385	S 5	0	0	0
1	68-A	263	Total 3980	C 1269	H 1969	N 352	O 385	S 5	0	0	0
1	69-A	263	Total 3980	C 1269	H 1969	N 352	O 385	S 5	0	0	0
1	70-A	263	Total 3980	C 1269	H 1969	N 352	O 385	S 5	0	0	0
1	71-A	263	Total 3980	C 1269	H 1969	N 352	O 385	S 5	0	0	0
1	72-A	263	Total 3980	C 1269	H 1969	N 352	O 385	S 5	0	0	0
1	73-A	263	Total 3980	C 1269	H 1969	N 352	O 385	S 5	0	0	0
1	74-A	263	Total 3980	C 1269	H 1969	N 352	O 385	S 5	0	0	0
1	75-A	263	Total 3980	C 1269	H 1969	N 352	O 385	S 5	0	0	0
1	76-A	263	Total 3980	C 1269	H 1969	N 352	O 385	S 5	0	0	0
1	77-A	263	Total 3980	C 1269	H 1969	N 352	O 385	S 5	0	0	0

There are 52 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-30	MET	-	expression tag	UNP E5BBQ3

Continued on next page...

Continued from previous page...

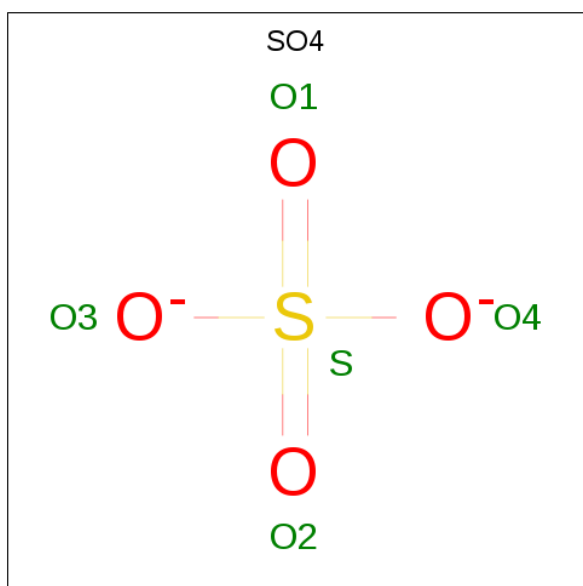
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-29	LYS	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-28	TYR	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-27	LEU	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-26	LEU	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-25	PRO	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-24	THR	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-23	ALA	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-22	ALA	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-21	ALA	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-20	GLY	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-19	LEU	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-18	LEU	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-17	LEU	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-16	LEU	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-15	ALA	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-14	ALA	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-13	GLN	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-12	PRO	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-11	ALA	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-10	MET	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-9	ALA	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-8	MET	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-7	ASP	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-6	ILE	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-5	GLY	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-4	ILE	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-3	ASN	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-2	SER	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	-1	ASP	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	0	PRO	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	262	TYR	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	263	PRO	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	264	ASN	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	265	SER	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	266	SER	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	267	SER	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	268	VAL	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	269	ASP	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	270	LYS	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	271	LEU	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	272	ALA	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	273	ALA	-	expression tag	UNP E5BBQ3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	274	ALA	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	275	LEU	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	276	GLU	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	277	HIS	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	278	HIS	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	279	HIS	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	280	HIS	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	281	HIS	-	expression tag	UNP E5BBQ3
A	282	HIS	-	expression tag	UNP E5BBQ3

- Molecule 2 is SULFATE ION (three-letter code: SO4) (formula: O₄S).



Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
2	1-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	2-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	3-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	4-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	5-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	6-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	7-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
			Total	O	S		
2	8-A	1	5	4	1	0	0
2	9-A	1	5	4	1	0	0
2	10-A	1	5	4	1	0	0
2	11-A	1	5	4	1	0	0
2	12-A	1	5	4	1	0	0
2	13-A	1	5	4	1	0	0
2	14-A	1	5	4	1	0	0
2	15-A	1	5	4	1	0	0
2	16-A	1	5	4	1	0	0
2	17-A	1	5	4	1	0	0
2	18-A	1	5	4	1	0	0
2	19-A	1	5	4	1	0	0
2	20-A	1	5	4	1	0	0
2	21-A	1	5	4	1	0	0
2	22-A	1	5	4	1	0	0
2	23-A	1	5	4	1	0	0
2	24-A	1	5	4	1	0	0
2	25-A	1	5	4	1	0	0
2	26-A	1	5	4	1	0	0
2	27-A	1	5	4	1	0	0
2	28-A	1	5	4	1	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
			Total	O	S		
2	29-A	1	5	4	1	0	0
2	30-A	1	5	4	1	0	0
2	31-A	1	5	4	1	0	0
2	32-A	1	5	4	1	0	0
2	33-A	1	5	4	1	0	0
2	34-A	1	5	4	1	0	0
2	35-A	1	5	4	1	0	0
2	36-A	1	5	4	1	0	0
2	37-A	1	5	4	1	0	0
2	38-A	1	5	4	1	0	0
2	39-A	1	5	4	1	0	0
2	40-A	1	5	4	1	0	0
2	41-A	1	5	4	1	0	0
2	42-A	1	5	4	1	0	0
2	43-A	1	5	4	1	0	0
2	44-A	1	5	4	1	0	0
2	45-A	1	5	4	1	0	0
2	46-A	1	5	4	1	0	0
2	47-A	1	5	4	1	0	0
2	48-A	1	5	4	1	0	0
2	49-A	1	5	4	1	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
			Total	O	S		
2	50-A	1	5	4	1	0	0
2	51-A	1	5	4	1	0	0
2	52-A	1	5	4	1	0	0
2	53-A	1	5	4	1	0	0
2	54-A	1	5	4	1	0	0
2	55-A	1	5	4	1	0	0
2	56-A	1	5	4	1	0	0
2	57-A	1	5	4	1	0	0
2	58-A	1	5	4	1	0	0
2	59-A	1	5	4	1	0	0
2	60-A	1	5	4	1	0	0
2	61-A	1	5	4	1	0	0
2	62-A	1	5	4	1	0	0
2	63-A	1	5	4	1	0	0
2	64-A	1	5	4	1	0	0
2	65-A	1	5	4	1	0	0
2	66-A	1	5	4	1	0	0
2	67-A	1	5	4	1	0	0
2	68-A	1	5	4	1	0	0
2	69-A	1	5	4	1	0	0
2	70-A	1	5	4	1	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
2	71-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	72-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	73-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	74-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	75-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	76-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	77-A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		

- Molecule 3 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	1-A	99	Total	O	0	0
			99	99		
3	2-A	101	Total	O	0	1
			102	102		
3	3-A	98	Total	O	0	0
			98	98		
3	4-A	85	Total	O	0	0
			85	85		
3	5-A	97	Total	O	0	1
			98	98		
3	6-A	98	Total	O	0	1
			99	99		
3	7-A	98	Total	O	0	0
			98	98		
3	8-A	100	Total	O	0	1
			101	101		
3	9-A	95	Total	O	0	0
			95	95		
3	10-A	90	Total	O	0	0
			90	90		
3	11-A	102	Total	O	0	1
			103	103		
3	12-A	97	Total	O	0	0
			97	97		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms	ZeroOcc	AltConf
3	13-A	87	Total O 87 87	0	0
3	14-A	89	Total O 90 90	0	1
3	15-A	111	Total O 112 112	0	1
3	16-A	93	Total O 93 93	0	0
3	17-A	82	Total O 82 82	0	0
3	18-A	88	Total O 89 89	0	1
3	19-A	89	Total O 89 89	0	0
3	20-A	102	Total O 103 103	0	1
3	21-A	101	Total O 101 101	0	0
3	22-A	83	Total O 83 83	0	0
3	23-A	102	Total O 103 103	0	1
3	24-A	98	Total O 98 98	0	0
3	25-A	98	Total O 99 99	0	1
3	26-A	85	Total O 85 85	0	0
3	27-A	99	Total O 100 100	0	1
3	28-A	103	Total O 104 104	0	1
3	29-A	104	Total O 105 105	0	1
3	30-A	94	Total O 94 94	0	0
3	31-A	91	Total O 91 91	0	0
3	32-A	95	Total O 96 96	0	1
3	33-A	90	Total O 90 90	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms	ZeroOcc	AltConf
3	34-A	93	Total O 94 94	0	1
3	35-A	97	Total O 98 98	0	1
3	36-A	98	Total O 98 98	0	0
3	37-A	97	Total O 97 97	0	0
3	38-A	91	Total O 91 91	0	0
3	39-A	103	Total O 104 104	0	1
3	40-A	89	Total O 89 89	0	0
3	41-A	103	Total O 104 104	0	1
3	42-A	111	Total O 112 112	0	1
3	43-A	102	Total O 102 102	0	0
3	44-A	83	Total O 83 83	0	0
3	45-A	95	Total O 96 96	0	1
3	46-A	98	Total O 99 99	0	1
3	47-A	99	Total O 100 100	0	1
3	48-A	83	Total O 83 83	0	0
3	49-A	92	Total O 93 93	0	1
3	50-A	94	Total O 95 95	0	1
3	51-A	98	Total O 99 99	0	1
3	52-A	98	Total O 98 98	0	0
3	53-A	90	Total O 90 90	0	0
3	54-A	94	Total O 95 95	0	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms	ZeroOcc	AltConf
3	55-A	92	Total O 92 92	0	0
3	56-A	94	Total O 95 95	0	1
3	57-A	96	Total O 97 97	0	1
3	58-A	91	Total O 91 91	0	0
3	59-A	88	Total O 88 88	0	0
3	60-A	97	Total O 98 98	0	1
3	61-A	112	Total O 113 113	0	1
3	62-A	103	Total O 103 103	0	0
3	63-A	106	Total O 107 107	0	1
3	64-A	100	Total O 100 100	0	0
3	65-A	88	Total O 88 88	0	0
3	66-A	103	Total O 104 104	0	1
3	67-A	102	Total O 102 102	0	0
3	68-A	104	Total O 105 105	0	1
3	69-A	104	Total O 104 104	0	0
3	70-A	103	Total O 103 103	0	0
3	71-A	107	Total O 108 108	0	1
3	72-A	101	Total O 101 101	0	0
3	73-A	96	Total O 96 96	0	0
3	74-A	95	Total O 95 95	0	0
3	75-A	88	Total O 88 88	0	0

Continued on next page...

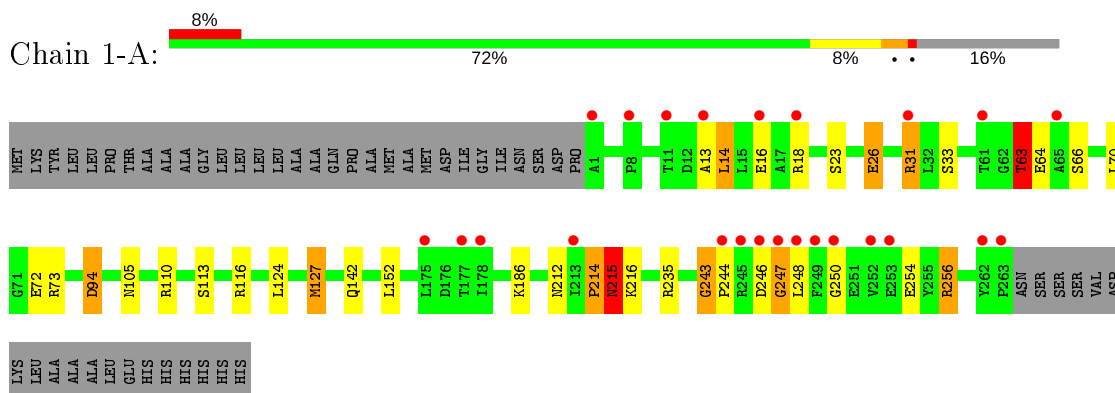
Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	76-A	88	Total 88	O 88	0	0
3	77-A	101	Total 102	O 102	0	1

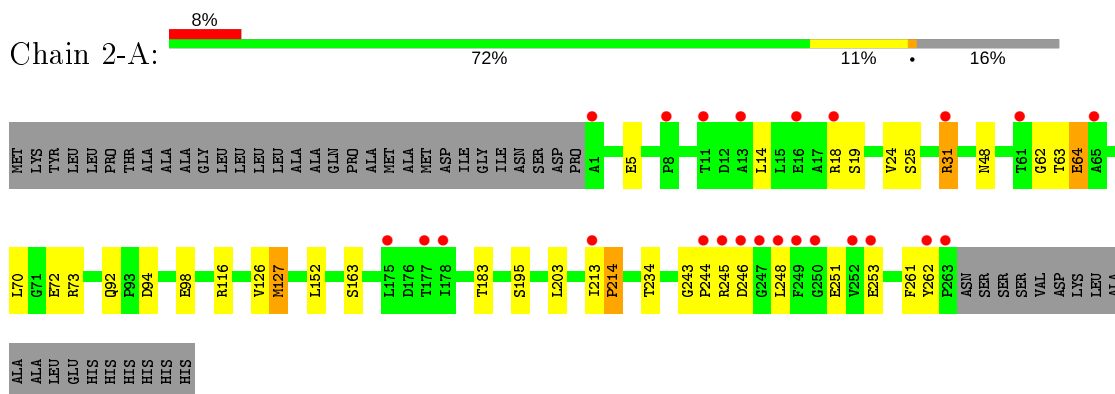
3 Residue-property plots [i](#)

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 and electron density. 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. A red dot above a residue indicates a poor fit to the electron density ($RSRZ > 2$). 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.

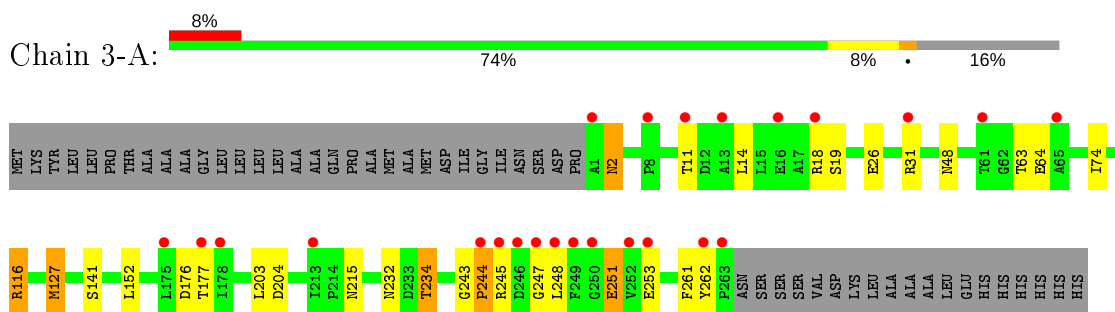
- Molecule 1: CUTINASE



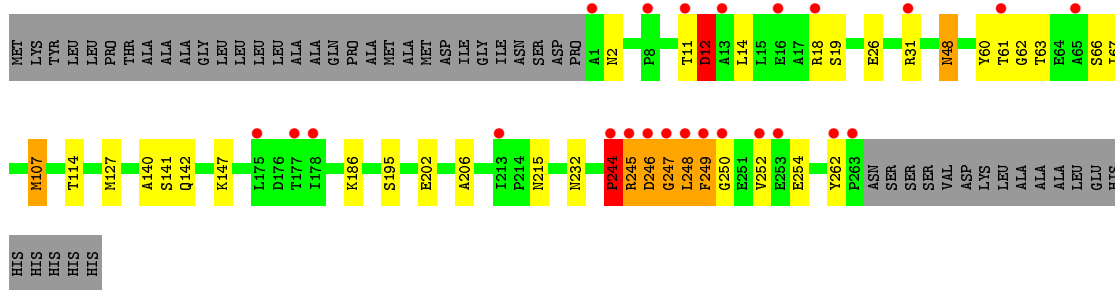
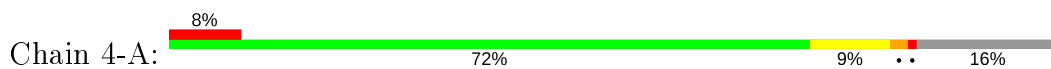
- Molecule 1: CUTINASE



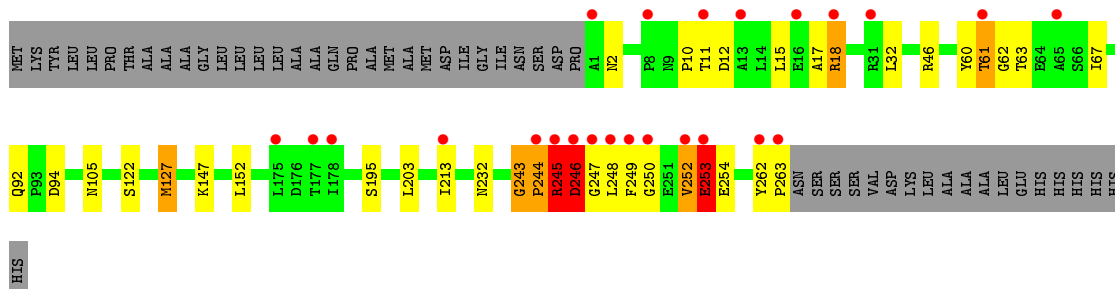
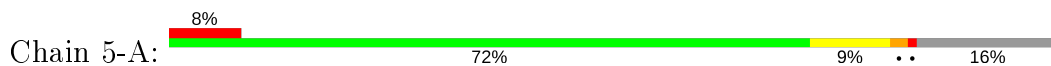
- Molecule 1: CUTINASE



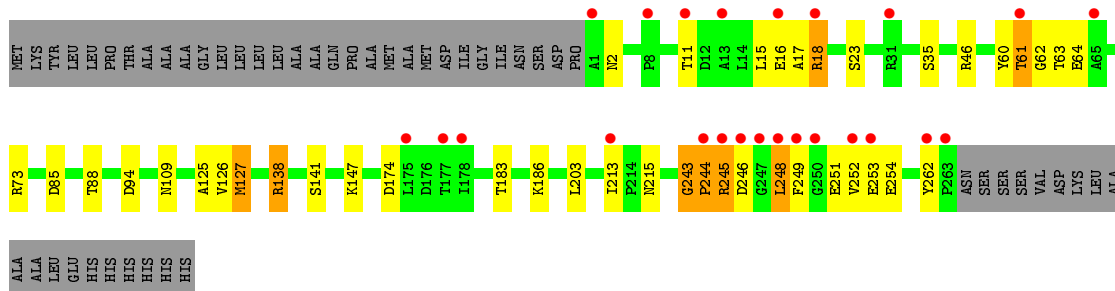
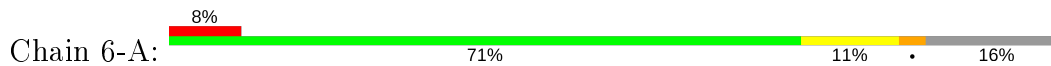
- Molecule 1: CUTINASE



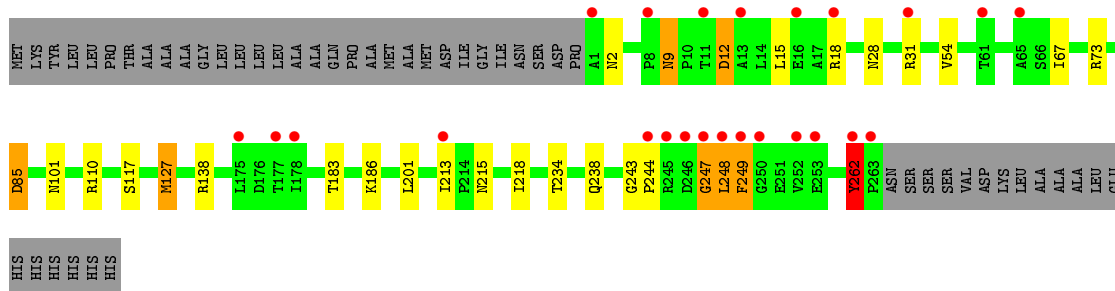
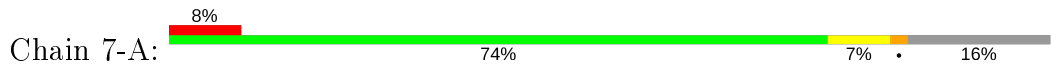
- Molecule 1: CUTINASE



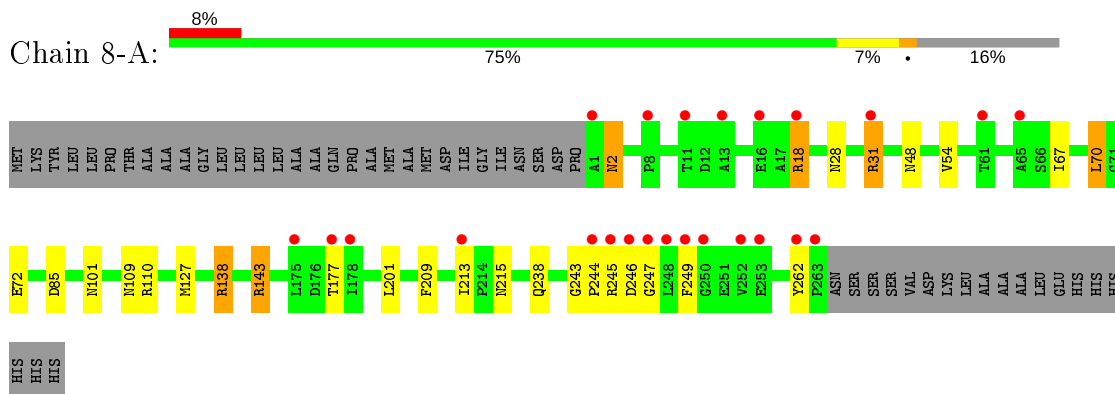
- Molecule 1: CUTINASE



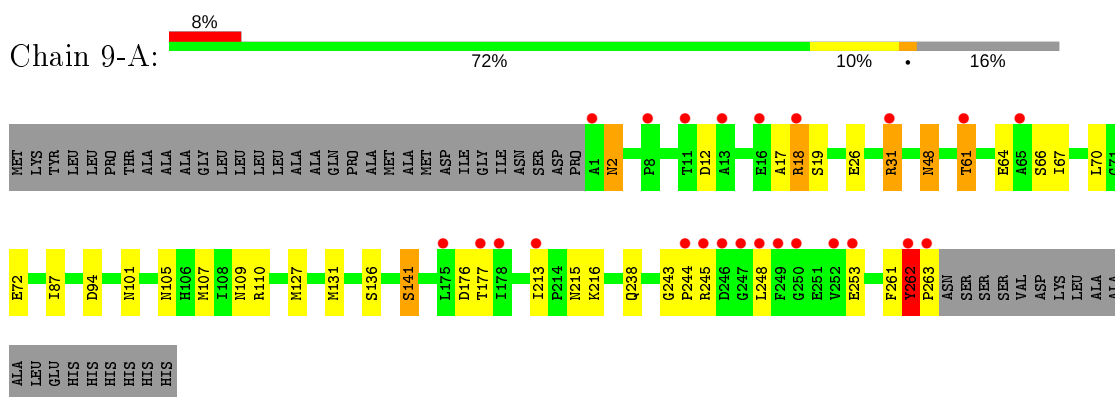
- Molecule 1: CUTINASE



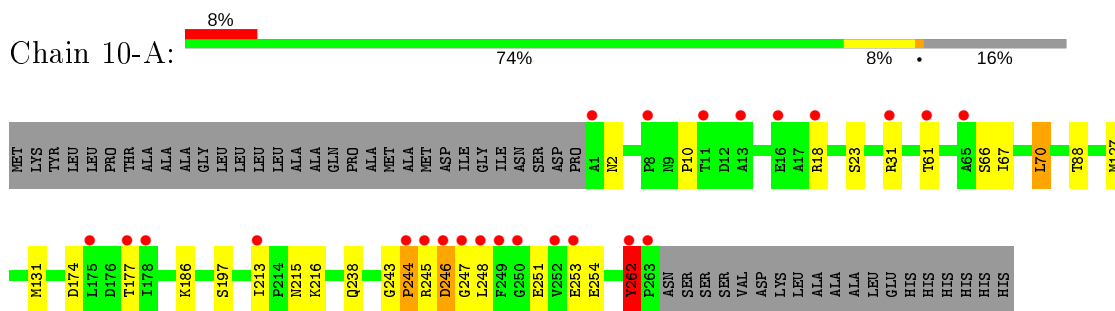
- Molecule 1: CUTINASE



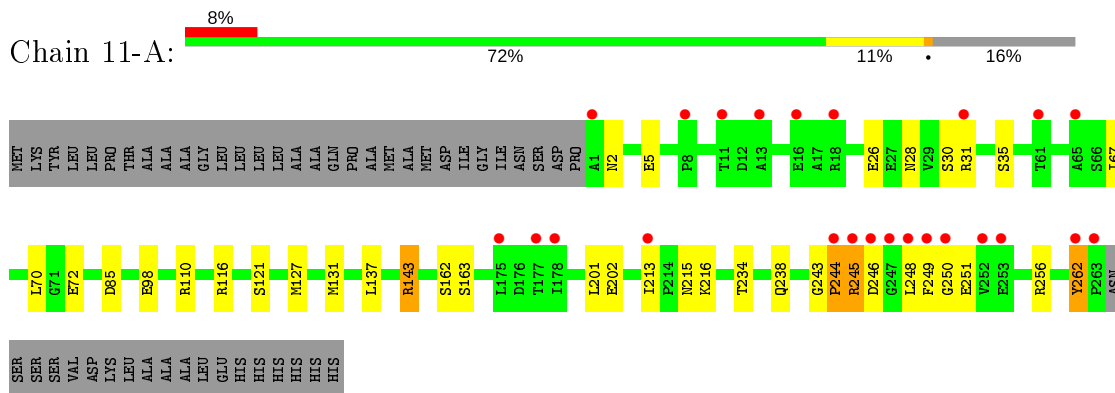
- Molecule 1: CUTINASE



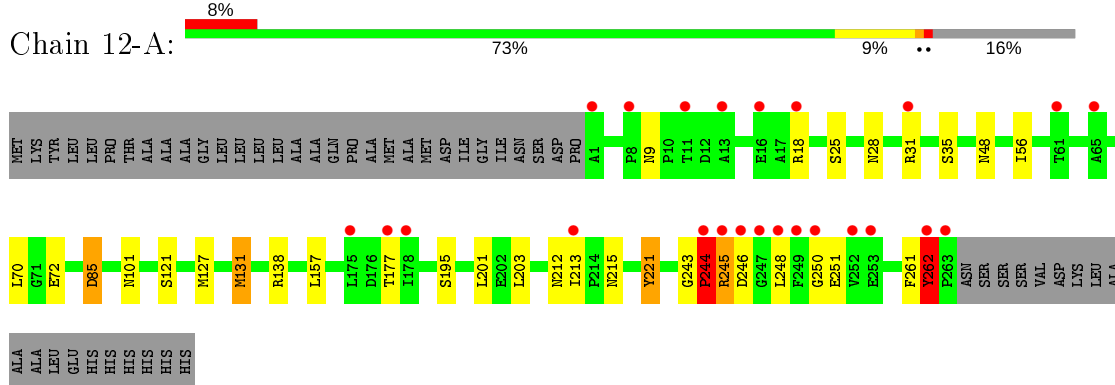
- Molecule 1: CUTINASE



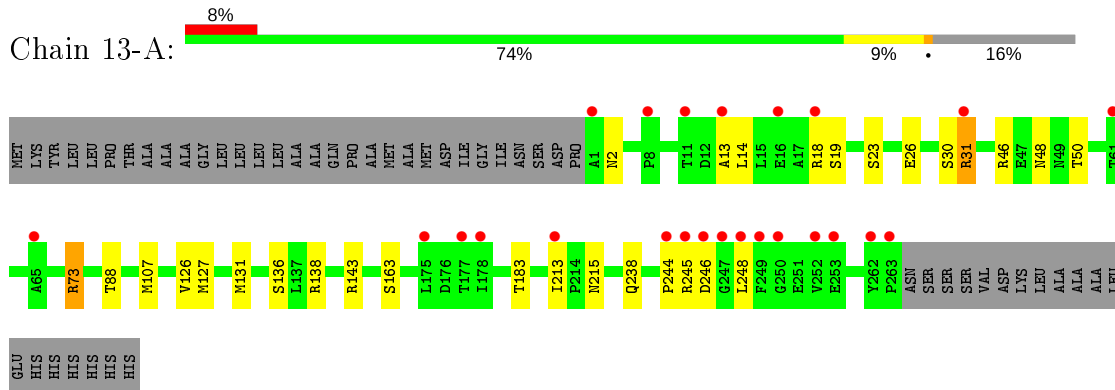
- Molecule 1: CUTINASE



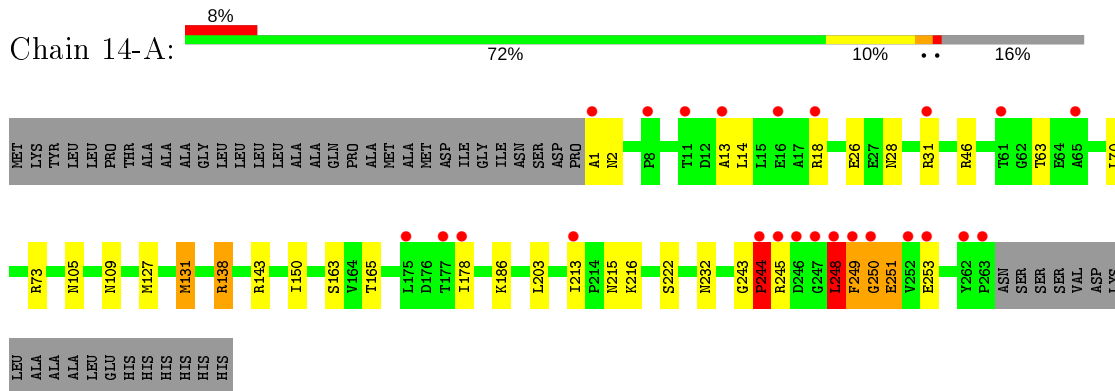
- Molecule 1: CUTINASE



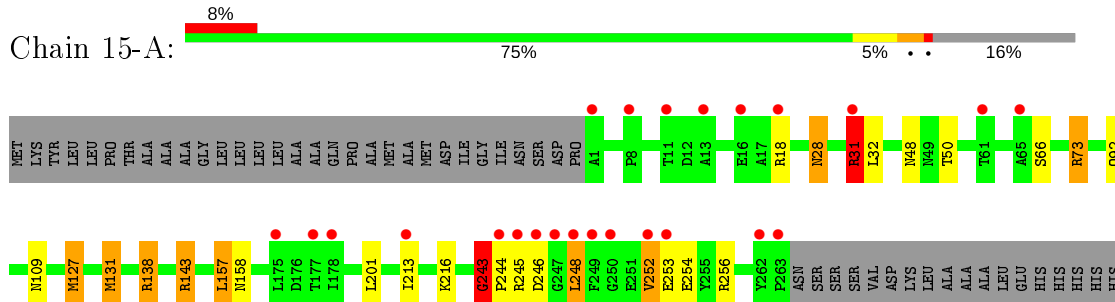
- Molecule 1: CUTINASE



- Molecule 1: CUTINASE

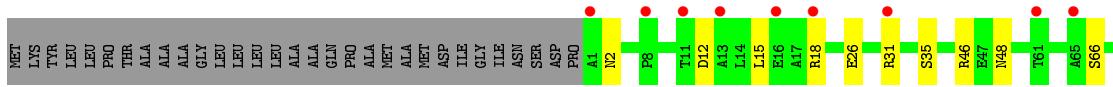
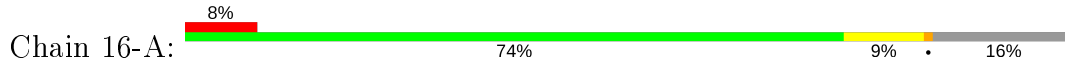


- Molecule 1: CUTINASE



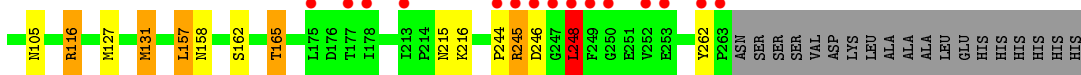
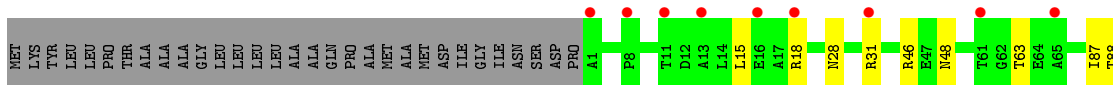
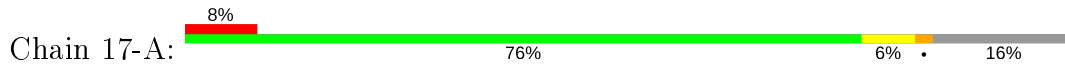
HIS

• Molecule 1: CUTINASE

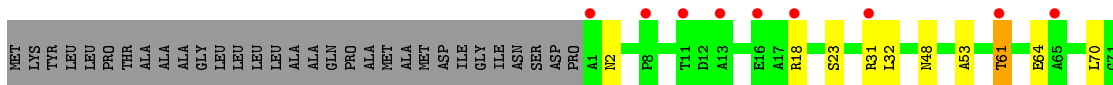
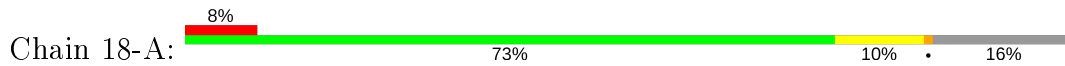


HIS
HIS
HIS

• Molecule 1: CUTINASE

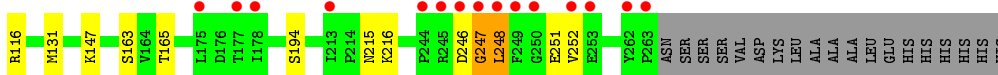
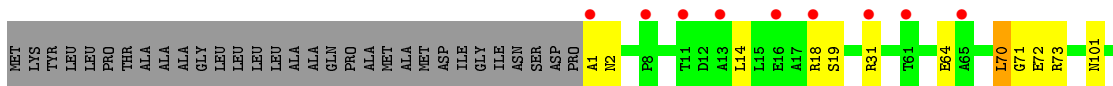
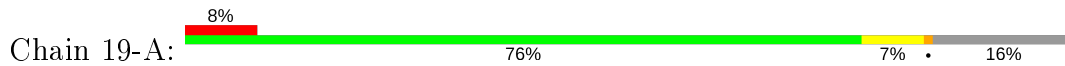


• Molecule 1: CUTINASE

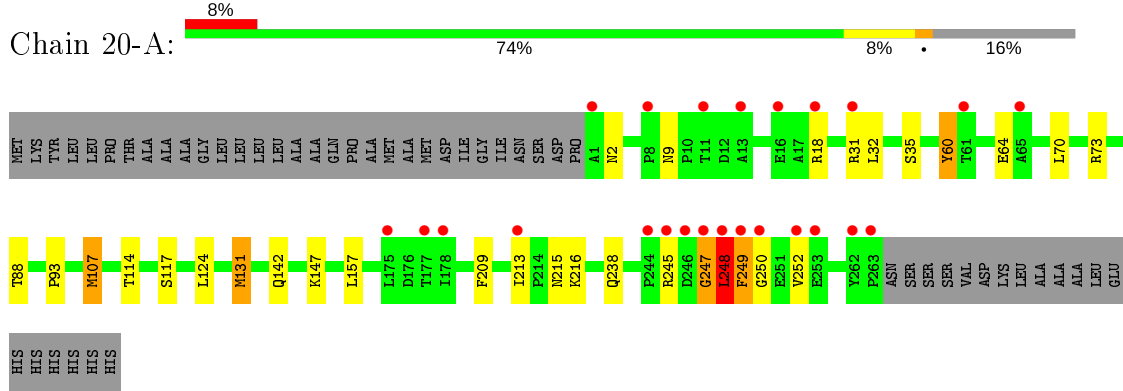


ALA
LEU
GLU
HIS
HIS
HIS
HIS
HIS

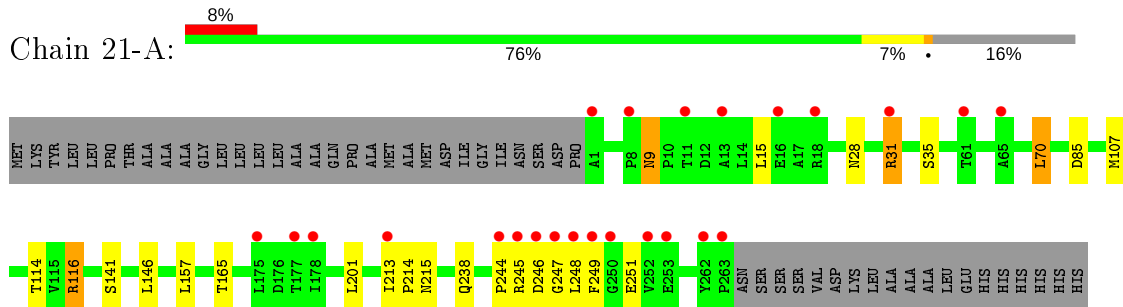
• Molecule 1: CUTINASE



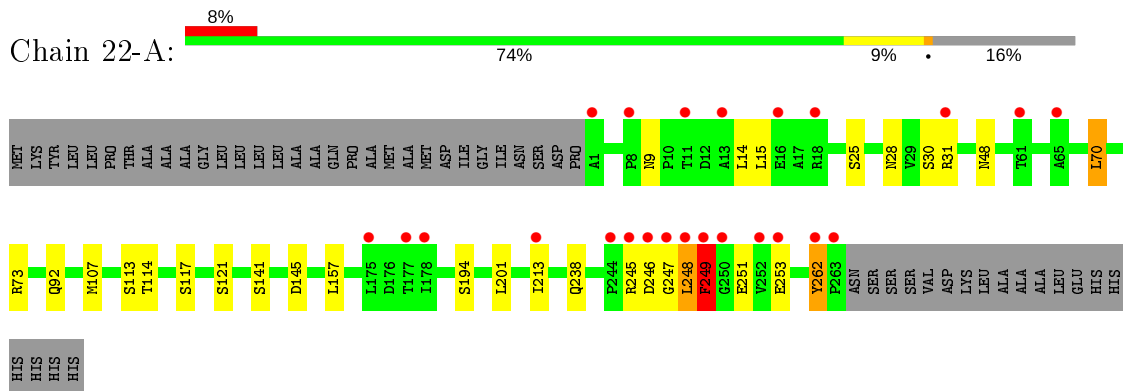
• Molecule 1: CUTINASE



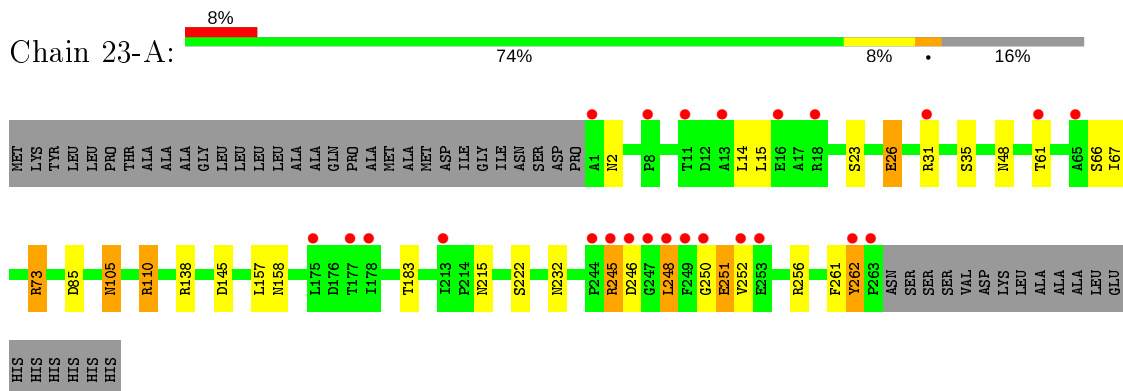
• Molecule 1: CUTINASE



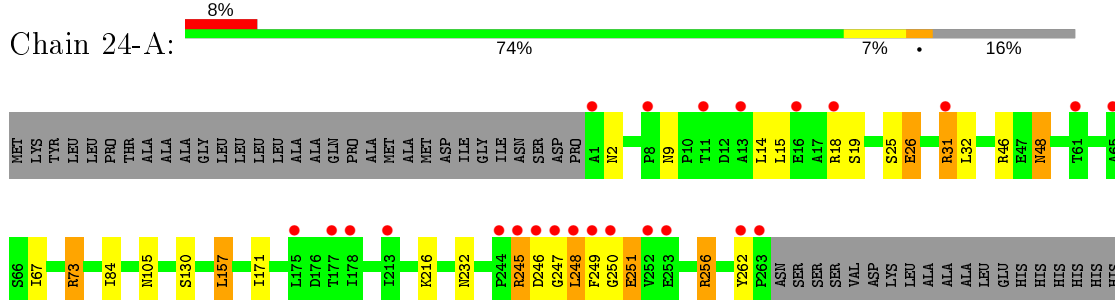
• Molecule 1: CUTINASE



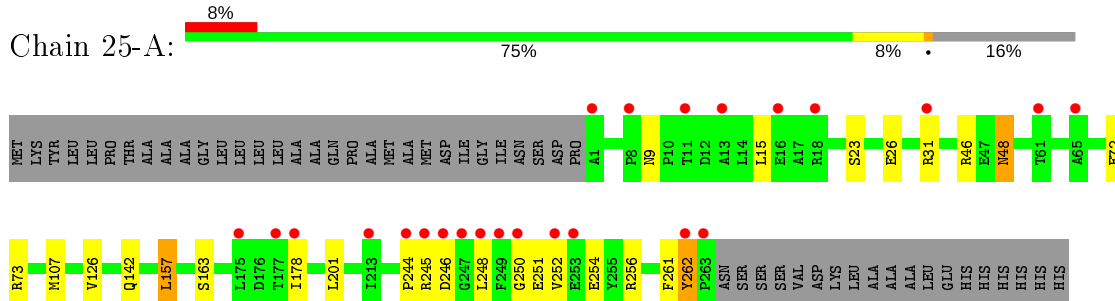
• Molecule 1: CUTINASE



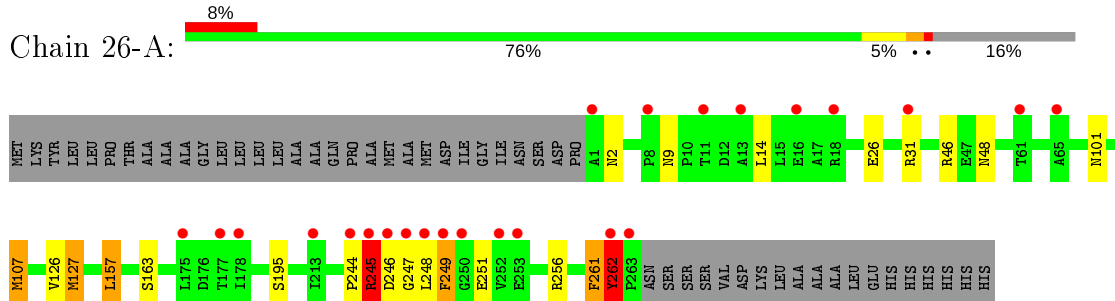
- Molecule 1: CUTINASE



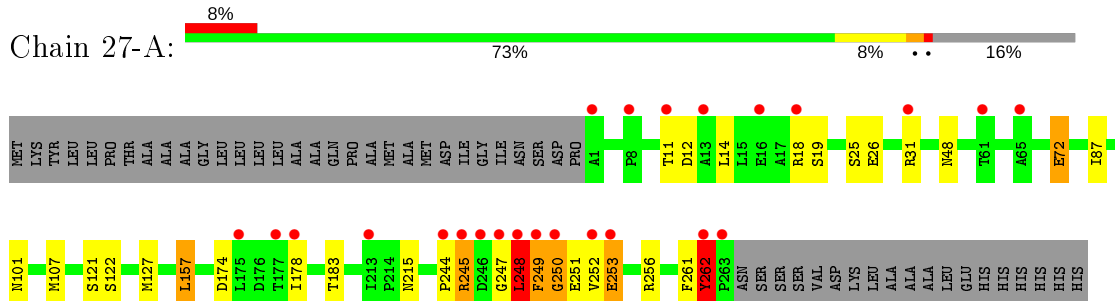
- Molecule 1: CUTINASE



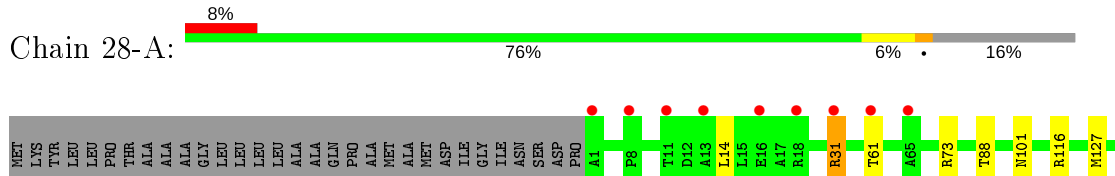
- Molecule 1: CUTINASE

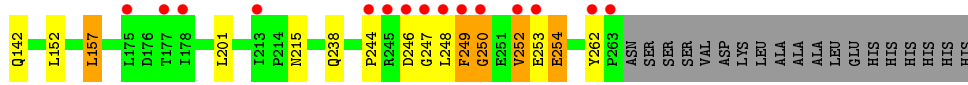


- Molecule 1: CUTINASE

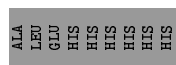
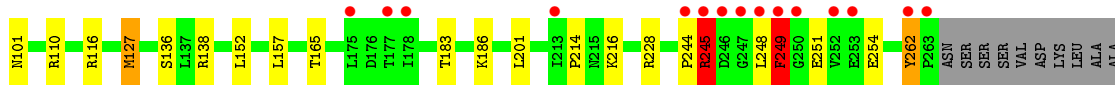
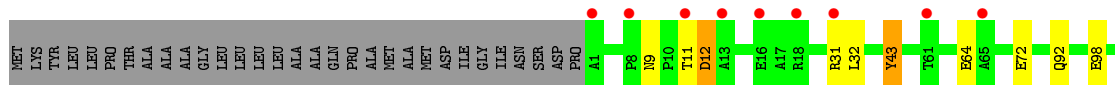
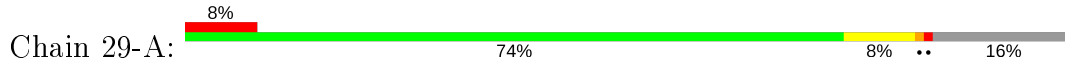


- Molecule 1: CUTINASE

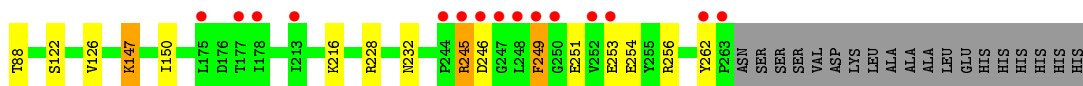
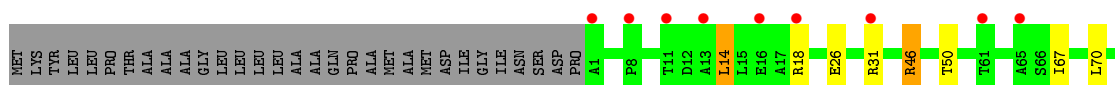
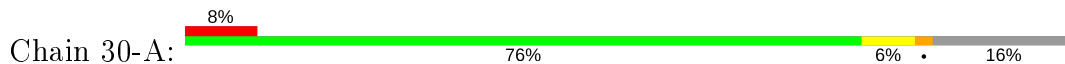




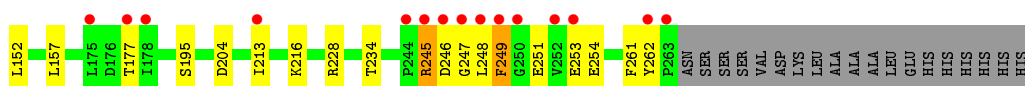
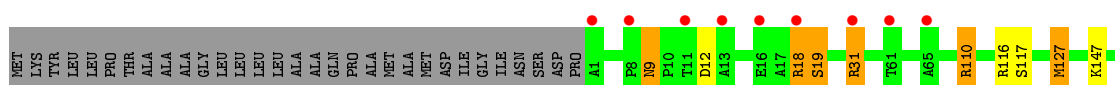
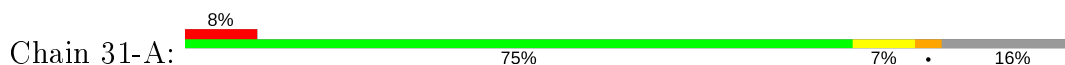
• Molecule 1: CUTINASE



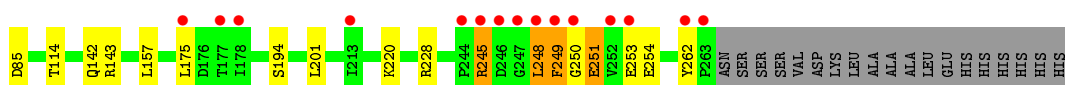
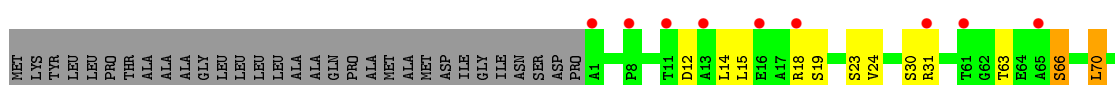
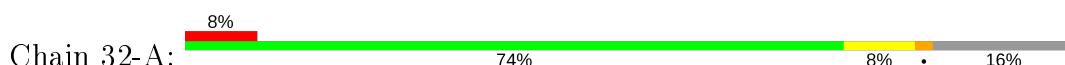
• Molecule 1: CUTINASE



• Molecule 1: CUTINASE



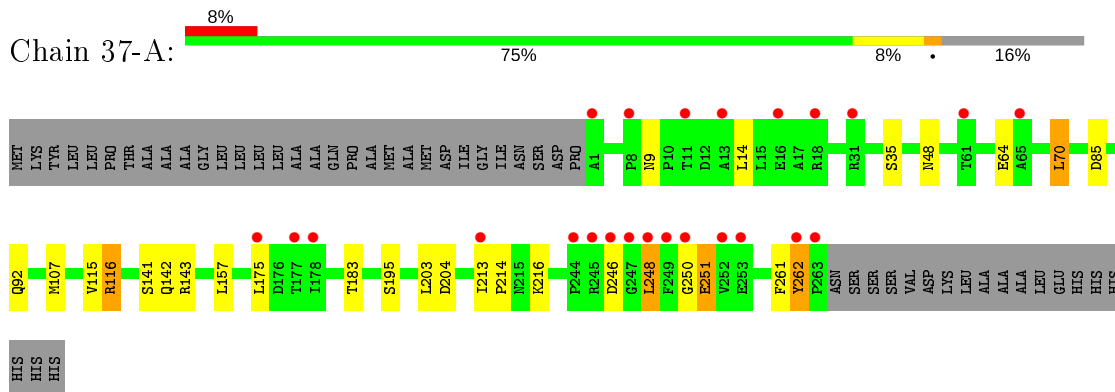
• Molecule 1: CUTINASE



• Molecule 1: CUTINASE

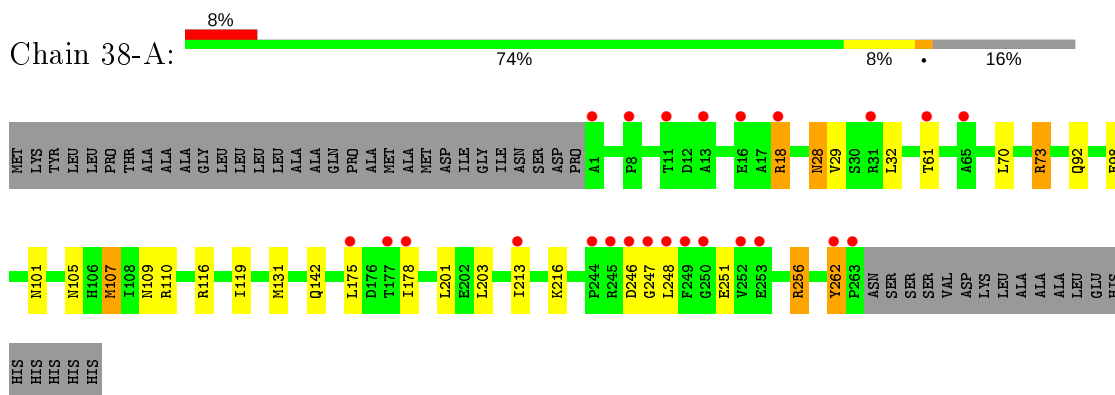
- Molecule 1: CUTINASE

Chain 37-A:



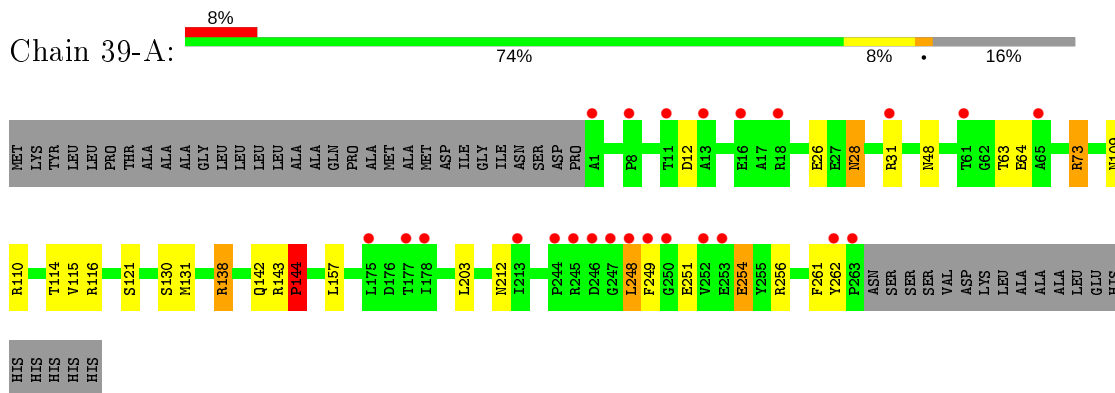
- Molecule 1: CUTINASE

Chain 38-A:



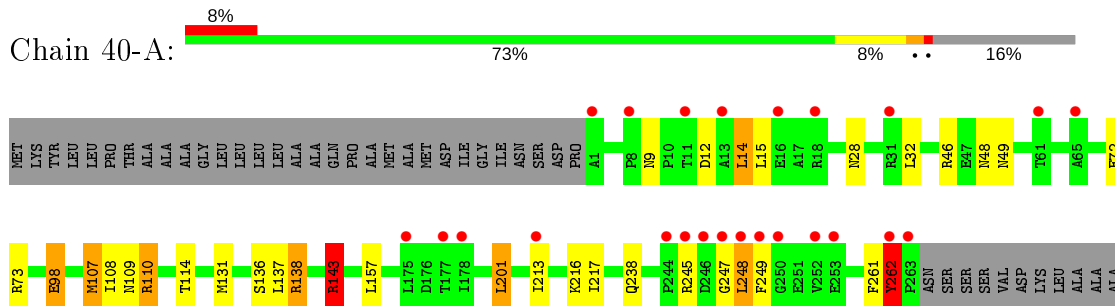
- Molecule 1: CUTINASE

Chain 39-A:



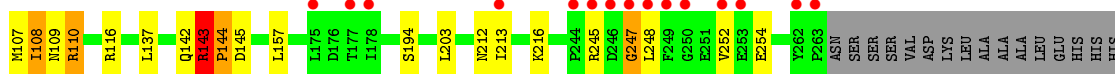
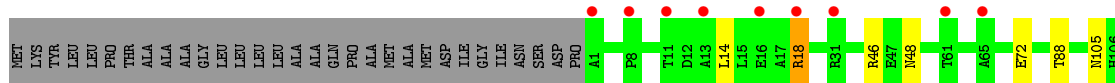
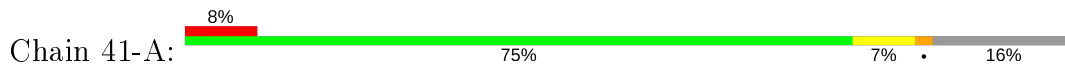
- Molecule 1: CUTINASE

Chain 40-A:



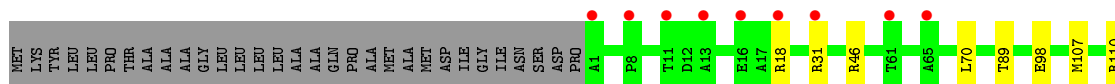
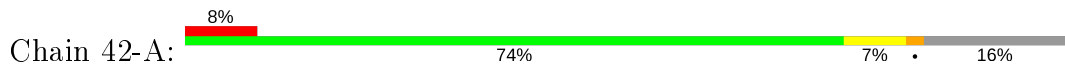
LEU
GLU
HIS
HIS
HIS
HIS
HIS
HIS

• Molecule 1: CUTINASE



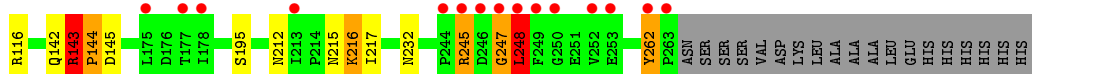
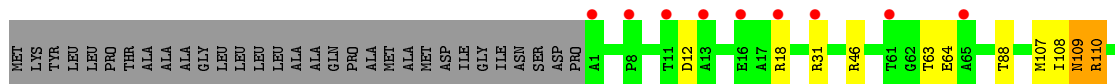
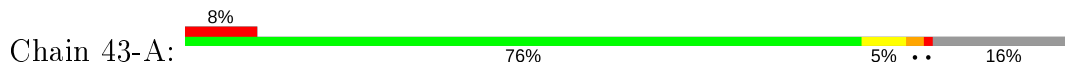
HIS
HIS
HIS

• Molecule 1: CUTINASE

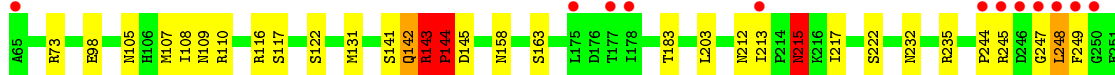
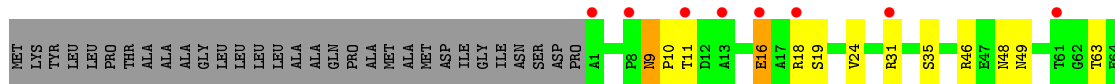
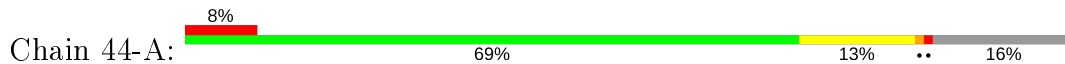


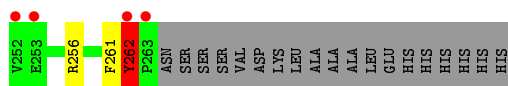
GLU
HIS
HIS
HIS
HIS
HIS

• Molecule 1: CUTINASE

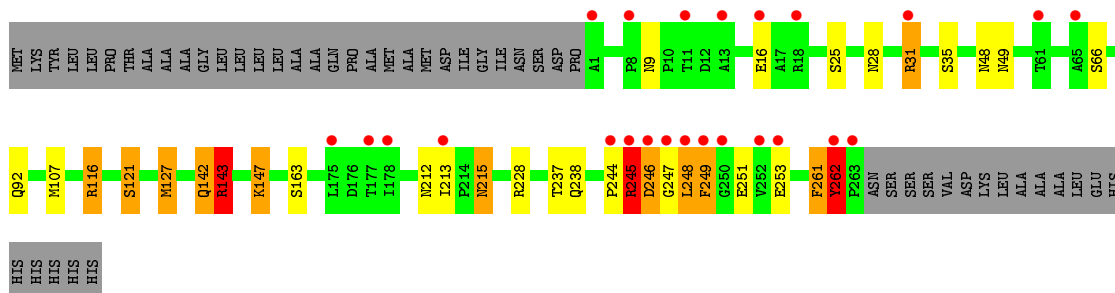
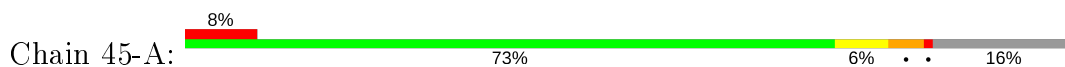


• Molecule 1: CUTINASE

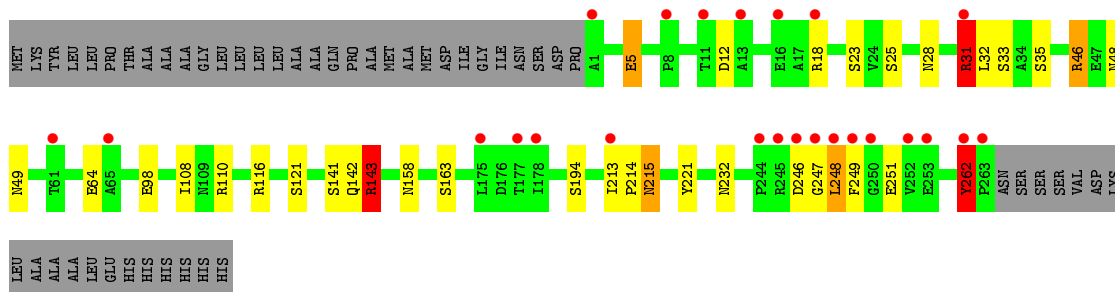
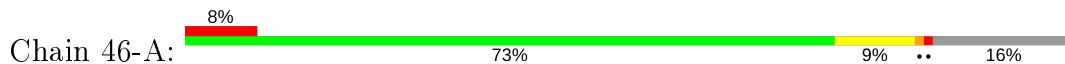




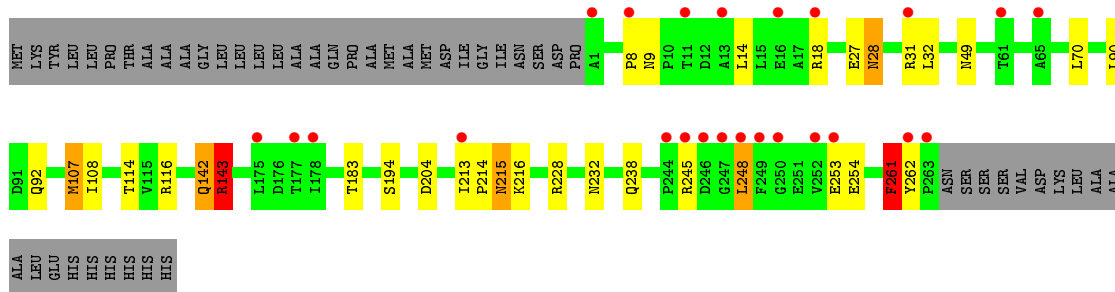
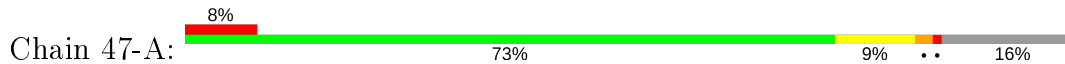
• Molecule 1: CUTINASE



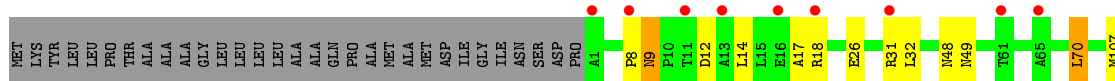
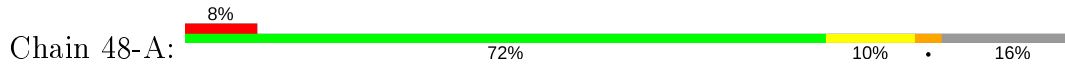
• Molecule 1: CUTINASE

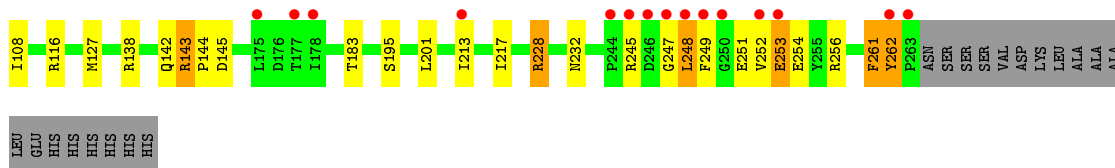


• Molecule 1: CUTINASE

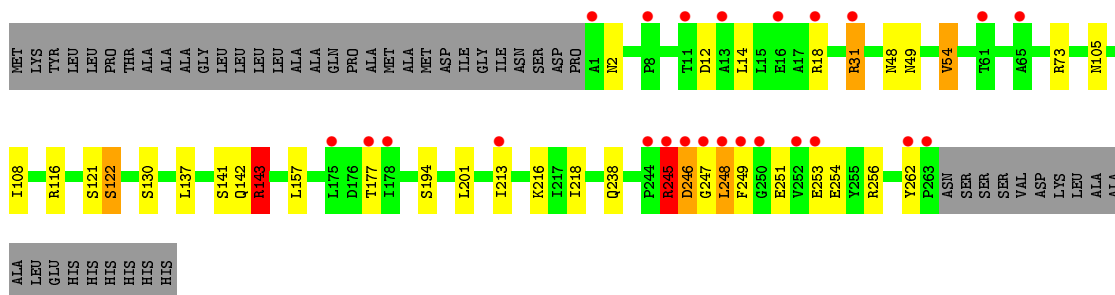
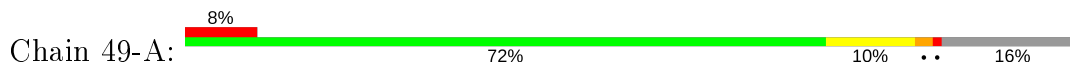


• Molecule 1: CUTINASE

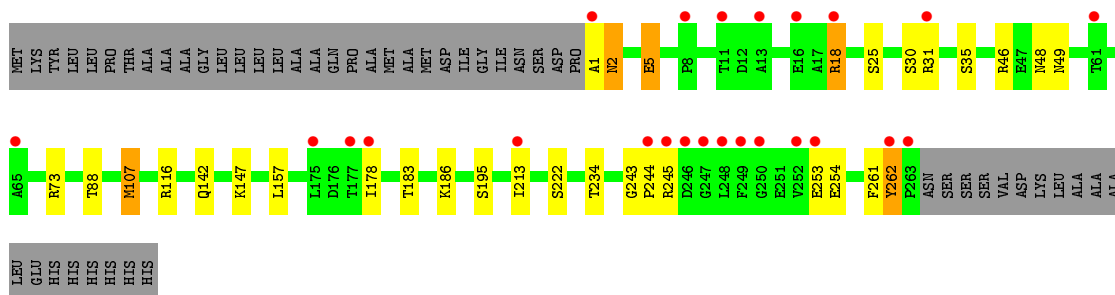
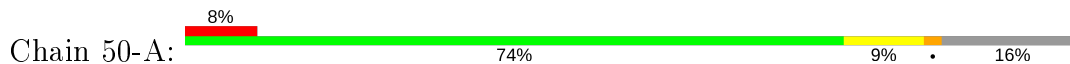




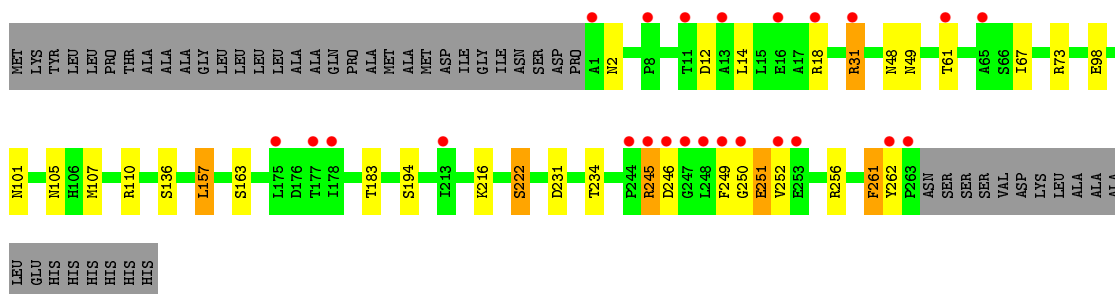
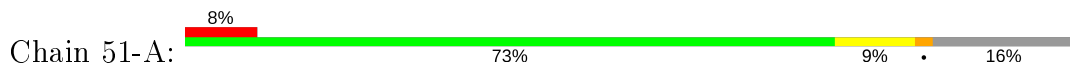
• Molecule 1: CUTINASE



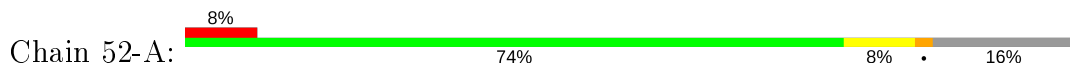
• Molecule 1: CUTINASE

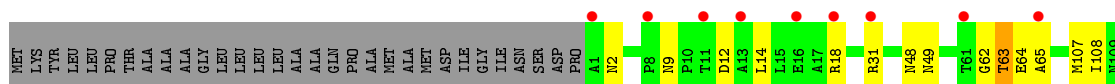


• Molecule 1: CUTINASE

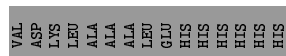
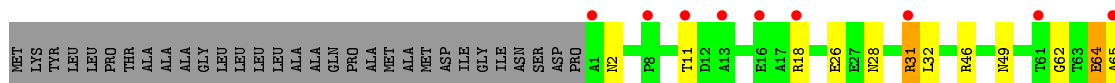
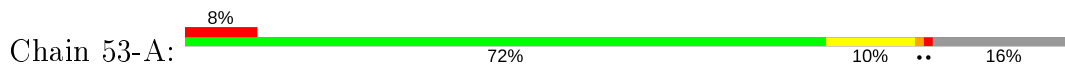


• Molecule 1: CUTINASE

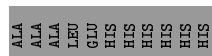
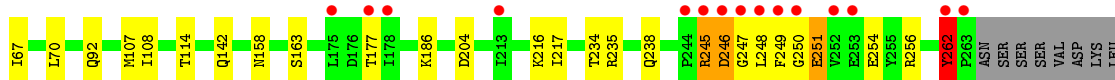
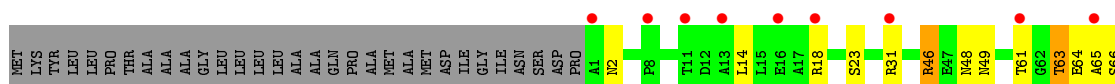
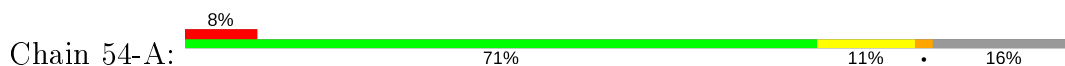




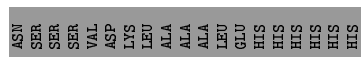
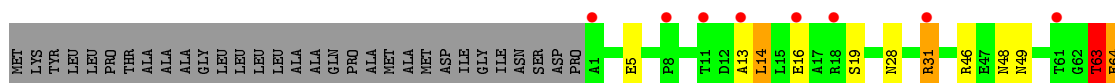
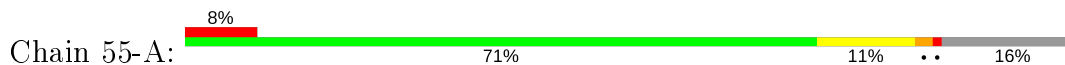
- Molecule 1: CUTINASE



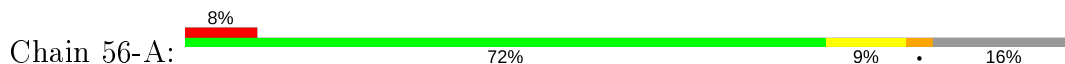
- Molecule 1: CUTINASE

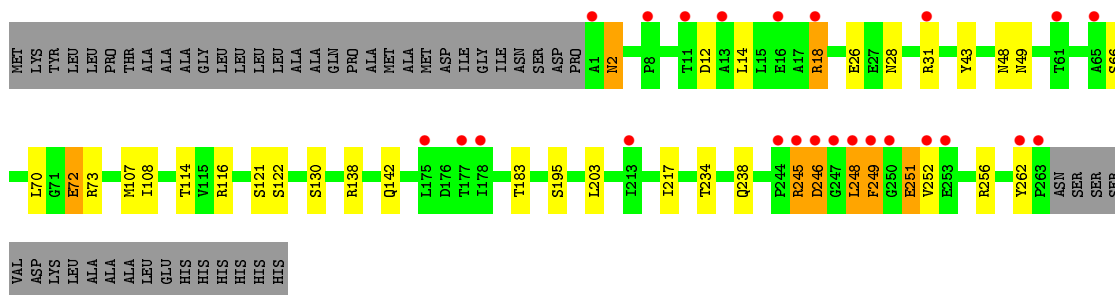


- Molecule 1: CUTINASE

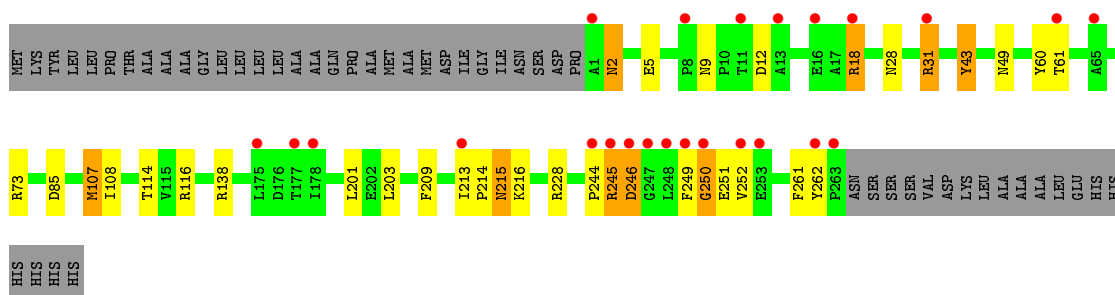
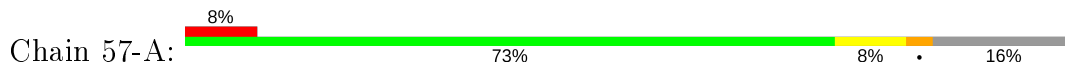


- Molecule 1: CUTINASE

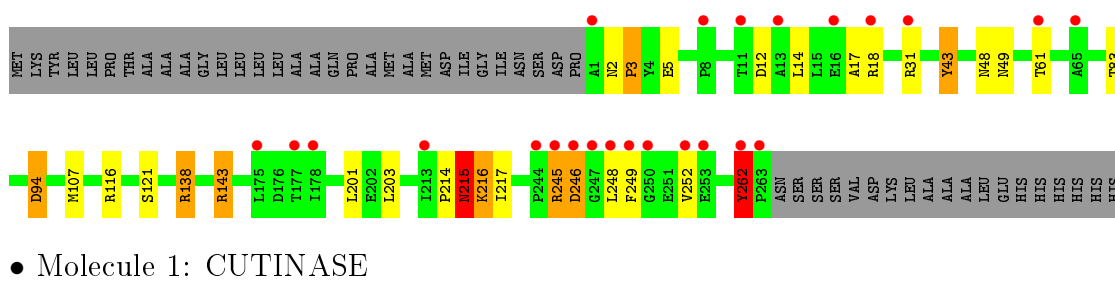
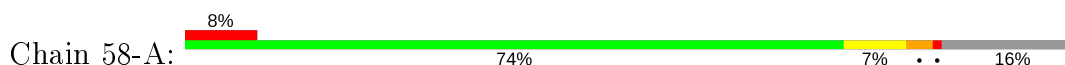




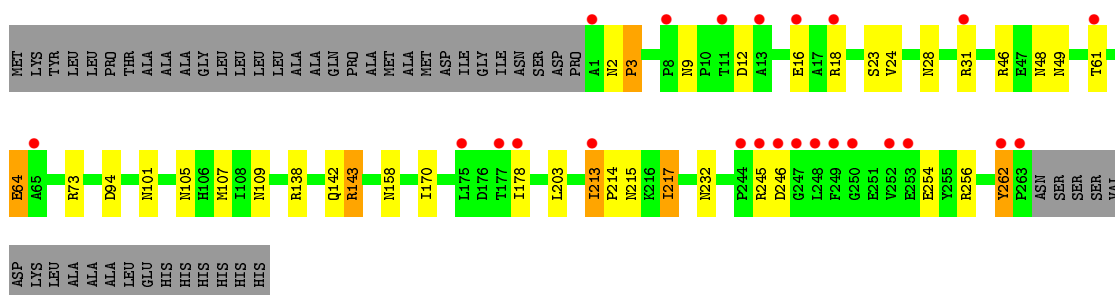
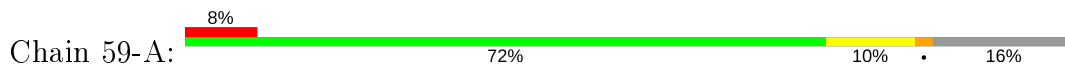
• Molecule 1: CUTINASE



• Molecule 1: CUTINASE

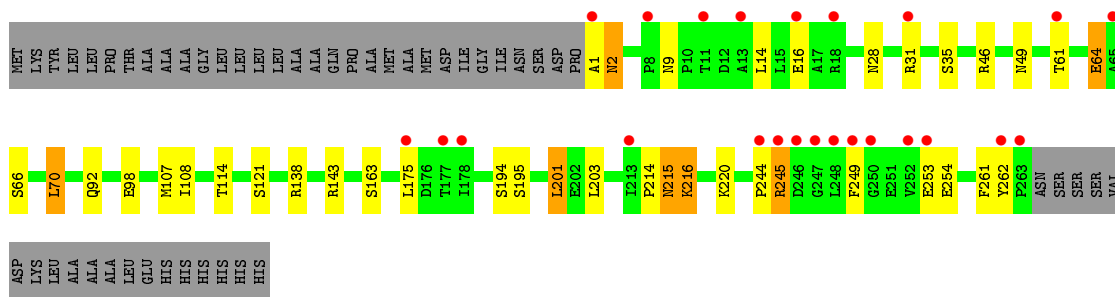


• Molecule 1: CUTINASE

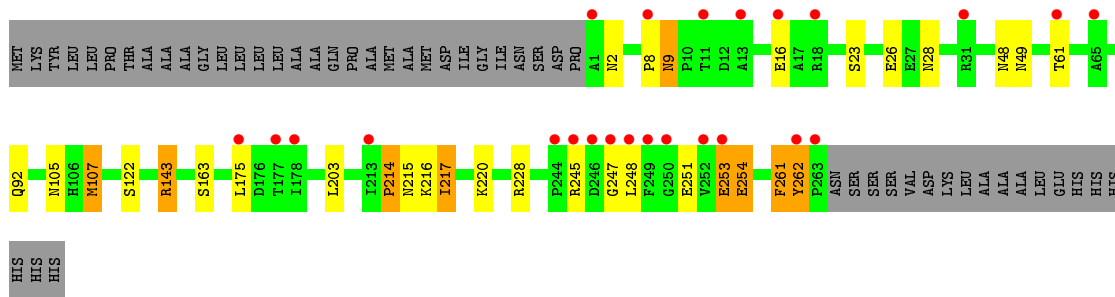
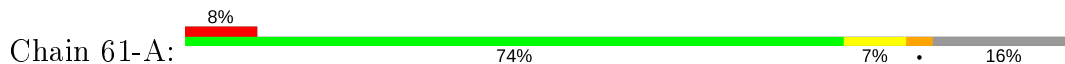


• Molecule 1: CUTINASE

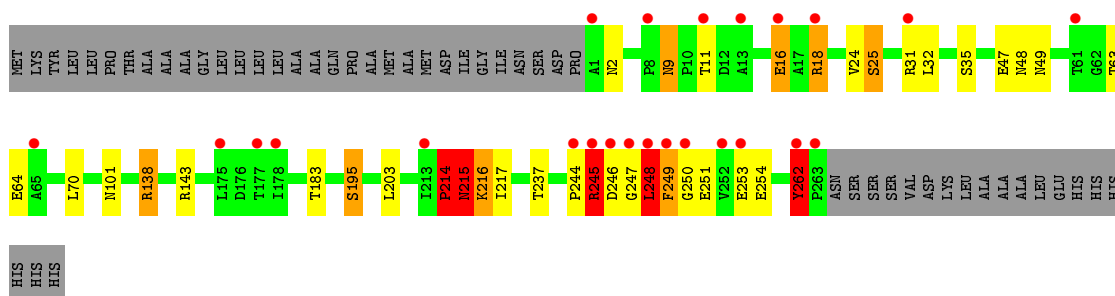
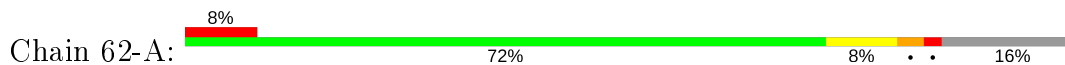




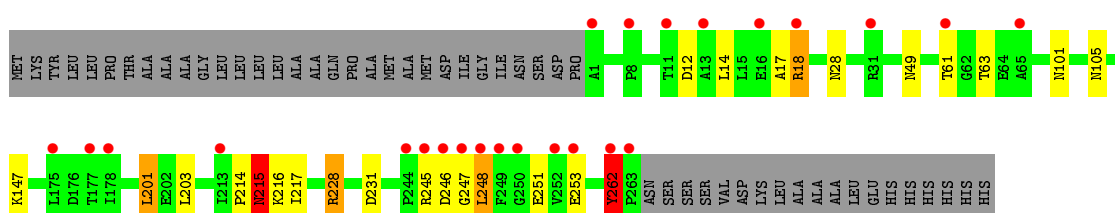
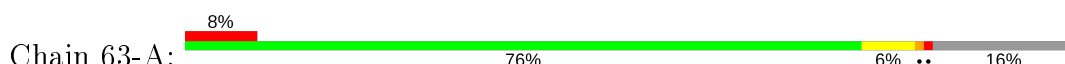
• Molecule 1: CUTINASE



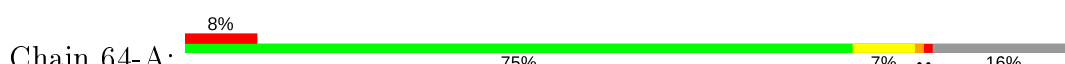
• Molecule 1: CUTINASE

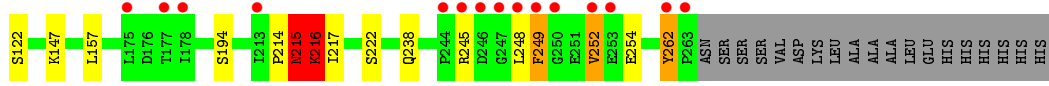
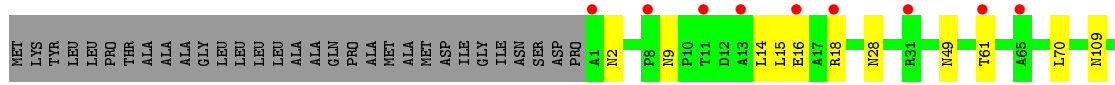


• Molecule 1: CUTINASE

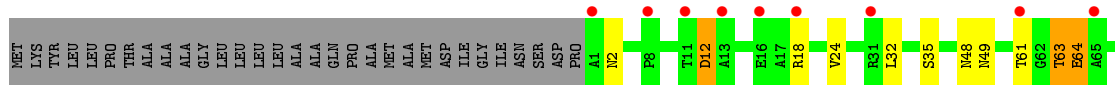
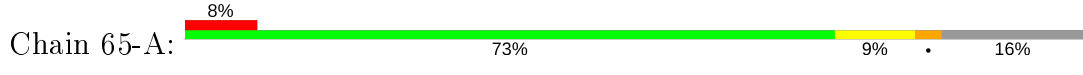


• Molecule 1: CUTINASE

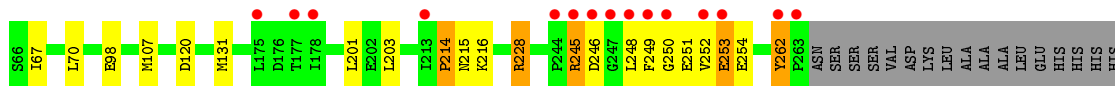
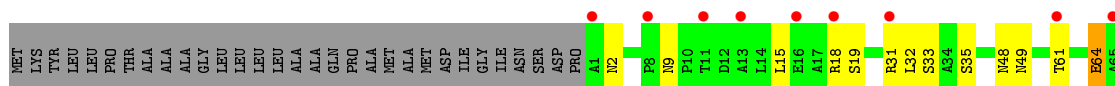
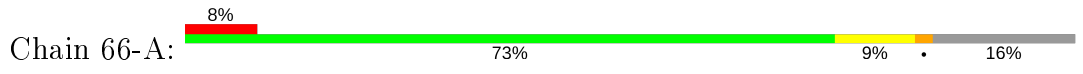




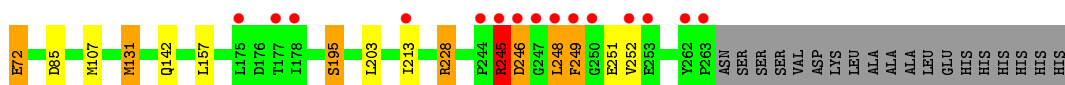
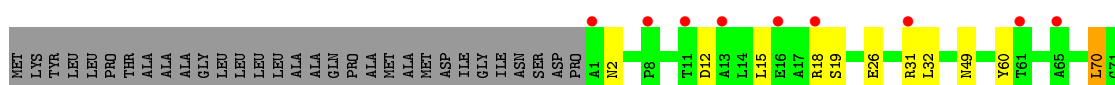
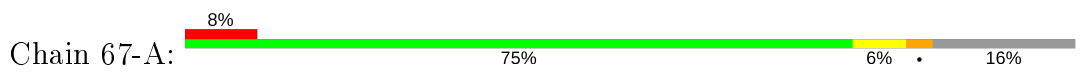
● Molecule 1: CUTINASE



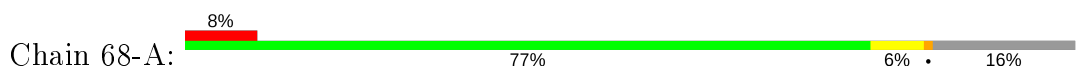
● Molecule 1: CUTINASE

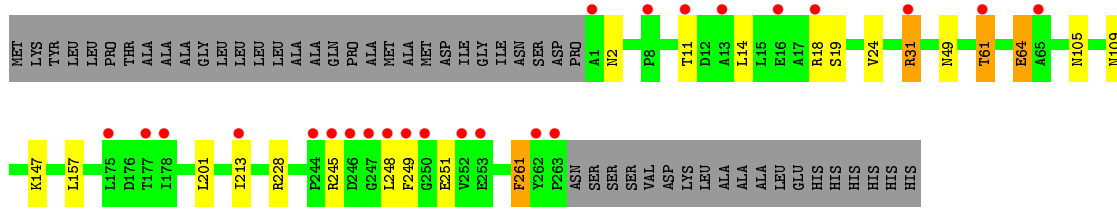


● Molecule 1: CUTINASE

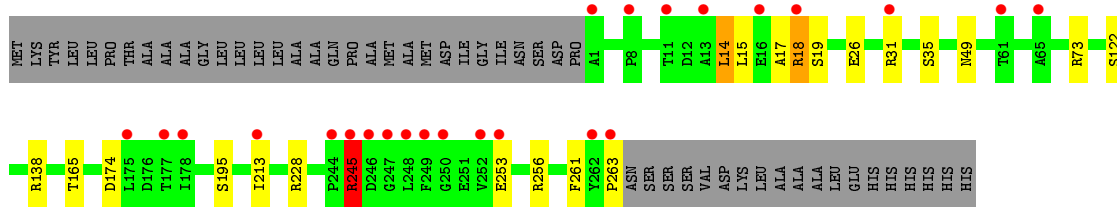
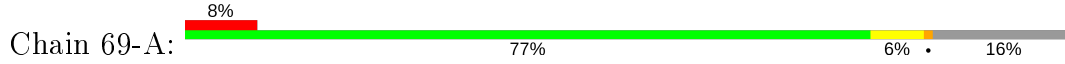


● Molecule 1: CUTINASE

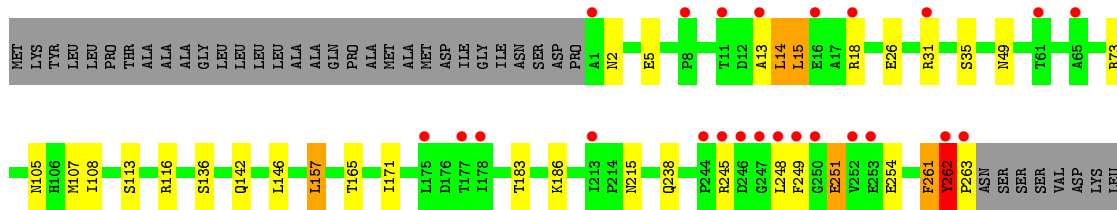
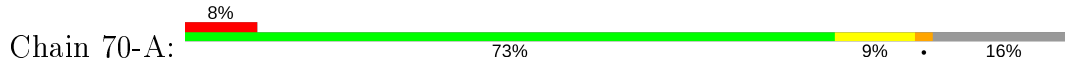




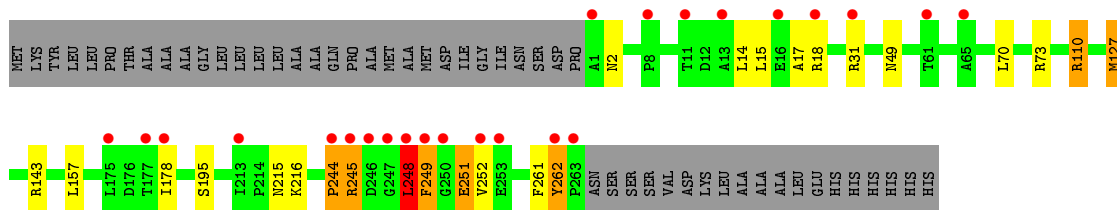
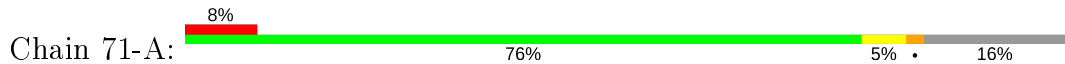
• Molecule 1: CUTINASE



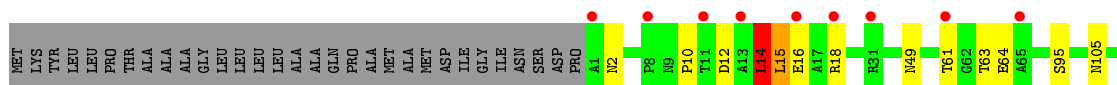
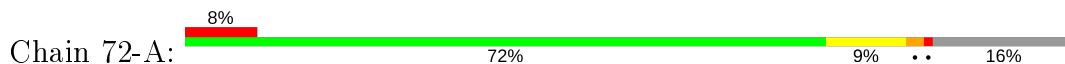
• Molecule 1: CUTINASE

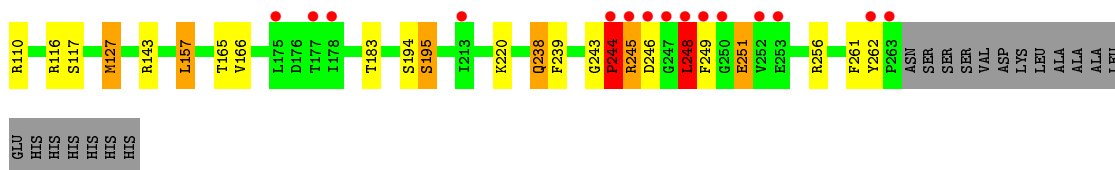


• Molecule 1: CUTINASE

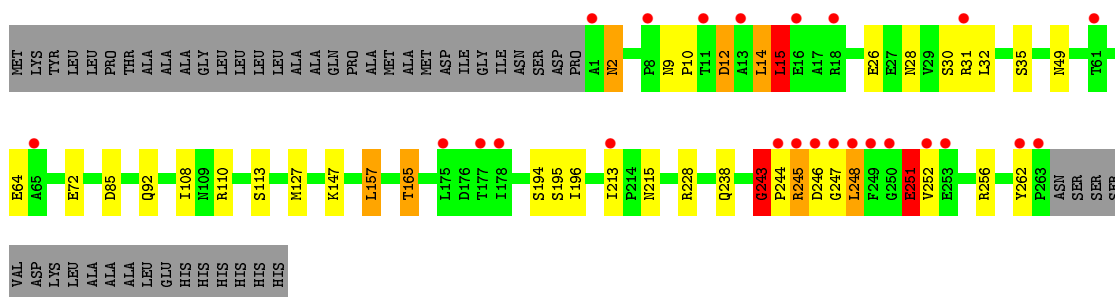
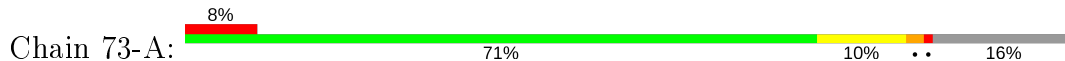


• Molecule 1: CUTINASE

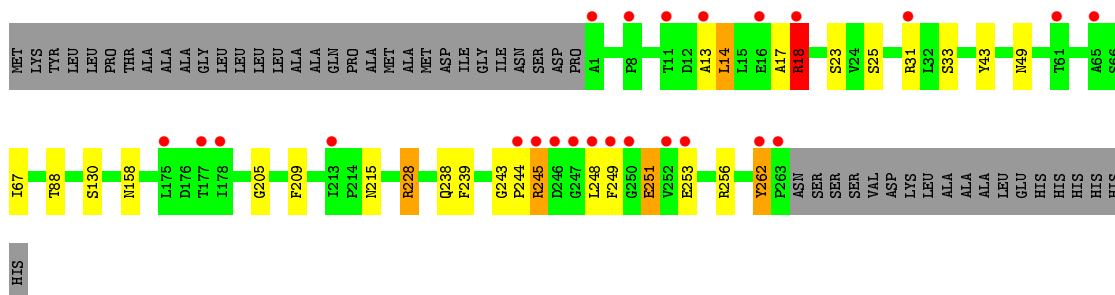
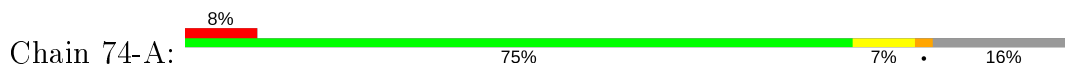




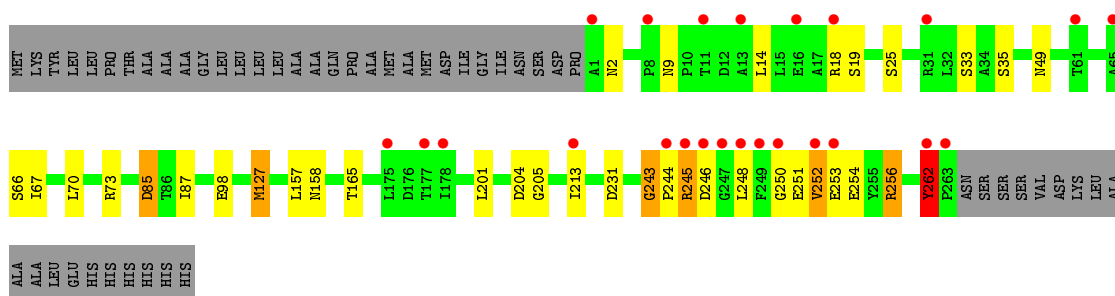
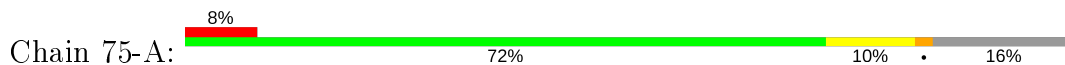
- Molecule 1: CUTINASE



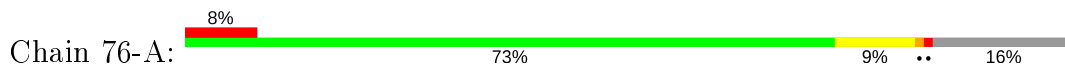
- Molecule 1: CUTINASE

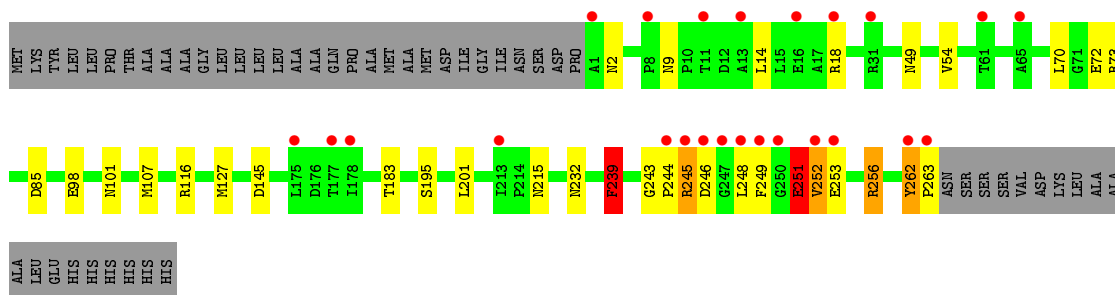


- Molecule 1: CUTINASE

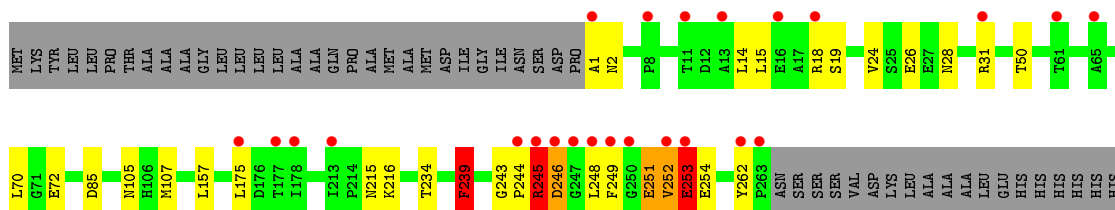
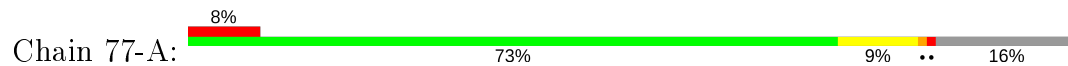


- Molecule 1: CUTINASE





● Molecule 1: CUTINASE



4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	I 41	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	117.90Å 117.90Å 36.44Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	23.12 – 1.55 23.12 – 1.55	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.9 (23.12-1.55) 99.9 (23.12-1.55)	Depositor EDS
R_{merge}	0.10	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	2.09 (at 1.55Å)	Xtrriage
Refinement program	PHENIX (PHENIX.REFINE)	Depositor
R, R_{free}	0.117 , 0.149 0.129 , 0.159	Depositor DCC
R_{free} test set	3279 reflections (8.93%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	16.0	Xtrriage
Anisotropy	0.254	Xtrriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.12 , 250.1	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.50$, $\langle L^2 \rangle = 0.33$	Xtrriage
Estimated twinning fraction	0.021 for -k,-h,-l	Xtrriage
F_o, F_c correlation	0.97	EDS
Total number of atoms	314292	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	14.0	wwPDB-VP

Xtrriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 8.33% 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: SO4

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	0.80	1/2064 (0.0%)	1.04	12/2817 (0.4%)
1	2-A	0.88	6/2064 (0.3%)	1.04	12/2817 (0.4%)
1	3-A	0.75	3/2064 (0.1%)	0.93	3/2817 (0.1%)
1	4-A	0.79	4/2064 (0.2%)	1.09	9/2817 (0.3%)
1	5-A	0.78	2/2064 (0.1%)	1.10	12/2817 (0.4%)
1	6-A	0.79	1/2064 (0.0%)	1.13	11/2817 (0.4%)
1	7-A	0.80	6/2064 (0.3%)	0.95	9/2817 (0.3%)
1	8-A	0.75	1/2064 (0.0%)	0.95	9/2817 (0.3%)
1	9-A	0.77	1/2064 (0.0%)	0.93	5/2817 (0.2%)
1	10-A	0.78	2/2064 (0.1%)	1.03	6/2817 (0.2%)
1	11-A	0.80	4/2064 (0.2%)	0.96	9/2817 (0.3%)
1	12-A	0.76	1/2064 (0.0%)	0.98	7/2817 (0.2%)
1	13-A	0.71	0/2064	1.02	6/2817 (0.2%)
1	14-A	0.78	3/2064 (0.1%)	1.10	12/2817 (0.4%)
1	15-A	0.77	4/2064 (0.2%)	1.03	11/2817 (0.4%)
1	16-A	0.78	2/2064 (0.1%)	0.96	5/2817 (0.2%)
1	17-A	0.72	2/2064 (0.1%)	0.98	6/2817 (0.2%)
1	18-A	0.68	1/2064 (0.0%)	0.95	8/2817 (0.3%)
1	19-A	0.69	0/2064	0.90	3/2817 (0.1%)
1	20-A	0.83	4/2064 (0.2%)	0.95	5/2817 (0.2%)
1	21-A	0.73	2/2064 (0.1%)	0.89	2/2817 (0.1%)
1	22-A	0.68	0/2064	0.90	5/2817 (0.2%)
1	23-A	0.79	4/2064 (0.2%)	1.00	6/2817 (0.2%)
1	24-A	0.75	3/2064 (0.1%)	0.95	9/2817 (0.3%)
1	25-A	0.72	1/2064 (0.0%)	0.91	2/2817 (0.1%)
1	26-A	0.74	1/2064 (0.0%)	0.96	6/2817 (0.2%)
1	27-A	0.81	3/2064 (0.1%)	0.94	5/2817 (0.2%)
1	28-A	0.77	2/2064 (0.1%)	0.92	5/2817 (0.2%)
1	29-A	0.81	4/2064 (0.2%)	0.98	7/2817 (0.2%)
1	30-A	0.79	3/2064 (0.1%)	0.95	5/2817 (0.2%)
1	31-A	0.77	4/2064 (0.2%)	0.97	8/2817 (0.3%)
1	32-A	0.71	0/2064	0.89	1/2817 (0.0%)

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z >5	RMSZ	# Z >5
1	33-A	0.77	4/2064 (0.2%)	1.00	6/2817 (0.2%)
1	34-A	0.73	1/2064 (0.0%)	0.94	5/2817 (0.2%)
1	35-A	0.71	0/2064	0.99	9/2817 (0.3%)
1	36-A	0.73	1/2064 (0.0%)	0.90	6/2817 (0.2%)
1	37-A	0.74	1/2064 (0.0%)	0.94	4/2817 (0.1%)
1	38-A	0.77	1/2064 (0.0%)	0.98	6/2817 (0.2%)
1	39-A	0.80	4/2064 (0.2%)	0.92	3/2817 (0.1%)
1	40-A	0.74	2/2064 (0.1%)	0.99	8/2817 (0.3%)
1	41-A	0.78	3/2064 (0.1%)	0.95	7/2817 (0.2%)
1	42-A	0.82	3/2064 (0.1%)	0.98	8/2817 (0.3%)
1	43-A	0.81	2/2064 (0.1%)	1.00	10/2817 (0.4%)
1	44-A	0.81	2/2064 (0.1%)	1.01	9/2817 (0.3%)
1	45-A	0.82	2/2064 (0.1%)	1.05	10/2817 (0.4%)
1	46-A	0.79	4/2064 (0.2%)	1.01	6/2817 (0.2%)
1	47-A	0.80	3/2064 (0.1%)	1.04	8/2817 (0.3%)
1	48-A	0.83	4/2064 (0.2%)	1.04	12/2817 (0.4%)
1	49-A	0.83	6/2064 (0.3%)	0.98	4/2817 (0.1%)
1	50-A	0.76	1/2064 (0.0%)	0.94	6/2817 (0.2%)
1	51-A	0.75	0/2064	0.94	6/2817 (0.2%)
1	52-A	0.73	1/2064 (0.0%)	0.97	9/2817 (0.3%)
1	53-A	0.73	1/2064 (0.0%)	0.97	7/2817 (0.2%)
1	54-A	0.70	0/2064	0.96	3/2817 (0.1%)
1	55-A	0.77	2/2064 (0.1%)	1.08	17/2817 (0.6%)
1	56-A	0.76	0/2064	0.94	5/2817 (0.2%)
1	57-A	0.80	4/2064 (0.2%)	0.96	9/2817 (0.3%)
1	58-A	0.82	8/2064 (0.4%)	1.01	10/2817 (0.4%)
1	59-A	0.80	4/2064 (0.2%)	0.98	7/2817 (0.2%)
1	60-A	0.81	4/2064 (0.2%)	0.99	10/2817 (0.4%)
1	61-A	0.80	3/2064 (0.1%)	0.97	4/2817 (0.1%)
1	62-A	0.77	2/2064 (0.1%)	0.96	9/2817 (0.3%)
1	63-A	0.75	0/2064	0.96	6/2817 (0.2%)
1	64-A	0.74	2/2064 (0.1%)	0.91	4/2817 (0.1%)
1	65-A	0.74	2/2064 (0.1%)	0.94	8/2817 (0.3%)
1	66-A	0.73	2/2064 (0.1%)	0.93	5/2817 (0.2%)
1	67-A	0.74	2/2064 (0.1%)	0.98	7/2817 (0.2%)
1	68-A	0.71	1/2064 (0.0%)	0.92	5/2817 (0.2%)
1	69-A	0.71	0/2064	1.04	8/2817 (0.3%)
1	70-A	0.76	2/2064 (0.1%)	0.96	5/2817 (0.2%)
1	71-A	0.73	0/2064	0.89	4/2817 (0.1%)
1	72-A	0.73	1/2064 (0.0%)	1.00	10/2817 (0.4%)
1	73-A	0.84	6/2064 (0.3%)	1.05	12/2817 (0.4%)
1	74-A	0.79	5/2064 (0.2%)	0.96	5/2817 (0.2%)
1	75-A	0.74	1/2064 (0.0%)	0.95	9/2817 (0.3%)

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z >5	RMSZ	# Z >5
1	76-A	0.78	2/2064 (0.1%)	1.01	9/2817 (0.3%)
1	77-A	0.72	2/2064 (0.1%)	0.92	2/2817 (0.1%)
All	All	0.77	176/158928 (0.1%)	0.98	543/216909 (0.3%)

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	3
1	3-A	0	5
1	4-A	0	5
1	5-A	0	9
1	6-A	0	9
1	7-A	0	3
1	8-A	0	2
1	9-A	0	3
1	10-A	0	2
1	11-A	0	2
1	12-A	0	5
1	14-A	0	3
1	15-A	0	2
1	16-A	0	1
1	17-A	0	1
1	18-A	0	1
1	19-A	0	4
1	20-A	0	2
1	21-A	0	1
1	22-A	0	1
1	23-A	0	4
1	24-A	0	4
1	25-A	0	3
1	26-A	0	4
1	27-A	0	3
1	28-A	0	4
1	29-A	0	5
1	31-A	0	1
1	32-A	0	2
1	34-A	0	2
1	35-A	0	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	36-A	0	2
1	37-A	0	3
1	38-A	0	1
1	39-A	0	2
1	40-A	0	2
1	41-A	0	2
1	42-A	0	3
1	43-A	0	5
1	44-A	0	9
1	45-A	0	8
1	46-A	0	4
1	47-A	0	4
1	48-A	0	4
1	49-A	0	1
1	50-A	0	3
1	51-A	0	1
1	52-A	0	3
1	53-A	0	8
1	54-A	0	3
1	55-A	0	4
1	56-A	0	2
1	57-A	0	4
1	58-A	0	2
1	59-A	0	3
1	60-A	0	2
1	61-A	0	3
1	62-A	0	5
1	63-A	0	4
1	64-A	0	4
1	65-A	0	3
1	66-A	0	2
1	67-A	0	3
1	68-A	0	2
1	69-A	0	4
1	70-A	0	4
1	71-A	0	1
1	72-A	0	2
1	73-A	0	6
1	74-A	0	4
1	75-A	0	6
1	76-A	0	2
1	77-A	0	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
All	All	0	249

All (176) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	20-A	131	MET	CB-CG	15.09	1.99	1.51
1	14-A	131	MET	CB-CG	11.82	1.89	1.51
1	70-A	5	GLU	CB-CG	10.43	1.72	1.52
1	57-A	43	TYR	CB-CG	-9.79	1.36	1.51
1	59-A	64	GLU	CB-CG	9.10	1.69	1.52
1	43-A	110	ARG	CG-CD	9.06	1.74	1.51
1	37-A	115	VAL	CB-CG1	-8.96	1.34	1.52
1	39-A	28	ASN	CB-CG	8.84	1.71	1.51
1	44-A	144	PRO	CA-C	-8.46	1.35	1.52
1	2-A	127	MET	CB-CG	-8.34	1.24	1.51
1	73-A	72	GLU	CG-CD	8.15	1.64	1.51
1	11-A	5	GLU	CB-CG	8.05	1.67	1.52
1	11-A	127	MET	CB-CG	7.86	1.76	1.51
1	58-A	5	GLU	CB-CG	7.76	1.66	1.52
1	58-A	107	MET	CB-CG	7.65	1.75	1.51
1	59-A	64	GLU	CG-CD	7.65	1.63	1.51
1	21-A	116	ARG	CB-CG	-7.64	1.31	1.52
1	64-A	16	GLU	CB-CG	7.60	1.66	1.52
1	5-A	253	GLU	CB-CG	7.60	1.66	1.52
1	73-A	251	GLU	CB-CG	7.51	1.66	1.52
1	20-A	117	SER	CB-OG	-7.44	1.32	1.42
1	48-A	262	TYR	CB-CG	7.43	1.62	1.51
1	5-A	127	MET	CB-CG	7.41	1.75	1.51
1	73-A	72	GLU	CB-CG	7.39	1.66	1.52
1	49-A	143	ARG	CG-CD	7.38	1.70	1.51
1	75-A	127	MET	CB-CG	7.25	1.74	1.51
1	41-A	143	ARG	C-O	7.19	1.37	1.23
1	30-A	122	SER	CB-OG	-7.16	1.32	1.42
1	70-A	5	GLU	CG-CD	7.07	1.62	1.51
1	61-A	254	GLU	CB-CG	7.03	1.65	1.52
1	11-A	5	GLU	CG-CD	6.97	1.62	1.51
1	24-A	26	GLU	CB-CG	6.93	1.65	1.52
1	27-A	107	MET	CG-SD	6.93	1.99	1.81
1	27-A	72	GLU	CB-CG	6.90	1.65	1.52
1	48-A	48	ASN	CB-CG	6.84	1.66	1.51
1	10-A	131	MET	CG-SD	-6.77	1.63	1.81
1	40-A	143	ARG	C-O	6.75	1.36	1.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	16-A	138	ARG	CG-CD	-6.75	1.35	1.51
1	24-A	48	ASN	CB-CG	6.75	1.66	1.51
1	46-A	31	ARG	CB-CG	6.73	1.70	1.52
1	67-A	228	ARG	CG-CD	6.72	1.68	1.51
1	30-A	46	ARG	CB-CG	-6.67	1.34	1.52
1	2-A	127	MET	CG-SD	-6.67	1.63	1.81
1	74-A	251	GLU	CG-CD	6.65	1.61	1.51
1	17-A	131	MET	CG-SD	6.65	1.98	1.81
1	49-A	31	ARG	CB-CG	6.64	1.70	1.52
1	15-A	131	MET	CB-CG	6.61	1.72	1.51
1	2-A	94	ASP	CB-CG	6.59	1.65	1.51
1	25-A	48	ASN	CB-CG	6.55	1.66	1.51
1	29-A	43	TYR	CB-CG	-6.54	1.41	1.51
1	59-A	143	ARG	CG-CD	6.52	1.68	1.51
1	2-A	31	ARG	CB-CG	6.52	1.70	1.52
1	4-A	127	MET	CB-CG	6.51	1.72	1.51
1	67-A	72	GLU	CG-CD	-6.50	1.42	1.51
1	58-A	107	MET	CG-SD	6.49	1.98	1.81
1	8-A	85	ASP	CB-CG	-6.43	1.38	1.51
1	29-A	43	TYR	CD1-CE1	-6.43	1.29	1.39
1	39-A	73	ARG	CB-CG	-6.38	1.35	1.52
1	23-A	26	GLU	CB-CG	6.38	1.64	1.52
1	20-A	131	MET	CG-SD	6.28	1.97	1.81
1	24-A	26	GLU	CG-CD	6.28	1.61	1.51
1	61-A	254	GLU	CG-CD	6.28	1.61	1.51
1	43-A	110	ARG	CB-CG	6.27	1.69	1.52
1	18-A	53	ALA	CA-CB	-6.25	1.39	1.52
1	65-A	216	LYS	N-CA	6.21	1.58	1.46
1	41-A	72	GLU	CG-CD	6.18	1.61	1.51
1	40-A	98	GLU	CB-CG	-6.16	1.40	1.52
1	73-A	64	GLU	CD-OE1	-6.15	1.18	1.25
1	73-A	251	GLU	CG-CD	6.13	1.61	1.51
1	60-A	64	GLU	CB-CG	-6.12	1.40	1.52
1	7-A	54	VAL	CB-CG1	-6.11	1.40	1.52
1	14-A	127	MET	CG-SD	-6.09	1.65	1.81
1	74-A	228	ARG	CG-CD	6.05	1.67	1.51
1	1-A	26	GLU	CG-CD	6.01	1.60	1.51
1	39-A	254	GLU	CG-CD	6.00	1.60	1.51
1	26-A	46	ARG	CG-CD	-5.98	1.37	1.51
1	77-A	239	PHE	CA-C	5.94	1.68	1.52
1	15-A	28	ASN	CB-CG	5.94	1.64	1.51
1	64-A	216	LYS	N-CA	5.91	1.58	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	42-A	144	PRO	CB-CG	-5.90	1.20	1.50
1	2-A	25	SER	CA-CB	5.89	1.61	1.52
1	7-A	110	ARG	CB-CG	5.87	1.68	1.52
1	66-A	64	GLU	CG-CD	5.86	1.60	1.51
1	7-A	117	SER	CB-OG	-5.85	1.34	1.42
1	48-A	261	PHE	CB-CG	-5.85	1.41	1.51
1	4-A	66	SER	CB-OG	-5.83	1.34	1.42
1	34-A	31	ARG	CG-CD	5.82	1.66	1.51
1	30-A	147	LYS	CB-CG	5.82	1.68	1.52
1	57-A	43	TYR	CG-CD1	-5.81	1.31	1.39
1	23-A	26	GLU	CG-CD	5.79	1.60	1.51
1	58-A	94	ASP	CB-CG	5.77	1.63	1.51
1	2-A	31	ARG	CG-CD	5.75	1.66	1.51
1	76-A	239	PHE	CA-C	5.73	1.67	1.52
1	7-A	85	ASP	CB-CG	-5.72	1.39	1.51
1	74-A	228	ARG	CB-CG	5.71	1.68	1.52
1	47-A	28	ASN	CB-CG	-5.69	1.38	1.51
1	15-A	31	ARG	CB-CG	5.67	1.67	1.52
1	68-A	64	GLU	CB-CG	-5.67	1.41	1.52
1	58-A	43	TYR	CD2-CE2	-5.67	1.30	1.39
1	55-A	31	ARG	CG-CD	5.67	1.66	1.51
1	58-A	143	ARG	CG-CD	5.63	1.66	1.51
1	42-A	127	MET	CG-SD	5.59	1.95	1.81
1	46-A	5	GLU	CG-CD	5.58	1.60	1.51
1	53-A	73	ARG	CG-CD	-5.58	1.38	1.51
1	66-A	131	MET	CB-CG	-5.58	1.33	1.51
1	11-A	256	ARG	CG-CD	5.57	1.65	1.51
1	28-A	262	TYR	CD1-CE1	-5.56	1.31	1.39
1	39-A	254	GLU	CB-CG	5.56	1.62	1.52
1	3-A	26	GLU	CB-CG	5.55	1.62	1.52
1	29-A	98	GLU	CB-CG	5.55	1.62	1.52
1	62-A	47	GLU	CD-OE1	5.55	1.31	1.25
1	55-A	92	GLN	CB-CG	5.54	1.67	1.52
1	46-A	46	ARG	CB-CG	5.54	1.67	1.52
1	52-A	63	THR	N-CA	5.52	1.57	1.46
1	74-A	18	ARG	CG-CD	5.51	1.65	1.51
1	3-A	26	GLU	CG-CD	5.51	1.60	1.51
1	59-A	143	ARG	CB-CG	5.50	1.67	1.52
1	72-A	127	MET	CB-CG	-5.50	1.33	1.51
1	73-A	26	GLU	CB-CG	5.49	1.62	1.52
1	31-A	262	TYR	CD1-CE1	5.47	1.47	1.39
1	45-A	147	LYS	CD-CE	-5.45	1.37	1.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	44-A	109	ASN	CB-CG	5.44	1.63	1.51
1	57-A	43	TYR	CD1-CE1	-5.44	1.31	1.39
1	9-A	48	ASN	CB-CG	5.43	1.63	1.51
1	45-A	31	ARG	CB-CG	5.42	1.67	1.52
1	7-A	110	ARG	CG-CD	5.39	1.65	1.51
1	60-A	107	MET	CG-SD	-5.38	1.67	1.81
1	33-A	31	ARG	CB-CG	5.37	1.67	1.52
1	42-A	262	TYR	CD2-CE2	-5.37	1.31	1.39
1	15-A	138	ARG	CB-CG	5.35	1.67	1.52
1	58-A	5	GLU	CG-CD	5.35	1.59	1.51
1	77-A	254	GLU	CB-CG	5.35	1.62	1.52
1	16-A	46	ARG	CG-CD	-5.34	1.38	1.51
1	20-A	131	MET	CA-CB	5.33	1.65	1.53
1	49-A	143	ARG	CB-CG	5.33	1.67	1.52
1	21-A	31	ARG	CB-CG	5.33	1.67	1.52
1	31-A	147	LYS	CB-CG	-5.32	1.38	1.52
1	27-A	26	GLU	CB-CG	-5.31	1.42	1.52
1	14-A	138	ARG	CG-CD	5.30	1.65	1.51
1	57-A	5	GLU	CG-CD	5.27	1.59	1.51
1	50-A	222	SER	CA-CB	5.26	1.60	1.52
1	36-A	116	ARG	CG-CD	5.25	1.65	1.51
1	38-A	107	MET	CB-CG	5.24	1.68	1.51
1	60-A	254	GLU	CB-CG	5.24	1.62	1.52
1	23-A	138	ARG	CG-CD	-5.23	1.38	1.51
1	29-A	249	PHE	CD1-CE1	5.22	1.49	1.39
1	76-A	251	GLU	CB-CG	5.21	1.62	1.52
1	6-A	126	VAL	CB-CG1	-5.21	1.42	1.52
1	49-A	54	VAL	CB-CG2	-5.20	1.42	1.52
1	46-A	46	ARG	CG-CD	5.20	1.65	1.51
1	48-A	143	ARG	N-CA	5.20	1.56	1.46
1	47-A	143	ARG	C-O	5.19	1.33	1.23
1	7-A	31	ARG	CG-CD	5.18	1.64	1.51
1	41-A	110	ARG	CB-CG	5.17	1.66	1.52
1	65-A	72	GLU	CG-CD	5.17	1.59	1.51
1	58-A	138	ARG	CG-CD	5.17	1.64	1.51
1	23-A	110	ARG	CZ-NH1	5.16	1.39	1.33
1	31-A	249	PHE	N-CA	5.14	1.56	1.46
1	47-A	261	PHE	CD1-CE1	-5.14	1.28	1.39
1	33-A	253	GLU	CB-CG	5.13	1.61	1.52
1	10-A	253	GLU	CB-CG	5.13	1.61	1.52
1	33-A	73	ARG	CG-CD	5.13	1.64	1.51
1	4-A	12	ASP	CB-CG	5.12	1.62	1.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	60-A	98	GLU	CG-CD	5.11	1.59	1.51
1	61-A	143	ARG	CG-CD	5.11	1.64	1.51
1	17-A	131	MET	CB-CG	5.11	1.67	1.51
1	33-A	142	GLN	CG-CD	5.11	1.62	1.51
1	28-A	116	ARG	CG-CD	5.08	1.64	1.51
1	3-A	116	ARG	CG-CD	-5.06	1.39	1.51
1	62-A	143	ARG	CG-CD	5.06	1.64	1.51
1	31-A	228	ARG	CD-NE	-5.06	1.37	1.46
1	49-A	141	SER	CB-OG	-5.05	1.35	1.42
1	74-A	251	GLU	CB-CG	5.02	1.61	1.52
1	49-A	122	SER	CA-CB	5.02	1.60	1.52
1	4-A	127	MET	CG-SD	5.01	1.94	1.81
1	12-A	262	TYR	CD1-CE1	-5.01	1.31	1.39

All (543) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	6-A	243	GLY	C-N-CD	-22.23	71.71	120.60
1	5-A	243	GLY	C-N-CD	-20.43	75.65	120.60
1	10-A	243	GLY	C-N-CD	-19.10	78.58	120.60
1	4-A	127	MET	CG-SD-CE	-16.77	73.37	100.20
1	14-A	127	MET	CG-SD-CE	-16.75	73.39	100.20
1	76-A	243	GLY	C-N-CD	-16.71	83.83	120.60
1	14-A	243	GLY	C-N-CD	-15.72	86.02	120.60
1	13-A	127	MET	CG-SD-CE	-15.68	75.11	100.20
1	69-A	228	ARG	NE-CZ-NH2	-15.64	112.48	120.30
1	69-A	228	ARG	NE-CZ-NH1	14.25	127.42	120.30
1	48-A	228	ARG	NE-CZ-NH1	14.01	127.30	120.30
1	3-A	127	MET	CG-SD-CE	-13.81	78.11	100.20
1	13-A	31	ARG	NE-CZ-NH1	13.45	127.02	120.30
1	67-A	31	ARG	NE-CZ-NH2	-13.13	113.74	120.30
1	6-A	243	GLY	C-N-CA	12.90	176.19	122.00
1	58-A	107	MET	CG-SD-CE	-12.84	79.66	100.20
1	73-A	243	GLY	C-N-CD	-12.70	92.65	120.60
1	20-A	131	MET	CA-CB-CG	12.57	134.66	113.30
1	14-A	131	MET	CA-CB-CG	12.43	134.44	113.30
1	5-A	243	GLY	C-N-CA	12.31	173.70	122.00
1	26-A	127	MET	CG-SD-CE	12.15	119.64	100.20
1	15-A	143	ARG	NE-CZ-NH1	12.12	126.36	120.30
1	15-A	73	ARG	NE-CZ-NH1	11.81	126.21	120.30
1	1-A	94	ASP	CB-CG-OD1	11.65	128.78	118.30
1	13-A	73	ARG	NE-CZ-NH1	11.60	126.10	120.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	46-A	143	ARG	NE-CZ-NH1	11.44	126.02	120.30
1	63-A	201	LEU	CA-CB-CG	11.20	141.06	115.30
1	18-A	138	ARG	NE-CZ-NH1	11.18	125.89	120.30
1	23-A	110	ARG	NE-CZ-NH1	11.06	125.83	120.30
1	69-A	31	ARG	NE-CZ-NH1	11.05	125.82	120.30
1	34-A	143	ARG	NE-CZ-NH1	10.95	125.77	120.30
1	2-A	127	MET	CG-SD-CE	-10.88	82.79	100.20
1	10-A	131	MET	CB-CG-SD	-10.87	79.79	112.40
1	1-A	31	ARG	NE-CZ-NH1	10.74	125.67	120.30
1	31-A	31	ARG	NE-CZ-NH1	10.73	125.67	120.30
1	18-A	138	ARG	NE-CZ-NH2	-10.64	114.98	120.30
1	47-A	228	ARG	CG-CD-NE	10.62	134.10	111.80
1	10-A	243	GLY	C-N-CA	10.59	166.47	122.00
1	55-A	31	ARG	NE-CZ-NH1	10.58	125.59	120.30
1	40-A	107	MET	CG-SD-CE	10.55	117.08	100.20
1	35-A	110	ARG	NE-CZ-NH1	10.31	125.46	120.30
1	4-A	12	ASP	CB-CG-OD2	10.31	127.58	118.30
1	48-A	107	MET	CG-SD-CE	-10.27	83.78	100.20
1	6-A	127	MET	CB-CG-SD	-10.08	82.15	112.40
1	11-A	127	MET	CG-SD-CE	-9.91	84.35	100.20
1	34-A	143	ARG	NE-CZ-NH2	-9.89	115.35	120.30
1	68-A	228	ARG	NE-CZ-NH2	-9.82	115.39	120.30
1	46-A	143	ARG	NE-CZ-NH2	-9.53	115.54	120.30
1	15-A	131	MET	CA-CB-CG	9.45	129.37	113.30
1	2-A	243	GLY	N-CA-C	-9.39	89.63	113.10
1	4-A	107	MET	CG-SD-CE	-9.35	85.25	100.20
1	14-A	127	MET	CB-CG-SD	-9.28	84.56	112.40
1	55-A	262	TYR	C-N-CD	-9.28	100.18	120.60
1	43-A	107	MET	CG-SD-CE	9.22	114.94	100.20
1	73-A	228	ARG	NE-CZ-NH1	9.12	124.86	120.30
1	69-A	31	ARG	NE-CZ-NH2	-9.09	115.75	120.30
1	55-A	138	ARG	NE-CZ-NH2	-9.03	115.78	120.30
1	56-A	73	ARG	NE-CZ-NH1	9.02	124.81	120.30
1	15-A	127	MET	CG-SD-CE	-8.98	85.83	100.20
1	53-A	31	ARG	NE-CZ-NH2	-8.94	115.83	120.30
1	58-A	43	TYR	CB-CG-CD2	-8.94	115.64	121.00
1	14-A	248	LEU	CA-CB-CG	8.92	135.81	115.30
1	60-A	46	ARG	NE-CZ-NH1	8.89	124.75	120.30
1	76-A	243	GLY	C-N-CA	8.87	159.23	122.00
1	16-A	138	ARG	NE-CZ-NH1	8.85	124.72	120.30
1	13-A	73	ARG	NE-CZ-NH2	-8.82	115.89	120.30
1	35-A	110	ARG	NE-CZ-NH2	-8.82	115.89	120.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	3-A	243	GLY	N-CA-C	-8.78	91.15	113.10
1	13-A	31	ARG	NE-CZ-NH2	-8.77	115.91	120.30
1	2-A	31	ARG	NE-CZ-NH2	-8.72	115.94	120.30
1	72-A	248	LEU	CA-CB-CG	8.70	135.31	115.30
1	55-A	143	ARG	NE-CZ-NH1	8.69	124.65	120.30
1	4-A	107	MET	CB-CG-SD	-8.67	86.39	112.40
1	24-A	157	LEU	CA-CB-CG	8.66	135.21	115.30
1	12-A	131	MET	CB-CG-SD	-8.63	86.52	112.40
1	76-A	107	MET	CG-SD-CE	-8.62	86.41	100.20
1	22-A	70	LEU	CA-CB-CG	8.60	135.07	115.30
1	38-A	73	ARG	N-CA-CB	8.59	126.07	110.60
1	7-A	138	ARG	NE-CZ-NH1	8.57	124.58	120.30
1	14-A	243	GLY	C-N-CA	8.42	157.34	122.00
1	17-A	116	ARG	NE-CZ-NH1	8.41	124.50	120.30
1	37-A	248	LEU	CA-CB-CG	8.39	134.61	115.30
1	53-A	110	ARG	NE-CZ-NH1	8.38	124.49	120.30
1	58-A	138	ARG	NE-CZ-NH2	8.37	124.48	120.30
1	27-A	157	LEU	CB-CG-CD2	8.36	125.21	111.00
1	45-A	127	MET	CG-SD-CE	8.32	113.52	100.20
1	35-A	228	ARG	NE-CZ-NH2	8.31	124.46	120.30
1	35-A	116	ARG	NE-CZ-NH1	8.30	124.45	120.30
1	55-A	64	GLU	N-CA-C	-8.29	88.62	111.00
1	72-A	127	MET	CB-CG-SD	-8.26	87.63	112.40
1	64-A	215	ASN	N-CA-C	8.25	133.27	111.00
1	73-A	228	ARG	NE-CZ-NH2	-8.22	116.19	120.30
1	73-A	157	LEU	CA-CB-CG	8.19	134.14	115.30
1	61-A	107	MET	CG-SD-CE	-8.17	87.13	100.20
1	57-A	107	MET	CG-SD-CE	-8.16	87.15	100.20
1	23-A	105	ASN	CB-CA-C	8.13	126.67	110.40
1	35-A	31	ARG	NE-CZ-NH1	8.13	124.37	120.30
1	33-A	228	ARG	NE-CZ-NH1	8.09	124.34	120.30
1	55-A	107	MET	CG-SD-CE	-8.07	87.29	100.20
1	26-A	107	MET	CG-SD-CE	-8.00	87.40	100.20
1	59-A	213	ILE	N-CA-C	-7.96	89.52	111.00
1	1-A	94	ASP	CB-CG-OD2	-7.95	111.14	118.30
1	33-A	228	ARG	NE-CZ-NH2	-7.94	116.33	120.30
1	58-A	138	ARG	NE-CZ-NH1	-7.91	116.34	120.30
1	60-A	31	ARG	NE-CZ-NH2	-7.91	116.35	120.30
1	73-A	251	GLU	N-CA-C	-7.90	89.66	111.00
1	62-A	18	ARG	NE-CZ-NH1	7.87	124.23	120.30
1	6-A	46	ARG	NE-CZ-NH1	7.87	124.23	120.30
1	69-A	73	ARG	NE-CZ-NH2	-7.86	116.37	120.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	70-A	31	ARG	NE-CZ-NH2	-7.84	116.38	120.30
1	48-A	228	ARG	NE-CZ-NH2	-7.84	116.38	120.30
1	40-A	110	ARG	NE-CZ-NH2	-7.81	116.39	120.30
1	52-A	110	ARG	NE-CZ-NH1	7.77	124.19	120.30
1	35-A	228	ARG	NE-CZ-NH1	-7.77	116.42	120.30
1	5-A	127	MET	CG-SD-CE	-7.76	87.78	100.20
1	47-A	228	ARG	CB-CG-CD	-7.76	91.43	111.60
1	23-A	245	ARG	N-CA-C	-7.75	90.07	111.00
1	31-A	228	ARG	NE-CZ-NH2	-7.73	116.43	120.30
1	44-A	107	MET	CG-SD-CE	7.72	112.55	100.20
1	45-A	116	ARG	NE-CZ-NH1	7.71	124.16	120.30
1	7-A	127	MET	CG-SD-CE	-7.71	87.87	100.20
1	2-A	127	MET	CB-CA-C	-7.68	95.05	110.40
1	17-A	131	MET	CB-CG-SD	7.67	135.42	112.40
1	12-A	157	LEU	CA-CB-CG	7.66	132.91	115.30
1	2-A	62	GLY	N-CA-C	7.63	132.18	113.10
1	48-A	262	TYR	CB-CA-C	7.59	125.57	110.40
1	43-A	46	ARG	NE-CZ-NH2	-7.58	116.51	120.30
1	38-A	110	ARG	NE-CZ-NH1	7.56	124.08	120.30
1	45-A	228	ARG	NE-CZ-NH1	-7.56	116.52	120.30
1	22-A	248	LEU	N-CA-C	-7.56	90.59	111.00
1	50-A	107	MET	CA-CB-CG	7.52	126.09	113.30
1	67-A	31	ARG	NE-CZ-NH1	7.52	124.06	120.30
1	20-A	131	MET	CG-SD-CE	7.52	112.23	100.20
1	2-A	31	ARG	NE-CZ-NH1	7.52	124.06	120.30
1	7-A	12	ASP	CB-CG-OD2	7.51	125.06	118.30
1	75-A	85	ASP	CB-CA-C	7.49	125.38	110.40
1	4-A	248	LEU	N-CA-C	-7.49	90.78	111.00
1	32-A	70	LEU	CA-CB-CG	7.48	132.51	115.30
1	37-A	116	ARG	NE-CZ-NH1	7.47	124.04	120.30
1	29-A	245	ARG	NE-CZ-NH2	-7.46	116.57	120.30
1	26-A	107	MET	CA-CB-CG	7.44	125.94	113.30
1	42-A	107	MET	CG-SD-CE	7.44	112.10	100.20
1	55-A	31	ARG	NE-CZ-NH2	-7.44	116.58	120.30
1	63-A	228	ARG	NE-CZ-NH2	-7.40	116.60	120.30
1	15-A	127	MET	CA-CB-CG	7.38	125.86	113.30
1	72-A	110	ARG	NE-CZ-NH1	7.38	123.99	120.30
1	49-A	73	ARG	NE-CZ-NH2	-7.35	116.63	120.30
1	15-A	73	ARG	NE-CZ-NH2	-7.34	116.63	120.30
1	1-A	127	MET	CG-SD-CE	-7.32	88.48	100.20
1	63-A	215	ASN	N-CA-C	7.29	130.67	111.00
1	29-A	12	ASP	CB-CG-OD1	-7.24	111.78	118.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	31-A	127	MET	CA-CB-CG	7.23	125.60	113.30
1	68-A	31	ARG	NE-CZ-NH2	-7.22	116.69	120.30
1	14-A	131	MET	CG-SD-CE	-7.21	88.66	100.20
1	44-A	46	ARG	NE-CZ-NH2	-7.21	116.69	120.30
1	24-A	31	ARG	NE-CZ-NH1	7.21	123.90	120.30
1	31-A	110	ARG	NE-CZ-NH2	7.20	123.90	120.30
1	51-A	157	LEU	CA-CB-CG	7.18	131.82	115.30
1	62-A	262	TYR	C-N-CD	7.18	143.47	128.40
1	44-A	235	ARG	NE-CZ-NH1	7.16	123.88	120.30
1	66-A	228	ARG	NE-CZ-NH1	-7.16	116.72	120.30
1	75-A	127	MET	CG-SD-CE	-7.13	88.79	100.20
1	60-A	46	ARG	NE-CZ-NH2	-7.12	116.74	120.30
1	16-A	66	SER	CB-CA-C	-7.12	96.58	110.10
1	41-A	143	ARG	NE-CZ-NH1	-7.10	116.75	120.30
1	2-A	94	ASP	CB-CG-OD1	7.09	124.68	118.30
1	58-A	262	TYR	C-N-CD	-7.08	105.01	120.60
1	43-A	46	ARG	NE-CZ-NH1	7.07	123.84	120.30
1	24-A	256	ARG	NE-CZ-NH1	7.07	123.83	120.30
1	41-A	46	ARG	NE-CZ-NH2	-7.07	116.77	120.30
1	53-A	163	SER	N-CA-C	-7.04	91.98	111.00
1	26-A	157	LEU	CB-CG-CD2	7.02	122.94	111.00
1	27-A	250	GLY	N-CA-C	-7.01	95.58	113.10
1	73-A	127	MET	CG-SD-CE	-6.99	89.02	100.20
1	1-A	214	PRO	N-CA-C	6.99	130.27	112.10
1	4-A	66	SER	CB-CA-C	-6.98	96.84	110.10
1	44-A	46	ARG	NE-CZ-NH1	6.97	123.78	120.30
1	45-A	127	MET	CA-CB-CG	6.96	125.14	113.30
1	7-A	138	ARG	CG-CD-NE	6.95	126.40	111.80
1	16-A	143	ARG	NE-CZ-NH1	6.94	123.77	120.30
1	11-A	127	MET	CA-CB-CG	6.93	125.08	113.30
1	14-A	46	ARG	NE-CZ-NH1	6.91	123.75	120.30
1	72-A	116	ARG	NE-CZ-NH2	-6.90	116.85	120.30
1	28-A	116	ARG	NE-CZ-NH1	6.89	123.75	120.30
1	60-A	201	LEU	CB-CG-CD1	6.89	122.72	111.00
1	24-A	256	ARG	NE-CZ-NH2	-6.89	116.86	120.30
1	70-A	73	ARG	NE-CZ-NH2	-6.87	116.86	120.30
1	66-A	31	ARG	NE-CZ-NH2	-6.85	116.87	120.30
1	15-A	157	LEU	CB-CG-CD2	6.84	122.63	111.00
1	51-A	107	MET	CG-SD-CE	-6.84	89.26	100.20
1	75-A	127	MET	CA-CB-CG	6.83	124.92	113.30
1	44-A	107	MET	CA-CB-CG	6.83	124.92	113.30
1	51-A	31	ARG	NE-CZ-NH1	-6.82	116.89	120.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	33-A	73	ARG	NE-CZ-NH2	6.81	123.71	120.30
1	44-A	73	ARG	NE-CZ-NH2	-6.80	116.90	120.30
1	23-A	110	ARG	NE-CZ-NH2	-6.80	116.90	120.30
1	55-A	138	ARG	NE-CZ-NH1	6.80	123.70	120.30
1	48-A	116	ARG	NE-CZ-NH1	6.79	123.70	120.30
1	5-A	127	MET	CA-CB-CG	6.79	124.84	113.30
1	14-A	243	GLY	N-CA-C	6.79	130.07	113.10
1	15-A	243	GLY	C-N-CD	-6.78	105.68	120.60
1	69-A	73	ARG	NE-CZ-NH1	6.77	123.69	120.30
1	52-A	63	THR	N-CA-C	6.76	129.25	111.00
1	28-A	157	LEU	CA-CB-CG	6.76	130.84	115.30
1	74-A	14	LEU	CA-CB-CG	6.75	130.83	115.30
1	30-A	70	LEU	CB-CG-CD2	-6.74	99.54	111.00
1	26-A	245	ARG	N-CA-C	6.72	129.15	111.00
1	52-A	256	ARG	NE-CZ-NH2	-6.71	116.94	120.30
1	9-A	107	MET	CG-SD-CE	-6.71	89.47	100.20
1	6-A	245	ARG	N-CA-C	-6.70	92.91	111.00
1	14-A	244	PRO	N-CA-C	6.70	129.52	112.10
1	43-A	110	ARG	CG-CD-NE	6.70	125.86	111.80
1	29-A	12	ASP	CB-CG-OD2	6.65	124.28	118.30
1	46-A	143	ARG	N-CA-CB	-6.64	98.64	110.60
1	25-A	157	LEU	CB-CG-CD2	6.64	122.29	111.00
1	71-A	248	LEU	CA-CB-CG	6.64	130.57	115.30
1	42-A	127	MET	CA-CB-CG	6.63	124.58	113.30
1	58-A	107	MET	CA-CB-CG	6.62	124.56	113.30
1	69-A	228	ARG	CD-NE-CZ	6.62	132.86	123.60
1	44-A	131	MET	CG-SD-CE	-6.61	89.62	100.20
1	40-A	262	TYR	CA-CB-CG	6.61	125.96	113.40
1	13-A	127	MET	CB-CG-SD	6.60	132.20	112.40
1	1-A	215	ASN	N-CA-C	6.59	128.81	111.00
1	7-A	248	LEU	N-CA-C	-6.59	93.20	111.00
1	43-A	143	ARG	N-CA-C	6.59	128.79	111.00
1	30-A	245	ARG	NE-CZ-NH2	-6.58	117.01	120.30
1	43-A	142	GLN	CB-CA-C	6.56	123.52	110.40
1	60-A	138	ARG	CA-CB-CG	6.54	127.78	113.40
1	5-A	46	ARG	NE-CZ-NH1	6.53	123.57	120.30
1	29-A	245	ARG	CB-CA-C	-6.53	97.33	110.40
1	46-A	143	ARG	CB-CG-CD	6.50	128.51	111.60
1	1-A	63	THR	CB-CA-C	-6.50	94.06	111.60
1	57-A	31	ARG	NE-CZ-NH2	-6.48	117.06	120.30
1	11-A	246	ASP	CB-CG-OD2	6.46	124.12	118.30
1	55-A	143	ARG	NE-CZ-NH2	-6.46	117.07	120.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	33-A	143	ARG	NE-CZ-NH1	6.46	123.53	120.30
1	9-A	31	ARG	CG-CD-NE	6.46	125.36	111.80
1	33-A	228	ARG	CB-CG-CD	6.46	128.38	111.60
1	52-A	107	MET	CG-SD-CE	-6.42	89.92	100.20
1	36-A	228	ARG	NE-CZ-NH2	6.42	123.51	120.30
1	22-A	248	LEU	CA-CB-CG	6.41	130.04	115.30
1	18-A	107	MET	CB-CG-SD	-6.39	93.23	112.40
1	23-A	73	ARG	NE-CZ-NH1	6.39	123.49	120.30
1	52-A	256	ARG	NE-CZ-NH1	6.38	123.49	120.30
1	28-A	157	LEU	CB-CG-CD2	6.38	121.85	111.00
1	62-A	214	PRO	N-CA-C	6.38	128.68	112.10
1	43-A	110	ARG	NE-CZ-NH1	6.37	123.49	120.30
1	75-A	243	GLY	C-N-CD	-6.36	106.61	120.60
1	59-A	64	GLU	CA-CB-CG	6.35	127.38	113.40
1	47-A	143	ARG	C-N-CD	-6.34	106.65	120.60
1	36-A	116	ARG	NE-CZ-NH1	6.34	123.47	120.30
1	72-A	157	LEU	CB-CG-CD2	6.34	121.78	111.00
1	28-A	31	ARG	NE-CZ-NH1	-6.33	117.13	120.30
1	65-A	215	ASN	C-N-CA	6.33	137.53	121.70
1	4-A	244	PRO	CA-N-CD	-6.31	102.67	111.50
1	41-A	143	ARG	NE-CZ-NH2	6.30	123.45	120.30
1	65-A	216	LYS	N-CA-C	6.29	128.00	111.00
1	63-A	262	TYR	CA-CB-CG	6.28	125.34	113.40
1	15-A	131	MET	CB-CG-SD	6.28	131.24	112.40
1	17-A	157	LEU	CA-CB-CG	6.26	129.71	115.30
1	68-A	147	LYS	CD-CE-NZ	6.26	126.10	111.70
1	6-A	46	ARG	CG-CD-NE	6.25	124.93	111.80
1	29-A	127	MET	CA-CB-CG	6.24	123.90	113.30
1	12-A	221	TYR	CB-CG-CD1	6.24	124.74	121.00
1	20-A	107	MET	CG-SD-CE	-6.22	90.25	100.20
1	37-A	262	TYR	CA-CB-CG	6.21	125.21	113.40
1	7-A	138	ARG	CB-CG-CD	6.21	127.75	111.60
1	71-A	127	MET	CG-SD-CE	-6.21	90.26	100.20
1	10-A	244	PRO	N-CA-C	6.20	128.21	112.10
1	42-A	146	LEU	N-CA-C	-6.19	94.28	111.00
1	61-A	217	ILE	N-CA-C	6.19	127.70	111.00
1	1-A	243	GLY	N-CA-C	-6.18	97.64	113.10
1	2-A	25	SER	N-CA-CB	6.18	119.77	110.50
1	39-A	31	ARG	NE-CZ-NH1	6.17	123.39	120.30
1	51-A	105	ASN	CB-CA-C	6.17	122.74	110.40
1	42-A	46	ARG	NE-CZ-NH1	6.17	123.38	120.30
1	38-A	110	ARG	NE-CZ-NH2	-6.16	117.22	120.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	36-A	143	ARG	CG-CD-NE	6.16	124.73	111.80
1	35-A	31	ARG	NE-CZ-NH2	-6.15	117.22	120.30
1	6-A	11	THR	N-CA-C	6.15	127.60	111.00
1	55-A	64	GLU	O-C-N	6.14	132.52	122.70
1	50-A	5	GLU	CA-CB-CG	6.13	126.89	113.40
1	50-A	142	GLN	CA-CB-CG	6.13	126.90	113.40
1	60-A	70	LEU	CB-CG-CD1	6.13	121.42	111.00
1	40-A	107	MET	CB-CA-C	-6.12	98.15	110.40
1	74-A	228	ARG	CB-CG-CD	6.12	127.50	111.60
1	10-A	262	TYR	CB-CG-CD1	-6.11	117.33	121.00
1	24-A	248	LEU	CA-CB-CG	6.11	129.36	115.30
1	41-A	144	PRO	CA-N-CD	-6.11	102.95	111.50
1	33-A	234	THR	CB-CA-C	-6.10	95.13	111.60
1	67-A	107	MET	CG-SD-CE	6.10	109.96	100.20
1	76-A	127	MET	CG-SD-CE	6.10	109.96	100.20
1	2-A	214	PRO	CB-CA-C	-6.10	96.76	112.00
1	75-A	245	ARG	N-CA-C	-6.09	94.56	111.00
1	72-A	127	MET	CB-CA-C	-6.08	98.23	110.40
1	45-A	31	ARG	NE-CZ-NH2	-6.08	117.26	120.30
1	28-A	116	ARG	NE-CZ-NH2	-6.08	117.26	120.30
1	1-A	31	ARG	NE-CZ-NH2	-6.08	117.26	120.30
1	64-A	216	LYS	N-CA-C	6.07	127.39	111.00
1	4-A	247	GLY	N-CA-C	6.07	128.27	113.10
1	66-A	214	PRO	N-CA-C	6.06	127.87	112.10
1	18-A	107	MET	CG-SD-CE	6.06	109.89	100.20
1	42-A	144	PRO	N-CA-C	6.06	127.85	112.10
1	41-A	252	VAL	CB-CA-C	-6.04	99.93	111.40
1	55-A	63	THR	CB-CA-C	-6.01	95.36	111.60
1	76-A	256	ARG	NE-CZ-NH1	6.00	123.30	120.30
1	12-A	251	GLU	CB-CA-C	-5.99	98.42	110.40
1	8-A	54	VAL	CG1-CB-CG2	5.95	120.42	110.90
1	9-A	70	LEU	CA-CB-CG	5.95	128.97	115.30
1	57-A	31	ARG	NE-CZ-NH1	5.94	123.27	120.30
1	22-A	249	PHE	CB-CG-CD2	-5.94	116.64	120.80
1	21-A	31	ARG	NE-CZ-NH2	-5.94	117.33	120.30
1	11-A	110	ARG	NE-CZ-NH1	5.93	123.27	120.30
1	8-A	70	LEU	CA-CB-CG	5.92	128.91	115.30
1	34-A	228	ARG	NE-CZ-NH2	-5.91	117.34	120.30
1	60-A	31	ARG	NE-CZ-NH1	5.91	123.25	120.30
1	47-A	215	ASN	N-CA-C	5.90	126.93	111.00
1	36-A	262	TYR	C-N-CD	-5.89	107.64	120.60
1	11-A	262	TYR	C-N-CD	-5.89	107.65	120.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	19-A	70	LEU	CA-CB-CG	5.88	128.82	115.30
1	61-A	228	ARG	CG-CD-NE	5.87	124.13	111.80
1	40-A	46	ARG	NE-CZ-NH2	-5.86	117.37	120.30
1	41-A	18	ARG	NE-CZ-NH2	-5.84	117.38	120.30
1	65-A	228	ARG	NE-CZ-NH1	5.84	123.22	120.30
1	54-A	46	ARG	NE-CZ-NH2	-5.84	117.38	120.30
1	1-A	235	ARG	NE-CZ-NH1	-5.84	117.38	120.30
1	63-A	262	TYR	CB-CG-CD1	5.83	124.50	121.00
1	73-A	248	LEU	CA-CB-CG	5.83	128.71	115.30
1	36-A	157	LEU	CA-CB-CG	5.83	128.70	115.30
1	5-A	248	LEU	N-CA-C	-5.83	95.27	111.00
1	48-A	70	LEU	CA-CB-CG	5.83	128.70	115.30
1	58-A	43	TYR	CB-CG-CD1	5.83	124.50	121.00
1	58-A	245	ARG	NE-CZ-NH2	-5.83	117.39	120.30
1	60-A	46	ARG	CG-CD-NE	-5.82	99.57	111.80
1	15-A	138	ARG	NE-CZ-NH1	-5.82	117.39	120.30
1	53-A	110	ARG	NE-CZ-NH2	-5.82	117.39	120.30
1	77-A	251	GLU	CB-CA-C	5.80	122.00	110.40
1	30-A	46	ARG	CB-CA-C	-5.79	98.83	110.40
1	7-A	138	ARG	NE-CZ-NH2	-5.78	117.41	120.30
1	17-A	165	THR	CB-CA-C	-5.78	96.00	111.60
1	44-A	262	TYR	CA-CB-CG	5.78	124.37	113.40
1	45-A	107	MET	CA-CB-CG	5.77	123.12	113.30
1	35-A	66	SER	N-CA-CB	5.77	119.15	110.50
1	39-A	28	ASN	CB-CA-C	-5.75	98.90	110.40
1	59-A	213	ILE	CB-CA-C	5.74	123.09	111.60
1	55-A	64	GLU	C-N-CA	5.74	136.06	121.70
1	27-A	262	TYR	C-N-CD	-5.74	107.98	120.60
1	50-A	147	LYS	CD-CE-NZ	5.73	124.89	111.70
1	38-A	18	ARG	CA-CB-CG	5.72	126.00	113.40
1	44-A	131	MET	CB-CG-SD	5.72	129.57	112.40
1	62-A	138	ARG	NE-CZ-NH2	5.72	123.16	120.30
1	47-A	27	GLU	C-N-CA	-5.72	107.41	121.70
1	73-A	127	MET	CB-CG-SD	-5.71	95.25	112.40
1	53-A	262	TYR	CB-CG-CD1	5.70	124.42	121.00
1	8-A	138	ARG	NE-CZ-NH2	-5.70	117.45	120.30
1	27-A	262	TYR	CA-CB-CG	5.70	124.22	113.40
1	21-A	70	LEU	CB-CG-CD2	5.70	120.68	111.00
1	68-A	31	ARG	NE-CZ-NH1	5.70	123.15	120.30
1	2-A	213	ILE	C-N-CD	-5.69	108.08	120.60
1	52-A	157	LEU	CA-CB-CG	5.69	128.39	115.30
1	72-A	195	SER	CB-CA-C	-5.68	99.31	110.10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	31-A	31	ARG	NE-CZ-NH2	-5.68	117.46	120.30
1	5-A	61	THR	N-CA-C	-5.68	95.67	111.00
1	17-A	248	LEU	CA-CB-CG	5.67	128.35	115.30
1	30-A	262	TYR	N-CA-C	5.67	126.30	111.00
1	57-A	228	ARG	NE-CZ-NH1	5.66	123.13	120.30
1	39-A	138	ARG	NE-CZ-NH2	-5.66	117.47	120.30
1	6-A	138	ARG	NE-CZ-NH1	5.66	123.13	120.30
1	55-A	204	ASP	CB-CG-OD1	-5.64	113.23	118.30
1	75-A	253	GLU	N-CA-C	5.64	126.22	111.00
1	14-A	105	ASN	CB-CA-C	5.63	121.65	110.40
1	76-A	54	VAL	CG1-CB-CG2	5.62	119.90	110.90
1	42-A	127	MET	CB-CG-SD	5.62	129.26	112.40
1	8-A	244	PRO	N-CA-C	5.62	126.70	112.10
1	55-A	31	ARG	CD-NE-CZ	5.62	131.46	123.60
1	57-A	18	ARG	NE-CZ-NH1	5.61	123.10	120.30
1	9-A	131	MET	CG-SD-CE	-5.59	91.25	100.20
1	31-A	262	TYR	CA-CB-CG	5.59	124.03	113.40
1	31-A	249	PHE	N-CA-C	5.59	126.08	111.00
1	2-A	251	GLU	CB-CA-C	-5.58	99.23	110.40
1	72-A	244	PRO	N-CA-C	5.57	126.59	112.10
1	26-A	262	TYR	CA-CB-CG	5.57	123.99	113.40
1	16-A	250	GLY	N-CA-C	-5.57	99.18	113.10
1	66-A	131	MET	CG-SD-CE	-5.57	91.29	100.20
1	12-A	85	ASP	CB-CG-OD2	-5.56	113.29	118.30
1	51-A	222	SER	CB-CA-C	5.56	120.67	110.10
1	48-A	127	MET	CG-SD-CE	5.56	109.10	100.20
1	74-A	228	ARG	NE-CZ-NH1	5.54	123.07	120.30
1	64-A	157	LEU	CA-CB-CG	5.54	128.03	115.30
1	40-A	201	LEU	CB-CG-CD1	5.53	120.41	111.00
1	25-A	251	GLU	N-CA-CB	5.52	120.54	110.60
1	71-A	110	ARG	NE-CZ-NH2	-5.52	117.54	120.30
1	65-A	116	ARG	NE-CZ-NH2	-5.52	117.54	120.30
1	1-A	256	ARG	NE-CZ-NH1	5.51	123.06	120.30
1	8-A	31	ARG	NE-CZ-NH2	-5.51	117.54	120.30
1	63-A	231	ASP	CB-CG-OD2	-5.51	113.34	118.30
1	54-A	66	SER	N-CA-C	5.51	125.88	111.00
1	56-A	14	LEU	CB-CG-CD2	5.51	120.36	111.00
1	12-A	131	MET	CG-SD-CE	-5.50	91.39	100.20
1	70-A	107	MET	CG-SD-CE	5.50	109.01	100.20
1	31-A	116	ARG	NE-CZ-NH1	5.50	123.05	120.30
1	5-A	246	ASP	N-CA-C	5.50	125.84	111.00
1	65-A	228	ARG	NE-CZ-NH2	-5.49	117.55	120.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	55-A	31	ARG	CG-CD-NE	5.49	123.33	111.80
1	34-A	256	ARG	NE-CZ-NH1	5.49	123.05	120.30
1	8-A	138	ARG	CG-CD-NE	5.49	123.32	111.80
1	49-A	245	ARG	N-CA-C	5.49	125.81	111.00
1	66-A	31	ARG	NE-CZ-NH1	5.49	123.04	120.30
1	48-A	138	ARG	NE-CZ-NH1	5.48	123.04	120.30
1	67-A	70	LEU	CA-CB-CG	5.48	127.91	115.30
1	23-A	245	ARG	NE-CZ-NH1	5.47	123.04	120.30
1	53-A	31	ARG	NE-CZ-NH1	5.47	123.03	120.30
1	42-A	145	ASP	CB-CG-OD1	5.47	123.22	118.30
1	42-A	228	ARG	NE-CZ-NH2	-5.46	117.57	120.30
1	54-A	235	ARG	NE-CZ-NH2	5.46	123.03	120.30
1	57-A	107	MET	CB-CG-SD	-5.46	96.02	112.40
1	57-A	18	ARG	NE-CZ-NH2	-5.46	117.57	120.30
1	8-A	246	ASP	CB-CG-OD1	5.46	123.21	118.30
1	59-A	46	ARG	NE-CZ-NH2	-5.46	117.57	120.30
1	52-A	116	ARG	NE-CZ-NH1	5.44	123.02	120.30
1	55-A	190	ASN	CB-CA-C	5.43	121.27	110.40
1	60-A	107	MET	CG-SD-CE	-5.43	91.51	100.20
1	55-A	5	GLU	CA-CB-CG	5.42	125.33	113.40
1	20-A	247	GLY	N-CA-C	-5.41	99.58	113.10
1	45-A	143	ARG	N-CA-C	5.41	125.60	111.00
1	57-A	213	ILE	CB-CA-C	-5.41	100.79	111.60
1	16-A	157	LEU	CB-CG-CD2	5.40	120.19	111.00
1	6-A	244	PRO	N-CA-C	5.40	126.15	112.10
1	4-A	12	ASP	N-CA-CB	5.40	120.32	110.60
1	24-A	73	ARG	CG-CD-NE	5.39	123.13	111.80
1	10-A	70	LEU	CA-CB-CG	5.39	127.70	115.30
1	15-A	253	GLU	N-CA-C	5.39	125.55	111.00
1	58-A	94	ASP	CB-CA-C	5.39	121.17	110.40
1	75-A	256	ARG	NE-CZ-NH2	-5.38	117.61	120.30
1	18-A	138	ARG	CD-NE-CZ	5.38	131.13	123.60
1	75-A	248	LEU	CA-CB-CG	5.38	127.67	115.30
1	36-A	35	SER	N-CA-C	-5.37	96.50	111.00
1	50-A	186	LYS	CD-CE-NZ	5.37	124.05	111.70
1	37-A	70	LEU	CB-CG-CD1	-5.37	101.87	111.00
1	67-A	228	ARG	CB-CG-CD	5.37	125.56	111.60
1	6-A	61	THR	N-CA-C	-5.36	96.53	111.00
1	52-A	116	ARG	NE-CZ-NH2	-5.35	117.62	120.30
1	40-A	14	LEU	CB-CG-CD2	5.35	120.09	111.00
1	48-A	228	ARG	CD-NE-CZ	5.35	131.09	123.60
1	30-A	253	GLU	N-CA-C	-5.34	96.57	111.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	11-A	110	ARG	NE-CZ-NH2	-5.33	117.63	120.30
1	52-A	62	GLY	N-CA-C	5.33	126.42	113.10
1	70-A	73	ARG	NE-CZ-NH1	5.32	122.96	120.30
1	24-A	46	ARG	CG-CD-NE	5.32	122.97	111.80
1	59-A	256	ARG	NE-CZ-NH1	5.31	122.95	120.30
1	34-A	228	ARG	NE-CZ-NH1	5.30	122.95	120.30
1	45-A	147	LYS	CD-CE-NZ	5.29	123.87	111.70
1	5-A	263	PRO	CA-N-CD	-5.29	104.09	111.50
1	47-A	107	MET	CG-SD-CE	-5.29	91.73	100.20
1	27-A	248	LEU	CA-CB-CG	-5.29	103.14	115.30
1	69-A	138	ARG	NE-CZ-NH1	5.29	122.94	120.30
1	43-A	109	ASN	N-CA-CB	5.29	120.11	110.60
1	70-A	157	LEU	CA-CB-CG	5.28	127.45	115.30
1	49-A	73	ARG	NE-CZ-NH1	5.28	122.94	120.30
1	53-A	262	TYR	CB-CG-CD2	-5.28	117.83	121.00
1	8-A	143	ARG	NE-CZ-NH1	5.27	122.94	120.30
1	2-A	5	GLU	CA-CB-CG	5.26	124.97	113.40
1	46-A	31	ARG	N-CA-CB	-5.26	101.14	110.60
1	65-A	141	SER	CB-CA-C	-5.24	100.15	110.10
1	50-A	222	SER	CB-CA-C	5.24	120.05	110.10
1	46-A	247	GLY	N-CA-C	-5.23	100.02	113.10
1	6-A	127	MET	CG-SD-CE	-5.22	91.84	100.20
1	49-A	143	ARG	CB-CA-C	5.22	120.84	110.40
1	56-A	73	ARG	NE-CZ-NH2	-5.22	117.69	120.30
1	47-A	214	PRO	C-N-CA	-5.22	108.66	121.70
1	48-A	245	ARG	CG-CD-NE	-5.21	100.86	111.80
1	12-A	221	TYR	CB-CG-CD2	-5.21	117.88	121.00
1	76-A	145	ASP	CB-CG-OD2	5.21	122.99	118.30
1	43-A	110	ARG	CB-CA-C	5.20	120.79	110.40
1	5-A	244	PRO	N-CA-C	5.20	125.61	112.10
1	14-A	131	MET	CB-CG-SD	5.20	127.98	112.40
1	48-A	256	ARG	NE-CZ-NH1	5.20	122.90	120.30
1	5-A	63	THR	N-CA-C	5.19	125.01	111.00
1	71-A	262	TYR	N-CA-C	5.18	124.99	111.00
1	29-A	228	ARG	NE-CZ-NH1	-5.17	117.72	120.30
1	56-A	14	LEU	CA-CB-CG	5.17	127.19	115.30
1	59-A	217	ILE	CB-CA-C	-5.17	101.27	111.60
1	60-A	107	MET	CB-CA-C	-5.16	100.07	110.40
1	3-A	234	THR	CB-CA-C	-5.15	97.69	111.60
1	56-A	12	ASP	CB-CG-OD2	5.15	122.94	118.30
1	20-A	60	TYR	CA-CB-CG	5.15	123.18	113.40
1	67-A	131	MET	CB-CG-SD	-5.15	96.96	112.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	1-A	116	ARG	NE-CZ-NH1	5.14	122.87	120.30
1	57-A	250	GLY	N-CA-C	-5.14	100.24	113.10
1	41-A	247	GLY	N-CA-C	-5.14	100.25	113.10
1	11-A	143	ARG	NE-CZ-NH1	5.13	122.87	120.30
1	35-A	67	ILE	N-CA-CB	5.13	122.60	110.80
1	62-A	248	LEU	CA-CB-CG	5.13	127.10	115.30
1	77-A	251	GLU	CA-CB-CG	5.13	124.68	113.40
1	11-A	143	ARG	NE-CZ-NH2	-5.12	117.74	120.30
1	65-A	147	LYS	CD-CE-NZ	5.12	123.48	111.70
1	74-A	253	GLU	N-CA-C	5.12	124.83	111.00
1	73-A	72	GLU	OE1-CD-OE2	-5.12	117.16	123.30
1	62-A	25	SER	CB-CA-C	5.11	119.81	110.10
1	73-A	14	LEU	CA-CB-CG	5.11	127.06	115.30
1	18-A	131	MET	CB-CG-SD	-5.11	97.08	112.40
1	24-A	31	ARG	CA-CB-CG	5.11	124.63	113.40
1	24-A	31	ARG	CB-CG-CD	5.11	124.88	111.60
1	8-A	109	ASN	N-CA-C	5.10	124.77	111.00
1	62-A	16	GLU	CB-CA-C	-5.10	100.20	110.40
1	47-A	143	ARG	C-N-CA	5.10	143.41	122.00
1	7-A	117	SER	CB-CA-C	-5.09	100.42	110.10
1	38-A	131	MET	CB-CG-SD	-5.09	97.13	112.40
1	64-A	222	SER	CB-CA-C	-5.09	100.43	110.10
1	43-A	107	MET	CB-CG-SD	-5.09	97.14	112.40
1	18-A	247	GLY	N-CA-C	-5.08	100.39	113.10
1	19-A	247	GLY	N-CA-C	-5.08	100.39	113.10
1	22-A	249	PHE	CB-CG-CD1	5.08	124.36	120.80
1	45-A	212	ASN	CB-CA-C	-5.08	100.23	110.40
1	76-A	127	MET	CB-CA-C	5.08	120.56	110.40
1	18-A	157	LEU	CA-CB-CG	5.08	126.98	115.30
1	75-A	231	ASP	CB-CG-OD2	-5.08	113.73	118.30
1	59-A	46	ARG	NE-CZ-NH1	5.08	122.84	120.30
1	72-A	248	LEU	CB-CG-CD2	5.07	119.62	111.00
1	9-A	262	TYR	CA-CB-CG	5.07	123.03	113.40
1	11-A	70	LEU	CB-CG-CD2	-5.07	102.38	111.00
1	58-A	216	LYS	N-CA-C	5.07	124.68	111.00
1	74-A	14	LEU	CB-CG-CD2	5.06	119.61	111.00
1	73-A	165	THR	N-CA-C	-5.06	97.35	111.00
1	61-A	253	GLU	CA-CB-CG	5.05	124.51	113.40
1	48-A	116	ARG	CA-CB-CG	5.05	124.51	113.40
1	7-A	262	TYR	CA-CB-CG	5.05	122.99	113.40
1	45-A	127	MET	N-CA-CB	-5.04	101.52	110.60
1	73-A	15	LEU	CB-CA-C	-5.04	100.62	110.20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	68-A	109	ASN	CB-CA-C	-5.04	100.33	110.40
1	65-A	250	GLY	N-CA-C	5.03	125.68	113.10
1	67-A	60	TYR	CA-CB-CG	5.03	122.96	113.40
1	51-A	231	ASP	CB-CG-OD2	-5.03	113.78	118.30
1	29-A	116	ARG	NE-CZ-NH1	5.03	122.81	120.30
1	76-A	127	MET	CA-CB-CG	5.03	121.84	113.30
1	62-A	215	ASN	N-CA-C	5.02	124.56	111.00
1	38-A	256	ARG	NE-CZ-NH2	-5.02	117.79	120.30
1	62-A	195	SER	CB-CA-C	-5.01	100.57	110.10
1	17-A	63	THR	CB-CA-C	-5.01	98.07	111.60
1	40-A	138	ARG	CG-CD-NE	5.01	122.32	111.80
1	5-A	243	GLY	O-C-N	5.01	130.61	121.10
1	19-A	147	LYS	CD-CE-NZ	5.00	123.21	111.70
1	72-A	14	LEU	CA-CB-CG	5.00	126.81	115.30

There are no chirality outliers.

All (249) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	1-A	13	ALA	Peptide
1	1-A	214	PRO	Peptide
1	1-A	247	GLY	Peptide
1	1-A	250	GLY	Peptide
1	1-A	63	THR	Peptide
1	10-A	247	GLY	Peptide
1	10-A	248	LEU	Peptide
1	11-A	243	GLY	Peptide
1	11-A	244	PRO	Peptide
1	12-A	243	GLY	Peptide
1	12-A	244	PRO	Peptide
1	12-A	245	ARG	Peptide
1	12-A	246	ASP	Peptide
1	12-A	262	TYR	Peptide
1	14-A	1	ALA	Peptide
1	14-A	13	ALA	Peptide
1	14-A	250	GLY	Peptide
1	15-A	243	GLY	Peptide
1	15-A	252	VAL	Peptide
1	16-A	245	ARG	Peptide
1	17-A	248	LEU	Peptide
1	18-A	248	LEU	Peptide
1	19-A	1	ALA	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	19-A	247	GLY	Peptide
1	19-A	248	LEU	Peptide
1	19-A	71	GLY	Peptide
1	2-A	245	ARG	Peptide
1	2-A	261	PHE	Peptide
1	2-A	262	TYR	Peptide
1	20-A	247	GLY	Peptide
1	20-A	248	LEU	Peptide
1	21-A	244	PRO	Peptide
1	22-A	262	TYR	Peptide
1	23-A	248	LEU	Peptide
1	23-A	250	GLY	Peptide
1	23-A	251	GLU	Peptide
1	23-A	262	TYR	Peptide
1	24-A	245	ARG	Peptide
1	24-A	247	GLY	Peptide
1	24-A	250	GLY	Peptide
1	24-A	251	GLU	Peptide
1	25-A	244	PRO	Peptide
1	25-A	250	GLY	Peptide
1	25-A	262	TYR	Peptide
1	26-A	244	PRO	Peptide
1	26-A	245	ARG	Peptide
1	26-A	261	PHE	Peptide
1	26-A	262	TYR	Peptide
1	27-A	248	LEU	Peptide
1	27-A	253	GLU	Peptide
1	27-A	262	TYR	Peptide
1	28-A	244	PRO	Peptide
1	28-A	248	LEU	Peptide
1	28-A	249	PHE	Peptide
1	28-A	250	GLY	Peptide
1	29-A	214	PRO	Peptide
1	29-A	244	PRO	Peptide
1	29-A	245	ARG	Peptide
1	29-A	248	LEU	Peptide
1	29-A	262	TYR	Peptide
1	3-A	11	THR	Peptide
1	3-A	244	PRO	Peptide
1	3-A	247	GLY	Peptide
1	3-A	251	GLU	Peptide
1	3-A	262	TYR	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	31-A	253	GLU	Peptide
1	32-A	248	LEU	Peptide
1	32-A	250	GLY	Peptide
1	34-A	249	PHE	Peptide
1	34-A	67	ILE	Peptide
1	35-A	249	PHE	Peptide
1	35-A	262	TYR	Peptide
1	36-A	250	GLY	Peptide
1	36-A	262	TYR	Peptide
1	37-A	141	SER	Peptide
1	37-A	250	GLY	Peptide
1	37-A	262	TYR	Peptide
1	38-A	28	ASN	Peptide
1	39-A	142	GLN	Peptide
1	39-A	144	PRO	Peptide
1	4-A	206	ALA	Peptide
1	4-A	245	ARG	Peptide
1	4-A	247	GLY	Peptide
1	4-A	60	TYR	Peptide
1	4-A	62	GLY	Peptide
1	40-A	261	PHE	Peptide
1	40-A	262	TYR	Peptide
1	41-A	109	ASN	Peptide
1	41-A	142	GLN	Peptide
1	42-A	145	ASP	Peptide
1	42-A	247	GLY	Peptide
1	42-A	262	TYR	Peptide
1	43-A	108	ILE	Peptide
1	43-A	144	PRO	Mainchain,Peptide
1	43-A	247	GLY	Peptide
1	43-A	248	LEU	Peptide
1	44-A	141	SER	Peptide
1	44-A	142	GLN	Peptide
1	44-A	143	ARG	Peptide
1	44-A	144	PRO	Peptide
1	44-A	215	ASN	Peptide
1	44-A	244	PRO	Peptide
1	44-A	247	GLY	Peptide
1	44-A	248	LEU	Peptide
1	44-A	9	ASN	Peptide
1	45-A	142	GLN	Peptide
1	45-A	143	ARG	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	45-A	16	GLU	Peptide
1	45-A	215	ASN	Peptide
1	45-A	245	ARG	Peptide
1	45-A	247	GLY	Peptide
1	45-A	261	PHE	Peptide
1	45-A	262	TYR	Peptide
1	46-A	142	GLN	Mainchain,Peptide
1	46-A	143	ARG	Peptide
1	46-A	262	TYR	Peptide
1	47-A	142	GLN	Peptide
1	47-A	143	ARG	Peptide
1	47-A	261	PHE	Peptide
1	47-A	8	PRO	Peptide
1	48-A	142	GLN	Peptide
1	48-A	248	LEU	Peptide
1	48-A	253	GLU	Peptide
1	48-A	8	PRO	Peptide
1	49-A	248	LEU	Peptide
1	5-A	17	ALA	Peptide
1	5-A	243	GLY	Peptide
1	5-A	245	ARG	Peptide
1	5-A	246	ASP	Peptide
1	5-A	247	GLY	Peptide
1	5-A	253	GLU	Peptide
1	5-A	60	TYR	Peptide
1	5-A	61	THR	Peptide
1	5-A	62	GLY	Peptide
1	50-A	1	ALA	Peptide
1	50-A	253	GLU	Peptide
1	50-A	262	TYR	Peptide
1	51-A	261	PHE	Peptide
1	52-A	245	ARG	Peptide
1	52-A	251	GLU	Peptide
1	52-A	262	TYR	Peptide
1	53-A	245	ARG	Peptide
1	53-A	247	GLY	Peptide
1	53-A	248	LEU	Peptide
1	53-A	249	PHE	Peptide
1	53-A	251	GLU	Peptide
1	53-A	262	TYR	Peptide
1	53-A	62	GLY	Peptide
1	53-A	64	GLU	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	54-A	245	ARG	Peptide
1	54-A	251	GLU	Peptide
1	54-A	262	TYR	Peptide
1	55-A	14	LEU	Peptide
1	55-A	249	PHE	Peptide
1	55-A	262	TYR	Peptide
1	55-A	63	THR	Peptide
1	56-A	249	PHE	Peptide
1	56-A	251	GLU	Peptide
1	57-A	215	ASN	Peptide
1	57-A	244	PRO	Peptide
1	57-A	250	GLY	Peptide
1	57-A	251	GLU	Peptide
1	58-A	215	ASN	Peptide
1	58-A	262	TYR	Peptide
1	59-A	213	ILE	Peptide
1	59-A	215	ASN	Peptide
1	59-A	3	PRO	Peptide
1	6-A	125	ALA	Peptide
1	6-A	17	ALA	Peptide
1	6-A	243	GLY	Peptide
1	6-A	245	ARG	Peptide
1	6-A	248	LEU	Peptide
1	6-A	249	PHE	Peptide
1	6-A	60	TYR	Peptide
1	6-A	62	GLY	Mainchain,Peptide
1	60-A	1	ALA	Peptide
1	60-A	244	PRO	Peptide
1	61-A	214	PRO	Peptide
1	61-A	217	ILE	Peptide
1	61-A	8	PRO	Peptide
1	62-A	215	ASN	Peptide
1	62-A	244	PRO	Peptide
1	62-A	245	ARG	Peptide
1	62-A	246	ASP	Peptide
1	62-A	248	LEU	Peptide
1	63-A	17	ALA	Peptide
1	63-A	214	PRO	Peptide
1	63-A	215	ASN	Peptide
1	63-A	247	GLY	Peptide
1	64-A	214	PRO	Peptide
1	64-A	215	ASN	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	64-A	249	PHE	Peptide
1	64-A	254	GLU	Peptide
1	65-A	215	ASN	Peptide
1	65-A	251	GLU	Peptide
1	65-A	63	THR	Peptide
1	66-A	245	ARG	Peptide
1	66-A	253	GLU	Peptide
1	67-A	245	ARG	Peptide
1	67-A	246	ASP	Peptide
1	67-A	251	GLU	Peptide
1	68-A	251	GLU	Peptide
1	68-A	261	PHE	Peptide
1	69-A	14	LEU	Peptide
1	69-A	17	ALA	Peptide
1	69-A	245	ARG	Peptide
1	69-A	261	PHE	Peptide
1	7-A	243	GLY	Peptide
1	7-A	247	GLY	Peptide
1	7-A	248	LEU	Peptide
1	70-A	14	LEU	Peptide
1	70-A	15	LEU	Peptide
1	70-A	261	PHE	Peptide
1	70-A	262	TYR	Peptide
1	71-A	251	GLU	Peptide
1	72-A	10	PRO	Peptide
1	72-A	238	GLN	Peptide
1	73-A	12	ASP	Peptide
1	73-A	15	LEU	Peptide
1	73-A	243	GLY	Peptide
1	73-A	245	ARG	Peptide
1	73-A	247	GLY	Peptide
1	73-A	248	LEU	Peptide
1	74-A	14	LEU	Peptide
1	74-A	17	ALA	Peptide
1	74-A	243	GLY	Peptide
1	74-A	245	ARG	Peptide
1	75-A	243	GLY	Peptide
1	75-A	245	ARG	Peptide
1	75-A	250	GLY	Peptide
1	75-A	252	VAL	Peptide
1	75-A	262	TYR	Peptide
1	75-A	9	ASN	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	76-A	239	PHE	Peptide
1	76-A	248	LEU	Peptide
1	77-A	1	ALA	Peptide
1	77-A	239	PHE	Peptide
1	77-A	243	GLY	Peptide
1	77-A	245	ARG	Peptide
1	77-A	252	VAL	Peptide
1	77-A	253	GLU	Peptide
1	8-A	243	GLY	Peptide
1	8-A	245	ARG	Peptide
1	9-A	17	ALA	Peptide
1	9-A	244	PRO	Peptide
1	9-A	261	PHE	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	2011	1969	1963	0	0
1	2-A	2011	1969	1963	0	0
1	3-A	2011	1969	1963	0	0
1	4-A	2011	1969	1963	0	0
1	5-A	2011	1969	1963	0	0
1	6-A	2011	1969	1963	0	0
1	7-A	2011	1969	1963	0	0
1	8-A	2011	1969	1963	0	0
1	9-A	2011	1969	1963	0	0
1	10-A	2011	1969	1963	0	0
1	11-A	2011	1969	1963	0	0
1	12-A	2011	1969	1963	0	0
1	13-A	2011	1969	1963	0	0
1	14-A	2011	1969	1963	0	0
1	15-A	2011	1969	1963	0	0
1	16-A	2011	1969	1963	0	0
1	17-A	2011	1969	1963	0	0
1	18-A	2011	1969	1963	0	0
1	19-A	2011	1969	1963	0	0
1	20-A	2011	1969	1963	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	21-A	2011	1969	1963	0	0
1	22-A	2011	1969	1963	0	0
1	23-A	2011	1969	1963	0	0
1	24-A	2011	1969	1963	0	0
1	25-A	2011	1969	1963	0	0
1	26-A	2011	1969	1963	0	0
1	27-A	2011	1969	1963	0	0
1	28-A	2011	1969	1963	0	0
1	29-A	2011	1969	1963	0	0
1	30-A	2011	1969	1963	0	0
1	31-A	2011	1969	1963	0	0
1	32-A	2011	1969	1963	0	0
1	33-A	2011	1969	1963	0	0
1	34-A	2011	1969	1963	0	0
1	35-A	2011	1969	1963	0	0
1	36-A	2011	1969	1963	0	0
1	37-A	2011	1969	1963	0	0
1	38-A	2011	1969	1963	0	0
1	39-A	2011	1969	1963	0	0
1	40-A	2011	1969	1963	0	0
1	41-A	2011	1969	1963	0	0
1	42-A	2011	1969	1963	0	0
1	43-A	2011	1969	1963	0	0
1	44-A	2011	1969	1963	0	0
1	45-A	2011	1969	1963	0	0
1	46-A	2011	1969	1963	0	0
1	47-A	2011	1969	1963	0	0
1	48-A	2011	1969	1963	0	0
1	49-A	2011	1969	1963	0	0
1	50-A	2011	1969	1963	0	0
1	51-A	2011	1969	1963	0	0
1	52-A	2011	1969	1963	0	0
1	53-A	2011	1969	1963	0	0
1	54-A	2011	1969	1963	0	0
1	55-A	2011	1969	1963	0	0
1	56-A	2011	1969	1963	0	0
1	57-A	2011	1969	1963	0	0
1	58-A	2011	1969	1963	0	0
1	59-A	2011	1969	1963	0	0
1	60-A	2011	1969	1963	0	0
1	61-A	2011	1969	1963	0	0
1	62-A	2011	1969	1963	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	63-A	2011	1969	1963	0	0
1	64-A	2011	1969	1963	0	0
1	65-A	2011	1969	1963	0	0
1	66-A	2011	1969	1963	0	0
1	67-A	2011	1969	1963	0	0
1	68-A	2011	1969	1963	0	0
1	69-A	2011	1969	1963	0	0
1	70-A	2011	1969	1963	0	0
1	71-A	2011	1969	1963	0	0
1	72-A	2011	1969	1963	0	0
1	73-A	2011	1969	1963	0	0
1	74-A	2011	1969	1963	0	0
1	75-A	2011	1969	1963	0	0
1	76-A	2011	1969	1963	0	0
1	77-A	2011	1969	1963	0	0
2	1-A	5	0	0	0	0
2	2-A	5	0	0	0	0
2	3-A	5	0	0	0	0
2	4-A	5	0	0	0	0
2	5-A	5	0	0	0	0
2	6-A	5	0	0	0	0
2	7-A	5	0	0	0	0
2	8-A	5	0	0	0	0
2	9-A	5	0	0	0	0
2	10-A	5	0	0	0	0
2	11-A	5	0	0	0	0
2	12-A	5	0	0	0	0
2	13-A	5	0	0	0	0
2	14-A	5	0	0	0	0
2	15-A	5	0	0	0	0
2	16-A	5	0	0	0	0
2	17-A	5	0	0	0	0
2	18-A	5	0	0	0	0
2	19-A	5	0	0	0	0
2	20-A	5	0	0	0	0
2	21-A	5	0	0	0	0
2	22-A	5	0	0	0	0
2	23-A	5	0	0	0	0
2	24-A	5	0	0	0	0
2	25-A	5	0	0	0	0
2	26-A	5	0	0	0	0
2	27-A	5	0	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
2	28-A	5	0	0	0	0
2	29-A	5	0	0	0	0
2	30-A	5	0	0	0	0
2	31-A	5	0	0	0	0
2	32-A	5	0	0	0	0
2	33-A	5	0	0	0	0
2	34-A	5	0	0	0	0
2	35-A	5	0	0	0	0
2	36-A	5	0	0	0	0
2	37-A	5	0	0	0	0
2	38-A	5	0	0	0	0
2	39-A	5	0	0	0	0
2	40-A	5	0	0	0	0
2	41-A	5	0	0	0	0
2	42-A	5	0	0	0	0
2	43-A	5	0	0	0	0
2	44-A	5	0	0	0	0
2	45-A	5	0	0	0	0
2	46-A	5	0	0	0	0
2	47-A	5	0	0	0	0
2	48-A	5	0	0	0	0
2	49-A	5	0	0	0	0
2	50-A	5	0	0	0	0
2	51-A	5	0	0	0	0
2	52-A	5	0	0	0	0
2	53-A	5	0	0	0	0
2	54-A	5	0	0	0	0
2	55-A	5	0	0	0	0
2	56-A	5	0	0	0	0
2	57-A	5	0	0	0	0
2	58-A	5	0	0	0	0
2	59-A	5	0	0	0	0
2	60-A	5	0	0	0	0
2	61-A	5	0	0	0	0
2	62-A	5	0	0	0	0
2	63-A	5	0	0	0	0
2	64-A	5	0	0	0	0
2	65-A	5	0	0	0	0
2	66-A	5	0	0	0	0
2	67-A	5	0	0	0	0
2	68-A	5	0	0	0	0
2	69-A	5	0	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
2	70-A	5	0	0	0	0
2	71-A	5	0	0	0	0
2	72-A	5	0	0	0	0
2	73-A	5	0	0	0	0
2	74-A	5	0	0	0	0
2	75-A	5	0	0	0	0
2	76-A	5	0	0	0	0
2	77-A	5	0	0	0	0
3	1-A	99	0	0	0	0
3	2-A	102	0	0	0	0
3	3-A	98	0	0	0	0
3	4-A	85	0	0	0	0
3	5-A	98	0	0	0	0
3	6-A	99	0	0	0	0
3	7-A	98	0	0	0	0
3	8-A	101	0	0	0	0
3	9-A	95	0	0	0	0
3	10-A	90	0	0	0	0
3	11-A	103	0	0	0	0
3	12-A	97	0	0	0	0
3	13-A	87	0	0	0	0
3	14-A	90	0	0	0	0
3	15-A	112	0	0	0	0
3	16-A	93	0	0	0	0
3	17-A	82	0	0	0	0
3	18-A	89	0	0	0	0
3	19-A	89	0	0	0	0
3	20-A	103	0	0	0	0
3	21-A	101	0	0	0	0
3	22-A	83	0	0	0	0
3	23-A	103	0	0	0	0
3	24-A	98	0	0	0	0
3	25-A	99	0	0	0	0
3	26-A	85	0	0	0	0
3	27-A	100	0	0	0	0
3	28-A	104	0	0	0	0
3	29-A	105	0	0	0	0
3	30-A	94	0	0	0	0
3	31-A	91	0	0	0	0
3	32-A	96	0	0	0	0
3	33-A	90	0	0	0	0
3	34-A	94	0	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
3	35-A	98	0	0	0	0
3	36-A	98	0	0	0	0
3	37-A	97	0	0	0	0
3	38-A	91	0	0	0	0
3	39-A	104	0	0	0	0
3	40-A	89	0	0	0	0
3	41-A	104	0	0	0	0
3	42-A	112	0	0	0	0
3	43-A	102	0	0	0	0
3	44-A	83	0	0	0	0
3	45-A	96	0	0	0	0
3	46-A	99	0	0	0	0
3	47-A	100	0	0	0	0
3	48-A	83	0	0	0	0
3	49-A	93	0	0	0	0
3	50-A	95	0	0	0	0
3	51-A	99	0	0	0	0
3	52-A	98	0	0	0	0
3	53-A	90	0	0	0	0
3	54-A	95	0	0	0	0
3	55-A	92	0	0	0	0
3	56-A	95	0	0	0	0
3	57-A	97	0	0	0	0
3	58-A	91	0	0	0	0
3	59-A	88	0	0	0	0
3	60-A	98	0	0	0	0
3	61-A	113	0	0	0	0
3	62-A	103	0	0	0	0
3	63-A	107	0	0	0	0
3	64-A	100	0	0	0	0
3	65-A	88	0	0	0	0
3	66-A	104	0	0	0	0
3	67-A	102	0	0	0	0
3	68-A	105	0	0	0	0
3	69-A	104	0	0	0	0
3	70-A	103	0	0	0	0
3	71-A	108	0	0	0	0
3	72-A	101	0	0	0	0
3	73-A	96	0	0	0	0
3	74-A	95	0	0	0	0
3	75-A	88	0	0	0	0
3	76-A	88	0	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
3	77-A	102	0	0	0	0
All	All	162679	151613	151151	0	0

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

There are no clashes within the asymmetric unit.

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	1-A	261/313 (83%)	242 (93%)	11 (4%)	8 (3%)	4 0
1	2-A	261/313 (83%)	239 (92%)	18 (7%)	4 (2%)	10 1
1	3-A	261/313 (83%)	238 (91%)	17 (6%)	6 (2%)	6 0
1	4-A	261/313 (83%)	237 (91%)	12 (5%)	12 (5%)	2 0
1	5-A	261/313 (83%)	233 (89%)	16 (6%)	12 (5%)	2 0
1	6-A	261/313 (83%)	239 (92%)	16 (6%)	6 (2%)	6 0
1	7-A	261/313 (83%)	247 (95%)	7 (3%)	7 (3%)	5 0
1	8-A	261/313 (83%)	243 (93%)	14 (5%)	4 (2%)	10 1
1	9-A	261/313 (83%)	240 (92%)	13 (5%)	8 (3%)	4 0
1	10-A	261/313 (83%)	248 (95%)	10 (4%)	3 (1%)	14 2
1	11-A	261/313 (83%)	242 (93%)	14 (5%)	5 (2%)	8 1
1	12-A	261/313 (83%)	243 (93%)	14 (5%)	4 (2%)	10 1
1	13-A	261/313 (83%)	243 (93%)	13 (5%)	5 (2%)	8 1
1	14-A	261/313 (83%)	244 (94%)	12 (5%)	5 (2%)	8 1
1	15-A	261/313 (83%)	244 (94%)	13 (5%)	4 (2%)	10 1
1	16-A	261/313 (83%)	240 (92%)	18 (7%)	3 (1%)	14 2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	17-A	261/313 (83%)	244 (94%)	13 (5%)	4 (2%)	10	1
1	18-A	261/313 (83%)	238 (91%)	16 (6%)	7 (3%)	5	0
1	19-A	261/313 (83%)	243 (93%)	15 (6%)	3 (1%)	14	2
1	20-A	261/313 (83%)	240 (92%)	18 (7%)	3 (1%)	14	2
1	21-A	261/313 (83%)	244 (94%)	13 (5%)	4 (2%)	10	1
1	22-A	261/313 (83%)	244 (94%)	14 (5%)	3 (1%)	14	2
1	23-A	261/313 (83%)	245 (94%)	10 (4%)	6 (2%)	6	0
1	24-A	261/313 (83%)	248 (95%)	9 (3%)	4 (2%)	10	1
1	25-A	261/313 (83%)	245 (94%)	13 (5%)	3 (1%)	14	2
1	26-A	261/313 (83%)	243 (93%)	14 (5%)	4 (2%)	10	1
1	27-A	261/313 (83%)	243 (93%)	11 (4%)	7 (3%)	5	0
1	28-A	261/313 (83%)	242 (93%)	13 (5%)	6 (2%)	6	0
1	29-A	261/313 (83%)	241 (92%)	18 (7%)	2 (1%)	19	4
1	30-A	261/313 (83%)	249 (95%)	6 (2%)	6 (2%)	6	0
1	31-A	261/313 (83%)	242 (93%)	9 (3%)	10 (4%)	3	0
1	32-A	261/313 (83%)	245 (94%)	10 (4%)	6 (2%)	6	0
1	33-A	261/313 (83%)	241 (92%)	12 (5%)	8 (3%)	4	0
1	34-A	261/313 (83%)	242 (93%)	11 (4%)	8 (3%)	4	0
1	35-A	261/313 (83%)	237 (91%)	19 (7%)	5 (2%)	8	1
1	36-A	261/313 (83%)	241 (92%)	15 (6%)	5 (2%)	8	1
1	37-A	261/313 (83%)	244 (94%)	11 (4%)	6 (2%)	6	0
1	38-A	261/313 (83%)	240 (92%)	15 (6%)	6 (2%)	6	0
1	39-A	261/313 (83%)	244 (94%)	12 (5%)	5 (2%)	8	1
1	40-A	261/313 (83%)	238 (91%)	16 (6%)	7 (3%)	5	0
1	41-A	261/313 (83%)	242 (93%)	13 (5%)	6 (2%)	6	0
1	42-A	261/313 (83%)	242 (93%)	12 (5%)	7 (3%)	5	0
1	43-A	261/313 (83%)	239 (92%)	13 (5%)	9 (3%)	3	0
1	44-A	261/313 (83%)	236 (90%)	14 (5%)	11 (4%)	3	0
1	45-A	261/313 (83%)	235 (90%)	16 (6%)	10 (4%)	3	0
1	46-A	261/313 (83%)	241 (92%)	13 (5%)	7 (3%)	5	0
1	47-A	261/313 (83%)	241 (92%)	13 (5%)	7 (3%)	5	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	48-A	261/313 (83%)	239 (92%)	14 (5%)	8 (3%)	4	0
1	49-A	261/313 (83%)	238 (91%)	13 (5%)	10 (4%)	3	0
1	50-A	261/313 (83%)	241 (92%)	13 (5%)	7 (3%)	5	0
1	51-A	261/313 (83%)	243 (93%)	12 (5%)	6 (2%)	6	0
1	52-A	261/313 (83%)	235 (90%)	14 (5%)	12 (5%)	2	0
1	53-A	261/313 (83%)	241 (92%)	10 (4%)	10 (4%)	3	0
1	54-A	261/313 (83%)	239 (92%)	11 (4%)	11 (4%)	3	0
1	55-A	261/313 (83%)	240 (92%)	12 (5%)	9 (3%)	3	0
1	56-A	261/313 (83%)	242 (93%)	8 (3%)	11 (4%)	3	0
1	57-A	261/313 (83%)	243 (93%)	8 (3%)	10 (4%)	3	0
1	58-A	261/313 (83%)	241 (92%)	11 (4%)	9 (3%)	3	0
1	59-A	261/313 (83%)	239 (92%)	16 (6%)	6 (2%)	6	0
1	60-A	261/313 (83%)	242 (93%)	11 (4%)	8 (3%)	4	0
1	61-A	261/313 (83%)	236 (90%)	17 (6%)	8 (3%)	4	0
1	62-A	261/313 (83%)	240 (92%)	11 (4%)	10 (4%)	3	0
1	63-A	261/313 (83%)	243 (93%)	13 (5%)	5 (2%)	8	1
1	64-A	261/313 (83%)	239 (92%)	15 (6%)	7 (3%)	5	0
1	65-A	261/313 (83%)	240 (92%)	11 (4%)	10 (4%)	3	0
1	66-A	261/313 (83%)	240 (92%)	13 (5%)	8 (3%)	4	0
1	67-A	261/313 (83%)	247 (95%)	9 (3%)	5 (2%)	8	1
1	68-A	261/313 (83%)	241 (92%)	17 (6%)	3 (1%)	14	2
1	69-A	261/313 (83%)	245 (94%)	14 (5%)	2 (1%)	19	4
1	70-A	261/313 (83%)	243 (93%)	11 (4%)	7 (3%)	5	0
1	71-A	261/313 (83%)	241 (92%)	12 (5%)	8 (3%)	4	0
1	72-A	261/313 (83%)	229 (88%)	19 (7%)	13 (5%)	2	0
1	73-A	261/313 (83%)	235 (90%)	14 (5%)	12 (5%)	2	0
1	74-A	261/313 (83%)	235 (90%)	17 (6%)	9 (3%)	3	0
1	75-A	261/313 (83%)	243 (93%)	12 (5%)	6 (2%)	6	0
1	76-A	261/313 (83%)	241 (92%)	12 (5%)	8 (3%)	4	0
1	77-A	261/313 (83%)	243 (93%)	12 (5%)	6 (2%)	6	0
All	All	20097/24101 (83%)	18565 (92%)	1007 (5%)	525 (3%)	5	0

All (525) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	215	ASN
1	1-A	244	PRO
1	1-A	248	LEU
1	3-A	2	ASN
1	3-A	244	PRO
1	4-A	63	THR
1	4-A	244	PRO
1	4-A	246	ASP
1	5-A	12	ASP
1	5-A	244	PRO
1	5-A	245	ARG
1	5-A	246	ASP
1	5-A	249	PHE
1	5-A	252	VAL
1	5-A	254	GLU
1	5-A	262	TYR
1	6-A	244	PRO
1	6-A	246	ASP
1	6-A	248	LEU
1	7-A	244	PRO
1	7-A	249	PHE
1	8-A	18	ARG
1	9-A	2	ASN
1	9-A	245	ARG
1	10-A	244	PRO
1	10-A	262	TYR
1	11-A	244	PRO
1	11-A	245	ARG
1	11-A	250	GLY
1	11-A	262	TYR
1	12-A	244	PRO
1	12-A	248	LEU
1	12-A	250	GLY
1	12-A	262	TYR
1	13-A	238	GLN
1	13-A	244	PRO
1	14-A	244	PRO
1	14-A	248	LEU
1	14-A	250	GLY
1	15-A	243	GLY
1	15-A	244	PRO
1	15-A	248	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	16-A	245	ARG
1	18-A	61	THR
1	18-A	72	GLU
1	18-A	195	SER
1	18-A	245	ARG
1	18-A	246	ASP
1	19-A	72	GLU
1	19-A	251	GLU
1	20-A	248	LEU
1	21-A	247	GLY
1	22-A	247	GLY
1	22-A	262	TYR
1	23-A	246	ASP
1	23-A	251	GLU
1	23-A	252	VAL
1	23-A	262	TYR
1	24-A	246	ASP
1	24-A	262	TYR
1	25-A	246	ASP
1	25-A	262	TYR
1	26-A	247	GLY
1	26-A	262	TYR
1	27-A	262	TYR
1	28-A	249	PHE
1	28-A	253	GLU
1	29-A	249	PHE
1	30-A	14	LEU
1	30-A	245	ARG
1	30-A	249	PHE
1	30-A	254	GLU
1	31-A	245	ARG
1	31-A	248	LEU
1	31-A	249	PHE
1	31-A	254	GLU
1	32-A	245	ARG
1	32-A	248	LEU
1	32-A	254	GLU
1	33-A	2	ASN
1	33-A	64	GLU
1	33-A	66	SER
1	33-A	248	LEU
1	34-A	64	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	34-A	66	SER
1	34-A	261	PHE
1	35-A	251	GLU
1	35-A	262	TYR
1	36-A	251	GLU
1	36-A	262	TYR
1	37-A	142	GLN
1	37-A	246	ASP
1	37-A	251	GLU
1	38-A	28	ASN
1	38-A	29	VAL
1	38-A	248	LEU
1	38-A	262	TYR
1	39-A	249	PHE
1	40-A	248	LEU
1	41-A	248	LEU
1	42-A	143	ARG
1	42-A	144	PRO
1	42-A	145	ASP
1	42-A	146	LEU
1	42-A	245	ARG
1	42-A	248	LEU
1	43-A	109	ASN
1	43-A	143	ARG
1	43-A	144	PRO
1	43-A	145	ASP
1	43-A	216	LYS
1	43-A	248	LEU
1	43-A	262	TYR
1	44-A	16	GLU
1	44-A	142	GLN
1	44-A	143	ARG
1	44-A	248	LEU
1	44-A	249	PHE
1	44-A	262	TYR
1	45-A	121	SER
1	45-A	215	ASN
1	45-A	245	ARG
1	45-A	246	ASP
1	45-A	248	LEU
1	45-A	262	TYR
1	46-A	64	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	46-A	215	ASN
1	46-A	248	LEU
1	46-A	262	TYR
1	47-A	143	ARG
1	47-A	216	LYS
1	47-A	262	TYR
1	48-A	249	PHE
1	48-A	262	TYR
1	49-A	142	GLN
1	49-A	143	ARG
1	49-A	245	ARG
1	49-A	246	ASP
1	49-A	249	PHE
1	50-A	244	PRO
1	50-A	254	GLU
1	50-A	262	TYR
1	51-A	249	PHE
1	51-A	251	GLU
1	51-A	252	VAL
1	52-A	63	THR
1	52-A	64	GLU
1	52-A	65	ALA
1	52-A	141	SER
1	52-A	246	ASP
1	52-A	248	LEU
1	52-A	252	VAL
1	52-A	262	TYR
1	53-A	66	SER
1	53-A	164	VAL
1	53-A	246	ASP
1	53-A	251	GLU
1	53-A	262	TYR
1	54-A	64	GLU
1	54-A	65	ALA
1	54-A	234	THR
1	54-A	247	GLY
1	54-A	248	LEU
1	54-A	262	TYR
1	55-A	65	ALA
1	55-A	252	VAL
1	55-A	262	TYR
1	56-A	249	PHE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	56-A	252	VAL
1	56-A	262	TYR
1	57-A	246	ASP
1	57-A	252	VAL
1	57-A	261	PHE
1	57-A	262	TYR
1	58-A	214	PRO
1	58-A	215	ASN
1	58-A	246	ASP
1	58-A	262	TYR
1	59-A	245	ARG
1	59-A	246	ASP
1	60-A	216	LYS
1	61-A	245	ARG
1	61-A	262	TYR
1	62-A	214	PRO
1	62-A	245	ARG
1	62-A	249	PHE
1	62-A	262	TYR
1	63-A	18	ARG
1	63-A	248	LEU
1	63-A	262	TYR
1	64-A	215	ASN
1	64-A	262	TYR
1	65-A	64	GLU
1	65-A	245	ARG
1	65-A	248	LEU
1	65-A	252	VAL
1	65-A	254	GLU
1	65-A	262	TYR
1	66-A	214	PRO
1	66-A	252	VAL
1	66-A	254	GLU
1	66-A	262	TYR
1	67-A	245	ARG
1	67-A	248	LEU
1	67-A	252	VAL
1	68-A	245	ARG
1	69-A	18	ARG
1	70-A	13	ALA
1	70-A	245	ARG
1	70-A	248	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	70-A	249	PHE
1	71-A	244	PRO
1	71-A	245	ARG
1	71-A	248	LEU
1	71-A	262	TYR
1	72-A	14	LEU
1	72-A	166	VAL
1	72-A	243	GLY
1	72-A	244	PRO
1	72-A	245	ARG
1	72-A	249	PHE
1	72-A	251	GLU
1	73-A	14	LEU
1	73-A	244	PRO
1	73-A	251	GLU
1	73-A	262	TYR
1	74-A	13	ALA
1	74-A	18	ARG
1	74-A	239	PHE
1	74-A	244	PRO
1	74-A	251	GLU
1	74-A	262	TYR
1	75-A	204	ASP
1	75-A	205	GLY
1	75-A	244	PRO
1	75-A	262	TYR
1	76-A	239	PHE
1	76-A	244	PRO
1	76-A	245	ARG
1	76-A	246	ASP
1	76-A	262	TYR
1	77-A	239	PHE
1	77-A	245	ARG
1	77-A	252	VAL
1	77-A	253	GLU
1	1-A	14	LEU
1	1-A	63	THR
1	2-A	234	THR
1	3-A	63	THR
1	3-A	234	THR
1	4-A	12	ASP
1	4-A	61	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	4-A	141	SER
1	4-A	250	GLY
1	5-A	18	ARG
1	5-A	253	GLU
1	6-A	16	GLU
1	7-A	12	ASP
1	7-A	247	GLY
1	8-A	249	PHE
1	9-A	18	ARG
1	9-A	61	THR
1	9-A	243	GLY
1	11-A	249	PHE
1	13-A	246	ASP
1	13-A	248	LEU
1	14-A	249	PHE
1	14-A	251	GLU
1	16-A	246	ASP
1	17-A	245	ARG
1	17-A	246	ASP
1	18-A	194	SER
1	22-A	249	PHE
1	23-A	2	ASN
1	26-A	249	PHE
1	26-A	261	PHE
1	27-A	244	PRO
1	27-A	245	ARG
1	27-A	247	GLY
1	27-A	250	GLY
1	28-A	247	GLY
1	28-A	252	VAL
1	28-A	254	GLU
1	29-A	254	GLU
1	30-A	246	ASP
1	30-A	251	GLU
1	31-A	19	SER
1	31-A	251	GLU
1	32-A	66	SER
1	33-A	245	ARG
1	33-A	252	VAL
1	33-A	261	PHE
1	34-A	245	ARG
1	34-A	252	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	36-A	66	SER
1	37-A	143	ARG
1	39-A	144	PRO
1	39-A	248	LEU
1	39-A	261	PHE
1	40-A	249	PHE
1	43-A	245	ARG
1	44-A	145	ASP
1	45-A	249	PHE
1	47-A	248	LEU
1	48-A	17	ALA
1	48-A	247	GLY
1	49-A	31	ARG
1	49-A	247	GLY
1	51-A	250	GLY
1	52-A	247	GLY
1	53-A	65	ALA
1	54-A	63	THR
1	54-A	246	ASP
1	54-A	249	PHE
1	55-A	247	GLY
1	56-A	245	ARG
1	56-A	248	LEU
1	57-A	18	ARG
1	57-A	249	PHE
1	58-A	3	PRO
1	58-A	249	PHE
1	59-A	214	PRO
1	60-A	214	PRO
1	60-A	215	ASN
1	60-A	245	ARG
1	60-A	261	PHE
1	61-A	214	PRO
1	62-A	215	ASN
1	62-A	216	LYS
1	62-A	248	LEU
1	62-A	250	GLY
1	63-A	216	LYS
1	64-A	15	LEU
1	64-A	61	THR
1	64-A	216	LYS
1	64-A	249	PHE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	66-A	246	ASP
1	66-A	248	LEU
1	67-A	195	SER
1	67-A	249	PHE
1	69-A	245	ARG
1	70-A	251	GLU
1	71-A	249	PHE
1	72-A	246	ASP
1	73-A	12	ASP
1	73-A	252	VAL
1	76-A	251	GLU
1	1-A	64	GLU
1	2-A	64	GLU
1	3-A	176	ASP
1	3-A	261	PHE
1	4-A	48	ASN
1	6-A	61	THR
1	8-A	2	ASN
1	13-A	13	ALA
1	17-A	244	PRO
1	20-A	249	PHE
1	20-A	250	GLY
1	25-A	261	PHE
1	32-A	251	GLU
1	34-A	67	ILE
1	35-A	245	ARG
1	36-A	9	ASN
1	36-A	19	SER
1	38-A	247	GLY
1	40-A	109	ASN
1	41-A	145	ASP
1	41-A	247	GLY
1	44-A	215	ASN
1	44-A	261	PHE
1	45-A	143	ARG
1	45-A	244	PRO
1	48-A	261	PHE
1	50-A	18	ARG
1	51-A	261	PHE
1	52-A	140	ALA
1	52-A	205	GLY
1	52-A	261	PHE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	53-A	64	GLU
1	55-A	64	GLU
1	57-A	2	ASN
1	57-A	214	PRO
1	57-A	215	ASN
1	58-A	17	ALA
1	58-A	248	LEU
1	60-A	262	TYR
1	61-A	61	THR
1	61-A	251	GLU
1	61-A	261	PHE
1	62-A	9	ASN
1	63-A	246	ASP
1	65-A	12	ASP
1	65-A	61	THR
1	66-A	249	PHE
1	68-A	61	THR
1	68-A	261	PHE
1	70-A	261	PHE
1	71-A	252	VAL
1	72-A	15	LEU
1	72-A	261	PHE
1	73-A	2	ASN
1	73-A	195	SER
1	76-A	253	GLU
1	2-A	244	PRO
1	4-A	140	ALA
1	4-A	245	ARG
1	4-A	249	PHE
1	7-A	2	ASN
1	7-A	9	ASN
1	9-A	262	TYR
1	10-A	246	ASP
1	15-A	31	ARG
1	16-A	244	PRO
1	18-A	261	PHE
1	21-A	249	PHE
1	23-A	261	PHE
1	27-A	249	PHE
1	27-A	261	PHE
1	31-A	9	ASN
1	31-A	18	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	31-A	261	PHE
1	32-A	249	PHE
1	33-A	67	ILE
1	35-A	66	SER
1	35-A	261	PHE
1	37-A	261	PHE
1	38-A	246	ASP
1	40-A	143	ARG
1	40-A	262	TYR
1	44-A	144	PRO
1	45-A	261	PHE
1	46-A	31	ARG
1	46-A	214	PRO
1	46-A	249	PHE
1	47-A	142	GLN
1	47-A	261	PHE
1	48-A	254	GLU
1	49-A	12	ASP
1	53-A	130	SER
1	55-A	191	SER
1	56-A	2	ASN
1	56-A	121	SER
1	57-A	245	ARG
1	58-A	252	VAL
1	60-A	121	SER
1	61-A	9	ASN
1	64-A	252	VAL
1	65-A	214	PRO
1	70-A	262	TYR
1	71-A	17	ALA
1	71-A	261	PHE
1	73-A	238	GLN
1	74-A	130	SER
1	74-A	249	PHE
1	75-A	246	ASP
1	75-A	251	GLU
1	1-A	243	GLY
1	2-A	246	ASP
1	5-A	10	PRO
1	6-A	18	ARG
1	8-A	247	GLY
1	9-A	141	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	9-A	176	ASP
1	17-A	262	TYR
1	24-A	2	ASN
1	24-A	130	SER
1	28-A	250	GLY
1	34-A	2	ASN
1	34-A	251	GLU
1	40-A	49	ASN
1	41-A	108	ILE
1	41-A	143	ARG
1	41-A	144	PRO
1	48-A	9	ASN
1	49-A	254	GLU
1	51-A	245	ARG
1	53-A	249	PHE
1	53-A	261	PHE
1	54-A	177	THR
1	55-A	13	ALA
1	55-A	249	PHE
1	56-A	18	ARG
1	56-A	130	SER
1	56-A	246	ASP
1	59-A	2	ASN
1	59-A	3	PRO
1	72-A	248	LEU
1	73-A	196	ILE
1	77-A	246	ASP
1	7-A	262	TYR
1	19-A	248	LEU
1	21-A	214	PRO
1	39-A	130	SER
1	42-A	247	GLY
1	44-A	10	PRO
1	50-A	2	ASN
1	50-A	243	GLY
1	50-A	261	PHE
1	56-A	72	GLU
1	59-A	262	TYR
1	60-A	2	ASN
1	65-A	215	ASN
1	66-A	250	GLY
1	72-A	239	PHE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	73-A	10	PRO
1	1-A	247	GLY
1	4-A	262	TYR
1	21-A	9	ASN
1	37-A	214	PRO
1	40-A	247	GLY
1	48-A	252	VAL
1	61-A	247	GLY
1	74-A	205	GLY
1	77-A	244	PRO
1	54-A	250	GLY
1	55-A	250	GLY
1	62-A	247	GLY
1	72-A	2	ASN
1	5-A	250	GLY
1	31-A	247	GLY
1	49-A	262	TYR
1	47-A	9	ASN
1	43-A	247	GLY
1	73-A	243	GLY
1	76-A	252	VAL

5.3.2 Protein sidechains [i](#)

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	216/254 (85%)	190 (88%)	26 (12%)	5 0
1	2-A	216/254 (85%)	192 (89%)	24 (11%)	6 0
1	3-A	216/254 (85%)	195 (90%)	21 (10%)	8 0
1	4-A	216/254 (85%)	191 (88%)	25 (12%)	5 0
1	5-A	216/254 (85%)	197 (91%)	19 (9%)	10 1
1	6-A	216/254 (85%)	189 (88%)	27 (12%)	4 0
1	7-A	216/254 (85%)	197 (91%)	19 (9%)	10 1
1	8-A	216/254 (85%)	196 (91%)	20 (9%)	9 0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	9-A	216/254 (85%)	186 (86%)	30 (14%)	3	0
1	10-A	216/254 (85%)	192 (89%)	24 (11%)	6	0
1	11-A	216/254 (85%)	189 (88%)	27 (12%)	4	0
1	12-A	216/254 (85%)	189 (88%)	27 (12%)	4	0
1	13-A	216/254 (85%)	192 (89%)	24 (11%)	6	0
1	14-A	216/254 (85%)	186 (86%)	30 (14%)	3	0
1	15-A	216/254 (85%)	191 (88%)	25 (12%)	5	0
1	16-A	216/254 (85%)	192 (89%)	24 (11%)	6	0
1	17-A	216/254 (85%)	196 (91%)	20 (9%)	9	0
1	18-A	216/254 (85%)	191 (88%)	25 (12%)	5	0
1	19-A	216/254 (85%)	198 (92%)	18 (8%)	11	1
1	20-A	216/254 (85%)	188 (87%)	28 (13%)	4	0
1	21-A	216/254 (85%)	194 (90%)	22 (10%)	7	0
1	22-A	216/254 (85%)	187 (87%)	29 (13%)	4	0
1	23-A	216/254 (85%)	192 (89%)	24 (11%)	6	0
1	24-A	216/254 (85%)	193 (89%)	23 (11%)	6	0
1	25-A	216/254 (85%)	195 (90%)	21 (10%)	8	0
1	26-A	216/254 (85%)	196 (91%)	20 (9%)	9	0
1	27-A	216/254 (85%)	189 (88%)	27 (12%)	4	0
1	28-A	216/254 (85%)	200 (93%)	16 (7%)	13	1
1	29-A	216/254 (85%)	191 (88%)	25 (12%)	5	0
1	30-A	216/254 (85%)	200 (93%)	16 (7%)	13	1
1	31-A	216/254 (85%)	198 (92%)	18 (8%)	11	1
1	32-A	216/254 (85%)	189 (88%)	27 (12%)	4	0
1	33-A	216/254 (85%)	192 (89%)	24 (11%)	6	0
1	34-A	216/254 (85%)	190 (88%)	26 (12%)	5	0
1	35-A	216/254 (85%)	189 (88%)	27 (12%)	4	0
1	36-A	216/254 (85%)	197 (91%)	19 (9%)	10	1
1	37-A	216/254 (85%)	196 (91%)	20 (9%)	9	0
1	38-A	216/254 (85%)	193 (89%)	23 (11%)	6	0
1	39-A	216/254 (85%)	191 (88%)	25 (12%)	5	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	40-A	216/254 (85%)	188 (87%)	28 (13%)	4	0
1	41-A	216/254 (85%)	197 (91%)	19 (9%)	10	1
1	42-A	216/254 (85%)	194 (90%)	22 (10%)	7	0
1	43-A	216/254 (85%)	198 (92%)	18 (8%)	11	1
1	44-A	216/254 (85%)	184 (85%)	32 (15%)	3	0
1	45-A	216/254 (85%)	190 (88%)	26 (12%)	5	0
1	46-A	216/254 (85%)	185 (86%)	31 (14%)	3	0
1	47-A	216/254 (85%)	191 (88%)	25 (12%)	5	0
1	48-A	216/254 (85%)	193 (89%)	23 (11%)	6	0
1	49-A	216/254 (85%)	188 (87%)	28 (13%)	4	0
1	50-A	216/254 (85%)	195 (90%)	21 (10%)	8	0
1	51-A	216/254 (85%)	190 (88%)	26 (12%)	5	0
1	52-A	216/254 (85%)	198 (92%)	18 (8%)	11	1
1	53-A	216/254 (85%)	192 (89%)	24 (11%)	6	0
1	54-A	216/254 (85%)	186 (86%)	30 (14%)	3	0
1	55-A	216/254 (85%)	187 (87%)	29 (13%)	4	0
1	56-A	216/254 (85%)	187 (87%)	29 (13%)	4	0
1	57-A	216/254 (85%)	194 (90%)	22 (10%)	7	0
1	58-A	216/254 (85%)	193 (89%)	23 (11%)	6	0
1	59-A	216/254 (85%)	187 (87%)	29 (13%)	4	0
1	60-A	216/254 (85%)	189 (88%)	27 (12%)	4	0
1	61-A	216/254 (85%)	192 (89%)	24 (11%)	6	0
1	62-A	216/254 (85%)	184 (85%)	32 (15%)	3	0
1	63-A	216/254 (85%)	196 (91%)	20 (9%)	9	0
1	64-A	216/254 (85%)	198 (92%)	18 (8%)	11	1
1	65-A	216/254 (85%)	191 (88%)	25 (12%)	5	0
1	66-A	216/254 (85%)	190 (88%)	26 (12%)	5	0
1	67-A	216/254 (85%)	194 (90%)	22 (10%)	7	0
1	68-A	216/254 (85%)	200 (93%)	16 (7%)	13	1
1	69-A	216/254 (85%)	200 (93%)	16 (7%)	13	1
1	70-A	216/254 (85%)	191 (88%)	25 (12%)	5	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	71-A	216/254 (85%)	195 (90%)	21 (10%)	8	0
1	72-A	216/254 (85%)	189 (88%)	27 (12%)	4	0
1	73-A	216/254 (85%)	192 (89%)	24 (11%)	6	0
1	74-A	216/254 (85%)	198 (92%)	18 (8%)	11	1
1	75-A	216/254 (85%)	191 (88%)	25 (12%)	5	0
1	76-A	216/254 (85%)	192 (89%)	24 (11%)	6	0
1	77-A	216/254 (85%)	188 (87%)	28 (13%)	4	0
All	All	16632/19558 (85%)	14796 (89%)	1836 (11%)	6	0

All (1836) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	14	LEU
1	1-A	16	GLU
1	1-A	18	ARG
1	1-A	23	SER
1	1-A	26	GLU
1	1-A	31	ARG
1	1-A	33	SER
1	1-A	66	SER
1	1-A	70	LEU
1	1-A	72	GLU
1	1-A	73	ARG
1	1-A	94	ASP
1	1-A	105	ASN
1	1-A	110	ARG
1	1-A	113	SER
1	1-A	124	LEU
1	1-A	127	MET
1	1-A	142	GLN
1	1-A	152	LEU
1	1-A	186	LYS
1	1-A	212	ASN
1	1-A	215	ASN
1	1-A	216	LYS
1	1-A	246	ASP
1	1-A	254	GLU
1	1-A	256	ARG
1	2-A	14	LEU
1	2-A	18	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	2-A	19	SER
1	2-A	24	VAL
1	2-A	31	ARG
1	2-A	48	ASN
1	2-A	63	THR
1	2-A	64	GLU
1	2-A	70	LEU
1	2-A	72	GLU
1	2-A	73	ARG
1	2-A	92	GLN
1	2-A	98	GLU
1	2-A	116	ARG
1	2-A	126	VAL
1	2-A	127	MET
1	2-A	152	LEU
1	2-A	163	SER
1	2-A	183	THR
1	2-A	195	SER
1	2-A	203	LEU
1	2-A	214	PRO
1	2-A	248	LEU
1	2-A	253	GLU
1	3-A	2	ASN
1	3-A	14	LEU
1	3-A	18	ARG
1	3-A	19	SER
1	3-A	31	ARG
1	3-A	48	ASN
1	3-A	64	GLU
1	3-A	74	ILE
1	3-A	116	ARG
1	3-A	127	MET
1	3-A	141	SER
1	3-A	152	LEU
1	3-A	177	THR
1	3-A	203	LEU
1	3-A	204	ASP
1	3-A	215	ASN
1	3-A	232	ASN
1	3-A	245	ARG
1	3-A	248	LEU
1	3-A	251	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	3-A	253	GLU
1	4-A	2	ASN
1	4-A	11	THR
1	4-A	12	ASP
1	4-A	14	LEU
1	4-A	18	ARG
1	4-A	19	SER
1	4-A	26	GLU
1	4-A	31	ARG
1	4-A	48	ASN
1	4-A	67	ILE
1	4-A	107	MET
1	4-A	114	THR
1	4-A	142	GLN
1	4-A	147	LYS
1	4-A	186	LYS
1	4-A	195	SER
1	4-A	202	GLU
1	4-A	215	ASN
1	4-A	232	ASN
1	4-A	244	PRO
1	4-A	246	ASP
1	4-A	248	LEU
1	4-A	249	PHE
1	4-A	252	VAL
1	4-A	254	GLU
1	5-A	2	ASN
1	5-A	11	THR
1	5-A	15	LEU
1	5-A	18	ARG
1	5-A	32	LEU
1	5-A	67	ILE
1	5-A	92	GLN
1	5-A	94	ASP
1	5-A	105	ASN
1	5-A	122	SER
1	5-A	127	MET
1	5-A	147	LYS
1	5-A	152	LEU
1	5-A	195	SER
1	5-A	203	LEU
1	5-A	213	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	5-A	232	ASN
1	5-A	245	ARG
1	5-A	252	VAL
1	6-A	2	ASN
1	6-A	15	LEU
1	6-A	18	ARG
1	6-A	23	SER
1	6-A	35	SER
1	6-A	63	THR
1	6-A	64	GLU
1	6-A	73	ARG
1	6-A	85	ASP
1	6-A	88	THR
1	6-A	94	ASP
1	6-A	109	ASN
1	6-A	127	MET
1	6-A	138	ARG
1	6-A	141	SER
1	6-A	147	LYS
1	6-A	174	ASP
1	6-A	183	THR
1	6-A	186	LYS
1	6-A	203	LEU
1	6-A	213	ILE
1	6-A	215	ASN
1	6-A	251	GLU
1	6-A	252	VAL
1	6-A	253	GLU
1	6-A	254	GLU
1	6-A	262	TYR
1	7-A	9	ASN
1	7-A	15	LEU
1	7-A	18	ARG
1	7-A	28	ASN
1	7-A	67	ILE
1	7-A	73	ARG
1	7-A	85	ASP
1	7-A	101	ASN
1	7-A	127	MET
1	7-A	183	THR
1	7-A	186	LYS
1	7-A	201	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	7-A	213	ILE
1	7-A	215	ASN
1	7-A	218	ILE
1	7-A	234	THR
1	7-A	238	GLN
1	7-A	249	PHE
1	7-A	262	TYR
1	8-A	2	ASN
1	8-A	18	ARG
1	8-A	28	ASN
1	8-A	31	ARG
1	8-A	48	ASN
1	8-A	67	ILE
1	8-A	70	LEU
1	8-A	72	GLU
1	8-A	101	ASN
1	8-A	110	ARG
1	8-A	127	MET
1	8-A	138	ARG
1	8-A	143	ARG
1	8-A	177	THR
1	8-A	201	LEU
1	8-A	209	PHE
1	8-A	213	ILE
1	8-A	215	ASN
1	8-A	238	GLN
1	8-A	262	TYR
1	9-A	2	ASN
1	9-A	12	ASP
1	9-A	18	ARG
1	9-A	19	SER
1	9-A	26	GLU
1	9-A	31	ARG
1	9-A	48	ASN
1	9-A	61	THR
1	9-A	64	GLU
1	9-A	66	SER
1	9-A	67	ILE
1	9-A	72	GLU
1	9-A	87	ILE
1	9-A	94	ASP
1	9-A	101	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	9-A	105	ASN
1	9-A	109	ASN
1	9-A	110	ARG
1	9-A	127	MET
1	9-A	136	SER
1	9-A	141	SER
1	9-A	177	THR
1	9-A	213	ILE
1	9-A	215	ASN
1	9-A	216	LYS
1	9-A	238	GLN
1	9-A	248	LEU
1	9-A	253	GLU
1	9-A	262	TYR
1	9-A	263	PRO
1	10-A	2	ASN
1	10-A	10	PRO
1	10-A	18	ARG
1	10-A	23	SER
1	10-A	31	ARG
1	10-A	61	THR
1	10-A	66	SER
1	10-A	67	ILE
1	10-A	70	LEU
1	10-A	88	THR
1	10-A	127	MET
1	10-A	174	ASP
1	10-A	177	THR
1	10-A	186	LYS
1	10-A	197	SER
1	10-A	213	ILE
1	10-A	215	ASN
1	10-A	216	LYS
1	10-A	238	GLN
1	10-A	245	ARG
1	10-A	246	ASP
1	10-A	251	GLU
1	10-A	254	GLU
1	10-A	262	TYR
1	11-A	2	ASN
1	11-A	26	GLU
1	11-A	28	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	11-A	30	SER
1	11-A	31	ARG
1	11-A	35	SER
1	11-A	67	ILE
1	11-A	72	GLU
1	11-A	85	ASP
1	11-A	98	GLU
1	11-A	116	ARG
1	11-A	121	SER
1	11-A	131	MET
1	11-A	137	LEU
1	11-A	143	ARG
1	11-A	162	SER
1	11-A	163	SER
1	11-A	201	LEU
1	11-A	202	GLU
1	11-A	213	ILE
1	11-A	215	ASN
1	11-A	216	LYS
1	11-A	234	THR
1	11-A	238	GLN
1	11-A	245	ARG
1	11-A	248	LEU
1	11-A	251	GLU
1	12-A	9	ASN
1	12-A	18	ARG
1	12-A	25	SER
1	12-A	28	ASN
1	12-A	31	ARG
1	12-A	35	SER
1	12-A	48	ASN
1	12-A	56	ILE
1	12-A	70	LEU
1	12-A	72	GLU
1	12-A	85	ASP
1	12-A	101	ASN
1	12-A	121	SER
1	12-A	127	MET
1	12-A	131	MET
1	12-A	138	ARG
1	12-A	177	THR
1	12-A	195	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	12-A	201	LEU
1	12-A	203	LEU
1	12-A	212	ASN
1	12-A	213	ILE
1	12-A	215	ASN
1	12-A	221	TYR
1	12-A	244	PRO
1	12-A	245	ARG
1	12-A	261	PHE
1	13-A	2	ASN
1	13-A	14	LEU
1	13-A	18	ARG
1	13-A	19	SER
1	13-A	23	SER
1	13-A	26	GLU
1	13-A	30	SER
1	13-A	31	ARG
1	13-A	46	ARG
1	13-A	48	ASN
1	13-A	50	THR
1	13-A	73	ARG
1	13-A	88	THR
1	13-A	107	MET
1	13-A	126	VAL
1	13-A	131	MET
1	13-A	136	SER
1	13-A	138	ARG
1	13-A	143	ARG
1	13-A	163	SER
1	13-A	183	THR
1	13-A	213	ILE
1	13-A	215	ASN
1	13-A	245	ARG
1	14-A	2	ASN
1	14-A	14	LEU
1	14-A	18	ARG
1	14-A	26	GLU
1	14-A	28	ASN
1	14-A	31	ARG
1	14-A	63	THR
1	14-A	70	LEU
1	14-A	73	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	14-A	109	ASN
1	14-A	131	MET
1	14-A	138	ARG
1	14-A	143	ARG
1	14-A	150	ILE
1	14-A	163	SER
1	14-A	165	THR
1	14-A	178	ILE
1	14-A	186	LYS
1	14-A	203	LEU
1	14-A	213	ILE
1	14-A	215	ASN
1	14-A	216	LYS
1	14-A	222	SER
1	14-A	232	ASN
1	14-A	244	PRO
1	14-A	245	ARG
1	14-A	248	LEU
1	14-A	249	PHE
1	14-A	251	GLU
1	14-A	253	GLU
1	15-A	18	ARG
1	15-A	28	ASN
1	15-A	31	ARG
1	15-A	32	LEU
1	15-A	48	ASN
1	15-A	50	THR
1	15-A	66	SER
1	15-A	73	ARG
1	15-A	92	GLN
1	15-A	109	ASN
1	15-A	127	MET
1	15-A	131	MET
1	15-A	138	ARG
1	15-A	143	ARG
1	15-A	157	LEU
1	15-A	158	ASN
1	15-A	201	LEU
1	15-A	213	ILE
1	15-A	216	LYS
1	15-A	245	ARG
1	15-A	246	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	15-A	248	LEU
1	15-A	252	VAL
1	15-A	254	GLU
1	15-A	256	ARG
1	16-A	2	ASN
1	16-A	12	ASP
1	16-A	15	LEU
1	16-A	18	ARG
1	16-A	26	GLU
1	16-A	31	ARG
1	16-A	35	SER
1	16-A	48	ASN
1	16-A	72	GLU
1	16-A	92	GLN
1	16-A	98	GLU
1	16-A	110	ARG
1	16-A	138	ARG
1	16-A	147	LYS
1	16-A	157	LEU
1	16-A	158	ASN
1	16-A	165	THR
1	16-A	183	THR
1	16-A	194	SER
1	16-A	213	ILE
1	16-A	215	ASN
1	16-A	245	ARG
1	16-A	248	LEU
1	16-A	251	GLU
1	17-A	15	LEU
1	17-A	18	ARG
1	17-A	28	ASN
1	17-A	31	ARG
1	17-A	46	ARG
1	17-A	48	ASN
1	17-A	87	ILE
1	17-A	88	THR
1	17-A	105	ASN
1	17-A	116	ARG
1	17-A	127	MET
1	17-A	131	MET
1	17-A	157	LEU
1	17-A	158	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	17-A	162	SER
1	17-A	165	THR
1	17-A	215	ASN
1	17-A	216	LYS
1	17-A	245	ARG
1	17-A	248	LEU
1	18-A	2	ASN
1	18-A	18	ARG
1	18-A	23	SER
1	18-A	31	ARG
1	18-A	32	LEU
1	18-A	48	ASN
1	18-A	61	THR
1	18-A	64	GLU
1	18-A	70	LEU
1	18-A	101	ASN
1	18-A	131	MET
1	18-A	141	SER
1	18-A	147	LYS
1	18-A	157	LEU
1	18-A	165	THR
1	18-A	175	LEU
1	18-A	183	THR
1	18-A	201	LEU
1	18-A	213	ILE
1	18-A	215	ASN
1	18-A	216	LYS
1	18-A	217	ILE
1	18-A	246	ASP
1	18-A	252	VAL
1	18-A	253	GLU
1	19-A	2	ASN
1	19-A	14	LEU
1	19-A	18	ARG
1	19-A	19	SER
1	19-A	31	ARG
1	19-A	64	GLU
1	19-A	70	LEU
1	19-A	73	ARG
1	19-A	101	ASN
1	19-A	116	ARG
1	19-A	131	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	19-A	163	SER
1	19-A	165	THR
1	19-A	194	SER
1	19-A	215	ASN
1	19-A	216	LYS
1	19-A	246	ASP
1	19-A	252	VAL
1	20-A	2	ASN
1	20-A	9	ASN
1	20-A	18	ARG
1	20-A	31	ARG
1	20-A	32	LEU
1	20-A	35	SER
1	20-A	60	TYR
1	20-A	64	GLU
1	20-A	70	LEU
1	20-A	73	ARG
1	20-A	88	THR
1	20-A	93	PRO
1	20-A	107	MET
1	20-A	114	THR
1	20-A	124	LEU
1	20-A	131	MET
1	20-A	142	GLN
1	20-A	147	LYS
1	20-A	157	LEU
1	20-A	209	PHE
1	20-A	213	ILE
1	20-A	215	ASN
1	20-A	216	LYS
1	20-A	238	GLN
1	20-A	245	ARG
1	20-A	248	LEU
1	20-A	249	PHE
1	20-A	252	VAL
1	21-A	9	ASN
1	21-A	15	LEU
1	21-A	28	ASN
1	21-A	31	ARG
1	21-A	35	SER
1	21-A	70	LEU
1	21-A	85	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	21-A	107	MET
1	21-A	114	THR
1	21-A	116	ARG
1	21-A	141	SER
1	21-A	146	LEU
1	21-A	157	LEU
1	21-A	165	THR
1	21-A	201	LEU
1	21-A	213	ILE
1	21-A	215	ASN
1	21-A	238	GLN
1	21-A	245	ARG
1	21-A	246	ASP
1	21-A	248	LEU
1	21-A	251	GLU
1	22-A	9	ASN
1	22-A	14	LEU
1	22-A	15	LEU
1	22-A	25	SER
1	22-A	28	ASN
1	22-A	30	SER
1	22-A	31	ARG
1	22-A	48	ASN
1	22-A	70	LEU
1	22-A	73	ARG
1	22-A	92	GLN
1	22-A	107	MET
1	22-A	113	SER
1	22-A	114	THR
1	22-A	117	SER
1	22-A	121	SER
1	22-A	141	SER
1	22-A	145	ASP
1	22-A	157	LEU
1	22-A	194	SER
1	22-A	201	LEU
1	22-A	213	ILE
1	22-A	238	GLN
1	22-A	245	ARG
1	22-A	246	ASP
1	22-A	248	LEU
1	22-A	249	PHE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	22-A	251	GLU
1	22-A	253	GLU
1	23-A	14	LEU
1	23-A	15	LEU
1	23-A	23	SER
1	23-A	26	GLU
1	23-A	31	ARG
1	23-A	35	SER
1	23-A	48	ASN
1	23-A	61	THR
1	23-A	66	SER
1	23-A	67	ILE
1	23-A	73	ARG
1	23-A	85	ASP
1	23-A	105	ASN
1	23-A	110	ARG
1	23-A	145	ASP
1	23-A	157	LEU
1	23-A	158	ASN
1	23-A	183	THR
1	23-A	215	ASN
1	23-A	222	SER
1	23-A	232	ASN
1	23-A	245	ARG
1	23-A	248	LEU
1	23-A	256	ARG
1	24-A	9	ASN
1	24-A	14	LEU
1	24-A	15	LEU
1	24-A	18	ARG
1	24-A	19	SER
1	24-A	25	SER
1	24-A	26	GLU
1	24-A	31	ARG
1	24-A	32	LEU
1	24-A	48	ASN
1	24-A	67	ILE
1	24-A	73	ARG
1	24-A	84	ILE
1	24-A	105	ASN
1	24-A	157	LEU
1	24-A	171	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	24-A	216	LYS
1	24-A	232	ASN
1	24-A	245	ARG
1	24-A	248	LEU
1	24-A	249	PHE
1	24-A	251	GLU
1	24-A	256	ARG
1	25-A	9	ASN
1	25-A	15	LEU
1	25-A	23	SER
1	25-A	26	GLU
1	25-A	31	ARG
1	25-A	46	ARG
1	25-A	48	ASN
1	25-A	72	GLU
1	25-A	73	ARG
1	25-A	107	MET
1	25-A	126	VAL
1	25-A	142	GLN
1	25-A	157	LEU
1	25-A	163	SER
1	25-A	178	ILE
1	25-A	201	LEU
1	25-A	245	ARG
1	25-A	248	LEU
1	25-A	252	VAL
1	25-A	254	GLU
1	25-A	256	ARG
1	26-A	2	ASN
1	26-A	9	ASN
1	26-A	14	LEU
1	26-A	26	GLU
1	26-A	31	ARG
1	26-A	48	ASN
1	26-A	101	ASN
1	26-A	107	MET
1	26-A	126	VAL
1	26-A	127	MET
1	26-A	157	LEU
1	26-A	163	SER
1	26-A	195	SER
1	26-A	245	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	26-A	246	ASP
1	26-A	248	LEU
1	26-A	249	PHE
1	26-A	251	GLU
1	26-A	256	ARG
1	26-A	262	TYR
1	27-A	11	THR
1	27-A	12	ASP
1	27-A	14	LEU
1	27-A	18	ARG
1	27-A	19	SER
1	27-A	25	SER
1	27-A	31	ARG
1	27-A	48	ASN
1	27-A	72	GLU
1	27-A	87	ILE
1	27-A	101	ASN
1	27-A	121	SER
1	27-A	122	SER
1	27-A	127	MET
1	27-A	157	LEU
1	27-A	174	ASP
1	27-A	178	ILE
1	27-A	183	THR
1	27-A	215	ASN
1	27-A	245	ARG
1	27-A	248	LEU
1	27-A	249	PHE
1	27-A	251	GLU
1	27-A	252	VAL
1	27-A	253	GLU
1	27-A	256	ARG
1	27-A	262	TYR
1	28-A	14	LEU
1	28-A	31	ARG
1	28-A	61	THR
1	28-A	73	ARG
1	28-A	88	THR
1	28-A	101	ASN
1	28-A	127	MET
1	28-A	142	GLN
1	28-A	152	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	28-A	157	LEU
1	28-A	201	LEU
1	28-A	215	ASN
1	28-A	238	GLN
1	28-A	246	ASP
1	28-A	252	VAL
1	28-A	254	GLU
1	29-A	9	ASN
1	29-A	11	THR
1	29-A	12	ASP
1	29-A	31	ARG
1	29-A	32	LEU
1	29-A	43	TYR
1	29-A	64	GLU
1	29-A	72	GLU
1	29-A	92	GLN
1	29-A	101	ASN
1	29-A	110	ARG
1	29-A	127	MET
1	29-A	136	SER
1	29-A	138	ARG
1	29-A	152	LEU
1	29-A	157	LEU
1	29-A	165	THR
1	29-A	183	THR
1	29-A	186	LYS
1	29-A	201	LEU
1	29-A	216	LYS
1	29-A	245	ARG
1	29-A	249	PHE
1	29-A	251	GLU
1	29-A	262	TYR
1	30-A	14	LEU
1	30-A	18	ARG
1	30-A	26	GLU
1	30-A	31	ARG
1	30-A	46	ARG
1	30-A	50	THR
1	30-A	67	ILE
1	30-A	88	THR
1	30-A	126	VAL
1	30-A	147	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	30-A	150	ILE
1	30-A	216	LYS
1	30-A	228	ARG
1	30-A	232	ASN
1	30-A	249	PHE
1	30-A	256	ARG
1	31-A	9	ASN
1	31-A	12	ASP
1	31-A	18	ARG
1	31-A	19	SER
1	31-A	31	ARG
1	31-A	110	ARG
1	31-A	117	SER
1	31-A	127	MET
1	31-A	152	LEU
1	31-A	157	LEU
1	31-A	177	THR
1	31-A	195	SER
1	31-A	204	ASP
1	31-A	213	ILE
1	31-A	216	LYS
1	31-A	234	THR
1	31-A	245	ARG
1	31-A	246	ASP
1	32-A	12	ASP
1	32-A	14	LEU
1	32-A	15	LEU
1	32-A	18	ARG
1	32-A	19	SER
1	32-A	23	SER
1	32-A	24	VAL
1	32-A	30	SER
1	32-A	31	ARG
1	32-A	63	THR
1	32-A	66	SER
1	32-A	70	LEU
1	32-A	85	ASP
1	32-A	114	THR
1	32-A	142	GLN
1	32-A	143	ARG
1	32-A	157	LEU
1	32-A	175	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	32-A	194	SER
1	32-A	201	LEU
1	32-A	220	LYS
1	32-A	228	ARG
1	32-A	245	ARG
1	32-A	249	PHE
1	32-A	251	GLU
1	32-A	253	GLU
1	32-A	262	TYR
1	33-A	12	ASP
1	33-A	14	LEU
1	33-A	18	ARG
1	33-A	24	VAL
1	33-A	26	GLU
1	33-A	28	ASN
1	33-A	31	ARG
1	33-A	33	SER
1	33-A	63	THR
1	33-A	67	ILE
1	33-A	70	LEU
1	33-A	72	GLU
1	33-A	114	THR
1	33-A	175	LEU
1	33-A	183	THR
1	33-A	195	SER
1	33-A	220	LYS
1	33-A	232	ASN
1	33-A	234	THR
1	33-A	246	ASP
1	33-A	251	GLU
1	33-A	252	VAL
1	33-A	253	GLU
1	33-A	262	TYR
1	34-A	11	THR
1	34-A	12	ASP
1	34-A	18	ARG
1	34-A	28	ASN
1	34-A	31	ARG
1	34-A	48	ASN
1	34-A	49	ASN
1	34-A	61	THR
1	34-A	66	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	34-A	85	ASP
1	34-A	88	THR
1	34-A	105	ASN
1	34-A	107	MET
1	34-A	116	ARG
1	34-A	143	ARG
1	34-A	157	LEU
1	34-A	163	SER
1	34-A	186	LYS
1	34-A	194	SER
1	34-A	201	LEU
1	34-A	213	ILE
1	34-A	216	LYS
1	34-A	245	ARG
1	34-A	252	VAL
1	34-A	254	GLU
1	34-A	262	TYR
1	35-A	9	ASN
1	35-A	14	LEU
1	35-A	18	ARG
1	35-A	23	SER
1	35-A	25	SER
1	35-A	31	ARG
1	35-A	33	SER
1	35-A	48	ASN
1	35-A	64	GLU
1	35-A	66	SER
1	35-A	87	ILE
1	35-A	107	MET
1	35-A	113	SER
1	35-A	116	ARG
1	35-A	143	ARG
1	35-A	157	LEU
1	35-A	175	LEU
1	35-A	177	THR
1	35-A	195	SER
1	35-A	213	ILE
1	35-A	216	LYS
1	35-A	245	ARG
1	35-A	246	ASP
1	35-A	249	PHE
1	35-A	251	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	35-A	252	VAL
1	35-A	254	GLU
1	36-A	9	ASN
1	36-A	18	ARG
1	36-A	31	ARG
1	36-A	50	THR
1	36-A	70	LEU
1	36-A	73	ARG
1	36-A	92	GLN
1	36-A	107	MET
1	36-A	110	ARG
1	36-A	116	ARG
1	36-A	117	SER
1	36-A	141	SER
1	36-A	152	LEU
1	36-A	177	THR
1	36-A	213	ILE
1	36-A	216	LYS
1	36-A	232	ASN
1	36-A	244	PRO
1	36-A	245	ARG
1	37-A	9	ASN
1	37-A	14	LEU
1	37-A	35	SER
1	37-A	48	ASN
1	37-A	64	GLU
1	37-A	70	LEU
1	37-A	85	ASP
1	37-A	92	GLN
1	37-A	107	MET
1	37-A	116	ARG
1	37-A	157	LEU
1	37-A	175	LEU
1	37-A	183	THR
1	37-A	195	SER
1	37-A	203	LEU
1	37-A	204	ASP
1	37-A	213	ILE
1	37-A	216	LYS
1	37-A	248	LEU
1	37-A	251	GLU
1	38-A	18	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	38-A	32	LEU
1	38-A	61	THR
1	38-A	70	LEU
1	38-A	73	ARG
1	38-A	92	GLN
1	38-A	98	GLU
1	38-A	101	ASN
1	38-A	105	ASN
1	38-A	107	MET
1	38-A	109	ASN
1	38-A	116	ARG
1	38-A	119	ILE
1	38-A	142	GLN
1	38-A	175	LEU
1	38-A	178	ILE
1	38-A	201	LEU
1	38-A	203	LEU
1	38-A	213	ILE
1	38-A	216	LYS
1	38-A	251	GLU
1	38-A	256	ARG
1	38-A	262	TYR
1	39-A	12	ASP
1	39-A	26	GLU
1	39-A	28	ASN
1	39-A	48	ASN
1	39-A	63	THR
1	39-A	64	GLU
1	39-A	73	ARG
1	39-A	109	ASN
1	39-A	110	ARG
1	39-A	114	THR
1	39-A	115	VAL
1	39-A	116	ARG
1	39-A	121	SER
1	39-A	131	MET
1	39-A	138	ARG
1	39-A	143	ARG
1	39-A	144	PRO
1	39-A	157	LEU
1	39-A	203	LEU
1	39-A	212	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	39-A	248	LEU
1	39-A	251	GLU
1	39-A	254	GLU
1	39-A	256	ARG
1	39-A	262	TYR
1	40-A	9	ASN
1	40-A	12	ASP
1	40-A	14	LEU
1	40-A	15	LEU
1	40-A	28	ASN
1	40-A	32	LEU
1	40-A	48	ASN
1	40-A	72	GLU
1	40-A	73	ARG
1	40-A	98	GLU
1	40-A	107	MET
1	40-A	108	ILE
1	40-A	110	ARG
1	40-A	114	THR
1	40-A	131	MET
1	40-A	136	SER
1	40-A	137	LEU
1	40-A	138	ARG
1	40-A	143	ARG
1	40-A	157	LEU
1	40-A	201	LEU
1	40-A	213	ILE
1	40-A	216	LYS
1	40-A	217	ILE
1	40-A	238	GLN
1	40-A	245	ARG
1	40-A	248	LEU
1	40-A	262	TYR
1	41-A	14	LEU
1	41-A	18	ARG
1	41-A	48	ASN
1	41-A	88	THR
1	41-A	105	ASN
1	41-A	107	MET
1	41-A	108	ILE
1	41-A	110	ARG
1	41-A	116	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	41-A	137	LEU
1	41-A	143	ARG
1	41-A	157	LEU
1	41-A	194	SER
1	41-A	203	LEU
1	41-A	212	ASN
1	41-A	213	ILE
1	41-A	216	LYS
1	41-A	245	ARG
1	41-A	254	GLU
1	42-A	18	ARG
1	42-A	31	ARG
1	42-A	70	LEU
1	42-A	89	THR
1	42-A	98	GLU
1	42-A	110	ARG
1	42-A	114	THR
1	42-A	117	SER
1	42-A	122	SER
1	42-A	127	MET
1	42-A	136	SER
1	42-A	141	SER
1	42-A	143	ARG
1	42-A	145	ASP
1	42-A	147	LYS
1	42-A	195	SER
1	42-A	216	LYS
1	42-A	217	ILE
1	42-A	245	ARG
1	42-A	246	ASP
1	42-A	252	VAL
1	42-A	256	ARG
1	43-A	12	ASP
1	43-A	18	ARG
1	43-A	31	ARG
1	43-A	63	THR
1	43-A	64	GLU
1	43-A	88	THR
1	43-A	110	ARG
1	43-A	116	ARG
1	43-A	143	ARG
1	43-A	195	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	43-A	212	ASN
1	43-A	215	ASN
1	43-A	216	LYS
1	43-A	217	ILE
1	43-A	232	ASN
1	43-A	245	ARG
1	43-A	248	LEU
1	43-A	262	TYR
1	44-A	9	ASN
1	44-A	11	THR
1	44-A	16	GLU
1	44-A	18	ARG
1	44-A	19	SER
1	44-A	24	VAL
1	44-A	31	ARG
1	44-A	35	SER
1	44-A	48	ASN
1	44-A	49	ASN
1	44-A	63	THR
1	44-A	98	GLU
1	44-A	105	ASN
1	44-A	108	ILE
1	44-A	110	ARG
1	44-A	116	ARG
1	44-A	117	SER
1	44-A	122	SER
1	44-A	143	ARG
1	44-A	158	ASN
1	44-A	163	SER
1	44-A	183	THR
1	44-A	203	LEU
1	44-A	212	ASN
1	44-A	213	ILE
1	44-A	215	ASN
1	44-A	217	ILE
1	44-A	222	SER
1	44-A	232	ASN
1	44-A	245	ARG
1	44-A	256	ARG
1	44-A	262	TYR
1	45-A	9	ASN
1	45-A	25	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	45-A	28	ASN
1	45-A	31	ARG
1	45-A	35	SER
1	45-A	48	ASN
1	45-A	49	ASN
1	45-A	66	SER
1	45-A	92	GLN
1	45-A	116	ARG
1	45-A	121	SER
1	45-A	127	MET
1	45-A	142	GLN
1	45-A	143	ARG
1	45-A	147	LYS
1	45-A	163	SER
1	45-A	213	ILE
1	45-A	237	THR
1	45-A	238	GLN
1	45-A	245	ARG
1	45-A	246	ASP
1	45-A	248	LEU
1	45-A	249	PHE
1	45-A	251	GLU
1	45-A	253	GLU
1	45-A	262	TYR
1	46-A	5	GLU
1	46-A	12	ASP
1	46-A	18	ARG
1	46-A	23	SER
1	46-A	25	SER
1	46-A	28	ASN
1	46-A	31	ARG
1	46-A	32	LEU
1	46-A	33	SER
1	46-A	35	SER
1	46-A	46	ARG
1	46-A	48	ASN
1	46-A	49	ASN
1	46-A	98	GLU
1	46-A	108	ILE
1	46-A	110	ARG
1	46-A	116	ARG
1	46-A	121	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	46-A	141	SER
1	46-A	143	ARG
1	46-A	158	ASN
1	46-A	163	SER
1	46-A	194	SER
1	46-A	213	ILE
1	46-A	215	ASN
1	46-A	221	TYR
1	46-A	232	ASN
1	46-A	246	ASP
1	46-A	248	LEU
1	46-A	251	GLU
1	46-A	262	TYR
1	47-A	14	LEU
1	47-A	18	ARG
1	47-A	28	ASN
1	47-A	31	ARG
1	47-A	32	LEU
1	47-A	49	ASN
1	47-A	70	LEU
1	47-A	90	LEU
1	47-A	92	GLN
1	47-A	107	MET
1	47-A	108	ILE
1	47-A	114	THR
1	47-A	116	ARG
1	47-A	143	ARG
1	47-A	183	THR
1	47-A	194	SER
1	47-A	204	ASP
1	47-A	213	ILE
1	47-A	215	ASN
1	47-A	232	ASN
1	47-A	238	GLN
1	47-A	245	ARG
1	47-A	248	LEU
1	47-A	253	GLU
1	47-A	254	GLU
1	48-A	9	ASN
1	48-A	12	ASP
1	48-A	14	LEU
1	48-A	18	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	48-A	26	GLU
1	48-A	31	ARG
1	48-A	32	LEU
1	48-A	49	ASN
1	48-A	70	LEU
1	48-A	108	ILE
1	48-A	143	ARG
1	48-A	144	PRO
1	48-A	145	ASP
1	48-A	183	THR
1	48-A	195	SER
1	48-A	201	LEU
1	48-A	213	ILE
1	48-A	217	ILE
1	48-A	228	ARG
1	48-A	232	ASN
1	48-A	248	LEU
1	48-A	251	GLU
1	48-A	253	GLU
1	49-A	2	ASN
1	49-A	14	LEU
1	49-A	18	ARG
1	49-A	48	ASN
1	49-A	49	ASN
1	49-A	54	VAL
1	49-A	105	ASN
1	49-A	108	ILE
1	49-A	116	ARG
1	49-A	121	SER
1	49-A	122	SER
1	49-A	130	SER
1	49-A	137	LEU
1	49-A	143	ARG
1	49-A	157	LEU
1	49-A	177	THR
1	49-A	194	SER
1	49-A	201	LEU
1	49-A	213	ILE
1	49-A	216	LYS
1	49-A	218	ILE
1	49-A	238	GLN
1	49-A	245	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	49-A	246	ASP
1	49-A	248	LEU
1	49-A	251	GLU
1	49-A	253	GLU
1	49-A	256	ARG
1	50-A	2	ASN
1	50-A	5	GLU
1	50-A	18	ARG
1	50-A	25	SER
1	50-A	30	SER
1	50-A	31	ARG
1	50-A	35	SER
1	50-A	46	ARG
1	50-A	48	ASN
1	50-A	49	ASN
1	50-A	73	ARG
1	50-A	88	THR
1	50-A	107	MET
1	50-A	116	ARG
1	50-A	157	LEU
1	50-A	178	ILE
1	50-A	183	THR
1	50-A	195	SER
1	50-A	213	ILE
1	50-A	234	THR
1	50-A	245	ARG
1	51-A	2	ASN
1	51-A	12	ASP
1	51-A	14	LEU
1	51-A	18	ARG
1	51-A	31	ARG
1	51-A	48	ASN
1	51-A	49	ASN
1	51-A	61	THR
1	51-A	67	ILE
1	51-A	73	ARG
1	51-A	98	GLU
1	51-A	101	ASN
1	51-A	110	ARG
1	51-A	136	SER
1	51-A	157	LEU
1	51-A	163	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	51-A	183	THR
1	51-A	194	SER
1	51-A	216	LYS
1	51-A	222	SER
1	51-A	234	THR
1	51-A	245	ARG
1	51-A	246	ASP
1	51-A	251	GLU
1	51-A	256	ARG
1	51-A	262	TYR
1	52-A	2	ASN
1	52-A	9	ASN
1	52-A	12	ASP
1	52-A	14	LEU
1	52-A	18	ARG
1	52-A	31	ARG
1	52-A	48	ASN
1	52-A	49	ASN
1	52-A	108	ILE
1	52-A	110	ARG
1	52-A	116	ARG
1	52-A	126	VAL
1	52-A	157	LEU
1	52-A	213	ILE
1	52-A	216	LYS
1	52-A	246	ASP
1	52-A	256	ARG
1	52-A	262	TYR
1	53-A	2	ASN
1	53-A	11	THR
1	53-A	18	ARG
1	53-A	26	GLU
1	53-A	28	ASN
1	53-A	31	ARG
1	53-A	32	LEU
1	53-A	46	ARG
1	53-A	49	ASN
1	53-A	88	THR
1	53-A	98	GLU
1	53-A	113	SER
1	53-A	141	SER
1	53-A	157	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	53-A	186	LYS
1	53-A	194	SER
1	53-A	196	ILE
1	53-A	204	ASP
1	53-A	216	LYS
1	53-A	234	THR
1	53-A	245	ARG
1	53-A	249	PHE
1	53-A	256	ARG
1	53-A	262	TYR
1	54-A	2	ASN
1	54-A	14	LEU
1	54-A	18	ARG
1	54-A	23	SER
1	54-A	31	ARG
1	54-A	46	ARG
1	54-A	48	ASN
1	54-A	49	ASN
1	54-A	61	THR
1	54-A	63	THR
1	54-A	67	ILE
1	54-A	70	LEU
1	54-A	92	GLN
1	54-A	107	MET
1	54-A	108	ILE
1	54-A	114	THR
1	54-A	142	GLN
1	54-A	158	ASN
1	54-A	163	SER
1	54-A	186	LYS
1	54-A	204	ASP
1	54-A	216	LYS
1	54-A	217	ILE
1	54-A	238	GLN
1	54-A	245	ARG
1	54-A	246	ASP
1	54-A	251	GLU
1	54-A	254	GLU
1	54-A	256	ARG
1	54-A	262	TYR
1	55-A	14	LEU
1	55-A	16	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	55-A	19	SER
1	55-A	28	ASN
1	55-A	31	ARG
1	55-A	46	ARG
1	55-A	48	ASN
1	55-A	49	ASN
1	55-A	63	THR
1	55-A	67	ILE
1	55-A	70	LEU
1	55-A	72	GLU
1	55-A	92	GLN
1	55-A	101	ASN
1	55-A	108	ILE
1	55-A	116	ARG
1	55-A	117	SER
1	55-A	141	SER
1	55-A	147	LYS
1	55-A	177	THR
1	55-A	186	LYS
1	55-A	201	LEU
1	55-A	216	LYS
1	55-A	217	ILE
1	55-A	245	ARG
1	55-A	248	LEU
1	55-A	252	VAL
1	55-A	256	ARG
1	55-A	262	TYR
1	56-A	2	ASN
1	56-A	18	ARG
1	56-A	26	GLU
1	56-A	28	ASN
1	56-A	31	ARG
1	56-A	43	TYR
1	56-A	48	ASN
1	56-A	49	ASN
1	56-A	66	SER
1	56-A	70	LEU
1	56-A	72	GLU
1	56-A	107	MET
1	56-A	108	ILE
1	56-A	114	THR
1	56-A	116	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	56-A	122	SER
1	56-A	138	ARG
1	56-A	142	GLN
1	56-A	183	THR
1	56-A	195	SER
1	56-A	203	LEU
1	56-A	217	ILE
1	56-A	234	THR
1	56-A	238	GLN
1	56-A	245	ARG
1	56-A	246	ASP
1	56-A	248	LEU
1	56-A	251	GLU
1	56-A	256	ARG
1	57-A	2	ASN
1	57-A	9	ASN
1	57-A	12	ASP
1	57-A	28	ASN
1	57-A	31	ARG
1	57-A	43	TYR
1	57-A	49	ASN
1	57-A	60	TYR
1	57-A	61	THR
1	57-A	73	ARG
1	57-A	85	ASP
1	57-A	107	MET
1	57-A	108	ILE
1	57-A	114	THR
1	57-A	116	ARG
1	57-A	138	ARG
1	57-A	201	LEU
1	57-A	203	LEU
1	57-A	209	PHE
1	57-A	216	LYS
1	57-A	245	ARG
1	57-A	246	ASP
1	58-A	2	ASN
1	58-A	3	PRO
1	58-A	12	ASP
1	58-A	14	LEU
1	58-A	18	ARG
1	58-A	31	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	58-A	43	TYR
1	58-A	48	ASN
1	58-A	49	ASN
1	58-A	61	THR
1	58-A	83	THR
1	58-A	94	ASP
1	58-A	116	ARG
1	58-A	121	SER
1	58-A	138	ARG
1	58-A	143	ARG
1	58-A	201	LEU
1	58-A	203	LEU
1	58-A	215	ASN
1	58-A	216	LYS
1	58-A	217	ILE
1	58-A	245	ARG
1	58-A	246	ASP
1	59-A	9	ASN
1	59-A	12	ASP
1	59-A	16	GLU
1	59-A	18	ARG
1	59-A	23	SER
1	59-A	24	VAL
1	59-A	28	ASN
1	59-A	31	ARG
1	59-A	48	ASN
1	59-A	49	ASN
1	59-A	61	THR
1	59-A	64	GLU
1	59-A	73	ARG
1	59-A	94	ASP
1	59-A	101	ASN
1	59-A	105	ASN
1	59-A	107	MET
1	59-A	109	ASN
1	59-A	138	ARG
1	59-A	142	GLN
1	59-A	143	ARG
1	59-A	158	ASN
1	59-A	170	ILE
1	59-A	178	ILE
1	59-A	203	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	59-A	217	ILE
1	59-A	232	ASN
1	59-A	254	GLU
1	59-A	262	TYR
1	60-A	2	ASN
1	60-A	9	ASN
1	60-A	14	LEU
1	60-A	16	GLU
1	60-A	28	ASN
1	60-A	35	SER
1	60-A	49	ASN
1	60-A	61	THR
1	60-A	64	GLU
1	60-A	66	SER
1	60-A	70	LEU
1	60-A	92	GLN
1	60-A	108	ILE
1	60-A	114	THR
1	60-A	143	ARG
1	60-A	163	SER
1	60-A	175	LEU
1	60-A	194	SER
1	60-A	195	SER
1	60-A	201	LEU
1	60-A	203	LEU
1	60-A	215	ASN
1	60-A	216	LYS
1	60-A	220	LYS
1	60-A	245	ARG
1	60-A	249	PHE
1	60-A	253	GLU
1	61-A	2	ASN
1	61-A	9	ASN
1	61-A	16	GLU
1	61-A	23	SER
1	61-A	26	GLU
1	61-A	28	ASN
1	61-A	48	ASN
1	61-A	49	ASN
1	61-A	92	GLN
1	61-A	105	ASN
1	61-A	107	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	61-A	122	SER
1	61-A	143	ARG
1	61-A	163	SER
1	61-A	175	LEU
1	61-A	203	LEU
1	61-A	215	ASN
1	61-A	216	LYS
1	61-A	220	LYS
1	61-A	248	LEU
1	61-A	253	GLU
1	61-A	254	GLU
1	61-A	261	PHE
1	61-A	262	TYR
1	62-A	2	ASN
1	62-A	9	ASN
1	62-A	11	THR
1	62-A	16	GLU
1	62-A	18	ARG
1	62-A	24	VAL
1	62-A	25	SER
1	62-A	31	ARG
1	62-A	32	LEU
1	62-A	35	SER
1	62-A	48	ASN
1	62-A	49	ASN
1	62-A	63	THR
1	62-A	64	GLU
1	62-A	70	LEU
1	62-A	101	ASN
1	62-A	138	ARG
1	62-A	183	THR
1	62-A	195	SER
1	62-A	203	LEU
1	62-A	214	PRO
1	62-A	215	ASN
1	62-A	216	LYS
1	62-A	217	ILE
1	62-A	237	THR
1	62-A	245	ARG
1	62-A	248	LEU
1	62-A	249	PHE
1	62-A	251	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	62-A	253	GLU
1	62-A	254	GLU
1	62-A	262	TYR
1	63-A	12	ASP
1	63-A	14	LEU
1	63-A	18	ARG
1	63-A	28	ASN
1	63-A	49	ASN
1	63-A	61	THR
1	63-A	63	THR
1	63-A	101	ASN
1	63-A	105	ASN
1	63-A	147	LYS
1	63-A	201	LEU
1	63-A	203	LEU
1	63-A	215	ASN
1	63-A	217	ILE
1	63-A	228	ARG
1	63-A	245	ARG
1	63-A	248	LEU
1	63-A	251	GLU
1	63-A	253	GLU
1	63-A	262	TYR
1	64-A	2	ASN
1	64-A	9	ASN
1	64-A	14	LEU
1	64-A	18	ARG
1	64-A	28	ASN
1	64-A	49	ASN
1	64-A	70	LEU
1	64-A	109	ASN
1	64-A	122	SER
1	64-A	147	LYS
1	64-A	194	SER
1	64-A	216	LYS
1	64-A	217	ILE
1	64-A	238	GLN
1	64-A	245	ARG
1	64-A	248	LEU
1	64-A	252	VAL
1	64-A	262	TYR
1	65-A	2	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	65-A	12	ASP
1	65-A	18	ARG
1	65-A	24	VAL
1	65-A	32	LEU
1	65-A	35	SER
1	65-A	48	ASN
1	65-A	49	ASN
1	65-A	63	THR
1	65-A	64	GLU
1	65-A	70	LEU
1	65-A	72	GLU
1	65-A	87	ILE
1	65-A	88	THR
1	65-A	178	ILE
1	65-A	201	LEU
1	65-A	209	PHE
1	65-A	213	ILE
1	65-A	222	SER
1	65-A	228	ARG
1	65-A	246	ASP
1	65-A	248	LEU
1	65-A	252	VAL
1	65-A	256	ARG
1	65-A	262	TYR
1	66-A	2	ASN
1	66-A	9	ASN
1	66-A	15	LEU
1	66-A	18	ARG
1	66-A	19	SER
1	66-A	32	LEU
1	66-A	33	SER
1	66-A	35	SER
1	66-A	48	ASN
1	66-A	49	ASN
1	66-A	61	THR
1	66-A	64	GLU
1	66-A	67	ILE
1	66-A	70	LEU
1	66-A	98	GLU
1	66-A	107	MET
1	66-A	120	ASP
1	66-A	201	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	66-A	203	LEU
1	66-A	215	ASN
1	66-A	216	LYS
1	66-A	228	ARG
1	66-A	245	ARG
1	66-A	251	GLU
1	66-A	253	GLU
1	66-A	262	TYR
1	67-A	2	ASN
1	67-A	12	ASP
1	67-A	15	LEU
1	67-A	18	ARG
1	67-A	19	SER
1	67-A	26	GLU
1	67-A	32	LEU
1	67-A	49	ASN
1	67-A	70	LEU
1	67-A	72	GLU
1	67-A	85	ASP
1	67-A	131	MET
1	67-A	142	GLN
1	67-A	157	LEU
1	67-A	195	SER
1	67-A	203	LEU
1	67-A	213	ILE
1	67-A	228	ARG
1	67-A	245	ARG
1	67-A	246	ASP
1	67-A	248	LEU
1	67-A	249	PHE
1	68-A	2	ASN
1	68-A	11	THR
1	68-A	14	LEU
1	68-A	18	ARG
1	68-A	19	SER
1	68-A	24	VAL
1	68-A	31	ARG
1	68-A	49	ASN
1	68-A	61	THR
1	68-A	64	GLU
1	68-A	105	ASN
1	68-A	157	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	68-A	201	LEU
1	68-A	213	ILE
1	68-A	248	LEU
1	68-A	249	PHE
1	69-A	14	LEU
1	69-A	15	LEU
1	69-A	18	ARG
1	69-A	19	SER
1	69-A	26	GLU
1	69-A	35	SER
1	69-A	49	ASN
1	69-A	122	SER
1	69-A	165	THR
1	69-A	174	ASP
1	69-A	195	SER
1	69-A	213	ILE
1	69-A	245	ARG
1	69-A	253	GLU
1	69-A	256	ARG
1	69-A	263	PRO
1	70-A	2	ASN
1	70-A	14	LEU
1	70-A	15	LEU
1	70-A	18	ARG
1	70-A	26	GLU
1	70-A	35	SER
1	70-A	49	ASN
1	70-A	105	ASN
1	70-A	108	ILE
1	70-A	113	SER
1	70-A	116	ARG
1	70-A	136	SER
1	70-A	142	GLN
1	70-A	146	LEU
1	70-A	157	LEU
1	70-A	165	THR
1	70-A	171	ILE
1	70-A	183	THR
1	70-A	186	LYS
1	70-A	215	ASN
1	70-A	238	GLN
1	70-A	251	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	70-A	254	GLU
1	70-A	262	TYR
1	70-A	263	PRO
1	71-A	2	ASN
1	71-A	14	LEU
1	71-A	15	LEU
1	71-A	18	ARG
1	71-A	31	ARG
1	71-A	49	ASN
1	71-A	70	LEU
1	71-A	73	ARG
1	71-A	110	ARG
1	71-A	127	MET
1	71-A	143	ARG
1	71-A	157	LEU
1	71-A	178	ILE
1	71-A	195	SER
1	71-A	215	ASN
1	71-A	216	LYS
1	71-A	244	PRO
1	71-A	245	ARG
1	71-A	248	LEU
1	71-A	249	PHE
1	71-A	251	GLU
1	72-A	12	ASP
1	72-A	14	LEU
1	72-A	15	LEU
1	72-A	16	GLU
1	72-A	18	ARG
1	72-A	49	ASN
1	72-A	61	THR
1	72-A	63	THR
1	72-A	64	GLU
1	72-A	95	SER
1	72-A	105	ASN
1	72-A	117	SER
1	72-A	127	MET
1	72-A	143	ARG
1	72-A	157	LEU
1	72-A	165	THR
1	72-A	183	THR
1	72-A	194	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	72-A	195	SER
1	72-A	220	LYS
1	72-A	238	GLN
1	72-A	244	PRO
1	72-A	245	ARG
1	72-A	248	LEU
1	72-A	251	GLU
1	72-A	256	ARG
1	72-A	262	TYR
1	73-A	2	ASN
1	73-A	9	ASN
1	73-A	15	LEU
1	73-A	28	ASN
1	73-A	30	SER
1	73-A	31	ARG
1	73-A	32	LEU
1	73-A	35	SER
1	73-A	49	ASN
1	73-A	85	ASP
1	73-A	92	GLN
1	73-A	108	ILE
1	73-A	110	ARG
1	73-A	113	SER
1	73-A	147	LYS
1	73-A	157	LEU
1	73-A	165	THR
1	73-A	194	SER
1	73-A	213	ILE
1	73-A	215	ASN
1	73-A	245	ARG
1	73-A	246	ASP
1	73-A	251	GLU
1	73-A	256	ARG
1	74-A	18	ARG
1	74-A	23	SER
1	74-A	25	SER
1	74-A	31	ARG
1	74-A	33	SER
1	74-A	43	TYR
1	74-A	49	ASN
1	74-A	67	ILE
1	74-A	88	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	74-A	158	ASN
1	74-A	209	PHE
1	74-A	215	ASN
1	74-A	228	ARG
1	74-A	238	GLN
1	74-A	245	ARG
1	74-A	248	LEU
1	74-A	256	ARG
1	74-A	262	TYR
1	75-A	2	ASN
1	75-A	14	LEU
1	75-A	18	ARG
1	75-A	19	SER
1	75-A	25	SER
1	75-A	33	SER
1	75-A	35	SER
1	75-A	49	ASN
1	75-A	66	SER
1	75-A	67	ILE
1	75-A	70	LEU
1	75-A	73	ARG
1	75-A	85	ASP
1	75-A	87	ILE
1	75-A	98	GLU
1	75-A	127	MET
1	75-A	157	LEU
1	75-A	158	ASN
1	75-A	165	THR
1	75-A	201	LEU
1	75-A	213	ILE
1	75-A	252	VAL
1	75-A	254	GLU
1	75-A	256	ARG
1	75-A	262	TYR
1	76-A	2	ASN
1	76-A	9	ASN
1	76-A	14	LEU
1	76-A	18	ARG
1	76-A	49	ASN
1	76-A	70	LEU
1	76-A	72	GLU
1	76-A	73	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	76-A	85	ASP
1	76-A	98	GLU
1	76-A	101	ASN
1	76-A	116	ARG
1	76-A	183	THR
1	76-A	195	SER
1	76-A	201	LEU
1	76-A	215	ASN
1	76-A	232	ASN
1	76-A	245	ARG
1	76-A	249	PHE
1	76-A	251	GLU
1	76-A	252	VAL
1	76-A	256	ARG
1	76-A	262	TYR
1	76-A	263	PRO
1	77-A	2	ASN
1	77-A	14	LEU
1	77-A	15	LEU
1	77-A	18	ARG
1	77-A	19	SER
1	77-A	24	VAL
1	77-A	26	GLU
1	77-A	28	ASN
1	77-A	31	ARG
1	77-A	50	THR
1	77-A	70	LEU
1	77-A	72	GLU
1	77-A	85	ASP
1	77-A	105	ASN
1	77-A	107	MET
1	77-A	157	LEU
1	77-A	175	LEU
1	77-A	215	ASN
1	77-A	216	LYS
1	77-A	234	THR
1	77-A	239	PHE
1	77-A	245	ARG
1	77-A	246	ASP
1	77-A	248	LEU
1	77-A	249	PHE
1	77-A	251	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	77-A	253	GLU
1	77-A	262	TYR

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. There are no such sidechains identified.

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](#)

77 ligands are modelled in this entry.

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	SO4	73-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	45-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	60-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	69-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	70-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	27-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	2-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	7-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	20-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	SO4	62-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	56-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	24-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	18-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	23-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	65-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	61-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	41-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	13-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	1-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	8-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	35-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	43-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	46-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	14-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	44-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	74-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	68-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	25-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	71-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	50-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	29-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	3-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	28-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	4-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	49-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	55-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	22-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	34-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	64-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	30-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	77-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	67-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	9-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	39-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	15-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	42-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	75-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	11-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	47-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	16-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	72-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	21-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	SO4	76-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	5-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	59-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	26-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	12-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	53-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	40-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	6-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	33-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	31-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	63-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	32-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	10-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	66-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	36-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	19-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	48-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	58-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	37-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	51-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	38-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	52-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	57-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	17-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0
2	SO4	54-A	1001	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.70	0

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

5.7 Other polymers

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.

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

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

In the following table, the column labelled '#RSRZ> 2' contains the number (and percentage) of RSRZ outliers, followed by percent RSRZ outliers for the chain as percentile scores relative to all X-ray entries and entries of similar resolution. The OWAB column contains the minimum, median, 95th percentile and maximum values of the occupancy-weighted average B-factor per residue. The column labelled 'Q< 0.9' lists the number of (and percentage) of residues with an average occupancy less than 0.9.

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	1-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	2-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	3-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	4-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	5-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	6-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	7-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	8-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	9-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	10-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	11-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	12-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	13-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	14-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	15-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	16-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	17-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	18-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	19-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	20-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	21-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	22-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	23-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	24-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	25-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	26-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	27-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	28-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	29-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	30-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	31-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	32-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	33-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	34-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	35-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	36-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	37-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	38-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	39-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	40-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	41-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	42-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	43-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	44-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	45-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	46-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	47-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	48-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	49-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	50-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	51-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	52-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	53-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	54-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	55-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	56-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	57-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	58-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	59-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	60-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	61-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	62-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	63-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	64-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	65-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	66-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	67-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	68-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	69-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	70-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	71-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	72-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	73-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	74-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	75-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	76-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
1	77-A	263/313 (84%)	0.31	24 (9%) 9 10	9, 14, 19, 25	263 (100%)
All	All	20251/24101 (84%)	0.31	1848 (9%) 11 10	9, 14, 19, 25	20251 (100%)

All (1848) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	248	LEU	23.6
1	2-A	248	LEU	23.6
1	3-A	248	LEU	23.6
1	4-A	248	LEU	23.6
1	5-A	248	LEU	23.6
1	6-A	248	LEU	23.6
1	7-A	248	LEU	23.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	8-A	248	LEU	23.6
1	9-A	248	LEU	23.6
1	10-A	248	LEU	23.6
1	11-A	248	LEU	23.6
1	12-A	248	LEU	23.6
1	13-A	248	LEU	23.6
1	14-A	248	LEU	23.6
1	15-A	248	LEU	23.6
1	16-A	248	LEU	23.6
1	17-A	248	LEU	23.6
1	18-A	248	LEU	23.6
1	19-A	248	LEU	23.6
1	20-A	248	LEU	23.6
1	21-A	248	LEU	23.6
1	22-A	248	LEU	23.6
1	23-A	248	LEU	23.6
1	24-A	248	LEU	23.6
1	25-A	248	LEU	23.6
1	26-A	248	LEU	23.6
1	27-A	248	LEU	23.6
1	28-A	248	LEU	23.6
1	29-A	248	LEU	23.6
1	30-A	248	LEU	23.6
1	31-A	248	LEU	23.6
1	32-A	248	LEU	23.6
1	33-A	248	LEU	23.6
1	34-A	248	LEU	23.6
1	35-A	248	LEU	23.6
1	36-A	248	LEU	23.6
1	37-A	248	LEU	23.6
1	38-A	248	LEU	23.6
1	39-A	248	LEU	23.6
1	40-A	248	LEU	23.6
1	41-A	248	LEU	23.6
1	42-A	248	LEU	23.6
1	43-A	248	LEU	23.6
1	44-A	248	LEU	23.6
1	45-A	248	LEU	23.6
1	46-A	248	LEU	23.6
1	47-A	248	LEU	23.6
1	48-A	248	LEU	23.6
1	49-A	248	LEU	23.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	50-A	248	LEU	23.6
1	51-A	248	LEU	23.6
1	52-A	248	LEU	23.6
1	53-A	248	LEU	23.6
1	54-A	248	LEU	23.6
1	55-A	248	LEU	23.6
1	56-A	248	LEU	23.6
1	57-A	248	LEU	23.6
1	58-A	248	LEU	23.6
1	59-A	248	LEU	23.6
1	60-A	248	LEU	23.6
1	61-A	248	LEU	23.6
1	62-A	248	LEU	23.6
1	63-A	248	LEU	23.6
1	64-A	248	LEU	23.6
1	65-A	248	LEU	23.6
1	66-A	248	LEU	23.6
1	67-A	248	LEU	23.6
1	68-A	248	LEU	23.6
1	69-A	248	LEU	23.6
1	70-A	248	LEU	23.6
1	71-A	248	LEU	23.6
1	72-A	248	LEU	23.6
1	73-A	248	LEU	23.6
1	74-A	248	LEU	23.6
1	75-A	248	LEU	23.6
1	76-A	248	LEU	23.6
1	77-A	248	LEU	23.6
1	1-A	246	ASP	18.6
1	2-A	246	ASP	18.6
1	3-A	246	ASP	18.6
1	4-A	246	ASP	18.6
1	5-A	246	ASP	18.6
1	6-A	246	ASP	18.6
1	7-A	246	ASP	18.6
1	8-A	246	ASP	18.6
1	9-A	246	ASP	18.6
1	10-A	246	ASP	18.6
1	11-A	246	ASP	18.6
1	12-A	246	ASP	18.6
1	13-A	246	ASP	18.6
1	14-A	246	ASP	18.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	15-A	246	ASP	18.6
1	16-A	246	ASP	18.6
1	17-A	246	ASP	18.6
1	18-A	246	ASP	18.6
1	19-A	246	ASP	18.6
1	20-A	246	ASP	18.6
1	21-A	246	ASP	18.6
1	22-A	246	ASP	18.6
1	23-A	246	ASP	18.6
1	24-A	246	ASP	18.6
1	25-A	246	ASP	18.6
1	26-A	246	ASP	18.6
1	27-A	246	ASP	18.6
1	28-A	246	ASP	18.6
1	29-A	246	ASP	18.6
1	30-A	246	ASP	18.6
1	31-A	246	ASP	18.6
1	32-A	246	ASP	18.6
1	33-A	246	ASP	18.6
1	34-A	246	ASP	18.6
1	35-A	246	ASP	18.6
1	36-A	246	ASP	18.6
1	37-A	246	ASP	18.6
1	38-A	246	ASP	18.6
1	39-A	246	ASP	18.6
1	40-A	246	ASP	18.6
1	41-A	246	ASP	18.6
1	42-A	246	ASP	18.6
1	43-A	246	ASP	18.6
1	44-A	246	ASP	18.6
1	45-A	246	ASP	18.6
1	46-A	246	ASP	18.6
1	47-A	246	ASP	18.6
1	48-A	246	ASP	18.6
1	49-A	246	ASP	18.6
1	50-A	246	ASP	18.6
1	51-A	246	ASP	18.6
1	52-A	246	ASP	18.6
1	53-A	246	ASP	18.6
1	54-A	246	ASP	18.6
1	55-A	246	ASP	18.6
1	56-A	246	ASP	18.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	57-A	246	ASP	18.6
1	58-A	246	ASP	18.6
1	59-A	246	ASP	18.6
1	60-A	246	ASP	18.6
1	61-A	246	ASP	18.6
1	62-A	246	ASP	18.6
1	63-A	246	ASP	18.6
1	64-A	246	ASP	18.6
1	65-A	246	ASP	18.6
1	66-A	246	ASP	18.6
1	67-A	246	ASP	18.6
1	68-A	246	ASP	18.6
1	69-A	246	ASP	18.6
1	70-A	246	ASP	18.6
1	71-A	246	ASP	18.6
1	72-A	246	ASP	18.6
1	73-A	246	ASP	18.6
1	74-A	246	ASP	18.6
1	75-A	246	ASP	18.6
1	76-A	246	ASP	18.6
1	77-A	246	ASP	18.6
1	1-A	249	PHE	13.2
1	2-A	249	PHE	13.2
1	3-A	249	PHE	13.2
1	4-A	249	PHE	13.2
1	5-A	249	PHE	13.2
1	6-A	249	PHE	13.2
1	7-A	249	PHE	13.2
1	8-A	249	PHE	13.2
1	9-A	249	PHE	13.2
1	10-A	249	PHE	13.2
1	11-A	249	PHE	13.2
1	12-A	249	PHE	13.2
1	13-A	249	PHE	13.2
1	14-A	249	PHE	13.2
1	15-A	249	PHE	13.2
1	16-A	249	PHE	13.2
1	17-A	249	PHE	13.2
1	18-A	249	PHE	13.2
1	19-A	249	PHE	13.2
1	20-A	249	PHE	13.2
1	21-A	249	PHE	13.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	22-A	249	PHE	13.2
1	23-A	249	PHE	13.2
1	24-A	249	PHE	13.2
1	25-A	249	PHE	13.2
1	26-A	249	PHE	13.2
1	27-A	249	PHE	13.2
1	28-A	249	PHE	13.2
1	29-A	249	PHE	13.2
1	30-A	249	PHE	13.2
1	31-A	249	PHE	13.2
1	32-A	249	PHE	13.2
1	33-A	249	PHE	13.2
1	34-A	249	PHE	13.2
1	35-A	249	PHE	13.2
1	36-A	249	PHE	13.2
1	37-A	249	PHE	13.2
1	38-A	249	PHE	13.2
1	39-A	249	PHE	13.2
1	40-A	249	PHE	13.2
1	41-A	249	PHE	13.2
1	42-A	249	PHE	13.2
1	43-A	249	PHE	13.2
1	44-A	249	PHE	13.2
1	45-A	249	PHE	13.2
1	46-A	249	PHE	13.2
1	47-A	249	PHE	13.2
1	48-A	249	PHE	13.2
1	49-A	249	PHE	13.2
1	50-A	249	PHE	13.2
1	51-A	249	PHE	13.2
1	52-A	249	PHE	13.2
1	53-A	249	PHE	13.2
1	54-A	249	PHE	13.2
1	55-A	249	PHE	13.2
1	56-A	249	PHE	13.2
1	57-A	249	PHE	13.2
1	58-A	249	PHE	13.2
1	59-A	249	PHE	13.2
1	60-A	249	PHE	13.2
1	61-A	249	PHE	13.2
1	62-A	249	PHE	13.2
1	63-A	249	PHE	13.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	64-A	249	PHE	13.2
1	65-A	249	PHE	13.2
1	66-A	249	PHE	13.2
1	67-A	249	PHE	13.2
1	68-A	249	PHE	13.2
1	69-A	249	PHE	13.2
1	70-A	249	PHE	13.2
1	71-A	249	PHE	13.2
1	72-A	249	PHE	13.2
1	73-A	249	PHE	13.2
1	74-A	249	PHE	13.2
1	75-A	249	PHE	13.2
1	76-A	249	PHE	13.2
1	77-A	249	PHE	13.2
1	1-A	252	VAL	10.1
1	2-A	252	VAL	10.1
1	3-A	252	VAL	10.1
1	4-A	252	VAL	10.1
1	5-A	252	VAL	10.1
1	6-A	252	VAL	10.1
1	7-A	252	VAL	10.1
1	8-A	252	VAL	10.1
1	9-A	252	VAL	10.1
1	10-A	252	VAL	10.1
1	11-A	252	VAL	10.1
1	12-A	252	VAL	10.1
1	13-A	252	VAL	10.1
1	14-A	252	VAL	10.1
1	15-A	252	VAL	10.1
1	16-A	252	VAL	10.1
1	17-A	252	VAL	10.1
1	18-A	252	VAL	10.1
1	19-A	252	VAL	10.1
1	20-A	252	VAL	10.1
1	21-A	252	VAL	10.1
1	22-A	252	VAL	10.1
1	23-A	252	VAL	10.1
1	24-A	252	VAL	10.1
1	25-A	252	VAL	10.1
1	26-A	252	VAL	10.1
1	27-A	252	VAL	10.1
1	28-A	252	VAL	10.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	29-A	252	VAL	10.1
1	30-A	252	VAL	10.1
1	31-A	252	VAL	10.1
1	32-A	252	VAL	10.1
1	33-A	252	VAL	10.1
1	34-A	252	VAL	10.1
1	35-A	252	VAL	10.1
1	36-A	252	VAL	10.1
1	37-A	252	VAL	10.1
1	38-A	252	VAL	10.1
1	39-A	252	VAL	10.1
1	40-A	252	VAL	10.1
1	41-A	252	VAL	10.1
1	42-A	252	VAL	10.1
1	43-A	252	VAL	10.1
1	44-A	252	VAL	10.1
1	45-A	252	VAL	10.1
1	46-A	252	VAL	10.1
1	47-A	252	VAL	10.1
1	48-A	252	VAL	10.1
1	49-A	252	VAL	10.1
1	50-A	252	VAL	10.1
1	51-A	252	VAL	10.1
1	52-A	252	VAL	10.1
1	53-A	252	VAL	10.1
1	54-A	252	VAL	10.1
1	55-A	252	VAL	10.1
1	56-A	252	VAL	10.1
1	57-A	252	VAL	10.1
1	58-A	252	VAL	10.1
1	59-A	252	VAL	10.1
1	60-A	252	VAL	10.1
1	61-A	252	VAL	10.1
1	62-A	252	VAL	10.1
1	63-A	252	VAL	10.1
1	64-A	252	VAL	10.1
1	65-A	252	VAL	10.1
1	66-A	252	VAL	10.1
1	67-A	252	VAL	10.1
1	68-A	252	VAL	10.1
1	69-A	252	VAL	10.1
1	70-A	252	VAL	10.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	71-A	252	VAL	10.1
1	72-A	252	VAL	10.1
1	73-A	252	VAL	10.1
1	74-A	252	VAL	10.1
1	75-A	252	VAL	10.1
1	76-A	252	VAL	10.1
1	77-A	252	VAL	10.1
1	1-A	1	ALA	9.7
1	2-A	1	ALA	9.7
1	3-A	1	ALA	9.7
1	4-A	1	ALA	9.7
1	5-A	1	ALA	9.7
1	6-A	1	ALA	9.7
1	7-A	1	ALA	9.7
1	8-A	1	ALA	9.7
1	9-A	1	ALA	9.7
1	10-A	1	ALA	9.7
1	11-A	1	ALA	9.7
1	12-A	1	ALA	9.7
1	13-A	1	ALA	9.7
1	14-A	1	ALA	9.7
1	15-A	1	ALA	9.7
1	16-A	1	ALA	9.7
1	17-A	1	ALA	9.7
1	18-A	1	ALA	9.7
1	19-A	1	ALA	9.7
1	20-A	1	ALA	9.7
1	21-A	1	ALA	9.7
1	22-A	1	ALA	9.7
1	23-A	1	ALA	9.7
1	24-A	1	ALA	9.7
1	25-A	1	ALA	9.7
1	26-A	1	ALA	9.7
1	27-A	1	ALA	9.7
1	28-A	1	ALA	9.7
1	29-A	1	ALA	9.7
1	30-A	1	ALA	9.7
1	31-A	1	ALA	9.7
1	32-A	1	ALA	9.7
1	33-A	1	ALA	9.7
1	34-A	1	ALA	9.7
1	35-A	1	ALA	9.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	36-A	1	ALA	9.7
1	37-A	1	ALA	9.7
1	38-A	1	ALA	9.7
1	39-A	1	ALA	9.7
1	40-A	1	ALA	9.7
1	41-A	1	ALA	9.7
1	42-A	1	ALA	9.7
1	43-A	1	ALA	9.7
1	44-A	1	ALA	9.7
1	45-A	1	ALA	9.7
1	46-A	1	ALA	9.7
1	47-A	1	ALA	9.7
1	48-A	1	ALA	9.7
1	49-A	1	ALA	9.7
1	50-A	1	ALA	9.7
1	51-A	1	ALA	9.7
1	52-A	1	ALA	9.7
1	53-A	1	ALA	9.7
1	54-A	1	ALA	9.7
1	55-A	1	ALA	9.7
1	56-A	1	ALA	9.7
1	57-A	1	ALA	9.7
1	58-A	1	ALA	9.7
1	59-A	1	ALA	9.7
1	60-A	1	ALA	9.7
1	61-A	1	ALA	9.7
1	62-A	1	ALA	9.7
1	63-A	1	ALA	9.7
1	64-A	1	ALA	9.7
1	65-A	1	ALA	9.7
1	66-A	1	ALA	9.7
1	67-A	1	ALA	9.7
1	68-A	1	ALA	9.7
1	69-A	1	ALA	9.7
1	70-A	1	ALA	9.7
1	71-A	1	ALA	9.7
1	72-A	1	ALA	9.7
1	73-A	1	ALA	9.7
1	74-A	1	ALA	9.7
1	75-A	1	ALA	9.7
1	76-A	1	ALA	9.7
1	77-A	1	ALA	9.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	263	PRO	7.8
1	2-A	263	PRO	7.8
1	3-A	263	PRO	7.8
1	4-A	263	PRO	7.8
1	5-A	263	PRO	7.8
1	6-A	263	PRO	7.8
1	7-A	263	PRO	7.8
1	8-A	263	PRO	7.8
1	9-A	263	PRO	7.8
1	10-A	263	PRO	7.8
1	11-A	263	PRO	7.8
1	12-A	263	PRO	7.8
1	13-A	263	PRO	7.8
1	14-A	263	PRO	7.8
1	15-A	263	PRO	7.8
1	16-A	263	PRO	7.8
1	17-A	263	PRO	7.8
1	18-A	263	PRO	7.8
1	19-A	263	PRO	7.8
1	20-A	263	PRO	7.8
1	21-A	263	PRO	7.8
1	22-A	263	PRO	7.8
1	23-A	263	PRO	7.8
1	24-A	263	PRO	7.8
1	25-A	263	PRO	7.8
1	26-A	263	PRO	7.8
1	27-A	263	PRO	7.8
1	28-A	263	PRO	7.8
1	29-A	263	PRO	7.8
1	30-A	263	PRO	7.8
1	31-A	263	PRO	7.8
1	32-A	263	PRO	7.8
1	33-A	263	PRO	7.8
1	34-A	263	PRO	7.8
1	35-A	263	PRO	7.8
1	36-A	263	PRO	7.8
1	37-A	263	PRO	7.8
1	38-A	263	PRO	7.8
1	39-A	263	PRO	7.8
1	40-A	263	PRO	7.8
1	41-A	263	PRO	7.8
1	42-A	263	PRO	7.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	43-A	263	PRO	7.8
1	44-A	263	PRO	7.8
1	45-A	263	PRO	7.8
1	46-A	263	PRO	7.8
1	47-A	263	PRO	7.8
1	48-A	263	PRO	7.8
1	49-A	263	PRO	7.8
1	50-A	263	PRO	7.8
1	51-A	263	PRO	7.8
1	52-A	263	PRO	7.8
1	53-A	263	PRO	7.8
1	54-A	263	PRO	7.8
1	55-A	263	PRO	7.8
1	56-A	263	PRO	7.8
1	57-A	263	PRO	7.8
1	58-A	263	PRO	7.8
1	59-A	263	PRO	7.8
1	60-A	263	PRO	7.8
1	61-A	263	PRO	7.8
1	62-A	263	PRO	7.8
1	63-A	263	PRO	7.8
1	64-A	263	PRO	7.8
1	65-A	263	PRO	7.8
1	66-A	263	PRO	7.8
1	67-A	263	PRO	7.8
1	68-A	263	PRO	7.8
1	69-A	263	PRO	7.8
1	70-A	263	PRO	7.8
1	71-A	263	PRO	7.8
1	72-A	263	PRO	7.8
1	73-A	263	PRO	7.8
1	74-A	263	PRO	7.8
1	75-A	263	PRO	7.8
1	76-A	263	PRO	7.8
1	77-A	263	PRO	7.8
1	1-A	253	GLU	5.5
1	2-A	253	GLU	5.5
1	3-A	253	GLU	5.5
1	4-A	253	GLU	5.5
1	5-A	253	GLU	5.5
1	6-A	253	GLU	5.5
1	7-A	253	GLU	5.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	8-A	253	GLU	5.5
1	9-A	253	GLU	5.5
1	10-A	253	GLU	5.5
1	11-A	253	GLU	5.5
1	12-A	253	GLU	5.5
1	13-A	253	GLU	5.5
1	14-A	253	GLU	5.5
1	15-A	253	GLU	5.5
1	16-A	253	GLU	5.5
1	17-A	253	GLU	5.5
1	18-A	253	GLU	5.5
1	19-A	253	GLU	5.5
1	20-A	253	GLU	5.5
1	21-A	253	GLU	5.5
1	22-A	253	GLU	5.5
1	23-A	253	GLU	5.5
1	24-A	253	GLU	5.5
1	25-A	253	GLU	5.5
1	26-A	253	GLU	5.5
1	27-A	253	GLU	5.5
1	28-A	253	GLU	5.5
1	29-A	253	GLU	5.5
1	30-A	253	GLU	5.5
1	31-A	253	GLU	5.5
1	32-A	253	GLU	5.5
1	33-A	253	GLU	5.5
1	34-A	253	GLU	5.5
1	35-A	253	GLU	5.5
1	36-A	253	GLU	5.5
1	37-A	253	GLU	5.5
1	38-A	253	GLU	5.5
1	39-A	253	GLU	5.5
1	40-A	253	GLU	5.5
1	41-A	253	GLU	5.5
1	42-A	253	GLU	5.5
1	43-A	253	GLU	5.5
1	44-A	253	GLU	5.5
1	45-A	253	GLU	5.5
1	46-A	253	GLU	5.5
1	47-A	253	GLU	5.5
1	48-A	253	GLU	5.5
1	49-A	253	GLU	5.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	50-A	253	GLU	5.5
1	51-A	253	GLU	5.5
1	52-A	253	GLU	5.5
1	53-A	253	GLU	5.5
1	54-A	253	GLU	5.5
1	55-A	253	GLU	5.5
1	56-A	253	GLU	5.5
1	57-A	253	GLU	5.5
1	58-A	253	GLU	5.5
1	59-A	253	GLU	5.5
1	60-A	253	GLU	5.5
1	61-A	253	GLU	5.5
1	62-A	253	GLU	5.5
1	63-A	253	GLU	5.5
1	64-A	253	GLU	5.5
1	65-A	253	GLU	5.5
1	66-A	253	GLU	5.5
1	67-A	253	GLU	5.5
1	68-A	253	GLU	5.5
1	69-A	253	GLU	5.5
1	70-A	253	GLU	5.5
1	71-A	253	GLU	5.5
1	72-A	253	GLU	5.5
1	73-A	253	GLU	5.5
1	74-A	253	GLU	5.5
1	75-A	253	GLU	5.5
1	76-A	253	GLU	5.5
1	77-A	253	GLU	5.5
1	1-A	244	PRO	5.4
1	2-A	244	PRO	5.4
1	3-A	244	PRO	5.4
1	4-A	244	PRO	5.4
1	5-A	244	PRO	5.4
1	6-A	244	PRO	5.4
1	7-A	244	PRO	5.4
1	8-A	244	PRO	5.4
1	9-A	244	PRO	5.4
1	10-A	244	PRO	5.4
1	11-A	244	PRO	5.4
1	12-A	244	PRO	5.4
1	13-A	244	PRO	5.4
1	14-A	244	PRO	5.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	15-A	244	PRO	5.4
1	16-A	244	PRO	5.4
1	17-A	244	PRO	5.4
1	18-A	244	PRO	5.4
1	19-A	244	PRO	5.4
1	20-A	244	PRO	5.4
1	21-A	244	PRO	5.4
1	22-A	244	PRO	5.4
1	23-A	244	PRO	5.4
1	24-A	244	PRO	5.4
1	25-A	244	PRO	5.4
1	26-A	244	PRO	5.4
1	27-A	244	PRO	5.4
1	28-A	244	PRO	5.4
1	29-A	244	PRO	5.4
1	30-A	244	PRO	5.4
1	31-A	244	PRO	5.4
1	32-A	244	PRO	5.4
1	33-A	244	PRO	5.4
1	34-A	244	PRO	5.4
1	35-A	244	PRO	5.4
1	36-A	244	PRO	5.4
1	37-A	244	PRO	5.4
1	38-A	244	PRO	5.4
1	39-A	244	PRO	5.4
1	40-A	244	PRO	5.4
1	41-A	244	PRO	5.4
1	42-A	244	PRO	5.4
1	43-A	244	PRO	5.4
1	44-A	244	PRO	5.4
1	45-A	244	PRO	5.4
1	46-A	244	PRO	5.4
1	47-A	244	PRO	5.4
1	48-A	244	PRO	5.4
1	49-A	244	PRO	5.4
1	50-A	244	PRO	5.4
1	51-A	244	PRO	5.4
1	52-A	244	PRO	5.4
1	53-A	244	PRO	5.4
1	54-A	244	PRO	5.4
1	55-A	244	PRO	5.4
1	56-A	244	PRO	5.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	57-A	244	PRO	5.4
1	58-A	244	PRO	5.4
1	59-A	244	PRO	5.4
1	60-A	244	PRO	5.4
1	61-A	244	PRO	5.4
1	62-A	244	PRO	5.4
1	63-A	244	PRO	5.4
1	64-A	244	PRO	5.4
1	65-A	244	PRO	5.4
1	66-A	244	PRO	5.4
1	67-A	244	PRO	5.4
1	68-A	244	PRO	5.4
1	69-A	244	PRO	5.4
1	70-A	244	PRO	5.4
1	71-A	244	PRO	5.4
1	72-A	244	PRO	5.4
1	73-A	244	PRO	5.4
1	74-A	244	PRO	5.4
1	75-A	244	PRO	5.4
1	76-A	244	PRO	5.4
1	77-A	244	PRO	5.4
1	1-A	245	ARG	5.3
1	2-A	245	ARG	5.3
1	3-A	245	ARG	5.3
1	4-A	245	ARG	5.3
1	5-A	245	ARG	5.3
1	6-A	245	ARG	5.3
1	7-A	245	ARG	5.3
1	8-A	245	ARG	5.3
1	9-A	245	ARG	5.3
1	10-A	245	ARG	5.3
1	11-A	245	ARG	5.3
1	12-A	245	ARG	5.3
1	13-A	245	ARG	5.3
1	14-A	245	ARG	5.3
1	15-A	245	ARG	5.3
1	16-A	245	ARG	5.3
1	17-A	245	ARG	5.3
1	18-A	245	ARG	5.3
1	19-A	245	ARG	5.3
1	20-A	245	ARG	5.3
1	21-A	245	ARG	5.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	22-A	245	ARG	5.3
1	23-A	245	ARG	5.3
1	24-A	245	ARG	5.3
1	25-A	245	ARG	5.3
1	26-A	245	ARG	5.3
1	27-A	245	ARG	5.3
1	28-A	245	ARG	5.3
1	29-A	245	ARG	5.3
1	30-A	245	ARG	5.3
1	31-A	245	ARG	5.3
1	32-A	245	ARG	5.3
1	33-A	245	ARG	5.3
1	34-A	245	ARG	5.3
1	35-A	245	ARG	5.3
1	36-A	245	ARG	5.3
1	37-A	245	ARG	5.3
1	38-A	245	ARG	5.3
1	39-A	245	ARG	5.3
1	40-A	245	ARG	5.3
1	41-A	245	ARG	5.3
1	42-A	245	ARG	5.3
1	43-A	245	ARG	5.3
1	44-A	245	ARG	5.3
1	45-A	245	ARG	5.3
1	46-A	245	ARG	5.3
1	47-A	245	ARG	5.3
1	48-A	245	ARG	5.3
1	49-A	245	ARG	5.3
1	50-A	245	ARG	5.3
1	51-A	245	ARG	5.3
1	52-A	245	ARG	5.3
1	53-A	245	ARG	5.3
1	54-A	245	ARG	5.3
1	55-A	245	ARG	5.3
1	56-A	245	ARG	5.3
1	57-A	245	ARG	5.3
1	58-A	245	ARG	5.3
1	59-A	245	ARG	5.3
1	60-A	245	ARG	5.3
1	61-A	245	ARG	5.3
1	62-A	245	ARG	5.3
1	63-A	245	ARG	5.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	64-A	245	ARG	5.3
1	65-A	245	ARG	5.3
1	66-A	245	ARG	5.3
1	67-A	245	ARG	5.3
1	68-A	245	ARG	5.3
1	69-A	245	ARG	5.3
1	70-A	245	ARG	5.3
1	71-A	245	ARG	5.3
1	72-A	245	ARG	5.3
1	73-A	245	ARG	5.3
1	74-A	245	ARG	5.3
1	75-A	245	ARG	5.3
1	76-A	245	ARG	5.3
1	77-A	245	ARG	5.3
1	1-A	247	GLY	5.3
1	2-A	247	GLY	5.3
1	3-A	247	GLY	5.3
1	4-A	247	GLY	5.3
1	5-A	247	GLY	5.3
1	6-A	247	GLY	5.3
1	7-A	247	GLY	5.3
1	8-A	247	GLY	5.3
1	9-A	247	GLY	5.3
1	10-A	247	GLY	5.3
1	11-A	247	GLY	5.3
1	12-A	247	GLY	5.3
1	13-A	247	GLY	5.3
1	14-A	247	GLY	5.3
1	15-A	247	GLY	5.3
1	16-A	247	GLY	5.3
1	17-A	247	GLY	5.3
1	18-A	247	GLY	5.3
1	19-A	247	GLY	5.3
1	20-A	247	GLY	5.3
1	21-A	247	GLY	5.3
1	22-A	247	GLY	5.3
1	23-A	247	GLY	5.3
1	24-A	247	GLY	5.3
1	25-A	247	GLY	5.3
1	26-A	247	GLY	5.3
1	27-A	247	GLY	5.3
1	28-A	247	GLY	5.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	29-A	247	GLY	5.3
1	30-A	247	GLY	5.3
1	31-A	247	GLY	5.3
1	32-A	247	GLY	5.3
1	33-A	247	GLY	5.3
1	34-A	247	GLY	5.3
1	35-A	247	GLY	5.3
1	36-A	247	GLY	5.3
1	37-A	247	GLY	5.3
1	38-A	247	GLY	5.3
1	39-A	247	GLY	5.3
1	40-A	247	GLY	5.3
1	41-A	247	GLY	5.3
1	42-A	247	GLY	5.3
1	43-A	247	GLY	5.3
1	44-A	247	GLY	5.3
1	45-A	247	GLY	5.3
1	46-A	247	GLY	5.3
1	47-A	247	GLY	5.3
1	48-A	247	GLY	5.3
1	49-A	247	GLY	5.3
1	50-A	247	GLY	5.3
1	51-A	247	GLY	5.3
1	52-A	247	GLY	5.3
1	53-A	247	GLY	5.3
1	54-A	247	GLY	5.3
1	55-A	247	GLY	5.3
1	56-A	247	GLY	5.3
1	57-A	247	GLY	5.3
1	58-A	247	GLY	5.3
1	59-A	247	GLY	5.3
1	60-A	247	GLY	5.3
1	61-A	247	GLY	5.3
1	62-A	247	GLY	5.3
1	63-A	247	GLY	5.3
1	64-A	247	GLY	5.3
1	65-A	247	GLY	5.3
1	66-A	247	GLY	5.3
1	67-A	247	GLY	5.3
1	68-A	247	GLY	5.3
1	69-A	247	GLY	5.3
1	70-A	247	GLY	5.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	71-A	247	GLY	5.3
1	72-A	247	GLY	5.3
1	73-A	247	GLY	5.3
1	74-A	247	GLY	5.3
1	75-A	247	GLY	5.3
1	76-A	247	GLY	5.3
1	77-A	247	GLY	5.3
1	1-A	250	GLY	4.4
1	2-A	250	GLY	4.4
1	3-A	250	GLY	4.4
1	4-A	250	GLY	4.4
1	5-A	250	GLY	4.4
1	6-A	250	GLY	4.4
1	7-A	250	GLY	4.4
1	8-A	250	GLY	4.4
1	9-A	250	GLY	4.4
1	10-A	250	GLY	4.4
1	11-A	250	GLY	4.4
1	12-A	250	GLY	4.4
1	13-A	250	GLY	4.4
1	14-A	250	GLY	4.4
1	15-A	250	GLY	4.4
1	16-A	250	GLY	4.4
1	17-A	250	GLY	4.4
1	18-A	250	GLY	4.4
1	19-A	250	GLY	4.4
1	20-A	250	GLY	4.4
1	21-A	250	GLY	4.4
1	22-A	250	GLY	4.4
1	23-A	250	GLY	4.4
1	24-A	250	GLY	4.4
1	25-A	250	GLY	4.4
1	26-A	250	GLY	4.4
1	27-A	250	GLY	4.4
1	28-A	250	GLY	4.4
1	29-A	250	GLY	4.4
1	30-A	250	GLY	4.4
1	31-A	250	GLY	4.4
1	32-A	250	GLY	4.4
1	33-A	250	GLY	4.4
1	34-A	250	GLY	4.4
1	35-A	250	GLY	4.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	36-A	250	GLY	4.4
1	37-A	250	GLY	4.4
1	38-A	250	GLY	4.4
1	39-A	250	GLY	4.4
1	40-A	250	GLY	4.4
1	41-A	250	GLY	4.4
1	42-A	250	GLY	4.4
1	43-A	250	GLY	4.4
1	44-A	250	GLY	4.4
1	45-A	250	GLY	4.4
1	46-A	250	GLY	4.4
1	47-A	250	GLY	4.4
1	48-A	250	GLY	4.4
1	49-A	250	GLY	4.4
1	50-A	250	GLY	4.4
1	51-A	250	GLY	4.4
1	52-A	250	GLY	4.4
1	53-A	250	GLY	4.4
1	54-A	250	GLY	4.4
1	55-A	250	GLY	4.4
1	56-A	250	GLY	4.4
1	57-A	250	GLY	4.4
1	58-A	250	GLY	4.4
1	59-A	250	GLY	4.4
1	60-A	250	GLY	4.4
1	61-A	250	GLY	4.4
1	62-A	250	GLY	4.4
1	63-A	250	GLY	4.4
1	64-A	250	GLY	4.4
1	65-A	250	GLY	4.4
1	66-A	250	GLY	4.4
1	67-A	250	GLY	4.4
1	68-A	250	GLY	4.4
1	69-A	250	GLY	4.4
1	70-A	250	GLY	4.4
1	71-A	250	GLY	4.4
1	72-A	250	GLY	4.4
1	73-A	250	GLY	4.4
1	74-A	250	GLY	4.4
1	75-A	250	GLY	4.4
1	76-A	250	GLY	4.4
1	77-A	250	GLY	4.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	262	TYR	4.4
1	2-A	262	TYR	4.4
1	3-A	262	TYR	4.4
1	4-A	262	TYR	4.4
1	5-A	262	TYR	4.4
1	6-A	262	TYR	4.4
1	7-A	262	TYR	4.4
1	8-A	262	TYR	4.4
1	9-A	262	TYR	4.4
1	10-A	262	TYR	4.4
1	11-A	262	TYR	4.4
1	12-A	262	TYR	4.4
1	13-A	262	TYR	4.4
1	14-A	262	TYR	4.4
1	15-A	262	TYR	4.4
1	16-A	262	TYR	4.4
1	17-A	262	TYR	4.4
1	18-A	262	TYR	4.4
1	19-A	262	TYR	4.4
1	20-A	262	TYR	4.4
1	21-A	262	TYR	4.4
1	22-A	262	TYR	4.4
1	23-A	262	TYR	4.4
1	24-A	262	TYR	4.4
1	25-A	262	TYR	4.4
1	26-A	262	TYR	4.4
1	27-A	262	TYR	4.4
1	28-A	262	TYR	4.4
1	29-A	262	TYR	4.4
1	30-A	262	TYR	4.4
1	31-A	262	TYR	4.4
1	32-A	262	TYR	4.4
1	33-A	262	TYR	4.4
1	34-A	262	TYR	4.4
1	35-A	262	TYR	4.4
1	36-A	262	TYR	4.4
1	37-A	262	TYR	4.4
1	38-A	262	TYR	4.4
1	39-A	262	TYR	4.4
1	40-A	262	TYR	4.4
1	41-A	262	TYR	4.4
1	42-A	262	TYR	4.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	43-A	262	TYR	4.4
1	44-A	262	TYR	4.4
1	45-A	262	TYR	4.4
1	46-A	262	TYR	4.4
1	47-A	262	TYR	4.4
1	48-A	262	TYR	4.4
1	49-A	262	TYR	4.4
1	50-A	262	TYR	4.4
1	51-A	262	TYR	4.4
1	52-A	262	TYR	4.4
1	53-A	262	TYR	4.4
1	54-A	262	TYR	4.4
1	55-A	262	TYR	4.4
1	56-A	262	TYR	4.4
1	57-A	262	TYR	4.4
1	58-A	262	TYR	4.4
1	59-A	262	TYR	4.4
1	60-A	262	TYR	4.4
1	61-A	262	TYR	4.4
1	62-A	262	TYR	4.4
1	63-A	262	TYR	4.4
1	64-A	262	TYR	4.4
1	65-A	262	TYR	4.4
1	66-A	262	TYR	4.4
1	67-A	262	TYR	4.4
1	68-A	262	TYR	4.4
1	69-A	262	TYR	4.4
1	70-A	262	TYR	4.4
1	71-A	262	TYR	4.4
1	72-A	262	TYR	4.4
1	73-A	262	TYR	4.4
1	74-A	262	TYR	4.4
1	75-A	262	TYR	4.4
1	76-A	262	TYR	4.4
1	77-A	262	TYR	4.4
1	1-A	175	LEU	3.7
1	2-A	175	LEU	3.7
1	3-A	175	LEU	3.7
1	4-A	175	LEU	3.7
1	5-A	175	LEU	3.7
1	6-A	175	LEU	3.7
1	7-A	175	LEU	3.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	8-A	175	LEU	3.7
1	9-A	175	LEU	3.7
1	10-A	175	LEU	3.7
1	11-A	175	LEU	3.7
1	12-A	175	LEU	3.7
1	13-A	175	LEU	3.7
1	14-A	175	LEU	3.7
1	15-A	175	LEU	3.7
1	16-A	175	LEU	3.7
1	17-A	175	LEU	3.7
1	18-A	175	LEU	3.7
1	19-A	175	LEU	3.7
1	20-A	175	LEU	3.7
1	21-A	175	LEU	3.7
1	22-A	175	LEU	3.7
1	23-A	175	LEU	3.7
1	24-A	175	LEU	3.7
1	25-A	175	LEU	3.7
1	26-A	175	LEU	3.7
1	27-A	175	LEU	3.7
1	28-A	175	LEU	3.7
1	29-A	175	LEU	3.7
1	30-A	175	LEU	3.7
1	31-A	175	LEU	3.7
1	32-A	175	LEU	3.7
1	33-A	175	LEU	3.7
1	34-A	175	LEU	3.7
1	35-A	175	LEU	3.7
1	36-A	175	LEU	3.7
1	37-A	175	LEU	3.7
1	38-A	175	LEU	3.7
1	39-A	175	LEU	3.7
1	40-A	175	LEU	3.7
1	41-A	175	LEU	3.7
1	42-A	175	LEU	3.7
1	43-A	175	LEU	3.7
1	44-A	175	LEU	3.7
1	45-A	175	LEU	3.7
1	46-A	175	LEU	3.7
1	47-A	175	LEU	3.7
1	48-A	175	LEU	3.7
1	49-A	175	LEU	3.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	50-A	175	LEU	3.7
1	51-A	175	LEU	3.7
1	52-A	175	LEU	3.7
1	53-A	175	LEU	3.7
1	54-A	175	LEU	3.7
1	55-A	175	LEU	3.7
1	56-A	175	LEU	3.7
1	57-A	175	LEU	3.7
1	58-A	175	LEU	3.7
1	59-A	175	LEU	3.7
1	60-A	175	LEU	3.7
1	61-A	175	LEU	3.7
1	62-A	175	LEU	3.7
1	63-A	175	LEU	3.7
1	64-A	175	LEU	3.7
1	65-A	175	LEU	3.7
1	66-A	175	LEU	3.7
1	67-A	175	LEU	3.7
1	68-A	175	LEU	3.7
1	69-A	175	LEU	3.7
1	70-A	175	LEU	3.7
1	71-A	175	LEU	3.7
1	72-A	175	LEU	3.7
1	73-A	175	LEU	3.7
1	74-A	175	LEU	3.7
1	75-A	175	LEU	3.7
1	76-A	175	LEU	3.7
1	77-A	175	LEU	3.7
1	1-A	31	ARG	3.5
1	2-A	31	ARG	3.5
1	3-A	31	ARG	3.5
1	4-A	31	ARG	3.5
1	5-A	31	ARG	3.5
1	6-A	31	ARG	3.5
1	7-A	31	ARG	3.5
1	8-A	31	ARG	3.5
1	9-A	31	ARG	3.5
1	10-A	31	ARG	3.5
1	11-A	31	ARG	3.5
1	12-A	31	ARG	3.5
1	13-A	31	ARG	3.5
1	14-A	31	ARG	3.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	15-A	31	ARG	3.5
1	16-A	31	ARG	3.5
1	17-A	31	ARG	3.5
1	18-A	31	ARG	3.5
1	19-A	31	ARG	3.5
1	20-A	31	ARG	3.5
1	21-A	31	ARG	3.5
1	22-A	31	ARG	3.5
1	23-A	31	ARG	3.5
1	24-A	31	ARG	3.5
1	25-A	31	ARG	3.5
1	26-A	31	ARG	3.5
1	27-A	31	ARG	3.5
1	28-A	31	ARG	3.5
1	29-A	31	ARG	3.5
1	30-A	31	ARG	3.5
1	31-A	31	ARG	3.5
1	32-A	31	ARG	3.5
1	33-A	31	ARG	3.5
1	34-A	31	ARG	3.5
1	35-A	31	ARG	3.5
1	36-A	31	ARG	3.5
1	37-A	31	ARG	3.5
1	38-A	31	ARG	3.5
1	39-A	31	ARG	3.5
1	40-A	31	ARG	3.5
1	41-A	31	ARG	3.5
1	42-A	31	ARG	3.5
1	43-A	31	ARG	3.5
1	44-A	31	ARG	3.5
1	45-A	31	ARG	3.5
1	46-A	31	ARG	3.5
1	47-A	31	ARG	3.5
1	48-A	31	ARG	3.5
1	49-A	31	ARG	3.5
1	50-A	31	ARG	3.5
1	51-A	31	ARG	3.5
1	52-A	31	ARG	3.5
1	53-A	31	ARG	3.5
1	54-A	31	ARG	3.5
1	55-A	31	ARG	3.5
1	56-A	31	ARG	3.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	57-A	31	ARG	3.5
1	58-A	31	ARG	3.5
1	59-A	31	ARG	3.5
1	60-A	31	ARG	3.5
1	61-A	31	ARG	3.5
1	62-A	31	ARG	3.5
1	63-A	31	ARG	3.5
1	64-A	31	ARG	3.5
1	65-A	31	ARG	3.5
1	66-A	31	ARG	3.5
1	67-A	31	ARG	3.5
1	68-A	31	ARG	3.5
1	69-A	31	ARG	3.5
1	70-A	31	ARG	3.5
1	71-A	31	ARG	3.5
1	72-A	31	ARG	3.5
1	73-A	31	ARG	3.5
1	74-A	31	ARG	3.5
1	75-A	31	ARG	3.5
1	76-A	31	ARG	3.5
1	77-A	31	ARG	3.5
1	1-A	18	ARG	3.4
1	2-A	18	ARG	3.4
1	3-A	18	ARG	3.4
1	4-A	18	ARG	3.4
1	5-A	18	ARG	3.4
1	6-A	18	ARG	3.4
1	7-A	18	ARG	3.4
1	8-A	18	ARG	3.4
1	9-A	18	ARG	3.4
1	10-A	18	ARG	3.4
1	11-A	18	ARG	3.4
1	12-A	18	ARG	3.4
1	13-A	18	ARG	3.4
1	14-A	18	ARG	3.4
1	15-A	18	ARG	3.4
1	16-A	18	ARG	3.4
1	17-A	18	ARG	3.4
1	18-A	18	ARG	3.4
1	19-A	18	ARG	3.4
1	20-A	18	ARG	3.4
1	21-A	18	ARG	3.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	22-A	18	ARG	3.4
1	23-A	18	ARG	3.4
1	24-A	18	ARG	3.4
1	25-A	18	ARG	3.4
1	26-A	18	ARG	3.4
1	27-A	18	ARG	3.4
1	28-A	18	ARG	3.4
1	29-A	18	ARG	3.4
1	30-A	18	ARG	3.4
1	31-A	18	ARG	3.4
1	32-A	18	ARG	3.4
1	33-A	18	ARG	3.4
1	34-A	18	ARG	3.4
1	35-A	18	ARG	3.4
1	36-A	18	ARG	3.4
1	37-A	18	ARG	3.4
1	38-A	18	ARG	3.4
1	39-A	18	ARG	3.4
1	40-A	18	ARG	3.4
1	41-A	18	ARG	3.4
1	42-A	18	ARG	3.4
1	43-A	18	ARG	3.4
1	44-A	18	ARG	3.4
1	45-A	18	ARG	3.4
1	46-A	18	ARG	3.4
1	47-A	18	ARG	3.4
1	48-A	18	ARG	3.4
1	49-A	18	ARG	3.4
1	50-A	18	ARG	3.4
1	51-A	18	ARG	3.4
1	52-A	18	ARG	3.4
1	53-A	18	ARG	3.4
1	54-A	18	ARG	3.4
1	55-A	18	ARG	3.4
1	56-A	18	ARG	3.4
1	57-A	18	ARG	3.4
1	58-A	18	ARG	3.4
1	59-A	18	ARG	3.4
1	60-A	18	ARG	3.4
1	61-A	18	ARG	3.4
1	62-A	18	ARG	3.4
1	63-A	18	ARG	3.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	64-A	18	ARG	3.4
1	65-A	18	ARG	3.4
1	66-A	18	ARG	3.4
1	67-A	18	ARG	3.4
1	68-A	18	ARG	3.4
1	69-A	18	ARG	3.4
1	70-A	18	ARG	3.4
1	71-A	18	ARG	3.4
1	72-A	18	ARG	3.4
1	73-A	18	ARG	3.4
1	74-A	18	ARG	3.4
1	75-A	18	ARG	3.4
1	76-A	18	ARG	3.4
1	77-A	18	ARG	3.4
1	1-A	11	THR	3.2
1	2-A	11	THR	3.2
1	3-A	11	THR	3.2
1	4-A	11	THR	3.2
1	5-A	11	THR	3.2
1	6-A	11	THR	3.2
1	7-A	11	THR	3.2
1	8-A	11	THR	3.2
1	9-A	11	THR	3.2
1	10-A	11	THR	3.2
1	11-A	11	THR	3.2
1	12-A	11	THR	3.2
1	13-A	11	THR	3.2
1	14-A	11	THR	3.2
1	15-A	11	THR	3.2
1	16-A	11	THR	3.2
1	17-A	11	THR	3.2
1	18-A	11	THR	3.2
1	19-A	11	THR	3.2
1	20-A	11	THR	3.2
1	21-A	11	THR	3.2
1	22-A	11	THR	3.2
1	23-A	11	THR	3.2
1	24-A	11	THR	3.2
1	25-A	11	THR	3.2
1	26-A	11	THR	3.2
1	27-A	11	THR	3.2
1	28-A	11	THR	3.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	29-A	11	THR	3.2
1	30-A	11	THR	3.2
1	31-A	11	THR	3.2
1	32-A	11	THR	3.2
1	33-A	11	THR	3.2
1	34-A	11	THR	3.2
1	35-A	11	THR	3.2
1	36-A	11	THR	3.2
1	37-A	11	THR	3.2
1	38-A	11	THR	3.2
1	39-A	11	THR	3.2
1	40-A	11	THR	3.2
1	41-A	11	THR	3.2
1	42-A	11	THR	3.2
1	43-A	11	THR	3.2
1	44-A	11	THR	3.2
1	45-A	11	THR	3.2
1	46-A	11	THR	3.2
1	47-A	11	THR	3.2
1	48-A	11	THR	3.2
1	49-A	11	THR	3.2
1	50-A	11	THR	3.2
1	51-A	11	THR	3.2
1	52-A	11	THR	3.2
1	53-A	11	THR	3.2
1	54-A	11	THR	3.2
1	55-A	11	THR	3.2
1	56-A	11	THR	3.2
1	57-A	11	THR	3.2
1	58-A	11	THR	3.2
1	59-A	11	THR	3.2
1	60-A	11	THR	3.2
1	61-A	11	THR	3.2
1	62-A	11	THR	3.2
1	63-A	11	THR	3.2
1	64-A	11	THR	3.2
1	65-A	11	THR	3.2
1	66-A	11	THR	3.2
1	67-A	11	THR	3.2
1	68-A	11	THR	3.2
1	69-A	11	THR	3.2
1	70-A	11	THR	3.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	71-A	11	THR	3.2
1	72-A	11	THR	3.2
1	73-A	11	THR	3.2
1	74-A	11	THR	3.2
1	75-A	11	THR	3.2
1	76-A	11	THR	3.2
1	77-A	11	THR	3.2
1	1-A	16	GLU	2.6
1	2-A	16	GLU	2.6
1	3-A	16	GLU	2.6
1	4-A	16	GLU	2.6
1	5-A	16	GLU	2.6
1	6-A	16	GLU	2.6
1	7-A	16	GLU	2.6
1	8-A	16	GLU	2.6
1	9-A	16	GLU	2.6
1	10-A	16	GLU	2.6
1	11-A	16	GLU	2.6
1	12-A	16	GLU	2.6
1	13-A	16	GLU	2.6
1	14-A	16	GLU	2.6
1	15-A	16	GLU	2.6
1	16-A	16	GLU	2.6
1	17-A	16	GLU	2.6
1	18-A	16	GLU	2.6
1	19-A	16	GLU	2.6
1	20-A	16	GLU	2.6
1	21-A	16	GLU	2.6
1	22-A	16	GLU	2.6
1	23-A	16	GLU	2.6
1	24-A	16	GLU	2.6
1	25-A	16	GLU	2.6
1	26-A	16	GLU	2.6
1	27-A	16	GLU	2.6
1	28-A	16	GLU	2.6
1	29-A	16	GLU	2.6
1	30-A	16	GLU	2.6
1	31-A	16	GLU	2.6
1	32-A	16	GLU	2.6
1	33-A	16	GLU	2.6
1	34-A	16	GLU	2.6
1	35-A	16	GLU	2.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	36-A	16	GLU	2.6
1	37-A	16	GLU	2.6
1	38-A	16	GLU	2.6
1	39-A	16	GLU	2.6
1	40-A	16	GLU	2.6
1	41-A	16	GLU	2.6
1	42-A	16	GLU	2.6
1	43-A	16	GLU	2.6
1	44-A	16	GLU	2.6
1	45-A	16	GLU	2.6
1	46-A	16	GLU	2.6
1	47-A	16	GLU	2.6
1	48-A	16	GLU	2.6
1	49-A	16	GLU	2.6
1	50-A	16	GLU	2.6
1	51-A	16	GLU	2.6
1	52-A	16	GLU	2.6
1	53-A	16	GLU	2.6
1	54-A	16	GLU	2.6
1	55-A	16	GLU	2.6
1	56-A	16	GLU	2.6
1	57-A	16	GLU	2.6
1	58-A	16	GLU	2.6
1	59-A	16	GLU	2.6
1	60-A	16	GLU	2.6
1	61-A	16	GLU	2.6
1	62-A	16	GLU	2.6
1	63-A	16	GLU	2.6
1	64-A	16	GLU	2.6
1	65-A	16	GLU	2.6
1	66-A	16	GLU	2.6
1	67-A	16	GLU	2.6
1	68-A	16	GLU	2.6
1	69-A	16	GLU	2.6
1	70-A	16	GLU	2.6
1	71-A	16	GLU	2.6
1	72-A	16	GLU	2.6
1	73-A	16	GLU	2.6
1	74-A	16	GLU	2.6
1	75-A	16	GLU	2.6
1	76-A	16	GLU	2.6
1	77-A	16	GLU	2.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	177	THR	2.6
1	2-A	177	THR	2.6
1	3-A	177	THR	2.6
1	4-A	177	THR	2.6
1	5-A	177	THR	2.6
1	6-A	177	THR	2.6
1	7-A	177	THR	2.6
1	8-A	177	THR	2.6
1	9-A	177	THR	2.6
1	10-A	177	THR	2.6
1	11-A	177	THR	2.6
1	12-A	177	THR	2.6
1	13-A	177	THR	2.6
1	14-A	177	THR	2.6
1	15-A	177	THR	2.6
1	16-A	177	THR	2.6
1	17-A	177	THR	2.6
1	18-A	177	THR	2.6
1	19-A	177	THR	2.6
1	20-A	177	THR	2.6
1	21-A	177	THR	2.6
1	22-A	177	THR	2.6
1	23-A	177	THR	2.6
1	24-A	177	THR	2.6
1	25-A	177	THR	2.6
1	26-A	177	THR	2.6
1	27-A	177	THR	2.6
1	28-A	177	THR	2.6
1	29-A	177	THR	2.6
1	30-A	177	THR	2.6
1	31-A	177	THR	2.6
1	32-A	177	THR	2.6
1	33-A	177	THR	2.6
1	34-A	177	THR	2.6
1	35-A	177	THR	2.6
1	36-A	177	THR	2.6
1	37-A	177	THR	2.6
1	38-A	177	THR	2.6
1	39-A	177	THR	2.6
1	40-A	177	THR	2.6
1	41-A	177	THR	2.6
1	42-A	177	THR	2.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	43-A	177	THR	2.6
1	44-A	177	THR	2.6
1	45-A	177	THR	2.6
1	46-A	177	THR	2.6
1	47-A	177	THR	2.6
1	48-A	177	THR	2.6
1	49-A	177	THR	2.6
1	50-A	177	THR	2.6
1	51-A	177	THR	2.6
1	52-A	177	THR	2.6
1	53-A	177	THR	2.6
1	54-A	177	THR	2.6
1	55-A	177	THR	2.6
1	56-A	177	THR	2.6
1	57-A	177	THR	2.6
1	58-A	177	THR	2.6
1	59-A	177	THR	2.6
1	60-A	177	THR	2.6
1	61-A	177	THR	2.6
1	62-A	177	THR	2.6
1	63-A	177	THR	2.6
1	64-A	177	THR	2.6
1	65-A	177	THR	2.6
1	66-A	177	THR	2.6
1	67-A	177	THR	2.6
1	68-A	177	THR	2.6
1	69-A	177	THR	2.6
1	70-A	177	THR	2.6
1	71-A	177	THR	2.6
1	72-A	177	THR	2.6
1	73-A	177	THR	2.6
1	74-A	177	THR	2.6
1	75-A	177	THR	2.6
1	76-A	177	THR	2.6
1	77-A	177	THR	2.6
1	1-A	213	ILE	2.6
1	2-A	213	ILE	2.6
1	3-A	213	ILE	2.6
1	4-A	213	ILE	2.6
1	5-A	213	ILE	2.6
1	6-A	213	ILE	2.6
1	7-A	213	ILE	2.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	8-A	213	ILE	2.6
1	9-A	213	ILE	2.6
1	10-A	213	ILE	2.6
1	11-A	213	ILE	2.6
1	12-A	213	ILE	2.6
1	13-A	213	ILE	2.6
1	14-A	213	ILE	2.6
1	15-A	213	ILE	2.6
1	16-A	213	ILE	2.6
1	17-A	213	ILE	2.6
1	18-A	213	ILE	2.6
1	19-A	213	ILE	2.6
1	20-A	213	ILE	2.6
1	21-A	213	ILE	2.6
1	22-A	213	ILE	2.6
1	23-A	213	ILE	2.6
1	24-A	213	ILE	2.6
1	25-A	213	ILE	2.6
1	26-A	213	ILE	2.6
1	27-A	213	ILE	2.6
1	28-A	213	ILE	2.6
1	29-A	213	ILE	2.6
1	30-A	213	ILE	2.6
1	31-A	213	ILE	2.6
1	32-A	213	ILE	2.6
1	33-A	213	ILE	2.6
1	34-A	213	ILE	2.6
1	35-A	213	ILE	2.6
1	36-A	213	ILE	2.6
1	37-A	213	ILE	2.6
1	38-A	213	ILE	2.6
1	39-A	213	ILE	2.6
1	40-A	213	ILE	2.6
1	41-A	213	ILE	2.6
1	42-A	213	ILE	2.6
1	43-A	213	ILE	2.6
1	44-A	213	ILE	2.6
1	45-A	213	ILE	2.6
1	46-A	213	ILE	2.6
1	47-A	213	ILE	2.6
1	48-A	213	ILE	2.6
1	49-A	213	ILE	2.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	50-A	213	ILE	2.6
1	51-A	213	ILE	2.6
1	52-A	213	ILE	2.6
1	53-A	213	ILE	2.6
1	54-A	213	ILE	2.6
1	55-A	213	ILE	2.6
1	56-A	213	ILE	2.6
1	57-A	213	ILE	2.6
1	58-A	213	ILE	2.6
1	59-A	213	ILE	2.6
1	60-A	213	ILE	2.6
1	61-A	213	ILE	2.6
1	62-A	213	ILE	2.6
1	63-A	213	ILE	2.6
1	64-A	213	ILE	2.6
1	65-A	213	ILE	2.6
1	66-A	213	ILE	2.6
1	67-A	213	ILE	2.6
1	68-A	213	ILE	2.6
1	69-A	213	ILE	2.6
1	70-A	213	ILE	2.6
1	71-A	213	ILE	2.6
1	72-A	213	ILE	2.6
1	73-A	213	ILE	2.6
1	74-A	213	ILE	2.6
1	75-A	213	ILE	2.6
1	76-A	213	ILE	2.6
1	77-A	213	ILE	2.6
1	1-A	178	ILE	2.2
1	2-A	178	ILE	2.2
1	3-A	178	ILE	2.2
1	4-A	178	ILE	2.2
1	5-A	178	ILE	2.2
1	6-A	178	ILE	2.2
1	7-A	178	ILE	2.2
1	8-A	178	ILE	2.2
1	9-A	178	ILE	2.2
1	10-A	178	ILE	2.2
1	11-A	178	ILE	2.2
1	12-A	178	ILE	2.2
1	13-A	178	ILE	2.2
1	14-A	178	ILE	2.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	15-A	178	ILE	2.2
1	16-A	178	ILE	2.2
1	17-A	178	ILE	2.2
1	18-A	178	ILE	2.2
1	19-A	178	ILE	2.2
1	20-A	178	ILE	2.2
1	21-A	178	ILE	2.2
1	22-A	178	ILE	2.2
1	23-A	178	ILE	2.2
1	24-A	178	ILE	2.2
1	25-A	178	ILE	2.2
1	26-A	178	ILE	2.2
1	27-A	178	ILE	2.2
1	28-A	178	ILE	2.2
1	29-A	178	ILE	2.2
1	30-A	178	ILE	2.2
1	31-A	178	ILE	2.2
1	32-A	178	ILE	2.2
1	33-A	178	ILE	2.2
1	34-A	178	ILE	2.2
1	35-A	178	ILE	2.2
1	36-A	178	ILE	2.2
1	37-A	178	ILE	2.2
1	38-A	178	ILE	2.2
1	39-A	178	ILE	2.2
1	40-A	178	ILE	2.2
1	41-A	178	ILE	2.2
1	42-A	178	ILE	2.2
1	43-A	178	ILE	2.2
1	44-A	178	ILE	2.2
1	45-A	178	ILE	2.2
1	46-A	178	ILE	2.2
1	47-A	178	ILE	2.2
1	48-A	178	ILE	2.2
1	49-A	178	ILE	2.2
1	50-A	178	ILE	2.2
1	51-A	178	ILE	2.2
1	52-A	178	ILE	2.2
1	53-A	178	ILE	2.2
1	54-A	178	ILE	2.2
1	55-A	178	ILE	2.2
1	56-A	178	ILE	2.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	57-A	178	ILE	2.2
1	58-A	178	ILE	2.2
1	59-A	178	ILE	2.2
1	60-A	178	ILE	2.2
1	61-A	178	ILE	2.2
1	62-A	178	ILE	2.2
1	63-A	178	ILE	2.2
1	64-A	178	ILE	2.2
1	65-A	178	ILE	2.2
1	66-A	178	ILE	2.2
1	67-A	178	ILE	2.2
1	68-A	178	ILE	2.2
1	69-A	178	ILE	2.2
1	70-A	178	ILE	2.2
1	71-A	178	ILE	2.2
1	72-A	178	ILE	2.2
1	73-A	178	ILE	2.2
1	74-A	178	ILE	2.2
1	75-A	178	ILE	2.2
1	76-A	178	ILE	2.2
1	77-A	178	ILE	2.2
1	1-A	61	THR	2.1
1	2-A	61	THR	2.1
1	3-A	61	THR	2.1
1	4-A	61	THR	2.1
1	5-A	61	THR	2.1
1	6-A	61	THR	2.1
1	7-A	61	THR	2.1
1	8-A	61	THR	2.1
1	9-A	61	THR	2.1
1	10-A	61	THR	2.1
1	11-A	61	THR	2.1
1	12-A	61	THR	2.1
1	13-A	61	THR	2.1
1	14-A	61	THR	2.1
1	15-A	61	THR	2.1
1	16-A	61	THR	2.1
1	17-A	61	THR	2.1
1	18-A	61	THR	2.1
1	19-A	61	THR	2.1
1	20-A	61	THR	2.1
1	21-A	61	THR	2.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	22-A	61	THR	2.1
1	23-A	61	THR	2.1
1	24-A	61	THR	2.1
1	25-A	61	THR	2.1
1	26-A	61	THR	2.1
1	27-A	61	THR	2.1
1	28-A	61	THR	2.1
1	29-A	61	THR	2.1
1	30-A	61	THR	2.1
1	31-A	61	THR	2.1
1	32-A	61	THR	2.1
1	33-A	61	THR	2.1
1	34-A	61	THR	2.1
1	35-A	61	THR	2.1
1	36-A	61	THR	2.1
1	37-A	61	THR	2.1
1	38-A	61	THR	2.1
1	39-A	61	THR	2.1
1	40-A	61	THR	2.1
1	41-A	61	THR	2.1
1	42-A	61	THR	2.1
1	43-A	61	THR	2.1
1	44-A	61	THR	2.1
1	45-A	61	THR	2.1
1	46-A	61	THR	2.1
1	47-A	61	THR	2.1
1	48-A	61	THR	2.1
1	49-A	61	THR	2.1
1	50-A	61	THR	2.1
1	51-A	61	THR	2.1
1	52-A	61	THR	2.1
1	53-A	61	THR	2.1
1	54-A	61	THR	2.1
1	55-A	61	THR	2.1
1	56-A	61	THR	2.1
1	57-A	61	THR	2.1
1	58-A	61	THR	2.1
1	59-A	61	THR	2.1
1	60-A	61	THR	2.1
1	61-A	61	THR	2.1
1	62-A	61	THR	2.1
1	63-A	61	THR	2.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	64-A	61	THR	2.1
1	65-A	61	THR	2.1
1	66-A	61	THR	2.1
1	67-A	61	THR	2.1
1	68-A	61	THR	2.1
1	69-A	61	THR	2.1
1	70-A	61	THR	2.1
1	71-A	61	THR	2.1
1	72-A	61	THR	2.1
1	73-A	61	THR	2.1
1	74-A	61	THR	2.1
1	75-A	61	THR	2.1
1	76-A	61	THR	2.1
1	77-A	61	THR	2.1
1	1-A	8	PRO	2.1
1	2-A	8	PRO	2.1
1	3-A	8	PRO	2.1
1	4-A	8	PRO	2.1
1	5-A	8	PRO	2.1
1	6-A	8	PRO	2.1
1	7-A	8	PRO	2.1
1	8-A	8	PRO	2.1
1	9-A	8	PRO	2.1
1	10-A	8	PRO	2.1
1	11-A	8	PRO	2.1
1	12-A	8	PRO	2.1
1	13-A	8	PRO	2.1
1	14-A	8	PRO	2.1
1	15-A	8	PRO	2.1
1	16-A	8	PRO	2.1
1	17-A	8	PRO	2.1
1	18-A	8	PRO	2.1
1	19-A	8	PRO	2.1
1	20-A	8	PRO	2.1
1	21-A	8	PRO	2.1
1	22-A	8	PRO	2.1
1	23-A	8	PRO	2.1
1	24-A	8	PRO	2.1
1	25-A	8	PRO	2.1
1	26-A	8	PRO	2.1
1	27-A	8	PRO	2.1
1	28-A	8	PRO	2.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	29-A	8	PRO	2.1
1	30-A	8	PRO	2.1
1	31-A	8	PRO	2.1
1	32-A	8	PRO	2.1
1	33-A	8	PRO	2.1
1	34-A	8	PRO	2.1
1	35-A	8	PRO	2.1
1	36-A	8	PRO	2.1
1	37-A	8	PRO	2.1
1	38-A	8	PRO	2.1
1	39-A	8	PRO	2.1
1	40-A	8	PRO	2.1
1	41-A	8	PRO	2.1
1	42-A	8	PRO	2.1
1	43-A	8	PRO	2.1
1	44-A	8	PRO	2.1
1	45-A	8	PRO	2.1
1	46-A	8	PRO	2.1
1	47-A	8	PRO	2.1
1	48-A	8	PRO	2.1
1	49-A	8	PRO	2.1
1	50-A	8	PRO	2.1
1	51-A	8	PRO	2.1
1	52-A	8	PRO	2.1
1	53-A	8	PRO	2.1
1	54-A	8	PRO	2.1
1	55-A	8	PRO	2.1
1	56-A	8	PRO	2.1
1	57-A	8	PRO	2.1
1	58-A	8	PRO	2.1
1	59-A	8	PRO	2.1
1	60-A	8	PRO	2.1
1	61-A	8	PRO	2.1
1	62-A	8	PRO	2.1
1	63-A	8	PRO	2.1
1	64-A	8	PRO	2.1
1	65-A	8	PRO	2.1
1	66-A	8	PRO	2.1
1	67-A	8	PRO	2.1
1	68-A	8	PRO	2.1
1	69-A	8	PRO	2.1
1	70-A	8	PRO	2.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	71-A	8	PRO	2.1
1	72-A	8	PRO	2.1
1	73-A	8	PRO	2.1
1	74-A	8	PRO	2.1
1	75-A	8	PRO	2.1
1	76-A	8	PRO	2.1
1	77-A	8	PRO	2.1
1	1-A	13	ALA	2.1
1	1-A	65	ALA	2.1
1	2-A	13	ALA	2.1
1	2-A	65	ALA	2.1
1	3-A	13	ALA	2.1
1	3-A	65	ALA	2.1
1	4-A	13	ALA	2.1
1	4-A	65	ALA	2.1
1	5-A	13	ALA	2.1
1	5-A	65	ALA	2.1
1	6-A	13	ALA	2.1
1	6-A	65	ALA	2.1
1	7-A	13	ALA	2.1
1	7-A	65	ALA	2.1
1	8-A	13	ALA	2.1
1	8-A	65	ALA	2.1
1	9-A	13	ALA	2.1
1	9-A	65	ALA	2.1
1	10-A	13	ALA	2.1
1	10-A	65	ALA	2.1
1	11-A	13	ALA	2.1
1	11-A	65	ALA	2.1
1	12-A	13	ALA	2.1
1	12-A	65	ALA	2.1
1	13-A	13	ALA	2.1
1	13-A	65	ALA	2.1
1	14-A	13	ALA	2.1
1	14-A	65	ALA	2.1
1	15-A	13	ALA	2.1
1	15-A	65	ALA	2.1
1	16-A	13	ALA	2.1
1	16-A	65	ALA	2.1
1	17-A	13	ALA	2.1
1	17-A	65	ALA	2.1
1	18-A	13	ALA	2.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	18-A	65	ALA	2.1
1	19-A	13	ALA	2.1
1	19-A	65	ALA	2.1
1	20-A	13	ALA	2.1
1	20-A	65	ALA	2.1
1	21-A	13	ALA	2.1
1	21-A	65	ALA	2.1
1	22-A	13	ALA	2.1
1	22-A	65	ALA	2.1
1	23-A	13	ALA	2.1
1	23-A	65	ALA	2.1
1	24-A	13	ALA	2.1
1	24-A	65	ALA	2.1
1	25-A	13	ALA	2.1
1	25-A	65	ALA	2.1
1	26-A	13	ALA	2.1
1	26-A	65	ALA	2.1
1	27-A	13	ALA	2.1
1	27-A	65	ALA	2.1
1	28-A	13	ALA	2.1
1	28-A	65	ALA	2.1
1	29-A	13	ALA	2.1
1	29-A	65	ALA	2.1
1	30-A	13	ALA	2.1
1	30-A	65	ALA	2.1
1	31-A	13	ALA	2.1
1	31-A	65	ALA	2.1
1	32-A	13	ALA	2.1
1	32-A	65	ALA	2.1
1	33-A	13	ALA	2.1
1	33-A	65	ALA	2.1
1	34-A	13	ALA	2.1
1	34-A	65	ALA	2.1
1	35-A	13	ALA	2.1
1	35-A	65	ALA	2.1
1	36-A	13	ALA	2.1
1	36-A	65	ALA	2.1
1	37-A	13	ALA	2.1
1	37-A	65	ALA	2.1
1	38-A	13	ALA	2.1
1	38-A	65	ALA	2.1
1	39-A	13	ALA	2.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	39-A	65	ALA	2.1
1	40-A	13	ALA	2.1
1	40-A	65	ALA	2.1
1	41-A	13	ALA	2.1
1	41-A	65	ALA	2.1
1	42-A	13	ALA	2.1
1	42-A	65	ALA	2.1
1	43-A	13	ALA	2.1
1	43-A	65	ALA	2.1
1	44-A	13	ALA	2.1
1	44-A	65	ALA	2.1
1	45-A	13	ALA	2.1
1	45-A	65	ALA	2.1
1	46-A	13	ALA	2.1
1	46-A	65	ALA	2.1
1	47-A	13	ALA	2.1
1	47-A	65	ALA	2.1
1	48-A	13	ALA	2.1
1	48-A	65	ALA	2.1
1	49-A	13	ALA	2.1
1	49-A	65	ALA	2.1
1	50-A	13	ALA	2.1
1	50-A	65	ALA	2.1
1	51-A	13	ALA	2.1
1	51-A	65	ALA	2.1
1	52-A	13	ALA	2.1
1	52-A	65	ALA	2.1
1	53-A	13	ALA	2.1
1	53-A	65	ALA	2.1
1	54-A	13	ALA	2.1
1	54-A	65	ALA	2.1
1	55-A	13	ALA	2.1
1	55-A	65	ALA	2.1
1	56-A	13	ALA	2.1
1	56-A	65	ALA	2.1
1	57-A	13	ALA	2.1
1	57-A	65	ALA	2.1
1	58-A	13	ALA	2.1
1	58-A	65	ALA	2.1
1	59-A	13	ALA	2.1
1	59-A	65	ALA	2.1
1	60-A	13	ALA	2.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	60-A	65	ALA	2.1
1	61-A	13	ALA	2.1
1	61-A	65	ALA	2.1
1	62-A	13	ALA	2.1
1	62-A	65	ALA	2.1
1	63-A	13	ALA	2.1
1	63-A	65	ALA	2.1
1	64-A	13	ALA	2.1
1	64-A	65	ALA	2.1
1	65-A	13	ALA	2.1
1	65-A	65	ALA	2.1
1	66-A	13	ALA	2.1
1	66-A	65	ALA	2.1
1	67-A	13	ALA	2.1
1	67-A	65	ALA	2.1
1	68-A	13	ALA	2.1
1	68-A	65	ALA	2.1
1	69-A	13	ALA	2.1
1	69-A	65	ALA	2.1
1	70-A	13	ALA	2.1
1	70-A	65	ALA	2.1
1	71-A	13	ALA	2.1
1	71-A	65	ALA	2.1
1	72-A	13	ALA	2.1
1	72-A	65	ALA	2.1
1	73-A	13	ALA	2.1
1	73-A	65	ALA	2.1
1	74-A	13	ALA	2.1
1	74-A	65	ALA	2.1
1	75-A	13	ALA	2.1
1	75-A	65	ALA	2.1
1	76-A	13	ALA	2.1
1	76-A	65	ALA	2.1
1	77-A	13	ALA	2.1
1	77-A	65	ALA	2.1

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

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

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. The B-factors column lists the minimum, median, 95th percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled 'Q< 0.9' lists the number of atoms with occupancy less than 0.9.

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors(Å ²)	Q<0.9
2	SO4	73-A	1001	5/5	0.12	0.70	25,27,28,28	5
2	SO4	45-A	1001	5/5	0.12	0.70	24,24,25,26	5
2	SO4	60-A	1001	5/5	0.12	0.70	30,30,30,32	5
2	SO4	69-A	1001	5/5	0.12	0.70	31,31,32,33	5
2	SO4	70-A	1001	5/5	0.12	0.70	29,31,31,32	5
2	SO4	74-A	1001	5/5	0.12	0.70	24,25,26,27	5
2	SO4	2-A	1001	5/5	0.12	0.70	22,22,23,24	5
2	SO4	7-A	1001	5/5	0.12	0.70	24,24,26,26	5
2	SO4	20-A	1001	5/5	0.12	0.70	18,19,19,21	5
2	SO4	62-A	1001	5/5	0.12	0.70	27,27,29,30	5
2	SO4	56-A	1001	5/5	0.12	0.70	25,25,26,27	5
2	SO4	24-A	1001	5/5	0.12	0.70	23,24,25,26	5
2	SO4	18-A	1001	5/5	0.12	0.70	21,21,22,23	5
2	SO4	23-A	1001	5/5	0.12	0.70	23,23,24,25	5
2	SO4	54-A	1001	5/5	0.12	0.70	21,22,22,23	5
2	SO4	65-A	1001	5/5	0.12	0.70	24,24,25,26	5
2	SO4	77-A	1001	5/5	0.12	0.70	26,26,28,28	5
2	SO4	61-A	1001	5/5	0.12	0.70	28,28,29,30	5
2	SO4	55-A	1001	5/5	0.12	0.70	22,22,23,24	5
2	SO4	41-A	1001	5/5	0.12	0.70	26,27,28,28	5
2	SO4	13-A	1001	5/5	0.12	0.70	22,23,23,24	5
2	SO4	1-A	1001	5/5	0.12	0.70	24,24,24,26	5
2	SO4	8-A	1001	5/5	0.12	0.70	24,24,25,26	5
2	SO4	35-A	1001	5/5	0.12	0.70	24,24,24,26	5
2	SO4	43-A	1001	5/5	0.12	0.70	23,24,25,25	5
2	SO4	14-A	1001	5/5	0.12	0.70	23,24,25,25	5
2	SO4	44-A	1001	5/5	0.12	0.70	24,25,26,27	5
2	SO4	49-A	1001	5/5	0.12	0.70	22,23,24,24	5
2	SO4	68-A	1001	5/5	0.12	0.70	27,28,29,29	5
2	SO4	25-A	1001	5/5	0.12	0.70	21,22,22,23	5
2	SO4	71-A	1001	5/5	0.12	0.70	29,31,31,32	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors(\AA^2)	Q<0.9
2	SO4	29-A	1001	5/5	0.12	0.70	24,25,26,26	5
2	SO4	3-A	1001	5/5	0.12	0.70	24,25,25,26	5
2	SO4	28-A	1001	5/5	0.12	0.70	23,24,24,25	5
2	SO4	4-A	1001	5/5	0.12	0.70	26,26,28,28	5
2	SO4	27-A	1001	5/5	0.12	0.70	22,22,23,24	5
2	SO4	19-A	1001	5/5	0.12	0.70	20,20,22,22	5
2	SO4	22-A	1001	5/5	0.12	0.70	19,21,21,21	5
2	SO4	34-A	1001	5/5	0.12	0.70	25,25,27,27	5
2	SO4	64-A	1001	5/5	0.12	0.70	25,25,26,27	5
2	SO4	30-A	1001	5/5	0.12	0.70	25,26,27,27	5
2	SO4	63-A	1001	5/5	0.12	0.70	26,27,27,28	5
2	SO4	67-A	1001	5/5	0.12	0.70	26,26,26,28	5
2	SO4	9-A	1001	5/5	0.12	0.70	20,22,22,23	5
2	SO4	39-A	1001	5/5	0.12	0.70	25,27,27,28	5
2	SO4	15-A	1001	5/5	0.12	0.70	21,23,23,23	5
2	SO4	42-A	1001	5/5	0.12	0.70	24,25,26,27	5
2	SO4	75-A	1001	5/5	0.12	0.70	23,24,25,25	5
2	SO4	11-A	1001	5/5	0.12	0.70	21,22,23,24	5
2	SO4	47-A	1001	5/5	0.12	0.70	21,21,22,23	5
2	SO4	16-A	1001	5/5	0.12	0.70	21,22,22,23	5
2	SO4	72-A	1001	5/5	0.12	0.70	27,28,29,30	5
2	SO4	76-A	1001	5/5	0.12	0.70	25,26,27,27	5
2	SO4	33-A	1001	5/5	0.12	0.70	27,28,29,29	5
2	SO4	5-A	1001	5/5	0.12	0.70	27,28,29,30	5
2	SO4	52-A	1001	5/5	0.12	0.70	20,21,21,22	5
2	SO4	26-A	1001	5/5	0.12	0.70	20,21,21,23	5
2	SO4	38-A	1001	5/5	0.12	0.70	24,25,25,26	5
2	SO4	53-A	1001	5/5	0.12	0.70	20,21,21,22	5
2	SO4	40-A	1001	5/5	0.12	0.70	27,28,29,30	5
2	SO4	6-A	1001	5/5	0.12	0.70	25,26,27,27	5
2	SO4	21-A	1001	5/5	0.12	0.70	18,19,19,20	5
2	SO4	31-A	1001	5/5	0.12	0.70	26,28,28,29	5
2	SO4	50-A	1001	5/5	0.12	0.70	20,20,22,22	5
2	SO4	59-A	1001	5/5	0.12	0.70	29,30,31,32	5
2	SO4	10-A	1001	5/5	0.12	0.70	21,21,23,23	5
2	SO4	66-A	1001	5/5	0.12	0.70	23,24,25,25	5
2	SO4	36-A	1001	5/5	0.12	0.70	24,24,26,26	5
2	SO4	48-A	1001	5/5	0.12	0.70	22,23,23,24	5
2	SO4	58-A	1001	5/5	0.12	0.70	27,27,28,29	5
2	SO4	37-A	1001	5/5	0.12	0.70	23,24,24,25	5
2	SO4	51-A	1001	5/5	0.12	0.70	18,19,19,20	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors(\AA^2)	Q<0.9
2	SO4	12-A	1001	5/5	0.12	0.70	20,21,21,22	5
2	SO4	46-A	1001	5/5	0.12	0.70	23,24,24,25	5
2	SO4	57-A	1001	5/5	0.12	0.70	25,26,26,28	5
2	SO4	17-A	1001	5/5	0.12	0.70	21,21,22,23	5
2	SO4	32-A	1001	5/5	0.12	0.70	27,27,29,29	5

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.