



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Sep 20, 2023 – 11:31 PM EDT

PDB ID : 5IVH
Title : The alpha-esterase-7 carboxylesterase, E3, from the blowfly *Lucilia cuprina*:
apo-enzyme ensemble refinement
Authors : Correy, G.J.; Jackson, C.J.
Deposited on : 2016-03-20
Resolution : 1.71 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 types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

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

MolProbity : 4.02b-467
Xtriage (Phenix) : 1.13
EDS : 2.35.1
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) : 2.35.1

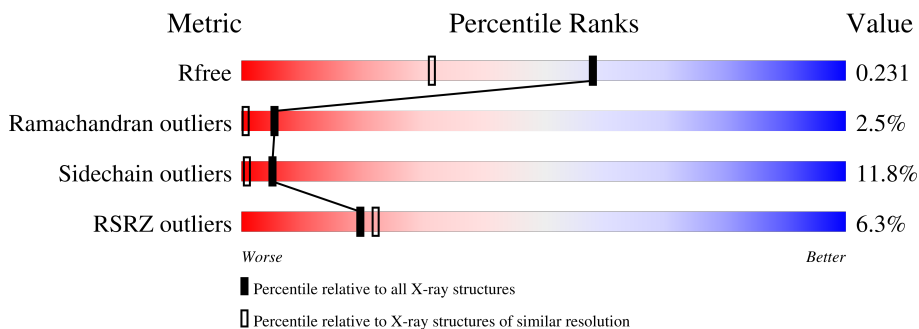
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 1.71 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	5722 (1.74-1.70)
Ramachandran outliers	138981	6051 (1.74-1.70)
Sidechain outliers	138945	6051 (1.74-1.70)
RSRZ outliers	127900	5629 (1.74-1.70)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments of the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria respectively. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$. 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	577	 7% 85% 11% ..
1	10-A	577	 7% 86% 11% ..
1	11-A	577	 7% 86% 11% ..
1	12-A	577	 7% 87% 10% ..
1	13-A	577	 7% 86% 11% ..
1	14-A	577	 7% 86% 10% ..
1	15-A	577	 7% 86% 11% ..

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	16-A	577	7% 85% 11% ..
1	17-A	577	7% 84% 13% .
1	18-A	577	7% 84% 13% ..
1	19-A	577	7% 86% 11% ..
1	2-A	577	7% 86% 10% ..
1	20-A	577	7% 86% 11% ...
1	21-A	577	7% 87% 9% ..
1	22-A	577	7% 84% 12% ..
1	23-A	577	7% 83% 13% ..
1	24-A	577	7% 82% 15% ..
1	25-A	577	7% 84% 12% ..
1	26-A	577	7% 86% 10% ..
1	27-A	577	7% 83% 12% ..
1	28-A	577	7% 86% 11% ..
1	29-A	577	7% 85% 12% ..
1	3-A	577	7% 85% 12% ..
1	30-A	577	7% 86% 10% ..
1	31-A	577	7% 86% 11% ..
1	32-A	577	7% 84% 12% ..
1	33-A	577	7% 86% 10% ..
1	34-A	577	7% 85% 11% ..
1	35-A	577	7% 86% 11% ..
1	36-A	577	7% 86% 10% ..
1	37-A	577	7% 85% 11% ..
1	38-A	577	7% 83% 14% ..

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	39-A	577	
1	4-A	577	
1	40-A	577	
1	41-A	577	
1	42-A	577	
1	43-A	577	
1	44-A	577	
1	5-A	577	
1	6-A	577	
1	7-A	577	
1	8-A	577	
1	9-A	577	

2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 407711 atoms, of which 197120 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 Carboxylic ester hydrolase.

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	H	N	O	S			
1	1-A	566	9037	2911	4480	766	846	34	0	0	0
1	2-A	566	9037	2911	4480	766	846	34	0	0	0
1	3-A	566	9037	2911	4480	766	846	34	0	0	0
1	4-A	566	9037	2911	4480	766	846	34	0	0	0
1	5-A	566	9037	2911	4480	766	846	34	0	0	0
1	6-A	566	9037	2911	4480	766	846	34	0	0	0
1	7-A	566	9037	2911	4480	766	846	34	0	0	0
1	8-A	566	9037	2911	4480	766	846	34	0	0	0
1	9-A	566	9037	2911	4480	766	846	34	0	0	0
1	10-A	566	9037	2911	4480	766	846	34	0	0	0
1	11-A	566	9037	2911	4480	766	846	34	0	0	0
1	12-A	566	9037	2911	4480	766	846	34	0	0	0
1	13-A	566	9037	2911	4480	766	846	34	0	0	0
1	14-A	566	9037	2911	4480	766	846	34	0	0	0
1	15-A	566	9037	2911	4480	766	846	34	0	0	0
1	16-A	566	9037	2911	4480	766	846	34	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace	
1	17-A	566	Total 9037	C 2911	H 4480	N 766	O 846	S 34	0	0	0
1	18-A	566	Total 9037	C 2911	H 4480	N 766	O 846	S 34	0	0	0
1	19-A	566	Total 9037	C 2911	H 4480	N 766	O 846	S 34	0	0	0
1	20-A	566	Total 9037	C 2911	H 4480	N 766	O 846	S 34	0	0	0
1	21-A	566	Total 9037	C 2911	H 4480	N 766	O 846	S 34	0	0	0
1	22-A	566	Total 9037	C 2911	H 4480	N 766	O 846	S 34	0	0	0
1	23-A	566	Total 9037	C 2911	H 4480	N 766	O 846	S 34	0	0	0
1	24-A	566	Total 9037	C 2911	H 4480	N 766	O 846	S 34	0	0	0
1	25-A	566	Total 9037	C 2911	H 4480	N 766	O 846	S 34	0	0	0
1	26-A	566	Total 9037	C 2911	H 4480	N 766	O 846	S 34	0	0	0
1	27-A	566	Total 9037	C 2911	H 4480	N 766	O 846	S 34	0	0	0
1	28-A	566	Total 9037	C 2911	H 4480	N 766	O 846	S 34	0	0	0
1	29-A	566	Total 9037	C 2911	H 4480	N 766	O 846	S 34	0	0	0
1	30-A	566	Total 9037	C 2911	H 4480	N 766	O 846	S 34	0	0	0
1	31-A	566	Total 9037	C 2911	H 4480	N 766	O 846	S 34	0	0	0
1	32-A	566	Total 9037	C 2911	H 4480	N 766	O 846	S 34	0	0	0
1	33-A	566	Total 9037	C 2911	H 4480	N 766	O 846	S 34	0	0	0
1	34-A	566	Total 9037	C 2911	H 4480	N 766	O 846	S 34	0	0	0
1	35-A	566	Total 9037	C 2911	H 4480	N 766	O 846	S 34	0	0	0
1	36-A	566	Total 9037	C 2911	H 4480	N 766	O 846	S 34	0	0	0
1	37-A	566	Total 9037	C 2911	H 4480	N 766	O 846	S 34	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace	
1	38-A	566	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			9037	2911	4480	766	846	34			
1	39-A	566	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			9037	2911	4480	766	846	34			
1	40-A	566	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			9037	2911	4480	766	846	34			
1	41-A	566	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			9037	2911	4480	766	846	34			
1	42-A	566	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			9037	2911	4480	766	846	34			
1	43-A	566	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			9037	2911	4480	766	846	34			
1	44-A	566	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			9037	2911	4480	766	846	34			

There are 14 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-6	MET	-	initiating methionine	UNP Q25252
A	-5	HIS	-	expression tag	UNP Q25252
A	-4	HIS	-	expression tag	UNP Q25252
A	-3	HIS	-	expression tag	UNP Q25252
A	-2	HIS	-	expression tag	UNP Q25252
A	-1	HIS	-	expression tag	UNP Q25252
A	0	HIS	-	expression tag	UNP Q25252
A	83	ALA	ASP	conflict	UNP Q25252
A	364	LEU	MET	conflict	UNP Q25252
A	419	PHE	ILE	conflict	UNP Q25252
A	472	THR	ALA	conflict	UNP Q25252
A	505	THR	ILE	conflict	UNP Q25252
A	530	GLU	LYS	conflict	UNP Q25252
A	554	GLY	ASP	conflict	UNP Q25252

- Molecule 2 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
2	1-A	234	Total	O	0	0
			234	234		
2	2-A	234	Total	O	0	0
			234	234		
2	3-A	224	Total	O	0	0
			224	224		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
2	4-A	222	Total 222	O 222	0	0
2	5-A	230	Total 230	O 230	0	0
2	6-A	233	Total 233	O 233	0	0
2	7-A	241	Total 241	O 241	0	0
2	8-A	238	Total 238	O 238	0	0
2	9-A	218	Total 218	O 218	0	0
2	10-A	217	Total 217	O 217	0	0
2	11-A	219	Total 219	O 219	0	0
2	12-A	231	Total 231	O 231	0	0
2	13-A	231	Total 231	O 231	0	0
2	14-A	235	Total 235	O 235	0	0
2	15-A	226	Total 226	O 226	0	0
2	16-A	230	Total 230	O 230	0	0
2	17-A	211	Total 211	O 211	0	0
2	18-A	228	Total 228	O 228	0	0
2	19-A	228	Total 228	O 228	0	0
2	20-A	236	Total 236	O 236	0	0
2	21-A	234	Total 234	O 234	0	0
2	22-A	225	Total 225	O 225	0	0
2	23-A	206	Total 206	O 206	0	0
2	24-A	218	Total 218	O 218	0	0

Continued on next page...

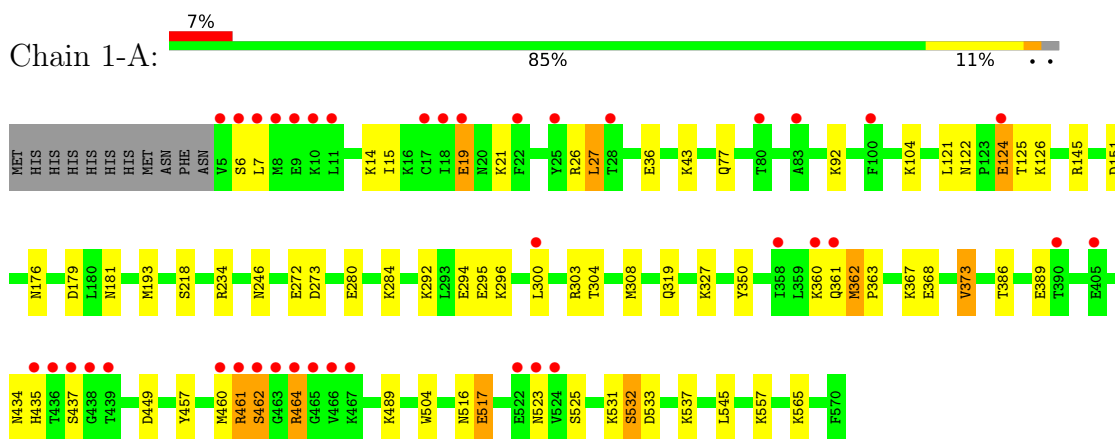
Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
2	25-A	227	Total 227	O 227	0	0
2	26-A	227	Total 227	O 227	0	0
2	27-A	214	Total 214	O 214	0	0
2	28-A	237	Total 237	O 237	0	0
2	29-A	238	Total 238	O 238	0	0
2	30-A	237	Total 237	O 237	0	0
2	31-A	224	Total 224	O 224	0	0
2	32-A	224	Total 224	O 224	0	0
2	33-A	224	Total 224	O 224	0	0
2	34-A	235	Total 235	O 235	0	0
2	35-A	227	Total 227	O 227	0	0
2	36-A	236	Total 236	O 236	0	0
2	37-A	234	Total 234	O 234	0	0
2	38-A	244	Total 244	O 244	0	0
2	39-A	231	Total 231	O 231	0	0
2	40-A	231	Total 231	O 231	0	0
2	41-A	242	Total 242	O 242	0	0
2	42-A	246	Total 246	O 246	0	0
2	43-A	233	Total 233	O 233	0	0
2	44-A	223	Total 223	O 223	0	0

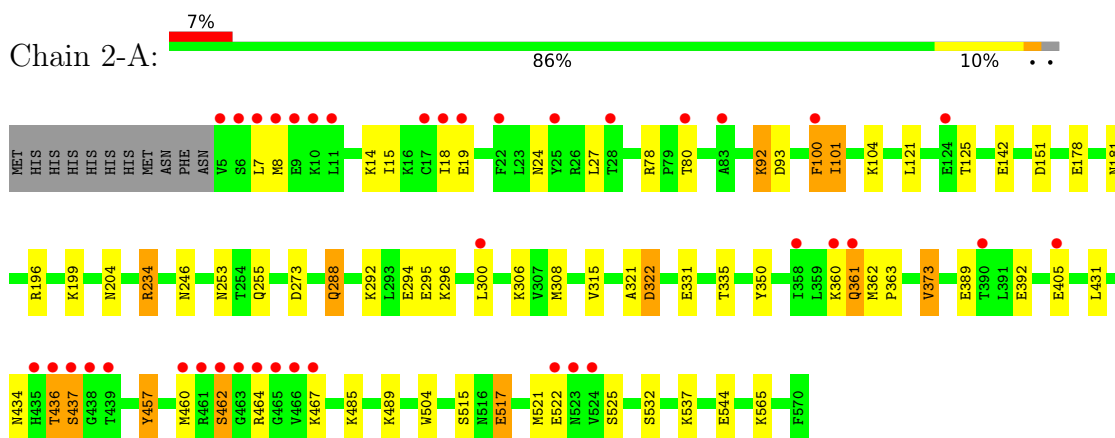
3 Residue-property plots [i](#)

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

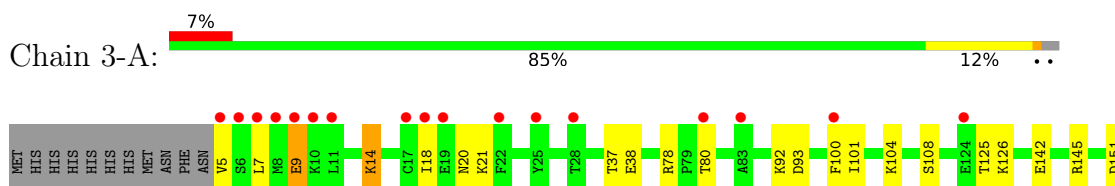
- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

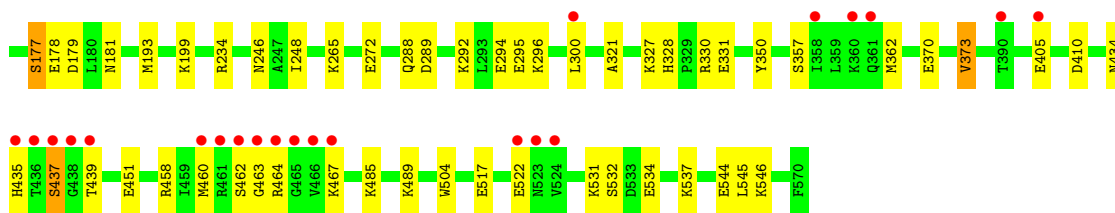


- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

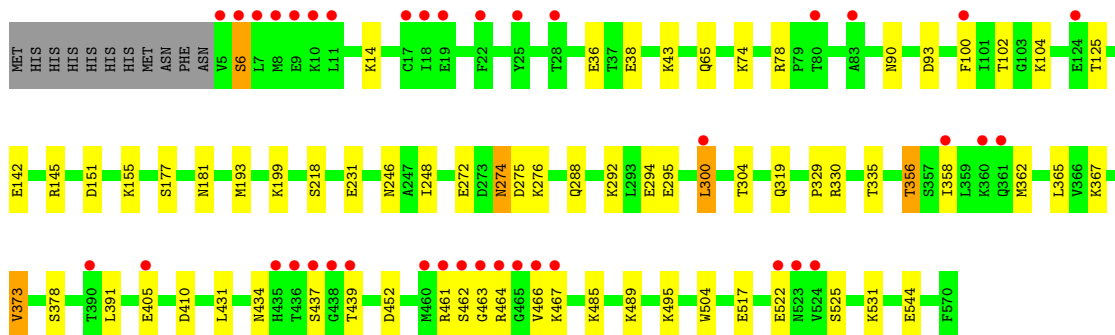
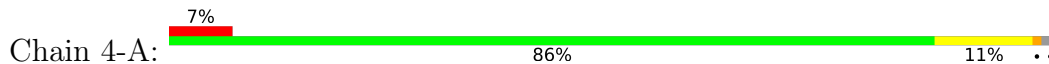


- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

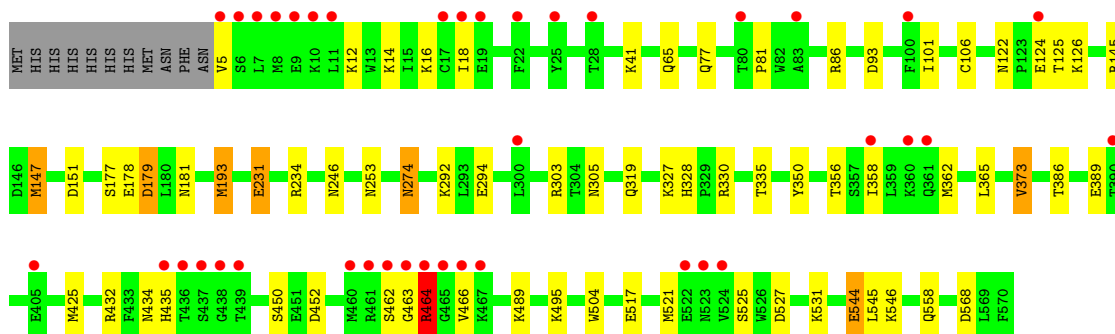
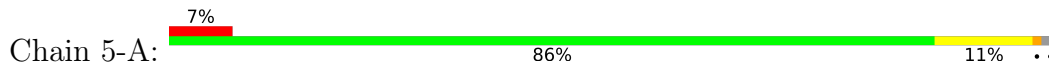




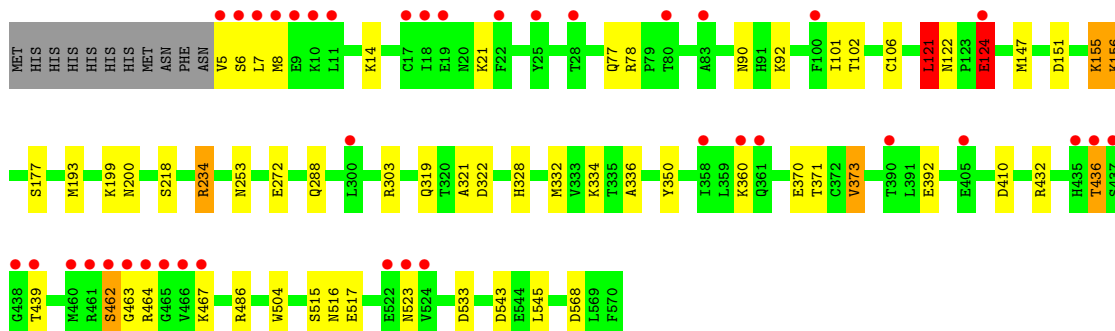
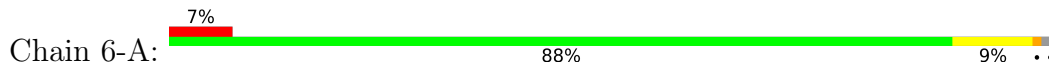
● Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase



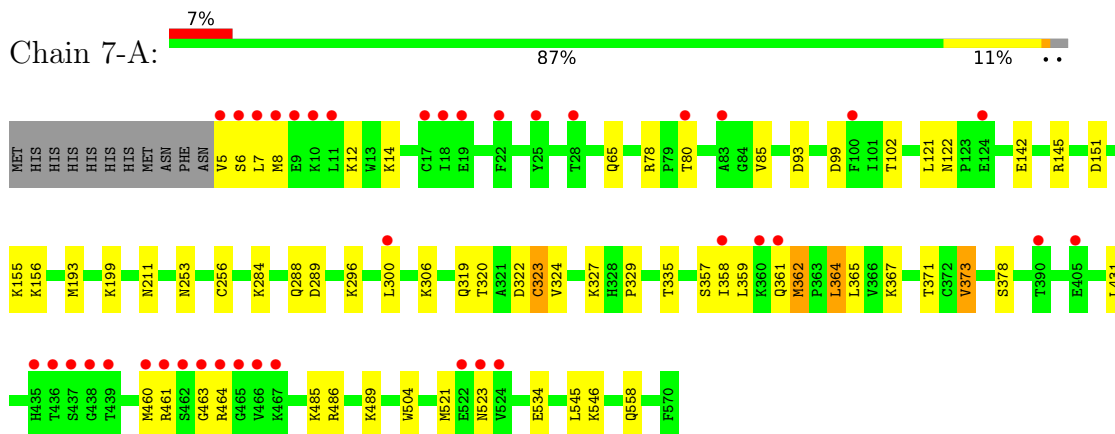
● Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase



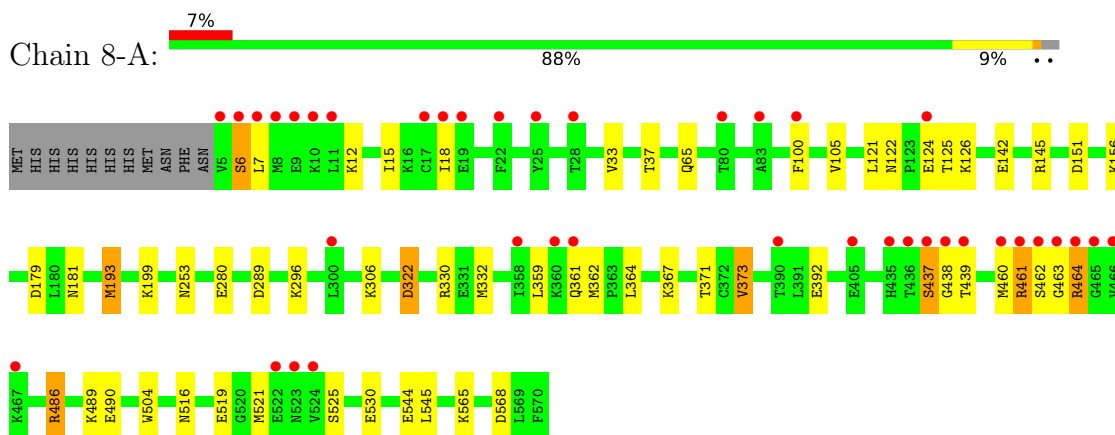
● Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase



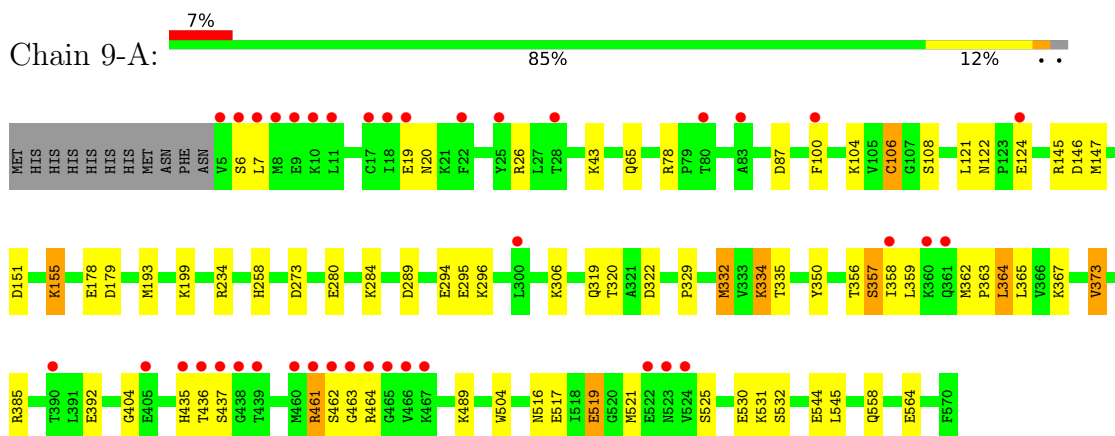
- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase



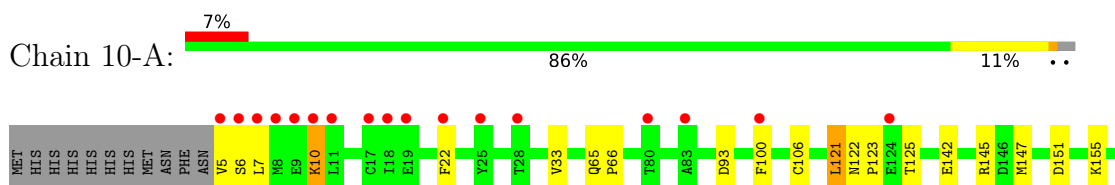
- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

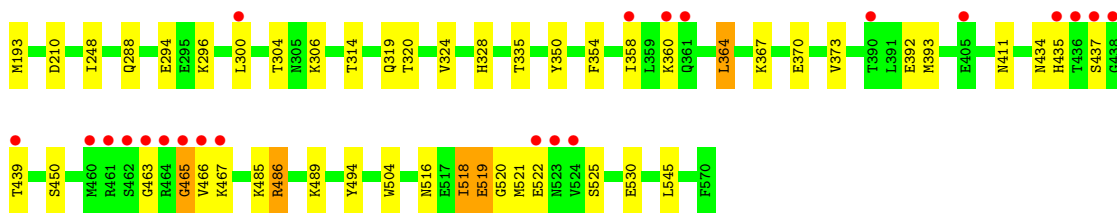


- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

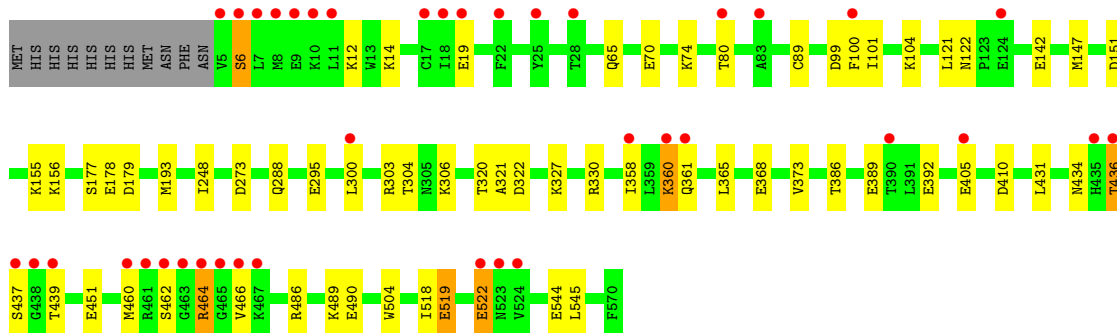
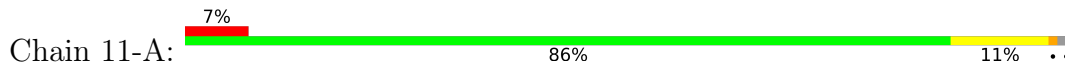


- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

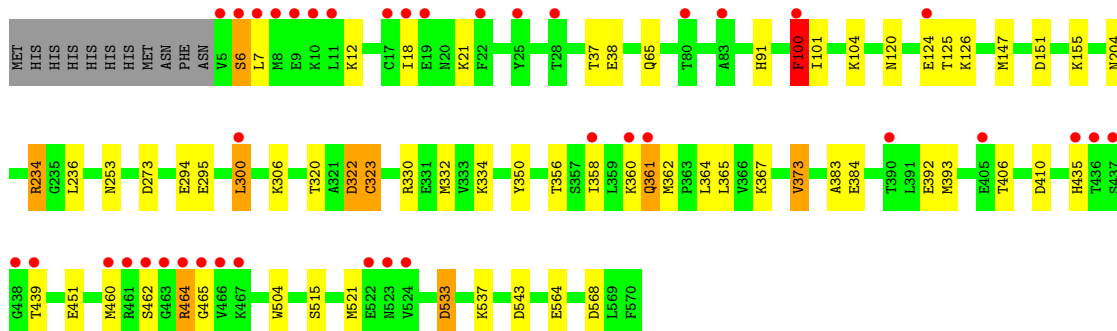
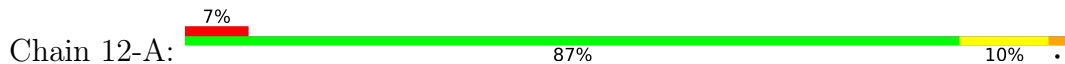




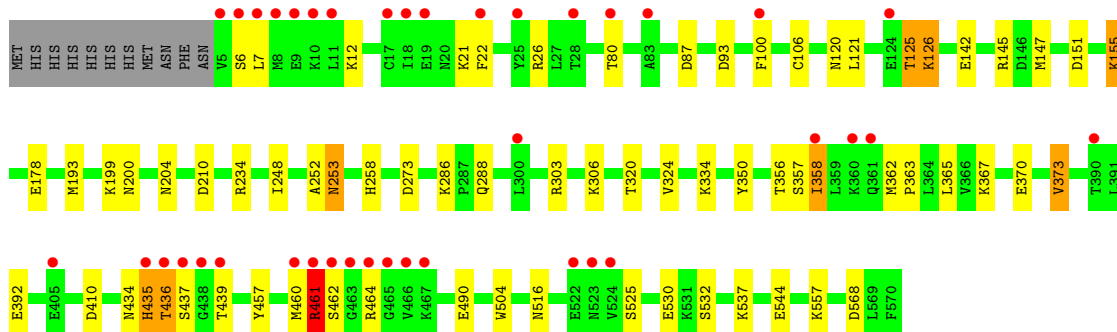
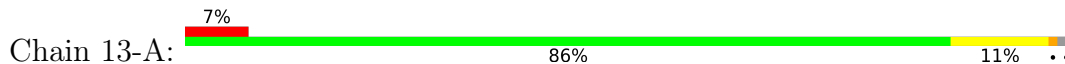
● Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase



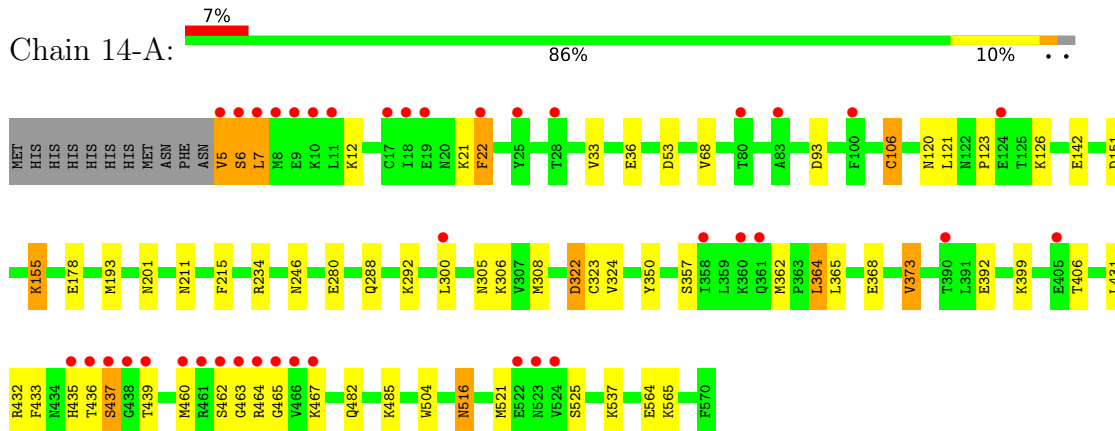
● Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase



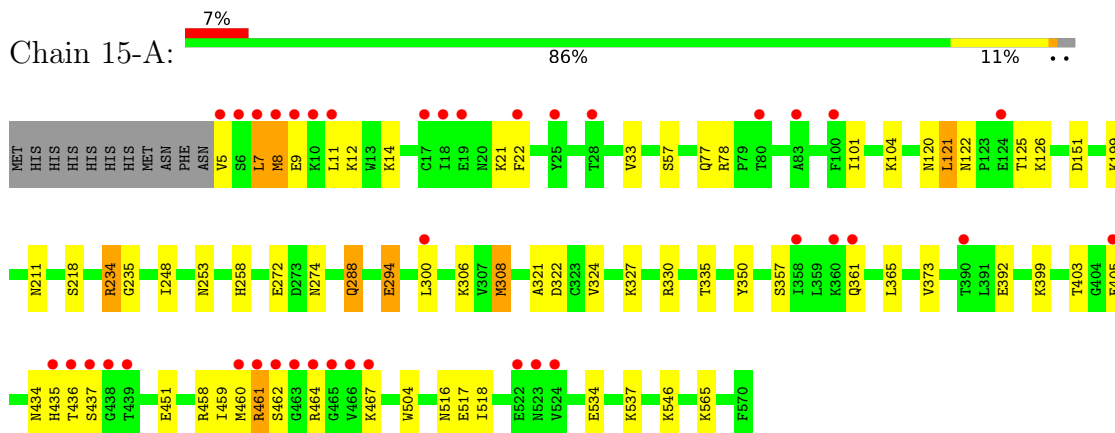
● Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase



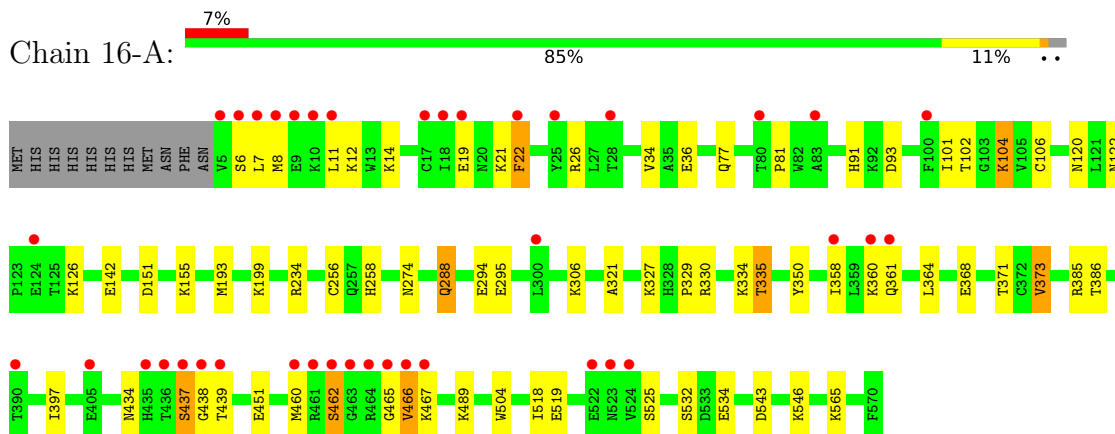
- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase



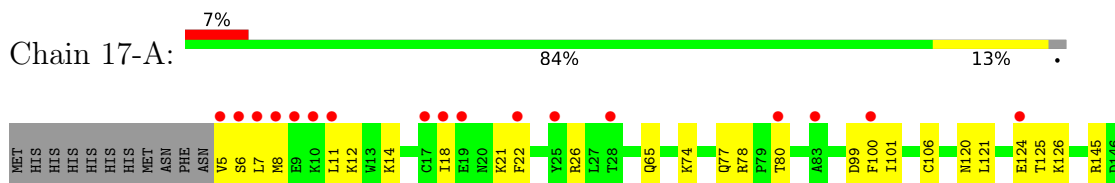
- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

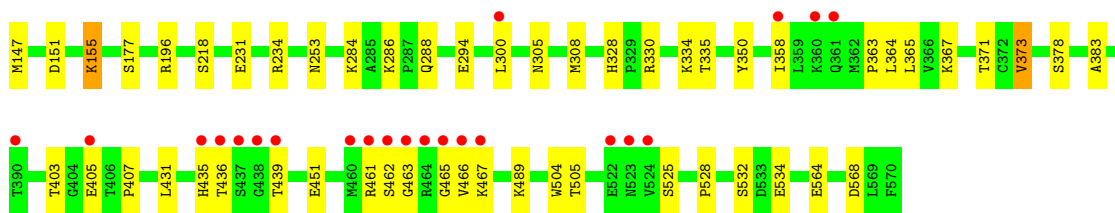


- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

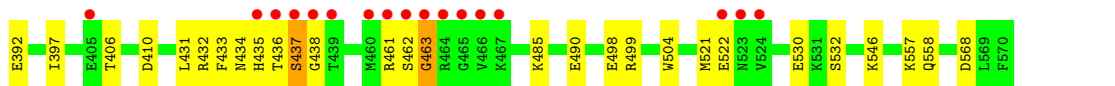
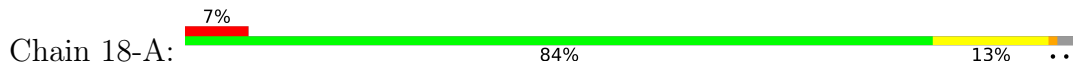


- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

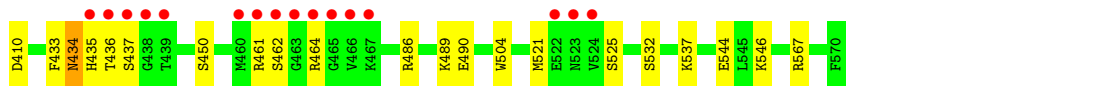
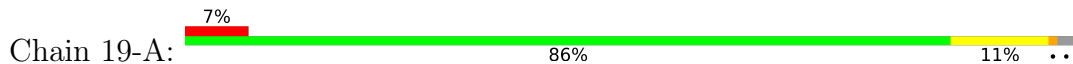




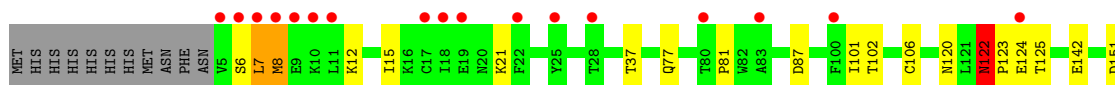
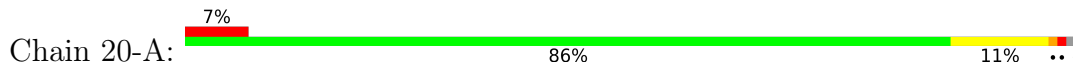
● Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase



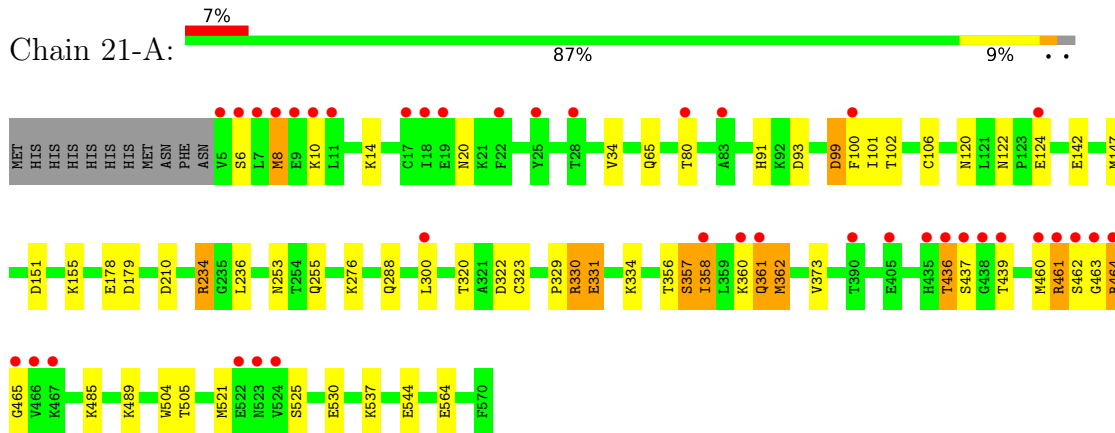
● Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase



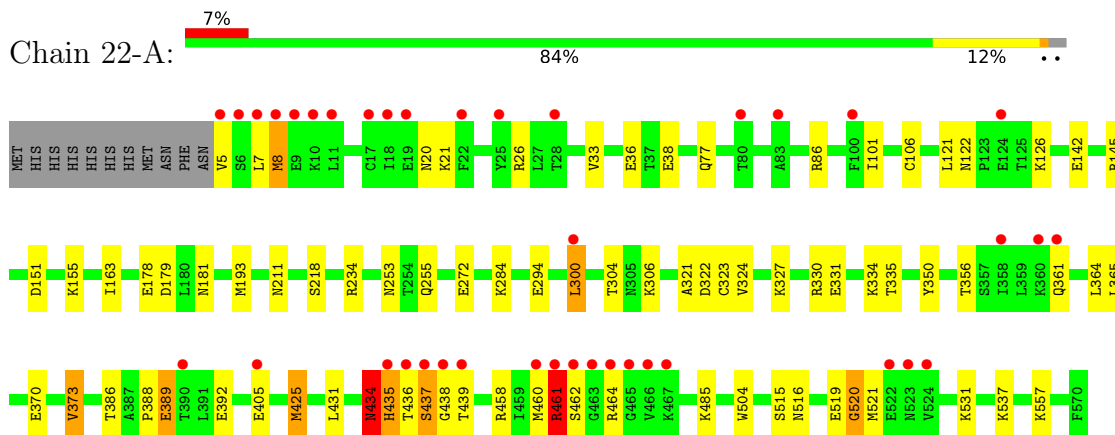
● Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase



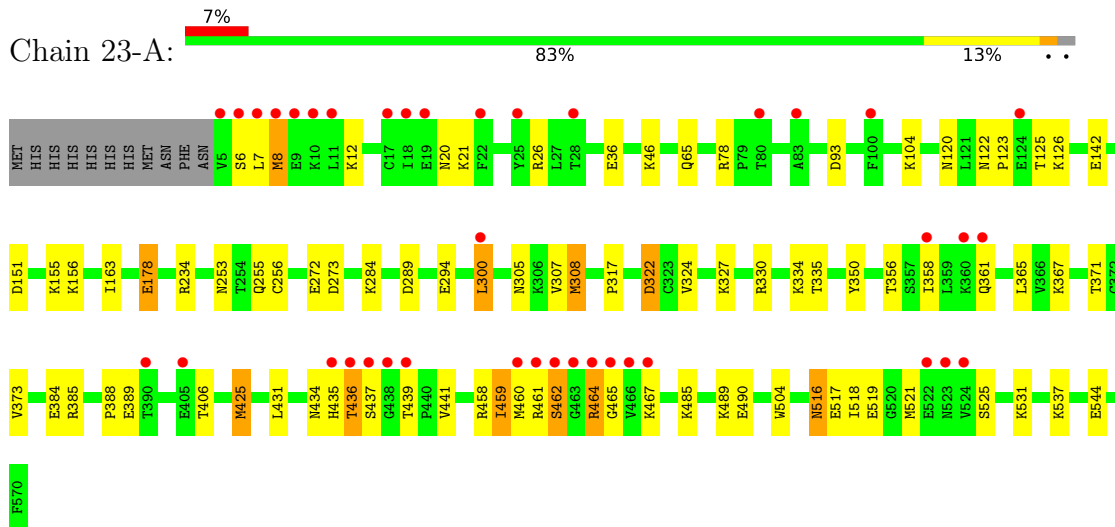
- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase



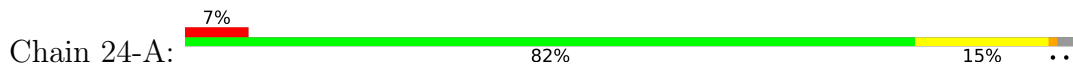
- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

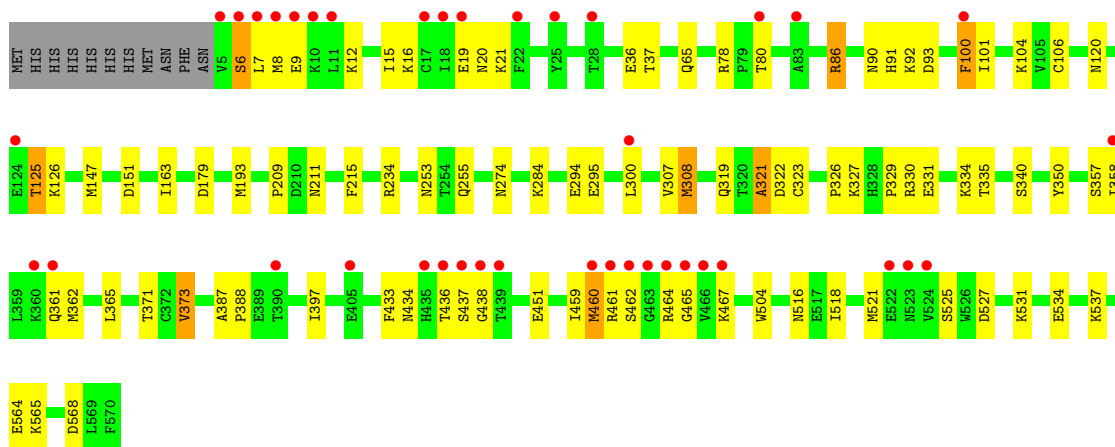


- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

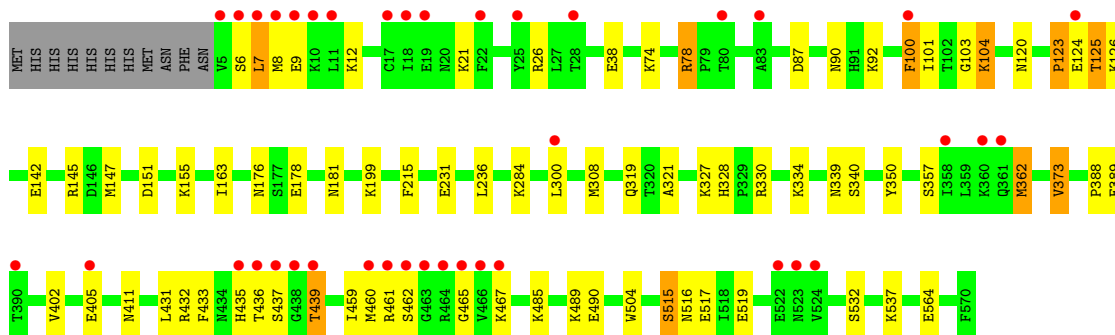
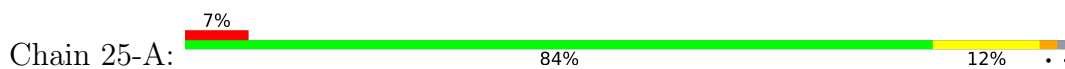


- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

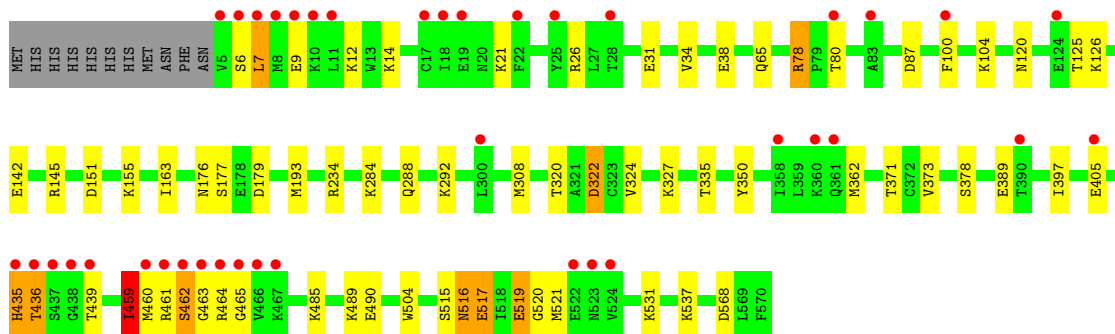
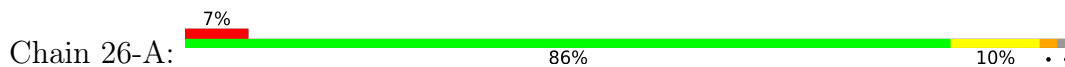




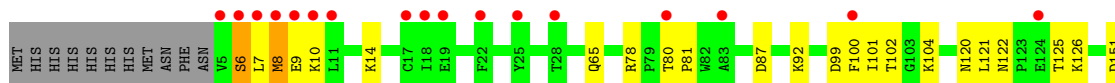
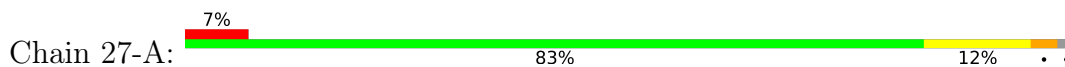
- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

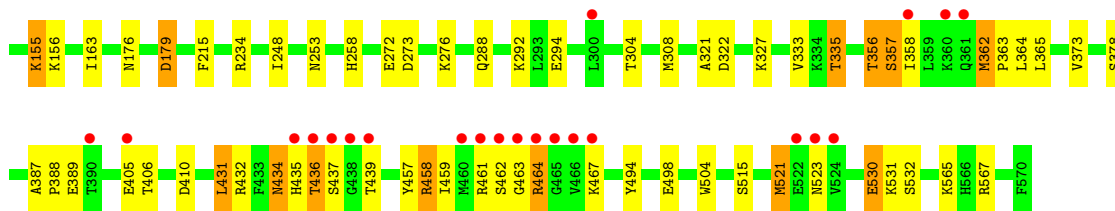


- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

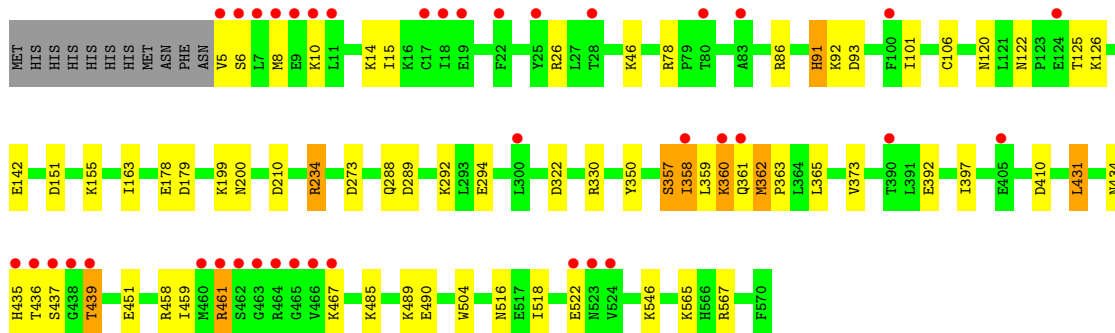
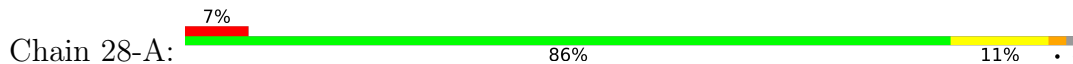


- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

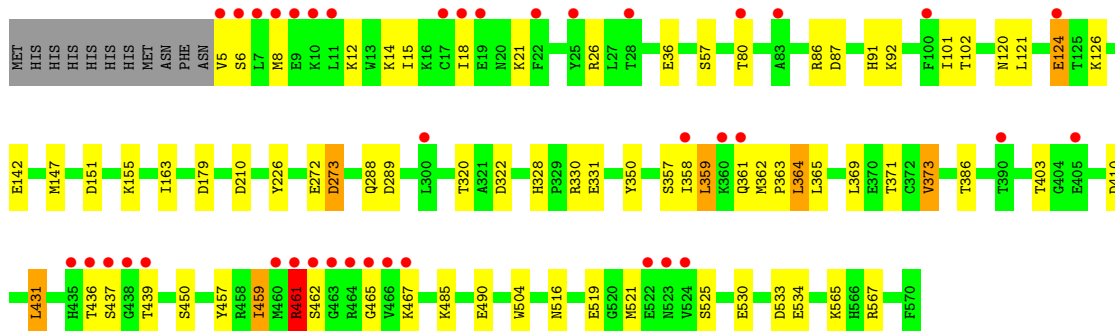
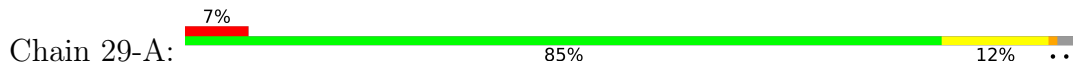




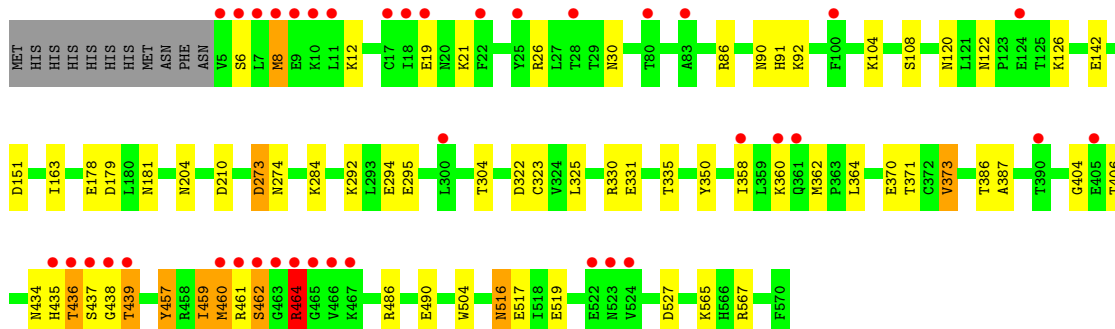
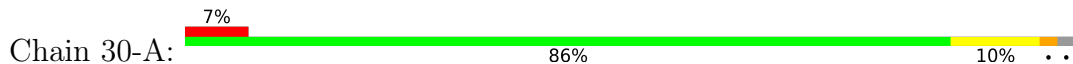
● Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase



● Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

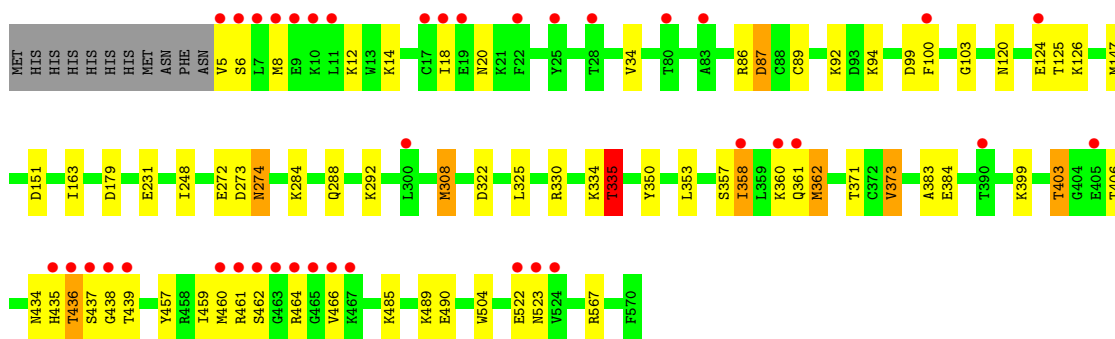


● Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase



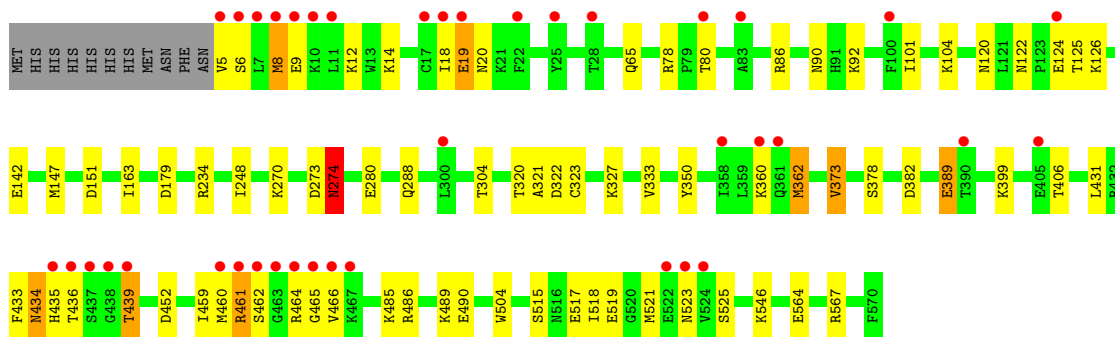
- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 31-A: 7% 86% 11% ..



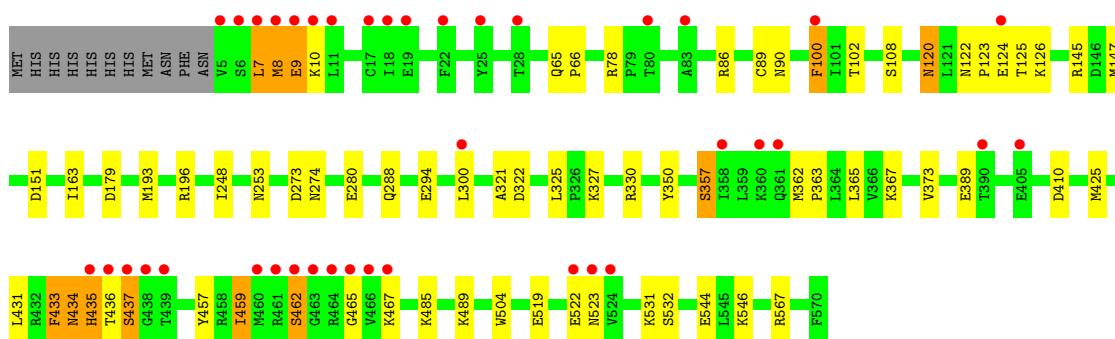
- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 32-A: 7% 84% 12% ..



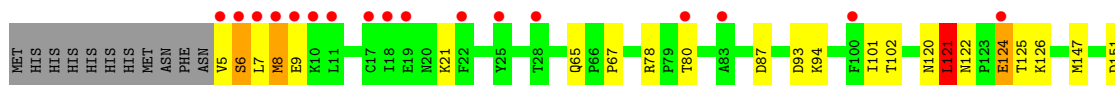
- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

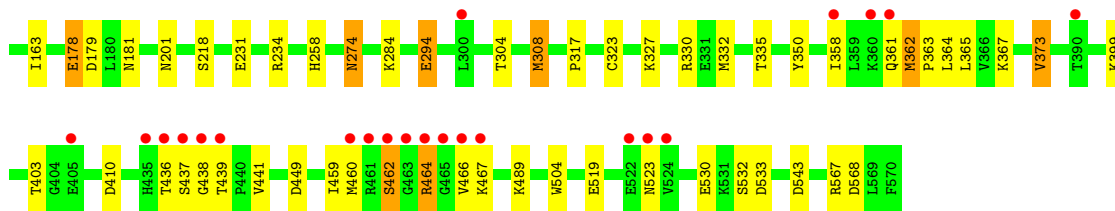
Chain 33-A: 7% 86% 10% ..



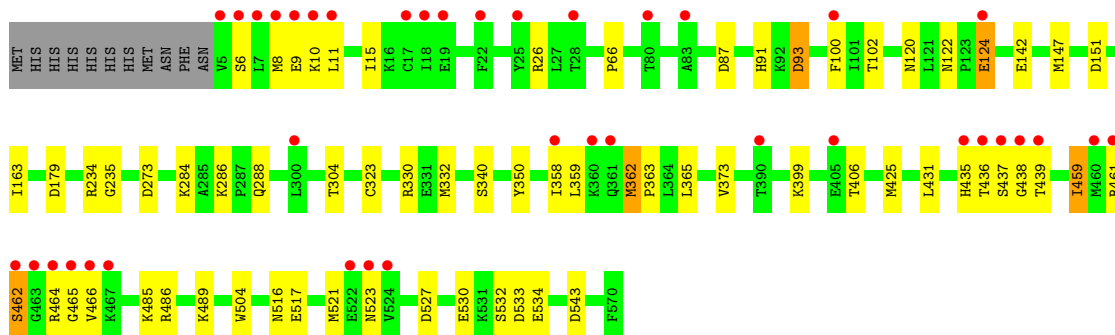
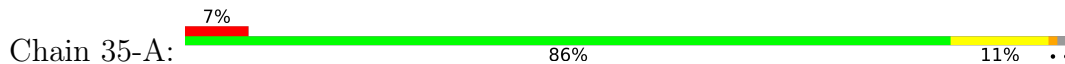
- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 34-A: 7% 85% 11% ..

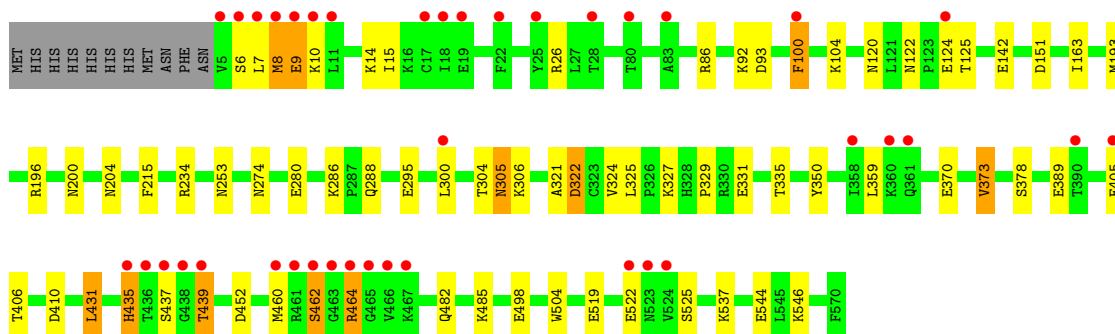
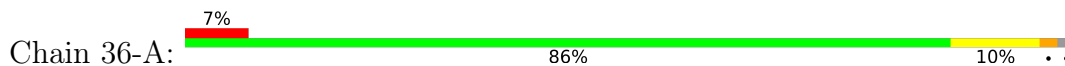




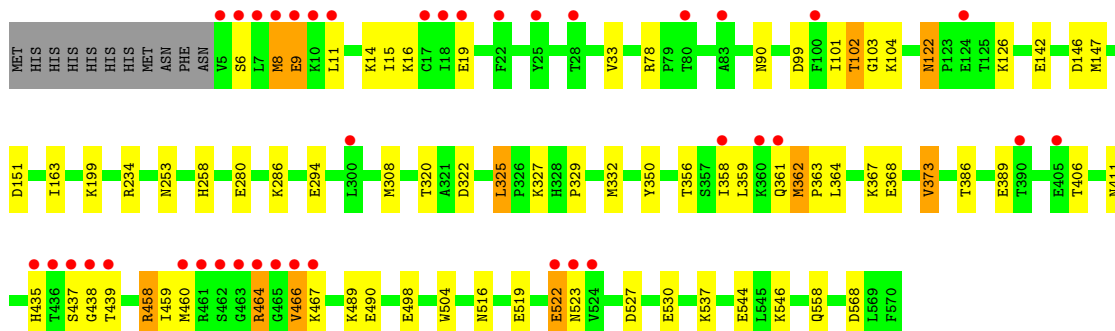
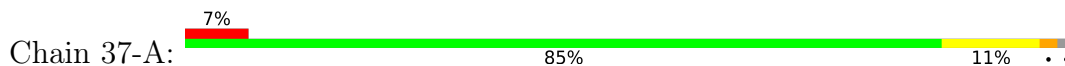
● Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase



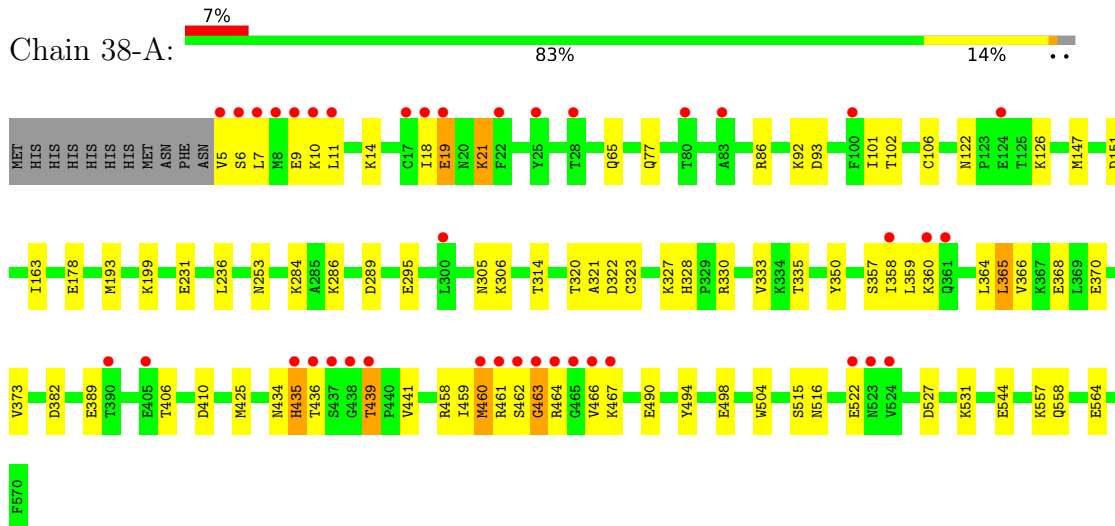
● Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase



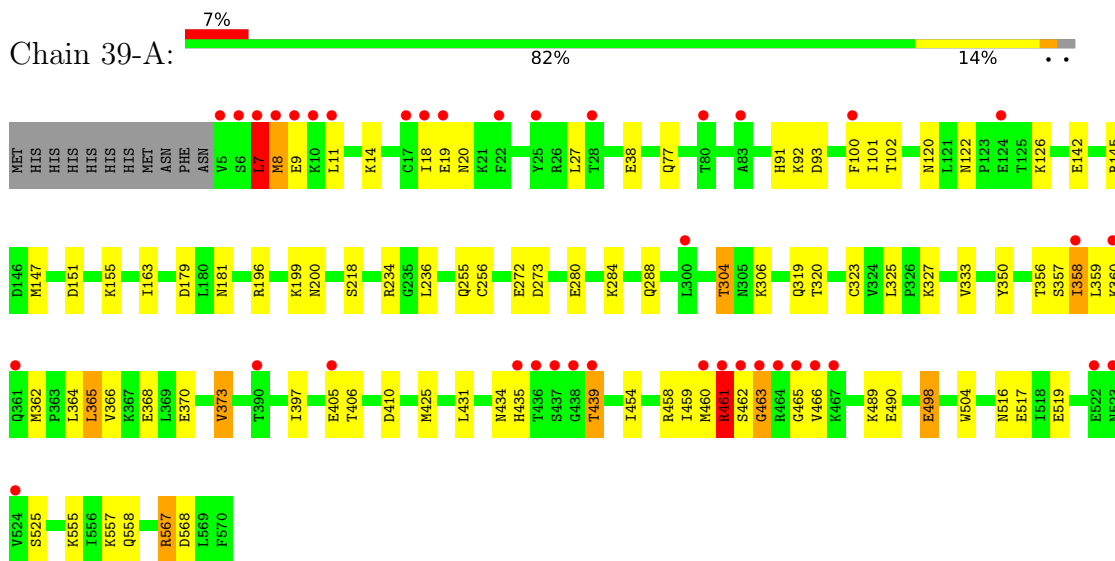
● Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase



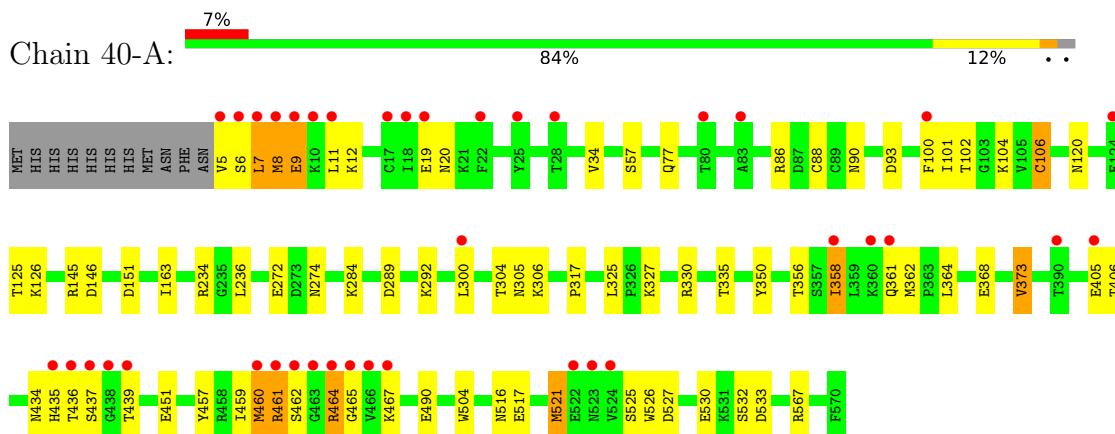
- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase




- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

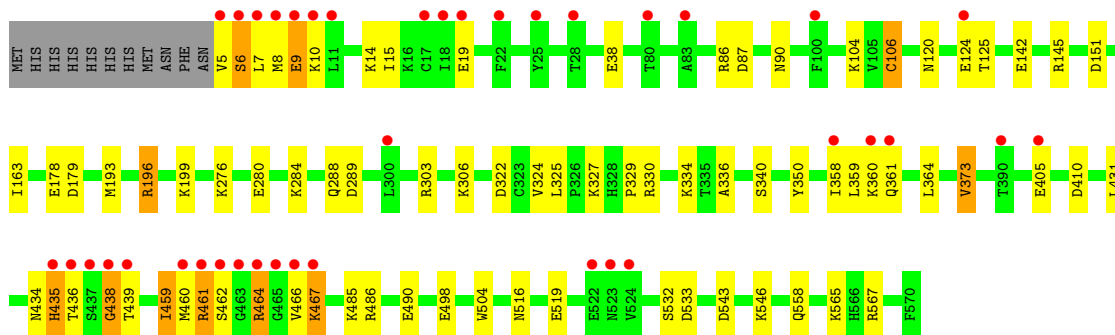


- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase




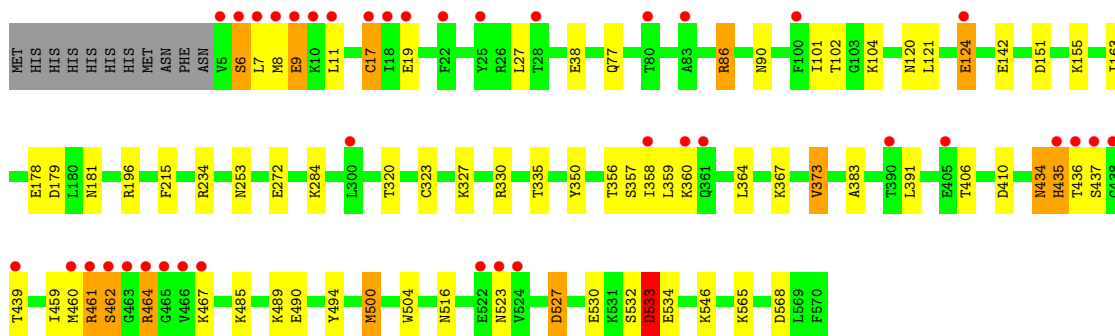
- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 41-A: 




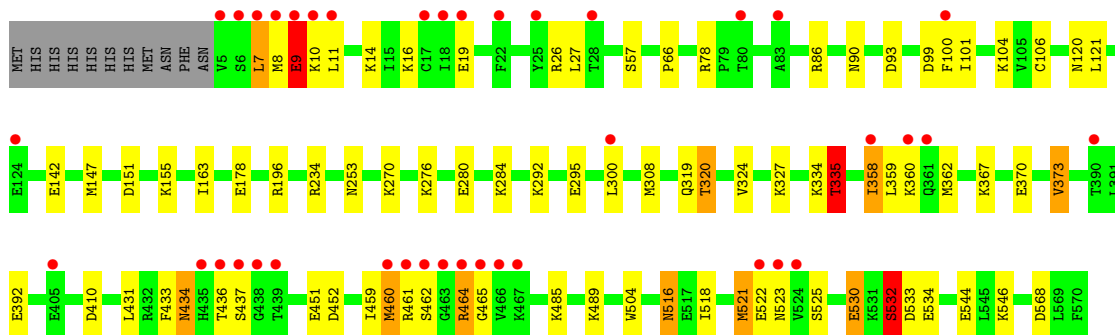
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 42-A: 




• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

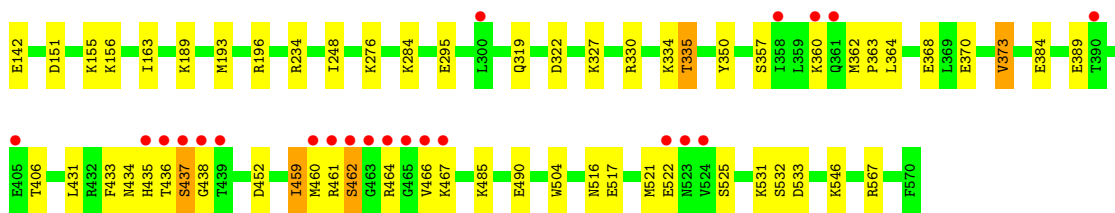
Chain 43-A: 



• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 44-A: 





4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	C 2 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	48.57Å 100.47Å 221.72Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	45.76 – 1.71 45.76 – 1.71	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.9 (45.76-1.71) 91.5 (45.76-1.71)	Depositor EDS
R_{merge}	0.14	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	0.62 (at 1.71Å)	Xtrriage
Refinement program	PHENIX 1.10.1_2155	Depositor
R, R_{free}	0.167 , 0.208 0.188 , 0.231	Depositor DCC
R_{free} test set	3002 reflections (5.07%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	22.1	Xtrriage
Anisotropy	0.681	Xtrriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.32 , 237.5	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.45$, $\langle L^2 \rangle = 0.27$	Xtrriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtrriage
F_o, F_c correlation	0.95	EDS
Total number of atoms	407711	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	30.0	wwPDB-VP

Xtrriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 4.89% 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 i

5.1 Standard geometry i

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	0.63	4/4672 (0.1%)	0.79	5/6320 (0.1%)
1	2-A	0.65	3/4672 (0.1%)	0.76	6/6320 (0.1%)
1	3-A	0.60	0/4672	0.75	3/6320 (0.0%)
1	4-A	0.64	0/4672	0.77	4/6320 (0.1%)
1	5-A	0.65	3/4672 (0.1%)	0.78	8/6320 (0.1%)
1	6-A	0.62	2/4672 (0.0%)	0.75	3/6320 (0.0%)
1	7-A	0.62	2/4672 (0.0%)	0.77	4/6320 (0.1%)
1	8-A	0.65	1/4672 (0.0%)	0.78	6/6320 (0.1%)
1	9-A	0.67	4/4672 (0.1%)	0.76	5/6320 (0.1%)
1	10-A	0.63	3/4672 (0.1%)	0.77	5/6320 (0.1%)
1	11-A	0.64	1/4672 (0.0%)	0.75	3/6320 (0.0%)
1	12-A	0.67	2/4672 (0.0%)	0.78	6/6320 (0.1%)
1	13-A	0.64	1/4672 (0.0%)	0.77	6/6320 (0.1%)
1	14-A	0.65	4/4672 (0.1%)	0.78	6/6320 (0.1%)
1	15-A	0.66	1/4672 (0.0%)	0.80	7/6320 (0.1%)
1	16-A	0.66	2/4672 (0.0%)	0.79	6/6320 (0.1%)
1	17-A	0.62	2/4672 (0.0%)	0.78	5/6320 (0.1%)
1	18-A	0.64	4/4672 (0.1%)	0.78	6/6320 (0.1%)
1	19-A	0.69	3/4672 (0.1%)	0.78	4/6320 (0.1%)
1	20-A	0.66	3/4672 (0.1%)	0.77	7/6320 (0.1%)
1	21-A	0.65	2/4672 (0.0%)	0.76	3/6320 (0.0%)
1	22-A	0.64	1/4672 (0.0%)	0.78	6/6320 (0.1%)
1	23-A	0.65	0/4672	0.79	9/6320 (0.1%)
1	24-A	0.65	2/4672 (0.0%)	0.80	6/6320 (0.1%)
1	25-A	0.63	0/4672	0.76	5/6320 (0.1%)
1	26-A	0.64	0/4672	0.79	5/6320 (0.1%)
1	27-A	0.66	2/4672 (0.0%)	0.80	10/6320 (0.2%)
1	28-A	0.63	1/4672 (0.0%)	0.77	5/6320 (0.1%)
1	29-A	0.67	2/4672 (0.0%)	0.82	10/6320 (0.2%)
1	30-A	0.65	3/4672 (0.1%)	0.81	8/6320 (0.1%)
1	31-A	0.65	3/4672 (0.1%)	0.78	3/6320 (0.0%)
1	32-A	0.62	2/4672 (0.0%)	0.77	4/6320 (0.1%)
1	33-A	0.68	4/4672 (0.1%)	0.82	10/6320 (0.2%)
1	34-A	0.62	2/4672 (0.0%)	0.79	5/6320 (0.1%)

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z >5	RMSZ	# Z >5
1	35-A	0.64	3/4672 (0.1%)	0.78	3/6320 (0.0%)
1	36-A	0.62	0/4672	0.79	7/6320 (0.1%)
1	37-A	0.64	0/4672	0.79	4/6320 (0.1%)
1	38-A	0.64	2/4672 (0.0%)	0.79	5/6320 (0.1%)
1	39-A	0.65	1/4672 (0.0%)	0.79	6/6320 (0.1%)
1	40-A	0.69	4/4672 (0.1%)	0.80	9/6320 (0.1%)
1	41-A	0.64	1/4672 (0.0%)	0.78	10/6320 (0.2%)
1	42-A	0.66	4/4672 (0.1%)	0.79	8/6320 (0.1%)
1	43-A	0.67	5/4672 (0.1%)	0.78	8/6320 (0.1%)
1	44-A	0.65	0/4672	0.77	3/6320 (0.0%)
All	All	0.65	89/205568 (0.0%)	0.78	257/278080 (0.1%)

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

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	1-A	0	3
1	2-A	0	4
1	3-A	0	6
1	4-A	0	2
1	6-A	0	4
1	7-A	0	1
1	8-A	0	2
1	9-A	0	5
1	10-A	0	3
1	11-A	0	3
1	12-A	0	3
1	13-A	0	6
1	14-A	0	5
1	15-A	0	1
1	16-A	0	3
1	17-A	0	4
1	18-A	0	7
1	19-A	0	3
1	20-A	0	4
1	21-A	0	6
1	22-A	0	5
1	23-A	0	11
1	24-A	0	10
1	25-A	0	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	26-A	0	8
1	27-A	0	9
1	28-A	0	5
1	29-A	0	5
1	30-A	0	7
1	31-A	0	10
1	32-A	0	8
1	33-A	0	7
1	34-A	0	5
1	35-A	0	3
1	36-A	0	2
1	37-A	0	1
1	38-A	0	5
1	39-A	0	8
1	40-A	0	7
1	41-A	0	7
1	42-A	0	5
1	43-A	0	5
1	44-A	0	4
All	All	0	219

All (89) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	40-A	106	CYS	CB-SG	13.00	2.04	1.82
1	21-A	106	CYS	CB-SG	10.02	1.99	1.82
1	42-A	17	CYS	CB-SG	8.87	1.97	1.82
1	40-A	526	TRP	C-N	8.79	1.54	1.34
1	43-A	530	GLU	CB-CG	8.34	1.68	1.52
1	20-A	106	CYS	CB-SG	8.12	1.96	1.82
1	19-A	155	LYS	CE-NZ	8.09	1.69	1.49
1	19-A	106	CYS	CB-SG	-7.99	1.68	1.82
1	33-A	294	GLU	CG-CD	7.73	1.63	1.51
1	28-A	451	GLU	CB-CG	7.70	1.66	1.52
1	2-A	457	TYR	CD1-CE1	-7.56	1.28	1.39
1	2-A	517	GLU	CB-CG	7.32	1.66	1.52
1	9-A	519	GLU	CB-CG	7.30	1.66	1.52
1	24-A	331	GLU	CB-CG	7.30	1.66	1.52
1	43-A	530	GLU	CG-CD	7.17	1.62	1.51
1	43-A	66	PRO	C-N	7.08	1.47	1.34
1	43-A	9	GLU	CB-CG	6.95	1.65	1.52
1	2-A	457	TYR	CB-CG	-6.90	1.41	1.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	21-A	331	GLU	CB-CG	6.85	1.65	1.52
1	7-A	323	CYS	CB-SG	-6.73	1.70	1.82
1	12-A	323	CYS	CB-SG	-6.59	1.71	1.82
1	15-A	294	GLU	CG-CD	6.52	1.61	1.51
1	40-A	517	GLU	CG-CD	-6.47	1.42	1.51
1	9-A	519	GLU	CG-CD	6.41	1.61	1.51
1	11-A	89	CYS	CB-SG	-6.28	1.71	1.82
1	8-A	544	GLU	CG-CD	6.22	1.61	1.51
1	30-A	322	ASP	CB-CG	6.21	1.64	1.51
1	14-A	106	CYS	CB-SG	6.13	1.92	1.82
1	33-A	457	TYR	CD2-CE2	-6.12	1.30	1.39
1	13-A	155	LYS	CE-NZ	6.08	1.64	1.49
1	27-A	530	GLU	CB-CG	6.08	1.63	1.52
1	10-A	66	PRO	C-N	6.07	1.45	1.34
1	18-A	498	GLU	CG-CD	6.06	1.61	1.51
1	42-A	527	ASP	C-N	-6.04	1.22	1.34
1	5-A	193	MET	CB-CG	5.91	1.70	1.51
1	38-A	19	GLU	CB-CG	5.89	1.63	1.52
1	9-A	155	LYS	CE-NZ	5.89	1.63	1.49
1	9-A	294	GLU	CD-OE2	5.87	1.32	1.25
1	10-A	106	CYS	CB-SG	-5.85	1.72	1.81
1	16-A	36	GLU	CB-CG	5.83	1.63	1.52
1	39-A	498	GLU	CG-CD	5.81	1.60	1.51
1	43-A	147	MET	CB-CG	5.79	1.69	1.51
1	42-A	124	GLU	CB-CG	5.73	1.63	1.52
1	33-A	294	GLU	CB-CG	5.72	1.63	1.52
1	1-A	124	GLU	CB-CG	5.72	1.63	1.52
1	38-A	323	CYS	CB-SG	-5.71	1.72	1.81
1	1-A	517	GLU	CB-CG	5.69	1.62	1.52
1	33-A	66	PRO	C-N	-5.67	1.23	1.34
1	22-A	323	CYS	CB-SG	-5.67	1.72	1.81
1	17-A	106	CYS	CB-SG	5.64	1.91	1.82
1	20-A	155	LYS	CE-NZ	5.62	1.63	1.49
1	30-A	457	TYR	CD1-CE1	5.60	1.47	1.39
1	16-A	36	GLU	CG-CD	5.59	1.60	1.51
1	35-A	323	CYS	CB-SG	-5.59	1.72	1.81
1	14-A	323	CYS	CB-SG	-5.57	1.72	1.81
1	5-A	231	GLU	CB-CG	5.56	1.62	1.52
1	14-A	155	LYS	CE-NZ	5.54	1.62	1.49
1	29-A	124	GLU	CG-CD	5.54	1.60	1.51
1	35-A	124	GLU	CB-CG	-5.51	1.41	1.52
1	30-A	457	TYR	CB-CG	5.51	1.59	1.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	6-A	124	GLU	CB-CG	5.46	1.62	1.52
1	35-A	66	PRO	C-N	-5.44	1.24	1.34
1	12-A	294	GLU	CG-CD	5.42	1.60	1.51
1	34-A	294	GLU	CG-CD	5.35	1.59	1.51
1	34-A	323	CYS	CB-SG	-5.31	1.73	1.81
1	19-A	19	GLU	CB-CG	5.31	1.62	1.52
1	18-A	89	CYS	CB-SG	-5.28	1.73	1.81
1	10-A	294	GLU	CD-OE2	5.25	1.31	1.25
1	31-A	457	TYR	CD2-CE2	-5.23	1.31	1.39
1	29-A	226	TYR	CD1-CE1	-5.20	1.31	1.39
1	18-A	155	LYS	CE-NZ	5.19	1.62	1.49
1	7-A	155	LYS	CE-NZ	5.16	1.61	1.49
1	31-A	89	CYS	CB-SG	-5.16	1.73	1.81
1	31-A	124	GLU	CB-CG	5.15	1.61	1.52
1	14-A	516	ASN	CB-CG	5.15	1.62	1.51
1	24-A	295	GLU	CB-CG	5.14	1.61	1.52
1	5-A	544	GLU	CB-CG	5.12	1.61	1.52
1	42-A	323	CYS	CB-SG	-5.11	1.73	1.81
1	18-A	498	GLU	CB-CG	5.11	1.61	1.52
1	17-A	155	LYS	CD-CE	5.10	1.64	1.51
1	40-A	88	CYS	CB-SG	-5.09	1.73	1.81
1	1-A	19	GLU	CG-CD	5.09	1.59	1.51
1	41-A	38	GLU	CB-CG	-5.08	1.42	1.52
1	32-A	389	GLU	CB-CG	5.06	1.61	1.52
1	6-A	156	LYS	CE-NZ	5.06	1.61	1.49
1	20-A	519	GLU	CB-CG	5.05	1.61	1.52
1	32-A	564	GLU	CB-CG	5.02	1.61	1.52
1	27-A	457	TYR	CD2-CE2	-5.00	1.31	1.39
1	1-A	389	GLU	CG-CD	5.00	1.59	1.51

All (257) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	30-A	322	ASP	CB-CG-OD1	13.73	130.66	118.30
1	29-A	461	ARG	NE-CZ-NH1	12.23	126.41	120.30
1	24-A	308	MET	CG-SD-CE	-10.92	82.73	100.20
1	22-A	461	ARG	NE-CZ-NH1	9.93	125.26	120.30
1	8-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	9.73	126.47	110.90
1	33-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	9.65	126.35	110.90
1	35-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	9.63	126.31	110.90
1	38-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	9.58	126.22	110.90
1	1-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	9.53	126.15	110.90

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	11-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	9.42	125.97	110.90
1	26-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	9.33	125.83	110.90
1	7-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	9.33	125.82	110.90
1	44-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	9.32	125.82	110.90
1	28-A	431	LEU	CA-CB-CG	9.30	136.69	115.30
1	40-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	9.25	125.69	110.90
1	42-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	9.24	125.69	110.90
1	4-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	9.24	125.68	110.90
1	20-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	9.22	125.65	110.90
1	29-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	9.15	125.53	110.90
1	16-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	9.14	125.52	110.90
1	10-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	9.13	125.51	110.90
1	34-A	308	MET	CG-SD-CE	-9.12	85.60	100.20
1	37-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	9.06	125.40	110.90
1	36-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	9.04	125.36	110.90
1	15-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.99	125.29	110.90
1	2-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.97	125.26	110.90
1	3-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.92	125.17	110.90
1	25-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.91	125.15	110.90
1	5-A	193	MET	CB-CG-SD	8.89	139.09	112.40
1	13-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.82	125.01	110.90
1	33-A	78	ARG	NE-CZ-NH1	-8.79	115.90	120.30
1	41-A	410	ASP	CB-CG-OD2	8.78	126.20	118.30
1	5-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.77	124.93	110.90
1	25-A	431	LEU	CA-CB-CG	8.76	135.45	115.30
1	42-A	17	CYS	CA-CB-SG	8.71	129.68	114.00
1	41-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.70	124.83	110.90
1	29-A	461	ARG	NE-CZ-NH2	-8.68	115.96	120.30
1	14-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.68	124.78	110.90
1	32-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.67	124.77	110.90
1	19-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.66	124.75	110.90
1	23-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.65	124.75	110.90
1	36-A	431	LEU	CA-CB-CG	8.59	135.06	115.30
1	39-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.59	124.65	110.90
1	17-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.54	124.56	110.90
1	9-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.53	124.55	110.90
1	30-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.53	124.54	110.90
1	38-A	322	ASP	CB-CG-OD2	-8.52	110.63	118.30
1	6-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.49	124.49	110.90
1	31-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.49	124.48	110.90
1	34-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.49	124.48	110.90
1	33-A	322	ASP	CB-CG-OD1	-8.36	110.78	118.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	10-A	486	ARG	NE-CZ-NH1	8.36	124.48	120.30
1	27-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.35	124.26	110.90
1	21-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.30	124.18	110.90
1	43-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.26	124.11	110.90
1	24-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.21	124.04	110.90
1	14-A	22	PHE	CB-CG-CD2	8.16	126.51	120.80
1	22-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.16	123.96	110.90
1	20-A	425	MET	CG-SD-CE	-8.14	87.18	100.20
1	22-A	461	ARG	NE-CZ-NH2	-8.09	116.25	120.30
1	28-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	8.03	123.75	110.90
1	42-A	527	ASP	CB-CG-OD2	8.02	125.51	118.30
1	29-A	431	LEU	CA-CB-CG	7.97	133.64	115.30
1	15-A	308	MET	CB-CG-SD	7.96	136.27	112.40
1	16-A	22	PHE	CB-CG-CD1	7.95	126.36	120.80
1	22-A	300	LEU	CA-CB-CG	7.93	133.54	115.30
1	8-A	364	LEU	CA-CB-CG	7.90	133.47	115.30
1	30-A	322	ASP	CB-CG-OD2	-7.89	111.20	118.30
1	12-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	7.83	123.43	110.90
1	18-A	373	VAL	CG1-CB-CG2	7.82	123.40	110.90
1	20-A	464	ARG	NE-CZ-NH2	-7.75	116.43	120.30
1	18-A	332	MET	CB-CG-SD	-7.71	89.26	112.40
1	5-A	464	ARG	NE-CZ-NH2	-7.50	116.55	120.30
1	18-A	147	MET	CG-SD-CE	-7.49	88.21	100.20
1	23-A	300	LEU	CA-CB-CG	7.41	132.34	115.30
1	33-A	322	ASP	CB-CG-OD2	7.39	124.95	118.30
1	36-A	464	ARG	NE-CZ-NH1	7.37	123.99	120.30
1	42-A	86	ARG	NE-CZ-NH1	7.36	123.98	120.30
1	42-A	86	ARG	NE-CZ-NH2	-7.35	116.63	120.30
1	35-A	93	ASP	CB-CG-OD2	7.32	124.89	118.30
1	23-A	425	MET	CG-SD-CE	-7.21	88.66	100.20
1	37-A	458	ARG	NE-CZ-NH2	-7.09	116.75	120.30
1	27-A	8	MET	CG-SD-CE	7.08	111.53	100.20
1	37-A	325	LEU	CB-CG-CD1	7.05	122.99	111.00
1	13-A	145	ARG	NE-CZ-NH2	-7.02	116.79	120.30
1	20-A	464	ARG	NE-CZ-NH1	7.00	123.80	120.30
1	18-A	155	LYS	CD-CE-NZ	6.95	127.67	111.70
1	19-A	155	LYS	CD-CE-NZ	6.92	127.63	111.70
1	40-A	460	MET	CA-CB-CG	6.92	125.06	113.30
1	14-A	22	PHE	CB-CG-CD1	-6.90	115.97	120.80
1	24-A	100	PHE	CB-CG-CD2	6.89	125.62	120.80
1	29-A	322	ASP	CB-CG-OD1	6.84	124.46	118.30
1	33-A	425	MET	CG-SD-CE	6.83	111.13	100.20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	38-A	365	LEU	CA-CB-CG	6.78	130.90	115.30
1	23-A	155	LYS	CD-CE-NZ	6.75	127.23	111.70
1	44-A	567	ARG	NE-CZ-NH1	6.71	123.66	120.30
1	26-A	461	ARG	NE-CZ-NH2	-6.71	116.94	120.30
1	39-A	425	MET	CG-SD-CE	6.67	110.87	100.20
1	33-A	7	LEU	CA-CB-CG	6.65	130.60	115.30
1	34-A	121	LEU	CA-CB-CG	6.64	130.58	115.30
1	8-A	330	ARG	NE-CZ-NH2	-6.64	116.98	120.30
1	15-A	121	LEU	CA-CB-CG	6.60	130.48	115.30
1	29-A	521	MET	CG-SD-CE	-6.59	89.66	100.20
1	24-A	86	ARG	NE-CZ-NH2	-6.52	117.04	120.30
1	4-A	300	LEU	CA-CB-CG	6.51	130.27	115.30
1	3-A	145	ARG	NE-CZ-NH2	-6.49	117.06	120.30
1	12-A	147	MET	CG-SD-CE	-6.48	89.84	100.20
1	32-A	521	MET	CG-SD-CE	-6.41	89.95	100.20
1	40-A	460	MET	CB-CG-SD	6.30	131.31	112.40
1	11-A	147	MET	CG-SD-CE	-6.30	90.12	100.20
1	35-A	425	MET	CG-SD-CE	6.28	110.24	100.20
1	41-A	410	ASP	CB-CG-OD1	-6.27	112.66	118.30
1	31-A	308	MET	CG-SD-CE	6.26	110.21	100.20
1	29-A	461	ARG	CG-CD-NE	6.25	124.92	111.80
1	33-A	457	TYR	CB-CG-CD2	-6.23	117.26	121.00
1	43-A	147	MET	CB-CG-SD	6.20	131.00	112.40
1	23-A	322	ASP	CB-CG-OD1	-6.17	112.75	118.30
1	5-A	330	ARG	NE-CZ-NH1	6.17	123.38	120.30
1	7-A	145	ARG	NE-CZ-NH2	-6.12	117.24	120.30
1	43-A	431	LEU	CA-CB-CG	6.04	129.20	115.30
1	8-A	193	MET	CA-CB-CG	-6.03	103.05	113.30
1	34-A	8	MET	CG-SD-CE	6.00	109.80	100.20
1	28-A	567	ARG	NE-CZ-NH2	-5.99	117.31	120.30
1	26-A	7	LEU	CA-CB-CG	5.87	128.81	115.30
1	15-A	234	ARG	NE-CZ-NH1	5.87	123.23	120.30
1	22-A	425	MET	CB-CG-SD	-5.86	94.81	112.40
1	1-A	362	MET	CA-CB-CG	5.82	123.20	113.30
1	5-A	147	MET	CG-SD-CE	-5.82	90.90	100.20
1	12-A	300	LEU	CA-CB-CG	5.82	128.68	115.30
1	12-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.82	119.62	110.90
1	7-A	155	LYS	CD-CE-NZ	5.78	125.00	111.70
1	1-A	145	ARG	NE-CZ-NH2	-5.77	117.41	120.30
1	16-A	22	PHE	CB-CG-CD2	-5.77	116.76	120.80
1	5-A	193	MET	CG-SD-CE	5.75	109.39	100.20
1	14-A	193	MET	CG-SD-CE	5.74	109.38	100.20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	40-A	146	ASP	CB-CG-OD1	5.74	123.47	118.30
1	30-A	210	ASP	CB-CG-OD1	5.74	123.46	118.30
1	27-A	567	ARG	NE-CZ-NH2	-5.73	117.43	120.30
1	22-A	145	ARG	NE-CZ-NH2	-5.71	117.45	120.30
1	19-A	486	ARG	NE-CZ-NH2	-5.70	117.45	120.30
1	29-A	86	ARG	NE-CZ-NH2	-5.70	117.45	120.30
1	2-A	457	TYR	CB-CG-CD1	-5.67	117.60	121.00
1	39-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.66	119.38	110.90
1	32-A	86	ARG	CG-CD-NE	-5.65	99.93	111.80
1	9-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.63	119.35	110.90
1	36-A	100	PHE	CB-CG-CD1	5.62	124.74	120.80
1	27-A	457	TYR	CB-CG-CD1	5.62	124.37	121.00
1	42-A	196	ARG	NE-CZ-NH2	-5.61	117.50	120.30
1	18-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.59	119.29	110.90
1	39-A	196	ARG	NE-CZ-NH2	-5.58	117.51	120.30
1	29-A	124	GLU	CA-CB-CG	5.57	125.66	113.40
1	17-A	145	ARG	NE-CZ-NH2	-5.57	117.52	120.30
1	36-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.56	119.24	110.90
1	12-A	460	MET	CG-SD-CE	-5.56	91.31	100.20
1	2-A	457	TYR	CA-CB-CG	-5.56	102.84	113.40
1	41-A	196	ARG	NE-CZ-NH2	-5.55	117.52	120.30
1	24-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.54	119.22	110.90
1	13-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.54	119.21	110.90
1	30-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.50	119.14	110.90
1	20-A	155	LYS	CD-CE-NZ	5.49	124.33	111.70
1	42-A	500	MET	CG-SD-CE	5.49	108.98	100.20
1	10-A	145	ARG	NE-CZ-NH2	-5.48	117.56	120.30
1	20-A	460	MET	CG-SD-CE	5.47	108.96	100.20
1	19-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.46	119.09	110.90
1	5-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.46	119.08	110.90
1	44-A	196	ARG	NE-CZ-NH1	5.45	123.03	120.30
1	43-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.45	119.07	110.90
1	15-A	308	MET	CG-SD-CE	-5.44	91.49	100.20
1	38-A	322	ASP	CB-CG-OD1	5.44	123.20	118.30
1	8-A	486	ARG	NE-CZ-NH1	5.44	123.02	120.30
1	32-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.43	119.05	110.90
1	31-A	87	ASP	CB-CG-OD2	5.43	123.19	118.30
1	40-A	521	MET	CG-SD-CE	5.43	108.88	100.20
1	42-A	410	ASP	CB-CG-OD2	5.43	123.18	118.30
1	4-A	145	ARG	NE-CZ-NH2	-5.42	117.59	120.30
1	26-A	322	ASP	CB-CG-OD1	-5.41	113.43	118.30
1	23-A	308	MET	CB-CG-SD	-5.40	96.21	112.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	25-A	7	LEU	CA-CB-CG	5.38	127.68	115.30
1	33-A	196	ARG	NE-CZ-NH2	-5.38	117.61	120.30
1	10-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.38	118.97	110.90
1	27-A	457	TYR	CB-CG-CD2	-5.37	117.78	121.00
1	17-A	196	ARG	NE-CZ-NH2	-5.34	117.63	120.30
1	8-A	145	ARG	NE-CZ-NH2	-5.34	117.63	120.30
1	16-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.34	118.91	110.90
1	1-A	461	ARG	NE-CZ-NH1	5.33	122.97	120.30
1	1-A	27	LEU	CA-CB-CG	5.32	127.55	115.30
1	25-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.32	118.87	110.90
1	43-A	121	LEU	CA-CB-CG	5.29	127.48	115.30
1	38-A	86	ARG	CG-CD-NE	-5.29	100.69	111.80
1	40-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.27	118.80	110.90
1	28-A	322	ASP	CB-CG-OD1	5.26	123.03	118.30
1	36-A	196	ARG	NE-CZ-NH2	-5.26	117.67	120.30
1	4-A	275	ASP	CB-CG-OD1	5.26	123.03	118.30
1	41-A	289	ASP	CB-CG-OD2	5.25	123.02	118.30
1	17-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.24	118.76	110.90
1	27-A	410	ASP	CB-CG-OD2	5.24	123.02	118.30
1	33-A	457	TYR	CB-CG-CD1	5.24	124.14	121.00
1	13-A	461	ARG	CG-CD-NE	5.23	122.79	111.80
1	36-A	193	MET	CG-SD-CE	-5.23	91.83	100.20
1	16-A	256	CYS	CA-CB-SG	5.23	123.41	114.00
1	40-A	145	ARG	NE-CZ-NH2	-5.22	117.69	120.30
1	6-A	121	LEU	CA-CB-CG	5.22	127.30	115.30
1	21-A	99	ASP	CB-CG-OD1	5.21	122.99	118.30
1	3-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.21	118.72	110.90
1	41-A	145	ARG	NE-CZ-NH2	-5.21	117.70	120.30
1	29-A	273	ASP	CB-CG-OD2	5.21	122.98	118.30
1	13-A	145	ARG	NE-CZ-NH1	5.20	122.90	120.30
1	39-A	145	ARG	NE-CZ-NH2	-5.19	117.70	120.30
1	9-A	364	LEU	CA-CB-CG	5.19	127.23	115.30
1	2-A	196	ARG	NE-CZ-NH2	-5.18	117.71	120.30
1	23-A	531	LYS	CB-CG-CD	5.18	125.08	111.60
1	30-A	330	ARG	CB-CG-CD	5.18	125.08	111.60
1	41-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.18	118.67	110.90
1	26-A	145	ARG	NE-CZ-NH2	-5.18	117.71	120.30
1	14-A	432	ARG	NE-CZ-NH1	5.17	122.89	120.30
1	18-A	93	ASP	CB-CG-OD1	-5.17	113.65	118.30
1	41-A	325	LEU	CA-CB-CG	5.16	127.17	115.30
1	15-A	461	ARG	NE-CZ-NH1	5.16	122.88	120.30
1	2-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.16	118.63	110.90

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	43-A	106	CYS	CA-CB-SG	5.16	123.28	114.00
1	25-A	145	ARG	NE-CZ-NH2	-5.15	117.72	120.30
1	2-A	322	ASP	CB-CG-OD2	-5.14	113.67	118.30
1	10-A	122	ASN	N-CA-CB	5.14	119.85	110.60
1	33-A	145	ARG	NE-CZ-NH2	-5.13	117.73	120.30
1	24-A	100	PHE	CB-CG-CD1	-5.13	117.21	120.80
1	27-A	521	MET	CA-CB-CG	5.13	122.02	113.30
1	15-A	8	MET	CB-CG-SD	5.13	127.79	112.40
1	5-A	145	ARG	NE-CZ-NH2	-5.13	117.74	120.30
1	6-A	155	LYS	CD-CE-NZ	5.12	123.48	111.70
1	27-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.12	118.59	110.90
1	43-A	521	MET	CB-CG-SD	5.12	127.75	112.40
1	13-A	457	TYR	CB-CG-CD1	-5.11	117.93	121.00
1	23-A	531	LYS	CD-CE-NZ	5.11	123.45	111.70
1	27-A	431	LEU	CB-CG-CD2	5.11	119.69	111.00
1	40-A	86	ARG	CG-CD-NE	-5.11	101.07	111.80
1	41-A	303	ARG	NE-CZ-NH2	-5.09	117.75	120.30
1	27-A	155	LYS	CD-CE-NZ	-5.09	99.99	111.70
1	7-A	362	MET	CG-SD-CE	5.09	108.35	100.20
1	12-A	234	ARG	CA-CB-CG	5.09	124.60	113.40
1	23-A	256	CYS	CA-CB-SG	5.08	123.15	114.00
1	9-A	332	MET	CG-SD-CE	-5.08	92.08	100.20
1	37-A	460	MET	CB-CG-SD	5.07	127.62	112.40
1	14-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.07	118.50	110.90
1	21-A	362	MET	CA-CB-CG	5.06	121.91	113.30
1	9-A	145	ARG	NE-CZ-NH2	-5.06	117.77	120.30
1	43-A	196	ARG	NE-CZ-NH2	-5.06	117.77	120.30
1	17-A	121	LEU	CA-CB-CG	5.05	126.93	115.30
1	39-A	365	LEU	CA-CB-CG	5.05	126.91	115.30
1	28-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.04	118.47	110.90
1	16-A	155	LYS	CD-CE-NZ	5.04	123.29	111.70
1	34-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.04	118.45	110.90
1	40-A	236	LEU	CA-CB-CG	5.04	126.88	115.30
1	20-A	373	VAL	CA-CB-CG1	5.02	118.43	110.90
1	41-A	303	ARG	NE-CZ-NH1	5.02	122.81	120.30
1	30-A	330	ARG	NE-CZ-NH2	5.01	122.81	120.30
1	30-A	457	TYR	CZ-CE2-CD2	5.00	124.30	119.80
1	11-A	193	MET	CA-CB-CG	-5.00	104.80	113.30

There are no chirality outliers.

All (219) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	1-A	435	HIS	Peptide
1	1-A	460	MET	Peptide
1	1-A	461	ARG	Peptide
1	10-A	121	LEU	Peptide
1	10-A	465	GLY	Peptide
1	10-A	518	ILE	Peptide
1	11-A	436	THR	Peptide
1	11-A	518	ILE	Peptide
1	11-A	99	ASP	Peptide
1	12-A	100	PHE	Peptide
1	12-A	273	ASP	Peptide
1	12-A	322	ASP	Peptide
1	13-A	125	THR	Peptide
1	13-A	252	ALA	Peptide
1	13-A	273	ASP	Peptide
1	13-A	363	PRO	Peptide
1	13-A	436	THR	Peptide
1	13-A	462	SER	Peptide
1	14-A	364	LEU	Peptide
1	14-A	437	SER	Peptide
1	14-A	463	GLY	Peptide
1	14-A	5	VAL	Peptide
1	14-A	7	LEU	Peptide
1	15-A	7	LEU	Peptide
1	16-A	104	LYS	Peptide
1	16-A	466	VAL	Peptide
1	16-A	7	LEU	Peptide
1	17-A	461	ARG	Peptide
1	17-A	465	GLY	Peptide
1	17-A	6	SER	Peptide
1	17-A	7	LEU	Peptide
1	18-A	358	ILE	Peptide
1	18-A	433	PHE	Peptide
1	18-A	437	SER	Peptide
1	18-A	438	GLY	Peptide
1	18-A	463	GLY	Peptide
1	18-A	6	SER	Peptide
1	18-A	7	LEU	Peptide
1	19-A	389	GLU	Peptide
1	19-A	435	HIS	Peptide
1	19-A	436	THR	Peptide
1	2-A	101	ILE	Peptide
1	2-A	273	ASP	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	2-A	361	GLN	Peptide
1	2-A	92	LYS	Peptide
1	20-A	122	ASN	Peptide
1	20-A	437	SER	Peptide
1	20-A	464	ARG	Peptide
1	20-A	519	GLU	Peptide
1	21-A	320	THR	Peptide
1	21-A	357	SER	Peptide
1	21-A	361	GLN	Peptide
1	21-A	436	THR	Peptide
1	21-A	463	GLY	Peptide
1	21-A	465	GLY	Peptide
1	22-A	388	PRO	Peptide
1	22-A	389	GLU	Peptide
1	22-A	434	ASN	Peptide
1	22-A	435	HIS	Peptide
1	22-A	520	GLY	Peptide
1	23-A	178	GLU	Peptide
1	23-A	273	ASP	Peptide
1	23-A	307	VAL	Peptide
1	23-A	388	PRO	Peptide
1	23-A	435	HIS	Peptide
1	23-A	436	THR	Peptide
1	23-A	464	ARG	Peptide
1	23-A	465	GLY	Peptide
1	23-A	516	ASN	Peptide
1	23-A	518	ILE	Peptide
1	23-A	6	SER	Peptide
1	24-A	307	VAL	Peptide
1	24-A	321	ALA	Peptide
1	24-A	334	LYS	Peptide
1	24-A	387	ALA	Peptide
1	24-A	433	PHE	Peptide
1	24-A	438	GLY	Peptide
1	24-A	461	ARG	Peptide
1	24-A	465	GLY	Peptide
1	24-A	518	ILE	Peptide
1	24-A	6	SER	Peptide
1	25-A	123	PRO	Peptide
1	25-A	124	GLU	Peptide
1	25-A	176	ASN	Peptide
1	25-A	321	ALA	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	25-A	402	VAL	Peptide
1	25-A	515	SER	Peptide
1	25-A	6	SER	Peptide
1	26-A	389	GLU	Peptide
1	26-A	459	ILE	Peptide
1	26-A	460	MET	Peptide
1	26-A	463	GLY	Peptide
1	26-A	465	GLY	Peptide
1	26-A	515	SER	Peptide
1	26-A	520	GLY	Peptide
1	26-A	6	SER	Peptide
1	27-A	333	VAL	Peptide
1	27-A	335	THR	Peptide
1	27-A	357	SER	Peptide
1	27-A	387	ALA	Peptide
1	27-A	434	ASN	Peptide
1	27-A	458	ARG	Peptide
1	27-A	459	ILE	Peptide
1	27-A	6	SER	Peptide
1	27-A	80	THR	Peptide
1	28-A	357	SER	Peptide
1	28-A	360	LYS	Peptide
1	28-A	363	PRO	Peptide
1	28-A	459	ILE	Peptide
1	28-A	518	ILE	Peptide
1	29-A	124	GLU	Peptide
1	29-A	273	ASP	Peptide
1	29-A	363	PRO	Peptide
1	29-A	436	THR	Peptide
1	29-A	459	ILE	Peptide
1	3-A	14	LYS	Peptide
1	3-A	327	LYS	Peptide
1	3-A	435	HIS	Peptide
1	3-A	437	SER	Peptide
1	3-A	5	VAL	Peptide
1	3-A	9	GLU	Peptide
1	30-A	179	ASP	Peptide
1	30-A	273	ASP	Peptide
1	30-A	360	LYS	Peptide
1	30-A	438	GLY	Peptide
1	30-A	459	ILE	Peptide
1	30-A	462	SER	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	30-A	464	ARG	Peptide
1	31-A	103	GLY	Peptide
1	31-A	179	ASP	Peptide
1	31-A	273	ASP	Peptide
1	31-A	274	ASN	Peptide
1	31-A	335	THR	Peptide
1	31-A	434	ASN	Peptide
1	31-A	435	HIS	Peptide
1	31-A	438	GLY	Peptide
1	31-A	461	ARG	Peptide
1	31-A	99	ASP	Peptide
1	32-A	179	ASP	Peptide
1	32-A	19	GLU	Peptide
1	32-A	273	ASP	Peptide
1	32-A	274	ASN	Peptide
1	32-A	320	THR	Peptide
1	32-A	433	PHE	Peptide
1	32-A	434	ASN	Peptide
1	32-A	459	ILE	Peptide
1	33-A	273	ASP	Peptide
1	33-A	435	HIS	Peptide
1	33-A	459	ILE	Peptide
1	33-A	462	SER	Peptide
1	33-A	467	LYS	Peptide
1	33-A	89	CYS	Peptide
1	33-A	90	ASN	Peptide
1	34-A	121	LEU	Peptide
1	34-A	124	GLU	Peptide
1	34-A	436	THR	Peptide
1	34-A	462	SER	Peptide
1	34-A	530	GLU	Peptide
1	35-A	436	THR	Peptide
1	35-A	465	GLY	Peptide
1	35-A	9	GLU	Peptide
1	36-A	435	HIS	Peptide
1	36-A	9	GLU	Peptide
1	37-A	458	ARG	Peptide
1	38-A	434	ASN	Peptide
1	38-A	436	THR	Peptide
1	38-A	458	ARG	Peptide
1	38-A	463	GLY	Peptide
1	38-A	6	SER	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	39-A	273	ASP	Peptide
1	39-A	358	ILE	Peptide
1	39-A	439	THR	Peptide
1	39-A	461	ARG	Peptide
1	39-A	463	GLY	Peptide
1	39-A	466	VAL	Peptide
1	39-A	567	ARG	Peptide
1	39-A	7	LEU	Peptide
1	4-A	177	SER	Peptide
1	4-A	439	THR	Peptide
1	40-A	11	LEU	Peptide
1	40-A	436	THR	Peptide
1	40-A	461	ARG	Peptide
1	40-A	6	SER	Peptide
1	40-A	7	LEU	Peptide
1	40-A	8	MET	Peptide
1	40-A	9	GLU	Peptide
1	41-A	106	CYS	Peptide
1	41-A	434	ASN	Peptide
1	41-A	438	GLY	Peptide
1	41-A	459	ILE	Peptide
1	41-A	466	VAL	Peptide
1	41-A	5	VAL	Peptide
1	41-A	6	SER	Peptide
1	42-A	434	ASN	Peptide
1	42-A	435	HIS	Peptide
1	42-A	460	MET	Peptide
1	42-A	461	ARG	Peptide
1	42-A	533	ASP	Peptide
1	43-A	335	THR	Peptide
1	43-A	433	PHE	Peptide
1	43-A	434	ASN	Peptide
1	43-A	532	SER	Peptide
1	43-A	9	GLU	Peptide
1	44-A	363	PRO	Peptide
1	44-A	438	GLY	Peptide
1	44-A	459	ILE	Peptide
1	44-A	462	SER	Peptide
1	6-A	121	LEU	Peptide
1	6-A	321	ALA	Peptide
1	6-A	463	GLY	Peptide
1	6-A	6	SER	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	7-A	99	ASP	Peptide
1	8-A	105	VAL	Peptide
1	8-A	322	ASP	Peptide
1	9-A	106	CYS	Peptide
1	9-A	273	ASP	Peptide
1	9-A	319	GLN	Peptide
1	9-A	461	ARG	Peptide
1	9-A	6	SER	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	4557	4480	4480	0	0
1	2-A	4557	4480	4480	0	0
1	3-A	4557	4480	4480	0	0
1	4-A	4557	4480	4480	0	0
1	5-A	4557	4480	4480	0	0
1	6-A	4557	4480	4480	0	0
1	7-A	4557	4480	4480	0	0
1	8-A	4557	4480	4480	0	0
1	9-A	4557	4480	4480	0	0
1	10-A	4557	4480	4480	0	0
1	11-A	4557	4480	4480	0	0
1	12-A	4557	4480	4480	0	0
1	13-A	4557	4480	4480	0	0
1	14-A	4557	4480	4480	0	0
1	15-A	4557	4480	4480	0	0
1	16-A	4557	4480	4480	0	0
1	17-A	4557	4480	4480	0	0
1	18-A	4557	4480	4480	0	0
1	19-A	4557	4480	4480	0	0
1	20-A	4557	4480	4480	0	0
1	21-A	4557	4480	4480	0	0
1	22-A	4557	4480	4480	0	0
1	23-A	4557	4480	4480	0	0
1	24-A	4557	4480	4480	0	0
1	25-A	4557	4480	4480	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	26-A	4557	4480	4480	0	0
1	27-A	4557	4480	4480	0	0
1	28-A	4557	4480	4480	0	0
1	29-A	4557	4480	4480	0	0
1	30-A	4557	4480	4480	0	0
1	31-A	4557	4480	4480	0	0
1	32-A	4557	4480	4480	0	0
1	33-A	4557	4480	4480	0	0
1	34-A	4557	4480	4480	0	0
1	35-A	4557	4480	4480	0	0
1	36-A	4557	4480	4480	0	0
1	37-A	4557	4480	4480	0	0
1	38-A	4557	4480	4480	0	0
1	39-A	4557	4480	4480	0	0
1	40-A	4557	4480	4480	0	0
1	41-A	4557	4480	4480	0	0
1	42-A	4557	4480	4480	0	0
1	43-A	4557	4480	4480	0	0
1	44-A	4557	4480	4480	0	0
2	1-A	234	0	0	0	0
2	2-A	234	0	0	0	0
2	3-A	224	0	0	0	0
2	4-A	222	0	0	0	0
2	5-A	230	0	0	0	0
2	6-A	233	0	0	0	0
2	7-A	241	0	0	0	0
2	8-A	238	0	0	0	0
2	9-A	218	0	0	0	0
2	10-A	217	0	0	0	0
2	11-A	219	0	0	0	0
2	12-A	231	0	0	0	0
2	13-A	231	0	0	0	0
2	14-A	235	0	0	0	0
2	15-A	226	0	0	0	0
2	16-A	230	0	0	0	0
2	17-A	211	0	0	0	0
2	18-A	228	0	0	0	0
2	19-A	228	0	0	0	0
2	20-A	236	0	0	0	0
2	21-A	234	0	0	0	0
2	22-A	225	0	0	0	0
2	23-A	206	0	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
2	24-A	218	0	0	0	0
2	25-A	227	0	0	0	0
2	26-A	227	0	0	0	0
2	27-A	214	0	0	0	0
2	28-A	237	0	0	0	0
2	29-A	238	0	0	0	0
2	30-A	237	0	0	0	0
2	31-A	224	0	0	0	0
2	32-A	224	0	0	0	0
2	33-A	224	0	0	0	0
2	34-A	235	0	0	0	0
2	35-A	227	0	0	0	0
2	36-A	236	0	0	0	0
2	37-A	234	0	0	0	0
2	38-A	244	0	0	0	0
2	39-A	231	0	0	0	0
2	40-A	231	0	0	0	0
2	41-A	242	0	0	0	0
2	42-A	246	0	0	0	0
2	43-A	233	0	0	0	0
2	44-A	223	0	0	0	0
All	All	210591	197120	197120	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	564/577 (98%)	514 (91%)	39 (7%)	11 (2%)	7 1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	2-A	564/577 (98%)	523 (93%)	29 (5%)	12 (2%)	7	1
1	3-A	564/577 (98%)	518 (92%)	35 (6%)	11 (2%)	7	1
1	4-A	564/577 (98%)	527 (93%)	29 (5%)	8 (1%)	11	2
1	5-A	564/577 (98%)	518 (92%)	39 (7%)	7 (1%)	13	3
1	6-A	564/577 (98%)	521 (92%)	33 (6%)	10 (2%)	8	1
1	7-A	564/577 (98%)	521 (92%)	36 (6%)	7 (1%)	13	3
1	8-A	564/577 (98%)	521 (92%)	32 (6%)	11 (2%)	7	1
1	9-A	564/577 (98%)	507 (90%)	40 (7%)	17 (3%)	4	0
1	10-A	564/577 (98%)	511 (91%)	43 (8%)	10 (2%)	8	1
1	11-A	564/577 (98%)	513 (91%)	36 (6%)	15 (3%)	5	0
1	12-A	564/577 (98%)	528 (94%)	22 (4%)	14 (2%)	5	1
1	13-A	564/577 (98%)	524 (93%)	25 (4%)	15 (3%)	5	0
1	14-A	564/577 (98%)	514 (91%)	37 (7%)	13 (2%)	6	1
1	15-A	564/577 (98%)	518 (92%)	31 (6%)	15 (3%)	5	0
1	16-A	564/577 (98%)	516 (92%)	32 (6%)	16 (3%)	5	0
1	17-A	564/577 (98%)	521 (92%)	33 (6%)	10 (2%)	8	1
1	18-A	564/577 (98%)	522 (93%)	35 (6%)	7 (1%)	13	3
1	19-A	564/577 (98%)	518 (92%)	33 (6%)	13 (2%)	6	1
1	20-A	564/577 (98%)	515 (91%)	36 (6%)	13 (2%)	6	1
1	21-A	564/577 (98%)	516 (92%)	39 (7%)	9 (2%)	9	1
1	22-A	564/577 (98%)	513 (91%)	35 (6%)	16 (3%)	5	0
1	23-A	564/577 (98%)	510 (90%)	42 (7%)	12 (2%)	7	1
1	24-A	564/577 (98%)	510 (90%)	40 (7%)	14 (2%)	5	1
1	25-A	564/577 (98%)	507 (90%)	39 (7%)	18 (3%)	4	0
1	26-A	564/577 (98%)	508 (90%)	42 (7%)	14 (2%)	5	1
1	27-A	564/577 (98%)	511 (91%)	33 (6%)	20 (4%)	3	0
1	28-A	564/577 (98%)	513 (91%)	33 (6%)	18 (3%)	4	0
1	29-A	564/577 (98%)	515 (91%)	39 (7%)	10 (2%)	8	1
1	30-A	564/577 (98%)	512 (91%)	36 (6%)	16 (3%)	5	0
1	31-A	564/577 (98%)	511 (91%)	39 (7%)	14 (2%)	5	1
1	32-A	564/577 (98%)	511 (91%)	39 (7%)	14 (2%)	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	33-A	564/577 (98%)	515 (91%)	30 (5%)	19 (3%)	3	0
1	34-A	564/577 (98%)	514 (91%)	31 (6%)	19 (3%)	3	0
1	35-A	564/577 (98%)	513 (91%)	41 (7%)	10 (2%)	8	1
1	36-A	564/577 (98%)	515 (91%)	40 (7%)	9 (2%)	9	1
1	37-A	564/577 (98%)	513 (91%)	32 (6%)	19 (3%)	3	0
1	38-A	564/577 (98%)	505 (90%)	41 (7%)	18 (3%)	4	0
1	39-A	564/577 (98%)	509 (90%)	34 (6%)	21 (4%)	3	0
1	40-A	564/577 (98%)	514 (91%)	37 (7%)	13 (2%)	6	1
1	41-A	564/577 (98%)	509 (90%)	36 (6%)	19 (3%)	3	0
1	42-A	564/577 (98%)	509 (90%)	35 (6%)	20 (4%)	3	0
1	43-A	564/577 (98%)	516 (92%)	27 (5%)	21 (4%)	3	0
1	44-A	564/577 (98%)	512 (91%)	40 (7%)	12 (2%)	7	1
All	All	24816/25388 (98%)	22651 (91%)	1555 (6%)	610 (2%)	5	1

All (610) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	295	GLU
1	1-A	363	PRO
1	1-A	437	SER
1	1-A	464	ARG
1	2-A	100	PHE
1	2-A	101	ILE
1	2-A	363	PRO
1	2-A	436	THR
1	2-A	464	ARG
1	3-A	7	LEU
1	3-A	178	GLU
1	3-A	179	ASP
1	3-A	463	GLY
1	4-A	6	SER
1	4-A	274	ASN
1	4-A	356	THR
1	4-A	358	ILE
1	5-A	274	ASN
1	5-A	462	SER
1	5-A	463	GLY
1	6-A	334	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	7-A	7	LEU
1	7-A	364	LEU
1	8-A	462	SER
1	8-A	463	GLY
1	9-A	7	LEU
1	9-A	106	CYS
1	9-A	178	GLU
1	9-A	335	THR
1	9-A	358	ILE
1	9-A	436	THR
1	9-A	437	SER
1	9-A	461	ARG
1	9-A	462	SER
1	9-A	463	GLY
1	10-A	434	ASN
1	10-A	463	GLY
1	11-A	6	SER
1	11-A	322	ASP
1	11-A	437	SER
1	11-A	464	ARG
1	11-A	522	GLU
1	12-A	6	SER
1	12-A	38	GLU
1	12-A	101	ILE
1	12-A	361	GLN
1	12-A	464	ARG
1	13-A	7	LEU
1	13-A	357	SER
1	13-A	358	ILE
1	13-A	435	HIS
1	13-A	436	THR
1	13-A	461	ARG
1	13-A	464	ARG
1	13-A	516	ASN
1	14-A	123	PRO
1	14-A	322	ASP
1	14-A	364	LEU
1	14-A	365	LEU
1	14-A	435	HIS
1	14-A	436	THR
1	14-A	437	SER
1	14-A	464	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	15-A	9	GLU
1	15-A	274	ASN
1	15-A	435	HIS
1	15-A	436	THR
1	15-A	437	SER
1	15-A	459	ILE
1	15-A	462	SER
1	16-A	8	MET
1	16-A	274	ASN
1	16-A	434	ASN
1	16-A	462	SER
1	17-A	8	MET
1	17-A	436	THR
1	17-A	439	THR
1	17-A	462	SER
1	17-A	463	GLY
1	18-A	234	ARG
1	18-A	321	ALA
1	18-A	434	ASN
1	18-A	462	SER
1	19-A	6	SER
1	19-A	8	MET
1	19-A	124	GLU
1	19-A	178	GLU
1	19-A	179	ASP
1	19-A	434	ASN
1	19-A	437	SER
1	20-A	6	SER
1	20-A	123	PRO
1	20-A	433	PHE
1	20-A	434	ASN
1	20-A	437	SER
1	20-A	461	ARG
1	20-A	464	ARG
1	21-A	8	MET
1	21-A	330	ARG
1	21-A	357	SER
1	21-A	358	ILE
1	21-A	461	ARG
1	21-A	462	SER
1	21-A	464	ARG
1	22-A	8	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	22-A	178	GLU
1	22-A	321	ALA
1	22-A	322	ASP
1	22-A	389	GLU
1	22-A	434	ASN
1	22-A	435	HIS
1	22-A	437	SER
1	22-A	461	ARG
1	23-A	389	GLU
1	23-A	434	ASN
1	23-A	436	THR
1	23-A	437	SER
1	23-A	459	ILE
1	23-A	462	SER
1	24-A	388	PRO
1	24-A	436	THR
1	24-A	459	ILE
1	24-A	460	MET
1	24-A	462	SER
1	25-A	104	LYS
1	25-A	125	THR
1	25-A	435	HIS
1	25-A	436	THR
1	25-A	439	THR
1	25-A	459	ILE
1	25-A	460	MET
1	25-A	516	ASN
1	26-A	179	ASP
1	26-A	322	ASP
1	26-A	435	HIS
1	26-A	459	ILE
1	26-A	462	SER
1	26-A	464	ARG
1	26-A	516	ASN
1	26-A	517	GLU
1	26-A	519	GLU
1	27-A	179	ASP
1	27-A	321	ALA
1	27-A	405	GLU
1	27-A	435	HIS
1	27-A	436	THR
1	27-A	437	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	27-A	464	ARG
1	28-A	362	MET
1	28-A	365	LEU
1	28-A	435	HIS
1	28-A	437	SER
1	28-A	458	ARG
1	28-A	461	ARG
1	29-A	364	LEU
1	29-A	461	ARG
1	30-A	387	ALA
1	30-A	435	HIS
1	30-A	436	THR
1	30-A	437	SER
1	30-A	459	ILE
1	30-A	461	ARG
1	30-A	462	SER
1	30-A	464	ARG
1	31-A	100	PHE
1	31-A	334	LYS
1	31-A	436	THR
1	31-A	439	THR
1	31-A	460	MET
1	31-A	462	SER
1	32-A	8	MET
1	32-A	124	GLU
1	32-A	321	ALA
1	32-A	322	ASP
1	32-A	362	MET
1	32-A	435	HIS
1	32-A	462	SER
1	33-A	8	MET
1	33-A	9	GLU
1	33-A	321	ALA
1	33-A	433	PHE
1	33-A	434	ASN
1	33-A	462	SER
1	34-A	6	SER
1	34-A	8	MET
1	34-A	9	GLU
1	34-A	179	ASP
1	34-A	274	ASN
1	34-A	358	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	34-A	361	GLN
1	34-A	362	MET
1	34-A	363	PRO
1	34-A	437	SER
1	34-A	462	SER
1	34-A	464	ARG
1	34-A	466	VAL
1	35-A	6	SER
1	35-A	459	ILE
1	35-A	462	SER
1	35-A	466	VAL
1	36-A	8	MET
1	36-A	321	ALA
1	36-A	322	ASP
1	36-A	462	SER
1	36-A	522	GLU
1	37-A	8	MET
1	37-A	294	GLU
1	37-A	358	ILE
1	37-A	438	GLY
1	37-A	439	THR
1	37-A	464	ARG
1	37-A	466	VAL
1	37-A	522	GLU
1	38-A	359	LEU
1	38-A	459	ILE
1	38-A	460	MET
1	38-A	464	ARG
1	39-A	7	LEU
1	39-A	8	MET
1	39-A	358	ILE
1	39-A	359	LEU
1	39-A	366	VAL
1	39-A	439	THR
1	39-A	459	ILE
1	39-A	460	MET
1	39-A	462	SER
1	39-A	568	ASP
1	40-A	7	LEU
1	40-A	8	MET
1	40-A	464	ARG
1	40-A	533	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	41-A	7	LEU
1	41-A	8	MET
1	41-A	106	CYS
1	41-A	124	GLU
1	41-A	329	PRO
1	41-A	336	ALA
1	41-A	435	HIS
1	41-A	459	ILE
1	41-A	461	ARG
1	41-A	464	ARG
1	41-A	532	SER
1	41-A	533	ASP
1	42-A	8	MET
1	42-A	11	LEU
1	42-A	358	ILE
1	42-A	434	ASN
1	42-A	435	HIS
1	42-A	436	THR
1	42-A	459	ILE
1	42-A	461	ARG
1	42-A	467	LYS
1	42-A	532	SER
1	43-A	8	MET
1	43-A	9	GLU
1	43-A	11	LEU
1	43-A	358	ILE
1	43-A	359	LEU
1	43-A	434	ASN
1	43-A	436	THR
1	43-A	437	SER
1	43-A	459	ILE
1	43-A	460	MET
1	43-A	462	SER
1	44-A	335	THR
1	44-A	433	PHE
1	44-A	435	HIS
1	44-A	460	MET
1	44-A	532	SER
1	44-A	533	ASP
1	1-A	179	ASP
1	1-A	462	SER
1	1-A	531	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	532	SER
1	2-A	234	ARG
1	2-A	321	ALA
1	3-A	38	GLU
1	3-A	522	GLU
1	4-A	462	SER
1	4-A	463	GLY
1	5-A	179	ASP
1	5-A	305	ASN
1	5-A	464	ARG
1	6-A	322	ASP
1	6-A	436	THR
1	6-A	439	THR
1	7-A	461	ARG
1	7-A	463	GLY
1	8-A	179	ASP
1	8-A	359	LEU
1	8-A	461	ARG
1	8-A	464	ARG
1	9-A	334	LYS
1	9-A	357	SER
1	10-A	7	LEU
1	10-A	364	LEU
1	10-A	520	GLY
1	11-A	273	ASP
1	11-A	321	ALA
1	11-A	360	LYS
1	11-A	368	GLU
1	11-A	405	GLU
1	11-A	434	ASN
1	11-A	519	GLU
1	12-A	7	LEU
1	12-A	100	PHE
1	12-A	323	CYS
1	13-A	6	SER
1	13-A	126	LYS
1	13-A	253	ASN
1	14-A	7	LEU
1	14-A	234	ARG
1	15-A	234	ARG
1	15-A	235	GLY
1	16-A	437	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	16-A	438	GLY
1	17-A	231	GLU
1	17-A	383	ALA
1	17-A	403	THR
1	17-A	405	GLU
1	18-A	463	GLY
1	19-A	462	SER
1	20-A	7	LEU
1	20-A	8	MET
1	20-A	435	HIS
1	21-A	234	ARG
1	22-A	179	ASP
1	22-A	405	GLU
1	23-A	8	MET
1	23-A	335	THR
1	24-A	321	ALA
1	24-A	322	ASP
1	24-A	434	ASN
1	24-A	437	SER
1	25-A	362	MET
1	25-A	437	SER
1	27-A	362	MET
1	27-A	365	LEU
1	27-A	458	ARG
1	27-A	463	GLY
1	28-A	91	HIS
1	28-A	179	ASP
1	28-A	234	ARG
1	28-A	357	SER
1	28-A	361	GLN
1	28-A	516	ASN
1	29-A	357	SER
1	29-A	437	SER
1	29-A	439	THR
1	30-A	273	ASP
1	30-A	404	GLY
1	30-A	460	MET
1	30-A	516	ASN
1	31-A	358	ILE
1	31-A	403	THR
1	31-A	459	ILE
1	32-A	274	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	32-A	439	THR
1	32-A	461	ARG
1	33-A	100	PHE
1	34-A	178	GLU
1	35-A	438	GLY
1	36-A	92	LYS
1	37-A	9	GLU
1	37-A	102	THR
1	37-A	103	GLY
1	37-A	467	LYS
1	38-A	11	LEU
1	38-A	358	ILE
1	38-A	366	VAL
1	38-A	463	GLY
1	39-A	11	LEU
1	39-A	365	LEU
1	39-A	461	ARG
1	39-A	463	GLY
1	40-A	317	PRO
1	40-A	358	ILE
1	40-A	405	GLU
1	40-A	462	SER
1	40-A	467	LYS
1	41-A	9	GLU
1	42-A	6	SER
1	42-A	9	GLU
1	42-A	359	LEU
1	42-A	462	SER
1	42-A	533	ASP
1	43-A	7	LEU
1	43-A	320	THR
1	43-A	335	THR
1	43-A	533	ASP
1	44-A	437	SER
1	44-A	464	ARG
1	1-A	368	GLU
1	2-A	288	GLN
1	2-A	306	LYS
1	3-A	177	SER
1	3-A	321	ALA
1	6-A	8	MET
1	8-A	6	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	8-A	7	LEU
1	11-A	462	SER
1	12-A	362	MET
1	12-A	462	SER
1	13-A	356	THR
1	13-A	365	LEU
1	13-A	439	THR
1	15-A	7	LEU
1	15-A	8	MET
1	15-A	357	SER
1	15-A	405	GLU
1	16-A	106	CYS
1	16-A	335	THR
1	16-A	360	LYS
1	18-A	322	ASP
1	19-A	218	SER
1	20-A	81	PRO
1	22-A	436	THR
1	23-A	178	GLU
1	23-A	294	GLU
1	25-A	100	PHE
1	26-A	177	SER
1	27-A	273	ASP
1	27-A	364	LEU
1	27-A	388	PRO
1	28-A	360	LYS
1	29-A	359	LEU
1	29-A	365	LEU
1	30-A	8	MET
1	31-A	335	THR
1	31-A	357	SER
1	31-A	360	LYS
1	32-A	122	ASN
1	32-A	382	ASP
1	33-A	123	PRO
1	33-A	465	GLY
1	33-A	519	GLU
1	33-A	531	LYS
1	34-A	122	ASN
1	35-A	362	MET
1	36-A	305	ASN
1	36-A	329	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	37-A	361	GLN
1	37-A	435	HIS
1	38-A	357	SER
1	38-A	382	ASP
1	38-A	467	LYS
1	39-A	357	SER
1	40-A	532	SER
1	41-A	405	GLU
1	41-A	436	THR
1	41-A	438	GLY
1	42-A	7	LEU
1	42-A	383	ALA
1	43-A	99	ASP
1	43-A	319	GLN
1	43-A	464	ARG
1	43-A	532	SER
1	2-A	437	SER
1	2-A	462	SER
1	3-A	328	HIS
1	6-A	124	GLU
1	6-A	234	ARG
1	6-A	336	ALA
1	6-A	462	SER
1	6-A	464	ARG
1	7-A	358	ILE
1	8-A	437	SER
1	8-A	438	GLY
1	9-A	322	ASP
1	10-A	10	LYS
1	10-A	465	GLY
1	10-A	519	GLU
1	12-A	322	ASP
1	12-A	533	ASP
1	13-A	460	MET
1	15-A	321	ALA
1	16-A	19	GLU
1	16-A	288	GLN
1	16-A	321	ALA
1	16-A	397	ILE
1	19-A	122	ASN
1	22-A	438	GLY
1	22-A	462	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	24-A	125	THR
1	24-A	335	THR
1	24-A	397	ILE
1	25-A	38	GLU
1	25-A	462	SER
1	25-A	465	GLY
1	26-A	436	THR
1	27-A	356	THR
1	28-A	358	ILE
1	28-A	359	LEU
1	28-A	397	ILE
1	29-A	462	SER
1	29-A	519	GLU
1	30-A	434	ASN
1	31-A	383	ALA
1	33-A	120	ASN
1	33-A	124	GLU
1	33-A	357	SER
1	33-A	437	SER
1	34-A	367	LYS
1	35-A	11	LEU
1	37-A	359	LEU
1	37-A	362	MET
1	37-A	437	SER
1	38-A	21	LYS
1	38-A	321	ALA
1	38-A	435	HIS
1	38-A	462	SER
1	39-A	458	ARG
1	39-A	465	GLY
1	40-A	12	LYS
1	41-A	334	LYS
1	41-A	462	SER
1	42-A	357	SER
1	44-A	462	SER
1	3-A	462	SER
1	5-A	81	PRO
1	7-A	359	LEU
1	8-A	126	LYS
1	9-A	19	GLU
1	9-A	516	ASN
1	9-A	564	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	10-A	516	ASN
1	11-A	466	VAL
1	12-A	383	ALA
1	14-A	433	PHE
1	14-A	465	GLY
1	16-A	519	GLU
1	17-A	528	PRO
1	19-A	7	LEU
1	19-A	433	PHE
1	22-A	516	ASN
1	24-A	6	SER
1	25-A	388	PRO
1	25-A	433	PHE
1	26-A	78	ARG
1	27-A	434	ASN
1	28-A	6	SER
1	28-A	439	THR
1	32-A	333	VAL
1	33-A	122	ASN
1	35-A	8	MET
1	37-A	459	ILE
1	38-A	305	ASN
1	38-A	439	THR
1	39-A	100	PHE
1	39-A	304	THR
1	41-A	467	LYS
1	42-A	437	SER
1	42-A	464	ARG
1	43-A	516	ASN
1	44-A	434	ASN
1	44-A	466	VAL
1	2-A	362	MET
1	3-A	357	SER
1	4-A	464	ARG
1	7-A	8	MET
1	10-A	123	PRO
1	11-A	436	THR
1	12-A	465	GLY
1	14-A	6	SER
1	15-A	288	GLN
1	19-A	123	PRO
1	25-A	78	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	26-A	362	MET
1	27-A	81	PRO
1	27-A	363	PRO
1	27-A	462	SER
1	29-A	465	GLY
1	30-A	362	MET
1	32-A	465	GLY
1	33-A	363	PRO
1	33-A	436	THR
1	35-A	235	GLY
1	35-A	273	ASP
1	38-A	466	VAL
1	39-A	218	SER
1	1-A	15	ILE
1	1-A	122	ASN
1	40-A	459	ILE
1	4-A	329	PRO
1	16-A	465	GLY
1	20-A	122	ASN
1	23-A	317	PRO
1	25-A	103	GLY
1	33-A	459	ILE
1	34-A	317	PRO
1	43-A	465	GLY
1	9-A	404	GLY
1	16-A	81	PRO
1	20-A	101	ILE
1	21-A	329	PRO
1	22-A	520	GLY
1	34-A	438	GLY
1	36-A	439	THR
1	37-A	122	ASN
1	40-A	465	GLY
1	23-A	123	PRO
1	24-A	326	PRO
1	26-A	397	ILE
1	31-A	362	MET
1	34-A	67	PRO
1	39-A	397	ILE
1	18-A	397	ILE
1	27-A	439	THR
1	30-A	439	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	44-A	81	PRO

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	500/511 (98%)	440 (88%)	60 (12%)	5	1
1	2-A	500/511 (98%)	436 (87%)	64 (13%)	4	1
1	3-A	500/511 (98%)	439 (88%)	61 (12%)	5	1
1	4-A	500/511 (98%)	439 (88%)	61 (12%)	5	1
1	5-A	500/511 (98%)	436 (87%)	64 (13%)	4	1
1	6-A	500/511 (98%)	448 (90%)	52 (10%)	7	1
1	7-A	500/511 (98%)	444 (89%)	56 (11%)	6	1
1	8-A	500/511 (98%)	452 (90%)	48 (10%)	8	1
1	9-A	500/511 (98%)	443 (89%)	57 (11%)	5	1
1	10-A	500/511 (98%)	444 (89%)	56 (11%)	6	1
1	11-A	500/511 (98%)	449 (90%)	51 (10%)	7	1
1	12-A	500/511 (98%)	448 (90%)	52 (10%)	7	1
1	13-A	500/511 (98%)	445 (89%)	55 (11%)	6	1
1	14-A	500/511 (98%)	447 (89%)	53 (11%)	6	1
1	15-A	500/511 (98%)	444 (89%)	56 (11%)	6	1
1	16-A	500/511 (98%)	443 (89%)	57 (11%)	5	1
1	17-A	500/511 (98%)	439 (88%)	61 (12%)	5	1
1	18-A	500/511 (98%)	436 (87%)	64 (13%)	4	1
1	19-A	500/511 (98%)	442 (88%)	58 (12%)	5	1
1	20-A	500/511 (98%)	438 (88%)	62 (12%)	4	1
1	21-A	500/511 (98%)	443 (89%)	57 (11%)	5	1
1	22-A	500/511 (98%)	435 (87%)	65 (13%)	4	1
1	23-A	500/511 (98%)	434 (87%)	66 (13%)	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	24-A	500/511 (98%)	429 (86%)	71 (14%)	3	0
1	25-A	500/511 (98%)	440 (88%)	60 (12%)	5	1
1	26-A	500/511 (98%)	447 (89%)	53 (11%)	6	1
1	27-A	500/511 (98%)	436 (87%)	64 (13%)	4	1
1	28-A	500/511 (98%)	449 (90%)	51 (10%)	7	1
1	29-A	500/511 (98%)	438 (88%)	62 (12%)	4	1
1	30-A	500/511 (98%)	446 (89%)	54 (11%)	6	1
1	31-A	500/511 (98%)	448 (90%)	52 (10%)	7	1
1	32-A	500/511 (98%)	438 (88%)	62 (12%)	4	1
1	33-A	500/511 (98%)	453 (91%)	47 (9%)	8	1
1	34-A	500/511 (98%)	440 (88%)	60 (12%)	5	1
1	35-A	500/511 (98%)	446 (89%)	54 (11%)	6	1
1	36-A	500/511 (98%)	435 (87%)	65 (13%)	4	1
1	37-A	500/511 (98%)	436 (87%)	64 (13%)	4	1
1	38-A	500/511 (98%)	434 (87%)	66 (13%)	4	1
1	39-A	500/511 (98%)	429 (86%)	71 (14%)	3	0
1	40-A	500/511 (98%)	441 (88%)	59 (12%)	5	1
1	41-A	500/511 (98%)	444 (89%)	56 (11%)	6	1
1	42-A	500/511 (98%)	443 (89%)	57 (11%)	5	1
1	43-A	500/511 (98%)	435 (87%)	65 (13%)	4	1
1	44-A	500/511 (98%)	436 (87%)	64 (13%)	4	1
All	All	22000/22484 (98%)	19407 (88%)	2593 (12%)	5	1

All (2593) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	6	SER
1	1-A	7	LEU
1	1-A	14	LYS
1	1-A	19	GLU
1	1-A	21	LYS
1	1-A	26	ARG
1	1-A	27	LEU
1	1-A	36	GLU
1	1-A	43	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	77	GLN
1	1-A	92	LYS
1	1-A	104	LYS
1	1-A	121	LEU
1	1-A	124	GLU
1	1-A	125	THR
1	1-A	126	LYS
1	1-A	151	ASP
1	1-A	176	ASN
1	1-A	181	ASN
1	1-A	193	MET
1	1-A	218	SER
1	1-A	234	ARG
1	1-A	246	ASN
1	1-A	272	GLU
1	1-A	273	ASP
1	1-A	280	GLU
1	1-A	284	LYS
1	1-A	292	LYS
1	1-A	294	GLU
1	1-A	296	LYS
1	1-A	300	LEU
1	1-A	303	ARG
1	1-A	304	THR
1	1-A	308	MET
1	1-A	319	GLN
1	1-A	327	LYS
1	1-A	350	TYR
1	1-A	360	LYS
1	1-A	361	GLN
1	1-A	362	MET
1	1-A	367	LYS
1	1-A	373	VAL
1	1-A	386	THR
1	1-A	434	ASN
1	1-A	449	ASP
1	1-A	457	TYR
1	1-A	462	SER
1	1-A	464	ARG
1	1-A	489	LYS
1	1-A	504	TRP
1	1-A	516	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	517	GLU
1	1-A	523	ASN
1	1-A	525	SER
1	1-A	532	SER
1	1-A	533	ASP
1	1-A	537	LYS
1	1-A	545	LEU
1	1-A	557	LYS
1	1-A	565	LYS
1	2-A	7	LEU
1	2-A	8	MET
1	2-A	14	LYS
1	2-A	15	ILE
1	2-A	18	ILE
1	2-A	19	GLU
1	2-A	24	ASN
1	2-A	27	LEU
1	2-A	78	ARG
1	2-A	80	THR
1	2-A	92	LYS
1	2-A	93	ASP
1	2-A	100	PHE
1	2-A	104	LYS
1	2-A	121	LEU
1	2-A	125	THR
1	2-A	142	GLU
1	2-A	151	ASP
1	2-A	178	GLU
1	2-A	181	ASN
1	2-A	199	LYS
1	2-A	204	ASN
1	2-A	234	ARG
1	2-A	246	ASN
1	2-A	253	ASN
1	2-A	255	GLN
1	2-A	288	GLN
1	2-A	292	LYS
1	2-A	294	GLU
1	2-A	295	GLU
1	2-A	296	LYS
1	2-A	300	LEU
1	2-A	308	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	2-A	315	VAL
1	2-A	322	ASP
1	2-A	331	GLU
1	2-A	335	THR
1	2-A	350	TYR
1	2-A	360	LYS
1	2-A	361	GLN
1	2-A	373	VAL
1	2-A	389	GLU
1	2-A	392	GLU
1	2-A	405	GLU
1	2-A	431	LEU
1	2-A	434	ASN
1	2-A	436	THR
1	2-A	437	SER
1	2-A	457	TYR
1	2-A	460	MET
1	2-A	462	SER
1	2-A	467	LYS
1	2-A	485	LYS
1	2-A	489	LYS
1	2-A	504	TRP
1	2-A	515	SER
1	2-A	517	GLU
1	2-A	521	MET
1	2-A	522	GLU
1	2-A	525	SER
1	2-A	532	SER
1	2-A	537	LYS
1	2-A	544	GLU
1	2-A	565	LYS
1	3-A	9	GLU
1	3-A	14	LYS
1	3-A	18	ILE
1	3-A	20	ASN
1	3-A	21	LYS
1	3-A	37	THR
1	3-A	78	ARG
1	3-A	80	THR
1	3-A	92	LYS
1	3-A	93	ASP
1	3-A	100	PHE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	3-A	101	ILE
1	3-A	104	LYS
1	3-A	108	SER
1	3-A	125	THR
1	3-A	126	LYS
1	3-A	142	GLU
1	3-A	151	ASP
1	3-A	177	SER
1	3-A	181	ASN
1	3-A	193	MET
1	3-A	199	LYS
1	3-A	234	ARG
1	3-A	246	ASN
1	3-A	248	ILE
1	3-A	265	LYS
1	3-A	272	GLU
1	3-A	288	GLN
1	3-A	289	ASP
1	3-A	292	LYS
1	3-A	294	GLU
1	3-A	295	GLU
1	3-A	296	LYS
1	3-A	300	LEU
1	3-A	330	ARG
1	3-A	331	GLU
1	3-A	350	TYR
1	3-A	362	MET
1	3-A	370	GLU
1	3-A	373	VAL
1	3-A	405	GLU
1	3-A	410	ASP
1	3-A	434	ASN
1	3-A	437	SER
1	3-A	439	THR
1	3-A	451	GLU
1	3-A	458	ARG
1	3-A	460	MET
1	3-A	464	ARG
1	3-A	467	LYS
1	3-A	485	LYS
1	3-A	489	LYS
1	3-A	504	TRP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	3-A	517	GLU
1	3-A	531	LYS
1	3-A	532	SER
1	3-A	534	GLU
1	3-A	537	LYS
1	3-A	544	GLU
1	3-A	545	LEU
1	3-A	546	LYS
1	4-A	6	SER
1	4-A	14	LYS
1	4-A	36	GLU
1	4-A	38	GLU
1	4-A	43	LYS
1	4-A	65	GLN
1	4-A	74	LYS
1	4-A	78	ARG
1	4-A	90	ASN
1	4-A	93	ASP
1	4-A	100	PHE
1	4-A	102	THR
1	4-A	104	LYS
1	4-A	125	THR
1	4-A	142	GLU
1	4-A	151	ASP
1	4-A	155	LYS
1	4-A	181	ASN
1	4-A	193	MET
1	4-A	199	LYS
1	4-A	218	SER
1	4-A	231	GLU
1	4-A	246	ASN
1	4-A	248	ILE
1	4-A	272	GLU
1	4-A	274	ASN
1	4-A	276	LYS
1	4-A	288	GLN
1	4-A	292	LYS
1	4-A	294	GLU
1	4-A	295	GLU
1	4-A	300	LEU
1	4-A	304	THR
1	4-A	319	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	4-A	330	ARG
1	4-A	335	THR
1	4-A	356	THR
1	4-A	362	MET
1	4-A	365	LEU
1	4-A	367	LYS
1	4-A	373	VAL
1	4-A	378	SER
1	4-A	391	LEU
1	4-A	405	GLU
1	4-A	410	ASP
1	4-A	431	LEU
1	4-A	434	ASN
1	4-A	437	SER
1	4-A	452	ASP
1	4-A	461	ARG
1	4-A	466	VAL
1	4-A	467	LYS
1	4-A	485	LYS
1	4-A	489	LYS
1	4-A	495	LYS
1	4-A	504	TRP
1	4-A	517	GLU
1	4-A	522	GLU
1	4-A	525	SER
1	4-A	531	LYS
1	4-A	544	GLU
1	5-A	5	VAL
1	5-A	12	LYS
1	5-A	14	LYS
1	5-A	16	LYS
1	5-A	18	ILE
1	5-A	41	LYS
1	5-A	65	GLN
1	5-A	77	GLN
1	5-A	86	ARG
1	5-A	93	ASP
1	5-A	101	ILE
1	5-A	106	CYS
1	5-A	122	ASN
1	5-A	124	GLU
1	5-A	125	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	5-A	126	LYS
1	5-A	147	MET
1	5-A	151	ASP
1	5-A	177	SER
1	5-A	178	GLU
1	5-A	179	ASP
1	5-A	181	ASN
1	5-A	193	MET
1	5-A	231	GLU
1	5-A	234	ARG
1	5-A	246	ASN
1	5-A	253	ASN
1	5-A	274	ASN
1	5-A	292	LYS
1	5-A	294	GLU
1	5-A	303	ARG
1	5-A	319	GLN
1	5-A	327	LYS
1	5-A	328	HIS
1	5-A	335	THR
1	5-A	350	TYR
1	5-A	356	THR
1	5-A	358	ILE
1	5-A	362	MET
1	5-A	365	LEU
1	5-A	373	VAL
1	5-A	386	THR
1	5-A	389	GLU
1	5-A	425	MET
1	5-A	432	ARG
1	5-A	434	ASN
1	5-A	435	HIS
1	5-A	450	SER
1	5-A	452	ASP
1	5-A	464	ARG
1	5-A	466	VAL
1	5-A	489	LYS
1	5-A	495	LYS
1	5-A	504	TRP
1	5-A	517	GLU
1	5-A	521	MET
1	5-A	525	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	5-A	527	ASP
1	5-A	531	LYS
1	5-A	544	GLU
1	5-A	545	LEU
1	5-A	546	LYS
1	5-A	558	GLN
1	5-A	568	ASP
1	6-A	5	VAL
1	6-A	7	LEU
1	6-A	14	LYS
1	6-A	21	LYS
1	6-A	77	GLN
1	6-A	78	ARG
1	6-A	90	ASN
1	6-A	92	LYS
1	6-A	101	ILE
1	6-A	102	THR
1	6-A	106	CYS
1	6-A	121	LEU
1	6-A	122	ASN
1	6-A	124	GLU
1	6-A	147	MET
1	6-A	151	ASP
1	6-A	155	LYS
1	6-A	156	LYS
1	6-A	177	SER
1	6-A	193	MET
1	6-A	199	LYS
1	6-A	200	ASN
1	6-A	218	SER
1	6-A	234	ARG
1	6-A	253	ASN
1	6-A	272	GLU
1	6-A	288	GLN
1	6-A	303	ARG
1	6-A	319	GLN
1	6-A	328	HIS
1	6-A	332	MET
1	6-A	350	TYR
1	6-A	360	LYS
1	6-A	370	GLU
1	6-A	371	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	6-A	373	VAL
1	6-A	392	GLU
1	6-A	410	ASP
1	6-A	432	ARG
1	6-A	436	THR
1	6-A	462	SER
1	6-A	467	LYS
1	6-A	486	ARG
1	6-A	504	TRP
1	6-A	515	SER
1	6-A	516	ASN
1	6-A	517	GLU
1	6-A	523	ASN
1	6-A	533	ASP
1	6-A	543	ASP
1	6-A	545	LEU
1	6-A	568	ASP
1	7-A	5	VAL
1	7-A	6	SER
1	7-A	12	LYS
1	7-A	14	LYS
1	7-A	65	GLN
1	7-A	78	ARG
1	7-A	80	THR
1	7-A	85	VAL
1	7-A	93	ASP
1	7-A	102	THR
1	7-A	121	LEU
1	7-A	122	ASN
1	7-A	142	GLU
1	7-A	151	ASP
1	7-A	156	LYS
1	7-A	193	MET
1	7-A	199	LYS
1	7-A	211	ASN
1	7-A	253	ASN
1	7-A	256	CYS
1	7-A	284	LYS
1	7-A	288	GLN
1	7-A	289	ASP
1	7-A	296	LYS
1	7-A	300	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	7-A	306	LYS
1	7-A	319	GLN
1	7-A	320	THR
1	7-A	322	ASP
1	7-A	323	CYS
1	7-A	324	VAL
1	7-A	327	LYS
1	7-A	329	PRO
1	7-A	335	THR
1	7-A	357	SER
1	7-A	361	GLN
1	7-A	362	MET
1	7-A	364	LEU
1	7-A	365	LEU
1	7-A	367	LYS
1	7-A	371	THR
1	7-A	373	VAL
1	7-A	378	SER
1	7-A	431	LEU
1	7-A	460	MET
1	7-A	464	ARG
1	7-A	485	LYS
1	7-A	486	ARG
1	7-A	489	LYS
1	7-A	504	TRP
1	7-A	521	MET
1	7-A	523	ASN
1	7-A	534	GLU
1	7-A	545	LEU
1	7-A	546	LYS
1	7-A	558	GLN
1	8-A	6	SER
1	8-A	12	LYS
1	8-A	15	ILE
1	8-A	18	ILE
1	8-A	33	VAL
1	8-A	37	THR
1	8-A	65	GLN
1	8-A	100	PHE
1	8-A	121	LEU
1	8-A	122	ASN
1	8-A	124	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	8-A	125	THR
1	8-A	142	GLU
1	8-A	151	ASP
1	8-A	156	LYS
1	8-A	181	ASN
1	8-A	193	MET
1	8-A	199	LYS
1	8-A	253	ASN
1	8-A	280	GLU
1	8-A	289	ASP
1	8-A	296	LYS
1	8-A	306	LYS
1	8-A	322	ASP
1	8-A	332	MET
1	8-A	361	GLN
1	8-A	362	MET
1	8-A	367	LYS
1	8-A	371	THR
1	8-A	373	VAL
1	8-A	392	GLU
1	8-A	437	SER
1	8-A	439	THR
1	8-A	460	MET
1	8-A	461	ARG
1	8-A	464	ARG
1	8-A	486	ARG
1	8-A	489	LYS
1	8-A	490	GLU
1	8-A	504	TRP
1	8-A	516	ASN
1	8-A	519	GLU
1	8-A	521	MET
1	8-A	525	SER
1	8-A	530	GLU
1	8-A	545	LEU
1	8-A	565	LYS
1	8-A	568	ASP
1	9-A	20	ASN
1	9-A	26	ARG
1	9-A	43	LYS
1	9-A	65	GLN
1	9-A	78	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	9-A	87	ASP
1	9-A	100	PHE
1	9-A	104	LYS
1	9-A	108	SER
1	9-A	121	LEU
1	9-A	122	ASN
1	9-A	124	GLU
1	9-A	146	ASP
1	9-A	147	MET
1	9-A	151	ASP
1	9-A	155	LYS
1	9-A	179	ASP
1	9-A	193	MET
1	9-A	199	LYS
1	9-A	234	ARG
1	9-A	258	HIS
1	9-A	280	GLU
1	9-A	284	LYS
1	9-A	289	ASP
1	9-A	295	GLU
1	9-A	296	LYS
1	9-A	306	LYS
1	9-A	320	THR
1	9-A	329	PRO
1	9-A	332	MET
1	9-A	334	LYS
1	9-A	350	TYR
1	9-A	356	THR
1	9-A	357	SER
1	9-A	359	LEU
1	9-A	362	MET
1	9-A	363	PRO
1	9-A	364	LEU
1	9-A	365	LEU
1	9-A	367	LYS
1	9-A	373	VAL
1	9-A	385	ARG
1	9-A	392	GLU
1	9-A	435	HIS
1	9-A	464	ARG
1	9-A	489	LYS
1	9-A	504	TRP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	9-A	517	GLU
1	9-A	519	GLU
1	9-A	521	MET
1	9-A	525	SER
1	9-A	530	GLU
1	9-A	531	LYS
1	9-A	532	SER
1	9-A	544	GLU
1	9-A	545	LEU
1	9-A	558	GLN
1	10-A	5	VAL
1	10-A	6	SER
1	10-A	10	LYS
1	10-A	22	PHE
1	10-A	33	VAL
1	10-A	65	GLN
1	10-A	93	ASP
1	10-A	100	PHE
1	10-A	121	LEU
1	10-A	125	THR
1	10-A	142	GLU
1	10-A	147	MET
1	10-A	151	ASP
1	10-A	155	LYS
1	10-A	193	MET
1	10-A	210	ASP
1	10-A	248	ILE
1	10-A	288	GLN
1	10-A	296	LYS
1	10-A	300	LEU
1	10-A	304	THR
1	10-A	306	LYS
1	10-A	314	THR
1	10-A	319	GLN
1	10-A	320	THR
1	10-A	324	VAL
1	10-A	328	HIS
1	10-A	335	THR
1	10-A	350	TYR
1	10-A	354	PHE
1	10-A	358	ILE
1	10-A	360	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	10-A	364	LEU
1	10-A	367	LYS
1	10-A	370	GLU
1	10-A	392	GLU
1	10-A	393	MET
1	10-A	411	ASN
1	10-A	435	HIS
1	10-A	437	SER
1	10-A	439	THR
1	10-A	450	SER
1	10-A	466	VAL
1	10-A	467	LYS
1	10-A	485	LYS
1	10-A	486	ARG
1	10-A	489	LYS
1	10-A	494	TYR
1	10-A	504	TRP
1	10-A	518	ILE
1	10-A	519	GLU
1	10-A	521	MET
1	10-A	522	GLU
1	10-A	525	SER
1	10-A	530	GLU
1	10-A	545	LEU
1	11-A	6	SER
1	11-A	12	LYS
1	11-A	14	LYS
1	11-A	19	GLU
1	11-A	65	GLN
1	11-A	70	GLU
1	11-A	74	LYS
1	11-A	80	THR
1	11-A	100	PHE
1	11-A	101	ILE
1	11-A	104	LYS
1	11-A	121	LEU
1	11-A	122	ASN
1	11-A	142	GLU
1	11-A	151	ASP
1	11-A	155	LYS
1	11-A	156	LYS
1	11-A	177	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	11-A	178	GLU
1	11-A	179	ASP
1	11-A	248	ILE
1	11-A	288	GLN
1	11-A	295	GLU
1	11-A	300	LEU
1	11-A	303	ARG
1	11-A	304	THR
1	11-A	306	LYS
1	11-A	320	THR
1	11-A	327	LYS
1	11-A	330	ARG
1	11-A	358	ILE
1	11-A	360	LYS
1	11-A	361	GLN
1	11-A	365	LEU
1	11-A	386	THR
1	11-A	389	GLU
1	11-A	392	GLU
1	11-A	410	ASP
1	11-A	431	LEU
1	11-A	439	THR
1	11-A	451	GLU
1	11-A	460	MET
1	11-A	464	ARG
1	11-A	486	ARG
1	11-A	489	LYS
1	11-A	490	GLU
1	11-A	504	TRP
1	11-A	519	GLU
1	11-A	522	GLU
1	11-A	544	GLU
1	11-A	545	LEU
1	12-A	6	SER
1	12-A	12	LYS
1	12-A	18	ILE
1	12-A	21	LYS
1	12-A	37	THR
1	12-A	65	GLN
1	12-A	91	HIS
1	12-A	100	PHE
1	12-A	104	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	12-A	120	ASN
1	12-A	124	GLU
1	12-A	125	THR
1	12-A	126	LYS
1	12-A	151	ASP
1	12-A	155	LYS
1	12-A	204	ASN
1	12-A	234	ARG
1	12-A	236	LEU
1	12-A	253	ASN
1	12-A	295	GLU
1	12-A	300	LEU
1	12-A	306	LYS
1	12-A	320	THR
1	12-A	330	ARG
1	12-A	332	MET
1	12-A	334	LYS
1	12-A	350	TYR
1	12-A	356	THR
1	12-A	358	ILE
1	12-A	360	LYS
1	12-A	361	GLN
1	12-A	364	LEU
1	12-A	365	LEU
1	12-A	367	LYS
1	12-A	373	VAL
1	12-A	384	GLU
1	12-A	392	GLU
1	12-A	393	MET
1	12-A	406	THR
1	12-A	410	ASP
1	12-A	435	HIS
1	12-A	439	THR
1	12-A	451	GLU
1	12-A	464	ARG
1	12-A	504	TRP
1	12-A	515	SER
1	12-A	521	MET
1	12-A	533	ASP
1	12-A	537	LYS
1	12-A	543	ASP
1	12-A	564	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	12-A	568	ASP
1	13-A	12	LYS
1	13-A	21	LYS
1	13-A	22	PHE
1	13-A	26	ARG
1	13-A	80	THR
1	13-A	87	ASP
1	13-A	93	ASP
1	13-A	100	PHE
1	13-A	106	CYS
1	13-A	120	ASN
1	13-A	121	LEU
1	13-A	125	THR
1	13-A	126	LYS
1	13-A	142	GLU
1	13-A	147	MET
1	13-A	151	ASP
1	13-A	155	LYS
1	13-A	178	GLU
1	13-A	193	MET
1	13-A	199	LYS
1	13-A	200	ASN
1	13-A	204	ASN
1	13-A	210	ASP
1	13-A	234	ARG
1	13-A	248	ILE
1	13-A	253	ASN
1	13-A	258	HIS
1	13-A	286	LYS
1	13-A	288	GLN
1	13-A	303	ARG
1	13-A	306	LYS
1	13-A	320	THR
1	13-A	324	VAL
1	13-A	334	LYS
1	13-A	350	TYR
1	13-A	358	ILE
1	13-A	362	MET
1	13-A	367	LYS
1	13-A	370	GLU
1	13-A	373	VAL
1	13-A	392	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	13-A	410	ASP
1	13-A	434	ASN
1	13-A	435	HIS
1	13-A	437	SER
1	13-A	461	ARG
1	13-A	490	GLU
1	13-A	504	TRP
1	13-A	525	SER
1	13-A	530	GLU
1	13-A	532	SER
1	13-A	537	LYS
1	13-A	544	GLU
1	13-A	557	LYS
1	13-A	568	ASP
1	14-A	5	VAL
1	14-A	6	SER
1	14-A	12	LYS
1	14-A	21	LYS
1	14-A	22	PHE
1	14-A	33	VAL
1	14-A	36	GLU
1	14-A	53	ASP
1	14-A	68	VAL
1	14-A	93	ASP
1	14-A	106	CYS
1	14-A	120	ASN
1	14-A	121	LEU
1	14-A	126	LYS
1	14-A	142	GLU
1	14-A	151	ASP
1	14-A	155	LYS
1	14-A	178	GLU
1	14-A	201	ASN
1	14-A	211	ASN
1	14-A	215	PHE
1	14-A	246	ASN
1	14-A	280	GLU
1	14-A	288	GLN
1	14-A	292	LYS
1	14-A	300	LEU
1	14-A	305	ASN
1	14-A	306	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	14-A	308	MET
1	14-A	322	ASP
1	14-A	324	VAL
1	14-A	350	TYR
1	14-A	357	SER
1	14-A	362	MET
1	14-A	368	GLU
1	14-A	373	VAL
1	14-A	392	GLU
1	14-A	399	LYS
1	14-A	406	THR
1	14-A	431	LEU
1	14-A	439	THR
1	14-A	460	MET
1	14-A	462	SER
1	14-A	467	LYS
1	14-A	482	GLN
1	14-A	485	LYS
1	14-A	504	TRP
1	14-A	516	ASN
1	14-A	521	MET
1	14-A	525	SER
1	14-A	537	LYS
1	14-A	564	GLU
1	14-A	565	LYS
1	15-A	5	VAL
1	15-A	11	LEU
1	15-A	12	LYS
1	15-A	14	LYS
1	15-A	21	LYS
1	15-A	22	PHE
1	15-A	33	VAL
1	15-A	57	SER
1	15-A	77	GLN
1	15-A	78	ARG
1	15-A	101	ILE
1	15-A	104	LYS
1	15-A	120	ASN
1	15-A	121	LEU
1	15-A	122	ASN
1	15-A	125	THR
1	15-A	126	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	15-A	151	ASP
1	15-A	199	LYS
1	15-A	211	ASN
1	15-A	218	SER
1	15-A	248	ILE
1	15-A	253	ASN
1	15-A	258	HIS
1	15-A	272	GLU
1	15-A	288	GLN
1	15-A	294	GLU
1	15-A	300	LEU
1	15-A	306	LYS
1	15-A	308	MET
1	15-A	322	ASP
1	15-A	324	VAL
1	15-A	327	LYS
1	15-A	330	ARG
1	15-A	335	THR
1	15-A	350	TYR
1	15-A	361	GLN
1	15-A	365	LEU
1	15-A	392	GLU
1	15-A	399	LYS
1	15-A	403	THR
1	15-A	434	ASN
1	15-A	451	GLU
1	15-A	458	ARG
1	15-A	460	MET
1	15-A	461	ARG
1	15-A	464	ARG
1	15-A	467	LYS
1	15-A	504	TRP
1	15-A	516	ASN
1	15-A	517	GLU
1	15-A	518	ILE
1	15-A	534	GLU
1	15-A	537	LYS
1	15-A	546	LYS
1	15-A	565	LYS
1	16-A	6	SER
1	16-A	11	LEU
1	16-A	12	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	16-A	14	LYS
1	16-A	21	LYS
1	16-A	22	PHE
1	16-A	26	ARG
1	16-A	34	VAL
1	16-A	77	GLN
1	16-A	91	HIS
1	16-A	93	ASP
1	16-A	101	ILE
1	16-A	102	THR
1	16-A	104	LYS
1	16-A	120	ASN
1	16-A	122	ASN
1	16-A	126	LYS
1	16-A	142	GLU
1	16-A	151	ASP
1	16-A	193	MET
1	16-A	199	LYS
1	16-A	234	ARG
1	16-A	258	HIS
1	16-A	288	GLN
1	16-A	294	GLU
1	16-A	295	GLU
1	16-A	306	LYS
1	16-A	327	LYS
1	16-A	329	PRO
1	16-A	330	ARG
1	16-A	334	LYS
1	16-A	335	THR
1	16-A	350	TYR
1	16-A	358	ILE
1	16-A	361	GLN
1	16-A	364	LEU
1	16-A	368	GLU
1	16-A	371	THR
1	16-A	373	VAL
1	16-A	385	ARG
1	16-A	386	THR
1	16-A	437	SER
1	16-A	439	THR
1	16-A	451	GLU
1	16-A	460	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	16-A	462	SER
1	16-A	466	VAL
1	16-A	467	LYS
1	16-A	489	LYS
1	16-A	504	TRP
1	16-A	518	ILE
1	16-A	525	SER
1	16-A	532	SER
1	16-A	534	GLU
1	16-A	543	ASP
1	16-A	546	LYS
1	16-A	565	LYS
1	17-A	5	VAL
1	17-A	11	LEU
1	17-A	12	LYS
1	17-A	14	LYS
1	17-A	18	ILE
1	17-A	21	LYS
1	17-A	22	PHE
1	17-A	26	ARG
1	17-A	65	GLN
1	17-A	74	LYS
1	17-A	77	GLN
1	17-A	78	ARG
1	17-A	80	THR
1	17-A	99	ASP
1	17-A	100	PHE
1	17-A	101	ILE
1	17-A	120	ASN
1	17-A	124	GLU
1	17-A	125	THR
1	17-A	126	LYS
1	17-A	147	MET
1	17-A	151	ASP
1	17-A	155	LYS
1	17-A	177	SER
1	17-A	218	SER
1	17-A	234	ARG
1	17-A	253	ASN
1	17-A	284	LYS
1	17-A	286	LYS
1	17-A	288	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	17-A	294	GLU
1	17-A	300	LEU
1	17-A	305	ASN
1	17-A	308	MET
1	17-A	328	HIS
1	17-A	330	ARG
1	17-A	334	LYS
1	17-A	335	THR
1	17-A	350	TYR
1	17-A	358	ILE
1	17-A	363	PRO
1	17-A	364	LEU
1	17-A	365	LEU
1	17-A	367	LYS
1	17-A	371	THR
1	17-A	373	VAL
1	17-A	378	SER
1	17-A	407	PRO
1	17-A	431	LEU
1	17-A	435	HIS
1	17-A	451	GLU
1	17-A	466	VAL
1	17-A	467	LYS
1	17-A	489	LYS
1	17-A	504	TRP
1	17-A	505	THR
1	17-A	525	SER
1	17-A	532	SER
1	17-A	534	GLU
1	17-A	564	GLU
1	17-A	568	ASP
1	18-A	6	SER
1	18-A	8	MET
1	18-A	12	LYS
1	18-A	14	LYS
1	18-A	18	ILE
1	18-A	20	ASN
1	18-A	21	LYS
1	18-A	22	PHE
1	18-A	26	ARG
1	18-A	41	LYS
1	18-A	46	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	18-A	74	LYS
1	18-A	77	GLN
1	18-A	80	THR
1	18-A	86	ARG
1	18-A	100	PHE
1	18-A	118	THR
1	18-A	120	ASN
1	18-A	124	GLU
1	18-A	142	GLU
1	18-A	151	ASP
1	18-A	211	ASN
1	18-A	218	SER
1	18-A	270	LYS
1	18-A	276	LYS
1	18-A	284	LYS
1	18-A	286	LYS
1	18-A	288	GLN
1	18-A	323	CYS
1	18-A	329	PRO
1	18-A	334	LYS
1	18-A	350	TYR
1	18-A	356	THR
1	18-A	358	ILE
1	18-A	360	LYS
1	18-A	362	MET
1	18-A	365	LEU
1	18-A	368	GLU
1	18-A	370	GLU
1	18-A	371	THR
1	18-A	373	VAL
1	18-A	384	GLU
1	18-A	389	GLU
1	18-A	392	GLU
1	18-A	406	THR
1	18-A	410	ASP
1	18-A	431	LEU
1	18-A	432	ARG
1	18-A	435	HIS
1	18-A	436	THR
1	18-A	437	SER
1	18-A	461	ARG
1	18-A	485	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	18-A	490	GLU
1	18-A	499	ARG
1	18-A	504	TRP
1	18-A	521	MET
1	18-A	522	GLU
1	18-A	530	GLU
1	18-A	532	SER
1	18-A	546	LYS
1	18-A	557	LYS
1	18-A	558	GLN
1	18-A	568	ASP
1	19-A	5	VAL
1	19-A	7	LEU
1	19-A	8	MET
1	19-A	12	LYS
1	19-A	15	ILE
1	19-A	21	LYS
1	19-A	22	PHE
1	19-A	26	ARG
1	19-A	77	GLN
1	19-A	87	ASP
1	19-A	90	ASN
1	19-A	93	ASP
1	19-A	101	ILE
1	19-A	102	THR
1	19-A	106	CYS
1	19-A	120	ASN
1	19-A	121	LEU
1	19-A	142	GLU
1	19-A	151	ASP
1	19-A	177	SER
1	19-A	178	GLU
1	19-A	179	ASP
1	19-A	201	ASN
1	19-A	211	ASN
1	19-A	236	LEU
1	19-A	284	LYS
1	19-A	286	LYS
1	19-A	288	GLN
1	19-A	291	ILE
1	19-A	295	GLU
1	19-A	305	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	19-A	322	ASP
1	19-A	329	PRO
1	19-A	330	ARG
1	19-A	332	MET
1	19-A	334	LYS
1	19-A	340	SER
1	19-A	350	TYR
1	19-A	364	LEU
1	19-A	370	GLU
1	19-A	373	VAL
1	19-A	389	GLU
1	19-A	406	THR
1	19-A	410	ASP
1	19-A	434	ASN
1	19-A	450	SER
1	19-A	461	ARG
1	19-A	464	ARG
1	19-A	489	LYS
1	19-A	490	GLU
1	19-A	504	TRP
1	19-A	521	MET
1	19-A	525	SER
1	19-A	532	SER
1	19-A	537	LYS
1	19-A	544	GLU
1	19-A	546	LYS
1	19-A	567	ARG
1	20-A	7	LEU
1	20-A	8	MET
1	20-A	12	LYS
1	20-A	15	ILE
1	20-A	21	LYS
1	20-A	37	THR
1	20-A	77	GLN
1	20-A	87	ASP
1	20-A	102	THR
1	20-A	120	ASN
1	20-A	122	ASN
1	20-A	124	GLU
1	20-A	125	THR
1	20-A	142	GLU
1	20-A	151	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	20-A	155	LYS
1	20-A	156	LYS
1	20-A	163	ILE
1	20-A	189	LYS
1	20-A	199	LYS
1	20-A	218	SER
1	20-A	232	GLN
1	20-A	236	LEU
1	20-A	253	ASN
1	20-A	255	GLN
1	20-A	270	LYS
1	20-A	288	GLN
1	20-A	294	GLU
1	20-A	300	LEU
1	20-A	304	THR
1	20-A	308	MET
1	20-A	322	ASP
1	20-A	327	LYS
1	20-A	330	ARG
1	20-A	334	LYS
1	20-A	335	THR
1	20-A	350	TYR
1	20-A	358	ILE
1	20-A	360	LYS
1	20-A	364	LEU
1	20-A	365	LEU
1	20-A	370	GLU
1	20-A	373	VAL
1	20-A	393	MET
1	20-A	410	ASP
1	20-A	433	PHE
1	20-A	434	ASN
1	20-A	437	SER
1	20-A	451	GLU
1	20-A	462	SER
1	20-A	464	ARG
1	20-A	485	LYS
1	20-A	498	GLU
1	20-A	504	TRP
1	20-A	505	THR
1	20-A	512	ASN
1	20-A	516	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	20-A	523	ASN
1	20-A	527	ASP
1	20-A	530	GLU
1	20-A	544	GLU
1	20-A	546	LYS
1	21-A	6	SER
1	21-A	8	MET
1	21-A	10	LYS
1	21-A	14	LYS
1	21-A	20	ASN
1	21-A	34	VAL
1	21-A	65	GLN
1	21-A	80	THR
1	21-A	91	HIS
1	21-A	93	ASP
1	21-A	99	ASP
1	21-A	100	PHE
1	21-A	101	ILE
1	21-A	102	THR
1	21-A	120	ASN
1	21-A	122	ASN
1	21-A	124	GLU
1	21-A	142	GLU
1	21-A	147	MET
1	21-A	151	ASP
1	21-A	155	LYS
1	21-A	178	GLU
1	21-A	179	ASP
1	21-A	210	ASP
1	21-A	234	ARG
1	21-A	236	LEU
1	21-A	253	ASN
1	21-A	255	GLN
1	21-A	276	LYS
1	21-A	288	GLN
1	21-A	300	LEU
1	21-A	322	ASP
1	21-A	323	CYS
1	21-A	330	ARG
1	21-A	331	GLU
1	21-A	334	LYS
1	21-A	356	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	21-A	358	ILE
1	21-A	360	LYS
1	21-A	361	GLN
1	21-A	362	MET
1	21-A	436	THR
1	21-A	437	SER
1	21-A	439	THR
1	21-A	460	MET
1	21-A	461	ARG
1	21-A	464	ARG
1	21-A	485	LYS
1	21-A	489	LYS
1	21-A	504	TRP
1	21-A	505	THR
1	21-A	521	MET
1	21-A	525	SER
1	21-A	530	GLU
1	21-A	537	LYS
1	21-A	544	GLU
1	21-A	564	GLU
1	22-A	5	VAL
1	22-A	7	LEU
1	22-A	8	MET
1	22-A	20	ASN
1	22-A	21	LYS
1	22-A	26	ARG
1	22-A	33	VAL
1	22-A	36	GLU
1	22-A	38	GLU
1	22-A	77	GLN
1	22-A	86	ARG
1	22-A	101	ILE
1	22-A	106	CYS
1	22-A	121	LEU
1	22-A	122	ASN
1	22-A	126	LYS
1	22-A	142	GLU
1	22-A	151	ASP
1	22-A	155	LYS
1	22-A	163	ILE
1	22-A	181	ASN
1	22-A	193	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	22-A	211	ASN
1	22-A	218	SER
1	22-A	234	ARG
1	22-A	253	ASN
1	22-A	255	GLN
1	22-A	272	GLU
1	22-A	284	LYS
1	22-A	294	GLU
1	22-A	300	LEU
1	22-A	304	THR
1	22-A	306	LYS
1	22-A	324	VAL
1	22-A	327	LYS
1	22-A	330	ARG
1	22-A	331	GLU
1	22-A	334	LYS
1	22-A	335	THR
1	22-A	350	TYR
1	22-A	356	THR
1	22-A	361	GLN
1	22-A	364	LEU
1	22-A	365	LEU
1	22-A	370	GLU
1	22-A	373	VAL
1	22-A	386	THR
1	22-A	392	GLU
1	22-A	425	MET
1	22-A	431	LEU
1	22-A	434	ASN
1	22-A	437	SER
1	22-A	439	THR
1	22-A	458	ARG
1	22-A	460	MET
1	22-A	461	ARG
1	22-A	464	ARG
1	22-A	485	LYS
1	22-A	504	TRP
1	22-A	515	SER
1	22-A	519	GLU
1	22-A	521	MET
1	22-A	531	LYS
1	22-A	537	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	22-A	557	LYS
1	23-A	7	LEU
1	23-A	8	MET
1	23-A	12	LYS
1	23-A	20	ASN
1	23-A	21	LYS
1	23-A	26	ARG
1	23-A	36	GLU
1	23-A	46	LYS
1	23-A	65	GLN
1	23-A	78	ARG
1	23-A	93	ASP
1	23-A	104	LYS
1	23-A	120	ASN
1	23-A	122	ASN
1	23-A	125	THR
1	23-A	126	LYS
1	23-A	142	GLU
1	23-A	151	ASP
1	23-A	156	LYS
1	23-A	163	ILE
1	23-A	234	ARG
1	23-A	253	ASN
1	23-A	255	GLN
1	23-A	272	GLU
1	23-A	284	LYS
1	23-A	289	ASP
1	23-A	300	LEU
1	23-A	305	ASN
1	23-A	308	MET
1	23-A	322	ASP
1	23-A	324	VAL
1	23-A	327	LYS
1	23-A	330	ARG
1	23-A	334	LYS
1	23-A	350	TYR
1	23-A	356	THR
1	23-A	358	ILE
1	23-A	361	GLN
1	23-A	365	LEU
1	23-A	367	LYS
1	23-A	371	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	23-A	384	GLU
1	23-A	385	ARG
1	23-A	406	THR
1	23-A	425	MET
1	23-A	431	LEU
1	23-A	439	THR
1	23-A	441	VAL
1	23-A	458	ARG
1	23-A	459	ILE
1	23-A	460	MET
1	23-A	461	ARG
1	23-A	462	SER
1	23-A	464	ARG
1	23-A	467	LYS
1	23-A	485	LYS
1	23-A	489	LYS
1	23-A	490	GLU
1	23-A	504	TRP
1	23-A	516	ASN
1	23-A	517	GLU
1	23-A	519	GLU
1	23-A	521	MET
1	23-A	525	SER
1	23-A	537	LYS
1	23-A	544	GLU
1	24-A	7	LEU
1	24-A	8	MET
1	24-A	9	GLU
1	24-A	12	LYS
1	24-A	15	ILE
1	24-A	16	LYS
1	24-A	19	GLU
1	24-A	20	ASN
1	24-A	21	LYS
1	24-A	36	GLU
1	24-A	37	THR
1	24-A	65	GLN
1	24-A	78	ARG
1	24-A	80	THR
1	24-A	86	ARG
1	24-A	90	ASN
1	24-A	91	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	24-A	92	LYS
1	24-A	93	ASP
1	24-A	100	PHE
1	24-A	101	ILE
1	24-A	104	LYS
1	24-A	106	CYS
1	24-A	120	ASN
1	24-A	125	THR
1	24-A	126	LYS
1	24-A	147	MET
1	24-A	151	ASP
1	24-A	163	ILE
1	24-A	179	ASP
1	24-A	193	MET
1	24-A	209	PRO
1	24-A	211	ASN
1	24-A	215	PHE
1	24-A	234	ARG
1	24-A	253	ASN
1	24-A	255	GLN
1	24-A	274	ASN
1	24-A	284	LYS
1	24-A	294	GLU
1	24-A	300	LEU
1	24-A	308	MET
1	24-A	319	GLN
1	24-A	323	CYS
1	24-A	327	LYS
1	24-A	329	PRO
1	24-A	330	ARG
1	24-A	340	SER
1	24-A	350	TYR
1	24-A	357	SER
1	24-A	358	ILE
1	24-A	361	GLN
1	24-A	362	MET
1	24-A	365	LEU
1	24-A	371	THR
1	24-A	373	VAL
1	24-A	451	GLU
1	24-A	460	MET
1	24-A	464	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	24-A	467	LYS
1	24-A	504	TRP
1	24-A	516	ASN
1	24-A	521	MET
1	24-A	525	SER
1	24-A	527	ASP
1	24-A	531	LYS
1	24-A	534	GLU
1	24-A	537	LYS
1	24-A	564	GLU
1	24-A	565	LYS
1	24-A	568	ASP
1	25-A	7	LEU
1	25-A	8	MET
1	25-A	9	GLU
1	25-A	12	LYS
1	25-A	21	LYS
1	25-A	26	ARG
1	25-A	74	LYS
1	25-A	78	ARG
1	25-A	87	ASP
1	25-A	90	ASN
1	25-A	92	LYS
1	25-A	100	PHE
1	25-A	101	ILE
1	25-A	104	LYS
1	25-A	120	ASN
1	25-A	123	PRO
1	25-A	125	THR
1	25-A	126	LYS
1	25-A	142	GLU
1	25-A	147	MET
1	25-A	151	ASP
1	25-A	155	LYS
1	25-A	163	ILE
1	25-A	178	GLU
1	25-A	181	ASN
1	25-A	199	LYS
1	25-A	215	PHE
1	25-A	231	GLU
1	25-A	236	LEU
1	25-A	284	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	25-A	300	LEU
1	25-A	308	MET
1	25-A	319	GLN
1	25-A	327	LYS
1	25-A	328	HIS
1	25-A	330	ARG
1	25-A	334	LYS
1	25-A	339	ASN
1	25-A	340	SER
1	25-A	350	TYR
1	25-A	357	SER
1	25-A	362	MET
1	25-A	373	VAL
1	25-A	389	GLU
1	25-A	405	GLU
1	25-A	411	ASN
1	25-A	432	ARG
1	25-A	439	THR
1	25-A	461	ARG
1	25-A	467	LYS
1	25-A	485	LYS
1	25-A	489	LYS
1	25-A	490	GLU
1	25-A	504	TRP
1	25-A	515	SER
1	25-A	517	GLU
1	25-A	519	GLU
1	25-A	532	SER
1	25-A	537	LYS
1	25-A	564	GLU
1	26-A	7	LEU
1	26-A	9	GLU
1	26-A	12	LYS
1	26-A	14	LYS
1	26-A	21	LYS
1	26-A	26	ARG
1	26-A	31	GLU
1	26-A	34	VAL
1	26-A	38	GLU
1	26-A	65	GLN
1	26-A	78	ARG
1	26-A	80	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	26-A	87	ASP
1	26-A	100	PHE
1	26-A	104	LYS
1	26-A	120	ASN
1	26-A	125	THR
1	26-A	126	LYS
1	26-A	142	GLU
1	26-A	151	ASP
1	26-A	155	LYS
1	26-A	163	ILE
1	26-A	176	ASN
1	26-A	193	MET
1	26-A	234	ARG
1	26-A	284	LYS
1	26-A	288	GLN
1	26-A	292	LYS
1	26-A	308	MET
1	26-A	320	THR
1	26-A	324	VAL
1	26-A	327	LYS
1	26-A	335	THR
1	26-A	350	TYR
1	26-A	371	THR
1	26-A	378	SER
1	26-A	405	GLU
1	26-A	435	HIS
1	26-A	436	THR
1	26-A	439	THR
1	26-A	459	ILE
1	26-A	462	SER
1	26-A	485	LYS
1	26-A	489	LYS
1	26-A	490	GLU
1	26-A	504	TRP
1	26-A	516	ASN
1	26-A	517	GLU
1	26-A	519	GLU
1	26-A	521	MET
1	26-A	531	LYS
1	26-A	537	LYS
1	26-A	568	ASP
1	27-A	6	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	27-A	7	LEU
1	27-A	8	MET
1	27-A	9	GLU
1	27-A	10	LYS
1	27-A	14	LYS
1	27-A	65	GLN
1	27-A	78	ARG
1	27-A	87	ASP
1	27-A	92	LYS
1	27-A	99	ASP
1	27-A	100	PHE
1	27-A	101	ILE
1	27-A	102	THR
1	27-A	104	LYS
1	27-A	120	ASN
1	27-A	121	LEU
1	27-A	122	ASN
1	27-A	125	THR
1	27-A	126	LYS
1	27-A	151	ASP
1	27-A	155	LYS
1	27-A	156	LYS
1	27-A	163	ILE
1	27-A	176	ASN
1	27-A	179	ASP
1	27-A	215	PHE
1	27-A	234	ARG
1	27-A	248	ILE
1	27-A	253	ASN
1	27-A	258	HIS
1	27-A	272	GLU
1	27-A	276	LYS
1	27-A	288	GLN
1	27-A	292	LYS
1	27-A	294	GLU
1	27-A	304	THR
1	27-A	308	MET
1	27-A	322	ASP
1	27-A	327	LYS
1	27-A	335	THR
1	27-A	356	THR
1	27-A	357	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	27-A	358	ILE
1	27-A	362	MET
1	27-A	378	SER
1	27-A	389	GLU
1	27-A	406	THR
1	27-A	431	LEU
1	27-A	432	ARG
1	27-A	436	THR
1	27-A	461	ARG
1	27-A	464	ARG
1	27-A	467	LYS
1	27-A	494	TYR
1	27-A	498	GLU
1	27-A	504	TRP
1	27-A	515	SER
1	27-A	521	MET
1	27-A	523	ASN
1	27-A	530	GLU
1	27-A	531	LYS
1	27-A	532	SER
1	27-A	565	LYS
1	28-A	5	VAL
1	28-A	8	MET
1	28-A	10	LYS
1	28-A	14	LYS
1	28-A	15	ILE
1	28-A	26	ARG
1	28-A	46	LYS
1	28-A	78	ARG
1	28-A	86	ARG
1	28-A	91	HIS
1	28-A	92	LYS
1	28-A	93	ASP
1	28-A	101	ILE
1	28-A	106	CYS
1	28-A	120	ASN
1	28-A	122	ASN
1	28-A	125	THR
1	28-A	126	LYS
1	28-A	142	GLU
1	28-A	151	ASP
1	28-A	155	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	28-A	163	ILE
1	28-A	178	GLU
1	28-A	199	LYS
1	28-A	200	ASN
1	28-A	210	ASP
1	28-A	234	ARG
1	28-A	273	ASP
1	28-A	288	GLN
1	28-A	289	ASP
1	28-A	292	LYS
1	28-A	294	GLU
1	28-A	330	ARG
1	28-A	350	TYR
1	28-A	358	ILE
1	28-A	362	MET
1	28-A	392	GLU
1	28-A	410	ASP
1	28-A	431	LEU
1	28-A	434	ASN
1	28-A	436	THR
1	28-A	439	THR
1	28-A	461	ARG
1	28-A	467	LYS
1	28-A	485	LYS
1	28-A	489	LYS
1	28-A	490	GLU
1	28-A	504	TRP
1	28-A	522	GLU
1	28-A	546	LYS
1	28-A	565	LYS
1	29-A	5	VAL
1	29-A	6	SER
1	29-A	8	MET
1	29-A	12	LYS
1	29-A	14	LYS
1	29-A	15	ILE
1	29-A	18	ILE
1	29-A	21	LYS
1	29-A	26	ARG
1	29-A	36	GLU
1	29-A	57	SER
1	29-A	80	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	29-A	87	ASP
1	29-A	91	HIS
1	29-A	92	LYS
1	29-A	101	ILE
1	29-A	102	THR
1	29-A	120	ASN
1	29-A	121	LEU
1	29-A	126	LYS
1	29-A	142	GLU
1	29-A	147	MET
1	29-A	151	ASP
1	29-A	155	LYS
1	29-A	163	ILE
1	29-A	179	ASP
1	29-A	210	ASP
1	29-A	272	GLU
1	29-A	288	GLN
1	29-A	289	ASP
1	29-A	320	THR
1	29-A	328	HIS
1	29-A	330	ARG
1	29-A	331	GLU
1	29-A	350	TYR
1	29-A	358	ILE
1	29-A	359	LEU
1	29-A	361	GLN
1	29-A	362	MET
1	29-A	364	LEU
1	29-A	369	LEU
1	29-A	371	THR
1	29-A	373	VAL
1	29-A	386	THR
1	29-A	403	THR
1	29-A	410	ASP
1	29-A	431	LEU
1	29-A	450	SER
1	29-A	457	TYR
1	29-A	459	ILE
1	29-A	461	ARG
1	29-A	467	LYS
1	29-A	485	LYS
1	29-A	490	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	29-A	504	TRP
1	29-A	516	ASN
1	29-A	525	SER
1	29-A	530	GLU
1	29-A	533	ASP
1	29-A	534	GLU
1	29-A	565	LYS
1	29-A	567	ARG
1	30-A	6	SER
1	30-A	8	MET
1	30-A	12	LYS
1	30-A	19	GLU
1	30-A	21	LYS
1	30-A	26	ARG
1	30-A	30	ASN
1	30-A	86	ARG
1	30-A	90	ASN
1	30-A	91	HIS
1	30-A	92	LYS
1	30-A	104	LYS
1	30-A	108	SER
1	30-A	120	ASN
1	30-A	122	ASN
1	30-A	126	LYS
1	30-A	142	GLU
1	30-A	151	ASP
1	30-A	163	ILE
1	30-A	178	GLU
1	30-A	181	ASN
1	30-A	204	ASN
1	30-A	274	ASN
1	30-A	284	LYS
1	30-A	292	LYS
1	30-A	294	GLU
1	30-A	295	GLU
1	30-A	304	THR
1	30-A	323	CYS
1	30-A	325	LEU
1	30-A	331	GLU
1	30-A	335	THR
1	30-A	350	TYR
1	30-A	358	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	30-A	364	LEU
1	30-A	370	GLU
1	30-A	371	THR
1	30-A	373	VAL
1	30-A	386	THR
1	30-A	406	THR
1	30-A	436	THR
1	30-A	439	THR
1	30-A	457	TYR
1	30-A	460	MET
1	30-A	464	ARG
1	30-A	486	ARG
1	30-A	490	GLU
1	30-A	504	TRP
1	30-A	516	ASN
1	30-A	517	GLU
1	30-A	519	GLU
1	30-A	527	ASP
1	30-A	565	LYS
1	30-A	567	ARG
1	31-A	5	VAL
1	31-A	6	SER
1	31-A	8	MET
1	31-A	12	LYS
1	31-A	14	LYS
1	31-A	18	ILE
1	31-A	20	ASN
1	31-A	34	VAL
1	31-A	86	ARG
1	31-A	87	ASP
1	31-A	92	LYS
1	31-A	94	LYS
1	31-A	120	ASN
1	31-A	125	THR
1	31-A	126	LYS
1	31-A	147	MET
1	31-A	151	ASP
1	31-A	163	ILE
1	31-A	231	GLU
1	31-A	248	ILE
1	31-A	272	GLU
1	31-A	274	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	31-A	284	LYS
1	31-A	288	GLN
1	31-A	292	LYS
1	31-A	308	MET
1	31-A	322	ASP
1	31-A	325	LEU
1	31-A	330	ARG
1	31-A	335	THR
1	31-A	350	TYR
1	31-A	353	LEU
1	31-A	358	ILE
1	31-A	361	GLN
1	31-A	362	MET
1	31-A	371	THR
1	31-A	373	VAL
1	31-A	384	GLU
1	31-A	399	LYS
1	31-A	403	THR
1	31-A	406	THR
1	31-A	436	THR
1	31-A	437	SER
1	31-A	464	ARG
1	31-A	466	VAL
1	31-A	485	LYS
1	31-A	489	LYS
1	31-A	490	GLU
1	31-A	504	TRP
1	31-A	522	GLU
1	31-A	523	ASN
1	31-A	567	ARG
1	32-A	5	VAL
1	32-A	6	SER
1	32-A	8	MET
1	32-A	9	GLU
1	32-A	12	LYS
1	32-A	14	LYS
1	32-A	18	ILE
1	32-A	19	GLU
1	32-A	20	ASN
1	32-A	65	GLN
1	32-A	78	ARG
1	32-A	80	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	32-A	90	ASN
1	32-A	92	LYS
1	32-A	101	ILE
1	32-A	104	LYS
1	32-A	120	ASN
1	32-A	125	THR
1	32-A	126	LYS
1	32-A	142	GLU
1	32-A	147	MET
1	32-A	151	ASP
1	32-A	163	ILE
1	32-A	234	ARG
1	32-A	248	ILE
1	32-A	270	LYS
1	32-A	274	ASN
1	32-A	280	GLU
1	32-A	288	GLN
1	32-A	304	THR
1	32-A	323	CYS
1	32-A	327	LYS
1	32-A	350	TYR
1	32-A	360	LYS
1	32-A	362	MET
1	32-A	373	VAL
1	32-A	378	SER
1	32-A	389	GLU
1	32-A	399	LYS
1	32-A	406	THR
1	32-A	431	LEU
1	32-A	434	ASN
1	32-A	436	THR
1	32-A	439	THR
1	32-A	452	ASP
1	32-A	460	MET
1	32-A	461	ARG
1	32-A	464	ARG
1	32-A	466	VAL
1	32-A	485	LYS
1	32-A	486	ARG
1	32-A	489	LYS
1	32-A	490	GLU
1	32-A	504	TRP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	32-A	515	SER
1	32-A	517	GLU
1	32-A	518	ILE
1	32-A	519	GLU
1	32-A	523	ASN
1	32-A	525	SER
1	32-A	546	LYS
1	32-A	567	ARG
1	33-A	7	LEU
1	33-A	8	MET
1	33-A	9	GLU
1	33-A	10	LYS
1	33-A	65	GLN
1	33-A	86	ARG
1	33-A	100	PHE
1	33-A	102	THR
1	33-A	108	SER
1	33-A	120	ASN
1	33-A	125	THR
1	33-A	126	LYS
1	33-A	147	MET
1	33-A	151	ASP
1	33-A	163	ILE
1	33-A	179	ASP
1	33-A	193	MET
1	33-A	248	ILE
1	33-A	253	ASN
1	33-A	274	ASN
1	33-A	280	GLU
1	33-A	288	GLN
1	33-A	300	LEU
1	33-A	325	LEU
1	33-A	327	LYS
1	33-A	330	ARG
1	33-A	350	TYR
1	33-A	357	SER
1	33-A	362	MET
1	33-A	365	LEU
1	33-A	367	LYS
1	33-A	389	GLU
1	33-A	410	ASP
1	33-A	431	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	33-A	433	PHE
1	33-A	434	ASN
1	33-A	435	HIS
1	33-A	437	SER
1	33-A	485	LYS
1	33-A	489	LYS
1	33-A	504	TRP
1	33-A	522	GLU
1	33-A	523	ASN
1	33-A	532	SER
1	33-A	544	GLU
1	33-A	546	LYS
1	33-A	567	ARG
1	34-A	5	VAL
1	34-A	6	SER
1	34-A	7	LEU
1	34-A	21	LYS
1	34-A	65	GLN
1	34-A	78	ARG
1	34-A	80	THR
1	34-A	87	ASP
1	34-A	93	ASP
1	34-A	94	LYS
1	34-A	101	ILE
1	34-A	102	THR
1	34-A	120	ASN
1	34-A	121	LEU
1	34-A	124	GLU
1	34-A	125	THR
1	34-A	126	LYS
1	34-A	147	MET
1	34-A	151	ASP
1	34-A	163	ILE
1	34-A	178	GLU
1	34-A	181	ASN
1	34-A	201	ASN
1	34-A	218	SER
1	34-A	231	GLU
1	34-A	234	ARG
1	34-A	258	HIS
1	34-A	274	ASN
1	34-A	284	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	34-A	294	GLU
1	34-A	304	THR
1	34-A	308	MET
1	34-A	327	LYS
1	34-A	330	ARG
1	34-A	332	MET
1	34-A	335	THR
1	34-A	350	TYR
1	34-A	362	MET
1	34-A	364	LEU
1	34-A	365	LEU
1	34-A	373	VAL
1	34-A	399	LYS
1	34-A	403	THR
1	34-A	410	ASP
1	34-A	439	THR
1	34-A	441	VAL
1	34-A	449	ASP
1	34-A	459	ILE
1	34-A	460	MET
1	34-A	464	ARG
1	34-A	467	LYS
1	34-A	489	LYS
1	34-A	504	TRP
1	34-A	519	GLU
1	34-A	523	ASN
1	34-A	532	SER
1	34-A	533	ASP
1	34-A	543	ASP
1	34-A	567	ARG
1	34-A	568	ASP
1	35-A	10	LYS
1	35-A	15	ILE
1	35-A	26	ARG
1	35-A	87	ASP
1	35-A	91	HIS
1	35-A	93	ASP
1	35-A	100	PHE
1	35-A	102	THR
1	35-A	120	ASN
1	35-A	122	ASN
1	35-A	124	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	35-A	142	GLU
1	35-A	147	MET
1	35-A	151	ASP
1	35-A	163	ILE
1	35-A	179	ASP
1	35-A	234	ARG
1	35-A	284	LYS
1	35-A	286	LYS
1	35-A	288	GLN
1	35-A	304	THR
1	35-A	330	ARG
1	35-A	332	MET
1	35-A	340	SER
1	35-A	350	TYR
1	35-A	358	ILE
1	35-A	359	LEU
1	35-A	362	MET
1	35-A	363	PRO
1	35-A	365	LEU
1	35-A	399	LYS
1	35-A	406	THR
1	35-A	431	LEU
1	35-A	435	HIS
1	35-A	437	SER
1	35-A	439	THR
1	35-A	459	ILE
1	35-A	461	ARG
1	35-A	462	SER
1	35-A	464	ARG
1	35-A	485	LYS
1	35-A	486	ARG
1	35-A	489	LYS
1	35-A	504	TRP
1	35-A	516	ASN
1	35-A	517	GLU
1	35-A	521	MET
1	35-A	523	ASN
1	35-A	527	ASP
1	35-A	530	GLU
1	35-A	532	SER
1	35-A	533	ASP
1	35-A	534	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	35-A	543	ASP
1	36-A	6	SER
1	36-A	7	LEU
1	36-A	8	MET
1	36-A	9	GLU
1	36-A	10	LYS
1	36-A	14	LYS
1	36-A	15	ILE
1	36-A	26	ARG
1	36-A	86	ARG
1	36-A	93	ASP
1	36-A	100	PHE
1	36-A	104	LYS
1	36-A	120	ASN
1	36-A	122	ASN
1	36-A	124	GLU
1	36-A	125	THR
1	36-A	142	GLU
1	36-A	151	ASP
1	36-A	163	ILE
1	36-A	200	ASN
1	36-A	204	ASN
1	36-A	215	PHE
1	36-A	234	ARG
1	36-A	253	ASN
1	36-A	274	ASN
1	36-A	280	GLU
1	36-A	286	LYS
1	36-A	288	GLN
1	36-A	295	GLU
1	36-A	300	LEU
1	36-A	304	THR
1	36-A	305	ASN
1	36-A	306	LYS
1	36-A	322	ASP
1	36-A	324	VAL
1	36-A	325	LEU
1	36-A	327	LYS
1	36-A	331	GLU
1	36-A	335	THR
1	36-A	350	TYR
1	36-A	359	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	36-A	370	GLU
1	36-A	373	VAL
1	36-A	378	SER
1	36-A	389	GLU
1	36-A	405	GLU
1	36-A	406	THR
1	36-A	410	ASP
1	36-A	431	LEU
1	36-A	435	HIS
1	36-A	437	SER
1	36-A	439	THR
1	36-A	452	ASP
1	36-A	460	MET
1	36-A	462	SER
1	36-A	464	ARG
1	36-A	482	GLN
1	36-A	485	LYS
1	36-A	498	GLU
1	36-A	504	TRP
1	36-A	519	GLU
1	36-A	525	SER
1	36-A	537	LYS
1	36-A	544	GLU
1	36-A	546	LYS
1	37-A	6	SER
1	37-A	8	MET
1	37-A	9	GLU
1	37-A	11	LEU
1	37-A	14	LYS
1	37-A	15	ILE
1	37-A	16	LYS
1	37-A	19	GLU
1	37-A	33	VAL
1	37-A	78	ARG
1	37-A	90	ASN
1	37-A	99	ASP
1	37-A	101	ILE
1	37-A	102	THR
1	37-A	104	LYS
1	37-A	122	ASN
1	37-A	126	LYS
1	37-A	142	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	37-A	146	ASP
1	37-A	147	MET
1	37-A	151	ASP
1	37-A	163	ILE
1	37-A	199	LYS
1	37-A	234	ARG
1	37-A	253	ASN
1	37-A	258	HIS
1	37-A	280	GLU
1	37-A	286	LYS
1	37-A	308	MET
1	37-A	320	THR
1	37-A	322	ASP
1	37-A	325	LEU
1	37-A	327	LYS
1	37-A	329	PRO
1	37-A	332	MET
1	37-A	350	TYR
1	37-A	356	THR
1	37-A	362	MET
1	37-A	363	PRO
1	37-A	364	LEU
1	37-A	367	LYS
1	37-A	368	GLU
1	37-A	373	VAL
1	37-A	386	THR
1	37-A	389	GLU
1	37-A	406	THR
1	37-A	411	ASN
1	37-A	464	ARG
1	37-A	466	VAL
1	37-A	489	LYS
1	37-A	490	GLU
1	37-A	498	GLU
1	37-A	504	TRP
1	37-A	516	ASN
1	37-A	519	GLU
1	37-A	522	GLU
1	37-A	523	ASN
1	37-A	527	ASP
1	37-A	530	GLU
1	37-A	537	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	37-A	544	GLU
1	37-A	546	LYS
1	37-A	558	GLN
1	37-A	568	ASP
1	38-A	5	VAL
1	38-A	7	LEU
1	38-A	9	GLU
1	38-A	10	LYS
1	38-A	14	LYS
1	38-A	18	ILE
1	38-A	19	GLU
1	38-A	21	LYS
1	38-A	65	GLN
1	38-A	77	GLN
1	38-A	92	LYS
1	38-A	93	ASP
1	38-A	101	ILE
1	38-A	102	THR
1	38-A	106	CYS
1	38-A	122	ASN
1	38-A	126	LYS
1	38-A	147	MET
1	38-A	151	ASP
1	38-A	163	ILE
1	38-A	178	GLU
1	38-A	193	MET
1	38-A	199	LYS
1	38-A	231	GLU
1	38-A	236	LEU
1	38-A	253	ASN
1	38-A	284	LYS
1	38-A	286	LYS
1	38-A	289	ASP
1	38-A	295	GLU
1	38-A	306	LYS
1	38-A	314	THR
1	38-A	320	THR
1	38-A	327	LYS
1	38-A	328	HIS
1	38-A	330	ARG
1	38-A	333	VAL
1	38-A	335	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	38-A	350	TYR
1	38-A	360	LYS
1	38-A	364	LEU
1	38-A	365	LEU
1	38-A	368	GLU
1	38-A	370	GLU
1	38-A	389	GLU
1	38-A	406	THR
1	38-A	410	ASP
1	38-A	425	MET
1	38-A	435	HIS
1	38-A	439	THR
1	38-A	441	VAL
1	38-A	460	MET
1	38-A	461	ARG
1	38-A	490	GLU
1	38-A	494	TYR
1	38-A	498	GLU
1	38-A	504	TRP
1	38-A	515	SER
1	38-A	516	ASN
1	38-A	522	GLU
1	38-A	527	ASP
1	38-A	531	LYS
1	38-A	544	GLU
1	38-A	557	LYS
1	38-A	558	GLN
1	38-A	564	GLU
1	39-A	7	LEU
1	39-A	8	MET
1	39-A	9	GLU
1	39-A	14	LYS
1	39-A	18	ILE
1	39-A	19	GLU
1	39-A	20	ASN
1	39-A	27	LEU
1	39-A	38	GLU
1	39-A	77	GLN
1	39-A	91	HIS
1	39-A	92	LYS
1	39-A	93	ASP
1	39-A	101	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	39-A	102	THR
1	39-A	120	ASN
1	39-A	122	ASN
1	39-A	126	LYS
1	39-A	142	GLU
1	39-A	147	MET
1	39-A	151	ASP
1	39-A	155	LYS
1	39-A	163	ILE
1	39-A	179	ASP
1	39-A	181	ASN
1	39-A	199	LYS
1	39-A	200	ASN
1	39-A	234	ARG
1	39-A	236	LEU
1	39-A	255	GLN
1	39-A	256	CYS
1	39-A	272	GLU
1	39-A	280	GLU
1	39-A	284	LYS
1	39-A	288	GLN
1	39-A	304	THR
1	39-A	306	LYS
1	39-A	319	GLN
1	39-A	320	THR
1	39-A	323	CYS
1	39-A	325	LEU
1	39-A	327	LYS
1	39-A	333	VAL
1	39-A	350	TYR
1	39-A	356	THR
1	39-A	360	LYS
1	39-A	362	MET
1	39-A	364	LEU
1	39-A	368	GLU
1	39-A	370	GLU
1	39-A	373	VAL
1	39-A	405	GLU
1	39-A	406	THR
1	39-A	410	ASP
1	39-A	431	LEU
1	39-A	434	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	39-A	435	HIS
1	39-A	454	ILE
1	39-A	461	ARG
1	39-A	489	LYS
1	39-A	490	GLU
1	39-A	498	GLU
1	39-A	504	TRP
1	39-A	516	ASN
1	39-A	517	GLU
1	39-A	519	GLU
1	39-A	525	SER
1	39-A	555	LYS
1	39-A	557	LYS
1	39-A	558	GLN
1	39-A	567	ARG
1	40-A	5	VAL
1	40-A	9	GLU
1	40-A	19	GLU
1	40-A	20	ASN
1	40-A	34	VAL
1	40-A	57	SER
1	40-A	77	GLN
1	40-A	90	ASN
1	40-A	93	ASP
1	40-A	100	PHE
1	40-A	101	ILE
1	40-A	102	THR
1	40-A	104	LYS
1	40-A	106	CYS
1	40-A	120	ASN
1	40-A	125	THR
1	40-A	126	LYS
1	40-A	151	ASP
1	40-A	163	ILE
1	40-A	234	ARG
1	40-A	272	GLU
1	40-A	274	ASN
1	40-A	284	LYS
1	40-A	289	ASP
1	40-A	292	LYS
1	40-A	300	LEU
1	40-A	304	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	40-A	305	ASN
1	40-A	306	LYS
1	40-A	325	LEU
1	40-A	327	LYS
1	40-A	330	ARG
1	40-A	335	THR
1	40-A	350	TYR
1	40-A	356	THR
1	40-A	358	ILE
1	40-A	361	GLN
1	40-A	362	MET
1	40-A	364	LEU
1	40-A	368	GLU
1	40-A	373	VAL
1	40-A	406	THR
1	40-A	434	ASN
1	40-A	435	HIS
1	40-A	437	SER
1	40-A	439	THR
1	40-A	451	GLU
1	40-A	457	TYR
1	40-A	460	MET
1	40-A	461	ARG
1	40-A	464	ARG
1	40-A	490	GLU
1	40-A	504	TRP
1	40-A	516	ASN
1	40-A	521	MET
1	40-A	525	SER
1	40-A	527	ASP
1	40-A	530	GLU
1	40-A	567	ARG
1	41-A	6	SER
1	41-A	9	GLU
1	41-A	10	LYS
1	41-A	14	LYS
1	41-A	15	ILE
1	41-A	19	GLU
1	41-A	86	ARG
1	41-A	87	ASP
1	41-A	90	ASN
1	41-A	104	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	41-A	120	ASN
1	41-A	125	THR
1	41-A	142	GLU
1	41-A	151	ASP
1	41-A	163	ILE
1	41-A	178	GLU
1	41-A	179	ASP
1	41-A	193	MET
1	41-A	196	ARG
1	41-A	199	LYS
1	41-A	276	LYS
1	41-A	280	GLU
1	41-A	284	LYS
1	41-A	288	GLN
1	41-A	306	LYS
1	41-A	322	ASP
1	41-A	324	VAL
1	41-A	327	LYS
1	41-A	330	ARG
1	41-A	340	SER
1	41-A	350	TYR
1	41-A	358	ILE
1	41-A	359	LEU
1	41-A	360	LYS
1	41-A	361	GLN
1	41-A	364	LEU
1	41-A	373	VAL
1	41-A	431	LEU
1	41-A	435	HIS
1	41-A	439	THR
1	41-A	460	MET
1	41-A	461	ARG
1	41-A	464	ARG
1	41-A	467	LYS
1	41-A	485	LYS
1	41-A	486	ARG
1	41-A	490	GLU
1	41-A	498	GLU
1	41-A	504	TRP
1	41-A	516	ASN
1	41-A	519	GLU
1	41-A	543	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	41-A	546	LYS
1	41-A	558	GLN
1	41-A	565	LYS
1	41-A	567	ARG
1	42-A	6	SER
1	42-A	9	GLU
1	42-A	17	CYS
1	42-A	19	GLU
1	42-A	27	LEU
1	42-A	38	GLU
1	42-A	77	GLN
1	42-A	86	ARG
1	42-A	90	ASN
1	42-A	101	ILE
1	42-A	102	THR
1	42-A	104	LYS
1	42-A	120	ASN
1	42-A	121	LEU
1	42-A	124	GLU
1	42-A	142	GLU
1	42-A	151	ASP
1	42-A	155	LYS
1	42-A	163	ILE
1	42-A	178	GLU
1	42-A	179	ASP
1	42-A	181	ASN
1	42-A	215	PHE
1	42-A	234	ARG
1	42-A	253	ASN
1	42-A	272	GLU
1	42-A	284	LYS
1	42-A	320	THR
1	42-A	327	LYS
1	42-A	330	ARG
1	42-A	335	THR
1	42-A	350	TYR
1	42-A	356	THR
1	42-A	360	LYS
1	42-A	364	LEU
1	42-A	367	LYS
1	42-A	373	VAL
1	42-A	391	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	42-A	406	THR
1	42-A	439	THR
1	42-A	462	SER
1	42-A	464	ARG
1	42-A	485	LYS
1	42-A	489	LYS
1	42-A	490	GLU
1	42-A	494	TYR
1	42-A	500	MET
1	42-A	504	TRP
1	42-A	516	ASN
1	42-A	523	ASN
1	42-A	527	ASP
1	42-A	530	GLU
1	42-A	533	ASP
1	42-A	534	GLU
1	42-A	546	LYS
1	42-A	565	LYS
1	42-A	568	ASP
1	43-A	7	LEU
1	43-A	9	GLU
1	43-A	10	LYS
1	43-A	14	LYS
1	43-A	16	LYS
1	43-A	19	GLU
1	43-A	26	ARG
1	43-A	27	LEU
1	43-A	57	SER
1	43-A	78	ARG
1	43-A	86	ARG
1	43-A	90	ASN
1	43-A	93	ASP
1	43-A	100	PHE
1	43-A	101	ILE
1	43-A	104	LYS
1	43-A	120	ASN
1	43-A	142	GLU
1	43-A	151	ASP
1	43-A	155	LYS
1	43-A	163	ILE
1	43-A	178	GLU
1	43-A	234	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	43-A	253	ASN
1	43-A	270	LYS
1	43-A	276	LYS
1	43-A	280	GLU
1	43-A	284	LYS
1	43-A	292	LYS
1	43-A	295	GLU
1	43-A	300	LEU
1	43-A	308	MET
1	43-A	320	THR
1	43-A	324	VAL
1	43-A	327	LYS
1	43-A	334	LYS
1	43-A	335	THR
1	43-A	358	ILE
1	43-A	360	LYS
1	43-A	362	MET
1	43-A	367	LYS
1	43-A	370	GLU
1	43-A	373	VAL
1	43-A	392	GLU
1	43-A	410	ASP
1	43-A	451	GLU
1	43-A	452	ASP
1	43-A	460	MET
1	43-A	461	ARG
1	43-A	464	ARG
1	43-A	485	LYS
1	43-A	489	LYS
1	43-A	504	TRP
1	43-A	516	ASN
1	43-A	518	ILE
1	43-A	521	MET
1	43-A	522	GLU
1	43-A	523	ASN
1	43-A	525	SER
1	43-A	530	GLU
1	43-A	532	SER
1	43-A	534	GLU
1	43-A	544	GLU
1	43-A	546	LYS
1	43-A	568	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	44-A	5	VAL
1	44-A	6	SER
1	44-A	12	LYS
1	44-A	14	LYS
1	44-A	15	ILE
1	44-A	16	LYS
1	44-A	19	GLU
1	44-A	33	VAL
1	44-A	36	GLU
1	44-A	38	GLU
1	44-A	90	ASN
1	44-A	93	ASP
1	44-A	99	ASP
1	44-A	100	PHE
1	44-A	101	ILE
1	44-A	104	LYS
1	44-A	120	ASN
1	44-A	126	LYS
1	44-A	142	GLU
1	44-A	151	ASP
1	44-A	155	LYS
1	44-A	156	LYS
1	44-A	163	ILE
1	44-A	189	LYS
1	44-A	193	MET
1	44-A	234	ARG
1	44-A	248	ILE
1	44-A	276	LYS
1	44-A	284	LYS
1	44-A	295	GLU
1	44-A	319	GLN
1	44-A	322	ASP
1	44-A	327	LYS
1	44-A	330	ARG
1	44-A	334	LYS
1	44-A	335	THR
1	44-A	350	TYR
1	44-A	357	SER
1	44-A	360	LYS
1	44-A	362	MET
1	44-A	364	LEU
1	44-A	368	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	44-A	370	GLU
1	44-A	373	VAL
1	44-A	384	GLU
1	44-A	389	GLU
1	44-A	406	THR
1	44-A	431	LEU
1	44-A	436	THR
1	44-A	437	SER
1	44-A	452	ASP
1	44-A	459	ILE
1	44-A	461	ARG
1	44-A	467	LYS
1	44-A	485	LYS
1	44-A	490	GLU
1	44-A	504	TRP
1	44-A	516	ASN
1	44-A	517	GLU
1	44-A	521	MET
1	44-A	522	GLU
1	44-A	525	SER
1	44-A	531	LYS
1	44-A	546	LYS

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (490) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	200	ASN
1	1-A	211	ASN
1	1-A	255	GLN
1	1-A	258	HIS
1	1-A	418	HIS
1	1-A	434	ASN
1	1-A	482	GLN
1	1-A	506	GLN
1	2-A	91	HIS
1	2-A	181	ASN
1	2-A	200	ASN
1	2-A	211	ASN
1	2-A	232	GLN
1	2-A	255	GLN
1	2-A	258	HIS
1	2-A	288	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	2-A	328	HIS
1	2-A	361	GLN
1	2-A	411	ASN
1	2-A	418	HIS
1	2-A	434	ASN
1	2-A	482	GLN
1	2-A	523	ASN
1	3-A	77	GLN
1	3-A	90	ASN
1	3-A	200	ASN
1	3-A	288	GLN
1	3-A	411	ASN
1	3-A	418	HIS
1	3-A	482	GLN
1	4-A	176	ASN
1	4-A	181	ASN
1	4-A	274	ASN
1	4-A	288	GLN
1	4-A	328	HIS
1	4-A	418	HIS
1	4-A	482	GLN
1	5-A	65	GLN
1	5-A	77	GLN
1	5-A	122	ASN
1	5-A	253	ASN
1	5-A	274	ASN
1	5-A	418	HIS
1	5-A	523	ASN
1	6-A	77	GLN
1	6-A	122	ASN
1	6-A	211	ASN
1	6-A	255	GLN
1	6-A	258	HIS
1	6-A	288	GLN
1	6-A	328	HIS
1	6-A	418	HIS
1	6-A	482	GLN
1	6-A	516	ASN
1	7-A	65	GLN
1	7-A	91	HIS
1	7-A	211	ASN
1	7-A	255	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	7-A	288	GLN
1	7-A	328	HIS
1	7-A	411	ASN
1	7-A	418	HIS
1	7-A	482	GLN
1	7-A	523	ASN
1	7-A	558	GLN
1	8-A	65	GLN
1	8-A	91	HIS
1	8-A	181	ASN
1	8-A	255	GLN
1	8-A	319	GLN
1	8-A	328	HIS
1	8-A	411	ASN
1	8-A	418	HIS
1	8-A	482	GLN
1	8-A	516	ASN
1	8-A	523	ASN
1	8-A	558	GLN
1	9-A	90	ASN
1	9-A	122	ASN
1	9-A	255	GLN
1	9-A	258	HIS
1	9-A	319	GLN
1	9-A	328	HIS
1	9-A	361	GLN
1	9-A	418	HIS
1	9-A	482	GLN
1	9-A	523	ASN
1	10-A	65	GLN
1	10-A	90	ASN
1	10-A	122	ASN
1	10-A	211	ASN
1	10-A	319	GLN
1	10-A	418	HIS
1	10-A	435	HIS
1	10-A	482	GLN
1	10-A	506	GLN
1	10-A	516	ASN
1	11-A	319	GLN
1	11-A	347	ASN
1	11-A	418	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	11-A	434	ASN
1	11-A	482	GLN
1	12-A	120	ASN
1	12-A	211	ASN
1	12-A	253	ASN
1	12-A	274	ASN
1	12-A	305	ASN
1	12-A	319	GLN
1	12-A	328	HIS
1	12-A	418	HIS
1	12-A	434	ASN
1	12-A	482	GLN
1	12-A	516	ASN
1	13-A	120	ASN
1	13-A	253	ASN
1	13-A	255	GLN
1	13-A	288	GLN
1	13-A	305	ASN
1	13-A	328	HIS
1	13-A	411	ASN
1	13-A	418	HIS
1	13-A	482	GLN
1	14-A	90	ASN
1	14-A	91	HIS
1	14-A	120	ASN
1	14-A	201	ASN
1	14-A	211	ASN
1	14-A	232	GLN
1	14-A	253	ASN
1	14-A	255	GLN
1	14-A	288	GLN
1	14-A	339	ASN
1	14-A	411	ASN
1	14-A	418	HIS
1	14-A	512	ASN
1	14-A	516	ASN
1	14-A	523	ASN
1	15-A	120	ASN
1	15-A	122	ASN
1	15-A	201	ASN
1	15-A	211	ASN
1	15-A	232	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	15-A	246	ASN
1	15-A	255	GLN
1	15-A	258	HIS
1	15-A	288	GLN
1	15-A	319	GLN
1	15-A	339	ASN
1	15-A	418	HIS
1	15-A	434	ASN
1	15-A	482	GLN
1	15-A	506	GLN
1	16-A	77	GLN
1	16-A	91	HIS
1	16-A	120	ASN
1	16-A	200	ASN
1	16-A	201	ASN
1	16-A	232	GLN
1	16-A	255	GLN
1	16-A	258	HIS
1	16-A	288	GLN
1	16-A	418	HIS
1	16-A	434	ASN
1	16-A	506	GLN
1	17-A	65	GLN
1	17-A	77	GLN
1	17-A	120	ASN
1	17-A	200	ASN
1	17-A	201	ASN
1	17-A	211	ASN
1	17-A	232	GLN
1	17-A	255	GLN
1	17-A	288	GLN
1	17-A	339	ASN
1	17-A	418	HIS
1	17-A	434	ASN
1	18-A	20	ASN
1	18-A	77	GLN
1	18-A	120	ASN
1	18-A	176	ASN
1	18-A	200	ASN
1	18-A	201	ASN
1	18-A	211	ASN
1	18-A	232	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	18-A	288	GLN
1	18-A	328	HIS
1	18-A	418	HIS
1	19-A	20	ASN
1	19-A	77	GLN
1	19-A	120	ASN
1	19-A	122	ASN
1	19-A	201	ASN
1	19-A	211	ASN
1	19-A	232	GLN
1	19-A	319	GLN
1	19-A	328	HIS
1	19-A	361	GLN
1	19-A	418	HIS
1	19-A	434	ASN
1	19-A	435	HIS
1	19-A	516	ASN
1	20-A	65	GLN
1	20-A	77	GLN
1	20-A	120	ASN
1	20-A	122	ASN
1	20-A	201	ASN
1	20-A	204	ASN
1	20-A	232	GLN
1	20-A	258	HIS
1	20-A	328	HIS
1	20-A	339	ASN
1	20-A	411	ASN
1	20-A	418	HIS
1	20-A	506	GLN
1	20-A	516	ASN
1	20-A	558	GLN
1	21-A	120	ASN
1	21-A	181	ASN
1	21-A	201	ASN
1	21-A	211	ASN
1	21-A	253	ASN
1	21-A	258	HIS
1	21-A	319	GLN
1	21-A	328	HIS
1	21-A	361	GLN
1	21-A	418	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	21-A	516	ASN
1	21-A	558	GLN
1	22-A	120	ASN
1	22-A	144	HIS
1	22-A	181	ASN
1	22-A	201	ASN
1	22-A	204	ASN
1	22-A	211	ASN
1	22-A	253	ASN
1	22-A	328	HIS
1	22-A	411	ASN
1	22-A	418	HIS
1	22-A	434	ASN
1	22-A	516	ASN
1	22-A	558	GLN
1	23-A	120	ASN
1	23-A	181	ASN
1	23-A	200	ASN
1	23-A	201	ASN
1	23-A	253	ASN
1	23-A	328	HIS
1	23-A	339	ASN
1	23-A	418	HIS
1	23-A	434	ASN
1	23-A	506	GLN
1	24-A	91	HIS
1	24-A	120	ASN
1	24-A	201	ASN
1	24-A	211	ASN
1	24-A	258	HIS
1	24-A	319	GLN
1	24-A	328	HIS
1	24-A	361	GLN
1	24-A	418	HIS
1	24-A	516	ASN
1	24-A	558	GLN
1	25-A	20	ASN
1	25-A	65	GLN
1	25-A	120	ASN
1	25-A	181	ASN
1	25-A	201	ASN
1	25-A	255	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	25-A	305	ASN
1	25-A	319	GLN
1	25-A	328	HIS
1	25-A	339	ASN
1	25-A	418	HIS
1	26-A	65	GLN
1	26-A	91	HIS
1	26-A	120	ASN
1	26-A	201	ASN
1	26-A	253	ASN
1	26-A	255	GLN
1	26-A	319	GLN
1	26-A	339	ASN
1	26-A	347	ASN
1	26-A	411	ASN
1	26-A	418	HIS
1	27-A	65	GLN
1	27-A	120	ASN
1	27-A	122	ASN
1	27-A	201	ASN
1	27-A	211	ASN
1	27-A	253	ASN
1	27-A	255	GLN
1	27-A	328	HIS
1	27-A	339	ASN
1	27-A	347	ASN
1	27-A	418	HIS
1	27-A	434	ASN
1	27-A	435	HIS
1	28-A	91	HIS
1	28-A	120	ASN
1	28-A	122	ASN
1	28-A	181	ASN
1	28-A	201	ASN
1	28-A	255	GLN
1	28-A	258	HIS
1	28-A	319	GLN
1	28-A	347	ASN
1	28-A	411	ASN
1	28-A	418	HIS
1	28-A	434	ASN
1	29-A	91	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	29-A	120	ASN
1	29-A	201	ASN
1	29-A	319	GLN
1	29-A	418	HIS
1	29-A	434	ASN
1	29-A	435	HIS
1	30-A	30	ASN
1	30-A	65	GLN
1	30-A	77	GLN
1	30-A	91	HIS
1	30-A	120	ASN
1	30-A	201	ASN
1	30-A	253	ASN
1	30-A	255	GLN
1	30-A	305	ASN
1	30-A	374	ASN
1	30-A	418	HIS
1	31-A	20	ASN
1	31-A	65	GLN
1	31-A	77	GLN
1	31-A	91	HIS
1	31-A	120	ASN
1	31-A	181	ASN
1	31-A	201	ASN
1	31-A	211	ASN
1	31-A	255	GLN
1	31-A	258	HIS
1	31-A	305	ASN
1	31-A	328	HIS
1	31-A	347	ASN
1	31-A	361	GLN
1	31-A	418	HIS
1	31-A	434	ASN
1	31-A	435	HIS
1	31-A	516	ASN
1	32-A	30	ASN
1	32-A	65	GLN
1	32-A	77	GLN
1	32-A	120	ASN
1	32-A	181	ASN
1	32-A	201	ASN
1	32-A	255	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	32-A	274	ASN
1	32-A	305	ASN
1	32-A	339	ASN
1	32-A	411	ASN
1	32-A	418	HIS
1	32-A	434	ASN
1	32-A	435	HIS
1	33-A	30	ASN
1	33-A	90	ASN
1	33-A	120	ASN
1	33-A	176	ASN
1	33-A	200	ASN
1	33-A	201	ASN
1	33-A	255	GLN
1	33-A	274	ASN
1	33-A	339	ASN
1	33-A	411	ASN
1	33-A	418	HIS
1	33-A	434	ASN
1	34-A	30	ASN
1	34-A	120	ASN
1	34-A	176	ASN
1	34-A	181	ASN
1	34-A	201	ASN
1	34-A	255	GLN
1	34-A	274	ASN
1	34-A	319	GLN
1	34-A	328	HIS
1	34-A	339	ASN
1	34-A	347	ASN
1	34-A	418	HIS
1	35-A	90	ASN
1	35-A	120	ASN
1	35-A	122	ASN
1	35-A	176	ASN
1	35-A	255	GLN
1	35-A	274	ASN
1	35-A	347	ASN
1	35-A	418	HIS
1	36-A	30	ASN
1	36-A	120	ASN
1	36-A	176	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	36-A	181	ASN
1	36-A	253	ASN
1	36-A	319	GLN
1	36-A	339	ASN
1	36-A	418	HIS
1	36-A	435	HIS
1	37-A	30	ASN
1	37-A	120	ASN
1	37-A	122	ASN
1	37-A	144	HIS
1	37-A	176	ASN
1	37-A	181	ASN
1	37-A	255	GLN
1	37-A	258	HIS
1	37-A	418	HIS
1	37-A	482	GLN
1	37-A	512	ASN
1	38-A	65	GLN
1	38-A	77	GLN
1	38-A	91	HIS
1	38-A	122	ASN
1	38-A	176	ASN
1	38-A	253	ASN
1	38-A	255	GLN
1	38-A	328	HIS
1	38-A	411	ASN
1	38-A	482	GLN
1	38-A	516	ASN
1	38-A	523	ASN
1	39-A	30	ASN
1	39-A	77	GLN
1	39-A	120	ASN
1	39-A	144	HIS
1	39-A	181	ASN
1	39-A	255	GLN
1	39-A	319	GLN
1	39-A	339	ASN
1	39-A	418	HIS
1	39-A	516	ASN
1	39-A	558	GLN
1	40-A	77	GLN
1	40-A	120	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	40-A	176	ASN
1	40-A	255	GLN
1	40-A	305	ASN
1	40-A	319	GLN
1	40-A	339	ASN
1	40-A	361	GLN
1	40-A	411	ASN
1	40-A	418	HIS
1	40-A	482	GLN
1	40-A	506	GLN
1	40-A	516	ASN
1	40-A	558	GLN
1	41-A	77	GLN
1	41-A	90	ASN
1	41-A	120	ASN
1	41-A	144	HIS
1	41-A	176	ASN
1	41-A	253	ASN
1	41-A	255	GLN
1	41-A	305	ASN
1	41-A	339	ASN
1	41-A	361	GLN
1	41-A	418	HIS
1	41-A	482	GLN
1	41-A	558	GLN
1	42-A	65	GLN
1	42-A	77	GLN
1	42-A	120	ASN
1	42-A	176	ASN
1	42-A	181	ASN
1	42-A	253	ASN
1	42-A	305	ASN
1	42-A	347	ASN
1	42-A	418	HIS
1	42-A	435	HIS
1	42-A	516	ASN
1	42-A	558	GLN
1	43-A	90	ASN
1	43-A	91	HIS
1	43-A	144	HIS
1	43-A	176	ASN
1	43-A	255	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	43-A	305	ASN
1	43-A	339	ASN
1	43-A	418	HIS
1	44-A	120	ASN
1	44-A	255	GLN
1	44-A	305	ASN
1	44-A	339	ASN
1	44-A	374	ASN
1	44-A	418	HIS
1	44-A	482	GLN
1	44-A	512	ASN
1	44-A	516	ASN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data 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	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	2-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	3-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	4-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	5-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	6-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	7-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	8-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	9-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	10-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	11-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	12-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	13-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	14-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	15-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	16-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	17-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	18-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	19-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	20-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	21-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	22-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	23-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	24-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	25-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	26-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	27-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	28-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	29-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	30-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	31-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	32-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	33-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	34-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	35-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	36-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	37-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	38-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	39-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	40-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	41-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	42-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	43-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
1	44-A	566/577 (98%)	0.40	39 (6%) 16 19	27, 30, 35, 39	566 (100%)
All	All	24904/25388 (98%)	0.40	1716 (6%) 20 19	27, 30, 35, 39	24904 (100%)

All (1716) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	464	ARG	20.3
1	2-A	464	ARG	20.3
1	3-A	464	ARG	20.3
1	4-A	464	ARG	20.3
1	5-A	464	ARG	20.3
1	6-A	464	ARG	20.3
1	7-A	464	ARG	20.3
1	8-A	464	ARG	20.3
1	9-A	464	ARG	20.3
1	10-A	464	ARG	20.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	11-A	464	ARG	20.3
1	12-A	464	ARG	20.3
1	13-A	464	ARG	20.3
1	14-A	464	ARG	20.3
1	15-A	464	ARG	20.3
1	16-A	464	ARG	20.3
1	17-A	464	ARG	20.3
1	18-A	464	ARG	20.3
1	19-A	464	ARG	20.3
1	20-A	464	ARG	20.3
1	21-A	464	ARG	20.3
1	22-A	464	ARG	20.3
1	23-A	464	ARG	20.3
1	24-A	464	ARG	20.3
1	25-A	464	ARG	20.3
1	26-A	464	ARG	20.3
1	27-A	464	ARG	20.3
1	28-A	464	ARG	20.3
1	29-A	464	ARG	20.3
1	30-A	464	ARG	20.3
1	31-A	464	ARG	20.3
1	32-A	464	ARG	20.3
1	33-A	464	ARG	20.3
1	34-A	464	ARG	20.3
1	35-A	464	ARG	20.3
1	36-A	464	ARG	20.3
1	37-A	464	ARG	20.3
1	38-A	464	ARG	20.3
1	39-A	464	ARG	20.3
1	40-A	464	ARG	20.3
1	41-A	464	ARG	20.3
1	42-A	464	ARG	20.3
1	43-A	464	ARG	20.3
1	44-A	464	ARG	20.3
1	1-A	6	SER	17.7
1	2-A	6	SER	17.7
1	3-A	6	SER	17.7
1	4-A	6	SER	17.7
1	5-A	6	SER	17.7
1	6-A	6	SER	17.7
1	7-A	6	SER	17.7
1	8-A	6	SER	17.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	9-A	6	SER	17.7
1	10-A	6	SER	17.7
1	11-A	6	SER	17.7
1	12-A	6	SER	17.7
1	13-A	6	SER	17.7
1	14-A	6	SER	17.7
1	15-A	6	SER	17.7
1	16-A	6	SER	17.7
1	17-A	6	SER	17.7
1	18-A	6	SER	17.7
1	19-A	6	SER	17.7
1	20-A	6	SER	17.7
1	21-A	6	SER	17.7
1	22-A	6	SER	17.7
1	23-A	6	SER	17.7
1	24-A	6	SER	17.7
1	25-A	6	SER	17.7
1	26-A	6	SER	17.7
1	27-A	6	SER	17.7
1	28-A	6	SER	17.7
1	29-A	6	SER	17.7
1	30-A	6	SER	17.7
1	31-A	6	SER	17.7
1	32-A	6	SER	17.7
1	33-A	6	SER	17.7
1	34-A	6	SER	17.7
1	35-A	6	SER	17.7
1	36-A	6	SER	17.7
1	37-A	6	SER	17.7
1	38-A	6	SER	17.7
1	39-A	6	SER	17.7
1	40-A	6	SER	17.7
1	41-A	6	SER	17.7
1	42-A	6	SER	17.7
1	43-A	6	SER	17.7
1	44-A	6	SER	17.7
1	1-A	7	LEU	13.7
1	2-A	7	LEU	13.7
1	3-A	7	LEU	13.7
1	4-A	7	LEU	13.7
1	5-A	7	LEU	13.7
1	6-A	7	LEU	13.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	7-A	7	LEU	13.7
1	8-A	7	LEU	13.7
1	9-A	7	LEU	13.7
1	10-A	7	LEU	13.7
1	11-A	7	LEU	13.7
1	12-A	7	LEU	13.7
1	13-A	7	LEU	13.7
1	14-A	7	LEU	13.7
1	15-A	7	LEU	13.7
1	16-A	7	LEU	13.7
1	17-A	7	LEU	13.7
1	18-A	7	LEU	13.7
1	19-A	7	LEU	13.7
1	20-A	7	LEU	13.7
1	21-A	7	LEU	13.7
1	22-A	7	LEU	13.7
1	23-A	7	LEU	13.7
1	24-A	7	LEU	13.7
1	25-A	7	LEU	13.7
1	26-A	7	LEU	13.7
1	27-A	7	LEU	13.7
1	28-A	7	LEU	13.7
1	29-A	7	LEU	13.7
1	30-A	7	LEU	13.7
1	31-A	7	LEU	13.7
1	32-A	7	LEU	13.7
1	33-A	7	LEU	13.7
1	34-A	7	LEU	13.7
1	35-A	7	LEU	13.7
1	36-A	7	LEU	13.7
1	37-A	7	LEU	13.7
1	38-A	7	LEU	13.7
1	39-A	7	LEU	13.7
1	40-A	7	LEU	13.7
1	41-A	7	LEU	13.7
1	42-A	7	LEU	13.7
1	43-A	7	LEU	13.7
1	44-A	7	LEU	13.7
1	1-A	437	SER	12.7
1	2-A	437	SER	12.7
1	3-A	437	SER	12.7
1	4-A	437	SER	12.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	5-A	437	SER	12.7
1	6-A	437	SER	12.7
1	7-A	437	SER	12.7
1	8-A	437	SER	12.7
1	9-A	437	SER	12.7
1	10-A	437	SER	12.7
1	11-A	437	SER	12.7
1	12-A	437	SER	12.7
1	13-A	437	SER	12.7
1	14-A	437	SER	12.7
1	15-A	437	SER	12.7
1	16-A	437	SER	12.7
1	17-A	437	SER	12.7
1	18-A	437	SER	12.7
1	19-A	437	SER	12.7
1	20-A	437	SER	12.7
1	21-A	437	SER	12.7
1	22-A	437	SER	12.7
1	23-A	437	SER	12.7
1	24-A	437	SER	12.7
1	25-A	437	SER	12.7
1	26-A	437	SER	12.7
1	27-A	437	SER	12.7
1	28-A	437	SER	12.7
1	29-A	437	SER	12.7
1	30-A	437	SER	12.7
1	31-A	437	SER	12.7
1	32-A	437	SER	12.7
1	33-A	437	SER	12.7
1	34-A	437	SER	12.7
1	35-A	437	SER	12.7
1	36-A	437	SER	12.7
1	37-A	437	SER	12.7
1	38-A	437	SER	12.7
1	39-A	437	SER	12.7
1	40-A	437	SER	12.7
1	41-A	437	SER	12.7
1	42-A	437	SER	12.7
1	43-A	437	SER	12.7
1	44-A	437	SER	12.7
1	1-A	5	VAL	9.8
1	2-A	5	VAL	9.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	3-A	5	VAL	9.8
1	4-A	5	VAL	9.8
1	5-A	5	VAL	9.8
1	6-A	5	VAL	9.8
1	7-A	5	VAL	9.8
1	8-A	5	VAL	9.8
1	9-A	5	VAL	9.8
1	10-A	5	VAL	9.8
1	11-A	5	VAL	9.8
1	12-A	5	VAL	9.8
1	13-A	5	VAL	9.8
1	14-A	5	VAL	9.8
1	15-A	5	VAL	9.8
1	16-A	5	VAL	9.8
1	17-A	5	VAL	9.8
1	18-A	5	VAL	9.8
1	19-A	5	VAL	9.8
1	20-A	5	VAL	9.8
1	21-A	5	VAL	9.8
1	22-A	5	VAL	9.8
1	23-A	5	VAL	9.8
1	24-A	5	VAL	9.8
1	25-A	5	VAL	9.8
1	26-A	5	VAL	9.8
1	27-A	5	VAL	9.8
1	28-A	5	VAL	9.8
1	29-A	5	VAL	9.8
1	30-A	5	VAL	9.8
1	31-A	5	VAL	9.8
1	32-A	5	VAL	9.8
1	33-A	5	VAL	9.8
1	34-A	5	VAL	9.8
1	35-A	5	VAL	9.8
1	36-A	5	VAL	9.8
1	37-A	5	VAL	9.8
1	38-A	5	VAL	9.8
1	39-A	5	VAL	9.8
1	40-A	5	VAL	9.8
1	41-A	5	VAL	9.8
1	42-A	5	VAL	9.8
1	43-A	5	VAL	9.8
1	44-A	5	VAL	9.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	8	MET	9.6
1	2-A	8	MET	9.6
1	3-A	8	MET	9.6
1	4-A	8	MET	9.6
1	5-A	8	MET	9.6
1	6-A	8	MET	9.6
1	7-A	8	MET	9.6
1	8-A	8	MET	9.6
1	9-A	8	MET	9.6
1	10-A	8	MET	9.6
1	11-A	8	MET	9.6
1	12-A	8	MET	9.6
1	13-A	8	MET	9.6
1	14-A	8	MET	9.6
1	15-A	8	MET	9.6
1	16-A	8	MET	9.6
1	17-A	8	MET	9.6
1	18-A	8	MET	9.6
1	19-A	8	MET	9.6
1	20-A	8	MET	9.6
1	21-A	8	MET	9.6
1	22-A	8	MET	9.6
1	23-A	8	MET	9.6
1	24-A	8	MET	9.6
1	25-A	8	MET	9.6
1	26-A	8	MET	9.6
1	27-A	8	MET	9.6
1	28-A	8	MET	9.6
1	29-A	8	MET	9.6
1	30-A	8	MET	9.6
1	31-A	8	MET	9.6
1	32-A	8	MET	9.6
1	33-A	8	MET	9.6
1	34-A	8	MET	9.6
1	35-A	8	MET	9.6
1	36-A	8	MET	9.6
1	37-A	8	MET	9.6
1	38-A	8	MET	9.6
1	39-A	8	MET	9.6
1	40-A	8	MET	9.6
1	41-A	8	MET	9.6
1	42-A	8	MET	9.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	43-A	8	MET	9.6
1	44-A	8	MET	9.6
1	1-A	463	GLY	7.6
1	2-A	463	GLY	7.6
1	3-A	463	GLY	7.6
1	4-A	463	GLY	7.6
1	5-A	463	GLY	7.6
1	6-A	463	GLY	7.6
1	7-A	463	GLY	7.6
1	8-A	463	GLY	7.6
1	9-A	463	GLY	7.6
1	10-A	463	GLY	7.6
1	11-A	463	GLY	7.6
1	12-A	463	GLY	7.6
1	13-A	463	GLY	7.6
1	14-A	463	GLY	7.6
1	15-A	463	GLY	7.6
1	16-A	463	GLY	7.6
1	17-A	463	GLY	7.6
1	18-A	463	GLY	7.6
1	19-A	463	GLY	7.6
1	20-A	463	GLY	7.6
1	21-A	463	GLY	7.6
1	22-A	463	GLY	7.6
1	23-A	463	GLY	7.6
1	24-A	463	GLY	7.6
1	25-A	463	GLY	7.6
1	26-A	463	GLY	7.6
1	27-A	463	GLY	7.6
1	28-A	463	GLY	7.6
1	29-A	463	GLY	7.6
1	30-A	463	GLY	7.6
1	31-A	463	GLY	7.6
1	32-A	463	GLY	7.6
1	33-A	463	GLY	7.6
1	34-A	463	GLY	7.6
1	35-A	463	GLY	7.6
1	36-A	463	GLY	7.6
1	37-A	463	GLY	7.6
1	38-A	463	GLY	7.6
1	39-A	463	GLY	7.6
1	40-A	463	GLY	7.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	41-A	463	GLY	7.6
1	42-A	463	GLY	7.6
1	43-A	463	GLY	7.6
1	44-A	463	GLY	7.6
1	1-A	11	LEU	7.2
1	2-A	11	LEU	7.2
1	3-A	11	LEU	7.2
1	4-A	11	LEU	7.2
1	5-A	11	LEU	7.2
1	6-A	11	LEU	7.2
1	7-A	11	LEU	7.2
1	8-A	11	LEU	7.2
1	9-A	11	LEU	7.2
1	10-A	11	LEU	7.2
1	11-A	11	LEU	7.2
1	12-A	11	LEU	7.2
1	13-A	11	LEU	7.2
1	14-A	11	LEU	7.2
1	15-A	11	LEU	7.2
1	16-A	11	LEU	7.2
1	17-A	11	LEU	7.2
1	18-A	11	LEU	7.2
1	19-A	11	LEU	7.2
1	20-A	11	LEU	7.2
1	21-A	11	LEU	7.2
1	22-A	11	LEU	7.2
1	23-A	11	LEU	7.2
1	24-A	11	LEU	7.2
1	25-A	11	LEU	7.2
1	26-A	11	LEU	7.2
1	27-A	11	LEU	7.2
1	28-A	11	LEU	7.2
1	29-A	11	LEU	7.2
1	30-A	11	LEU	7.2
1	31-A	11	LEU	7.2
1	32-A	11	LEU	7.2
1	33-A	11	LEU	7.2
1	34-A	11	LEU	7.2
1	35-A	11	LEU	7.2
1	36-A	11	LEU	7.2
1	37-A	11	LEU	7.2
1	38-A	11	LEU	7.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	39-A	11	LEU	7.2
1	40-A	11	LEU	7.2
1	41-A	11	LEU	7.2
1	42-A	11	LEU	7.2
1	43-A	11	LEU	7.2
1	44-A	11	LEU	7.2
1	1-A	22	PHE	7.0
1	2-A	22	PHE	7.0
1	3-A	22	PHE	7.0
1	4-A	22	PHE	7.0
1	5-A	22	PHE	7.0
1	6-A	22	PHE	7.0
1	7-A	22	PHE	7.0
1	8-A	22	PHE	7.0
1	9-A	22	PHE	7.0
1	10-A	22	PHE	7.0
1	11-A	22	PHE	7.0
1	12-A	22	PHE	7.0
1	13-A	22	PHE	7.0
1	14-A	22	PHE	7.0
1	15-A	22	PHE	7.0
1	16-A	22	PHE	7.0
1	17-A	22	PHE	7.0
1	18-A	22	PHE	7.0
1	19-A	22	PHE	7.0
1	20-A	22	PHE	7.0
1	21-A	22	PHE	7.0
1	22-A	22	PHE	7.0
1	23-A	22	PHE	7.0
1	24-A	22	PHE	7.0
1	25-A	22	PHE	7.0
1	26-A	22	PHE	7.0
1	27-A	22	PHE	7.0
1	28-A	22	PHE	7.0
1	29-A	22	PHE	7.0
1	30-A	22	PHE	7.0
1	31-A	22	PHE	7.0
1	32-A	22	PHE	7.0
1	33-A	22	PHE	7.0
1	34-A	22	PHE	7.0
1	35-A	22	PHE	7.0
1	36-A	22	PHE	7.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	37-A	22	PHE	7.0
1	38-A	22	PHE	7.0
1	39-A	22	PHE	7.0
1	40-A	22	PHE	7.0
1	41-A	22	PHE	7.0
1	42-A	22	PHE	7.0
1	43-A	22	PHE	7.0
1	44-A	22	PHE	7.0
1	1-A	435	HIS	6.8
1	2-A	435	HIS	6.8
1	3-A	435	HIS	6.8
1	4-A	435	HIS	6.8
1	5-A	435	HIS	6.8
1	6-A	435	HIS	6.8
1	7-A	435	HIS	6.8
1	8-A	435	HIS	6.8
1	9-A	435	HIS	6.8
1	10-A	435	HIS	6.8
1	11-A	435	HIS	6.8
1	12-A	435	HIS	6.8
1	13-A	435	HIS	6.8
1	14-A	435	HIS	6.8
1	15-A	435	HIS	6.8
1	16-A	435	HIS	6.8
1	17-A	435	HIS	6.8
1	18-A	435	HIS	6.8
1	19-A	435	HIS	6.8
1	20-A	435	HIS	6.8
1	21-A	435	HIS	6.8
1	22-A	435	HIS	6.8
1	23-A	435	HIS	6.8
1	24-A	435	HIS	6.8
1	25-A	435	HIS	6.8
1	26-A	435	HIS	6.8
1	27-A	435	HIS	6.8
1	28-A	435	HIS	6.8
1	29-A	435	HIS	6.8
1	30-A	435	HIS	6.8
1	31-A	435	HIS	6.8
1	32-A	435	HIS	6.8
1	33-A	435	HIS	6.8
1	34-A	435	HIS	6.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	35-A	435	HIS	6.8
1	36-A	435	HIS	6.8
1	37-A	435	HIS	6.8
1	38-A	435	HIS	6.8
1	39-A	435	HIS	6.8
1	40-A	435	HIS	6.8
1	41-A	435	HIS	6.8
1	42-A	435	HIS	6.8
1	43-A	435	HIS	6.8
1	44-A	435	HIS	6.8
1	1-A	467	LYS	5.6
1	2-A	467	LYS	5.6
1	3-A	467	LYS	5.6
1	4-A	467	LYS	5.6
1	5-A	467	LYS	5.6
1	6-A	467	LYS	5.6
1	7-A	467	LYS	5.6
1	8-A	467	LYS	5.6
1	9-A	467	LYS	5.6
1	10-A	467	LYS	5.6
1	11-A	467	LYS	5.6
1	12-A	467	LYS	5.6
1	13-A	467	LYS	5.6
1	14-A	467	LYS	5.6
1	15-A	467	LYS	5.6
1	16-A	467	LYS	5.6
1	17-A	467	LYS	5.6
1	18-A	467	LYS	5.6
1	19-A	467	LYS	5.6
1	20-A	467	LYS	5.6
1	21-A	467	LYS	5.6
1	22-A	467	LYS	5.6
1	23-A	467	LYS	5.6
1	24-A	467	LYS	5.6
1	25-A	467	LYS	5.6
1	26-A	467	LYS	5.6
1	27-A	467	LYS	5.6
1	28-A	467	LYS	5.6
1	29-A	467	LYS	5.6
1	30-A	467	LYS	5.6
1	31-A	467	LYS	5.6
1	32-A	467	LYS	5.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	33-A	467	LYS	5.6
1	34-A	467	LYS	5.6
1	35-A	467	LYS	5.6
1	36-A	467	LYS	5.6
1	37-A	467	LYS	5.6
1	38-A	467	LYS	5.6
1	39-A	467	LYS	5.6
1	40-A	467	LYS	5.6
1	41-A	467	LYS	5.6
1	42-A	467	LYS	5.6
1	43-A	467	LYS	5.6
1	44-A	467	LYS	5.6
1	1-A	465	GLY	5.6
1	2-A	465	GLY	5.6
1	3-A	465	GLY	5.6
1	4-A	465	GLY	5.6
1	5-A	465	GLY	5.6
1	6-A	465	GLY	5.6
1	7-A	465	GLY	5.6
1	8-A	465	GLY	5.6
1	9-A	465	GLY	5.6
1	10-A	465	GLY	5.6
1	11-A	465	GLY	5.6
1	12-A	465	GLY	5.6
1	13-A	465	GLY	5.6
1	14-A	465	GLY	5.6
1	15-A	465	GLY	5.6
1	16-A	465	GLY	5.6
1	17-A	465	GLY	5.6
1	18-A	465	GLY	5.6
1	19-A	465	GLY	5.6
1	20-A	465	GLY	5.6
1	21-A	465	GLY	5.6
1	22-A	465	GLY	5.6
1	23-A	465	GLY	5.6
1	24-A	465	GLY	5.6
1	25-A	465	GLY	5.6
1	26-A	465	GLY	5.6
1	27-A	465	GLY	5.6
1	28-A	465	GLY	5.6
1	29-A	465	GLY	5.6
1	30-A	465	GLY	5.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	31-A	465	GLY	5.6
1	32-A	465	GLY	5.6
1	33-A	465	GLY	5.6
1	34-A	465	GLY	5.6
1	35-A	465	GLY	5.6
1	36-A	465	GLY	5.6
1	37-A	465	GLY	5.6
1	38-A	465	GLY	5.6
1	39-A	465	GLY	5.6
1	40-A	465	GLY	5.6
1	41-A	465	GLY	5.6
1	42-A	465	GLY	5.6
1	43-A	465	GLY	5.6
1	44-A	465	GLY	5.6
1	1-A	9	GLU	5.5
1	2-A	9	GLU	5.5
1	3-A	9	GLU	5.5
1	4-A	9	GLU	5.5
1	5-A	9	GLU	5.5
1	6-A	9	GLU	5.5
1	7-A	9	GLU	5.5
1	8-A	9	GLU	5.5
1	9-A	9	GLU	5.5
1	10-A	9	GLU	5.5
1	11-A	9	GLU	5.5
1	12-A	9	GLU	5.5
1	13-A	9	GLU	5.5
1	14-A	9	GLU	5.5
1	15-A	9	GLU	5.5
1	16-A	9	GLU	5.5
1	17-A	9	GLU	5.5
1	18-A	9	GLU	5.5
1	19-A	9	GLU	5.5
1	20-A	9	GLU	5.5
1	21-A	9	GLU	5.5
1	22-A	9	GLU	5.5
1	23-A	9	GLU	5.5
1	24-A	9	GLU	5.5
1	25-A	9	GLU	5.5
1	26-A	9	GLU	5.5
1	27-A	9	GLU	5.5
1	28-A	9	GLU	5.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	29-A	9	GLU	5.5
1	30-A	9	GLU	5.5
1	31-A	9	GLU	5.5
1	32-A	9	GLU	5.5
1	33-A	9	GLU	5.5
1	34-A	9	GLU	5.5
1	35-A	9	GLU	5.5
1	36-A	9	GLU	5.5
1	37-A	9	GLU	5.5
1	38-A	9	GLU	5.5
1	39-A	9	GLU	5.5
1	40-A	9	GLU	5.5
1	41-A	9	GLU	5.5
1	42-A	9	GLU	5.5
1	43-A	9	GLU	5.5
1	44-A	9	GLU	5.5
1	1-A	18	ILE	4.9
1	2-A	18	ILE	4.9
1	3-A	18	ILE	4.9
1	4-A	18	ILE	4.9
1	5-A	18	ILE	4.9
1	6-A	18	ILE	4.9
1	7-A	18	ILE	4.9
1	8-A	18	ILE	4.9
1	9-A	18	ILE	4.9
1	10-A	18	ILE	4.9
1	11-A	18	ILE	4.9
1	12-A	18	ILE	4.9
1	13-A	18	ILE	4.9
1	14-A	18	ILE	4.9
1	15-A	18	ILE	4.9
1	16-A	18	ILE	4.9
1	17-A	18	ILE	4.9
1	18-A	18	ILE	4.9
1	19-A	18	ILE	4.9
1	20-A	18	ILE	4.9
1	21-A	18	ILE	4.9
1	22-A	18	ILE	4.9
1	23-A	18	ILE	4.9
1	24-A	18	ILE	4.9
1	25-A	18	ILE	4.9
1	26-A	18	ILE	4.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	27-A	18	ILE	4.9
1	28-A	18	ILE	4.9
1	29-A	18	ILE	4.9
1	30-A	18	ILE	4.9
1	31-A	18	ILE	4.9
1	32-A	18	ILE	4.9
1	33-A	18	ILE	4.9
1	34-A	18	ILE	4.9
1	35-A	18	ILE	4.9
1	36-A	18	ILE	4.9
1	37-A	18	ILE	4.9
1	38-A	18	ILE	4.9
1	39-A	18	ILE	4.9
1	40-A	18	ILE	4.9
1	41-A	18	ILE	4.9
1	42-A	18	ILE	4.9
1	43-A	18	ILE	4.9
1	44-A	18	ILE	4.9
1	1-A	522	GLU	3.8
1	2-A	522	GLU	3.8
1	3-A	522	GLU	3.8
1	4-A	522	GLU	3.8
1	5-A	522	GLU	3.8
1	6-A	522	GLU	3.8
1	7-A	522	GLU	3.8
1	8-A	522	GLU	3.8
1	9-A	522	GLU	3.8
1	10-A	522	GLU	3.8
1	11-A	522	GLU	3.8
1	12-A	522	GLU	3.8
1	13-A	522	GLU	3.8
1	14-A	522	GLU	3.8
1	15-A	522	GLU	3.8
1	16-A	522	GLU	3.8
1	17-A	522	GLU	3.8
1	18-A	522	GLU	3.8
1	19-A	522	GLU	3.8
1	20-A	522	GLU	3.8
1	21-A	522	GLU	3.8
1	22-A	522	GLU	3.8
1	23-A	522	GLU	3.8
1	24-A	522	GLU	3.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	25-A	522	GLU	3.8
1	26-A	522	GLU	3.8
1	27-A	522	GLU	3.8
1	28-A	522	GLU	3.8
1	29-A	522	GLU	3.8
1	30-A	522	GLU	3.8
1	31-A	522	GLU	3.8
1	32-A	522	GLU	3.8
1	33-A	522	GLU	3.8
1	34-A	522	GLU	3.8
1	35-A	522	GLU	3.8
1	36-A	522	GLU	3.8
1	37-A	522	GLU	3.8
1	38-A	522	GLU	3.8
1	39-A	522	GLU	3.8
1	40-A	522	GLU	3.8
1	41-A	522	GLU	3.8
1	42-A	522	GLU	3.8
1	43-A	522	GLU	3.8
1	44-A	522	GLU	3.8
1	1-A	360	LYS	3.8
1	2-A	360	LYS	3.8
1	3-A	360	LYS	3.8
1	4-A	360	LYS	3.8
1	5-A	360	LYS	3.8
1	6-A	360	LYS	3.8
1	7-A	360	LYS	3.8
1	8-A	360	LYS	3.8
1	9-A	360	LYS	3.8
1	10-A	360	LYS	3.8
1	11-A	360	LYS	3.8
1	12-A	360	LYS	3.8
1	13-A	360	LYS	3.8
1	14-A	360	LYS	3.8
1	15-A	360	LYS	3.8
1	16-A	360	LYS	3.8
1	17-A	360	LYS	3.8
1	18-A	360	LYS	3.8
1	19-A	360	LYS	3.8
1	20-A	360	LYS	3.8
1	21-A	360	LYS	3.8
1	22-A	360	LYS	3.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	23-A	360	LYS	3.8
1	24-A	360	LYS	3.8
1	25-A	360	LYS	3.8
1	26-A	360	LYS	3.8
1	27-A	360	LYS	3.8
1	28-A	360	LYS	3.8
1	29-A	360	LYS	3.8
1	30-A	360	LYS	3.8
1	31-A	360	LYS	3.8
1	32-A	360	LYS	3.8
1	33-A	360	LYS	3.8
1	34-A	360	LYS	3.8
1	35-A	360	LYS	3.8
1	36-A	360	LYS	3.8
1	37-A	360	LYS	3.8
1	38-A	360	LYS	3.8
1	39-A	360	LYS	3.8
1	40-A	360	LYS	3.8
1	41-A	360	LYS	3.8
1	42-A	360	LYS	3.8
1	43-A	360	LYS	3.8
1	44-A	360	LYS	3.8
1	1-A	523	ASN	3.6
1	2-A	523	ASN	3.6
1	3-A	523	ASN	3.6
1	4-A	523	ASN	3.6
1	5-A	523	ASN	3.6
1	6-A	523	ASN	3.6
1	7-A	523	ASN	3.6
1	8-A	523	ASN	3.6
1	9-A	523	ASN	3.6
1	10-A	523	ASN	3.6
1	11-A	523	ASN	3.6
1	12-A	523	ASN	3.6
1	13-A	523	ASN	3.6
1	14-A	523	ASN	3.6
1	15-A	523	ASN	3.6
1	16-A	523	ASN	3.6
1	17-A	523	ASN	3.6
1	18-A	523	ASN	3.6
1	19-A	523	ASN	3.6
1	20-A	523	ASN	3.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	21-A	523	ASN	3.6
1	22-A	523	ASN	3.6
1	23-A	523	ASN	3.6
1	24-A	523	ASN	3.6
1	25-A	523	ASN	3.6
1	26-A	523	ASN	3.6
1	27-A	523	ASN	3.6
1	28-A	523	ASN	3.6
1	29-A	523	ASN	3.6
1	30-A	523	ASN	3.6
1	31-A	523	ASN	3.6
1	32-A	523	ASN	3.6
1	33-A	523	ASN	3.6
1	34-A	523	ASN	3.6
1	35-A	523	ASN	3.6
1	36-A	523	ASN	3.6
1	37-A	523	ASN	3.6
1	38-A	523	ASN	3.6
1	39-A	523	ASN	3.6
1	40-A	523	ASN	3.6
1	41-A	523	ASN	3.6
1	42-A	523	ASN	3.6
1	43-A	523	ASN	3.6
1	44-A	523	ASN	3.6
1	1-A	524	VAL	3.6
1	2-A	524	VAL	3.6
1	3-A	524	VAL	3.6
1	4-A	524	VAL	3.6
1	5-A	524	VAL	3.6
1	6-A	524	VAL	3.6
1	7-A	524	VAL	3.6
1	8-A	524	VAL	3.6
1	9-A	524	VAL	3.6
1	10-A	524	VAL	3.6
1	11-A	524	VAL	3.6
1	12-A	524	VAL	3.6
1	13-A	524	VAL	3.6
1	14-A	524	VAL	3.6
1	15-A	524	VAL	3.6
1	16-A	524	VAL	3.6
1	17-A	524	VAL	3.6
1	18-A	524	VAL	3.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	19-A	524	VAL	3.6
1	20-A	524	VAL	3.6
1	21-A	524	VAL	3.6
1	22-A	524	VAL	3.6
1	23-A	524	VAL	3.6
1	24-A	524	VAL	3.6
1	25-A	524	VAL	3.6
1	26-A	524	VAL	3.6
1	27-A	524	VAL	3.6
1	28-A	524	VAL	3.6
1	29-A	524	VAL	3.6
1	30-A	524	VAL	3.6
1	31-A	524	VAL	3.6
1	32-A	524	VAL	3.6
1	33-A	524	VAL	3.6
1	34-A	524	VAL	3.6
1	35-A	524	VAL	3.6
1	36-A	524	VAL	3.6
1	37-A	524	VAL	3.6
1	38-A	524	VAL	3.6
1	39-A	524	VAL	3.6
1	40-A	524	VAL	3.6
1	41-A	524	VAL	3.6
1	42-A	524	VAL	3.6
1	43-A	524	VAL	3.6
1	44-A	524	VAL	3.6
1	1-A	10	LYS	3.4
1	2-A	10	LYS	3.4
1	3-A	10	LYS	3.4
1	4-A	10	LYS	3.4
1	5-A	10	LYS	3.4
1	6-A	10	LYS	3.4
1	7-A	10	LYS	3.4
1	8-A	10	LYS	3.4
1	9-A	10	LYS	3.4
1	10-A	10	LYS	3.4
1	11-A	10	LYS	3.4
1	12-A	10	LYS	3.4
1	13-A	10	LYS	3.4
1	14-A	10	LYS	3.4
1	15-A	10	LYS	3.4
1	16-A	10	LYS	3.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	17-A	10	LYS	3.4
1	18-A	10	LYS	3.4
1	19-A	10	LYS	3.4
1	20-A	10	LYS	3.4
1	21-A	10	LYS	3.4
1	22-A	10	LYS	3.4
1	23-A	10	LYS	3.4
1	24-A	10	LYS	3.4
1	25-A	10	LYS	3.4
1	26-A	10	LYS	3.4
1	27-A	10	LYS	3.4
1	28-A	10	LYS	3.4
1	29-A	10	LYS	3.4
1	30-A	10	LYS	3.4
1	31-A	10	LYS	3.4
1	32-A	10	LYS	3.4
1	33-A	10	LYS	3.4
1	34-A	10	LYS	3.4
1	35-A	10	LYS	3.4
1	36-A	10	LYS	3.4
1	37-A	10	LYS	3.4
1	38-A	10	LYS	3.4
1	39-A	10	LYS	3.4
1	40-A	10	LYS	3.4
1	41-A	10	LYS	3.4
1	42-A	10	LYS	3.4
1	43-A	10	LYS	3.4
1	44-A	10	LYS	3.4
1	1-A	436	THR	3.3
1	2-A	436	THR	3.3
1	3-A	436	THR	3.3
1	4-A	436	THR	3.3
1	5-A	436	THR	3.3
1	6-A	436	THR	3.3
1	7-A	436	THR	3.3
1	8-A	436	THR	3.3
1	9-A	436	THR	3.3
1	10-A	436	THR	3.3
1	11-A	436	THR	3.3
1	12-A	436	THR	3.3
1	13-A	436	THR	3.3
1	14-A	436	THR	3.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	15-A	436	THR	3.3
1	16-A	436	THR	3.3
1	17-A	436	THR	3.3
1	18-A	436	THR	3.3
1	19-A	436	THR	3.3
1	20-A	436	THR	3.3
1	21-A	436	THR	3.3
1	22-A	436	THR	3.3
1	23-A	436	THR	3.3
1	24-A	436	THR	3.3
1	25-A	436	THR	3.3
1	26-A	436	THR	3.3
1	27-A	436	THR	3.3
1	28-A	436	THR	3.3
1	29-A	436	THR	3.3
1	30-A	436	THR	3.3
1	31-A	436	THR	3.3
1	32-A	436	THR	3.3
1	33-A	436	THR	3.3
1	34-A	436	THR	3.3
1	35-A	436	THR	3.3
1	36-A	436	THR	3.3
1	37-A	436	THR	3.3
1	38-A	436	THR	3.3
1	39-A	436	THR	3.3
1	40-A	436	THR	3.3
1	41-A	436	THR	3.3
1	42-A	436	THR	3.3
1	43-A	436	THR	3.3
1	44-A	436	THR	3.3
1	1-A	100	PHE	3.3
1	2-A	100	PHE	3.3
1	3-A	100	PHE	3.3
1	4-A	100	PHE	3.3
1	5-A	100	PHE	3.3
1	6-A	100	PHE	3.3
1	7-A	100	PHE	3.3
1	8-A	100	PHE	3.3
1	9-A	100	PHE	3.3
1	10-A	100	PHE	3.3
1	11-A	100	PHE	3.3
1	12-A	100	PHE	3.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	13-A	100	PHE	3.3
1	14-A	100	PHE	3.3
1	15-A	100	PHE	3.3
1	16-A	100	PHE	3.3
1	17-A	100	PHE	3.3
1	18-A	100	PHE	3.3
1	19-A	100	PHE	3.3
1	20-A	100	PHE	3.3
1	21-A	100	PHE	3.3
1	22-A	100	PHE	3.3
1	23-A	100	PHE	3.3
1	24-A	100	PHE	3.3
1	25-A	100	PHE	3.3
1	26-A	100	PHE	3.3
1	27-A	100	PHE	3.3
1	28-A	100	PHE	3.3
1	29-A	100	PHE	3.3
1	30-A	100	PHE	3.3
1	31-A	100	PHE	3.3
1	32-A	100	PHE	3.3
1	33-A	100	PHE	3.3
1	34-A	100	PHE	3.3
1	35-A	100	PHE	3.3
1	36-A	100	PHE	3.3
1	37-A	100	PHE	3.3
1	38-A	100	PHE	3.3
1	39-A	100	PHE	3.3
1	40-A	100	PHE	3.3
1	41-A	100	PHE	3.3
1	42-A	100	PHE	3.3
1	43-A	100	PHE	3.3
1	44-A	100	PHE	3.3
1	1-A	438	GLY	3.2
1	2-A	438	GLY	3.2
1	3-A	438	GLY	3.2
1	4-A	438	GLY	3.2
1	5-A	438	GLY	3.2
1	6-A	438	GLY	3.2
1	7-A	438	GLY	3.2
1	8-A	438	GLY	3.2
1	9-A	438	GLY	3.2
1	10-A	438	GLY	3.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	11-A	438	GLY	3.2
1	12-A	438	GLY	3.2
1	13-A	438	GLY	3.2
1	14-A	438	GLY	3.2
1	15-A	438	GLY	3.2
1	16-A	438	GLY	3.2
1	17-A	438	GLY	3.2
1	18-A	438	GLY	3.2
1	19-A	438	GLY	3.2
1	20-A	438	GLY	3.2
1	21-A	438	GLY	3.2
1	22-A	438	GLY	3.2
1	23-A	438	GLY	3.2
1	24-A	438	GLY	3.2
1	25-A	438	GLY	3.2
1	26-A	438	GLY	3.2
1	27-A	438	GLY	3.2
1	28-A	438	GLY	3.2
1	29-A	438	GLY	3.2
1	30-A	438	GLY	3.2
1	31-A	438	GLY	3.2
1	32-A	438	GLY	3.2
1	33-A	438	GLY	3.2
1	34-A	438	GLY	3.2
1	35-A	438	GLY	3.2
1	36-A	438	GLY	3.2
1	37-A	438	GLY	3.2
1	38-A	438	GLY	3.2
1	39-A	438	GLY	3.2
1	40-A	438	GLY	3.2
1	41-A	438	GLY	3.2
1	42-A	438	GLY	3.2
1	43-A	438	GLY	3.2
1	44-A	438	GLY	3.2
1	1-A	466	VAL	3.2
1	2-A	466	VAL	3.2
1	3-A	466	VAL	3.2
1	4-A	466	VAL	3.2
1	5-A	466	VAL	3.2
1	6-A	466	VAL	3.2
1	7-A	466	VAL	3.2
1	8-A	466	VAL	3.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	9-A	466	VAL	3.2
1	10-A	466	VAL	3.2
1	11-A	466	VAL	3.2
1	12-A	466	VAL	3.2
1	13-A	466	VAL	3.2
1	14-A	466	VAL	3.2
1	15-A	466	VAL	3.2
1	16-A	466	VAL	3.2
1	17-A	466	VAL	3.2
1	18-A	466	VAL	3.2
1	19-A	466	VAL	3.2
1	20-A	466	VAL	3.2
1	21-A	466	VAL	3.2
1	22-A	466	VAL	3.2
1	23-A	466	VAL	3.2
1	24-A	466	VAL	3.2
1	25-A	466	VAL	3.2
1	26-A	466	VAL	3.2
1	27-A	466	VAL	3.2
1	28-A	466	VAL	3.2
1	29-A	466	VAL	3.2
1	30-A	466	VAL	3.2
1	31-A	466	VAL	3.2
1	32-A	466	VAL	3.2
1	33-A	466	VAL	3.2
1	34-A	466	VAL	3.2
1	35-A	466	VAL	3.2
1	36-A	466	VAL	3.2
1	37-A	466	VAL	3.2
1	38-A	466	VAL	3.2
1	39-A	466	VAL	3.2
1	40-A	466	VAL	3.2
1	41-A	466	VAL	3.2
1	42-A	466	VAL	3.2
1	43-A	466	VAL	3.2
1	44-A	466	VAL	3.2
1	1-A	361	GLN	3.1
1	2-A	361	GLN	3.1
1	3-A	361	GLN	3.1
1	4-A	361	GLN	3.1
1	5-A	361	GLN	3.1
1	6-A	361	GLN	3.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	7-A	361	GLN	3.1
1	8-A	361	GLN	3.1
1	9-A	361	GLN	3.1
1	10-A	361	GLN	3.1
1	11-A	361	GLN	3.1
1	12-A	361	GLN	3.1
1	13-A	361	GLN	3.1
1	14-A	361	GLN	3.1
1	15-A	361	GLN	3.1
1	16-A	361	GLN	3.1
1	17-A	361	GLN	3.1
1	18-A	361	GLN	3.1
1	19-A	361	GLN	3.1
1	20-A	361	GLN	3.1
1	21-A	361	GLN	3.1
1	22-A	361	GLN	3.1
1	23-A	361	GLN	3.1
1	24-A	361	GLN	3.1
1	25-A	361	GLN	3.1
1	26-A	361	GLN	3.1
1	27-A	361	GLN	3.1
1	28-A	361	GLN	3.1
1	29-A	361	GLN	3.1
1	30-A	361	GLN	3.1
1	31-A	361	GLN	3.1
1	32-A	361	GLN	3.1
1	33-A	361	GLN	3.1
1	34-A	361	GLN	3.1
1	35-A	361	GLN	3.1
1	36-A	361	GLN	3.1
1	37-A	361	GLN	3.1
1	38-A	361	GLN	3.1
1	39-A	361	GLN	3.1
1	40-A	361	GLN	3.1
1	41-A	361	GLN	3.1
1	42-A	361	GLN	3.1
1	43-A	361	GLN	3.1
1	44-A	361	GLN	3.1
1	1-A	124	GLU	2.8
1	2-A	124	GLU	2.8
1	3-A	124	GLU	2.8
1	4-A	124	GLU	2.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	5-A	124	GLU	2.8
1	6-A	124	GLU	2.8
1	7-A	124	GLU	2.8
1	8-A	124	GLU	2.8
1	9-A	124	GLU	2.8
1	10-A	124	GLU	2.8
1	11-A	124	GLU	2.8
1	12-A	124	GLU	2.8
1	13-A	124	GLU	2.8
1	14-A	124	GLU	2.8
1	15-A	124	GLU	2.8
1	16-A	124	GLU	2.8
1	17-A	124	GLU	2.8
1	18-A	124	GLU	2.8
1	19-A	124	GLU	2.8
1	20-A	124	GLU	2.8
1	21-A	124	GLU	2.8
1	22-A	124	GLU	2.8
1	23-A	124	GLU	2.8
1	24-A	124	GLU	2.8
1	25-A	124	GLU	2.8
1	26-A	124	GLU	2.8
1	27-A	124	GLU	2.8
1	28-A	124	GLU	2.8
1	29-A	124	GLU	2.8
1	30-A	124	GLU	2.8
1	31-A	124	GLU	2.8
1	32-A	124	GLU	2.8
1	33-A	124	GLU	2.8
1	34-A	124	GLU	2.8
1	35-A	124	GLU	2.8
1	36-A	124	GLU	2.8
1	37-A	124	GLU	2.8
1	38-A	124	GLU	2.8
1	39-A	124	GLU	2.8
1	40-A	124	GLU	2.8
1	41-A	124	GLU	2.8
1	42-A	124	GLU	2.8
1	43-A	124	GLU	2.8
1	44-A	124	GLU	2.8
1	1-A	461	ARG	2.7
1	2-A	461	ARG	2.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	3-A	461	ARG	2.7
1	4-A	461	ARG	2.7
1	5-A	461	ARG	2.7
1	6-A	461	ARG	2.7
1	7-A	461	ARG	2.7
1	8-A	461	ARG	2.7
1	9-A	461	ARG	2.7
1	10-A	461	ARG	2.7
1	11-A	461	ARG	2.7
1	12-A	461	ARG	2.7
1	13-A	461	ARG	2.7
1	14-A	461	ARG	2.7
1	15-A	461	ARG	2.7
1	16-A	461	ARG	2.7
1	17-A	461	ARG	2.7
1	18-A	461	ARG	2.7
1	19-A	461	ARG	2.7
1	20-A	461	ARG	2.7
1	21-A	461	ARG	2.7
1	22-A	461	ARG	2.7
1	23-A	461	ARG	2.7
1	24-A	461	ARG	2.7
1	25-A	461	ARG	2.7
1	26-A	461	ARG	2.7
1	27-A	461	ARG	2.7
1	28-A	461	ARG	2.7
1	29-A	461	ARG	2.7
1	30-A	461	ARG	2.7
1	31-A	461	ARG	2.7
1	32-A	461	ARG	2.7
1	33-A	461	ARG	2.7
1	34-A	461	ARG	2.7
1	35-A	461	ARG	2.7
1	36-A	461	ARG	2.7
1	37-A	461	ARG	2.7
1	38-A	461	ARG	2.7
1	39-A	461	ARG	2.7
1	40-A	461	ARG	2.7
1	41-A	461	ARG	2.7
1	42-A	461	ARG	2.7
1	43-A	461	ARG	2.7
1	44-A	461	ARG	2.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	83	ALA	2.7
1	2-A	83	ALA	2.7
1	3-A	83	ALA	2.7
1	4-A	83	ALA	2.7
1	5-A	83	ALA	2.7
1	6-A	83	ALA	2.7
1	7-A	83	ALA	2.7
1	8-A	83	ALA	2.7
1	9-A	83	ALA	2.7
1	10-A	83	ALA	2.7
1	11-A	83	ALA	2.7
1	12-A	83	ALA	2.7
1	13-A	83	ALA	2.7
1	14-A	83	ALA	2.7
1	15-A	83	ALA	2.7
1	16-A	83	ALA	2.7
1	17-A	83	ALA	2.7
1	18-A	83	ALA	2.7
1	19-A	83	ALA	2.7
1	20-A	83	ALA	2.7
1	21-A	83	ALA	2.7
1	22-A	83	ALA	2.7
1	23-A	83	ALA	2.7
1	24-A	83	ALA	2.7
1	25-A	83	ALA	2.7
1	26-A	83	ALA	2.7
1	27-A	83	ALA	2.7
1	28-A	83	ALA	2.7
1	29-A	83	ALA	2.7
1	30-A	83	ALA	2.7
1	31-A	83	ALA	2.7
1	32-A	83	ALA	2.7
1	33-A	83	ALA	2.7
1	34-A	83	ALA	2.7
1	35-A	83	ALA	2.7
1	36-A	83	ALA	2.7
1	37-A	83	ALA	2.7
1	38-A	83	ALA	2.7
1	39-A	83	ALA	2.7
1	40-A	83	ALA	2.7
1	41-A	83	ALA	2.7
1	42-A	83	ALA	2.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	43-A	83	ALA	2.7
1	44-A	83	ALA	2.7
1	1-A	25	TYR	2.6
1	2-A	25	TYR	2.6
1	3-A	25	TYR	2.6
1	4-A	25	TYR	2.6
1	5-A	25	TYR	2.6
1	6-A	25	TYR	2.6
1	7-A	25	TYR	2.6
1	8-A	25	TYR	2.6
1	9-A	25	TYR	2.6
1	10-A	25	TYR	2.6
1	11-A	25	TYR	2.6
1	12-A	25	TYR	2.6
1	13-A	25	TYR	2.6
1	14-A	25	TYR	2.6
1	15-A	25	TYR	2.6
1	16-A	25	TYR	2.6
1	17-A	25	TYR	2.6
1	18-A	25	TYR	2.6
1	19-A	25	TYR	2.6
1	20-A	25	TYR	2.6
1	21-A	25	TYR	2.6
1	22-A	25	TYR	2.6
1	23-A	25	TYR	2.6
1	24-A	25	TYR	2.6
1	25-A	25	TYR	2.6
1	26-A	25	TYR	2.6
1	27-A	25	TYR	2.6
1	28-A	25	TYR	2.6
1	29-A	25	TYR	2.6
1	30-A	25	TYR	2.6
1	31-A	25	TYR	2.6
1	32-A	25	TYR	2.6
1	33-A	25	TYR	2.6
1	34-A	25	TYR	2.6
1	35-A	25	TYR	2.6
1	36-A	25	TYR	2.6
1	37-A	25	TYR	2.6
1	38-A	25	TYR	2.6
1	39-A	25	TYR	2.6
1	40-A	25	TYR	2.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	41-A	25	TYR	2.6
1	42-A	25	TYR	2.6
1	43-A	25	TYR	2.6
1	44-A	25	TYR	2.6
1	1-A	439	THR	2.5
1	2-A	439	THR	2.5
1	3-A	439	THR	2.5
1	4-A	439	THR	2.5
1	5-A	439	THR	2.5
1	6-A	439	THR	2.5
1	7-A	439	THR	2.5
1	8-A	439	THR	2.5
1	9-A	439	THR	2.5
1	10-A	439	THR	2.5
1	11-A	439	THR	2.5
1	12-A	439	THR	2.5
1	13-A	439	THR	2.5
1	14-A	439	THR	2.5
1	15-A	439	THR	2.5
1	16-A	439	THR	2.5
1	17-A	439	THR	2.5
1	18-A	439	THR	2.5
1	19-A	439	THR	2.5
1	20-A	439	THR	2.5
1	21-A	439	THR	2.5
1	22-A	439	THR	2.5
1	23-A	439	THR	2.5
1	24-A	439	THR	2.5
1	25-A	439	THR	2.5
1	26-A	439	THR	2.5
1	27-A	439	THR	2.5
1	28-A	439	THR	2.5
1	29-A	439	THR	2.5
1	30-A	439	THR	2.5
1	31-A	439	THR	2.5
1	32-A	439	THR	2.5
1	33-A	439	THR	2.5
1	34-A	439	THR	2.5
1	35-A	439	THR	2.5
1	36-A	439	THR	2.5
1	37-A	439	THR	2.5
1	38-A	439	THR	2.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	39-A	439	THR	2.5
1	40-A	439	THR	2.5
1	41-A	439	THR	2.5
1	42-A	439	THR	2.5
1	43-A	439	THR	2.5
1	44-A	439	THR	2.5
1	1-A	358	ILE	2.4
1	2-A	358	ILE	2.4
1	3-A	358	ILE	2.4
1	4-A	358	ILE	2.4
1	5-A	358	ILE	2.4
1	6-A	358	ILE	2.4
1	7-A	358	ILE	2.4
1	8-A	358	ILE	2.4
1	9-A	358	ILE	2.4
1	10-A	358	ILE	2.4
1	11-A	358	ILE	2.4
1	12-A	358	ILE	2.4
1	13-A	358	ILE	2.4
1	14-A	358	ILE	2.4
1	15-A	358	ILE	2.4
1	16-A	358	ILE	2.4
1	17-A	358	ILE	2.4
1	18-A	358	ILE	2.4
1	19-A	358	ILE	2.4
1	20-A	358	ILE	2.4
1	21-A	358	ILE	2.4
1	22-A	358	ILE	2.4
1	23-A	358	ILE	2.4
1	24-A	358	ILE	2.4
1	25-A	358	ILE	2.4
1	26-A	358	ILE	2.4
1	27-A	358	ILE	2.4
1	28-A	358	ILE	2.4
1	29-A	358	ILE	2.4
1	30-A	358	ILE	2.4
1	31-A	358	ILE	2.4
1	32-A	358	ILE	2.4
1	33-A	358	ILE	2.4
1	34-A	358	ILE	2.4
1	35-A	358	ILE	2.4
1	36-A	358	ILE	2.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	37-A	358	ILE	2.4
1	38-A	358	ILE	2.4
1	39-A	358	ILE	2.4
1	40-A	358	ILE	2.4
1	41-A	358	ILE	2.4
1	42-A	358	ILE	2.4
1	43-A	358	ILE	2.4
1	44-A	358	ILE	2.4
1	1-A	462	SER	2.3
1	2-A	462	SER	2.3
1	3-A	462	SER	2.3
1	4-A	462	SER	2.3
1	5-A	462	SER	2.3
1	6-A	462	SER	2.3
1	7-A	462	SER	2.3
1	8-A	462	SER	2.3
1	9-A	462	SER	2.3
1	10-A	462	SER	2.3
1	11-A	462	SER	2.3
1	12-A	462	SER	2.3
1	13-A	462	SER	2.3
1	14-A	462	SER	2.3
1	15-A	462	SER	2.3
1	16-A	462	SER	2.3
1	17-A	462	SER	2.3
1	18-A	462	SER	2.3
1	19-A	462	SER	2.3
1	20-A	462	SER	2.3
1	21-A	462	SER	2.3
1	22-A	462	SER	2.3
1	23-A	462	SER	2.3
1	24-A	462	SER	2.3
1	25-A	462	SER	2.3
1	26-A	462	SER	2.3
1	27-A	462	SER	2.3
1	28-A	462	SER	2.3
1	29-A	462	SER	2.3
1	30-A	462	SER	2.3
1	31-A	462	SER	2.3
1	32-A	462	SER	2.3
1	33-A	462	SER	2.3
1	34-A	462	SER	2.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	35-A	462	SER	2.3
1	36-A	462	SER	2.3
1	37-A	462	SER	2.3
1	38-A	462	SER	2.3
1	39-A	462	SER	2.3
1	40-A	462	SER	2.3
1	41-A	462	SER	2.3
1	42-A	462	SER	2.3
1	43-A	462	SER	2.3
1	44-A	462	SER	2.3
1	1-A	300	LEU	2.3
1	2-A	300	LEU	2.3
1	3-A	300	LEU	2.3
1	4-A	300	LEU	2.3
1	5-A	300	LEU	2.3
1	6-A	300	LEU	2.3
1	7-A	300	LEU	2.3
1	8-A	300	LEU	2.3
1	9-A	300	LEU	2.3
1	10-A	300	LEU	2.3
1	11-A	300	LEU	2.3
1	12-A	300	LEU	2.3
1	13-A	300	LEU	2.3
1	14-A	300	LEU	2.3
1	15-A	300	LEU	2.3
1	16-A	300	LEU	2.3
1	17-A	300	LEU	2.3
1	18-A	300	LEU	2.3
1	19-A	300	LEU	2.3
1	20-A	300	LEU	2.3
1	21-A	300	LEU	2.3
1	22-A	300	LEU	2.3
1	23-A	300	LEU	2.3
1	24-A	300	LEU	2.3
1	25-A	300	LEU	2.3
1	26-A	300	LEU	2.3
1	27-A	300	LEU	2.3
1	28-A	300	LEU	2.3
1	29-A	300	LEU	2.3
1	30-A	300	LEU	2.3
1	31-A	300	LEU	2.3
1	32-A	300	LEU	2.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	33-A	300	LEU	2.3
1	34-A	300	LEU	2.3
1	35-A	300	LEU	2.3
1	36-A	300	LEU	2.3
1	37-A	300	LEU	2.3
1	38-A	300	LEU	2.3
1	39-A	300	LEU	2.3
1	40-A	300	LEU	2.3
1	41-A	300	LEU	2.3
1	42-A	300	LEU	2.3
1	43-A	300	LEU	2.3
1	44-A	300	LEU	2.3
1	1-A	28	THR	2.3
1	2-A	28	THR	2.3
1	3-A	28	THR	2.3
1	4-A	28	THR	2.3
1	5-A	28	THR	2.3
1	6-A	28	THR	2.3
1	7-A	28	THR	2.3
1	8-A	28	THR	2.3
1	9-A	28	THR	2.3
1	10-A	28	THR	2.3
1	11-A	28	THR	2.3
1	12-A	28	THR	2.3
1	13-A	28	THR	2.3
1	14-A	28	THR	2.3
1	15-A	28	THR	2.3
1	16-A	28	THR	2.3
1	17-A	28	THR	2.3
1	18-A	28	THR	2.3
1	19-A	28	THR	2.3
1	20-A	28	THR	2.3
1	21-A	28	THR	2.3
1	22-A	28	THR	2.3
1	23-A	28	THR	2.3
1	24-A	28	THR	2.3
1	25-A	28	THR	2.3
1	26-A	28	THR	2.3
1	27-A	28	THR	2.3
1	28-A	28	THR	2.3
1	29-A	28	THR	2.3
1	30-A	28	THR	2.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	31-A	28	THR	2.3
1	32-A	28	THR	2.3
1	33-A	28	THR	2.3
1	34-A	28	THR	2.3
1	35-A	28	THR	2.3
1	36-A	28	THR	2.3
1	37-A	28	THR	2.3
1	38-A	28	THR	2.3
1	39-A	28	THR	2.3
1	40-A	28	THR	2.3
1	41-A	28	THR	2.3
1	42-A	28	THR	2.3
1	43-A	28	THR	2.3
1	44-A	28	THR	2.3
1	1-A	460	MET	2.3
1	2-A	460	MET	2.3
1	3-A	460	MET	2.3
1	4-A	460	MET	2.3
1	5-A	460	MET	2.3
1	6-A	460	MET	2.3
1	7-A	460	MET	2.3
1	8-A	460	MET	2.3
1	9-A	460	MET	2.3
1	10-A	460	MET	2.3
1	11-A	460	MET	2.3
1	12-A	460	MET	2.3
1	13-A	460	MET	2.3
1	14-A	460	MET	2.3
1	15-A	460	MET	2.3
1	16-A	460	MET	2.3
1	17-A	460	MET	2.3
1	18-A	460	MET	2.3
1	19-A	460	MET	2.3
1	20-A	460	MET	2.3
1	21-A	460	MET	2.3
1	22-A	460	MET	2.3
1	23-A	460	MET	2.3
1	24-A	460	MET	2.3
1	25-A	460	MET	2.3
1	26-A	460	MET	2.3
1	27-A	460	MET	2.3
1	28-A	460	MET	2.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	29-A	460	MET	2.3
1	30-A	460	MET	2.3
1	31-A	460	MET	2.3
1	32-A	460	MET	2.3
1	33-A	460	MET	2.3
1	34-A	460	MET	2.3
1	35-A	460	MET	2.3
1	36-A	460	MET	2.3
1	37-A	460	MET	2.3
1	38-A	460	MET	2.3
1	39-A	460	MET	2.3
1	40-A	460	MET	2.3
1	41-A	460	MET	2.3
1	42-A	460	MET	2.3
1	43-A	460	MET	2.3
1	44-A	460	MET	2.3
1	1-A	390	THR	2.2
1	2-A	390	THR	2.2
1	3-A	390	THR	2.2
1	4-A	390	THR	2.2
1	5-A	390	THR	2.2
1	6-A	390	THR	2.2
1	7-A	390	THR	2.2
1	8-A	390	THR	2.2
1	9-A	390	THR	2.2
1	10-A	390	THR	2.2
1	11-A	390	THR	2.2
1	12-A	390	THR	2.2
1	13-A	390	THR	2.2
1	14-A	390	THR	2.2
1	15-A	390	THR	2.2
1	16-A	390	THR	2.2
1	17-A	390	THR	2.2
1	18-A	390	THR	2.2
1	19-A	390	THR	2.2
1	20-A	390	THR	2.2
1	21-A	390	THR	2.2
1	22-A	390	THR	2.2
1	23-A	390	THR	2.2
1	24-A	390	THR	2.2
1	25-A	390	THR	2.2
1	26-A	390	THR	2.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	27-A	390	THR	2.2
1	28-A	390	THR	2.2
1	29-A	390	THR	2.2
1	30-A	390	THR	2.2
1	31-A	390	THR	2.2
1	32-A	390	THR	2.2
1	33-A	390	THR	2.2
1	34-A	390	THR	2.2
1	35-A	390	THR	2.2
1	36-A	390	THR	2.2
1	37-A	390	THR	2.2
1	38-A	390	THR	2.2
1	39-A	390	THR	2.2
1	40-A	390	THR	2.2
1	41-A	390	THR	2.2
1	42-A	390	THR	2.2
1	43-A	390	THR	2.2
1	44-A	390	THR	2.2
1	1-A	17	CYS	2.2
1	2-A	17	CYS	2.2
1	3-A	17	CYS	2.2
1	4-A	17	CYS	2.2
1	5-A	17	CYS	2.2
1	6-A	17	CYS	2.2
1	7-A	17	CYS	2.2
1	8-A	17	CYS	2.2
1	9-A	17	CYS	2.2
1	10-A	17	CYS	2.2
1	11-A	17	CYS	2.2
1	12-A	17	CYS	2.2
1	13-A	17	CYS	2.2
1	14-A	17	CYS	2.2
1	15-A	17	CYS	2.2
1	16-A	17	CYS	2.2
1	17-A	17	CYS	2.2
1	18-A	17	CYS	2.2
1	19-A	17	CYS	2.2
1	20-A	17	CYS	2.2
1	21-A	17	CYS	2.2
1	22-A	17	CYS	2.2
1	23-A	17	CYS	2.2
1	24-A	17	CYS	2.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	25-A	17	CYS	2.2
1	26-A	17	CYS	2.2
1	27-A	17	CYS	2.2
1	28-A	17	CYS	2.2
1	29-A	17	CYS	2.2
1	30-A	17	CYS	2.2
1	31-A	17	CYS	2.2
1	32-A	17	CYS	2.2
1	33-A	17	CYS	2.2
1	34-A	17	CYS	2.2
1	35-A	17	CYS	2.2
1	36-A	17	CYS	2.2
1	37-A	17	CYS	2.2
1	38-A	17	CYS	2.2
1	39-A	17	CYS	2.2
1	40-A	17	CYS	2.2
1	41-A	17	CYS	2.2
1	42-A	17	CYS	2.2
1	43-A	17	CYS	2.2
1	44-A	17	CYS	2.2
1	1-A	80	THR	2.2
1	2-A	80	THR	2.2
1	3-A	80	THR	2.2
1	4-A	80	THR	2.2
1	5-A	80	THR	2.2
1	6-A	80	THR	2.2
1	7-A	80	THR	2.2
1	8-A	80	THR	2.2
1	9-A	80	THR	2.2
1	10-A	80	THR	2.2
1	11-A	80	THR	2.2
1	12-A	80	THR	2.2
1	13-A	80	THR	2.2
1	14-A	80	THR	2.2
1	15-A	80	THR	2.2
1	16-A	80	THR	2.2
1	17-A	80	THR	2.2
1	18-A	80	THR	2.2
1	19-A	80	THR	2.2
1	20-A	80	THR	2.2
1	21-A	80	THR	2.2
1	22-A	80	THR	2.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	23-A	80	THR	2.2
1	24-A	80	THR	2.2
1	25-A	80	THR	2.2
1	26-A	80	THR	2.2
1	27-A	80	THR	2.2
1	28-A	80	THR	2.2
1	29-A	80	THR	2.2
1	30-A	80	THR	2.2
1	31-A	80	THR	2.2
1	32-A	80	THR	2.2
1	33-A	80	THR	2.2
1	34-A	80	THR	2.2
1	35-A	80	THR	2.2
1	36-A	80	THR	2.2
1	37-A	80	THR	2.2
1	38-A	80	THR	2.2
1	39-A	80	THR	2.2
1	40-A	80	THR	2.2
1	41-A	80	THR	2.2
1	42-A	80	THR	2.2
1	43-A	80	THR	2.2
1	44-A	80	THR	2.2
1	1-A	19	GLU	2.0
1	2-A	19	GLU	2.0
1	3-A	19	GLU	2.0
1	4-A	19	GLU	2.0
1	5-A	19	GLU	2.0
1	6-A	19	GLU	2.0
1	7-A	19	GLU	2.0
1	8-A	19	GLU	2.0
1	9-A	19	GLU	2.0
1	10-A	19	GLU	2.0
1	11-A	19	GLU	2.0
1	12-A	19	GLU	2.0
1	13-A	19	GLU	2.0
1	14-A	19	GLU	2.0
1	15-A	19	GLU	2.0
1	16-A	19	GLU	2.0
1	17-A	19	GLU	2.0
1	18-A	19	GLU	2.0
1	19-A	19	GLU	2.0
1	20-A	19	GLU	2.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	21-A	19	GLU	2.0
1	22-A	19	GLU	2.0
1	23-A	19	GLU	2.0
1	24-A	19	GLU	2.0
1	25-A	19	GLU	2.0
1	26-A	19	GLU	2.0
1	27-A	19	GLU	2.0
1	28-A	19	GLU	2.0
1	29-A	19	GLU	2.0
1	30-A	19	GLU	2.0
1	31-A	19	GLU	2.0
1	32-A	19	GLU	2.0
1	33-A	19	GLU	2.0
1	34-A	19	GLU	2.0
1	35-A	19	GLU	2.0
1	36-A	19	GLU	2.0
1	37-A	19	GLU	2.0
1	38-A	19	GLU	2.0
1	39-A	19	GLU	2.0
1	40-A	19	GLU	2.0
1	41-A	19	GLU	2.0
1	42-A	19	GLU	2.0
1	43-A	19	GLU	2.0
1	44-A	19	GLU	2.0
1	1-A	405	GLU	2.0
1	2-A	405	GLU	2.0
1	3-A	405	GLU	2.0
1	4-A	405	GLU	2.0
1	5-A	405	GLU	2.0
1	6-A	405	GLU	2.0
1	7-A	405	GLU	2.0
1	8-A	405	GLU	2.0
1	9-A	405	GLU	2.0
1	10-A	405	GLU	2.0
1	11-A	405	GLU	2.0
1	12-A	405	GLU	2.0
1	13-A	405	GLU	2.0
1	14-A	405	GLU	2.0
1	15-A	405	GLU	2.0
1	16-A	405	GLU	2.0
1	17-A	405	GLU	2.0
1	18-A	405	GLU	2.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	19-A	405	GLU	2.0
1	20-A	405	GLU	2.0
1	21-A	405	GLU	2.0
1	22-A	405	GLU	2.0
1	23-A	405	GLU	2.0
1	24-A	405	GLU	2.0
1	25-A	405	GLU	2.0
1	26-A	405	GLU	2.0
1	27-A	405	GLU	2.0
1	28-A	405	GLU	2.0
1	29-A	405	GLU	2.0
1	30-A	405	GLU	2.0
1	31-A	405	GLU	2.0
1	32-A	405	GLU	2.0
1	33-A	405	GLU	2.0
1	34-A	405	GLU	2.0
1	35-A	405	GLU	2.0
1	36-A	405	GLU	2.0
1	37-A	405	GLU	2.0
1	38-A	405	GLU	2.0
1	39-A	405	GLU	2.0
1	40-A	405	GLU	2.0
1	41-A	405	GLU	2.0
1	42-A	405	GLU	2.0
1	43-A	405	GLU	2.0
1	44-A	405	GLU	2.0

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

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 [\(i\)](#)

There are no ligands in this entry.

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.