Full wwPDB X-ray Structure Validation Report (i)

Jun 23, 2024 – 08:13 AM EDT

PDB ID	:	5IVK
Title	:	The alpha-esterase-7 carboxylesterase, E3, from the blowfly Lucilia cuprina: phosphorylated-enzyme ensemble refinement
Authors	:	Correy, G.J.; Jackson, C.J.
Deposited on	:	2016-03-21
Resolution	:	1.53 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 (i) 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 (i)) were used in the production of this report:

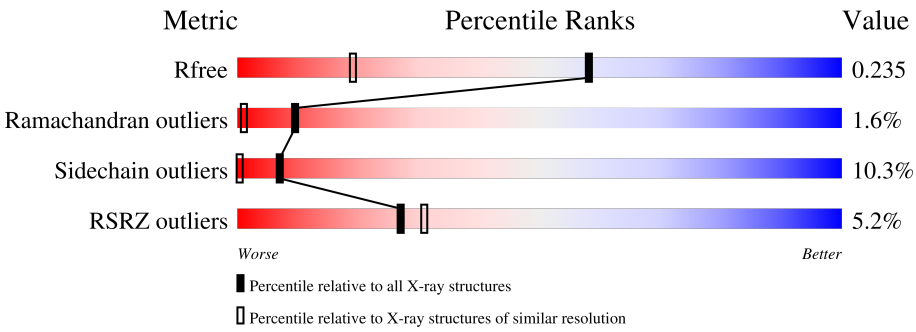
MolProbity	:	4.02b-467
Mogul	:	1.8.5 (274361), CSD as541be (2020)
Xtriage (Phenix)	:	1.13
EDS	:	2.37.1
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Refmac	:	5.8.0158
CCP4	:	7.0.044 (Gargrove)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.37.1

1 Overall quality at a glance (i)

The following experimental techniques were used to determine the structure:
X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 1.53 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	2556 (1.56-1.52)
Ramachandran outliers	138981	2580 (1.56-1.52)
Sidechain outliers	138945	2577 (1.56-1.52)
RSRZ outliers	127900	2524 (1.56-1.52)

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 <=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	5% 87% 10% • •
1	10-A	577	5% 88% 9% • •
1	11-A	577	5% 89% 8% • •
1	12-A	577	5% 90% 7% • •
1	13-A	577	5% 87% 10% • •
1	14-A	577	5% 89% 8% • •
1	15-A	577	5% 86% 11% • •

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	16-A	577	5% 88% 9%
1	17-A	577	5% 86% 10%
1	18-A	577	5% 87% 9%
1	19-A	577	5% 86% 11%
1	2-A	577	5% 88% 9%
1	20-A	577	5% 86% 11%
1	21-A	577	5% 85% 12%
1	22-A	577	5% 87% 10%
1	23-A	577	5% 87% 10%
1	24-A	577	5% 86% 11%
1	25-A	577	5% 85% 12%
1	26-A	577	5% 86% 11%
1	27-A	577	5% 88% 9%
1	28-A	577	5% 87% 10%
1	29-A	577	5% 87% 10%
1	3-A	577	5% 89% 8%
1	30-A	577	5% 89% 8%
1	31-A	577	5% 87% 10%
1	32-A	577	5% 86% 10%
1	33-A	577	5% 87% 10%
1	34-A	577	5% 86% 10%
1	35-A	577	5% 88% 9%
1	36-A	577	5% 88% 9%
1	37-A	577	5% 89% 7%
1	38-A	577	5% 88% 8%

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	39-A	577	5% 86% 10%
1	4-A	577	5% 87% 10%
1	40-A	577	5% 86% 11%
1	41-A	577	5% 87% 9%
1	42-A	577	5% 87% 10%
1	43-A	577	5% 86% 11%
1	5-A	577	5% 86% 11%
1	6-A	577	5% 89% 9%
1	7-A	577	5% 89% 8%
1	8-A	577	5% 89% 8%
1	9-A	577	5% 88% 9%

2 Entry composition (i)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 405539 atoms, of which 192984 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	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	2-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	3-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	4-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	5-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	6-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	7-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	8-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	9-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	10-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	11-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	12-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	13-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	14-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	15-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	16-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	H	N	O	S			
1	17-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	18-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	19-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	20-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	21-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	22-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	23-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	24-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	25-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	26-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	27-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	28-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	29-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	30-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	31-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	32-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	33-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	34-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	35-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	36-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	37-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0

Continued on next page...

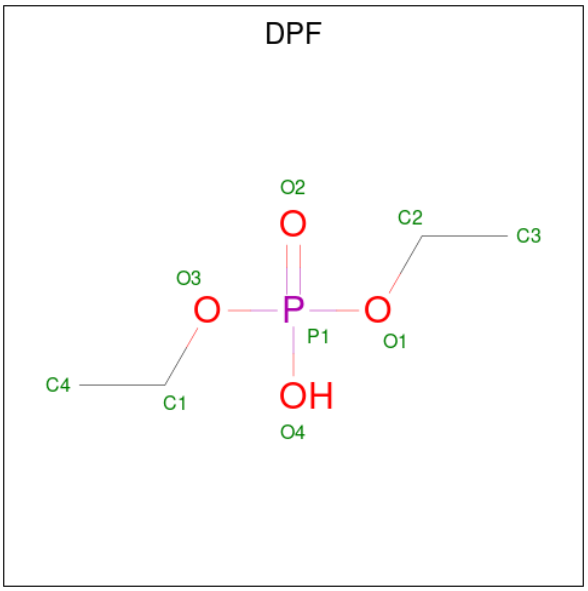
Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	H	N	O	S			
1	38-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	39-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	40-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	41-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	42-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0
1	43-A	566	9035	2911	4478	766	846	34	0	0	0

There are 13 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	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 DIETHYL HYDROGEN PHOSPHATE (three-letter code: DPF) (formula: $C_4H_{11}O_4P$).



Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	1-A	1	Total	C	H	O	P	0	0
			18	4	10	3	1		
2	2-A	1	Total	C	H	O	P	0	0
			18	4	10	3	1		
2	3-A	1	Total	C	H	O	P	0	0
			18	4	10	3	1		
2	4-A	1	Total	C	H	O	P	0	0
			18	4	10	3	1		
2	5-A	1	Total	C	H	O	P	0	0
			18	4	10	3	1		
2	6-A	1	Total	C	H	O	P	0	0
			18	4	10	3	1		
2	7-A	1	Total	C	H	O	P	0	0
			18	4	10	3	1		
2	8-A	1	Total	C	H	O	P	0	0
			18	4	10	3	1		
2	9-A	1	Total	C	H	O	P	0	0
			18	4	10	3	1		
2	10-A	1	Total	C	H	O	P	0	0
			18	4	10	3	1		
2	11-A	1	Total	C	H	O	P	0	0
			18	4	10	3	1		
2	12-A	1	Total	C	H	O	P	0	0
			18	4	10	3	1		
2	13-A	1	Total	C	H	O	P	0	0
			18	4	10	3	1		
2	14-A	1	Total	C	H	O	P	0	0
			18	4	10	3	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
			Total	C	H	O	P		
2	15-A	1	18	4	10	3	1	0	0
			Total	C	H	O	P		
2	16-A	1	18	4	10	3	1	0	0
			Total	C	H	O	P		
2	17-A	1	18	4	10	3	1	0	0
			Total	C	H	O	P		
2	18-A	1	18	4	10	3	1	0	0
			Total	C	H	O	P		
2	19-A	1	18	4	10	3	1	0	0
			Total	C	H	O	P		
2	20-A	1	18	4	10	3	1	0	0
			Total	C	H	O	P		
2	21-A	1	18	4	10	3	1	0	0
			Total	C	H	O	P		
2	22-A	1	18	4	10	3	1	0	0
			Total	C	H	O	P		
2	23-A	1	18	4	10	3	1	0	0
			Total	C	H	O	P		
2	24-A	1	18	4	10	3	1	0	0
			Total	C	H	O	P		
2	25-A	1	18	4	10	3	1	0	0
			Total	C	H	O	P		
2	26-A	1	18	4	10	3	1	0	0
			Total	C	H	O	P		
2	27-A	1	18	4	10	3	1	0	0
			Total	C	H	O	P		
2	28-A	1	18	4	10	3	1	0	0
			Total	C	H	O	P		
2	29-A	1	18	4	10	3	1	0	0
			Total	C	H	O	P		
2	30-A	1	18	4	10	3	1	0	0
			Total	C	H	O	P		
2	31-A	1	18	4	10	3	1	0	0
			Total	C	H	O	P		
2	32-A	1	18	4	10	3	1	0	0
			Total	C	H	O	P		
2	33-A	1	18	4	10	3	1	0	0
			Total	C	H	O	P		
2	34-A	1	18	4	10	3	1	0	0
			Total	C	H	O	P		
2	35-A	1	18	4	10	3	1	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
			Total	C	H	O	P		
2	36-A	1	18	4	10	3	1	0	0
2	37-A	1	18	4	10	3	1	0	0
2	38-A	1	18	4	10	3	1	0	0
2	39-A	1	18	4	10	3	1	0	0
2	40-A	1	18	4	10	3	1	0	0
2	41-A	1	18	4	10	3	1	0	0
2	42-A	1	18	4	10	3	1	0	0
2	43-A	1	18	4	10	3	1	0	0

- Molecule 3 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
			Total	O		
3	1-A	399	399	399	0	0
3	2-A	380	380	380	0	0
3	3-A	356	356	356	0	0
3	4-A	389	389	389	0	0
3	5-A	386	386	386	0	0
3	6-A	379	379	379	0	0
3	7-A	375	375	375	0	0
3	8-A	365	365	365	0	0
3	9-A	373	373	373	0	0
3	10-A	365	365	365	0	0
3	11-A	360	360	360	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms	ZeroOcc	AltConf
3	12-A	396	Total O 396 396	0	0
3	13-A	406	Total O 406 406	0	0
3	14-A	378	Total O 378 378	0	0
3	15-A	374	Total O 374 374	0	0
3	16-A	386	Total O 386 386	0	0
3	17-A	357	Total O 357 357	0	0
3	18-A	353	Total O 353 353	0	0
3	19-A	363	Total O 363 363	0	0
3	20-A	399	Total O 399 399	0	0
3	21-A	389	Total O 389 389	0	0
3	22-A	380	Total O 380 380	0	0
3	23-A	376	Total O 376 376	0	0
3	24-A	381	Total O 381 381	0	0
3	25-A	359	Total O 359 359	0	0
3	26-A	362	Total O 362 362	0	0
3	27-A	379	Total O 379 379	0	0
3	28-A	389	Total O 389 389	0	0
3	29-A	377	Total O 377 377	0	0
3	30-A	363	Total O 363 363	0	0
3	31-A	365	Total O 365 365	0	0
3	32-A	393	Total O 393 393	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

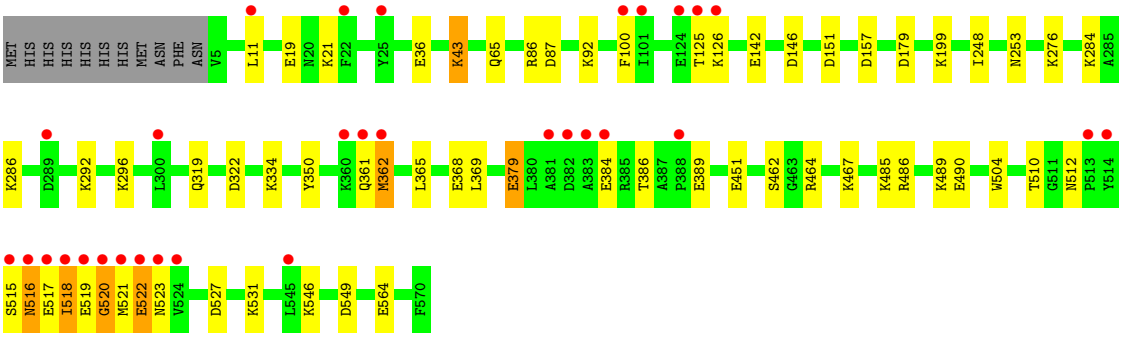
Mol	Chain	Residues	Atoms	ZeroOcc	AltConf
3	33-A	378	Total O 378 378	0	0
3	34-A	384	Total O 384 384	0	0
3	35-A	383	Total O 383 383	0	0
3	36-A	390	Total O 390 390	0	0
3	37-A	358	Total O 358 358	0	0
3	38-A	377	Total O 377 377	0	0
3	39-A	393	Total O 393 393	0	0
3	40-A	388	Total O 388 388	0	0
3	41-A	390	Total O 390 390	0	0
3	42-A	390	Total O 390 390	0	0
3	43-A	377	Total O 377 377	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.

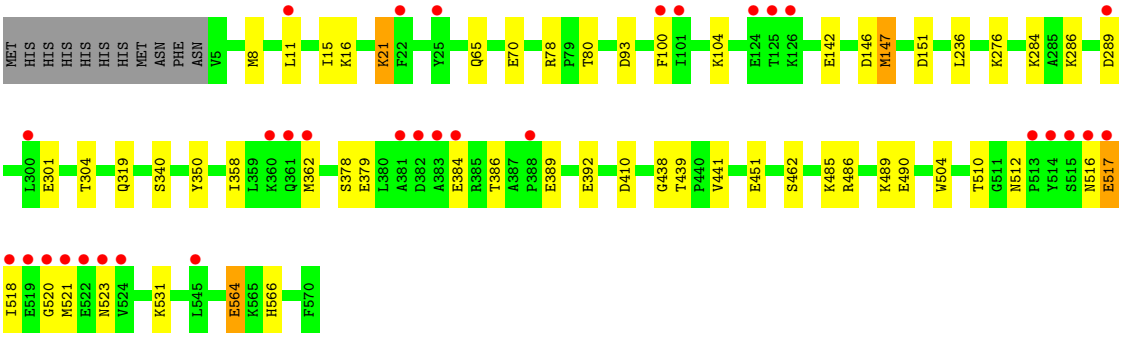
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 1-A:



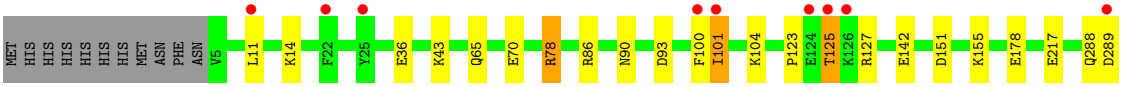
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

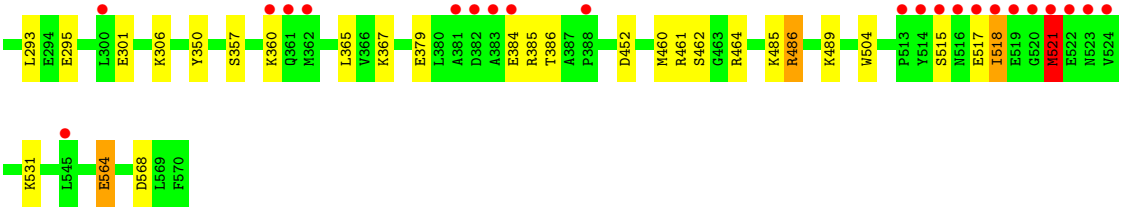
Chain 2-A:



• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

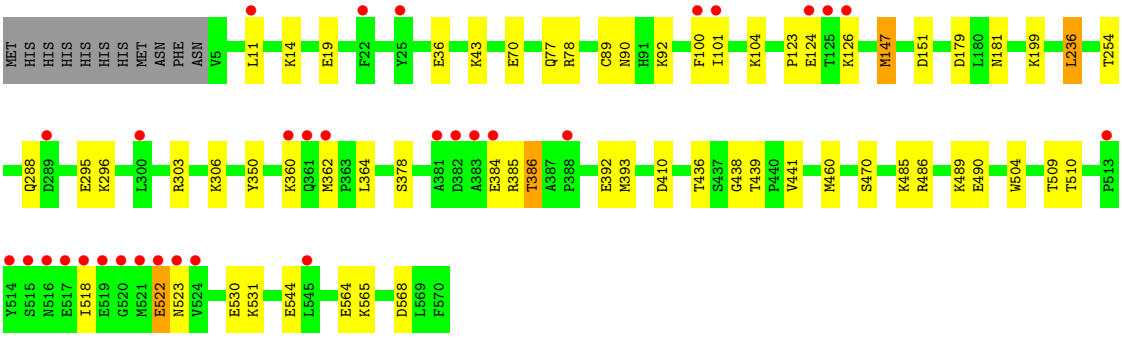
Chain 3-A:





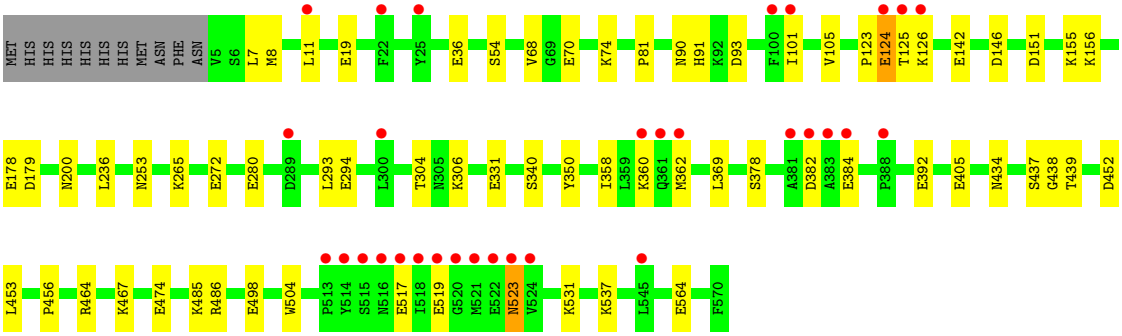
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 4-A:



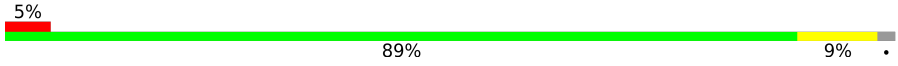
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

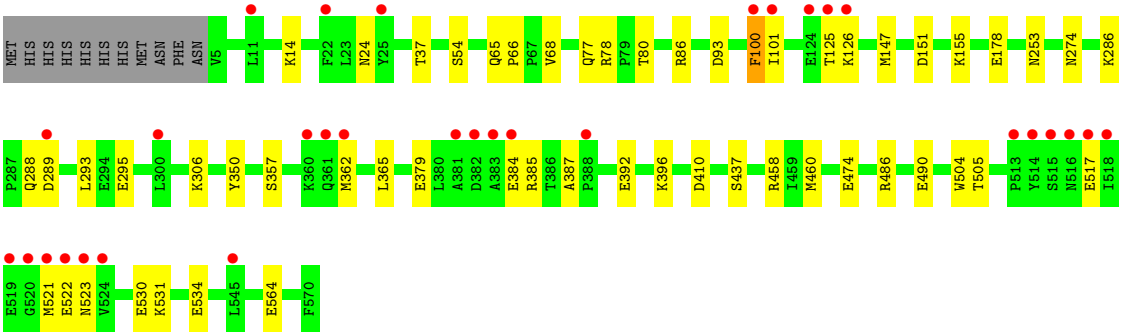
Chain 5-A:



• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

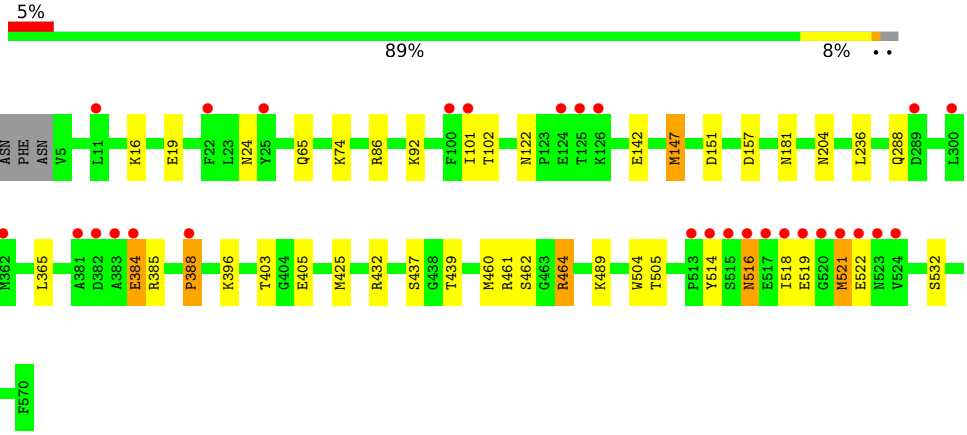
Chain 6-A:





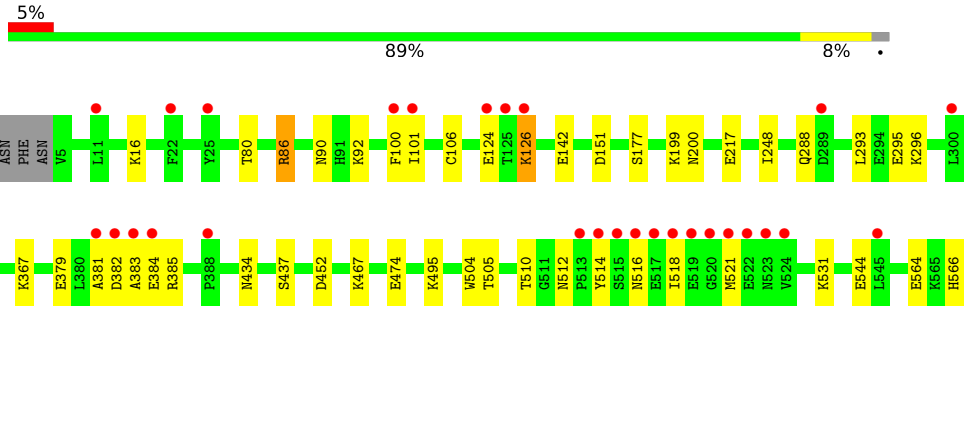
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 7-A:



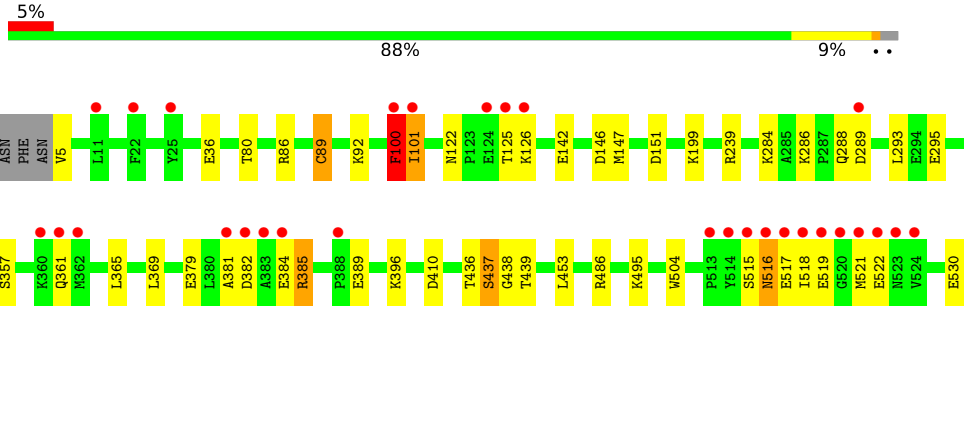
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 8-A:



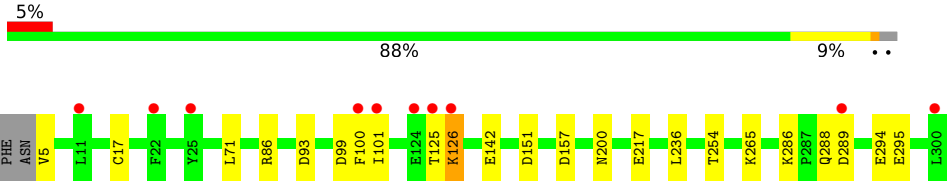
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

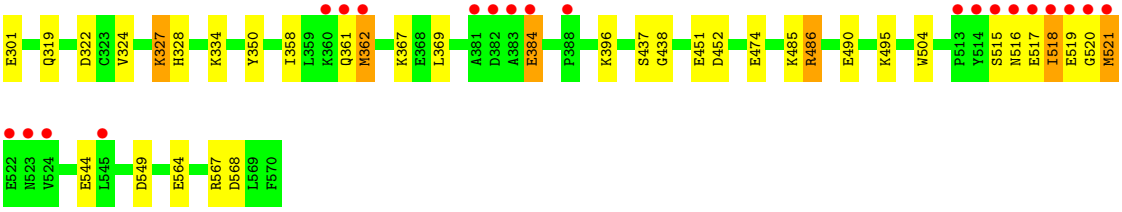
Chain 9-A:



• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

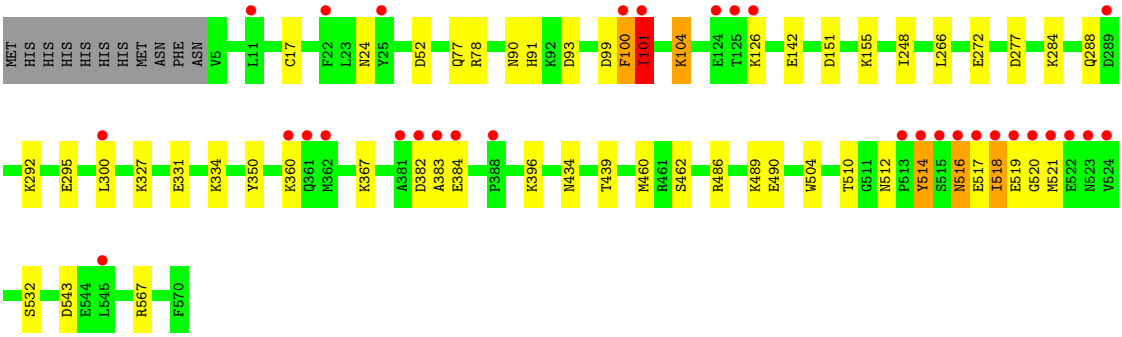
Chain 10-A:





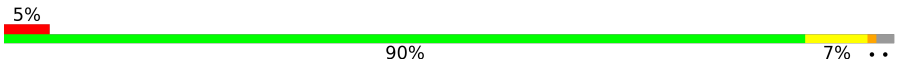
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

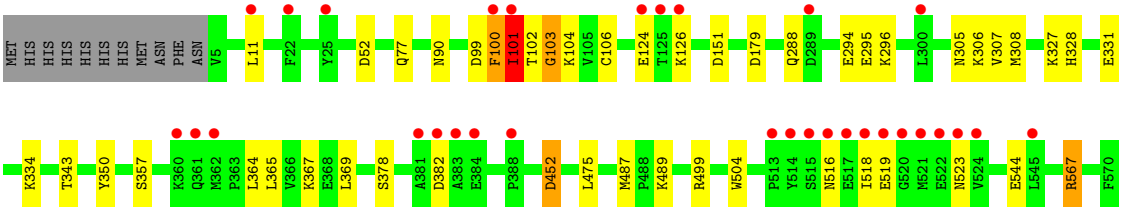
Chain 11-A:



• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

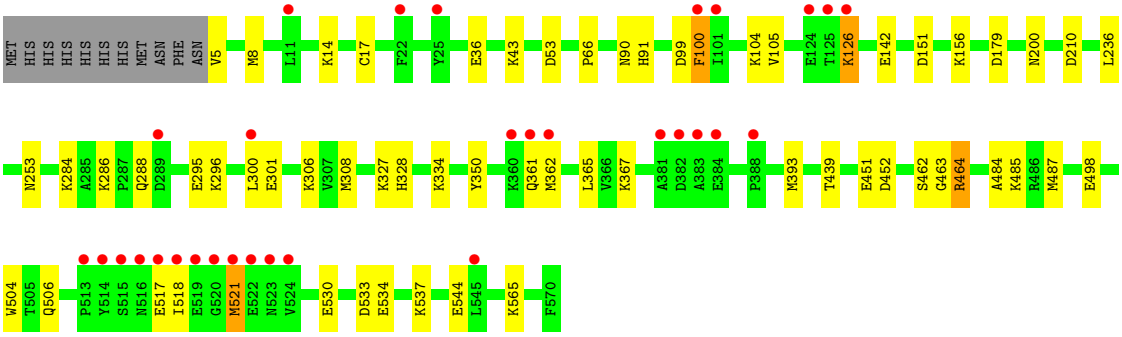
Chain 12-A:





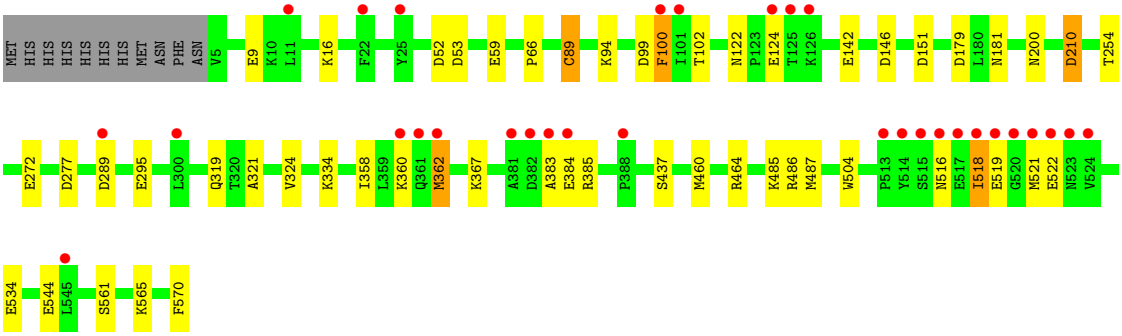
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 13-A:



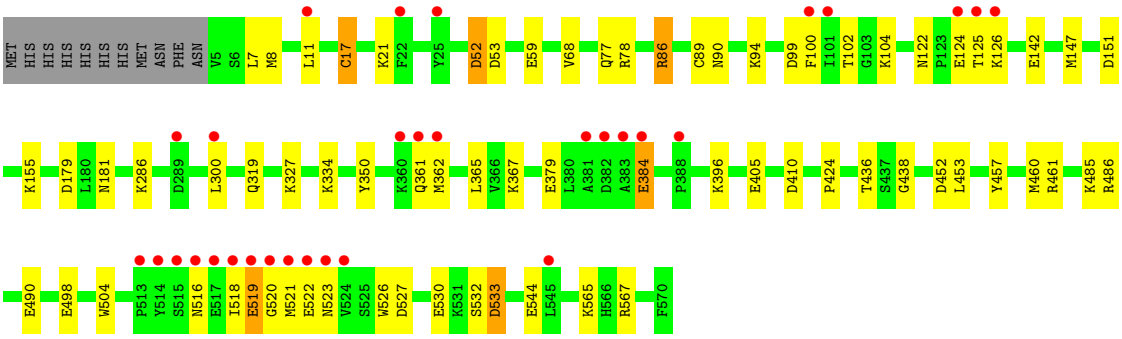
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 14-A:



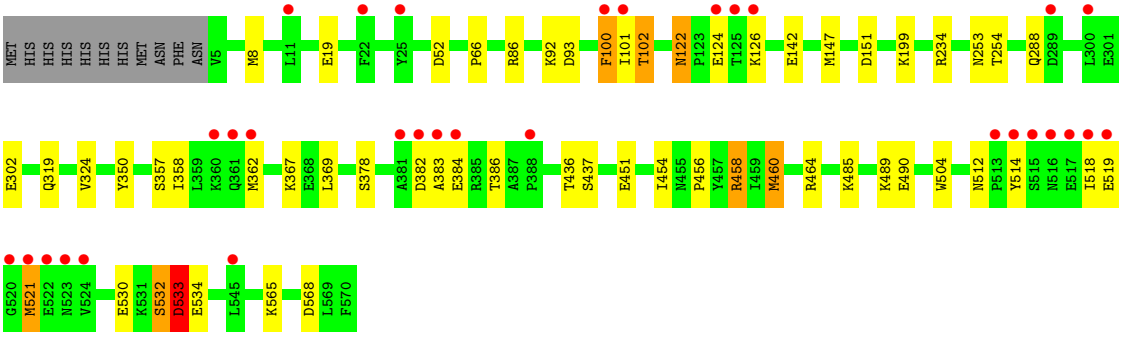
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 15-A:



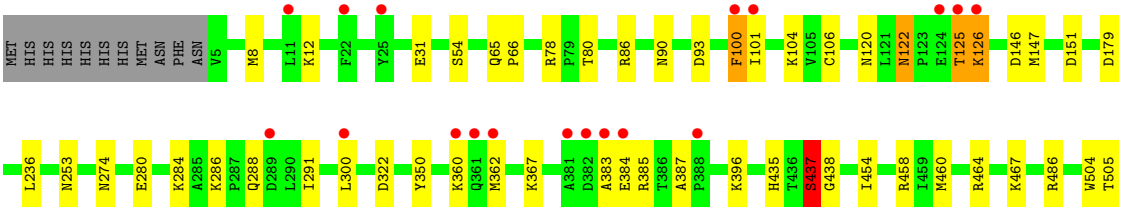
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

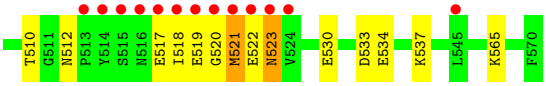
Chain 16-A:



• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

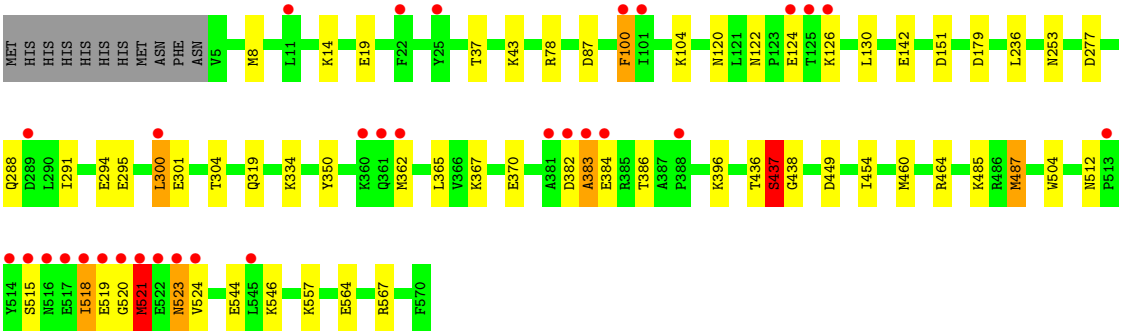
Chain 17-A:





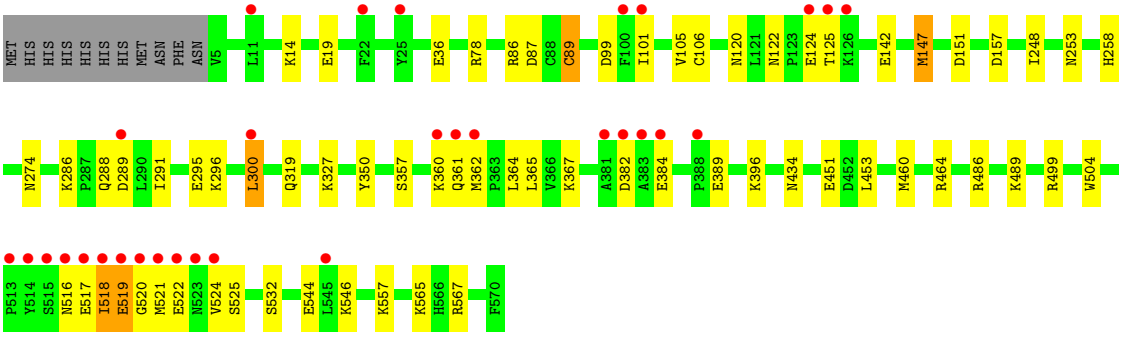
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 18-A:



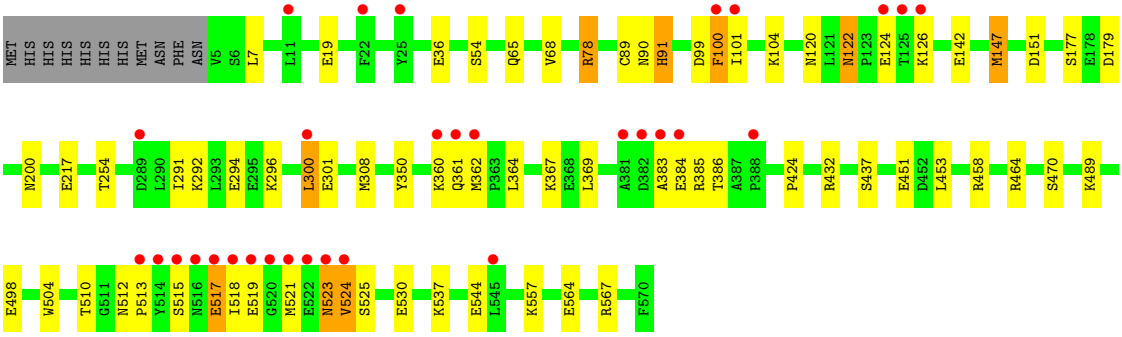
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 19-A:



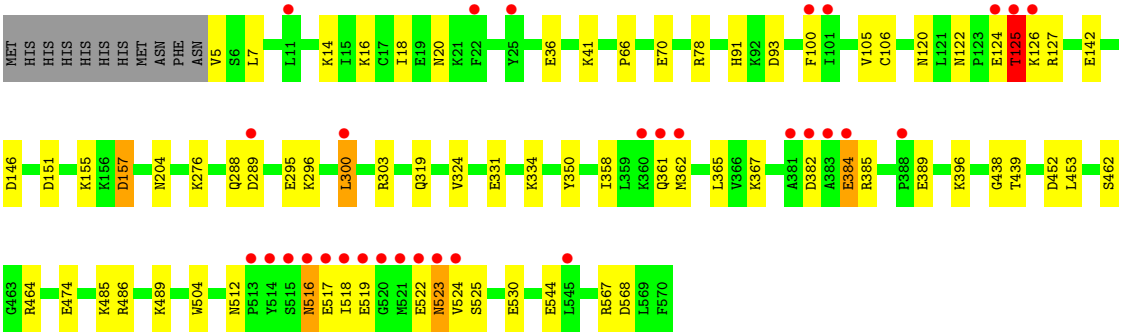
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 20-A:



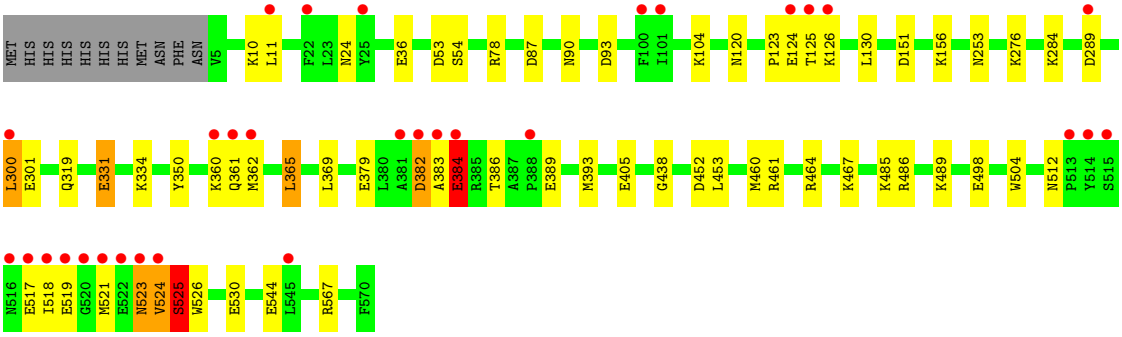
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 21-A:



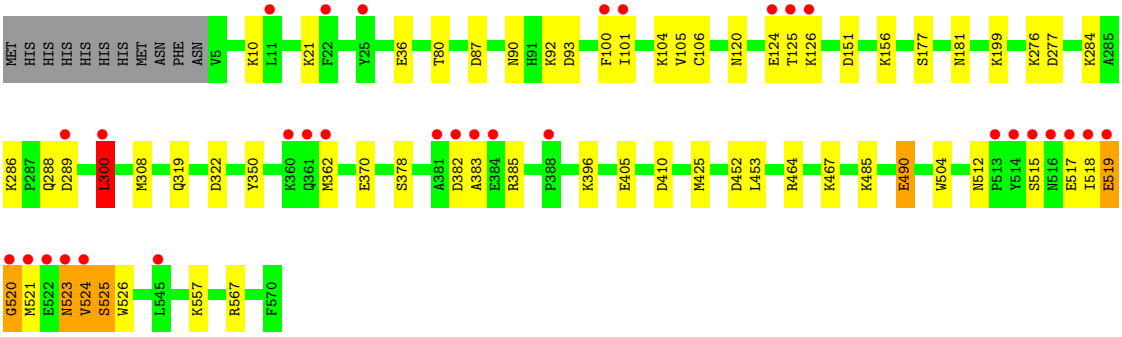
- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 22-A:



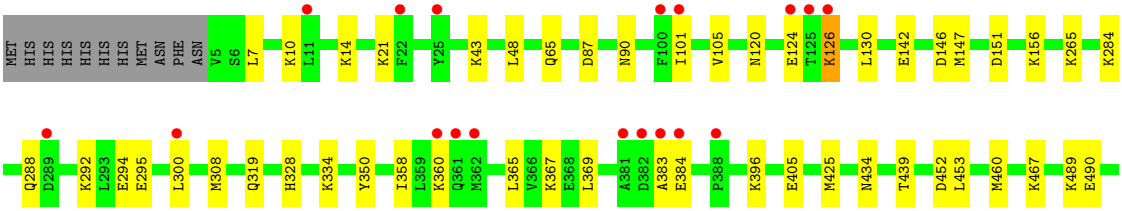
- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

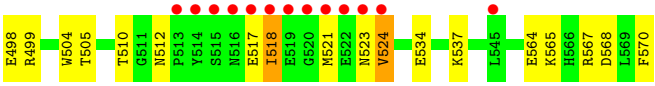
Chain 23-A:



- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

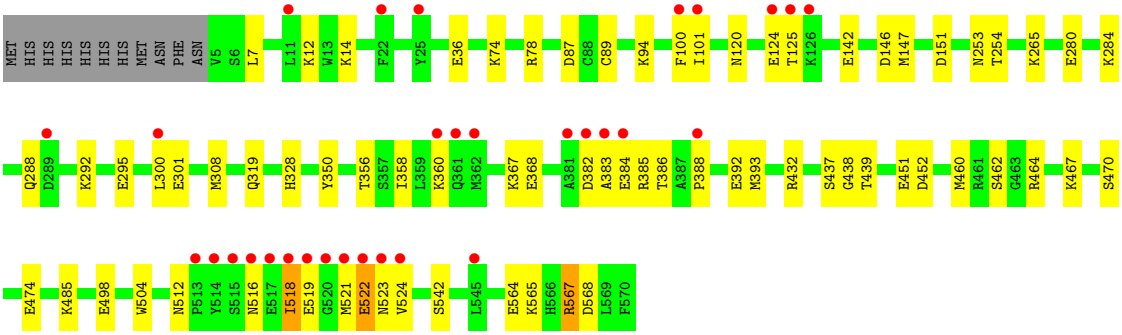
Chain 24-A:





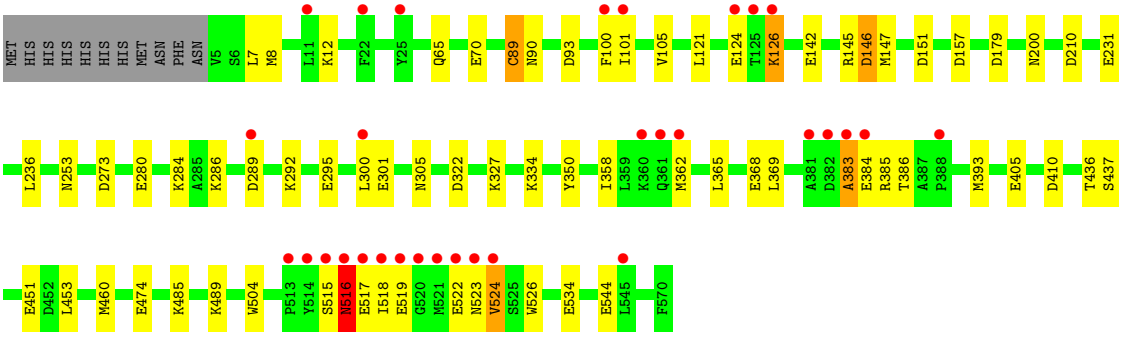
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 25-A:



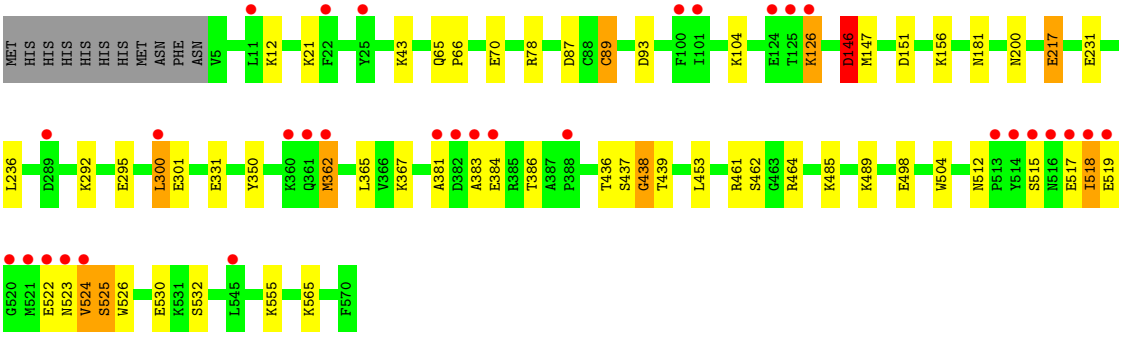
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 26-A:



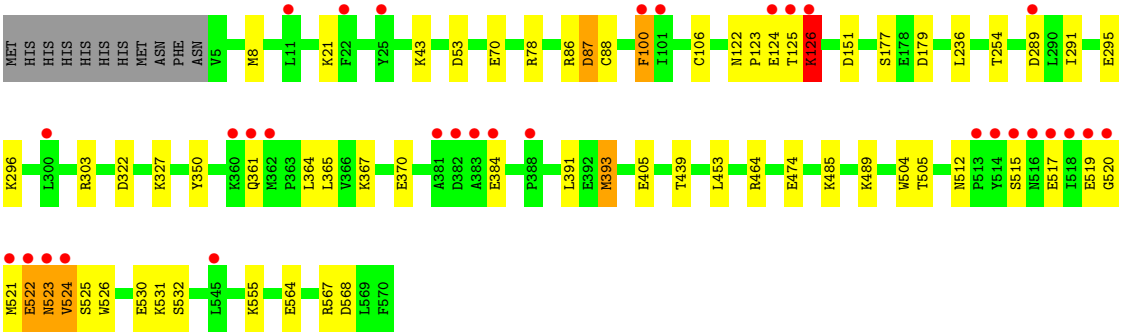
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 27-A:



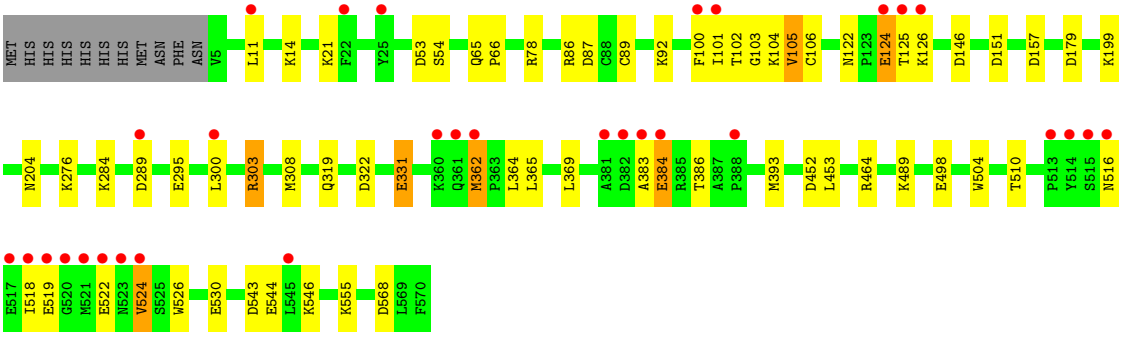
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 28-A:



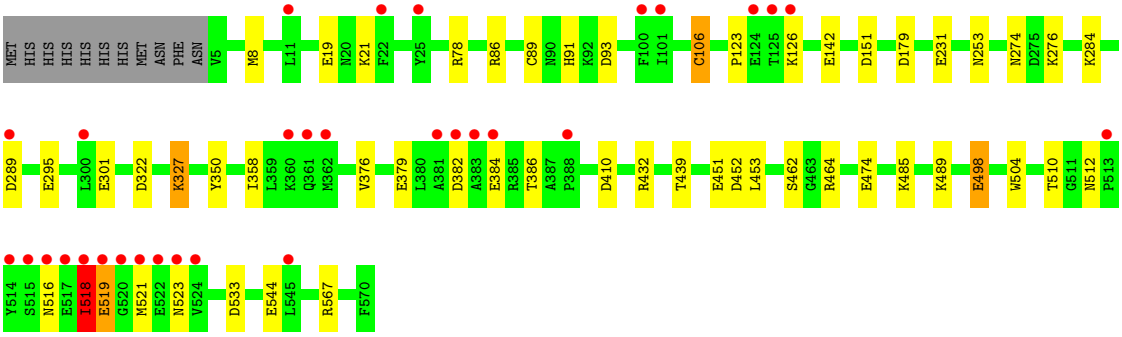
- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 29-A:



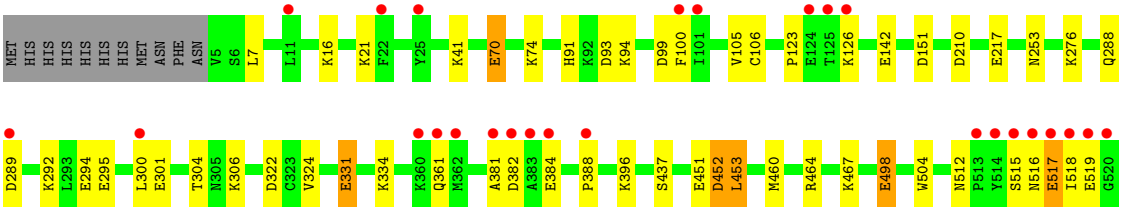
- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

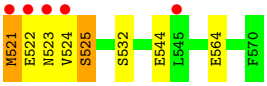
Chain 30-A:



- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

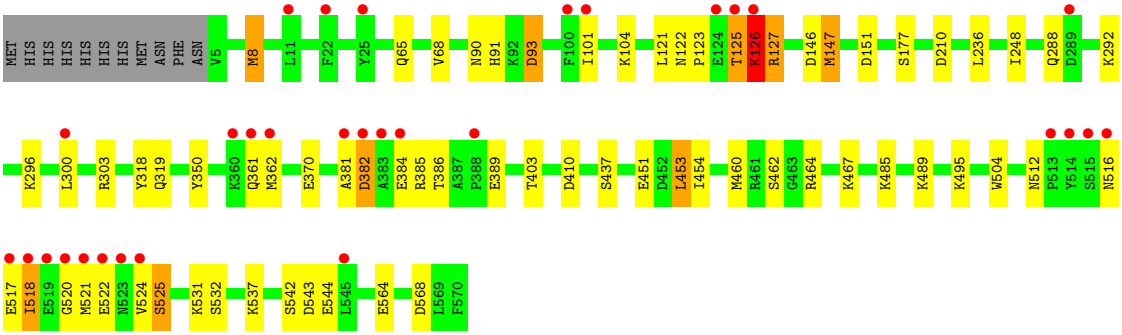
Chain 31-A:





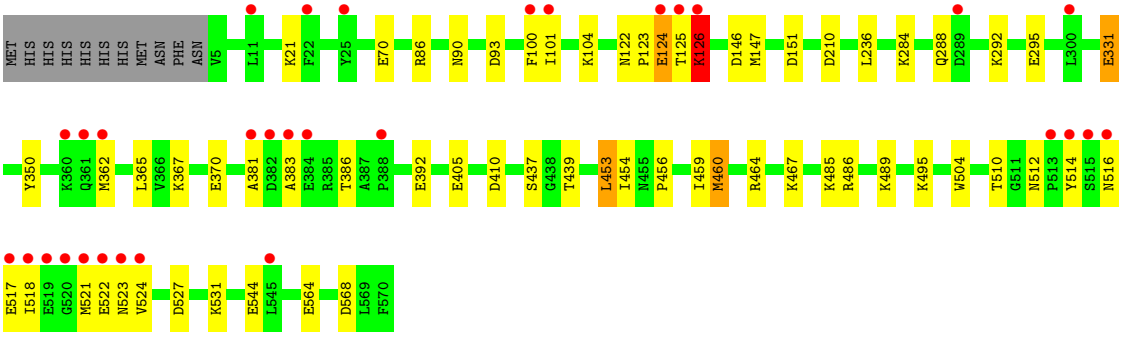
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 32-A:



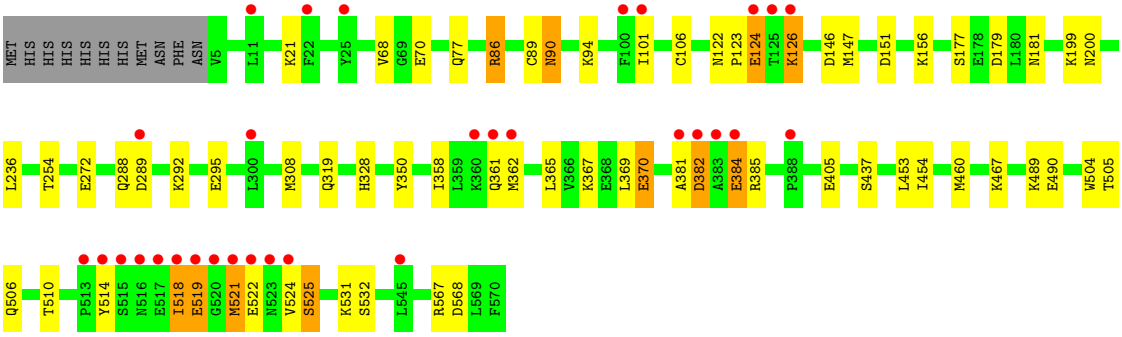
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 33-A:



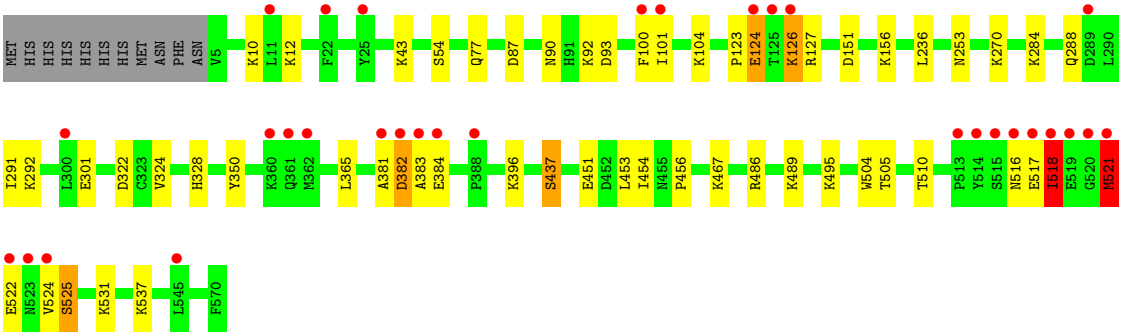
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 34-A:



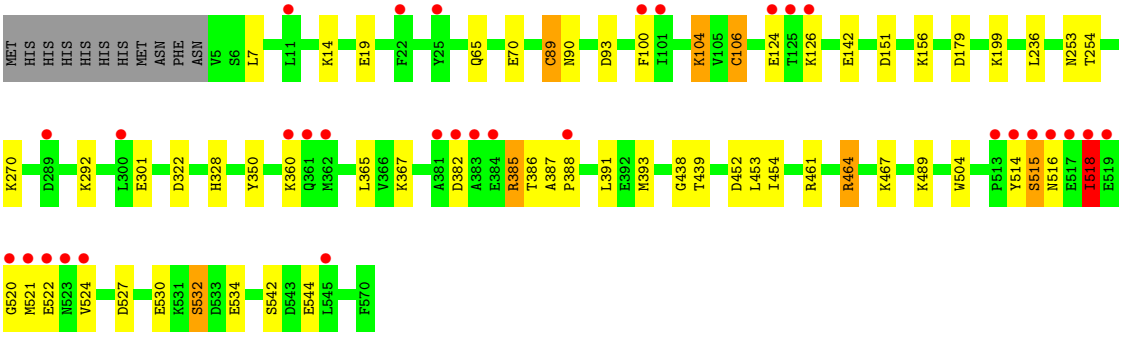
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 35-A:



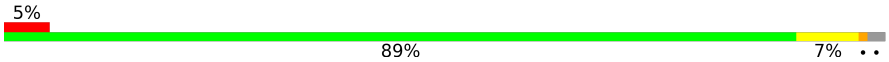
- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

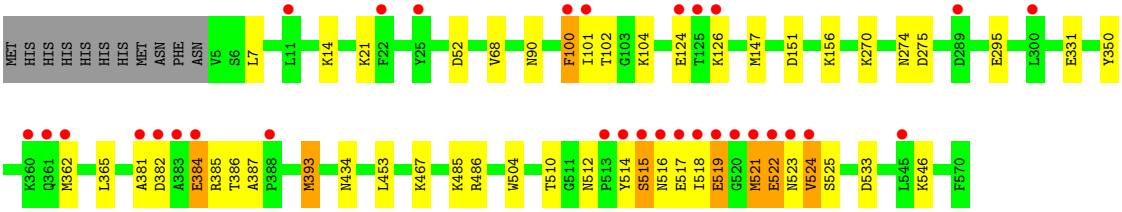
Chain 36-A:



- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

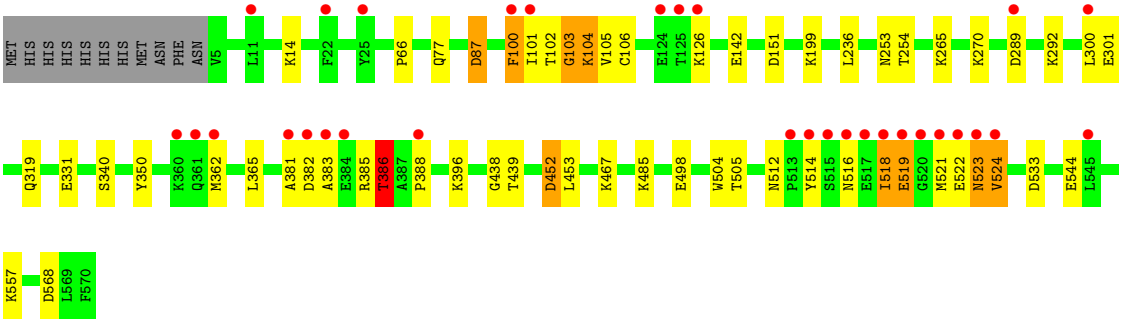
Chain 37-A:





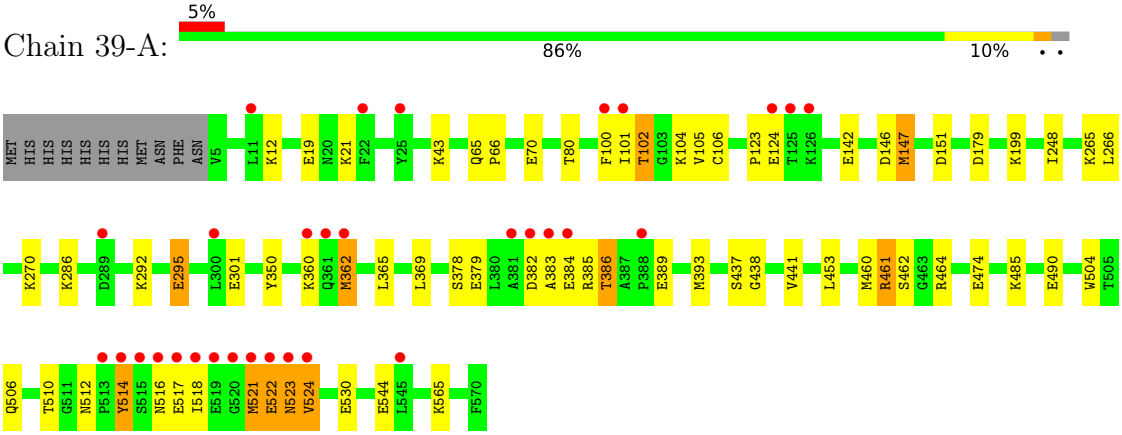
- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 38-A:



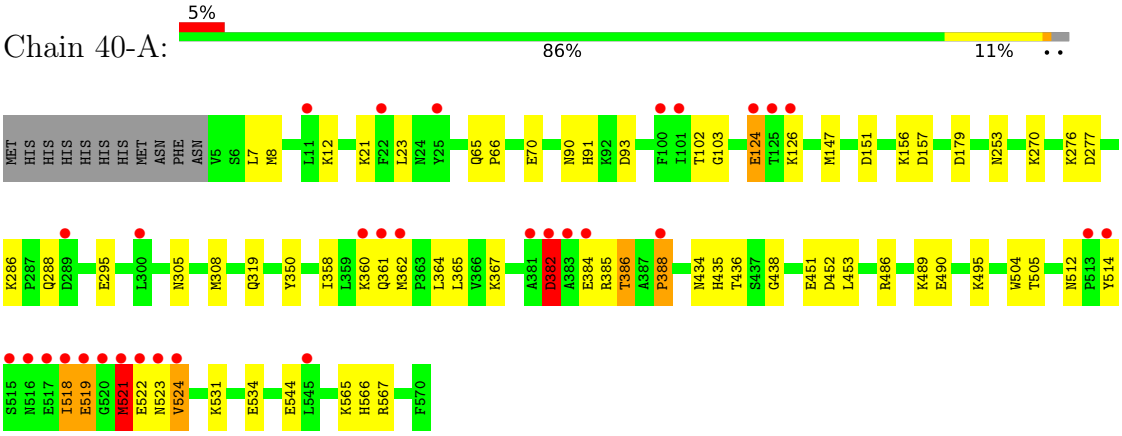
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 39-A:



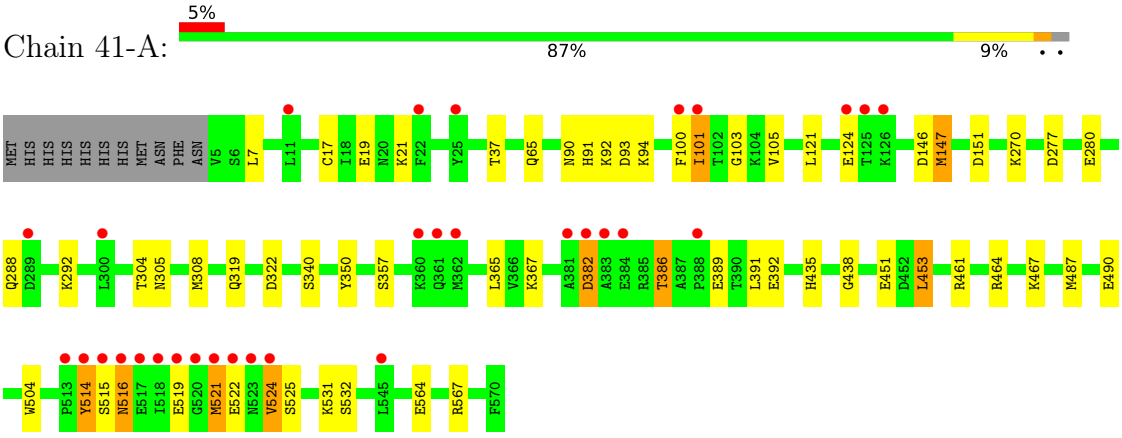
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 40-A:



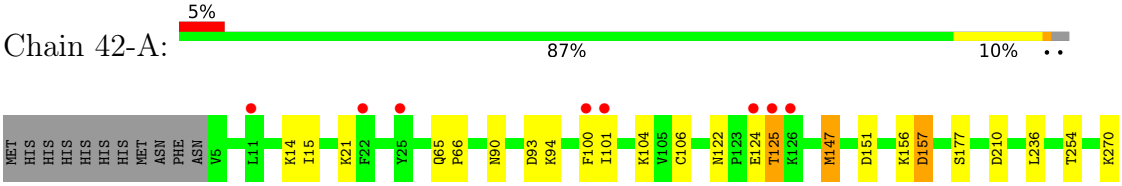
• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

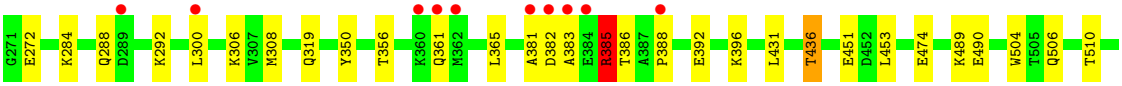
Chain 41-A:

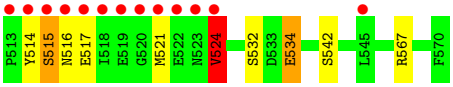


• Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 42-A:

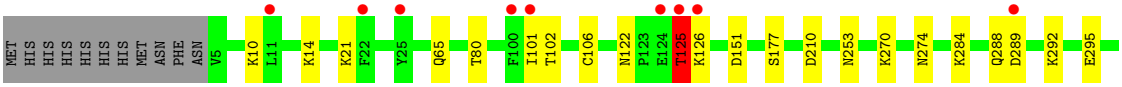


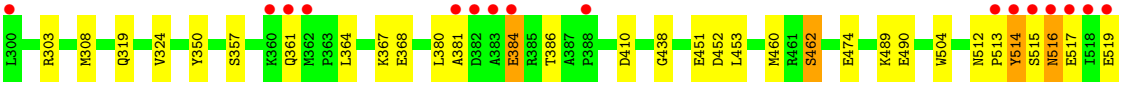


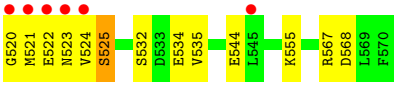


- Molecule 1: Carboxylic ester hydrolase

Chain 43-A:







4 Data and refinement statistics (i)

Property	Value	Source
Space group	C 2 2 21	Depositor
Cell constants a, b, c, α, β, γ	51.82Å 101.25Å 225.82Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	42.01 – 1.53 46.13 – 1.53	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	100.0 (42.01-1.53) 95.8 (46.13-1.53)	Depositor EDS
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$< I/\sigma(I) >$ [1]	1.27 (at 1.53Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX 1.10.1_2155	Depositor
R, R_{free}	0.181 , 0.220 0.192 , 0.235	Depositor DCC
R_{free} test set	4499 reflections (5.00%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å^2)	14.7	Xtriage
Anisotropy	0.400	Xtriage
Bulk solvent k_{sol}(e/Å^3), B_{sol}(Å^2)	0.31 , 456.2	EDS
L-test for twinning[2]	$< \|L\| > = 0.41$, $< L^2 > = 0.24$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o,F_c correlation	0.94	EDS
Total number of atoms	405539	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å^2)	18.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.58% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

[1]Intensities estimated from amplitudes.

[2]Theoretical values of $< |L| >$, $< L^2 >$ 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)

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

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	2/4672 (0.0%)	0.78	5/6320 (0.1%)
1	2-A	0.57	0/4672	0.73	2/6320 (0.0%)
1	3-A	0.62	0/4672	0.76	7/6320 (0.1%)
1	4-A	0.65	2/4672 (0.0%)	0.78	7/6320 (0.1%)
1	5-A	0.62	2/4672 (0.0%)	0.74	0/6320
1	6-A	0.58	2/4672 (0.0%)	0.74	3/6320 (0.0%)
1	7-A	0.60	0/4672	0.75	4/6320 (0.1%)
1	8-A	0.59	1/4672 (0.0%)	0.73	2/6320 (0.0%)
1	9-A	0.62	3/4672 (0.1%)	0.76	5/6320 (0.1%)
1	10-A	0.62	3/4672 (0.1%)	0.78	3/6320 (0.0%)
1	11-A	0.59	3/4672 (0.1%)	0.75	3/6320 (0.0%)
1	12-A	0.61	3/4672 (0.1%)	0.79	7/6320 (0.1%)
1	13-A	0.65	6/4672 (0.1%)	0.79	4/6320 (0.1%)
1	14-A	0.61	2/4672 (0.0%)	0.77	6/6320 (0.1%)
1	15-A	0.62	3/4672 (0.1%)	0.80	7/6320 (0.1%)
1	16-A	0.62	1/4672 (0.0%)	0.79	3/6320 (0.0%)
1	17-A	0.63	2/4672 (0.0%)	0.78	7/6320 (0.1%)
1	18-A	0.61	0/4672	0.78	8/6320 (0.1%)
1	19-A	0.60	0/4672	0.79	8/6320 (0.1%)
1	20-A	0.64	1/4672 (0.0%)	0.80	8/6320 (0.1%)
1	21-A	0.61	2/4672 (0.0%)	0.77	5/6320 (0.1%)
1	22-A	0.60	2/4672 (0.0%)	0.78	5/6320 (0.1%)
1	23-A	0.65	1/4672 (0.0%)	0.79	9/6320 (0.1%)
1	24-A	0.61	3/4672 (0.1%)	0.78	3/6320 (0.0%)
1	25-A	0.59	1/4672 (0.0%)	0.77	2/6320 (0.0%)
1	26-A	0.61	2/4672 (0.0%)	0.78	3/6320 (0.0%)
1	27-A	0.63	4/4672 (0.1%)	0.78	4/6320 (0.1%)
1	28-A	0.63	1/4672 (0.0%)	0.77	3/6320 (0.0%)
1	29-A	0.62	3/4672 (0.1%)	0.77	6/6320 (0.1%)
1	30-A	0.64	5/4672 (0.1%)	0.77	5/6320 (0.1%)
1	31-A	0.63	5/4672 (0.1%)	0.77	1/6320 (0.0%)
1	32-A	0.69	4/4672 (0.1%)	0.81	10/6320 (0.2%)

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#|Z| >5	RMSZ	#|Z| >5
1	33-A	0.60	4/4672 (0.1%)	0.77	7/6320 (0.1%)
1	34-A	0.64	4/4672 (0.1%)	0.78	4/6320 (0.1%)
1	35-A	0.61	1/4672 (0.0%)	0.75	0/6320
1	36-A	0.59	1/4672 (0.0%)	0.78	3/6320 (0.0%)
1	37-A	0.58	0/4672	0.77	1/6320 (0.0%)
1	38-A	0.60	2/4672 (0.0%)	0.77	3/6320 (0.0%)
1	39-A	0.61	2/4672 (0.0%)	0.76	5/6320 (0.1%)
1	40-A	0.61	4/4672 (0.1%)	0.77	0/6320
1	41-A	0.60	3/4672 (0.1%)	0.77	7/6320 (0.1%)
1	42-A	0.63	4/4672 (0.1%)	0.79	5/6320 (0.1%)
1	43-A	0.62	4/4672 (0.1%)	0.77	2/6320 (0.0%)
All	All	0.62	98/200896 (0.0%)	0.77	192/271760 (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	3
1	3-A	0	3
1	4-A	0	2
1	5-A	0	1
1	7-A	0	1
1	8-A	0	1
1	9-A	0	3
1	10-A	0	5
1	11-A	0	3
1	12-A	0	4
1	13-A	0	3
1	14-A	0	1
1	15-A	0	5
1	16-A	0	4
1	17-A	0	5
1	18-A	0	5
1	19-A	0	3
1	20-A	0	4
1	21-A	0	7
1	22-A	0	5
1	23-A	0	6
1	24-A	0	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	25-A	0	1
1	26-A	0	4
1	27-A	0	5
1	28-A	0	2
1	29-A	0	2
1	30-A	0	2
1	31-A	0	1
1	32-A	0	3
1	33-A	0	2
1	34-A	0	5
1	35-A	0	6
1	36-A	0	3
1	37-A	0	4
1	38-A	0	5
1	39-A	0	3
1	40-A	0	6
1	41-A	0	2
1	42-A	0	4
1	43-A	0	5
All	All	0	143

All (98) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	32-A	125	THR	C-N	21.17	1.82	1.34
1	9-A	89	CYS	CB-SG	11.56	2.01	1.82
1	23-A	106	CYS	CB-SG	11.46	2.01	1.82
1	13-A	126	LYS	C-N	11.18	1.59	1.34
1	34-A	126	LYS	C-N	10.49	1.58	1.34
1	28-A	126	LYS	C-N	10.16	1.57	1.34
1	30-A	89	CYS	CB-SG	9.78	1.98	1.82
1	20-A	89	CYS	CB-SG	-9.45	1.66	1.82
1	24-A	126	LYS	C-N	9.35	1.55	1.34
1	8-A	126	LYS	C-N	8.86	1.54	1.34
1	10-A	126	LYS	C-N	8.00	1.52	1.34
1	13-A	17	CYS	CB-SG	-7.99	1.68	1.82
1	34-A	370	GLU	CB-CG	7.87	1.67	1.52
1	31-A	498	GLU	CB-CG	7.69	1.66	1.52
1	35-A	126	LYS	C-N	7.60	1.51	1.34
1	11-A	17	CYS	CB-SG	-7.59	1.69	1.82
1	29-A	331	GLU	CB-CG	7.45	1.66	1.52
1	40-A	295	GLU	CB-CG	7.44	1.66	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	15-A	126	LYS	C-N	7.31	1.50	1.34
1	34-A	384	GLU	CB-CG	7.16	1.65	1.52
1	38-A	66	PRO	C-N	-7.14	1.20	1.34
1	40-A	126	LYS	C-N	7.14	1.50	1.34
1	26-A	534	GLU	CB-CG	6.98	1.65	1.52
1	42-A	147	MET	CB-CG	6.96	1.73	1.51
1	38-A	106	CYS	CB-SG	6.86	1.94	1.82
1	33-A	126	LYS	C-N	6.73	1.49	1.34
1	15-A	17	CYS	CB-SG	6.65	1.93	1.82
1	31-A	70	GLU	CB-CG	6.57	1.64	1.52
1	43-A	126	LYS	C-N	6.55	1.49	1.34
1	9-A	379	GLU	CG-CD	6.49	1.61	1.51
1	12-A	106	CYS	CB-SG	-6.41	1.71	1.82
1	42-A	66	PRO	C-N	-6.40	1.22	1.34
1	21-A	142	GLU	CB-CG	6.37	1.64	1.52
1	33-A	524	VAL	CB-CG1	-6.35	1.39	1.52
1	4-A	530	GLU	CB-CG	6.28	1.64	1.52
1	25-A	89	CYS	CB-SG	-6.26	1.71	1.82
1	40-A	295	GLU	CG-CD	6.16	1.61	1.51
1	24-A	295	GLU	CG-CD	-6.13	1.42	1.51
1	31-A	331	GLU	CG-CD	6.13	1.61	1.51
1	29-A	66	PRO	C-N	-6.13	1.22	1.34
1	5-A	124	GLU	CB-CG	6.11	1.63	1.52
1	27-A	126	LYS	C-N	6.11	1.48	1.34
1	1-A	362	MET	CG-SD	6.10	1.97	1.81
1	10-A	327	LYS	CB-CG	6.08	1.69	1.52
1	30-A	498	GLU	CB-CG	6.05	1.63	1.52
1	39-A	66	PRO	C-N	-6.01	1.22	1.34
1	27-A	217	GLU	CB-CG	6.00	1.63	1.52
1	30-A	451	GLU	CB-CG	5.96	1.63	1.52
1	11-A	126	LYS	C-N	5.95	1.47	1.34
1	17-A	537	LYS	CD-CE	-5.92	1.36	1.51
1	15-A	526	TRP	C-N	5.82	1.47	1.34
1	10-A	17	CYS	CB-SG	-5.78	1.72	1.81
1	6-A	126	LYS	C-N	5.77	1.47	1.34
1	14-A	66	PRO	C-N	-5.77	1.23	1.34
1	29-A	526	TRP	C-N	-5.75	1.20	1.34
1	43-A	295	GLU	CB-CG	5.74	1.63	1.52
1	12-A	308	MET	CB-CG	-5.72	1.33	1.51
1	31-A	451	GLU	CB-CG	5.71	1.62	1.52
1	32-A	462	SER	CB-OG	5.62	1.49	1.42
1	13-A	295	GLU	CB-CG	5.61	1.62	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	9-A	379	GLU	CB-CG	5.58	1.62	1.52
1	40-A	66	PRO	C-N	-5.54	1.23	1.34
1	39-A	295	GLU	CB-CG	5.53	1.62	1.52
1	41-A	17	CYS	CB-SG	5.51	1.91	1.82
1	24-A	564	GLU	CB-CG	5.47	1.62	1.52
1	41-A	490	GLU	CB-CG	5.46	1.62	1.52
1	27-A	89	CYS	CB-SG	-5.45	1.73	1.81
1	21-A	66	PRO	C-N	-5.45	1.24	1.34
1	43-A	295	GLU	CG-CD	5.42	1.60	1.51
1	1-A	36	GLU	CB-CG	5.41	1.62	1.52
1	36-A	393	MET	CG-SD	-5.41	1.67	1.81
1	27-A	66	PRO	C-N	-5.31	1.24	1.34
1	11-A	384	GLU	CB-CG	5.31	1.62	1.52
1	26-A	526	TRP	C-N	5.28	1.46	1.34
1	33-A	124	GLU	CB-CG	5.26	1.62	1.52
1	42-A	396	LYS	CG-CD	-5.23	1.34	1.52
1	16-A	66	PRO	C-N	-5.22	1.24	1.34
1	22-A	384	GLU	CB-CG	5.22	1.62	1.52
1	33-A	331	GLU	CB-CG	5.22	1.62	1.52
1	6-A	66	PRO	C-N	-5.21	1.24	1.34
1	22-A	331	GLU	CB-CG	5.20	1.62	1.52
1	13-A	66	PRO	C-N	-5.18	1.24	1.34
1	30-A	376	VAL	CB-CG1	-5.18	1.42	1.52
1	32-A	147	MET	CB-CG	5.15	1.67	1.51
1	30-A	301	GLU	CB-CG	5.14	1.61	1.52
1	17-A	66	PRO	C-N	-5.13	1.24	1.34
1	12-A	126	LYS	C-N	5.12	1.45	1.34
1	43-A	308	MET	CB-CG	5.11	1.67	1.51
1	13-A	498	GLU	CB-CG	5.11	1.61	1.52
1	32-A	451	GLU	CB-CG	5.10	1.61	1.52
1	34-A	568	ASP	CB-CG	5.08	1.62	1.51
1	41-A	147	MET	CB-CG	5.08	1.67	1.51
1	5-A	124	GLU	CG-CD	5.06	1.59	1.51
1	13-A	5	VAL	CB-CG1	-5.06	1.42	1.52
1	31-A	217	GLU	CB-CG	5.04	1.61	1.52
1	14-A	89	CYS	CB-SG	-5.03	1.73	1.81
1	4-A	544	GLU	CB-CG	5.02	1.61	1.52
1	42-A	147	MET	CG-SD	5.01	1.94	1.81

All (192) bond angle outliers are listed below:

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})
1	22-A	130	LEU	CA-CB-CG	13.13	145.50	115.30
1	15-A	17	CYS	CA-CB-SG	12.26	136.07	114.00
1	42-A	157	ASP	CB-CG-OD2	-9.89	109.40	118.30
1	17-A	147	MET	CG-SD-CE	-9.52	84.96	100.20
1	1-A	179	ASP	CB-CG-OD2	-8.96	110.23	118.30
1	34-A	86	ARG	NE-CZ-NH1	8.73	124.66	120.30
1	29-A	179	ASP	CB-CG-OD2	-8.36	110.78	118.30
1	13-A	308	MET	CG-SD-CE	-8.23	87.03	100.20
1	20-A	300	LEU	CB-CG-CD2	8.14	124.84	111.00
1	15-A	99	ASP	CB-CG-OD2	8.08	125.58	118.30
1	3-A	78	ARG	NE-CZ-NH1	-8.07	116.26	120.30
1	26-A	89	CYS	CA-CB-SG	-7.84	99.89	114.00
1	30-A	289	ASP	CB-CG-OD1	-7.78	111.30	118.30
1	10-A	362	MET	CB-CG-SD	-7.70	89.31	112.40
1	12-A	308	MET	CG-SD-CE	-7.70	87.88	100.20
1	1-A	179	ASP	CB-CG-OD1	7.68	125.22	118.30
1	10-A	486	ARG	NE-CZ-NH2	-7.59	116.51	120.30
1	13-A	521	MET	CG-SD-CE	7.56	112.30	100.20
1	29-A	157	ASP	CB-CG-OD2	7.49	125.04	118.30
1	9-A	89	CYS	CA-CB-SG	7.42	127.36	114.00
1	30-A	89	CYS	CA-CB-SG	7.42	127.36	114.00
1	29-A	179	ASP	CB-CG-OD1	7.36	124.92	118.30
1	4-A	147	MET	CG-SD-CE	-7.35	88.44	100.20
1	17-A	458	ARG	NE-CZ-NH2	-7.33	116.64	120.30
1	36-A	89	CYS	CA-CB-SG	7.17	126.91	114.00
1	20-A	78	ARG	NE-CZ-NH2	7.16	123.88	120.30
1	27-A	146	ASP	CB-CA-C	-7.13	96.14	110.40
1	12-A	475	LEU	CA-CB-CG	7.12	131.66	115.30
1	4-A	544	GLU	OE1-CD-OE2	-7.09	114.80	123.30
1	43-A	308	MET	CB-CG-SD	7.08	133.65	112.40
1	27-A	300	LEU	CA-CB-CG	7.04	131.49	115.30
1	16-A	458	ARG	NE-CZ-NH1	6.99	123.80	120.30
1	32-A	460	MET	CB-CG-SD	6.93	133.21	112.40
1	12-A	499	ARG	NE-CZ-NH2	-6.92	116.84	120.30
1	16-A	460	MET	CG-SD-CE	-6.88	89.20	100.20
1	17-A	93	ASP	CB-CG-OD2	-6.85	112.14	118.30
1	32-A	93	ASP	CB-CG-OD1	-6.85	112.14	118.30
1	18-A	78	ARG	NE-CZ-NH2	6.82	123.71	120.30
1	15-A	86	ARG	NE-CZ-NH1	6.79	123.69	120.30
1	36-A	393	MET	CA-CB-CG	-6.78	101.77	113.30
1	27-A	362	MET	CA-CB-CG	6.69	124.68	113.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	34-A	385	ARG	NE-CZ-NH2	-6.69	116.95	120.30
1	30-A	327	LYS	CD-CE-NZ	-6.67	96.36	111.70
1	32-A	147	MET	CB-CG-SD	6.64	132.33	112.40
1	23-A	93	ASP	CB-CG-OD1	-6.64	112.33	118.30
1	27-A	89	CYS	CA-CB-SG	-6.59	102.13	114.00
1	33-A	460	MET	CG-SD-CE	6.58	110.73	100.20
1	3-A	461	ARG	NE-CZ-NH2	-6.57	117.02	120.30
1	19-A	300	LEU	CA-CB-CG	6.55	130.38	115.30
1	4-A	92	LYS	CD-CE-NZ	6.52	126.70	111.70
1	19-A	78	ARG	NE-CZ-NH1	6.51	123.55	120.30
1	17-A	93	ASP	CB-CG-OD1	6.48	124.14	118.30
1	21-A	300	LEU	CA-CB-CG	6.47	130.19	115.30
1	41-A	147	MET	CA-CB-CG	6.47	124.31	113.30
1	17-A	460	MET	CB-CG-SD	6.44	131.71	112.40
1	2-A	362	MET	CB-CG-SD	-6.43	93.12	112.40
1	4-A	236	LEU	CA-CB-CG	6.41	130.03	115.30
1	24-A	308	MET	CA-CB-CG	-6.39	102.43	113.30
1	32-A	303	ARG	NE-CZ-NH1	6.39	123.49	120.30
1	15-A	99	ASP	CB-CG-OD1	-6.38	112.55	118.30
1	3-A	486	ARG	NE-CZ-NH1	6.36	123.48	120.30
1	7-A	86	ARG	NE-CZ-NH2	-6.34	117.13	120.30
1	18-A	300	LEU	CA-CB-CG	6.30	129.79	115.30
1	39-A	460	MET	CB-CG-SD	-6.29	93.52	112.40
1	14-A	570	PHE	N-CA-C	-6.29	94.02	111.00
1	6-A	289	ASP	CB-CG-OD2	-6.27	112.66	118.30
1	20-A	147	MET	CG-SD-CE	6.26	110.22	100.20
1	9-A	146	ASP	CB-CG-OD2	6.24	123.92	118.30
1	33-A	126	LYS	C-N-CA	-6.23	106.12	121.70
1	17-A	537	LYS	CD-CE-NZ	6.21	125.99	111.70
1	41-A	93	ASP	CB-CG-OD1	6.20	123.88	118.30
1	33-A	460	MET	CA-CB-CG	6.18	123.81	113.30
1	26-A	322	ASP	CB-CG-OD2	6.14	123.83	118.30
1	14-A	53	ASP	CB-CG-OD1	-6.13	112.78	118.30
1	32-A	8	MET	CB-CG-SD	6.12	130.74	112.40
1	20-A	100	PHE	CB-CG-CD2	6.10	125.07	120.80
1	7-A	464	ARG	NE-CZ-NH1	6.08	123.34	120.30
1	23-A	300	LEU	CA-CB-CG	6.07	129.27	115.30
1	18-A	521	MET	CG-SD-CE	6.06	109.90	100.20
1	11-A	78	ARG	NE-CZ-NH1	6.05	123.33	120.30
1	12-A	567	ARG	NE-CZ-NH1	6.04	123.32	120.30
1	22-A	461	ARG	NE-CZ-NH2	-6.03	117.28	120.30
1	34-A	86	ARG	NE-CZ-NH2	-6.03	117.28	120.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})
1	31-A	334	LYS	CD-CE-NZ	-6.01	97.87	111.70
1	9-A	289	ASP	CB-CG-OD2	6.00	123.70	118.30
1	20-A	78	ARG	NE-CZ-NH1	-5.98	117.31	120.30
1	1-A	379	GLU	CA-CB-CG	5.97	126.54	113.40
1	17-A	385	ARG	NE-CZ-NH2	-5.96	117.32	120.30
1	4-A	147	MET	CB-CG-SD	5.95	130.24	112.40
1	3-A	127	ARG	NE-CZ-NH2	-5.91	117.34	120.30
1	21-A	127	ARG	NE-CZ-NH2	-5.90	117.35	120.30
1	7-A	147	MET	CB-CG-SD	5.89	130.08	112.40
1	25-A	567	ARG	NE-CZ-NH1	5.89	123.25	120.30
1	6-A	100	PHE	CB-CG-CD1	5.89	124.92	120.80
1	10-A	486	ARG	NE-CZ-NH1	5.88	123.24	120.30
1	32-A	460	MET	CG-SD-CE	5.87	109.59	100.20
1	18-A	521	MET	CA-CB-CG	5.86	123.27	113.30
1	41-A	514	TYR	CA-CB-CG	5.86	124.53	113.40
1	22-A	300	LEU	CB-CG-CD1	5.86	120.96	111.00
1	32-A	453	LEU	CA-CB-CG	5.85	128.75	115.30
1	21-A	125	THR	CA-C-N	-5.83	104.37	117.20
1	39-A	147	MET	CB-CG-SD	5.83	129.89	112.40
1	28-A	393	MET	CG-SD-CE	5.80	109.48	100.20
1	14-A	52	ASP	CB-CG-OD2	5.80	123.52	118.30
1	32-A	127	ARG	NE-CZ-NH2	-5.77	117.42	120.30
1	8-A	86	ARG	NE-CZ-NH1	5.73	123.17	120.30
1	23-A	93	ASP	CB-CG-OD2	5.71	123.44	118.30
1	42-A	147	MET	CB-CG-SD	5.71	129.52	112.40
1	23-A	300	LEU	CB-CG-CD1	5.70	120.69	111.00
1	41-A	93	ASP	CB-CG-OD2	-5.66	113.20	118.30
1	30-A	289	ASP	CB-CG-OD2	5.65	123.39	118.30
1	33-A	147	MET	CB-CG-SD	5.65	129.34	112.40
1	24-A	308	MET	CB-CG-SD	-5.62	95.55	112.40
1	14-A	362	MET	CB-CG-SD	-5.61	95.58	112.40
1	41-A	453	LEU	CA-CB-CG	5.60	128.18	115.30
1	20-A	89	CYS	CA-CB-SG	-5.58	103.97	114.00
1	26-A	289	ASP	CB-CG-OD2	5.57	123.31	118.30
1	39-A	514	TYR	CA-CB-CG	5.57	123.98	113.40
1	23-A	322	ASP	CB-CG-OD1	-5.56	113.30	118.30
1	38-A	300	LEU	CA-CB-CG	-5.55	102.53	115.30
1	29-A	303	ARG	NE-CZ-NH1	5.54	123.07	120.30
1	34-A	236	LEU	CA-CB-CG	5.54	128.04	115.30
1	3-A	521	MET	CB-CG-SD	-5.54	95.78	112.40
1	38-A	87	ASP	CB-CG-OD1	5.53	123.28	118.30
1	12-A	499	ARG	NE-CZ-NH1	5.53	123.07	120.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	15-A	461	ARG	NE-CZ-NH2	-5.53	117.53	120.30
1	41-A	514	TYR	CB-CG-CD1	5.53	124.32	121.00
1	25-A	385	ARG	NE-CZ-NH2	-5.52	117.54	120.30
1	19-A	78	ARG	NE-CZ-NH2	-5.52	117.54	120.30
1	42-A	157	ASP	CB-CG-OD1	5.51	123.26	118.30
1	39-A	362	MET	CG-SD-CE	5.49	108.98	100.20
1	22-A	382	ASP	CB-CG-OD1	5.47	123.22	118.30
1	33-A	460	MET	CB-CG-SD	5.47	128.81	112.40
1	19-A	521	MET	CG-SD-CE	5.46	108.93	100.20
1	21-A	106	CYS	CA-CB-SG	5.45	123.80	114.00
1	1-A	43	LYS	CD-CE-NZ	5.44	124.22	111.70
1	36-A	385	ARG	NE-CZ-NH2	-5.43	117.58	120.30
1	18-A	87	ASP	CB-CG-OD2	5.42	123.18	118.30
1	15-A	78	ARG	NE-CZ-NH2	-5.41	117.59	120.30
1	18-A	487	MET	CG-SD-CE	5.41	108.86	100.20
1	13-A	8	MET	CG-SD-CE	5.41	108.85	100.20
1	24-A	568	ASP	CB-CG-OD1	5.40	123.16	118.30
1	14-A	487	MET	CG-SD-CE	-5.39	91.58	100.20
1	11-A	514	TYR	CA-CB-CG	5.39	123.64	113.40
1	41-A	487	MET	CG-SD-CE	5.38	108.80	100.20
1	29-A	362	MET	CG-SD-CE	5.37	108.79	100.20
1	32-A	385	ARG	NE-CZ-NH1	5.37	122.98	120.30
1	28-A	567	ARG	CG-CD-NE	-5.36	100.54	111.80
1	23-A	322	ASP	CB-CG-OD2	5.36	123.13	118.30
1	43-A	514	TYR	CA-CB-CG	5.34	123.55	113.40
1	22-A	365	LEU	CA-CB-CG	5.34	127.58	115.30
1	23-A	308	MET	CB-CG-SD	-5.34	96.38	112.40
1	19-A	147	MET	CG-SD-CE	5.32	108.72	100.20
1	37-A	393	MET	CA-CB-CG	5.30	122.31	113.30
1	19-A	499	ARG	NE-CZ-NH2	-5.29	117.65	120.30
1	9-A	385	ARG	NE-CZ-NH2	-5.27	117.66	120.30
1	7-A	432	ARG	NE-CZ-NH1	5.26	122.93	120.30
1	11-A	384	GLU	CB-CA-C	5.25	120.91	110.40
1	9-A	147	MET	CB-CG-SD	5.24	128.11	112.40
1	33-A	453	LEU	CA-CB-CG	5.23	127.33	115.30
1	18-A	449	ASP	CB-CG-OD2	-5.22	113.60	118.30
1	38-A	452	ASP	CB-CG-OD2	5.20	122.98	118.30
1	14-A	210	ASP	CB-CG-OD2	-5.18	113.63	118.30
1	2-A	147	MET	CG-SD-CE	-5.18	91.91	100.20
1	16-A	52	ASP	CB-CG-OD1	5.18	122.97	118.30
1	39-A	106	CYS	CA-CB-SG	5.18	123.33	114.00
1	15-A	52	ASP	CB-CG-OD2	5.17	122.96	118.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})
1	1-A	276	LYS	CD-CE-NZ	5.15	123.55	111.70
1	19-A	300	LEU	CB-CG-CD2	5.15	119.76	111.00
1	30-A	106	CYS	CA-CB-SG	-5.15	104.73	114.00
1	12-A	104	LYS	CA-CB-CG	5.15	124.72	113.40
1	13-A	300	LEU	CA-CB-CG	5.13	127.11	115.30
1	4-A	385	ARG	NE-CZ-NH2	-5.13	117.73	120.30
1	19-A	89	CYS	CA-CB-SG	-5.13	104.76	114.00
1	42-A	236	LEU	CA-CB-CG	5.12	127.08	115.30
1	32-A	126	LYS	C-N-CA	5.12	134.50	121.70
1	20-A	458	ARG	NE-CZ-NH1	5.12	122.86	120.30
1	28-A	100	PHE	CB-CG-CD1	5.12	124.38	120.80
1	6-A	458	ARG	NE-CZ-NH2	-5.11	117.75	120.30
1	33-A	486	ARG	NE-CZ-NH2	-5.10	117.75	120.30
1	23-A	521	MET	CA-CB-CG	5.10	121.97	113.30
1	20-A	498	GLU	OE1-CD-OE2	-5.09	117.19	123.30
1	23-A	425	MET	CG-SD-CE	5.09	108.35	100.20
1	4-A	385	ARG	NE-CZ-NH1	5.09	122.85	120.30
1	42-A	385	ARG	NE-CZ-NH2	-5.09	117.75	120.30
1	3-A	125	THR	O-C-N	5.07	130.82	122.70
1	3-A	461	ARG	NE-CZ-NH1	5.04	122.82	120.30
1	18-A	449	ASP	CB-CG-OD1	5.03	122.83	118.30
1	12-A	307	VAL	C-N-CA	5.02	134.25	121.70
1	21-A	157	ASP	CB-CG-OD1	5.02	122.82	118.30
1	29-A	78	ARG	NE-CZ-NH1	5.01	122.81	120.30
1	8-A	385	ARG	NE-CZ-NH1	5.01	122.80	120.30

There are no chirality outliers.

All (143) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	1-A	518	ILE	Peptide
1	1-A	520	GLY	Peptide
1	1-A	522	GLU	Peptide
1	10-A	327	LYS	Peptide
1	10-A	384	GLU	Peptide
1	10-A	438	GLY	Peptide
1	10-A	521	MET	Peptide
1	10-A	99	ASP	Peptide
1	11-A	101	ILE	Peptide
1	11-A	383	ALA	Peptide
1	11-A	521	MET	Peptide
1	12-A	101	ILE	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	12-A	102	THR	Peptide
1	12-A	103	GLY	Peptide
1	12-A	99	ASP	Peptide
1	13-A	100	PHE	Peptide
1	13-A	463	GLY	Peptide
1	13-A	517	GLU	Peptide
1	14-A	100	PHE	Peptide
1	15-A	384	GLU	Peptide
1	15-A	520	GLY	Peptide
1	15-A	521	MET	Peptide
1	15-A	89	CYS	Peptide
1	15-A	90	ASN	Peptide
1	16-A	437	SER	Peptide
1	16-A	514	TYR	Peptide
1	16-A	532	SER	Peptide
1	16-A	533	ASP	Peptide
1	17-A	125	THR	Peptide
1	17-A	146	ASP	Peptide
1	17-A	384	GLU	Peptide
1	17-A	437	SER	Peptide
1	17-A	523	ASN	Peptide
1	18-A	383	ALA	Peptide
1	18-A	384	GLU	Peptide
1	18-A	436	THR	Peptide
1	18-A	437	SER	Peptide
1	18-A	523	ASN	Peptide
1	19-A	384	GLU	Peptide
1	19-A	519	GLU	Peptide
1	19-A	520	GLY	Peptide
1	2-A	517	GLU	Peptide
1	2-A	518	ILE	Peptide
1	2-A	520	GLY	Peptide
1	20-A	384	GLU	Peptide
1	20-A	470	SER	Peptide
1	20-A	517	GLU	Peptide
1	20-A	523	ASN	Peptide
1	21-A	125	THR	Mainchain
1	21-A	382	ASP	Peptide
1	21-A	384	GLU	Peptide
1	21-A	438	GLY	Peptide
1	21-A	5	VAL	Peptide
1	21-A	522	GLU	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	21-A	523	ASN	Peptide
1	22-A	382	ASP	Peptide
1	22-A	384	GLU	Peptide
1	22-A	523	ASN	Peptide
1	22-A	524	VAL	Peptide
1	22-A	525	SER	Peptide
1	23-A	382	ASP	Peptide
1	23-A	517	GLU	Peptide
1	23-A	520	GLY	Peptide
1	23-A	523	ASN	Peptide
1	23-A	524	VAL	Peptide
1	23-A	525	SER	Peptide
1	24-A	518	ILE	Peptide
1	25-A	438	GLY	Peptide
1	26-A	145	ARG	Peptide
1	26-A	383	ALA	Peptide
1	26-A	516	ASN	Peptide
1	26-A	517	GLU	Peptide
1	27-A	381	ALA	Peptide
1	27-A	383	ALA	Peptide
1	27-A	438	GLY	Peptide
1	27-A	522	GLU	Peptide
1	27-A	525	SER	Peptide
1	28-A	124	GLU	Peptide
1	28-A	522	GLU	Peptide
1	29-A	103	GLY	Peptide
1	29-A	124	GLU	Peptide
1	3-A	517	GLU	Peptide
1	3-A	518	ILE	Peptide
1	3-A	521	MET	Peptide
1	30-A	518	ILE	Peptide
1	30-A	521	MET	Peptide
1	31-A	519	GLU	Peptide
1	32-A	318	TYR	Peptide
1	32-A	382	ASP	Peptide
1	32-A	520	GLY	Peptide
1	33-A	126	LYS	Peptide
1	33-A	514	TYR	Peptide
1	34-A	382	ASP	Peptide
1	34-A	519	GLU	Peptide
1	34-A	521	MET	Peptide
1	34-A	89	CYS	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	34-A	90	ASN	Peptide
1	35-A	124	GLU	Peptide
1	35-A	382	ASP	Peptide
1	35-A	384	GLU	Peptide
1	35-A	517	GLU	Peptide
1	35-A	518	ILE	Peptide
1	35-A	521	MET	Peptide
1	36-A	514	TYR	Peptide
1	36-A	518	ILE	Peptide
1	36-A	520	GLY	Peptide
1	37-A	102	THR	Peptide
1	37-A	384	GLU	Peptide
1	37-A	515	SER	Peptide
1	37-A	522	GLU	Peptide
1	38-A	103	GLY	Peptide
1	38-A	104	LYS	Peptide
1	38-A	386	THR	Peptide
1	38-A	522	GLU	Peptide
1	38-A	523	ASN	Peptide
1	39-A	461	ARG	Peptide
1	39-A	518	ILE	Peptide
1	39-A	523	ASN	Peptide
1	4-A	386	THR	Peptide
1	4-A	522	GLU	Peptide
1	40-A	103	GLY	Peptide
1	40-A	382	ASP	Peptide
1	40-A	435	HIS	Peptide
1	40-A	519	GLU	Peptide
1	40-A	521	MET	Peptide
1	40-A	523	ASN	Peptide
1	41-A	435	HIS	Peptide
1	41-A	531	LYS	Peptide
1	42-A	382	ASP	Peptide
1	42-A	385	ARG	Peptide
1	42-A	515	SER	Peptide
1	42-A	524	VAL	Peptide
1	43-A	125	THR	Peptide
1	43-A	380	LEU	Peptide
1	43-A	384	GLU	Peptide
1	43-A	438	GLY	Peptide
1	43-A	525	SER	Peptide
1	5-A	438	GLY	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	7-A	516	ASN	Peptide
1	8-A	126	LYS	Peptide
1	9-A	100	PHE	Peptide
1	9-A	381	ALA	Peptide
1	9-A	521	MET	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	4478	4476	0	0
1	2-A	4557	4478	4476	0	0
1	3-A	4557	4478	4476	0	0
1	4-A	4557	4478	4476	0	0
1	5-A	4557	4478	4476	0	0
1	6-A	4557	4478	4476	0	0
1	7-A	4557	4478	4476	0	0
1	8-A	4557	4478	4476	0	0
1	9-A	4557	4478	4476	0	0
1	10-A	4557	4478	4476	0	0
1	11-A	4557	4478	4476	0	0
1	12-A	4557	4478	4476	0	0
1	13-A	4557	4478	4476	0	0
1	14-A	4557	4478	4476	0	0
1	15-A	4557	4478	4476	0	0
1	16-A	4557	4478	4476	0	0
1	17-A	4557	4478	4476	0	0
1	18-A	4557	4478	4476	0	0
1	19-A	4557	4478	4475	0	0
1	20-A	4557	4478	4476	0	0
1	21-A	4557	4478	4476	0	0
1	22-A	4557	4478	4476	0	0
1	23-A	4557	4478	4476	0	0
1	24-A	4557	4478	4476	0	0
1	25-A	4557	4478	4476	0	0
1	26-A	4557	4478	4476	0	0
1	27-A	4557	4478	4476	0	0
1	28-A	4557	4478	4476	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	29-A	4557	4478	4476	0	0
1	30-A	4557	4478	4476	0	0
1	31-A	4557	4478	4476	0	0
1	32-A	4557	4478	4475	0	0
1	33-A	4557	4478	4476	0	0
1	34-A	4557	4478	4476	0	0
1	35-A	4557	4478	4476	0	0
1	36-A	4557	4478	4476	0	0
1	37-A	4557	4478	4476	0	0
1	38-A	4557	4478	4476	0	0
1	39-A	4557	4478	4476	0	0
1	40-A	4557	4478	4476	0	0
1	41-A	4557	4478	4476	0	0
1	42-A	4557	4478	4476	0	0
1	43-A	4557	4478	4476	0	0
2	1-A	8	10	10	0	0
2	2-A	8	10	10	0	0
2	3-A	8	10	10	0	0
2	4-A	8	10	10	0	0
2	5-A	8	10	10	0	0
2	6-A	8	10	10	0	0
2	7-A	8	10	10	0	0
2	8-A	8	10	10	0	0
2	9-A	8	10	10	0	0
2	10-A	8	10	10	0	0
2	11-A	8	10	10	0	0
2	12-A	8	10	10	0	0
2	13-A	8	10	10	0	0
2	14-A	8	10	10	0	0
2	15-A	8	10	10	0	0
2	16-A	8	10	10	0	0
2	17-A	8	10	10	0	0
2	18-A	8	10	10	0	0
2	19-A	8	10	10	0	0
2	20-A	8	10	10	0	0
2	21-A	8	10	10	0	0
2	22-A	8	10	10	0	0
2	23-A	8	10	10	0	0
2	24-A	8	10	10	0	0
2	25-A	8	10	10	0	0
2	26-A	8	10	10	0	0
2	27-A	8	10	10	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
2	28-A	8	10	10	0	0
2	29-A	8	10	10	0	0
2	30-A	8	10	10	0	0
2	31-A	8	10	10	0	0
2	32-A	8	10	10	0	0
2	33-A	8	10	10	0	0
2	34-A	8	10	10	0	0
2	35-A	8	10	10	0	0
2	36-A	8	10	10	0	0
2	37-A	8	10	10	0	0
2	38-A	8	10	10	0	0
2	39-A	8	10	10	0	0
2	40-A	8	10	10	0	0
2	41-A	8	10	10	0	0
2	42-A	8	10	10	0	0
2	43-A	8	10	10	0	0
3	1-A	399	0	0	0	0
3	2-A	380	0	0	0	0
3	3-A	356	0	0	0	0
3	4-A	389	0	0	0	0
3	5-A	386	0	0	0	0
3	6-A	379	0	0	0	0
3	7-A	375	0	0	0	0
3	8-A	365	0	0	0	0
3	9-A	373	0	0	0	0
3	10-A	365	0	0	0	0
3	11-A	360	0	0	0	0
3	12-A	396	0	0	0	0
3	13-A	406	0	0	0	0
3	14-A	378	0	0	0	0
3	15-A	374	0	0	0	0
3	16-A	386	0	0	0	0
3	17-A	357	0	0	0	0
3	18-A	353	0	0	0	0
3	19-A	363	0	0	0	0
3	20-A	399	0	0	0	0
3	21-A	389	0	0	0	0
3	22-A	380	0	0	0	0
3	23-A	376	0	0	0	0
3	24-A	381	0	0	0	0
3	25-A	359	0	0	0	0
3	26-A	362	0	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
3	27-A	379	0	0	0	0
3	28-A	389	0	0	0	0
3	29-A	377	0	0	0	0
3	30-A	363	0	0	0	0
3	31-A	365	0	0	0	0
3	32-A	393	0	0	0	0
3	33-A	378	0	0	0	0
3	34-A	384	0	0	0	0
3	35-A	383	0	0	0	0
3	36-A	390	0	0	0	0
3	37-A	358	0	0	0	0
3	38-A	377	0	0	0	0
3	39-A	393	0	0	0	0
3	40-A	388	0	0	0	0
3	41-A	390	0	0	0	0
3	42-A	390	0	0	0	0
3	43-A	377	0	0	0	0
All	All	212555	192984	192896	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%)	531 (94%)	27 (5%)	6 (1%)	14 2
1	2-A	564/577 (98%)	524 (93%)	34 (6%)	6 (1%)	14 2
1	3-A	564/577 (98%)	528 (94%)	29 (5%)	7 (1%)	13 2
1	4-A	564/577 (98%)	533 (94%)	27 (5%)	4 (1%)	22 5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	5-A	564/577 (98%)	529 (94%)	28 (5%)	7 (1%)	13	2
1	6-A	564/577 (98%)	528 (94%)	30 (5%)	6 (1%)	14	2
1	7-A	564/577 (98%)	527 (93%)	31 (6%)	6 (1%)	14	2
1	8-A	564/577 (98%)	528 (94%)	28 (5%)	8 (1%)	11	1
1	9-A	564/577 (98%)	531 (94%)	26 (5%)	7 (1%)	13	2
1	10-A	564/577 (98%)	538 (95%)	20 (4%)	6 (1%)	14	2
1	11-A	564/577 (98%)	528 (94%)	30 (5%)	6 (1%)	14	2
1	12-A	564/577 (98%)	528 (94%)	28 (5%)	8 (1%)	11	1
1	13-A	564/577 (98%)	532 (94%)	27 (5%)	5 (1%)	17	3
1	14-A	564/577 (98%)	531 (94%)	25 (4%)	8 (1%)	11	1
1	15-A	564/577 (98%)	523 (93%)	32 (6%)	9 (2%)	9	1
1	16-A	564/577 (98%)	531 (94%)	24 (4%)	9 (2%)	9	1
1	17-A	564/577 (98%)	532 (94%)	23 (4%)	9 (2%)	9	1
1	18-A	564/577 (98%)	529 (94%)	26 (5%)	9 (2%)	9	1
1	19-A	564/577 (98%)	530 (94%)	29 (5%)	5 (1%)	17	3
1	20-A	564/577 (98%)	525 (93%)	30 (5%)	9 (2%)	9	1
1	21-A	564/577 (98%)	523 (93%)	34 (6%)	7 (1%)	13	2
1	22-A	564/577 (98%)	525 (93%)	29 (5%)	10 (2%)	8	1
1	23-A	564/577 (98%)	521 (92%)	31 (6%)	12 (2%)	7	0
1	24-A	564/577 (98%)	530 (94%)	30 (5%)	4 (1%)	22	5
1	25-A	564/577 (98%)	524 (93%)	32 (6%)	8 (1%)	11	1
1	26-A	564/577 (98%)	527 (93%)	28 (5%)	9 (2%)	9	1
1	27-A	564/577 (98%)	519 (92%)	34 (6%)	11 (2%)	7	1
1	28-A	564/577 (98%)	527 (93%)	25 (4%)	12 (2%)	7	0
1	29-A	564/577 (98%)	530 (94%)	24 (4%)	10 (2%)	8	1
1	30-A	564/577 (98%)	531 (94%)	29 (5%)	4 (1%)	22	5
1	31-A	564/577 (98%)	530 (94%)	22 (4%)	12 (2%)	7	0
1	32-A	564/577 (98%)	534 (95%)	17 (3%)	13 (2%)	6	0
1	33-A	564/577 (98%)	520 (92%)	36 (6%)	8 (1%)	11	1
1	34-A	564/577 (98%)	518 (92%)	34 (6%)	12 (2%)	7	0
1	35-A	564/577 (98%)	517 (92%)	39 (7%)	8 (1%)	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	36-A	564/577 (98%)	524 (93%)	27 (5%)	13 (2%)	6	0
1	37-A	564/577 (98%)	519 (92%)	31 (6%)	14 (2%)	5	0
1	38-A	564/577 (98%)	522 (93%)	30 (5%)	12 (2%)	7	0
1	39-A	564/577 (98%)	523 (93%)	28 (5%)	13 (2%)	6	0
1	40-A	564/577 (98%)	530 (94%)	22 (4%)	12 (2%)	7	0
1	41-A	564/577 (98%)	524 (93%)	27 (5%)	13 (2%)	6	0
1	42-A	564/577 (98%)	525 (93%)	28 (5%)	11 (2%)	7	1
1	43-A	564/577 (98%)	526 (93%)	23 (4%)	15 (3%)	5	0
All	All	24252/24811 (98%)	22655 (93%)	1214 (5%)	383 (2%)	9	1

All (383) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	515	SER
1	1-A	522	GLU
1	2-A	564	GLU
1	3-A	123	PRO
1	3-A	518	ILE
1	3-A	521	MET
1	3-A	564	GLU
1	4-A	123	PRO
1	4-A	124	GLU
1	5-A	123	PRO
1	5-A	434	ASN
1	5-A	439	THR
1	5-A	523	ASN
1	6-A	288	GLN
1	6-A	385	ARG
1	7-A	385	ARG
1	7-A	405	GLU
1	8-A	381	ALA
1	8-A	383	ALA
1	8-A	516	ASN
1	9-A	100	PHE
1	9-A	385	ARG
1	9-A	437	SER
1	10-A	437	SER
1	11-A	100	PHE
1	11-A	104	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	11-A	518	ILE
1	11-A	520	GLY
1	12-A	101	ILE
1	12-A	516	ASN
1	12-A	519	GLU
1	13-A	518	ILE
1	14-A	99	ASP
1	14-A	100	PHE
1	14-A	383	ALA
1	14-A	518	ILE
1	15-A	122	ASN
1	15-A	124	GLU
1	15-A	125	THR
1	15-A	362	MET
1	15-A	519	GLU
1	16-A	122	ASN
1	16-A	383	ALA
1	16-A	436	THR
1	16-A	521	MET
1	16-A	532	SER
1	16-A	533	ASP
1	17-A	122	ASN
1	17-A	126	LYS
1	17-A	520	GLY
1	18-A	124	GLU
1	18-A	383	ALA
1	18-A	437	SER
1	19-A	105	VAL
1	19-A	106	CYS
1	19-A	434	ASN
1	20-A	122	ASN
1	20-A	383	ALA
1	20-A	518	ILE
1	20-A	519	GLU
1	21-A	516	ASN
1	21-A	517	GLU
1	21-A	519	GLU
1	21-A	523	ASN
1	22-A	384	GLU
1	22-A	525	SER
1	22-A	526	TRP
1	23-A	383	ALA

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	23-A	385	ARG
1	23-A	452	ASP
1	23-A	518	ILE
1	23-A	523	ASN
1	23-A	525	SER
1	24-A	524	VAL
1	25-A	518	ILE
1	25-A	519	GLU
1	25-A	523	ASN
1	26-A	385	ARG
1	26-A	519	GLU
1	26-A	523	ASN
1	27-A	384	GLU
1	27-A	523	ASN
1	27-A	526	TRP
1	28-A	125	THR
1	28-A	384	GLU
1	28-A	521	MET
1	28-A	523	ASN
1	29-A	102	THR
1	29-A	105	VAL
1	29-A	125	THR
1	29-A	384	GLU
1	30-A	123	PRO
1	30-A	384	GLU
1	30-A	518	ILE
1	30-A	519	GLU
1	31-A	126	LYS
1	31-A	384	GLU
1	31-A	452	ASP
1	31-A	517	GLU
1	31-A	518	ILE
1	31-A	522	GLU
1	32-A	123	PRO
1	32-A	125	THR
1	32-A	126	LYS
1	32-A	127	ARG
1	32-A	382	ASP
1	32-A	518	ILE
1	33-A	123	PRO
1	33-A	518	ILE
1	34-A	122	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	34-A	123	PRO
1	34-A	124	GLU
1	34-A	126	LYS
1	34-A	437	SER
1	34-A	519	GLU
1	34-A	524	VAL
1	34-A	525	SER
1	35-A	123	PRO
1	35-A	437	SER
1	35-A	518	ILE
1	35-A	524	VAL
1	36-A	104	LYS
1	36-A	385	ARG
1	36-A	387	ALA
1	36-A	438	GLY
1	36-A	518	ILE
1	36-A	524	VAL
1	37-A	100	PHE
1	37-A	519	GLU
1	37-A	523	ASN
1	37-A	524	VAL
1	38-A	100	PHE
1	38-A	101	ILE
1	38-A	381	ALA
1	38-A	383	ALA
1	38-A	518	ILE
1	38-A	524	VAL
1	39-A	385	ARG
1	39-A	437	SER
1	39-A	462	SER
1	39-A	521	MET
1	39-A	522	GLU
1	39-A	524	VAL
1	40-A	124	GLU
1	40-A	388	PRO
1	40-A	519	GLU
1	40-A	521	MET
1	40-A	522	GLU
1	41-A	103	GLY
1	41-A	382	ASP
1	41-A	519	GLU
1	41-A	521	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	41-A	522	GLU
1	41-A	524	VAL
1	42-A	381	ALA
1	42-A	383	ALA
1	42-A	388	PRO
1	42-A	436	THR
1	42-A	516	ASN
1	42-A	524	VAL
1	43-A	125	THR
1	43-A	381	ALA
1	43-A	516	ASN
1	43-A	519	GLU
1	43-A	523	ASN
1	43-A	524	VAL
1	43-A	525	SER
1	43-A	535	VAL
1	2-A	21	LYS
1	2-A	438	GLY
1	2-A	462	SER
1	2-A	517	GLU
1	2-A	521	MET
1	6-A	387	ALA
1	6-A	517	GLU
1	6-A	523	ASN
1	7-A	516	ASN
1	8-A	382	ASP
1	8-A	384	GLU
1	8-A	437	SER
1	9-A	101	ILE
1	9-A	516	ASN
1	10-A	101	ILE
1	10-A	518	ILE
1	10-A	519	GLU
1	11-A	101	ILE
1	11-A	516	ASN
1	12-A	124	GLU
1	14-A	102	THR
1	15-A	533	ASP
1	16-A	100	PHE
1	16-A	102	THR
1	17-A	438	GLY
1	17-A	521	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	18-A	519	GLU
1	18-A	521	MET
1	19-A	518	ILE
1	20-A	101	ILE
1	20-A	515	SER
1	21-A	384	GLU
1	21-A	518	ILE
1	22-A	521	MET
1	22-A	523	ASN
1	23-A	519	GLU
1	23-A	520	GLY
1	23-A	526	TRP
1	24-A	523	ASN
1	25-A	356	THR
1	25-A	383	ALA
1	25-A	522	GLU
1	26-A	384	GLU
1	27-A	386	THR
1	27-A	438	GLY
1	27-A	518	ILE
1	27-A	519	GLU
1	27-A	524	VAL
1	28-A	87	ASP
1	28-A	126	LYS
1	28-A	526	TRP
1	29-A	101	ILE
1	29-A	383	ALA
1	29-A	516	ASN
1	29-A	518	ILE
1	31-A	453	LEU
1	31-A	524	VAL
1	32-A	384	GLU
1	32-A	522	GLU
1	32-A	525	SER
1	33-A	381	ALA
1	33-A	383	ALA
1	34-A	381	ALA
1	35-A	381	ALA
1	35-A	383	ALA
1	35-A	521	MET
1	35-A	525	SER
1	36-A	522	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	36-A	532	SER
1	37-A	124	GLU
1	37-A	381	ALA
1	37-A	525	SER
1	38-A	438	GLY
1	38-A	519	GLU
1	38-A	523	ASN
1	39-A	383	ALA
1	39-A	384	GLU
1	40-A	386	THR
1	41-A	92	LYS
1	41-A	386	THR
1	42-A	125	THR
1	42-A	386	THR
1	42-A	534	GLU
1	43-A	452	ASP
1	1-A	517	GLU
1	1-A	520	GLY
1	3-A	100	PHE
1	4-A	509	THR
1	5-A	304	THR
1	5-A	453	LEU
1	7-A	384	GLU
1	8-A	434	ASN
1	10-A	520	GLY
1	12-A	452	ASP
1	13-A	100	PHE
1	13-A	104	LYS
1	14-A	321	ALA
1	14-A	519	GLU
1	15-A	102	THR
1	15-A	523	ASN
1	17-A	100	PHE
1	17-A	383	ALA
1	18-A	100	PHE
1	20-A	521	MET
1	22-A	518	ILE
1	23-A	300	LEU
1	23-A	490	GLU
1	24-A	383	ALA
1	24-A	452	ASP
1	27-A	146	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	28-A	88	CYS
1	28-A	122	ASN
1	29-A	124	GLU
1	31-A	381	ALA
1	32-A	122	ASN
1	32-A	319	GLN
1	33-A	126	LYS
1	33-A	437	SER
1	33-A	522	GLU
1	34-A	384	GLU
1	34-A	518	ILE
1	37-A	387	ALA
1	37-A	522	GLU
1	38-A	385	ARG
1	39-A	386	THR
1	39-A	438	GLY
1	40-A	382	ASP
1	40-A	524	VAL
1	41-A	90	ASN
1	41-A	438	GLY
1	41-A	515	SER
1	43-A	364	LEU
1	43-A	384	GLU
1	1-A	521	MET
1	3-A	385	ARG
1	5-A	81	PRO
1	7-A	388	PRO
1	7-A	521	MET
1	10-A	521	MET
1	12-A	294	GLU
1	13-A	464	ARG
1	15-A	438	GLY
1	18-A	518	ILE
1	19-A	519	GLU
1	21-A	525	SER
1	22-A	383	ALA
1	22-A	438	GLY
1	23-A	524	VAL
1	26-A	146	ASP
1	26-A	383	ALA
1	26-A	516	ASN
1	27-A	462	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	27-A	525	SER
1	28-A	524	VAL
1	31-A	521	MET
1	32-A	381	ALA
1	34-A	382	ASP
1	36-A	106	CYS
1	36-A	386	THR
1	36-A	388	PRO
1	36-A	464	ARG
1	37-A	385	ARG
1	37-A	386	THR
1	37-A	518	ILE
1	37-A	521	MET
1	38-A	386	THR
1	39-A	102	THR
1	39-A	123	PRO
1	40-A	438	GLY
1	42-A	385	ARG
1	43-A	534	GLU
1	6-A	362	MET
1	9-A	453	LEU
1	12-A	100	PHE
1	12-A	103	GLY
1	13-A	484	ALA
1	14-A	385	ARG
1	16-A	386	THR
1	17-A	387	ALA
1	17-A	437	SER
1	20-A	91	HIS
1	22-A	524	VAL
1	25-A	521	MET
1	31-A	525	SER
1	39-A	461	ARG
1	40-A	384	GLU
1	41-A	516	ASN
1	42-A	106	CYS
1	43-A	513	PRO
1	1-A	516	ASN
1	8-A	100	PHE
1	26-A	126	LYS
1	26-A	524	VAL
1	28-A	520	GLY

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	32-A	524	VAL
1	36-A	515	SER
1	37-A	101	ILE
1	40-A	385	ARG
1	43-A	462	SER
1	18-A	438	GLY
1	22-A	123	PRO
1	25-A	388	PRO
1	38-A	103	GLY
1	41-A	101	ILE
1	3-A	101	ILE
1	18-A	520	GLY
1	28-A	123	PRO
1	29-A	524	VAL
1	40-A	518	ILE
1	43-A	520	GLY
1	20-A	524	VAL
1	31-A	123	PRO
1	33-A	439	THR
1	9-A	438	GLY
1	4-A	438	GLY

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	500/512 (98%)	445 (89%)	55 (11%)	6 0
1	2-A	500/512 (98%)	451 (90%)	49 (10%)	8 0
1	3-A	500/512 (98%)	456 (91%)	44 (9%)	10 0
1	4-A	500/512 (98%)	446 (89%)	54 (11%)	6 0
1	5-A	500/512 (98%)	439 (88%)	61 (12%)	5 0
1	6-A	500/512 (98%)	455 (91%)	45 (9%)	9 0
1	7-A	500/512 (98%)	455 (91%)	45 (9%)	9 0
1	8-A	500/512 (98%)	460 (92%)	40 (8%)	12 1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	9-A	500/512 (98%)	453 (91%)	47 (9%)	8	0
1	10-A	500/512 (98%)	449 (90%)	51 (10%)	7	0
1	11-A	500/512 (98%)	452 (90%)	48 (10%)	8	0
1	12-A	500/512 (98%)	466 (93%)	34 (7%)	16	1
1	13-A	500/512 (98%)	452 (90%)	48 (10%)	8	0
1	14-A	500/512 (98%)	459 (92%)	41 (8%)	11	1
1	15-A	500/512 (98%)	444 (89%)	56 (11%)	6	0
1	16-A	500/512 (98%)	450 (90%)	50 (10%)	7	0
1	17-A	500/512 (98%)	446 (89%)	54 (11%)	6	0
1	18-A	500/512 (98%)	448 (90%)	52 (10%)	7	0
1	19-A	500/512 (98%)	441 (88%)	59 (12%)	5	0
1	20-A	500/512 (98%)	439 (88%)	61 (12%)	5	0
1	21-A	500/512 (98%)	440 (88%)	60 (12%)	5	0
1	22-A	500/512 (98%)	446 (89%)	54 (11%)	6	0
1	23-A	500/512 (98%)	454 (91%)	46 (9%)	9	0
1	24-A	500/512 (98%)	439 (88%)	61 (12%)	5	0
1	25-A	500/512 (98%)	436 (87%)	64 (13%)	4	0
1	26-A	500/512 (98%)	439 (88%)	61 (12%)	5	0
1	27-A	500/512 (98%)	452 (90%)	48 (10%)	8	0
1	28-A	500/512 (98%)	446 (89%)	54 (11%)	6	0
1	29-A	500/512 (98%)	447 (89%)	53 (11%)	6	0
1	30-A	500/512 (98%)	454 (91%)	46 (9%)	9	0
1	31-A	500/512 (98%)	448 (90%)	52 (10%)	7	0
1	32-A	500/512 (98%)	448 (90%)	52 (10%)	7	0
1	33-A	500/512 (98%)	449 (90%)	51 (10%)	7	0
1	34-A	500/512 (98%)	445 (89%)	55 (11%)	6	0
1	35-A	500/512 (98%)	449 (90%)	51 (10%)	7	0
1	36-A	500/512 (98%)	449 (90%)	51 (10%)	7	0
1	37-A	500/512 (98%)	460 (92%)	40 (8%)	12	1
1	38-A	500/512 (98%)	452 (90%)	48 (10%)	8	0
1	39-A	500/512 (98%)	442 (88%)	58 (12%)	5	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	40-A	500/512 (98%)	441 (88%)	59 (12%)	5 0
1	41-A	500/512 (98%)	451 (90%)	49 (10%)	8 0
1	42-A	500/512 (98%)	447 (89%)	53 (11%)	6 0
1	43-A	500/512 (98%)	450 (90%)	50 (10%)	7 0
All	All	21500/22016 (98%)	19290 (90%)	2210 (10%)	7 0

All (2210) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	11	LEU
1	1-A	19	GLU
1	1-A	21	LYS
1	1-A	43	LYS
1	1-A	65	GLN
1	1-A	86	ARG
1	1-A	87	ASP
1	1-A	92	LYS
1	1-A	100	PHE
1	1-A	125	THR
1	1-A	126	LYS
1	1-A	142	GLU
1	1-A	146	ASP
1	1-A	151	ASP
1	1-A	157	ASP
1	1-A	199	LYS
1	1-A	248	ILE
1	1-A	253	ASN
1	1-A	284	LYS
1	1-A	286	LYS
1	1-A	292	LYS
1	1-A	296	LYS
1	1-A	319	GLN
1	1-A	322	ASP
1	1-A	334	LYS
1	1-A	350	TYR
1	1-A	361	GLN
1	1-A	362	MET
1	1-A	365	LEU
1	1-A	368	GLU
1	1-A	369	LEU
1	1-A	379	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	384	GLU
1	1-A	386	THR
1	1-A	389	GLU
1	1-A	451	GLU
1	1-A	462	SER
1	1-A	464	ARG
1	1-A	467	LYS
1	1-A	485	LYS
1	1-A	486	ARG
1	1-A	489	LYS
1	1-A	490	GLU
1	1-A	504	TRP
1	1-A	510	THR
1	1-A	512	ASN
1	1-A	516	ASN
1	1-A	518	ILE
1	1-A	519	GLU
1	1-A	523	ASN
1	1-A	527	ASP
1	1-A	531	LYS
1	1-A	546	LYS
1	1-A	549	ASP
1	1-A	564	GLU
1	2-A	8	MET
1	2-A	11	LEU
1	2-A	15	ILE
1	2-A	16	LYS
1	2-A	21	LYS
1	2-A	65	GLN
1	2-A	70	GLU
1	2-A	78	ARG
1	2-A	80	THR
1	2-A	93	ASP
1	2-A	100	PHE
1	2-A	104	LYS
1	2-A	142	GLU
1	2-A	146	ASP
1	2-A	147	MET
1	2-A	151	ASP
1	2-A	236	LEU
1	2-A	276	LYS
1	2-A	284	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	2-A	286	LYS
1	2-A	289	ASP
1	2-A	301	GLU
1	2-A	304	THR
1	2-A	319	GLN
1	2-A	340	SER
1	2-A	350	TYR
1	2-A	358	ILE
1	2-A	378	SER
1	2-A	379	GLU
1	2-A	384	GLU
1	2-A	386	THR
1	2-A	389	GLU
1	2-A	392	GLU
1	2-A	410	ASP
1	2-A	439	THR
1	2-A	441	VAL
1	2-A	451	GLU
1	2-A	485	LYS
1	2-A	486	ARG
1	2-A	489	LYS
1	2-A	490	GLU
1	2-A	504	TRP
1	2-A	510	THR
1	2-A	512	ASN
1	2-A	516	ASN
1	2-A	523	ASN
1	2-A	531	LYS
1	2-A	564	GLU
1	2-A	566	HIS
1	3-A	11	LEU
1	3-A	14	LYS
1	3-A	36	GLU
1	3-A	43	LYS
1	3-A	65	GLN
1	3-A	70	GLU
1	3-A	78	ARG
1	3-A	86	ARG
1	3-A	90	ASN
1	3-A	93	ASP
1	3-A	101	ILE
1	3-A	104	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	3-A	125	THR
1	3-A	142	GLU
1	3-A	151	ASP
1	3-A	155	LYS
1	3-A	178	GLU
1	3-A	217	GLU
1	3-A	288	GLN
1	3-A	289	ASP
1	3-A	293	LEU
1	3-A	295	GLU
1	3-A	301	GLU
1	3-A	306	LYS
1	3-A	350	TYR
1	3-A	357	SER
1	3-A	360	LYS
1	3-A	365	LEU
1	3-A	367	LYS
1	3-A	379	GLU
1	3-A	384	GLU
1	3-A	386	THR
1	3-A	452	ASP
1	3-A	460	MET
1	3-A	462	SER
1	3-A	464	ARG
1	3-A	485	LYS
1	3-A	486	ARG
1	3-A	489	LYS
1	3-A	504	TRP
1	3-A	515	SER
1	3-A	531	LYS
1	3-A	564	GLU
1	3-A	568	ASP
1	4-A	11	LEU
1	4-A	14	LYS
1	4-A	19	GLU
1	4-A	36	GLU
1	4-A	43	LYS
1	4-A	70	GLU
1	4-A	77	GLN
1	4-A	78	ARG
1	4-A	89	CYS
1	4-A	90	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	4-A	100	PHE
1	4-A	101	ILE
1	4-A	104	LYS
1	4-A	126	LYS
1	4-A	147	MET
1	4-A	151	ASP
1	4-A	179	ASP
1	4-A	181	ASN
1	4-A	199	LYS
1	4-A	236	LEU
1	4-A	254	THR
1	4-A	288	GLN
1	4-A	295	GLU
1	4-A	296	LYS
1	4-A	303	ARG
1	4-A	306	LYS
1	4-A	350	TYR
1	4-A	360	LYS
1	4-A	362	MET
1	4-A	364	LEU
1	4-A	378	SER
1	4-A	384	GLU
1	4-A	386	THR
1	4-A	392	GLU
1	4-A	393	MET
1	4-A	410	ASP
1	4-A	436	THR
1	4-A	439	THR
1	4-A	441	VAL
1	4-A	460	MET
1	4-A	470	SER
1	4-A	485	LYS
1	4-A	486	ARG
1	4-A	489	LYS
1	4-A	490	GLU
1	4-A	504	TRP
1	4-A	510	THR
1	4-A	518	ILE
1	4-A	522	GLU
1	4-A	523	ASN
1	4-A	531	LYS
1	4-A	564	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	4-A	565	LYS
1	4-A	568	ASP
1	5-A	7	LEU
1	5-A	8	MET
1	5-A	11	LEU
1	5-A	19	GLU
1	5-A	36	GLU
1	5-A	54	SER
1	5-A	68	VAL
1	5-A	70	GLU
1	5-A	74	LYS
1	5-A	90	ASN
1	5-A	91	HIS
1	5-A	93	ASP
1	5-A	101	ILE
1	5-A	105	VAL
1	5-A	124	GLU
1	5-A	125	THR
1	5-A	126	LYS
1	5-A	142	GLU
1	5-A	146	ASP
1	5-A	151	ASP
1	5-A	155	LYS
1	5-A	156	LYS
1	5-A	178	GLU
1	5-A	179	ASP
1	5-A	200	ASN
1	5-A	236	LEU
1	5-A	253	ASN
1	5-A	265	LYS
1	5-A	272	GLU
1	5-A	280	GLU
1	5-A	293	LEU
1	5-A	294	GLU
1	5-A	306	LYS
1	5-A	331	GLU
1	5-A	340	SER
1	5-A	350	TYR
1	5-A	358	ILE
1	5-A	360	LYS
1	5-A	362	MET
1	5-A	369	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	5-A	378	SER
1	5-A	382	ASP
1	5-A	384	GLU
1	5-A	392	GLU
1	5-A	405	GLU
1	5-A	437	SER
1	5-A	452	ASP
1	5-A	456	PRO
1	5-A	464	ARG
1	5-A	467	LYS
1	5-A	474	GLU
1	5-A	485	LYS
1	5-A	486	ARG
1	5-A	498	GLU
1	5-A	504	TRP
1	5-A	517	GLU
1	5-A	519	GLU
1	5-A	523	ASN
1	5-A	531	LYS
1	5-A	537	LYS
1	5-A	564	GLU
1	6-A	14	LYS
1	6-A	24	ASN
1	6-A	37	THR
1	6-A	54	SER
1	6-A	65	GLN
1	6-A	68	VAL
1	6-A	77	GLN
1	6-A	78	ARG
1	6-A	80	THR
1	6-A	86	ARG
1	6-A	93	ASP
1	6-A	100	PHE
1	6-A	101	ILE
1	6-A	125	THR
1	6-A	147	MET
1	6-A	151	ASP
1	6-A	155	LYS
1	6-A	178	GLU
1	6-A	253	ASN
1	6-A	274	ASN
1	6-A	286	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	6-A	293	LEU
1	6-A	295	GLU
1	6-A	306	LYS
1	6-A	350	TYR
1	6-A	357	SER
1	6-A	365	LEU
1	6-A	379	GLU
1	6-A	384	GLU
1	6-A	392	GLU
1	6-A	396	LYS
1	6-A	410	ASP
1	6-A	437	SER
1	6-A	460	MET
1	6-A	474	GLU
1	6-A	486	ARG
1	6-A	490	GLU
1	6-A	504	TRP
1	6-A	505	THR
1	6-A	521	MET
1	6-A	522	GLU
1	6-A	530	GLU
1	6-A	531	LYS
1	6-A	534	GLU
1	6-A	564	GLU
1	7-A	16	LYS
1	7-A	19	GLU
1	7-A	24	ASN
1	7-A	65	GLN
1	7-A	74	LYS
1	7-A	92	LYS
1	7-A	101	ILE
1	7-A	102	THR
1	7-A	122	ASN
1	7-A	142	GLU
1	7-A	147	MET
1	7-A	151	ASP
1	7-A	157	ASP
1	7-A	181	ASN
1	7-A	204	ASN
1	7-A	236	LEU
1	7-A	288	GLN
1	7-A	301	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	7-A	350	TYR
1	7-A	355	PHE
1	7-A	365	LEU
1	7-A	384	GLU
1	7-A	388	PRO
1	7-A	396	LYS
1	7-A	403	THR
1	7-A	425	MET
1	7-A	437	SER
1	7-A	439	THR
1	7-A	460	MET
1	7-A	461	ARG
1	7-A	462	SER
1	7-A	464	ARG
1	7-A	489	LYS
1	7-A	504	TRP
1	7-A	505	THR
1	7-A	514	TYR
1	7-A	518	ILE
1	7-A	519	GLU
1	7-A	521	MET
1	7-A	522	GLU
1	7-A	532	SER
1	7-A	542	SER
1	7-A	544	GLU
1	7-A	549	ASP
1	7-A	566	HIS
1	8-A	16	LYS
1	8-A	80	THR
1	8-A	86	ARG
1	8-A	90	ASN
1	8-A	92	LYS
1	8-A	101	ILE
1	8-A	106	CYS
1	8-A	124	GLU
1	8-A	142	GLU
1	8-A	151	ASP
1	8-A	177	SER
1	8-A	199	LYS
1	8-A	200	ASN
1	8-A	217	GLU
1	8-A	248	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	8-A	288	GLN
1	8-A	293	LEU
1	8-A	295	GLU
1	8-A	296	LYS
1	8-A	345	MET
1	8-A	350	TYR
1	8-A	361	GLN
1	8-A	367	LYS
1	8-A	379	GLU
1	8-A	452	ASP
1	8-A	467	LYS
1	8-A	474	GLU
1	8-A	495	LYS
1	8-A	504	TRP
1	8-A	505	THR
1	8-A	510	THR
1	8-A	512	ASN
1	8-A	514	TYR
1	8-A	518	ILE
1	8-A	521	MET
1	8-A	531	LYS
1	8-A	544	GLU
1	8-A	564	GLU
1	8-A	566	HIS
1	8-A	567	ARG
1	9-A	5	VAL
1	9-A	36	GLU
1	9-A	80	THR
1	9-A	86	ARG
1	9-A	89	CYS
1	9-A	92	LYS
1	9-A	100	PHE
1	9-A	101	ILE
1	9-A	122	ASN
1	9-A	125	THR
1	9-A	126	LYS
1	9-A	142	GLU
1	9-A	151	ASP
1	9-A	199	LYS
1	9-A	239	ARG
1	9-A	284	LYS
1	9-A	286	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	9-A	288	GLN
1	9-A	293	LEU
1	9-A	295	GLU
1	9-A	322	ASP
1	9-A	345	MET
1	9-A	350	TYR
1	9-A	357	SER
1	9-A	361	GLN
1	9-A	365	LEU
1	9-A	369	LEU
1	9-A	382	ASP
1	9-A	384	GLU
1	9-A	389	GLU
1	9-A	396	LYS
1	9-A	410	ASP
1	9-A	436	THR
1	9-A	437	SER
1	9-A	439	THR
1	9-A	486	ARG
1	9-A	495	LYS
1	9-A	504	TRP
1	9-A	515	SER
1	9-A	516	ASN
1	9-A	517	GLU
1	9-A	518	ILE
1	9-A	519	GLU
1	9-A	522	GLU
1	9-A	530	GLU
1	9-A	533	ASP
1	9-A	544	GLU
1	10-A	5	VAL
1	10-A	71	LEU
1	10-A	86	ARG
1	10-A	93	ASP
1	10-A	100	PHE
1	10-A	125	THR
1	10-A	126	LYS
1	10-A	142	GLU
1	10-A	151	ASP
1	10-A	157	ASP
1	10-A	200	ASN
1	10-A	217	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	10-A	236	LEU
1	10-A	254	THR
1	10-A	265	LYS
1	10-A	286	LYS
1	10-A	288	GLN
1	10-A	289	ASP
1	10-A	294	GLU
1	10-A	295	GLU
1	10-A	301	GLU
1	10-A	319	GLN
1	10-A	322	ASP
1	10-A	324	VAL
1	10-A	328	HIS
1	10-A	334	LYS
1	10-A	350	TYR
1	10-A	358	ILE
1	10-A	361	GLN
1	10-A	362	MET
1	10-A	367	LYS
1	10-A	369	LEU
1	10-A	384	GLU
1	10-A	396	LYS
1	10-A	451	GLU
1	10-A	452	ASP
1	10-A	474	GLU
1	10-A	485	LYS
1	10-A	486	ARG
1	10-A	490	GLU
1	10-A	495	LYS
1	10-A	504	TRP
1	10-A	515	SER
1	10-A	516	ASN
1	10-A	517	GLU
1	10-A	518	ILE
1	10-A	544	GLU
1	10-A	549	ASP
1	10-A	564	GLU
1	10-A	567	ARG
1	10-A	568	ASP
1	11-A	24	ASN
1	11-A	52	ASP
1	11-A	77	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	11-A	90	ASN
1	11-A	91	HIS
1	11-A	93	ASP
1	11-A	99	ASP
1	11-A	100	PHE
1	11-A	101	ILE
1	11-A	104	LYS
1	11-A	142	GLU
1	11-A	151	ASP
1	11-A	155	LYS
1	11-A	248	ILE
1	11-A	266	LEU
1	11-A	272	GLU
1	11-A	277	ASP
1	11-A	284	LYS
1	11-A	288	GLN
1	11-A	292	LYS
1	11-A	295	GLU
1	11-A	300	LEU
1	11-A	327	LYS
1	11-A	331	GLU
1	11-A	334	LYS
1	11-A	350	TYR
1	11-A	360	LYS
1	11-A	367	LYS
1	11-A	382	ASP
1	11-A	396	LYS
1	11-A	434	ASN
1	11-A	439	THR
1	11-A	460	MET
1	11-A	462	SER
1	11-A	486	ARG
1	11-A	489	LYS
1	11-A	490	GLU
1	11-A	504	TRP
1	11-A	510	THR
1	11-A	512	ASN
1	11-A	514	TYR
1	11-A	516	ASN
1	11-A	517	GLU
1	11-A	518	ILE
1	11-A	519	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	11-A	532	SER
1	11-A	543	ASP
1	11-A	567	ARG
1	12-A	11	LEU
1	12-A	52	ASP
1	12-A	77	GLN
1	12-A	90	ASN
1	12-A	100	PHE
1	12-A	101	ILE
1	12-A	151	ASP
1	12-A	179	ASP
1	12-A	288	GLN
1	12-A	295	GLU
1	12-A	296	LYS
1	12-A	305	ASN
1	12-A	306	LYS
1	12-A	327	LYS
1	12-A	328	HIS
1	12-A	331	GLU
1	12-A	334	LYS
1	12-A	343	THR
1	12-A	350	TYR
1	12-A	357	SER
1	12-A	364	LEU
1	12-A	365	LEU
1	12-A	367	LYS
1	12-A	369	LEU
1	12-A	378	SER
1	12-A	382	ASP
1	12-A	452	ASP
1	12-A	487	MET
1	12-A	489	LYS
1	12-A	504	TRP
1	12-A	518	ILE
1	12-A	523	ASN
1	12-A	544	GLU
1	12-A	567	ARG
1	13-A	14	LYS
1	13-A	36	GLU
1	13-A	43	LYS
1	13-A	53	ASP
1	13-A	90	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	13-A	91	HIS
1	13-A	99	ASP
1	13-A	105	VAL
1	13-A	126	LYS
1	13-A	142	GLU
1	13-A	151	ASP
1	13-A	156	LYS
1	13-A	179	ASP
1	13-A	200	ASN
1	13-A	210	ASP
1	13-A	236	LEU
1	13-A	253	ASN
1	13-A	284	LYS
1	13-A	286	LYS
1	13-A	288	GLN
1	13-A	296	LYS
1	13-A	301	GLU
1	13-A	306	LYS
1	13-A	327	LYS
1	13-A	328	HIS
1	13-A	334	LYS
1	13-A	350	TYR
1	13-A	361	GLN
1	13-A	362	MET
1	13-A	365	LEU
1	13-A	367	LYS
1	13-A	393	MET
1	13-A	439	THR
1	13-A	451	GLU
1	13-A	452	ASP
1	13-A	462	SER
1	13-A	464	ARG
1	13-A	485	LYS
1	13-A	487	MET
1	13-A	504	TRP
1	13-A	506	GLN
1	13-A	521	MET
1	13-A	530	GLU
1	13-A	533	ASP
1	13-A	534	GLU
1	13-A	537	LYS
1	13-A	544	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	13-A	565	LYS
1	14-A	9	GLU
1	14-A	16	LYS
1	14-A	59	GLU
1	14-A	89	CYS
1	14-A	94	LYS
1	14-A	122	ASN
1	14-A	124	GLU
1	14-A	142	GLU
1	14-A	146	ASP
1	14-A	151	ASP
1	14-A	179	ASP
1	14-A	181	ASN
1	14-A	200	ASN
1	14-A	210	ASP
1	14-A	254	THR
1	14-A	272	GLU
1	14-A	277	ASP
1	14-A	289	ASP
1	14-A	295	GLU
1	14-A	319	GLN
1	14-A	324	VAL
1	14-A	334	LYS
1	14-A	358	ILE
1	14-A	360	LYS
1	14-A	362	MET
1	14-A	367	LYS
1	14-A	384	GLU
1	14-A	437	SER
1	14-A	460	MET
1	14-A	464	ARG
1	14-A	485	LYS
1	14-A	486	ARG
1	14-A	504	TRP
1	14-A	516	ASN
1	14-A	518	ILE
1	14-A	521	MET
1	14-A	522	GLU
1	14-A	534	GLU
1	14-A	544	GLU
1	14-A	561	SER
1	14-A	565	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	15-A	7	LEU
1	15-A	8	MET
1	15-A	11	LEU
1	15-A	17	CYS
1	15-A	21	LYS
1	15-A	52	ASP
1	15-A	53	ASP
1	15-A	59	GLU
1	15-A	68	VAL
1	15-A	77	GLN
1	15-A	86	ARG
1	15-A	94	LYS
1	15-A	100	PHE
1	15-A	104	LYS
1	15-A	142	GLU
1	15-A	147	MET
1	15-A	151	ASP
1	15-A	155	LYS
1	15-A	179	ASP
1	15-A	181	ASN
1	15-A	286	LYS
1	15-A	300	LEU
1	15-A	319	GLN
1	15-A	327	LYS
1	15-A	334	LYS
1	15-A	350	TYR
1	15-A	361	GLN
1	15-A	365	LEU
1	15-A	367	LYS
1	15-A	379	GLU
1	15-A	384	GLU
1	15-A	396	LYS
1	15-A	405	GLU
1	15-A	410	ASP
1	15-A	424	PRO
1	15-A	436	THR
1	15-A	452	ASP
1	15-A	453	LEU
1	15-A	457	TYR
1	15-A	460	MET
1	15-A	485	LYS
1	15-A	486	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	15-A	490	GLU
1	15-A	498	GLU
1	15-A	504	TRP
1	15-A	516	ASN
1	15-A	518	ILE
1	15-A	519	GLU
1	15-A	522	GLU
1	15-A	527	ASP
1	15-A	530	GLU
1	15-A	532	SER
1	15-A	533	ASP
1	15-A	544	GLU
1	15-A	565	LYS
1	15-A	567	ARG
1	16-A	8	MET
1	16-A	19	GLU
1	16-A	86	ARG
1	16-A	92	LYS
1	16-A	93	ASP
1	16-A	100	PHE
1	16-A	101	ILE
1	16-A	102	THR
1	16-A	122	ASN
1	16-A	124	GLU
1	16-A	126	LYS
1	16-A	142	GLU
1	16-A	147	MET
1	16-A	151	ASP
1	16-A	199	LYS
1	16-A	234	ARG
1	16-A	253	ASN
1	16-A	254	THR
1	16-A	288	GLN
1	16-A	302	GLU
1	16-A	319	GLN
1	16-A	324	VAL
1	16-A	350	TYR
1	16-A	357	SER
1	16-A	358	ILE
1	16-A	362	MET
1	16-A	367	LYS
1	16-A	369	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	16-A	378	SER
1	16-A	382	ASP
1	16-A	384	GLU
1	16-A	451	GLU
1	16-A	454	ILE
1	16-A	456	PRO
1	16-A	458	ARG
1	16-A	460	MET
1	16-A	464	ARG
1	16-A	485	LYS
1	16-A	489	LYS
1	16-A	490	GLU
1	16-A	504	TRP
1	16-A	512	ASN
1	16-A	518	ILE
1	16-A	519	GLU
1	16-A	521	MET
1	16-A	530	GLU
1	16-A	533	ASP
1	16-A	534	GLU
1	16-A	565	LYS
1	16-A	568	ASP
1	17-A	8	MET
1	17-A	12	LYS
1	17-A	31	GLU
1	17-A	54	SER
1	17-A	65	GLN
1	17-A	78	ARG
1	17-A	80	THR
1	17-A	86	ARG
1	17-A	90	ASN
1	17-A	100	PHE
1	17-A	101	ILE
1	17-A	104	LYS
1	17-A	106	CYS
1	17-A	120	ASN
1	17-A	122	ASN
1	17-A	125	THR
1	17-A	126	LYS
1	17-A	151	ASP
1	17-A	179	ASP
1	17-A	236	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	17-A	253	ASN
1	17-A	274	ASN
1	17-A	280	GLU
1	17-A	284	LYS
1	17-A	286	LYS
1	17-A	288	GLN
1	17-A	291	ILE
1	17-A	300	LEU
1	17-A	322	ASP
1	17-A	350	TYR
1	17-A	360	LYS
1	17-A	362	MET
1	17-A	367	LYS
1	17-A	396	LYS
1	17-A	435	HIS
1	17-A	437	SER
1	17-A	454	ILE
1	17-A	464	ARG
1	17-A	467	LYS
1	17-A	486	ARG
1	17-A	504	TRP
1	17-A	505	THR
1	17-A	510	THR
1	17-A	512	ASN
1	17-A	517	GLU
1	17-A	518	ILE
1	17-A	519	GLU
1	17-A	521	MET
1	17-A	522	GLU
1	17-A	523	ASN
1	17-A	530	GLU
1	17-A	533	ASP
1	17-A	534	GLU
1	17-A	565	LYS
1	18-A	8	MET
1	18-A	14	LYS
1	18-A	19	GLU
1	18-A	37	THR
1	18-A	43	LYS
1	18-A	100	PHE
1	18-A	104	LYS
1	18-A	120	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	18-A	122	ASN
1	18-A	126	LYS
1	18-A	130	LEU
1	18-A	142	GLU
1	18-A	151	ASP
1	18-A	179	ASP
1	18-A	236	LEU
1	18-A	253	ASN
1	18-A	277	ASP
1	18-A	288	GLN
1	18-A	291	ILE
1	18-A	294	GLU
1	18-A	295	GLU
1	18-A	300	LEU
1	18-A	301	GLU
1	18-A	304	THR
1	18-A	319	GLN
1	18-A	334	LYS
1	18-A	350	TYR
1	18-A	362	MET
1	18-A	365	LEU
1	18-A	367	LYS
1	18-A	370	GLU
1	18-A	382	ASP
1	18-A	386	THR
1	18-A	396	LYS
1	18-A	437	SER
1	18-A	454	ILE
1	18-A	460	MET
1	18-A	464	ARG
1	18-A	485	LYS
1	18-A	487	MET
1	18-A	504	TRP
1	18-A	512	ASN
1	18-A	515	SER
1	18-A	518	ILE
1	18-A	521	MET
1	18-A	523	ASN
1	18-A	524	VAL
1	18-A	544	GLU
1	18-A	546	LYS
1	18-A	557	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	18-A	564	GLU
1	18-A	567	ARG
1	19-A	14	LYS
1	19-A	19	GLU
1	19-A	36	GLU
1	19-A	86	ARG
1	19-A	87	ASP
1	19-A	89	CYS
1	19-A	99	ASP
1	19-A	101	ILE
1	19-A	120	ASN
1	19-A	122	ASN
1	19-A	124	GLU
1	19-A	125	THR
1	19-A	142	GLU
1	19-A	147	MET
1	19-A	151	ASP
1	19-A	157	ASP
1	19-A	248	ILE
1	19-A	253	ASN
1	19-A	258	HIS
1	19-A	274	ASN
1	19-A	286	LYS
1	19-A	288	GLN
1	19-A	289	ASP
1	19-A	291	ILE
1	19-A	295	GLU
1	19-A	296	LYS
1	19-A	300	LEU
1	19-A	319	GLN
1	19-A	327	LYS
1	19-A	350	TYR
1	19-A	357	SER
1	19-A	360	LYS
1	19-A	361	GLN
1	19-A	362	MET
1	19-A	364	LEU
1	19-A	365	LEU
1	19-A	367	LYS
1	19-A	382	ASP
1	19-A	389	GLU
1	19-A	396	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	19-A	451	GLU
1	19-A	453	LEU
1	19-A	460	MET
1	19-A	464	ARG
1	19-A	486	ARG
1	19-A	489	LYS
1	19-A	504	TRP
1	19-A	516	ASN
1	19-A	517	GLU
1	19-A	518	ILE
1	19-A	522	GLU
1	19-A	524	VAL
1	19-A	525	SER
1	19-A	532	SER
1	19-A	544	GLU
1	19-A	546	LYS
1	19-A	557	LYS
1	19-A	565	LYS
1	19-A	567	ARG
1	20-A	7	LEU
1	20-A	19	GLU
1	20-A	36	GLU
1	20-A	54	SER
1	20-A	65	GLN
1	20-A	68	VAL
1	20-A	78	ARG
1	20-A	90	ASN
1	20-A	91	HIS
1	20-A	99	ASP
1	20-A	100	PHE
1	20-A	104	LYS
1	20-A	120	ASN
1	20-A	122	ASN
1	20-A	124	GLU
1	20-A	126	LYS
1	20-A	142	GLU
1	20-A	147	MET
1	20-A	151	ASP
1	20-A	177	SER
1	20-A	179	ASP
1	20-A	200	ASN
1	20-A	217	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	20-A	254	THR
1	20-A	291	ILE
1	20-A	292	LYS
1	20-A	294	GLU
1	20-A	296	LYS
1	20-A	300	LEU
1	20-A	301	GLU
1	20-A	308	MET
1	20-A	350	TYR
1	20-A	360	LYS
1	20-A	361	GLN
1	20-A	362	MET
1	20-A	364	LEU
1	20-A	367	LYS
1	20-A	369	LEU
1	20-A	385	ARG
1	20-A	386	THR
1	20-A	424	PRO
1	20-A	432	ARG
1	20-A	437	SER
1	20-A	451	GLU
1	20-A	453	LEU
1	20-A	464	ARG
1	20-A	489	LYS
1	20-A	504	TRP
1	20-A	510	THR
1	20-A	512	ASN
1	20-A	513	PRO
1	20-A	517	GLU
1	20-A	523	ASN
1	20-A	524	VAL
1	20-A	525	SER
1	20-A	530	GLU
1	20-A	537	LYS
1	20-A	544	GLU
1	20-A	557	LYS
1	20-A	564	GLU
1	20-A	567	ARG
1	21-A	7	LEU
1	21-A	14	LYS
1	21-A	16	LYS
1	21-A	18	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	21-A	20	ASN
1	21-A	36	GLU
1	21-A	41	LYS
1	21-A	70	GLU
1	21-A	78	ARG
1	21-A	91	HIS
1	21-A	93	ASP
1	21-A	100	PHE
1	21-A	105	VAL
1	21-A	120	ASN
1	21-A	122	ASN
1	21-A	124	GLU
1	21-A	125	THR
1	21-A	126	LYS
1	21-A	146	ASP
1	21-A	151	ASP
1	21-A	155	LYS
1	21-A	157	ASP
1	21-A	204	ASN
1	21-A	276	LYS
1	21-A	288	GLN
1	21-A	289	ASP
1	21-A	295	GLU
1	21-A	296	LYS
1	21-A	300	LEU
1	21-A	303	ARG
1	21-A	319	GLN
1	21-A	324	VAL
1	21-A	331	GLU
1	21-A	334	LYS
1	21-A	350	TYR
1	21-A	358	ILE
1	21-A	361	GLN
1	21-A	362	MET
1	21-A	365	LEU
1	21-A	367	LYS
1	21-A	385	ARG
1	21-A	389	GLU
1	21-A	396	LYS
1	21-A	439	THR
1	21-A	452	ASP
1	21-A	453	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	21-A	462	SER
1	21-A	464	ARG
1	21-A	474	GLU
1	21-A	485	LYS
1	21-A	486	ARG
1	21-A	489	LYS
1	21-A	504	TRP
1	21-A	512	ASN
1	21-A	516	ASN
1	21-A	524	VAL
1	21-A	530	GLU
1	21-A	544	GLU
1	21-A	567	ARG
1	21-A	568	ASP
1	22-A	10	LYS
1	22-A	11	LEU
1	22-A	24	ASN
1	22-A	36	GLU
1	22-A	53	ASP
1	22-A	54	SER
1	22-A	78	ARG
1	22-A	87	ASP
1	22-A	90	ASN
1	22-A	93	ASP
1	22-A	104	LYS
1	22-A	120	ASN
1	22-A	124	GLU
1	22-A	125	THR
1	22-A	126	LYS
1	22-A	151	ASP
1	22-A	156	LYS
1	22-A	253	ASN
1	22-A	276	LYS
1	22-A	284	LYS
1	22-A	289	ASP
1	22-A	300	LEU
1	22-A	301	GLU
1	22-A	319	GLN
1	22-A	331	GLU
1	22-A	334	LYS
1	22-A	350	TYR
1	22-A	360	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	22-A	361	GLN
1	22-A	362	MET
1	22-A	365	LEU
1	22-A	369	LEU
1	22-A	379	GLU
1	22-A	386	THR
1	22-A	389	GLU
1	22-A	393	MET
1	22-A	405	GLU
1	22-A	452	ASP
1	22-A	453	LEU
1	22-A	460	MET
1	22-A	464	ARG
1	22-A	467	LYS
1	22-A	485	LYS
1	22-A	486	ARG
1	22-A	489	LYS
1	22-A	498	GLU
1	22-A	504	TRP
1	22-A	512	ASN
1	22-A	517	GLU
1	22-A	519	GLU
1	22-A	525	SER
1	22-A	530	GLU
1	22-A	544	GLU
1	22-A	567	ARG
1	23-A	10	LYS
1	23-A	21	LYS
1	23-A	36	GLU
1	23-A	80	THR
1	23-A	87	ASP
1	23-A	90	ASN
1	23-A	92	LYS
1	23-A	100	PHE
1	23-A	101	ILE
1	23-A	104	LYS
1	23-A	105	VAL
1	23-A	120	ASN
1	23-A	124	GLU
1	23-A	125	THR
1	23-A	126	LYS
1	23-A	151	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	23-A	156	LYS
1	23-A	177	SER
1	23-A	181	ASN
1	23-A	199	LYS
1	23-A	276	LYS
1	23-A	277	ASP
1	23-A	284	LYS
1	23-A	286	LYS
1	23-A	288	GLN
1	23-A	289	ASP
1	23-A	300	LEU
1	23-A	319	GLN
1	23-A	350	TYR
1	23-A	362	MET
1	23-A	370	GLU
1	23-A	378	SER
1	23-A	396	LYS
1	23-A	405	GLU
1	23-A	410	ASP
1	23-A	453	LEU
1	23-A	464	ARG
1	23-A	467	LYS
1	23-A	485	LYS
1	23-A	490	GLU
1	23-A	504	TRP
1	23-A	512	ASN
1	23-A	515	SER
1	23-A	519	GLU
1	23-A	557	LYS
1	23-A	567	ARG
1	24-A	7	LEU
1	24-A	10	LYS
1	24-A	14	LYS
1	24-A	21	LYS
1	24-A	43	LYS
1	24-A	48	LEU
1	24-A	65	GLN
1	24-A	87	ASP
1	24-A	90	ASN
1	24-A	101	ILE
1	24-A	105	VAL
1	24-A	120	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	24-A	124	GLU
1	24-A	126	LYS
1	24-A	130	LEU
1	24-A	142	GLU
1	24-A	146	ASP
1	24-A	147	MET
1	24-A	151	ASP
1	24-A	156	LYS
1	24-A	265	LYS
1	24-A	284	LYS
1	24-A	288	GLN
1	24-A	292	LYS
1	24-A	294	GLU
1	24-A	300	LEU
1	24-A	319	GLN
1	24-A	328	HIS
1	24-A	334	LYS
1	24-A	350	TYR
1	24-A	358	ILE
1	24-A	360	LYS
1	24-A	365	LEU
1	24-A	367	LYS
1	24-A	369	LEU
1	24-A	384	GLU
1	24-A	396	LYS
1	24-A	405	GLU
1	24-A	425	MET
1	24-A	434	ASN
1	24-A	439	THR
1	24-A	453	LEU
1	24-A	460	MET
1	24-A	467	LYS
1	24-A	489	LYS
1	24-A	490	GLU
1	24-A	498	GLU
1	24-A	499	ARG
1	24-A	504	TRP
1	24-A	505	THR
1	24-A	510	THR
1	24-A	512	ASN
1	24-A	517	GLU
1	24-A	518	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	24-A	521	MET
1	24-A	524	VAL
1	24-A	534	GLU
1	24-A	537	LYS
1	24-A	565	LYS
1	24-A	567	ARG
1	24-A	570	PHE
1	25-A	7	LEU
1	25-A	12	LYS
1	25-A	14	LYS
1	25-A	36	GLU
1	25-A	74	LYS
1	25-A	78	ARG
1	25-A	87	ASP
1	25-A	94	LYS
1	25-A	100	PHE
1	25-A	101	ILE
1	25-A	120	ASN
1	25-A	124	GLU
1	25-A	125	THR
1	25-A	142	GLU
1	25-A	146	ASP
1	25-A	147	MET
1	25-A	151	ASP
1	25-A	253	ASN
1	25-A	254	THR
1	25-A	265	LYS
1	25-A	280	GLU
1	25-A	284	LYS
1	25-A	288	GLN
1	25-A	292	LYS
1	25-A	295	GLU
1	25-A	300	LEU
1	25-A	301	GLU
1	25-A	308	MET
1	25-A	319	GLN
1	25-A	328	HIS
1	25-A	350	TYR
1	25-A	358	ILE
1	25-A	360	LYS
1	25-A	367	LYS
1	25-A	368	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	25-A	382	ASP
1	25-A	384	GLU
1	25-A	386	THR
1	25-A	392	GLU
1	25-A	393	MET
1	25-A	432	ARG
1	25-A	437	SER
1	25-A	439	THR
1	25-A	451	GLU
1	25-A	452	ASP
1	25-A	460	MET
1	25-A	462	SER
1	25-A	464	ARG
1	25-A	467	LYS
1	25-A	470	SER
1	25-A	474	GLU
1	25-A	485	LYS
1	25-A	498	GLU
1	25-A	504	TRP
1	25-A	512	ASN
1	25-A	516	ASN
1	25-A	518	ILE
1	25-A	522	GLU
1	25-A	524	VAL
1	25-A	542	SER
1	25-A	564	GLU
1	25-A	565	LYS
1	25-A	567	ARG
1	25-A	568	ASP
1	26-A	7	LEU
1	26-A	8	MET
1	26-A	12	LYS
1	26-A	65	GLN
1	26-A	70	GLU
1	26-A	89	CYS
1	26-A	90	ASN
1	26-A	93	ASP
1	26-A	100	PHE
1	26-A	101	ILE
1	26-A	105	VAL
1	26-A	121	LEU
1	26-A	124	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	26-A	126	LYS
1	26-A	142	GLU
1	26-A	146	ASP
1	26-A	147	MET
1	26-A	151	ASP
1	26-A	157	ASP
1	26-A	179	ASP
1	26-A	200	ASN
1	26-A	210	ASP
1	26-A	231	GLU
1	26-A	236	LEU
1	26-A	253	ASN
1	26-A	273	ASP
1	26-A	280	GLU
1	26-A	284	LYS
1	26-A	286	LYS
1	26-A	292	LYS
1	26-A	295	GLU
1	26-A	300	LEU
1	26-A	301	GLU
1	26-A	305	ASN
1	26-A	327	LYS
1	26-A	334	LYS
1	26-A	350	TYR
1	26-A	358	ILE
1	26-A	362	MET
1	26-A	365	LEU
1	26-A	368	GLU
1	26-A	369	LEU
1	26-A	386	THR
1	26-A	393	MET
1	26-A	405	GLU
1	26-A	410	ASP
1	26-A	436	THR
1	26-A	437	SER
1	26-A	451	GLU
1	26-A	453	LEU
1	26-A	460	MET
1	26-A	474	GLU
1	26-A	485	LYS
1	26-A	489	LYS
1	26-A	504	TRP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	26-A	515	SER
1	26-A	516	ASN
1	26-A	518	ILE
1	26-A	522	GLU
1	26-A	524	VAL
1	26-A	544	GLU
1	27-A	12	LYS
1	27-A	21	LYS
1	27-A	43	LYS
1	27-A	65	GLN
1	27-A	70	GLU
1	27-A	78	ARG
1	27-A	87	ASP
1	27-A	89	CYS
1	27-A	93	ASP
1	27-A	104	LYS
1	27-A	126	LYS
1	27-A	146	ASP
1	27-A	147	MET
1	27-A	151	ASP
1	27-A	156	LYS
1	27-A	181	ASN
1	27-A	200	ASN
1	27-A	217	GLU
1	27-A	231	GLU
1	27-A	236	LEU
1	27-A	292	LYS
1	27-A	295	GLU
1	27-A	300	LEU
1	27-A	301	GLU
1	27-A	331	GLU
1	27-A	350	TYR
1	27-A	362	MET
1	27-A	365	LEU
1	27-A	367	LYS
1	27-A	436	THR
1	27-A	437	SER
1	27-A	439	THR
1	27-A	453	LEU
1	27-A	461	ARG
1	27-A	464	ARG
1	27-A	485	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	27-A	489	LYS
1	27-A	498	GLU
1	27-A	504	TRP
1	27-A	512	ASN
1	27-A	515	SER
1	27-A	517	GLU
1	27-A	518	ILE
1	27-A	524	VAL
1	27-A	530	GLU
1	27-A	532	SER
1	27-A	555	LYS
1	27-A	565	LYS
1	28-A	8	MET
1	28-A	21	LYS
1	28-A	43	LYS
1	28-A	53	ASP
1	28-A	70	GLU
1	28-A	78	ARG
1	28-A	86	ARG
1	28-A	87	ASP
1	28-A	100	PHE
1	28-A	106	CYS
1	28-A	126	LYS
1	28-A	151	ASP
1	28-A	177	SER
1	28-A	179	ASP
1	28-A	236	LEU
1	28-A	254	THR
1	28-A	289	ASP
1	28-A	291	ILE
1	28-A	295	GLU
1	28-A	296	LYS
1	28-A	303	ARG
1	28-A	322	ASP
1	28-A	327	LYS
1	28-A	350	TYR
1	28-A	361	GLN
1	28-A	364	LEU
1	28-A	365	LEU
1	28-A	367	LYS
1	28-A	370	GLU
1	28-A	391	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	28-A	393	MET
1	28-A	405	GLU
1	28-A	439	THR
1	28-A	453	LEU
1	28-A	464	ARG
1	28-A	474	GLU
1	28-A	485	LYS
1	28-A	489	LYS
1	28-A	504	TRP
1	28-A	505	THR
1	28-A	512	ASN
1	28-A	515	SER
1	28-A	517	GLU
1	28-A	519	GLU
1	28-A	522	GLU
1	28-A	523	ASN
1	28-A	524	VAL
1	28-A	525	SER
1	28-A	530	GLU
1	28-A	531	LYS
1	28-A	532	SER
1	28-A	555	LYS
1	28-A	564	GLU
1	28-A	568	ASP
1	29-A	11	LEU
1	29-A	14	LYS
1	29-A	21	LYS
1	29-A	53	ASP
1	29-A	54	SER
1	29-A	65	GLN
1	29-A	86	ARG
1	29-A	87	ASP
1	29-A	89	CYS
1	29-A	92	LYS
1	29-A	100	PHE
1	29-A	104	LYS
1	29-A	105	VAL
1	29-A	106	CYS
1	29-A	122	ASN
1	29-A	126	LYS
1	29-A	146	ASP
1	29-A	151	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	29-A	199	LYS
1	29-A	204	ASN
1	29-A	276	LYS
1	29-A	284	LYS
1	29-A	289	ASP
1	29-A	295	GLU
1	29-A	300	LEU
1	29-A	303	ARG
1	29-A	308	MET
1	29-A	319	GLN
1	29-A	322	ASP
1	29-A	331	GLU
1	29-A	362	MET
1	29-A	364	LEU
1	29-A	365	LEU
1	29-A	369	LEU
1	29-A	384	GLU
1	29-A	386	THR
1	29-A	393	MET
1	29-A	452	ASP
1	29-A	453	LEU
1	29-A	464	ARG
1	29-A	489	LYS
1	29-A	498	GLU
1	29-A	504	TRP
1	29-A	510	THR
1	29-A	519	GLU
1	29-A	522	GLU
1	29-A	524	VAL
1	29-A	530	GLU
1	29-A	543	ASP
1	29-A	544	GLU
1	29-A	546	LYS
1	29-A	555	LYS
1	29-A	568	ASP
1	30-A	8	MET
1	30-A	19	GLU
1	30-A	21	LYS
1	30-A	78	ARG
1	30-A	86	ARG
1	30-A	91	HIS
1	30-A	93	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	30-A	106	CYS
1	30-A	126	LYS
1	30-A	142	GLU
1	30-A	151	ASP
1	30-A	179	ASP
1	30-A	231	GLU
1	30-A	253	ASN
1	30-A	274	ASN
1	30-A	276	LYS
1	30-A	284	LYS
1	30-A	295	GLU
1	30-A	322	ASP
1	30-A	327	LYS
1	30-A	350	TYR
1	30-A	358	ILE
1	30-A	379	GLU
1	30-A	382	ASP
1	30-A	386	THR
1	30-A	410	ASP
1	30-A	432	ARG
1	30-A	439	THR
1	30-A	452	ASP
1	30-A	453	LEU
1	30-A	462	SER
1	30-A	464	ARG
1	30-A	474	GLU
1	30-A	485	LYS
1	30-A	489	LYS
1	30-A	498	GLU
1	30-A	504	TRP
1	30-A	510	THR
1	30-A	512	ASN
1	30-A	516	ASN
1	30-A	518	ILE
1	30-A	519	GLU
1	30-A	523	ASN
1	30-A	533	ASP
1	30-A	544	GLU
1	30-A	567	ARG
1	31-A	7	LEU
1	31-A	16	LYS
1	31-A	21	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	31-A	41	LYS
1	31-A	70	GLU
1	31-A	74	LYS
1	31-A	91	HIS
1	31-A	93	ASP
1	31-A	94	LYS
1	31-A	99	ASP
1	31-A	100	PHE
1	31-A	105	VAL
1	31-A	106	CYS
1	31-A	142	GLU
1	31-A	151	ASP
1	31-A	210	ASP
1	31-A	253	ASN
1	31-A	276	LYS
1	31-A	288	GLN
1	31-A	289	ASP
1	31-A	292	LYS
1	31-A	294	GLU
1	31-A	295	GLU
1	31-A	300	LEU
1	31-A	301	GLU
1	31-A	304	THR
1	31-A	306	LYS
1	31-A	322	ASP
1	31-A	324	VAL
1	31-A	331	GLU
1	31-A	361	GLN
1	31-A	382	ASP
1	31-A	388	PRO
1	31-A	396	LYS
1	31-A	437	SER
1	31-A	452	ASP
1	31-A	453	LEU
1	31-A	460	MET
1	31-A	464	ARG
1	31-A	467	LYS
1	31-A	498	GLU
1	31-A	504	TRP
1	31-A	512	ASN
1	31-A	515	SER
1	31-A	516	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	31-A	517	GLU
1	31-A	521	MET
1	31-A	523	ASN
1	31-A	525	SER
1	31-A	532	SER
1	31-A	544	GLU
1	31-A	564	GLU
1	32-A	8	MET
1	32-A	65	GLN
1	32-A	68	VAL
1	32-A	90	ASN
1	32-A	91	HIS
1	32-A	93	ASP
1	32-A	101	ILE
1	32-A	104	LYS
1	32-A	121	LEU
1	32-A	126	LYS
1	32-A	146	ASP
1	32-A	147	MET
1	32-A	151	ASP
1	32-A	177	SER
1	32-A	210	ASP
1	32-A	236	LEU
1	32-A	248	ILE
1	32-A	288	GLN
1	32-A	292	LYS
1	32-A	296	LYS
1	32-A	300	LEU
1	32-A	350	TYR
1	32-A	361	GLN
1	32-A	362	MET
1	32-A	370	GLU
1	32-A	386	THR
1	32-A	389	GLU
1	32-A	403	THR
1	32-A	410	ASP
1	32-A	437	SER
1	32-A	453	LEU
1	32-A	454	ILE
1	32-A	464	ARG
1	32-A	467	LYS
1	32-A	485	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	32-A	489	LYS
1	32-A	495	LYS
1	32-A	504	TRP
1	32-A	512	ASN
1	32-A	516	ASN
1	32-A	517	GLU
1	32-A	518	ILE
1	32-A	521	MET
1	32-A	525	SER
1	32-A	531	LYS
1	32-A	532	SER
1	32-A	537	LYS
1	32-A	542	SER
1	32-A	543	ASP
1	32-A	544	GLU
1	32-A	564	GLU
1	32-A	568	ASP
1	33-A	21	LYS
1	33-A	70	GLU
1	33-A	86	ARG
1	33-A	90	ASN
1	33-A	93	ASP
1	33-A	100	PHE
1	33-A	101	ILE
1	33-A	104	LYS
1	33-A	122	ASN
1	33-A	124	GLU
1	33-A	125	THR
1	33-A	146	ASP
1	33-A	151	ASP
1	33-A	210	ASP
1	33-A	236	LEU
1	33-A	284	LYS
1	33-A	288	GLN
1	33-A	292	LYS
1	33-A	295	GLU
1	33-A	331	GLU
1	33-A	350	TYR
1	33-A	362	MET
1	33-A	365	LEU
1	33-A	367	LYS
1	33-A	370	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	33-A	386	THR
1	33-A	392	GLU
1	33-A	405	GLU
1	33-A	410	ASP
1	33-A	453	LEU
1	33-A	454	ILE
1	33-A	456	PRO
1	33-A	459	ILE
1	33-A	460	MET
1	33-A	464	ARG
1	33-A	467	LYS
1	33-A	485	LYS
1	33-A	489	LYS
1	33-A	495	LYS
1	33-A	504	TRP
1	33-A	510	THR
1	33-A	512	ASN
1	33-A	516	ASN
1	33-A	517	GLU
1	33-A	521	MET
1	33-A	523	ASN
1	33-A	527	ASP
1	33-A	531	LYS
1	33-A	544	GLU
1	33-A	564	GLU
1	33-A	568	ASP
1	34-A	21	LYS
1	34-A	68	VAL
1	34-A	70	GLU
1	34-A	77	GLN
1	34-A	86	ARG
1	34-A	90	ASN
1	34-A	94	LYS
1	34-A	101	ILE
1	34-A	106	CYS
1	34-A	124	GLU
1	34-A	146	ASP
1	34-A	147	MET
1	34-A	151	ASP
1	34-A	156	LYS
1	34-A	177	SER
1	34-A	179	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	34-A	181	ASN
1	34-A	199	LYS
1	34-A	200	ASN
1	34-A	254	THR
1	34-A	272	GLU
1	34-A	288	GLN
1	34-A	289	ASP
1	34-A	292	LYS
1	34-A	295	GLU
1	34-A	308	MET
1	34-A	319	GLN
1	34-A	328	HIS
1	34-A	350	TYR
1	34-A	358	ILE
1	34-A	361	GLN
1	34-A	362	MET
1	34-A	365	LEU
1	34-A	367	LYS
1	34-A	369	LEU
1	34-A	370	GLU
1	34-A	405	GLU
1	34-A	453	LEU
1	34-A	454	ILE
1	34-A	460	MET
1	34-A	467	LYS
1	34-A	489	LYS
1	34-A	490	GLU
1	34-A	504	TRP
1	34-A	505	THR
1	34-A	506	GLN
1	34-A	510	THR
1	34-A	514	TYR
1	34-A	518	ILE
1	34-A	521	MET
1	34-A	522	GLU
1	34-A	525	SER
1	34-A	531	LYS
1	34-A	532	SER
1	34-A	567	ARG
1	35-A	10	LYS
1	35-A	12	LYS
1	35-A	43	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	35-A	54	SER
1	35-A	77	GLN
1	35-A	87	ASP
1	35-A	90	ASN
1	35-A	92	LYS
1	35-A	93	ASP
1	35-A	100	PHE
1	35-A	101	ILE
1	35-A	104	LYS
1	35-A	124	GLU
1	35-A	126	LYS
1	35-A	127	ARG
1	35-A	151	ASP
1	35-A	156	LYS
1	35-A	236	LEU
1	35-A	253	ASN
1	35-A	270	LYS
1	35-A	284	LYS
1	35-A	288	GLN
1	35-A	291	ILE
1	35-A	292	LYS
1	35-A	301	GLU
1	35-A	322	ASP
1	35-A	324	VAL
1	35-A	328	HIS
1	35-A	350	TYR
1	35-A	365	LEU
1	35-A	382	ASP
1	35-A	396	LYS
1	35-A	437	SER
1	35-A	451	GLU
1	35-A	453	LEU
1	35-A	454	ILE
1	35-A	456	PRO
1	35-A	467	LYS
1	35-A	486	ARG
1	35-A	489	LYS
1	35-A	495	LYS
1	35-A	504	TRP
1	35-A	505	THR
1	35-A	510	THR
1	35-A	516	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	35-A	518	ILE
1	35-A	521	MET
1	35-A	522	GLU
1	35-A	525	SER
1	35-A	531	LYS
1	35-A	537	LYS
1	36-A	7	LEU
1	36-A	14	LYS
1	36-A	19	GLU
1	36-A	65	GLN
1	36-A	70	GLU
1	36-A	89	CYS
1	36-A	90	ASN
1	36-A	93	ASP
1	36-A	100	PHE
1	36-A	104	LYS
1	36-A	106	CYS
1	36-A	124	GLU
1	36-A	126	LYS
1	36-A	142	GLU
1	36-A	151	ASP
1	36-A	156	LYS
1	36-A	179	ASP
1	36-A	199	LYS
1	36-A	236	LEU
1	36-A	253	ASN
1	36-A	254	THR
1	36-A	270	LYS
1	36-A	292	LYS
1	36-A	301	GLU
1	36-A	322	ASP
1	36-A	328	HIS
1	36-A	350	TYR
1	36-A	360	LYS
1	36-A	365	LEU
1	36-A	367	LYS
1	36-A	382	ASP
1	36-A	391	LEU
1	36-A	439	THR
1	36-A	452	ASP
1	36-A	453	LEU
1	36-A	454	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	36-A	461	ARG
1	36-A	464	ARG
1	36-A	467	LYS
1	36-A	489	LYS
1	36-A	504	TRP
1	36-A	515	SER
1	36-A	516	ASN
1	36-A	518	ILE
1	36-A	521	MET
1	36-A	527	ASP
1	36-A	530	GLU
1	36-A	532	SER
1	36-A	534	GLU
1	36-A	542	SER
1	36-A	544	GLU
1	37-A	7	LEU
1	37-A	14	LYS
1	37-A	21	LYS
1	37-A	52	ASP
1	37-A	68	VAL
1	37-A	90	ASN
1	37-A	100	PHE
1	37-A	104	LYS
1	37-A	126	LYS
1	37-A	147	MET
1	37-A	151	ASP
1	37-A	156	LYS
1	37-A	270	LYS
1	37-A	274	ASN
1	37-A	275	ASP
1	37-A	295	GLU
1	37-A	331	GLU
1	37-A	350	TYR
1	37-A	362	MET
1	37-A	365	LEU
1	37-A	382	ASP
1	37-A	384	GLU
1	37-A	393	MET
1	37-A	434	ASN
1	37-A	453	LEU
1	37-A	467	LYS
1	37-A	485	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	37-A	486	ARG
1	37-A	504	TRP
1	37-A	510	THR
1	37-A	512	ASN
1	37-A	514	TYR
1	37-A	515	SER
1	37-A	516	ASN
1	37-A	517	GLU
1	37-A	519	GLU
1	37-A	521	MET
1	37-A	524	VAL
1	37-A	533	ASP
1	37-A	546	LYS
1	38-A	14	LYS
1	38-A	77	GLN
1	38-A	87	ASP
1	38-A	100	PHE
1	38-A	102	THR
1	38-A	104	LYS
1	38-A	105	VAL
1	38-A	126	LYS
1	38-A	142	GLU
1	38-A	151	ASP
1	38-A	199	LYS
1	38-A	236	LEU
1	38-A	253	ASN
1	38-A	254	THR
1	38-A	265	LYS
1	38-A	270	LYS
1	38-A	289	ASP
1	38-A	292	LYS
1	38-A	301	GLU
1	38-A	319	GLN
1	38-A	331	GLU
1	38-A	340	SER
1	38-A	350	TYR
1	38-A	362	MET
1	38-A	365	LEU
1	38-A	382	ASP
1	38-A	386	THR
1	38-A	388	PRO
1	38-A	396	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	38-A	439	THR
1	38-A	452	ASP
1	38-A	453	LEU
1	38-A	467	LYS
1	38-A	485	LYS
1	38-A	498	GLU
1	38-A	504	TRP
1	38-A	505	THR
1	38-A	512	ASN
1	38-A	514	TYR
1	38-A	516	ASN
1	38-A	518	ILE
1	38-A	519	GLU
1	38-A	521	MET
1	38-A	524	VAL
1	38-A	533	ASP
1	38-A	544	GLU
1	38-A	557	LYS
1	38-A	568	ASP
1	39-A	12	LYS
1	39-A	19	GLU
1	39-A	21	LYS
1	39-A	43	LYS
1	39-A	65	GLN
1	39-A	70	GLU
1	39-A	80	THR
1	39-A	100	PHE
1	39-A	101	ILE
1	39-A	102	THR
1	39-A	104	LYS
1	39-A	105	VAL
1	39-A	124	GLU
1	39-A	142	GLU
1	39-A	146	ASP
1	39-A	147	MET
1	39-A	151	ASP
1	39-A	179	ASP
1	39-A	199	LYS
1	39-A	248	ILE
1	39-A	265	LYS
1	39-A	266	LEU
1	39-A	270	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	39-A	286	LYS
1	39-A	292	LYS
1	39-A	295	GLU
1	39-A	301	GLU
1	39-A	350	TYR
1	39-A	360	LYS
1	39-A	362	MET
1	39-A	365	LEU
1	39-A	369	LEU
1	39-A	378	SER
1	39-A	379	GLU
1	39-A	382	ASP
1	39-A	386	THR
1	39-A	389	GLU
1	39-A	393	MET
1	39-A	441	VAL
1	39-A	453	LEU
1	39-A	464	ARG
1	39-A	474	GLU
1	39-A	485	LYS
1	39-A	490	GLU
1	39-A	504	TRP
1	39-A	506	GLN
1	39-A	510	THR
1	39-A	512	ASN
1	39-A	514	TYR
1	39-A	516	ASN
1	39-A	517	GLU
1	39-A	521	MET
1	39-A	522	GLU
1	39-A	523	ASN
1	39-A	524	VAL
1	39-A	530	GLU
1	39-A	544	GLU
1	39-A	565	LYS
1	40-A	7	LEU
1	40-A	8	MET
1	40-A	12	LYS
1	40-A	21	LYS
1	40-A	23	LEU
1	40-A	65	GLN
1	40-A	70	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	40-A	90	ASN
1	40-A	91	HIS
1	40-A	93	ASP
1	40-A	102	THR
1	40-A	124	GLU
1	40-A	147	MET
1	40-A	151	ASP
1	40-A	156	LYS
1	40-A	157	ASP
1	40-A	179	ASP
1	40-A	253	ASN
1	40-A	270	LYS
1	40-A	276	LYS
1	40-A	277	ASP
1	40-A	286	LYS
1	40-A	288	GLN
1	40-A	305	ASN
1	40-A	308	MET
1	40-A	319	GLN
1	40-A	350	TYR
1	40-A	358	ILE
1	40-A	360	LYS
1	40-A	361	GLN
1	40-A	362	MET
1	40-A	364	LEU
1	40-A	365	LEU
1	40-A	367	LYS
1	40-A	382	ASP
1	40-A	386	THR
1	40-A	388	PRO
1	40-A	434	ASN
1	40-A	436	THR
1	40-A	451	GLU
1	40-A	452	ASP
1	40-A	453	LEU
1	40-A	486	ARG
1	40-A	489	LYS
1	40-A	490	GLU
1	40-A	495	LYS
1	40-A	504	TRP
1	40-A	505	THR
1	40-A	512	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	40-A	514	TYR
1	40-A	518	ILE
1	40-A	521	MET
1	40-A	524	VAL
1	40-A	531	LYS
1	40-A	534	GLU
1	40-A	544	GLU
1	40-A	565	LYS
1	40-A	566	HIS
1	40-A	567	ARG
1	41-A	7	LEU
1	41-A	19	GLU
1	41-A	21	LYS
1	41-A	37	THR
1	41-A	65	GLN
1	41-A	91	HIS
1	41-A	94	LYS
1	41-A	100	PHE
1	41-A	101	ILE
1	41-A	105	VAL
1	41-A	121	LEU
1	41-A	124	GLU
1	41-A	146	ASP
1	41-A	147	MET
1	41-A	151	ASP
1	41-A	270	LYS
1	41-A	277	ASP
1	41-A	280	GLU
1	41-A	288	GLN
1	41-A	292	LYS
1	41-A	304	THR
1	41-A	305	ASN
1	41-A	308	MET
1	41-A	319	GLN
1	41-A	322	ASP
1	41-A	340	SER
1	41-A	350	TYR
1	41-A	357	SER
1	41-A	365	LEU
1	41-A	367	LYS
1	41-A	382	ASP
1	41-A	386	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	41-A	389	GLU
1	41-A	391	LEU
1	41-A	392	GLU
1	41-A	451	GLU
1	41-A	453	LEU
1	41-A	461	ARG
1	41-A	464	ARG
1	41-A	467	LYS
1	41-A	504	TRP
1	41-A	514	TYR
1	41-A	516	ASN
1	41-A	521	MET
1	41-A	524	VAL
1	41-A	525	SER
1	41-A	532	SER
1	41-A	564	GLU
1	41-A	567	ARG
1	42-A	14	LYS
1	42-A	15	ILE
1	42-A	21	LYS
1	42-A	65	GLN
1	42-A	90	ASN
1	42-A	93	ASP
1	42-A	94	LYS
1	42-A	100	PHE
1	42-A	101	ILE
1	42-A	104	LYS
1	42-A	122	ASN
1	42-A	124	GLU
1	42-A	125	THR
1	42-A	147	MET
1	42-A	151	ASP
1	42-A	156	LYS
1	42-A	157	ASP
1	42-A	177	SER
1	42-A	210	ASP
1	42-A	254	THR
1	42-A	270	LYS
1	42-A	272	GLU
1	42-A	284	LYS
1	42-A	288	GLN
1	42-A	292	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	42-A	300	LEU
1	42-A	306	LYS
1	42-A	308	MET
1	42-A	319	GLN
1	42-A	350	TYR
1	42-A	356	THR
1	42-A	361	GLN
1	42-A	365	LEU
1	42-A	392	GLU
1	42-A	431	LEU
1	42-A	436	THR
1	42-A	451	GLU
1	42-A	453	LEU
1	42-A	474	GLU
1	42-A	489	LYS
1	42-A	490	GLU
1	42-A	504	TRP
1	42-A	506	GLN
1	42-A	510	THR
1	42-A	514	TYR
1	42-A	515	SER
1	42-A	517	GLU
1	42-A	521	MET
1	42-A	524	VAL
1	42-A	532	SER
1	42-A	534	GLU
1	42-A	542	SER
1	42-A	567	ARG
1	43-A	10	LYS
1	43-A	14	LYS
1	43-A	21	LYS
1	43-A	65	GLN
1	43-A	80	THR
1	43-A	101	ILE
1	43-A	102	THR
1	43-A	106	CYS
1	43-A	122	ASN
1	43-A	125	THR
1	43-A	151	ASP
1	43-A	177	SER
1	43-A	210	ASP
1	43-A	253	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	43-A	270	LYS
1	43-A	274	ASN
1	43-A	284	LYS
1	43-A	288	GLN
1	43-A	289	ASP
1	43-A	292	LYS
1	43-A	303	ARG
1	43-A	319	GLN
1	43-A	324	VAL
1	43-A	350	TYR
1	43-A	357	SER
1	43-A	361	GLN
1	43-A	367	LYS
1	43-A	368	GLU
1	43-A	386	THR
1	43-A	410	ASP
1	43-A	451	GLU
1	43-A	453	LEU
1	43-A	460	MET
1	43-A	462	SER
1	43-A	474	GLU
1	43-A	489	LYS
1	43-A	490	GLU
1	43-A	504	TRP
1	43-A	512	ASN
1	43-A	514	TYR
1	43-A	515	SER
1	43-A	516	ASN
1	43-A	517	GLU
1	43-A	521	MET
1	43-A	522	GLU
1	43-A	532	SER
1	43-A	544	GLU
1	43-A	555	LYS
1	43-A	567	ARG
1	43-A	568	ASP

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (364) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	65	GLN
1	1-A	77	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	91	HIS
1	1-A	181	ASN
1	1-A	374	ASN
1	1-A	418	HIS
1	1-A	435	HIS
1	1-A	506	GLN
1	1-A	558	GLN
1	2-A	24	ASN
1	2-A	65	GLN
1	2-A	90	ASN
1	2-A	181	ASN
1	2-A	200	ASN
1	2-A	204	ASN
1	2-A	319	GLN
1	2-A	418	HIS
1	2-A	512	ASN
1	2-A	523	ASN
1	2-A	566	HIS
1	3-A	24	ASN
1	3-A	65	GLN
1	3-A	77	GLN
1	3-A	90	ASN
1	3-A	91	HIS
1	3-A	181	ASN
1	3-A	274	ASN
1	3-A	319	GLN
1	3-A	411	ASN
1	3-A	418	HIS
1	3-A	506	GLN
1	3-A	523	ASN
1	3-A	566	HIS
1	4-A	24	ASN
1	4-A	181	ASN
1	4-A	200	ASN
1	4-A	319	GLN
1	4-A	328	HIS
1	4-A	418	HIS
1	4-A	506	GLN
1	4-A	516	ASN
1	4-A	523	ASN
1	5-A	20	ASN
1	5-A	24	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	5-A	65	GLN
1	5-A	91	HIS
1	5-A	181	ASN
1	5-A	204	ASN
1	5-A	253	ASN
1	5-A	418	HIS
1	5-A	430	GLN
1	5-A	523	ASN
1	6-A	181	ASN
1	6-A	208	ASN
1	6-A	274	ASN
1	6-A	361	GLN
1	6-A	418	HIS
1	6-A	506	GLN
1	7-A	181	ASN
1	7-A	204	ASN
1	7-A	274	ASN
1	7-A	411	ASN
1	7-A	418	HIS
1	7-A	506	GLN
1	7-A	516	ASN
1	8-A	90	ASN
1	8-A	144	HIS
1	8-A	181	ASN
1	8-A	211	ASN
1	8-A	274	ASN
1	8-A	328	HIS
1	8-A	418	HIS
1	8-A	506	GLN
1	9-A	91	HIS
1	9-A	181	ASN
1	9-A	204	ASN
1	9-A	274	ASN
1	9-A	288	GLN
1	9-A	347	ASN
1	9-A	411	ASN
1	9-A	418	HIS
1	9-A	516	ASN
1	9-A	523	ASN
1	10-A	122	ASN
1	10-A	181	ASN
1	10-A	274	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	10-A	288	GLN
1	10-A	328	HIS
1	10-A	347	ASN
1	10-A	418	HIS
1	10-A	435	HIS
1	10-A	506	GLN
1	10-A	516	ASN
1	10-A	558	GLN
1	11-A	91	HIS
1	11-A	144	HIS
1	11-A	181	ASN
1	11-A	204	ASN
1	11-A	274	ASN
1	11-A	288	GLN
1	11-A	418	HIS
1	11-A	434	ASN
1	11-A	506	GLN
1	11-A	516	ASN
1	12-A	77	GLN
1	12-A	90	ASN
1	12-A	181	ASN
1	12-A	253	ASN
1	12-A	258	HIS
1	12-A	274	ASN
1	12-A	418	HIS
1	12-A	516	ASN
1	12-A	523	ASN
1	12-A	558	GLN
1	13-A	91	HIS
1	13-A	144	HIS
1	13-A	200	ASN
1	13-A	288	GLN
1	13-A	361	GLN
1	13-A	374	ASN
1	13-A	418	HIS
1	13-A	516	ASN
1	13-A	558	GLN
1	14-A	253	ASN
1	14-A	319	GLN
1	14-A	328	HIS
1	14-A	418	HIS
1	15-A	91	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	15-A	144	HIS
1	15-A	181	ASN
1	15-A	258	HIS
1	15-A	411	ASN
1	15-A	418	HIS
1	15-A	506	GLN
1	15-A	512	ASN
1	16-A	181	ASN
1	16-A	204	ASN
1	16-A	347	ASN
1	16-A	418	HIS
1	16-A	506	GLN
1	16-A	512	ASN
1	17-A	20	ASN
1	17-A	65	GLN
1	17-A	91	HIS
1	17-A	120	ASN
1	17-A	122	ASN
1	17-A	181	ASN
1	17-A	253	ASN
1	17-A	418	HIS
1	17-A	482	GLN
1	17-A	512	ASN
1	18-A	91	HIS
1	18-A	120	ASN
1	18-A	122	ASN
1	18-A	418	HIS
1	18-A	506	GLN
1	18-A	558	GLN
1	19-A	120	ASN
1	19-A	181	ASN
1	19-A	319	GLN
1	19-A	361	GLN
1	19-A	418	HIS
1	19-A	512	ASN
1	20-A	90	ASN
1	20-A	120	ASN
1	20-A	122	ASN
1	20-A	181	ASN
1	20-A	319	GLN
1	20-A	347	ASN
1	20-A	418	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	20-A	512	ASN
1	20-A	566	HIS
1	21-A	20	ASN
1	21-A	90	ASN
1	21-A	91	HIS
1	21-A	120	ASN
1	21-A	319	GLN
1	21-A	418	HIS
1	21-A	506	GLN
1	21-A	512	ASN
1	21-A	516	ASN
1	21-A	523	ASN
1	22-A	91	HIS
1	22-A	120	ASN
1	22-A	122	ASN
1	22-A	181	ASN
1	22-A	418	HIS
1	22-A	512	ASN
1	22-A	523	ASN
1	23-A	77	GLN
1	23-A	91	HIS
1	23-A	120	ASN
1	23-A	181	ASN
1	23-A	288	GLN
1	23-A	328	HIS
1	23-A	418	HIS
1	23-A	506	GLN
1	23-A	512	ASN
1	23-A	566	HIS
1	24-A	77	GLN
1	24-A	90	ASN
1	24-A	91	HIS
1	24-A	120	ASN
1	24-A	176	ASN
1	24-A	181	ASN
1	24-A	211	ASN
1	24-A	319	GLN
1	24-A	418	HIS
1	24-A	512	ASN
1	25-A	20	ASN
1	25-A	65	GLN
1	25-A	77	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	25-A	181	ASN
1	25-A	347	ASN
1	25-A	374	ASN
1	25-A	418	HIS
1	26-A	77	GLN
1	26-A	90	ASN
1	26-A	200	ASN
1	26-A	328	HIS
1	26-A	418	HIS
1	26-A	506	GLN
1	27-A	91	HIS
1	27-A	144	HIS
1	27-A	181	ASN
1	27-A	418	HIS
1	27-A	506	GLN
1	27-A	512	ASN
1	27-A	516	ASN
1	28-A	77	GLN
1	28-A	90	ASN
1	28-A	181	ASN
1	28-A	253	ASN
1	28-A	328	HIS
1	28-A	361	GLN
1	28-A	411	ASN
1	28-A	418	HIS
1	28-A	512	ASN
1	29-A	20	ASN
1	29-A	65	GLN
1	29-A	91	HIS
1	29-A	181	ASN
1	29-A	253	ASN
1	29-A	361	GLN
1	29-A	418	HIS
1	29-A	506	GLN
1	29-A	512	ASN
1	29-A	523	ASN
1	30-A	20	ASN
1	30-A	122	ASN
1	30-A	144	HIS
1	30-A	181	ASN
1	30-A	200	ASN
1	30-A	328	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	30-A	418	HIS
1	30-A	512	ASN
1	31-A	418	HIS
1	31-A	506	GLN
1	31-A	512	ASN
1	31-A	516	ASN
1	31-A	523	ASN
1	32-A	20	ASN
1	32-A	91	HIS
1	32-A	181	ASN
1	32-A	411	ASN
1	32-A	418	HIS
1	32-A	516	ASN
1	32-A	523	ASN
1	33-A	90	ASN
1	33-A	91	HIS
1	33-A	181	ASN
1	33-A	200	ASN
1	33-A	418	HIS
1	33-A	506	GLN
1	33-A	512	ASN
1	33-A	516	ASN
1	33-A	523	ASN
1	33-A	558	GLN
1	34-A	181	ASN
1	34-A	200	ASN
1	34-A	328	HIS
1	34-A	361	GLN
1	34-A	418	HIS
1	34-A	506	GLN
1	34-A	512	ASN
1	34-A	558	GLN
1	35-A	77	GLN
1	35-A	90	ASN
1	35-A	91	HIS
1	35-A	144	HIS
1	35-A	328	HIS
1	35-A	418	HIS
1	35-A	506	GLN
1	35-A	516	ASN
1	35-A	523	ASN
1	35-A	558	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	36-A	65	GLN
1	36-A	91	HIS
1	36-A	181	ASN
1	36-A	319	GLN
1	36-A	328	HIS
1	36-A	411	ASN
1	36-A	418	HIS
1	36-A	558	GLN
1	37-A	181	ASN
1	37-A	418	HIS
1	37-A	434	ASN
1	37-A	506	GLN
1	37-A	516	ASN
1	38-A	20	ASN
1	38-A	77	GLN
1	38-A	181	ASN
1	38-A	253	ASN
1	38-A	274	ASN
1	38-A	411	ASN
1	38-A	418	HIS
1	38-A	434	ASN
1	38-A	506	GLN
1	39-A	91	HIS
1	39-A	181	ASN
1	39-A	319	GLN
1	39-A	361	GLN
1	39-A	418	HIS
1	39-A	434	ASN
1	39-A	506	GLN
1	39-A	523	ASN
1	39-A	558	GLN
1	40-A	91	HIS
1	40-A	181	ASN
1	40-A	274	ASN
1	40-A	288	GLN
1	40-A	319	GLN
1	40-A	418	HIS
1	40-A	434	ASN
1	40-A	523	ASN
1	40-A	558	GLN
1	40-A	566	HIS
1	41-A	181	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	41-A	208	ASN
1	41-A	274	ASN
1	41-A	418	HIS
1	41-A	434	ASN
1	41-A	506	GLN
1	41-A	516	ASN
1	41-A	523	ASN
1	42-A	65	GLN
1	42-A	181	ASN
1	42-A	274	ASN
1	42-A	288	GLN
1	42-A	319	GLN
1	42-A	418	HIS
1	42-A	434	ASN
1	42-A	558	GLN
1	43-A	65	GLN
1	43-A	122	ASN
1	43-A	181	ASN
1	43-A	274	ASN
1	43-A	288	GLN
1	43-A	418	HIS
1	43-A	434	ASN
1	43-A	506	GLN
1	43-A	512	ASN
1	43-A	558	GLN
1	43-A	566	HIS

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)

43 ligands are modelled in this entry.

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	$\#\|Z\| > 2$	Counts	RMSZ	$\#\|Z\| > 2$
2	DPF	12-A	601	1	4,7,8	1.36	1 (25%)	2,7,10	0.71	0
2	DPF	22-A	601	1	4,7,8	1.57	1 (25%)	2,7,10	0.60	0
2	DPF	31-A	601	1	4,7,8	1.01	0	2,7,10	0.08	0
2	DPF	38-A	601	1	4,7,8	1.27	0	2,7,10	0.66	0
2	DPF	39-A	601	1	4,7,8	1.19	0	2,7,10	0.32	0
2	DPF	2-A	601	1	4,7,8	1.49	1 (25%)	2,7,10	0.67	0
2	DPF	33-A	601	1	4,7,8	1.46	1 (25%)	2,7,10	1.04	0
2	DPF	14-A	601	1	4,7,8	1.31	0	2,7,10	0.24	0
2	DPF	6-A	601	1	4,7,8	1.47	1 (25%)	2,7,10	0.92	0
2	DPF	30-A	601	1	4,7,8	1.42	1 (25%)	2,7,10	0.58	0
2	DPF	4-A	601	1	4,7,8	1.19	0	2,7,10	1.05	0
2	DPF	34-A	601	1	4,7,8	1.23	0	2,7,10	0.43	0
2	DPF	32-A	601	1	4,7,8	0.76	0	2,7,10	0.36	0
2	DPF	19-A	601	1	4,7,8	1.20	0	2,7,10	0.76	0
2	DPF	20-A	601	1	4,7,8	1.38	0	2,7,10	0.27	0
2	DPF	29-A	601	1	4,7,8	1.34	0	2,7,10	0.52	0
2	DPF	26-A	601	1	4,7,8	1.03	0	2,7,10	0.57	0
2	DPF	21-A	601	1	4,7,8	1.33	0	2,7,10	0.14	0
2	DPF	5-A	601	1	4,7,8	1.11	0	2,7,10	0.21	0
2	DPF	40-A	601	1	4,7,8	1.35	0	2,7,10	0.22	0
2	DPF	27-A	601	1	4,7,8	1.33	1 (25%)	2,7,10	0.58	0
2	DPF	18-A	601	1	4,7,8	1.32	1 (25%)	2,7,10	0.84	0
2	DPF	41-A	601	1	4,7,8	1.09	0	2,7,10	0.22	0
2	DPF	17-A	601	1	4,7,8	1.33	0	2,7,10	0.03	0
2	DPF	23-A	601	1	4,7,8	1.25	0	2,7,10	0.38	0
2	DPF	1-A	601	1	4,7,8	1.63	1 (25%)	2,7,10	0.41	0
2	DPF	8-A	601	1	4,7,8	1.27	0	2,7,10	0.36	0
2	DPF	7-A	601	1	4,7,8	1.35	1 (25%)	2,7,10	0.51	0
2	DPF	42-A	601	1	4,7,8	1.02	0	2,7,10	0.32	0
2	DPF	9-A	601	1	4,7,8	1.49	1 (25%)	2,7,10	0.35	0

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	$\#\|Z\| > 2$	Counts	RMSZ	$\#\|Z\| > 2$
2	DPF	24-A	601	1	4,7,8	1.31	1 (25%)	2,7,10	0.40	0
2	DPF	36-A	601	1	4,7,8	1.13	0	2,7,10	0.17	0
2	DPF	35-A	601	1	4,7,8	1.39	1 (25%)	2,7,10	0.57	0
2	DPF	15-A	601	1	4,7,8	1.88	2 (50%)	2,7,10	0.92	0
2	DPF	43-A	601	1	4,7,8	1.31	1 (25%)	2,7,10	0.59	0
2	DPF	25-A	601	1	4,7,8	1.25	0	2,7,10	0.64	0
2	DPF	3-A	601	1	4,7,8	1.39	1 (25%)	2,7,10	0.28	0
2	DPF	16-A	601	1	4,7,8	1.32	0	2,7,10	0.62	0
2	DPF	37-A	601	1	4,7,8	1.20	0	2,7,10	0.65	0
2	DPF	28-A	601	1	4,7,8	1.24	0	2,7,10	0.12	0
2	DPF	13-A	601	1	4,7,8	1.54	2 (50%)	2,7,10	0.43	0
2	DPF	10-A	601	1	4,7,8	1.17	0	2,7,10	0.63	0
2	DPF	11-A	601	1	4,7,8	1.45	1 (25%)	2,7,10	0.63	0

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the Chemical Component Dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	DPF	12-A	601	1	-	1/2/6/8	-
2	DPF	22-A	601	1	-	1/2/6/8	-
2	DPF	31-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	38-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	39-A	601	1	-	1/2/6/8	-
2	DPF	2-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	33-A	601	1	-	1/2/6/8	-
2	DPF	14-A	601	1	-	1/2/6/8	-
2	DPF	6-A	601	1	-	1/2/6/8	-
2	DPF	30-A	601	1	-	1/2/6/8	-
2	DPF	4-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	34-A	601	1	-	1/2/6/8	-
2	DPF	32-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	19-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	20-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	29-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	26-A	601	1	-	1/2/6/8	-
2	DPF	21-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	5-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	40-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	27-A	601	1	-	0/2/6/8	-

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	DPF	18-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	41-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	17-A	601	1	-	1/2/6/8	-
2	DPF	23-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	1-A	601	1	-	2/2/6/8	-
2	DPF	8-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	7-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	42-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	9-A	601	1	-	1/2/6/8	-
2	DPF	24-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	36-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	35-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	15-A	601	1	-	1/2/6/8	-
2	DPF	43-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	25-A	601	1	-	1/2/6/8	-
2	DPF	3-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	16-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	37-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	28-A	601	1	-	1/2/6/8	-
2	DPF	13-A	601	1	-	2/2/6/8	-
2	DPF	10-A	601	1	-	0/2/6/8	-
2	DPF	11-A	601	1	-	2/2/6/8	-

All (20) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	15-A	601	DPF	O1-C2	-2.91	1.37	1.44
2	1-A	601	DPF	O1-C2	-2.69	1.38	1.44
2	22-A	601	DPF	O1-C2	-2.66	1.38	1.44
2	2-A	601	DPF	O1-C2	-2.55	1.38	1.44
2	11-A	601	DPF	O1-C2	-2.34	1.39	1.44
2	33-A	601	DPF	O1-C2	-2.34	1.39	1.44
2	6-A	601	DPF	O1-C2	-2.32	1.39	1.44
2	18-A	601	DPF	O1-C2	-2.30	1.39	1.44
2	15-A	601	DPF	O3-C1	-2.24	1.39	1.44
2	13-A	601	DPF	O1-C2	-2.21	1.39	1.44
2	9-A	601	DPF	O1-C2	-2.17	1.39	1.44
2	12-A	601	DPF	O1-C2	-2.13	1.39	1.44
2	7-A	601	DPF	O1-C2	-2.09	1.39	1.44
2	43-A	601	DPF	O1-C2	-2.09	1.39	1.44
2	3-A	601	DPF	O1-C2	-2.08	1.39	1.44
2	27-A	601	DPF	O1-C2	-2.04	1.39	1.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	30-A	601	DPF	O3-C1	-2.03	1.39	1.44
2	24-A	601	DPF	O3-C1	-2.02	1.39	1.44
2	13-A	601	DPF	O3-C1	-2.01	1.39	1.44
2	35-A	601	DPF	O3-C1	-2.01	1.39	1.44

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

All (20) torsion outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
2	1-A	601	DPF	C4-C1-O3-P1
2	1-A	601	DPF	C3-C2-O1-P1
2	6-A	601	DPF	C4-C1-O3-P1
2	9-A	601	DPF	C4-C1-O3-P1
2	11-A	601	DPF	C4-C1-O3-P1
2	11-A	601	DPF	C3-C2-O1-P1
2	12-A	601	DPF	C3-C2-O1-P1
2	13-A	601	DPF	C4-C1-O3-P1
2	13-A	601	DPF	C3-C2-O1-P1
2	14-A	601	DPF	C4-C1-O3-P1
2	15-A	601	DPF	C4-C1-O3-P1
2	22-A	601	DPF	C3-C2-O1-P1
2	25-A	601	DPF	C4-C1-O3-P1
2	26-A	601	DPF	C4-C1-O3-P1
2	28-A	601	DPF	C4-C1-O3-P1
2	30-A	601	DPF	C4-C1-O3-P1
2	33-A	601	DPF	C4-C1-O3-P1
2	34-A	601	DPF	C4-C1-O3-P1
2	39-A	601	DPF	C4-C1-O3-P1
2	17-A	601	DPF	C3-C2-O1-P1

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

5.7 Other polymers (i)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues (i)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	32-A	1

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
32	A	125:THR	C	126:LYS	N	1.82

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%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	2-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	3-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	4-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	5-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	6-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	7-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	8-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	9-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	10-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	11-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	12-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	13-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	14-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	15-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	16-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	17-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	18-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	19-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	20-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	21-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	22-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	23-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	24-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	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%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	26-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	27-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	28-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	29-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	30-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	31-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	32-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	33-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	34-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	35-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	36-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	37-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	38-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	39-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	40-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	41-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	42-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
1	43-A	566/577 (98%)	0.26	31 (5%)	25	28	16, 19, 22, 24	566 (100%)
All	All	24338/24811 (98%)	0.26	1333 (5%)	27	28	16, 19, 22, 24	24338 (100%)

All (1333) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	523	ASN	15.4
1	2-A	523	ASN	15.4
1	3-A	523	ASN	15.4
1	4-A	523	ASN	15.4
1	5-A	523	ASN	15.4
1	6-A	523	ASN	15.4
1	7-A	523	ASN	15.4
1	8-A	523	ASN	15.4
1	9-A	523	ASN	15.4
1	10-A	523	ASN	15.4
1	11-A	523	ASN	15.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	12-A	523	ASN	15.4
1	13-A	523	ASN	15.4
1	14-A	523	ASN	15.4
1	15-A	523	ASN	15.4
1	16-A	523	ASN	15.4
1	17-A	523	ASN	15.4
1	18-A	523	ASN	15.4
1	19-A	523	ASN	15.4
1	20-A	523	ASN	15.4
1	21-A	523	ASN	15.4
1	22-A	523	ASN	15.4
1	23-A	523	ASN	15.4
1	24-A	523	ASN	15.4
1	25-A	523	ASN	15.4
1	26-A	523	ASN	15.4
1	27-A	523	ASN	15.4
1	28-A	523	ASN	15.4
1	29-A	523	ASN	15.4
1	30-A	523	ASN	15.4
1	31-A	523	ASN	15.4
1	32-A	523	ASN	15.4
1	33-A	523	ASN	15.4
1	34-A	523	ASN	15.4
1	35-A	523	ASN	15.4
1	36-A	523	ASN	15.4
1	37-A	523	ASN	15.4
1	38-A	523	ASN	15.4
1	39-A	523	ASN	15.4
1	40-A	523	ASN	15.4
1	41-A	523	ASN	15.4
1	42-A	523	ASN	15.4
1	43-A	523	ASN	15.4
1	1-A	100	PHE	8.6
1	2-A	100	PHE	8.6
1	3-A	100	PHE	8.6
1	4-A	100	PHE	8.6
1	5-A	100	PHE	8.6
1	6-A	100	PHE	8.6
1	7-A	100	PHE	8.6
1	8-A	100	PHE	8.6
1	9-A	100	PHE	8.6
1	10-A	100	PHE	8.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	11-A	100	PHE	8.6
1	12-A	100	PHE	8.6
1	13-A	100	PHE	8.6
1	14-A	100	PHE	8.6
1	15-A	100	PHE	8.6
1	16-A	100	PHE	8.6
1	17-A	100	PHE	8.6
1	18-A	100	PHE	8.6
1	19-A	100	PHE	8.6
1	20-A	100	PHE	8.6
1	21-A	100	PHE	8.6
1	22-A	100	PHE	8.6
1	23-A	100	PHE	8.6
1	24-A	100	PHE	8.6
1	25-A	100	PHE	8.6
1	26-A	100	PHE	8.6
1	27-A	100	PHE	8.6
1	28-A	100	PHE	8.6
1	29-A	100	PHE	8.6
1	30-A	100	PHE	8.6
1	31-A	100	PHE	8.6
1	32-A	100	PHE	8.6
1	33-A	100	PHE	8.6
1	34-A	100	PHE	8.6
1	35-A	100	PHE	8.6
1	36-A	100	PHE	8.6
1	37-A	100	PHE	8.6
1	38-A	100	PHE	8.6
1	39-A	100	PHE	8.6
1	40-A	100	PHE	8.6
1	41-A	100	PHE	8.6
1	42-A	100	PHE	8.6
1	43-A	100	PHE	8.6
1	1-A	514	TYR	7.9
1	2-A	514	TYR	7.9
1	3-A	514	TYR	7.9
1	4-A	514	TYR	7.9
1	5-A	514	TYR	7.9
1	6-A	514	TYR	7.9
1	7-A	514	TYR	7.9
1	8-A	514	TYR	7.9
1	9-A	514	TYR	7.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	10-A	514	TYR	7.9
1	11-A	514	TYR	7.9
1	12-A	514	TYR	7.9
1	13-A	514	TYR	7.9
1	14-A	514	TYR	7.9
1	15-A	514	TYR	7.9
1	16-A	514	TYR	7.9
1	17-A	514	TYR	7.9
1	18-A	514	TYR	7.9
1	19-A	514	TYR	7.9
1	20-A	514	TYR	7.9
1	21-A	514	TYR	7.9
1	22-A	514	TYR	7.9
1	23-A	514	TYR	7.9
1	24-A	514	TYR	7.9
1	25-A	514	TYR	7.9
1	26-A	514	TYR	7.9
1	27-A	514	TYR	7.9
1	28-A	514	TYR	7.9
1	29-A	514	TYR	7.9
1	30-A	514	TYR	7.9
1	31-A	514	TYR	7.9
1	32-A	514	TYR	7.9
1	33-A	514	TYR	7.9
1	34-A	514	TYR	7.9
1	35-A	514	TYR	7.9
1	36-A	514	TYR	7.9
1	37-A	514	TYR	7.9
1	38-A	514	TYR	7.9
1	39-A	514	TYR	7.9
1	40-A	514	TYR	7.9
1	41-A	514	TYR	7.9
1	42-A	514	TYR	7.9
1	43-A	514	TYR	7.9
1	1-A	519	GLU	7.9
1	2-A	519	GLU	7.9
1	3-A	519	GLU	7.9
1	4-A	519	GLU	7.9
1	5-A	519	GLU	7.9
1	6-A	519	GLU	7.9
1	7-A	519	GLU	7.9
1	8-A	519	GLU	7.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	9-A	519	GLU	7.9
1	10-A	519	GLU	7.9
1	11-A	519	GLU	7.9
1	12-A	519	GLU	7.9
1	13-A	519	GLU	7.9
1	14-A	519	GLU	7.9
1	15-A	519	GLU	7.9
1	16-A	519	GLU	7.9
1	17-A	519	GLU	7.9
1	18-A	519	GLU	7.9
1	19-A	519	GLU	7.9
1	20-A	519	GLU	7.9
1	21-A	519	GLU	7.9
1	22-A	519	GLU	7.9
1	23-A	519	GLU	7.9
1	24-A	519	GLU	7.9
1	25-A	519	GLU	7.9
1	26-A	519	GLU	7.9
1	27-A	519	GLU	7.9
1	28-A	519	GLU	7.9
1	29-A	519	GLU	7.9
1	30-A	519	GLU	7.9
1	31-A	519	GLU	7.9
1	32-A	519	GLU	7.9
1	33-A	519	GLU	7.9
1	34-A	519	GLU	7.9
1	35-A	519	GLU	7.9
1	36-A	519	GLU	7.9
1	37-A	519	GLU	7.9
1	38-A	519	GLU	7.9
1	39-A	519	GLU	7.9
1	40-A	519	GLU	7.9
1	41-A	519	GLU	7.9
1	42-A	519	GLU	7.9
1	43-A	519	GLU	7.9
1	1-A	383	ALA	6.8
1	2-A	383	ALA	6.8
1	3-A	383	ALA	6.8
1	4-A	383	ALA	6.8
1	5-A	383	ALA	6.8
1	6-A	383	ALA	6.8
1	7-A	383	ALA	6.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	8-A	383	ALA	6.8
1	9-A	383	ALA	6.8
1	10-A	383	ALA	6.8
1	11-A	383	ALA	6.8
1	12-A	383	ALA	6.8
1	13-A	383	ALA	6.8
1	14-A	383	ALA	6.8
1	15-A	383	ALA	6.8
1	16-A	383	ALA	6.8
1	17-A	383	ALA	6.8
1	18-A	383	ALA	6.8
1	19-A	383	ALA	6.8
1	20-A	383	ALA	6.8
1	21-A	383	ALA	6.8
1	22-A	383	ALA	6.8
1	23-A	383	ALA	6.8
1	24-A	383	ALA	6.8
1	25-A	383	ALA	6.8
1	26-A	383	ALA	6.8
1	27-A	383	ALA	6.8
1	28-A	383	ALA	6.8
1	29-A	383	ALA	6.8
1	30-A	383	ALA	6.8
1	31-A	383	ALA	6.8
1	32-A	383	ALA	6.8
1	33-A	383	ALA	6.8
1	34-A	383	ALA	6.8
1	35-A	383	ALA	6.8
1	36-A	383	ALA	6.8
1	37-A	383	ALA	6.8
1	38-A	383	ALA	6.8
1	39-A	383	ALA	6.8
1	40-A	383	ALA	6.8
1	41-A	383	ALA	6.8
1	42-A	383	ALA	6.8
1	43-A	383	ALA	6.8
1	1-A	381	ALA	5.9
1	2-A	381	ALA	5.9
1	3-A	381	ALA	5.9
1	4-A	381	ALA	5.9
1	5-A	381	ALA	5.9
1	6-A	381	ALA	5.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	7-A	381	ALA	5.9
1	8-A	381	ALA	5.9
1	9-A	381	ALA	5.9
1	10-A	381	ALA	5.9
1	11-A	381	ALA	5.9
1	12-A	381	ALA	5.9
1	13-A	381	ALA	5.9
1	14-A	381	ALA	5.9
1	15-A	381	ALA	5.9
1	16-A	381	ALA	5.9
1	17-A	381	ALA	5.9
1	18-A	381	ALA	5.9
1	19-A	381	ALA	5.9
1	20-A	381	ALA	5.9
1	21-A	381	ALA	5.9
1	22-A	381	ALA	5.9
1	23-A	381	ALA	5.9
1	24-A	381	ALA	5.9
1	25-A	381	ALA	5.9
1	26-A	381	ALA	5.9
1	27-A	381	ALA	5.9
1	28-A	381	ALA	5.9
1	29-A	381	ALA	5.9
1	30-A	381	ALA	5.9
1	31-A	381	ALA	5.9
1	32-A	381	ALA	5.9
1	33-A	381	ALA	5.9
1	34-A	381	ALA	5.9
1	35-A	381	ALA	5.9
1	36-A	381	ALA	5.9
1	37-A	381	ALA	5.9
1	38-A	381	ALA	5.9
1	39-A	381	ALA	5.9
1	40-A	381	ALA	5.9
1	41-A	381	ALA	5.9
1	42-A	381	ALA	5.9
1	43-A	381	ALA	5.9
1	1-A	516	ASN	5.1
1	2-A	516	ASN	5.1
1	3-A	516	ASN	5.1
1	4-A	516	ASN	5.1
1	5-A	516	ASN	5.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	6-A	516	ASN	5.1
1	7-A	516	ASN	5.1
1	8-A	516	ASN	5.1
1	9-A	516	ASN	5.1
1	10-A	516	ASN	5.1
1	11-A	516	ASN	5.1
1	12-A	516	ASN	5.1
1	13-A	516	ASN	5.1
1	14-A	516	ASN	5.1
1	15-A	516	ASN	5.1
1	16-A	516	ASN	5.1
1	17-A	516	ASN	5.1
1	18-A	516	ASN	5.1
1	19-A	516	ASN	5.1
1	20-A	516	ASN	5.1
1	21-A	516	ASN	5.1
1	22-A	516	ASN	5.1
1	23-A	516	ASN	5.1
1	24-A	516	ASN	5.1
1	25-A	516	ASN	5.1
1	26-A	516	ASN	5.1
1	27-A	516	ASN	5.1
1	28-A	516	ASN	5.1
1	29-A	516	ASN	5.1
1	30-A	516	ASN	5.1
1	31-A	516	ASN	5.1
1	32-A	516	ASN	5.1
1	33-A	516	ASN	5.1
1	34-A	516	ASN	5.1
1	35-A	516	ASN	5.1
1	36-A	516	ASN	5.1
1	37-A	516	ASN	5.1
1	38-A	516	ASN	5.1
1	39-A	516	ASN	5.1
1	40-A	516	ASN	5.1
1	41-A	516	ASN	5.1
1	42-A	516	ASN	5.1
1	43-A	516	ASN	5.1
1	1-A	384	GLU	4.7
1	2-A	384	GLU	4.7
1	3-A	384	GLU	4.7
1	4-A	384	GLU	4.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	5-A	384	GLU	4.7
1	6-A	384	GLU	4.7
1	7-A	384	GLU	4.7
1	8-A	384	GLU	4.7
1	9-A	384	GLU	4.7
1	10-A	384	GLU	4.7
1	11-A	384	GLU	4.7
1	12-A	384	GLU	4.7
1	13-A	384	GLU	4.7
1	14-A	384	GLU	4.7
1	15-A	384	GLU	4.7
1	16-A	384	GLU	4.7
1	17-A	384	GLU	4.7
1	18-A	384	GLU	4.7
1	19-A	384	GLU	4.7
1	20-A	384	GLU	4.7
1	21-A	384	GLU	4.7
1	22-A	384	GLU	4.7
1	23-A	384	GLU	4.7
1	24-A	384	GLU	4.7
1	25-A	384	GLU	4.7
1	26-A	384	GLU	4.7
1	27-A	384	GLU	4.7
1	28-A	384	GLU	4.7
1	29-A	384	GLU	4.7
1	30-A	384	GLU	4.7
1	31-A	384	GLU	4.7
1	32-A	384	GLU	4.7
1	33-A	384	GLU	4.7
1	34-A	384	GLU	4.7
1	35-A	384	GLU	4.7
1	36-A	384	GLU	4.7
1	37-A	384	GLU	4.7
1	38-A	384	GLU	4.7
1	39-A	384	GLU	4.7
1	40-A	384	GLU	4.7
1	41-A	384	GLU	4.7
1	42-A	384	GLU	4.7
1	43-A	384	GLU	4.7
1	1-A	524	VAL	4.4
1	2-A	524	VAL	4.4
1	3-A	524	VAL	4.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	4-A	524	VAL	4.4
1	5-A	524	VAL	4.4
1	6-A	524	VAL	4.4
1	7-A	524	VAL	4.4
1	8-A	524	VAL	4.4
1	9-A	524	VAL	4.4
1	10-A	524	VAL	4.4
1	11-A	524	VAL	4.4
1	12-A	524	VAL	4.4
1	13-A	524	VAL	4.4
1	14-A	524	VAL	4.4
1	15-A	524	VAL	4.4
1	16-A	524	VAL	4.4
1	17-A	524	VAL	4.4
1	18-A	524	VAL	4.4
1	19-A	524	VAL	4.4
1	20-A	524	VAL	4.4
1	21-A	524	VAL	4.4
1	22-A	524	VAL	4.4
1	23-A	524	VAL	4.4
1	24-A	524	VAL	4.4
1	25-A	524	VAL	4.4
1	26-A	524	VAL	4.4
1	27-A	524	VAL	4.4
1	28-A	524	VAL	4.4
1	29-A	524	VAL	4.4
1	30-A	524	VAL	4.4
1	31-A	524	VAL	4.4
1	32-A	524	VAL	4.4
1	33-A	524	VAL	4.4
1	34-A	524	VAL	4.4
1	35-A	524	VAL	4.4
1	36-A	524	VAL	4.4
1	37-A	524	VAL	4.4
1	38-A	524	VAL	4.4
1	39-A	524	VAL	4.4
1	40-A	524	VAL	4.4
1	41-A	524	VAL	4.4
1	42-A	524	VAL	4.4
1	43-A	524	VAL	4.4
1	1-A	25	TYR	4.4
1	2-A	25	TYR	4.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	3-A	25	TYR	4.4
1	4-A	25	TYR	4.4
1	5-A	25	TYR	4.4
1	6-A	25	TYR	4.4
1	7-A	25	TYR	4.4
1	8-A	25	TYR	4.4
1	9-A	25	TYR	4.4
1	10-A	25	TYR	4.4
1	11-A	25	TYR	4.4
1	12-A	25	TYR	4.4
1	13-A	25	TYR	4.4
1	14-A	25	TYR	4.4
1	15-A	25	TYR	4.4
1	16-A	25	TYR	4.4
1	17-A	25	TYR	4.4
1	18-A	25	TYR	4.4
1	19-A	25	TYR	4.4
1	20-A	25	TYR	4.4
1	21-A	25	TYR	4.4
1	22-A	25	TYR	4.4
1	23-A	25	TYR	4.4
1	24-A	25	TYR	4.4
1	25-A	25	TYR	4.4
1	26-A	25	TYR	4.4
1	27-A	25	TYR	4.4
1	28-A	25	TYR	4.4
1	29-A	25	TYR	4.4
1	30-A	25	TYR	4.4
1	31-A	25	TYR	4.4
1	32-A	25	TYR	4.4
1	33-A	25	TYR	4.4
1	34-A	25	TYR	4.4
1	35-A	25	TYR	4.4
1	36-A	25	TYR	4.4
1	37-A	25	TYR	4.4
1	38-A	25	TYR	4.4
1	39-A	25	TYR	4.4
1	40-A	25	TYR	4.4
1	41-A	25	TYR	4.4
1	42-A	25	TYR	4.4
1	43-A	25	TYR	4.4
1	1-A	518	ILE	4.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	2-A	518	ILE	4.2
1	3-A	518	ILE	4.2
1	4-A	518	ILE	4.2
1	5-A	518	ILE	4.2
1	6-A	518	ILE	4.2
1	7-A	518	ILE	4.2
1	8-A	518	ILE	4.2
1	9-A	518	ILE	4.2
1	10-A	518	ILE	4.2
1	11-A	518	ILE	4.2
1	12-A	518	ILE	4.2
1	13-A	518	ILE	4.2
1	14-A	518	ILE	4.2
1	15-A	518	ILE	4.2
1	16-A	518	ILE	4.2
1	17-A	518	ILE	4.2
1	18-A	518	ILE	4.2
1	19-A	518	ILE	4.2
1	20-A	518	ILE	4.2
1	21-A	518	ILE	4.2
1	22-A	518	ILE	4.2
1	23-A	518	ILE	4.2
1	24-A	518	ILE	4.2
1	25-A	518	ILE	4.2
1	26-A	518	ILE	4.2
1	27-A	518	ILE	4.2
1	28-A	518	ILE	4.2
1	29-A	518	ILE	4.2
1	30-A	518	ILE	4.2
1	31-A	518	ILE	4.2
1	32-A	518	ILE	4.2
1	33-A	518	ILE	4.2
1	34-A	518	ILE	4.2
1	35-A	518	ILE	4.2
1	36-A	518	ILE	4.2
1	37-A	518	ILE	4.2
1	38-A	518	ILE	4.2
1	39-A	518	ILE	4.2
1	40-A	518	ILE	4.2
1	41-A	518	ILE	4.2
1	42-A	518	ILE	4.2
1	43-A	518	ILE	4.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	382	ASP	4.2
1	2-A	382	ASP	4.2
1	3-A	382	ASP	4.2
1	4-A	382	ASP	4.2
1	5-A	382	ASP	4.2
1	6-A	382	ASP	4.2
1	7-A	382	ASP	4.2
1	8-A	382	ASP	4.2
1	9-A	382	ASP	4.2
1	10-A	382	ASP	4.2
1	11-A	382	ASP	4.2
1	12-A	382	ASP	4.2
1	13-A	382	ASP	4.2
1	14-A	382	ASP	4.2
1	15-A	382	ASP	4.2
1	16-A	382	ASP	4.2
1	17-A	382	ASP	4.2
1	18-A	382	ASP	4.2
1	19-A	382	ASP	4.2
1	20-A	382	ASP	4.2
1	21-A	382	ASP	4.2
1	22-A	382	ASP	4.2
1	23-A	382	ASP	4.2
1	24-A	382	ASP	4.2
1	25-A	382	ASP	4.2
1	26-A	382	ASP	4.2
1	27-A	382	ASP	4.2
1	28-A	382	ASP	4.2
1	29-A	382	ASP	4.2
1	30-A	382	ASP	4.2
1	31-A	382	ASP	4.2
1	32-A	382	ASP	4.2
1	33-A	382	ASP	4.2
1	34-A	382	ASP	4.2
1	35-A	382	ASP	4.2
1	36-A	382	ASP	4.2
1	37-A	382	ASP	4.2
1	38-A	382	ASP	4.2
1	39-A	382	ASP	4.2
1	40-A	382	ASP	4.2
1	41-A	382	ASP	4.2
1	42-A	382	ASP	4.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	43-A	382	ASP	4.2
1	1-A	515	SER	4.0
1	2-A	515	SER	4.0
1	3-A	515	SER	4.0
1	4-A	515	SER	4.0
1	5-A	515	SER	4.0
1	6-A	515	SER	4.0
1	7-A	515	SER	4.0
1	8-A	515	SER	4.0
1	9-A	515	SER	4.0
1	10-A	515	SER	4.0
1	11-A	515	SER	4.0
1	12-A	515	SER	4.0
1	13-A	515	SER	4.0
1	14-A	515	SER	4.0
1	15-A	515	SER	4.0
1	16-A	515	SER	4.0
1	17-A	515	SER	4.0
1	18-A	515	SER	4.0
1	19-A	515	SER	4.0
1	20-A	515	SER	4.0
1	21-A	515	SER	4.0
1	22-A	515	SER	4.0
1	23-A	515	SER	4.0
1	24-A	515	SER	4.0
1	25-A	515	SER	4.0
1	26-A	515	SER	4.0
1	27-A	515	SER	4.0
1	28-A	515	SER	4.0
1	29-A	515	SER	4.0
1	30-A	515	SER	4.0
1	31-A	515	SER	4.0
1	32-A	515	SER	4.0
1	33-A	515	SER	4.0
1	34-A	515	SER	4.0
1	35-A	515	SER	4.0
1	36-A	515	SER	4.0
1	37-A	515	SER	4.0
1	38-A	515	SER	4.0
1	39-A	515	SER	4.0
1	40-A	515	SER	4.0
1	41-A	515	SER	4.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	42-A	515	SER	4.0
1	43-A	515	SER	4.0
1	1-A	22	PHE	4.0
1	2-A	22	PHE	4.0
1	3-A	22	PHE	4.0
1	4-A	22	PHE	4.0
1	5-A	22	PHE	4.0
1	6-A	22	PHE	4.0
1	7-A	22	PHE	4.0
1	8-A	22	PHE	4.0
1	9-A	22	PHE	4.0
1	10-A	22	PHE	4.0
1	11-A	22	PHE	4.0
1	12-A	22	PHE	4.0
1	13-A	22	PHE	4.0
1	14-A	22	PHE	4.0
1	15-A	22	PHE	4.0
1	16-A	22	PHE	4.0
1	17-A	22	PHE	4.0
1	18-A	22	PHE	4.0
1	19-A	22	PHE	4.0
1	20-A	22	PHE	4.0
1	21-A	22	PHE	4.0
1	22-A	22	PHE	4.0
1	23-A	22	PHE	4.0
1	24-A	22	PHE	4.0
1	25-A	22	PHE	4.0
1	26-A	22	PHE	4.0
1	27-A	22	PHE	4.0
1	28-A	22	PHE	4.0
1	29-A	22	PHE	4.0
1	30-A	22	PHE	4.0
1	31-A	22	PHE	4.0
1	32-A	22	PHE	4.0
1	33-A	22	PHE	4.0
1	34-A	22	PHE	4.0
1	35-A	22	PHE	4.0
1	36-A	22	PHE	4.0
1	37-A	22	PHE	4.0
1	38-A	22	PHE	4.0
1	39-A	22	PHE	4.0
1	40-A	22	PHE	4.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	41-A	22	PHE	4.0
1	42-A	22	PHE	4.0
1	43-A	22	PHE	4.0
1	1-A	521	MET	3.6
1	2-A	521	MET	3.6
1	3-A	521	MET	3.6
1	4-A	521	MET	3.6
1	5-A	521	MET	3.6
1	6-A	521	MET	3.6
1	7-A	521	MET	3.6
1	8-A	521	MET	3.6
1	9-A	521	MET	3.6
1	10-A	521	MET	3.6
1	11-A	521	MET	3.6
1	12-A	521	MET	3.6
1	13-A	521	MET	3.6
1	14-A	521	MET	3.6
1	15-A	521	MET	3.6
1	16-A	521	MET	3.6
1	17-A	521	MET	3.6
1	18-A	521	MET	3.6
1	19-A	521	MET	3.6
1	20-A	521	MET	3.6
1	21-A	521	MET	3.6
1	22-A	521	MET	3.6
1	23-A	521	MET	3.6
1	24-A	521	MET	3.6
1	25-A	521	MET	3.6
1	26-A	521	MET	3.6
1	27-A	521	MET	3.6
1	28-A	521	MET	3.6
1	29-A	521	MET	3.6
1	30-A	521	MET	3.6
1	31-A	521	MET	3.6
1	32-A	521	MET	3.6
1	33-A	521	MET	3.6
1	34-A	521	MET	3.6
1	35-A	521	MET	3.6
1	36-A	521	MET	3.6
1	37-A	521	MET	3.6
1	38-A	521	MET	3.6
1	39-A	521	MET	3.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	40-A	521	MET	3.6
1	41-A	521	MET	3.6
1	42-A	521	MET	3.6
1	43-A	521	MET	3.6
1	1-A	101	ILE	3.6
1	2-A	101	ILE	3.6
1	3-A	101	ILE	3.6
1	4-A	101	ILE	3.6
1	5-A	101	ILE	3.6
1	6-A	101	ILE	3.6
1	7-A	101	ILE	3.6
1	8-A	101	ILE	3.6
1	9-A	101	ILE	3.6
1	10-A	101	ILE	3.6
1	11-A	101	ILE	3.6
1	12-A	101	ILE	3.6
1	13-A	101	ILE	3.6
1	14-A	101	ILE	3.6
1	15-A	101	ILE	3.6
1	16-A	101	ILE	3.6
1	17-A	101	ILE	3.6
1	18-A	101	ILE	3.6
1	19-A	101	ILE	3.6
1	20-A	101	ILE	3.6
1	21-A	101	ILE	3.6
1	22-A	101	ILE	3.6
1	23-A	101	ILE	3.6
1	24-A	101	ILE	3.6
1	25-A	101	ILE	3.6
1	26-A	101	ILE	3.6
1	27-A	101	ILE	3.6
1	28-A	101	ILE	3.6
1	29-A	101	ILE	3.6
1	30-A	101	ILE	3.6
1	31-A	101	ILE	3.6
1	32-A	101	ILE	3.6
1	33-A	101	ILE	3.6
1	34-A	101	ILE	3.6
1	35-A	101	ILE	3.6
1	36-A	101	ILE	3.6
1	37-A	101	ILE	3.6
1	38-A	101	ILE	3.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	39-A	101	ILE	3.6
1	40-A	101	ILE	3.6
1	41-A	101	ILE	3.6
1	42-A	101	ILE	3.6
1	43-A	101	ILE	3.6
1	1-A	125	THR	3.5
1	2-A	125	THR	3.5
1	3-A	125	THR	3.5
1	4-A	125	THR	3.5
1	5-A	125	THR	3.5
1	6-A	125	THR	3.5
1	7-A	125	THR	3.5
1	8-A	125	THR	3.5
1	9-A	125	THR	3.5
1	10-A	125	THR	3.5
1	11-A	125	THR	3.5
1	12-A	125	THR	3.5
1	13-A	125	THR	3.5
1	14-A	125	THR	3.5
1	15-A	125	THR	3.5
1	16-A	125	THR	3.5
1	17-A	125	THR	3.5
1	18-A	125	THR	3.5
1	19-A	125	THR	3.5
1	20-A	125	THR	3.5
1	21-A	125	THR	3.5
1	22-A	125	THR	3.5
1	23-A	125	THR	3.5
1	24-A	125	THR	3.5
1	25-A	125	THR	3.5
1	26-A	125	THR	3.5
1	27-A	125	THR	3.5
1	28-A	125	THR	3.5
1	29-A	125	THR	3.5
1	30-A	125	THR	3.5
1	31-A	125	THR	3.5
1	32-A	125	THR	3.5
1	33-A	125	THR	3.5
1	34-A	125	THR	3.5
1	35-A	125	THR	3.5
1	36-A	125	THR	3.5
1	37-A	125	THR	3.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	38-A	125	THR	3.5
1	39-A	125	THR	3.5
1	40-A	125	THR	3.5
1	41-A	125	THR	3.5
1	42-A	125	THR	3.5
1	43-A	125	THR	3.5
1	1-A	388	PRO	3.4
1	2-A	388	PRO	3.4
1	3-A	388	PRO	3.4
1	4-A	388	PRO	3.4
1	5-A	388	PRO	3.4
1	6-A	388	PRO	3.4
1	7-A	388	PRO	3.4
1	8-A	388	PRO	3.4
1	9-A	388	PRO	3.4
1	10-A	388	PRO	3.4
1	11-A	388	PRO	3.4
1	12-A	388	PRO	3.4
1	13-A	388	PRO	3.4
1	14-A	388	PRO	3.4
1	15-A	388	PRO	3.4
1	16-A	388	PRO	3.4
1	17-A	388	PRO	3.4
1	18-A	388	PRO	3.4
1	19-A	388	PRO	3.4
1	20-A	388	PRO	3.4
1	21-A	388	PRO	3.4
1	22-A	388	PRO	3.4
1	23-A	388	PRO	3.4
1	24-A	388	PRO	3.4
1	25-A	388	PRO	3.4
1	26-A	388	PRO	3.4
1	27-A	388	PRO	3.4
1	28-A	388	PRO	3.4
1	29-A	388	PRO	3.4
1	30-A	388	PRO	3.4
1	31-A	388	PRO	3.4
1	32-A	388	PRO	3.4
1	33-A	388	PRO	3.4
1	34-A	388	PRO	3.4
1	35-A	388	PRO	3.4
1	36-A	388	PRO	3.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	37-A	388	PRO	3.4
1	38-A	388	PRO	3.4
1	39-A	388	PRO	3.4
1	40-A	388	PRO	3.4
1	41-A	388	PRO	3.4
1	42-A	388	PRO	3.4
1	43-A	388	PRO	3.4
1	1-A	362	MET	3.3
1	2-A	362	MET	3.3
1	3-A	362	MET	3.3
1	4-A	362	MET	3.3
1	5-A	362	MET	3.3
1	6-A	362	MET	3.3
1	7-A	362	MET	3.3
1	8-A	362	MET	3.3
1	9-A	362	MET	3.3
1	10-A	362	MET	3.3
1	11-A	362	MET	3.3
1	12-A	362	MET	3.3
1	13-A	362	MET	3.3
1	14-A	362	MET	3.3
1	15-A	362	MET	3.3
1	16-A	362	MET	3.3
1	17-A	362	MET	3.3
1	18-A	362	MET	3.3
1	19-A	362	MET	3.3
1	20-A	362	MET	3.3
1	21-A	362	MET	3.3
1	22-A	362	MET	3.3
1	23-A	362	MET	3.3
1	24-A	362	MET	3.3
1	25-A	362	MET	3.3
1	26-A	362	MET	3.3
1	27-A	362	MET	3.3
1	28-A	362	MET	3.3
1	29-A	362	MET	3.3
1	30-A	362	MET	3.3
1	31-A	362	MET	3.3
1	32-A	362	MET	3.3
1	33-A	362	MET	3.3
1	34-A	362	MET	3.3
1	35-A	362	MET	3.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	36-A	362	MET	3.3
1	37-A	362	MET	3.3
1	38-A	362	MET	3.3
1	39-A	362	MET	3.3
1	40-A	362	MET	3.3
1	41-A	362	MET	3.3
1	42-A	362	MET	3.3
1	43-A	362	MET	3.3
1	1-A	126	LYS	3.3
1	2-A	126	LYS	3.3
1	3-A	126	LYS	3.3
1	4-A	126	LYS	3.3
1	5-A	126	LYS	3.3
1	6-A	126	LYS	3.3
1	7-A	126	LYS	3.3
1	8-A	126	LYS	3.3
1	9-A	126	LYS	3.3
1	10-A	126	LYS	3.3
1	11-A	126	LYS	3.3
1	12-A	126	LYS	3.3
1	13-A	126	LYS	3.3
1	14-A	126	LYS	3.3
1	15-A	126	LYS	3.3
1	16-A	126	LYS	3.3
1	17-A	126	LYS	3.3
1	18-A	126	LYS	3.3
1	19-A	126	LYS	3.3
1	20-A	126	LYS	3.3
1	21-A	126	LYS	3.3
1	22-A	126	LYS	3.3
1	23-A	126	LYS	3.3
1	24-A	126	LYS	3.3
1	25-A	126	LYS	3.3
1	26-A	126	LYS	3.3
1	27-A	126	LYS	3.3
1	28-A	126	LYS	3.3
1	29-A	126	LYS	3.3
1	30-A	126	LYS	3.3
1	31-A	126	LYS	3.3
1	32-A	126	LYS	3.3
1	33-A	126	LYS	3.3
1	34-A	126	LYS	3.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	35-A	126	LYS	3.3
1	36-A	126	LYS	3.3
1	37-A	126	LYS	3.3
1	38-A	126	LYS	3.3
1	39-A	126	LYS	3.3
1	40-A	126	LYS	3.3
1	41-A	126	LYS	3.3
1	42-A	126	LYS	3.3
1	43-A	126	LYS	3.3
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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
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	1-A	513	PRO	2.9
1	1-A	520	GLY	2.9
1	2-A	513	PRO	2.9
1	2-A	520	GLY	2.9
1	3-A	513	PRO	2.9
1	3-A	520	GLY	2.9
1	4-A	513	PRO	2.9
1	4-A	520	GLY	2.9
1	5-A	513	PRO	2.9
1	5-A	520	GLY	2.9
1	6-A	513	PRO	2.9
1	6-A	520	GLY	2.9
1	7-A	513	PRO	2.9
1	7-A	520	GLY	2.9
1	8-A	513	PRO	2.9
1	8-A	520	GLY	2.9
1	9-A	513	PRO	2.9
1	9-A	520	GLY	2.9
1	10-A	513	PRO	2.9
1	10-A	520	GLY	2.9
1	11-A	513	PRO	2.9
1	11-A	520	GLY	2.9
1	12-A	513	PRO	2.9
1	12-A	520	GLY	2.9
1	13-A	513	PRO	2.9
1	13-A	520	GLY	2.9
1	14-A	513	PRO	2.9
1	14-A	520	GLY	2.9
1	15-A	513	PRO	2.9
1	15-A	520	GLY	2.9
1	16-A	513	PRO	2.9
1	16-A	520	GLY	2.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	17-A	513	PRO	2.9
1	17-A	520	GLY	2.9
1	18-A	513	PRO	2.9
1	18-A	520	GLY	2.9
1	19-A	513	PRO	2.9
1	19-A	520	GLY	2.9
1	20-A	513	PRO	2.9
1	20-A	520	GLY	2.9
1	21-A	513	PRO	2.9
1	21-A	520	GLY	2.9
1	22-A	513	PRO	2.9
1	22-A	520	GLY	2.9
1	23-A	513	PRO	2.9
1	23-A	520	GLY	2.9
1	24-A	513	PRO	2.9
1	24-A	520	GLY	2.9
1	25-A	513	PRO	2.9
1	25-A	520	GLY	2.9
1	26-A	513	PRO	2.9
1	26-A	520	GLY	2.9
1	27-A	513	PRO	2.9
1	27-A	520	GLY	2.9
1	28-A	513	PRO	2.9
1	28-A	520	GLY	2.9
1	29-A	513	PRO	2.9
1	29-A	520	GLY	2.9
1	30-A	513	PRO	2.9
1	30-A	520	GLY	2.9
1	31-A	513	PRO	2.9
1	31-A	520	GLY	2.9
1	32-A	513	PRO	2.9
1	32-A	520	GLY	2.9
1	33-A	513	PRO	2.9
1	33-A	520	GLY	2.9
1	34-A	513	PRO	2.9
1	34-A	520	GLY	2.9
1	35-A	513	PRO	2.9
1	35-A	520	GLY	2.9
1	36-A	513	PRO	2.9
1	36-A	520	GLY	2.9
1	37-A	513	PRO	2.9
1	37-A	520	GLY	2.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	38-A	513	PRO	2.9
1	38-A	520	GLY	2.9
1	39-A	513	PRO	2.9
1	39-A	520	GLY	2.9
1	40-A	513	PRO	2.9
1	40-A	520	GLY	2.9
1	41-A	513	PRO	2.9
1	41-A	520	GLY	2.9
1	42-A	513	PRO	2.9
1	42-A	520	GLY	2.9
1	43-A	513	PRO	2.9
1	43-A	520	GLY	2.9
1	1-A	300	LEU	2.5
1	2-A	300	LEU	2.5
1	3-A	300	LEU	2.5
1	4-A	300	LEU	2.5
1	5-A	300	LEU	2.5
1	6-A	300	LEU	2.5
1	7-A	300	LEU	2.5
1	8-A	300	LEU	2.5
1	9-A	300	LEU	2.5
1	10-A	300	LEU	2.5
1	11-A	300	LEU	2.5
1	12-A	300	LEU	2.5
1	13-A	300	LEU	2.5
1	14-A	300	LEU	2.5
1	15-A	300	LEU	2.5
1	16-A	300	LEU	2.5
1	17-A	300	LEU	2.5
1	18-A	300	LEU	2.5
1	19-A	300	LEU	2.5
1	20-A	300	LEU	2.5
1	21-A	300	LEU	2.5
1	22-A	300	LEU	2.5
1	23-A	300	LEU	2.5
1	24-A	300	LEU	2.5
1	25-A	300	LEU	2.5
1	26-A	300	LEU	2.5
1	27-A	300	LEU	2.5
1	28-A	300	LEU	2.5
1	29-A	300	LEU	2.5
1	30-A	300	LEU	2.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	31-A	300	LEU	2.5
1	32-A	300	LEU	2.5
1	33-A	300	LEU	2.5
1	34-A	300	LEU	2.5
1	35-A	300	LEU	2.5
1	36-A	300	LEU	2.5
1	37-A	300	LEU	2.5
1	38-A	300	LEU	2.5
1	39-A	300	LEU	2.5
1	40-A	300	LEU	2.5
1	41-A	300	LEU	2.5
1	42-A	300	LEU	2.5
1	43-A	300	LEU	2.5
1	1-A	289	ASP	2.4
1	2-A	289	ASP	2.4
1	3-A	289	ASP	2.4
1	4-A	289	ASP	2.4
1	5-A	289	ASP	2.4
1	6-A	289	ASP	2.4
1	7-A	289	ASP	2.4
1	8-A	289	ASP	2.4
1	9-A	289	ASP	2.4
1	10-A	289	ASP	2.4
1	11-A	289	ASP	2.4
1	12-A	289	ASP	2.4
1	13-A	289	ASP	2.4
1	14-A	289	ASP	2.4
1	15-A	289	ASP	2.4
1	16-A	289	ASP	2.4
1	17-A	289	ASP	2.4
1	18-A	289	ASP	2.4
1	19-A	289	ASP	2.4
1	20-A	289	ASP	2.4
1	21-A	289	ASP	2.4
1	22-A	289	ASP	2.4
1	23-A	289	ASP	2.4
1	24-A	289	ASP	2.4
1	25-A	289	ASP	2.4
1	26-A	289	ASP	2.4
1	27-A	289	ASP	2.4
1	28-A	289	ASP	2.4
1	29-A	289	ASP	2.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	30-A	289	ASP	2.4
1	31-A	289	ASP	2.4
1	32-A	289	ASP	2.4
1	33-A	289	ASP	2.4
1	34-A	289	ASP	2.4
1	35-A	289	ASP	2.4
1	36-A	289	ASP	2.4
1	37-A	289	ASP	2.4
1	38-A	289	ASP	2.4
1	39-A	289	ASP	2.4
1	40-A	289	ASP	2.4
1	41-A	289	ASP	2.4
1	42-A	289	ASP	2.4
1	43-A	289	ASP	2.4
1	1-A	11	LEU	2.4
1	2-A	11	LEU	2.4
1	3-A	11	LEU	2.4
1	4-A	11	LEU	2.4
1	5-A	11	LEU	2.4
1	6-A	11	LEU	2.4
1	7-A	11	LEU	2.4
1	8-A	11	LEU	2.4
1	9-A	11	LEU	2.4
1	10-A	11	LEU	2.4
1	11-A	11	LEU	2.4
1	12-A	11	LEU	2.4
1	13-A	11	LEU	2.4
1	14-A	11	LEU	2.4
1	15-A	11	LEU	2.4
1	16-A	11	LEU	2.4
1	17-A	11	LEU	2.4
1	18-A	11	LEU	2.4
1	19-A	11	LEU	2.4
1	20-A	11	LEU	2.4
1	21-A	11	LEU	2.4
1	22-A	11	LEU	2.4
1	23-A	11	LEU	2.4
1	24-A	11	LEU	2.4
1	25-A	11	LEU	2.4
1	26-A	11	LEU	2.4
1	27-A	11	LEU	2.4
1	28-A	11	LEU	2.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	29-A	11	LEU	2.4
1	30-A	11	LEU	2.4
1	31-A	11	LEU	2.4
1	32-A	11	LEU	2.4
1	33-A	11	LEU	2.4
1	34-A	11	LEU	2.4
1	35-A	11	LEU	2.4
1	36-A	11	LEU	2.4
1	37-A	11	LEU	2.4
1	38-A	11	LEU	2.4
1	39-A	11	LEU	2.4
1	40-A	11	LEU	2.4
1	41-A	11	LEU	2.4
1	42-A	11	LEU	2.4
1	43-A	11	LEU	2.4
1	1-A	124	GLU	2.4
1	2-A	124	GLU	2.4
1	3-A	124	GLU	2.4
1	4-A	124	GLU	2.4
1	5-A	124	GLU	2.4
1	6-A	124	GLU	2.4
1	7-A	124	GLU	2.4
1	8-A	124	GLU	2.4
1	9-A	124	GLU	2.4
1	10-A	124	GLU	2.4
1	11-A	124	GLU	2.4
1	12-A	124	GLU	2.4
1	13-A	124	GLU	2.4
1	14-A	124	GLU	2.4
1	15-A	124	GLU	2.4
1	16-A	124	GLU	2.4
1	17-A	124	GLU	2.4
1	18-A	124	GLU	2.4
1	19-A	124	GLU	2.4
1	20-A	124	GLU	2.4
1	21-A	124	GLU	2.4
1	22-A	124	GLU	2.4
1	23-A	124	GLU	2.4
1	24-A	124	GLU	2.4
1	25-A	124	GLU	2.4
1	26-A	124	GLU	2.4
1	27-A	124	GLU	2.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	28-A	124	GLU	2.4
1	29-A	124	GLU	2.4
1	30-A	124	GLU	2.4
1	31-A	124	GLU	2.4
1	32-A	124	GLU	2.4
1	33-A	124	GLU	2.4
1	34-A	124	GLU	2.4
1	35-A	124	GLU	2.4
1	36-A	124	GLU	2.4
1	37-A	124	GLU	2.4
1	38-A	124	GLU	2.4
1	39-A	124	GLU	2.4
1	40-A	124	GLU	2.4
1	41-A	124	GLU	2.4
1	42-A	124	GLU	2.4
1	43-A	124	GLU	2.4
1	1-A	545	LEU	2.3
1	2-A	545	LEU	2.3
1	3-A	545	LEU	2.3
1	4-A	545	LEU	2.3
1	5-A	545	LEU	2.3
1	6-A	545	LEU	2.3
1	7-A	545	LEU	2.3
1	8-A	545	LEU	2.3
1	9-A	545	LEU	2.3
1	10-A	545	LEU	2.3
1	11-A	545	LEU	2.3
1	12-A	545	LEU	2.3
1	13-A	545	LEU	2.3
1	14-A	545	LEU	2.3
1	15-A	545	LEU	2.3
1	16-A	545	LEU	2.3
1	17-A	545	LEU	2.3
1	18-A	545	LEU	2.3
1	19-A	545	LEU	2.3
1	20-A	545	LEU	2.3
1	21-A	545	LEU	2.3
1	22-A	545	LEU	2.3
1	23-A	545	LEU	2.3
1	24-A	545	LEU	2.3
1	25-A	545	LEU	2.3
1	26-A	545	LEU	2.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	27-A	545	LEU	2.3
1	28-A	545	LEU	2.3
1	29-A	545	LEU	2.3
1	30-A	545	LEU	2.3
1	31-A	545	LEU	2.3
1	32-A	545	LEU	2.3
1	33-A	545	LEU	2.3
1	34-A	545	LEU	2.3
1	35-A	545	LEU	2.3
1	36-A	545	LEU	2.3
1	37-A	545	LEU	2.3
1	38-A	545	LEU	2.3
1	39-A	545	LEU	2.3
1	40-A	545	LEU	2.3
1	41-A	545	LEU	2.3
1	42-A	545	LEU	2.3
1	43-A	545	LEU	2.3
1	1-A	360	LYS	2.1
1	2-A	360	LYS	2.1
1	3-A	360	LYS	2.1
1	4-A	360	LYS	2.1
1	5-A	360	LYS	2.1
1	6-A	360	LYS	2.1
1	7-A	360	LYS	2.1
1	8-A	360	LYS	2.1
1	9-A	360	LYS	2.1
1	10-A	360	LYS	2.1
1	11-A	360	LYS	2.1
1	12-A	360	LYS	2.1
1	13-A	360	LYS	2.1
1	14-A	360	LYS	2.1
1	15-A	360	LYS	2.1
1	16-A	360	LYS	2.1
1	17-A	360	LYS	2.1
1	18-A	360	LYS	2.1
1	19-A	360	LYS	2.1
1	20-A	360	LYS	2.1
1	21-A	360	LYS	2.1
1	22-A	360	LYS	2.1
1	23-A	360	LYS	2.1
1	24-A	360	LYS	2.1
1	25-A	360	LYS	2.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	26-A	360	LYS	2.1
1	27-A	360	LYS	2.1
1	28-A	360	LYS	2.1
1	29-A	360	LYS	2.1
1	30-A	360	LYS	2.1
1	31-A	360	LYS	2.1
1	32-A	360	LYS	2.1
1	33-A	360	LYS	2.1
1	34-A	360	LYS	2.1
1	35-A	360	LYS	2.1
1	36-A	360	LYS	2.1
1	37-A	360	LYS	2.1
1	38-A	360	LYS	2.1
1	39-A	360	LYS	2.1
1	40-A	360	LYS	2.1
1	41-A	360	LYS	2.1
1	42-A	360	LYS	2.1
1	43-A	360	LYS	2.1
1	1-A	517	GLU	2.0
1	2-A	517	GLU	2.0
1	3-A	517	GLU	2.0
1	4-A	517	GLU	2.0
1	5-A	517	GLU	2.0
1	6-A	517	GLU	2.0
1	7-A	517	GLU	2.0
1	8-A	517	GLU	2.0
1	9-A	517	GLU	2.0
1	10-A	517	GLU	2.0
1	11-A	517	GLU	2.0
1	12-A	517	GLU	2.0
1	13-A	517	GLU	2.0
1	14-A	517	GLU	2.0
1	15-A	517	GLU	2.0
1	16-A	517	GLU	2.0
1	17-A	517	GLU	2.0
1	18-A	517	GLU	2.0
1	19-A	517	GLU	2.0
1	20-A	517	GLU	2.0
1	21-A	517	GLU	2.0
1	22-A	517	GLU	2.0
1	23-A	517	GLU	2.0
1	24-A	517	GLU	2.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	25-A	517	GLU	2.0
1	26-A	517	GLU	2.0
1	27-A	517	GLU	2.0
1	28-A	517	GLU	2.0
1	29-A	517	GLU	2.0
1	30-A	517	GLU	2.0
1	31-A	517	GLU	2.0
1	32-A	517	GLU	2.0
1	33-A	517	GLU	2.0
1	34-A	517	GLU	2.0
1	35-A	517	GLU	2.0
1	36-A	517	GLU	2.0
1	37-A	517	GLU	2.0
1	38-A	517	GLU	2.0
1	39-A	517	GLU	2.0
1	40-A	517	GLU	2.0
1	41-A	517	GLU	2.0
1	42-A	517	GLU	2.0
1	43-A	517	GLU	2.0
1	1-A	522	GLU	2.0
1	2-A	522	GLU	2.0
1	3-A	522	GLU	2.0
1	4-A	522	GLU	2.0
1	5-A	522	GLU	2.0
1	6-A	522	GLU	2.0
1	7-A	522	GLU	2.0
1	8-A	522	GLU	2.0
1	9-A	522	GLU	2.0
1	10-A	522	GLU	2.0
1	11-A	522	GLU	2.0
1	12-A	522	GLU	2.0
1	13-A	522	GLU	2.0
1	14-A	522	GLU	2.0
1	15-A	522	GLU	2.0
1	16-A	522	GLU	2.0
1	17-A	522	GLU	2.0
1	18-A	522	GLU	2.0
1	19-A	522	GLU	2.0
1	20-A	522	GLU	2.0
1	21-A	522	GLU	2.0
1	22-A	522	GLU	2.0
1	23-A	522	GLU	2.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	24-A	522	GLU	2.0
1	25-A	522	GLU	2.0
1	26-A	522	GLU	2.0
1	27-A	522	GLU	2.0
1	28-A	522	GLU	2.0
1	29-A	522	GLU	2.0
1	30-A	522	GLU	2.0
1	31-A	522	GLU	2.0
1	32-A	522	GLU	2.0
1	33-A	522	GLU	2.0
1	34-A	522	GLU	2.0
1	35-A	522	GLU	2.0
1	36-A	522	GLU	2.0
1	37-A	522	GLU	2.0
1	38-A	522	GLU	2.0
1	39-A	522	GLU	2.0
1	40-A	522	GLU	2.0
1	41-A	522	GLU	2.0
1	42-A	522	GLU	2.0
1	43-A	522	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)

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

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors(Å^2)	Q<0.9
2	DPF	1-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,16	18
2	DPF	2-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,17,17	18
2	DPF	3-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,16	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors(Å^2)	Q<0.9
2	DPF	4-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,16	18
2	DPF	5-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,17	18
2	DPF	6-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,17	18
2	DPF	7-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,17	18
2	DPF	8-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,17,17	18
2	DPF	9-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,16	18
2	DPF	10-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,17	18
2	DPF	11-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,17	18
2	DPF	12-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,16	18
2	DPF	13-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,16	18
2	DPF	14-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,17	18
2	DPF	15-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,17,17	18
2	DPF	16-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,16	18
2	DPF	17-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,16	18
2	DPF	18-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,17,17	18
2	DPF	19-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,16	18
2	DPF	20-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,16	18
2	DPF	21-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,16	18
2	DPF	22-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,16	18
2	DPF	23-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,16	18
2	DPF	24-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,16	18
2	DPF	25-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,17,17	18
2	DPF	26-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,17,17	18
2	DPF	27-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,16	18
2	DPF	28-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,16	18
2	DPF	29-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,16	18
2	DPF	30-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,17,17	18
2	DPF	31-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,17,17	18
2	DPF	32-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,17,17	18
2	DPF	33-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,17,17	18
2	DPF	34-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,17,17	18
2	DPF	35-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,17,17	18
2	DPF	36-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,17,17	18
2	DPF	37-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,16	18
2	DPF	38-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,17,17	18
2	DPF	39-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,16	18
2	DPF	40-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,17	18
2	DPF	41-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,17,17	18
2	DPF	42-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,17	18
2	DPF	43-A	601	8/9	0.98	0.07	16,16,16,17	18

6.5 Other polymers (i)

There are no such residues in this entry.