



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 05:01 PM UTC

PDB ID : 7MHP / pdb_00007mhp
Title : Ensemble refinement structure of SARS-CoV-2 main protease (Mpro) at 298 K at high humidity
Authors : Ebrahim, A.; Riley, B.T.; Kumaran, D.; Andi, B.; Fuchs, M.R.; McSweeney, S.; Keedy, D.A.
Deposited on : 2021-04-15
Resolution : 2.00 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0
Xtriage (Phenix) : 2.0
EDS : 3.0
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
CCP4 : 9.0.010 (Gargrove)
Density-Fitness : 1.0.12
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.49

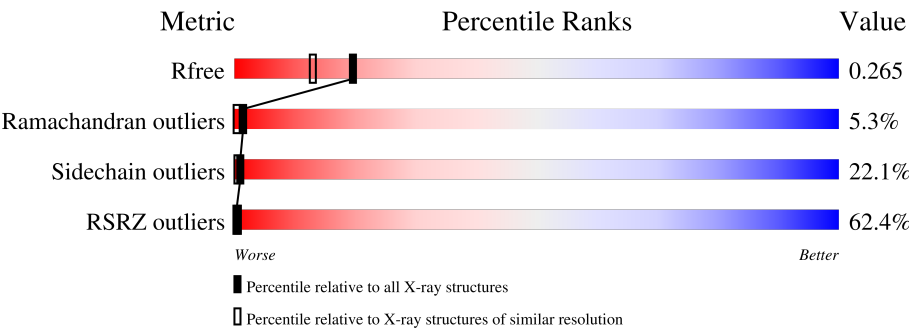
1 Overall quality at a glance i

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 2.00 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}	180053	10052 (2.00-2.00)
Ramachandran outliers	187476	11031 (2.00-2.00)
Sidechain outliers	187428	11029 (2.00-2.00)
RSRZ outliers	180081	10067 (2.00-2.00)

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	1-A	306	62% 76% 21% ..
1	10-A	306	76% 21% ..
1	11-A	306	75% 21% .
1	12-A	306	74% 24% .
1	13-A	306	76% 21% ..
1	14-A	306	75% 23% ..
1	15-A	306	75% 22% .

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Length	Quality of chain	
1	16-A	306		•
1	17-A	306		•
1	18-A	306		•
1	19-A	306		•
1	2-A	306		• •
1	20-A	306		•
1	21-A	306		•
1	22-A	306		•
1	23-A	306		•
1	24-A	306		•
1	25-A	306		•
1	26-A	306		•
1	27-A	306		•
1	28-A	306		•
1	3-A	306		•
1	4-A	306		•
1	5-A	306		•
1	6-A	306		• •
1	7-A	306		•
1	8-A	306		•
1	9-A	306		• •

2 Entry composition

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 132023 atoms, of which 64764 are hydrogens and 0 are deuteriums.

In the tables below, the ZeroOcc column contains the number of atoms modelled with zero occupancy, the AltConf column contains the number of residues with at least one atom in alternate conformation and the Trace column contains the number of residues modelled with at most 2 atoms.

- Molecule 1 is a protein called 3C-like proteinase.

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	1-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	2-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	3-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	4-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	5-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	6-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	7-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	8-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	9-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	10-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	11-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	12-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	13-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	14-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	15-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	16-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	17-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	18-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	19-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	20-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	21-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	22-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	23-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	24-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	25-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	26-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	27-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			
1	28-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4680	1499	2313	402	444	22			

- Molecule 2 is ZINC ION (CCD ID: ZN) (formula: Zn).

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

Continued on next page...

Continued from previous page...

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

- Molecule 3 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms	ZeroOcc	AltConf
3	1-A	34	Total O 34 34	0	0
3	2-A	29	Total O 29 29	0	0
3	3-A	24	Total O 24 24	0	0
3	4-A	37	Total O 37 37	0	0
3	5-A	46	Total O 46 46	0	0
3	6-A	30	Total O 30 30	0	0
3	7-A	45	Total O 45 45	0	0
3	8-A	30	Total O 30 30	0	0
3	9-A	35	Total O 35 35	0	0
3	10-A	38	Total O 38 38	0	0
3	11-A	41	Total O 41 41	0	0
3	12-A	34	Total O 34 34	0	0
3	13-A	36	Total O 36 36	0	0
3	14-A	29	Total O 29 29	0	0
3	15-A	29	Total O 29 29	0	0
3	16-A	36	Total O 36 36	0	0
3	17-A	33	Total O 33 33	0	0
3	18-A	29	Total O 29 29	0	0
3	19-A	31	Total O 31 31	0	0
3	20-A	29	Total O 29 29	0	0
3	21-A	34	Total O 34 34	0	0

Continued on next page...

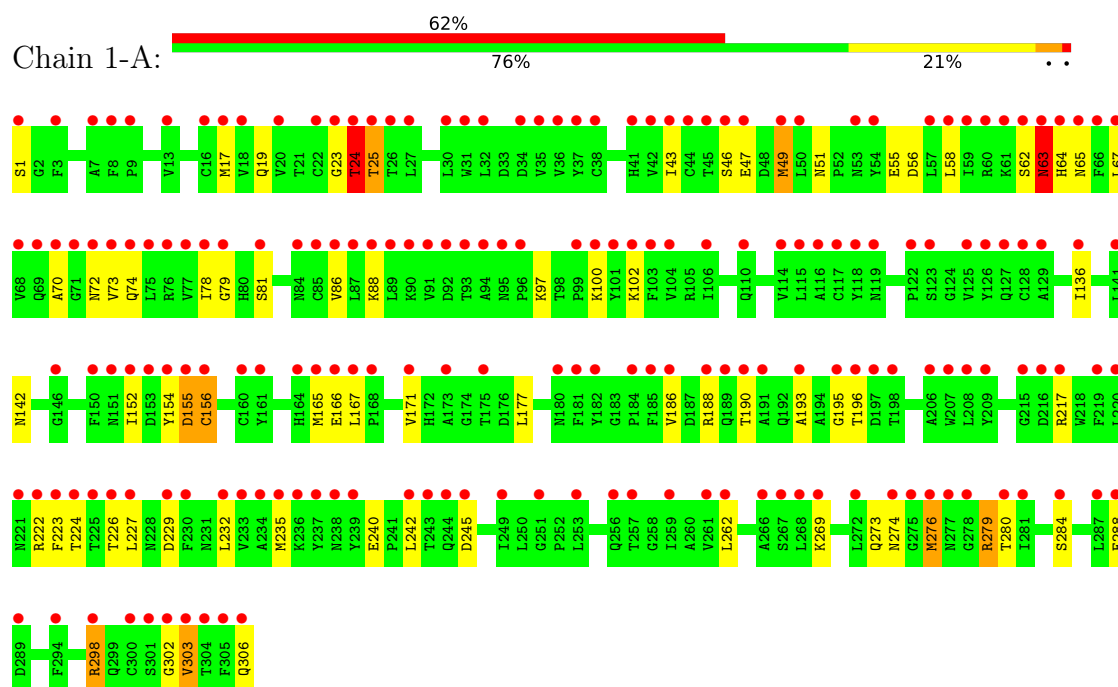
Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	22-A	37	Total 37	O 37	0	0
3	23-A	37	Total 37	O 37	0	0
3	24-A	38	Total 38	O 38	0	0
3	25-A	40	Total 40	O 40	0	0
3	26-A	33	Total 33	O 33	0	0
3	27-A	30	Total 30	O 30	0	0
3	28-A	31	Total 31	O 31	0	0

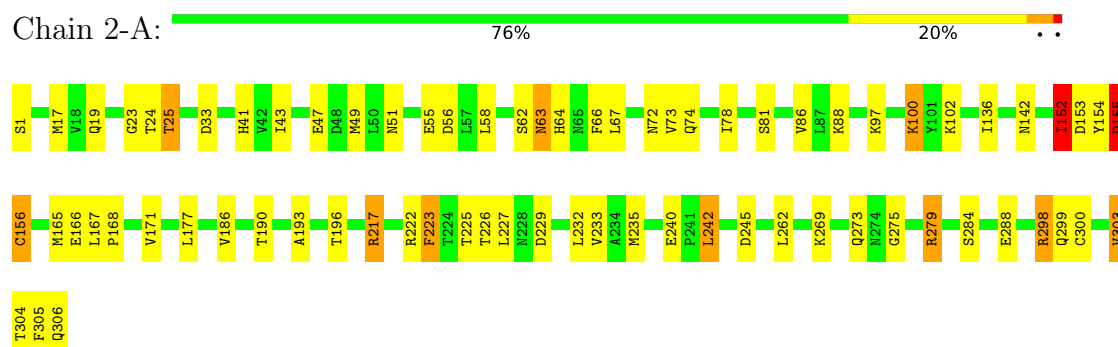
3 Residue-property plots [i](#)

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.

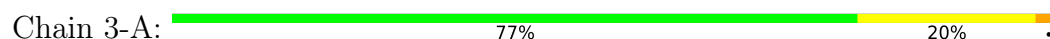
• Molecule 1: 3C-like proteinase

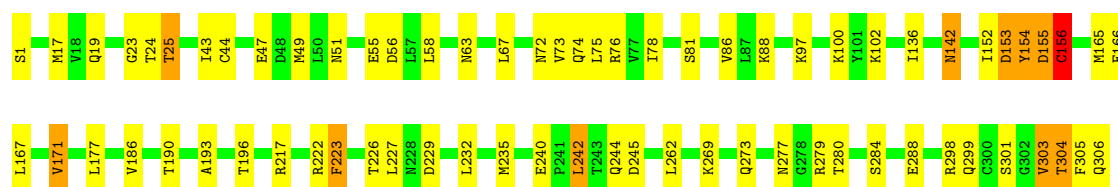


• Molecule 1: 3C-like proteinase



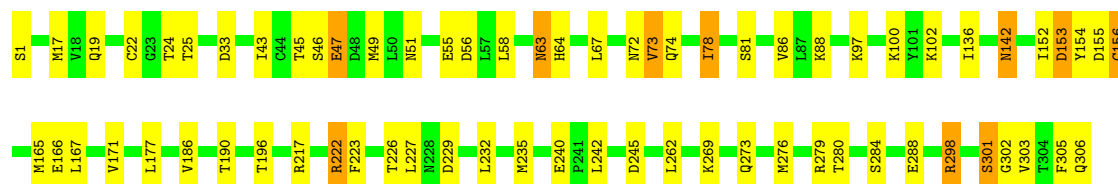
• Molecule 1: 3C-like proteinase





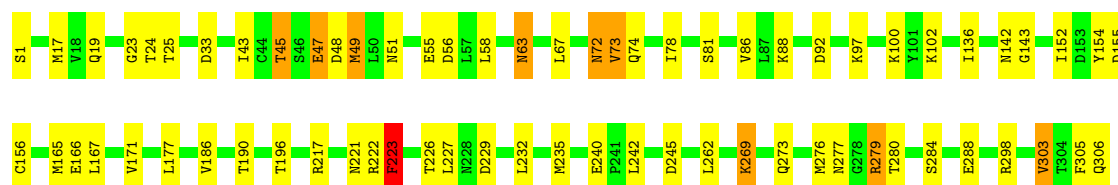
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 4-A:  77% 19% .



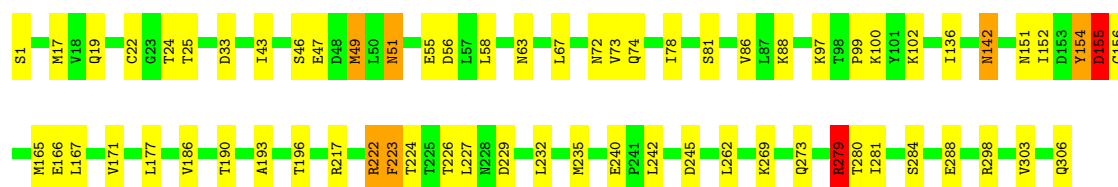
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 5-A:  77% 19% .



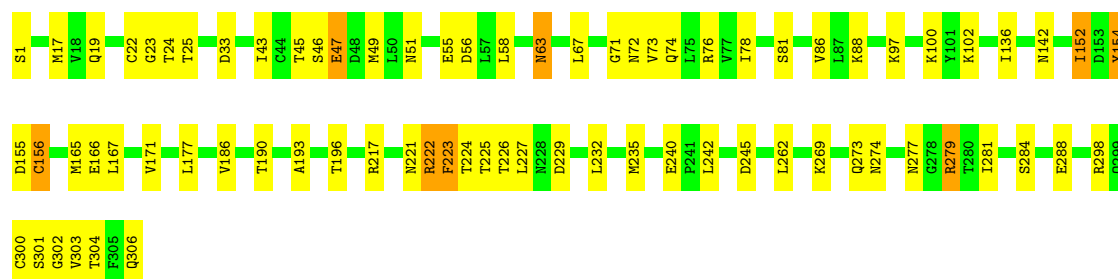
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 6-A:  78% 19% . .

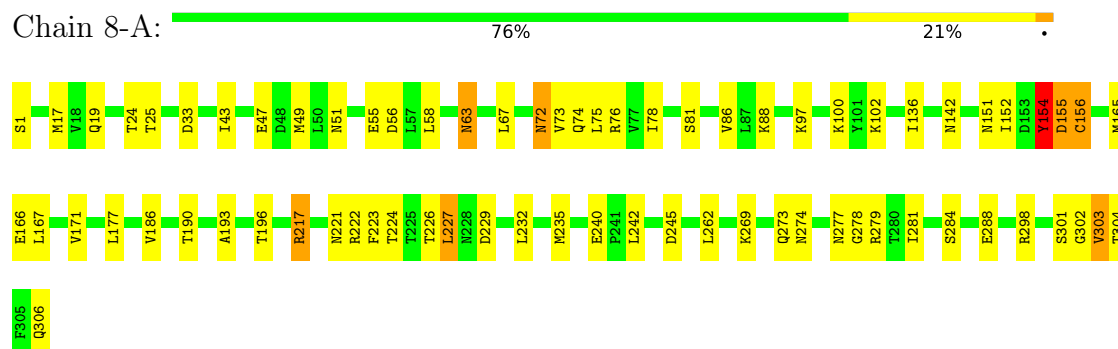


- Molecule 1: 3C-like proteinase

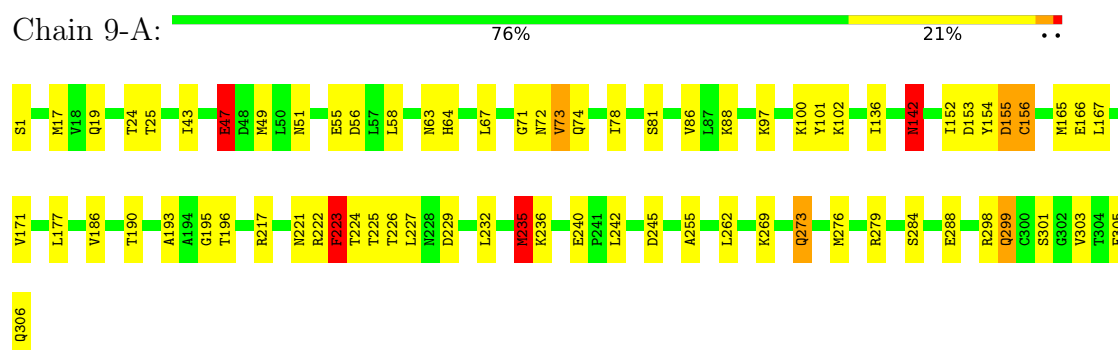
Chain 7-A:  75% 22% .



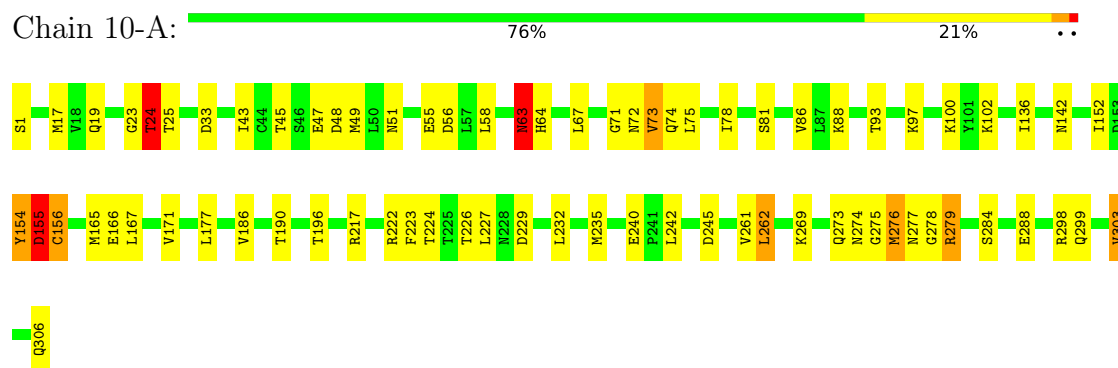
- Molecule 1: 3C-like proteinase



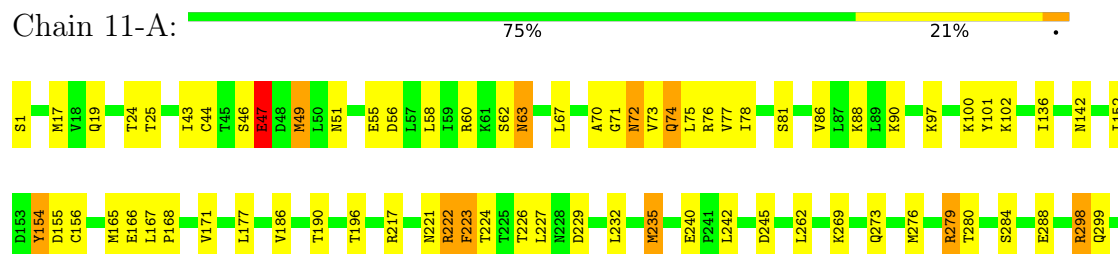
- Molecule 1: 3C-like proteinase



- Molecule 1: 3C-like proteinase



- Molecule 1: 3C-like proteinase



V303
T304
F305
Q306

- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 12-A:  74% 24% .

S1 M17 V18 Q19 T24 T25 D33 D34 V35 I43 E47 D48 M49 M51 E55 D56 D57 L58 K61 S62 N63 L67 G71 M72 V73 Q74 L75 R76 V77 I78 S81 V86 L87 K88 L89 P96 K97 K100 Y101 K102 I136 L141 N142

I152 D153 Y154 D155 C156 M165 E166 L167 V171 L177 V186 T190 T196 R217 L220 N221 R222 F223 T224 T225 T226 L227 N228 D229 L232 M235 E240 F241 L242 D245 L262 K269 Q273 Q274 G275 N276 K279 T280 S284 E288 R298

Q299 C300 S301 G302 V303 T304 F305 Q306

- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 13-A:  76% 21% ..

S1 M17 V18 Q19 T24 T25 V35 I43 E47 D48 M49 M51 E55 D56 D57 L58 N63 L67 N72 V73 Q74 I78 S81 V86 L87 K88 K97 T98 P99 K100 Y101 K102 R105 I136 N142 G143 I152 D153 Y154 C156

M165 E166 L167 V171 L177 P184 F185 V186 T190 T196 R217 R221 N222 F223 T224 T225 T226 L227 N228 D229 L232 M235 K236 Y237 E240 P241 L242 D245 L262 K269 Q273 N274 G275 M276 R279 S284 E288 R298 Q299 C300 V303

Q306

- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 14-A:  75% 23% ..

S1 M17 V18 Q19 T24 T25 V35 I43 E47 D48 M49 M51 E55 D56 D57 L58 N63 L67 V68 Q69 A70 G71 N72 V73 Q74 I78 S81 V86 L87 K88 L89 K90 K97 T98 P99 K100 Y101 K102 I136 N142 I152 D153 Y154 D155

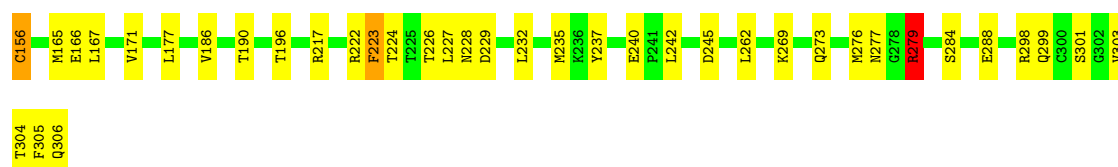
C156 M165 E166 L167 P168 V171 L177 V186 T190 T196 R217 R221 N222 F223 T224 T225 T226 L227 N228 D229 L232 M235 E240 P241 L242 D245 L262 K269 Q273 R274 G275 M276 N277 G278 R279 S284 E288 R298 Q299 C300 S301 G302

V303
T304
F305
Q306

- Molecule 1: 3C-like proteinase

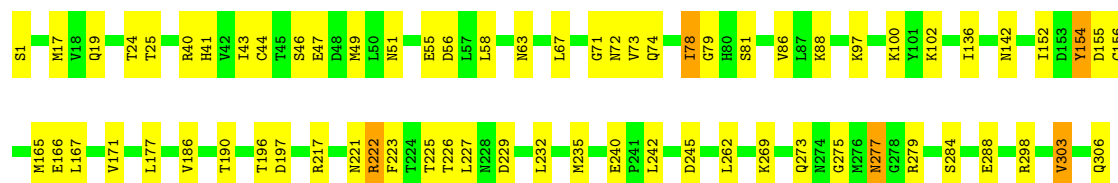
Chain 15-A:  75% 22% .

S1 M17 V18 Q19 Q23 T24 T25 R40 R41 V42 I43 S46 E47 D48 M49 M51 E55 D56 D57 L58 N63 H64 L67 N72 V73 Q74 I78 S81 V86 L87 K88 L89 K90 K97 K100 Y101 K102 I136 N142 I152 D153 Y154 D155



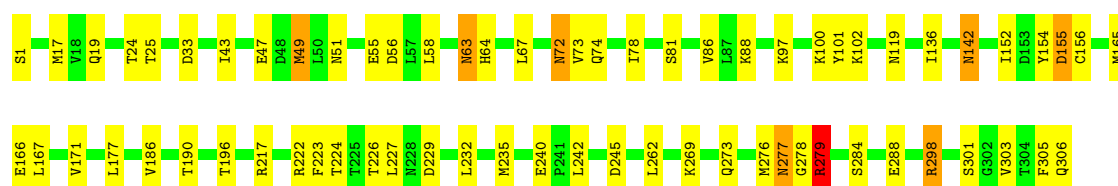
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 16-A: 77% 21% .



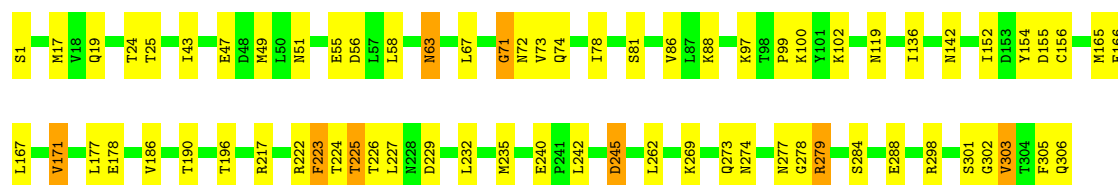
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 17-A: 78% 20% .



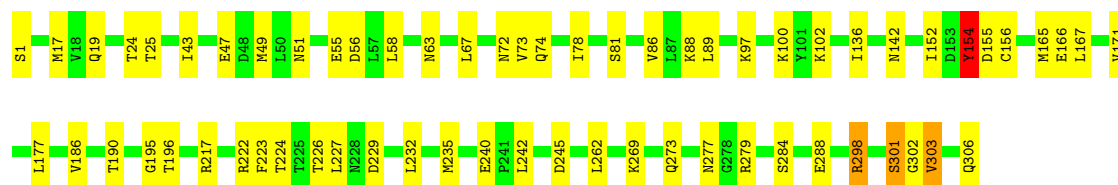
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 18-A: 77% 20% .



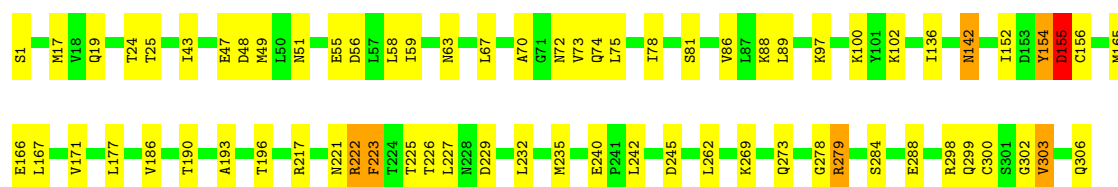
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 19-A: 79% 20% .



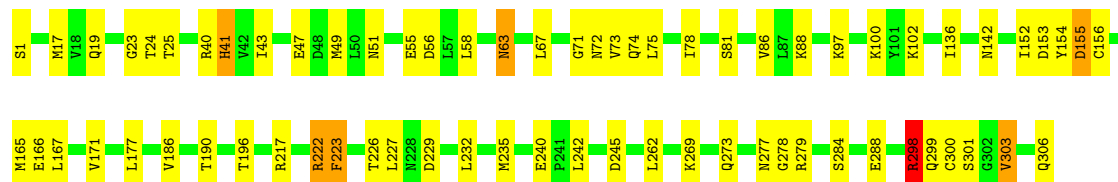
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 20-A: 77% 21% .



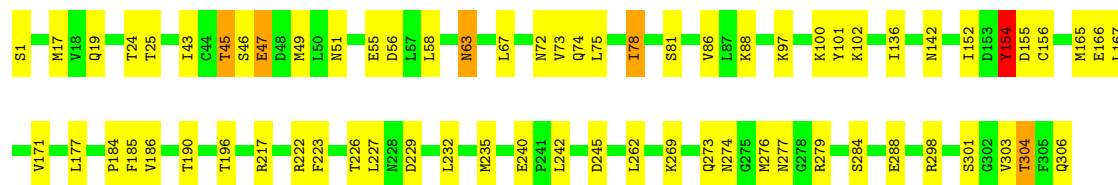
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 21-A: 77% 20% .



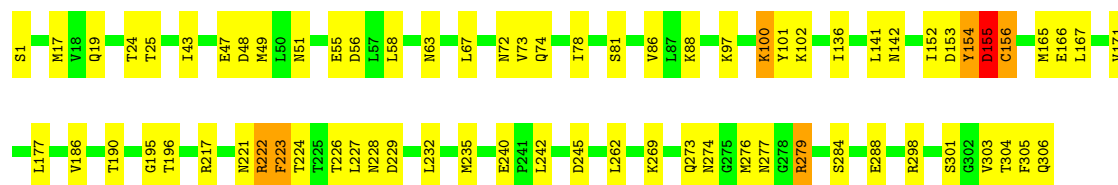
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 22-A: 77% 21% .



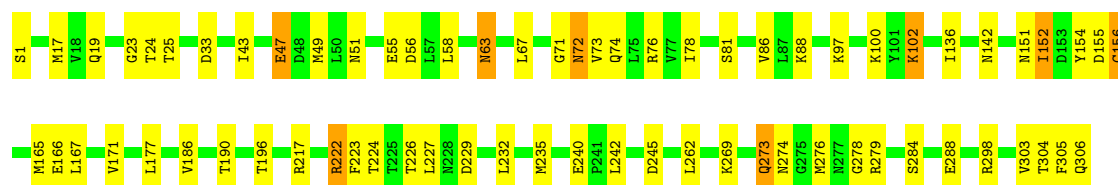
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 23-A: 76% 21% .



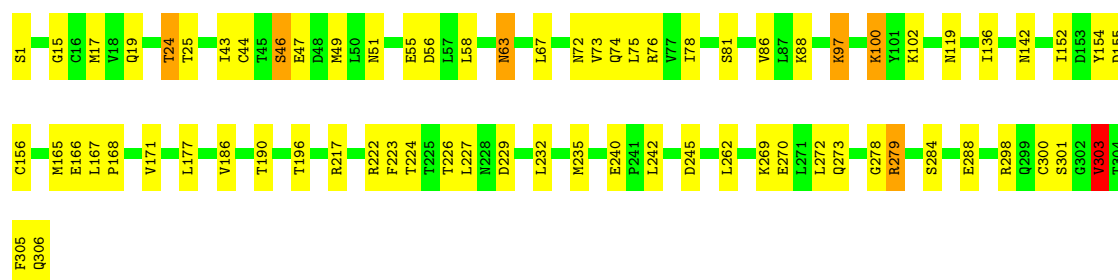
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 24-A: 77% 20% .



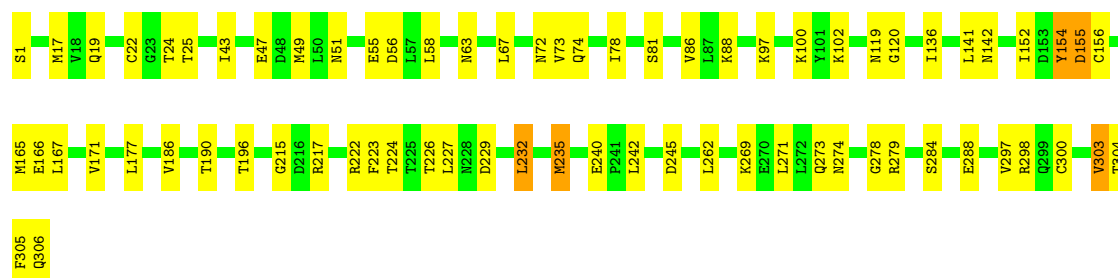
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 25-A: 76% 21% .



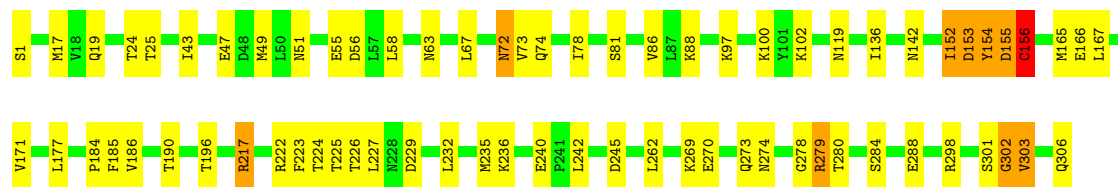
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 26-A: 77% 22% .



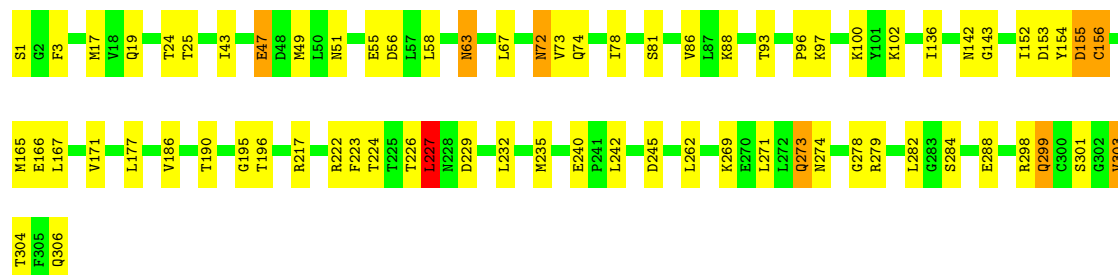
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 27-A: 77% 20% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 28-A: 76% 21% .



4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	C 1 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	114.88Å 54.74Å 45.24Å 90.00° 101.42° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	56.30 – 2.00 56.30 – 2.00	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.0 (56.30-2.00) 88.6 (56.30-2.00)	Depositor EDS
R_{merge}	0.18	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	0.59 (at 2.00Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX (phenix.ensemble_refinement:1.19.2_4158)	Depositor
R, R_{free}	0.159 , 0.221 0.189 , 0.265	Depositor DCC
R_{free} test set	924 reflections (4.92%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	34.3	Xtriage
Anisotropy	0.135	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.02 , 43.7	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.51$, $\langle L^2 \rangle = 0.35$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.88	EDS
Total number of atoms	132023	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	45.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 9.00% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z >5	RMSZ	# Z >5
1	1-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	2-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	3-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	4-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	5-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	6-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	7-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	8-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	9-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	10-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	11-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	12-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	13-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	14-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	15-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	16-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	17-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	18-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	19-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	20-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	21-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	22-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	23-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	24-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	25-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	26-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	27-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
1	28-A	0.10	0/2420	0.14	0/3289
All	All	0.10	0/67760	0.14	0/92092

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	11
1	2-A	0	8
1	3-A	0	7
1	4-A	0	4
1	5-A	0	7
1	6-A	0	4
1	7-A	0	5
1	8-A	0	8
1	9-A	0	9
1	10-A	0	7
1	11-A	0	11
1	12-A	0	9
1	13-A	0	14
1	14-A	0	5
1	15-A	0	6
1	16-A	0	4
1	17-A	0	5
1	18-A	0	7
1	19-A	0	5
1	20-A	0	7
1	21-A	0	8
1	22-A	0	5
1	23-A	0	6
1	24-A	0	4
1	25-A	0	8
1	26-A	0	4
1	27-A	0	8
1	28-A	0	7
All	All	0	193

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

All (193) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	1-A	155	ASP	Peptide
1	1-A	156	CYS	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	1-A	188	ARG	Sidechain
1	1-A	23	GLY	Peptide
1	1-A	24	THR	Peptide
1	1-A	276	MET	Peptide
1	1-A	279	ARG	Sidechain
1	1-A	303	VAL	Peptide
1	1-A	62	SER	Peptide
1	1-A	63	ASN	Peptide
1	1-A	79	GLY	Peptide
1	10-A	155	ASP	Peptide
1	10-A	23	GLY	Peptide
1	10-A	24	THR	Peptide
1	10-A	276	MET	Peptide
1	10-A	299	GLN	Peptide
1	10-A	63	ASN	Peptide
1	10-A	75	LEU	Peptide
1	11-A	101	TYR	Peptide
1	11-A	222	ARG	Peptide
1	11-A	280	THR	Peptide
1	11-A	298	ARG	Sidechain
1	11-A	47	GLU	Peptide
1	11-A	60	ARG	Peptide
1	11-A	62	SER	Peptide
1	11-A	71	GLY	Peptide
1	11-A	72	ASN	Peptide
1	11-A	74	GLN	Peptide
1	11-A	76	ARG	Sidechain
1	12-A	101	TYR	Peptide
1	12-A	141	LEU	Peptide
1	12-A	142	ASN	Peptide
1	12-A	152	ILE	Peptide
1	12-A	275	GLY	Peptide
1	12-A	299	GLN	Peptide
1	12-A	304	THR	Peptide
1	12-A	61	LYS	Peptide
1	12-A	96	PRO	Peptide
1	13-A	105	ARG	Sidechain
1	13-A	143	GLY	Peptide
1	13-A	153	ASP	Peptide
1	13-A	184	PRO	Peptide
1	13-A	221	ASN	Peptide
1	13-A	222	ARG	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	13-A	223	PHE	Peptide
1	13-A	235	MET	Peptide
1	13-A	275	GLY	Peptide
1	13-A	279	ARG	Peptide
1	13-A	298	ARG	Peptide,Sidechain
1	13-A	300	CYS	Peptide
1	13-A	47	GLU	Peptide
1	14-A	153	ASP	Peptide
1	14-A	223	PHE	Peptide
1	14-A	279	ARG	Peptide
1	14-A	300	CYS	Peptide
1	14-A	68	VAL	Peptide
1	15-A	153	ASP	Peptide
1	15-A	24	THR	Peptide
1	15-A	279	ARG	Peptide
1	15-A	299	GLN	Peptide
1	15-A	40	ARG	Peptide
1	15-A	89	LEU	Peptide
1	16-A	154	TYR	Peptide
1	16-A	275	GLY	Peptide
1	16-A	277	ASN	Peptide
1	16-A	40	ARG	Peptide
1	17-A	101	TYR	Peptide
1	17-A	142	ASN	Peptide
1	17-A	277	ASN	Peptide
1	17-A	279	ARG	Peptide
1	17-A	298	ARG	Sidechain
1	18-A	171	VAL	Peptide
1	18-A	178	GLU	Peptide
1	18-A	225	THR	Peptide
1	18-A	279	ARG	Sidechain
1	18-A	301	SER	Peptide
1	18-A	303	VAL	Peptide
1	18-A	71	GLY	Peptide
1	19-A	154	TYR	Peptide
1	19-A	195	GLY	Peptide
1	19-A	298	ARG	Sidechain
1	19-A	301	SER	Peptide
1	19-A	302	GLY	Peptide
1	2-A	152	ILE	Peptide
1	2-A	155	ASP	Peptide
1	2-A	242	LEU	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	2-A	275	GLY	Peptide
1	2-A	279	ARG	Peptide
1	2-A	298	ARG	Sidechain
1	2-A	303	VAL	Peptide
1	2-A	62	SER	Peptide
1	20-A	142	ASN	Peptide
1	20-A	155	ASP	Peptide
1	20-A	193	ALA	Peptide
1	20-A	221	ASN	Peptide
1	20-A	222	ARG	Peptide
1	20-A	302	GLY	Peptide
1	20-A	75	LEU	Peptide
1	21-A	153	ASP	Peptide
1	21-A	155	ASP	Peptide
1	21-A	222	ARG	Peptide
1	21-A	298	ARG	Peptide
1	21-A	40	ARG	Peptide
1	21-A	41	HIS	Peptide
1	21-A	71	GLY	Peptide
1	21-A	75	LEU	Peptide
1	22-A	101	TYR	Peptide
1	22-A	154	TYR	Peptide
1	22-A	304	THR	Peptide
1	22-A	45	THR	Peptide
1	22-A	46	SER	Peptide
1	23-A	101	TYR	Peptide
1	23-A	141	LEU	Peptide
1	23-A	153	ASP	Peptide
1	23-A	155	ASP	Peptide
1	23-A	156	CYS	Peptide
1	23-A	276	MET	Peptide
1	24-A	102	LYS	Peptide
1	24-A	151	ASN	Peptide
1	24-A	152	ILE	Peptide
1	24-A	222	ARG	Peptide
1	25-A	270	GLU	Peptide
1	25-A	278	GLY	Peptide
1	25-A	279	ARG	Peptide
1	25-A	301	SER	Peptide
1	25-A	303	VAL	Peptide
1	25-A	44	CYS	Peptide
1	25-A	46	SER	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	25-A	75	LEU	Peptide
1	26-A	141	LEU	Peptide
1	26-A	235	MET	Peptide
1	26-A	300	CYS	Peptide
1	26-A	305	PHE	Peptide
1	27-A	152	ILE	Peptide
1	27-A	153	ASP	Peptide
1	27-A	156	CYS	Peptide
1	27-A	184	PRO	Peptide
1	27-A	274	ASN	Peptide
1	27-A	280	THR	Peptide
1	27-A	301	SER	Peptide
1	27-A	302	GLY	Peptide
1	28-A	143	GLY	Peptide
1	28-A	153	ASP	Peptide
1	28-A	195	GLY	Peptide
1	28-A	227	LEU	Peptide
1	28-A	299	GLN	Peptide
1	28-A	301	SER	Peptide
1	28-A	303	VAL	Peptide
1	3-A	153	ASP	Peptide
1	3-A	156	CYS	Peptide
1	3-A	171	VAL	Peptide
1	3-A	23	GLY	Peptide
1	3-A	242	LEU	Peptide
1	3-A	304	THR	Peptide
1	3-A	75	LEU	Peptide
1	4-A	153	ASP	Peptide
1	4-A	276	MET	Peptide
1	4-A	298	ARG	Sidechain
1	4-A	301	SER	Peptide
1	5-A	143	GLY	Peptide
1	5-A	221	ASN	Peptide
1	5-A	223	PHE	Peptide
1	5-A	276	MET	Peptide
1	5-A	279	ARG	Peptide
1	5-A	45	THR	Peptide
1	5-A	72	ASN	Peptide
1	6-A	151	ASN	Peptide
1	6-A	155	ASP	Peptide
1	6-A	222	ARG	Peptide
1	6-A	279	ARG	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	7-A	154	TYR	Peptide
1	7-A	274	ASN	Peptide
1	7-A	300	CYS	Peptide
1	7-A	302	GLY	Peptide
1	7-A	304	THR	Peptide
1	8-A	151	ASN	Peptide
1	8-A	154	TYR	Peptide
1	8-A	155	ASP	Peptide
1	8-A	156	CYS	Peptide
1	8-A	217	ARG	Sidechain
1	8-A	221	ASN	Peptide
1	8-A	227	LEU	Peptide
1	8-A	304	THR	Peptide
1	9-A	101	TYR	Peptide
1	9-A	142	ASN	Peptide
1	9-A	195	GLY	Peptide
1	9-A	221	ASN	Peptide
1	9-A	223	PHE	Peptide
1	9-A	235	MET	Peptide
1	9-A	299	GLN	Peptide
1	9-A	47	GLU	Peptide
1	9-A	64	HIS	Peptide

5.2 Too-close contacts

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in the chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes within the asymmetric unit, whereas Symm-Clashes lists symmetry-related clashes.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	1-A	2367	2313	2313	0	0
1	2-A	2367	2313	2313	0	0
1	3-A	2367	2313	2313	0	0
1	4-A	2367	2313	2313	0	0
1	5-A	2367	2313	2313	0	0
1	6-A	2367	2313	2313	0	0
1	7-A	2367	2313	2313	0	0
1	8-A	2367	2313	2313	0	0
1	9-A	2367	2313	2313	0	0
1	10-A	2367	2313	2313	0	0
1	11-A	2367	2313	2313	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	12-A	2367	2313	2313	0	0
1	13-A	2367	2313	2313	0	0
1	14-A	2367	2313	2313	0	0
1	15-A	2367	2313	2313	0	0
1	16-A	2367	2313	2313	0	0
1	17-A	2367	2313	2313	0	0
1	18-A	2367	2313	2313	0	0
1	19-A	2367	2313	2313	0	0
1	20-A	2367	2313	2313	0	0
1	21-A	2367	2313	2313	0	0
1	22-A	2367	2313	2313	0	0
1	23-A	2367	2313	2313	0	0
1	24-A	2367	2313	2313	0	0
1	25-A	2367	2313	2313	0	0
1	26-A	2367	2313	2313	0	0
1	27-A	2367	2313	2313	0	0
1	28-A	2367	2313	2313	0	0
2	1-A	1	0	0	0	0
2	2-A	1	0	0	0	0
2	3-A	1	0	0	0	0
2	4-A	1	0	0	0	0
2	5-A	1	0	0	0	0
2	6-A	1	0	0	0	0
2	7-A	1	0	0	0	0
2	8-A	1	0	0	0	0
2	9-A	1	0	0	0	0
2	10-A	1	0	0	0	0
2	11-A	1	0	0	0	0
2	12-A	1	0	0	0	0
2	13-A	1	0	0	0	0
2	14-A	1	0	0	0	0
2	15-A	1	0	0	0	0
2	16-A	1	0	0	0	0
2	17-A	1	0	0	0	0
2	18-A	1	0	0	0	0
2	19-A	1	0	0	0	0
2	20-A	1	0	0	0	0
2	21-A	1	0	0	0	0
2	22-A	1	0	0	0	0
2	23-A	1	0	0	0	0
2	24-A	1	0	0	0	0
2	25-A	1	0	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
2	26-A	1	0	0	0	0
2	27-A	1	0	0	0	0
2	28-A	1	0	0	0	0
3	1-A	34	0	0	0	0
3	2-A	29	0	0	0	0
3	3-A	24	0	0	0	0
3	4-A	37	0	0	0	0
3	5-A	46	0	0	0	0
3	6-A	30	0	0	0	0
3	7-A	45	0	0	0	0
3	8-A	30	0	0	0	0
3	9-A	35	0	0	0	0
3	10-A	38	0	0	0	0
3	11-A	41	0	0	0	0
3	12-A	34	0	0	0	0
3	13-A	36	0	0	0	0
3	14-A	29	0	0	0	0
3	15-A	29	0	0	0	0
3	16-A	36	0	0	0	0
3	17-A	33	0	0	0	0
3	18-A	29	0	0	0	0
3	19-A	31	0	0	0	0
3	20-A	29	0	0	0	0
3	21-A	34	0	0	0	0
3	22-A	37	0	0	0	0
3	23-A	37	0	0	0	0
3	24-A	38	0	0	0	0
3	25-A	40	0	0	0	0
3	26-A	33	0	0	0	0
3	27-A	30	0	0	0	0
3	28-A	31	0	0	0	0
All	All	67259	64764	64764	0	0

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

There are no clashes within the asymmetric unit.

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles ⓘ

5.3.1 Protein backbone ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	1-A	304/306 (99%)	253 (83%)	35 (12%)	16 (5%)	1	0
1	2-A	304/306 (99%)	246 (81%)	36 (12%)	22 (7%)	1	0
1	3-A	304/306 (99%)	257 (84%)	29 (10%)	18 (6%)	1	0
1	4-A	304/306 (99%)	262 (86%)	25 (8%)	17 (6%)	1	0
1	5-A	304/306 (99%)	256 (84%)	33 (11%)	15 (5%)	1	0
1	6-A	304/306 (99%)	261 (86%)	28 (9%)	15 (5%)	1	0
1	7-A	304/306 (99%)	255 (84%)	28 (9%)	21 (7%)	1	0
1	8-A	304/306 (99%)	253 (83%)	36 (12%)	15 (5%)	1	0
1	9-A	304/306 (99%)	243 (80%)	42 (14%)	19 (6%)	1	0
1	10-A	304/306 (99%)	256 (84%)	26 (9%)	22 (7%)	1	0
1	11-A	304/306 (99%)	251 (83%)	34 (11%)	19 (6%)	1	0
1	12-A	304/306 (99%)	258 (85%)	26 (9%)	20 (7%)	1	0
1	13-A	304/306 (99%)	259 (85%)	32 (10%)	13 (4%)	2	0
1	14-A	304/306 (99%)	260 (86%)	23 (8%)	21 (7%)	1	0
1	15-A	304/306 (99%)	258 (85%)	26 (9%)	20 (7%)	1	0
1	16-A	304/306 (99%)	262 (86%)	30 (10%)	12 (4%)	2	1
1	17-A	304/306 (99%)	253 (83%)	37 (12%)	14 (5%)	2	0
1	18-A	304/306 (99%)	266 (88%)	25 (8%)	13 (4%)	2	0
1	19-A	304/306 (99%)	268 (88%)	30 (10%)	6 (2%)	6	2
1	20-A	304/306 (99%)	267 (88%)	24 (8%)	13 (4%)	2	0
1	21-A	304/306 (99%)	265 (87%)	28 (9%)	11 (4%)	2	1
1	22-A	304/306 (99%)	258 (85%)	33 (11%)	13 (4%)	2	0
1	23-A	304/306 (99%)	263 (86%)	25 (8%)	16 (5%)	1	0
1	24-A	304/306 (99%)	250 (82%)	39 (13%)	15 (5%)	1	0
1	25-A	304/306 (99%)	261 (86%)	29 (10%)	14 (5%)	2	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	26-A	304/306 (99%)	263 (86%)	27 (9%)	14 (5%)	2	0
1	27-A	304/306 (99%)	262 (86%)	26 (9%)	16 (5%)	1	0
1	28-A	304/306 (99%)	248 (82%)	39 (13%)	17 (6%)	1	0
All	All	8512/8568 (99%)	7214 (85%)	851 (10%)	447 (5%)	1	0

All (447) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	25	THR
1	1-A	63	ASN
1	1-A	193	ALA
1	1-A	274	ASN
1	1-A	276	MET
1	1-A	302	GLY
1	2-A	25	THR
1	2-A	63	ASN
1	2-A	153	ASP
1	2-A	155	ASP
1	2-A	156	CYS
1	2-A	168	PRO
1	2-A	193	ALA
1	3-A	76	ARG
1	3-A	155	ASP
1	3-A	156	CYS
1	3-A	223	PHE
1	3-A	277	ASN
1	3-A	280	THR
1	3-A	301	SER
1	4-A	22	CYS
1	4-A	46	SER
1	4-A	47	GLU
1	4-A	156	CYS
1	4-A	222	ARG
1	4-A	301	SER
1	4-A	305	PHE
1	5-A	45	THR
1	5-A	73	VAL
1	5-A	92	ASP
1	5-A	223	PHE
1	5-A	303	VAL
1	5-A	305	PHE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	6-A	22	CYS
1	6-A	154	TYR
1	6-A	193	ALA
1	6-A	223	PHE
1	6-A	281	ILE
1	7-A	46	SER
1	7-A	47	GLU
1	7-A	63	ASN
1	7-A	221	ASN
1	7-A	224	THR
1	8-A	33	ASP
1	8-A	63	ASN
1	8-A	76	ARG
1	8-A	224	THR
1	8-A	277	ASN
1	8-A	281	ILE
1	9-A	47	GLU
1	9-A	142	ASN
1	9-A	156	CYS
1	9-A	223	PHE
1	9-A	276	MET
1	9-A	301	SER
1	9-A	305	PHE
1	10-A	45	THR
1	10-A	48	ASP
1	10-A	64	HIS
1	10-A	73	VAL
1	10-A	93	THR
1	10-A	156	CYS
1	10-A	277	ASN
1	10-A	279	ARG
1	10-A	303	VAL
1	11-A	46	SER
1	11-A	70	ALA
1	11-A	75	LEU
1	11-A	77	VAL
1	11-A	221	ASN
1	11-A	223	PHE
1	11-A	224	THR
1	11-A	235	MET
1	11-A	276	MET
1	11-A	304	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	12-A	76	ARG
1	12-A	77	VAL
1	12-A	154	TYR
1	12-A	220	LEU
1	12-A	221	ASN
1	12-A	223	PHE
1	12-A	224	THR
1	12-A	279	ARG
1	12-A	280	THR
1	13-A	47	GLU
1	13-A	78	ILE
1	13-A	153	ASP
1	13-A	185	PHE
1	13-A	223	PHE
1	13-A	224	THR
1	13-A	236	LYS
1	13-A	237	TYR
1	13-A	276	MET
1	13-A	279	ARG
1	14-A	35	VAL
1	14-A	70	ALA
1	14-A	154	TYR
1	14-A	168	PRO
1	14-A	223	PHE
1	14-A	224	THR
1	14-A	276	MET
1	14-A	277	ASN
1	15-A	41	HIS
1	15-A	46	SER
1	15-A	63	ASN
1	15-A	64	HIS
1	15-A	90	LYS
1	15-A	154	TYR
1	15-A	277	ASN
1	15-A	279	ARG
1	15-A	301	SER
1	15-A	304	THR
1	15-A	305	PHE
1	16-A	41	HIS
1	16-A	78	ILE
1	16-A	225	THR
1	17-A	63	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	17-A	277	ASN
1	17-A	301	SER
1	18-A	223	PHE
1	18-A	224	THR
1	18-A	225	THR
1	18-A	277	ASN
1	18-A	305	PHE
1	19-A	154	TYR
1	19-A	277	ASN
1	19-A	303	VAL
1	20-A	48	ASP
1	20-A	70	ALA
1	20-A	155	ASP
1	20-A	223	PHE
1	20-A	300	CYS
1	21-A	63	ASN
1	21-A	223	PHE
1	21-A	277	ASN
1	21-A	298	ARG
1	21-A	300	CYS
1	21-A	303	VAL
1	22-A	45	THR
1	22-A	154	TYR
1	22-A	184	PRO
1	22-A	185	PHE
1	22-A	277	ASN
1	22-A	301	SER
1	22-A	304	THR
1	23-A	155	ASP
1	23-A	223	PHE
1	23-A	224	THR
1	23-A	279	ARG
1	23-A	305	PHE
1	24-A	23	GLY
1	24-A	47	GLU
1	24-A	224	THR
1	24-A	274	ASN
1	24-A	276	MET
1	24-A	304	THR
1	24-A	305	PHE
1	25-A	63	ASN
1	25-A	76	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	25-A	97	LYS
1	25-A	224	THR
1	25-A	300	CYS
1	25-A	305	PHE
1	26-A	22	CYS
1	26-A	119	ASN
1	26-A	154	TYR
1	26-A	155	ASP
1	26-A	224	THR
1	26-A	271	LEU
1	26-A	303	VAL
1	27-A	72	ASN
1	27-A	153	ASP
1	27-A	154	TYR
1	27-A	155	ASP
1	27-A	185	PHE
1	27-A	217	ARG
1	27-A	278	GLY
1	27-A	302	GLY
1	28-A	3	PHE
1	28-A	63	ASN
1	28-A	93	THR
1	28-A	156	CYS
1	28-A	227	LEU
1	28-A	274	ASN
1	28-A	299	GLN
1	28-A	304	THR
1	1-A	49	MET
1	2-A	23	GLY
1	2-A	33	ASP
1	2-A	64	HIS
1	2-A	100	LYS
1	2-A	299	GLN
1	2-A	304	THR
1	2-A	305	PHE
1	3-A	244	GLN
1	3-A	299	GLN
1	3-A	304	THR
1	3-A	305	PHE
1	4-A	64	HIS
1	4-A	73	VAL
1	4-A	142	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	4-A	153	ASP
1	4-A	280	THR
1	4-A	302	GLY
1	5-A	49	MET
1	5-A	63	ASN
1	5-A	277	ASN
1	6-A	49	MET
1	6-A	155	ASP
1	6-A	279	ARG
1	7-A	45	THR
1	7-A	76	ARG
1	7-A	156	CYS
1	7-A	223	PHE
1	7-A	277	ASN
1	7-A	301	SER
1	8-A	72	ASN
1	8-A	75	LEU
1	8-A	301	SER
1	8-A	302	GLY
1	9-A	71	GLY
1	9-A	73	VAL
1	9-A	235	MET
1	9-A	236	LYS
1	10-A	71	GLY
1	10-A	224	THR
1	10-A	262	LEU
1	10-A	275	GLY
1	11-A	299	GLN
1	12-A	33	ASP
1	12-A	89	LEU
1	13-A	35	VAL
1	13-A	298	ARG
1	14-A	63	ASN
1	14-A	71	GLY
1	14-A	74	GLN
1	14-A	275	GLY
1	14-A	279	ARG
1	14-A	305	PHE
1	15-A	223	PHE
1	15-A	237	TYR
1	16-A	44	CYS
1	16-A	197	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	16-A	221	ASN
1	17-A	72	ASN
1	17-A	119	ASN
1	17-A	224	THR
1	17-A	276	MET
1	17-A	278	GLY
1	17-A	279	ARG
1	18-A	63	ASN
1	18-A	245	ASP
1	18-A	274	ASN
1	19-A	224	THR
1	20-A	154	TYR
1	20-A	278	GLY
1	20-A	279	ARG
1	20-A	303	VAL
1	21-A	41	HIS
1	21-A	301	SER
1	22-A	276	MET
1	23-A	48	ASP
1	23-A	100	LYS
1	23-A	154	TYR
1	23-A	301	SER
1	23-A	304	THR
1	24-A	71	GLY
1	24-A	72	ASN
1	24-A	76	ARG
1	24-A	273	GLN
1	24-A	278	GLY
1	25-A	100	LYS
1	26-A	274	ASN
1	26-A	278	GLY
1	27-A	156	CYS
1	27-A	236	LYS
1	28-A	72	ASN
1	28-A	155	ASP
1	28-A	271	LEU
1	28-A	278	GLY
1	28-A	282	LEU
1	1-A	70	ALA
1	1-A	280	THR
1	1-A	298	ARG
1	2-A	66	PHE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	2-A	217	ARG
1	2-A	223	PHE
1	2-A	225	THR
1	2-A	300	CYS
1	3-A	25	THR
1	3-A	44	CYS
1	3-A	142	ASN
1	3-A	153	ASP
1	3-A	154	TYR
1	4-A	63	ASN
1	5-A	23	GLY
1	5-A	47	GLU
1	5-A	48	ASP
1	6-A	33	ASP
1	6-A	46	SER
1	6-A	142	ASN
1	7-A	22	CYS
1	7-A	71	GLY
1	9-A	155	ASP
1	9-A	193	ALA
1	9-A	224	THR
1	9-A	255	ALA
1	10-A	24	THR
1	10-A	155	ASP
1	10-A	276	MET
1	11-A	49	MET
1	11-A	90	LYS
1	11-A	279	ARG
1	12-A	75	LEU
1	12-A	100	LYS
1	12-A	153	ASP
1	12-A	300	CYS
1	14-A	90	LYS
1	14-A	98	THR
1	15-A	97	LYS
1	15-A	156	CYS
1	15-A	224	THR
1	16-A	46	SER
1	16-A	71	GLY
1	16-A	277	ASN
1	17-A	33	ASP
1	17-A	64	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	18-A	119	ASN
1	19-A	301	SER
1	20-A	89	LEU
1	22-A	63	ASN
1	24-A	33	ASP
1	25-A	24	THR
1	25-A	272	LEU
1	26-A	304	THR
1	27-A	119	ASN
1	27-A	270	GLU
1	27-A	279	ARG
1	28-A	224	THR
1	28-A	273	GLN
1	1-A	46	SER
1	2-A	41	HIS
1	4-A	33	ASP
1	4-A	45	THR
1	4-A	78	ILE
1	5-A	33	ASP
1	6-A	51	ASN
1	6-A	224	THR
1	7-A	23	GLY
1	7-A	33	ASP
1	7-A	222	ARG
1	7-A	279	ARG
1	8-A	154	TYR
1	8-A	193	ALA
1	9-A	153	ASP
1	9-A	225	THR
1	9-A	273	GLN
1	9-A	299	GLN
1	10-A	33	ASP
1	10-A	63	ASN
1	10-A	154	TYR
1	10-A	274	ASN
1	11-A	63	ASN
1	11-A	168	PRO
1	13-A	98	THR
1	14-A	304	THR
1	15-A	23	GLY
1	15-A	72	ASN
1	15-A	276	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	16-A	222	ARG
1	16-A	303	VAL
1	17-A	155	ASP
1	17-A	305	PHE
1	18-A	278	GLY
1	19-A	89	LEU
1	20-A	225	THR
1	21-A	278	GLY
1	21-A	299	GLN
1	22-A	47	GLU
1	23-A	221	ASN
1	23-A	277	ASN
1	26-A	120	GLY
1	26-A	215	GLY
1	26-A	232	LEU
1	28-A	47	GLU
1	1-A	24	THR
1	1-A	64	HIS
1	1-A	65	ASN
1	1-A	224	THR
1	2-A	152	ILE
1	3-A	193	ALA
1	3-A	303	VAL
1	5-A	280	THR
1	6-A	280	THR
1	7-A	193	ALA
1	7-A	225	THR
1	7-A	281	ILE
1	8-A	278	GLY
1	11-A	44	CYS
1	11-A	47	GLU
1	12-A	71	GLY
1	14-A	221	ASN
1	14-A	301	SER
1	14-A	302	GLY
1	15-A	228	ASN
1	20-A	299	GLN
1	22-A	75	LEU
1	22-A	274	ASN
1	23-A	195	GLY
1	23-A	222	ARG
1	23-A	274	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	24-A	63	ASN
1	24-A	156	CYS
1	25-A	46	SER
1	25-A	119	ASN
1	25-A	303	VAL
1	27-A	225	THR
1	5-A	269	LYS
1	6-A	99	PRO
1	7-A	152	ILE
1	8-A	274	ASN
1	10-A	278	GLY
1	11-A	154	TYR
1	12-A	276	MET
1	16-A	79	GLY
1	17-A	49	MET
1	23-A	228	ASN
1	27-A	224	THR
1	1-A	195	GLY
1	18-A	99	PRO
1	18-A	302	GLY
1	10-A	261	VAL
1	12-A	275	GLY
1	12-A	302	GLY
1	14-A	73	VAL
1	28-A	96	PRO
1	2-A	233	VAL
1	12-A	35	VAL
1	20-A	59	ILE
1	8-A	303	VAL
1	18-A	71	GLY
1	21-A	23	GLY
1	22-A	78	ILE
1	25-A	15	GLY
1	25-A	168	PRO
1	26-A	297	VAL
1	27-A	303	VAL

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	1-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	2-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	3-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	4-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	5-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	6-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	7-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	8-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	9-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	10-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	11-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	12-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	13-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	14-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	15-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	16-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	17-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	18-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	19-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	20-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	21-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	22-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	23-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	24-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	25-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	26-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	27-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
1	28-A	263/263 (100%)	205 (78%)	58 (22%)	1	0
All	All	7364/7364 (100%)	5740 (78%)	1624 (22%)	1	0

All (1624) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	1	SER
1	1-A	17	MET
1	1-A	19	GLN
1	1-A	24	THR
1	1-A	25	THR
1	1-A	43	ILE
1	1-A	47	GLU
1	1-A	49	MET
1	1-A	51	ASN
1	1-A	55	GLU
1	1-A	56	ASP
1	1-A	58	LEU
1	1-A	63	ASN
1	1-A	67	LEU
1	1-A	72	ASN
1	1-A	73	VAL
1	1-A	74	GLN
1	1-A	78	ILE
1	1-A	81	SER
1	1-A	86	VAL
1	1-A	88	LYS
1	1-A	97	LYS
1	1-A	100	LYS
1	1-A	102	LYS
1	1-A	136	ILE
1	1-A	142	ASN
1	1-A	152	ILE
1	1-A	154	TYR
1	1-A	155	ASP
1	1-A	156	CYS
1	1-A	165	MET
1	1-A	166	GLU
1	1-A	167	LEU
1	1-A	171	VAL
1	1-A	177	LEU
1	1-A	186	VAL
1	1-A	190	THR
1	1-A	196	THR
1	1-A	217	ARG
1	1-A	222	ARG
1	1-A	223	PHE
1	1-A	226	THR
1	1-A	227	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	229	ASP
1	1-A	232	LEU
1	1-A	235	MET
1	1-A	240	GLU
1	1-A	242	LEU
1	1-A	245	ASP
1	1-A	262	LEU
1	1-A	269	LYS
1	1-A	273	GLN
1	1-A	279	ARG
1	1-A	284	SER
1	1-A	288	GLU
1	1-A	298	ARG
1	1-A	303	VAL
1	1-A	306	GLN
1	2-A	1	SER
1	2-A	17	MET
1	2-A	19	GLN
1	2-A	24	THR
1	2-A	25	THR
1	2-A	43	ILE
1	2-A	47	GLU
1	2-A	49	MET
1	2-A	51	ASN
1	2-A	55	GLU
1	2-A	56	ASP
1	2-A	58	LEU
1	2-A	63	ASN
1	2-A	67	LEU
1	2-A	72	ASN
1	2-A	73	VAL
1	2-A	74	GLN
1	2-A	78	ILE
1	2-A	81	SER
1	2-A	86	VAL
1	2-A	88	LYS
1	2-A	97	LYS
1	2-A	100	LYS
1	2-A	102	LYS
1	2-A	136	ILE
1	2-A	142	ASN
1	2-A	152	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	2-A	154	TYR
1	2-A	155	ASP
1	2-A	156	CYS
1	2-A	165	MET
1	2-A	166	GLU
1	2-A	167	LEU
1	2-A	171	VAL
1	2-A	177	LEU
1	2-A	186	VAL
1	2-A	190	THR
1	2-A	196	THR
1	2-A	217	ARG
1	2-A	222	ARG
1	2-A	223	PHE
1	2-A	226	THR
1	2-A	227	LEU
1	2-A	229	ASP
1	2-A	232	LEU
1	2-A	235	MET
1	2-A	240	GLU
1	2-A	242	LEU
1	2-A	245	ASP
1	2-A	262	LEU
1	2-A	269	LYS
1	2-A	273	GLN
1	2-A	279	ARG
1	2-A	284	SER
1	2-A	288	GLU
1	2-A	298	ARG
1	2-A	303	VAL
1	2-A	306	GLN
1	3-A	1	SER
1	3-A	17	MET
1	3-A	19	GLN
1	3-A	24	THR
1	3-A	25	THR
1	3-A	43	ILE
1	3-A	47	GLU
1	3-A	49	MET
1	3-A	51	ASN
1	3-A	55	GLU
1	3-A	56	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	3-A	58	LEU
1	3-A	63	ASN
1	3-A	67	LEU
1	3-A	72	ASN
1	3-A	73	VAL
1	3-A	74	GLN
1	3-A	78	ILE
1	3-A	81	SER
1	3-A	86	VAL
1	3-A	88	LYS
1	3-A	97	LYS
1	3-A	100	LYS
1	3-A	102	LYS
1	3-A	136	ILE
1	3-A	142	ASN
1	3-A	152	ILE
1	3-A	154	TYR
1	3-A	155	ASP
1	3-A	156	CYS
1	3-A	165	MET
1	3-A	166	GLU
1	3-A	167	LEU
1	3-A	171	VAL
1	3-A	177	LEU
1	3-A	186	VAL
1	3-A	190	THR
1	3-A	196	THR
1	3-A	217	ARG
1	3-A	222	ARG
1	3-A	223	PHE
1	3-A	226	THR
1	3-A	227	LEU
1	3-A	229	ASP
1	3-A	232	LEU
1	3-A	235	MET
1	3-A	240	GLU
1	3-A	242	LEU
1	3-A	245	ASP
1	3-A	262	LEU
1	3-A	269	LYS
1	3-A	273	GLN
1	3-A	279	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	3-A	284	SER
1	3-A	288	GLU
1	3-A	298	ARG
1	3-A	303	VAL
1	3-A	306	GLN
1	4-A	1	SER
1	4-A	17	MET
1	4-A	19	GLN
1	4-A	24	THR
1	4-A	25	THR
1	4-A	43	ILE
1	4-A	47	GLU
1	4-A	49	MET
1	4-A	51	ASN
1	4-A	55	GLU
1	4-A	56	ASP
1	4-A	58	LEU
1	4-A	63	ASN
1	4-A	67	LEU
1	4-A	72	ASN
1	4-A	73	VAL
1	4-A	74	GLN
1	4-A	78	ILE
1	4-A	81	SER
1	4-A	86	VAL
1	4-A	88	LYS
1	4-A	97	LYS
1	4-A	100	LYS
1	4-A	102	LYS
1	4-A	136	ILE
1	4-A	142	ASN
1	4-A	152	ILE
1	4-A	154	TYR
1	4-A	155	ASP
1	4-A	156	CYS
1	4-A	165	MET
1	4-A	166	GLU
1	4-A	167	LEU
1	4-A	171	VAL
1	4-A	177	LEU
1	4-A	186	VAL
1	4-A	190	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	4-A	196	THR
1	4-A	217	ARG
1	4-A	222	ARG
1	4-A	223	PHE
1	4-A	226	THR
1	4-A	227	LEU
1	4-A	229	ASP
1	4-A	232	LEU
1	4-A	235	MET
1	4-A	240	GLU
1	4-A	242	LEU
1	4-A	245	ASP
1	4-A	262	LEU
1	4-A	269	LYS
1	4-A	273	GLN
1	4-A	279	ARG
1	4-A	284	SER
1	4-A	288	GLU
1	4-A	298	ARG
1	4-A	303	VAL
1	4-A	306	GLN
1	5-A	1	SER
1	5-A	17	MET
1	5-A	19	GLN
1	5-A	24	THR
1	5-A	25	THR
1	5-A	43	ILE
1	5-A	47	GLU
1	5-A	49	MET
1	5-A	51	ASN
1	5-A	55	GLU
1	5-A	56	ASP
1	5-A	58	LEU
1	5-A	63	ASN
1	5-A	67	LEU
1	5-A	72	ASN
1	5-A	73	VAL
1	5-A	74	GLN
1	5-A	78	ILE
1	5-A	81	SER
1	5-A	86	VAL
1	5-A	88	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	5-A	97	LYS
1	5-A	100	LYS
1	5-A	102	LYS
1	5-A	136	ILE
1	5-A	142	ASN
1	5-A	152	ILE
1	5-A	154	TYR
1	5-A	155	ASP
1	5-A	156	CYS
1	5-A	165	MET
1	5-A	166	GLU
1	5-A	167	LEU
1	5-A	171	VAL
1	5-A	177	LEU
1	5-A	186	VAL
1	5-A	190	THR
1	5-A	196	THR
1	5-A	217	ARG
1	5-A	222	ARG
1	5-A	223	PHE
1	5-A	226	THR
1	5-A	227	LEU
1	5-A	229	ASP
1	5-A	232	LEU
1	5-A	235	MET
1	5-A	240	GLU
1	5-A	242	LEU
1	5-A	245	ASP
1	5-A	262	LEU
1	5-A	269	LYS
1	5-A	273	GLN
1	5-A	279	ARG
1	5-A	284	SER
1	5-A	288	GLU
1	5-A	298	ARG
1	5-A	303	VAL
1	5-A	306	GLN
1	6-A	1	SER
1	6-A	17	MET
1	6-A	19	GLN
1	6-A	24	THR
1	6-A	25	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	6-A	43	ILE
1	6-A	47	GLU
1	6-A	49	MET
1	6-A	51	ASN
1	6-A	55	GLU
1	6-A	56	ASP
1	6-A	58	LEU
1	6-A	63	ASN
1	6-A	67	LEU
1	6-A	72	ASN
1	6-A	73	VAL
1	6-A	74	GLN
1	6-A	78	ILE
1	6-A	81	SER
1	6-A	86	VAL
1	6-A	88	LYS
1	6-A	97	LYS
1	6-A	100	LYS
1	6-A	102	LYS
1	6-A	136	ILE
1	6-A	142	ASN
1	6-A	152	ILE
1	6-A	154	TYR
1	6-A	155	ASP
1	6-A	156	CYS
1	6-A	165	MET
1	6-A	166	GLU
1	6-A	167	LEU
1	6-A	171	VAL
1	6-A	177	LEU
1	6-A	186	VAL
1	6-A	190	THR
1	6-A	196	THR
1	6-A	217	ARG
1	6-A	222	ARG
1	6-A	223	PHE
1	6-A	226	THR
1	6-A	227	LEU
1	6-A	229	ASP
1	6-A	232	LEU
1	6-A	235	MET
1	6-A	240	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	6-A	242	LEU
1	6-A	245	ASP
1	6-A	262	LEU
1	6-A	269	LYS
1	6-A	273	GLN
1	6-A	279	ARG
1	6-A	284	SER
1	6-A	288	GLU
1	6-A	298	ARG
1	6-A	303	VAL
1	6-A	306	GLN
1	7-A	1	SER
1	7-A	17	MET
1	7-A	19	GLN
1	7-A	24	THR
1	7-A	25	THR
1	7-A	43	ILE
1	7-A	47	GLU
1	7-A	49	MET
1	7-A	51	ASN
1	7-A	55	GLU
1	7-A	56	ASP
1	7-A	58	LEU
1	7-A	63	ASN
1	7-A	67	LEU
1	7-A	72	ASN
1	7-A	73	VAL
1	7-A	74	GLN
1	7-A	78	ILE
1	7-A	81	SER
1	7-A	86	VAL
1	7-A	88	LYS
1	7-A	97	LYS
1	7-A	100	LYS
1	7-A	102	LYS
1	7-A	136	ILE
1	7-A	142	ASN
1	7-A	152	ILE
1	7-A	154	TYR
1	7-A	155	ASP
1	7-A	156	CYS
1	7-A	165	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	7-A	166	GLU
1	7-A	167	LEU
1	7-A	171	VAL
1	7-A	177	LEU
1	7-A	186	VAL
1	7-A	190	THR
1	7-A	196	THR
1	7-A	217	ARG
1	7-A	222	ARG
1	7-A	223	PHE
1	7-A	226	THR
1	7-A	227	LEU
1	7-A	229	ASP
1	7-A	232	LEU
1	7-A	235	MET
1	7-A	240	GLU
1	7-A	242	LEU
1	7-A	245	ASP
1	7-A	262	LEU
1	7-A	269	LYS
1	7-A	273	GLN
1	7-A	279	ARG
1	7-A	284	SER
1	7-A	288	GLU
1	7-A	298	ARG
1	7-A	303	VAL
1	7-A	306	GLN
1	8-A	1	SER
1	8-A	17	MET
1	8-A	19	GLN
1	8-A	24	THR
1	8-A	25	THR
1	8-A	43	ILE
1	8-A	47	GLU
1	8-A	49	MET
1	8-A	51	ASN
1	8-A	55	GLU
1	8-A	56	ASP
1	8-A	58	LEU
1	8-A	63	ASN
1	8-A	67	LEU
1	8-A	72	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	8-A	73	VAL
1	8-A	74	GLN
1	8-A	78	ILE
1	8-A	81	SER
1	8-A	86	VAL
1	8-A	88	LYS
1	8-A	97	LYS
1	8-A	100	LYS
1	8-A	102	LYS
1	8-A	136	ILE
1	8-A	142	ASN
1	8-A	152	ILE
1	8-A	154	TYR
1	8-A	155	ASP
1	8-A	156	CYS
1	8-A	165	MET
1	8-A	166	GLU
1	8-A	167	LEU
1	8-A	171	VAL
1	8-A	177	LEU
1	8-A	186	VAL
1	8-A	190	THR
1	8-A	196	THR
1	8-A	217	ARG
1	8-A	222	ARG
1	8-A	223	PHE
1	8-A	226	THR
1	8-A	227	LEU
1	8-A	229	ASP
1	8-A	232	LEU
1	8-A	235	MET
1	8-A	240	GLU
1	8-A	242	LEU
1	8-A	245	ASP
1	8-A	262	LEU
1	8-A	269	LYS
1	8-A	273	GLN
1	8-A	279	ARG
1	8-A	284	SER
1	8-A	288	GLU
1	8-A	298	ARG
1	8-A	303	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	8-A	306	GLN
1	9-A	1	SER
1	9-A	17	MET
1	9-A	19	GLN
1	9-A	24	THR
1	9-A	25	THR
1	9-A	43	ILE
1	9-A	47	GLU
1	9-A	49	MET
1	9-A	51	ASN
1	9-A	55	GLU
1	9-A	56	ASP
1	9-A	58	LEU
1	9-A	63	ASN
1	9-A	67	LEU
1	9-A	72	ASN
1	9-A	73	VAL
1	9-A	74	GLN
1	9-A	78	ILE
1	9-A	81	SER
1	9-A	86	VAL
1	9-A	88	LYS
1	9-A	97	LYS
1	9-A	100	LYS
1	9-A	102	LYS
1	9-A	136	ILE
1	9-A	142	ASN
1	9-A	152	ILE
1	9-A	154	TYR
1	9-A	155	ASP
1	9-A	156	CYS
1	9-A	165	MET
1	9-A	166	GLU
1	9-A	167	LEU
1	9-A	171	VAL
1	9-A	177	LEU
1	9-A	186	VAL
1	9-A	190	THR
1	9-A	196	THR
1	9-A	217	ARG
1	9-A	222	ARG
1	9-A	223	PHE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	9-A	226	THR
1	9-A	227	LEU
1	9-A	229	ASP
1	9-A	232	LEU
1	9-A	235	MET
1	9-A	240	GLU
1	9-A	242	LEU
1	9-A	245	ASP
1	9-A	262	LEU
1	9-A	269	LYS
1	9-A	273	GLN
1	9-A	279	ARG
1	9-A	284	SER
1	9-A	288	GLU
1	9-A	298	ARG
1	9-A	303	VAL
1	9-A	306	GLN
1	10-A	1	SER
1	10-A	17	MET
1	10-A	19	GLN
1	10-A	24	THR
1	10-A	25	THR
1	10-A	43	ILE
1	10-A	47	GLU
1	10-A	49	MET
1	10-A	51	ASN
1	10-A	55	GLU
1	10-A	56	ASP
1	10-A	58	LEU
1	10-A	63	ASN
1	10-A	67	LEU
1	10-A	72	ASN
1	10-A	73	VAL
1	10-A	74	GLN
1	10-A	78	ILE
1	10-A	81	SER
1	10-A	86	VAL
1	10-A	88	LYS
1	10-A	97	LYS
1	10-A	100	LYS
1	10-A	102	LYS
1	10-A	136	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	10-A	142	ASN
1	10-A	152	ILE
1	10-A	154	TYR
1	10-A	155	ASP
1	10-A	156	CYS
1	10-A	165	MET
1	10-A	166	GLU
1	10-A	167	LEU
1	10-A	171	VAL
1	10-A	177	LEU
1	10-A	186	VAL
1	10-A	190	THR
1	10-A	196	THR
1	10-A	217	ARG
1	10-A	222	ARG
1	10-A	223	PHE
1	10-A	226	THR
1	10-A	227	LEU
1	10-A	229	ASP
1	10-A	232	LEU
1	10-A	235	MET
1	10-A	240	GLU
1	10-A	242	LEU
1	10-A	245	ASP
1	10-A	262	LEU
1	10-A	269	LYS
1	10-A	273	GLN
1	10-A	279	ARG
1	10-A	284	SER
1	10-A	288	GLU
1	10-A	298	ARG
1	10-A	303	VAL
1	10-A	306	GLN
1	11-A	1	SER
1	11-A	17	MET
1	11-A	19	GLN
1	11-A	24	THR
1	11-A	25	THR
1	11-A	43	ILE
1	11-A	47	GLU
1	11-A	49	MET
1	11-A	51	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	11-A	55	GLU
1	11-A	56	ASP
1	11-A	58	LEU
1	11-A	63	ASN
1	11-A	67	LEU
1	11-A	72	ASN
1	11-A	73	VAL
1	11-A	74	GLN
1	11-A	78	ILE
1	11-A	81	SER
1	11-A	86	VAL
1	11-A	88	LYS
1	11-A	97	LYS
1	11-A	100	LYS
1	11-A	102	LYS
1	11-A	136	ILE
1	11-A	142	ASN
1	11-A	152	ILE
1	11-A	154	TYR
1	11-A	155	ASP
1	11-A	156	CYS
1	11-A	165	MET
1	11-A	166	GLU
1	11-A	167	LEU
1	11-A	171	VAL
1	11-A	177	LEU
1	11-A	186	VAL
1	11-A	190	THR
1	11-A	196	THR
1	11-A	217	ARG
1	11-A	222	ARG
1	11-A	223	PHE
1	11-A	226	THR
1	11-A	227	LEU
1	11-A	229	ASP
1	11-A	232	LEU
1	11-A	235	MET
1	11-A	240	GLU
1	11-A	242	LEU
1	11-A	245	ASP
1	11-A	262	LEU
1	11-A	269	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	11-A	273	GLN
1	11-A	279	ARG
1	11-A	284	SER
1	11-A	288	GLU
1	11-A	298	ARG
1	11-A	303	VAL
1	11-A	306	GLN
1	12-A	1	SER
1	12-A	17	MET
1	12-A	19	GLN
1	12-A	24	THR
1	12-A	25	THR
1	12-A	43	ILE
1	12-A	47	GLU
1	12-A	49	MET
1	12-A	51	ASN
1	12-A	55	GLU
1	12-A	56	ASP
1	12-A	58	LEU
1	12-A	63	ASN
1	12-A	67	LEU
1	12-A	72	ASN
1	12-A	73	VAL
1	12-A	74	GLN
1	12-A	78	ILE
1	12-A	81	SER
1	12-A	86	VAL
1	12-A	88	LYS
1	12-A	97	LYS
1	12-A	100	LYS
1	12-A	102	LYS
1	12-A	136	ILE
1	12-A	142	ASN
1	12-A	152	ILE
1	12-A	154	TYR
1	12-A	155	ASP
1	12-A	156	CYS
1	12-A	165	MET
1	12-A	166	GLU
1	12-A	167	LEU
1	12-A	171	VAL
1	12-A	177	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	12-A	186	VAL
1	12-A	190	THR
1	12-A	196	THR
1	12-A	217	ARG
1	12-A	222	ARG
1	12-A	223	PHE
1	12-A	226	THR
1	12-A	227	LEU
1	12-A	229	ASP
1	12-A	232	LEU
1	12-A	235	MET
1	12-A	240	GLU
1	12-A	242	LEU
1	12-A	245	ASP
1	12-A	262	LEU
1	12-A	269	LYS
1	12-A	273	GLN
1	12-A	279	ARG
1	12-A	284	SER
1	12-A	288	GLU
1	12-A	298	ARG
1	12-A	303	VAL
1	12-A	306	GLN
1	13-A	1	SER
1	13-A	17	MET
1	13-A	19	GLN
1	13-A	24	THR
1	13-A	25	THR
1	13-A	43	ILE
1	13-A	47	GLU
1	13-A	49	MET
1	13-A	51	ASN
1	13-A	55	GLU
1	13-A	56	ASP
1	13-A	58	LEU
1	13-A	63	ASN
1	13-A	67	LEU
1	13-A	72	ASN
1	13-A	73	VAL
1	13-A	74	GLN
1	13-A	78	ILE
1	13-A	81	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	13-A	86	VAL
1	13-A	88	LYS
1	13-A	97	LYS
1	13-A	100	LYS
1	13-A	102	LYS
1	13-A	136	ILE
1	13-A	142	ASN
1	13-A	152	ILE
1	13-A	154	TYR
1	13-A	155	ASP
1	13-A	156	CYS
1	13-A	165	MET
1	13-A	166	GLU
1	13-A	167	LEU
1	13-A	171	VAL
1	13-A	177	LEU
1	13-A	186	VAL
1	13-A	190	THR
1	13-A	196	THR
1	13-A	217	ARG
1	13-A	222	ARG
1	13-A	223	PHE
1	13-A	226	THR
1	13-A	227	LEU
1	13-A	229	ASP
1	13-A	232	LEU
1	13-A	235	MET
1	13-A	240	GLU
1	13-A	242	LEU
1	13-A	245	ASP
1	13-A	262	LEU
1	13-A	269	LYS
1	13-A	273	GLN
1	13-A	279	ARG
1	13-A	284	SER
1	13-A	288	GLU
1	13-A	298	ARG
1	13-A	303	VAL
1	13-A	306	GLN
1	14-A	1	SER
1	14-A	17	MET
1	14-A	19	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	14-A	24	THR
1	14-A	25	THR
1	14-A	43	ILE
1	14-A	47	GLU
1	14-A	49	MET
1	14-A	51	ASN
1	14-A	55	GLU
1	14-A	56	ASP
1	14-A	58	LEU
1	14-A	63	ASN
1	14-A	67	LEU
1	14-A	72	ASN
1	14-A	73	VAL
1	14-A	74	GLN
1	14-A	78	ILE
1	14-A	81	SER
1	14-A	86	VAL
1	14-A	88	LYS
1	14-A	97	LYS
1	14-A	100	LYS
1	14-A	102	LYS
1	14-A	136	ILE
1	14-A	142	ASN
1	14-A	152	ILE
1	14-A	154	TYR
1	14-A	155	ASP
1	14-A	156	CYS
1	14-A	165	MET
1	14-A	166	GLU
1	14-A	167	LEU
1	14-A	171	VAL
1	14-A	177	LEU
1	14-A	186	VAL
1	14-A	190	THR
1	14-A	196	THR
1	14-A	217	ARG
1	14-A	222	ARG
1	14-A	223	PHE
1	14-A	226	THR
1	14-A	227	LEU
1	14-A	229	ASP
1	14-A	232	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	14-A	235	MET
1	14-A	240	GLU
1	14-A	242	LEU
1	14-A	245	ASP
1	14-A	262	LEU
1	14-A	269	LYS
1	14-A	273	GLN
1	14-A	279	ARG
1	14-A	284	SER
1	14-A	288	GLU
1	14-A	298	ARG
1	14-A	303	VAL
1	14-A	306	GLN
1	15-A	1	SER
1	15-A	17	MET
1	15-A	19	GLN
1	15-A	24	THR
1	15-A	25	THR
1	15-A	43	ILE
1	15-A	47	GLU
1	15-A	49	MET
1	15-A	51	ASN
1	15-A	55	GLU
1	15-A	56	ASP
1	15-A	58	LEU
1	15-A	63	ASN
1	15-A	67	LEU
1	15-A	72	ASN
1	15-A	73	VAL
1	15-A	74	GLN
1	15-A	78	ILE
1	15-A	81	SER
1	15-A	86	VAL
1	15-A	88	LYS
1	15-A	97	LYS
1	15-A	100	LYS
1	15-A	102	LYS
1	15-A	136	ILE
1	15-A	142	ASN
1	15-A	152	ILE
1	15-A	154	TYR
1	15-A	155	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	15-A	156	CYS
1	15-A	165	MET
1	15-A	166	GLU
1	15-A	167	LEU
1	15-A	171	VAL
1	15-A	177	LEU
1	15-A	186	VAL
1	15-A	190	THR
1	15-A	196	THR
1	15-A	217	ARG
1	15-A	222	ARG
1	15-A	223	PHE
1	15-A	226	THR
1	15-A	227	LEU
1	15-A	229	ASP
1	15-A	232	LEU
1	15-A	235	MET
1	15-A	240	GLU
1	15-A	242	LEU
1	15-A	245	ASP
1	15-A	262	LEU
1	15-A	269	LYS
1	15-A	273	GLN
1	15-A	279	ARG
1	15-A	284	SER
1	15-A	288	GLU
1	15-A	298	ARG
1	15-A	303	VAL
1	15-A	306	GLN
1	16-A	1	SER
1	16-A	17	MET
1	16-A	19	GLN
1	16-A	24	THR
1	16-A	25	THR
1	16-A	43	ILE
1	16-A	47	GLU
1	16-A	49	MET
1	16-A	51	ASN
1	16-A	55	GLU
1	16-A	56	ASP
1	16-A	58	LEU
1	16-A	63	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	16-A	67	LEU
1	16-A	72	ASN
1	16-A	73	VAL
1	16-A	74	GLN
1	16-A	78	ILE
1	16-A	81	SER
1	16-A	86	VAL
1	16-A	88	LYS
1	16-A	97	LYS
1	16-A	100	LYS
1	16-A	102	LYS
1	16-A	136	ILE
1	16-A	142	ASN
1	16-A	152	ILE
1	16-A	154	TYR
1	16-A	155	ASP
1	16-A	156	CYS
1	16-A	165	MET
1	16-A	166	GLU
1	16-A	167	LEU
1	16-A	171	VAL
1	16-A	177	LEU
1	16-A	186	VAL
1	16-A	190	THR
1	16-A	196	THR
1	16-A	217	ARG
1	16-A	222	ARG
1	16-A	223	PHE
1	16-A	226	THR
1	16-A	227	LEU
1	16-A	229	ASP
1	16-A	232	LEU
1	16-A	235	MET
1	16-A	240	GLU
1	16-A	242	LEU
1	16-A	245	ASP
1	16-A	262	LEU
1	16-A	269	LYS
1	16-A	273	GLN
1	16-A	279	ARG
1	16-A	284	SER
1	16-A	288	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	16-A	298	ARG
1	16-A	303	VAL
1	16-A	306	GLN
1	17-A	1	SER
1	17-A	17	MET
1	17-A	19	GLN
1	17-A	24	THR
1	17-A	25	THR
1	17-A	43	ILE
1	17-A	47	GLU
1	17-A	49	MET
1	17-A	51	ASN
1	17-A	55	GLU
1	17-A	56	ASP
1	17-A	58	LEU
1	17-A	63	ASN
1	17-A	67	LEU
1	17-A	72	ASN
1	17-A	73	VAL
1	17-A	74	GLN
1	17-A	78	ILE
1	17-A	81	SER
1	17-A	86	VAL
1	17-A	88	LYS
1	17-A	97	LYS
1	17-A	100	LYS
1	17-A	102	LYS
1	17-A	136	ILE
1	17-A	142	ASN
1	17-A	152	ILE
1	17-A	154	TYR
1	17-A	155	ASP
1	17-A	156	CYS
1	17-A	165	MET
1	17-A	166	GLU
1	17-A	167	LEU
1	17-A	171	VAL
1	17-A	177	LEU
1	17-A	186	VAL
1	17-A	190	THR
1	17-A	196	THR
1	17-A	217	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	17-A	222	ARG
1	17-A	223	PHE
1	17-A	226	THR
1	17-A	227	LEU
1	17-A	229	ASP
1	17-A	232	LEU
1	17-A	235	MET
1	17-A	240	GLU
1	17-A	242	LEU
1	17-A	245	ASP
1	17-A	262	LEU
1	17-A	269	LYS
1	17-A	273	GLN
1	17-A	279	ARG
1	17-A	284	SER
1	17-A	288	GLU
1	17-A	298	ARG
1	17-A	303	VAL
1	17-A	306	GLN
1	18-A	1	SER
1	18-A	17	MET
1	18-A	19	GLN
1	18-A	24	THR
1	18-A	25	THR
1	18-A	43	ILE
1	18-A	47	GLU
1	18-A	49	MET
1	18-A	51	ASN
1	18-A	55	GLU
1	18-A	56	ASP
1	18-A	58	LEU
1	18-A	63	ASN
1	18-A	67	LEU
1	18-A	72	ASN
1	18-A	73	VAL
1	18-A	74	GLN
1	18-A	78	ILE
1	18-A	81	SER
1	18-A	86	VAL
1	18-A	88	LYS
1	18-A	97	LYS
1	18-A	100	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	18-A	102	LYS
1	18-A	136	ILE
1	18-A	142	ASN
1	18-A	152	ILE
1	18-A	154	TYR
1	18-A	155	ASP
1	18-A	156	CYS
1	18-A	165	MET
1	18-A	166	GLU
1	18-A	167	LEU
1	18-A	171	VAL
1	18-A	177	LEU
1	18-A	186	VAL
1	18-A	190	THR
1	18-A	196	THR
1	18-A	217	ARG
1	18-A	222	ARG
1	18-A	223	PHE
1	18-A	226	THR
1	18-A	227	LEU
1	18-A	229	ASP
1	18-A	232	LEU
1	18-A	235	MET
1	18-A	240	GLU
1	18-A	242	LEU
1	18-A	245	ASP
1	18-A	262	LEU
1	18-A	269	LYS
1	18-A	273	GLN
1	18-A	279	ARG
1	18-A	284	SER
1	18-A	288	GLU
1	18-A	298	ARG
1	18-A	303	VAL
1	18-A	306	GLN
1	19-A	1	SER
1	19-A	17	MET
1	19-A	19	GLN
1	19-A	24	THR
1	19-A	25	THR
1	19-A	43	ILE
1	19-A	47	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	19-A	49	MET
1	19-A	51	ASN
1	19-A	55	GLU
1	19-A	56	ASP
1	19-A	58	LEU
1	19-A	63	ASN
1	19-A	67	LEU
1	19-A	72	ASN
1	19-A	73	VAL
1	19-A	74	GLN
1	19-A	78	ILE
1	19-A	81	SER
1	19-A	86	VAL
1	19-A	88	LYS
1	19-A	97	LYS
1	19-A	100	LYS
1	19-A	102	LYS
1	19-A	136	ILE
1	19-A	142	ASN
1	19-A	152	ILE
1	19-A	154	TYR
1	19-A	155	ASP
1	19-A	156	CYS
1	19-A	165	MET
1	19-A	166	GLU
1	19-A	167	LEU
1	19-A	171	VAL
1	19-A	177	LEU
1	19-A	186	VAL
1	19-A	190	THR
1	19-A	196	THR
1	19-A	217	ARG
1	19-A	222	ARG
1	19-A	223	PHE
1	19-A	226	THR
1	19-A	227	LEU
1	19-A	229	ASP
1	19-A	232	LEU
1	19-A	235	MET
1	19-A	240	GLU
1	19-A	242	LEU
1	19-A	245	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	19-A	262	LEU
1	19-A	269	LYS
1	19-A	273	GLN
1	19-A	279	ARG
1	19-A	284	SER
1	19-A	288	GLU
1	19-A	298	ARG
1	19-A	303	VAL
1	19-A	306	GLN
1	20-A	1	SER
1	20-A	17	MET
1	20-A	19	GLN
1	20-A	24	THR
1	20-A	25	THR
1	20-A	43	ILE
1	20-A	47	GLU
1	20-A	49	MET
1	20-A	51	ASN
1	20-A	55	GLU
1	20-A	56	ASP
1	20-A	58	LEU
1	20-A	63	ASN
1	20-A	67	LEU
1	20-A	72	ASN
1	20-A	73	VAL
1	20-A	74	GLN
1	20-A	78	ILE
1	20-A	81	SER
1	20-A	86	VAL
1	20-A	88	LYS
1	20-A	97	LYS
1	20-A	100	LYS
1	20-A	102	LYS
1	20-A	136	ILE
1	20-A	142	ASN
1	20-A	152	ILE
1	20-A	154	TYR
1	20-A	155	ASP
1	20-A	156	CYS
1	20-A	165	MET
1	20-A	166	GLU
1	20-A	167	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	20-A	171	VAL
1	20-A	177	LEU
1	20-A	186	VAL
1	20-A	190	THR
1	20-A	196	THR
1	20-A	217	ARG
1	20-A	222	ARG
1	20-A	223	PHE
1	20-A	226	THR
1	20-A	227	LEU
1	20-A	229	ASP
1	20-A	232	LEU
1	20-A	235	MET
1	20-A	240	GLU
1	20-A	242	LEU
1	20-A	245	ASP
1	20-A	262	LEU
1	20-A	269	LYS
1	20-A	273	GLN
1	20-A	279	ARG
1	20-A	284	SER
1	20-A	288	GLU
1	20-A	298	ARG
1	20-A	303	VAL
1	20-A	306	GLN
1	21-A	1	SER
1	21-A	17	MET
1	21-A	19	GLN
1	21-A	24	THR
1	21-A	25	THR
1	21-A	43	ILE
1	21-A	47	GLU
1	21-A	49	MET
1	21-A	51	ASN
1	21-A	55	GLU
1	21-A	56	ASP
1	21-A	58	LEU
1	21-A	63	ASN
1	21-A	67	LEU
1	21-A	72	ASN
1	21-A	73	VAL
1	21-A	74	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	21-A	78	ILE
1	21-A	81	SER
1	21-A	86	VAL
1	21-A	88	LYS
1	21-A	97	LYS
1	21-A	100	LYS
1	21-A	102	LYS
1	21-A	136	ILE
1	21-A	142	ASN
1	21-A	152	ILE
1	21-A	154	TYR
1	21-A	155	ASP
1	21-A	156	CYS
1	21-A	165	MET
1	21-A	166	GLU
1	21-A	167	LEU
1	21-A	171	VAL
1	21-A	177	LEU
1	21-A	186	VAL
1	21-A	190	THR
1	21-A	196	THR
1	21-A	217	ARG
1	21-A	222	ARG
1	21-A	223	PHE
1	21-A	226	THR
1	21-A	227	LEU
1	21-A	229	ASP
1	21-A	232	LEU
1	21-A	235	MET
1	21-A	240	GLU
1	21-A	242	LEU
1	21-A	245	ASP
1	21-A	262	LEU
1	21-A	269	LYS
1	21-A	273	GLN
1	21-A	279	ARG
1	21-A	284	SER
1	21-A	288	GLU
1	21-A	298	ARG
1	21-A	303	VAL
1	21-A	306	GLN
1	22-A	1	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	22-A	17	MET
1	22-A	19	GLN
1	22-A	24	THR
1	22-A	25	THR
1	22-A	43	ILE
1	22-A	47	GLU
1	22-A	49	MET
1	22-A	51	ASN
1	22-A	55	GLU
1	22-A	56	ASP
1	22-A	58	LEU
1	22-A	63	ASN
1	22-A	67	LEU
1	22-A	72	ASN
1	22-A	73	VAL
1	22-A	74	GLN
1	22-A	78	ILE
1	22-A	81	SER
1	22-A	86	VAL
1	22-A	88	LYS
1	22-A	97	LYS
1	22-A	100	LYS
1	22-A	102	LYS
1	22-A	136	ILE
1	22-A	142	ASN
1	22-A	152	ILE
1	22-A	154	TYR
1	22-A	155	ASP
1	22-A	156	CYS
1	22-A	165	MET
1	22-A	166	GLU
1	22-A	167	LEU
1	22-A	171	VAL
1	22-A	177	LEU
1	22-A	186	VAL
1	22-A	190	THR
1	22-A	196	THR
1	22-A	217	ARG
1	22-A	222	ARG
1	22-A	223	PHE
1	22-A	226	THR
1	22-A	227	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	22-A	229	ASP
1	22-A	232	LEU
1	22-A	235	MET
1	22-A	240	GLU
1	22-A	242	LEU
1	22-A	245	ASP
1	22-A	262	LEU
1	22-A	269	LYS
1	22-A	273	GLN
1	22-A	279	ARG
1	22-A	284	SER
1	22-A	288	GLU
1	22-A	298	ARG
1	22-A	303	VAL
1	22-A	306	GLN
1	23-A	1	SER
1	23-A	17	MET
1	23-A	19	GLN
1	23-A	24	THR
1	23-A	25	THR
1	23-A	43	ILE
1	23-A	47	GLU
1	23-A	49	MET
1	23-A	51	ASN
1	23-A	55	GLU
1	23-A	56	ASP
1	23-A	58	LEU
1	23-A	63	ASN
1	23-A	67	LEU
1	23-A	72	ASN
1	23-A	73	VAL
1	23-A	74	GLN
1	23-A	78	ILE
1	23-A	81	SER
1	23-A	86	VAL
1	23-A	88	LYS
1	23-A	97	LYS
1	23-A	100	LYS
1	23-A	102	LYS
1	23-A	136	ILE
1	23-A	142	ASN
1	23-A	152	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	23-A	154	TYR
1	23-A	155	ASP
1	23-A	156	CYS
1	23-A	165	MET
1	23-A	166	GLU
1	23-A	167	LEU
1	23-A	171	VAL
1	23-A	177	LEU
1	23-A	186	VAL
1	23-A	190	THR
1	23-A	196	THR
1	23-A	217	ARG
1	23-A	222	ARG
1	23-A	223	PHE
1	23-A	226	THR
1	23-A	227	LEU
1	23-A	229	ASP
1	23-A	232	LEU
1	23-A	235	MET
1	23-A	240	GLU
1	23-A	242	LEU
1	23-A	245	ASP
1	23-A	262	LEU
1	23-A	269	LYS
1	23-A	273	GLN
1	23-A	279	ARG
1	23-A	284	SER
1	23-A	288	GLU
1	23-A	298	ARG
1	23-A	303	VAL
1	23-A	306	GLN
1	24-A	1	SER
1	24-A	17	MET
1	24-A	19	GLN
1	24-A	24	THR
1	24-A	25	THR
1	24-A	43	ILE
1	24-A	47	GLU
1	24-A	49	MET
1	24-A	51	ASN
1	24-A	55	GLU
1	24-A	56	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	24-A	58	LEU
1	24-A	63	ASN
1	24-A	67	LEU
1	24-A	72	ASN
1	24-A	73	VAL
1	24-A	74	GLN
1	24-A	78	ILE
1	24-A	81	SER
1	24-A	86	VAL
1	24-A	88	LYS
1	24-A	97	LYS
1	24-A	100	LYS
1	24-A	102	LYS
1	24-A	136	ILE
1	24-A	142	ASN
1	24-A	152	ILE
1	24-A	154	TYR
1	24-A	155	ASP
1	24-A	156	CYS
1	24-A	165	MET
1	24-A	166	GLU
1	24-A	167	LEU
1	24-A	171	VAL
1	24-A	177	LEU
1	24-A	186	VAL
1	24-A	190	THR
1	24-A	196	THR
1	24-A	217	ARG
1	24-A	222	ARG
1	24-A	223	PHE
1	24-A	226	THR
1	24-A	227	LEU
1	24-A	229	ASP
1	24-A	232	LEU
1	24-A	235	MET
1	24-A	240	GLU
1	24-A	242	LEU
1	24-A	245	ASP
1	24-A	262	LEU
1	24-A	269	LYS
1	24-A	273	GLN
1	24-A	279	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	24-A	284	SER
1	24-A	288	GLU
1	24-A	298	ARG
1	24-A	303	VAL
1	24-A	306	GLN
1	25-A	1	SER
1	25-A	17	MET
1	25-A	19	GLN
1	25-A	24	THR
1	25-A	25	THR
1	25-A	43	ILE
1	25-A	47	GLU
1	25-A	49	MET
1	25-A	51	ASN
1	25-A	55	GLU
1	25-A	56	ASP
1	25-A	58	LEU
1	25-A	63	ASN
1	25-A	67	LEU
1	25-A	72	ASN
1	25-A	73	VAL
1	25-A	74	GLN
1	25-A	78	ILE
1	25-A	81	SER
1	25-A	86	VAL
1	25-A	88	LYS
1	25-A	97	LYS
1	25-A	100	LYS
1	25-A	102	LYS
1	25-A	136	ILE
1	25-A	142	ASN
1	25-A	152	ILE
1	25-A	154	TYR
1	25-A	155	ASP
1	25-A	156	CYS
1	25-A	165	MET
1	25-A	166	GLU
1	25-A	167	LEU
1	25-A	171	VAL
1	25-A	177	LEU
1	25-A	186	VAL
1	25-A	190	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	25-A	196	THR
1	25-A	217	ARG
1	25-A	222	ARG
1	25-A	223	PHE
1	25-A	226	THR
1	25-A	227	LEU
1	25-A	229	ASP
1	25-A	232	LEU
1	25-A	235	MET
1	25-A	240	GLU
1	25-A	242	LEU
1	25-A	245	ASP
1	25-A	262	LEU
1	25-A	269	LYS
1	25-A	273	GLN
1	25-A	279	ARG
1	25-A	284	SER
1	25-A	288	GLU
1	25-A	298	ARG
1	25-A	303	VAL
1	25-A	306	GLN
1	26-A	1	SER
1	26-A	17	MET
1	26-A	19	GLN
1	26-A	24	THR
1	26-A	25	THR
1	26-A	43	ILE
1	26-A	47	GLU
1	26-A	49	MET
1	26-A	51	ASN
1	26-A	55	GLU
1	26-A	56	ASP
1	26-A	58	LEU
1	26-A	63	ASN
1	26-A	67	LEU
1	26-A	72	ASN
1	26-A	73	VAL
1	26-A	74	GLN
1	26-A	78	ILE
1	26-A	81	SER
1	26-A	86	VAL
1	26-A	88	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	26-A	97	LYS
1	26-A	100	LYS
1	26-A	102	LYS
1	26-A	136	ILE
1	26-A	142	ASN
1	26-A	152	ILE
1	26-A	154	TYR
1	26-A	155	ASP
1	26-A	156	CYS
1	26-A	165	MET
1	26-A	166	GLU
1	26-A	167	LEU
1	26-A	171	VAL
1	26-A	177	LEU
1	26-A	186	VAL
1	26-A	190	THR
1	26-A	196	THR
1	26-A	217	ARG
1	26-A	222	ARG
1	26-A	223	PHE
1	26-A	226	THR
1	26-A	227	LEU
1	26-A	229	ASP
1	26-A	232	LEU
1	26-A	235	MET
1	26-A	240	GLU
1	26-A	242	LEU
1	26-A	245	ASP
1	26-A	262	LEU
1	26-A	269	LYS
1	26-A	273	GLN
1	26-A	279	ARG
1	26-A	284	SER
1	26-A	288	GLU
1	26-A	298	ARG
1	26-A	303	VAL
1	26-A	306	GLN
1	27-A	1	SER
1	27-A	17	MET
1	27-A	19	GLN
1	27-A	24	THR
1	27-A	25	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	27-A	43	ILE
1	27-A	47	GLU
1	27-A	49	MET
1	27-A	51	ASN
1	27-A	55	GLU
1	27-A	56	ASP
1	27-A	58	LEU
1	27-A	63	ASN
1	27-A	67	LEU
1	27-A	72	ASN
1	27-A	73	VAL
1	27-A	74	GLN
1	27-A	78	ILE
1	27-A	81	SER
1	27-A	86	VAL
1	27-A	88	LYS
1	27-A	97	LYS
1	27-A	100	LYS
1	27-A	102	LYS
1	27-A	136	ILE
1	27-A	142	ASN
1	27-A	152	ILE
1	27-A	154	TYR
1	27-A	155	ASP
1	27-A	156	CYS
1	27-A	165	MET
1	27-A	166	GLU
1	27-A	167	LEU
1	27-A	171	VAL
1	27-A	177	LEU
1	27-A	186	VAL
1	27-A	190	THR
1	27-A	196	THR
1	27-A	217	ARG
1	27-A	222	ARG
1	27-A	223	PHE
1	27-A	226	THR
1	27-A	227	LEU
1	27-A	229	ASP
1	27-A	232	LEU
1	27-A	235	MET
1	27-A	240	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	27-A	242	LEU
1	27-A	245	ASP
1	27-A	262	LEU
1	27-A	269	LYS
1	27-A	273	GLN
1	27-A	279	ARG
1	27-A	284	SER
1	27-A	288	GLU
1	27-A	298	ARG
1	27-A	303	VAL
1	27-A	306	GLN
1	28-A	1	SER
1	28-A	17	MET
1	28-A	19	GLN
1	28-A	24	THR
1	28-A	25	THR
1	28-A	43	ILE
1	28-A	47	GLU
1	28-A	49	MET
1	28-A	51	ASN
1	28-A	55	GLU
1	28-A	56	ASP
1	28-A	58	LEU
1	28-A	63	ASN
1	28-A	67	LEU
1	28-A	72	ASN
1	28-A	73	VAL
1	28-A	74	GLN
1	28-A	78	ILE
1	28-A	81	SER
1	28-A	86	VAL
1	28-A	88	LYS
1	28-A	97	LYS
1	28-A	100	LYS
1	28-A	102	LYS
1	28-A	136	ILE
1	28-A	142	ASN
1	28-A	152	ILE
1	28-A	154	TYR
1	28-A	155	ASP
1	28-A	156	CYS
1	28-A	165	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	28-A	166	GLU
1	28-A	167	LEU
1	28-A	171	VAL
1	28-A	177	LEU
1	28-A	186	VAL
1	28-A	190	THR
1	28-A	196	THR
1	28-A	217	ARG
1	28-A	222	ARG
1	28-A	223	PHE
1	28-A	226	THR
1	28-A	227	LEU
1	28-A	229	ASP
1	28-A	232	LEU
1	28-A	235	MET
1	28-A	240	GLU
1	28-A	242	LEU
1	28-A	245	ASP
1	28-A	262	LEU
1	28-A	269	LYS
1	28-A	273	GLN
1	28-A	279	ARG
1	28-A	284	SER
1	28-A	288	GLU
1	28-A	298	ARG
1	28-A	303	VAL
1	28-A	306	GLN

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (260) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	51	ASN
1	1-A	65	ASN
1	1-A	69	GLN
1	1-A	74	GLN
1	1-A	107	GLN
1	1-A	221	ASN
1	1-A	246	HIS
1	1-A	256	GLN
1	2-A	51	ASN
1	2-A	69	GLN
1	2-A	74	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	2-A	80	HIS
1	2-A	110	GLN
1	2-A	142	ASN
1	2-A	214	ASN
1	3-A	63	ASN
1	3-A	69	GLN
1	3-A	74	GLN
1	3-A	84	ASN
1	3-A	107	GLN
1	3-A	142	ASN
1	3-A	244	GLN
1	3-A	246	HIS
1	3-A	256	GLN
1	3-A	273	GLN
1	4-A	63	ASN
1	4-A	64	HIS
1	4-A	65	ASN
1	4-A	69	GLN
1	4-A	74	GLN
1	4-A	80	HIS
1	4-A	84	ASN
1	4-A	142	ASN
1	4-A	151	ASN
1	4-A	180	ASN
1	4-A	214	ASN
1	4-A	238	ASN
1	4-A	246	HIS
1	4-A	273	GLN
1	4-A	306	GLN
1	5-A	74	GLN
1	5-A	80	HIS
1	5-A	84	ASN
1	5-A	107	GLN
1	5-A	119	ASN
1	5-A	189	GLN
1	5-A	221	ASN
1	5-A	274	ASN
1	5-A	277	ASN
1	6-A	19	GLN
1	6-A	41	HIS
1	6-A	63	ASN
1	6-A	64	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	6-A	65	ASN
1	6-A	69	GLN
1	6-A	74	GLN
1	6-A	83	GLN
1	6-A	84	ASN
1	6-A	127	GLN
1	6-A	189	GLN
1	6-A	192	GLN
1	6-A	221	ASN
1	6-A	274	ASN
1	7-A	80	HIS
1	7-A	83	GLN
1	7-A	189	GLN
1	7-A	192	GLN
1	7-A	244	GLN
1	7-A	274	ASN
1	8-A	51	ASN
1	8-A	72	ASN
1	8-A	74	GLN
1	8-A	83	GLN
1	8-A	107	GLN
1	8-A	189	GLN
1	8-A	203	ASN
1	8-A	214	ASN
1	8-A	244	GLN
1	8-A	277	ASN
1	8-A	306	GLN
1	9-A	51	ASN
1	9-A	63	ASN
1	9-A	74	GLN
1	9-A	80	HIS
1	9-A	119	ASN
1	9-A	151	ASN
1	9-A	192	GLN
1	9-A	238	ASN
1	9-A	306	GLN
1	10-A	51	ASN
1	10-A	83	GLN
1	10-A	142	ASN
1	10-A	151	ASN
1	10-A	192	GLN
1	10-A	274	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	10-A	277	ASN
1	11-A	19	GLN
1	11-A	64	HIS
1	11-A	80	HIS
1	11-A	83	GLN
1	11-A	142	ASN
1	11-A	192	GLN
1	11-A	228	ASN
1	11-A	244	GLN
1	12-A	19	GLN
1	12-A	64	HIS
1	12-A	74	GLN
1	12-A	83	GLN
1	12-A	84	ASN
1	12-A	110	GLN
1	12-A	192	GLN
1	12-A	221	ASN
1	12-A	231	ASN
1	12-A	273	GLN
1	13-A	64	HIS
1	13-A	80	HIS
1	13-A	83	GLN
1	13-A	84	ASN
1	13-A	110	GLN
1	13-A	151	ASN
1	13-A	221	ASN
1	13-A	231	ASN
1	13-A	256	GLN
1	13-A	274	ASN
1	13-A	306	GLN
1	14-A	19	GLN
1	14-A	63	ASN
1	14-A	69	GLN
1	14-A	74	GLN
1	14-A	84	ASN
1	14-A	119	ASN
1	14-A	127	GLN
1	14-A	238	ASN
1	14-A	244	GLN
1	14-A	273	GLN
1	14-A	274	ASN
1	15-A	63	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	15-A	65	ASN
1	15-A	83	GLN
1	15-A	127	GLN
1	15-A	180	ASN
1	15-A	238	ASN
1	15-A	244	GLN
1	16-A	64	HIS
1	16-A	72	ASN
1	16-A	80	HIS
1	16-A	84	ASN
1	16-A	180	ASN
1	17-A	65	ASN
1	17-A	80	HIS
1	17-A	83	GLN
1	17-A	110	GLN
1	17-A	119	ASN
1	17-A	189	GLN
1	17-A	192	GLN
1	17-A	214	ASN
1	17-A	228	ASN
1	17-A	256	GLN
1	17-A	273	GLN
1	18-A	19	GLN
1	18-A	41	HIS
1	18-A	74	GLN
1	18-A	80	HIS
1	18-A	189	GLN
1	18-A	192	GLN
1	18-A	203	ASN
1	18-A	214	ASN
1	18-A	246	HIS
1	18-A	273	GLN
1	19-A	110	GLN
1	19-A	180	ASN
1	19-A	192	GLN
1	19-A	231	ASN
1	19-A	238	ASN
1	19-A	246	HIS
1	20-A	41	HIS
1	20-A	64	HIS
1	20-A	119	ASN
1	20-A	151	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	20-A	221	ASN
1	20-A	231	ASN
1	20-A	277	ASN
1	20-A	306	GLN
1	21-A	64	HIS
1	21-A	65	ASN
1	21-A	83	GLN
1	21-A	110	GLN
1	21-A	180	ASN
1	21-A	192	GLN
1	21-A	221	ASN
1	21-A	231	ASN
1	21-A	238	ASN
1	21-A	244	GLN
1	21-A	274	ASN
1	22-A	51	ASN
1	22-A	69	GLN
1	22-A	80	HIS
1	22-A	119	ASN
1	22-A	180	ASN
1	22-A	238	ASN
1	22-A	256	GLN
1	23-A	19	GLN
1	23-A	51	ASN
1	23-A	63	ASN
1	23-A	69	GLN
1	23-A	83	GLN
1	23-A	142	ASN
1	23-A	180	ASN
1	23-A	192	GLN
1	23-A	228	ASN
1	23-A	274	ASN
1	23-A	277	ASN
1	23-A	306	GLN
1	24-A	63	ASN
1	24-A	83	GLN
1	24-A	180	ASN
1	24-A	192	GLN
1	24-A	244	GLN
1	25-A	19	GLN
1	25-A	41	HIS
1	25-A	63	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	25-A	192	GLN
1	25-A	256	GLN
1	25-A	273	GLN
1	25-A	277	ASN
1	25-A	306	GLN
1	26-A	19	GLN
1	26-A	63	ASN
1	26-A	80	HIS
1	26-A	107	GLN
1	26-A	119	ASN
1	26-A	180	ASN
1	26-A	214	ASN
1	26-A	246	HIS
1	26-A	273	GLN
1	27-A	19	GLN
1	27-A	41	HIS
1	27-A	53	ASN
1	27-A	63	ASN
1	27-A	110	GLN
1	27-A	192	GLN
1	27-A	231	ASN
1	27-A	244	GLN
1	28-A	51	ASN
1	28-A	63	ASN
1	28-A	64	HIS
1	28-A	65	ASN
1	28-A	69	GLN
1	28-A	74	GLN
1	28-A	80	HIS
1	28-A	84	ASN
1	28-A	107	GLN
1	28-A	133	ASN
1	28-A	151	ASN
1	28-A	172	HIS
1	28-A	180	ASN
1	28-A	238	ASN
1	28-A	244	GLN
1	28-A	246	HIS
1	28-A	306	GLN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 28 ligands modelled in this entry, 28 are monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data ⓘ

6.1 Protein, DNA and RNA chains ⓘ

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	306/306 (100%)	2.64	191 (62%) 0 0	2, 2, 2, 2	306 (100%)
1	2-A	0/306	-	-	-	-
1	3-A	0/306	-	-	-	-
1	4-A	0/306	-	-	-	-
1	5-A	0/306	-	-	-	-
1	6-A	0/306	-	-	-	-
1	7-A	0/306	-	-	-	-
1	8-A	0/306	-	-	-	-
1	9-A	0/306	-	-	-	-
1	10-A	0/306	-	-	-	-
1	11-A	0/306	-	-	-	-
1	12-A	0/306	-	-	-	-
1	13-A	0/306	-	-	-	-
1	14-A	0/306	-	-	-	-
1	15-A	0/306	-	-	-	-
1	16-A	0/306	-	-	-	-
1	17-A	0/306	-	-	-	-
1	18-A	0/306	-	-	-	-
1	19-A	0/306	-	-	-	-
1	20-A	0/306	-	-	-	-
1	21-A	0/306	-	-	-	-
1	22-A	0/306	-	-	-	-
1	23-A	0/306	-	-	-	-
1	24-A	0/306	-	-	-	-
1	25-A	0/306	-	-	-	-
1	26-A	0/306	-	-	-	-
1	27-A	0/306	-	-	-	-
1	28-A	0/306	-	-	-	-
All	All	306/8568 (3%)	2.64	191 (62%) 0 0	2, 2, 2, 2	306 (100%)

All (191) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	275	GLY	9.6
1	1-A	302	GLY	9.3
1	1-A	305	PHE	8.3
1	1-A	62	SER	7.0
1	1-A	304	THR	7.0
1	1-A	276	MET	7.0
1	1-A	300	CYS	6.9
1	1-A	225	THR	6.3
1	1-A	165	MET	5.9
1	1-A	64	HIS	5.8
1	1-A	227	LEU	5.7
1	1-A	63	ASN	5.6
1	1-A	66	PHE	5.6
1	1-A	154	TYR	5.4
1	1-A	266	ALA	5.2
1	1-A	153	ASP	5.2
1	1-A	234	ALA	5.2
1	1-A	23	GLY	5.1
1	1-A	89	LEU	5.0
1	1-A	45	THR	5.0
1	1-A	280	THR	5.0
1	1-A	298	ARG	5.0
1	1-A	59	ILE	4.9
1	1-A	90	LYS	4.8
1	1-A	27	LEU	4.8
1	1-A	49	MET	4.7
1	1-A	79	GLY	4.7
1	1-A	224	THR	4.7
1	1-A	156	CYS	4.6
1	1-A	65	ASN	4.6
1	1-A	136	ILE	4.4
1	1-A	223	PHE	4.4
1	1-A	193	ALA	4.3
1	1-A	87	LEU	4.3
1	1-A	146	GLY	4.3
1	1-A	119	ASN	4.3
1	1-A	166	GLU	4.3
1	1-A	77	VAL	4.2
1	1-A	46	SER	4.2
1	1-A	123	SER	4.2
1	1-A	31	TRP	4.2
1	1-A	75	LEU	4.2
1	1-A	303	VAL	4.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	43	ILE	3.9
1	1-A	306	GLN	3.9
1	1-A	76	ARG	3.9
1	1-A	38	CYS	3.8
1	1-A	70	ALA	3.8
1	1-A	30	LEU	3.8
1	1-A	42	VAL	3.8
1	1-A	294	PHE	3.8
1	1-A	34	ASP	3.7
1	1-A	229	ASP	3.7
1	1-A	88	LYS	3.7
1	1-A	78	ILE	3.7
1	1-A	222	ARG	3.7
1	1-A	50	LEU	3.7
1	1-A	235	MET	3.7
1	1-A	274	ASN	3.7
1	1-A	104	VAL	3.7
1	1-A	188	ARG	3.7
1	1-A	230	PHE	3.6
1	1-A	102	LYS	3.6
1	1-A	249	ILE	3.6
1	1-A	262	LEU	3.6
1	1-A	73	VAL	3.6
1	1-A	152	ILE	3.6
1	1-A	184	PRO	3.5
1	1-A	191	ALA	3.5
1	1-A	24	THR	3.5
1	1-A	67	LEU	3.5
1	1-A	103	PHE	3.4
1	1-A	253	LEU	3.4
1	1-A	20	VAL	3.4
1	1-A	93	THR	3.4
1	1-A	22	CYS	3.4
1	1-A	221	ASN	3.3
1	1-A	277	ASN	3.3
1	1-A	216	ASP	3.3
1	1-A	226	THR	3.3
1	1-A	155	ASP	3.3
1	1-A	244	GLN	3.3
1	1-A	35	VAL	3.2
1	1-A	114	VAL	3.2
1	1-A	243	THR	3.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	239	TYR	3.2
1	1-A	278	GLY	3.2
1	1-A	9	PRO	3.2
1	1-A	94	ALA	3.1
1	1-A	101	TYR	3.1
1	1-A	215	GLY	3.1
1	1-A	301	SER	3.1
1	1-A	47	GLU	3.1
1	1-A	110	GLN	3.0
1	1-A	232	LEU	3.0
1	1-A	181	PHE	3.0
1	1-A	36	VAL	3.0
1	1-A	281	ILE	2.9
1	1-A	197	ASP	2.9
1	1-A	256	GLN	2.9
1	1-A	207	TRP	2.9
1	1-A	26	THR	2.9
1	1-A	1	SER	2.9
1	1-A	261	VAL	2.8
1	1-A	61	LYS	2.8
1	1-A	189	GLN	2.8
1	1-A	57	LEU	2.8
1	1-A	242	LEU	2.8
1	1-A	217	ARG	2.8
1	1-A	41	HIS	2.8
1	1-A	37	TYR	2.8
1	1-A	126	TYR	2.8
1	1-A	115	LEU	2.8
1	1-A	99	PRO	2.8
1	1-A	86	VAL	2.8
1	1-A	186	VAL	2.8
1	1-A	150	PHE	2.7
1	1-A	220	LEU	2.7
1	1-A	219	PHE	2.7
1	1-A	167	LEU	2.7
1	1-A	171	VAL	2.7
1	1-A	60	ARG	2.7
1	1-A	91	VAL	2.7
1	1-A	106	ILE	2.7
1	1-A	288	GLU	2.6
1	1-A	122	PRO	2.6
1	1-A	128	CYS	2.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	190	THR	2.6
1	1-A	116	ALA	2.6
1	1-A	74	GLN	2.6
1	1-A	118	TYR	2.6
1	1-A	127	GLN	2.5
1	1-A	161	TYR	2.5
1	1-A	100	LYS	2.5
1	1-A	236	LYS	2.5
1	1-A	81	SER	2.5
1	1-A	32	LEU	2.5
1	1-A	17	MET	2.5
1	1-A	125	VAL	2.5
1	1-A	245	ASP	2.5
1	1-A	129	ALA	2.5
1	1-A	71	GLY	2.5
1	1-A	173	ALA	2.4
1	1-A	251	GLY	2.4
1	1-A	18	VAL	2.4
1	1-A	160	CYS	2.4
1	1-A	209	TYR	2.4
1	1-A	195	GLY	2.4
1	1-A	269	LYS	2.4
1	1-A	206	ALA	2.3
1	1-A	198	THR	2.3
1	1-A	44	CYS	2.3
1	1-A	182	TYR	2.3
1	1-A	272	LEU	2.3
1	1-A	267	SER	2.3
1	1-A	72	ASN	2.3
1	1-A	117	CYS	2.3
1	1-A	58	LEU	2.3
1	1-A	175	THR	2.3
1	1-A	16	CYS	2.3
1	1-A	92	ASP	2.3
1	1-A	141	LEU	2.3
1	1-A	185	PHE	2.2
1	1-A	233	VAL	2.2
1	1-A	151	ASN	2.2
1	1-A	237	TYR	2.2
1	1-A	8	PHE	2.2
1	1-A	53	ASN	2.2
1	1-A	84	ASN	2.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	68	VAL	2.2
1	1-A	164	HIS	2.2
1	1-A	284	SER	2.2
1	1-A	180	ASN	2.2
1	1-A	25	THR	2.2
1	1-A	289	ASP	2.2
1	1-A	268	LEU	2.2
1	1-A	3	PHE	2.1
1	1-A	259	ILE	2.1
1	1-A	13	VAL	2.1
1	1-A	69	GLN	2.1
1	1-A	7	ALA	2.1
1	1-A	196	THR	2.1
1	1-A	208	LEU	2.1
1	1-A	287	LEU	2.1
1	1-A	85	CYS	2.1
1	1-A	168	PRO	2.1
1	1-A	95	ASN	2.1
1	1-A	238	ASN	2.1
1	1-A	54	TYR	2.1
1	1-A	96	PRO	2.1
1	1-A	257	THR	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 oligosaccharides 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	ZN	1-A	401	1/1	0.89	0.46	42,42,42,42	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
2	ZN	2-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	3-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	4-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	5-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	6-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	7-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	8-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	9-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	10-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	11-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	12-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	13-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	14-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	15-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	16-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	17-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	18-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	19-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	20-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	21-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	22-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	23-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	24-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	25-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	26-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	27-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1
2	ZN	28-A	401	1/1	-	-	42,42,42,42	1

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.