



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

May 23, 2024 – 04:43 PM EDT

PDB ID : 4P3Q
Title : Room-temperature WT DHFR, time-averaged ensemble
Authors : Keedy, D.A.; van den Bedem, H.; Fraser, J.S.
Deposited on : 2014-03-10
Resolution : 1.35 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

MolProbity	:	4.02b-467
Mogul	:	1.8.5 (274361), CSD as541be (2020)
Xtriage (Phenix)	:	1.13
EDS	:	FAILED
buster-report	:	1.1.7 (2018)
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.36.2

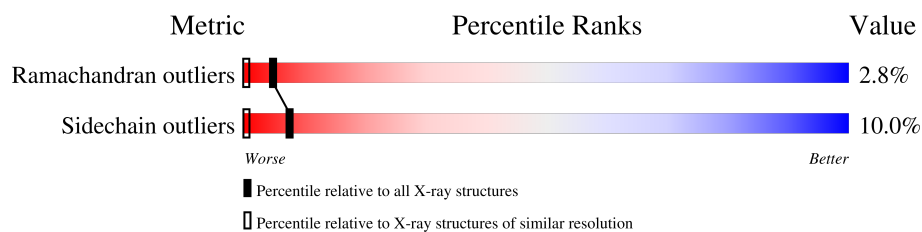
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 1.35 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
Ramachandran outliers	138981	1530 (1.38-1.34)
Sidechain outliers	138945	1530 (1.38-1.34)

2 Entry composition

There are 5 unique types of molecules in this entry. The entry contains 451154 atoms, of which 211088 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 Dihydrofolate reductase.

Mol	Chain	Residues	Atoms							ZeroOcc	AltConf	Trace
1	1-A	159	Total	C	H	N	O	S		0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7				
1	2-A	159	Total	C	H	N	O	S		0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7				
1	3-A	159	Total	C	H	N	O	S		0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7				
1	4-A	159	Total	C	H	N	O	S		0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7				
1	5-A	159	Total	C	H	N	O	S		0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7				
1	6-A	159	Total	C	H	N	O	S		0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7				
1	7-A	159	Total	C	H	N	O	S		0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7				
1	8-A	159	Total	C	H	N	O	S		0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7				
1	9-A	159	Total	C	H	N	O	S		0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7				
1	10-A	159	Total	C	H	N	O	S		0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7				
1	11-A	159	Total	C	H	N	O	S		0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7				
1	12-A	159	Total	C	H	N	O	S		0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7				
1	13-A	159	Total	C	H	N	O	S		0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7				
1	14-A	159	Total	C	H	N	O	S		0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7				
1	15-A	159	Total	C	H	N	O	S		0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7				
1	16-A	159	Total	C	H	N	O	S		0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7				

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	17-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	18-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	19-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	20-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	21-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	22-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	23-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	24-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	25-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	26-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	27-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	28-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	29-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	30-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	31-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	32-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	33-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	34-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	35-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	36-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	37-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	38-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	39-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	40-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	41-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	42-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	43-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	44-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	45-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	46-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	47-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	48-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	49-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	50-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	51-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	52-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	53-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	54-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	55-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	56-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	57-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	58-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	59-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	60-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	61-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	62-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	63-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	64-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	65-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	66-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	67-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	68-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	69-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	70-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	71-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	72-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	73-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	74-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	75-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	76-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	77-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	78-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	79-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	80-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	81-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	82-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	83-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	84-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	85-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	86-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	87-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	88-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	89-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	90-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	91-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	92-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	93-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	94-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	95-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	96-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	97-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	98-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	99-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	100-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	101-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	102-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	103-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	104-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	105-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	106-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	107-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	108-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	109-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	110-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	111-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	112-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	113-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	114-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	115-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	116-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	117-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	118-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	119-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	120-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	121-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	122-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	123-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	124-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	125-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	126-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	127-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	128-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	129-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	130-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	131-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	132-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	133-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	134-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	135-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	136-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	137-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	138-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	139-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	140-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	141-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	142-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			

Continued on next page...

Continued from previous page...

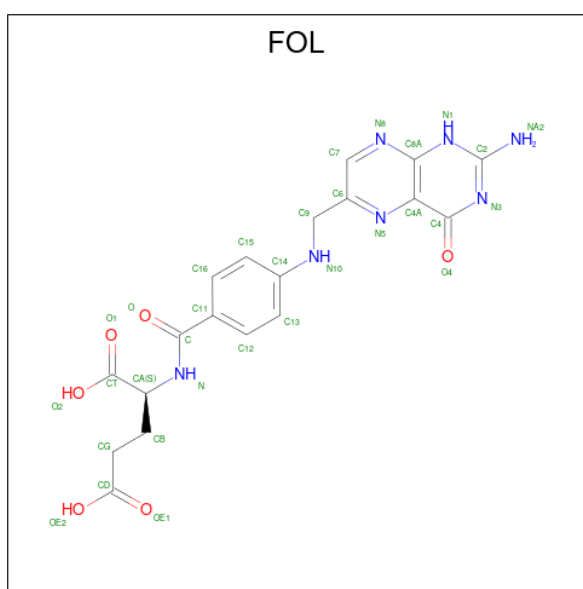
Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	143-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	144-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	145-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	146-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	147-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	148-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	149-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	150-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	151-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	152-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	153-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	154-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	155-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	156-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	157-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	158-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	159-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	160-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	161-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	162-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	163-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	164-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	165-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	166-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			
1	167-A	159	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			2491	805	1223	217	239	7			

- Molecule 2 is FOLIC ACID (three-letter code: FOL) (formula: $C_{19}H_{19}N_7O_6$).



Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	1-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	2-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	3-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	4-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	5-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	6-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	7-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	8-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	9-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	10-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	11-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	12-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	13-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	14-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	15-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	16-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	17-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	18-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	19-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	20-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	21-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	22-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	23-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	24-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	25-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	26-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	27-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	28-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	29-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	30-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	31-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	32-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	33-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	34-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	35-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	36-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	37-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	38-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	39-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	40-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	41-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	42-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	43-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	44-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	45-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	46-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	47-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	48-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	49-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	50-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	51-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	52-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	53-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	54-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	55-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	56-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	57-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	58-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	59-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	60-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	61-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	62-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	63-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	64-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	65-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	66-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	67-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	68-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	69-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	70-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	71-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	72-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	73-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	74-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	75-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	76-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	77-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	78-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	79-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	80-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	81-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	82-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	83-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	84-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	85-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	86-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	87-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	88-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	89-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	90-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	91-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	92-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	93-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	94-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	95-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	96-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	97-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	98-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	99-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	100-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	101-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	102-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	103-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	104-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	105-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	106-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	107-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	108-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	109-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	110-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	111-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	112-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	113-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	114-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	115-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	116-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	117-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	118-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	119-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	120-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	121-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	122-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	123-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	124-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	125-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	126-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	127-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	128-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	129-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	130-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	131-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	132-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	133-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	134-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	135-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	136-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	137-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	138-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	139-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	140-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	141-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	142-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	143-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	144-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	145-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	146-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	147-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	148-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	149-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	150-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	151-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	152-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	153-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0
2	154-A	1	Total 49	C 19	H 17	N 7	O 6	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	155-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	156-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	157-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	158-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	159-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	160-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	161-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	162-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	163-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	164-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	165-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	166-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		
2	167-A	1	Total	C	H	N	O	0	0
			49	19	17	7	6		

- Molecule 3 is CALCIUM ION (three-letter code: CA) (formula: Ca).

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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	7-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	8-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	9-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	10-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	11-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	12-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	13-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	14-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	15-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	16-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	17-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	18-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	19-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	20-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	21-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	22-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	23-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	24-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	25-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	26-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	27-A	2	Total 2	Ca 2	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	28-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	29-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	30-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	31-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	32-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	33-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	34-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	35-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	36-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	37-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	38-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	39-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	40-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	41-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	42-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	43-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	44-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	45-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	46-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	47-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	48-A	2	Total 2	Ca 2	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	49-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	50-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	51-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	52-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	53-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	54-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	55-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	56-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	57-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	58-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	59-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	60-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	61-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	62-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	63-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	64-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	65-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	66-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	67-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	68-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	69-A	2	Total 2	Ca 2	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	70-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	71-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	72-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	73-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	74-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	75-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	76-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	77-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	78-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	79-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	80-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	81-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	82-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	83-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	84-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	85-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	86-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	87-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	88-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	89-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	90-A	2	Total 2	Ca 2	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	91-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	92-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	93-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	94-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	95-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	96-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	97-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	98-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	99-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	100-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	101-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	102-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	103-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	104-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	105-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	106-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	107-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	108-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	109-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	110-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	111-A	2	Total 2	Ca 2	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	112-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	113-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	114-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	115-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	116-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	117-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	118-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	119-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	120-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	121-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	122-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	123-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	124-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	125-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	126-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	127-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	128-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	129-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	130-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	131-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	132-A	2	Total 2	Ca 2	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

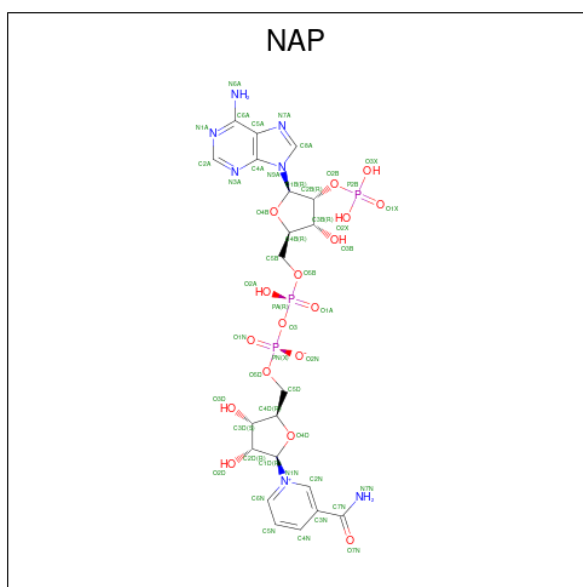
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	133-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	134-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	135-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	136-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	137-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	138-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	139-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	140-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	141-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	142-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	143-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	144-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	145-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	146-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	147-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	148-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	149-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	150-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	151-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	152-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	153-A	2	Total 2	Ca 2	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	154-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	155-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	156-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	157-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	158-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	159-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	160-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	161-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	162-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	163-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	164-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	165-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	166-A	2	Total 2	Ca 2	0	0
3	167-A	2	Total 2	Ca 2	0	0

- Molecule 4 is NADP NICOTINAMIDE-ADENINE-DINUCLEOTIDE PHOSPHATE (three-letter code: NAP) (formula: C₂₁H₂₈N₇O₁₇P₃).



Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf
4	1-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	2-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	3-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	4-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	5-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	6-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	7-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	8-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	9-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	10-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	11-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	12-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	13-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	14-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf
4	15-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	16-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	17-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	18-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	19-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	20-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	21-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	22-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	23-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	24-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	25-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	26-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	27-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	28-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	29-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	30-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	31-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	32-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	33-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	34-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	35-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf
4	36-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	37-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	38-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	39-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	40-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	41-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	42-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	43-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	44-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	45-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	46-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	47-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	48-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	49-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	50-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	51-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	52-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	53-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	54-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	55-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	56-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf
4	57-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	58-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	59-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	60-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	61-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	62-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	63-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	64-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	65-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	66-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	67-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	68-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	69-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	70-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	71-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	72-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	73-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	74-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	75-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	76-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	77-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf
4	78-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	79-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	80-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	81-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	82-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	83-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	84-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	85-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	86-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	87-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	88-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	89-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	90-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	91-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	92-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	93-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	94-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	95-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	96-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	97-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	98-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf
4	99-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	100-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	101-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	102-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	103-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	104-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	105-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	106-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	107-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	108-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	109-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	110-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	111-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	112-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	113-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	114-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	115-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	116-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	117-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	118-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	119-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf
4	120-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	121-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	122-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	123-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	124-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	125-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	126-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	127-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	128-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	129-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	130-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	131-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	132-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	133-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	134-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	135-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	136-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	137-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	138-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	139-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	140-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf
4	141-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	142-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	143-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	144-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	145-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	146-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	147-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	148-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	149-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	150-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	151-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	152-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	153-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	154-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	155-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	156-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	157-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	158-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	159-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	160-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	161-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf
4	162-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	163-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	164-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	165-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	166-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0
4	167-A	1	Total 72	C 21	H 24	N 7	O 17	P 3	0	0

- Molecule 5 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
5	1-A	83	Total	O	0	0
			83	83		
5	2-A	83	Total	O	0	0
			83	83		
5	3-A	79	Total	O	0	0
			79	79		
5	4-A	68	Total	O	0	0
			68	68		
5	5-A	75	Total	O	0	0
			75	75		
5	6-A	80	Total	O	0	0
			80	80		
5	7-A	99	Total	O	0	0
			99	99		
5	8-A	89	Total	O	0	0
			89	89		
5	9-A	79	Total	O	0	0
			79	79		
5	10-A	79	Total	O	0	0
			79	79		
5	11-A	82	Total	O	0	0
			82	82		
5	12-A	88	Total	O	0	0
			88	88		
5	13-A	89	Total	O	0	0
			89	89		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
5	14-A	96	Total	O	0	0
			96	96		
5	15-A	96	Total	O	0	0
			96	96		
5	16-A	94	Total	O	0	0
			94	94		
5	17-A	84	Total	O	0	0
			84	84		
5	18-A	89	Total	O	0	0
			89	89		
5	19-A	80	Total	O	0	0
			80	80		
5	20-A	73	Total	O	0	0
			73	73		
5	21-A	92	Total	O	0	0
			92	92		
5	22-A	91	Total	O	0	0
			91	91		
5	23-A	94	Total	O	0	0
			94	94		
5	24-A	95	Total	O	0	0
			95	95		
5	25-A	76	Total	O	0	0
			76	76		
5	26-A	83	Total	O	0	0
			83	83		
5	27-A	81	Total	O	0	0
			81	81		
5	28-A	81	Total	O	0	0
			81	81		
5	29-A	83	Total	O	0	0
			83	83		
5	30-A	84	Total	O	0	0
			84	84		
5	31-A	86	Total	O	0	0
			86	86		
5	32-A	85	Total	O	0	0
			85	85		
5	33-A	86	Total	O	0	0
			86	86		
5	34-A	93	Total	O	0	0
			93	93		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
5	35-A	93	Total 93	O 93	0	0
5	36-A	77	Total 77	O 77	0	0
5	37-A	82	Total 82	O 82	0	0
5	38-A	87	Total 87	O 87	0	0
5	39-A	93	Total 93	O 93	0	0
5	40-A	84	Total 84	O 84	0	0
5	41-A	82	Total 82	O 82	0	0
5	42-A	83	Total 83	O 83	0	0
5	43-A	95	Total 95	O 95	0	0
5	44-A	100	Total 100	O 100	0	0
5	45-A	93	Total 93	O 93	0	0
5	46-A	92	Total 92	O 92	0	0
5	47-A	98	Total 98	O 98	0	0
5	48-A	92	Total 92	O 92	0	0
5	49-A	89	Total 89	O 89	0	0
5	50-A	78	Total 78	O 78	0	0
5	51-A	68	Total 68	O 68	0	0
5	52-A	77	Total 77	O 77	0	0
5	53-A	87	Total 87	O 87	0	0
5	54-A	92	Total 92	O 92	0	0
5	55-A	92	Total 92	O 92	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
5	56-A	82	Total	O	0	0
			82	82		
5	57-A	86	Total	O	0	0
			86	86		
5	58-A	89	Total	O	0	0
			89	89		
5	59-A	96	Total	O	0	0
			96	96		
5	60-A	96	Total	O	0	0
			96	96		
5	61-A	98	Total	O	0	0
			98	98		
5	62-A	100	Total	O	0	0
			100	100		
5	63-A	97	Total	O	0	0
			97	97		
5	64-A	87	Total	O	0	0
			87	87		
5	65-A	83	Total	O	0	0
			83	83		
5	66-A	77	Total	O	0	0
			77	77		
5	67-A	78	Total	O	0	0
			78	78		
5	68-A	79	Total	O	0	0
			79	79		
5	69-A	79	Total	O	0	0
			79	79		
5	70-A	85	Total	O	0	0
			85	85		
5	71-A	91	Total	O	0	0
			91	91		
5	72-A	101	Total	O	0	0
			101	101		
5	73-A	94	Total	O	0	0
			94	94		
5	74-A	85	Total	O	0	0
			85	85		
5	75-A	92	Total	O	0	0
			92	92		
5	76-A	82	Total	O	0	0
			82	82		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
5	77-A	85	Total 85	O 85	0	0
5	78-A	84	Total 84	O 84	0	0
5	79-A	86	Total 86	O 86	0	0
5	80-A	85	Total 85	O 85	0	0
5	81-A	92	Total 92	O 92	0	0
5	82-A	91	Total 91	O 91	0	0
5	83-A	98	Total 98	O 98	0	0
5	84-A	94	Total 94	O 94	0	0
5	85-A	94	Total 94	O 94	0	0
5	86-A	88	Total 88	O 88	0	0
5	87-A	84	Total 84	O 84	0	0
5	88-A	82	Total 82	O 82	0	0
5	89-A	92	Total 92	O 92	0	0
5	90-A	98	Total 98	O 98	0	0
5	91-A	75	Total 75	O 75	0	0
5	92-A	77	Total 77	O 77	0	0
5	93-A	78	Total 78	O 78	0	0
5	94-A	92	Total 92	O 92	0	0
5	95-A	101	Total 101	O 101	0	0
5	96-A	106	Total 106	O 106	0	0
5	97-A	94	Total 94	O 94	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
5	98-A	86	Total 86	O 86	0	0
5	99-A	87	Total 87	O 87	0	0
5	100-A	80	Total 80	O 80	0	0
5	101-A	76	Total 76	O 76	0	0
5	102-A	80	Total 80	O 80	0	0
5	103-A	89	Total 89	O 89	0	0
5	104-A	88	Total 88	O 88	0	0
5	105-A	97	Total 97	O 97	0	0
5	106-A	85	Total 85	O 85	0	0
5	107-A	87	Total 87	O 87	0	0
5	108-A	93	Total 93	O 93	0	0
5	109-A	82	Total 82	O 82	0	0
5	110-A	82	Total 82	O 82	0	0
5	111-A	75	Total 75	O 75	0	0
5	112-A	85	Total 85	O 85	0	0
5	113-A	97	Total 97	O 97	0	0
5	114-A	98	Total 98	O 98	0	0
5	115-A	86	Total 86	O 86	0	0
5	116-A	89	Total 89	O 89	0	0
5	117-A	85	Total 85	O 85	0	0
5	118-A	89	Total 89	O 89	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
5	119-A	88	Total	O	0	0
			88	88		
5	120-A	95	Total	O	0	0
			95	95		
5	121-A	93	Total	O	0	0
			93	93		
5	122-A	90	Total	O	0	0
			90	90		
5	123-A	82	Total	O	0	0
			82	82		
5	124-A	81	Total	O	0	0
			81	81		
5	125-A	84	Total	O	0	0
			84	84		
5	126-A	101	Total	O	0	0
			101	101		
5	127-A	96	Total	O	0	0
			96	96		
5	128-A	90	Total	O	0	0
			90	90		
5	129-A	89	Total	O	0	0
			89	89		
5	130-A	81	Total	O	0	0
			81	81		
5	131-A	75	Total	O	0	0
			75	75		
5	132-A	87	Total	O	0	0
			87	87		
5	133-A	96	Total	O	0	0
			96	96		
5	134-A	89	Total	O	0	0
			89	89		
5	135-A	89	Total	O	0	0
			89	89		
5	136-A	87	Total	O	0	0
			87	87		
5	137-A	88	Total	O	0	0
			88	88		
5	138-A	88	Total	O	0	0
			88	88		
5	139-A	96	Total	O	0	0
			96	96		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
5	140-A	88	Total 88	O 88	0	0
5	141-A	80	Total 80	O 80	0	0
5	142-A	80	Total 80	O 80	0	0
5	143-A	83	Total 83	O 83	0	0
5	144-A	84	Total 84	O 84	0	0
5	145-A	99	Total 99	O 99	0	0
5	146-A	101	Total 101	O 101	0	0
5	147-A	105	Total 105	O 105	0	0
5	148-A	103	Total 103	O 103	0	0
5	149-A	86	Total 86	O 86	0	0
5	150-A	94	Total 94	O 94	0	0
5	151-A	92	Total 92	O 92	0	0
5	152-A	89	Total 89	O 89	0	0
5	153-A	99	Total 99	O 99	0	0
5	154-A	98	Total 98	O 98	0	0
5	155-A	78	Total 78	O 78	0	0
5	156-A	79	Total 79	O 79	0	0
5	157-A	80	Total 80	O 80	0	0
5	158-A	78	Total 78	O 78	0	0
5	159-A	82	Total 82	O 82	0	0
5	160-A	82	Total 82	O 82	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
5	161-A	86	Total 86	O 86	0	0
5	162-A	84	Total 84	O 84	0	0
5	163-A	91	Total 91	O 91	0	0
5	164-A	92	Total 92	O 92	0	0
5	165-A	90	Total 90	O 90	0	0
5	166-A	81	Total 81	O 81	0	0
5	167-A	89	Total 89	O 89	0	0

SEQUENCE-PLOTS INFOmissingINFO

3 Data and refinement statistics

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

Property	Value	Source
Space group	P 21 21 21	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	34.32Å 45.51Å 98.91Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	41.34 – 1.35	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	91.6 (41.34-1.35)	Depositor
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	1.87 (at 1.35Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX (phenix.ensemble_refinement: 1.8.4_1496)	Depositor
R, R_{free}	0.118 , 0.153	Depositor
Wilson B-factor (Å ²)	11.2	Xtriage
Anisotropy	0.170	Xtriage
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.49$, $\langle L^2 \rangle = 0.32$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	451154	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	9.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 12.87% 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.

4 Model quality ⓘ

4.1 Standard geometry ⓘ

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: NAP, CA, FOL

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	0.70	0/1302	0.91	3/1770 (0.2%)
1	2-A	0.71	0/1302	0.91	2/1770 (0.1%)
1	3-A	0.70	0/1302	1.01	4/1770 (0.2%)
1	4-A	0.76	2/1302 (0.2%)	0.97	5/1770 (0.3%)
1	5-A	0.73	0/1302	1.03	3/1770 (0.2%)
1	6-A	0.91	4/1302 (0.3%)	1.03	6/1770 (0.3%)
1	7-A	0.94	6/1302 (0.5%)	1.09	8/1770 (0.5%)
1	8-A	0.86	5/1302 (0.4%)	1.14	11/1770 (0.6%)
1	9-A	0.82	0/1302	1.00	6/1770 (0.3%)
1	10-A	0.66	0/1302	0.87	2/1770 (0.1%)
1	11-A	0.73	1/1302 (0.1%)	0.94	4/1770 (0.2%)
1	12-A	0.73	1/1302 (0.1%)	0.98	3/1770 (0.2%)
1	13-A	0.67	1/1302 (0.1%)	0.91	2/1770 (0.1%)
1	14-A	0.78	1/1302 (0.1%)	0.92	2/1770 (0.1%)
1	15-A	0.76	0/1302	0.94	1/1770 (0.1%)
1	16-A	0.72	0/1302	0.99	5/1770 (0.3%)
1	17-A	0.75	3/1302 (0.2%)	0.94	2/1770 (0.1%)
1	18-A	0.74	1/1302 (0.1%)	0.91	1/1770 (0.1%)
1	19-A	0.73	2/1302 (0.2%)	0.90	1/1770 (0.1%)
1	20-A	0.76	2/1302 (0.2%)	0.93	7/1770 (0.4%)
1	21-A	0.76	2/1302 (0.2%)	0.97	5/1770 (0.3%)
1	22-A	0.71	0/1302	0.99	4/1770 (0.2%)
1	23-A	0.75	0/1302	0.95	4/1770 (0.2%)
1	24-A	0.71	0/1302	0.95	3/1770 (0.2%)
1	25-A	0.72	0/1302	0.93	2/1770 (0.1%)
1	26-A	0.78	0/1302	0.95	4/1770 (0.2%)
1	27-A	0.78	0/1302	0.98	5/1770 (0.3%)
1	28-A	0.81	1/1239 (0.1%)	1.03	4/1688 (0.2%)
All	All	0.76	32/36393 (0.1%)	0.97	109/49478 (0.2%)

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	1
1	2-A	0	1
1	3-A	0	1
1	4-A	0	3
1	5-A	0	3
1	6-A	0	2
1	7-A	0	5
1	8-A	0	4
1	9-A	0	5
1	10-A	0	5
1	11-A	0	2
1	12-A	0	3
1	13-A	0	3
1	14-A	0	3
1	15-A	0	1
1	16-A	0	3
1	17-A	0	4
1	18-A	0	2
1	19-A	0	2
1	20-A	0	2
1	21-A	0	2
1	22-A	0	1
1	23-A	0	3
1	24-A	0	2
1	25-A	0	3
1	26-A	0	3
1	27-A	0	1
1	28-A	0	3
1	29-A	0	1
1	30-A	0	1
1	31-A	0	2
1	32-A	0	4
1	33-A	0	6
1	34-A	0	3
1	35-A	0	2
1	36-A	0	4
1	37-A	0	2
1	38-A	0	2
1	39-A	0	1
1	40-A	0	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	41-A	0	4
1	42-A	0	2
1	43-A	0	1
1	44-A	0	2
1	45-A	0	2
1	46-A	0	3
1	47-A	0	1
1	48-A	0	2
1	49-A	0	4
1	50-A	0	4
1	51-A	0	3
1	52-A	0	4
1	53-A	0	4
1	57-A	0	1
1	61-A	0	1
1	62-A	0	1
1	63-A	0	1
1	66-A	0	3
1	67-A	0	1
1	68-A	0	2
1	69-A	0	1
1	70-A	0	1
1	71-A	0	2
1	72-A	0	4
1	73-A	0	2
1	74-A	0	1
1	75-A	0	1
1	78-A	0	1
1	79-A	0	2
1	80-A	0	2
1	81-A	0	2
1	82-A	0	1
1	83-A	0	1
1	84-A	0	1
1	85-A	0	1
1	86-A	0	2
1	88-A	0	1
1	89-A	0	2
1	90-A	0	2
1	91-A	0	1
1	94-A	0	1
1	95-A	0	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	97-A	0	1
1	98-A	0	1
1	99-A	0	1
1	100-A	0	1
1	102-A	0	1
1	104-A	0	2
1	105-A	0	4
1	107-A	0	3
1	108-A	0	2
1	109-A	0	2
1	110-A	0	2
1	111-A	0	2
1	112-A	0	2
1	113-A	0	5
1	114-A	0	4
1	115-A	0	3
1	116-A	0	3
1	117-A	0	4
1	122-A	0	3
1	124-A	0	1
1	126-A	0	1
1	127-A	0	1
1	130-A	0	1
1	131-A	0	2
1	132-A	0	3
1	133-A	0	3
1	134-A	0	1
1	136-A	0	2
1	137-A	0	2
1	138-A	0	3
1	139-A	0	1
1	140-A	0	2
1	141-A	0	1
1	143-A	0	2
1	144-A	0	2
1	145-A	0	4
1	146-A	0	4
1	147-A	0	1
1	149-A	0	2
1	150-A	0	2
1	151-A	0	2
1	152-A	0	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	154-A	0	1
1	155-A	0	2
1	156-A	0	1
1	157-A	0	3
1	158-A	0	2
1	159-A	0	5
1	160-A	0	3
1	161-A	0	3
1	162-A	0	5
1	163-A	0	5
1	164-A	0	5
1	165-A	0	1
1	166-A	0	2
1	167-A	0	1
All	All	0	312

All (32) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	6-A	152	CYS	CB-SG	10.09	1.99	1.82
1	6-A	10	VAL	CB-CG2	-7.95	1.36	1.52
1	14-A	118	GLU	CB-CG	7.91	1.67	1.52
1	21-A	21	PRO	CA-C	7.22	1.67	1.52
1	8-A	101	GLU	CB-CG	-7.17	1.38	1.52
1	20-A	17	GLU	CG-CD	-6.83	1.41	1.51
1	18-A	139	GLU	CB-CG	6.75	1.65	1.52
1	17-A	101	GLU	CB-CG	6.44	1.64	1.52
1	4-A	154	GLU	CB-CG	6.24	1.64	1.52
1	7-A	128	TYR	CB-CG	-6.05	1.42	1.51
1	6-A	101	GLU	CB-CG	-6.02	1.40	1.52
1	6-A	159	ARG	CG-CD	5.91	1.66	1.51
1	20-A	120	GLU	CB-CG	5.82	1.63	1.52
1	19-A	152	CYS	CB-SG	-5.72	1.72	1.81
1	11-A	17	GLU	CB-CG	5.70	1.62	1.52
1	28-A	18	ASN	C-O	-5.66	1.12	1.23
1	7-A	10	VAL	CB-CG2	-5.65	1.41	1.52
1	7-A	79	ASP	CB-CG	5.55	1.63	1.51
1	4-A	157	GLU	CB-CG	-5.53	1.41	1.52
1	12-A	120	GLU	CG-CD	5.51	1.60	1.51
1	17-A	139	GLU	CG-CD	5.40	1.60	1.51
1	7-A	120	GLU	CG-CD	5.37	1.60	1.51
1	7-A	101	GLU	CB-CG	-5.35	1.42	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	19-A	17	GLU	CG-CD	-5.31	1.44	1.51
1	8-A	68	THR	CB-CG2	-5.26	1.34	1.52
1	8-A	17	GLU	N-CA	5.23	1.56	1.46
1	13-A	120	GLU	CB-CG	5.23	1.62	1.52
1	17-A	152	CYS	CB-SG	5.21	1.91	1.82
1	8-A	16	MET	CG-SD	-5.21	1.67	1.81
1	7-A	159	ARG	CG-CD	5.13	1.64	1.51
1	21-A	118	GLU	CG-CD	5.10	1.59	1.51
1	8-A	108	GLN	CB-CG	5.08	1.66	1.52

All (109) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	8-A	20	MET	C-N-CD	-13.50	90.90	120.60
1	5-A	129	GLU	C-N-CD	-13.17	91.63	120.60
1	8-A	16	MET	CG-SD-CE	10.75	117.40	100.20
1	4-A	129	GLU	C-N-CD	-10.24	98.06	120.60
1	16-A	129	GLU	C-N-CD	-9.63	99.41	120.60
1	3-A	129	GLU	C-N-CD	-9.53	99.64	120.60
1	23-A	20	MET	N-CA-C	-9.31	85.87	111.00
1	22-A	20	MET	CG-SD-CE	-9.07	85.68	100.20
1	8-A	20	MET	C-N-CA	8.24	156.59	122.00
1	21-A	152	CYS	CA-CB-SG	-8.24	99.17	114.00
1	15-A	11	ASP	CB-CG-OD1	8.20	125.68	118.30
1	23-A	20	MET	CA-CB-CG	8.05	126.99	113.30
1	5-A	20	MET	CG-SD-CE	7.86	112.78	100.20
1	14-A	104	LEU	CB-CG-CD2	7.69	124.07	111.00
1	16-A	159	ARG	NE-CZ-NH1	7.44	124.02	120.30
1	7-A	44	ARG	NE-CZ-NH2	-7.34	116.63	120.30
1	7-A	12	ARG	NE-CZ-NH2	-7.31	116.65	120.30
1	8-A	12	ARG	NE-CZ-NH2	-7.21	116.69	120.30
1	9-A	21	PRO	N-CA-C	7.21	130.85	112.10
1	4-A	44	ARG	NE-CZ-NH2	-7.14	116.73	120.30
1	12-A	17	GLU	N-CA-C	7.09	130.15	111.00
1	6-A	156	LEU	CA-CB-CG	7.03	131.47	115.30
1	20-A	108	GLN	CA-CB-CG	6.96	128.72	113.40
1	7-A	12	ARG	NE-CZ-NH1	6.95	123.77	120.30
1	7-A	44	ARG	NE-CZ-NH1	6.77	123.69	120.30
1	12-A	119	VAL	CB-CA-C	-6.77	98.54	111.40
1	11-A	21	PRO	N-CA-C	6.64	129.35	112.10
1	16-A	18	ASN	N-CA-C	6.58	128.78	111.00
1	16-A	38	LYS	CD-CE-NZ	-6.54	96.67	111.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	24-A	111	TYR	CA-CB-CG	-6.51	101.02	113.40
1	9-A	20	MET	C-N-CD	-6.38	106.58	120.60
1	9-A	104	LEU	CB-CG-CD1	6.31	121.72	111.00
1	23-A	20	MET	CB-CG-SD	6.27	131.20	112.40
1	9-A	119	VAL	CB-CA-C	-6.26	99.50	111.40
1	6-A	44	ARG	NE-CZ-NH1	6.20	123.40	120.30
1	21-A	12	ARG	NE-CZ-NH1	6.20	123.40	120.30
1	20-A	159	ARG	NE-CZ-NH1	6.18	123.39	120.30
1	8-A	4	LEU	CB-CG-CD1	-6.18	100.50	111.00
1	21-A	152	CYS	CB-CA-C	-6.12	98.16	110.40
1	17-A	79	ASP	CB-CG-OD1	6.10	123.79	118.30
1	12-A	119	VAL	N-CA-C	6.07	127.40	111.00
1	16-A	159	ARG	NE-CZ-NH2	-6.06	117.27	120.30
1	28-A	20	MET	N-CA-C	6.06	127.37	111.00
1	28-A	32	LYS	CD-CE-NZ	6.05	125.62	111.70
1	20-A	36	LEU	CB-CG-CD1	6.04	121.27	111.00
1	21-A	12	ARG	NE-CZ-NH2	-6.02	117.29	120.30
1	10-A	156	LEU	CA-CB-CG	5.97	129.03	115.30
1	11-A	156	LEU	CA-CB-CG	5.96	129.02	115.30
1	10-A	119	VAL	CB-CA-C	-5.96	100.08	111.40
1	27-A	108	GLN	CA-CB-CG	5.95	126.49	113.40
1	25-A	61	ILE	CG1-CB-CG2	-5.93	98.36	111.40
1	2-A	159	ARG	NE-CZ-NH1	5.90	123.25	120.30
1	8-A	159	ARG	NE-CZ-NH1	5.82	123.21	120.30
1	6-A	44	ARG	NE-CZ-NH2	-5.80	117.40	120.30
1	8-A	12	ARG	NE-CZ-NH1	5.80	123.20	120.30
1	3-A	128	TYR	CB-CG-CD2	5.77	124.46	121.00
1	26-A	61	ILE	CG1-CB-CG2	-5.77	98.70	111.40
1	9-A	16	MET	CA-CB-CG	5.74	123.06	113.30
1	18-A	4	LEU	CB-CG-CD2	5.67	120.64	111.00
1	27-A	61	ILE	CG1-CB-CG2	-5.66	98.94	111.40
1	13-A	98	ARG	NE-CZ-NH2	-5.66	117.47	120.30
1	5-A	129	GLU	C-N-CA	5.65	145.73	122.00
1	26-A	4	LEU	CB-CG-CD2	5.65	120.60	111.00
1	14-A	131	ASP	CB-CG-OD2	-5.64	113.22	118.30
1	20-A	4	LEU	CB-CG-CD2	-5.61	101.47	111.00
1	2-A	159	ARG	CG-CD-NE	5.59	123.54	111.80
1	1-A	132	ASP	CB-CG-OD2	5.57	123.31	118.30
1	3-A	128	TYR	CA-CB-CG	5.56	123.96	113.40
1	7-A	121	GLY	N-CA-C	5.55	126.98	113.10
1	4-A	44	ARG	NE-CZ-NH1	5.50	123.05	120.30
1	9-A	21	PRO	CA-N-CD	-5.50	103.80	111.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	8-A	33	ARG	CB-CG-CD	5.49	125.86	111.60
1	27-A	20	MET	N-CA-C	5.47	125.78	111.00
1	17-A	1	MET	CG-SD-CE	-5.41	91.54	100.20
1	3-A	156	LEU	CA-CB-CG	5.40	127.71	115.30
1	11-A	16	MET	CA-CB-CG	5.37	122.43	113.30
1	8-A	128	TYR	CA-CB-CG	5.37	123.60	113.40
1	8-A	142	ASP	CB-CG-OD1	5.34	123.10	118.30
1	7-A	79	ASP	CB-CA-C	5.33	121.06	110.40
1	1-A	157	GLU	OE1-CD-OE2	-5.33	116.91	123.30
1	13-A	104	LEU	CB-CG-CD2	5.32	120.05	111.00
1	26-A	12	ARG	NE-CZ-NH2	-5.30	117.65	120.30
1	22-A	17	GLU	CB-CA-C	5.29	120.98	110.40
1	6-A	52	ARG	NE-CZ-NH2	-5.29	117.65	120.30
1	27-A	20	MET	CB-CG-SD	5.25	128.16	112.40
1	21-A	131	ASP	CB-CG-OD2	-5.24	113.58	118.30
1	25-A	87	ASP	N-CA-C	-5.23	96.88	111.00
1	26-A	12	ARG	NE-CZ-NH1	5.22	122.91	120.30
1	7-A	129	GLU	OE1-CD-OE2	5.21	129.56	123.30
1	7-A	79	ASP	N-CA-CB	-5.21	101.23	110.60
1	24-A	17	GLU	CB-CA-C	5.20	120.80	110.40
1	4-A	17	GLU	N-CA-C	-5.20	96.96	111.00
1	28-A	52	ARG	CA-CB-CG	5.17	124.77	113.40
1	6-A	152	CYS	CA-CB-SG	5.15	123.28	114.00
1	20-A	44	ARG	NE-CZ-NH1	5.15	122.88	120.30
1	11-A	156	LEU	CB-CG-CD1	5.15	119.75	111.00
1	20-A	20	MET	CA-CB-CG	5.14	122.03	113.30
1	22-A	132	ASP	CB-CG-OD2	5.14	122.92	118.30
1	28-A	19	ALA	C-N-CA	5.13	134.53	121.70
1	20-A	20	MET	CG-SD-CE	5.11	108.38	100.20
1	1-A	131	ASP	CB-CG-OD1	5.11	122.90	118.30
1	4-A	52	ARG	NE-CZ-NH1	5.10	122.85	120.30
1	8-A	1	MET	CG-SD-CE	-5.06	92.10	100.20
1	24-A	127	ASP	N-CA-C	-5.06	97.34	111.00
1	27-A	19	ALA	C-N-CA	5.06	134.35	121.70
1	23-A	52	ARG	NE-CZ-NH1	5.05	122.83	120.30
1	22-A	128	TYR	CA-CB-CG	5.03	122.95	113.40
1	6-A	128	TYR	CB-CA-C	-5.02	100.35	110.40
1	19-A	44	ARG	NE-CZ-NH1	5.01	122.81	120.30

There are no chirality outliers.

All (312) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	1-A	128	TYR	Peptide
1	10-A	119	VAL	Peptide
1	10-A	17	GLU	Peptide
1	10-A	20	MET	Peptide
1	10-A	21	PRO	Peptide
1	10-A	67	GLY	Peptide
1	100-A	18	ASN	Peptide
1	102-A	17	GLU	Peptide
1	104-A	128	TYR	Peptide
1	104-A	16	MET	Peptide
1	105-A	128	TYR	Peptide
1	105-A	129	GLU	Peptide
1	105-A	17	GLU	Peptide
1	105-A	18	ASN	Peptide
1	107-A	17	GLU	Peptide
1	107-A	19	ALA	Peptide
1	107-A	22	TRP	Peptide
1	108-A	1	MET	Peptide
1	108-A	18	ASN	Peptide
1	109-A	17	GLU	Peptide
1	109-A	67	GLY	Peptide
1	11-A	119	VAL	Peptide
1	11-A	16	MET	Peptide
1	110-A	17	GLU	Peptide
1	110-A	67	GLY	Peptide
1	111-A	17	GLU	Peptide
1	111-A	20	MET	Peptide
1	112-A	1	MET	Peptide
1	112-A	20	MET	Peptide
1	113-A	1	MET	Peptide
1	113-A	17	GLU	Peptide
1	113-A	19	ALA	Peptide
1	113-A	20	MET	Peptide
1	113-A	22	TRP	Peptide
1	114-A	128	TYR	Peptide
1	114-A	17	GLU	Peptide
1	114-A	19	ALA	Peptide
1	114-A	20	MET	Peptide
1	115-A	17	GLU	Peptide
1	115-A	19	ALA	Peptide
1	115-A	20	MET	Peptide
1	116-A	121	GLY	Peptide
1	116-A	19	ALA	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	116-A	22	TRP	Peptide
1	117-A	17	GLU	Peptide
1	117-A	18	ASN	Peptide,Mainchain
1	117-A	21	PRO	Peptide
1	12-A	119	VAL	Peptide
1	12-A	16	MET	Peptide
1	12-A	21	PRO	Peptide
1	122-A	127	ASP	Peptide
1	122-A	129	GLU	Peptide
1	122-A	130	PRO	Peptide
1	124-A	128	TYR	Peptide
1	126-A	22	TRP	Peptide
1	127-A	120	GLU	Peptide
1	13-A	16	MET	Peptide
1	13-A	17	GLU	Peptide
1	13-A	21	PRO	Peptide
1	130-A	67	GLY	Peptide
1	131-A	118	GLU	Peptide
1	131-A	128	TYR	Peptide
1	132-A	118	GLU	Peptide
1	132-A	119	VAL	Peptide
1	132-A	52	ARG	Peptide
1	133-A	118	GLU	Peptide
1	133-A	51	GLY	Peptide
1	133-A	52	ARG	Peptide
1	134-A	52	ARG	Peptide
1	136-A	18	ASN	Peptide
1	136-A	51	GLY	Peptide
1	137-A	129	GLU	Peptide
1	137-A	18	ASN	Peptide
1	138-A	10	VAL	Peptide
1	138-A	129	GLU	Peptide
1	138-A	20	MET	Peptide
1	139-A	18	ASN	Peptide
1	14-A	17	GLU	Peptide
1	14-A	19	ALA	Peptide
1	14-A	21	PRO	Peptide
1	140-A	131	ASP	Peptide
1	140-A	18	ASN	Peptide
1	141-A	18	ASN	Peptide
1	143-A	129	GLU	Peptide
1	143-A	18	ASN	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	144-A	129	GLU	Peptide
1	144-A	18	ASN	Peptide
1	145-A	128	TYR	Peptide
1	145-A	129	GLU	Peptide
1	145-A	130	PRO	Peptide
1	145-A	18	ASN	Peptide
1	146-A	128	TYR	Peptide
1	146-A	130	PRO	Peptide
1	146-A	20	MET	Peptide
1	146-A	21	PRO	Peptide
1	147-A	129	GLU	Peptide
1	149-A	20	MET	Peptide
1	149-A	85	CYS	Peptide
1	15-A	128	TYR	Peptide
1	150-A	129	GLU	Peptide
1	150-A	83	ALA	Peptide
1	151-A	129	GLU	Peptide
1	151-A	130	PRO	Peptide
1	152-A	129	GLU	Peptide
1	152-A	130	PRO	Peptide
1	154-A	129	GLU	Peptide
1	155-A	129	GLU	Peptide
1	155-A	130	PRO	Peptide
1	156-A	129	GLU	Peptide
1	157-A	128	TYR	Peptide
1	157-A	65	GLN	Peptide
1	157-A	85	CYS	Peptide
1	158-A	130	PRO	Peptide
1	158-A	67	GLY	Peptide
1	159-A	1	MET	Peptide
1	159-A	129	GLU	Peptide
1	159-A	131	ASP	Peptide
1	159-A	63	SER	Peptide
1	159-A	86	GLY	Peptide
1	16-A	128	TYR	Peptide
1	16-A	16	MET	Peptide
1	16-A	18	ASN	Peptide
1	160-A	129	GLU	Peptide
1	160-A	131	ASP	Peptide
1	160-A	86	GLY	Peptide
1	161-A	128	TYR	Peptide
1	161-A	129	GLU	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	161-A	130	PRO	Peptide
1	162-A	127	ASP	Peptide
1	162-A	128	TYR	Peptide
1	162-A	130	PRO	Peptide
1	162-A	51	GLY	Peptide
1	162-A	67	GLY	Peptide
1	163-A	127	ASP	Peptide
1	163-A	128	TYR	Peptide
1	163-A	130	PRO	Peptide
1	163-A	131	ASP	Peptide
1	163-A	67	GLY	Peptide
1	164-A	126	PRO	Peptide
1	164-A	127	ASP	Peptide
1	164-A	128	TYR	Peptide
1	164-A	130	PRO	Peptide
1	164-A	67	GLY	Peptide
1	165-A	129	GLU	Peptide
1	166-A	128	TYR	Peptide
1	166-A	129	GLU	Peptide
1	167-A	128	TYR	Peptide
1	17-A	16	MET	Peptide
1	17-A	17	GLU	Peptide
1	17-A	18	ASN	Peptide
1	17-A	20	MET	Peptide
1	18-A	16	MET	Peptide
1	18-A	17	GLU	Peptide
1	19-A	17	GLU	Peptide
1	19-A	21	PRO	Peptide
1	2-A	20	MET	Peptide
1	20-A	16	MET	Peptide
1	20-A	87	ASP	Peptide
1	21-A	17	GLU	Peptide
1	21-A	87	ASP	Peptide
1	22-A	87	ASP	Peptide
1	23-A	17	GLU	Peptide
1	23-A	18	ASN	Peptide
1	23-A	87	ASP	Peptide
1	24-A	128	TYR	Peptide
1	24-A	18	ASN	Peptide
1	25-A	1	MET	Peptide
1	25-A	18	ASN	Peptide
1	25-A	86	GLY	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	26-A	1	MET	Peptide
1	26-A	18	ASN	Peptide
1	26-A	86	GLY	Peptide
1	27-A	86	GLY	Peptide
1	28-A	129	GLU	Peptide
1	28-A	20	MET	Peptide
1	28-A	86	GLY	Peptide
1	29-A	16	MET	Peptide
1	3-A	129	GLU	Peptide
1	30-A	86	GLY	Peptide
1	31-A	86	GLY	Peptide
1	31-A	89	PRO	Peptide
1	32-A	16	MET	Peptide
1	32-A	18	ASN	Peptide
1	32-A	87	ASP	Peptide
1	32-A	89	PRO	Peptide
1	33-A	118	GLU	Peptide
1	33-A	127	ASP	Peptide
1	33-A	141	HIS	Peptide
1	33-A	18	ASN	Peptide
1	33-A	22	TRP	Peptide
1	33-A	88	VAL	Peptide
1	34-A	128	TYR	Peptide
1	34-A	86	GLY	Peptide
1	34-A	88	VAL	Peptide
1	35-A	19	ALA	Peptide
1	35-A	88	VAL	Peptide
1	36-A	23	ASN	Peptide
1	36-A	67	GLY	Peptide
1	36-A	87	ASP	Peptide
1	36-A	88	VAL	Peptide
1	37-A	141	HIS	Peptide
1	37-A	87	ASP	Peptide
1	38-A	19	ALA	Peptide
1	38-A	87	ASP	Peptide
1	39-A	87	ASP	Peptide
1	4-A	127	ASP	Peptide
1	4-A	129	GLU	Peptide
1	4-A	86	GLY	Peptide
1	40-A	18	ASN	Peptide
1	40-A	87	ASP	Peptide
1	41-A	121	GLY	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	41-A	16	MET	Peptide
1	41-A	86	GLY	Peptide
1	41-A	88	VAL	Peptide
1	42-A	16	MET	Peptide
1	42-A	86	GLY	Peptide
1	43-A	16	MET	Peptide
1	44-A	16	MET	Peptide
1	44-A	87	ASP	Peptide
1	45-A	17	GLU	Peptide
1	45-A	87	ASP	Peptide
1	46-A	121	GLY	Peptide
1	46-A	86	GLY	Peptide
1	46-A	87	ASP	Peptide
1	47-A	88	VAL	Peptide
1	48-A	86	GLY	Peptide
1	48-A	88	VAL	Peptide
1	49-A	119	VAL	Peptide
1	49-A	86	GLY	Peptide
1	49-A	87	ASP	Peptide
1	49-A	88	VAL	Peptide
1	5-A	129	GLU	Peptide
1	5-A	17	GLU	Peptide
1	5-A	18	ASN	Peptide
1	50-A	119	VAL	Peptide
1	50-A	84	ALA	Peptide
1	50-A	86	GLY	Peptide
1	50-A	87	ASP	Peptide
1	51-A	120	GLU	Peptide
1	51-A	85	CYS	Peptide
1	51-A	87	ASP	Peptide
1	52-A	120	GLU	Peptide
1	52-A	84	ALA	Peptide
1	52-A	85	CYS	Peptide
1	52-A	87	ASP	Peptide
1	53-A	120	GLU	Peptide
1	53-A	85	CYS	Peptide
1	53-A	86	GLY	Peptide
1	53-A	87	ASP	Peptide
1	57-A	20	MET	Peptide
1	6-A	16	MET	Peptide
1	6-A	17	GLU	Peptide
1	61-A	129	GLU	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	62-A	126	PRO	Peptide
1	63-A	20	MET	Peptide
1	66-A	128	TYR	Peptide
1	66-A	20	MET	Peptide
1	66-A	87	ASP	Peptide
1	67-A	87	ASP	Peptide
1	68-A	20	MET	Peptide
1	68-A	21	PRO	Peptide
1	69-A	20	MET	Peptide
1	7-A	127	ASP	Peptide
1	7-A	16	MET	Peptide
1	7-A	18	ASN	Peptide
1	7-A	19	ALA	Peptide
1	7-A	20	MET	Peptide
1	70-A	20	MET	Peptide
1	71-A	20	MET	Peptide
1	71-A	21	PRO	Peptide
1	72-A	17	GLU	Peptide
1	72-A	18	ASN	Peptide
1	72-A	21	PRO	Peptide
1	72-A	65	GLN	Peptide
1	73-A	19	ALA	Peptide
1	73-A	65	GLN	Peptide
1	74-A	65	GLN	Peptide
1	75-A	128	TYR	Peptide
1	78-A	127	ASP	Peptide
1	79-A	126	PRO	Peptide
1	79-A	127	ASP	Peptide
1	8-A	119	VAL	Peptide
1	8-A	127	ASP	Peptide
1	8-A	16	MET	Peptide
1	8-A	20	MET	Peptide
1	80-A	126	PRO	Peptide
1	80-A	127	ASP	Peptide
1	81-A	127	ASP	Peptide
1	81-A	129	GLU	Peptide
1	82-A	129	GLU	Peptide
1	83-A	129	GLU	Peptide
1	84-A	130	PRO	Peptide
1	85-A	130	PRO	Peptide
1	86-A	127	ASP	Peptide
1	86-A	130	PRO	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	88-A	129	GLU	Peptide
1	89-A	1	MET	Peptide
1	89-A	129	GLU	Peptide
1	9-A	119	VAL	Peptide
1	9-A	15	GLY	Peptide
1	9-A	18	ASN	Peptide
1	9-A	19	ALA	Peptide
1	9-A	67	GLY	Peptide
1	90-A	128	TYR	Peptide
1	90-A	129	GLU	Peptide
1	91-A	129	GLU	Peptide
1	94-A	18	ASN	Peptide
1	95-A	18	ASN	Peptide
1	97-A	18	ASN	Peptide
1	98-A	18	ASN	Peptide
1	99-A	18	ASN	Peptide

4.2 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	1268	1223	1223	0	0
1	2-A	1268	1223	1223	0	0
1	3-A	1268	1223	1223	0	0
1	4-A	1268	1223	1223	0	0
1	5-A	1268	1223	1223	0	0
1	6-A	1268	1223	1223	0	0
1	7-A	1268	1223	1223	0	0
1	8-A	1268	1223	1223	0	0
1	9-A	1268	1223	1223	0	0
1	10-A	1268	1223	1223	0	0
1	11-A	1268	1223	1223	0	0
1	12-A	1268	1223	1222	0	0
1	13-A	1268	1223	1223	0	0
1	14-A	1268	1223	1223	0	0
1	15-A	1268	1223	1223	0	0
1	16-A	1268	1223	1223	0	0
1	17-A	1268	1223	1223	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	18-A	1268	1223	1223	0	0
1	19-A	1268	1223	1223	0	0
1	20-A	1268	1223	1223	0	0
1	21-A	1268	1223	1223	0	0
1	22-A	1268	1223	1223	0	0
1	23-A	1268	1223	1223	0	0
1	24-A	1268	1223	1223	0	0
1	25-A	1268	1223	1223	0	0
1	26-A	1268	1223	1223	0	0
1	27-A	1268	1223	1222	0	0
1	28-A	1268	1223	1158	0	0
1	29-A	1268	1223	0	0	0
1	30-A	1268	1223	0	0	0
1	31-A	1268	1223	0	0	0
1	32-A	1268	1223	0	0	0
1	33-A	1268	1223	0	0	0
1	34-A	1268	1223	0	0	0
1	35-A	1268	1223	0	0	0
1	36-A	1268	1223	0	0	0
1	37-A	1268	1223	0	0	0
1	38-A	1268	1223	0	0	0
1	39-A	1268	1223	0	0	0
1	40-A	1268	1223	0	0	0
1	41-A	1268	1223	0	0	0
1	42-A	1268	1223	0	0	0
1	43-A	1268	1223	0	0	0
1	44-A	1268	1223	0	0	0
1	45-A	1268	1223	0	0	0
1	46-A	1268	1223	0	0	0
1	47-A	1268	1223	0	0	0
1	48-A	1268	1223	0	0	0
1	49-A	1268	1223	0	0	0
1	50-A	1268	1223	0	0	0
1	51-A	1268	1223	0	0	0
1	52-A	1268	1223	0	0	0
1	53-A	1268	1223	0	0	0
1	54-A	1268	1223	0	0	0
1	55-A	1268	1223	0	0	0
1	56-A	1268	1223	0	0	0
1	57-A	1268	1223	0	0	0
1	58-A	1268	1223	0	0	0
1	59-A	1268	1223	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	60-A	1268	1223	0	0	0
1	61-A	1268	1223	0	0	0
1	62-A	1268	1223	0	0	0
1	63-A	1268	1223	0	0	0
1	64-A	1268	1223	0	0	0
1	65-A	1268	1223	0	0	0
1	66-A	1268	1223	0	0	0
1	67-A	1268	1223	0	0	0
1	68-A	1268	1223	0	0	0
1	69-A	1268	1223	0	0	0
1	70-A	1268	1223	0	0	0
1	71-A	1268	1223	0	0	0
1	72-A	1268	1223	0	0	0
1	73-A	1268	1223	0	0	0
1	74-A	1268	1223	0	0	0
1	75-A	1268	1223	0	0	0
1	76-A	1268	1223	0	0	0
1	77-A	1268	1223	0	0	0
1	78-A	1268	1223	0	0	0
1	79-A	1268	1223	0	0	0
1	80-A	1268	1223	0	0	0
1	81-A	1268	1223	0	0	0
1	82-A	1268	1223	0	0	0
1	83-A	1268	1223	0	0	0
1	84-A	1268	1223	0	0	0
1	85-A	1268	1223	0	0	0
1	86-A	1268	1223	0	0	0
1	87-A	1268	1223	0	0	0
1	88-A	1268	1223	0	0	0
1	89-A	1268	1223	0	0	0
1	90-A	1268	1223	0	0	0
1	91-A	1268	1223	0	0	0
1	92-A	1268	1223	0	0	0
1	93-A	1268	1223	0	0	0
1	94-A	1268	1223	0	0	0
1	95-A	1268	1223	0	0	0
1	96-A	1268	1223	0	0	0
1	97-A	1268	1223	0	0	0
1	98-A	1268	1223	0	0	0
1	99-A	1268	1223	0	0	0
1	100-A	1268	1223	0	0	0
1	101-A	1268	1223	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	102-A	1268	1223	0	0	0
1	103-A	1268	1223	0	0	0
1	104-A	1268	1223	0	0	0
1	105-A	1268	1223	0	0	0
1	106-A	1268	1223	0	0	0
1	107-A	1268	1223	0	0	0
1	108-A	1268	1223	0	0	0
1	109-A	1268	1223	0	0	0
1	110-A	1268	1223	0	0	0
1	111-A	1268	1223	0	0	0
1	112-A	1268	1223	0	0	0
1	113-A	1268	1223	0	0	0
1	114-A	1268	1223	0	0	0
1	115-A	1268	1223	0	0	0
1	116-A	1268	1223	0	0	0
1	117-A	1268	1223	0	0	0
1	118-A	1268	1223	0	0	0
1	119-A	1268	1223	0	0	0
1	120-A	1268	1223	0	0	0
1	121-A	1268	1223	0	0	0
1	122-A	1268	1223	0	0	0
1	123-A	1268	1223	0	0	0
1	124-A	1268	1223	0	0	0
1	125-A	1268	1223	0	0	0
1	126-A	1268	1223	0	0	0
1	127-A	1268	1223	0	0	0
1	128-A	1268	1223	0	0	0
1	129-A	1268	1223	0	0	0
1	130-A	1268	1223	0	0	0
1	131-A	1268	1223	0	0	0
1	132-A	1268	1223	0	0	0
1	133-A	1268	1223	0	0	0
1	134-A	1268	1223	0	0	0
1	135-A	1268	1223	0	0	0
1	136-A	1268	1223	0	0	0
1	137-A	1268	1223	0	0	0
1	138-A	1268	1223	0	0	0
1	139-A	1268	1223	0	0	0
1	140-A	1268	1223	0	0	0
1	141-A	1268	1223	0	0	0
1	142-A	1268	1223	0	0	0
1	143-A	1268	1223	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	144-A	1268	1223	0	0	0
1	145-A	1268	1223	0	0	0
1	146-A	1268	1223	0	0	0
1	147-A	1268	1223	0	0	0
1	148-A	1268	1223	0	0	0
1	149-A	1268	1223	0	0	0
1	150-A	1268	1223	0	0	0
1	151-A	1268	1223	0	0	0
1	152-A	1268	1223	0	0	0
1	153-A	1268	1223	0	0	0
1	154-A	1268	1223	0	0	0
1	155-A	1268	1223	0	0	0
1	156-A	1268	1223	0	0	0
1	157-A	1268	1223	0	0	0
1	158-A	1268	1223	0	0	0
1	159-A	1268	1223	0	0	0
1	160-A	1268	1223	0	0	0
1	161-A	1268	1223	0	0	0
1	162-A	1268	1223	0	0	0
1	163-A	1268	1223	0	0	0
1	164-A	1268	1223	0	0	0
1	165-A	1268	1223	0	0	0
1	166-A	1268	1223	0	0	0
1	167-A	1268	1223	0	0	0
2	1-A	32	17	17	0	0
2	2-A	32	17	17	0	0
2	3-A	32	17	17	0	0
2	4-A	32	17	17	0	0
2	5-A	32	17	17	0	0
2	6-A	32	17	17	0	0
2	7-A	32	17	17	0	0
2	8-A	32	17	17	0	0
2	9-A	32	17	17	0	0
2	10-A	32	17	17	0	0
2	11-A	32	17	17	0	0
2	12-A	32	17	17	0	0
2	13-A	32	17	17	0	0
2	14-A	32	17	17	0	0
2	15-A	32	17	17	0	0
2	16-A	32	17	17	0	0
2	17-A	32	17	17	0	0
2	18-A	32	17	17	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
2	19-A	32	17	17	0	0
2	20-A	32	17	17	0	0
2	21-A	32	17	17	0	0
2	22-A	32	17	17	0	0
2	23-A	32	17	17	0	0
2	24-A	32	17	17	0	0
2	25-A	32	17	17	0	0
2	26-A	32	17	17	0	0
2	27-A	32	17	17	0	0
2	28-A	32	17	0	0	0
2	29-A	32	17	0	0	0
2	30-A	32	17	0	0	0
2	31-A	32	17	0	0	0
2	32-A	32	17	0	0	0
2	33-A	32	17	0	0	0
2	34-A	32	17	0	0	0
2	35-A	32	17	0	0	0
2	36-A	32	17	0	0	0
2	37-A	32	17	0	0	0
2	38-A	32	17	0	0	0
2	39-A	32	17	0	0	0
2	40-A	32	17	0	0	0
2	41-A	32	17	0	0	0
2	42-A	32	17	0	0	0
2	43-A	32	17	0	0	0
2	44-A	32	17	0	0	0
2	45-A	32	17	0	0	0
2	46-A	32	17	0	0	0
2	47-A	32	17	0	0	0
2	48-A	32	17	0	0	0
2	49-A	32	17	0	0	0
2	50-A	32	17	0	0	0
2	51-A	32	17	0	0	0
2	52-A	32	17	0	0	0
2	53-A	32	17	0	0	0
2	54-A	32	17	0	0	0
2	55-A	32	17	0	0	0
2	56-A	32	17	0	0	0
2	57-A	32	17	0	0	0
2	58-A	32	17	0	0	0
2	59-A	32	17	0	0	0
2	60-A	32	17	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
2	61-A	32	17	0	0	0
2	62-A	32	17	0	0	0
2	63-A	32	17	0	0	0
2	64-A	32	17	0	0	0
2	65-A	32	17	0	0	0
2	66-A	32	17	0	0	0
2	67-A	32	17	0	0	0
2	68-A	32	17	0	0	0
2	69-A	32	17	0	0	0
2	70-A	32	17	0	0	0
2	71-A	32	17	0	0	0
2	72-A	32	17	0	0	0
2	73-A	32	17	0	0	0
2	74-A	32	17	0	0	0
2	75-A	32	17	0	0	0
2	76-A	32	17	0	0	0
2	77-A	32	17	0	0	0
2	78-A	32	17	0	0	0
2	79-A	32	17	0	0	0
2	80-A	32	17	0	0	0
2	81-A	32	17	0	0	0
2	82-A	32	17	0	0	0
2	83-A	32	17	0	0	0
2	84-A	32	17	0	0	0
2	85-A	32	17	0	0	0
2	86-A	32	17	0	0	0
2	87-A	32	17	0	0	0
2	88-A	32	17	0	0	0
2	89-A	32	17	0	0	0
2	90-A	32	17	0	0	0
2	91-A	32	17	0	0	0
2	92-A	32	17	0	0	0
2	93-A	32	17	0	0	0
2	94-A	32	17	0	0	0
2	95-A	32	17	0	0	0
2	96-A	32	17	0	0	0
2	97-A	32	17	0	0	0
2	98-A	32	17	0	0	0
2	99-A	32	17	0	0	0
2	100-A	32	17	0	0	0
2	101-A	32	17	0	0	0
2	102-A	32	17	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
2	103-A	32	17	0	0	0
2	104-A	32	17	0	0	0
2	105-A	32	17	0	0	0
2	106-A	32	17	0	0	0
2	107-A	32	17	0	0	0
2	108-A	32	17	0	0	0
2	109-A	32	17	0	0	0
2	110-A	32	17	0	0	0
2	111-A	32	17	0	0	0
2	112-A	32	17	0	0	0
2	113-A	32	17	0	0	0
2	114-A	32	17	0	0	0
2	115-A	32	17	0	0	0
2	116-A	32	17	0	0	0
2	117-A	32	17	0	0	0
2	118-A	32	17	0	0	0
2	119-A	32	17	0	0	0
2	120-A	32	17	0	0	0
2	121-A	32	17	0	0	0
2	122-A	32	17	0	0	0
2	123-A	32	17	0	0	0
2	124-A	32	17	0	0	0
2	125-A	32	17	0	0	0
2	126-A	32	17	0	0	0
2	127-A	32	17	0	0	0
2	128-A	32	17	0	0	0
2	129-A	32	17	0	0	0
2	130-A	32	17	0	0	0
2	131-A	32	17	0	0	0
2	132-A	32	17	0	0	0
2	133-A	32	17	0	0	0
2	134-A	32	17	0	0	0
2	135-A	32	17	0	0	0
2	136-A	32	17	0	0	0
2	137-A	32	17	0	0	0
2	138-A	32	17	0	0	0
2	139-A	32	17	0	0	0
2	140-A	32	17	0	0	0
2	141-A	32	17	0	0	0
2	142-A	32	17	0	0	0
2	143-A	32	17	0	0	0
2	144-A	32	17	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
2	145-A	32	17	0	0	0
2	146-A	32	17	0	0	0
2	147-A	32	17	0	0	0
2	148-A	32	17	0	0	0
2	149-A	32	17	0	0	0
2	150-A	32	17	0	0	0
2	151-A	32	17	0	0	0
2	152-A	32	17	0	0	0
2	153-A	32	17	0	0	0
2	154-A	32	17	0	0	0
2	155-A	32	17	0	0	0
2	156-A	32	17	0	0	0
2	157-A	32	17	0	0	0
2	158-A	32	17	0	0	0
2	159-A	32	17	0	0	0
2	160-A	32	17	0	0	0
2	161-A	32	17	0	0	0
2	162-A	32	17	0	0	0
2	163-A	32	17	0	0	0
2	164-A	32	17	0	0	0
2	165-A	32	17	0	0	0
2	166-A	32	17	0	0	0
2	167-A	32	17	0	0	0
3	1-A	2	0	0	0	0
3	2-A	2	0	0	0	0
3	3-A	2	0	0	0	0
3	4-A	2	0	0	0	0
3	5-A	2	0	0	0	0
3	6-A	2	0	0	0	0
3	7-A	2	0	0	0	0
3	8-A	2	0	0	0	0
3	9-A	2	0	0	0	0
3	10-A	2	0	0	0	0
3	11-A	2	0	0	0	0
3	12-A	2	0	0	0	0
3	13-A	2	0	0	0	0
3	14-A	2	0	0	0	0
3	15-A	2	0	0	0	0
3	16-A	2	0	0	0	0
3	17-A	2	0	0	0	0
3	18-A	2	0	0	0	0
3	19-A	2	0	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
3	20-A	2	0	0	0	0
3	21-A	2	0	0	0	0
3	22-A	2	0	0	0	0
3	23-A	2	0	0	0	0
3	24-A	2	0	0	0	0
3	25-A	2	0	0	0	0
3	26-A	2	0	0	0	0
3	27-A	2	0	0	0	0
3	28-A	2	0	0	0	0
3	29-A	2	0	0	0	0
3	30-A	2	0	0	0	0
3	31-A	2	0	0	0	0
3	32-A	2	0	0	0	0
3	33-A	2	0	0	0	0
3	34-A	2	0	0	0	0
3	35-A	2	0	0	0	0
3	36-A	2	0	0	0	0
3	37-A	2	0	0	0	0
3	38-A	2	0	0	0	0
3	39-A	2	0	0	0	0
3	40-A	2	0	0	0	0
3	41-A	2	0	0	0	0
3	42-A	2	0	0	0	0
3	43-A	2	0	0	0	0
3	44-A	2	0	0	0	0
3	45-A	2	0	0	0	0
3	46-A	2	0	0	0	0
3	47-A	2	0	0	0	0
3	48-A	2	0	0	0	0
3	49-A	2	0	0	0	0
3	50-A	2	0	0	0	0
3	51-A	2	0	0	0	0
3	52-A	2	0	0	0	0
3	53-A	2	0	0	0	0
3	54-A	2	0	0	0	0
3	55-A	2	0	0	0	0
3	56-A	2	0	0	0	0
3	57-A	2	0	0	0	0
3	58-A	2	0	0	0	0
3	59-A	2	0	0	0	0
3	60-A	2	0	0	0	0
3	61-A	2	0	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
3	62-A	2	0	0	0	0
3	63-A	2	0	0	0	0
3	64-A	2	0	0	0	0
3	65-A	2	0	0	0	0
3	66-A	2	0	0	0	0
3	67-A	2	0	0	0	0
3	68-A	2	0	0	0	0
3	69-A	2	0	0	0	0
3	70-A	2	0	0	0	0
3	71-A	2	0	0	0	0
3	72-A	2	0	0	0	0
3	73-A	2	0	0	0	0
3	74-A	2	0	0	0	0
3	75-A	2	0	0	0	0
3	76-A	2	0	0	0	0
3	77-A	2	0	0	0	0
3	78-A	2	0	0	0	0
3	79-A	2	0	0	0	0
3	80-A	2	0	0	0	0
3	81-A	2	0	0	0	0
3	82-A	2	0	0	0	0
3	83-A	2	0	0	0	0
3	84-A	2	0	0	0	0
3	85-A	2	0	0	0	0
3	86-A	2	0	0	0	0
3	87-A	2	0	0	0	0
3	88-A	2	0	0	0	0
3	89-A	2	0	0	0	0
3	90-A	2	0	0	0	0
3	91-A	2	0	0	0	0
3	92-A	2	0	0	0	0
3	93-A	2	0	0	0	0
3	94-A	2	0	0	0	0
3	95-A	2	0	0	0	0
3	96-A	2	0	0	0	0
3	97-A	2	0	0	0	0
3	98-A	2	0	0	0	0
3	99-A	2	0	0	0	0
3	100-A	2	0	0	0	0
3	101-A	2	0	0	0	0
3	102-A	2	0	0	0	0
3	103-A	2	0	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
3	104-A	2	0	0	0	0
3	105-A	2	0	0	0	0
3	106-A	2	0	0	0	0
3	107-A	2	0	0	0	0
3	108-A	2	0	0	0	0
3	109-A	2	0	0	0	0
3	110-A	2	0	0	0	0
3	111-A	2	0	0	0	0
3	112-A	2	0	0	0	0
3	113-A	2	0	0	0	0
3	114-A	2	0	0	0	0
3	115-A	2	0	0	0	0
3	116-A	2	0	0	0	0
3	117-A	2	0	0	0	0
3	118-A	2	0	0	0	0
3	119-A	2	0	0	0	0
3	120-A	2	0	0	0	0
3	121-A	2	0	0	0	0
3	122-A	2	0	0	0	0
3	123-A	2	0	0	0	0
3	124-A	2	0	0	0	0
3	125-A	2	0	0	0	0
3	126-A	2	0	0	0	0
3	127-A	2	0	0	0	0
3	128-A	2	0	0	0	0
3	129-A	2	0	0	0	0
3	130-A	2	0	0	0	0
3	131-A	2	0	0	0	0
3	132-A	2	0	0	0	0
3	133-A	2	0	0	0	0
3	134-A	2	0	0	0	0
3	135-A	2	0	0	0	0
3	136-A	2	0	0	0	0
3	137-A	2	0	0	0	0
3	138-A	2	0	0	0	0
3	139-A	2	0	0	0	0
3	140-A	2	0	0	0	0
3	141-A	2	0	0	0	0
3	142-A	2	0	0	0	0
3	143-A	2	0	0	0	0
3	144-A	2	0	0	0	0
3	145-A	2	0	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
3	146-A	2	0	0	0	0
3	147-A	2	0	0	0	0
3	148-A	2	0	0	0	0
3	149-A	2	0	0	0	0
3	150-A	2	0	0	0	0
3	151-A	2	0	0	0	0
3	152-A	2	0	0	0	0
3	153-A	2	0	0	0	0
3	154-A	2	0	0	0	0
3	155-A	2	0	0	0	0
3	156-A	2	0	0	0	0
3	157-A	2	0	0	0	0
3	158-A	2	0	0	0	0
3	159-A	2	0	0	0	0
3	160-A	2	0	0	0	0
3	161-A	2	0	0	0	0
3	162-A	2	0	0	0	0
3	163-A	2	0	0	0	0
3	164-A	2	0	0	0	0
3	165-A	2	0	0	0	0
3	166-A	2	0	0	0	0
3	167-A	2	0	0	0	0
4	1-A	48	24	24	0	0
4	2-A	48	24	24	0	0
4	3-A	48	24	24	0	0
4	4-A	48	24	24	0	0
4	5-A	48	24	24	0	0
4	6-A	48	24	24	0	0
4	7-A	48	24	24	0	0
4	8-A	48	24	24	0	0
4	9-A	48	24	24	0	0
4	10-A	48	24	24	0	0
4	11-A	48	24	24	0	0
4	12-A	48	24	24	0	0
4	13-A	48	24	24	0	0
4	14-A	48	24	24	0	0
4	15-A	48	24	24	0	0
4	16-A	48	24	24	0	0
4	17-A	48	24	24	0	0
4	18-A	48	24	24	0	0
4	19-A	48	24	24	0	0
4	20-A	48	24	24	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
4	21-A	48	24	24	0	0
4	22-A	48	24	24	0	0
4	23-A	48	24	24	0	0
4	24-A	48	24	24	0	0
4	25-A	48	24	24	0	0
4	26-A	48	24	24	0	0
4	27-A	48	24	24	0	0
4	28-A	48	24	0	0	0
4	29-A	48	24	0	0	0
4	30-A	48	24	0	0	0
4	31-A	48	24	0	0	0
4	32-A	48	24	0	0	0
4	33-A	48	24	0	0	0
4	34-A	48	24	0	0	0
4	35-A	48	24	0	0	0
4	36-A	48	24	0	0	0
4	37-A	48	24	0	0	0
4	38-A	48	24	0	0	0
4	39-A	48	24	0	0	0
4	40-A	48	24	0	0	0
4	41-A	48	24	0	0	0
4	42-A	48	24	0	0	0
4	43-A	48	24	0	0	0
4	44-A	48	24	0	0	0
4	45-A	48	24	0	0	0
4	46-A	48	24	0	0	0
4	47-A	48	24	0	0	0
4	48-A	48	24	0	0	0
4	49-A	48	24	0	0	0
4	50-A	48	24	0	0	0
4	51-A	48	24	0	0	0
4	52-A	48	24	0	0	0
4	53-A	48	24	0	0	0
4	54-A	48	24	0	0	0
4	55-A	48	24	0	0	0
4	56-A	48	24	0	0	0
4	57-A	48	24	0	0	0
4	58-A	48	24	0	0	0
4	59-A	48	24	0	0	0
4	60-A	48	24	0	0	0
4	61-A	48	24	0	0	0
4	62-A	48	24	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
4	63-A	48	24	0	0	0
4	64-A	48	24	0	0	0
4	65-A	48	24	0	0	0
4	66-A	48	24	0	0	0
4	67-A	48	24	0	0	0
4	68-A	48	24	0	0	0
4	69-A	48	24	0	0	0
4	70-A	48	24	0	0	0
4	71-A	48	24	0	0	0
4	72-A	48	24	0	0	0
4	73-A	48	24	0	0	0
4	74-A	48	24	0	0	0
4	75-A	48	24	0	0	0
4	76-A	48	24	0	0	0
4	77-A	48	24	0	0	0
4	78-A	48	24	0	0	0
4	79-A	48	24	0	0	0
4	80-A	48	24	0	0	0
4	81-A	48	24	0	0	0
4	82-A	48	24	0	0	0
4	83-A	48	24	0	0	0
4	84-A	48	24	0	0	0
4	85-A	48	24	0	0	0
4	86-A	48	24	0	0	0
4	87-A	48	24	0	0	0
4	88-A	48	24	0	0	0
4	89-A	48	24	0	0	0
4	90-A	48	24	0	0	0
4	91-A	48	24	0	0	0
4	92-A	48	24	0	0	0
4	93-A	48	24	0	0	0
4	94-A	48	24	0	0	0
4	95-A	48	24	0	0	0
4	96-A	48	24	0	0	0
4	97-A	48	24	0	0	0
4	98-A	48	24	0	0	0
4	99-A	48	24	0	0	0
4	100-A	48	24	0	0	0
4	101-A	48	24	0	0	0
4	102-A	48	24	0	0	0
4	103-A	48	24	0	0	0
4	104-A	48	24	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
4	105-A	48	24	0	0	0
4	106-A	48	24	0	0	0
4	107-A	48	24	0	0	0
4	108-A	48	24	0	0	0
4	109-A	48	24	0	0	0
4	110-A	48	24	0	0	0
4	111-A	48	24	0	0	0
4	112-A	48	24	0	0	0
4	113-A	48	24	0	0	0
4	114-A	48	24	0	0	0
4	115-A	48	24	0	0	0
4	116-A	48	24	0	0	0
4	117-A	48	24	0	0	0
4	118-A	48	24	0	0	0
4	119-A	48	24	0	0	0
4	120-A	48	24	0	0	0
4	121-A	48	24	0	0	0
4	122-A	48	24	0	0	0
4	123-A	48	24	0	0	0
4	124-A	48	24	0	0	0
4	125-A	48	24	0	0	0
4	126-A	48	24	0	0	0
4	127-A	48	24	0	0	0
4	128-A	48	24	0	0	0
4	129-A	48	24	0	0	0
4	130-A	48	24	0	0	0
4	131-A	48	24	0	0	0
4	132-A	48	24	0	0	0
4	133-A	48	24	0	0	0
4	134-A	48	24	0	0	0
4	135-A	48	24	0	0	0
4	136-A	48	24	0	0	0
4	137-A	48	24	0	0	0
4	138-A	48	24	0	0	0
4	139-A	48	24	0	0	0
4	140-A	48	24	0	0	0
4	141-A	48	24	0	0	0
4	142-A	48	24	0	0	0
4	143-A	48	24	0	0	0
4	144-A	48	24	0	0	0
4	145-A	48	24	0	0	0
4	146-A	48	24	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
4	147-A	48	24	0	0	0
4	148-A	48	24	0	0	0
4	149-A	48	24	0	0	0
4	150-A	48	24	0	0	0
4	151-A	48	24	0	0	0
4	152-A	48	24	0	0	0
4	153-A	48	24	0	0	0
4	154-A	48	24	0	0	0
4	155-A	48	24	0	0	0
4	156-A	48	24	0	0	0
4	157-A	48	24	0	0	0
4	158-A	48	24	0	0	0
4	159-A	48	24	0	0	0
4	160-A	48	24	0	0	0
4	161-A	48	24	0	0	0
4	162-A	48	24	0	0	0
4	163-A	48	24	0	0	0
4	164-A	48	24	0	0	0
4	165-A	48	24	0	0	0
4	166-A	48	24	0	0	0
4	167-A	48	24	0	0	0
5	1-A	83	0	0	0	0
5	2-A	83	0	0	0	0
5	3-A	79	0	0	0	0
5	4-A	68	0	0	0	0
5	5-A	75	0	0	0	0
5	6-A	80	0	0	0	0
5	7-A	99	0	0	0	0
5	8-A	89	0	0	0	0
5	9-A	79	0	0	0	0
5	10-A	79	0	0	0	0
5	11-A	82	0	0	0	0
5	12-A	88	0	0	0	0
5	13-A	89	0	0	0	0
5	14-A	96	0	0	0	0
5	15-A	96	0	0	0	0
5	16-A	94	0	0	0	0
5	17-A	84	0	0	0	0
5	18-A	89	0	0	0	0
5	19-A	80	0	0	0	0
5	20-A	73	0	0	0	0
5	21-A	92	0	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
5	22-A	91	0	0	0	0
5	23-A	94	0	0	0	0
5	24-A	95	0	0	0	0
5	25-A	76	0	0	0	0
5	26-A	83	0	0	0	0
5	27-A	81	0	0	0	0
5	28-A	81	0	0	0	0
5	29-A	83	0	0	0	0
5	30-A	84	0	0	0	0
5	31-A	86	0	0	0	0
5	32-A	85	0	0	0	0
5	33-A	86	0	0	0	0
5	34-A	93	0	0	0	0
5	35-A	93	0	0	0	0
5	36-A	77	0	0	0	0
5	37-A	82	0	0	0	0
5	38-A	87	0	0	0	0
5	39-A	93	0	0	0	0
5	40-A	84	0	0	0	0
5	41-A	82	0	0	0	0
5	42-A	83	0	0	0	0
5	43-A	95	0	0	0	0
5	44-A	100	0	0	0	0
5	45-A	93	0	0	0	0
5	46-A	92	0	0	0	0
5	47-A	98	0	0	0	0
5	48-A	92	0	0	0	0
5	49-A	89	0	0	0	0
5	50-A	78	0	0	0	0
5	51-A	68	0	0	0	0
5	52-A	77	0	0	0	0
5	53-A	87	0	0	0	0
5	54-A	92	0	0	0	0
5	55-A	92	0	0	0	0
5	56-A	82	0	0	0	0
5	57-A	86	0	0	0	0
5	58-A	89	0	0	0	0
5	59-A	96	0	0	0	0
5	60-A	96	0	0	0	0
5	61-A	98	0	0	0	0
5	62-A	100	0	0	0	0
5	63-A	97	0	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
5	64-A	87	0	0	0	0
5	65-A	83	0	0	0	0
5	66-A	77	0	0	0	0
5	67-A	78	0	0	0	0
5	68-A	79	0	0	0	0
5	69-A	79	0	0	0	0
5	70-A	85	0	0	0	0
5	71-A	91	0	0	0	0
5	72-A	101	0	0	0	0
5	73-A	94	0	0	0	0
5	74-A	85	0	0	0	0
5	75-A	92	0	0	0	0
5	76-A	82	0	0	0	0
5	77-A	85	0	0	0	0
5	78-A	84	0	0	0	0
5	79-A	86	0	0	0	0
5	80-A	85	0	0	0	0
5	81-A	92	0	0	0	0
5	82-A	91	0	0	0	0
5	83-A	98	0	0	0	0
5	84-A	94	0	0	0	0
5	85-A	94	0	0	0	0
5	86-A	88	0	0	0	0
5	87-A	84	0	0	0	0
5	88-A	82	0	0	0	0
5	89-A	92	0	0	0	0
5	90-A	98	0	0	0	0
5	91-A	75	0	0	0	0
5	92-A	77	0	0	0	0
5	93-A	78	0	0	0	0
5	94-A	92	0	0	0	0
5	95-A	101	0	0	0	0
5	96-A	106	0	0	0	0
5	97-A	94	0	0	0	0
5	98-A	86	0	0	0	0
5	99-A	87	0	0	0	0
5	100-A	80	0	0	0	0
5	101-A	76	0	0	0	0
5	102-A	80	0	0	0	0
5	103-A	89	0	0	0	0
5	104-A	88	0	0	0	0
5	105-A	97	0	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
5	106-A	85	0	0	0	0
5	107-A	87	0	0	0	0
5	108-A	93	0	0	0	0
5	109-A	82	0	0	0	0
5	110-A	82	0	0	0	0
5	111-A	75	0	0	0	0
5	112-A	85	0	0	0	0
5	113-A	97	0	0	0	0
5	114-A	98	0	0	0	0
5	115-A	86	0	0	0	0
5	116-A	89	0	0	0	0
5	117-A	85	0	0	0	0
5	118-A	89	0	0	0	0
5	119-A	88	0	0	0	0
5	120-A	95	0	0	0	0
5	121-A	93	0	0	0	0
5	122-A	90	0	0	0	0
5	123-A	82	0	0	0	0
5	124-A	81	0	0	0	0
5	125-A	84	0	0	0	0
5	126-A	101	0	0	0	0
5	127-A	96	0	0	0	0
5	128-A	90	0	0	0	0
5	129-A	89	0	0	0	0
5	130-A	81	0	0	0	0
5	131-A	75	0	0	0	0
5	132-A	87	0	0	0	0
5	133-A	96	0	0	0	0
5	134-A	89	0	0	0	0
5	135-A	89	0	0	0	0
5	136-A	87	0	0	0	0
5	137-A	88	0	0	0	0
5	138-A	88	0	0	0	0
5	139-A	96	0	0	0	0
5	140-A	88	0	0	0	0
5	141-A	80	0	0	0	0
5	142-A	80	0	0	0	0
5	143-A	83	0	0	0	0
5	144-A	84	0	0	0	0
5	145-A	99	0	0	0	0
5	146-A	101	0	0	0	0
5	147-A	105	0	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
5	148-A	103	0	0	0	0
5	149-A	86	0	0	0	0
5	150-A	94	0	0	0	0
5	151-A	92	0	0	0	0
5	152-A	89	0	0	0	0
5	153-A	99	0	0	0	0
5	154-A	98	0	0	0	0
5	155-A	78	0	0	0	0
5	156-A	79	0	0	0	0
5	157-A	80	0	0	0	0
5	158-A	78	0	0	0	0
5	159-A	82	0	0	0	0
5	160-A	82	0	0	0	0
5	161-A	86	0	0	0	0
5	162-A	84	0	0	0	0
5	163-A	91	0	0	0	0
5	164-A	92	0	0	0	0
5	165-A	90	0	0	0	0
5	166-A	81	0	0	0	0
5	167-A	89	0	0	0	0
All	All	240066	211088	35284	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.

4.3 Torsion angles [i](#)

4.3.1 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	157/159 (99%)	145 (92%)	8 (5%)	4 (2%)	<div>50</div>
1	2-A	157/159 (99%)	143 (91%)	11 (7%)	3 (2%)	<div>80</div>

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	3-A	157/159 (99%)	150 (96%)	4 (2%)	3 (2%)	8	0
1	4-A	157/159 (99%)	146 (93%)	6 (4%)	5 (3%)	4	0
1	5-A	157/159 (99%)	147 (94%)	4 (2%)	6 (4%)	3	0
1	6-A	157/159 (99%)	144 (92%)	9 (6%)	4 (2%)	5	0
1	7-A	157/159 (99%)	147 (94%)	7 (4%)	3 (2%)	8	0
1	8-A	157/159 (99%)	142 (90%)	11 (7%)	4 (2%)	5	0
1	9-A	157/159 (99%)	144 (92%)	9 (6%)	4 (2%)	5	0
1	10-A	157/159 (99%)	146 (93%)	3 (2%)	8 (5%)	2	0
1	11-A	157/159 (99%)	144 (92%)	7 (4%)	6 (4%)	3	0
1	12-A	157/159 (99%)	147 (94%)	6 (4%)	4 (2%)	5	0
1	13-A	157/159 (99%)	145 (92%)	10 (6%)	2 (1%)	12	1
1	14-A	157/159 (99%)	146 (93%)	8 (5%)	3 (2%)	8	0
1	15-A	157/159 (99%)	147 (94%)	6 (4%)	4 (2%)	5	0
1	16-A	157/159 (99%)	144 (92%)	8 (5%)	5 (3%)	4	0
1	17-A	157/159 (99%)	146 (93%)	5 (3%)	6 (4%)	3	0
1	18-A	157/159 (99%)	142 (90%)	10 (6%)	5 (3%)	4	0
1	19-A	157/159 (99%)	148 (94%)	4 (2%)	5 (3%)	4	0
1	20-A	157/159 (99%)	148 (94%)	8 (5%)	1 (1%)	25	6
1	21-A	157/159 (99%)	147 (94%)	6 (4%)	4 (2%)	5	0
1	22-A	157/159 (99%)	145 (92%)	9 (6%)	3 (2%)	8	0
1	23-A	157/159 (99%)	148 (94%)	5 (3%)	4 (2%)	5	0
1	24-A	157/159 (99%)	147 (94%)	4 (2%)	6 (4%)	3	0
1	25-A	157/159 (99%)	145 (92%)	6 (4%)	6 (4%)	3	0
1	26-A	157/159 (99%)	142 (90%)	9 (6%)	6 (4%)	3	0
1	27-A	157/159 (99%)	143 (91%)	10 (6%)	4 (2%)	5	0
1	28-A	151/159 (95%)	137 (91%)	7 (5%)	7 (5%)	2	0
All	All	4390/4452 (99%)	4065 (93%)	200 (5%)	125 (3%)	5	0

All (125) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	18	ASN
1	1-A	119	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	130	PRO
1	3-A	130	PRO
1	4-A	18	ASN
1	4-A	130	PRO
1	5-A	18	ASN
1	5-A	130	PRO
1	6-A	127	ASP
1	7-A	22	TRP
1	8-A	21	PRO
1	9-A	18	ASN
1	9-A	19	ALA
1	9-A	21	PRO
1	10-A	18	ASN
1	10-A	21	PRO
1	10-A	68	THR
1	11-A	18	ASN
1	11-A	21	PRO
1	11-A	22	TRP
1	12-A	16	MET
1	12-A	18	ASN
1	12-A	21	PRO
1	12-A	22	TRP
1	14-A	21	PRO
1	14-A	22	TRP
1	15-A	17	GLU
1	15-A	130	PRO
1	15-A	131	ASP
1	16-A	19	ALA
1	16-A	130	PRO
1	17-A	20	MET
1	17-A	21	PRO
1	17-A	129	GLU
1	17-A	130	PRO
1	18-A	21	PRO
1	18-A	143	ALA
1	19-A	17	GLU
1	19-A	21	PRO
1	19-A	143	ALA
1	20-A	17	GLU
1	21-A	18	ASN
1	21-A	21	PRO
1	21-A	87	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	22-A	87	ASP
1	22-A	88	VAL
1	23-A	17	GLU
1	23-A	19	ALA
1	23-A	20	MET
1	23-A	88	VAL
1	24-A	20	MET
1	24-A	85	CYS
1	24-A	87	ASP
1	24-A	128	TYR
1	25-A	19	ALA
1	25-A	20	MET
1	26-A	17	GLU
1	26-A	18	ASN
1	26-A	19	ALA
1	26-A	20	MET
1	26-A	21	PRO
1	26-A	88	VAL
1	27-A	87	ASP
1	28-A	21	PRO
1	28-A	87	ASP
1	28-A	88	VAL
1	2-A	18	ASN
1	2-A	129	GLU
1	3-A	17	GLU
1	6-A	130	PRO
1	7-A	137	PHE
1	8-A	16	MET
1	10-A	128	TYR
1	11-A	16	MET
1	11-A	68	THR
1	11-A	119	VAL
1	13-A	21	PRO
1	13-A	22	TRP
1	15-A	20	MET
1	16-A	21	PRO
1	17-A	120	GLU
1	18-A	120	GLU
1	19-A	144	ASP
1	25-A	88	VAL
1	27-A	18	ASN
1	27-A	19	ALA

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	28-A	19	ALA
1	28-A	90	GLU
1	1-A	17	GLU
1	2-A	130	PRO
1	5-A	127	ASP
1	8-A	128	TYR
1	10-A	17	GLU
1	14-A	17	GLU
1	18-A	17	GLU
1	22-A	17	GLU
1	24-A	19	ALA
1	25-A	85	CYS
1	5-A	87	ASP
1	10-A	16	MET
1	18-A	137	PHE
1	25-A	16	MET
1	28-A	17	GLU
1	4-A	21	PRO
1	7-A	20	MET
1	9-A	16	MET
1	10-A	20	MET
1	16-A	129	GLU
1	21-A	127	ASP
1	25-A	21	PRO
1	27-A	88	VAL
1	28-A	20	MET
1	4-A	137	PHE
1	17-A	16	MET
1	24-A	18	ASN
1	4-A	129	GLU
1	5-A	52	ARG
1	3-A	129	GLU
1	6-A	20	MET
1	16-A	20	MET
1	19-A	136	VAL
1	8-A	67	GLY
1	10-A	66	PRO
1	5-A	129	GLU
1	6-A	129	GLU

4.3.2 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	136/136 (100%)	122 (90%)	14 (10%)	7	0
1	2-A	136/136 (100%)	122 (90%)	14 (10%)	7	0
1	3-A	136/136 (100%)	119 (88%)	17 (12%)	4	0
1	4-A	136/136 (100%)	121 (89%)	15 (11%)	6	0
1	5-A	136/136 (100%)	127 (93%)	9 (7%)	16	1
1	6-A	136/136 (100%)	119 (88%)	17 (12%)	4	0
1	7-A	136/136 (100%)	119 (88%)	17 (12%)	4	0
1	8-A	136/136 (100%)	123 (90%)	13 (10%)	8	0
1	9-A	136/136 (100%)	123 (90%)	13 (10%)	8	0
1	10-A	136/136 (100%)	126 (93%)	10 (7%)	13	1
1	11-A	136/136 (100%)	120 (88%)	16 (12%)	5	0
1	12-A	136/136 (100%)	119 (88%)	17 (12%)	4	0
1	13-A	136/136 (100%)	127 (93%)	9 (7%)	16	1
1	14-A	136/136 (100%)	121 (89%)	15 (11%)	6	0
1	15-A	136/136 (100%)	120 (88%)	16 (12%)	5	0
1	16-A	136/136 (100%)	122 (90%)	14 (10%)	7	0
1	17-A	136/136 (100%)	125 (92%)	11 (8%)	11	0
1	18-A	136/136 (100%)	128 (94%)	8 (6%)	19	1
1	19-A	136/136 (100%)	125 (92%)	11 (8%)	11	0
1	20-A	136/136 (100%)	121 (89%)	15 (11%)	6	0
1	21-A	136/136 (100%)	126 (93%)	10 (7%)	13	1
1	22-A	136/136 (100%)	124 (91%)	12 (9%)	10	0
1	23-A	136/136 (100%)	122 (90%)	14 (10%)	7	0
1	24-A	136/136 (100%)	124 (91%)	12 (9%)	10	0
1	25-A	136/136 (100%)	120 (88%)	16 (12%)	5	0
1	26-A	136/136 (100%)	124 (91%)	12 (9%)	10	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	27-A	136/136 (100%)	117 (86%)	19 (14%)	3	0
1	28-A	129/136 (95%)	113 (88%)	16 (12%)	4	0
All	All	3801/3808 (100%)	3419 (90%)	382 (10%)	7	0

All (382) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	4	LEU
1	1-A	20	MET
1	1-A	23	ASN
1	1-A	24	LEU
1	1-A	52	ARG
1	1-A	106	LYS
1	1-A	109	LYS
1	1-A	111	TYR
1	1-A	119	VAL
1	1-A	129	GLU
1	1-A	138	SER
1	1-A	148	SER
1	1-A	156	LEU
1	1-A	157	GLU
1	2-A	16	MET
1	2-A	17	GLU
1	2-A	33	ARG
1	2-A	38	LYS
1	2-A	52	ARG
1	2-A	106	LYS
1	2-A	109	LYS
1	2-A	119	VAL
1	2-A	128	TYR
1	2-A	129	GLU
1	2-A	134	GLU
1	2-A	148	SER
1	2-A	156	LEU
1	2-A	159	ARG
1	3-A	1	MET
1	3-A	2	ILE
1	3-A	16	MET
1	3-A	17	GLU
1	3-A	20	MET
1	3-A	33	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	3-A	44	ARG
1	3-A	49	SER
1	3-A	52	ARG
1	3-A	59	ASN
1	3-A	106	LYS
1	3-A	118	GLU
1	3-A	119	VAL
1	3-A	128	TYR
1	3-A	129	GLU
1	3-A	135	SER
1	3-A	148	SER
1	4-A	4	LEU
1	4-A	11	ASP
1	4-A	17	GLU
1	4-A	20	MET
1	4-A	23	ASN
1	4-A	24	LEU
1	4-A	33	ARG
1	4-A	52	ARG
1	4-A	60	ILE
1	4-A	70	ASP
1	4-A	108	GLN
1	4-A	109	LYS
1	4-A	118	GLU
1	4-A	123	THR
1	4-A	132	ASP
1	5-A	17	GLU
1	5-A	20	MET
1	5-A	33	ARG
1	5-A	38	LYS
1	5-A	60	ILE
1	5-A	70	ASP
1	5-A	108	GLN
1	5-A	128	TYR
1	5-A	129	GLU
1	6-A	1	MET
1	6-A	18	ASN
1	6-A	20	MET
1	6-A	24	LEU
1	6-A	33	ARG
1	6-A	36	LEU
1	6-A	37	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	6-A	52	ARG
1	6-A	70	ASP
1	6-A	79	ASP
1	6-A	108	GLN
1	6-A	118	GLU
1	6-A	123	THR
1	6-A	128	TYR
1	6-A	129	GLU
1	6-A	136	VAL
1	6-A	152	CYS
1	7-A	10	VAL
1	7-A	17	GLU
1	7-A	18	ASN
1	7-A	20	MET
1	7-A	33	ARG
1	7-A	36	LEU
1	7-A	38	LYS
1	7-A	52	ARG
1	7-A	70	ASP
1	7-A	79	ASP
1	7-A	87	ASP
1	7-A	108	GLN
1	7-A	123	THR
1	7-A	128	TYR
1	7-A	142	ASP
1	7-A	148	SER
1	7-A	156	LEU
1	8-A	1	MET
1	8-A	4	LEU
1	8-A	17	GLU
1	8-A	18	ASN
1	8-A	20	MET
1	8-A	24	LEU
1	8-A	38	LYS
1	8-A	59	ASN
1	8-A	60	ILE
1	8-A	87	ASP
1	8-A	104	LEU
1	8-A	128	TYR
1	8-A	156	LEU
1	9-A	1	MET
1	9-A	16	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	9-A	24	LEU
1	9-A	30	TRP
1	9-A	65	GLN
1	9-A	76	LYS
1	9-A	87	ASP
1	9-A	104	LEU
1	9-A	108	GLN
1	9-A	127	ASP
1	9-A	129	GLU
1	9-A	138	SER
1	9-A	156	LEU
1	10-A	1	MET
1	10-A	17	GLU
1	10-A	20	MET
1	10-A	59	ASN
1	10-A	104	LEU
1	10-A	106	LYS
1	10-A	118	GLU
1	10-A	126	PRO
1	10-A	127	ASP
1	10-A	156	LEU
1	11-A	1	MET
1	11-A	8	LEU
1	11-A	16	MET
1	11-A	17	GLU
1	11-A	18	ASN
1	11-A	20	MET
1	11-A	24	LEU
1	11-A	38	LYS
1	11-A	45	HIS
1	11-A	87	ASP
1	11-A	104	LEU
1	11-A	106	LYS
1	11-A	120	GLU
1	11-A	129	GLU
1	11-A	139	GLU
1	11-A	156	LEU
1	12-A	1	MET
1	12-A	17	GLU
1	12-A	18	ASN
1	12-A	33	ARG
1	12-A	38	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	12-A	52	ARG
1	12-A	61	ILE
1	12-A	68	THR
1	12-A	88	VAL
1	12-A	104	LEU
1	12-A	106	LYS
1	12-A	118	GLU
1	12-A	128	TYR
1	12-A	129	GLU
1	12-A	134	GLU
1	12-A	138	SER
1	12-A	156	LEU
1	13-A	1	MET
1	13-A	10	VAL
1	13-A	18	ASN
1	13-A	58	LYS
1	13-A	104	LEU
1	13-A	106	LYS
1	13-A	118	GLU
1	13-A	128	TYR
1	13-A	129	GLU
1	14-A	1	MET
1	14-A	17	GLU
1	14-A	20	MET
1	14-A	24	LEU
1	14-A	33	ARG
1	14-A	37	ASN
1	14-A	44	ARG
1	14-A	61	ILE
1	14-A	65	GLN
1	14-A	101	GLU
1	14-A	104	LEU
1	14-A	115	ILE
1	14-A	128	TYR
1	14-A	129	GLU
1	14-A	134	GLU
1	15-A	4	LEU
1	15-A	17	GLU
1	15-A	20	MET
1	15-A	33	ARG
1	15-A	38	LYS
1	15-A	52	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	15-A	61	ILE
1	15-A	65	GLN
1	15-A	87	ASP
1	15-A	101	GLU
1	15-A	104	LEU
1	15-A	109	LYS
1	15-A	118	GLU
1	15-A	129	GLU
1	15-A	148	SER
1	15-A	158	ARG
1	16-A	4	LEU
1	16-A	17	GLU
1	16-A	20	MET
1	16-A	22	TRP
1	16-A	28	LEU
1	16-A	32	LYS
1	16-A	33	ARG
1	16-A	52	ARG
1	16-A	59	ASN
1	16-A	61	ILE
1	16-A	118	GLU
1	16-A	129	GLU
1	16-A	134	GLU
1	16-A	158	ARG
1	17-A	16	MET
1	17-A	17	GLU
1	17-A	20	MET
1	17-A	33	ARG
1	17-A	52	ARG
1	17-A	61	ILE
1	17-A	65	GLN
1	17-A	119	VAL
1	17-A	128	TYR
1	17-A	132	ASP
1	17-A	138	SER
1	18-A	10	VAL
1	18-A	18	ASN
1	18-A	23	ASN
1	18-A	61	ILE
1	18-A	104	LEU
1	18-A	119	VAL
1	18-A	138	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	18-A	152	CYS
1	19-A	1	MET
1	19-A	8	LEU
1	19-A	18	ASN
1	19-A	22	TRP
1	19-A	32	LYS
1	19-A	36	LEU
1	19-A	52	ARG
1	19-A	76	LYS
1	19-A	134	GLU
1	19-A	135	SER
1	19-A	154	GLU
1	20-A	1	MET
1	20-A	8	LEU
1	20-A	20	MET
1	20-A	52	ARG
1	20-A	59	ASN
1	20-A	65	GLN
1	20-A	79	ASP
1	20-A	108	GLN
1	20-A	111	TYR
1	20-A	119	VAL
1	20-A	122	ASP
1	20-A	129	GLU
1	20-A	148	SER
1	20-A	152	CYS
1	20-A	157	GLU
1	21-A	24	LEU
1	21-A	28	LEU
1	21-A	32	LYS
1	21-A	49	SER
1	21-A	65	GLN
1	21-A	70	ASP
1	21-A	106	LYS
1	21-A	119	VAL
1	21-A	128	TYR
1	21-A	157	GLU
1	22-A	16	MET
1	22-A	18	ASN
1	22-A	24	LEU
1	22-A	28	LEU
1	22-A	48	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	22-A	50	ILE
1	22-A	52	ARG
1	22-A	106	LYS
1	22-A	108	GLN
1	22-A	128	TYR
1	22-A	138	SER
1	22-A	157	GLU
1	23-A	1	MET
1	23-A	16	MET
1	23-A	18	ASN
1	23-A	23	ASN
1	23-A	28	LEU
1	23-A	50	ILE
1	23-A	52	ARG
1	23-A	59	ASN
1	23-A	62	LEU
1	23-A	119	VAL
1	23-A	128	TYR
1	23-A	148	SER
1	23-A	156	LEU
1	23-A	157	GLU
1	24-A	23	ASN
1	24-A	28	LEU
1	24-A	33	ARG
1	24-A	45	HIS
1	24-A	52	ARG
1	24-A	76	LYS
1	24-A	108	GLN
1	24-A	119	VAL
1	24-A	122	ASP
1	24-A	127	ASP
1	24-A	148	SER
1	24-A	157	GLU
1	25-A	1	MET
1	25-A	11	ASP
1	25-A	23	ASN
1	25-A	28	LEU
1	25-A	52	ARG
1	25-A	76	LYS
1	25-A	88	VAL
1	25-A	106	LYS
1	25-A	119	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	25-A	120	GLU
1	25-A	129	GLU
1	25-A	139	GLU
1	25-A	142	ASP
1	25-A	148	SER
1	25-A	157	GLU
1	25-A	158	ARG
1	26-A	1	MET
1	26-A	18	ASN
1	26-A	23	ASN
1	26-A	24	LEU
1	26-A	28	LEU
1	26-A	33	ARG
1	26-A	52	ARG
1	26-A	60	ILE
1	26-A	76	LYS
1	26-A	87	ASP
1	26-A	106	LYS
1	26-A	108	GLN
1	27-A	1	MET
1	27-A	20	MET
1	27-A	21	PRO
1	27-A	24	LEU
1	27-A	28	LEU
1	27-A	33	ARG
1	27-A	52	ARG
1	27-A	58	LYS
1	27-A	60	ILE
1	27-A	76	LYS
1	27-A	87	ASP
1	27-A	98	ARG
1	27-A	104	LEU
1	27-A	106	LYS
1	27-A	108	GLN
1	27-A	119	VAL
1	27-A	120	GLU
1	27-A	142	ASP
1	27-A	159	ARG
1	28-A	1	MET
1	28-A	18	ASN
1	28-A	49	SER
1	28-A	52	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	28-A	65	GLN
1	28-A	76	LYS
1	28-A	79	ASP
1	28-A	87	ASP
1	28-A	88	VAL
1	28-A	104	LEU
1	28-A	106	LYS
1	28-A	108	GLN
1	28-A	119	VAL
1	28-A	120	GLU
1	28-A	138	SER
1	28-A	148	SER

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

4.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

4.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

4.6 Ligand geometry [i](#)

Of 668 ligands modelled in this entry, 334 are monoatomic - leaving 334 for Mogul analysis.

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	FOL	11-A	201	-	34,34,34	1.04	3 (8%)	44,47,47	1.99	10 (22%)
2	FOL	33-A	201	-	34,34,34	1.16	3 (8%)	44,47,47	2.18	11 (25%)
2	FOL	18-A	201	-	34,34,34	1.08	3 (8%)	44,47,47	2.16	12 (27%)
2	FOL	21-A	201	-	34,34,34	1.32	3 (8%)	44,47,47	2.14	13 (29%)
2	FOL	27-A	201	-	34,34,34	1.23	3 (8%)	44,47,47	1.89	7 (15%)
2	FOL	29-A	201	-	34,34,34	1.08	2 (5%)	44,47,47	2.00	10 (22%)
4	NAP	5-A	204	-	45,52,52	1.76	10 (22%)	56,80,80	1.43	10 (17%)
4	NAP	31-A	204	-	45,52,52	1.83	11 (24%)	56,80,80	1.25	6 (10%)
4	NAP	22-A	204	-	45,52,52	1.87	11 (24%)	56,80,80	1.37	9 (16%)
4	NAP	8-A	204	-	45,52,52	1.72	11 (24%)	56,80,80	1.32	6 (10%)
2	FOL	23-A	201	-	34,34,34	1.07	4 (11%)	44,47,47	1.99	10 (22%)
4	NAP	21-A	204	-	45,52,52	1.81	10 (22%)	56,80,80	1.30	8 (14%)
4	NAP	29-A	204	-	45,52,52	1.83	11 (24%)	56,80,80	1.33	7 (12%)
4	NAP	10-A	204	-	45,52,52	1.82	9 (20%)	56,80,80	1.33	9 (16%)
2	FOL	3-A	201	-	34,34,34	1.13	3 (8%)	44,47,47	1.91	8 (18%)
4	NAP	11-A	204	-	45,52,52	1.82	10 (22%)	56,80,80	1.33	8 (14%)
2	FOL	13-A	201	-	34,34,34	1.30	5 (14%)	44,47,47	2.60	16 (36%)
4	NAP	6-A	204	-	45,52,52	1.73	10 (22%)	56,80,80	1.28	6 (10%)
2	FOL	19-A	201	-	34,34,34	1.13	3 (8%)	44,47,47	1.81	9 (20%)
2	FOL	24-A	201	-	34,34,34	1.13	3 (8%)	44,47,47	2.12	13 (29%)
2	FOL	1-A	201	-	34,34,34	0.98	3 (8%)	44,47,47	1.89	11 (25%)
2	FOL	16-A	201	-	34,34,34	1.08	4 (11%)	44,47,47	1.98	7 (15%)
2	FOL	7-A	201	-	34,34,34	1.09	3 (8%)	44,47,47	1.88	10 (22%)
4	NAP	15-A	204	-	45,52,52	1.78	9 (20%)	56,80,80	1.44	11 (19%)
2	FOL	25-A	201	-	34,34,34	1.17	3 (8%)	44,47,47	2.27	13 (29%)
2	FOL	4-A	201	-	34,34,34	1.19	4 (11%)	44,47,47	2.01	11 (25%)
4	NAP	32-A	204	-	45,52,52	1.74	11 (24%)	56,80,80	1.25	5 (8%)
4	NAP	24-A	204	-	45,52,52	1.84	9 (20%)	56,80,80	1.29	8 (14%)
2	FOL	12-A	201	-	34,34,34	1.23	4 (11%)	44,47,47	1.85	7 (15%)
2	FOL	17-A	201	-	34,34,34	1.14	3 (8%)	44,47,47	1.73	6 (13%)
4	NAP	28-A	204	-	45,52,52	1.84	10 (22%)	56,80,80	1.34	7 (12%)
2	FOL	14-A	201	-	34,34,34	1.23	4 (11%)	44,47,47	2.47	14 (31%)
2	FOL	5-A	201	-	34,34,34	1.17	3 (8%)	44,47,47	1.96	12 (27%)
2	FOL	31-A	201	-	34,34,34	1.14	3 (8%)	44,47,47	2.08	14 (31%)
4	NAP	7-A	204	-	45,52,52	1.68	11 (24%)	56,80,80	1.26	5 (8%)

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
4	NAP	25-A	204	-	45,52,52	1.88	10 (22%)	56,80,80	1.39	8 (14%)
2	FOL	30-A	201	-	34,34,34	1.36	3 (8%)	44,47,47	1.97	8 (18%)
4	NAP	19-A	204	-	45,52,52	1.86	10 (22%)	56,80,80	1.36	9 (16%)
2	FOL	26-A	201	-	34,34,34	1.33	4 (11%)	44,47,47	2.18	15 (34%)
2	FOL	9-A	201	-	34,34,34	1.12	3 (8%)	44,47,47	1.81	10 (22%)
2	FOL	20-A	201	-	34,34,34	1.10	3 (8%)	44,47,47	1.70	6 (13%)
2	FOL	6-A	201	-	34,34,34	1.34	4 (11%)	44,47,47	2.03	12 (27%)
2	FOL	15-A	201	-	34,34,34	1.23	3 (8%)	44,47,47	2.14	11 (25%)
4	NAP	13-A	204	-	45,52,52	1.79	10 (22%)	56,80,80	1.30	10 (17%)
4	NAP	4-A	204	-	45,52,52	1.79	10 (22%)	56,80,80	1.35	9 (16%)
4	NAP	16-A	204	-	45,52,52	1.84	10 (22%)	56,80,80	1.29	9 (16%)
4	NAP	18-A	204	-	45,52,52	1.85	10 (22%)	56,80,80	1.48	10 (17%)
4	NAP	14-A	204	-	45,52,52	1.80	10 (22%)	56,80,80	1.37	10 (17%)
4	NAP	23-A	204	-	45,52,52	1.87	10 (22%)	56,80,80	1.53	10 (17%)
4	NAP	27-A	204	-	45,52,52	1.84	10 (22%)	56,80,80	1.34	8 (14%)
4	NAP	30-A	204	-	45,52,52	1.89	9 (20%)	56,80,80	1.30	8 (14%)
4	NAP	1-A	204	-	45,52,52	1.78	10 (22%)	56,80,80	1.32	10 (17%)
4	NAP	3-A	204	-	45,52,52	1.82	10 (22%)	56,80,80	1.37	8 (14%)
4	NAP	12-A	204	-	45,52,52	1.78	10 (22%)	56,80,80	1.29	10 (17%)
2	FOL	10-A	201	-	34,34,34	1.09	3 (8%)	44,47,47	2.03	10 (22%)
2	FOL	32-A	201	-	34,34,34	1.08	4 (11%)	44,47,47	1.77	9 (20%)
4	NAP	20-A	204	-	45,52,52	1.84	9 (20%)	56,80,80	1.31	8 (14%)
4	NAP	17-A	204	-	45,52,52	1.83	9 (20%)	56,80,80	1.36	10 (17%)
2	FOL	22-A	201	-	34,34,34	1.12	3 (8%)	44,47,47	1.99	9 (20%)
4	NAP	9-A	204	-	45,52,52	1.73	11 (24%)	56,80,80	1.23	7 (12%)
2	FOL	28-A	201	-	34,34,34	1.25	3 (8%)	44,47,47	1.81	8 (18%)
4	NAP	26-A	204	-	45,52,52	1.83	10 (22%)	56,80,80	1.36	10 (17%)
4	NAP	2-A	204	-	45,52,52	1.76	9 (20%)	56,80,80	1.36	10 (17%)
2	FOL	2-A	201	-	34,34,34	1.16	3 (8%)	44,47,47	1.79	7 (15%)
2	FOL	8-A	201	-	34,34,34	1.10	3 (8%)	44,47,47	1.91	7 (15%)

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	FOL	11-A	201	-	-	3/22/22/22	0/3/3/3
2	FOL	33-A	201	-	-	4/22/22/22	0/3/3/3
2	FOL	18-A	201	-	-	4/22/22/22	0/3/3/3
2	FOL	21-A	201	-	-	3/22/22/22	0/3/3/3
2	FOL	27-A	201	-	-	2/22/22/22	0/3/3/3
2	FOL	29-A	201	-	-	0/22/22/22	0/3/3/3
4	NAP	5-A	204	-	-	1/31/67/67	0/5/5/5
4	NAP	31-A	204	-	-	1/31/67/67	0/5/5/5
4	NAP	22-A	204	-	-	1/31/67/67	0/5/5/5
4	NAP	8-A	204	-	-	0/31/67/67	0/5/5/5
2	FOL	23-A	201	-	-	4/22/22/22	0/3/3/3
4	NAP	21-A	204	-	-	1/31/67/67	0/5/5/5
4	NAP	29-A	204	-	-	2/31/67/67	0/5/5/5
4	NAP	10-A	204	-	-	1/31/67/67	0/5/5/5
2	FOL	3-A	201	-	-	4/22/22/22	0/3/3/3
4	NAP	11-A	204	-	-	1/31/67/67	0/5/5/5
2	FOL	13-A	201	-	-	2/22/22/22	0/3/3/3
4	NAP	6-A	204	-	-	0/31/67/67	0/5/5/5
2	FOL	19-A	201	-	-	0/22/22/22	0/3/3/3
2	FOL	24-A	201	-	-	5/22/22/22	0/3/3/3
2	FOL	1-A	201	-	-	5/22/22/22	0/3/3/3
2	FOL	16-A	201	-	-	1/22/22/22	0/3/3/3
2	FOL	7-A	201	-	-	2/22/22/22	0/3/3/3
4	NAP	15-A	204	-	-	6/31/67/67	0/5/5/5
2	FOL	25-A	201	-	-	4/22/22/22	0/3/3/3
2	FOL	4-A	201	-	-	1/22/22/22	0/3/3/3
4	NAP	32-A	204	-	-	2/31/67/67	0/5/5/5
4	NAP	24-A	204	-	-	0/31/67/67	0/5/5/5
2	FOL	12-A	201	-	-	1/22/22/22	0/3/3/3
2	FOL	17-A	201	-	-	0/22/22/22	0/3/3/3
4	NAP	28-A	204	-	-	4/31/67/67	0/5/5/5
2	FOL	14-A	201	-	-	4/22/22/22	0/3/3/3
2	FOL	5-A	201	-	-	2/22/22/22	0/3/3/3
2	FOL	31-A	201	-	-	5/22/22/22	0/3/3/3
4	NAP	7-A	204	-	-	0/31/67/67	0/5/5/5
4	NAP	25-A	204	-	-	0/31/67/67	0/5/5/5
2	FOL	30-A	201	-	-	2/22/22/22	0/3/3/3
4	NAP	19-A	204	-	-	3/31/67/67	0/5/5/5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	FOL	26-A	201	-	-	2/22/22/22	0/3/3/3
2	FOL	9-A	201	-	-	2/22/22/22	0/3/3/3
2	FOL	20-A	201	-	-	0/22/22/22	0/3/3/3
2	FOL	6-A	201	-	-	5/22/22/22	0/3/3/3
2	FOL	15-A	201	-	-	3/22/22/22	0/3/3/3
4	NAP	13-A	204	-	-	1/31/67/67	0/5/5/5
4	NAP	4-A	204	-	-	1/31/67/67	0/5/5/5
4	NAP	16-A	204	-	-	1/31/67/67	0/5/5/5
4	NAP	18-A	204	-	-	1/31/67/67	0/5/5/5
4	NAP	14-A	204	-	-	2/31/67/67	0/5/5/5
4	NAP	23-A	204	-	-	2/31/67/67	0/5/5/5
4	NAP	27-A	204	-	-	4/31/67/67	0/5/5/5
4	NAP	30-A	204	-	-	0/31/67/67	0/5/5/5
4	NAP	1-A	204	-	-	2/31/67/67	0/5/5/5
4	NAP	3-A	204	-	-	1/31/67/67	0/5/5/5
4	NAP	12-A	204	-	-	3/31/67/67	0/5/5/5
2	FOL	10-A	201	-	-	4/22/22/22	0/3/3/3
2	FOL	32-A	201	-	-	1/22/22/22	0/3/3/3
4	NAP	20-A	204	-	-	1/31/67/67	0/5/5/5
4	NAP	17-A	204	-	-	1/31/67/67	0/5/5/5
2	FOL	22-A	201	-	-	8/22/22/22	0/3/3/3
4	NAP	9-A	204	-	-	1/31/67/67	0/5/5/5
2	FOL	28-A	201	-	-	3/22/22/22	0/3/3/3
4	NAP	26-A	204	-	-	1/31/67/67	0/5/5/5
4	NAP	2-A	204	-	-	2/31/67/67	0/5/5/5
2	FOL	2-A	201	-	-	2/22/22/22	0/3/3/3
2	FOL	8-A	201	-	-	0/22/22/22	0/3/3/3

All (428) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
4	25-A	204	NAP	O3B-C3B	-6.42	1.27	1.43
4	22-A	204	NAP	O3B-C3B	-6.37	1.28	1.43
4	26-A	204	NAP	O3B-C3B	-6.31	1.28	1.43
4	23-A	204	NAP	O3B-C3B	-6.27	1.28	1.43
4	30-A	204	NAP	O3B-C3B	-6.23	1.28	1.43
4	19-A	204	NAP	O3B-C3B	-6.20	1.28	1.43
4	11-A	204	NAP	O3B-C3B	-6.18	1.28	1.43
4	17-A	204	NAP	O3B-C3B	-6.14	1.28	1.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
4	24-A	204	NAP	O3B-C3B	-6.12	1.28	1.43
4	27-A	204	NAP	O3B-C3B	-6.11	1.28	1.43
4	20-A	204	NAP	O3B-C3B	-6.10	1.28	1.43
4	10-A	204	NAP	O3B-C3B	-6.08	1.28	1.43
4	18-A	204	NAP	O3B-C3B	-6.08	1.28	1.43
4	4-A	204	NAP	O3B-C3B	-6.06	1.28	1.43
4	16-A	204	NAP	O3B-C3B	-5.99	1.28	1.43
4	3-A	204	NAP	O3B-C3B	-5.98	1.28	1.43
4	28-A	204	NAP	O3B-C3B	-5.98	1.28	1.43
4	5-A	204	NAP	O3B-C3B	-5.86	1.29	1.43
4	15-A	204	NAP	O3B-C3B	-5.84	1.29	1.43
4	21-A	204	NAP	O3B-C3B	-5.82	1.29	1.43
4	1-A	204	NAP	O3B-C3B	-5.81	1.29	1.43
4	13-A	204	NAP	O3B-C3B	-5.80	1.29	1.43
4	14-A	204	NAP	O3B-C3B	-5.72	1.29	1.43
4	2-A	204	NAP	O3B-C3B	-5.69	1.29	1.43
4	12-A	204	NAP	O3B-C3B	-5.68	1.29	1.43
4	29-A	204	NAP	O3B-C3B	-5.66	1.29	1.43
4	32-A	204	NAP	O3B-C3B	-5.17	1.30	1.43
4	31-A	204	NAP	O3B-C3B	-5.17	1.30	1.43
4	9-A	204	NAP	O3B-C3B	-4.88	1.31	1.43
4	6-A	204	NAP	O3B-C3B	-4.85	1.31	1.43
4	8-A	204	NAP	O3B-C3B	-4.84	1.31	1.43
4	7-A	204	NAP	O3B-C3B	-4.60	1.32	1.43
2	30-A	201	FOL	C4A-C4	4.32	1.48	1.41
2	26-A	201	FOL	C4A-C4	4.28	1.48	1.41
4	18-A	204	NAP	C2N-N1N	4.09	1.39	1.35
4	3-A	204	NAP	C7N-N7N	4.05	1.40	1.33
4	31-A	204	NAP	C2N-N1N	3.92	1.39	1.35
4	5-A	204	NAP	C7N-N7N	3.91	1.40	1.33
4	20-A	204	NAP	C2N-N1N	3.90	1.39	1.35
4	21-A	204	NAP	C2N-N1N	3.89	1.39	1.35
4	8-A	204	NAP	C2N-N1N	3.89	1.39	1.35
2	28-A	201	FOL	C4A-C4	3.89	1.48	1.41
4	24-A	204	NAP	C2N-N1N	3.87	1.39	1.35
4	29-A	204	NAP	C2N-N1N	3.87	1.39	1.35
4	25-A	204	NAP	C2N-N1N	3.85	1.39	1.35
2	6-A	201	FOL	C4A-C4	3.83	1.48	1.41
4	7-A	204	NAP	C2A-N3A	3.82	1.38	1.32
4	19-A	204	NAP	C2N-N1N	3.80	1.39	1.35
4	16-A	204	NAP	C2N-N1N	3.79	1.39	1.35
4	19-A	204	NAP	C2A-N3A	3.78	1.38	1.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
4	29-A	204	NAP	C7N-N7N	3.77	1.40	1.33
4	26-A	204	NAP	C2N-N1N	3.77	1.39	1.35
4	30-A	204	NAP	C7N-N7N	3.77	1.40	1.33
4	27-A	204	NAP	C2N-N1N	3.75	1.39	1.35
4	22-A	204	NAP	C2N-N1N	3.74	1.39	1.35
4	30-A	204	NAP	C2N-N1N	3.73	1.39	1.35
4	1-A	204	NAP	C2A-N3A	3.71	1.38	1.32
4	4-A	204	NAP	C7N-N7N	3.68	1.40	1.33
4	22-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.68	1.48	1.53
2	27-A	201	FOL	C4A-C4	3.66	1.47	1.41
4	18-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.65	1.48	1.53
2	15-A	201	FOL	C4A-C4	3.65	1.47	1.41
4	2-A	204	NAP	C7N-N7N	3.63	1.39	1.33
2	12-A	201	FOL	C4A-C4	3.63	1.47	1.41
4	14-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.62	1.48	1.53
4	1-A	204	NAP	C7N-N7N	3.61	1.39	1.33
4	2-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.60	1.48	1.53
2	9-A	201	FOL	C4A-C4	3.60	1.47	1.41
4	6-A	204	NAP	C2A-N3A	3.60	1.37	1.32
4	13-A	204	NAP	C2A-N3A	3.59	1.37	1.32
4	31-A	204	NAP	P2B-O2B	3.59	1.66	1.59
4	17-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.58	1.48	1.53
4	20-A	204	NAP	C2A-N3A	3.58	1.37	1.32
2	5-A	201	FOL	C4A-C4	3.57	1.47	1.41
2	21-A	201	FOL	C4A-C4	3.56	1.47	1.41
4	12-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.56	1.48	1.53
4	23-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.55	1.48	1.53
4	12-A	204	NAP	C2A-N3A	3.55	1.37	1.32
2	13-A	201	FOL	C4A-C4	3.52	1.47	1.41
4	14-A	204	NAP	C7N-N7N	3.51	1.39	1.33
4	17-A	204	NAP	C2N-N1N	3.50	1.39	1.35
4	28-A	204	NAP	C2A-N3A	3.50	1.37	1.32
4	15-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.48	1.48	1.53
2	25-A	201	FOL	C4A-C4	3.48	1.47	1.41
4	30-A	204	NAP	C2A-N3A	3.48	1.37	1.32
4	3-A	204	NAP	C2A-N3A	3.47	1.37	1.32
4	13-A	204	NAP	C7N-N7N	3.46	1.39	1.33
4	9-A	204	NAP	C2A-N3A	3.45	1.37	1.32
4	24-A	204	NAP	C2A-N3A	3.45	1.37	1.32
4	16-A	204	NAP	C2A-N3A	3.45	1.37	1.32
4	28-A	204	NAP	C2N-N1N	3.44	1.39	1.35
4	22-A	204	NAP	C2A-N3A	3.43	1.37	1.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
4	16-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.43	1.48	1.53
4	23-A	204	NAP	C7N-N7N	3.43	1.39	1.33
4	23-A	204	NAP	C2A-N3A	3.43	1.37	1.32
4	31-A	204	NAP	C2A-N3A	3.43	1.37	1.32
4	28-A	204	NAP	C7N-N7N	3.42	1.39	1.33
4	21-A	204	NAP	C7N-N7N	3.41	1.39	1.33
4	16-A	204	NAP	C7N-N7N	3.41	1.39	1.33
2	31-A	201	FOL	C4A-C4	3.41	1.47	1.41
4	20-A	204	NAP	C7N-N7N	3.41	1.39	1.33
4	9-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.40	1.48	1.53
4	24-A	204	NAP	C7N-N7N	3.40	1.39	1.33
2	6-A	201	FOL	C8A-N1	-3.40	1.30	1.36
2	24-A	201	FOL	C4A-C4	3.39	1.47	1.41
4	13-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.38	1.48	1.53
4	4-A	204	NAP	C2A-N3A	3.38	1.37	1.32
4	25-A	204	NAP	C2A-N3A	3.38	1.37	1.32
4	10-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.37	1.48	1.53
4	11-A	204	NAP	C2N-N1N	3.37	1.39	1.35
4	27-A	204	NAP	C2A-N3A	3.37	1.37	1.32
2	18-A	201	FOL	C4A-C4	3.37	1.47	1.41
4	13-A	204	NAP	C2N-N1N	3.37	1.39	1.35
4	1-A	204	NAP	C2N-N1N	3.37	1.39	1.35
4	17-A	204	NAP	C7N-N7N	3.35	1.39	1.33
4	7-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.35	1.48	1.53
2	11-A	201	FOL	C4A-C4	3.35	1.47	1.41
4	10-A	204	NAP	C2N-N1N	3.34	1.39	1.35
4	5-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.34	1.48	1.53
4	9-A	204	NAP	C2N-N1N	3.33	1.39	1.35
4	7-A	204	NAP	C7N-N7N	3.32	1.39	1.33
4	11-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.31	1.48	1.53
4	29-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.31	1.48	1.53
4	20-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.30	1.48	1.53
4	23-A	204	NAP	C2N-N1N	3.29	1.39	1.35
4	6-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.29	1.48	1.53
4	19-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.28	1.48	1.53
4	8-A	204	NAP	C2A-N3A	3.28	1.37	1.32
2	8-A	201	FOL	C4A-C4	3.28	1.47	1.41
4	12-A	204	NAP	C7N-N7N	3.27	1.39	1.33
4	26-A	204	NAP	C7N-N7N	3.27	1.39	1.33
2	12-A	201	FOL	C8A-N1	-3.27	1.30	1.36
4	14-A	204	NAP	C2N-N1N	3.26	1.38	1.35
4	19-A	204	NAP	C7N-N7N	3.26	1.39	1.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	30-A	201	FOL	C4A-C8A	3.25	1.46	1.40
4	27-A	204	NAP	C7N-N7N	3.25	1.39	1.33
4	10-A	204	NAP	C7N-N7N	3.25	1.39	1.33
2	3-A	201	FOL	C4A-C4	3.25	1.47	1.41
4	32-A	204	NAP	C2A-N3A	3.24	1.37	1.32
4	2-A	204	NAP	C2A-N3A	3.24	1.37	1.32
2	4-A	201	FOL	C4A-C4	3.24	1.46	1.41
4	22-A	204	NAP	C7N-N7N	3.24	1.39	1.33
4	1-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.23	1.48	1.53
4	15-A	204	NAP	C7N-N7N	3.23	1.39	1.33
4	6-A	204	NAP	C2N-N1N	3.23	1.38	1.35
2	17-A	201	FOL	C4A-C4	3.23	1.46	1.41
4	10-A	204	NAP	C2A-N3A	3.22	1.37	1.32
4	4-A	204	NAP	C2N-N1N	3.22	1.38	1.35
2	15-A	201	FOL	C8A-N1	-3.21	1.30	1.36
4	11-A	204	NAP	C2A-N3A	3.21	1.37	1.32
4	24-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.20	1.48	1.53
4	18-A	204	NAP	C2A-N3A	3.20	1.37	1.32
2	10-A	201	FOL	C4A-C4	3.20	1.46	1.41
2	7-A	201	FOL	C8A-N1	-3.20	1.30	1.36
4	30-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.20	1.48	1.53
4	14-A	204	NAP	C2A-N3A	3.20	1.37	1.32
4	21-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.20	1.48	1.53
4	6-A	204	NAP	C7N-N7N	3.20	1.39	1.33
4	7-A	204	NAP	C2N-N1N	3.20	1.38	1.35
2	29-A	201	FOL	C4A-C4	3.18	1.46	1.41
2	19-A	201	FOL	C4A-C4	3.18	1.46	1.41
4	26-A	204	NAP	C2A-N3A	3.17	1.37	1.32
4	28-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.16	1.49	1.53
2	9-A	201	FOL	C8A-N1	-3.15	1.30	1.36
4	11-A	204	NAP	C7N-N7N	3.15	1.39	1.33
4	3-A	204	NAP	C2N-N1N	3.14	1.38	1.35
4	32-A	204	NAP	C7N-N7N	3.13	1.39	1.33
2	13-A	201	FOL	CG-CD	3.13	1.57	1.50
2	21-A	201	FOL	C8A-N1	-3.13	1.30	1.36
4	25-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.12	1.49	1.53
4	6-A	204	NAP	C8A-N7A	3.12	1.40	1.34
2	21-A	201	FOL	C4A-C8A	3.12	1.46	1.40
4	24-A	204	NAP	O4B-C4B	-3.11	1.38	1.45
2	28-A	201	FOL	C4A-C8A	3.11	1.46	1.40
4	21-A	204	NAP	C2A-N3A	3.10	1.37	1.32
4	21-A	204	NAP	C8A-N7A	3.10	1.40	1.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	17-A	201	FOL	C4A-C8A	3.10	1.46	1.40
2	33-A	201	FOL	C4A-C4	3.09	1.46	1.41
2	19-A	201	FOL	C8A-N1	-3.09	1.30	1.36
2	22-A	201	FOL	C4A-C4	3.09	1.46	1.41
4	5-A	204	NAP	C2A-N3A	3.09	1.37	1.32
2	2-A	201	FOL	C4A-C4	3.08	1.46	1.41
4	25-A	204	NAP	C7N-N7N	3.07	1.38	1.33
4	32-A	204	NAP	C2N-N1N	3.07	1.38	1.35
4	2-A	204	NAP	C2N-N1N	3.07	1.38	1.35
4	31-A	204	NAP	C2D-C1D	-3.06	1.49	1.53
2	26-A	201	FOL	C4A-C8A	3.05	1.46	1.40
4	29-A	204	NAP	C2A-N3A	3.05	1.37	1.32
2	4-A	201	FOL	C8A-N1	-3.05	1.30	1.36
4	17-A	204	NAP	C2A-N3A	3.05	1.37	1.32
2	24-A	201	FOL	C4A-C8A	3.04	1.46	1.40
2	7-A	201	FOL	C4A-C4	3.01	1.46	1.41
4	31-A	204	NAP	C7N-N7N	3.01	1.38	1.33
2	14-A	201	FOL	C4A-C4	3.01	1.46	1.41
2	32-A	201	FOL	C4A-C4	3.00	1.46	1.41
2	27-A	201	FOL	C4A-C8A	2.99	1.46	1.40
4	30-A	204	NAP	O4D-C1D	2.98	1.45	1.41
4	8-A	204	NAP	C2D-C1D	-2.98	1.49	1.53
4	3-A	204	NAP	C2D-C1D	-2.97	1.49	1.53
4	20-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.97	1.38	1.45
4	18-A	204	NAP	C7N-N7N	2.96	1.38	1.33
4	21-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.95	1.38	1.45
2	8-A	201	FOL	C8A-N1	-2.95	1.31	1.36
4	15-A	204	NAP	C2A-N3A	2.95	1.36	1.32
4	9-A	204	NAP	C8A-N7A	2.95	1.39	1.34
4	8-A	204	NAP	C8A-N7A	2.94	1.39	1.34
4	25-A	204	NAP	O4D-C1D	2.94	1.45	1.41
4	27-A	204	NAP	C2D-C1D	-2.93	1.49	1.53
2	15-A	201	FOL	C4A-C8A	2.93	1.46	1.40
4	4-A	204	NAP	C2D-C1D	-2.92	1.49	1.53
4	18-A	204	NAP	O4D-C1D	2.92	1.45	1.41
4	15-A	204	NAP	C8A-N7A	2.91	1.39	1.34
4	16-A	204	NAP	C8A-N7A	2.91	1.39	1.34
4	6-A	204	NAP	O7N-C7N	-2.91	1.18	1.24
4	25-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.91	1.38	1.45
4	23-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.91	1.38	1.45
4	32-A	204	NAP	C2D-C1D	-2.90	1.49	1.53
2	6-A	201	FOL	C4A-C8A	2.89	1.46	1.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
4	18-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.89	1.38	1.45
4	27-A	204	NAP	O4D-C1D	2.88	1.45	1.41
4	24-A	204	NAP	C6N-N1N	2.88	1.42	1.35
4	19-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.86	1.38	1.45
4	31-A	204	NAP	O7N-C7N	-2.86	1.18	1.24
2	20-A	201	FOL	C4A-C4	2.85	1.46	1.41
2	2-A	201	FOL	C8A-N1	-2.83	1.31	1.36
4	10-A	204	NAP	O4D-C1D	2.82	1.45	1.41
4	4-A	204	NAP	O4D-C1D	2.81	1.45	1.41
4	26-A	204	NAP	C2D-C1D	-2.80	1.49	1.53
4	15-A	204	NAP	O4D-C1D	2.80	1.45	1.41
4	12-A	204	NAP	C2N-N1N	2.79	1.38	1.35
2	16-A	201	FOL	C4A-C4	2.79	1.46	1.41
4	26-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.79	1.38	1.45
4	31-A	204	NAP	C8A-N7A	2.79	1.39	1.34
4	11-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.79	1.38	1.45
4	12-A	204	NAP	O4D-C1D	2.79	1.45	1.41
4	22-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.79	1.38	1.45
2	29-A	201	FOL	C4A-C8A	2.79	1.46	1.40
2	20-A	201	FOL	C8A-N1	-2.78	1.31	1.36
4	11-A	204	NAP	O4D-C1D	2.77	1.44	1.41
2	20-A	201	FOL	C4A-C8A	2.77	1.46	1.40
4	17-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.76	1.38	1.45
4	28-A	204	NAP	C8A-N7A	2.76	1.39	1.34
4	9-A	204	NAP	C7N-N7N	2.75	1.38	1.33
4	12-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.75	1.38	1.45
2	32-A	201	FOL	C8A-N1	-2.75	1.31	1.36
4	30-A	204	NAP	C6N-N1N	2.75	1.42	1.35
4	16-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.75	1.38	1.45
4	26-A	204	NAP	O4D-C1D	2.74	1.44	1.41
2	19-A	201	FOL	C4A-C8A	2.74	1.46	1.40
4	23-A	204	NAP	C8A-N7A	2.73	1.39	1.34
4	20-A	204	NAP	C6N-N1N	2.73	1.42	1.35
4	9-A	204	NAP	O7N-C7N	-2.72	1.18	1.24
4	5-A	204	NAP	C2N-N1N	2.72	1.38	1.35
4	13-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.72	1.38	1.45
4	27-A	204	NAP	C8A-N7A	2.71	1.39	1.34
4	25-A	204	NAP	C8A-N7A	2.71	1.39	1.34
4	25-A	204	NAP	C6N-N1N	2.70	1.42	1.35
4	14-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.70	1.39	1.45
4	26-A	204	NAP	C6N-N1N	2.70	1.42	1.35
2	18-A	201	FOL	C4A-C8A	2.69	1.45	1.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
4	32-A	204	NAP	O7N-C7N	-2.69	1.19	1.24
4	28-A	204	NAP	O4D-C1D	2.69	1.44	1.41
4	23-A	204	NAP	C6N-N1N	2.69	1.42	1.35
2	25-A	201	FOL	C4A-C8A	2.68	1.45	1.40
2	12-A	201	FOL	C4A-C8A	2.67	1.45	1.40
4	23-A	204	NAP	O4D-C1D	2.67	1.44	1.41
4	17-A	204	NAP	C6N-N1N	2.67	1.41	1.35
4	32-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.67	1.39	1.45
2	30-A	201	FOL	C8A-N1	-2.67	1.31	1.36
4	8-A	204	NAP	O7N-C7N	-2.67	1.19	1.24
4	15-A	204	NAP	C2N-N1N	2.66	1.38	1.35
4	26-A	204	NAP	C8A-N7A	2.66	1.39	1.34
2	28-A	201	FOL	C8A-N1	-2.66	1.31	1.36
2	1-A	201	FOL	C8A-N1	-2.66	1.31	1.36
2	22-A	201	FOL	C8A-N1	-2.66	1.31	1.36
4	17-A	204	NAP	O4D-C1D	2.65	1.44	1.41
4	17-A	204	NAP	C8A-N7A	2.65	1.39	1.34
2	23-A	201	FOL	C8A-N1	-2.65	1.31	1.36
2	5-A	201	FOL	C4A-C8A	2.65	1.45	1.40
4	27-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.65	1.39	1.45
4	20-A	204	NAP	O4D-C1D	2.65	1.44	1.41
2	14-A	201	FOL	CG-CD	2.64	1.56	1.50
2	27-A	201	FOL	C8A-N1	-2.64	1.31	1.36
2	16-A	201	FOL	C4A-C8A	2.63	1.45	1.40
2	1-A	201	FOL	C4A-C4	2.63	1.45	1.41
4	4-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.63	1.39	1.45
2	31-A	201	FOL	C4A-C8A	2.62	1.45	1.40
4	16-A	204	NAP	C6N-N1N	2.62	1.41	1.35
2	2-A	201	FOL	C4A-C8A	2.61	1.45	1.40
4	25-A	204	NAP	O7N-C7N	-2.60	1.19	1.24
4	21-A	204	NAP	O4D-C1D	2.59	1.44	1.41
2	17-A	201	FOL	C8A-N1	-2.59	1.31	1.36
4	10-A	204	NAP	C8A-N7A	2.59	1.39	1.34
4	1-A	204	NAP	C8A-N7A	2.59	1.39	1.34
4	5-A	204	NAP	C8A-N7A	2.59	1.39	1.34
4	5-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.58	1.39	1.45
4	19-A	204	NAP	O4D-C1D	2.58	1.44	1.41
4	19-A	204	NAP	C8A-N7A	2.57	1.39	1.34
4	31-A	204	NAP	C6N-N1N	2.57	1.41	1.35
4	20-A	204	NAP	C8A-N7A	2.57	1.39	1.34
4	24-A	204	NAP	C8A-N7A	2.57	1.39	1.34
4	14-A	204	NAP	O4D-C1D	2.57	1.44	1.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
4	27-A	204	NAP	C6N-N1N	2.56	1.41	1.35
4	29-A	204	NAP	O4D-C1D	2.56	1.44	1.41
4	19-A	204	NAP	C6N-N1N	2.55	1.41	1.35
4	15-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.55	1.39	1.45
4	11-A	204	NAP	C8A-N7A	2.54	1.39	1.34
4	10-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.54	1.39	1.45
4	3-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.54	1.39	1.45
2	18-A	201	FOL	C8A-N1	-2.53	1.31	1.36
4	24-A	204	NAP	O4D-C1D	2.52	1.44	1.41
2	23-A	201	FOL	C4A-C8A	2.52	1.45	1.40
4	8-A	204	NAP	C7N-N7N	2.52	1.37	1.33
4	30-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.52	1.39	1.45
4	32-A	204	NAP	C6N-N1N	2.52	1.41	1.35
4	30-A	204	NAP	C8A-N7A	2.51	1.39	1.34
4	23-A	204	NAP	P2B-O2B	2.51	1.64	1.59
4	18-A	204	NAP	C6N-N1N	2.50	1.41	1.35
2	4-A	201	FOL	C4A-C8A	2.50	1.45	1.40
2	16-A	201	FOL	C8A-N1	-2.50	1.31	1.36
2	25-A	201	FOL	C8A-N1	-2.50	1.31	1.36
2	23-A	201	FOL	OE2-CD	-2.49	1.22	1.30
2	26-A	201	FOL	C8A-N1	-2.49	1.31	1.36
4	14-A	204	NAP	C8A-N7A	2.49	1.39	1.34
2	14-A	201	FOL	C4A-C8A	2.48	1.45	1.40
2	33-A	201	FOL	C8A-N1	-2.48	1.31	1.36
4	28-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.48	1.39	1.45
4	18-A	204	NAP	C8A-N7A	2.48	1.39	1.34
4	28-A	204	NAP	C6N-N1N	2.48	1.41	1.35
4	8-A	204	NAP	O4D-C1D	2.48	1.44	1.41
2	10-A	201	FOL	C4A-C8A	2.47	1.45	1.40
4	3-A	204	NAP	O4D-C1D	2.46	1.44	1.41
4	12-A	204	NAP	P2B-O2B	2.46	1.64	1.59
4	9-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.46	1.39	1.45
4	12-A	204	NAP	C8A-N7A	2.46	1.39	1.34
4	3-A	204	NAP	C8A-N7A	2.46	1.39	1.34
4	29-A	204	NAP	C6N-N1N	2.46	1.41	1.35
4	1-A	204	NAP	O4D-C1D	2.45	1.44	1.41
4	16-A	204	NAP	O4D-C1D	2.45	1.44	1.41
2	22-A	201	FOL	C4A-C8A	2.45	1.45	1.40
4	5-A	204	NAP	O4D-C1D	2.45	1.44	1.41
4	31-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.44	1.39	1.45
4	22-A	204	NAP	C8A-N7A	2.44	1.39	1.34
4	7-A	204	NAP	O7N-C7N	-2.43	1.19	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	9-A	201	FOL	C4A-C8A	2.43	1.45	1.40
4	8-A	204	NAP	P2B-O2B	2.43	1.63	1.59
4	19-A	204	NAP	P2B-O2B	2.42	1.63	1.59
2	23-A	201	FOL	C4A-C4	2.42	1.45	1.41
4	29-A	204	NAP	C8A-N7A	2.41	1.39	1.34
4	14-A	204	NAP	C6N-N1N	2.41	1.41	1.35
4	2-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.41	1.39	1.45
2	13-A	201	FOL	C8A-N1	-2.40	1.32	1.36
4	22-A	204	NAP	C6N-N1N	2.40	1.41	1.35
4	13-A	204	NAP	O4D-C1D	2.39	1.44	1.41
4	22-A	204	NAP	O4D-C1D	2.39	1.44	1.41
4	11-A	204	NAP	C6N-N1N	2.38	1.41	1.35
4	13-A	204	NAP	C6N-N1N	2.38	1.41	1.35
4	1-A	204	NAP	C6N-N1N	2.38	1.41	1.35
4	32-A	204	NAP	C8A-N7A	2.37	1.38	1.34
4	32-A	204	NAP	P2B-O2B	2.37	1.63	1.59
4	9-A	204	NAP	P2B-O2B	2.37	1.63	1.59
4	21-A	204	NAP	C6N-N1N	2.37	1.41	1.35
4	22-A	204	NAP	O7N-C7N	-2.36	1.19	1.24
4	29-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.35	1.39	1.45
2	11-A	201	FOL	C4A-C8A	2.35	1.45	1.40
2	1-A	201	FOL	C4A-C8A	2.34	1.45	1.40
4	3-A	204	NAP	C6N-N1N	2.32	1.41	1.35
4	18-A	204	NAP	O7N-C7N	-2.31	1.19	1.24
4	15-A	204	NAP	C6N-N1N	2.30	1.41	1.35
2	13-A	201	FOL	C4A-C8A	2.29	1.45	1.40
4	1-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.29	1.39	1.45
2	14-A	201	FOL	C8A-N1	-2.28	1.32	1.36
4	13-A	204	NAP	C8A-N7A	2.28	1.38	1.34
4	7-A	204	NAP	C8A-N7A	2.27	1.38	1.34
2	11-A	201	FOL	C8A-N1	-2.26	1.32	1.36
4	12-A	204	NAP	C6N-N1N	2.26	1.40	1.35
2	5-A	201	FOL	C8A-N1	-2.26	1.32	1.36
4	29-A	204	NAP	P2B-O2B	2.26	1.63	1.59
4	10-A	204	NAP	C6N-N1N	2.26	1.40	1.35
4	5-A	204	NAP	C6N-N1N	2.25	1.40	1.35
4	7-A	204	NAP	C6N-N1N	2.25	1.40	1.35
4	8-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.24	1.40	1.45
4	31-A	204	NAP	O4D-C1D	2.24	1.44	1.41
4	6-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.24	1.40	1.45
2	3-A	201	FOL	C8A-N1	-2.23	1.32	1.36
4	28-A	204	NAP	P2B-O2B	2.23	1.63	1.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
4	16-A	204	NAP	P2B-O2B	2.22	1.63	1.59
4	7-A	204	NAP	O4D-C1D	2.21	1.44	1.41
4	2-A	204	NAP	C6N-N1N	2.21	1.40	1.35
2	32-A	201	FOL	C4A-C8A	2.21	1.45	1.40
4	11-A	204	NAP	O7N-C7N	-2.20	1.19	1.24
2	24-A	201	FOL	C8A-N1	-2.18	1.32	1.36
2	6-A	201	FOL	O2-CT	-2.18	1.23	1.30
4	2-A	204	NAP	O7N-C7N	-2.18	1.20	1.24
4	3-A	204	NAP	P2B-O2B	2.17	1.63	1.59
4	32-A	204	NAP	C2D-C3D	-2.17	1.47	1.53
4	9-A	204	NAP	O4D-C1D	2.16	1.44	1.41
4	4-A	204	NAP	O7N-C7N	-2.15	1.20	1.24
4	6-A	204	NAP	P2B-O2B	2.14	1.63	1.59
2	3-A	201	FOL	C4A-C8A	2.13	1.44	1.40
4	22-A	204	NAP	C2D-C3D	-2.13	1.47	1.53
2	8-A	201	FOL	C4A-C8A	2.12	1.44	1.40
2	4-A	201	FOL	CG-CD	2.12	1.55	1.50
4	4-A	204	NAP	C6N-N1N	2.12	1.40	1.35
4	4-A	204	NAP	C8A-N7A	2.11	1.38	1.34
4	7-A	204	NAP	O4B-C4B	-2.11	1.40	1.45
2	31-A	201	FOL	C8A-N1	-2.11	1.32	1.36
4	8-A	204	NAP	C6N-N1N	2.11	1.40	1.35
2	16-A	201	FOL	C7-N8	2.10	1.35	1.31
4	14-A	204	NAP	C2D-C3D	-2.10	1.47	1.53
2	12-A	201	FOL	C8A-N8	-2.09	1.34	1.37
4	9-A	204	NAP	C6N-N1N	2.09	1.40	1.35
2	13-A	201	FOL	CB-CA	2.09	1.58	1.53
4	29-A	204	NAP	C2D-C3D	-2.09	1.47	1.53
2	32-A	201	FOL	OE2-CD	-2.08	1.23	1.30
2	26-A	201	FOL	OE1-CD	2.08	1.29	1.22
4	7-A	204	NAP	P2B-O2B	2.08	1.63	1.59
2	7-A	201	FOL	C4A-C8A	2.08	1.44	1.40
4	1-A	204	NAP	C6A-N6A	2.06	1.41	1.34
4	5-A	204	NAP	C6A-N6A	2.06	1.41	1.34
2	33-A	201	FOL	CG-CD	2.06	1.55	1.50
4	27-A	204	NAP	O7N-C7N	-2.05	1.20	1.24
4	26-A	204	NAP	O7N-C7N	-2.03	1.20	1.24
4	2-A	204	NAP	P2B-O2B	2.03	1.63	1.59
4	21-A	204	NAP	P2B-O2B	2.01	1.63	1.59
2	10-A	201	FOL	C8A-N1	-2.01	1.32	1.36
4	6-A	204	NAP	C6N-N1N	2.00	1.40	1.35
4	13-A	204	NAP	O7N-C7N	-2.00	1.20	1.24

All (605) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	10-A	201	FOL	N8-C8A-N1	7.31	124.17	115.82
2	16-A	201	FOL	N8-C8A-N1	6.85	123.64	115.82
2	29-A	201	FOL	N8-C8A-N1	6.85	123.64	115.82
2	21-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-6.69	115.53	119.95
2	8-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-6.68	114.29	123.43
2	5-A	201	FOL	N8-C8A-N1	6.60	123.36	115.82
2	23-A	201	FOL	N8-C8A-N1	6.56	123.31	115.82
2	13-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-6.47	114.59	123.43
2	20-A	201	FOL	N8-C8A-N1	6.35	123.08	115.82
2	30-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-6.28	115.79	119.95
2	24-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-6.22	115.83	119.95
4	23-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-6.06	98.07	106.93
2	31-A	201	FOL	N8-C8A-N1	5.88	122.54	115.82
2	13-A	201	FOL	C2-N3-C4	5.88	125.27	115.93
2	6-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-5.86	115.42	123.43
2	27-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-5.85	115.43	123.43
2	33-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-5.80	116.11	119.95
2	28-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-5.76	115.55	123.43
2	26-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-5.76	116.14	119.95
2	15-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-5.72	115.61	123.43
2	33-A	201	FOL	CB-CG-CD	5.71	127.67	112.51
2	19-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-5.68	115.67	123.43
2	15-A	201	FOL	CG-CB-CA	5.66	123.73	113.16
2	7-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-5.64	115.71	123.43
2	3-A	201	FOL	N8-C8A-N1	5.63	122.25	115.82
2	12-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-5.61	116.24	119.95
2	4-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-5.56	115.83	123.43
2	1-A	201	FOL	N8-C8A-N1	5.51	122.11	115.82
2	22-A	201	FOL	N8-C8A-N1	5.46	122.06	115.82
2	33-A	201	FOL	N8-C8A-N1	5.46	122.05	115.82
2	14-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-5.44	116.00	123.43
2	11-A	201	FOL	N8-C8A-N1	5.42	122.00	115.82
2	17-A	201	FOL	N8-C8A-N1	5.39	121.97	115.82
2	32-A	201	FOL	N8-C8A-N1	5.37	121.95	115.82
2	14-A	201	FOL	N8-C8A-N1	5.36	121.94	115.82
2	25-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-5.32	116.43	119.95
2	25-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-5.30	116.18	123.43
2	13-A	201	FOL	CB-CG-CD	5.27	126.48	112.51
2	18-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-5.25	116.25	123.43
2	24-A	201	FOL	N8-C8A-N1	5.24	121.80	115.82
2	18-A	201	FOL	N8-C8A-N1	5.23	121.79	115.82
2	22-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-5.20	116.31	123.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	29-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-5.14	116.41	123.43
2	23-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-5.11	116.57	119.95
2	1-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-5.07	116.49	123.43
2	25-A	201	FOL	N8-C8A-N1	5.04	121.57	115.82
2	18-A	201	FOL	C2-N1-C8A	5.01	121.08	115.36
2	26-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-5.00	116.59	123.43
2	22-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-4.99	116.65	119.95
2	6-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-4.99	116.65	119.95
2	11-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-4.98	116.62	123.43
2	13-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-4.96	116.67	119.95
2	27-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-4.93	116.69	119.95
2	2-A	201	FOL	N8-C8A-N1	4.93	121.45	115.82
2	8-A	201	FOL	C2-N3-C4	4.90	123.72	115.93
2	31-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-4.90	116.72	123.43
2	9-A	201	FOL	N8-C8A-N1	4.86	121.37	115.82
2	32-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-4.85	116.80	123.43
2	7-A	201	FOL	N8-C8A-N1	4.85	121.35	115.82
2	14-A	201	FOL	CB-CG-CD	4.84	125.36	112.51
2	14-A	201	FOL	C2-N3-C4	4.81	123.58	115.93
2	3-A	201	FOL	C2-N1-C8A	4.77	120.80	115.36
2	22-A	201	FOL	C2-N1-C8A	4.76	120.79	115.36
2	11-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-4.75	116.81	119.95
2	14-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-4.72	116.83	119.95
2	2-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-4.71	116.83	119.95
2	21-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-4.71	116.99	123.43
2	14-A	201	FOL	C2-N1-C8A	4.71	120.73	115.36
2	12-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-4.70	117.01	123.43
2	3-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-4.65	117.07	123.43
2	15-A	201	FOL	CB-CA-CT	4.65	121.56	110.35
2	25-A	201	FOL	C2-N3-C4	4.64	123.30	115.93
2	27-A	201	FOL	C2-N3-C4	4.63	123.29	115.93
2	25-A	201	FOL	CB-CA-N	4.62	120.22	110.88
2	13-A	201	FOL	N8-C8A-N1	4.60	121.07	115.82
4	7-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-4.59	104.61	109.40
2	4-A	201	FOL	N8-C8A-N1	4.59	121.06	115.82
2	20-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-4.59	117.16	123.43
2	17-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-4.57	117.18	123.43
2	25-A	201	FOL	C2-N1-C8A	4.56	120.56	115.36
2	16-A	201	FOL	C2-N1-C8A	4.51	120.51	115.36
4	14-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-4.50	104.71	109.40
2	17-A	201	FOL	C2-N1-C8A	4.50	120.49	115.36
4	25-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-4.49	104.72	109.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	5-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-4.47	117.31	123.43
2	2-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-4.47	117.32	123.43
2	17-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-4.47	116.99	119.95
2	3-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-4.46	117.00	119.95
2	4-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-4.46	117.00	119.95
2	14-A	201	FOL	CB-CA-N	4.43	119.83	110.88
4	10-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-4.41	104.80	109.40
2	28-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-4.40	117.04	119.95
2	13-A	201	FOL	CB-CA-N	4.39	119.76	110.88
2	9-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-4.38	117.44	123.43
2	10-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-4.38	117.44	123.43
2	30-A	201	FOL	C2-N1-C8A	4.36	120.34	115.36
2	18-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-4.36	117.06	119.95
2	30-A	201	FOL	N8-C8A-N1	4.33	120.77	115.82
4	15-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-4.33	104.88	109.40
4	17-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-4.33	104.89	109.40
4	18-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-4.32	104.90	109.40
2	22-A	201	FOL	C2-N3-C4	4.32	122.79	115.93
2	19-A	201	FOL	C2-N1-C8A	4.30	120.27	115.36
2	33-A	201	FOL	C2-N1-C8A	4.29	120.26	115.36
4	2-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-4.29	104.93	109.40
2	19-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-4.27	117.12	119.95
2	15-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-4.25	117.14	119.95
2	9-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-4.23	117.15	119.95
2	16-A	201	FOL	CB-CA-N	-4.21	102.35	110.88
4	3-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-4.21	100.78	106.93
2	24-A	201	FOL	C2-N1-C8A	4.21	120.16	115.36
2	18-A	201	FOL	C2-N3-C4	4.20	122.61	115.93
4	5-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-4.20	105.02	109.40
2	19-A	201	FOL	C2-N3-C4	4.20	122.60	115.93
2	11-A	201	FOL	C2-N1-C8A	4.19	120.15	115.36
2	10-A	201	FOL	C2-N1-C8A	4.18	120.14	115.36
2	29-A	201	FOL	C2-N1-C8A	4.18	120.13	115.36
4	4-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-4.17	105.05	109.40
2	31-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-4.17	117.19	119.95
2	30-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-4.17	117.73	123.43
2	28-A	201	FOL	C2-N3-C4	4.16	122.53	115.93
2	21-A	201	FOL	C2-N1-C8A	4.13	120.08	115.36
2	6-A	201	FOL	C2-N3-C4	4.12	122.48	115.93
2	13-A	201	FOL	CG-CB-CA	4.12	120.86	113.16
2	6-A	201	FOL	CB-CA-CT	-4.12	100.42	110.35
4	8-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-4.10	105.13	109.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	23-A	201	FOL	C2-N1-C8A	4.10	120.04	115.36
2	26-A	201	FOL	N8-C8A-N1	4.10	120.50	115.82
2	30-A	201	FOL	C4-C4A-N5	4.10	123.28	118.60
2	11-A	201	FOL	C2-N3-C4	4.08	122.42	115.93
2	18-A	201	FOL	CG-CB-CA	4.07	120.76	113.16
2	28-A	201	FOL	C2-N1-C8A	4.07	120.00	115.36
4	32-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-4.07	105.16	109.40
2	8-A	201	FOL	N8-C8A-N1	4.06	120.46	115.82
2	4-A	201	FOL	C2-N3-C4	4.06	122.38	115.93
2	26-A	201	FOL	C2-N3-C4	4.04	122.36	115.93
2	19-A	201	FOL	N8-C8A-N1	4.04	120.43	115.82
2	5-A	201	FOL	C2-N1-C8A	4.03	119.97	115.36
4	22-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-4.03	101.03	106.93
2	21-A	201	FOL	CB-CA-N	-4.03	102.73	110.88
2	24-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-4.03	117.92	123.43
4	22-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-4.01	105.22	109.40
2	9-A	201	FOL	C2-N1-C8A	3.97	119.89	115.36
4	29-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-3.96	105.27	109.40
4	11-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-3.96	105.27	109.40
4	8-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-3.95	101.15	106.93
4	30-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-3.93	105.31	109.40
2	1-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-3.92	117.36	119.95
2	2-A	201	FOL	C2-N1-C8A	3.92	119.83	115.36
2	25-A	201	FOL	CB-CG-CD	-3.91	102.13	112.51
4	19-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-3.89	105.34	109.40
4	3-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-3.89	105.35	109.40
2	21-A	201	FOL	C2-N3-C4	3.86	122.06	115.93
2	26-A	201	FOL	C2-N1-C8A	3.85	119.76	115.36
2	12-A	201	FOL	C2-N1-C8A	3.85	119.75	115.36
2	1-A	201	FOL	C2-N3-C4	3.84	122.03	115.93
2	1-A	201	FOL	C2-N1-C8A	3.84	119.74	115.36
2	20-A	201	FOL	C2-N1-C8A	3.83	119.74	115.36
2	15-A	201	FOL	C2-N3-C4	3.83	122.02	115.93
2	8-A	201	FOL	C2-N1-C8A	3.82	119.72	115.36
2	29-A	201	FOL	C2-N3-C4	3.81	121.98	115.93
2	16-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-3.79	118.25	123.43
2	7-A	201	FOL	C2-N3-C4	3.78	121.93	115.93
2	7-A	201	FOL	C2-N1-C8A	3.77	119.66	115.36
2	14-A	201	FOL	N1-C2-N3	-3.76	122.21	127.22
2	26-A	201	FOL	CB-CA-N	3.76	118.47	110.88
2	3-A	201	FOL	C2-N3-C4	3.76	121.90	115.93
2	31-A	201	FOL	C2-N3-C4	3.75	121.89	115.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	27-A	201	FOL	C2-N1-C8A	3.75	119.64	115.36
4	10-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-3.74	101.46	106.93
4	21-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-3.74	105.50	109.40
2	24-A	201	FOL	CG-CB-CA	3.73	120.13	113.16
2	24-A	201	FOL	C2-N3-C4	3.73	121.85	115.93
2	16-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-3.71	117.49	119.95
2	13-A	201	FOL	OE2-CD-OE1	-3.71	114.05	123.30
2	14-A	201	FOL	CG-CB-CA	3.70	120.06	113.16
4	12-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-3.68	105.56	109.40
2	13-A	201	FOL	C2-N1-C8A	3.67	119.55	115.36
2	15-A	201	FOL	C2-N1-C8A	3.67	119.55	115.36
2	4-A	201	FOL	C2-N1-C8A	3.67	119.55	115.36
2	28-A	201	FOL	N8-C8A-N1	3.65	119.99	115.82
2	31-A	201	FOL	CB-CG-CD	-3.65	102.82	112.51
2	30-A	201	FOL	C2-N3-C4	3.65	121.73	115.93
4	23-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-3.64	105.60	109.40
4	7-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-3.64	101.61	106.93
4	18-A	204	NAP	O7N-C7N-C3N	3.61	123.95	119.63
2	27-A	201	FOL	N8-C8A-N1	3.60	119.93	115.82
4	27-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-3.60	105.65	109.40
4	6-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-3.60	105.65	109.40
2	31-A	201	FOL	C2-N1-C8A	3.58	119.44	115.36
4	16-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-3.58	105.67	109.40
4	26-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-3.58	105.67	109.40
4	28-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-3.57	105.68	109.40
4	24-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-3.57	105.68	109.40
2	8-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-3.56	117.59	119.95
2	32-A	201	FOL	C2-N1-C8A	3.55	119.41	115.36
4	9-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-3.53	105.72	109.40
2	33-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-3.53	118.60	123.43
4	19-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-3.53	101.77	106.93
4	13-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-3.51	105.74	109.40
4	9-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-3.50	101.82	106.93
2	25-A	201	FOL	N1-C2-N3	-3.49	122.57	127.22
2	13-A	201	FOL	N1-C2-N3	-3.48	122.58	127.22
2	2-A	201	FOL	C2-N3-C4	3.47	121.44	115.93
2	21-A	201	FOL	C4-C4A-N5	3.45	122.54	118.60
4	20-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-3.45	101.89	106.93
4	6-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-3.44	101.90	106.93
2	12-A	201	FOL	N8-C8A-N1	3.44	119.74	115.82
2	32-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-3.43	117.68	119.95
4	20-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-3.42	105.83	109.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
4	14-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-3.41	101.94	106.93
4	18-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-3.41	101.94	106.93
4	18-A	204	NAP	O7N-C7N-N7N	-3.39	117.76	122.58
2	7-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-3.39	117.71	119.95
2	12-A	201	FOL	C2-N3-C4	3.38	121.30	115.93
2	18-A	201	FOL	OE2-CD-CG	3.38	124.89	114.03
4	1-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-3.37	105.88	109.40
2	14-A	201	FOL	OE2-CD-OE1	-3.36	114.92	123.30
2	17-A	201	FOL	C2-N3-C4	3.36	121.26	115.93
2	33-A	201	FOL	CB-CA-CT	3.35	118.42	110.35
2	6-A	201	FOL	C2-N1-C8A	3.33	119.16	115.36
2	3-A	201	FOL	CB-CA-CT	3.29	118.29	110.35
2	15-A	201	FOL	N8-C8A-N1	3.29	119.58	115.82
4	31-A	204	NAP	C4A-C5A-N7A	-3.29	105.97	109.40
2	22-A	201	FOL	N1-C2-N3	-3.28	122.85	127.22
2	6-A	201	FOL	OE1-CD-CG	-3.28	112.55	123.08
2	32-A	201	FOL	C2-N3-C4	3.26	121.11	115.93
4	1-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	3.23	128.23	112.24
4	16-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-3.23	102.21	106.93
2	18-A	201	FOL	N1-C2-N3	-3.22	122.93	127.22
2	33-A	201	FOL	C2-N3-C4	3.21	121.03	115.93
2	23-A	201	FOL	C4A-C4-N3	-3.20	119.05	123.43
2	11-A	201	FOL	CB-CA-N	3.20	117.34	110.88
4	28-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	3.19	128.03	112.24
2	29-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-3.17	117.85	119.95
2	25-A	201	FOL	O1-CT-CA	-3.16	111.89	122.26
4	15-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	3.15	127.83	112.24
2	5-A	201	FOL	C2-N3-C4	3.14	120.91	115.93
2	23-A	201	FOL	CB-CA-N	3.13	117.21	110.88
2	5-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-3.13	117.88	119.95
4	25-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-3.12	102.36	106.93
4	15-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-3.12	102.36	106.93
4	26-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-3.12	102.37	106.93
4	29-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	3.11	127.63	112.24
2	10-A	201	FOL	C2-N3-C4	3.11	120.87	115.93
2	13-A	201	FOL	CT-CA-N	-3.11	103.19	110.55
2	7-A	201	FOL	CA-N-C	3.10	129.20	121.60
2	10-A	201	FOL	CB-CA-N	3.09	117.13	110.88
4	2-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	3.09	127.52	112.24
4	13-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-3.09	102.41	106.93
4	4-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	3.08	121.12	109.07
4	27-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	3.06	121.04	109.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
4	28-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	3.05	127.32	112.24
2	10-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-3.03	117.95	119.95
2	31-A	201	FOL	CB-CA-CT	-3.03	103.06	110.35
4	29-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	3.03	127.20	112.24
2	8-A	201	FOL	N1-C2-N3	-3.02	123.20	127.22
2	4-A	201	FOL	OE2-CD-CG	3.01	123.71	114.03
4	20-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	3.01	127.13	112.24
4	3-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.99	127.04	112.24
2	26-A	201	FOL	C4-C4A-N5	2.98	122.01	118.60
2	13-A	201	FOL	C7-N8-C8A	2.98	119.69	116.69
4	4-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.97	126.94	112.24
2	26-A	201	FOL	CB-CA-CT	2.97	117.51	110.35
4	3-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.97	126.92	112.24
4	23-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.97	126.90	112.24
2	24-A	201	FOL	CB-CA-N	2.95	116.83	110.88
2	21-A	201	FOL	N8-C8A-N1	2.95	119.19	115.82
4	21-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-2.94	102.63	106.93
4	28-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.94	120.53	109.07
4	14-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.92	126.67	112.24
2	16-A	201	FOL	C2-N3-C4	2.92	120.56	115.93
2	13-A	201	FOL	C4-C4A-N5	2.91	121.93	118.60
2	3-A	201	FOL	N1-C2-N3	-2.91	123.34	127.22
2	5-A	201	FOL	CB-CG-CD	2.90	120.22	112.51
2	6-A	201	FOL	N8-C8A-N1	2.90	119.14	115.82
4	28-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-2.90	102.69	106.93
2	31-A	201	FOL	CG-CB-CA	2.89	118.56	113.16
4	27-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.89	126.53	112.24
4	29-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.89	120.35	109.07
2	13-A	201	FOL	CA-N-C	2.89	128.66	121.60
4	18-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.88	126.50	112.24
2	26-A	201	FOL	C9-C6-N5	2.88	121.78	116.66
4	5-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.88	126.49	112.24
4	26-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.88	126.47	112.24
2	30-A	201	FOL	CB-CG-CD	-2.88	104.87	112.51
4	28-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.87	94.42	107.75
4	19-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.86	126.38	112.24
4	24-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-2.86	102.75	106.93
4	30-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.85	126.31	112.24
2	11-A	201	FOL	N1-C2-N3	-2.84	123.43	127.22
4	3-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.84	120.17	109.07
4	21-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.83	126.23	112.24
4	4-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.83	126.22	112.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
4	5-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.83	120.11	109.07
4	15-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.82	126.20	112.24
2	12-A	201	FOL	CG-CB-CA	2.82	118.42	113.16
4	23-A	204	NAP	O5D-PN-O1N	2.80	120.02	109.07
2	4-A	201	FOL	C16-C11-C12	-2.80	114.60	118.59
4	29-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-2.79	102.85	106.93
2	26-A	201	FOL	CB-CG-CD	2.79	119.91	112.51
4	10-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.79	126.02	112.24
4	15-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.79	121.42	118.26
4	3-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.79	94.81	107.75
4	25-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.78	126.00	112.24
4	17-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-2.77	102.88	106.93
4	29-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.77	94.89	107.75
2	9-A	201	FOL	C2-N3-C4	2.77	120.33	115.93
4	27-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-2.76	102.90	106.93
2	6-A	201	FOL	OE2-CD-CG	2.76	122.89	114.03
4	19-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.76	118.99	111.17
4	2-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.75	125.85	112.24
4	24-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.74	118.95	111.17
4	17-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.74	125.78	112.24
2	21-A	201	FOL	C9-C6-N5	2.73	121.51	116.66
2	20-A	201	FOL	C2-N3-C4	2.73	120.27	115.93
4	11-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.73	125.73	112.24
4	17-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.72	125.71	112.24
4	25-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.72	118.90	111.17
4	12-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.72	125.68	112.24
4	25-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.71	125.66	112.24
4	16-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.71	125.62	112.24
4	24-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.70	125.61	112.24
2	19-A	201	FOL	N1-C2-N3	-2.70	123.62	127.22
4	27-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.69	95.24	107.75
4	30-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.69	125.55	112.24
2	18-A	201	FOL	CB-CA-CT	-2.69	103.86	110.35
2	11-A	201	FOL	OE2-CD-CG	2.69	122.67	114.03
2	1-A	201	FOL	CB-CA-N	2.69	116.31	110.88
2	27-A	201	FOL	C4-C4A-N5	2.68	121.67	118.60
2	18-A	201	FOL	OE2-CD-OE1	-2.68	116.62	123.30
4	6-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.68	118.77	111.17
4	13-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.68	125.47	112.24
4	23-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.68	125.47	112.24
4	17-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.67	121.29	118.26
4	32-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-2.67	103.02	106.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
4	13-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.67	118.75	111.17
4	5-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.67	121.28	118.26
2	9-A	201	FOL	O-C-C11	-2.67	116.18	120.94
2	11-A	201	FOL	OE2-CD-OE1	-2.67	116.65	123.30
2	24-A	201	FOL	O2-CT-CA	2.66	122.26	113.40
4	13-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.66	119.45	109.07
2	7-A	201	FOL	CG-CB-CA	-2.66	108.19	113.16
2	12-A	201	FOL	C4-C4A-N5	2.64	121.62	118.60
4	20-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.64	118.67	111.17
2	15-A	201	FOL	C4-C4A-N5	2.64	121.62	118.60
4	32-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.64	121.25	118.26
2	27-A	201	FOL	N1-C2-N3	-2.64	123.71	127.22
4	16-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.64	125.27	112.24
2	7-A	201	FOL	CT-CA-N	-2.63	104.31	110.55
4	4-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.63	95.52	107.75
4	1-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.63	118.64	111.17
4	27-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.63	125.23	112.24
2	8-A	201	FOL	NA2-C2-N3	2.62	121.32	117.25
2	21-A	201	FOL	N1-C2-N3	-2.62	123.73	127.22
4	26-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.62	119.28	109.07
4	1-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.61	125.14	112.24
4	26-A	204	NAP	C6N-N1N-C2N	-2.60	119.61	121.97
2	26-A	201	FOL	O-C-N	-2.59	117.68	122.45
2	33-A	201	FOL	N1-C2-N3	-2.59	123.77	127.22
4	12-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.57	118.47	111.17
2	10-A	201	FOL	C7-C6-N5	-2.57	119.17	120.85
2	31-A	201	FOL	CA-N-C	2.56	127.86	121.60
4	14-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.55	119.05	109.07
4	7-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.55	121.15	118.26
4	15-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.54	95.94	107.75
4	5-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-2.54	103.22	106.93
4	16-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.54	118.37	111.17
4	12-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.52	124.68	112.24
2	21-A	201	FOL	C9-C6-C7	-2.52	117.17	121.55
2	25-A	201	FOL	C4-C4A-N5	2.52	121.47	118.60
2	1-A	201	FOL	N1-C2-N3	-2.51	123.87	127.22
4	2-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-2.51	103.26	106.93
4	2-A	204	NAP	O3D-C3D-C2D	-2.51	103.70	111.82
4	14-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.51	124.63	112.24
2	28-A	201	FOL	C4-C4A-N5	2.51	121.46	118.60
4	30-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.51	121.10	118.26
4	15-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.50	118.85	109.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
4	24-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.50	121.09	118.26
4	10-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.50	121.09	118.26
2	3-A	201	FOL	CG-CB-CA	-2.49	108.50	113.16
4	22-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.49	124.56	112.24
4	26-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.49	121.08	118.26
4	11-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.49	124.55	112.24
4	15-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.49	118.23	111.17
2	21-A	201	FOL	C16-C11-C12	-2.49	115.05	118.59
4	22-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.48	118.76	109.07
4	13-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.48	124.50	112.24
4	16-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.48	96.24	107.75
2	26-A	201	FOL	C11-C-N	2.48	121.81	117.06
4	5-A	204	NAP	PN-O3-PA	-2.47	124.34	132.83
4	9-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.47	124.45	112.24
4	8-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.47	118.17	111.17
4	12-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.46	118.69	109.07
4	13-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.46	96.31	107.75
4	5-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.46	96.33	107.75
2	4-A	201	FOL	C9-N10-C14	2.46	128.47	122.15
4	5-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.46	118.14	111.17
4	23-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.45	118.65	109.07
4	8-A	204	NAP	C5A-C6A-N6A	2.45	124.08	120.35
4	19-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.45	124.35	112.24
4	23-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.45	118.12	111.17
4	26-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.44	124.31	112.24
4	16-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.43	121.02	118.26
4	10-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.43	124.26	112.24
4	23-A	204	NAP	O2N-PN-O5D	-2.43	96.45	107.75
4	1-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.43	118.55	109.07
2	29-A	201	FOL	CB-CG-CD	-2.43	106.07	112.51
4	25-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.42	118.54	109.07
2	15-A	201	FOL	C7-C6-N5	2.42	122.43	120.85
2	1-A	201	FOL	O-C-N	2.42	126.91	122.45
4	12-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.42	96.49	107.75
2	6-A	201	FOL	C4-C4A-N5	2.42	121.36	118.60
4	6-A	204	NAP	O3D-C3D-C2D	-2.42	104.00	111.82
4	30-A	204	NAP	PN-O3-PA	-2.42	124.53	132.83
2	14-A	201	FOL	O2-CT-CA	2.42	121.43	113.40
4	14-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.42	118.02	111.17
4	14-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.41	96.56	107.75
2	29-A	201	FOL	N1-C2-N3	-2.41	124.01	127.22
2	2-A	201	FOL	CG-CB-CA	-2.41	108.66	113.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
4	31-A	204	NAP	O3X-P2B-O2B	2.41	116.77	105.99
4	31-A	204	NAP	O2X-P2B-O1X	-2.40	101.27	110.68
2	24-A	201	FOL	N1-C2-N3	-2.40	124.02	127.22
2	20-A	201	FOL	C8A-C4A-C4	-2.40	118.36	119.95
4	25-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.40	96.60	107.75
2	4-A	201	FOL	N1-C2-N3	-2.39	124.03	127.22
4	31-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-2.39	103.43	106.93
4	22-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.39	124.06	112.24
4	11-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.38	117.94	111.17
2	22-A	201	FOL	OE2-CD-CG	2.38	121.68	114.03
4	12-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-2.38	103.45	106.93
2	29-A	201	FOL	OE1-CD-CG	-2.38	115.43	123.08
2	15-A	201	FOL	CB-CG-CD	2.38	118.83	112.51
2	24-A	201	FOL	C9-N10-C14	2.38	128.26	122.15
2	6-A	201	FOL	C9-C6-N5	2.38	120.88	116.66
4	1-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.38	96.70	107.75
4	21-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.38	117.91	111.17
4	16-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.38	118.35	109.07
4	9-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.37	117.90	111.17
4	18-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.37	123.94	112.24
2	29-A	201	FOL	C9-N10-C14	2.36	128.22	122.15
2	22-A	201	FOL	CB-CG-CD	2.35	118.75	112.51
4	5-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.35	123.87	112.24
2	23-A	201	FOL	C7-C6-N5	-2.35	119.31	120.85
4	30-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.34	96.85	107.75
4	17-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.34	96.86	107.75
4	18-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.34	117.81	111.17
4	24-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.34	123.79	112.24
4	20-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.33	123.75	112.24
4	23-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.33	96.94	107.75
4	24-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.32	118.15	109.07
2	25-A	201	FOL	CT-CA-N	-2.31	105.07	110.55
4	11-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.31	97.00	107.75
2	26-A	201	FOL	O2-CT-CA	2.31	121.08	113.40
2	23-A	201	FOL	C2-N3-C4	2.31	119.60	115.93
2	1-A	201	FOL	OE2-CD-CG	2.31	121.45	114.03
4	22-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.30	97.05	107.75
4	17-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.30	117.70	111.17
2	9-A	201	FOL	CB-CG-CD	2.29	118.59	112.51
4	30-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.29	118.02	109.07
2	33-A	201	FOL	C6-C9-N10	2.29	118.13	113.07
2	23-A	201	FOL	CT-CA-N	-2.29	105.13	110.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	32-A	201	FOL	O2-CT-CA	2.29	121.00	113.40
4	13-A	204	NAP	O3D-C3D-C2D	-2.28	104.44	111.82
4	4-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.28	120.84	118.26
4	26-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.28	97.16	107.75
4	18-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.28	117.97	109.07
4	11-A	204	NAP	C2D-C3D-C4D	2.28	107.07	102.64
4	15-A	204	NAP	C6N-N1N-C2N	-2.28	119.90	121.97
2	5-A	201	FOL	C9-N10-C14	2.27	127.99	122.15
4	24-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.27	97.19	107.75
4	20-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.27	120.83	118.26
4	20-A	204	NAP	C6N-N1N-C2N	-2.26	119.91	121.97
4	19-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.26	120.82	118.26
2	5-A	201	FOL	OE2-CD-CG	2.26	121.29	114.03
4	17-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.26	117.89	109.07
4	7-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.26	117.58	111.17
2	4-A	201	FOL	CB-CA-N	2.26	115.44	110.88
4	8-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.25	123.38	112.24
4	14-A	204	NAP	PN-O3-PA	-2.25	125.09	132.83
2	29-A	201	FOL	C11-C-N	2.25	121.38	117.06
4	6-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.25	123.38	112.24
2	21-A	201	FOL	C6-N5-C4A	-2.25	115.80	118.45
2	5-A	201	FOL	CT-CA-N	-2.25	105.23	110.55
4	18-A	204	NAP	PN-O3-PA	-2.24	125.13	132.83
4	22-A	204	NAP	PN-O3-PA	-2.24	125.14	132.83
4	2-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.24	117.53	111.17
2	23-A	201	FOL	C13-C14-N10	-2.24	116.34	120.97
2	21-A	201	FOL	C11-C-N	2.24	121.35	117.06
2	23-A	201	FOL	CA-N-C	2.23	127.07	121.60
2	17-A	201	FOL	N1-C2-N3	-2.23	124.25	127.22
4	27-A	204	NAP	C6N-N1N-C2N	-2.23	119.94	121.97
2	2-A	201	FOL	N1-C2-N3	-2.23	124.25	127.22
4	9-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.22	120.78	118.26
4	27-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.22	120.78	118.26
2	31-A	201	FOL	OE2-CD-CG	2.22	121.16	114.03
2	24-A	201	FOL	C15-C14-N10	2.21	125.56	120.97
4	19-A	204	NAP	O3X-P2B-O2X	2.21	116.08	107.64
4	10-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.21	97.50	107.75
4	2-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.20	117.68	109.07
4	2-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.20	97.51	107.75
2	28-A	201	FOL	N1-C2-N3	-2.20	124.28	127.22
2	15-A	201	FOL	C9-C6-C7	-2.20	117.71	121.55
4	8-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.20	120.75	118.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
4	1-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-2.20	103.71	106.93
4	15-A	204	NAP	PN-O3-PA	-2.20	125.29	132.83
4	21-A	204	NAP	C2D-C3D-C4D	2.19	106.90	102.64
4	30-A	204	NAP	C2D-C3D-C4D	2.19	106.90	102.64
4	11-A	204	NAP	PN-O3-PA	-2.19	125.30	132.83
2	9-A	201	FOL	CG-CB-CA	-2.19	109.06	113.16
4	15-A	204	NAP	C5A-C6A-N6A	2.19	123.68	120.35
4	21-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.19	123.06	112.24
2	6-A	201	FOL	C9-C6-C7	-2.19	117.74	121.55
2	18-A	201	FOL	C4-C4A-N5	2.19	121.10	118.60
2	1-A	201	FOL	C13-C14-N10	-2.19	116.44	120.97
2	7-A	201	FOL	N1-C2-N3	-2.18	124.31	127.22
2	10-A	201	FOL	O-C-N	-2.18	118.44	122.45
2	10-A	201	FOL	O2-CT-CA	2.18	120.65	113.40
2	26-A	201	FOL	N1-C2-N3	-2.18	124.32	127.22
2	24-A	201	FOL	C4-C4A-N5	2.18	121.09	118.60
2	24-A	201	FOL	C13-C14-N10	-2.18	116.46	120.97
2	9-A	201	FOL	CT-CA-N	-2.18	105.39	110.55
4	9-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.18	123.00	112.24
4	22-A	204	NAP	O7N-C7N-N7N	-2.18	119.49	122.58
4	26-A	204	NAP	PN-O3-PA	-2.17	125.37	132.83
4	4-A	204	NAP	O4D-C1D-C2D	-2.17	103.75	106.93
4	20-A	204	NAP	PN-O3-PA	-2.17	125.37	132.83
4	12-A	204	NAP	C2D-C3D-C4D	2.17	106.86	102.64
4	14-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.17	120.72	118.26
4	21-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.17	117.53	109.07
2	19-A	201	FOL	NA2-C2-N3	2.17	120.62	117.25
4	26-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.16	117.31	111.17
4	4-A	204	NAP	C2D-C3D-C4D	2.16	106.84	102.64
2	33-A	201	FOL	OE2-CD-OE1	-2.16	117.91	123.30
2	26-A	201	FOL	OE2-CD-OE1	-2.16	117.92	123.30
2	25-A	201	FOL	O2-CT-CA	2.15	120.56	113.40
2	9-A	201	FOL	O2-CT-CA	2.15	120.55	113.40
2	10-A	201	FOL	C6-C9-N10	2.15	117.82	113.07
4	17-A	204	NAP	PN-O3-PA	-2.14	125.47	132.83
4	11-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.14	117.45	109.07
2	14-A	201	FOL	CA-N-C	2.14	126.85	121.60
2	33-A	201	FOL	C4-C4A-N5	2.14	121.05	118.60
4	22-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.14	117.25	111.17
4	3-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.14	117.23	111.17
4	10-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.13	117.40	109.07
4	1-A	204	NAP	C2D-C3D-C4D	2.13	106.78	102.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
4	12-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.13	120.67	118.26
4	6-A	204	NAP	C2B-C3B-C4B	-2.13	97.37	101.99
2	31-A	201	FOL	C7-C6-N5	-2.13	119.46	120.85
4	1-A	204	NAP	O2N-PN-O5D	-2.13	97.87	107.75
4	17-A	204	NAP	C6N-N1N-C2N	-2.12	120.04	121.97
2	11-A	201	FOL	O1-CT-CA	-2.12	115.30	122.26
4	21-A	204	NAP	PN-O3-PA	-2.12	125.56	132.83
4	3-A	204	NAP	PN-O3-PA	-2.12	125.56	132.83
4	19-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.10	117.28	109.07
2	20-A	201	FOL	C9-N10-C14	2.10	127.55	122.15
4	16-A	204	NAP	PN-O3-PA	-2.10	125.62	132.83
4	1-A	204	NAP	PN-O3-PA	-2.10	125.63	132.83
4	13-A	204	NAP	PN-O3-PA	-2.10	125.63	132.83
2	14-A	201	FOL	OE1-CD-CG	2.10	129.81	123.08
4	2-A	204	NAP	PN-O3-PA	-2.09	125.65	132.83
2	19-A	201	FOL	C9-N10-C14	2.09	127.52	122.15
2	31-A	201	FOL	C9-N10-C14	2.09	127.51	122.15
2	19-A	201	FOL	C4-C4A-N5	2.08	120.98	118.60
4	18-A	204	NAP	O2A-PA-O5B	-2.08	98.08	107.75
4	4-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.08	117.07	111.17
2	6-A	201	FOL	C6-N5-C4A	-2.08	116.00	118.45
4	7-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.08	122.51	112.24
2	1-A	201	FOL	OE1-CD-CG	-2.08	116.41	123.08
4	32-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.07	122.49	112.24
2	30-A	201	FOL	CA-N-C	2.07	126.67	121.60
2	32-A	201	FOL	CA-N-C	2.07	126.67	121.60
4	31-A	204	NAP	O2N-PN-O1N	2.07	122.48	112.24
2	32-A	201	FOL	CB-CG-CD	2.07	117.99	112.51
2	16-A	201	FOL	N1-C2-N3	-2.07	124.47	127.22
2	28-A	201	FOL	CA-N-C	2.06	126.65	121.60
2	13-A	201	FOL	O2-CT-CA	2.06	120.25	113.40
2	31-A	201	FOL	C16-C11-C12	-2.06	115.65	118.59
4	12-A	204	NAP	PN-O3-PA	-2.05	125.78	132.83
4	19-A	204	NAP	PN-O3-PA	-2.05	125.78	132.83
4	14-A	204	NAP	O3D-C3D-C2D	-2.05	105.19	111.82
2	31-A	201	FOL	N1-C2-N3	-2.05	124.49	127.22
4	32-A	204	NAP	C2A-N1A-C6A	-2.05	115.25	118.75
4	5-A	204	NAP	C5A-C6A-N6A	2.04	123.46	120.35
2	25-A	201	FOL	CB-CA-CT	-2.04	105.43	110.35
4	10-A	204	NAP	PN-O3-PA	-2.04	125.82	132.83
2	5-A	201	FOL	O-C-N	-2.04	118.69	122.45
4	31-A	204	NAP	O2A-PA-O1A	2.04	122.33	112.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
4	29-A	204	NAP	PN-O3-PA	-2.04	125.84	132.83
2	18-A	201	FOL	CA-N-C	2.04	126.58	121.60
4	13-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.03	120.56	118.26
2	5-A	201	FOL	OE1-CD-CG	-2.03	116.55	123.08
2	5-A	201	FOL	C7-C6-N5	-2.03	119.52	120.85
2	32-A	201	FOL	C9-N10-C14	2.03	127.37	122.15
4	23-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.03	120.56	118.26
4	28-A	204	NAP	C6N-N1N-C2N	-2.03	120.12	121.97
4	2-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.03	120.56	118.26
2	7-A	201	FOL	C9-N10-C14	2.03	127.36	122.15
2	22-A	201	FOL	C4-C4A-N5	2.02	120.91	118.60
4	10-A	204	NAP	O3B-C3B-C2B	2.02	116.89	111.17
2	13-A	201	FOL	O1-CT-CA	-2.01	115.65	122.26
2	4-A	201	FOL	OE1-CD-CG	-2.01	116.63	123.08
2	14-A	201	FOL	C9-N10-C14	2.01	127.30	122.15
4	25-A	204	NAP	C2N-C3N-C4N	2.01	120.53	118.26
4	9-A	204	NAP	O5B-PA-O1A	2.00	116.89	109.07

There are no chirality outliers.

All (135) torsion outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
2	7-A	201	FOL	CT-CA-CB-CG
2	14-A	201	FOL	CT-CA-CB-CG
2	22-A	201	FOL	N-CA-CB-CG
4	1-A	204	NAP	C5D-O5D-PN-O2N
4	2-A	204	NAP	O4D-C1D-N1N-C6N
4	3-A	204	NAP	O4D-C1D-N1N-C6N
4	5-A	204	NAP	O4D-C1D-N1N-C6N
4	9-A	204	NAP	C2B-O2B-P2B-O3X
4	10-A	204	NAP	O4D-C1D-N1N-C6N
4	12-A	204	NAP	O4D-C1D-N1N-C6N
4	13-A	204	NAP	O4D-C1D-N1N-C6N
4	14-A	204	NAP	O4D-C1D-N1N-C6N
4	15-A	204	NAP	C5D-O5D-PN-O2N
4	15-A	204	NAP	O4D-C1D-N1N-C6N
4	16-A	204	NAP	O4D-C1D-N1N-C6N
4	17-A	204	NAP	C2B-O2B-P2B-O3X
4	19-A	204	NAP	C2B-O2B-P2B-O3X
4	19-A	204	NAP	O4D-C1D-N1N-C6N
4	20-A	204	NAP	O4D-C1D-N1N-C6N
4	21-A	204	NAP	O4D-C1D-N1N-C6N

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
4	23-A	204	NAP	O4D-C1D-N1N-C6N
4	26-A	204	NAP	C5D-O5D-PN-O2N
4	27-A	204	NAP	C2B-O2B-P2B-O3X
4	27-A	204	NAP	C5D-O5D-PN-O2N
4	27-A	204	NAP	O4D-C1D-N1N-C6N
4	28-A	204	NAP	O4D-C1D-N1N-C6N
4	29-A	204	NAP	O4D-C1D-N1N-C6N
4	32-A	204	NAP	O4D-C1D-N1N-C6N
2	25-A	201	FOL	CB-CA-N-C
2	1-A	201	FOL	N-CA-CB-CG
2	15-A	201	FOL	N-CA-CB-CG
2	24-A	201	FOL	N-CA-CB-CG
2	25-A	201	FOL	N-CA-CB-CG
2	31-A	201	FOL	N-CA-CB-CG
2	33-A	201	FOL	N-CA-CB-CG
2	15-A	201	FOL	CA-CB-CG-CD
2	1-A	201	FOL	CT-CA-CB-CG
2	15-A	201	FOL	CT-CA-CB-CG
2	22-A	201	FOL	CT-CA-CB-CG
2	31-A	201	FOL	CT-CA-CB-CG
2	14-A	201	FOL	N-CA-CB-CG
2	22-A	201	FOL	O-C-C11-C12
4	15-A	204	NAP	C2N-C3N-C7N-O7N
2	2-A	201	FOL	CT-CA-CB-CG
2	11-A	201	FOL	CT-CA-CB-CG
2	21-A	201	FOL	CT-CA-CB-CG
2	24-A	201	FOL	CT-CA-CB-CG
2	25-A	201	FOL	CT-CA-CB-CG
2	33-A	201	FOL	CT-CA-CB-CG
2	22-A	201	FOL	N-C-C11-C12
2	7-A	201	FOL	N-CA-CB-CG
2	1-A	201	FOL	CA-CB-CG-CD
2	6-A	201	FOL	CA-CB-CG-CD
2	13-A	201	FOL	CA-CB-CG-CD
2	22-A	201	FOL	O-C-C11-C16
2	23-A	201	FOL	CB-CA-N-C
2	9-A	201	FOL	C11-C-N-CA
2	2-A	201	FOL	N-CA-CB-CG
2	18-A	201	FOL	N-CA-CB-CG
2	22-A	201	FOL	N-C-C11-C16
2	13-A	201	FOL	CT-CA-CB-CG
2	31-A	201	FOL	CA-CB-CG-CD

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
2	33-A	201	FOL	CA-CB-CG-CD
2	6-A	201	FOL	N-CA-CB-CG
2	6-A	201	FOL	CT-CA-CB-CG
2	18-A	201	FOL	CT-CA-CB-CG
2	14-A	201	FOL	CA-CB-CG-CD
2	32-A	201	FOL	CA-CB-CG-CD
4	1-A	204	NAP	C2B-O2B-P2B-O3X
4	4-A	204	NAP	C2B-O2B-P2B-O3X
4	12-A	204	NAP	C2B-O2B-P2B-O3X
4	15-A	204	NAP	C2B-O2B-P2B-O3X
4	22-A	204	NAP	C2B-O2B-P2B-O3X
4	28-A	204	NAP	C2B-O2B-P2B-O3X
4	29-A	204	NAP	C2B-O2B-P2B-O3X
4	31-A	204	NAP	C2B-O2B-P2B-O3X
4	15-A	204	NAP	C4N-C3N-C7N-O7N
2	11-A	201	FOL	N-CA-CB-CG
2	28-A	201	FOL	CA-CB-CG-CD
2	21-A	201	FOL	CT-CA-N-C
2	23-A	201	FOL	CT-CA-N-C
2	24-A	201	FOL	CA-CB-CG-CD
2	24-A	201	FOL	OE1-CD-CG-CB
2	1-A	201	FOL	OE1-CD-CG-CB
2	23-A	201	FOL	OE1-CD-CG-CB
2	1-A	201	FOL	OE2-CD-CG-CB
2	22-A	201	FOL	OE1-CD-CG-CB
2	31-A	201	FOL	OE1-CD-CG-CB
2	5-A	201	FOL	OE1-CD-CG-CB
2	26-A	201	FOL	OE2-CD-CG-CB
2	30-A	201	FOL	OE1-CD-CG-CB
2	31-A	201	FOL	OE2-CD-CG-CB
2	26-A	201	FOL	OE1-CD-CG-CB
2	12-A	201	FOL	CT-CA-CB-CG
2	30-A	201	FOL	OE2-CD-CG-CB
2	6-A	201	FOL	OE1-CD-CG-CB
2	23-A	201	FOL	OE2-CD-CG-CB
2	5-A	201	FOL	OE2-CD-CG-CB
2	21-A	201	FOL	N-CA-CB-CG
2	22-A	201	FOL	OE2-CD-CG-CB
2	24-A	201	FOL	OE2-CD-CG-CB
2	14-A	201	FOL	C6-C9-N10-C14
2	33-A	201	FOL	C6-C9-N10-C14
2	6-A	201	FOL	OE2-CD-CG-CB

Continued on next page...

Continued from previous page...

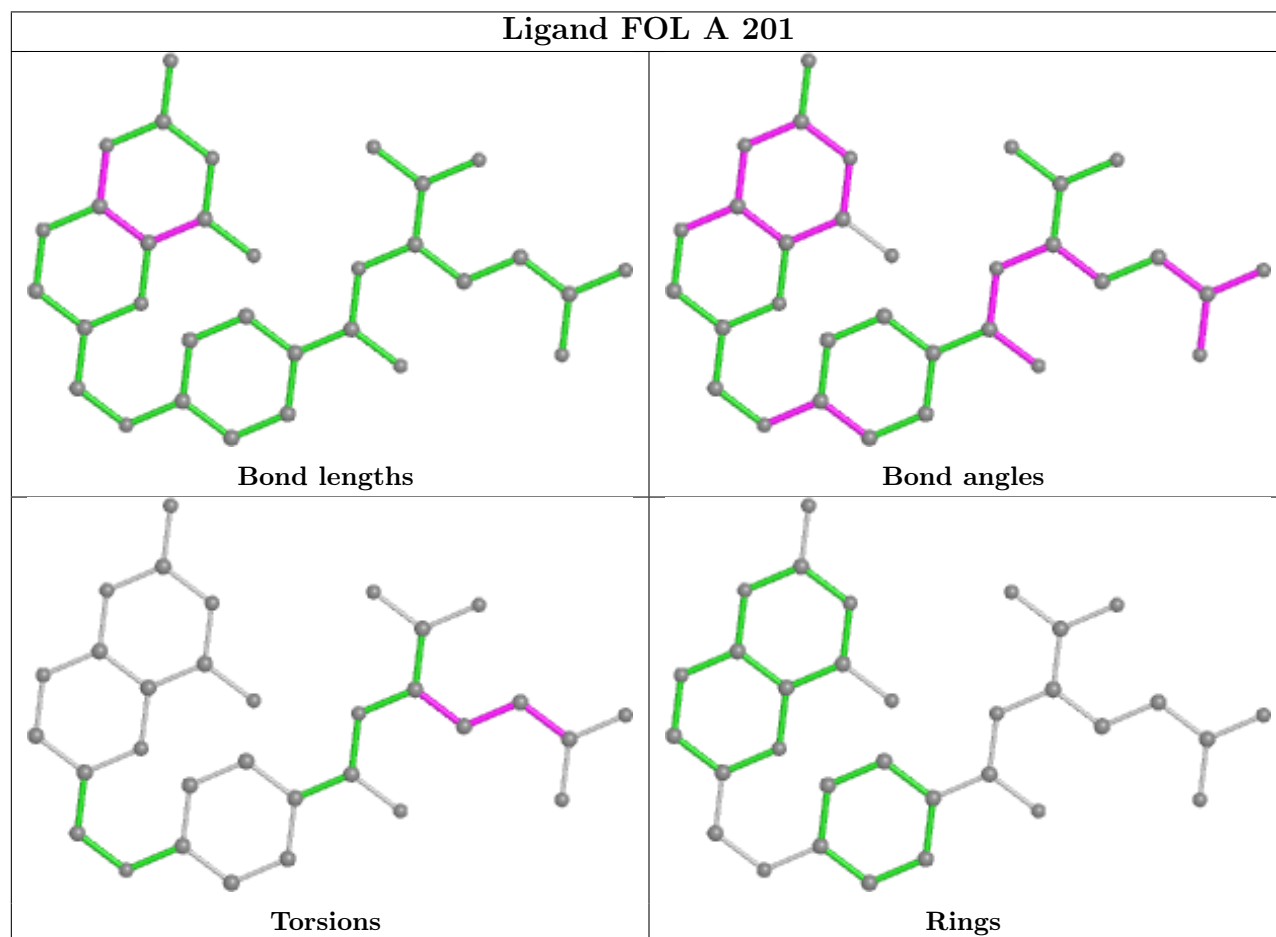
Mol	Chain	Res	Type	Atoms
2	18-A	201	FOL	OE2-CD-CG-CB
2	10-A	201	FOL	OE2-CD-CG-CB
2	3-A	201	FOL	OE2-CD-CG-CB
2	11-A	201	FOL	CA-CB-CG-CD
2	28-A	201	FOL	OE2-CD-CG-CB
2	10-A	201	FOL	OE1-CD-CG-CB
2	27-A	201	FOL	OE1-CD-CG-CB
2	27-A	201	FOL	OE2-CD-CG-CB
2	28-A	201	FOL	OE1-CD-CG-CB
2	3-A	201	FOL	CT-CA-CB-CG
2	9-A	201	FOL	O-C-C11-C16
2	18-A	201	FOL	OE1-CD-CG-CB
2	16-A	201	FOL	CA-CB-CG-CD
4	11-A	204	NAP	C2B-O2B-P2B-O3X
4	14-A	204	NAP	C2B-O2B-P2B-O3X
4	15-A	204	NAP	C2D-C1D-N1N-C2N
4	18-A	204	NAP	C2B-O2B-P2B-O3X
4	19-A	204	NAP	C2B-O2B-P2B-O2X
4	23-A	204	NAP	C2D-C1D-N1N-C2N
4	27-A	204	NAP	C2B-O2B-P2B-O2X
4	28-A	204	NAP	C2D-C1D-N1N-C2N
4	32-A	204	NAP	C2B-O2B-P2B-O3X
2	10-A	201	FOL	C6-C9-N10-C14
2	4-A	201	FOL	OE2-CD-CG-CB
2	3-A	201	FOL	OE1-CD-CG-CB
2	25-A	201	FOL	OE1-CD-CG-CB
4	2-A	204	NAP	C5D-O5D-PN-O2N
4	12-A	204	NAP	C5D-O5D-PN-O2N
2	3-A	201	FOL	N-CA-CB-CG
4	28-A	204	NAP	C3B-C4B-C5B-O5B
2	10-A	201	FOL	C11-C-N-CA

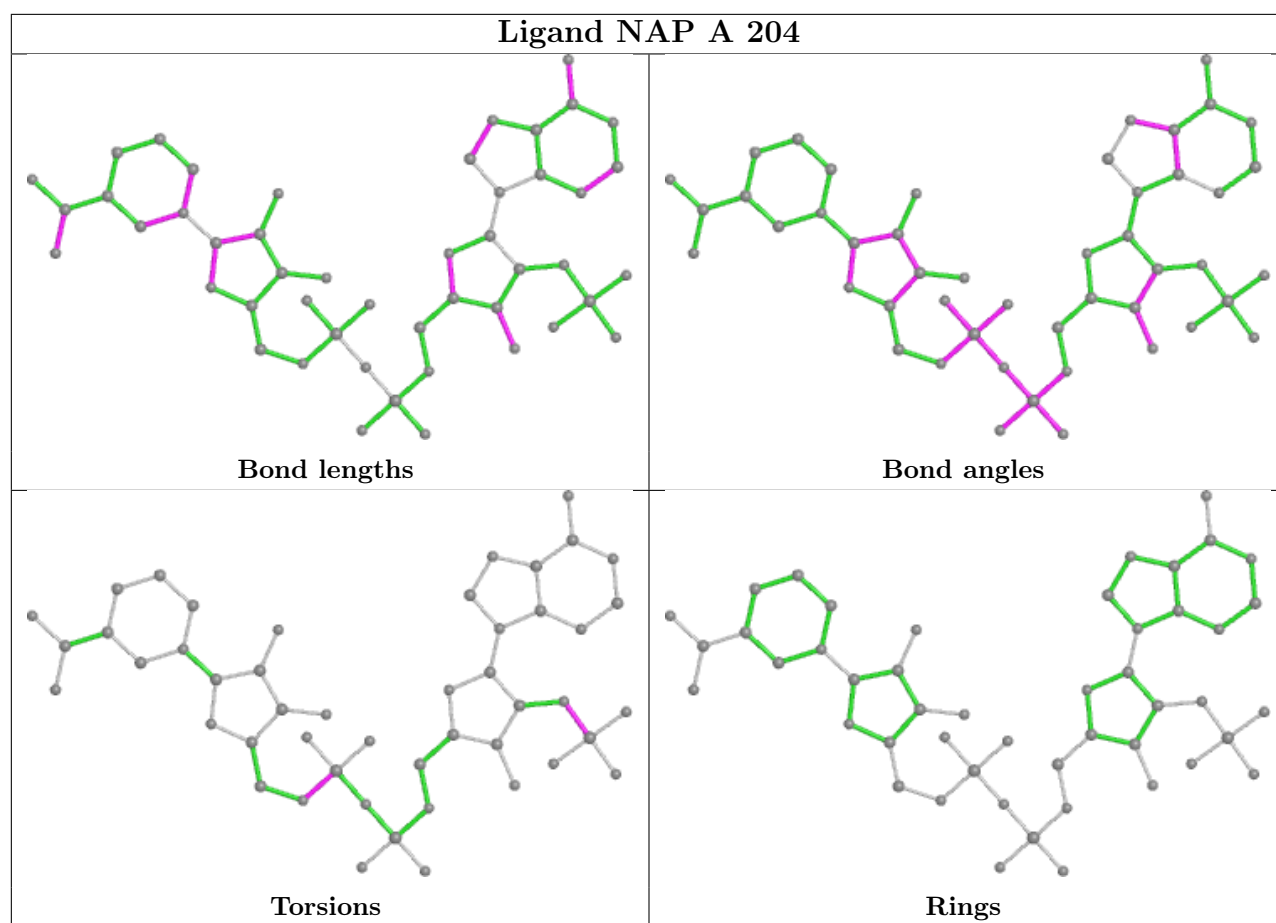
There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less than 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the

average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient equivalents in the CSD to analyse the geometry.





4.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

4.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

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

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

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

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

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

5.3 Carbohydrates [i](#)

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

5.4 Ligands [i](#)

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

5.5 Other polymers [i](#)

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