Supplementary Material (ESI) for Metallomics This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2011

Table S1. Selected properties of the protein-protein interfaces in the complexes analyzed. IF area: interface area (Å²); IF/S: interface/total surface area ratio; NP at: fraction of polar atoms at the interface; RPS: residue propensity score; LD: local density; redox center: redox center of the partner; distance; distance (Å) between the cyt c heme iron and the center of mass of the redox center of the partner; group: configuration of the interfaction, as defined in Figure 5)

Interaction	PDB	cyt c domain	partner domains	IF area (c)	IF area (p)	IF area (total)	IF/S (c)	IF/S (p)	IF/S (total)	NP at (c)	NP at (p)	NP at (total)	FB at (c)	FB at (p)	FB at (total)	RPS (c) F	RPS (p)	RPS (total)	LD (c)	LD (p) redox center	distance	Group
Cyt c 2-PRC	119b	C (124 aa)	L (281 aa), M (267 aa)	606	631	1237	0,1	0,03	0,04	0,58	0,64	0,61	0,23	0,29	0,26	-2,27	-0,28	-2,55	30,5	32,2 BCL (Mg)(avg)	21,2	Pyrrole II
Cyt <i>c</i> -Fab E8	1wej	F (105 aa)	L (214 aa), H (223 aa)	616	532	1148	0,1	0,03	0,05	0,61	0,59	0,6	0,31	0,38	0,35	-2,79	-0,23	-3,02	34,1	37,5 n.a.	n.a.	Methyl 8
Cyt c 552-aa 3 oxidase	1zyy	C (100 aa)	B (252 aa)	624	676	1300	0,12	0,05	0,07	0,58	0,63	0,61	0,38	0,34	0,36	-2,6	1,4	-1,2	31,8	34,9 CuA (avg)	19,0	Pyrrole II
Cyt c 552-ba 3 oxidase	2fwl	A (129 aa)	B (134 aa)	565	654	1219	0,1	0,09	0,09	0,57	0,63	0,6	0,35	0,27	0,31	0,04	0,71	0,75	32,5	33,5 CuA (avg)	16,3	Pyrrole II
Cyt c 551-amicyanin	2gc4	D (147 aa)	C (105 aa)	445	401	846	0,06	0,08	0,07	0,63	0,61	0,62	0,33	0,18	0,26	-1,26	-1,42	-2,68	33,1	24,6 Cu	24,5	Propionate 7
Cyt c-CCP	2pcc	B (108 aa)	A (294 aa)	545	581	1127	0,1	0,05	0,06	0,61	0,55	0,58	0,12	0,15	0,14	-1,9	-0,95	-2,85	26,5	22,0 Heme (Fe)	26,4	Pyrrole II
Cyt c -CuNiR	2zon	G (81 aa)	A (334 aa)	510	519	1029	0,12	0,03	0,05	0,66	0,67	0,67	0,36	0,36	0,36	0,35	-0,04	0,31	31,6	31,7 Cu	17,1	Pyrrole II
cyt c-cyt c1	3cx5	W (108 aa)	O (248 aa)	434	443	877	0,08	0,03	0,04	0,53	0,56	0,55	0,02	0,04	0,03	-2,01	-0,61	-2,62	22,2	19,3 Heme (Fe)	17,4	Pyrrole II
cyt c1-cyt c	3cx5	O (248 aa)	W (108 aa)	443	434	877	0,03	0,08	0,04	0,56	0,53	0,55	0,04	0,02	0,03	-0,61	-2,01	-2,62	19,3	22,2 Heme (Fe)	17,4	Pyrrole II
SoxX-SoxA R.sul.	1h32	B (135 aa)	A (261 aa)	1246	1272	2518	0,16	0,11	0,13	0,63	0,67	0,65	0,31	0,4	0,35	1,29	2,43	3,72	43,0	48,2 Heme (Fe)	18,9	Pyrrole II
SoxX-SoxA P.pan.	2c1d	B (137 aa)	A (264 aa)	1244	1270	2514	0,16	0,11	0,13	0,67	0,6	0,64	0,33	0,48	0,4	0,88	1,67	2,55	43,0	46,1 Heme (Fe)	19,6	Pyrrole II
SoxA-SoxX R.sul.	1h32	A (261 aa)	B (135 aa)	1272	1246	2518	0,11	0,16	0,13	0,67	0,63	0,65	0,4	0,31	0,35	2,43	1,29	3,72	48,2	43,0 Heme (Fe)	18,9	Pyrrole II
SoxA-SoxX P.pan.	2c1d	A (264 aa)	B (137 aa)	1270	1244	2514	0,11	0,16	0,13	0,6	0,67	0,64	0,48	0,33	0,4	1,67	0,88	2,55	46,1	43,0 Heme (Fe)	19,6	Pyrrole II
p-cresol methylhydroxylase	1wve	C (75 aa)	A (515 aa)	960	971	1930	0,24	0,05	0,08	0,62	0,68	0,65	0,31	0,31	0,31	1,72	-0,54	1,18	44,9	36,7 FAD (avg)	19,2	Pyrrole II
SorB-SorA	2blf	B (511-581)	A (373 aa)	783	871	1654	0,21	0,06	0,09	0,57	0,6	0,58	0,37	0,31	0,34	0,26	0,56	0,82	44,1	34,9 Mo	16,6	Propionate 7
cyt c_1 -ISP interaction	1be3	D (241 aa)	M (196 aa)	323	351	675	0,02	0,03	0,02	0,54	0,66	0,61	0,19	0,21	0,2	0,25	1,27	1,52	20,9	33,8 Fe2S2 (Fe avg)	16,0	Propionate 7
FixO-FixN	3mk7	B (41-202)	A (466 aa)	2312	2423	4735	0,29	0,13	0,18	0,63	0,65	0,64	0,43	0,39	0,41	1,98	5,5	7,48	52,7	51,6 Heme (Fe)	19,8	-
FixO-FixP	3mk7	B (41-202)	C (303 aa)	842	810	1652	0,1	0,05	0,07	0,62	0,64	0,63	0,23	0,18	0,21	0,11	0,51	0,62	35,1	28,2 Heme (Fe)	20,8	Propionate 7
FixP-FixO	3mk7	C (303 aa)	B (41-202)	810	842	1652	0,05	0,1	0,07	0,64	0,62	0,63	0,18	0,23	0,21	0,51	0,11	0,62	28,2	35,1 Heme (Fe)	20,8	Pyrrole II
Di-heme CCP (Nterm-Cterm) P.aer.	1eb7	A (18-163)	A (166-302)	993	1033	2026	0,13	0,14	0,14	0,63	0,61	0,62	0,37	0,38	0,38	0,18	1,48	1,66	43,1	43,6 Heme (Fe)	20,9	Propionate 7
Di-heme CCP (Nterm-Cterm) N.eur.	1iqc	A (12-149)	A (152-284)	927	922	1850	0,13	0,13	0,13	0,64	0,64	0,64	0,34	0,37	0,35	2,04	-0,26	1,78	42,6	41,6 Heme (Fe)	21,0	Propionate 7
Di-heme CCP (Cterm-Nterm) P.aer.	1eb7	A (166-302)	A (18-163)	1033	993	2026	0,14	0,13	0,14	0,61	0,63	0,62	0,38	0,37	0,38	1,48	0,18	1,66	43,6	43,1 Heme (Fe)	20,9	Propionate 7
Di-heme CCP (Cterm-Nterm) N.eur.	1iqc	A (152-284)	A (12-149)	922	927	1850	0,13	0,13	0,13	0,64	0,64	0,64	0,37	0,34	0,35	-0,26	2,04	1,78	41,6	42,6 Heme (Fe)	21,0	Propionate 7
cyt c4 (Nterm-Cterm) A.fer.	1h1o	A (12-89)	A (98-183)	758	773	1530	0,17	0,17	0,17	0,54	0,56	0,55	0,49	0,47	0,48	-0,49	-0,47	-0,96	47,1	45,1 Heme (Fe)	18,7	Propionate 7
cyt c4 (Nterm-Cterm) P.stu.	1m70	A (1-88)	A (97-190)	677	757	1434	0,16	0,15	0,15	0,55	0,54	0,55	0,37	0,37	0,37	-2,64	-1,65	-4,29	42,0	41,1 Heme (Fe)	19,2	Propionate 7
cyt c4 (Cterm-Nterm) A.fer.	1h1o	A (98-183)	A (12-89)	773	758	1530	0,17	0,17	0,17	0,56	0,54	0,55	0,47	0,49	0,48	-0,47	-0,49	-0,96	45,1	47,1 Heme (Fe)	18,7	Propionate 7
cyt c4 (Cterm-Nterm) P.stu.	1m70	A (97-190)	A (1-88)	757	677	1434	0.15	0.16	0.15	0.54	0.55	0.55	0.37	0.37	0.37	-1.65	-2.64	-4.29	41.1	42.0 Heme (Fe)	19.2	Propionate 7
SoxA (Nterm-Cterm)	1h32	A (55-143)	A (157-261)	867	854	1721	0.16	0.13	0.14	0.67	0.66	0.67	0.31	0.31	0.31	1.6	1.08	2.68	38.9	38.1 Heme (Fe)	31.3	Methyl 8
SoxA (Cterm-Nterm)	1h32	A (157-261)	A (55-143)	854	867	1721	0.13	0.16	0.14	0.66	0.67	0,67	0.31	0.31	0.31	1.08	1.6	2.68	38.1	38.9 Heme (Fe)	31.3	Methyl 8
cd 1 nitrite reductase	1gks	A (9-134)	A (137-567)	1373	1086	2459	0,2	0,09	0,12	0,66	0,53	0,59	0,44	0,47	0,46	-0,16	-0,96	-1,12	46,9	48,0 Heme d1 (Fe)	20,6	Pyrrole II
FixP (Nterm-Cterm)	3mk7	C (1-183)	C (186-275)	478	426	904	0,03	0,1	0,05	0,54	0,56	0,55	0,38	0,26	0,32	0,17	-0,4	-0,23	39,2	31,3 Heme (Fe)	18,7	Propionate 7
FixP (Cterm-Nterm)	3mk7	C (186-275)	C (1-183)	426	478	904	0,1	0,03	0,05	0,56	0,54	0,55	0,26	0,38	0,32	-0,4	0,17	-0,23	31,3	39,2 Heme (Fe)	18,7	Propionate 7

Supplementary Material (ESI) for Metallomics This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2011

Table S2. Comparison of selected properties of the protein-protein interfaces in the permanent complexes analyzed for which extra residues are present in the proteins containing cyt c domains. IF area: interface area (Å²); IF/S: interface/total surface area ratio; NP at: fraction of polar atoms at the interface; FB at: fraction of fully buried atoms at the interface; RPS: residue propensity score; LD: local density

Interaction	PDB	cyt c chain	partner chain	IF area (c)	IF area (p)	IF area (total)	IF/S (c)	IF/S (p)	IF/S (total)	NP at (c)	NP at (p)	NP at (total)	FB at (cy)	FB at (p)	FB at (total)	RPS (c)	RPS (p)	RPS (total)	LD (c)	LD (p)
SorB-SorA	2blf	B (511-581)	A (373 aa)	782,83	871,3	1654,13	0,21	0,06	0,09	0,57	0,6	0,58	0,37	0,31	0,34	0,26	0,56	0,82	44,09	34,89
SorB-SorA (whole chains)	2blf	B (81 aa)	A (373 aa)	1327,28	1342,12	2669,4	0,25	0,09	0,13	0,62	0,65	0,64	0,35	0,31	0,33	0,41	2,5	2,91	41,6	40,49
FixO-FixN	3mk7	B (41-202)	A (466 aa)	2311,95	2422,65	4734,6	0,29	0,13	0,18	0,63	0,65	0,64	0,43	0,39	0,41	1,98	5,5	7,48	52,68	51,55
FixO-FixN (whole chains)	3mk7	B (197 aa)	A (466 aa)	3639,85	3546,88	7186,73	0,32	0,2	0,25	0,66	0,68	0,67	0,41	0,41	0,41	4,07	11,83	15,9	49,4	54,06
FixO-FixP	3mk7	B (41-202)	C (303 aa)	841,8	809,91	1651,71	0,1	0,05	0,07	0,62	0,64	0,63	0,23	0,18	0,21	0,11	0,51	0,62	35,08	28,19
FixO-FixP (whole chains)	3mk7	B (197 aa)	C (303 aa)	1170,37	1113,11	2283,48	0,1	0,07	0,08	0,65	0,66	0,66	0,24	0,22	0,23	0,19	3,45	3,64	31,91	26,94

Table S3. Spatially equivalent contact residues in cyt c domains that interact in the "methyl8" mode. Residues are colored as blue=basic, red=acidic, light green=polar neutral,
yellow=non polar, orange=aromatic, purple= heme groups.

TRANSIENT	FUSED	
1wej (F vs L+H)	1h32 (A 55-143 vs A 157-261)	1h32 (A 157-261 vs A 55-143)
	MET 55	
	PHE 57	THR 158
VAL 3	VAL 58	
PHE 36	ARG 91	
GLY 37	ALA 92	VAL 254
		PHE 202
	PRO 95	PRO 203
		TYR 205
		ALA 210
		ARG 211
	VAL 104	LEU 212
		ASN 213
THR 58	THR 106	ALA 214
LYS 60		
		VAL 215
GLU 61	GLU 108	HIS 216
GLU 62	GLN 109	ASP 217
		ARG 220
	TYR 126	VAL 233
	ILE 127	GLY 234
	THR 132	VAL 239
	ALA 133	
	VAL 135	GLU 242
ALA 96	ALA 136	LEU 243
LYS 99	ALA 139	ALA 246
LYS 100	SER 140	
THR 102	SER 142	
ASN 103		
GLU 104		
	ARG 143	
		GLU 255
		GLY 256
		PRO 257

Table S4. Spatially equivalent contact residues in cyt *c* domains that interact in the "pyrrole II" mode. Residues are colored as blue=basic, red=acidic, light green=polar neutral, yellow=non polar, orange=aromatic, purple= heme groups.

TRANSIENT							PERMANENT		FUSED				
1l9b (C vs L+M)	1zyy (C vs B)	2fwl (A vs B)	2pcc (B vs A)	2zon (G vs A)	3cx5 (O vs W)	3cx5 (W vs O)	1h32 (A vs B)	1h32 (B vs A)	1wve (C vs A)	2c1d (A vs B)	2c1d (B vs A)	3mk7 (C vs B)	1qks (A 9-134 vs A 137-567)
													THR 21
													ASP 22
													ARG 24
													TYR 25
													GLU 26
													PRO 27
													SER 28
													LEU 29
													ASP 30
													ASN 31
													LEU 32
													GLN 35
												GLN 95	
												GLU 96	
												TRP 99	
												GLU 100	
												GLU 102	
												ALA 106	
												TYR 110	
								ARG 37			ASN 56		
								SER 38					
							THR 168			THR 197			
							ARG 169			ARG 198			
							GLY 171			GLY 200			
							GLN 172			GLN 201			
							LEU 173			LEU 202			
							ASP 174			GLU 203			
							LEU 175			MET 204			
			LYS 10										
LYS 10													
ASN 13				ARG 17		LYS 16							
			LEU 14										
			THR 17	SER 18		THR 17			LYS 613			ASN 141	
GLN 14	LYS 13		ARG 18	ALA 19		ARG 18			VAL 614		ASN 60	TYR 142	
	LYS 15			VAL 21				ILE 43			VAL 62		ALA 66
THR 17	ALA 16	GLY 13	GLN 21	VAL 22	ALA O 103	GLN 21	SER 179	ALA 44	HIS 617	ASN 208	ALA 63	ILE 145	GLY 67
								GLN 55			GLU 74		
ARG 32								PHE 56			PHE 75		
	CYS 17	CYS 14	CYS 22		Thia i	Supplementary	Vaterial (ESI) fo	or Metallomics	ÇYŞ 618	CYS 209	CYS 64	CYS 146	
	LYS 19	GLN 16			1115]		c0mt00108b	on Onemistry 2					GLY 70

	ASN 23												
								-	-		-		
	-									-			
			_										LEU 72
				SER 26									LYS 74
							GLN 183	PRO 57			PRO 76		
							TYR 184	GLY 58	VAL 623	ASN 213	GLY 77		
													GLY 75
	GLY 25	GLY 24		VAL 28		LYS 32	HIS 187	THR 59	GLY 624	ASN 216	THR 78		ALA 76
							TYR 188			MET 217			
THR 36	VAL 26	ALA 25	VAL 33			VAL 33	ILE 189	VAL 60	VAL 625	ILE 218	ILE 79		THR 77
							ARG 190			ARG 219			
							ALA 191						
		PHE 26										DHE 157	
				+									
	ASP 48	GLIN 57											
									ARG 644				
			ASN 75				ARG 224		ASN 645	ARG 253			
									GLY 646				
	LYS 70		LYS 77			M3L 77		LYS 84	PHE 647		LYS 103		
	LYS 74	GLN 119											
LYS 97	GLY 75							GLU 89			GLY 108		
GLY 98	THR 76	GLN 55		GLY 60				THR 90	ARG 648		THR 109		
		ASN 66											
					ALA O 168								
					ASN O 169								
					GLN 0 170								
					ASP O 200								
			-					-	-		-		
	-				ASN U 213					-		101070	
												ASN 276	
LYS 99	LYS 77	GLY 67		ALA 61	ALA O 224			VAL 91	ALA 649		PHE 110	GLN 278	
		VAL 68											
		MET 69							MÉT 650				
							ASP 225			ASP 254			
THR 101	ALA 79	SER 70	ALA 86	PRO 63	ALA O 226	ALA 86	ARG 227	PRO 93	PRO 651	ARG 256	PRO 112	PRO 280	
PHE 102	PHE 80		PHE 87				GLY 228			ALA 257			
LYS 103							PRO 230			THR 259			
LYS 105			LYS 91			LYS 91							
									ALA 652				
	1			1	1	1	1		PHE 653		1	1	
				+			Aaterial (ESI) f	or Metallomics				GLN 282	
					ARG O 22 This	ournadis (c) Th	Rovab Society	abchemistry 2		GUU 259	1 VS 116	GLN 294	1
	ALA OI				ANG 0 227.110		comt00108b	AND Spinor J	r NO 034	310 230	13 110	ULIN 204	
		LYS 115											

		THR 117	LYS 78										
		PRO 118											
			LYS 92			LYS 92							
				GLY 66									
				GLY 67									
				THR 68			TYR 170			TYR 199			
								PHE 101			PHE 120		
								ASN 102			VAL 121		
								ARG 103			ARG 122		
								PRO 104			PRO 123		
								GLY 105			GLY 124		
								ALA 107			GLY 126		
													MET 106
								PHE 108			PHE 127		PRO 107
											SER 128		
								SER 110			GLY 129		
								LYS 111			LYS 130		
								PRO 112			ALA 131		
								ILE 113					
								ILE 117			LEU 136		
								ARG 118			ALA 137		
								PRO 119			PRO 138		
				ALA 69	PHE O 230			LEU 120	TYR 657		ILE 139	TYR 285	
				ALA 70								LEU 286	
					ASP O 231				SER 656				
					ASP O 232								
					MET O 233								
							PHE 231			PHE 260			
												LYS 290	
													ASN 108
													TRP 109
										L			PRO 134
HEM 1009	HEC 101	HEC 132	HEM 109	HEM 200	HEM 4023	HEM 4026		HEC 1139	HEM 699		HEC 1158	HEC 322	

Supplementary Material (ESI) for Metallomics This journal is (c) The Royal Society of Chemistry 2011 c0mt00108b TRANSIENT PERMANENT FUSED 1eb7 (A 18-163 vs A 1eb7 (A 166-302 vs 1h1o (A 12-89 vs A 1h1o (A 98-183 vs A 1iqc (A 12-149 vs A 1iqc (A 152-284 vs A 1m70 (A 97-190 vs 3mk7 (C 1-183 vs C 3mk7 (C 186-275 vs 1m70 (A 1-88 vs A 2gc4 (D vs C) 1be3 (D vs M) 2blf (B vs A) 3mk7 (B vs C 166-302) 152-284) A 18-163) 98-183) 12-89) 12-149) A 1-88) 97-190) 186-275) C 1-183) THR 27 **PRO 75 PHE 76 THR 80** ARG 82 TYR 86 ALA 530 ALA 531 CYS 532 HIS 533 SER 534 FYR 537 **THR 59** LE 204 MET 47 **PRO 190** GLY 60 ASN 205 GLY 48 ALA 191 ASN 539 ALA 62 GLY 207 GLN 128 THR 50 SLY 67 GLY 208 GLY 129 GLY 194 SER 24 YS 68 GLN 209 ALA 130 SER 195 PRO 25 SER 154 ASN 64 TYR 29 ASN 52 **MET 244** ALA 26 PRO 27 /AL 65 ALA 210 **PRO 30** GLY 131 ILE 53 SER 196 ALA 245 RO 66 YR 211 THR 54 YR 197 LEU 132 ALA 246 ALA 133 LEU 247 LEU 155 PRO 132 GLY 134 **GLY 156** GLY 248 THR 67 LE 31 ASN 28 LE 69 SLY 70 /AL 32 PHE 133 PHE 29 PHE 157 ALA 249 TYR 243 VAL 244 PRO 77 PRO 65 ALA 212 GLY 214 ARG 215 VAL 218 PHE 245 ILE 66 PHE 228 RG 78 ASN 67 ASN 79 ARG 246 LYS 229 PRO 134 RO 81 ALA 248 **PRO 33** PRO 231 **PRO 136 PRO 30** PRO 158 PRO 250 PRO 71 THR 82 PRO 249 ARG 34 THR 540 ARG 135 THR 232 LYS 137 LYS 31 **SLY 72** THR 70 YS 251 ASN 85 ASN 252 GLY 140 **GLY 37** GLY 138 ASN 73 ASN 235 GLY 34 ASP 162 ALA 76 ALA 256 GLN 541 PRO 542 GLY 257 YR 77 TRP 165 TRP 258 FHR 79 RP 94 TRP 82 ARG 166 HIS 261 HIS 244 ARG 102 ASN 106 GLY 107 Supplementary Material (ESI) for Metallomics LA 108 This journal is (¢) The Royal Society of Chemistry 2011 ARG 144 c0mt00108b

Table S5. Spatially equivalent contact residues in cyt c domains that interact in the "propionate 7" mode. Residues are colored as blue=basic, red=acidic, light green=polar neutral, yellow=non polar, orange=aromatic, purple= heme groups.

LEU 147					GLN 58							
					ASN 59							
PHE 153												
		VAL 131			ARG 55	ARG 156			ARG 158	ARG 61		
					ALA 56				THR 159			
ALA 157		VAL 132			ASP 57				ASN 160			
	PRO 543		PHE 84	ARG 251			LEU 72	ARG 234				
		GLY 113										
		GLY 114	PHE 88	LEU 255			MET 76	LEU 238				
		ARG 115	ASN 89	THR 256			ASN 77	THR 239				
	LYS 545	TYR 116			GLN 38	GLN 139			GLN 141	GLN 35		
		SER 117			HIS 39	ARG 140			HIS 142	GLY 36		
										GLU 37		
		ASP 119			SER 41	GLY 142			ALA 144	ARG 38		
	PHE 549	TRP 120			TYR 42	TYR 143			TYR 145	TYR 39		GLN 266
						GLN 146			LYS 148	LYS 42		
					GLN 46	GLN 147			GLN 149	GLN 43		
	VAL 560											
	TYR 561											
	HIS 562											
		THR 200										
			ALA 90	ALA 257			LEU 78	TYR 240				
			ALA 91	PRO 258			ALA 79	PRO 241			GLY 168	GLY 261
			GLN 92				GLN 80					TYR 260
			PHE 93	PHE 260			PHE 81	PHE 243			TRP 167	ILE 259
			ASP 95	SER 262			ASP 83	ASP 245				
			GLY 96					ASN 210				
			ARG 97									
			ALA 98									
			LEU 101									
				GLY 263			GLY 84	GLY 246				
				TRP 266								
					PRO 89							
						TYR 150				ASP 46		
										GLY 58		
						THR 155				GLY 60		
							ARG 85					
									ASP 163			
HEC 242	HEC 1582	HEC 211	HEC 401	HEC 402	HEM 1185	HEM 1184	HEM 401	HEM 402	HEC 199	HEC 200	HEC 322	HEC 321

Table S6. Contact residues in the cyt *c* domain FixO that interacts with FixN. Residues are colored as blue=basic, red=acidic, light green=polar neutral, yellow=non polar, orange=aromatic, purple= heme group.

PERMANENT
3mk7 (B vs A)
LEU 54
ASP 58
ILE 61
ARG 62
GLU 63
GLY 64
GLY 67
CYS 68
SER 70
MET 72
ARG 74
PRO 75
PHE 76
ARG 77
ALA 78
GLU 81
ARG 82
TYR 83
SER 87
VAL 88
ALA 89
SER 92
VAL 93
TYR 94
ASP 95
HIS 96
PRO 97
PHE 98
LEU 99
TRP 100
GLY 101
SER 102
LYS 103
ARG 104
THR 105
GLY 106
PRO 107
AKG 129
VAL 132
GLU 134
SER 135
CED 130
SEK 139
TRD 142
1KP 142
LTS 155
MET 162
HEC 211