

Table 1. Crystal data and structure refinement for 1UNO.cif.

Identification code	1UNO	
Empirical formula	C ₇₈ H ₀ N ₁₀ O _{27.50}	
Formula weight	1516.88	
Temperature	103(2) K	
Wavelength	0.95000 Å	
Crystal system	Tetragonal	
Space group	P4(3)2(1)2	
Unit cell dimensions	a = 28.00(3) Å	α = 90°.
	b = 28.00(3) Å	β = 90°.
	c = 78.93(8) Å	γ = 90°.
Volume	61878(107) Å ³	
Z	16	
Density (calculated)	0.651 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.051 mm ⁻¹	
F(000)	12128	
Crystal size	0.20 x 0.10 x 0.10 mm ³	
Theta range for data collection	1.37 to 21.43°.	
Index ranges	0 ≤ h ≤ 15, 0 ≤ k ≤ 21, 0 ≤ l ≤ 60	
Reflections collected	8289	
Independent reflections	8289 [R(int) = 0.0710]	
Completeness to theta = 21.43°	99.6 %	
Max. and min. transmission	0.9949 and 0.9898	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	8289 / 908 / 939	
Goodness-of-fit on F ²	4.887	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.2208, wR2 = 0.5087	
R indices (all data)	R1 = 0.2476, wR2 = 0.5255	
Absolute structure parameter	0(10)	
Largest diff. peak and hole	0.677 and -0.487 e.Å ⁻³	

Table 2. Atomic coordinates ($\times 10^3$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for IUNO. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
N1	5023(18)	8750(20)	2600(7)	210(30)
CA1	5384(18)	8800(16)	2736(6)	180(30)
CB1	5864(19)	8570(20)	2685(8)	210(30)
CG1	6265(18)	8660(20)	2811(8)	250(40)
CD11	6320(30)	8350(30)	2949(10)	410(70)
CE11	6690(30)	8420(30)	3065(10)	430(80)
CD21	6589(18)	9030(20)	2794(8)	280(40)
CE21	6960(20)	9100(30)	2909(10)	330(60)
CZ1	7000(30)	8790(30)	3044(9)	480(80)
OH1	7370(30)	8870(40)	3158(11)	510(70)
C1	5458(14)	9330(16)	2767(6)	180(30)
O1	5621(14)	9590(14)	2654(5)	170(20)
N2	5357(14)	9492(14)	2921(5)	140(20)
CA2	5419(15)	10005(15)	2952(5)	160(30)
CB2	5922(15)	10127(18)	3006(7)	170(30)
CG2	5997(14)	10666(19)	2999(9)	230(40)
CD22	6030(20)	10890(30)	2841(8)	290(40)
CE22	6100(30)	11370(30)	2825(10)	370(60)
CZ2	6140(20)	11640(30)	2972(10)	370(60)
CE12	6100(30)	11430(30)	3128(10)	390(70)
CD12	6030(20)	10940(30)	3146(9)	310(50)
OH2	6200(30)	12130(30)	2955(12)	440(60)
C2	5066(14)	10137(13)	3093(6)	150(30)
O2	5171(13)	10141(13)	3243(5)	160(20)
N3	4634(13)	10226(14)	3034(5)	140(20)
CA3	4232(14)	10318(13)	3144(5)	130(30)
CB3	3932(14)	10729(13)	3072(6)	130(30)
CG3	4220(14)	11183(14)	3069(7)	160(30)
CD13	4488(17)	11328(18)	2931(6)	180(30)
CE13	4748(19)	11750(20)	2936(7)	230(40)
CD23	4227(18)	11467(19)	3214(7)	210(30)

CE23	4488(18)	11888(19)	3221(7)	230(40)
CZ3	4745(17)	12024(19)	3080(8)	220(40)
OH3	5001(18)	12442(18)	3092(7)	270(30)
C3	3919(13)	9877(14)	3162(5)	140(30)
O3	3859(12)	9579(12)	3050(4)	150(20)
N4	3694(13)	9860(14)	3310(5)	140(20)
CA4	3348(14)	9482(14)	3342(5)	150(30)
CB4	2846(14)	9640(17)	3292(6)	160(30)
CG4	2480(15)	9265(17)	3340(6)	170(30)
CD24	2485(18)	8830(19)	3255(6)	190(30)
CE24	2148(19)	8484(19)	3298(6)	220(40)
CZ4	1817(18)	8590(19)	3421(6)	220(40)
CE14	1801(18)	9020(20)	3508(6)	210(30)
CD14	2143(17)	9362(18)	3464(6)	190(30)
OH4	1494(17)	8234(18)	3461(6)	240(30)
C4	3340(13)	9357(16)	3529(5)	160(30)
O4	3297(14)	9682(14)	3635(5)	170(20)
N5	3386(13)	8900(13)	3562(4)	130(20)
CA5	3347(14)	8711(13)	3733(4)	130(30)
CB5	2971(14)	8307(16)	3728(5)	140(30)
CG5	2946(14)	8034(17)	3891(6)	160(30)
CD15	2756(16)	8230(18)	4041(6)	170(30)
CE15	2744(18)	7950(20)	4186(7)	220(40)
CD25	3116(17)	7569(19)	3894(7)	210(30)
CE25	3104(17)	7300(20)	4042(7)	220(40)
CZ5	2923(16)	7490(20)	4185(7)	230(40)
OH5	2910(19)	7220(20)	4331(7)	300(30)
C5	3825(14)	8524(14)	3790(5)	140(30)
O5	4078(13)	8281(13)	3693(4)	150(20)
N6	3953(14)	8611(14)	3948(5)	140(20)
CA6	4398(15)	8433(15)	4022(5)	160(30)
CB6	4320(19)	7937(17)	4094(7)	190(30)
CG6	4760(20)	7630(20)	4111(5)	250(40)
CD26	4720(30)	7140(20)	4070(9)	400(70)
CE26	5120(30)	6860(30)	4083(10)	410(70)
CZ6	5550(30)	7050(30)	4135(8)	480(90)

CE16	5600(20)	7530(30)	4176(8)	320(50)
CD16	5200(20)	7806(18)	4161(7)	240(40)
OH6	5940(40)	6760(40)	4148(12)	710(120)
C6	4551(13)	8782(14)	4159(6)	160(30)
O6	4529(13)	8663(13)	4310(5)	170(20)
N7	4721(14)	9191(13)	4102(5)	140(20)
CA7	4902(14)	9551(13)	4218(5)	140(30)
CB7	5417(14)	9708(16)	4171(6)	160(30)
CG7	5742(14)	9277(17)	4179(8)	210(30)
CD17	5880(20)	9090(20)	4333(8)	240(40)
CE17	6180(20)	8700(20)	4337(9)	280(50)
CD27	5890(20)	9070(20)	4028(8)	260(40)
CE27	6190(20)	8670(20)	4033(9)	340(60)
CZ7	6330(20)	8490(20)	4187(10)	370(60)
OH7	6620(20)	8090(20)	4195(10)	400(50)
C7	4593(13)	9994(13)	4211(6)	140(30)
O7	4428(12)	10152(13)	4080(4)	150(20)
N8	4537(14)	10199(13)	4361(5)	150(20)
CA8	4299(14)	10666(14)	4369(5)	160(30)
CB8	4676(14)	11063(14)	4358(6)	160(30)
CG8	4431(13)	11546(14)	4352(6)	140(30)
CD28	4406(16)	11826(17)	4497(6)	180(30)
CE28	4186(15)	12268(17)	4497(6)	170(30)
CZ8	3991(14)	12420(16)	4348(7)	170(30)
CE18	4007(17)	12154(18)	4198(6)	190(30)
CD18	4230(15)	11709(17)	4201(6)	170(30)
OH8	3770(14)	12864(15)	4345(5)	190(30)
C8	4027(15)	10697(13)	4535(5)	140(30)
O8	4247(13)	10709(12)	4672(4)	150(20)
N9	3552(13)	10703(14)	4523(5)	140(20)
CA9	3261(14)	10741(15)	4679(5)	130(30)
CB9	3230(20)	11271(16)	4729(6)	170(30)
CG9	2940(20)	11573(17)	4603(6)	150(30)
CD9	2940(20)	12094(18)	4660(7)	170(30)
CE9	2660(20)	12420(20)	4539(8)	180(30)
NZ9	2140(20)	12300(20)	4542(7)	200(30)

C9	2769(16)	10539(14)	4650(7)	150(30)
O9	2654(13)	10408(13)	4505(5)	160(20)
O29	2513(15)	10517(13)	4769(5)	170(20)
N11	4168(15)	10863(16)	5209(6)	160(30)
CA11	4503(14)	11040(14)	5079(5)	140(30)
CB11	4727(14)	11526(13)	5127(6)	130(30)
CG11	4342(14)	11912(13)	5135(6)	150(30)
CD111	4130(17)	12038(17)	5289(6)	180(30)
CE111	3778(18)	12394(18)	5293(7)	210(30)
CD211	4194(16)	12139(16)	4988(6)	180(30)
CE211	3848(16)	12486(16)	4990(6)	170(30)
CZ11	3641(16)	12611(16)	5142(7)	230(40)
OH11	3292(14)	12960(15)	5144(5)	210(30)
C11	4899(14)	10676(13)	5063(5)	150(30)
O11	5167(13)	10579(12)	5183(4)	150(20)
N12	4943(13)	10466(14)	4913(5)	140(20)
CA12	5290(15)	10080(14)	4892(5)	150(30)
CB12	5782(17)	10260(20)	4846(7)	200(30)
CG12	6170(19)	9870(20)	4864(8)	290(50)
CD212	6195(18)	9460(30)	4770(10)	410(70)
CE212	6550(20)	9120(30)	4788(10)	370(60)
CZ12	6900(20)	9210(30)	4906(9)	360(60)
CE112	6900(30)	9620(30)	5003(10)	450(80)
CD112	6540(30)	9950(30)	4982(10)	480(90)
OH12	7250(30)	8870(30)	4923(12)	530(80)
C12	5071(13)	9763(14)	4752(6)	150(30)
O12	5165(12)	9852(12)	4602(4)	150(20)
N13	4793(14)	9433(13)	4816(5)	140(20)
CA13	4527(14)	9121(15)	4700(5)	160(30)
CB13	4488(17)	8622(15)	4776(7)	180(30)
CG13	4982(17)	8396(14)	4782(7)	190(30)
CD113	5230(20)	8380(20)	4932(7)	250(40)
CE113	5680(20)	8170(20)	4932(8)	280(50)
CD213	5180(20)	8198(18)	4638(7)	210(30)
CE213	5620(20)	7990(20)	4636(8)	260(40)
CZ13	5870(20)	7982(18)	4787(9)	290(50)

OH13	6310(20)	7780(20)	4792(9)	350(40)
C13	4031(14)	9322(14)	4665(5)	150(30)
O13	3818(13)	9584(13)	4768(4)	150(20)
N14	3844(13)	9177(14)	4521(5)	140(20)
CA14	3360(15)	9308(14)	4479(5)	140(30)
CB14	3022(17)	8881(19)	4500(6)	190(30)
CG14	2888(15)	8767(18)	4682(5)	160(30)
CD214	2592(17)	9068(18)	4770(7)	180(30)
CE214	2453(18)	8980(20)	4936(7)	220(40)
CZ14	2642(19)	8570(20)	5004(7)	260(40)
CE114	2940(20)	8260(20)	4918(7)	270(40)
CD114	3070(19)	8357(19)	4751(7)	220(40)
OH14	2510(20)	8470(20)	5170(7)	320(40)
C14	3339(14)	9453(15)	4295(5)	140(30)
O14	3560(14)	9209(14)	4190(5)	170(20)
N15	3074(13)	9830(13)	4259(4)	130(20)
CA15	2977(14)	9950(13)	4082(5)	130(30)
CB15	2442(13)	10073(15)	4062(6)	150(30)
CG15	2135(12)	9640(14)	4098(6)	140(30)
CD115	2018(17)	9340(18)	3963(7)	200(30)
CE115	1739(18)	8941(19)	3994(7)	230(40)
CD215	1975(17)	9543(18)	4257(6)	180(30)
CE215	1693(18)	9145(19)	4289(7)	240(40)
CZ15	1577(16)	8849(18)	4154(8)	230(40)
OH15	1296(16)	8450(16)	4189(6)	240(30)
C15	3259(13)	10383(15)	4029(5)	130(30)
O15	3322(11)	10701(12)	4133(4)	140(20)
N16	3418(13)	10391(13)	3871(4)	130(20)
CA16	3680(14)	10802(14)	3807(4)	130(30)
CB16	3326(16)	11154(14)	3729(5)	150(30)
CG16	3521(18)	11636(14)	3684(4)	150(30)
CD216	3212(17)	11953(17)	3599(5)	160(30)
CE216	3400(20)	12397(18)	3559(5)	200(30)
CZ16	3850(20)	12530(19)	3596(6)	250(40)
CE116	4160(20)	12224(17)	3679(6)	210(30)
CD116	3982(18)	11779(14)	3721(5)	170(30)

OH16	4012(19)	12974(18)	3554(6)	250(30)
C16	4019(13)	10613(12)	3672(5)	130(30)
O16	3936(12)	10680(12)	3519(4)	140(20)
N17	4381(13)	10366(13)	3736(4)	130(20)
CA17	4752(14)	10182(14)	3626(5)	140(30)
CB17	5247(14)	10356(15)	3679(6)	160(30)
CG17	5292(12)	10898(16)	3682(7)	160(30)
CD117	5281(17)	11140(20)	3838(7)	210(30)
CE117	5319(19)	11640(20)	3833(8)	260(40)
CD217	5332(16)	11140(20)	3531(7)	190(30)
CE217	5371(17)	11640(20)	3529(7)	210(30)
CZ17	5364(15)	11870(20)	3682(8)	250(40)
OH17	5405(17)	12367(19)	3680(7)	270(30)
C17	4754(13)	9642(14)	3628(6)	140(30)
O17	4659(13)	9399(14)	3755(4)	160(20)
N18	4884(13)	9443(13)	3481(4)	130(20)
CA18	4920(15)	8927(14)	3475(5)	150(30)
CB18	5442(16)	8769(17)	3510(7)	170(30)
CG18	5486(14)	8232(18)	3505(7)	190(30)
CD218	5628(16)	7996(19)	3356(7)	190(30)
CE218	5663(19)	7500(20)	3356(8)	260(40)
CZ18	5560(20)	7240(20)	3500(9)	400(70)
CE118	5410(20)	7470(30)	3646(9)	320(50)
CD118	5380(20)	7960(20)	3646(8)	260(40)
OH18	5590(30)	6750(20)	3502(11)	430(60)
C18	4753(14)	8763(13)	3303(5)	150(30)
O18	4963(13)	8904(13)	3175(5)	160(20)
N19	4368(15)	8483(15)	3299(5)	160(30)
CA19	4184(15)	8318(14)	3136(5)	130(30)
CB19	4465(18)	7886(16)	3069(6)	150(30)
CG19	4390(20)	7451(19)	3182(8)	190(30)
CD19	4700(30)	7040(20)	3115(10)	260(40)
CE19	4650(40)	6600(30)	3228(13)	320(50)
NZ19	4160(40)	6410(30)	3218(12)	350(50)
C19	3662(17)	8194(15)	3160(7)	170(30)
O19	3477(14)	8226(14)	3302(5)	170(20)

O219	3417(14)	8057(14)	3031(5)	170(20)
O1001	3181(16)	11261(16)	5207(5)	200(30)
O1002	2760(20)	11510(20)	4124(7)	260(30)
O1003	4180(20)	7310(20)	3641(7)	260(30)
O1004	2960(20)	7460(20)	3370(7)	240(30)
O1005	1770(30)	10710(30)	4432(8)	310(40)
O1006	3390(20)	13630(20)	5375(8)	290(30)
O1007	760(30)	8490(30)	3665(9)	330(40)
O1008	4607(18)	7825(18)	2599(6)	210(30)
O1009	1720(30)	9950(40)	4834(11)	390(50)
O1010	1900(40)	11140(40)	4933(12)	420(50)
O1011	2180(40)	9180(40)	5369(12)	390(50)
O1012	2888(19)	12368(19)	3968(6)	230(30)
O1013	2490(20)	11910(20)	5100(7)	250(30)
O1014	1960(30)	11500(30)	4326(9)	310(40)
O1015	1970(30)	10000(30)	5184(8)	310(40)
O1016	3630(30)	6910(30)	3470(10)	350(40)
O1017	6300(70)	12760(80)	3290(20)	650(110)
O1018	6750(40)	7460(50)	4495(14)	460(60)
O1019	5120(40)	12870(40)	3402(11)	400(50)

Table 11. Bond lengths [\AA] and angles [$^\circ$] for 1UNO.cif.

N1-CA1	1.48(4)
CA1-C1	1.52(4)
CA1-CB1	1.54(4)
CB1-CG1	1.52(4)
CG1-CD21	1.39(4)
CG1-CD11	1.40(4)
CD11-CE11	1.39(4)
CE11-CZ1	1.38(4)
CD21-CE21	1.39(4)
CE21-CZ1	1.37(4)
CZ1-OH1	1.38(4)
C1-O1	1.24(4)
C1-N2	1.33(3)
N2-CA2	1.47(3)
CA2-CB2	1.51(3)
CA2-C2	1.53(3)
CB2-CG2	1.52(4)
CG2-CD12	1.39(4)
CG2-CD22	1.39(4)
CD22-CE22	1.38(4)
CE22-CZ2	1.38(4)
CZ2-CE12	1.37(4)
CZ2-OH2	1.38(4)
CE12-CD12	1.39(4)
C2-O2	1.22(3)
C2-N3	1.32(3)
N3-CA3	1.44(3)
CA3-C3	1.52(3)
CA3-CB3	1.54(3)
CB3-CG3	1.50(3)
CG3-CD13	1.39(4)
CG3-CD23	1.39(4)
CD13-CE13	1.38(4)
CE13-CZ3	1.38(4)

CD23-CE23	1.39(4)
CE23-CZ3	1.38(4)
CZ3-OH3	1.37(4)
C3-O3	1.23(3)
C3-N4	1.33(3)
N4-CA4	1.46(3)
CA4-C4	1.51(3)
CA4-CB4	1.53(3)
CB4-CG4	1.52(4)
CG4-CD24	1.39(4)
CG4-CD14	1.39(4)
CD24-CE24	1.39(4)
CE24-CZ4	1.38(4)
CZ4-OH4	1.38(4)
CZ4-CE14	1.38(4)
CE14-CD14	1.40(4)
C4-O4	1.24(3)
C4-N5	1.31(3)
N5-CA5	1.45(3)
CA5-C5	1.51(3)
CA5-CB5	1.54(3)
CB5-CG5	1.50(3)
CG5-CD25	1.39(4)
CG5-CD15	1.41(4)
CD15-CE15	1.39(4)
CE15-CZ5	1.38(4)
CD25-CE25	1.39(4)
CE25-CZ5	1.36(4)
CZ5-OH5	1.39(4)
C5-O5	1.24(3)
C5-N6	1.32(3)
N6-CA6	1.46(3)
CA6-CB6	1.52(4)
CA6-C6	1.52(3)
CB6-CG6	1.52(4)
CG6-CD16	1.37(4)

CG6-CD26	1.41(4)
CD26-CE26	1.38(4)
CE26-CZ6	1.38(4)
CZ6-OH6	1.38(4)
CZ6-CE16	1.38(4)
CE16-CD16	1.37(4)
C6-O6	1.24(3)
C6-N7	1.32(3)
N7-CA7	1.45(3)
CA7-C7	1.51(3)
CA7-CB7	1.55(3)
CB7-CG7	1.51(4)
CG7-CD17	1.38(4)
CG7-CD27	1.39(4)
CD17-CE17	1.39(4)
CE17-CZ7	1.38(4)
CD27-CE27	1.40(4)
CE27-CZ7	1.37(4)
CZ7-OH7	1.38(4)
C7-O7	1.22(3)
C7-N8	1.33(3)
N8-CA8	1.47(3)
CA8-C8	1.52(3)
CA8-CB8	1.53(3)
CB8-CG8	1.52(3)
CG8-CD28	1.38(4)
CG8-CD18	1.40(4)
CD28-CE28	1.38(4)
CE28-CZ8	1.36(4)
CZ8-OH8	1.39(3)
CZ8-CE18	1.40(4)
CE18-CD18	1.39(4)
C8-O8	1.25(3)
C8-N9	1.33(3)
N9-CA9	1.48(3)
CA9-C9	1.51(4)

CA9-CB9	1.54(3)
CB9-CG9	1.53(4)
CG9-CD9	1.53(4)
CD9-CE9	1.52(4)
CE9-NZ9	1.51(4)
C9-O29	1.18(5)
C9-O9	1.24(4)
N11-CA11	1.47(3)
CA11-C11	1.51(3)
CA11-CB11	1.55(3)
CB11-CG11	1.53(3)
CG11-CD211	1.38(4)
CG11-CD111	1.40(4)
CD111-CE111	1.40(4)
CE111-CZ11	1.39(4)
CD211-CE211	1.37(4)
CE211-CZ11	1.38(4)
CZ11-OH11	1.38(4)
C11-O11	1.24(3)
C11-N12	1.33(3)
N12-CA12	1.46(3)
CA12-CB12	1.51(4)
CA12-C12	1.55(3)
CB12-CG12	1.53(4)
CG12-CD212	1.38(4)
CG12-CD112	1.40(4)
CD212-CE212	1.38(4)
CE212-CZ12	1.38(4)
CZ12-CE112	1.37(4)
CZ12-OH12	1.38(4)
CE112-CD112	1.39(4)
C12-O12	1.24(3)
C12-N13	1.31(3)
N13-CA13	1.47(3)
CA13-C13	1.53(3)
CA13-CB13	1.53(3)

CB13-CG13	1.52(4)
CG13-CD113	1.38(4)
CG13-CD213	1.38(4)
CD113-CE113	1.38(4)
CE113-CZ13	1.37(4)
CD213-CE213	1.38(4)
CE213-CZ13	1.37(4)
CZ13-OH13	1.38(4)
C13-O13	1.25(3)
C13-N14	1.31(3)
N14-CA14	1.44(3)
CA14-C14	1.50(3)
CA14-CB14	1.53(3)
CB14-CG14	1.52(3)
CG14-CD214	1.37(4)
CG14-CD114	1.37(4)
CD214-CE214	1.39(4)
CE214-CZ14	1.38(4)
CZ14-CE114	1.37(4)
CZ14-OH14	1.39(4)
CE114-CD114	1.39(4)
C14-O14	1.24(3)
C14-N15	1.32(3)
N15-CA15	1.46(3)
CA15-C15	1.50(3)
CA15-CB15	1.55(3)
CB15-CG15	1.51(3)
CG15-CD215	1.36(4)
CG15-CD115	1.40(4)
CD115-CE115	1.39(4)
CE115-CZ15	1.37(4)
CD215-CE215	1.39(4)
CE215-CZ15	1.38(4)
CZ15-OH15	1.39(4)
C15-O15	1.22(3)
C15-N16	1.33(3)

N16-CA16	1.46(3)
CA16-C16	1.52(3)
CA16-CB16	1.52(3)
CB16-CG16	1.50(3)
CG16-CD116	1.38(4)
CG16-CD216	1.41(4)
CD216-CE216	1.38(4)
CE216-CZ16	1.35(4)
CZ16-OH16	1.37(4)
CZ16-CE116	1.40(4)
CE116-CD116	1.39(4)
C16-O16	1.24(3)
C16-N17	1.32(3)
N17-CA17	1.45(3)
CA17-C17	1.51(3)
CA17-CB17	1.53(3)
CB17-CG17	1.52(4)
CG17-CD217	1.38(4)
CG17-CD117	1.40(4)
CD117-CE117	1.40(4)
CE117-CZ17	1.37(4)
CD217-CE217	1.40(4)
CE217-CZ17	1.38(4)
CZ17-OH17	1.39(4)
C17-O17	1.23(3)
C17-N18	1.34(3)
N18-CA18	1.45(3)
CA18-C18	1.51(3)
CA18-CB18	1.55(3)
CB18-CG18	1.51(4)
CG18-CD118	1.38(4)
CG18-CD218	1.40(4)
CD218-CE218	1.39(4)
CE218-CZ18	1.37(4)
CZ18-CE118	1.38(4)
CZ18-OH18	1.39(4)

CE118-CD118	1.38(4)
C18-O18	1.23(3)
C18-N19	1.33(3)
N19-CA19	1.46(3)
CA19-C19	1.51(4)
CA19-CB19	1.54(3)
CB19-CG19	1.53(4)
CG19-CD19	1.54(4)
CD19-CE19	1.53(4)
CE19-NZ19	1.48(4)
C19-O19	1.24(4)
C19-O219	1.28(5)

N1-CA1-C1	108(3)
N1-CA1-CB1	111(4)
C1-CA1-CB1	109(3)
CG1-CB1-CA1	114(3)
CD21-CG1-CD11	118(4)
CD21-CG1-CB1	123(5)
CD11-CG1-CB1	120(5)
CE11-CD11-CG1	120(5)
CZ1-CE11-CD11	120(5)
CG1-CD21-CE21	123(5)
CZ1-CE21-CD21	118(5)
CE21-CZ1-OH1	118(6)
CE21-CZ1-CE11	121(5)
OH1-CZ1-CE11	121(6)
O1-C1-N2	122(4)
O1-C1-CA1	121(4)
N2-C1-CA1	117(4)
C1-N2-CA2	117(3)
N2-CA2-CB2	112(3)
N2-CA2-C2	106(3)
CB2-CA2-C2	110(3)
CA2-CB2-CG2	110(3)
CD12-CG2-CD22	120(4)

CD12-CG2-CB2	121(5)
CD22-CG2-CB2	119(5)
CE22-CD22-CG2	122(5)
CD22-CE22-CZ2	118(5)
CE12-CZ2-OH2	122(6)
CE12-CZ2-CE22	120(5)
OH2-CZ2-CE22	118(6)
CZ2-CE12-CD12	122(5)
CG2-CD12-CE12	117(5)
O2-C2-N3	124(4)
O2-C2-CA2	123(4)
N3-C2-CA2	113(4)
C2-N3-CA3	122(3)
N3-CA3-C3	111(3)
N3-CA3-CB3	110(3)
C3-CA3-CB3	109(3)
CG3-CB3-CA3	110(3)
CD13-CG3-CD23	118(4)
CD13-CG3-CB3	123(4)
CD23-CG3-CB3	119(4)
CE13-CD13-CG3	121(4)
CZ3-CE13-CD13	120(5)
CE23-CD23-CG3	122(4)
CZ3-CE23-CD23	119(5)
OH3-CZ3-CE13	122(5)
OH3-CZ3-CE23	117(5)
CE13-CZ3-CE23	121(4)
O3-C3-N4	123(4)
O3-C3-CA3	124(4)
N4-C3-CA3	113(3)
C3-N4-CA4	120(3)
N4-CA4-C4	110(3)
N4-CA4-CB4	111(3)
C4-CA4-CB4	108(3)
CG4-CB4-CA4	111(3)
CD24-CG4-CD14	121(4)

CD24-CG4-CB4	119(4)
CD14-CG4-CB4	120(4)
CG4-CD24-CE24	119(4)
CZ4-CE24-CD24	118(4)
CE24-CZ4-OH4	116(5)
CE24-CZ4-CE14	124(4)
OH4-CZ4-CE14	120(5)
CZ4-CE14-CD14	117(4)
CG4-CD14-CE14	120(4)
O4-C4-N5	126(4)
O4-C4-CA4	119(4)
N5-C4-CA4	115(4)
C4-N5-CA5	122(3)
N5-CA5-C5	109(3)
N5-CA5-CB5	107(3)
C5-CA5-CB5	111(3)
CG5-CB5-CA5	113(3)
CD25-CG5-CD15	119(4)
CD25-CG5-CB5	119(4)
CD15-CG5-CB5	123(4)
CE15-CD15-CG5	119(4)
CZ5-CE15-CD15	120(5)
CG5-CD25-CE25	121(4)
CZ5-CE25-CD25	119(5)
CE25-CZ5-CE15	121(4)
CE25-CZ5-OH5	118(5)
CE15-CZ5-OH5	120(5)
O5-C5-N6	122(4)
O5-C5-CA5	121(3)
N6-C5-CA5	117(4)
C5-N6-CA6	123(3)
N6-CA6-CB6	110(3)
N6-CA6-C6	108(3)
CB6-CA6-C6	111(3)
CA6-CB6-CG6	116(4)
CD16-CG6-CD26	119(4)

CD16-CG6-CB6	123(5)
CD26-CG6-CB6	117(5)
CE26-CD26-CG6	118(5)
CZ6-CE26-CD26	120(5)
CE26-CZ6-OH6	119(6)
CE26-CZ6-CE16	123(5)
OH6-CZ6-CE16	118(6)
CD16-CE16-CZ6	116(5)
CE16-CD16-CG6	123(5)
O6-C6-N7	125(4)
O6-C6-CA6	120(4)
N7-C6-CA6	115(4)
C6-N7-CA7	121(3)
N7-CA7-C7	110(3)
N7-CA7-CB7	112(3)
C7-CA7-CB7	107(3)
CG7-CB7-CA7	109(3)
CD17-CG7-CD27	121(4)
CD17-CG7-CB7	120(5)
CD27-CG7-CB7	119(5)
CG7-CD17-CE17	119(5)
CZ7-CE17-CD17	120(5)
CG7-CD27-CE27	119(5)
CZ7-CE27-CD27	119(5)
CE27-CZ7-CE17	122(5)
CE27-CZ7-OH7	120(5)
CE17-CZ7-OH7	119(6)
O7-C7-N8	124(4)
O7-C7-CA7	123(4)
N8-C7-CA7	113(3)
C7-N8-CA8	118(3)
N8-CA8-C8	108(3)
N8-CA8-CB8	109(3)
C8-CA8-CB8	111(3)
CG8-CB8-CA8	110(3)
CD28-CG8-CD18	120(4)

CD28-CG8-CB8	120(4)
CD18-CG8-CB8	120(4)
CE28-CD28-CG8	122(4)
CZ8-CE28-CD28	117(4)
CE28-CZ8-OH8	118(4)
CE28-CZ8-CE18	123(4)
OH8-CZ8-CE18	119(4)
CD18-CE18-CZ8	119(4)
CE18-CD18-CG8	119(4)
O8-C8-N9	124(4)
O8-C8-CA8	120(4)
N9-C8-CA8	116(4)
C8-N9-CA9	120(3)
N9-CA9-C9	110(3)
N9-CA9-CB9	108(3)
C9-CA9-CB9	110(3)
CG9-CB9-CA9	113(3)
CD9-CG9-CB9	110(4)
CE9-CD9-CG9	113(4)
NZ9-CE9-CD9	110(4)
O29-C9-O9	124(5)
O29-C9-CA9	117(5)
O9-C9-CA9	119(4)
N11-CA11-C11	107(3)
N11-CA11-CB11	113(3)
C11-CA11-CB11	108(3)
CG11-CB11-CA11	110(3)
CD211-CG11-CD111	119(4)
CD211-CG11-CB11	120(4)
CD111-CG11-CB11	121(4)
CG11-CD111-CE111	120(4)
CZ11-CE111-CD111	119(4)
CE211-CD211-CG11	122(4)
CD211-CE211-CZ11	119(4)
CE211-CZ11-OH11	119(5)
CE211-CZ11-CE111	121(4)

OH11-CZ11-CE111	120(5)
O11-C11-N12	122(4)
O11-C11-CA11	122(4)
N12-C11-CA11	116(4)
C11-N12-CA12	119(3)
N12-CA12-CB12	113(3)
N12-CA12-C12	104(3)
CB12-CA12-C12	112(3)
CA12-CB12-CG12	113(3)
CD212-CG12-CD112	117(4)
CD212-CG12-CB12	125(5)
CD112-CG12-CB12	118(5)
CG12-CD212-CE212	124(5)
CZ12-CE212-CD212	117(5)
CE112-CZ12-OH12	121(6)
CE112-CZ12-CE212	122(5)
OH12-CZ12-CE212	116(6)
CZ12-CE112-CD112	119(5)
CE112-CD112-CG12	121(5)
O12-C12-N13	130(4)
O12-C12-CA12	119(3)
N13-C12-CA12	111(3)
C12-N13-CA13	119(3)
N13-CA13-C13	111(3)
N13-CA13-CB13	110(3)
C13-CA13-CB13	110(3)
CG13-CB13-CA13	109(3)
CD113-CG13-CD213	120(4)
CD113-CG13-CB13	120(5)
CD213-CG13-CB13	120(5)
CG13-CD113-CE113	118(5)
CZ13-CE113-CD113	121(5)
CE213-CD213-CG13	122(5)
CZ13-CE213-CD213	117(5)
CE213-CZ13-CE113	122(5)
CE213-CZ13-OH13	119(5)

CE113-CZ13-OH13	119(5)
O13-C13-N14	124(4)
O13-C13-CA13	122(4)
N14-C13-CA13	114(4)
C13-N14-CA14	120(3)
N14-CA14-C14	109(3)
N14-CA14-CB14	111(3)
C14-CA14-CB14	107(3)
CG14-CB14-CA14	115(3)
CD214-CG14-CD114	123(4)
CD214-CG14-CB14	120(4)
CD114-CG14-CB14	117(4)
CG14-CD214-CE214	123(4)
CZ14-CE214-CD214	114(4)
CE114-CZ14-CE214	124(5)
CE114-CZ14-OH14	119(5)
CE214-CZ14-OH14	116(5)
CZ14-CE114-CD114	121(5)
CG14-CD114-CE114	116(4)
O14-C14-N15	125(4)
O14-C14-CA14	118(4)
N15-C14-CA14	117(4)
C14-N15-CA15	120(3)
N15-CA15-C15	111(3)
N15-CA15-CB15	109(3)
C15-CA15-CB15	107(3)
CG15-CB15-CA15	111(3)
CD215-CG15-CD115	121(4)
CD215-CG15-CB15	121(4)
CD115-CG15-CB15	118(4)
CE115-CD115-CG15	119(4)
CZ15-CE115-CD115	120(5)
CG15-CD215-CE215	121(4)
CZ15-CE215-CD215	118(5)
CE115-CZ15-CE215	121(4)
CE115-CZ15-OH15	121(5)

CE215-CZ15-OH15	118(5)
O15-C15-N16	125(4)
O15-C15-CA15	118(3)
N16-C15-CA15	117(3)
C15-N16-CA16	121(3)
N16-CA16-C16	106(3)
N16-CA16-CB16	109(3)
C16-CA16-CB16	111(3)
CG16-CB16-CA16	116(3)
CD116-CG16-CD216	120(4)
CD116-CG16-CB16	123(4)
CD216-CG16-CB16	117(4)
CE216-CD216-CG16	117(4)
CZ16-CE216-CD216	123(5)
CE216-CZ16-OH16	121(5)
CE216-CZ16-CE116	122(4)
OH16-CZ16-CE116	117(5)
CD116-CE116-CZ16	115(4)
CG16-CD116-CE116	124(4)
O16-C16-N17	126(4)
O16-C16-CA16	121(3)
N17-C16-CA16	113(3)
C16-N17-CA17	121(3)
N17-CA17-C17	110(3)
N17-CA17-CB17	112(3)
C17-CA17-CB17	108(3)
CG17-CB17-CA17	113(3)
CD217-CG17-CD117	122(4)
CD217-CG17-CB17	119(4)
CD117-CG17-CB17	120(4)
CE117-CD117-CG17	117(4)
CZ17-CE117-CD117	121(5)
CG17-CD217-CE217	120(4)
CZ17-CE217-CD217	118(4)
CE117-CZ17-CE217	122(4)
CE117-CZ17-OH17	120(5)

CE217-CZ17-OH17	118(5)
O17-C17-N18	122(4)
O17-C17-CA17	124(4)
N18-C17-CA17	114(3)
C17-N18-CA18	117(3)
N18-CA18-C18	108(3)
N18-CA18-CB18	110(3)
C18-CA18-CB18	111(3)
CG18-CB18-CA18	111(3)
CD118-CG18-CD218	119(4)
CD118-CG18-CB18	120(5)
CD218-CG18-CB18	121(4)
CE218-CD218-CG18	119(4)
CZ18-CE218-CD218	121(5)
CE118-CZ18-CE218	121(5)
CE118-CZ18-OH18	118(5)
CE218-CZ18-OH18	121(6)
CZ18-CE118-CD118	118(5)
CG18-CD118-CE118	122(5)
O18-C18-N19	124(4)
O18-C18-CA18	119(4)
N19-C18-CA18	117(4)
C18-N19-CA19	120(3)
N19-CA19-C19	108(3)
N19-CA19-CB19	112(3)
C19-CA19-CB19	111(3)
CG19-CB19-CA19	111(3)
CB19-CG19-CD19	108(4)
CE19-CD19-CG19	111(5)
NZ19-CE19-CD19	110(6)
O19-C19-O219	121(5)
O19-C19-CA19	120(5)
O219-C19-CA19	119(4)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: