



STRUCTURAL  
BIOLOGY

**Volume 74 (2018)**

**Supporting information for article:**

**Improving the accuracy and resolution of neutron crystallographic data by three-dimensional profile fitting of Bragg peaks in reciprocal space**

**Brendan Sullivan, Rick Archibald, Patricia S. Langan, Holger Dobbek, Martin Bommer, Robert L. McFeeters, Leighton Coates, Xiaoping P. Wang, Franz Gallmeier, John M. Carpenter, Vickie Lynch and Paul Langan**

**Table S1** Shell-by-shell merging statistics for the E166Q  $\beta$ -lactamase mutant.

Resolution	Num Obs	Num Unique	Multiplicity	Completeness	Mean I	Mean I/ $\sigma$ (I)	R <sub>merge</sub>	R <sub>meas</sub>	R <sub>pim</sub>	CC <sub>1/2</sub>
<b>Profile Fitted</b>										
14.77-4.05	15762	2570	6.13	96.47	407.2	27.3	0.193	0.21	0.08	0.907
4.05-3.23	17395	2516	6.91	98.05	134.5	15.7	0.207	0.221	0.076	0.947
3.23-2.82	15365	2464	6.24	97.35	68.8	9.3	0.243	0.261	0.09	0.895
2.82-2.57	13466	2418	5.57	96.22	53	7.1	0.27	0.291	0.106	0.873
2.57-2.38	12779	2438	5.24	96.21	46.6	6.1	0.282	0.306	0.114	0.834
2.38-2.24	11088	2369	4.68	95.52	41.6	5.1	0.304	0.333	0.13	0.754
2.24-2.13	9679	2362	4.1	94.4	36.6	4.2	0.318	0.354	0.148	0.686
2.13-2.04	7953	2264	3.51	91.4	32.8	3.5	0.318	0.361	0.164	0.545
2.04-1.96	6737	2262	2.98	90.05	31.4	2.9	0.319	0.371	0.183	0.464
1.96-1.89	4929	1970	2.5	79.69	30.9	2.5	0.316	0.381	0.205	0.285
<b>14.77-1.89</b>	<b>115153</b>	<b>23633</b>	<b>4.87</b>	<b>93.59</b>	<b>92.6</b>	<b>8.7</b>	<b>0.226</b>	<b>0.246</b>	<b>0.093</b>	<b>0.941</b>
<b>Spherical Integration</b>										
14.77-4.05	15762	2570	6.13	96.47	740.2	20.2	0.182	0.199	0.077	0.92
4.05-3.23	17395	2516	6.91	98.05	242.1	11.2	0.224	0.241	0.084	0.938
3.23-2.82	15365	2464	6.24	97.35	129.1	6.8	0.269	0.29	0.103	0.798
2.82-2.57	13466	2418	5.57	96.22	98.2	5.5	0.279	0.303	0.113	0.678
2.57-2.38	12779	2438	5.24	96.21	85.4	4.9	0.292	0.319	0.123	0.514
2.38-2.24	11088	2369	4.68	95.52	77.5	4.4	0.292	0.323	0.131	0.314
2.24-2.13	9679	2362	4.1	94.4	72.2	3.9	0.289	0.325	0.142	0.206
2.13-2.04	7953	2264	3.51	91.4	67.1	3.5	0.279	0.32	0.15	0.157
2.04-1.96	6737	2262	2.98	90.05	63.6	3.2	0.266	0.313	0.159	0.11
1.96-1.89	4929	1970	2.5	79.69	62	2.9	0.266	0.322	0.175	0.036
<b>14.77-1.89</b>	<b>115153</b>	<b>23633</b>	<b>4.87</b>	<b>93.59</b>	<b>171.3</b>	<b>6.9</b>	<b>0.223</b>	<b>0.243</b>	<b>0.094</b>	<b>0.948</b>

**Table S2** Shell-by-shell merging statistics for PsbO.

Resolution	Num Obs	Num Unique	Multipl icity	Completeness	Mean I	Mean I/ $\sigma(I)$	R <sub>merge</sub>	R <sub>meas</sub>	R <sub>pim</sub>	CC <sub>1/2</sub>
<b>Profile Fitted</b>										
13.98-4.69	9191	962	9.55	87.3	705.4	37.6	0.216	0.228	0.069	0.912
4.69-3.74	11776	965	12.2	94.79	364.3	31.2	0.228	0.237	0.061	0.95
3.74-3.28	10606	939	11.29	93.43	168.4	16.9	0.273	0.284	0.072	0.867
3.28-2.98	9329	913	10.22	92.69	115.5	11.2	0.302	0.314	0.082	0.859
2.98-2.77	7856	907	8.66	93.03	86.3	7.8	0.304	0.319	0.09	0.799
2.77-2.61	6466	899	7.19	92.58	72.7	6	0.306	0.325	0.102	0.731
2.61-2.48	5698	884	6.45	92.18	66.8	5.2	0.31	0.333	0.115	0.631
2.48-2.37	5300	878	6.04	92.42	63.7	4.7	0.316	0.342	0.123	0.53
2.37-2.28	4965	903	5.5	93.58	61.3	4.3	0.309	0.337	0.125	0.478
2.29-2.20	4392	868	5.06	92.54	59.4	3.8	0.311	0.344	0.138	0.277
<b>13.98-2.20</b>	<b>75579</b>	<b>9118</b>	<b>8.29</b>	<b>92.39</b>	<b>182</b>	<b>13.2</b>	<b>0.248</b>	<b>0.261</b>	<b>0.075</b>	<b>0.948</b>
<b>Spherical Integration</b>										
13.98-4.69	9191	962	9.55	87.3	1402.6	23.4	0.204	0.215	0.066	0.934
4.69-3.74	11776	965	12.2	94.79	623.3	19.3	0.22	0.229	0.059	0.969
3.74-3.28	10606	939	11.29	93.43	294.1	11.2	0.264	0.275	0.072	0.909
3.28-2.98	9329	913	10.22	92.69	194.3	8.1	0.285	0.298	0.082	0.802
2.98-2.77	7856	907	8.66	93.03	148.1	6.4	0.302	0.319	0.096	0.504
2.77-2.61	6466	899	7.19	92.58	127.8	5.5	0.295	0.315	0.104	0.367
2.61-2.48	5698	884	6.45	92.18	115.2	5	0.297	0.321	0.114	0.269
2.48-2.37	5300	878	6.04	92.42	106.8	4.8	0.292	0.317	0.117	0.261
2.37-2.28	4965	903	5.5	93.58	99.4	4.4	0.286	0.312	0.117	0.125
2.29-2.20	4392	868	5.06	92.54	94.9	4.2	0.279	0.309	0.125	-0.018
<b>13.98-2.20</b>	<b>75579</b>	<b>9118</b>	<b>8.29</b>	<b>92.39</b>	<b>331.4</b>	<b>9.4</b>	<b>0.234</b>	<b>0.247</b>	<b>0.072</b>	<b>0.965</b>

**Table S3** Shell-by-shell merging statistics for PaPth1.

Resolution	Num Obs	Num Unique	Multiplicity	Completeness	Mean I	Mean I/ $\sigma$ (I)	R <sub>merge</sub>	R <sub>meas</sub>	R <sub>pim</sub>	CC <sub>1/2</sub>
<b>Profile Fitted</b>										
13.73-5.49	1118	430	2.6	58.98	281.8	12.6	0.209	0.245	0.12	0.903
5.49-4.41	1656	497	3.33	72.87	254	13.9	0.205	0.236	0.109	0.893
4.41-3.86	1871	555	3.37	84.09	155	10.6	0.214	0.245	0.113	0.858
3.86-3.52	1811	565	3.21	85.22	81.3	6.9	0.231	0.272	0.135	0.733
3.52-3.27	1622	536	3.03	83.75	61	5.3	0.244	0.285	0.141	0.771
3.27-3.08	1392	527	2.64	81.71	47.3	4	0.253	0.303	0.161	0.682
3.08-2.93	1250	492	2.54	76.64	38.9	3.4	0.291	0.343	0.172	0.628
2.93-2.80	1175	481	2.44	75.75	33.2	3	0.287	0.347	0.187	0.48
2.80-2.69	1126	471	2.39	74.29	29.6	2.7	0.312	0.377	0.203	0.297
2.69-2.60	1115	489	2.28	77.99	25.8	2.5	0.313	0.381	0.211	0.228
<b>13.73-2.60</b>	<b>14136</b>	<b>5043</b>	<b>2.8</b>	<b>76.9</b>	<b>98.9</b>	<b>6.5</b>	<b>0.225</b>	<b>0.262</b>	<b>0.127</b>	<b>0.911</b>
<b>Spherical Integration</b>										
13.73-5.49	1118	430	2.6	58.98	596.2	8.7	0.187	0.22	0.11	0.913
5.49-4.41	1656	497	3.33	72.87	478	9.4	0.211	0.243	0.113	0.84
4.41-3.86	1871	555	3.37	84.09	321.2	7.5	0.233	0.267	0.123	0.753
3.86-3.52	1811	565	3.21	85.22	197.6	5.5	0.258	0.3	0.146	0.581
3.52-3.27	1622	536	3.03	83.75	157.4	4.8	0.26	0.304	0.15	0.481
3.27-3.08	1392	527	2.64	81.71	132	4.3	0.261	0.311	0.163	0.305
3.08-2.93	1250	492	2.54	76.64	119.5	4.1	0.27	0.32	0.164	0.175
2.93-2.80	1175	481	2.44	75.75	111.2	4	0.272	0.33	0.18	0.077
2.80-2.69	1126	471	2.39	74.29	105.4	4	0.273	0.331	0.18	0.002
2.69-2.60	1115	489	2.28	77.99	98	3.9	0.272	0.333	0.187	-0.035
<b>13.73-2.60</b>	<b>14136</b>	<b>5043</b>	<b>2.8</b>	<b>76.9</b>	<b>227.6</b>	<b>5.6</b>	<b>0.231</b>	<b>0.27</b>	<b>0.133</b>	<b>0.89</b>

**Table S4** Shell-by-shell merging statistics for the E166Q  $\beta$ -lactamase mutant sorted by  $I/\sigma(I)$ .

Resolution	Num Obs	Num Unique	Multipl icity	Completeness	Mean I	Mean $I/\sigma(I)$	$R_{\text{merge}}$	$R_{\text{meas}}$	$R_{\text{pim}}$	$CC_{1/2}$
<b>Profile Fitted – Low <math>I/\sigma(I)</math></b>										
12.42-4.03	1732	772	2.24	29.06	904.4	2.9	0.304	0.368	0.202	0.243
4.03-3.22	3764	1448	2.6	56.67	871.1	3.1	0.268	0.322	0.172	0.211
3.22-2.82	5934	2006	2.96	79.16	814.1	3.2	0.275	0.327	0.171	0.326
2.82-2.56	6787	2149	3.16	85.62	749.5	3.2	0.287	0.337	0.171	0.318
2.56-2.38	7475	2260	3.31	89.86	726.5	3.2	0.296	0.346	0.173	0.372
2.38-2.24	7299	2287	3.19	91.96	695	3.0	0.309	0.362	0.182	0.302
2.24-2.13	7318	2296	3.19	91.88	656.1	2.9	0.317	0.371	0.186	0.283
2.13-2.04	6632	2227	2.98	90.09	625.3	2.8	0.31	0.366	0.189	0.288
2.04-1.96	5915	2210	2.68	88.61	612.8	2.5	0.312	0.375	0.201	0.257
1.96-1.89	4705	1978	2.38	79.5	618.1	2.3	0.308	0.377	0.212	0.197
12.42-1.89	57561	19633	2.93	77.88	708.6	2.9	0.299	0.354	0.183	0.308
<b>Profile Fitted – High <math>I/\sigma(I)</math></b>										
14.42-4.06	14046	2346	5.99	88.36	9263.2	29.6	0.182	0.198	0.076	0.909
4.06-3.23	13521	2012	6.72	79.18	3447.5	18.7	0.184	0.197	0.068	0.948
3.23-2.83	9493	1567	6.06	62.36	2059.1	12.5	0.207	0.222	0.077	0.879
2.83-2.57	6682	1308	5.11	52.09	1746.3	10.2	0.223	0.242	0.089	0.815
2.57-2.39	5260	1154	4.56	46.05	1622	9.0	0.227	0.248	0.095	0.74
2.39-2.25	3807	936	4.07	37.58	1593.9	8.2	0.239	0.263	0.105	0.645
2.25-2.13	2381	710	3.35	28.69	1527.2	7.1	0.249	0.28	0.122	0.495
2.13-2.04	1324	473	2.8	19.24	1464	6.1	0.247	0.282	0.129	0.319
2.04-1.96	787	328	2.4	13.23	1473	5.6	0.259	0.299	0.143	0.337
1.96-1.89	290	167	1.74	6.77	1465.9	4.6	0.224	0.272	0.148	0.26
14.42-1.89	57591	11001	5.24	43.78	3640.3	15.3	0.193	0.209	0.078	0.935
<b>Spherical - Low <math>I/\sigma(I)</math></b>										
10.71-4.01	2124	1042	2.04	39.35	1786.4	2.4	0.192	0.239	0.138	0.253
4.01-3.21	4670	1748	2.67	68.63	1271	2.7	0.198	0.237	0.127	0.171
3.21-2.81	6735	2207	3.05	87.75	1081.3	2.8	0.197	0.233	0.119	0.142
2.81-2.56	7362	2301	3.2	90.95	942	2.9	0.201	0.236	0.118	0.156
2.56-2.38	7677	2284	3.36	92.06	864.8	2.9	0.208	0.242	0.12	0.115

2.38-2.24	7392	2299	3.22	91.59	820.7	2.8	0.209	0.244	0.122	0.114
2.24-2.13	6833	2255	3.03	90.93	789.6	2.7	0.212	0.25	0.129	0.028
2.13-2.04	5883	2151	2.74	87.01	742.2	2.5	0.206	0.247	0.132	0.088
2.04-1.96	5083	2100	2.42	84.51	713.2	2.4	0.199	0.243	0.135	0.103
1.96-1.89	3812	1822	2.09	73.41	689.6	2.2	0.196	0.245	0.143	0.068
10.71-1.89	57571	20209	2.85	80.36	921.9	2.7	0.203	0.241	0.126	0.484
<b>Spherical - High I/<math>\sigma</math>(I)</b>										
14.42-4.06	13780	2457	5.61	92.33	10361.4	21.0	0.164	0.18	0.07	0.929
4.06-3.23	12722	2256	5.64	88.06	3737.6	11.9	0.183	0.197	0.071	0.94
3.23-2.83	8605	1950	4.41	77.88	2277.5	7.5	0.195	0.213	0.082	0.762
2.83-2.57	6149	1791	3.43	70.87	1830.6	5.9	0.188	0.211	0.09	0.577
2.57-2.39	4979	1688	2.95	67.47	1675.4	5.3	0.187	0.213	0.096	0.435
2.39-2.25	3723	1521	2.45	60.99	1578.3	4.7	0.183	0.214	0.105	0.239
2.25-2.13	2799	1397	2	56.19	1484	4.2	0.18	0.218	0.119	0.16
2.13-2.04	2063	1182	1.75	47.82	1407.8	3.9	0.167	0.204	0.114	0.196
2.04-1.96	1557	1058	1.47	42.7	1346.5	3.6	0.151	0.195	0.121	0.142
1.96-1.89	1204	899	1.34	36.06	1284.7	3.4	0.157	0.211	0.139	-0.081
14.42-1.89	57581	16199	3.55	64.32	3281.4	8.5	0.173	0.191	0.075	0.949

**Table S5** Shell-by-shell merging statistics for PsbO sorted by  $I/\sigma(I)$ .

Resolution	Num Obs	Num Unique	Multipl icity	Completeness	Mean I	Mean $I/\sigma(I)$	$R_{\text{merge}}$	$R_{\text{meas}}$	$R_{\text{pim}}$	$CC_{1/2}$
<b>Profile Fitted – Low <math>I/\sigma(I)</math></b>										
11.46-4.64	821	346	2.37	31.6	885.7	2.9	0.433	0.522	0.281	0.194
4.64-3.73	1366	454	3.01	44.73	1067.8	3.3	0.343	0.397	0.191	0.174
3.73-3.27	2707	671	4.03	67.44	948.3	3.7	0.302	0.339	0.148	0.303
3.27-2.98	3875	802	4.83	81.59	872.8	4	0.299	0.33	0.133	0.4
2.98-2.77	4706	866	5.43	89	808.8	4.1	0.298	0.326	0.126	0.318
2.77-2.60	4514	866	5.21	90.3	746.5	3.9	0.302	0.331	0.131	0.254
2.60-2.48	4465	868	5.14	90.61	717.8	3.8	0.307	0.338	0.136	0.221
2.48-2.37	4364	870	5.02	91.39	701.1	3.7	0.31	0.344	0.142	0.113
2.37-2.28	4218	895	4.71	93.04	699.5	3.5	0.305	0.34	0.144	0.201
2.28-2.20	3989	860	4.64	92.18	697.7	3.4	0.306	0.342	0.147	0.222
11.46-2.20	35025	7498	4.67	76.3	791.4	3.7	0.308	0.343	0.143	0.293
<b>Profile Fitted – High <math>I/\sigma(I)</math></b>										
13.98-4.69	8311	901	9.22	82.13	9418.1	40	0.204	0.216	0.066	0.913
4.69-3.75	10500	895	11.73	88.18	4995.3	33.5	0.216	0.224	0.058	0.949
3.75-3.28	7837	774	10.13	77.48	2700.3	19.5	0.244	0.254	0.064	0.866
3.28-2.98	5484	643	8.53	65.28	2143.3	13.9	0.254	0.265	0.069	0.776
2.98-2.77	3200	502	6.37	51.97	1761.9	10.1	0.237	0.251	0.073	0.582
2.77-2.61	1908	379	5.03	38.95	1654.3	8.4	0.221	0.237	0.078	0.465
2.61-2.48	1210	308	3.93	32.29	1579.2	7.2	0.216	0.236	0.087	0.545
2.48-2.37	979	259	3.78	27.47	1543.6	6.9	0.222	0.242	0.088	0.577
2.37-2.28	745	190	3.92	19.81	1505.3	6.9	0.214	0.232	0.081	0.517
2.28-2.20	380	132	2.88	14.16	1468.8	5.8	0.189	0.212	0.092	0.277
13.98-2.20	40554	4983	8.14	50.69	3873.6	20.9	0.218	0.229	0.064	0.937
<b>Spherical - Low <math>I/\sigma(I)</math></b>										
10.33-4.61	1346	500	2.69	46.38	1917.6	2.7	0.201	0.238	0.123	0.301
4.61-3.71	2694	687	3.92	67.82	1398.7	3.2	0.209	0.237	0.106	0.224
3.71-3.26	3825	797	4.8	80.51	1098.7	3.5	0.211	0.233	0.095	0.246
3.26-2.97	4564	868	5.26	88.39	944.3	3.6	0.217	0.239	0.094	0.221
2.97-2.76	4806	879	5.47	90.34	809.9	3.7	0.217	0.238	0.094	0.096

2.76-2.60	4194	863	4.86	89.99	728.6	3.4	0.216	0.24	0.099	0.065
2.60-2.47	3963	857	4.62	89.83	671.7	3.3	0.213	0.238	0.102	0.083
2.47-2.37	3765	856	4.4	89.92	632.8	3.2	0.211	0.237	0.103	0.027
2.37-2.28	3632	876	4.15	91.44	599	3.1	0.21	0.238	0.106	0.025
2.28-2.20	3237	839	3.86	90.22	577	3.0	0.209	0.239	0.111	0.013
10.33-2.20	36026	8022	4.49	81.93	882.8	3.3	0.212	0.237	0.101	0.7
<b>Spherical - High I/<math>\sigma</math>(I)</b>										
13.98-4.69	7933	929	8.54	84.3	10818	24.2	0.182	0.193	0.06	0.931
4.69-3.74	9176	909	10.09	89.29	5108.6	20.2	0.182	0.19	0.051	0.967
3.74-3.28	6750	853	7.91	84.88	2669.1	11.6	0.196	0.206	0.059	0.88
3.28-2.98	4755	760	6.26	77.16	1945.2	8.4	0.199	0.212	0.066	0.697
2.98-2.77	3074	718	4.28	73.64	1578	6.4	0.188	0.206	0.078	0.363
2.77-2.61	2185	681	3.21	70.13	1378.8	5.4	0.176	0.199	0.085	0.255
2.61-2.48	1727	625	2.76	65.24	1283	5.0	0.175	0.203	0.097	0.239
2.48-2.37	1515	611	2.48	64.32	1194	4.7	0.174	0.204	0.099	0.11
2.37-2.28	1325	571	2.32	59.23	1121.5	4.5	0.166	0.194	0.095	0.151
2.28-2.20	1113	558	1.99	59.55	1055.8	4.1	0.162	0.198	0.11	-0.117
13.98-2.20	39553	7215	5.48	73.12	3226.8	10.6	0.184	0.195	0.06	0.96



**Table S6** Shell-by-shell refinement statistics for the E166Q  $\beta$ -lactamase mutant.

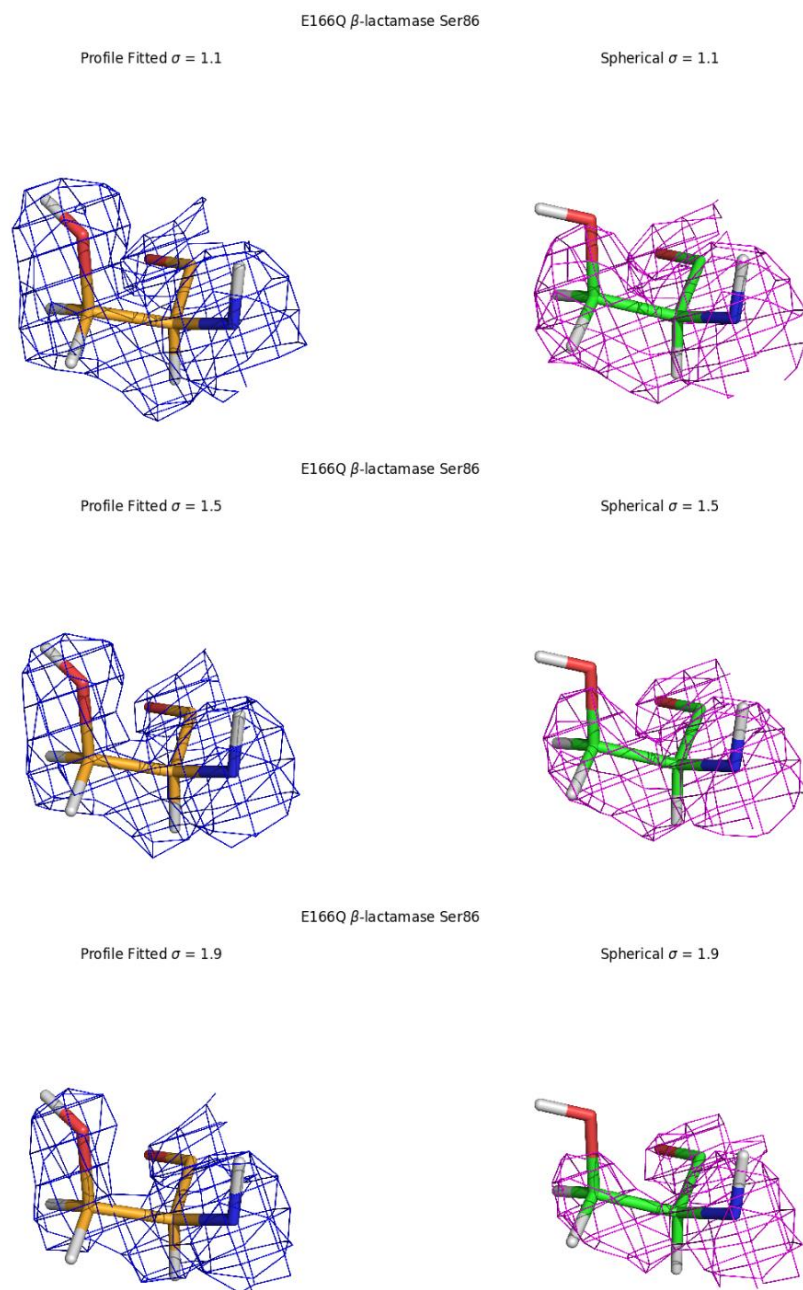
Mean Resolution (Å)	Profile Fitted				Spherical			
	CC <sub>work</sub>	CC <sub>free</sub>	R <sub>work</sub>	R <sub>free</sub>	CC <sub>work</sub>	CC <sub>free</sub>	R <sub>work</sub>	R <sub>free</sub>
9.42	0.90	0.92	0.19	0.19	0.91	0.92	0.18	0.18
3.65	0.87	0.87	0.21	0.24	0.86	0.85	0.21	0.24
3.04	0.77	0.73	0.25	0.30	0.71	0.66	0.27	0.33
2.70	0.79	0.70	0.24	0.28	0.69	0.58	0.28	0.32
2.48	0.77	0.65	0.24	0.27	0.62	0.56	0.29	0.30
2.32	0.74	0.67	0.25	0.28	0.53	0.40	0.29	0.33
2.20	0.67	0.61	0.27	0.28	0.42	0.43	0.32	0.32
2.09	0.62	0.45	0.30	0.36	0.36	0.25	0.35	0.38
2.01	0.49	0.31	0.34	0.37	0.25	0.13	0.37	0.38
1.93	0.36	0.19	0.36	0.43	0.17	0.14	0.38	0.42

**Table S7** Shell-by-shell refinement statistics for the PsbO.

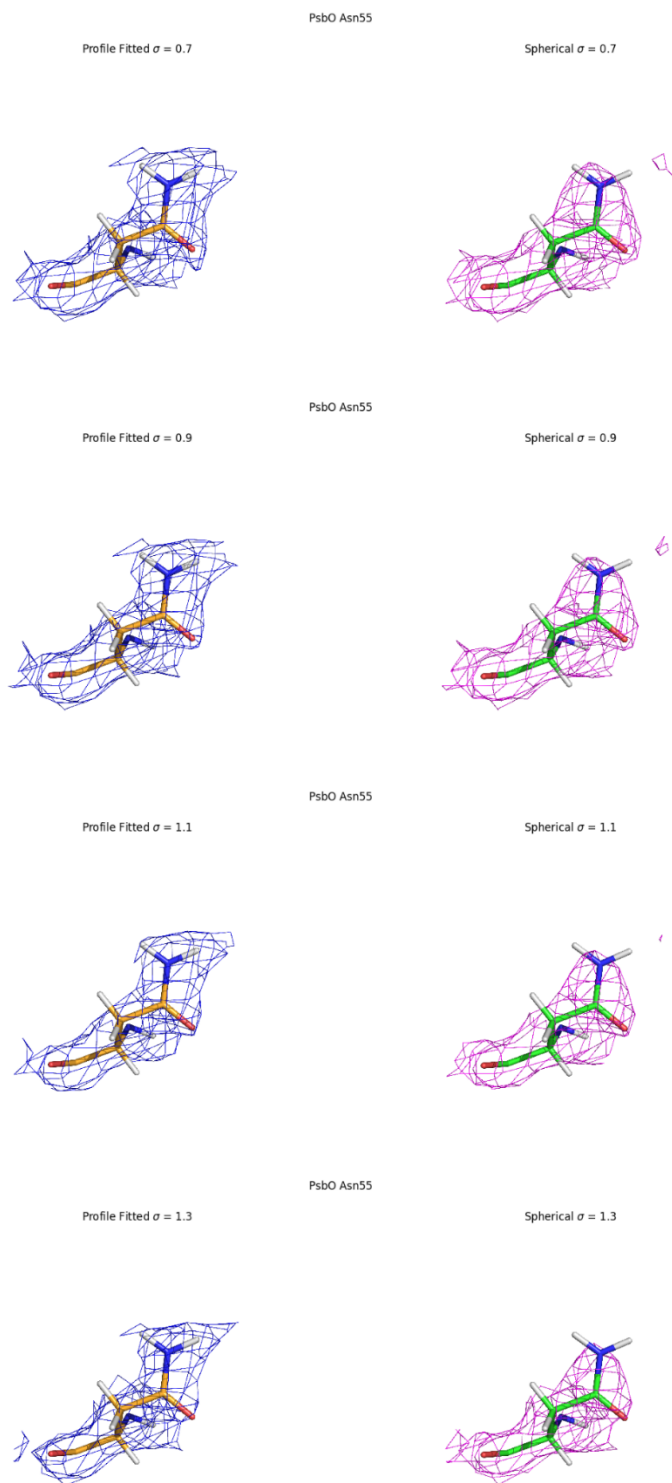
Mean Resolution (Å)	Profile Fitted				Spherical			
	CC <sub>work</sub>	CC <sub>free</sub>	R <sub>work</sub>	R <sub>free</sub>	CC <sub>work</sub>	CC <sub>free</sub>	R <sub>work</sub>	R <sub>free</sub>
9.33	0.83	0.73	0.27	0.31	0.81	0.70	0.27	0.32
4.21	0.89	0.88	0.21	0.21	0.88	0.84	0.22	0.24
3.51	0.79	0.83	0.25	0.26	0.79	0.79	0.27	0.29
3.13	0.79	0.81	0.23	0.27	0.70	0.73	0.26	0.31
2.87	0.72	0.59	0.26	0.29	0.56	0.47	0.28	0.30
2.69	0.66	0.53	0.27	0.31	0.48	0.41	0.29	0.35
2.54	0.60	0.60	0.29	0.34	0.45	0.47	0.30	0.37
2.42	0.57	0.53	0.29	0.39	0.44	0.44	0.31	0.36
2.32	0.53	0.16	0.31	0.38	0.38	0.39	0.33	0.39
2.24	0.42	0.42	0.31	0.33	0.30	0.34	0.34	0.40

**Table S8** Shell-by-shell refinement statistics for the PaPth1.

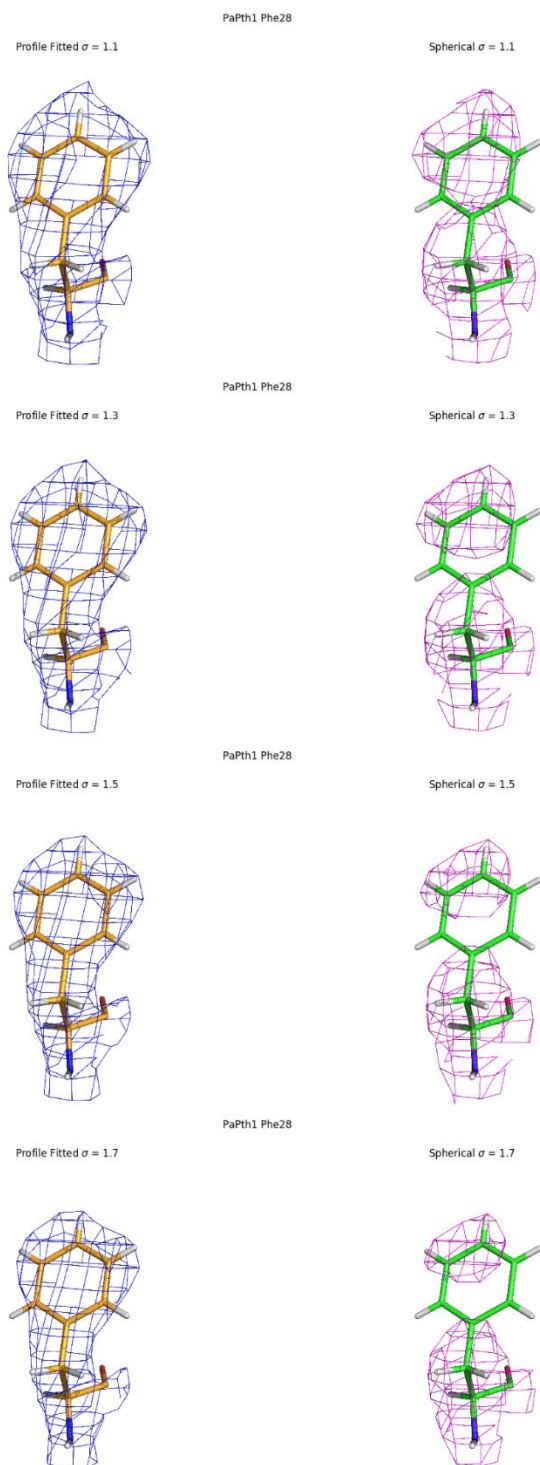
Mean Resolution (Å)	Profile Fitted				Spherical			
	CC <sub>work</sub>	CC <sub>free</sub>	R <sub>work</sub>	R <sub>free</sub>	CC <sub>work</sub>	CC <sub>free</sub>	R <sub>work</sub>	R <sub>free</sub>
9.61	0.72	0.80	0.31	0.32	0.71	0.81	0.26	0.32
4.95	0.88	0.82	0.22	0.26	0.87	0.76	0.20	0.27
4.14	0.86	0.70	0.22	0.31	0.84	0.63	0.21	0.29
3.69	0.81	0.63	0.25	0.30	0.72	0.39	0.27	0.40
3.39	0.71	0.42	0.28	0.42	0.60	0.37	0.30	0.43
3.17	0.75	0.19	0.26	0.44	0.43	0.24	0.38	0.37
3.00	0.70	0.56	0.28	0.38	0.36	0.28	0.36	0.42
2.86	0.64	0.48	0.29	0.34	0.35	-0.10	0.37	0.42
2.75	0.61	0.39	0.27	0.36	0.20	0.10	0.40	0.44
2.65	0.55	0.17	0.31	0.39	0.22	0.01	0.39	0.41



**Figure S1** 2mFo-DFc density maps of E166Q  $\beta$ -lactamase Ser86 at (from top to bottom) 1.1 $\sigma$ , 1.5 $\sigma$ , 1.9 $\sigma$ . Profile fitted maps are on the left and spherical maps are on the right.



**Figure S2** 2mFo-DFc density maps of PsbO Asn55 at (from top to bottom) 0.7 $\sigma$ , 0.9 $\sigma$ , 1.1 $\sigma$ , 1.3 $\sigma$ . Profile fitted maps are on the left and spherical maps are on the right.



**Figure S3** 2mFo-DFc density maps of PaPth1 Phe28 at (from top to bottom) 1.1 $\sigma$ , 1.3 $\sigma$ , 1.5 $\sigma$ , 1.9 $\sigma$ . Profile fitted maps are on the left and spherical maps are on the right.