

Supplemental Material for MolProbity’s Ultimate Rotamer-Library Distributions for Model Validation

Bradley J. Hintze, Steven M. Lewis, Jane S. Richardson, and David C. Richardson

Department of Biochemistry, Duke University

Contents

Explanation of Material on GitHub	2
Top500 vs. Top8000 Reference Contours	3
Filtered Top8000 Residue Counts	4
Outlier Counts: Top500 vs. Top8000 Reference Contours	5
Top8000 Filtered Dataset: Rotamer Frequency	6
χ and Covalent Bond Angle Central Values	9

List of Figures

S1 Top500 vs Top8000 Contours for Residues with 2 χ s	3
--	---

List of Tables

S1 Filtered and Unfiltered Residue Counts	4
S2 Top500 vs. Top8000 Outlier Counts	5
S3 List of Rotamer with Frequencies	8
S4 SER Central Values	9
S5 CYS Central Values	10
S6 THR Central Values	11
S7 VAL Central Values	12
S8 PRO Central Values	13
S9 LEU Central Values	14
S10 ILE Central Values	16
S11 ASN Central Values	18
S12 ASP Central Values	19
S13 HIS Central Values	20
S14 PHE Central Values	22
S15 TYR Central Values	23
S16 TRP Central Values	24
S17 MET Central Values	27
S18 GLU Central Values	31
S19 GLN Central Values	33
S20 ARG Central Values	36
S21 LYS Central Values	51

Explanation of Material on GitHub

The rotamer data generated in this work are freely available via GitHub. To download the rotamer database, install git if necessary (instructions below) and then in a terminal run the command:

```
git clone --depth=1 https://github.com/rlduke/reference_data.git
```

This will download the Richardson Lab reference data repository into a new subdirectory called `reference_data`. It contains the Top8000-generated rotamer data in `reference_data/Top8000`. The database requires a few hundred megabytes of disk space at the time of publication.

If you are experienced with SVN, you can instead use the command::

```
svn export https://github.com/rlduke/reference_data.git/trunk/ reference_data
```

You can also browse the data online at https://github.com/rlduke/reference_data/tree/master/Top8000. Most of the data files are too large to interact with in a browser. GitHub has a *raw* option to view text files directly in your browser available from each individual file's page after navigating to it in your browser, or via URLs of the form https://raw.githubusercontent.com/rlduke/reference_data/master/Top8000/Top8000-SFbest_hom50_pdb_chain_list.csv, where the URL path after `master/` is identical to the file path in the repository proper.

Contents of the Top8000 database:

- **Top8000_best_hom##_pdb_chain_list.csv**: a list of high data quality PDB chains at varying homology levels
- **Top8000_SFbest_hom##_pdb_chain_list.csv**: a list of high data quality PDB chains at varying homology levels that also have structure factor data deposited
- **Top8000_rotamer_pdb_chain_count.csv**: a list of exactly which structures were used to generate the rotamer data used here
- **Top8000_rotamer_residues.csv**: the rotamer assignment of each residue in the filtered dataset
- **Top8000_rotamer_central_values**

This directory contains, for each of the 18 canonical, rotameric amino acids, a table listing rotamer frequency data and the means and standard deviations of each rotamer's bond-torsion and covalent-bond angles.

- **Top8000_rotamer_kinimages**

This directory contains kinimage files plotting the rotamer distributions in various chi angle spaces (including both the data points and the contours), for visualization of the distributions.

- **Top8000_rotamer_pct_contour_grids**

This directory contains contour/rotameric grids in χ space for each of the canonical, rotameric amino acids. Each file's header describes how to interpret it. Broadly, each file is a list of points that collectively grid out all of chi space (in however many dimensions/ χ s that sidechain has), plotting rotamericities at each grid point. Contours drawn through grid points of given values define regions of χ space above a the given rotamericities value. Grid areas with rotamericities below 0.3% (inclusive) represent outlier regions, regions above 2.0% (inclusive) define favored rotamers, and regions in between are defined as allowed.

Installing git

Git is a powerful tool for version control, used by the Richardson Lab and many others to distribute and control their source code. GitHub is a popular website used to manage git-controlled projects. We are using GitHub and git to distribute these rotamer database in the same way we distribute our other source code.

Installation instructions for git are available at <http://git-scm.com/>.

GitHub is simply a website (github.com).

Top500 vs. Top8000 Reference Contours

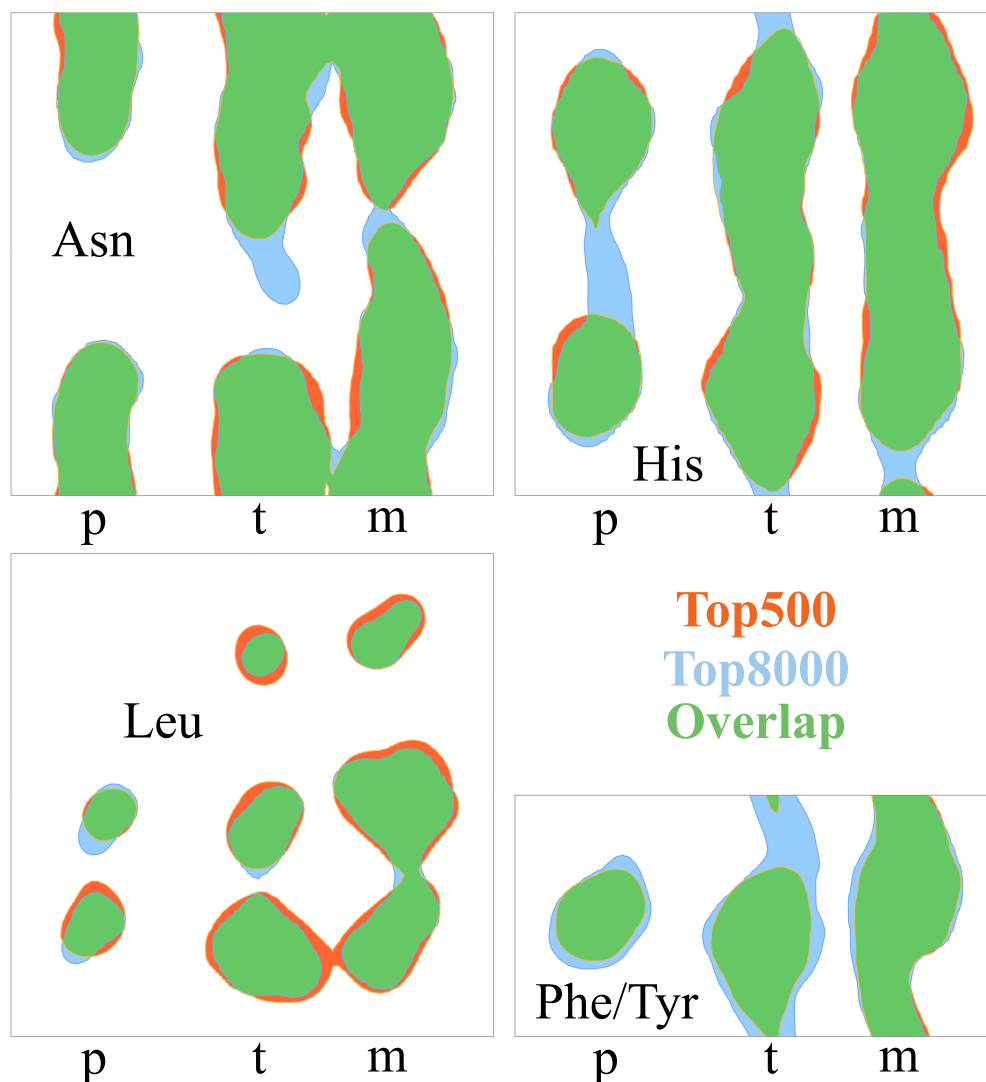


Figure S1: Areas in orange (from Top500 data) and in blue (from Top8000) fill the allowed regions for AsN, His, Leu, and Phe/Tyr. Phe and Tyr were done together as no significant difference was detected between their distributions. The extensive areas in green are where the two systems both declare allowed conformations. See Figure 2 for Asp, Trp, and Ile

Filtered Top8000 Residue Counts

Residue Type	No Filter	Filter	%Kept
LYS	70035	34829	49.78%
GLU	88745	57462	64.82%
ARG	64333	46380	72.18%
GLN	50112	37119	74.14%
ASP	88822	72336	81.52%
ASN	63553	53650	84.57%
MET	21764	18382	84.62%
HIS	33910	29791	87.99%
SER	84656	76186	90.21%
LEU	126451	115053	91.22%
ILE	78547	71693	91.51%
TYR	51638	47243	91.61%
PRO	65013	59515	91.74%
THR	82124	75180	91.80%
PHE	60306	56282	93.52%
TRP	19966	18715	93.90%
VAL	103690	97050	93.92%
CYS	17808	16708	94.15%
Total	1171473	983574	83.96%

Table S1: Residue counts with and without residue-level filters ordered by % kept after filtering. 'No Filter' means no RSCC, 2mF_o-DF_c sigma, and B filters but all other residue-level filters applied.

Outlier Counts: Top500 vs. Top8000 Reference Contours

Residue	n	Top500 < 1.0%	Top8000 < 0.3%	Δ
ARG	193295	7501	5643	-1858
ASN	161814	2143	1926	-217
ASP	225302	3745	2779	-966
CYS	50824	618	462	-156
GLN	140651	2751	2810	59
GLU	255560	4803	6334	1531
HIS	91316	1303	802	-501
ILE	222518	1766	3241	1475
LEU	347449	8245	9806	1561
LYS	209811	6501	7709	1208
MET	69395	1874	1830	-44
PHE	153564	1896	703	-1193
PRO	174910	849	800	-49
SER	236825	2640	2638	-2
THR	214960	2225	2787	562
TRP	53869	713	266	-447
TYR	134580	1757	696	-1061
VAL	280539	1633	3282	1649

Table S2: Showing differences between outlier counts in the unfiltered dataset using the Top500 and Top8000 reference contours.

Top8000 Filtered Dataset: Rotamer Frequency

The following is a table describing counts of each of the 213 rotamers identified in the Top8000 filtered dataset. *n* is the count of each rotamer, % is the percent of the rotamer that occurs in the given residue type (e.g. 17.7% of CYS are **p**). Also noted is the *rarity* of each rotamer, marked with a checkmark. The rarity metric is normalized by both the number of residues and the number of rotamer types in a given residue type. If the empirical count for a rotamer is $< 8\%$ of the *expected rotamer count* then the rarity is marked with a checkmark.

The *expected rotamer count* is the number of residues in a rotamer bin if all residues were distributed equally to all rotamer bins for a given residue type. e.g. as shown below, LEU has 115,053 examples in the filtered dataset and 8 rotamers. Thus LEU has an *expected rotamer count* of $115,053/8 \approx 14,382$. LEU **pp** has 521 examples which is 3.7% of the *expected rotamer count* thus gets a checkmark.

These numbers, along with central angle values, are available in CSV format on GitHub under Top8000/Top8000_rotamer.central_values at http://github.com/rlabduke/reference_data.

residue	rotamer	n	%	rarity
SER : TOTAL N = 76186				
SER	p	36901	48.44	
SER	t	17502	22.97	
SER	m	21558	28.30	
SER	OUTLIER	225	0.30	
CYS : TOTAL N = 16708				
CYS	p	2962	17.73	
CYS	t	4399	26.33	
CYS	m	9301	55.67	
CYS	OUTLIER	46	0.28	
THR : TOTAL N = 75180				
THR	p	36195	48.14	
THR	t	5197	6.91	
THR	m	33559	44.64	
THR	OUTLIER	229	0.30	
VAL : TOTAL N = 97050				
VAL	p	6015	6.20	
VAL	t	73329	75.56	
VAL	m	17410	17.94	
VAL	OUTLIER	296	0.30	
PRO : TOTAL N = 59515				
PRO	Cg_exo	30128	50.62	
PRO	Cg_endo	29192	49.05	
PRO	OUTLIER	195	0.33	
LEU : TOTAL N = 115053				
LEU	pp	521	0.45	✓
LEU	pt	378	0.33	✓
LEU	tp	34655	30.12	
LEU	tt	1576	1.37	
LEU	tm	143	0.12	✓
LEU	mp	2711	2.36	
LEU	mt	74252	64.54	
LEU	mm	484	0.42	✓
LEU	OUTLIER	333	0.29	
ILE : TOTAL N = 71693				
ILE	pp	254	0.35	✓
ILE	pt	8837	12.33	
ILE	tp	1869	2.61	
ILE	tt	4163	5.81	
ILE	mp	623	0.87	✓
ILE	mt	44470	62.03	
ILE	mm	11258	15.70	
ILE	OUTLIER	219	0.31	

residue	rotamer	n	%	rarity
ASN : TOTAL N = 53650				
ASN	p0	7513	14.00	
ASN	t0	15610	29.10	
ASN	t160	61	0.11	✓
ASN	m110	4003	7.46	
ASN	m-40	26292	49.01	
ASN	OUTLIER	171	0.32	
ASP : TOTAL N = 72336				
ASP	p0	11746	16.24	
ASP	t0	17107	23.65	
ASP	t70	6029	8.33	
ASP	m-30	37239	51.48	
ASP	OUTLIER	215	0.30	
HIS : TOTAL N = 29791				
HIS	p90	1492	5.01	
HIS	p-80	2203	7.39	
HIS	t70	5068	17.01	
HIS	t-170	1332	4.47	
HIS	t-90	3553	11.93	
HIS	m170	2695	9.05	
HIS	m90	3914	13.14	
HIS	m-70	9453	31.73	
HIS	OUTLIER	81	0.27	
PHE : TOTAL N = 56282				
PHE	p90	6289	11.17	
PHE	t80	19289	34.27	
PHE	m-10	3880	6.89	
PHE	m-80	26665	47.38	
PHE	OUTLIER	159	0.28	
TYR : TOTAL N = 47243				
TYR	p90	5466	11.57	
TYR	t80	16312	34.53	
TYR	m-10	2623	5.55	
TYR	m-80	22683	48.01	
TYR	OUTLIER	159	0.34	
TRP : TOTAL N = 18715				
TRP	p90	971	5.19	
TRP	p-90	1937	10.35	
TRP	t60	3385	18.09	
TRP	t-100	2893	15.46	
TRP	m100	6319	33.76	
TRP	m-10	2196	11.73	
TRP	m-90	961	5.13	

residue	rotamer	n	%	rarity
TRP	OUTLIER	53	0.28	
MET : TOTAL N = 16794				
MET	ppp	50	0.30	✓
MET	pp-130	27	0.16	✓
MET	ptp	404	2.41	
MET	ptt	260	1.55	
MET	ptm	375	2.23	
MET	pmt	7	0.04	✓
MET	pmm	42	0.25	✓
MET	tpp	1138	6.78	
MET	tpt	388	2.31	
MET	ttp	1246	7.42	
MET	ttt	569	3.39	
MET	ttm	1124	6.69	
MET	tmt	34	0.20	✓
MET	tmm	276	1.64	
MET	mpp	74	0.44	
MET	mpt	34	0.20	✓
MET	mpm	13	0.08	✓
MET	mtp	2815	16.76	
MET	mtt	1542	9.18	
MET	mtm	1851	11.02	
MET	mmp	520	3.10	
MET	mmt	597	3.55	
MET	mmm	3354	19.97	
MET	OUTLIER	54	0.32	
GLU : TOTAL N = 57462				
GLU	pp20	159	0.28	✓
GLU	pt0	2800	4.87	
GLU	pm20	1485	2.58	
GLU	tp30	4616	8.03	
GLU	tt0	13610	23.69	
GLU	tm-30	862	1.50	
GLU	mp0	3671	6.39	
GLU	mt-10	21021	36.58	
GLU	mm-30	9080	15.80	
GLU	OUTLIER	158	0.27	
GLN : TOTAL N = 37119				
GLN	pp30	178	0.48	✓
GLN	pt0	1885	5.08	
GLN	pm20	487	1.31	
GLN	tp40	3618	9.75	
GLN	tp-100	534	1.44	
GLN	tt0	6936	18.69	
GLN	tm130	55	0.15	✓
GLN	tm-30	547	1.47	
GLN	mp10	1207	3.25	
GLN	mp-120	87	0.23	✓
GLN	mt0	14370	38.71	
GLN	mm110	1147	3.09	
GLN	mm-40	5959	16.05	
GLN	OUTLIER	109	0.29	
ARG : TOTAL N = 46380				
ARG	ppp80	10	0.02	✓
ARG	ppp-140	4	0.01	✓
ARG	ppt170	57	0.12	✓
ARG	ppt90	19	0.04	✓
ARG	ppt-90	15	0.03	✓
ARG	ptp90	223	0.48	
ARG	ptp-110	77	0.17	

residue	rotamer	n	%	rarity
ARG	ptp-170	388	0.84	
ARG	ptt180	820	1.77	
ARG	ptt90	814	1.76	
ARG	ptt-90	726	1.57	
ARG	ptm160	502	1.08	
ARG	ptm-80	215	0.46	
ARG	pmt100	4	0.01	✓
ARG	pmt170	39	0.08	✓
ARG	pmt-80	27	0.06	✓
ARG	pmm150	12	0.03	✓
ARG	pmm-80	19	0.04	✓
ARG	tpp80	363	0.78	
ARG	tpp-160	496	1.07	
ARG	tpt170	825	1.78	
ARG	tpt90	652	1.41	
ARG	tpt-90	365	0.79	
ARG	tpm170	110	0.24	
ARG	tpm-80	20	0.04	✓
ARG	ttp80	1896	4.09	
ARG	ttp-110	623	1.34	
ARG	ttp-170	1533	3.31	
ARG	ttt180	2339	5.04	
ARG	ttt90	1057	2.28	
ARG	ttt-90	1380	2.98	
ARG	ttm110	725	1.56	
ARG	ttm170	1317	2.84	
ARG	ttm-80	1504	3.24	
ARG	tmt170	104	0.22	
ARG	tmt90	23	0.05	✓
ARG	tmt-80	62	0.13	
ARG	tmml160	92	0.20	
ARG	tmm-80	71	0.15	
ARG	mpp80	54	0.12	✓
ARG	mpp-170	64	0.14	
ARG	mpt180	245	0.53	
ARG	mpt90	46	0.10	✓
ARG	mpt-90	85	0.18	
ARG	mtp180	2504	5.40	
ARG	mtp85	1857	4.00	
ARG	mtp-110	470	1.01	
ARG	mtt180	4592	9.90	
ARG	mtt90	2460	5.30	
ARG	mtt-85	2843	6.13	
ARG	mtm110	781	1.68	
ARG	mtm180	2407	5.19	
ARG	mtm-85	2848	6.14	
ARG	mmp80	164	0.35	
ARG	mmp-170	123	0.27	
ARG	mmt180	1203	2.59	
ARG	mmt90	567	1.22	
ARG	mmt-90	1428	3.08	
ARG	mmm160	951	2.05	
ARG	mmm-85	1022	2.20	
ARG	OUTLIER	138	0.30	
LYS : TOTAL N = 34829				
LYS	pptt	25	0.07	✓
LYS	ptpp	89	0.26	
LYS	ptpt	148	0.42	
LYS	pttp	240	0.69	
LYS	pttt	1385	3.98	

residue	rotamer	n	%	rarity
LYS	pttm	268	0.77	
LYS	ptmt	187	0.54	
LYS	ptmm	80	0.23	
LYS	pmtt	10	0.03	✓
LYS	tppp	37	0.11	✓
LYS	tppt	272	0.78	
LYS	tptp	409	1.17	
LYS	tptt	1228	3.53	
LYS	tptm	197	0.57	
LYS	tttp	229	0.66	
LYS	ttpt	883	2.54	
LYS	tttp	1233	3.54	
LYS	tttt	5043	14.48	
LYS	tttm	1176	3.38	
LYS	ttmp	9	0.03	✓
LYS	ttmt	674	1.94	
LYS	ttmm	197	0.57	
LYS	tmtp	11	0.03	✓
LYS	tmtt	82	0.24	
LYS	tmtm	20	0.06	✓
LYS	tmmt	33	0.09	✓
LYS	tmmm	8	0.02	✓
LYS	mppt	31	0.09	✓
LYS	mptp	26	0.07	✓
LYS	mppt	124	0.36	
LYS	mptm	11	0.03	✓
LYS	mtpm	392	1.13	
LYS	mtpt	1357	3.90	
LYS	mtpm	17	0.05	✓
LYS	mttp	1414	4.06	
LYS	mttt	8597	24.68	
LYS	mttm	1829	5.25	
LYS	mtmp	9	0.03	✓
LYS	mtmt	1314	3.77	
LYS	mtmm	424	1.22	
LYS	mmpt	31	0.09	✓
LYS	mmtp	463	1.33	
LYS	mmtt	3137	9.01	
LYS	mmtm	727	2.09	
LYS	mmmt	544	1.56	
LYS	mmmm	90	0.26	
LYS	OUTLIER	114	0.33	

Table S3: Rotamer names, number of examples in the filtered data set, and frequency in its residue type.

χ and Covalent Bond Angle Central Values

The following tables report the central χ and covalent bond angles for each rotamer identified in the Top8000. The central χ values are calculated by taking the center-of-mass (COM) of the smoothed contours in the given rotamer bin as described in Section 2.4. The mean for the covalent bond angles is a simple mean. These numbers, along with rotamer occurrence frequencies, are available in CSV format on GitHub under Top8000/Top8000_rotamer_central_values at http://github.com/rlabduke/reference_data.

Table S4: SER Central Values

SER p n = 36901			SER t n = 17502		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	66	8.6	chi1	179	9.0
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -OG	111.0	1.35	C α -C β -OG	110.7	1.42
C α -C-O	120.5	0.92	C α -C-O	120.6	0.82
C β -C α -C	109.9	1.39	C β -C α -C	109.8	1.45
N-C α -C	111.6	2.52	N-C α -C	110.5	2.40
N-C α -C β	110.7	1.12	N-C α -C β	110.1	1.21

SER m n = 21558		
χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-64	7.7
Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -OG	110.5	1.46
C α -C-O	120.5	0.85
C β -C α -C	109.5	1.45
N-C α -C	111.5	2.44
N-C α -C β	110.6	1.03

Table S5: CYS Central Values

CYS p n = 2962			CYS t n = 4399		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	65	9.0	chi1	-178	8.2
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -SG	114.6	1.68	C α -C β -SG	113.7	1.94
C α -C-O	120.5	0.98	C α -C-O	120.5	0.86
C β -C α -C	110.5	1.50	C β -C α -C	110.3	1.30
N-C α -C	111.3	2.78	N-C α -C	109.7	2.44
N-C α -C β	110.9	1.23	N-C α -C β	110.0	1.37

CYS m n = 9301		
χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-65	8.2
Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -SG	113.6	1.86
C α -C-O	120.4	0.87
C β -C α -C	109.5	1.63
N-C α -C	111.5	2.42
N-C α -C β	110.6	1.07

Table S6: THR Central Values

THR p n = 36195			THR t n = 5197		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	61	7.7	chi1	-173	7.4
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ 2	111.0	1.01	C α -C β -C γ 2	111.7	1.10
C α -C β -OG1	109.5	0.97	C α -C β -OG1	109.5	0.99
C α -C-O	120.5	0.96	C α -C-O	120.6	0.83
C β -C α -C	108.8	1.70	C β -C α -C	111.0	1.90
N-C α -C	111.4	2.77	N-C α -C	110.1	2.33
N-C α -C β	111.8	1.26	N-C α -C β	111.3	1.34
OG1-C β -C γ 2	109.2	1.71	OG1-C β -C γ 2	109.1	1.81

THR m n = 33559		
χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-60	6.1
Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ 2	111.1	0.94
C α -C β -OG1	108.9	0.97
C α -C-O	120.5	0.81
C β -C α -C	110.0	1.53
N-C α -C	110.2	2.31
N-C α -C β	110.7	1.19
OG1-C β -C γ 2	108.8	1.67

Table S7: VAL Central Values

VAL p n = 6015			VAL t n = 73329		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	65	7.2	chi1	176	6.4
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ 1	111.5	1.09	C α -C β -C γ 1	110.7	0.94
C α -C β -C γ 2	110.8	1.02	C α -C β -C γ 2	110.2	0.95
C α -C-O	120.6	0.83	C α -C-O	120.5	0.79
C β -C α -C	111.4	1.57	C β -C α -C	110.2	1.51
C γ 1-C β -C γ 2	111.0	1.20	C γ 1-C β -C γ 2	110.5	1.13
N-C α -C	110.3	2.48	N-C α -C	109.4	2.36
N-C α -C β	111.6	1.26	N-C α -C β	111.3	1.11

VAL m n = 17410		
χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-62	5.7
Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ 1	110.4	0.92
C α -C β -C γ 2	111.3	1.02
C α -C-O	120.6	0.91
C β -C α -C	109.8	1.60
C γ 1-C β -C γ 2	110.9	1.16
N-C α -C	111.1	2.69
N-C α -C β	112.3	1.18

Table S8: PRO Central Values

PRO Cg _{exo} n = 30128			PRO Cg _{endo} n = 29192		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-25	7.2	chi1	27	7.7
chi2	36	7.8	chi2	-34	8.9
chi3	-32	7.1	chi3	28	9.2
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	104.2	1.40	C α -C β -C γ	104.2	1.47
C α -C-O	120.2	1.03	C α -C-O	120.2	1.07
C α -N-C δ	111.7	0.81	C α -N-C δ	111.8	0.84
C β -C α -C	110.8	1.30	C β -C α -C	110.9	1.41
C β -C γ -C δ	104.7	2.31	C β -C γ -C δ	105.3	2.36
N-C α -C	112.7	2.42	N-C α -C	112.9	2.60
N-C α -C β	103.3	0.59	N-C α -C β	103.2	0.72
N-C δ -C γ	102.7	0.88	N-C δ -C γ	103.1	0.88

Table S9: LEU Central Values

LEU pp n = 521			LEU pt n = 378		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	61	8.2	chi1	73	8.5
chi2	83	9.5	chi2	165	10.8
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	119.1	2.53	C α -C β -C γ	118.7	2.16
C α -C-O	120.6	0.83	C α -C-O	120.8	0.83
C β -C α -C	111.5	1.38	C β -C α -C	110.4	1.45
C β -C γ -C δ 1	111.5	1.89	C β -C γ -C δ 1	109.8	1.54
C β -C γ -C δ 2	109.8	1.68	C β -C γ -C δ 2	111.6	1.84
C δ 1-C γ -C δ 2	109.7	1.23	C δ 1-C γ -C δ 2	110.4	1.24
N-C α -C	110.7	2.36	N-C α -C	110.4	2.45
N-C α -C β	111.1	1.15	N-C α -C β	111.6	1.18
LEU tp n = 34655			LEU tt n = 1576		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-177	8.2	chi1	-172	8.5
chi2	63	7.0	chi2	153	10.5
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	116.5	2.06	C α -C β -C γ	117.3	2.71
C α -C-O	120.5	0.79	C α -C-O	120.6	0.86
C β -C α -C	110.2	1.21	C β -C α -C	111.1	1.26
C β -C γ -C δ 1	111.1	1.55	C β -C γ -C δ 1	110.1	1.53
C β -C γ -C δ 2	109.8	1.50	C β -C γ -C δ 2	111.6	1.84
C δ 1-C γ -C δ 2	110.7	1.13	C δ 1-C γ -C δ 2	110.4	1.32
N-C α -C	110.2	2.38	N-C α -C	109.1	2.50
N-C α -C β	110.3	1.15	N-C α -C β	110.2	1.25
LEU tm n = 143			LEU mp n = 2711		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-172	5.9	chi1	-77	12.5
chi2	-75	6.4	chi2	72	15.7
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	120.4	2.30	C α -C β -C γ	116.6	2.64
C α -C-O	120.6	0.80	C α -C-O	120.5	0.85
C β -C α -C	111.3	1.17	C β -C α -C	109.7	1.57
C β -C γ -C δ 1	112.3	1.92	C β -C γ -C δ 1	111.6	2.04
C β -C γ -C δ 2	111.6	1.69	C β -C γ -C δ 2	109.9	1.58
C δ 1-C γ -C δ 2	111.4	1.44	C δ 1-C γ -C δ 2	110.5	1.45
N-C α -C	108.5	2.32	N-C α -C	110.2	2.64
N-C α -C β	109.9	1.13	N-C α -C β	111.1	1.03

LEU mt n = 74252			LEU mm n = 484		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-66	8.2	chi1	-83	10.2
chi2	174	8.1	chi2	-64	10.0
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	115.9	2.17	C α -C β -C γ	117.8	2.63
C α -C-O	120.4	0.82	C α -C-O	120.3	0.89
C β -C α -C	109.8	1.42	C β -C α -C	110.1	1.58
C β -C γ -C δ 1	109.9	1.47	C β -C γ -C δ 1	110.9	1.60
C β -C γ -C δ 2	111.0	1.55	C β -C γ -C δ 2	111.9	1.72
C δ 1-C γ -C δ 2	110.8	1.11	C δ 1-C γ -C δ 2	110.7	1.40
N-C α -C	111.4	2.34	N-C α -C	111.1	2.61
N-C α -C β	110.6	0.99	N-C α -C β	111.0	0.98

Table S10: ILE Central Values

ILE pp n = 254			ILE pt n = 8837		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	58	7.7	chi1	62	6.1
chi2	84	12.8	chi2	170	7.6
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ 1	112.5	1.28	C α -C β -C γ 1	111.3	1.08
C α -C β -C γ 2	109.9	1.15	C α -C β -C γ 2	110.2	0.94
C α -C-O	120.5	0.87	C α -C-O	120.5	0.94
C β -C α -C	111.3	1.61	C β -C α -C	110.1	1.67
C β -C γ 1-C δ 1	115.1	1.80	C β -C γ 1-C δ 1	113.6	1.25
C γ 1-C β -C γ 2	110.0	1.96	C γ 1-C β -C γ 2	111.4	1.53
N-C α -C	112.0	2.51	N-C α -C	111.4	2.74
N-C α -C β	112.3	1.25	N-C α -C β	112.3	1.20
ILE tp n = 1869			ILE tt n = 4163		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-167	7.8	chi1	-170	7.7
chi2	66	7.3	chi2	167	6.9
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ 1	111.1	1.13	C α -C β -C γ 1	110.7	1.07
C α -C β -C γ 2	111.4	1.03	C α -C β -C γ 2	111.4	1.04
C α -C-O	120.4	0.82	C α -C-O	120.6	0.83
C β -C α -C	111.5	1.46	C β -C α -C	111.6	1.48
C β -C γ 1-C δ 1	114.2	1.15	C β -C γ 1-C δ 1	113.5	1.27
C γ 1-C β -C γ 2	110.8	1.70	C γ 1-C β -C γ 2	111.7	1.61
N-C α -C	111.6	2.33	N-C α -C	110.1	2.52
N-C α -C β	111.5	1.27	N-C α -C β	111.4	1.32
ILE mp n = 623			ILE mt n = 44470		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-63	11.6	chi1	-63	6.4
chi2	89	16.6	chi2	169	7.4
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ 1	111.2	1.11	C α -C β -C γ 1	110.0	1.08
C α -C β -C γ 2	110.5	1.09	C α -C β -C γ 2	110.6	0.92
C α -C-O	120.5	0.81	C α -C-O	120.5	0.79
C β -C α -C	110.1	1.63	C β -C α -C	110.4	1.58
C β -C γ 1-C δ 1	114.6	1.67	C β -C γ 1-C δ 1	114.0	1.22
C γ 1-C β -C γ 2	109.3	1.87	C γ 1-C β -C γ 2	110.8	1.44
N-C α -C	108.3	2.26	N-C α -C	109.4	2.34
N-C α -C β	111.9	1.29	N-C α -C β	111.2	1.15

ILE mm n = 11258		
χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-59	7.1
chi2	-61	7.3
Bond Angle	Mean	StdDev
C α _C β _C γ 1	110.9	1.12
C α _C β _C γ 2	110.8	0.97
C α _C_O	120.5	0.80
C β _C α _C	109.8	1.61
C β _C γ 1_C δ 1	114.8	1.21
C γ 1_C β _C γ 2	111.3	1.47
N_C α _C	109.4	2.45
N_C α _C β	111.3	1.15

Table S11: ASN Central Values

ASN p0 n = 7513			ASN t0 n = 15610		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	64	7.8	chi1	-171	10.5
chi2	7	43.3	chi2	-1	54.9
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	113.1	0.88	C α -C β -C γ	112.7	0.92
C α -C-O	120.4	0.97	C α -C-O	120.6	0.87
C β -C α -C	111.3	1.68	C β -C α -C	110.6	1.31
C β -C γ -N δ 2	116.3	0.91	C β -C γ -N δ 2	116.5	0.85
C β -C γ -O δ 1	121.1	0.98	C β -C γ -O δ 1	120.9	0.92
N-C α -C	112.0	2.77	N-C α -C	110.1	2.82
N-C α -C β	111.1	1.29	N-C α -C β	110.1	1.45
O δ 1-C γ -N δ 2	122.5	0.72	O δ 1-C γ -N δ 2	122.6	0.68
ASN t160 n = 61			ASN m110 n = 4003		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-161	7.4	chi1	-64	9.6
chi2	164	9.1	chi2	115	28.4
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.2	1.52	C α -C β -C γ	112.7	1.15
C α -C-O	120.4	0.85	C α -C-O	120.5	0.90
C β -C α -C	111.3	1.38	C β -C α -C	109.5	1.84
C β -C γ -N δ 2	117.0	2.10	C β -C γ -N δ 2	116.6	1.14
C β -C γ -O δ 1	120.5	2.02	C β -C γ -O δ 1	120.7	1.17
N-C α -C	110.0	1.95	N-C α -C	112.0	2.78
N-C α -C β	109.3	1.46	N-C α -C β	110.6	1.20
O δ 1-C γ -N δ 2	122.4	0.78	O δ 1-C γ -N δ 2	122.6	0.82
ASN m-40 n = 26292					
χ	Smooth COM	StdDev			
chi1	-70	9.1			
chi2	-42	26.3			
Bond Angle	Mean	StdDev			
C α -C β -C γ	112.5	0.92			
C α -C-O	120.4	0.87			
C β -C α -C	110.0	1.72			
C β -C γ -N δ 2	116.5	0.85			
C β -C γ -O δ 1	120.8	0.89			
N-C α -C	112.2	2.54			
N-C α -C β	110.5	1.10			
O δ 1-C γ -N δ 2	122.7	0.70			

Table S12: ASP Central Values

ASP p0 n = 11746			ASP t0 n = 17107		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	63	7.5	chi1	-172	10.2
chi2	-2	31.0	chi2	-2	23.8
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	113.5	1.02	C α -C β -C γ	113.2	0.91
C α -C-O	120.4	0.91	C α -C-O	120.7	0.89
C β -C α -C	111.3	1.65	C β -C α -C	110.9	1.23
C β -C γ -O δ 1	119.7	1.56	C β -C γ -O δ 1	119.5	1.39
C β -C γ -O δ 2	118.2	1.77	C β -C γ -O δ 2	118.1	1.73
N-C α -C	112.2	2.55	N-C α -C	108.9	2.65
N-C α -C β	111.1	1.25	N-C α -C β	109.7	1.45
O δ 1-C γ -O δ 2	122.1	1.64	O δ 1-C γ -O δ 2	122.4	1.58
ASP t70 n = 6029			ASP m-30 n = 37239		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-174	9.2	chi1	-69	8.2
chi2	74	19.8	chi2	-29	22.4
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	112.4	0.83	C α -C β -C γ	112.9	0.95
C α -C-O	120.5	0.80	C α -C-O	120.5	0.86
C β -C α -C	110.1	1.27	C β -C α -C	109.4	1.67
C β -C γ -O δ 1	118.5	1.11	C β -C γ -O δ 1	119.2	1.36
C β -C γ -O δ 2	118.7	1.56	C β -C γ -O δ 2	118.2	1.70
N-C α -C	110.5	2.36	N-C α -C	111.7	2.30
N-C α -C β	110.2	1.37	N-C α -C β	110.8	1.06
O δ 1-C γ -O δ 2	122.7	1.54	O δ 1-C γ -O δ 2	122.6	1.56

Table S13: HIS Central Values

HIS p90 n = 1492			HIS p-80 n = 2203		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	62	9.7	chi1	65	9.9
chi2	87	21.8	chi2	-81	16.2
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.2	1.05	C α -C β -C γ	114.1	1.06
C α -C-O	120.6	0.95	C α -C-O	120.4	0.98
C β -C α -C	110.8	1.57	C β -C α -C	110.4	1.53
C β -C γ -C δ 2	131.0	0.86	C β -C γ -C δ 2	131.0	0.80
C β -C γ -N δ 1	122.8	0.91	C β -C γ -N δ 1	122.7	0.81
C ϵ 1-N ϵ 2-C δ 2	108.8	0.59	C ϵ 1-N ϵ 2-C δ 2	108.8	0.58
C γ -C δ 2-N ϵ 2	107.3	0.50	C γ -C δ 2-N ϵ 2	107.2	0.52
C γ -N δ 1-C ϵ 1	109.2	0.72	C γ -N δ 1-C ϵ 1	109.2	0.61
N δ 1-C ϵ 1-N ϵ 2	108.5	0.66	N δ 1-C ϵ 1-N ϵ 2	108.5	0.60
N δ 1-C γ -C δ 2	106.2	0.53	N δ 1-C γ -C δ 2	106.2	0.51
N-C α -C	111.3	2.74	N-C α -C	112.0	2.43
N-C α -C β	111.0	1.36	N-C α -C β	111.0	1.32
HIS t70 n = 5068			HIS t-170 n = 1332		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-178	10.0	chi1	-173	9.7
chi2	74	17.3	chi2	-167	21.6
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	113.6	1.07	C α -C β -C γ	114.2	1.02
C α -C-O	120.6	0.83	C α -C-O	120.6	0.81
C β -C α -C	110.1	1.34	C β -C α -C	110.9	1.31
C β -C γ -C δ 2	131.0	0.82	C β -C γ -C δ 2	131.4	0.98
C β -C γ -N δ 1	122.7	0.79	C β -C γ -N δ 1	122.4	1.05
C ϵ 1-N ϵ 2-C δ 2	108.9	0.52	C ϵ 1-N ϵ 2-C δ 2	108.8	0.55
C γ -C δ 2-N ϵ 2	107.2	0.46	C γ -C δ 2-N ϵ 2	107.2	0.45
C γ -N δ 1-C ϵ 1	109.2	0.62	C γ -N δ 1-C ϵ 1	109.2	0.66
N δ 1-C ϵ 1-N ϵ 2	108.5	0.56	N δ 1-C ϵ 1-N ϵ 2	108.6	0.63
N δ 1-C γ -C δ 2	106.2	0.50	N δ 1-C γ -C δ 2	106.2	0.52
N-C α -C	110.7	2.35	N-C α -C	109.2	2.61
N-C α -C β	110.2	1.49	N-C α -C β	109.6	1.52

HIS t-90 n = 3553			HIS m170 n = 2695		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-173	10.4	chi1	-68	8.2
chi2	-87	18.5	chi2	171	21.7
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	113.7	1.01	C α -C β -C γ	113.7	0.93
C α -C-O	120.5	0.85	C α -C-O	120.4	0.88
C β -C α -C	110.4	1.22	C β -C α -C	109.7	1.79
C β -C γ -C δ 2	130.9	0.83	C β -C γ -C δ 2	131.1	0.99
C β -C γ -N δ 1	122.8	0.75	C β -C γ -N δ 1	122.6	1.04
C ϵ 1-N ϵ 2-C δ 2	108.8	0.52	C ϵ 1-N ϵ 2-C δ 2	108.8	0.53
C γ -C δ 2-N ϵ 2	107.2	0.48	C γ -C δ 2-N ϵ 2	107.2	0.47
C γ -N δ 1-C ϵ 1	109.2	0.72	C γ -N δ 1-C ϵ 1	109.2	0.69
N δ 1-C ϵ 1-N ϵ 2	108.5	0.62	N δ 1-C ϵ 1-N ϵ 2	108.6	0.62
N δ 1-C γ -C δ 2	106.2	0.55	N δ 1-C γ -C δ 2	106.2	0.53
N-C α -C	109.9	2.47	N-C α -C	111.5	2.54
N-C α -C β	110.1	1.46	N-C α -C β	110.7	1.15
HIS m90 n = 3914			HIS m-70 n = 9453		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-66	9.8	chi1	-64	10.0
chi2	88	17.5	chi2	-75	19.3
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	113.5	1.11	C α -C β -C γ	113.4	1.06
C α -C-O	120.5	0.90	C α -C-O	120.4	0.87
C β -C α -C	109.8	1.96	C β -C α -C	109.9	1.89
C β -C γ -C δ 2	130.9	0.85	C β -C γ -C δ 2	131.1	0.82
C β -C γ -N δ 1	122.8	0.82	C β -C γ -N δ 1	122.6	0.80
C ϵ 1-N ϵ 2-C δ 2	108.9	0.56	C ϵ 1-N ϵ 2-C δ 2	108.9	0.52
C γ -C δ 2-N ϵ 2	107.2	0.50	C γ -C δ 2-N ϵ 2	107.2	0.47
C γ -N δ 1-C ϵ 1	109.2	0.64	C γ -N δ 1-C ϵ 1	109.2	0.63
N δ 1-C ϵ 1-N ϵ 2	108.5	0.61	N δ 1-C ϵ 1-N ϵ 2	108.5	0.56
N δ 1-C γ -C δ 2	106.2	0.51	N δ 1-C γ -C δ 2	106.3	0.53
N-C α -C	111.5	2.73	N-C α -C	111.7	2.84
N-C α -C β	110.6	1.18	N-C α -C β	110.4	1.17

Table S14: PHE Central Values

PHE p90 n = 6289			PHE t80 n = 19289		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	64	9.6	chi1	-178	10.0
chi2	-90	9.4	chi2	76	17.4
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.4	0.97	C α -C β -C γ	113.8	1.07
C α -C-O	120.7	0.89	C α -C-O	120.6	0.80
C β -C α -C	110.9	1.46	C β -C α -C	110.3	1.30
C β -C γ -C δ 1	120.7	0.62	C β -C γ -C δ 1	120.6	0.72
C β -C γ -C δ 2	120.6	0.58	C β -C γ -C δ 2	120.5	0.68
C δ 1-C ϵ 1-C ζ	119.9	0.60	C δ 1-C ϵ 1-C ζ	119.9	0.59
C δ 1-C γ -C δ 2	118.6	0.53	C δ 1-C γ -C δ 2	118.8	0.55
C ϵ 1-C ζ -C ϵ 2	119.8	0.63	C ϵ 1-C ζ -C ϵ 2	119.9	0.63
C γ -C δ 1-C ϵ 1	120.9	0.59	C γ -C δ 1-C ϵ 1	120.8	0.58
C γ -C δ 2-C ϵ 2	120.9	0.58	C γ -C δ 2-C ϵ 2	120.8	0.59
C ζ -C ϵ 2-C δ 2	119.9	0.59	C ζ -C ϵ 2-C δ 2	119.9	0.59
N-C α -C	110.9	2.57	N-C α -C	110.3	2.31
N-C α -C β	111.4	1.32	N-C α -C β	110.2	1.50
PHE m-10 n = 3880			PHE m-80 n = 26665		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-68	9.3	chi1	-67	10.1
chi2	-15	19.8	chi2	-81	16.8
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.8	0.96	C α -C β -C γ	113.5	1.02
C α -C-O	120.4	0.87	C α -C-O	120.5	0.86
C β -C α -C	108.9	1.78	C β -C α -C	109.8	1.99
C β -C γ -C δ 1	121.5	1.22	C β -C γ -C δ 1	120.6	0.60
C β -C γ -C δ 2	119.9	1.16	C β -C γ -C δ 2	120.6	0.59
C δ 1-C ϵ 1-C ζ	119.9	0.61	C δ 1-C ϵ 1-C ζ	119.9	0.58
C δ 1-C γ -C δ 2	118.5	0.56	C δ 1-C γ -C δ 2	118.8	0.53
C ϵ 1-C ζ -C ϵ 2	119.8	0.62	C ϵ 1-C ζ -C ϵ 2	119.9	0.61
C γ -C δ 1-C ϵ 1	120.8	0.60	C γ -C δ 1-C ϵ 1	120.8	0.56
C γ -C δ 2-C ϵ 2	121.0	0.61	C γ -C δ 2-C ϵ 2	120.8	0.57
C ζ -C ϵ 2-C δ 2	119.9	0.61	C ζ -C ϵ 2-C δ 2	119.9	0.58
N-C α -C	111.0	2.42	N-C α -C	111.2	2.81
N-C α -C β	111.2	1.11	N-C α -C β	110.5	1.11

Table S15: TYR Central Values

TYR p90 n = 5466			TYR t80 n = 16312		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	64	10.6	chi1	-178	10.5
chi2	-90	10.1	chi2	76	16.7
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.8	1.88	C α -C β -C γ	113.7	2.14
C α -C-O	120.7	0.93	C α -C-O	120.6	0.80
C β -C α -C	110.6	1.41	C β -C α -C	110.3	1.25
C β -C γ -C δ 1	121.0	0.65	C β -C γ -C δ 1	120.9	0.66
C β -C γ -C δ 2	120.9	0.60	C β -C γ -C δ 2	120.8	0.65
C δ 1-C ϵ 1-C ζ	119.5	0.62	C δ 1-C ϵ 1-C ζ	119.5	0.60
C δ 1-C γ -C δ 2	118.1	0.55	C δ 1-C γ -C δ 2	118.2	0.52
C ϵ 1-C ζ -C ϵ 2	120.4	0.66	C ϵ 1-C ζ -C ϵ 2	120.5	0.65
C ϵ 1-C ζ -OH	119.8	1.25	C ϵ 1-C ζ -OH	119.7	1.28
C γ -C δ 1-C ϵ 1	121.2	0.58	C γ -C δ 1-C ϵ 1	121.1	0.55
C γ -C δ 2-C ϵ 2	121.2	0.55	C γ -C δ 2-C ϵ 2	121.1	0.56
C ζ -C ϵ 2-C δ 2	119.6	0.62	C ζ -C ϵ 2-C δ 2	119.5	0.63
N-C α -C	111.1	2.66	N-C α -C	110.4	2.25
N-C α -C β	111.2	1.22	N-C α -C β	110.2	1.44
OH-C ζ -C ϵ 2	119.7	1.24	OH-C ζ -C ϵ 2	119.7	1.28
TYR m-10 n = 2623			TYR m-80 n = 22683		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-68	9.9	chi1	-67	10.4
chi2	-15	20.2	chi2	-81	16.8
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	115.8	1.57	C α -C β -C γ	113.2	2.04
C α -C-O	120.4	0.84	C α -C-O	120.4	0.88
C β -C α -C	109.1	1.75	C β -C α -C	109.6	1.92
C β -C γ -C δ 1	121.6	1.01	C β -C γ -C δ 1	120.9	0.63
C β -C γ -C δ 2	120.4	0.94	C β -C γ -C δ 2	120.9	0.62
C δ 1-C ϵ 1-C ζ	119.5	0.62	C δ 1-C ϵ 1-C ζ	119.5	0.90
C δ 1-C γ -C δ 2	118.0	0.57	C δ 1-C γ -C δ 2	118.2	0.58
C ϵ 1-C ζ -C ϵ 2	120.4	0.65	C ϵ 1-C ζ -C ϵ 2	120.5	0.73
C ϵ 1-C ζ -OH	120.1	1.32	C ϵ 1-C ζ -OH	119.7	1.24
C γ -C δ 1-C ϵ 1	121.1	0.60	C γ -C δ 1-C ϵ 1	121.1	0.86
C γ -C δ 2-C ϵ 2	121.3	0.57	C γ -C δ 2-C ϵ 2	121.1	0.86
C ζ -C ϵ 2-C δ 2	119.7	0.64	C ζ -C ϵ 2-C δ 2	119.5	0.90
N-C α -C	111.4	2.35	N-C α -C	111.4	2.76
N-C α -C β	111.0	1.14	N-C α -C β	110.6	1.10
OH-C ζ -C ϵ 2	119.5	1.34	OH-C ζ -C ϵ 2	119.8	1.25

Table S16: TRP Central Values

TRP p90 n = 971			TRP p-90 n = 1937		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	60	9.9	chi1	62	9.8
chi2	88	14.7	chi2	-89	12.9
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	115.0	2.04	C α -C β -C γ	115.0	1.90
C α -C-O	120.6	0.86	C α -C-O	120.5	0.93
C β -C α -C	110.7	1.41	C β -C α -C	110.5	1.43
C β -C γ -C δ 1	127.0	0.70	C β -C γ -C δ 1	126.9	0.67
C β -C γ -C δ 2	126.7	0.76	C β -C γ -C δ 2	126.9	0.71
C δ 1-C γ -C δ 2	106.2	0.38	C δ 1-C γ -C δ 2	106.2	0.44
C δ 1-N ϵ 1-C ϵ 2	108.9	0.60	C δ 1-N ϵ 1-C ϵ 2	109.0	0.46
C δ 2-C ϵ 2-C ζ 2	122.5	0.37	C δ 2-C ϵ 2-C ζ 2	122.4	0.34
C δ 2-C ϵ 3-C ζ 3	118.7	0.34	C δ 2-C ϵ 3-C ζ 3	118.7	0.47
C ϵ 2-C δ 2-C ϵ 3	118.8	0.36	C ϵ 2-C δ 2-C ϵ 3	118.8	0.39
C ϵ 2-C δ 2-C γ	107.3	0.31	C ϵ 2-C δ 2-C γ	107.2	0.33
C ϵ 3-C ζ 3-C η 2	121.0	0.42	C ϵ 3-C ζ 3-C η 2	121.0	0.46
C γ -C δ 1-N ϵ 1	110.2	0.50	C γ -C δ 1-N ϵ 1	110.2	0.46
C γ -C δ 2-C ϵ 3	133.9	0.34	C γ -C δ 2-C ϵ 3	133.9	0.41
C η 2-C ζ 2-C ϵ 2	117.5	0.45	C η 2-C ζ 2-C ϵ 2	117.5	0.44
C ζ 3-C η 2-C ζ 2	121.5	0.46	C ζ 3-C η 2-C ζ 2	121.5	0.46
N ϵ 1-C ϵ 2-C δ 2	107.4	0.37	N ϵ 1-C ϵ 2-C δ 2	107.4	0.34
N ϵ 1-C ϵ 2-C ζ 2	130.1	0.40	N ϵ 1-C ϵ 2-C ζ 2	130.1	0.41
N-C α -C	111.2	2.41	N-C α -C	112.1	2.60
N-C α -C β	111.1	1.26	N-C α -C β	111.1	1.24

TRP t60 n = 3385			TRP t-100 n = 2893		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-179	9.8	chi1	-177	11.6
chi2	65	32.8	chi2	-103	15.4
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.3	2.14	C α -C β -C γ	113.6	2.32
C α -C-O	120.7	0.81	C α -C-O	120.6	0.87
C β -C α -C	110.6	1.35	C β -C α -C	110.3	1.33
C β -C γ -C δ 1	127.1	0.79	C β -C γ -C δ 1	126.9	0.69
C β -C γ -C δ 2	126.5	0.82	C β -C γ -C δ 2	126.7	0.71
C δ 1-C γ -C δ 2	106.3	0.48	C δ 1-C γ -C δ 2	106.3	0.42
C δ 1-N ϵ 1-C ϵ 2	108.9	0.51	C δ 1-N ϵ 1-C ϵ 2	108.9	0.45
C δ 2-C ϵ 2-C ζ 2	122.4	0.40	C δ 2-C ϵ 2-C ζ 2	122.4	0.36
C δ 2-C ϵ 3-C ζ 3	118.7	0.42	C δ 2-C ϵ 3-C ζ 3	118.7	0.45
C ϵ 2-C δ 2-C ϵ 3	118.9	0.38	C ϵ 2-C δ 2-C ϵ 3	118.8	0.35
C ϵ 2-C δ 2-C γ	107.3	0.38	C ϵ 2-C δ 2-C γ	107.2	0.32
C ϵ 3-C ζ 3-C η 2	121.0	0.48	C ϵ 3-C ζ 3-C η 2	121.0	0.48
C γ -C δ 1-N ϵ 1	110.1	0.53	C γ -C δ 1-N ϵ 1	110.1	0.48
C γ -C δ 2-C ϵ 3	133.9	0.43	C γ -C δ 2-C ϵ 3	133.9	0.37
C η 2-C ζ 2-C ϵ 2	117.5	0.46	C η 2-C ζ 2-C ϵ 2	117.5	0.45
C ζ 3-C η 2-C ζ 2	121.5	0.48	C ζ 3-C η 2-C ζ 2	121.5	0.46
N ϵ 1-C ϵ 2-C δ 2	107.5	0.38	N ϵ 1-C ϵ 2-C δ 2	107.4	0.34
N ϵ 1-C ϵ 2-C ζ 2	130.1	0.46	N ϵ 1-C ϵ 2-C ζ 2	130.1	0.43
N-C α -C	110.1	2.15	N-C α -C	110.5	2.42
N-C α -C β	110.0	1.42	N-C α -C β	110.3	1.42

TRP m100 n = 6319			TRP m-10 n = 2196		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-67	10.8	chi1	-68	9.0
chi2	97	17.0	chi2	-7	21.7
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	113.2	2.22	C α -C β -C γ	114.7	1.64
C α -C-O	120.4	0.86	C α -C-O	120.5	0.88
C β -C α -C	109.6	1.92	C β -C α -C	109.2	1.71
C β -C γ -C δ 1	127.0	0.66	C β -C γ -C δ 1	127.5	0.71
C β -C γ -C δ 2	126.6	0.69	C β -C γ -C δ 2	126.1	0.77
C δ 1-C γ -C δ 2	106.3	0.43	C δ 1-C γ -C δ 2	106.3	0.45
C δ 1-N ϵ 1-C ϵ 2	108.9	0.49	C δ 1-N ϵ 1-C ϵ 2	108.8	0.45
C δ 2-C ϵ 2-C ζ 2	122.4	0.36	C δ 2-C ϵ 2-C ζ 2	122.3	0.41
C δ 2-C ϵ 3-C ζ 3	118.7	0.46	C δ 2-C ϵ 3-C ζ 3	118.7	0.43
C ϵ 2-C δ 2-C ϵ 3	118.9	0.37	C ϵ 2-C δ 2-C ϵ 3	118.9	0.38
C ϵ 2-C δ 2-C γ	107.2	0.33	C ϵ 2-C δ 2-C γ	107.3	0.38
C ϵ 3-C ζ 3-C η 2	121.0	0.48	C ϵ 3-C ζ 3-C η 2	121.0	0.43
C γ -C δ 1-N ϵ 1	110.1	0.49	C γ -C δ 1-N ϵ 1	110.0	0.48
C γ -C δ 2-C ϵ 3	133.9	0.40	C γ -C δ 2-C ϵ 3	133.8	0.39
C η 2-C ζ 2-C ϵ 2	117.5	0.45	C η 2-C ζ 2-C ϵ 2	117.5	0.47
C ζ 3-C η 2-C ζ 2	121.5	0.46	C ζ 3-C η 2-C ζ 2	121.5	0.46
N ϵ 1-C ϵ 2-C δ 2	107.4	0.35	N ϵ 1-C ϵ 2-C δ 2	107.5	0.37
N ϵ 1-C ϵ 2-C ζ 2	130.2	0.43	N ϵ 1-C ϵ 2-C ζ 2	130.2	0.45
N-C α -C	111.4	2.64	N-C α -C	111.4	2.54
N-C α -C β	110.6	1.11	N-C α -C β	110.8	1.15

TRP m-90 n = 961		
χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-68	12.4
chi2	-89	13.8
Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	113.8	2.48
C α -C-O	120.5	0.86
C β -C α -C	109.4	2.04
C β -C γ -C δ 1	126.7	0.72
C β -C γ -C δ 2	127.0	0.78
C δ 1-C γ -C δ 2	106.3	0.44
C δ 1-N ϵ 1-C ϵ 2	108.9	0.47
C δ 2-C ϵ 2-C ζ 2	122.4	0.35
C δ 2-C ϵ 3-C ζ 3	118.7	0.45
C ϵ 2-C δ 2-C ϵ 3	118.8	0.38
C ϵ 2-C δ 2-C γ	107.2	0.32
C ϵ 3-C ζ 3-C η 2	121.0	0.46
C γ -C δ 1-N ϵ 1	110.1	0.50
C γ -C δ 2-C ϵ 3	133.9	0.38
C η 2-C ζ 2-C ϵ 2	117.5	0.43
C ζ 3-C η 2-C ζ 2	121.5	0.45
N ϵ 1-C ϵ 2-C δ 2	107.5	0.35
N ϵ 1-C ϵ 2-C ζ 2	130.1	0.43
N-C α -C	110.6	2.88
N-C α -C β	110.7	1.12

Table S17: MET Central Values

MET ppp n = 50			MET pp-130 n = 27		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	61	9.3	chi1	64	7.2
chi2	79	11.0	chi2	82	4.9
chi3	71	9.9	chi3	-154	27.8
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	115.7	1.79	C α -C β -C γ	115.4	1.18
C α -C-O	120.7	0.90	C α -C-O	120.9	0.65
C β -C α -C	111.2	1.57	C β -C α -C	111.1	0.91
C β -C γ -SD	114.4	2.33	C β -C γ -SD	113.7	2.01
C γ -SD-C ϵ	100.5	4.02	C γ -SD-C ϵ	100.8	1.95
N-C α -C	111.8	2.72	N-C α -C	111.0	1.84
N-C α -C β	110.9	1.02	N-C α -C β	110.9	0.99
MET ptp n = 404			MET ptt n = 260		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	65	8.5	chi1	65	8.2
chi2	-176	11.4	chi2	-178	9.1
chi3	73	11.6	chi3	179	15.6
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.6	1.80	C α -C β -C γ	114.7	1.69
C α -C-O	120.7	0.92	C α -C-O	120.6	0.94
C β -C α -C	110.3	1.46	C β -C α -C	110.3	1.49
C β -C γ -SD	112.9	2.19	C β -C γ -SD	111.0	2.39
C γ -SD-C ϵ	100.8	1.94	C γ -SD-C ϵ	99.8	2.32
N-C α -C	110.6	2.56	N-C α -C	111.1	2.70
N-C α -C β	111.0	1.23	N-C α -C β	111.1	1.30
MET ptm n = 375			MET pmt n = 7		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	65	8.2	chi1	71	3.4
chi2	179	10.2	chi2	-75	3.2
chi3	-72	11.6	chi3	-162	4.9
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.6	1.65	C α -C β -C γ	114.8	0.77
C α -C-O	120.6	0.93	C α -C-O	121.0	0.64
C β -C α -C	110.3	1.44	C β -C α -C	111.1	1.13
C β -C γ -SD	112.8	2.11	C β -C γ -SD	111.7	2.28
C γ -SD-C ϵ	100.9	1.82	C γ -SD-C ϵ	100.2	1.91
N-C α -C	110.9	2.77	N-C α -C	109.0	1.55
N-C α -C β	111.2	1.21	N-C α -C β	111.6	1.28

MET pmm n = 42			MET tpp n = 1138		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	73	7.8	chi1	-175	9.4
chi2	-69	6.7	chi2	64	8.0
chi3	-69	8.1	chi3	72	12.0
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	115.5	0.86	C α -C β -C γ	114.2	1.35
C α -C-O	120.6	0.79	C α -C-O	120.5	0.84
C β -C α -C	110.2	1.22	C β -C α -C	110.3	1.13
C β -C γ -SD	115.2	2.54	C β -C γ -SD	113.7	2.02
C γ -SD-C ϵ	101.1	1.58	C γ -SD-C ϵ	100.7	1.77
N-C α -C	112.3	2.69	N-C α -C	110.7	2.23
N-C α -C β	110.8	1.21	N-C α -C β	110.5	1.17
MET tpt n = 388			MET ttp n = 1246		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-173	8.7	chi1	-178	8.6
chi2	66	7.8	chi2	179	11.4
chi3	-156	31.2	chi3	72	10.6
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.1	1.39	C α -C β -C γ	113.6	1.65
C α -C-O	120.5	0.74	C α -C-O	120.6	0.85
C β -C α -C	110.5	1.13	C β -C α -C	110.0	1.17
C β -C γ -SD	112.4	1.99	C β -C γ -SD	112.8	2.11
C γ -SD-C ϵ	100.4	2.09	C γ -SD-C ϵ	100.7	2.07
N-C α -C	110.4	2.25	N-C α -C	110.3	2.15
N-C α -C β	110.3	1.36	N-C α -C β	110.4	1.31
MET ttt n = 569			MET ttm n = 1124		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-177	8.8	chi1	-175	9.3
chi2	177	9.5	chi2	180	8.2
chi3	176	15.5	chi3	-72	13.1
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	113.7	1.72	C α -C β -C γ	113.5	1.71
C α -C-O	120.6	0.96	C α -C-O	120.5	0.80
C β -C α -C	110.1	1.31	C β -C α -C	110.0	1.17
C β -C γ -SD	110.6	2.20	C β -C γ -SD	112.8	2.16
C γ -SD-C ϵ	100.1	1.66	C γ -SD-C ϵ	100.8	1.74
N-C α -C	110.2	2.43	N-C α -C	110.1	2.40
N-C α -C β	110.1	1.39	N-C α -C β	110.4	1.33

MET tmt n = 34			MET tmm n = 276		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-179	6.7	chi1	-177	7.3
chi2	-86	7.6	chi2	-82	6.8
chi3	174	24.4	chi3	-72	10.5
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.9	1.13	C α -C β -C γ	115.0	1.37
C α -C-O	120.7	0.56	C α -C-O	120.5	0.78
C β -C α -C	110.7	1.24	C β -C α -C	111.0	1.24
C β -C γ -SD	112.8	1.77	C β -C γ -SD	114.0	2.12
C γ -SD-C ϵ	100.3	1.37	C γ -SD-C ϵ	100.8	1.64
N-C α -C	110.0	2.89	N-C α -C	109.9	2.10
N-C α -C β	110.1	1.22	N-C α -C β	110.1	1.16
MET mpp n = 74			MET mpt n = 34		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-77	13.7	chi1	-70	11.7
chi2	73	12.3	chi2	74	11.0
chi3	74	11.9	chi3	167	18.6
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.6	1.36	C α -C β -C γ	114.6	0.96
C α -C-O	120.5	0.89	C α -C-O	120.4	0.88
C β -C α -C	109.9	1.63	C β -C α -C	109.3	1.40
C β -C γ -SD	114.3	2.25	C β -C γ -SD	113.2	2.02
C γ -SD-C ϵ	101.2	2.26	C γ -SD-C ϵ	100.1	2.40
N-C α -C	110.7	2.69	N-C α -C	110.1	2.78
N-C α -C β	110.8	1.20	N-C α -C β	111.0	1.12
MET mpm n = 13			MET mtp n = 2815		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-77	5.1	chi1	-67	7.1
chi2	64	5.5	chi2	177	9.3
chi3	-102	5.0	chi3	70	10.1
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	116.1	1.02	C α -C β -C γ	113.1	1.64
C α -C-O	120.7	0.73	C α -C-O	120.5	0.84
C β -C α -C	109.1	1.27	C β -C α -C	110.0	1.59
C β -C γ -SD	115.9	2.31	C β -C γ -SD	112.8	2.08
C γ -SD-C ϵ	100.4	1.56	C γ -SD-C ϵ	100.8	1.73
N-C α -C	110.7	1.81	N-C α -C	111.3	2.35
N-C α -C β	111.0	1.05	N-C α -C β	110.5	1.01

MET mtt n = 1542			MET mtm n = 1851		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-67	7.7	chi1	-66	7.9
chi2	180	8.7	chi2	-178	10.7
chi3	-177	16.5	chi3	-74	10.8
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α _C β _C γ	113.6	1.71	C α _C β _C γ	113.2	1.72
C α _C_O	120.5	0.82	C α _C_O	120.5	0.90
C β _C α _C	109.4	1.67	C β _C α _C	109.9	1.63
C β _C γ _SD	110.4	2.19	C β _C γ _SD	112.9	2.15
C γ _SD_C ϵ	100.1	1.97	C γ _SD_C ϵ	100.8	1.78
N_C α _C	111.1	2.27	N_C α _C	111.1	2.32
N_C α _C β	110.7	1.00	N_C α _C β	110.7	1.07
MET mmp n = 520			MET mmt n = 597		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-65	5.3	chi1	-65	8.7
chi2	-62	6.3	chi2	-64	9.4
chi3	102	9.3	chi3	172	18.5
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α _C β _C γ	114.2	1.41	C α _C β _C γ	113.9	1.44
C α _C_O	120.3	0.80	C α _C_O	120.4	0.80
C β _C α _C	110.2	1.55	C β _C α _C	109.9	1.55
C β _C γ _SD	113.8	2.14	C β _C γ _SD	112.1	2.04
C γ _SD_C ϵ	101.2	2.18	C γ _SD_C ϵ	100.3	1.99
N_C α _C	111.5	2.15	N_C α _C	111.5	2.25
N_C α _C β	110.8	1.10	N_C α _C β	110.6	0.94
MET mmm n = 3354					
χ	Smooth COM	StdDev			
chi1	-66	8.9			
chi2	-61	8.8			
chi3	-69	10.2			
Bond Angle	Mean	StdDev			
C α _C β _C γ	114.0	1.29			
C α _C_O	120.4	0.86			
C β _C α _C	110.0	1.53			
C β _C γ _SD	113.7	1.95			
C γ _SD_C ϵ	100.9	1.74			
N_C α _C	111.6	2.38			
N_C α _C β	110.7	1.02			

Table S18: GLU Central Values

GLU pp20 n = 159			GLU pt0 n = 2800		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	61	8.1	chi1	65	8.4
chi2	86	8.0	chi2	-177	10.1
chi3	20	17.2	chi3	1	51.0
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	115.6	1.28	C α -C β -C γ	114.6	1.60
C α -C-O	120.4	0.85	C α -C-O	120.5	0.93
C β -C α -C	111.6	1.84	C β -C α -C	110.5	1.50
C β -C γ -C δ	114.1	1.30	C β -C γ -C δ	112.9	1.53
C γ -C δ -O ϵ 1	119.0	1.43	C γ -C δ -O ϵ 1	118.9	1.38
C γ -C δ -O ϵ 2	118.4	1.34	C γ -C δ -O ϵ 2	118.2	1.35
N-C α -C	110.8	2.54	N-C α -C	111.3	2.67
N-C α -C β	111.4	1.25	N-C α -C β	111.1	1.18
O ϵ 1-C δ -O ϵ 2	122.6	1.02	O ϵ 1-C δ -O ϵ 2	122.9	1.15
GLU pm20 n = 1485			GLU tp30 n = 4616		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	69	8.8	chi1	-178	9.8
chi2	-85	8.6	chi2	65	9.2
chi3	16	21.7	chi3	26	26.1
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	115.6	1.35	C α -C β -C γ	114.6	1.39
C α -C-O	120.2	0.83	C α -C-O	120.5	0.80
C β -C α -C	110.5	1.25	C β -C α -C	110.6	1.21
C β -C γ -C δ	114.5	1.45	C β -C γ -C δ	113.8	1.35
C γ -C δ -O ϵ 1	119.8	1.71	C γ -C δ -O ϵ 1	119.3	1.46
C γ -C δ -O ϵ 2	117.7	1.69	C γ -C δ -O ϵ 2	118.0	1.38
N-C α -C	112.9	1.83	N-C α -C	110.9	2.09
N-C α -C β	110.9	1.05	N-C α -C β	110.3	1.12
O ϵ 1-C δ -O ϵ 2	122.5	1.10	O ϵ 1-C δ -O ϵ 2	122.7	1.07
GLU tt0 n = 13610			GLU tm-30 n = 862		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-177	8.6	chi1	-170	8.6
chi2	178	10.3	chi2	-83	9.2
chi3	1	41.4	chi3	-29	17.3
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	113.5	1.74	C α -C β -C γ	114.5	1.35
C α -C-O	120.6	0.77	C α -C-O	120.5	0.84
C β -C α -C	110.1	1.17	C β -C α -C	111.0	1.33
C β -C γ -C δ	113.1	1.50	C β -C γ -C δ	113.8	1.47
C γ -C δ -O ϵ 1	119.0	1.27	C γ -C δ -O ϵ 1	119.0	1.36
C γ -C δ -O ϵ 2	118.0	1.27	C γ -C δ -O ϵ 2	118.2	1.25
N-C α -C	110.6	2.26	N-C α -C	110.2	2.46
N-C α -C β	110.4	1.37	N-C α -C β	110.2	1.16
O ϵ 1-C δ -O ϵ 2	123.1	1.07	O ϵ 1-C δ -O ϵ 2	122.8	1.17

GLU mp0 n = 3671			GLU mt-10 n = 21021		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-67	7.3	chi1	-67	7.7
chi2	83	9.4	chi2	179	11.4
chi3	3	27.5	chi3	-7	37.3
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.4	1.34	C α -C β -C γ	113.0	1.85
C α -C-O	120.4	0.82	C α -C-O	120.5	0.82
C β -C α -C	109.7	1.42	C β -C α -C	110.0	1.73
C β -C γ -C δ	114.2	1.40	C β -C γ -C δ	113.3	1.50
C γ -C δ -O ϵ 1	119.8	1.66	C γ -C δ -O ϵ 1	119.1	1.29
C γ -C δ -O ϵ 2	117.8	1.47	C γ -C δ -O ϵ 2	117.9	1.29
N-C α -C	112.0	2.00	N-C α -C	111.4	2.32
N-C α -C β	110.6	1.06	N-C α -C β	110.6	1.00
O ϵ 1-C δ -O ϵ 2	122.4	1.18	O ϵ 1-C δ -O ϵ 2	123.0	1.06

GLU mm-30 n = 9080		
χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-66	8.7
chi2	-67	10.6
chi3	-32	26.9
Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.0	1.41
C α -C-O	120.4	0.83
C β -C α -C	109.9	1.50
C β -C γ -C δ	113.4	1.34
C γ -C δ -O ϵ 1	119.2	1.35
C γ -C δ -O ϵ 2	118.2	1.26
N-C α -C	111.5	2.36
N-C α -C β	110.7	1.01
O ϵ 1-C δ -O ϵ 2	122.6	1.09

Table S19: GLN Central Values

GLN pp30 n = 178			GLN pt0 n = 1885		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	63	7.8	chi1	65	8.1
chi2	84	8.5	chi2	-177	11.3
chi3	30	20.9	chi3	-3	75.2
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	115.9	1.28	C α -C β -C γ	114.5	1.53
C α -C-O	120.3	0.95	C α -C-O	120.5	0.96
C β -C α -C	111.4	1.62	C β -C α -C	110.4	1.52
C β -C γ -C δ	113.6	1.40	C β -C γ -C δ	112.5	1.47
C γ -C δ -N ϵ 2	116.4	0.89	C γ -C δ -N ϵ 2	116.5	0.95
C γ -C δ -O ϵ 1	120.9	0.95	C γ -C δ -O ϵ 1	120.8	0.97
N-C α -C	111.0	2.55	N-C α -C	111.3	2.63
N-C α -C β	111.5	1.15	N-C α -C β	110.9	1.18
O ϵ 1-C δ -N ϵ 2	122.6	0.67	O ϵ 1-C δ -N ϵ 2	122.6	0.75
GLN pm20 n = 487			GLN tp40 n = 3618		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	70	9.9	chi1	-177	8.7
chi2	-84	9.3	chi2	66	8.2
chi3	17	32.3	chi3	41	24.2
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	115.7	1.41	C α -C β -C γ	113.9	1.42
C α -C-O	120.3	0.93	C α -C-O	120.4	0.79
C β -C α -C	110.4	1.35	C β -C α -C	110.2	1.15
C β -C γ -C δ	113.9	1.43	C β -C γ -C δ	112.9	1.24
C γ -C δ -N ϵ 2	116.3	0.86	C γ -C δ -N ϵ 2	116.6	0.84
C γ -C δ -O ϵ 1	121.3	0.99	C γ -C δ -O ϵ 1	120.8	0.87
N-C α -C	112.4	2.22	N-C α -C	111.0	2.01
N-C α -C β	111.2	1.13	N-C α -C β	110.6	1.13
O ϵ 1-C δ -N ϵ 2	122.5	0.72	O ϵ 1-C δ -N ϵ 2	122.6	0.65
GLN tp-100 n = 534			GLN tt0 n = 6936		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-177	8.7	chi1	-176	8.5
chi2	62	8.8	chi2	178	10.8
chi3	-105	27.5	chi3	2	60.9
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.4	1.57	C α -C β -C γ	113.6	1.80
C α -C-O	120.6	0.83	C α -C-O	120.6	0.76
C β -C α -C	110.5	1.24	C β -C α -C	110.1	1.18
C β -C γ -C δ	113.0	1.31	C β -C γ -C δ	112.6	1.50
C γ -C δ -N ϵ 2	116.6	0.95	C γ -C δ -N ϵ 2	116.5	0.84
C γ -C δ -O ϵ 1	120.9	0.85	C γ -C δ -O ϵ 1	120.8	0.88
N-C α -C	110.4	2.26	N-C α -C	110.4	2.27
N-C α -C β	110.4	1.24	N-C α -C β	110.3	1.36
O ϵ 1-C δ -N ϵ 2	122.6	0.64	O ϵ 1-C δ -N ϵ 2	122.7	0.71

GLN tm130 n = 55			GLN tm-30 n = 547		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-172	9.7	chi1	-172	10.1
chi2	-76	10.4	chi2	-86	11.0
chi3	127	16.1	chi3	-29	20.3
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.9	1.44	C α -C β -C γ	114.6	1.35
C α -C-O	120.5	0.94	C α -C-O	120.5	0.83
C β -C α -C	111.3	1.63	C β -C α -C	110.9	1.31
C β -C γ -C δ	114.4	2.70	C β -C γ -C δ	113.5	1.40
C γ -C δ -N ϵ 2	117.1	1.28	C γ -C δ -N ϵ 2	116.5	0.71
C γ -C δ -O ϵ 1	120.5	1.17	C γ -C δ -O ϵ 1	120.9	0.81
N-C α -C	108.8	3.40	N-C α -C	110.2	2.51
N-C α -C β	110.1	1.37	N-C α -C β	110.3	1.24
O ϵ 1-C δ -N ϵ 2	122.4	0.74	O ϵ 1-C δ -N ϵ 2	122.6	0.68
GLN mp10 n = 1207			GLN mp-120 n = 87		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-67	9.0	chi1	-73	10.0
chi2	82	11.4	chi2	69	11.4
chi3	17	37.5	chi3	-120	13.0
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.2	1.36	C α -C β -C γ	114.4	1.55
C α -C-O	120.4	0.84	C α -C-O	120.5	0.88
C β -C α -C	109.8	1.52	C β -C α -C	109.7	1.79
C β -C γ -C δ	113.4	1.29	C β -C γ -C δ	113.6	1.57
C γ -C δ -N ϵ 2	116.3	0.82	C γ -C δ -N ϵ 2	116.6	0.65
C γ -C δ -O ϵ 1	121.1	0.95	C γ -C δ -O ϵ 1	120.6	1.09
N-C α -C	111.6	2.35	N-C α -C	111.6	2.76
N-C α -C β	110.8	1.10	N-C α -C β	110.7	1.01
O ϵ 1-C δ -N ϵ 2	122.5	0.60	O ϵ 1-C δ -N ϵ 2	122.7	0.84
GLN mt0 n = 14370			GLN mm110 n = 1147		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-67	7.5	chi1	-65	8.6
chi2	179	11.2	chi2	-63	10.9
chi3	-4	62.6	chi3	109	24.1
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	113.2	1.82	C α -C β -C γ	114.0	1.56
C α -C-O	120.5	0.85	C α -C-O	120.4	0.85
C β -C α -C	109.9	1.71	C β -C α -C	110.0	1.53
C β -C γ -C δ	112.6	1.53	C β -C γ -C δ	112.9	1.43
C γ -C δ -N ϵ 2	116.4	0.85	C γ -C δ -N ϵ 2	116.6	0.92
C γ -C δ -O ϵ 1	120.8	0.90	C γ -C δ -O ϵ 1	120.8	0.94
N-C α -C	111.4	2.26	N-C α -C	111.6	2.28
N-C α -C β	110.6	1.04	N-C α -C β	110.7	1.07
O ϵ 1-C δ -N ϵ 2	122.7	0.70	O ϵ 1-C δ -N ϵ 2	122.6	0.68

GLN mm-40 n = 5959		
χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-64	8.6
chi2	-66	10.4
chi3	-39	24.7
Bond Angle	Mean	StdDev
C α _C β _C γ	113.9	1.42
C α _C_O	120.5	0.87
C β _C α _C	109.9	1.49
C β _C γ _C δ	112.8	1.28
C γ _C δ _N ϵ 2	116.5	0.91
C γ _C δ _O ϵ 1	120.9	0.91
N_C α _C	111.4	2.45
N_C α _C β	110.6	1.04
O ϵ 1_C δ _N ϵ 2	122.6	0.78

Table S20: ARG Central Values

ARG ppp80 n = 10			ARG ppp-140 n = 4		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	62	5.1	chi1	58	3.0
chi2	87	7.0	chi2	92	4.6
chi3	57	3.8	chi3	62	10.6
chi4	80	8.5	chi4	-143	12.6
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	116.1	0.88	C α -C β -C γ	115.2	0.90
C α -C-O	120.8	0.55	C α -C-O	120.7	0.54
C β -C α -C	111.0	1.51	C β -C α -C	112.0	1.46
C β -C γ -C δ	113.9	0.82	C β -C γ -C δ	112.2	1.50
C δ -N ϵ -C ζ	125.0	0.34	C δ -N ϵ -C ζ	125.9	1.18
C γ -C δ -N ϵ	112.5	1.08	C γ -C δ -N ϵ	113.8	2.26
N ϵ -C ζ -N η 1	120.6	0.68	N ϵ -C ζ -N η 1	121.0	1.24
N ϵ -C ζ -N η 2	119.8	0.63	N ϵ -C ζ -N η 2	120.1	1.38
N η 1-C ζ -N η 2	119.6	0.32	N η 1-C ζ -N η 2	118.9	0.61
N-C α -C	111.1	2.18	N-C α -C	113.6	2.34
N-C α -C β	111.9	1.19	N-C α -C β	111.2	1.26
ARG ppt170 n = 57			ARG ppt90 n = 19		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	59	9.9	chi1	64	5.9
chi2	88	12.3	chi2	99	8.0
chi3	174	12.3	chi3	-180	9.8
chi4	173	17.3	chi4	87	13.0
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	116.2	1.39	C α -C β -C γ	115.4	1.89
C α -C-O	120.4	1.04	C α -C-O	120.8	0.83
C β -C α -C	111.9	1.37	C β -C α -C	110.8	1.70
C β -C γ -C δ	112.4	1.63	C β -C γ -C δ	111.9	2.41
C δ -N ϵ -C ζ	124.2	1.28	C δ -N ϵ -C ζ	125.4	1.13
C γ -C δ -N ϵ	111.4	1.60	C γ -C δ -N ϵ	113.1	2.89
N ϵ -C ζ -N η 1	120.5	1.08	N ϵ -C ζ -N η 1	120.9	1.09
N ϵ -C ζ -N η 2	119.8	0.87	N ϵ -C ζ -N η 2	119.9	1.09
N η 1-C ζ -N η 2	119.7	0.70	N η 1-C ζ -N η 2	119.2	0.79
N-C α -C	110.8	2.50	N-C α -C	111.0	2.14
N-C α -C β	111.6	1.32	N-C α -C β	110.8	1.30

ARG ppt-90 n = 15			ARG ptp90 n = 223		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	62	9.1	chi1	65	9.4
chi2	90	11.1	chi2	179	11.3
chi3	178	5.5	chi3	64	8.6
chi4	-92	14.4	chi4	88	11.1
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	115.8	1.38	C α -C β -C γ	115.0	1.71
C α -C-O	120.6	0.93	C α -C-O	120.5	0.96
C β -C α -C	111.2	1.75	C β -C α -C	110.5	1.39
C β -C γ -C δ	113.0	1.28	C β -C γ -C δ	111.8	1.56
C δ -N ϵ -C ζ	125.0	0.74	C δ -N ϵ -C ζ	124.9	1.15
C γ -C δ -N ϵ	111.7	1.96	C γ -C δ -N ϵ	112.2	2.18
N ϵ -C ζ -N η 1	120.6	1.31	N ϵ -C ζ -N η 1	120.8	1.06
N ϵ -C ζ -N η 2	119.9	1.17	N ϵ -C ζ -N η 2	119.7	0.97
N η 1-C ζ -N η 2	119.5	0.60	N η 1-C ζ -N η 2	119.5	0.80
N-C α -C	111.6	3.12	N-C α -C	110.9	2.82
N-C α -C β	111.6	1.24	N-C α -C β	111.1	1.19
ARG ptp-110 n = 77			ARG ptp-170 n = 388		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	68	8.2	chi1	67	7.7
chi2	-180	11.9	chi2	-176	12.2
chi3	65	10.0	chi3	68	9.7
chi4	-108	9.9	chi4	-172	16.0
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.8	1.93	C α -C β -C γ	114.5	1.46
C α -C-O	120.7	1.22	C α -C-O	120.6	0.96
C β -C α -C	110.4	1.42	C β -C α -C	110.4	1.57
C β -C γ -C δ	111.9	1.47	C β -C γ -C δ	111.3	1.74
C δ -N ϵ -C ζ	125.6	1.44	C δ -N ϵ -C ζ	124.6	1.14
C γ -C δ -N ϵ	111.7	2.29	C γ -C δ -N ϵ	111.4	1.63
N ϵ -C ζ -N η 1	121.0	1.42	N ϵ -C ζ -N η 1	120.5	0.94
N ϵ -C ζ -N η 2	119.6	1.57	N ϵ -C ζ -N η 2	119.8	0.93
N η 1-C ζ -N η 2	119.4	1.13	N η 1-C ζ -N η 2	119.8	0.92
N-C α -C	111.0	2.37	N-C α -C	111.3	2.56
N-C α -C β	111.0	1.30	N-C α -C β	110.8	1.15

ARG ptt180 n = 820			ARG ptt90 n = 814		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	65	8.3	chi1	65	7.6
chi2	-177	10.4	chi2	179	12.3
chi3	-180	10.4	chi3	177	8.7
chi4	179	17.5	chi4	88	9.8
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α _C β _C γ	114.6	1.53	C α _C β _C γ	114.8	1.43
C α _C_O	120.6	1.01	C α _C_O	120.6	0.86
C β _C α _C	110.5	1.50	C β _C α _C	110.2	1.41
C β _C γ _C δ	111.1	2.01	C β _C γ _C δ	111.0	1.95
C δ _N ϵ _C ζ	124.4	1.10	C δ _N ϵ _C ζ	124.9	0.92
C γ _C δ _N ϵ	110.7	1.99	C γ _C δ _N ϵ	111.9	2.47
N ϵ _C ζ _N η 1	120.5	0.94	N ϵ _C ζ _N η 1	120.8	0.99
N ϵ _C ζ _N η 2	119.6	0.89	N ϵ _C ζ _N η 2	119.7	0.91
N η 1_C ζ _N η 2	119.9	0.88	N η 1_C ζ _N η 2	119.5	0.70
N_C α _C	111.3	2.49	N_C α _C	110.8	2.51
N_C α _C β	111.0	1.12	N_C α _C β	111.0	1.15
ARG ptt-90 n = 726			ARG ptm160 n = 502		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	66	7.9	chi1	63	8.7
chi2	-175	12.0	chi2	-179	15.0
chi3	-177	8.9	chi3	-67	9.7
chi4	-87	11.8	chi4	165	25.7
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α _C β _C γ	114.8	1.51	C α _C β _C γ	114.6	1.63
C α _C_O	120.5	0.94	C α _C_O	120.5	0.98
C β _C α _C	110.5	1.55	C β _C α _C	110.4	1.56
C β _C γ _C δ	111.0	2.04	C β _C γ _C δ	111.7	1.80
C δ _N ϵ _C ζ	124.9	1.14	C δ _N ϵ _C ζ	124.7	1.39
C γ _C δ _N ϵ	111.7	2.66	C γ _C δ _N ϵ	111.5	2.11
N ϵ _C ζ _N η 1	120.8	1.01	N ϵ _C ζ _N η 1	120.6	1.28
N ϵ _C ζ _N η 2	119.7	1.14	N ϵ _C ζ _N η 2	119.7	1.12
N η 1_C ζ _N η 2	119.5	1.03	N η 1_C ζ _N η 2	119.7	1.00
N_C α _C	111.7	2.55	N_C α _C	110.9	2.57
N_C α _C β	111.0	1.16	N_C α _C β	111.0	1.27

ARG ptm-80 n = 215			ARG pmt100 n = 4		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	65	8.3	chi1	70	7.2
chi2	-178	14.4	chi2	-91	9.1
chi3	-66	10.3	chi3	-174	5.4
chi4	-85	10.8	chi4	98	2.0
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.6	1.28	C α -C β -C γ	115.8	0.42
C α -C-O	120.4	0.84	C α -C-O	120.6	0.28
C β -C α -C	110.3	1.38	C β -C α -C	110.8	0.49
C β -C γ -C δ	111.9	1.74	C β -C γ -C δ	112.7	0.57
C δ -N ϵ -C ζ	125.0	1.43	C δ -N ϵ -C ζ	125.1	0.12
C γ -C δ -N ϵ	112.4	2.28	C γ -C δ -N ϵ	111.2	0.92
N ϵ -C ζ -N η 1	120.7	1.21	N ϵ -C ζ -N η 1	121.0	0.29
N ϵ -C ζ -N η 2	119.9	1.46	N ϵ -C ζ -N η 2	119.6	0.27
N η 1-C ζ -N η 2	119.4	0.87	N η 1-C ζ -N η 2	119.4	0.05
N-C α -C	111.6	2.54	N-C α -C	110.2	1.44
N-C α -C β	111.0	1.31	N-C α -C β	111.4	0.42
ARG pmt170 n = 39			ARG pmt-80 n = 27		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	74	11.2	chi1	81	9.3
chi2	-79	15.4	chi2	-68	7.6
chi3	-169	10.1	chi3	-177	11.0
chi4	-169	15.1	chi4	-84	8.3
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	116.3	1.19	C α -C β -C γ	115.8	1.16
C α -C-O	120.8	0.70	C α -C-O	121.0	0.65
C β -C α -C	110.8	1.12	C β -C α -C	110.3	1.02
C β -C γ -C δ	112.7	1.26	C β -C γ -C δ	113.3	1.79
C δ -N ϵ -C ζ	124.4	1.05	C δ -N ϵ -C ζ	124.9	0.99
C γ -C δ -N ϵ	111.6	1.87	C γ -C δ -N ϵ	112.1	1.75
N ϵ -C ζ -N η 1	120.4	0.78	N ϵ -C ζ -N η 1	121.0	0.89
N ϵ -C ζ -N η 2	120.0	0.64	N ϵ -C ζ -N η 2	119.6	0.60
N η 1-C ζ -N η 2	119.6	0.56	N η 1-C ζ -N η 2	119.4	0.60
N-C α -C	110.7	2.40	N-C α -C	110.7	2.03
N-C α -C β	111.8	1.07	N-C α -C β	111.4	1.16

ARG pmm150 n = 12			ARG pmm-80 n = 19		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	76	3.2	chi1	74	12.6
chi2	-75	5.6	chi2	-76	11.2
chi3	-65	6.3	chi3	-57	8.1
chi4	152	15.4	chi4	-81	7.4
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	116.2	1.50	C α -C β -C γ	115.9	1.02
C α -C-O	120.3	0.93	C α -C-O	120.8	0.55
C β -C α -C	110.4	1.04	C β -C α -C	110.9	1.23
C β -C γ -C δ	112.4	1.15	C β -C γ -C δ	113.5	1.56
C δ -N ϵ -C ζ	125.3	2.47	C δ -N ϵ -C ζ	125.1	1.08
C γ -C δ -N ϵ	111.6	2.06	C γ -C δ -N ϵ	112.5	1.30
N ϵ -C ζ -N η 1	121.1	1.74	N ϵ -C ζ -N η 1	120.4	0.95
N ϵ -C ζ -N η 2	119.7	1.03	N ϵ -C ζ -N η 2	120.3	0.95
N η 1-C ζ -N η 2	119.2	1.39	N η 1-C ζ -N η 2	119.3	0.67
N-C α -C	109.0	1.00	N-C α -C	109.7	2.43
N-C α -C β	112.1	0.96	N-C α -C β	111.6	1.00
ARG tpp80 n = 363			ARG tpp-160 n = 496		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-178	10.3	chi1	179	9.6
chi2	65	10.7	chi2	66	10.7
chi3	60	9.5	chi3	65	9.8
chi4	84	9.1	chi4	-168	19.7
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.9	1.37	C α -C β -C γ	114.8	1.30
C α -C-O	120.5	0.75	C α -C-O	120.5	0.84
C β -C α -C	110.5	1.23	C β -C α -C	110.4	1.29
C β -C γ -C δ	113.0	1.59	C β -C γ -C δ	112.7	1.75
C δ -N ϵ -C ζ	125.0	1.05	C δ -N ϵ -C ζ	124.5	1.38
C γ -C δ -N ϵ	112.6	2.06	C γ -C δ -N ϵ	111.9	1.82
N ϵ -C ζ -N η 1	120.7	0.87	N ϵ -C ζ -N η 1	120.5	1.03
N ϵ -C ζ -N η 2	119.7	0.83	N ϵ -C ζ -N η 2	119.8	1.09
N η 1-C ζ -N η 2	119.5	0.72	N η 1-C ζ -N η 2	119.7	0.84
N-C α -C	110.8	2.03	N-C α -C	110.6	2.30
N-C α -C β	110.3	1.12	N-C α -C β	110.2	1.09

ARG tpt170 n = 825			ARG tpt90 n = 652		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-179	9.0	chi1	179	8.4
chi2	66	10.4	chi2	66	7.7
chi3	178	11.7	chi3	179	9.9
chi4	171	19.3	chi4	86	10.3
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α _C β _C γ	114.5	1.23	C α _C β _C γ	114.7	1.27
C α _C_O	120.5	0.74	C α _C_O	120.5	0.80
C β _C α _C	110.6	1.15	C β _C α _C	110.3	1.18
C β _C γ _C δ	112.2	1.71	C β _C γ _C δ	112.1	1.67
C δ _N ϵ _C ζ	124.5	1.14	C δ _N ϵ _C ζ	124.8	0.92
C γ _C δ _N ϵ	110.9	1.87	C γ _C δ _N ϵ	111.9	2.27
N ϵ _C ζ _N η 1	120.5	0.94	N ϵ _C ζ _N η 1	120.8	0.97
N ϵ _C ζ _N η 2	119.7	0.88	N ϵ _C ζ _N η 2	119.7	0.89
N η 1_C ζ _N η 2	119.8	0.86	N η 1_C ζ _N η 2	119.5	0.82
N_C α _C	110.7	1.99	N_C α _C	111.4	2.06
N_C α _C β	110.2	1.19	N_C α _C β	110.2	1.09
ARG tpt-90 n = 365			ARG tpm170 n = 110		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	179	8.4	chi1	178	8.1
chi2	67	10.8	chi2	70	10.9
chi3	-180	8.8	chi3	-85	12.8
chi4	-89	12.2	chi4	172	18.6
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α _C β _C γ	114.7	1.25	C α _C β _C γ	115.6	1.26
C α _C_O	120.5	0.72	C α _C_O	120.6	0.80
C β _C α _C	110.6	1.20	C β _C α _C	110.6	1.33
C β _C γ _C δ	112.4	1.62	C β _C γ _C δ	112.8	2.17
C δ _N ϵ _C ζ	124.9	1.15	C δ _N ϵ _C ζ	124.7	2.25
C γ _C δ _N ϵ	111.1	2.52	C γ _C δ _N ϵ	112.0	2.15
N ϵ _C ζ _N η 1	120.7	1.03	N ϵ _C ζ _N η 1	120.5	1.05
N ϵ _C ζ _N η 2	119.7	1.05	N ϵ _C ζ _N η 2	119.8	0.90
N η 1_C ζ _N η 2	119.6	0.73	N η 1_C ζ _N η 2	119.7	0.74
N_C α _C	110.9	2.15	N_C α _C	111.1	1.43
N_C α _C β	110.2	1.19	N_C α _C β	109.9	1.12

ARG tpm-80 n = 20			ARG ttp80 n = 1896		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-177	5.2	chi1	-177	8.2
chi2	79	8.2	chi2	180	13.4
chi3	-80	10.4	chi3	63	9.9
chi4	-80	9.1	chi4	83	9.6
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α _C β _C γ	115.2	1.38	C α _C β _C γ	113.7	1.50
C α _C_O	120.7	1.05	C α _C_O	120.7	0.80
C β _C α _C	110.3	1.13	C β _C α _C	110.0	1.21
C β _C γ _C δ	113.0	1.22	C β _C γ _C δ	112.1	1.53
C δ _N ϵ _C ζ	125.2	1.19	C δ _N ϵ _C ζ	124.9	1.04
C γ _C δ _N ϵ	113.7	2.21	C γ _C δ _N ϵ	112.6	1.94
N ϵ _C ζ _N η 1	120.6	0.96	N ϵ _C ζ _N η 1	120.7	0.95
N ϵ _C ζ _N η 2	120.1	0.92	N ϵ _C ζ _N η 2	119.8	0.86
N η 1_C ζ _N η 2	119.3	0.63	N η 1_C ζ _N η 2	119.5	0.75
N_C α _C	110.8	1.48	N_C α _C	110.7	2.06
N_C α _C β	109.8	1.13	N_C α _C β	110.4	1.20
ARG ttp-110 n = 623			ARG ttp-170 n = 1533		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-175	8.5	chi1	-175	9.3
chi2	177	13.0	chi2	179	13.2
chi3	65	10.7	chi3	67	9.0
chi4	-113	9.9	chi4	-171	17.3
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α _C β _C γ	113.8	1.63	C α _C β _C γ	113.7	1.65
C α _C_O	120.6	0.80	C α _C_O	120.6	0.76
C β _C α _C	110.2	1.23	C β _C α _C	110.0	1.24
C β _C γ _C δ	112.0	1.75	C β _C γ _C δ	111.6	1.68
C δ _N ϵ _C ζ	125.4	1.36	C δ _N ϵ _C ζ	124.5	1.17
C γ _C δ _N ϵ	111.9	2.16	C γ _C δ _N ϵ	111.5	1.58
N ϵ _C ζ _N η 1	121.1	1.28	N ϵ _C ζ _N η 1	120.5	0.90
N ϵ _C ζ _N η 2	119.5	1.16	N ϵ _C ζ _N η 2	119.8	0.88
N η 1_C ζ _N η 2	119.4	0.89	N η 1_C ζ _N η 2	119.8	0.70
N_C α _C	110.7	2.18	N_C α _C	110.5	2.21
N_C α _C β	110.3	1.29	N_C α _C β	110.4	1.31

ARG ttt180 n = 2339			ARG ttt90 n = 1057		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-176	9.1	chi1	-176	9.3
chi2	176	11.2	chi2	176	10.8
chi3	179	11.5	chi3	176	9.6
chi4	179	18.7	chi4	87	10.8
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α _C β _C γ	113.5	1.78	C α _C β _C γ	113.9	1.70
C α _C_O	120.6	0.81	C α _C_O	120.6	0.79
C β _C α _C	110.2	1.17	C β _C α _C	110.2	1.25
C β _C γ _C δ	111.4	2.19	C β _C γ _C δ	111.3	2.08
C δ _N ϵ _C ζ	124.3	1.19	C δ _N ϵ _C ζ	124.8	1.01
C γ _C δ _N ϵ	110.7	1.92	C γ _C δ _N ϵ	111.6	2.62
N ϵ _C ζ _N η 1	120.4	0.90	N ϵ _C ζ _N η 1	120.7	1.02
N ϵ _C ζ _N η 2	119.6	0.92	N ϵ _C ζ _N η 2	119.6	1.00
N η 1_C ζ _N η 2	120.0	0.81	N η 1_C ζ _N η 2	119.6	0.74
N_C α _C	110.5	2.41	N_C α _C	110.5	2.40
N_C α _C β	110.2	1.39	N_C α _C β	110.4	1.37
ARG ttt-90 n = 1380			ARG ttm110 n = 725		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-177	9.4	chi1	-175	9.0
chi2	178	11.5	chi2	179	9.5
chi3	-178	9.9	chi3	-64	10.7
chi4	-90	12.5	chi4	113	9.8
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α _C β _C γ	114.0	1.62	C α _C β _C γ	113.9	1.64
C α _C_O	120.5	0.79	C α _C_O	120.6	0.78
C β _C α _C	110.3	1.26	C β _C α _C	110.3	1.23
C β _C γ _C δ	110.9	2.08	C β _C γ _C δ	112.2	1.69
C δ _N ϵ _C ζ	124.8	1.17	C δ _N ϵ _C ζ	125.3	1.23
C γ _C δ _N ϵ	111.8	2.58	C γ _C δ _N ϵ	111.6	1.93
N ϵ _C ζ _N η 1	120.8	1.08	N ϵ _C ζ _N η 1	121.0	1.24
N ϵ _C ζ _N η 2	119.6	1.01	N ϵ _C ζ _N η 2	119.5	1.12
N η 1_C ζ _N η 2	119.6	0.87	N η 1_C ζ _N η 2	119.4	0.82
N_C α _C	110.4	2.30	N_C α _C	110.5	2.14
N_C α _C β	110.2	1.31	N_C α _C β	110.4	1.24

ARG t_{tm}170 n = 1317			ARG t_{tm}-80 n = 1504		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-177	9.9	chi1	-174	9.4
chi2	177	12.4	chi2	179	9.9
chi3	-68	9.9	chi3	-65	10.6
chi4	171	17.6	chi4	-85	9.7
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	113.8	1.74	C α -C β -C γ	113.7	1.66
C α -C-O	120.6	0.81	C α -C-O	120.5	0.79
C β -C α -C	110.1	1.16	C β -C α -C	110.2	1.24
C β -C γ -C δ	111.5	1.83	C β -C γ -C δ	112.0	1.64
C δ -N ϵ -C ζ	124.4	1.17	C δ -N ϵ -C ζ	124.9	1.30
C γ -C δ -N ϵ	111.3	1.65	C γ -C δ -N ϵ	112.4	2.03
N ϵ -C ζ -N η 1	120.5	0.96	N ϵ -C ζ -N η 1	120.7	1.02
N ϵ -C ζ -N η 2	119.7	0.93	N ϵ -C ζ -N η 2	119.7	1.04
N η 1-C ζ -N η 2	119.7	0.83	N η 1-C ζ -N η 2	119.5	0.76
N-C α -C	110.3	2.38	N-C α -C	110.6	2.26
N-C α -C β	110.3	1.34	N-C α -C β	110.4	1.36
ARG t_{mt}170 n = 104			ARG t_{mt}90 n = 23		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-174	12.3	chi1	-178	9.2
chi2	-91	12.7	chi2	-94	9.1
chi3	-174	9.4	chi3	-178	11.2
chi4	-171	17.5	chi4	87	12.0
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	115.0	1.33	C α -C β -C γ	115.2	1.49
C α -C-O	120.6	0.74	C α -C-O	120.6	0.98
C β -C α -C	110.9	1.07	C β -C α -C	110.5	1.33
C β -C γ -C δ	112.7	1.72	C β -C γ -C δ	112.9	2.34
C δ -N ϵ -C ζ	124.5	0.90	C δ -N ϵ -C ζ	125.1	1.26
C γ -C δ -N ϵ	110.7	1.62	C γ -C δ -N ϵ	111.4	2.85
N ϵ -C ζ -N η 1	120.7	1.03	N ϵ -C ζ -N η 1	120.9	1.86
N ϵ -C ζ -N η 2	119.6	0.80	N ϵ -C ζ -N η 2	119.6	1.46
N η 1-C ζ -N η 2	119.7	0.72	N η 1-C ζ -N η 2	119.4	0.74
N-C α -C	108.5	3.17	N-C α -C	110.3	1.54
N-C α -C β	110.0	1.25	N-C α -C β	109.9	1.13

ARG tmt-80 n = 62			ARG tmm160 n = 92		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-174	10.8	chi1	-172	10.9
chi2	-93	11.4	chi2	-90	11.1
chi3	-178	10.0	chi3	-61	11.3
chi4	-85	11.5	chi4	164	18.6
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α _C β _C γ	114.7	1.34	C α _C β _C γ	114.8	1.32
C α _C_O	120.5	0.77	C α _C_O	120.6	0.80
C β _C α _C	111.3	1.33	C β _C α _C	111.3	1.11
C β _C γ _C δ	112.5	1.92	C β _C γ _C δ	112.6	1.82
C δ _N ϵ _C ζ	124.7	1.12	C δ _N ϵ _C ζ	124.6	1.19
C γ _C δ _N ϵ	111.2	2.14	C γ _C δ _N ϵ	111.9	1.92
N ϵ _C ζ _N η 1	120.6	0.91	N ϵ _C ζ _N η 1	120.7	1.00
N ϵ _C ζ _N η 2	119.7	0.90	N ϵ _C ζ _N η 2	119.7	0.89
N η 1_C ζ _N η 2	119.6	0.63	N η 1_C ζ _N η 2	119.6	0.81
N_C α _C	110.1	2.45	N_C α _C	110.0	2.05
N_C α _C β	110.1	1.03	N_C α _C β	110.1	1.13
ARG tmm-80 n = 71			ARG mpp80 n = 54		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-174	9.2	chi1	-77	11.8
chi2	-86	8.8	chi2	82	12.0
chi3	-56	10.7	chi3	58	7.4
chi4	-82	8.5	chi4	85	10.1
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α _C β _C γ	115.3	1.32	C α _C β _C γ	115.5	1.72
C α _C_O	120.6	0.78	C α _C_O	120.4	1.09
C β _C α _C	111.1	1.01	C β _C α _C	109.2	1.98
C β _C γ _C δ	113.7	2.29	C β _C γ _C δ	113.6	1.62
C δ _N ϵ _C ζ	124.9	1.25	C δ _N ϵ _C ζ	125.0	1.16
C γ _C δ _N ϵ	112.6	1.89	C γ _C δ _N ϵ	113.1	2.28
N ϵ _C ζ _N η 1	120.9	1.10	N ϵ _C ζ _N η 1	120.8	1.17
N ϵ _C ζ _N η 2	119.7	0.92	N ϵ _C ζ _N η 2	119.8	1.13
N η 1_C ζ _N η 2	119.4	0.72	N η 1_C ζ _N η 2	119.4	0.73
N_C α _C	109.7	1.70	N_C α _C	109.7	2.54
N_C α _C β	110.1	1.01	N_C α _C β	111.5	1.26

ARG mpp-170 n = 64			ARG mpt180 n = 245		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-79	12.9	chi1	-85	8.0
chi2	82	17.4	chi2	69	13.1
chi3	65	7.4	chi3	174	9.4
chi4	-167	16.4	chi4	174	16.8
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α _C β _C γ	114.6	1.43	C α _C β _C γ	114.8	1.42
C α _C_O	120.5	0.68	C α _C_O	120.6	0.86
C β _C α _C	109.7	1.57	C β _C α _C	109.5	1.66
C β _C γ _C δ	112.7	1.74	C β _C γ _C δ	113.0	1.81
C δ _N ϵ _C ζ	124.5	1.19	C δ _N ϵ _C ζ	124.4	1.45
C γ _C δ _N ϵ	111.5	1.34	C γ _C δ _N ϵ	110.7	2.00
N ϵ _C ζ _N η 1	120.6	1.06	N ϵ _C ζ _N η 1	120.4	1.02
N ϵ _C ζ _N η 2	119.7	0.76	N ϵ _C ζ _N η 2	119.7	0.92
N η 1_C ζ _N η 2	119.7	0.70	N η 1_C ζ _N η 2	119.8	0.88
N_C α _C	110.0	3.12	N_C α _C	110.0	2.75
N_C α _C β	111.4	1.11	N_C α _C β	111.1	1.15
ARG mpt90 n = 46			ARG mpt-90 n = 85		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-76	12.9	chi1	-79	13.9
chi2	85	13.6	chi2	75	16.3
chi3	170	9.7	chi3	178	9.6
chi4	93	11.2	chi4	-88	13.7
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α _C β _C γ	114.6	1.63	C α _C β _C γ	114.9	1.26
C α _C_O	120.4	0.64	C α _C_O	120.4	0.75
C β _C α _C	109.3	1.43	C β _C α _C	110.0	1.55
C β _C γ _C δ	112.5	1.55	C β _C γ _C δ	112.9	2.30
C δ _N ϵ _C ζ	125.1	0.85	C δ _N ϵ _C ζ	124.9	1.00
C γ _C δ _N ϵ	111.0	2.03	C γ _C δ _N ϵ	111.6	2.53
N ϵ _C ζ _N η 1	121.1	0.91	N ϵ _C ζ _N η 1	120.6	1.07
N ϵ _C ζ _N η 2	119.4	0.68	N ϵ _C ζ _N η 2	119.8	0.83
N η 1_C ζ _N η 2	119.5	0.59	N η 1_C ζ _N η 2	119.6	0.67
N_C α _C	110.0	2.68	N_C α _C	110.4	2.71
N_C α _C β	111.3	1.24	N_C α _C β	110.9	1.02

ARG mtp180 n = 2504			ARG mtp85 n = 1857		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-66	8.1	chi1	-66	8.6
chi2	179	13.0	chi2	178	11.2
chi3	66	9.1	chi3	65	9.7
chi4	-172	16.5	chi4	88	11.0
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α _C β _C γ	113.2	1.79	C α _C β _C γ	113.3	1.82
C α _C_O	120.5	0.83	C α _C_O	120.5	0.91
C β _C α _C	110.0	1.65	C β _C α _C	110.1	1.68
C β _C γ _C δ	111.7	1.81	C β _C γ _C δ	112.1	1.71
C δ _N ϵ _C ζ	124.4	1.21	C δ _N ϵ _C ζ	124.9	1.20
C γ _C δ _N ϵ	111.6	1.56	C γ _C δ _N ϵ	112.3	1.99
N ϵ _C ζ _N η 1	120.4	1.00	N ϵ _C ζ _N η 1	120.8	1.05
N ϵ _C ζ _N η 2	119.8	0.97	N ϵ _C ζ _N η 2	119.7	1.04
N η 1_C ζ _N η 2	119.8	0.77	N η 1_C ζ _N η 2	119.5	0.81
N_C α _C	111.4	2.42	N_C α _C	111.1	2.41
N_C α _C β	110.5	1.05	N_C α _C β	110.6	1.05
ARG mtp-110 n = 470			ARG mtt180 n = 4592		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-65	8.1	chi1	-67	7.8
chi2	179	10.8	chi2	180	11.0
chi3	66	11.6	chi3	-179	10.7
chi4	-110	9.6	chi4	177	17.9
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α _C β _C γ	113.4	1.66	C α _C β _C γ	112.9	1.75
C α _C_O	120.4	0.95	C α _C_O	120.4	0.85
C β _C α _C	110.1	1.68	C β _C α _C	110.0	1.66
C β _C γ _C δ	112.4	1.63	C β _C γ _C δ	111.5	2.02
C δ _N ϵ _C ζ	125.3	2.05	C δ _N ϵ _C ζ	124.4	1.10
C γ _C δ _N ϵ	111.7	1.88	C γ _C δ _N ϵ	110.6	1.82
N ϵ _C ζ _N η 1	121.1	1.20	N ϵ _C ζ _N η 1	120.4	0.89
N ϵ _C ζ _N η 2	119.4	1.29	N ϵ _C ζ _N η 2	119.6	0.90
N η 1_C ζ _N η 2	119.5	0.90	N η 1_C ζ _N η 2	119.9	0.79
N_C α _C	111.1	2.59	N_C α _C	111.6	2.33
N_C α _C β	110.7	1.05	N_C α _C β	110.6	1.05

ARG mtt90 n = 2460			ARG mtt-85 n = 2843		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-68	7.5	chi1	-67	7.8
chi2	180	13.5	chi2	-179	10.6
chi3	179	10.6	chi3	-176	9.2
chi4	91	15.1	chi4	-89	11.7
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	113.3	1.72	C α -C β -C γ	113.5	1.70
C α -C-O	120.4	0.80	C α -C-O	120.4	0.82
C β -C α -C	109.9	1.73	C β -C α -C	109.8	1.65
C β -C γ -C δ	111.5	2.04	C β -C γ -C δ	111.4	1.97
C δ -N ϵ -C ζ	124.9	1.14	C δ -N ϵ -C ζ	124.8	1.05
C γ -C δ -N ϵ	111.0	2.49	C γ -C δ -N ϵ	111.4	2.43
N ϵ -C ζ -N η 1	120.9	1.07	N ϵ -C ζ -N η 1	120.8	1.02
N ϵ -C ζ -N η 2	119.5	1.06	N ϵ -C ζ -N η 2	119.6	0.93
N η 1-C ζ -N η 2	119.6	0.80	N η 1-C ζ -N η 2	119.6	0.77
N-C α -C	111.4	2.40	N-C α -C	111.4	2.30
N-C α -C β	110.6	1.12	N-C α -C β	110.6	1.04
ARG mtm110 n = 781			ARG mtm180 n = 2407		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-68	8.2	chi1	-66	8.1
chi2	-177	9.7	chi2	179	12.7
chi3	-69	10.2	chi3	-67	8.8
chi4	113	10.6	chi4	173	15.2
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	113.1	1.81	C α -C β -C γ	113.3	1.63
C α -C-O	120.4	0.90	C α -C-O	120.5	0.89
C β -C α -C	110.1	1.76	C β -C α -C	109.9	1.62
C β -C γ -C δ	112.4	1.72	C β -C γ -C δ	111.6	1.68
C δ -N ϵ -C ζ	125.3	1.52	C δ -N ϵ -C ζ	124.4	1.08
C γ -C δ -N ϵ	112.1	1.88	C γ -C δ -N ϵ	111.4	1.69
N ϵ -C ζ -N η 1	121.1	1.28	N ϵ -C ζ -N η 1	120.4	0.90
N ϵ -C ζ -N η 2	119.4	1.12	N ϵ -C ζ -N η 2	119.8	0.88
N η 1-C ζ -N η 2	119.5	0.92	N η 1-C ζ -N η 2	119.8	0.77
N-C α -C	111.7	2.44	N-C α -C	111.3	2.63
N-C α -C β	110.7	1.04	N-C α -C β	110.5	1.05

ARG mtm-85 n = 2848			ARG mmp80 n = 164		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-68	8.1	chi1	-63	6.7
chi2	-172	9.3	chi2	-75	12.7
chi3	-64	9.5	chi3	74	11.7
chi4	-88	8.9	chi4	78	6.9
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α _C β _C γ	113.5	1.56	C α _C β _C γ	114.8	1.39
C α _C_O	120.5	0.81	C α _C_O	120.4	0.95
C β _C α _C	110.0	1.49	C β _C α _C	109.8	1.49
C β _C γ _C δ	112.0	1.57	C β _C γ _C δ	113.4	1.62
C δ _N ϵ _C ζ	124.9	1.17	C δ _N ϵ _C ζ	125.0	1.16
C γ _C δ _N ϵ	112.7	1.96	C γ _C δ _N ϵ	113.5	2.23
N ϵ _C ζ _N η 1	120.8	1.03	N ϵ _C ζ _N η 1	120.6	0.99
N ϵ _C ζ _N η 2	119.7	1.00	N ϵ _C ζ _N η 2	120.0	0.86
N η 1_C ζ _N η 2	119.5	0.78	N η 1_C ζ _N η 2	119.5	0.64
N_C α _C	111.3	1.97	N_C α _C	111.4	1.82
N_C α _C β	111.1	1.03	N_C α _C β	110.9	0.93
ARG mmp-170 n = 123			ARG mmt180 n = 1203		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-64	7.2	chi1	-62	9.1
chi2	-65	14.3	chi2	-68	12.9
chi3	86	9.7	chi3	-177	11.3
chi4	-167	19.8	chi4	-176	17.4
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α _C β _C γ	115.5	1.27	C α _C β _C γ	114.5	1.38
C α _C_O	120.4	0.99	C α _C_O	120.4	0.87
C β _C α _C	109.5	1.52	C β _C α _C	109.4	1.62
C β _C γ _C δ	112.8	1.74	C β _C γ _C δ	112.0	1.71
C δ _N ϵ _C ζ	124.8	1.32	C δ _N ϵ _C ζ	124.4	1.19
C γ _C δ _N ϵ	111.5	1.61	C γ _C δ _N ϵ	111.0	1.83
N ϵ _C ζ _N η 1	120.5	1.21	N ϵ _C ζ _N η 1	120.5	0.87
N ϵ _C ζ _N η 2	119.8	1.10	N ϵ _C ζ _N η 2	119.7	0.87
N η 1_C ζ _N η 2	119.7	1.14	N η 1_C ζ _N η 2	119.8	0.74
N_C α _C	111.0	2.15	N_C α _C	111.2	2.57
N_C α _C β	111.1	1.12	N_C α _C β	110.7	1.07

ARG mmt90 n = 567			ARG mmt-90 n = 1428		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-61	8.8	chi1	-64	6.6
chi2	-68	12.5	chi2	-69	8.1
chi3	179	10.4	chi3	-175	7.7
chi4	90	12.9	chi4	-91	11.1
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.6	1.39	C α -C β -C γ	114.5	1.43
C α -C-O	120.5	0.87	C α -C-O	120.5	0.85
C β -C α -C	109.5	1.65	C β -C α -C	109.6	1.64
C β -C γ -C δ	112.2	1.61	C β -C γ -C δ	112.0	1.67
C δ -N ϵ -C ζ	124.9	1.24	C δ -N ϵ -C ζ	124.9	1.00
C γ -C δ -N ϵ	111.6	2.49	C γ -C δ -N ϵ	111.8	2.28
N ϵ -C ζ -N η 1	120.8	1.22	N ϵ -C ζ -N η 1	120.9	1.00
N ϵ -C ζ -N η 2	119.6	1.09	N ϵ -C ζ -N η 2	119.6	0.88
N η 1-C ζ -N η 2	119.6	0.72	N η 1-C ζ -N η 2	119.4	0.82
N-C α -C	111.4	2.72	N-C α -C	110.1	2.67
N-C α -C β	110.7	1.08	N-C α -C β	110.9	1.11
ARG mmm160 n = 951			ARG mmm-85 n = 1022		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-62	9.2	chi1	-63	9.2
chi2	-66	13.7	chi2	-68	10.9
chi3	-64	9.9	chi3	-61	9.2
chi4	163	24.2	chi4	-86	10.1
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.5	1.60	C α -C β -C γ	114.6	1.52
C α -C-O	120.4	0.88	C α -C-O	120.5	0.88
C β -C α -C	109.8	1.54	C β -C α -C	109.7	1.54
C β -C γ -C δ	112.5	1.73	C β -C γ -C δ	112.8	1.62
C δ -N ϵ -C ζ	124.6	1.31	C δ -N ϵ -C ζ	125.0	1.09
C γ -C δ -N ϵ	111.9	1.89	C γ -C δ -N ϵ	112.5	2.26
N ϵ -C ζ -N η 1	120.6	1.17	N ϵ -C ζ -N η 1	120.9	1.01
N ϵ -C ζ -N η 2	119.8	1.11	N ϵ -C ζ -N η 2	119.6	0.96
N η 1-C ζ -N η 2	119.6	0.77	N η 1-C ζ -N η 2	119.5	0.83
N-C α -C	111.4	2.43	N-C α -C	111.3	2.64
N-C α -C β	110.7	1.18	N-C α -C β	110.8	1.12

Table S21: LYS Central Values

LYS pttt n = 25			LYS ptpp n = 89		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	64	7.5	chi1	65	6.8
chi2	90	8.3	chi2	178	8.1
chi3	176	11.9	chi3	72	9.7
chi4	179	7.4	chi4	66	8.1
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	116.1	1.24	C α -C β -C γ	114.6	1.20
C α -C-O	120.4	0.70	C α -C-O	120.2	0.97
C β -C α -C	111.3	1.43	C β -C α -C	110.1	1.28
C β -C γ -C δ	112.2	1.70	C β -C γ -C δ	112.2	1.29
C δ -C ϵ -N ζ	111.3	1.82	C δ -C ϵ -N ζ	112.5	1.72
C γ -C δ -C ϵ	110.6	1.94	C γ -C δ -C ϵ	112.7	1.34
N-C α -C	111.7	2.09	N-C α -C	111.9	2.03
N-C α -C β	111.6	1.19	N-C α -C β	110.9	1.31
LYS ptpt n = 148			LYS pttp n = 240		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	65	8.2	chi1	68	8.3
chi2	179	11.8	chi2	-179	10.4
chi3	73	10.4	chi3	178	11.2
chi4	175	11.2	chi4	67	12.3
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.7	1.64	C α -C β -C γ	114.8	1.43
C α -C-O	120.5	0.85	C α -C-O	120.4	0.90
C β -C α -C	110.5	1.43	C β -C α -C	110.4	1.45
C β -C γ -C δ	112.1	1.65	C β -C γ -C δ	110.9	1.68
C δ -C ϵ -N ζ	111.4	2.10	C δ -C ϵ -N ζ	112.4	2.34
C γ -C δ -C ϵ	112.4	1.85	C γ -C δ -C ϵ	111.7	1.42
N-C α -C	111.2	2.94	N-C α -C	111.8	2.55
N-C α -C β	111.1	1.32	N-C α -C β	111.0	1.09
LYS pttt n = 1385			LYS pttm n = 268		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	65	7.6	chi1	64	6.9
chi2	-178	8.7	chi2	-178	9.1
chi3	-179	9.7	chi3	-179	10.0
chi4	-180	9.6	chi4	-67	11.7
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.8	1.46	C α -C β -C γ	114.9	1.47
C α -C-O	120.4	0.95	C α -C-O	120.4	0.98
C β -C α -C	110.4	1.38	C β -C α -C	110.4	1.45
C β -C γ -C δ	110.8	1.79	C β -C γ -C δ	110.7	2.05
C δ -C ϵ -N ζ	111.3	2.00	C δ -C ϵ -N ζ	112.3	2.37
C γ -C δ -C ϵ	111.0	1.62	C γ -C δ -C ϵ	111.9	1.51
N-C α -C	111.3	2.77	N-C α -C	112.0	2.55
N-C α -C β	111.1	1.10	N-C α -C β	111.0	1.16

LYS ptmt n = 187			LYS ptmm n = 80		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	67	8.2	chi1	67	8.4
chi2	-176	12.0	chi2	-178	10.0
chi3	-71	11.7	chi3	-70	9.8
chi4	-176	10.3	chi4	-66	7.0
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.5	1.57	C α -C β -C γ	114.5	1.30
C α -C-O	120.5	0.97	C α -C-O	120.6	1.03
C β -C α -C	110.4	1.61	C β -C α -C	109.9	1.49
C β -C γ -C δ	112.1	1.58	C β -C γ -C δ	112.3	1.44
C δ -C ϵ -N ζ	111.5	2.11	C δ -C ϵ -N ζ	113.0	1.78
C γ -C δ -C ϵ	112.4	1.87	C γ -C δ -C ϵ	113.0	1.15
N-C α -C	111.0	2.72	N-C α -C	110.5	2.70
N-C α -C β	111.0	1.10	N-C α -C β	110.8	1.21
LYS pmtt n = 10			LYS tppp n = 37		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	73	8.4	chi1	-178	11.5
chi2	-74	10.5	chi2	62	10.1
chi3	-168	10.6	chi3	66	7.8
chi4	-175	10.7	chi4	68	11.3
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	116.4	1.64	C α -C β -C γ	115.1	1.50
C α -C-O	120.8	0.55	C α -C-O	120.7	0.87
C β -C α -C	110.4	1.28	C β -C α -C	110.3	0.75
C β -C γ -C δ	112.6	2.23	C β -C γ -C δ	113.5	1.87
C δ -C ϵ -N ζ	111.7	2.25	C δ -C ϵ -N ζ	113.0	1.70
C γ -C δ -C ϵ	111.3	1.31	C γ -C δ -C ϵ	113.4	1.74
N-C α -C	110.0	2.38	N-C α -C	110.9	1.93
N-C α -C β	112.1	2.13	N-C α -C β	110.2	1.12
LYS tppt n = 272			LYS tptp n = 409		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-178	7.9	chi1	-180	8.0
chi2	63	8.9	chi2	67	10.4
chi3	70	9.2	chi3	174	13.6
chi4	177	9.4	chi4	66	13.0
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.8	1.23	C α -C β -C γ	114.8	1.34
C α -C-O	120.5	0.74	C α -C-O	120.5	0.83
C β -C α -C	110.6	1.10	C β -C α -C	110.2	1.23
C β -C γ -C δ	113.2	1.54	C β -C γ -C δ	112.1	1.49
C δ -C ϵ -N ζ	111.2	1.84	C δ -C ϵ -N ζ	112.7	1.95
C γ -C δ -C ϵ	112.4	1.45	C γ -C δ -C ϵ	112.2	1.31
N-C α -C	110.6	2.08	N-C α -C	110.3	2.08
N-C α -C β	110.3	1.07	N-C α -C β	110.3	1.12

LYS tptt n = 1228			LYS tptm n = 197		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-179	9.1	chi1	-178	7.6
chi2	69	9.0	chi2	67	9.7
chi3	176	10.1	chi3	-179	11.4
chi4	177	12.3	chi4	-66	13.4
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.8	1.31	C α -C β -C γ	115.0	1.45
C α -C-O	120.5	0.78	C α -C-O	120.4	0.77
C β -C α -C	110.4	1.22	C β -C α -C	110.4	1.10
C β -C γ -C δ	112.0	1.60	C β -C γ -C δ	111.9	1.41
C δ -C ϵ -N ζ	111.1	2.24	C δ -C ϵ -N ζ	112.5	2.06
C γ -C δ -C ϵ	111.0	1.47	C γ -C δ -C ϵ	111.9	1.35
N-C α -C	110.7	2.15	N-C α -C	110.3	2.06
N-C α -C β	110.2	1.11	N-C α -C β	110.3	1.14
LYS ttpp n = 229			LYS ttpt n = 883		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-178	8.6	chi1	-178	8.1
chi2	174	14.5	chi2	175	12.1
chi3	72	11.2	chi3	73	11.9
chi4	68	10.5	chi4	175	11.3
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	113.7	1.58	C α -C β -C γ	113.8	1.64
C α -C-O	120.6	0.78	C α -C-O	120.6	0.75
C β -C α -C	110.1	1.26	C β -C α -C	110.1	1.18
C β -C γ -C δ	112.1	1.68	C β -C γ -C δ	112.1	1.47
C δ -C ϵ -N ζ	112.8	2.35	C δ -C ϵ -N ζ	111.1	2.07
C γ -C δ -C ϵ	112.8	1.57	C γ -C δ -C ϵ	112.2	1.58
N-C α -C	110.2	2.48	N-C α -C	110.3	2.32
N-C α -C β	110.4	1.47	N-C α -C β	110.2	1.32
LYS tttp n = 1233			LYS tttt n = 5043		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-178	8.1	chi1	-175	8.2
chi2	175	9.9	chi2	177	8.7
chi3	174	10.8	chi3	180	9.2
chi4	66	12.8	chi4	-180	10.3
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	113.9	1.52	C α -C β -C γ	113.9	1.52
C α -C-O	120.6	0.75	C α -C-O	120.6	0.78
C β -C α -C	110.2	1.09	C β -C α -C	110.2	1.14
C β -C γ -C δ	111.1	1.61	C β -C γ -C δ	111.1	1.74
C δ -C ϵ -N ζ	112.3	1.98	C δ -C ϵ -N ζ	111.2	1.99
C γ -C δ -C ϵ	111.8	1.35	C γ -C δ -C ϵ	111.0	1.54
N-C α -C	110.7	2.22	N-C α -C	110.5	2.28
N-C α -C β	110.4	1.14	N-C α -C β	110.3	1.21

LYS tttm n = 1176			LYS ttmp n = 9		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-176	8.1	chi1	-174	4.2
chi2	178	9.7	chi2	-179	8.5
chi3	-176	10.5	chi3	-96	18.6
chi4	-67	12.1	chi4	77	25.2
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	113.9	1.60	C α -C β -C γ	113.2	1.24
C α -C-O	120.6	0.82	C α -C-O	120.6	0.50
C β -C α -C	110.3	1.14	C β -C α -C	110.3	1.62
C β -C γ -C δ	111.0	1.70	C β -C γ -C δ	112.6	1.74
C δ -C ϵ -N ζ	112.3	1.97	C δ -C ϵ -N ζ	114.0	1.36
C γ -C δ -C ϵ	111.8	1.47	C γ -C δ -C ϵ	112.9	0.74
N-C α -C	110.5	2.11	N-C α -C	110.8	1.51
N-C α -C β	110.4	1.16	N-C α -C β	111.4	1.04
LYS ttmt n = 674			LYS ttmm n = 197		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-175	9.4	chi1	-174	8.5
chi2	-177	10.8	chi2	180	9.9
chi3	-73	11.7	chi3	-71	11.9
chi4	-175	11.5	chi4	-67	11.4
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	113.7	1.55	C α -C β -C γ	113.6	1.46
C α -C-O	120.6	0.86	C α -C-O	120.6	0.82
C β -C α -C	110.2	1.18	C β -C α -C	110.2	1.29
C β -C γ -C δ	112.2	1.52	C β -C γ -C δ	112.1	1.57
C δ -C ϵ -N ζ	110.9	2.32	C δ -C ϵ -N ζ	112.6	2.30
C γ -C δ -C ϵ	112.2	1.65	C γ -C δ -C ϵ	112.5	1.56
N-C α -C	110.3	2.33	N-C α -C	110.2	2.45
N-C α -C β	110.3	1.25	N-C α -C β	110.3	1.39
LYS tmtp n = 11			LYS tmmt n = 82		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-177	7.5	chi1	-173	8.5
chi2	-98	8.3	chi2	-91	9.6
chi3	-178	12.4	chi3	-177	11.7
chi4	65	7.8	chi4	-179	10.7
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.6	1.22	C α -C β -C γ	114.5	1.14
C α -C-O	120.8	0.41	C α -C-O	120.8	0.61
C β -C α -C	110.5	0.70	C β -C α -C	110.9	1.09
C β -C γ -C δ	112.0	1.51	C β -C γ -C δ	111.9	1.44
C δ -C ϵ -N ζ	113.1	3.03	C δ -C ϵ -N ζ	110.8	2.07
C γ -C δ -C ϵ	111.8	1.20	C γ -C δ -C ϵ	111.0	1.37
N-C α -C	110.1	3.05	N-C α -C	110.2	1.89
N-C α -C β	110.4	0.87	N-C α -C β	110.1	0.81

LYS tmtm n = 20			LYS tmmt n = 33		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-172	10.4	chi1	-179	10.0
chi2	-91	5.6	chi2	-93	12.1
chi3	-173	15.1	chi3	-70	8.9
chi4	-65	7.7	chi4	-180	10.2
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	115.5	1.62	C α -C β -C γ	115.0	1.85
C α -C-O	120.6	0.65	C α -C-O	120.5	0.88
C β -C α -C	111.0	0.85	C β -C α -C	110.7	1.12
C β -C γ -C δ	112.2	1.23	C β -C γ -C δ	113.5	1.73
C δ -C ϵ -N ζ	112.7	1.69	C δ -C ϵ -N ζ	110.8	2.86
C γ -C δ -C ϵ	112.0	1.55	C γ -C δ -C ϵ	112.4	2.86
N-C α -C	110.1	1.72	N-C α -C	110.0	2.15
N-C α -C β	109.8	0.79	N-C α -C β	109.9	1.08
LYS tmmm n = 8			LYS mppt n = 31		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-178	11.9	chi1	-83	8.9
chi2	-82	7.5	chi2	74	14.9
chi3	-63	8.0	chi3	69	8.0
chi4	-64	4.9	chi4	177	5.4
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	116.2	2.69	C α -C β -C γ	115.1	1.99
C α -C-O	120.3	0.85	C α -C-O	120.4	0.89
C β -C α -C	111.2	1.13	C β -C α -C	109.9	1.23
C β -C γ -C δ	114.9	1.37	C β -C γ -C δ	113.7	1.56
C δ -C ϵ -N ζ	113.1	1.48	C δ -C ϵ -N ζ	111.4	1.92
C γ -C δ -C ϵ	115.0	1.62	C γ -C δ -C ϵ	112.2	1.37
N-C α -C	109.0	2.01	N-C α -C	108.8	1.97
N-C α -C β	109.5	1.26	N-C α -C β	110.9	0.92
LYS mptp n = 26			LYS mptt n = 124		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-75	18.5	chi1	-80	13.3
chi2	87	18.2	chi2	73	17.3
chi3	172	9.0	chi3	176	12.4
chi4	65	12.1	chi4	175	11.9
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.7	1.56	C α -C β -C γ	114.9	1.39
C α -C-O	120.5	1.13	C α -C-O	120.6	0.78
C β -C α -C	110.1	1.43	C β -C α -C	109.7	1.53
C β -C γ -C δ	113.2	2.50	C β -C γ -C δ	112.6	2.03
C δ -C ϵ -N ζ	113.4	2.26	C δ -C ϵ -N ζ	110.9	2.27
C γ -C δ -C ϵ	112.5	2.72	C γ -C δ -C ϵ	111.2	1.60
N-C α -C	110.6	2.77	N-C α -C	110.6	2.59
N-C α -C β	110.9	1.04	N-C α -C β	110.8	1.10

LYS mptm n = 11			LYS mtpp n = 392		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-92	6.7	chi1	-69	7.5
chi2	61	11.1	chi2	177	10.9
chi3	-174	5.4	chi3	70	10.8
chi4	-61	13.5	chi4	68	10.9
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.6	0.81	C α -C β -C γ	113.2	1.66
C α -C-O	120.7	0.57	C α -C-O	120.4	0.82
C β -C α -C	110.7	0.84	C β -C α -C	110.2	1.51
C β -C γ -C δ	112.8	0.65	C β -C γ -C δ	112.4	1.45
C δ -C ϵ -N ζ	113.4	1.68	C δ -C ϵ -N ζ	112.8	2.11
C γ -C δ -C ϵ	111.8	0.50	C γ -C δ -C ϵ	112.7	1.41
N-C α -C	110.8	2.19	N-C α -C	111.4	2.53
N-C α -C β	110.6	0.91	N-C α -C β	110.5	1.01
LYS mtpt n = 1357			LYS mtpm n = 17		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-69	8.1	chi1	-70	6.1
chi2	174	11.3	chi2	175	15.5
chi3	71	11.8	chi3	91	14.7
chi4	175	10.4	chi4	-70	12.1
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	113.3	1.54	C α -C β -C γ	113.5	2.14
C α -C-O	120.5	0.84	C α -C-O	120.3	0.77
C β -C α -C	110.0	1.65	C β -C α -C	109.8	2.27
C β -C γ -C δ	112.3	1.55	C β -C γ -C δ	112.3	1.70
C δ -C ϵ -N ζ	110.8	2.15	C δ -C ϵ -N ζ	113.4	1.87
C γ -C δ -C ϵ	112.3	1.49	C γ -C δ -C ϵ	113.2	1.59
N-C α -C	111.4	2.21	N-C α -C	110.9	2.12
N-C α -C β	110.7	1.03	N-C α -C β	110.5	1.03
LYS mttp n = 1414			LYS mttt n = 8597		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-66	8.3	chi1	-68	7.1
chi2	-179	10.7	chi2	-179	9.1
chi3	176	11.2	chi3	-179	9.8
chi4	67	13.6	chi4	179	10.3
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	113.4	1.73	C α -C β -C γ	113.5	1.62
C α -C-O	120.5	0.84	C α -C-O	120.5	0.83
C β -C α -C	110.1	1.63	C β -C α -C	110.0	1.56
C β -C γ -C δ	111.3	1.75	C β -C γ -C δ	111.1	1.85
C δ -C ϵ -N ζ	112.2	1.98	C δ -C ϵ -N ζ	111.1	2.10
C γ -C δ -C ϵ	111.8	1.47	C γ -C δ -C ϵ	111.0	1.60
N-C α -C	111.3	2.49	N-C α -C	111.3	2.24
N-C α -C β	110.6	1.02	N-C α -C β	110.7	0.99

LYS mttm n = 1829			LYS mtmp n = 9		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-67	7.3	chi1	-67	5.8
chi2	-178	10.0	chi2	-176	8.3
chi3	-177	10.8	chi3	-96	7.4
chi4	-67	12.8	chi4	74	12.3
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	113.4	1.74	C α -C β -C γ	113.8	1.23
C α -C-O	120.5	0.85	C α -C-O	120.6	0.61
C β -C α -C	110.1	1.54	C β -C α -C	109.9	1.20
C β -C γ -C δ	111.2	1.73	C β -C γ -C δ	111.7	1.98
C δ -C ϵ -N ζ	112.2	2.03	C δ -C ϵ -N ζ	113.7	2.37
C γ -C δ -C ϵ	111.8	1.47	C γ -C δ -C ϵ	112.7	0.79
N-C α -C	111.4	2.37	N-C α -C	110.4	2.29
N-C α -C β	110.6	1.00	N-C α -C β	110.8	0.91
LYS mtmt n = 1314			LYS mtmm n = 424		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-67	6.9	chi1	-64	6.9
chi2	-173	9.8	chi2	-177	10.1
chi3	-74	11.7	chi3	-70	10.9
chi4	-175	10.6	chi4	-66	9.8
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	113.2	1.59	C α -C β -C γ	113.5	1.53
C α -C-O	120.4	0.86	C α -C-O	120.5	0.84
C β -C α -C	110.1	1.56	C β -C α -C	109.8	1.56
C β -C γ -C δ	112.3	1.52	C β -C γ -C δ	112.3	1.37
C δ -C ϵ -N ζ	111.0	2.18	C δ -C ϵ -N ζ	112.8	2.10
C γ -C δ -C ϵ	112.1	1.45	C γ -C δ -C ϵ	112.9	1.50
N-C α -C	111.3	2.14	N-C α -C	111.5	2.39
N-C α -C β	110.7	0.96	N-C α -C β	110.6	1.03
LYS mmpt n = 31			LYS mmtp n = 463		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-60	7.0	chi1	-61	8.2
chi2	-71	19.5	chi2	-69	12.0
chi3	94	14.5	chi3	180	11.9
chi4	176	10.7	chi4	68	13.2
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	115.3	1.12	C α -C β -C γ	114.7	1.51
C α -C-O	120.4	0.89	C α -C-O	120.4	0.90
C β -C α -C	109.8	1.68	C β -C α -C	109.6	1.56
C β -C γ -C δ	113.4	1.80	C β -C γ -C δ	112.0	1.55
C δ -C ϵ -N ζ	111.5	1.77	C δ -C ϵ -N ζ	112.6	2.34
C γ -C δ -C ϵ	112.0	1.40	C γ -C δ -C ϵ	111.9	1.34
N-C α -C	111.5	2.37	N-C α -C	111.1	2.60
N-C α -C β	111.2	1.39	N-C α -C β	110.7	1.04

LYS mmtt n = 3137			LYS mmtm n = 727		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-62	8.3	chi1	-60	8.2
chi2	-67	9.8	chi2	-66	10.8
chi3	-177	10.1	chi3	-173	11.2
chi4	-178	11.0	chi4	-69	13.4
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.5	1.32	C α -C β -C γ	114.5	1.40
C α -C-O	120.4	0.91	C α -C-O	120.5	0.87
C β -C α -C	109.6	1.56	C β -C α -C	109.7	1.57
C β -C γ -C δ	111.9	1.49	C β -C γ -C δ	111.9	1.43
C δ -C ϵ -N ζ	111.1	2.08	C δ -C ϵ -N ζ	112.4	1.97
C γ -C δ -C ϵ	111.1	1.53	C γ -C δ -C ϵ	112.0	1.44
N-C α -C	111.5	2.47	N-C α -C	111.4	2.53
N-C α -C β	110.7	1.01	N-C α -C β	110.6	1.02
LYS mmmt n = 544			LYS mmmm n = 90		
χ	Smooth COM	StdDev	χ	Smooth COM	StdDev
chi1	-63	7.7	chi1	-61	8.3
chi2	-64	10.7	chi2	-62	10.4
chi3	-71	9.7	chi3	-67	10.8
chi4	-177	9.8	chi4	-65	10.9
Bond Angle	Mean	StdDev	Bond Angle	Mean	StdDev
C α -C β -C γ	114.6	1.31	C α -C β -C γ	114.7	1.39
C α -C-O	120.4	0.97	C α -C-O	120.4	1.06
C β -C α -C	109.6	1.46	C β -C α -C	109.5	1.53
C β -C γ -C δ	113.1	1.51	C β -C γ -C δ	113.2	1.43
C δ -C ϵ -N ζ	111.2	2.21	C δ -C ϵ -N ζ	112.6	2.73
C γ -C δ -C ϵ	112.3	1.53	C γ -C δ -C ϵ	113.2	1.87
N-C α -C	111.8	2.31	N-C α -C	111.7	2.47
N-C α -C β	110.7	1.05	N-C α -C β	110.5	1.11