

Supplementary Table 1

Residue#	ΠO_2	$\Pi CrOx$	Φ	δ^-
6	0.22	0.63	-1.07	0.32
7	0.22	0.18	0.18	0.29
8	0.25	0.43	-0.54	0.34
9	0.18	0.96	-1.69	0.31
10	0.18	0.59	-1.17	0.35
11	0.23	0.27	-0.20	0.25
12	0.16	0.25	-0.47	0.23
13	0.14	1.63	-2.48	0.39
14	0.27	0.92	-1.24	0.28
15	0.40	0.15	0.98	0.28
16	0.16	0.27	-0.54	0.25
17	0.03	0.43	-2.69	0.26
18	0.23	0.06	1.37	0.25
19	0.28	0.13	0.75	0.23
20	0.15	0.39	-1.00	0.27
21	0.26	1.14	-1.47	0.26
22	0.30	0.07	1.44	0.26
23	0.32	0.11	1.08	0.23
24	0.25	1.70	-1.92	0.39
25	0.15	0.15	0.00	0.25
26	0.31	0.10	1.17	0.24
27	0.14	0.41	-1.11	0.35
28	0.27	3.42	-2.53	0.34
29	0.28	0.29	-0.04	0.27
30	0.19	0.09	0.81	0.27
31	0.27	2.12	-2.08	0.37
32	0.16	1.14	-1.99	0.26
33	0.18	0.09	0.69	0.26
34	0.17	0.44	-0.96	0.24
35	0.24	0.58	-0.89	0.38
36	0.16	0.41	-0.97	0.28

Residue#	ΠO_2	$\Pi CrOx$	Φ	δ^-
37	0.16	0.26	-0.50	0.26
38	0.21	0.40	-0.63	0.29
39	0.21	0.18	0.16	0.26
40	0.18	0.42	-0.83	0.30
41	0.11	0.70	-1.82	0.25
42	0.18	0.38	-0.74	0.25
43	0.14	0.77	-1.73	0.28
44	0.16	0.08	0.65	0.30
45	0.24	0.47	-0.67	0.26
46	0.20	0.07	1.11	0.25
47	0.03	0.26	-2.30	0.28
48	0.20	0.17	0.14	0.28
49	0.20	0.15	0.29	0.28
50	0.17	0.08	0.82	0.25
51	0.18	0.26	-0.38	0.29
52	0.16	1.96	-2.49	0.28
53	0.06	0.08	-0.25	0.24
54	0.03	0.24	-2.01	0.28
55	0.23	0.81	-1.25	0.36
56	0.19	0.94	-1.60	0.27
57	0.16	0.06	0.97	0.22
58	0.14	1.76	-2.57	0.25
59	0.17	1.47	-2.14	0.31
60	0.17	0.71	-1.41	0.24
61	0.24	0.04	1.90	0.27
62	0.21	0.53	-0.91	0.38
63	0.15	0.79	-1.68	0.26
64	0.18	0.21	-0.15	0.24
65	0.28	0.44	-0.46	0.27
66	0.16	0.90	-1.73	0.30
67	0.14	0.53	-1.37	0.23

Residue#	ΠO_2	$\Pi CrOx$	Φ	δ^-
68	0.20	0.11	0.55	0.28
69	0.13	0.89	-1.93	0.24
70	0.17	1.89	-2.39	0.28
71	0.16	0.13	0.24	0.22
72	0.04	0.07	-0.49	0.24
73	0.22	2.86	-2.56	0.35
74	0.15	0.09	0.48	0.18
75	0.22	0.06	1.20	0.21
76	0.19	0.22	-0.15	0.25
77	0.17	1.85	-2.41	0.33
78	0.17	0.17	0.01	0.23
79	0.15	0.17	-0.13	0.21
80	0.20	0.91	-1.54	0.34
81	0.14	2.44	-2.82	0.30
82	0.27	0.60	-0.79	0.31
83	0.19	0.08	0.82	0.28
84	0.21	2.36	-2.42	0.36
85	0.14	0.77	-1.70	0.29
86	0.17	0.18	-0.03	0.22
87	0.16	1.50	-2.25	0.25
88	0.23	2.33	-2.30	0.29
89	0.22	0.13	0.47	0.23
90	0.08	0.13	-0.49	0.25
91	0.18	1.73	-2.24	0.25
92	0.06	1.23	-3.10	0.32
93	0.18	0.10	0.56	0.26
94	0.22	0.65	-1.06	0.31
95	0.10	1.75	-2.88	0.43
96	0.18	0.58	-1.16	0.35
97	0.14	0.23	-0.48	0.24
98	0.22	0.64	-1.08	0.28