

Table S1. pK_a values calculated with the program PROPKA

	Model pK _a	Orthorhombic A	Orthorhombic B	Monoclinic		Trigonal					
		A	A	A	B	A	B	C	D	E	F
ASP 306	3.8	4.00	2.48	3.99	3.97						
ASP 332	3.8	4.02	3.97	3.97	4.01	3.96	3.94	3.96	3.97	3.98	3.96
ASP 348	3.8	3.18	3.28	3.26	3.25	3.30	3.31	3.29	3.31	3.30	3.31
ASP 357	3.8	4.11	3.96	4.18	4.12	5.57	5.34	5.47	5.2	5.44	5.48
ASP 366	3.8	2.43	2.49	2.34	2.45	3.21	1.65	2.17	2.44	2.18	2.61
GLU 304	4.5	4.57	3.77	4.58	4.50						
GLU 305	4.5	4.69	4.60	4.65	4.14						
GLU 310	4.5	2.83	4.58	2.79	2.77	4.61	4.63	4.62	4.61	4.49	4.5
GLU 331	4.5	4.91	4.85	4.85	4.59	4.75	4.80	4.85	4.78	4.81	4.77
GLU 334	4.5	6.68	5.85	6.73	5.41	6.71	6.59	5.58	5.39	6.67	5.34
GLU 352	4.5	4.75	4.55	4.76	4.7	4.53	4.67	4.61	4.54	4.46	4.5
GLU 373	4.5	4.62	4.58	4.59	4.58	4.60	4.57	4.61	4.66	4.61	4.61
GLU 395	4.5	4.45	3.12	4.37	4.58	3.48	3.9	3.74	4.22	4.11	4.72
GLU 396	4.5	4.30	4.47	4.44	4.36	4.32	4.19	4.14	4.52	4.43	3.95
GLU 401	4.5	4.32	4.86	4.41	4.61	4.25	4.35	4.68		4.24	5.76
HIS 317	6.5	6.26	6.25	6.27	6.28	6.24	6.23	6.26	6.24	6.22	6.25
HIS 372	6.5	6.92	6.94	6.89	6.94	7.00	6.86	6.73	6.89	6.96	6.54
TYR 392	10	10.87	10.05	9.67	9.93	10.02	10.22	9.98	10.25	10.39	10.13
TYR 397	10	11.03	11.21	11.06	11.29	10.96	10.85	11.04	10.22	10.96	10.45
LYS 355	10.5	10.31	10.43	10.31	10.61	10.22	10.20	10.41	10.54	10.23	10.53
LYS 380	10.5	10.32	10.21	10.31	10.25	10.25	10.14	10.22	10.25	10.22	10.34
LYS 393	10.5	10.19	10.36	10.06	10.38	9.73	10.54	10.63	10.28	10.13	9.92
ARG 309	12.5	12.32	12.82	12.37	12.46	12.78	12.43	12.38	12.46	12.54	12.31
ARG 312	12.5	13.59	13.64	13.47	13.48	12.64	12.11	12.58	12.64	12.66	12.68
ARG 313	12.5	12.39	12.28	12.34	12.41	12.34	12.35	12.35	12.35	12.34	12.35
ARG 318	12.5	11.94	12.00	11.97	11.99	12.03	11.95	11.95	12.00	12.00	12.00
ARG 354	12.5	12.24	12.51	13.59	13.97	12.54	12.63	12.61	12.41	12.44	12.64
ARG 368	12.5	13.12	13.05	13.2	13.1	12.41	14.15	13.59	13.17	13.54	13.01
ARG 399	12.5	12.6	14.11	12.7	12.58	12.57	12.45	12.5	12.44	12.46	12.49