

Supplementary Material

Secondary Structure Content

TABLE S 1: Secondary structure content

PDB	Structural type	helix	sheet	unordered
1ado	α	0.46	0.24	0.30
1ed9	$\alpha\beta$	0.31	0.32	0.37
1vjs	$\alpha\beta$	0.29	0.33	0.39
1hc9	β	0.05	0.52	0.42
5cha	β	0.12	0.44	0.44
2cga	β	0.14	0.47	0.40
5pti		0.21	0.31	0.48
1rav	β	0.07	0.54	0.38
1fa2		0.38	0.24	0.38
1bgl	β	0.14	0.48	0.38
1b8e	β	0.14	0.49	0.36
2bb2	β	0.07	0.46	0.47
4gcr	β	0.09	0.54	0.37
1elp	β	0.09	0.53	0.38
1m8u	β	0.06	0.53	0.41
1ha7	α	0.76	0.09	0.15
1lin	α	0.57	0.14	0.29
1hcb		0.18	0.39	0.43
1ca2	β	0.16	0.41	0.43
5cpa	$\alpha\beta$	0.38	0.28	0.34
1f4j	$\alpha\beta$	0.30	0.27	0.43
1kcw	β	0.12	0.49	0.39
2cts	α	0.61	0.12	0.27
1nls	β	0.04	0.58	0.38
1hrc	α	0.41	0.17	0.41
1qfe	$\alpha\beta$	0.46	0.28	0.27
2dhq	$\alpha\beta$	0.44	0.26	0.30
3dni	$\alpha\beta$	0.29	0.34	0.37
3est	β	0.11	0.51	0.38
2fdn		0.13	0.40	0.47
1ha4	β	0.12	0.51	0.37
1cf3	$\alpha\beta$	0.34	0.32	0.34
1hwx	$\alpha\beta$	0.49	0.25	0.26

PDB	Structural type	helix	sheet	unordered
1gpb	$\alpha\beta$	0.50	0.25	0.25
1bn6	$\alpha\beta$	0.45	0.28	0.27
1hda	α	0.77	0.09	0.14
1n5u	α	0.72	0.10	0.18
1hk0	β	0.08	0.57	0.35
1igt	β	0.07	0.56	0.37
1trz	α	0.58	0.09	0.33
1ku8	β	0.00	0.68	0.32
1blf	$\alpha\beta$	0.32	0.36	0.32
1les	β	0.04	0.59	0.37
1ax8	α	0.69	0.04	0.28
193l	$\alpha\beta$	0.40	0.30	0.29
1mol	β	0.17	0.62	0.21
1ymb	α	0.74	0.13	0.13
1a6m	α	0.78	0.09	0.13
1k6j	$\alpha\beta$	0.37	0.28	0.35
1ova	$\alpha\beta$	0.31	0.45	0.24
1dot	$\alpha\beta$	0.29	0.32	0.39
1ppn	$\alpha\beta$	0.26	0.31	0.43
1ofs	β	0.04	0.58	0.38
1air		0.13	0.40	0.47
2psg	β	0.20	0.50	0.29
1atj	α	0.51	0.19	0.31
3pmg	$\alpha\beta$	0.36	0.38	0.27
3pgk		0.34	0.15	0.50
1une	α	0.50	0.23	0.28
1hnn	$\alpha\beta$	0.37	0.36	0.26
1a49	$\alpha\beta$	0.39	0.30	0.31
1rhs	$\alpha\beta$	0.33	0.25	0.42
3rn3	β	0.21	0.48	0.32
1r0i	β	0.17	0.42	0.41
1avu	β	0.02	0.48	0.50
1stp	β	0.08	0.60	0.31
1sca	$\alpha\beta$	0.30	0.34	0.37
1cbj	β	0.04	0.55	0.40
1thw	β	0.11	0.48	0.41
7tim	$\alpha\beta$	0.45	0.27	0.28
1ubi	$\alpha\beta$	0.25	0.46	0.29

Comparisons of Calculation and Experiment

Machine-readable versions of the experimental spectra are available on request from BAW.
 CT = backbone and charge-transfer transitions.























