

Supplementary Material

An example of the PHENIX.REFINE refinement protocol utilized for the refinement of rotational OD-structure of rsTagRFP

```
refinement {
  main {
    number_of_macro_cycles = 3
    ordered_solvent = true
  }
  output {
    prefix = "TagRFP_OD"
  }
  refine {
    strategy = *individual_sites individual_sites_real_space rigid_body \
              *individual_adp group_adp tls *occupancies group_anomalous
    occupancies {
      remove_selection = chain A
    }
  }
  pdb_interpretation {
    custom_nonbonded_symmetry_exclusions = chain A
  }
  ordered_solvent {
    refine_occupancies = true
  }
}
```

Table 1s

The complete list of contacting residues between adjacent tetramers within 4 Å cutoff distance. The chains of tetramer 1 were renamed from A, B, C, D to E, F, G, H, respectively, for clarity of comparison.

I
0 x,y,z 0 x+1,y,z
 source atoms target atoms distance angle
Lys 6H CE ... Lys 6C CE ... 3.56

II
0 x,y,z 90 x+1,y,z
 source atoms target atoms distance angle

III
0 x,y,z 0 x+0.5,y+0.5,z+0.5
 source atoms target atoms distance angle
Gly 75H CA ... Gly 75A O ... 3.86
Gly 75H O ... Gly 75A CA ... 3.86
Pro 225H CA ... Ser 226A O ... 3.33
Pro 225H CB ... Ser 226A C ... 3.85
 ... Ser 226A O ... 2.82
 ... Lys 227A CA ... 3.81
 ... Lys 227A C ... 3.54
 ... Lys 227A O ... 3.36
 ... Leu 228A O ... 3.93
Pro 225H CG ... Lys 227A C ... 3.81
 ... Lys 227A O ... 3.16
Pro 225H C ... Ser 226A O ... 3.73
Ser 226H N ... Ser 226A O ... 3.31 *
Ser 226H C ... Pro 225A CB ... 3.85
Ser 226H O ... Ser 226A N ... 3.31 *
 ... Ser 226A O ... 3.63 *
 ... Pro 225A CA ... 3.33
 ... Pro 225A CB ... 2.82
 ... Pro 225A C ... 3.73
Lys 227H CA ... Pro 225A CB ... 3.82
Lys 227H C ... Pro 225A CB ... 3.54
 ... Pro 225A CG ... 3.81
Lys 227H O ... Pro 225A CB ... 3.36
 ... Pro 225A CG ... 3.16
Leu 228H O ... Pro 225A CB ... 3.93

IV
0 x,y,z 90 x+0.5,y+0.5,z+0.5
 source atoms target atoms distance angle
Gln 74H CA ... Val 46D O ... 3.73
Gln 74H NE2 ... Glu 47D OE2 ... 3.47 *

```

=====
V
90 x,y,z          90 x+0.5,y+0.5,z+0.5
   source atoms      target atoms          distance  angle
=====

```

```

VI
0 x,y,z          0 x,y,z+1
   source atoms      target atoms          distance  angle
Ala  205E  CA      ...  Lys  185A  NZ      ...  3.17
Ala  205E  CB      ...  Lys  185A  NZ      ...  2.84
Ala  205E  C       ...  Lys  185A  NZ      ...  3.30
Asp  206E  N       ...  Lys  185A  CE      ...  3.22
      ...  Lys  185A  NZ      ...  2.66 ***
Asp  206E  CA      ...  Lys  185A  CE      ...  3.57
      ...  Lys  185A  NZ      ...  3.60
Asp  206E  CB      ...  Lys  185A  CE      ...  3.47
      ...  Lys  185A  NZ      ...  3.87
Asp  206E  CG      ...  Lys  185A  CD      ...  3.48
      ...  Lys  185A  CE      ...  2.32
      ...  Lys  185A  NZ      ...  3.16
Asp  206E  OD1     ...  Lys  185A  CG      ...  3.80
      ...  Lys  185A  CD      ...  2.59
      ...  Lys  185A  CE      ...  1.33
      ...  Lys  185A  NZ      ...  2.46 ***
Asp  206E  OD2     ...  Lys  185A  CD      ...  3.67
      ...  Lys  185A  CE      ...  2.94
      ...  Lys  185A  NZ      ...  3.85 *
Lys  136E  CE      ...  Lys  136C  NZ      ...  3.86
Lys  136E  NZ      ...  Lys  136C  CE      ...  3.86
      ...  Lys  136C  NZ      ...  2.79 ***
Val  165E  CG1     ...  Gly  166C  N       ...  3.99
      ...  Gly  166C  CA      ...  3.84
Gly  166E  N       ...  Val  165C  CG1     ...  3.99
Gly  166E  CA      ...  Val  165C  CG1     ...  3.84
Ala  205F  CA      ...  Lys  185B  NZ      ...  3.17
Ala  205F  CB      ...  Lys  185B  NZ      ...  2.84
Ala  205F  C       ...  Lys  185B  NZ      ...  3.30
Asp  206F  N       ...  Lys  185B  CE      ...  3.22
      ...  Lys  185B  NZ      ...  2.66 ***
Asp  206F  CA      ...  Lys  185B  CE      ...  3.57
      ...  Lys  185B  NZ      ...  3.60
Asp  206F  CB      ...  Lys  185B  CE      ...  3.47
      ...  Lys  185B  NZ      ...  3.87
Asp  206F  CG      ...  Lys  185B  CD      ...  3.48
      ...  Lys  185B  CE      ...  2.32
      ...  Lys  185B  NZ      ...  3.16
Asp  206F  OD1     ...  Lys  185B  CG      ...  3.80
      ...  Lys  185B  CD      ...  2.59
      ...  Lys  185B  CE      ...  1.33
      ...  Lys  185B  NZ      ...  2.46 ***
Asp  206F  OD2     ...  Lys  185B  CD      ...  3.67
      ...  Lys  185B  CE      ...  2.94
      ...  Lys  185B  NZ      ...  3.85 *

```

Lys	136F	CE	...	Lys	136D	NZ	...	3.86
Lys	136F	NZ	...	Lys	136D	CE	...	3.86
			...	Lys	136D	NZ	...	2.79 ***
Val	165F	CG1	...	Gly	166D	CA	...	3.84
			...	Gly	166D	N	...	3.99
Gly	166F	N	...	Val	165D	CG1	...	3.99
Gly	166F	CA	...	Val	165D	CG1	...	3.84
Lys	185G	CG	...	Asp	206C	OD1	...	3.80
Lys	185G	CD	...	Asp	206C	CG	...	3.48
			...	Asp	206C	OD1	...	2.59
			...	Asp	206C	OD2	...	3.67
Lys	185G	CE	...	Asp	206C	N	...	3.22
			...	Asp	206C	CB	...	3.47
			...	Asp	206C	CG	...	2.32
			...	Asp	206C	OD1	...	1.33
			...	Asp	206C	OD2	...	2.94
			...	Asp	206C	CA	...	3.57
Lys	185G	NZ	...	Asp	206C	N	...	2.66 ***
			...	Asp	206C	CB	...	3.87
			...	Asp	206C	CG	...	3.16
			...	Asp	206C	OD1	...	2.46 ***
			...	Asp	206C	OD2	...	3.85 *
			...	Ala	205C	CA	...	3.17
			...	Ala	205C	CB	...	2.84
			...	Ala	205C	C	...	3.30
			...	Asp	206C	CA	...	3.60
Lys	185H	CG	...	Asp	206D	OD1	...	3.80
Lys	185H	CD	...	Asp	206D	CG	...	3.48
			...	Asp	206D	OD1	...	2.59
			...	Asp	206D	OD2	...	3.67
Lys	185H	CE	...	Asp	206D	CA	...	3.57
			...	Asp	206D	CB	...	3.47
			...	Asp	206D	N	...	3.22
			...	Asp	206D	CG	...	2.32
			...	Asp	206D	OD1	...	1.33
			...	Asp	206D	OD2	...	2.94
Lys	185H	NZ	...	Asp	206D	CA	...	3.60
			...	Asp	206D	CB	...	3.87
			...	Asp	206D	N	...	2.66 ***
			...	Ala	205D	C	...	3.30
			...	Asp	206D	CG	...	3.16
			...	Asp	206D	OD1	...	2.46 ***
			...	Asp	206D	OD2	...	3.85 *
			...	Ala	205D	CA	...	3.17
			...	Ala	205D	CB	...	2.84

VII

0	x,y,z		90	x,y,z+1		distance	angle	
	source atoms			target atoms				
Gln	134E	CD	...	Lys	136D	NZ	...	3.74
Gln	134E	OE1	...	Lys	136D	CE	...	3.67
			...	Lys	136D	NZ	...	2.77 ***
Lys	136E	CE	...	Gln	134D	OE1	...	3.67
Lys	136E	NZ	...	Gln	134D	CD	...	3.74
			...	Gln	134D	OE1	...	2.77 ***

Arg	201E	NH2	...	Lys	207D	NZ	...	3.72	*
Lys	203E	CA	...	Asp	206D	OD1	...	3.47	
Lys	203E	CG	...	Asp	206D	OD1	...	3.73	
Lys	203E	C	...	Asp	206D	OD1	...	3.76	
Glu	204E	N	...	Asp	206D	OD1	...	3.13	***
Glu	204E	CG	...	Asp	206D	N	...	3.91	
Glu	204E	CD	...	Asp	206D	N	...	3.68	
			...	Glu	204D	OE1	...	3.96	
			...	Lys	207D	N	...	3.72	
			...	Glu	204D	OE2	...	3.26	
Glu	204E	OE1	...	Glu	204D	CD	...	3.96	
			...	Glu	204D	OE2	...	2.88	***
Glu	204E	OE2	...	Ala	205D	CA	...	3.86	
			...	Ala	205D	C	...	3.45	
			...	Asp	206D	N	...	2.90	***
			...	Glu	204D	CD	...	3.26	
			...	Glu	204D	OE1	...	2.88	***
			...	Asp	206D	CA	...	3.44	
			...	Asp	206D	C	...	3.54	
			...	Lys	207D	N	...	2.70	***
			...	Lys	207D	CA	...	3.61	
			...	Glu	204D	OE2	...	2.82	***
Glu	204E	C	...	Asp	206D	N	...	3.92	
Glu	204E	O	...	Asp	206D	OD1	...	3.47	*
			...	Ala	205D	CA	...	3.19	
			...	Ala	205D	CB	...	3.41	
			...	Ala	205D	C	...	3.53	
			...	Asp	206D	N	...	2.88	***
			...	Asp	206D	CA	...	3.96	
Ala	205E	CA	...	Glu	204D	O	...	3.19	
			...	Glu	204D	OE2	...	3.86	
Ala	205E	CB	...	Glu	204D	O	...	3.41	
Ala	205E	C	...	Glu	204D	O	...	3.53	
			...	Glu	204D	OE2	...	3.45	
Asp	206E	N	...	Glu	204D	C	...	3.92	
			...	Glu	204D	CD	...	3.68	
			...	Glu	204D	O	...	2.88	***
			...	Glu	204D	CG	...	3.91	
			...	Glu	204D	OE2	...	2.90	***
Asp	206E	CA	...	Glu	204D	O	...	3.96	
			...	Glu	204D	OE2	...	3.44	
Asp	206E	OD1	...	Lys	203D	CG	...	3.73	
			...	Glu	204D	N	...	3.13	***
			...	Glu	204D	O	...	3.47	*
			...	Lys	203D	CA	...	3.47	
			...	Lys	203D	C	...	3.76	
Asp	206E	C	...	Glu	204D	OE2	...	3.54	
Lys	207E	N	...	Glu	204D	CD	...	3.72	
			...	Glu	204D	OE2	...	2.70	***
Lys	207E	CA	...	Glu	204D	OE2	...	3.61	
Lys	207E	NZ	...	Glu	208D	OE2	...	3.65	*
			...	Arg	201D	NH2	...	3.72	*
Glu	208E	OE2	...	Lys	207D	NZ	...	3.65	*
Gln	134F	CD	...	Lys	136C	NZ	...	3.74	
Gln	134F	OE1	...	Lys	136C	CE	...	3.67	
			...	Lys	136C	NZ	...	2.77	***
Lys	136F	CE	...	Gln	134C	OE1	...	3.67	

Lys	136F	NZ	...	Gln	134C	CD	...	3.74	
			...	Gln	134C	OE1	...	2.77	***
Arg	201F	NH2	...	Lys	207C	NZ	...	3.72	*
Lys	203F	CA	...	Asp	206C	OD1	...	3.47	
Lys	203F	CG	...	Asp	206C	OD1	...	3.73	
Lys	203F	C	...	Asp	206C	OD1	...	3.76	
Glu	204F	N	...	Asp	206C	OD1	...	3.13	***
Glu	204F	CG	...	Asp	206C	N	...	3.91	
Glu	204F	CD	...	Glu	204C	OE1	...	3.96	
			...	Glu	204C	OE2	...	3.26	
			...	Asp	206C	N	...	3.68	
			...	Lys	207C	N	...	3.72	
Glu	204F	OE1	...	Glu	204C	CD	...	3.96	
			...	Glu	204C	OE2	...	2.88	***
Glu	204F	OE2	...	Glu	204C	CD	...	3.26	
			...	Glu	204C	OE1	...	2.88	***
			...	Glu	204C	OE2	...	2.82	***
			...	Ala	205C	C	...	3.45	
			...	Asp	206C	N	...	2.90	***
			...	Asp	206C	CA	...	3.44	
			...	Asp	206C	C	...	3.54	
			...	Lys	207C	N	...	2.70	***
			...	Lys	207C	CA	...	3.61	
			...	Ala	205C	CA	...	3.86	
Glu	204F	C	...	Asp	206C	N	...	3.92	
Glu	204F	O	...	Ala	205C	C	...	3.53	
			...	Asp	206C	N	...	2.88	***
			...	Asp	206C	CA	...	3.96	
			...	Asp	206C	OD1	...	3.47	*
			...	Ala	205C	CA	...	3.19	
			...	Ala	205C	CB	...	3.41	
Ala	205F	CA	...	Glu	204C	OE2	...	3.86	
			...	Glu	204C	O	...	3.19	
Ala	205F	CB	...	Glu	204C	O	...	3.41	
Ala	205F	C	...	Glu	204C	OE2	...	3.45	
			...	Glu	204C	O	...	3.53	
Asp	206F	N	...	Glu	204C	CG	...	3.91	
			...	Glu	204C	CD	...	3.68	
			...	Glu	204C	OE2	...	2.90	***
			...	Glu	204C	C	...	3.92	
			...	Glu	204C	O	...	2.88	***
Asp	206F	CA	...	Glu	204C	OE2	...	3.44	
			...	Glu	204C	O	...	3.96	
Asp	206F	OD1	...	Lys	203C	CG	...	3.73	
			...	Glu	204C	N	...	3.13	***
			...	Glu	204C	O	...	3.47	*
			...	Lys	203C	CA	...	3.47	
			...	Lys	203C	C	...	3.76	
Asp	206F	C	...	Glu	204C	OE2	...	3.54	
Lys	207F	N	...	Glu	204C	CD	...	3.72	
			...	Glu	204C	OE2	...	2.70	***
Lys	207F	CA	...	Glu	204C	OE2	...	3.61	
Lys	207F	NZ	...	Glu	208C	OE2	...	3.65	*
			...	Arg	201C	NH2	...	3.72	*
Glu	208F	OE2	...	Lys	207C	NZ	...	3.65	*