



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Jan 31, 2016 – 07:12 PM GMT

PDB ID : 1EHA
Title : CRYSTAL STRUCTURE OF GLYCOSYLTREHALOSE TREHALOHYDROLASE FROM SULFOLOBUS SOLFATARICUS
Authors : Feese, M.D.; Kato, Y.; Tamada, T.; Kato, M.; Komeda, T.; Kobayashi, K.; Kuroki, R.
Deposited on : 2000-02-19
Resolution : 3.00 Å(reported)

This is a Full wwPDB X-ray Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.
We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org
A user guide is available at
<http://wwpdb.org/validation/2016/XrayValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

MolProbity : 4.02b-467
Mogul : 1.7 (RC4), CSD as536be (2015)
Xtriage (Phenix) : 1.9-1692
EDS : rb-20026688
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)
Refmac : 5.8.0135
CCP4 : 6.5.0
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : trunk26865

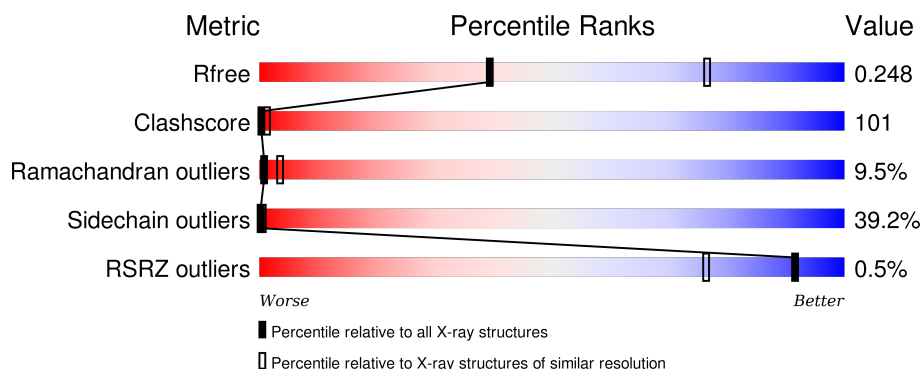
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.00 Å.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
R_{free}	91344	1578 (3.00-3.00)
Clashscore	102246	1912 (3.00-3.00)
Ramachandran outliers	100387	1853 (3.00-3.00)
Sidechain outliers	100360	1856 (3.00-3.00)
RSRZ outliers	91569	1592 (3.00-3.00)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments on the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$. The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the electron density. The numeric value is given above the bar.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	558	<div> <div></div> <div> <div></div> <div>8%</div> <div>50%</div> <div>34%</div> <div>8%</div> </div> </div>

2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 4572 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

In the tables below, the ZeroOcc column contains the number of atoms modelled with zero occupancy, the AltConf column contains the number of residues with at least one atom in alternate conformation and the Trace column contains the number of residues modelled with at most 2 atoms.

- Molecule 1 is a protein called GLYCOSYLTREHALOSE TREHALOHYDROLASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	557	Total	C	N	O	S	0	0	0
			4542	2928	741	865	8			

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	298	VAL	CYS	MUTATION	UNP Q55088

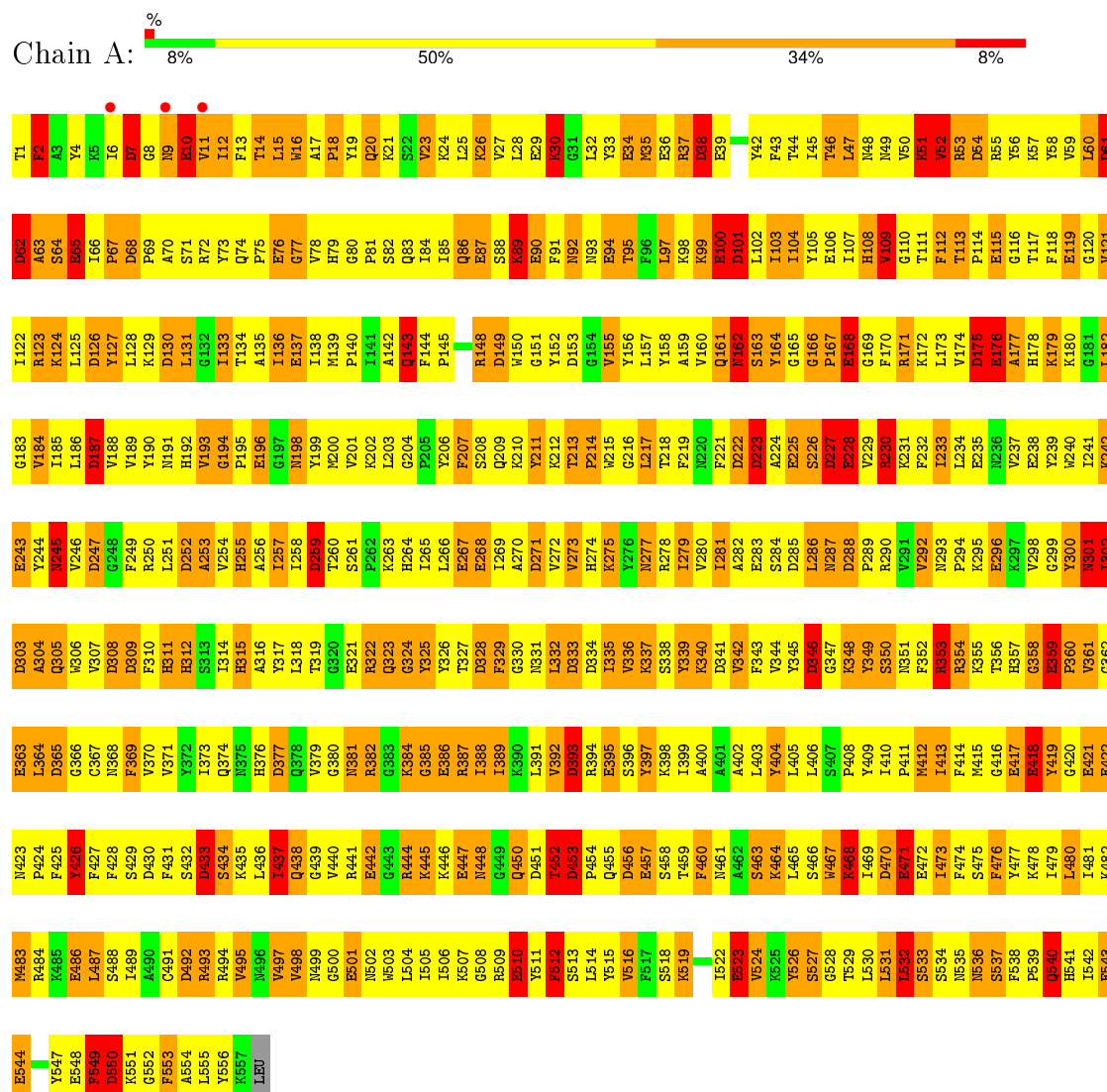
- Molecule 2 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
2	A	30	Total	O	0	0
			30	30		

3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA and DNA chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of errors displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry and electron density. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. A red dot above a residue indicates a poor fit to the electron density ($RSRZ > 2$). Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

• Molecule 1: GLYCOSYLTREHALOSE TREHALOXYDROLASE



4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 32 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	80.37Å 80.37Å 282.00Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	20.00 – 3.00 55.94 – 3.00	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	93.0 (20.00-3.00) 97.4 (55.94-3.00)	Depositor EDS
R_{merge}	0.12	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	1.71 (at 3.01Å)	Xtriage
Refinement program	TNT V. 5-E	Depositor
R, R_{free}	(Not available) , (Not available) 0.190 , 0.248	Depositor DCC
R_{free} test set	1096 reflections (5.40%)	DCC
Wilson B-factor (Å ²)	52.9	Xtriage
Anisotropy	0.709	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.35 , 236.1	EDS
Estimated twinning fraction	0.042 for -h,-k,l	Xtriage
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.49$, $\langle L^2 \rangle = 0.32$	Xtriage
Outliers	0 of 21505 reflections	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.93	EDS
Total number of atoms	4572	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	45.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 4.00% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

²Theoretical values of $\langle |L| \rangle$, $\langle L^2 \rangle$ for acentric reflections are 0.5, 0.375 respectively for untwinned datasets, and 0.333, 0.2 for perfectly twinned datasets.

5 Model quality

5.1 Standard geometry

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	1.18	42/4660 (0.9%)	1.51	94/6307 (1.5%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	2	0

All (42) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	137	GLU	CD-OE2	10.98	1.37	1.25
1	A	106	GLU	CD-OE2	8.82	1.35	1.25
1	A	76	GLU	CD-OE2	7.82	1.34	1.25
1	A	486	GLU	CD-OE2	7.34	1.33	1.25
1	A	296	GLU	CD-OE2	7.06	1.33	1.25
1	A	90	GLU	CD-OE2	7.04	1.33	1.25
1	A	34	GLU	CD-OE2	6.85	1.33	1.25
1	A	267	GLU	CD-OE2	6.82	1.33	1.25
1	A	39	GLU	CD-OE2	6.73	1.33	1.25
1	A	119	GLU	CD-OE2	6.66	1.32	1.25
1	A	363	GLU	CD-OE2	6.65	1.32	1.25
1	A	196	GLU	CD-OE2	6.62	1.32	1.25
1	A	36	GLU	CD-OE2	6.61	1.32	1.25
1	A	176	GLU	CD-OE2	6.54	1.32	1.25
1	A	523	GLU	CD-OE2	6.44	1.32	1.25
1	A	29	GLU	CD-OE2	6.41	1.32	1.25
1	A	422	GLU	CD-OE2	6.41	1.32	1.25
1	A	442	GLU	CD-OE2	6.33	1.32	1.25
1	A	544	GLU	CD-OE2	6.33	1.32	1.25
1	A	65	GLU	CD-OE2	6.29	1.32	1.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	100	GLU	CD-OE2	6.28	1.32	1.25
1	A	457	GLU	CD-OE2	6.27	1.32	1.25
1	A	447	GLU	CD-OE2	6.21	1.32	1.25
1	A	225	GLU	CD-OE2	6.20	1.32	1.25
1	A	87	GLU	CD-OE2	6.20	1.32	1.25
1	A	238	GLU	CD-OE2	6.18	1.32	1.25
1	A	168	GLU	CD-OE2	6.15	1.32	1.25
1	A	268	GLU	CD-OE2	6.03	1.32	1.25
1	A	395	GLU	CD-OE2	6.03	1.32	1.25
1	A	94	GLU	CD-OE2	6.00	1.32	1.25
1	A	386	GLU	CD-OE2	5.86	1.32	1.25
1	A	283	GLU	CD-OE2	5.70	1.31	1.25
1	A	510	GLU	CD-OE2	5.69	1.31	1.25
1	A	501	GLU	CD-OE2	5.63	1.31	1.25
1	A	548	GLU	CD-OE2	5.61	1.31	1.25
1	A	228	GLU	CD-OE2	5.51	1.31	1.25
1	A	359	GLU	CD-OE2	5.49	1.31	1.25
1	A	10	GLU	CD-OE2	5.48	1.31	1.25
1	A	471	GLU	CD-OE2	5.44	1.31	1.25
1	A	543	GLU	CD-OE2	5.27	1.31	1.25
1	A	115	GLU	CD-OE2	5.18	1.31	1.25
1	A	472	GLU	CD-OE2	5.02	1.31	1.25

All (94) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	303	ASP	CB-CG-OD2	-10.56	108.80	118.30
1	A	247	ASP	CB-CG-OD2	-9.73	109.54	118.30
1	A	309	ASP	CB-CG-OD2	-9.14	110.08	118.30
1	A	470	ASP	CB-CG-OD2	-8.53	110.62	118.30
1	A	149	ASP	CB-CG-OD2	-8.26	110.87	118.30
1	A	346	ASP	CB-CG-OD2	-8.24	110.88	118.30
1	A	161	GLN	N-CA-CB	8.16	125.30	110.60
1	A	365	ASP	CB-CG-OD2	-7.91	111.18	118.30
1	A	550	ASP	CB-CG-OD2	-7.90	111.19	118.30
1	A	271	ASP	CB-CG-OD2	-7.80	111.28	118.30
1	A	222	ASP	CB-CG-OD2	-7.68	111.39	118.30
1	A	304	ALA	N-CA-CB	7.62	120.77	110.10
1	A	308	ASP	CB-CG-OD2	-7.59	111.47	118.30
1	A	328	ASP	CB-CG-OD2	-7.50	111.55	118.30
1	A	7	ASP	CB-CG-OD2	-7.50	111.55	118.30
1	A	353	ARG	NE-CZ-NH2	-7.40	116.60	120.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	166	GLY	C-N-CD	-7.38	104.37	120.60
1	A	288	ASP	CB-CG-OD2	-7.34	111.69	118.30
1	A	346	ASP	N-CA-CB	-7.31	97.44	110.60
1	A	61	ASP	CB-CG-OD2	-7.26	111.76	118.30
1	A	304	ALA	CB-CA-C	7.25	120.97	110.10
1	A	252	ASP	CB-CG-OD1	7.18	124.76	118.30
1	A	470	ASP	CB-CG-OD1	7.14	124.73	118.30
1	A	126	ASP	CB-CG-OD2	-7.12	111.89	118.30
1	A	223	ASP	CB-CG-OD2	-7.09	111.92	118.30
1	A	309	ASP	CB-CG-OD1	7.07	124.67	118.30
1	A	247	ASP	CB-CG-OD1	7.03	124.63	118.30
1	A	426	TYR	CB-CG-CD1	-7.00	116.80	121.00
1	A	230	ARG	NE-CZ-NH1	6.97	123.78	120.30
1	A	271	ASP	CB-CG-OD1	6.90	124.51	118.30
1	A	288	ASP	CB-CG-OD1	6.90	124.51	118.30
1	A	149	ASP	CB-CG-OD1	6.82	124.44	118.30
1	A	68	ASP	CB-CG-OD2	-6.74	112.23	118.30
1	A	54	ASP	CB-CG-OD2	-6.70	112.27	118.30
1	A	393	ASP	CB-CG-OD2	-6.70	112.27	118.30
1	A	453	ASP	CB-CG-OD2	-6.64	112.33	118.30
1	A	194	GLY	C-N-CD	-6.63	106.02	120.60
1	A	430	ASP	CB-CG-OD2	-6.59	112.37	118.30
1	A	76	GLU	N-CA-CB	6.50	122.30	110.60
1	A	365	ASP	CB-CG-OD1	6.50	124.14	118.30
1	A	308	ASP	CB-CG-OD1	6.49	124.14	118.30
1	A	353	ARG	NE-CZ-NH1	6.45	123.52	120.30
1	A	492	ASP	CB-CG-OD2	-6.45	112.50	118.30
1	A	101	ASP	CB-CG-OD2	-6.40	112.54	118.30
1	A	227	ASP	CB-CG-OD2	-6.39	112.55	118.30
1	A	456	ASP	CB-CG-OD2	-6.36	112.58	118.30
1	A	187	ASP	CB-CG-OD1	6.35	124.02	118.30
1	A	259	ASP	CB-CG-OD2	-6.35	112.59	118.30
1	A	430	ASP	CB-CG-OD1	6.34	124.00	118.30
1	A	277	ASN	N-CA-CB	6.27	121.88	110.60
1	A	187	ASP	CB-CG-OD2	-6.24	112.68	118.30
1	A	451	ASP	CB-CG-OD2	-6.20	112.72	118.30
1	A	285	ASP	CB-CG-OD2	-6.09	112.82	118.30
1	A	252	ASP	CB-CG-OD2	-6.06	112.85	118.30
1	A	7	ASP	CB-CG-OD1	6.05	123.75	118.30
1	A	54	ASP	CB-CG-OD1	6.05	123.75	118.30
1	A	333	ASP	CB-CG-OD2	-6.00	112.90	118.30
1	A	493	ARG	NE-CZ-NH1	5.99	123.30	120.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	222	ASP	CB-CG-OD1	5.97	123.68	118.30
1	A	38	ASP	CB-CG-OD2	-5.88	113.01	118.30
1	A	61	ASP	CB-CG-OD1	5.88	123.59	118.30
1	A	130	ASP	CB-CG-OD2	-5.87	113.02	118.30
1	A	377	ASP	CB-CG-OD2	-5.86	113.03	118.30
1	A	153	ASP	CB-CG-OD1	5.84	123.56	118.30
1	A	62	ASP	CB-CG-OD1	5.80	123.52	118.30
1	A	62	ASP	CB-CG-OD2	-5.78	113.10	118.30
1	A	550	ASP	CB-CG-OD1	5.78	123.50	118.30
1	A	287	ASN	N-CA-CB	5.75	120.95	110.60
1	A	549	PHE	N-CA-CB	5.72	120.89	110.60
1	A	162	ASN	N-CA-CB	-5.71	100.32	110.60
1	A	230	ARG	NE-CZ-NH2	-5.66	117.47	120.30
1	A	130	ASP	CB-CG-OD1	5.63	123.37	118.30
1	A	123	ARG	NE-CZ-NH1	5.61	123.10	120.30
1	A	223	ASP	CB-CG-OD1	5.61	123.34	118.30
1	A	393	ASP	CB-CG-OD1	5.58	123.32	118.30
1	A	227	ASP	CB-CG-OD1	5.56	123.31	118.30
1	A	90	GLU	N-CA-CB	5.48	120.46	110.60
1	A	328	ASP	CB-CG-OD1	5.47	123.23	118.30
1	A	285	ASP	CB-CG-OD1	5.37	123.13	118.30
1	A	512	PHE	N-CA-CB	5.31	120.16	110.60
1	A	126	ASP	CB-CG-OD1	5.29	123.06	118.30
1	A	346	ASP	CB-CG-OD1	5.26	123.03	118.30
1	A	238	GLU	N-CA-CB	5.24	120.03	110.60
1	A	377	ASP	CB-CG-OD1	5.21	122.98	118.30
1	A	301	ASN	N-CA-CB	5.16	119.89	110.60
1	A	433	ASP	CB-CG-OD1	5.14	122.92	118.30
1	A	175	ASP	CB-CG-OD2	-5.12	113.70	118.30
1	A	418	GLU	N-CA-CB	5.11	119.80	110.60
1	A	532	LEU	CB-CA-C	5.10	119.88	110.20
1	A	453	ASP	CB-CG-OD1	5.09	122.88	118.30
1	A	175	ASP	CB-CG-OD1	5.07	122.87	118.30
1	A	333	ASP	CB-CG-OD1	5.07	122.86	118.30
1	A	68	ASP	CB-CG-OD1	5.07	122.86	118.30
1	A	492	ASP	CB-CG-OD1	5.04	122.83	118.30

All (2) chirality outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atom
1	A	90	GLU	CA
1	A	304	ALA	CA

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in the chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes within the asymmetric unit, whereas Symm-Clashes lists symmetry related clashes.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	4542	0	4353	895	0
2	A	30	0	0	7	0
All	All	4572	0	4353	895	0

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 101.

All (895) close contacts within the same asymmetric unit are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:113:THR:HG21	1:A:120:GLY:HA3	1.29	1.14
1:A:35:MET:HB2	1:A:43:PHE:HB3	1.27	1.11
1:A:337:LYS:HD2	1:A:344:VAL:HA	1.18	1.11
1:A:273:VAL:HG21	1:A:280:VAL:HG13	1.31	1.10
1:A:139:MET:HE1	1:A:376:HIS:HB3	1.27	1.08
1:A:24:LYS:HD2	1:A:32:LEU:HD11	1.36	1.07
1:A:104:ILE:HB	1:A:412:MET:HB2	1.32	1.07
1:A:287:ASN:HB2	1:A:358:GLY:HA3	1.37	1.05
1:A:113:THR:HG22	1:A:116:GLY:H	1.19	1.01
1:A:131:LEU:HD21	1:A:418:GLU:HG2	1.40	0.99
1:A:191:ASN:HB3	1:A:257:ILE:HD12	1.44	0.99
1:A:55:ARG:HB3	1:A:81:PRO:HB2	1.43	0.98
1:A:476:PHE:HA	1:A:479:ILE:HD12	1.45	0.98
1:A:23:VAL:HG13	1:A:60:LEU:HA	1.47	0.96
1:A:476:PHE:HE1	1:A:532:LEU:HD11	1.27	0.96
1:A:266:LEU:HB2	1:A:300:TYR:HD2	1.31	0.96
1:A:25:LEU:HB2	1:A:45:ILE:HD12	1.45	0.95
1:A:24:LYS:HB3	1:A:32:LEU:HD11	1.46	0.95
1:A:542:ILE:HD12	1:A:543:GLU:H	1.33	0.94
1:A:69:PRO:HB3	1:A:200:MET:HE3	1.49	0.93
1:A:35:MET:HE3	1:A:45:ILE:HG13	1.47	0.93
1:A:474:PHE:HE1	1:A:478:LYS:HD2	1.33	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:52:VAL:HB	1:A:54:ASP:HB2	1.52	0.92
1:A:16:TRP:CE3	1:A:18:PRO:HD3	2.06	0.91
1:A:25:LEU:HD13	1:A:26:LYS:N	1.87	0.90
1:A:255:HIS:HB3	1:A:286:LEU:HD12	1.54	0.89
1:A:186:LEU:HD12	1:A:187:ASP:N	1.86	0.89
1:A:35:MET:CE	1:A:45:ILE:HG13	2.03	0.89
1:A:389:ILE:HG23	1:A:397:TYR:CE2	2.07	0.89
1:A:266:LEU:HB2	1:A:300:TYR:CD2	2.06	0.89
1:A:219:PHE:HB2	1:A:221:PHE:CE1	2.07	0.89
1:A:530:LEU:HD12	1:A:531:LEU:N	1.87	0.89
1:A:200:MET:HG3	1:A:207:PHE:HZ	1.39	0.88
1:A:131:LEU:CD2	1:A:418:GLU:HG2	2.03	0.88
1:A:6:ILE:HA	1:A:11:VAL:HG23	1.55	0.88
1:A:139:MET:HE1	1:A:376:HIS:CB	2.03	0.88
1:A:35:MET:CB	1:A:43:PHE:HB3	2.04	0.87
1:A:186:LEU:HD12	1:A:187:ASP:H	1.40	0.86
1:A:547:TYR:HB2	1:A:549:PHE:CE1	2.11	0.86
1:A:530:LEU:HB3	1:A:540:GLN:HA	1.56	0.86
1:A:104:ILE:CB	1:A:412:MET:HB2	2.05	0.86
1:A:287:ASN:HB2	1:A:358:GLY:CA	2.04	0.86
1:A:434:SER:HA	1:A:437:ILE:HD12	1.57	0.85
1:A:16:TRP:HA	1:A:42:TYR:HD1	1.41	0.85
1:A:27:VAL:HG12	1:A:30:LYS:H	1.42	0.85
1:A:255:HIS:HB3	1:A:286:LEU:CD1	2.07	0.85
1:A:532:LEU:HD12	1:A:533:SER:N	1.92	0.84
1:A:191:ASN:HB3	1:A:257:ILE:CD1	2.07	0.84
1:A:91:PHE:CE2	1:A:242:LYS:HB3	2.12	0.84
1:A:287:ASN:H	1:A:357:HIS:HE1	1.25	0.84
1:A:349:TYR:HE1	1:A:354:ARG:HA	1.42	0.84
1:A:500:GLY:HA3	1:A:503:TRP:NE1	1.92	0.83
1:A:465:LEU:HB2	1:A:467:TRP:CZ3	2.13	0.83
1:A:113:THR:HG21	1:A:120:GLY:CA	2.06	0.83
1:A:78:VAL:HG22	1:A:156:TYR:CE1	2.14	0.82
1:A:254:VAL:HG11	1:A:282:ALA:HB1	1.62	0.82
1:A:452:THR:CG2	1:A:459:THR:HG23	2.09	0.82
1:A:406:LEU:HD22	1:A:489:ILE:HD12	1.62	0.82
1:A:349:TYR:CE1	1:A:354:ARG:HA	2.14	0.82
1:A:419:TYR:CE1	1:A:421:GLU:HG2	2.14	0.82
1:A:103:ILE:H	1:A:134:THR:HG1	1.28	0.81
1:A:32:LEU:HD13	1:A:33:TYR:N	1.95	0.81
1:A:190:TYR:CD2	1:A:251:LEU:HD21	2.16	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:24:LYS:HD2	1:A:32:LEU:CD1	2.10	0.80
1:A:24:LYS:HB2	1:A:59:VAL:CG1	2.11	0.80
1:A:371:VAL:HG22	1:A:409:TYR:HB2	1.62	0.80
1:A:12:ILE:HD12	1:A:14:THR:H	1.46	0.80
1:A:474:PHE:CE1	1:A:478:LYS:HD2	2.17	0.80
1:A:24:LYS:HB3	1:A:32:LEU:CD1	2.11	0.79
1:A:187:ASP:HB2	1:A:250:ARG:HD2	1.64	0.79
1:A:119:GLU:HA	1:A:122:ILE:HD12	1.64	0.79
1:A:419:TYR:CZ	1:A:421:GLU:HG2	2.16	0.79
1:A:50:VAL:HG22	1:A:52:VAL:CG2	2.12	0.79
1:A:113:THR:HG23	1:A:115:GLU:OE2	1.83	0.79
1:A:452:THR:HB	1:A:459:THR:HG23	1.65	0.79
1:A:25:LEU:O	1:A:32:LEU:HD22	1.82	0.78
1:A:16:TRP:CH2	1:A:18:PRO:HG3	2.18	0.78
1:A:131:LEU:HD12	1:A:131:LEU:O	1.84	0.77
1:A:179:LYS:HZ2	1:A:179:LYS:HB2	1.50	0.77
1:A:503:TRP:CZ3	1:A:505:ILE:HG23	2.19	0.77
1:A:140:PRO:HG2	1:A:152:TYR:CE1	2.19	0.77
1:A:200:MET:HG3	1:A:207:PHE:CZ	2.20	0.77
1:A:27:VAL:HG11	1:A:30:LYS:HB2	1.65	0.77
1:A:145:PRO:HG2	1:A:431:PHE:CE1	2.20	0.77
1:A:461:ASN:HA	1:A:464:LYS:HG3	1.65	0.77
1:A:530:LEU:HD12	1:A:531:LEU:H	1.48	0.77
1:A:287:ASN:H	1:A:357:HIS:CE1	2.03	0.76
1:A:373:ILE:HG23	1:A:404:TYR:CD2	2.19	0.76
1:A:357:HIS:ND1	1:A:358:GLY:N	2.33	0.76
1:A:148:ARG:HD2	1:A:460:PHE:HD2	1.51	0.76
1:A:503:TRP:CE3	1:A:505:ILE:HG23	2.21	0.76
1:A:83:GLN:HG2	1:A:84:ILE:N	2.01	0.75
1:A:503:TRP:CD2	1:A:522:ILE:HD13	2.21	0.75
1:A:119:GLU:CA	1:A:122:ILE:HD12	2.16	0.75
1:A:113:THR:CG2	1:A:115:GLU:HB2	2.16	0.75
1:A:16:TRP:HA	1:A:42:TYR:CD1	2.19	0.75
1:A:108:HIS:HE2	1:A:428:PHE:HZ	1.33	0.75
1:A:433:ASP:OD2	1:A:436:LEU:HG	1.87	0.75
1:A:406:LEU:HD22	1:A:489:ILE:CD1	2.15	0.75
1:A:373:ILE:O	1:A:374:GLN:HG2	1.87	0.75
1:A:527:SER:OG	1:A:543:GLU:HA	1.88	0.74
1:A:179:LYS:HB2	1:A:179:LYS:NZ	2.03	0.74
1:A:245:ASN:ND2	1:A:278:ARG:HH12	1.85	0.73
1:A:432:SER:O	1:A:437:ILE:HD11	1.89	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:105:TYR:HB3	1:A:136:ILE:CD1	2.19	0.73
1:A:105:TYR:HB3	1:A:136:ILE:HD12	1.69	0.73
1:A:173:LEU:HD12	1:A:173:LEU:O	1.88	0.73
1:A:73:TYR:CZ	1:A:75:PRO:HA	2.23	0.73
1:A:498:VAL:HG12	1:A:499:ASN:H	1.53	0.73
1:A:25:LEU:CB	1:A:45:ILE:HD12	2.17	0.73
1:A:531:LEU:HB3	1:A:555:LEU:CD1	2.18	0.73
1:A:27:VAL:CG1	1:A:30:LYS:H	2.02	0.73
1:A:6:ILE:HG13	1:A:11:VAL:CG2	2.19	0.72
1:A:12:ILE:CD1	1:A:14:THR:H	2.02	0.72
1:A:105:TYR:HB2	1:A:133:ILE:HG13	1.70	0.72
1:A:265:ILE:HD12	1:A:268:GLU:HB2	1.72	0.72
1:A:384:LYS:HA	1:A:426:TYR:HE1	1.53	0.72
1:A:294:PRO:HA	1:A:301:ASN:ND2	2.04	0.72
1:A:87:GLU:HB3	1:A:89:LYS:HG3	1.71	0.72
1:A:373:ILE:HG23	1:A:404:TYR:HD2	1.53	0.72
1:A:381:ASN:HA	1:A:444:ARG:NH2	2.05	0.72
1:A:361:VAL:HG21	1:A:369:PHE:CE2	2.25	0.71
1:A:307:VAL:CG2	1:A:369:PHE:HB3	2.19	0.71
1:A:301:ASN:O	1:A:302:ILE:C	2.28	0.71
1:A:286:LEU:CD1	1:A:286:LEU:H	2.03	0.71
1:A:99:LYS:H	1:A:99:LYS:CD	2.02	0.71
1:A:24:LYS:CB	1:A:32:LEU:HD11	2.21	0.71
1:A:133:ILE:HD11	1:A:413:ILE:CD1	2.20	0.71
1:A:91:PHE:CD2	1:A:242:LYS:HA	2.26	0.71
1:A:437:ILE:HG23	1:A:455:GLN:HG3	1.72	0.71
1:A:16:TRP:CZ2	1:A:18:PRO:HG3	2.25	0.71
1:A:138:ILE:HG22	1:A:139:MET:O	1.90	0.70
1:A:133:ILE:HD11	1:A:413:ILE:HD12	1.73	0.70
1:A:137:GLU:HG3	1:A:185:ILE:HG22	1.72	0.70
1:A:53:ARG:HG2	1:A:53:ARG:HH11	1.56	0.70
1:A:219:PHE:HB2	1:A:221:PHE:CZ	2.26	0.70
1:A:513:SER:HG	1:A:515:TYR:HE1	1.37	0.70
1:A:99:LYS:H	1:A:99:LYS:CE	2.04	0.70
1:A:26:LYS:HB2	1:A:32:LEU:CD2	2.21	0.70
1:A:103:ILE:HG12	1:A:134:THR:OG1	1.91	0.70
1:A:203:LEU:HB2	1:A:206:TYR:HE1	1.56	0.70
1:A:35:MET:HB3	1:A:44:THR:N	2.07	0.70
1:A:50:VAL:HG22	1:A:52:VAL:HG23	1.71	0.70
1:A:264:HIS:CD2	1:A:265:ILE:HG22	2.26	0.69
1:A:542:ILE:CD1	1:A:543:GLU:H	2.04	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:304:ALA:HB2	1:A:368:ASN:HA	1.74	0.69
1:A:337:LYS:HG3	1:A:338:SER:N	2.07	0.69
1:A:527:SER:OG	1:A:543:GLU:HG2	1.93	0.69
1:A:507:LYS:HG2	1:A:508:GLY:N	2.06	0.69
1:A:314:ILE:HA	1:A:335:ILE:CD1	2.22	0.69
1:A:24:LYS:CD	1:A:32:LEU:HD11	2.20	0.69
1:A:452:THR:CB	1:A:459:THR:HG23	2.22	0.69
1:A:336:VAL:O	1:A:340:LYS:HG2	1.93	0.69
1:A:342:VAL:HG23	1:A:493:ARG:NH1	2.08	0.69
1:A:371:VAL:CG2	1:A:409:TYR:HB2	2.23	0.69
1:A:156:TYR:O	1:A:158:TYR:N	2.27	0.68
1:A:312:HIS:N	1:A:312:HIS:ND1	2.36	0.68
1:A:542:ILE:HG22	1:A:556:TYR:CD2	2.29	0.68
1:A:503:TRP:HZ3	1:A:505:ILE:HG12	1.58	0.68
1:A:113:THR:HG22	1:A:116:GLY:N	2.02	0.68
1:A:105:TYR:HD1	1:A:107:ILE:HD11	1.58	0.68
1:A:148:ARG:NH1	1:A:148:ARG:HB2	2.09	0.68
1:A:127:TYR:HE1	1:A:474:PHE:HE2	1.41	0.68
1:A:287:ASN:HB3	1:A:343:PHE:CD1	2.29	0.68
1:A:273:VAL:CG2	1:A:280:VAL:HG13	2.17	0.68
1:A:99:LYS:O	1:A:102:LEU:HB2	1.94	0.68
1:A:118:PHE:HB3	1:A:173:LEU:HB2	1.76	0.67
1:A:419:TYR:OH	1:A:421:GLU:HG2	1.93	0.67
1:A:341:ASP:O	1:A:343:PHE:N	2.28	0.67
1:A:105:TYR:HD1	1:A:107:ILE:CD1	2.07	0.67
1:A:424:PRO:O	1:A:463:SER:HA	1.95	0.67
1:A:307:VAL:HG23	1:A:369:PHE:HB3	1.76	0.67
1:A:27:VAL:HG12	1:A:30:LYS:N	2.08	0.67
1:A:53:ARG:HG2	1:A:53:ARG:NH1	2.10	0.67
1:A:155:VAL:HG23	1:A:194:GLY:CA	2.24	0.67
1:A:345:TYR:HA	1:A:348:LYS:CD	2.25	0.67
1:A:269:ILE:HG22	1:A:270:ALA:N	2.09	0.67
1:A:225:GLU:O	1:A:227:ASP:N	2.27	0.66
1:A:6:ILE:CA	1:A:11:VAL:HG23	2.24	0.66
1:A:103:ILE:N	1:A:134:THR:OG1	2.28	0.66
1:A:531:LEU:HB3	1:A:555:LEU:HD13	1.76	0.66
1:A:24:LYS:HB2	1:A:59:VAL:HG13	1.78	0.66
1:A:384:LYS:O	1:A:386:GLU:N	2.29	0.66
1:A:387:ARG:NH1	2:A:577:HOH:O	2.28	0.66
1:A:539:PRO:O	1:A:541:HIS:N	2.29	0.66
1:A:84:ILE:HD12	1:A:84:ILE:N	2.11	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:432:SER:C	1:A:437:ILE:HD11	2.16	0.66
1:A:124:LYS:HG2	1:A:127:TYR:HD2	1.61	0.66
1:A:389:ILE:HD13	1:A:397:TYR:HE2	1.61	0.66
1:A:12:ILE:HD12	1:A:14:THR:N	2.10	0.66
1:A:78:VAL:HG22	1:A:156:TYR:HE1	1.59	0.66
1:A:265:ILE:O	1:A:268:GLU:HB2	1.95	0.66
1:A:163:SER:O	1:A:165:GLY:N	2.29	0.66
1:A:112:PHE:HD2	1:A:121:VAL:HG12	1.61	0.66
1:A:364:LEU:HD23	1:A:364:LEU:N	2.09	0.66
1:A:399:ILE:HG22	1:A:400:ALA:N	2.10	0.66
1:A:254:VAL:O	1:A:256:ALA:N	2.29	0.66
1:A:314:ILE:HG22	1:A:315:HIS:N	2.09	0.66
1:A:389:ILE:HG23	1:A:397:TYR:CD2	2.31	0.66
1:A:45:ILE:HG22	1:A:46:THR:N	2.11	0.65
1:A:68:ASP:O	1:A:71:SER:N	2.29	0.65
1:A:4:TYR:CE2	1:A:72:ARG:HG3	2.31	0.65
1:A:328:ASP:HB3	1:A:345:TYR:OH	1.95	0.65
1:A:271:ASP:O	1:A:275:LYS:HB2	1.95	0.65
1:A:233:ILE:HG22	1:A:234:LEU:N	2.10	0.65
1:A:287:ASN:ND2	1:A:345:TYR:O	2.30	0.65
1:A:114:PRO:HD2	1:A:115:GLU:OE2	1.95	0.65
1:A:437:ILE:HG23	1:A:455:GLN:CG	2.25	0.65
1:A:498:VAL:HG12	1:A:499:ASN:N	2.10	0.65
1:A:280:VAL:O	1:A:303:ASP:HB2	1.96	0.65
1:A:321:GLU:O	1:A:322:ARG:NE	2.30	0.65
1:A:483:MET:CE	1:A:531:LEU:HD11	2.27	0.65
1:A:476:PHE:CE1	1:A:532:LEU:HD11	2.20	0.65
1:A:367:CYS:SG	1:A:410:ILE:HD11	2.35	0.65
1:A:384:LYS:HA	1:A:426:TYR:CE1	2.31	0.65
1:A:319:THR:OG1	1:A:321:GLU:HB2	1.96	0.65
1:A:338:SER:HB2	1:A:344:VAL:HG23	1.78	0.65
1:A:95:THR:HG23	1:A:97:LEU:HB2	1.77	0.65
1:A:287:ASN:N	1:A:357:HIS:HE1	1.94	0.65
1:A:245:ASN:O	1:A:245:ASN:ND2	2.29	0.64
1:A:27:VAL:CG1	1:A:30:LYS:HB2	2.28	0.64
1:A:418:GLU:OE2	1:A:418:GLU:N	2.29	0.64
1:A:24:LYS:HB2	1:A:59:VAL:HG12	1.79	0.64
1:A:328:ASP:OD2	1:A:352:PHE:HB3	1.97	0.64
1:A:222:ASP:OD2	1:A:260:THR:HG23	1.96	0.64
1:A:404:TYR:CZ	1:A:405:LEU:HD11	2.32	0.64
1:A:385:GLY:HA3	1:A:425:PHE:O	1.97	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:466:SER:O	1:A:468:LYS:N	2.29	0.64
1:A:113:THR:HB	2:A:575:HOH:O	1.97	0.64
1:A:138:ILE:N	1:A:138:ILE:HD12	2.12	0.64
1:A:333:ASP:O	1:A:336:VAL:HG13	1.97	0.64
1:A:461:ASN:HA	1:A:464:LYS:CG	2.28	0.64
1:A:28:LEU:CD1	1:A:56:TYR:HA	2.28	0.64
1:A:127:TYR:HE1	1:A:474:PHE:CE2	2.15	0.64
1:A:131:LEU:HD21	1:A:418:GLU:CG	2.24	0.64
1:A:19:TYR:CD1	1:A:204:GLY:HA2	2.32	0.63
1:A:122:ILE:O	1:A:125:LEU:HD13	1.98	0.63
1:A:254:VAL:O	1:A:257:ILE:N	2.31	0.63
1:A:318:LEU:HD23	1:A:318:LEU:N	2.13	0.63
1:A:42:TYR:OH	1:A:228:GLU:HG3	1.97	0.63
1:A:354:ARG:CZ	1:A:354:ARG:HB3	2.27	0.63
1:A:127:TYR:CE1	1:A:474:PHE:HE2	2.16	0.63
1:A:161:GLN:HG3	1:A:162:ASN:H	1.62	0.63
1:A:312:HIS:CD2	1:A:325:TYR:HD2	2.15	0.63
1:A:420:GLY:N	1:A:473:ILE:HG21	2.13	0.63
1:A:203:LEU:N	1:A:203:LEU:HD23	2.13	0.63
1:A:56:TYR:HE1	1:A:68:ASP:HB2	1.62	0.62
1:A:361:VAL:HG21	1:A:369:PHE:HE2	1.62	0.62
1:A:145:PRO:HG2	1:A:431:PHE:HE1	1.64	0.62
1:A:51:LYS:O	1:A:53:ARG:NH2	2.30	0.62
1:A:48:ASN:OD1	1:A:48:ASN:N	2.29	0.62
1:A:287:ASN:ND2	1:A:345:TYR:HB2	2.14	0.62
1:A:346:ASP:O	1:A:360:PRO:HD3	1.98	0.62
1:A:473:ILE:N	1:A:473:ILE:HD13	2.15	0.62
1:A:108:HIS:NE2	1:A:428:PHE:HZ	1.97	0.62
1:A:504:LEU:CD2	1:A:506:ILE:HG13	2.29	0.62
1:A:387:ARG:NH2	1:A:415:MET:O	2.28	0.62
1:A:538:PHE:CD1	1:A:554:ALA:HB2	2.34	0.62
1:A:144:PHE:CD2	1:A:151:GLY:HA2	2.35	0.61
1:A:136:ILE:HG22	1:A:138:ILE:CD1	2.30	0.61
1:A:519:LYS:HA	1:A:549:PHE:O	2.00	0.61
1:A:187:ASP:HB2	1:A:250:ARG:HB3	1.81	0.61
1:A:91:PHE:CD2	1:A:242:LYS:HB3	2.36	0.61
1:A:503:TRP:HZ3	1:A:505:ILE:CG1	2.14	0.61
1:A:161:GLN:HG3	1:A:162:ASN:N	2.15	0.61
1:A:176:GLU:O	1:A:179:LYS:N	2.34	0.61
1:A:461:ASN:CA	1:A:464:LYS:HG3	2.30	0.61
1:A:342:VAL:HG11	1:A:369:PHE:CD2	2.34	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:167:PRO:O	1:A:171:ARG:N	2.29	0.61
1:A:269:ILE:O	1:A:272:VAL:HG23	2.01	0.61
1:A:331:ASN:OD1	1:A:332:LEU:N	2.33	0.61
1:A:50:VAL:HG22	1:A:52:VAL:HG21	1.82	0.61
1:A:437:ILE:HG23	1:A:455:GLN:NE2	2.16	0.61
1:A:207:PHE:HB3	1:A:218:THR:O	1.99	0.61
1:A:55:ARG:HB3	1:A:81:PRO:CB	2.24	0.61
1:A:136:ILE:HG22	1:A:138:ILE:HD12	1.82	0.61
1:A:437:ILE:HG23	1:A:455:GLN:CD	2.20	0.61
1:A:58:TYR:N	1:A:66:ILE:O	2.32	0.60
1:A:23:VAL:HG13	1:A:60:LEU:CA	2.27	0.60
1:A:217:LEU:HD12	1:A:217:LEU:N	2.16	0.60
1:A:26:LYS:NZ	1:A:65:GLU:OE1	2.34	0.60
1:A:406:LEU:CD2	1:A:489:ILE:HD12	2.31	0.60
1:A:45:ILE:HG22	1:A:46:THR:H	1.65	0.60
1:A:47:LEU:HD12	1:A:49:ASN:OD1	2.00	0.60
1:A:148:ARG:HD2	1:A:460:PHE:CD2	2.35	0.60
1:A:345:TYR:HA	1:A:348:LYS:HD3	1.83	0.60
1:A:353:ARG:NE	1:A:357:HIS:HD2	1.98	0.60
1:A:264:HIS:HD2	1:A:265:ILE:HG22	1.65	0.60
1:A:264:HIS:CG	1:A:300:TYR:HE2	2.19	0.60
1:A:50:VAL:O	1:A:51:LYS:HD3	2.01	0.60
1:A:95:THR:HG23	1:A:97:LEU:N	2.17	0.60
1:A:499:ASN:HA	1:A:504:LEU:HA	1.83	0.60
1:A:246:VAL:O	1:A:278:ARG:NH1	2.34	0.60
1:A:119:GLU:N	1:A:122:ILE:HD12	2.17	0.60
1:A:396:SER:O	1:A:398:LYS:N	2.35	0.60
1:A:395:GLU:OE1	1:A:535:ASN:ND2	2.35	0.59
1:A:530:LEU:N	1:A:540:GLN:O	2.33	0.59
1:A:286:LEU:HD13	1:A:286:LEU:H	1.67	0.59
1:A:382:ARG:HB3	1:A:382:ARG:HH11	1.67	0.59
1:A:144:PHE:CE1	1:A:149:ASP:HB2	2.37	0.59
1:A:280:VAL:HG23	1:A:303:ASP:H	1.66	0.59
1:A:337:LYS:CG	1:A:344:VAL:HG22	2.32	0.59
1:A:476:PHE:HA	1:A:479:ILE:CD1	2.24	0.59
1:A:16:TRP:HA	1:A:16:TRP:HE3	1.67	0.59
1:A:293:ASN:OD1	1:A:294:PRO:HD2	2.03	0.59
1:A:12:ILE:HD12	1:A:13:PHE:N	2.17	0.59
1:A:280:VAL:N	1:A:303:ASP:OD2	2.28	0.59
1:A:231:LYS:O	1:A:235:GLU:HG3	2.03	0.59
1:A:135:ALA:C	1:A:136:ILE:HD13	2.22	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:394:ARG:O	1:A:398:LYS:HG3	2.02	0.59
1:A:399:ILE:O	1:A:402:ALA:HB3	2.03	0.59
1:A:421:GLU:OE2	1:A:422:GLU:N	2.34	0.59
1:A:105:TYR:CD1	1:A:107:ILE:HD11	2.38	0.59
1:A:135:ALA:HB1	1:A:183:GLY:O	2.03	0.58
1:A:112:PHE:CD2	1:A:121:VAL:HG12	2.37	0.58
1:A:441:ARG:NH1	1:A:453:ASP:OD1	2.29	0.58
1:A:388:ILE:O	1:A:388:ILE:HG12	2.03	0.58
1:A:6:ILE:HG13	1:A:11:VAL:HG23	1.85	0.58
1:A:418:GLU:O	1:A:473:ILE:HG22	2.03	0.58
1:A:16:TRP:CZ3	1:A:18:PRO:HD3	2.37	0.58
1:A:32:LEU:HD21	1:A:59:VAL:CG1	2.33	0.58
1:A:315:HIS:NE2	1:A:321:GLU:OE1	2.27	0.58
1:A:483:MET:HE2	1:A:531:LEU:HD11	1.83	0.58
1:A:17:ALA:O	1:A:18:PRO:C	2.41	0.58
1:A:35:MET:HB3	1:A:44:THR:H	1.67	0.58
1:A:281:ILE:HA	1:A:304:ALA:O	2.04	0.58
1:A:108:HIS:O	1:A:110:GLY:N	2.36	0.58
1:A:389:ILE:CD1	1:A:397:TYR:HE2	2.17	0.58
1:A:23:VAL:O	1:A:35:MET:HG2	2.04	0.58
1:A:452:THR:HB	1:A:459:THR:CG2	2.32	0.58
1:A:289:PRO:C	1:A:293:ASN:HD22	2.05	0.58
1:A:2:PHE:HD1	1:A:235:GLU:OE2	1.87	0.57
1:A:105:TYR:CZ	1:A:415:MET:HA	2.39	0.57
1:A:187:ASP:CB	1:A:250:ARG:HD2	2.34	0.57
1:A:448:ASN:N	1:A:448:ASN:OD1	2.36	0.57
1:A:122:ILE:HA	1:A:125:LEU:CD1	2.34	0.57
1:A:555:LEU:HD22	1:A:556:TYR:N	2.20	0.57
1:A:12:ILE:HG13	1:A:12:ILE:O	2.04	0.57
1:A:16:TRP:CD2	1:A:18:PRO:HD3	2.40	0.57
1:A:314:ILE:HA	1:A:335:ILE:HD13	1.84	0.57
1:A:139:MET:HE1	1:A:376:HIS:CG	2.38	0.57
1:A:495:VAL:CG1	1:A:497:VAL:HG12	2.34	0.57
1:A:160:VAL:HG21	1:A:244:TYR:OH	2.04	0.57
1:A:200:MET:HB3	1:A:206:TYR:CD1	2.39	0.57
1:A:304:ALA:HB1	1:A:368:ASN:O	2.05	0.57
1:A:396:SER:O	1:A:397:TYR:C	2.42	0.57
1:A:264:HIS:HD2	1:A:265:ILE:N	2.01	0.57
1:A:150:TRP:CH2	1:A:380:GLY:HA3	2.39	0.57
1:A:302:ILE:H	1:A:302:ILE:HD13	1.70	0.57
1:A:196:GLU:HG3	1:A:436:LEU:CD1	2.35	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:273:VAL:HG21	1:A:280:VAL:CG1	2.21	0.57
1:A:269:ILE:O	1:A:270:ALA:C	2.42	0.57
1:A:104:ILE:CG1	1:A:412:MET:HB2	2.35	0.57
1:A:453:ASP:O	1:A:456:ASP:HB2	2.04	0.57
1:A:67:PRO:O	1:A:69:PRO:HD3	2.05	0.57
1:A:52:VAL:O	1:A:54:ASP:N	2.36	0.57
1:A:427:PHE:H	1:A:450:GLN:HE22	1.53	0.56
1:A:26:LYS:HB2	1:A:32:LEU:HD22	1.87	0.56
1:A:321:GLU:HB3	1:A:323:GLN:NE2	2.20	0.56
1:A:60:LEU:HD12	1:A:64:SER:H	1.71	0.56
1:A:287:ASN:HD21	1:A:345:TYR:HB2	1.69	0.56
1:A:373:ILE:HG12	1:A:404:TYR:CE2	2.40	0.56
1:A:387:ARG:HG2	2:A:576:HOH:O	2.05	0.56
1:A:155:VAL:HG11	1:A:196:GLU:O	2.04	0.56
1:A:461:ASN:O	1:A:464:LYS:HG3	2.05	0.56
1:A:337:LYS:CD	1:A:344:VAL:HA	2.12	0.56
1:A:532:LEU:HD12	1:A:532:LEU:C	2.25	0.56
1:A:469:ILE:HD12	1:A:469:ILE:H	1.70	0.56
1:A:408:PRO:HB3	1:A:492:ASP:O	2.06	0.56
1:A:46:THR:O	1:A:47:LEU:HD22	2.05	0.56
1:A:186:LEU:HD11	2:A:563:HOH:O	2.05	0.56
1:A:26:LYS:HB2	1:A:32:LEU:HD23	1.86	0.56
1:A:15:LEU:HD22	1:A:16:TRP:N	2.20	0.56
1:A:62:ASP:OD1	1:A:64:SER:HB2	2.06	0.56
1:A:144:PHE:HB2	1:A:145:PRO:HD2	1.88	0.56
1:A:346:ASP:HB2	1:A:348:LYS:HZ1	1.71	0.56
1:A:475:SER:O	1:A:479:ILE:HG13	2.05	0.56
1:A:118:PHE:O	1:A:122:ILE:N	2.38	0.56
1:A:301:ASN:O	1:A:302:ILE:O	2.23	0.56
1:A:503:TRP:CZ3	1:A:505:ILE:HD13	2.41	0.56
1:A:466:SER:C	1:A:468:LYS:H	2.09	0.56
1:A:95:THR:CG2	1:A:97:LEU:HB2	2.35	0.55
1:A:255:HIS:HB3	1:A:286:LEU:HD11	1.89	0.55
1:A:438:GLN:O	1:A:439:GLY:C	2.44	0.55
1:A:437:ILE:CG2	1:A:455:GLN:HG3	2.35	0.55
1:A:60:LEU:CD1	1:A:64:SER:H	2.19	0.55
1:A:245:ASN:ND2	1:A:278:ARG:NH1	2.55	0.55
1:A:286:LEU:O	1:A:288:ASP:N	2.35	0.55
1:A:140:PRO:HD3	1:A:187:ASP:OD2	2.06	0.55
1:A:111:THR:HG23	1:A:460:PHE:HE1	1.71	0.55
1:A:304:ALA:HB1	1:A:368:ASN:C	2.27	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:288:ASP:OD2	1:A:290:ARG:HD2	2.05	0.55
1:A:498:VAL:O	1:A:504:LEU:HA	2.07	0.55
1:A:202:LYS:C	1:A:203:LEU:HD23	2.27	0.55
1:A:50:VAL:HA	1:A:52:VAL:CG2	2.36	0.55
1:A:9:ASN:HA	1:A:51:LYS:HE2	1.89	0.55
1:A:244:TYR:O	1:A:246:VAL:N	2.40	0.55
1:A:77:GLY:C	1:A:79:HIS:H	2.11	0.55
1:A:504:LEU:HD21	1:A:506:ILE:HD11	1.89	0.55
1:A:469:ILE:HG22	1:A:470:ASP:N	2.20	0.55
1:A:155:VAL:HG23	1:A:194:GLY:HA3	1.89	0.54
1:A:10:GLU:HB2	1:A:47:LEU:O	2.06	0.54
1:A:345:TYR:HA	1:A:348:LYS:HD2	1.89	0.54
1:A:547:TYR:HB2	1:A:549:PHE:HE1	1.67	0.54
1:A:13:PHE:CD2	1:A:25:LEU:HD21	2.43	0.54
1:A:35:MET:CB	1:A:44:THR:H	2.20	0.54
1:A:69:PRO:HB3	1:A:200:MET:CE	2.31	0.54
1:A:166:GLY:O	1:A:169:GLY:N	2.39	0.54
1:A:323:GLN:O	1:A:324:GLY:C	2.44	0.54
1:A:30:LYS:NZ	1:A:52:VAL:HG21	2.22	0.54
1:A:186:LEU:HG	1:A:188:VAL:HG13	1.88	0.54
1:A:167:PRO:O	1:A:171:ARG:HB2	2.08	0.54
1:A:113:THR:HG21	1:A:115:GLU:HB2	1.89	0.54
1:A:23:VAL:HG23	1:A:43:PHE:CD2	2.42	0.54
1:A:100:GLU:O	1:A:102:LEU:N	2.41	0.54
1:A:331:ASN:O	1:A:334:ASP:HB2	2.07	0.54
1:A:516:VAL:HG22	1:A:552:GLY:H	1.72	0.54
1:A:418:GLU:HB3	1:A:477:TYR:CD2	2.42	0.54
1:A:398:LYS:HB3	1:A:476:PHE:CE2	2.42	0.54
1:A:254:VAL:CG1	1:A:282:ALA:HB1	2.36	0.54
1:A:487:LEU:HB3	1:A:489:ILE:HG13	1.90	0.54
1:A:440:VAL:HG13	1:A:441:ARG:N	2.23	0.54
1:A:170:PHE:HD2	1:A:244:TYR:CD2	2.26	0.54
1:A:477:TYR:O	1:A:481:ILE:HD12	2.07	0.54
1:A:498:VAL:O	1:A:505:ILE:N	2.41	0.54
1:A:32:LEU:HD21	1:A:59:VAL:HG12	1.89	0.53
1:A:389:ILE:HA	1:A:397:TYR:HD2	1.72	0.53
1:A:483:MET:HE2	1:A:531:LEU:CD1	2.38	0.53
1:A:555:LEU:C	1:A:555:LEU:HD22	2.28	0.53
1:A:187:ASP:CG	1:A:250:ARG:HH11	2.09	0.53
1:A:124:LYS:HB3	1:A:128:LEU:CD2	2.38	0.53
1:A:346:ASP:HB2	1:A:348:LYS:NZ	2.23	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:418:GLU:O	1:A:474:PHE:HA	2.07	0.53
1:A:382:ARG:CB	1:A:382:ARG:HH11	2.21	0.53
1:A:254:VAL:HG23	1:A:255:HIS:N	2.24	0.53
1:A:144:PHE:HB2	1:A:145:PRO:CD	2.39	0.53
1:A:61:ASP:O	1:A:63:ALA:N	2.41	0.53
1:A:118:PHE:C	1:A:122:ILE:HD12	2.28	0.53
1:A:103:ILE:HB	1:A:133:ILE:HD12	1.88	0.53
1:A:429:SER:OG	1:A:455:GLN:HG2	2.07	0.53
1:A:269:ILE:HA	1:A:272:VAL:HG23	1.91	0.53
1:A:213:THR:HB	1:A:214:PRO:HD2	1.89	0.53
1:A:300:TYR:HD1	1:A:300:TYR:H	1.57	0.53
1:A:429:SER:HG	1:A:455:GLN:HG2	1.74	0.53
1:A:395:GLU:OE2	1:A:552:GLY:HA2	2.08	0.53
1:A:431:PHE:N	1:A:455:GLN:OE1	2.29	0.53
1:A:16:TRP:HA	1:A:16:TRP:CE3	2.43	0.53
1:A:125:LEU:HD23	1:A:177:ALA:HA	1.91	0.53
1:A:369:PHE:CD1	1:A:369:PHE:N	2.76	0.53
1:A:20:GLN:O	1:A:37:ARG:NH1	2.42	0.53
1:A:244:TYR:O	1:A:245:ASN:C	2.46	0.53
1:A:321:GLU:HB3	1:A:323:GLN:HE22	1.74	0.53
1:A:434:SER:CA	1:A:437:ILE:HD12	2.34	0.53
1:A:503:TRP:CE3	1:A:522:ILE:HD13	2.44	0.53
1:A:200:MET:HE2	1:A:200:MET:N	2.24	0.52
1:A:530:LEU:CB	1:A:540:GLN:HA	2.33	0.52
1:A:148:ARG:HH11	1:A:148:ARG:CB	2.22	0.52
1:A:322:ARG:CZ	1:A:330:GLY:HA3	2.39	0.52
1:A:337:LYS:HG3	1:A:338:SER:H	1.72	0.52
1:A:337:LYS:HG3	1:A:344:VAL:HG22	1.89	0.52
1:A:136:ILE:N	1:A:136:ILE:HD13	2.24	0.52
1:A:542:ILE:HD11	1:A:547:TYR:CZ	2.44	0.52
1:A:270:ALA:O	1:A:274:HIS:HD2	1.91	0.52
1:A:537:SER:O	1:A:539:PRO:HD3	2.10	0.52
1:A:264:HIS:CD2	1:A:265:ILE:N	2.78	0.52
1:A:25:LEU:HD12	1:A:33:TYR:HD2	1.74	0.52
1:A:274:HIS:H	1:A:274:HIS:CD2	2.28	0.52
1:A:15:LEU:HD22	1:A:15:LEU:C	2.29	0.52
1:A:324:GLY:O	1:A:327:THR:HG22	2.09	0.52
1:A:366:GLY:N	1:A:491:CYS:O	2.35	0.52
1:A:207:PHE:HE2	1:A:219:PHE:CE1	2.27	0.52
1:A:164:TYR:HD1	1:A:164:TYR:N	2.08	0.52
1:A:75:PRO:HG3	1:A:83:GLN:OE1	2.09	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:33:TYR:HB2	1:A:45:ILE:HD13	1.92	0.52
1:A:139:MET:HE2	1:A:376:HIS:ND1	2.25	0.52
1:A:191:ASN:O	1:A:192:HIS:HB3	2.09	0.52
1:A:257:ILE:HG22	1:A:257:ILE:O	2.09	0.52
1:A:300:TYR:CD1	1:A:300:TYR:N	2.78	0.52
1:A:193:VAL:HG13	1:A:194:GLY:N	2.25	0.52
1:A:530:LEU:N	1:A:556:TYR:CD2	2.78	0.52
1:A:30:LYS:HZ2	1:A:52:VAL:HG21	1.75	0.52
1:A:111:THR:HG21	1:A:463:SER:HB2	1.91	0.52
1:A:50:VAL:HA	1:A:52:VAL:HG22	1.91	0.51
1:A:73:TYR:O	1:A:75:PRO:HD3	2.11	0.51
1:A:76:GLU:O	1:A:77:GLY:O	2.28	0.51
1:A:13:PHE:CE2	1:A:25:LEU:HD21	2.45	0.51
1:A:35:MET:HE3	1:A:44:THR:C	2.31	0.51
1:A:240:TRP:HA	1:A:240:TRP:CE3	2.45	0.51
1:A:311:HIS:CD2	1:A:312:HIS:N	2.78	0.51
1:A:316:ALA:O	1:A:322:ARG:NH2	2.43	0.51
1:A:148:ARG:HH11	1:A:148:ARG:HB2	1.75	0.51
1:A:511:TYR:CD1	1:A:512:PHE:N	2.79	0.51
1:A:234:LEU:CD2	1:A:272:VAL:HG21	2.40	0.51
1:A:416:GLY:O	1:A:417:GLU:C	2.48	0.51
1:A:69:PRO:CB	1:A:200:MET:HE3	2.32	0.51
1:A:6:ILE:HG13	1:A:11:VAL:HG21	1.91	0.51
1:A:108:HIS:HE1	1:A:164:TYR:OH	1.93	0.51
1:A:114:PRO:HD2	1:A:123:ARG:HH21	1.76	0.51
1:A:68:ASP:O	1:A:71:SER:HB2	2.10	0.51
1:A:345:TYR:CD1	1:A:345:TYR:N	2.79	0.51
1:A:163:SER:C	1:A:165:GLY:H	2.14	0.51
1:A:310:PHE:O	1:A:311:HIS:C	2.48	0.51
1:A:329:PHE:N	1:A:329:PHE:CD1	2.77	0.51
1:A:396:SER:O	1:A:399:ILE:N	2.43	0.51
1:A:186:LEU:O	1:A:249:PHE:HA	2.11	0.51
1:A:16:TRP:CE3	1:A:42:TYR:CE1	2.99	0.51
1:A:245:ASN:HD22	1:A:245:ASN:C	2.12	0.51
1:A:269:ILE:CA	1:A:272:VAL:HG23	2.41	0.51
1:A:53:ARG:HD2	1:A:84:ILE:HG22	1.92	0.51
1:A:102:LEU:O	1:A:411:PRO:HD2	2.10	0.51
1:A:427:PHE:CD2	1:A:444:ARG:HG3	2.46	0.51
1:A:351:ASN:HD22	1:A:351:ASN:H	1.57	0.51
1:A:108:HIS:HD2	1:A:425:PHE:CZ	2.28	0.51
1:A:382:ARG:CG	1:A:382:ARG:HH11	2.24	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:409:TYR:CD1	1:A:409:TYR:N	2.78	0.50
1:A:125:LEU:HB3	1:A:180:LYS:HG3	1.93	0.50
1:A:344:VAL:HG12	1:A:345:TYR:CE1	2.46	0.50
1:A:528:GLY:O	1:A:542:ILE:HG22	2.11	0.50
1:A:259:ASP:OD2	1:A:265:ILE:N	2.40	0.50
1:A:4:TYR:CE1	1:A:72:ARG:NH1	2.80	0.50
1:A:542:ILE:HG22	1:A:556:TYR:CE2	2.47	0.50
1:A:95:THR:HG23	1:A:97:LEU:CB	2.42	0.50
1:A:543:GLU:O	1:A:547:TYR:OH	2.29	0.50
1:A:503:TRP:CE3	1:A:504:LEU:N	2.79	0.50
1:A:373:ILE:CG2	1:A:404:TYR:HD2	2.23	0.50
1:A:168:GLU:O	1:A:171:ARG:HB3	2.12	0.50
1:A:92:ASN:O	1:A:278:ARG:NH2	2.45	0.50
1:A:427:PHE:O	1:A:454:PRO:HB3	2.11	0.50
1:A:355:LYS:HG2	1:A:356:THR:N	2.26	0.50
1:A:101:ASP:N	1:A:101:ASP:OD1	2.43	0.50
1:A:43:PHE:O	1:A:44:THR:OG1	2.28	0.50
1:A:118:PHE:CD2	1:A:170:PHE:N	2.80	0.50
1:A:245:ASN:HD22	1:A:278:ARG:HH12	1.58	0.50
1:A:98:LYS:HA	1:A:99:LYS:NZ	2.27	0.50
1:A:171:ARG:O	1:A:175:ASP:OD1	2.29	0.50
1:A:526:TYR:CD1	1:A:526:TYR:N	2.79	0.50
1:A:20:GLN:HG2	1:A:23:VAL:HG22	1.93	0.50
1:A:389:ILE:HA	1:A:397:TYR:CD2	2.47	0.50
1:A:170:PHE:CD2	1:A:244:TYR:CD2	3.00	0.50
1:A:311:HIS:CD2	1:A:312:HIS:ND1	2.80	0.50
1:A:414:PHE:CD1	1:A:415:MET:N	2.79	0.50
1:A:371:VAL:HG22	1:A:409:TYR:CB	2.37	0.50
1:A:269:ILE:HA	1:A:272:VAL:CG2	2.42	0.49
1:A:434:SER:O	1:A:438:GLN:HB2	2.11	0.49
1:A:221:PHE:CD1	1:A:221:PHE:N	2.79	0.49
1:A:4:TYR:HE1	1:A:6:ILE:HD12	1.77	0.49
1:A:312:HIS:NE2	1:A:325:TYR:CD2	2.80	0.49
1:A:384:LYS:O	1:A:385:GLY:C	2.50	0.49
1:A:533:SER:OG	1:A:535:ASN:O	2.30	0.49
1:A:207:PHE:HA	1:A:219:PHE:HA	1.95	0.49
1:A:426:TYR:HB3	1:A:459:THR:HG22	1.94	0.49
1:A:99:LYS:HZ3	1:A:99:LYS:N	2.10	0.49
1:A:550:ASP:O	1:A:551:LYS:C	2.50	0.49
1:A:24:LYS:HB2	1:A:32:LEU:HD21	1.94	0.49
1:A:25:LEU:HD12	1:A:33:TYR:CD2	2.47	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:278:ARG:C	1:A:279:ILE:HD13	2.33	0.49
1:A:83:GLN:HG2	1:A:84:ILE:H	1.75	0.49
1:A:73:TYR:HB3	1:A:85:ILE:HD11	1.95	0.49
1:A:506:ILE:O	1:A:506:ILE:HG22	2.12	0.49
1:A:113:THR:HG23	1:A:115:GLU:H	1.77	0.49
1:A:25:LEU:HD13	1:A:25:LEU:C	2.32	0.49
1:A:191:ASN:ND2	1:A:252:ASP:O	2.46	0.49
1:A:411:PRO:HG3	1:A:484:ARG:CZ	2.43	0.49
1:A:67:PRO:HG2	1:A:156:TYR:OH	2.13	0.49
1:A:367:CYS:CB	1:A:410:ILE:HD11	2.43	0.49
1:A:213:THR:HB	1:A:214:PRO:CD	2.43	0.49
1:A:474:PHE:HE1	1:A:478:LYS:CD	2.15	0.49
1:A:164:TYR:CD1	1:A:164:TYR:N	2.79	0.49
1:A:503:TRP:CB	1:A:522:ILE:HD11	2.43	0.49
1:A:207:PHE:CE2	1:A:219:PHE:CE1	3.01	0.49
1:A:107:ILE:O	1:A:139:MET:HG3	2.13	0.49
1:A:254:VAL:O	1:A:257:ILE:HB	2.13	0.49
1:A:72:ARG:O	1:A:159:ALA:HA	2.13	0.48
1:A:20:GLN:O	1:A:43:PHE:HZ	1.96	0.48
1:A:161:GLN:CG	1:A:162:ASN:N	2.76	0.48
1:A:74:GLN:OE1	1:A:80:GLY:O	2.30	0.48
1:A:312:HIS:CD2	1:A:325:TYR:CD2	2.99	0.48
1:A:530:LEU:HD12	1:A:532:LEU:H	1.77	0.48
1:A:257:ILE:HG21	1:A:266:LEU:HD21	1.94	0.48
1:A:51:LYS:H	1:A:52:VAL:CG2	2.26	0.48
1:A:457:GLU:O	1:A:460:PHE:HB3	2.14	0.48
1:A:117:THR:O	1:A:121:VAL:HG13	2.14	0.48
1:A:73:TYR:OH	1:A:75:PRO:HA	2.13	0.48
1:A:467:TRP:O	1:A:469:ILE:HD12	2.14	0.48
1:A:351:ASN:ND2	1:A:351:ASN:H	2.11	0.48
1:A:234:LEU:HD22	1:A:272:VAL:HG21	1.94	0.48
1:A:487:LEU:HA	1:A:487:LEU:HD12	1.67	0.48
1:A:298:VAL:O	1:A:298:VAL:HG12	2.13	0.48
1:A:23:VAL:HG23	1:A:43:PHE:CE2	2.48	0.48
1:A:254:VAL:C	1:A:256:ALA:H	2.16	0.48
1:A:423:ASN:ND2	1:A:466:SER:HB3	2.28	0.48
1:A:19:TYR:CE1	1:A:204:GLY:HA2	2.48	0.48
1:A:409:TYR:O	1:A:484:ARG:NH2	2.45	0.48
1:A:71:SER:HB3	1:A:159:ALA:HB2	1.96	0.47
1:A:319:THR:C	1:A:321:GLU:H	2.18	0.47
1:A:325:TYR:CD1	1:A:325:TYR:N	2.81	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:323:GLN:O	1:A:326:TYR:N	2.46	0.47
1:A:518:SER:O	1:A:519:LYS:C	2.51	0.47
1:A:306:TRP:CD1	1:A:370:VAL:HG22	2.49	0.47
1:A:531:LEU:CB	1:A:555:LEU:HD13	2.43	0.47
1:A:254:VAL:HA	1:A:257:ILE:HD13	1.96	0.47
1:A:145:PRO:HG2	1:A:431:PHE:CD1	2.48	0.47
1:A:155:VAL:O	1:A:155:VAL:HG13	2.13	0.47
1:A:87:GLU:O	1:A:88:SER:C	2.52	0.47
1:A:185:ILE:O	1:A:185:ILE:HG22	2.13	0.47
1:A:274:HIS:CD2	1:A:274:HIS:N	2.80	0.47
1:A:336:VAL:HG22	1:A:337:LYS:N	2.28	0.47
1:A:355:LYS:CG	1:A:356:THR:N	2.78	0.47
1:A:542:ILE:HD12	1:A:543:GLU:N	2.15	0.47
1:A:368:ASN:HB2	1:A:369:PHE:CE1	2.48	0.47
1:A:105:TYR:CD1	1:A:107:ILE:HG13	2.49	0.47
1:A:250:ARG:O	1:A:250:ARG:HD3	2.14	0.47
1:A:444:ARG:HH12	1:A:450:GLN:HB2	1.80	0.47
1:A:536:ASN:C	1:A:538:PHE:H	2.18	0.47
1:A:124:LYS:O	1:A:125:LEU:C	2.52	0.47
1:A:365:ASP:O	1:A:369:PHE:HE1	1.98	0.47
1:A:92:ASN:O	1:A:94:GLU:N	2.44	0.47
1:A:389:ILE:HD11	2:A:576:HOH:O	2.15	0.47
1:A:471:GLU:O	1:A:475:SER:HB2	2.13	0.47
1:A:27:VAL:HG11	1:A:30:LYS:HD3	1.97	0.47
1:A:113:THR:HG23	1:A:115:GLU:CD	2.35	0.47
1:A:28:LEU:HD12	1:A:56:TYR:HA	1.96	0.47
1:A:542:ILE:CG2	1:A:556:TYR:CD2	2.97	0.47
1:A:542:ILE:CG1	1:A:543:GLU:N	2.78	0.47
1:A:211:TYR:OH	1:A:222:ASP:OD2	2.28	0.47
1:A:359:GLU:HG3	1:A:359:GLU:O	2.03	0.47
1:A:334:ASP:N	1:A:334:ASP:OD1	2.45	0.47
1:A:105:TYR:HD1	1:A:107:ILE:CG1	2.28	0.47
1:A:302:ILE:HD13	1:A:302:ILE:N	2.29	0.47
1:A:43:PHE:CD1	1:A:43:PHE:N	2.82	0.47
1:A:173:LEU:C	1:A:173:LEU:HD12	2.35	0.47
1:A:145:PRO:HG3	2:A:586:HOH:O	2.14	0.47
1:A:469:ILE:CG2	1:A:470:ASP:N	2.78	0.47
1:A:18:PRO:HD2	1:A:203:LEU:O	2.15	0.46
1:A:305:GLN:O	1:A:369:PHE:HA	2.13	0.46
1:A:452:THR:HG21	1:A:459:THR:HG23	1.94	0.46
1:A:531:LEU:HB3	1:A:555:LEU:HD12	1.95	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:444:ARG:HA	1:A:444:ARG:HD2	1.46	0.46
1:A:56:TYR:CZ	1:A:82:SER:HB2	2.50	0.46
1:A:353:ARG:C	1:A:354:ARG:HG2	2.29	0.46
1:A:504:LEU:C	1:A:504:LEU:HD23	2.36	0.46
1:A:507:LYS:CG	1:A:508:GLY:N	2.77	0.46
1:A:477:TYR:O	1:A:480:LEU:HB2	2.14	0.46
1:A:51:LYS:O	1:A:53:ARG:NE	2.48	0.46
1:A:373:ILE:C	1:A:374:GLN:HG2	2.36	0.46
1:A:102:LEU:HB3	1:A:410:ILE:HG23	1.97	0.46
1:A:217:LEU:HD12	1:A:217:LEU:H	1.79	0.46
1:A:119:GLU:HA	1:A:122:ILE:CD1	2.38	0.46
1:A:125:LEU:O	1:A:128:LEU:HB2	2.16	0.46
1:A:127:TYR:O	1:A:130:ASP:HB3	2.15	0.46
1:A:350:SER:OG	1:A:353:ARG:N	2.39	0.46
1:A:294:PRO:HA	1:A:301:ASN:HD22	1.78	0.46
1:A:495:VAL:HG13	1:A:497:VAL:HG12	1.97	0.46
1:A:198:ASN:OD1	1:A:200:MET:HG2	2.15	0.46
1:A:243:GLU:HB3	1:A:244:TYR:CD1	2.51	0.46
1:A:542:ILE:HD11	1:A:547:TYR:CE1	2.51	0.46
1:A:289:PRO:CB	1:A:293:ASN:ND2	2.79	0.46
1:A:289:PRO:HB2	1:A:293:ASN:ND2	2.31	0.46
1:A:500:GLY:HA3	1:A:503:TRP:CD1	2.48	0.46
1:A:32:LEU:HD13	1:A:32:LEU:C	2.37	0.46
1:A:4:TYR:CE1	1:A:6:ILE:CD1	2.99	0.46
1:A:170:PHE:O	1:A:174:VAL:HG13	2.16	0.46
1:A:308:ASP:O	1:A:312:HIS:ND1	2.48	0.46
1:A:94:GLU:HG2	1:A:95:THR:H	1.81	0.46
1:A:253:ALA:HA	1:A:255:HIS:CE1	2.51	0.46
1:A:267:GLU:O	1:A:271:ASP:OD1	2.34	0.46
1:A:11:VAL:HG13	1:A:13:PHE:CE1	2.51	0.46
1:A:207:PHE:CD2	1:A:219:PHE:CD1	3.04	0.46
1:A:4:TYR:CZ	1:A:72:ARG:NH1	2.83	0.46
1:A:332:LEU:HA	1:A:335:ILE:HG13	1.98	0.46
1:A:473:ILE:HA	1:A:473:ILE:HD12	1.61	0.46
1:A:393:ASP:OD1	1:A:396:SER:N	2.36	0.46
1:A:53:ARG:CD	1:A:84:ILE:HG22	2.46	0.46
1:A:240:TRP:HB2	1:A:249:PHE:HZ	1.81	0.46
1:A:240:TRP:CD1	1:A:249:PHE:HE2	2.34	0.46
1:A:303:ASP:O	1:A:304:ALA:HB2	2.15	0.46
1:A:108:HIS:HD2	1:A:425:PHE:CE1	2.33	0.46
1:A:542:ILE:CD1	1:A:547:TYR:CZ	2.99	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:229:VAL:CG2	1:A:230:ARG:N	2.79	0.46
1:A:92:ASN:C	1:A:94:GLU:H	2.19	0.45
1:A:53:ARG:HD3	1:A:84:ILE:HB	1.98	0.45
1:A:193:VAL:CG1	1:A:194:GLY:N	2.79	0.45
1:A:498:VAL:CG1	1:A:499:ASN:N	2.79	0.45
1:A:507:LYS:HE2	1:A:508:GLY:O	2.16	0.45
1:A:507:LYS:HG2	1:A:508:GLY:O	2.15	0.45
1:A:440:VAL:CG1	1:A:441:ARG:N	2.79	0.45
1:A:11:VAL:CG1	1:A:13:PHE:CE1	3.00	0.45
1:A:324:GLY:O	1:A:325:TYR:C	2.53	0.45
1:A:477:TYR:C	1:A:481:ILE:HD12	2.37	0.45
1:A:530:LEU:HB2	1:A:556:TYR:CE2	2.51	0.45
1:A:289:PRO:O	1:A:290:ARG:C	2.55	0.45
1:A:294:PRO:O	1:A:299:GLY:N	2.43	0.45
1:A:503:TRP:CZ3	1:A:505:ILE:CD1	3.00	0.45
1:A:11:VAL:CG1	1:A:13:PHE:HE1	2.29	0.45
1:A:14:THR:O	1:A:15:LEU:HB2	2.15	0.45
1:A:108:HIS:O	1:A:109:VAL:C	2.55	0.45
1:A:444:ARG:NH1	1:A:450:GLN:CB	2.80	0.45
1:A:16:TRP:CE3	1:A:16:TRP:CA	3.00	0.45
1:A:59:VAL:HA	1:A:64:SER:O	2.17	0.45
1:A:346:ASP:CB	1:A:348:LYS:NZ	2.79	0.45
1:A:376:HIS:O	1:A:380:GLY:HA3	2.17	0.45
1:A:286:LEU:HD12	1:A:286:LEU:H	1.80	0.45
1:A:487:LEU:CB	1:A:489:ILE:HG13	2.46	0.45
1:A:138:ILE:N	1:A:138:ILE:CD1	2.80	0.45
1:A:85:ILE:CG2	1:A:86:GLN:N	2.79	0.45
1:A:310:PHE:HD1	1:A:338:SER:HG	1.64	0.45
1:A:84:ILE:C	1:A:85:ILE:HD12	2.37	0.45
1:A:250:ARG:C	1:A:250:ARG:HD3	2.37	0.45
1:A:45:ILE:CG2	1:A:46:THR:N	2.80	0.45
1:A:4:TYR:HE1	1:A:6:ILE:CD1	2.29	0.45
1:A:95:THR:HG23	1:A:97:LEU:H	1.81	0.45
1:A:289:PRO:O	1:A:293:ASN:ND2	2.39	0.45
1:A:293:ASN:CB	1:A:294:PRO:HD2	2.47	0.45
1:A:194:GLY:HA2	1:A:195:PRO:HD2	1.70	0.45
1:A:444:ARG:HD2	1:A:448:ASN:OD1	2.17	0.45
1:A:65:GLU:HG2	1:A:65:GLU:H	1.60	0.45
1:A:376:HIS:CG	1:A:377:ASP:N	2.84	0.45
1:A:479:ILE:H	1:A:479:ILE:HG13	1.51	0.45
1:A:404:TYR:CZ	1:A:405:LEU:CD1	3.00	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:512:PHE:N	1:A:512:PHE:CD1	2.85	0.45
1:A:221:PHE:O	1:A:226:SER:HB2	2.17	0.44
1:A:118:PHE:HE2	1:A:166:GLY:H	1.65	0.44
1:A:118:PHE:CE2	1:A:170:PHE:HB2	2.51	0.44
1:A:279:ILE:CG2	1:A:280:VAL:N	2.80	0.44
1:A:503:TRP:CG	1:A:522:ILE:CD1	2.99	0.44
1:A:504:LEU:HB3	1:A:515:TYR:HB2	1.99	0.44
1:A:410:ILE:HA	1:A:411:PRO:HD3	1.56	0.44
1:A:404:TYR:CE1	1:A:405:LEU:CD1	3.00	0.44
1:A:174:VAL:HB	1:A:184:VAL:HG11	1.98	0.44
1:A:264:HIS:HB3	1:A:300:TYR:CE2	2.52	0.44
1:A:30:LYS:NZ	1:A:52:VAL:CG2	2.80	0.44
1:A:437:ILE:CG2	1:A:455:GLN:NE2	2.79	0.44
1:A:339:TYR:CE1	1:A:403:LEU:HD22	2.51	0.44
1:A:523:GLU:O	1:A:524:VAL:C	2.55	0.44
1:A:4:TYR:CE1	1:A:6:ILE:HD11	2.52	0.44
1:A:145:PRO:CG	1:A:431:PHE:HE1	2.30	0.44
1:A:510:GLU:O	1:A:511:TYR:HB3	2.17	0.44
1:A:156:TYR:O	1:A:159:ALA:N	2.48	0.44
1:A:294:PRO:HA	1:A:301:ASN:HD21	1.81	0.44
1:A:84:ILE:CD1	1:A:84:ILE:N	2.79	0.44
1:A:84:ILE:HG22	1:A:85:ILE:N	2.33	0.44
1:A:423:ASN:HD21	1:A:466:SER:HB3	1.82	0.44
1:A:176:GLU:O	1:A:178:HIS:N	2.50	0.44
1:A:187:ASP:OD1	1:A:250:ARG:NH1	2.43	0.44
1:A:503:TRP:CG	1:A:522:ILE:HD13	2.52	0.44
1:A:19:TYR:N	1:A:19:TYR:CD1	2.84	0.44
1:A:122:ILE:HA	1:A:125:LEU:HD13	2.00	0.44
1:A:314:ILE:CA	1:A:335:ILE:HD13	2.47	0.44
1:A:139:MET:CE	1:A:376:HIS:ND1	2.80	0.44
1:A:13:PHE:CD2	1:A:25:LEU:CD2	3.00	0.44
1:A:287:ASN:CB	1:A:343:PHE:CD1	2.99	0.44
1:A:304:ALA:CB	1:A:368:ASN:O	2.66	0.44
1:A:530:LEU:CD1	1:A:532:LEU:H	2.30	0.44
1:A:444:ARG:NH1	1:A:450:GLN:HB3	2.33	0.44
1:A:534:SER:OG	1:A:553:PHE:N	2.30	0.44
1:A:379:VAL:O	1:A:382:ARG:HG3	2.16	0.44
1:A:287:ASN:HB3	1:A:343:PHE:CE1	2.53	0.44
1:A:307:VAL:HG21	1:A:342:VAL:CG1	2.48	0.44
1:A:307:VAL:HG21	1:A:369:PHE:HB3	1.97	0.44
1:A:293:ASN:O	1:A:301:ASN:HA	2.18	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:6:ILE:CG1	1:A:11:VAL:HG23	2.48	0.44
1:A:304:ALA:CB	1:A:368:ASN:C	2.87	0.44
1:A:312:HIS:HB3	1:A:329:PHE:CE1	2.53	0.44
1:A:97:LEU:HA	1:A:97:LEU:HD23	1.68	0.44
1:A:539:PRO:O	1:A:540:GLN:C	2.57	0.44
1:A:450:GLN:HE21	1:A:450:GLN:HB2	1.58	0.44
1:A:441:ARG:HH11	1:A:453:ASP:CG	2.19	0.44
1:A:350:SER:OG	1:A:350:SER:O	2.36	0.43
1:A:35:MET:HA	1:A:44:THR:O	2.18	0.43
1:A:62:ASP:O	1:A:63:ALA:HB3	2.18	0.43
1:A:281:ILE:O	1:A:281:ILE:HG22	2.11	0.43
1:A:323:GLN:O	1:A:324:GLY:O	2.36	0.43
1:A:392:VAL:CG2	1:A:397:TYR:H	2.31	0.43
1:A:254:VAL:CG2	1:A:255:HIS:N	2.80	0.43
1:A:140:PRO:HD3	1:A:187:ASP:CG	2.38	0.43
1:A:315:HIS:CD2	1:A:315:HIS:C	2.92	0.43
1:A:532:LEU:O	1:A:555:LEU:N	2.50	0.43
1:A:144:PHE:CE1	1:A:149:ASP:CB	3.01	0.43
1:A:47:LEU:HD13	1:A:47:LEU:HA	1.52	0.43
1:A:70:ALA:O	1:A:71:SER:C	2.56	0.43
1:A:125:LEU:HD12	1:A:125:LEU:N	2.33	0.43
1:A:124:LYS:HG2	1:A:127:TYR:CD2	2.48	0.43
1:A:265:ILE:HD12	1:A:268:GLU:CB	2.45	0.43
1:A:199:TYR:O	1:A:203:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:398:LYS:HB3	1:A:476:PHE:HE2	1.84	0.43
1:A:373:ILE:HD13	1:A:404:TYR:CD2	2.54	0.43
1:A:427:PHE:CD2	1:A:444:ARG:CG	3.02	0.43
1:A:175:ASP:N	1:A:175:ASP:OD1	2.50	0.43
1:A:19:TYR:HD1	1:A:19:TYR:N	2.17	0.43
1:A:24:LYS:HA	1:A:33:TYR:O	2.19	0.43
1:A:473:ILE:HG22	1:A:474:PHE:N	2.33	0.43
1:A:104:ILE:HG13	1:A:412:MET:CB	2.49	0.43
1:A:259:ASP:OD2	1:A:264:HIS:HA	2.19	0.43
1:A:51:LYS:HA	1:A:51:LYS:HD2	1.51	0.43
1:A:84:ILE:CG2	1:A:85:ILE:N	2.81	0.43
1:A:437:ILE:CG2	1:A:455:GLN:HE21	2.32	0.43
1:A:24:LYS:HD3	1:A:34:GLU:HG3	1.99	0.43
1:A:292:VAL:HA	1:A:302:ILE:O	2.18	0.43
1:A:513:SER:OG	1:A:515:TYR:HE1	2.00	0.43
1:A:427:PHE:HB2	1:A:444:ARG:NH2	2.34	0.43
1:A:216:GLY:C	1:A:217:LEU:HG	2.39	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:441:ARG:O	1:A:445:LYS:HB3	2.19	0.43
1:A:59:VAL:HG23	1:A:64:SER:O	2.19	0.43
1:A:213:THR:CB	1:A:214:PRO:CD	2.97	0.43
1:A:324:GLY:O	1:A:326:TYR:N	2.52	0.43
1:A:337:LYS:CG	1:A:338:SER:N	2.79	0.43
1:A:353:ARG:CZ	1:A:357:HIS:CD2	3.02	0.43
1:A:293:ASN:O	1:A:301:ASN:N	2.49	0.43
1:A:30:LYS:HZ1	1:A:52:VAL:HG22	1.84	0.43
1:A:83:GLN:O	1:A:85:ILE:HD12	2.19	0.43
1:A:102:LEU:HB3	1:A:410:ILE:CG2	2.49	0.42
1:A:511:TYR:HD1	1:A:512:PHE:C	2.22	0.42
1:A:71:SER:OG	1:A:74:GLN:NE2	2.52	0.42
1:A:92:ASN:N	1:A:245:ASN:OD1	2.53	0.42
1:A:530:LEU:HD12	1:A:530:LEU:C	2.31	0.42
1:A:395:GLU:CD	1:A:535:ASN:HD21	2.22	0.42
1:A:19:TYR:CG	1:A:204:GLY:HA2	2.54	0.42
1:A:104:ILE:HG13	1:A:412:MET:HB2	2.00	0.42
1:A:553:PHE:CD1	1:A:554:ALA:N	2.87	0.42
1:A:37:ARG:HG3	1:A:38:ASP:N	2.28	0.42
1:A:7:ASP:HB2	1:A:10:GLU:O	2.19	0.42
1:A:246:VAL:CG1	1:A:247:ASP:N	2.80	0.42
1:A:287:ASN:HB2	1:A:358:GLY:HA2	1.97	0.42
1:A:346:ASP:CB	1:A:348:LYS:HZ1	2.31	0.42
1:A:289:PRO:O	1:A:293:ASN:HB2	2.20	0.42
1:A:433:ASP:OD2	1:A:436:LEU:N	2.52	0.42
1:A:507:LYS:HG2	1:A:508:GLY:H	1.82	0.42
1:A:316:ALA:O	1:A:319:THR:O	2.38	0.42
1:A:341:ASP:O	1:A:342:VAL:C	2.58	0.42
1:A:504:LEU:HD21	1:A:506:ILE:CD1	2.49	0.42
1:A:142:ALA:O	1:A:143:GLN:C	2.58	0.42
1:A:229:VAL:HG22	1:A:230:ARG:N	2.34	0.42
1:A:15:LEU:HD23	1:A:15:LEU:HA	1.88	0.42
1:A:503:TRP:HZ3	1:A:505:ILE:HG23	1.76	0.42
1:A:408:PRO:O	1:A:491:CYS:N	2.47	0.42
1:A:182:LEU:HD22	1:A:182:LEU:HA	1.80	0.42
1:A:18:PRO:HG2	1:A:204:GLY:HA3	2.01	0.42
1:A:200:MET:HB2	1:A:207:PHE:CE1	2.54	0.42
1:A:203:LEU:HB2	1:A:206:TYR:CE1	2.43	0.42
1:A:71:SER:OG	1:A:82:SER:HB3	2.19	0.42
1:A:131:LEU:HD12	1:A:131:LEU:C	2.31	0.42
1:A:317:TYR:CB	1:A:335:ILE:HD11	2.50	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:350:SER:OG	1:A:353:ARG:HG3	2.19	0.42
1:A:254:VAL:HG13	1:A:254:VAL:H	1.47	0.42
1:A:171:ARG:HD2	1:A:171:ARG:HA	1.42	0.42
1:A:293:ASN:HA	1:A:294:PRO:HD3	1.75	0.42
1:A:187:ASP:HA	1:A:250:ARG:O	2.20	0.42
1:A:339:TYR:HE1	1:A:403:LEU:HD22	1.83	0.42
1:A:269:ILE:C	1:A:272:VAL:HG23	2.40	0.42
1:A:50:VAL:HG13	1:A:51:LYS:N	2.35	0.42
1:A:240:TRP:HA	1:A:240:TRP:HE3	1.84	0.42
1:A:144:PHE:CD1	1:A:149:ASP:HB2	2.55	0.42
1:A:33:TYR:HB2	1:A:45:ILE:CD1	2.49	0.42
1:A:497:VAL:HB	1:A:506:ILE:HG12	2.02	0.42
1:A:442:GLU:O	1:A:446:LYS:N	2.44	0.42
1:A:143:GLN:OE1	1:A:161:GLN:HG3	2.20	0.41
1:A:46:THR:C	1:A:47:LEU:HD22	2.41	0.41
1:A:544:GLU:OE2	1:A:544:GLU:N	2.37	0.41
1:A:347:GLY:HA2	1:A:357:HIS:O	2.20	0.41
1:A:140:PRO:CG	1:A:152:TYR:CE1	2.98	0.41
1:A:538:PHE:CG	1:A:554:ALA:HB2	2.55	0.41
1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:GLY:H	1.31	0.41
1:A:234:LEU:HD22	1:A:272:VAL:CG2	2.51	0.41
1:A:503:TRP:HE3	1:A:504:LEU:N	2.18	0.41
1:A:35:MET:HE2	1:A:44:THR:HA	2.03	0.41
1:A:124:LYS:O	1:A:127:TYR:HB3	2.20	0.41
1:A:476:PHE:HD1	1:A:476:PHE:HA	1.68	0.41
1:A:288:ASP:HA	1:A:289:PRO:HD2	1.27	0.41
1:A:228:GLU:O	1:A:231:LYS:N	2.49	0.41
1:A:538:PHE:CD1	1:A:554:ALA:CB	3.03	0.41
1:A:105:TYR:HD1	1:A:107:ILE:HG13	1.86	0.41
1:A:66:ILE:HA	1:A:67:PRO:HD3	1.84	0.41
1:A:176:GLU:O	1:A:177:ALA:C	2.59	0.41
1:A:95:THR:HG23	1:A:97:LEU:CA	2.51	0.41
1:A:389:ILE:CD1	1:A:397:TYR:CE2	3.00	0.41
1:A:187:ASP:CG	1:A:250:ARG:HD2	2.41	0.41
1:A:251:LEU:HD23	2:A:582:HOH:O	2.20	0.41
1:A:274:HIS:HE1	1:A:303:ASP:OD1	2.03	0.41
1:A:107:ILE:CG2	1:A:108:HIS:N	2.83	0.41
1:A:413:ILE:HG23	1:A:417:GLU:OE2	2.21	0.41
1:A:436:LEU:O	1:A:438:GLN:N	2.54	0.41
1:A:419:TYR:HD1	1:A:419:TYR:O	2.03	0.41
1:A:403:LEU:HD23	1:A:403:LEU:HA	1.58	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:91:PHE:CE2	1:A:242:LYS:HD2	2.55	0.41
1:A:35:MET:HA	1:A:45:ILE:HG12	2.03	0.40
1:A:483:MET:HG3	1:A:531:LEU:HD12	2.02	0.40
1:A:30:LYS:HZ1	1:A:52:VAL:CG2	2.34	0.40
1:A:336:VAL:HG22	1:A:340:LYS:HZ2	1.87	0.40
1:A:50:VAL:CG1	1:A:51:LYS:N	2.80	0.40
1:A:83:GLN:CG	1:A:84:ILE:N	2.79	0.40
1:A:504:LEU:HD21	1:A:506:ILE:CG1	2.51	0.40
1:A:503:TRP:CZ3	1:A:505:ILE:HG12	2.46	0.40
1:A:499:ASN:N	1:A:499:ASN:OD1	2.54	0.40
1:A:162:ASN:HB3	1:A:163:SER:H	1.26	0.40
1:A:542:ILE:HG13	1:A:543:GLU:N	2.36	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all X-ray entries followed by that with respect to entries of similar resolution.

The Analysed column shows the number of residues for which the backbone conformation was analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	555/558 (100%)	392 (71%)	110 (20%)	53 (10%)	1 3

All (53) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	30	LYS
1	A	62	ASP
1	A	109	VAL
1	A	157	LEU
1	A	167	PRO
1	A	213	THR
1	A	214	PRO
1	A	224	ALA
1	A	226	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	245	ASN
1	A	255	HIS
1	A	302	ILE
1	A	342	VAL
1	A	385	GLY
1	A	460	PHE
1	A	467	TRP
1	A	540	GLN
1	A	77	GLY
1	A	93	ASN
1	A	97	LEU
1	A	112	PHE
1	A	164	TYR
1	A	201	VAL
1	A	223	ASP
1	A	358	GLY
1	A	362	GLY
1	A	397	TYR
1	A	438	GLN
1	A	452	THR
1	A	524	VAL
1	A	2	PHE
1	A	7	ASP
1	A	63	ALA
1	A	101	ASP
1	A	143	GLN
1	A	162	ASN
1	A	301	ASN
1	A	324	GLY
1	A	360	PRO
1	A	417	GLU
1	A	468	LYS
1	A	18	PRO
1	A	51	LYS
1	A	52	VAL
1	A	61	ASP
1	A	176	GLU
1	A	253	ALA
1	A	311	HIS
1	A	239	TYR
1	A	89	LYS
1	A	177	ALA

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	437	ILE
1	A	67	PRO

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all X-ray entries followed by that with respect to entries of similar resolution.

The Analysed column shows the number of residues for which the sidechain conformation was analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	485/494 (98%)	295 (61%)	190 (39%)	0 0

All (190) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1	THR
1	A	2	PHE
1	A	9	ASN
1	A	10	GLU
1	A	11	VAL
1	A	12	ILE
1	A	14	THR
1	A	15	LEU
1	A	16	TRP
1	A	20	GLN
1	A	21	LYS
1	A	23	VAL
1	A	26	LYS
1	A	30	LYS
1	A	35	MET
1	A	37	ARG
1	A	38	ASP
1	A	46	THR
1	A	47	LEU
1	A	51	LYS
1	A	52	VAL
1	A	53	ARG
1	A	57	LYS
1	A	60	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	62	ASP
1	A	64	SER
1	A	65	GLU
1	A	86	GLN
1	A	89	LYS
1	A	90	GLU
1	A	92	ASN
1	A	95	THR
1	A	99	LYS
1	A	100	GLU
1	A	101	ASP
1	A	103	ILE
1	A	104	ILE
1	A	108	HIS
1	A	109	VAL
1	A	113	THR
1	A	121	VAL
1	A	124	LYS
1	A	126	ASP
1	A	127	TYR
1	A	129	LYS
1	A	131	LEU
1	A	133	ILE
1	A	136	ILE
1	A	143	GLN
1	A	148	ARG
1	A	155	VAL
1	A	163	SER
1	A	168	GLU
1	A	171	ARG
1	A	172	LYS
1	A	175	ASP
1	A	179	LYS
1	A	182	LEU
1	A	184	VAL
1	A	187	ASP
1	A	189	VAL
1	A	193	VAL
1	A	198	ASN
1	A	207	PHE
1	A	208	SER
1	A	209	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	210	LYS
1	A	211	TYR
1	A	212	LYS
1	A	215	TRP
1	A	217	LEU
1	A	223	ASP
1	A	227	ASP
1	A	228	GLU
1	A	230	ARG
1	A	232	PHE
1	A	233	ILE
1	A	237	VAL
1	A	241	ILE
1	A	242	LYS
1	A	243	GLU
1	A	245	ASN
1	A	257	ILE
1	A	258	ILE
1	A	259	ASP
1	A	261	SER
1	A	263	LYS
1	A	273	VAL
1	A	275	LYS
1	A	277	ASN
1	A	279	ILE
1	A	281	ILE
1	A	284	SER
1	A	286	LEU
1	A	292	VAL
1	A	295	LYS
1	A	296	GLU
1	A	300	TYR
1	A	301	ASN
1	A	302	ILE
1	A	305	GLN
1	A	309	ASP
1	A	312	HIS
1	A	315	HIS
1	A	322	ARG
1	A	323	GLN
1	A	325	TYR
1	A	329	PHE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	332	LEU
1	A	335	ILE
1	A	336	VAL
1	A	337	LYS
1	A	339	TYR
1	A	340	LYS
1	A	346	ASP
1	A	348	LYS
1	A	349	TYR
1	A	350	SER
1	A	353	ARG
1	A	354	ARG
1	A	359	GLU
1	A	361	VAL
1	A	363	GLU
1	A	364	LEU
1	A	369	PHE
1	A	381	ASN
1	A	382	ARG
1	A	384	LYS
1	A	387	ARG
1	A	388	ILE
1	A	389	ILE
1	A	391	LEU
1	A	392	VAL
1	A	393	ASP
1	A	404	TYR
1	A	412	MET
1	A	413	ILE
1	A	418	GLU
1	A	419	TYR
1	A	421	GLU
1	A	426	TYR
1	A	433	ASP
1	A	434	SER
1	A	435	LYS
1	A	437	ILE
1	A	444	ARG
1	A	445	LYS
1	A	447	GLU
1	A	448	ASN
1	A	450	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	452	THR
1	A	453	ASP
1	A	458	SER
1	A	463	SER
1	A	464	LYS
1	A	468	LYS
1	A	471	GLU
1	A	473	ILE
1	A	476	PHE
1	A	480	LEU
1	A	482	LYS
1	A	483	MET
1	A	486	GLU
1	A	487	LEU
1	A	488	SER
1	A	494	ARG
1	A	495	VAL
1	A	497	VAL
1	A	498	VAL
1	A	501	GLU
1	A	502	ASN
1	A	509	ARG
1	A	510	GLU
1	A	512	PHE
1	A	514	LEU
1	A	516	VAL
1	A	519	LYS
1	A	523	GLU
1	A	526	TYR
1	A	527	SER
1	A	529	THR
1	A	531	LEU
1	A	532	LEU
1	A	533	SER
1	A	536	ASN
1	A	537	SER
1	A	540	GLN
1	A	549	PHE
1	A	550	ASP
1	A	553	PHE

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (14) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	74	GLN
1	A	79	HIS
1	A	108	HIS
1	A	161	GLN
1	A	274	HIS
1	A	301	ASN
1	A	311	HIS
1	A	323	GLN
1	A	351	ASN
1	A	381	ASN
1	A	423	ASN
1	A	450	GLN
1	A	496	ASN
1	A	535	ASN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

5.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

There are no non-standard protein/DNA/RNA residues in this entry.

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data [i](#)

6.1 Protein, DNA and RNA chains [i](#)

In the following table, the column labelled ‘#RSRZ> 2’ contains the number (and percentage) of RSRZ outliers, followed by percent RSRZ outliers for the chain as percentile scores relative to all X-ray entries and entries of similar resolution. The OWAB column contains the minimum, median, 95th percentile and maximum values of the occupancy-weighted average B-factor per residue. The column labelled ‘Q< 0.9’ lists the number of (and percentage) of residues with an average occupancy less than 0.9.

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2		OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	557/558 (99%)	-0.57	3 (0%)	91 76	4, 42, 85, 100	0

All (3) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	6	ILE	2.1
1	A	11	VAL	2.1
1	A	9	ASN	2.0

6.2 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

There are no non-standard protein/DNA/RNA residues in this entry.

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.