



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Jan 31, 2016 – 08:41 PM GMT

PDB ID : 1LIO  
Title : STRUCTURE OF APO T. GONDII ADENOSINE KINASE  
Authors : Schumacher, M.A.; Scott, D.M.; Mathews, I.I.; Ealick, S.E.; Brennan, R.G.  
Deposited on : 2002-04-17  
Resolution : 2.50 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](mailto: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) : **NOT EXECUTED**  
EDS : **NOT EXECUTED**  
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : trunk26865

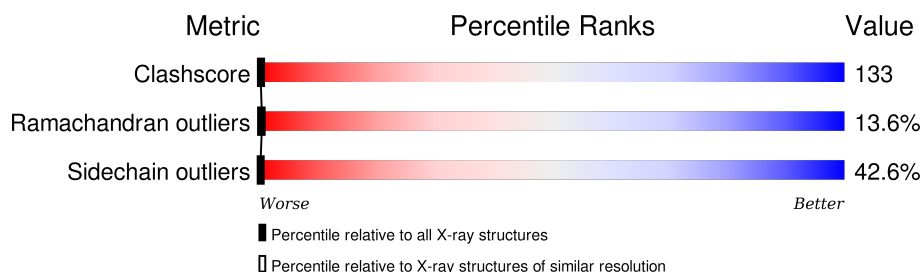
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*X-RAY DIFFRACTION*

The reported resolution of this entry is 2.50 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))
Clashscore	102246	4242 (2.50-2.50)
Ramachandran outliers	100387	4156 (2.50-2.50)
Sidechain outliers	100360	4158 (2.50-2.50)

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  $\geq 3$ , 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.

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	363	

## 2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2599 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 adenosine kinase.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	329	Total	C	N	O	S	0	0	0
			2420	1537	413	455	15			

There are 4 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	126	THR	VAL	CONFLICT	UNP Q9TVW2
A	150	ILE	LEU	CONFLICT	UNP Q9TVW2
A	240	ASP	GLU	CONFLICT	UNP Q9TVW2
A	327	GLY	ALA	CONFLICT	UNP Q9TVW2

- Molecule 2 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
2	A	179	Total	O	0	0
			179	179		

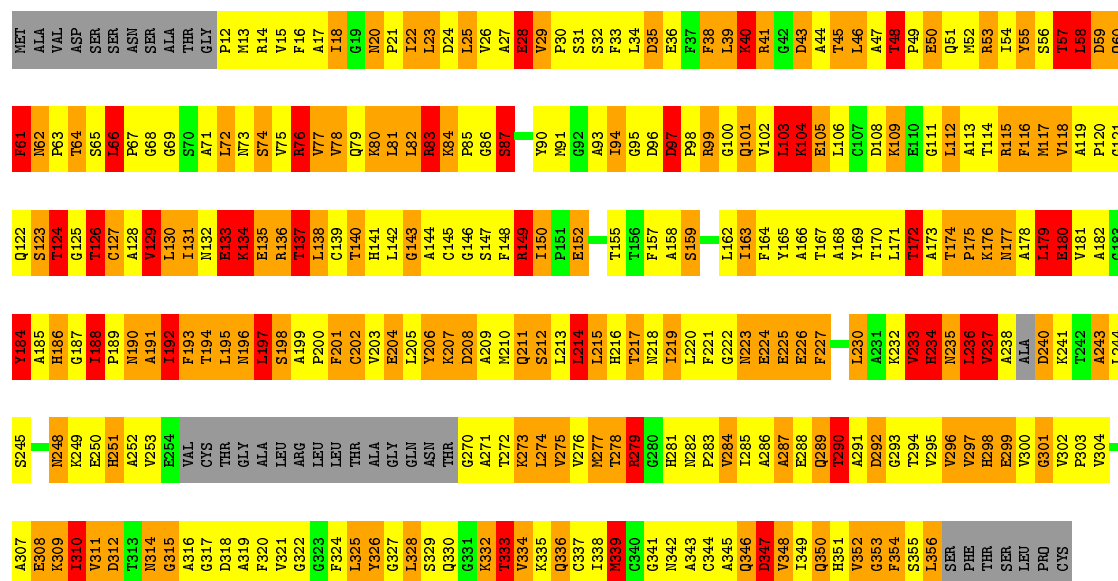
### 3 Residue-property plots

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.

Note EDS was not executed.

- Molecule 1: adenosine kinase

Chain A: 



## 4 Data and refinement statistics

Xtriage (Phenix) and EDS were not executed - this section will therefore be incomplete.

Property	Value	Source
Space group	P 1 21 1	Depositor
Cell constants a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	47.10 Å   68.00 Å   56.80 Å 90.00°   100.80°   90.00°	Depositor
Resolution (Å)	10.00 – 2.50	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	99.0 (10.00-2.50)	Depositor
$R_{merge}$	0.10	Depositor
$R_{sym}$	(Not available)	Depositor
Refinement program	TNT	Depositor
R, $R_{free}$	0.198 , 0.260	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	2599	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	50.0	wwPDB-VP

## 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	1.20	10/2465 (0.4%)	1.79	86/3350 (2.6%)

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	6	0

All (10) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	105	GLU	CG-CD	8.42	1.64	1.51
1	A	224	GLU	CG-CD	7.96	1.63	1.51
1	A	184	TYR	CB-CG	7.57	1.63	1.51
1	A	61	PHE	CB-CG	-6.49	1.40	1.51
1	A	87	SER	CA-CB	6.27	1.62	1.52
1	A	180	GLU	CG-CD	-5.82	1.43	1.51
1	A	159	SER	N-CA	5.29	1.56	1.46
1	A	192	ILE	CA-CB	5.22	1.66	1.54
1	A	38	PHE	N-CA	5.21	1.56	1.46
1	A	193	PHE	CA-CB	-5.04	1.42	1.53

All (86) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	326	TYR	CB-CA-C	-10.06	90.28	110.40
1	A	251	HIS	CB-CA-C	9.27	128.94	110.40
1	A	289	GLN	O-C-N	8.76	136.72	122.70
1	A	136	ARG	NE-CZ-NH1	-8.47	116.06	120.30
1	A	279	ARG	NE-CZ-NH2	8.02	124.31	120.30
1	A	41	ARG	NE-CZ-NH2	7.98	124.29	120.30

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	180	GLU	N-CA-CB	-7.90	96.38	110.60
1	A	188	ILE	CG1-CB-CG2	7.89	128.77	111.40
1	A	333	THR	N-CA-CB	7.81	125.14	110.30
1	A	72	LEU	CA-CB-CG	-7.80	97.36	115.30
1	A	40	LYS	O-C-N	7.67	134.97	122.70
1	A	103	LEU	CB-CA-C	7.64	124.72	110.20
1	A	115	ARG	NE-CZ-NH2	7.64	124.12	120.30
1	A	124	THR	N-CA-CB	7.63	124.80	110.30
1	A	236	LEU	CA-CB-CG	7.62	132.82	115.30
1	A	193	PHE	N-CA-CB	7.62	124.31	110.60
1	A	38	PHE	N-CA-CB	7.33	123.79	110.60
1	A	241	LYS	N-CA-CB	-7.12	97.78	110.60
1	A	129	VAL	CG1-CB-CG2	7.10	122.25	110.90
1	A	328	LEU	CA-CB-CG	-7.07	99.03	115.30
1	A	194	THR	N-CA-CB	-7.07	96.87	110.30
1	A	64	THR	N-CA-CB	7.05	123.70	110.30
1	A	186	HIS	CB-CA-C	7.04	124.49	110.40
1	A	103	LEU	N-CA-CB	7.02	124.44	110.40
1	A	149	ARG	NE-CZ-NH2	6.95	123.77	120.30
1	A	179	LEU	CB-CA-C	6.72	122.97	110.20
1	A	289	GLN	CA-C-N	-6.66	102.54	117.20
1	A	339	MET	CA-CB-CG	6.62	124.55	113.30
1	A	61	PHE	CB-CA-C	-6.61	97.18	110.40
1	A	348	VAL	CB-CA-C	6.56	123.87	111.40
1	A	236	LEU	N-CA-CB	-6.46	97.49	110.40
1	A	84	LYS	C-N-CD	-6.44	106.43	120.60
1	A	290	THR	N-CA-CB	-6.36	98.22	110.30
1	A	184	TYR	CB-CG-CD2	6.31	124.79	121.00
1	A	104	LYS	CB-CA-C	6.31	123.02	110.40
1	A	356	LEU	CA-CB-CG	-6.31	100.79	115.30
1	A	53	ARG	NE-CZ-NH1	-6.31	117.15	120.30
1	A	136	ARG	CB-CA-C	-6.28	97.84	110.40
1	A	277	MET	CG-SD-CE	6.23	110.17	100.20
1	A	236	LEU	CB-CA-C	-6.22	98.38	110.20
1	A	240	ASP	CB-CA-C	6.17	122.73	110.40
1	A	234	HIS	CB-CA-C	6.08	122.55	110.40
1	A	214	LEU	CB-CG-CD1	6.07	121.32	111.00
1	A	328	LEU	CB-CG-CD2	6.07	121.32	111.00
1	A	97	ASP	CB-CA-C	6.04	122.49	110.40
1	A	84	LYS	CB-CA-C	6.04	122.48	110.40
1	A	83	ARG	NE-CZ-NH2	6.04	123.32	120.30
1	A	237	VAL	N-CA-CB	6.04	124.78	111.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	40	LYS	CA-C-N	-6.03	103.94	117.20
1	A	57	THR	CA-CB-CG2	-5.99	104.01	112.40
1	A	129	VAL	CB-CA-C	5.91	122.64	111.40
1	A	55	TYR	CA-CB-CG	-5.90	102.18	113.40
1	A	292	ASP	N-CA-CB	5.90	121.22	110.60
1	A	356	LEU	CB-CA-C	5.89	121.39	110.20
1	A	136	ARG	NE-CZ-NH2	5.86	123.23	120.30
1	A	211	GLN	CB-CA-C	5.83	122.06	110.40
1	A	39	LEU	CB-CA-C	-5.77	99.23	110.20
1	A	137	THR	N-CA-CB	5.75	121.23	110.30
1	A	333	THR	CA-CB-CG2	-5.67	104.46	112.40
1	A	117	MET	CG-SD-CE	5.64	109.23	100.20
1	A	310	ILE	N-CA-CB	5.61	123.70	110.80
1	A	103	LEU	CB-CG-CD2	5.61	120.53	111.00
1	A	40	LYS	N-CA-CB	5.59	120.67	110.60
1	A	116	PHE	CB-CA-C	-5.57	99.26	110.40
1	A	202	CYS	CB-CA-C	-5.52	99.36	110.40
1	A	248	ASN	N-CA-CB	5.47	120.45	110.60
1	A	233	VAL	CA-CB-CG1	-5.45	102.73	110.90
1	A	126	THR	CA-CB-CG2	-5.41	104.82	112.40
1	A	347	ASP	CB-CA-C	-5.40	99.60	110.40
1	A	234	HIS	N-CA-CB	5.37	120.27	110.60
1	A	38	PHE	CB-CA-C	-5.35	99.69	110.40
1	A	61	PHE	N-CA-CB	-5.31	101.04	110.60
1	A	206	TYR	N-CA-CB	5.30	120.15	110.60
1	A	204	GLU	CB-CA-C	-5.30	99.80	110.40
1	A	292	ASP	CA-CB-CG	5.25	124.95	113.40
1	A	96	ASP	CB-CG-OD1	5.24	123.02	118.30
1	A	136	ARG	N-CA-CB	-5.20	101.25	110.60
1	A	245	SER	CB-CA-C	5.16	119.91	110.10
1	A	55	TYR	CB-CA-C	5.15	120.70	110.40
1	A	133	GLU	CB-CA-C	5.15	120.70	110.40
1	A	66	LEU	CA-CB-CG	5.11	127.06	115.30
1	A	198	SER	CB-CA-C	5.09	119.76	110.10
1	A	212	SER	CB-CA-C	-5.06	100.49	110.10
1	A	219	ILE	CB-CA-C	5.06	121.72	111.60
1	A	38	PHE	O-C-N	5.05	130.78	122.70
1	A	179	LEU	N-CA-CB	5.01	120.43	110.40

All (6) chirality outliers are listed below:

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atom
-----	-------	-----	------	------

Mol	Chain	Res	Type	Atom
1	A	103	LEU	CA
1	A	124	THR	CA
1	A	179	LEU	CA
1	A	188	ILE	CA
1	A	308	GLU	CA
1	A	334	VAL	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	2420	0	2384	640	4
2	A	179	0	0	38	4
All	All	2599	0	2384	640	4

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 133.

All (640) 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:150:ILE:HD11	1:A:177:ASN:CA	1.24	1.62
1:A:150:ILE:CD1	1:A:177:ASN:HA	1.26	1.59
1:A:155:THR:CG2	1:A:184:TYR:CE1	1.97	1.47
1:A:155:THR:HG21	1:A:184:TYR:CD1	1.69	1.26
1:A:150:ILE:HG13	1:A:177:ASN:ND2	1.53	1.24
1:A:162:LEU:HD21	1:A:189:PRO:CG	1.69	1.22
1:A:155:THR:CG2	1:A:184:TYR:CD1	2.21	1.21
1:A:155:THR:HG21	1:A:184:TYR:CE1	1.67	1.19
1:A:162:LEU:CD2	1:A:189:PRO:HG2	1.72	1.18
1:A:284:VAL:O	1:A:285:ILE:HD13	1.43	1.17
1:A:290:THR:OG1	1:A:294:THR:O	1.60	1.16

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:40:LYS:O	1:A:43:ASP:HB2	1.46	1.15
1:A:192:ILE:HD13	1:A:271:ALA:HB1	1.21	1.15
1:A:162:LEU:HD21	1:A:189:PRO:HG2	1.19	1.14
1:A:201:PHE:HA	1:A:205:LEU:HD13	1.18	1.14
1:A:48:THR:OG1	1:A:49:PRO:HD2	1.47	1.14
1:A:287:ALA:HB1	1:A:296:VAL:O	1.47	1.13
1:A:171:LEU:HD23	2:A:521:HOH:O	0.96	1.13
1:A:162:LEU:CD2	1:A:189:PRO:CG	2.28	1.12
1:A:211:GLN:HA	1:A:214:LEU:HD22	1.33	1.11
1:A:312:ASP:HB3	1:A:349:ILE:HG13	1.30	1.10
1:A:131:ILE:HG23	1:A:136:ARG:HD3	1.28	1.10
1:A:18:ILE:HG22	1:A:166:ALA:HB2	1.32	1.09
1:A:155:THR:HG22	1:A:184:TYR:CE1	1.84	1.09
1:A:115:ARG:HD2	1:A:157:PHE:CD2	1.88	1.07
1:A:28:GLU:O	1:A:28:GLU:HG2	1.55	1.06
1:A:27:ALA:HB2	1:A:58:LEU:HD21	1.38	1.04
1:A:272:THR:CG2	1:A:273:LYS:H	1.67	1.04
1:A:194:THR:HG21	2:A:542:HOH:O	1.56	1.04
1:A:115:ARG:HD2	1:A:157:PHE:CE2	1.93	1.04
1:A:272:THR:HG23	1:A:273:LYS:N	1.71	1.03
1:A:163:ILE:HD13	1:A:328:LEU:HD23	1.39	1.03
1:A:240:ASP:O	2:A:514:HOH:O	1.75	1.03
1:A:283:PRO:HB3	1:A:301:GLY:HA2	1.40	1.02
1:A:222:GLY:O	1:A:278:THR:HG23	1.60	1.01
1:A:23:LEU:HD12	1:A:24:ASP:H	1.23	1.01
1:A:285:ILE:HD12	1:A:299:GLU:HG2	1.40	1.01
1:A:272:THR:HG23	1:A:273:LYS:H	0.86	1.00
1:A:244:LEU:CB	2:A:514:HOH:O	2.09	1.00
1:A:155:THR:CB	1:A:184:TYR:CE1	2.46	0.99
1:A:302:VAL:HG22	1:A:304:VAL:HG23	1.44	0.99
1:A:115:ARG:HB2	1:A:157:PHE:CZ	1.97	0.98
1:A:194:THR:HG22	1:A:219:ILE:HB	1.44	0.98
1:A:23:LEU:HD12	1:A:24:ASP:N	1.79	0.97
1:A:18:ILE:HG22	1:A:166:ALA:CB	1.94	0.97
1:A:283:PRO:CB	1:A:301:GLY:HA2	1.96	0.96
1:A:29:VAL:HG21	1:A:33:PHE:CD2	2.00	0.96
1:A:40:LYS:HG3	1:A:41:ARG:H	1.26	0.96
1:A:91:MET:HB3	1:A:148:PHE:CZ	2.02	0.95
1:A:150:ILE:CG1	1:A:177:ASN:HD22	1.79	0.95
1:A:150:ILE:HG13	1:A:177:ASN:HD22	1.07	0.95
1:A:91:MET:HB3	1:A:148:PHE:HZ	1.31	0.94

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:279:ARG:HH12	1:A:283:PRO:CD	1.80	0.94
1:A:279:ARG:NH1	1:A:283:PRO:O	2.01	0.94
1:A:76:ARG:HG2	1:A:76:ARG:HH11	1.32	0.93
1:A:75:VAL:O	1:A:78:VAL:HB	1.68	0.93
1:A:76:ARG:CG	1:A:76:ARG:HH11	1.83	0.91
1:A:285:ILE:CD1	1:A:299:GLU:HG2	2.00	0.91
1:A:155:THR:CG2	1:A:184:TYR:HE1	1.84	0.91
1:A:175:PRO:O	1:A:179:LEU:HD13	1.71	0.90
1:A:155:THR:HG22	1:A:184:TYR:CD1	1.97	0.90
1:A:48:THR:CB	1:A:49:PRO:HD2	2.02	0.90
1:A:219:ILE:HD11	1:A:274:LEU:HD23	1.52	0.89
1:A:223:ASN:ND2	1:A:225:GLU:H	1.70	0.89
1:A:29:VAL:HG23	1:A:61:PHE:CZ	2.07	0.89
1:A:90:TYR:H	1:A:114:THR:HA	1.38	0.89
1:A:283:PRO:HB3	1:A:301:GLY:CA	2.03	0.88
1:A:281:HIS:O	1:A:302:VAL:HG12	1.72	0.88
1:A:277:MET:CE	2:A:514:HOH:O	2.21	0.88
1:A:324:PHE:HE1	1:A:338:ILE:HG12	1.39	0.88
1:A:232:LYS:NZ	2:A:529:HOH:O	1.78	0.88
1:A:163:ILE:CD1	1:A:328:LEU:HD23	2.03	0.88
1:A:33:PHE:HE1	1:A:57:THR:HG21	1.39	0.88
1:A:119:ALA:HB1	1:A:122:GLN:HG3	1.56	0.86
1:A:155:THR:HB	1:A:184:TYR:CE1	2.08	0.86
1:A:162:LEU:HD21	1:A:189:PRO:HG3	1.57	0.86
1:A:167:THR:HG23	1:A:169:TYR:HB2	1.58	0.86
1:A:288:GLU:H	1:A:296:VAL:HG22	1.40	0.85
1:A:67:PRO:HB2	1:A:76:ARG:NH2	1.91	0.85
1:A:48:THR:CB	1:A:49:PRO:CD	2.54	0.85
1:A:283:PRO:CA	1:A:301:GLY:HA2	2.06	0.85
1:A:90:TYR:HB3	1:A:114:THR:HG22	1.59	0.85
1:A:29:VAL:HG21	1:A:33:PHE:CG	2.12	0.85
1:A:197:LEU:O	2:A:541:HOH:O	1.91	0.85
1:A:204:GLU:HB3	1:A:205:LEU:HD12	1.59	0.85
1:A:73:ASN:HB3	1:A:354:PHE:CE2	2.11	0.84
1:A:131:ILE:HG23	1:A:136:ARG:CD	2.07	0.84
1:A:119:ALA:HB1	1:A:122:GLN:CG	2.07	0.84
1:A:288:GLU:O	1:A:296:VAL:HG13	1.76	0.84
1:A:277:MET:HE1	2:A:514:HOH:O	1.77	0.84
1:A:40:LYS:HG3	1:A:41:ARG:N	1.92	0.84
1:A:211:GLN:HA	1:A:214:LEU:CD2	2.08	0.84
1:A:31:SER:O	1:A:34:LEU:HB3	1.76	0.83

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:279:ARG:HB3	1:A:282:ASN:HB2	1.60	0.83
1:A:25:LEU:CD1	1:A:65:SER:HB3	2.07	0.83
1:A:287:ALA:CB	1:A:296:VAL:O	2.24	0.83
1:A:312:ASP:CB	1:A:349:ILE:HG13	2.06	0.83
1:A:192:ILE:HD13	1:A:271:ALA:CB	2.07	0.83
1:A:175:PRO:HA	2:A:521:HOH:O	1.78	0.83
1:A:201:PHE:HA	1:A:205:LEU:CD1	2.06	0.82
1:A:284:VAL:C	1:A:285:ILE:HD13	1.98	0.82
1:A:150:ILE:HD13	1:A:180:GLU:HG2	1.60	0.82
1:A:130:LEU:HD22	1:A:130:LEU:H	1.44	0.82
1:A:211:GLN:CA	1:A:214:LEU:HD22	2.10	0.81
1:A:25:LEU:HD12	1:A:65:SER:HB3	1.63	0.81
1:A:99:ARG:HB2	1:A:99:ARG:HH11	1.45	0.81
1:A:127:CYS:SG	1:A:138:LEU:HB3	2.22	0.80
1:A:48:THR:OG1	1:A:49:PRO:CD	2.29	0.80
1:A:223:ASN:ND2	1:A:225:GLU:N	2.29	0.80
1:A:84:LYS:HG2	1:A:85:PRO:HD2	1.63	0.80
1:A:131:ILE:HG22	1:A:132:ASN:H	1.46	0.80
1:A:192:ILE:CD1	1:A:271:ALA:HB1	2.07	0.80
1:A:281:HIS:HB2	2:A:525:HOH:O	1.80	0.79
1:A:72:LEU:O	1:A:76:ARG:HD3	1.81	0.79
1:A:29:VAL:HG13	1:A:33:PHE:HB3	1.65	0.79
1:A:223:ASN:HD21	1:A:225:GLU:H	1.31	0.79
1:A:29:VAL:HG23	1:A:61:PHE:HZ	1.48	0.79
1:A:127:CYS:O	1:A:129:VAL:HG12	1.82	0.78
1:A:176:LYS:O	1:A:180:GLU:HB3	1.83	0.78
1:A:298:HIS:NE2	1:A:334:VAL:HA	1.99	0.78
1:A:34:LEU:HD23	1:A:34:LEU:C	2.02	0.78
1:A:16:PHE:HE2	1:A:18:ILE:HD13	1.47	0.78
1:A:223:ASN:HD22	1:A:224:GLU:N	1.82	0.78
1:A:155:THR:CB	1:A:184:TYR:HE1	1.93	0.78
1:A:155:THR:HG21	1:A:184:TYR:HD1	1.47	0.78
1:A:115:ARG:CD	1:A:157:PHE:CD2	2.66	0.78
1:A:14:ARG:HH12	1:A:329:SER:HB2	1.49	0.78
1:A:98:PRO:HA	1:A:101:GLN:HG2	1.66	0.77
1:A:76:ARG:HB3	1:A:356:LEU:CD1	2.13	0.77
1:A:58:LEU:HD12	1:A:128:ALA:HB1	1.64	0.77
1:A:279:ARG:HH12	1:A:283:PRO:N	1.82	0.77
1:A:220:LEU:HD23	1:A:275:VAL:HG23	1.66	0.77
1:A:129:VAL:HG22	1:A:136:ARG:NH1	2.00	0.77
1:A:76:ARG:O	1:A:79:GLN:HB3	1.85	0.77

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:298:HIS:HD2	1:A:334:VAL:HB	1.50	0.76
1:A:14:ARG:NH1	1:A:329:SER:HB2	2.01	0.76
1:A:283:PRO:HA	1:A:301:GLY:HA2	1.65	0.76
1:A:67:PRO:HB2	1:A:76:ARG:HH21	1.51	0.75
1:A:142:LEU:HD11	2:A:437:HOH:O	1.85	0.75
1:A:106:LEU:HA	1:A:109:LYS:HD2	1.67	0.75
1:A:324:PHE:O	1:A:328:LEU:HB2	1.86	0.75
1:A:12:PRO:C	1:A:87:SER:HA	2.07	0.75
1:A:40:LYS:CG	1:A:41:ARG:N	2.48	0.75
1:A:81:LEU:HB3	1:A:326:TYR:CD1	2.22	0.75
1:A:48:THR:HG1	1:A:49:PRO:HD2	1.52	0.75
1:A:119:ALA:O	1:A:122:GLN:HB2	1.87	0.74
1:A:22:ILE:O	1:A:68:GLY:O	2.04	0.74
1:A:300:VAL:HG21	1:A:338:ILE:CG2	2.17	0.74
1:A:124:THR:HG23	1:A:125:GLY:H	1.52	0.74
1:A:44:ALA:HB2	1:A:138:LEU:HD22	1.68	0.74
1:A:312:ASP:HB3	1:A:349:ILE:CG1	2.15	0.74
1:A:84:LYS:HG2	1:A:85:PRO:CD	2.16	0.74
1:A:120:PRO:HD3	2:A:418:HOH:O	1.87	0.74
1:A:105:GLU:O	1:A:108:ASP:HB3	1.88	0.73
1:A:192:ILE:HD11	1:A:218:ASN:HB3	1.70	0.73
1:A:150:ILE:H	1:A:177:ASN:ND2	1.86	0.73
1:A:192:ILE:CD1	1:A:218:ASN:HB3	2.20	0.72
1:A:197:LEU:HD23	1:A:221:PHE:O	1.89	0.72
1:A:27:ALA:CB	1:A:58:LEU:HD21	2.19	0.72
1:A:80:LYS:HE2	1:A:356:LEU:HB3	1.71	0.72
1:A:34:LEU:HD21	1:A:39:LEU:O	1.90	0.72
1:A:143:GLY:HA3	2:A:443:HOH:O	1.89	0.72
1:A:119:ALA:HA	2:A:418:HOH:O	1.89	0.72
1:A:132:ASN:HB3	1:A:135:GLU:OE1	1.90	0.72
1:A:227:PHE:HE2	1:A:277:MET:HA	1.55	0.72
1:A:29:VAL:CG2	1:A:33:PHE:CG	2.72	0.72
1:A:193:PHE:HD1	1:A:217:THR:HG1	1.38	0.71
1:A:169:TYR:O	1:A:172:THR:HB	1.89	0.71
1:A:81:LEU:HD23	1:A:326:TYR:CB	2.20	0.71
1:A:171:LEU:HD22	1:A:175:PRO:HB3	1.72	0.71
1:A:150:ILE:CG1	1:A:177:ASN:ND2	2.41	0.71
1:A:284:VAL:HG11	1:A:338:ILE:HG21	1.70	0.71
1:A:230:LEU:O	1:A:233:VAL:HG12	1.90	0.71
1:A:94:ILE:O	1:A:119:ALA:N	2.24	0.71
1:A:302:VAL:HG22	1:A:304:VAL:CG2	2.20	0.71

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:132:ASN:HB3	1:A:135:GLU:CD	2.10	0.71
1:A:298:HIS:CD2	1:A:334:VAL:HB	2.25	0.71
1:A:279:ARG:HH12	1:A:283:PRO:HD2	1.54	0.71
1:A:101:GLN:HG3	1:A:102:VAL:HG13	1.72	0.70
1:A:17:ALA:HB3	1:A:90:TYR:HD1	1.53	0.70
1:A:103:LEU:O	1:A:103:LEU:HD13	1.91	0.70
1:A:275:VAL:O	1:A:275:VAL:HG13	1.90	0.70
1:A:284:VAL:HG11	1:A:338:ILE:CG2	2.22	0.70
1:A:219:ILE:HD13	1:A:274:LEU:HB2	1.74	0.69
1:A:316:ALA:HB1	1:A:345:ALA:HB1	1.74	0.69
1:A:14:ARG:HG2	2:A:486:HOH:O	1.91	0.69
1:A:82:LEU:CD1	1:A:84:LYS:H	2.06	0.69
1:A:79:GLN:O	1:A:79:GLN:OE1	2.11	0.69
1:A:81:LEU:HD23	1:A:326:TYR:HB2	1.76	0.68
1:A:207:LYS:O	1:A:209:ALA:N	2.27	0.68
1:A:27:ALA:O	1:A:28:GLU:HB3	1.94	0.68
1:A:45:THR:CG2	1:A:46:LEU:N	2.56	0.68
1:A:71:ALA:HB3	1:A:90:TYR:HE1	1.56	0.68
1:A:76:ARG:HB3	1:A:356:LEU:HD12	1.76	0.68
1:A:91:MET:CE	1:A:115:ARG:HD3	2.24	0.68
1:A:201:PHE:CA	1:A:205:LEU:HD13	2.12	0.68
1:A:55:TYR:O	1:A:59:ASP:HB2	1.95	0.67
1:A:150:ILE:HD11	1:A:177:ASN:CB	2.21	0.67
1:A:279:ARG:HD3	1:A:285:ILE:HG12	1.75	0.67
1:A:115:ARG:HH11	1:A:157:PHE:HD2	1.41	0.67
1:A:282:ASN:ND2	2:A:400:HOH:O	2.27	0.67
1:A:176:LYS:O	1:A:180:GLU:N	2.26	0.67
1:A:86:GLY:HA2	1:A:113:ALA:HB2	1.77	0.67
1:A:20:ASN:OD1	1:A:20:ASN:N	2.27	0.67
1:A:197:LEU:H	1:A:197:LEU:CD2	2.07	0.66
1:A:249:LYS:O	1:A:251:HIS:N	2.28	0.66
1:A:281:HIS:O	1:A:302:VAL:CG1	2.42	0.66
1:A:320:PHE:HE1	1:A:338:ILE:HG23	1.60	0.66
1:A:223:ASN:HD21	1:A:225:GLU:N	1.88	0.66
1:A:333:THR:HB	1:A:336:GLN:HB2	1.75	0.66
1:A:150:ILE:CD1	1:A:180:GLU:HG2	2.26	0.66
1:A:29:VAL:HG13	1:A:30:PRO:O	1.96	0.66
1:A:320:PHE:CE1	1:A:338:ILE:HG23	2.31	0.66
1:A:199:ALA:HB3	1:A:201:PHE:CD2	2.31	0.66
1:A:285:ILE:HD12	1:A:299:GLU:CG	2.21	0.65
1:A:350:GLN:HB3	1:A:351:HIS:HD2	1.60	0.65

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:131:ILE:HA	1:A:136:ARG:HA	1.79	0.65
1:A:194:THR:HA	1:A:219:ILE:O	1.95	0.65
1:A:135:GLU:OE1	1:A:135:GLU:N	2.29	0.65
1:A:62:ASN:ND2	2:A:433:HOH:O	2.29	0.65
1:A:237:VAL:HG13	1:A:238:ALA:N	2.11	0.65
1:A:219:ILE:CD1	1:A:274:LEU:HB2	2.27	0.65
1:A:155:THR:HB	1:A:184:TYR:HE1	1.57	0.65
1:A:33:PHE:HE1	1:A:57:THR:CG2	2.08	0.65
1:A:219:ILE:CD1	1:A:274:LEU:HD23	2.26	0.65
1:A:227:PHE:CE2	1:A:277:MET:HA	2.32	0.65
1:A:277:MET:HB3	1:A:285:ILE:O	1.97	0.65
1:A:29:VAL:CG1	1:A:33:PHE:HB3	2.27	0.65
1:A:71:ALA:CB	1:A:90:TYR:HE1	2.10	0.65
1:A:16:PHE:CE2	1:A:18:ILE:HD13	2.31	0.65
1:A:177:ASN:O	1:A:181:VAL:HG23	1.96	0.64
1:A:188:ILE:HB	1:A:190:ASN:N	2.12	0.64
1:A:237:VAL:HG13	1:A:238:ALA:H	1.62	0.64
1:A:178:ALA:O	1:A:213:LEU:HD11	1.97	0.64
1:A:218:ASN:O	1:A:219:ILE:HG12	1.96	0.64
1:A:44:ALA:HA	1:A:138:LEU:O	1.98	0.64
1:A:219:ILE:HD13	1:A:274:LEU:CB	2.28	0.64
1:A:21:PRO:HB3	1:A:116:PHE:CE2	2.33	0.64
1:A:29:VAL:HG22	1:A:33:PHE:CB	2.27	0.64
1:A:99:ARG:HB3	1:A:124:THR:HG22	1.79	0.64
1:A:188:ILE:HB	1:A:189:PRO:C	2.18	0.64
1:A:17:ALA:CB	1:A:90:TYR:HD1	2.10	0.64
1:A:142:LEU:HD22	1:A:145:CYS:SG	2.37	0.63
1:A:77:VAL:HG11	1:A:322:GLY:HA3	1.80	0.63
1:A:279:ARG:NH1	1:A:283:PRO:HD2	2.13	0.63
1:A:13:MET:HE2	2:A:438:HOH:O	1.99	0.63
1:A:74:SER:HA	1:A:318:ASP:O	1.98	0.63
1:A:300:VAL:HG21	1:A:338:ILE:HG21	1.80	0.63
1:A:286:ALA:N	1:A:298:HIS:O	2.17	0.63
1:A:18:ILE:HD12	1:A:91:MET:HB2	1.79	0.63
1:A:341:GLY:O	1:A:344:CYS:HB2	1.99	0.63
1:A:18:ILE:CG1	1:A:148:PHE:HE2	2.12	0.62
1:A:33:PHE:CE1	1:A:57:THR:HG21	2.29	0.62
1:A:287:ALA:CB	1:A:297:VAL:HA	2.29	0.62
1:A:345:ALA:O	1:A:349:ILE:N	2.27	0.62
1:A:134:LYS:N	1:A:135:GLU:OE1	2.32	0.62
1:A:196:ASN:HA	1:A:221:PHE:O	1.99	0.62

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:276:VAL:O	1:A:276:VAL:HG22	1.99	0.62
1:A:82:LEU:HD12	1:A:84:LYS:H	1.65	0.62
1:A:18:ILE:HG13	1:A:148:PHE:HE2	1.65	0.62
1:A:182:ALA:HA	1:A:185:ALA:HB3	1.82	0.62
1:A:130:LEU:N	1:A:130:LEU:HD13	2.13	0.61
1:A:279:ARG:NH1	1:A:283:PRO:CD	2.60	0.61
1:A:133:GLU:N	1:A:135:GLU:OE1	2.34	0.61
1:A:284:VAL:O	1:A:285:ILE:CD1	2.35	0.61
1:A:223:ASN:ND2	1:A:224:GLU:N	2.48	0.61
1:A:300:VAL:O	1:A:301:GLY:O	2.18	0.61
1:A:129:VAL:HG22	1:A:136:ARG:HH12	1.66	0.61
1:A:276:VAL:CG2	1:A:276:VAL:O	2.48	0.61
1:A:276:VAL:HG21	1:A:320:PHE:CE2	2.34	0.61
1:A:238:ALA:CB	1:A:243:ALA:HB1	2.30	0.61
1:A:127:CYS:HB2	1:A:140:THR:HG23	1.83	0.61
1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:N	2.16	0.61
1:A:134:LYS:O	1:A:136:ARG:HD3	2.01	0.61
1:A:197:LEU:HD21	1:A:220:LEU:HG	1.82	0.61
1:A:75:VAL:HG12	1:A:76:ARG:N	2.15	0.61
1:A:275:VAL:O	1:A:275:VAL:CG1	2.48	0.60
1:A:221:PHE:CD2	1:A:321:VAL:HG22	2.36	0.60
1:A:48:THR:HB	1:A:49:PRO:CD	2.31	0.60
1:A:100:GLY:O	1:A:103:LEU:N	2.34	0.60
1:A:352:VAL:HG23	2:A:520:HOH:O	2.01	0.60
1:A:201:PHE:O	1:A:205:LEU:N	2.32	0.60
1:A:314:ASN:O	1:A:316:ALA:N	2.34	0.60
1:A:131:ILE:HD13	1:A:136:ARG:CZ	2.32	0.60
1:A:17:ALA:O	1:A:90:TYR:HA	2.00	0.60
1:A:341:GLY:HA2	1:A:344:CYS:HB2	1.82	0.60
1:A:126:THR:OG1	1:A:127:CYS:N	2.29	0.60
1:A:12:PRO:O	1:A:14:ARG:HG3	2.01	0.60
1:A:18:ILE:HG13	1:A:148:PHE:CE2	2.37	0.60
1:A:168:ALA:O	1:A:171:LEU:HG	2.02	0.60
1:A:155:THR:HG21	1:A:184:TYR:HE1	1.46	0.60
1:A:287:ALA:HB2	1:A:297:VAL:HA	1.83	0.60
1:A:171:LEU:CD2	2:A:521:HOH:O	1.78	0.60
1:A:193:PHE:O	1:A:219:ILE:N	2.31	0.60
1:A:196:ASN:ND2	1:A:196:ASN:O	2.26	0.59
1:A:131:ILE:CG2	1:A:132:ASN:H	2.04	0.59
1:A:115:ARG:HB2	1:A:157:PHE:CE2	2.35	0.59
1:A:179:LEU:HB3	1:A:213:LEU:HD13	1.85	0.59

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:238:ALA:HB1	1:A:243:ALA:HB1	1.83	0.59
1:A:270:GLY:CA	1:A:332:LYS:HD3	2.32	0.59
1:A:162:LEU:HD22	1:A:189:PRO:HG2	1.74	0.59
1:A:223:ASN:ND2	2:A:480:HOH:O	2.34	0.59
1:A:76:ARG:CG	1:A:76:ARG:NH1	2.51	0.59
1:A:73:ASN:O	1:A:76:ARG:HB2	2.03	0.59
1:A:97:ASP:O	1:A:100:GLY:N	2.29	0.59
1:A:334:VAL:HG23	2:A:475:HOH:O	2.01	0.59
1:A:309:LYS:HD3	1:A:350:GLN:HG2	1.85	0.59
1:A:321:VAL:O	1:A:325:LEU:HG	2.03	0.59
1:A:50:GLU:HG2	1:A:51:GLN:HG3	1.84	0.59
1:A:140:THR:HG22	1:A:141:HIS:H	1.69	0.58
1:A:325:LEU:HD22	2:A:542:HOH:O	2.03	0.58
1:A:350:GLN:NE2	2:A:378:HOH:O	2.36	0.58
1:A:170:THR:HG21	1:A:178:ALA:HB2	1.85	0.58
1:A:300:VAL:CG2	1:A:338:ILE:HG21	2.34	0.58
1:A:162:LEU:CD2	1:A:189:PRO:CD	2.81	0.58
1:A:169:TYR:HE2	1:A:201:PHE:HE2	1.52	0.58
1:A:55:TYR:HE2	1:A:128:ALA:H	1.50	0.58
1:A:226:GLU:O	1:A:230:LEU:N	2.36	0.58
1:A:16:PHE:CD1	1:A:158:ALA:HB2	2.39	0.58
1:A:335:LYS:O	1:A:339:MET:N	2.31	0.58
1:A:57:THR:HA	1:A:60:GLN:OE1	2.04	0.58
1:A:95:GLY:HA2	1:A:119:ALA:H	1.69	0.58
1:A:73:ASN:HB3	1:A:354:PHE:CZ	2.37	0.58
1:A:336:GLN:OE1	1:A:336:GLN:HA	2.03	0.58
1:A:202:CYS:O	1:A:206:TYR:HB2	2.04	0.58
1:A:324:PHE:CE1	1:A:338:ILE:HG12	2.31	0.57
1:A:309:LYS:CD	1:A:350:GLN:HG2	2.34	0.57
1:A:47:ALA:HB2	1:A:139:CYS:SG	2.44	0.57
1:A:220:LEU:HB3	1:A:275:VAL:HG23	1.86	0.57
1:A:301:GLY:O	1:A:302:VAL:HB	2.04	0.57
1:A:45:THR:HG23	1:A:46:LEU:N	2.19	0.57
1:A:90:TYR:N	1:A:114:THR:HA	2.16	0.57
1:A:327:GLY:HA3	2:A:453:HOH:O	2.05	0.57
1:A:220:LEU:HB3	1:A:275:VAL:HA	1.86	0.57
1:A:279:ARG:NH1	1:A:283:PRO:N	2.53	0.57
1:A:300:VAL:HG21	1:A:338:ILE:HG22	1.86	0.57
1:A:77:VAL:HG11	1:A:322:GLY:C	2.25	0.57
1:A:29:VAL:HG11	1:A:33:PHE:HD2	1.70	0.57
1:A:113:ALA:CB	2:A:438:HOH:O	2.51	0.57

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:333:THR:CB	1:A:336:GLN:HB2	2.35	0.57
1:A:68:GLY:HA2	1:A:72:LEU:HB3	1.86	0.56
1:A:155:THR:HB	1:A:184:TYR:CZ	2.39	0.56
1:A:167:THR:CG2	1:A:169:TYR:HB2	2.34	0.56
1:A:270:GLY:N	1:A:332:LYS:HD3	2.19	0.56
1:A:196:ASN:C	1:A:196:ASN:HD22	2.05	0.56
1:A:138:LEU:HD13	1:A:138:LEU:N	2.21	0.56
1:A:328:LEU:HG	1:A:328:LEU:O	2.05	0.56
1:A:75:VAL:CG1	1:A:112:LEU:HD21	2.36	0.56
1:A:102:VAL:O	1:A:106:LEU:HB2	2.06	0.56
1:A:182:ALA:HB1	1:A:216:HIS:O	2.06	0.56
1:A:135:GLU:H	1:A:135:GLU:CD	2.01	0.56
1:A:140:THR:HG22	1:A:141:HIS:N	2.21	0.55
1:A:79:GLN:NE2	1:A:111:GLY:O	2.39	0.55
1:A:12:PRO:O	1:A:87:SER:HA	2.06	0.55
1:A:210:MET:O	1:A:214:LEU:HD22	2.06	0.55
1:A:18:ILE:CD1	1:A:91:MET:HB2	2.35	0.55
1:A:220:LEU:HD23	1:A:275:VAL:CG2	2.36	0.55
1:A:94:ILE:HD11	1:A:118:VAL:HG23	1.88	0.55
1:A:99:ARG:CB	1:A:99:ARG:HH11	2.15	0.55
1:A:300:VAL:HB	2:A:537:HOH:O	2.07	0.55
1:A:82:LEU:O	1:A:83:ARG:HB2	2.07	0.55
1:A:162:LEU:HD23	1:A:189:PRO:CD	2.35	0.55
1:A:284:VAL:CG1	1:A:338:ILE:HG21	2.35	0.55
1:A:91:MET:HE3	1:A:115:ARG:HD3	1.89	0.55
1:A:197:LEU:H	1:A:197:LEU:HD22	1.71	0.55
1:A:283:PRO:HA	1:A:301:GLY:CA	2.35	0.55
1:A:300:VAL:CG1	1:A:335:LYS:HG2	2.36	0.55
1:A:307:ALA:O	1:A:310:ILE:HG12	2.06	0.55
1:A:314:ASN:O	1:A:317:GLY:N	2.35	0.55
1:A:123:SER:O	1:A:144:ALA:HB1	2.07	0.55
1:A:181:VAL:O	1:A:185:ALA:HB2	2.07	0.55
1:A:195:LEU:N	1:A:219:ILE:O	2.34	0.55
1:A:221:PHE:CG	1:A:321:VAL:HG22	2.42	0.55
1:A:210:MET:O	1:A:214:LEU:HD13	2.07	0.54
1:A:311:VAL:O	1:A:312:ASP:HB2	2.06	0.54
1:A:316:ALA:HB2	1:A:349:ILE:HB	1.89	0.54
1:A:34:LEU:HD23	1:A:35:ASP:N	2.21	0.54
1:A:22:ILE:HG23	1:A:68:GLY:O	2.06	0.54
1:A:101:GLN:HA	1:A:104:LYS:CE	2.38	0.54
1:A:164:PHE:HE2	1:A:191:ALA:CB	2.21	0.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:127:CYS:HA	1:A:139:CYS:O	2.08	0.54
1:A:283:PRO:HB3	1:A:301:GLY:N	2.22	0.54
1:A:324:PHE:HE1	1:A:338:ILE:CG1	2.18	0.54
1:A:119:ALA:CB	1:A:122:GLN:HB2	2.37	0.54
1:A:115:ARG:CD	1:A:157:PHE:CE2	2.81	0.54
1:A:22:ILE:CG2	1:A:69:GLY:CA	2.86	0.54
1:A:58:LEU:CD1	1:A:128:ALA:HB1	2.35	0.54
1:A:57:THR:O	1:A:60:GLN:HG3	2.08	0.54
1:A:162:LEU:HD23	1:A:189:PRO:CG	2.31	0.53
1:A:77:VAL:HG11	1:A:322:GLY:CA	2.38	0.53
1:A:95:GLY:O	1:A:97:ASP:N	2.41	0.53
1:A:34:LEU:CD2	1:A:34:LEU:C	2.74	0.53
1:A:129:VAL:HG23	1:A:138:LEU:HD12	1.90	0.53
1:A:236:LEU:HD21	2:A:495:HOH:O	2.09	0.53
1:A:276:VAL:HG21	1:A:320:PHE:HE2	1.73	0.53
1:A:45:THR:HG23	1:A:46:LEU:H	1.73	0.53
1:A:14:ARG:O	1:A:15:VAL:HG23	2.09	0.53
1:A:16:PHE:CE1	1:A:158:ALA:HB2	2.44	0.53
1:A:186:HIS:HD2	2:A:470:HOH:O	1.92	0.53
1:A:82:LEU:O	1:A:83:ARG:CB	2.57	0.53
1:A:295:VAL:O	1:A:295:VAL:HG12	2.08	0.53
1:A:119:ALA:CB	1:A:122:GLN:CB	2.87	0.52
1:A:203:VAL:HG12	1:A:204:GLU:N	2.23	0.52
1:A:75:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD21	1.91	0.52
1:A:196:ASN:O	1:A:198:SER:N	2.41	0.52
1:A:223:ASN:HD21	1:A:225:GLU:CB	2.22	0.52
1:A:270:GLY:HA3	1:A:332:LYS:HD3	1.92	0.52
1:A:300:VAL:O	1:A:300:VAL:HG23	2.07	0.52
1:A:277:MET:HG3	1:A:277:MET:O	2.08	0.52
1:A:82:LEU:HD13	1:A:84:LYS:H	1.75	0.52
1:A:288:GLU:N	1:A:296:VAL:HG22	2.18	0.52
1:A:238:ALA:HB1	1:A:243:ALA:CB	2.40	0.52
1:A:22:ILE:CG2	1:A:68:GLY:O	2.58	0.52
1:A:277:MET:HE3	2:A:514:HOH:O	1.96	0.51
1:A:29:VAL:HG11	1:A:33:PHE:CD2	2.45	0.51
1:A:13:MET:CE	2:A:438:HOH:O	2.58	0.51
1:A:342:ASN:O	1:A:346:GLN:HB3	2.10	0.51
1:A:297:VAL:HG11	2:A:477:HOH:O	2.09	0.51
1:A:131:ILE:HG22	1:A:132:ASN:N	2.22	0.51
1:A:333:THR:CG2	1:A:336:GLN:HB2	2.40	0.51
1:A:171:LEU:HA	2:A:521:HOH:O	2.10	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:354:PHE:HB3	2:A:530:HOH:O	2.10	0.51
1:A:149:ARG:O	1:A:150:ILE:C	2.47	0.51
1:A:308:GLU:C	1:A:310:ILE:H	2.14	0.51
1:A:14:ARG:O	1:A:163:ILE:HG13	2.11	0.51
1:A:67:PRO:HB3	1:A:103:LEU:HD22	1.91	0.51
1:A:71:ALA:HB3	1:A:90:TYR:CE1	2.43	0.51
1:A:72:LEU:HD12	1:A:72:LEU:O	2.11	0.51
1:A:22:ILE:CG2	1:A:69:GLY:HA2	2.41	0.50
1:A:76:ARG:NH1	1:A:76:ARG:HG2	2.11	0.50
1:A:309:LYS:HZ2	1:A:309:LYS:HB2	1.76	0.50
1:A:105:GLU:O	1:A:109:LYS:HG3	2.10	0.50
1:A:223:ASN:HD21	1:A:225:GLU:HB3	1.77	0.50
1:A:21:PRO:HG3	1:A:116:PHE:CD2	2.45	0.50
1:A:288:GLU:OE2	1:A:334:VAL:HG21	2.11	0.50
1:A:57:THR:O	1:A:60:GLN:OE1	2.30	0.50
1:A:73:ASN:HB3	1:A:354:PHE:CD2	2.46	0.50
1:A:16:PHE:CE2	1:A:18:ILE:CD1	2.94	0.50
1:A:220:LEU:O	1:A:276:VAL:HG13	2.12	0.50
1:A:341:GLY:CA	1:A:344:CYS:HB2	2.42	0.50
1:A:124:THR:O	1:A:144:ALA:HB3	2.13	0.49
1:A:168:ALA:HB3	1:A:198:SER:HB2	1.93	0.49
1:A:119:ALA:HB3	1:A:122:GLN:HB2	1.94	0.49
1:A:29:VAL:CG2	1:A:33:PHE:CB	2.90	0.49
1:A:345:ALA:O	1:A:348:VAL:N	2.44	0.49
1:A:23:LEU:O	1:A:126:THR:HA	2.12	0.49
1:A:55:TYR:OH	1:A:139:CYS:O	2.28	0.49
1:A:162:LEU:O	1:A:192:ILE:N	2.46	0.49
1:A:284:VAL:HB	1:A:300:VAL:HG23	1.93	0.49
1:A:309:LYS:NZ	1:A:309:LYS:HB2	2.28	0.49
1:A:333:THR:HG22	1:A:336:GLN:H	1.78	0.49
1:A:67:PRO:CB	1:A:76:ARG:NH2	2.72	0.49
1:A:272:THR:CG2	1:A:273:LYS:N	2.42	0.49
1:A:18:ILE:HG22	1:A:166:ALA:HB1	1.89	0.49
1:A:335:LYS:HB3	1:A:335:LYS:NZ	2.28	0.49
1:A:75:VAL:O	1:A:76:ARG:C	2.50	0.49
1:A:279:ARG:HH22	1:A:283:PRO:HD2	1.77	0.48
1:A:119:ALA:HB1	1:A:122:GLN:CB	2.43	0.48
1:A:207:LYS:O	1:A:210:MET:N	2.46	0.48
1:A:351:HIS:O	1:A:352:VAL:O	2.31	0.48
1:A:94:ILE:HG23	1:A:116:PHE:HB3	1.96	0.48
1:A:279:ARG:CD	1:A:285:ILE:HG12	2.43	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:84:LYS:HG2	1:A:85:PRO:N	2.27	0.48
1:A:193:PHE:O	1:A:218:ASN:N	2.44	0.48
1:A:193:PHE:H	1:A:218:ASN:HB2	1.79	0.48
1:A:77:VAL:CG1	1:A:322:GLY:HA3	2.43	0.48
1:A:179:LEU:CB	1:A:213:LEU:HD13	2.43	0.48
1:A:284:VAL:N	1:A:300:VAL:O	2.44	0.48
1:A:77:VAL:HG12	1:A:78:VAL:N	2.28	0.48
1:A:287:ALA:HA	1:A:297:VAL:HA	1.96	0.48
1:A:211:GLN:NE2	1:A:234:HIS:HD2	2.12	0.48
1:A:235:ASN:O	1:A:236:LEU:HD13	2.13	0.48
1:A:84:LYS:HA	1:A:85:PRO:HD2	1.68	0.48
1:A:162:LEU:O	1:A:191:ALA:HB1	2.14	0.48
1:A:29:VAL:CG2	1:A:61:PHE:HZ	2.21	0.48
1:A:234:HIS:O	1:A:236:LEU:HB2	2.13	0.48
1:A:279:ARG:HH12	1:A:283:PRO:CG	2.26	0.47
1:A:333:THR:HB	1:A:336:GLN:CB	2.43	0.47
1:A:329:SER:O	1:A:330:GLN:HG2	2.14	0.47
1:A:22:ILE:HG22	1:A:69:GLY:HA3	1.96	0.47
1:A:310:ILE:O	1:A:311:VAL:HB	2.12	0.47
1:A:109:LYS:H	1:A:109:LYS:HG3	1.36	0.47
1:A:165:TYR:CG	1:A:166:ALA:N	2.82	0.47
1:A:32:SER:O	1:A:33:PHE:C	2.53	0.47
1:A:197:LEU:HD21	1:A:220:LEU:CG	2.44	0.47
1:A:352:VAL:CG1	1:A:353:GLY:N	2.78	0.47
1:A:33:PHE:CD2	1:A:33:PHE:C	2.88	0.47
1:A:58:LEU:O	1:A:63:PRO:HG3	2.15	0.47
1:A:291:ALA:C	1:A:293:GLY:H	2.18	0.47
1:A:130:LEU:HB2	1:A:137:THR:HG23	1.97	0.47
1:A:197:LEU:N	1:A:197:LEU:HD22	2.30	0.47
1:A:98:PRO:HA	1:A:101:GLN:CG	2.42	0.47
1:A:346:GLN:HG2	1:A:347:ASP:N	2.30	0.47
1:A:287:ALA:CA	1:A:297:VAL:HA	2.45	0.46
1:A:210:MET:HB3	1:A:214:LEU:HD13	1.97	0.46
1:A:164:PHE:O	1:A:194:THR:OG1	2.34	0.46
1:A:171:LEU:O	1:A:173:ALA:N	2.48	0.46
1:A:279:ARG:NH2	1:A:283:PRO:HD2	2.31	0.46
1:A:29:VAL:HG22	1:A:33:PHE:CG	2.50	0.46
1:A:307:ALA:O	1:A:309:LYS:N	2.48	0.46
1:A:94:ILE:HG12	1:A:116:PHE:HB3	1.97	0.46
1:A:57:THR:C	1:A:59:ASP:H	2.19	0.46
1:A:167:THR:OG1	1:A:169:TYR:HD1	1.97	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:182:ALA:O	1:A:186:HIS:HB3	2.16	0.46
1:A:237:VAL:CG1	1:A:238:ALA:N	2.78	0.46
1:A:91:MET:HG2	1:A:115:ARG:O	2.16	0.46
1:A:249:LYS:C	1:A:251:HIS:H	2.18	0.46
1:A:356:LEU:N	2:A:406:HOH:O	2.36	0.46
1:A:91:MET:CE	1:A:115:ARG:HB3	2.45	0.46
1:A:220:LEU:CD2	1:A:275:VAL:HG23	2.43	0.46
1:A:73:ASN:HB2	1:A:318:ASP:OD2	2.15	0.46
1:A:174:THR:OG1	1:A:176:LYS:CD	2.64	0.46
1:A:335:LYS:NZ	1:A:335:LYS:CB	2.79	0.46
1:A:207:LYS:HB3	1:A:208:ASP:H	1.35	0.46
1:A:142:LEU:HA	1:A:142:LEU:HD23	1.79	0.46
1:A:77:VAL:HG12	1:A:81:LEU:HD22	1.97	0.46
1:A:338:ILE:HG22	1:A:338:ILE:O	2.14	0.45
1:A:341:GLY:C	1:A:344:CYS:HB2	2.37	0.45
1:A:100:GLY:C	1:A:103:LEU:H	2.19	0.45
1:A:309:LYS:NZ	1:A:309:LYS:CB	2.80	0.45
1:A:272:THR:HG21	1:A:289:GLN:O	2.15	0.45
1:A:164:PHE:CE2	1:A:191:ALA:CB	3.00	0.45
1:A:162:LEU:O	1:A:191:ALA:CA	2.65	0.45
1:A:54:ILE:HG21	1:A:54:ILE:HD13	1.54	0.45
1:A:55:TYR:HE2	1:A:128:ALA:N	2.14	0.45
1:A:137:THR:C	1:A:138:LEU:HD13	2.37	0.45
1:A:335:LYS:HB3	1:A:335:LYS:HZ3	1.82	0.45
1:A:307:ALA:C	1:A:309:LYS:H	2.20	0.45
1:A:319:ALA:HB1	1:A:344:CYS:C	2.37	0.45
1:A:81:LEU:HD23	1:A:326:TYR:CG	2.51	0.45
1:A:120:PRO:O	1:A:122:GLN:N	2.49	0.45
1:A:193:PHE:HD1	1:A:217:THR:OG1	1.97	0.45
1:A:286:ALA:O	1:A:297:VAL:HG22	2.17	0.45
1:A:270:GLY:N	1:A:332:LYS:CD	2.79	0.44
1:A:97:ASP:OD2	1:A:124:THR:HA	2.17	0.44
1:A:23:LEU:CD1	1:A:66:LEU:O	2.66	0.44
1:A:54:ILE:CG2	1:A:55:TYR:N	2.79	0.44
1:A:273:LYS:HE3	1:A:273:LYS:HB3	1.43	0.44
1:A:66:LEU:CD1	1:A:66:LEU:N	2.80	0.44
1:A:84:LYS:CG	1:A:85:PRO:HD2	2.40	0.44
1:A:101:GLN:HA	1:A:104:LYS:CD	2.48	0.44
1:A:91:MET:CG	1:A:115:ARG:HB3	2.47	0.44
1:A:99:ARG:HD3	1:A:126:THR:HG21	2.00	0.44
1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CD1	2.80	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:180:GLU:HG3	1:A:180:GLU:O	2.16	0.44
1:A:302:VAL:HG13	1:A:302:VAL:O	2.18	0.44
1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HD2	1.71	0.44
1:A:343:ALA:O	1:A:347:ASP:HB2	2.18	0.44
1:A:77:VAL:O	1:A:81:LEU:HB2	2.17	0.44
1:A:97:ASP:HA	1:A:98:PRO:HD3	1.90	0.43
1:A:298:HIS:CD2	1:A:334:VAL:CB	2.98	0.43
1:A:103:LEU:C	1:A:103:LEU:HD13	2.38	0.43
1:A:75:VAL:CG1	1:A:76:ARG:N	2.81	0.43
1:A:169:TYR:CE2	1:A:201:PHE:CE2	3.06	0.43
1:A:21:PRO:HG2	1:A:93:ALA:O	2.18	0.43
1:A:287:ALA:HA	1:A:298:HIS:H	1.83	0.43
1:A:84:LYS:HE2	1:A:84:LYS:HB3	1.41	0.43
1:A:146:GLY:CA	2:A:442:HOH:O	2.65	0.43
1:A:119:ALA:HB3	1:A:122:GLN:CB	2.49	0.43
1:A:244:LEU:O	1:A:248:ASN:N	2.33	0.43
1:A:284:VAL:HG11	1:A:338:ILE:HG23	1.98	0.43
1:A:101:GLN:HA	1:A:104:LYS:HD3	2.00	0.43
1:A:29:VAL:HG22	1:A:33:PHE:HB3	2.00	0.43
1:A:297:VAL:HG12	1:A:297:VAL:O	2.17	0.43
1:A:343:ALA:HA	1:A:346:GLN:HB3	1.99	0.43
1:A:270:GLY:O	1:A:332:LYS:NZ	2.46	0.43
1:A:77:VAL:CB	1:A:322:GLY:HA3	2.48	0.43
1:A:78:VAL:HG23	1:A:322:GLY:HA2	2.00	0.43
1:A:344:CYS:O	1:A:348:VAL:HB	2.19	0.43
1:A:188:ILE:CB	1:A:189:PRO:CA	2.97	0.43
1:A:184:TYR:O	1:A:187:GLY:N	2.50	0.43
1:A:82:LEU:HD22	2:A:423:HOH:O	2.19	0.43
1:A:291:ALA:C	1:A:293:GLY:N	2.71	0.43
1:A:48:THR:HB	1:A:49:PRO:HD3	1.99	0.42
1:A:101:GLN:HA	1:A:104:LYS:HE2	2.00	0.42
1:A:219:ILE:CG1	1:A:274:LEU:HB2	2.49	0.42
1:A:326:TYR:C	1:A:328:LEU:H	2.22	0.42
1:A:56:SER:O	1:A:60:GLN:HG3	2.20	0.42
1:A:22:ILE:CG2	1:A:69:GLY:HA3	2.50	0.42
1:A:155:THR:HB	1:A:184:TYR:OH	2.18	0.42
1:A:205:LEU:N	1:A:205:LEU:HD12	2.34	0.42
1:A:334:VAL:HG12	1:A:334:VAL:O	2.19	0.42
1:A:120:PRO:C	1:A:122:GLN:N	2.73	0.42
1:A:223:ASN:HD22	1:A:224:GLU:H	1.63	0.42
1:A:119:ALA:HA	1:A:120:PRO:HD3	1.65	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:221:PHE:HA	1:A:276:VAL:HG13	2.02	0.42
1:A:277:MET:O	1:A:277:MET:CG	2.67	0.42
1:A:234:HIS:C	1:A:236:LEU:HD22	2.40	0.42
1:A:52:MET:C	1:A:54:ILE:H	2.22	0.42
1:A:76:ARG:HG3	1:A:76:ARG:HH11	1.76	0.42
1:A:90:TYR:O	1:A:115:ARG:N	2.49	0.42
1:A:112:LEU:HA	1:A:112:LEU:HD13	1.86	0.42
1:A:162:LEU:O	1:A:191:ALA:HA	2.20	0.42
1:A:165:TYR:OH	1:A:196:ASN:OD1	2.28	0.42
1:A:188:ILE:HB	1:A:189:PRO:CA	2.50	0.42
1:A:79:GLN:CD	1:A:79:GLN:C	2.78	0.42
1:A:356:LEU:HD23	1:A:356:LEU:HA	1.31	0.42
1:A:345:ALA:C	1:A:348:VAL:H	2.23	0.42
1:A:98:PRO:CA	1:A:101:GLN:HG2	2.44	0.41
1:A:15:VAL:HG23	2:A:427:HOH:O	2.20	0.41
1:A:316:ALA:O	1:A:345:ALA:HB2	2.19	0.41
1:A:99:ARG:CD	1:A:126:THR:HG21	2.50	0.41
1:A:150:ILE:H	1:A:177:ASN:HD21	1.67	0.41
1:A:54:ILE:HG22	1:A:55:TYR:CD1	2.55	0.41
1:A:57:THR:HG22	1:A:58:LEU:N	2.35	0.41
1:A:33:PHE:CE1	1:A:57:THR:CG2	2.95	0.41
1:A:36:GLU:HG3	1:A:36:GLU:O	2.20	0.41
1:A:95:GLY:HA2	1:A:119:ALA:N	2.34	0.41
1:A:82:LEU:HA	1:A:82:LEU:HD22	1.62	0.41
1:A:174:THR:OG1	1:A:176:LYS:HD3	2.20	0.41
1:A:286:ALA:C	1:A:298:HIS:H	2.23	0.41
1:A:215:LEU:C	1:A:217:THR:H	2.24	0.41
1:A:286:ALA:HB3	1:A:298:HIS:HB2	2.02	0.41
1:A:298:HIS:HA	1:A:298:HIS:HD1	1.82	0.41
1:A:346:GLN:CG	1:A:347:ASP:N	2.79	0.41
1:A:281:HIS:C	1:A:282:ASN:O	2.58	0.41
1:A:68:GLY:C	1:A:72:LEU:HB3	2.42	0.41
1:A:127:CYS:SG	1:A:127:CYS:O	2.79	0.41
1:A:197:LEU:N	1:A:197:LEU:CD2	2.77	0.41
1:A:199:ALA:CB	1:A:201:PHE:CD2	3.03	0.41
1:A:48:THR:HG23	1:A:51:GLN:OE1	2.21	0.41
1:A:177:ASN:C	1:A:179:LEU:H	2.24	0.41
1:A:76:ARG:H	1:A:76:ARG:HD3	1.85	0.40
1:A:307:ALA:C	1:A:309:LYS:N	2.75	0.40
1:A:316:ALA:O	1:A:319:ALA:HB3	2.21	0.40
1:A:47:ALA:CB	1:A:139:CYS:SG	3.09	0.40

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:108:ASP:OD1	1:A:109:LYS:N	2.54	0.40
1:A:15:VAL:HG22	1:A:163:ILE:HB	2.03	0.40
1:A:94:ILE:HG13	1:A:118:VAL:HA	2.03	0.40
1:A:129:VAL:HG23	1:A:138:LEU:CD1	2.50	0.40
1:A:18:ILE:O	1:A:166:ALA:HB1	2.21	0.40
1:A:196:ASN:ND2	1:A:198:SER:OG	2.55	0.40
1:A:281:HIS:O	1:A:282:ASN:C	2.60	0.40
1:A:72:LEU:HD12	1:A:72:LEU:HA	1.39	0.40
1:A:99:ARG:CD	1:A:126:THR:CG2	2.99	0.40
1:A:312:ASP:OD2	1:A:315:GLY:HA3	2.21	0.40
1:A:120:PRO:C	1:A:122:GLN:H	2.25	0.40
1:A:188:ILE:HG22	1:A:190:ASN:H	1.87	0.40
1:A:81:LEU:HD12	1:A:81:LEU:HA	1.57	0.40
1:A:298:HIS:CD2	1:A:334:VAL:HA	2.55	0.40

All (4) symmetry-related close contacts are listed below. The label for Atom-2 includes the symmetry operator and encoded unit-cell translations to be applied.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:152:GLU:OE1	2:A:534:HOH:O[1_655]	0.85	1.35
1:A:152:GLU:CD	2:A:534:HOH:O[1_655]	1.06	1.14
1:A:152:GLU:CG	2:A:534:HOH:O[1_655]	1.93	0.27
1:A:152:GLU:OE2	2:A:534:HOH:O[1_655]	2.16	0.04

## 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	323/363 (89%)	224 (69%)	55 (17%)	44 (14%)	<b>0</b> <b>0</b>

All (44) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	28	GLU
1	A	61	PHE
1	A	190	ASN
1	A	197	LEU
1	A	208	ASP
1	A	250	GLU
1	A	252	ALA
1	A	253	VAL
1	A	301	GLY
1	A	312	ASP
1	A	315	GLY
1	A	333	THR
1	A	334	VAL
1	A	352	VAL
1	A	38	PHE
1	A	77	VAL
1	A	83	ARG
1	A	134	LYS
1	A	147	SER
1	A	159	SER
1	A	172	THR
1	A	191	ALA
1	A	236	LEU
1	A	243	ALA
1	A	275	VAL
1	A	308	GLU
1	A	57	THR
1	A	287	ALA
1	A	76	ARG
1	A	121	GLY
1	A	143	GLY
1	A	58	LEU
1	A	175	PRO
1	A	177	ASN
1	A	225	GLU
1	A	235	ASN
1	A	311	VAL
1	A	48	THR
1	A	131	ILE
1	A	188	ILE
1	A	353	GLY
1	A	310	ILE
1	A	237	VAL

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	78	VAL

### 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	249/287 (87%)	143 (57%)	106 (43%)	<b>0</b> <b>0</b>

All (106) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	18	ILE
1	A	20	ASN
1	A	22	ILE
1	A	23	LEU
1	A	25	LEU
1	A	26	VAL
1	A	28	GLU
1	A	29	VAL
1	A	35	ASP
1	A	40	LYS
1	A	43	ASP
1	A	45	THR
1	A	46	LEU
1	A	48	THR
1	A	50	GLU
1	A	53	ARG
1	A	58	LEU
1	A	59	ASP
1	A	60	GLN
1	A	61	PHE
1	A	62	ASN
1	A	64	THR
1	A	66	LEU
1	A	74	SER
1	A	76	ARG

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	80	LYS
1	A	81	LEU
1	A	82	LEU
1	A	87	SER
1	A	94	ILE
1	A	97	ASP
1	A	99	ARG
1	A	101	GLN
1	A	103	LEU
1	A	104	LYS
1	A	109	LYS
1	A	112	LEU
1	A	117	MET
1	A	118	VAL
1	A	123	SER
1	A	124	THR
1	A	126	THR
1	A	127	CYS
1	A	129	VAL
1	A	130	LEU
1	A	133	GLU
1	A	134	LYS
1	A	135	GLU
1	A	137	THR
1	A	138	LEU
1	A	140	THR
1	A	149	ARG
1	A	150	ILE
1	A	152	GLU
1	A	163	ILE
1	A	172	THR
1	A	174	THR
1	A	176	LYS
1	A	179	LEU
1	A	180	GLU
1	A	184	TYR
1	A	188	ILE
1	A	192	ILE
1	A	195	LEU
1	A	196	ASN
1	A	197	LEU
1	A	200	PRO

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	201	PHE
1	A	207	LYS
1	A	212	SER
1	A	214	LEU
1	A	215	LEU
1	A	217	THR
1	A	223	ASN
1	A	226	GLU
1	A	227	PHE
1	A	230	LEU
1	A	233	VAL
1	A	234	HIS
1	A	236	LEU
1	A	237	VAL
1	A	273	LYS
1	A	274	LEU
1	A	278	THR
1	A	279	ARG
1	A	284	VAL
1	A	290	THR
1	A	292	ASP
1	A	296	VAL
1	A	297	VAL
1	A	298	HIS
1	A	299	GLU
1	A	303	PRO
1	A	309	LYS
1	A	310	ILE
1	A	314	ASN
1	A	325	LEU
1	A	332	LYS
1	A	336	GLN
1	A	337	CYS
1	A	339	MET
1	A	346	GLN
1	A	347	ASP
1	A	350	GLN
1	A	354	PHE
1	A	355	SER

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (9) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	177	ASN
1	A	211	GLN
1	A	223	ASN
1	A	235	ASN
1	A	281	HIS
1	A	298	HIS
1	A	342	ASN
1	A	346	GLN
1	A	351	HIS

### 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

### 6.1 Protein, DNA and RNA chains

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

### 6.2 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

### 6.3 Carbohydrates

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

### 6.4 Ligands

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

### 6.5 Other polymers

EDS was not executed - this section will therefore be empty.