



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report

Feb 26, 2014 – 04:51 PM GMT

PDB ID : 1I6B  
Title : STRUCTURE OF EQUINE APOLACTOFERRIN AT 3.2 Å RESOLUTION  
USING CRYSTALS GROWN AT 303K  
Authors : Kumar, P.; Yadav, S.; Singh, T.P.  
Deposited on : 2001-03-02  
Resolution : 3.20 Å(reported)

This is a full wwPDB 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/ValidationPDFNotes.html>

---

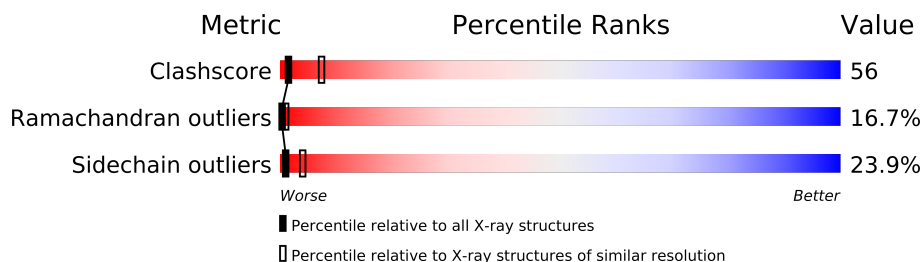
The following versions of software and data (see [references](#)) were used in the production of this report:

MolProbity : 4.02b-467  
Mogul : 1.15 2013  
Xtriage (Phenix) : **NOT EXECUTED**  
EDS : **NOT EXECUTED**  
Percentile statistics : 21963  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et. al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : stable22683

# 1 Overall quality at a glance

The reported resolution of this entry is 3.20 Å.

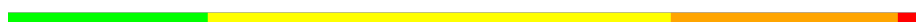
Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	79885	1078 (3.26-3.14)
Ramachandran outliers	78287	1059 (3.26-3.14)
Sidechain outliers	78261	1058 (3.26-3.14)

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. The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the electron density.

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	689	

## 2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 5281 atoms, of which 0 are hydrogen and 0 are deuterium.

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 LACTOTRANSFERRIN.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	689	5281	3299	937	1008	37	0	0	0

There are 6 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	223	GLU	ASP	SEE REMARK 999	UNP O77811
A	269	LYS	ARG	SEE REMARK 999	UNP O77811
A	290	GLY	LYS	SEE REMARK 999	UNP O77811
A	294	GLY	GLU	SEE REMARK 999	UNP O77811
A	295	GLU	ASN	SEE REMARK 999	UNP O77811
A	296	GLN	LYS	SEE REMARK 999	UNP O77811

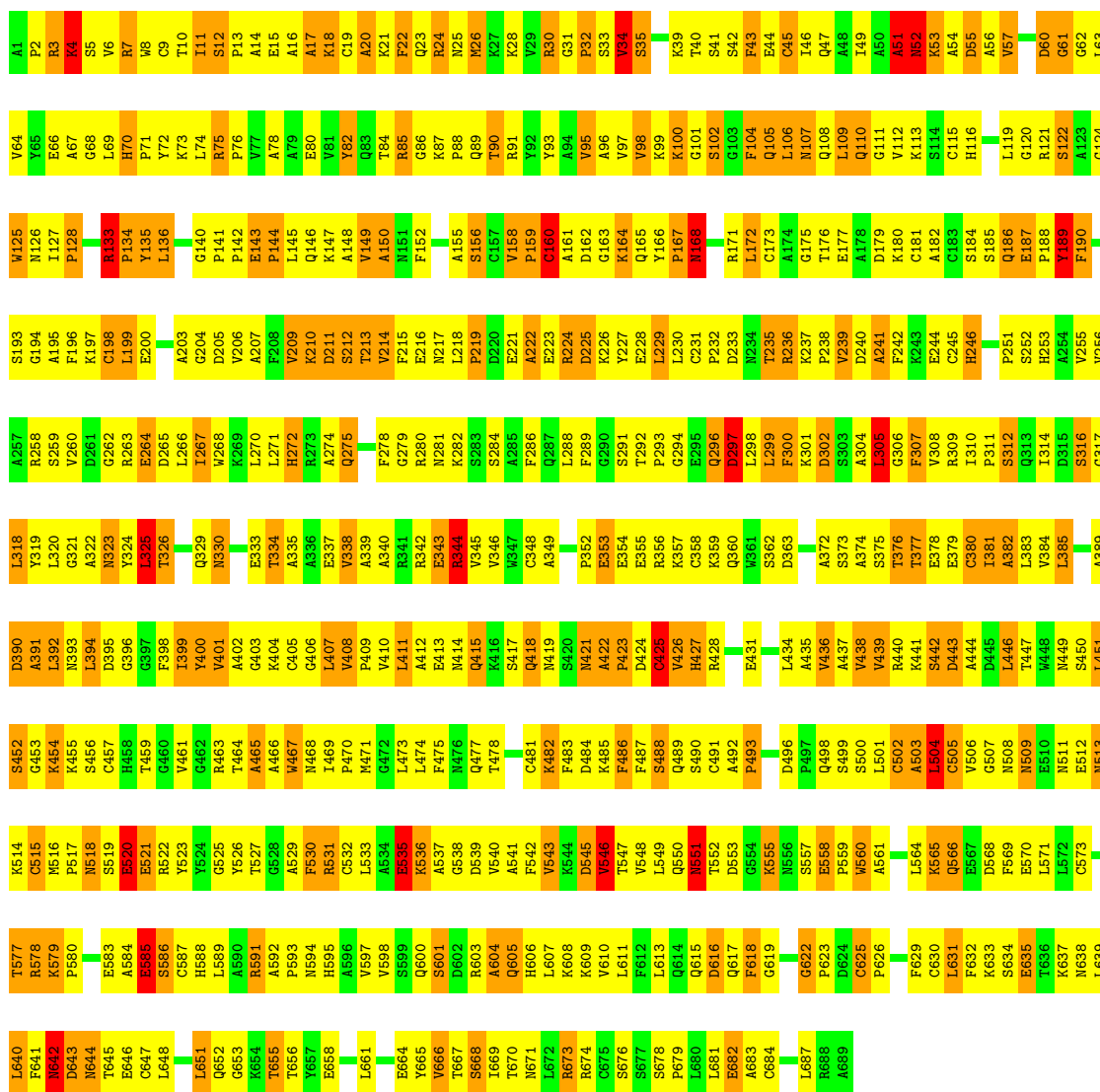
### 3 Residue-property plots

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: LACTOTRANSFERRIN

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 21 21 21	Depositor
Cell constants a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	80.49Å 103.48Å 112.27Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	20.00 – 3.20	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	84.1 (20.00-3.20)	Depositor
$R_{merge}$	0.07	Depositor
$R_{sym}$	0.07	Depositor
Refinement program	X-PLOR 3.851	Depositor
R, $R_{free}$	0.222 , 0.291	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	5281	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	82.0	wwPDB-VP

## 5 Model quality i

### 5.1 Standard geometry i

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	0.72	3/5392 (0.1%)	0.81	5/7298 (0.1%)

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	0	1

All (3) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	452	SER	CB-OG	-7.67	1.32	1.42
1	A	51	ALA	C-O	-6.32	1.11	1.23
1	A	52	ASN	CB-CG	-5.45	1.38	1.51

All (5) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	535	GLU	N-CA-C	-9.32	85.84	111.00
1	A	52	ASN	CB-CG-OD1	-7.10	107.40	121.60
1	A	504	LEU	N-CA-C	5.48	125.81	111.00
1	A	52	ASN	CB-CA-C	5.43	121.27	110.40
1	A	488	SER	N-CA-C	5.36	125.48	111.00

There are no chirality outliers.

All (1) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	51	ALA	Mainchain

## 5.2 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 hydrogens added by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes within the asymmetric unit, and the number in parentheses is this value normalized per 1000 atoms of the molecule in the chain. The Symm-Clashes column gives symmetry related clashes, in the same way as for the Clashes column.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	5281	0	5147	581	0
All	All	5281	0	5147	581	0

Clashscore is defined as the number of clashes calculated for the entry per 1000 atoms (including hydrogens) of the entry. The overall clashscore for this entry is 56.

All (581) close contacts within the same asymmetric unit are listed below.

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:625:CYS:HB3	1:A:626:PRO:HD3	1.29	1.09
1:A:49:ILE:HG23	1:A:55:ASP:HA	1.32	1.07
1:A:133:ARG:HA	1:A:136:LEU:HD12	1.40	1.01
1:A:457:CYS:HB2	1:A:541:ALA:HA	1.44	1.00
1:A:330:ASN:HD22	1:A:330:ASN:H	1.08	0.98
1:A:330:ASN:N	1:A:330:ASN:HD22	1.63	0.96
1:A:70:HIS:HB3	1:A:71:PRO:HD3	1.49	0.92
1:A:188:PRO:O	1:A:189:TYR:HB2	1.69	0.92
1:A:292:THR:HB	1:A:293:PRO:HD2	1.52	0.90
1:A:381:ILE:O	1:A:384:VAL:HG12	1.71	0.90
1:A:297:ASP:HB3	1:A:301:LYS:HA	1.54	0.88
1:A:376:THR:HG23	1:A:379:GLU:H	1.37	0.88
1:A:156:SER:HA	1:A:172:LEU:HD12	1.55	0.85
1:A:93:TYR:HB2	1:A:211:ASP:HB3	1.57	0.84
1:A:343:GLU:O	1:A:344:ARG:HB3	1.73	0.84
1:A:314:ILE:HA	1:A:318:LEU:HD22	1.60	0.83
1:A:291:SER:HB3	1:A:298:LEU:HD12	1.62	0.82
1:A:76:PRO:O	1:A:310:ILE:HD12	1.80	0.82
1:A:625:CYS:HB3	1:A:626:PRO:CD	2.10	0.81
1:A:155:ALA:O	1:A:156:SER:HB3	1.79	0.81
1:A:175:GLY:HA3	1:A:180:LYS:HA	1.63	0.81
1:A:78:ALA:HA	1:A:310:ILE:HG13	1.63	0.80
1:A:446:LEU:HD21	1:A:454:LYS:HG3	1.64	0.80
1:A:523:TYR:CZ	1:A:532:CYS:HA	2.16	0.80
1:A:110:GLN:HE21	1:A:111:GLY:N	1.78	0.80
1:A:127:ILE:HB	1:A:128:PRO:HD3	1.64	0.80

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:56:ALA:O	1:A:57:VAL:HB	1.82	0.79
1:A:330:ASN:H	1:A:330:ASN:ND2	1.80	0.78
1:A:91:ARG:HG2	1:A:251:PRO:HA	1.64	0.78
1:A:402:ALA:HB1	1:A:407:LEU:HD12	1.64	0.78
1:A:68:GLY:HA2	1:A:74:LEU:H	1.47	0.78
1:A:141:PRO:HD2	1:A:334:THR:HA	1.67	0.77
1:A:122:SER:HA	1:A:126:ASN:HB2	1.66	0.76
1:A:189:TYR:CZ	1:A:198:CYS:HA	2.19	0.76
1:A:447:THR:HG23	1:A:449:ASN:H	1.49	0.76
1:A:455:LYS:HB2	1:A:539:ASP:HB2	1.66	0.76
1:A:104:PHE:H	1:A:104:PHE:HD1	1.33	0.75
1:A:415:GLN:HB2	1:A:644:ASN:HD21	1.52	0.74
1:A:395:ASP:HA	1:A:595:HIS:CD2	2.23	0.74
1:A:629:PHE:CZ	1:A:631:LEU:HA	2.22	0.73
1:A:470:PRO:HA	1:A:473:LEU:HD12	1.69	0.73
1:A:18:LYS:HA	1:A:21:LYS:HE3	1.70	0.73
1:A:580:PRO:HD2	1:A:583:GLU:HB3	1.71	0.73
1:A:530:PHE:O	1:A:532:CYS:N	2.21	0.73
1:A:543:VAL:HG11	1:A:547:THR:HG21	1.70	0.73
1:A:231:CYS:SG	1:A:237:LYS:HB2	2.28	0.73
1:A:90:THR:C	1:A:252:SER:HB3	2.10	0.72
1:A:258:ARG:NH1	1:A:262:GLY:HA2	2.05	0.72
1:A:311:PRO:HD2	1:A:314:ILE:HD12	1.71	0.72
1:A:463:ARG:HH21	1:A:465:ALA:HB2	1.55	0.71
1:A:41:SER:O	1:A:45:CYS:HB2	1.89	0.71
1:A:530:PHE:C	1:A:532:CYS:H	1.94	0.70
1:A:564:LEU:HD23	1:A:565:LYS:NZ	2.06	0.70
1:A:11:ILE:H	1:A:15:GLU:HG2	1.56	0.70
1:A:7:ARG:H	1:A:7:ARG:HD2	1.57	0.69
1:A:408:VAL:HB	1:A:409:PRO:HD2	1.73	0.69
1:A:447:THR:H	1:A:450:SER:HB3	1.57	0.69
1:A:422:ALA:HB1	1:A:423:PRO:HD2	1.74	0.68
1:A:393:ASN:OD1	1:A:394:LEU:N	2.25	0.68
1:A:418:GLN:HA	1:A:421:ASN:OD1	1.94	0.68
1:A:382:ALA:O	1:A:385:LEU:N	2.27	0.68
1:A:437:ALA:O	1:A:571:LEU:HA	1.93	0.68
1:A:105:GLN:OE1	1:A:235:THR:HA	1.94	0.68
1:A:374:ALA:HB1	1:A:379:GLU:HB3	1.74	0.68
1:A:451:LEU:O	1:A:454:LYS:HG2	1.93	0.67
1:A:514:LYS:O	1:A:515:CYS:HB2	1.93	0.67
1:A:19:CYS:O	1:A:22:PHE:HB3	1.93	0.67
1:A:143:GLU:HG3	1:A:147:LYS:HD2	1.76	0.67

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:385:LEU:HD21	1:A:405:CYS:HB3	1.75	0.67
1:A:418:GLN:HA	1:A:421:ASN:ND2	2.10	0.67
1:A:392:LEU:HD13	1:A:393:ASN:O	1.93	0.67
1:A:384:VAL:HA	1:A:389:ALA:HB3	1.76	0.67
1:A:631:LEU:HB3	1:A:632:PHE:HD2	1.59	0.67
1:A:173:CYS:HB3	1:A:187:GLU:OE1	1.95	0.67
1:A:469:ILE:HB	1:A:470:PRO:CD	2.25	0.67
1:A:444:ALA:HA	1:A:578:ARG:NH2	2.10	0.67
1:A:376:THR:HG22	1:A:379:GLU:HG3	1.78	0.66
1:A:113:LYS:HB3	1:A:172:LEU:HD11	1.76	0.66
1:A:440:ARG:HH22	1:A:536:LYS:HB3	1.60	0.66
1:A:489:GLN:HB3	1:A:504:LEU:HD12	1.78	0.66
1:A:533:LEU:H	1:A:533:LEU:HD23	1.61	0.66
1:A:425:CYS:HA	1:A:428:ARG:HB3	1.78	0.66
1:A:551:ASN:ND2	1:A:552:THR:H	1.94	0.66
1:A:97:VAL:O	1:A:98:VAL:HG13	1.95	0.66
1:A:231:CYS:HB2	1:A:233:ASP:OD1	1.96	0.66
1:A:418:GLN:HA	1:A:421:ASN:HD21	1.61	0.66
1:A:496:ASP:HB3	1:A:499:SER:HB3	1.78	0.65
1:A:438:VAL:HG23	1:A:541:ALA:HB3	1.78	0.65
1:A:57:VAL:H	1:A:255:VAL:HG13	1.61	0.65
1:A:223:GLU:O	1:A:225:ASP:N	2.29	0.65
1:A:107:ASN:HD22	1:A:107:ASN:H	1.44	0.65
1:A:217:ASN:O	1:A:219:PRO:HD3	1.97	0.65
1:A:51:ALA:O	1:A:53:LYS:N	2.29	0.64
1:A:11:ILE:HG22	1:A:42:SER:N	2.12	0.64
1:A:55:ASP:HB3	1:A:258:ARG:NH2	2.12	0.64
1:A:385:LEU:HG	1:A:407:LEU:HD21	1.78	0.64
1:A:425:CYS:SG	1:A:426:VAL:N	2.69	0.64
1:A:193:SER:OG	1:A:296:GLN:HG3	1.97	0.64
1:A:551:ASN:HD22	1:A:552:THR:N	1.96	0.64
1:A:606:HIS:O	1:A:610:VAL:HG23	1.98	0.64
1:A:60:ASP:O	1:A:64:VAL:HG23	1.98	0.64
1:A:629:PHE:CE2	1:A:631:LEU:HA	2.33	0.64
1:A:517:PRO:O	1:A:518:ASN:HB3	1.98	0.64
1:A:530:PHE:CE2	1:A:548:VAL:HA	2.32	0.64
1:A:223:GLU:HG3	1:A:224:ARG:H	1.63	0.64
1:A:438:VAL:HA	1:A:570:GLU:O	1.97	0.63
1:A:122:SER:HA	1:A:126:ASN:HD22	1.62	0.63
1:A:395:ASP:HA	1:A:595:HIS:NE2	2.13	0.63
1:A:263:ARG:O	1:A:264:GLU:C	2.36	0.63
1:A:394:LEU:HD23	1:A:395:ASP:N	2.12	0.63

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:525:GLY:O	1:A:529:ALA:HB2	1.98	0.63
1:A:411:LEU:HD11	1:A:611:LEU:HD13	1.79	0.63
1:A:245:CYS:O	1:A:246:HIS:HB3	1.97	0.63
1:A:133:ARG:HB3	1:A:134:PRO:CD	2.29	0.63
1:A:19:CYS:O	1:A:22:PHE:N	2.31	0.63
1:A:533:LEU:HD22	1:A:541:ALA:HB2	1.80	0.63
1:A:106:LEU:H	1:A:230:LEU:HD22	1.63	0.62
1:A:533:LEU:HD13	1:A:539:ASP:O	1.98	0.62
1:A:155:ALA:HA	1:A:168:ASN:HB3	1.80	0.62
1:A:110:GLN:HE21	1:A:111:GLY:H	1.48	0.62
1:A:23:GLN:NE2	1:A:35:SER:HA	2.14	0.62
1:A:107:ASN:HA	1:A:135:TYR:OH	2.00	0.61
1:A:147:LYS:O	1:A:150:ALA:HB3	2.00	0.61
1:A:267:ILE:O	1:A:270:LEU:HB3	2.00	0.61
1:A:101:GLY:O	1:A:102:SER:C	2.37	0.61
1:A:564:LEU:HD23	1:A:565:LYS:HZ1	1.65	0.61
1:A:10:THR:HG21	1:A:16:ALA:HA	1.82	0.61
1:A:21:LYS:HB2	1:A:286:PHE:CE1	2.35	0.61
1:A:631:LEU:HG	1:A:641:PHE:CE1	2.35	0.61
1:A:665:TYR:O	1:A:669:ILE:HG12	2.01	0.61
1:A:444:ALA:HA	1:A:578:ARG:HH22	1.64	0.60
1:A:106:LEU:HD22	1:A:232:PRO:HA	1.83	0.60
1:A:64:VAL:O	1:A:67:ALA:HB3	2.01	0.60
1:A:158:VAL:O	1:A:159:PRO:C	2.39	0.60
1:A:322:ALA:O	1:A:323:ASN:C	2.39	0.60
1:A:268:TRP:CZ3	1:A:309:ARG:HB2	2.36	0.60
1:A:133:ARG:O	1:A:136:LEU:HB2	2.01	0.60
1:A:23:GLN:HE21	1:A:35:SER:HA	1.67	0.60
1:A:523:TYR:OH	1:A:532:CYS:HA	2.02	0.59
1:A:469:ILE:HB	1:A:470:PRO:HD3	1.84	0.59
1:A:49:ILE:CG2	1:A:55:ASP:HA	2.19	0.59
1:A:553:ASP:OD1	1:A:565:LYS:HA	2.02	0.59
1:A:536:LYS:HD2	1:A:536:LYS:N	2.18	0.59
1:A:213:THR:O	1:A:214:VAL:C	2.41	0.59
1:A:66:GLU:HA	1:A:69:LEU:HD12	1.85	0.59
1:A:32:PRO:HG3	1:A:270:LEU:HA	1.84	0.59
1:A:423:PRO:O	1:A:426:VAL:HG23	2.03	0.59
1:A:434:LEU:HD23	1:A:591:ARG:HA	1.84	0.59
1:A:461:VAL:HG12	1:A:467:TRP:CZ3	2.38	0.59
1:A:631:LEU:HG	1:A:641:PHE:HE1	1.68	0.59
1:A:376:THR:CG2	1:A:379:GLU:HG3	2.33	0.59
1:A:330:ASN:N	1:A:330:ASN:ND2	2.37	0.59

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:44:GLU:HA	1:A:47:GLN:OE1	2.03	0.59
1:A:622:GLY:O	1:A:625:CYS:HB2	2.03	0.58
1:A:463:ARG:HH21	1:A:465:ALA:CB	2.15	0.58
1:A:301:LYS:HG3	1:A:302:ASP:N	2.18	0.58
1:A:658:GLU:HA	1:A:666:VAL:HG21	1.85	0.58
1:A:133:ARG:HB3	1:A:134:PRO:HD3	1.85	0.58
1:A:530:PHE:C	1:A:532:CYS:N	2.57	0.58
1:A:348:CYS:HA	1:A:372:ALA:O	2.04	0.58
1:A:12:SER:CB	1:A:185:SER:HB2	2.34	0.58
1:A:453:GLY:HA2	1:A:488:SER:H	1.68	0.58
1:A:314:ILE:HG23	1:A:318:LEU:HD23	1.86	0.58
1:A:47:GLN:HG3	1:A:72:TYR:HE1	1.69	0.58
1:A:173:CYS:SG	1:A:181:CYS:SG	3.02	0.58
1:A:353:GLU:HA	1:A:356:ARG:HE	1.69	0.58
1:A:490:SER:OG	1:A:491:CYS:N	2.37	0.57
1:A:395:ASP:OD2	1:A:396:GLY:N	2.37	0.57
1:A:505:CYS:HB3	1:A:521:GLU:OE1	2.04	0.57
1:A:194:GLY:O	1:A:197:LYS:HB2	2.04	0.57
1:A:394:LEU:HD23	1:A:395:ASP:H	1.69	0.57
1:A:665:TYR:CE1	1:A:669:ILE:HD11	2.39	0.57
1:A:98:VAL:O	1:A:227:TYR:HB3	2.04	0.57
1:A:142:PRO:O	1:A:144:PRO:HD3	2.04	0.57
1:A:418:GLN:HA	1:A:421:ASN:CG	2.25	0.57
1:A:223:GLU:O	1:A:226:LYS:HG3	2.04	0.57
1:A:632:PHE:HD1	1:A:645:THR:HB	1.70	0.57
1:A:439:VAL:O	1:A:569:PHE:HD1	1.86	0.57
1:A:296:GLN:O	1:A:298:LEU:HG	2.05	0.57
1:A:115:CYS:SG	1:A:204:GLY:HA3	2.45	0.57
1:A:455:LYS:CB	1:A:539:ASP:HB2	2.35	0.56
1:A:532:CYS:SG	1:A:538:GLY:HA3	2.44	0.56
1:A:617:GLN:HG2	1:A:618:PHE:CD1	2.40	0.56
1:A:70:HIS:CB	1:A:71:PRO:HD3	2.28	0.56
1:A:378:GLU:HA	1:A:381:ILE:HD12	1.87	0.56
1:A:390:ASP:O	1:A:391:ALA:HB2	2.05	0.56
1:A:6:VAL:HB	1:A:34:VAL:HG12	1.88	0.56
1:A:317:GLY:HA2	1:A:325:LEU:HD21	1.87	0.56
1:A:348:CYS:HB3	1:A:392:LEU:HD23	1.88	0.56
1:A:14:ALA:O	1:A:17:ALA:HB3	2.06	0.56
1:A:551:ASN:ND2	1:A:552:THR:N	2.52	0.56
1:A:182:ALA:H	1:A:187:GLU:HB3	1.71	0.56
1:A:297:ASP:OD1	1:A:302:ASP:HB2	2.06	0.56
1:A:381:ILE:HG22	1:A:385:LEU:HD12	1.87	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:396:GLY:HA2	1:A:399:ILE:HB	1.88	0.56
1:A:395:ASP:HA	1:A:595:HIS:CE1	2.41	0.55
1:A:346:VAL:HB	1:A:390:ASP:HB2	1.88	0.55
1:A:251:PRO:HG2	1:A:320:LEU:HA	1.88	0.55
1:A:90:THR:O	1:A:252:SER:HB3	2.07	0.55
1:A:521:GLU:OE2	1:A:523:TYR:HB2	2.07	0.55
1:A:104:PHE:HB2	1:A:108:GLN:HB2	1.88	0.55
1:A:34:VAL:O	1:A:35:SER:HB3	2.07	0.55
1:A:71:PRO:HD2	1:A:72:TYR:CD2	2.42	0.55
1:A:412:ALA:O	1:A:648:LEU:HA	2.07	0.55
1:A:116:HIS:HB3	1:A:124:GLY:O	2.06	0.55
1:A:381:ILE:O	1:A:382:ALA:C	2.45	0.54
1:A:490:SER:O	1:A:504:LEU:N	2.40	0.54
1:A:352:PRO:HA	1:A:355:GLU:HB3	1.89	0.54
1:A:553:ASP:OD1	1:A:566:GLN:HG3	2.07	0.54
1:A:185:SER:HA	1:A:190:PHE:CD1	2.42	0.54
1:A:95:VAL:HG23	1:A:209:VAL:O	2.06	0.54
1:A:568:ASP:HB3	1:A:569:PHE:CD2	2.42	0.54
1:A:533:LEU:CD2	1:A:533:LEU:H	2.20	0.54
1:A:533:LEU:HD23	1:A:533:LEU:N	2.22	0.54
1:A:422:ALA:O	1:A:424:ASP:N	2.41	0.54
1:A:414:ASN:O	1:A:646:GLU:N	2.31	0.54
1:A:491:CYS:HA	1:A:502:CYS:O	2.08	0.54
1:A:349:ALA:HB3	1:A:373:SER:HB3	1.88	0.54
1:A:82:TYR:CE2	1:A:252:SER:HB2	2.43	0.53
1:A:461:VAL:HG13	1:A:492:ALA:O	2.08	0.53
1:A:507:GLY:HA2	1:A:513:ASN:O	2.08	0.53
1:A:12:SER:O	1:A:15:GLU:HB3	2.08	0.53
1:A:666:VAL:O	1:A:667:THR:C	2.46	0.53
1:A:63:LEU:O	1:A:64:VAL:C	2.46	0.53
1:A:401:VAL:O	1:A:404:LYS:N	2.41	0.53
1:A:593:PRO:HG2	1:A:665:TYR:HD2	1.74	0.53
1:A:415:GLN:HA	1:A:645:THR:HA	1.90	0.53
1:A:104:PHE:N	1:A:104:PHE:HD1	2.03	0.53
1:A:127:ILE:HB	1:A:128:PRO:CD	2.35	0.53
1:A:409:PRO:HD2	1:A:655:THR:O	2.09	0.53
1:A:69:LEU:H	1:A:73:LYS:H	1.57	0.53
1:A:49:ILE:HA	1:A:54:ALA:O	2.08	0.53
1:A:80:GLU:HG2	1:A:253:HIS:O	2.09	0.52
1:A:105:GLN:O	1:A:107:ASN:N	2.43	0.52
1:A:146:GLN:HB2	1:A:166:TYR:CE1	2.44	0.52
1:A:421:ASN:O	1:A:422:ALA:O	2.28	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:119:LEU:HB3	1:A:160:CYS:HB2	1.90	0.52
1:A:112:VAL:HG12	1:A:113:LYS:H	1.73	0.52
1:A:107:ASN:ND2	1:A:107:ASN:H	2.06	0.52
1:A:75:ARG:NH2	1:A:312:SER:HA	2.25	0.52
1:A:637:LYS:O	1:A:638:ASN:HB2	2.09	0.52
1:A:398:PHE:O	1:A:401:VAL:N	2.43	0.52
1:A:546:VAL:O	1:A:547:THR:C	2.47	0.52
1:A:413:GLU:HB2	1:A:645:THR:CG2	2.40	0.52
1:A:597:VAL:HG12	1:A:598:VAL:N	2.24	0.52
1:A:613:LEU:O	1:A:616:ASP:HB2	2.09	0.52
1:A:551:ASN:ND2	1:A:552:THR:HG23	2.24	0.52
1:A:316:SER:O	1:A:317:GLY:C	2.47	0.52
1:A:447:THR:CG2	1:A:450:SER:H	2.22	0.52
1:A:447:THR:HG23	1:A:450:SER:H	1.73	0.52
1:A:87:LYS:HB2	1:A:88:PRO:HD2	1.90	0.52
1:A:133:ARG:O	1:A:134:PRO:C	2.47	0.52
1:A:12:SER:HB3	1:A:185:SER:HB2	1.92	0.52
1:A:651:LEU:O	1:A:653:GLY:N	2.43	0.52
1:A:354:GLU:O	1:A:355:GLU:C	2.49	0.51
1:A:569:PHE:CD2	1:A:569:PHE:N	2.78	0.51
1:A:239:VAL:O	1:A:241:ALA:N	2.43	0.51
1:A:345:VAL:HG12	1:A:346:VAL:N	2.24	0.51
1:A:104:PHE:HA	1:A:108:GLN:NE2	2.25	0.51
1:A:159:PRO:O	1:A:161:ALA:N	2.43	0.51
1:A:11:ILE:N	1:A:15:GLU:HG2	2.25	0.51
1:A:61:GLY:O	1:A:64:VAL:HG23	2.11	0.51
1:A:166:TYR:CD2	1:A:166:TYR:N	2.78	0.51
1:A:484:ASP:HA	1:A:501:LEU:HG	1.91	0.51
1:A:393:ASN:ND2	1:A:641:PHE:HA	2.26	0.51
1:A:10:THR:HG22	1:A:15:GLU:HG3	1.92	0.51
1:A:357:LYS:O	1:A:358:CYS:C	2.48	0.51
1:A:630:CYS:O	1:A:633:LYS:N	2.36	0.51
1:A:604:ALA:O	1:A:605:GLN:C	2.49	0.51
1:A:632:PHE:CD1	1:A:645:THR:HB	2.46	0.51
1:A:11:ILE:HB	1:A:184:SER:HB2	1.93	0.50
1:A:630:CYS:O	1:A:631:LEU:C	2.49	0.50
1:A:580:PRO:CD	1:A:583:GLU:HB3	2.39	0.50
1:A:666:VAL:O	1:A:668:SER:N	2.45	0.50
1:A:639:LEU:O	1:A:640:LEU:HB2	2.11	0.50
1:A:447:THR:HG22	1:A:450:SER:HB2	1.94	0.50
1:A:5:SER:HB2	1:A:34:VAL:O	2.11	0.50
1:A:463:ARG:O	1:A:468:ASN:HB2	2.11	0.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:116:HIS:CD2	1:A:158:VAL:HG13	2.47	0.50
1:A:238:PRO:O	1:A:241:ALA:HB3	2.11	0.50
1:A:464:THR:HA	1:A:665:TYR:OH	2.12	0.50
1:A:82:TYR:HE2	1:A:252:SER:HB2	1.76	0.50
1:A:352:PRO:O	1:A:356:ARG:HG3	2.12	0.50
1:A:19:CYS:O	1:A:20:ALA:C	2.50	0.49
1:A:321:GLY:O	1:A:325:LEU:HB2	2.12	0.49
1:A:289:PHE:CZ	1:A:306:GLY:HA2	2.46	0.49
1:A:571:LEU:HB2	1:A:587:CYS:SG	2.52	0.49
1:A:523:TYR:OH	1:A:537:ALA:HB3	2.12	0.49
1:A:193:SER:O	1:A:196:PHE:HB3	2.11	0.49
1:A:314:ILE:HD13	1:A:687:LEU:HD21	1.93	0.49
1:A:100:LYS:HB2	1:A:226:LYS:O	2.12	0.49
1:A:461:VAL:HG13	1:A:493:PRO:O	2.11	0.49
1:A:619:GLY:H	1:A:622:GLY:HA3	1.76	0.49
1:A:60:ASP:HB3	1:A:63:LEU:HD12	1.93	0.49
1:A:384:VAL:CG1	1:A:385:LEU:N	2.76	0.49
1:A:167:PRO:HG2	1:A:168:ASN:ND2	2.27	0.49
1:A:580:PRO:HG2	1:A:583:GLU:H	1.78	0.49
1:A:513:ASN:N	1:A:513:ASN:HD22	2.11	0.49
1:A:509:ASN:C	1:A:511:ASN:H	2.15	0.49
1:A:210:LYS:HG2	1:A:211:ASP:N	2.27	0.49
1:A:453:GLY:HA2	1:A:487:PHE:HA	1.95	0.49
1:A:298:LEU:O	1:A:299:LEU:HB2	2.13	0.49
1:A:376:THR:HG23	1:A:379:GLU:N	2.18	0.49
1:A:96:ALA:HB3	1:A:230:LEU:HB2	1.93	0.49
1:A:7:ARG:HG2	1:A:55:ASP:OD1	2.13	0.49
1:A:413:GLU:HB2	1:A:645:THR:HG21	1.95	0.49
1:A:76:PRO:C	1:A:310:ILE:HD12	2.33	0.49
1:A:223:GLU:O	1:A:224:ARG:C	2.50	0.49
1:A:482:LYS:HD2	1:A:485:LYS:HB2	1.95	0.49
1:A:665:TYR:HE1	1:A:669:ILE:HD11	1.78	0.49
1:A:546:VAL:HA	1:A:549:LEU:HD12	1.95	0.49
1:A:262:GLY:O	1:A:263:ARG:HB2	2.12	0.48
1:A:535:GLU:CD	1:A:560:TRP:HB3	2.33	0.48
1:A:60:ASP:O	1:A:61:GLY:C	2.51	0.48
1:A:194:GLY:O	1:A:197:LYS:N	2.46	0.48
1:A:109:LEU:O	1:A:112:VAL:HG23	2.13	0.48
1:A:425:CYS:O	1:A:427:HIS:N	2.47	0.48
1:A:466:ALA:HB1	1:A:542:PHE:HB3	1.96	0.48
1:A:275:GLN:NE2	1:A:307:PHE:H	2.11	0.48
1:A:447:THR:HG22	1:A:450:SER:CB	2.42	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:425:CYS:HA	1:A:428:ARG:CB	2.43	0.48
1:A:7:ARG:H	1:A:7:ARG:CD	2.25	0.48
1:A:264:GLU:O	1:A:265:ASP:C	2.51	0.48
1:A:502:CYS:O	1:A:503:ALA:C	2.50	0.48
1:A:296:GLN:O	1:A:297:ASP:C	2.52	0.48
1:A:141:PRO:O	1:A:142:PRO:C	2.51	0.48
1:A:46:ILE:HA	1:A:49:ILE:HD12	1.94	0.48
1:A:125:TRP:CH2	1:A:149:VAL:HG21	2.49	0.48
1:A:97:VAL:O	1:A:206:VAL:HG23	2.14	0.48
1:A:526:TYR:O	1:A:529:ALA:HB3	2.14	0.48
1:A:23:GLN:O	1:A:24:ARG:C	2.53	0.48
1:A:393:ASN:HD22	1:A:641:PHE:HD2	1.61	0.48
1:A:398:PHE:O	1:A:401:VAL:HB	2.14	0.48
1:A:156:SER:CA	1:A:172:LEU:HD12	2.36	0.48
1:A:471:MET:HA	1:A:474:LEU:HD12	1.96	0.47
1:A:200:GLU:HG3	1:A:227:TYR:OH	2.14	0.47
1:A:144:PRO:HB2	1:A:147:LYS:HG3	1.95	0.47
1:A:100:LYS:HA	1:A:228:GLU:HG3	1.96	0.47
1:A:197:LYS:O	1:A:200:GLU:N	2.47	0.47
1:A:398:PHE:O	1:A:399:ILE:C	2.53	0.47
1:A:122:SER:HA	1:A:126:ASN:ND2	2.28	0.47
1:A:424:ASP:O	1:A:426:VAL:N	2.46	0.47
1:A:80:GLU:OE1	1:A:301:LYS:HB3	2.15	0.47
1:A:52:ASN:O	1:A:54:ALA:N	2.47	0.47
1:A:381:ILE:O	1:A:384:VAL:N	2.45	0.47
1:A:607:LEU:O	1:A:608:LYS:C	2.52	0.47
1:A:34:VAL:HB	1:A:35:SER:H	1.47	0.47
1:A:76:PRO:HB2	1:A:310:ILE:CD1	2.44	0.47
1:A:422:ALA:CB	1:A:423:PRO:HD2	2.36	0.47
1:A:188:PRO:O	1:A:189:TYR:CB	2.50	0.47
1:A:425:CYS:O	1:A:426:VAL:C	2.53	0.47
1:A:30:ARG:O	1:A:30:ARG:HG3	2.13	0.47
1:A:97:VAL:HG12	1:A:98:VAL:H	1.79	0.47
1:A:93:TYR:HD2	1:A:211:ASP:OD2	1.97	0.47
1:A:141:PRO:HD2	1:A:334:THR:CA	2.41	0.47
1:A:473:LEU:O	1:A:477:GLN:N	2.45	0.47
1:A:423:PRO:O	1:A:424:ASP:C	2.52	0.47
1:A:634:SER:O	1:A:635:GLU:C	2.53	0.47
1:A:464:THR:O	1:A:465:ALA:C	2.53	0.47
1:A:632:PHE:HZ	1:A:648:LEU:HG	1.80	0.47
1:A:632:PHE:N	1:A:632:PHE:CD2	2.82	0.47
1:A:222:ALA:O	1:A:223:GLU:C	2.53	0.47

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:400:TYR:OH	1:A:670:THR:HG22	2.16	0.47
1:A:408:VAL:CB	1:A:409:PRO:HD2	2.44	0.47
1:A:434:LEU:HD22	1:A:588:HIS:ND1	2.29	0.47
1:A:600:GLN:O	1:A:601:SER:C	2.52	0.47
1:A:9:CYS:HB3	1:A:54:ALA:HB1	1.96	0.46
1:A:523:TYR:CE2	1:A:532:CYS:HA	2.49	0.46
1:A:408:VAL:HB	1:A:409:PRO:CD	2.40	0.46
1:A:4:LYS:HB3	1:A:5:SER:H	1.41	0.46
1:A:8:TRP:CH2	1:A:271:LEU:HD21	2.50	0.46
1:A:107:ASN:N	1:A:107:ASN:ND2	2.63	0.46
1:A:359:LYS:O	1:A:360:GLN:C	2.54	0.46
1:A:530:PHE:CZ	1:A:548:VAL:HG22	2.51	0.46
1:A:175:GLY:HA3	1:A:180:LYS:CA	2.41	0.46
1:A:102:SER:HB2	1:A:236:ARG:HH22	1.80	0.46
1:A:545:ASP:CG	1:A:546:VAL:H	2.19	0.46
1:A:242:PHE:HA	1:A:245:CYS:O	2.15	0.46
1:A:67:ALA:O	1:A:72:TYR:HB2	2.15	0.46
1:A:146:GLN:O	1:A:147:LYS:C	2.53	0.46
1:A:380:CYS:HA	1:A:383:LEU:HD12	1.98	0.46
1:A:7:ARG:HA	1:A:35:SER:HG	1.80	0.46
1:A:297:ASP:HA	1:A:302:ASP:OD1	2.16	0.46
1:A:377:THR:O	1:A:378:GLU:C	2.54	0.46
1:A:461:VAL:HG22	1:A:493:PRO:O	2.15	0.46
1:A:459:THR:HG22	1:A:529:ALA:HB2	1.98	0.46
1:A:503:ALA:O	1:A:505:CYS:N	2.44	0.46
1:A:326:THR:O	1:A:330:ASN:ND2	2.48	0.46
1:A:197:LYS:O	1:A:198:CYS:C	2.54	0.46
1:A:401:VAL:O	1:A:402:ALA:C	2.54	0.46
1:A:296:GLN:HB3	1:A:297:ASP:H	1.56	0.45
1:A:354:GLU:HG2	1:A:639:LEU:HD22	1.97	0.45
1:A:214:VAL:O	1:A:215:PHE:C	2.54	0.45
1:A:464:THR:CG2	1:A:592:ALA:HB1	2.46	0.45
1:A:113:LYS:HB3	1:A:172:LEU:CD1	2.43	0.45
1:A:229:LEU:HD22	1:A:245:CYS:SG	2.56	0.45
1:A:635:GLU:HB2	1:A:637:LYS:NZ	2.31	0.45
1:A:618:PHE:O	1:A:631:LEU:HB2	2.17	0.45
1:A:530:PHE:CE2	1:A:548:VAL:HG13	2.51	0.45
1:A:182:ALA:C	1:A:184:SER:H	2.19	0.45
1:A:206:VAL:HG13	1:A:206:VAL:O	2.17	0.45
1:A:436:VAL:HG23	1:A:543:VAL:O	2.16	0.45
1:A:217:ASN:H	1:A:217:ASN:HD22	1.64	0.45
1:A:98:VAL:HG12	1:A:205:ASP:O	2.16	0.45

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:125:TRP:CZ3	1:A:158:VAL:HG11	2.52	0.45
1:A:338:VAL:O	1:A:339:ALA:C	2.54	0.45
1:A:531:ARG:HD2	1:A:560:TRP:CD2	2.52	0.45
1:A:299:LEU:HD22	1:A:300:PHE:CZ	2.52	0.45
1:A:115:CYS:HB2	1:A:207:ALA:HA	1.99	0.45
1:A:345:VAL:HA	1:A:390:ASP:OD2	2.17	0.45
1:A:486:PHE:O	1:A:487:PHE:HD1	2.00	0.45
1:A:330:ASN:O	1:A:333:GLU:O	2.35	0.45
1:A:63:LEU:O	1:A:66:GLU:N	2.49	0.45
1:A:292:THR:HB	1:A:293:PRO:CD	2.35	0.45
1:A:112:VAL:HG12	1:A:113:LYS:N	2.31	0.45
1:A:165:GLN:HB2	1:A:166:TYR:CE2	2.52	0.45
1:A:442:SER:O	1:A:444:ALA:N	2.49	0.45
1:A:95:VAL:HG12	1:A:246:HIS:HA	1.98	0.45
1:A:584:ALA:O	1:A:586:SER:N	2.49	0.45
1:A:3:ARG:HG3	1:A:4:LYS:H	1.82	0.45
1:A:561:ALA:HB2	1:A:564:LEU:HD12	1.98	0.45
1:A:163:GLY:O	1:A:166:TYR:O	2.35	0.45
1:A:579:LYS:HD3	1:A:580:PRO:HD3	1.98	0.45
1:A:560:TRP:CG	1:A:561:ALA:N	2.84	0.45
1:A:20:ALA:O	1:A:23:GLN:HB3	2.17	0.44
1:A:110:GLN:NE2	1:A:152:PHE:O	2.50	0.44
1:A:141:PRO:CD	1:A:334:THR:HA	2.43	0.44
1:A:349:ALA:HB3	1:A:373:SER:CB	2.47	0.44
1:A:298:LEU:O	1:A:300:PHE:N	2.49	0.44
1:A:60:ASP:H	1:A:63:LEU:HD12	1.82	0.44
1:A:175:GLY:HA2	1:A:188:PRO:HD2	1.98	0.44
1:A:199:LEU:HA	1:A:204:GLY:O	2.17	0.44
1:A:384:VAL:CA	1:A:389:ALA:HB3	2.47	0.44
1:A:393:ASN:HD22	1:A:641:PHE:HA	1.80	0.44
1:A:116:HIS:HB2	1:A:158:VAL:HG13	1.99	0.44
1:A:418:GLN:CA	1:A:421:ASN:HD21	2.30	0.44
1:A:585:GLU:HG2	1:A:585:GLU:H	1.56	0.44
1:A:530:PHE:HA	1:A:530:PHE:HD1	1.63	0.44
1:A:446:LEU:HD23	1:A:451:LEU:HA	1.99	0.44
1:A:355:GLU:O	1:A:359:LYS:HG2	2.17	0.44
1:A:87:LYS:O	1:A:89:GLN:HG3	2.17	0.44
1:A:512:GLU:O	1:A:514:LYS:N	2.51	0.44
1:A:155:ALA:HA	1:A:168:ASN:CB	2.45	0.44
1:A:147:LYS:O	1:A:148:ALA:C	2.55	0.44
1:A:162:ASP:O	1:A:166:TYR:HB2	2.17	0.44
1:A:425:CYS:HB2	1:A:428:ARG:HH12	1.81	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:668:SER:O	1:A:671:ASN:HB2	2.17	0.44
1:A:475:PHE:HE1	1:A:481:CYS:SG	2.40	0.44
1:A:20:ALA:O	1:A:23:GLN:N	2.51	0.44
1:A:212:SER:O	1:A:216:GLU:HG3	2.18	0.44
1:A:337:GLU:O	1:A:338:VAL:C	2.56	0.44
1:A:409:PRO:HA	1:A:598:VAL:HG12	2.00	0.44
1:A:673:ARG:HG2	1:A:676:SER:O	2.18	0.44
1:A:564:LEU:HD23	1:A:565:LYS:HZ2	1.77	0.44
1:A:70:HIS:HB3	1:A:71:PRO:CD	2.35	0.44
1:A:334:THR:HG23	1:A:337:GLU:H	1.82	0.44
1:A:21:LYS:HB2	1:A:286:PHE:HE1	1.82	0.44
1:A:457:CYS:SG	1:A:538:GLY:HA3	2.58	0.43
1:A:558:GLU:HB3	1:A:560:TRP:HE1	1.83	0.43
1:A:561:ALA:CB	1:A:564:LEU:HD12	2.47	0.43
1:A:120:GLY:O	1:A:121:ARG:C	2.56	0.43
1:A:399:ILE:O	1:A:400:TYR:C	2.56	0.43
1:A:266:LEU:O	1:A:267:ILE:C	2.57	0.43
1:A:360:GLN:O	1:A:363:ASP:OD1	2.36	0.43
1:A:25:ASN:O	1:A:26:MET:C	2.56	0.43
1:A:678:SER:O	1:A:682:GLU:HB2	2.18	0.43
1:A:60:ASP:HA	1:A:253:HIS:CD2	2.53	0.43
1:A:147:LYS:HG2	1:A:166:TYR:HE1	1.83	0.43
1:A:403:GLY:O	1:A:406:GLY:N	2.40	0.43
1:A:632:PHE:HD2	1:A:632:PHE:N	2.17	0.43
1:A:122:SER:HB3	1:A:324:TYR:OH	2.19	0.43
1:A:10:THR:CG2	1:A:15:GLU:HG3	2.48	0.43
1:A:104:PHE:N	1:A:104:PHE:CD1	2.74	0.43
1:A:579:LYS:HD3	1:A:579:LYS:HA	1.85	0.43
1:A:229:LEU:HD23	1:A:230:LEU:N	2.33	0.43
1:A:568:ASP:HB3	1:A:569:PHE:CE2	2.54	0.43
1:A:551:ASN:HD22	1:A:552:THR:HG23	1.83	0.43
1:A:85:ARG:HG3	1:A:86:GLY:N	2.33	0.43
1:A:11:ILE:CG1	1:A:12:SER:H	2.31	0.43
1:A:179:ASP:O	1:A:187:GLU:HB2	2.19	0.43
1:A:148:ALA:O	1:A:149:VAL:C	2.55	0.43
1:A:546:VAL:O	1:A:550:GLN:HG3	2.18	0.43
1:A:408:VAL:CB	1:A:409:PRO:CD	2.97	0.43
1:A:635:GLU:O	1:A:637:LYS:HE3	2.18	0.43
1:A:7:ARG:HA	1:A:35:SER:OG	2.19	0.43
1:A:532:CYS:O	1:A:535:GLU:O	2.37	0.43
1:A:551:ASN:N	1:A:555:LYS:HB3	2.33	0.43
1:A:11:ILE:HG13	1:A:12:SER:H	1.83	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:394:LEU:HD21	1:A:398:PHE:HB2	2.01	0.43
1:A:440:ARG:HH22	1:A:536:LYS:CB	2.29	0.43
1:A:119:LEU:HG	1:A:120:GLY:N	2.34	0.43
1:A:415:GLN:CB	1:A:644:ASN:HD21	2.28	0.43
1:A:145:LEU:O	1:A:146:GLN:C	2.55	0.43
1:A:638:ASN:OD1	1:A:643:ASP:HB2	2.19	0.43
1:A:508:ASN:ND2	1:A:509:ASN:OD1	2.52	0.43
1:A:466:ALA:HB2	1:A:542:PHE:O	2.19	0.43
1:A:600:GLN:O	1:A:603:ARG:N	2.52	0.43
1:A:26:MET:CE	1:A:274:ALA:HB2	2.49	0.43
1:A:435:ALA:HB3	1:A:589:LEU:HB2	2.00	0.43
1:A:196:PHE:HE1	1:A:214:VAL:HG22	1.84	0.42
1:A:195:ALA:O	1:A:198:CYS:HB3	2.19	0.42
1:A:197:LYS:O	1:A:199:LEU:N	2.52	0.42
1:A:334:THR:OG1	1:A:335:ALA:N	2.52	0.42
1:A:280:ARG:O	1:A:281:ASN:HB3	2.18	0.42
1:A:271:LEU:O	1:A:272:HIS:C	2.57	0.42
1:A:221:GLU:O	1:A:224:ARG:HB2	2.19	0.42
1:A:548:VAL:O	1:A:551:ASN:ND2	2.52	0.42
1:A:185:SER:O	1:A:186:GLN:C	2.58	0.42
1:A:223:GLU:CG	1:A:224:ARG:H	2.31	0.42
1:A:516:MET:HG3	1:A:518:ASN:ND2	2.34	0.42
1:A:304:ALA:O	1:A:305:LEU:C	2.58	0.42
1:A:42:SER:O	1:A:43:PHE:C	2.57	0.42
1:A:415:GLN:H	1:A:415:GLN:HG2	1.62	0.42
1:A:258:ARG:HH12	1:A:263:ARG:HH11	1.67	0.42
1:A:15:GLU:OE2	1:A:299:LEU:HG	2.20	0.42
1:A:193:SER:CB	1:A:296:GLN:HG3	2.50	0.42
1:A:61:GLY:O	1:A:63:LEU:N	2.52	0.42
1:A:399:ILE:HG22	1:A:661:LEU:HD11	2.01	0.42
1:A:164:LYS:HE3	1:A:165:GLN:NE2	2.34	0.42
1:A:256:VAL:O	1:A:256:VAL:HG23	2.18	0.42
1:A:396:GLY:HA2	1:A:399:ILE:HD12	2.02	0.42
1:A:172:LEU:HD22	1:A:203:ALA:HB1	2.02	0.42
1:A:25:ASN:O	1:A:28:LYS:HB3	2.20	0.42
1:A:496:ASP:OD2	1:A:498:GLN:O	2.38	0.42
1:A:521:GLU:HG3	1:A:523:TYR:H	1.83	0.42
1:A:297:ASP:HB3	1:A:301:LYS:CA	2.38	0.42
1:A:401:VAL:HG12	1:A:402:ALA:N	2.35	0.42
1:A:413:GLU:HG2	1:A:595:HIS:O	2.20	0.42
1:A:419:ASN:N	1:A:421:ASN:ND2	2.68	0.42
1:A:19:CYS:O	1:A:22:PHE:CB	2.63	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:218:LEU:HD11	1:A:227:TYR:HE1	1.85	0.42
1:A:606:HIS:O	1:A:607:LEU:C	2.57	0.42
1:A:483:PHE:O	1:A:501:LEU:HD21	2.19	0.42
1:A:181:CYS:N	1:A:187:GLU:OE1	2.38	0.41
1:A:400:TYR:C	1:A:400:TYR:CD2	2.93	0.41
1:A:344:ARG:HG3	1:A:345:VAL:N	2.32	0.41
1:A:317:GLY:O	1:A:318:LEU:C	2.58	0.41
1:A:536:LYS:HD2	1:A:536:LYS:H	1.85	0.41
1:A:403:GLY:HA2	1:A:407:LEU:O	2.20	0.41
1:A:100:LYS:HD2	1:A:228:GLU:HG2	2.03	0.41
1:A:553:ASP:N	1:A:564:LEU:O	2.52	0.41
1:A:320:LEU:HB2	1:A:325:LEU:CD2	2.50	0.41
1:A:664:GLU:HG3	1:A:665:TYR:H	1.86	0.41
1:A:466:ALA:HB1	1:A:542:PHE:CB	2.51	0.41
1:A:398:PHE:CE2	1:A:463:ARG:HG3	2.56	0.41
1:A:76:PRO:HB2	1:A:310:ILE:HD12	2.03	0.41
1:A:540:VAL:O	1:A:540:VAL:HG13	2.21	0.41
1:A:213:THR:HA	1:A:216:GLU:OE1	2.21	0.41
1:A:414:ASN:HB2	1:A:647:CYS:SG	2.61	0.41
1:A:158:VAL:HB	1:A:161:ALA:HB2	2.03	0.41
1:A:564:LEU:HA	1:A:564:LEU:HD23	1.95	0.41
1:A:104:PHE:CE2	1:A:112:VAL:HG21	2.55	0.41
1:A:251:PRO:HB2	1:A:319:TYR:HE2	1.85	0.41
1:A:446:LEU:CD2	1:A:451:LEU:HA	2.51	0.41
1:A:242:PHE:H	1:A:242:PHE:HD1	1.63	0.41
1:A:552:THR:O	1:A:553:ASP:HB2	2.21	0.41
1:A:185:SER:HA	1:A:190:PHE:CE1	2.56	0.41
1:A:8:TRP:NE1	1:A:57:VAL:HA	2.36	0.41
1:A:491:CYS:SG	1:A:523:TYR:HB3	2.60	0.40
1:A:395:ASP:HA	1:A:595:HIS:CG	2.55	0.40
1:A:414:ASN:O	1:A:415:GLN:O	2.39	0.40
1:A:140:GLY:C	1:A:142:PRO:HD2	2.42	0.40
1:A:339:ALA:O	1:A:340:ALA:C	2.59	0.40
1:A:135:TYR:HD2	1:A:135:TYR:O	2.03	0.40
1:A:683:ALA:O	1:A:684:CYS:C	2.60	0.40
1:A:10:THR:HB	1:A:15:GLU:CG	2.51	0.40
1:A:171:ARG:O	1:A:173:CYS:N	2.55	0.40
1:A:381:ILE:HG22	1:A:385:LEU:CD1	2.51	0.40
1:A:125:TRP:O	1:A:126:ASN:C	2.59	0.40
1:A:606:HIS:O	1:A:609:LYS:HB3	2.20	0.40
1:A:642:ASN:HB3	1:A:643:ASP:H	1.55	0.40
1:A:353:GLU:HG3	1:A:356:ARG:HH21	1.85	0.40

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:519:SER:O	1:A:520:GLU:C	2.58	0.40
1:A:12:SER:CB	1:A:13:PRO:CD	2.99	0.40
1:A:32:PRO:HB2	1:A:33:SER:H	1.76	0.40
1:A:469:ILE:O	1:A:473:LEU:HG	2.21	0.40
1:A:588:HIS:CG	1:A:588:HIS:O	2.74	0.40
1:A:104:PHE:HA	1:A:108:GLN:HE21	1.85	0.40
1:A:93:TYR:N	1:A:93:TYR:CD2	2.89	0.40
1:A:270:LEU:HG	1:A:271:LEU:N	2.36	0.40
1:A:526:TYR:O	1:A:527:THR:C	2.60	0.40

There are no symmetry-related clashes.

## 5.3 Torsion angles

### 5.3.1 Protein backbone ⓘ

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	687/689 (100%)	411 (60%)	161 (23%)	115 (17%)	<b>0</b> <b>1</b>

All (115) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2	PRO
1	A	4	LYS
1	A	35	SER
1	A	40	THR
1	A	52	ASN
1	A	57	VAL
1	A	102	SER
1	A	106	LEU
1	A	156	SER
1	A	159	PRO
1	A	167	PRO
1	A	176	THR
1	A	177	GLU
1	A	186	GLN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	214	VAL
1	A	222	ALA
1	A	224	ARG
1	A	239	VAL
1	A	241	ALA
1	A	282	LYS
1	A	305	LEU
1	A	344	ARG
1	A	415	GLN
1	A	421	ASN
1	A	422	ALA
1	A	423	PRO
1	A	425	CYS
1	A	442	SER
1	A	443	ASP
1	A	467	TRP
1	A	503	ALA
1	A	504	LEU
1	A	506	VAL
1	A	531	ARG
1	A	559	PRO
1	A	560	TRP
1	A	573	CYS
1	A	585	GLU
1	A	604	ALA
1	A	605	GLN
1	A	625	CYS
1	A	642	ASN
1	A	652	GLN
1	A	666	VAL
1	A	668	SER
1	A	11	ILE
1	A	53	LYS
1	A	144	PRO
1	A	160	CYS
1	A	189	TYR
1	A	219	PRO
1	A	246	HIS
1	A	294	GLY
1	A	316	SER
1	A	325	LEU
1	A	426	VAL

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	452	SER
1	A	454	LYS
1	A	482	LYS
1	A	513	ASN
1	A	577	THR
1	A	601	SER
1	A	631	LEU
1	A	635	GLU
1	A	17	ALA
1	A	20	ALA
1	A	32	PRO
1	A	84	THR
1	A	125	TRP
1	A	133	ARG
1	A	134	PRO
1	A	198	CYS
1	A	264	GLU
1	A	297	ASP
1	A	334	THR
1	A	382	ALA
1	A	391	ALA
1	A	410	VAL
1	A	505	CYS
1	A	520	GLU
1	A	551	ASN
1	A	24	ARG
1	A	31	GLY
1	A	62	GLY
1	A	70	HIS
1	A	98	VAL
1	A	150	ALA
1	A	164	LYS
1	A	168	ASN
1	A	172	LEU
1	A	272	HIS
1	A	279	GLY
1	A	296	GLN
1	A	375	SER
1	A	465	ALA
1	A	545	ASP
1	A	213	THR
1	A	288	LEU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	362	SER
1	A	439	VAL
1	A	640	LEU
1	A	61	GLY
1	A	211	ASP
1	A	267	ILE
1	A	34	VAL
1	A	128	PRO
1	A	381	ILE
1	A	493	PRO
1	A	546	VAL
1	A	401	VAL
1	A	679	PRO
1	A	623	PRO
1	A	149	VAL
1	A	338	VAL
1	A	622	GLY

### 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	565/565 (100%)	430 (76%)	135 (24%)	<b>1</b> <b>4</b>

All (135) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	3	ARG
1	A	4	LYS
1	A	7	ARG
1	A	12	SER
1	A	18	LYS
1	A	22	PHE
1	A	26	MET
1	A	30	ARG
1	A	34	VAL
1	A	39	LYS
1	A	43	PHE

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	45	CYS
1	A	55	ASP
1	A	60	ASP
1	A	75	ARG
1	A	82	TYR
1	A	85	ARG
1	A	90	THR
1	A	95	VAL
1	A	99	LYS
1	A	100	LYS
1	A	104	PHE
1	A	105	GLN
1	A	107	ASN
1	A	109	LEU
1	A	110	GLN
1	A	122	SER
1	A	133	ARG
1	A	135	TYR
1	A	136	LEU
1	A	143	GLU
1	A	158	VAL
1	A	160	CYS
1	A	168	ASN
1	A	187	GLU
1	A	189	TYR
1	A	190	PHE
1	A	199	LEU
1	A	209	VAL
1	A	210	LYS
1	A	212	SER
1	A	225	ASP
1	A	229	LEU
1	A	235	THR
1	A	236	ARG
1	A	240	ASP
1	A	244	GLU
1	A	259	SER
1	A	260	VAL
1	A	275	GLN
1	A	278	PHE
1	A	284	SER
1	A	297	ASP

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	299	LEU
1	A	300	PHE
1	A	302	ASP
1	A	305	LEU
1	A	307	PHE
1	A	308	VAL
1	A	312	SER
1	A	318	LEU
1	A	323	ASN
1	A	325	LEU
1	A	326	THR
1	A	329	GLN
1	A	330	ASN
1	A	342	ARG
1	A	343	GLU
1	A	344	ARG
1	A	353	GLU
1	A	376	THR
1	A	377	THR
1	A	380	CYS
1	A	385	LEU
1	A	390	ASP
1	A	392	LEU
1	A	394	LEU
1	A	399	ILE
1	A	400	TYR
1	A	407	LEU
1	A	408	VAL
1	A	411	LEU
1	A	417	SER
1	A	418	GLN
1	A	425	CYS
1	A	427	HIS
1	A	431	GLU
1	A	436	VAL
1	A	438	VAL
1	A	441	LYS
1	A	443	ASP
1	A	446	LEU
1	A	451	LEU
1	A	456	SER
1	A	478	THR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	486	PHE
1	A	500	SER
1	A	502	CYS
1	A	509	ASN
1	A	515	CYS
1	A	518	ASN
1	A	520	GLU
1	A	521	GLU
1	A	522	ARG
1	A	530	PHE
1	A	535	GLU
1	A	536	LYS
1	A	543	VAL
1	A	546	VAL
1	A	551	ASN
1	A	555	LYS
1	A	557	SER
1	A	558	GLU
1	A	565	LYS
1	A	566	GLN
1	A	577	THR
1	A	578	ARG
1	A	579	LYS
1	A	585	GLU
1	A	586	SER
1	A	591	ARG
1	A	594	ASN
1	A	615	GLN
1	A	616	ASP
1	A	618	PHE
1	A	642	ASN
1	A	643	ASP
1	A	644	ASN
1	A	651	LEU
1	A	655	THR
1	A	656	THR
1	A	673	ARG
1	A	674	ARG
1	A	681	LEU
1	A	682	GLU

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (21) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	23	GLN
1	A	89	GLN
1	A	107	ASN
1	A	108	GLN
1	A	110	GLN
1	A	126	ASN
1	A	168	ASN
1	A	201	ASN
1	A	217	ASN
1	A	234	ASN
1	A	275	GLN
1	A	281	ASN
1	A	330	ASN
1	A	360	GLN
1	A	421	ASN
1	A	427	HIS
1	A	508	ASN
1	A	513	ASN
1	A	551	ASN
1	A	594	ASN
1	A	671	ASN

### 5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA chains in this entry.

### 5.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

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

### 5.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

### 5.6 Ligand geometry ⓘ

There are no ligands in this entry.

## 5.7 Other polymers ⓘ

There are no such residues in this entry.

## 5.8 Polymer linkage issues

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.