



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 1, 2014 – 04:09 AM GMT

PDB ID : 1S58
Title : The structure of B19 parvovirus capsid
Authors : Kaufmann, B.; Simpson, A.A.; Rossmann, M.G.
Deposited on : 2004-01-20
Resolution : 3.50 Å(reported)

This is a full wwPDB 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/ValidationPDFNotes.html>

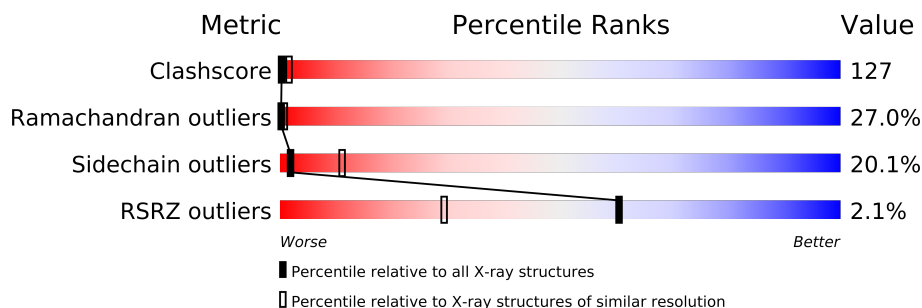
The following versions of software and data (see [references](#)) were used in the production of this report:

MolProbity : 4.02b-467
Mogul : 1.15 2013
Xtriage (Phenix) : dev-1323
EDS : stable22639
Percentile statistics : 21963
Refmac : 5.8.0049
CCP4 : 6.3.0 (Settle)
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 3.50 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	79885	1039 (3.66-3.34)
Ramachandran outliers	78287	1000 (3.66-3.34)
Sidechain outliers	78261	1000 (3.66-3.34)
RSRZ outliers	66119	1243 (3.70-3.30)

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	554	

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 4108 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 B19 parvovirus capsid.

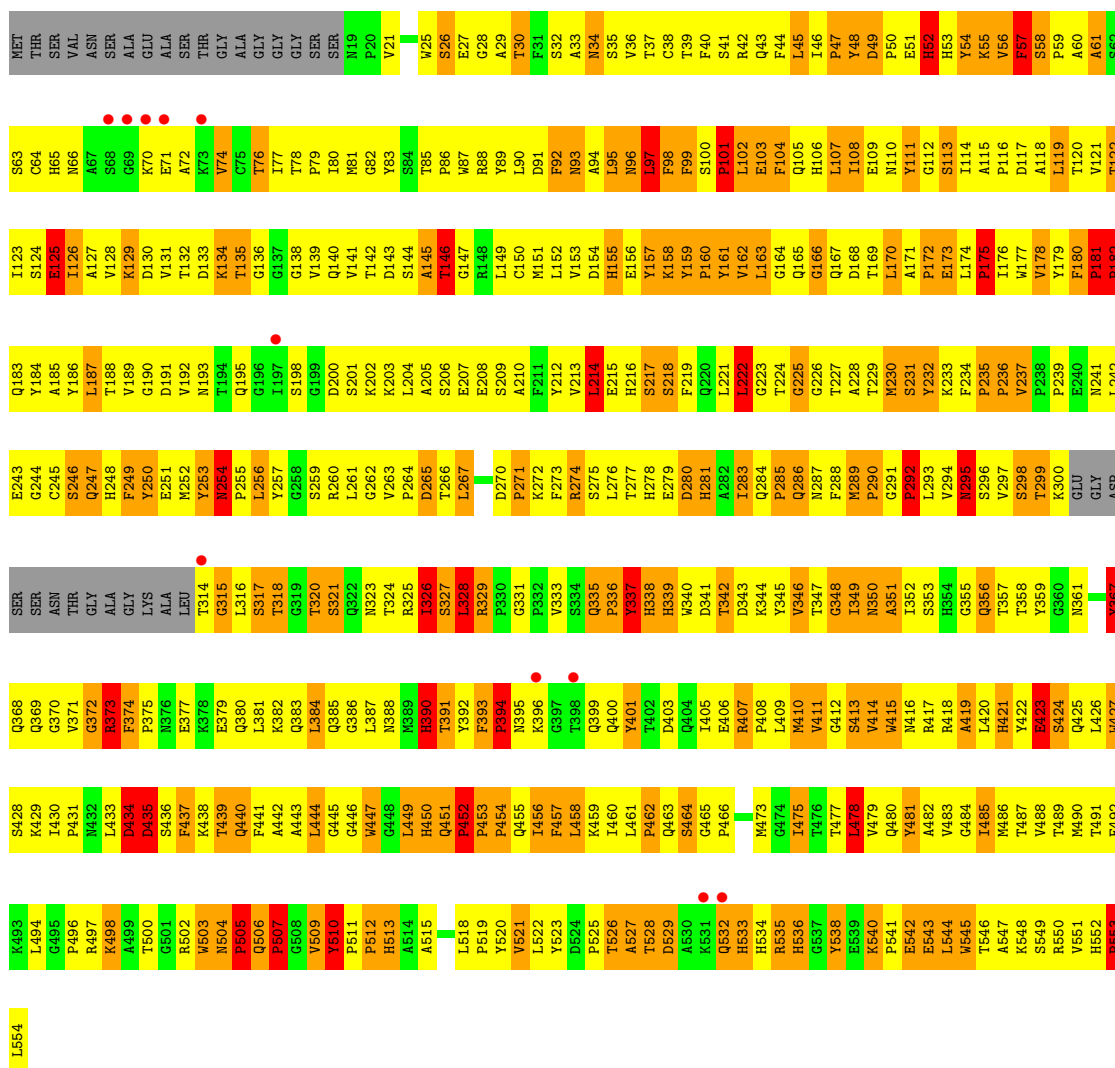
Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	523	4108	2625	695	772	16	0	0	0

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: B19 parvovirus capsid

Chain A: 



4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 21 3	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	351.39Å 351.39Å 351.39Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	20.00 – 3.50 19.99 – 3.50	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	62.4 (20.00-3.50) 58.3 (19.99-3.50)	Depositor EDS
R_{merge}	0.10	Depositor
R_{sym}	0.10	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	0.92 (at 3.52Å)	Xtriage
Refinement program	CNS, REFMAC	Depositor
R, R_{free}	0.313 , 0.316 0.490 , (Not available)	Depositor DCC
R_{free} test set	No test flags present.	DCC
Wilson B-factor (Å ²)	90.5	Xtriage
Anisotropy	0.000	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.26 , -20.0	EDS
Estimated twinning fraction	0.027 for l,-k,h	Xtriage
L-test for twinning	$\langle L \rangle = 0.55$, $\langle L^2 \rangle = 0.40$	Xtriage
Outliers	0 of 123514 reflections	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.45	EDS
Total number of atoms	4108	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	93.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 2.70% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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	0.56	0/4238	0.85	3/5779 (0.1%)

There are no bond length outliers.

All (3) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	175	PRO	CA-N-CD	-6.26	102.74	111.50
1	A	158	LYS	N-CA-C	-5.49	96.18	111.00
1	A	423	GLU	N-CA-C	-5.10	97.22	111.00

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

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	4108	0	3959	1026	0
All	All	4108	0	3959	1026	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 127.

All (1026) close contacts within the same asymmetric unit are listed below.

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:42:ARG:HH12	1:A:175:PRO:CD	1.15	1.54
1:A:42:ARG:NH1	1:A:175:PRO:HD3	1.25	1.47
1:A:176:ILE:O	1:A:177:TRP:HD1	1.16	1.23
1:A:176:ILE:O	1:A:177:TRP:CD1	2.02	1.11
1:A:39:THR:HB	1:A:489:THR:HG23	1.10	1.09
1:A:127:ALA:HB3	1:A:483:VAL:H	1.15	1.09
1:A:56:VAL:HG22	1:A:57:PHE:H	1.15	1.07
1:A:250:TYR:HA	1:A:286:GLN:NE2	1.69	1.07
1:A:294:VAL:H	1:A:335:GLN:NE2	1.52	1.06
1:A:506:GLN:HE22	1:A:551:VAL:N	1.52	1.05
1:A:525:PRO:HB3	1:A:535:ARG:HB2	1.38	1.05
1:A:510:TYR:HD2	1:A:511:PRO:HD2	1.18	1.04
1:A:94:ALA:HB3	1:A:97:LEU:HD11	1.33	1.03
1:A:42:ARG:CZ	1:A:175:PRO:HD3	1.88	1.03
1:A:42:ARG:NH1	1:A:175:PRO:CD	1.95	1.02
1:A:425:GLN:HG2	1:A:444:LEU:HD23	1.43	1.01
1:A:510:TYR:CD2	1:A:511:PRO:HD2	1.96	1.00
1:A:506:GLN:NE2	1:A:551:VAL:H	1.59	1.00
1:A:293:LEU:HD23	1:A:407:ARG:HD3	1.41	0.99
1:A:129:LYS:HZ2	1:A:129:LYS:HB3	1.27	0.99
1:A:457:PHE:H	1:A:457:PHE:HD2	1.07	0.99
1:A:42:ARG:HH12	1:A:175:PRO:CG	1.75	0.98
1:A:188:THR:HG21	1:A:210:ALA:H	1.29	0.98
1:A:263:VAL:HG13	1:A:272:LYS:HZ3	1.26	0.97
1:A:504:ASN:H	1:A:504:ASN:HD22	1.08	0.97
1:A:506:GLN:NE2	1:A:551:VAL:N	2.13	0.96
1:A:126:ILE:HG22	1:A:224:THR:HA	1.46	0.96
1:A:292:PRO:HD3	1:A:409:LEU:HA	1.46	0.95
1:A:504:ASN:H	1:A:504:ASN:ND2	1.64	0.95
1:A:130:ASP:HA	1:A:480:GLN:HA	1.48	0.95
1:A:295:ASN:HD21	1:A:350:ASN:ND2	1.65	0.94
1:A:414:VAL:O	1:A:415:TRP:HB3	1.64	0.94
1:A:444:LEU:HD22	1:A:444:LEU:H	1.33	0.94
1:A:227:THR:HG22	1:A:228:ALA:H	1.34	0.93
1:A:375:PRO:HB3	1:A:377:GLU:HG3	1.50	0.92
1:A:294:VAL:H	1:A:335:GLN:HE21	1.17	0.92
1:A:124:SER:HB2	1:A:485:ILE:HG23	1.50	0.92
1:A:320:THR:HG22	1:A:321:SER:H	1.34	0.92
1:A:126:ILE:HD12	1:A:222:LEU:HD22	1.48	0.92
1:A:100:SER:H	1:A:103:GLU:HB2	1.31	0.92
1:A:503:TRP:O	1:A:503:TRP:HE3	1.54	0.91
1:A:39:THR:CB	1:A:489:THR:HG23	1.99	0.91
1:A:506:GLN:HE22	1:A:551:VAL:H	1.07	0.90

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:274:ARG:HG3	1:A:275:SER:H	1.36	0.90
1:A:235:PRO:HB2	1:A:236:PRO:HD2	1.54	0.90
1:A:121:VAL:O	1:A:229:THR:HG23	1.70	0.90
1:A:152:LEU:HD12	1:A:219:PHE:HB3	1.53	0.89
1:A:227:THR:HG22	1:A:228:ALA:N	1.86	0.89
1:A:172:PRO:HG2	1:A:179:TYR:HB2	1.55	0.89
1:A:162:VAL:HG22	1:A:163:LEU:N	1.87	0.88
1:A:26:SER:HB2	1:A:487:THR:HG21	1.53	0.88
1:A:383:GLN:O	1:A:385:GLN:HG2	1.74	0.88
1:A:79:PRO:HB2	1:A:203:LYS:HB2	1.55	0.87
1:A:109:GLU:HB2	1:A:550:ARG:HH21	1.37	0.87
1:A:145:ALA:O	1:A:147:GLY:N	2.07	0.87
1:A:188:THR:HG22	1:A:189:VAL:N	1.89	0.87
1:A:56:VAL:HG22	1:A:57:PHE:N	1.89	0.87
1:A:96:ASN:HB3	1:A:97:LEU:HD13	1.55	0.87
1:A:264:PRO:CG	1:A:273:PHE:H	1.89	0.86
1:A:421:HIS:HA	1:A:545:TRP:O	1.76	0.86
1:A:42:ARG:HH12	1:A:175:PRO:HD3	0.70	0.86
1:A:419:ALA:HB1	1:A:547:ALA:HB3	1.56	0.85
1:A:449:LEU:HD22	1:A:449:LEU:O	1.75	0.85
1:A:478:LEU:H	1:A:478:LEU:CD2	1.89	0.85
1:A:387:LEU:HD11	1:A:407:ARG:HG3	1.58	0.85
1:A:45:LEU:HD11	1:A:481:TYR:HD1	1.41	0.85
1:A:502:ARG:NH1	1:A:506:GLN:HB2	1.92	0.85
1:A:245:CYS:N	1:A:551:VAL:HG23	1.91	0.85
1:A:45:LEU:HD11	1:A:481:TYR:CD1	2.11	0.85
1:A:349:ILE:HG22	1:A:350:ASN:H	1.41	0.85
1:A:457:PHE:CD2	1:A:457:PHE:N	2.44	0.85
1:A:338:HIS:HD2	1:A:339:HIS:H	1.25	0.84
1:A:293:LEU:HB2	1:A:407:ARG:HB3	1.59	0.84
1:A:188:THR:HG22	1:A:189:VAL:H	1.39	0.84
1:A:298:SER:HA	1:A:348:GLY:HA2	1.60	0.84
1:A:248:HIS:HA	1:A:380:GLN:HE22	1.43	0.84
1:A:32:SER:O	1:A:34:ASN:N	2.11	0.84
1:A:30:THR:O	1:A:36:VAL:HG23	1.78	0.84
1:A:449:LEU:HD21	1:A:452:PRO:HB3	1.59	0.83
1:A:523:TYR:HB2	1:A:536:HIS:HB3	1.58	0.83
1:A:114:ILE:HG13	1:A:242:LEU:HD11	1.59	0.83
1:A:88:ARG:HH12	1:A:180:PHE:HA	1.44	0.83
1:A:440:GLN:HB2	1:A:441:PHE:CE1	2.14	0.83
1:A:504:ASN:N	1:A:504:ASN:HD22	1.77	0.83
1:A:338:HIS:CD2	1:A:339:HIS:H	1.97	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:449:LEU:CD2	1:A:452:PRO:HB3	2.08	0.82
1:A:46:ILE:HG12	1:A:460:ILE:HG13	1.60	0.82
1:A:510:TYR:HD2	1:A:511:PRO:CD	1.91	0.82
1:A:46:ILE:HG22	1:A:482:ALA:O	1.79	0.82
1:A:78:THR:HA	1:A:325:ARG:HH11	1.43	0.82
1:A:94:ALA:HB3	1:A:97:LEU:CD1	2.09	0.82
1:A:96:ASN:O	1:A:98:PHE:N	2.13	0.82
1:A:249:PHE:CE1	1:A:290:PRO:HD3	2.14	0.82
1:A:229:THR:HG22	1:A:230:MET:N	1.92	0.82
1:A:162:VAL:HG13	1:A:163:LEU:H	1.45	0.82
1:A:179:TYR:C	1:A:181:PRO:HD3	2.01	0.82
1:A:457:PHE:HD2	1:A:457:PHE:N	1.78	0.81
1:A:244:GLY:C	1:A:551:VAL:HG23	1.99	0.81
1:A:229:THR:HG22	1:A:230:MET:H	1.44	0.81
1:A:374:PHE:CD1	1:A:374:PHE:N	2.45	0.81
1:A:383:GLN:HG3	1:A:384:LEU:H	1.42	0.81
1:A:425:GLN:CG	1:A:444:LEU:HD23	2.10	0.81
1:A:290:PRO:HG2	1:A:381:LEU:HD12	1.63	0.81
1:A:320:THR:HG22	1:A:321:SER:N	1.94	0.81
1:A:452:PRO:HB2	1:A:453:PRO:HD2	1.62	0.81
1:A:95:LEU:O	1:A:95:LEU:HD13	1.81	0.81
1:A:248:HIS:HB2	1:A:251:GLU:HB2	1.61	0.81
1:A:318:THR:OG1	1:A:326:ILE:HG22	1.79	0.81
1:A:118:ALA:HB2	1:A:233:LYS:HA	1.63	0.80
1:A:263:VAL:HG13	1:A:272:LYS:NZ	1.97	0.80
1:A:118:ALA:HB1	1:A:232:TYR:O	1.82	0.80
1:A:295:ASN:HD21	1:A:350:ASN:HD21	1.27	0.80
1:A:340:TRP:HE3	1:A:343:ASP:H	1.30	0.80
1:A:27:GLU:HG3	1:A:40:PHE:HA	1.64	0.80
1:A:427:TRP:HA	1:A:447:TRP:H	1.47	0.79
1:A:107:LEU:CD2	1:A:114:ILE:HD11	2.11	0.79
1:A:420:LEU:H	1:A:547:ALA:HB2	1.45	0.79
1:A:478:LEU:H	1:A:478:LEU:HD23	1.46	0.79
1:A:243:GLU:OE1	1:A:498:LYS:HG2	1.82	0.79
1:A:463:GLN:HB2	1:A:480:GLN:OE1	1.83	0.79
1:A:434:ASP:O	1:A:435:ASP:O	2.01	0.79
1:A:442:ALA:HB1	1:A:444:LEU:CD2	2.13	0.78
1:A:81:MET:HE1	1:A:205:ALA:HB2	1.63	0.78
1:A:130:ASP:HB2	1:A:479:VAL:O	1.83	0.78
1:A:51:GLU:HG2	1:A:52:HIS:H	1.49	0.78
1:A:523:TYR:HB2	1:A:536:HIS:CB	2.13	0.78
1:A:413:SER:O	1:A:414:VAL:HG23	1.84	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:403:ASP:HB3	1:A:406:GLU:HB2	1.66	0.77
1:A:161:TYR:HA	1:A:455:GLN:OE1	1.84	0.77
1:A:502:ARG:NH1	1:A:504:ASN:O	2.16	0.77
1:A:83:TYR:O	1:A:185:ALA:HA	1.84	0.77
1:A:170:LEU:HG	1:A:171:ALA:H	1.49	0.77
1:A:149:LEU:HD11	1:A:458:LEU:HB2	1.67	0.77
1:A:92:PHE:O	1:A:94:ALA:N	2.17	0.76
1:A:392:TYR:O	1:A:393:PHE:HB2	1.84	0.76
1:A:421:HIS:ND1	1:A:421:HIS:N	2.33	0.76
1:A:41:SER:HB2	1:A:485:ILE:HD11	1.67	0.76
1:A:131:VAL:O	1:A:479:VAL:HB	1.86	0.76
1:A:394:PRO:HB3	1:A:399:GLN:HB2	1.68	0.76
1:A:521:VAL:HG22	1:A:522:LEU:N	2.01	0.76
1:A:90:LEU:HD22	1:A:486:MET:CE	2.16	0.76
1:A:109:GLU:HB2	1:A:550:ARG:NH2	2.01	0.76
1:A:63:SER:HB2	1:A:76:THR:HB	1.67	0.76
1:A:129:LYS:HZ2	1:A:143:ASP:HA	1.49	0.76
1:A:295:ASN:CG	1:A:296:SER:H	1.87	0.76
1:A:320:THR:HG23	1:A:325:ARG:C	2.06	0.76
1:A:227:THR:CG2	1:A:228:ALA:H	1.98	0.76
1:A:78:THR:HG22	1:A:79:PRO:HD2	1.67	0.76
1:A:461:LEU:HD22	1:A:462:PRO:HD2	1.67	0.75
1:A:420:LEU:H	1:A:547:ALA:CB	1.99	0.75
1:A:520:TYR:HA	1:A:538:TYR:CE1	2.21	0.75
1:A:341:ASP:O	1:A:342:THR:HG23	1.86	0.75
1:A:353:SER:HB2	1:A:371:VAL:HG22	1.68	0.75
1:A:547:ALA:O	1:A:549:SER:N	2.16	0.75
1:A:129:LYS:NZ	1:A:129:LYS:HB3	1.94	0.75
1:A:444:LEU:N	1:A:444:LEU:HD22	2.01	0.75
1:A:359:TYR:HB3	1:A:534:HIS:ND1	2.02	0.74
1:A:295:ASN:CG	1:A:296:SER:N	2.41	0.74
1:A:504:ASN:O	1:A:506:GLN:N	2.20	0.74
1:A:188:THR:CG2	1:A:189:VAL:H	2.00	0.74
1:A:88:ARG:HA	1:A:183:GLN:HA	1.68	0.74
1:A:195:GLN:HB2	1:A:202:LYS:HE2	1.70	0.74
1:A:264:PRO:HG3	1:A:273:PHE:H	1.53	0.74
1:A:206:SER:O	1:A:209:SER:HB2	1.87	0.73
1:A:295:ASN:HA	1:A:405:ILE:HA	1.70	0.73
1:A:128:VAL:O	1:A:128:VAL:HG13	1.87	0.73
1:A:90:LEU:HD23	1:A:458:LEU:HD21	1.69	0.73
1:A:87:TRP:NE1	1:A:215:GLU:OE2	2.20	0.73
1:A:426:LEU:HG	1:A:427:TRP:HD1	1.52	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:94:ALA:C	1:A:96:ASN:N	2.39	0.73
1:A:117:ASP:HB3	1:A:491:THR:OG1	1.88	0.73
1:A:456:ILE:HD12	1:A:456:ILE:N	2.04	0.73
1:A:94:ALA:O	1:A:96:ASN:N	2.21	0.73
1:A:116:PRO:HB2	1:A:234:PHE:CD1	2.24	0.73
1:A:188:THR:CG2	1:A:210:ALA:H	2.01	0.72
1:A:411:VAL:O	1:A:411:VAL:HG13	1.89	0.72
1:A:118:ALA:CB	1:A:233:LYS:HA	2.19	0.72
1:A:56:VAL:CG2	1:A:57:PHE:H	1.97	0.72
1:A:506:GLN:HG2	1:A:550:ARG:HD2	1.69	0.72
1:A:213:VAL:HG22	1:A:213:VAL:O	1.87	0.72
1:A:46:ILE:HG21	1:A:482:ALA:HB3	1.69	0.72
1:A:284:GLN:OE1	1:A:284:GLN:HA	1.89	0.72
1:A:535:ARG:HH11	1:A:535:ARG:HB3	1.53	0.72
1:A:346:VAL:HG12	1:A:347:THR:H	1.55	0.72
1:A:346:VAL:HG12	1:A:347:THR:N	2.04	0.72
1:A:39:THR:HB	1:A:489:THR:CG2	2.05	0.71
1:A:46:ILE:CG1	1:A:460:ILE:HG13	2.20	0.71
1:A:372:GLY:O	1:A:544:LEU:HB2	1.89	0.71
1:A:152:LEU:HB2	1:A:219:PHE:CB	2.21	0.71
1:A:367:TYR:O	1:A:369:GLN:HG2	1.90	0.71
1:A:249:PHE:HE1	1:A:290:PRO:HD3	1.53	0.71
1:A:101:PRO:O	1:A:102:LEU:C	2.28	0.71
1:A:391:THR:HG23	1:A:394:PRO:HD2	1.72	0.71
1:A:107:LEU:HD21	1:A:114:ILE:HD11	1.71	0.70
1:A:119:LEU:HD22	1:A:120:THR:N	2.06	0.70
1:A:187:LEU:HD22	1:A:187:LEU:N	2.06	0.70
1:A:422:TYR:H	1:A:545:TRP:HB3	1.56	0.70
1:A:48:TYR:CE1	1:A:479:VAL:HA	2.25	0.70
1:A:264:PRO:HG2	1:A:273:PHE:H	1.55	0.70
1:A:373:ARG:HE	1:A:375:PRO:HD3	1.56	0.70
1:A:440:GLN:HB2	1:A:441:PHE:CD1	2.27	0.70
1:A:292:PRO:HG3	1:A:409:LEU:HB2	1.73	0.70
1:A:52:HIS:CB	1:A:86:PRO:HB3	2.21	0.70
1:A:320:THR:CG2	1:A:321:SER:H	2.01	0.70
1:A:374:PHE:CE1	1:A:543:GLU:HG3	2.26	0.70
1:A:460:ILE:CD1	1:A:481:TYR:HA	2.21	0.70
1:A:506:GLN:NE2	1:A:550:ARG:HG3	2.06	0.70
1:A:255:PRO:C	1:A:256:LEU:HD23	2.11	0.70
1:A:161:TYR:HB2	1:A:429:LYS:HD3	1.72	0.70
1:A:103:GLU:O	1:A:104:PHE:C	2.28	0.69
1:A:109:GLU:CB	1:A:550:ARG:HH21	2.05	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:51:GLU:CG	1:A:52:HIS:H	2.04	0.69
1:A:444:LEU:HD13	1:A:444:LEU:N	2.07	0.69
1:A:122:THR:HG23	1:A:229:THR:OG1	1.93	0.69
1:A:393:PHE:H	1:A:394:PRO:HD3	1.57	0.69
1:A:188:THR:CG2	1:A:189:VAL:N	2.56	0.69
1:A:172:PRO:O	1:A:174:LEU:N	2.25	0.69
1:A:119:LEU:HB2	1:A:489:THR:O	1.93	0.69
1:A:129:LYS:HB2	1:A:142:THR:O	1.92	0.69
1:A:373:ARG:N	1:A:373:ARG:HD3	2.08	0.69
1:A:293:LEU:HD23	1:A:407:ARG:CD	2.18	0.69
1:A:337:TYR:O	1:A:338:HIS:HB2	1.92	0.69
1:A:79:PRO:HG3	1:A:192:VAL:HG23	1.74	0.69
1:A:465:GLY:CA	1:A:478:LEU:HD21	2.22	0.69
1:A:328:LEU:O	1:A:329:ARG:HB3	1.93	0.68
1:A:88:ARG:NH1	1:A:180:PHE:HA	2.07	0.68
1:A:423:GLU:O	1:A:424:SER:HB2	1.94	0.68
1:A:437:PHE:CE2	1:A:438:LYS:HG3	2.29	0.68
1:A:427:TRP:HA	1:A:447:TRP:N	2.09	0.68
1:A:465:GLY:HA3	1:A:478:LEU:HD21	1.75	0.68
1:A:100:SER:H	1:A:103:GLU:CB	2.06	0.68
1:A:291:GLY:HA2	1:A:410:MET:HE1	1.75	0.68
1:A:110:ASN:O	1:A:497:ARG:HD2	1.94	0.68
1:A:162:VAL:HG22	1:A:163:LEU:H	1.58	0.68
1:A:265:ASP:OD1	1:A:271:PRO:HD2	1.93	0.68
1:A:337:TYR:O	1:A:337:TYR:HD1	1.77	0.68
1:A:383:GLN:CG	1:A:384:LEU:H	2.07	0.68
1:A:410:MET:H	1:A:410:MET:HE2	1.59	0.68
1:A:41:SER:O	1:A:42:ARG:HD3	1.92	0.68
1:A:250:TYR:HA	1:A:286:GLN:HE21	1.53	0.67
1:A:45:LEU:HD12	1:A:46:ILE:N	2.08	0.67
1:A:244:GLY:H	1:A:551:VAL:HA	1.57	0.67
1:A:293:LEU:HD13	1:A:335:GLN:HG2	1.75	0.67
1:A:162:VAL:O	1:A:164:GLY:N	2.27	0.67
1:A:156:GLU:O	1:A:157:TYR:HB2	1.95	0.67
1:A:526:THR:C	1:A:528:THR:H	1.97	0.67
1:A:525:PRO:HA	1:A:535:ARG:HA	1.77	0.67
1:A:502:ARG:NH1	1:A:502:ARG:HB3	2.10	0.67
1:A:167:GLN:OE1	1:A:170:LEU:HB3	1.95	0.67
1:A:279:GLU:HA	1:A:281:HIS:CE1	2.30	0.67
1:A:241:ASN:O	1:A:242:LEU:HD23	1.95	0.66
1:A:414:VAL:O	1:A:415:TRP:HE3	1.78	0.66
1:A:338:HIS:O	1:A:339:HIS:ND1	2.28	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:46:ILE:HD12	1:A:47:PRO:HD2	1.76	0.66
1:A:78:THR:CG2	1:A:79:PRO:HD2	2.25	0.66
1:A:48:TYR:HE2	1:A:50:PRO:HG3	1.61	0.66
1:A:229:THR:CG2	1:A:230:MET:H	2.09	0.66
1:A:554:LEU:HD12	1:A:554:LEU:OXT	1.95	0.66
1:A:349:ILE:O	1:A:351:ALA:N	2.29	0.66
1:A:46:ILE:CG2	1:A:482:ALA:HB3	2.26	0.66
1:A:500:THR:HG22	1:A:553:PRO:HD3	1.76	0.66
1:A:80:ILE:C	1:A:203:LYS:HG2	2.17	0.66
1:A:96:ASN:ND2	1:A:97:LEU:H	1.94	0.66
1:A:177:TRP:O	1:A:178:VAL:O	2.15	0.65
1:A:414:VAL:O	1:A:415:TRP:CB	2.39	0.65
1:A:167:GLN:HG2	1:A:169:THR:OG1	1.97	0.65
1:A:234:PHE:O	1:A:235:PRO:O	2.14	0.65
1:A:316:LEU:O	1:A:318:THR:HG22	1.95	0.65
1:A:99:PHE:CE2	1:A:107:LEU:HD22	2.31	0.65
1:A:391:THR:HG23	1:A:394:PRO:CD	2.26	0.65
1:A:106:HIS:O	1:A:109:GLU:HG2	1.97	0.65
1:A:134:LYS:HB3	1:A:138:GLY:H	1.62	0.65
1:A:315:GLY:O	1:A:316:LEU:HD23	1.97	0.65
1:A:130:ASP:HB3	1:A:480:GLN:HB3	1.78	0.65
1:A:400:GLN:O	1:A:401:TYR:HB2	1.95	0.65
1:A:425:GLN:NE2	1:A:444:LEU:HD23	2.12	0.65
1:A:112:GLY:O	1:A:113:SER:CB	2.44	0.65
1:A:45:LEU:C	1:A:88:ARG:NH2	2.50	0.65
1:A:87:TRP:HZ3	1:A:458:LEU:HA	1.62	0.65
1:A:85:THR:CG2	1:A:86:PRO:HD2	2.27	0.65
1:A:477:THR:O	1:A:478:LEU:C	2.35	0.65
1:A:316:LEU:HD22	1:A:349:ILE:HG22	1.80	0.64
1:A:373:ARG:N	1:A:373:ARG:CD	2.59	0.64
1:A:552:HIS:HE1	1:A:554:LEU:HB3	1.63	0.64
1:A:377:GLU:HB3	1:A:382:LYS:HG3	1.80	0.64
1:A:506:GLN:CG	1:A:550:ARG:HD2	2.28	0.64
1:A:159:TYR:CE1	1:A:214:LEU:HD22	2.33	0.64
1:A:249:PHE:CD2	1:A:249:PHE:C	2.66	0.64
1:A:294:VAL:N	1:A:335:GLN:HE21	1.95	0.64
1:A:42:ARG:NH2	1:A:175:PRO:HD3	2.13	0.64
1:A:74:VAL:HG12	1:A:74:VAL:O	1.98	0.64
1:A:520:TYR:HD2	1:A:538:TYR:HH	1.45	0.64
1:A:128:VAL:HA	1:A:482:ALA:HB2	1.79	0.64
1:A:249:PHE:CB	1:A:380:GLN:OE1	2.46	0.64
1:A:383:GLN:HG3	1:A:384:LEU:N	2.13	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:58:SER:HB2	1:A:203:LYS:O	1.98	0.63
1:A:158:LYS:O	1:A:159:TYR:HB2	1.99	0.63
1:A:63:SER:CB	1:A:76:THR:HB	2.28	0.63
1:A:444:LEU:HD13	1:A:444:LEU:H	1.63	0.63
1:A:94:ALA:C	1:A:96:ASN:H	2.00	0.63
1:A:181:PRO:O	1:A:183:GLN:NE2	2.31	0.63
1:A:250:TYR:CE2	1:A:381:LEU:HD21	2.33	0.63
1:A:338:HIS:HD2	1:A:339:HIS:N	1.95	0.63
1:A:425:GLN:HG3	1:A:446:GLY:HA3	1.80	0.63
1:A:53:HIS:C	1:A:55:LYS:H	2.02	0.63
1:A:133:ASP:HA	1:A:139:VAL:HA	1.80	0.63
1:A:347:THR:O	1:A:349:ILE:N	2.31	0.63
1:A:42:ARG:NH1	1:A:175:PRO:CA	2.62	0.63
1:A:505:PRO:O	1:A:506:GLN:O	2.16	0.62
1:A:111:TYR:CE2	1:A:494:LEU:HD12	2.34	0.62
1:A:101:PRO:HA	1:A:104:PHE:HB3	1.80	0.62
1:A:157:TYR:CE2	1:A:451:GLN:HA	2.34	0.62
1:A:27:GLU:HG2	1:A:28:GLY:N	2.14	0.62
1:A:46:ILE:HG23	1:A:460:ILE:HD11	1.81	0.62
1:A:298:SER:CA	1:A:348:GLY:HA2	2.29	0.62
1:A:52:HIS:HB3	1:A:86:PRO:HB3	1.80	0.62
1:A:423:GLU:HB2	1:A:540:LYS:NZ	2.15	0.62
1:A:188:THR:HG21	1:A:210:ALA:N	2.09	0.62
1:A:423:GLU:HB2	1:A:540:LYS:HZ1	1.64	0.62
1:A:254:ASN:HB2	1:A:257:TYR:HB2	1.82	0.62
1:A:440:GLN:CA	1:A:440:GLN:HE21	2.13	0.62
1:A:333:VAL:HG12	1:A:417:ARG:HB3	1.80	0.62
1:A:190:GLY:HA3	1:A:206:SER:HB3	1.81	0.62
1:A:414:VAL:CG1	1:A:415:TRP:N	2.62	0.62
1:A:82:GLY:HA2	1:A:186:TYR:O	1.99	0.62
1:A:420:LEU:N	1:A:547:ALA:HB2	2.12	0.62
1:A:92:PHE:HA	1:A:171:ALA:HB2	1.82	0.62
1:A:521:VAL:HG22	1:A:522:LEU:H	1.63	0.62
1:A:430:ILE:HG23	1:A:431:PRO:HD2	1.82	0.62
1:A:353:SER:HA	1:A:371:VAL:HG13	1.81	0.61
1:A:288:PHE:HB3	1:A:412:GLY:O	2.00	0.61
1:A:452:PRO:O	1:A:454:PRO:N	2.33	0.61
1:A:42:ARG:HH11	1:A:175:PRO:HA	1.64	0.61
1:A:440:GLN:HE21	1:A:440:GLN:HA	1.64	0.61
1:A:207:GLU:C	1:A:209:SER:H	2.03	0.61
1:A:450:HIS:N	1:A:450:HIS:ND1	2.47	0.61
1:A:449:LEU:HD21	1:A:452:PRO:CB	2.30	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:295:ASN:CA	1:A:405:ILE:HA	2.30	0.61
1:A:506:GLN:NE2	1:A:551:VAL:HG12	2.16	0.61
1:A:375:PRO:HB3	1:A:377:GLU:CG	2.27	0.61
1:A:475:ILE:HG13	1:A:475:ILE:O	2.00	0.61
1:A:100:SER:O	1:A:102:LEU:N	2.33	0.61
1:A:328:LEU:CD2	1:A:329:ARG:H	2.12	0.61
1:A:338:HIS:CD2	1:A:339:HIS:N	2.67	0.61
1:A:93:ASN:OD1	1:A:426:LEU:HB3	2.00	0.61
1:A:386:GLY:O	1:A:387:LEU:HD22	2.01	0.61
1:A:414:VAL:HG12	1:A:415:TRP:N	2.16	0.61
1:A:52:HIS:HB2	1:A:86:PRO:HB3	1.83	0.61
1:A:63:SER:C	1:A:65:HIS:H	2.04	0.61
1:A:236:PRO:O	1:A:237:VAL:HB	2.00	0.61
1:A:45:LEU:HD12	1:A:45:LEU:C	2.21	0.60
1:A:421:HIS:CG	1:A:423:GLU:O	2.55	0.60
1:A:46:ILE:CG2	1:A:482:ALA:H	2.14	0.60
1:A:145:ALA:C	1:A:147:GLY:H	2.02	0.60
1:A:100:SER:HB2	1:A:103:GLU:HG3	1.83	0.60
1:A:160:PRO:O	1:A:184:TYR:OH	2.18	0.60
1:A:425:GLN:HB2	1:A:444:LEU:HB2	1.83	0.60
1:A:430:ILE:CG2	1:A:431:PRO:HD2	2.31	0.60
1:A:51:GLU:HG2	1:A:52:HIS:N	2.16	0.60
1:A:63:SER:OG	1:A:74:VAL:HG13	2.02	0.60
1:A:294:VAL:O	1:A:295:ASN:HB3	2.00	0.60
1:A:295:ASN:ND2	1:A:350:ASN:HD21	1.99	0.60
1:A:523:TYR:HD2	1:A:536:HIS:CD2	2.19	0.60
1:A:521:VAL:CG2	1:A:522:LEU:N	2.64	0.60
1:A:522:LEU:HD11	1:A:538:TYR:HB2	1.84	0.60
1:A:428:SER:N	1:A:447:TRP:O	2.29	0.60
1:A:131:VAL:HG22	1:A:141:VAL:HG23	1.83	0.60
1:A:162:VAL:CG2	1:A:163:LEU:N	2.58	0.60
1:A:132:THR:O	1:A:140:GLN:HB3	2.02	0.60
1:A:100:SER:O	1:A:103:GLU:HG3	2.02	0.60
1:A:245:CYS:O	1:A:247:GLN:N	2.32	0.59
1:A:155:HIS:H	1:A:454:PRO:HB3	1.67	0.59
1:A:57:PHE:HB2	1:A:82:GLY:O	2.02	0.59
1:A:114:ILE:HG22	1:A:115:ALA:N	2.16	0.59
1:A:129:LYS:NZ	1:A:143:ASP:HA	2.17	0.59
1:A:42:ARG:NH1	1:A:175:PRO:N	2.48	0.59
1:A:346:VAL:HG12	1:A:348:GLY:H	1.67	0.59
1:A:384:LEU:HD12	1:A:384:LEU:O	2.02	0.59
1:A:40:PHE:O	1:A:487:THR:HG23	2.01	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:244:GLY:N	1:A:551:VAL:HA	2.16	0.59
1:A:99:PHE:H	1:A:99:PHE:HD1	1.47	0.59
1:A:274:ARG:CG	1:A:275:SER:H	2.13	0.59
1:A:97:LEU:HD13	1:A:97:LEU:N	2.17	0.59
1:A:455:GLN:HB2	1:A:457:PHE:CE2	2.37	0.59
1:A:393:PHE:N	1:A:394:PRO:HD3	2.17	0.59
1:A:338:HIS:ND1	1:A:371:VAL:HB	2.17	0.59
1:A:157:TYR:CE1	1:A:454:PRO:HG3	2.38	0.59
1:A:46:ILE:HD13	1:A:458:LEU:O	2.03	0.59
1:A:419:ALA:O	1:A:420:LEU:HD23	2.03	0.59
1:A:44:PHE:CZ	1:A:484:GLY:HA3	2.38	0.59
1:A:119:LEU:HG	1:A:490:MET:HE2	1.83	0.59
1:A:263:VAL:HG22	1:A:272:LYS:HZ2	1.68	0.59
1:A:30:THR:C	1:A:36:VAL:HG23	2.22	0.59
1:A:46:ILE:CG2	1:A:460:ILE:HD11	2.33	0.59
1:A:36:VAL:HG22	1:A:37:THR:N	2.18	0.59
1:A:337:TYR:O	1:A:337:TYR:CD1	2.55	0.58
1:A:127:ALA:CB	1:A:483:VAL:H	2.04	0.58
1:A:64:CYS:O	1:A:65:HIS:HB2	2.02	0.58
1:A:314:THR:HG22	1:A:315:GLY:N	2.18	0.58
1:A:87:TRP:CZ2	1:A:459:LYS:HG2	2.39	0.58
1:A:506:GLN:HE22	1:A:551:VAL:CA	2.16	0.58
1:A:42:ARG:NH1	1:A:175:PRO:HA	2.18	0.58
1:A:192:VAL:HG13	1:A:192:VAL:O	2.03	0.58
1:A:87:TRP:CH2	1:A:459:LYS:HG2	2.38	0.58
1:A:129:LYS:HZ2	1:A:129:LYS:CB	2.10	0.58
1:A:452:PRO:HB2	1:A:453:PRO:CD	2.31	0.58
1:A:503:TRP:O	1:A:503:TRP:CE3	2.46	0.58
1:A:35:SER:HA	1:A:494:LEU:HG	1.84	0.58
1:A:421:HIS:O	1:A:423:GLU:O	2.22	0.58
1:A:60:ALA:HA	1:A:202:LYS:HA	1.86	0.58
1:A:374:PHE:CZ	1:A:543:GLU:HG3	2.38	0.58
1:A:152:LEU:HB2	1:A:219:PHE:HB3	1.85	0.58
1:A:300:LYS:HA	1:A:300:LYS:HE2	1.86	0.58
1:A:246:SER:H	1:A:551:VAL:CG2	2.16	0.58
1:A:550:ARG:HG3	1:A:551:VAL:H	1.69	0.58
1:A:521:VAL:CG2	1:A:522:LEU:H	2.16	0.57
1:A:170:LEU:CG	1:A:171:ALA:N	2.66	0.57
1:A:415:TRP:HD1	1:A:416:ASN:O	1.88	0.57
1:A:45:LEU:N	1:A:88:ARG:HH22	2.03	0.57
1:A:180:PHE:N	1:A:180:PHE:CD1	2.71	0.57
1:A:189:VAL:HG12	1:A:190:GLY:N	2.18	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:430:ILE:CG2	1:A:439:THR:HG21	2.34	0.57
1:A:113:SER:OG	1:A:239:PRO:HB2	2.04	0.57
1:A:158:LYS:O	1:A:159:TYR:CB	2.52	0.57
1:A:237:VAL:HG21	1:A:447:TRP:CD1	2.40	0.57
1:A:107:LEU:HD11	1:A:242:LEU:CD1	2.34	0.57
1:A:251:GLU:HA	1:A:253:TYR:CE2	2.39	0.57
1:A:500:THR:HB	1:A:502:ARG:HG3	1.85	0.57
1:A:410:MET:N	1:A:410:MET:HE2	2.19	0.57
1:A:413:SER:O	1:A:414:VAL:CG2	2.53	0.57
1:A:176:ILE:HG22	1:A:176:ILE:O	2.05	0.57
1:A:320:THR:OG1	1:A:326:ILE:HG23	2.04	0.57
1:A:94:ALA:O	1:A:97:LEU:CD2	2.53	0.57
1:A:99:PHE:CD1	1:A:99:PHE:N	2.72	0.57
1:A:478:LEU:N	1:A:478:LEU:CD2	2.59	0.57
1:A:27:GLU:HA	1:A:39:THR:O	2.05	0.57
1:A:316:LEU:HD12	1:A:328:LEU:HD11	1.85	0.57
1:A:42:ARG:NH1	1:A:175:PRO:CG	2.52	0.56
1:A:350:ASN:O	1:A:351:ALA:O	2.22	0.56
1:A:170:LEU:CG	1:A:171:ALA:H	2.06	0.56
1:A:128:VAL:HG21	1:A:147:GLY:C	2.26	0.56
1:A:252:MET:O	1:A:253:TYR:O	2.24	0.56
1:A:407:ARG:H	1:A:408:PRO:HD3	1.70	0.56
1:A:367:TYR:O	1:A:369:GLN:N	2.38	0.56
1:A:44:PHE:HA	1:A:179:TYR:O	2.05	0.56
1:A:81:MET:HG2	1:A:203:LYS:HG3	1.86	0.56
1:A:414:VAL:O	1:A:415:TRP:CE3	2.57	0.56
1:A:161:TYR:HH	1:A:427:TRP:HZ3	1.53	0.56
1:A:392:TYR:H	1:A:394:PRO:HD3	1.71	0.56
1:A:207:GLU:O	1:A:209:SER:N	2.36	0.56
1:A:511:PRO:HB3	1:A:545:TRP:NE1	2.20	0.56
1:A:162:VAL:HG13	1:A:163:LEU:N	2.18	0.56
1:A:179:TYR:CZ	1:A:181:PRO:HG3	2.41	0.56
1:A:338:HIS:HE2	1:A:345:TYR:HD2	1.54	0.56
1:A:442:ALA:HB1	1:A:444:LEU:HD22	1.86	0.56
1:A:87:TRP:CE2	1:A:459:LYS:HG2	2.41	0.56
1:A:406:GLU:O	1:A:407:ARG:HB2	2.05	0.56
1:A:535:ARG:NH1	1:A:535:ARG:HB3	2.20	0.56
1:A:513:HIS:HA	1:A:542:GLU:HG2	1.87	0.56
1:A:216:HIS:O	1:A:217:SER:HB3	2.05	0.56
1:A:329:ARG:C	1:A:331:GLY:H	2.08	0.56
1:A:382:LYS:HE3	1:A:415:TRP:HB2	1.85	0.56
1:A:295:ASN:ND2	1:A:296:SER:H	2.04	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:421:HIS:CD2	1:A:423:GLU:O	2.59	0.56
1:A:506:GLN:O	1:A:507:PRO:O	2.24	0.56
1:A:165:GLN:O	1:A:166:GLY:C	2.43	0.56
1:A:392:TYR:CE2	1:A:399:GLN:HB3	2.41	0.55
1:A:107:LEU:HD22	1:A:114:ILE:HD11	1.87	0.55
1:A:126:ILE:CG2	1:A:224:THR:HA	2.30	0.55
1:A:426:LEU:CG	1:A:427:TRP:HD1	2.20	0.55
1:A:65:HIS:HB3	1:A:200:ASP:OD1	2.05	0.55
1:A:551:VAL:HG22	1:A:552:HIS:O	2.06	0.55
1:A:434:ASP:OD1	1:A:434:ASP:N	2.34	0.55
1:A:27:GLU:CG	1:A:40:PHE:HA	2.35	0.55
1:A:123:ILE:O	1:A:227:THR:HG23	2.06	0.55
1:A:107:LEU:O	1:A:107:LEU:HD12	2.07	0.55
1:A:340:TRP:HE3	1:A:342:THR:HA	1.71	0.55
1:A:157:TYR:CZ	1:A:451:GLN:HA	2.41	0.55
1:A:372:GLY:C	1:A:373:ARG:HD3	2.26	0.55
1:A:249:PHE:HB3	1:A:380:GLN:OE1	2.06	0.55
1:A:449:LEU:HD22	1:A:452:PRO:HB3	1.86	0.55
1:A:485:ILE:C	1:A:485:ILE:HD12	2.26	0.55
1:A:78:THR:HA	1:A:325:ARG:NH1	2.16	0.55
1:A:179:TYR:O	1:A:181:PRO:HD3	2.05	0.55
1:A:320:THR:CG2	1:A:321:SER:N	2.62	0.55
1:A:161:TYR:OH	1:A:452:PRO:HG2	2.07	0.55
1:A:46:ILE:N	1:A:88:ARG:NH2	2.55	0.55
1:A:426:LEU:HB3	1:A:427:TRP:CD1	2.42	0.55
1:A:505:PRO:O	1:A:506:GLN:HB3	2.05	0.55
1:A:544:LEU:H	1:A:544:LEU:HD22	1.72	0.55
1:A:400:GLN:O	1:A:401:TYR:CB	2.55	0.55
1:A:235:PRO:CB	1:A:236:PRO:HD2	2.33	0.55
1:A:551:VAL:HG22	1:A:552:HIS:N	2.21	0.55
1:A:529:ASP:HB3	1:A:533:HIS:HA	1.86	0.55
1:A:96:ASN:HA	1:A:422:TYR:O	2.07	0.55
1:A:433:LEU:O	1:A:434:ASP:O	2.25	0.55
1:A:295:ASN:ND2	1:A:317:SER:OG	2.40	0.54
1:A:455:GLN:HB2	1:A:457:PHE:HE2	1.72	0.54
1:A:54:TYR:HE2	1:A:213:VAL:HA	1.72	0.54
1:A:292:PRO:CD	1:A:409:LEU:HA	2.30	0.54
1:A:46:ILE:HG23	1:A:482:ALA:H	1.71	0.54
1:A:371:VAL:O	1:A:372:GLY:C	2.46	0.54
1:A:427:TRP:CZ3	1:A:453:PRO:HD2	2.43	0.54
1:A:503:TRP:O	1:A:505:PRO:HD3	2.06	0.54
1:A:529:ASP:HB2	1:A:534:HIS:H	1.72	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:152:LEU:HB2	1:A:219:PHE:HB2	1.90	0.54
1:A:40:PHE:C	1:A:40:PHE:CD1	2.81	0.54
1:A:127:ALA:HB3	1:A:483:VAL:N	2.01	0.54
1:A:45:LEU:O	1:A:88:ARG:NH1	2.40	0.54
1:A:340:TRP:HE3	1:A:343:ASP:N	2.02	0.54
1:A:48:TYR:CE2	1:A:50:PRO:HG3	2.42	0.54
1:A:161:TYR:OH	1:A:427:TRP:HZ3	1.90	0.54
1:A:248:HIS:CE1	1:A:379:GLU:HB3	2.43	0.54
1:A:427:TRP:HA	1:A:447:TRP:O	2.07	0.54
1:A:500:THR:HG22	1:A:553:PRO:CD	2.37	0.54
1:A:316:LEU:HD22	1:A:349:ILE:CG2	2.38	0.54
1:A:320:THR:HG23	1:A:326:ILE:N	2.23	0.54
1:A:326:ILE:O	1:A:327:SER:CB	2.55	0.54
1:A:96:ASN:HD22	1:A:97:LEU:H	1.56	0.54
1:A:374:PHE:HE1	1:A:543:GLU:HG3	1.71	0.54
1:A:206:SER:OG	1:A:207:GLU:N	2.41	0.53
1:A:250:TYR:O	1:A:253:TYR:HE2	1.90	0.53
1:A:393:PHE:H	1:A:394:PRO:CD	2.22	0.53
1:A:105:GLN:O	1:A:108:ILE:HG12	2.08	0.53
1:A:115:ALA:O	1:A:492:PHE:HA	2.09	0.53
1:A:235:PRO:HB2	1:A:236:PRO:CD	2.33	0.53
1:A:377:GLU:C	1:A:382:LYS:HB2	2.28	0.53
1:A:87:TRP:CZ3	1:A:458:LEU:HA	2.44	0.53
1:A:96:ASN:HD21	1:A:173:GLU:HG3	1.73	0.53
1:A:252:MET:HE2	1:A:554:LEU:HD12	1.89	0.53
1:A:427:TRP:CA	1:A:447:TRP:H	2.19	0.53
1:A:26:SER:HB2	1:A:487:THR:CG2	2.32	0.53
1:A:241:ASN:OD1	1:A:242:LEU:N	2.42	0.53
1:A:88:ARG:HB2	1:A:182:PRO:O	2.09	0.53
1:A:485:ILE:HG13	1:A:485:ILE:O	2.09	0.53
1:A:391:THR:HG23	1:A:393:PHE:H	1.73	0.53
1:A:522:LEU:CD1	1:A:538:TYR:HB2	2.38	0.53
1:A:353:SER:CB	1:A:371:VAL:HG22	2.37	0.53
1:A:44:PHE:CE2	1:A:486:MET:HB3	2.43	0.53
1:A:263:VAL:HG22	1:A:272:LYS:NZ	2.22	0.53
1:A:150:CYS:SG	1:A:461:LEU:HD23	2.49	0.53
1:A:298:SER:H	1:A:384:LEU:HD23	1.73	0.53
1:A:373:ARG:HH21	1:A:375:PRO:CD	2.22	0.53
1:A:154:ASP:O	1:A:156:GLU:N	2.42	0.52
1:A:452:PRO:O	1:A:454:PRO:CD	2.57	0.52
1:A:81:MET:CE	1:A:205:ALA:HB2	2.34	0.52
1:A:276:LEU:O	1:A:279:GLU:O	2.27	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:340:TRP:CE3	1:A:342:THR:HA	2.44	0.52
1:A:76:THR:HG23	1:A:76:THR:O	2.09	0.52
1:A:107:LEU:HD21	1:A:114:ILE:CD1	2.38	0.52
1:A:425:GLN:CD	1:A:444:LEU:HD23	2.29	0.52
1:A:170:LEU:HG	1:A:171:ALA:N	2.23	0.52
1:A:193:ASN:O	1:A:202:LYS:HG2	2.09	0.52
1:A:298:SER:H	1:A:384:LEU:CD2	2.21	0.52
1:A:95:LEU:O	1:A:96:ASN:O	2.25	0.52
1:A:48:TYR:O	1:A:49:ASP:C	2.47	0.52
1:A:265:ASP:OD2	1:A:270:ASP:HA	2.10	0.52
1:A:383:GLN:CG	1:A:384:LEU:N	2.71	0.52
1:A:131:VAL:HB	1:A:479:VAL:HG11	1.91	0.52
1:A:114:ILE:CG2	1:A:115:ALA:N	2.72	0.52
1:A:154:ASP:OD1	1:A:157:TYR:HA	2.10	0.52
1:A:232:TYR:OH	1:A:453:PRO:HD3	2.09	0.52
1:A:523:TYR:CD2	1:A:536:HIS:CD2	2.98	0.52
1:A:152:LEU:HD23	1:A:152:LEU:C	2.30	0.52
1:A:174:LEU:O	1:A:177:TRP:HB2	2.10	0.52
1:A:172:PRO:CG	1:A:179:TYR:HB2	2.34	0.52
1:A:526:THR:C	1:A:528:THR:N	2.63	0.52
1:A:141:VAL:O	1:A:141:VAL:HG13	2.09	0.52
1:A:45:LEU:C	1:A:88:ARG:HH22	2.13	0.52
1:A:400:GLN:HG3	1:A:401:TYR:H	1.75	0.52
1:A:241:ASN:OD1	1:A:243:GLU:N	2.42	0.52
1:A:246:SER:O	1:A:247:GLN:HB2	2.09	0.52
1:A:179:TYR:CE2	1:A:181:PRO:HA	2.45	0.52
1:A:94:ALA:O	1:A:95:LEU:C	2.48	0.52
1:A:273:PHE:HZ	1:A:276:LEU:HG	1.75	0.52
1:A:134:LYS:C	1:A:136:GLY:H	2.13	0.52
1:A:114:ILE:HG23	1:A:492:PHE:HB3	1.92	0.51
1:A:112:GLY:O	1:A:113:SER:HB2	2.09	0.51
1:A:94:ALA:O	1:A:97:LEU:HD22	2.08	0.51
1:A:123:ILE:HD12	1:A:123:ILE:N	2.26	0.51
1:A:276:LEU:HB2	1:A:280:ASP:HB3	1.91	0.51
1:A:54:TYR:CE2	1:A:213:VAL:HA	2.46	0.51
1:A:131:VAL:HB	1:A:479:VAL:CG1	2.41	0.51
1:A:314:THR:O	1:A:315:GLY:O	2.28	0.51
1:A:95:LEU:HD13	1:A:95:LEU:C	2.30	0.51
1:A:525:PRO:O	1:A:528:THR:HB	2.09	0.51
1:A:63:SER:OG	1:A:64:CYS:N	2.43	0.51
1:A:381:LEU:CB	1:A:407:ARG:HH22	2.23	0.51
1:A:460:ILE:HD12	1:A:481:TYR:HA	1.93	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:526:THR:O	1:A:528:THR:N	2.35	0.51
1:A:165:GLN:O	1:A:166:GLY:O	2.29	0.51
1:A:157:TYR:HE2	1:A:451:GLN:CB	2.23	0.51
1:A:328:LEU:HD22	1:A:329:ARG:H	1.73	0.51
1:A:87:TRP:CZ3	1:A:459:LYS:HG2	2.45	0.51
1:A:346:VAL:CG1	1:A:347:THR:H	2.23	0.51
1:A:333:VAL:CG1	1:A:417:ARG:HB3	2.41	0.51
1:A:456:ILE:CD1	1:A:456:ILE:N	2.70	0.51
1:A:59:PRO:HD2	1:A:80:ILE:HD12	1.93	0.51
1:A:340:TRP:HA	1:A:344:LYS:O	2.10	0.51
1:A:186:TYR:OH	1:A:212:TYR:N	2.43	0.51
1:A:81:MET:N	1:A:203:LYS:HG2	2.25	0.51
1:A:425:GLN:NE2	1:A:444:LEU:CD2	2.73	0.51
1:A:426:LEU:HG	1:A:427:TRP:CD1	2.40	0.51
1:A:111:TYR:CD2	1:A:494:LEU:HD12	2.46	0.51
1:A:107:LEU:HG	1:A:108:ILE:HD13	1.93	0.51
1:A:442:ALA:O	1:A:443:ALA:C	2.49	0.51
1:A:460:ILE:CG2	1:A:461:LEU:N	2.73	0.51
1:A:552:HIS:C	1:A:552:HIS:ND1	2.64	0.51
1:A:244:GLY:N	1:A:550:ARG:O	2.44	0.50
1:A:346:VAL:CG1	1:A:347:THR:N	2.73	0.50
1:A:444:LEU:CD2	1:A:444:LEU:H	2.02	0.50
1:A:387:LEU:HB2	1:A:403:ASP:O	2.12	0.50
1:A:444:LEU:H	1:A:444:LEU:CD1	2.23	0.50
1:A:453:PRO:O	1:A:454:PRO:C	2.49	0.50
1:A:53:HIS:C	1:A:55:LYS:N	2.65	0.50
1:A:88:ARG:NH1	1:A:180:PHE:CA	2.75	0.50
1:A:29:ALA:HA	1:A:37:THR:O	2.12	0.50
1:A:512:PRO:O	1:A:541:PRO:HB3	2.12	0.50
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:HD12	2.31	0.50
1:A:54:TYR:CZ	1:A:85:THR:HG23	2.46	0.50
1:A:96:ASN:C	1:A:97:LEU:HD22	2.31	0.50
1:A:264:PRO:HG3	1:A:273:PHE:HB3	1.94	0.50
1:A:521:VAL:O	1:A:538:TYR:HA	2.11	0.50
1:A:338:HIS:O	1:A:339:HIS:HB3	2.11	0.50
1:A:425:GLN:CB	1:A:444:LEU:HB2	2.41	0.50
1:A:449:LEU:N	1:A:449:LEU:HD13	2.27	0.50
1:A:46:ILE:CG2	1:A:482:ALA:N	2.74	0.50
1:A:393:PHE:N	1:A:394:PRO:CD	2.75	0.50
1:A:204:LEU:HG	1:A:205:ALA:H	1.77	0.49
1:A:42:ARG:HH12	1:A:175:PRO:HG3	1.73	0.49
1:A:411:VAL:O	1:A:411:VAL:CG1	2.59	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:157:TYR:HE2	1:A:451:GLN:HB3	1.77	0.49
1:A:177:TRP:O	1:A:178:VAL:C	2.50	0.49
1:A:249:PHE:N	1:A:380:GLN:OE1	2.38	0.49
1:A:250:TYR:CE2	1:A:381:LEU:CD2	2.95	0.49
1:A:423:GLU:OE1	1:A:424:SER:N	2.46	0.49
1:A:353:SER:CA	1:A:371:VAL:HG13	2.42	0.49
1:A:57:PHE:HB2	1:A:82:GLY:C	2.31	0.49
1:A:339:HIS:HE1	1:A:383:GLN:CG	2.26	0.49
1:A:358:THR:HB	1:A:361:ASN:O	2.13	0.49
1:A:413:SER:O	1:A:414:VAL:CB	2.60	0.49
1:A:294:VAL:O	1:A:294:VAL:HG12	2.12	0.49
1:A:452:PRO:O	1:A:454:PRO:HD3	2.12	0.49
1:A:248:HIS:ND1	1:A:379:GLU:O	2.46	0.49
1:A:124:SER:O	1:A:125:GLU:C	2.51	0.49
1:A:129:LYS:HG3	1:A:481:TYR:CE2	2.48	0.49
1:A:117:ASP:OD1	1:A:233:LYS:HE2	2.13	0.49
1:A:249:PHE:HE1	1:A:290:PRO:CD	2.25	0.49
1:A:373:ARG:O	1:A:375:PRO:HD3	2.13	0.49
1:A:429:LYS:HG2	1:A:430:ILE:O	2.12	0.49
1:A:372:GLY:O	1:A:373:ARG:HB3	2.12	0.49
1:A:373:ARG:HH21	1:A:375:PRO:CG	2.25	0.49
1:A:45:LEU:CD1	1:A:481:TYR:CD1	2.92	0.49
1:A:111:TYR:CD1	1:A:111:TYR:N	2.80	0.49
1:A:256:LEU:HD23	1:A:256:LEU:N	2.24	0.49
1:A:100:SER:N	1:A:103:GLU:HB2	2.13	0.49
1:A:53:HIS:O	1:A:54:TYR:HB2	2.12	0.49
1:A:116:PRO:O	1:A:234:PHE:HB2	2.13	0.48
1:A:249:PHE:HD2	1:A:249:PHE:C	2.14	0.48
1:A:250:TYR:HE2	1:A:381:LEU:HG	1.77	0.48
1:A:455:GLN:CB	1:A:457:PHE:CE2	2.96	0.48
1:A:83:TYR:HB2	1:A:186:TYR:CE2	2.48	0.48
1:A:161:TYR:CB	1:A:429:LYS:HD3	2.42	0.48
1:A:430:ILE:HG12	1:A:439:THR:HG22	1.96	0.48
1:A:460:ILE:O	1:A:462:PRO:HD3	2.12	0.48
1:A:372:GLY:N	1:A:544:LEU:HD23	2.28	0.48
1:A:286:GLN:OE1	1:A:286:GLN:HA	2.12	0.48
1:A:316:LEU:O	1:A:317:SER:C	2.51	0.48
1:A:418:ARG:O	1:A:419:ALA:O	2.31	0.48
1:A:463:GLN:OE1	1:A:480:GLN:NE2	2.46	0.48
1:A:120:THR:HB	1:A:231:SER:HB3	1.96	0.48
1:A:181:PRO:O	1:A:182:PRO:O	2.32	0.48
1:A:232:TYR:CZ	1:A:453:PRO:HD3	2.48	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:381:LEU:HB3	1:A:407:ARG:HH22	1.78	0.48
1:A:453:PRO:O	1:A:454:PRO:O	2.31	0.48
1:A:36:VAL:HG12	1:A:494:LEU:HD21	1.96	0.48
1:A:161:TYR:CZ	1:A:452:PRO:HG2	2.48	0.48
1:A:244:GLY:CA	1:A:551:VAL:HG23	2.43	0.48
1:A:338:HIS:O	1:A:339:HIS:CB	2.60	0.48
1:A:449:LEU:N	1:A:449:LEU:CD1	2.77	0.48
1:A:42:ARG:NH1	1:A:175:PRO:HG3	2.28	0.48
1:A:436:SER:O	1:A:439:THR:OG1	2.31	0.48
1:A:545:TRP:C	1:A:545:TRP:HE3	2.17	0.48
1:A:450:HIS:O	1:A:451:GLN:HB2	2.14	0.48
1:A:45:LEU:HD21	1:A:481:TYR:CD1	2.49	0.48
1:A:91:ASP:OD2	1:A:93:ASN:HB2	2.13	0.48
1:A:93:ASN:OD1	1:A:93:ASN:O	2.32	0.48
1:A:230:MET:C	1:A:230:MET:SD	2.92	0.48
1:A:388:ASN:C	1:A:390:HIS:H	2.16	0.48
1:A:214:LEU:HD11	1:A:457:PHE:CD1	2.49	0.48
1:A:87:TRP:CD2	1:A:459:LYS:HG2	2.49	0.48
1:A:502:ARG:NH1	1:A:502:ARG:CB	2.77	0.48
1:A:79:PRO:HB2	1:A:203:LYS:CB	2.36	0.48
1:A:90:LEU:HD22	1:A:486:MET:HE2	1.93	0.48
1:A:107:LEU:HG	1:A:108:ILE:N	2.28	0.48
1:A:337:TYR:HB2	1:A:351:ALA:HB2	1.95	0.48
1:A:101:PRO:HD3	1:A:422:TYR:CD1	2.48	0.48
1:A:252:MET:CE	1:A:554:LEU:HD12	2.43	0.48
1:A:532:GLN:O	1:A:533:HIS:O	2.31	0.48
1:A:246:SER:N	1:A:551:VAL:CG2	2.77	0.47
1:A:420:LEU:CA	1:A:547:ALA:HB2	2.44	0.47
1:A:85:THR:HG22	1:A:86:PRO:HD2	1.96	0.47
1:A:161:TYR:C	1:A:162:VAL:HG12	2.34	0.47
1:A:90:LEU:HD22	1:A:486:MET:HE3	1.94	0.47
1:A:104:PHE:CG	1:A:108:ILE:HD11	2.49	0.47
1:A:289:MET:O	1:A:290:PRO:O	2.32	0.47
1:A:293:LEU:HB2	1:A:407:ARG:CB	2.38	0.47
1:A:526:THR:HG22	1:A:527:ALA:N	2.29	0.47
1:A:464:SER:OG	1:A:465:GLY:N	2.47	0.47
1:A:347:THR:O	1:A:347:THR:HG22	2.14	0.47
1:A:46:ILE:O	1:A:46:ILE:HG23	2.14	0.47
1:A:186:TYR:C	1:A:187:LEU:HD22	2.34	0.47
1:A:236:PRO:O	1:A:237:VAL:CB	2.62	0.47
1:A:77:ILE:O	1:A:78:THR:O	2.33	0.47
1:A:519:PRO:CG	1:A:541:PRO:HA	2.45	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:161:TYR:OH	1:A:427:TRP:CZ3	2.67	0.47
1:A:46:ILE:HD12	1:A:47:PRO:CD	2.42	0.47
1:A:90:LEU:HD13	1:A:486:MET:CE	2.44	0.47
1:A:513:HIS:HB3	1:A:519:PRO:HD3	1.96	0.47
1:A:529:ASP:HB2	1:A:534:HIS:N	2.29	0.47
1:A:128:VAL:H	1:A:482:ALA:CB	2.28	0.47
1:A:327:SER:O	1:A:328:LEU:O	2.33	0.47
1:A:27:GLU:CB	1:A:40:PHE:HA	2.45	0.47
1:A:59:PRO:O	1:A:60:ALA:HB3	2.14	0.47
1:A:152:LEU:CD1	1:A:219:PHE:HB3	2.35	0.47
1:A:42:ARG:C	1:A:43:GLN:O	2.49	0.47
1:A:427:TRP:CE3	1:A:452:PRO:HB2	2.49	0.47
1:A:490:MET:HG3	1:A:491:THR:H	1.80	0.47
1:A:85:THR:HG23	1:A:86:PRO:HD2	1.96	0.47
1:A:494:LEU:N	1:A:494:LEU:HD23	2.30	0.47
1:A:153:VAL:HG22	1:A:456:ILE:HG23	1.96	0.47
1:A:249:PHE:CZ	1:A:288:PHE:HB2	2.49	0.47
1:A:425:GLN:HE21	1:A:444:LEU:CD2	2.28	0.47
1:A:520:TYR:HD2	1:A:538:TYR:OH	1.97	0.47
1:A:144:SER:C	1:A:145:ALA:O	2.51	0.47
1:A:502:ARG:NH2	1:A:504:ASN:O	2.48	0.47
1:A:116:PRO:HB2	1:A:234:PHE:CE1	2.49	0.47
1:A:117:ASP:O	1:A:234:PHE:N	2.48	0.47
1:A:291:GLY:HA3	1:A:292:PRO:HD2	1.59	0.47
1:A:423:GLU:O	1:A:424:SER:CB	2.56	0.47
1:A:425:GLN:CG	1:A:446:GLY:H	2.28	0.47
1:A:490:MET:CG	1:A:491:THR:N	2.78	0.47
1:A:232:TYR:OH	1:A:452:PRO:HA	2.15	0.46
1:A:234:PHE:C	1:A:235:PRO:O	2.53	0.46
1:A:293:LEU:CD2	1:A:407:ARG:HH11	2.28	0.46
1:A:502:ARG:HH11	1:A:502:ARG:CB	2.28	0.46
1:A:89:TYR:HA	1:A:457:PHE:HA	1.96	0.46
1:A:36:VAL:CG2	1:A:37:THR:N	2.77	0.46
1:A:224:THR:HG22	1:A:225:GLY:N	2.31	0.46
1:A:246:SER:N	1:A:551:VAL:HG21	2.30	0.46
1:A:122:THR:HG23	1:A:229:THR:HG1	1.80	0.46
1:A:162:VAL:CG2	1:A:163:LEU:H	2.21	0.46
1:A:180:PHE:N	1:A:181:PRO:HD3	2.30	0.46
1:A:425:GLN:HE21	1:A:444:LEU:HD23	1.77	0.46
1:A:502:ARG:CZ	1:A:504:ASN:O	2.64	0.46
1:A:104:PHE:CD2	1:A:108:ILE:HD11	2.50	0.46
1:A:179:TYR:CE1	1:A:181:PRO:HG3	2.51	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:329:ARG:C	1:A:331:GLY:N	2.68	0.46
1:A:52:HIS:O	1:A:52:HIS:ND1	2.48	0.46
1:A:95:LEU:HA	1:A:426:LEU:HD22	1.96	0.46
1:A:488:VAL:HG12	1:A:489:THR:N	2.31	0.46
1:A:59:PRO:HD2	1:A:80:ILE:CD1	2.46	0.46
1:A:513:HIS:ND1	1:A:518:LEU:HD23	2.30	0.46
1:A:170:LEU:O	1:A:172:PRO:HD3	2.15	0.46
1:A:179:TYR:CE2	1:A:181:PRO:HG3	2.51	0.46
1:A:338:HIS:C	1:A:339:HIS:HD1	2.18	0.46
1:A:101:PRO:HD2	1:A:422:TYR:CZ	2.51	0.46
1:A:45:LEU:CD1	1:A:481:TYR:HD1	2.22	0.46
1:A:129:LYS:HG3	1:A:481:TYR:HE2	1.80	0.46
1:A:87:TRP:HE1	1:A:215:GLU:CD	2.15	0.46
1:A:47:PRO:HD3	1:A:88:ARG:HD3	1.97	0.46
1:A:97:LEU:HD13	1:A:97:LEU:H	1.79	0.46
1:A:104:PHE:O	1:A:107:LEU:HB3	2.16	0.46
1:A:51:GLU:CG	1:A:52:HIS:N	2.75	0.46
1:A:553:PRO:O	1:A:553:PRO:HG2	2.15	0.46
1:A:97:LEU:HD22	1:A:98:PHE:H	1.79	0.46
1:A:133:ASP:HB2	1:A:138:GLY:O	2.15	0.46
1:A:105:GLN:O	1:A:106:HIS:C	2.53	0.46
1:A:119:LEU:HD22	1:A:119:LEU:C	2.35	0.46
1:A:333:VAL:HA	1:A:418:ARG:CZ	2.46	0.46
1:A:274:ARG:O	1:A:275:SER:OG	2.28	0.46
1:A:121:VAL:HB	1:A:230:MET:SD	2.55	0.46
1:A:85:THR:C	1:A:87:TRP:H	2.19	0.46
1:A:217:SER:O	1:A:218:SER:C	2.53	0.46
1:A:129:LYS:O	1:A:481:TYR:HD2	1.99	0.46
1:A:126:ILE:HD11	1:A:149:LEU:HD23	1.98	0.46
1:A:190:GLY:CA	1:A:206:SER:HB3	2.46	0.46
1:A:210:ALA:HB1	1:A:212:TYR:CZ	2.51	0.46
1:A:407:ARG:H	1:A:408:PRO:CD	2.28	0.46
1:A:430:ILE:HG21	1:A:439:THR:HG21	1.98	0.46
1:A:44:PHE:HD1	1:A:88:ARG:NH2	2.13	0.46
1:A:96:ASN:HA	1:A:422:TYR:CE1	2.50	0.45
1:A:135:THR:HG22	1:A:135:THR:O	2.16	0.45
1:A:119:LEU:HG	1:A:490:MET:CE	2.47	0.45
1:A:27:GLU:HG3	1:A:40:PHE:CA	2.42	0.45
1:A:87:TRP:CE3	1:A:459:LYS:HG2	2.52	0.45
1:A:443:ALA:HB3	1:A:444:LEU:HD13	1.99	0.45
1:A:437:PHE:CZ	1:A:438:LYS:HG3	2.52	0.45
1:A:191:ASP:CB	1:A:204:LEU:HB3	2.47	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:329:ARG:O	1:A:329:ARG:CG	2.63	0.45
1:A:46:ILE:HA	1:A:88:ARG:CZ	2.46	0.45
1:A:131:VAL:HG22	1:A:141:VAL:CG2	2.46	0.45
1:A:434:ASP:O	1:A:435:ASP:C	2.53	0.45
1:A:320:THR:OG1	1:A:326:ILE:HA	2.17	0.45
1:A:387:LEU:HD23	1:A:403:ASP:O	2.16	0.45
1:A:326:ILE:HB	1:A:327:SER:H	1.45	0.45
1:A:44:PHE:HB2	1:A:179:TYR:O	2.16	0.45
1:A:45:LEU:HD21	1:A:481:TYR:CE1	2.52	0.45
1:A:264:PRO:HG3	1:A:273:PHE:CB	2.46	0.45
1:A:266:THR:HG21	1:A:396:LYS:HG2	1.99	0.45
1:A:320:THR:HG23	1:A:326:ILE:HA	1.98	0.45
1:A:427:TRP:CH2	1:A:453:PRO:HB2	2.51	0.45
1:A:460:ILE:HD11	1:A:482:ALA:N	2.31	0.45
1:A:290:PRO:CG	1:A:381:LEU:HD12	2.41	0.45
1:A:294:VAL:N	1:A:335:GLN:NE2	2.37	0.45
1:A:339:HIS:CE1	1:A:383:GLN:HB2	2.52	0.45
1:A:441:PHE:CD1	1:A:441:PHE:N	2.84	0.45
1:A:79:PRO:O	1:A:80:ILE:HG23	2.17	0.45
1:A:88:ARG:HB3	1:A:183:GLN:OE1	2.16	0.45
1:A:130:ASP:HA	1:A:480:GLN:CA	2.33	0.45
1:A:395:ASN:O	1:A:396:LYS:HB2	2.17	0.44
1:A:100:SER:CB	1:A:103:GLU:HG3	2.47	0.44
1:A:289:MET:O	1:A:290:PRO:C	2.55	0.44
1:A:412:GLY:O	1:A:413:SER:O	2.34	0.44
1:A:426:LEU:O	1:A:427:TRP:HB3	2.17	0.44
1:A:77:ILE:C	1:A:78:THR:O	2.56	0.44
1:A:54:TYR:CE2	1:A:85:THR:HG23	2.52	0.44
1:A:94:ALA:O	1:A:97:LEU:HD21	2.17	0.44
1:A:100:SER:C	1:A:103:GLU:HG3	2.38	0.44
1:A:43:GLN:HA	1:A:485:ILE:HA	2.00	0.44
1:A:45:LEU:CD1	1:A:482:ALA:O	2.66	0.44
1:A:245:CYS:HB3	1:A:554:LEU:CD2	2.47	0.44
1:A:260:ARG:O	1:A:261:LEU:HG	2.17	0.44
1:A:326:ILE:O	1:A:327:SER:HB2	2.17	0.44
1:A:350:ASN:HB2	1:A:351:ALA:H	1.61	0.44
1:A:101:PRO:O	1:A:105:GLN:N	2.49	0.44
1:A:452:PRO:CB	1:A:453:PRO:CD	2.94	0.44
1:A:478:LEU:H	1:A:478:LEU:HD22	1.75	0.44
1:A:104:PHE:O	1:A:105:GLN:C	2.55	0.44
1:A:128:VAL:HG13	1:A:144:SER:O	2.18	0.44
1:A:187:LEU:CD2	1:A:187:LEU:N	2.76	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:66:ASN:O	1:A:76:THR:HG21	2.17	0.44
1:A:191:ASP:HB2	1:A:204:LEU:HB3	1.99	0.44
1:A:126:ILE:HG21	1:A:223:GLY:O	2.17	0.44
1:A:386:GLY:C	1:A:387:LEU:HD22	2.38	0.44
1:A:423:GLU:CG	1:A:540:LYS:HZ2	2.30	0.44
1:A:95:LEU:HB3	1:A:424:SER:HB3	2.00	0.44
1:A:455:GLN:C	1:A:456:ILE:HD12	2.38	0.44
1:A:359:TYR:HD2	1:A:534:HIS:CG	2.36	0.44
1:A:320:THR:HG1	1:A:326:ILE:HA	1.83	0.43
1:A:161:TYR:CD2	1:A:429:LYS:HB2	2.53	0.43
1:A:502:ARG:CZ	1:A:506:GLN:HB2	2.48	0.43
1:A:104:PHE:O	1:A:108:ILE:HG12	2.18	0.43
1:A:176:ILE:C	1:A:177:TRP:CD1	2.86	0.43
1:A:328:LEU:O	1:A:329:ARG:CB	2.62	0.43
1:A:349:ILE:HG22	1:A:350:ASN:N	2.19	0.43
1:A:417:ARG:CZ	1:A:441:PHE:CZ	3.00	0.43
1:A:157:TYR:OH	1:A:452:PRO:N	2.50	0.43
1:A:356:GLN:O	1:A:358:THR:HG23	2.18	0.43
1:A:256:LEU:O	1:A:257:TYR:CD1	2.72	0.43
1:A:164:GLY:HA3	1:A:428:SER:CB	2.49	0.43
1:A:339:HIS:HE1	1:A:383:GLN:HG2	1.83	0.43
1:A:46:ILE:HA	1:A:47:PRO:HD3	1.87	0.43
1:A:34:ASN:O	1:A:35:SER:HB3	2.19	0.43
1:A:101:PRO:C	1:A:103:GLU:N	2.62	0.43
1:A:383:GLN:HE21	1:A:384:LEU:H	1.65	0.43
1:A:41:SER:C	1:A:42:ARG:HG2	2.39	0.43
1:A:450:HIS:O	1:A:451:GLN:CB	2.67	0.43
1:A:38:CYS:O	1:A:490:MET:N	2.52	0.43
1:A:407:ARG:N	1:A:408:PRO:HD3	2.31	0.43
1:A:500:THR:CG2	1:A:553:PRO:HD3	2.47	0.43
1:A:159:TYR:HA	1:A:160:PRO:HD2	1.74	0.43
1:A:164:GLY:O	1:A:425:GLN:NE2	2.48	0.43
1:A:430:ILE:HD13	1:A:439:THR:CG2	2.49	0.43
1:A:485:ILE:CG1	1:A:485:ILE:O	2.66	0.43
1:A:510:TYR:HA	1:A:511:PRO:HD2	1.70	0.43
1:A:509:VAL:O	1:A:545:TRP:HH2	2.01	0.43
1:A:388:ASN:HD22	1:A:388:ASN:N	2.16	0.43
1:A:384:LEU:O	1:A:385:GLN:OE1	2.36	0.43
1:A:40:PHE:HE2	1:A:97:LEU:HD23	1.84	0.43
1:A:478:LEU:N	1:A:478:LEU:HD22	2.31	0.43
1:A:103:GLU:O	1:A:106:HIS:N	2.51	0.43
1:A:145:ALA:C	1:A:147:GLY:N	2.67	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:60:ALA:HB1	1:A:202:LYS:HB3	2.01	0.43
1:A:373:ARG:NE	1:A:373:ARG:C	2.72	0.43
1:A:455:GLN:HA	1:A:456:ILE:HD12	1.99	0.43
1:A:518:LEU:HA	1:A:519:PRO:HD3	1.91	0.43
1:A:172:PRO:C	1:A:174:LEU:H	2.21	0.43
1:A:174:LEU:HA	1:A:175:PRO:HD2	1.95	0.43
1:A:189:VAL:CG1	1:A:190:GLY:N	2.81	0.43
1:A:213:VAL:CG2	1:A:213:VAL:O	2.59	0.43
1:A:221:LEU:O	1:A:222:LEU:CB	2.63	0.43
1:A:77:ILE:HG21	1:A:327:SER:OG	2.19	0.43
1:A:427:TRP:CD2	1:A:427:TRP:O	2.72	0.43
1:A:390:HIS:HB3	1:A:391:THR:H	1.52	0.43
1:A:529:ASP:HB3	1:A:533:HIS:CA	2.48	0.43
1:A:295:ASN:CG	1:A:317:SER:OG	2.58	0.42
1:A:331:GLY:O	1:A:418:ARG:NH2	2.51	0.42
1:A:333:VAL:HA	1:A:418:ARG:NH2	2.34	0.42
1:A:461:LEU:HD13	1:A:461:LEU:C	2.38	0.42
1:A:461:LEU:HA	1:A:462:PRO:HD3	1.85	0.42
1:A:78:THR:HG22	1:A:79:PRO:CD	2.43	0.42
1:A:82:GLY:O	1:A:83:TYR:CD1	2.72	0.42
1:A:63:SER:C	1:A:65:HIS:N	2.70	0.42
1:A:532:GLN:O	1:A:533:HIS:C	2.57	0.42
1:A:145:ALA:C	1:A:146:THR:CG2	2.88	0.42
1:A:145:ALA:O	1:A:146:THR:HG23	2.19	0.42
1:A:80:ILE:N	1:A:203:LYS:HB2	2.34	0.42
1:A:245:CYS:N	1:A:551:VAL:CG2	2.73	0.42
1:A:410:MET:H	1:A:410:MET:CE	2.29	0.42
1:A:54:TYR:CD1	1:A:54:TYR:N	2.87	0.42
1:A:80:ILE:HD12	1:A:80:ILE:O	2.19	0.42
1:A:90:LEU:HD13	1:A:486:MET:HE1	2.02	0.42
1:A:370:GLY:HA2	1:A:542:GLU:O	2.19	0.42
1:A:180:PHE:N	1:A:181:PRO:CD	2.83	0.42
1:A:106:HIS:ND1	1:A:110:ASN:ND2	2.66	0.42
1:A:87:TRP:NE1	1:A:214:LEU:HB3	2.34	0.42
1:A:293:LEU:HA	1:A:293:LEU:HD13	1.89	0.42
1:A:104:PHE:CD2	1:A:422:TYR:HB2	2.54	0.42
1:A:164:GLY:HA3	1:A:428:SER:OG	2.18	0.42
1:A:490:MET:CG	1:A:491:THR:H	2.33	0.42
1:A:511:PRO:HB3	1:A:545:TRP:CE2	2.55	0.42
1:A:57:PHE:O	1:A:58:SER:HB3	2.19	0.42
1:A:160:PRO:HD3	1:A:212:TYR:CE1	2.54	0.42
1:A:55:LYS:O	1:A:56:VAL:O	2.36	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:71:GLU:HB3	1:A:72:ALA:H	1.68	0.42
1:A:149:LEU:HG	1:A:149:LEU:O	2.19	0.42
1:A:235:PRO:C	1:A:236:PRO:O	2.55	0.42
1:A:256:LEU:C	1:A:257:TYR:CD1	2.93	0.42
1:A:100:SER:HA	1:A:101:PRO:HD2	1.65	0.42
1:A:25:TRP:CE2	1:A:41:SER:OG	2.69	0.42
1:A:405:ILE:H	1:A:405:ILE:HG13	1.68	0.42
1:A:426:LEU:CB	1:A:427:TRP:HD1	2.32	0.42
1:A:91:ASP:OD2	1:A:92:PHE:N	2.52	0.42
1:A:130:ASP:CB	1:A:480:GLN:HB3	2.48	0.42
1:A:276:LEU:HB3	1:A:279:GLU:HG3	2.00	0.42
1:A:314:THR:CG2	1:A:315:GLY:N	2.82	0.42
1:A:41:SER:O	1:A:42:ARG:CD	2.64	0.42
1:A:45:LEU:HD12	1:A:482:ALA:O	2.19	0.42
1:A:46:ILE:HG23	1:A:460:ILE:CD1	2.49	0.42
1:A:88:ARG:HD2	1:A:181:PRO:O	2.19	0.42
1:A:277:THR:O	1:A:278:HIS:HB3	2.20	0.42
1:A:87:TRP:HA	1:A:459:LYS:HB3	2.00	0.42
1:A:552:HIS:CE1	1:A:554:LEU:N	2.87	0.42
1:A:32:SER:OG	1:A:35:SER:O	2.32	0.42
1:A:124:SER:HB2	1:A:485:ILE:CG2	2.37	0.42
1:A:179:TYR:CD2	1:A:181:PRO:HD3	2.54	0.42
1:A:89:TYR:CE1	1:A:182:PRO:HB2	2.55	0.42
1:A:262:GLY:O	1:A:264:PRO:HD3	2.20	0.42
1:A:388:ASN:C	1:A:390:HIS:N	2.73	0.42
1:A:267:LEU:HD12	1:A:267:LEU:O	2.19	0.42
1:A:207:GLU:C	1:A:209:SER:N	2.69	0.41
1:A:455:GLN:HE21	1:A:455:GLN:HB2	1.61	0.41
1:A:283:ILE:O	1:A:284:GLN:C	2.59	0.41
1:A:217:SER:O	1:A:218:SER:O	2.38	0.41
1:A:150:CYS:HB3	1:A:219:PHE:CE1	2.55	0.41
1:A:234:PHE:O	1:A:235:PRO:C	2.59	0.41
1:A:157:TYR:CE2	1:A:451:GLN:CB	3.04	0.41
1:A:455:GLN:NE2	1:A:457:PHE:HZ	2.18	0.41
1:A:85:THR:HG22	1:A:86:PRO:CD	2.49	0.41
1:A:246:SER:H	1:A:551:VAL:HG22	1.85	0.41
1:A:295:ASN:HA	1:A:405:ILE:HG23	2.02	0.41
1:A:52:HIS:N	1:A:52:HIS:ND1	2.68	0.41
1:A:179:TYR:C	1:A:181:PRO:CD	2.83	0.41
1:A:289:MET:SD	1:A:410:MET:HG3	2.60	0.41
1:A:101:PRO:HD3	1:A:422:TYR:CE1	2.55	0.41
1:A:427:TRP:CZ3	1:A:452:PRO:HB2	2.55	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:245:CYS:HB3	1:A:554:LEU:HD23	2.00	0.41
1:A:56:VAL:CG2	1:A:57:PHE:N	2.62	0.41
1:A:277:THR:O	1:A:278:HIS:CB	2.67	0.41
1:A:100:SER:CA	1:A:103:GLU:HG3	2.50	0.41
1:A:316:LEU:C	1:A:318:THR:HG22	2.41	0.41
1:A:502:ARG:CZ	1:A:502:ARG:HB3	2.51	0.41
1:A:392:TYR:O	1:A:393:PHE:CB	2.62	0.41
1:A:392:TYR:N	1:A:394:PRO:HD3	2.36	0.41
1:A:204:LEU:HG	1:A:205:ALA:N	2.35	0.41
1:A:338:HIS:NE2	1:A:345:TYR:HD2	2.17	0.41
1:A:426:LEU:CB	1:A:427:TRP:CD1	3.04	0.41
1:A:56:VAL:O	1:A:57:PHE:CD1	2.74	0.41
1:A:274:ARG:CG	1:A:275:SER:N	2.81	0.41
1:A:342:THR:C	1:A:344:LYS:H	2.23	0.41
1:A:433:LEU:C	1:A:434:ASP:O	2.59	0.41
1:A:128:VAL:H	1:A:482:ALA:HB1	1.86	0.41
1:A:333:VAL:HG12	1:A:418:ARG:H	1.85	0.41
1:A:279:GLU:O	1:A:280:ASP:OD2	2.39	0.41
1:A:513:HIS:HB3	1:A:519:PRO:CD	2.51	0.41
1:A:119:LEU:CD2	1:A:120:THR:N	2.81	0.41
1:A:248:HIS:O	1:A:249:PHE:C	2.59	0.41
1:A:320:THR:HG23	1:A:325:ARG:O	2.19	0.41
1:A:423:GLU:CB	1:A:540:LYS:NZ	2.82	0.41
1:A:106:HIS:CE1	1:A:110:ASN:ND2	2.89	0.41
1:A:288:PHE:O	1:A:289:MET:CB	2.69	0.41
1:A:297:VAL:O	1:A:348:GLY:HA2	2.21	0.41
1:A:442:ALA:O	1:A:445:GLY:N	2.50	0.41
1:A:129:LYS:O	1:A:481:TYR:CD2	2.73	0.41
1:A:83:TYR:O	1:A:185:ALA:CA	2.63	0.41
1:A:426:LEU:HD12	1:A:426:LEU:O	2.21	0.41
1:A:61:ALA:HB2	1:A:201:SER:O	2.21	0.41
1:A:149:LEU:HD12	1:A:150:CYS:O	2.21	0.40
1:A:248:HIS:HA	1:A:380:GLN:NE2	2.24	0.40
1:A:249:PHE:O	1:A:249:PHE:HD2	2.03	0.40
1:A:299:THR:HA	1:A:349:ILE:HG12	2.03	0.40
1:A:461:LEU:HD22	1:A:462:PRO:CD	2.46	0.40
1:A:481:TYR:H	1:A:481:TYR:HD2	1.69	0.40
1:A:48:TYR:O	1:A:49:ASP:O	2.38	0.40
1:A:279:GLU:O	1:A:280:ASP:CG	2.60	0.40
1:A:35:SER:HA	1:A:494:LEU:H	1.86	0.40
1:A:101:PRO:O	1:A:105:GLN:HB3	2.20	0.40
1:A:440:GLN:NE2	1:A:440:GLN:CA	2.81	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:229:THR:CG2	1:A:230:MET:N	2.60	0.40
1:A:127:ALA:O	1:A:128:VAL:C	2.59	0.40
1:A:391:THR:HG23	1:A:394:PRO:HD3	2.00	0.40
1:A:519:PRO:O	1:A:520:TYR:HB2	2.21	0.40
1:A:284:GLN:O	1:A:285:PRO:C	2.59	0.40
1:A:232:TYR:CD2	1:A:232:TYR:C	2.94	0.40
1:A:118:ALA:HB2	1:A:233:LYS:HG2	2.02	0.40
1:A:425:GLN:HG2	1:A:444:LEU:CD2	2.33	0.40
1:A:95:LEU:HD11	1:A:104:PHE:CE1	2.57	0.40
1:A:273:PHE:CZ	1:A:276:LEU:HG	2.56	0.40
1:A:162:VAL:CG1	1:A:163:LEU:H	2.12	0.40
1:A:88:ARG:NH1	1:A:181:PRO:HD2	2.36	0.40
1:A:96:ASN:OD1	1:A:422:TYR:CE2	2.75	0.40
1:A:430:ILE:HG23	1:A:439:THR:HG21	2.04	0.40
1:A:46:ILE:HG22	1:A:482:ALA:C	2.40	0.40
1:A:554:LEU:CD1	1:A:554:LEU:OXT	2.67	0.40
1:A:324:THR:HG22	1:A:324:THR:O	2.21	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	519/554 (94%)	261 (50%)	118 (23%)	140 (27%)	0 1

All (140) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	33	ALA
1	A	47	PRO
1	A	52	HIS
1	A	55	LYS
1	A	56	VAL
1	A	93	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	96	ASN
1	A	97	LEU
1	A	101	PRO
1	A	113	SER
1	A	134	LYS
1	A	146	THR
1	A	162	VAL
1	A	163	LEU
1	A	166	GLY
1	A	173	GLU
1	A	178	VAL
1	A	181	PRO
1	A	182	PRO
1	A	198	SER
1	A	217	SER
1	A	218	SER
1	A	222	LEU
1	A	235	PRO
1	A	253	TYR
1	A	274	ARG
1	A	283	ILE
1	A	292	PRO
1	A	326	ILE
1	A	327	SER
1	A	328	LEU
1	A	329	ARG
1	A	339	HIS
1	A	348	GLY
1	A	349	ILE
1	A	351	ALA
1	A	367	TYR
1	A	368	GLN
1	A	390	HIS
1	A	393	PHE
1	A	401	TYR
1	A	407	ARG
1	A	413	SER
1	A	414	VAL
1	A	415	TRP
1	A	419	ALA
1	A	434	ASP
1	A	435	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	437	PHE
1	A	453	PRO
1	A	505	PRO
1	A	507	PRO
1	A	510	TYR
1	A	515	ALA
1	A	528	THR
1	A	533	HIS
1	A	544	LEU
1	A	548	LYS
1	A	553	PRO
1	A	21	VAL
1	A	48	TYR
1	A	58	SER
1	A	76	THR
1	A	95	LEU
1	A	125	GLU
1	A	161	TYR
1	A	208	GLU
1	A	237	VAL
1	A	246	SER
1	A	259	SER
1	A	295	ASN
1	A	315	GLY
1	A	323	ASN
1	A	336	PRO
1	A	337	TYR
1	A	346	VAL
1	A	350	ASN
1	A	352	ILE
1	A	355	GLY
1	A	372	GLY
1	A	373	ARG
1	A	391	THR
1	A	452	PRO
1	A	454	PRO
1	A	526	THR
1	A	49	ASP
1	A	70	LYS
1	A	74	VAL
1	A	98	PHE
1	A	103	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	104	PHE
1	A	145	ALA
1	A	155	HIS
1	A	157	TYR
1	A	160	PRO
1	A	214	LEU
1	A	226	GLY
1	A	254	ASN
1	A	271	PRO
1	A	280	ASP
1	A	281	HIS
1	A	317	SER
1	A	320	THR
1	A	321	SER
1	A	338	HIS
1	A	357	THR
1	A	464	SER
1	A	532	GLN
1	A	536	HIS
1	A	542	GLU
1	A	61	ALA
1	A	159	TYR
1	A	247	GLN
1	A	290	PRO
1	A	298	SER
1	A	342	THR
1	A	427	TRP
1	A	462	PRO
1	A	498	LYS
1	A	527	ALA
1	A	538	TYR
1	A	57	PHE
1	A	289	MET
1	A	424	SER
1	A	506	GLN
1	A	546	THR
1	A	135	THR
1	A	250	TYR
1	A	285	PRO
1	A	478	LEU
1	A	451	GLN
1	A	225	GLY

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	236	PRO
1	A	411	VAL
1	A	496	PRO
1	A	540	LYS
1	A	394	PRO
1	A	475	ILE
1	A	521	VAL
1	A	172	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	448/467 (96%)	358 (80%)	90 (20%)	2 11

All (90) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	26	SER
1	A	30	THR
1	A	34	ASN
1	A	45	LEU
1	A	52	HIS
1	A	54	TYR
1	A	57	PHE
1	A	92	PHE
1	A	97	LEU
1	A	99	PHE
1	A	101	PRO
1	A	102	LEU
1	A	107	LEU
1	A	108	ILE
1	A	111	TYR
1	A	119	LEU
1	A	122	THR
1	A	125	GLU
1	A	126	ILE
1	A	129	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	146	THR
1	A	151	MET
1	A	168	ASP
1	A	170	LEU
1	A	175	PRO
1	A	180	PHE
1	A	181	PRO
1	A	182	PRO
1	A	187	LEU
1	A	214	LEU
1	A	222	LEU
1	A	230	MET
1	A	231	SER
1	A	232	TYR
1	A	249	PHE
1	A	254	ASN
1	A	256	LEU
1	A	265	ASP
1	A	267	LEU
1	A	286	GLN
1	A	287	ASN
1	A	292	PRO
1	A	295	ASN
1	A	299	THR
1	A	318	THR
1	A	326	ILE
1	A	328	LEU
1	A	335	GLN
1	A	336	PRO
1	A	337	TYR
1	A	356	GLN
1	A	367	TYR
1	A	373	ARG
1	A	374	PHE
1	A	384	LEU
1	A	390	HIS
1	A	394	PRO
1	A	410	MET
1	A	421	HIS
1	A	423	GLU
1	A	434	ASP
1	A	435	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	439	THR
1	A	440	GLN
1	A	444	LEU
1	A	447	TRP
1	A	449	LEU
1	A	450	HIS
1	A	452	PRO
1	A	456	ILE
1	A	457	PHE
1	A	458	LEU
1	A	466	PRO
1	A	473	MET
1	A	478	LEU
1	A	481	TYR
1	A	485	ILE
1	A	503	TRP
1	A	504	ASN
1	A	505	PRO
1	A	507	PRO
1	A	509	VAL
1	A	510	TYR
1	A	512	PRO
1	A	513	HIS
1	A	529	ASP
1	A	535	ARG
1	A	543	GLU
1	A	545	TRP
1	A	553	PRO

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (16) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	65	HIS
1	A	96	ASN
1	A	278	HIS
1	A	281	HIS
1	A	286	GLN
1	A	295	ASN
1	A	335	GLN
1	A	338	HIS
1	A	339	HIS
1	A	376	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	383	GLN
1	A	388	ASN
1	A	440	GLN
1	A	504	ASN
1	A	506	GLN
1	A	536	HIS

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 ⓘ

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	523/554 (94%)	0.60	11 (2%) 60 29	32, 78, 175, 211	0

All (11) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	532	GLN	5.2
1	A	70	LYS	4.4
1	A	71	GLU	3.2
1	A	314	THR	3.2
1	A	73	LYS	3.1
1	A	396	LYS	2.9
1	A	531	LYS	2.7
1	A	197	ILE	2.4
1	A	69	GLY	2.2
1	A	68	SER	2.1
1	A	398	THR	2.0

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

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

6.3 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

6.4 Ligands ⓘ

There are no ligands in this entry.

6.5 Other polymers ⓘ

There are no such residues in this entry.