



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

May 29, 2020 – 04:22 am BST

PDB ID : 4AQQ  
Title : Dodecahedron formed of penton base protein from adenovirus Ad3  
Authors : Burmeister, W.P.; Szolajska, E.; Zochowska, M.; Nerlo, B.; Andreev, I.; Schoehn, G.; Andrieu, J.-P.; Fender, P.; Naskalska, A.; Zubieta, C.; Cusack, S.; Chroboczek, J.  
Deposited on : 2012-04-19  
Resolution : 4.75 Å(reported)

This is a Full wwPDB X-ray Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/XrayValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

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

MolProbity	:	4.02b-467
Xtriage (Phenix)	:	1.13
EDS	:	2.11
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Refmac	:	5.8.0158
CCP4	:	7.0.044 (Gargrove)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.11

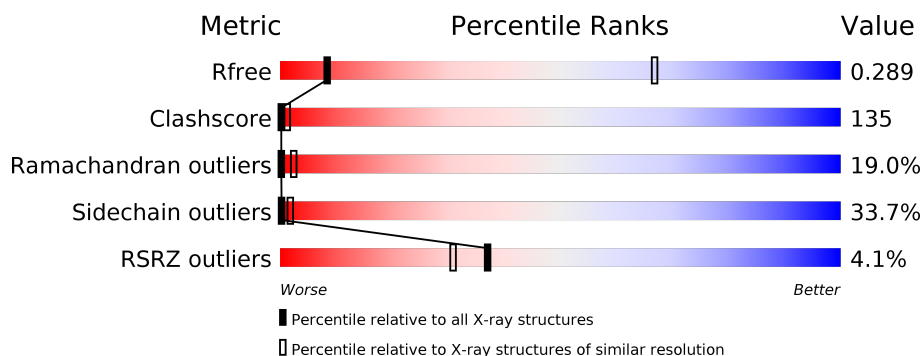
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

## *X-RAY DIFFRACTION*

The reported resolution of this entry is 4.75 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
$R_{free}$	130704	1089 (5.70-3.80)
Clashscore	141614	1163 (5.70-3.80)
Ramachandran outliers	138981	1098 (5.70-3.80)
Sidechain outliers	138945	1078 (5.70-3.80)
RSRZ outliers	127900	1124 (5.82-3.70)

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 respectively. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions  $\leq 5\%$ . The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the electron density. The numeric value is given above the bar.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	509	

## 2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3725 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

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

- Molecule 1 is a protein called L2 PROTEIN III (PENTON BASE).

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	462	Total	C	N	O	S	0	0	0
			3724	2353	636	721	14			

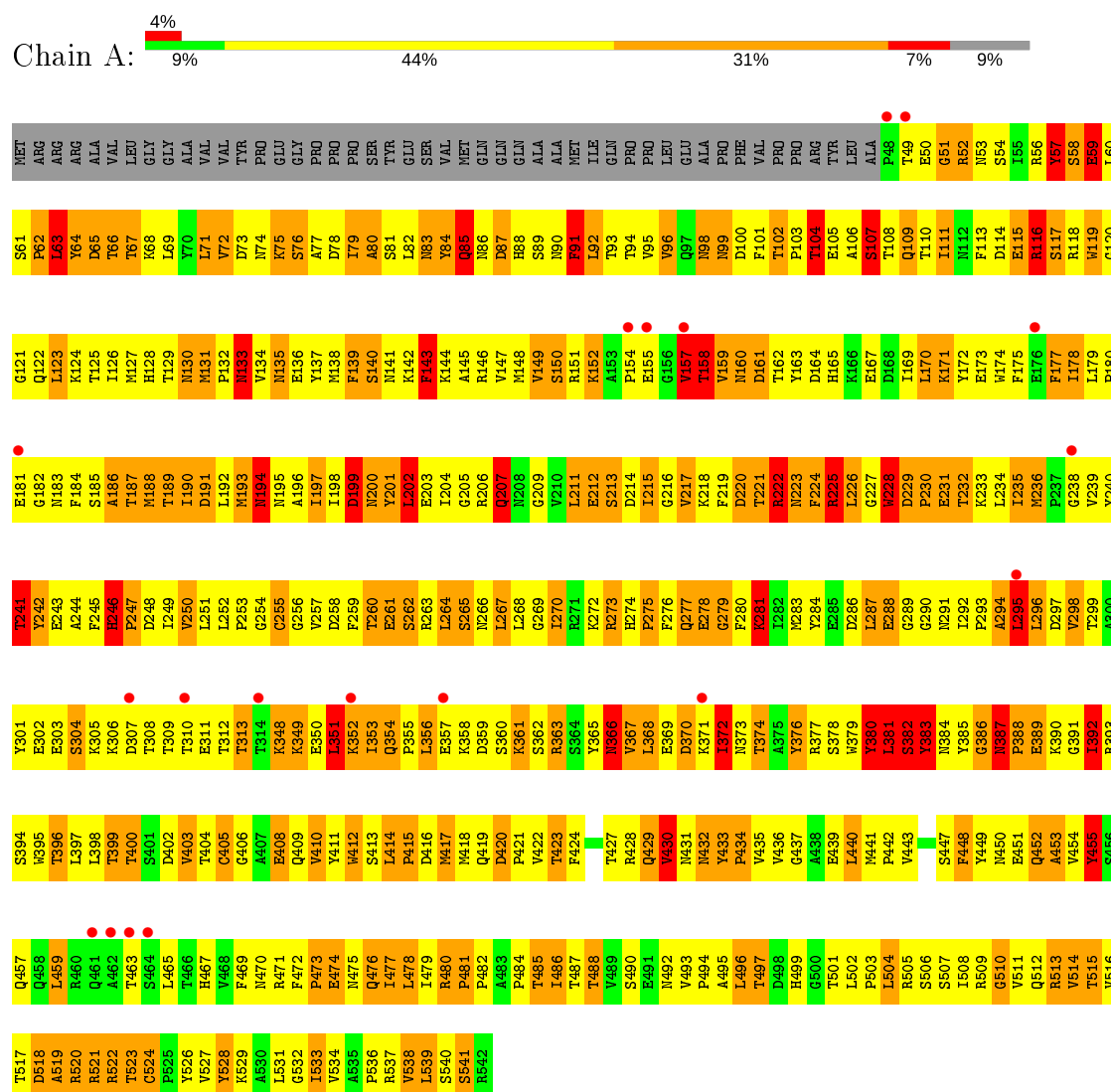
- Molecule 2 is CALCIUM ION (three-letter code: CA) (formula: Ca).

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
2	A	1	Total	Ca	0	0
			1	1		

### 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 the various outlier classes 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: L2 PROTEIN III (PENTON BASE)



## 4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 21 3	Depositor
Cell constants a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	342.70Å 342.70Å 342.70Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	242.33 – 4.75 69.95 – 4.75	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.9 (242.33-4.75) 99.9 (69.95-4.75)	Depositor EDS
$R_{merge}$	0.21	Depositor
$R_{sym}$	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ <sup>1</sup>	2.30 (at 4.65Å)	Xtriage
Refinement program	REFMAC 5.6.0116	Depositor
R, $R_{free}$	0.291 , 0.290 0.290 , 0.289	Depositor DCC
$R_{free}$ test set	3418 reflections (5.06%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å <sup>2</sup> )	127.0	Xtriage
Anisotropy	0.000	Xtriage
Bulk solvent $k_{sol}$ (e/Å <sup>3</sup> ), $B_{sol}$ (Å <sup>2</sup> )	0.96 , 93.9	EDS
L-test for twinning <sup>2</sup>	$\langle  L  \rangle = 0.44$ , $\langle L^2 \rangle = 0.27$	Xtriage
Estimated twinning fraction	0.026 for l,-k,h	Xtriage
$F_o, F_c$ correlation	0.83	EDS
Total number of atoms	3725	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	56.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 1.28% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

<sup>1</sup>Intensities estimated from amplitudes.

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

## 5 Model quality

### 5.1 Standard geometry

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section:  
CA

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	2/3809 (0.1%)	1.10	23/5175 (0.4%)

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 (2) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	115	GLU	CB-CG	-6.30	1.40	1.52
1	A	115	GLU	CG-CD	-5.72	1.43	1.51

All (23) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	84	TYR	N-CA-C	-8.95	86.84	111.00
1	A	386	GLY	N-CA-C	8.57	134.53	113.10
1	A	157	VAL	N-CA-C	8.52	134.01	111.00
1	A	115	GLU	N-CA-C	7.47	131.18	111.00
1	A	158	THR	N-CA-C	7.35	130.84	111.00
1	A	279	GLY	N-CA-C	-7.09	95.36	113.10
1	A	387	ASN	N-CA-C	7.05	130.04	111.00
1	A	140	SER	N-CA-C	-6.87	92.44	111.00
1	A	414	LEU	N-CA-C	-6.68	92.96	111.00
1	A	83	ASN	N-CA-C	6.39	128.25	111.00
1	A	155	GLU	N-CA-C	6.39	128.25	111.00

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	84	TYR	CB-CG-CD2	-6.35	117.19	121.00
1	A	91	PHE	N-CA-C	-6.26	94.10	111.00
1	A	84	TYR	CB-CA-C	-6.04	98.33	110.40
1	A	116	ARG	N-CA-C	-5.91	95.04	111.00
1	A	50	GLU	N-CA-C	-5.78	95.39	111.00
1	A	111	ILE	N-CA-C	-5.63	95.81	111.00
1	A	76	SER	N-CA-C	5.59	126.11	111.00
1	A	281	LYS	N-CA-C	-5.51	96.13	111.00
1	A	414	LEU	C-N-CA	-5.37	99.44	122.00
1	A	159	VAL	N-CA-C	5.34	125.42	111.00
1	A	63	LEU	N-CA-C	5.32	125.37	111.00
1	A	51	GLY	N-CA-C	5.08	125.79	113.10

There are no chirality outliers.

All (1) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	528	TYR	Sidechain

## 5.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	3724	0	3648	995	0
2	A	1	0	0	0	0
All	All	3725	0	3648	995	0

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 135.

All (995) close contacts within the same asymmetric unit are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:129:THR:OG1	1:A:442:PRO:HG2	1.38	1.23
1:A:114:ASP:CG	1:A:115:GLU:H	1.34	1.18

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:105:GLU:O	1:A:108:THR:HG22	1.44	1.18
1:A:206:ARG:HB2	1:A:207:GLN:NE2	1.61	1.15
1:A:309:THR:CG2	1:A:351:LEU:HD22	1.79	1.12
1:A:202:LEU:HD12	1:A:203:GLU:H	1.09	1.12
1:A:235:ILE:HG12	1:A:295:LEU:HA	1.27	1.10
1:A:312:THR:OG1	1:A:348:LYS:HD3	1.48	1.10
1:A:381:LEU:H	1:A:381:LEU:HD12	0.98	1.10
1:A:206:ARG:HB2	1:A:207:GLN:HE21	1.08	1.08
1:A:199:ASP:HA	1:A:202:LEU:HD21	1.09	1.08
1:A:259:PHE:HB2	1:A:280:PHE:HE1	1.07	1.05
1:A:159:VAL:HA	1:A:162:THR:HB	1.37	1.05
1:A:226:LEU:HD23	1:A:227:GLY:H	1.22	1.05
1:A:171:LYS:HZ2	1:A:171:LYS:HA	1.17	1.05
1:A:501:THR:HG21	1:A:537:ARG:HH21	1.20	1.04
1:A:295:LEU:HD23	1:A:296:LEU:H	1.23	1.03
1:A:370:ASP:HB2	1:A:372:ILE:HD11	1.39	1.03
1:A:178:ILE:HD13	1:A:178:ILE:H	1.19	1.03
1:A:98:ASN:HD22	1:A:99:ASN:N	1.55	1.03
1:A:517:THR:HG21	1:A:521:ARG:HG2	1.38	1.02
1:A:309:THR:HG21	1:A:351:LEU:CD2	1.88	1.02
1:A:235:ILE:CG1	1:A:295:LEU:HA	1.88	1.02
1:A:429:GLN:HE21	1:A:429:GLN:HA	1.22	1.02
1:A:349:LYS:HA	1:A:351:LEU:HD21	1.41	1.01
1:A:348:LYS:HG3	1:A:350:GLU:OE1	1.59	1.01
1:A:71:LEU:HB3	1:A:532:GLY:O	1.61	1.00
1:A:424:PHE:CD2	1:A:434:PRO:HA	1.97	1.00
1:A:381:LEU:N	1:A:381:LEU:HD12	1.76	1.00
1:A:114:ASP:CG	1:A:115:GLU:N	2.14	0.99
1:A:313:THR:HG23	1:A:348:LYS:NZ	1.76	0.99
1:A:440:LEU:HD12	1:A:440:LEU:H	1.25	0.99
1:A:381:LEU:CD1	1:A:381:LEU:H	1.72	0.99
1:A:221:THR:O	1:A:222:ARG:HB2	1.59	0.98
1:A:309:THR:HG21	1:A:351:LEU:HD22	0.99	0.98
1:A:101:PHE:HA	1:A:105:GLU:OE2	1.64	0.98
1:A:309:THR:O	1:A:348:LYS:N	1.97	0.98
1:A:259:PHE:HB2	1:A:280:PHE:CE1	1.97	0.97
1:A:98:ASN:ND2	1:A:100:ASP:H	1.61	0.97
1:A:239:VAL:HG13	1:A:476:GLN:HE22	1.28	0.97
1:A:413:SER:HA	1:A:436:VAL:HG23	1.47	0.96
1:A:131:MET:H	1:A:492:ASN:ND2	1.61	0.96
1:A:475:ASN:HB3	1:A:478:LEU:HD23	1.44	0.95

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:397:LEU:HD22	1:A:398:LEU:H	1.30	0.95
1:A:351:LEU:O	1:A:352:LYS:HB3	1.64	0.95
1:A:199:ASP:CA	1:A:202:LEU:HD21	1.97	0.95
1:A:79:ILE:H	1:A:79:ILE:HD12	1.27	0.94
1:A:129:THR:HG22	1:A:527:VAL:HA	1.48	0.94
1:A:422:VAL:HG22	1:A:423:THR:HG23	1.51	0.93
1:A:119:TRP:HA	1:A:539:LEU:HD12	1.49	0.93
1:A:517:THR:HG23	1:A:521:ARG:HA	1.52	0.92
1:A:313:THR:HG23	1:A:348:LYS:HZ3	1.32	0.91
1:A:397:LEU:HD22	1:A:398:LEU:N	1.85	0.91
1:A:501:THR:HG21	1:A:537:ARG:NH2	1.86	0.90
1:A:383:TYR:CE1	1:A:393:ARG:HG3	2.06	0.90
1:A:93:THR:HG22	1:A:94:THR:O	1.72	0.90
1:A:99:ASN:HD22	1:A:99:ASN:H	0.94	0.90
1:A:355:PRO:HG3	1:A:371:LYS:HB3	1.54	0.89
1:A:263:ARG:HD2	1:A:406:GLY:HA3	1.52	0.89
1:A:356:LEU:HD12	1:A:357:GLU:N	1.88	0.89
1:A:309:THR:CB	1:A:348:LYS:HG2	2.03	0.88
1:A:161:ASP:OD1	1:A:164:ASP:HB3	1.73	0.88
1:A:278:GLU:OE1	1:A:280:PHE:HB3	1.74	0.88
1:A:134:VAL:HG22	1:A:182:GLY:O	1.74	0.88
1:A:403:VAL:CG2	1:A:488:THR:HB	2.04	0.87
1:A:376:TYR:CE2	1:A:477:ILE:HG21	2.08	0.87
1:A:99:ASN:ND2	1:A:99:ASN:H	1.72	0.87
1:A:517:THR:CG2	1:A:521:ARG:HA	2.04	0.87
1:A:67:THR:O	1:A:536:PRO:HD2	1.74	0.87
1:A:199:ASP:HA	1:A:202:LEU:CD2	2.02	0.87
1:A:177:PHE:HD1	1:A:177:PHE:N	1.71	0.86
1:A:233:LYS:O	1:A:372:ILE:HG22	1.75	0.86
1:A:196:ALA:HA	1:A:199:ASP:HB2	1.58	0.86
1:A:518:ASP:O	1:A:521:ARG:N	2.09	0.86
1:A:161:ASP:O	1:A:165:HIS:N	2.07	0.85
1:A:135:ASN:ND2	1:A:138:MET:H	1.75	0.85
1:A:131:MET:H	1:A:492:ASN:HD21	1.20	0.85
1:A:304:SER:OG	1:A:351:LEU:HB3	1.77	0.85
1:A:410:VAL:HG23	1:A:517:THR:O	1.77	0.85
1:A:159:VAL:CA	1:A:162:THR:HB	2.06	0.84
1:A:188:MET:O	1:A:192:LEU:HD23	1.76	0.84
1:A:235:ILE:N	1:A:235:ILE:HD13	1.92	0.84
1:A:295:LEU:HD23	1:A:296:LEU:N	1.92	0.84
1:A:63:LEU:HD22	1:A:64:TYR:H	1.43	0.84

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:171:LYS:HA	1:A:171:LYS:NZ	1.93	0.84
1:A:273:ARG:C	1:A:275:PRO:HD2	1.97	0.84
1:A:218:LYS:O	1:A:250:VAL:HG23	1.78	0.83
1:A:187:THR:CG2	1:A:484:PRO:HD3	2.07	0.83
1:A:403:VAL:HG21	1:A:488:THR:HB	1.59	0.83
1:A:187:THR:HA	1:A:190:ILE:HD13	1.60	0.83
1:A:190:ILE:H	1:A:190:ILE:HD12	1.43	0.83
1:A:72:VAL:HA	1:A:531:LEU:HD22	1.61	0.83
1:A:240:TYR:CE2	1:A:295:LEU:HD12	2.14	0.83
1:A:348:LYS:HB3	1:A:348:LYS:HZ3	1.43	0.83
1:A:292:ILE:HB	1:A:374:THR:HG23	1.60	0.83
1:A:309:THR:HA	1:A:348:LYS:HD2	1.61	0.83
1:A:313:THR:CA	1:A:348:LYS:HZ1	1.91	0.82
1:A:270:ILE:HD11	1:A:379:TRP:CD1	2.14	0.82
1:A:232:THR:HG21	1:A:236:MET:SD	2.19	0.82
1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:HD1	1.77	0.82
1:A:202:LEU:HD12	1:A:203:GLU:N	1.94	0.82
1:A:235:ILE:HD11	1:A:295:LEU:N	1.95	0.82
1:A:293:PRO:O	1:A:373:ASN:HA	1.80	0.82
1:A:307:ASP:C	1:A:309:THR:H	1.80	0.81
1:A:309:THR:CA	1:A:348:LYS:HG2	2.10	0.81
1:A:147:VAL:HG22	1:A:148:MET:N	1.94	0.81
1:A:232:THR:OG1	1:A:234:LEU:HB2	1.80	0.81
1:A:291:ASN:HD21	1:A:377:ARG:HE	1.28	0.81
1:A:102:THR:HG23	1:A:105:GLU:CD	2.00	0.81
1:A:504:LEU:H	1:A:504:LEU:HD12	1.45	0.81
1:A:533:ILE:HD13	1:A:533:ILE:O	1.80	0.81
1:A:363:ARG:HB2	1:A:475:ASN:HD21	1.46	0.81
1:A:518:ASP:OD1	1:A:520:ARG:HG3	1.81	0.81
1:A:89:SER:HB3	1:A:523:THR:HG22	1.62	0.81
1:A:230:PRO:HG2	1:A:231:GLU:H	1.46	0.81
1:A:287:LEU:H	1:A:287:LEU:HD22	1.45	0.80
1:A:236:MET:HA	1:A:296:LEU:HD23	1.63	0.80
1:A:72:VAL:HA	1:A:531:LEU:CD2	2.12	0.80
1:A:177:PHE:N	1:A:177:PHE:CD1	2.45	0.80
1:A:417:MET:HB2	1:A:512:GLN:NE2	1.96	0.80
1:A:235:ILE:HD11	1:A:295:LEU:H	1.45	0.79
1:A:215:ILE:HG22	1:A:216:GLY:N	1.97	0.79
1:A:294:ALA:HA	1:A:374:THR:HG22	1.65	0.79
1:A:291:ASN:ND2	1:A:377:ARG:HE	1.81	0.79
1:A:133:ASN:HB2	1:A:490:SER:CB	2.12	0.79

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:478:LEU:HD22	1:A:478:LEU:N	1.98	0.79
1:A:63:LEU:HD13	1:A:64:TYR:O	1.83	0.79
1:A:198:ILE:O	1:A:202:LEU:HG	1.83	0.78
1:A:246:HIS:NE2	1:A:398:LEU:HD11	1.98	0.78
1:A:356:LEU:HD12	1:A:357:GLU:H	1.46	0.78
1:A:376:TYR:CD2	1:A:477:ILE:HG13	2.18	0.78
1:A:123:LEU:HD12	1:A:123:LEU:C	2.04	0.78
1:A:309:THR:HB	1:A:348:LYS:HG2	1.63	0.78
1:A:493:VAL:HG22	1:A:494:PRO:HD2	1.65	0.78
1:A:130:ASN:HA	1:A:492:ASN:HD21	1.49	0.78
1:A:177:PHE:HD1	1:A:177:PHE:H	1.26	0.78
1:A:307:ASP:C	1:A:309:THR:N	2.32	0.78
1:A:133:ASN:HB2	1:A:490:SER:HB3	1.66	0.78
1:A:267:LEU:HD12	1:A:267:LEU:O	1.84	0.78
1:A:274:HIS:O	1:A:276:PHE:N	2.17	0.78
1:A:313:THR:H	1:A:348:LYS:HE3	1.48	0.78
1:A:496:LEU:HD23	1:A:496:LEU:N	2.00	0.78
1:A:246:HIS:ND1	1:A:247:PRO:O	2.17	0.77
1:A:224:PHE:O	1:A:225:ARG:HB3	1.83	0.77
1:A:133:ASN:HB3	1:A:183:ASN:HB2	1.64	0.77
1:A:238:GLY:HA2	1:A:295:LEU:HD21	1.65	0.77
1:A:159:VAL:H	1:A:162:THR:HB	1.50	0.77
1:A:369:GLU:O	1:A:371:LYS:N	2.15	0.77
1:A:250:VAL:HG13	1:A:378:SER:HB2	1.65	0.77
1:A:370:ASP:HB2	1:A:372:ILE:CD1	2.14	0.76
1:A:136:GLU:HA	1:A:141:ASN:CB	2.15	0.76
1:A:264:LEU:O	1:A:267:LEU:HB3	1.84	0.76
1:A:178:ILE:HD13	1:A:178:ILE:N	2.00	0.76
1:A:137:TYR:HE1	1:A:522:ARG:CZ	1.98	0.76
1:A:136:GLU:HB2	1:A:141:ASN:ND2	2.00	0.76
1:A:88:HIS:CD2	1:A:528:TYR:O	2.39	0.76
1:A:270:ILE:HD11	1:A:379:TRP:CG	2.20	0.76
1:A:248:ASP:OD2	1:A:380:TYR:HB2	1.85	0.76
1:A:363:ARG:CB	1:A:475:ASN:HD21	1.98	0.75
1:A:99:ASN:N	1:A:99:ASN:HD22	1.76	0.75
1:A:274:HIS:N	1:A:275:PRO:CD	2.50	0.75
1:A:392:ILE:N	1:A:392:ILE:HD12	2.01	0.74
1:A:98:ASN:C	1:A:98:ASN:HD22	1.90	0.74
1:A:409:GLN:HA	1:A:440:LEU:HA	1.69	0.74
1:A:88:HIS:HD2	1:A:528:TYR:O	1.69	0.74
1:A:159:VAL:N	1:A:162:THR:HB	2.02	0.74

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:356:LEU:HD11	1:A:358:LYS:O	1.87	0.74
1:A:61:SER:O	1:A:63:LEU:N	2.21	0.74
1:A:131:MET:N	1:A:492:ASN:HD21	1.85	0.74
1:A:202:LEU:CD1	1:A:203:GLU:H	1.96	0.74
1:A:125:THR:HG21	1:A:499:HIS:CE1	2.22	0.74
1:A:108:THR:HG23	1:A:109:GLN:N	2.03	0.74
1:A:440:LEU:N	1:A:440:LEU:HD12	2.02	0.73
1:A:79:ILE:HD12	1:A:79:ILE:N	2.03	0.73
1:A:246:HIS:CD2	1:A:398:LEU:HD11	2.22	0.73
1:A:448:PHE:N	1:A:448:PHE:CD1	2.54	0.73
1:A:119:TRP:CA	1:A:539:LEU:HD12	2.18	0.73
1:A:119:TRP:HA	1:A:539:LEU:CD1	2.16	0.73
1:A:293:PRO:O	1:A:294:ALA:HB2	1.89	0.73
1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CD1	2.57	0.73
1:A:187:THR:HG21	1:A:484:PRO:HD3	1.69	0.73
1:A:135:ASN:HD21	1:A:138:MET:N	1.86	0.73
1:A:263:ARG:O	1:A:265:SER:N	2.21	0.73
1:A:517:THR:HG21	1:A:521:ARG:CG	2.16	0.73
1:A:201:TYR:CD2	1:A:202:LEU:N	2.56	0.73
1:A:294:ALA:O	1:A:295:LEU:HB2	1.88	0.73
1:A:147:VAL:HG22	1:A:148:MET:H	1.53	0.72
1:A:449:TYR:HA	1:A:486:ILE:HD12	1.70	0.72
1:A:190:ILE:H	1:A:190:ILE:CD1	2.03	0.72
1:A:91:PHE:CE1	1:A:514:VAL:HG13	2.23	0.72
1:A:274:HIS:N	1:A:275:PRO:HD2	2.01	0.72
1:A:287:LEU:HD22	1:A:287:LEU:N	2.04	0.72
1:A:164:ASP:O	1:A:167:GLU:HG2	1.89	0.72
1:A:199:ASP:C	1:A:202:LEU:HD11	2.09	0.72
1:A:226:LEU:HD23	1:A:227:GLY:N	2.01	0.72
1:A:252:LEU:HD21	1:A:376:TYR:CD1	2.24	0.72
1:A:313:THR:N	1:A:348:LYS:HZ1	1.87	0.72
1:A:493:VAL:CG2	1:A:494:PRO:HD2	2.19	0.72
1:A:119:TRP:HB2	1:A:537:ARG:O	1.90	0.72
1:A:104:THR:O	1:A:107:SER:HB3	1.90	0.72
1:A:235:ILE:HD12	1:A:293:PRO:HB2	1.72	0.72
1:A:135:ASN:ND2	1:A:138:MET:N	2.37	0.72
1:A:367:VAL:O	1:A:368:LEU:HB2	1.90	0.72
1:A:179:LEU:HD22	1:A:192:LEU:HB3	1.70	0.72
1:A:223:ASN:O	1:A:226:LEU:HD22	1.89	0.72
1:A:451:GLU:C	1:A:453:ALA:H	1.92	0.72
1:A:477:ILE:HG22	1:A:478:LEU:HD22	1.71	0.72

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:108:THR:HG23	1:A:109:GLN:H	1.54	0.71
1:A:193:MET:C	1:A:195:ASN:H	1.92	0.71
1:A:142:LYS:O	1:A:143:PHE:HB3	1.89	0.71
1:A:104:THR:OG1	1:A:105:GLU:N	2.24	0.71
1:A:309:THR:C	1:A:348:LYS:HD2	2.10	0.71
1:A:187:THR:O	1:A:190:ILE:N	2.23	0.71
1:A:78:ASP:OD2	1:A:93:THR:HG23	1.89	0.71
1:A:232:THR:HG23	1:A:234:LEU:H	1.55	0.71
1:A:119:TRP:CE3	1:A:538:VAL:HG13	2.26	0.71
1:A:125:THR:HG21	1:A:412:TRP:CZ3	2.26	0.70
1:A:145:ALA:HA	1:A:174:TRP:HZ3	1.53	0.70
1:A:178:ILE:H	1:A:178:ILE:CD1	1.97	0.70
1:A:493:VAL:HG22	1:A:494:PRO:CD	2.21	0.70
1:A:233:LYS:HB2	1:A:372:ILE:HG21	1.72	0.70
1:A:236:MET:HA	1:A:296:LEU:CD2	2.20	0.70
1:A:235:ILE:CD1	1:A:293:PRO:HB2	2.21	0.70
1:A:357:GLU:O	1:A:365:TYR:HB2	1.91	0.70
1:A:422:VAL:HG22	1:A:423:THR:N	2.05	0.70
1:A:189:THR:O	1:A:192:LEU:HB2	1.91	0.70
1:A:414:LEU:HD12	1:A:414:LEU:C	2.12	0.70
1:A:429:GLN:NE2	1:A:429:GLN:HA	2.02	0.70
1:A:223:ASN:HB3	1:A:226:LEU:HD13	1.72	0.70
1:A:83:ASN:OD1	1:A:85:GLN:HG3	1.92	0.70
1:A:267:LEU:C	1:A:267:LEU:HD12	2.12	0.70
1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CD1	2.51	0.70
1:A:197:ILE:HD12	1:A:217:VAL:O	1.92	0.70
1:A:287:LEU:CD2	1:A:287:LEU:H	2.04	0.70
1:A:349:LYS:CA	1:A:351:LEU:HD21	2.19	0.70
1:A:475:ASN:CB	1:A:478:LEU:HD23	2.20	0.69
1:A:131:MET:N	1:A:492:ASN:ND2	2.40	0.69
1:A:74:ASN:CG	1:A:529:LYS:HZ1	1.95	0.69
1:A:83:ASN:OD1	1:A:86:ASN:O	2.10	0.69
1:A:102:THR:O	1:A:103:PRO:C	2.30	0.69
1:A:146:ARG:HB3	1:A:174:TRP:CE3	2.28	0.69
1:A:197:ILE:CD1	1:A:217:VAL:O	2.40	0.69
1:A:225:ARG:O	1:A:228:TRP:HB2	1.92	0.69
1:A:292:ILE:HG12	1:A:376:TYR:O	1.91	0.69
1:A:220:ASP:HB2	1:A:481:PRO:HG3	1.73	0.69
1:A:130:ASN:CA	1:A:492:ASN:HD21	2.05	0.69
1:A:147:VAL:HG11	1:A:200:ASN:HD21	1.58	0.69
1:A:397:LEU:C	1:A:397:LEU:HD13	2.13	0.69

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:422:VAL:HG22	1:A:423:THR:CG2	2.21	0.69
1:A:238:GLY:HA2	1:A:295:LEU:CD2	2.22	0.69
1:A:177:PHE:HE2	1:A:197:ILE:HA	1.58	0.69
1:A:198:ILE:C	1:A:200:ASN:H	1.97	0.69
1:A:259:PHE:O	1:A:261:GLU:N	2.26	0.69
1:A:197:ILE:HG23	1:A:198:ILE:N	2.08	0.69
1:A:351:LEU:O	1:A:352:LYS:CB	2.39	0.69
1:A:312:THR:HG1	1:A:348:LYS:HD3	1.53	0.69
1:A:56:ARG:O	1:A:57:TYR:HB3	1.92	0.69
1:A:383:TYR:HA	1:A:392:ILE:HD13	1.74	0.68
1:A:234:LEU:HD21	1:A:294:ALA:HB3	1.76	0.68
1:A:417:MET:CA	1:A:512:GLN:HE22	2.06	0.68
1:A:230:PRO:O	1:A:233:LYS:HG2	1.94	0.68
1:A:293:PRO:O	1:A:294:ALA:CB	2.41	0.68
1:A:160:ASN:ND2	1:A:160:ASN:H	1.90	0.68
1:A:376:TYR:HE2	1:A:477:ILE:HG21	1.58	0.68
1:A:472:PHE:O	1:A:479:ILE:HG12	1.93	0.68
1:A:119:TRP:HB3	1:A:538:VAL:HA	1.76	0.68
1:A:203:GLU:C	1:A:204:ILE:HD12	2.13	0.68
1:A:478:LEU:H	1:A:478:LEU:CD2	2.08	0.67
1:A:478:LEU:H	1:A:478:LEU:HD22	1.58	0.67
1:A:383:TYR:HE2	1:A:398:LEU:N	1.91	0.67
1:A:440:LEU:H	1:A:440:LEU:CD1	2.05	0.67
1:A:223:ASN:C	1:A:223:ASN:HD22	1.97	0.67
1:A:58:SER:O	1:A:59:GLU:C	2.32	0.67
1:A:76:SER:O	1:A:79:ILE:HD13	1.93	0.67
1:A:132:PRO:HD3	1:A:526:TYR:CD2	2.30	0.67
1:A:177:PHE:CE2	1:A:197:ILE:HA	2.30	0.67
1:A:238:GLY:CA	1:A:295:LEU:HD21	2.24	0.67
1:A:259:PHE:O	1:A:262:SER:N	2.27	0.67
1:A:304:SER:CB	1:A:351:LEU:HB3	2.24	0.67
1:A:313:THR:N	1:A:348:LYS:HE3	2.09	0.67
1:A:395:TRP:HD1	1:A:396:THR:HG22	1.60	0.67
1:A:296:LEU:HD12	1:A:297:ASP:N	2.09	0.66
1:A:367:VAL:O	1:A:374:THR:HA	1.95	0.66
1:A:416:ASP:C	1:A:512:GLN:HE22	1.98	0.66
1:A:263:ARG:HD2	1:A:406:GLY:CA	2.25	0.66
1:A:518:ASP:O	1:A:520:ARG:N	2.29	0.66
1:A:117:SER:HA	1:A:541:SER:HA	1.78	0.66
1:A:309:THR:CA	1:A:348:LYS:HD2	2.24	0.66
1:A:252:LEU:HD21	1:A:376:TYR:CE1	2.31	0.66

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:418:MET:CE	1:A:502:LEU:HB2	2.25	0.66
1:A:75:LYS:O	1:A:79:ILE:CD1	2.42	0.66
1:A:89:SER:CB	1:A:523:THR:HG22	2.26	0.66
1:A:416:ASP:HB2	1:A:512:GLN:OE1	1.95	0.66
1:A:195:ASN:O	1:A:198:ILE:N	2.29	0.66
1:A:272:LYS:HD2	1:A:280:PHE:HB2	1.78	0.66
1:A:302:GLU:O	1:A:305:LYS:HB2	1.96	0.66
1:A:433:TYR:O	1:A:434:PRO:O	2.13	0.66
1:A:424:PHE:HD2	1:A:434:PRO:HA	1.57	0.66
1:A:187:THR:HG23	1:A:484:PRO:HD3	1.77	0.65
1:A:280:PHE:C	1:A:281:LYS:HG2	2.16	0.65
1:A:304:SER:O	1:A:351:LEU:HD13	1.96	0.65
1:A:224:PHE:O	1:A:225:ARG:CB	2.43	0.65
1:A:376:TYR:HD2	1:A:477:ILE:HG13	1.62	0.65
1:A:91:PHE:C	1:A:92:LEU:HG	2.16	0.65
1:A:147:VAL:HG11	1:A:200:ASN:ND2	2.12	0.65
1:A:51:GLY:O	1:A:52:ARG:HD3	1.96	0.65
1:A:187:THR:O	1:A:189:THR:N	2.30	0.65
1:A:452:GLN:HG3	1:A:455:TYR:CD2	2.31	0.65
1:A:75:LYS:O	1:A:79:ILE:HD11	1.96	0.65
1:A:263:ARG:NH1	1:A:405:CYS:O	2.26	0.65
1:A:194:ASN:ND2	1:A:219:PHE:O	2.29	0.65
1:A:309:THR:HA	1:A:348:LYS:CD	2.27	0.65
1:A:212:GLU:HA	1:A:215:ILE:CD1	2.27	0.65
1:A:226:LEU:H	1:A:226:LEU:CD2	2.09	0.65
1:A:475:ASN:O	1:A:477:ILE:N	2.30	0.65
1:A:170:LEU:H	1:A:170:LEU:HD22	1.62	0.64
1:A:294:ALA:O	1:A:295:LEU:CB	2.44	0.64
1:A:102:THR:O	1:A:105:GLU:HG2	1.97	0.64
1:A:136:GLU:HA	1:A:141:ASN:HB2	1.79	0.64
1:A:226:LEU:HD21	1:A:241:THR:HG23	1.78	0.64
1:A:122:GLN:C	1:A:534:VAL:HG23	2.17	0.64
1:A:313:THR:CG2	1:A:348:LYS:NZ	2.58	0.64
1:A:379:TRP:HH2	1:A:396:THR:HG1	1.45	0.64
1:A:248:ASP:OD1	1:A:249:ILE:N	2.30	0.64
1:A:293:PRO:O	1:A:372:ILE:O	2.16	0.64
1:A:85:GLN:CG	1:A:86:ASN:H	2.09	0.64
1:A:226:LEU:CD2	1:A:226:LEU:N	2.60	0.64
1:A:288:GLU:O	1:A:290:GLY:N	2.26	0.64
1:A:126:ILE:HG22	1:A:531:LEU:H	1.63	0.64
1:A:132:PRO:HD3	1:A:526:TYR:HD2	1.63	0.64

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:226:LEU:HD22	1:A:226:LEU:H	1.62	0.64
1:A:272:LYS:O	1:A:275:PRO:HD3	1.97	0.64
1:A:472:PHE:N	1:A:473:PRO:HD3	2.13	0.64
1:A:474:GLU:N	1:A:474:GLU:CD	2.50	0.64
1:A:360:SER:C	1:A:362:SER:H	1.99	0.64
1:A:96:VAL:HG11	1:A:109:GLN:OE1	1.98	0.64
1:A:147:VAL:CG2	1:A:148:MET:H	2.10	0.63
1:A:534:VAL:HG13	1:A:534:VAL:O	1.99	0.63
1:A:143:PHE:O	1:A:143:PHE:HD1	1.80	0.63
1:A:198:ILE:HG22	1:A:202:LEU:HD23	1.81	0.63
1:A:138:MET:HB3	1:A:263:ARG:NH2	2.13	0.63
1:A:194:ASN:HD21	1:A:219:PHE:N	1.97	0.63
1:A:252:LEU:HD22	1:A:253:PRO:HD3	1.81	0.63
1:A:157:VAL:HB	1:A:158:THR:HG22	1.79	0.63
1:A:238:GLY:C	1:A:295:LEU:HD21	2.19	0.63
1:A:106:ALA:O	1:A:109:GLN:HG2	1.99	0.63
1:A:147:VAL:CG2	1:A:148:MET:N	2.60	0.63
1:A:89:SER:O	1:A:516:VAL:HG12	1.97	0.63
1:A:111:ILE:CG2	1:A:111:ILE:O	2.46	0.63
1:A:391:GLY:O	1:A:392:ILE:HG23	1.99	0.63
1:A:471:ARG:C	1:A:473:PRO:HD3	2.19	0.63
1:A:167:GLU:O	1:A:167:GLU:HG3	1.99	0.63
1:A:174:TRP:C	1:A:175:PHE:HD1	2.02	0.63
1:A:158:THR:OG1	1:A:159:VAL:N	2.31	0.62
1:A:179:LEU:CD2	1:A:192:LEU:HB3	2.29	0.62
1:A:187:THR:O	1:A:188:MET:C	2.38	0.62
1:A:143:PHE:HE2	1:A:219:PHE:CZ	2.17	0.62
1:A:478:LEU:N	1:A:478:LEU:CD2	2.63	0.62
1:A:216:GLY:HA2	1:A:252:LEU:HB2	1.81	0.62
1:A:313:THR:N	1:A:348:LYS:NZ	2.46	0.62
1:A:125:THR:CG2	1:A:499:HIS:CE1	2.82	0.62
1:A:161:ASP:O	1:A:165:HIS:HB2	1.99	0.62
1:A:226:LEU:HG	1:A:241:THR:CG2	2.30	0.62
1:A:352:LYS:C	1:A:354:GLN:N	2.49	0.62
1:A:379:TRP:CZ2	1:A:383:TYR:HD2	2.17	0.62
1:A:501:THR:O	1:A:502:LEU:HD23	1.98	0.62
1:A:106:ALA:O	1:A:107:SER:C	2.36	0.62
1:A:270:ILE:HD11	1:A:379:TRP:CD2	2.34	0.62
1:A:157:VAL:C	1:A:158:THR:HG22	2.20	0.62
1:A:195:ASN:O	1:A:198:ILE:HB	1.99	0.62
1:A:226:LEU:CD2	1:A:241:THR:HG23	2.29	0.62

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:100:ASP:O	1:A:101:PHE:CD1	2.52	0.62
1:A:135:ASN:OD1	1:A:137:TYR:N	2.30	0.62
1:A:136:GLU:HA	1:A:141:ASN:HB3	1.82	0.62
1:A:212:GLU:O	1:A:215:ILE:HD13	1.99	0.62
1:A:313:THR:HG23	1:A:348:LYS:HZ1	1.59	0.62
1:A:263:ARG:HD2	1:A:405:CYS:O	1.99	0.62
1:A:92:LEU:H	1:A:92:LEU:HD12	1.65	0.62
1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:HD12	2.14	0.61
1:A:370:ASP:OD1	1:A:372:ILE:HD12	1.99	0.61
1:A:383:TYR:CD1	1:A:393:ARG:HG3	2.36	0.61
1:A:206:ARG:CB	1:A:207:GLN:HE21	2.00	0.61
1:A:263:ARG:O	1:A:264:LEU:C	2.38	0.61
1:A:125:THR:CG2	1:A:499:HIS:HE1	2.13	0.61
1:A:222:ARG:HD3	1:A:482:PRO:HD3	1.82	0.61
1:A:119:TRP:HD1	1:A:119:TRP:N	1.98	0.61
1:A:143:PHE:C	1:A:143:PHE:CD1	2.73	0.61
1:A:376:TYR:CE2	1:A:477:ILE:HG13	2.35	0.61
1:A:137:TYR:CE1	1:A:522:ARG:NH2	2.69	0.61
1:A:495:ALA:C	1:A:496:LEU:HD23	2.21	0.61
1:A:508:ILE:HG23	1:A:512:GLN:NE2	2.16	0.61
1:A:85:GLN:CD	1:A:86:ASN:H	2.03	0.61
1:A:226:LEU:HG	1:A:241:THR:HG23	1.81	0.61
1:A:270:ILE:HG22	1:A:270:ILE:O	1.99	0.61
1:A:143:PHE:O	1:A:143:PHE:CD1	2.53	0.60
1:A:239:VAL:CG1	1:A:476:GLN:HE22	2.09	0.60
1:A:226:LEU:CG	1:A:241:THR:HG23	2.31	0.60
1:A:246:HIS:C	1:A:246:HIS:HD1	2.05	0.60
1:A:386:GLY:O	1:A:388:PRO:HD2	2.01	0.60
1:A:194:ASN:OD1	1:A:218:LYS:HG2	2.01	0.60
1:A:283:MET:O	1:A:284:TYR:C	2.39	0.60
1:A:65:ASP:O	1:A:66:THR:CB	2.49	0.60
1:A:414:LEU:HD11	1:A:418:MET:HG2	1.82	0.60
1:A:352:LYS:O	1:A:354:GLN:N	2.34	0.60
1:A:267:LEU:C	1:A:269:GLY:H	2.03	0.60
1:A:380:TYR:CE1	1:A:384:ASN:ND2	2.69	0.60
1:A:524:CYS:SG	1:A:527:VAL:HG23	2.41	0.60
1:A:65:ASP:O	1:A:66:THR:HB	2.01	0.60
1:A:493:VAL:HG22	1:A:494:PRO:N	2.17	0.60
1:A:246:HIS:C	1:A:246:HIS:ND1	2.54	0.59
1:A:98:ASN:ND2	1:A:100:ASP:N	2.43	0.59
1:A:201:TYR:O	1:A:202:LEU:C	2.41	0.59

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:307:ASP:O	1:A:311:GLU:HG3	2.02	0.59
1:A:313:THR:N	1:A:348:LYS:CE	2.66	0.59
1:A:215:ILE:CG2	1:A:216:GLY:N	2.66	0.59
1:A:479:ILE:O	1:A:480:ARG:C	2.41	0.59
1:A:76:SER:HA	1:A:79:ILE:CD1	2.32	0.59
1:A:145:ALA:CA	1:A:174:TRP:HZ3	2.15	0.59
1:A:117:SER:CB	1:A:541:SER:HA	2.33	0.59
1:A:313:THR:CG2	1:A:348:LYS:HZ1	2.15	0.59
1:A:405:CYS:SG	1:A:405:CYS:O	2.60	0.59
1:A:263:ARG:CD	1:A:406:GLY:HA3	2.31	0.59
1:A:427:THR:OG1	1:A:428:ARG:N	2.34	0.59
1:A:170:LEU:HD13	1:A:170:LEU:N	2.18	0.59
1:A:185:SER:O	1:A:186:ALA:C	2.41	0.59
1:A:125:THR:CG2	1:A:412:TRP:CZ3	2.86	0.59
1:A:287:LEU:HD12	1:A:379:TRP:HA	1.83	0.59
1:A:367:VAL:O	1:A:373:ASN:O	2.20	0.59
1:A:363:ARG:HD3	1:A:475:ASN:CG	2.24	0.59
1:A:90:ASN:CB	1:A:515:THR:OG1	2.51	0.59
1:A:229:ASP:CG	1:A:232:THR:HG22	2.23	0.58
1:A:252:LEU:O	1:A:284:TYR:CD1	2.56	0.58
1:A:366:ASN:ND2	1:A:366:ASN:N	2.50	0.58
1:A:378:SER:HB3	1:A:381:LEU:HD13	1.85	0.58
1:A:248:ASP:OD2	1:A:378:SER:OG	2.21	0.58
1:A:270:ILE:HD11	1:A:379:TRP:CE2	2.38	0.58
1:A:502:LEU:HB3	1:A:503:PRO:HD2	1.84	0.58
1:A:526:TYR:CD1	1:A:526:TYR:N	2.70	0.58
1:A:120:GLY:HA3	1:A:502:LEU:O	2.03	0.58
1:A:131:MET:HE3	1:A:138:MET:HG3	1.85	0.58
1:A:259:PHE:O	1:A:260:THR:C	2.42	0.58
1:A:63:LEU:HD13	1:A:64:TYR:N	2.19	0.58
1:A:198:ILE:O	1:A:200:ASN:N	2.35	0.58
1:A:225:ARG:HD3	1:A:385:TYR:CD2	2.38	0.58
1:A:436:VAL:HG12	1:A:502:LEU:HD12	1.84	0.58
1:A:234:LEU:CD2	1:A:294:ALA:HB3	2.33	0.58
1:A:98:ASN:C	1:A:98:ASN:ND2	2.57	0.58
1:A:143:PHE:HE2	1:A:219:PHE:HZ	1.50	0.58
1:A:199:ASP:O	1:A:202:LEU:HD11	2.03	0.58
1:A:221:THR:O	1:A:222:ARG:CB	2.42	0.58
1:A:131:MET:HA	1:A:526:TYR:HD2	1.66	0.58
1:A:114:ASP:H	1:A:119:TRP:HZ2	1.50	0.57
1:A:235:ILE:H	1:A:235:ILE:HD13	1.67	0.57

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:132:PRO:HD2	1:A:526:TYR:HE2	1.69	0.57
1:A:193:MET:O	1:A:195:ASN:N	2.37	0.57
1:A:399:THR:OG1	1:A:400:THR:N	2.37	0.57
1:A:101:PHE:CA	1:A:105:GLU:OE2	2.46	0.57
1:A:309:THR:HA	1:A:348:LYS:HG2	1.86	0.57
1:A:381:LEU:O	1:A:385:TYR:N	2.37	0.57
1:A:396:THR:OG1	1:A:397:LEU:N	2.35	0.57
1:A:292:ILE:HB	1:A:374:THR:CG2	2.33	0.57
1:A:61:SER:O	1:A:62:PRO:C	2.43	0.57
1:A:128:HIS:ND1	1:A:129:THR:N	2.52	0.57
1:A:223:ASN:O	1:A:224:PHE:C	2.43	0.57
1:A:220:ASP:O	1:A:248:ASP:HB3	2.05	0.57
1:A:296:LEU:HD12	1:A:297:ASP:H	1.69	0.57
1:A:348:LYS:HB2	1:A:350:GLU:OE2	2.04	0.57
1:A:352:LYS:O	1:A:353:ILE:C	2.41	0.57
1:A:355:PRO:O	1:A:356:LEU:C	2.42	0.57
1:A:379:TRP:HH2	1:A:396:THR:OG1	1.85	0.57
1:A:218:LYS:HD3	1:A:219:PHE:O	2.04	0.57
1:A:349:LYS:C	1:A:351:LEU:CD2	2.73	0.57
1:A:190:ILE:N	1:A:190:ILE:HD12	2.12	0.57
1:A:387:ASN:O	1:A:388:PRO:C	2.43	0.57
1:A:309:THR:C	1:A:348:LYS:CD	2.72	0.57
1:A:474:GLU:OE1	1:A:474:GLU:N	2.37	0.57
1:A:509:ARG:O	1:A:511:VAL:N	2.38	0.57
1:A:132:PRO:HA	1:A:183:ASN:HB3	1.87	0.57
1:A:121:GLY:O	1:A:501:THR:HA	2.05	0.57
1:A:363:ARG:HD3	1:A:475:ASN:ND2	2.19	0.57
1:A:367:VAL:O	1:A:368:LEU:CB	2.52	0.57
1:A:196:ALA:HA	1:A:199:ASP:CB	2.33	0.56
1:A:417:MET:CB	1:A:512:GLN:NE2	2.68	0.56
1:A:395:TRP:CD1	1:A:396:THR:HG22	2.40	0.56
1:A:138:MET:HB3	1:A:263:ARG:HH22	1.70	0.56
1:A:417:MET:HG2	1:A:418:MET:SD	2.45	0.56
1:A:132:PRO:HD2	1:A:526:TYR:CE2	2.40	0.56
1:A:193:MET:C	1:A:195:ASN:N	2.59	0.56
1:A:475:ASN:O	1:A:478:LEU:N	2.39	0.56
1:A:161:ASP:HB3	1:A:165:HIS:CG	2.41	0.56
1:A:146:ARG:O	1:A:255:CYS:HB3	2.05	0.56
1:A:298:VAL:O	1:A:301:TYR:HB3	2.05	0.56
1:A:87:ASP:OD1	1:A:88:HIS:N	2.39	0.56
1:A:414:LEU:CD1	1:A:417:MET:HB3	2.36	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:122:GLN:O	1:A:534:VAL:HG23	2.05	0.56
1:A:171:LYS:NZ	1:A:172:TYR:H	2.04	0.56
1:A:262:SER:OG	1:A:263:ARG:N	2.39	0.56
1:A:387:ASN:CB	1:A:391:GLY:HA3	2.36	0.56
1:A:111:ILE:CG2	1:A:508:ILE:HG12	2.36	0.56
1:A:134:VAL:HG22	1:A:182:GLY:C	2.26	0.56
1:A:125:THR:HG21	1:A:499:HIS:HE1	1.68	0.56
1:A:360:SER:C	1:A:362:SER:N	2.59	0.56
1:A:477:ILE:CG2	1:A:478:LEU:HD22	2.36	0.56
1:A:84:TYR:O	1:A:85:GLN:C	2.42	0.56
1:A:252:LEU:HD11	1:A:376:TYR:HE1	1.72	0.55
1:A:269:GLY:C	1:A:399:THR:HG23	2.27	0.55
1:A:303:GLU:HG2	1:A:304:SER:N	2.20	0.55
1:A:309:THR:HA	1:A:348:LYS:CG	2.36	0.55
1:A:307:ASP:O	1:A:309:THR:N	2.39	0.55
1:A:383:TYR:HA	1:A:392:ILE:CD1	2.35	0.55
1:A:429:GLN:CA	1:A:429:GLN:HE21	2.08	0.55
1:A:152:LYS:C	1:A:169:ILE:HG22	2.26	0.55
1:A:226:LEU:CD2	1:A:227:GLY:H	2.09	0.55
1:A:380:TYR:HE1	1:A:384:ASN:ND2	2.03	0.55
1:A:517:THR:HG23	1:A:521:ARG:CA	2.30	0.55
1:A:533:ILE:HD13	1:A:533:ILE:C	2.26	0.55
1:A:115:GLU:O	1:A:116:ARG:HG2	2.07	0.55
1:A:158:THR:OG1	1:A:159:VAL:HG23	2.06	0.55
1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CD1	2.69	0.55
1:A:102:THR:N	1:A:105:GLU:OE2	2.38	0.55
1:A:391:GLY:O	1:A:392:ILE:HG13	2.06	0.55
1:A:471:ARG:HB2	1:A:472:PHE:CE1	2.42	0.55
1:A:418:MET:HE2	1:A:502:LEU:HB2	1.89	0.55
1:A:369:GLU:C	1:A:371:LYS:H	2.07	0.55
1:A:143:PHE:CE2	1:A:219:PHE:HZ	2.24	0.55
1:A:286:ASP:O	1:A:288:GLU:N	2.40	0.55
1:A:302:GLU:O	1:A:305:LYS:CB	2.55	0.55
1:A:383:TYR:CE2	1:A:398:LEU:N	2.74	0.55
1:A:304:SER:OG	1:A:309:THR:HG23	2.07	0.55
1:A:309:THR:CG2	1:A:351:LEU:CD2	2.64	0.55
1:A:351:LEU:N	1:A:351:LEU:HD23	2.22	0.55
1:A:90:ASN:HB3	1:A:515:THR:OG1	2.07	0.55
1:A:277:GLN:O	1:A:278:GLU:HG2	2.06	0.55
1:A:365:TYR:C	1:A:366:ASN:HD22	2.09	0.55
1:A:187:THR:CA	1:A:190:ILE:HD13	2.32	0.55

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:203:GLU:O	1:A:204:ILE:HD12	2.07	0.55
1:A:475:ASN:O	1:A:476:GLN:C	2.45	0.55
1:A:507:SER:C	1:A:508:ILE:HD13	2.27	0.55
1:A:220:ASP:O	1:A:248:ASP:N	2.40	0.54
1:A:239:VAL:HG13	1:A:476:GLN:NE2	2.11	0.54
1:A:233:LYS:CB	1:A:372:ILE:HG21	2.36	0.54
1:A:378:SER:CB	1:A:381:LEU:HD13	2.38	0.54
1:A:437:GLY:HA3	1:A:499:HIS:HD2	1.72	0.54
1:A:294:ALA:HA	1:A:374:THR:CG2	2.37	0.54
1:A:246:HIS:NE2	1:A:398:LEU:CD1	2.69	0.54
1:A:102:THR:H	1:A:105:GLU:CD	2.09	0.54
1:A:313:THR:CB	1:A:348:LYS:HZ1	2.19	0.54
1:A:301:TYR:CD1	1:A:352:LYS:HD2	2.42	0.54
1:A:374:THR:O	1:A:376:TYR:N	2.38	0.54
1:A:120:GLY:N	1:A:539:LEU:HD11	2.22	0.54
1:A:107:SER:HA	1:A:511:VAL:HG13	1.89	0.54
1:A:152:LYS:HB2	1:A:169:ILE:HG21	1.90	0.54
1:A:151:ARG:C	1:A:152:LYS:HG3	2.28	0.54
1:A:422:VAL:CG2	1:A:423:THR:N	2.71	0.54
1:A:348:LYS:NZ	1:A:348:LYS:HB3	1.97	0.54
1:A:301:TYR:HA	1:A:351:LEU:O	2.07	0.54
1:A:383:TYR:C	1:A:383:TYR:CD1	2.81	0.54
1:A:103:PRO:O	1:A:106:ALA:HB3	2.07	0.54
1:A:250:VAL:O	1:A:251:LEU:HD23	2.07	0.54
1:A:526:TYR:N	1:A:526:TYR:HD1	2.05	0.54
1:A:94:THR:CG2	1:A:103:PRO:HB3	2.38	0.53
1:A:122:GLN:HA	1:A:501:THR:HG22	1.90	0.53
1:A:178:ILE:N	1:A:178:ILE:CD1	2.62	0.53
1:A:249:ILE:HD12	1:A:257:VAL:HG11	1.90	0.53
1:A:122:GLN:CA	1:A:501:THR:HG22	2.37	0.53
1:A:150:SER:HB3	1:A:171:LYS:CB	2.38	0.53
1:A:69:LEU:HB2	1:A:534:VAL:O	2.09	0.53
1:A:197:ILE:CG2	1:A:198:ILE:N	2.71	0.53
1:A:263:ARG:C	1:A:265:SER:N	2.59	0.53
1:A:440:LEU:N	1:A:440:LEU:CD1	2.70	0.53
1:A:455:TYR:CE1	1:A:459:LEU:HG	2.43	0.53
1:A:365:TYR:O	1:A:366:ASN:C	2.48	0.53
1:A:294:ALA:CA	1:A:374:THR:HG22	2.36	0.53
1:A:190:ILE:O	1:A:193:MET:N	2.42	0.53
1:A:371:LYS:C	1:A:372:ILE:HG13	2.28	0.53
1:A:383:TYR:C	1:A:383:TYR:HD1	2.12	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:508:ILE:HG23	1:A:512:GLN:HE21	1.74	0.53
1:A:133:ASN:CB	1:A:490:SER:OG	2.57	0.52
1:A:232:THR:O	1:A:233:LYS:HB2	2.09	0.52
1:A:258:ASP:C	1:A:258:ASP:OD1	2.48	0.52
1:A:126:ILE:HD11	1:A:496:LEU:HD13	1.90	0.52
1:A:129:THR:O	1:A:492:ASN:ND2	2.41	0.52
1:A:134:VAL:HA	1:A:140:SER:OG	2.09	0.52
1:A:383:TYR:CA	1:A:392:ILE:HD13	2.38	0.52
1:A:473:PRO:HD2	1:A:474:GLU:OE2	2.10	0.52
1:A:98:ASN:ND2	1:A:99:ASN:N	2.40	0.52
1:A:467:HIS:C	1:A:469:PHE:H	2.12	0.52
1:A:239:VAL:HA	1:A:476:GLN:NE2	2.24	0.52
1:A:508:ILE:CG2	1:A:512:GLN:HE21	2.22	0.52
1:A:197:ILE:HD11	1:A:217:VAL:HB	1.89	0.52
1:A:441:MET:C	1:A:443:VAL:H	2.13	0.52
1:A:467:HIS:C	1:A:469:PHE:N	2.62	0.52
1:A:72:VAL:HG12	1:A:73:ASP:H	1.75	0.52
1:A:179:LEU:HD11	1:A:193:MET:HG3	1.90	0.52
1:A:288:GLU:C	1:A:290:GLY:H	2.13	0.52
1:A:359:ASP:CG	1:A:360:SER:N	2.62	0.52
1:A:361:LYS:HB2	1:A:363:ARG:HD2	1.91	0.52
1:A:387:ASN:HB2	1:A:391:GLY:HA3	1.91	0.52
1:A:132:PRO:CD	1:A:526:TYR:CE2	2.92	0.52
1:A:76:SER:HA	1:A:79:ILE:HD13	1.90	0.52
1:A:190:ILE:HG22	1:A:191:ASP:N	2.24	0.52
1:A:198:ILE:C	1:A:200:ASN:N	2.61	0.52
1:A:239:VAL:HG22	1:A:476:GLN:NE2	2.25	0.52
1:A:404:THR:O	1:A:405:CYS:SG	2.68	0.52
1:A:429:GLN:O	1:A:431:ASN:N	2.43	0.52
1:A:90:ASN:HA	1:A:514:VAL:O	2.10	0.52
1:A:161:ASP:CG	1:A:164:ASP:HB3	2.31	0.52
1:A:194:ASN:HD22	1:A:219:PHE:HB2	1.75	0.52
1:A:246:HIS:CE1	1:A:247:PRO:O	2.63	0.52
1:A:433:TYR:O	1:A:434:PRO:C	2.47	0.52
1:A:78:ASP:O	1:A:79:ILE:C	2.48	0.52
1:A:75:LYS:O	1:A:79:ILE:HD12	2.10	0.52
1:A:105:GLU:O	1:A:106:ALA:C	2.48	0.52
1:A:273:ARG:C	1:A:275:PRO:CD	2.73	0.52
1:A:392:ILE:HA	1:A:395:TRP:HB3	1.92	0.52
1:A:418:MET:C	1:A:420:ASP:H	2.13	0.52
1:A:108:THR:CG2	1:A:109:GLN:H	2.23	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:292:ILE:HG22	1:A:293:PRO:N	2.24	0.51
1:A:417:MET:N	1:A:512:GLN:HE22	2.08	0.51
1:A:116:ARG:O	1:A:117:SER:HB3	2.10	0.51
1:A:145:ALA:HA	1:A:257:VAL:HA	1.93	0.51
1:A:248:ASP:OD2	1:A:380:TYR:CB	2.57	0.51
1:A:270:ILE:HD11	1:A:379:TRP:NE1	2.26	0.51
1:A:304:SER:HB3	1:A:351:LEU:HB3	1.91	0.51
1:A:403:VAL:HG22	1:A:488:THR:HB	1.89	0.51
1:A:451:GLU:C	1:A:453:ALA:N	2.62	0.51
1:A:114:ASP:N	1:A:119:TRP:HZ2	2.09	0.51
1:A:130:ASN:HA	1:A:492:ASN:ND2	2.22	0.51
1:A:174:TRP:C	1:A:175:PHE:CD1	2.84	0.51
1:A:223:ASN:O	1:A:223:ASN:ND2	2.44	0.51
1:A:90:ASN:HB2	1:A:515:THR:OG1	2.10	0.51
1:A:92:LEU:HA	1:A:513:ARG:HA	1.93	0.51
1:A:98:ASN:HD22	1:A:99:ASN:H	1.50	0.51
1:A:193:MET:O	1:A:197:ILE:N	2.43	0.51
1:A:381:LEU:O	1:A:382:SER:C	2.48	0.51
1:A:380:TYR:HB3	1:A:381:LEU:HD12	1.92	0.51
1:A:452:GLN:HG3	1:A:455:TYR:HD2	1.76	0.51
1:A:160:ASN:HD22	1:A:160:ASN:H	1.56	0.51
1:A:366:ASN:N	1:A:366:ASN:HD22	2.08	0.51
1:A:408:GLU:OE1	1:A:408:GLU:HA	2.10	0.51
1:A:104:THR:O	1:A:105:GLU:C	2.48	0.50
1:A:192:LEU:O	1:A:195:ASN:HB3	2.11	0.50
1:A:216:GLY:CA	1:A:252:LEU:HB2	2.41	0.50
1:A:246:HIS:CE1	1:A:247:PRO:HG2	2.46	0.50
1:A:430:VAL:CG1	1:A:431:ASN:N	2.75	0.50
1:A:113:PHE:CE1	1:A:536:PRO:CB	2.94	0.50
1:A:202:LEU:O	1:A:206:ARG:HG3	2.11	0.50
1:A:304:SER:HB3	1:A:351:LEU:CB	2.40	0.50
1:A:363:ARG:HB2	1:A:475:ASN:ND2	2.21	0.50
1:A:114:ASP:OD1	1:A:115:GLU:N	2.37	0.50
1:A:125:THR:HG22	1:A:497:THR:O	2.11	0.50
1:A:226:LEU:N	1:A:226:LEU:HD23	2.26	0.50
1:A:258:ASP:OD1	1:A:259:PHE:N	2.45	0.50
1:A:418:MET:HE3	1:A:502:LEU:HB2	1.94	0.50
1:A:111:ILE:HG22	1:A:508:ILE:H	1.77	0.50
1:A:58:SER:O	1:A:60:LEU:N	2.44	0.50
1:A:135:ASN:OD1	1:A:136:GLU:N	2.45	0.50
1:A:185:SER:O	1:A:186:ALA:O	2.30	0.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:276:PHE:C	1:A:277:GLN:HG3	2.31	0.50
1:A:235:ILE:CD1	1:A:295:LEU:HA	2.41	0.50
1:A:504:LEU:HD12	1:A:504:LEU:N	2.17	0.50
1:A:119:TRP:CB	1:A:538:VAL:HA	2.41	0.50
1:A:540:SER:O	1:A:541:SER:CB	2.60	0.50
1:A:447:SER:C	1:A:448:PHE:CD1	2.85	0.50
1:A:511:VAL:O	1:A:511:VAL:HG23	2.10	0.50
1:A:191:ASP:N	1:A:191:ASP:OD1	2.45	0.50
1:A:194:ASN:ND2	1:A:219:PHE:HB2	2.27	0.50
1:A:120:GLY:CA	1:A:502:LEU:O	2.60	0.49
1:A:418:MET:HG3	1:A:436:VAL:CG1	2.42	0.49
1:A:117:SER:CA	1:A:541:SER:HA	2.41	0.49
1:A:89:SER:HA	1:A:516:VAL:CG1	2.41	0.49
1:A:173:GLU:HB3	1:A:175:PHE:HE1	1.77	0.49
1:A:191:ASP:O	1:A:195:ASN:N	2.45	0.49
1:A:280:PHE:O	1:A:281:LYS:HG2	2.11	0.49
1:A:96:VAL:HG21	1:A:106:ALA:HB1	1.93	0.49
1:A:106:ALA:O	1:A:109:GLN:CG	2.60	0.49
1:A:111:ILE:HG23	1:A:111:ILE:O	2.12	0.49
1:A:126:ILE:CD1	1:A:496:LEU:HD22	2.42	0.49
1:A:132:PRO:O	1:A:134:VAL:N	2.46	0.49
1:A:161:ASP:O	1:A:165:HIS:CB	2.61	0.49
1:A:146:ARG:HB2	1:A:173:GLU:O	2.12	0.49
1:A:355:PRO:CG	1:A:371:LYS:HB3	2.35	0.49
1:A:108:THR:CG2	1:A:109:GLN:N	2.72	0.49
1:A:416:ASP:O	1:A:512:GLN:NE2	2.46	0.49
1:A:82:LEU:HB2	1:A:92:LEU:HD13	1.93	0.49
1:A:171:LYS:CA	1:A:171:LYS:HZ2	2.06	0.49
1:A:452:GLN:O	1:A:452:GLN:HG2	2.13	0.49
1:A:122:GLN:HB2	1:A:501:THR:HG22	1.95	0.49
1:A:114:ASP:O	1:A:119:TRP:NE1	2.45	0.49
1:A:133:ASN:HB2	1:A:490:SER:OG	2.11	0.49
1:A:270:ILE:CG2	1:A:270:ILE:O	2.61	0.49
1:A:349:LYS:C	1:A:351:LEU:HD23	2.33	0.49
1:A:107:SER:HB2	1:A:511:VAL:CG2	2.43	0.49
1:A:187:THR:HG23	1:A:484:PRO:CD	2.43	0.49
1:A:244:ALA:CB	1:A:484:PRO:HA	2.42	0.49
1:A:150:SER:HB3	1:A:171:LYS:HB3	1.94	0.48
1:A:144:LYS:HB2	1:A:258:ASP:HB3	1.94	0.48
1:A:422:VAL:CG2	1:A:423:THR:HG23	2.33	0.48
1:A:215:ILE:HG22	1:A:216:GLY:H	1.76	0.48

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:223:ASN:C	1:A:223:ASN:ND2	2.66	0.48
1:A:370:ASP:CB	1:A:372:ILE:HD11	2.28	0.48
1:A:414:LEU:HG	1:A:436:VAL:HG21	1.94	0.48
1:A:515:THR:HG22	1:A:515:THR:O	2.13	0.48
1:A:63:LEU:HD22	1:A:64:TYR:N	2.19	0.48
1:A:134:VAL:HG23	1:A:181:GLU:HA	1.95	0.48
1:A:417:MET:CA	1:A:512:GLN:NE2	2.74	0.48
1:A:451:GLU:O	1:A:453:ALA:N	2.46	0.48
1:A:123:LEU:C	1:A:123:LEU:CD1	2.76	0.48
1:A:246:HIS:O	1:A:247:PRO:C	2.50	0.48
1:A:229:ASP:OD1	1:A:231:GLU:N	2.47	0.48
1:A:111:ILE:CG2	1:A:508:ILE:HB	2.43	0.48
1:A:540:SER:O	1:A:541:SER:HB2	2.13	0.48
1:A:133:ASN:HB3	1:A:183:ASN:CB	2.37	0.48
1:A:159:VAL:O	1:A:162:THR:HG22	2.13	0.48
1:A:179:LEU:CD2	1:A:180:PRO:HD2	2.43	0.48
1:A:201:TYR:O	1:A:204:ILE:N	2.44	0.48
1:A:251:LEU:CD1	1:A:256:GLY:HA2	2.43	0.48
1:A:267:LEU:C	1:A:269:GLY:N	2.67	0.48
1:A:303:GLU:C	1:A:305:LYS:H	2.17	0.48
1:A:309:THR:CA	1:A:348:LYS:CG	2.85	0.48
1:A:129:THR:O	1:A:492:ASN:CG	2.51	0.48
1:A:113:PHE:CE1	1:A:536:PRO:HG3	2.49	0.48
1:A:132:PRO:CD	1:A:526:TYR:CD2	2.97	0.48
1:A:193:MET:O	1:A:197:ILE:HG22	2.14	0.48
1:A:239:VAL:O	1:A:241:THR:N	2.47	0.48
1:A:291:ASN:HA	1:A:377:ARG:HA	1.96	0.48
1:A:437:GLY:HA3	1:A:499:HIS:CD2	2.49	0.48
1:A:78:ASP:O	1:A:79:ILE:O	2.30	0.48
1:A:91:PHE:CD1	1:A:92:LEU:N	2.82	0.48
1:A:350:GLU:CD	1:A:350:GLU:H	2.17	0.48
1:A:421:PRO:HG2	1:A:424:PHE:CD1	2.49	0.48
1:A:479:ILE:O	1:A:481:PRO:N	2.47	0.48
1:A:417:MET:HA	1:A:512:GLN:HE22	1.75	0.48
1:A:92:LEU:HD12	1:A:92:LEU:O	2.14	0.48
1:A:412:TRP:HE3	1:A:499:HIS:NE2	2.11	0.47
1:A:133:ASN:N	1:A:183:ASN:HB3	2.29	0.47
1:A:63:LEU:CD1	1:A:64:TYR:O	2.60	0.47
1:A:64:TYR:O	1:A:65:ASP:CB	2.62	0.47
1:A:411:TYR:N	1:A:411:TYR:CD1	2.82	0.47
1:A:220:ASP:OD1	1:A:220:ASP:C	2.52	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:102:THR:OG1	1:A:104:THR:HG23	2.15	0.47
1:A:246:HIS:O	1:A:247:PRO:O	2.32	0.47
1:A:413:SER:HB3	1:A:435:VAL:HA	1.96	0.47
1:A:263:ARG:O	1:A:266:ASN:N	2.48	0.47
1:A:417:MET:CE	1:A:534:VAL:HG11	2.44	0.47
1:A:516:VAL:O	1:A:516:VAL:HG13	2.14	0.47
1:A:518:ASP:OD1	1:A:520:ARG:CG	2.60	0.47
1:A:57:TYR:O	1:A:58:SER:C	2.52	0.47
1:A:107:SER:HB2	1:A:511:VAL:HG21	1.95	0.47
1:A:169:ILE:O	1:A:169:ILE:HG23	2.14	0.47
1:A:360:SER:O	1:A:362:SER:N	2.48	0.47
1:A:76:SER:C	1:A:79:ILE:HD13	2.35	0.47
1:A:514:VAL:HG23	1:A:515:THR:N	2.30	0.47
1:A:67:THR:OG1	1:A:68:LYS:N	2.48	0.47
1:A:69:LEU:HA	1:A:69:LEU:HD23	1.56	0.47
1:A:127:MET:HG3	1:A:127:MET:O	2.15	0.47
1:A:132:PRO:O	1:A:133:ASN:C	2.53	0.47
1:A:171:LYS:CE	1:A:171:LYS:HA	2.36	0.47
1:A:234:LEU:HD22	1:A:295:LEU:O	2.14	0.47
1:A:397:LEU:HD13	1:A:398:LEU:N	2.30	0.47
1:A:56:ARG:O	1:A:57:TYR:CB	2.62	0.46
1:A:279:GLY:O	1:A:395:TRP:HZ2	1.98	0.46
1:A:351:LEU:HD23	1:A:351:LEU:H	1.80	0.46
1:A:381:LEU:CD1	1:A:381:LEU:N	2.48	0.46
1:A:392:ILE:C	1:A:394:SER:N	2.68	0.46
1:A:134:VAL:HG23	1:A:134:VAL:O	2.16	0.46
1:A:151:ARG:HA	1:A:169:ILE:O	2.15	0.46
1:A:187:THR:O	1:A:190:ILE:HD13	2.15	0.46
1:A:91:PHE:HD1	1:A:92:LEU:N	2.13	0.46
1:A:107:SER:OG	1:A:108:THR:N	2.47	0.46
1:A:251:LEU:HD13	1:A:256:GLY:HA2	1.97	0.46
1:A:64:TYR:O	1:A:65:ASP:HB2	2.16	0.46
1:A:164:ASP:O	1:A:167:GLU:CG	2.61	0.46
1:A:218:LYS:NZ	1:A:478:LEU:HA	2.31	0.46
1:A:380:TYR:O	1:A:381:LEU:C	2.54	0.46
1:A:422:VAL:O	1:A:424:PHE:N	2.46	0.46
1:A:85:GLN:CG	1:A:86:ASN:N	2.76	0.46
1:A:189:THR:O	1:A:190:ILE:C	2.54	0.46
1:A:304:SER:O	1:A:309:THR:CG2	2.64	0.46
1:A:383:TYR:OH	1:A:397:LEU:HD22	2.16	0.46
1:A:78:ASP:OD1	1:A:94:THR:HG23	2.16	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:508:ILE:CG2	1:A:512:GLN:NE2	2.79	0.46
1:A:123:LEU:HD12	1:A:123:LEU:O	2.16	0.46
1:A:157:VAL:C	1:A:158:THR:CG2	2.84	0.46
1:A:230:PRO:CG	1:A:231:GLU:H	2.20	0.46
1:A:220:ASP:N	1:A:248:ASP:O	2.45	0.46
1:A:302:GLU:O	1:A:305:LYS:N	2.48	0.45
1:A:412:TRP:O	1:A:435:VAL:HG13	2.16	0.45
1:A:493:VAL:CG2	1:A:494:PRO:CD	2.87	0.45
1:A:496:LEU:N	1:A:496:LEU:CD2	2.72	0.45
1:A:159:VAL:HA	1:A:162:THR:CB	2.25	0.45
1:A:197:ILE:HG23	1:A:198:ILE:H	1.78	0.45
1:A:258:ASP:HA	1:A:281:LYS:HA	1.97	0.45
1:A:253:PRO:HA	1:A:284:TYR:CG	2.50	0.45
1:A:79:ILE:HB	1:A:80:ALA:H	1.42	0.45
1:A:82:LEU:HB2	1:A:92:LEU:CD1	2.46	0.45
1:A:135:ASN:CG	1:A:136:GLU:N	2.70	0.45
1:A:138:MET:HE2	1:A:263:ARG:HH22	1.81	0.45
1:A:240:TYR:HE1	1:A:293:PRO:HD2	1.81	0.45
1:A:288:GLU:C	1:A:387:ASN:HD21	2.20	0.45
1:A:119:TRP:O	1:A:504:LEU:HD12	2.16	0.45
1:A:534:VAL:CG1	1:A:534:VAL:O	2.64	0.45
1:A:540:SER:OG	1:A:541:SER:N	2.49	0.45
1:A:161:ASP:HA	1:A:164:ASP:HB3	1.98	0.45
1:A:304:SER:O	1:A:309:THR:HG21	2.17	0.45
1:A:369:GLU:CD	1:A:369:GLU:H	2.19	0.45
1:A:198:ILE:HG22	1:A:202:LEU:CD2	2.46	0.45
1:A:418:MET:HG3	1:A:436:VAL:HG13	1.98	0.45
1:A:470:ASN:O	1:A:473:PRO:HG3	2.16	0.45
1:A:533:ILE:CD1	1:A:533:ILE:C	2.85	0.45
1:A:264:LEU:O	1:A:267:LEU:N	2.44	0.45
1:A:133:ASN:OD1	1:A:134:VAL:HG13	2.17	0.45
1:A:151:ARG:O	1:A:152:LYS:HG3	2.17	0.45
1:A:179:LEU:HB3	1:A:180:PRO:HD2	1.99	0.45
1:A:126:ILE:HD11	1:A:496:LEU:HD22	1.99	0.45
1:A:518:ASP:C	1:A:518:ASP:OD1	2.54	0.45
1:A:137:TYR:CE1	1:A:522:ARG:CZ	2.88	0.45
1:A:113:PHE:CZ	1:A:536:PRO:HB3	2.52	0.45
1:A:216:GLY:HA2	1:A:252:LEU:CB	2.47	0.45
1:A:263:ARG:HH11	1:A:406:GLY:HA3	1.81	0.45
1:A:81:SER:O	1:A:82:LEU:HD23	2.17	0.45
1:A:224:PHE:HB2	1:A:381:LEU:HD21	1.98	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:230:PRO:HG2	1:A:231:GLU:N	2.23	0.45
1:A:252:LEU:C	1:A:284:TYR:CD1	2.90	0.45
1:A:359:ASP:O	1:A:362:SER:N	2.47	0.45
1:A:278:GLU:CD	1:A:280:PHE:HB3	2.35	0.45
1:A:252:LEU:HD21	1:A:376:TYR:HD1	1.78	0.44
1:A:299:THR:O	1:A:302:GLU:N	2.50	0.44
1:A:379:TRP:O	1:A:382:SER:OG	2.31	0.44
1:A:454:VAL:O	1:A:457:GLN:HB3	2.17	0.44
1:A:509:ARG:C	1:A:511:VAL:N	2.70	0.44
1:A:518:ASP:O	1:A:521:ARG:CA	2.64	0.44
1:A:85:GLN:HG3	1:A:86:ASN:H	1.81	0.44
1:A:287:LEU:O	1:A:377:ARG:HD3	2.16	0.44
1:A:410:VAL:HG21	1:A:516:VAL:CG2	2.48	0.44
1:A:442:PRO:HD2	1:A:443:VAL:HG23	1.99	0.44
1:A:448:PHE:N	1:A:448:PHE:HD1	2.11	0.44
1:A:73:ASP:HB3	1:A:91:PHE:CE1	2.52	0.44
1:A:200:ASN:O	1:A:201:TYR:C	2.55	0.44
1:A:228:TRP:HA	1:A:234:LEU:O	2.17	0.44
1:A:309:THR:CA	1:A:348:LYS:CD	2.93	0.44
1:A:135:ASN:ND2	1:A:137:TYR:HB3	2.33	0.44
1:A:171:LYS:HZ1	1:A:172:TYR:H	1.63	0.44
1:A:252:LEU:CD2	1:A:376:TYR:CD1	2.97	0.44
1:A:115:GLU:C	1:A:116:ARG:HG2	2.36	0.44
1:A:119:TRP:CA	1:A:539:LEU:CD1	2.88	0.44
1:A:138:MET:CE	1:A:263:ARG:NH2	2.81	0.44
1:A:145:ALA:CA	1:A:174:TRP:CZ3	2.99	0.44
1:A:205:GLY:O	1:A:206:ARG:C	2.56	0.44
1:A:509:ARG:C	1:A:511:VAL:H	2.21	0.44
1:A:302:GLU:O	1:A:303:GLU:C	2.56	0.44
1:A:365:TYR:O	1:A:367:VAL:N	2.51	0.44
1:A:242:TYR:CZ	1:A:482:PRO:HA	2.53	0.44
1:A:519:ALA:C	1:A:521:ARG:H	2.20	0.44
1:A:263:ARG:HD2	1:A:405:CYS:C	2.37	0.44
1:A:277:GLN:O	1:A:278:GLU:CB	2.65	0.44
1:A:138:MET:CE	1:A:263:ARG:HH22	2.31	0.44
1:A:148:MET:HA	1:A:172:TYR:HD1	1.83	0.44
1:A:197:ILE:CG2	1:A:198:ILE:H	2.30	0.44
1:A:388:PRO:HB2	1:A:389:GLU:HG3	1.98	0.44
1:A:312:THR:CB	1:A:348:LYS:HD3	2.45	0.43
1:A:158:THR:HA	1:A:165:HIS:HD2	1.83	0.43
1:A:418:MET:C	1:A:420:ASP:N	2.72	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:475:ASN:C	1:A:477:ILE:N	2.71	0.43
1:A:79:ILE:O	1:A:80:ALA:C	2.56	0.43
1:A:197:ILE:O	1:A:200:ASN:HB3	2.18	0.43
1:A:358:LYS:HB3	1:A:363:ARG:O	2.18	0.43
1:A:378:SER:OG	1:A:381:LEU:CD1	2.66	0.43
1:A:389:GLU:H	1:A:389:GLU:HG3	1.69	0.43
1:A:480:ARG:O	1:A:481:PRO:O	2.36	0.43
1:A:51:GLY:HA3	1:A:53:ASN:HD22	1.83	0.43
1:A:115:GLU:O	1:A:116:ARG:CG	2.67	0.43
1:A:131:MET:CE	1:A:138:MET:CG	2.96	0.43
1:A:135:ASN:OD1	1:A:137:TYR:HB3	2.18	0.43
1:A:131:MET:CE	1:A:138:MET:HG3	2.47	0.43
1:A:450:ASN:HD21	1:A:452:GLN:HB3	1.84	0.43
1:A:135:ASN:HD21	1:A:137:TYR:HB3	1.83	0.43
1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	1.29	0.43
1:A:172:TYR:CE2	1:A:254:GLY:HA3	2.54	0.43
1:A:293:PRO:O	1:A:372:ILE:C	2.56	0.43
1:A:387:ASN:HA	1:A:388:PRO:HD2	1.67	0.43
1:A:118:ARG:C	1:A:119:TRP:CD1	2.92	0.43
1:A:161:ASP:OD1	1:A:164:ASP:CB	2.57	0.43
1:A:174:TRP:O	1:A:175:PHE:CD1	2.71	0.43
1:A:190:ILE:O	1:A:191:ASP:C	2.57	0.43
1:A:299:THR:O	1:A:302:GLU:HB2	2.18	0.43
1:A:306:LYS:O	1:A:310:THR:HG23	2.19	0.43
1:A:419:GLN:O	1:A:420:ASP:HB2	2.19	0.43
1:A:77:ALA:O	1:A:80:ALA:HB3	2.18	0.43
1:A:195:ASN:O	1:A:199:ASP:N	2.38	0.43
1:A:378:SER:O	1:A:379:TRP:C	2.56	0.43
1:A:424:PHE:CE2	1:A:434:PRO:HA	2.50	0.43
1:A:524:CYS:O	1:A:527:VAL:HG23	2.18	0.43
1:A:135:ASN:HD21	1:A:137:TYR:CA	2.32	0.43
1:A:235:ILE:N	1:A:235:ILE:CD1	2.61	0.43
1:A:383:TYR:CE2	1:A:398:LEU:HB2	2.54	0.43
1:A:395:TRP:C	1:A:396:THR:CG2	2.87	0.43
1:A:472:PHE:C	1:A:474:GLU:OE1	2.57	0.43
1:A:507:SER:O	1:A:508:ILE:HD13	2.19	0.43
1:A:85:GLN:CD	1:A:86:ASN:N	2.71	0.43
1:A:135:ASN:HD21	1:A:137:TYR:CB	2.32	0.42
1:A:159:VAL:H	1:A:162:THR:CB	2.26	0.42
1:A:229:ASP:OD1	1:A:232:THR:HG22	2.19	0.42
1:A:383:TYR:N	1:A:392:ILE:HD11	2.34	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:493:VAL:HG23	1:A:494:PRO:HD2	1.99	0.42
1:A:412:TRP:CE3	1:A:499:HIS:NE2	2.87	0.42
1:A:538:VAL:O	1:A:539:LEU:HG	2.19	0.42
1:A:149:VAL:O	1:A:149:VAL:HG23	2.19	0.42
1:A:200:ASN:ND2	1:A:201:TYR:N	2.67	0.42
1:A:211:LEU:HB3	1:A:213:SER:HB3	2.01	0.42
1:A:354:GLN:HE21	1:A:354:GLN:HB3	1.64	0.42
1:A:414:LEU:CD1	1:A:414:LEU:C	2.85	0.42
1:A:414:LEU:HD13	1:A:417:MET:HB3	2.01	0.42
1:A:128:HIS:HB3	1:A:528:TYR:HD2	1.84	0.42
1:A:76:SER:HA	1:A:79:ILE:HD11	2.00	0.42
1:A:352:LYS:C	1:A:354:GLN:H	2.19	0.42
1:A:111:ILE:HG22	1:A:508:ILE:HB	2.01	0.42
1:A:150:SER:HB3	1:A:171:LYS:HB2	2.01	0.42
1:A:204:ILE:N	1:A:204:ILE:CD1	2.82	0.42
1:A:277:GLN:HB2	1:A:278:GLU:H	1.44	0.42
1:A:284:TYR:CZ	1:A:377:ARG:HD2	2.55	0.42
1:A:120:GLY:HA2	1:A:504:LEU:HG	2.01	0.42
1:A:95:VAL:O	1:A:95:VAL:HG22	2.20	0.42
1:A:111:ILE:HA	1:A:111:ILE:HD12	1.92	0.42
1:A:273:ARG:HH21	1:A:397:LEU:HD23	1.84	0.42
1:A:485:THR:C	1:A:486:ILE:HD13	2.40	0.42
1:A:73:ASP:OD1	1:A:529:LYS:NZ	2.49	0.42
1:A:130:ASN:CA	1:A:492:ASN:ND2	2.80	0.42
1:A:74:ASN:CB	1:A:529:LYS:HZ1	2.33	0.42
1:A:264:LEU:HG	1:A:264:LEU:H	1.43	0.42
1:A:379:TRP:O	1:A:380:TYR:C	2.56	0.42
1:A:218:LYS:NZ	1:A:477:ILE:O	2.47	0.42
1:A:180:PRO:O	1:A:181:GLU:C	2.58	0.42
1:A:232:THR:HG23	1:A:233:LYS:N	2.35	0.42
1:A:450:ASN:ND2	1:A:452:GLN:HB3	2.35	0.42
1:A:194:ASN:HD21	1:A:219:PHE:C	2.23	0.41
1:A:220:ASP:HB2	1:A:481:PRO:CG	2.48	0.41
1:A:235:ILE:HD11	1:A:295:LEU:CA	2.49	0.41
1:A:267:LEU:O	1:A:269:GLY:N	2.53	0.41
1:A:131:MET:HA	1:A:132:PRO:HD3	1.73	0.41
1:A:152:LYS:HB2	1:A:169:ILE:CG2	2.50	0.41
1:A:422:VAL:HG22	1:A:423:THR:H	1.80	0.41
1:A:220:ASP:CB	1:A:481:PRO:HG3	2.48	0.41
1:A:93:THR:HG22	1:A:94:THR:N	2.35	0.41
1:A:391:GLY:C	1:A:392:ILE:CG1	2.87	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:424:PHE:HE2	1:A:435:VAL:HG23	1.85	0.41
1:A:106:ALA:O	1:A:108:THR:N	2.54	0.41
1:A:116:ARG:HH11	1:A:116:ARG:HG2	1.85	0.41
1:A:124:LYS:HB2	1:A:533:ILE:CD1	2.50	0.41
1:A:267:LEU:C	1:A:267:LEU:CD1	2.82	0.41
1:A:388:PRO:HB2	1:A:389:GLU:H	1.53	0.41
1:A:91:PHE:CE1	1:A:514:VAL:CG1	2.98	0.41
1:A:102:THR:HG23	1:A:105:GLU:OE1	2.19	0.41
1:A:116:ARG:O	1:A:117:SER:CB	2.68	0.41
1:A:414:LEU:HA	1:A:514:VAL:HA	2.02	0.41
1:A:137:TYR:O	1:A:139:PHE:CE1	2.74	0.41
1:A:219:PHE:CD2	1:A:249:ILE:HG22	2.55	0.41
1:A:230:PRO:CG	1:A:231:GLU:N	2.82	0.41
1:A:252:LEU:HD23	1:A:252:LEU:HA	1.35	0.41
1:A:269:GLY:O	1:A:399:THR:HG23	2.20	0.41
1:A:403:VAL:C	1:A:405:CYS:N	2.70	0.41
1:A:87:ASP:OD1	1:A:89:SER:N	2.38	0.41
1:A:379:TRP:CH2	1:A:396:THR:OG1	2.64	0.41
1:A:391:GLY:C	1:A:392:ILE:HG13	2.40	0.41
1:A:429:GLN:O	1:A:430:VAL:C	2.59	0.41
1:A:111:ILE:HG22	1:A:111:ILE:O	2.20	0.41
1:A:183:ASN:C	1:A:184:PHE:CD1	2.94	0.41
1:A:226:LEU:HG	1:A:241:THR:HG21	2.01	0.41
1:A:387:ASN:O	1:A:389:GLU:N	2.54	0.41
1:A:203:GLU:HB3	1:A:204:ILE:CD1	2.50	0.41
1:A:218:LYS:HE2	1:A:220:ASP:HB2	2.02	0.41
1:A:89:SER:O	1:A:515:THR:HA	2.21	0.41
1:A:57:TYR:CE1	1:A:58:SER:HB3	2.56	0.41
1:A:372:ILE:O	1:A:373:ASN:OD1	2.39	0.41
1:A:273:ARG:NH2	1:A:397:LEU:HD23	2.36	0.41
1:A:151:ARG:HB3	1:A:209:GLY:O	2.21	0.40
1:A:245:PHE:O	1:A:246:HIS:CB	2.68	0.40
1:A:472:PHE:N	1:A:472:PHE:CD1	2.89	0.40
1:A:98:ASN:HD21	1:A:100:ASP:H	1.59	0.40
1:A:149:VAL:O	1:A:149:VAL:CG2	2.68	0.40
1:A:305:LYS:HA	1:A:351:LEU:HD13	2.03	0.40
1:A:111:ILE:HG21	1:A:508:ILE:CG1	2.50	0.40
1:A:113:PHE:HE1	1:A:536:PRO:HG3	1.85	0.40
1:A:60:LEU:O	1:A:61:SER:C	2.58	0.40
1:A:395:TRP:C	1:A:396:THR:HG22	2.42	0.40
1:A:133:ASN:H	1:A:183:ASN:CB	2.34	0.40

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:273:ARG:O	1:A:275:PRO:HD2	2.18	0.40
1:A:404:THR:O	1:A:405:CYS:C	2.60	0.40
1:A:436:VAL:CG1	1:A:502:LEU:HD12	2.49	0.40
1:A:63:LEU:CD2	1:A:64:TYR:H	2.23	0.40
1:A:82:LEU:CB	1:A:92:LEU:HD13	2.50	0.40
1:A:136:GLU:N	1:A:181:GLU:OE2	2.43	0.40
1:A:248:ASP:OD1	1:A:379:TRP:HB3	2.22	0.40
1:A:383:TYR:CA	1:A:392:ILE:CD1	2.99	0.40
1:A:94:THR:HA	1:A:510:GLY:O	2.22	0.40

There are no symmetry-related clashes.

## 5.3 Torsion angles [i](#)

### 5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	458/509 (90%)	274 (60%)	97 (21%)	87 (19%)	<b>0</b> <b>2</b>

All (87) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	57	TYR
1	A	59	GLU
1	A	66	THR
1	A	79	ILE
1	A	85	GLN
1	A	87	ASP
1	A	117	SER
1	A	188	MET
1	A	190	ILE
1	A	199	ASP
1	A	222	ARG
1	A	242	TYR

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	260	THR
1	A	275	PRO
1	A	278	GLU
1	A	351	LEU
1	A	352	LYS
1	A	368	LEU
1	A	370	ASP
1	A	388	PRO
1	A	392	ILE
1	A	415	PRO
1	A	423	THR
1	A	430	VAL
1	A	434	PRO
1	A	476	GLN
1	A	519	ALA
1	A	541	SER
1	A	49	THR
1	A	58	SER
1	A	80	ALA
1	A	133	ASN
1	A	143	PHE
1	A	186	ALA
1	A	194	ASN
1	A	225	ARG
1	A	241	THR
1	A	264	LEU
1	A	289	GLY
1	A	294	ALA
1	A	295	LEU
1	A	372	ILE
1	A	380	TYR
1	A	383	TYR
1	A	452	GLN
1	A	481	PRO
1	A	510	GLY
1	A	521	ARG
1	A	107	SER
1	A	109	GLN
1	A	152	LYS
1	A	202	LEU
1	A	247	PRO
1	A	268	LEU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	366	ASN
1	A	432	ASN
1	A	433	TYR
1	A	465	LEU
1	A	154	PRO
1	A	201	TYR
1	A	207	GLN
1	A	228	TRP
1	A	230	PRO
1	A	304	SER
1	A	367	VAL
1	A	381	LEU
1	A	382	SER
1	A	405	CYS
1	A	420	ASP
1	A	62	PRO
1	A	91	PHE
1	A	104	THR
1	A	187	THR
1	A	246	HIS
1	A	277	GLN
1	A	298	VAL
1	A	353	ILE
1	A	453	ALA
1	A	455	TYR
1	A	463	THR
1	A	356	LEU
1	A	361	LYS
1	A	387	ASN
1	A	473	PRO
1	A	480	ARG
1	A	236	MET
1	A	217	VAL

### 5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	419/457 (92%)	278 (66%)	141 (34%)	<b>0</b> <b>2</b>

All (141) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	52	ARG
1	A	54	SER
1	A	57	TYR
1	A	59	GLU
1	A	63	LEU
1	A	64	TYR
1	A	65	ASP
1	A	67	THR
1	A	71	LEU
1	A	72	VAL
1	A	75	LYS
1	A	85	GLN
1	A	92	LEU
1	A	96	VAL
1	A	98	ASN
1	A	99	ASN
1	A	102	THR
1	A	104	THR
1	A	107	SER
1	A	110	THR
1	A	116	ARG
1	A	119	TRP
1	A	123	LEU
1	A	130	ASN
1	A	131	MET
1	A	133	ASN
1	A	135	ASN
1	A	139	PHE
1	A	143	PHE
1	A	149	VAL
1	A	150	SER
1	A	157	VAL
1	A	158	THR
1	A	160	ASN
1	A	161	ASP
1	A	163	TYR
1	A	170	LEU
1	A	171	LYS

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	177	PHE
1	A	178	ILE
1	A	189	THR
1	A	191	ASP
1	A	193	MET
1	A	194	ASN
1	A	197	ILE
1	A	199	ASP
1	A	200	ASN
1	A	202	LEU
1	A	207	GLN
1	A	211	LEU
1	A	212	GLU
1	A	213	SER
1	A	214	ASP
1	A	215	ILE
1	A	220	ASP
1	A	221	THR
1	A	222	ARG
1	A	223	ASN
1	A	224	PHE
1	A	225	ARG
1	A	226	LEU
1	A	228	TRP
1	A	229	ASP
1	A	231	GLU
1	A	232	THR
1	A	235	ILE
1	A	241	THR
1	A	243	GLU
1	A	246	HIS
1	A	250	VAL
1	A	255	CYS
1	A	261	GLU
1	A	262	SER
1	A	265	SER
1	A	267	LEU
1	A	270	ILE
1	A	273	ARG
1	A	281	LYS
1	A	287	LEU
1	A	288	GLU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	295	LEU
1	A	296	LEU
1	A	308	THR
1	A	313	THR
1	A	348	LYS
1	A	349	LYS
1	A	351	LEU
1	A	354	GLN
1	A	363	ARG
1	A	366	ASN
1	A	372	ILE
1	A	374	THR
1	A	376	TYR
1	A	380	TYR
1	A	381	LEU
1	A	382	SER
1	A	383	TYR
1	A	389	GLU
1	A	390	LYS
1	A	392	ILE
1	A	396	THR
1	A	399	THR
1	A	400	THR
1	A	402	ASP
1	A	403	VAL
1	A	408	GLU
1	A	410	VAL
1	A	412	TRP
1	A	415	PRO
1	A	417	MET
1	A	429	GLN
1	A	430	VAL
1	A	432	ASN
1	A	439	GLU
1	A	440	LEU
1	A	448	PHE
1	A	455	TYR
1	A	459	LEU
1	A	474	GLU
1	A	477	ILE
1	A	478	LEU
1	A	485	THR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	486	ILE
1	A	487	THR
1	A	488	THR
1	A	496	LEU
1	A	497	THR
1	A	504	LEU
1	A	505	ARG
1	A	506	SER
1	A	513	ARG
1	A	514	VAL
1	A	515	THR
1	A	518	ASP
1	A	520	ARG
1	A	522	ARG
1	A	523	THR
1	A	524	CYS
1	A	533	ILE
1	A	538	VAL
1	A	539	LEU

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (23) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	53	ASN
1	A	85	GLN
1	A	88	HIS
1	A	98	ASN
1	A	99	ASN
1	A	130	ASN
1	A	141	ASN
1	A	160	ASN
1	A	165	HIS
1	A	194	ASN
1	A	200	ASN
1	A	207	GLN
1	A	223	ASN
1	A	291	ASN
1	A	354	GLN
1	A	366	ASN
1	A	387	ASN
1	A	429	GLN
1	A	450	ASN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	476	GLN
1	A	492	ASN
1	A	499	HIS
1	A	512	GLN

### 5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

### 5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

### 5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 1 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

### 5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

### 5.8 Polymer linkage issues [i](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	A	1

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	314:THR	C	348:LYS	N	10.17



## 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, 95<sup>th</sup> 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 <sup>2</sup> )	Q<0.9
1	A	462/509 (90%)	0.22	19 (4%) 37 31	40, 44, 102, 154	0

All (19) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	49	THR	4.6
1	A	314	THR	3.8
1	A	463	THR	3.8
1	A	48	PRO	3.8
1	A	352	LYS	3.1
1	A	157	VAL	2.9
1	A	464	SER	2.9
1	A	357	GLU	2.8
1	A	154	PRO	2.7
1	A	155	GLU	2.5
1	A	462	ALA	2.4
1	A	307	ASP	2.3
1	A	310	THR	2.2
1	A	176	GLU	2.2
1	A	238	GLY	2.1
1	A	295	LEU	2.1
1	A	181	GLU	2.0
1	A	461	GLN	2.0
1	A	371	LYS	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 [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

### 6.4 Ligands [i](#)

In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. The B-factors column lists the minimum, median, 95<sup>th</sup> percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled 'Q< 0.9' lists the number of atoms with occupancy less than 0.9.

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors( $\text{\AA}^2$ )	Q<0.9
2	CA	A	1001	1/1	0.83	1.08	54,54,54,54	1

### 6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.