



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

May 27, 2020 – 05:06 pm BST

PDB ID : 1DNV
Title : PARVOVIRUS (DENSOVIRUS) FROM GALLERIA MELLONELLA
Authors : Simpson, A.A.; Chipmann, P.R.; Baker, T.S.; Tijssen, P.; Rossmann, M.G.
Deposited on : 1998-07-22
Resolution : 3.60 Å(reported)

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

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<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

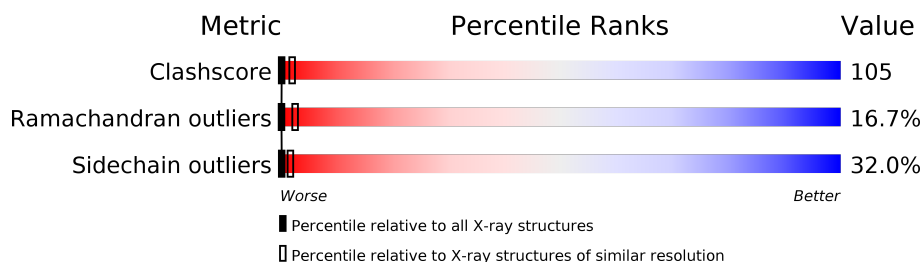
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.60 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	141614	1353 (3.70-3.50)
Ramachandran outliers	138981	1307 (3.70-3.50)
Sidechain outliers	138945	1307 (3.70-3.50)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments on the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 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 $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	437	

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3197 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.

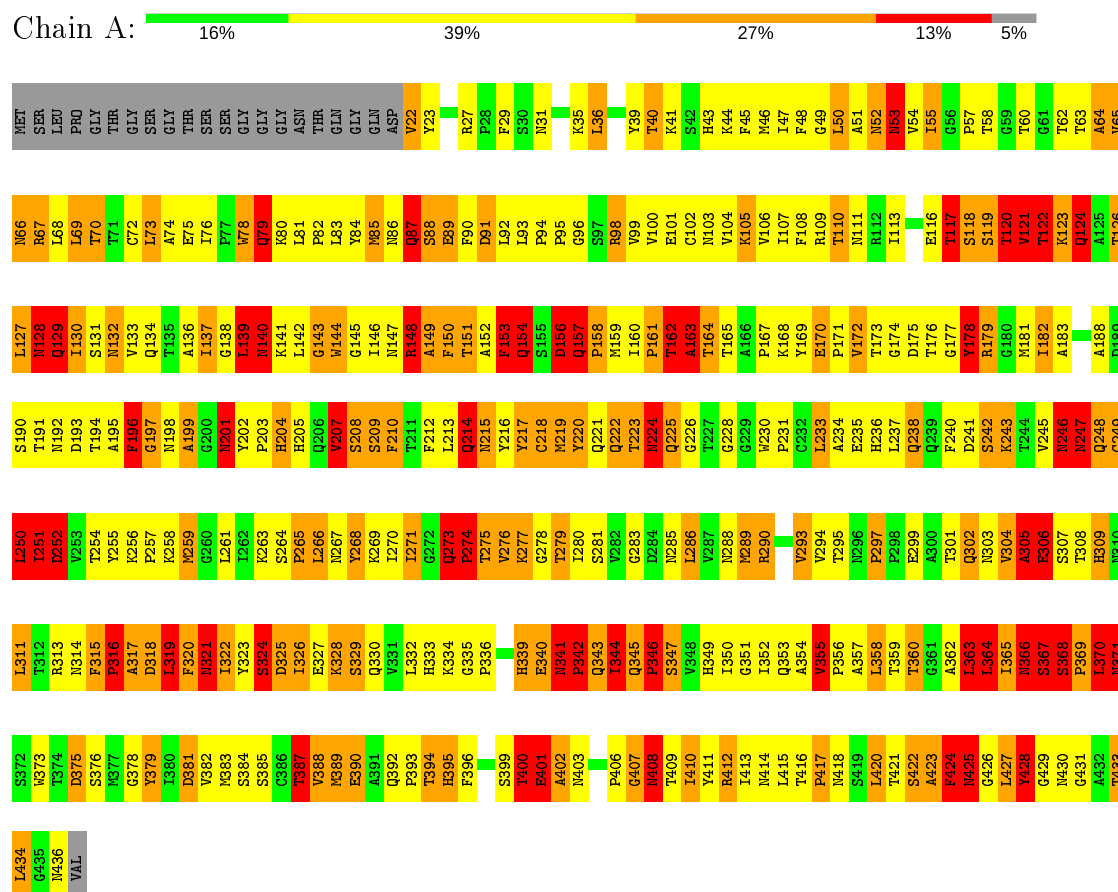
- Molecule 1 is a protein called GALLERIA MELLONELLA DENSOVIRUS CAPSID PROTEIN.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	415	Total	C	N	O	S	0	0	0
			3197	2024	544	613	16			

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. 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. 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: GALLERIA MELLONELLA DENSOVIRUS CAPSID PROTEIN



4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 41 21 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	264.44Å 264.44Å 683.45Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	9.00 – 3.60 60.71 – 3.50	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	35.6 (9.00-3.60) 35.7 (60.71-3.50)	Depositor EDS
R_{merge}	0.11	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	1.57 (at 3.49Å)	Xtriage
Refinement program	X-PLOR 3.1	Depositor
R, R_{free}	0.271 , (Not available) 0.301 , (Not available)	Depositor DCC
R_{free} test set	No test flags present.	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	55.9	Xtriage
Anisotropy	0.430	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.32 , 78.9	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.45$, $\langle L^2 \rangle = 0.28$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.12	EDS
Total number of atoms	3197	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	26.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.77% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	1.69	48/3278 (1.5%)	2.32	116/4477 (2.6%)

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

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	33

All (48) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	322	ILE	C-N	24.68	1.90	1.34
1	A	321	ASN	C-N	-21.30	0.85	1.34
1	A	366	ASN	C-N	-21.13	0.85	1.34
1	A	400	THR	C-N	-17.10	0.94	1.34
1	A	250	LEU	C-N	-16.73	0.95	1.34
1	A	317	ALA	C-N	14.56	1.67	1.34
1	A	387	THR	C-N	-14.33	1.01	1.34
1	A	128	ASN	C-N	-14.28	1.01	1.34
1	A	251	ILE	C-N	-13.83	1.02	1.34
1	A	121	VAL	C-N	-13.40	1.03	1.34
1	A	324	SER	C-N	-13.35	1.03	1.34
1	A	427	LEU	C-N	-12.92	1.04	1.34
1	A	408	ASN	C-N	-12.81	1.04	1.34
1	A	347	SER	C-N	11.70	1.60	1.34
1	A	214	GLN	C-N	-11.08	1.08	1.34
1	A	123	LYS	N-CA	-11.08	1.24	1.46
1	A	121	VAL	CA-C	-10.73	1.25	1.52
1	A	197	GLY	N-CA	8.80	1.59	1.46
1	A	424	PHE	C-N	-8.77	1.13	1.34
1	A	121	VAL	N-CA	-8.64	1.29	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	420	LEU	C-N	8.41	1.53	1.34
1	A	149	ALA	N-CA	-7.83	1.30	1.46
1	A	215	ASN	C-N	-7.50	1.16	1.34
1	A	317	ALA	CA-C	7.40	1.72	1.52
1	A	129	GLN	C-N	-7.39	1.17	1.34
1	A	122	THR	CA-C	-7.06	1.34	1.52
1	A	274	PRO	C-N	-6.99	1.18	1.34
1	A	224	ASN	C-N	-6.90	1.18	1.34
1	A	371	ASN	N-CA	-6.89	1.32	1.46
1	A	426	GLY	C-N	-6.84	1.18	1.34
1	A	306	GLU	C-N	-6.79	1.18	1.34
1	A	122	THR	C-N	-6.75	1.18	1.34
1	A	148	ARG	C-N	-6.44	1.19	1.34
1	A	162	THR	C-N	-6.38	1.19	1.34
1	A	210	PHE	N-CA	-5.92	1.34	1.46
1	A	370	LEU	C-N	-5.68	1.21	1.34
1	A	201	ASN	CB-CG	5.55	1.63	1.51
1	A	119	SER	CA-CB	-5.54	1.44	1.52
1	A	209	SER	C-N	-5.48	1.21	1.34
1	A	275	THR	C-O	5.48	1.33	1.23
1	A	196	PHE	CA-C	5.44	1.67	1.52
1	A	320	PHE	N-CA	-5.39	1.35	1.46
1	A	346	PRO	C-N	-5.33	1.21	1.34
1	A	367	SER	C-N	-5.31	1.21	1.34
1	A	357	ALA	CA-CB	5.18	1.63	1.52
1	A	252	ASP	N-CA	-5.16	1.36	1.46
1	A	368	SER	N-CA	-5.12	1.36	1.46
1	A	163	ALA	C-N	-5.01	1.22	1.34

All (116) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	400	THR	O-C-N	-38.08	61.77	122.70
1	A	250	LEU	O-C-N	-33.18	69.62	122.70
1	A	321	ASN	O-C-N	-32.05	71.42	122.70
1	A	346	PRO	O-C-N	-26.50	80.30	122.70
1	A	128	ASN	O-C-N	-23.77	84.66	122.70
1	A	387	THR	O-C-N	-21.14	88.87	122.70
1	A	427	LEU	C-N-CA	21.02	174.26	121.70
1	A	366	ASN	O-C-N	-20.95	89.18	122.70
1	A	346	PRO	CA-C-N	19.74	160.63	117.20
1	A	324	SER	O-C-N	-19.32	91.78	122.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	424	PHE	O-C-N	-19.21	91.96	122.70
1	A	122	THR	O-C-N	18.13	151.70	122.70
1	A	250	LEU	CA-C-N	17.82	156.40	117.20
1	A	317	ALA	C-N-CA	17.39	165.18	121.70
1	A	427	LEU	O-C-N	-15.98	97.13	122.70
1	A	408	ASN	O-C-N	-15.84	97.36	122.70
1	A	319	LEU	C-N-CA	15.69	160.92	121.70
1	A	401	GLU	O-C-N	-15.34	98.15	122.70
1	A	121	VAL	C-N-CA	-14.69	84.97	121.70
1	A	387	THR	CA-C-N	14.58	149.27	117.20
1	A	162	THR	C-N-CA	14.46	157.84	121.70
1	A	400	THR	CA-C-N	14.35	148.78	117.20
1	A	128	ASN	CA-C-N	14.35	148.76	117.20
1	A	121	VAL	CB-CA-C	-14.04	84.73	111.40
1	A	324	SER	C-N-CA	13.74	156.05	121.70
1	A	121	VAL	O-C-N	-13.46	101.16	122.70
1	A	122	THR	CA-C-N	-13.34	87.85	117.20
1	A	317	ALA	O-C-N	-13.32	101.39	122.70
1	A	305	ALA	C-N-CA	13.21	154.72	121.70
1	A	196	PHE	O-C-N	-12.87	101.33	123.20
1	A	368	SER	CB-CA-C	12.67	134.17	110.10
1	A	387	THR	C-N-CA	12.46	152.85	121.70
1	A	324	SER	CA-C-N	12.41	144.49	117.20
1	A	322	ILE	C-N-CA	-12.37	90.77	121.70
1	A	319	LEU	O-C-N	-12.25	103.10	122.70
1	A	118	SER	O-C-N	-12.03	103.46	122.70
1	A	214	GLN	O-C-N	-11.92	103.62	122.70
1	A	366	ASN	CA-C-N	11.71	142.95	117.20
1	A	305	ALA	O-C-N	-11.63	104.09	122.70
1	A	346	PRO	C-N-CA	11.46	150.36	121.70
1	A	424	PHE	C-N-CA	10.66	148.36	121.70
1	A	427	LEU	CA-C-N	10.54	140.39	117.20
1	A	366	ASN	C-N-CA	10.51	147.98	121.70
1	A	400	THR	C-N-CA	10.48	147.91	121.70
1	A	147	ASN	O-C-N	-10.30	106.22	122.70
1	A	117	THR	CA-C-N	-10.25	94.65	117.20
1	A	408	ASN	C-N-CA	9.95	146.56	121.70
1	A	214	GLN	C-N-CA	9.83	146.28	121.70
1	A	128	ASN	C-N-CA	9.77	146.13	121.70
1	A	147	ASN	C-N-CA	9.69	145.92	121.70
1	A	317	ALA	CA-C-N	9.68	138.49	117.20
1	A	121	VAL	CA-C-N	9.41	137.89	117.20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	196	PHE	CA-C-N	9.10	134.40	116.20
1	A	224	ASN	N-CA-CB	9.01	126.81	110.60
1	A	120	THR	C-N-CA	-8.94	99.36	121.70
1	A	118	SER	C-N-CA	-8.43	100.63	121.70
1	A	319	LEU	CA-C-N	8.38	135.64	117.20
1	A	408	ASN	CA-C-N	8.29	135.44	117.20
1	A	401	GLU	CA-C-N	8.19	135.22	117.20
1	A	157	GLN	O-C-N	8.15	136.59	121.10
1	A	278	GLY	N-CA-C	-8.14	92.74	113.10
1	A	358	LEU	CA-CB-CG	-8.10	96.67	115.30
1	A	274	PRO	C-N-CA	7.92	141.50	121.70
1	A	121	VAL	N-CA-C	7.88	132.27	111.00
1	A	117	THR	C-N-CA	-7.85	102.07	121.70
1	A	250	LEU	N-CA-C	-7.83	89.87	111.00
1	A	153	PHE	N-CA-C	7.73	131.87	111.00
1	A	224	ASN	O-C-N	-7.65	110.45	122.70
1	A	117	THR	O-C-N	7.49	134.68	122.70
1	A	139	LEU	CA-CB-CG	7.32	132.14	115.30
1	A	197	GLY	O-C-N	-7.28	111.06	122.70
1	A	162	THR	O-C-N	-7.27	111.06	122.70
1	A	347	SER	CA-C-O	7.26	135.35	120.10
1	A	223	THR	C-N-CA	7.17	139.62	121.70
1	A	158	PRO	CB-CA-C	-7.13	94.19	112.00
1	A	316	PRO	N-CA-C	7.09	130.53	112.10
1	A	147	ASN	CA-C-N	7.08	132.77	117.20
1	A	224	ASN	CB-CA-C	-6.94	96.52	110.40
1	A	429	GLY	N-CA-C	-6.91	95.83	113.10
1	A	305	ALA	CA-C-N	6.90	132.38	117.20
1	A	157	GLN	CB-CA-C	6.81	124.02	110.40
1	A	214	GLN	CA-C-N	6.77	132.09	117.20
1	A	154	GLN	N-CA-C	6.74	129.20	111.00
1	A	422	SER	O-C-N	6.71	133.44	122.70
1	A	163	ALA	N-CA-CB	6.68	119.45	110.10
1	A	276	VAL	N-CA-C	-6.57	93.25	111.00
1	A	174	GLY	N-CA-C	-6.49	96.89	113.10
1	A	224	ASN	C-N-CA	-6.27	106.02	121.70
1	A	355	VAL	CB-CA-C	-6.27	99.48	111.40
1	A	52	ASN	CA-C-N	-6.21	103.53	117.20
1	A	118	SER	CB-CA-C	6.12	121.72	110.10
1	A	343	GLN	N-CA-C	5.96	127.08	111.00
1	A	427	LEU	N-CA-C	-5.93	95.00	111.00
1	A	347	SER	CA-C-N	-5.85	104.33	117.20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	207	VAL	O-C-N	5.80	131.99	122.70
1	A	120	THR	CB-CA-C	-5.78	95.99	111.60
1	A	369	PRO	CB-CA-C	-5.78	97.54	112.00
1	A	363	LEU	CA-CB-CG	5.74	128.49	115.30
1	A	196	PHE	N-CA-C	-5.72	95.55	111.00
1	A	121	VAL	N-CA-CB	5.71	124.05	111.50
1	A	148	ARG	NE-CZ-NH2	5.67	123.14	120.30
1	A	153	PHE	CB-CA-C	-5.65	99.10	110.40
1	A	129	GLN	O-C-N	-5.60	113.73	122.70
1	A	434	LEU	N-CA-C	5.53	125.94	111.00
1	A	124	GLN	O-C-N	5.46	131.43	122.70
1	A	156	ASP	O-C-N	5.44	131.40	122.70
1	A	53	ASN	CA-C-N	-5.40	105.32	117.20
1	A	197	GLY	N-CA-C	5.36	126.50	113.10
1	A	322	ILE	CA-C-N	-5.31	105.52	117.20
1	A	422	SER	CA-C-N	-5.21	105.73	117.20
1	A	118	SER	CA-C-N	5.21	128.67	117.20
1	A	207	VAL	CB-CA-C	-5.12	101.67	111.40
1	A	344	ILE	N-CA-C	5.09	124.75	111.00
1	A	328	LYS	N-CA-C	-5.09	97.25	111.00
1	A	148	ARG	C-N-CA	-5.09	108.98	121.70
1	A	425	ASN	CA-C-N	-5.04	106.13	116.20

There are no chirality outliers.

All (33) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	117	THR	Mainchain
1	A	121	VAL	Peptide
1	A	122	THR	Peptide
1	A	128	ASN	Mainchain,Peptide
1	A	129	GLN	Mainchain
1	A	153	PHE	Mainchain
1	A	162	THR	Peptide
1	A	178	TYR	Sidechain
1	A	214	GLN	Mainchain,Peptide
1	A	250	LEU	Mainchain,Peptide
1	A	273	GLN	Peptide
1	A	274	PRO	Peptide
1	A	305	ALA	Peptide
1	A	319	LEU	Peptide
1	A	321	ASN	Mainchain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	324	SER	Mainchain,Peptide
1	A	366	ASN	Mainchain
1	A	387	THR	Mainchain,Peptide
1	A	388	VAL	Mainchain
1	A	400	THR	Mainchain,Peptide
1	A	401	GLU	Mainchain,Peptide
1	A	408	ASN	Mainchain,Peptide
1	A	424	PHE	Mainchain,Peptide
1	A	427	LEU	Peptide

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	3197	0	3088	658	0
All	All	3197	0	3088	658	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 105.

All (658) 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:421:THR:HB	1:A:424:PHE:CE1	1.11	1.61
1:A:421:THR:CB	1:A:424:PHE:HE1	1.05	1.57
1:A:123:LYS:HG3	1:A:157:GLN:NE2	1.29	1.45
1:A:317:ALA:C	1:A:318:ASP:N	1.67	1.45
1:A:148:ARG:NH1	1:A:167:PRO:HD3	1.31	1.42
1:A:40:THR:O	1:A:41:LYS:HG2	1.29	1.31
1:A:99:VAL:CA	1:A:388:VAL:HG22	1.62	1.29
1:A:157:GLN:N	1:A:158:PRO:HD3	1.23	1.28
1:A:421:THR:O	1:A:424:PHE:CE1	1.89	1.26
1:A:322:ILE:C	1:A:323:TYR:N	1.90	1.25
1:A:319:LEU:O	1:A:412:ARG:HD2	1.35	1.23
1:A:421:THR:O	1:A:424:PHE:CD1	1.94	1.21
1:A:157:GLN:H	1:A:158:PRO:CD	1.53	1.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:148:ARG:HD3	1:A:165:THR:O	1.39	1.19
1:A:333:HIS:CE1	1:A:347:SER:O	1.98	1.17
1:A:148:ARG:NH1	1:A:167:PRO:CD	2.08	1.16
1:A:98:ARG:C	1:A:388:VAL:HG13	1.68	1.15
1:A:418:ASN:ND2	1:A:421:THR:OG1	1.80	1.14
1:A:157:GLN:N	1:A:158:PRO:CD	1.96	1.14
1:A:421:THR:HB	1:A:424:PHE:CZ	1.82	1.12
1:A:47:ILE:HG21	1:A:355:VAL:HG12	1.24	1.12
1:A:321:ASN:O	1:A:322:ILE:HG13	1.42	1.11
1:A:148:ARG:HA	1:A:148:ARG:NH1	1.66	1.10
1:A:99:VAL:HA	1:A:388:VAL:CG2	1.81	1.09
1:A:198:ASN:O	1:A:199:ALA:HB3	1.50	1.08
1:A:99:VAL:HG22	1:A:388:VAL:CG2	1.84	1.07
1:A:406:PRO:HA	1:A:409:THR:HG23	1.09	1.06
1:A:406:PRO:HA	1:A:409:THR:CG2	1.84	1.06
1:A:54:VAL:HB	1:A:160:ILE:HG21	1.36	1.06
1:A:420:LEU:HD22	1:A:430:ASN:O	1.54	1.05
1:A:421:THR:HG21	1:A:434:LEU:HD13	1.36	1.05
1:A:421:THR:CB	1:A:424:PHE:CE1	1.93	1.04
1:A:363:LEU:HD11	1:A:370:LEU:HD13	1.40	1.03
1:A:148:ARG:CD	1:A:165:THR:O	2.07	1.02
1:A:40:THR:O	1:A:41:LYS:CG	2.07	1.02
1:A:36:LEU:HD23	1:A:389:MET:HB3	1.41	1.01
1:A:148:ARG:HA	1:A:148:ARG:HH11	1.15	1.00
1:A:50:LEU:HD12	1:A:161:PRO:HG3	1.44	1.00
1:A:123:LYS:CG	1:A:157:GLN:NE2	2.24	1.00
1:A:406:PRO:CA	1:A:409:THR:HG23	1.93	0.99
1:A:148:ARG:HH12	1:A:167:PRO:CD	1.73	0.99
1:A:99:VAL:HG22	1:A:388:VAL:HG21	1.45	0.99
1:A:53:ASN:HB2	1:A:70:THR:CB	1.94	0.98
1:A:198:ASN:O	1:A:199:ALA:CB	2.09	0.98
1:A:418:ASN:CG	1:A:421:THR:OG1	2.00	0.98
1:A:321:ASN:O	1:A:322:ILE:CG1	1.84	0.98
1:A:53:ASN:HB2	1:A:70:THR:HB	1.44	0.97
1:A:149:ALA:O	1:A:165:THR:OG1	1.81	0.96
1:A:273:GLN:HB3	1:A:274:PRO:HD3	1.45	0.96
1:A:363:LEU:HD12	1:A:367:SER:OG	1.67	0.95
1:A:273:GLN:HB3	1:A:274:PRO:CD	1.96	0.95
1:A:123:LYS:HG3	1:A:157:GLN:HE21	1.23	0.94
1:A:224:ASN:OD1	1:A:225:GLN:OE1	1.85	0.94
1:A:51:ALA:HB3	1:A:160:ILE:HG12	1.50	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:150:PHE:O	1:A:164:THR:O	1.84	0.93
1:A:142:LEU:HD12	1:A:428:TYR:CE2	2.04	0.93
1:A:421:THR:CA	1:A:424:PHE:CE1	2.50	0.93
1:A:421:THR:CG2	1:A:424:PHE:HE1	1.81	0.93
1:A:98:ARG:O	1:A:388:VAL:HG13	1.67	0.93
1:A:149:ALA:C	1:A:150:PHE:O	2.03	0.93
1:A:149:ALA:O	1:A:150:PHE:O	1.86	0.92
1:A:268:TYR:HB2	1:A:409:THR:HG22	1.49	0.92
1:A:421:THR:C	1:A:424:PHE:CE1	2.43	0.92
1:A:118:SER:O	1:A:119:SER:C	1.92	0.92
1:A:121:VAL:HG12	1:A:121:VAL:O	1.70	0.92
1:A:225:GLN:HA	1:A:225:GLN:OE1	1.66	0.92
1:A:421:THR:CG2	1:A:434:LEU:HD13	1.99	0.91
1:A:49:GLY:HA3	1:A:358:LEU:HD13	1.50	0.91
1:A:122:THR:O	1:A:124:GLN:OE1	1.87	0.91
1:A:421:THR:CA	1:A:424:PHE:HE1	1.84	0.90
1:A:295:THR:HB	1:A:313:ARG:HB2	1.54	0.89
1:A:106:VAL:HG22	1:A:251:ILE:HB	1.52	0.89
1:A:99:VAL:HA	1:A:388:VAL:HG22	0.91	0.89
1:A:333:HIS:ND1	1:A:347:SER:O	2.05	0.88
1:A:273:GLN:CB	1:A:274:PRO:HD3	2.03	0.88
1:A:322:ILE:C	1:A:323:TYR:CA	2.41	0.88
1:A:188:ALA:HB2	1:A:195:ALA:HB3	1.56	0.87
1:A:336:PRO:HG2	1:A:420:LEU:HD12	1.56	0.87
1:A:195:ALA:HB2	1:A:201:ASN:HB2	1.56	0.87
1:A:358:LEU:HD23	1:A:373:TRP:HB3	1.56	0.87
1:A:268:TYR:CB	1:A:409:THR:HG22	2.05	0.87
1:A:145:GLY:O	1:A:425:ASN:CG	2.14	0.86
1:A:222:GLN:HG2	1:A:223:THR:H	1.40	0.85
1:A:140:ASN:OD1	1:A:141:LYS:HG2	1.76	0.85
1:A:420:LEU:HD13	1:A:430:ASN:H	1.41	0.85
1:A:41:LYS:HB3	1:A:205:HIS:NE2	1.89	0.85
1:A:302:GLN:CB	1:A:306:GLU:HA	2.06	0.85
1:A:123:LYS:HG3	1:A:157:GLN:HE22	1.38	0.85
1:A:54:VAL:HG23	1:A:160:ILE:HD12	1.57	0.84
1:A:151:THR:HA	1:A:163:ALA:O	1.78	0.84
1:A:153:PHE:HB3	1:A:162:THR:N	1.92	0.84
1:A:204:HIS:HD2	1:A:209:SER:CB	1.90	0.84
1:A:368:SER:H	1:A:369:PRO:CD	1.92	0.83
1:A:250:LEU:HD22	1:A:250:LEU:H	1.40	0.83
1:A:157:GLN:H	1:A:158:PRO:HD3	0.68	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:55:ILE:HG22	1:A:69:LEU:HA	1.60	0.83
1:A:195:ALA:CB	1:A:201:ASN:HB2	2.08	0.82
1:A:40:THR:C	1:A:41:LYS:CG	2.45	0.82
1:A:197:GLY:O	1:A:198:ASN:HB3	1.79	0.82
1:A:333:HIS:HE1	1:A:347:SER:O	1.58	0.82
1:A:172:VAL:HG23	1:A:178:TYR:HD1	1.43	0.81
1:A:233:LEU:HD22	1:A:237:LEU:HD23	1.62	0.81
1:A:121:VAL:HG12	1:A:122:THR:HA	1.63	0.81
1:A:148:ARG:NH1	1:A:167:PRO:CG	2.43	0.81
1:A:265:PRO:HB3	1:A:410:ILE:HD13	1.61	0.81
1:A:60:THR:HG23	1:A:63:THR:H	1.44	0.81
1:A:68:LEU:HG	1:A:220:TYR:CD1	2.16	0.81
1:A:288:ASN:O	1:A:289:MET:SD	2.39	0.81
1:A:420:LEU:HB3	1:A:430:ASN:HB2	1.61	0.80
1:A:418:ASN:CB	1:A:421:THR:OG1	2.29	0.80
1:A:29:PHE:CZ	1:A:31:ASN:HB2	2.17	0.80
1:A:68:LEU:HG	1:A:220:TYR:HD1	1.46	0.80
1:A:127:LEU:HD12	1:A:127:LEU:H	1.47	0.80
1:A:273:GLN:CG	1:A:274:PRO:HD3	2.12	0.80
1:A:368:SER:H	1:A:369:PRO:HD2	1.48	0.79
1:A:72:CYS:O	1:A:355:VAL:HG11	1.81	0.79
1:A:122:THR:N	1:A:123:LYS:HG2	1.97	0.78
1:A:66:ASN:HA	1:A:222:GLN:HA	1.65	0.78
1:A:118:SER:O	1:A:119:SER:O	1.99	0.78
1:A:152:ALA:HB3	1:A:163:ALA:CB	2.14	0.78
1:A:156:ASP:HA	1:A:158:PRO:HD3	1.64	0.78
1:A:99:VAL:CG2	1:A:388:VAL:CG2	2.62	0.78
1:A:50:LEU:HB3	1:A:53:ASN:HD21	1.48	0.78
1:A:190:SER:HA	1:A:196:PHE:CZ	2.17	0.77
1:A:409:THR:O	1:A:410:ILE:HB	1.85	0.77
1:A:53:ASN:CB	1:A:70:THR:HB	2.14	0.77
1:A:273:GLN:O	1:A:274:PRO:O	2.03	0.77
1:A:173:THR:HG23	1:A:177:GLY:N	2.00	0.77
1:A:53:ASN:HB2	1:A:70:THR:OG1	1.85	0.77
1:A:273:GLN:CB	1:A:274:PRO:CD	2.56	0.76
1:A:107:ILE:HA	1:A:249:CYS:HA	1.65	0.76
1:A:322:ILE:CG2	1:A:327:GLU:HB2	2.16	0.76
1:A:204:HIS:CD2	1:A:209:SER:CB	2.69	0.76
1:A:141:LYS:HB2	1:A:142:LEU:HD22	1.67	0.75
1:A:156:ASP:HA	1:A:158:PRO:HG3	1.68	0.75
1:A:358:LEU:HG	1:A:359:THR:N	2.00	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:87:GLN:HE21	1:A:328:LYS:HD2	1.51	0.75
1:A:168:LYS:HD3	1:A:172:VAL:HG21	1.67	0.75
1:A:421:THR:CG2	1:A:424:PHE:CE1	2.61	0.75
1:A:302:GLN:HB2	1:A:306:GLU:HA	1.67	0.74
1:A:73:LEU:HA	1:A:355:VAL:HG21	1.68	0.74
1:A:148:ARG:HH12	1:A:167:PRO:CG	1.97	0.74
1:A:350:ILE:HG22	1:A:351:GLY:N	2.02	0.74
1:A:87:GLN:NE2	1:A:87:GLN:HA	2.02	0.74
1:A:169:TYR:O	1:A:181:MET:HB2	1.88	0.74
1:A:241:ASP:O	1:A:243:LYS:HG2	1.87	0.74
1:A:322:ILE:HG12	1:A:330:GLN:OE1	1.86	0.74
1:A:317:ALA:HB1	1:A:411:TYR:HB3	1.70	0.74
1:A:416:THR:HB	1:A:417:PRO:HD3	1.69	0.74
1:A:297:PRO:HD2	1:A:311:LEU:H	1.52	0.73
1:A:58:THR:HG22	1:A:60:THR:H	1.52	0.73
1:A:154:GLN:CD	1:A:158:PRO:HA	2.09	0.73
1:A:424:PHE:O	1:A:424:PHE:CD2	2.41	0.73
1:A:107:ILE:HD12	1:A:107:ILE:N	2.04	0.73
1:A:108:PHE:CD2	1:A:246:ASN:HA	2.24	0.73
1:A:418:ASN:HD21	1:A:433:THR:N	1.86	0.73
1:A:197:GLY:O	1:A:198:ASN:CB	2.29	0.73
1:A:319:LEU:O	1:A:412:ARG:CD	2.29	0.73
1:A:39:TYR:O	1:A:385:SER:HA	1.88	0.72
1:A:412:ARG:HH11	1:A:412:ARG:HG3	1.53	0.72
1:A:50:LEU:HD13	1:A:159:MET:O	1.90	0.72
1:A:360:THR:HG23	1:A:373:TRP:CZ3	2.24	0.72
1:A:121:VAL:O	1:A:121:VAL:CG1	2.10	0.72
1:A:258:LYS:HB3	1:A:333:HIS:CE1	2.24	0.72
1:A:99:VAL:CB	1:A:388:VAL:HG22	2.19	0.72
1:A:73:LEU:HD12	1:A:355:VAL:HG21	1.72	0.72
1:A:302:GLN:HB3	1:A:306:GLU:HA	1.71	0.72
1:A:222:GLN:HG2	1:A:223:THR:N	2.03	0.71
1:A:54:VAL:HB	1:A:160:ILE:CG2	2.16	0.71
1:A:156:ASP:C	1:A:158:PRO:HD3	2.08	0.71
1:A:49:GLY:CA	1:A:358:LEU:HD13	2.21	0.71
1:A:146:ILE:HB	1:A:425:ASN:OD1	1.90	0.71
1:A:270:ILE:O	1:A:277:LYS:HG3	1.91	0.71
1:A:203:PRO:HG2	1:A:207:VAL:CG2	2.21	0.71
1:A:368:SER:N	1:A:369:PRO:CD	2.54	0.71
1:A:258:LYS:HB3	1:A:333:HIS:NE2	2.06	0.70
1:A:153:PHE:HB3	1:A:162:THR:H	1.54	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:280:ILE:HG13	1:A:280:ILE:O	1.90	0.70
1:A:153:PHE:CB	1:A:161:PRO:HA	2.20	0.70
1:A:270:ILE:HG13	1:A:277:LYS:CG	2.21	0.70
1:A:261:LEU:O	1:A:334:LYS:HE3	1.91	0.70
1:A:255:TYR:CE2	1:A:257:PRO:HA	2.26	0.70
1:A:58:THR:HB	1:A:64:ALA:HA	1.73	0.70
1:A:204:HIS:CD2	1:A:209:SER:HB3	2.27	0.70
1:A:99:VAL:CG2	1:A:388:VAL:HG22	2.22	0.70
1:A:250:LEU:O	1:A:250:LEU:CD2	2.40	0.69
1:A:51:ALA:O	1:A:53:ASN:N	2.26	0.69
1:A:36:LEU:HA	1:A:389:MET:HB3	1.74	0.69
1:A:273:GLN:O	1:A:274:PRO:C	2.29	0.69
1:A:409:THR:O	1:A:410:ILE:CB	2.38	0.69
1:A:173:THR:HG22	1:A:175:ASP:H	1.58	0.69
1:A:108:PHE:HD2	1:A:246:ASN:HA	1.57	0.69
1:A:73:LEU:HA	1:A:355:VAL:CG2	2.21	0.69
1:A:154:GLN:OE1	1:A:160:ILE:N	2.26	0.69
1:A:123:LYS:CG	1:A:157:GLN:HE21	1.97	0.69
1:A:358:LEU:HD11	1:A:376:SER:OG	1.92	0.68
1:A:99:VAL:HG22	1:A:388:VAL:HG22	1.75	0.68
1:A:43:HIS:HE1	1:A:83:LEU:O	1.73	0.68
1:A:173:THR:HG22	1:A:175:ASP:N	2.09	0.68
1:A:148:ARG:HH11	1:A:167:PRO:HD3	1.54	0.68
1:A:156:ASP:HA	1:A:158:PRO:CD	2.24	0.68
1:A:51:ALA:CB	1:A:160:ILE:HG12	2.22	0.68
1:A:156:ASP:CA	1:A:158:PRO:HD3	2.24	0.68
1:A:224:ASN:OD1	1:A:225:GLN:CD	2.32	0.68
1:A:53:ASN:OD1	1:A:70:THR:HB	1.94	0.68
1:A:425:ASN:OD1	1:A:425:ASN:N	2.26	0.67
1:A:178:TYR:O	1:A:179:ARG:HB2	1.93	0.67
1:A:188:ALA:CB	1:A:195:ALA:HB3	2.23	0.67
1:A:68:LEU:HA	1:A:219:MET:O	1.94	0.67
1:A:317:ALA:O	1:A:318:ASP:N	2.28	0.67
1:A:418:ASN:HB2	1:A:421:THR:OG1	1.95	0.67
1:A:153:PHE:CG	1:A:161:PRO:HA	2.30	0.66
1:A:51:ALA:HB3	1:A:160:ILE:CG1	2.25	0.66
1:A:109:ARG:HB3	1:A:379:TYR:O	1.95	0.66
1:A:113:ILE:HD11	1:A:131:SER:HB2	1.76	0.66
1:A:152:ALA:CB	1:A:163:ALA:HB3	2.26	0.66
1:A:315:PHE:HB2	1:A:316:PRO:HD2	1.76	0.66
1:A:368:SER:N	1:A:369:PRO:HD2	2.11	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:250:LEU:N	1:A:250:LEU:HD13	2.09	0.66
1:A:87:GLN:HE21	1:A:87:GLN:HA	1.60	0.66
1:A:182:ILE:HG12	1:A:183:ALA:N	2.11	0.66
1:A:363:LEU:HD11	1:A:370:LEU:CD1	2.23	0.66
1:A:364:LEU:HD22	1:A:365:ILE:HG13	1.77	0.66
1:A:354:ALA:O	1:A:355:VAL:HG13	1.96	0.65
1:A:47:ILE:HG21	1:A:355:VAL:CG1	2.15	0.65
1:A:389:MET:C	1:A:389:MET:SD	2.74	0.65
1:A:294:VAL:HG12	1:A:295:THR:N	2.11	0.65
1:A:40:THR:HA	1:A:384:SER:O	1.97	0.65
1:A:418:ASN:CB	1:A:421:THR:HG1	2.07	0.65
1:A:140:ASN:CG	1:A:351:GLY:HA3	2.17	0.65
1:A:51:ALA:O	1:A:160:ILE:HD13	1.97	0.65
1:A:273:GLN:HG2	1:A:274:PRO:HD3	1.79	0.65
1:A:148:ARG:HH12	1:A:167:PRO:HD3	1.27	0.65
1:A:47:ILE:CG2	1:A:355:VAL:HG12	2.15	0.65
1:A:87:GLN:NE2	1:A:328:LYS:HD2	2.11	0.64
1:A:389:MET:O	1:A:390:GLU:HB3	1.97	0.64
1:A:124:GLN:HE22	1:A:363:LEU:HA	1.62	0.64
1:A:259:MET:H	1:A:333:HIS:CD2	2.15	0.64
1:A:350:ILE:HG22	1:A:351:GLY:H	1.60	0.64
1:A:156:ASP:HA	1:A:158:PRO:CG	2.27	0.64
1:A:268:TYR:CB	1:A:409:THR:CG2	2.75	0.64
1:A:63:THR:O	1:A:65:VAL:N	2.30	0.64
1:A:84:TYR:N	1:A:84:TYR:CD1	2.64	0.64
1:A:139:LEU:HD23	1:A:140:ASN:H	1.63	0.64
1:A:197:GLY:O	1:A:198:ASN:O	2.16	0.64
1:A:315:PHE:N	1:A:315:PHE:CD1	2.63	0.64
1:A:273:GLN:O	1:A:276:VAL:O	2.17	0.63
1:A:322:ILE:C	1:A:323:TYR:HA	2.17	0.63
1:A:58:THR:HG21	1:A:64:ALA:N	2.12	0.63
1:A:80:LYS:HB2	1:A:181:MET:HE1	1.81	0.63
1:A:50:LEU:HB3	1:A:53:ASN:ND2	2.12	0.63
1:A:156:ASP:C	1:A:157:GLN:HG2	2.19	0.63
1:A:363:LEU:CD1	1:A:367:SER:OG	2.46	0.62
1:A:250:LEU:HD22	1:A:250:LEU:O	1.98	0.62
1:A:109:ARG:O	1:A:110:THR:HB	1.99	0.62
1:A:154:GLN:HG2	1:A:160:ILE:O	1.99	0.62
1:A:318:ASP:OD1	1:A:318:ASP:O	2.18	0.62
1:A:40:THR:C	1:A:41:LYS:HG3	2.18	0.62
1:A:49:GLY:HA3	1:A:358:LEU:CD1	2.25	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:51:ALA:O	1:A:53:ASN:ND2	2.32	0.62
1:A:137:ILE:O	1:A:140:ASN:ND2	2.33	0.62
1:A:270:ILE:HG23	1:A:270:ILE:O	2.00	0.62
1:A:106:VAL:HG22	1:A:250:LEU:O	2.00	0.61
1:A:118:SER:HB2	1:A:120:THR:OG1	1.98	0.61
1:A:70:THR:HA	1:A:218:CYS:HB3	1.82	0.61
1:A:152:ALA:HB3	1:A:163:ALA:HB3	1.81	0.61
1:A:299:GLU:HB3	1:A:309:HIS:ND1	2.15	0.61
1:A:58:THR:HG21	1:A:63:THR:C	2.21	0.61
1:A:273:GLN:HG2	1:A:274:PRO:CD	2.30	0.61
1:A:66:ASN:OD1	1:A:220:TYR:CE1	2.53	0.61
1:A:78:TRP:CE3	1:A:352:ILE:HG12	2.36	0.61
1:A:294:VAL:HG12	1:A:295:THR:H	1.65	0.61
1:A:119:SER:O	1:A:120:THR:C	2.38	0.61
1:A:124:GLN:HE22	1:A:363:LEU:CA	2.13	0.61
1:A:245:VAL:HG22	1:A:250:LEU:HD12	1.82	0.61
1:A:344:ILE:N	1:A:344:ILE:HD12	2.16	0.61
1:A:116:GLU:HG3	1:A:123:LYS:O	2.01	0.61
1:A:315:PHE:N	1:A:315:PHE:HD1	1.99	0.60
1:A:148:ARG:HD2	1:A:165:THR:N	2.15	0.60
1:A:152:ALA:HB3	1:A:162:THR:O	2.01	0.60
1:A:188:ALA:HB2	1:A:195:ALA:CB	2.30	0.60
1:A:78:TRP:HH2	1:A:350:ILE:HB	1.67	0.60
1:A:132:ASN:HB2	1:A:240:PHE:O	2.01	0.60
1:A:343:GLN:HB3	1:A:344:ILE:HD12	1.84	0.60
1:A:93:LEU:HB2	1:A:263:LYS:HE3	1.82	0.59
1:A:53:ASN:HB3	1:A:161:PRO:CD	2.31	0.59
1:A:241:ASP:O	1:A:243:LYS:N	2.35	0.59
1:A:396:PHE:HB2	1:A:399:SER:HB3	1.84	0.59
1:A:47:ILE:HG22	1:A:48:PHE:N	2.15	0.59
1:A:325:ASP:O	1:A:327:GLU:N	2.35	0.59
1:A:394:THR:HA	1:A:403:ASN:OD1	2.03	0.59
1:A:288:ASN:C	1:A:289:MET:SD	2.81	0.58
1:A:145:GLY:O	1:A:425:ASN:ND2	2.36	0.58
1:A:109:ARG:HG2	1:A:109:ARG:NH1	2.18	0.58
1:A:139:LEU:HD21	1:A:353:GLN:OE1	2.02	0.58
1:A:100:VAL:HB	1:A:387:THR:OG1	2.04	0.58
1:A:159:MET:HG3	1:A:358:LEU:CD2	2.33	0.58
1:A:400:THR:HG23	1:A:401:GLU:HG3	1.85	0.58
1:A:233:LEU:HD22	1:A:237:LEU:CD2	2.32	0.58
1:A:268:TYR:CD1	1:A:406:PRO:HD3	2.38	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:315:PHE:HB2	1:A:316:PRO:CD	2.34	0.58
1:A:420:LEU:HD13	1:A:430:ASN:N	2.13	0.58
1:A:109:ARG:HD2	1:A:247:ASN:OD1	2.04	0.58
1:A:243:LYS:NZ	1:A:243:LYS:HB3	2.19	0.58
1:A:98:ARG:NH2	1:A:261:LEU:HB2	2.19	0.58
1:A:53:ASN:HB3	1:A:161:PRO:HD3	1.84	0.58
1:A:98:ARG:O	1:A:388:VAL:CG1	2.49	0.58
1:A:270:ILE:HG13	1:A:277:LYS:CD	2.34	0.58
1:A:295:THR:N	1:A:313:ARG:O	2.37	0.58
1:A:322:ILE:HG23	1:A:327:GLU:CB	2.34	0.57
1:A:203:PRO:HG2	1:A:207:VAL:HG21	1.85	0.57
1:A:274:PRO:C	1:A:276:VAL:H	2.06	0.57
1:A:325:ASP:C	1:A:327:GLU:H	2.06	0.57
1:A:421:THR:HG21	1:A:434:LEU:CD1	2.23	0.57
1:A:204:HIS:HD2	1:A:209:SER:HB3	1.59	0.57
1:A:159:MET:SD	1:A:375:ASP:HA	2.44	0.57
1:A:204:HIS:CD2	1:A:209:SER:HB2	2.39	0.57
1:A:418:ASN:HD21	1:A:433:THR:H	1.52	0.57
1:A:148:ARG:CZ	1:A:167:PRO:HD3	2.23	0.57
1:A:48:PHE:HB2	1:A:50:LEU:CD2	2.35	0.57
1:A:68:LEU:CG	1:A:220:TYR:CD1	2.86	0.57
1:A:268:TYR:HB3	1:A:409:THR:CG2	2.35	0.56
1:A:53:ASN:HA	1:A:160:ILE:HG23	1.87	0.56
1:A:268:TYR:CE1	1:A:406:PRO:HD3	2.40	0.56
1:A:124:GLN:NE2	1:A:362:ALA:C	2.59	0.56
1:A:215:ASN:O	1:A:216:TYR:HD1	1.88	0.56
1:A:137:ILE:HG23	1:A:352:ILE:HG22	1.88	0.56
1:A:122:THR:N	1:A:123:LYS:CG	2.66	0.56
1:A:159:MET:CB	1:A:358:LEU:HD22	2.35	0.56
1:A:273:GLN:CG	1:A:274:PRO:CD	2.83	0.56
1:A:302:GLN:HB2	1:A:306:GLU:CA	2.35	0.56
1:A:106:VAL:CG1	1:A:382:VAL:HG22	2.36	0.56
1:A:156:ASP:OD1	1:A:157:GLN:OE1	2.23	0.56
1:A:195:ALA:O	1:A:196:PHE:HB2	2.05	0.56
1:A:423:ALA:O	1:A:424:PHE:HB3	2.06	0.56
1:A:242:SER:HA	1:A:245:VAL:HG12	1.88	0.56
1:A:55:ILE:HG22	1:A:69:LEU:HD23	1.86	0.56
1:A:150:PHE:O	1:A:165:THR:OG1	2.24	0.56
1:A:101:GLU:HB2	1:A:256:LYS:HG3	1.86	0.56
1:A:328:LYS:C	1:A:330:GLN:H	2.08	0.56
1:A:111:ASN:HA	1:A:378:GLY:HA2	1.87	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:413:ILE:HG23	1:A:413:ILE:O	2.07	0.55
1:A:46:MET:O	1:A:47:ILE:HD13	2.06	0.55
1:A:273:GLN:HG2	1:A:274:PRO:N	2.22	0.55
1:A:81:LEU:N	1:A:82:PRO:HD2	2.22	0.55
1:A:22:VAL:HG13	1:A:23:TYR:N	2.22	0.55
1:A:210:PHE:N	1:A:210:PHE:CD1	2.75	0.54
1:A:251:ILE:O	1:A:252:ASP:HB2	2.06	0.54
1:A:326:ILE:HG22	1:A:326:ILE:O	2.08	0.54
1:A:317:ALA:HB1	1:A:411:TYR:CG	2.42	0.54
1:A:322:ILE:CG2	1:A:327:GLU:CB	2.85	0.54
1:A:340:GLU:HA	1:A:410:ILE:HA	1.89	0.54
1:A:271:ILE:HG13	1:A:396:PHE:CE2	2.42	0.54
1:A:279:THR:OG1	1:A:280:ILE:N	2.41	0.54
1:A:36:LEU:HD23	1:A:389:MET:CB	2.26	0.54
1:A:317:ALA:HB1	1:A:411:TYR:CB	2.36	0.54
1:A:149:ALA:HB3	1:A:215:ASN:OD1	2.08	0.54
1:A:159:MET:HG3	1:A:358:LEU:HD21	1.88	0.54
1:A:124:GLN:HE22	1:A:363:LEU:N	2.07	0.53
1:A:294:VAL:HG13	1:A:314:ASN:ND2	2.23	0.53
1:A:412:ARG:NH1	1:A:412:ARG:HG3	2.17	0.53
1:A:268:TYR:HB3	1:A:409:THR:HG22	1.87	0.53
1:A:41:LYS:CE	1:A:85:MET:HA	2.16	0.53
1:A:424:PHE:CE2	1:A:431:GLY:O	2.62	0.53
1:A:123:LYS:O	1:A:124:GLN:C	2.46	0.53
1:A:106:VAL:HG12	1:A:382:VAL:HG22	1.90	0.53
1:A:217:TYR:CD1	1:A:217:TYR:C	2.82	0.53
1:A:50:LEU:HA	1:A:159:MET:O	2.08	0.53
1:A:195:ALA:HB1	1:A:201:ASN:HB2	1.90	0.53
1:A:133:VAL:HG12	1:A:134:GLN:N	2.24	0.53
1:A:197:GLY:O	1:A:198:ASN:C	2.37	0.52
1:A:322:ILE:HG21	1:A:327:GLU:HB2	1.90	0.52
1:A:137:ILE:HD12	1:A:352:ILE:HG22	1.90	0.52
1:A:424:PHE:CZ	1:A:431:GLY:O	2.62	0.52
1:A:90:PHE:O	1:A:93:LEU:HG	2.08	0.52
1:A:46:MET:C	1:A:47:ILE:HD13	2.29	0.52
1:A:126:THR:HG23	1:A:128:ASN:H	1.73	0.52
1:A:268:TYR:CE2	1:A:406:PRO:HG3	2.45	0.52
1:A:58:THR:HG22	1:A:60:THR:N	2.24	0.52
1:A:58:THR:HG22	1:A:60:THR:O	2.08	0.52
1:A:90:PHE:CD2	1:A:328:LYS:HB3	2.45	0.52
1:A:140:ASN:ND2	1:A:351:GLY:C	2.63	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:164:THR:C	1:A:165:THR:HG23	2.30	0.52
1:A:173:THR:OG1	1:A:177:GLY:HA2	2.09	0.52
1:A:35:LYS:O	1:A:389:MET:HB2	2.10	0.52
1:A:51:ALA:HB1	1:A:373:TRP:CD1	2.44	0.52
1:A:309:HIS:ND1	1:A:309:HIS:N	2.58	0.52
1:A:49:GLY:O	1:A:159:MET:HB3	2.10	0.52
1:A:138:GLY:O	1:A:139:LEU:C	2.48	0.52
1:A:409:THR:O	1:A:410:ILE:HG22	2.10	0.52
1:A:159:MET:HE1	1:A:376:SER:H	1.74	0.51
1:A:167:PRO:HA	1:A:215:ASN:OD1	2.11	0.51
1:A:152:ALA:HB3	1:A:163:ALA:HB2	1.91	0.51
1:A:270:ILE:HG13	1:A:277:LYS:HG2	1.92	0.51
1:A:145:GLY:O	1:A:425:ASN:CB	2.58	0.51
1:A:47:ILE:CD1	1:A:213:LEU:HB2	2.41	0.51
1:A:130:ILE:CG2	1:A:130:ILE:O	2.59	0.51
1:A:73:LEU:CA	1:A:355:VAL:HG21	2.39	0.51
1:A:86:ASN:OD1	1:A:89:GLU:HG2	2.10	0.51
1:A:152:ALA:CB	1:A:163:ALA:CB	2.84	0.51
1:A:164:THR:O	1:A:165:THR:OG1	2.29	0.51
1:A:173:THR:HA	1:A:178:TYR:CE1	2.45	0.51
1:A:93:LEU:HB2	1:A:263:LYS:CE	2.41	0.51
1:A:82:PRO:HA	1:A:85:MET:O	2.10	0.51
1:A:306:GLU:N	1:A:306:GLU:CD	2.64	0.51
1:A:78:TRP:HB2	1:A:104:VAL:HG21	1.93	0.50
1:A:242:SER:O	1:A:245:VAL:HG12	2.10	0.50
1:A:358:LEU:CD1	1:A:376:SER:OG	2.59	0.50
1:A:78:TRP:O	1:A:78:TRP:CG	2.64	0.50
1:A:148:ARG:NH1	1:A:167:PRO:HG3	2.26	0.50
1:A:299:GLU:HB3	1:A:309:HIS:HD1	1.74	0.50
1:A:408:ASN:O	1:A:410:ILE:N	2.45	0.50
1:A:294:VAL:CG1	1:A:295:THR:H	2.23	0.50
1:A:416:THR:HB	1:A:417:PRO:CD	2.39	0.50
1:A:140:ASN:HD21	1:A:351:GLY:C	2.15	0.50
1:A:190:SER:HA	1:A:196:PHE:CE1	2.46	0.50
1:A:106:VAL:HG13	1:A:251:ILE:CG2	2.41	0.50
1:A:164:THR:OG1	1:A:165:THR:N	2.43	0.50
1:A:140:ASN:CG	1:A:141:LYS:H	2.10	0.50
1:A:188:ALA:HB1	1:A:192:ASN:HB3	1.93	0.50
1:A:102:CYS:SG	1:A:102:CYS:O	2.70	0.50
1:A:148:ARG:HA	1:A:148:ARG:CZ	2.36	0.50
1:A:148:ARG:O	1:A:148:ARG:HG3	2.11	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:54:VAL:CG2	1:A:160:ILE:HD12	2.38	0.49
1:A:193:ASP:O	1:A:195:ALA:N	2.45	0.49
1:A:248:GLN:O	1:A:250:LEU:HD13	2.12	0.49
1:A:301:THR:O	1:A:307:SER:HB3	2.12	0.49
1:A:350:ILE:CG2	1:A:351:GLY:N	2.73	0.49
1:A:60:THR:OG1	1:A:62:THR:N	2.42	0.49
1:A:421:THR:H	1:A:424:PHE:HZ	1.60	0.49
1:A:51:ALA:HB1	1:A:373:TRP:NE1	2.28	0.49
1:A:107:ILE:O	1:A:109:ARG:N	2.44	0.49
1:A:95:PRO:HB3	1:A:264:SER:O	2.11	0.49
1:A:409:THR:O	1:A:410:ILE:CG2	2.60	0.49
1:A:410:ILE:O	1:A:411:TYR:CG	2.65	0.49
1:A:294:VAL:CG1	1:A:295:THR:N	2.75	0.49
1:A:245:VAL:CG2	1:A:250:LEU:HD12	2.42	0.49
1:A:57:PRO:HB3	1:A:67:ARG:NH1	2.28	0.49
1:A:148:ARG:HH11	1:A:167:PRO:CD	2.16	0.49
1:A:286:LEU:HD22	1:A:286:LEU:H	1.76	0.49
1:A:72:CYS:C	1:A:355:VAL:HG11	2.33	0.49
1:A:364:LEU:HD22	1:A:365:ILE:CG1	2.43	0.49
1:A:55:ILE:HG12	1:A:55:ILE:O	2.12	0.49
1:A:268:TYR:CE1	1:A:269:LYS:O	2.66	0.48
1:A:136:ALA:C	1:A:137:ILE:HD13	2.32	0.48
1:A:154:GLN:NE2	1:A:157:GLN:O	2.45	0.48
1:A:322:ILE:CA	1:A:323:TYR:N	2.75	0.48
1:A:406:PRO:O	1:A:407:GLY:C	2.52	0.48
1:A:53:ASN:CG	1:A:70:THR:HB	2.32	0.48
1:A:74:ALA:H	1:A:355:VAL:HG13	1.79	0.48
1:A:149:ALA:CB	1:A:215:ASN:HA	2.43	0.48
1:A:36:LEU:CD2	1:A:389:MET:HB3	2.29	0.48
1:A:250:LEU:HD23	1:A:250:LEU:O	2.14	0.48
1:A:101:GLU:HA	1:A:256:LYS:HA	1.96	0.48
1:A:49:GLY:O	1:A:358:LEU:HD13	2.13	0.48
1:A:104:VAL:O	1:A:252:ASP:HA	2.14	0.47
1:A:277:LYS:HD3	1:A:277:LYS:HA	1.59	0.47
1:A:93:LEU:HA	1:A:94:PRO:HD3	1.71	0.47
1:A:182:ILE:HG12	1:A:183:ALA:H	1.76	0.47
1:A:341:ASN:C	1:A:411:TYR:HE2	2.18	0.47
1:A:421:THR:HG22	1:A:424:PHE:CE1	2.46	0.47
1:A:139:LEU:O	1:A:140:ASN:C	2.52	0.47
1:A:144:TRP:CZ2	1:A:231:PRO:HB2	2.50	0.47
1:A:36:LEU:HA	1:A:389:MET:CB	2.44	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:46:MET:HE3	1:A:379:TYR:HB2	1.97	0.47
1:A:99:VAL:CG2	1:A:388:VAL:HG21	2.30	0.47
1:A:124:GLN:CD	1:A:124:GLN:H	2.16	0.47
1:A:233:LEU:O	1:A:236:HIS:N	2.47	0.47
1:A:153:PHE:CD2	1:A:161:PRO:HA	2.49	0.47
1:A:47:ILE:HG22	1:A:48:PHE:O	2.14	0.47
1:A:65:VAL:O	1:A:222:GLN:HB2	2.15	0.47
1:A:322:ILE:O	1:A:323:TYR:HB2	2.15	0.47
1:A:365:ILE:HB	1:A:366:ASN:H	1.35	0.47
1:A:55:ILE:CG2	1:A:69:LEU:HA	2.39	0.47
1:A:149:ALA:O	1:A:164:THR:O	2.33	0.47
1:A:315:PHE:H	1:A:315:PHE:HD1	1.61	0.47
1:A:130:ILE:HG23	1:A:130:ILE:O	2.15	0.47
1:A:150:PHE:HE2	1:A:214:GLN:HE21	1.63	0.47
1:A:274:PRO:C	1:A:276:VAL:N	2.67	0.47
1:A:109:ARG:NH1	1:A:381:ASP:OD2	2.47	0.47
1:A:78:TRP:CH2	1:A:350:ILE:HB	2.48	0.47
1:A:103:ASN:HB2	1:A:254:THR:HB	1.97	0.46
1:A:148:ARG:CD	1:A:165:THR:C	2.83	0.46
1:A:78:TRP:O	1:A:349:HIS:CE1	2.68	0.46
1:A:364:LEU:HD22	1:A:365:ILE:CD1	2.45	0.46
1:A:66:ASN:HB2	1:A:222:GLN:HB2	1.96	0.46
1:A:141:LYS:HG3	1:A:349:HIS:O	2.15	0.46
1:A:152:ALA:CB	1:A:162:THR:O	2.60	0.46
1:A:215:ASN:C	1:A:216:TYR:HD1	2.19	0.46
1:A:324:SER:HB3	1:A:327:GLU:HG2	1.97	0.46
1:A:58:THR:CG2	1:A:60:THR:O	2.63	0.46
1:A:268:TYR:OH	1:A:270:ILE:HD12	2.15	0.46
1:A:152:ALA:HB2	1:A:163:ALA:HB3	1.96	0.46
1:A:123:LYS:CD	1:A:157:GLN:HE21	2.28	0.46
1:A:179:ARG:HH22	1:A:181:MET:CA	2.28	0.46
1:A:308:THR:C	1:A:309:HIS:ND1	2.68	0.46
1:A:333:HIS:CE1	1:A:335:GLY:HA3	2.51	0.46
1:A:142:LEU:HD22	1:A:142:LEU:N	2.31	0.46
1:A:54:VAL:H	1:A:160:ILE:HD12	1.80	0.46
1:A:172:VAL:O	1:A:177:GLY:HA2	2.14	0.46
1:A:294:VAL:HG22	1:A:314:ASN:CG	2.36	0.46
1:A:421:THR:N	1:A:424:PHE:CZ	2.83	0.46
1:A:130:ILE:HA	1:A:130:ILE:HD12	1.78	0.46
1:A:261:LEU:HD11	1:A:263:LYS:O	2.15	0.46
1:A:88:SER:O	1:A:89:GLU:C	2.54	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:47:ILE:CG2	1:A:48:PHE:N	2.78	0.46
1:A:139:LEU:O	1:A:143:GLY:N	2.45	0.46
1:A:316:PRO:O	1:A:317:ALA:HB2	2.15	0.46
1:A:78:TRP:CZ3	1:A:352:ILE:HG12	2.51	0.46
1:A:371:ASN:H	1:A:371:ASN:HD22	1.64	0.46
1:A:406:PRO:CA	1:A:409:THR:CG2	2.70	0.46
1:A:108:PHE:O	1:A:247:ASN:N	2.49	0.45
1:A:219:MET:H	1:A:219:MET:HG2	1.55	0.45
1:A:251:ILE:CG2	1:A:252:ASP:N	2.76	0.45
1:A:137:ILE:HG22	1:A:138:GLY:N	2.31	0.45
1:A:178:TYR:N	1:A:178:TYR:CD1	2.83	0.45
1:A:202:TYR:HB3	1:A:203:PRO:HD2	1.97	0.45
1:A:105:LYS:HA	1:A:251:ILE:HG22	1.99	0.45
1:A:293:VAL:HB	1:A:315:PHE:CE1	2.51	0.45
1:A:50:LEU:N	1:A:50:LEU:CD2	2.78	0.45
1:A:60:THR:HG21	1:A:62:THR:OG1	2.17	0.45
1:A:172:VAL:HG23	1:A:178:TYR:CD1	2.36	0.45
1:A:213:LEU:HA	1:A:213:LEU:HD23	1.83	0.45
1:A:395:HIS:H	1:A:403:ASN:HD21	1.65	0.45
1:A:66:ASN:HB2	1:A:222:GLN:CB	2.47	0.45
1:A:108:PHE:HB2	1:A:250:LEU:HD11	1.99	0.45
1:A:133:VAL:CG1	1:A:134:GLN:N	2.79	0.45
1:A:168:LYS:HD3	1:A:172:VAL:CG2	2.41	0.45
1:A:214:GLN:HG2	1:A:214:GLN:H	1.58	0.45
1:A:233:LEU:O	1:A:235:GLU:N	2.49	0.45
1:A:255:TYR:CZ	1:A:349:HIS:HA	2.51	0.45
1:A:203:PRO:HG2	1:A:207:VAL:HG22	1.99	0.45
1:A:170:GLU:HB2	1:A:171:PRO:HD2	1.99	0.45
1:A:363:LEU:CD1	1:A:370:LEU:HD13	2.29	0.45
1:A:51:ALA:CB	1:A:373:TRP:CD1	2.99	0.45
1:A:318:ASP:HA	1:A:411:TYR:HA	1.98	0.45
1:A:248:GLN:NE2	1:A:249:CYS:N	2.64	0.45
1:A:290:ARG:H	1:A:290:ARG:HG2	1.57	0.45
1:A:58:THR:HB	1:A:64:ALA:CA	2.44	0.45
1:A:92:LEU:HD12	1:A:92:LEU:N	2.32	0.45
1:A:413:ILE:HA	1:A:413:ILE:HD12	1.73	0.44
1:A:58:THR:N	1:A:66:ASN:O	2.50	0.44
1:A:69:LEU:HB2	1:A:230:TRP:CH2	2.52	0.44
1:A:299:GLU:O	1:A:308:THR:HA	2.18	0.44
1:A:142:LEU:CD1	1:A:428:TYR:CE2	2.88	0.44
1:A:48:PHE:HB2	1:A:50:LEU:HD21	1.98	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:73:LEU:HD12	1:A:355:VAL:CG2	2.45	0.44
1:A:339:HIS:CD2	1:A:411:TYR:HB2	2.52	0.44
1:A:343:GLN:C	1:A:344:ILE:HG13	2.38	0.44
1:A:84:TYR:HD1	1:A:84:TYR:H	1.64	0.44
1:A:106:VAL:HG23	1:A:250:LEU:CD2	2.47	0.44
1:A:109:ARG:HG2	1:A:109:ARG:HH11	1.82	0.44
1:A:154:GLN:CG	1:A:158:PRO:HA	2.46	0.44
1:A:154:GLN:OE1	1:A:159:MET:N	2.51	0.44
1:A:306:GLU:N	1:A:306:GLU:OE2	2.50	0.44
1:A:109:ARG:O	1:A:110:THR:CB	2.65	0.44
1:A:266:LEU:HD13	1:A:267:ASN:H	1.83	0.44
1:A:336:PRO:CG	1:A:420:LEU:HD12	2.38	0.44
1:A:60:THR:OG1	1:A:62:THR:HG23	2.17	0.44
1:A:149:ALA:HB3	1:A:215:ASN:HA	1.99	0.44
1:A:167:PRO:HB3	1:A:215:ASN:OD1	2.18	0.44
1:A:85:MET:HB2	1:A:89:GLU:HG3	2.00	0.44
1:A:212:PHE:CD1	1:A:212:PHE:N	2.85	0.44
1:A:242:SER:O	1:A:246:ASN:N	2.51	0.44
1:A:242:SER:OG	1:A:243:LYS:N	2.50	0.44
1:A:222:GLN:CG	1:A:223:THR:N	2.75	0.44
1:A:246:ASN:O	1:A:248:GLN:N	2.50	0.44
1:A:297:PRO:HG2	1:A:311:LEU:HD13	2.00	0.43
1:A:406:PRO:O	1:A:408:ASN:N	2.51	0.43
1:A:266:LEU:HD11	1:A:402:ALA:CB	2.48	0.43
1:A:69:LEU:HB3	1:A:219:MET:HG3	2.01	0.43
1:A:413:ILE:CG2	1:A:413:ILE:O	2.67	0.43
1:A:268:TYR:CZ	1:A:406:PRO:HG3	2.53	0.43
1:A:328:LYS:C	1:A:330:GLN:N	2.71	0.43
1:A:255:TYR:CZ	1:A:257:PRO:HA	2.52	0.43
1:A:406:PRO:C	1:A:408:ASN:N	2.69	0.43
1:A:76:ILE:HG12	1:A:213:LEU:HD11	2.01	0.43
1:A:47:ILE:HD11	1:A:213:LEU:HD12	1.99	0.43
1:A:237:LEU:O	1:A:237:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:45:PHE:HB3	1:A:213:LEU:HG	2.00	0.43
1:A:68:LEU:CD2	1:A:220:TYR:CD1	3.02	0.43
1:A:137:ILE:HG23	1:A:352:ILE:CG2	2.48	0.42
1:A:246:ASN:CG	1:A:247:ASN:N	2.71	0.42
1:A:379:TYR:C	1:A:379:TYR:CD1	2.93	0.42
1:A:173:THR:OG1	1:A:177:GLY:CA	2.67	0.42
1:A:70:THR:CG2	1:A:218:CYS:HB3	2.49	0.42
1:A:238:GLN:H	1:A:238:GLN:CD	2.22	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:418:ASN:ND2	1:A:421:THR:CB	2.78	0.42
1:A:105:LYS:HA	1:A:252:ASP:HA	2.01	0.42
1:A:297:PRO:HG2	1:A:311:LEU:CD1	2.50	0.42
1:A:323:TYR:CG	1:A:324:SER:N	2.87	0.42
1:A:341:ASN:HB2	1:A:408:ASN:HA	2.01	0.42
1:A:54:VAL:HG23	1:A:160:ILE:CD1	2.38	0.42
1:A:66:ASN:OD1	1:A:66:ASN:C	2.58	0.42
1:A:89:GLU:H	1:A:89:GLU:HG2	1.51	0.42
1:A:358:LEU:HA	1:A:358:LEU:HD12	1.66	0.42
1:A:87:GLN:O	1:A:91:ASP:HB2	2.19	0.42
1:A:195:ALA:O	1:A:196:PHE:CB	2.66	0.42
1:A:246:ASN:C	1:A:248:GLN:N	2.72	0.42
1:A:336:PRO:HG2	1:A:420:LEU:CD1	2.40	0.42
1:A:124:GLN:NE2	1:A:363:LEU:N	2.67	0.42
1:A:44:LYS:HD3	1:A:379:TYR:OH	2.20	0.42
1:A:45:PHE:HZ	1:A:83:LEU:HD11	1.84	0.42
1:A:60:THR:CG2	1:A:63:THR:OG1	2.67	0.42
1:A:82:PRO:HG2	1:A:181:MET:HE2	2.01	0.42
1:A:53:ASN:HB3	1:A:161:PRO:HD2	2.00	0.42
1:A:108:PHE:CB	1:A:250:LEU:HD11	2.49	0.42
1:A:259:MET:H	1:A:333:HIS:HD2	1.65	0.42
1:A:367:SER:O	1:A:368:SER:OG	2.27	0.42
1:A:57:PRO:HG3	1:A:67:ARG:NH1	2.34	0.42
1:A:84:TYR:CE2	1:A:102:CYS:HB2	2.55	0.42
1:A:146:ILE:HG13	1:A:424:PHE:HA	2.02	0.42
1:A:49:GLY:O	1:A:358:LEU:HD22	2.20	0.42
1:A:148:ARG:HH11	1:A:167:PRO:CG	2.31	0.41
1:A:22:VAL:HG22	1:A:23:TYR:H	1.84	0.41
1:A:103:ASN:HD21	1:A:105:LYS:HG2	1.85	0.41
1:A:73:LEU:HB3	1:A:353:GLN:HG2	2.01	0.41
1:A:363:LEU:HG	1:A:367:SER:CB	2.50	0.41
1:A:78:TRP:HA	1:A:84:TYR:OH	2.19	0.41
1:A:241:ASP:O	1:A:242:SER:C	2.59	0.41
1:A:148:ARG:HD2	1:A:165:THR:O	2.10	0.41
1:A:179:ARG:HH22	1:A:181:MET:HA	1.85	0.41
1:A:193:ASP:O	1:A:195:ALA:O	2.37	0.41
1:A:96:GLY:HA2	1:A:261:LEU:HD21	2.01	0.41
1:A:246:ASN:C	1:A:248:GLN:H	2.24	0.41
1:A:370:LEU:HA	1:A:370:LEU:HD13	1.82	0.41
1:A:123:LYS:HE3	1:A:157:GLN:HE21	1.85	0.41
1:A:123:LYS:O	1:A:124:GLN:O	2.38	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:128:ASN:O	1:A:129:GLN:HG3	2.21	0.41
1:A:328:LYS:HG3	1:A:329:SER:N	2.36	0.41
1:A:341:ASN:OD1	1:A:342:PRO:HD2	2.20	0.41
1:A:421:THR:O	1:A:423:ALA:N	2.53	0.41
1:A:358:LEU:CD2	1:A:373:TRP:HB3	2.38	0.41
1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HD3	1.72	0.41
1:A:83:LEU:HA	1:A:83:LEU:HD12	1.88	0.41
1:A:255:TYR:CE2	1:A:257:PRO:CA	3.01	0.41
1:A:317:ALA:HA	1:A:412:ARG:O	2.21	0.41
1:A:371:ASN:H	1:A:371:ASN:ND2	2.17	0.41
1:A:364:LEU:CD1	1:A:364:LEU:C	2.89	0.41
1:A:39:TYR:O	1:A:385:SER:CA	2.66	0.41
1:A:182:ILE:CG1	1:A:183:ALA:N	2.81	0.40
1:A:303:ASN:O	1:A:304:VAL:HB	2.20	0.40
1:A:322:ILE:C	1:A:323:TYR:CB	2.89	0.40
1:A:158:PRO:HG2	1:A:375:ASP:OD2	2.21	0.40
1:A:79:GLN:HG2	1:A:79:GLN:O	2.17	0.40
1:A:345:GLN:HA	1:A:346:PRO:HD3	1.94	0.40
1:A:78:TRP:O	1:A:349:HIS:NE2	2.55	0.40
1:A:224:ASN:O	1:A:226:GLY:N	2.54	0.40
1:A:263:LYS:O	1:A:264:SER:C	2.60	0.40
1:A:46:MET:CE	1:A:379:TYR:HB2	2.50	0.40
1:A:169:TYR:CE1	1:A:215:ASN:ND2	2.89	0.40
1:A:193:ASP:C	1:A:195:ALA:H	2.24	0.40
1:A:193:ASP:C	1:A:195:ALA:N	2.75	0.40
1:A:255:TYR:HE2	1:A:333:HIS:HB2	1.86	0.40
1:A:85:MET:HG3	1:A:89:GLU:HB2	2.03	0.40
1:A:172:VAL:CG2	1:A:178:TYR:HD1	2.24	0.40
1:A:345:GLN:HG2	1:A:346:PRO:HD3	2.03	0.40
1:A:50:LEU:CB	1:A:53:ASN:HD21	2.23	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	413/437 (94%)	257 (62%)	87 (21%)	69 (17%)	0	3

All (69) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	52	ASN
1	A	64	ALA
1	A	110	THR
1	A	128	ASN
1	A	140	ASN
1	A	148	ARG
1	A	150	PHE
1	A	154	GLN
1	A	164	THR
1	A	201	ASN
1	A	204	HIS
1	A	208	SER
1	A	242	SER
1	A	247	ASN
1	A	252	ASP
1	A	273	GLN
1	A	275	THR
1	A	297	PRO
1	A	316	PRO
1	A	324	SER
1	A	325	ASP
1	A	346	PRO
1	A	365	ILE
1	A	410	ILE
1	A	423	ALA
1	A	428	TYR
1	A	73	LEU
1	A	79	GLN
1	A	124	GLN
1	A	129	GLN
1	A	143	GLY
1	A	163	ALA
1	A	179	ARG
1	A	194	THR
1	A	199	ALA

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	207	VAL
1	A	234	ALA
1	A	283	GLY
1	A	304	VAL
1	A	318	ASP
1	A	320	PHE
1	A	326	ILE
1	A	342	PRO
1	A	345	GLN
1	A	356	PRO
1	A	363	LEU
1	A	364	LEU
1	A	402	ALA
1	A	53	ASN
1	A	161	PRO
1	A	221	GLN
1	A	424	PHE
1	A	139	LEU
1	A	228	GLY
1	A	265	PRO
1	A	400	THR
1	A	120	THR
1	A	305	ALA
1	A	341	ASN
1	A	87	GLN
1	A	88	SER
1	A	246	ASN
1	A	344	ILE
1	A	368	SER
1	A	417	PRO
1	A	137	ILE
1	A	407	GLY
1	A	157	GLN
1	A	355	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	356/371 (96%)	242 (68%)	114 (32%)	0 2

All (114) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	22	VAL
1	A	27	ARG
1	A	36	LEU
1	A	40	THR
1	A	50	LEU
1	A	53	ASN
1	A	55	ILE
1	A	65	VAL
1	A	66	ASN
1	A	67	ARG
1	A	69	LEU
1	A	70	THR
1	A	75	GLU
1	A	78	TRP
1	A	79	GLN
1	A	85	MET
1	A	87	GLN
1	A	89	GLU
1	A	91	ASP
1	A	98	ARG
1	A	105	LYS
1	A	117	THR
1	A	120	THR
1	A	121	VAL
1	A	122	THR
1	A	124	GLN
1	A	126	THR
1	A	127	LEU
1	A	130	ILE
1	A	132	ASN
1	A	139	LEU
1	A	140	ASN
1	A	144	TRP
1	A	148	ARG
1	A	151	THR
1	A	154	GLN
1	A	156	ASP
1	A	162	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	170	GLU
1	A	172	VAL
1	A	176	THR
1	A	178	TYR
1	A	182	ILE
1	A	191	THR
1	A	196	PHE
1	A	208	SER
1	A	214	GLN
1	A	217	TYR
1	A	218	CYS
1	A	219	MET
1	A	220	TYR
1	A	222	GLN
1	A	224	ASN
1	A	225	GLN
1	A	233	LEU
1	A	238	GLN
1	A	243	LYS
1	A	246	ASN
1	A	247	ASN
1	A	248	GLN
1	A	249	CYS
1	A	250	LEU
1	A	251	ILE
1	A	259	MET
1	A	266	LEU
1	A	268	TYR
1	A	271	ILE
1	A	277	LYS
1	A	279	THR
1	A	281	SER
1	A	285	ASN
1	A	286	LEU
1	A	289	MET
1	A	290	ARG
1	A	293	VAL
1	A	302	GLN
1	A	306	GLU
1	A	309	HIS
1	A	311	LEU
1	A	315	PHE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	316	PRO
1	A	329	SER
1	A	332	LEU
1	A	339	HIS
1	A	340	GLU
1	A	341	ASN
1	A	342	PRO
1	A	344	ILE
1	A	355	VAL
1	A	360	THR
1	A	363	LEU
1	A	364	LEU
1	A	367	SER
1	A	370	LEU
1	A	371	ASN
1	A	375	ASP
1	A	379	TYR
1	A	381	ASP
1	A	383	MET
1	A	389	MET
1	A	390	GLU
1	A	392	GLN
1	A	393	PRO
1	A	394	THR
1	A	395	HIS
1	A	400	THR
1	A	412	ARG
1	A	414	ASN
1	A	415	LEU
1	A	422	SER
1	A	425	ASN
1	A	428	TYR
1	A	433	THR
1	A	436	ASN

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (17) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	43	HIS
1	A	87	GLN
1	A	124	GLN
1	A	132	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	147	ASN
1	A	157	GLN
1	A	192	ASN
1	A	204	HIS
1	A	214	GLN
1	A	248	GLN
1	A	288	ASN
1	A	296	ASN
1	A	314	ASN
1	A	371	ASN
1	A	392	GLN
1	A	405	ASN
1	A	418	ASN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	A	25

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	322:ILE	C	323:TYR	N	1.90
1	A	317:ALA	C	318:ASP	N	1.67
1	A	347:SER	C	348:VAL	N	1.60
1	A	148:ARG	C	149:ALA	N	1.19
1	A	162:THR	C	163:ALA	N	1.19
1	A	122:THR	C	123:LYS	N	1.18
1	A	224:ASN	C	225:GLN	N	1.18
1	A	274:PRO	C	275:THR	N	1.18
1	A	306:GLU	C	307:SER	N	1.18
1	A	426:GLY	C	427:LEU	N	1.18
1	A	129:GLN	C	130:ILE	N	1.17
1	A	215:ASN	C	216:TYR	N	1.16
1	A	424:PHE	C	425:ASN	N	1.13
1	A	214:GLN	C	215:ASN	N	1.08
1	A	408:ASN	C	409:THR	N	1.04
1	A	427:LEU	C	428:TYR	N	1.04
1	A	121:VAL	C	122:THR	N	1.03
1	A	324:SER	C	325:ASP	N	1.03
1	A	251:ILE	C	252:ASP	N	1.02
1	A	128:ASN	C	129:GLN	N	1.01
1	A	387:THR	C	388:VAL	N	1.01
1	A	250:LEU	C	251:ILE	N	0.95
1	A	400:THR	C	401:GLU	N	0.94
1	A	321:ASN	C	322:ILE	N	0.85
1	A	366:ASN	C	367:SER	N	0.85

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

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

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.

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

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.

6.3 Carbohydrates [i](#)

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.

6.4 Ligands [i](#)

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.

6.5 Other polymers [i](#)

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.