



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Oct 16, 2023 – 07:15 AM EDT

PDB ID : 1RYX
Title : Crystal structure of hen serum transferrin in apo- form
Authors : Dattagupta, J.K.; Thakurta, P.G.; Choudhury, D.; Dasgupta, R.
Deposited on : 2003-12-23
Resolution : 3.50 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

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 : 2.36
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) : 2.36

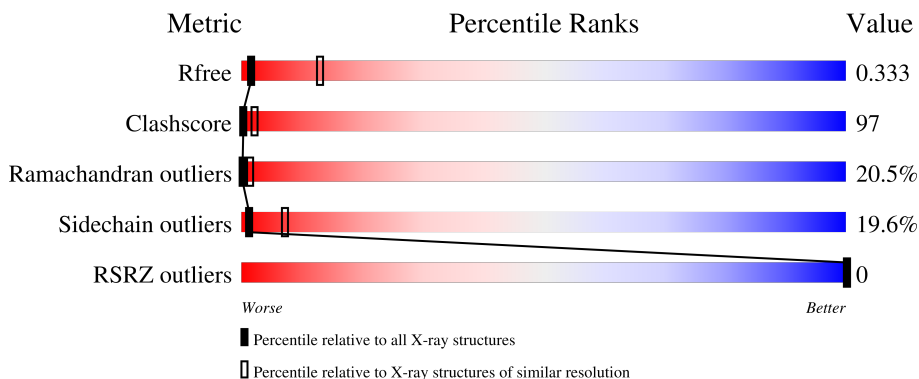
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

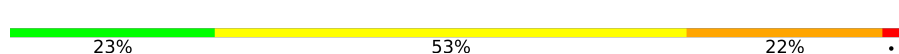
The reported resolution of this entry is 3.50 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
R_{free}	130704	1659 (3.60-3.40)
Clashscore	141614	1036 (3.58-3.42)
Ramachandran outliers	138981	1005 (3.58-3.42)
Sidechain outliers	138945	1006 (3.58-3.42)
RSRZ outliers	127900	1559 (3.60-3.40)

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 of 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 $\leq 5\%$. 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	686	

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 4657 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.

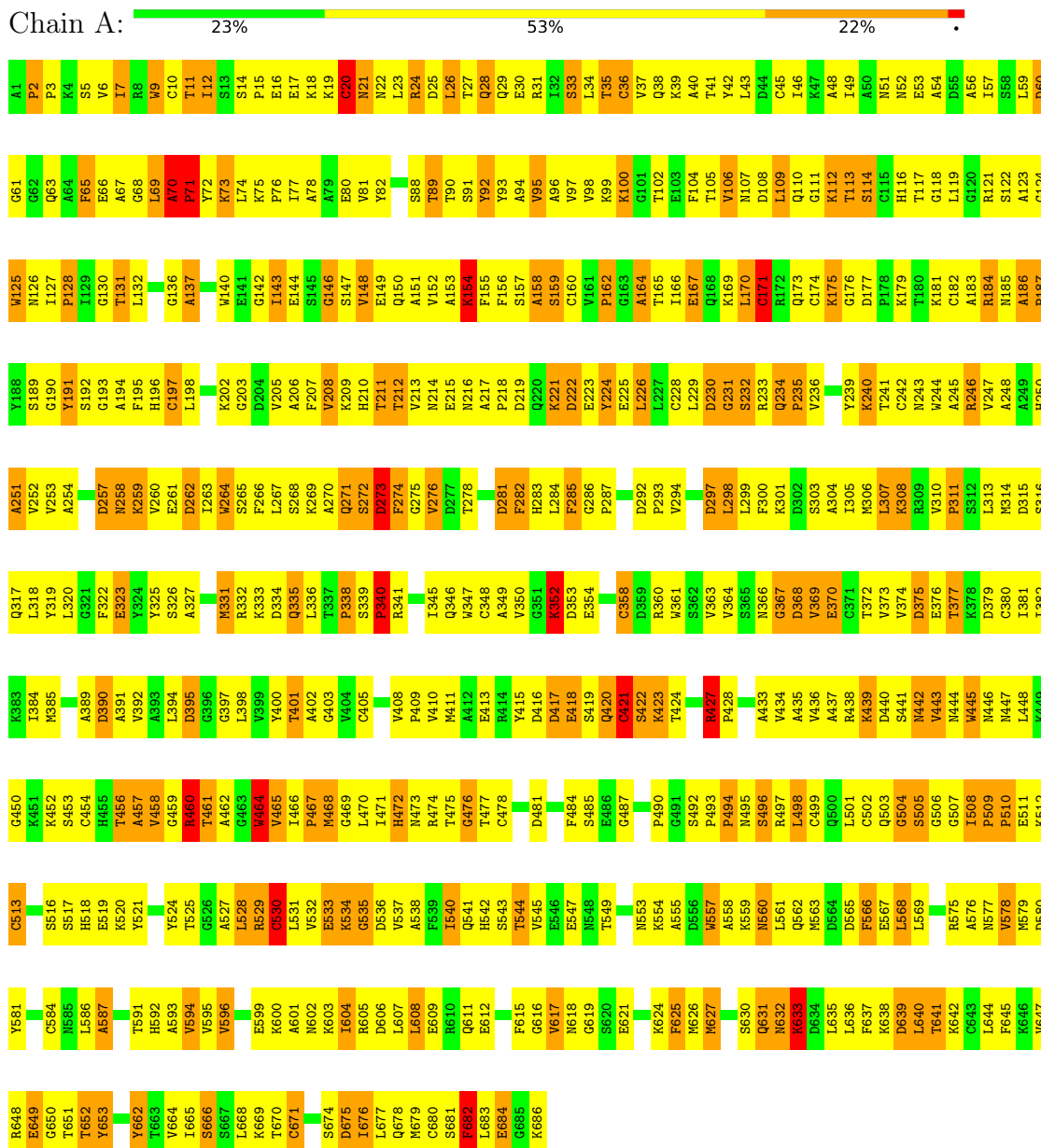
- Molecule 1 is a protein called Ovotransferrin.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	686	4657	2893	795	929	40	0	0	0

3 Residue-property plots [i](#)

These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide 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: Ovotransferrin



4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 43 21 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	90.30Å 90.30Å 177.67Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	19.69 – 3.50 19.69 – 3.40	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	88.3 (19.69-3.50) 88.4 (19.69-3.40)	Depositor EDS
R_{merge}	0.10	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	2.17 (at 3.44Å)	Xtrriage
Refinement program	CNS 1.0	Depositor
R, R_{free}	0.283 , 0.341 0.278 , 0.333	Depositor DCC
R_{free} test set	444 reflections (4.73%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	71.2	Xtrriage
Anisotropy	0.055	Xtrriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.14 , 51.4	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.45$, $\langle L^2 \rangle = 0.28$	Xtrriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtrriage
F_o, F_c correlation	0.84	EDS
Total number of atoms	4657	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	21.0	wwPDB-VP

Xtrriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 4.22% 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 [i](#)

5.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z >5	RMSZ	# Z >5
1	A	0.51	0/4739	0.85	5/6478 (0.1%)

There are no bond length outliers.

All (5) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	70	ALA	C-N-CD	-7.15	104.86	120.60
1	A	340	PRO	N-CA-CB	5.49	109.89	103.30
1	A	2	PRO	N-CA-CB	5.33	109.70	103.30
1	A	20	CYS	CA-CB-SG	5.13	123.24	114.00
1	A	71	PRO	CA-N-CD	-5.09	104.38	111.50

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts [i](#)

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	4657	0	4024	845	0
All	All	4657	0	4024	845	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 97.

All (845) 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:70:ALA:CB	1:A:71:PRO:HD2	1.76	1.13
1:A:208:VAL:HG12	1:A:209:LYS:H	1.06	1.13
1:A:540:ILE:HD13	1:A:544:THR:HG21	1.33	1.10
1:A:493:PRO:HG2	1:A:496:SER:HB2	1.32	1.09
1:A:113:THR:HG22	1:A:158:ALA:HB3	1.34	1.07
1:A:427:ARG:HB3	1:A:428:PRO:HD2	1.31	1.07
1:A:651:THR:HG22	1:A:652:THR:H	1.20	1.07
1:A:7:ILE:HD11	1:A:263:ILE:HG12	1.35	1.06
1:A:504:GLY:HA2	1:A:519:GLU:HG3	1.38	1.05
1:A:384:ILE:HD11	1:A:392:VAL:HG23	1.39	1.05
1:A:305:ILE:HG22	1:A:306:MET:HG2	1.40	1.03
1:A:132:LEU:HB3	1:A:137:ALA:HB3	1.40	1.02
1:A:26:LEU:HD23	1:A:26:LEU:H	1.24	1.01
1:A:68:GLY:HA2	1:A:74:LEU:H	1.23	1.01
1:A:508:ILE:CB	1:A:509:PRO:HD2	1.93	0.99
1:A:543:SER:O	1:A:547:GLU:HG3	1.61	0.99
1:A:70:ALA:HB1	1:A:71:PRO:HD2	1.44	0.98
1:A:313:LEU:HD23	1:A:679:MET:HE3	1.46	0.97
1:A:78:ALA:HB3	1:A:252:VAL:HB	1.47	0.96
1:A:105:THR:CG2	1:A:231:GLY:HA2	1.97	0.95
1:A:114:SER:HB2	1:A:156:PHE:CD2	2.02	0.94
1:A:492:SER:HB2	1:A:499:CYS:HB2	1.49	0.93
1:A:114:SER:HB2	1:A:156:PHE:HD2	1.32	0.93
1:A:545:VAL:O	1:A:549:THR:HG23	1.67	0.93
1:A:191:TYR:HD2	1:A:192:SER:H	0.97	0.93
1:A:338:PRO:HG2	1:A:339:SER:H	1.34	0.92
1:A:56:ALA:HB2	1:A:254:ALA:HB2	1.52	0.91
1:A:162:PRO:HB2	1:A:184:ARG:HA	1.52	0.90
1:A:11:THR:HG22	1:A:12:ILE:N	1.86	0.90
1:A:190:GLY:O	1:A:194:ALA:HB2	1.71	0.90
1:A:616:GLY:HA3	1:A:627:MET:HE1	1.53	0.90
1:A:532:VAL:HG23	1:A:533:GLU:H	1.34	0.90
1:A:394:LEU:HD12	1:A:595:VAL:CG1	2.01	0.89
1:A:462:ALA:HA	1:A:466:ILE:HD12	1.53	0.89
1:A:146:GLY:O	1:A:151:ALA:HB2	1.73	0.89
1:A:408:VAL:HG13	1:A:409:PRO:HD2	1.54	0.88
1:A:662:TYR:O	1:A:666:SER:HB3	1.73	0.88
1:A:42:TYR:CB	1:A:63:GLN:HE22	1.84	0.88
1:A:208:VAL:HG12	1:A:209:LYS:N	1.87	0.88
1:A:60:ASP:HB3	1:A:250:HIS:CE1	2.09	0.87
1:A:427:ARG:HB3	1:A:428:PRO:CD	2.04	0.87
1:A:576:ALA:HB1	1:A:580:ASP:HB2	1.55	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:604:ILE:O	1:A:608:LEU:HB2	1.76	0.86
1:A:470:LEU:HD23	1:A:664:VAL:HG21	1.57	0.85
1:A:364:VAL:HB	1:A:615:PHE:CZ	2.11	0.85
1:A:166:ILE:HG22	1:A:167:GLU:H	1.38	0.85
1:A:348:CYS:HB3	1:A:392:VAL:HG22	1.59	0.85
1:A:59:LEU:HB3	1:A:63:GLN:HB3	1.59	0.85
1:A:132:LEU:HB3	1:A:137:ALA:CB	2.07	0.85
1:A:444:ASN:HA	1:A:569:LEU:HD22	1.58	0.84
1:A:630:SER:O	1:A:632:ASN:N	2.11	0.84
1:A:281:ASP:O	1:A:282:PHE:HB2	1.77	0.83
1:A:615:PHE:HD2	1:A:625:PHE:O	1.60	0.83
1:A:363:VAL:HG23	1:A:364:VAL:H	1.43	0.83
1:A:651:THR:HG22	1:A:652:THR:N	1.89	0.83
1:A:537:VAL:HG12	1:A:538:ALA:N	1.94	0.82
1:A:532:VAL:HG23	1:A:533:GLU:N	1.94	0.82
1:A:297:ASP:CB	1:A:301:LYS:HA	2.10	0.82
1:A:405:CYS:HA	1:A:680:CYS:HB3	1.62	0.82
1:A:549:THR:OG1	1:A:563:MET:HG3	1.80	0.81
1:A:469:GLY:HA3	1:A:664:VAL:HG13	1.63	0.81
1:A:345:ILE:O	1:A:369:VAL:HA	1.80	0.80
1:A:20:CYS:HB2	1:A:299:LEU:HD11	1.61	0.80
1:A:80:GLU:OE1	1:A:301:LYS:HG2	1.81	0.80
1:A:27:THR:HG23	1:A:33:SER:HA	1.64	0.80
1:A:474:ARG:HH11	1:A:474:ARG:HG2	1.44	0.80
1:A:676:ILE:HD12	1:A:676:ILE:H	1.47	0.79
1:A:7:ILE:HD11	1:A:263:ILE:CG1	2.11	0.79
1:A:461:THR:O	1:A:466:ILE:HG13	1.83	0.79
1:A:433:ALA:O	1:A:434:VAL:HG23	1.82	0.78
1:A:112:LYS:HD3	1:A:112:LYS:H	1.49	0.78
1:A:7:ILE:O	1:A:34:LEU:HA	1.84	0.78
1:A:70:ALA:HB3	1:A:71:PRO:HD2	1.64	0.78
1:A:191:TYR:HD2	1:A:192:SER:N	1.78	0.78
1:A:307:LEU:O	1:A:307:LEU:HD23	1.84	0.78
1:A:48:ALA:O	1:A:53:GLU:HB2	1.84	0.77
1:A:345:ILE:HG22	1:A:346:GLN:O	1.83	0.77
1:A:384:ILE:CD1	1:A:392:VAL:HG23	2.14	0.77
1:A:195:PHE:CZ	1:A:213:VAL:HG13	2.20	0.77
1:A:450:GLY:O	1:A:485:SER:HB2	1.83	0.77
1:A:258:ASN:O	1:A:260:VAL:HG23	1.84	0.77
1:A:125:TRP:CH2	1:A:152:VAL:HG21	2.20	0.77
1:A:617:VAL:O	1:A:619:GLY:N	2.18	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:102:THR:HG22	1:A:104:PHE:H	1.49	0.77
1:A:394:LEU:HD12	1:A:595:VAL:HG11	1.66	0.77
1:A:261:GLU:C	1:A:263:ILE:H	1.88	0.76
1:A:492:SER:CB	1:A:499:CYS:HB2	2.15	0.76
1:A:59:LEU:HD22	1:A:63:GLN:NE2	2.00	0.76
1:A:403:GLY:HA3	1:A:653:TYR:CD1	2.20	0.76
1:A:441:SER:CB	1:A:443:VAL:HG23	2.15	0.76
1:A:651:THR:CG2	1:A:652:THR:H	1.96	0.76
1:A:508:ILE:CB	1:A:509:PRO:CD	2.63	0.76
1:A:109:LEU:HA	1:A:112:LYS:HE2	1.66	0.75
1:A:390:ASP:OD1	1:A:600:LYS:HE2	1.86	0.75
1:A:380:CYS:HB3	1:A:392:VAL:HG21	1.68	0.75
1:A:508:ILE:O	1:A:510:PRO:N	2.18	0.75
1:A:441:SER:OG	1:A:443:VAL:HG23	1.85	0.75
1:A:257:ASP:CG	1:A:258:ASN:H	1.90	0.75
1:A:11:THR:HG22	1:A:12:ILE:H	1.51	0.75
1:A:531:LEU:HA	1:A:535:GLY:HA3	1.66	0.75
1:A:540:ILE:HD13	1:A:544:THR:CG2	2.15	0.75
1:A:568:LEU:HD11	1:A:578:VAL:O	1.87	0.75
1:A:105:THR:HG23	1:A:231:GLY:HA2	1.68	0.75
1:A:118:GLY:HA2	1:A:162:PRO:HD2	1.68	0.75
1:A:132:LEU:CB	1:A:137:ALA:HB3	2.17	0.74
1:A:147:SER:O	1:A:150:GLN:N	2.19	0.74
1:A:285:PHE:HE1	1:A:306:MET:HA	1.50	0.74
1:A:348:CYS:CB	1:A:392:VAL:HG22	2.17	0.74
1:A:452:LYS:HB3	1:A:501:LEU:HD11	1.68	0.74
1:A:143:ILE:O	1:A:147:SER:HB2	1.88	0.74
1:A:562:GLN:HG3	1:A:565:ASP:OD2	1.87	0.74
1:A:504:GLY:CA	1:A:519:GLU:HG3	2.16	0.74
1:A:90:THR:HB	1:A:686:LYS:O	1.88	0.74
1:A:427:ARG:CB	1:A:428:PRO:HD2	2.12	0.73
1:A:621:GLU:O	1:A:624:LYS:HB2	1.88	0.73
1:A:113:THR:HB	1:A:203:GLY:HA2	1.71	0.73
1:A:445:TRP:HZ3	1:A:474:ARG:NE	1.86	0.73
1:A:70:ALA:CB	1:A:71:PRO:CD	2.63	0.73
1:A:348:CYS:SG	1:A:374:VAL:HG21	2.29	0.73
1:A:609:GLU:HA	1:A:612:GLU:OE2	1.88	0.73
1:A:313:LEU:HD23	1:A:679:MET:CE	2.17	0.73
1:A:398:LEU:HA	1:A:401:THR:CG2	2.19	0.73
1:A:434:VAL:HG11	1:A:568:LEU:HD22	1.71	0.73
1:A:475:THR:HG23	1:A:475:THR:O	1.88	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:363:VAL:HG23	1:A:364:VAL:N	2.03	0.73
1:A:252:VAL:HG21	1:A:307:LEU:HD11	1.71	0.73
1:A:376:GLU:HB3	1:A:379:ASP:OD1	1.89	0.72
1:A:568:LEU:HG	1:A:578:VAL:HA	1.71	0.72
1:A:612:GLU:HA	1:A:627:MET:HE1	1.70	0.72
1:A:78:ALA:HB1	1:A:307:LEU:HG	1.72	0.72
1:A:557:TRP:O	1:A:561:LEU:HD23	1.90	0.72
1:A:456:THR:HG1	1:A:524:TYR:HD2	1.38	0.72
1:A:649:GLU:HG3	1:A:650:GLY:N	2.04	0.72
1:A:117:THR:HG22	1:A:190:GLY:O	1.89	0.72
1:A:537:VAL:HG12	1:A:538:ALA:H	1.54	0.72
1:A:252:VAL:HG21	1:A:307:LEU:CD1	2.20	0.72
1:A:411:MET:HB2	1:A:645:PHE:O	1.90	0.71
1:A:612:GLU:HA	1:A:627:MET:CE	2.20	0.71
1:A:567:GLU:HB2	1:A:575:ARG:HH21	1.55	0.71
1:A:616:GLY:HA3	1:A:627:MET:CE	2.20	0.71
1:A:505:SER:CB	1:A:510:PRO:HA	2.21	0.71
1:A:444:ASN:ND2	1:A:446:ASN:HD22	1.88	0.71
1:A:532:VAL:CG2	1:A:533:GLU:H	2.03	0.71
1:A:558:ALA:HA	1:A:561:LEU:HD23	1.73	0.71
1:A:246:ARG:HH21	1:A:248:ALA:HB2	1.55	0.70
1:A:105:THR:HG21	1:A:231:GLY:HA2	1.73	0.70
1:A:531:LEU:O	1:A:531:LEU:HD22	1.91	0.70
1:A:59:LEU:HB3	1:A:63:GLN:CB	2.21	0.70
1:A:166:ILE:HG22	1:A:167:GLU:N	2.06	0.69
1:A:615:PHE:CD2	1:A:625:PHE:O	2.45	0.69
1:A:284:LEU:C	1:A:286:GLY:H	1.93	0.69
1:A:311:PRO:HD3	1:A:682:PHE:CD1	2.26	0.69
1:A:317:GLN:HA	1:A:325:TYR:CD1	2.25	0.69
1:A:441:SER:C	1:A:443:VAL:H	1.95	0.69
1:A:494:PRO:HG2	1:A:495:ASN:H	1.55	0.69
1:A:78:ALA:HB1	1:A:307:LEU:CD2	2.22	0.69
1:A:113:THR:CB	1:A:203:GLY:HA2	2.22	0.69
1:A:338:PRO:CG	1:A:339:SER:H	2.06	0.69
1:A:95:VAL:HG12	1:A:96:ALA:H	1.56	0.69
1:A:148:VAL:HG12	1:A:149:GLU:N	2.05	0.69
1:A:285:PHE:N	1:A:285:PHE:CD2	2.60	0.69
1:A:97:VAL:HG12	1:A:98:VAL:H	1.58	0.68
1:A:301:LYS:HG3	1:A:304:ALA:HB2	1.75	0.68
1:A:476:GLY:O	1:A:477:THR:C	2.31	0.68
1:A:7:ILE:CD1	1:A:263:ILE:HA	2.24	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:162:PRO:HB2	1:A:184:ARG:CA	2.23	0.68
1:A:411:MET:HE2	1:A:644:LEU:CB	2.24	0.68
1:A:121:ARG:O	1:A:126:ASN:CB	2.41	0.68
1:A:567:GLU:HB2	1:A:575:ARG:NH2	2.09	0.68
1:A:217:ALA:C	1:A:219:ASP:H	1.97	0.68
1:A:616:GLY:O	1:A:619:GLY:N	2.26	0.68
1:A:549:THR:HG21	1:A:566:PHE:CE1	2.28	0.68
1:A:317:GLN:HG2	1:A:325:TYR:CD2	2.29	0.67
1:A:456:THR:O	1:A:457:ALA:HB2	1.94	0.67
1:A:70:ALA:HB1	1:A:71:PRO:CD	2.22	0.67
1:A:549:THR:HG21	1:A:566:PHE:HE1	1.58	0.67
1:A:20:CYS:HB2	1:A:299:LEU:CD1	2.23	0.67
1:A:125:TRP:O	1:A:128:PRO:HG2	1.94	0.67
1:A:7:ILE:CD1	1:A:263:ILE:HG12	2.20	0.67
1:A:118:GLY:HA2	1:A:162:PRO:CD	2.25	0.67
1:A:397:GLY:O	1:A:400:TYR:HB3	1.95	0.67
1:A:27:THR:CG2	1:A:33:SER:HA	2.24	0.67
1:A:42:TYR:CB	1:A:63:GLN:NE2	2.58	0.67
1:A:265:SER:O	1:A:267:LEU:N	2.28	0.67
1:A:457:ALA:HA	1:A:490:PRO:HG2	1.77	0.66
1:A:467:PRO:HG2	1:A:468:MET:H	1.59	0.66
1:A:513:CYS:O	1:A:513:CYS:SG	2.52	0.66
1:A:442:ASN:O	1:A:447:ASN:ND2	2.25	0.66
1:A:467:PRO:C	1:A:469:GLY:H	1.97	0.66
1:A:630:SER:C	1:A:632:ASN:H	1.98	0.66
1:A:374:VAL:CG1	1:A:379:ASP:HB2	2.26	0.66
1:A:420:GLN:O	1:A:421:CYS:HB2	1.95	0.66
1:A:540:ILE:HG23	1:A:541:GLN:N	2.11	0.66
1:A:466:ILE:H	1:A:467:PRO:HD2	1.60	0.66
1:A:470:LEU:CD1	1:A:586:LEU:HD22	2.26	0.66
1:A:468:MET:O	1:A:668:LEU:HD13	1.96	0.65
1:A:137:ALA:HB1	1:A:155:PHE:CZ	2.31	0.65
1:A:283:HIS:HD2	1:A:287:PRO:HD3	1.59	0.65
1:A:405:CYS:SG	1:A:676:ILE:HG22	2.37	0.65
1:A:493:PRO:HG2	1:A:496:SER:CB	2.19	0.65
1:A:441:SER:HB2	1:A:443:VAL:HG23	1.78	0.65
1:A:46:ILE:HD13	1:A:67:ALA:HA	1.77	0.65
1:A:434:VAL:CG1	1:A:568:LEU:HD22	2.26	0.65
1:A:496:SER:OG	1:A:497:ARG:N	2.30	0.65
1:A:232:SER:OG	1:A:233:ARG:N	2.28	0.65
1:A:234:GLN:CB	1:A:235:PRO:HD2	2.27	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:285:PHE:N	1:A:285:PHE:HD2	1.92	0.65
1:A:617:VAL:C	1:A:619:GLY:H	2.01	0.65
1:A:649:GLU:CG	1:A:650:GLY:H	2.10	0.65
1:A:11:THR:CG2	1:A:12:ILE:N	2.59	0.64
1:A:195:PHE:CE1	1:A:213:VAL:HG13	2.32	0.64
1:A:184:ARG:N	1:A:184:ARG:CD	2.61	0.64
1:A:181:LYS:C	1:A:183:ALA:H	2.00	0.64
1:A:472:HIS:CE1	1:A:478:CYS:HB3	2.31	0.64
1:A:251:ALA:HB2	1:A:319:TYR:CE2	2.33	0.64
1:A:345:ILE:HD11	1:A:607:LEU:CB	2.28	0.64
1:A:579:MET:C	1:A:581:TYR:H	2.00	0.64
1:A:109:LEU:O	1:A:112:LYS:HG2	1.97	0.64
1:A:221:LYS:HG3	1:A:222:ASP:H	1.62	0.64
1:A:529:ARG:O	1:A:532:VAL:HG22	1.97	0.64
1:A:78:ALA:HB3	1:A:252:VAL:CB	2.24	0.64
1:A:413:GLU:CB	1:A:638:LYS:HE2	2.28	0.64
1:A:586:LEU:O	1:A:587:ALA:HB2	1.97	0.64
1:A:649:GLU:CG	1:A:650:GLY:N	2.61	0.64
1:A:292:ASP:O	1:A:294:VAL:N	2.31	0.64
1:A:470:LEU:HD23	1:A:664:VAL:CG2	2.28	0.64
1:A:543:SER:O	1:A:547:GLU:CG	2.43	0.64
1:A:633:LYS:O	1:A:639:ASP:OD2	2.16	0.64
1:A:59:LEU:HD22	1:A:63:GLN:HE21	1.62	0.64
1:A:540:ILE:CD1	1:A:544:THR:HG21	2.21	0.64
1:A:641:THR:HG22	1:A:642:LYS:N	2.13	0.64
1:A:265:SER:C	1:A:267:LEU:H	2.01	0.63
1:A:496:SER:HB3	1:A:499:CYS:HB3	1.78	0.63
1:A:461:THR:HG22	1:A:466:ILE:HD11	1.79	0.63
1:A:112:LYS:O	1:A:156:PHE:HB3	1.98	0.63
1:A:169:LYS:O	1:A:170:LEU:HB2	1.96	0.63
1:A:367:GLY:C	1:A:369:VAL:H	2.01	0.63
1:A:239:TYR:O	1:A:241:THR:N	2.32	0.63
1:A:283:HIS:CD2	1:A:287:PRO:HD3	2.33	0.63
1:A:466:ILE:HG21	1:A:587:ALA:HB3	1.80	0.63
1:A:230:ASP:OD1	1:A:232:SER:HB3	1.98	0.63
1:A:398:LEU:HD23	1:A:401:THR:HG21	1.80	0.63
1:A:427:ARG:CB	1:A:428:PRO:CD	2.75	0.63
1:A:283:HIS:HB2	1:A:286:GLY:HA2	1.79	0.63
1:A:317:GLN:HG2	1:A:325:TYR:CE2	2.34	0.63
1:A:292:ASP:C	1:A:294:VAL:H	2.02	0.62
1:A:398:LEU:HA	1:A:401:THR:HG23	1.81	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:305:ILE:HG22	1:A:306:MET:CG	2.24	0.62
1:A:5:SER:OG	1:A:262:ASP:HB3	2.00	0.62
1:A:78:ALA:HB1	1:A:307:LEU:CG	2.30	0.62
1:A:105:THR:HG22	1:A:106:VAL:N	2.12	0.62
1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HD2	1.64	0.62
1:A:98:VAL:HG12	1:A:225:GLU:O	1.99	0.62
1:A:271:GLN:O	1:A:273:ASP:N	2.33	0.62
1:A:445:TRP:HZ3	1:A:474:ARG:HE	1.45	0.62
1:A:56:ALA:HB1	1:A:253:VAL:O	2.00	0.61
1:A:411:MET:HE2	1:A:644:LEU:HB2	1.81	0.61
1:A:415:TYR:HA	1:A:641:THR:HA	1.82	0.61
1:A:59:LEU:HD12	1:A:253:VAL:HG21	1.81	0.61
1:A:27:THR:HG21	1:A:34:LEU:H	1.66	0.61
1:A:284:LEU:C	1:A:286:GLY:N	2.53	0.61
1:A:48:ALA:HA	1:A:53:GLU:OE1	2.00	0.61
1:A:56:ALA:CB	1:A:254:ALA:HB2	2.27	0.61
1:A:7:ILE:HD11	1:A:263:ILE:HA	1.82	0.61
1:A:57:ILE:O	1:A:59:LEU:HG	2.00	0.61
1:A:616:GLY:O	1:A:617:VAL:C	2.39	0.61
1:A:261:GLU:C	1:A:263:ILE:N	2.52	0.61
1:A:285:PHE:CE1	1:A:306:MET:HA	2.33	0.61
1:A:360:ARG:O	1:A:363:VAL:HG22	2.01	0.61
1:A:394:LEU:HD12	1:A:595:VAL:HG13	1.82	0.61
1:A:537:VAL:CG1	1:A:538:ALA:N	2.63	0.61
1:A:466:ILE:N	1:A:467:PRO:HD2	2.16	0.61
1:A:48:ALA:HA	1:A:51:ASN:HD22	1.66	0.61
1:A:60:ASP:HB3	1:A:250:HIS:ND1	2.16	0.61
1:A:93:TYR:CE2	1:A:240:LYS:HA	2.36	0.61
1:A:385:MET:HE2	1:A:405:CYS:HB3	1.81	0.61
1:A:677:LEU:O	1:A:681:SER:HB3	2.01	0.61
1:A:456:THR:OG1	1:A:524:TYR:HD2	1.84	0.60
1:A:519:GLU:CG	1:A:520:LYS:N	2.64	0.60
1:A:317:GLN:NE2	1:A:325:TYR:HB3	2.16	0.60
1:A:394:LEU:CD1	1:A:595:VAL:HG11	2.30	0.60
1:A:508:ILE:O	1:A:510:PRO:CD	2.49	0.60
1:A:461:THR:HG22	1:A:466:ILE:CG1	2.31	0.60
1:A:80:GLU:HG3	1:A:250:HIS:O	2.01	0.60
1:A:466:ILE:HG21	1:A:587:ALA:CB	2.31	0.60
1:A:493:PRO:HB2	1:A:494:PRO:HD2	1.82	0.60
1:A:208:VAL:CG1	1:A:209:LYS:H	1.92	0.60
1:A:96:ALA:HB2	1:A:207:PHE:CD2	2.37	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:46:ILE:HD11	1:A:59:LEU:CD1	2.31	0.60
1:A:349:ALA:HB1	1:A:354:GLU:CB	2.31	0.60
1:A:638:LYS:HE3	1:A:641:THR:OG1	2.01	0.60
1:A:221:LYS:HG3	1:A:222:ASP:N	2.16	0.60
1:A:468:MET:O	1:A:472:HIS:HD2	1.85	0.59
1:A:98:VAL:HG21	1:A:102:THR:HG23	1.83	0.59
1:A:502:CYS:SG	1:A:513:CYS:HB2	2.41	0.59
1:A:229:LEU:HD11	1:A:244:TRP:HA	1.84	0.59
1:A:638:LYS:CE	1:A:641:THR:OG1	2.51	0.59
1:A:384:ILE:HD11	1:A:391:ALA:C	2.22	0.59
1:A:51:ASN:C	1:A:53:GLU:H	2.05	0.59
1:A:147:SER:O	1:A:148:VAL:C	2.41	0.59
1:A:471:ILE:C	1:A:473:ASN:H	2.06	0.59
1:A:72:TYR:O	1:A:73:LYS:HB2	2.03	0.59
1:A:390:ASP:OD1	1:A:600:LYS:CE	2.51	0.59
1:A:364:VAL:CB	1:A:615:PHE:CZ	2.84	0.58
1:A:261:GLU:O	1:A:263:ILE:N	2.36	0.58
1:A:345:ILE:HD13	1:A:604:ILE:HD13	1.86	0.58
1:A:461:THR:HA	1:A:465:VAL:HG12	1.84	0.58
1:A:94:ALA:O	1:A:243:ASN:HB2	2.04	0.58
1:A:576:ALA:HB1	1:A:580:ASP:CB	2.32	0.58
1:A:127:ILE:N	1:A:128:PRO:HD2	2.18	0.58
1:A:517:SER:C	1:A:519:GLU:H	2.05	0.58
1:A:166:ILE:CG2	1:A:167:GLU:H	2.14	0.58
1:A:195:PHE:CE1	1:A:213:VAL:HA	2.38	0.58
1:A:306:MET:O	1:A:308:LYS:N	2.37	0.58
1:A:358:CYS:C	1:A:360:ARG:H	2.06	0.58
1:A:536:ASP:O	1:A:537:VAL:HG23	2.04	0.58
1:A:11:THR:HB	1:A:38:GLN:HA	1.85	0.58
1:A:16:GLU:O	1:A:20:CYS:HB3	2.04	0.58
1:A:65:PHE:C	1:A:65:PHE:CD2	2.77	0.58
1:A:468:MET:O	1:A:472:HIS:CD2	2.57	0.58
1:A:472:HIS:HA	1:A:475:THR:HG22	1.85	0.58
1:A:7:ILE:O	1:A:34:LEU:CA	2.51	0.58
1:A:160:CYS:SG	1:A:160:CYS:O	2.62	0.58
1:A:193:GLY:O	1:A:196:HIS:N	2.37	0.58
1:A:410:VAL:HB	1:A:594:VAL:O	2.04	0.58
1:A:265:SER:C	1:A:267:LEU:N	2.58	0.57
1:A:517:SER:C	1:A:519:GLU:N	2.55	0.57
1:A:630:SER:O	1:A:633:LYS:HG3	2.04	0.57
1:A:156:PHE:CD1	1:A:156:PHE:N	2.72	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:461:THR:HG23	1:A:465:VAL:CG1	2.34	0.57
1:A:465:VAL:HG22	1:A:668:LEU:HD23	1.86	0.57
1:A:292:ASP:C	1:A:294:VAL:N	2.57	0.57
1:A:537:VAL:CG1	1:A:538:ALA:H	2.17	0.57
1:A:81:VAL:HG13	1:A:89:THR:O	2.04	0.57
1:A:258:ASN:O	1:A:259:LYS:C	2.43	0.57
1:A:530:CYS:SG	1:A:531:LEU:N	2.78	0.57
1:A:65:PHE:C	1:A:65:PHE:HD2	2.08	0.57
1:A:109:LEU:O	1:A:111:GLY:N	2.37	0.57
1:A:528:LEU:O	1:A:529:ARG:C	2.39	0.57
1:A:19:LYS:C	1:A:21:ASN:H	2.08	0.57
1:A:99:LYS:HA	1:A:223:GLU:O	2.04	0.57
1:A:154:LYS:HD2	1:A:154:LYS:O	2.05	0.57
1:A:615:PHE:O	1:A:627:MET:SD	2.63	0.57
1:A:441:SER:O	1:A:443:VAL:N	2.38	0.57
1:A:553:ASN:HB3	1:A:558:ALA:HB3	1.85	0.57
1:A:372:THR:O	1:A:374:VAL:HG23	2.05	0.56
1:A:437:ALA:N	1:A:567:GLU:O	2.37	0.56
1:A:459:GLY:O	1:A:461:THR:N	2.38	0.56
1:A:100:LYS:HA	1:A:225:GLU:OE1	2.06	0.56
1:A:217:ALA:O	1:A:219:ASP:N	2.38	0.56
1:A:338:PRO:HG2	1:A:339:SER:N	2.13	0.56
1:A:366:ASN:O	1:A:368:ASP:N	2.39	0.56
1:A:405:CYS:HA	1:A:680:CYS:CB	2.34	0.56
1:A:519:GLU:CG	1:A:520:LYS:H	2.18	0.56
1:A:648:ARG:O	1:A:649:GLU:O	2.23	0.56
1:A:492:SER:HB3	1:A:493:PRO:HD2	1.88	0.56
1:A:395:ASP:OD1	1:A:397:GLY:N	2.37	0.56
1:A:481:ASP:OD1	1:A:481:ASP:O	2.24	0.56
1:A:205:VAL:CG2	1:A:206:ALA:N	2.69	0.56
1:A:649:GLU:HG3	1:A:650:GLY:H	1.67	0.56
1:A:195:PHE:HZ	1:A:213:VAL:HG13	1.69	0.56
1:A:340:PRO:C	1:A:341:ARG:HD3	2.26	0.56
1:A:400:TYR:HE2	1:A:677:LEU:HD11	1.70	0.56
1:A:411:MET:HE2	1:A:644:LEU:HB3	1.87	0.56
1:A:377:THR:O	1:A:377:THR:OG1	2.24	0.56
1:A:561:LEU:HD12	1:A:566:PHE:CZ	2.41	0.56
1:A:97:VAL:HG12	1:A:98:VAL:N	2.19	0.56
1:A:164:ALA:O	1:A:165:THR:HB	2.06	0.56
1:A:205:VAL:HG22	1:A:206:ALA:N	2.21	0.55
1:A:519:GLU:HG3	1:A:520:LYS:H	1.71	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:45:CYS:O	1:A:48:ALA:HB3	2.06	0.55
1:A:427:ARG:HE	1:A:428:PRO:HD3	1.71	0.55
1:A:510:PRO:C	1:A:512:LYS:H	2.09	0.55
1:A:630:SER:C	1:A:632:ASN:N	2.59	0.55
1:A:49:ILE:HG13	1:A:54:ALA:HB3	1.87	0.55
1:A:69:LEU:O	1:A:70:ALA:O	2.25	0.55
1:A:408:VAL:HG13	1:A:409:PRO:CD	2.31	0.55
1:A:470:LEU:O	1:A:473:ASN:N	2.40	0.55
1:A:470:LEU:CD2	1:A:664:VAL:HG21	2.32	0.55
1:A:496:SER:CB	1:A:499:CYS:HB3	2.37	0.55
1:A:641:THR:HG21	1:A:644:LEU:HD21	1.89	0.55
1:A:93:TYR:O	1:A:210:HIS:CB	2.54	0.55
1:A:234:GLN:CB	1:A:235:PRO:CD	2.85	0.55
1:A:408:VAL:CG1	1:A:409:PRO:HD2	2.31	0.55
1:A:80:GLU:OE1	1:A:301:LYS:HE2	2.06	0.55
1:A:186:ALA:HB1	1:A:187:PRO:CD	2.36	0.55
1:A:568:LEU:HD12	1:A:577:ASN:O	2.07	0.55
1:A:113:THR:CG2	1:A:158:ALA:HB3	2.22	0.55
1:A:461:THR:HA	1:A:465:VAL:CG1	2.36	0.55
1:A:499:CYS:O	1:A:499:CYS:SG	2.65	0.55
1:A:676:ILE:O	1:A:679:MET:N	2.40	0.55
1:A:70:ALA:C	1:A:72:TYR:H	2.11	0.55
1:A:191:TYR:CD2	1:A:192:SER:N	2.62	0.55
1:A:198:LEU:HG	1:A:198:LEU:O	2.06	0.55
1:A:57:ILE:O	1:A:253:VAL:HG23	2.06	0.55
1:A:674:SER:O	1:A:678:GLN:CB	2.55	0.55
1:A:307:LEU:O	1:A:308:LYS:O	2.24	0.54
1:A:472:HIS:ND1	1:A:475:THR:HG23	2.22	0.54
1:A:142:GLY:O	1:A:144:GLU:N	2.40	0.54
1:A:338:PRO:CG	1:A:339:SER:N	2.70	0.54
1:A:14:SER:N	1:A:15:PRO:HD2	2.22	0.54
1:A:148:VAL:O	1:A:151:ALA:N	2.41	0.54
1:A:391:ALA:O	1:A:392:VAL:CG2	2.55	0.54
1:A:69:LEU:C	1:A:70:ALA:O	2.45	0.54
1:A:445:TRP:CH2	1:A:470:LEU:HB2	2.42	0.54
1:A:542:HIS:CG	1:A:543:SER:N	2.75	0.54
1:A:641:THR:HG21	1:A:644:LEU:CD2	2.38	0.54
1:A:419:SER:O	1:A:420:GLN:CB	2.56	0.54
1:A:239:TYR:O	1:A:242:CYS:N	2.34	0.54
1:A:669:LYS:O	1:A:670:THR:C	2.46	0.54
1:A:99:LYS:HA	1:A:224:TYR:HA	1.89	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:132:LEU:CA	1:A:137:ALA:HB3	2.38	0.54
1:A:434:VAL:HG12	1:A:436:VAL:CG2	2.38	0.54
1:A:475:THR:O	1:A:476:GLY:O	2.26	0.54
1:A:545:VAL:HG12	1:A:563:MET:HG2	1.89	0.54
1:A:322:PHE:CE2	1:A:326:SER:HB3	2.42	0.54
1:A:376:GLU:O	1:A:379:ASP:HB2	2.08	0.54
1:A:461:THR:HG22	1:A:466:ILE:CD1	2.37	0.54
1:A:631:GLN:O	1:A:632:ASN:CB	2.56	0.54
1:A:124:GLY:O	1:A:128:PRO:HD2	2.08	0.53
1:A:269:LYS:O	1:A:270:ALA:C	2.46	0.53
1:A:23:LEU:HD23	1:A:23:LEU:C	2.28	0.53
1:A:91:SER:HA	1:A:247:VAL:O	2.08	0.53
1:A:192:SER:OG	1:A:193:GLY:N	2.40	0.53
1:A:299:LEU:O	1:A:300:PHE:CD1	2.62	0.53
1:A:363:VAL:CG2	1:A:364:VAL:H	2.19	0.53
1:A:453:SER:HB3	1:A:484:PHE:CD2	2.43	0.53
1:A:155:PHE:HD2	1:A:156:PHE:CE1	2.26	0.53
1:A:191:TYR:CB	1:A:208:VAL:HG13	2.38	0.53
1:A:6:VAL:HA	1:A:33:SER:OG	2.09	0.53
1:A:140:TRP:CB	1:A:146:GLY:O	2.57	0.53
1:A:159:SER:O	1:A:173:GLN:N	2.28	0.53
1:A:212:THR:C	1:A:214:ASN:N	2.52	0.53
1:A:402:ALA:O	1:A:405:CYS:N	2.42	0.53
1:A:402:ALA:O	1:A:405:CYS:HB2	2.09	0.53
1:A:408:VAL:HG12	1:A:409:PRO:N	2.23	0.53
1:A:532:VAL:CG2	1:A:533:GLU:N	2.63	0.53
1:A:265:SER:O	1:A:268:SER:N	2.42	0.53
1:A:374:VAL:HG12	1:A:376:GLU:O	2.09	0.53
1:A:398:LEU:C	1:A:400:TYR:N	2.63	0.53
1:A:98:VAL:O	1:A:224:TYR:HA	2.09	0.53
1:A:126:ASN:O	1:A:130:GLY:HA3	2.07	0.53
1:A:300:PHE:O	1:A:301:LYS:C	2.46	0.53
1:A:452:LYS:O	1:A:536:ASP:HB2	2.09	0.53
1:A:113:THR:OG1	1:A:203:GLY:HA2	2.09	0.52
1:A:298:LEU:O	1:A:299:LEU:HB2	2.09	0.52
1:A:462:ALA:HA	1:A:466:ILE:CD1	2.34	0.52
1:A:162:PRO:CB	1:A:184:ARG:HA	2.33	0.52
1:A:230:ASP:CG	1:A:230:ASP:O	2.45	0.52
1:A:394:LEU:CD1	1:A:595:VAL:HG21	2.39	0.52
1:A:508:ILE:O	1:A:510:PRO:HD3	2.09	0.52
1:A:92:TYR:O	1:A:247:VAL:HG22	2.09	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:114:SER:OG	1:A:156:PHE:HE2	1.91	0.52
1:A:156:PHE:N	1:A:156:PHE:HD1	2.06	0.52
1:A:332:ARG:O	1:A:334:ASP:N	2.41	0.52
1:A:364:VAL:HB	1:A:615:PHE:HZ	1.70	0.52
1:A:517:SER:O	1:A:519:GLU:N	2.42	0.52
1:A:28:GLN:O	1:A:30:GLU:N	2.39	0.52
1:A:36:CYS:SG	1:A:37:VAL:N	2.81	0.52
1:A:467:PRO:C	1:A:469:GLY:N	2.63	0.52
1:A:127:ILE:HD13	1:A:245:ALA:HB3	1.92	0.52
1:A:81:VAL:HG23	1:A:306:MET:O	2.10	0.52
1:A:112:LYS:HD3	1:A:112:LYS:N	2.21	0.52
1:A:361:TRP:HB2	1:A:625:PHE:HE2	1.75	0.52
1:A:553:ASN:O	1:A:555:ALA:N	2.40	0.52
1:A:616:GLY:N	1:A:626:MET:HA	2.25	0.52
1:A:35:THR:O	1:A:36:CYS:O	2.28	0.52
1:A:26:LEU:H	1:A:26:LEU:CD2	2.00	0.52
1:A:100:LYS:N	1:A:223:GLU:O	2.37	0.52
1:A:257:ASP:CG	1:A:258:ASN:N	2.63	0.52
1:A:441:SER:C	1:A:443:VAL:N	2.62	0.52
1:A:307:LEU:O	1:A:307:LEU:CD2	2.57	0.51
1:A:459:GLY:O	1:A:460:ARG:C	2.48	0.51
1:A:651:THR:CG2	1:A:652:THR:N	2.61	0.51
1:A:7:ILE:O	1:A:34:LEU:C	2.49	0.51
1:A:114:SER:CB	1:A:156:PHE:CD2	2.87	0.51
1:A:128:PRO:HB3	1:A:207:PHE:CD2	2.45	0.51
1:A:247:VAL:O	1:A:247:VAL:HG23	2.10	0.51
1:A:408:VAL:CG1	1:A:409:PRO:N	2.74	0.51
1:A:411:MET:CE	1:A:644:LEU:HB2	2.40	0.51
1:A:264:TRP:O	1:A:268:SER:N	2.24	0.51
1:A:452:LYS:O	1:A:536:ASP:N	2.42	0.51
1:A:536:ASP:O	1:A:537:VAL:CG2	2.59	0.51
1:A:7:ILE:HD11	1:A:263:ILE:CA	2.41	0.51
1:A:95:VAL:HG11	1:A:226:LEU:HD13	1.93	0.51
1:A:474:ARG:HG2	1:A:474:ARG:NH1	2.18	0.51
1:A:615:PHE:O	1:A:627:MET:HE1	2.11	0.51
1:A:23:LEU:O	1:A:25:ASP:N	2.44	0.51
1:A:56:ALA:CB	1:A:253:VAL:O	2.59	0.51
1:A:461:THR:HG23	1:A:465:VAL:HG12	1.92	0.51
1:A:502:CYS:HB3	1:A:519:GLU:OE2	2.11	0.51
1:A:467:PRO:O	1:A:469:GLY:N	2.43	0.51
1:A:470:LEU:O	1:A:473:ASN:CB	2.58	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:513:CYS:HA	1:A:519:GLU:OE2	2.10	0.51
1:A:408:VAL:CG1	1:A:409:PRO:CD	2.88	0.51
1:A:601:ALA:O	1:A:604:ILE:N	2.41	0.51
1:A:664:VAL:HG12	1:A:665:ILE:N	2.25	0.51
1:A:78:ALA:HB1	1:A:307:LEU:HD21	1.92	0.51
1:A:361:TRP:C	1:A:363:VAL:H	2.13	0.51
1:A:528:LEU:O	1:A:529:ARG:O	2.29	0.51
1:A:529:ARG:O	1:A:530:CYS:C	2.49	0.50
1:A:155:PHE:CD2	1:A:156:PHE:HE1	2.29	0.50
1:A:381:ILE:HG22	1:A:385:MET:CE	2.41	0.50
1:A:531:LEU:O	1:A:531:LEU:HD13	2.10	0.50
1:A:561:LEU:HD12	1:A:566:PHE:HZ	1.76	0.50
1:A:95:VAL:HG13	1:A:242:CYS:O	2.10	0.50
1:A:136:GLY:O	1:A:137:ALA:C	2.50	0.50
1:A:39:LYS:O	1:A:41:THR:N	2.44	0.50
1:A:212:THR:O	1:A:215:GLU:N	2.44	0.50
1:A:258:ASN:O	1:A:260:VAL:N	2.44	0.50
1:A:615:PHE:CE2	1:A:624:LYS:HB3	2.46	0.50
1:A:334:ASP:O	1:A:335:GLN:CB	2.59	0.50
1:A:471:ILE:HG22	1:A:475:THR:CG2	2.42	0.50
1:A:505:SER:HB3	1:A:510:PRO:HA	1.92	0.50
1:A:641:THR:CG2	1:A:642:LYS:N	2.74	0.50
1:A:669:LYS:C	1:A:671:CYS:N	2.60	0.50
1:A:410:VAL:HG23	1:A:596:VAL:HG22	1.93	0.50
1:A:221:LYS:O	1:A:224:TYR:N	2.40	0.50
1:A:461:THR:HG22	1:A:466:ILE:HG12	1.94	0.50
1:A:23:LEU:C	1:A:25:ASP:H	2.15	0.50
1:A:508:ILE:O	1:A:509:PRO:C	2.47	0.50
1:A:7:ILE:HD12	1:A:263:ILE:HA	1.94	0.49
1:A:197:CYS:O	1:A:202:LYS:O	2.30	0.49
1:A:212:THR:O	1:A:213:VAL:C	2.50	0.49
1:A:417:ASP:C	1:A:419:SER:H	2.13	0.49
1:A:109:LEU:CA	1:A:112:LYS:HE2	2.39	0.49
1:A:117:THR:HG22	1:A:190:GLY:C	2.31	0.49
1:A:164:ALA:HB2	1:A:182:CYS:SG	2.52	0.49
1:A:191:TYR:HB2	1:A:208:VAL:HG13	1.92	0.49
1:A:595:VAL:O	1:A:596:VAL:HG13	2.12	0.49
1:A:640:LEU:O	1:A:641:THR:O	2.30	0.49
1:A:649:GLU:CD	1:A:650:GLY:H	2.14	0.49
1:A:67:ALA:HB1	1:A:253:VAL:HG11	1.93	0.49
1:A:217:ALA:C	1:A:219:ASP:N	2.65	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:311:PRO:HD3	1:A:682:PHE:CE1	2.47	0.49
1:A:456:THR:O	1:A:457:ALA:CB	2.59	0.49
1:A:7:ILE:N	1:A:33:SER:O	2.45	0.49
1:A:261:GLU:O	1:A:265:SER:N	2.42	0.49
1:A:529:ARG:CB	1:A:557:TRP:CZ2	2.95	0.49
1:A:51:ASN:C	1:A:53:GLU:N	2.65	0.49
1:A:78:ALA:CB	1:A:307:LEU:HD21	2.42	0.49
1:A:346:GLN:CB	1:A:390:ASP:HB2	2.42	0.49
1:A:398:LEU:C	1:A:400:TYR:H	2.15	0.49
1:A:493:PRO:CB	1:A:494:PRO:HD2	2.43	0.49
1:A:187:PRO:C	1:A:189:SER:H	2.16	0.49
1:A:349:ALA:HB1	1:A:354:GLU:C	2.33	0.49
1:A:559:LYS:HB3	1:A:560:ASN:OD1	2.12	0.49
1:A:540:ILE:HG23	1:A:541:GLN:O	2.13	0.49
1:A:171:CYS:O	1:A:174:CYS:HB2	2.13	0.49
1:A:675:ASP:O	1:A:679:MET:N	2.45	0.49
1:A:363:VAL:CG2	1:A:364:VAL:N	2.74	0.49
1:A:364:VAL:O	1:A:366:ASN:OD1	2.31	0.49
1:A:127:ILE:O	1:A:131:THR:HB	2.13	0.48
1:A:157:SER:O	1:A:158:ALA:HB2	2.13	0.48
1:A:385:MET:HE1	1:A:680:CYS:SG	2.53	0.48
1:A:73:LYS:O	1:A:74:LEU:HD23	2.13	0.48
1:A:326:SER:O	1:A:327:ALA:C	2.51	0.48
1:A:417:ASP:C	1:A:419:SER:N	2.65	0.48
1:A:505:SER:HB3	1:A:511:GLU:N	2.29	0.48
1:A:568:LEU:HD11	1:A:578:VAL:C	2.33	0.48
1:A:635:LEU:O	1:A:637:PHE:N	2.46	0.48
1:A:191:TYR:O	1:A:194:ALA:HB3	2.12	0.48
1:A:392:VAL:O	1:A:594:VAL:HA	2.13	0.48
1:A:466:ILE:N	1:A:467:PRO:CD	2.76	0.48
1:A:117:THR:OG1	1:A:124:GLY:HA3	2.12	0.48
1:A:137:ALA:O	1:A:155:PHE:CE1	2.66	0.48
1:A:184:ARG:HD3	1:A:185:ASN:H	1.77	0.48
1:A:24:ARG:O	1:A:27:THR:HB	2.12	0.48
1:A:70:ALA:O	1:A:72:TYR:N	2.43	0.48
1:A:265:SER:HA	1:A:268:SER:HB2	1.96	0.48
1:A:155:PHE:CD2	1:A:156:PHE:CE1	3.02	0.48
1:A:410:VAL:CG2	1:A:596:VAL:HG22	2.43	0.48
1:A:461:THR:C	1:A:466:ILE:HG13	2.34	0.48
1:A:350:VAL:H	1:A:354:GLU:CB	2.27	0.48
1:A:553:ASN:C	1:A:555:ALA:H	2.17	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:207:PHE:HE2	1:A:244:TRP:CZ2	2.31	0.47
1:A:221:LYS:CG	1:A:222:ASP:H	2.27	0.47
1:A:341:ARG:HD3	1:A:341:ARG:N	2.28	0.47
1:A:398:LEU:O	1:A:401:THR:HG23	2.13	0.47
1:A:624:LYS:O	1:A:625:PHE:CB	2.62	0.47
1:A:669:LYS:O	1:A:671:CYS:N	2.47	0.47
1:A:27:THR:HG21	1:A:34:LEU:N	2.29	0.47
1:A:263:ILE:O	1:A:264:TRP:C	2.51	0.47
1:A:271:GLN:O	1:A:272:SER:C	2.52	0.47
1:A:361:TRP:CD1	1:A:361:TRP:O	2.67	0.47
1:A:476:GLY:O	1:A:478:CYS:SG	2.72	0.47
1:A:509:PRO:O	1:A:511:GLU:N	2.47	0.47
1:A:549:THR:OG1	1:A:563:MET:CG	2.58	0.47
1:A:615:PHE:CD1	1:A:615:PHE:N	2.82	0.47
1:A:51:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HG3	1.95	0.47
1:A:56:ALA:CA	1:A:253:VAL:O	2.63	0.47
1:A:408:VAL:O	1:A:595:VAL:HA	2.14	0.47
1:A:534:LYS:O	1:A:535:GLY:O	2.32	0.47
1:A:46:ILE:HG23	1:A:74:LEU:CD1	2.44	0.47
1:A:198:LEU:HB2	1:A:206:ALA:HB2	1.96	0.47
1:A:439:LYS:CB	1:A:565:ASP:O	2.62	0.47
1:A:487:GLY:C	1:A:501:LEU:HB2	2.35	0.47
1:A:364:VAL:CB	1:A:615:PHE:HZ	2.24	0.47
1:A:458:VAL:HG12	1:A:458:VAL:O	2.12	0.47
1:A:487:GLY:HA2	1:A:501:LEU:HD12	1.96	0.47
1:A:119:LEU:C	1:A:121:ARG:H	2.18	0.47
1:A:367:GLY:O	1:A:369:VAL:N	2.47	0.47
1:A:504:GLY:HA2	1:A:520:LYS:H	1.79	0.47
1:A:536:ASP:C	1:A:537:VAL:HG23	2.35	0.47
1:A:241:THR:HG22	1:A:241:THR:O	2.15	0.47
1:A:264:TRP:O	1:A:264:TRP:HE3	1.98	0.47
1:A:298:LEU:O	1:A:299:LEU:CB	2.62	0.47
1:A:418:GLU:O	1:A:420:GLN:N	2.39	0.47
1:A:427:ARG:CD	1:A:428:PRO:HD2	2.44	0.47
1:A:467:PRO:HG2	1:A:468:MET:N	2.29	0.47
1:A:519:GLU:HG2	1:A:520:LYS:N	2.29	0.47
1:A:98:VAL:HG22	1:A:99:LYS:N	2.30	0.47
1:A:487:GLY:HA3	1:A:498:LEU:HD23	1.96	0.47
1:A:6:VAL:HA	1:A:33:SER:CB	2.44	0.47
1:A:283:HIS:CD2	1:A:287:PRO:HB3	2.49	0.47
1:A:394:LEU:CD1	1:A:595:VAL:CG2	2.92	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:540:ILE:HG23	1:A:544:THR:HB	1.97	0.47
1:A:464:TRP:C	1:A:467:PRO:HD2	2.36	0.46
1:A:102:THR:CG2	1:A:104:PHE:O	2.63	0.46
1:A:527:ALA:O	1:A:528:LEU:C	2.54	0.46
1:A:72:TYR:O	1:A:73:LYS:CB	2.63	0.46
1:A:394:LEU:O	1:A:592:HIS:HA	2.15	0.46
1:A:311:PRO:CD	1:A:682:PHE:CD1	2.96	0.46
1:A:360:ARG:O	1:A:363:VAL:CG2	2.63	0.46
1:A:297:ASP:O	1:A:299:LEU:N	2.48	0.46
1:A:364:VAL:CG1	1:A:615:PHE:CE1	2.98	0.46
1:A:611:GLN:O	1:A:627:MET:SD	2.74	0.46
1:A:25:ASP:C	1:A:27:THR:N	2.67	0.46
1:A:114:SER:OG	1:A:116:HIS:NE2	2.36	0.46
1:A:23:LEU:HD23	1:A:27:THR:OG1	2.16	0.46
1:A:119:LEU:C	1:A:121:ARG:N	2.69	0.46
1:A:444:ASN:HD22	1:A:446:ASN:HD22	1.59	0.46
1:A:195:PHE:HE1	1:A:213:VAL:HG22	1.81	0.46
1:A:358:CYS:O	1:A:360:ARG:N	2.41	0.46
1:A:557:TRP:HD1	1:A:558:ALA:N	2.13	0.46
1:A:153:ALA:HA	1:A:169:LYS:O	2.16	0.46
1:A:230:ASP:O	1:A:232:SER:N	2.49	0.46
1:A:391:ALA:C	1:A:392:VAL:HG23	2.36	0.46
1:A:504:GLY:O	1:A:505:SER:O	2.34	0.46
1:A:531:LEU:HD23	1:A:537:VAL:H	1.81	0.46
1:A:540:ILE:CG2	1:A:541:GLN:O	2.64	0.46
1:A:592:HIS:CD2	1:A:592:HIS:H	2.33	0.46
1:A:265:SER:HA	1:A:268:SER:CB	2.45	0.46
1:A:434:VAL:HG11	1:A:568:LEU:CD2	2.42	0.46
1:A:93:TYR:CD2	1:A:240:LYS:HA	2.51	0.45
1:A:208:VAL:CG1	1:A:209:LYS:N	2.61	0.45
1:A:682:PHE:O	1:A:683:LEU:C	2.53	0.45
1:A:125:TRP:CZ2	1:A:152:VAL:HG21	2.50	0.45
1:A:527:ALA:O	1:A:530:CYS:HB3	2.16	0.45
1:A:633:LYS:O	1:A:639:ASP:HB2	2.15	0.45
1:A:23:LEU:HD23	1:A:23:LEU:O	2.16	0.45
1:A:45:CYS:O	1:A:48:ALA:N	2.50	0.45
1:A:313:LEU:HB3	1:A:679:MET:HG3	1.98	0.45
1:A:364:VAL:O	1:A:364:VAL:HG12	2.17	0.45
1:A:474:ARG:NH1	1:A:474:ARG:CG	2.77	0.45
1:A:534:LYS:HB3	1:A:534:LYS:HE2	1.69	0.45
1:A:475:THR:O	1:A:476:GLY:C	2.55	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:640:LEU:O	1:A:641:THR:C	2.55	0.45
1:A:51:ASN:O	1:A:53:GLU:N	2.50	0.45
1:A:56:ALA:HA	1:A:253:VAL:O	2.17	0.45
1:A:102:THR:HG22	1:A:104:PHE:O	2.17	0.45
1:A:251:ALA:HB2	1:A:319:TYR:HE2	1.78	0.45
1:A:183:ALA:O	1:A:186:ALA:CB	2.64	0.45
1:A:43:LEU:C	1:A:45:CYS:N	2.68	0.45
1:A:211:THR:HG23	1:A:214:ASN:CB	2.47	0.45
1:A:408:VAL:HG12	1:A:409:PRO:O	2.17	0.45
1:A:531:LEU:HD23	1:A:537:VAL:N	2.31	0.45
1:A:46:ILE:HG23	1:A:74:LEU:HD12	1.98	0.45
1:A:127:ILE:N	1:A:128:PRO:CD	2.80	0.45
1:A:184:ARG:N	1:A:184:ARG:HD3	2.29	0.45
1:A:317:GLN:NE2	1:A:325:TYR:CD2	2.82	0.45
1:A:443:VAL:O	1:A:569:LEU:HD21	2.17	0.45
1:A:472:HIS:ND1	1:A:475:THR:CG2	2.80	0.45
1:A:317:GLN:HE21	1:A:325:TYR:HD2	1.61	0.44
1:A:19:LYS:C	1:A:21:ASN:N	2.71	0.44
1:A:66:GLU:O	1:A:67:ALA:C	2.55	0.44
1:A:152:VAL:HB	1:A:170:LEU:CD1	2.46	0.44
1:A:258:ASN:HB3	1:A:259:LYS:H	1.47	0.44
1:A:317:GLN:O	1:A:317:GLN:OE1	2.36	0.44
1:A:361:TRP:O	1:A:363:VAL:N	2.46	0.44
1:A:444:ASN:HD22	1:A:446:ASN:ND2	2.15	0.44
1:A:106:VAL:HG21	1:A:228:CYS:O	2.18	0.44
1:A:495:ASN:O	1:A:496:SER:O	2.36	0.44
1:A:10:CYS:O	1:A:11:THR:OG1	2.32	0.44
1:A:114:SER:OG	1:A:156:PHE:CE2	2.71	0.44
1:A:166:ILE:CG2	1:A:167:GLU:N	2.75	0.44
1:A:540:ILE:CG2	1:A:541:GLN:N	2.78	0.44
1:A:391:ALA:O	1:A:392:VAL:HG23	2.16	0.44
1:A:562:GLN:CG	1:A:565:ASP:OD2	2.61	0.44
1:A:381:ILE:O	1:A:385:MET:HB2	2.18	0.44
1:A:434:VAL:HG12	1:A:436:VAL:HG23	1.99	0.44
1:A:11:THR:O	1:A:12:ILE:CB	2.64	0.44
1:A:394:LEU:HD11	1:A:595:VAL:HG21	1.98	0.44
1:A:436:VAL:N	1:A:538:ALA:O	2.38	0.44
1:A:444:ASN:ND2	1:A:446:ASN:ND2	2.61	0.44
1:A:465:VAL:HG22	1:A:668:LEU:CD2	2.47	0.44
1:A:471:ILE:O	1:A:474:ARG:N	2.49	0.44
1:A:358:CYS:C	1:A:360:ARG:N	2.71	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:369:VAL:O	1:A:370:GLU:O	2.36	0.44
1:A:125:TRP:HH2	1:A:170:LEU:HD11	1.82	0.44
1:A:132:LEU:HD13	1:A:155:PHE:CE2	2.53	0.44
1:A:174:CYS:O	1:A:175:LYS:HB2	2.18	0.43
1:A:394:LEU:HD12	1:A:595:VAL:CG2	2.48	0.43
1:A:421:CYS:O	1:A:423:LYS:N	2.50	0.43
1:A:576:ALA:CB	1:A:580:ASP:HB2	2.37	0.43
1:A:665:ILE:O	1:A:665:ILE:HG22	2.18	0.43
1:A:675:ASP:O	1:A:679:MET:CB	2.66	0.43
1:A:128:PRO:O	1:A:132:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:225:GLU:O	1:A:226:LEU:O	2.36	0.43
1:A:352:LYS:HB2	1:A:352:LYS:HE3	1.77	0.43
1:A:441:SER:HB2	1:A:443:VAL:CG2	2.47	0.43
1:A:531:LEU:HD13	1:A:531:LEU:C	2.38	0.43
1:A:23:LEU:C	1:A:25:ASP:N	2.71	0.43
1:A:77:ILE:O	1:A:78:ALA:HB2	2.18	0.43
1:A:545:VAL:O	1:A:549:THR:CG2	2.51	0.43
1:A:225:GLU:HA	1:A:236:VAL:HG22	2.01	0.43
1:A:226:LEU:HG	1:A:236:VAL:HA	1.99	0.43
1:A:273:ASP:HB3	1:A:274:PHE:H	1.68	0.43
1:A:450:GLY:O	1:A:485:SER:CB	2.60	0.43
1:A:469:GLY:HA3	1:A:664:VAL:CG1	2.41	0.43
1:A:5:SER:O	1:A:33:SER:N	2.52	0.43
1:A:88:SER:OG	1:A:686:LYS:OXT	2.37	0.43
1:A:175:LYS:NZ	1:A:202:LYS:NZ	2.67	0.43
1:A:434:VAL:CG1	1:A:436:VAL:HG22	2.49	0.43
1:A:76:PRO:HD2	1:A:315:ASP:O	2.19	0.43
1:A:221:LYS:CG	1:A:222:ASP:N	2.81	0.43
1:A:239:TYR:C	1:A:241:THR:N	2.71	0.43
1:A:239:TYR:C	1:A:241:THR:H	2.22	0.43
1:A:245:ALA:HB2	1:A:323:GLU:CB	2.49	0.43
1:A:470:LEU:HD11	1:A:586:LEU:HD22	1.98	0.43
1:A:90:THR:CB	1:A:686:LYS:O	2.62	0.43
1:A:149:GLU:OE1	1:A:166:ILE:HB	2.18	0.43
1:A:461:THR:HG23	1:A:465:VAL:HG11	2.01	0.43
1:A:473:ASN:C	1:A:474:ARG:HG2	2.39	0.43
1:A:567:GLU:CB	1:A:575:ARG:HH21	2.26	0.43
1:A:148:VAL:O	1:A:152:VAL:N	2.51	0.43
1:A:17:GLU:O	1:A:21:ASN:HB2	2.19	0.43
1:A:109:LEU:HA	1:A:112:LYS:CE	2.42	0.43
1:A:593:ALA:O	1:A:594:VAL:C	2.57	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:16:GLU:CB	1:A:298:LEU:HD22	2.49	0.42
1:A:18:LYS:O	1:A:22:ASN:N	2.52	0.42
1:A:411:MET:HA	1:A:647:VAL:HG23	2.01	0.42
1:A:142:GLY:C	1:A:144:GLU:H	2.22	0.42
1:A:350:VAL:N	1:A:354:GLU:CB	2.82	0.42
1:A:367:GLY:C	1:A:369:VAL:N	2.69	0.42
1:A:471:ILE:HG22	1:A:475:THR:HG22	2.00	0.42
1:A:475:THR:O	1:A:477:THR:O	2.37	0.42
1:A:147:SER:O	1:A:149:GLU:N	2.52	0.42
1:A:664:VAL:C	1:A:666:SER:H	2.21	0.42
1:A:65:PHE:HD2	1:A:66:GLU:N	2.17	0.42
1:A:126:ASN:O	1:A:130:GLY:CA	2.67	0.42
1:A:369:VAL:C	1:A:370:GLU:O	2.55	0.42
1:A:9:TRP:CZ3	1:A:299:LEU:HD22	2.55	0.42
1:A:25:ASP:HB2	1:A:26:LEU:HD23	2.02	0.42
1:A:143:ILE:HA	1:A:147:SER:HA	2.02	0.42
1:A:273:ASP:O	1:A:278:THR:CG2	2.67	0.42
1:A:364:VAL:C	1:A:366:ASN:H	2.23	0.42
1:A:435:ALA:O	1:A:568:LEU:HA	2.20	0.42
1:A:668:LEU:HD12	1:A:668:LEU:O	2.19	0.42
1:A:26:LEU:HD23	1:A:26:LEU:N	2.08	0.42
1:A:210:HIS:O	1:A:211:THR:HB	2.18	0.42
1:A:460:ARG:O	1:A:462:ALA:N	2.52	0.42
1:A:470:LEU:O	1:A:473:ASN:HB3	2.20	0.42
1:A:681:SER:O	1:A:684:GLU:CB	2.67	0.42
1:A:106:VAL:HG12	1:A:106:VAL:O	2.19	0.42
1:A:152:VAL:HB	1:A:170:LEU:HD11	2.01	0.42
1:A:181:LYS:C	1:A:183:ALA:N	2.70	0.42
1:A:184:ARG:N	1:A:184:ARG:HD2	2.28	0.42
1:A:466:ILE:H	1:A:467:PRO:CD	2.27	0.42
1:A:95:VAL:O	1:A:207:PHE:HA	2.20	0.42
1:A:122:SER:O	1:A:123:ALA:C	2.58	0.42
1:A:592:HIS:CD2	1:A:592:HIS:N	2.88	0.42
1:A:81:VAL:HG12	1:A:82:TYR:H	1.85	0.42
1:A:162:PRO:HB2	1:A:184:ARG:N	2.35	0.42
1:A:318:LEU:O	1:A:320:LEU:N	2.53	0.42
1:A:418:GLU:C	1:A:420:GLN:N	2.73	0.42
1:A:433:ALA:O	1:A:434:VAL:CG2	2.62	0.42
1:A:487:GLY:O	1:A:501:LEU:HB2	2.19	0.42
1:A:502:CYS:O	1:A:503:GLN:NE2	2.53	0.42
1:A:91:SER:HA	1:A:248:ALA:HA	2.02	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:368:ASP:C	1:A:369:VAL:HG23	2.41	0.42
1:A:438:ARG:O	1:A:440:ASP:N	2.53	0.42
1:A:461:THR:CG2	1:A:465:VAL:HG12	2.50	0.42
1:A:465:VAL:O	1:A:465:VAL:HG13	2.19	0.42
1:A:471:ILE:O	1:A:473:ASN:N	2.52	0.42
1:A:17:GLU:HA	1:A:36:CYS:SG	2.60	0.41
1:A:318:LEU:O	1:A:319:TYR:C	2.57	0.41
1:A:345:ILE:HG23	1:A:604:ILE:HD11	2.02	0.41
1:A:494:PRO:HG2	1:A:495:ASN:N	2.30	0.41
1:A:601:ALA:O	1:A:603:LYS:N	2.53	0.41
1:A:617:VAL:C	1:A:619:GLY:N	2.66	0.41
1:A:189:SER:O	1:A:193:GLY:HA3	2.19	0.41
1:A:445:TRP:HZ3	1:A:474:ARG:CZ	2.33	0.41
1:A:114:SER:HG	1:A:116:HIS:CD2	2.34	0.41
1:A:132:LEU:O	1:A:137:ALA:HB3	2.21	0.41
1:A:509:PRO:HA	1:A:510:PRO:HD2	1.72	0.41
1:A:318:LEU:HD23	1:A:318:LEU:HA	1.77	0.41
1:A:384:ILE:N	1:A:389:ALA:HB3	2.36	0.41
1:A:471:ILE:C	1:A:473:ASN:N	2.72	0.41
1:A:473:ASN:O	1:A:474:ARG:HG2	2.20	0.41
1:A:65:PHE:CD2	1:A:66:GLU:N	2.89	0.41
1:A:364:VAL:O	1:A:364:VAL:CG1	2.68	0.41
1:A:505:SER:O	1:A:506:GLY:C	2.58	0.41
1:A:118:GLY:HA2	1:A:162:PRO:HG2	2.03	0.41
1:A:125:TRP:C	1:A:128:PRO:HG2	2.40	0.41
1:A:510:PRO:C	1:A:512:LYS:N	2.72	0.41
1:A:664:VAL:C	1:A:666:SER:N	2.73	0.41
1:A:221:LYS:O	1:A:223:GLU:N	2.54	0.41
1:A:25:ASP:O	1:A:28:GLN:N	2.54	0.41
1:A:34:LEU:O	1:A:35:THR:CB	2.69	0.41
1:A:46:ILE:HD11	1:A:59:LEU:HD13	2.03	0.41
1:A:93:TYR:O	1:A:210:HIS:N	2.54	0.41
1:A:118:GLY:HA2	1:A:162:PRO:CG	2.51	0.41
1:A:196:HIS:O	1:A:197:CYS:HB2	2.21	0.41
1:A:311:PRO:HD2	1:A:314:MET:HE1	2.02	0.41
1:A:366:ASN:C	1:A:368:ASP:H	2.24	0.41
1:A:379:ASP:O	1:A:382:ILE:HG12	2.20	0.41
1:A:384:ILE:HD13	1:A:391:ALA:HA	2.02	0.41
1:A:427:ARG:NE	1:A:428:PRO:HD3	2.34	0.41
1:A:452:LYS:HB3	1:A:501:LEU:CD1	2.47	0.41
1:A:524:TYR:CE1	1:A:541:GLN:HB2	2.55	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:579:MET:C	1:A:581:TYR:N	2.67	0.41
1:A:683:LEU:O	1:A:684:GLU:C	2.59	0.41
1:A:98:VAL:O	1:A:224:TYR:CA	2.69	0.41
1:A:119:LEU:O	1:A:121:ARG:N	2.54	0.40
1:A:125:TRP:CH2	1:A:152:VAL:HG11	2.56	0.40
1:A:125:TRP:CH2	1:A:170:LEU:HD11	2.56	0.40
1:A:126:ASN:O	1:A:130:GLY:N	2.54	0.40
1:A:155:PHE:HD2	1:A:156:PHE:HE1	1.62	0.40
1:A:384:ILE:HA	1:A:389:ALA:HB3	2.02	0.40
1:A:434:VAL:HG12	1:A:436:VAL:HG22	2.03	0.40
1:A:461:THR:HA	1:A:465:VAL:HB	2.03	0.40
1:A:490:PRO:HB3	1:A:519:GLU:OE1	2.21	0.40
1:A:410:VAL:HG12	1:A:411:MET:N	2.36	0.40
1:A:606:ASP:C	1:A:608:LEU:H	2.23	0.40
1:A:609:GLU:CD	1:A:609:GLU:O	2.60	0.40
1:A:632:ASN:C	1:A:633:LYS:CG	2.90	0.40
1:A:361:TRP:HB2	1:A:625:PHE:CE2	2.56	0.40
1:A:615:PHE:O	1:A:627:MET:CE	2.70	0.40
1:A:615:PHE:HE2	1:A:624:LYS:HB3	1.87	0.40
1:A:18:LYS:HA	1:A:21:ASN:HB2	2.04	0.40
1:A:45:CYS:O	1:A:46:ILE:C	2.60	0.40
1:A:239:TYR:HD1	1:A:240:LYS:H	1.68	0.40
1:A:605:ARG:O	1:A:609:GLU:HB3	2.22	0.40
1:A:352:LYS:CE	1:A:352:LYS:O	2.70	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	684/686 (100%)	356 (52%)	188 (28%)	140 (20%)	0 1

All (140) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2	PRO
1	A	3	PRO
1	A	7	ILE
1	A	12	ILE
1	A	31	ARG
1	A	35	THR
1	A	36	CYS
1	A	70	ALA
1	A	71	PRO
1	A	92	TYR
1	A	106	VAL
1	A	108	ASP
1	A	110	GLN
1	A	125	TRP
1	A	143	ILE
1	A	148	VAL
1	A	170	LEU
1	A	171	CYS
1	A	187	PRO
1	A	216	ASN
1	A	226	LEU
1	A	240	LYS
1	A	251	ALA
1	A	271	GLN
1	A	272	SER
1	A	298	LEU
1	A	307	LEU
1	A	308	LYS
1	A	331	MET
1	A	333	LYS
1	A	335	GLN
1	A	336	LEU
1	A	340	PRO
1	A	416	ASP
1	A	420	GLN
1	A	421	CYS
1	A	423	LYS
1	A	424	THR
1	A	427	ARG
1	A	439	LYS
1	A	442	ASN
1	A	460	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	461	THR
1	A	476	GLY
1	A	496	SER
1	A	504	GLY
1	A	505	SER
1	A	508	ILE
1	A	535	GLY
1	A	554	LYS
1	A	594	VAL
1	A	596	VAL
1	A	617	VAL
1	A	618	ASN
1	A	631	GLN
1	A	632	ASN
1	A	641	THR
1	A	649	GLU
1	A	671	CYS
1	A	24	ARG
1	A	29	GLN
1	A	40	ALA
1	A	73	LYS
1	A	100	LYS
1	A	112	LYS
1	A	158	ALA
1	A	159	SER
1	A	179	LYS
1	A	186	ALA
1	A	197	CYS
1	A	222	ASP
1	A	257	ASP
1	A	259	LYS
1	A	262	ASP
1	A	266	PHE
1	A	273	ASP
1	A	275	GLY
1	A	281	ASP
1	A	282	PHE
1	A	338	PRO
1	A	367	GLY
1	A	368	ASP
1	A	370	GLU
1	A	422	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	457	ALA
1	A	458	VAL
1	A	494	PRO
1	A	509	PRO
1	A	510	PRO
1	A	529	ARG
1	A	533	GLU
1	A	602	ASN
1	A	625	PHE
1	A	639	ASP
1	A	684	GLU
1	A	11	THR
1	A	28	GLN
1	A	137	ALA
1	A	164	ALA
1	A	167	GLU
1	A	274	PHE
1	A	311	PRO
1	A	369	VAL
1	A	375	ASP
1	A	464	TRP
1	A	468	MET
1	A	472	HIS
1	A	521	TYR
1	A	530	CYS
1	A	584	CYS
1	A	636	LEU
1	A	128	PRO
1	A	154	LYS
1	A	221	LYS
1	A	235	PRO
1	A	303	SER
1	A	323	GLU
1	A	507	GLY
1	A	518	HIS
1	A	587	ALA
1	A	633	LYS
1	A	682	PHE
1	A	52	ASN
1	A	175	LYS
1	A	211	THR
1	A	234	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	293	PRO
1	A	297	ASP
1	A	352	LYS
1	A	61	GLY
1	A	218	PRO
1	A	276	VAL
1	A	676	ILE
1	A	146	GLY
1	A	162	PRO
1	A	208	VAL
1	A	231	GLY
1	A	310	VAL
1	A	467	PRO
1	A	176	GLY

5.3.2 Protein sidechains [i](#)

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	423/580 (73%)	340 (80%)	83 (20%)	1 7

All (83) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	9	TRP
1	A	20	CYS
1	A	21	ASN
1	A	26	LEU
1	A	33	SER
1	A	60	ASP
1	A	65	PHE
1	A	69	LEU
1	A	75	LYS
1	A	89	THR
1	A	95	VAL
1	A	107	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	109	LEU
1	A	113	THR
1	A	114	SER
1	A	131	THR
1	A	154	LYS
1	A	171	CYS
1	A	177	ASP
1	A	184	ARG
1	A	191	TYR
1	A	212	THR
1	A	224	TYR
1	A	230	ASP
1	A	232	SER
1	A	246	ARG
1	A	258	ASN
1	A	264	TRP
1	A	273	ASP
1	A	276	VAL
1	A	285	PHE
1	A	316	SER
1	A	331	MET
1	A	347	TRP
1	A	352	LYS
1	A	353	ASP
1	A	358	CYS
1	A	373	VAL
1	A	375	ASP
1	A	377	THR
1	A	390	ASP
1	A	395	ASP
1	A	401	THR
1	A	417	ASP
1	A	418	GLU
1	A	421	CYS
1	A	422	SER
1	A	427	ARG
1	A	443	VAL
1	A	445	TRP
1	A	448	LEU
1	A	454	CYS
1	A	456	THR
1	A	460	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	464	TRP
1	A	465	VAL
1	A	498	LEU
1	A	513	CYS
1	A	516	SER
1	A	525	THR
1	A	528	LEU
1	A	530	CYS
1	A	534	LYS
1	A	540	ILE
1	A	544	THR
1	A	557	TRP
1	A	560	ASN
1	A	566	PHE
1	A	568	LEU
1	A	578	VAL
1	A	591	THR
1	A	599	GLU
1	A	604	ILE
1	A	608	LEU
1	A	627	MET
1	A	633	LYS
1	A	640	LEU
1	A	652	THR
1	A	653	TYR
1	A	662	TYR
1	A	666	SER
1	A	675	ASP
1	A	682	PHE

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (7) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	51	ASN
1	A	63	GLN
1	A	216	ASN
1	A	283	HIS
1	A	446	ASN
1	A	472	HIS
1	A	592	HIS

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

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

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

In the following table, the column labelled ‘#RSRZ > 2’ contains the number (and percentage) of RSRZ outliers, followed by percent RSRZ outliers for the chain as percentile scores relative to all X-ray entries and entries of similar resolution. The OWAB column contains the minimum, median, 95th percentile and maximum values of the occupancy-weighted average B-factor per residue. The column labelled ‘Q < 0.9’ lists the number of (and percentage) of residues with an average occupancy less than 0.9.

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	686/686 (100%)	-0.67	0 100 100	6, 22, 27, 32	0

There are no RSRZ outliers to report.

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

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

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.