



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Jun 12, 2024 – 05:12 PM EDT

PDB ID : 1JW1
Title : Crystallization and structure determination of goat lactoferrin at 4.0 resolution: A new form of packing in lactoferrins with a high solvent content in crystals
Authors : Kumar, P.; Yadav, S.; Singh, T.P.
Deposited on : 2001-09-02
Resolution : 4.00 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)	:	NOT EXECUTED
EDS	:	NOT EXECUTED
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.36.2

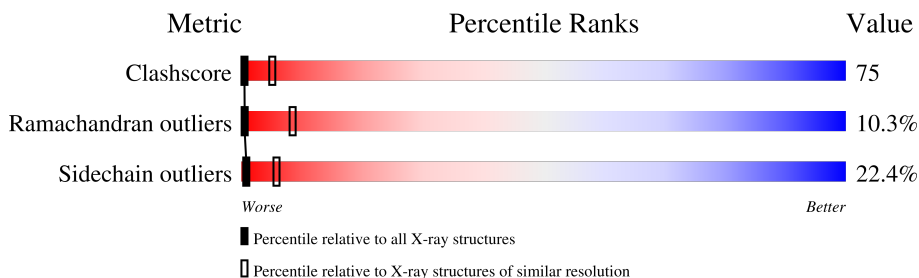
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 4.00 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	1148 (4.30-3.70)
Ramachandran outliers	138981	1108 (4.30-3.70)
Sidechain outliers	138945	1099 (4.30-3.70)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments 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 $\leq 5\%$.

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	689	<div> <div></div> <div>21%</div> <div>56%</div> <div>20%</div> <div>.</div> </div>

2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 5295 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 LACTOFERRIN.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	689	Total	C	N	O	S	0	0	0
			5293	3316	934	1003	40			

There are 7 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	42	VAL	ALA	CONFLICT	UNP Q29477
A	61	ASP	SER	CONFLICT	UNP Q29477
A	308	LEU	VAL	CONFLICT	UNP Q29477
A	338	VAL	LEU	CONFLICT	UNP Q29477
A	395	ASP	GLY	CONFLICT	UNP Q29477
A	420	HIS	TYR	CONFLICT	UNP Q29477
A	628	LYS	GLN	CONFLICT	UNP Q29477

- Molecule 2 is FE (III) ION (three-letter code: FE) (formula: Fe).

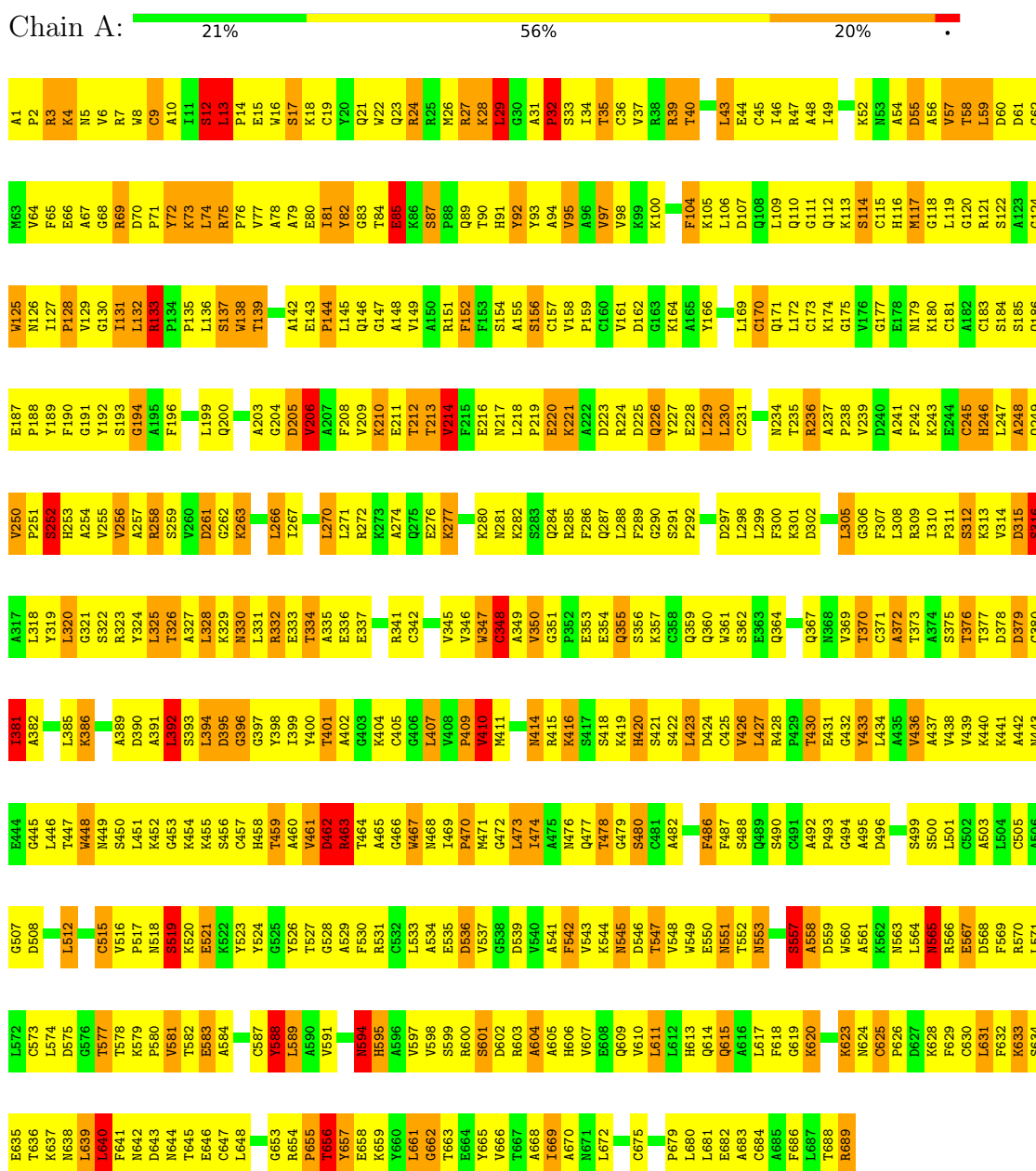
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
2	A	2	Total	Fe	0	0
			2	2		

3 Residue-property plots

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. 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.

Note EDS was not executed.

• Molecule 1: LACTOFERRIN



4 Data and refinement statistics

Xtriage (Phenix) and EDS were not executed - this section is therefore incomplete.

Property	Value	Source
Space group	P 21 21 21	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	104.60Å 153.80Å 155.05Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	12.00 – 4.00	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	83.0 (12.00-4.00)	Depositor
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
Refinement program	CNS 0.9	Depositor
R, R_{free}	0.228 , 0.328	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	5295	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	28.0	wwPDB-VP

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

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	0.96	7/5401 (0.1%)	1.28	52/7308 (0.7%)

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	8

All (7) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	347	TRP	CB-CG	8.00	1.64	1.50
1	A	463	ARG	N-CA	7.03	1.60	1.46
1	A	395	ASP	CB-CG	5.56	1.63	1.51
1	A	433	TYR	CZ-OH	-5.40	1.28	1.37
1	A	285	ARG	CG-CD	5.17	1.64	1.51
1	A	250	VAL	CB-CG1	-5.15	1.42	1.52
1	A	476	ASN	CB-CG	5.08	1.62	1.51

All (52) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	557	SER	CA-C-N	-9.19	96.99	117.20
1	A	395	ASP	CB-CG-OD2	8.77	126.19	118.30
1	A	463	ARG	CA-CB-CG	8.60	132.33	113.40
1	A	462	ASP	O-C-N	8.48	136.28	122.70
1	A	640	LEU	CA-CB-CG	8.46	134.76	115.30
1	A	617	LEU	CA-CB-CG	8.29	134.36	115.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	462	ASP	CA-C-N	-8.10	99.39	117.20
1	A	284	GLN	N-CA-C	8.07	132.79	111.00
1	A	462	ASP	CA-C-O	-8.00	103.31	120.10
1	A	59	LEU	CA-CB-CG	7.72	133.05	115.30
1	A	463	ARG	NE-CZ-NH2	7.63	124.11	120.30
1	A	29	LEU	CA-CB-CG	7.36	132.22	115.30
1	A	662	GLY	N-CA-C	-7.17	95.19	113.10
1	A	230	LEU	CA-CB-CG	6.99	131.38	115.30
1	A	272	ARG	N-CA-C	-6.88	92.42	111.00
1	A	128	PRO	N-CA-C	6.88	129.97	112.10
1	A	117	MET	CB-CG-SD	-6.82	91.94	112.40
1	A	12	SER	C-N-CA	6.48	137.91	121.70
1	A	394	LEU	CA-CB-CG	6.32	129.84	115.30
1	A	395	ASP	N-CA-CB	-6.26	99.33	110.60
1	A	272	ARG	CA-CB-CG	6.17	126.97	113.40
1	A	43	LEU	CA-CB-CG	6.15	129.45	115.30
1	A	463	ARG	NE-CZ-NH1	-6.15	117.23	120.30
1	A	557	SER	O-C-N	6.13	132.51	122.70
1	A	376	THR	N-CA-C	-6.12	94.48	111.00
1	A	272	ARG	CB-CA-C	-6.02	98.37	110.40
1	A	55	ASP	N-CA-C	5.93	127.02	111.00
1	A	312	SER	N-CA-C	5.89	126.90	111.00
1	A	132	LEU	CA-CB-CG	5.84	128.74	115.30
1	A	285	ARG	N-CA-C	-5.70	95.61	111.00
1	A	675	CYS	CA-CB-SG	5.68	124.23	114.00
1	A	325	LEU	CA-CB-CG	5.66	128.31	115.30
1	A	395	ASP	CB-CG-OD1	-5.65	113.22	118.30
1	A	206	VAL	CB-CA-C	-5.59	100.78	111.40
1	A	12	SER	CA-C-N	-5.58	104.92	117.20
1	A	381	ILE	CB-CA-C	-5.52	100.55	111.60
1	A	461	VAL	N-CA-C	5.47	125.78	111.00
1	A	557	SER	C-N-CA	5.46	135.36	121.70
1	A	24	ARG	CG-CD-NE	-5.42	100.41	111.80
1	A	372	ALA	N-CA-C	-5.33	96.60	111.00
1	A	256	VAL	N-CA-C	5.27	125.23	111.00
1	A	117	MET	CA-CB-CG	5.21	122.16	113.30
1	A	85	GLU	N-CA-C	5.20	125.03	111.00
1	A	285	ARG	N-CA-CB	5.20	119.95	110.60
1	A	463	ARG	CG-CD-NE	5.20	122.71	111.80
1	A	117	MET	CB-CA-C	-5.19	100.02	110.40
1	A	69	ARG	N-CA-C	-5.18	97.01	111.00
1	A	24	ARG	NE-CZ-NH2	-5.17	117.72	120.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	117	MET	N-CA-C	-5.15	97.09	111.00
1	A	214	VAL	N-CA-C	-5.14	97.11	111.00
1	A	432	GLY	N-CA-C	5.12	125.89	113.10
1	A	565	ASN	N-CA-C	-5.04	97.38	111.00

There are no chirality outliers.

All (8) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	462	ASP	Mainchain
1	A	463	ARG	Mainchain
1	A	542	PHE	Sidechain
1	A	557	SER	Mainchain
1	A	558	ALA	Mainchain
1	A	72	TYR	Sidechain
1	A	82	TYR	Sidechain
1	A	92	TYR	Sidechain

5.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	5293	0	5201	783	0
2	A	2	0	0	1	0
All	All	5295	0	5201	783	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 75.

All (783) 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:457:CYS:HB2	1:A:541:ALA:HA	1.26	1.10
1:A:211:GLU:HB2	1:A:242:PHE:HB2	1.37	1.06
1:A:92:TYR:CD2	1:A:252:SER:HA	1.92	1.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:115:CYS:SG	1:A:204:GLY:HA3	1.97	1.04
1:A:415:ARG:HA	1:A:645:THR:HA	1.39	1.04
1:A:615:GLN:HB3	1:A:648:LEU:HD12	1.39	1.02
1:A:133:ARG:HH22	1:A:335:ALA:HB2	1.22	1.02
1:A:297:ASP:HB3	1:A:301:LYS:HA	1.41	1.02
1:A:12:SER:HB2	1:A:14:PRO:HD2	1.41	0.99
1:A:92:TYR:HD2	1:A:252:SER:HA	1.28	0.99
1:A:166:TYR:HB3	1:A:169:LEU:HB2	1.47	0.97
1:A:109:LEU:HD11	1:A:206:VAL:HG11	1.46	0.96
1:A:138:TRP:HB2	1:A:148:ALA:HB3	1.47	0.96
1:A:57:VAL:HG13	1:A:256:VAL:HG23	1.46	0.96
1:A:136:LEU:HD23	1:A:152:PHE:HD1	1.31	0.95
1:A:67:ALA:HB1	1:A:74:LEU:HD12	1.49	0.94
1:A:192:TYR:HB2	1:A:213:THR:HG21	1.50	0.94
1:A:552:THR:HG22	1:A:564:LEU:HD12	1.51	0.93
1:A:529:ALA:O	1:A:541:ALA:HB1	1.68	0.91
1:A:27:ARG:HG3	1:A:33:SER:HB3	1.52	0.91
1:A:113:LYS:HG2	1:A:155:ALA:HB3	1.52	0.91
1:A:519:SER:HA	1:A:524:TYR:HD2	1.37	0.90
1:A:132:LEU:O	1:A:135:PRO:HD2	1.72	0.90
1:A:433:TYR:HE2	1:A:595:HIS:NE2	1.70	0.90
1:A:433:TYR:HE2	1:A:595:HIS:HE2	1.20	0.89
1:A:122:SER:HA	1:A:126:ASN:HB2	1.53	0.88
1:A:69:ARG:HB2	1:A:71:PRO:HD2	1.52	0.88
1:A:133:ARG:NH2	1:A:335:ALA:HB2	1.90	0.87
1:A:534:ALA:O	1:A:535:GLU:HG3	1.75	0.87
1:A:469:ILE:O	1:A:473:LEU:HB2	1.75	0.86
1:A:438:VAL:HG22	1:A:571:LEU:HD22	1.58	0.86
1:A:619:GLY:HA2	1:A:632:PHE:HE2	1.41	0.86
1:A:391:ALA:HB2	1:A:599:SER:HB3	1.56	0.86
1:A:117:MET:SD	1:A:121:ARG:NH2	2.47	0.85
1:A:18:LYS:HZ2	1:A:290:GLY:N	1.74	0.85
1:A:18:LYS:NZ	1:A:290:GLY:H	1.75	0.85
1:A:126:ASN:HB3	1:A:324:TYR:HE1	1.42	0.85
1:A:457:CYS:HB2	1:A:541:ALA:CA	2.07	0.85
1:A:125:TRP:CH2	1:A:149:VAL:HG11	2.12	0.84
1:A:192:TYR:CB	1:A:213:THR:HG21	2.06	0.84
1:A:211:GLU:HB2	1:A:242:PHE:CB	2.07	0.84
1:A:118:GLY:HA2	1:A:159:PRO:HD2	1.58	0.84
1:A:126:ASN:ND2	1:A:328:LEU:HD23	1.91	0.84
1:A:148:ALA:HA	1:A:151:ARG:HG3	1.58	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:117:MET:SD	1:A:121:ARG:NE	2.50	0.83
1:A:348:CYS:HA	1:A:372:ALA:O	1.80	0.82
1:A:27:ARG:HG2	1:A:31:ALA:O	1.78	0.82
1:A:136:LEU:HD23	1:A:152:PHE:CD1	2.15	0.81
1:A:382:ALA:HA	1:A:385:LEU:HD12	1.61	0.81
1:A:494:GLY:HA2	1:A:517:PRO:HD3	1.62	0.81
1:A:276:GLU:HG3	1:A:277:LYS:H	1.46	0.81
1:A:447:THR:HG22	1:A:578:THR:OG1	1.80	0.81
1:A:277:LYS:HE3	1:A:277:LYS:HA	1.60	0.81
1:A:81:ILE:HG12	1:A:90:THR:HG22	1.61	0.80
1:A:619:GLY:HA2	1:A:632:PHE:CE2	2.16	0.80
1:A:560:TRP:CE2	1:A:561:ALA:HB2	2.16	0.80
1:A:174:LYS:HD3	1:A:189:TYR:CZ	2.17	0.80
1:A:274:ALA:HB1	1:A:288:LEU:HD22	1.63	0.80
1:A:300:PHE:CE1	1:A:307:PHE:HZ	1.99	0.80
1:A:12:SER:OG	1:A:13:LEU:N	2.14	0.80
1:A:325:LEU:HA	1:A:328:LEU:HD12	1.64	0.79
1:A:453:GLY:O	1:A:488:SER:HB3	1.83	0.79
1:A:390:ASP:O	1:A:599:SER:HB2	1.83	0.79
1:A:395:ASP:OD2	1:A:463:ARG:HD2	1.84	0.78
1:A:196:PHE:HE2	1:A:217:ASN:HB2	1.47	0.78
1:A:569:PHE:O	1:A:581:VAL:HG13	1.83	0.78
1:A:448:TRP:HZ3	1:A:589:LEU:HD22	1.48	0.78
1:A:127:ILE:HD11	1:A:250:VAL:CG1	2.14	0.78
1:A:97:VAL:HA	1:A:229:LEU:HD23	1.63	0.77
1:A:116:HIS:HD2	1:A:124:GLY:O	1.66	0.77
1:A:34:ILE:HG12	1:A:270:LEU:HD22	1.66	0.77
1:A:289:PHE:CE1	1:A:306:GLY:HA2	2.20	0.77
1:A:348:CYS:HB3	1:A:392:LEU:HD13	1.66	0.77
1:A:328:LEU:O	1:A:332:ARG:HD3	1.83	0.77
1:A:13:LEU:H	1:A:14:PRO:HD2	1.48	0.77
1:A:211:GLU:CB	1:A:242:PHE:HB2	2.13	0.77
1:A:448:TRP:CZ2	1:A:474:ILE:HD12	2.20	0.77
1:A:196:PHE:CE2	1:A:217:ASN:HB2	2.19	0.77
1:A:300:PHE:CD1	1:A:307:PHE:HZ	2.03	0.76
1:A:82:TYR:CE2	1:A:252:SER:HB3	2.20	0.76
1:A:541:ALA:O	1:A:543:VAL:HG13	1.85	0.76
1:A:127:ILE:HB	1:A:128:PRO:HD3	1.67	0.76
1:A:321:GLY:O	1:A:325:LEU:HG	1.86	0.76
1:A:618:PHE:CD1	1:A:629:PHE:HB3	2.21	0.76
1:A:394:LEU:HD13	1:A:398:TYR:O	1.87	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:521:GLU:HG2	1:A:524:TYR:HB2	1.69	0.75
1:A:460:ALA:HB3	1:A:463:ARG:HG3	1.68	0.75
1:A:625:CYS:HA	1:A:629:PHE:O	1.86	0.75
1:A:95:VAL:HG22	1:A:210:LYS:O	1.87	0.75
1:A:456:SER:OG	1:A:490:SER:HB3	1.86	0.75
1:A:573:CYS:HB2	1:A:577:THR:HG22	1.66	0.75
1:A:291:SER:OG	1:A:298:LEU:HD12	1.87	0.74
1:A:381:ILE:HG21	1:A:402:ALA:HB2	1.68	0.74
1:A:381:ILE:HG21	1:A:402:ALA:CB	2.18	0.74
1:A:416:LYS:HE2	1:A:620:LYS:HD2	1.70	0.74
1:A:117:MET:HB3	1:A:191:GLY:HA2	1.68	0.74
1:A:59:LEU:O	1:A:253:HIS:HB3	1.88	0.73
1:A:26:MET:SD	1:A:29:LEU:HD12	2.29	0.73
1:A:106:LEU:HD21	1:A:131:ILE:HG23	1.71	0.73
1:A:290:GLY:HA2	1:A:302:ASP:OD1	1.87	0.73
1:A:18:LYS:NZ	1:A:290:GLY:N	2.34	0.73
1:A:400:TYR:OH	1:A:670:ALA:HA	1.88	0.73
1:A:499:SER:O	1:A:503:ALA:HB2	1.87	0.73
1:A:468:ASN:HD21	1:A:669:ILE:HG23	1.52	0.73
1:A:423:LEU:HD22	1:A:427:LEU:O	1.89	0.72
1:A:580:PRO:HB2	1:A:582:THR:OG1	1.89	0.72
1:A:230:LEU:HA	1:A:235:THR:O	1.89	0.72
1:A:280:LYS:HG2	1:A:281:ASN:ND2	2.05	0.72
1:A:357:LYS:HD3	1:A:639:LEU:HB2	1.71	0.72
1:A:113:LYS:HD3	1:A:172:LEU:HD11	1.71	0.71
1:A:349:ALA:O	1:A:373:THR:HG23	1.91	0.71
1:A:611:LEU:O	1:A:615:GLN:HG2	1.90	0.71
1:A:214:VAL:HG11	1:A:239:VAL:HG11	1.73	0.71
1:A:110:GLN:HA	1:A:152:PHE:CD2	2.25	0.71
1:A:289:PHE:CZ	1:A:306:GLY:HA2	2.25	0.71
1:A:6:VAL:HG22	1:A:266:LEU:HD23	1.73	0.71
1:A:60:ASP:HA	1:A:253:HIS:CD2	2.26	0.71
1:A:258:ARG:NH1	1:A:262:GLY:HA2	2.05	0.71
1:A:603:ARG:NH2	1:A:606:HIS:ND1	2.39	0.71
1:A:615:GLN:HB3	1:A:648:LEU:CD1	2.19	0.70
1:A:446:LEU:HD11	1:A:451:LEU:HD23	1.73	0.70
1:A:360:GLN:O	1:A:364:GLN:HG2	1.91	0.70
1:A:587:CYS:C	1:A:588:TYR:HD1	1.94	0.70
1:A:291:SER:OG	1:A:298:LEU:HB2	1.92	0.69
1:A:138:TRP:HD1	1:A:143:GLU:HG3	1.56	0.69
1:A:414:ASN:HD21	1:A:428:ARG:NH1	1.90	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:414:ASN:O	1:A:645:THR:HG23	1.92	0.69
1:A:662:GLY:O	1:A:666:VAL:HG23	1.93	0.69
1:A:174:LYS:HD3	1:A:189:TYR:CE1	2.28	0.69
1:A:138:TRP:CB	1:A:148:ALA:HB3	2.20	0.69
1:A:200:GLN:HA	1:A:227:TYR:OH	1.92	0.69
1:A:462:ASP:OD2	1:A:463:ARG:N	2.26	0.69
1:A:416:LYS:HD2	1:A:646:GLU:HB2	1.73	0.69
1:A:688:THR:O	1:A:689:ARG:HB2	1.92	0.69
1:A:162:ASP:OD2	1:A:164:LYS:HB2	1.93	0.69
1:A:280:LYS:NZ	1:A:281:ASN:HD21	1.91	0.69
1:A:441:LYS:HD2	1:A:570:ARG:CZ	2.23	0.69
1:A:362:SER:O	1:A:367:GLN:HA	1.93	0.68
1:A:416:LYS:HD2	1:A:646:GLU:CB	2.23	0.68
1:A:69:ARG:CB	1:A:71:PRO:HD2	2.23	0.68
1:A:607:VAL:O	1:A:611:LEU:HD22	1.92	0.68
1:A:126:ASN:HB3	1:A:324:TYR:CE1	2.28	0.68
1:A:458:HIS:HB3	1:A:466:GLY:O	1.94	0.68
1:A:220:GLU:O	1:A:223:ASP:HB2	1.93	0.68
1:A:258:ARG:HD2	1:A:262:GLY:CA	2.24	0.68
1:A:523:TYR:CE2	1:A:537:VAL:HG21	2.29	0.68
1:A:13:LEU:O	1:A:17:SER:HB2	1.94	0.67
1:A:110:GLN:HA	1:A:152:PHE:CE2	2.29	0.67
1:A:57:VAL:HG13	1:A:256:VAL:CG2	2.23	0.67
1:A:619:GLY:O	1:A:625:CYS:SG	2.52	0.67
1:A:661:LEU:HD12	1:A:669:ILE:HD11	1.75	0.67
1:A:109:LEU:HD13	1:A:208:PHE:HZ	1.59	0.67
1:A:515:CYS:HA	1:A:521:GLU:OE1	1.93	0.67
1:A:434:LEU:HB3	1:A:588:TYR:CD2	2.30	0.67
1:A:603:ARG:O	1:A:607:VAL:HG23	1.95	0.67
1:A:347:TRP:CZ3	1:A:611:LEU:HD21	2.28	0.67
1:A:456:SER:O	1:A:457:CYS:SG	2.53	0.67
1:A:438:VAL:HG22	1:A:571:LEU:CD2	2.24	0.67
1:A:448:TRP:HZ2	1:A:474:ILE:HD12	1.60	0.67
1:A:658:GLU:HG2	1:A:666:VAL:HG11	1.75	0.67
1:A:300:PHE:CE1	1:A:307:PHE:CZ	2.81	0.66
1:A:460:ALA:HB2	1:A:524:TYR:HE1	1.60	0.66
1:A:258:ARG:HH11	1:A:262:GLY:CA	2.07	0.66
1:A:361:TRP:HA	1:A:364:GLN:HB2	1.77	0.66
1:A:122:SER:HB2	1:A:324:TYR:OH	1.96	0.66
1:A:149:VAL:O	1:A:149:VAL:HG12	1.96	0.66
1:A:114:SER:O	1:A:115:CYS:SG	2.53	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:414:ASN:ND2	1:A:428:ARG:NH1	2.44	0.66
1:A:70:ASP:N	1:A:71:PRO:HD2	2.12	0.65
1:A:117:MET:SD	1:A:121:ARG:CZ	2.84	0.65
1:A:21:GLN:HB3	1:A:286:PHE:CD1	2.32	0.65
1:A:138:TRP:HB2	1:A:148:ALA:CB	2.24	0.65
1:A:52:LYS:HA	1:A:258:ARG:HH21	1.60	0.65
1:A:94:ALA:HB3	1:A:127:ILE:HG21	1.77	0.65
1:A:521:GLU:CG	1:A:524:TYR:HB2	2.25	0.65
1:A:415:ARG:CA	1:A:645:THR:HA	2.22	0.65
1:A:381:ILE:HD12	1:A:680:LEU:CD2	2.27	0.65
1:A:49:ILE:HD11	1:A:56:ALA:O	1.97	0.65
1:A:91:HIS:CD2	1:A:249:GLN:HG3	2.30	0.65
1:A:138:TRP:CD1	1:A:143:GLU:HG3	2.32	0.64
1:A:169:LEU:O	1:A:170:CYS:SG	2.54	0.64
1:A:288:LEU:HD23	1:A:289:PHE:CZ	2.32	0.64
1:A:624:ASN:HB3	1:A:628:LYS:HB3	1.80	0.64
1:A:407:LEU:N	1:A:407:LEU:HD23	2.12	0.64
1:A:218:LEU:HD22	1:A:223:ASP:HB3	1.79	0.64
1:A:325:LEU:HA	1:A:328:LEU:CD1	2.28	0.63
1:A:136:LEU:HD21	1:A:149:VAL:HG22	1.79	0.63
1:A:448:TRP:CZ3	1:A:589:LEU:HD22	2.30	0.63
1:A:76:PRO:HA	1:A:255:VAL:O	1.98	0.63
1:A:210:LYS:HD3	1:A:301:LYS:HE2	1.80	0.63
1:A:631:LEU:HD22	1:A:631:LEU:O	1.97	0.63
1:A:353:GLU:O	1:A:639:LEU:HD13	1.97	0.63
1:A:566:ARG:HG3	1:A:567:GLU:N	2.14	0.63
1:A:625:CYS:HB3	1:A:626:PRO:HD3	1.81	0.62
1:A:611:LEU:C	1:A:613:HIS:H	2.02	0.62
1:A:211:GLU:HG2	1:A:212:THR:CG2	2.30	0.62
1:A:505:CYS:SG	1:A:521:GLU:OE1	2.57	0.62
1:A:507:GLY:HA3	1:A:512:LEU:O	2.00	0.62
1:A:550:GLU:O	1:A:551:ASN:ND2	2.32	0.62
1:A:65:PHE:HB2	1:A:320:LEU:HD13	1.82	0.62
1:A:257:ALA:HB2	1:A:267:ILE:HD12	1.80	0.62
1:A:258:ARG:HH11	1:A:262:GLY:HA2	1.65	0.62
1:A:145:LEU:C	1:A:147:GLY:H	2.02	0.62
1:A:311:PRO:HB2	1:A:683:ALA:HB2	1.82	0.62
1:A:376:THR:OG1	1:A:379:ASP:HB2	1.99	0.62
1:A:638:ASN:ND2	1:A:643:ASP:H	1.98	0.62
1:A:257:ALA:HB2	1:A:267:ILE:CD1	2.30	0.62
1:A:680:LEU:O	1:A:684:CYS:SG	2.58	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:246:HIS:O	1:A:247:LEU:HD23	2.00	0.62
1:A:117:MET:HA	1:A:191:GLY:H	1.64	0.61
1:A:12:SER:HB2	1:A:14:PRO:CD	2.25	0.61
1:A:13:LEU:H	1:A:14:PRO:CD	2.13	0.61
1:A:297:ASP:OD1	1:A:302:ASP:HB2	1.99	0.61
1:A:1:ALA:C	1:A:3:ARG:H	2.02	0.61
1:A:60:ASP:HA	1:A:253:HIS:CG	2.35	0.61
1:A:341:ARG:HG3	1:A:341:ARG:HH11	1.65	0.61
1:A:46:ILE:HD13	1:A:67:ALA:HB2	1.83	0.61
1:A:570:ARG:HG2	1:A:578:THR:HG22	1.82	0.61
1:A:105:LYS:HB3	1:A:234:ASN:O	1.99	0.61
1:A:439:VAL:HA	1:A:533:LEU:HD11	1.82	0.61
1:A:465:ALA:O	1:A:542:PHE:HB3	2.00	0.61
1:A:175:GLY:HA2	1:A:188:PRO:HD3	1.83	0.61
1:A:577:THR:HG23	1:A:578:THR:N	2.15	0.61
1:A:679:PRO:HA	1:A:682:GLU:HB2	1.83	0.61
1:A:133:ARG:HH22	1:A:335:ALA:CB	2.06	0.60
1:A:467:TRP:CZ3	1:A:471:MET:HG3	2.36	0.60
1:A:642:ASN:C	1:A:644:ASN:N	2.54	0.60
1:A:519:SER:CA	1:A:524:TYR:HD2	2.11	0.60
1:A:425:CYS:SG	1:A:428:ARG:NH2	2.74	0.60
1:A:135:PRO:HG2	1:A:152:PHE:CZ	2.36	0.60
1:A:175:GLY:HA2	1:A:188:PRO:CD	2.32	0.60
1:A:377:THR:O	1:A:381:ILE:HG13	2.01	0.60
1:A:392:LEU:O	1:A:597:VAL:HA	2.01	0.60
1:A:545:ASN:O	1:A:549:TRP:HD1	1.84	0.60
1:A:113:LYS:HB2	1:A:205:ASP:OD2	2.01	0.60
1:A:172:LEU:HD13	1:A:204:GLY:HA2	1.83	0.60
1:A:414:ASN:ND2	1:A:428:ARG:HH12	2.00	0.60
1:A:130:GLY:HA2	1:A:133:ARG:CB	2.32	0.60
1:A:657:TYR:CE2	1:A:658:GLU:HG3	2.37	0.60
1:A:271:LEU:HD22	1:A:307:PHE:CD2	2.35	0.60
1:A:276:GLU:CG	1:A:277:LYS:H	2.13	0.60
1:A:228:GLU:HB3	1:A:236:ARG:HB2	1.83	0.59
1:A:570:ARG:HG2	1:A:578:THR:CG2	2.32	0.59
1:A:107:ASP:H	1:A:234:ASN:ND2	2.00	0.59
1:A:478:THR:HG22	1:A:480:SER:H	1.67	0.59
1:A:615:GLN:O	1:A:619:GLY:HA3	2.02	0.59
1:A:196:PHE:CZ	1:A:214:VAL:HA	2.37	0.59
1:A:418:SER:O	1:A:421:SER:HB3	2.02	0.59
1:A:55:ASP:O	1:A:267:ILE:HD11	2.03	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:379:ASP:O	1:A:382:ALA:HB3	2.02	0.59
1:A:467:TRP:C	1:A:470:PRO:HD2	2.23	0.59
1:A:461:VAL:HG21	1:A:492:ALA:HB1	1.84	0.59
1:A:92:TYR:CE2	1:A:252:SER:HA	2.37	0.59
1:A:364:GLN:O	1:A:618:PHE:CZ	2.55	0.59
1:A:530:PHE:CD2	1:A:560:TRP:HH2	2.21	0.59
1:A:7:ARG:HG2	1:A:35:THR:HB	1.83	0.58
1:A:126:ASN:HD22	1:A:328:LEU:HD23	1.68	0.58
1:A:467:TRP:CE3	1:A:471:MET:HG3	2.38	0.58
1:A:65:PHE:CG	1:A:328:LEU:HD22	2.38	0.58
1:A:311:PRO:HD3	1:A:686:PHE:CE1	2.38	0.58
1:A:211:GLU:HG2	1:A:212:THR:HG22	1.86	0.58
1:A:548:VAL:HG21	1:A:581:VAL:CG1	2.33	0.58
1:A:61:ASP:HA	1:A:64:VAL:HG12	1.85	0.58
1:A:192:TYR:HA	1:A:209:VAL:CG1	2.33	0.58
1:A:276:GLU:O	1:A:282:LYS:HD3	2.03	0.58
1:A:90:THR:CG2	1:A:308:LEU:HD11	2.34	0.58
1:A:126:ASN:O	1:A:327:ALA:HB1	2.02	0.58
1:A:458:HIS:CE1	1:A:542:PHE:CD2	2.91	0.58
1:A:526:TYR:CD2	1:A:544:LYS:HD3	2.39	0.58
1:A:531:ARG:HA	1:A:534:ALA:HB3	1.84	0.58
1:A:320:LEU:O	1:A:324:TYR:HB3	2.04	0.58
1:A:381:ILE:HG22	1:A:407:LEU:HD11	1.86	0.58
1:A:34:ILE:HD11	1:A:270:LEU:HD13	1.86	0.58
1:A:116:HIS:CD2	1:A:125:TRP:HE3	2.21	0.58
1:A:557:SER:OG	1:A:558:ALA:N	2.33	0.58
1:A:638:ASN:ND2	1:A:643:ASP:HB2	2.19	0.58
1:A:242:PHE:CD1	1:A:243:LYS:N	2.72	0.58
1:A:345:VAL:HG23	1:A:606:HIS:CE1	2.38	0.58
1:A:251:PRO:HB3	1:A:689:ARG:HH21	1.68	0.58
1:A:43:LEU:HD13	1:A:46:ILE:HD12	1.85	0.58
1:A:59:LEU:O	1:A:253:HIS:CB	2.51	0.57
1:A:113:LYS:HB3	1:A:155:ALA:O	2.04	0.57
1:A:65:PHE:HB2	1:A:320:LEU:CD1	2.34	0.57
1:A:217:ASN:N	1:A:217:ASN:HD22	2.00	0.57
1:A:548:VAL:HG21	1:A:581:VAL:HG11	1.86	0.57
1:A:91:HIS:HD2	1:A:249:GLN:HG3	1.69	0.57
1:A:434:LEU:HD22	1:A:588:TYR:CE2	2.38	0.57
1:A:654:ARG:N	1:A:655:PRO:CD	2.67	0.57
1:A:181:CYS:HA	1:A:187:GLU:HG2	1.86	0.57
1:A:560:TRP:CG	1:A:561:ALA:N	2.73	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:300:PHE:CZ	1:A:307:PHE:CZ	2.92	0.57
1:A:322:SER:HA	1:A:325:LEU:HB2	1.86	0.57
1:A:614:GLN:O	1:A:631:LEU:HD12	2.05	0.57
1:A:92:TYR:HD2	1:A:252:SER:CA	2.11	0.57
1:A:351:GLY:O	1:A:355:GLN:HB3	2.04	0.57
1:A:570:ARG:CG	1:A:578:THR:HG22	2.35	0.57
1:A:56:ALA:O	1:A:57:VAL:HB	2.04	0.57
1:A:60:ASP:OD2	1:A:61:ASP:N	2.38	0.57
1:A:109:LEU:HB2	1:A:132:LEU:HD21	1.86	0.57
1:A:411:MET:HE1	1:A:611:LEU:HB2	1.86	0.57
1:A:12:SER:CB	1:A:14:PRO:HD2	2.26	0.56
1:A:454:LYS:HB3	1:A:539:ASP:OD2	2.05	0.56
1:A:130:GLY:HA2	1:A:133:ARG:HB3	1.86	0.56
1:A:192:TYR:HB3	1:A:213:THR:HG21	1.87	0.56
1:A:347:TRP:HZ3	1:A:611:LEU:HD21	1.70	0.56
1:A:82:TYR:CE2	1:A:252:SER:CB	2.88	0.56
1:A:109:LEU:HD13	1:A:208:PHE:CZ	2.40	0.56
1:A:456:SER:HB3	1:A:487:PHE:CG	2.39	0.56
1:A:493:PRO:HB3	1:A:521:GLU:HG2	1.86	0.56
1:A:631:LEU:HD22	1:A:641:PHE:CE2	2.39	0.56
1:A:79:ALA:HB2	1:A:319:TYR:HE1	1.71	0.56
1:A:113:LYS:HA	1:A:155:ALA:O	2.05	0.56
1:A:276:GLU:HG3	1:A:277:LYS:N	2.17	0.56
1:A:277:LYS:HA	1:A:277:LYS:CE	2.34	0.56
1:A:310:ILE:HG22	1:A:314:VAL:HG13	1.86	0.56
1:A:62:GLY:HA2	1:A:126:ASN:ND2	2.20	0.56
1:A:145:LEU:C	1:A:147:GLY:N	2.58	0.56
1:A:7:ARG:HG2	1:A:35:THR:CB	2.36	0.56
1:A:49:ILE:HG22	1:A:74:LEU:HD22	1.88	0.56
1:A:98:VAL:CG2	1:A:206:VAL:HA	2.35	0.56
1:A:106:LEU:HD12	1:A:109:LEU:HD12	1.87	0.56
1:A:341:ARG:HG3	1:A:341:ARG:NH1	2.21	0.56
1:A:661:LEU:O	1:A:665:TYR:HD2	1.88	0.56
1:A:2:PRO:O	1:A:3:ARG:HD3	2.06	0.55
1:A:6:VAL:CG2	1:A:266:LEU:HD23	2.35	0.55
1:A:8:TRP:CD1	1:A:9:CYS:N	2.74	0.55
1:A:124:GLY:O	1:A:125:TRP:HB2	2.06	0.55
1:A:76:PRO:HD2	1:A:315:ASP:HA	1.88	0.55
1:A:19:CYS:O	1:A:36:CYS:SG	2.64	0.55
1:A:354:GLU:O	1:A:640:LEU:HD21	2.06	0.55
1:A:460:ALA:HB2	1:A:524:TYR:CE1	2.41	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:376:THR:OG1	1:A:379:ASP:N	2.39	0.55
1:A:493:PRO:HG3	1:A:521:GLU:OE1	2.06	0.55
1:A:127:ILE:HD11	1:A:250:VAL:HG13	1.86	0.55
1:A:230:LEU:C	1:A:245:CYS:SG	2.84	0.55
1:A:21:GLN:HB3	1:A:286:PHE:HD1	1.70	0.55
1:A:465:ALA:HB1	1:A:543:VAL:O	2.06	0.55
1:A:347:TRP:CH2	1:A:611:LEU:HD21	2.41	0.55
1:A:560:TRP:CE3	1:A:564:LEU:HD11	2.42	0.55
1:A:109:LEU:CD1	1:A:206:VAL:HG11	2.27	0.55
1:A:43:LEU:C	1:A:45:CYS:H	2.10	0.54
1:A:82:TYR:HB2	1:A:89:GLN:O	2.07	0.54
1:A:364:GLN:O	1:A:618:PHE:HZ	1.90	0.54
1:A:433:TYR:CE2	1:A:595:HIS:NE2	2.58	0.54
1:A:4:LYS:HE2	1:A:32:PRO:HB3	1.87	0.54
1:A:405:CYS:HA	1:A:684:CYS:HB3	1.88	0.54
1:A:451:LEU:C	1:A:486:PHE:HE2	2.10	0.54
1:A:81:ILE:HG22	1:A:305:LEU:HB2	1.89	0.54
1:A:381:ILE:HD12	1:A:680:LEU:HD23	1.89	0.54
1:A:492:ALA:N	1:A:501:LEU:O	2.40	0.54
1:A:494:GLY:CA	1:A:517:PRO:HD3	2.36	0.54
1:A:588:TYR:CD1	1:A:588:TYR:N	2.76	0.54
1:A:642:ASN:C	1:A:644:ASN:H	2.09	0.54
1:A:452:LYS:HA	1:A:486:PHE:CD2	2.43	0.54
1:A:318:LEU:HG	1:A:386:LYS:HD3	1.88	0.54
1:A:43:LEU:HA	1:A:46:ILE:HB	1.89	0.54
1:A:346:VAL:HA	1:A:370:THR:O	2.06	0.54
1:A:80:GLU:HB2	1:A:253:HIS:O	2.07	0.54
1:A:179:ASN:HB3	1:A:186:GLN:HB3	1.90	0.54
1:A:419:LYS:HE2	1:A:420:HIS:HB2	1.90	0.54
1:A:83:GLY:O	1:A:305:LEU:HD11	2.07	0.54
1:A:214:VAL:HG11	1:A:239:VAL:CG1	2.38	0.54
1:A:70:ASP:N	1:A:71:PRO:CD	2.69	0.54
1:A:391:ALA:HB1	1:A:597:VAL:HG12	1.90	0.54
1:A:57:VAL:CG1	1:A:256:VAL:HG23	2.28	0.53
1:A:618:PHE:CG	1:A:629:PHE:HD2	2.27	0.53
1:A:23:GLN:HG3	1:A:34:ILE:O	2.08	0.53
1:A:115:CYS:SG	1:A:204:GLY:CA	2.85	0.53
1:A:218:LEU:HD13	1:A:223:ASP:O	2.08	0.53
1:A:460:ALA:CB	1:A:524:TYR:HE1	2.21	0.53
1:A:29:LEU:HD22	1:A:29:LEU:O	2.08	0.53
1:A:680:LEU:O	1:A:680:LEU:HG	2.07	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:221:LYS:C	1:A:223:ASP:H	2.11	0.53
1:A:385:LEU:HD23	1:A:600:ARG:HE	1.74	0.53
1:A:454:LYS:O	1:A:487:PHE:HD1	1.91	0.53
1:A:607:VAL:HG12	1:A:611:LEU:HD22	1.89	0.53
1:A:474:ILE:HG12	1:A:486:PHE:CD1	2.44	0.53
1:A:456:SER:OG	1:A:490:SER:CB	2.54	0.53
1:A:326:THR:O	1:A:330:ASN:HB2	2.09	0.53
1:A:247:LEU:O	1:A:248:ALA:HB2	2.09	0.53
1:A:257:ALA:CB	1:A:267:ILE:HD12	2.38	0.53
1:A:288:LEU:HB3	1:A:289:PHE:CE2	2.44	0.53
1:A:68:GLY:HA3	1:A:316:SER:HB3	1.91	0.52
1:A:111:GLY:HA2	1:A:152:PHE:O	2.09	0.52
1:A:10:ALA:HB3	1:A:37:VAL:O	2.09	0.52
1:A:440:LYS:HE3	1:A:533:LEU:O	2.10	0.52
1:A:447:THR:O	1:A:449:ASN:N	2.43	0.52
1:A:184:SER:C	1:A:186:GLN:H	2.12	0.52
1:A:657:TYR:CG	1:A:658:GLU:N	2.77	0.52
1:A:174:LYS:C	1:A:188:PRO:HD2	2.29	0.52
1:A:324:TYR:C	1:A:326:THR:H	2.12	0.52
1:A:15:GLU:HG3	1:A:299:LEU:HD23	1.92	0.52
1:A:398:TYR:CD1	1:A:462:ASP:OD1	2.63	0.52
1:A:356:SER:O	1:A:360:GLN:HG3	2.09	0.52
1:A:657:TYR:O	1:A:661:LEU:HD23	2.09	0.52
1:A:437:ALA:HB2	1:A:542:PHE:CE1	2.44	0.52
1:A:519:SER:N	1:A:524:TYR:CD2	2.78	0.52
1:A:455:LYS:HG3	1:A:488:SER:OG	2.10	0.52
1:A:633:LYS:NZ	1:A:643:ASP:O	2.30	0.51
1:A:49:ILE:HA	1:A:54:ALA:O	2.10	0.51
1:A:174:LYS:O	1:A:188:PRO:HG2	2.09	0.51
1:A:330:ASN:O	1:A:333:GLU:O	2.28	0.51
1:A:642:ASN:HB2	1:A:645:THR:OG1	2.11	0.51
1:A:334:THR:HG22	1:A:335:ALA:H	1.75	0.51
1:A:62:GLY:HA3	1:A:120:GLY:O	2.11	0.51
1:A:214:VAL:HG21	1:A:239:VAL:HB	1.92	0.51
1:A:113:LYS:CD	1:A:172:LEU:HD11	2.41	0.51
1:A:199:LEU:HD22	1:A:205:ASP:O	2.10	0.51
1:A:94:ALA:O	1:A:247:LEU:HG	2.11	0.51
1:A:113:LYS:CB	1:A:155:ALA:O	2.58	0.51
1:A:113:LYS:CA	1:A:155:ALA:O	2.58	0.51
1:A:411:MET:HE1	1:A:611:LEU:CB	2.41	0.51
1:A:516:VAL:HG12	1:A:518:ASN:H	1.76	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4:LYS:HD2	1:A:266:LEU:HD11	1.91	0.51
1:A:81:ILE:HG13	1:A:308:LEU:HG	1.93	0.51
1:A:237:ALA:HB1	1:A:238:PRO:HD2	1.92	0.51
1:A:311:PRO:O	1:A:313:LYS:N	2.42	0.51
1:A:43:LEU:C	1:A:45:CYS:N	2.63	0.51
1:A:560:TRP:CZ3	1:A:564:LEU:HD11	2.45	0.51
1:A:661:LEU:HD23	1:A:661:LEU:H	1.76	0.51
1:A:39:ARG:HG2	1:A:44:GLU:O	2.11	0.50
1:A:75:ARG:HH11	1:A:75:ARG:HB2	1.76	0.50
1:A:129:VAL:HG12	1:A:129:VAL:O	2.12	0.50
1:A:438:VAL:HG13	1:A:571:LEU:HD23	1.92	0.50
1:A:588:TYR:HD1	1:A:588:TYR:N	2.09	0.50
1:A:604:ALA:O	1:A:606:HIS:N	2.45	0.50
1:A:230:LEU:O	1:A:245:CYS:SG	2.69	0.50
1:A:258:ARG:HH11	1:A:262:GLY:HA3	1.76	0.50
1:A:515:CYS:O	1:A:516:VAL:HG23	2.12	0.50
1:A:661:LEU:HD23	1:A:661:LEU:N	2.26	0.50
1:A:13:LEU:HD22	1:A:16:TRP:CE3	2.46	0.50
1:A:173:CYS:HB3	1:A:187:GLU:CD	2.31	0.50
1:A:346:VAL:HB	1:A:389:ALA:HA	1.94	0.50
1:A:551:ASN:O	1:A:561:ALA:HB1	2.11	0.50
1:A:117:MET:CA	1:A:191:GLY:H	2.24	0.50
1:A:438:VAL:HG12	1:A:569:PHE:HB3	1.92	0.50
1:A:138:TRP:NE1	1:A:144:PRO:C	2.65	0.50
1:A:350:VAL:HG22	1:A:376:THR:O	2.11	0.50
1:A:552:THR:CG2	1:A:564:LEU:HD12	2.33	0.50
1:A:553:ASN:ND2	1:A:566:ARG:NH1	2.60	0.50
1:A:571:LEU:HD11	1:A:584:ALA:HB2	1.94	0.50
1:A:22:TRP:CZ2	1:A:288:LEU:HD11	2.46	0.50
1:A:462:ASP:O	1:A:468:ASN:OD1	2.30	0.50
1:A:587:CYS:C	1:A:588:TYR:CD1	2.82	0.50
1:A:361:TRP:CZ2	1:A:369:VAL:HG11	2.47	0.50
1:A:361:TRP:CH2	1:A:369:VAL:HG11	2.47	0.50
1:A:396:GLY:O	1:A:399:ILE:N	2.39	0.50
1:A:560:TRP:O	1:A:564:LEU:HD21	2.12	0.49
1:A:565:ASN:HB3	1:A:568:ASP:CG	2.32	0.49
1:A:623:LYS:H	1:A:623:LYS:CD	2.24	0.49
1:A:618:PHE:HB2	1:A:631:LEU:HB2	1.94	0.49
1:A:400:TYR:O	1:A:400:TYR:CD2	2.65	0.49
1:A:457:CYS:CB	1:A:541:ALA:HA	2.19	0.49
1:A:500:SER:HA	1:A:503:ALA:HB2	1.94	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:638:ASN:HD22	1:A:643:ASP:H	1.60	0.49
1:A:589:LEU:N	1:A:589:LEU:HD23	2.28	0.49
1:A:90:THR:HG21	1:A:308:LEU:HD11	1.95	0.49
1:A:104:PHE:HD2	1:A:112:GLN:HE21	1.60	0.49
1:A:110:GLN:HA	1:A:152:PHE:HD2	1.76	0.49
1:A:211:GLU:HG2	1:A:212:THR:N	2.27	0.49
1:A:282:LYS:NZ	1:A:282:LYS:HB3	2.27	0.49
1:A:560:TRP:CZ2	1:A:561:ALA:HB2	2.47	0.49
1:A:310:ILE:HG12	1:A:686:PHE:HZ	1.77	0.49
1:A:357:LYS:HD3	1:A:639:LEU:O	2.12	0.49
1:A:452:LYS:N	1:A:486:PHE:CE2	2.81	0.49
1:A:262:GLY:O	1:A:263:LYS:HE3	2.13	0.49
1:A:415:ARG:HA	1:A:645:THR:CA	2.27	0.49
1:A:461:VAL:CG2	1:A:492:ALA:HB1	2.43	0.49
1:A:618:PHE:O	1:A:631:LEU:HB2	2.12	0.49
1:A:439:VAL:HA	1:A:533:LEU:CD1	2.42	0.49
1:A:521:GLU:O	1:A:524:TYR:HB3	2.13	0.49
1:A:22:TRP:CH2	1:A:288:LEU:HD11	2.48	0.49
1:A:270:LEU:HD12	1:A:270:LEU:O	2.13	0.49
1:A:350:VAL:HG21	1:A:377:THR:OG1	2.13	0.49
1:A:549:TRP:CE3	1:A:566:ARG:NH2	2.80	0.49
1:A:257:ALA:O	1:A:258:ARG:O	2.31	0.48
1:A:320:LEU:O	1:A:324:TYR:HD2	1.96	0.48
1:A:552:THR:HG22	1:A:564:LEU:HB2	1.96	0.48
1:A:125:TRP:HH2	1:A:149:VAL:HG11	1.70	0.48
1:A:461:VAL:HG11	1:A:495:ALA:HB2	1.95	0.48
1:A:595:HIS:CE1	1:A:642:ASN:OD1	2.67	0.48
1:A:15:GLU:HB2	1:A:298:LEU:HB3	1.96	0.48
1:A:289:PHE:HD1	1:A:300:PHE:HB3	1.78	0.48
1:A:434:LEU:CD2	1:A:591:VAL:HB	2.44	0.48
1:A:438:VAL:CG1	1:A:569:PHE:HB3	2.44	0.48
1:A:59:LEU:HD12	1:A:64:VAL:HG23	1.94	0.48
1:A:436:VAL:HG11	1:A:571:LEU:HD13	1.95	0.48
1:A:394:LEU:CD1	1:A:598:VAL:HG21	2.43	0.48
1:A:56:ALA:O	1:A:57:VAL:CB	2.62	0.48
1:A:500:SER:HA	1:A:503:ALA:CB	2.43	0.48
1:A:550:GLU:OE1	1:A:644:ASN:ND2	2.47	0.48
1:A:217:ASN:N	1:A:217:ASN:ND2	2.62	0.47
1:A:26:MET:SD	1:A:29:LEU:CD1	2.99	0.47
1:A:323:ARG:CZ	1:A:323:ARG:HB3	2.43	0.47
1:A:414:ASN:HD21	1:A:428:ARG:HH12	1.55	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:7:ARG:HB2	1:A:55:ASP:H	1.79	0.47
1:A:79:ALA:O	1:A:308:LEU:N	2.47	0.47
1:A:190:PHE:H	1:A:194:GLY:HA3	1.79	0.47
1:A:254:ALA:HB2	1:A:319:TYR:CE2	2.49	0.47
1:A:350:VAL:HG11	1:A:377:THR:OG1	2.13	0.47
1:A:395:ASP:CG	1:A:463:ARG:HD2	2.35	0.47
1:A:665:TYR:O	1:A:668:ALA:HB3	2.13	0.47
1:A:288:LEU:HB3	1:A:289:PHE:CD2	2.50	0.47
1:A:600:ARG:O	1:A:602:ASP:N	2.44	0.47
1:A:122:SER:OG	1:A:250:VAL:HG11	2.14	0.47
1:A:229:LEU:HG	1:A:237:ALA:O	2.14	0.47
1:A:130:GLY:HA2	1:A:133:ARG:HB2	1.95	0.47
1:A:61:ASP:OD2	1:A:252:SER:O	2.32	0.47
1:A:92:TYR:CD1	1:A:250:VAL:HG23	2.50	0.47
1:A:116:HIS:CD2	1:A:124:GLY:O	2.56	0.47
1:A:149:VAL:O	1:A:149:VAL:CG1	2.63	0.47
1:A:159:PRO:HG2	1:A:190:PHE:HD1	1.79	0.47
1:A:192:TYR:HA	1:A:209:VAL:HG12	1.97	0.47
1:A:334:THR:HB	1:A:337:GLU:HB2	1.95	0.47
1:A:349:ALA:HB1	1:A:354:GLU:O	2.14	0.47
1:A:396:GLY:O	1:A:397:GLY:C	2.53	0.47
1:A:65:PHE:CG	1:A:65:PHE:O	2.67	0.47
1:A:400:TYR:CD1	1:A:669:ILE:HD12	2.49	0.47
1:A:467:TRP:O	1:A:471:MET:N	2.44	0.47
1:A:469:ILE:HA	1:A:469:ILE:HD13	1.56	0.47
1:A:381:ILE:HG21	1:A:402:ALA:HB1	1.95	0.47
1:A:478:THR:HG22	1:A:480:SER:N	2.28	0.47
1:A:492:ALA:HB3	1:A:501:LEU:HB3	1.97	0.47
1:A:521:GLU:O	1:A:521:GLU:HG3	2.15	0.47
1:A:615:GLN:CB	1:A:648:LEU:HD12	2.28	0.47
1:A:618:PHE:HA	1:A:629:PHE:O	2.13	0.47
1:A:325:LEU:HD22	1:A:329:LYS:HE3	1.98	0.46
1:A:468:ASN:O	1:A:472:GLY:HA3	2.16	0.46
1:A:81:ILE:CG1	1:A:90:THR:HG22	2.38	0.46
1:A:410:VAL:HB	1:A:411:MET:H	1.56	0.46
1:A:149:VAL:O	1:A:169:LEU:HD21	2.15	0.46
1:A:400:TYR:HB2	1:A:669:ILE:HD12	1.98	0.46
1:A:324:TYR:CD1	1:A:327:ALA:HB3	2.50	0.46
1:A:23:GLN:O	1:A:23:GLN:HG2	2.15	0.46
1:A:43:LEU:O	1:A:47:ARG:HB3	2.15	0.46
1:A:57:VAL:O	1:A:255:VAL:HA	2.15	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:58:THR:O	1:A:58:THR:HG22	2.14	0.46
1:A:382:ALA:O	1:A:385:LEU:HB2	2.16	0.46
1:A:618:PHE:CE1	1:A:629:PHE:HB3	2.50	0.46
1:A:331:LEU:C	1:A:333:GLU:H	2.17	0.46
1:A:353:GLU:OE2	1:A:520:LYS:HG3	2.15	0.46
1:A:390:ASP:O	1:A:599:SER:CB	2.59	0.46
1:A:401:THR:HA	1:A:681:LEU:HD13	1.98	0.46
1:A:111:GLY:O	1:A:154:SER:HB3	2.15	0.46
1:A:404:LYS:HB2	1:A:681:LEU:CD1	2.45	0.46
1:A:452:LYS:HA	1:A:486:PHE:CE2	2.51	0.46
1:A:624:ASN:O	1:A:629:PHE:O	2.34	0.46
1:A:654:ARG:N	1:A:655:PRO:HD2	2.30	0.46
1:A:136:LEU:HA	1:A:152:PHE:CD1	2.51	0.46
1:A:310:ILE:HD11	1:A:319:TYR:CE1	2.51	0.46
1:A:393:SER:HA	1:A:597:VAL:HA	1.97	0.46
1:A:416:LYS:HD2	1:A:646:GLU:HG3	1.98	0.46
1:A:571:LEU:CD1	1:A:584:ALA:HB2	2.46	0.46
1:A:92:TYR:HH	2:A:690:FE:FE	1.31	0.46
1:A:157:CYS:SG	1:A:157:CYS:O	2.74	0.46
1:A:175:GLY:N	1:A:188:PRO:HD2	2.30	0.46
1:A:607:VAL:HG12	1:A:611:LEU:CD2	2.46	0.46
1:A:659:LYS:HE2	1:A:659:LYS:HB3	1.48	0.46
1:A:52:LYS:HG2	1:A:258:ARG:HE	1.80	0.46
1:A:117:MET:HE1	1:A:121:ARG:HB3	1.97	0.46
1:A:211:GLU:HG2	1:A:212:THR:HG23	1.97	0.46
1:A:395:ASP:OD1	1:A:595:HIS:CD2	2.69	0.46
1:A:452:LYS:HA	1:A:486:PHE:O	2.16	0.46
1:A:231:CYS:N	1:A:245:CYS:SG	2.89	0.45
1:A:280:LYS:O	1:A:281:ASN:HB2	2.16	0.45
1:A:428:ARG:NH2	1:A:646:GLU:OE1	2.49	0.45
1:A:461:VAL:HG12	1:A:461:VAL:O	2.15	0.45
1:A:535:GLU:OE2	1:A:560:TRP:HB2	2.15	0.45
1:A:109:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HA	1.59	0.45
1:A:424:ASP:O	1:A:428:ARG:N	2.49	0.45
1:A:474:ILE:O	1:A:474:ILE:HG23	2.16	0.45
1:A:655:PRO:O	1:A:656:THR:O	2.35	0.45
1:A:310:ILE:HA	1:A:311:PRO:HD3	1.41	0.45
1:A:390:ASP:OD2	1:A:607:VAL:HG22	2.16	0.45
1:A:462:ASP:O	1:A:467:TRP:CD1	2.69	0.45
1:A:661:LEU:N	1:A:661:LEU:CD2	2.80	0.45
1:A:18:LYS:HG2	1:A:286:PHE:CE1	2.52	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:113:LYS:CG	1:A:155:ALA:HB3	2.35	0.45
1:A:136:LEU:HD21	1:A:149:VAL:CG2	2.45	0.45
1:A:291:SER:CB	1:A:298:LEU:HD12	2.47	0.45
1:A:39:ARG:CB	1:A:45:CYS:SG	3.05	0.45
1:A:114:SER:CB	1:A:156:SER:HB3	2.46	0.45
1:A:143:GLU:OE1	1:A:151:ARG:NH1	2.49	0.45
1:A:147:GLY:HA2	1:A:166:TYR:CE1	2.52	0.45
1:A:324:TYR:C	1:A:326:THR:N	2.70	0.45
1:A:478:THR:HG22	1:A:479:GLY:N	2.30	0.45
1:A:486:PHE:CD2	1:A:486:PHE:O	2.69	0.45
1:A:357:LYS:NZ	1:A:633:LYS:O	2.50	0.45
1:A:78:ALA:HB1	1:A:307:PHE:HB3	1.98	0.45
1:A:122:SER:HB2	1:A:324:TYR:HH	1.82	0.45
1:A:276:GLU:CG	1:A:277:LYS:N	2.79	0.45
1:A:661:LEU:HB2	1:A:666:VAL:CG2	2.46	0.45
1:A:486:PHE:O	1:A:486:PHE:HD2	1.99	0.45
1:A:519:SER:HA	1:A:524:TYR:CD2	2.30	0.45
1:A:574:LEU:CD1	1:A:589:LEU:HA	2.47	0.45
1:A:603:ARG:HD2	1:A:603:ARG:HA	1.61	0.45
1:A:48:ALA:O	1:A:54:ALA:HB3	2.17	0.45
1:A:263:LYS:HE3	1:A:263:LYS:HB2	1.63	0.45
1:A:686:PHE:O	1:A:686:PHE:CD2	2.70	0.45
1:A:72:TYR:O	1:A:73:LYS:HB2	2.17	0.45
1:A:189:TYR:HA	1:A:194:GLY:O	2.16	0.45
1:A:280:LYS:HZ1	1:A:281:ASN:HD21	1.62	0.45
1:A:331:LEU:H	1:A:331:LEU:HG	1.52	0.45
1:A:440:LYS:C	1:A:442:ALA:N	2.70	0.45
1:A:447:THR:O	1:A:448:TRP:C	2.53	0.45
1:A:530:PHE:CZ	1:A:548:VAL:HA	2.51	0.45
1:A:558:ALA:O	1:A:560:TRP:N	2.49	0.45
1:A:611:LEU:C	1:A:613:HIS:N	2.69	0.45
1:A:7:ARG:HA	1:A:35:THR:HB	1.98	0.44
1:A:79:ALA:HB3	1:A:308:LEU:HB2	1.98	0.44
1:A:159:PRO:HG2	1:A:190:PHE:HA	1.99	0.44
1:A:523:TYR:CD1	1:A:531:ARG:HB3	2.53	0.44
1:A:347:TRP:CD1	1:A:640:LEU:HD13	2.52	0.44
1:A:450:SER:O	1:A:454:LYS:HE2	2.16	0.44
1:A:575:ASP:OD1	1:A:577:THR:HB	2.18	0.44
1:A:325:LEU:O	1:A:329:LYS:HD2	2.17	0.44
1:A:415:ARG:HA	1:A:646:GLU:H	1.81	0.44
1:A:645:THR:CG2	1:A:647:CYS:O	2.65	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:135:PRO:HG2	1:A:152:PHE:HZ	1.81	0.44
1:A:246:HIS:C	1:A:247:LEU:HD23	2.38	0.44
1:A:345:VAL:CG1	1:A:346:VAL:N	2.80	0.44
1:A:116:HIS:ND1	1:A:158:VAL:HG22	2.32	0.44
1:A:172:LEU:O	1:A:189:TYR:HD2	2.01	0.44
1:A:362:SER:HA	1:A:369:VAL:O	2.17	0.44
1:A:407:LEU:N	1:A:407:LEU:CD2	2.81	0.44
1:A:523:TYR:CZ	1:A:537:VAL:HG21	2.52	0.44
1:A:18:LYS:CE	1:A:290:GLY:H	2.29	0.44
1:A:461:VAL:O	1:A:462:ASP:HB3	2.17	0.44
1:A:79:ALA:HB2	1:A:319:TYR:CE1	2.53	0.44
1:A:93:TYR:HB2	1:A:211:GLU:OE1	2.17	0.44
1:A:246:HIS:C	1:A:246:HIS:ND1	2.70	0.44
1:A:407:LEU:HB3	1:A:598:VAL:HB	2.00	0.44
1:A:566:ARG:HB2	1:A:581:VAL:HG21	1.99	0.44
1:A:637:LYS:NZ	1:A:639:LEU:HD21	2.33	0.44
1:A:180:LYS:O	1:A:181:CYS:HB3	2.18	0.44
1:A:49:ILE:CG2	1:A:74:LEU:HD22	2.48	0.44
1:A:60:ASP:HB2	1:A:253:HIS:CE1	2.52	0.44
1:A:129:VAL:HG11	1:A:149:VAL:HG21	2.00	0.44
1:A:434:LEU:HD23	1:A:591:VAL:HG23	1.98	0.44
1:A:416:LYS:H	1:A:416:LYS:HG2	1.48	0.43
1:A:22:TRP:HE1	1:A:26:MET:CE	2.30	0.43
1:A:65:PHE:CB	1:A:328:LEU:HD22	2.48	0.43
1:A:217:ASN:O	1:A:219:PRO:HD3	2.18	0.43
1:A:61:ASP:OD2	1:A:251:PRO:HG2	2.19	0.43
1:A:64:VAL:HG23	1:A:256:VAL:CG1	2.48	0.43
1:A:69:ARG:HB2	1:A:71:PRO:CD	2.37	0.43
1:A:300:PHE:CE2	1:A:307:PHE:CE2	3.06	0.43
1:A:580:PRO:C	1:A:582:THR:N	2.72	0.43
1:A:619:GLY:O	1:A:625:CYS:CB	2.66	0.43
1:A:320:LEU:HD23	1:A:320:LEU:N	2.33	0.43
1:A:405:CYS:SG	1:A:680:LEU:HG	2.58	0.43
1:A:551:ASN:O	1:A:561:ALA:CA	2.67	0.43
1:A:638:ASN:HD21	1:A:643:ASP:HB2	1.84	0.43
1:A:40:THR:HG23	1:A:186:GLN:HE22	1.83	0.43
1:A:111:GLY:N	1:A:152:PHE:O	2.51	0.43
1:A:211:GLU:HB2	1:A:242:PHE:CG	2.53	0.43
1:A:258:ARG:NH1	1:A:262:GLY:CA	2.72	0.43
1:A:534:ALA:CB	1:A:560:TRP:CZ3	3.02	0.43
1:A:610:VAL:O	1:A:613:HIS:HB3	2.18	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:139:THR:O	1:A:143:GLU:HG2	2.19	0.43
1:A:181:CYS:SG	1:A:181:CYS:O	2.76	0.43
1:A:516:VAL:C	1:A:518:ASN:H	2.22	0.43
1:A:642:ASN:O	1:A:644:ASN:N	2.51	0.43
1:A:119:LEU:HD12	1:A:119:LEU:HA	1.78	0.43
1:A:172:LEU:O	1:A:189:TYR:CD2	2.71	0.43
1:A:320:LEU:H	1:A:320:LEU:HG	1.47	0.43
1:A:350:VAL:HG12	1:A:350:VAL:O	2.18	0.43
1:A:469:ILE:N	1:A:470:PRO:CD	2.82	0.43
1:A:174:LYS:N	1:A:187:GLU:OE2	2.52	0.43
1:A:548:VAL:HG12	1:A:549:TRP:CD1	2.54	0.43
1:A:77:VAL:HG21	1:A:267:ILE:HG21	2.00	0.43
1:A:127:ILE:HG23	1:A:127:ILE:HD12	1.67	0.43
1:A:280:LYS:HZ3	1:A:281:ASN:HD21	1.63	0.43
1:A:382:ALA:HA	1:A:385:LEU:CD1	2.41	0.43
1:A:447:THR:HG22	1:A:578:THR:HG1	1.78	0.43
1:A:127:ILE:HD11	1:A:250:VAL:HG11	1.96	0.42
1:A:334:THR:HG22	1:A:335:ALA:N	2.33	0.42
1:A:348:CYS:HB3	1:A:392:LEU:CD1	2.41	0.42
1:A:22:TRP:CZ2	1:A:288:LEU:CD1	3.01	0.42
1:A:98:VAL:HG22	1:A:206:VAL:HA	1.99	0.42
1:A:117:MET:HB3	1:A:191:GLY:CA	2.42	0.42
1:A:138:TRP:CD1	1:A:144:PRO:O	2.73	0.42
1:A:196:PHE:CE2	1:A:214:VAL:HA	2.54	0.42
1:A:394:LEU:HD12	1:A:598:VAL:HG21	2.02	0.42
1:A:122:SER:OG	1:A:127:ILE:HG12	2.20	0.42
1:A:350:VAL:CG2	1:A:376:THR:O	2.67	0.42
1:A:414:ASN:C	1:A:414:ASN:HD22	2.23	0.42
1:A:416:LYS:HD2	1:A:646:GLU:CG	2.50	0.42
1:A:468:ASN:ND2	1:A:669:ILE:HG23	2.26	0.42
1:A:4:LYS:NZ	1:A:4:LYS:HB3	2.35	0.42
1:A:8:TRP:HD1	1:A:9:CYS:N	2.18	0.42
1:A:85:GLU:C	1:A:87:SER:N	2.72	0.42
1:A:95:VAL:HG12	1:A:246:HIS:HA	2.01	0.42
1:A:184:SER:C	1:A:186:GLN:N	2.73	0.42
1:A:251:PRO:HG3	1:A:320:LEU:HA	2.02	0.42
1:A:348:CYS:HA	1:A:372:ALA:HB3	2.02	0.42
1:A:524:TYR:O	1:A:528:GLY:HA3	2.20	0.42
1:A:531:ARG:O	1:A:534:ALA:N	2.52	0.42
1:A:75:ARG:NH2	1:A:77:VAL:HA	2.34	0.42
1:A:224:ARG:HB3	1:A:239:VAL:CG2	2.50	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:382:ALA:CA	1:A:385:LEU:HD12	2.41	0.42
1:A:391:ALA:O	1:A:392:LEU:HB3	2.20	0.42
1:A:410:VAL:HG23	1:A:597:VAL:O	2.20	0.42
1:A:452:LYS:N	1:A:486:PHE:HE2	2.17	0.42
1:A:66:GLU:C	1:A:68:GLY:H	2.21	0.42
1:A:98:VAL:O	1:A:228:GLU:O	2.37	0.42
1:A:530:PHE:O	1:A:530:PHE:CD1	2.73	0.42
1:A:2:PRO:C	1:A:3:ARG:HD3	2.40	0.41
1:A:10:ALA:HB1	1:A:16:TRP:HB2	2.01	0.41
1:A:452:LYS:CA	1:A:486:PHE:CE2	3.03	0.41
1:A:552:THR:HG22	1:A:564:LEU:CD1	2.35	0.41
1:A:46:ILE:HD11	1:A:59:LEU:CD2	2.50	0.41
1:A:631:LEU:CD2	1:A:641:PHE:CE2	3.03	0.41
1:A:71:PRO:HB2	1:A:72:TYR:CZ	2.55	0.41
1:A:574:LEU:HD11	1:A:589:LEU:HA	2.01	0.41
1:A:618:PHE:O	1:A:631:LEU:CB	2.68	0.41
1:A:209:VAL:O	1:A:210:LYS:O	2.39	0.41
1:A:523:TYR:HD1	1:A:531:ARG:HB3	1.84	0.41
1:A:530:PHE:CG	1:A:547:THR:HG23	2.55	0.41
1:A:625:CYS:HA	1:A:629:PHE:C	2.39	0.41
1:A:111:GLY:CA	1:A:152:PHE:O	2.68	0.41
1:A:216:GLU:OE1	1:A:301:LYS:NZ	2.54	0.41
1:A:530:PHE:HB2	1:A:547:THR:HG21	2.03	0.41
1:A:125:TRP:CH2	1:A:149:VAL:CG1	2.96	0.41
1:A:161:VAL:CG1	1:A:166:TYR:HD2	2.33	0.41
1:A:189:TYR:HA	1:A:194:GLY:CA	2.50	0.41
1:A:426:VAL:C	1:A:428:ARG:H	2.24	0.41
1:A:530:PHE:HE2	1:A:551:ASN:HB2	1.85	0.41
1:A:27:ARG:CG	1:A:33:SER:HB3	2.37	0.41
1:A:242:PHE:CD1	1:A:242:PHE:C	2.93	0.41
1:A:347:TRP:O	1:A:349:ALA:N	2.53	0.41
1:A:404:LYS:HB2	1:A:681:LEU:HD11	2.03	0.41
1:A:505:CYS:HB3	1:A:521:GLU:OE2	2.21	0.41
1:A:579:LYS:HB3	1:A:583:GLU:HB3	2.03	0.41
1:A:68:GLY:HA3	1:A:316:SER:CB	2.50	0.41
1:A:116:HIS:CD2	1:A:125:TRP:CE3	3.06	0.41
1:A:342:CYS:O	1:A:342:CYS:SG	2.79	0.41
1:A:416:LYS:CD	1:A:646:GLU:HB2	2.48	0.41
1:A:530:PHE:HB2	1:A:547:THR:CG2	2.51	0.41
1:A:1:ALA:C	1:A:3:ARG:N	2.71	0.41
1:A:84:THR:HG22	1:A:85:GLU:H	1.86	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:136:LEU:C	1:A:138:TRP:N	2.74	0.41
1:A:258:ARG:HD2	1:A:262:GLY:HA2	2.03	0.41
1:A:313:LYS:NZ	1:A:379:ASP:OD1	2.54	0.41
1:A:346:VAL:CG1	1:A:372:ALA:HB2	2.51	0.41
1:A:354:GLU:O	1:A:640:LEU:CD2	2.68	0.41
1:A:370:THR:HG22	1:A:371:CYS:H	1.86	0.41
1:A:549:TRP:HZ2	1:A:582:THR:HA	1.85	0.41
1:A:29:LEU:HG	1:A:277:LYS:HG2	2.03	0.41
1:A:72:TYR:O	1:A:73:LYS:CB	2.69	0.41
1:A:78:ALA:CB	1:A:308:LEU:O	2.69	0.41
1:A:310:ILE:HG12	1:A:686:PHE:CZ	2.55	0.41
1:A:345:VAL:HG12	1:A:346:VAL:N	2.35	0.41
1:A:430:THR:CG2	1:A:594:ASN:HD21	2.33	0.41
1:A:448:TRP:CH2	1:A:473:LEU:HD13	2.56	0.41
1:A:107:ASP:N	1:A:234:ASN:HD21	2.19	0.40
1:A:117:MET:O	1:A:159:PRO:CD	2.68	0.40
1:A:550:GLU:O	1:A:551:ASN:CG	2.59	0.40
1:A:618:PHE:C	1:A:625:CYS:SG	2.99	0.40
1:A:455:LYS:HE2	1:A:455:LYS:HB2	1.83	0.40
1:A:456:SER:HB3	1:A:487:PHE:CD1	2.56	0.40
1:A:459:THR:HG21	1:A:526:TYR:HD1	1.86	0.40
1:A:570:ARG:CG	1:A:578:THR:CG2	2.96	0.40
1:A:618:PHE:HB3	1:A:629:PHE:O	2.21	0.40
1:A:46:ILE:HG23	1:A:74:LEU:HD11	2.04	0.40
1:A:237:ALA:HB1	1:A:241:ALA:CB	2.52	0.40
1:A:92:TYR:CD1	1:A:250:VAL:CG2	3.05	0.40
1:A:125:TRP:HH2	1:A:149:VAL:CG1	2.32	0.40
1:A:448:TRP:O	1:A:448:TRP:CD1	2.75	0.40
1:A:457:CYS:HB2	1:A:541:ALA:CB	2.52	0.40
1:A:666:VAL:O	1:A:666:VAL:HG12	2.21	0.40
1:A:22:TRP:NE1	1:A:26:MET:CE	2.84	0.40
1:A:28:LYS:HE3	1:A:28:LYS:HB3	1.54	0.40
1:A:192:TYR:HA	1:A:209:VAL:HG11	2.03	0.40
1:A:348:CYS:CB	1:A:392:LEU:HD13	2.42	0.40
1:A:364:GLN:HB3	1:A:618:PHE:CZ	2.56	0.40
1:A:369:VAL:O	1:A:369:VAL:HG12	2.20	0.40
1:A:391:ALA:HA	1:A:598:VAL:O	2.21	0.40
1:A:399:ILE:HD13	1:A:399:ILE:HG21	1.73	0.40
1:A:440:LYS:C	1:A:442:ALA:H	2.23	0.40
1:A:492:ALA:O	1:A:515:CYS:SG	2.79	0.40
1:A:494:GLY:HA2	1:A:517:PRO:CD	2.43	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:661:LEU:HB2	1:A:666:VAL:HG23	2.04	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	687/689 (100%)	473 (69%)	143 (21%)	71 (10%)	0 8

All (71) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	12	SER
1	A	13	LEU
1	A	57	VAL
1	A	73	LYS
1	A	97	VAL
1	A	125	TRP
1	A	170	CYS
1	A	210	LYS
1	A	226	GLN
1	A	258	ARG
1	A	312	SER
1	A	334	THR
1	A	359	GLN
1	A	396	GLY
1	A	423	LEU
1	A	448	TRP
1	A	459	THR
1	A	462	ASP
1	A	478	THR
1	A	519	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	551	ASN
1	A	604	ALA
1	A	605	ALA
1	A	142	ALA
1	A	177	GLY
1	A	348	CYS
1	A	430	THR
1	A	463	ARG
1	A	464	THR
1	A	467	TRP
1	A	482	ALA
1	A	512	LEU
1	A	557	SER
1	A	601	SER
1	A	640	LEU
1	A	653	GLY
1	A	656	THR
1	A	100	LYS
1	A	137	SER
1	A	203	ALA
1	A	205	ASP
1	A	316	SER
1	A	330	ASN
1	A	350	VAL
1	A	427	LEU
1	A	470	PRO
1	A	508	ASP
1	A	515	CYS
1	A	588	TYR
1	A	655	PRO
1	A	32	PRO
1	A	40	THR
1	A	229	LEU
1	A	252	SER
1	A	261	ASP
1	A	386	LYS
1	A	409	PRO
1	A	422	SER
1	A	445	GLY
1	A	536	ASP
1	A	545	ASN
1	A	594	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	625	CYS
1	A	133	ARG
1	A	248	ALA
1	A	392	LEU
1	A	144	PRO
1	A	194	GLY
1	A	292	PRO
1	A	95	VAL
1	A	410	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	568/568 (100%)	441 (78%)	127 (22%)	1 6

All (127) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	3	ARG
1	A	4	LYS
1	A	5	ASN
1	A	9	CYS
1	A	13	LEU
1	A	17	SER
1	A	24	ARG
1	A	27	ARG
1	A	28	LYS
1	A	29	LEU
1	A	32	PRO
1	A	35	THR
1	A	39	ARG
1	A	58	THR
1	A	74	LEU
1	A	75	ARG
1	A	81	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	85	GLU
1	A	87	SER
1	A	104	PHE
1	A	114	SER
1	A	131	ILE
1	A	133	ARG
1	A	137	SER
1	A	138	TRP
1	A	139	THR
1	A	146	GLN
1	A	152	PHE
1	A	156	SER
1	A	171	GLN
1	A	183	CYS
1	A	185	SER
1	A	193	SER
1	A	206	VAL
1	A	212	THR
1	A	213	THR
1	A	214	VAL
1	A	220	GLU
1	A	221	LYS
1	A	225	ASP
1	A	226	GLN
1	A	236	ARG
1	A	245	CYS
1	A	246	HIS
1	A	252	SER
1	A	259	SER
1	A	261	ASP
1	A	263	LYS
1	A	266	LEU
1	A	270	LEU
1	A	277	LYS
1	A	287	GLN
1	A	305	LEU
1	A	309	ARG
1	A	315	ASP
1	A	316	SER
1	A	320	LEU
1	A	326	THR
1	A	328	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	332	ARG
1	A	336	GLU
1	A	348	CYS
1	A	355	GLN
1	A	370	THR
1	A	375	SER
1	A	378	ASP
1	A	379	ASP
1	A	380	CYS
1	A	381	ILE
1	A	392	LEU
1	A	401	THR
1	A	407	LEU
1	A	409	PRO
1	A	410	VAL
1	A	414	ASN
1	A	416	LYS
1	A	420	HIS
1	A	426	VAL
1	A	431	GLU
1	A	436	VAL
1	A	443	ASN
1	A	473	LEU
1	A	474	ILE
1	A	477	GLN
1	A	480	SER
1	A	486	PHE
1	A	496	ASP
1	A	519	SER
1	A	521	GLU
1	A	527	THR
1	A	536	ASP
1	A	546	ASP
1	A	547	THR
1	A	553	ASN
1	A	557	SER
1	A	559	ASP
1	A	563	ASN
1	A	565	ASN
1	A	567	GLU
1	A	577	THR
1	A	581	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	583	GLU
1	A	588	TYR
1	A	589	LEU
1	A	594	ASN
1	A	595	HIS
1	A	601	SER
1	A	609	GLN
1	A	611	LEU
1	A	615	GLN
1	A	620	LYS
1	A	623	LYS
1	A	630	CYS
1	A	631	LEU
1	A	633	LYS
1	A	634	SER
1	A	635	GLU
1	A	636	THR
1	A	639	LEU
1	A	640	LEU
1	A	656	THR
1	A	657	TYR
1	A	661	LEU
1	A	663	THR
1	A	669	ILE
1	A	672	LEU
1	A	689	ARG

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

Mol	Chain	Res	Type
1	A	91	HIS
1	A	116	HIS
1	A	126	ASN
1	A	171	GLN
1	A	186	GLN
1	A	217	ASN
1	A	234	ASN
1	A	281	ASN
1	A	330	ASN
1	A	414	ASN
1	A	553	ASN
1	A	563	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	565	ASN
1	A	585	GLN
1	A	594	ASN
1	A	638	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 monosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 2 ligands modelled in this entry, 2 are monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data

6.1 Protein, DNA and RNA chains

EDS was not executed - this section is therefore empty.

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

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.3 Carbohydrates

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.4 Ligands

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.5 Other polymers

EDS was not executed - this section is therefore empty.