



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Jul 4, 2016 – 05:02 AM EDT

PDB ID : 5BN7
Title : Crystal structure of maltodextrin glucosidase from E.coli at 3.7 Å resolution
Authors : Shukla, P.K.; Pastor, A.; Singh, A.K.; Sharma, S.; Singh, T.P.; Chaudhuri, T.K.
Deposited on : 2015-05-25
Resolution : 3.70 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
<http://wwpdb.org/validation/2016/XrayValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

MolProbity : 4.02b-467
Mogul : unknown
Xtriage (Phenix) : 1.9-1692
EDS : rb-20027790
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)
Refmac : 5.8.0135
CCP4 : 6.5.0
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20027790

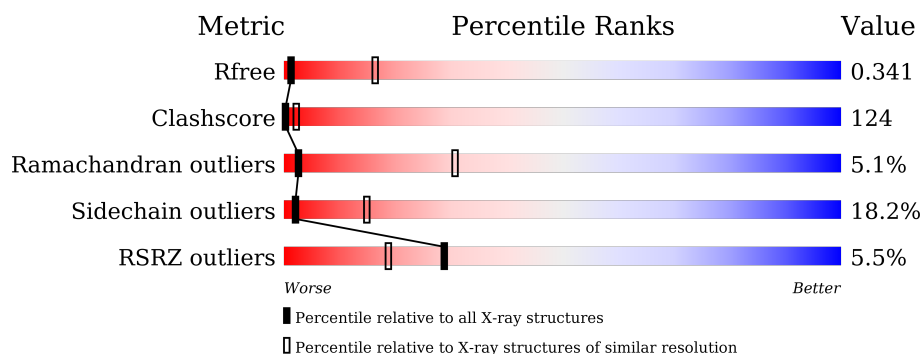
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.70 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}	91344	1101 (3.90-3.50)
Clashscore	102246	1224 (3.90-3.50)
Ramachandran outliers	100387	1172 (3.90-3.50)
Sidechain outliers	100360	1170 (3.90-3.50)
RSRZ outliers	91569	1108 (3.90-3.50)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments on the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. 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	616	<div> <div>4%</div> <div>12%</div> <div>44%</div> <div>16%</div> <div>•</div> <div>26%</div> </div>

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3618 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 Maltodextrin glucosidase.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	453	3618	2298	642	666	12	0	0	0

There are 12 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-1	MET	-	expression tag	UNP P21517
A	0	GLY	-	expression tag	UNP P21517
A	605	GLY	-	expression tag	UNP P21517
A	606	SER	-	expression tag	UNP P21517
A	607	ARG	-	expression tag	UNP P21517
A	608	SER	-	expression tag	UNP P21517
A	609	HIS	-	expression tag	UNP P21517
A	610	HIS	-	expression tag	UNP P21517
A	611	HIS	-	expression tag	UNP P21517
A	612	HIS	-	expression tag	UNP P21517
A	613	HIS	-	expression tag	UNP P21517
A	614	HIS	-	expression tag	UNP P21517

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 4	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	110.59Å 110.59Å 69.54Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	110.61 – 3.70 58.87 – 3.70	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	70.3 (110.61-3.70) 70.5 (58.87-3.70)	Depositor EDS
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	0.10	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	1.27 (at 3.67Å)	Xtriage
Refinement program	REFMAC 5.6.0117	Depositor
R, R_{free}	0.330 , 0.344 0.330 , 0.341	Depositor DCC
R_{free} test set	303 reflections (4.92%)	DCC
Wilson B-factor (Å ²)	165.6	Xtriage
Anisotropy	0.006	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.33 , 455.6	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.32$, $\langle L^2 \rangle = 0.16$	Xtriage
Estimated twinning fraction	0.329 for h,-k,-l	Xtriage
Reported twinning fraction	0.525 for H, K, L 0.475 for K, H, -L	Depositor
Outliers	0 of 6457 reflections	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.86	EDS
Total number of atoms	3618	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	131.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.45% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	0.84	11/3720 (0.3%)	1.16	35/5059 (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	10

All (11) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	401	TRP	C-O	-9.19	1.05	1.23
1	A	401	TRP	CD2-CE2	6.07	1.48	1.41
1	A	342	GLY	N-CA	-6.01	1.37	1.46
1	A	280	TRP	CD2-CE2	5.84	1.48	1.41
1	A	341	LEU	N-CA	-5.76	1.34	1.46
1	A	578	TRP	CD2-CE2	5.45	1.47	1.41
1	A	174	PHE	C-O	5.27	1.33	1.23
1	A	595	PRO	N-CD	5.25	1.55	1.47
1	A	473	TRP	CD2-CE2	5.17	1.47	1.41
1	A	571	PRO	N-CD	5.15	1.55	1.47
1	A	333	TRP	CD2-CE2	5.08	1.47	1.41

All (35) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	341	LEU	CA-C-N	-11.75	92.70	116.20
1	A	185	LYS	CB-CA-C	-11.08	88.24	110.40
1	A	378	ALA	CB-CA-C	-10.07	94.99	110.10
1	A	501	TRP	CB-CA-C	8.95	128.30	110.40
1	A	442	ASN	CB-CA-C	-8.58	93.24	110.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	592	LEU	N-CA-CB	8.43	127.27	110.40
1	A	387	GLU	CB-CA-C	8.23	126.86	110.40
1	A	463	LEU	CB-CA-C	-7.51	95.94	110.20
1	A	440	MET	CB-CA-C	-7.45	95.50	110.40
1	A	341	LEU	O-C-N	7.17	135.39	123.20
1	A	596	ALA	N-CA-CB	-6.72	100.69	110.10
1	A	594	LEU	C-N-CD	-6.38	106.56	120.60
1	A	290	LEU	N-CA-C	6.32	128.07	111.00
1	A	184	GLU	CB-CA-C	-6.30	97.80	110.40
1	A	522	LYS	CB-CA-C	-6.22	97.95	110.40
1	A	570	SER	CB-CA-C	-5.90	98.88	110.10
1	A	291	ASP	N-CA-C	5.90	126.93	111.00
1	A	588	THR	N-CA-CB	5.85	121.42	110.30
1	A	442	ASN	N-CA-C	5.83	126.74	111.00
1	A	341	LEU	C-N-CA	5.83	134.54	122.30
1	A	135	ARG	NE-CZ-NH1	5.80	123.20	120.30
1	A	243	LEU	N-CA-C	5.76	126.56	111.00
1	A	280	TRP	CB-CA-C	-5.74	98.92	110.40
1	A	465	LEU	CA-CB-CG	5.69	128.39	115.30
1	A	171	GLY	C-N-CA	5.68	135.89	121.70
1	A	155	GLU	CB-CA-C	-5.63	99.14	110.40
1	A	341	LEU	CA-C-O	5.62	131.91	120.10
1	A	357	ILE	CB-CA-C	-5.44	100.73	111.60
1	A	593	ALA	CB-CA-C	5.44	118.26	110.10
1	A	471	PHE	CB-CA-C	5.37	121.14	110.40
1	A	345	GLY	N-CA-C	5.36	126.49	113.10
1	A	177	GLY	N-CA-C	5.21	126.12	113.10
1	A	382	LEU	CA-CB-CG	5.20	127.27	115.30
1	A	145	HIS	CB-CA-C	-5.18	100.04	110.40
1	A	531	GLY	N-CA-C	5.08	125.81	113.10

There are no chirality outliers.

All (10) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	171	GLY	Peptide
1	A	204	LYS	Peptide
1	A	259	PHE	Peptide
1	A	283	PHE	Peptide
1	A	284	SER	Peptide
1	A	451	ARG	Sidechain
1	A	501	TRP	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	506	GLN	Peptide
1	A	522	LYS	Peptide
1	A	546	ARG	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	3618	0	3441	876	0
All	All	3618	0	3441	876	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 124.

All (876) 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:567:LEU:CB	1:A:592:LEU:HD13	1.68	1.22
1:A:452:PHE:CE1	1:A:453:LYS:HE2	1.73	1.21
1:A:378:ALA:CB	1:A:432:LEU:HD11	1.70	1.21
1:A:567:LEU:HB3	1:A:592:LEU:CD1	1.71	1.20
1:A:186:LEU:N	1:A:187:PRO:HD3	1.55	1.20
1:A:407:THR:CG2	1:A:413:PRO:HA	1.72	1.19
1:A:378:ALA:HB3	1:A:432:LEU:HD11	1.17	1.17
1:A:570:SER:HB3	1:A:573:LEU:HD22	1.21	1.15
1:A:444:LEU:HB2	1:A:480:TYR:CB	1.77	1.14
1:A:167:ALA:HB3	1:A:172:SER:HA	1.17	1.14
1:A:319:ILE:HA	1:A:322:HIS:HB3	1.20	1.13
1:A:201:PRO:HB3	1:A:248:VAL:HG22	1.24	1.13
1:A:151:ALA:HA	1:A:153:GLY:HA3	1.28	1.12
1:A:338:VAL:HG12	1:A:341:LEU:HB2	1.27	1.11
1:A:451:ARG:NE	1:A:495:CYS:HB3	1.66	1.11
1:A:186:LEU:N	1:A:187:PRO:CD	2.12	1.10
1:A:569:ALA:HA	1:A:592:LEU:HA	1.15	1.10
1:A:335:LEU:HB2	1:A:372:GLY:HA2	1.27	1.10
1:A:230:LEU:HD21	1:A:327:PRO:HG2	1.33	1.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:148:TYR:CD2	1:A:151:ALA:HB2	1.89	1.08
1:A:382:LEU:HD22	1:A:384:ALA:H	0.97	1.08
1:A:451:ARG:HE	1:A:495:CYS:HB3	0.98	1.07
1:A:381:TRP:CE2	1:A:390:ALA:HB3	1.89	1.07
1:A:452:PHE:HE1	1:A:453:LYS:HE2	0.93	1.07
1:A:309:VAL:HA	1:A:312:ILE:HB	1.27	1.07
1:A:157:ILE:HG22	1:A:167:ALA:HB1	1.36	1.06
1:A:540:ASN:HA	1:A:559:ARG:HB3	1.12	1.06
1:A:436:GLN:HA	1:A:439:ARG:HB2	1.36	1.05
1:A:233:ARG:HG3	1:A:243:LEU:HD23	1.34	1.04
1:A:325:LYS:HG3	1:A:326:ALA:H	1.22	1.04
1:A:216:TYR:HB3	1:A:319:ILE:HD11	1.38	1.03
1:A:217:ARG:HH21	1:A:317:ASP:HB3	1.21	1.03
1:A:233:ARG:HH22	1:A:245:LEU:HG	1.20	1.03
1:A:136:SER:H	1:A:178:ASP:HB2	1.19	1.03
1:A:506:GLN:HG3	1:A:511:PHE:CB	1.88	1.03
1:A:407:THR:HG22	1:A:414:GLN:H	1.25	1.02
1:A:148:TYR:CE2	1:A:151:ALA:HB2	1.95	1.01
1:A:182:ILE:O	1:A:186:LEU:HG	1.59	1.01
1:A:233:ARG:NH2	1:A:245:LEU:HG	1.75	1.01
1:A:245:LEU:HD12	1:A:330:MET:HE1	1.40	1.01
1:A:569:ALA:CA	1:A:592:LEU:HA	1.91	1.00
1:A:570:SER:CB	1:A:573:LEU:HD22	1.90	0.99
1:A:382:LEU:HD22	1:A:384:ALA:N	1.75	0.99
1:A:182:ILE:HA	1:A:185:LYS:HB2	1.43	0.98
1:A:444:LEU:HB2	1:A:480:TYR:HB3	1.00	0.98
1:A:341:LEU:HD12	1:A:342:GLY:H	1.24	0.98
1:A:506:GLN:CG	1:A:511:PHE:HB3	1.93	0.98
1:A:381:TRP:NE1	1:A:390:ALA:HB3	1.79	0.97
1:A:186:LEU:H	1:A:187:PRO:HD3	1.22	0.97
1:A:379:ARG:NH2	1:A:383:GLN:HB2	1.80	0.97
1:A:325:LYS:CG	1:A:326:ALA:H	1.77	0.97
1:A:406:ASN:O	1:A:407:THR:CG2	2.12	0.97
1:A:506:GLN:HG3	1:A:511:PHE:HB3	1.00	0.96
1:A:381:TRP:CZ3	1:A:432:LEU:HD13	2.01	0.96
1:A:407:THR:HG22	1:A:413:PRO:HA	1.44	0.96
1:A:540:ASN:HA	1:A:559:ARG:CB	1.95	0.96
1:A:538:GLU:HB2	1:A:541:VAL:HB	1.44	0.96
1:A:354:VAL:O	1:A:357:ILE:HG12	1.65	0.95
1:A:444:LEU:CB	1:A:480:TYR:HB3	1.93	0.95
1:A:484:GLU:HB3	1:A:514:TYR:CD2	2.00	0.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:229:LEU:HG	1:A:328:TRP:CH2	2.02	0.95
1:A:205:ALA:HB3	1:A:210:LYS:HA	1.47	0.94
1:A:151:ALA:HA	1:A:153:GLY:CA	1.98	0.94
1:A:249:PHE:HD2	1:A:312:ILE:HD12	1.33	0.94
1:A:341:LEU:O	1:A:345:GLY:HA2	1.67	0.94
1:A:377:ASP:HB3	1:A:394:ARG:HH11	1.31	0.93
1:A:381:TRP:CE3	1:A:432:LEU:HD13	2.02	0.93
1:A:309:VAL:HG12	1:A:314:ARG:HG3	1.50	0.93
1:A:259:PHE:HD1	1:A:269:ALA:HB3	1.34	0.93
1:A:411:TYR:HD1	1:A:455:LEU:CD2	1.81	0.93
1:A:243:LEU:HD12	1:A:244:VAL:H	1.34	0.92
1:A:534:VAL:HA	1:A:544:PHE:HB3	1.50	0.92
1:A:309:VAL:HA	1:A:312:ILE:CB	2.00	0.92
1:A:381:TRP:CD1	1:A:390:ALA:HB3	2.06	0.91
1:A:144:ASP:HB2	1:A:156:ILE:O	1.69	0.91
1:A:159:ARG:NH1	1:A:164:PRO:HG2	1.85	0.90
1:A:406:ASN:C	1:A:407:THR:HG23	1.92	0.90
1:A:451:ARG:HE	1:A:495:CYS:CB	1.85	0.90
1:A:136:SER:C	1:A:137:LEU:HD23	1.92	0.90
1:A:382:LEU:C	1:A:382:LEU:HD13	1.91	0.90
1:A:232:LEU:O	1:A:236:THR:HG23	1.72	0.90
1:A:155:GLU:O	1:A:157:ILE:HD12	1.72	0.89
1:A:259:PHE:CD1	1:A:269:ALA:HB3	2.07	0.89
1:A:140:GLU:HG3	1:A:221:PRO:O	1.70	0.89
1:A:471:PHE:O	1:A:521:ARG:HD3	1.72	0.89
1:A:406:ASN:O	1:A:407:THR:HG23	1.73	0.88
1:A:292:TRP:CD1	1:A:298:LEU:HD13	2.07	0.88
1:A:212:ASP:HB2	1:A:253:GLY:HA2	1.56	0.88
1:A:569:ALA:HB1	1:A:591:ILE:O	1.71	0.88
1:A:340:MET:O	1:A:341:LEU:C	2.09	0.88
1:A:319:ILE:CA	1:A:322:HIS:HB3	2.03	0.87
1:A:440:MET:HG2	1:A:475:GLY:HA3	1.56	0.87
1:A:407:THR:HG22	1:A:414:GLN:N	1.88	0.87
1:A:464:PRO:O	1:A:468:VAL:HG23	1.73	0.86
1:A:337:VAL:HG22	1:A:373:GLU:HG3	1.55	0.86
1:A:341:LEU:HD12	1:A:342:GLY:N	1.89	0.86
1:A:149:HIS:ND1	1:A:206:PRO:HG2	1.91	0.86
1:A:250:ASN:ND2	1:A:292:TRP:HZ3	1.73	0.85
1:A:407:THR:HG21	1:A:413:PRO:HA	1.57	0.85
1:A:461:ALA:O	1:A:464:PRO:HD2	1.76	0.85
1:A:491:ASN:H	1:A:494:PHE:HB2	1.40	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:576:VAL:HB	1:A:579:GLN:CD	1.96	0.85
1:A:167:ALA:HB3	1:A:172:SER:CA	2.05	0.85
1:A:229:LEU:HG	1:A:328:TRP:HH2	1.42	0.85
1:A:148:TYR:CE2	1:A:151:ALA:CB	2.59	0.85
1:A:377:ASP:HB3	1:A:394:ARG:NH1	1.90	0.85
1:A:411:TYR:CD1	1:A:455:LEU:CD2	2.61	0.84
1:A:186:LEU:HB3	1:A:190:LYS:HB2	1.57	0.84
1:A:540:ASN:CA	1:A:559:ARG:HB3	2.04	0.84
1:A:151:ALA:CA	1:A:153:GLY:HA3	2.07	0.84
1:A:440:MET:HG3	1:A:440:MET:O	1.76	0.84
1:A:451:ARG:HG2	1:A:489:GLY:O	1.77	0.84
1:A:136:SER:OG	1:A:137:LEU:CD2	2.25	0.84
1:A:309:VAL:HG12	1:A:309:VAL:O	1.76	0.83
1:A:569:ALA:HA	1:A:592:LEU:CA	2.06	0.83
1:A:319:ILE:HA	1:A:322:HIS:CB	2.05	0.83
1:A:411:TYR:HD1	1:A:455:LEU:HD22	1.42	0.83
1:A:456:LEU:CD2	1:A:462:ARG:HB3	2.08	0.83
1:A:341:LEU:HD23	1:A:353:HIS:CE1	2.14	0.83
1:A:341:LEU:CD1	1:A:342:GLY:H	1.92	0.83
1:A:456:LEU:HD22	1:A:462:ARG:HB3	1.59	0.83
1:A:381:TRP:O	1:A:387:GLU:HB2	1.78	0.82
1:A:396:PHE:HD2	1:A:473:TRP:CE2	1.97	0.82
1:A:201:PRO:HB3	1:A:248:VAL:CG2	2.09	0.82
1:A:217:ARG:HG2	1:A:319:ILE:HG12	1.59	0.82
1:A:452:PHE:HE1	1:A:453:LYS:CE	1.85	0.82
1:A:226:ASP:HA	1:A:229:LEU:HD22	1.62	0.82
1:A:569:ALA:CB	1:A:591:ILE:O	2.27	0.82
1:A:378:ALA:HB1	1:A:381:TRP:HB3	1.62	0.81
1:A:229:LEU:O	1:A:328:TRP:HZ3	1.63	0.81
1:A:452:PHE:HD1	1:A:456:LEU:HD11	1.45	0.81
1:A:340:MET:O	1:A:341:LEU:O	1.97	0.81
1:A:408:ASP:HB2	1:A:412:ASP:H	1.45	0.81
1:A:233:ARG:HD2	1:A:328:TRP:O	1.81	0.81
1:A:440:MET:CG	1:A:440:MET:O	2.29	0.81
1:A:173:THR:HG1	1:A:175:TYR:HE1	1.25	0.80
1:A:217:ARG:NH2	1:A:317:ASP:HB3	1.97	0.80
1:A:570:SER:HB3	1:A:573:LEU:CD2	2.09	0.80
1:A:438:LEU:HA	1:A:475:GLY:H	1.43	0.80
1:A:325:LYS:CG	1:A:326:ALA:N	2.44	0.80
1:A:256:HIS:O	1:A:260:ASP:HB3	1.81	0.80
1:A:382:LEU:CD2	1:A:384:ALA:H	1.87	0.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:136:SER:OG	1:A:137:LEU:HD23	1.81	0.80
1:A:590:GLY:O	1:A:591:ILE:HG12	1.81	0.79
1:A:440:MET:HG2	1:A:475:GLY:CA	2.13	0.79
1:A:516:ARG:O	1:A:520:LEU:HG	1.83	0.79
1:A:453:LYS:HA	1:A:456:LEU:HD12	1.64	0.79
1:A:490:LYS:HB3	1:A:494:PHE:CB	2.12	0.79
1:A:182:ILE:HA	1:A:185:LYS:CB	2.11	0.79
1:A:144:ASP:HA	1:A:156:ILE:HB	1.65	0.78
1:A:442:ASN:HD21	1:A:470:LEU:HD12	1.49	0.78
1:A:136:SER:N	1:A:178:ASP:HB2	1.96	0.78
1:A:338:VAL:HG12	1:A:341:LEU:CB	2.11	0.78
1:A:401:TRP:CG	1:A:405:ALA:HB3	2.18	0.77
1:A:536:TYR:H	1:A:543:VAL:HB	1.48	0.77
1:A:214:GLU:HA	1:A:256:HIS:HA	1.66	0.77
1:A:251:HIS:HB2	1:A:298:LEU:HD22	1.65	0.77
1:A:291:ASP:HA	1:A:300:LYS:HB2	1.66	0.77
1:A:378:ALA:CB	1:A:381:TRP:CG	2.69	0.76
1:A:386:VAL:HG12	1:A:387:GLU:HG2	1.66	0.76
1:A:143:GLN:H	1:A:146:VAL:HG21	1.49	0.76
1:A:251:HIS:CB	1:A:298:LEU:HD22	2.15	0.76
1:A:152:ALA:HA	1:A:153:GLY:C	2.06	0.76
1:A:159:ARG:HH21	1:A:168:GLN:HG3	1.49	0.76
1:A:304:GLN:O	1:A:307:SER:HB2	1.85	0.76
1:A:381:TRP:CE3	1:A:382:LEU:HB3	2.20	0.76
1:A:506:GLN:HA	1:A:511:PHE:HB2	1.67	0.76
1:A:406:ASN:O	1:A:407:THR:HG22	1.85	0.76
1:A:338:VAL:CG1	1:A:341:LEU:HD23	2.17	0.75
1:A:577:GLN:HG2	1:A:591:ILE:HG22	1.68	0.75
1:A:159:ARG:HB2	1:A:175:TYR:HE2	1.51	0.75
1:A:205:ALA:CB	1:A:210:LYS:HA	2.16	0.75
1:A:185:LYS:C	1:A:187:PRO:CD	2.53	0.75
1:A:250:ASN:ND2	1:A:292:TRP:CZ3	2.53	0.75
1:A:318:SER:O	1:A:322:HIS:CB	2.34	0.75
1:A:182:ILE:HG22	1:A:186:LEU:HD21	1.69	0.75
1:A:434:HIS:HA	1:A:437:GLN:CD	2.07	0.75
1:A:337:VAL:H	1:A:373:GLU:HB3	1.51	0.75
1:A:187:PRO:HA	1:A:191:LYS:HB2	1.66	0.75
1:A:337:VAL:HG22	1:A:373:GLU:CG	2.17	0.75
1:A:133:PHE:HZ	1:A:189:LEU:HD21	1.52	0.75
1:A:319:ILE:HG23	1:A:322:HIS:ND1	2.02	0.74
1:A:403:PHE:HB2	1:A:416:ILE:HD11	1.69	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:381:TRP:CD2	1:A:390:ALA:HB3	2.21	0.74
1:A:378:ALA:HB1	1:A:381:TRP:CG	2.22	0.74
1:A:525:GLN:HA	1:A:528:ARG:HB2	1.69	0.74
1:A:404:LEU:HD21	1:A:469:TRP:CZ2	2.23	0.74
1:A:338:VAL:HG12	1:A:341:LEU:CD2	2.18	0.74
1:A:505:LYS:O	1:A:506:GLN:HB2	1.88	0.73
1:A:210:LYS:O	1:A:248:VAL:HG11	1.87	0.73
1:A:205:ALA:HB3	1:A:210:LYS:CA	2.19	0.73
1:A:492:ASP:N	1:A:495:CYS:SG	2.61	0.73
1:A:341:LEU:O	1:A:345:GLY:CA	2.36	0.73
1:A:382:LEU:HD13	1:A:383:GLN:N	2.03	0.73
1:A:338:VAL:CG1	1:A:341:LEU:CD2	2.67	0.72
1:A:378:ALA:HB3	1:A:432:LEU:CD1	2.11	0.72
1:A:474:PRO:HG3	1:A:546:ARG:NH1	2.04	0.72
1:A:401:TRP:O	1:A:406:ASN:N	2.22	0.72
1:A:136:SER:HB3	1:A:178:ASP:CB	2.20	0.72
1:A:444:LEU:HG	1:A:483:ASP:OD2	1.89	0.72
1:A:318:SER:O	1:A:322:HIS:HB3	1.89	0.72
1:A:145:HIS:H	1:A:156:ILE:HB	1.55	0.72
1:A:297:SER:O	1:A:299:PRO:HD3	1.90	0.72
1:A:381:TRP:NE1	1:A:390:ALA:CB	2.51	0.72
1:A:451:ARG:HH11	1:A:495:CYS:HB2	1.52	0.72
1:A:576:VAL:HB	1:A:579:GLN:OE1	1.90	0.72
1:A:159:ARG:HH21	1:A:168:GLN:CG	2.03	0.71
1:A:541:VAL:O	1:A:542:VAL:HG23	1.90	0.71
1:A:341:LEU:HD12	1:A:342:GLY:CA	2.20	0.71
1:A:508:THR:HG22	1:A:510:LEU:HD21	1.72	0.71
1:A:204:LYS:HD2	1:A:215:ASP:HB2	1.70	0.71
1:A:451:ARG:CZ	1:A:495:CYS:HB3	2.21	0.71
1:A:152:ALA:HB1	1:A:154:GLN:HG2	1.73	0.71
1:A:339:HIS:HA	1:A:350:ASN:HD21	1.56	0.71
1:A:508:THR:CG2	1:A:510:LEU:HD21	2.20	0.71
1:A:309:VAL:CG1	1:A:314:ARG:HG3	2.20	0.71
1:A:445:ASP:HB2	1:A:451:ARG:HH21	1.56	0.71
1:A:340:MET:C	1:A:341:LEU:O	2.27	0.70
1:A:442:ASN:HB3	1:A:477:PRO:HA	1.73	0.70
1:A:536:TYR:HB2	1:A:543:VAL:HG23	1.73	0.70
1:A:451:ARG:NH2	1:A:480:TYR:CE1	2.59	0.70
1:A:329:ASN:HB2	1:A:365:GLN:NE2	2.05	0.70
1:A:534:VAL:HA	1:A:544:PHE:CB	2.21	0.70
1:A:411:TYR:CD1	1:A:455:LEU:HD23	2.25	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:185:LYS:C	1:A:187:PRO:HD2	2.13	0.69
1:A:504:GLU:HB3	1:A:511:PHE:CZ	2.27	0.69
1:A:493:PRO:HG3	1:A:496:ARG:HH21	1.57	0.69
1:A:148:TYR:CD2	1:A:151:ALA:CB	2.72	0.69
1:A:379:ARG:HH22	1:A:383:GLN:HB2	1.57	0.69
1:A:387:GLU:HA	1:A:387:GLU:OE1	1.93	0.69
1:A:403:PHE:HD1	1:A:416:ILE:HG13	1.58	0.69
1:A:136:SER:H	1:A:178:ASP:CB	2.01	0.69
1:A:451:ARG:HH11	1:A:495:CYS:CB	2.05	0.69
1:A:464:PRO:HB3	1:A:513:LEU:HD22	1.73	0.69
1:A:490:LYS:HB3	1:A:494:PHE:HB3	1.75	0.69
1:A:136:SER:CB	1:A:137:LEU:HD23	2.22	0.69
1:A:309:VAL:CA	1:A:312:ILE:HB	2.15	0.69
1:A:243:LEU:HD12	1:A:244:VAL:N	2.07	0.69
1:A:404:LEU:O	1:A:462:ARG:HG2	1.92	0.69
1:A:217:ARG:HB3	1:A:322:HIS:CE1	2.28	0.68
1:A:230:LEU:HA	1:A:328:TRP:CE3	2.28	0.68
1:A:165:VAL:HG23	1:A:494:PHE:HD1	1.56	0.68
1:A:155:GLU:N	1:A:155:GLU:OE1	2.25	0.68
1:A:381:TRP:CD1	1:A:390:ALA:CB	2.76	0.68
1:A:453:LYS:HE3	1:A:486:GLY:HA2	1.76	0.68
1:A:378:ALA:HB1	1:A:432:LEU:HD11	1.71	0.68
1:A:231:ARG:O	1:A:235:ASN:N	2.26	0.68
1:A:315:GLY:O	1:A:321:ARG:HG2	1.93	0.68
1:A:436:GLN:CA	1:A:439:ARG:HB2	2.20	0.68
1:A:226:ASP:HA	1:A:229:LEU:HB3	1.76	0.67
1:A:381:TRP:HE3	1:A:382:LEU:HB3	1.58	0.67
1:A:337:VAL:CG2	1:A:373:GLU:HG3	2.23	0.67
1:A:407:THR:HG22	1:A:413:PRO:CA	2.22	0.67
1:A:536:TYR:CD1	1:A:543:VAL:HG21	2.28	0.67
1:A:569:ALA:HB1	1:A:571:PRO:HD2	1.76	0.67
1:A:467:VAL:HG21	1:A:514:TYR:HD2	1.59	0.67
1:A:445:ASP:CB	1:A:451:ARG:HH21	2.07	0.67
1:A:203:PHE:CZ	1:A:319:ILE:HG21	2.30	0.67
1:A:337:VAL:H	1:A:373:GLU:CB	2.08	0.67
1:A:416:ILE:HG13	1:A:416:ILE:O	1.93	0.67
1:A:443:GLN:CG	1:A:444:LEU:H	2.07	0.67
1:A:246:ASP:OD1	1:A:334:ARG:HD2	1.93	0.67
1:A:338:VAL:HG11	1:A:341:LEU:HD23	1.77	0.67
1:A:219:VAL:HG23	1:A:226:ASP:OD2	1.95	0.66
1:A:451:ARG:CG	1:A:489:GLY:O	2.43	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:135:ARG:HG2	1:A:176:GLY:HA2	1.75	0.66
1:A:167:ALA:CB	1:A:172:SER:HA	2.11	0.66
1:A:246:ASP:CG	1:A:334:ARG:HD2	2.16	0.66
1:A:245:LEU:CD1	1:A:330:MET:HE1	2.20	0.66
1:A:339:HIS:CD2	1:A:374:HIS:CE1	2.84	0.66
1:A:471:PHE:CD2	1:A:517:MET:HG2	2.30	0.66
1:A:398:PHE:H	1:A:399:PRO:HD2	1.60	0.66
1:A:137:LEU:HD12	1:A:140:GLU:HG2	1.76	0.66
1:A:244:VAL:O	1:A:245:LEU:HD23	1.94	0.66
1:A:272:ASN:OD1	1:A:273:PRO:HD2	1.96	0.66
1:A:143:GLN:N	1:A:146:VAL:HG21	2.10	0.66
1:A:452:PHE:CD1	1:A:456:LEU:HD11	2.28	0.66
1:A:464:PRO:O	1:A:467:VAL:HG12	1.95	0.66
1:A:303:TYR:CE1	1:A:308:LEU:HB2	2.30	0.66
1:A:382:LEU:C	1:A:382:LEU:CD1	2.63	0.66
1:A:471:PHE:O	1:A:521:ARG:CD	2.44	0.66
1:A:481:TYR:CZ	1:A:499:PHE:HB2	2.31	0.66
1:A:506:GLN:CA	1:A:511:PHE:HB2	2.25	0.66
1:A:182:ILE:HG23	1:A:189:LEU:CD1	2.25	0.66
1:A:378:ALA:HB1	1:A:381:TRP:CB	2.25	0.66
1:A:204:LYS:HD2	1:A:215:ASP:CB	2.25	0.66
1:A:220:ASP:HB3	1:A:223:PHE:CD2	2.31	0.66
1:A:226:ASP:HA	1:A:229:LEU:CD2	2.27	0.65
1:A:276:PRO:HG2	1:A:277:TRP:CE2	2.32	0.65
1:A:309:VAL:HA	1:A:312:ILE:CG1	2.26	0.65
1:A:379:ARG:H	1:A:381:TRP:H	1.42	0.65
1:A:317:ASP:O	1:A:318:SER:C	2.32	0.65
1:A:484:GLU:O	1:A:510:LEU:HB3	1.97	0.65
1:A:196:ALA:HB1	1:A:243:LEU:C	2.15	0.65
1:A:339:HIS:NE2	1:A:374:HIS:CE1	2.65	0.65
1:A:337:VAL:H	1:A:373:GLU:HG3	1.62	0.65
1:A:456:LEU:C	1:A:458:ARG:H	2.00	0.65
1:A:484:GLU:HB3	1:A:514:TYR:CG	2.31	0.65
1:A:186:LEU:HA	1:A:189:LEU:HB2	1.78	0.65
1:A:229:LEU:O	1:A:232:LEU:N	2.30	0.65
1:A:251:HIS:HD2	1:A:292:TRP:CE2	2.15	0.65
1:A:442:ASN:ND2	1:A:470:LEU:HD12	2.12	0.65
1:A:137:LEU:HD23	1:A:137:LEU:N	2.12	0.64
1:A:136:SER:OG	1:A:180:ASP:HB2	1.97	0.64
1:A:443:GLN:HG2	1:A:444:LEU:H	1.62	0.64
1:A:571:PRO:HD3	1:A:591:ILE:O	1.97	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:323:TRP:HB3	1:A:330:MET:SD	2.38	0.64
1:A:381:TRP:CG	1:A:390:ALA:HB3	2.32	0.64
1:A:136:SER:HB3	1:A:178:ASP:HB2	1.80	0.64
1:A:172:SER:HB2	1:A:173:THR:HB	1.79	0.64
1:A:186:LEU:HD22	1:A:190:LYS:CD	2.27	0.63
1:A:465:LEU:O	1:A:469:TRP:HD1	1.79	0.63
1:A:378:ALA:HB1	1:A:381:TRP:CD2	2.33	0.63
1:A:569:ALA:HB1	1:A:571:PRO:CD	2.28	0.63
1:A:369:TYR:CE2	1:A:441:PHE:CZ	2.86	0.63
1:A:378:ALA:CB	1:A:432:LEU:CD1	2.63	0.63
1:A:536:TYR:CE1	1:A:568:PRO:HA	2.33	0.63
1:A:136:SER:HB3	1:A:178:ASP:HB3	1.81	0.63
1:A:519:ALA:HA	1:A:522:LYS:HD2	1.80	0.63
1:A:186:LEU:HD22	1:A:190:LYS:HD2	1.79	0.63
1:A:388:ASP:HA	1:A:436:GLN:HE21	1.63	0.63
1:A:479:ILE:HG12	1:A:483:ASP:OD2	1.98	0.63
1:A:182:ILE:HA	1:A:185:LYS:CG	2.29	0.63
1:A:229:LEU:CG	1:A:328:TRP:CH2	2.78	0.63
1:A:185:LYS:CA	1:A:187:PRO:HD2	2.29	0.63
1:A:325:LYS:HG3	1:A:326:ALA:N	2.02	0.62
1:A:198:TYR:CB	1:A:478:CYS:HB3	2.29	0.62
1:A:137:LEU:HD12	1:A:140:GLU:HB2	1.81	0.62
1:A:538:GLU:HB2	1:A:541:VAL:CB	2.26	0.62
1:A:461:ALA:HB1	1:A:600:THR:HG21	1.81	0.62
1:A:353:HIS:O	1:A:357:ILE:HG23	1.99	0.62
1:A:337:VAL:HA	1:A:373:GLU:O	2.00	0.62
1:A:378:ALA:CB	1:A:381:TRP:HB3	2.30	0.62
1:A:438:LEU:HD13	1:A:529:HIS:ND1	2.15	0.62
1:A:161:TRP:HE1	1:A:500:PRO:HA	1.65	0.62
1:A:453:LYS:HE3	1:A:486:GLY:CA	2.29	0.62
1:A:600:THR:HG22	1:A:600:THR:O	1.98	0.62
1:A:392:ASN:ND2	1:A:440:MET:SD	2.73	0.62
1:A:411:TYR:CE1	1:A:454:THR:HG22	2.34	0.62
1:A:552:ARG:HD3	1:A:573:LEU:HD11	1.80	0.62
1:A:233:ARG:CD	1:A:328:TRP:O	2.48	0.62
1:A:439:ARG:HA	1:A:476:VAL:HG23	1.82	0.62
1:A:471:PHE:HD2	1:A:517:MET:HG2	1.64	0.62
1:A:190:LYS:HE3	1:A:197:LEU:HD13	1.82	0.62
1:A:452:PHE:CE1	1:A:453:LYS:HG2	2.35	0.62
1:A:591:ILE:HG13	1:A:591:ILE:O	2.00	0.62
1:A:341:LEU:HD23	1:A:353:HIS:HE1	1.65	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:405:ALA:O	1:A:455:LEU:HB3	2.00	0.61
1:A:334:ARG:HD3	1:A:335:LEU:O	1.98	0.61
1:A:340:MET:HA	1:A:345:GLY:HA3	1.80	0.61
1:A:411:TYR:CD1	1:A:455:LEU:HD22	2.29	0.61
1:A:175:TYR:N	1:A:175:TYR:CD1	2.69	0.61
1:A:185:LYS:O	1:A:189:LEU:HD12	2.00	0.61
1:A:398:PHE:N	1:A:399:PRO:HD2	2.16	0.61
1:A:517:MET:HE2	1:A:520:LEU:HD12	1.82	0.61
1:A:545:VAL:HG12	1:A:546:ARG:N	2.16	0.61
1:A:233:ARG:HA	1:A:236:THR:OG1	2.00	0.61
1:A:144:ASP:O	1:A:145:HIS:HB2	2.00	0.61
1:A:362:LYS:NZ	1:A:366:PRO:O	2.33	0.61
1:A:197:LEU:O	1:A:199:LEU:HG	2.01	0.61
1:A:471:PHE:CE1	1:A:518:ILE:HG12	2.35	0.61
1:A:552:ARG:HG2	1:A:553:VAL:N	2.16	0.61
1:A:351:MET:HA	1:A:354:VAL:HB	1.82	0.61
1:A:518:ILE:O	1:A:521:ARG:N	2.34	0.61
1:A:216:TYR:CB	1:A:319:ILE:HD11	2.24	0.60
1:A:190:LYS:NZ	1:A:236:THR:HB	2.16	0.60
1:A:249:PHE:HD2	1:A:312:ILE:CD1	2.11	0.60
1:A:233:ARG:NH2	1:A:330:MET:HE3	2.15	0.60
1:A:435:GLN:C	1:A:439:ARG:HD2	2.22	0.60
1:A:379:ARG:NH2	1:A:383:GLN:CB	2.60	0.60
1:A:146:VAL:HG12	1:A:147:TYR:HD1	1.67	0.60
1:A:531:GLY:HA3	1:A:547:VAL:O	2.01	0.60
1:A:149:HIS:HD2	1:A:150:HIS:HB3	1.66	0.60
1:A:337:VAL:N	1:A:373:GLU:HG3	2.16	0.60
1:A:351:MET:O	1:A:355:ALA:N	2.29	0.60
1:A:480:TYR:O	1:A:483:ASP:HB2	2.01	0.60
1:A:379:ARG:C	1:A:381:TRP:H	2.04	0.60
1:A:540:ASN:O	1:A:541:VAL:HG22	2.02	0.60
1:A:371:VAL:HG13	1:A:390:ALA:HA	1.82	0.59
1:A:374:HIS:NE2	1:A:376:GLY:HA3	2.17	0.59
1:A:452:PHE:CE1	1:A:453:LYS:CE	2.67	0.59
1:A:131:ASP:O	1:A:176:GLY:N	2.35	0.59
1:A:295:TYR:N	1:A:295:TYR:HD1	2.00	0.59
1:A:312:ILE:HG22	1:A:313:TYR:CD2	2.37	0.59
1:A:309:VAL:CG1	1:A:309:VAL:O	2.49	0.59
1:A:213:THR:HG21	1:A:216:TYR:CD1	2.38	0.59
1:A:407:THR:CB	1:A:413:PRO:HA	2.31	0.59
1:A:493:PRO:HB3	1:A:496:ARG:HE	1.66	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:211:TYR:OH	1:A:447:HIS:CD2	2.56	0.59
1:A:136:SER:CB	1:A:178:ASP:HB2	2.32	0.59
1:A:472:THR:HA	1:A:527:LEU:HB3	1.85	0.59
1:A:259:PHE:C	1:A:260:ASP:OD1	2.42	0.59
1:A:217:ARG:CG	1:A:319:ILE:HG12	2.32	0.58
1:A:320:VAL:O	1:A:324:LEU:HG	2.02	0.58
1:A:382:LEU:HD12	1:A:432:LEU:HD22	1.84	0.58
1:A:405:ALA:HB1	1:A:455:LEU:HD12	1.86	0.58
1:A:200:ASN:OD1	1:A:447:HIS:HE1	1.86	0.58
1:A:453:LYS:HE3	1:A:486:GLY:C	2.23	0.58
1:A:405:ALA:HB1	1:A:455:LEU:HB2	1.85	0.58
1:A:444:LEU:CB	1:A:480:TYR:CB	2.67	0.58
1:A:159:ARG:NH2	1:A:168:GLN:HE21	2.02	0.58
1:A:181:GLY:O	1:A:185:LYS:HG2	2.03	0.58
1:A:260:ASP:O	1:A:263:ASN:N	2.32	0.58
1:A:337:VAL:H	1:A:373:GLU:CG	2.15	0.58
1:A:451:ARG:NH1	1:A:495:CYS:CB	2.66	0.58
1:A:132:ARG:HD2	1:A:497:LYS:N	2.18	0.58
1:A:335:LEU:CB	1:A:372:GLY:HA2	2.17	0.58
1:A:411:TYR:CZ	1:A:454:THR:HG22	2.38	0.58
1:A:159:ARG:HD2	1:A:167:ALA:HA	1.86	0.58
1:A:586:GLN:OE1	1:A:595:PRO:HG3	2.04	0.58
1:A:246:ASP:OD1	1:A:247:GLY:N	2.37	0.58
1:A:186:LEU:O	1:A:191:LYS:N	2.37	0.57
1:A:283:PHE:O	1:A:285:ASP:HB3	2.03	0.57
1:A:204:LYS:HB2	1:A:215:ASP:H	1.68	0.57
1:A:249:PHE:CD2	1:A:312:ILE:HG23	2.39	0.57
1:A:343:GLU:N	1:A:343:GLU:OE1	2.37	0.57
1:A:510:LEU:HD12	1:A:511:PHE:CD1	2.38	0.57
1:A:136:SER:OG	1:A:137:LEU:HD21	2.03	0.57
1:A:226:ASP:HB3	1:A:323:TRP:CZ2	2.39	0.57
1:A:318:SER:O	1:A:322:HIS:N	2.37	0.57
1:A:339:HIS:CE1	1:A:374:HIS:CE1	2.92	0.57
1:A:396:PHE:HD2	1:A:473:TRP:CD2	2.23	0.57
1:A:489:GLY:C	1:A:495:CYS:HA	2.25	0.57
1:A:386:VAL:O	1:A:387:GLU:HG2	2.04	0.57
1:A:217:ARG:HA	1:A:319:ILE:HG12	1.86	0.57
1:A:220:ASP:HB3	1:A:223:PHE:CE2	2.39	0.57
1:A:536:TYR:HB2	1:A:543:VAL:CG2	2.33	0.57
1:A:381:TRP:CE2	1:A:390:ALA:CB	2.77	0.57
1:A:388:ASP:O	1:A:436:GLN:HG3	2.04	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:336:ASP:OD1	1:A:337:VAL:HG23	2.05	0.57
1:A:451:ARG:NH1	1:A:495:CYS:HB2	2.20	0.57
1:A:160:ASP:HB2	1:A:163:GLU:HG3	1.86	0.57
1:A:229:LEU:CD2	1:A:328:TRP:CH2	2.88	0.57
1:A:351:MET:SD	1:A:380:GLN:HB3	2.45	0.57
1:A:143:GLN:N	1:A:143:GLN:CD	2.59	0.56
1:A:200:ASN:HB3	1:A:201:PRO:HD2	1.85	0.56
1:A:378:ALA:CB	1:A:381:TRP:CB	2.83	0.56
1:A:402:GLY:HA2	1:A:406:ASN:C	2.25	0.56
1:A:456:LEU:HD22	1:A:462:ARG:CB	2.32	0.56
1:A:160:ASP:O	1:A:163:GLU:HB2	2.05	0.56
1:A:280:TRP:HB3	1:A:301:LEU:HD22	1.88	0.56
1:A:343:GLU:O	1:A:344:ALA:HB3	2.05	0.56
1:A:182:ILE:HA	1:A:185:LYS:HG2	1.87	0.56
1:A:149:HIS:CD2	1:A:150:HIS:HB3	2.40	0.56
1:A:379:ARG:N	1:A:381:TRP:HB3	2.19	0.56
1:A:456:LEU:O	1:A:458:ARG:N	2.32	0.56
1:A:339:HIS:CG	1:A:374:HIS:ND1	2.74	0.56
1:A:135:ARG:HH21	1:A:175:TYR:HB3	1.70	0.56
1:A:203:PHE:HZ	1:A:319:ILE:HG21	1.71	0.56
1:A:341:LEU:HD12	1:A:342:GLY:HA2	1.86	0.56
1:A:398:PHE:HB2	1:A:409:ILE:HD11	1.88	0.55
1:A:357:ILE:O	1:A:360:ALA:HB3	2.06	0.55
1:A:408:ASP:HB3	1:A:410:SER:OG	2.07	0.55
1:A:484:GLU:CB	1:A:514:TYR:CG	2.89	0.55
1:A:182:ILE:CA	1:A:185:LYS:HB2	2.29	0.55
1:A:438:LEU:CA	1:A:475:GLY:H	2.18	0.55
1:A:443:GLN:HA	1:A:479:ILE:HA	1.88	0.55
1:A:211:TYR:HH	1:A:447:HIS:CD2	2.24	0.55
1:A:453:LYS:HA	1:A:456:LEU:CD1	2.35	0.55
1:A:541:VAL:O	1:A:542:VAL:CG2	2.55	0.55
1:A:190:LYS:HE3	1:A:197:LEU:CD1	2.37	0.55
1:A:571:PRO:HB3	1:A:591:ILE:HB	1.88	0.55
1:A:233:ARG:NH2	1:A:245:LEU:CG	2.61	0.55
1:A:295:TYR:N	1:A:295:TYR:CD1	2.72	0.55
1:A:172:SER:CB	1:A:173:THR:HB	2.37	0.55
1:A:216:TYR:HB3	1:A:319:ILE:CD1	2.26	0.55
1:A:467:VAL:HA	1:A:470:LEU:HD23	1.87	0.55
1:A:479:ILE:HG23	1:A:483:ASP:HB2	1.87	0.55
1:A:571:PRO:O	1:A:574:ASN:N	2.40	0.55
1:A:493:PRO:CG	1:A:496:ARG:HH21	2.20	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:567:LEU:HB3	1:A:592:LEU:HD13	0.76	0.55
1:A:198:TYR:C	1:A:198:TYR:CD1	2.80	0.54
1:A:272:ASN:OD1	1:A:273:PRO:CD	2.55	0.54
1:A:371:VAL:HG22	1:A:441:PHE:CE1	2.42	0.54
1:A:196:ALA:HB1	1:A:243:LEU:O	2.08	0.54
1:A:321:ARG:HA	1:A:324:LEU:HD12	1.89	0.54
1:A:403:PHE:CZ	1:A:542:VAL:HG21	2.41	0.54
1:A:291:ASP:CA	1:A:300:LYS:HB2	2.37	0.54
1:A:386:VAL:O	1:A:387:GLU:CG	2.55	0.54
1:A:149:HIS:O	1:A:153:GLY:CA	2.56	0.54
1:A:185:LYS:CA	1:A:187:PRO:CD	2.86	0.54
1:A:382:LEU:CD2	1:A:436:GLN:NE2	2.70	0.54
1:A:369:TYR:HE2	1:A:441:PHE:CZ	2.25	0.54
1:A:502:GLN:O	1:A:505:LYS:HD3	2.07	0.54
1:A:472:THR:HG21	1:A:555:VAL:HG21	1.89	0.54
1:A:378:ALA:CB	1:A:381:TRP:CD2	2.91	0.54
1:A:401:TRP:CB	1:A:405:ALA:HB3	2.37	0.54
1:A:405:ALA:CB	1:A:455:LEU:HD12	2.38	0.54
1:A:561:GLU:O	1:A:599:ALA:HB1	2.08	0.54
1:A:379:ARG:HH22	1:A:383:GLN:CG	2.21	0.53
1:A:146:VAL:H	1:A:156:ILE:HD12	1.72	0.53
1:A:287:GLY:O	1:A:288:THR:HG23	2.08	0.53
1:A:323:TRP:C	1:A:330:MET:HG3	2.29	0.53
1:A:508:THR:HB	1:A:510:LEU:HG	1.90	0.53
1:A:587:LEU:C	1:A:589:ASP:H	2.12	0.53
1:A:341:LEU:CD2	1:A:353:HIS:CE1	2.90	0.53
1:A:396:PHE:HZ	1:A:469:TRP:CB	2.22	0.53
1:A:149:HIS:ND1	1:A:206:PRO:CG	2.69	0.53
1:A:337:VAL:CA	1:A:373:GLU:HG3	2.39	0.53
1:A:456:LEU:C	1:A:458:ARG:N	2.61	0.53
1:A:440:MET:CG	1:A:475:GLY:HA3	2.31	0.53
1:A:193:GLY:O	1:A:522:LYS:NZ	2.37	0.53
1:A:516:ARG:O	1:A:520:LEU:N	2.42	0.53
1:A:251:HIS:CD2	1:A:292:TRP:CE2	2.96	0.53
1:A:396:PHE:HZ	1:A:469:TRP:HB2	1.74	0.53
1:A:443:GLN:HG3	1:A:480:TYR:N	2.23	0.53
1:A:174:PHE:HZ	1:A:206:PRO:O	1.92	0.53
1:A:401:TRP:HB3	1:A:405:ALA:HB3	1.90	0.53
1:A:461:ALA:HB1	1:A:600:THR:CG2	2.38	0.53
1:A:569:ALA:HB2	1:A:592:LEU:HB3	1.89	0.52
1:A:261:ARG:HG2	1:A:262:HIS:CE1	2.44	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:338:VAL:O	1:A:341:LEU:N	2.42	0.52
1:A:452:PHE:O	1:A:456:LEU:HG	2.09	0.52
1:A:479:ILE:HG23	1:A:483:ASP:CB	2.39	0.52
1:A:533:GLN:O	1:A:544:PHE:HB2	2.10	0.52
1:A:566:VAL:O	1:A:567:LEU:HD23	2.09	0.52
1:A:165:VAL:HG23	1:A:494:PHE:CD1	2.40	0.52
1:A:173:THR:HG21	1:A:208:VAL:CG1	2.39	0.52
1:A:251:HIS:HB2	1:A:298:LEU:CD2	2.35	0.52
1:A:378:ALA:HB2	1:A:381:TRP:CG	2.43	0.52
1:A:400:LEU:HD13	1:A:469:TRP:CE3	2.45	0.52
1:A:540:ASN:O	1:A:541:VAL:CG2	2.58	0.52
1:A:136:SER:CB	1:A:137:LEU:CD2	2.86	0.52
1:A:137:LEU:HD12	1:A:140:GLU:CG	2.40	0.52
1:A:182:ILE:HG22	1:A:186:LEU:CD2	2.37	0.52
1:A:229:LEU:C	1:A:328:TRP:HZ3	2.12	0.52
1:A:404:LEU:HD11	1:A:469:TRP:CD2	2.44	0.52
1:A:567:LEU:O	1:A:592:LEU:HB2	2.08	0.52
1:A:307:SER:HB3	1:A:308:LEU:HD23	1.91	0.52
1:A:452:PHE:O	1:A:456:LEU:N	2.35	0.52
1:A:443:GLN:CG	1:A:444:LEU:N	2.71	0.52
1:A:445:ASP:HB2	1:A:480:TYR:CE1	2.44	0.52
1:A:249:PHE:CD2	1:A:312:ILE:HD12	2.26	0.52
1:A:379:ARG:HH22	1:A:383:GLN:CB	2.20	0.52
1:A:407:THR:HA	1:A:414:GLN:HB2	1.92	0.52
1:A:485:VAL:O	1:A:510:LEU:HD22	2.09	0.52
1:A:451:ARG:HG3	1:A:489:GLY:HA3	1.92	0.52
1:A:338:VAL:C	1:A:340:MET:H	2.11	0.52
1:A:513:LEU:O	1:A:517:MET:HB2	2.09	0.52
1:A:445:ASP:OD2	1:A:480:TYR:CD2	2.63	0.52
1:A:329:ASN:OD1	1:A:329:ASN:O	2.28	0.51
1:A:405:ALA:HB1	1:A:455:LEU:CB	2.40	0.51
1:A:472:THR:HB	1:A:527:LEU:HD22	1.92	0.51
1:A:532:CYS:H	1:A:546:ARG:HA	1.75	0.51
1:A:205:ALA:HB3	1:A:210:LYS:CB	2.39	0.51
1:A:363:GLU:HG2	1:A:364:THR:N	2.25	0.51
1:A:505:LYS:O	1:A:506:GLN:CB	2.56	0.51
1:A:205:ALA:HB3	1:A:210:LYS:HG2	1.92	0.51
1:A:173:THR:HG23	1:A:174:PHE:N	2.26	0.51
1:A:499:PHE:CD1	1:A:500:PRO:HD2	2.46	0.51
1:A:155:GLU:H	1:A:155:GLU:CD	2.06	0.51
1:A:582:GLU:HA	1:A:582:GLU:OE2	2.10	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:203:PHE:C	1:A:220:ASP:HB2	2.31	0.51
1:A:338:VAL:C	1:A:340:MET:N	2.63	0.51
1:A:440:MET:N	1:A:475:GLY:HA2	2.25	0.51
1:A:481:TYR:CD1	1:A:481:TYR:C	2.85	0.51
1:A:338:VAL:CG1	1:A:341:LEU:HD22	2.41	0.51
1:A:382:LEU:HD21	1:A:436:GLN:NE2	2.25	0.51
1:A:301:LEU:HD12	1:A:303:TYR:CE2	2.46	0.51
1:A:338:VAL:HG12	1:A:341:LEU:HD23	1.86	0.51
1:A:416:ILE:O	1:A:416:ILE:CG1	2.58	0.51
1:A:352:GLN:HA	1:A:355:ALA:HB3	1.93	0.50
1:A:599:ALA:O	1:A:600:THR:HB	2.11	0.50
1:A:254:ASP:CG	1:A:255:SER:N	2.65	0.50
1:A:159:ARG:NH1	1:A:164:PRO:CG	2.68	0.50
1:A:321:ARG:HD2	1:A:324:LEU:HD12	1.93	0.50
1:A:467:VAL:HG13	1:A:468:VAL:N	2.26	0.50
1:A:281:TYR:HD1	1:A:300:LYS:O	1.93	0.50
1:A:132:ARG:NH2	1:A:496:ARG:CB	2.75	0.50
1:A:161:TRP:O	1:A:162:ASP:HB2	2.11	0.50
1:A:157:ILE:HG21	1:A:168:GLN:HB2	1.94	0.50
1:A:220:ASP:HB3	1:A:223:PHE:HD2	1.77	0.50
1:A:353:HIS:O	1:A:357:ILE:CG2	2.59	0.50
1:A:401:TRP:O	1:A:403:PHE:N	2.45	0.50
1:A:508:THR:HG22	1:A:510:LEU:CD2	2.41	0.50
1:A:381:TRP:CE3	1:A:432:LEU:CD1	2.88	0.50
1:A:465:LEU:O	1:A:469:TRP:CD1	2.63	0.50
1:A:570:SER:HB2	1:A:573:LEU:HD22	1.89	0.50
1:A:467:VAL:HG22	1:A:471:PHE:CE2	2.47	0.49
1:A:187:PRO:HD2	1:A:188:TYR:H	1.77	0.49
1:A:540:ASN:ND2	1:A:564:GLU:OE2	2.44	0.49
1:A:552:ARG:O	1:A:553:VAL:HG23	2.12	0.49
1:A:187:PRO:CD	1:A:188:TYR:H	2.25	0.49
1:A:313:TYR:OH	1:A:335:LEU:CD2	2.61	0.49
1:A:370:ILE:HG22	1:A:371:VAL:N	2.27	0.49
1:A:452:PHE:CD1	1:A:453:LYS:HG2	2.46	0.49
1:A:462:ARG:NH1	1:A:462:ARG:HG3	2.27	0.49
1:A:378:ALA:CA	1:A:381:TRP:HB3	2.42	0.49
1:A:410:SER:O	1:A:411:TYR:HB3	2.13	0.49
1:A:467:VAL:CG1	1:A:468:VAL:N	2.75	0.49
1:A:466:ALA:O	1:A:469:TRP:HB2	2.12	0.49
1:A:152:ALA:HB1	1:A:154:GLN:CG	2.41	0.49
1:A:378:ALA:CA	1:A:381:TRP:CB	2.91	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:198:TYR:HB3	1:A:478:CYS:HB3	1.94	0.49
1:A:506:GLN:CG	1:A:511:PHE:CB	2.70	0.49
1:A:554:LEU:C	1:A:554:LEU:HD12	2.33	0.49
1:A:232:LEU:HA	1:A:235:ASN:HB2	1.94	0.49
1:A:347:ALA:HB3	1:A:349:ASN:ND2	2.27	0.49
1:A:396:PHE:HD2	1:A:473:TRP:CZ2	2.30	0.49
1:A:408:ASP:HB2	1:A:412:ASP:N	2.20	0.49
1:A:181:GLY:O	1:A:185:LYS:N	2.45	0.49
1:A:484:GLU:O	1:A:510:LEU:CB	2.59	0.49
1:A:386:VAL:O	1:A:387:GLU:CD	2.51	0.49
1:A:396:PHE:CZ	1:A:469:TRP:CB	2.96	0.49
1:A:441:PHE:HD2	1:A:478:CYS:HG	1.59	0.49
1:A:260:ASP:O	1:A:263:ASN:HA	2.13	0.48
1:A:251:HIS:CD2	1:A:292:TRP:CZ2	3.01	0.48
1:A:340:MET:CA	1:A:345:GLY:HA3	2.42	0.48
1:A:159:ARG:NH2	1:A:168:GLN:HG3	2.25	0.48
1:A:468:VAL:HA	1:A:471:PHE:HD2	1.78	0.48
1:A:440:MET:O	1:A:475:GLY:HA3	2.13	0.48
1:A:452:PHE:HD1	1:A:456:LEU:CD1	2.23	0.48
1:A:536:TYR:N	1:A:543:VAL:HB	2.23	0.48
1:A:186:LEU:HD22	1:A:190:LYS:CE	2.43	0.48
1:A:340:MET:O	1:A:345:GLY:N	2.47	0.48
1:A:382:LEU:HD22	1:A:384:ALA:CA	2.41	0.48
1:A:434:HIS:HA	1:A:437:GLN:NE2	2.27	0.48
1:A:320:VAL:CG2	1:A:321:ARG:N	2.76	0.48
1:A:379:ARG:H	1:A:381:TRP:HB3	1.78	0.48
1:A:181:GLY:C	1:A:185:LYS:HG2	2.33	0.48
1:A:335:LEU:HB3	1:A:338:VAL:CG2	2.43	0.48
1:A:445:ASP:OD1	1:A:451:ARG:HA	2.13	0.48
1:A:396:PHE:CZ	1:A:469:TRP:HB3	2.49	0.48
1:A:161:TRP:HZ2	1:A:499:PHE:O	1.97	0.48
1:A:488:ASP:O	1:A:497:LYS:HD3	2.14	0.48
1:A:226:ASP:CA	1:A:229:LEU:HB3	2.42	0.48
1:A:308:LEU:O	1:A:309:VAL:HB	2.13	0.48
1:A:329:ASN:HB2	1:A:365:GLN:HE22	1.77	0.48
1:A:591:ILE:CG1	1:A:591:ILE:O	2.60	0.48
1:A:303:TYR:CD1	1:A:308:LEU:HB2	2.48	0.48
1:A:309:VAL:HA	1:A:312:ILE:HG12	1.96	0.48
1:A:132:ARG:HH21	1:A:496:ARG:C	2.17	0.47
1:A:143:GLN:C	1:A:146:VAL:HG23	2.35	0.47
1:A:226:ASP:O	1:A:230:LEU:HB2	2.13	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:214:GLU:OE2	1:A:257:ALA:HB2	2.14	0.47
1:A:382:LEU:CD2	1:A:384:ALA:N	2.62	0.47
1:A:354:VAL:HG13	1:A:387:GLU:OE2	2.13	0.47
1:A:394:ARG:O	1:A:399:PRO:HG3	2.15	0.47
1:A:545:VAL:HG13	1:A:553:VAL:O	2.13	0.47
1:A:136:SER:HG	1:A:180:ASP:HB2	1.79	0.47
1:A:182:ILE:C	1:A:185:LYS:H	2.18	0.47
1:A:396:PHE:CD2	1:A:473:TRP:CE2	2.89	0.47
1:A:201:PRO:CB	1:A:248:VAL:HG22	2.17	0.47
1:A:320:VAL:HG23	1:A:321:ARG:N	2.28	0.47
1:A:571:PRO:C	1:A:573:LEU:N	2.67	0.47
1:A:143:GLN:O	1:A:146:VAL:HG23	2.14	0.47
1:A:269:ALA:HB1	1:A:278:ARG:HD2	1.97	0.47
1:A:374:HIS:CD2	1:A:376:GLY:HA3	2.49	0.47
1:A:205:ALA:HB1	1:A:212:ASP:OD1	2.14	0.47
1:A:527:LEU:HD21	1:A:553:VAL:HG11	1.95	0.47
1:A:401:TRP:C	1:A:403:PHE:N	2.68	0.47
1:A:440:MET:HG2	1:A:475:GLY:HA2	1.94	0.47
1:A:313:TYR:OH	1:A:335:LEU:HD23	2.15	0.47
1:A:349:ASN:O	1:A:353:HIS:HB3	2.15	0.47
1:A:446:SER:O	1:A:451:ARG:CZ	2.63	0.46
1:A:481:TYR:CE1	1:A:499:PHE:HB2	2.50	0.46
1:A:567:LEU:CG	1:A:592:LEU:HD13	2.42	0.46
1:A:461:ALA:CB	1:A:600:THR:HG21	2.45	0.46
1:A:149:HIS:CD2	1:A:149:HIS:C	2.89	0.46
1:A:148:TYR:CD2	1:A:151:ALA:N	2.83	0.46
1:A:161:TRP:CZ2	1:A:499:PHE:O	2.68	0.46
1:A:211:TYR:HD1	1:A:251:HIS:NE2	2.13	0.46
1:A:309:VAL:HG13	1:A:313:TYR:H	1.80	0.46
1:A:521:ARG:CG	1:A:521:ARG:O	2.62	0.46
1:A:403:PHE:CD2	1:A:469:TRP:CH2	3.04	0.46
1:A:396:PHE:CD1	1:A:470:LEU:HD11	2.50	0.46
1:A:526:ALA:O	1:A:546:ARG:HB2	2.16	0.46
1:A:571:PRO:HD3	1:A:591:ILE:HB	1.98	0.46
1:A:186:LEU:HD22	1:A:190:LYS:HE3	1.97	0.46
1:A:335:LEU:HD22	1:A:338:VAL:HG21	1.98	0.46
1:A:145:HIS:N	1:A:156:ILE:HB	2.26	0.46
1:A:146:VAL:N	1:A:156:ILE:HD12	2.31	0.46
1:A:131:ASP:O	1:A:176:GLY:CA	2.64	0.46
1:A:144:ASP:HB3	1:A:158:LEU:HG	1.98	0.46
1:A:133:PHE:CZ	1:A:189:LEU:HD21	2.42	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:204:LYS:CD	1:A:215:ASP:CB	2.94	0.46
1:A:235:ASN:O	1:A:236:THR:C	2.52	0.46
1:A:370:ILE:CG2	1:A:371:VAL:N	2.78	0.46
1:A:548:LEU:CD1	1:A:549:ASN:N	2.78	0.46
1:A:165:VAL:CG1	1:A:496:ARG:O	2.63	0.46
1:A:186:LEU:HD23	1:A:189:LEU:CD1	2.46	0.46
1:A:328:TRP:CG	1:A:328:TRP:O	2.69	0.46
1:A:383:GLN:C	1:A:385:ASP:H	2.18	0.46
1:A:383:GLN:O	1:A:384:ALA:HB3	2.16	0.46
1:A:441:PHE:HA	1:A:476:VAL:O	2.15	0.46
1:A:497:LYS:HA	1:A:498:PRO:HD2	1.81	0.46
1:A:569:ALA:CB	1:A:571:PRO:HD2	2.45	0.46
1:A:137:LEU:HD12	1:A:140:GLU:CB	2.44	0.46
1:A:140:GLU:HB3	1:A:222:GLN:O	2.17	0.46
1:A:325:LYS:HG2	1:A:326:ALA:N	2.28	0.46
1:A:348:ARG:HA	1:A:348:ARG:HD2	1.80	0.45
1:A:383:GLN:C	1:A:385:ASP:N	2.69	0.45
1:A:401:TRP:HA	1:A:405:ALA:H	1.80	0.45
1:A:439:ARG:N	1:A:475:GLY:HA2	2.31	0.45
1:A:400:LEU:HD22	1:A:469:TRP:CZ3	2.51	0.45
1:A:490:LYS:CB	1:A:494:PHE:HB3	2.46	0.45
1:A:290:LEU:HD23	1:A:290:LEU:N	2.32	0.45
1:A:246:ASP:HA	1:A:334:ARG:HB3	1.98	0.45
1:A:379:ARG:C	1:A:379:ARG:HD3	2.36	0.45
1:A:446:SER:N	1:A:451:ARG:NH2	2.65	0.45
1:A:577:GLN:O	1:A:578:TRP:HB2	2.17	0.45
1:A:157:ILE:HG21	1:A:168:GLN:N	2.31	0.45
1:A:351:MET:CE	1:A:380:GLN:HA	2.46	0.45
1:A:536:TYR:CZ	1:A:568:PRO:HA	2.51	0.45
1:A:325:LYS:HG2	1:A:326:ALA:H	1.75	0.45
1:A:379:ARG:C	1:A:381:TRP:N	2.65	0.45
1:A:396:PHE:CD2	1:A:473:TRP:CD2	3.04	0.45
1:A:493:PRO:CB	1:A:496:ARG:HH21	2.30	0.45
1:A:548:LEU:HD12	1:A:549:ASN:N	2.32	0.45
1:A:145:HIS:CE1	1:A:155:GLU:HG2	2.51	0.45
1:A:197:LEU:N	1:A:244:VAL:HG23	2.31	0.45
1:A:211:TYR:O	1:A:248:VAL:HG12	2.17	0.45
1:A:382:LEU:HD23	1:A:436:GLN:NE2	2.32	0.45
1:A:157:ILE:HD13	1:A:171:GLY:N	2.31	0.45
1:A:198:TYR:HB2	1:A:478:CYS:SG	2.57	0.45
1:A:404:LEU:HD13	1:A:466:ALA:HA	1.99	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:485:VAL:HA	1:A:510:LEU:HD13	1.98	0.45
1:A:442:ASN:HD21	1:A:470:LEU:CD1	2.26	0.45
1:A:213:THR:HG21	1:A:216:TYR:CE1	2.52	0.45
1:A:479:ILE:HD13	1:A:514:TYR:HE2	1.82	0.45
1:A:149:HIS:O	1:A:150:HIS:C	2.54	0.44
1:A:155:GLU:O	1:A:157:ILE:CD1	2.56	0.44
1:A:185:LYS:C	1:A:187:PRO:HD3	2.26	0.44
1:A:131:ASP:HB2	1:A:208:VAL:HG23	1.98	0.44
1:A:305:SER:HA	1:A:306:GLU:HA	1.60	0.44
1:A:205:ALA:O	1:A:210:LYS:HG2	2.18	0.44
1:A:261:ARG:O	1:A:262:HIS:CG	2.70	0.44
1:A:291:ASP:HA	1:A:300:LYS:CB	2.42	0.44
1:A:311:GLU:C	1:A:318:SER:HA	2.38	0.44
1:A:144:ASP:O	1:A:145:HIS:CB	2.65	0.44
1:A:445:ASP:HB2	1:A:480:TYR:CZ	2.53	0.44
1:A:389:ALA:O	1:A:390:ALA:HB2	2.17	0.44
1:A:401:TRP:O	1:A:404:LEU:N	2.47	0.44
1:A:545:VAL:HG22	1:A:554:LEU:CB	2.47	0.44
1:A:577:GLN:N	1:A:577:GLN:OE1	2.50	0.44
1:A:157:ILE:CG2	1:A:167:ALA:HB1	2.26	0.44
1:A:301:LEU:HB2	1:A:303:TYR:CD2	2.53	0.44
1:A:378:ALA:HA	1:A:381:TRP:HB2	2.00	0.44
1:A:479:ILE:HD13	1:A:514:TYR:CE2	2.52	0.44
1:A:357:ILE:HA	1:A:360:ALA:CB	2.47	0.44
1:A:165:VAL:CG2	1:A:494:PHE:HD1	2.26	0.44
1:A:506:GLN:HG2	1:A:511:PHE:C	2.38	0.44
1:A:251:HIS:CG	1:A:298:LEU:HD22	2.52	0.44
1:A:445:ASP:HB3	1:A:451:ARG:HD3	2.00	0.44
1:A:401:TRP:CE3	1:A:455:LEU:HD11	2.53	0.44
1:A:188:TYR:CZ	1:A:499:PHE:CZ	3.06	0.44
1:A:358:THR:O	1:A:361:ALA:HB3	2.17	0.44
1:A:396:PHE:CE2	1:A:469:TRP:HB3	2.53	0.44
1:A:525:GLN:CA	1:A:528:ARG:HB2	2.45	0.44
1:A:135:ARG:CG	1:A:176:GLY:HA2	2.44	0.43
1:A:200:ASN:C	1:A:246:ASP:HB3	2.38	0.43
1:A:211:TYR:HB3	1:A:251:HIS:CD2	2.52	0.43
1:A:568:PRO:HD2	1:A:593:ALA:O	2.18	0.43
1:A:593:ALA:O	1:A:595:PRO:HD2	2.18	0.43
1:A:199:LEU:O	1:A:246:ASP:HB2	2.17	0.43
1:A:407:THR:HG22	1:A:413:PRO:C	2.36	0.43
1:A:410:SER:O	1:A:411:TYR:CB	2.66	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:462:ARG:O	1:A:465:LEU:HB3	2.17	0.43
1:A:503:VAL:HG13	1:A:508:THR:HG21	1.99	0.43
1:A:151:ALA:N	1:A:153:GLY:HA3	2.33	0.43
1:A:211:TYR:CD1	1:A:251:HIS:NE2	2.87	0.43
1:A:196:ALA:HB1	1:A:244:VAL:CG2	2.49	0.43
1:A:453:LYS:HA	1:A:456:LEU:CG	2.48	0.43
1:A:484:GLU:CB	1:A:514:TYR:CD2	2.88	0.43
1:A:148:TYR:HE2	1:A:151:ALA:H	1.64	0.43
1:A:200:ASN:HB3	1:A:201:PRO:CD	2.49	0.43
1:A:303:TYR:CD1	1:A:308:LEU:HD12	2.53	0.43
1:A:318:SER:C	1:A:322:HIS:HB3	2.39	0.43
1:A:369:TYR:CE1	1:A:389:ALA:HB2	2.53	0.43
1:A:442:ASN:O	1:A:477:PRO:HA	2.19	0.43
1:A:444:LEU:H	1:A:480:TYR:HB2	1.84	0.43
1:A:587:LEU:C	1:A:589:ASP:N	2.72	0.43
1:A:179:LEU:HD21	1:A:229:LEU:HD12	2.01	0.43
1:A:204:LYS:O	1:A:213:THR:HA	2.18	0.43
1:A:204:LYS:CD	1:A:215:ASP:HB3	2.48	0.43
1:A:357:ILE:HA	1:A:360:ALA:HB3	2.00	0.43
1:A:362:LYS:HA	1:A:362:LYS:HD3	1.63	0.43
1:A:463:LEU:HB3	1:A:464:PRO:HD3	2.01	0.43
1:A:525:GLN:HG2	1:A:529:HIS:H	1.83	0.43
1:A:526:ALA:O	1:A:546:ARG:CB	2.66	0.43
1:A:226:ASP:HB3	1:A:323:TRP:HZ2	1.84	0.43
1:A:286:ASP:HB3	1:A:287:GLY:H	1.70	0.43
1:A:379:ARG:NH2	1:A:383:GLN:CG	2.82	0.43
1:A:487:LEU:HD11	1:A:500:PRO:CG	2.48	0.43
1:A:587:LEU:HB3	1:A:589:ASP:CG	2.39	0.43
1:A:191:LYS:HA	1:A:192:LEU:HA	1.59	0.43
1:A:173:THR:OG1	1:A:174:PHE:N	2.52	0.43
1:A:201:PRO:HA	1:A:246:ASP:O	2.17	0.43
1:A:272:ASN:HA	1:A:273:PRO:HD3	1.96	0.43
1:A:301:LEU:HB2	1:A:303:TYR:CE2	2.54	0.43
1:A:392:ASN:HB2	1:A:441:PHE:O	2.18	0.43
1:A:493:PRO:HB3	1:A:496:ARG:HH21	1.84	0.43
1:A:132:ARG:NH2	1:A:496:ARG:HB2	2.34	0.43
1:A:186:LEU:HB3	1:A:190:LYS:CB	2.39	0.43
1:A:490:LYS:HB3	1:A:494:PHE:CG	2.53	0.43
1:A:532:CYS:HA	1:A:545:VAL:O	2.19	0.43
1:A:342:GLY:C	1:A:343:GLU:HG2	2.38	0.42
1:A:159:ARG:NH2	1:A:168:GLN:NE2	2.67	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:202:VAL:HG21	1:A:245:LEU:HD13	2.01	0.42
1:A:400:LEU:HD13	1:A:469:TRP:HE3	1.83	0.42
1:A:462:ARG:HH11	1:A:462:ARG:HG3	1.84	0.42
1:A:453:LYS:HE3	1:A:486:GLY:O	2.18	0.42
1:A:511:PHE:O	1:A:512:ALA:HB3	2.19	0.42
1:A:564:GLU:O	1:A:566:VAL:HG23	2.19	0.42
1:A:230:LEU:HA	1:A:328:TRP:HE3	1.78	0.42
1:A:319:ILE:O	1:A:323:TRP:HB2	2.19	0.42
1:A:339:HIS:CD2	1:A:374:HIS:ND1	2.87	0.42
1:A:377:ASP:OD1	1:A:377:ASP:O	2.36	0.42
1:A:301:LEU:HD12	1:A:303:TYR:HE2	1.85	0.42
1:A:323:TRP:CE3	1:A:323:TRP:HA	2.53	0.42
1:A:436:GLN:O	1:A:440:MET:N	2.53	0.42
1:A:187:PRO:CD	1:A:188:TYR:N	2.81	0.42
1:A:393:TYR:HA	1:A:397:THR:HB	2.00	0.42
1:A:403:PHE:CZ	1:A:542:VAL:CG2	3.03	0.42
1:A:143:GLN:HB2	1:A:146:VAL:HG23	2.02	0.42
1:A:211:TYR:HA	1:A:248:VAL:CG1	2.50	0.42
1:A:292:TRP:HD1	1:A:298:LEU:HD13	1.74	0.42
1:A:330:MET:HE2	1:A:333:TRP:NE1	2.34	0.42
1:A:328:TRP:CD1	1:A:328:TRP:O	2.72	0.42
1:A:188:TYR:CE1	1:A:499:PHE:CZ	3.07	0.42
1:A:138:PRO:HA	1:A:141:ALA:HB3	2.00	0.42
1:A:159:ARG:HG2	1:A:159:ARG:HH11	1.83	0.42
1:A:514:TYR:CD1	1:A:514:TYR:O	2.73	0.42
1:A:161:TRP:O	1:A:162:ASP:CB	2.67	0.42
1:A:190:LYS:HZ2	1:A:236:THR:HB	1.82	0.42
1:A:536:TYR:CD1	1:A:543:VAL:CG2	3.02	0.42
1:A:233:ARG:NH2	1:A:330:MET:CE	2.80	0.41
1:A:437:GLN:O	1:A:440:MET:HE2	2.20	0.41
1:A:198:TYR:HB2	1:A:478:CYS:HB3	2.00	0.41
1:A:504:GLU:H	1:A:504:GLU:HG3	1.69	0.41
1:A:535:LEU:HB2	1:A:543:VAL:HB	2.01	0.41
1:A:443:GLN:HG2	1:A:444:LEU:N	2.32	0.41
1:A:326:ALA:HA	1:A:327:PRO:HA	1.76	0.41
1:A:233:ARG:CA	1:A:236:THR:OG1	2.68	0.41
1:A:355:ALA:HA	1:A:358:THR:HG23	2.01	0.41
1:A:462:ARG:HH11	1:A:462:ARG:CG	2.32	0.41
1:A:472:THR:HA	1:A:527:LEU:HD22	2.01	0.41
1:A:154:GLN:OE1	1:A:170:GLY:CA	2.69	0.41
1:A:252:SER:HB3	1:A:301:LEU:HD11	2.02	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:217:ARG:CB	1:A:322:HIS:CE1	3.02	0.41
1:A:434:HIS:HA	1:A:437:GLN:OE1	2.18	0.41
1:A:433:SER:O	1:A:437:GLN:HG3	2.21	0.41
1:A:540:ASN:C	1:A:541:VAL:CG2	2.88	0.41
1:A:131:ASP:CB	1:A:208:VAL:HG23	2.51	0.41
1:A:370:ILE:O	1:A:389:ALA:HB3	2.21	0.41
1:A:179:LEU:HG	1:A:223:PHE:HB3	2.01	0.41
1:A:182:ILE:HG23	1:A:189:LEU:HD11	2.03	0.41
1:A:293:LEU:HA	1:A:293:LEU:HD23	1.94	0.41
1:A:396:PHE:CZ	1:A:469:TRP:HB2	2.53	0.41
1:A:161:TRP:CZ2	1:A:499:PHE:N	2.89	0.41
1:A:479:ILE:HG21	1:A:514:TYR:OH	2.21	0.41
1:A:386:VAL:C	1:A:387:GLU:HG2	2.40	0.41
1:A:545:VAL:CG1	1:A:546:ARG:N	2.82	0.41
1:A:196:ALA:HB1	1:A:244:VAL:HG22	2.02	0.41
1:A:330:MET:HE2	1:A:333:TRP:CD1	2.56	0.41
1:A:320:VAL:HG12	1:A:333:TRP:CE2	2.55	0.41
1:A:401:TRP:HZ2	1:A:444:LEU:HD22	1.86	0.41
1:A:374:HIS:CD2	1:A:376:GLY:CA	3.03	0.41
1:A:404:LEU:HD11	1:A:469:TRP:CE2	2.55	0.41
1:A:536:TYR:HD1	1:A:543:VAL:CB	2.33	0.41
1:A:152:ALA:CA	1:A:153:GLY:C	2.85	0.41
1:A:217:ARG:HG2	1:A:319:ILE:CG1	2.40	0.41
1:A:354:VAL:O	1:A:355:ALA:C	2.58	0.41
1:A:323:TRP:O	1:A:328:TRP:HD1	2.03	0.40
1:A:358:THR:OG1	1:A:359:GLU:N	2.53	0.40
1:A:132:ARG:NH2	1:A:496:ARG:HB3	2.36	0.40
1:A:186:LEU:HD23	1:A:189:LEU:HD13	2.04	0.40
1:A:192:LEU:O	1:A:522:LYS:NZ	2.55	0.40
1:A:570:SER:N	1:A:571:PRO:CD	2.84	0.40
1:A:504:GLU:O	1:A:505:LYS:HD2	2.20	0.40
1:A:210:LYS:HE3	1:A:220:ASP:OD2	2.22	0.40
1:A:442:ASN:CB	1:A:477:PRO:HA	2.48	0.40
1:A:444:LEU:HD12	1:A:483:ASP:HA	2.03	0.40
1:A:520:LEU:C	1:A:522:LYS:H	2.24	0.40
1:A:598:SER:O	1:A:599:ALA:C	2.60	0.40
1:A:323:TRP:O	1:A:330:MET:HG3	2.20	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles

5.3.1 Protein backbone

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	447/616 (73%)	328 (73%)	96 (22%)	23 (5%)	2	31

All (23) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	177	GLY
1	A	328	TRP
1	A	341	LEU
1	A	345	GLY
1	A	595	PRO
1	A	309	VAL
1	A	342	GLY
1	A	379	ARG
1	A	402	GLY
1	A	514	TYR
1	A	173	THR
1	A	399	PRO
1	A	411	TYR
1	A	571	PRO
1	A	273	PRO
1	A	289	ALA
1	A	500	PRO
1	A	406	ASN
1	A	413	PRO
1	A	186	LEU
1	A	457	GLY
1	A	489	GLY
1	A	327	PRO

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	373/518 (72%)	305 (82%)	68 (18%)	2 15

All (68) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	133	PHE
1	A	137	LEU
1	A	140	GLU
1	A	142	GLU
1	A	143	GLN
1	A	149	HIS
1	A	154	GLN
1	A	158	LEU
1	A	162	ASP
1	A	165	VAL
1	A	173	THR
1	A	183	SER
1	A	188	TYR
1	A	198	TYR
1	A	209	HIS
1	A	214	GLU
1	A	216	TYR
1	A	229	LEU
1	A	231	ARG
1	A	233	ARG
1	A	244	VAL
1	A	248	VAL
1	A	251	HIS
1	A	274	GLU
1	A	288	THR
1	A	290	LEU
1	A	295	TYR
1	A	297	SER
1	A	306	GLU
1	A	308	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	322	HIS
1	A	323	TRP
1	A	330	MET
1	A	334	ARG
1	A	337	VAL
1	A	338	VAL
1	A	341	LEU
1	A	343	GLU
1	A	352	GLN
1	A	353	HIS
1	A	371	VAL
1	A	379	ARG
1	A	382	LEU
1	A	393	TYR
1	A	412	ASP
1	A	433	SER
1	A	438	LEU
1	A	446	SER
1	A	458	ARG
1	A	462	ARG
1	A	472	THR
1	A	479	ILE
1	A	481	TYR
1	A	484	GLU
1	A	488	ASP
1	A	504	GLU
1	A	505	LYS
1	A	506	GLN
1	A	508	THR
1	A	510	LEU
1	A	513	LEU
1	A	517	MET
1	A	539	ASP
1	A	540	ASN
1	A	580	CYS
1	A	588	THR
1	A	592	LEU
1	A	598	SER

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (11) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	168	GLN
1	A	329	ASN
1	A	349	ASN
1	A	350	ASN
1	A	353	HIS
1	A	365	GLN
1	A	392	ASN
1	A	437	GLN
1	A	442	ASN
1	A	447	HIS
1	A	525	GLN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

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 ⓘ

6.1 Protein, DNA and RNA chains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2		OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	453/616 (73%)	-0.15	25 (5%)	29 19	58, 130, 178, 222	0

All (25) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	245	LEU	7.6
1	A	202	VAL	5.1
1	A	526	ALA	5.0
1	A	542	VAL	4.6
1	A	249	PHE	4.6
1	A	558	ASN	4.3
1	A	250	ASN	4.3
1	A	372	GLY	4.2
1	A	346	GLY	4.0
1	A	401	TRP	3.6
1	A	333	TRP	3.2
1	A	371	VAL	3.0
1	A	527	LEU	3.0
1	A	442	ASN	3.0
1	A	472	THR	2.9
1	A	400	LEU	2.6
1	A	201	PRO	2.6
1	A	258	TRP	2.6
1	A	313	TYR	2.5
1	A	244	VAL	2.4
1	A	452	PHE	2.2
1	A	590	GLY	2.2
1	A	392	ASN	2.1
1	A	243	LEU	2.1
1	A	347	ALA	2.0

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 carbohydrates 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.