



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Jan 31, 2016 – 10:06 PM GMT

PDB ID : 1S58  
Title : The structure of B19 parvovirus capsid  
Authors : Kaufmann, B.; Simpson, A.A.; Rossmann, M.G.  
Deposited on : 2004-01-20  
Resolution : 3.50 Å(reported)

This is a Full wwPDB X-ray Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.  
We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto: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 : 1.7 (RC4), CSD as536be (2015)  
Xtriage (Phenix) : 1.9-1692  
EDS : rb-20026688  
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) : trunk26865

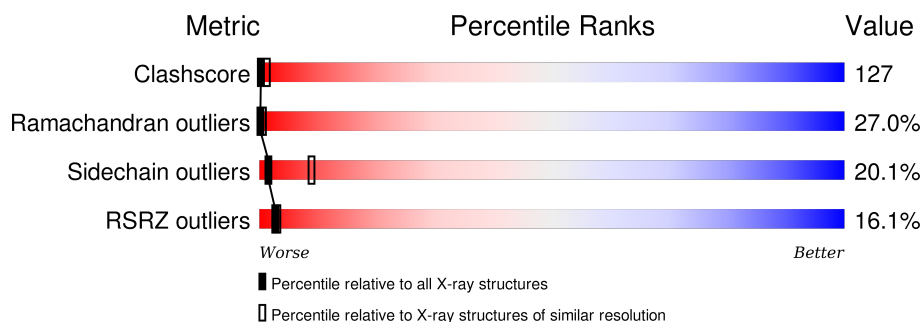
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*X-RAY DIFFRACTION*

The reported resolution of this entry is 3.50 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	102246	1157 (3.60-3.40)
Ramachandran outliers	100387	1120 (3.60-3.40)
Sidechain outliers	100360	1121 (3.60-3.40)
RSRZ outliers	91569	1058 (3.60-3.40)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments on the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for  $\geq 3$ , 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	554	

## 2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 4108 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.

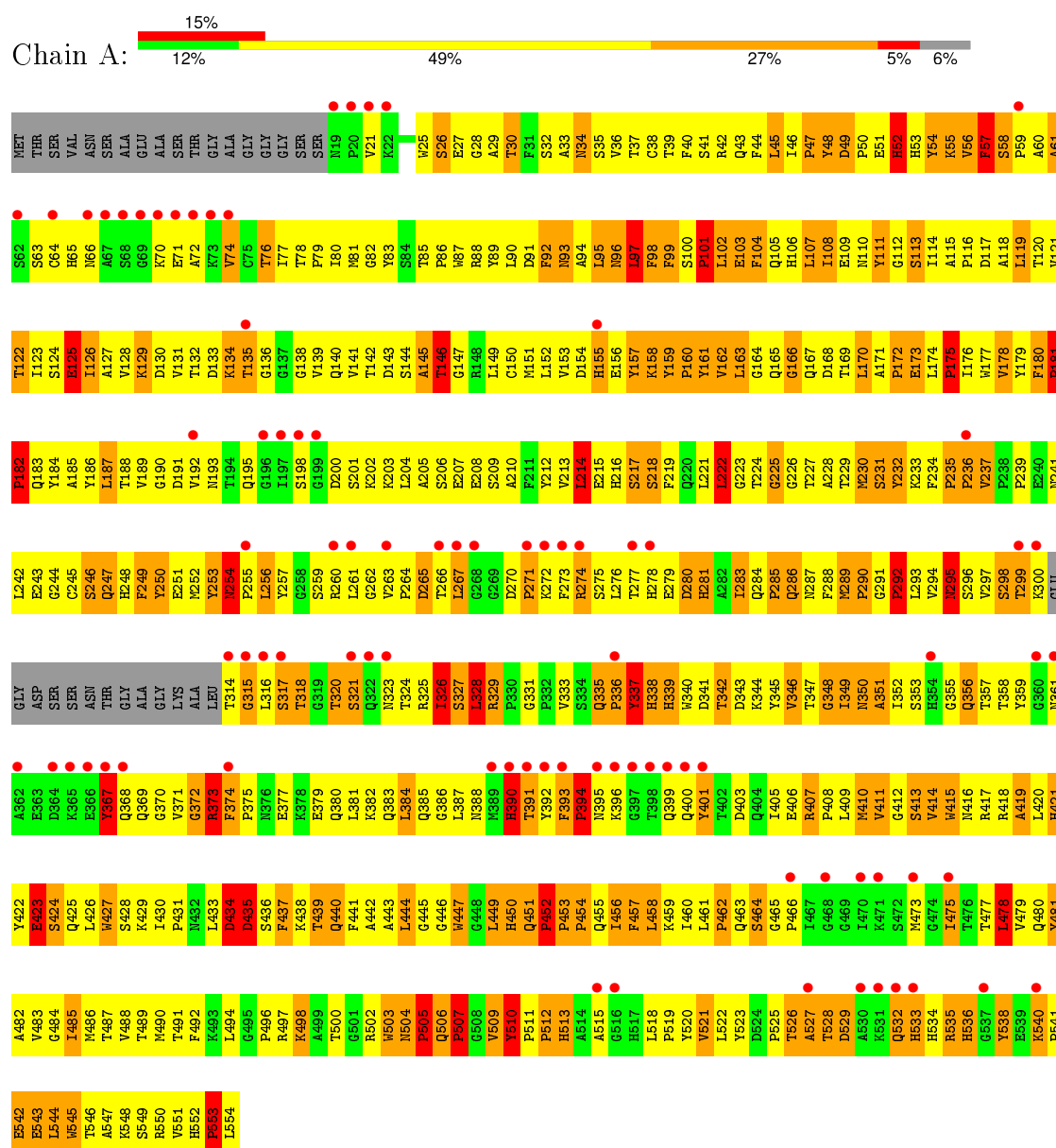
- Molecule 1 is a protein called B19 parvovirus capsid.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	523	4108	2625	695	772	16	0	0	0

### 3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA and DNA chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of errors displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry and electron density. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. A red dot above a residue indicates a poor fit to the electron density ( $RSRZ > 2$ ). Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

- Molecule 1: B19 parvovirus capsid



## 4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 21 3	Depositor
Cell constants a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	351.39Å 351.39Å 351.39Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	20.00 – 3.50 19.99 – 3.50	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	62.4 (20.00-3.50) 58.3 (19.99-3.50)	Depositor EDS
$R_{merge}$	0.10	Depositor
$R_{sym}$	0.10	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ <sup>1</sup>	0.92 (at 3.52Å)	Xtriage
Refinement program	CNS, REFMAC	Depositor
R, $R_{free}$	0.313 , 0.316 0.488 , (Not available)	Depositor DCC
$R_{free}$ test set	No test flags present.	DCC
Wilson B-factor (Å <sup>2</sup> )	90.5	Xtriage
Anisotropy	0.000	Xtriage
Bulk solvent $k_{sol}$ (e/Å <sup>3</sup> ), $B_{sol}$ (Å <sup>2</sup> )	(Not available) , (Not available)	EDS
Estimated twinning fraction	0.027 for l,-k,h	Xtriage
L-test for twinning <sup>2</sup>	$\langle  L  \rangle = 0.55$ , $\langle L^2 \rangle = 0.40$	Xtriage
Outliers	0 of 123514 reflections	Xtriage
$F_o, F_c$ correlation	0.46	EDS
Total number of atoms	4108	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	93.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 2.70% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

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

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

## 5 Model quality [i](#)

### 5.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z  > 5$	RMSZ	$\# Z  > 5$
1	A	0.56	0/4238	0.85	3/5779 (0.1%)

There are no bond length outliers.

All (3) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed( $^{\circ}$ )	Ideal( $^{\circ}$ )
1	A	175	PRO	CA-N-CD	-6.26	102.74	111.50
1	A	158	LYS	N-CA-C	-5.49	96.18	111.00
1	A	423	GLU	N-CA-C	-5.10	97.22	111.00

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

### 5.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	4108	0	3959	1026	0
All	All	4108	0	3959	1026	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 127.

All (1026) 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:42:ARG:HH12	1:A:175:PRO:CD	1.15	1.54
1:A:42:ARG:NH1	1:A:175:PRO:HD3	1.25	1.47
1:A:176:ILE:O	1:A:177:TRP:HD1	1.16	1.23
1:A:176:ILE:O	1:A:177:TRP:CD1	2.02	1.11
1:A:39:THR:HB	1:A:489:THR:HG23	1.10	1.09
1:A:127:ALA:HB3	1:A:483:VAL:H	1.15	1.09
1:A:56:VAL:HG22	1:A:57:PHE:H	1.15	1.07
1:A:250:TYR:HA	1:A:286:GLN:NE2	1.69	1.07
1:A:294:VAL:H	1:A:335:GLN:NE2	1.52	1.06
1:A:506:GLN:HE22	1:A:551:VAL:N	1.52	1.05
1:A:525:PRO:HB3	1:A:535:ARG:HB2	1.38	1.05
1:A:510:TYR:HD2	1:A:511:PRO:HD2	1.18	1.04
1:A:94:ALA:HB3	1:A:97:LEU:HD11	1.33	1.03
1:A:42:ARG:CZ	1:A:175:PRO:HD3	1.88	1.03
1:A:42:ARG:NH1	1:A:175:PRO:CD	1.95	1.02
1:A:425:GLN:HG2	1:A:444:LEU:HD23	1.43	1.01
1:A:510:TYR:CD2	1:A:511:PRO:HD2	1.96	1.00
1:A:506:GLN:NE2	1:A:551:VAL:H	1.59	1.00
1:A:293:LEU:HD23	1:A:407:ARG:HD3	1.41	0.99
1:A:129:LYS:HZ2	1:A:129:LYS:HB3	1.27	0.99
1:A:457:PHE:H	1:A:457:PHE:HD2	1.07	0.99
1:A:42:ARG:HH12	1:A:175:PRO:CG	1.75	0.98
1:A:188:THR:HG21	1:A:210:ALA:H	1.29	0.98
1:A:263:VAL:HG13	1:A:272:LYS:HZ3	1.26	0.97
1:A:504:ASN:H	1:A:504:ASN:HD22	1.08	0.97
1:A:506:GLN:NE2	1:A:551:VAL:N	2.13	0.96
1:A:126:ILE:HG22	1:A:224:THR:HA	1.46	0.96
1:A:292:PRO:HD3	1:A:409:LEU:HA	1.46	0.95
1:A:504:ASN:H	1:A:504:ASN:ND2	1.64	0.95
1:A:130:ASP:HA	1:A:480:GLN:HA	1.48	0.95
1:A:295:ASN:HD21	1:A:350:ASN:ND2	1.65	0.94
1:A:414:VAL:O	1:A:415:TRP:HB3	1.64	0.94
1:A:444:LEU:HD22	1:A:444:LEU:H	1.33	0.94
1:A:227:THR:HG22	1:A:228:ALA:H	1.34	0.93
1:A:375:PRO:HB3	1:A:377:GLU:HG3	1.50	0.92
1:A:294:VAL:H	1:A:335:GLN:HE21	1.17	0.92
1:A:124:SER:HB2	1:A:485:ILE:HG23	1.50	0.92
1:A:320:THR:HG22	1:A:321:SER:H	1.34	0.92
1:A:126:ILE:HD12	1:A:222:LEU:HD22	1.48	0.92
1:A:100:SER:H	1:A:103:GLU:HB2	1.31	0.92
1:A:503:TRP:O	1:A:503:TRP:HE3	1.54	0.91
1:A:39:THR:CB	1:A:489:THR:HG23	1.99	0.91

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:506:GLN:HE22	1:A:551:VAL:H	1.07	0.90
1:A:274:ARG:HG3	1:A:275:SER:H	1.36	0.90
1:A:235:PRO:HB2	1:A:236:PRO:HD2	1.54	0.90
1:A:121:VAL:O	1:A:229:THR:HG23	1.70	0.90
1:A:152:LEU:HD12	1:A:219:PHE:HB3	1.53	0.89
1:A:227:THR:HG22	1:A:228:ALA:N	1.86	0.89
1:A:172:PRO:HG2	1:A:179:TYR:HB2	1.55	0.89
1:A:162:VAL:HG22	1:A:163:LEU:N	1.87	0.88
1:A:26:SER:HB2	1:A:487:THR:HG21	1.53	0.88
1:A:383:GLN:O	1:A:385:GLN:HG2	1.74	0.88
1:A:79:PRO:HB2	1:A:203:LYS:HB2	1.55	0.87
1:A:109:GLU:HB2	1:A:550:ARG:HH21	1.37	0.87
1:A:145:ALA:O	1:A:147:GLY:N	2.07	0.87
1:A:188:THR:HG22	1:A:189:VAL:N	1.89	0.87
1:A:56:VAL:HG22	1:A:57:PHE:N	1.89	0.87
1:A:96:ASN:HB3	1:A:97:LEU:HD13	1.55	0.87
1:A:264:PRO:CG	1:A:273:PHE:H	1.89	0.86
1:A:421:HIS:HA	1:A:545:TRP:O	1.76	0.86
1:A:42:ARG:HH12	1:A:175:PRO:HD3	0.70	0.86
1:A:419:ALA:HB1	1:A:547:ALA:HB3	1.56	0.85
1:A:449:LEU:HD22	1:A:449:LEU:O	1.75	0.85
1:A:478:LEU:H	1:A:478:LEU:CD2	1.89	0.85
1:A:387:LEU:HD11	1:A:407:ARG:HG3	1.58	0.85
1:A:45:LEU:HD11	1:A:481:TYR:HD1	1.41	0.85
1:A:502:ARG:NH1	1:A:506:GLN:HB2	1.92	0.85
1:A:245:CYS:N	1:A:551:VAL:HG23	1.91	0.85
1:A:45:LEU:HD11	1:A:481:TYR:CD1	2.11	0.85
1:A:349:ILE:HG22	1:A:350:ASN:H	1.41	0.85
1:A:457:PHE:CD2	1:A:457:PHE:N	2.44	0.85
1:A:338:HIS:HD2	1:A:339:HIS:H	1.25	0.84
1:A:293:LEU:HB2	1:A:407:ARG:HB3	1.59	0.84
1:A:188:THR:HG22	1:A:189:VAL:H	1.39	0.84
1:A:298:SER:HA	1:A:348:GLY:HA2	1.60	0.84
1:A:248:HIS:HA	1:A:380:GLN:HE22	1.43	0.84
1:A:32:SER:O	1:A:34:ASN:N	2.11	0.84
1:A:30:THR:O	1:A:36:VAL:HG23	1.78	0.84
1:A:449:LEU:HD21	1:A:452:PRO:HB3	1.59	0.83
1:A:523:TYR:HB2	1:A:536:HIS:HB3	1.58	0.83
1:A:114:ILE:HG13	1:A:242:LEU:HD11	1.59	0.83
1:A:88:ARG:HH12	1:A:180:PHE:HA	1.44	0.83
1:A:440:GLN:HB2	1:A:441:PHE:CE1	2.14	0.83

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:504:ASN:N	1:A:504:ASN:HD22	1.77	0.83
1:A:338:HIS:CD2	1:A:339:HIS:H	1.97	0.82
1:A:449:LEU:CD2	1:A:452:PRO:HB3	2.08	0.82
1:A:46:ILE:HG12	1:A:460:ILE:HG13	1.60	0.82
1:A:510:TYR:HD2	1:A:511:PRO:CD	1.91	0.82
1:A:46:ILE:HG22	1:A:482:ALA:O	1.79	0.82
1:A:78:THR:HA	1:A:325:ARG:HH11	1.43	0.82
1:A:94:ALA:HB3	1:A:97:LEU:CD1	2.09	0.82
1:A:96:ASN:O	1:A:98:PHE:N	2.13	0.82
1:A:249:PHE:CE1	1:A:290:PRO:HD3	2.14	0.82
1:A:229:THR:HG22	1:A:230:MET:N	1.92	0.82
1:A:162:VAL:HG13	1:A:163:LEU:H	1.45	0.82
1:A:179:TYR:C	1:A:181:PRO:HD3	2.01	0.82
1:A:457:PHE:HD2	1:A:457:PHE:N	1.78	0.81
1:A:244:GLY:C	1:A:551:VAL:HG23	1.99	0.81
1:A:229:THR:HG22	1:A:230:MET:H	1.44	0.81
1:A:374:PHE:CD1	1:A:374:PHE:N	2.45	0.81
1:A:383:GLN:HG3	1:A:384:LEU:H	1.42	0.81
1:A:425:GLN:CG	1:A:444:LEU:HD23	2.10	0.81
1:A:290:PRO:HG2	1:A:381:LEU:HD12	1.63	0.81
1:A:320:THR:HG22	1:A:321:SER:N	1.94	0.81
1:A:452:PRO:HB2	1:A:453:PRO:HD2	1.62	0.81
1:A:95:LEU:O	1:A:95:LEU:HD13	1.81	0.81
1:A:248:HIS:HB2	1:A:251:GLU:HB2	1.61	0.81
1:A:318:THR:OG1	1:A:326:ILE:HG22	1.79	0.81
1:A:118:ALA:HB2	1:A:233:LYS:HA	1.63	0.80
1:A:263:VAL:HG13	1:A:272:LYS:NZ	1.97	0.80
1:A:118:ALA:HB1	1:A:232:TYR:O	1.82	0.80
1:A:295:ASN:HD21	1:A:350:ASN:HD21	1.27	0.80
1:A:340:TRP:HE3	1:A:343:ASP:H	1.30	0.80
1:A:27:GLU:HG3	1:A:40:PHE:HA	1.64	0.80
1:A:427:TRP:HA	1:A:447:TRP:H	1.47	0.79
1:A:107:LEU:CD2	1:A:114:ILE:HD11	2.11	0.79
1:A:420:LEU:H	1:A:547:ALA:HB2	1.45	0.79
1:A:478:LEU:H	1:A:478:LEU:HD23	1.46	0.79
1:A:243:GLU:OE1	1:A:498:LYS:HG2	1.82	0.79
1:A:463:GLN:HB2	1:A:480:GLN:OE1	1.83	0.79
1:A:434:ASP:O	1:A:435:ASP:O	2.01	0.79
1:A:442:ALA:HB1	1:A:444:LEU:CD2	2.13	0.78
1:A:81:MET:HE1	1:A:205:ALA:HB2	1.63	0.78
1:A:130:ASP:HB2	1:A:479:VAL:O	1.83	0.78

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:51:GLU:HG2	1:A:52:HIS:H	1.49	0.78
1:A:523:TYR:HB2	1:A:536:HIS:CB	2.13	0.78
1:A:413:SER:O	1:A:414:VAL:HG23	1.84	0.78
1:A:403:ASP:HB3	1:A:406:GLU:HB2	1.66	0.77
1:A:161:TYR:HA	1:A:455:GLN:OE1	1.84	0.77
1:A:502:ARG:NH1	1:A:504:ASN:O	2.16	0.77
1:A:83:TYR:O	1:A:185:ALA:HA	1.84	0.77
1:A:170:LEU:HG	1:A:171:ALA:H	1.49	0.77
1:A:149:LEU:HD11	1:A:458:LEU:HB2	1.67	0.77
1:A:92:PHE:O	1:A:94:ALA:N	2.17	0.76
1:A:392:TYR:O	1:A:393:PHE:HB2	1.84	0.76
1:A:421:HIS:ND1	1:A:421:HIS:N	2.33	0.76
1:A:41:SER:HB2	1:A:485:ILE:HD11	1.67	0.76
1:A:131:VAL:O	1:A:479:VAL:HB	1.86	0.76
1:A:394:PRO:HB3	1:A:399:GLN:HB2	1.68	0.76
1:A:521:VAL:HG22	1:A:522:LEU:N	2.01	0.76
1:A:90:LEU:HD22	1:A:486:MET:CE	2.16	0.76
1:A:109:GLU:HB2	1:A:550:ARG:NH2	2.01	0.76
1:A:63:SER:HB2	1:A:76:THR:HB	1.67	0.76
1:A:129:LYS:HZ2	1:A:143:ASP:HA	1.49	0.76
1:A:295:ASN:CG	1:A:296:SER:H	1.87	0.76
1:A:320:THR:HG23	1:A:325:ARG:C	2.06	0.76
1:A:227:THR:CG2	1:A:228:ALA:H	1.98	0.76
1:A:78:THR:HG22	1:A:79:PRO:HD2	1.67	0.76
1:A:461:LEU:HD22	1:A:462:PRO:HD2	1.67	0.75
1:A:420:LEU:H	1:A:547:ALA:CB	1.99	0.75
1:A:520:TYR:HA	1:A:538:TYR:CE1	2.21	0.75
1:A:341:ASP:O	1:A:342:THR:HG23	1.86	0.75
1:A:353:SER:HB2	1:A:371:VAL:HG22	1.68	0.75
1:A:547:ALA:O	1:A:549:SER:N	2.16	0.75
1:A:129:LYS:NZ	1:A:129:LYS:HB3	1.94	0.75
1:A:444:LEU:N	1:A:444:LEU:HD22	2.01	0.75
1:A:359:TYR:HB3	1:A:534:HIS:ND1	2.02	0.74
1:A:295:ASN:CG	1:A:296:SER:N	2.41	0.74
1:A:504:ASN:O	1:A:506:GLN:N	2.20	0.74
1:A:188:THR:CG2	1:A:189:VAL:H	2.00	0.74
1:A:88:ARG:HA	1:A:183:GLN:HA	1.68	0.74
1:A:195:GLN:HB2	1:A:202:LYS:HE2	1.70	0.74
1:A:264:PRO:HG3	1:A:273:PHE:H	1.53	0.74
1:A:206:SER:O	1:A:209:SER:HB2	1.87	0.73
1:A:295:ASN:HA	1:A:405:ILE:HA	1.70	0.73

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:128:VAL:O	1:A:128:VAL:HG13	1.87	0.73
1:A:90:LEU:HD23	1:A:458:LEU:HD21	1.69	0.73
1:A:87:TRP:NE1	1:A:215:GLU:OE2	2.20	0.73
1:A:426:LEU:HG	1:A:427:TRP:HD1	1.52	0.73
1:A:94:ALA:C	1:A:96:ASN:N	2.39	0.73
1:A:117:ASP:HB3	1:A:491:THR:OG1	1.88	0.73
1:A:456:ILE:HD12	1:A:456:ILE:N	2.04	0.73
1:A:94:ALA:O	1:A:96:ASN:N	2.21	0.73
1:A:116:PRO:HB2	1:A:234:PHE:CD1	2.24	0.73
1:A:188:THR:CG2	1:A:210:ALA:H	2.01	0.72
1:A:411:VAL:O	1:A:411:VAL:HG13	1.89	0.72
1:A:118:ALA:CB	1:A:233:LYS:HA	2.19	0.72
1:A:56:VAL:CG2	1:A:57:PHE:H	1.97	0.72
1:A:506:GLN:HG2	1:A:550:ARG:HD2	1.69	0.72
1:A:213:VAL:HG22	1:A:213:VAL:O	1.87	0.72
1:A:46:ILE:HG21	1:A:482:ALA:HB3	1.69	0.72
1:A:284:GLN:OE1	1:A:284:GLN:HA	1.89	0.72
1:A:535:ARG:HH11	1:A:535:ARG:HB3	1.53	0.72
1:A:346:VAL:HG12	1:A:347:THR:H	1.55	0.72
1:A:346:VAL:HG12	1:A:347:THR:N	2.04	0.72
1:A:39:THR:HB	1:A:489:THR:CG2	2.05	0.71
1:A:46:ILE:CG1	1:A:460:ILE:HG13	2.20	0.71
1:A:372:GLY:O	1:A:544:LEU:HB2	1.89	0.71
1:A:152:LEU:HB2	1:A:219:PHE:CB	2.21	0.71
1:A:367:TYR:O	1:A:369:GLN:HG2	1.90	0.71
1:A:249:PHE:HE1	1:A:290:PRO:HD3	1.53	0.71
1:A:101:PRO:O	1:A:102:LEU:C	2.28	0.71
1:A:391:THR:HG23	1:A:394:PRO:HD2	1.72	0.71
1:A:107:LEU:HD21	1:A:114:ILE:HD11	1.71	0.70
1:A:119:LEU:HD22	1:A:120:THR:N	2.06	0.70
1:A:187:LEU:HD22	1:A:187:LEU:N	2.06	0.70
1:A:422:TYR:H	1:A:545:TRP:HB3	1.56	0.70
1:A:48:TYR:CE1	1:A:479:VAL:HA	2.25	0.70
1:A:264:PRO:HG2	1:A:273:PHE:H	1.55	0.70
1:A:373:ARG:HE	1:A:375:PRO:HD3	1.56	0.70
1:A:440:GLN:HB2	1:A:441:PHE:CD1	2.27	0.70
1:A:292:PRO:HG3	1:A:409:LEU:HB2	1.73	0.70
1:A:52:HIS:CB	1:A:86:PRO:HB3	2.21	0.70
1:A:320:THR:CG2	1:A:321:SER:H	2.01	0.70
1:A:374:PHE:CE1	1:A:543:GLU:HG3	2.26	0.70
1:A:460:ILE:CD1	1:A:481:TYR:HA	2.21	0.70

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:506:GLN:NE2	1:A:550:ARG:HG3	2.06	0.70
1:A:255:PRO:C	1:A:256:LEU:HD23	2.11	0.70
1:A:161:TYR:HB2	1:A:429:LYS:HD3	1.72	0.70
1:A:103:GLU:O	1:A:104:PHE:C	2.28	0.69
1:A:109:GLU:CB	1:A:550:ARG:HH21	2.05	0.69
1:A:51:GLU:CG	1:A:52:HIS:H	2.04	0.69
1:A:444:LEU:HD13	1:A:444:LEU:N	2.07	0.69
1:A:122:THR:HG23	1:A:229:THR:OG1	1.93	0.69
1:A:393:PHE:H	1:A:394:PRO:HD3	1.57	0.69
1:A:188:THR:CG2	1:A:189:VAL:N	2.56	0.69
1:A:172:PRO:O	1:A:174:LEU:N	2.25	0.69
1:A:119:LEU:HB2	1:A:489:THR:O	1.93	0.69
1:A:129:LYS:HB2	1:A:142:THR:O	1.92	0.69
1:A:373:ARG:N	1:A:373:ARG:HD3	2.08	0.69
1:A:293:LEU:HD23	1:A:407:ARG:CD	2.18	0.69
1:A:337:TYR:O	1:A:338:HIS:HB2	1.92	0.69
1:A:79:PRO:HG3	1:A:192:VAL:HG23	1.74	0.69
1:A:465:GLY:CA	1:A:478:LEU:HD21	2.22	0.69
1:A:328:LEU:O	1:A:329:ARG:HB3	1.93	0.68
1:A:88:ARG:NH1	1:A:180:PHE:HA	2.07	0.68
1:A:423:GLU:O	1:A:424:SER:HB2	1.94	0.68
1:A:437:PHE:CE2	1:A:438:LYS:HG3	2.29	0.68
1:A:427:TRP:HA	1:A:447:TRP:N	2.09	0.68
1:A:465:GLY:HA3	1:A:478:LEU:HD21	1.75	0.68
1:A:100:SER:H	1:A:103:GLU:CB	2.06	0.68
1:A:291:GLY:HA2	1:A:410:MET:HE1	1.75	0.68
1:A:110:ASN:O	1:A:497:ARG:HD2	1.94	0.68
1:A:162:VAL:HG22	1:A:163:LEU:H	1.58	0.68
1:A:265:ASP:OD1	1:A:271:PRO:HD2	1.93	0.68
1:A:337:TYR:O	1:A:337:TYR:HD1	1.77	0.68
1:A:383:GLN:CG	1:A:384:LEU:H	2.07	0.68
1:A:410:MET:H	1:A:410:MET:HE2	1.59	0.68
1:A:41:SER:O	1:A:42:ARG:HD3	1.92	0.68
1:A:250:TYR:HA	1:A:286:GLN:HE21	1.53	0.67
1:A:45:LEU:HD12	1:A:46:ILE:N	2.08	0.67
1:A:244:GLY:H	1:A:551:VAL:HA	1.57	0.67
1:A:293:LEU:HD13	1:A:335:GLN:HG2	1.75	0.67
1:A:162:VAL:O	1:A:164:GLY:N	2.27	0.67
1:A:156:GLU:O	1:A:157:TYR:HB2	1.95	0.67
1:A:526:THR:C	1:A:528:THR:H	1.97	0.67
1:A:525:PRO:HA	1:A:535:ARG:HA	1.77	0.67

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:502:ARG:NH1	1:A:502:ARG:HB3	2.10	0.67
1:A:167:GLN:OE1	1:A:170:LEU:HB3	1.95	0.67
1:A:279:GLU:HA	1:A:281:HIS:CE1	2.30	0.67
1:A:241:ASN:O	1:A:242:LEU:HD23	1.95	0.66
1:A:414:VAL:O	1:A:415:TRP:HE3	1.78	0.66
1:A:338:HIS:O	1:A:339:HIS:ND1	2.28	0.66
1:A:46:ILE:HD12	1:A:47:PRO:HD2	1.76	0.66
1:A:78:THR:CG2	1:A:79:PRO:HD2	2.25	0.66
1:A:48:TYR:HE2	1:A:50:PRO:HG3	1.61	0.66
1:A:229:THR:CG2	1:A:230:MET:H	2.09	0.66
1:A:554:LEU:HD12	1:A:554:LEU:OXT	1.95	0.66
1:A:349:ILE:O	1:A:351:ALA:N	2.29	0.66
1:A:46:ILE:CG2	1:A:482:ALA:HB3	2.26	0.66
1:A:500:THR:HG22	1:A:553:PRO:HD3	1.76	0.66
1:A:80:ILE:C	1:A:203:LYS:HG2	2.17	0.66
1:A:96:ASN:ND2	1:A:97:LEU:H	1.94	0.66
1:A:177:TRP:O	1:A:178:VAL:O	2.15	0.65
1:A:414:VAL:O	1:A:415:TRP:CB	2.39	0.65
1:A:167:GLN:HG2	1:A:169:THR:OG1	1.97	0.65
1:A:234:PHE:O	1:A:235:PRO:O	2.14	0.65
1:A:316:LEU:O	1:A:318:THR:HG22	1.95	0.65
1:A:99:PHE:CE2	1:A:107:LEU:HD22	2.31	0.65
1:A:391:THR:HG23	1:A:394:PRO:CD	2.26	0.65
1:A:106:HIS:O	1:A:109:GLU:HG2	1.97	0.65
1:A:134:LYS:HB3	1:A:138:GLY:H	1.62	0.65
1:A:315:GLY:O	1:A:316:LEU:HD23	1.97	0.65
1:A:130:ASP:HB3	1:A:480:GLN:HB3	1.78	0.65
1:A:400:GLN:O	1:A:401:TYR:HB2	1.95	0.65
1:A:425:GLN:NE2	1:A:444:LEU:HD23	2.12	0.65
1:A:112:GLY:O	1:A:113:SER:CB	2.44	0.65
1:A:45:LEU:C	1:A:88:ARG:NH2	2.50	0.65
1:A:87:TRP:HZ3	1:A:458:LEU:HA	1.62	0.65
1:A:85:THR:CG2	1:A:86:PRO:HD2	2.27	0.65
1:A:477:THR:O	1:A:478:LEU:C	2.35	0.65
1:A:316:LEU:HD22	1:A:349:ILE:HG22	1.80	0.64
1:A:373:ARG:N	1:A:373:ARG:CD	2.59	0.64
1:A:552:HIS:HE1	1:A:554:LEU:HB3	1.63	0.64
1:A:377:GLU:HB3	1:A:382:LYS:HG3	1.80	0.64
1:A:506:GLN:CG	1:A:550:ARG:HD2	2.28	0.64
1:A:159:TYR:CE1	1:A:214:LEU:HD22	2.33	0.64
1:A:249:PHE:CD2	1:A:249:PHE:C	2.66	0.64

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:294:VAL:N	1:A:335:GLN:HE21	1.95	0.64
1:A:42:ARG:NH2	1:A:175:PRO:HD3	2.13	0.64
1:A:74:VAL:HG12	1:A:74:VAL:O	1.98	0.64
1:A:520:TYR:HD2	1:A:538:TYR:HH	1.45	0.64
1:A:128:VAL:HA	1:A:482:ALA:HB2	1.79	0.64
1:A:249:PHE:CB	1:A:380:GLN:OE1	2.46	0.64
1:A:383:GLN:HG3	1:A:384:LEU:N	2.13	0.63
1:A:58:SER:HB2	1:A:203:LYS:O	1.98	0.63
1:A:158:LYS:O	1:A:159:TYR:HB2	1.99	0.63
1:A:63:SER:CB	1:A:76:THR:HB	2.28	0.63
1:A:444:LEU:HD13	1:A:444:LEU:H	1.63	0.63
1:A:94:ALA:C	1:A:96:ASN:H	2.00	0.63
1:A:181:PRO:O	1:A:183:GLN:NE2	2.31	0.63
1:A:250:TYR:CE2	1:A:381:LEU:HD21	2.33	0.63
1:A:338:HIS:HD2	1:A:339:HIS:N	1.95	0.63
1:A:425:GLN:HG3	1:A:446:GLY:HA3	1.80	0.63
1:A:53:HIS:C	1:A:55:LYS:H	2.02	0.63
1:A:133:ASP:HA	1:A:139:VAL:HA	1.80	0.63
1:A:347:THR:O	1:A:349:ILE:N	2.31	0.63
1:A:42:ARG:NH1	1:A:175:PRO:CA	2.62	0.63
1:A:505:PRO:O	1:A:506:GLN:O	2.16	0.62
1:A:111:TYR:CE2	1:A:494:LEU:HD12	2.34	0.62
1:A:101:PRO:HA	1:A:104:PHE:HB3	1.80	0.62
1:A:157:TYR:CE2	1:A:451:GLN:HA	2.34	0.62
1:A:27:GLU:HG2	1:A:28:GLY:N	2.14	0.62
1:A:46:ILE:HG23	1:A:460:ILE:HD11	1.81	0.62
1:A:298:SER:CA	1:A:348:GLY:HA2	2.29	0.62
1:A:52:HIS:HB3	1:A:86:PRO:HB3	1.80	0.62
1:A:423:GLU:HB2	1:A:540:LYS:NZ	2.15	0.62
1:A:188:THR:HG21	1:A:210:ALA:N	2.09	0.62
1:A:423:GLU:HB2	1:A:540:LYS:HZ1	1.64	0.62
1:A:254:ASN:HB2	1:A:257:TYR:HB2	1.82	0.62
1:A:440:GLN:CA	1:A:440:GLN:HE21	2.13	0.62
1:A:333:VAL:HG12	1:A:417:ARG:HB3	1.80	0.62
1:A:190:GLY:HA3	1:A:206:SER:HB3	1.81	0.62
1:A:414:VAL:CG1	1:A:415:TRP:N	2.62	0.62
1:A:82:GLY:HA2	1:A:186:TYR:O	1.99	0.62
1:A:420:LEU:N	1:A:547:ALA:HB2	2.12	0.62
1:A:92:PHE:HA	1:A:171:ALA:HB2	1.82	0.62
1:A:521:VAL:HG22	1:A:522:LEU:H	1.63	0.62
1:A:430:ILE:HG23	1:A:431:PRO:HD2	1.82	0.62

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:353:SER:HA	1:A:371:VAL:HG13	1.81	0.61
1:A:288:PHE:HB3	1:A:412:GLY:O	2.00	0.61
1:A:452:PRO:O	1:A:454:PRO:N	2.33	0.61
1:A:42:ARG:HH11	1:A:175:PRO:HA	1.64	0.61
1:A:440:GLN:HE21	1:A:440:GLN:HA	1.64	0.61
1:A:207:GLU:C	1:A:209:SER:H	2.03	0.61
1:A:450:HIS:N	1:A:450:HIS:ND1	2.47	0.61
1:A:449:LEU:HD21	1:A:452:PRO:CB	2.30	0.61
1:A:295:ASN:CA	1:A:405:ILE:HA	2.30	0.61
1:A:506:GLN:NE2	1:A:551:VAL:HG12	2.16	0.61
1:A:375:PRO:HB3	1:A:377:GLU:CG	2.27	0.61
1:A:475:ILE:HG13	1:A:475:ILE:O	2.00	0.61
1:A:100:SER:O	1:A:102:LEU:N	2.33	0.61
1:A:328:LEU:CD2	1:A:329:ARG:H	2.12	0.61
1:A:338:HIS:CD2	1:A:339:HIS:N	2.67	0.61
1:A:93:ASN:OD1	1:A:426:LEU:HB3	2.00	0.61
1:A:386:GLY:O	1:A:387:LEU:HD22	2.01	0.61
1:A:414:VAL:HG12	1:A:415:TRP:N	2.16	0.61
1:A:52:HIS:HB2	1:A:86:PRO:HB3	1.83	0.61
1:A:63:SER:C	1:A:65:HIS:H	2.04	0.61
1:A:236:PRO:O	1:A:237:VAL:HB	2.00	0.61
1:A:45:LEU:HD12	1:A:45:LEU:C	2.21	0.60
1:A:421:HIS:CG	1:A:423:GLU:O	2.55	0.60
1:A:46:ILE:CG2	1:A:482:ALA:H	2.14	0.60
1:A:145:ALA:C	1:A:147:GLY:H	2.02	0.60
1:A:100:SER:HB2	1:A:103:GLU:HG3	1.83	0.60
1:A:160:PRO:O	1:A:184:TYR:OH	2.18	0.60
1:A:425:GLN:HB2	1:A:444:LEU:HB2	1.83	0.60
1:A:430:ILE:CG2	1:A:431:PRO:HD2	2.31	0.60
1:A:51:GLU:HG2	1:A:52:HIS:N	2.16	0.60
1:A:63:SER:OG	1:A:74:VAL:HG13	2.02	0.60
1:A:294:VAL:O	1:A:295:ASN:HB3	2.00	0.60
1:A:295:ASN:ND2	1:A:350:ASN:HD21	1.99	0.60
1:A:523:TYR:HD2	1:A:536:HIS:CD2	2.19	0.60
1:A:521:VAL:CG2	1:A:522:LEU:N	2.64	0.60
1:A:522:LEU:HD11	1:A:538:TYR:HB2	1.84	0.60
1:A:428:SER:N	1:A:447:TRP:O	2.29	0.60
1:A:131:VAL:HG22	1:A:141:VAL:HG23	1.83	0.60
1:A:162:VAL:CG2	1:A:163:LEU:N	2.58	0.60
1:A:132:THR:O	1:A:140:GLN:HB3	2.02	0.60
1:A:100:SER:O	1:A:103:GLU:HG3	2.02	0.60

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:245:CYS:O	1:A:247:GLN:N	2.32	0.59
1:A:155:HIS:H	1:A:454:PRO:HB3	1.67	0.59
1:A:57:PHE:HB2	1:A:82:GLY:O	2.02	0.59
1:A:114:ILE:HG22	1:A:115:ALA:N	2.16	0.59
1:A:129:LYS:NZ	1:A:143:ASP:HA	2.17	0.59
1:A:42:ARG:NH1	1:A:175:PRO:N	2.48	0.59
1:A:346:VAL:HG12	1:A:348:GLY:H	1.67	0.59
1:A:384:LEU:HD12	1:A:384:LEU:O	2.02	0.59
1:A:40:PHE:O	1:A:487:THR:HG23	2.01	0.59
1:A:244:GLY:N	1:A:551:VAL:HA	2.16	0.59
1:A:99:PHE:H	1:A:99:PHE:HD1	1.47	0.59
1:A:274:ARG:CG	1:A:275:SER:H	2.13	0.59
1:A:97:LEU:HD13	1:A:97:LEU:N	2.17	0.59
1:A:455:GLN:HB2	1:A:457:PHE:CE2	2.37	0.59
1:A:393:PHE:N	1:A:394:PRO:HD3	2.17	0.59
1:A:338:HIS:ND1	1:A:371:VAL:HB	2.17	0.59
1:A:157:TYR:CE1	1:A:454:PRO:HG3	2.38	0.59
1:A:46:ILE:HD13	1:A:458:LEU:O	2.03	0.59
1:A:419:ALA:O	1:A:420:LEU:HD23	2.03	0.59
1:A:44:PHE:CZ	1:A:484:GLY:HA3	2.38	0.59
1:A:119:LEU:HG	1:A:490:MET:HE2	1.83	0.59
1:A:263:VAL:HG22	1:A:272:LYS:HZ2	1.68	0.59
1:A:30:THR:C	1:A:36:VAL:HG23	2.22	0.59
1:A:46:ILE:CG2	1:A:460:ILE:HD11	2.33	0.59
1:A:36:VAL:HG22	1:A:37:THR:N	2.18	0.59
1:A:337:TYR:O	1:A:337:TYR:CD1	2.55	0.58
1:A:127:ALA:CB	1:A:483:VAL:H	2.04	0.58
1:A:64:CYS:O	1:A:65:HIS:HB2	2.02	0.58
1:A:314:THR:HG22	1:A:315:GLY:N	2.18	0.58
1:A:87:TRP:CZ2	1:A:459:LYS:HG2	2.39	0.58
1:A:506:GLN:HE22	1:A:551:VAL:CA	2.16	0.58
1:A:42:ARG:NH1	1:A:175:PRO:HA	2.18	0.58
1:A:192:VAL:HG13	1:A:192:VAL:O	2.03	0.58
1:A:87:TRP:CH2	1:A:459:LYS:HG2	2.38	0.58
1:A:129:LYS:HZ2	1:A:129:LYS:CB	2.10	0.58
1:A:452:PRO:HB2	1:A:453:PRO:CD	2.31	0.58
1:A:503:TRP:O	1:A:503:TRP:CE3	2.46	0.58
1:A:35:SER:HA	1:A:494:LEU:HG	1.84	0.58
1:A:421:HIS:O	1:A:423:GLU:O	2.22	0.58
1:A:60:ALA:HA	1:A:202:LYS:HA	1.86	0.58
1:A:374:PHE:CZ	1:A:543:GLU:HG3	2.38	0.58

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:152:LEU:HB2	1:A:219:PHE:HB3	1.85	0.58
1:A:300:LYS:HA	1:A:300:LYS:HE2	1.86	0.58
1:A:246:SER:H	1:A:551:VAL:CG2	2.16	0.58
1:A:550:ARG:HG3	1:A:551:VAL:H	1.69	0.58
1:A:521:VAL:CG2	1:A:522:LEU:H	2.16	0.57
1:A:170:LEU:CG	1:A:171:ALA:N	2.66	0.57
1:A:415:TRP:HD1	1:A:416:ASN:O	1.88	0.57
1:A:45:LEU:N	1:A:88:ARG:HH22	2.03	0.57
1:A:180:PHE:N	1:A:180:PHE:CD1	2.71	0.57
1:A:189:VAL:HG12	1:A:190:GLY:N	2.18	0.57
1:A:430:ILE:CG2	1:A:439:THR:HG21	2.34	0.57
1:A:113:SER:OG	1:A:239:PRO:HB2	2.04	0.57
1:A:158:LYS:O	1:A:159:TYR:CB	2.52	0.57
1:A:237:VAL:HG21	1:A:447:TRP:CD1	2.40	0.57
1:A:107:LEU:HD11	1:A:242:LEU:CD1	2.34	0.57
1:A:251:GLU:HA	1:A:253:TYR:CE2	2.39	0.57
1:A:500:THR:HB	1:A:502:ARG:HG3	1.85	0.57
1:A:410:MET:N	1:A:410:MET:HE2	2.19	0.57
1:A:413:SER:O	1:A:414:VAL:CG2	2.53	0.57
1:A:176:ILE:HG22	1:A:176:ILE:O	2.05	0.57
1:A:320:THR:OG1	1:A:326:ILE:HG23	2.04	0.57
1:A:94:ALA:O	1:A:97:LEU:CD2	2.53	0.57
1:A:99:PHE:CD1	1:A:99:PHE:N	2.72	0.57
1:A:478:LEU:N	1:A:478:LEU:CD2	2.59	0.57
1:A:27:GLU:HA	1:A:39:THR:O	2.05	0.57
1:A:316:LEU:HD12	1:A:328:LEU:HD11	1.85	0.57
1:A:42:ARG:NH1	1:A:175:PRO:CG	2.52	0.56
1:A:350:ASN:O	1:A:351:ALA:O	2.22	0.56
1:A:170:LEU:CG	1:A:171:ALA:H	2.06	0.56
1:A:128:VAL:HG21	1:A:147:GLY:C	2.26	0.56
1:A:252:MET:O	1:A:253:TYR:O	2.24	0.56
1:A:407:ARG:H	1:A:408:PRO:HD3	1.70	0.56
1:A:367:TYR:O	1:A:369:GLN:N	2.38	0.56
1:A:44:PHE:HA	1:A:179:TYR:O	2.05	0.56
1:A:81:MET:HG2	1:A:203:LYS:HG3	1.86	0.56
1:A:414:VAL:O	1:A:415:TRP:CE3	2.57	0.56
1:A:161:TYR:HH	1:A:427:TRP:HZ3	1.53	0.56
1:A:392:TYR:H	1:A:394:PRO:HD3	1.71	0.56
1:A:207:GLU:O	1:A:209:SER:N	2.36	0.56
1:A:511:PRO:HB3	1:A:545:TRP:NE1	2.20	0.56
1:A:162:VAL:HG13	1:A:163:LEU:N	2.18	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:179:TYR:CZ	1:A:181:PRO:HG3	2.41	0.56
1:A:338:HIS:HE2	1:A:345:TYR:HD2	1.54	0.56
1:A:442:ALA:HB1	1:A:444:LEU:HD22	1.86	0.56
1:A:87:TRP:CE2	1:A:459:LYS:HG2	2.41	0.56
1:A:406:GLU:O	1:A:407:ARG:HB2	2.05	0.56
1:A:535:ARG:NH1	1:A:535:ARG:HB3	2.20	0.56
1:A:513:HIS:HA	1:A:542:GLU:HG2	1.87	0.56
1:A:216:HIS:O	1:A:217:SER:HB3	2.05	0.56
1:A:329:ARG:C	1:A:331:GLY:H	2.08	0.56
1:A:382:LYS:HE3	1:A:415:TRP:HB2	1.85	0.56
1:A:295:ASN:ND2	1:A:296:SER:H	2.04	0.56
1:A:421:HIS:CD2	1:A:423:GLU:O	2.59	0.56
1:A:506:GLN:O	1:A:507:PRO:O	2.24	0.56
1:A:165:GLN:O	1:A:166:GLY:C	2.43	0.56
1:A:392:TYR:CE2	1:A:399:GLN:HB3	2.41	0.55
1:A:107:LEU:HD22	1:A:114:ILE:HD11	1.87	0.55
1:A:126:ILE:CG2	1:A:224:THR:HA	2.30	0.55
1:A:426:LEU:CG	1:A:427:TRP:HD1	2.20	0.55
1:A:65:HIS:HB3	1:A:200:ASP:OD1	2.05	0.55
1:A:551:VAL:HG22	1:A:552:HIS:O	2.06	0.55
1:A:434:ASP:OD1	1:A:434:ASP:N	2.34	0.55
1:A:27:GLU:CG	1:A:40:PHE:HA	2.35	0.55
1:A:123:ILE:O	1:A:227:THR:HG23	2.06	0.55
1:A:107:LEU:O	1:A:107:LEU:HD12	2.07	0.55
1:A:340:TRP:HE3	1:A:342:THR:HA	1.71	0.55
1:A:157:TYR:CZ	1:A:451:GLN:HA	2.41	0.55
1:A:372:GLY:C	1:A:373:ARG:HD3	2.26	0.55
1:A:249:PHE:HB3	1:A:380:GLN:OE1	2.06	0.55
1:A:449:LEU:HD22	1:A:452:PRO:HB3	1.86	0.55
1:A:485:ILE:C	1:A:485:ILE:HD12	2.26	0.55
1:A:78:THR:HA	1:A:325:ARG:NH1	2.16	0.55
1:A:179:TYR:O	1:A:181:PRO:HD3	2.05	0.55
1:A:320:THR:CG2	1:A:321:SER:N	2.62	0.55
1:A:161:TYR:OH	1:A:452:PRO:HG2	2.07	0.55
1:A:46:ILE:N	1:A:88:ARG:NH2	2.55	0.55
1:A:426:LEU:HB3	1:A:427:TRP:CD1	2.42	0.55
1:A:505:PRO:O	1:A:506:GLN:HB3	2.05	0.55
1:A:544:LEU:H	1:A:544:LEU:HD22	1.72	0.55
1:A:400:GLN:O	1:A:401:TYR:CB	2.55	0.55
1:A:235:PRO:CB	1:A:236:PRO:HD2	2.33	0.55
1:A:551:VAL:HG22	1:A:552:HIS:N	2.21	0.55

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:529:ASP:HB3	1:A:533:HIS:HA	1.86	0.55
1:A:96:ASN:HA	1:A:422:TYR:O	2.07	0.55
1:A:433:LEU:O	1:A:434:ASP:O	2.25	0.55
1:A:295:ASN:ND2	1:A:317:SER:OG	2.40	0.54
1:A:455:GLN:HB2	1:A:457:PHE:HE2	1.72	0.54
1:A:54:TYR:HE2	1:A:213:VAL:HA	1.72	0.54
1:A:292:PRO:CD	1:A:409:LEU:HA	2.30	0.54
1:A:46:ILE:HG23	1:A:482:ALA:H	1.71	0.54
1:A:371:VAL:O	1:A:372:GLY:C	2.46	0.54
1:A:427:TRP:CZ3	1:A:453:PRO:HD2	2.43	0.54
1:A:503:TRP:O	1:A:505:PRO:HD3	2.06	0.54
1:A:529:ASP:HB2	1:A:534:HIS:H	1.72	0.54
1:A:152:LEU:HB2	1:A:219:PHE:HB2	1.90	0.54
1:A:40:PHE:C	1:A:40:PHE:CD1	2.81	0.54
1:A:127:ALA:HB3	1:A:483:VAL:N	2.01	0.54
1:A:45:LEU:O	1:A:88:ARG:NH1	2.40	0.54
1:A:340:TRP:HE3	1:A:343:ASP:N	2.02	0.54
1:A:48:TYR:CE2	1:A:50:PRO:HG3	2.42	0.54
1:A:161:TYR:OH	1:A:427:TRP:HZ3	1.90	0.54
1:A:248:HIS:CE1	1:A:379:GLU:HB3	2.43	0.54
1:A:427:TRP:HA	1:A:447:TRP:O	2.07	0.54
1:A:500:THR:HG22	1:A:553:PRO:CD	2.37	0.54
1:A:316:LEU:HD22	1:A:349:ILE:CG2	2.38	0.54
1:A:320:THR:HG23	1:A:326:ILE:N	2.23	0.54
1:A:326:ILE:O	1:A:327:SER:CB	2.55	0.54
1:A:96:ASN:HD22	1:A:97:LEU:H	1.56	0.54
1:A:374:PHE:HE1	1:A:543:GLU:HG3	1.71	0.54
1:A:206:SER:OG	1:A:207:GLU:N	2.41	0.53
1:A:250:TYR:O	1:A:253:TYR:HE2	1.90	0.53
1:A:393:PHE:H	1:A:394:PRO:CD	2.22	0.53
1:A:105:GLN:O	1:A:108:ILE:HG12	2.08	0.53
1:A:115:ALA:O	1:A:492:PHE:HA	2.09	0.53
1:A:235:PRO:HB2	1:A:236:PRO:CD	2.33	0.53
1:A:377:GLU:C	1:A:382:LYS:HB2	2.28	0.53
1:A:87:TRP:CZ3	1:A:458:LEU:HA	2.44	0.53
1:A:96:ASN:HD21	1:A:173:GLU:HG3	1.73	0.53
1:A:252:MET:HE2	1:A:554:LEU:HD12	1.89	0.53
1:A:427:TRP:CA	1:A:447:TRP:H	2.19	0.53
1:A:26:SER:HB2	1:A:487:THR:CG2	2.32	0.53
1:A:241:ASN:OD1	1:A:242:LEU:N	2.42	0.53
1:A:88:ARG:HB2	1:A:182:PRO:O	2.09	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:485:ILE:HG13	1:A:485:ILE:O	2.09	0.53
1:A:391:THR:HG23	1:A:393:PHE:H	1.73	0.53
1:A:522:LEU:CD1	1:A:538:TYR:HB2	2.38	0.53
1:A:353:SER:CB	1:A:371:VAL:HG22	2.37	0.53
1:A:44:PHE:CE2	1:A:486:MET:HB3	2.43	0.53
1:A:263:VAL:HG22	1:A:272:LYS:NZ	2.22	0.53
1:A:150:CYS:SG	1:A:461:LEU:HD23	2.49	0.53
1:A:298:SER:H	1:A:384:LEU:HD23	1.73	0.53
1:A:373:ARG:HH21	1:A:375:PRO:CD	2.22	0.53
1:A:154:ASP:O	1:A:156:GLU:N	2.42	0.52
1:A:452:PRO:O	1:A:454:PRO:CD	2.57	0.52
1:A:81:MET:CE	1:A:205:ALA:HB2	2.34	0.52
1:A:276:LEU:O	1:A:279:GLU:O	2.27	0.52
1:A:340:TRP:CE3	1:A:342:THR:HA	2.44	0.52
1:A:76:THR:HG23	1:A:76:THR:O	2.09	0.52
1:A:107:LEU:HD21	1:A:114:ILE:CD1	2.38	0.52
1:A:425:GLN:CD	1:A:444:LEU:HD23	2.29	0.52
1:A:170:LEU:HG	1:A:171:ALA:N	2.23	0.52
1:A:193:ASN:O	1:A:202:LYS:HG2	2.09	0.52
1:A:298:SER:H	1:A:384:LEU:CD2	2.21	0.52
1:A:95:LEU:O	1:A:96:ASN:O	2.25	0.52
1:A:48:TYR:O	1:A:49:ASP:C	2.47	0.52
1:A:265:ASP:OD2	1:A:270:ASP:HA	2.10	0.52
1:A:383:GLN:CG	1:A:384:LEU:N	2.71	0.52
1:A:131:VAL:HB	1:A:479:VAL:HG11	1.91	0.52
1:A:114:ILE:CG2	1:A:115:ALA:N	2.72	0.52
1:A:154:ASP:OD1	1:A:157:TYR:HA	2.10	0.52
1:A:232:TYR:OH	1:A:453:PRO:HD3	2.09	0.52
1:A:523:TYR:CD2	1:A:536:HIS:CD2	2.98	0.52
1:A:152:LEU:HD23	1:A:152:LEU:C	2.30	0.52
1:A:174:LEU:O	1:A:177:TRP:HB2	2.10	0.52
1:A:172:PRO:CG	1:A:179:TYR:HB2	2.34	0.52
1:A:526:THR:C	1:A:528:THR:N	2.63	0.52
1:A:141:VAL:O	1:A:141:VAL:HG13	2.09	0.52
1:A:45:LEU:C	1:A:88:ARG:HH22	2.13	0.52
1:A:400:GLN:HG3	1:A:401:TYR:H	1.75	0.52
1:A:241:ASN:OD1	1:A:243:GLU:N	2.42	0.52
1:A:246:SER:O	1:A:247:GLN:HB2	2.09	0.52
1:A:179:TYR:CE2	1:A:181:PRO:HA	2.45	0.52
1:A:94:ALA:O	1:A:95:LEU:C	2.48	0.52
1:A:273:PHE:HZ	1:A:276:LEU:HG	1.75	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:134:LYS:C	1:A:136:GLY:H	2.13	0.52
1:A:114:ILE:HG23	1:A:492:PHE:HB3	1.92	0.51
1:A:112:GLY:O	1:A:113:SER:HB2	2.09	0.51
1:A:94:ALA:O	1:A:97:LEU:HD22	2.08	0.51
1:A:123:ILE:HD12	1:A:123:ILE:N	2.26	0.51
1:A:276:LEU:HB2	1:A:280:ASP:HB3	1.91	0.51
1:A:54:TYR:CE2	1:A:213:VAL:HA	2.46	0.51
1:A:131:VAL:HB	1:A:479:VAL:CG1	2.41	0.51
1:A:314:THR:O	1:A:315:GLY:O	2.28	0.51
1:A:95:LEU:HD13	1:A:95:LEU:C	2.30	0.51
1:A:525:PRO:O	1:A:528:THR:HB	2.09	0.51
1:A:63:SER:OG	1:A:64:CYS:N	2.43	0.51
1:A:381:LEU:CB	1:A:407:ARG:HH22	2.23	0.51
1:A:460:ILE:HD12	1:A:481:TYR:HA	1.93	0.51
1:A:526:THR:O	1:A:528:THR:N	2.35	0.51
1:A:165:GLN:O	1:A:166:GLY:O	2.29	0.51
1:A:157:TYR:HE2	1:A:451:GLN:CB	2.23	0.51
1:A:328:LEU:HD22	1:A:329:ARG:H	1.73	0.51
1:A:87:TRP:CZ3	1:A:459:LYS:HG2	2.45	0.51
1:A:346:VAL:CG1	1:A:347:THR:H	2.23	0.51
1:A:333:VAL:CG1	1:A:417:ARG:HB3	2.41	0.51
1:A:456:ILE:CD1	1:A:456:ILE:N	2.70	0.51
1:A:59:PRO:HD2	1:A:80:ILE:HD12	1.93	0.51
1:A:340:TRP:HA	1:A:344:LYS:O	2.10	0.51
1:A:186:TYR:OH	1:A:212:TYR:N	2.43	0.51
1:A:81:MET:N	1:A:203:LYS:HG2	2.25	0.51
1:A:425:GLN:NE2	1:A:444:LEU:CD2	2.73	0.51
1:A:426:LEU:HG	1:A:427:TRP:CD1	2.40	0.51
1:A:111:TYR:CD2	1:A:494:LEU:HD12	2.46	0.51
1:A:107:LEU:HG	1:A:108:ILE:HD13	1.93	0.51
1:A:442:ALA:O	1:A:443:ALA:C	2.49	0.51
1:A:460:ILE:CG2	1:A:461:LEU:N	2.73	0.51
1:A:552:HIS:C	1:A:552:HIS:ND1	2.64	0.51
1:A:244:GLY:N	1:A:550:ARG:O	2.44	0.50
1:A:346:VAL:CG1	1:A:347:THR:N	2.73	0.50
1:A:444:LEU:CD2	1:A:444:LEU:H	2.02	0.50
1:A:387:LEU:HB2	1:A:403:ASP:O	2.12	0.50
1:A:444:LEU:H	1:A:444:LEU:CD1	2.23	0.50
1:A:453:PRO:O	1:A:454:PRO:C	2.49	0.50
1:A:53:HIS:C	1:A:55:LYS:N	2.65	0.50
1:A:88:ARG:NH1	1:A:180:PHE:CA	2.75	0.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:29:ALA:HA	1:A:37:THR:O	2.12	0.50
1:A:512:PRO:O	1:A:541:PRO:HB3	2.12	0.50
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:HD12	2.31	0.50
1:A:54:TYR:CZ	1:A:85:THR:HG23	2.46	0.50
1:A:96:ASN:C	1:A:97:LEU:HD22	2.31	0.50
1:A:264:PRO:HG3	1:A:273:PHE:HB3	1.94	0.50
1:A:521:VAL:O	1:A:538:TYR:HA	2.11	0.50
1:A:338:HIS:O	1:A:339:HIS:HB3	2.11	0.50
1:A:425:GLN:CB	1:A:444:LEU:HB2	2.41	0.50
1:A:449:LEU:N	1:A:449:LEU:HD13	2.27	0.50
1:A:46:ILE:CG2	1:A:482:ALA:N	2.74	0.50
1:A:393:PHE:N	1:A:394:PRO:CD	2.75	0.50
1:A:204:LEU:HG	1:A:205:ALA:H	1.77	0.49
1:A:42:ARG:HH12	1:A:175:PRO:HG3	1.73	0.49
1:A:411:VAL:O	1:A:411:VAL:CG1	2.59	0.49
1:A:157:TYR:HE2	1:A:451:GLN:HB3	1.77	0.49
1:A:177:TRP:O	1:A:178:VAL:C	2.50	0.49
1:A:249:PHE:N	1:A:380:GLN:OE1	2.38	0.49
1:A:250:TYR:CE2	1:A:381:LEU:CD2	2.95	0.49
1:A:423:GLU:OE1	1:A:424:SER:N	2.46	0.49
1:A:353:SER:CA	1:A:371:VAL:HG13	2.42	0.49
1:A:57:PHE:HB2	1:A:82:GLY:C	2.31	0.49
1:A:339:HIS:HE1	1:A:383:GLN:CG	2.26	0.49
1:A:358:THR:HB	1:A:361:ASN:O	2.13	0.49
1:A:413:SER:O	1:A:414:VAL:CB	2.60	0.49
1:A:294:VAL:O	1:A:294:VAL:HG12	2.12	0.49
1:A:452:PRO:O	1:A:454:PRO:HD3	2.12	0.49
1:A:248:HIS:ND1	1:A:379:GLU:O	2.46	0.49
1:A:124:SER:O	1:A:125:GLU:C	2.51	0.49
1:A:129:LYS:HG3	1:A:481:TYR:CE2	2.48	0.49
1:A:117:ASP:OD1	1:A:233:LYS:HE2	2.13	0.49
1:A:249:PHE:HE1	1:A:290:PRO:CD	2.25	0.49
1:A:373:ARG:O	1:A:375:PRO:HD3	2.13	0.49
1:A:429:LYS:HG2	1:A:430:ILE:O	2.12	0.49
1:A:372:GLY:O	1:A:373:ARG:HB3	2.12	0.49
1:A:373:ARG:HH21	1:A:375:PRO:CG	2.25	0.49
1:A:45:LEU:CD1	1:A:481:TYR:CD1	2.92	0.49
1:A:111:TYR:CD1	1:A:111:TYR:N	2.80	0.49
1:A:256:LEU:HD23	1:A:256:LEU:N	2.24	0.49
1:A:100:SER:N	1:A:103:GLU:HB2	2.13	0.49
1:A:53:HIS:O	1:A:54:TYR:HB2	2.12	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:116:PRO:O	1:A:234:PHE:HB2	2.13	0.48
1:A:249:PHE:HD2	1:A:249:PHE:C	2.14	0.48
1:A:250:TYR:HE2	1:A:381:LEU:HG	1.77	0.48
1:A:455:GLN:CB	1:A:457:PHE:CE2	2.96	0.48
1:A:83:TYR:HB2	1:A:186:TYR:CE2	2.48	0.48
1:A:161:TYR:CB	1:A:429:LYS:HD3	2.42	0.48
1:A:430:ILE:HG12	1:A:439:THR:HG22	1.96	0.48
1:A:460:ILE:O	1:A:462:PRO:HD3	2.12	0.48
1:A:372:GLY:N	1:A:544:LEU:HD23	2.28	0.48
1:A:286:GLN:OE1	1:A:286:GLN:HA	2.12	0.48
1:A:316:LEU:O	1:A:317:SER:C	2.51	0.48
1:A:418:ARG:O	1:A:419:ALA:O	2.31	0.48
1:A:463:GLN:OE1	1:A:480:GLN:NE2	2.46	0.48
1:A:120:THR:HB	1:A:231:SER:HB3	1.96	0.48
1:A:181:PRO:O	1:A:182:PRO:O	2.32	0.48
1:A:232:TYR:CZ	1:A:453:PRO:HD3	2.48	0.48
1:A:381:LEU:HB3	1:A:407:ARG:HH22	1.78	0.48
1:A:453:PRO:O	1:A:454:PRO:O	2.31	0.48
1:A:36:VAL:HG12	1:A:494:LEU:HD21	1.96	0.48
1:A:161:TYR:CZ	1:A:452:PRO:HG2	2.48	0.48
1:A:244:GLY:CA	1:A:551:VAL:HG23	2.43	0.48
1:A:338:HIS:O	1:A:339:HIS:CB	2.60	0.48
1:A:449:LEU:N	1:A:449:LEU:CD1	2.77	0.48
1:A:42:ARG:NH1	1:A:175:PRO:HG3	2.28	0.48
1:A:436:SER:O	1:A:439:THR:OG1	2.31	0.48
1:A:545:TRP:C	1:A:545:TRP:HE3	2.17	0.48
1:A:450:HIS:O	1:A:451:GLN:HB2	2.14	0.48
1:A:45:LEU:HD21	1:A:481:TYR:CD1	2.49	0.48
1:A:91:ASP:OD2	1:A:93:ASN:HB2	2.13	0.48
1:A:93:ASN:OD1	1:A:93:ASN:O	2.32	0.48
1:A:230:MET:C	1:A:230:MET:SD	2.92	0.48
1:A:388:ASN:C	1:A:390:HIS:H	2.16	0.48
1:A:214:LEU:HD11	1:A:457:PHE:CD1	2.49	0.48
1:A:87:TRP:CD2	1:A:459:LYS:HG2	2.49	0.48
1:A:502:ARG:NH1	1:A:502:ARG:CB	2.77	0.48
1:A:79:PRO:HB2	1:A:203:LYS:CB	2.36	0.48
1:A:90:LEU:HD22	1:A:486:MET:HE2	1.93	0.48
1:A:107:LEU:HG	1:A:108:ILE:N	2.28	0.48
1:A:337:TYR:HB2	1:A:351:ALA:HB2	1.95	0.48
1:A:101:PRO:HD3	1:A:422:TYR:CD1	2.48	0.48
1:A:252:MET:CE	1:A:554:LEU:HD12	2.43	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:532:GLN:O	1:A:533:HIS:O	2.31	0.48
1:A:246:SER:N	1:A:551:VAL:CG2	2.77	0.47
1:A:420:LEU:CA	1:A:547:ALA:HB2	2.44	0.47
1:A:85:THR:HG22	1:A:86:PRO:HD2	1.96	0.47
1:A:161:TYR:C	1:A:162:VAL:HG12	2.34	0.47
1:A:90:LEU:HD22	1:A:486:MET:HE3	1.94	0.47
1:A:104:PHE:CG	1:A:108:ILE:HD11	2.49	0.47
1:A:289:MET:O	1:A:290:PRO:O	2.32	0.47
1:A:293:LEU:HB2	1:A:407:ARG:CB	2.38	0.47
1:A:526:THR:HG22	1:A:527:ALA:N	2.29	0.47
1:A:464:SER:OG	1:A:465:GLY:N	2.47	0.47
1:A:347:THR:O	1:A:347:THR:HG22	2.14	0.47
1:A:46:ILE:O	1:A:46:ILE:HG23	2.14	0.47
1:A:186:TYR:C	1:A:187:LEU:HD22	2.34	0.47
1:A:236:PRO:O	1:A:237:VAL:CB	2.62	0.47
1:A:77:ILE:O	1:A:78:THR:O	2.33	0.47
1:A:519:PRO:CG	1:A:541:PRO:HA	2.45	0.47
1:A:161:TYR:OH	1:A:427:TRP:CZ3	2.67	0.47
1:A:46:ILE:HD12	1:A:47:PRO:CD	2.42	0.47
1:A:90:LEU:HD13	1:A:486:MET:CE	2.44	0.47
1:A:513:HIS:HB3	1:A:519:PRO:HD3	1.96	0.47
1:A:529:ASP:HB2	1:A:534:HIS:N	2.29	0.47
1:A:128:VAL:H	1:A:482:ALA:CB	2.28	0.47
1:A:327:SER:O	1:A:328:LEU:O	2.33	0.47
1:A:27:GLU:CB	1:A:40:PHE:HA	2.45	0.47
1:A:59:PRO:O	1:A:60:ALA:HB3	2.14	0.47
1:A:152:LEU:CD1	1:A:219:PHE:HB3	2.35	0.47
1:A:42:ARG:C	1:A:43:GLN:O	2.49	0.47
1:A:427:TRP:CE3	1:A:452:PRO:HB2	2.49	0.47
1:A:490:MET:HG3	1:A:491:THR:H	1.80	0.47
1:A:85:THR:HG23	1:A:86:PRO:HD2	1.96	0.47
1:A:494:LEU:N	1:A:494:LEU:HD23	2.30	0.47
1:A:153:VAL:HG22	1:A:456:ILE:HG23	1.96	0.47
1:A:249:PHE:CZ	1:A:288:PHE:HB2	2.49	0.47
1:A:425:GLN:HE21	1:A:444:LEU:CD2	2.28	0.47
1:A:520:TYR:HD2	1:A:538:TYR:OH	1.97	0.47
1:A:144:SER:C	1:A:145:ALA:O	2.51	0.47
1:A:502:ARG:NH2	1:A:504:ASN:O	2.48	0.47
1:A:116:PRO:HB2	1:A:234:PHE:CE1	2.49	0.47
1:A:117:ASP:O	1:A:234:PHE:N	2.48	0.47
1:A:291:GLY:HA3	1:A:292:PRO:HD2	1.59	0.47

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:423:GLU:O	1:A:424:SER:CB	2.56	0.47
1:A:425:GLN:CG	1:A:446:GLY:H	2.28	0.47
1:A:490:MET:CG	1:A:491:THR:N	2.78	0.47
1:A:232:TYR:OH	1:A:452:PRO:HA	2.15	0.46
1:A:234:PHE:C	1:A:235:PRO:O	2.53	0.46
1:A:293:LEU:CD2	1:A:407:ARG:HH11	2.28	0.46
1:A:502:ARG:HH11	1:A:502:ARG:CB	2.28	0.46
1:A:89:TYR:HA	1:A:457:PHE:HA	1.96	0.46
1:A:36:VAL:CG2	1:A:37:THR:N	2.77	0.46
1:A:224:THR:HG22	1:A:225:GLY:N	2.31	0.46
1:A:246:SER:N	1:A:551:VAL:HG21	2.30	0.46
1:A:122:THR:HG23	1:A:229:THR:HG1	1.80	0.46
1:A:162:VAL:CG2	1:A:163:LEU:H	2.21	0.46
1:A:180:PHE:N	1:A:181:PRO:HD3	2.30	0.46
1:A:425:GLN:HE21	1:A:444:LEU:HD23	1.77	0.46
1:A:502:ARG:CZ	1:A:504:ASN:O	2.64	0.46
1:A:104:PHE:CD2	1:A:108:ILE:HD11	2.50	0.46
1:A:179:TYR:CE1	1:A:181:PRO:HG3	2.51	0.46
1:A:329:ARG:C	1:A:331:GLY:N	2.68	0.46
1:A:52:HIS:O	1:A:52:HIS:ND1	2.48	0.46
1:A:95:LEU:HA	1:A:426:LEU:HD22	1.96	0.46
1:A:488:VAL:HG12	1:A:489:THR:N	2.31	0.46
1:A:59:PRO:HD2	1:A:80:ILE:CD1	2.46	0.46
1:A:513:HIS:ND1	1:A:518:LEU:HD23	2.30	0.46
1:A:170:LEU:O	1:A:172:PRO:HD3	2.15	0.46
1:A:179:TYR:CE2	1:A:181:PRO:HG3	2.51	0.46
1:A:338:HIS:C	1:A:339:HIS:HD1	2.18	0.46
1:A:101:PRO:HD2	1:A:422:TYR:CZ	2.51	0.46
1:A:45:LEU:CD1	1:A:481:TYR:HD1	2.22	0.46
1:A:129:LYS:HG3	1:A:481:TYR:HE2	1.80	0.46
1:A:87:TRP:HE1	1:A:215:GLU:CD	2.15	0.46
1:A:47:PRO:HD3	1:A:88:ARG:HD3	1.97	0.46
1:A:97:LEU:HD13	1:A:97:LEU:H	1.79	0.46
1:A:104:PHE:O	1:A:107:LEU:HB3	2.16	0.46
1:A:51:GLU:CG	1:A:52:HIS:N	2.75	0.46
1:A:553:PRO:O	1:A:553:PRO:HG2	2.15	0.46
1:A:97:LEU:HD22	1:A:98:PHE:H	1.79	0.46
1:A:133:ASP:HB2	1:A:138:GLY:O	2.15	0.46
1:A:105:GLN:O	1:A:106:HIS:C	2.53	0.46
1:A:119:LEU:HD22	1:A:119:LEU:C	2.35	0.46
1:A:333:VAL:HA	1:A:418:ARG:CZ	2.46	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:274:ARG:O	1:A:275:SER:OG	2.28	0.46
1:A:121:VAL:HB	1:A:230:MET:SD	2.55	0.46
1:A:85:THR:C	1:A:87:TRP:H	2.19	0.46
1:A:217:SER:O	1:A:218:SER:C	2.53	0.46
1:A:129:LYS:O	1:A:481:TYR:HD2	1.99	0.46
1:A:126:ILE:HD11	1:A:149:LEU:HD23	1.98	0.46
1:A:190:GLY:CA	1:A:206:SER:HB3	2.46	0.46
1:A:210:ALA:HB1	1:A:212:TYR:CZ	2.51	0.46
1:A:407:ARG:H	1:A:408:PRO:CD	2.28	0.46
1:A:430:ILE:HG21	1:A:439:THR:HG21	1.98	0.46
1:A:44:PHE:HD1	1:A:88:ARG:NH2	2.13	0.46
1:A:96:ASN:HA	1:A:422:TYR:CE1	2.50	0.45
1:A:135:THR:HG22	1:A:135:THR:O	2.16	0.45
1:A:119:LEU:HG	1:A:490:MET:CE	2.47	0.45
1:A:27:GLU:HG3	1:A:40:PHE:CA	2.42	0.45
1:A:87:TRP:CE3	1:A:459:LYS:HG2	2.52	0.45
1:A:443:ALA:HB3	1:A:444:LEU:HD13	1.99	0.45
1:A:437:PHE:CZ	1:A:438:LYS:HG3	2.52	0.45
1:A:191:ASP:CB	1:A:204:LEU:HB3	2.47	0.45
1:A:329:ARG:O	1:A:329:ARG:CG	2.63	0.45
1:A:46:ILE:HA	1:A:88:ARG:CZ	2.46	0.45
1:A:131:VAL:HG22	1:A:141:VAL:CG2	2.46	0.45
1:A:434:ASP:O	1:A:435:ASP:C	2.53	0.45
1:A:320:THR:OG1	1:A:326:ILE:HA	2.17	0.45
1:A:387:LEU:HD23	1:A:403:ASP:O	2.16	0.45
1:A:326:ILE:HB	1:A:327:SER:H	1.45	0.45
1:A:44:PHE:HB2	1:A:179:TYR:O	2.16	0.45
1:A:45:LEU:HD21	1:A:481:TYR:CE1	2.52	0.45
1:A:264:PRO:HG3	1:A:273:PHE:CB	2.46	0.45
1:A:266:THR:HG21	1:A:396:LYS:HG2	1.99	0.45
1:A:320:THR:HG23	1:A:326:ILE:HA	1.98	0.45
1:A:427:TRP:CH2	1:A:453:PRO:HB2	2.51	0.45
1:A:460:ILE:HD11	1:A:482:ALA:N	2.31	0.45
1:A:290:PRO:CG	1:A:381:LEU:HD12	2.41	0.45
1:A:294:VAL:N	1:A:335:GLN:NE2	2.37	0.45
1:A:339:HIS:CE1	1:A:383:GLN:HB2	2.52	0.45
1:A:441:PHE:CD1	1:A:441:PHE:N	2.84	0.45
1:A:79:PRO:O	1:A:80:ILE:HG23	2.17	0.45
1:A:88:ARG:HB3	1:A:183:GLN:OE1	2.16	0.45
1:A:130:ASP:HA	1:A:480:GLN:CA	2.33	0.45
1:A:395:ASN:O	1:A:396:LYS:HB2	2.17	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:100:SER:CB	1:A:103:GLU:HG3	2.47	0.44
1:A:289:MET:O	1:A:290:PRO:C	2.55	0.44
1:A:412:GLY:O	1:A:413:SER:O	2.34	0.44
1:A:426:LEU:O	1:A:427:TRP:HB3	2.17	0.44
1:A:77:ILE:C	1:A:78:THR:O	2.56	0.44
1:A:54:TYR:CE2	1:A:85:THR:HG23	2.52	0.44
1:A:94:ALA:O	1:A:97:LEU:HD21	2.17	0.44
1:A:100:SER:C	1:A:103:GLU:HG3	2.38	0.44
1:A:43:GLN:HA	1:A:485:ILE:HA	2.00	0.44
1:A:45:LEU:CD1	1:A:482:ALA:O	2.66	0.44
1:A:245:CYS:HB3	1:A:554:LEU:CD2	2.47	0.44
1:A:260:ARG:O	1:A:261:LEU:HG	2.17	0.44
1:A:326:ILE:O	1:A:327:SER:HB2	2.17	0.44
1:A:350:ASN:HB2	1:A:351:ALA:H	1.61	0.44
1:A:101:PRO:O	1:A:105:GLN:N	2.49	0.44
1:A:452:PRO:CB	1:A:453:PRO:CD	2.94	0.44
1:A:478:LEU:H	1:A:478:LEU:HD22	1.75	0.44
1:A:104:PHE:O	1:A:105:GLN:C	2.55	0.44
1:A:128:VAL:HG13	1:A:144:SER:O	2.18	0.44
1:A:187:LEU:CD2	1:A:187:LEU:N	2.76	0.44
1:A:66:ASN:O	1:A:76:THR:HG21	2.17	0.44
1:A:191:ASP:HB2	1:A:204:LEU:HB3	1.99	0.44
1:A:126:ILE:HG21	1:A:223:GLY:O	2.17	0.44
1:A:386:GLY:C	1:A:387:LEU:HD22	2.38	0.44
1:A:423:GLU:CG	1:A:540:LYS:HZ2	2.30	0.44
1:A:95:LEU:HB3	1:A:424:SER:HB3	2.00	0.44
1:A:455:GLN:C	1:A:456:ILE:HD12	2.38	0.44
1:A:359:TYR:HD2	1:A:534:HIS:CG	2.36	0.44
1:A:320:THR:HG1	1:A:326:ILE:HA	1.83	0.43
1:A:161:TYR:CD2	1:A:429:LYS:HB2	2.53	0.43
1:A:502:ARG:CZ	1:A:506:GLN:HB2	2.48	0.43
1:A:104:PHE:O	1:A:108:ILE:HG12	2.18	0.43
1:A:176:ILE:C	1:A:177:TRP:CD1	2.86	0.43
1:A:328:LEU:O	1:A:329:ARG:CB	2.62	0.43
1:A:349:ILE:HG22	1:A:350:ASN:N	2.19	0.43
1:A:417:ARG:CZ	1:A:441:PHE:CZ	3.00	0.43
1:A:157:TYR:OH	1:A:452:PRO:N	2.50	0.43
1:A:356:GLN:O	1:A:358:THR:HG23	2.18	0.43
1:A:256:LEU:O	1:A:257:TYR:CD1	2.72	0.43
1:A:164:GLY:HA3	1:A:428:SER:CB	2.49	0.43
1:A:339:HIS:HE1	1:A:383:GLN:HG2	1.83	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:46:ILE:HA	1:A:47:PRO:HD3	1.87	0.43
1:A:34:ASN:O	1:A:35:SER:HB3	2.19	0.43
1:A:101:PRO:C	1:A:103:GLU:N	2.62	0.43
1:A:383:GLN:HE21	1:A:384:LEU:H	1.65	0.43
1:A:41:SER:C	1:A:42:ARG:HG2	2.39	0.43
1:A:450:HIS:O	1:A:451:GLN:CB	2.67	0.43
1:A:38:CYS:O	1:A:490:MET:N	2.52	0.43
1:A:407:ARG:N	1:A:408:PRO:HD3	2.31	0.43
1:A:500:THR:CG2	1:A:553:PRO:HD3	2.47	0.43
1:A:159:TYR:HA	1:A:160:PRO:HD2	1.74	0.43
1:A:164:GLY:O	1:A:425:GLN:NE2	2.48	0.43
1:A:430:ILE:HD13	1:A:439:THR:CG2	2.49	0.43
1:A:485:ILE:CG1	1:A:485:ILE:O	2.66	0.43
1:A:510:TYR:HA	1:A:511:PRO:HD2	1.70	0.43
1:A:509:VAL:O	1:A:545:TRP:HH2	2.01	0.43
1:A:388:ASN:HD22	1:A:388:ASN:N	2.16	0.43
1:A:384:LEU:O	1:A:385:GLN:OE1	2.36	0.43
1:A:40:PHE:HE2	1:A:97:LEU:HD23	1.84	0.43
1:A:478:LEU:N	1:A:478:LEU:HD22	2.31	0.43
1:A:103:GLU:O	1:A:106:HIS:N	2.51	0.43
1:A:145:ALA:C	1:A:147:GLY:N	2.67	0.43
1:A:60:ALA:HB1	1:A:202:LYS:HB3	2.01	0.43
1:A:373:ARG:NE	1:A:373:ARG:C	2.72	0.43
1:A:455:GLN:HA	1:A:456:ILE:HD12	1.99	0.43
1:A:518:LEU:HA	1:A:519:PRO:HD3	1.91	0.43
1:A:172:PRO:C	1:A:174:LEU:H	2.21	0.43
1:A:174:LEU:HA	1:A:175:PRO:HD2	1.95	0.43
1:A:189:VAL:CG1	1:A:190:GLY:N	2.81	0.43
1:A:213:VAL:CG2	1:A:213:VAL:O	2.59	0.43
1:A:221:LEU:O	1:A:222:LEU:CB	2.63	0.43
1:A:77:ILE:HG21	1:A:327:SER:OG	2.19	0.43
1:A:427:TRP:CD2	1:A:427:TRP:O	2.72	0.43
1:A:390:HIS:HB3	1:A:391:THR:H	1.52	0.43
1:A:529:ASP:HB3	1:A:533:HIS:CA	2.48	0.43
1:A:295:ASN:CG	1:A:317:SER:OG	2.58	0.42
1:A:331:GLY:O	1:A:418:ARG:NH2	2.51	0.42
1:A:333:VAL:HA	1:A:418:ARG:NH2	2.34	0.42
1:A:461:LEU:HD13	1:A:461:LEU:C	2.38	0.42
1:A:461:LEU:HA	1:A:462:PRO:HD3	1.85	0.42
1:A:78:THR:HG22	1:A:79:PRO:CD	2.43	0.42
1:A:82:GLY:O	1:A:83:TYR:CD1	2.72	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:63:SER:C	1:A:65:HIS:N	2.70	0.42
1:A:532:GLN:O	1:A:533:HIS:C	2.57	0.42
1:A:145:ALA:C	1:A:146:THR:CG2	2.88	0.42
1:A:145:ALA:O	1:A:146:THR:HG23	2.19	0.42
1:A:80:ILE:N	1:A:203:LYS:HB2	2.34	0.42
1:A:245:CYS:N	1:A:551:VAL:CG2	2.73	0.42
1:A:410:MET:H	1:A:410:MET:CE	2.29	0.42
1:A:54:TYR:CD1	1:A:54:TYR:N	2.87	0.42
1:A:80:ILE:HD12	1:A:80:ILE:O	2.19	0.42
1:A:90:LEU:HD13	1:A:486:MET:HE1	2.02	0.42
1:A:370:GLY:HA2	1:A:542:GLU:O	2.19	0.42
1:A:180:PHE:N	1:A:181:PRO:CD	2.83	0.42
1:A:106:HIS:ND1	1:A:110:ASN:ND2	2.66	0.42
1:A:87:TRP:NE1	1:A:214:LEU:HB3	2.34	0.42
1:A:293:LEU:HA	1:A:293:LEU:HD13	1.89	0.42
1:A:104:PHE:CD2	1:A:422:TYR:HB2	2.54	0.42
1:A:164:GLY:HA3	1:A:428:SER:OG	2.18	0.42
1:A:490:MET:CG	1:A:491:THR:H	2.33	0.42
1:A:511:PRO:HB3	1:A:545:TRP:CE2	2.55	0.42
1:A:57:PHE:O	1:A:58:SER:HB3	2.19	0.42
1:A:160:PRO:HD3	1:A:212:TYR:CE1	2.54	0.42
1:A:55:LYS:O	1:A:56:VAL:O	2.36	0.42
1:A:71:GLU:HB3	1:A:72:ALA:H	1.68	0.42
1:A:149:LEU:HG	1:A:149:LEU:O	2.19	0.42
1:A:235:PRO:C	1:A:236:PRO:O	2.55	0.42
1:A:256:LEU:C	1:A:257:TYR:CD1	2.93	0.42
1:A:100:SER:HA	1:A:101:PRO:HD2	1.65	0.42
1:A:25:TRP:CE2	1:A:41:SER:OG	2.69	0.42
1:A:405:ILE:H	1:A:405:ILE:HG13	1.68	0.42
1:A:426:LEU:CB	1:A:427:TRP:HD1	2.32	0.42
1:A:91:ASP:OD2	1:A:92:PHE:N	2.52	0.42
1:A:130:ASP:CB	1:A:480:GLN:HB3	2.48	0.42
1:A:276:LEU:HB3	1:A:279:GLU:HG3	2.00	0.42
1:A:314:THR:CG2	1:A:315:GLY:N	2.82	0.42
1:A:41:SER:O	1:A:42:ARG:CD	2.64	0.42
1:A:45:LEU:HD12	1:A:482:ALA:O	2.19	0.42
1:A:46:ILE:HG23	1:A:460:ILE:CD1	2.49	0.42
1:A:88:ARG:HD2	1:A:181:PRO:O	2.19	0.42
1:A:277:THR:O	1:A:278:HIS:HB3	2.20	0.42
1:A:87:TRP:HA	1:A:459:LYS:HB3	2.00	0.42
1:A:552:HIS:CE1	1:A:554:LEU:N	2.87	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:32:SER:OG	1:A:35:SER:O	2.32	0.42
1:A:124:SER:HB2	1:A:485:ILE:CG2	2.37	0.42
1:A:179:TYR:CD2	1:A:181:PRO:HD3	2.54	0.42
1:A:89:TYR:CE1	1:A:182:PRO:HB2	2.55	0.42
1:A:262:GLY:O	1:A:264:PRO:HD3	2.20	0.42
1:A:388:ASN:C	1:A:390:HIS:N	2.73	0.42
1:A:267:LEU:HD12	1:A:267:LEU:O	2.19	0.42
1:A:207:GLU:C	1:A:209:SER:N	2.69	0.41
1:A:455:GLN:HE21	1:A:455:GLN:HB2	1.61	0.41
1:A:283:ILE:O	1:A:284:GLN:C	2.59	0.41
1:A:217:SER:O	1:A:218:SER:O	2.38	0.41
1:A:150:CYS:HB3	1:A:219:PHE:CE1	2.55	0.41
1:A:234:PHE:O	1:A:235:PRO:C	2.59	0.41
1:A:157:TYR:CE2	1:A:451:GLN:CB	3.04	0.41
1:A:455:GLN:NE2	1:A:457:PHE:HZ	2.18	0.41
1:A:85:THR:HG22	1:A:86:PRO:CD	2.49	0.41
1:A:246:SER:H	1:A:551:VAL:HG22	1.85	0.41
1:A:295:ASN:HA	1:A:405:ILE:HG23	2.02	0.41
1:A:52:HIS:N	1:A:52:HIS:ND1	2.68	0.41
1:A:179:TYR:C	1:A:181:PRO:CD	2.83	0.41
1:A:289:MET:SD	1:A:410:MET:HG3	2.60	0.41
1:A:101:PRO:HD3	1:A:422:TYR:CE1	2.55	0.41
1:A:427:TRP:CZ3	1:A:452:PRO:HB2	2.55	0.41
1:A:245:CYS:HB3	1:A:554:LEU:HD23	2.00	0.41
1:A:56:VAL:CG2	1:A:57:PHE:N	2.62	0.41
1:A:277:THR:O	1:A:278:HIS:CB	2.67	0.41
1:A:100:SER:CA	1:A:103:GLU:HG3	2.50	0.41
1:A:316:LEU:C	1:A:318:THR:HG22	2.41	0.41
1:A:502:ARG:CZ	1:A:502:ARG:HB3	2.51	0.41
1:A:392:TYR:O	1:A:393:PHE:CB	2.62	0.41
1:A:392:TYR:N	1:A:394:PRO:HD3	2.36	0.41
1:A:204:LEU:HG	1:A:205:ALA:N	2.35	0.41
1:A:338:HIS:NE2	1:A:345:TYR:HD2	2.17	0.41
1:A:426:LEU:CB	1:A:427:TRP:CD1	3.04	0.41
1:A:56:VAL:O	1:A:57:PHE:CD1	2.74	0.41
1:A:274:ARG:CG	1:A:275:SER:N	2.81	0.41
1:A:342:THR:C	1:A:344:LYS:H	2.23	0.41
1:A:433:LEU:C	1:A:434:ASP:O	2.59	0.41
1:A:128:VAL:H	1:A:482:ALA:HB1	1.86	0.41
1:A:333:VAL:HG12	1:A:418:ARG:H	1.85	0.41
1:A:279:GLU:O	1:A:280:ASP:OD2	2.39	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:513:HIS:HB3	1:A:519:PRO:CD	2.51	0.41
1:A:119:LEU:CD2	1:A:120:THR:N	2.81	0.41
1:A:248:HIS:O	1:A:249:PHE:C	2.59	0.41
1:A:320:THR:HG23	1:A:325:ARG:O	2.19	0.41
1:A:423:GLU:CB	1:A:540:LYS:NZ	2.82	0.41
1:A:106:HIS:CE1	1:A:110:ASN:ND2	2.89	0.41
1:A:288:PHE:O	1:A:289:MET:CB	2.69	0.41
1:A:297:VAL:O	1:A:348:GLY:HA2	2.21	0.41
1:A:442:ALA:O	1:A:445:GLY:N	2.50	0.41
1:A:129:LYS:O	1:A:481:TYR:CD2	2.73	0.41
1:A:83:TYR:O	1:A:185:ALA:CA	2.63	0.41
1:A:426:LEU:HD12	1:A:426:LEU:O	2.21	0.41
1:A:61:ALA:HB2	1:A:201:SER:O	2.21	0.41
1:A:149:LEU:HD12	1:A:150:CYS:O	2.21	0.40
1:A:248:HIS:HA	1:A:380:GLN:NE2	2.24	0.40
1:A:249:PHE:O	1:A:249:PHE:HD2	2.03	0.40
1:A:299:THR:HA	1:A:349:ILE:HG12	2.03	0.40
1:A:461:LEU:HD22	1:A:462:PRO:CD	2.46	0.40
1:A:481:TYR:H	1:A:481:TYR:HD2	1.69	0.40
1:A:48:TYR:O	1:A:49:ASP:O	2.38	0.40
1:A:279:GLU:O	1:A:280:ASP:CG	2.60	0.40
1:A:35:SER:HA	1:A:494:LEU:H	1.86	0.40
1:A:101:PRO:O	1:A:105:GLN:HB3	2.20	0.40
1:A:440:GLN:NE2	1:A:440:GLN:CA	2.81	0.40
1:A:229:THR:CG2	1:A:230:MET:N	2.60	0.40
1:A:127:ALA:O	1:A:128:VAL:C	2.59	0.40
1:A:391:THR:HG23	1:A:394:PRO:HD3	2.00	0.40
1:A:519:PRO:O	1:A:520:TYR:HB2	2.21	0.40
1:A:284:GLN:O	1:A:285:PRO:C	2.59	0.40
1:A:232:TYR:CD2	1:A:232:TYR:C	2.94	0.40
1:A:118:ALA:HB2	1:A:233:LYS:HG2	2.02	0.40
1:A:425:GLN:HG2	1:A:444:LEU:CD2	2.33	0.40
1:A:95:LEU:HD11	1:A:104:PHE:CE1	2.57	0.40
1:A:273:PHE:CZ	1:A:276:LEU:HG	2.56	0.40
1:A:162:VAL:CG1	1:A:163:LEU:H	2.12	0.40
1:A:88:ARG:NH1	1:A:181:PRO:HD2	2.36	0.40
1:A:96:ASN:OD1	1:A:422:TYR:CE2	2.75	0.40
1:A:430:ILE:HG23	1:A:439:THR:HG21	2.04	0.40
1:A:46:ILE:HG22	1:A:482:ALA:C	2.40	0.40
1:A:554:LEU:CD1	1:A:554:LEU:OXT	2.67	0.40
1:A:324:THR:HG22	1:A:324:THR:O	2.21	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	519/554 (94%)	261 (50%)	118 (23%)	140 (27%)	<b>0</b> <b>0</b>

All (140) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	33	ALA
1	A	47	PRO
1	A	52	HIS
1	A	55	LYS
1	A	56	VAL
1	A	93	ASN
1	A	96	ASN
1	A	97	LEU
1	A	101	PRO
1	A	113	SER
1	A	134	LYS
1	A	146	THR
1	A	162	VAL
1	A	163	LEU
1	A	166	GLY
1	A	173	GLU
1	A	178	VAL
1	A	181	PRO
1	A	182	PRO
1	A	198	SER
1	A	217	SER
1	A	218	SER
1	A	222	LEU
1	A	235	PRO
1	A	253	TYR

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	274	ARG
1	A	283	ILE
1	A	292	PRO
1	A	326	ILE
1	A	327	SER
1	A	328	LEU
1	A	329	ARG
1	A	339	HIS
1	A	348	GLY
1	A	349	ILE
1	A	351	ALA
1	A	367	TYR
1	A	368	GLN
1	A	390	HIS
1	A	393	PHE
1	A	401	TYR
1	A	407	ARG
1	A	413	SER
1	A	414	VAL
1	A	415	TRP
1	A	419	ALA
1	A	434	ASP
1	A	435	ASP
1	A	437	PHE
1	A	453	PRO
1	A	505	PRO
1	A	507	PRO
1	A	510	TYR
1	A	515	ALA
1	A	528	THR
1	A	533	HIS
1	A	544	LEU
1	A	548	LYS
1	A	553	PRO
1	A	21	VAL
1	A	48	TYR
1	A	58	SER
1	A	76	THR
1	A	95	LEU
1	A	125	GLU
1	A	161	TYR
1	A	208	GLU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	237	VAL
1	A	246	SER
1	A	259	SER
1	A	295	ASN
1	A	315	GLY
1	A	323	ASN
1	A	336	PRO
1	A	337	TYR
1	A	346	VAL
1	A	350	ASN
1	A	352	ILE
1	A	355	GLY
1	A	372	GLY
1	A	373	ARG
1	A	391	THR
1	A	452	PRO
1	A	454	PRO
1	A	526	THR
1	A	49	ASP
1	A	70	LYS
1	A	74	VAL
1	A	98	PHE
1	A	103	GLU
1	A	104	PHE
1	A	145	ALA
1	A	155	HIS
1	A	157	TYR
1	A	160	PRO
1	A	214	LEU
1	A	226	GLY
1	A	254	ASN
1	A	271	PRO
1	A	280	ASP
1	A	281	HIS
1	A	317	SER
1	A	320	THR
1	A	321	SER
1	A	338	HIS
1	A	357	THR
1	A	464	SER
1	A	532	GLN
1	A	536	HIS

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	542	GLU
1	A	61	ALA
1	A	159	TYR
1	A	247	GLN
1	A	290	PRO
1	A	298	SER
1	A	342	THR
1	A	427	TRP
1	A	462	PRO
1	A	498	LYS
1	A	527	ALA
1	A	538	TYR
1	A	57	PHE
1	A	289	MET
1	A	424	SER
1	A	506	GLN
1	A	546	THR
1	A	135	THR
1	A	250	TYR
1	A	285	PRO
1	A	478	LEU
1	A	451	GLN
1	A	225	GLY
1	A	236	PRO
1	A	411	VAL
1	A	496	PRO
1	A	540	LYS
1	A	394	PRO
1	A	475	ILE
1	A	521	VAL
1	A	172	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.

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
-----	-------	----------	-----------	----------	-------------

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	448/467 (96%)	358 (80%)	90 (20%)	<b>1</b> <b>9</b>

All (90) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	26	SER
1	A	30	THR
1	A	34	ASN
1	A	45	LEU
1	A	52	HIS
1	A	54	TYR
1	A	57	PHE
1	A	92	PHE
1	A	97	LEU
1	A	99	PHE
1	A	101	PRO
1	A	102	LEU
1	A	107	LEU
1	A	108	ILE
1	A	111	TYR
1	A	119	LEU
1	A	122	THR
1	A	125	GLU
1	A	126	ILE
1	A	129	LYS
1	A	146	THR
1	A	151	MET
1	A	168	ASP
1	A	170	LEU
1	A	175	PRO
1	A	180	PHE
1	A	181	PRO
1	A	182	PRO
1	A	187	LEU
1	A	214	LEU
1	A	222	LEU
1	A	230	MET
1	A	231	SER
1	A	232	TYR
1	A	249	PHE

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	254	ASN
1	A	256	LEU
1	A	265	ASP
1	A	267	LEU
1	A	286	GLN
1	A	287	ASN
1	A	292	PRO
1	A	295	ASN
1	A	299	THR
1	A	318	THR
1	A	326	ILE
1	A	328	LEU
1	A	335	GLN
1	A	336	PRO
1	A	337	TYR
1	A	356	GLN
1	A	367	TYR
1	A	373	ARG
1	A	374	PHE
1	A	384	LEU
1	A	390	HIS
1	A	394	PRO
1	A	410	MET
1	A	421	HIS
1	A	423	GLU
1	A	434	ASP
1	A	435	ASP
1	A	439	THR
1	A	440	GLN
1	A	444	LEU
1	A	447	TRP
1	A	449	LEU
1	A	450	HIS
1	A	452	PRO
1	A	456	ILE
1	A	457	PHE
1	A	458	LEU
1	A	466	PRO
1	A	473	MET
1	A	478	LEU
1	A	481	TYR
1	A	485	ILE

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	503	TRP
1	A	504	ASN
1	A	505	PRO
1	A	507	PRO
1	A	509	VAL
1	A	510	TYR
1	A	512	PRO
1	A	513	HIS
1	A	529	ASP
1	A	535	ARG
1	A	543	GLU
1	A	545	TRP
1	A	553	PRO

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

Mol	Chain	Res	Type
1	A	65	HIS
1	A	96	ASN
1	A	278	HIS
1	A	281	HIS
1	A	286	GLN
1	A	295	ASN
1	A	335	GLN
1	A	338	HIS
1	A	339	HIS
1	A	376	ASN
1	A	383	GLN
1	A	388	ASN
1	A	440	GLN
1	A	504	ASN
1	A	506	GLN
1	A	536	HIS

### 5.3.3 RNA ⓘ

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, 95<sup>th</sup> percentile and maximum values of the occupancy-weighted average B-factor per residue. The column labelled ‘Q< 0.9’ lists the number of (and percentage) of residues with an average occupancy less than 0.9.

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å <sup>2</sup> )	Q<0.9
1	A	523/554 (94%)	1.14	84 (16%) <b>3</b> <b>3</b>	32, 78, 175, 211	0

All (84) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	314	THR	9.8
1	A	68	SER	8.3
1	A	532	GLN	7.5
1	A	70	LYS	7.5
1	A	69	GLY	6.7
1	A	71	GLU	6.5
1	A	396	LYS	5.4
1	A	397	GLY	5.2
1	A	317	SER	4.7
1	A	22	LYS	4.5
1	A	196	GLY	4.4
1	A	66	ASN	4.4
1	A	198	SER	4.3
1	A	197	ILE	4.3
1	A	73	LYS	4.1
1	A	398	THR	4.1
1	A	365	LYS	4.1
1	A	531	LYS	4.0
1	A	300	LYS	4.0
1	A	62	SER	3.6
1	A	20	PRO	3.6
1	A	19	ASN	3.5
1	A	321	SER	3.5
1	A	323	ASN	3.5
1	A	527	ALA	3.4
1	A	278	HIS	3.3
1	A	72	ALA	3.3

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	393	PHE	3.3
1	A	354	HIS	3.3
1	A	268	GLY	3.3
1	A	261	LEU	3.3
1	A	366	GLU	3.3
1	A	135	THR	3.2
1	A	361	ASN	3.2
1	A	271	PRO	3.1
1	A	67	ALA	3.1
1	A	395	ASN	3.1
1	A	516	GLY	3.1
1	A	368	GLN	3.0
1	A	399	GLN	3.0
1	A	266	THR	3.0
1	A	392	TYR	3.0
1	A	364	ASP	3.0
1	A	199	GLY	3.0
1	A	299	THR	2.9
1	A	362	ALA	2.9
1	A	389	MET	2.9
1	A	468	GLY	2.9
1	A	473	MET	2.9
1	A	267	LEU	2.8
1	A	21	VAL	2.8
1	A	263	VAL	2.8
1	A	322	GLN	2.7
1	A	530	ALA	2.7
1	A	401	TYR	2.7
1	A	471	LYS	2.7
1	A	533	HIS	2.7
1	A	400	GLN	2.6
1	A	272	LYS	2.6
1	A	74	VAL	2.6
1	A	391	THR	2.5
1	A	470	ILE	2.5
1	A	515	ALA	2.4
1	A	260	ARG	2.3
1	A	540	LYS	2.3
1	A	155	HIS	2.3
1	A	367	TYR	2.3
1	A	192	VAL	2.3
1	A	466	PRO	2.2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	64	CYS	2.2
1	A	273	PHE	2.2
1	A	475	ILE	2.1
1	A	277	THR	2.1
1	A	316	LEU	2.1
1	A	315	GLY	2.1
1	A	59	PRO	2.1
1	A	336	PRO	2.1
1	A	255	PRO	2.1
1	A	236	PRO	2.1
1	A	390	HIS	2.0
1	A	360	GLY	2.0
1	A	274	ARG	2.0
1	A	537	GLY	2.0
1	A	374	PHE	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.