



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Feb 1, 2016 – 06:49 AM GMT

PDB ID : 2YHX
Title : SEQUENCING A PROTEIN BY X-RAY CRYSTALLOGRAPHY. II. RE-FINEMENT OF YEAST HEXOKINASE B CO-ORDINATES AND SEQUENCE AT 2.1 ANGSTROMS RESOLUTION
Authors : Steitz, T.A.; Anderson, C.M.; Stenkamp, R.E.
Deposited on : 1978-03-20
Resolution : 2.10 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 : 1.7 (RC4), CSD as536be (2015)
Xtriage (Phenix) : **NOT EXECUTED**
EDS : **NOT EXECUTED**
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : trunk26865

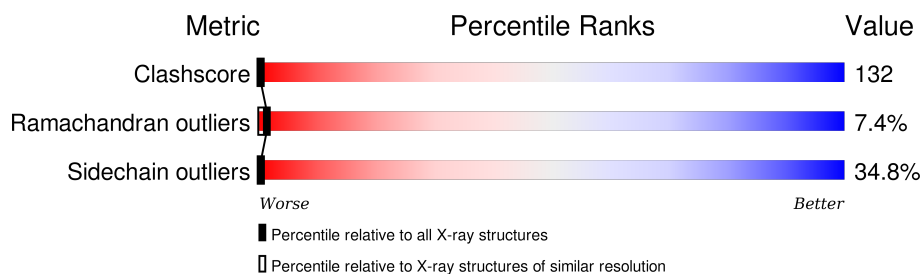
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 2.10 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	4460 (2.10-2.10)
Ramachandran outliers	100387	4413 (2.10-2.10)
Sidechain outliers	100360	4414 (2.10-2.10)

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.

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	457	

2 Entry composition [i](#)

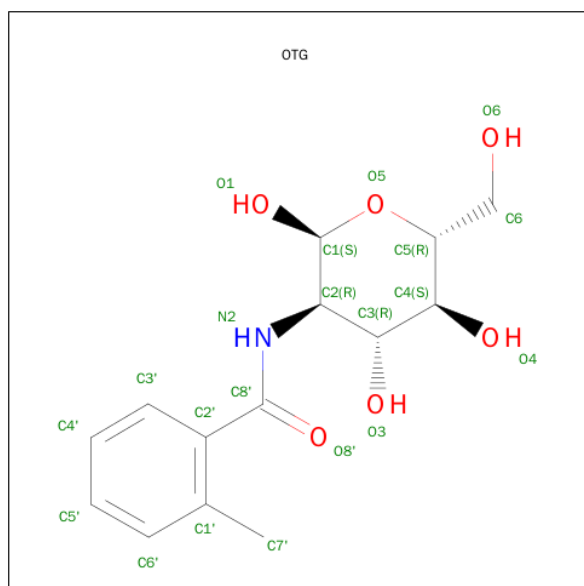
There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3311 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

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 HEXOKINASE B.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	457	3290	2126	545	606	13	0	0	0

- Molecule 2 is ORTHO-TOLUOYLGLUCOSAMINE (three-letter code: OTG) (formula: $C_{14}H_{19}NO_6$).



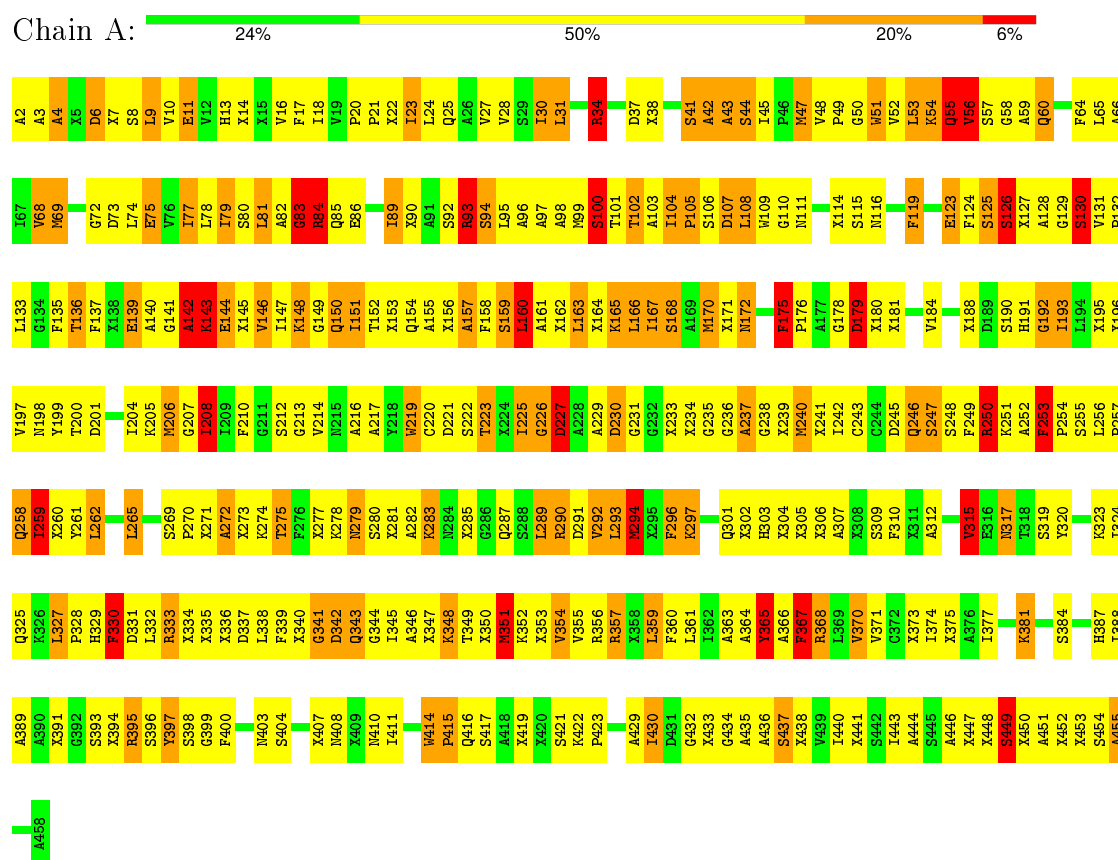
Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
			Total	C	N	O		
2	A	1	21	14	1	6	0	0

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.

Note EDS was not executed.

• Molecule 1: HEXOKINASE B



4 Data and refinement statistics

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

Property	Value	Source
Space group	P 21 21 21	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	166.50Å 59.20Å 58.50Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	(Not available) – 2.10	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	(Not available) ((Not available)-2.10)	Depositor
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
Refinement program	PROLSQ	Depositor
R, R_{free}	(Not available) , (Not available)	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	3311	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	0.0	wwPDB-VP

5 Model quality ⓘ

5.1 Standard geometry ⓘ

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	1.58	36/2746 (1.3%)	1.58	39/3622 (1.1%)

All (36) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	365	TYR	CG-CD2	13.11	1.56	1.39
1	A	397	TYR	CG-CD2	12.95	1.55	1.39
1	A	262	LEU	CB-CG	12.00	1.87	1.52
1	A	75	GLU	CG-CD	11.90	1.69	1.51
1	A	262	LEU	CG-CD1	-11.03	1.11	1.51
1	A	219	TRP	CG-CD2	9.40	1.59	1.43
1	A	84	ARG	N-CA	9.17	1.64	1.46
1	A	83	GLY	CA-C	8.98	1.66	1.51
1	A	137	PHE	CG-CD2	-8.78	1.25	1.38
1	A	367	PHE	CG-CD2	8.47	1.51	1.38
1	A	160	LEU	N-CA	-7.64	1.31	1.46
1	A	397	TYR	CB-CG	7.44	1.62	1.51
1	A	226	GLY	N-CA	7.32	1.57	1.46
1	A	296	PHE	CG-CD2	-7.21	1.27	1.38
1	A	51	TRP	CG-CD2	-6.89	1.31	1.43
1	A	253	PHE	CG-CD2	-6.76	1.28	1.38
1	A	238	GLY	N-CA	-6.32	1.36	1.46
1	A	175	PHE	CG-CD2	-6.25	1.29	1.38
1	A	227	ASP	N-CA	-6.19	1.33	1.46
1	A	414	TRP	NE1-CE2	-6.18	1.29	1.37
1	A	119	PHE	CG-CD2	6.16	1.48	1.38
1	A	4	ALA	N-CA	6.14	1.58	1.46
1	A	231	GLY	N-CA	6.12	1.55	1.46
1	A	41	SER	CA-CB	-5.97	1.44	1.52
1	A	128	ALA	N-CA	5.71	1.57	1.46
1	A	105	PRO	CG-CD	-5.66	1.31	1.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	399	GLY	CA-C	5.53	1.60	1.51
1	A	365	TYR	CB-CG	5.49	1.59	1.51
1	A	219	TRP	NE1-CE2	-5.36	1.30	1.37
1	A	192	GLY	N-CA	-5.32	1.38	1.46
1	A	44	SER	N-CA	5.29	1.56	1.46
1	A	307	ALA	N-CA	5.15	1.56	1.46
1	A	259	ILE	CB-CG1	-5.06	1.39	1.54
1	A	75	GLU	CD-OE2	5.05	1.31	1.25
1	A	103	ALA	N-CA	-5.03	1.36	1.46
1	A	142	ALA	N-CA	-5.02	1.36	1.46

All (39) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	262	LEU	CB-CG-CD2	12.42	132.12	111.00
1	A	219	TRP	NE1-CE2-CZ2	-12.34	116.82	130.40
1	A	219	TRP	CH2-CZ2-CE2	-10.81	106.59	117.40
1	A	262	LEU	CD1-CG-CD2	-10.65	78.55	110.50
1	A	262	LEU	CB-CG-CD1	9.75	127.58	111.00
1	A	179	ASP	CB-CA-C	-9.65	91.09	110.40
1	A	330	PHE	CB-CG-CD2	-8.82	114.62	120.80
1	A	34	ARG	NE-CZ-NH2	8.71	124.66	120.30
1	A	84	ARG	NE-CZ-NH2	8.68	124.64	120.30
1	A	219	TRP	CD2-CE2-CZ2	8.56	132.57	122.30
1	A	75	GLU	OE1-CD-OE2	-8.41	113.20	123.30
1	A	208	ILE	CB-CA-C	-8.30	95.01	111.60
1	A	395	ARG	NE-CZ-NH2	7.21	123.90	120.30
1	A	259	ILE	CA-CB-CG1	7.09	124.47	111.00
1	A	368	ARG	NE-CZ-NH2	6.95	123.78	120.30
1	A	227	ASP	N-CA-CB	-6.86	98.25	110.60
1	A	357	ARG	NE-CZ-NH2	6.55	123.58	120.30
1	A	93	ARG	NE-CZ-NH2	6.25	123.42	120.30
1	A	330	PHE	N-CA-CB	-6.22	99.41	110.60
1	A	351	MET	CG-SD-CE	6.05	109.88	100.20
1	A	34	ARG	NH1-CZ-NH2	-5.99	112.82	119.40
1	A	175	PHE	CB-CG-CD2	-5.98	116.61	120.80
1	A	315	VAL	CB-CA-C	-5.95	100.09	111.40
1	A	240	MET	CG-SD-CE	5.83	109.53	100.20
1	A	170	MET	CG-SD-CE	5.81	109.49	100.20
1	A	333	ARG	N-CA-CB	-5.79	100.19	110.60
1	A	69	MET	CG-SD-CE	5.78	109.45	100.20
1	A	341	GLY	O-C-N	5.68	131.78	122.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	47	MET	CG-SD-CE	5.63	109.21	100.20
1	A	41	SER	N-CA-CB	5.57	118.86	110.50
1	A	206	MET	CG-SD-CE	5.49	108.98	100.20
1	A	51	TRP	CG-CD2-CE3	-5.47	128.98	133.90
1	A	333	ARG	NE-CZ-NH2	5.43	123.02	120.30
1	A	84	ARG	CB-CA-C	-5.29	99.81	110.40
1	A	143	LYS	N-CA-CB	5.28	120.10	110.60
1	A	250	ARG	CD-NE-CZ	5.27	130.98	123.60
1	A	395	ARG	O-C-N	5.22	131.05	122.70
1	A	294	MET	CG-SD-CE	5.07	108.32	100.20
1	A	395	ARG	CA-C-N	-5.03	106.13	117.20

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

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	3290	0	3142	857	5
2	A	21	0	19	0	0
All	All	3311	0	3161	857	5

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 132.

All (857) 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:54:LYS:HE3	1:A:443:ILE:CG2	1.32	1.52
1:A:9:LEU:HD13	1:A:296:PHE:CZ	1.42	1.51
1:A:262:LEU:CB	1:A:262:LEU:CG	1.87	1.51
1:A:324:ILE:CG2	1:A:359:LEU:HD13	1.41	1.50
1:A:13:HIS:CE1	1:A:292:VAL:CG1	1.92	1.49
1:A:324:ILE:CG2	1:A:359:LEU:CD1	1.87	1.47
1:A:143:LYS:HG2	1:A:148:LYS:NZ	1.21	1.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:303:HIS:H	1:A:351:MET:CE	1.30	1.44
1:A:184:VAL:CG2	1:A:441:UNK:HG3	1.48	1.43
1:A:143:LYS:CG	1:A:148:LYS:HZ1	1.31	1.43
1:A:367:PHE:CE2	1:A:403:ASN:ND2	1.81	1.41
1:A:271:UNK:CG	1:A:272:ALA:H	1.24	1.41
1:A:324:ILE:HG22	1:A:359:LEU:CD1	1.44	1.37
1:A:143:LYS:CG	1:A:148:LYS:NZ	1.87	1.37
1:A:367:PHE:CD2	1:A:403:ASN:ND2	1.86	1.35
1:A:327:LEU:CD1	1:A:335:UNK:HG2	1.54	1.35
1:A:31:LEU:HD21	1:A:373:UNK:CG	1.58	1.33
1:A:148:LYS:HD3	1:A:148:LYS:C	1.31	1.31
1:A:271:UNK:CG	1:A:272:ALA:N	1.82	1.30
1:A:34:ARG:O	1:A:34:ARG:NH1	1.62	1.30
1:A:37:ASP:O	1:A:43:ALA:HB2	1.20	1.29
1:A:64:PHE:HB2	1:A:438:UNK:CG	1.63	1.29
1:A:140:ALA:HB1	1:A:152:THR:CB	1.63	1.28
1:A:142:ALA:HB1	1:A:150:GLN:CG	1.63	1.27
1:A:172:ASN:O	1:A:176:PRO:HD2	1.28	1.27
1:A:367:PHE:HD2	1:A:403:ASN:CB	1.48	1.27
1:A:140:ALA:CB	1:A:152:THR:HB	1.68	1.24
1:A:84:ARG:CD	1:A:199:TYR:O	1.85	1.24
1:A:13:HIS:CE1	1:A:292:VAL:HG12	1.65	1.23
1:A:327:LEU:CD2	1:A:334:UNK:HB2	1.68	1.22
1:A:329:HIS:O	1:A:330:PHE:CB	1.82	1.22
1:A:356:ARG:HA	1:A:359:LEU:CD1	1.70	1.22
1:A:375:UNK:CD	1:A:411:ILE:HD13	1.70	1.21
1:A:247:SER:CB	1:A:277:UNK:HG2	1.70	1.21
1:A:148:LYS:HD3	1:A:149:GLY:N	1.53	1.21
1:A:191:HIS:NE2	1:A:243:CYS:HB2	1.53	1.21
1:A:192:GLY:O	1:A:436:ALA:HB1	1.35	1.21
1:A:38:UNK:HA	1:A:43:ALA:CB	1.70	1.20
1:A:13:HIS:CE1	1:A:292:VAL:HG11	1.73	1.20
1:A:144:GLU:OE2	1:A:148:LYS:HB2	1.41	1.20
1:A:145:UNK:CD	1:A:147:ILE:CG2	2.19	1.19
1:A:34:ARG:NH2	1:A:44:SER:N	1.90	1.19
1:A:324:ILE:CG2	1:A:359:LEU:HD11	1.66	1.18
1:A:149:GLY:O	1:A:166:LEU:HD23	1.41	1.18
1:A:34:ARG:HH21	1:A:44:SER:N	1.41	1.18
1:A:31:LEU:HD11	1:A:373:UNK:HG3	1.26	1.17
1:A:191:HIS:CG	1:A:241:UNK:CE	2.26	1.17
1:A:262:LEU:HD21	1:A:365:TYR:OH	1.41	1.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:192:GLY:O	1:A:436:ALA:CB	1.91	1.17
1:A:37:ASP:C	1:A:43:ALA:HB2	1.65	1.17
1:A:89:ILE:HD12	1:A:90:UNK:N	1.59	1.16
1:A:54:LYS:CE	1:A:443:ILE:CG2	2.24	1.16
1:A:143:LYS:HA	1:A:148:LYS:HG2	1.25	1.16
1:A:247:SER:HB3	1:A:277:UNK:CG	1.74	1.16
1:A:294:MET:CE	1:A:294:MET:HA	1.70	1.16
1:A:54:LYS:CE	1:A:443:ILE:HG23	1.77	1.15
1:A:324:ILE:HG21	1:A:359:LEU:CD1	1.63	1.15
1:A:251:LYS:HE3	1:A:274:LYS:H	1.12	1.15
1:A:339:PHE:O	1:A:340:UNK:O	1.64	1.14
1:A:327:LEU:HD12	1:A:335:UNK:CG	1.76	1.14
1:A:79:ILE:HG23	1:A:438:UNK:HG1	1.16	1.13
1:A:452:UNK:O	1:A:453:UNK:HB1	1.46	1.13
1:A:89:ILE:HD12	1:A:89:ILE:C	1.69	1.13
1:A:38:UNK:HB1	1:A:45:ILE:O	1.47	1.12
1:A:271:UNK:HG2	1:A:272:ALA:H	1.06	1.12
1:A:303:HIS:N	1:A:351:MET:CE	2.11	1.11
1:A:225:ILE:CG2	1:A:226:GLY:H	1.63	1.11
1:A:99:MET:O	1:A:100:SER:HB2	1.50	1.11
1:A:9:LEU:CD1	1:A:296:PHE:CZ	2.33	1.10
1:A:64:PHE:HB2	1:A:438:UNK:HG3	1.34	1.10
1:A:148:LYS:CD	1:A:148:LYS:C	2.11	1.10
1:A:58:GLY:O	1:A:84:ARG:N	1.84	1.09
1:A:251:LYS:HE3	1:A:274:LYS:N	1.66	1.09
1:A:294:MET:HE3	1:A:294:MET:HA	1.13	1.09
1:A:197:VAL:HG11	1:A:389:ALA:CB	1.83	1.09
1:A:303:HIS:H	1:A:351:MET:HE3	0.96	1.09
1:A:184:VAL:HG22	1:A:441:UNK:HG3	1.15	1.09
1:A:251:LYS:HA	1:A:275:THR:HG21	1.33	1.08
1:A:31:LEU:CD2	1:A:373:UNK:HG2	1.81	1.08
1:A:234:UNK:C	1:A:236:GLY:H	1.65	1.08
1:A:225:ILE:HG22	1:A:226:GLY:H	1.10	1.08
1:A:140:ALA:CB	1:A:152:THR:H	1.66	1.08
1:A:327:LEU:HD12	1:A:335:UNK:HG2	1.10	1.07
1:A:367:PHE:CD2	1:A:403:ASN:CB	2.38	1.07
1:A:324:ILE:HG21	1:A:359:LEU:HD11	1.20	1.07
1:A:191:HIS:CD2	1:A:241:UNK:CE	2.37	1.07
1:A:197:VAL:HG22	1:A:430:ILE:H	1.02	1.06
1:A:184:VAL:HG22	1:A:441:UNK:CG	1.83	1.06
1:A:34:ARG:NH2	1:A:44:SER:H	1.48	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:79:ILE:HD11	1:A:86:GLU:HB2	1.37	1.06
1:A:234:UNK:O	1:A:236:GLY:N	1.87	1.06
1:A:37:ASP:C	1:A:43:ALA:CB	2.24	1.06
1:A:325:GLN:HE22	1:A:363:ALA:CB	1.68	1.05
1:A:165:LYS:HB2	1:A:170:MET:HE1	1.28	1.05
1:A:269:SER:O	1:A:271:UNK:N	1.90	1.05
1:A:38:UNK:HG1	1:A:45:ILE:CB	1.85	1.05
1:A:356:ARG:HA	1:A:359:LEU:HD11	1.39	1.04
1:A:84:ARG:HD3	1:A:199:TYR:O	1.56	1.04
1:A:184:VAL:CG2	1:A:441:UNK:CG	2.33	1.04
1:A:367:PHE:HD2	1:A:403:ASN:CG	1.61	1.04
1:A:142:ALA:CB	1:A:150:GLN:HG3	1.86	1.04
1:A:84:ARG:HH11	1:A:84:ARG:CG	1.67	1.04
1:A:38:UNK:HB2	1:A:47:MET:HG3	1.34	1.04
1:A:262:LEU:CB	1:A:262:LEU:HG	1.82	1.03
1:A:143:LYS:CB	1:A:148:LYS:NZ	2.21	1.03
1:A:145:UNK:O	1:A:148:LYS:HG3	1.56	1.03
1:A:271:UNK:HG3	1:A:272:ALA:N	1.31	1.03
1:A:271:UNK:HG3	1:A:272:ALA:CB	1.89	1.03
1:A:191:HIS:HB3	1:A:241:UNK:CE	1.89	1.02
1:A:191:HIS:CB	1:A:241:UNK:CE	2.37	1.02
1:A:9:LEU:HD13	1:A:296:PHE:CE1	1.94	1.02
1:A:366:ALA:O	1:A:370:VAL:HB	1.60	1.02
1:A:37:ASP:O	1:A:43:ALA:CB	2.06	1.02
1:A:145:UNK:CD	1:A:147:ILE:HG23	1.86	1.02
1:A:142:ALA:CB	1:A:150:GLN:CG	2.36	1.02
1:A:144:GLU:HG3	1:A:145:UNK:HG3	1.37	1.01
1:A:247:SER:HB3	1:A:277:UNK:HG2	1.03	1.01
1:A:38:UNK:CA	1:A:43:ALA:HB3	1.91	1.01
1:A:64:PHE:CB	1:A:438:UNK:CG	2.38	1.01
1:A:303:HIS:N	1:A:351:MET:HE3	1.74	1.01
1:A:51:TRP:HA	1:A:240:MET:HE1	1.43	1.00
1:A:164:UNK:O	1:A:164:UNK:HG3	1.61	1.00
1:A:34:ARG:HH12	1:A:38:UNK:CG	1.73	1.00
1:A:271:UNK:HG3	1:A:272:ALA:CA	1.91	1.00
1:A:197:VAL:CG2	1:A:430:ILE:H	1.74	1.00
1:A:38:UNK:CG	1:A:45:ILE:HB	1.90	1.00
1:A:370:VAL:HG11	1:A:400:PHE:CZ	1.95	1.00
1:A:31:LEU:CD1	1:A:373:UNK:HG3	1.91	0.99
1:A:14:UNK:O	1:A:18:ILE:HG12	1.62	0.99
1:A:327:LEU:HD21	1:A:334:UNK:HB2	1.43	0.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:38:UNK:CA	1:A:43:ALA:CB	2.39	0.99
1:A:251:LYS:CE	1:A:274:LYS:H	1.76	0.99
1:A:151:ILE:HG22	1:A:164:UNK:HA	1.39	0.99
1:A:51:TRP:H	1:A:240:MET:HE2	1.27	0.99
1:A:165:LYS:CB	1:A:170:MET:HE1	1.92	0.98
1:A:143:LYS:HB3	1:A:148:LYS:HZ2	1.24	0.98
1:A:367:PHE:HD2	1:A:403:ASN:HB2	1.25	0.98
1:A:303:HIS:H	1:A:351:MET:HE2	1.26	0.98
1:A:143:LYS:CG	1:A:148:LYS:CE	2.41	0.98
1:A:38:UNK:HA	1:A:43:ALA:HB3	0.99	0.98
1:A:223:THR:HG21	1:A:237:ALA:HB1	1.45	0.97
1:A:367:PHE:HE2	1:A:403:ASN:ND2	1.48	0.97
1:A:31:LEU:HD21	1:A:373:UNK:HG2	0.97	0.97
1:A:148:LYS:CD	1:A:149:GLY:N	2.24	0.97
1:A:197:VAL:CG1	1:A:204:ILE:HD12	1.95	0.97
1:A:225:ILE:HG22	1:A:226:GLY:N	1.73	0.97
1:A:143:LYS:CB	1:A:148:LYS:HZ2	1.75	0.96
1:A:363:ALA:O	1:A:367:PHE:CD1	2.17	0.96
1:A:34:ARG:O	1:A:38:UNK:HG2	1.65	0.96
1:A:317:ASN:ND2	1:A:319:SER:H	1.64	0.96
1:A:31:LEU:CD2	1:A:373:UNK:CG	2.42	0.96
1:A:188:UNK:CD	1:A:190:SER:HB2	1.96	0.95
1:A:57:SER:H	1:A:60:GLN:HE22	0.98	0.95
1:A:325:GLN:HE22	1:A:363:ALA:HB2	1.29	0.95
1:A:197:VAL:HG22	1:A:430:ILE:N	1.82	0.95
1:A:142:ALA:HB1	1:A:150:GLN:HG3	0.95	0.95
1:A:84:ARG:HG3	1:A:84:ARG:HH11	1.31	0.95
1:A:188:UNK:CD	1:A:190:SER:H	1.79	0.95
1:A:367:PHE:CD2	1:A:403:ASN:CG	2.36	0.95
1:A:34:ARG:HH11	1:A:34:ARG:C	1.67	0.95
1:A:57:SER:N	1:A:60:GLN:HE22	1.62	0.95
1:A:356:ARG:HA	1:A:359:LEU:HD12	1.47	0.94
1:A:327:LEU:HD11	1:A:335:UNK:HG2	1.47	0.94
1:A:223:THR:HG22	1:A:237:ALA:HA	1.45	0.94
1:A:143:LYS:HB3	1:A:148:LYS:NZ	1.80	0.94
1:A:57:SER:H	1:A:60:GLN:NE2	1.63	0.94
1:A:34:ARG:HH12	1:A:38:UNK:HG2	1.33	0.94
1:A:197:VAL:HG12	1:A:204:ILE:HD12	1.50	0.94
1:A:140:ALA:HB1	1:A:152:THR:HB	0.96	0.94
1:A:259:ILE:HB	1:A:262:LEU:CD1	1.98	0.93
1:A:34:ARG:CA	1:A:34:ARG:HH11	1.80	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:34:ARG:NH1	1:A:37:ASP:HB3	1.84	0.93
1:A:363:ALA:HB1	1:A:367:PHE:CZ	2.03	0.93
1:A:370:VAL:HG11	1:A:400:PHE:HZ	1.27	0.93
1:A:184:VAL:HG21	1:A:441:UNK:HG3	1.51	0.93
1:A:38:UNK:HB2	1:A:47:MET:CG	1.99	0.93
1:A:83:GLY:O	1:A:85:GLN:OE1	1.87	0.93
1:A:367:PHE:CD2	1:A:403:ASN:HB2	2.02	0.93
1:A:197:VAL:HG11	1:A:389:ALA:HB2	1.48	0.92
1:A:143:LYS:HB3	1:A:148:LYS:CE	1.99	0.92
1:A:223:THR:HG21	1:A:237:ALA:CB	1.99	0.92
1:A:327:LEU:HD23	1:A:334:UNK:HB2	1.50	0.92
1:A:140:ALA:HB3	1:A:152:THR:H	1.34	0.92
1:A:163:LEU:HD23	1:A:170:MET:HE3	1.49	0.92
1:A:280:SER:HB2	1:A:370:VAL:HG23	1.49	0.92
1:A:325:GLN:NE2	1:A:363:ALA:HB2	1.84	0.92
1:A:38:UNK:HG1	1:A:45:ILE:HB	0.94	0.92
1:A:79:ILE:HG23	1:A:438:UNK:CG	1.99	0.91
1:A:21:PRO:O	1:A:25:GLN:HG3	1.70	0.91
1:A:64:PHE:CB	1:A:438:UNK:HG2	2.00	0.91
1:A:34:ARG:HH21	1:A:44:SER:H	0.99	0.90
1:A:171:UNK:HG3	1:A:175:PHE:HE1	1.32	0.90
1:A:9:LEU:HD13	1:A:296:PHE:CE2	2.06	0.90
1:A:329:HIS:O	1:A:330:PHE:HB2	0.97	0.90
1:A:34:ARG:HH22	1:A:38:UNK:HG3	1.36	0.90
1:A:196:UNK:HB2	1:A:436:ALA:HA	1.50	0.90
1:A:259:ILE:HB	1:A:262:LEU:HD12	1.50	0.89
1:A:31:LEU:HD11	1:A:373:UNK:CG	2.02	0.89
1:A:144:GLU:O	1:A:455:ALA:HB1	1.73	0.89
1:A:250:ARG:HD2	1:A:255:SER:H	1.37	0.89
1:A:9:LEU:CD1	1:A:296:PHE:CE1	2.55	0.89
1:A:338:LEU:O	1:A:342:ASP:HB2	1.71	0.89
1:A:54:LYS:HE3	1:A:443:ILE:HG21	1.50	0.89
1:A:175:PHE:HB2	1:A:176:PRO:HD3	1.52	0.89
1:A:192:GLY:C	1:A:436:ALA:HB1	1.92	0.88
1:A:250:ARG:CD	1:A:255:SER:H	1.87	0.88
1:A:324:ILE:HG22	1:A:359:LEU:HD13	1.04	0.88
1:A:172:ASN:O	1:A:176:PRO:CD	2.20	0.88
1:A:250:ARG:NH2	1:A:253:PHE:HD2	1.71	0.88
1:A:14:UNK:O	1:A:18:ILE:CG1	2.22	0.87
1:A:143:LYS:CB	1:A:148:LYS:CE	2.52	0.87
1:A:171:UNK:HG3	1:A:175:PHE:CE1	2.08	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:355:VAL:O	1:A:359:LEU:HG	1.74	0.86
1:A:175:PHE:HB2	1:A:176:PRO:CD	2.04	0.86
1:A:262:LEU:CD2	1:A:365:TYR:OH	2.23	0.86
1:A:51:TRP:HA	1:A:240:MET:CE	2.06	0.86
1:A:102:THR:CG2	1:A:104:ILE:O	2.23	0.86
1:A:104:ILE:HG12	1:A:105:PRO:CD	2.06	0.86
1:A:143:LYS:HA	1:A:148:LYS:CG	2.06	0.86
1:A:165:LYS:HB2	1:A:170:MET:CE	2.06	0.86
1:A:251:LYS:HA	1:A:275:THR:CG2	2.04	0.86
1:A:54:LYS:O	1:A:219:TRP:CH2	2.29	0.86
1:A:432:GLY:O	1:A:436:ALA:HB3	1.76	0.85
1:A:196:UNK:HB2	1:A:436:ALA:CA	2.06	0.85
1:A:34:ARG:HH21	1:A:44:SER:CA	1.89	0.85
1:A:225:ILE:CG2	1:A:227:ASP:HB3	2.06	0.85
1:A:212:SER:O	1:A:281:UNK:CG	2.24	0.85
1:A:324:ILE:CB	1:A:359:LEU:HD13	2.06	0.85
1:A:230:ASP:N	1:A:230:ASP:OD2	2.05	0.84
1:A:250:ARG:CZ	1:A:253:PHE:HD2	1.89	0.84
1:A:348:LYS:HE3	1:A:349:THR:OG1	1.77	0.84
1:A:247:SER:CB	1:A:277:UNK:CG	2.45	0.84
1:A:327:LEU:HD13	1:A:332:LEU:HA	1.60	0.84
1:A:327:LEU:HD21	1:A:334:UNK:N	1.92	0.84
1:A:171:UNK:O	1:A:175:PHE:CD1	2.31	0.84
1:A:89:ILE:CD1	1:A:90:UNK:N	2.41	0.84
1:A:449:SER:OG	1:A:450:UNK:N	2.05	0.83
1:A:20:PRO:HB2	1:A:22:UNK:CD	2.08	0.83
1:A:84:ARG:NE	1:A:199:TYR:O	2.09	0.83
1:A:13:HIS:HE1	1:A:292:VAL:CG1	1.51	0.83
1:A:143:LYS:CG	1:A:148:LYS:HE3	2.08	0.83
1:A:303:HIS:N	1:A:351:MET:HE2	1.86	0.83
1:A:317:ASN:C	1:A:317:ASN:HD22	1.82	0.83
1:A:145:UNK:O	1:A:148:LYS:CG	2.27	0.83
1:A:327:LEU:HD13	1:A:332:LEU:CA	2.09	0.83
1:A:172:ASN:HA	1:A:175:PHE:CD1	2.13	0.82
1:A:54:LYS:HE3	1:A:443:ILE:HG23	0.84	0.82
1:A:143:LYS:HB3	1:A:148:LYS:CG	2.10	0.82
1:A:38:UNK:N	1:A:43:ALA:CB	2.42	0.82
1:A:23:ILE:CD1	1:A:23:ILE:N	2.43	0.82
1:A:68:VAL:HG23	1:A:136:THR:OG1	1.77	0.82
1:A:55:GLN:O	1:A:56:VAL:HG12	1.78	0.82
1:A:271:UNK:CG	1:A:272:ALA:CB	2.58	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:327:LEU:CD1	1:A:332:LEU:HB3	2.10	0.82
1:A:250:ARG:NH2	1:A:253:PHE:CD2	2.47	0.82
1:A:305:UNK:O	1:A:306:UNK:O	1.96	0.82
1:A:312:ALA:HB3	1:A:315:VAL:HG13	1.62	0.81
1:A:192:GLY:O	1:A:436:ALA:HB2	1.80	0.81
1:A:163:LEU:HD23	1:A:167:ILE:CD1	2.10	0.81
1:A:179:ASP:O	1:A:180:UNK:HB2	1.79	0.81
1:A:148:LYS:HD3	1:A:148:LYS:O	1.78	0.81
1:A:89:ILE:CD1	1:A:89:ILE:C	2.45	0.81
1:A:145:UNK:CD	1:A:147:ILE:HG22	2.07	0.81
1:A:304:UNK:O	1:A:305:UNK:HB2	1.80	0.81
1:A:251:LYS:HG2	1:A:275:THR:HG22	1.61	0.81
1:A:145:UNK:HB1	1:A:455:ALA:HB2	1.63	0.80
1:A:212:SER:O	1:A:281:UNK:HG2	1.81	0.80
1:A:273:UNK:O	1:A:278:LYS:HE3	1.80	0.80
1:A:347:UNK:CD	1:A:347:UNK:N	2.43	0.80
1:A:143:LYS:HG3	1:A:148:LYS:HE3	1.63	0.80
1:A:142:ALA:CB	1:A:150:GLN:HG2	2.10	0.80
1:A:16:VAL:HG13	1:A:259:ILE:HG12	1.62	0.80
1:A:141:GLY:O	1:A:142:ALA:HB3	1.81	0.80
1:A:31:LEU:CG	1:A:373:UNK:HG3	2.12	0.80
1:A:145:UNK:HB1	1:A:455:ALA:CB	2.12	0.80
1:A:206:MET:SD	1:A:377:ILE:HD12	2.21	0.80
1:A:416:GLN:NE2	1:A:423:PRO:HD3	1.96	0.80
1:A:163:LEU:CD2	1:A:167:ILE:HD11	2.12	0.79
1:A:23:ILE:O	1:A:27:VAL:HG23	1.82	0.79
1:A:13:HIS:HE1	1:A:292:VAL:HG13	1.46	0.79
1:A:51:TRP:N	1:A:240:MET:HE2	1.96	0.79
1:A:79:ILE:CD1	1:A:86:GLU:HB2	2.12	0.79
1:A:143:LYS:HB3	1:A:148:LYS:HG3	1.64	0.79
1:A:163:LEU:HD23	1:A:167:ILE:HD11	1.65	0.79
1:A:195:UNK:HG1	1:A:440:ILE:HG13	1.64	0.79
1:A:250:ARG:HD3	1:A:256:LEU:H	1.47	0.79
1:A:357:ARG:O	1:A:360:PHE:HB2	1.83	0.79
1:A:338:LEU:O	1:A:342:ASP:CB	2.31	0.79
1:A:407:UNK:O	1:A:410:ASN:HB2	1.83	0.78
1:A:58:GLY:O	1:A:83:GLY:HA2	1.84	0.78
1:A:348:LYS:HE3	1:A:349:THR:H	1.49	0.78
1:A:142:ALA:O	1:A:150:GLN:HG2	1.83	0.78
1:A:151:ILE:HG22	1:A:164:UNK:CA	2.13	0.78
1:A:171:UNK:O	1:A:175:PHE:HD1	1.67	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:97:ALA:O	1:A:98:ALA:HB3	1.84	0.78
1:A:236:GLY:O	1:A:237:ALA:HB2	1.83	0.78
1:A:325:GLN:NE2	1:A:397:TYR:OH	2.16	0.78
1:A:225:ILE:HG22	1:A:227:ASP:HB3	1.64	0.77
1:A:250:ARG:CZ	1:A:253:PHE:HA	2.13	0.77
1:A:84:ARG:HG2	1:A:84:ARG:HH11	1.49	0.77
1:A:367:PHE:HZ	1:A:397:TYR:HE2	1.31	0.77
1:A:282:ALA:HB3	1:A:394:UNK:CD	2.15	0.77
1:A:414:TRP:CE3	1:A:422:LYS:HG2	2.19	0.77
1:A:201:ASP:O	1:A:204:ILE:HG12	1.85	0.77
1:A:104:ILE:HG12	1:A:105:PRO:HD2	1.66	0.77
1:A:271:UNK:CG	1:A:272:ALA:HB2	2.15	0.77
1:A:20:PRO:HD2	1:A:23:ILE:HG12	1.66	0.77
1:A:141:GLY:O	1:A:142:ALA:CB	2.31	0.76
1:A:197:VAL:HG12	1:A:204:ILE:CD1	2.13	0.76
1:A:129:GLY:O	1:A:130:SER:HB3	1.85	0.76
1:A:51:TRP:CA	1:A:240:MET:CE	2.64	0.76
1:A:375:UNK:CD	1:A:411:ILE:CD1	2.59	0.76
1:A:356:ARG:NE	1:A:360:PHE:CE1	2.53	0.76
1:A:110:GLY:O	1:A:114:UNK:HG2	1.85	0.75
1:A:259:ILE:HG22	1:A:261:TYR:H	1.52	0.75
1:A:367:PHE:CD2	1:A:400:PHE:HA	2.21	0.75
1:A:317:ASN:ND2	1:A:319:SER:N	2.34	0.75
1:A:102:THR:HG23	1:A:104:ILE:H	1.52	0.75
1:A:193:ILE:HD12	1:A:429:ALA:CB	2.17	0.75
1:A:452:UNK:O	1:A:453:UNK:CB	2.31	0.74
1:A:34:ARG:HH12	1:A:38:UNK:HG3	1.52	0.74
1:A:223:THR:CG2	1:A:237:ALA:HA	2.17	0.74
1:A:327:LEU:HD21	1:A:334:UNK:CB	2.16	0.74
1:A:104:ILE:HD13	1:A:106:SER:HB2	1.68	0.74
1:A:79:ILE:HD11	1:A:86:GLU:CB	2.16	0.73
1:A:192:GLY:CA	1:A:436:ALA:HB1	2.17	0.73
1:A:340:UNK:HA	1:A:345:ILE:O	1.88	0.73
1:A:102:THR:HG21	1:A:104:ILE:O	1.87	0.73
1:A:156:UNK:O	1:A:157:ALA:HB3	1.87	0.73
1:A:51:TRP:CA	1:A:240:MET:HE1	2.18	0.73
1:A:22:UNK:HG2	1:A:23:ILE:CD1	2.18	0.73
1:A:84:ARG:HD2	1:A:199:TYR:O	1.88	0.73
1:A:155:ALA:O	1:A:157:ALA:N	2.22	0.73
1:A:34:ARG:HH11	1:A:34:ARG:HA	1.54	0.73
1:A:140:ALA:CB	1:A:152:THR:N	2.48	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:164:UNK:O	1:A:164:UNK:CG	2.36	0.73
1:A:42:ALA:O	1:A:43:ALA:CB	2.37	0.72
1:A:64:PHE:CB	1:A:438:UNK:HG3	2.09	0.72
1:A:9:LEU:CD1	1:A:296:PHE:CE2	2.68	0.72
1:A:143:LYS:CB	1:A:148:LYS:HE3	2.19	0.72
1:A:327:LEU:HD13	1:A:332:LEU:CB	2.18	0.72
1:A:143:LYS:CA	1:A:148:LYS:HG2	2.14	0.72
1:A:368:ARG:HH22	1:A:410:ASN:HD22	1.34	0.72
1:A:368:ARG:HH12	1:A:410:ASN:ND2	1.87	0.72
1:A:38:UNK:N	1:A:43:ALA:HB1	2.05	0.72
1:A:259:ILE:CB	1:A:262:LEU:HD12	2.19	0.72
1:A:34:ARG:NH1	1:A:38:UNK:CG	2.52	0.72
1:A:16:VAL:CG1	1:A:259:ILE:HG12	2.20	0.72
1:A:34:ARG:C	1:A:34:ARG:NH1	2.32	0.71
1:A:102:THR:O	1:A:160:LEU:HD13	1.90	0.71
1:A:223:THR:CG2	1:A:237:ALA:CB	2.68	0.71
1:A:180:UNK:CD	1:A:180:UNK:O	2.39	0.71
1:A:148:LYS:CG	1:A:149:GLY:N	2.46	0.71
1:A:167:ILE:HA	1:A:170:MET:HG3	1.72	0.71
1:A:281:UNK:HG3	1:A:283:LYS:H	1.55	0.71
1:A:23:ILE:H	1:A:23:ILE:HD13	1.56	0.71
1:A:367:PHE:CZ	1:A:397:TYR:CE2	2.78	0.71
1:A:102:THR:HG23	1:A:104:ILE:N	2.06	0.70
1:A:72:GLY:C	1:A:95:LEU:HD23	2.11	0.70
1:A:289:LEU:HD22	1:A:293:LEU:HD22	1.72	0.70
1:A:259:ILE:CG2	1:A:260:UNK:N	2.54	0.70
1:A:367:PHE:HE2	1:A:403:ASN:HD22	1.05	0.70
1:A:250:ARG:HD3	1:A:256:LEU:N	2.06	0.70
1:A:145:UNK:CB	1:A:455:ALA:HB2	2.21	0.70
1:A:259:ILE:HG22	1:A:261:TYR:N	2.07	0.70
1:A:269:SER:C	1:A:271:UNK:N	2.42	0.70
1:A:212:SER:O	1:A:281:UNK:HG1	1.90	0.70
1:A:192:GLY:C	1:A:436:ALA:CB	2.53	0.69
1:A:58:GLY:O	1:A:83:GLY:CA	2.40	0.69
1:A:108:LEU:O	1:A:111:ASN:HB3	1.92	0.69
1:A:416:GLN:HE21	1:A:423:PRO:HD3	1.57	0.69
1:A:143:LYS:NZ	1:A:191:HIS:HE1	1.89	0.69
1:A:282:ALA:HA	1:A:285:UNK:CD	2.22	0.69
1:A:13:HIS:CE1	1:A:292:VAL:HG13	2.17	0.69
1:A:64:PHE:CD2	1:A:81:LEU:HD22	2.27	0.69
1:A:355:VAL:O	1:A:359:LEU:CG	2.40	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2:ALA:HB1	1:A:350:UNK:CG	2.23	0.69
1:A:55:GLN:C	1:A:56:VAL:HG12	2.12	0.69
1:A:367:PHE:HZ	1:A:397:TYR:CE2	2.10	0.69
1:A:283:LYS:HD3	1:A:283:LYS:C	2.13	0.69
1:A:34:ARG:NH2	1:A:38:UNK:HG3	2.06	0.69
1:A:89:ILE:HD12	1:A:90:UNK:CA	2.21	0.68
1:A:367:PHE:CZ	1:A:397:TYR:HE2	2.12	0.68
1:A:357:ARG:O	1:A:361:LEU:HD22	1.92	0.68
1:A:64:PHE:HB3	1:A:438:UNK:HG2	1.74	0.68
1:A:84:ARG:HD2	1:A:200:THR:HA	1.75	0.68
1:A:34:ARG:NH2	1:A:45:ILE:H	1.91	0.68
1:A:53:LEU:O	1:A:239:UNK:HB1	1.93	0.68
1:A:371:VAL:CG1	1:A:404:SER:HB2	2.24	0.68
1:A:140:ALA:HB1	1:A:152:THR:H	1.55	0.68
1:A:208:ILE:CD1	1:A:374:ILE:HD11	2.24	0.67
1:A:206:MET:CE	1:A:216:ALA:CB	2.73	0.67
1:A:34:ARG:HH22	1:A:45:ILE:H	1.42	0.67
1:A:197:VAL:CG1	1:A:204:ILE:CD1	2.70	0.67
1:A:363:ALA:O	1:A:367:PHE:CE1	2.46	0.67
1:A:349:THR:HA	1:A:352:LYS:HE2	1.76	0.67
1:A:100:SER:O	1:A:159:SER:N	2.28	0.67
1:A:188:UNK:CD	1:A:190:SER:N	2.56	0.67
1:A:327:LEU:CD2	1:A:334:UNK:CB	2.60	0.67
1:A:167:ILE:HD12	1:A:170:MET:CE	2.25	0.67
1:A:84:ARG:NH1	1:A:84:ARG:CG	2.39	0.67
1:A:343:GLN:HB2	1:A:345:ILE:HG12	1.76	0.67
1:A:48:VAL:HG22	1:A:243:CYS:HB3	1.77	0.67
1:A:72:GLY:O	1:A:94:SER:HA	1.94	0.67
1:A:54:LYS:CE	1:A:443:ILE:HG21	2.13	0.67
1:A:196:UNK:HG3	1:A:430:ILE:HB	1.77	0.66
1:A:259:ILE:CG2	1:A:261:TYR:H	2.08	0.66
1:A:206:MET:CE	1:A:216:ALA:HB1	2.26	0.66
1:A:223:THR:HG22	1:A:237:ALA:CA	2.24	0.66
1:A:148:LYS:HD3	1:A:149:GLY:CA	2.25	0.66
1:A:38:UNK:HG3	1:A:45:ILE:H	1.60	0.66
1:A:99:MET:O	1:A:100:SER:CB	2.32	0.66
1:A:208:ILE:HD11	1:A:388:ILE:CG2	2.25	0.66
1:A:89:ILE:HD12	1:A:90:UNK:H	1.57	0.66
1:A:271:UNK:CG	1:A:272:ALA:CA	2.64	0.66
1:A:22:UNK:HG2	1:A:23:ILE:HD13	1.78	0.66
1:A:343:GLN:HB2	1:A:345:ILE:CG1	2.25	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:89:ILE:CD1	1:A:90:UNK:H	2.07	0.65
1:A:250:ARG:CD	1:A:256:LEU:H	2.09	0.65
1:A:166:LEU:HD22	1:A:168:SER:H	1.60	0.65
1:A:250:ARG:NE	1:A:253:PHE:HA	2.12	0.65
1:A:13:HIS:ND1	1:A:292:VAL:HG11	2.08	0.65
1:A:97:ALA:O	1:A:98:ALA:CB	2.43	0.65
1:A:236:GLY:O	1:A:237:ALA:CB	2.45	0.65
1:A:327:LEU:CD1	1:A:332:LEU:CB	2.75	0.65
1:A:149:GLY:O	1:A:166:LEU:CD2	2.34	0.65
1:A:2:ALA:CB	1:A:350:UNK:HB1	2.27	0.65
1:A:54:LYS:O	1:A:219:TRP:HH2	1.79	0.65
1:A:84:ARG:NH1	1:A:84:ARG:HG2	2.07	0.65
1:A:340:UNK:O	1:A:344:GLY:N	2.29	0.65
1:A:222:SER:HA	1:A:225:ILE:HD12	1.79	0.65
1:A:13:HIS:NE2	1:A:292:VAL:HG12	2.07	0.64
1:A:210:PHE:HD1	1:A:395:ARG:HD2	1.61	0.64
1:A:96:ALA:O	1:A:97:ALA:C	2.34	0.64
1:A:66:ALA:HB1	1:A:437:SER:OG	1.97	0.64
1:A:145:UNK:HA	1:A:455:ALA:HB2	1.80	0.64
1:A:225:ILE:CG2	1:A:226:GLY:N	2.34	0.64
1:A:259:ILE:H	1:A:262:LEU:HD13	1.63	0.64
1:A:20:PRO:HG2	1:A:23:ILE:HD13	1.79	0.64
1:A:294:MET:CA	1:A:294:MET:CE	2.63	0.64
1:A:23:ILE:N	1:A:23:ILE:HD12	2.12	0.64
1:A:320:TYR:HD2	1:A:338:LEU:HD21	1.62	0.64
1:A:129:GLY:O	1:A:130:SER:CB	2.45	0.64
1:A:414:TRP:HB3	1:A:416:GLN:OE1	1.98	0.64
1:A:37:ASP:C	1:A:43:ALA:HB1	2.19	0.63
1:A:22:UNK:N	1:A:22:UNK:CD	2.61	0.63
1:A:196:UNK:CB	1:A:436:ALA:HA	2.26	0.63
1:A:227:ASP:O	1:A:230:ASP:OD2	2.16	0.63
1:A:38:UNK:CA	1:A:43:ALA:HB1	2.26	0.63
1:A:306:UNK:CE	1:A:346:ALA:H	2.11	0.63
1:A:282:ALA:HB3	1:A:394:UNK:CG	2.28	0.63
1:A:368:ARG:HH22	1:A:410:ASN:ND2	1.95	0.63
1:A:59:ALA:HA	1:A:83:GLY:HA2	1.80	0.63
1:A:348:LYS:HG3	1:A:349:THR:H	1.64	0.63
1:A:325:GLN:NE2	1:A:363:ALA:CB	2.45	0.63
1:A:144:GLU:HG2	1:A:145:UNK:N	2.14	0.62
1:A:206:MET:HE3	1:A:216:ALA:HB1	1.79	0.62
1:A:208:ILE:HD13	1:A:374:ILE:HD11	1.81	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:136:THR:HG21	1:A:433:UNK:O	2.00	0.62
1:A:252:ALA:C	1:A:254:PRO:HD3	2.20	0.62
1:A:143:LYS:HB3	1:A:148:LYS:CD	2.28	0.62
1:A:225:ILE:HG21	1:A:227:ASP:HB3	1.78	0.62
1:A:250:ARG:CD	1:A:253:PHE:HA	2.30	0.62
1:A:208:ILE:HG23	1:A:216:ALA:HB2	1.82	0.62
1:A:38:UNK:CB	1:A:45:ILE:O	2.37	0.62
1:A:319:SER:O	1:A:323:LYS:HD3	1.99	0.62
1:A:259:ILE:HB	1:A:262:LEU:HD13	1.80	0.62
1:A:283:LYS:HD3	1:A:283:LYS:O	2.00	0.61
1:A:193:ILE:HG22	1:A:432:GLY:HA3	1.81	0.61
1:A:172:ASN:O	1:A:175:PHE:N	2.29	0.61
1:A:233:UNK:HG1	1:A:452:UNK:O	1.99	0.61
1:A:262:LEU:HD22	1:A:279:ASN:HD21	1.64	0.61
1:A:363:ALA:HB1	1:A:367:PHE:CE1	2.35	0.61
1:A:197:VAL:HG21	1:A:429:ALA:HB1	1.83	0.61
1:A:193:ILE:HD12	1:A:429:ALA:HB2	1.82	0.61
1:A:312:ALA:HB3	1:A:315:VAL:CG1	2.29	0.61
1:A:143:LYS:HZ1	1:A:191:HIS:HE1	1.47	0.61
1:A:49:PRO:HA	1:A:242:ILE:HD13	1.82	0.61
1:A:166:LEU:HD22	1:A:168:SER:HB2	1.83	0.61
1:A:34:ARG:NH2	1:A:44:SER:CA	2.57	0.61
1:A:143:LYS:CA	1:A:148:LYS:CG	2.77	0.60
1:A:206:MET:HE3	1:A:216:ALA:CB	2.31	0.60
1:A:163:LEU:HD23	1:A:167:ILE:HD12	1.82	0.60
1:A:223:THR:CG2	1:A:237:ALA:CA	2.79	0.60
1:A:327:LEU:CD1	1:A:335:UNK:CG	2.45	0.60
1:A:251:LYS:HG2	1:A:275:THR:CG2	2.30	0.60
1:A:206:MET:HE2	1:A:216:ALA:CB	2.31	0.60
1:A:24:LEU:O	1:A:28:VAL:HG23	2.01	0.60
1:A:320:TYR:CD2	1:A:338:LEU:HD21	2.35	0.60
1:A:143:LYS:HG3	1:A:148:LYS:CE	2.21	0.60
1:A:155:ALA:C	1:A:157:ALA:H	2.05	0.60
1:A:13:HIS:NE2	1:A:296:PHE:CZ	2.69	0.60
1:A:324:ILE:HG22	1:A:359:LEU:HD12	1.72	0.60
1:A:197:VAL:CG1	1:A:389:ALA:HB2	2.28	0.60
1:A:262:LEU:CA	1:A:262:LEU:HG	2.31	0.60
1:A:140:ALA:HB1	1:A:152:THR:N	2.16	0.60
1:A:336:UNK:O	1:A:340:UNK:HB2	2.01	0.59
1:A:167:ILE:CA	1:A:170:MET:HG3	2.32	0.59
1:A:171:UNK:O	1:A:175:PHE:CE1	2.55	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:156:UNK:O	1:A:157:ALA:CB	2.50	0.59
1:A:193:ILE:O	1:A:197:VAL:HB	2.02	0.59
1:A:144:GLU:CG	1:A:145:UNK:HG3	2.23	0.59
1:A:191:HIS:CD2	1:A:243:CYS:HB2	2.33	0.59
1:A:30:ILE:HG23	1:A:249:PHE:HZ	1.66	0.59
1:A:449:SER:C	1:A:451:ALA:H	2.04	0.59
1:A:30:ILE:HG23	1:A:249:PHE:CZ	2.38	0.59
1:A:171:UNK:C	1:A:175:PHE:CE1	2.84	0.59
1:A:84:ARG:NH1	1:A:84:ARG:HG3	2.11	0.59
1:A:66:ALA:CB	1:A:437:SER:OG	2.51	0.59
1:A:23:ILE:N	1:A:23:ILE:HD13	2.15	0.59
1:A:143:LYS:CB	1:A:148:LYS:CG	2.81	0.59
1:A:163:LEU:HD22	1:A:167:ILE:HD11	1.85	0.59
1:A:37:ASP:OD1	1:A:43:ALA:HA	2.01	0.59
1:A:250:ARG:CZ	1:A:253:PHE:CD2	2.80	0.59
1:A:20:PRO:HG2	1:A:23:ILE:CD1	2.32	0.59
1:A:262:LEU:HD11	1:A:365:TYR:OH	2.03	0.58
1:A:51:TRP:N	1:A:240:MET:CE	2.66	0.58
1:A:303:HIS:CA	1:A:351:MET:CE	2.80	0.58
1:A:197:VAL:CG2	1:A:430:ILE:N	2.55	0.58
1:A:34:ARG:NH1	1:A:37:ASP:CB	2.63	0.58
1:A:281:UNK:HG3	1:A:283:LYS:HB3	1.85	0.58
1:A:50:GLY:HA3	1:A:241:UNK:CD	2.33	0.58
1:A:364:ALA:O	1:A:368:ARG:HG3	2.04	0.58
1:A:165:LYS:CB	1:A:170:MET:CE	2.72	0.58
1:A:206:MET:CE	1:A:377:ILE:HD12	2.34	0.58
1:A:93:ARG:HD2	1:A:115:SER:HB3	1.85	0.58
1:A:17:PHE:CE2	1:A:259:ILE:CD1	2.87	0.58
1:A:259:ILE:HG23	1:A:260:UNK:N	2.19	0.58
1:A:251:LYS:NZ	1:A:274:LYS:H	2.02	0.58
1:A:250:ARG:HD2	1:A:253:PHE:HA	1.84	0.58
1:A:55:GLN:C	1:A:56:VAL:CG1	2.72	0.58
1:A:16:VAL:HG12	1:A:259:ILE:HD11	1.84	0.58
1:A:282:ALA:CB	1:A:394:UNK:CG	2.81	0.58
1:A:317:ASN:ND2	1:A:317:ASN:C	2.54	0.57
1:A:175:PHE:O	1:A:178:GLY:N	2.34	0.57
1:A:2:ALA:HB1	1:A:350:UNK:HG3	1.86	0.57
1:A:37:ASP:O	1:A:42:ALA:O	2.22	0.57
1:A:454:SER:O	1:A:455:ALA:HB2	2.04	0.57
1:A:367:PHE:CE2	1:A:400:PHE:HA	2.40	0.57
1:A:327:LEU:CD1	1:A:332:LEU:CA	2.82	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:34:ARG:HH21	1:A:44:SER:CB	2.17	0.57
1:A:274:LYS:O	1:A:278:LYS:HG3	2.04	0.57
1:A:175:PHE:CB	1:A:176:PRO:CD	2.82	0.57
1:A:250:ARG:CZ	1:A:256:LEU:HB2	2.35	0.57
1:A:144:GLU:CG	1:A:145:UNK:N	2.68	0.57
1:A:31:LEU:CG	1:A:373:UNK:CG	2.80	0.57
1:A:149:GLY:C	1:A:166:LEU:HD23	2.22	0.56
1:A:133:LEU:C	1:A:441:UNK:HG1	2.24	0.56
1:A:140:ALA:HB2	1:A:152:THR:HB	1.79	0.56
1:A:356:ARG:HE	1:A:360:PHE:HE1	1.45	0.56
1:A:348:LYS:CE	1:A:349:THR:OG1	2.51	0.56
1:A:165:LYS:HB3	1:A:170:MET:HE1	1.84	0.56
1:A:368:ARG:NH2	1:A:410:ASN:HD22	2.02	0.56
1:A:197:VAL:HG11	1:A:389:ALA:HB3	1.85	0.56
1:A:196:UNK:HB2	1:A:436:ALA:N	2.19	0.56
1:A:104:ILE:CD1	1:A:106:SER:HB2	2.35	0.56
1:A:136:THR:HG22	1:A:437:SER:HB2	1.86	0.56
1:A:53:LEU:HA	1:A:239:UNK:O	2.04	0.56
1:A:17:PHE:CD2	1:A:259:ILE:HD11	2.41	0.56
1:A:145:UNK:CA	1:A:455:ALA:HB2	2.36	0.56
1:A:140:ALA:HB3	1:A:151:ILE:HD13	1.87	0.56
1:A:192:GLY:CA	1:A:436:ALA:CB	2.83	0.56
1:A:259:ILE:HG21	1:A:261:TYR:HD2	1.70	0.56
1:A:262:LEU:HD21	1:A:365:TYR:CZ	2.37	0.56
1:A:163:LEU:CD2	1:A:167:ILE:CD1	2.77	0.56
1:A:327:LEU:CG	1:A:334:UNK:HB2	2.33	0.56
1:A:312:ALA:O	1:A:315:VAL:HG22	2.06	0.56
1:A:42:ALA:O	1:A:43:ALA:HB3	2.06	0.56
1:A:175:PHE:O	1:A:176:PRO:C	2.45	0.56
1:A:34:ARG:NH2	1:A:45:ILE:N	2.55	0.55
1:A:146:VAL:HG23	1:A:454:SER:HB3	1.89	0.55
1:A:208:ILE:HD11	1:A:388:ILE:HG22	1.88	0.55
1:A:225:ILE:HG23	1:A:226:GLY:H	1.64	0.55
1:A:34:ARG:NH1	1:A:38:UNK:HG2	2.13	0.55
1:A:259:ILE:HD12	1:A:262:LEU:CD1	2.37	0.55
1:A:348:LYS:HG3	1:A:349:THR:N	2.21	0.55
1:A:250:ARG:HD3	1:A:255:SER:H	1.68	0.55
1:A:143:LYS:CB	1:A:148:LYS:HG3	2.36	0.55
1:A:251:LYS:CG	1:A:275:THR:CG2	2.84	0.55
1:A:363:ALA:HB2	1:A:397:TYR:OH	2.06	0.55
1:A:201:ASP:OD1	1:A:387:HIS:ND1	2.32	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:192:GLY:HA2	1:A:436:ALA:HB1	1.88	0.55
1:A:144:GLU:HG2	1:A:148:LYS:CB	2.37	0.55
1:A:167:ILE:O	1:A:170:MET:HB2	2.07	0.55
1:A:271:UNK:HG3	1:A:272:ALA:HB3	1.86	0.55
1:A:136:THR:CG2	1:A:433:UNK:O	2.55	0.55
1:A:31:LEU:CD2	1:A:373:UNK:HG3	2.27	0.54
1:A:166:LEU:O	1:A:170:MET:HG3	2.08	0.54
1:A:82:ALA:O	1:A:85:GLN:CD	2.46	0.54
1:A:250:ARG:NH1	1:A:253:PHE:HA	2.21	0.54
1:A:24:LEU:HD13	1:A:407:UNK:HG2	1.87	0.54
1:A:140:ALA:HB1	1:A:152:THR:CA	2.36	0.54
1:A:34:ARG:NH1	1:A:38:UNK:HG3	2.18	0.54
1:A:368:ARG:HH12	1:A:410:ASN:HD22	1.52	0.54
1:A:208:ILE:HD11	1:A:388:ILE:HG21	1.89	0.54
1:A:34:ARG:HH22	1:A:44:SER:N	1.97	0.54
1:A:99:MET:CE	1:A:111:ASN:HB2	2.37	0.54
1:A:151:ILE:HD12	1:A:153:UNK:H	1.72	0.54
1:A:143:LYS:NZ	1:A:191:HIS:CE1	2.74	0.53
1:A:83:GLY:O	1:A:85:GLN:CD	2.46	0.53
1:A:16:VAL:HG12	1:A:259:ILE:CD1	2.39	0.53
1:A:179:ASP:O	1:A:180:UNK:CB	2.55	0.53
1:A:64:PHE:HB3	1:A:438:UNK:CG	2.35	0.53
1:A:10:VAL:HG23	1:A:354:VAL:CG2	2.38	0.53
1:A:23:ILE:CD1	1:A:23:ILE:H	2.14	0.53
1:A:317:ASN:HD21	1:A:319:SER:CB	2.21	0.53
1:A:142:ALA:HB3	1:A:150:GLN:HG2	1.87	0.53
1:A:131:VAL:O	1:A:181:UNK:HB2	2.09	0.53
1:A:172:ASN:CA	1:A:175:PHE:CD1	2.90	0.52
1:A:196:UNK:HB1	1:A:436:ALA:HB2	1.90	0.52
1:A:86:GLU:HG2	1:A:86:GLU:O	2.09	0.52
1:A:166:LEU:CD2	1:A:168:SER:HB2	2.40	0.52
1:A:356:ARG:CA	1:A:359:LEU:HD12	2.31	0.52
1:A:171:UNK:CG	1:A:175:PHE:HE1	2.13	0.52
1:A:68:VAL:O	1:A:68:VAL:CG1	2.58	0.52
1:A:78:LEU:HB2	1:A:119:PHE:HE2	1.75	0.52
1:A:188:UNK:CD	1:A:190:SER:CB	2.81	0.52
1:A:144:GLU:CD	1:A:148:LYS:HB2	2.24	0.51
1:A:77:ILE:HD13	1:A:434:GLY:HA2	1.92	0.51
1:A:302:UNK:HB2	1:A:351:MET:HE2	1.93	0.51
1:A:391:UNK:CE	1:A:432:GLY:H	2.24	0.51
1:A:281:UNK:CG	1:A:283:LYS:HB3	2.39	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:355:VAL:O	1:A:359:LEU:CD2	2.58	0.51
1:A:57:SER:HB2	1:A:60:GLN:NE2	2.26	0.51
1:A:247:SER:HB2	1:A:277:UNK:CG	2.37	0.51
1:A:51:TRP:CA	1:A:240:MET:HE2	2.35	0.51
1:A:367:PHE:O	1:A:370:VAL:HG12	2.11	0.51
1:A:79:ILE:CD1	1:A:86:GLU:HG3	2.41	0.51
1:A:52:VAL:O	1:A:219:TRP:HZ3	1.93	0.51
1:A:327:LEU:HD21	1:A:334:UNK:CA	2.41	0.51
1:A:184:VAL:HG23	1:A:441:UNK:CG	2.37	0.50
1:A:251:LYS:HE2	1:A:273:UNK:HA	1.93	0.50
1:A:339:PHE:O	1:A:340:UNK:C	2.44	0.50
1:A:348:LYS:CE	1:A:349:THR:H	2.20	0.50
1:A:151:ILE:CG2	1:A:151:ILE:O	2.59	0.50
1:A:440:ILE:O	1:A:440:ILE:CG2	2.59	0.50
1:A:259:ILE:HD12	1:A:262:LEU:HD11	1.94	0.50
1:A:367:PHE:HB2	1:A:403:ASN:HB3	1.92	0.50
1:A:41:SER:O	1:A:42:ALA:CB	2.59	0.50
1:A:251:LYS:CA	1:A:275:THR:CG2	2.84	0.50
1:A:414:TRP:HE3	1:A:422:LYS:HG2	1.72	0.50
1:A:34:ARG:HH21	1:A:44:SER:HB3	1.76	0.50
1:A:331:ASP:O	1:A:352:LYS:HE3	2.10	0.50
1:A:23:ILE:HG21	1:A:257:PRO:HG3	1.93	0.50
1:A:206:MET:CE	1:A:377:ILE:CD1	2.89	0.50
1:A:142:ALA:HB3	1:A:150:GLN:CG	2.34	0.50
1:A:124:PHE:O	1:A:125:SER:OG	2.30	0.50
1:A:34:ARG:CZ	1:A:37:ASP:HB3	2.41	0.50
1:A:38:UNK:HB2	1:A:47:MET:HG2	1.92	0.50
1:A:234:UNK:C	1:A:236:GLY:N	2.40	0.50
1:A:197:VAL:CG2	1:A:429:ALA:HB1	2.41	0.50
1:A:38:UNK:CG	1:A:45:ILE:H	2.24	0.49
1:A:287:GLN:HE22	1:A:290:ARG:NH1	2.10	0.49
1:A:52:VAL:O	1:A:219:TRP:CZ3	2.66	0.49
1:A:143:LYS:HG2	1:A:148:LYS:HZ1	0.42	0.49
1:A:126:SER:O	1:A:127:UNK:HB1	2.11	0.49
1:A:9:LEU:HD12	1:A:296:PHE:CE2	2.48	0.49
1:A:191:HIS:CD2	1:A:241:UNK:CD	2.94	0.49
1:A:371:VAL:CG2	1:A:407:UNK:CG	2.90	0.49
1:A:448:UNK:O	1:A:451:ALA:HA	2.13	0.49
1:A:448:UNK:O	1:A:451:ALA:N	2.40	0.49
1:A:208:ILE:HD13	1:A:210:PHE:CZ	2.48	0.49
1:A:151:ILE:O	1:A:164:UNK:HA	2.13	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:247:SER:HB3	1:A:277:UNK:CD	2.41	0.49
1:A:73:ASP:N	1:A:95:LEU:HD23	2.27	0.49
1:A:440:ILE:O	1:A:440:ILE:HG22	2.13	0.49
1:A:294:MET:CE	1:A:297:LYS:HB3	2.43	0.48
1:A:124:PHE:O	1:A:125:SER:CB	2.61	0.48
1:A:294:MET:CE	1:A:297:LYS:HG2	2.44	0.48
1:A:338:LEU:O	1:A:342:ASP:HB3	2.11	0.48
1:A:262:LEU:HD22	1:A:279:ASN:ND2	2.29	0.48
1:A:363:ALA:HB1	1:A:397:TYR:HE2	1.79	0.48
1:A:367:PHE:HE2	1:A:403:ASN:HD21	1.53	0.48
1:A:57:SER:HB2	1:A:60:GLN:HE21	1.79	0.48
1:A:54:LYS:HB2	1:A:54:LYS:HE2	1.54	0.48
1:A:447:UNK:CE	1:A:453:UNK:O	2.62	0.48
1:A:259:ILE:HG22	1:A:260:UNK:N	2.28	0.48
1:A:148:LYS:CG	1:A:149:GLY:H	2.25	0.48
1:A:151:ILE:HG22	1:A:164:UNK:N	2.29	0.48
1:A:58:GLY:O	1:A:83:GLY:C	2.50	0.48
1:A:99:MET:HE1	1:A:111:ASN:HB2	1.95	0.48
1:A:201:ASP:O	1:A:204:ILE:CG1	2.58	0.48
1:A:163:LEU:HD23	1:A:170:MET:CE	2.34	0.48
1:A:294:MET:HE3	1:A:294:MET:CA	2.09	0.48
1:A:250:ARG:HD2	1:A:253:PHE:CA	2.43	0.48
1:A:356:ARG:NE	1:A:360:PHE:HE1	2.05	0.47
1:A:171:UNK:C	1:A:175:PHE:HE1	2.25	0.47
1:A:196:UNK:CB	1:A:436:ALA:CA	2.84	0.47
1:A:100:SER:HA	1:A:158:PHE:CD1	2.49	0.47
1:A:50:GLY:O	1:A:51:TRP:HB2	2.14	0.47
1:A:370:VAL:CG1	1:A:400:PHE:HZ	2.12	0.47
1:A:343:GLN:HB2	1:A:345:ILE:HG13	1.94	0.47
1:A:101:THR:O	1:A:101:THR:HG22	2.14	0.47
1:A:51:TRP:HA	1:A:51:TRP:CE3	2.50	0.47
1:A:259:ILE:HG21	1:A:261:TYR:CD2	2.49	0.47
1:A:109:TRP:HZ2	1:A:163:LEU:HD21	1.79	0.47
1:A:207:GLY:O	1:A:217:ALA:N	2.43	0.47
1:A:371:VAL:HG22	1:A:407:UNK:HG1	1.95	0.47
1:A:371:VAL:HG11	1:A:404:SER:HB2	1.92	0.47
1:A:347:UNK:CD	1:A:347:UNK:O	2.62	0.47
1:A:2:ALA:CB	1:A:350:UNK:CB	2.93	0.47
1:A:149:GLY:O	1:A:166:LEU:HA	2.15	0.47
1:A:51:TRP:CZ3	1:A:455:ALA:HA	2.49	0.47
1:A:21:PRO:HD3	1:A:368:ARG:NH2	2.30	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:31:LEU:HD22	1:A:249:PHE:CD2	2.50	0.47
1:A:208:ILE:HD11	1:A:374:ILE:HD11	1.96	0.47
1:A:324:ILE:HD13	1:A:359:LEU:CD2	2.44	0.46
1:A:327:LEU:HD12	1:A:335:UNK:HG1	1.86	0.46
1:A:2:ALA:HB2	1:A:350:UNK:HB1	1.95	0.46
1:A:3:ALA:O	1:A:6:ASP:HB2	2.15	0.46
1:A:79:ILE:HG23	1:A:438:UNK:CB	2.44	0.46
1:A:250:ARG:HD2	1:A:253:PHE:C	2.35	0.46
1:A:167:ILE:HD12	1:A:170:MET:HE2	1.98	0.46
1:A:248:SER:HB2	1:A:251:LYS:HD2	1.98	0.46
1:A:336:UNK:HB2	1:A:352:LYS:HD3	1.97	0.46
1:A:104:ILE:HA	1:A:105:PRO:HD3	1.59	0.46
1:A:305:UNK:O	1:A:306:UNK:C	2.64	0.46
1:A:54:LYS:C	1:A:55:GLN:O	2.54	0.46
1:A:373:UNK:O	1:A:377:ILE:HG13	2.15	0.46
1:A:175:PHE:O	1:A:179:ASP:N	2.31	0.46
1:A:7:UNK:O	1:A:11:GLU:HG3	2.15	0.46
1:A:54:LYS:O	1:A:55:GLN:O	2.33	0.46
1:A:79:ILE:CG2	1:A:438:UNK:CB	2.94	0.46
1:A:340:UNK:HB1	1:A:341:GLY:H	1.44	0.46
1:A:367:PHE:CD1	1:A:400:PHE:CD1	3.03	0.46
1:A:151:ILE:HD12	1:A:153:UNK:N	2.30	0.46
1:A:55:GLN:O	1:A:56:VAL:CG1	2.58	0.46
1:A:167:ILE:HD12	1:A:170:MET:HE3	1.94	0.46
1:A:197:VAL:HG21	1:A:429:ALA:CB	2.45	0.46
1:A:348:LYS:CG	1:A:349:THR:H	2.26	0.46
1:A:327:LEU:HD23	1:A:334:UNK:CB	2.35	0.46
1:A:34:ARG:HB3	1:A:45:ILE:CD1	2.46	0.46
1:A:247:SER:HB2	1:A:274:LYS:HZ3	1.80	0.46
1:A:48:VAL:O	1:A:48:VAL:CG2	2.64	0.46
1:A:20:PRO:O	1:A:23:ILE:N	2.47	0.46
1:A:2:ALA:CB	1:A:350:UNK:CG	2.93	0.46
1:A:38:UNK:CB	1:A:47:MET:CG	2.85	0.46
1:A:357:ARG:O	1:A:361:LEU:CD2	2.61	0.45
1:A:312:ALA:CB	1:A:315:VAL:HG13	2.41	0.45
1:A:324:ILE:HB	1:A:359:LEU:HD13	1.93	0.45
1:A:389:ALA:HB1	1:A:429:ALA:HA	1.98	0.45
1:A:328:PRO:HB2	1:A:329:HIS:CD2	2.52	0.45
1:A:371:VAL:CG2	1:A:407:UNK:HG1	2.47	0.45
1:A:42:ALA:O	1:A:43:ALA:HB2	2.13	0.45
1:A:250:ARG:NH1	1:A:253:PHE:CA	2.79	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:448:UNK:O	1:A:451:ALA:CA	2.64	0.45
1:A:144:GLU:HG2	1:A:148:LYS:HB3	1.98	0.45
1:A:31:LEU:HD22	1:A:249:PHE:CE2	2.51	0.45
1:A:246:GLN:H	1:A:246:GLN:HG3	1.42	0.45
1:A:251:LYS:HE3	1:A:273:UNK:C	2.38	0.45
1:A:248:SER:O	1:A:251:LYS:HG3	2.17	0.45
1:A:371:VAL:HG21	1:A:407:UNK:HG3	1.98	0.45
1:A:446:ALA:O	1:A:447:UNK:C	2.63	0.45
1:A:136:THR:HG22	1:A:437:SER:CB	2.47	0.45
1:A:324:ILE:HD13	1:A:359:LEU:HD22	1.98	0.45
1:A:213:GLY:HA2	1:A:277:UNK:CE	2.47	0.45
1:A:191:HIS:NE2	1:A:243:CYS:CB	2.48	0.45
1:A:210:PHE:CD1	1:A:395:ARG:HD2	2.47	0.45
1:A:251:LYS:CE	1:A:273:UNK:HA	2.46	0.45
1:A:198:ASN:HD22	1:A:204:ILE:HB	1.82	0.45
1:A:197:VAL:O	1:A:204:ILE:HG13	2.16	0.45
1:A:324:ILE:HG21	1:A:359:LEU:CD2	2.46	0.45
1:A:41:SER:O	1:A:42:ALA:HB2	2.17	0.44
1:A:251:LYS:CA	1:A:275:THR:HG21	2.24	0.44
1:A:16:VAL:CG1	1:A:259:ILE:CG1	2.94	0.44
1:A:368:ARG:NH1	1:A:410:ASN:HD22	2.15	0.44
1:A:82:ALA:O	1:A:83:GLY:C	2.55	0.44
1:A:84:ARG:HD2	1:A:200:THR:CA	2.46	0.44
1:A:161:ALA:C	1:A:162:UNK:HG2	2.38	0.44
1:A:363:ALA:HB1	1:A:397:TYR:CE2	2.53	0.44
1:A:79:ILE:HG13	1:A:80:SER:N	2.33	0.44
1:A:356:ARG:CA	1:A:359:LEU:HD11	2.28	0.44
1:A:259:ILE:HD13	1:A:259:ILE:HG21	1.36	0.44
1:A:367:PHE:HA	1:A:400:PHE:CE1	2.52	0.44
1:A:367:PHE:CB	1:A:403:ASN:HB3	2.48	0.44
1:A:246:GLN:C	1:A:248:SER:H	2.19	0.44
1:A:220:CYS:HA	1:A:381:LYS:HD2	2.00	0.44
1:A:74:LEU:O	1:A:92:SER:HA	2.17	0.44
1:A:17:PHE:CE2	1:A:259:ILE:HD11	2.52	0.44
1:A:281:UNK:HG3	1:A:283:LYS:N	2.28	0.44
1:A:147:ILE:HG21	1:A:147:ILE:HD13	1.51	0.43
1:A:368:ARG:O	1:A:371:VAL:HG22	2.18	0.43
1:A:142:ALA:O	1:A:150:GLN:CG	2.61	0.43
1:A:210:PHE:O	1:A:394:UNK:HB2	2.18	0.43
1:A:197:VAL:HG12	1:A:204:ILE:CG1	2.47	0.43
1:A:252:ALA:O	1:A:254:PRO:HD3	2.18	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:261:TYR:CZ	1:A:292:VAL:HG13	2.53	0.43
1:A:327:LEU:CD1	1:A:332:LEU:HD23	2.49	0.43
1:A:34:ARG:HB3	1:A:45:ILE:HD12	1.99	0.43
1:A:304:UNK:O	1:A:305:UNK:CB	2.52	0.43
1:A:247:SER:CB	1:A:277:UNK:CD	2.96	0.43
1:A:367:PHE:CE1	1:A:397:TYR:CE2	3.07	0.43
1:A:419:UNK:HA	1:A:422:LYS:HD2	2.00	0.43
1:A:13:HIS:NE2	1:A:296:PHE:CE2	2.86	0.43
1:A:327:LEU:HD13	1:A:332:LEU:HD23	2.00	0.43
1:A:207:GLY:O	1:A:216:ALA:HA	2.19	0.43
1:A:48:VAL:O	1:A:48:VAL:HG22	2.19	0.42
1:A:196:UNK:HG1	1:A:435:ALA:HB3	2.01	0.42
1:A:363:ALA:HB1	1:A:367:PHE:HZ	1.71	0.42
1:A:68:VAL:HG12	1:A:75:GLU:HB3	2.01	0.42
1:A:163:LEU:O	1:A:165:LYS:HD2	2.19	0.42
1:A:10:VAL:CG2	1:A:354:VAL:CG2	2.98	0.42
1:A:359:LEU:HG	1:A:359:LEU:H	1.34	0.42
1:A:367:PHE:CD2	1:A:403:ASN:HB3	2.46	0.42
1:A:2:ALA:CB	1:A:350:UNK:HG3	2.48	0.42
1:A:58:GLY:H	1:A:60:GLN:NE2	2.17	0.42
1:A:415:PRO:HD2	1:A:416:GLN:OE1	2.19	0.42
1:A:265:LEU:HD21	1:A:291:ASP:OD1	2.20	0.42
1:A:303:HIS:ND1	1:A:351:MET:CE	2.82	0.42
1:A:96:ALA:C	1:A:97:ALA:O	2.55	0.42
1:A:57:SER:N	1:A:60:GLN:NE2	2.38	0.42
1:A:356:ARG:CA	1:A:359:LEU:CD1	2.65	0.42
1:A:140:ALA:CB	1:A:151:ILE:HD13	2.50	0.42
1:A:247:SER:HB2	1:A:274:LYS:NZ	2.35	0.42
1:A:3:ALA:O	1:A:6:ASP:N	2.47	0.42
1:A:294:MET:HE3	1:A:297:LYS:HB3	2.02	0.41
1:A:145:UNK:CD	1:A:147:ILE:HG21	2.33	0.41
1:A:166:LEU:O	1:A:170:MET:CG	2.68	0.41
1:A:282:ALA:CA	1:A:285:UNK:CD	2.97	0.41
1:A:234:UNK:O	1:A:236:GLY:CA	2.67	0.41
1:A:148:LYS:C	1:A:166:LEU:HD21	2.39	0.41
1:A:363:ALA:C	1:A:367:PHE:CE1	2.93	0.41
1:A:175:PHE:N	1:A:175:PHE:CD1	2.88	0.41
1:A:371:VAL:CG2	1:A:407:UNK:HG3	2.51	0.41
1:A:64:PHE:CE2	1:A:81:LEU:HD22	2.55	0.41
1:A:96:ALA:HB3	1:A:99:MET:HG3	2.02	0.41
1:A:131:VAL:HA	1:A:132:PRO:HD3	1.64	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:333:ARG:H	1:A:333:ARG:HG3	1.07	0.41
1:A:193:ILE:HD11	1:A:389:ALA:O	2.20	0.41
1:A:250:ARG:HD3	1:A:255:SER:N	2.34	0.41
1:A:422:LYS:HA	1:A:423:PRO:HD3	1.97	0.41
1:A:144:GLU:HG2	1:A:144:GLU:H	1.47	0.41
1:A:28:VAL:O	1:A:31:LEU:HB3	2.21	0.41
1:A:34:ARG:CA	1:A:34:ARG:NH1	2.65	0.41
1:A:327:LEU:HA	1:A:327:LEU:HD23	1.85	0.41
1:A:82:ALA:O	1:A:85:GLN:NE2	2.54	0.41
1:A:350:UNK:O	1:A:353:UNK:HB2	2.20	0.41
1:A:119:PHE:O	1:A:123:GLU:HB2	2.21	0.41
1:A:13:HIS:CD2	1:A:296:PHE:CE2	3.09	0.40
1:A:277:UNK:O	1:A:281:UNK:CB	2.69	0.40
1:A:281:UNK:HG3	1:A:283:LYS:CB	2.50	0.40
1:A:348:LYS:CG	1:A:349:THR:N	2.83	0.40
1:A:324:ILE:CD1	1:A:359:LEU:HD22	2.52	0.40
1:A:21:PRO:O	1:A:22:UNK:C	2.67	0.40
1:A:10:VAL:HG23	1:A:354:VAL:HG23	2.03	0.40
1:A:367:PHE:CZ	1:A:397:TYR:CD2	3.09	0.40
1:A:79:ILE:CD1	1:A:86:GLU:CG	2.99	0.40
1:A:84:ARG:HA	1:A:84:ARG:HD3	1.92	0.40
1:A:247:SER:CA	1:A:277:UNK:HG2	2.44	0.40
1:A:175:PHE:N	1:A:175:PHE:HD1	2.20	0.40
1:A:294:MET:SD	1:A:310:PHE:HD2	2.44	0.40
1:A:99:MET:HE3	1:A:111:ASN:HB2	2.03	0.40
1:A:96:ALA:O	1:A:97:ALA:O	2.39	0.40
1:A:414:TRP:HB3	1:A:416:GLN:CD	2.41	0.40
1:A:9:LEU:HD11	1:A:296:PHE:CE1	2.51	0.40
1:A:371:VAL:HG21	1:A:407:UNK:CG	2.51	0.40
1:A:105:PRO:O	1:A:106:SER:C	2.59	0.40

All (5) symmetry-related close contacts are listed below. The label for Atom-2 includes the symmetry operator and encoded unit-cell translations to be applied.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:258:GLN:NE2	1:A:330:PHE:CZ[2_555]	1.78	0.42
1:A:258:GLN:NE2	1:A:330:PHE:CE2[2_555]	1.84	0.36
1:A:258:GLN:O	1:A:329:HIS:O[2_555]	1.90	0.30
1:A:107:ASP:OD1	1:A:415:PRO:CD[1_545]	1.97	0.23
1:A:107:ASP:OD1	1:A:415:PRO:CG[1_545]	2.10	0.10

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	377/457 (82%)	304 (81%)	45 (12%)	28 (7%)	1 0

All (28) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	42	ALA
1	A	43	ALA
1	A	55	GLN
1	A	130	SER
1	A	142	ALA
1	A	229	ALA
1	A	235	GLY
1	A	237	ALA
1	A	272	ALA
1	A	396	SER
1	A	83	GLY
1	A	100	SER
1	A	126	SER
1	A	253	PHE
1	A	330	PHE
1	A	342	ASP
1	A	4	ALA
1	A	157	ALA
1	A	449	SER
1	A	455	ALA
1	A	139	GLU
1	A	159	SER
1	A	179	ASP
1	A	444	ALA
1	A	270	PRO
1	A	415	PRO
1	A	56	VAL
1	A	225	ILE

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	287/287 (100%)	187 (65%)	100 (35%)	0 0

All (100) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	6	ASP
1	A	8	SER
1	A	9	LEU
1	A	11	GLU
1	A	23	ILE
1	A	30	ILE
1	A	31	LEU
1	A	34	ARG
1	A	53	LEU
1	A	54	LYS
1	A	55	GLN
1	A	56	VAL
1	A	60	GLN
1	A	65	LEU
1	A	68	VAL
1	A	69	MET
1	A	77	ILE
1	A	79	ILE
1	A	81	LEU
1	A	84	ARG
1	A	89	ILE
1	A	93	ARG
1	A	94	SER
1	A	100	SER
1	A	102	THR
1	A	104	ILE
1	A	107	ASP
1	A	108	LEU
1	A	116	ASN
1	A	123	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	125	SER
1	A	126	SER
1	A	130	SER
1	A	135	PHE
1	A	136	THR
1	A	139	GLU
1	A	143	LYS
1	A	144	GLU
1	A	146	VAL
1	A	148	LYS
1	A	150	GLN
1	A	151	ILE
1	A	154	GLN
1	A	160	LEU
1	A	163	LEU
1	A	165	LYS
1	A	166	LEU
1	A	167	ILE
1	A	168	SER
1	A	172	ASN
1	A	175	PHE
1	A	179	ASP
1	A	193	ILE
1	A	205	LYS
1	A	208	ILE
1	A	214	VAL
1	A	221	ASP
1	A	223	THR
1	A	227	ASP
1	A	230	ASP
1	A	245	ASP
1	A	246	GLN
1	A	247	SER
1	A	250	ARG
1	A	258	GLN
1	A	259	ILE
1	A	265	LEU
1	A	275	THR
1	A	279	ASN
1	A	283	LYS
1	A	289	LEU
1	A	290	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	292	VAL
1	A	293	LEU
1	A	294	MET
1	A	297	LYS
1	A	301	GLN
1	A	309	SER
1	A	315	VAL
1	A	317	ASN
1	A	327	LEU
1	A	337	ASP
1	A	343	GLN
1	A	348	LYS
1	A	351	MET
1	A	354	VAL
1	A	359	LEU
1	A	365	TYR
1	A	367	PHE
1	A	370	VAL
1	A	381	LYS
1	A	384	SER
1	A	393	SER
1	A	398	SER
1	A	408	ASN
1	A	417	SER
1	A	421	SER
1	A	430	ILE
1	A	437	SER
1	A	449	SER

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (13) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	55	GLN
1	A	60	GLN
1	A	116	ASN
1	A	172	ASN
1	A	191	HIS
1	A	198	ASN
1	A	258	GLN
1	A	279	ASN
1	A	317	ASN
1	A	325	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	329	HIS
1	A	408	ASN
1	A	410	ASN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

1 ligand is modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. 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 $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	OTG	A	1	-	22,22,22	0.72	0	27,31,31	1.00	1 (3%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	OTG	A	1	-	-	0/10/30/30	0/2/2/2

There are no bond length outliers.

All (1) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed($^{\circ}$)	Ideal($^{\circ}$)
2	A	1	OTG	C1-O5-C5	-2.23	109.34	113.47

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

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

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

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

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

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

6.3 Carbohydrates [i](#)

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

6.4 Ligands [i](#)

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

6.5 Other polymers [i](#)

EDS was not executed - this section will therefore be empty.