Full wwPDB X-ray Structure Validation Report (i)

Jun 12, 2024 – 08:57 PM EDT

PDB ID	:	1EH9
Title	:	CRYSTAL STRUCTURE OF SULFOLOBUS SOLFATARICUS GLYCOSYL-TREHALOSE TREHALOHYDROLASE
Authors	:	Feese, M.D.; Kato, Y.; Tamada, T.; Kato, M.; Komeda, T.; Kobayashi, K.; Kuroki, R.
Deposited on	:	2000-02-19
Resolution	:	3.00 Å(reported)

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

We welcome your comments at *validation@mail.wwpdb.org*
A user guide is available at
https://www.wwpdb.org/validation/2017/XrayValidationReportHelp
with specific help available everywhere you see the (i) symbol.

The types of validation reports are described at
http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types.

The following versions of software and data (see references (1)) were used in the production of this report:

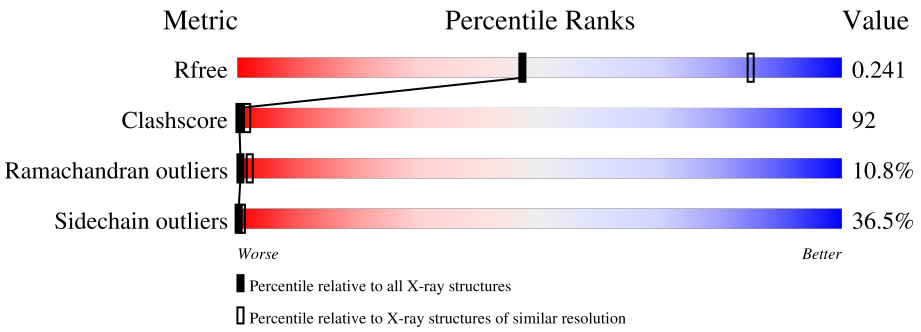
MolProbity	:	4.02b-467
Xtriage (Phenix)	:	1.13
EDS	:	2.36.2
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Refmac	:	5.8.0158
CCP4	:	7.0.044 (Gargrove)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.36.2

1 Overall quality at a glance (i)

The following experimental techniques were used to determine the structure:
X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.00 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
R_{free}	130704	2092 (3.00-3.00)
Clashscore	141614	2416 (3.00-3.00)
Ramachandran outliers	138981	2333 (3.00-3.00)
Sidechain outliers	138945	2336 (3.00-3.00)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments of the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for >=3, 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria respectively. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions <=5%

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	558	11% 45% 35% 8%

2 Entry composition (i)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 4570 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 GLYCOSYLTREHALOSE TREHALOHYDROLASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	557	4541	2926	741	865	9	0	0	0

- Molecule 2 is water.

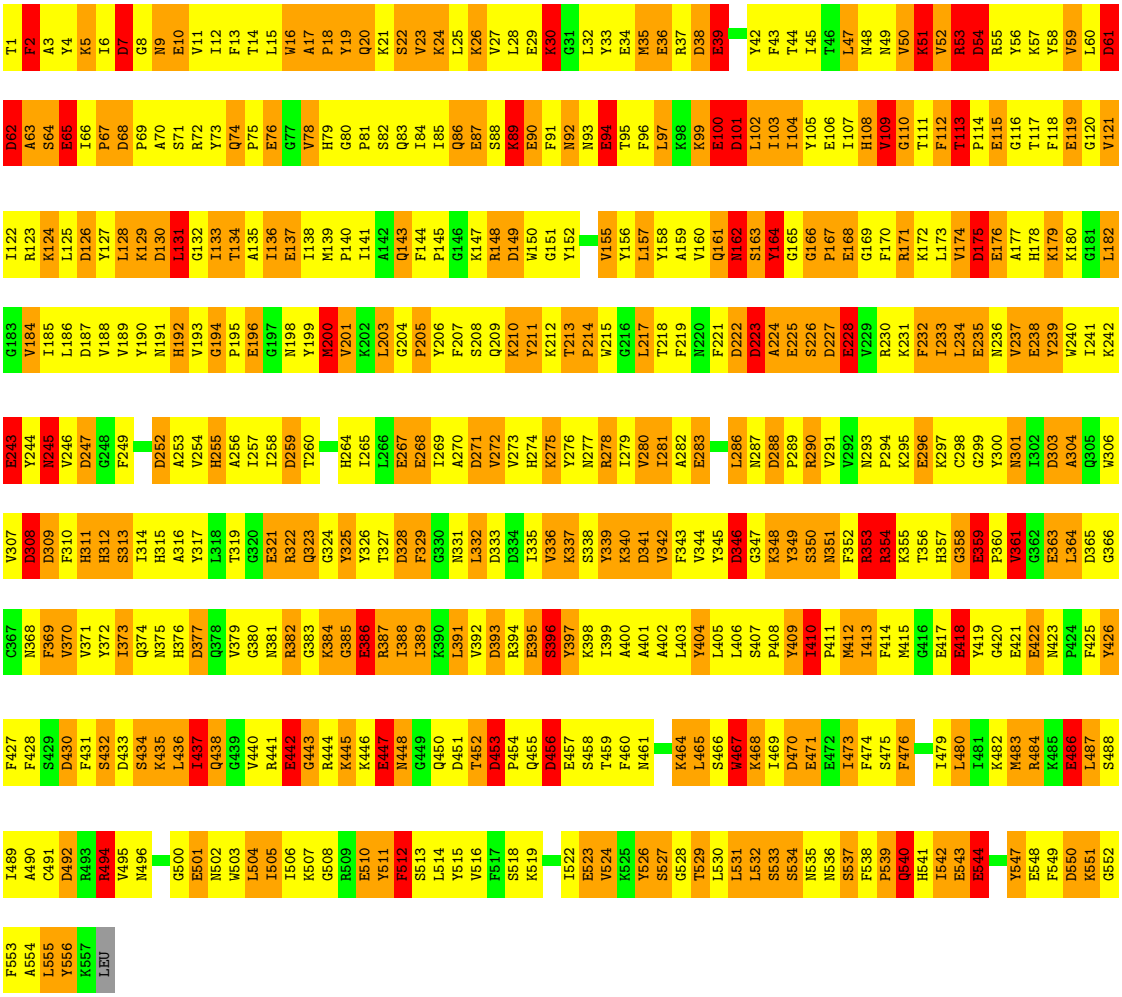
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
			Total	O		
2	A	29	29	29	0	0

3 Residue-property plots (i)

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

- Molecule 1: GLYCOSYLTREHALOSE TREHALOHYDROLASE

Chain A: 11% 45% 35% 8%



4 Data and refinement statistics (i)

Property	Value	Source
Space group	P 32 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α, β, γ	80.24Å 80.24Å 281.97Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	20.00 – 3.00 55.88 – 3.00	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	95.0 (20.00-3.00) 99.1 (55.88-3.00)	Depositor EDS
R_{merge}	0.12	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$< I/\sigma(I) >$ [1]	2.39 (at 3.01Å)	Xtriage
Refinement program	TNT 5E	Depositor
R, R_{free}	(Not available) , (Not available) 0.188 , 0.241	Depositor DCC
R_{free} test set	1116 reflections (5.12%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å^2)	61.1	Xtriage
Anisotropy	0.718	Xtriage
Bulk solvent k_{sol}(e/Å^3), B_{sol}(Å^2)	0.33 , 218.5	EDS
L-test for twinning[2]	$< \|L\| > = 0.50$, $< L^2 > = 0.33$	Xtriage
Estimated twinning fraction	0.027 for -h,-k,l	Xtriage
F_o,F_c correlation	0.95	EDS
Total number of atoms	4570	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å^2)	46.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.92% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

[1]Intensities estimated from amplitudes.

[2]Theoretical values of $< |L| >$, $< L^2 >$ for acentric reflections are 0.5, 0.333 respectively for untwinned datasets, and 0.375, 0.2 for perfectly twinned datasets.

5 Model quality (i)

5.1 Standard geometry (i)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\#\|Z\|>5$	RMSZ	$\#\|Z\|>5$
1	A	1.17	45/4659 (1.0%)	1.54	86/6305 (1.4%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand.A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	1	0

All (45) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	137	GLU	CD-OE2	9.84	1.36	1.25
1	A	106	GLU	CD-OE2	8.35	1.34	1.25
1	A	168	GLU	CD-OE2	7.17	1.33	1.25
1	A	76	GLU	CD-OE2	7.12	1.33	1.25
1	A	296	GLU	CD-OE2	7.09	1.33	1.25
1	A	363	GLU	CD-OE2	7.03	1.33	1.25
1	A	29	GLU	CD-OE2	6.99	1.33	1.25
1	A	523	GLU	CD-OE2	6.93	1.33	1.25
1	A	447	GLU	CD-OE2	6.86	1.33	1.25
1	A	65	GLU	CD-OE2	6.85	1.33	1.25
1	A	486	GLU	CD-OE2	6.84	1.33	1.25
1	A	94	GLU	CD-OE2	6.80	1.33	1.25
1	A	196	GLU	CD-OE2	6.79	1.33	1.25
1	A	36	GLU	CD-OE2	6.69	1.33	1.25
1	A	267	GLU	CD-OE2	6.56	1.32	1.25
1	A	34	GLU	CD-OE2	6.55	1.32	1.25
1	A	87	GLU	CD-OE2	6.49	1.32	1.25
1	A	176	GLU	CD-OE2	6.46	1.32	1.25
1	A	115	GLU	CD-OE2	6.41	1.32	1.25
1	A	359	GLU	CD-OE2	6.38	1.32	1.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	225	GLU	CD-OE2	6.35	1.32	1.25
1	A	90	GLU	CD-OE2	6.32	1.32	1.25
1	A	39	GLU	CD-OE2	6.27	1.32	1.25
1	A	418	GLU	CD-OE2	6.27	1.32	1.25
1	A	119	GLU	CD-OE2	6.26	1.32	1.25
1	A	321	GLU	CD-OE2	6.25	1.32	1.25
1	A	228	GLU	CD-OE2	6.25	1.32	1.25
1	A	471	GLU	CD-OE2	6.24	1.32	1.25
1	A	268	GLU	CD-OE2	6.02	1.32	1.25
1	A	386	GLU	CD-OE2	5.96	1.32	1.25
1	A	422	GLU	CD-OE2	5.94	1.32	1.25
1	A	543	GLU	CD-OE2	5.93	1.32	1.25
1	A	544	GLU	CD-OE2	5.93	1.32	1.25
1	A	243	GLU	CD-OE2	5.89	1.32	1.25
1	A	442	GLU	CD-OE2	5.89	1.32	1.25
1	A	283	GLU	CD-OE2	5.80	1.32	1.25
1	A	10	GLU	CD-OE2	5.75	1.31	1.25
1	A	395	GLU	CD-OE2	5.50	1.31	1.25
1	A	501	GLU	CD-OE2	5.50	1.31	1.25
1	A	100	GLU	CD-OE2	5.50	1.31	1.25
1	A	235	GLU	CD-OE2	5.40	1.31	1.25
1	A	417	GLU	CD-OE2	5.35	1.31	1.25
1	A	510	GLU	CD-OE2	5.33	1.31	1.25
1	A	548	GLU	CD-OE2	5.22	1.31	1.25
1	A	457	GLU	CD-OE2	5.16	1.31	1.25

All (86) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})
1	A	303	ASP	CB-CG-OD2	-9.82	109.46	118.30
1	A	247	ASP	CB-CG-OD2	-9.28	109.95	118.30
1	A	288	ASP	CB-CG-OD2	-9.25	109.97	118.30
1	A	309	ASP	CB-CG-OD2	-8.82	110.36	118.30
1	A	470	ASP	CB-CG-OD1	8.25	125.72	118.30
1	A	470	ASP	CB-CG-OD2	-8.10	111.01	118.30
1	A	223	ASP	CB-CG-OD2	-7.94	111.15	118.30
1	A	101	ASP	CB-CG-OD2	-7.92	111.17	118.30
1	A	194	GLY	C-N-CD	-7.92	103.19	120.60
1	A	271	ASP	CB-CG-OD2	-7.88	111.21	118.30
1	A	550	ASP	CB-CG-OD2	-7.88	111.21	118.30
1	A	7	ASP	CB-CG-OD2	-7.83	111.25	118.30
1	A	328	ASP	CB-CG-OD2	-7.57	111.49	118.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})
1	A	430	ASP	CB-CG-OD2	-7.53	111.53	118.30
1	A	149	ASP	CB-CG-OD2	-7.49	111.56	118.30
1	A	484	ARG	NE-CZ-NH1	7.39	124.00	120.30
1	A	54	ASP	CB-CG-OD2	-7.32	111.71	118.30
1	A	393	ASP	CB-CG-OD2	-7.27	111.76	118.30
1	A	341	ASP	CB-CG-OD1	7.19	124.77	118.30
1	A	223	ASP	CB-CG-OD1	7.08	124.67	118.30
1	A	365	ASP	CB-CG-OD2	-7.05	111.95	118.30
1	A	252	ASP	CB-CG-OD1	7.03	124.62	118.30
1	A	346	ASP	CB-CG-OD2	-6.93	112.07	118.30
1	A	394	ARG	NE-CZ-NH1	6.84	123.72	120.30
1	A	341	ASP	CB-CG-OD2	-6.80	112.18	118.30
1	A	130	ASP	CB-CG-OD2	-6.79	112.19	118.30
1	A	271	ASP	CB-CG-OD1	6.78	124.40	118.30
1	A	456	ASP	CB-CG-OD2	-6.77	112.21	118.30
1	A	365	ASP	CB-CG-OD1	6.73	124.36	118.30
1	A	126	ASP	CB-CG-OD2	-6.72	112.25	118.30
1	A	430	ASP	CB-CG-OD1	6.70	124.33	118.30
1	A	410	ILE	C-N-CD	-6.69	105.88	120.60
1	A	68	ASP	CB-CG-OD2	-6.56	112.40	118.30
1	A	512	PHE	N-CA-CB	6.51	122.32	110.60
1	A	309	ASP	CB-CG-OD1	6.47	124.12	118.30
1	A	149	ASP	CB-CG-OD1	6.46	124.12	118.30
1	A	333	ASP	CB-CG-OD2	-6.40	112.54	118.30
1	A	61	ASP	CB-CG-OD2	-6.35	112.58	118.30
1	A	239	TYR	CB-CG-CD2	-6.33	117.20	121.00
1	A	62	ASP	CB-CG-OD1	6.27	123.94	118.30
1	A	333	ASP	CB-CG-OD1	6.26	123.94	118.30
1	A	222	ASP	CB-CG-OD2	-6.26	112.67	118.30
1	A	227	ASP	CB-CG-OD2	-6.26	112.67	118.30
1	A	101	ASP	CB-CG-OD1	6.23	123.91	118.30
1	A	550	ASP	CB-CG-OD1	6.21	123.89	118.30
1	A	451	ASP	CB-CG-OD2	-6.07	112.83	118.30
1	A	353	ARG	NE-CZ-NH2	-6.06	117.27	120.30
1	A	7	ASP	CB-CG-OD1	6.04	123.74	118.30
1	A	354	ARG	NE-CZ-NH1	6.04	123.32	120.30
1	A	288	ASP	CB-CG-OD1	5.97	123.67	118.30
1	A	252	ASP	CB-CG-OD2	-5.95	112.95	118.30
1	A	54	ASP	CB-CG-OD1	5.91	123.61	118.30
1	A	61	ASP	CB-CG-OD1	5.87	123.58	118.30
1	A	492	ASP	CB-CG-OD2	-5.85	113.03	118.30
1	A	130	ASP	CB-CG-OD1	5.82	123.53	118.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})
1	A	308	ASP	CB-CG-OD2	-5.81	113.07	118.30
1	A	328	ASP	CB-CG-OD1	5.79	123.52	118.30
1	A	453	ASP	CB-CG-OD2	-5.77	113.11	118.30
1	A	166	GLY	C-N-CD	-5.76	107.92	120.60
1	A	62	ASP	CB-CG-OD2	-5.73	113.14	118.30
1	A	393	ASP	CB-CG-OD1	5.72	123.45	118.30
1	A	346	ASP	N-CA-CB	-5.67	100.39	110.60
1	A	353	ARG	NE-CZ-NH1	5.64	123.12	120.30
1	A	308	ASP	CB-CG-OD1	5.60	123.34	118.30
1	A	126	ASP	CB-CG-OD1	5.59	123.33	118.30
1	A	504	LEU	N-CA-CB	-5.58	99.24	110.40
1	A	456	ASP	CB-CG-OD1	5.51	123.26	118.30
1	A	451	ASP	CB-CG-OD1	5.49	123.24	118.30
1	A	53	ARG	CA-CB-CG	-5.49	101.33	113.40
1	A	377	ASP	N-CA-CB	5.48	120.46	110.60
1	A	175	ASP	CB-CG-OD2	-5.40	113.44	118.30
1	A	453	ASP	C-N-CD	-5.36	108.80	120.60
1	A	53	ARG	NE-CZ-NH2	-5.36	117.62	120.30
1	A	361	VAL	C-N-CA	-5.35	111.06	122.30
1	A	304	ALA	CB-CA-C	5.31	118.07	110.10
1	A	426	TYR	CB-CG-CD1	-5.29	117.82	121.00
1	A	238	GLU	N-CA-CB	5.29	120.12	110.60
1	A	377	ASP	CB-CG-OD1	5.25	123.03	118.30
1	A	259	ASP	CB-CG-OD2	-5.24	113.58	118.30
1	A	453	ASP	CB-CG-OD1	5.14	122.92	118.30
1	A	161	GLN	N-CA-CB	5.13	119.84	110.60
1	A	494	ARG	NE-CZ-NH1	5.09	122.85	120.30
1	A	495	VAL	N-CA-CB	-5.08	100.32	111.50
1	A	190	TYR	CB-CG-CD2	-5.07	117.96	121.00
1	A	442	GLU	N-CA-CB	5.04	119.67	110.60
1	A	113	THR	N-CA-CB	-5.03	100.75	110.30

All (1) chirality outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atom
1	A	556	TYR	CA

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	4541	0	4349	815	0
2	A	29	0	0	6	0
All	All	4570	0	4349	815	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 92.

All (815) 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:113:THR:HG22	1:A:116:GLY:H	1.05	1.17
1:A:107:ILE:HD12	1:A:136:ILE:HG23	1.29	1.15
1:A:104:ILE:HB	1:A:412:MET:HB2	1.23	1.12
1:A:287:ASN:HB2	1:A:358:GLY:HA3	1.31	1.11
1:A:139:MET:HE1	1:A:376:HIS:HB3	1.27	1.10
1:A:337:LYS:HD2	1:A:344:VAL:HA	1.13	1.06
1:A:131:LEU:HD21	1:A:418:GLU:HG2	1.39	1.05
1:A:186:LEU:HD12	1:A:187:ASP:H	1.21	1.03
1:A:35:MET:HB2	1:A:43:PHE:HB3	1.41	1.00
1:A:113:THR:HG21	1:A:120:GLY:HA3	1.45	0.99
1:A:476:PHE:HE1	1:A:532:LEU:HD11	1.27	0.97
1:A:273:VAL:HG21	1:A:280:VAL:HG22	1.44	0.97
1:A:28:LEU:HD12	1:A:55:ARG:HB2	1.47	0.95
1:A:52:VAL:HG23	1:A:54:ASP:HB2	1.48	0.94
1:A:88:SER:HB2	1:A:243:GLU:HG3	1.50	0.93
1:A:396:SER:HA	1:A:399:ILE:HD12	1.50	0.93
1:A:294:PRO:HA	1:A:301:ASN:ND2	1.84	0.92
1:A:255:HIS:HB3	1:A:286:LEU:HD12	1.51	0.91
1:A:24:LYS:HB3	1:A:32:LEU:HD11	1.54	0.90
1:A:503:TRP:CZ3	1:A:505:ILE:HG23	2.07	0.90
1:A:500:GLY:HA3	1:A:503:TRP:NE1	1.87	0.90
1:A:140:PRO:HG2	1:A:152:TYR:CE1	2.06	0.90
1:A:255:HIS:HB3	1:A:286:LEU:CD1	2.01	0.90
1:A:219:PHE:HB2	1:A:221:PHE:CZ	2.06	0.89
1:A:23:VAL:HG13	1:A:60:LEU:HA	1.54	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:219:PHE:HB2	1:A:221:PHE:CE1	2.08	0.88
1:A:25:LEU:HD13	1:A:26:LYS:N	1.88	0.88
1:A:532:LEU:HD12	1:A:533:SER:N	1.88	0.88
1:A:35:MET:HG2	1:A:45:ILE:HD11	1.54	0.88
1:A:35:MET:HE2	1:A:45:ILE:HG13	1.55	0.87
1:A:337:LYS:CD	1:A:344:VAL:HA	2.03	0.86
1:A:104:ILE:CB	1:A:412:MET:HB2	2.04	0.86
1:A:433:ASP:HB3	1:A:436:LEU:CD1	2.05	0.86
1:A:131:LEU:CD2	1:A:418:GLU:HG2	2.06	0.85
1:A:419:TYR:CE1	1:A:421:GLU:HB2	2.12	0.85
1:A:186:LEU:HD12	1:A:187:ASP:N	1.92	0.85
1:A:24:LYS:HB2	1:A:59:VAL:HG13	1.59	0.84
1:A:389:ILE:HG23	1:A:397:TYR:CE2	2.12	0.84
1:A:155:VAL:HG12	1:A:156:TYR:CD1	2.12	0.84
1:A:35:MET:CB	1:A:43:PHE:HB3	2.07	0.84
1:A:384:LYS:HA	1:A:426:TYR:HE1	1.42	0.84
1:A:522:ILE:HG22	1:A:524:VAL:H	1.43	0.84
1:A:52:VAL:CG2	1:A:54:ASP:HB2	2.07	0.83
1:A:27:VAL:HG12	1:A:30:LYS:H	1.42	0.83
1:A:145:PRO:HG2	1:A:431:PHE:HE1	1.42	0.83
1:A:16:TRP:CE3	1:A:18:PRO:HD3	2.13	0.82
1:A:133:ILE:HD11	1:A:413:ILE:CD1	2.09	0.82
1:A:155:VAL:HG12	1:A:156:TYR:CE1	2.15	0.82
1:A:373:ILE:HD13	1:A:404:TYR:HD2	1.45	0.82
1:A:503:TRP:CZ3	1:A:505:ILE:HD13	2.15	0.82
1:A:113:THR:HG22	1:A:116:GLY:N	1.91	0.81
1:A:547:TYR:HB2	1:A:549:PHE:CE1	2.15	0.81
1:A:476:PHE:CE1	1:A:532:LEU:HD11	2.16	0.81
1:A:137:GLU:HG3	1:A:185:ILE:HG22	1.63	0.81
1:A:373:ILE:HD13	1:A:404:TYR:CD2	2.16	0.80
1:A:452:THR:HG21	1:A:459:THR:HG23	1.62	0.80
1:A:27:VAL:HG11	1:A:30:LYS:HD3	1.64	0.80
1:A:291:VAL:HA	1:A:300:TYR:HD1	1.45	0.79
1:A:26:LYS:HB2	1:A:32:LEU:CD2	2.12	0.79
1:A:60:LEU:CD1	1:A:62:ASP:HB3	2.12	0.79
1:A:174:VAL:HG23	1:A:178:HIS:ND1	1.97	0.79
1:A:354:ARG:HB3	1:A:354:ARG:CZ	2.12	0.79
1:A:50:VAL:HG22	1:A:52:VAL:CG2	2.13	0.78
1:A:542:ILE:HG13	1:A:543:GLU:H	1.48	0.78
1:A:140:PRO:HG2	1:A:152:TYR:HE1	1.47	0.78
1:A:357:HIS:ND1	1:A:358:GLY:N	2.31	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:349:TYR:HE1	1:A:354:ARG:HA	1.47	0.78
1:A:32:LEU:HD21	1:A:59:VAL:CG1	2.14	0.77
1:A:139:MET:HE1	1:A:376:HIS:CB	2.09	0.77
1:A:42:TYR:OH	1:A:228:GLU:HG3	1.84	0.77
1:A:135:ALA:C	1:A:136:ILE:HD13	2.05	0.77
1:A:287:ASN:HB2	1:A:358:GLY:CA	2.12	0.77
1:A:25:LEU:O	1:A:32:LEU:HD22	1.83	0.76
1:A:383:GLY:HA2	1:A:450:GLN:HB2	1.65	0.76
1:A:11:VAL:HG13	1:A:13:PHE:HE1	1.48	0.76
1:A:113:THR:CG2	1:A:115:GLU:HB2	2.16	0.76
1:A:461:ASN:HA	1:A:464:LYS:HG3	1.67	0.76
1:A:113:THR:CG2	1:A:116:GLY:H	1.94	0.76
1:A:210:LYS:HZ2	1:A:222:ASP:HB3	1.52	0.75
1:A:542:ILE:HG13	1:A:543:GLU:N	1.98	0.75
1:A:83:GLN:HG2	1:A:84:ILE:N	2.02	0.74
1:A:337:LYS:HG3	1:A:344:VAL:HG22	1.68	0.74
1:A:373:ILE:O	1:A:374:GLN:HG2	1.87	0.74
1:A:131:LEU:HD12	1:A:131:LEU:O	1.87	0.74
1:A:113:THR:HG23	1:A:115:GLU:OE2	1.88	0.74
1:A:254:VAL:HG11	1:A:282:ALA:HB1	1.67	0.74
1:A:312:HIS:N	1:A:312:HIS:ND1	2.29	0.74
1:A:145:PRO:HG2	1:A:431:PHE:CE1	2.21	0.74
1:A:24:LYS:CB	1:A:32:LEU:HD11	2.18	0.74
1:A:337:LYS:CG	1:A:344:VAL:HG22	2.18	0.73
1:A:210:LYS:NZ	1:A:222:ASP:HB3	2.04	0.73
1:A:122:ILE:HA	1:A:125:LEU:CD1	2.19	0.73
1:A:32:LEU:HD21	1:A:59:VAL:HG11	1.70	0.73
1:A:24:LYS:HD2	1:A:32:LEU:HD11	1.70	0.73
1:A:287:ASN:H	1:A:357:HIS:HE1	1.34	0.73
1:A:434:SER:HA	1:A:437:ILE:HD12	1.70	0.73
1:A:527:SER:OG	1:A:543:GLU:HA	1.89	0.72
1:A:136:ILE:HG22	1:A:138:ILE:HD12	1.70	0.72
1:A:433:ASP:OD2	1:A:436:LEU:HG	1.88	0.72
1:A:16:TRP:HA	1:A:42:TYR:CD1	2.25	0.72
1:A:105:TYR:HB2	1:A:133:ILE:HG13	1.70	0.72
1:A:287:ASN:H	1:A:357:HIS:CE1	2.07	0.71
1:A:461:ASN:HA	1:A:464:LYS:CG	2.20	0.71
1:A:280:VAL:O	1:A:303:ASP:HB2	1.90	0.71
1:A:307:VAL:HG21	1:A:369:PHE:HB3	1.71	0.71
1:A:349:TYR:CE1	1:A:354:ARG:HA	2.25	0.71
1:A:96:PHE:CE2	1:A:178:HIS:HD2	2.09	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:433:ASP:HB3	1:A:436:LEU:HD11	1.70	0.71
1:A:173:LEU:HD12	1:A:173:LEU:O	1.91	0.71
1:A:269:ILE:HG22	1:A:270:ALA:N	2.04	0.71
1:A:56:TYR:O	1:A:57:LYS:HG2	1.88	0.71
1:A:56:TYR:CE1	1:A:82:SER:HB2	2.26	0.71
1:A:107:ILE:CD1	1:A:136:ILE:HG23	2.16	0.71
1:A:118:PHE:HB3	1:A:173:LEU:HB2	1.73	0.71
1:A:32:LEU:HD13	1:A:33:TYR:N	2.06	0.70
1:A:16:TRP:HA	1:A:42:TYR:HD1	1.56	0.70
1:A:174:VAL:HB	1:A:184:VAL:HG11	1.74	0.70
1:A:278:ARG:O	1:A:279:ILE:HD13	1.90	0.70
1:A:287:ASN:CB	1:A:358:GLY:HA3	2.18	0.70
1:A:432:SER:C	1:A:437:ILE:HD11	2.12	0.70
1:A:507:LYS:HG2	1:A:508:GLY:O	1.92	0.70
1:A:26:LYS:HB2	1:A:32:LEU:HD23	1.74	0.70
1:A:91:PHE:CE2	1:A:242:LYS:HD2	2.25	0.70
1:A:484:ARG:NH1	1:A:490:ALA:HB2	2.06	0.70
1:A:113:THR:HG21	1:A:120:GLY:CA	2.22	0.70
1:A:418:GLU:O	1:A:473:ILE:HG22	1.92	0.69
1:A:108:HIS:HD2	1:A:425:PHE:HZ	1.40	0.69
1:A:174:VAL:HG23	1:A:178:HIS:CE1	2.27	0.69
1:A:467:TRP:O	1:A:469:ILE:HD12	1.92	0.69
1:A:265:ILE:HD12	1:A:268:GLU:HB2	1.75	0.69
1:A:337:LYS:HA	1:A:340:LYS:NZ	2.06	0.69
1:A:384:LYS:HA	1:A:426:TYR:CE1	2.25	0.69
1:A:408:PRO:HB3	1:A:492:ASP:O	1.91	0.69
1:A:371:VAL:HG11	1:A:409:TYR:HD2	1.57	0.69
1:A:105:TYR:HD1	1:A:107:ILE:HG13	1.56	0.69
1:A:346:ASP:HB2	1:A:348:LYS:NZ	2.06	0.69
1:A:433:ASP:HB3	1:A:436:LEU:HD12	1.74	0.69
1:A:148:ARG:HH11	1:A:148:ARG:HB2	1.57	0.69
1:A:291:VAL:HA	1:A:300:TYR:CD1	2.26	0.69
1:A:36:GLU:H	1:A:44:THR:H	1.41	0.69
1:A:127:TYR:HE1	1:A:474:PHE:CE2	2.11	0.69
1:A:9:ASN:HD21	1:A:48:ASN:HB2	1.58	0.68
1:A:503:TRP:HZ3	1:A:505:ILE:HG23	1.56	0.68
1:A:530:LEU:HD12	1:A:531:LEU:H	1.58	0.68
1:A:342:VAL:HG11	1:A:369:PHE:CD2	2.29	0.68
1:A:213:THR:HB	1:A:214:PRO:CD	2.24	0.68
1:A:6:ILE:HA	1:A:10:GLU:O	1.93	0.68
1:A:492:ASP:OD2	1:A:494:ARG:HG3	1.94	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:69:PRO:HB2	1:A:200:MET:HE1	1.75	0.68
1:A:140:PRO:HD3	1:A:187:ASP:OD2	1.94	0.68
1:A:371:VAL:HG22	1:A:409:TYR:HB2	1.76	0.68
1:A:156:TYR:O	1:A:158:TYR:N	2.27	0.67
1:A:319:THR:OG1	1:A:321:GLU:HB2	1.95	0.67
1:A:245:ASN:ND2	1:A:278:ARG:HH12	1.91	0.67
1:A:384:LYS:O	1:A:386:GLU:N	2.28	0.67
1:A:199:TYR:O	1:A:200:MET:C	2.33	0.67
1:A:241:ILE:HD11	1:A:249:PHE:HE1	1.59	0.67
1:A:507:LYS:HG2	1:A:508:GLY:N	2.09	0.67
1:A:100:GLU:N	1:A:100:GLU:OE2	2.27	0.67
1:A:483:MET:HE2	1:A:531:LEU:HD11	1.76	0.67
1:A:312:HIS:CD2	1:A:325:TYR:HD2	2.13	0.67
1:A:307:VAL:CG2	1:A:369:PHE:HB3	2.24	0.67
1:A:452:THR:CG2	1:A:459:THR:HG23	2.24	0.67
1:A:60:LEU:HD13	1:A:62:ASP:HB3	1.76	0.67
1:A:122:ILE:HA	1:A:125:LEU:HD13	1.76	0.67
1:A:423:ASN:HD21	1:A:466:SER:HB3	1.59	0.66
1:A:418:GLU:OE2	1:A:418:GLU:N	2.29	0.66
1:A:547:TYR:HB2	1:A:549:PHE:HE1	1.57	0.66
1:A:144:PHE:HB2	1:A:145:PRO:HD2	1.76	0.66
1:A:133:ILE:HD11	1:A:413:ILE:HD12	1.75	0.66
1:A:539:PRO:O	1:A:541:HIS:N	2.29	0.66
1:A:469:ILE:HD12	1:A:469:ILE:H	1.60	0.66
1:A:136:ILE:HD13	1:A:136:ILE:N	2.11	0.66
1:A:351:ASN:ND2	1:A:351:ASN:H	1.94	0.66
1:A:113:THR:HG23	1:A:115:GLU:H	1.61	0.66
1:A:286:LEU:CD1	1:A:286:LEU:H	2.08	0.66
1:A:24:LYS:HB3	1:A:32:LEU:CD1	2.25	0.66
1:A:54:ASP:O	1:A:84:ILE:HD12	1.96	0.66
1:A:437:ILE:HG23	1:A:455:GLN:CD	2.17	0.66
1:A:269:ILE:O	1:A:272:VAL:HG23	1.95	0.66
1:A:393:ASP:O	1:A:396:SER:HB2	1.96	0.66
1:A:341:ASP:O	1:A:343:PHE:N	2.29	0.66
1:A:483:MET:O	1:A:487:LEU:HB2	1.96	0.66
1:A:108:HIS:O	1:A:110:GLY:N	2.29	0.65
1:A:396:SER:CA	1:A:399:ILE:HD12	2.25	0.65
1:A:387:ARG:NH2	1:A:415:MET:O	2.29	0.65
1:A:163:SER:O	1:A:165:GLY:N	2.28	0.65
1:A:73:TYR:CE2	1:A:75:PRO:HB3	2.32	0.65
1:A:254:VAL:CG1	1:A:282:ALA:HB1	2.25	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:542:ILE:HG22	1:A:556:TYR:CD2	2.30	0.65
1:A:273:VAL:CG2	1:A:280:VAL:HG22	2.23	0.65
1:A:289:PRO:HB2	1:A:293:ASN:ND2	2.10	0.65
1:A:139:MET:HE2	1:A:376:HIS:ND1	2.12	0.65
1:A:155:VAL:HG23	1:A:194:GLY:HA3	1.77	0.65
1:A:11:VAL:CG1	1:A:13:PHE:HE1	2.09	0.65
1:A:105:TYR:HB3	1:A:136:ILE:HD12	1.79	0.65
1:A:87:GLU:O	1:A:89:LYS:HG3	1.97	0.65
1:A:427:PHE:HB3	1:A:450:GLN:HE22	1.61	0.64
1:A:68:ASP:O	1:A:71:SER:HB2	1.96	0.64
1:A:113:THR:HG21	1:A:115:GLU:HB2	1.78	0.64
1:A:245:ASN:ND2	1:A:245:ASN:O	2.29	0.64
1:A:396:SER:O	1:A:399:ILE:N	2.30	0.64
1:A:267:GLU:OE1	1:A:295:LYS:HE2	1.98	0.64
1:A:109:VAL:HG22	1:A:110:GLY:N	2.13	0.64
1:A:230:ARG:O	1:A:234:LEU:HD12	1.97	0.64
1:A:307:VAL:O	1:A:309:ASP:N	2.30	0.64
1:A:487:LEU:HB3	1:A:489:ILE:HG13	1.80	0.64
1:A:382:ARG:HB3	1:A:382:ARG:NH1	2.13	0.64
1:A:37:ARG:HH11	1:A:37:ARG:HG2	1.64	0.63
1:A:314:ILE:HG22	1:A:315:HIS:N	2.12	0.63
1:A:103:ILE:N	1:A:134:THR:OG1	2.31	0.63
1:A:92:ASN:O	1:A:278:ARG:NH2	2.31	0.63
1:A:171:ARG:HH11	1:A:244:TYR:HA	1.63	0.63
1:A:217:LEU:HD12	1:A:217:LEU:H	1.64	0.63
1:A:346:ASP:O	1:A:360:PRO:HD3	1.97	0.63
1:A:50:VAL:HG22	1:A:52:VAL:HG21	1.80	0.63
1:A:52:VAL:O	1:A:84:ILE:HD13	1.99	0.63
1:A:19:TYR:CD1	1:A:204:GLY:HA2	2.34	0.63
1:A:119:GLU:O	1:A:122:ILE:N	2.31	0.63
1:A:288:ASP:OD1	1:A:290:ARG:HB2	1.99	0.63
1:A:444:ARG:HA	1:A:448:ASN:OD1	1.98	0.62
1:A:265:ILE:HD12	1:A:268:GLU:CB	2.28	0.62
1:A:436:LEU:O	1:A:438:GLN:N	2.33	0.62
1:A:437:ILE:HG23	1:A:455:GLN:HG3	1.82	0.62
1:A:127:TYR:HE1	1:A:474:PHE:HE2	1.46	0.62
1:A:359:GLU:HG3	1:A:360:PRO:N	2.13	0.62
1:A:286:LEU:H	1:A:286:LEU:HD13	1.65	0.62
1:A:530:LEU:HD13	1:A:556:TYR:CZ	2.34	0.62
1:A:16:TRP:HD1	1:A:206:TYR:CE2	2.18	0.62
1:A:265:ILE:O	1:A:268:GLU:HB2	1.98	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:170:PHE:HD2	1:A:244:TYR:CD2	2.18	0.61
1:A:328:ASP:OD2	1:A:352:PHE:HB3	2.00	0.61
1:A:338:SER:HB2	1:A:344:VAL:HG23	1.81	0.61
1:A:404:TYR:CZ	1:A:405:LEU:HD11	2.35	0.61
1:A:287:ASN:N	1:A:357:HIS:HE1	1.97	0.61
1:A:60:LEU:HD11	1:A:62:ASP:HB3	1.82	0.61
1:A:289:PRO:C	1:A:293:ASN:HD22	2.03	0.61
1:A:479:ILE:O	1:A:483:MET:N	2.30	0.61
1:A:25:LEU:HB2	1:A:45:ILE:HD12	1.81	0.61
1:A:24:LYS:HB3	1:A:33:TYR:O	2.01	0.61
1:A:108:HIS:HD2	1:A:425:PHE:CZ	2.16	0.61
1:A:389:ILE:HA	1:A:397:TYR:CD2	2.35	0.61
1:A:337:LYS:HG3	1:A:338:SER:N	2.14	0.61
1:A:16:TRP:HA	1:A:16:TRP:HE3	1.65	0.61
1:A:222:ASP:OD2	1:A:260:THR:HG23	2.01	0.61
1:A:203:LEU:HD12	1:A:206:TYR:CE1	2.36	0.61
1:A:361:VAL:HG21	1:A:369:PHE:CE2	2.34	0.61
1:A:71:SER:CB	1:A:74:GLN:HE22	2.13	0.61
1:A:432:SER:O	1:A:437:ILE:HD11	2.00	0.61
1:A:50:VAL:HG22	1:A:52:VAL:HG22	1.82	0.60
1:A:510:GLU:O	1:A:511:TYR:HB3	2.00	0.60
1:A:83:GLN:HG2	1:A:84:ILE:H	1.64	0.60
1:A:147:LYS:N	1:A:430:ASP:OD2	2.30	0.60
1:A:148:ARG:HB2	1:A:148:ARG:NH1	2.16	0.60
1:A:114:PRO:HD2	1:A:115:GLU:OE2	2.01	0.60
1:A:244:TYR:O	1:A:246:VAL:N	2.35	0.60
1:A:265:ILE:HA	1:A:268:GLU:HB2	1.82	0.60
1:A:131:LEU:HD21	1:A:418:GLU:CG	2.23	0.60
1:A:281:ILE:HA	1:A:304:ALA:O	2.01	0.60
1:A:107:ILE:HD12	1:A:136:ILE:CG2	2.20	0.60
1:A:384:LYS:CA	1:A:426:TYR:HE1	2.12	0.60
1:A:71:SER:OG	1:A:82:SER:HB3	2.01	0.60
1:A:129:LYS:HE2	1:A:180:LYS:O	2.02	0.60
1:A:225:GLU:O	1:A:227:ASP:N	2.34	0.60
1:A:226:SER:O	1:A:230:ARG:HG2	2.02	0.60
1:A:461:ASN:O	1:A:464:LYS:HG3	2.00	0.59
1:A:475:SER:O	1:A:479:ILE:HD12	2.01	0.59
1:A:371:VAL:CG2	1:A:409:TYR:HB2	2.31	0.59
1:A:10:GLU:HG2	1:A:48:ASN:HB3	1.83	0.59
1:A:255:HIS:HB3	1:A:286:LEU:HD11	1.83	0.59
1:A:395:GLU:OE1	1:A:535:ASN:ND2	2.35	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:16:TRP:CZ3	1:A:18:PRO:HD3	2.36	0.59
1:A:37:ARG:HD2	1:A:38:ASP:O	2.01	0.59
1:A:99:LYS:H	1:A:99:LYS:HE3	1.67	0.59
1:A:156:TYR:O	1:A:159:ALA:N	2.30	0.59
1:A:436:LEU:O	1:A:440:VAL:HG12	2.01	0.59
1:A:18:PRO:HG2	1:A:204:GLY:HA3	1.85	0.59
1:A:93:ASN:O	1:A:94:GLU:HB2	2.02	0.59
1:A:337:LYS:HD2	1:A:344:VAL:CA	2.08	0.58
1:A:295:LYS:O	1:A:298:CYS:N	2.30	0.58
1:A:23:VAL:HG23	1:A:43:PHE:CD2	2.38	0.58
1:A:51:LYS:O	1:A:53:ARG:NH2	2.35	0.58
1:A:138:ILE:HG22	1:A:139:MET:O	2.03	0.58
1:A:316:ALA:O	1:A:322:ARG:NH2	2.35	0.58
1:A:200:MET:HA	1:A:203:LEU:CD1	2.33	0.58
1:A:328:ASP:HB3	1:A:345:TYR:OH	2.03	0.58
1:A:78:VAL:HG22	1:A:156:TYR:CE1	2.39	0.58
1:A:87:GLU:CB	1:A:89:LYS:HG3	2.34	0.58
1:A:200:MET:HA	1:A:203:LEU:HD12	1.85	0.58
1:A:73:TYR:CZ	1:A:75:PRO:HA	2.39	0.58
1:A:92:ASN:N	1:A:245:ASN:OD1	2.36	0.58
1:A:96:PHE:HE2	1:A:178:HIS:HD2	1.50	0.58
1:A:239:TYR:O	1:A:242:LYS:N	2.37	0.58
1:A:143:GLN:OE1	1:A:162:ASN:HB2	2.03	0.57
1:A:350:SER:OG	1:A:353:ARG:HG3	2.03	0.57
1:A:17:ALA:O	1:A:18:PRO:C	2.41	0.57
1:A:26:LYS:O	1:A:27:VAL:C	2.39	0.57
1:A:353:ARG:CD	1:A:357:HIS:HD2	2.17	0.57
1:A:389:ILE:HA	1:A:397:TYR:HD2	1.69	0.57
1:A:313:SER:HB2	1:A:335:ILE:HG12	1.86	0.57
1:A:23:VAL:HG13	1:A:60:LEU:CA	2.33	0.57
1:A:24:LYS:HB2	1:A:32:LEU:HD21	1.86	0.57
1:A:118:PHE:O	1:A:122:ILE:N	2.38	0.57
1:A:84:ILE:C	1:A:85:ILE:HD12	2.25	0.57
1:A:503:TRP:CE3	1:A:505:ILE:HG23	2.39	0.57
1:A:420:GLY:N	1:A:473:ILE:HG21	2.19	0.56
1:A:437:ILE:HG23	1:A:455:GLN:CG	2.35	0.56
1:A:400:ALA:O	1:A:401:ALA:C	2.43	0.56
1:A:530:LEU:HD12	1:A:531:LEU:N	2.19	0.56
1:A:274:HIS:CD2	1:A:274:HIS:H	2.24	0.56
1:A:371:VAL:CG1	1:A:409:TYR:HD2	2.16	0.56
1:A:389:ILE:HG23	1:A:397:TYR:CD2	2.41	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:44:THR:C	1:A:45:ILE:HG13	2.25	0.56
1:A:398:LYS:HB3	1:A:476:PHE:HE2	1.71	0.56
1:A:445:LYS:HE2	1:A:445:LYS:HA	1.87	0.56
1:A:100:GLU:H	1:A:100:GLU:CD	2.09	0.56
1:A:217:LEU:HD12	1:A:217:LEU:N	2.19	0.56
1:A:35:MET:CG	1:A:45:ILE:HD11	2.33	0.56
1:A:105:TYR:CZ	1:A:415:MET:HA	2.40	0.56
1:A:304:ALA:HB1	1:A:368:ASN:C	2.25	0.56
1:A:349:TYR:HD1	1:A:350:SER:N	2.03	0.56
1:A:382:ARG:CB	1:A:382:ARG:HH11	2.18	0.56
1:A:105:TYR:CD1	1:A:107:ILE:HG13	2.40	0.56
1:A:382:ARG:HB3	1:A:382:ARG:HH11	1.70	0.56
1:A:452:THR:HG22	1:A:459:THR:OG1	2.06	0.56
1:A:487:LEU:O	1:A:488:SER:HB2	2.06	0.56
1:A:37:ARG:HG2	1:A:37:ARG:NH1	2.21	0.56
1:A:108:HIS:O	1:A:108:HIS:ND1	2.39	0.56
1:A:127:TYR:CE1	1:A:474:PHE:HE2	2.23	0.55
1:A:479:ILE:O	1:A:482:LYS:N	2.38	0.55
1:A:13:PHE:CD2	1:A:25:LEU:HD21	2.41	0.55
1:A:461:ASN:CA	1:A:464:LYS:HG3	2.37	0.55
1:A:516:VAL:HG23	1:A:551:LYS:HA	1.87	0.55
1:A:528:GLY:O	1:A:542:ILE:HG22	2.07	0.55
1:A:16:TRP:CE3	1:A:16:TRP:HA	2.41	0.55
1:A:280:VAL:N	1:A:303:ASP:OD2	2.29	0.55
1:A:483:MET:HE3	1:A:486:GLU:HG2	1.88	0.55
1:A:231:LYS:O	1:A:235:GLU:HG3	2.06	0.55
1:A:512:PHE:CZ	1:A:556:TYR:HB2	2.41	0.55
1:A:191:ASN:O	1:A:192:HIS:HB3	2.05	0.55
1:A:534:SER:OG	1:A:553:PHE:N	2.29	0.55
1:A:399:ILE:HG23	1:A:515:TYR:HD2	1.72	0.55
1:A:11:VAL:HG22	1:A:13:PHE:CE1	2.42	0.55
1:A:133:ILE:HG21	1:A:136:ILE:HD11	1.89	0.55
1:A:396:SER:O	1:A:398:LYS:N	2.40	0.55
1:A:399:ILE:O	1:A:402:ALA:HB3	2.07	0.55
1:A:438:GLN:H	1:A:440:VAL:HG12	1.72	0.54
1:A:343:PHE:HE2	1:A:361:VAL:HG23	1.72	0.54
1:A:355:LYS:HG2	1:A:356:THR:N	2.21	0.54
1:A:20:GLN:O	1:A:37:ARG:NH1	2.40	0.54
1:A:26:LYS:HB2	1:A:32:LEU:HD22	1.88	0.54
1:A:99:LYS:HE3	1:A:99:LYS:N	2.22	0.54
1:A:30:LYS:NZ	1:A:52:VAL:HG11	2.23	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:259:ASP:OD2	1:A:264:HIS:HA	2.07	0.54
1:A:531:LEU:HB3	1:A:555:LEU:HD13	1.90	0.54
1:A:336:VAL:HG22	1:A:337:LYS:N	2.23	0.54
1:A:523:GLU:O	1:A:524:VAL:C	2.44	0.54
1:A:156:TYR:HB3	2:A:568:HOH:O	2.07	0.54
1:A:294:PRO:HA	1:A:301:ASN:HD22	1.70	0.54
1:A:324:GLY:O	1:A:327:THR:HG22	2.06	0.54
1:A:337:LYS:HG3	1:A:338:SER:H	1.72	0.54
1:A:346:ASP:H	1:A:348:LYS:NZ	2.06	0.54
1:A:22:SER:HA	1:A:43:PHE:HE2	1.73	0.54
1:A:44:THR:O	1:A:45:ILE:HG13	2.07	0.54
1:A:388:ILE:HG12	1:A:388:ILE:O	2.07	0.54
1:A:55:ARG:HB3	1:A:81:PRO:HB2	1.89	0.53
1:A:304:ALA:HB2	1:A:368:ASN:HA	1.88	0.53
1:A:418:GLU:O	1:A:474:PHE:HA	2.08	0.53
1:A:164:TYR:HD1	1:A:164:TYR:N	2.05	0.53
1:A:440:VAL:HG13	1:A:441:ARG:N	2.22	0.53
1:A:500:GLY:HA3	1:A:503:TRP:CE2	2.43	0.53
1:A:404:TYR:CE1	1:A:405:LEU:HD11	2.44	0.53
1:A:23:VAL:O	1:A:35:MET:HG3	2.08	0.53
1:A:35:MET:HE2	1:A:44:THR:C	2.28	0.53
1:A:511:TYR:HD1	1:A:512:PHE:O	1.92	0.53
1:A:102:LEU:C	1:A:103:ILE:HG12	2.29	0.53
1:A:310:PHE:HD1	1:A:338:SER:HG	1.56	0.53
1:A:354:ARG:HB3	1:A:354:ARG:NH1	2.23	0.53
1:A:306:TRP:CD1	1:A:370:VAL:HG22	2.43	0.53
1:A:231:LYS:O	1:A:232:PHE:C	2.45	0.53
1:A:234:LEU:HD21	1:A:268:GLU:HB3	1.90	0.53
1:A:6:ILE:HG23	1:A:10:GLU:O	2.09	0.53
1:A:124:LYS:O	1:A:125:LEU:C	2.45	0.53
1:A:329:PHE:N	1:A:329:PHE:CD1	2.77	0.53
1:A:35:MET:HB3	1:A:44:THR:N	2.23	0.52
1:A:56:TYR:HE1	1:A:68:ASP:HB2	1.74	0.52
1:A:125:LEU:O	1:A:128:LEU:HB2	2.09	0.52
1:A:84:ILE:HG22	1:A:85:ILE:N	2.23	0.52
1:A:325:TYR:HD1	1:A:325:TYR:H	1.58	0.52
1:A:37:ARG:HD2	1:A:38:ASP:N	2.24	0.52
1:A:137:GLU:HG3	1:A:185:ILE:CG2	2.37	0.52
1:A:240:TRP:HA	1:A:240:TRP:CE3	2.44	0.52
1:A:421:GLU:OE2	1:A:423:ASN:N	2.28	0.52
1:A:443:GLY:O	1:A:446:LYS:N	2.42	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:56:TYR:CZ	1:A:82:SER:HB2	2.43	0.52
1:A:150:TRP:CH2	1:A:380:GLY:HA3	2.44	0.52
1:A:273:VAL:HG22	1:A:274:HIS:CD2	2.44	0.52
1:A:317:TYR:CE2	1:A:332:LEU:HD23	2.45	0.52
1:A:259:ASP:OD2	1:A:265:ILE:N	2.41	0.52
1:A:52:VAL:C	1:A:53:ARG:HE	2.12	0.52
1:A:71:SER:OG	1:A:74:GLN:NE2	2.42	0.52
1:A:434:SER:CA	1:A:437:ILE:HD12	2.37	0.52
1:A:4:TYR:CE1	1:A:72:ARG:NH1	2.78	0.52
1:A:144:PHE:CE1	1:A:149:ASP:HB2	2.45	0.52
1:A:270:ALA:O	1:A:274:HIS:HD2	1.91	0.52
1:A:374:GLN:NE2	1:A:388:ILE:HB	2.24	0.52
1:A:384:LYS:O	1:A:385:GLY:C	2.48	0.52
1:A:426:TYR:CD2	1:A:459:THR:HG23	2.45	0.52
1:A:108:HIS:O	1:A:109:VAL:C	2.48	0.52
1:A:64:SER:HB3	2:A:585:HOH:O	2.09	0.52
1:A:121:VAL:O	1:A:125:LEU:HD12	2.10	0.52
1:A:17:ALA:HA	1:A:203:LEU:O	2.09	0.52
1:A:48:ASN:OD1	1:A:48:ASN:N	2.43	0.52
1:A:119:GLU:HA	1:A:122:ILE:HD12	1.91	0.52
1:A:164:TYR:N	1:A:164:TYR:CD1	2.78	0.52
1:A:108:HIS:NE2	1:A:428:PHE:HZ	2.08	0.51
1:A:30:LYS:HZ1	1:A:52:VAL:HG11	1.75	0.51
1:A:88:SER:CB	1:A:243:GLU:HG3	2.34	0.51
1:A:469:ILE:HG22	1:A:470:ASP:N	2.25	0.51
1:A:516:VAL:CG2	1:A:552:GLY:H	2.23	0.51
1:A:78:VAL:HG12	1:A:79:HIS:CD2	2.45	0.51
1:A:310:PHE:CG	1:A:371:VAL:HG12	2.46	0.51
1:A:311:HIS:CD2	1:A:312:HIS:N	2.79	0.51
1:A:483:MET:HE3	1:A:486:GLU:HB3	1.93	0.51
1:A:73:TYR:HB3	1:A:85:ILE:HD11	1.92	0.51
1:A:133:ILE:HD11	1:A:413:ILE:HD11	1.88	0.51
1:A:516:VAL:HG22	1:A:552:GLY:H	1.75	0.51
1:A:244:TYR:O	1:A:245:ASN:C	2.48	0.51
1:A:264:HIS:HD2	1:A:265:ILE:N	2.09	0.51
1:A:99:LYS:HA	1:A:102:LEU:HD22	1.93	0.51
1:A:117:THR:O	1:A:121:VAL:HG13	2.11	0.51
1:A:148:ARG:HD2	1:A:460:PHE:HD2	1.74	0.51
1:A:161:GLN:HG3	1:A:162:ASN:H	1.75	0.51
1:A:373:ILE:HG23	1:A:404:TYR:CD2	2.46	0.51
1:A:155:VAL:HG21	1:A:196:GLU:O	2.10	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:161:GLN:HG3	1:A:162:ASN:N	2.26	0.51
1:A:52:VAL:HG23	1:A:52:VAL:O	2.11	0.51
1:A:238:GLU:HB2	1:A:276:TYR:HE2	1.76	0.51
1:A:254:VAL:O	1:A:256:ALA:N	2.44	0.51
1:A:353:ARG:NE	1:A:357:HIS:HD2	2.08	0.51
1:A:414:PHE:CD1	1:A:415:MET:N	2.79	0.51
1:A:16:TRP:CE3	1:A:42:TYR:CE1	2.99	0.50
1:A:51:LYS:O	1:A:53:ARG:NE	2.44	0.50
1:A:166:GLY:O	1:A:169:GLY:N	2.44	0.50
1:A:369:PHE:CD1	1:A:369:PHE:N	2.79	0.50
1:A:26:LYS:NZ	1:A:65:GLU:OE1	2.44	0.50
1:A:148:ARG:HH11	1:A:148:ARG:CB	2.21	0.50
1:A:193:VAL:O	1:A:195:PRO:HD3	2.11	0.50
1:A:211:TYR:OH	1:A:222:ASP:OD2	2.29	0.50
1:A:526:TYR:N	1:A:526:TYR:CD1	2.79	0.50
1:A:530:LEU:N	1:A:556:TYR:CD2	2.79	0.50
1:A:74:GLN:OE1	1:A:80:GLY:O	2.29	0.50
1:A:155:VAL:HG23	1:A:194:GLY:CA	2.39	0.50
1:A:331:ASN:OD1	1:A:332:LEU:N	2.44	0.50
1:A:530:LEU:HB3	1:A:540:GLN:HA	1.91	0.50
1:A:136:ILE:HG22	1:A:138:ILE:CD1	2.38	0.50
1:A:312:HIS:NE2	1:A:325:TYR:CD2	2.79	0.50
1:A:350:SER:OG	1:A:350:SER:O	2.28	0.50
1:A:381:ASN:HA	1:A:444:ARG:HH12	1.76	0.50
1:A:316:ALA:O	1:A:319:THR:O	2.29	0.50
1:A:345:TYR:CD1	1:A:345:TYR:N	2.79	0.50
1:A:73:TYR:O	1:A:75:PRO:HD3	2.12	0.50
1:A:395:GLU:CD	1:A:535:ASN:HD21	2.15	0.50
1:A:484:ARG:HH11	1:A:490:ALA:HB2	1.75	0.50
1:A:10:GLU:CG	1:A:48:ASN:HB3	2.42	0.50
1:A:122:ILE:O	1:A:125:LEU:HD13	2.10	0.50
1:A:203:LEU:HD23	1:A:203:LEU:N	2.27	0.50
1:A:304:ALA:HB1	1:A:368:ASN:O	2.11	0.50
1:A:372:TYR:CE1	1:A:375:ASN:ND2	2.79	0.50
1:A:398:LYS:HB3	1:A:476:PHE:CE2	2.46	0.50
1:A:111:THR:O	1:A:112:PHE:O	2.30	0.50
1:A:10:GLU:HG2	1:A:47:LEU:O	2.12	0.50
1:A:171:ARG:O	1:A:175:ASP:OD1	2.30	0.50
1:A:221:PHE:CD1	1:A:221:PHE:N	2.80	0.49
1:A:35:MET:SD	1:A:45:ILE:HD12	2.51	0.49
1:A:466:SER:O	1:A:468:LYS:N	2.41	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:219:PHE:HD2	1:A:221:PHE:HZ	1.60	0.49
1:A:483:MET:HG3	1:A:531:LEU:HD12	1.94	0.49
1:A:483:MET:HE2	1:A:531:LEU:CD1	2.42	0.49
1:A:11:VAL:HG13	1:A:13:PHE:CE1	2.38	0.49
1:A:11:VAL:HG12	1:A:47:LEU:HB3	1.95	0.49
1:A:27:VAL:HG13	1:A:54:ASP:OD1	2.12	0.49
1:A:139:MET:HE1	1:A:376:HIS:CG	2.47	0.49
1:A:453:ASP:O	1:A:456:ASP:HB2	2.12	0.49
1:A:516:VAL:HG22	1:A:552:GLY:O	2.12	0.49
1:A:67:PRO:O	1:A:69:PRO:HD3	2.12	0.49
1:A:524:VAL:HG12	1:A:524:VAL:O	2.11	0.49
1:A:254:VAL:O	1:A:257:ILE:HB	2.12	0.49
1:A:269:ILE:O	1:A:270:ALA:C	2.51	0.49
1:A:286:LEU:HD13	1:A:286:LEU:N	2.26	0.49
1:A:364:LEU:HD23	1:A:364:LEU:N	2.27	0.49
1:A:404:TYR:CG	1:A:405:LEU:HD12	2.48	0.49
1:A:524:VAL:CG1	1:A:526:TYR:H	2.26	0.49
1:A:24:LYS:CB	1:A:59:VAL:HG13	2.39	0.49
1:A:111:THR:HG23	1:A:460:PHE:HE1	1.78	0.49
1:A:274:HIS:CD2	1:A:274:HIS:N	2.79	0.49
1:A:507:LYS:HB2	1:A:526:TYR:OH	2.13	0.49
1:A:547:TYR:N	1:A:547:TYR:CD1	2.80	0.49
1:A:556:TYR:N	1:A:556:TYR:CD1	2.81	0.49
1:A:170:PHE:CD2	1:A:244:TYR:CD2	3.00	0.49
1:A:324:GLY:O	1:A:326:TYR:N	2.46	0.49
1:A:160:VAL:HG12	1:A:166:GLY:HA2	1.94	0.48
1:A:36:GLU:N	1:A:44:THR:O	2.45	0.48
1:A:252:ASP:N	2:A:583:HOH:O	2.46	0.48
1:A:531:LEU:HB2	1:A:555:LEU:O	2.12	0.48
1:A:351:ASN:H	1:A:351:ASN:HD22	1.61	0.48
1:A:131:LEU:HD12	1:A:131:LEU:C	2.30	0.48
1:A:225:GLU:O	1:A:226:SER:C	2.52	0.48
1:A:385:GLY:HA3	1:A:425:PHE:O	2.13	0.48
1:A:419:TYR:HD1	1:A:419:TYR:O	1.97	0.48
1:A:35:MET:HE2	1:A:45:ILE:CG1	2.35	0.48
1:A:61:ASP:O	1:A:63:ALA:N	2.47	0.48
1:A:144:PHE:HB2	1:A:145:PRO:CD	2.40	0.48
1:A:207:PHE:HA	1:A:219:PHE:HA	1.95	0.48
1:A:9:ASN:O	1:A:48:ASN:HA	2.14	0.48
1:A:105:TYR:HD1	1:A:107:ILE:CG1	2.24	0.48
1:A:245:ASN:HD21	1:A:278:ARG:HH12	1.60	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:410:ILE:HA	1:A:411:PRO:HD3	1.63	0.48
1:A:85:ILE:HG22	1:A:86:GLN:N	2.28	0.48
1:A:533:SER:HA	1:A:553:PHE:O	2.13	0.48
1:A:544:GLU:CD	1:A:544:GLU:H	2.16	0.48
1:A:32:LEU:HD13	1:A:32:LEU:C	2.35	0.47
1:A:69:PRO:CB	1:A:200:MET:HE1	2.43	0.47
1:A:130:ASP:O	1:A:132:GLY:N	2.47	0.47
1:A:346:ASP:CB	1:A:348:LYS:HZ2	2.26	0.47
1:A:437:ILE:HG23	1:A:455:GLN:NE2	2.29	0.47
1:A:483:MET:CE	1:A:531:LEU:HD11	2.44	0.47
1:A:95:THR:OG1	1:A:247:ASP:HB3	2.13	0.47
1:A:60:LEU:HD12	1:A:60:LEU:C	2.35	0.47
1:A:73:TYR:C	1:A:75:PRO:HD3	2.35	0.47
1:A:135:ALA:O	1:A:136:ILE:HD13	2.13	0.47
1:A:267:GLU:O	1:A:271:ASP:OD1	2.30	0.47
1:A:133:ILE:HD12	1:A:133:ILE:HA	1.42	0.47
1:A:239:TYR:O	1:A:240:TRP:C	2.52	0.47
1:A:503:TRP:HE3	1:A:504:LEU:N	2.12	0.47
1:A:25:LEU:HB2	1:A:45:ILE:CD1	2.45	0.47
1:A:108:HIS:NE2	1:A:428:PHE:CZ	2.82	0.47
1:A:199:TYR:O	1:A:201:VAL:N	2.47	0.47
1:A:264:HIS:CD2	1:A:265:ILE:N	2.82	0.47
1:A:30:LYS:HD2	1:A:30:LYS:N	2.30	0.47
1:A:144:PHE:CD2	1:A:151:GLY:HA2	2.49	0.47
1:A:233:ILE:O	1:A:234:LEU:C	2.51	0.47
1:A:99:LYS:O	1:A:102:LEU:HB2	2.14	0.47
1:A:112:PHE:CD1	1:A:467:TRP:CH2	3.03	0.47
1:A:114:PRO:HD2	1:A:123:ARG:HH21	1.79	0.47
1:A:171:ARG:HD2	1:A:171:ARG:HA	1.43	0.47
1:A:203:LEU:H	1:A:203:LEU:HG	1.35	0.47
1:A:213:THR:HB	1:A:214:PRO:HD3	1.95	0.47
1:A:373:ILE:HG23	1:A:404:TYR:HD2	1.79	0.47
1:A:373:ILE:C	1:A:374:GLN:HG2	2.35	0.47
1:A:514:LEU:O	1:A:553:PHE:HA	2.14	0.47
1:A:4:TYR:HD1	1:A:5:LYS:N	2.13	0.47
1:A:58:TYR:N	1:A:66:ILE:O	2.46	0.47
1:A:409:TYR:N	1:A:409:TYR:CD1	2.81	0.47
1:A:476:PHE:CA	1:A:479:ILE:HD12	2.45	0.47
1:A:543:GLU:O	1:A:547:TYR:OH	2.29	0.47
1:A:86:GLN:HG2	1:A:87:GLU:N	2.23	0.47
1:A:35:MET:CE	1:A:45:ILE:HG13	2.37	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:328:ASP:HB3	1:A:345:TYR:CZ	2.50	0.47
1:A:3:ALA:HB2	1:A:70:ALA:O	2.15	0.46
1:A:144:PHE:CE1	1:A:149:ASP:CB	2.99	0.46
1:A:163:SER:C	1:A:165:GLY:H	2.18	0.46
1:A:294:PRO:O	1:A:299:GLY:N	2.42	0.46
1:A:487:LEU:HA	1:A:487:LEU:HD12	1.21	0.46
1:A:71:SER:CB	1:A:74:GLN:NE2	2.78	0.46
1:A:84:ILE:O	1:A:85:ILE:HG13	2.15	0.46
1:A:295:LYS:O	1:A:297:LYS:N	2.48	0.46
1:A:316:ALA:HB1	1:A:321:GLU:O	2.15	0.46
1:A:24:LYS:HB2	1:A:59:VAL:CG1	2.37	0.46
1:A:161:GLN:CG	1:A:162:ASN:N	2.79	0.46
1:A:164:TYR:HD1	1:A:164:TYR:H	1.63	0.46
1:A:200:MET:HB3	1:A:206:TYR:CD1	2.51	0.46
1:A:257:ILE:O	1:A:257:ILE:HG22	2.14	0.46
1:A:324:GLY:O	1:A:325:TYR:C	2.54	0.46
1:A:489:ILE:HG23	2:A:562:HOH:O	2.16	0.46
1:A:4:TYR:HA	1:A:12:ILE:O	2.16	0.46
1:A:507:LYS:CG	1:A:508:GLY:N	2.77	0.46
1:A:118:PHE:C	1:A:122:ILE:HD12	2.36	0.46
1:A:538:PHE:HA	1:A:539:PRO:HD2	1.49	0.46
1:A:237:VAL:CG2	1:A:238:GLU:N	2.79	0.46
1:A:252:ASP:OD1	1:A:283:GLU:OE1	2.32	0.46
1:A:19:TYR:CD1	1:A:19:TYR:N	2.84	0.46
1:A:112:PHE:CD1	1:A:467:TRP:HH2	2.33	0.46
1:A:119:GLU:CA	1:A:122:ILE:HD12	2.46	0.46
1:A:254:VAL:HG23	1:A:255:HIS:N	2.30	0.46
1:A:419:TYR:CZ	1:A:421:GLU:HB2	2.51	0.46
1:A:36:GLU:N	1:A:44:THR:H	2.11	0.46
1:A:301:ASN:HD22	1:A:301:ASN:HA	1.39	0.46
1:A:427:PHE:CD2	1:A:444:ARG:HG3	2.51	0.46
1:A:507:LYS:HG2	1:A:508:GLY:H	1.79	0.46
1:A:355:LYS:CG	1:A:356:THR:N	2.79	0.45
1:A:16:TRP:CH2	1:A:18:PRO:HG3	2.52	0.45
1:A:69:PRO:HG2	1:A:203:LEU:CD1	2.46	0.45
1:A:99:LYS:O	1:A:101:ASP:N	2.49	0.45
1:A:200:MET:H	1:A:200:MET:HG2	1.47	0.45
1:A:273:VAL:O	1:A:275:LYS:N	2.49	0.45
1:A:286:LEU:CD1	1:A:286:LEU:N	2.79	0.45
1:A:2:PHE:HD1	1:A:235:GLU:OE2	1.99	0.45
1:A:43:PHE:CD1	1:A:43:PHE:N	2.83	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:102:LEU:HB3	1:A:410:ILE:CG2	2.47	0.45
1:A:176:GLU:O	1:A:179:LYS:N	2.50	0.45
1:A:246:VAL:CG1	1:A:247:ASP:N	2.79	0.45
1:A:440:VAL:CG1	1:A:441:ARG:N	2.80	0.45
1:A:51:LYS:H	1:A:52:VAL:HG22	1.81	0.45
1:A:158:TYR:OH	1:A:235:GLU:HB2	2.16	0.45
1:A:303:ASP:O	1:A:304:ALA:HB2	2.17	0.45
1:A:306:TRP:CD1	1:A:370:VAL:CG2	3.00	0.45
1:A:311:HIS:O	1:A:314:ILE:HB	2.16	0.45
1:A:396:SER:O	1:A:397:TYR:C	2.54	0.45
1:A:127:TYR:O	1:A:130:ASP:HB3	2.17	0.45
1:A:233:ILE:HG22	1:A:234:LEU:N	2.30	0.45
1:A:453:ASP:O	1:A:455:GLN:N	2.50	0.45
1:A:512:PHE:O	1:A:555:LEU:HD23	2.16	0.45
1:A:12:ILE:HD12	1:A:12:ILE:C	2.36	0.45
1:A:17:ALA:N	1:A:18:PRO:CD	2.80	0.45
1:A:87:GLU:HB2	1:A:89:LYS:HG3	1.98	0.45
1:A:547:TYR:N	1:A:547:TYR:HD1	2.15	0.45
1:A:13:PHE:CD2	1:A:25:LEU:CD2	3.00	0.45
1:A:13:PHE:CD1	1:A:13:PHE:N	2.85	0.45
1:A:35:MET:HA	1:A:45:ILE:HG13	1.99	0.45
1:A:74:GLN:OE1	1:A:82:SER:N	2.49	0.45
1:A:160:VAL:HB	1:A:167:PRO:HD3	1.99	0.45
1:A:184:VAL:CG2	1:A:185:ILE:N	2.79	0.45
1:A:312:HIS:CD2	1:A:325:TYR:CD2	3.00	0.45
1:A:503:TRP:CE3	1:A:504:LEU:N	2.85	0.45
1:A:78:VAL:CG1	1:A:79:HIS:CD2	3.00	0.45
1:A:241:ILE:HD11	1:A:249:PHE:CE1	2.45	0.45
1:A:531:LEU:HD22	1:A:531:LEU:HA	1.57	0.45
1:A:32:LEU:CD2	1:A:59:VAL:HG11	2.44	0.45
1:A:184:VAL:O	1:A:247:ASP:HB2	2.16	0.45
1:A:337:LYS:CG	1:A:338:SER:N	2.78	0.45
1:A:437:ILE:CG2	1:A:455:GLN:NE2	2.79	0.45
1:A:469:ILE:CG2	1:A:470:ASP:N	2.79	0.45
1:A:35:MET:HA	1:A:45:ILE:CG1	2.47	0.45
1:A:47:LEU:HA	1:A:47:LEU:HD13	1.74	0.45
1:A:101:ASP:O	1:A:134:THR:HG21	2.17	0.45
1:A:175:ASP:OD1	1:A:175:ASP:N	2.47	0.45
1:A:191:ASN:HB2	1:A:256:ALA:HB3	1.99	0.45
1:A:203:LEU:HD12	1:A:206:TYR:CZ	2.52	0.45
1:A:254:VAL:C	1:A:256:ALA:H	2.20	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:323:GLN:O	1:A:324:GLY:C	2.54	0.45
1:A:85:ILE:CG2	1:A:86:GLN:N	2.80	0.44
1:A:308:ASP:OD1	1:A:372:TYR:OH	2.29	0.44
1:A:347:GLY:HA2	1:A:358:GLY:O	2.17	0.44
1:A:465:LEU:HB2	1:A:467:TRP:CZ3	2.53	0.44
1:A:542:ILE:CG2	1:A:556:TYR:CD2	2.99	0.44
1:A:139:MET:CE	1:A:376:HIS:ND1	2.79	0.44
1:A:237:VAL:O	1:A:238:GLU:C	2.55	0.44
1:A:386:GLU:HB3	1:A:391:LEU:HD21	1.99	0.44
1:A:403:LEU:HA	1:A:403:LEU:HD23	1.46	0.44
1:A:404:TYR:CE1	1:A:405:LEU:CD1	3.00	0.44
1:A:483:MET:CE	1:A:486:GLU:HG2	2.47	0.44
1:A:550:ASP:O	1:A:551:LYS:C	2.55	0.44
1:A:16:TRP:CE3	1:A:16:TRP:CA	3.00	0.44
1:A:130:ASP:O	1:A:131:LEU:C	2.56	0.44
1:A:173:LEU:HD12	1:A:173:LEU:C	2.37	0.44
1:A:505:ILE:HG22	1:A:514:LEU:HD23	1.98	0.44
1:A:307:VAL:O	1:A:307:VAL:HG12	2.18	0.44
1:A:366:GLY:N	1:A:491:CYS:O	2.43	0.44
1:A:377:ASP:HB3	1:A:381:ASN:HD21	1.82	0.44
1:A:404:TYR:CD1	1:A:405:LEU:HD12	2.52	0.44
1:A:23:VAL:HG12	1:A:59:VAL:O	2.17	0.44
1:A:113:THR:CG2	1:A:115:GLU:H	2.29	0.44
1:A:265:ILE:C	1:A:268:GLU:HB2	2.38	0.44
1:A:361:VAL:HG21	1:A:369:PHE:CZ	2.52	0.44
1:A:435:LYS:HD2	1:A:435:LYS:HA	1.81	0.44
1:A:395:GLU:OE2	1:A:534:SER:HB2	2.17	0.44
1:A:7:ASP:HB3	1:A:8:GLY:H	1.46	0.44
1:A:12:ILE:O	1:A:12:ILE:HD12	2.18	0.44
1:A:113:THR:HB	2:A:576:HOH:O	2.18	0.44
1:A:539:PRO:O	1:A:540:GLN:C	2.55	0.44
1:A:156:TYR:O	1:A:157:LEU:C	2.55	0.44
1:A:406:LEU:HD23	1:A:406:LEU:HA	1.82	0.44
1:A:530:LEU:CB	1:A:540:GLN:HA	2.47	0.44
1:A:87:GLU:O	1:A:88:SER:C	2.56	0.44
1:A:209:GLN:H	1:A:209:GLN:HG2	1.57	0.44
1:A:480:LEU:HD12	1:A:480:LEU:HA	1.48	0.44
1:A:53:ARG:HD2	1:A:84:ILE:C	2.38	0.43
1:A:102:LEU:HB3	1:A:410:ILE:HG23	2.00	0.43
1:A:112:PHE:HD2	1:A:121:VAL:HG12	1.83	0.43
1:A:315:HIS:NE2	1:A:321:GLU:OE1	2.28	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:532:LEU:HD12	1:A:533:SER:H	1.79	0.43
1:A:289:PRO:HB2	1:A:293:ASN:HD22	1.81	0.43
1:A:144:PHE:CD1	1:A:149:ASP:HB2	2.53	0.43
1:A:179:LYS:HZ3	1:A:179:LYS:HB2	1.83	0.43
1:A:273:VAL:CG2	1:A:274:HIS:N	2.81	0.43
1:A:53:ARG:NH1	1:A:53:ARG:HG2	2.32	0.43
1:A:207:PHE:HB3	1:A:218:THR:O	2.17	0.43
1:A:210:LYS:H	1:A:210:LYS:HG3	1.46	0.43
1:A:264:HIS:HB3	1:A:300:TYR:CE2	2.53	0.43
1:A:17:ALA:O	1:A:19:TYR:N	2.52	0.43
1:A:54:ASP:CA	1:A:84:ILE:HD12	2.48	0.43
1:A:139:MET:CE	1:A:376:HIS:CG	3.02	0.43
1:A:156:TYR:CB	1:A:159:ALA:HB3	2.48	0.43
1:A:240:TRP:HA	1:A:240:TRP:HE3	1.83	0.43
1:A:348:LYS:HE3	1:A:348:LYS:HB3	1.27	0.43
1:A:353:ARG:CZ	1:A:357:HIS:CD2	3.02	0.43
1:A:19:TYR:N	1:A:19:TYR:HD1	2.17	0.43
1:A:122:ILE:CA	1:A:125:LEU:HD13	2.44	0.43
1:A:350:SER:HG	1:A:353:ARG:H	1.60	0.43
1:A:437:ILE:H	1:A:437:ILE:HG13	1.56	0.43
1:A:453:ASP:OD1	1:A:455:GLN:HB2	2.17	0.43
1:A:503:TRP:HZ3	1:A:505:ILE:HD13	1.75	0.43
1:A:518:SER:O	1:A:519:LYS:C	2.57	0.43
1:A:39:GLU:H	1:A:39:GLU:HG3	1.35	0.43
1:A:99:LYS:O	1:A:100:GLU:C	2.57	0.43
1:A:102:LEU:HD12	1:A:102:LEU:HA	1.82	0.43
1:A:223:ASP:O	1:A:224:ALA:C	2.57	0.43
1:A:289:PRO:CB	1:A:293:ASN:ND2	2.79	0.43
1:A:310:PHE:O	1:A:311:HIS:C	2.56	0.43
1:A:19:TYR:OH	1:A:205:PRO:HB3	2.18	0.43
1:A:542:ILE:CG1	1:A:543:GLU:N	2.78	0.43
1:A:17:ALA:HA	1:A:18:PRO:HD2	1.86	0.43
1:A:172:LYS:O	1:A:173:LEU:C	2.56	0.43
1:A:504:LEU:HB3	1:A:515:TYR:HB2	2.00	0.43
1:A:84:ILE:CG2	1:A:85:ILE:N	2.82	0.43
1:A:155:VAL:HG22	1:A:193:VAL:HG13	2.01	0.43
1:A:273:VAL:O	1:A:274:HIS:C	2.55	0.43
1:A:442:GLU:HA	1:A:445:LYS:HB3	2.01	0.43
1:A:97:LEU:HD23	1:A:97:LEU:HA	1.84	0.42
1:A:221:PHE:C	1:A:226:SER:HB2	2.40	0.42
1:A:264:HIS:CD2	1:A:265:ILE:HG22	2.54	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:379:VAL:O	1:A:382:ARG:HG3	2.19	0.42
1:A:387:ARG:HG2	2:A:577:HOH:O	2.18	0.42
1:A:483:MET:HE3	1:A:486:GLU:CB	2.49	0.42
1:A:9:ASN:ND2	1:A:48:ASN:HB2	2.30	0.42
1:A:111:THR:HG23	1:A:460:PHE:CE1	2.54	0.42
1:A:375:ASN:OD1	1:A:377:ASP:N	2.52	0.42
1:A:426:TYR:HD1	1:A:426:TYR:HA	1.56	0.42
1:A:86:GLN:CG	1:A:87:GLU:N	2.82	0.42
1:A:527:SER:OG	1:A:543:GLU:HG2	2.19	0.42
1:A:311:HIS:HD2	1:A:312:HIS:HA	1.84	0.42
1:A:483:MET:HE3	1:A:486:GLU:CG	2.48	0.42
1:A:66:ILE:HB	1:A:67:PRO:CD	2.49	0.42
1:A:346:ASP:H	1:A:348:LYS:HZ2	1.67	0.42
1:A:437:ILE:O	1:A:438:GLN:HB2	2.19	0.42
1:A:349:TYR:CD1	1:A:350:SER:N	2.86	0.42
1:A:503:TRP:CH2	1:A:505:ILE:HD13	2.53	0.42
1:A:174:VAL:CG2	1:A:178:HIS:CE1	3.01	0.42
1:A:341:ASP:O	1:A:342:VAL:C	2.57	0.42
1:A:431:PHE:O	1:A:437:ILE:HG12	2.20	0.42
1:A:158:TYR:CZ	1:A:236:ASN:HB2	2.55	0.42
1:A:233:ILE:O	1:A:236:ASN:N	2.53	0.42
1:A:344:VAL:HG12	1:A:345:TYR:CE1	2.54	0.42
1:A:20:GLN:HG3	1:A:61:ASP:CG	2.40	0.42
1:A:427:PHE:HB2	1:A:444:ARG:CZ	2.50	0.42
1:A:504:LEU:HD22	1:A:506:ILE:CG1	2.50	0.42
1:A:511:TYR:CD1	1:A:512:PHE:N	2.88	0.42
1:A:536:ASN:C	1:A:538:PHE:H	2.23	0.42
1:A:35:MET:HE1	1:A:44:THR:HA	2.01	0.41
1:A:194:GLY:HA2	1:A:195:PRO:HD2	1.52	0.41
1:A:519:LYS:HA	1:A:549:PHE:O	2.20	0.41
1:A:87:GLU:HB2	1:A:89:LYS:HD2	2.02	0.41
1:A:315:HIS:CD2	1:A:315:HIS:C	2.94	0.41
1:A:207:PHE:HE2	1:A:219:PHE:CE1	2.38	0.41
1:A:185:ILE:HD13	1:A:185:ILE:HG21	1.84	0.41
1:A:54:ASP:N	1:A:84:ILE:HD12	2.35	0.41
1:A:114:PRO:CD	1:A:123:ARG:HH21	2.33	0.41
1:A:200:MET:HA	1:A:200:MET:CE	2.49	0.41
1:A:294:PRO:HA	1:A:301:ASN:HD21	1.76	0.41
1:A:466:SER:C	1:A:468:LYS:H	2.22	0.41
1:A:473:ILE:O	1:A:474:PHE:C	2.59	0.41
1:A:73:TYR:CE2	1:A:75:PRO:CB	3.02	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:118:PHE:CD2	1:A:170:PHE:N	2.89	0.41
1:A:127:TYR:CE1	1:A:474:PHE:CE2	2.99	0.41
1:A:177:ALA:O	1:A:182:LEU:N	2.40	0.41
1:A:353:ARG:NE	1:A:357:HIS:CD2	2.88	0.41
1:A:389:ILE:CD1	1:A:397:TYR:HE2	2.32	0.41
1:A:35:MET:CE	1:A:45:ILE:HD12	2.50	0.41
1:A:47:LEU:HD12	1:A:48:ASN:H	1.86	0.41
1:A:167:PRO:O	1:A:171:ARG:N	2.42	0.41
1:A:337:LYS:HD2	1:A:344:VAL:HG22	2.03	0.41
1:A:23:VAL:C	1:A:24:LYS:HG2	2.40	0.41
1:A:16:TRP:CZ2	1:A:18:PRO:HG3	2.56	0.41
1:A:339:TYR:CE1	1:A:403:LEU:HD22	2.55	0.41
1:A:353:ARG:C	1:A:354:ARG:HG2	2.41	0.41
1:A:376:HIS:CG	1:A:377:ASP:N	2.89	0.41
1:A:447:GLU:OE2	1:A:447:GLU:HA	2.21	0.41
1:A:473:ILE:N	1:A:473:ILE:HD13	2.36	0.41
1:A:483:MET:O	1:A:486:GLU:HB3	2.21	0.41
1:A:484:ARG:NH1	1:A:490:ALA:CB	2.80	0.41
1:A:373:ILE:CD1	1:A:404:TYR:CE2	3.04	0.41
1:A:376:HIS:O	1:A:380:GLY:HA3	2.21	0.41
1:A:444:ARG:HE	1:A:450:GLN:NE2	2.19	0.41
1:A:504:LEU:HD22	1:A:506:ILE:HG13	2.03	0.41
1:A:118:PHE:HE2	1:A:166:GLY:H	1.69	0.40
1:A:158:TYR:OH	1:A:236:ASN:N	2.54	0.40
1:A:254:VAL:CG2	1:A:255:HIS:N	2.85	0.40
1:A:351:ASN:ND2	1:A:351:ASN:N	2.65	0.40
1:A:404:TYR:OH	1:A:413:ILE:HG23	2.21	0.40
1:A:35:MET:SD	1:A:45:ILE:CD1	3.09	0.40
1:A:57:LYS:HE2	1:A:81:PRO:HD3	2.02	0.40
1:A:99:LYS:H	1:A:99:LYS:CE	2.31	0.40
1:A:279:ILE:HA	1:A:303:ASP:OD2	2.21	0.40
1:A:286:LEU:C	1:A:288:ASP:H	2.22	0.40
1:A:533:SER:OG	1:A:535:ASN:O	2.30	0.40
1:A:95:THR:HG23	1:A:97:LEU:HB2	2.03	0.40
1:A:108:HIS:HE1	1:A:164:TYR:OH	2.03	0.40
1:A:200:MET:CE	1:A:200:MET:CA	2.99	0.40
1:A:350:SER:O	1:A:354:ARG:N	2.53	0.40
1:A:366:GLY:O	1:A:409:TYR:HA	2.21	0.40
1:A:426:TYR:CD2	1:A:459:THR:CG2	3.05	0.40
1:A:427:PHE:HD2	1:A:444:ARG:HG3	1.86	0.40
1:A:476:PHE:HD1	1:A:476:PHE:HA	1.68	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:530:LEU:HA	1:A:556:TYR:CD2	2.56	0.40
1:A:43:PHE:HD1	1:A:43:PHE:H	1.69	0.40
1:A:69:PRO:CB	1:A:200:MET:CE	2.99	0.40
1:A:162:ASN:HB3	1:A:163:SER:H	1.44	0.40
1:A:191:ASN:ND2	1:A:252:ASP:O	2.53	0.40
1:A:529:THR:H	1:A:529:THR:HG23	1.60	0.40
1:A:35:MET:HB3	1:A:44:THR:H	1.85	0.40
1:A:53:ARG:HD2	1:A:84:ILE:O	2.22	0.40
1:A:53:ARG:HD3	1:A:84:ILE:HB	2.03	0.40
1:A:65:GLU:H	1:A:65:GLU:HG2	1.65	0.40
1:A:532:LEU:O	1:A:554:ALA:HA	2.22	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles (i)

5.3.1 Protein backbone (i)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	555/558 (100%)	393 (71%)	102 (18%)	60 (11%)	0 2

All (60) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	62	ASP
1	A	63	ALA
1	A	109	VAL
1	A	112	PHE
1	A	157	LEU
1	A	164	TYR
1	A	167	PRO
1	A	213	THR
1	A	214	PRO
1	A	223	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	224	ALA
1	A	245	ASN
1	A	255	HIS
1	A	308	ASP
1	A	342	VAL
1	A	385	GLY
1	A	524	VAL
1	A	540	GLN
1	A	18	PRO
1	A	94	GLU
1	A	100	GLU
1	A	110	GLY
1	A	131	LEU
1	A	201	VAL
1	A	226	SER
1	A	253	ALA
1	A	296	GLU
1	A	311	HIS
1	A	397	TYR
1	A	409	TYR
1	A	438	GLN
1	A	467	TRP
1	A	511	TYR
1	A	537	SER
1	A	2	PHE
1	A	7	ASP
1	A	30	LYS
1	A	51	LYS
1	A	61	ASP
1	A	89	LYS
1	A	143	GLN
1	A	162	ASN
1	A	163	SER
1	A	205	PRO
1	A	453	ASP
1	A	551	LYS
1	A	67	PRO
1	A	97	LEU
1	A	192	HIS
1	A	200	MET
1	A	396	SER
1	A	437	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	443	GLY
1	A	5	LYS
1	A	539	PRO
1	A	358	GLY
1	A	17	ALA
1	A	52	VAL
1	A	233	ILE
1	A	454	PRO

5.3.2 Protein sidechains (i)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	485/494 (98%)	308 (64%)	177 (36%)	0 1

All (177) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1	THR
1	A	2	PHE
1	A	9	ASN
1	A	14	THR
1	A	15	LEU
1	A	16	TRP
1	A	19	TYR
1	A	20	GLN
1	A	21	LYS
1	A	22	SER
1	A	23	VAL
1	A	24	LYS
1	A	26	LYS
1	A	30	LYS
1	A	35	MET
1	A	38	ASP
1	A	39	GLU
1	A	47	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	49	ASN
1	A	50	VAL
1	A	51	LYS
1	A	53	ARG
1	A	54	ASP
1	A	59	VAL
1	A	64	SER
1	A	65	GLU
1	A	74	GLN
1	A	76	GLU
1	A	78	VAL
1	A	86	GLN
1	A	89	LYS
1	A	90	GLU
1	A	92	ASN
1	A	99	LYS
1	A	100	GLU
1	A	101	ASP
1	A	102	LEU
1	A	103	ILE
1	A	104	ILE
1	A	108	HIS
1	A	109	VAL
1	A	113	THR
1	A	121	VAL
1	A	124	LYS
1	A	126	ASP
1	A	128	LEU
1	A	129	LYS
1	A	131	LEU
1	A	133	ILE
1	A	134	THR
1	A	136	ILE
1	A	141	ILE
1	A	148	ARG
1	A	155	VAL
1	A	162	ASN
1	A	164	TYR
1	A	168	GLU
1	A	171	ARG
1	A	174	VAL
1	A	175	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	179	LYS
1	A	182	LEU
1	A	184	VAL
1	A	188	VAL
1	A	189	VAL
1	A	198	ASN
1	A	200	MET
1	A	203	LEU
1	A	208	SER
1	A	210	LYS
1	A	211	TYR
1	A	212	LYS
1	A	215	TRP
1	A	217	LEU
1	A	223	ASP
1	A	228	GLU
1	A	232	PHE
1	A	234	LEU
1	A	237	VAL
1	A	243	GLU
1	A	245	ASN
1	A	258	ILE
1	A	272	VAL
1	A	275	LYS
1	A	277	ASN
1	A	278	ARG
1	A	280	VAL
1	A	281	ILE
1	A	286	LEU
1	A	290	ARG
1	A	301	ASN
1	A	312	HIS
1	A	313	SER
1	A	322	ARG
1	A	323	GLN
1	A	325	TYR
1	A	329	PHE
1	A	332	LEU
1	A	336	VAL
1	A	337	LYS
1	A	339	TYR
1	A	340	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	346	ASP
1	A	348	LYS
1	A	349	TYR
1	A	350	SER
1	A	351	ASN
1	A	353	ARG
1	A	354	ARG
1	A	359	GLU
1	A	361	VAL
1	A	363	GLU
1	A	364	LEU
1	A	369	PHE
1	A	370	VAL
1	A	373	ILE
1	A	382	ARG
1	A	384	LYS
1	A	386	GLU
1	A	387	ARG
1	A	388	ILE
1	A	389	ILE
1	A	391	LEU
1	A	392	VAL
1	A	396	SER
1	A	404	TYR
1	A	407	SER
1	A	410	ILE
1	A	412	MET
1	A	413	ILE
1	A	418	GLU
1	A	422	GLU
1	A	432	SER
1	A	434	SER
1	A	435	LYS
1	A	436	LEU
1	A	437	ILE
1	A	442	GLU
1	A	445	LYS
1	A	447	GLU
1	A	448	ASN
1	A	452	THR
1	A	453	ASP
1	A	456	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	458	SER
1	A	464	LYS
1	A	465	LEU
1	A	467	TRP
1	A	468	LYS
1	A	471	GLU
1	A	473	ILE
1	A	476	PHE
1	A	480	LEU
1	A	483	MET
1	A	486	GLU
1	A	487	LEU
1	A	494	ARG
1	A	496	ASN
1	A	501	GLU
1	A	502	ASN
1	A	505	ILE
1	A	512	PHE
1	A	513	SER
1	A	526	TYR
1	A	527	SER
1	A	529	THR
1	A	531	LEU
1	A	532	LEU
1	A	533	SER
1	A	534	SER
1	A	537	SER
1	A	540	GLN
1	A	542	ILE
1	A	544	GLU
1	A	547	TYR
1	A	555	LEU
1	A	556	TYR

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (18) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	9	ASN
1	A	74	GLN
1	A	79	HIS
1	A	162	ASN
1	A	178	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	192	HIS
1	A	264	HIS
1	A	274	HIS
1	A	293	ASN
1	A	301	ASN
1	A	311	HIS
1	A	351	ASN
1	A	357	HIS
1	A	368	ASN
1	A	381	ASN
1	A	423	ASN
1	A	450	GLN
1	A	535	ASN

5.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates (i)

There are no monosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry (i)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers (i)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data (i)

6.1 Protein, DNA and RNA chains (i)

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.

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

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.

6.3 Carbohydrates (i)

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.

6.4 Ligands (i)

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.

6.5 Other polymers (i)

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.