



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Dec 11, 2022 – 02:49 AM EST

PDB ID : 1B7U
Title : Structure of Mare Apolactoferrin: the N and C Lobes are in the Closed Form
Authors : Sharma, A.K.; Singh, T.P.
Deposited on : 1999-01-01
Resolution : 3.80 Å(reported)

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

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/XrayValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

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

MolProbity : 4.02b-467
Xtrriage (Phenix) : **NOT EXECUTED**
EDS : **NOT EXECUTED**
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.31.2

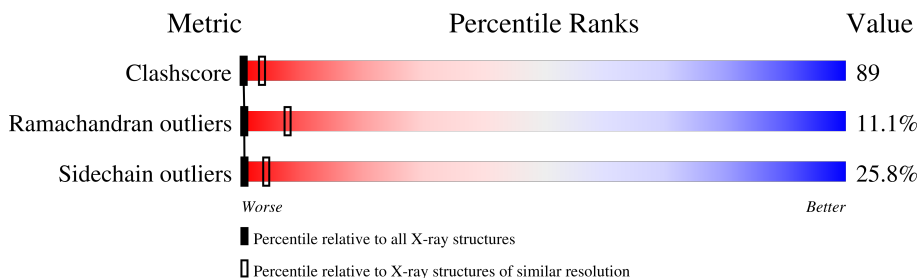
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.80 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	141614	1288 (4.00-3.60)
Ramachandran outliers	138981	1243 (4.00-3.60)
Sidechain outliers	138945	1237 (4.00-3.60)

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

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	689	

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 5281 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 Lactotransferrin.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	689	5281	3299	937	1008	37	0	0	0

There are 6 discrepancies between the modelled and reference sequences:

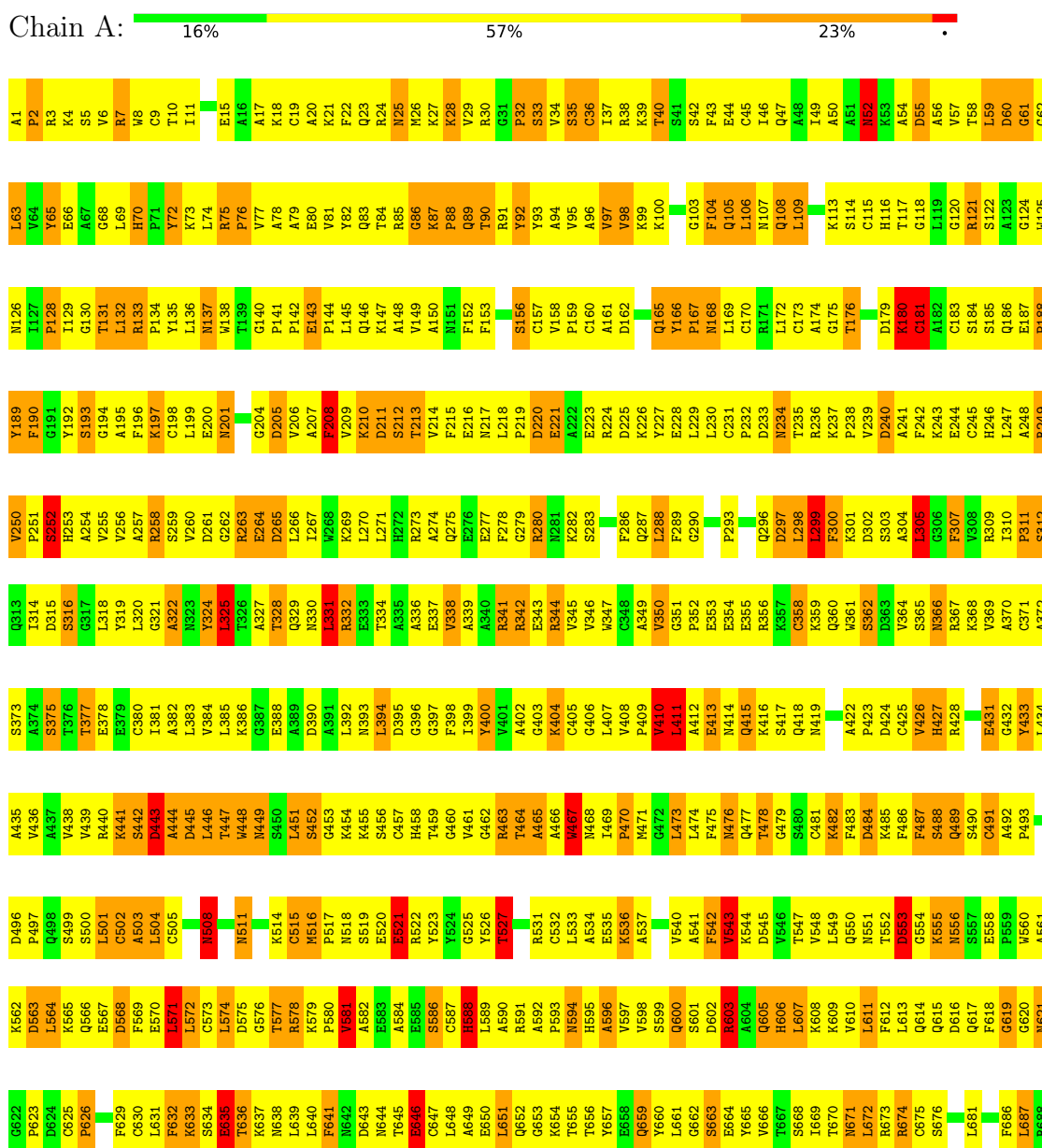
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	223	GLU	ASP	conflict	UNP O77811
A	269	LYS	ARG	conflict	UNP O77811
A	290	GLY	LYS	conflict	UNP O77811
A	294	GLY	GLU	conflict	UNP O77811
A	295	GLU	ASN	conflict	UNP O77811
A	296	GLN	LYS	conflict	UNP O77811

3 Residue-property plots

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

Note EDS was not executed.

- Molecule 1: Lactotransferrin



6897

4 Data and refinement statistics

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

Property	Value	Source
Space group	P 21 21 21	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	100.40Å 77.40Å 102.60Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	32.00 – 3.80	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	99.2 (32.00-3.80)	Depositor
R_{merge}	0.15	Depositor
R_{sym}	0.15	Depositor
Refinement program	X-PLOR 3.851	Depositor
R, R_{free}	0.200 , 0.300	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtrriage
Total number of atoms	5281	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	44.0	wwPDB-VP

5 Model quality i

5.1 Standard geometry i

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z >5	RMSZ	# Z >5
1	A	0.73	2/5392 (0.0%)	1.09	25/7298 (0.3%)

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

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

All (2) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	689	ALA	C-OXT	7.41	1.37	1.23
1	A	467	TRP	CB-CG	-5.18	1.41	1.50

All (25) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	180	LYS	CB-CA-C	17.81	146.03	110.40
1	A	410	VAL	CB-CA-C	13.43	136.92	111.40
1	A	7	ARG	NE-CZ-NH2	7.43	124.02	120.30
1	A	571	LEU	CA-CB-CG	7.39	132.30	115.30
1	A	491	CYS	CA-CB-SG	-7.12	101.18	114.00
1	A	312	SER	CB-CA-C	-7.03	96.74	110.10
1	A	263	ARG	NE-CZ-NH2	6.90	123.75	120.30
1	A	312	SER	N-CA-C	6.58	128.78	111.00
1	A	410	VAL	N-CA-C	-6.57	93.26	111.00
1	A	521	GLU	N-CA-C	-6.37	93.81	111.00
1	A	635	GLU	N-CA-C	-6.19	94.30	111.00
1	A	181	CYS	CB-CA-C	-6.14	98.12	110.40
1	A	633	LYS	N-CA-C	-6.10	94.52	111.00
1	A	411	LEU	CB-CA-C	-6.03	98.75	110.20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	36	CYS	CA-CB-SG	-5.81	103.54	114.00
1	A	143	GLU	N-CA-C	-5.79	95.36	111.00
1	A	290	GLY	N-CA-C	-5.73	98.78	113.10
1	A	325	LEU	CA-CB-CG	5.64	128.28	115.30
1	A	299	LEU	O-C-N	5.60	131.66	122.70
1	A	86	GLY	N-CA-C	-5.55	99.22	113.10
1	A	515	CYS	CA-CB-SG	5.54	123.97	114.00
1	A	331	LEU	CA-CB-CG	5.46	127.85	115.30
1	A	372	ALA	N-CA-C	-5.43	96.33	111.00
1	A	180	LYS	N-CA-C	-5.08	97.28	111.00
1	A	208	PHE	N-CA-C	-5.04	97.39	111.00

There are no chirality outliers.

All (1) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	28	LYS	Mainchain

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	5281	0	5149	924	0
All	All	5281	0	5149	924	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 89.

All (924) 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:258:ARG:NH2	1:A:261:ASP:O	1.64	1.30
1:A:179:ASP:O	1:A:180:LYS:O	1.56	1.21
1:A:299:LEU:HB2	1:A:300:PHE:CE1	1.79	1.18
1:A:75:ARG:HH12	1:A:312:SER:HA	1.03	1.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:579:LYS:HD2	1:A:587:CYS:HB2	1.27	1.16
1:A:15:GLU:HA	1:A:298:LEU:HD11	1.36	1.07
1:A:75:ARG:NH1	1:A:312:SER:HA	1.72	1.05
1:A:354:GLU:HG2	1:A:639:LEU:HG	1.37	1.05
1:A:18:LYS:HG2	1:A:299:LEU:HD11	1.32	1.05
1:A:383:LEU:HD11	1:A:388:GLU:HB2	1.35	1.04
1:A:299:LEU:HB2	1:A:300:PHE:CD1	1.94	1.03
1:A:469:ILE:HB	1:A:470:PRO:HD3	1.42	1.01
1:A:349:ALA:O	1:A:373:SER:HB2	1.61	1.01
1:A:630:CYS:HB3	1:A:633:LYS:HB2	1.42	1.01
1:A:436:VAL:HG12	1:A:588:HIS:HA	1.42	1.00
1:A:96:ALA:HA	1:A:208:PHE:HA	1.44	0.99
1:A:469:ILE:HD12	1:A:469:ILE:H	1.27	0.99
1:A:651:LEU:HD12	1:A:651:LEU:H	1.29	0.98
1:A:470:PRO:HA	1:A:473:LEU:HD22	1.43	0.98
1:A:100:LYS:HG2	1:A:228:GLU:HB2	1.43	0.98
1:A:258:ARG:H	1:A:258:ARG:HD3	1.26	0.97
1:A:68:GLY:HA3	1:A:316:SER:HB2	1.47	0.96
1:A:392:LEU:HD11	1:A:394:LEU:HG	1.48	0.95
1:A:75:ARG:HB2	1:A:259:SER:HA	1.49	0.95
1:A:573:CYS:HB2	1:A:577:THR:HB	1.48	0.94
1:A:465:ALA:HB2	1:A:526:TYR:CZ	2.02	0.94
1:A:641:PHE:CE2	1:A:648:LEU:HD11	2.03	0.94
1:A:262:GLY:O	1:A:263:ARG:HB2	1.66	0.93
1:A:7:ARG:HA	1:A:35:SER:O	1.67	0.93
1:A:265:ASP:HA	1:A:309:ARG:HH12	1.34	0.92
1:A:9:CYS:HB3	1:A:57:VAL:HG11	1.52	0.92
1:A:133:ARG:HA	1:A:136:LEU:HD12	1.50	0.92
1:A:404:LYS:HE3	1:A:657:TYR:OH	1.71	0.91
1:A:79:ALA:HA	1:A:254:ALA:HA	1.55	0.89
1:A:413:GLU:HG3	1:A:595:HIS:HB2	1.54	0.89
1:A:385:LEU:HD21	1:A:407:LEU:HD11	1.55	0.89
1:A:289:PHE:HB3	1:A:303:SER:H	1.39	0.88
1:A:416:LYS:HA	1:A:646:GLU:HG2	1.53	0.88
1:A:25:ASN:HA	1:A:28:LYS:HB2	1.57	0.87
1:A:280:ARG:NH1	1:A:305:LEU:HA	1.90	0.86
1:A:408:VAL:HG23	1:A:655:THR:O	1.76	0.86
1:A:456:SER:HB2	1:A:487:PHE:CE1	2.11	0.86
1:A:258:ARG:CZ	1:A:261:ASP:O	2.24	0.86
1:A:439:VAL:HG11	1:A:572:LEU:HD23	1.57	0.86
1:A:179:ASP:O	1:A:180:LYS:C	2.12	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:76:PRO:HA	1:A:256:VAL:HG12	1.59	0.85
1:A:460:GLY:O	1:A:467:TRP:HB2	1.76	0.85
1:A:625:CYS:HA	1:A:629:PHE:O	1.75	0.85
1:A:457:CYS:HB2	1:A:541:ALA:HB2	1.58	0.85
1:A:402:ALA:HB1	1:A:407:LEU:HB2	1.60	0.84
1:A:28:LYS:NZ	1:A:28:LYS:HB3	1.93	0.83
1:A:482:LYS:H	1:A:482:LYS:HD3	1.42	0.83
1:A:300:PHE:CD1	1:A:300:PHE:N	2.45	0.83
1:A:82:TYR:CE2	1:A:252:SER:HB3	2.14	0.83
1:A:106:LEU:O	1:A:109:LEU:HB2	1.78	0.83
1:A:448:TRP:O	1:A:451:LEU:HG	1.78	0.83
1:A:117:THR:OG1	1:A:124:GLY:HA3	1.79	0.82
1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:SER:H	1.45	0.81
1:A:298:LEU:HD13	1:A:299:LEU:HG	1.60	0.81
1:A:523:TYR:CZ	1:A:532:CYS:HA	2.15	0.81
1:A:460:GLY:HA2	1:A:493:PRO:HD2	1.61	0.81
1:A:674:ARG:HG2	1:A:674:ARG:HH11	1.44	0.81
1:A:6:VAL:HG13	1:A:55:ASP:OD1	1.80	0.81
1:A:409:PRO:HD2	1:A:655:THR:O	1.81	0.81
1:A:456:SER:O	1:A:490:SER:HB3	1.81	0.81
1:A:80:GLU:OE1	1:A:300:PHE:HB3	1.81	0.80
1:A:189:TYR:HA	1:A:194:GLY:C	2.02	0.80
1:A:288:LEU:HD22	1:A:288:LEU:H	1.46	0.80
1:A:74:LEU:HD22	1:A:258:ARG:HA	1.63	0.80
1:A:381:ILE:O	1:A:384:VAL:HG22	1.83	0.79
1:A:491:CYS:HB2	1:A:504:LEU:HB2	1.63	0.79
1:A:328:THR:HA	1:A:331:LEU:HD23	1.63	0.79
1:A:671:ASN:O	1:A:674:ARG:HB2	1.82	0.79
1:A:397:GLY:O	1:A:400:TYR:HB3	1.81	0.79
1:A:116:HIS:CD2	1:A:158:VAL:HG22	2.18	0.78
1:A:65:TYR:CE2	1:A:328:THR:HB	2.18	0.78
1:A:277:GLU:O	1:A:283:SER:HB2	1.82	0.78
1:A:3:ARG:HA	1:A:3:ARG:NE	1.98	0.78
1:A:196:PHE:HE2	1:A:214:VAL:HG22	1.49	0.78
1:A:176:THR:O	1:A:180:LYS:HB2	1.83	0.77
1:A:347:TRP:HE1	1:A:640:LEU:HD22	1.50	0.77
1:A:399:ILE:HG23	1:A:598:VAL:HG21	1.66	0.77
1:A:77:VAL:HG23	1:A:256:VAL:HA	1.65	0.76
1:A:28:LYS:HB3	1:A:28:LYS:HZ2	1.50	0.76
1:A:499:SER:HB2	1:A:501:LEU:HD23	1.68	0.76
1:A:565:LYS:HB2	1:A:567:GLU:HG2	1.67	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:425:CYS:HA	1:A:428:ARG:HD3	1.68	0.76
1:A:423:PRO:O	1:A:426:VAL:HG23	1.86	0.76
1:A:98:VAL:HG13	1:A:206:VAL:HG23	1.67	0.76
1:A:579:LYS:CD	1:A:587:CYS:HB2	2.13	0.76
1:A:98:VAL:HG11	1:A:230:LEU:HD21	1.69	0.75
1:A:436:VAL:HA	1:A:589:LEU:HG	1.68	0.75
1:A:113:LYS:HB2	1:A:205:ASP:HB2	1.69	0.75
1:A:59:LEU:HD13	1:A:63:LEU:HD23	1.68	0.74
1:A:223:GLU:O	1:A:226:LYS:HB2	1.86	0.74
1:A:91:ARG:HE	1:A:251:PRO:HG3	1.52	0.74
1:A:280:ARG:HB2	1:A:282:LYS:HD3	1.68	0.74
1:A:606:HIS:O	1:A:609:LYS:HG2	1.88	0.74
1:A:631:LEU:HD22	1:A:641:PHE:HE1	1.52	0.74
1:A:77:VAL:O	1:A:310:ILE:HG12	1.88	0.74
1:A:263:ARG:HD3	1:A:266:LEU:HD22	1.69	0.74
1:A:436:VAL:HG12	1:A:588:HIS:CA	2.17	0.74
1:A:551:ASN:HA	1:A:556:ASN:HB3	1.68	0.74
1:A:45:CYS:O	1:A:49:ILE:HD13	1.88	0.73
1:A:403:GLY:HA3	1:A:657:TYR:CD1	2.23	0.73
1:A:10:THR:HB	1:A:15:GLU:HB3	1.68	0.73
1:A:503:ALA:O	1:A:514:LYS:HE2	1.89	0.73
1:A:299:LEU:CB	1:A:300:PHE:CE1	2.68	0.73
1:A:651:LEU:H	1:A:651:LEU:CD1	2.01	0.73
1:A:113:LYS:HB3	1:A:172:LEU:HD21	1.70	0.73
1:A:283:SER:HB3	1:A:286:PHE:O	1.88	0.73
1:A:411:LEU:HB3	1:A:648:LEU:HB3	1.70	0.73
1:A:475:PHE:CE1	1:A:479:GLY:HA2	2.24	0.73
1:A:573:CYS:CB	1:A:577:THR:HB	2.18	0.73
1:A:400:TYR:OH	1:A:673:ARG:HD2	1.88	0.72
1:A:531:ARG:HA	1:A:560:TRP:CZ3	2.24	0.72
1:A:629:PHE:HE2	1:A:631:LEU:HG	1.55	0.72
1:A:354:GLU:HA	1:A:639:LEU:HD23	1.71	0.72
1:A:451:LEU:O	1:A:454:LYS:HG2	1.90	0.72
1:A:166:TYR:CD1	1:A:166:TYR:N	2.57	0.72
1:A:448:TRP:CE3	1:A:451:LEU:HD21	2.24	0.71
1:A:395:ASP:O	1:A:399:ILE:HG13	1.90	0.71
1:A:3:ARG:HH22	1:A:4:LYS:HG2	1.56	0.71
1:A:280:ARG:NH2	1:A:289:PHE:HD2	1.89	0.71
1:A:91:ARG:HA	1:A:251:PRO:HA	1.72	0.70
1:A:192:TYR:CE2	1:A:210:LYS:HG3	2.26	0.70
1:A:605:GLN:OE1	1:A:608:LYS:HD3	1.91	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:271:LEU:HD12	1:A:307:PHE:CE2	2.26	0.70
1:A:633:LYS:HA	1:A:643:ASP:HA	1.73	0.70
1:A:60:ASP:HB2	1:A:253:HIS:CE1	2.26	0.70
1:A:573:CYS:SG	1:A:579:LYS:HG3	2.31	0.70
1:A:60:ASP:CG	1:A:121:ARG:HG3	2.11	0.70
1:A:118:GLY:HA2	1:A:159:PRO:HB2	1.74	0.70
1:A:9:CYS:HB3	1:A:57:VAL:CG1	2.22	0.70
1:A:192:TYR:HB3	1:A:213:THR:OG1	1.92	0.70
1:A:463:ARG:HG2	1:A:464:THR:N	2.06	0.70
1:A:571:LEU:HD13	1:A:579:LYS:HB2	1.74	0.69
1:A:558:GLU:HB3	1:A:560:TRP:CD1	2.27	0.69
1:A:499:SER:HB2	1:A:501:LEU:CD2	2.21	0.69
1:A:458:HIS:HB2	1:A:492:ALA:HA	1.75	0.69
1:A:467:TRP:HD1	1:A:468:ASN:OD1	1.74	0.69
1:A:129:ILE:H	1:A:129:ILE:HD12	1.57	0.69
1:A:91:ARG:NE	1:A:251:PRO:HG3	2.06	0.69
1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CD1	2.60	0.69
1:A:461:VAL:HG12	1:A:467:TRP:CZ3	2.28	0.69
1:A:440:ARG:HH22	1:A:536:LYS:HA	1.58	0.68
1:A:455:LYS:HA	1:A:489:GLN:O	1.93	0.68
1:A:466:ALA:O	1:A:470:PRO:HD2	1.93	0.68
1:A:531:ARG:HA	1:A:560:TRP:CH2	2.28	0.68
1:A:523:TYR:OH	1:A:532:CYS:HA	1.92	0.68
1:A:416:LYS:HA	1:A:646:GLU:CG	2.23	0.68
1:A:289:PHE:HB3	1:A:303:SER:N	2.07	0.68
1:A:469:ILE:O	1:A:473:LEU:HD13	1.93	0.68
1:A:579:LYS:HB3	1:A:580:PRO:HD2	1.75	0.68
1:A:534:ALA:HB3	1:A:560:TRP:HZ3	1.57	0.68
1:A:490:SER:HA	1:A:504:LEU:HD11	1.75	0.68
1:A:322:ALA:HB2	1:A:385:LEU:O	1.93	0.67
1:A:279:GLY:O	1:A:282:LYS:HB2	1.94	0.67
1:A:632:PHE:CD1	1:A:632:PHE:N	2.61	0.67
1:A:511:ASN:ND2	1:A:522:ARG:HH22	1.92	0.67
1:A:632:PHE:O	1:A:633:LYS:HG2	1.94	0.67
1:A:579:LYS:HB2	1:A:587:CYS:SG	2.35	0.67
1:A:189:TYR:HA	1:A:194:GLY:O	1.94	0.67
1:A:298:LEU:HD13	1:A:299:LEU:CG	2.24	0.67
1:A:504:LEU:H	1:A:504:LEU:HD23	1.59	0.67
1:A:334:THR:O	1:A:338:VAL:HG23	1.95	0.67
1:A:463:ARG:NE	1:A:526:TYR:HE1	1.91	0.67
1:A:490:SER:C	1:A:504:LEU:HG	2.15	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:581:VAL:HG23	1:A:582:ALA:H	1.59	0.67
1:A:199:LEU:HA	1:A:204:GLY:HA3	1.77	0.67
1:A:280:ARG:CZ	1:A:289:PHE:HD2	2.08	0.67
1:A:411:LEU:HD23	1:A:611:LEU:HD22	1.76	0.67
1:A:356:ARG:HG2	1:A:359:LYS:NZ	2.10	0.66
1:A:469:ILE:HB	1:A:470:PRO:CD	2.22	0.66
1:A:471:MET:SD	1:A:471:MET:N	2.68	0.66
1:A:470:PRO:CA	1:A:473:LEU:HD22	2.23	0.66
1:A:592:ALA:HB1	1:A:593:PRO:HD2	1.78	0.66
1:A:355:GLU:O	1:A:359:LYS:HG3	1.95	0.66
1:A:432:GLY:HA2	1:A:594:ASN:OD1	1.96	0.66
1:A:105:GLN:OE1	1:A:235:THR:HA	1.96	0.66
1:A:237:LYS:HB2	1:A:245:CYS:SG	2.36	0.66
1:A:114:SER:O	1:A:156:SER:HA	1.96	0.66
1:A:193:SER:HB2	1:A:296:GLN:HB3	1.78	0.66
1:A:265:ASP:O	1:A:269:LYS:HG2	1.96	0.66
1:A:631:LEU:HD22	1:A:641:PHE:CE1	2.31	0.66
1:A:75:ARG:HG2	1:A:76:PRO:HD2	1.77	0.66
1:A:105:GLN:HB3	1:A:234:ASN:O	1.95	0.66
1:A:280:ARG:HH12	1:A:305:LEU:HA	1.59	0.66
1:A:361:TRP:CZ3	1:A:631:LEU:HD21	2.31	0.66
1:A:407:LEU:HB3	1:A:598:VAL:HG12	1.78	0.65
1:A:527:THR:HG21	1:A:636:THR:O	1.97	0.65
1:A:3:ARG:HG3	1:A:266:LEU:HD21	1.77	0.65
1:A:93:TYR:HD2	1:A:246:HIS:CE1	2.15	0.65
1:A:50:ALA:C	1:A:52:ASN:H	1.98	0.65
1:A:617:GLN:HB3	1:A:618:PHE:CE2	2.31	0.65
1:A:193:SER:CB	1:A:296:GLN:HB3	2.27	0.65
1:A:365:SER:O	1:A:368:LYS:HB2	1.96	0.65
1:A:15:GLU:HA	1:A:298:LEU:CD1	2.22	0.65
1:A:470:PRO:HA	1:A:473:LEU:CD2	2.22	0.65
1:A:496:ASP:O	1:A:499:SER:HB3	1.97	0.65
1:A:461:VAL:HA	1:A:467:TRP:CD2	2.32	0.64
1:A:74:LEU:HA	1:A:259:SER:H	1.62	0.64
1:A:293:PRO:HA	1:A:296:GLN:HE21	1.62	0.64
1:A:114:SER:HB3	1:A:153:PHE:CD2	2.32	0.64
1:A:394:LEU:HD13	1:A:398:PHE:C	2.18	0.64
1:A:416:LYS:HB3	1:A:644:ASN:O	1.97	0.64
1:A:453:GLY:HA2	1:A:486:PHE:O	1.97	0.64
1:A:607:LEU:O	1:A:610:VAL:HG22	1.97	0.64
1:A:674:ARG:HG2	1:A:674:ARG:NH1	2.12	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:49:ILE:HG23	1:A:55:ASP:O	1.98	0.64
1:A:100:LYS:CG	1:A:228:GLU:HB2	2.22	0.64
1:A:189:TYR:CZ	1:A:198:CYS:HA	2.32	0.64
1:A:189:TYR:CG	1:A:198:CYS:HB2	2.32	0.64
1:A:9:CYS:SG	1:A:39:LYS:HB2	2.38	0.64
1:A:278:PHE:HB2	1:A:288:LEU:HD11	1.79	0.64
1:A:630:CYS:HB3	1:A:633:LYS:CB	2.22	0.64
1:A:11:ILE:HG12	1:A:15:GLU:OE1	1.98	0.63
1:A:165:GLN:NE2	1:A:166:TYR:CD2	2.66	0.63
1:A:392:LEU:O	1:A:392:LEU:HD12	1.98	0.63
1:A:352:PRO:HA	1:A:355:GLU:HB3	1.80	0.63
1:A:482:LYS:HD3	1:A:482:LYS:N	2.13	0.63
1:A:400:TYR:HE1	1:A:681:LEU:HD21	1.63	0.63
1:A:463:ARG:CZ	1:A:526:TYR:HE1	2.11	0.63
1:A:619:GLY:C	1:A:621:ASN:H	2.02	0.63
1:A:73:LYS:C	1:A:74:LEU:HD23	2.19	0.63
1:A:561:ALA:O	1:A:564:LEU:HG	1.97	0.63
1:A:561:ALA:HB1	1:A:564:LEU:CD2	2.29	0.63
1:A:192:TYR:HB2	1:A:301:LYS:NZ	2.14	0.63
1:A:558:GLU:OE1	1:A:560:TRP:HD1	1.82	0.63
1:A:653:GLY:O	1:A:655:THR:HG23	1.99	0.63
1:A:334:THR:OG1	1:A:336:ALA:HB3	1.99	0.63
1:A:438:VAL:HA	1:A:571:LEU:HA	1.79	0.63
1:A:579:LYS:HE3	1:A:586:SER:HB2	1.80	0.63
1:A:463:ARG:NE	1:A:526:TYR:CE1	2.67	0.63
1:A:463:ARG:O	1:A:467:TRP:HB3	1.98	0.63
1:A:571:LEU:O	1:A:578:ARG:HA	1.99	0.62
1:A:192:TYR:HB2	1:A:301:LYS:HZ2	1.64	0.62
1:A:548:VAL:HG12	1:A:549:LEU:HD23	1.81	0.62
1:A:49:ILE:HD11	1:A:57:VAL:HG13	1.81	0.62
1:A:433:TYR:O	1:A:591:ARG:HA	1.99	0.62
1:A:547:THR:O	1:A:550:GLN:HB2	1.99	0.62
1:A:611:LEU:O	1:A:615:GLN:HG2	1.98	0.62
1:A:11:ILE:HB	1:A:40:THR:O	2.00	0.62
1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:HD1	1.97	0.62
1:A:59:LEU:O	1:A:253:HIS:HB3	1.99	0.62
1:A:9:CYS:HA	1:A:37:ILE:O	2.00	0.62
1:A:188:PRO:O	1:A:190:PHE:N	2.33	0.62
1:A:435:ALA:HB1	1:A:589:LEU:HD12	1.80	0.62
1:A:460:GLY:CA	1:A:493:PRO:HD2	2.28	0.62
1:A:250:VAL:HB	1:A:324:TYR:CD2	2.34	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:571:LEU:HD22	1:A:587:CYS:SG	2.40	0.61
1:A:93:TYR:HA	1:A:249:ARG:HA	1.81	0.61
1:A:521:GLU:HG3	1:A:523:TYR:H	1.65	0.61
1:A:631:LEU:HB3	1:A:632:PHE:CD1	2.35	0.61
1:A:237:LYS:HD2	1:A:245:CYS:HB2	1.82	0.61
1:A:157:CYS:HB2	1:A:172:LEU:HB3	1.83	0.61
1:A:347:TRP:NE1	1:A:640:LEU:HD22	2.15	0.61
1:A:8:TRP:HH2	1:A:58:THR:HG1	1.47	0.61
1:A:490:SER:H	1:A:501:LEU:HA	1.66	0.61
1:A:463:ARG:NH2	1:A:526:TYR:CE1	2.69	0.61
1:A:334:THR:HG23	1:A:337:GLU:OE2	2.00	0.61
1:A:5:SER:HB3	1:A:33:SER:O	2.01	0.61
1:A:461:VAL:HG12	1:A:467:TRP:CH2	2.36	0.60
1:A:38:ARG:HH12	1:A:39:LYS:C	2.04	0.60
1:A:150:ALA:HB2	1:A:169:LEU:HD11	1.83	0.60
1:A:52:ASN:HA	1:A:54:ALA:O	2.00	0.60
1:A:293:PRO:HA	1:A:296:GLN:HG2	1.82	0.60
1:A:385:LEU:HD11	1:A:405:CYS:HB3	1.82	0.60
1:A:95:VAL:CG1	1:A:246:HIS:HB2	2.31	0.60
1:A:505:CYS:HB2	1:A:514:LYS:HG3	1.83	0.60
1:A:550:GLN:HE22	1:A:638:ASN:HD21	1.49	0.60
1:A:356:ARG:HA	1:A:359:LYS:HE2	1.84	0.60
1:A:346:VAL:O	1:A:390:ASP:HB2	2.01	0.60
1:A:407:LEU:N	1:A:407:LEU:HD12	2.16	0.60
1:A:410:VAL:O	1:A:651:LEU:HG	2.02	0.60
1:A:516:MET:HG2	1:A:517:PRO:N	2.17	0.60
1:A:608:LYS:HE2	1:A:650:GLU:OE2	2.01	0.60
1:A:334:THR:OG1	1:A:337:GLU:HG3	2.02	0.60
1:A:434:LEU:HD22	1:A:588:HIS:ND1	2.16	0.60
1:A:232:PRO:C	1:A:234:ASN:H	2.04	0.60
1:A:328:THR:O	1:A:331:LEU:HB2	2.01	0.60
1:A:149:VAL:O	1:A:153:PHE:HD1	1.84	0.59
1:A:212:SER:O	1:A:215:PHE:N	2.36	0.59
1:A:298:LEU:O	1:A:299:LEU:HD12	2.01	0.59
1:A:75:ARG:NH1	1:A:312:SER:CA	2.57	0.59
1:A:288:LEU:HD22	1:A:288:LEU:N	2.17	0.59
1:A:508:ASN:O	1:A:511:ASN:N	2.34	0.59
1:A:75:ARG:NH2	1:A:311:PRO:O	2.33	0.59
1:A:656:THR:N	1:A:659:GLN:HG3	2.18	0.59
1:A:632:PHE:CE2	1:A:647:CYS:HA	2.38	0.59
1:A:663:SER:O	1:A:666:VAL:HB	2.03	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:347:TRP:O	1:A:371:CYS:HB2	2.03	0.59
1:A:473:LEU:HD13	1:A:473:LEU:H	1.67	0.59
1:A:395:ASP:HB3	1:A:398:PHE:HD2	1.67	0.59
1:A:436:VAL:CA	1:A:589:LEU:HG	2.33	0.58
1:A:571:LEU:HD11	1:A:587:CYS:HB3	1.85	0.58
1:A:597:VAL:CG2	1:A:648:LEU:HD13	2.33	0.58
1:A:394:LEU:O	1:A:595:HIS:HB3	2.03	0.58
1:A:415:GLN:NE2	1:A:431:GLU:HB2	2.17	0.58
1:A:459:THR:OG1	1:A:463:ARG:HD3	2.03	0.58
1:A:464:THR:HG22	1:A:469:ILE:HD11	1.85	0.58
1:A:79:ALA:HA	1:A:254:ALA:CA	2.29	0.58
1:A:97:VAL:N	1:A:207:ALA:O	2.36	0.58
1:A:106:LEU:HA	1:A:109:LEU:HD13	1.85	0.58
1:A:490:SER:O	1:A:504:LEU:HG	2.03	0.58
1:A:632:PHE:HB3	1:A:645:THR:HB	1.85	0.58
1:A:393:ASN:HB3	1:A:640:LEU:O	2.03	0.58
1:A:238:PRO:O	1:A:241:ALA:HB3	2.04	0.58
1:A:351:GLY:HA3	1:A:518:ASN:ND2	2.19	0.58
1:A:392:LEU:CD1	1:A:394:LEU:HG	2.30	0.58
1:A:166:TYR:N	1:A:166:TYR:HD1	2.01	0.58
1:A:298:LEU:HD22	1:A:299:LEU:H	1.68	0.57
1:A:392:LEU:HD12	1:A:392:LEU:C	2.24	0.57
1:A:115:CYS:SG	1:A:204:GLY:HA2	2.45	0.57
1:A:365:SER:O	1:A:366:ASN:HB3	2.04	0.57
1:A:404:LYS:HA	1:A:404:LYS:CE	2.34	0.57
1:A:633:LYS:CA	1:A:643:ASP:HA	2.35	0.57
1:A:3:ARG:CZ	1:A:4:LYS:H	2.17	0.57
1:A:394:LEU:HB3	1:A:399:ILE:HG12	1.86	0.57
1:A:380:CYS:HB3	1:A:392:LEU:HD23	1.86	0.57
1:A:396:GLY:HA2	1:A:399:ILE:HD12	1.86	0.57
1:A:10:THR:O	1:A:38:ARG:HD2	2.05	0.57
1:A:133:ARG:HB3	1:A:134:PRO:HD3	1.85	0.57
1:A:250:VAL:HG23	1:A:251:PRO:HD2	1.85	0.57
1:A:499:SER:OG	1:A:502:CYS:HB2	2.04	0.57
1:A:561:ALA:HB1	1:A:564:LEU:HG	1.85	0.57
1:A:356:ARG:HG2	1:A:359:LYS:HZ3	1.68	0.57
1:A:395:ASP:HB3	1:A:398:PHE:CD2	2.40	0.57
1:A:635:GLU:O	1:A:636:THR:HG22	2.05	0.57
1:A:189:TYR:HB3	1:A:195:ALA:HA	1.87	0.57
1:A:278:PHE:HB2	1:A:288:LEU:CD1	2.34	0.57
1:A:409:PRO:O	1:A:651:LEU:HD21	2.04	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:448:TRP:CE3	1:A:448:TRP:HA	2.39	0.57
1:A:49:ILE:HG12	1:A:57:VAL:HG22	1.86	0.56
1:A:162:ASP:O	1:A:166:TYR:HE1	1.87	0.56
1:A:39:LYS:HD2	1:A:44:GLU:HG2	1.86	0.56
1:A:73:LYS:O	1:A:74:LEU:HD23	2.06	0.56
1:A:120:GLY:O	1:A:126:ASN:ND2	2.38	0.56
1:A:141:PRO:N	1:A:142:PRO:HD2	2.20	0.56
1:A:189:TYR:HB3	1:A:198:CYS:HB2	1.86	0.56
1:A:258:ARG:HB2	1:A:260:VAL:O	2.04	0.56
1:A:264:GLU:O	1:A:267:ILE:HB	2.06	0.56
1:A:456:SER:HB2	1:A:487:PHE:CD1	2.40	0.56
1:A:534:ALA:CB	1:A:560:TRP:HZ3	2.18	0.56
1:A:560:TRP:CE3	1:A:561:ALA:HB2	2.40	0.56
1:A:77:VAL:HG11	1:A:267:ILE:HG21	1.87	0.56
1:A:79:ALA:H	1:A:310:ILE:HD11	1.70	0.56
1:A:342:ARG:HA	1:A:603:ARG:HH21	1.70	0.56
1:A:383:LEU:HD11	1:A:388:GLU:CB	2.22	0.56
1:A:95:VAL:HG12	1:A:246:HIS:CB	2.36	0.56
1:A:299:LEU:HB2	1:A:300:PHE:HE1	1.55	0.56
1:A:415:GLN:O	1:A:416:LYS:HB3	2.06	0.56
1:A:671:ASN:ND2	1:A:674:ARG:NH2	2.52	0.56
1:A:199:LEU:HD12	1:A:204:GLY:O	2.06	0.56
1:A:206:VAL:HG21	1:A:230:LEU:HD11	1.86	0.56
1:A:473:LEU:O	1:A:476:ASN:HB3	2.05	0.56
1:A:656:THR:H	1:A:659:GLN:HG3	1.70	0.56
1:A:185:SER:C	1:A:187:GLU:H	2.08	0.56
1:A:189:TYR:CD1	1:A:198:CYS:N	2.74	0.56
1:A:344:ARG:HG3	1:A:344:ARG:O	2.06	0.56
1:A:7:ARG:CA	1:A:35:SER:O	2.50	0.56
1:A:441:LYS:HG3	1:A:442:SER:N	2.21	0.55
1:A:8:TRP:HH2	1:A:58:THR:OG1	1.88	0.55
1:A:62:GLY:O	1:A:65:TYR:HB3	2.06	0.55
1:A:132:LEU:HD12	1:A:152:PHE:HE2	1.70	0.55
1:A:467:TRP:O	1:A:471:MET:HG2	2.06	0.55
1:A:518:ASN:OD1	1:A:520:GLU:HB2	2.06	0.55
1:A:380:CYS:O	1:A:383:LEU:HB3	2.06	0.55
1:A:615:GLN:NE2	1:A:647:CYS:HB2	2.21	0.55
1:A:278:PHE:CD1	1:A:286:PHE:HD2	2.24	0.55
1:A:297:ASP:CG	1:A:301:LYS:HD2	2.26	0.55
1:A:130:GLY:O	1:A:133:ARG:HB3	2.07	0.55
1:A:448:TRP:N	1:A:572:LEU:HD11	2.22	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:504:LEU:HD23	1:A:504:LEU:N	2.22	0.55
1:A:94:ALA:O	1:A:247:LEU:N	2.37	0.55
1:A:174:ALA:C	1:A:180:LYS:HG3	2.27	0.55
1:A:298:LEU:C	1:A:299:LEU:HD12	2.27	0.55
1:A:349:ALA:HB1	1:A:354:GLU:HB2	1.88	0.55
1:A:175:GLY:HA3	1:A:180:LYS:HA	1.88	0.55
1:A:201:ASN:HD22	1:A:201:ASN:N	2.04	0.55
1:A:345:VAL:HG21	1:A:610:VAL:HG21	1.88	0.55
1:A:349:ALA:HB1	1:A:354:GLU:CB	2.37	0.55
1:A:250:VAL:HB	1:A:324:TYR:HD2	1.71	0.55
1:A:434:LEU:O	1:A:544:LYS:HA	2.07	0.55
1:A:319:TYR:CD1	1:A:687:LEU:HD21	2.42	0.55
1:A:411:LEU:HD11	1:A:612:PHE:CE2	2.42	0.55
1:A:116:HIS:HB2	1:A:158:VAL:HA	1.88	0.54
1:A:343:GLU:HA	1:A:606:HIS:CE1	2.42	0.54
1:A:561:ALA:HB1	1:A:564:LEU:HD21	1.88	0.54
1:A:625:CYS:SG	1:A:633:LYS:HG3	2.47	0.54
1:A:98:VAL:HB	1:A:236:ARG:NH2	2.22	0.54
1:A:201:ASN:N	1:A:201:ASN:ND2	2.51	0.54
1:A:280:ARG:HH11	1:A:305:LEU:HA	1.71	0.54
1:A:356:ARG:HA	1:A:359:LYS:HG3	1.89	0.54
1:A:297:ASP:OD1	1:A:301:LYS:HA	2.07	0.54
1:A:196:PHE:CE2	1:A:214:VAL:HG22	2.37	0.54
1:A:552:THR:O	1:A:554:GLY:N	2.41	0.54
1:A:10:THR:HG22	1:A:15:GLU:HG2	1.90	0.54
1:A:219:PRO:HA	1:A:224:ARG:NH2	2.22	0.54
1:A:641:PHE:HE2	1:A:648:LEU:HD11	1.61	0.54
1:A:670:THR:HG23	1:A:673:ARG:HD3	1.90	0.54
1:A:3:ARG:NH2	1:A:4:LYS:HG2	2.22	0.54
1:A:75:ARG:NH2	1:A:310:ILE:HB	2.23	0.54
1:A:95:VAL:HG13	1:A:246:HIS:HB2	1.90	0.54
1:A:439:VAL:HG13	1:A:572:LEU:HB2	1.90	0.54
1:A:465:ALA:HB2	1:A:526:TYR:CE1	2.42	0.54
1:A:52:ASN:ND2	1:A:54:ALA:O	2.41	0.53
1:A:394:LEU:HD13	1:A:399:ILE:N	2.23	0.53
1:A:435:ALA:CB	1:A:589:LEU:HD12	2.38	0.53
1:A:609:LYS:O	1:A:613:LEU:HG	2.08	0.53
1:A:94:ALA:N	1:A:248:ALA:O	2.41	0.53
1:A:193:SER:OG	1:A:297:ASP:HB2	2.08	0.53
1:A:458:HIS:CD2	1:A:492:ALA:HB2	2.43	0.53
1:A:344:ARG:HA	1:A:368:LYS:O	2.08	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:545:ASP:O	1:A:548:VAL:HB	2.09	0.53
1:A:77:VAL:HB	1:A:255:VAL:O	2.09	0.53
1:A:237:LYS:CD	1:A:245:CYS:HB2	2.38	0.53
1:A:425:CYS:O	1:A:427:HIS:N	2.42	0.53
1:A:459:THR:HG22	1:A:525:GLY:O	2.09	0.53
1:A:629:PHE:CE2	1:A:631:LEU:HG	2.42	0.53
1:A:116:HIS:CG	1:A:158:VAL:HG22	2.44	0.53
1:A:609:LYS:HG3	1:A:610:VAL:N	2.23	0.53
1:A:315:ASP:H	1:A:318:LEU:HB2	1.74	0.53
1:A:561:ALA:HB1	1:A:564:LEU:CG	2.39	0.53
1:A:22:PHE:CD1	1:A:286:PHE:CE2	2.96	0.53
1:A:138:TRP:CD2	1:A:145:LEU:HD13	2.43	0.53
1:A:407:LEU:HB3	1:A:598:VAL:CG1	2.39	0.53
1:A:410:VAL:O	1:A:651:LEU:CD1	2.57	0.53
1:A:502:CYS:O	1:A:504:LEU:N	2.41	0.53
1:A:58:THR:O	1:A:59:LEU:HD23	2.09	0.53
1:A:457:CYS:SG	1:A:533:LEU:CD1	2.97	0.53
1:A:475:PHE:CE2	1:A:675:CYS:SG	3.02	0.53
1:A:210:LYS:O	1:A:212:SER:N	2.40	0.53
1:A:265:ASP:HA	1:A:309:ARG:NH1	2.14	0.53
1:A:399:ILE:O	1:A:402:ALA:HB3	2.09	0.53
1:A:439:VAL:N	1:A:570:GLU:O	2.39	0.53
1:A:17:ALA:O	1:A:20:ALA:HB3	2.09	0.52
1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:SER:N	2.22	0.52
1:A:138:TRP:CZ2	1:A:145:LEU:HB2	2.43	0.52
1:A:347:TRP:CH2	1:A:641:PHE:HZ	2.27	0.52
1:A:377:THR:O	1:A:380:CYS:HB2	2.10	0.52
1:A:65:TYR:CD1	1:A:66:GLU:OE2	2.63	0.52
1:A:99:LYS:HE3	1:A:200:GLU:HA	1.91	0.52
1:A:436:VAL:O	1:A:542:PHE:HA	2.09	0.52
1:A:133:ARG:CG	1:A:133:ARG:HH11	2.22	0.52
1:A:133:ARG:HE	1:A:138:TRP:HE3	1.54	0.52
1:A:258:ARG:NH1	1:A:262:GLY:O	2.43	0.52
1:A:266:LEU:O	1:A:269:LYS:HB2	2.09	0.52
1:A:314:ILE:HA	1:A:318:LEU:HD13	1.92	0.52
1:A:416:LYS:HB2	1:A:646:GLU:N	2.25	0.52
1:A:422:ALA:HB1	1:A:423:PRO:HD2	1.91	0.52
1:A:118:GLY:HA2	1:A:159:PRO:CB	2.39	0.52
1:A:250:VAL:HG22	1:A:251:PRO:O	2.10	0.52
1:A:444:ALA:O	1:A:578:ARG:HD3	2.10	0.52
1:A:634:SER:OG	1:A:643:ASP:HB2	2.10	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:385:LEU:CD2	1:A:407:LEU:HD11	2.36	0.52
1:A:400:TYR:CE1	1:A:681:LEU:HD21	2.44	0.52
1:A:475:PHE:HE2	1:A:481:CYS:CA	2.22	0.52
1:A:606:HIS:ND1	1:A:607:LEU:HD23	2.25	0.52
1:A:457:CYS:HB2	1:A:541:ALA:CB	2.33	0.52
1:A:457:CYS:SG	1:A:533:LEU:HD12	2.50	0.52
1:A:561:ALA:O	1:A:563:ASP:N	2.43	0.52
1:A:342:ARG:HA	1:A:603:ARG:NH2	2.26	0.52
1:A:350:VAL:HG12	1:A:350:VAL:O	2.10	0.52
1:A:426:VAL:HA	1:A:647:CYS:SG	2.49	0.52
1:A:615:GLN:HE22	1:A:647:CYS:HB2	1.75	0.52
1:A:325:LEU:HD21	1:A:386:LYS:O	2.10	0.51
1:A:475:PHE:CZ	1:A:479:GLY:HA2	2.45	0.51
1:A:463:ARG:NH2	1:A:526:TYR:HE1	2.05	0.51
1:A:629:PHE:CG	1:A:630:CYS:N	2.78	0.51
1:A:25:ASN:CA	1:A:28:LYS:HB2	2.35	0.51
1:A:38:ARG:HH22	1:A:40:THR:HA	1.74	0.51
1:A:74:LEU:HB3	1:A:257:ALA:O	2.10	0.51
1:A:611:LEU:HD21	1:A:648:LEU:CD1	2.40	0.51
1:A:70:HIS:HA	1:A:73:LYS:HE3	1.91	0.51
1:A:440:ARG:NH2	1:A:536:LYS:HA	2.25	0.51
1:A:571:LEU:O	1:A:579:LYS:N	2.43	0.51
1:A:617:GLN:O	1:A:618:PHE:CD1	2.64	0.51
1:A:18:LYS:CG	1:A:299:LEU:HD11	2.22	0.51
1:A:572:LEU:CD2	1:A:578:ARG:HD2	2.41	0.51
1:A:77:VAL:N	1:A:255:VAL:O	2.44	0.51
1:A:565:LYS:O	1:A:568:ASP:HB2	2.11	0.51
1:A:93:TYR:CD2	1:A:246:HIS:CE1	2.97	0.51
1:A:221:GLU:N	1:A:224:ARG:HH11	2.08	0.51
1:A:394:LEU:HD22	1:A:398:PHE:HB3	1.91	0.51
1:A:621:ASN:ND2	1:A:646:GLU:O	2.44	0.51
1:A:258:ARG:C	1:A:260:VAL:N	2.64	0.51
1:A:533:LEU:HD13	1:A:541:ALA:HB2	1.92	0.51
1:A:632:PHE:HE2	1:A:647:CYS:HA	1.76	0.51
1:A:477:GLN:O	1:A:478:THR:HG23	2.11	0.51
1:A:491:CYS:CB	1:A:504:LEU:HB2	2.38	0.51
1:A:656:THR:O	1:A:659:GLN:HB2	2.11	0.51
1:A:314:ILE:CG2	1:A:319:TYR:HB2	2.41	0.50
1:A:347:TRP:CE2	1:A:392:LEU:HA	2.46	0.50
1:A:453:GLY:N	1:A:486:PHE:O	2.44	0.50
1:A:623:PRO:O	1:A:626:PRO:HD2	2.11	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:448:TRP:CZ3	1:A:451:LEU:HD21	2.46	0.50
1:A:358:CYS:O	1:A:362:SER:N	2.39	0.50
1:A:162:ASP:O	1:A:166:TYR:CE1	2.64	0.50
1:A:8:TRP:O	1:A:36:CYS:CB	2.60	0.50
1:A:116:HIS:ND1	1:A:208:PHE:HE2	2.08	0.50
1:A:131:THR:O	1:A:134:PRO:HD2	2.11	0.50
1:A:133:ARG:O	1:A:135:TYR:N	2.45	0.50
1:A:327:ALA:O	1:A:331:LEU:HD22	2.12	0.50
1:A:215:PHE:HZ	1:A:240:ASP:HA	1.76	0.50
1:A:345:VAL:HG22	1:A:607:LEU:HD22	1.94	0.50
1:A:347:TRP:CH2	1:A:641:PHE:CZ	3.00	0.50
1:A:402:ALA:HB1	1:A:407:LEU:CB	2.36	0.50
1:A:34:VAL:CG1	1:A:35:SER:H	2.22	0.49
1:A:473:LEU:HD13	1:A:473:LEU:N	2.27	0.49
1:A:526:TYR:C	1:A:547:THR:HG21	2.32	0.49
1:A:597:VAL:HG21	1:A:648:LEU:HD13	1.92	0.49
1:A:60:ASP:O	1:A:63:LEU:N	2.45	0.49
1:A:189:TYR:CE2	1:A:198:CYS:HA	2.47	0.49
1:A:458:HIS:HB2	1:A:492:ALA:CB	2.41	0.49
1:A:672:LEU:N	1:A:672:LEU:CD2	2.75	0.49
1:A:28:LYS:NZ	1:A:28:LYS:CB	2.72	0.49
1:A:95:VAL:HG12	1:A:246:HIS:HB2	1.94	0.49
1:A:193:SER:HB2	1:A:296:GLN:CB	2.41	0.49
1:A:441:LYS:HB3	1:A:568:ASP:O	2.13	0.49
1:A:27:LYS:O	1:A:27:LYS:HG2	2.12	0.49
1:A:199:LEU:HA	1:A:204:GLY:CA	2.42	0.49
1:A:298:LEU:C	1:A:300:PHE:H	2.16	0.49
1:A:92:TYR:HE1	1:A:250:VAL:HG22	1.77	0.49
1:A:411:LEU:HD12	1:A:649:ALA:O	2.12	0.49
1:A:439:VAL:CG1	1:A:572:LEU:HD23	2.35	0.49
1:A:475:PHE:HE2	1:A:481:CYS:N	2.11	0.49
1:A:99:LYS:HG3	1:A:199:LEU:HD11	1.94	0.49
1:A:170:CYS:SG	1:A:181:CYS:CB	3.01	0.49
1:A:491:CYS:HB2	1:A:504:LEU:CB	2.39	0.49
1:A:543:VAL:HG13	1:A:544:LYS:N	2.28	0.49
1:A:657:TYR:C	1:A:659:GLN:N	2.65	0.49
1:A:324:TYR:CD1	1:A:324:TYR:C	2.85	0.49
1:A:631:LEU:HD13	1:A:632:PHE:HE1	1.78	0.49
1:A:1:ALA:N	1:A:2:PRO:CD	2.75	0.49
1:A:212:SER:O	1:A:214:VAL:N	2.46	0.49
1:A:298:LEU:HD13	1:A:299:LEU:CD1	2.43	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:299:LEU:C	1:A:300:PHE:CD1	2.86	0.49
1:A:339:ALA:O	1:A:343:GLU:OE1	2.30	0.49
1:A:49:ILE:HD12	1:A:54:ALA:HB3	1.95	0.49
1:A:118:GLY:N	1:A:159:PRO:HD2	2.28	0.49
1:A:410:VAL:O	1:A:651:LEU:HD11	2.12	0.49
1:A:425:CYS:HA	1:A:428:ARG:CD	2.41	0.49
1:A:469:ILE:H	1:A:469:ILE:CD1	2.05	0.49
1:A:606:HIS:HA	1:A:609:LYS:HE3	1.93	0.49
1:A:394:LEU:HD22	1:A:398:PHE:CB	2.42	0.48
1:A:448:TRP:O	1:A:449:ASN:C	2.51	0.48
1:A:38:ARG:NH1	1:A:39:LYS:N	2.61	0.48
1:A:58:THR:HA	1:A:254:ALA:O	2.13	0.48
1:A:92:TYR:CE1	1:A:250:VAL:HG13	2.48	0.48
1:A:94:ALA:O	1:A:246:HIS:HB2	2.13	0.48
1:A:320:LEU:HB2	1:A:325:LEU:HD12	1.95	0.48
1:A:403:GLY:HA3	1:A:657:TYR:CE1	2.48	0.48
1:A:497:PRO:HA	1:A:515:CYS:SG	2.53	0.48
1:A:175:GLY:HA3	1:A:180:LYS:CA	2.43	0.48
1:A:280:ARG:NH2	1:A:289:PHE:CD2	2.77	0.48
1:A:82:TYR:HE2	1:A:252:SER:HB3	1.70	0.48
1:A:105:GLN:OE1	1:A:236:ARG:N	2.46	0.48
1:A:221:GLU:HA	1:A:224:ARG:HB2	1.95	0.48
1:A:618:PHE:CD1	1:A:629:PHE:HD2	2.32	0.48
1:A:193:SER:OG	1:A:296:GLN:HB3	2.13	0.48
1:A:34:VAL:HG22	1:A:270:LEU:HD21	1.96	0.48
1:A:91:ARG:HG2	1:A:251:PRO:HA	1.96	0.48
1:A:213:THR:HA	1:A:216:GLU:HB2	1.96	0.48
1:A:361:TRP:CZ2	1:A:631:LEU:HD11	2.49	0.48
1:A:384:VAL:HG21	1:A:407:LEU:HD21	1.96	0.48
1:A:394:LEU:HD22	1:A:395:ASP:H	1.79	0.48
1:A:411:LEU:HA	1:A:649:ALA:O	2.13	0.48
1:A:113:LYS:HD3	1:A:205:ASP:CG	2.34	0.48
1:A:573:CYS:N	1:A:577:THR:O	2.45	0.48
1:A:6:VAL:CG1	1:A:7:ARG:N	2.76	0.48
1:A:133:ARG:O	1:A:134:PRO:C	2.52	0.48
1:A:447:THR:HA	1:A:572:LEU:HD21	1.95	0.48
1:A:534:ALA:HB3	1:A:560:TRP:CZ3	2.44	0.48
1:A:577:THR:HG22	1:A:578:ARG:N	2.29	0.48
1:A:211:ASP:HB2	1:A:242:PHE:CG	2.48	0.48
1:A:148:ALA:O	1:A:152:PHE:HB2	2.14	0.47
1:A:265:ASP:OD2	1:A:266:LEU:HD12	2.14	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:382:ALA:O	1:A:385:LEU:HB2	2.14	0.47
1:A:411:LEU:HD11	1:A:612:PHE:CZ	2.49	0.47
1:A:516:MET:HG2	1:A:517:PRO:CD	2.44	0.47
1:A:22:PHE:HZ	1:A:274:ALA:CB	2.26	0.47
1:A:50:ALA:HA	1:A:258:ARG:HG3	1.96	0.47
1:A:288:LEU:HD23	1:A:289:PHE:CG	2.49	0.47
1:A:423:PRO:O	1:A:425:CYS:N	2.47	0.47
1:A:467:TRP:CD1	1:A:468:ASN:N	2.82	0.47
1:A:608:LYS:O	1:A:612:PHE:CD2	2.68	0.47
1:A:3:ARG:CG	1:A:266:LEU:HD21	2.44	0.47
1:A:258:ARG:C	1:A:260:VAL:H	2.17	0.47
1:A:315:ASP:O	1:A:316:SER:C	2.53	0.47
1:A:588:HIS:CE1	1:A:590:ALA:HA	2.49	0.47
1:A:595:HIS:O	1:A:596:ALA:HB2	2.14	0.47
1:A:686:PHE:CD1	1:A:687:LEU:HD23	2.50	0.47
1:A:91:ARG:HB3	1:A:249:ARG:HD3	1.96	0.47
1:A:400:TYR:CD1	1:A:400:TYR:C	2.86	0.47
1:A:653:GLY:O	1:A:655:THR:N	2.47	0.47
1:A:20:ALA:O	1:A:23:GLN:HB3	2.14	0.47
1:A:25:ASN:O	1:A:29:VAL:HG23	2.14	0.47
1:A:189:TYR:CE1	1:A:198:CYS:N	2.82	0.47
1:A:250:VAL:HG23	1:A:251:PRO:CD	2.44	0.47
1:A:263:ARG:O	1:A:265:ASP:N	2.47	0.47
1:A:279:GLY:C	1:A:280:ARG:HG2	2.34	0.47
1:A:436:VAL:HG11	1:A:584:ALA:HB1	1.95	0.47
1:A:467:TRP:C	1:A:471:MET:HG2	2.35	0.47
1:A:107:ASN:C	1:A:109:LEU:H	2.17	0.47
1:A:384:VAL:CG2	1:A:385:LEU:N	2.78	0.47
1:A:415:GLN:CD	1:A:415:GLN:H	2.18	0.47
1:A:433:TYR:HE1	1:A:592:ALA:HB3	1.80	0.47
1:A:466:ALA:O	1:A:470:PRO:CD	2.61	0.47
1:A:44:GLU:HA	1:A:47:GLN:OE1	2.14	0.47
1:A:138:TRP:CH2	1:A:145:LEU:HD22	2.50	0.47
1:A:264:GLU:CG	1:A:309:ARG:NH2	2.78	0.47
1:A:315:ASP:OD1	1:A:318:LEU:HD12	2.14	0.47
1:A:395:ASP:HA	1:A:595:HIS:CG	2.50	0.47
1:A:453:GLY:CA	1:A:486:PHE:O	2.60	0.47
1:A:458:HIS:O	1:A:493:PRO:HD3	2.15	0.47
1:A:470:PRO:O	1:A:474:LEU:HG	2.14	0.47
1:A:70:HIS:HA	1:A:73:LYS:HG3	1.97	0.47
1:A:265:ASP:CA	1:A:309:ARG:HH12	2.18	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:425:CYS:CA	1:A:428:ARG:HD3	2.41	0.47
1:A:476:ASN:HB3	1:A:477:GLN:OE1	2.15	0.47
1:A:60:ASP:O	1:A:62:GLY:N	2.48	0.47
1:A:214:VAL:O	1:A:217:ASN:N	2.48	0.47
1:A:95:VAL:CG1	1:A:246:HIS:CB	2.92	0.47
1:A:195:ALA:O	1:A:198:CYS:CB	2.63	0.47
1:A:523:TYR:CZ	1:A:532:CYS:CA	2.95	0.47
1:A:599:SER:OG	1:A:600:GLN:N	2.48	0.47
1:A:614:GLN:OE1	1:A:618:PHE:HE2	1.98	0.47
1:A:415:GLN:C	1:A:417:SER:N	2.67	0.46
1:A:446:LEU:HD22	1:A:454:LYS:NZ	2.30	0.46
1:A:140:GLY:C	1:A:142:PRO:HD2	2.36	0.46
1:A:221:GLU:O	1:A:225:ASP:HB2	2.15	0.46
1:A:297:ASP:OD1	1:A:301:LYS:HD2	2.15	0.46
1:A:43:PHE:O	1:A:47:GLN:NE2	2.48	0.46
1:A:98:VAL:CG1	1:A:206:VAL:HG23	2.41	0.46
1:A:251:PRO:O	1:A:252:SER:O	2.34	0.46
1:A:411:LEU:CB	1:A:648:LEU:HB3	2.44	0.46
1:A:138:TRP:NE1	1:A:143:GLU:O	2.48	0.46
1:A:176:THR:OG1	1:A:179:ASP:HB2	2.16	0.46
1:A:243:LYS:HB2	1:A:244:GLU:OE1	2.16	0.46
1:A:403:GLY:O	1:A:406:GLY:N	2.45	0.46
1:A:625:CYS:HB3	1:A:626:PRO:HD3	1.98	0.46
1:A:121:ARG:HE	1:A:121:ARG:HB2	1.48	0.46
1:A:329:GLN:O	1:A:332:ARG:HG2	2.15	0.46
1:A:413:GLU:CG	1:A:595:HIS:HB2	2.36	0.46
1:A:65:TYR:CD2	1:A:328:THR:HB	2.51	0.46
1:A:220:ASP:HB2	1:A:223:GLU:HB2	1.98	0.46
1:A:263:ARG:O	1:A:266:LEU:N	2.49	0.46
1:A:369:VAL:HG12	1:A:370:ALA:N	2.31	0.46
1:A:381:ILE:O	1:A:382:ALA:C	2.53	0.46
1:A:579:LYS:HB3	1:A:580:PRO:CD	2.42	0.46
1:A:550:GLN:NE2	1:A:638:ASN:HD21	2.12	0.46
1:A:635:GLU:C	1:A:637:LYS:H	2.19	0.46
1:A:133:ARG:O	1:A:136:LEU:N	2.49	0.46
1:A:482:LYS:H	1:A:482:LYS:CD	2.20	0.46
1:A:49:ILE:HD12	1:A:54:ALA:CB	2.45	0.46
1:A:394:LEU:CD2	1:A:398:PHE:HB3	2.45	0.46
1:A:657:TYR:O	1:A:659:GLN:N	2.49	0.46
1:A:668:SER:O	1:A:671:ASN:HB2	2.16	0.46
1:A:137:ASN:HD22	1:A:137:ASN:HA	1.63	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:377:THR:O	1:A:381:ILE:CD1	2.64	0.45
1:A:526:TYR:CD2	1:A:544:LYS:HG2	2.51	0.45
1:A:8:TRP:CZ2	1:A:58:THR:N	2.85	0.45
1:A:206:VAL:HG21	1:A:230:LEU:CD1	2.47	0.45
1:A:278:PHE:HA	1:A:283:SER:HB2	1.98	0.45
1:A:288:LEU:N	1:A:288:LEU:HD13	2.31	0.45
1:A:404:LYS:HA	1:A:404:LYS:HE2	1.98	0.45
1:A:440:ARG:HH22	1:A:536:LYS:CA	2.27	0.45
1:A:458:HIS:HB2	1:A:492:ALA:CA	2.44	0.45
1:A:460:GLY:N	1:A:493:PRO:HD2	2.31	0.45
1:A:568:ASP:HB3	1:A:569:PHE:CE1	2.52	0.45
1:A:606:HIS:HD2	1:A:609:LYS:NZ	2.15	0.45
1:A:607:LEU:O	1:A:610:VAL:N	2.48	0.45
1:A:84:THR:C	1:A:86:GLY:N	2.67	0.45
1:A:189:TYR:CE1	1:A:198:CYS:HA	2.50	0.45
1:A:213:THR:O	1:A:216:GLU:HB2	2.16	0.45
1:A:263:ARG:N	1:A:264:GLU:OE2	2.50	0.45
1:A:353:GLU:HG3	1:A:519:SER:OG	2.16	0.45
1:A:426:VAL:N	1:A:647:CYS:SG	2.89	0.45
1:A:459:THR:CG2	1:A:526:TYR:HA	2.46	0.45
1:A:463:ARG:NH1	1:A:463:ARG:HG3	2.30	0.45
1:A:662:GLY:O	1:A:663:SER:C	2.55	0.45
1:A:169:LEU:HD12	1:A:169:LEU:H	1.82	0.45
1:A:223:GLU:CD	1:A:226:LYS:HD2	2.36	0.45
1:A:218:LEU:HD11	1:A:227:TYR:HE2	1.82	0.45
1:A:526:TYR:CD2	1:A:543:VAL:HG22	2.52	0.45
1:A:133:ARG:NE	1:A:138:TRP:HE3	2.14	0.45
1:A:526:TYR:HB3	1:A:547:THR:HG21	1.98	0.45
1:A:534:ALA:C	1:A:536:LYS:H	2.20	0.45
1:A:184:SER:OG	1:A:186:GLN:HB2	2.16	0.45
1:A:475:PHE:CE2	1:A:481:CYS:N	2.85	0.45
1:A:99:LYS:CE	1:A:200:GLU:HA	2.47	0.45
1:A:185:SER:C	1:A:187:GLU:N	2.69	0.45
1:A:262:GLY:O	1:A:263:ARG:CB	2.47	0.45
1:A:436:VAL:N	1:A:543:VAL:O	2.47	0.45
1:A:8:TRP:O	1:A:36:CYS:HA	2.17	0.45
1:A:195:ALA:O	1:A:198:CYS:HB3	2.16	0.45
1:A:395:ASP:O	1:A:398:PHE:HB2	2.17	0.45
1:A:469:ILE:CB	1:A:470:PRO:HD3	2.29	0.45
1:A:615:GLN:HG3	1:A:616:ASP:N	2.30	0.45
1:A:49:ILE:HG13	1:A:56:ALA:N	2.32	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:94:ALA:HB3	1:A:248:ALA:H	1.82	0.45
1:A:232:PRO:C	1:A:234:ASN:N	2.70	0.45
1:A:393:ASN:HD22	1:A:641:PHE:HA	1.82	0.45
1:A:607:LEU:HA	1:A:610:VAL:HG22	1.99	0.45
1:A:21:LYS:HA	1:A:24:ARG:HD2	1.98	0.44
1:A:133:ARG:CG	1:A:133:ARG:NH1	2.78	0.44
1:A:508:ASN:O	1:A:522:ARG:NH2	2.36	0.44
1:A:611:LEU:HD21	1:A:648:LEU:HD12	1.98	0.44
1:A:69:LEU:O	1:A:72:TYR:O	2.35	0.44
1:A:319:TYR:CE1	1:A:687:LEU:HD21	2.52	0.44
1:A:561:ALA:C	1:A:563:ASP:N	2.70	0.44
1:A:574:LEU:O	1:A:576:GLY:N	2.50	0.44
1:A:60:ASP:HA	1:A:253:HIS:CG	2.52	0.44
1:A:105:GLN:O	1:A:108:GLN:N	2.50	0.44
1:A:214:VAL:O	1:A:218:LEU:N	2.50	0.44
1:A:229:LEU:O	1:A:236:ARG:HA	2.18	0.44
1:A:262:GLY:C	1:A:264:GLU:H	2.19	0.44
1:A:349:ALA:O	1:A:351:GLY:N	2.50	0.44
1:A:439:VAL:HG12	1:A:540:VAL:HG23	2.00	0.44
1:A:189:TYR:CB	1:A:198:CYS:HB2	2.46	0.44
1:A:280:ARG:HE	1:A:280:ARG:N	2.14	0.44
1:A:400:TYR:CE2	1:A:669:ILE:HG23	2.52	0.44
1:A:549:LEU:O	1:A:555:LYS:HG2	2.18	0.44
1:A:686:PHE:HD1	1:A:687:LEU:HD23	1.81	0.44
1:A:38:ARG:HH12	1:A:40:THR:N	2.16	0.44
1:A:81:VAL:HG23	1:A:307:PHE:HA	2.00	0.44
1:A:218:LEU:HD11	1:A:227:TYR:CE2	2.52	0.44
1:A:352:PRO:HA	1:A:355:GLU:CB	2.48	0.44
1:A:415:GLN:NE2	1:A:415:GLN:H	2.15	0.44
1:A:220:ASP:O	1:A:223:GLU:N	2.51	0.44
1:A:439:VAL:HG23	1:A:570:GLU:HB2	1.99	0.44
1:A:466:ALA:O	1:A:470:PRO:CG	2.65	0.44
1:A:656:THR:O	1:A:659:GLN:HG3	2.18	0.44
1:A:10:THR:O	1:A:38:ARG:NH1	2.49	0.44
1:A:80:GLU:HB2	1:A:82:TYR:CE1	2.53	0.44
1:A:199:LEU:CA	1:A:204:GLY:HA3	2.47	0.44
1:A:394:LEU:HD13	1:A:398:PHE:HB3	1.98	0.44
1:A:415:GLN:CD	1:A:431:GLU:HB2	2.38	0.44
1:A:542:PHE:CD1	1:A:542:PHE:N	2.83	0.44
1:A:6:VAL:HA	1:A:263:ARG:NH1	2.33	0.44
1:A:113:LYS:HB3	1:A:172:LEU:CD2	2.43	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:462:GLY:N	1:A:467:TRP:CD1	2.82	0.44
1:A:463:ARG:HG3	1:A:463:ARG:HH11	1.83	0.44
1:A:471:MET:HA	1:A:474:LEU:HD12	2.00	0.44
1:A:549:LEU:HD23	1:A:549:LEU:N	2.32	0.44
1:A:25:ASN:ND2	1:A:25:ASN:H	2.16	0.43
1:A:475:PHE:CE2	1:A:481:CYS:SG	3.11	0.43
1:A:603:ARG:NH1	1:A:607:LEU:HD21	2.33	0.43
1:A:410:VAL:O	1:A:651:LEU:CG	2.66	0.43
1:A:607:LEU:O	1:A:608:LYS:C	2.56	0.43
1:A:445:ASP:O	1:A:447:THR:N	2.51	0.43
1:A:553:ASP:OD1	1:A:566:GLN:HB3	2.18	0.43
1:A:8:TRP:O	1:A:36:CYS:CA	2.66	0.43
1:A:46:ILE:HD11	1:A:63:LEU:HD23	2.01	0.43
1:A:74:LEU:HA	1:A:259:SER:N	2.30	0.43
1:A:94:ALA:HB3	1:A:248:ALA:O	2.18	0.43
1:A:189:TYR:CG	1:A:198:CYS:CB	2.99	0.43
1:A:233:ASP:O	1:A:235:THR:HG23	2.19	0.43
1:A:393:ASN:HD21	1:A:413:GLU:HG3	1.82	0.43
1:A:448:TRP:O	1:A:451:LEU:CG	2.58	0.43
1:A:15:GLU:HG3	1:A:299:LEU:HG	2.01	0.43
1:A:32:PRO:HG2	1:A:269:LYS:HB3	2.00	0.43
1:A:77:VAL:H	1:A:256:VAL:HA	1.83	0.43
1:A:97:VAL:HG22	1:A:209:VAL:HG22	2.00	0.43
1:A:138:TRP:CE3	1:A:145:LEU:HD13	2.53	0.43
1:A:233:ASP:C	1:A:235:THR:H	2.22	0.43
1:A:350:VAL:HG21	1:A:377:THR:HG22	2.00	0.43
1:A:288:LEU:HD23	1:A:289:PHE:CD1	2.54	0.43
1:A:416:LYS:NZ	1:A:620:GLY:HA3	2.34	0.43
1:A:423:PRO:C	1:A:425:CYS:N	2.72	0.43
1:A:550:GLN:HE22	1:A:638:ASN:ND2	2.16	0.43
1:A:619:GLY:C	1:A:621:ASN:N	2.71	0.43
1:A:77:VAL:HG23	1:A:257:ALA:H	1.84	0.43
1:A:223:GLU:OE1	1:A:226:LYS:HD2	2.19	0.43
1:A:608:LYS:HG3	1:A:612:PHE:HE2	1.83	0.43
1:A:610:VAL:O	1:A:614:GLN:HB2	2.19	0.43
1:A:38:ARG:NH1	1:A:38:ARG:HB3	2.34	0.43
1:A:343:GLU:HA	1:A:606:HIS:NE2	2.34	0.43
1:A:412:ALA:O	1:A:648:LEU:HA	2.19	0.43
1:A:566:GLN:HG2	1:A:567:GLU:OE2	2.18	0.43
1:A:666:VAL:O	1:A:669:ILE:HG22	2.18	0.43
1:A:57:VAL:HG23	1:A:59:LEU:HD21	2.01	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:87:LYS:HA	1:A:88:PRO:HD2	1.58	0.43
1:A:166:TYR:O	1:A:168:ASN:N	2.51	0.43
1:A:278:PHE:HA	1:A:283:SER:CB	2.48	0.43
1:A:458:HIS:CG	1:A:492:ALA:HB2	2.54	0.43
1:A:571:LEU:HD12	1:A:580:PRO:O	2.19	0.43
1:A:573:CYS:HB2	1:A:577:THR:CB	2.35	0.43
1:A:656:THR:CA	1:A:659:GLN:HG3	2.48	0.43
1:A:43:PHE:CD1	1:A:44:GLU:N	2.86	0.42
1:A:87:LYS:HD2	1:A:87:LYS:N	2.34	0.42
1:A:307:PHE:CD1	1:A:307:PHE:N	2.86	0.42
1:A:39:LYS:HD3	1:A:39:LYS:HA	1.65	0.42
1:A:58:THR:HB	1:A:299:LEU:O	2.19	0.42
1:A:98:VAL:HG11	1:A:230:LEU:CD2	2.44	0.42
1:A:118:GLY:HA2	1:A:159:PRO:CD	2.48	0.42
1:A:411:LEU:HD12	1:A:649:ALA:C	2.39	0.42
1:A:416:LYS:O	1:A:416:LYS:HG2	2.19	0.42
1:A:425:CYS:C	1:A:427:HIS:N	2.72	0.42
1:A:490:SER:O	1:A:501:LEU:O	2.37	0.42
1:A:634:SER:CB	1:A:638:ASN:H	2.32	0.42
1:A:656:THR:OG1	1:A:659:GLN:HG3	2.19	0.42
1:A:4:LYS:NZ	1:A:4:LYS:HA	2.35	0.42
1:A:26:MET:O	1:A:30:ARG:N	2.52	0.42
1:A:297:ASP:HA	1:A:302:ASP:OD1	2.19	0.42
1:A:433:TYR:CE1	1:A:592:ALA:HB3	2.55	0.42
1:A:564:LEU:O	1:A:564:LEU:HD12	2.20	0.42
1:A:656:THR:OG1	1:A:659:GLN:CG	2.67	0.42
1:A:60:ASP:O	1:A:61:GLY:C	2.57	0.42
1:A:92:TYR:N	1:A:250:VAL:O	2.53	0.42
1:A:275:GLN:HB3	1:A:307:PHE:CZ	2.53	0.42
1:A:416:LYS:CA	1:A:646:GLU:HG2	2.38	0.42
1:A:571:LEU:O	1:A:578:ARG:CA	2.66	0.42
1:A:82:TYR:N	1:A:89:GLN:O	2.45	0.42
1:A:150:ALA:O	1:A:153:PHE:O	2.38	0.42
1:A:377:THR:O	1:A:381:ILE:HD13	2.19	0.42
1:A:487:PHE:O	1:A:488:SER:C	2.58	0.42
1:A:571:LEU:HD11	1:A:584:ALA:HA	2.01	0.42
1:A:598:VAL:HG12	1:A:599:SER:N	2.35	0.42
1:A:600:GLN:HG3	1:A:602:ASP:OD1	2.18	0.42
1:A:94:ALA:CB	1:A:248:ALA:O	2.68	0.42
1:A:94:ALA:H	1:A:246:HIS:HD2	1.68	0.42
1:A:264:GLU:HB2	1:A:309:ARG:NH2	2.34	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:301:LYS:HB3	1:A:304:ALA:HB2	2.01	0.42
1:A:393:ASN:HD21	1:A:413:GLU:CG	2.33	0.42
1:A:526:TYR:HB3	1:A:547:THR:CG2	2.50	0.42
1:A:593:PRO:HG3	1:A:661:LEU:CD2	2.49	0.42
1:A:10:THR:CB	1:A:15:GLU:HB3	2.46	0.42
1:A:289:PHE:HE2	1:A:305:LEU:O	2.02	0.42
1:A:394:LEU:HD23	1:A:394:LEU:HA	1.54	0.42
1:A:469:ILE:HD12	1:A:469:ILE:N	2.11	0.42
1:A:116:HIS:HB2	1:A:157:CYS:O	2.19	0.42
1:A:175:GLY:C	1:A:176:THR:O	2.57	0.42
1:A:289:PHE:CE2	1:A:304:ALA:O	2.73	0.42
1:A:212:SER:HA	1:A:215:PHE:CD1	2.54	0.42
1:A:368:LYS:HD2	1:A:368:LYS:HA	1.80	0.42
1:A:573:CYS:SG	1:A:577:THR:HB	2.59	0.42
1:A:631:LEU:HD23	1:A:631:LEU:HA	1.90	0.42
1:A:25:ASN:HB2	1:A:278:PHE:CE1	2.55	0.42
1:A:129:ILE:H	1:A:129:ILE:CD1	2.28	0.42
1:A:414:ASN:ND2	1:A:428:ARG:HE	2.17	0.42
1:A:473:LEU:N	1:A:473:LEU:CD1	2.82	0.42
1:A:55:ASP:O	1:A:257:ALA:HA	2.20	0.41
1:A:415:GLN:C	1:A:417:SER:H	2.20	0.41
1:A:92:TYR:CE1	1:A:250:VAL:HG22	2.54	0.41
1:A:128:PRO:O	1:A:129:ILE:C	2.58	0.41
1:A:147:LYS:HE2	1:A:147:LYS:HB3	1.76	0.41
1:A:150:ALA:HB1	1:A:168:ASN:HB3	2.03	0.41
1:A:461:VAL:HA	1:A:467:TRP:CE3	2.55	0.41
1:A:687:LEU:HD22	1:A:687:LEU:HA	1.81	0.41
1:A:129:ILE:HD12	1:A:129:ILE:N	2.30	0.41
1:A:153:PHE:CD1	1:A:153:PHE:N	2.88	0.41
1:A:197:LYS:HA	1:A:197:LYS:HD2	1.88	0.41
1:A:492:ALA:HA	1:A:493:PRO:HD3	1.71	0.41
1:A:552:THR:OG1	1:A:555:LYS:HD3	2.20	0.41
1:A:158:VAL:O	1:A:161:ALA:HB2	2.21	0.41
1:A:407:LEU:N	1:A:407:LEU:CD1	2.84	0.41
1:A:408:VAL:HG23	1:A:409:PRO:HD2	2.03	0.41
1:A:8:TRP:CH2	1:A:58:THR:OG1	2.62	0.41
1:A:15:GLU:CA	1:A:298:LEU:HD11	2.26	0.41
1:A:192:TYR:CD2	1:A:301:LYS:HD3	2.55	0.41
1:A:266:LEU:CA	1:A:269:LYS:HG2	2.49	0.41
1:A:542:PHE:HB3	1:A:589:LEU:HD11	2.02	0.41
1:A:78:ALA:O	1:A:255:VAL:N	2.53	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:188:PRO:HB2	1:A:189:TYR:H	1.61	0.41
1:A:258:ARG:HD3	1:A:258:ARG:N	2.09	0.41
1:A:310:ILE:HG22	1:A:314:ILE:HG13	2.02	0.41
1:A:394:LEU:CD1	1:A:398:PHE:HB3	2.51	0.41
1:A:464:THR:HB	1:A:465:ALA:H	1.57	0.41
1:A:22:PHE:HD1	1:A:286:PHE:CE2	2.37	0.41
1:A:565:LYS:C	1:A:567:GLU:H	2.24	0.41
1:A:670:THR:O	1:A:671:ASN:C	2.59	0.41
1:A:90:THR:HB	1:A:252:SER:OG	2.20	0.41
1:A:239:VAL:C	1:A:241:ALA:N	2.74	0.41
1:A:280:ARG:CZ	1:A:289:PHE:CD2	2.96	0.41
1:A:353:GLU:HG2	1:A:520:GLU:CG	2.51	0.41
1:A:560:TRP:CE3	1:A:561:ALA:CB	3.03	0.41
1:A:565:LYS:CB	1:A:567:GLU:HG2	2.43	0.41
1:A:671:ASN:ND2	1:A:674:ARG:HH22	2.17	0.41
1:A:18:LYS:HG2	1:A:298:LEU:HD12	2.03	0.41
1:A:97:VAL:O	1:A:206:VAL:HG23	2.21	0.41
1:A:104:PHE:HD1	1:A:104:PHE:O	2.03	0.41
1:A:118:GLY:CA	1:A:159:PRO:HD2	2.51	0.41
1:A:144:PRO:C	1:A:146:GLN:N	2.73	0.41
1:A:252:SER:HB2	1:A:253:HIS:H	1.69	0.41
1:A:443:ASP:N	1:A:443:ASP:OD1	2.54	0.41
1:A:463:ARG:CG	1:A:464:THR:N	2.82	0.41
1:A:474:LEU:HG	1:A:474:LEU:H	1.54	0.41
1:A:555:LYS:H	1:A:555:LYS:HD2	1.85	0.41
1:A:118:GLY:HA2	1:A:159:PRO:HD2	2.01	0.41
1:A:152:PHE:HD2	1:A:153:PHE:CE1	2.39	0.41
1:A:400:TYR:HE1	1:A:681:LEU:CD2	2.32	0.41
1:A:571:LEU:HD11	1:A:584:ALA:HB2	2.03	0.41
1:A:43:PHE:HD1	1:A:47:GLN:HE22	1.69	0.40
1:A:107:ASN:O	1:A:109:LEU:N	2.50	0.40
1:A:116:HIS:N	1:A:157:CYS:O	2.52	0.40
1:A:224:ARG:O	1:A:226:LYS:N	2.54	0.40
1:A:358:CYS:O	1:A:361:TRP:HB3	2.22	0.40
1:A:484:ASP:O	1:A:486:PHE:N	2.54	0.40
1:A:125:TRP:O	1:A:128:PRO:HG2	2.21	0.40
1:A:190:PHE:O	1:A:194:GLY:HA3	2.21	0.40
1:A:196:PHE:CE2	1:A:214:VAL:HA	2.56	0.40
1:A:341:ARG:O	1:A:343:GLU:N	2.55	0.40
1:A:448:TRP:HA	1:A:448:TRP:HE3	1.83	0.40
1:A:565:LYS:C	1:A:567:GLU:N	2.74	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:635:GLU:O	1:A:637:LYS:N	2.52	0.40
1:A:52:ASN:C	1:A:54:ALA:N	2.71	0.40
1:A:115:CYS:HB2	1:A:207:ALA:HB2	2.03	0.40
1:A:199:LEU:HA	1:A:204:GLY:C	2.41	0.40
1:A:224:ARG:C	1:A:226:LYS:N	2.74	0.40
1:A:392:LEU:CD1	1:A:392:LEU:C	2.90	0.40
1:A:105:GLN:HA	1:A:105:GLN:NE2	2.36	0.40
1:A:150:ALA:HB1	1:A:168:ASN:ND2	2.36	0.40
1:A:197:LYS:O	1:A:198:CYS:C	2.60	0.40
1:A:319:TYR:HD1	1:A:687:LEU:HD21	1.84	0.40
1:A:334:THR:HG1	1:A:336:ALA:HB3	1.84	0.40
1:A:366:ASN:C	1:A:366:ASN:HD22	2.25	0.40
1:A:490:SER:O	1:A:501:LEU:C	2.59	0.40
1:A:496:ASP:O	1:A:497:PRO:C	2.58	0.40
1:A:535:GLU:O	1:A:537:ALA:N	2.55	0.40
1:A:156:SER:O	1:A:169:LEU:O	2.39	0.40
1:A:173:CYS:HB3	1:A:187:GLU:OE1	2.22	0.40
1:A:221:GLU:HA	1:A:224:ARG:HD2	2.02	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	687/689 (100%)	468 (68%)	143 (21%)	76 (11%)	0 7

All (76) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	52	ASN
1	A	122	SER
1	A	167	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	168	ASN
1	A	180	LYS
1	A	183	CYS
1	A	188	PRO
1	A	189	TYR
1	A	213	THR
1	A	252	SER
1	A	264	GLU
1	A	305	LEU
1	A	316	SER
1	A	322	ALA
1	A	350	VAL
1	A	375	SER
1	A	444	ALA
1	A	448	TRP
1	A	452	SER
1	A	464	THR
1	A	465	ALA
1	A	467	TRP
1	A	484	ASP
1	A	503	ALA
1	A	511	ASN
1	A	543	VAL
1	A	553	ASP
1	A	577	THR
1	A	603	ARG
1	A	635	GLU
1	A	663	SER
1	A	40	THR
1	A	88	PRO
1	A	103	GLY
1	A	108	GLN
1	A	176	THR
1	A	212	SER
1	A	419	ASN
1	A	426	VAL
1	A	443	ASP
1	A	446	LEU
1	A	485	LYS
1	A	654	LYS
1	A	297	ASP
1	A	342	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	488	SER
1	A	536	LYS
1	A	562	LYS
1	A	575	ASP
1	A	586	SER
1	A	594	ASN
1	A	636	THR
1	A	61	GLY
1	A	70	HIS
1	A	106	LEU
1	A	234	ASN
1	A	424	ASP
1	A	441	LYS
1	A	508	ASN
1	A	527	THR
1	A	588	HIS
1	A	601	SER
1	A	646	GLU
1	A	32	PRO
1	A	128	PRO
1	A	211	ASP
1	A	581	VAL
1	A	478	THR
1	A	596	ALA
1	A	311	PRO
1	A	338	VAL
1	A	619	GLY
1	A	76	PRO
1	A	410	VAL
1	A	2	PRO
1	A	321	GLY

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.

Continued on next page...

Continued from previous page...

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	565/565 (100%)	419 (74%)	146 (26%)	0 4

All (146) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	19	CYS
1	A	25	ASN
1	A	33	SER
1	A	35	SER
1	A	42	SER
1	A	52	ASN
1	A	55	ASP
1	A	59	LEU
1	A	60	ASP
1	A	63	LEU
1	A	65	TYR
1	A	72	TYR
1	A	75	ARG
1	A	83	GLN
1	A	85	ARG
1	A	87	LYS
1	A	89	GLN
1	A	90	THR
1	A	92	TYR
1	A	97	VAL
1	A	98	VAL
1	A	104	PHE
1	A	105	GLN
1	A	109	LEU
1	A	121	ARG
1	A	131	THR
1	A	132	LEU
1	A	133	ARG
1	A	137	ASN
1	A	156	SER
1	A	160	CYS
1	A	165	GLN
1	A	166	TYR
1	A	167	PRO
1	A	181	CYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	190	PHE
1	A	193	SER
1	A	197	LYS
1	A	201	ASN
1	A	205	ASP
1	A	208	PHE
1	A	210	LYS
1	A	220	ASP
1	A	221	GLU
1	A	231	CYS
1	A	240	ASP
1	A	249	ARG
1	A	250	VAL
1	A	252	SER
1	A	258	ARG
1	A	265	ASP
1	A	273	ARG
1	A	280	ARG
1	A	287	GLN
1	A	288	LEU
1	A	298	LEU
1	A	299	LEU
1	A	300	PHE
1	A	305	LEU
1	A	307	PHE
1	A	324	TYR
1	A	325	LEU
1	A	328	THR
1	A	330	ASN
1	A	331	LEU
1	A	332	ARG
1	A	341	ARG
1	A	344	ARG
1	A	358	CYS
1	A	360	GLN
1	A	362	SER
1	A	364	VAL
1	A	366	ASN
1	A	367	ARG
1	A	375	SER
1	A	377	THR
1	A	378	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	394	LEU
1	A	400	TYR
1	A	404	LYS
1	A	411	LEU
1	A	413	GLU
1	A	415	GLN
1	A	418	GLN
1	A	427	HIS
1	A	431	GLU
1	A	433	TYR
1	A	442	SER
1	A	443	ASP
1	A	445	ASP
1	A	447	THR
1	A	449	ASN
1	A	451	LEU
1	A	452	SER
1	A	463	ARG
1	A	470	PRO
1	A	473	LEU
1	A	476	ASN
1	A	482	LYS
1	A	483	PHE
1	A	487	PHE
1	A	489	GLN
1	A	500	SER
1	A	501	LEU
1	A	502	CYS
1	A	504	LEU
1	A	508	ASN
1	A	516	MET
1	A	521	GLU
1	A	527	THR
1	A	542	PHE
1	A	543	VAL
1	A	553	ASP
1	A	555	LYS
1	A	556	ASN
1	A	563	ASP
1	A	564	LEU
1	A	568	ASP
1	A	571	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	572	LEU
1	A	574	LEU
1	A	578	ARG
1	A	581	VAL
1	A	588	HIS
1	A	600	GLN
1	A	603	ARG
1	A	605	GLN
1	A	606	HIS
1	A	607	LEU
1	A	611	LEU
1	A	621	ASN
1	A	626	PRO
1	A	632	PHE
1	A	641	PHE
1	A	646	GLU
1	A	651	LEU
1	A	652	GLN
1	A	659	GLN
1	A	660	TYR
1	A	664	GLU
1	A	665	TYR
1	A	671	ASN
1	A	672	LEU
1	A	674	ARG
1	A	676	SER
1	A	687	LEU

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (22) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	25	ASN
1	A	52	ASN
1	A	83	GLN
1	A	89	GLN
1	A	126	ASN
1	A	137	ASN
1	A	165	GLN
1	A	168	ASN
1	A	201	ASN
1	A	246	HIS
1	A	275	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	287	GLN
1	A	323	ASN
1	A	330	ASN
1	A	366	ASN
1	A	511	ASN
1	A	550	GLN
1	A	595	HIS
1	A	606	HIS
1	A	615	GLN
1	A	652	GLN
1	A	671	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](#)

EDS was not executed - this section is therefore empty.

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

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.3 Carbohydrates [i](#)

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.4 Ligands [i](#)

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.5 Other polymers [i](#)

EDS was not executed - this section is therefore empty.