



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 02:03 PM UTC

PDB ID : 1EH9 / pdb_00001eh9
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 ⓘ 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	:	4-5-2 with Phenix2.0
Xtriage (Phenix)	:	2.0
EDS	:	3.0
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
CCP4	:	9.0.010 (Gargrove)
Density-Fitness	:	1.0.12
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

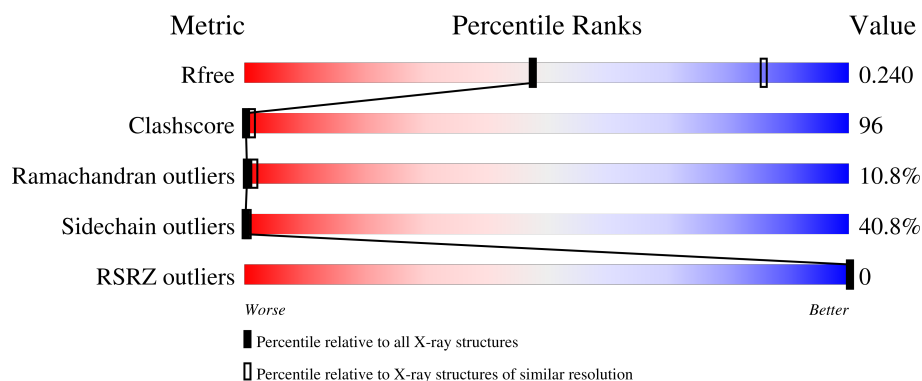
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.00 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}	180053	2672 (3.00-3.00)
Clashscore	190562	2977 (3.00-3.00)
Ramachandran outliers	187476	2877 (3.00-3.00)
Sidechain outliers	187428	2880 (3.00-3.00)
RSRZ outliers	180081	2671 (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 $\leq 5\%$. The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the electron density. The numeric value is given above the bar.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	558	

2 Entry composition

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
1	A	557	Total	C	N	O	S	0	0	0
			4541	2926	741	865	9			

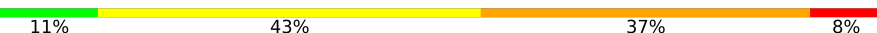
- Molecule 2 is water.

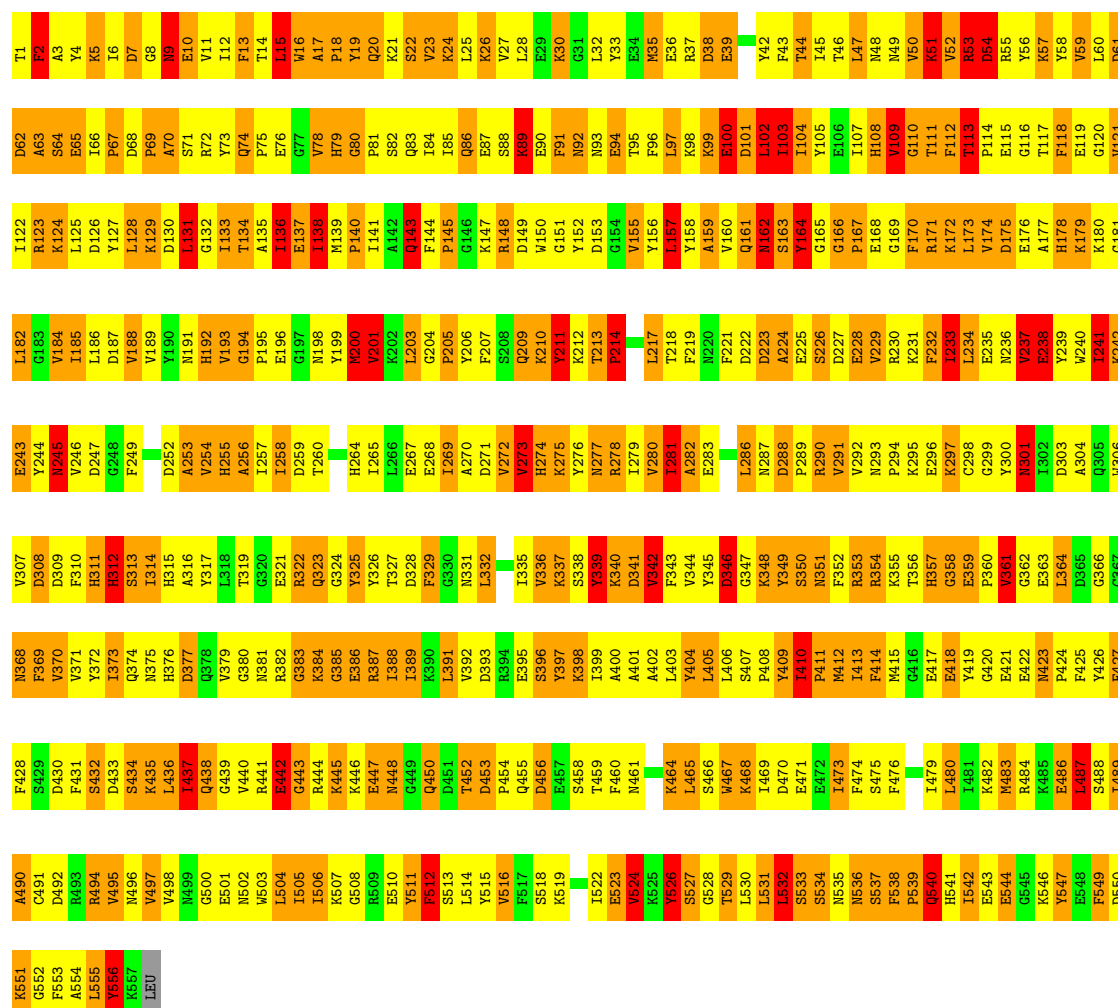
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
2	A	29	Total	O	0	0
			29	29		

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 and electron density. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. A red dot above a residue indicates a poor fit to the electron density ($RSRZ > 2$). Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

• Molecule 1: GLYCOSYLTREHALOSE TREHALOXYDROLASE

Chain A: 



4 Data and refinement statistics

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 20.00 – 3.00	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	95.0 (20.00-3.00) 98.7 (20.00-3.00)	Depositor EDS
R_{merge}	0.12	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	2.39 (at 3.01Å)	Xtriage
Refinement program	TNT 5E	Depositor
R, R_{free}	(Not available) , (Not available) 0.189 , 0.240	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)	0.31 , 192.9	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.50$, $\langle L^2 \rangle = 0.33$	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.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality [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	1.34	12/4659 (0.3%)	1.81	98/6305 (1.6%)

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 (12) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	282	ALA	CA-C	-6.27	1.45	1.52
1	A	410	ILE	CA-C	-5.96	1.46	1.52
1	A	137	GLU	CD-OE2	5.86	1.36	1.25
1	A	80	GLY	C-N	-5.84	1.26	1.33
1	A	405	LEU	CA-C	-5.78	1.45	1.52
1	A	424	PRO	N-CA	-5.45	1.40	1.46
1	A	512	PHE	CA-C	-5.43	1.45	1.52
1	A	342	VAL	CA-CB	-5.41	1.47	1.54
1	A	258	ILE	CA-CB	-5.38	1.47	1.54
1	A	291	VAL	C-N	-5.28	1.27	1.33
1	A	233	ILE	N-CA	-5.07	1.40	1.46
1	A	273	VAL	C-N	-5.01	1.27	1.33

All (98) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	288	ASP	CA-C-N	9.67	129.92	119.28
1	A	288	ASP	C-N-CA	9.67	129.92	119.28
1	A	361	VAL	N-CA-C	-8.65	100.44	110.21
1	A	237	VAL	N-CA-CB	8.37	120.11	110.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	301	ASN	CA-CB-CG	-8.32	104.28	112.60
1	A	291	VAL	N-CA-C	7.89	118.43	110.23
1	A	349	TYR	N-CA-C	7.73	120.28	109.15
1	A	526	TYR	N-CA-C	7.69	120.55	108.79
1	A	145	PRO	N-CA-CB	7.60	108.32	103.23
1	A	504	LEU	N-CA-CB	-7.54	99.24	110.86
1	A	538	PHE	CA-C-N	7.50	129.21	119.84
1	A	538	PHE	C-N-CA	7.50	129.21	119.84
1	A	377	ASP	N-CA-CB	7.23	120.46	109.91
1	A	346	ASP	N-CA-CB	-7.23	100.39	110.65
1	A	161	GLN	N-CA-C	7.21	121.11	110.30
1	A	506	ILE	N-CA-CB	-6.97	104.06	112.35
1	A	495	VAL	N-CA-CB	-6.79	100.32	111.45
1	A	15	LEU	N-CA-C	6.74	119.07	107.28
1	A	166	GLY	CA-C-N	6.71	128.23	119.84
1	A	166	GLY	C-N-CA	6.71	128.23	119.84
1	A	188	VAL	N-CA-C	6.68	119.04	108.89
1	A	427	PHE	CA-CB-CG	-6.67	107.12	113.80
1	A	512	PHE	N-CA-CB	6.59	122.32	111.31
1	A	10	GLU	N-CA-C	6.59	120.19	109.59
1	A	346	ASP	N-CA-C	-6.53	106.04	112.97
1	A	368	ASN	CA-C-O	6.47	126.01	118.90
1	A	229	VAL	N-CA-CB	6.46	118.11	110.55
1	A	273	VAL	N-CA-CB	6.46	117.67	110.62
1	A	161	GLN	N-CA-CB	6.44	119.84	109.28
1	A	53	ARG	CA-CB-CG	-6.39	101.33	114.10
1	A	357	HIS	N-CA-C	6.33	119.86	110.48
1	A	91	PHE	CA-CB-CG	-6.14	107.66	113.80
1	A	98	LYS	N-CA-C	-6.13	102.28	110.55
1	A	368	ASN	N-CA-C	-6.12	105.61	114.12
1	A	274	HIS	CA-CB-CG	-6.10	107.70	113.80
1	A	410	ILE	CA-C-N	6.10	126.12	119.90
1	A	410	ILE	C-N-CA	6.10	126.12	119.90
1	A	487	LEU	N-CA-C	6.08	118.70	111.71
1	A	383	GLY	N-CA-C	-6.07	107.47	114.69
1	A	138	ILE	N-CA-C	6.06	117.51	108.54
1	A	170	PHE	CA-CB-CG	-6.03	107.77	113.80
1	A	258	ILE	N-CA-C	6.02	116.53	107.80
1	A	281	ILE	CA-C-N	-6.01	112.38	122.29
1	A	281	ILE	C-N-CA	-6.01	112.38	122.29
1	A	13	PHE	N-CA-C	6.00	117.00	108.54
1	A	69	PRO	N-CA-CB	5.91	109.09	103.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	339	TYR	CA-C-N	-5.89	112.90	122.26
1	A	339	TYR	C-N-CA	-5.89	112.90	122.26
1	A	194	GLY	CA-C-N	5.82	126.77	120.83
1	A	194	GLY	C-N-CA	5.82	126.77	120.83
1	A	51	LYS	N-CA-C	-5.81	98.43	110.80
1	A	497	VAL	N-CA-C	5.78	116.32	107.77
1	A	238	GLU	N-CA-CB	5.70	120.12	110.49
1	A	140	PRO	N-CA-C	5.69	120.54	111.26
1	A	103	ILE	CA-C-N	-5.65	114.83	122.91
1	A	103	ILE	C-N-CA	-5.65	114.83	122.91
1	A	123	ARG	N-CA-CB	5.63	118.50	110.06
1	A	178	HIS	CA-CB-CG	-5.59	108.21	113.80
1	A	439	GLY	N-CA-C	-5.58	106.03	112.50
1	A	312	HIS	CA-CB-CG	-5.58	108.22	113.80
1	A	70	ALA	N-CA-C	-5.56	105.80	112.59
1	A	214	PRO	N-CA-CB	5.54	109.06	103.25
1	A	357	HIS	O-C-N	5.54	129.22	122.96
1	A	524	VAL	CB-CA-C	-5.49	102.30	111.29
1	A	241	ILE	N-CA-C	5.47	116.20	110.62
1	A	556	TYR	N-CA-C	5.44	122.39	110.80
1	A	79	HIS	CA-CB-CG	-5.43	108.37	113.80
1	A	113	THR	N-CA-CB	-5.41	100.75	110.37
1	A	241	ILE	CB-CA-C	-5.40	104.85	112.14
1	A	194	GLY	C-N-CD	-5.32	103.19	125.00
1	A	423	ASN	N-CA-CB	5.32	117.22	110.04
1	A	153	ASP	CA-CB-CG	-5.31	107.29	112.60
1	A	256	ALA	N-CA-C	-5.31	105.45	112.94
1	A	442	GLU	N-CA-CB	5.30	119.67	110.39
1	A	490	ALA	N-CA-C	5.29	117.91	110.23
1	A	9	ASN	N-CA-C	-5.29	106.67	113.02
1	A	414	PHE	CA-CB-CG	-5.29	108.51	113.80
1	A	361	VAL	CA-C-N	-5.28	111.06	121.41
1	A	361	VAL	C-N-CA	-5.28	111.06	121.41
1	A	341	ASP	CA-CB-CG	5.25	117.85	112.60
1	A	54	ASP	N-CA-C	5.22	118.74	109.96
1	A	159	ALA	N-CA-C	5.18	117.19	108.96
1	A	136	ILE	N-CA-C	5.16	115.28	107.80
1	A	211	TYR	N-CA-C	5.13	117.66	109.81
1	A	549	PHE	N-CA-CB	5.11	118.72	111.05
1	A	411	PRO	CB-CA-C	-5.11	105.07	111.56
1	A	102	LEU	N-CA-C	5.10	116.83	108.52
1	A	89	LYS	N-CA-C	5.09	121.64	110.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	532	LEU	N-CA-C	5.06	116.20	108.52
1	A	506	ILE	N-CA-C	5.05	115.61	106.61
1	A	162	ASN	N-CA-CB	-5.05	101.95	110.49
1	A	143	GLN	N-CA-CB	5.05	119.02	110.49
1	A	526	TYR	N-CA-CB	5.05	119.38	111.56
1	A	362	GLY	CA-C-N	5.04	129.35	121.08
1	A	362	GLY	C-N-CA	5.04	129.35	121.08
1	A	118	PHE	CA-CB-CG	-5.02	108.78	113.80
1	A	173	LEU	CA-C-N	-5.00	114.16	120.56
1	A	173	LEU	C-N-CA	-5.00	114.16	120.56

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 ⓘ

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	857	0
2	A	29	0	0	6	0
All	All	4570	0	4349	857	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 96.

All (857) close contacts within the same asymmetric unit are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:139:MET:HE1	1:A:376:HIS:HB3	1.27	1.11
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:35:MET:HE3	1:A:45:ILE:HG13	1.51	0.92
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:483:MET:HE2	1:A:531:LEU:HD11	1.51	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
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:HE3	1:A:45:ILE:CG1	2.05	0.86
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:139:MET:HE1	1:A:376:HIS:CB	2.06	0.85
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:135:ALA:C	1:A:136:ILE:HD13	2.05	0.81
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
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:42:TYR:OH	1:A:228:GLU:HG3	1.84	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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:432:SER:C	1:A:437:ILE:HD11	2.12	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:199:TYR:O	1:A:200:MET:C	2.33	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
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:437:ILE:HG23	1:A:455:GLN:CD	2.17	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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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:200:MET:HE2	1:A:200:MET:HA	1.75	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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:289:PRO:C	1:A:293:ASN:HD22	2.03	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: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
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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:17:ALA:O	1:A:18:PRO:C	2.41	0.62
1:A:26:LYS:O	1:A:27:VAL:C	2.39	0.62
1:A:286:LEU:H	1:A:286:LEU:HD13	1.65	0.62
1:A:44:THR:C	1:A:45:ILE:HG13	2.25	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
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:84:ILE:C	1:A:85:ILE:HD12	2.25	0.61
1:A:287:ASN:N	1:A:357:HIS:HE1	1.97	0.61
1:A:304:ALA:HB1	1:A:368:ASN:C	2.25	0.61
1:A:60:LEU:HD11	1:A:62:ASP:HB3	1.82	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:400:ALA:O	1:A:401:ALA:C	2.43	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:35:MET:HE3	1:A:45:ILE:CD1	2.31	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:100:GLU:CD	1:A:100:GLU:H	2.09	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:35:MET:HE2	1:A:44:THR:CA	2.31	0.60
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:483:MET:HE2	1:A:531:LEU:CD1	2.29	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
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:483:MET:HE1	1:A:486:GLU:HG2	1.85	0.59
1:A:523:GLU:O	1:A:524:VAL:C	2.44	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:139:MET:HE2	1:A:376:HIS:ND1	2.19	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:102:LEU:C	1:A:103:ILE:HG12	2.29	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:231:LYS:O	1:A:232:PHE:C	2.45	0.57
1:A:124:LYS:O	1:A:125:LEU:C	2.45	0.57
1:A:353:ARG:CD	1:A:357:HIS:HD2	2.17	0.57
1:A:139:MET:HE1	1:A:376:HIS:CG	2.39	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:52:VAL:C	1:A:53:ARG:HE	2.12	0.57
1:A:384:LYS:O	1:A:385:GLY:C	2.48	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:108:HIS:O	1:A:109:VAL:C	2.48	0.56
1:A:210:LYS:HZ2	1:A:222:ASP:HB3	1.68	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
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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:244:TYR:O	1:A:245:ASN:C	2.48	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: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:395:GLU:CD	1:A:535:ASN:HD21	2.15	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
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:131:LEU:HD12	1:A:131:LEU:C	2.30	0.54
1:A:336:VAL:HG22	1:A:337:LYS:N	2.23	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:269:ILE:O	1:A:270:ALA:C	2.51	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: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:511:TYR:HD1	1:A:512:PHE:O	1.92	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:225:GLU:O	1:A:226:SER:C	2.52	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:329:PHE:N	1:A:329:PHE:CD1	2.77	0.53
1:A:388:ILE:HG12	1:A:388:ILE:O	2.07	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:544:GLU:CD	1:A:544:GLU:H	2.16	0.52
1:A:32:LEU:HD13	1:A:32:LEU:C	2.35	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
1:A:56:TYR:CZ	1:A:82:SER:HB2	2.43	0.52
1:A:60:LEU:HD12	1:A:60:LEU:C	2.35	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:71:SER:OG	1:A:74:GLN:NE2	2.42	0.52
1:A:73:TYR:C	1:A:75:PRO:HD3	2.35	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:239:TYR:O	1:A:240:TRP:C	2.52	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:426:TYR:CD2	1:A:459:THR:HG23	2.45	0.52
1:A:233:ILE:O	1:A:234:LEU:C	2.51	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:373:ILE:C	1:A:374:GLN:HG2	2.35	0.52
1:A:17:ALA:HA	1:A:203:LEU:O	2.09	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: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:163:SER:C	1:A:165:GLY:H	2.18	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: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:359:GLU:HG3	1:A:360:PRO:N	2.13	0.51
1:A:516:VAL:HG22	1:A:552:GLY:H	1.75	0.51
1:A:48:ASN:OD1	1:A:48:ASN:N	2.43	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
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:118:PHE:C	1:A:122:ILE:HD12	2.36	0.51
1:A:176:GLU:CD	1:A:179:LYS:HZ1	2.18	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:210:LYS:HZ3	1:A:222:ASP:HB3	1.74	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: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:396:SER:O	1:A:397:TYR:C	2.54	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:12:ILE:HD12	1:A:12:ILE:C	2.36	0.50
1:A:171:ARG:O	1:A:175:ASP:OD1	2.30	0.50
1:A:254:VAL:C	1:A:256:ALA:H	2.20	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
1:A:35:MET:HE2	1:A:44:THR:HA	1.94	0.49
1:A:69:PRO:CB	1:A:200:MET:HE3	2.42	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: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:323:GLN:O	1:A:324:GLY:C	2.54	0.49
1:A:346:ASP:CB	1:A:348:LYS:HZ1	2.24	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:173:LEU:HD12	1:A:173:LEU:C	2.37	0.49
1:A:237:VAL:O	1:A:238:GLU:C	2.55	0.49
1:A:524:VAL:O	1:A:524:VAL:HG12	2.11	0.49
1:A:550:ASP:O	1:A:551:LYS:C	2.55	0.49
1:A:254:VAL:O	1:A:257:ILE:HB	2.12	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:265:ILE:C	1:A:268:GLU:HB2	2.38	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:325:TYR:C	2.54	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:539:PRO:O	1:A:540:GLN:C	2.55	0.48
1:A:156:TYR:O	1:A:157:LEU:C	2.55	0.48
1:A:36:GLU:N	1:A:44:THR:O	2.45	0.48
1:A:87:GLU:O	1:A:88:SER:C	2.56	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:130:ASP:O	1:A:131:LEU:C	2.56	0.48
1:A:351:ASN:H	1:A:351:ASN:HD22	1.61	0.48
1:A:346:ASP:H	1:A:348:LYS:HZ2	1.59	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
1:A:273:VAL:O	1:A:274:HIS:C	2.55	0.48
1:A:410:ILE:HA	1:A:411:PRO:HD3	1.63	0.48
1:A:518:SER:O	1:A:519:LYS:C	2.57	0.48
1:A:85:ILE:HG22	1:A:86:GLN:N	2.28	0.48
1:A:99:LYS:O	1:A:100:GLU:C	2.57	0.48
1:A:223:ASP:O	1:A:224:ALA:C	2.57	0.48
1:A:310:PHE:O	1:A:311:HIS:C	2.56	0.48
1:A:533:SER:HA	1:A:553:PHE:O	2.13	0.48
1:A:35:MET:HE3	1:A:45:ILE:HD12	1.95	0.47
1:A:53:ARG:HD2	1:A:84:ILE:C	2.38	0.47
1:A:130:ASP:O	1:A:132:GLY:N	2.47	0.47
1:A:95:THR:OG1	1:A:247:ASP:HB3	2.13	0.47
1:A:172:LYS:O	1:A:173:LEU:C	2.56	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:25:LEU:HD13	1:A:25:LEU:C	2.39	0.47
1:A:133:ILE:HD12	1:A:133:ILE:HA	1.42	0.47
1:A:221:PHE:C	1:A:226:SER:HB2	2.40	0.47
1:A:437:ILE:HG23	1:A:455:GLN:NE2	2.29	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:30:LYS:HZ1	1:A:52:VAL:HG11	1.79	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:23:VAL:C	1:A:24:LYS:HG2	2.40	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:210:LYS:HZ3	1:A:222:ASP:CB	2.28	0.47
1:A:213:THR:HB	1:A:214:PRO:HD3	1.95	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:373:ILE:HG23	1:A:404:TYR:HD2	1.79	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:86:GLN:HG2	1:A:87:GLU:N	2.23	0.47
1:A:341:ASP:O	1:A:342:VAL:C	2.57	0.47
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:20:GLN:HG3	1:A:61:ASP:CG	2.40	0.46
1:A:144:PHE:CE1	1:A:149:ASP:CB	2.99	0.46
1:A:294:PRO:O	1:A:299:GLY:N	2.42	0.46
1:A:536:ASN:C	1:A:538:PHE:H	2.23	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:315:HIS:CD2	1:A:315:HIS:C	2.94	0.46
1:A:257:ILE:O	1:A:257:ILE:HG22	2.14	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:466:SER:C	1:A:468:LYS:H	2.22	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:353:ARG:C	1:A:354:ARG:HG2	2.41	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:507:LYS:HG2	1:A:508:GLY:H	1.79	0.46
1:A:200:MET:HE2	1:A:200:MET:CA	2.41	0.45
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
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: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:286:LEU:C	1:A:288:ASP:H	2.22	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: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:139:MET:CE	1:A:376:HIS:ND1	2.79	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:56:TYR:C	1:A:57:LYS:HG2	2.41	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:85:ILE:CG2	1:A:86:GLN:N	2.80	0.44
1:A:87:GLU:C	1:A:89:LYS:HG3	2.43	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: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:16:TRP:CE3	1:A:16:TRP:CA	3.00	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: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:483:MET:CE	1:A:486:GLU:HG2	2.47	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:HD12	1:A:12:ILE:O	2.18	0.44
1:A:113:THR:HB	2:A:576:HOH:O	2.18	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:15:LEU:C	1:A:15:LEU:HD22	2.42	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:102:LEU:HB3	1:A:410:ILE:HG23	2.00	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:112:PHE:HD2	1:A:121:VAL:HG12	1.83	0.43
1:A:276:TYR:O	1:A:277:ASN:C	2.60	0.43
1:A:307:VAL:C	1:A:309:ASP:H	2.26	0.43
1:A:315:HIS:NE2	1:A:321:GLU:OE1	2.28	0.43
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:473:ILE:O	1:A:474:PHE:C	2.59	0.43
1:A:144:PHE:CD1	1:A:149:ASP:HB2	2.53	0.43
1:A:350:SER:HG	1:A:353:ARG:H	1.60	0.43
1:A:532:LEU:HD12	1:A:532:LEU:C	2.40	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: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:307:VAL:C	1:A:309:ASP:N	2.76	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:35:MET:HE2	1:A:35:MET:HB3	1.87	0.43
1:A:122:ILE:CA	1:A:125:LEU:HD13	2.44	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:39:GLU:H	1:A:39:GLU:HG3	1.35	0.43
1:A:69:PRO:HB2	1:A:200:MET:HE1	2.00	0.43
1:A:102:LEU:HD12	1:A:102:LEU:HA	1.82	0.43
1:A:163:SER:C	1:A:165:GLY:N	2.76	0.43
1:A:289:PRO:CB	1:A:293:ASN:ND2	2.79	0.43
1:A:311:HIS:CD2	1:A:311:HIS:C	2.97	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: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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:264:HIS:CD2	1:A:265:ILE:HG22	2.54	0.42
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: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:66:ILE:HB	1:A:67:PRO:CD	2.49	0.42
1:A:139:MET:CE	1:A:376:HIS:CG	3.02	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:382:ARG:C	1:A:384:LYS:H	2.28	0.42
1:A:437:ILE:O	1:A:438:GLN:HB2	2.19	0.42
1:A:474:PHE:C	1:A:474:PHE:CD1	2.98	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:174:VAL:O	1:A:175:ASP:C	2.63	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:273:VAL:CG2	1:A:274:HIS:N	2.81	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:194:GLY:HA2	1:A:195:PRO:HD2	1.52	0.41
1:A:396:SER:C	1:A:398:LYS:N	2.78	0.41
1:A:519:LYS:HA	1:A:549:PHE:O	2.20	0.41
1:A:35:MET:HE2	1:A:44:THR:N	2.35	0.41
1:A:87:GLU:HB2	1:A:89:LYS:HD2	2.02	0.41
1:A:475:SER:C	1:A:479:ILE:HD12	2.45	0.41
1:A:207:PHE:HE2	1:A:219:PHE:CE1	2.38	0.41
1:A:346:ASP:C	1:A:360:PRO:HD3	2.45	0.41
1:A:546:LYS:C	1:A:547:TYR:HD1	2.28	0.41
1:A:185:ILE:HD13	1:A:185:ILE:HG21	1.84	0.41
1:A:419:TYR:C	1:A:419:TYR:CD1	2.98	0.41
1:A:54:ASP:N	1:A:84:ILE:HD12	2.35	0.41
1:A:91:PHE:CD1	1:A:91:PHE:C	2.98	0.41
1:A:108:HIS:ND1	1:A:108:HIS:C	2.79	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:114:PRO:CD	1:A:123:ARG:HH21	2.33	0.41
1:A:287:ASN:CG	1:A:343:PHE:CD1	2.98	0.41
1:A:294:PRO:HA	1:A:301:ASN:HD21	1.76	0.41
1:A:73:TYR:CE2	1:A:75:PRO:CB	3.02	0.41
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:138:ILE:O	1:A:139:MET:C	2.62	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:476:PHE:C	1:A:479:ILE:HD12	2.46	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:243:GLU:C	1:A:244:TYR:CD1	2.99	0.41
1:A:337:LYS:HD2	1:A:344:VAL:HG22	2.03	0.41
1:A:12:ILE:C	1:A:13:PHE:CD1	2.99	0.41
1:A:16:TRP:CZ2	1:A:18:PRO:HG3	2.56	0.41
1:A:52:VAL:C	1:A:54:ASP:N	2.79	0.41
1:A:339:TYR:CE1	1:A:403:LEU:HD22	2.55	0.41
1:A:376:HIS:CG	1:A:377:ASP:N	2.89	0.41
1:A:436:LEU:C	1:A:438:GLN:N	2.78	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:314:ILE:O	1:A:315:HIS:C	2.61	0.41
1:A:371:VAL:C	1:A:372:TYR:CD2	2.99	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:543:GLU:O	1:A:547:TYR:OH	2.29	0.41
1:A:67:PRO:O	1:A:68:ASP:C	2.63	0.40
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:179:LYS:C	1:A:181:GLY:H	2.29	0.40
1:A:254:VAL:CG2	1:A:255:HIS:N	2.85	0.40
1:A:295:LYS:C	1:A:297:LYS:N	2.78	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:253:ALA:O	1:A:254:VAL:C	2.62	0.40
1:A:279:ILE:HA	1:A:303:ASP:OD2	2.21	0.40
1:A:349:TYR:CD1	1:A:349:TYR:C	2.99	0.40
1:A:533:SER:OG	1:A:535:ASN:O	2.30	0.40
1:A:69:PRO:CB	1:A:200:MET:CE	2.99	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:CA	1:A:200:MET:CE	2.99	0.40
1:A:244:TYR:C	1:A:246:VAL:N	2.79	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:404:TYR:CD1	1:A:404:TYR:C	2.99	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
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:103:ILE:N	1:A:134:THR:HG1	2.20	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:349:TYR:HD1	1:A:349:TYR:C	2.28	0.40
1:A:529:THR:H	1:A:529:THR:HG23	1.60	0.40
1:A:546:LYS:C	1:A:547:TYR:CD1	2.99	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:286:LEU:C	1:A:288:ASP:N	2.80	0.40
1:A:441:ARG:NH1	1:A:453:ASP:CG	2.80	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

5.3.1 Protein backbone

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

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

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

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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
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
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 ⓘ

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%)	287 (59%)	198 (41%)	0 0

All (198) 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	35	MET
1	A	38	ASP
1	A	39	GLU
1	A	44	THR
1	A	46	THR
1	A	47	LEU
1	A	49	ASN
1	A	50	VAL
1	A	51	LYS
1	A	53	ARG
1	A	54	ASP
1	A	57	LYS
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	102	LEU
1	A	103	ILE
1	A	104	ILE
1	A	108	HIS
1	A	109	VAL
1	A	111	THR
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	138	ILE
1	A	141	ILE
1	A	148	ARG
1	A	155	VAL
1	A	157	LEU
1	A	162	ASN
1	A	164	TYR
1	A	168	GLU
1	A	171	ARG
1	A	172	LYS
1	A	174	VAL
1	A	175	ASP
1	A	179	LYS
1	A	182	LEU
1	A	184	VAL
1	A	185	ILE
1	A	188	VAL
1	A	189	VAL
1	A	193	VAL
1	A	198	ASN
1	A	200	MET
1	A	201	VAL
1	A	203	LEU
1	A	209	GLN
1	A	210	LYS
1	A	211	TYR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	212	LYS
1	A	217	LEU
1	A	228	GLU
1	A	229	VAL
1	A	232	PHE
1	A	234	LEU
1	A	237	VAL
1	A	238	GLU
1	A	241	ILE
1	A	242	LYS
1	A	243	GLU
1	A	245	ASN
1	A	254	VAL
1	A	258	ILE
1	A	269	ILE
1	A	272	VAL
1	A	273	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	292	VAL
1	A	297	LYS
1	A	301	ASN
1	A	312	HIS
1	A	313	SER
1	A	314	ILE
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
1	A	346	ASP
1	A	348	LYS
1	A	350	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
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	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	398	LYS
1	A	404	TYR
1	A	407	SER
1	A	410	ILE
1	A	412	MET
1	A	413	ILE
1	A	417	GLU
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	450	GLN
1	A	452	THR
1	A	456	ASP
1	A	458	SER
1	A	464	LYS
1	A	465	LEU
1	A	468	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	471	GLU
1	A	473	ILE
1	A	480	LEU
1	A	483	MET
1	A	486	GLU
1	A	487	LEU
1	A	489	ILE
1	A	494	ARG
1	A	495	VAL
1	A	496	ASN
1	A	497	VAL
1	A	498	VAL
1	A	501	GLU
1	A	502	ASN
1	A	505	ILE
1	A	512	PHE
1	A	513	SER
1	A	516	VAL
1	A	523	GLU
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	536	ASN
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 (20) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	9	ASN
1	A	74	GLN
1	A	79	HIS
1	A	86	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	162	ASN
1	A	178	HIS
1	A	191	ASN
1	A	192	HIS
1	A	264	HIS
1	A	274	HIS
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
1	A	540	GLN

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry ⓘ

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers ⓘ

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.

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

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

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	557/558 (99%)	-0.54	0 100 100	7, 42, 89, 100	0

There are no RSRZ outliers to report.

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

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

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.