



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 09:31 AM UTC

PDB ID : 1JW1 / pdb_00001jw1
Title : Crystallization and structure determination of goat lactoferrin at 4.0 resolution: A new form of packing in lactoferrins with a high solvent content in crystals
Authors : Kumar, P.; Yadav, S.; Singh, T.P.
Deposited on : 2001-09-02
Resolution : 4.00 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)	:	NOT EXECUTED
EDS	:	NOT EXECUTED
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

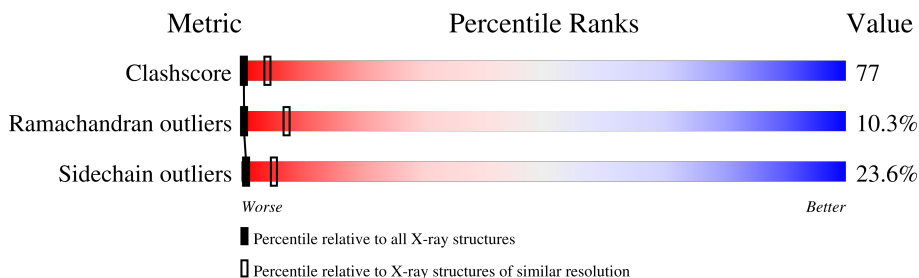
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 4.00 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))
Clashscore	190562	1129 (4.20-3.80)
Ramachandran outliers	187476	1064 (4.20-3.80)
Sidechain outliers	187428	1055 (4.20-3.80)

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 are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 5295 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 LACTOFERRIN.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	689	Total	C	N	O	S	0	0	0
			5293	3316	934	1003	40			

There are 7 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	42	VAL	ALA	conflict	UNP Q29477
A	61	ASP	SER	conflict	UNP Q29477
A	308	LEU	VAL	conflict	UNP Q29477
A	338	VAL	LEU	conflict	UNP Q29477
A	395	ASP	GLY	conflict	UNP Q29477
A	420	HIS	TYR	conflict	UNP Q29477
A	628	LYS	GLN	conflict	UNP Q29477

- Molecule 2 is FE (III) ION (CCD ID: FE) (formula: Fe).

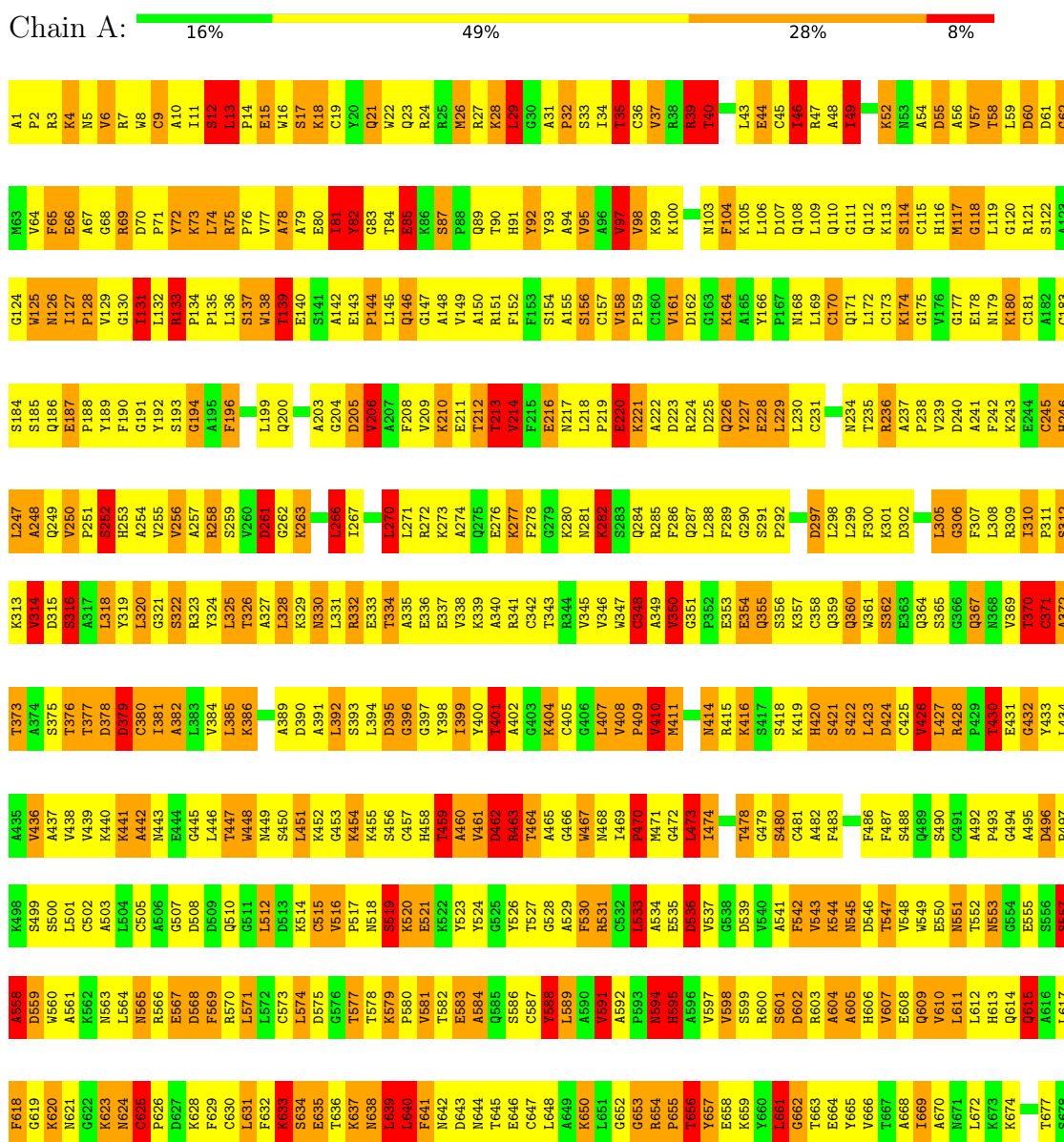
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
2	A	2	Total	Fe	0	0
			2	2		

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: LACTOFERRIN



P679
L680
L681
E682
A683
C684
A685
F686
L687
T688
R689

4 Data and refinement statistics

Xtriage (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	104.60Å 153.80Å 155.05Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	12.00 – 4.00	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	83.0 (12.00-4.00)	Depositor
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
Refinement program	CNS 0.9	Depositor
R, R_{free}	0.228 , 0.328	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	5295	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	28.0	wwPDB-VP

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

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	1.25	27/5401 (0.5%)	1.88	199/7308 (2.7%)

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	8

All (27) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	463	ARG	N-CA	11.02	1.60	1.46
1	A	557	SER	CA-C	-9.05	1.40	1.52
1	A	139	THR	CA-CB	7.34	1.64	1.53
1	A	463	ARG	CA-C	-6.99	1.43	1.52
1	A	11	ILE	CA-CB	6.96	1.64	1.54
1	A	411	MET	CA-C	-6.62	1.45	1.52
1	A	338	VAL	CA-CB	6.56	1.62	1.54
1	A	543	VAL	CA-CB	6.21	1.62	1.54
1	A	426	VAL	CA-CB	6.15	1.62	1.54
1	A	462	ASP	N-CA	5.92	1.53	1.46
1	A	408	VAL	CA-CB	5.88	1.61	1.54
1	A	557	SER	C-O	5.74	1.31	1.24
1	A	6	VAL	CA-CB	5.74	1.60	1.54
1	A	459	THR	CA-CB	5.72	1.63	1.53
1	A	638	ASN	CA-C	5.61	1.60	1.52
1	A	558	ALA	CA-C	-5.59	1.45	1.52
1	A	350	VAL	CA-CB	5.45	1.61	1.54
1	A	579	LYS	CA-C	5.41	1.57	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	462	ASP	C-N	5.32	1.41	1.33
1	A	11	ILE	CA-C	5.31	1.59	1.52
1	A	131	ILE	CA-CB	5.29	1.61	1.54
1	A	591	VAL	CA-C	5.24	1.58	1.52
1	A	134	PRO	CA-C	5.22	1.57	1.52
1	A	367	GLN	N-CA	5.22	1.52	1.46
1	A	558	ALA	C-O	-5.07	1.17	1.23
1	A	314	VAL	CA-CB	5.06	1.59	1.53
1	A	591	VAL	CA-CB	5.00	1.60	1.54

All (199) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	272	ARG	N-CA-C	-17.43	92.42	111.07
1	A	310	ILE	CA-C-N	14.96	138.54	119.84
1	A	310	ILE	C-N-CA	14.96	138.54	119.84
1	A	214	VAL	N-CA-C	-14.15	97.11	110.42
1	A	128	PRO	N-CA-C	12.96	129.97	114.03
1	A	662	GLY	N-CA-C	-12.62	95.19	111.72
1	A	461	VAL	N-CA-C	12.09	125.78	106.32
1	A	462	ASP	CA-C-O	-12.03	103.31	120.51
1	A	49	ILE	N-CA-C	-11.97	100.30	111.67
1	A	378	ASP	N-CA-C	-11.85	98.93	113.50
1	A	284	GLN	N-CA-C	11.71	132.79	107.49
1	A	285	ARG	N-CA-C	-11.69	95.61	113.02
1	A	55	ASP	N-CA-C	11.18	127.02	113.16
1	A	266	LEU	N-CA-C	-11.07	99.28	113.12
1	A	318	LEU	N-CA-C	11.03	123.39	111.36
1	A	404	LYS	N-CA-C	-10.36	100.75	113.50
1	A	462	ASP	O-C-N	10.29	136.28	122.59
1	A	21	GLN	N-CA-C	-10.14	100.32	112.89
1	A	306	GLY	N-CA-C	10.02	123.11	110.29
1	A	557	SER	CA-C-N	10.01	135.36	121.05
1	A	557	SER	C-N-CA	10.01	135.36	121.05
1	A	273	LYS	N-CA-C	9.75	124.28	112.38
1	A	686	PHE	N-CA-C	-9.70	102.53	114.75
1	A	127	ILE	CA-C-N	9.37	129.61	119.87
1	A	127	ILE	C-N-CA	9.37	129.61	119.87
1	A	473	LEU	N-CA-C	-9.36	103.94	114.62
1	A	568	ASP	N-CA-C	-9.18	102.22	113.97
1	A	602	ASP	N-CA-C	-9.18	103.19	114.75
1	A	451	LEU	N-CA-C	9.15	124.24	112.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	574	LEU	N-CA-C	9.12	124.22	113.18
1	A	421	SER	N-CA-C	-9.12	101.34	111.28
1	A	463	ARG	CA-CB-CG	9.11	132.33	114.10
1	A	18	LYS	N-CA-C	-9.01	101.10	112.90
1	A	401	THR	N-CA-C	-8.78	102.11	113.17
1	A	52	LYS	N-CA-C	8.68	123.17	112.58
1	A	558	ALA	N-CA-C	8.60	122.88	110.24
1	A	496	ASP	CA-C-N	8.50	128.49	119.05
1	A	496	ASP	C-N-CA	8.50	128.49	119.05
1	A	530	PHE	N-CA-C	-8.48	103.12	113.97
1	A	531	ARG	N-CA-C	-8.46	101.28	111.69
1	A	82	TYR	N-CA-C	8.28	121.88	109.95
1	A	618	PHE	N-CA-C	-8.23	99.14	111.81
1	A	428	ARG	CA-C-N	8.21	128.36	120.31
1	A	428	ARG	C-N-CA	8.21	128.36	120.31
1	A	592	ALA	N-CA-C	8.11	117.66	108.25
1	A	60	ASP	N-CA-C	-8.09	98.55	110.52
1	A	380	CYS	N-CA-C	8.06	121.17	111.82
1	A	602	ASP	CB-CA-C	7.98	119.45	109.16
1	A	272	ARG	CB-CA-C	-7.97	98.37	110.88
1	A	325	LEU	N-CA-C	-7.95	103.73	113.19
1	A	222	ALA	N-CA-C	-7.92	101.94	112.72
1	A	615	GLN	N-CA-C	-7.86	103.42	113.16
1	A	373	THR	N-CA-C	7.80	123.17	107.41
1	A	362	SER	N-CA-C	-7.75	102.83	111.82
1	A	15	GLU	N-CA-C	-7.68	104.06	113.50
1	A	376	THR	N-CA-C	-7.66	94.48	108.65
1	A	688	THR	N-CA-C	-7.66	103.74	113.23
1	A	608	GLU	N-CA-C	-7.64	101.39	111.24
1	A	256	VAL	N-CA-C	7.64	125.23	109.34
1	A	247	LEU	N-CA-C	-7.63	104.87	114.56
1	A	272	ARG	CA-C-N	7.59	132.75	120.60
1	A	272	ARG	C-N-CA	7.59	132.75	120.60
1	A	196	PHE	N-CA-C	-7.58	102.96	111.14
1	A	312	SER	N-CA-C	7.56	126.90	110.80
1	A	360	GLN	N-CA-C	-7.53	103.93	113.72
1	A	408	VAL	CA-C-N	7.52	129.25	119.84
1	A	408	VAL	C-N-CA	7.52	129.25	119.84
1	A	146	GLN	N-CA-C	-7.52	103.85	112.87
1	A	610	VAL	N-CA-C	-7.47	104.58	111.67
1	A	557	SER	O-C-N	7.46	132.51	122.59
1	A	395	ASP	CA-CB-CG	7.45	120.05	112.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	371	CYS	N-CA-C	7.37	121.85	110.42
1	A	213	THR	N-CA-C	-7.36	105.47	114.75
1	A	164	LYS	N-CA-C	7.32	120.70	111.69
1	A	150	ALA	N-CA-C	-7.31	104.98	114.04
1	A	612	LEU	N-CA-C	-7.28	104.84	113.21
1	A	168	ASN	N-CA-C	-7.18	102.64	111.33
1	A	395	ASP	N-CA-CB	-7.14	99.33	110.55
1	A	481	CYS	N-CA-C	7.13	118.74	110.97
1	A	343	THR	N-CA-C	-7.05	103.24	112.41
1	A	118	GLY	N-CA-C	7.03	121.60	111.12
1	A	661	LEU	N-CA-C	7.01	120.93	112.38
1	A	677	THR	N-CA-C	7.00	120.30	107.99
1	A	161	VAL	CB-CA-C	-6.99	103.62	111.45
1	A	39	ARG	N-CA-C	6.99	116.52	108.49
1	A	117	MET	CB-CG-SD	-6.92	91.94	112.70
1	A	586	SER	N-CA-C	-6.92	104.31	112.89
1	A	126	ASN	N-CA-C	-6.91	103.19	111.69
1	A	322	SER	N-CA-C	-6.91	105.38	113.88
1	A	609	GLN	N-CA-C	6.91	121.41	113.19
1	A	637	LYS	N-CA-C	-6.89	104.75	113.43
1	A	533	LEU	N-CA-C	-6.84	105.09	113.50
1	A	654	ARG	CA-C-N	6.80	128.34	119.84
1	A	654	ARG	C-N-CA	6.80	128.34	119.84
1	A	447	THR	N-CA-C	-6.78	97.57	108.55
1	A	565	ASN	N-CA-C	-6.77	97.38	108.41
1	A	598	VAL	N-CA-C	6.75	117.77	107.77
1	A	559	ASP	N-CA-C	6.72	121.18	113.19
1	A	85	GLU	N-CA-C	6.68	125.03	110.80
1	A	625	CYS	CA-C-N	-6.66	112.13	119.19
1	A	625	CYS	C-N-CA	-6.66	112.13	119.19
1	A	442	ALA	N-CA-C	-6.65	104.11	111.82
1	A	377	THR	N-CA-C	-6.63	102.71	113.19
1	A	250	VAL	CA-C-N	-6.62	112.96	119.78
1	A	250	VAL	C-N-CA	-6.62	112.96	119.78
1	A	216	GLU	N-CA-C	6.62	118.50	111.28
1	A	12	SER	CA-C-N	6.60	137.91	121.80
1	A	12	SER	C-N-CA	6.60	137.91	121.80
1	A	569	PHE	N-CA-C	6.55	119.19	108.52
1	A	103	ASN	N-CA-C	6.52	121.08	113.20
1	A	180	LYS	N-CA-C	6.50	118.50	109.15
1	A	379	ASP	N-CA-C	-6.48	103.50	111.40
1	A	69	ARG	N-CA-C	-6.48	97.01	110.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	99	LYS	N-CA-C	6.47	119.10	109.59
1	A	206	VAL	CB-CA-C	-6.46	100.78	111.32
1	A	65	PHE	N-CA-C	-6.46	104.88	112.89
1	A	117	MET	N-CA-C	-6.44	97.09	110.80
1	A	272	ARG	CA-CB-CG	6.43	126.97	114.10
1	A	46	ILE	N-CA-C	-6.38	103.64	112.50
1	A	441	LYS	N-CA-C	-6.36	105.38	113.01
1	A	558	ALA	CA-C-O	-6.35	114.03	120.96
1	A	98	VAL	N-CA-C	6.33	119.12	109.12
1	A	81	ILE	N-CA-C	6.30	118.45	108.87
1	A	605	ALA	N-CA-C	6.29	124.19	110.80
1	A	29	LEU	N-CA-C	-6.28	105.58	113.18
1	A	134	PRO	N-CA-C	6.26	118.34	110.70
1	A	358	CYS	N-CA-C	-6.22	104.19	110.97
1	A	650	LYS	N-CA-C	-6.19	99.19	109.46
1	A	340	ALA	N-CA-C	-6.14	104.59	111.28
1	A	134	PRO	CA-C-N	-6.06	113.72	120.45
1	A	134	PRO	C-N-CA	-6.06	113.72	120.45
1	A	228	GLU	N-CA-C	-6.05	100.88	109.96
1	A	635	GLU	N-CA-C	6.04	123.66	110.80
1	A	174	LYS	N-CA-C	6.02	119.37	112.57
1	A	187	GLU	N-CA-C	-5.99	97.66	109.10
1	A	37	VAL	N-CA-C	5.96	117.59	108.71
1	A	464	THR	N-CA-C	5.95	123.48	110.80
1	A	584	ALA	N-CA-C	-5.94	105.89	113.02
1	A	674	LYS	N-CA-C	-5.94	105.99	113.18
1	A	78	ALA	N-CA-C	5.91	120.05	107.70
1	A	382	ALA	N-CA-C	-5.90	104.43	111.69
1	A	424	ASP	N-CA-C	-5.88	100.31	109.72
1	A	502	CYS	N-CA-C	-5.86	105.33	112.88
1	A	454	LYS	N-CA-C	-5.81	102.17	110.59
1	A	272	ARG	O-C-N	5.80	128.05	122.07
1	A	430	THR	N-CA-C	5.67	122.88	110.80
1	A	40	THR	N-CA-C	5.59	122.72	110.80
1	A	261	ASP	N-CA-C	5.57	122.66	110.80
1	A	520	LYS	N-CA-C	-5.56	105.59	112.38
1	A	365	SER	N-CA-C	-5.54	106.65	113.41
1	A	592	ALA	CA-C-N	-5.53	113.55	120.51
1	A	592	ALA	C-N-CA	-5.53	113.55	120.51
1	A	26	MET	N-CA-C	5.52	122.57	110.80
1	A	282	LYS	N-CA-C	5.50	116.88	108.30
1	A	657	TYR	N-CA-C	-5.47	104.55	111.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	270	LEU	N-CA-C	-5.46	105.48	111.82
1	A	399	ILE	N-CA-C	-5.46	105.59	113.07
1	A	463	ARG	NE-CZ-NH2	5.46	124.11	119.20
1	A	595	HIS	N-CA-C	5.43	117.16	108.41
1	A	483	PHE	N-CA-C	5.39	117.91	111.71
1	A	178	GLU	N-CA-C	-5.38	106.56	113.23
1	A	621	ASN	N-CA-C	-5.38	106.39	113.17
1	A	432	GLY	N-CA-C	5.36	125.89	113.18
1	A	97	VAL	N-CA-C	5.33	120.43	109.34
1	A	385	LEU	N-CA-C	5.33	116.95	111.03
1	A	372	ALA	N-CA-C	-5.31	96.60	107.70
1	A	220	GLU	N-CA-C	5.31	118.01	110.10
1	A	35	THR	N-CA-C	-5.29	101.08	109.96
1	A	422	SER	N-CA-C	5.29	122.06	110.80
1	A	555	GLU	N-CA-C	5.29	121.41	114.75
1	A	544	LYS	N-CA-C	-5.28	100.57	109.07
1	A	44	GLU	N-CA-C	-5.27	106.92	113.19
1	A	640	LEU	CA-CB-CG	5.27	134.76	116.30
1	A	24	ARG	CG-CD-NE	-5.27	100.41	112.00
1	A	62	GLY	N-CA-C	-5.25	106.36	113.24
1	A	641	PHE	N-CA-C	5.25	118.12	109.72
1	A	285	ARG	N-CA-CB	5.23	119.95	111.27
1	A	354	GLU	N-CA-C	-5.23	106.41	112.89
1	A	117	MET	CB-CA-C	-5.23	100.02	110.42
1	A	272	ARG	N-CA-CB	5.21	117.57	110.01
1	A	463	ARG	CA-C-O	-5.19	113.08	120.51
1	A	633	LYS	N-CA-C	5.17	118.37	110.20
1	A	384	VAL	CA-C-N	5.17	127.66	120.63
1	A	384	VAL	C-N-CA	5.17	127.66	120.63
1	A	370	THR	N-CA-C	5.16	117.38	109.95
1	A	617	LEU	CA-CB-CG	5.16	134.36	116.30
1	A	460	ALA	N-CA-C	-5.16	101.92	109.81
1	A	639	LEU	N-CA-C	5.16	116.88	108.63
1	A	158	VAL	N-CA-C	-5.11	102.59	107.76
1	A	12	SER	N-CA-C	-5.07	100.00	110.80
1	A	227	TYR	N-CA-C	5.07	118.36	107.67
1	A	634	SER	N-CA-C	5.07	121.59	110.80
1	A	497	PRO	N-CA-C	5.05	120.55	113.53
1	A	623	LYS	N-CA-C	-5.04	105.79	111.28
1	A	350	VAL	N-CA-C	5.03	119.81	109.34
1	A	681	LEU	N-CA-C	-5.03	107.20	113.38
1	A	339	LYS	N-CA-C	-5.02	107.32	113.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	514	LYS	N-CA-C	-5.01	102.97	110.23
1	A	12	SER	O-C-N	5.00	129.25	122.59

There are no chirality outliers.

All (8) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	462	ASP	Mainchain
1	A	463	ARG	Mainchain
1	A	542	PHE	Sidechain
1	A	557	SER	Mainchain
1	A	558	ALA	Mainchain
1	A	72	TYR	Sidechain
1	A	82	TYR	Sidechain
1	A	92	TYR	Sidechain

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	5293	0	5201	809	0
2	A	2	0	0	2	0
All	All	5295	0	5201	809	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 77.

All (809) 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:457:CYS:HB2	1:A:541:ALA:HA	1.26	1.10
1:A:211:GLU:HB2	1:A:242:PHE:HB2	1.37	1.06
1:A:92:TYR:CD2	1:A:252:SER:HA	1.92	1.05
1:A:115:CYS:SG	1:A:204:GLY:HA3	1.97	1.04
1:A:415:ARG:HA	1:A:645:THR:HA	1.39	1.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:615:GLN:HB3	1:A:648:LEU:HD12	1.39	1.02
1:A:133:ARG:HH22	1:A:335:ALA:HB2	1.22	1.02
1:A:297:ASP:HB3	1:A:301:LYS:HA	1.41	1.02
1:A:12:SER:HB2	1:A:14:PRO:HD2	1.41	0.99
1:A:92:TYR:HD2	1:A:252:SER:HA	1.28	0.99
1:A:166:TYR:HB3	1:A:169:LEU:HB2	1.47	0.97
1:A:109:LEU:HD11	1:A:206:VAL:HG11	1.46	0.96
1:A:138:TRP:HB2	1:A:148:ALA:HB3	1.47	0.96
1:A:57:VAL:HG13	1:A:256:VAL:HG23	1.46	0.96
1:A:136:LEU:HD23	1:A:152:PHE:HD1	1.31	0.95
1:A:67:ALA:HB1	1:A:74:LEU:HD12	1.49	0.94
1:A:192:TYR:HB2	1:A:213:THR:HG21	1.50	0.94
1:A:552:THR:HG22	1:A:564:LEU:HD12	1.51	0.93
1:A:529:ALA:O	1:A:541:ALA:HB1	1.68	0.91
1:A:27:ARG:HG3	1:A:33:SER:HB3	1.52	0.91
1:A:113:LYS:HG2	1:A:155:ALA:HB3	1.52	0.91
1:A:519:SER:HA	1:A:524:TYR:HD2	1.37	0.90
1:A:132:LEU:O	1:A:135:PRO:HD2	1.72	0.90
1:A:433:TYR:HE2	1:A:595:HIS:NE2	1.70	0.90
1:A:433:TYR:HE2	1:A:595:HIS:HE2	1.20	0.89
1:A:122:SER:HA	1:A:126:ASN:HB2	1.53	0.88
1:A:69:ARG:HB2	1:A:71:PRO:HD2	1.52	0.88
1:A:133:ARG:NH2	1:A:335:ALA:HB2	1.90	0.87
1:A:534:ALA:O	1:A:535:GLU:HG3	1.75	0.87
1:A:469:ILE:O	1:A:473:LEU:HB2	1.75	0.86
1:A:438:VAL:HG22	1:A:571:LEU:HD22	1.58	0.86
1:A:619:GLY:HA2	1:A:632:PHE:HE2	1.41	0.86
1:A:391:ALA:HB2	1:A:599:SER:HB3	1.56	0.86
1:A:117:MET:SD	1:A:121:ARG:NH2	2.47	0.85
1:A:18:LYS:HZ2	1:A:290:GLY:N	1.74	0.85
1:A:18:LYS:NZ	1:A:290:GLY:H	1.75	0.85
1:A:126:ASN:HB3	1:A:324:TYR:HE1	1.42	0.85
1:A:457:CYS:HB2	1:A:541:ALA:CA	2.07	0.85
1:A:125:TRP:CH2	1:A:149:VAL:HG11	2.12	0.84
1:A:192:TYR:CB	1:A:213:THR:HG21	2.06	0.84
1:A:211:GLU:HB2	1:A:242:PHE:CB	2.07	0.84
1:A:118:GLY:HA2	1:A:159:PRO:HD2	1.58	0.84
1:A:126:ASN:ND2	1:A:328:LEU:HD23	1.91	0.84
1:A:148:ALA:HA	1:A:151:ARG:HG3	1.58	0.83
1:A:117:MET:SD	1:A:121:ARG:NE	2.50	0.83
1:A:348:CYS:HA	1:A:372:ALA:O	1.80	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:27:ARG:HG2	1:A:31:ALA:O	1.78	0.82
1:A:136:LEU:HD23	1:A:152:PHE:CD1	2.15	0.81
1:A:382:ALA:HA	1:A:385:LEU:HD12	1.61	0.81
1:A:494:GLY:HA2	1:A:517:PRO:HD3	1.62	0.81
1:A:276:GLU:HG3	1:A:277:LYS:H	1.46	0.81
1:A:447:THR:HG22	1:A:578:THR:OG1	1.80	0.81
1:A:277:LYS:HE3	1:A:277:LYS:HA	1.60	0.81
1:A:81:ILE:HG12	1:A:90:THR:HG22	1.61	0.80
1:A:619:GLY:HA2	1:A:632:PHE:CE2	2.16	0.80
1:A:560:TRP:CE2	1:A:561:ALA:HB2	2.16	0.80
1:A:174:LYS:HD3	1:A:189:TYR:CZ	2.17	0.80
1:A:274:ALA:HB1	1:A:288:LEU:HD22	1.63	0.80
1:A:300:PHE:CE1	1:A:307:PHE:HZ	1.99	0.80
1:A:12:SER:OG	1:A:13:LEU:N	2.14	0.80
1:A:325:LEU:HA	1:A:328:LEU:HD12	1.64	0.79
1:A:453:GLY:O	1:A:488:SER:HB3	1.83	0.79
1:A:390:ASP:O	1:A:599:SER:HB2	1.83	0.79
1:A:395:ASP:OD2	1:A:463:ARG:HD2	1.84	0.78
1:A:196:PHE:HE2	1:A:217:ASN:HB2	1.47	0.78
1:A:569:PHE:O	1:A:581:VAL:HG13	1.83	0.78
1:A:448:TRP:HZ3	1:A:589:LEU:HD22	1.48	0.78
1:A:127:ILE:HD11	1:A:250:VAL:CG1	2.14	0.78
1:A:97:VAL:HA	1:A:229:LEU:HD23	1.63	0.77
1:A:116:HIS:HD2	1:A:124:GLY:O	1.66	0.77
1:A:34:ILE:HG12	1:A:270:LEU:HD22	1.66	0.77
1:A:289:PHE:CE1	1:A:306:GLY:HA2	2.20	0.77
1:A:348:CYS:HB3	1:A:392:LEU:HD13	1.66	0.77
1:A:328:LEU:O	1:A:332:ARG:HD3	1.83	0.77
1:A:13:LEU:H	1:A:14:PRO:HD2	1.48	0.77
1:A:211:GLU:CB	1:A:242:PHE:HB2	2.13	0.77
1:A:448:TRP:CZ2	1:A:474:ILE:HD12	2.20	0.77
1:A:196:PHE:CE2	1:A:217:ASN:HB2	2.19	0.77
1:A:300:PHE:CD1	1:A:307:PHE:HZ	2.03	0.76
1:A:82:TYR:CE2	1:A:252:SER:HB3	2.20	0.76
1:A:541:ALA:O	1:A:543:VAL:HG13	1.85	0.76
1:A:127:ILE:HB	1:A:128:PRO:HD3	1.67	0.76
1:A:321:GLY:O	1:A:325:LEU:HG	1.86	0.76
1:A:92:TYR:HH	2:A:690:FE:FE	1.00	0.76
1:A:618:PHE:CD1	1:A:629:PHE:HB3	2.21	0.76
1:A:394:LEU:HD13	1:A:398:TYR:O	1.87	0.75
1:A:521:GLU:HG2	1:A:524:TYR:HB2	1.69	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:460:ALA:HB3	1:A:463:ARG:HG3	1.68	0.75
1:A:625:CYS:HA	1:A:629:PHE:O	1.86	0.75
1:A:95:VAL:HG22	1:A:210:LYS:O	1.87	0.75
1:A:456:SER:OG	1:A:490:SER:HB3	1.86	0.75
1:A:573:CYS:HB2	1:A:577:THR:HG22	1.66	0.75
1:A:587:CYS:C	1:A:588:TYR:HD1	1.94	0.75
1:A:291:SER:OG	1:A:298:LEU:HD12	1.87	0.74
1:A:381:ILE:HG21	1:A:402:ALA:HB2	1.68	0.74
1:A:381:ILE:HG21	1:A:402:ALA:CB	2.18	0.74
1:A:416:LYS:HE2	1:A:620:LYS:HD2	1.70	0.74
1:A:117:MET:HB3	1:A:191:GLY:HA2	1.68	0.74
1:A:59:LEU:O	1:A:253:HIS:HB3	1.88	0.73
1:A:26:MET:SD	1:A:29:LEU:HD12	2.29	0.73
1:A:106:LEU:HD21	1:A:131:ILE:HG23	1.71	0.73
1:A:290:GLY:HA2	1:A:302:ASP:OD1	1.87	0.73
1:A:18:LYS:NZ	1:A:290:GLY:N	2.34	0.73
1:A:400:TYR:OH	1:A:670:ALA:HA	1.88	0.73
1:A:499:SER:O	1:A:503:ALA:HB2	1.87	0.73
1:A:468:ASN:HD21	1:A:669:ILE:HG23	1.52	0.73
1:A:423:LEU:HD22	1:A:427:LEU:O	1.89	0.72
1:A:580:PRO:HB2	1:A:582:THR:OG1	1.89	0.72
1:A:230:LEU:HA	1:A:235:THR:O	1.89	0.72
1:A:280:LYS:HG2	1:A:281:ASN:ND2	2.05	0.72
1:A:357:LYS:HD3	1:A:639:LEU:HB2	1.71	0.72
1:A:113:LYS:HD3	1:A:172:LEU:HD11	1.71	0.71
1:A:349:ALA:O	1:A:373:THR:HG23	1.91	0.71
1:A:611:LEU:O	1:A:615:GLN:HG2	1.90	0.71
1:A:214:VAL:HG11	1:A:239:VAL:HG11	1.73	0.71
1:A:110:GLN:HA	1:A:152:PHE:CD2	2.25	0.71
1:A:289:PHE:CZ	1:A:306:GLY:HA2	2.25	0.71
1:A:6:VAL:HG22	1:A:266:LEU:HD23	1.73	0.71
1:A:60:ASP:HA	1:A:253:HIS:CD2	2.26	0.71
1:A:258:ARG:NH1	1:A:262:GLY:HA2	2.05	0.71
1:A:603:ARG:NH2	1:A:606:HIS:ND1	2.39	0.71
1:A:615:GLN:HB3	1:A:648:LEU:CD1	2.19	0.70
1:A:446:LEU:HD11	1:A:451:LEU:HD23	1.73	0.70
1:A:360:GLN:O	1:A:364:GLN:HG2	1.91	0.70
1:A:291:SER:OG	1:A:298:LEU:HB2	1.92	0.69
1:A:138:TRP:HD1	1:A:143:GLU:HG3	1.56	0.69
1:A:414:ASN:HD21	1:A:428:ARG:NH1	1.90	0.69
1:A:414:ASN:O	1:A:645:THR:HG23	1.92	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:662:GLY:O	1:A:666:VAL:HG23	1.93	0.69
1:A:174:LYS:HD3	1:A:189:TYR:CE1	2.28	0.69
1:A:138:TRP:CB	1:A:148:ALA:HB3	2.20	0.69
1:A:200:GLN:HA	1:A:227:TYR:OH	1.92	0.69
1:A:462:ASP:OD2	1:A:463:ARG:N	2.26	0.69
1:A:416:LYS:HD2	1:A:646:GLU:HB2	1.73	0.69
1:A:688:THR:O	1:A:689:ARG:HB2	1.92	0.69
1:A:162:ASP:OD2	1:A:164:LYS:HB2	1.93	0.69
1:A:280:LYS:NZ	1:A:281:ASN:HD21	1.91	0.69
1:A:441:LYS:HD2	1:A:570:ARG:CZ	2.23	0.69
1:A:362:SER:O	1:A:367:GLN:HA	1.93	0.68
1:A:416:LYS:HD2	1:A:646:GLU:CB	2.23	0.68
1:A:69:ARG:CB	1:A:71:PRO:HD2	2.23	0.68
1:A:607:VAL:O	1:A:611:LEU:HD22	1.92	0.68
1:A:126:ASN:HB3	1:A:324:TYR:CE1	2.28	0.68
1:A:458:HIS:HB3	1:A:466:GLY:O	1.94	0.68
1:A:1:ALA:C	1:A:3:ARG:H	2.02	0.68
1:A:220:GLU:O	1:A:223:ASP:HB2	1.93	0.68
1:A:258:ARG:HD2	1:A:262:GLY:CA	2.24	0.68
1:A:523:TYR:CE2	1:A:537:VAL:HG21	2.29	0.68
1:A:13:LEU:O	1:A:17:SER:HB2	1.94	0.67
1:A:110:GLN:HA	1:A:152:PHE:CE2	2.29	0.67
1:A:57:VAL:HG13	1:A:256:VAL:CG2	2.23	0.67
1:A:619:GLY:O	1:A:625:CYS:SG	2.52	0.67
1:A:661:LEU:HD12	1:A:669:ILE:HD11	1.75	0.67
1:A:109:LEU:HD13	1:A:208:PHE:HZ	1.59	0.67
1:A:515:CYS:HA	1:A:521:GLU:OE1	1.93	0.67
1:A:434:LEU:HB3	1:A:588:TYR:CD2	2.30	0.67
1:A:603:ARG:O	1:A:607:VAL:HG23	1.95	0.67
1:A:347:TRP:CZ3	1:A:611:LEU:HD21	2.28	0.67
1:A:611:LEU:C	1:A:613:HIS:H	2.02	0.67
1:A:456:SER:O	1:A:457:CYS:SG	2.53	0.67
1:A:438:VAL:HG22	1:A:571:LEU:CD2	2.24	0.67
1:A:448:TRP:HZ2	1:A:474:ILE:HD12	1.60	0.67
1:A:658:GLU:HG2	1:A:666:VAL:HG11	1.75	0.67
1:A:145:LEU:C	1:A:147:GLY:H	2.02	0.66
1:A:122:SER:HB2	1:A:324:TYR:HH	1.61	0.66
1:A:300:PHE:CE1	1:A:307:PHE:CZ	2.81	0.66
1:A:460:ALA:HB2	1:A:524:TYR:HE1	1.60	0.66
1:A:258:ARG:HH11	1:A:262:GLY:CA	2.07	0.66
1:A:361:TRP:HA	1:A:364:GLN:HB2	1.77	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:122:SER:HB2	1:A:324:TYR:OH	1.96	0.66
1:A:114:SER:O	1:A:115:CYS:SG	2.53	0.66
1:A:414:ASN:ND2	1:A:428:ARG:NH1	2.44	0.66
1:A:70:ASP:N	1:A:71:PRO:HD2	2.12	0.65
1:A:117:MET:SD	1:A:121:ARG:CZ	2.84	0.65
1:A:21:GLN:HB3	1:A:286:PHE:CD1	2.32	0.65
1:A:138:TRP:HB2	1:A:148:ALA:CB	2.24	0.65
1:A:52:LYS:HA	1:A:258:ARG:HH21	1.60	0.65
1:A:94:ALA:HB3	1:A:127:ILE:HG21	1.77	0.65
1:A:521:GLU:CG	1:A:524:TYR:HB2	2.25	0.65
1:A:642:ASN:C	1:A:644:ASN:N	2.54	0.65
1:A:415:ARG:CA	1:A:645:THR:HA	2.22	0.65
1:A:381:ILE:HD12	1:A:680:LEU:CD2	2.27	0.65
1:A:49:ILE:HD11	1:A:56:ALA:O	1.97	0.65
1:A:91:HIS:CD2	1:A:249:GLN:HG3	2.30	0.65
1:A:138:TRP:CD1	1:A:143:GLU:HG3	2.32	0.64
1:A:149:VAL:O	1:A:149:VAL:HG12	1.96	0.64
1:A:169:LEU:O	1:A:170:CYS:SG	2.54	0.64
1:A:288:LEU:HD23	1:A:289:PHE:CZ	2.32	0.64
1:A:624:ASN:HB3	1:A:628:LYS:HB3	1.80	0.64
1:A:407:LEU:N	1:A:407:LEU:HD23	2.12	0.64
1:A:467:TRP:C	1:A:470:PRO:HD2	2.23	0.64
1:A:218:LEU:HD22	1:A:223:ASP:HB3	1.79	0.64
1:A:325:LEU:HA	1:A:328:LEU:CD1	2.28	0.63
1:A:136:LEU:HD21	1:A:149:VAL:HG22	1.79	0.63
1:A:448:TRP:CZ3	1:A:589:LEU:HD22	2.30	0.63
1:A:76:PRO:HA	1:A:255:VAL:O	1.98	0.63
1:A:210:LYS:HD3	1:A:301:LYS:HE2	1.80	0.63
1:A:631:LEU:HD22	1:A:631:LEU:O	1.97	0.63
1:A:353:GLU:O	1:A:639:LEU:HD13	1.97	0.63
1:A:566:ARG:HG3	1:A:567:GLU:N	2.14	0.63
1:A:625:CYS:HB3	1:A:626:PRO:HD3	1.81	0.62
1:A:211:GLU:HG2	1:A:212:THR:CG2	2.30	0.62
1:A:505:CYS:SG	1:A:521:GLU:OE1	2.57	0.62
1:A:507:GLY:HA3	1:A:512:LEU:O	2.00	0.62
1:A:550:GLU:O	1:A:551:ASN:ND2	2.32	0.62
1:A:65:PHE:HB2	1:A:320:LEU:HD13	1.82	0.62
1:A:257:ALA:HB2	1:A:267:ILE:HD12	1.80	0.62
1:A:258:ARG:HH11	1:A:262:GLY:HA2	1.65	0.62
1:A:311:PRO:HB2	1:A:683:ALA:HB2	1.82	0.62
1:A:376:THR:OG1	1:A:379:ASP:HB2	1.99	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:638:ASN:ND2	1:A:643:ASP:H	1.98	0.62
1:A:257:ALA:HB2	1:A:267:ILE:CD1	2.30	0.62
1:A:680:LEU:O	1:A:684:CYS:SG	2.58	0.62
1:A:246:HIS:O	1:A:247:LEU:HD23	2.00	0.62
1:A:117:MET:HA	1:A:191:GLY:H	1.64	0.61
1:A:12:SER:HB2	1:A:14:PRO:CD	2.25	0.61
1:A:13:LEU:H	1:A:14:PRO:CD	2.13	0.61
1:A:117:MET:HE1	1:A:121:ARG:HB3	1.81	0.61
1:A:297:ASP:OD1	1:A:302:ASP:HB2	1.99	0.61
1:A:60:ASP:HA	1:A:253:HIS:CG	2.35	0.61
1:A:341:ARG:HG3	1:A:341:ARG:HH11	1.65	0.61
1:A:46:ILE:HD13	1:A:67:ALA:HB2	1.83	0.61
1:A:570:ARG:HG2	1:A:578:THR:HG22	1.82	0.61
1:A:105:LYS:HB3	1:A:234:ASN:O	1.99	0.61
1:A:439:VAL:HA	1:A:533:LEU:HD11	1.82	0.61
1:A:465:ALA:O	1:A:542:PHE:HB3	2.00	0.61
1:A:175:GLY:HA2	1:A:188:PRO:HD3	1.83	0.61
1:A:577:THR:HG23	1:A:578:THR:N	2.15	0.61
1:A:679:PRO:HA	1:A:682:GLU:HB2	1.83	0.61
1:A:133:ARG:HH22	1:A:335:ALA:CB	2.06	0.60
1:A:467:TRP:CZ3	1:A:471:MET:HG3	2.36	0.60
1:A:519:SER:CA	1:A:524:TYR:HD2	2.11	0.60
1:A:145:LEU:C	1:A:147:GLY:N	2.58	0.60
1:A:425:CYS:SG	1:A:428:ARG:NH2	2.74	0.60
1:A:135:PRO:HG2	1:A:152:PHE:CZ	2.36	0.60
1:A:175:GLY:HA2	1:A:188:PRO:CD	2.32	0.60
1:A:377:THR:O	1:A:381:ILE:HG13	2.01	0.60
1:A:392:LEU:O	1:A:597:VAL:HA	2.01	0.60
1:A:545:ASN:O	1:A:549:TRP:HD1	1.84	0.60
1:A:113:LYS:HB2	1:A:205:ASP:OD2	2.01	0.60
1:A:172:LEU:HD13	1:A:204:GLY:HA2	1.83	0.60
1:A:414:ASN:ND2	1:A:428:ARG:HH12	2.00	0.60
1:A:130:GLY:HA2	1:A:133:ARG:CB	2.32	0.60
1:A:657:TYR:CE2	1:A:658:GLU:HG3	2.37	0.60
1:A:271:LEU:HD22	1:A:307:PHE:CD2	2.35	0.60
1:A:276:GLU:CG	1:A:277:LYS:H	2.13	0.60
1:A:228:GLU:HB3	1:A:236:ARG:HB2	1.83	0.59
1:A:230:LEU:C	1:A:245:CYS:SG	2.84	0.59
1:A:570:ARG:HG2	1:A:578:THR:CG2	2.32	0.59
1:A:43:LEU:C	1:A:45:CYS:H	2.10	0.59
1:A:107:ASP:H	1:A:234:ASN:ND2	2.00	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:478:THR:HG22	1:A:480:SER:H	1.67	0.59
1:A:615:GLN:O	1:A:619:GLY:HA3	2.02	0.59
1:A:196:PHE:CZ	1:A:214:VAL:HA	2.37	0.59
1:A:418:SER:O	1:A:421:SER:HB3	2.02	0.59
1:A:55:ASP:O	1:A:267:ILE:HD11	2.03	0.59
1:A:451:LEU:C	1:A:486:PHE:HE2	2.10	0.59
1:A:379:ASP:O	1:A:382:ALA:HB3	2.02	0.59
1:A:461:VAL:HG21	1:A:492:ALA:HB1	1.84	0.59
1:A:92:TYR:CE2	1:A:252:SER:HA	2.37	0.59
1:A:364:GLN:O	1:A:618:PHE:CZ	2.55	0.59
1:A:530:PHE:CD2	1:A:560:TRP:HH2	2.21	0.59
1:A:642:ASN:C	1:A:644:ASN:H	2.09	0.59
1:A:7:ARG:HG2	1:A:35:THR:HB	1.83	0.58
1:A:126:ASN:HD22	1:A:328:LEU:HD23	1.68	0.58
1:A:467:TRP:CE3	1:A:471:MET:HG3	2.38	0.58
1:A:65:PHE:CG	1:A:328:LEU:HD22	2.38	0.58
1:A:311:PRO:HD3	1:A:686:PHE:CE1	2.38	0.58
1:A:211:GLU:HG2	1:A:212:THR:HG22	1.86	0.58
1:A:548:VAL:HG21	1:A:581:VAL:CG1	2.33	0.58
1:A:61:ASP:HA	1:A:64:VAL:HG12	1.85	0.58
1:A:192:TYR:HA	1:A:209:VAL:CG1	2.33	0.58
1:A:276:GLU:O	1:A:282:LYS:HD3	2.03	0.58
1:A:90:THR:CG2	1:A:308:LEU:HD11	2.34	0.58
1:A:126:ASN:O	1:A:327:ALA:HB1	2.02	0.58
1:A:458:HIS:CE1	1:A:542:PHE:CD2	2.91	0.58
1:A:526:TYR:CD2	1:A:544:LYS:HD3	2.39	0.58
1:A:531:ARG:HA	1:A:534:ALA:HB3	1.84	0.58
1:A:320:LEU:O	1:A:324:TYR:HB3	2.04	0.58
1:A:381:ILE:HG22	1:A:407:LEU:HD11	1.86	0.58
1:A:34:ILE:HD11	1:A:270:LEU:HD13	1.86	0.58
1:A:116:HIS:CD2	1:A:125:TRP:HE3	2.21	0.58
1:A:557:SER:OG	1:A:558:ALA:N	2.33	0.58
1:A:638:ASN:ND2	1:A:643:ASP:HB2	2.19	0.58
1:A:242:PHE:CD1	1:A:243:LYS:N	2.72	0.58
1:A:345:VAL:HG23	1:A:606:HIS:CE1	2.38	0.58
1:A:221:LYS:C	1:A:223:ASP:H	2.11	0.58
1:A:251:PRO:HB3	1:A:689:ARG:HH21	1.68	0.58
1:A:43:LEU:HD13	1:A:46:ILE:HD12	1.85	0.58
1:A:59:LEU:O	1:A:253:HIS:CB	2.51	0.57
1:A:113:LYS:HB3	1:A:155:ALA:O	2.04	0.57
1:A:65:PHE:HB2	1:A:320:LEU:CD1	2.34	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:217:ASN:N	1:A:217:ASN:HD22	2.00	0.57
1:A:548:VAL:HG21	1:A:581:VAL:HG11	1.86	0.57
1:A:91:HIS:HD2	1:A:249:GLN:HG3	1.69	0.57
1:A:434:LEU:HD22	1:A:588:TYR:CE2	2.38	0.57
1:A:654:ARG:N	1:A:655:PRO:CD	2.67	0.57
1:A:181:CYS:HA	1:A:187:GLU:HG2	1.86	0.57
1:A:560:TRP:CG	1:A:561:ALA:N	2.73	0.57
1:A:184:SER:C	1:A:186:GLN:H	2.12	0.57
1:A:300:PHE:CZ	1:A:307:PHE:CZ	2.92	0.57
1:A:322:SER:HA	1:A:325:LEU:HB2	1.86	0.57
1:A:174:LYS:C	1:A:188:PRO:HD2	2.29	0.57
1:A:614:GLN:O	1:A:631:LEU:HD12	2.05	0.57
1:A:92:TYR:HD2	1:A:252:SER:CA	2.11	0.57
1:A:351:GLY:O	1:A:355:GLN:HB3	2.04	0.57
1:A:570:ARG:CG	1:A:578:THR:HG22	2.35	0.57
1:A:56:ALA:O	1:A:57:VAL:HB	2.04	0.57
1:A:60:ASP:OD2	1:A:61:ASP:N	2.38	0.57
1:A:109:LEU:HB2	1:A:132:LEU:HD21	1.86	0.57
1:A:12:SER:CB	1:A:14:PRO:HD2	2.26	0.56
1:A:324:TYR:C	1:A:326:THR:H	2.12	0.56
1:A:454:LYS:HB3	1:A:539:ASP:OD2	2.05	0.56
1:A:130:GLY:HA2	1:A:133:ARG:HB3	1.86	0.56
1:A:192:TYR:HB3	1:A:213:THR:HG21	1.87	0.56
1:A:347:TRP:HZ3	1:A:611:LEU:HD21	1.70	0.56
1:A:82:TYR:CE2	1:A:252:SER:CB	2.88	0.56
1:A:109:LEU:HD13	1:A:208:PHE:CZ	2.40	0.56
1:A:456:SER:HB3	1:A:487:PHE:CG	2.39	0.56
1:A:493:PRO:HB3	1:A:521:GLU:HG2	1.86	0.56
1:A:631:LEU:HD22	1:A:641:PHE:CE2	2.39	0.56
1:A:79:ALA:HB2	1:A:319:TYR:HE1	1.71	0.56
1:A:113:LYS:HA	1:A:155:ALA:O	2.05	0.56
1:A:276:GLU:HG3	1:A:277:LYS:N	2.17	0.56
1:A:277:LYS:HA	1:A:277:LYS:CE	2.34	0.56
1:A:310:ILE:HG22	1:A:314:VAL:HG13	1.86	0.56
1:A:62:GLY:HA2	1:A:126:ASN:ND2	2.20	0.56
1:A:7:ARG:HG2	1:A:35:THR:CB	2.36	0.56
1:A:26:MET:HE1	1:A:278:PHE:CE2	2.40	0.56
1:A:49:ILE:HG22	1:A:74:LEU:HD22	1.88	0.56
1:A:98:VAL:CG2	1:A:206:VAL:HA	2.35	0.56
1:A:106:LEU:HD12	1:A:109:LEU:HD12	1.87	0.56
1:A:341:ARG:HG3	1:A:341:ARG:NH1	2.21	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:661:LEU:O	1:A:665:TYR:HD2	1.88	0.56
1:A:2:PRO:O	1:A:3:ARG:HD3	2.06	0.55
1:A:6:VAL:CG2	1:A:266:LEU:HD23	2.35	0.55
1:A:8:TRP:CD1	1:A:9:CYS:N	2.74	0.55
1:A:124:GLY:O	1:A:125:TRP:HB2	2.06	0.55
1:A:43:LEU:C	1:A:45:CYS:N	2.63	0.55
1:A:76:PRO:HD2	1:A:315:ASP:HA	1.88	0.55
1:A:19:CYS:O	1:A:36:CYS:SG	2.64	0.55
1:A:354:GLU:O	1:A:640:LEU:HD21	2.06	0.55
1:A:460:ALA:HB2	1:A:524:TYR:CE1	2.41	0.55
1:A:376:THR:OG1	1:A:379:ASP:N	2.39	0.55
1:A:493:PRO:HG3	1:A:521:GLU:OE1	2.06	0.55
1:A:127:ILE:HD11	1:A:250:VAL:HG13	1.86	0.55
1:A:173:CYS:HB3	1:A:187:GLU:CD	2.31	0.55
1:A:21:GLN:HB3	1:A:286:PHE:HD1	1.70	0.55
1:A:465:ALA:HB1	1:A:543:VAL:O	2.06	0.55
1:A:138:TRP:NE1	1:A:144:PRO:C	2.65	0.55
1:A:347:TRP:CH2	1:A:611:LEU:HD21	2.41	0.55
1:A:560:TRP:CE3	1:A:564:LEU:HD11	2.42	0.55
1:A:109:LEU:CD1	1:A:206:VAL:HG11	2.27	0.55
1:A:82:TYR:HB2	1:A:89:GLN:O	2.07	0.54
1:A:364:GLN:O	1:A:618:PHE:HZ	1.90	0.54
1:A:433:TYR:CE2	1:A:595:HIS:NE2	2.58	0.54
1:A:4:LYS:HE2	1:A:32:PRO:HB3	1.87	0.54
1:A:405:CYS:HA	1:A:684:CYS:HB3	1.88	0.54
1:A:565:ASN:HB3	1:A:568:ASP:CG	2.32	0.54
1:A:81:ILE:HG22	1:A:305:LEU:HB2	1.89	0.54
1:A:381:ILE:HD12	1:A:680:LEU:HD23	1.89	0.54
1:A:492:ALA:N	1:A:501:LEU:O	2.40	0.54
1:A:494:GLY:CA	1:A:517:PRO:HD3	2.36	0.54
1:A:587:CYS:C	1:A:588:TYR:CD1	2.82	0.54
1:A:588:TYR:CD1	1:A:588:TYR:N	2.76	0.54
1:A:452:LYS:HA	1:A:486:PHE:CD2	2.43	0.54
1:A:318:LEU:HG	1:A:386:LYS:HD3	1.88	0.54
1:A:43:LEU:HA	1:A:46:ILE:HB	1.89	0.54
1:A:346:VAL:HA	1:A:370:THR:O	2.06	0.54
1:A:80:GLU:HB2	1:A:253:HIS:O	2.07	0.54
1:A:179:ASN:HB3	1:A:186:GLN:HB3	1.90	0.54
1:A:419:LYS:HE2	1:A:420:HIS:HB2	1.90	0.54
1:A:83:GLY:O	1:A:305:LEU:HD11	2.07	0.54
1:A:214:VAL:HG11	1:A:239:VAL:CG1	2.38	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:70:ASP:N	1:A:71:PRO:CD	2.69	0.54
1:A:391:ALA:HB1	1:A:597:VAL:HG12	1.90	0.54
1:A:57:VAL:CG1	1:A:256:VAL:HG23	2.28	0.53
1:A:618:PHE:CG	1:A:629:PHE:HD2	2.27	0.53
1:A:23:GLN:HG3	1:A:34:ILE:O	2.08	0.53
1:A:115:CYS:SG	1:A:204:GLY:CA	2.85	0.53
1:A:218:LEU:HD13	1:A:223:ASP:O	2.08	0.53
1:A:460:ALA:CB	1:A:524:TYR:HE1	2.21	0.53
1:A:29:LEU:HD22	1:A:29:LEU:O	2.08	0.53
1:A:680:LEU:O	1:A:680:LEU:HG	2.07	0.53
1:A:385:LEU:HD23	1:A:600:ARG:HE	1.74	0.53
1:A:454:LYS:O	1:A:487:PHE:HD1	1.91	0.53
1:A:607:VAL:HG12	1:A:611:LEU:HD22	1.89	0.53
1:A:474:ILE:HG12	1:A:486:PHE:CD1	2.44	0.53
1:A:456:SER:OG	1:A:490:SER:CB	2.54	0.53
1:A:326:THR:O	1:A:330:ASN:HB2	2.09	0.53
1:A:257:ALA:CB	1:A:267:ILE:HD12	2.38	0.53
1:A:288:LEU:HB3	1:A:289:PHE:CE2	2.44	0.53
1:A:8:TRP:CD1	1:A:9:CYS:H	2.27	0.52
1:A:68:GLY:HA3	1:A:316:SER:HB3	1.91	0.52
1:A:111:GLY:HA2	1:A:152:PHE:O	2.09	0.52
1:A:10:ALA:HB3	1:A:37:VAL:O	2.09	0.52
1:A:440:LYS:HE3	1:A:533:LEU:O	2.10	0.52
1:A:447:THR:O	1:A:449:ASN:N	2.43	0.52
1:A:657:TYR:CG	1:A:658:GLU:N	2.77	0.52
1:A:15:GLU:HG3	1:A:299:LEU:HD23	1.92	0.52
1:A:395:ASP:CG	1:A:463:ARG:HD2	2.35	0.52
1:A:398:TYR:CD1	1:A:462:ASP:OD1	2.63	0.52
1:A:356:SER:O	1:A:360:GLN:HG3	2.09	0.52
1:A:657:TYR:O	1:A:661:LEU:HD23	2.09	0.52
1:A:280:LYS:HZ3	1:A:281:ASN:HD21	1.56	0.52
1:A:437:ALA:HB2	1:A:542:PHE:CE1	2.44	0.52
1:A:519:SER:N	1:A:524:TYR:CD2	2.78	0.52
1:A:396:GLY:O	1:A:397:GLY:C	2.53	0.52
1:A:331:LEU:C	1:A:333:GLU:H	2.17	0.52
1:A:455:LYS:HG3	1:A:488:SER:OG	2.10	0.52
1:A:633:LYS:NZ	1:A:643:ASP:O	2.30	0.51
1:A:49:ILE:HA	1:A:54:ALA:O	2.10	0.51
1:A:174:LYS:O	1:A:188:PRO:HG2	2.09	0.51
1:A:330:ASN:O	1:A:333:GLU:O	2.28	0.51
1:A:642:ASN:HB2	1:A:645:THR:OG1	2.11	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:334:THR:HG22	1:A:335:ALA:H	1.75	0.51
1:A:62:GLY:HA3	1:A:120:GLY:O	2.11	0.51
1:A:214:VAL:HG21	1:A:239:VAL:HB	1.92	0.51
1:A:247:LEU:O	1:A:248:ALA:HB2	2.09	0.51
1:A:411:MET:HE1	1:A:611:LEU:CB	2.40	0.51
1:A:113:LYS:CD	1:A:172:LEU:HD11	2.41	0.51
1:A:199:LEU:HD22	1:A:205:ASP:O	2.10	0.51
1:A:94:ALA:O	1:A:247:LEU:HG	2.11	0.51
1:A:113:LYS:CB	1:A:155:ALA:O	2.58	0.51
1:A:113:LYS:CA	1:A:155:ALA:O	2.58	0.51
1:A:516:VAL:HG12	1:A:518:ASN:H	1.76	0.51
1:A:4:LYS:HD2	1:A:266:LEU:HD11	1.91	0.51
1:A:81:ILE:HG13	1:A:308:LEU:HG	1.93	0.51
1:A:237:ALA:HB1	1:A:238:PRO:HD2	1.92	0.51
1:A:311:PRO:O	1:A:313:LYS:N	2.42	0.51
1:A:411:MET:HE1	1:A:611:LEU:HB2	1.93	0.51
1:A:560:TRP:CZ3	1:A:564:LEU:HD11	2.45	0.51
1:A:661:LEU:HD23	1:A:661:LEU:H	1.76	0.51
1:A:39:ARG:HG2	1:A:44:GLU:O	2.11	0.50
1:A:75:ARG:HH11	1:A:75:ARG:HB2	1.76	0.50
1:A:438:VAL:HG13	1:A:571:LEU:HD23	1.92	0.50
1:A:588:TYR:HD1	1:A:588:TYR:N	2.09	0.50
1:A:604:ALA:O	1:A:606:HIS:N	2.45	0.50
1:A:230:LEU:O	1:A:245:CYS:SG	2.69	0.50
1:A:258:ARG:HH11	1:A:262:GLY:HA3	1.76	0.50
1:A:515:CYS:O	1:A:516:VAL:HG23	2.12	0.50
1:A:661:LEU:HD23	1:A:661:LEU:N	2.26	0.50
1:A:13:LEU:HD22	1:A:16:TRP:CE3	2.46	0.50
1:A:346:VAL:HB	1:A:389:ALA:HA	1.94	0.50
1:A:551:ASN:O	1:A:561:ALA:HB1	2.11	0.50
1:A:117:MET:CA	1:A:191:GLY:H	2.24	0.50
1:A:438:VAL:HG12	1:A:569:PHE:HB3	1.92	0.50
1:A:350:VAL:HG22	1:A:376:THR:O	2.11	0.50
1:A:552:THR:CG2	1:A:564:LEU:HD12	2.33	0.50
1:A:553:ASN:ND2	1:A:566:ARG:NH1	2.60	0.50
1:A:571:LEU:HD11	1:A:584:ALA:HB2	1.94	0.50
1:A:22:TRP:CZ2	1:A:288:LEU:HD11	2.46	0.50
1:A:462:ASP:O	1:A:468:ASN:OD1	2.30	0.50
1:A:361:TRP:CZ2	1:A:369:VAL:HG11	2.47	0.50
1:A:361:TRP:CH2	1:A:369:VAL:HG11	2.47	0.50
1:A:396:GLY:O	1:A:399:ILE:N	2.39	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:560:TRP:O	1:A:564:LEU:HD21	2.12	0.49
1:A:623:LYS:H	1:A:623:LYS:CD	2.24	0.49
1:A:618:PHE:HB2	1:A:631:LEU:HB2	1.94	0.49
1:A:400:TYR:O	1:A:400:TYR:CD2	2.65	0.49
1:A:457:CYS:CB	1:A:541:ALA:HA	2.19	0.49
1:A:500:SER:HA	1:A:503:ALA:HB2	1.94	0.49
1:A:611:LEU:C	1:A:613:HIS:N	2.69	0.49
1:A:638:ASN:HD22	1:A:643:ASP:H	1.60	0.49
1:A:246:HIS:C	1:A:247:LEU:HD23	2.38	0.49
1:A:447:THR:O	1:A:448:TRP:C	2.53	0.49
1:A:589:LEU:N	1:A:589:LEU:HD23	2.28	0.49
1:A:90:THR:HG21	1:A:308:LEU:HD11	1.95	0.49
1:A:104:PHE:HD2	1:A:112:GLN:HE21	1.60	0.49
1:A:110:GLN:HA	1:A:152:PHE:HD2	1.76	0.49
1:A:211:GLU:HG2	1:A:212:THR:N	2.27	0.49
1:A:282:LYS:NZ	1:A:282:LYS:HB3	2.27	0.49
1:A:324:TYR:C	1:A:326:THR:N	2.70	0.49
1:A:560:TRP:CZ2	1:A:561:ALA:HB2	2.47	0.49
1:A:310:ILE:HG12	1:A:686:PHE:HZ	1.77	0.49
1:A:357:LYS:HD3	1:A:639:LEU:O	2.12	0.49
1:A:452:LYS:N	1:A:486:PHE:CE2	2.81	0.49
1:A:246:HIS:C	1:A:246:HIS:ND1	2.70	0.49
1:A:262:GLY:O	1:A:263:LYS:HE3	2.13	0.49
1:A:415:ARG:HA	1:A:645:THR:CA	2.27	0.49
1:A:461:VAL:CG2	1:A:492:ALA:HB1	2.43	0.49
1:A:618:PHE:O	1:A:631:LEU:HB2	2.12	0.49
1:A:439:VAL:HA	1:A:533:LEU:CD1	2.42	0.49
1:A:521:GLU:O	1:A:524:TYR:HB3	2.13	0.49
1:A:22:TRP:CH2	1:A:288:LEU:HD11	2.48	0.49
1:A:270:LEU:HD12	1:A:270:LEU:O	2.13	0.49
1:A:350:VAL:HG21	1:A:377:THR:OG1	2.13	0.49
1:A:549:TRP:CE3	1:A:566:ARG:NH2	2.80	0.49
1:A:257:ALA:O	1:A:258:ARG:O	2.31	0.48
1:A:320:LEU:O	1:A:324:TYR:HD2	1.96	0.48
1:A:552:THR:HG22	1:A:564:LEU:HB2	1.96	0.48
1:A:125:TRP:HH2	1:A:149:VAL:HG11	1.70	0.48
1:A:461:VAL:HG11	1:A:495:ALA:HB2	1.95	0.48
1:A:595:HIS:CE1	1:A:642:ASN:OD1	2.67	0.48
1:A:15:GLU:HB2	1:A:298:LEU:HB3	1.96	0.48
1:A:289:PHE:HD1	1:A:300:PHE:HB3	1.78	0.48
1:A:282:LYS:HB3	1:A:282:LYS:HZ3	1.79	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:434:LEU:CD2	1:A:591:VAL:HB	2.44	0.48
1:A:438:VAL:CG1	1:A:569:PHE:HB3	2.44	0.48
1:A:59:LEU:HD12	1:A:64:VAL:HG23	1.94	0.48
1:A:129:VAL:HG12	1:A:129:VAL:O	2.12	0.48
1:A:436:VAL:HG11	1:A:571:LEU:HD13	1.95	0.48
1:A:394:LEU:CD1	1:A:598:VAL:HG21	2.43	0.48
1:A:56:ALA:O	1:A:57:VAL:CB	2.62	0.48
1:A:500:SER:HA	1:A:503:ALA:CB	2.43	0.48
1:A:516:VAL:C	1:A:518:ASN:H	2.22	0.48
1:A:550:GLU:OE1	1:A:644:ASN:ND2	2.47	0.48
1:A:217:ASN:N	1:A:217:ASN:ND2	2.62	0.47
1:A:26:MET:SD	1:A:29:LEU:CD1	2.99	0.47
1:A:323:ARG:CZ	1:A:323:ARG:HB3	2.43	0.47
1:A:414:ASN:HD21	1:A:428:ARG:HH12	1.55	0.47
1:A:7:ARG:HB2	1:A:55:ASP:H	1.79	0.47
1:A:79:ALA:O	1:A:308:LEU:N	2.47	0.47
1:A:190:PHE:H	1:A:194:GLY:HA3	1.79	0.47
1:A:254:ALA:HB2	1:A:319:TYR:CE2	2.49	0.47
1:A:350:VAL:HG11	1:A:377:THR:OG1	2.13	0.47
1:A:440:LYS:C	1:A:442:ALA:N	2.70	0.47
1:A:625:CYS:HA	1:A:629:PHE:C	2.39	0.47
1:A:665:TYR:O	1:A:668:ALA:HB3	2.13	0.47
1:A:288:LEU:HB3	1:A:289:PHE:CD2	2.50	0.47
1:A:600:ARG:O	1:A:602:ASP:N	2.44	0.47
1:A:122:SER:OG	1:A:250:VAL:HG11	2.14	0.47
1:A:229:LEU:HG	1:A:237:ALA:O	2.14	0.47
1:A:85:GLU:C	1:A:87:SER:N	2.72	0.47
1:A:130:GLY:HA2	1:A:133:ARG:HB2	1.95	0.47
1:A:61:ASP:OD2	1:A:252:SER:O	2.32	0.47
1:A:92:TYR:CD1	1:A:250:VAL:HG23	2.50	0.47
1:A:116:HIS:CD2	1:A:124:GLY:O	2.56	0.47
1:A:149:VAL:O	1:A:149:VAL:CG1	2.63	0.47
1:A:159:PRO:HG2	1:A:190:PHE:HD1	1.79	0.47
1:A:184:SER:C	1:A:186:GLN:N	2.73	0.47
1:A:192:TYR:HA	1:A:209:VAL:HG12	1.97	0.47
1:A:334:THR:HB	1:A:337:GLU:HB2	1.95	0.47
1:A:349:ALA:HB1	1:A:354:GLU:O	2.14	0.47
1:A:414:ASN:C	1:A:414:ASN:HD22	2.23	0.47
1:A:65:PHE:CG	1:A:65:PHE:O	2.67	0.47
1:A:400:TYR:CD1	1:A:669:ILE:HD12	2.49	0.47
1:A:467:TRP:O	1:A:471:MET:N	2.44	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:469:ILE:HA	1:A:469:ILE:HD13	1.56	0.47
1:A:381:ILE:HG21	1:A:402:ALA:HB1	1.95	0.47
1:A:478:THR:HG22	1:A:480:SER:N	2.28	0.47
1:A:492:ALA:HB3	1:A:501:LEU:HB3	1.97	0.47
1:A:521:GLU:O	1:A:521:GLU:HG3	2.15	0.47
1:A:615:GLN:CB	1:A:648:LEU:HD12	2.28	0.47
1:A:618:PHE:HA	1:A:629:PHE:O	2.13	0.47
1:A:325:LEU:HD22	1:A:329:LYS:HE3	1.98	0.46
1:A:433:TYR:HH	2:A:691:FE:FE	1.30	0.46
1:A:468:ASN:O	1:A:472:GLY:HA3	2.16	0.46
1:A:81:ILE:CG1	1:A:90:THR:HG22	2.38	0.46
1:A:410:VAL:HB	1:A:411:MET:H	1.56	0.46
1:A:149:VAL:O	1:A:169:LEU:HD21	2.15	0.46
1:A:400:TYR:HB2	1:A:669:ILE:HD12	1.98	0.46
1:A:66:GLU:C	1:A:68:GLY:H	2.21	0.46
1:A:324:TYR:CD1	1:A:327:ALA:HB3	2.50	0.46
1:A:2:PRO:C	1:A:3:ARG:HD3	2.40	0.46
1:A:23:GLN:O	1:A:23:GLN:HG2	2.15	0.46
1:A:43:LEU:O	1:A:47:ARG:HB3	2.15	0.46
1:A:57:VAL:O	1:A:255:VAL:HA	2.15	0.46
1:A:58:THR:O	1:A:58:THR:HG22	2.14	0.46
1:A:382:ALA:O	1:A:385:LEU:HB2	2.16	0.46
1:A:618:PHE:CE1	1:A:629:PHE:HB3	2.50	0.46
1:A:353:GLU:OE2	1:A:520:LYS:HG3	2.15	0.46
1:A:390:ASP:O	1:A:599:SER:CB	2.59	0.46
1:A:401:THR:HA	1:A:681:LEU:HD13	1.98	0.46
1:A:111:GLY:O	1:A:154:SER:HB3	2.15	0.46
1:A:404:LYS:HB2	1:A:681:LEU:CD1	2.45	0.46
1:A:452:LYS:HA	1:A:486:PHE:CE2	2.51	0.46
1:A:624:ASN:O	1:A:629:PHE:O	2.34	0.46
1:A:654:ARG:N	1:A:655:PRO:HD2	2.30	0.46
1:A:136:LEU:HA	1:A:152:PHE:CD1	2.51	0.46
1:A:310:ILE:HD11	1:A:319:TYR:CE1	2.51	0.46
1:A:393:SER:HA	1:A:597:VAL:HA	1.97	0.46
1:A:416:LYS:HD2	1:A:646:GLU:HG3	1.98	0.46
1:A:426:VAL:C	1:A:428:ARG:H	2.24	0.46
1:A:571:LEU:CD1	1:A:584:ALA:HB2	2.46	0.46
1:A:1:ALA:C	1:A:3:ARG:N	2.71	0.46
1:A:157:CYS:SG	1:A:157:CYS:O	2.74	0.46
1:A:175:GLY:N	1:A:188:PRO:HD2	2.30	0.46
1:A:242:PHE:CD1	1:A:242:PHE:C	2.93	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:440:LYS:C	1:A:442:ALA:H	2.23	0.46
1:A:607:VAL:HG12	1:A:611:LEU:CD2	2.46	0.46
1:A:659:LYS:HE2	1:A:659:LYS:HB3	1.48	0.46
1:A:52:LYS:HG2	1:A:258:ARG:HE	1.80	0.46
1:A:211:GLU:HG2	1:A:212:THR:HG23	1.97	0.46
1:A:395:ASP:OD1	1:A:595:HIS:CD2	2.69	0.46
1:A:452:LYS:HA	1:A:486:PHE:O	2.16	0.46
1:A:231:CYS:N	1:A:245:CYS:SG	2.89	0.45
1:A:280:LYS:O	1:A:281:ASN:HB2	2.16	0.45
1:A:428:ARG:NH2	1:A:646:GLU:OE1	2.49	0.45
1:A:461:VAL:HG12	1:A:461:VAL:O	2.15	0.45
1:A:535:GLU:OE2	1:A:560:TRP:HB2	2.15	0.45
1:A:109:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HA	1.59	0.45
1:A:424:ASP:O	1:A:428:ARG:N	2.49	0.45
1:A:474:ILE:O	1:A:474:ILE:HG23	2.16	0.45
1:A:655:PRO:O	1:A:656:THR:O	2.35	0.45
1:A:136:LEU:C	1:A:138:TRP:N	2.74	0.45
1:A:310:ILE:HA	1:A:311:PRO:HD3	1.41	0.45
1:A:390:ASP:OD2	1:A:607:VAL:HG22	2.16	0.45
1:A:462:ASP:O	1:A:467:TRP:CD1	2.69	0.45
1:A:661:LEU:N	1:A:661:LEU:CD2	2.80	0.45
1:A:18:LYS:HG2	1:A:286:PHE:CE1	2.52	0.45
1:A:113:LYS:CG	1:A:155:ALA:HB3	2.35	0.45
1:A:136:LEU:HD21	1:A:149:VAL:CG2	2.45	0.45
1:A:291:SER:CB	1:A:298:LEU:HD12	2.47	0.45
1:A:550:GLU:O	1:A:551:ASN:CG	2.59	0.45
1:A:618:PHE:C	1:A:625:CYS:SG	2.99	0.45
1:A:39:ARG:CB	1:A:45:CYS:SG	3.05	0.45
1:A:114:SER:CB	1:A:156:SER:HB3	2.46	0.45
1:A:143:GLU:OE1	1:A:151:ARG:NH1	2.49	0.45
1:A:147:GLY:HA2	1:A:166:TYR:CE1	2.52	0.45
1:A:478:THR:HG22	1:A:479:GLY:N	2.30	0.45
1:A:486:PHE:CD2	1:A:486:PHE:O	2.69	0.45
1:A:357:LYS:NZ	1:A:633:LYS:O	2.50	0.45
1:A:458:HIS:NE2	1:A:471:MET:HE3	2.31	0.45
1:A:78:ALA:HB1	1:A:307:PHE:HB3	1.98	0.45
1:A:276:GLU:CG	1:A:277:LYS:N	2.79	0.45
1:A:661:LEU:HB2	1:A:666:VAL:CG2	2.46	0.45
1:A:486:PHE:O	1:A:486:PHE:HD2	1.99	0.45
1:A:519:SER:HA	1:A:524:TYR:CD2	2.30	0.45
1:A:574:LEU:CD1	1:A:589:LEU:HA	2.47	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:603:ARG:HD2	1:A:603:ARG:HA	1.61	0.45
1:A:48:ALA:O	1:A:54:ALA:HB3	2.17	0.45
1:A:263:LYS:HE3	1:A:263:LYS:HB2	1.63	0.45
1:A:686:PHE:O	1:A:686:PHE:CD2	2.70	0.45
1:A:72:TYR:O	1:A:73:LYS:HB2	2.17	0.45
1:A:189:TYR:HA	1:A:194:GLY:O	2.16	0.45
1:A:331:LEU:H	1:A:331:LEU:HG	1.52	0.45
1:A:530:PHE:CZ	1:A:548:VAL:HA	2.51	0.45
1:A:558:ALA:O	1:A:560:TRP:N	2.49	0.45
1:A:7:ARG:HA	1:A:35:THR:HB	1.98	0.44
1:A:79:ALA:HB3	1:A:308:LEU:HB2	1.98	0.44
1:A:104:PHE:CD1	1:A:104:PHE:C	2.95	0.44
1:A:159:PRO:HG2	1:A:190:PHE:HA	1.99	0.44
1:A:523:TYR:CD1	1:A:531:ARG:HB3	2.53	0.44
1:A:347:TRP:CD1	1:A:640:LEU:HD13	2.52	0.44
1:A:450:SER:O	1:A:454:LYS:HE2	2.16	0.44
1:A:575:ASP:OD1	1:A:577:THR:HB	2.18	0.44
1:A:325:LEU:O	1:A:329:LYS:HD2	2.17	0.44
1:A:415:ARG:HA	1:A:646:GLU:H	1.81	0.44
1:A:600:ARG:C	1:A:602:ASP:H	2.24	0.44
1:A:645:THR:CG2	1:A:647:CYS:O	2.65	0.44
1:A:135:PRO:HG2	1:A:152:PHE:HZ	1.81	0.44
1:A:345:VAL:CG1	1:A:346:VAL:N	2.80	0.44
1:A:116:HIS:ND1	1:A:158:VAL:HG22	2.32	0.44
1:A:172:LEU:O	1:A:189:TYR:HD2	2.01	0.44
1:A:362:SER:HA	1:A:369:VAL:O	2.17	0.44
1:A:407:LEU:N	1:A:407:LEU:CD2	2.81	0.44
1:A:415:ARG:HH12	1:A:432:GLY:C	2.26	0.44
1:A:523:TYR:CZ	1:A:537:VAL:HG21	2.52	0.44
1:A:580:PRO:C	1:A:582:THR:N	2.72	0.44
1:A:18:LYS:CE	1:A:290:GLY:H	2.29	0.44
1:A:461:VAL:O	1:A:462:ASP:HB3	2.17	0.44
1:A:79:ALA:HB2	1:A:319:TYR:CE1	2.53	0.44
1:A:93:TYR:HB2	1:A:211:GLU:OE1	2.17	0.44
1:A:407:LEU:HB3	1:A:598:VAL:HB	2.00	0.44
1:A:544:LYS:O	1:A:545:ASN:C	2.60	0.44
1:A:566:ARG:HB2	1:A:581:VAL:HG21	1.99	0.44
1:A:637:LYS:NZ	1:A:639:LEU:HD21	2.33	0.44
1:A:108:GLN:C	1:A:110:GLN:H	2.25	0.44
1:A:180:LYS:O	1:A:181:CYS:HB3	2.18	0.44
1:A:447:THR:HG22	1:A:578:THR:HG1	1.78	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:49:ILE:CG2	1:A:74:LEU:HD22	2.48	0.44
1:A:60:ASP:HB2	1:A:253:HIS:CE1	2.52	0.44
1:A:129:VAL:HG11	1:A:149:VAL:HG21	2.00	0.44
1:A:434:LEU:HD23	1:A:591:VAL:HG23	1.98	0.44
1:A:416:LYS:H	1:A:416:LYS:HG2	1.48	0.43
1:A:22:TRP:HE1	1:A:26:MET:CE	2.30	0.43
1:A:65:PHE:CB	1:A:328:LEU:HD22	2.48	0.43
1:A:217:ASN:O	1:A:219:PRO:HD3	2.18	0.43
1:A:566:ARG:C	1:A:568:ASP:H	2.26	0.43
1:A:61:ASP:OD2	1:A:251:PRO:HG2	2.19	0.43
1:A:64:VAL:HG23	1:A:256:VAL:CG1	2.48	0.43
1:A:69:ARG:HB2	1:A:71:PRO:CD	2.37	0.43
1:A:300:PHE:CE2	1:A:307:PHE:CE2	3.06	0.43
1:A:331:LEU:C	1:A:333:GLU:N	2.77	0.43
1:A:619:GLY:O	1:A:625:CYS:CB	2.66	0.43
1:A:320:LEU:HD23	1:A:320:LEU:N	2.33	0.43
1:A:405:CYS:SG	1:A:680:LEU:HG	2.58	0.43
1:A:486:PHE:CD2	1:A:486:PHE:C	2.96	0.43
1:A:551:ASN:O	1:A:561:ALA:CA	2.67	0.43
1:A:638:ASN:HD21	1:A:643:ASP:HB2	1.84	0.43
1:A:40:THR:HG23	1:A:186:GLN:HE22	1.83	0.43
1:A:111:GLY:N	1:A:152:PHE:O	2.51	0.43
1:A:211:GLU:HB2	1:A:242:PHE:CG	2.53	0.43
1:A:238:PRO:C	1:A:240:ASP:H	2.27	0.43
1:A:258:ARG:NH1	1:A:262:GLY:CA	2.72	0.43
1:A:534:ALA:CB	1:A:560:TRP:CZ3	3.02	0.43
1:A:610:VAL:O	1:A:613:HIS:HB3	2.18	0.43
1:A:139:THR:O	1:A:143:GLU:HG2	2.19	0.43
1:A:181:CYS:SG	1:A:181:CYS:O	2.76	0.43
1:A:619:GLY:C	1:A:625:CYS:SG	3.01	0.43
1:A:642:ASN:O	1:A:644:ASN:N	2.51	0.43
1:A:119:LEU:HD12	1:A:119:LEU:HA	1.78	0.43
1:A:172:LEU:O	1:A:189:TYR:CD2	2.71	0.43
1:A:320:LEU:H	1:A:320:LEU:HG	1.47	0.43
1:A:350:VAL:HG12	1:A:350:VAL:O	2.18	0.43
1:A:456:SER:C	1:A:457:CYS:SG	3.02	0.43
1:A:469:ILE:N	1:A:470:PRO:CD	2.82	0.43
1:A:174:LYS:N	1:A:187:GLU:OE2	2.52	0.43
1:A:548:VAL:HG12	1:A:549:TRP:CD1	2.54	0.43
1:A:77:VAL:HG21	1:A:267:ILE:HG21	2.00	0.43
1:A:127:ILE:HG23	1:A:127:ILE:HD12	1.67	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:382:ALA:HA	1:A:385:LEU:CD1	2.41	0.43
1:A:127:ILE:HD11	1:A:250:VAL:HG11	1.96	0.42
1:A:334:THR:HG22	1:A:335:ALA:N	2.33	0.42
1:A:348:CYS:HB3	1:A:392:LEU:CD1	2.41	0.42
1:A:22:TRP:CZ2	1:A:288:LEU:CD1	3.01	0.42
1:A:98:VAL:HG22	1:A:206:VAL:HA	1.99	0.42
1:A:117:MET:HB3	1:A:191:GLY:CA	2.42	0.42
1:A:138:TRP:CD1	1:A:144:PRO:O	2.73	0.42
1:A:196:PHE:CE2	1:A:214:VAL:HA	2.54	0.42
1:A:394:LEU:HD12	1:A:598:VAL:HG21	2.02	0.42
1:A:440:LYS:NZ	1:A:536:ASP:CG	2.78	0.42
1:A:637:LYS:HZ2	1:A:639:LEU:HD21	1.84	0.42
1:A:122:SER:OG	1:A:127:ILE:HG12	2.20	0.42
1:A:350:VAL:CG2	1:A:376:THR:O	2.67	0.42
1:A:416:LYS:HD2	1:A:646:GLU:CG	2.50	0.42
1:A:468:ASN:ND2	1:A:669:ILE:HG23	2.26	0.42
1:A:4:LYS:NZ	1:A:4:LYS:HB3	2.35	0.42
1:A:8:TRP:HD1	1:A:9:CYS:N	2.18	0.42
1:A:95:VAL:HG12	1:A:246:HIS:HA	2.01	0.42
1:A:251:PRO:HG3	1:A:320:LEU:HA	2.02	0.42
1:A:348:CYS:HA	1:A:372:ALA:HB3	2.02	0.42
1:A:524:TYR:O	1:A:528:GLY:HA3	2.20	0.42
1:A:531:ARG:O	1:A:534:ALA:N	2.52	0.42
1:A:18:LYS:HZ1	1:A:288:LEU:C	2.28	0.42
1:A:75:ARG:NH2	1:A:77:VAL:HA	2.34	0.42
1:A:224:ARG:HB3	1:A:239:VAL:CG2	2.50	0.42
1:A:382:ALA:CA	1:A:385:LEU:HD12	2.41	0.42
1:A:391:ALA:O	1:A:392:LEU:HB3	2.20	0.42
1:A:410:VAL:HG23	1:A:597:VAL:O	2.20	0.42
1:A:452:LYS:N	1:A:486:PHE:HE2	2.17	0.42
1:A:26:MET:HE1	1:A:278:PHE:CD2	2.55	0.42
1:A:515:CYS:HA	1:A:521:GLU:CD	2.44	0.42
1:A:98:VAL:O	1:A:228:GLU:O	2.37	0.42
1:A:530:PHE:O	1:A:530:PHE:CD1	2.73	0.42
1:A:10:ALA:HB1	1:A:16:TRP:HB2	2.01	0.41
1:A:452:LYS:CA	1:A:486:PHE:CE2	3.03	0.41
1:A:552:THR:HG22	1:A:564:LEU:CD1	2.35	0.41
1:A:46:ILE:HD11	1:A:59:LEU:CD2	2.50	0.41
1:A:631:LEU:CD2	1:A:641:PHE:CE2	3.03	0.41
1:A:71:PRO:HB2	1:A:72:TYR:CZ	2.55	0.41
1:A:574:LEU:HD11	1:A:589:LEU:HA	2.01	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:618:PHE:O	1:A:631:LEU:CB	2.68	0.41
1:A:209:VAL:O	1:A:210:LYS:O	2.39	0.41
1:A:523:TYR:HD1	1:A:531:ARG:HB3	1.84	0.41
1:A:530:PHE:CG	1:A:547:THR:HG23	2.55	0.41
1:A:85:GLU:C	1:A:87:SER:H	2.27	0.41
1:A:111:GLY:CA	1:A:152:PHE:O	2.68	0.41
1:A:216:GLU:OE1	1:A:301:LYS:NZ	2.54	0.41
1:A:530:PHE:HB2	1:A:547:THR:HG21	2.03	0.41
1:A:125:TRP:CH2	1:A:149:VAL:CG1	2.96	0.41
1:A:161:VAL:CG1	1:A:166:TYR:HD2	2.33	0.41
1:A:189:TYR:HA	1:A:194:GLY:CA	2.50	0.41
1:A:530:PHE:HE2	1:A:551:ASN:HB2	1.85	0.41
1:A:27:ARG:CG	1:A:33:SER:HB3	2.37	0.41
1:A:347:TRP:O	1:A:349:ALA:N	2.53	0.41
1:A:404:LYS:HB2	1:A:681:LEU:HD11	2.03	0.41
1:A:505:CYS:HB3	1:A:521:GLU:OE2	2.21	0.41
1:A:579:LYS:HB3	1:A:583:GLU:HB3	2.03	0.41
1:A:68:GLY:HA3	1:A:316:SER:CB	2.50	0.41
1:A:116:HIS:CD2	1:A:125:TRP:CE3	3.06	0.41
1:A:342:CYS:O	1:A:342:CYS:SG	2.79	0.41
1:A:416:LYS:CD	1:A:646:GLU:HB2	2.48	0.41
1:A:530:PHE:HB2	1:A:547:THR:CG2	2.51	0.41
1:A:84:THR:HG22	1:A:85:GLU:H	1.86	0.41
1:A:104:PHE:C	1:A:104:PHE:HD1	2.29	0.41
1:A:246:HIS:C	1:A:246:HIS:HD1	2.28	0.41
1:A:258:ARG:HD2	1:A:262:GLY:HA2	2.03	0.41
1:A:313:LYS:NZ	1:A:379:ASP:OD1	2.54	0.41
1:A:346:VAL:CG1	1:A:372:ALA:HB2	2.51	0.41
1:A:354:GLU:O	1:A:640:LEU:CD2	2.68	0.41
1:A:370:THR:HG22	1:A:371:CYS:H	1.86	0.41
1:A:549:TRP:HZ2	1:A:582:THR:HA	1.85	0.41
1:A:652:GLY:O	1:A:653:GLY:C	2.63	0.41
1:A:4:LYS:HB3	1:A:4:LYS:HZ3	1.85	0.41
1:A:29:LEU:HG	1:A:277:LYS:HG2	2.03	0.41
1:A:72:TYR:O	1:A:73:LYS:CB	2.69	0.41
1:A:78:ALA:CB	1:A:308:LEU:O	2.69	0.41
1:A:310:ILE:HG12	1:A:686:PHE:CZ	2.55	0.41
1:A:345:VAL:HG12	1:A:346:VAL:N	2.35	0.41
1:A:430:THR:CG2	1:A:594:ASN:HD21	2.33	0.41
1:A:448:TRP:CH2	1:A:473:LEU:HD13	2.56	0.41
1:A:107:ASP:N	1:A:234:ASN:HD21	2.19	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:117:MET:O	1:A:159:PRO:CD	2.68	0.40
1:A:455:LYS:HE2	1:A:455:LYS:HB2	1.83	0.40
1:A:456:SER:HB3	1:A:487:PHE:CD1	2.56	0.40
1:A:459:THR:HG21	1:A:526:TYR:HD1	1.86	0.40
1:A:570:ARG:CG	1:A:578:THR:CG2	2.96	0.40
1:A:618:PHE:HB3	1:A:629:PHE:O	2.21	0.40
1:A:46:ILE:HG23	1:A:74:LEU:HD11	2.04	0.40
1:A:237:ALA:HB1	1:A:241:ALA:CB	2.52	0.40
1:A:92:TYR:CD1	1:A:250:VAL:CG2	3.05	0.40
1:A:114:SER:C	1:A:115:CYS:SG	3.05	0.40
1:A:125:TRP:HH2	1:A:149:VAL:CG1	2.32	0.40
1:A:448:TRP:O	1:A:448:TRP:CD1	2.75	0.40
1:A:457:CYS:HB2	1:A:541:ALA:CB	2.52	0.40
1:A:666:VAL:O	1:A:666:VAL:HG12	2.21	0.40
1:A:22:TRP:NE1	1:A:26:MET:CE	2.84	0.40
1:A:28:LYS:HE3	1:A:28:LYS:HB3	1.54	0.40
1:A:192:TYR:HA	1:A:209:VAL:HG11	2.03	0.40
1:A:348:CYS:CB	1:A:392:LEU:HD13	2.42	0.40
1:A:364:GLN:HB3	1:A:618:PHE:CZ	2.56	0.40
1:A:369:VAL:O	1:A:369:VAL:HG12	2.20	0.40
1:A:391:ALA:HA	1:A:598:VAL:O	2.21	0.40
1:A:399:ILE:HD13	1:A:399:ILE:HG21	1.73	0.40
1:A:492:ALA:O	1:A:515:CYS:SG	2.79	0.40
1:A:494:GLY:HA2	1:A:517:PRO:CD	2.43	0.40
1:A:661:LEU:HB2	1:A:666:VAL:HG23	2.04	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%)	473 (69%)	143 (21%)	71 (10%)	0 7

All (71) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	12	SER
1	A	13	LEU
1	A	57	VAL
1	A	73	LYS
1	A	97	VAL
1	A	125	TRP
1	A	170	CYS
1	A	210	LYS
1	A	226	GLN
1	A	258	ARG
1	A	312	SER
1	A	334	THR
1	A	359	GLN
1	A	396	GLY
1	A	423	LEU
1	A	448	TRP
1	A	459	THR
1	A	462	ASP
1	A	478	THR
1	A	519	SER
1	A	551	ASN
1	A	604	ALA
1	A	605	ALA
1	A	142	ALA
1	A	177	GLY
1	A	348	CYS
1	A	430	THR
1	A	463	ARG
1	A	464	THR
1	A	467	TRP
1	A	482	ALA
1	A	512	LEU
1	A	557	SER
1	A	601	SER
1	A	640	LEU
1	A	653	GLY
1	A	656	THR
1	A	100	LYS
1	A	137	SER
1	A	203	ALA
1	A	205	ASP
1	A	316	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	330	ASN
1	A	350	VAL
1	A	427	LEU
1	A	470	PRO
1	A	508	ASP
1	A	515	CYS
1	A	588	TYR
1	A	655	PRO
1	A	32	PRO
1	A	40	THR
1	A	229	LEU
1	A	252	SER
1	A	261	ASP
1	A	386	LYS
1	A	409	PRO
1	A	422	SER
1	A	445	GLY
1	A	536	ASP
1	A	545	ASN
1	A	594	ASN
1	A	625	CYS
1	A	133	ARG
1	A	248	ALA
1	A	392	LEU
1	A	144	PRO
1	A	194	GLY
1	A	292	PRO
1	A	95	VAL
1	A	410	VAL

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	568/568 (100%)	434 (76%)	134 (24%)	1 5

All (134) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	4	LYS
1	A	5	ASN
1	A	9	CYS
1	A	13	LEU
1	A	17	SER
1	A	28	LYS
1	A	29	LEU
1	A	35	THR
1	A	39	ARG
1	A	46	ILE
1	A	49	ILE
1	A	58	THR
1	A	66	GLU
1	A	74	LEU
1	A	75	ARG
1	A	81	ILE
1	A	85	GLU
1	A	87	SER
1	A	104	PHE
1	A	114	SER
1	A	131	ILE
1	A	133	ARG
1	A	137	SER
1	A	138	TRP
1	A	139	THR
1	A	140	GLU
1	A	146	GLN
1	A	156	SER
1	A	171	GLN
1	A	183	CYS
1	A	185	SER
1	A	193	SER
1	A	206	VAL
1	A	212	THR
1	A	213	THR
1	A	214	VAL
1	A	220	GLU
1	A	221	LYS
1	A	225	ASP
1	A	226	GLN
1	A	236	ARG
1	A	245	CYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	246	HIS
1	A	252	SER
1	A	259	SER
1	A	261	ASP
1	A	263	LYS
1	A	266	LEU
1	A	270	LEU
1	A	277	LYS
1	A	282	LYS
1	A	287	GLN
1	A	297	ASP
1	A	305	LEU
1	A	309	ARG
1	A	314	VAL
1	A	316	SER
1	A	320	LEU
1	A	326	THR
1	A	328	LEU
1	A	332	ARG
1	A	336	GLU
1	A	348	CYS
1	A	355	GLN
1	A	370	THR
1	A	371	CYS
1	A	375	SER
1	A	378	ASP
1	A	379	ASP
1	A	380	CYS
1	A	381	ILE
1	A	401	THR
1	A	407	LEU
1	A	408	VAL
1	A	409	PRO
1	A	410	VAL
1	A	414	ASN
1	A	416	LYS
1	A	420	HIS
1	A	426	VAL
1	A	431	GLU
1	A	436	VAL
1	A	443	ASN
1	A	470	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	473	LEU
1	A	474	ILE
1	A	480	SER
1	A	496	ASP
1	A	510	GLN
1	A	516	VAL
1	A	519	SER
1	A	521	GLU
1	A	527	THR
1	A	533	LEU
1	A	536	ASP
1	A	546	ASP
1	A	547	THR
1	A	553	ASN
1	A	557	SER
1	A	559	ASP
1	A	563	ASN
1	A	567	GLU
1	A	571	LEU
1	A	577	THR
1	A	581	VAL
1	A	583	GLU
1	A	588	TYR
1	A	589	LEU
1	A	591	VAL
1	A	594	ASN
1	A	595	HIS
1	A	601	SER
1	A	607	VAL
1	A	609	GLN
1	A	611	LEU
1	A	615	GLN
1	A	620	LYS
1	A	624	ASN
1	A	630	CYS
1	A	631	LEU
1	A	633	LYS
1	A	634	SER
1	A	635	GLU
1	A	636	THR
1	A	639	LEU
1	A	640	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	650	LYS
1	A	656	THR
1	A	661	LEU
1	A	663	THR
1	A	664	GLU
1	A	669	ILE
1	A	672	LEU
1	A	689	ARG

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

Mol	Chain	Res	Type
1	A	21	GLN
1	A	91	HIS
1	A	112	GLN
1	A	116	HIS
1	A	126	ASN
1	A	171	GLN
1	A	186	GLN
1	A	217	ASN
1	A	234	ASN
1	A	281	ASN
1	A	364	GLN
1	A	414	ASN
1	A	551	ASN
1	A	553	ASN
1	A	563	ASN
1	A	565	ASN
1	A	585	GLN
1	A	638	ASN

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 [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 2 ligands modelled in this entry, 2 are monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data

6.1 Protein, DNA and RNA chains

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.2 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.3 Carbohydrates

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.4 Ligands

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.5 Other polymers

EDS was not executed - this section is therefore empty.