



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 05:43 AM UTC

PDB ID : 5L5M / pdb_00005l5m
Title : Plexin A4 full extracellular region, domains 1 to 7 modeled, data to 8 angstrom, spacegroup P4(3)2(1)2
Authors : Janssen, B.J.C.; Kong, Y.; Malinauskas, T.; Vangoor, V.R.; Coles, C.H.; Kaufmann, R.; Ni, T.; Gilbert, R.J.C.; Padilla-Parra, S.; Pasterkamp, R.J.; Jones, E.Y.
Deposited on : 2016-05-28
Resolution : 8.00 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

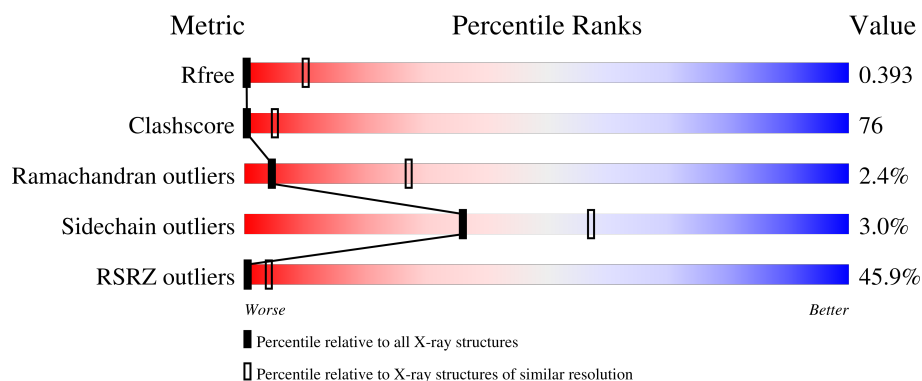
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 8.00 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	1168 (11.50-4.00)
Clashscore	190562	1001 (11.50-4.06)
Ramachandran outliers	187476	1055 (11.50-4.00)
Sidechain outliers	187428	1018 (11.50-4.00)
RSRZ outliers	180081	1162 (11.50-4.00)

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	1207	

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 7189 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 Plexin-A4.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	915	7189	4533	1239	1357	60	0	0	0

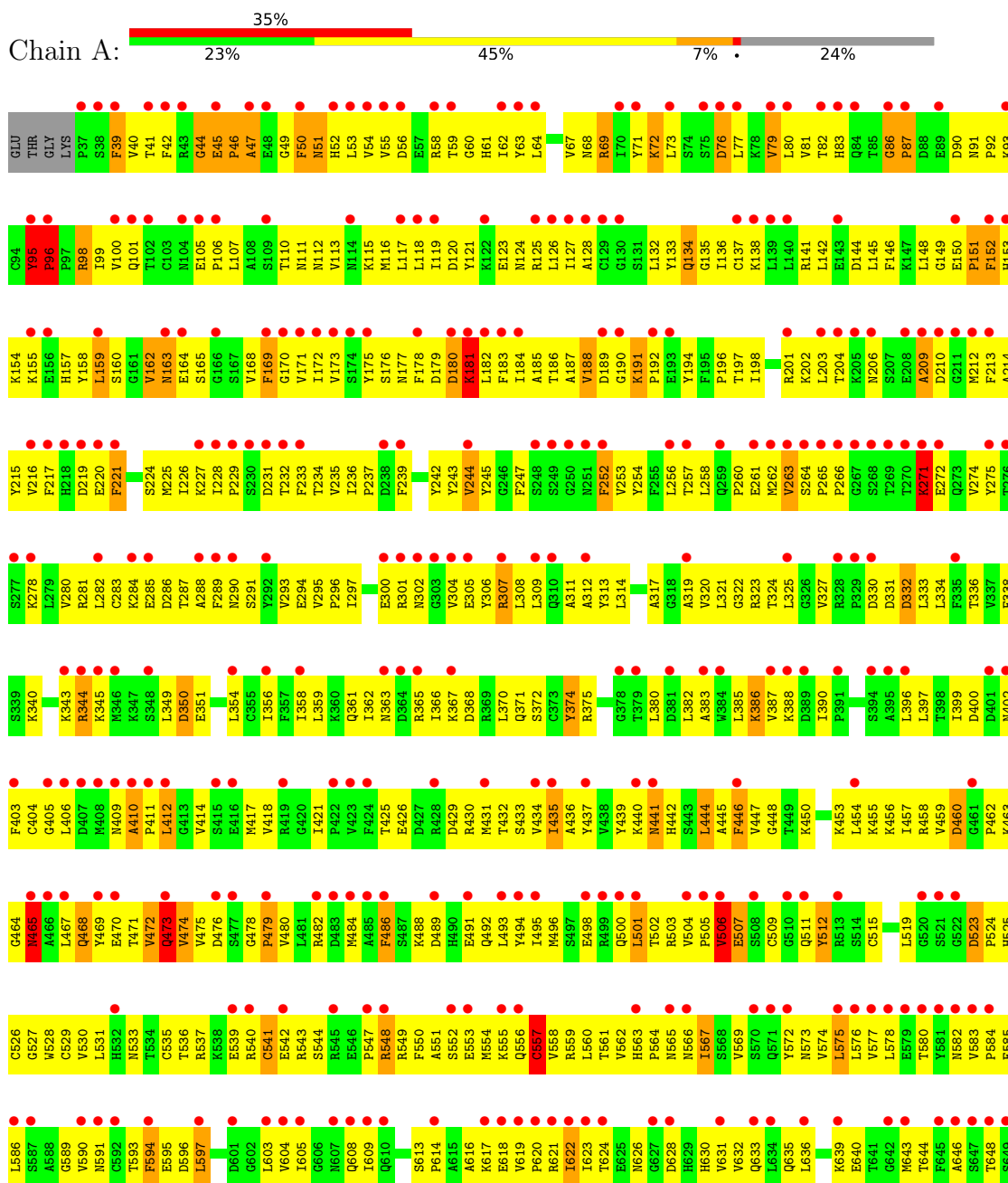
There are 13 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	33	GLU	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	34	THR	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	35	GLY	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1230	GLY	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1231	ARG	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1232	THR	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1233	LYS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1234	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1235	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1236	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1237	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1238	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1239	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2

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: Plexin-A4



PRO	ASN	PHE	ASN	ASP	GLY	L903	S842	T781	V715	F650
ASN	ILE	GLU	ILE	ARG	PRO	V904	R843	V782	V716	V651
ILE	CYS	PHE	CYS	ALA	MET	D905	W844	W783	F717	F652
GLY	GLU	SER	GLU	ARG	SER	G906	L845	W784	Y653	Y654
ARG	LEU	PRO	VAL	ILE	GLY	Y907	E846	N785	I719	N654
HIS	ASN	SER	LEU	GLN	THR	I908	L847	G786	T720	G655
LYS	ALA	GLY	ASN	ASP	THR	P909	S848	H787	L721	S656
VAL	ALA	ILE	ALA	LEU	GLN	A910	G849	F788	K722	V657
GLY	THR	LEU	THR	LEU	VAL	E911	A850	N789	A723	H658
MET	THR	LEU	THR	VAL	THR	Q912	N851	I790	K724	N659
ALA	MET	GLU	ILE	PHE	ILE	I913	S852	D791	N725	
ARG	THR	LEU	THR	GLN	THR	V914	K853	N792	L726	L662
VAL	CYS	LYS	GLY	TYR	GLY	C915	C854	P793	P727	S663
PRO	GLN	PRO	THR	VAL	THR	E916	T855	A794	Q728	G664
GLY	ALA	GLY	ASN	GLU	ASN	M917	N856	Q730	P729	V665
MET	PRO	THR	LEU	ASP	LEU	G918	P857	Q731	Q730	E666
GLU	ALA	PRO	ASN	PRO	ASN	E919	R858	S731	S667	
TYR	ILE	THR	ALA	THR	ALA	A920	E861	G732	P668	Y669
SER	ALA	ILE	GLY	ILE	GLY	K921	L862	Q733	Y670	
PRO	LEU	LEU	SER	VAL	SER	P922	I863	L800	C671	
GLY	GLY	LEU	ARG	ARG	ASN	S923	P864	Y801	G674	
MET	PRO	LYS	ILE	ILE	VAL	Q924	V865	C802	H672	
VAL	VAL	GLY	ASP	GLU	VAL	H925	T866	C803	W673	
TYR	ASN	ASN	HIS	PRO	VAL	A926	G867	G804	G675	
ILE	LEU	LEU	GLN	GLU	MET	G927	P868	A805	Y676	
ALA	ILE	ILE	SER	TRP	PHE	F928	R869	N806		
PRO	ASP	PRO	ASP	SER	GLY	V929	R869	R807		
GLY	LEU	VAL	LEU	ILE	SER	E930	E870	E808	V679	
ARG	THR	VAL	THR	VAL	GLN	I931	G871	S809	C680	
THR	ALA	ALA	GLU	SER	PRO	C932	G872	C810	T681	
LYS	GLY	GLY	ARG	GLY	CYS	V933	T873	G811	H682	
HIS	ASN	GLY	PRO	ASN	LEU	A934	K874	L812	D683	
HIS	ASN	VAL	GLU	THR	PHE	V935	V875	C813	T686	
HIS	LYS	VAL	GLU	PRO	HIS	C936	T876	L814		
HIS	LEU	LEU	GLY	ILE	ARG	R937	I877	K815		
HIS	ASN	ASN	GLY	ALA	ARG	P938	R878	A816	F689	
HIS	TYR	THR	ILE	VAL	SER	E939	G879	R753	G690	
	THR	THR	LEU	TRP	PRO	F940	E880	F754	E691	
	VAL	VAL	ASP	GLY	SER	M941	N881	N755		
	LEU	THR	THR	THR	TYR	A942	L882	S756	V694	
	ASN	LEU	ILE	HIS	ILE	R943	G883	C922	K695	
	VAL	VAL	VAL	LEU	ILE	S944	L884	G823	L696	
	GLY	GLY	GLN	ASP	CYS	Q945	E885	W824	P697	
	LYS	LYS	SER	LEU	ASN	Q946	F886	C825	E698	
	PRO	PRO	LEU	ILE	THR	L947	R887	Q826	D699	
	CYS	THR	LEU	GLN	THR	Y948	D888	S827	C700	
	THR	THR	ILE	ASN	SER	Y949	I889	P828	P701	
	VAL	VAL	ASN	PRO	SER	F950	A890	G829	Q702	
	VAL	VAL	ASN	GLN	GLU	M951	S891	Q830	L703	
	THR	THR	LYS	ILE	THR	THR	H892	C831	L704	
	SER	SER	THR	ARG	VAL	LEU	V893	T832	R785	
	ASP	ASP	ASN	ALA	LEU	THR	K894	L833	V706	
	VAL	VAL	PHE	LYS	ASP	LEU	V895	R834	D707	
	GLN	GLN	THR	HIS	THR	ALA	Q835	I773	K708	
	TYR	TYR	GLY	LYS	LYS	ASP	G897	W774	I709	
	PRO	PRO	GLY	VAL	VAL	LEU	V898	C837	L710	
	ASN	LEU	LYS	THR	THR	LYS	E899	P838	V711	
	CYS	CYS	ASN	GLU	VAL	PRO	C900	A839	P712	
	GLU	GLU	PRO	HIS	GLN	ASN	S901	H840	V713	
	SER	SER	SER	ILE	VAL	ARG	P902	E841	E714	

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 43 21 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	271.48Å 271.48Å 251.25Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	72.13 – 8.00 72.13 – 8.00	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.4 (72.13-8.00) 99.1 (72.13-8.00)	Depositor EDS
R_{merge}	0.13	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	1.60 (at 8.39Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX 1.8.2_1309	Depositor
R, R_{free}	0.373 , 0.395 0.380 , 0.393	Depositor DCC
R_{free} test set	496 reflections (4.77%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	530.0	Xtriage
Anisotropy	0.475	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.24 , 274.2	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.39$, $\langle L^2 \rangle = 0.21$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.73	EDS
Total number of atoms	7189	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	250.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 6.43% 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	1.36	10/7346 (0.1%)	2.05	132/9949 (1.3%)

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

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	7

All (10) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	557	CYS	C-N	29.07	1.73	1.33
1	A	700	CYS	C-N	-10.61	1.09	1.33
1	A	49	GLY	C-N	9.87	1.45	1.33
1	A	180	ASP	C-N	7.53	1.44	1.33
1	A	506	VAL	C-N	-7.38	1.23	1.33
1	A	49	GLY	CA-C	7.17	1.61	1.51
1	A	50	PHE	N-CA	6.91	1.53	1.46
1	A	46	PRO	N-CA	-6.42	1.41	1.47
1	A	711	VAL	CA-CB	-5.26	1.50	1.54
1	A	465	ASN	C-N	5.17	1.41	1.33

All (132) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	854	CYS	O-C-N	-59.41	78.66	122.03
1	A	506	VAL	O-C-N	-45.32	65.92	122.57
1	A	557	CYS	CA-C-N	-44.76	41.40	121.97
1	A	557	CYS	C-N-CA	-44.76	41.40	121.97
1	A	747	GLN	CG-CD-OE1	-38.43	43.94	120.80
1	A	700	CYS	O-C-N	-31.70	84.87	121.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	854	CYS	CA-C-N	-24.32	71.57	122.41
1	A	854	CYS	C-N-CA	-24.32	71.57	122.41
1	A	802	LYS	O-C-N	-19.00	98.31	123.01
1	A	747	GLN	OE1-CD-NE2	15.12	137.72	122.60
1	A	747	GLN	CG-CD-NE2	-15.08	93.78	116.40
1	A	700	CYS	CA-C-N	14.49	137.96	119.84
1	A	700	CYS	C-N-CA	14.49	137.96	119.84
1	A	557	CYS	O-C-N	-14.23	103.67	122.59
1	A	700	CYS	C-N-CD	-14.00	67.61	125.00
1	A	843	ARG	CA-C-N	11.62	141.05	122.81
1	A	843	ARG	C-N-CA	11.62	141.05	122.81
1	A	892	HIS	CA-CB-CG	11.00	124.80	113.80
1	A	479	PRO	N-CA-C	10.11	133.30	112.47
1	A	478	GLY	CA-C-N	10.08	132.44	119.84
1	A	478	GLY	C-N-CA	10.08	132.44	119.84
1	A	473	GLN	CA-C-N	-9.44	104.98	121.97
1	A	473	GLN	C-N-CA	-9.44	104.98	121.97
1	A	478	GLY	CA-C-O	-9.34	108.17	121.52
1	A	221	PHE	CA-CB-CG	-9.21	104.58	113.80
1	A	940	PHE	CA-CB-CG	-9.12	104.68	113.80
1	A	594	PHE	CA-CB-CG	-8.87	104.93	113.80
1	A	506	VAL	CA-C-N	8.64	138.04	121.54
1	A	506	VAL	C-N-CA	8.64	138.04	121.54
1	A	446	PHE	CA-CB-CG	-8.36	105.44	113.80
1	A	45	GLU	N-CA-C	-7.98	101.90	112.75
1	A	754	PHE	CA-CB-CG	-7.94	105.86	113.80
1	A	46	PRO	N-CA-CB	7.81	107.29	102.92
1	A	330	ASP	CA-CB-CG	-7.71	104.89	112.60
1	A	802	LYS	CA-C-N	7.70	136.25	121.54
1	A	802	LYS	C-N-CA	7.70	136.25	121.54
1	A	473	GLN	N-CA-C	-7.49	103.40	112.54
1	A	844	TRP	N-CA-C	-7.45	97.81	109.72
1	A	45	GLU	CA-C-N	-7.36	111.22	120.79
1	A	45	GLU	C-N-CA	-7.36	111.22	120.79
1	A	188	VAL	N-CA-C	7.17	117.98	111.81
1	A	152	PHE	CA-CB-CG	-7.02	106.78	113.80
1	A	169	PHE	CA-CB-CG	-6.85	106.95	113.80
1	A	46	PRO	CB-CA-C	6.80	117.58	111.87
1	A	46	PRO	N-CA-C	-6.76	99.52	110.74
1	A	486	PHE	CA-CB-CG	-6.67	107.13	113.80
1	A	47	ALA	N-CA-C	-6.66	104.26	112.38
1	A	363	ASN	CA-CB-CG	-6.63	105.97	112.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	596	ASP	CA-CB-CG	-6.59	106.01	112.60
1	A	49	GLY	CA-C-N	6.42	135.68	121.81
1	A	49	GLY	C-N-CA	6.42	135.68	121.81
1	A	95	TYR	N-CA-C	-6.42	102.61	110.31
1	A	919	GLU	CA-C-N	6.41	134.75	121.94
1	A	919	GLU	C-N-CA	6.41	134.75	121.94
1	A	134	GLN	N-CA-C	-6.36	104.05	113.40
1	A	79	VAL	CB-CA-C	-6.36	104.36	111.23
1	A	39	PHE	CA-CB-CG	-6.35	107.45	113.80
1	A	741	ASN	CA-CB-CG	-6.34	106.26	112.60
1	A	476	ASP	CA-C-N	-6.33	113.78	123.14
1	A	476	ASP	C-N-CA	-6.33	113.78	123.14
1	A	854	CYS	CB-CA-C	-6.27	107.38	116.54
1	A	928	PHE	CA-CB-CG	-6.25	107.55	113.80
1	A	183	PHE	CA-CB-CG	-6.18	107.62	113.80
1	A	441	ASN	CA-CB-CG	-6.15	106.45	112.60
1	A	622	ILE	CB-CA-C	-6.14	103.98	112.02
1	A	307	ARG	N-CA-C	6.04	120.64	113.28
1	A	512	TYR	CA-C-N	6.02	128.84	120.29
1	A	512	TYR	C-N-CA	6.02	128.84	120.29
1	A	573	ASN	CA-CB-CG	-6.02	106.58	112.60
1	A	51	ASN	CA-CB-CG	-5.99	106.61	112.60
1	A	209	ALA	CA-C-N	5.97	129.38	120.31
1	A	209	ALA	C-N-CA	5.97	129.38	120.31
1	A	924	GLN	N-CA-C	5.92	117.73	111.28
1	A	803	CYS	CA-C-N	5.91	132.99	121.41
1	A	803	CYS	C-N-CA	5.91	132.99	121.41
1	A	86	GLY	O-C-N	5.88	127.64	121.77
1	A	290	ASN	CA-CB-CG	-5.83	106.77	112.60
1	A	805	ALA	CA-C-N	5.81	130.55	120.68
1	A	805	ALA	C-N-CA	5.81	130.55	120.68
1	A	60	GLY	N-CA-C	-5.77	107.36	115.32
1	A	409	ASN	CA-C-N	5.77	135.88	121.80
1	A	409	ASN	C-N-CA	5.77	135.88	121.80
1	A	331	ASP	CA-CB-CG	-5.75	106.85	112.60
1	A	805	ALA	N-CA-C	-5.73	104.65	111.69
1	A	676	TYR	CA-CB-CG	-5.67	103.69	113.90
1	A	460	ASP	CA-CB-CG	-5.64	106.95	112.60
1	A	829	GLY	N-CA-C	-5.64	106.40	115.08
1	A	699	ASP	CA-CB-CG	-5.63	106.97	112.60
1	A	153	HIS	N-CA-C	5.59	117.06	111.07
1	A	541	CYS	CB-CA-C	-5.59	101.13	110.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	840	HIS	N-CA-C	-5.56	105.30	111.36
1	A	476	ASP	CA-CB-CG	-5.54	107.06	112.60
1	A	621	ARG	N-CA-C	-5.51	105.27	111.28
1	A	683	ASP	CA-CB-CG	-5.51	107.09	112.60
1	A	332	ASP	CA-CB-CG	-5.50	107.10	112.60
1	A	76	ASP	CA-CB-CG	-5.44	107.16	112.60
1	A	252	PHE	CA-CB-CG	-5.43	108.37	113.80
1	A	244	VAL	N-CA-C	5.38	116.04	110.82
1	A	96	PRO	N-CA-CB	5.38	108.30	103.08
1	A	881	ASN	CB-CA-C	-5.36	103.88	111.76
1	A	350	ASP	CA-CB-CG	-5.34	107.26	112.60
1	A	237	PRO	CA-C-N	5.32	131.95	121.58
1	A	237	PRO	C-N-CA	5.32	131.95	121.58
1	A	95	TYR	N-CA-CB	5.31	115.78	109.72
1	A	302	ASN	CA-CB-CG	-5.30	107.30	112.60
1	A	565	ASN	CA-CB-CG	-5.28	107.32	112.60
1	A	691	GLU	CA-C-N	5.27	130.17	120.79
1	A	691	GLU	C-N-CA	5.27	130.17	120.79
1	A	152	PHE	N-CA-C	5.22	119.78	113.41
1	A	287	THR	CA-C-N	5.19	128.20	120.31
1	A	287	THR	C-N-CA	5.19	128.20	120.31
1	A	159	LEU	N-CA-C	5.18	117.72	111.40
1	A	855	THR	CA-C-N	5.18	128.42	122.83
1	A	855	THR	C-N-CA	5.18	128.42	122.83
1	A	886	PHE	CA-CB-CG	-5.15	108.65	113.80
1	A	774	ASN	CB-CA-C	-5.15	102.80	110.88
1	A	151	PRO	CA-C-N	5.12	131.25	122.09
1	A	151	PRO	C-N-CA	5.12	131.25	122.09
1	A	163	ASN	CA-CB-CG	-5.12	107.48	112.60
1	A	215	TYR	CA-CB-CG	-5.10	104.71	113.90
1	A	512	TYR	CA-CB-CG	-5.09	104.74	113.90
1	A	162	VAL	CA-C-N	5.08	130.02	121.14
1	A	162	VAL	C-N-CA	5.08	130.02	121.14
1	A	181	LYS	N-CA-C	5.07	121.60	110.80
1	A	472	VAL	CA-C-N	-5.07	112.26	120.72
1	A	472	VAL	C-N-CA	-5.07	112.26	120.72
1	A	844	TRP	CA-C-N	-5.06	116.01	123.00
1	A	844	TRP	C-N-CA	-5.06	116.01	123.00
1	A	792	ASN	CA-C-N	5.04	124.21	118.97
1	A	792	ASN	C-N-CA	5.04	124.21	118.97
1	A	374	TYR	CA-CB-CG	-5.03	104.85	113.90
1	A	523	ASP	CB-CA-C	-5.01	102.03	109.60

There are no chirality outliers.

All (7) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	506	VAL	Mainchain
1	A	700	CYS	Mainchain
1	A	802	LYS	Mainchain,Peptide
1	A	854	CYS	Mainchain
1	A	863	ILE	Peptide
1	A	95	TYR	Peptide

5.2 Too-close contacts [i](#)

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in the chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes within the asymmetric unit, whereas Symm-Clashes lists symmetry-related clashes.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	7189	0	7046	1088	16
All	All	7189	0	7046	1088	16

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 76.

All (1088) 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:439:TYR:CD1	1:A:537:ARG:NH1	1.70	1.55
1:A:439:TYR:CE1	1:A:537:ARG:NH1	1.71	1.54
1:A:548:ARG:CG	1:A:584:PRO:HA	1.31	1.52
1:A:556:GLN:HA	1:A:582:ASN:CB	1.40	1.51
1:A:548:ARG:HG3	1:A:584:PRO:CA	1.45	1.40
1:A:555:LYS:NZ	1:A:582:ASN:HD21	0.93	1.40
1:A:556:GLN:HA	1:A:582:ASN:CG	1.51	1.36
1:A:531:LEU:HD13	1:A:640:GLU:CD	1.53	1.31
1:A:555:LYS:NZ	1:A:582:ASN:ND2	1.77	1.29
1:A:555:LYS:HZ2	1:A:582:ASN:ND2	1.27	1.25
1:A:556:GLN:CA	1:A:582:ASN:HB3	1.65	1.25
1:A:556:GLN:CA	1:A:582:ASN:CB	2.18	1.19
1:A:653:TYR:C	1:A:654:ASN:N	2.02	1.18
1:A:531:LEU:HD13	1:A:640:GLU:OE2	1.40	1.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:359:LEU:HD12	1:A:362:ILE:HD11	1.24	1.16
1:A:439:TYR:CE1	1:A:537:ARG:CZ	2.08	1.15
1:A:118:LEU:HD12	1:A:172:ILE:HD12	1.17	1.13
1:A:295:VAL:HG12	1:A:414:VAL:HG11	1.27	1.12
1:A:556:GLN:HA	1:A:582:ASN:HB3	1.20	1.11
1:A:474:VAL:HG12	1:A:475:VAL:HG23	1.33	1.10
1:A:556:GLN:HG2	1:A:582:ASN:ND2	1.63	1.10
1:A:806:MET:H	1:A:806:MET:HE3	1.16	1.10
1:A:324:THR:HB	1:A:462:PRO:HB3	1.27	1.09
1:A:435:ILE:HG22	1:A:446:PHE:HB2	1.22	1.09
1:A:595:GLU:HB2	1:A:597:LEU:HD23	1.32	1.09
1:A:453:LYS:HG2	1:A:472:VAL:HG22	1.25	1.08
1:A:569:VAL:HG21	1:A:654:ASN:HB2	1.26	1.08
1:A:301:ARG:HD2	1:A:425:THR:HG21	1.37	1.06
1:A:439:TYR:HE1	1:A:537:ARG:CZ	1.43	1.05
1:A:560:LEU:HD23	1:A:648:THR:HG23	1.37	1.05
1:A:225:MET:HE1	1:A:227:LYS:HG3	1.31	1.03
1:A:46:PRO:HG2	1:A:69:ARG:HG3	1.41	1.03
1:A:494:TYR:HB3	1:A:501:LEU:HD21	1.40	1.01
1:A:620:PRO:HA	1:A:623:ILE:HG13	1.41	1.01
1:A:556:GLN:C	1:A:582:ASN:HB3	1.87	1.00
1:A:556:GLN:O	1:A:582:ASN:O	1.80	0.99
1:A:444:LEU:HD12	1:A:446:PHE:CE1	1.98	0.98
1:A:117:LEU:HD11	1:A:126:LEU:HD21	1.45	0.98
1:A:563:HIS:HB3	1:A:564:PRO:HD3	1.44	0.97
1:A:623:ILE:HA	1:A:626:ASN:HD21	1.28	0.96
1:A:439:TYR:HD1	1:A:537:ARG:NH1	1.60	0.96
1:A:297:ILE:HG22	1:A:418:VAL:HG12	1.49	0.95
1:A:566:ASN:HA	1:A:651:VAL:HG23	1.49	0.95
1:A:531:LEU:CD1	1:A:640:GLU:OE2	2.14	0.94
1:A:458:ARG:CZ	1:A:524:PRO:HB3	1.95	0.94
1:A:862:ILE:HG22	1:A:877:ILE:HA	1.46	0.94
1:A:810:CYS:SG	1:A:855:THR:HG22	2.06	0.94
1:A:949:TYR:HE2	1:A:951:MET:HE2	1.31	0.93
1:A:72:LYS:HE3	1:A:80:LEU:HD13	1.49	0.93
1:A:297:ILE:HG22	1:A:418:VAL:CG1	1.97	0.93
1:A:804:GLY:HA2	1:A:806:MET:SD	2.09	0.92
1:A:527:GLY:HA3	1:A:550:PHE:CZ	2.05	0.92
1:A:62:ILE:CG1	1:A:73:LEU:HB2	1.98	0.92
1:A:435:ILE:HD13	1:A:436:ALA:H	1.34	0.92
1:A:271:LYS:HG3	1:A:272:GLU:H	1.34	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:863:ILE:HG22	1:A:876:THR:HB	1.48	0.92
1:A:225:MET:HE1	1:A:227:LYS:CG	1.99	0.91
1:A:239:PHE:HA	1:A:260:PRO:HG2	1.51	0.91
1:A:806:MET:SD	1:A:807:ARG:HG3	2.11	0.91
1:A:39:PHE:CE2	1:A:473:GLN:HG3	2.04	0.91
1:A:42:PHE:HE1	1:A:79:VAL:HG22	1.31	0.91
1:A:865:VAL:HG13	1:A:866:THR:HG23	1.50	0.91
1:A:933:VAL:HG23	1:A:934:ALA:H	1.36	0.91
1:A:447:VAL:HG22	1:A:455:LYS:HB2	1.53	0.91
1:A:196:PRO:HB3	1:A:225:MET:HE2	1.53	0.89
1:A:447:VAL:CG2	1:A:455:LYS:HB2	2.03	0.89
1:A:446:PHE:HD2	1:A:454:LEU:HD21	1.38	0.89
1:A:555:LYS:HZ3	1:A:582:ASN:HD21	1.16	0.89
1:A:653:TYR:HE2	1:A:682:HIS:HD1	1.18	0.89
1:A:95:TYR:CD2	1:A:96:PRO:HD3	2.08	0.88
1:A:486:PHE:CD1	1:A:493:LEU:HD13	2.09	0.88
1:A:181:LYS:CD	1:A:202:LYS:HA	2.04	0.88
1:A:359:LEU:CD1	1:A:362:ILE:HD11	2.02	0.88
1:A:863:ILE:HG23	1:A:864:PRO:HD2	1.55	0.88
1:A:548:ARG:HG2	1:A:584:PRO:HA	1.53	0.88
1:A:453:LYS:CG	1:A:472:VAL:HG22	2.03	0.87
1:A:556:GLN:O	1:A:582:ASN:HB3	1.74	0.87
1:A:603:LEU:HD23	1:A:604:VAL:N	1.90	0.87
1:A:39:PHE:CE1	1:A:505:PRO:HD2	2.11	0.86
1:A:892:HIS:HB2	1:A:932:CYS:O	1.74	0.86
1:A:295:VAL:HA	1:A:414:VAL:CG2	2.05	0.86
1:A:833:LEU:HB2	1:A:836:HIS:HD2	1.39	0.86
1:A:435:ILE:CG2	1:A:446:PHE:HB2	2.06	0.86
1:A:847:LEU:HD12	1:A:852:SER:HB3	1.58	0.86
1:A:370:LEU:CD1	1:A:399:ILE:HD12	2.05	0.85
1:A:473:GLN:CG	1:A:504:VAL:HG22	2.06	0.85
1:A:133:TYR:CG	1:A:136:ILE:HG12	2.12	0.85
1:A:110:THR:CG2	1:A:132:LEU:HD21	2.05	0.85
1:A:295:VAL:CG1	1:A:414:VAL:HG11	2.07	0.85
1:A:100:VAL:HG12	1:A:101:GLN:HG3	1.58	0.85
1:A:569:VAL:CG2	1:A:654:ASN:HB2	2.06	0.85
1:A:882:LEU:HB2	1:A:910:ALA:HA	1.58	0.85
1:A:256:LEU:HB3	1:A:309:LEU:HD22	1.56	0.85
1:A:847:LEU:HD11	1:A:850:ALA:HA	1.58	0.85
1:A:863:ILE:CG2	1:A:876:THR:HB	2.07	0.85
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:H	1.39	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:556:GLN:HG2	1:A:582:ASN:HD22	1.42	0.84
1:A:118:LEU:HD13	1:A:119:ILE:N	1.91	0.84
1:A:356:ILE:CG2	1:A:421:ILE:HB	2.07	0.84
1:A:556:GLN:C	1:A:582:ASN:CB	2.46	0.84
1:A:42:PHE:CZ	1:A:45:GLU:HB2	2.12	0.84
1:A:50:PHE:HB2	1:A:498:GLU:O	1.78	0.84
1:A:229:PRO:O	1:A:232:THR:HG22	1.79	0.83
1:A:706:VAL:HG22	1:A:707:ASP:H	1.42	0.83
1:A:40:VAL:CG1	1:A:503:ARG:HB3	2.08	0.83
1:A:830:GLN:HG2	1:A:831:CYS:H	1.43	0.83
1:A:118:LEU:HD12	1:A:172:ILE:CD1	2.05	0.83
1:A:556:GLN:CA	1:A:582:ASN:CG	2.44	0.83
1:A:555:LYS:HZ1	1:A:582:ASN:HD21	1.23	0.82
1:A:356:ILE:HG22	1:A:421:ILE:HB	1.61	0.82
1:A:53:LEU:HD23	1:A:54:VAL:N	1.94	0.82
1:A:53:LEU:HB2	1:A:496:MET:HE3	1.61	0.82
1:A:295:VAL:HA	1:A:414:VAL:HG22	1.60	0.82
1:A:42:PHE:CE1	1:A:79:VAL:HG22	2.14	0.82
1:A:44:GLY:HA2	1:A:50:PHE:CE2	2.15	0.82
1:A:133:TYR:CB	1:A:136:ILE:HG12	2.09	0.82
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CE1	2.15	0.82
1:A:474:VAL:HG22	1:A:495:ILE:HG21	1.61	0.82
1:A:397:LEU:HD23	1:A:399:ILE:HD13	1.61	0.82
1:A:44:GLY:HA2	1:A:50:PHE:HE2	1.44	0.81
1:A:336:THR:O	1:A:354:LEU:HD12	1.78	0.81
1:A:785:ASN:HB3	1:A:788:PHE:CD2	2.14	0.81
1:A:397:LEU:HD23	1:A:399:ILE:CD1	2.10	0.81
1:A:533:ASN:HD22	1:A:643:MET:CB	1.94	0.81
1:A:154:LYS:HD3	1:A:210:ASP:OD1	1.81	0.81
1:A:949:TYR:CE2	1:A:951:MET:HE2	2.15	0.81
1:A:889:ILE:HG23	1:A:892:HIS:CE1	2.16	0.81
1:A:926:ALA:HB1	1:A:947:LEU:HD12	1.63	0.81
1:A:370:LEU:HD12	1:A:399:ILE:HD12	1.63	0.80
1:A:548:ARG:CG	1:A:584:PRO:CA	2.27	0.80
1:A:358:ILE:HG23	1:A:361:GLN:H	1.44	0.80
1:A:324:THR:HB	1:A:462:PRO:CB	2.10	0.80
1:A:623:ILE:HD12	1:A:624:THR:N	1.97	0.80
1:A:154:LYS:HB2	1:A:157:HIS:CD2	2.16	0.80
1:A:444:LEU:HD13	1:A:445:ALA:N	1.97	0.80
1:A:314:LEU:HD11	1:A:332:ASP:HB3	1.64	0.80
1:A:192:PRO:HB3	1:A:233:PHE:CE1	2.17	0.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:486:PHE:CE1	1:A:493:LEU:HD13	2.16	0.79
1:A:239:PHE:CE1	1:A:260:PRO:HD2	2.18	0.79
1:A:62:ILE:HG13	1:A:73:LEU:HB2	1.62	0.79
1:A:863:ILE:HG13	1:A:864:PRO:HD3	1.62	0.79
1:A:715:VAL:HG21	1:A:717:LYS:HD2	1.65	0.79
1:A:317:ALA:HB1	1:A:321:LEU:HB3	1.64	0.79
1:A:321:LEU:HD12	1:A:462:PRO:HG2	1.64	0.79
1:A:380:LEU:HD12	1:A:386:LYS:HE3	1.64	0.79
1:A:56:ASP:OD2	1:A:142:LEU:HD11	1.83	0.79
1:A:847:LEU:CG	1:A:850:ALA:HA	2.13	0.79
1:A:295:VAL:HG12	1:A:414:VAL:CG1	2.09	0.78
1:A:533:ASN:ND2	1:A:643:MET:HB3	1.97	0.78
1:A:244:VAL:HG13	1:A:482:ARG:NH1	1.98	0.78
1:A:785:ASN:HB3	1:A:788:PHE:HD2	1.48	0.78
1:A:231:ASP:O	1:A:234:THR:HG22	1.84	0.78
1:A:548:ARG:O	1:A:584:PRO:HD3	1.82	0.78
1:A:742:ILE:HB	1:A:745:ILE:O	1.84	0.78
1:A:359:LEU:HD12	1:A:362:ILE:CD1	2.10	0.78
1:A:181:LYS:NZ	1:A:216:VAL:HG23	1.98	0.78
1:A:168:VAL:HG23	1:A:185:ALA:O	1.84	0.78
1:A:319:ALA:H	1:A:441:ASN:HD22	1.31	0.78
1:A:327:VAL:CG1	1:A:358:ILE:HD11	2.14	0.78
1:A:620:PRO:HA	1:A:623:ILE:CG1	2.12	0.78
1:A:453:LYS:HE3	1:A:472:VAL:CG2	2.13	0.78
1:A:284:LYS:O	1:A:284:LYS:HD3	1.84	0.77
1:A:444:LEU:HD23	1:A:525:HIS:CE1	2.20	0.77
1:A:591:ASN:OD1	1:A:639:LYS:HE2	1.83	0.77
1:A:204:THR:HG21	1:A:209:ALA:HB3	1.66	0.77
1:A:278:LYS:HE3	1:A:296:PRO:HG3	1.67	0.77
1:A:320:VAL:HG21	1:A:442:HIS:CD2	2.19	0.77
1:A:547:PRO:O	1:A:548:ARG:HG2	1.84	0.77
1:A:51:ASN:HD21	1:A:67:VAL:HG23	1.49	0.76
1:A:780:LEU:HD12	1:A:780:LEU:O	1.86	0.76
1:A:460:ASP:HB3	1:A:464:GLY:N	2.00	0.76
1:A:533:ASN:ND2	1:A:643:MET:SD	2.58	0.76
1:A:327:VAL:HG12	1:A:358:ILE:HD11	1.65	0.76
1:A:567:ILE:HD13	1:A:567:ILE:H	1.50	0.76
1:A:64:LEU:HD12	1:A:496:MET:CE	2.16	0.76
1:A:120:ASP:OD2	1:A:123:GLU:HG3	1.86	0.76
1:A:595:GLU:CB	1:A:597:LEU:HD23	2.14	0.76
1:A:623:ILE:HA	1:A:626:ASN:ND2	2.01	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:847:LEU:HD12	1:A:852:SER:CB	2.16	0.75
1:A:854:CYS:O	1:A:940:PHE:CE1	2.38	0.75
1:A:917:MET:HE1	1:A:948:TYR:OH	1.84	0.75
1:A:278:LYS:HG2	1:A:296:PRO:HA	1.69	0.75
1:A:616:ALA:O	1:A:620:PRO:HD2	1.85	0.75
1:A:403:PHE:CE1	1:A:406:LEU:HD23	2.20	0.75
1:A:873:THR:HB	1:A:917:MET:CE	2.17	0.75
1:A:448:GLY:HA3	1:A:480:VAL:HG21	1.68	0.75
1:A:710:LEU:HD12	1:A:710:LEU:O	1.84	0.75
1:A:531:LEU:CD1	1:A:640:GLU:CD	2.48	0.75
1:A:202:LYS:HD3	1:A:214:ALA:HB3	1.69	0.75
1:A:739:ILE:CD1	1:A:748:ARG:HG2	2.17	0.74
1:A:847:LEU:CD1	1:A:850:ALA:HA	2.16	0.74
1:A:63:TYR:C	1:A:64:LEU:HD22	2.12	0.74
1:A:446:PHE:HB3	1:A:454:LEU:HD11	1.69	0.74
1:A:473:GLN:CB	1:A:504:VAL:HG22	2.17	0.74
1:A:151:PRO:HB2	1:A:157:HIS:ND1	2.02	0.74
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CZ	2.23	0.74
1:A:869:ARG:O	1:A:920:ALA:HB3	1.86	0.74
1:A:39:PHE:CD2	1:A:473:GLN:HG3	2.23	0.74
1:A:172:ILE:HG12	1:A:182:LEU:HD13	1.68	0.74
1:A:256:LEU:CB	1:A:309:LEU:HD22	2.17	0.74
1:A:323:ARG:HG3	1:A:324:THR:N	2.02	0.74
1:A:531:LEU:HD13	1:A:640:GLU:OE1	1.86	0.74
1:A:683:ASP:O	1:A:686:THR:HG22	1.87	0.74
1:A:704:LEU:HD11	1:A:724:LYS:HE3	1.69	0.74
1:A:784:TRP:HD1	1:A:790:ILE:HD11	1.51	0.74
1:A:42:PHE:HZ	1:A:45:GLU:HB2	1.50	0.73
1:A:806:MET:H	1:A:806:MET:CE	1.97	0.73
1:A:188:VAL:HG22	1:A:191:LYS:H	1.52	0.73
1:A:435:ILE:HD13	1:A:436:ALA:N	2.03	0.73
1:A:46:PRO:HG2	1:A:69:ARG:CG	2.17	0.73
1:A:562:VAL:HG22	1:A:578:LEU:CD2	2.18	0.73
1:A:822:CYS:HA	1:A:833:LEU:HD23	1.70	0.73
1:A:99:ILE:HD11	1:A:152:PHE:HB2	1.69	0.73
1:A:154:LYS:H	1:A:157:HIS:HD2	1.36	0.73
1:A:567:ILE:HD12	1:A:650:PHE:CZ	2.22	0.73
1:A:814:LEU:HB3	1:A:847:LEU:HB2	1.70	0.73
1:A:704:LEU:HB2	1:A:722:LYS:HG3	1.71	0.73
1:A:321:LEU:HG	1:A:325:LEU:HD11	1.71	0.72
1:A:321:LEU:CD1	1:A:462:PRO:HG2	2.17	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:556:GLN:O	1:A:582:ASN:CB	2.37	0.72
1:A:261:GLU:HA	1:A:264:SER:O	1.89	0.72
1:A:324:THR:HG21	1:A:462:PRO:HA	1.70	0.72
1:A:832:THR:CG2	1:A:836:HIS:HB2	2.20	0.72
1:A:184:ILE:HD12	1:A:184:ILE:O	1.89	0.72
1:A:73:LEU:HD22	1:A:79:VAL:HA	1.72	0.72
1:A:115:LYS:HB3	1:A:168:VAL:HG11	1.71	0.72
1:A:847:LEU:CD1	1:A:852:SER:HB3	2.20	0.72
1:A:321:LEU:HG	1:A:325:LEU:CD1	2.20	0.72
1:A:304:VAL:HG11	1:A:351:GLU:OE2	1.91	0.71
1:A:380:LEU:HB2	1:A:386:LYS:CE	2.20	0.71
1:A:548:ARG:HG3	1:A:584:PRO:C	2.14	0.71
1:A:533:ASN:ND2	1:A:643:MET:CB	2.53	0.71
1:A:370:LEU:HD21	1:A:374:TYR:HE1	1.55	0.71
1:A:471:THR:HG23	1:A:473:GLN:HE22	1.55	0.71
1:A:515:CYS:O	1:A:519:LEU:HD23	1.91	0.71
1:A:558:VAL:HG11	1:A:646:ALA:HB2	1.71	0.71
1:A:181:LYS:HZ3	1:A:216:VAL:HG23	1.56	0.71
1:A:188:VAL:HG13	1:A:190:GLY:H	1.56	0.71
1:A:575:LEU:HD22	1:A:575:LEU:H	1.56	0.71
1:A:450:LYS:HA	1:A:479:PRO:HB3	1.73	0.71
1:A:519:LEU:HD12	1:A:552:SER:O	1.90	0.71
1:A:93:LYS:HD2	1:A:105:GLU:OE1	1.91	0.71
1:A:444:LEU:HD23	1:A:525:HIS:NE2	2.05	0.71
1:A:446:PHE:HZ	1:A:506:VAL:HG23	1.55	0.71
1:A:548:ARG:C	1:A:584:PRO:HB3	2.15	0.71
1:A:653:TYR:CE2	1:A:682:HIS:ND1	2.56	0.71
1:A:806:MET:HE3	1:A:806:MET:N	1.99	0.71
1:A:367:LYS:HE2	1:A:399:ILE:O	1.91	0.70
1:A:551:ALA:HA	1:A:556:GLN:OE1	1.91	0.70
1:A:670:ARG:HE	1:A:670:ARG:HA	1.55	0.70
1:A:847:LEU:HD21	1:A:850:ALA:HA	1.72	0.70
1:A:854:CYS:O	1:A:940:PHE:HE1	1.72	0.70
1:A:548:ARG:O	1:A:584:PRO:CD	2.39	0.70
1:A:181:LYS:HD2	1:A:202:LYS:HA	1.71	0.70
1:A:595:GLU:HG2	1:A:632:VAL:HG13	1.72	0.70
1:A:72:LYS:HE3	1:A:80:LEU:CD1	2.21	0.70
1:A:563:HIS:HB2	1:A:577:VAL:CG1	2.21	0.70
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:OE1	1.90	0.70
1:A:474:VAL:HG21	1:A:495:ILE:HD13	1.72	0.70
1:A:480:VAL:HB	1:A:484:MET:CE	2.21	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:619:VAL:HB	1:A:620:PRO:HD3	1.72	0.70
1:A:261:GLU:HG2	1:A:264:SER:C	2.17	0.70
1:A:453:LYS:HE3	1:A:472:VAL:HG21	1.73	0.70
1:A:937:ARG:CG	1:A:938:PRO:HD2	2.20	0.70
1:A:281:ARG:HB3	1:A:293:VAL:CG1	2.22	0.70
1:A:809:SER:CB	1:A:881:ASN:HD21	2.04	0.70
1:A:446:PHE:CD2	1:A:454:LEU:HD21	2.24	0.70
1:A:40:VAL:HG12	1:A:503:ARG:HB3	1.73	0.70
1:A:507:GLU:HG3	1:A:537:ARG:HG3	1.74	0.69
1:A:595:GLU:CG	1:A:632:VAL:HG13	2.22	0.69
1:A:380:LEU:HB2	1:A:386:LYS:HE3	1.74	0.69
1:A:435:ILE:HD12	1:A:486:PHE:CD1	2.27	0.69
1:A:133:TYR:HB2	1:A:136:ILE:HG12	1.75	0.69
1:A:569:VAL:HG21	1:A:654:ASN:CB	2.14	0.69
1:A:473:GLN:OE1	1:A:504:VAL:HG13	1.93	0.69
1:A:474:VAL:CG1	1:A:475:VAL:HG23	2.18	0.69
1:A:560:LEU:CD2	1:A:648:THR:HG23	2.19	0.69
1:A:689:PHE:CD1	1:A:691:GLU:HG2	2.28	0.69
1:A:739:ILE:HB	1:A:781:THR:CG2	2.22	0.69
1:A:809:SER:HB2	1:A:881:ASN:HD21	1.57	0.69
1:A:216:VAL:HG12	1:A:224:SER:OG	1.92	0.69
1:A:555:LYS:HZ2	1:A:582:ASN:HD21	0.76	0.69
1:A:73:LEU:CD2	1:A:79:VAL:HA	2.23	0.68
1:A:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:C	2.17	0.68
1:A:39:PHE:HE1	1:A:505:PRO:HD2	1.56	0.68
1:A:110:THR:HG22	1:A:132:LEU:HD21	1.74	0.68
1:A:412:LEU:HD13	1:A:412:LEU:H	1.59	0.68
1:A:405:GLY:C	1:A:406:LEU:HD22	2.19	0.68
1:A:555:LYS:HG3	1:A:556:GLN:N	2.09	0.68
1:A:62:ILE:HD11	1:A:73:LEU:HD12	1.76	0.68
1:A:133:TYR:CD2	1:A:136:ILE:HG12	2.28	0.68
1:A:594:PHE:O	1:A:595:GLU:HG2	1.94	0.67
1:A:830:GLN:HG2	1:A:831:CYS:N	2.09	0.67
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:NE	2.09	0.67
1:A:98:ARG:HE	1:A:107:LEU:CD1	2.07	0.67
1:A:98:ARG:HH21	1:A:107:LEU:HD12	1.59	0.67
1:A:863:ILE:HG23	1:A:864:PRO:CD	2.23	0.67
1:A:867:GLY:HA3	1:A:948:TYR:OH	1.94	0.67
1:A:46:PRO:HG3	1:A:69:ARG:HD2	1.75	0.67
1:A:555:LYS:HZ2	1:A:556:GLN:HG2	1.59	0.67
1:A:190:GLY:HA2	1:A:233:PHE:CE2	2.29	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:321:LEU:O	1:A:325:LEU:HG	1.95	0.67
1:A:239:PHE:CD1	1:A:260:PRO:HD2	2.30	0.67
1:A:474:VAL:HG12	1:A:475:VAL:CG2	2.21	0.67
1:A:137:CYS:HB2	1:A:213:PHE:CZ	2.30	0.67
1:A:62:ILE:HD12	1:A:64:LEU:HD21	1.76	0.67
1:A:703:LEU:HD13	1:A:723:ALA:HB2	1.76	0.67
1:A:133:TYR:HB2	1:A:136:ILE:H	1.61	0.66
1:A:460:ASP:HB3	1:A:463:LYS:HB3	1.77	0.66
1:A:739:ILE:HD12	1:A:748:ARG:HG2	1.76	0.66
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:N	2.10	0.66
1:A:42:PHE:HE1	1:A:79:VAL:CG2	2.05	0.66
1:A:62:ILE:HG13	1:A:62:ILE:O	1.94	0.66
1:A:323:ARG:HG3	1:A:324:THR:H	1.58	0.66
1:A:110:THR:HB	1:A:132:LEU:CD2	2.26	0.66
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:CD	2.20	0.66
1:A:556:GLN:CG	1:A:582:ASN:ND2	2.51	0.66
1:A:325:LEU:CD1	1:A:333:LEU:HD11	2.25	0.66
1:A:595:GLU:HG2	1:A:632:VAL:CG1	2.25	0.66
1:A:773:ILE:HD13	1:A:773:ILE:H	1.59	0.66
1:A:98:ARG:HE	1:A:107:LEU:HD11	1.60	0.66
1:A:432:THR:OG1	1:A:480:VAL:HG23	1.96	0.66
1:A:797:LYS:N	1:A:797:LYS:HD2	2.11	0.66
1:A:444:LEU:CD2	1:A:525:HIS:CE1	2.78	0.66
1:A:257:THR:C	1:A:258:LEU:HD12	2.21	0.66
1:A:863:ILE:HG13	1:A:864:PRO:CD	2.25	0.66
1:A:181:LYS:HD3	1:A:202:LYS:HA	1.78	0.66
1:A:548:ARG:CB	1:A:584:PRO:HA	2.24	0.65
1:A:296:PRO:HD2	1:A:414:VAL:CG2	2.27	0.65
1:A:446:PHE:CZ	1:A:486:PHE:HZ	2.14	0.65
1:A:567:ILE:HD13	1:A:651:VAL:O	1.96	0.65
1:A:706:VAL:HG13	1:A:707:ASP:O	1.96	0.65
1:A:713:VAL:HG12	1:A:714:GLU:HG3	1.79	0.65
1:A:216:VAL:HG12	1:A:224:SER:CB	2.26	0.65
1:A:675:LYS:HE3	1:A:694:VAL:HG22	1.79	0.65
1:A:926:ALA:HB1	1:A:947:LEU:CD1	2.27	0.65
1:A:265:PRO:HD3	1:A:274:VAL:CG2	2.27	0.64
1:A:782:VAL:HG23	1:A:790:ILE:HB	1.77	0.64
1:A:847:LEU:CD2	1:A:850:ALA:HA	2.27	0.64
1:A:309:LEU:HD11	1:A:311:ALA:O	1.98	0.64
1:A:410:ALA:HB1	1:A:411:PRO:HD2	1.78	0.64
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CD1	2.33	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:620:PRO:CA	1:A:623:ILE:HG13	2.23	0.64
1:A:154:LYS:H	1:A:157:HIS:CD2	2.15	0.64
1:A:368:ASP:O	1:A:371:GLN:HG2	1.97	0.64
1:A:892:HIS:NE2	1:A:931:ILE:HB	2.11	0.64
1:A:53:LEU:HG	1:A:64:LEU:CD1	2.27	0.64
1:A:175:TYR:HD2	1:A:179:ASP:HB3	1.63	0.64
1:A:446:PHE:CE1	1:A:486:PHE:HZ	2.16	0.64
1:A:181:LYS:HE2	1:A:202:LYS:HG2	1.80	0.64
1:A:105:GLU:HB3	1:A:106:PRO:HD2	1.80	0.63
1:A:320:VAL:O	1:A:323:ARG:HG2	1.98	0.63
1:A:446:PHE:CZ	1:A:506:VAL:HG23	2.33	0.63
1:A:405:GLY:O	1:A:406:LEU:HD22	1.98	0.63
1:A:806:MET:HG2	1:A:807:ARG:HG3	1.80	0.63
1:A:460:ASP:CB	1:A:463:LYS:HB3	2.28	0.63
1:A:566:ASN:HA	1:A:651:VAL:CG2	2.25	0.63
1:A:118:LEU:HG	1:A:172:ILE:HG13	1.80	0.63
1:A:548:ARG:HG3	1:A:584:PRO:HA	0.65	0.63
1:A:833:LEU:HB2	1:A:836:HIS:CD2	2.29	0.63
1:A:41:THR:HG22	1:A:502:THR:HA	1.81	0.63
1:A:186:THR:HG22	1:A:187:ALA:N	2.13	0.63
1:A:566:ASN:HB3	1:A:651:VAL:HG21	1.80	0.63
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:CZ	2.29	0.63
1:A:473:GLN:HB2	1:A:504:VAL:HG22	1.80	0.63
1:A:448:GLY:CA	1:A:480:VAL:HG21	2.28	0.63
1:A:575:LEU:HD22	1:A:575:LEU:N	2.14	0.63
1:A:453:LYS:HG2	1:A:472:VAL:CG2	2.16	0.63
1:A:847:LEU:HD11	1:A:850:ALA:CA	2.29	0.63
1:A:56:ASP:OD1	1:A:119:ILE:HD12	1.98	0.62
1:A:372:SER:O	1:A:375:ARG:HB2	1.99	0.62
1:A:110:THR:HG22	1:A:111:ASN:N	2.14	0.62
1:A:480:VAL:HG11	1:A:495:ILE:HD11	1.81	0.62
1:A:180:ASP:O	1:A:181:LYS:HG2	1.99	0.62
1:A:382:LEU:HD23	1:A:385:LEU:HB3	1.81	0.62
1:A:469:TYR:HE2	1:A:471:THR:HB	1.65	0.62
1:A:473:GLN:HG2	1:A:504:VAL:HG22	1.79	0.62
1:A:741:ASN:O	1:A:778:VAL:HG13	1.98	0.62
1:A:855:THR:HG23	1:A:856:ASN:OD1	1.99	0.62
1:A:296:PRO:HB2	1:A:417:MET:SD	2.39	0.62
1:A:410:ALA:HB1	1:A:411:PRO:CD	2.30	0.62
1:A:53:LEU:HB2	1:A:496:MET:CE	2.27	0.62
1:A:197:THR:HG21	1:A:228:ILE:HD11	1.82	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:556:GLN:C	1:A:582:ASN:HB2	2.25	0.62
1:A:225:MET:CE	1:A:227:LYS:HG3	2.18	0.62
1:A:204:THR:HG22	1:A:212:MET:SD	2.40	0.62
1:A:492:GLN:HG2	1:A:503:ARG:CG	2.29	0.62
1:A:696:LEU:N	1:A:696:LEU:HD12	2.15	0.61
1:A:894:LYS:HD3	1:A:899:GLU:HA	1.81	0.61
1:A:468:GLN:HB2	1:A:523:ASP:CG	2.25	0.61
1:A:806:MET:CG	1:A:807:ARG:HG3	2.29	0.61
1:A:386:LYS:O	1:A:386:LYS:HG3	1.99	0.61
1:A:548:ARG:NE	1:A:583:VAL:O	2.34	0.61
1:A:41:THR:HG22	1:A:502:THR:HG23	1.83	0.61
1:A:469:TYR:CE2	1:A:471:THR:HB	2.36	0.61
1:A:474:VAL:CG2	1:A:495:ILE:HD13	2.29	0.61
1:A:809:SER:HB2	1:A:881:ASN:ND2	2.15	0.61
1:A:873:THR:HB	1:A:917:MET:HE2	1.81	0.61
1:A:46:PRO:HD2	1:A:71:TYR:CE1	2.35	0.61
1:A:175:TYR:CD2	1:A:179:ASP:HB3	2.36	0.61
1:A:333:LEU:CD2	1:A:358:ILE:HG13	2.31	0.61
1:A:474:VAL:HG22	1:A:495:ILE:CG2	2.29	0.61
1:A:715:VAL:CG2	1:A:717:LYS:HD2	2.30	0.61
1:A:72:LYS:CD	1:A:80:LEU:HD12	2.30	0.61
1:A:480:VAL:CG2	1:A:484:MET:HE1	2.30	0.61
1:A:665:VAL:HG12	1:A:697:PRO:HG3	1.83	0.61
1:A:845:LEU:HD13	1:A:845:LEU:C	2.26	0.61
1:A:182:LEU:HG	1:A:184:ILE:HG23	1.82	0.60
1:A:488:LYS:HG3	1:A:489:ASP:N	2.14	0.60
1:A:712:PRO:HG3	1:A:801:TYR:OH	2.01	0.60
1:A:46:PRO:HD2	1:A:71:TYR:CZ	2.36	0.60
1:A:295:VAL:HA	1:A:414:VAL:HG21	1.81	0.60
1:A:313:TYR:CE1	1:A:435:ILE:HG12	2.37	0.60
1:A:403:PHE:CZ	1:A:406:LEU:HD23	2.37	0.60
1:A:530:VAL:HB	1:A:584:PRO:HG3	1.82	0.60
1:A:95:TYR:CG	1:A:96:PRO:HD3	2.36	0.60
1:A:119:ILE:HD13	1:A:121:TYR:CZ	2.36	0.60
1:A:548:ARG:O	1:A:584:PRO:HB3	2.02	0.60
1:A:566:ASN:CA	1:A:651:VAL:HG23	2.28	0.60
1:A:320:VAL:HG21	1:A:442:HIS:HD2	1.63	0.60
1:A:495:ILE:CG2	1:A:502:THR:HB	2.32	0.60
1:A:271:LYS:HG3	1:A:272:GLU:N	2.13	0.60
1:A:370:LEU:C	1:A:370:LEU:HD13	2.27	0.60
1:A:387:VAL:HG13	1:A:388:LYS:HG3	1.83	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:548:ARG:O	1:A:584:PRO:CB	2.50	0.60
1:A:51:ASN:HD21	1:A:67:VAL:CG2	2.15	0.59
1:A:154:LYS:N	1:A:157:HIS:HD2	2.00	0.59
1:A:773:ILE:HD13	1:A:773:ILE:N	2.17	0.59
1:A:832:THR:HG23	1:A:836:HIS:HB2	1.85	0.59
1:A:243:TYR:CD2	1:A:257:THR:HG22	2.37	0.59
1:A:665:VAL:HG11	1:A:697:PRO:HD3	1.84	0.59
1:A:62:ILE:HD13	1:A:77:LEU:CD2	2.32	0.59
1:A:314:LEU:HD12	1:A:333:LEU:O	2.01	0.59
1:A:780:LEU:HD12	1:A:780:LEU:C	2.27	0.59
1:A:904:VAL:HG13	1:A:905:ASP:N	2.18	0.59
1:A:706:VAL:HG22	1:A:707:ASP:N	2.12	0.59
1:A:323:ARG:HH21	1:A:463:LYS:HD2	1.67	0.59
1:A:933:VAL:HG23	1:A:934:ALA:N	2.10	0.59
1:A:99:ILE:HG13	1:A:100:VAL:N	2.16	0.59
1:A:349:LEU:N	1:A:349:LEU:HD22	2.18	0.59
1:A:548:ARG:O	1:A:584:PRO:CG	2.51	0.59
1:A:548:ARG:HB2	1:A:583:VAL:C	2.27	0.59
1:A:91:ASN:CG	1:A:92:PRO:HD2	2.27	0.58
1:A:171:VAL:O	1:A:182:LEU:HD12	2.02	0.58
1:A:578:LEU:HD13	1:A:636:LEU:HD21	1.85	0.58
1:A:473:GLN:NE2	1:A:473:GLN:H	2.01	0.58
1:A:759:VAL:HG12	1:A:760:GLN:N	2.18	0.58
1:A:937:ARG:HG2	1:A:938:PRO:HD2	1.85	0.58
1:A:62:ILE:HD12	1:A:501:LEU:CD1	2.33	0.58
1:A:630:HIS:HD2	1:A:632:VAL:CG2	2.15	0.58
1:A:853:LYS:HB2	1:A:940:PHE:CZ	2.38	0.58
1:A:412:LEU:C	1:A:412:LEU:HD22	2.28	0.58
1:A:585:GLU:OE1	1:A:585:GLU:HA	2.04	0.58
1:A:889:ILE:HD12	1:A:907:TYR:CZ	2.38	0.58
1:A:931:ILE:HG13	1:A:931:ILE:O	2.02	0.58
1:A:457:ILE:HG12	1:A:467:LEU:HD13	1.84	0.58
1:A:623:ILE:HD12	1:A:623:ILE:C	2.28	0.58
1:A:387:VAL:HG13	1:A:388:LYS:N	2.18	0.58
1:A:110:THR:HB	1:A:132:LEU:HD23	1.85	0.57
1:A:385:LEU:C	1:A:385:LEU:HD13	2.29	0.57
1:A:814:LEU:HD22	1:A:847:LEU:N	2.18	0.57
1:A:198:ILE:HB	1:A:226:ILE:CG2	2.34	0.57
1:A:814:LEU:HD22	1:A:847:LEU:H	1.69	0.57
1:A:263:VAL:HG12	1:A:263:VAL:O	2.04	0.57
1:A:885:GLU:HG3	1:A:887:ARG:H	1.70	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:434:VAL:HG22	1:A:435:ILE:N	2.20	0.57
1:A:324:THR:CG2	1:A:462:PRO:HA	2.34	0.57
1:A:430:ARG:HH21	1:A:432:THR:HG22	1.68	0.57
1:A:433:SER:HB3	1:A:484:MET:SD	2.45	0.57
1:A:531:LEU:HB3	1:A:640:GLU:OE2	2.04	0.57
1:A:40:VAL:HG13	1:A:503:ARG:HB3	1.85	0.57
1:A:188:VAL:HG22	1:A:191:LYS:N	2.18	0.57
1:A:396:LEU:HD13	1:A:396:LEU:C	2.30	0.57
1:A:321:LEU:HD12	1:A:462:PRO:CG	2.35	0.57
1:A:350:ASP:HA	1:A:430:ARG:HB2	1.86	0.57
1:A:501:LEU:HD23	1:A:502:THR:H	1.70	0.57
1:A:703:LEU:HD21	1:A:782:VAL:HG21	1.86	0.57
1:A:704:LEU:HD11	1:A:724:LYS:CE	2.35	0.57
1:A:41:THR:CG2	1:A:502:THR:HG23	2.35	0.56
1:A:892:HIS:CE1	1:A:931:ILE:HB	2.40	0.56
1:A:262:MET:O	1:A:262:MET:HG3	2.05	0.56
1:A:42:PHE:CE2	1:A:50:PHE:HZ	2.23	0.56
1:A:226:ILE:HG23	1:A:226:ILE:O	2.06	0.56
1:A:239:PHE:CA	1:A:260:PRO:HG2	2.30	0.56
1:A:305:GLU:O	1:A:340:LYS:HG3	2.06	0.56
1:A:474:VAL:CG2	1:A:495:ILE:HG21	2.35	0.56
1:A:506:VAL:HG22	1:A:507:GLU:H	1.69	0.56
1:A:710:LEU:HB2	1:A:801:TYR:HE1	1.70	0.56
1:A:45:GLU:HB3	1:A:46:PRO:CD	2.35	0.56
1:A:785:ASN:HD22	1:A:788:PHE:HE2	1.54	0.56
1:A:853:LYS:CG	1:A:940:PHE:HZ	2.19	0.56
1:A:533:ASN:HD22	1:A:643:MET:CG	2.18	0.56
1:A:184:ILE:HD12	1:A:184:ILE:C	2.31	0.56
1:A:456:LYS:O	1:A:468:GLN:HG2	2.04	0.56
1:A:459:VAL:HG23	1:A:459:VAL:O	2.05	0.56
1:A:820:PHE:O	1:A:821:GLU:HB3	2.06	0.56
1:A:42:PHE:HE2	1:A:50:PHE:HZ	1.54	0.56
1:A:446:PHE:CE1	1:A:486:PHE:CZ	2.93	0.56
1:A:480:VAL:HG21	1:A:484:MET:HE1	1.87	0.56
1:A:53:LEU:HD23	1:A:53:LEU:C	2.31	0.56
1:A:426:GLU:OE1	1:A:426:GLU:HA	2.04	0.56
1:A:665:VAL:CG1	1:A:697:PRO:HD3	2.35	0.56
1:A:713:VAL:HG13	1:A:766:TYR:O	2.06	0.56
1:A:949:TYR:HE2	1:A:951:MET:CE	2.12	0.56
1:A:563:HIS:HB3	1:A:564:PRO:CD	2.28	0.56
1:A:785:ASN:ND2	1:A:788:PHE:HE2	2.03	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:882:LEU:N	1:A:882:LEU:HD12	2.21	0.56
1:A:926:ALA:CB	1:A:947:LEU:HD12	2.35	0.56
1:A:46:PRO:CG	1:A:69:ARG:HD2	2.36	0.56
1:A:53:LEU:HG	1:A:64:LEU:HD13	1.87	0.56
1:A:62:ILE:HG12	1:A:73:LEU:HB2	1.84	0.56
1:A:175:TYR:HB3	1:A:179:ASP:HB3	1.88	0.56
1:A:254:TYR:CZ	1:A:281:ARG:HD2	2.39	0.56
1:A:597:LEU:N	1:A:597:LEU:HD22	2.21	0.56
1:A:265:PRO:HD3	1:A:274:VAL:HG21	1.87	0.55
1:A:51:ASN:ND2	1:A:67:VAL:HG23	2.20	0.55
1:A:284:LYS:HD3	1:A:284:LYS:C	2.31	0.55
1:A:480:VAL:HB	1:A:484:MET:HE2	1.89	0.55
1:A:110:THR:HG22	1:A:111:ASN:H	1.72	0.55
1:A:380:LEU:HB2	1:A:386:LYS:HE2	1.87	0.55
1:A:473:GLN:CD	1:A:504:VAL:HG13	2.31	0.55
1:A:710:LEU:HB2	1:A:801:TYR:CE1	2.42	0.55
1:A:72:LYS:HD2	1:A:80:LEU:HB2	1.87	0.55
1:A:196:PRO:HB3	1:A:225:MET:CE	2.33	0.55
1:A:619:VAL:CB	1:A:620:PRO:HD3	2.36	0.55
1:A:118:LEU:HB3	1:A:127:ILE:CG2	2.36	0.55
1:A:242:TYR:CD1	1:A:345:LYS:HE2	2.41	0.55
1:A:435:ILE:CG2	1:A:486:PHE:HE1	2.19	0.55
1:A:797:LYS:HD2	1:A:797:LYS:H	1.71	0.55
1:A:804:GLY:HA2	1:A:806:MET:CE	2.36	0.55
1:A:865:VAL:HG13	1:A:866:THR:N	2.21	0.55
1:A:435:ILE:HD12	1:A:486:PHE:HD1	1.71	0.55
1:A:509:CYS:HB3	1:A:535:CYS:SG	2.47	0.55
1:A:556:GLN:HA	1:A:582:ASN:ND2	2.19	0.55
1:A:359:LEU:HA	1:A:362:ILE:HG12	1.89	0.55
1:A:412:LEU:HD13	1:A:412:LEU:N	2.22	0.55
1:A:460:ASP:OD2	1:A:463:LYS:HB3	2.06	0.55
1:A:825:CYS:HB3	1:A:828:PRO:HG2	1.89	0.55
1:A:190:GLY:O	1:A:192:PRO:HD3	2.07	0.54
1:A:382:LEU:HD23	1:A:385:LEU:CB	2.36	0.54
1:A:526:CYS:HB3	1:A:535:CYS:SG	2.46	0.54
1:A:709:ILE:O	1:A:799:TYR:HD1	1.90	0.54
1:A:116:MET:HG3	1:A:117:LEU:N	2.21	0.54
1:A:628:ASP:OD2	1:A:669:TYR:HE1	1.90	0.54
1:A:947:LEU:H	1:A:947:LEU:CD2	2.21	0.54
1:A:474:VAL:HG12	1:A:475:VAL:N	2.21	0.54
1:A:168:VAL:HG22	1:A:169:PHE:N	2.22	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:370:LEU:HD13	1:A:370:LEU:O	2.07	0.54
1:A:921:LYS:N	1:A:922:PRO:HD2	2.23	0.54
1:A:63:TYR:CE2	1:A:72:LYS:HG2	2.43	0.54
1:A:190:GLY:C	1:A:192:PRO:HD3	2.33	0.54
1:A:370:LEU:HD21	1:A:374:TYR:CE1	2.39	0.54
1:A:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:O	2.07	0.54
1:A:861:GLU:HG3	1:A:862:ILE:N	2.21	0.54
1:A:937:ARG:HG3	1:A:938:PRO:HD2	1.89	0.54
1:A:72:LYS:HD2	1:A:80:LEU:HD12	1.90	0.54
1:A:151:PRO:O	1:A:157:HIS:HB3	2.07	0.54
1:A:280:VAL:HG12	1:A:281:ARG:N	2.22	0.53
1:A:472:VAL:HG12	1:A:472:VAL:O	2.09	0.53
1:A:925:HIS:O	1:A:950:PHE:HD2	1.91	0.53
1:A:236:ILE:HG23	1:A:236:ILE:O	2.07	0.53
1:A:429:ASP:OD1	1:A:450:LYS:HB3	2.08	0.53
1:A:501:LEU:HD23	1:A:502:THR:N	2.22	0.53
1:A:603:LEU:HD23	1:A:603:LEU:C	2.33	0.53
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:HA	1.91	0.53
1:A:447:VAL:HG23	1:A:447:VAL:O	2.06	0.53
1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:N	2.24	0.53
1:A:567:ILE:HD13	1:A:567:ILE:N	2.20	0.53
1:A:739:ILE:HB	1:A:781:THR:HG23	1.90	0.53
1:A:154:LYS:HB2	1:A:157:HIS:HD2	1.70	0.53
1:A:448:GLY:HA3	1:A:480:VAL:CG2	2.37	0.53
1:A:471:THR:CG2	1:A:473:GLN:HE22	2.20	0.53
1:A:473:GLN:CD	1:A:504:VAL:HG22	2.34	0.53
1:A:807:ARG:HD2	1:A:813:CYS:HA	1.90	0.53
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:NH2	2.24	0.53
1:A:553:GLU:HG3	1:A:554:MET:N	2.24	0.53
1:A:575:LEU:H	1:A:575:LEU:CD2	2.22	0.53
1:A:630:HIS:HD2	1:A:632:VAL:HG23	1.73	0.53
1:A:924:GLN:O	1:A:925:HIS:HB2	2.09	0.53
1:A:239:PHE:HA	1:A:260:PRO:CG	2.32	0.53
1:A:495:ILE:O	1:A:495:ILE:HG23	2.08	0.53
1:A:712:PRO:O	1:A:715:VAL:HG22	2.09	0.53
1:A:806:MET:HG2	1:A:807:ARG:CG	2.39	0.53
1:A:135:GLY:O	1:A:159:LEU:HD13	2.08	0.53
1:A:370:LEU:HD11	1:A:399:ILE:HD12	1.89	0.53
1:A:578:LEU:HB2	1:A:609:ILE:HB	1.91	0.53
1:A:930:GLU:OE2	1:A:941:MET:HG3	2.07	0.53
1:A:39:PHE:CD1	1:A:505:PRO:HD2	2.44	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:281:ARG:O	1:A:282:LEU:HD23	2.09	0.53
1:A:426:GLU:HG2	1:A:429:ASP:O	2.08	0.53
1:A:580:THR:HG21	1:A:583:VAL:HG11	1.91	0.53
1:A:805:ALA:H	1:A:806:MET:CE	2.22	0.53
1:A:947:LEU:HD23	1:A:947:LEU:O	2.09	0.52
1:A:198:ILE:HB	1:A:226:ILE:HG22	1.91	0.52
1:A:321:LEU:CD2	1:A:325:LEU:HD11	2.39	0.52
1:A:827:SER:HB2	1:A:828:PRO:CD	2.39	0.52
1:A:827:SER:HB2	1:A:828:PRO:HD3	1.91	0.52
1:A:882:LEU:HD13	1:A:910:ALA:O	2.09	0.52
1:A:118:LEU:HD13	1:A:118:LEU:C	2.34	0.52
1:A:371:GLN:O	1:A:375:ARG:HG3	2.09	0.52
1:A:589:GLY:HA3	1:A:639:LYS:HG3	1.90	0.52
1:A:875:VAL:HG22	1:A:915:CYS:O	2.09	0.52
1:A:42:PHE:HZ	1:A:45:GLU:CB	2.22	0.52
1:A:308:LEU:O	1:A:338:PHE:HA	2.09	0.52
1:A:569:VAL:CG2	1:A:654:ASN:CB	2.81	0.52
1:A:679:VAL:HG12	1:A:680:CYS:N	2.24	0.52
1:A:53:LEU:HG	1:A:64:LEU:HD11	1.92	0.52
1:A:181:LYS:CE	1:A:202:LYS:HG2	2.38	0.52
1:A:301:ARG:CD	1:A:425:THR:HG21	2.26	0.52
1:A:468:GLN:CB	1:A:523:ASP:HA	2.38	0.52
1:A:783:VAL:HG12	1:A:784:TRP:N	2.25	0.52
1:A:509:CYS:HB2	1:A:536:THR:HA	1.91	0.52
1:A:853:LYS:CG	1:A:940:PHE:CZ	2.93	0.52
1:A:185:ALA:HB3	1:A:243:TYR:CG	2.44	0.52
1:A:356:ILE:HG22	1:A:421:ILE:O	2.09	0.52
1:A:560:LEU:HG	1:A:648:THR:HG21	1.92	0.52
1:A:196:PRO:CB	1:A:225:MET:HE2	2.34	0.52
1:A:228:ILE:HG22	1:A:233:PHE:CE1	2.45	0.52
1:A:716:ILE:HG23	1:A:716:ILE:O	2.09	0.52
1:A:119:ILE:HG23	1:A:119:ILE:O	2.09	0.52
1:A:716:ILE:HG12	1:A:763:ASN:HB3	1.90	0.52
1:A:261:GLU:HG2	1:A:265:PRO:N	2.25	0.52
1:A:296:PRO:HD2	1:A:414:VAL:HG22	1.92	0.52
1:A:439:TYR:HD1	1:A:537:ARG:HH12	1.38	0.52
1:A:739:ILE:HB	1:A:781:THR:HG22	1.90	0.52
1:A:933:VAL:HG22	1:A:940:PHE:HB3	1.91	0.51
1:A:556:GLN:CB	1:A:582:ASN:HB3	2.35	0.51
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CG	2.94	0.51
1:A:426:GLU:HG3	1:A:429:ASP:H	1.75	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:567:ILE:CD1	1:A:650:PHE:CE2	2.94	0.51
1:A:127:ILE:HG23	1:A:127:ILE:O	2.09	0.51
1:A:593:THR:HG23	1:A:593:THR:O	2.10	0.51
1:A:716:ILE:CG1	1:A:763:ASN:HB3	2.41	0.51
1:A:790:ILE:HD12	1:A:790:ILE:N	2.25	0.51
1:A:560:LEU:HD23	1:A:648:THR:CG2	2.25	0.51
1:A:727:PRO:O	1:A:729:PRO:HD3	2.10	0.51
1:A:930:GLU:HG3	1:A:941:MET:SD	2.51	0.51
1:A:64:LEU:HD11	1:A:501:LEU:HD12	1.92	0.51
1:A:93:LYS:HD3	1:A:105:GLU:OE2	2.10	0.51
1:A:181:LYS:HZ2	1:A:216:VAL:HG23	1.75	0.51
1:A:370:LEU:HD13	1:A:374:TYR:CD1	2.46	0.51
1:A:418:VAL:O	1:A:418:VAL:HG13	2.10	0.51
1:A:473:GLN:HB2	1:A:504:VAL:CG2	2.40	0.51
1:A:853:LYS:H	1:A:853:LYS:HD2	1.76	0.51
1:A:171:VAL:HG12	1:A:172:ILE:N	2.26	0.51
1:A:265:PRO:HD3	1:A:274:VAL:HG22	1.92	0.51
1:A:322:GLY:CA	1:A:327:VAL:HG22	2.41	0.51
1:A:370:LEU:HD11	1:A:374:TYR:CE1	2.46	0.51
1:A:491:GLU:O	1:A:506:VAL:HG12	2.11	0.51
1:A:712:PRO:HG3	1:A:801:TYR:CZ	2.45	0.51
1:A:798:VAL:O	1:A:798:VAL:HG13	2.10	0.51
1:A:278:LYS:HG2	1:A:296:PRO:CA	2.39	0.51
1:A:566:ASN:HB3	1:A:651:VAL:CG2	2.40	0.51
1:A:810:CYS:SG	1:A:855:THR:CG2	2.92	0.51
1:A:823:GLY:HA3	1:A:844:TRP:CZ2	2.46	0.51
1:A:895:VAL:O	1:A:896:ALA:HB3	2.11	0.51
1:A:234:THR:HG23	1:A:235:VAL:N	2.26	0.51
1:A:519:LEU:N	1:A:519:LEU:HD22	2.26	0.51
1:A:541:CYS:SG	1:A:550:PHE:HD2	2.33	0.51
1:A:703:LEU:N	1:A:703:LEU:HD22	2.26	0.51
1:A:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:HB3	1.93	0.51
1:A:889:ILE:CD1	1:A:907:TYR:CE1	2.94	0.51
1:A:59:THR:HB	1:A:61:HIS:CE1	2.45	0.50
1:A:403:PHE:CE1	1:A:406:LEU:CD2	2.94	0.50
1:A:412:LEU:HD22	1:A:412:LEU:O	2.11	0.50
1:A:695:LYS:CB	1:A:696:LEU:HD12	2.41	0.50
1:A:119:ILE:CG2	1:A:121:TYR:CE1	2.95	0.50
1:A:400:ASP:HB2	1:A:402:ASN:OD1	2.11	0.50
1:A:76:ASP:O	1:A:77:LEU:HB2	2.11	0.50
1:A:81:VAL:HG12	1:A:82:THR:N	2.26	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:204:THR:HG23	1:A:206:ASN:O	2.11	0.50
1:A:358:ILE:CG2	1:A:361:GLN:HB2	2.41	0.50
1:A:689:PHE:CE1	1:A:691:GLU:CG	2.94	0.50
1:A:54:VAL:HG22	1:A:55:VAL:N	2.25	0.50
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CD2	2.94	0.50
1:A:300:GLU:HG2	1:A:305:GLU:HA	1.93	0.50
1:A:628:ASP:OD2	1:A:669:TYR:CE1	2.64	0.50
1:A:713:VAL:HG13	1:A:767:SER:HA	1.94	0.50
1:A:133:TYR:O	1:A:134:GLN:HB2	2.11	0.50
1:A:228:ILE:CG2	1:A:233:PHE:CE1	2.94	0.50
1:A:673:TRP:HB3	1:A:694:VAL:HB	1.94	0.50
1:A:64:LEU:HB2	1:A:71:TYR:HD2	1.77	0.50
1:A:370:LEU:CD1	1:A:374:TYR:CD1	2.95	0.50
1:A:457:ILE:HG12	1:A:467:LEU:CD1	2.42	0.50
1:A:695:LYS:C	1:A:696:LEU:HD12	2.37	0.50
1:A:216:VAL:HG13	1:A:217:PHE:N	2.26	0.50
1:A:444:LEU:HD12	1:A:446:PHE:CZ	2.44	0.50
1:A:507:GLU:HG3	1:A:537:ARG:CG	2.41	0.50
1:A:132:LEU:HD11	1:A:163:ASN:HD22	1.77	0.50
1:A:182:LEU:HD21	1:A:184:ILE:HG21	1.94	0.50
1:A:782:VAL:HG23	1:A:782:VAL:O	2.12	0.50
1:A:597:LEU:CD2	1:A:597:LEU:H	2.25	0.49
1:A:676:TYR:CD1	1:A:730:GLN:HG3	2.47	0.49
1:A:185:ALA:HA	1:A:197:THR:O	2.13	0.49
1:A:321:LEU:CG	1:A:325:LEU:HD11	2.40	0.49
1:A:894:LYS:CD	1:A:899:GLU:HA	2.41	0.49
1:A:295:VAL:O	1:A:295:VAL:HG23	2.12	0.49
1:A:312:ALA:HB1	1:A:334:LEU:HD11	1.95	0.49
1:A:473:GLN:HB3	1:A:502:THR:HG21	1.94	0.49
1:A:892:HIS:HD2	1:A:893:VAL:N	2.10	0.49
1:A:190:GLY:HA2	1:A:233:PHE:HE2	1.73	0.49
1:A:541:CYS:CB	1:A:544:SER:HB3	2.42	0.49
1:A:792:ASN:HD21	1:A:796:ASN:N	2.10	0.49
1:A:133:TYR:HB3	1:A:136:ILE:HG23	1.94	0.49
1:A:380:LEU:CD1	1:A:386:LYS:HE3	2.37	0.49
1:A:623:ILE:HD12	1:A:624:THR:CA	2.42	0.49
1:A:46:PRO:CG	1:A:69:ARG:HG3	2.27	0.49
1:A:105:GLU:CB	1:A:106:PRO:HD2	2.42	0.49
1:A:110:THR:CB	1:A:132:LEU:HD21	2.42	0.49
1:A:590:VAL:HG12	1:A:591:ASN:N	2.27	0.49
1:A:841:GLU:HG3	1:A:842:SER:H	1.77	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:CA	2.42	0.49
1:A:475:VAL:HG22	1:A:500:GLN:OE1	2.13	0.49
1:A:863:ILE:HG13	1:A:864:PRO:N	2.28	0.49
1:A:856:ASN:N	1:A:857:PRO:HD3	2.27	0.49
1:A:403:PHE:HE1	1:A:406:LEU:HD23	1.76	0.49
1:A:453:LYS:HE3	1:A:472:VAL:HG22	1.94	0.49
1:A:557:CYS:HB3	1:A:558:VAL:HG23	1.95	0.49
1:A:935:VAL:HG12	1:A:936:CYS:N	2.28	0.49
1:A:40:VAL:HG21	1:A:76:ASP:O	2.12	0.49
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CE2	2.47	0.48
1:A:435:ILE:HG21	1:A:486:PHE:CE1	2.48	0.48
1:A:527:GLY:HA3	1:A:550:PHE:CE1	2.45	0.48
1:A:785:ASN:HB3	1:A:788:PHE:CE2	2.46	0.48
1:A:790:ILE:HD12	1:A:790:ILE:H	1.77	0.48
1:A:39:PHE:CD2	1:A:473:GLN:CG	2.95	0.48
1:A:59:THR:HB	1:A:61:HIS:ND1	2.27	0.48
1:A:265:PRO:CD	1:A:274:VAL:HG22	2.42	0.48
1:A:506:VAL:HG13	1:A:507:GLU:N	2.27	0.48
1:A:736:TYR:CD2	1:A:784:TRP:HB3	2.47	0.48
1:A:781:THR:HG23	1:A:781:THR:O	2.12	0.48
1:A:278:LYS:CE	1:A:296:PRO:HG3	2.41	0.48
1:A:320:VAL:HG23	1:A:441:ASN:HB3	1.94	0.48
1:A:258:LEU:HD12	1:A:258:LEU:N	2.29	0.48
1:A:557:CYS:CB	1:A:558:VAL:HG23	2.29	0.48
1:A:175:TYR:CG	1:A:176:SER:N	2.82	0.48
1:A:254:TYR:CE2	1:A:281:ARG:HD2	2.48	0.48
1:A:782:VAL:CG2	1:A:790:ILE:HB	2.41	0.48
1:A:239:PHE:CD1	1:A:260:PRO:HG2	2.48	0.48
1:A:265:PRO:HB2	1:A:266:PRO:HD2	1.94	0.48
1:A:681:THR:HG21	1:A:686:THR:HG21	1.95	0.48
1:A:743:GLN:CD	1:A:743:GLN:H	2.21	0.48
1:A:783:VAL:HG13	1:A:788:PHE:O	2.13	0.48
1:A:374:TYR:CE2	1:A:397:LEU:HD22	2.48	0.48
1:A:882:LEU:HD23	1:A:913:ILE:HD11	1.94	0.48
1:A:440:LYS:O	1:A:440:LYS:HG2	2.14	0.48
1:A:862:ILE:HG22	1:A:877:ILE:CA	2.32	0.48
1:A:77:LEU:HD22	1:A:501:LEU:HD13	1.96	0.48
1:A:430:ARG:HG2	1:A:431:MET:O	2.14	0.48
1:A:567:ILE:HD12	1:A:650:PHE:CE2	2.49	0.48
1:A:710:LEU:HD13	1:A:801:TYR:OH	2.14	0.48
1:A:160:SER:OG	1:A:162:VAL:HG23	2.14	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:541:CYS:SG	1:A:550:PHE:CD2	3.06	0.48
1:A:862:ILE:CG2	1:A:877:ILE:HG23	2.44	0.48
1:A:460:ASP:CG	1:A:463:LYS:HB3	2.39	0.47
1:A:597:LEU:HD22	1:A:597:LEU:H	1.78	0.47
1:A:555:LYS:HB2	1:A:559:ARG:NH2	2.28	0.47
1:A:561:THR:HG22	1:A:562:VAL:N	2.28	0.47
1:A:626:ASN:ND2	1:A:630:HIS:HB2	2.29	0.47
1:A:740:LEU:HD12	1:A:740:LEU:N	2.29	0.47
1:A:889:ILE:O	1:A:892:HIS:HB3	2.13	0.47
1:A:68:ASN:ND2	1:A:87:PRO:HD3	2.30	0.47
1:A:90:ASP:C	1:A:107:LEU:HD22	2.39	0.47
1:A:144:ASP:O	1:A:145:LEU:HB2	2.13	0.47
1:A:807:ARG:HB3	1:A:812:LEU:HB2	1.96	0.47
1:A:907:TYR:CZ	1:A:909:PRO:HA	2.48	0.47
1:A:262:MET:O	1:A:263:VAL:HB	2.14	0.47
1:A:281:ARG:HB3	1:A:293:VAL:HG11	1.97	0.47
1:A:495:ILE:HG22	1:A:502:THR:HB	1.96	0.47
1:A:52:HIS:O	1:A:496:MET:HE1	2.15	0.47
1:A:702:GLN:O	1:A:723:ALA:HB1	2.14	0.47
1:A:947:LEU:H	1:A:947:LEU:HD23	1.79	0.47
1:A:82:THR:HG23	1:A:82:THR:O	2.14	0.47
1:A:333:LEU:HD21	1:A:358:ILE:HG13	1.94	0.47
1:A:380:LEU:CB	1:A:386:LYS:HE3	2.43	0.47
1:A:569:VAL:CG1	1:A:620:PRO:HG3	2.45	0.47
1:A:589:GLY:C	1:A:639:LYS:HG2	2.39	0.47
1:A:728:GLN:HA	1:A:753:ARG:NH2	2.30	0.47
1:A:863:ILE:CG1	1:A:864:PRO:HD3	2.39	0.47
1:A:124:ASN:OD1	1:A:142:LEU:HB3	2.14	0.47
1:A:361:GLN:HE21	1:A:365:ARG:HH21	1.61	0.47
1:A:372:SER:HA	1:A:375:ARG:NE	2.30	0.47
1:A:458:ARG:NH1	1:A:524:PRO:HB3	2.29	0.47
1:A:555:LYS:HZ2	1:A:556:GLN:CG	2.25	0.47
1:A:716:ILE:HD11	1:A:763:ASN:HB3	1.96	0.47
1:A:745:ILE:O	1:A:745:ILE:HG23	2.15	0.47
1:A:790:ILE:HG22	1:A:791:ASP:N	2.28	0.47
1:A:715:VAL:O	1:A:715:VAL:HG23	2.13	0.47
1:A:253:VAL:HG23	1:A:253:VAL:O	2.15	0.47
1:A:448:GLY:HA3	1:A:484:MET:HE1	1.97	0.47
1:A:805:ALA:H	1:A:806:MET:HE1	1.79	0.47
1:A:244:VAL:HB	1:A:309:LEU:HD23	1.97	0.47
1:A:295:VAL:CA	1:A:414:VAL:HG21	2.45	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:361:GLN:O	1:A:365:ARG:HG2	2.16	0.46
1:A:380:LEU:HD12	1:A:390:ILE:CG2	2.45	0.46
1:A:503:ARG:O	1:A:505:PRO:HD3	2.16	0.46
1:A:556:GLN:CA	1:A:582:ASN:HB2	2.35	0.46
1:A:689:PHE:CE1	1:A:691:GLU:HG2	2.50	0.46
1:A:814:LEU:HD11	1:A:845:LEU:CD1	2.44	0.46
1:A:45:GLU:HB3	1:A:46:PRO:HD3	1.97	0.46
1:A:333:LEU:CD2	1:A:358:ILE:HA	2.45	0.46
1:A:113:VAL:HG11	1:A:165:SER:HB3	1.96	0.46
1:A:265:PRO:CB	1:A:266:PRO:HD2	2.45	0.46
1:A:68:ASN:HB3	1:A:86:GLY:HA3	1.97	0.46
1:A:704:LEU:H	1:A:723:ALA:HA	1.79	0.46
1:A:947:LEU:HD23	1:A:947:LEU:N	2.30	0.46
1:A:203:LEU:HD22	1:A:212:MET:HE1	1.98	0.46
1:A:252:PHE:CD1	1:A:283:CYS:HA	2.51	0.46
1:A:264:SER:HA	1:A:265:PRO:HA	1.53	0.46
1:A:435:ILE:HG21	1:A:486:PHE:HE1	1.81	0.46
1:A:62:ILE:HD11	1:A:73:LEU:CD1	2.45	0.46
1:A:159:LEU:HG	1:A:201:ARG:HH12	1.81	0.46
1:A:695:LYS:HB2	1:A:696:LEU:HD12	1.96	0.46
1:A:892:HIS:CD2	1:A:893:VAL:CG2	2.98	0.46
1:A:920:ALA:C	1:A:922:PRO:HD2	2.40	0.46
1:A:72:LYS:O	1:A:80:LEU:HB2	2.15	0.46
1:A:343:LYS:HG2	1:A:344:ARG:HG2	1.97	0.46
1:A:531:LEU:CB	1:A:640:GLU:OE2	2.64	0.46
1:A:543:ARG:HH11	1:A:549:ARG:HH22	1.62	0.46
1:A:286:ASP:OD1	1:A:288:ALA:HB3	2.16	0.46
1:A:468:GLN:HE21	1:A:468:GLN:HB3	1.47	0.46
1:A:511:GLN:HG3	1:A:512:TYR:CD2	2.51	0.46
1:A:843:ARG:HB2	1:A:843:ARG:NH1	2.30	0.46
1:A:892:HIS:CD2	1:A:893:VAL:HG22	2.51	0.46
1:A:117:LEU:HD11	1:A:126:LEU:CD2	2.31	0.46
1:A:118:LEU:HB3	1:A:127:ILE:HG22	1.98	0.46
1:A:245:TYR:CD2	1:A:312:ALA:HB3	2.51	0.46
1:A:902:PRO:HA	1:A:915:CYS:HA	1.97	0.46
1:A:44:GLY:CA	1:A:50:PHE:HE2	2.23	0.46
1:A:226:ILE:HD11	1:A:385:LEU:CD2	2.46	0.46
1:A:539:GLU:HG3	1:A:540:ARG:N	2.31	0.46
1:A:91:ASN:OD1	1:A:92:PRO:HD2	2.17	0.45
1:A:192:PRO:HB3	1:A:233:PHE:CZ	2.51	0.45
1:A:288:ALA:O	1:A:289:PHE:HB2	2.17	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:444:LEU:CD2	1:A:525:HIS:NE2	2.76	0.45
1:A:594:PHE:CZ	1:A:614:PRO:HD3	2.51	0.45
1:A:624:THR:O	1:A:624:THR:HG23	2.15	0.45
1:A:46:PRO:HD2	1:A:71:TYR:OH	2.16	0.45
1:A:296:PRO:CD	1:A:414:VAL:HG22	2.45	0.45
1:A:492:GLN:HG2	1:A:503:ARG:HD2	1.98	0.45
1:A:710:LEU:HD12	1:A:710:LEU:C	2.40	0.45
1:A:830:GLN:CG	1:A:831:CYS:H	2.24	0.45
1:A:873:THR:HG22	1:A:874:LYS:N	2.31	0.45
1:A:110:THR:CB	1:A:132:LEU:CD2	2.94	0.45
1:A:256:LEU:HD22	1:A:256:LEU:N	2.31	0.45
1:A:99:ILE:HD11	1:A:152:PHE:CB	2.41	0.45
1:A:358:ILE:CG2	1:A:361:GLN:CB	2.95	0.45
1:A:444:LEU:HD13	1:A:445:ALA:H	1.79	0.45
1:A:563:HIS:CB	1:A:577:VAL:HG12	2.46	0.45
1:A:116:MET:SD	1:A:169:PHE:HA	2.57	0.45
1:A:446:PHE:CB	1:A:454:LEU:HD11	2.43	0.45
1:A:469:TYR:CG	1:A:470:GLU:N	2.84	0.45
1:A:783:VAL:HG11	1:A:786:GLY:O	2.15	0.45
1:A:62:ILE:CD1	1:A:501:LEU:CD1	2.95	0.45
1:A:62:ILE:CD1	1:A:77:LEU:CD2	2.94	0.45
1:A:98:ARG:NH2	1:A:107:LEU:HD12	2.29	0.45
1:A:778:VAL:O	1:A:797:LYS:HB2	2.17	0.45
1:A:828:PRO:HG3	1:A:837:CYS:SG	2.56	0.45
1:A:890:ALA:O	1:A:891:SER:HB2	2.17	0.45
1:A:58:ARG:NH1	1:A:58:ARG:HG2	2.31	0.45
1:A:442:HIS:CD2	1:A:458:ARG:HH21	2.35	0.45
1:A:492:GLN:HG2	1:A:503:ARG:HG2	1.98	0.45
1:A:833:LEU:CB	1:A:836:HIS:HD2	2.22	0.45
1:A:72:LYS:CE	1:A:80:LEU:CD1	2.95	0.45
1:A:110:THR:HG21	1:A:132:LEU:HD21	1.97	0.45
1:A:118:LEU:O	1:A:127:ILE:HG22	2.17	0.45
1:A:179:ASP:O	1:A:180:ASP:HB3	2.17	0.45
1:A:305:GLU:HG2	1:A:307:ARG:HG2	1.99	0.45
1:A:370:LEU:CD2	1:A:374:TYR:HE1	2.27	0.45
1:A:435:ILE:HG23	1:A:486:PHE:HE1	1.81	0.45
1:A:245:TYR:CE2	1:A:247:PHE:HD2	2.34	0.45
1:A:437:TYR:CE2	1:A:439:TYR:HB2	2.51	0.45
1:A:564:PRO:HB2	1:A:576:LEU:CD2	2.48	0.45
1:A:574:VAL:HG22	1:A:613:SER:OG	2.17	0.45
1:A:847:LEU:HD11	1:A:850:ALA:C	2.42	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:892:HIS:CD2	1:A:893:VAL:N	2.85	0.45
1:A:62:ILE:CD1	1:A:73:LEU:HD12	2.45	0.44
1:A:162:VAL:HG21	1:A:187:ALA:HB3	1.99	0.44
1:A:306:TYR:HE1	1:A:351:GLU:HG2	1.82	0.44
1:A:247:PHE:CD1	1:A:314:LEU:HD22	2.52	0.44
1:A:435:ILE:CD1	1:A:486:PHE:HD1	2.31	0.44
1:A:541:CYS:HB3	1:A:544:SER:HB3	1.99	0.44
1:A:566:ASN:CB	1:A:651:VAL:CG2	2.95	0.44
1:A:151:PRO:HB2	1:A:157:HIS:CE1	2.52	0.44
1:A:278:LYS:HD3	1:A:294:GLU:HG2	1.98	0.44
1:A:567:ILE:HD11	1:A:652:PHE:CD1	2.53	0.44
1:A:586:LEU:HD13	1:A:590:VAL:HG21	1.99	0.44
1:A:663:SER:O	1:A:667:SER:HB2	2.17	0.44
1:A:884:LEU:HA	1:A:884:LEU:HD23	1.76	0.44
1:A:620:PRO:O	1:A:623:ILE:HG13	2.18	0.44
1:A:671:CYS:HB3	1:A:680:CYS:SG	2.57	0.44
1:A:291:SER:HB3	1:A:404:CYS:O	2.18	0.44
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:NE2	2.32	0.44
1:A:703:LEU:CD2	1:A:790:ILE:CG2	2.95	0.44
1:A:743:GLN:HG2	1:A:744:GLY:N	2.31	0.44
1:A:40:VAL:HG13	1:A:40:VAL:O	2.17	0.44
1:A:252:PHE:HD1	1:A:283:CYS:HA	1.82	0.44
1:A:549:ARG:HA	1:A:584:PRO:HB3	2.00	0.44
1:A:597:LEU:HG	1:A:622:ILE:HG12	1.99	0.44
1:A:653:TYR:O	1:A:654:ASN:N	2.43	0.44
1:A:42:PHE:CZ	1:A:45:GLU:CB	2.95	0.44
1:A:713:VAL:O	1:A:714:GLU:HB2	2.18	0.44
1:A:889:ILE:HA	1:A:892:HIS:ND1	2.33	0.44
1:A:95:TYR:HD1	1:A:95:TYR:HA	1.70	0.44
1:A:217:PHE:CE2	1:A:219:ASP:HB2	2.53	0.44
1:A:262:MET:SD	1:A:383:ALA:HB3	2.58	0.44
1:A:322:GLY:HA2	1:A:327:VAL:HG22	1.99	0.44
1:A:464:GLY:O	1:A:465:ASN:HB3	2.17	0.44
1:A:635:GLN:HB3	1:A:644:THR:HB	1.99	0.44
1:A:759:VAL:CG1	1:A:760:GLN:N	2.81	0.44
1:A:832:THR:HG21	1:A:836:HIS:CB	2.47	0.44
1:A:53:LEU:HD12	1:A:501:LEU:HG	1.99	0.43
1:A:324:THR:O	1:A:324:THR:HG22	2.18	0.43
1:A:501:LEU:CD2	1:A:502:THR:N	2.81	0.43
1:A:711:VAL:HG21	1:A:798:VAL:CG2	2.48	0.43
1:A:853:LYS:HG3	1:A:940:PHE:CZ	2.53	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:949:TYR:CE2	1:A:951:MET:CE	2.95	0.43
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CD1	3.00	0.43
1:A:189:ASP:HB3	1:A:191:LYS:HD3	1.99	0.43
1:A:281:ARG:NH1	1:A:366:ILE:HG21	2.33	0.43
1:A:295:VAL:CB	1:A:414:VAL:HG21	2.47	0.43
1:A:841:GLU:HG3	1:A:842:SER:N	2.32	0.43
1:A:569:VAL:CG2	1:A:654:ASN:CA	2.95	0.43
1:A:572:TYR:CD2	1:A:572:TYR:C	2.96	0.43
1:A:764:THR:CG2	1:A:766:TYR:CZ	3.01	0.43
1:A:119:ILE:HG23	1:A:121:TYR:CE1	2.53	0.43
1:A:296:PRO:HB2	1:A:417:MET:CE	2.48	0.43
1:A:528:TRP:HZ2	1:A:533:ASN:OD1	2.01	0.43
1:A:716:ILE:CD1	1:A:763:ASN:HB3	2.49	0.43
1:A:98:ARG:HE	1:A:107:LEU:HD12	1.83	0.43
1:A:358:ILE:HG23	1:A:358:ILE:O	2.18	0.43
1:A:574:VAL:CG2	1:A:613:SER:HB3	2.48	0.43
1:A:662:LEU:HD21	1:A:791:ASP:HB2	1.79	0.43
1:A:764:THR:HG23	1:A:766:TYR:CZ	2.54	0.43
1:A:53:LEU:HD11	1:A:501:LEU:HD11	2.00	0.43
1:A:133:TYR:CG	1:A:136:ILE:CG1	2.94	0.43
1:A:162:VAL:HG12	1:A:164:GLU:H	1.84	0.43
1:A:444:LEU:HD13	1:A:444:LEU:C	2.44	0.43
1:A:458:ARG:HB2	1:A:468:GLN:HE22	1.83	0.43
1:A:567:ILE:HD11	1:A:650:PHE:CE2	2.53	0.43
1:A:863:ILE:HG22	1:A:876:THR:CB	2.35	0.43
1:A:68:ASN:CG	1:A:87:PRO:HD3	2.43	0.43
1:A:333:LEU:HD23	1:A:358:ILE:HA	2.01	0.43
1:A:468:GLN:HB2	1:A:523:ASP:HA	2.00	0.43
1:A:542:GLU:HG2	1:A:543:ARG:HG3	2.01	0.43
1:A:562:VAL:HG22	1:A:578:LEU:HD22	1.98	0.43
1:A:703:LEU:HD13	1:A:723:ALA:CB	2.47	0.43
1:A:173:VAL:HG23	1:A:173:VAL:O	2.18	0.43
1:A:471:THR:HG23	1:A:473:GLN:NE2	2.27	0.43
1:A:547:PRO:C	1:A:548:ARG:HG2	2.43	0.43
1:A:617:LYS:HG3	1:A:618:GLU:N	2.34	0.43
1:A:676:TYR:HD1	1:A:730:GLN:HG3	1.84	0.43
1:A:805:ALA:N	1:A:806:MET:CE	2.82	0.43
1:A:62:ILE:CD1	1:A:73:LEU:HB2	2.46	0.42
1:A:182:LEU:HB2	1:A:203:LEU:HD11	1.99	0.42
1:A:370:LEU:HD12	1:A:399:ILE:HG23	2.01	0.42
1:A:484:MET:HE2	1:A:495:ILE:HG13	2.01	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:500:GLN:HE21	1:A:500:GLN:HB3	1.59	0.42
1:A:679:VAL:CG1	1:A:680:CYS:N	2.82	0.42
1:A:728:GLN:HG3	1:A:753:ARG:NH2	2.34	0.42
1:A:839:ALA:HB1	1:A:841:GLU:O	2.18	0.42
1:A:889:ILE:HG23	1:A:892:HIS:NE2	2.33	0.42
1:A:123:GLU:HB2	1:A:125:ARG:HG2	2.00	0.42
1:A:133:TYR:CB	1:A:136:ILE:HG23	2.49	0.42
1:A:234:THR:CG2	1:A:235:VAL:N	2.82	0.42
1:A:100:VAL:HG21	1:A:158:TYR:OH	2.19	0.42
1:A:178:PHE:HD1	1:A:178:PHE:O	2.02	0.42
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CE2	3.02	0.42
1:A:186:THR:CG2	1:A:187:ALA:N	2.81	0.42
1:A:224:SER:HA	1:A:289:PHE:CD1	2.54	0.42
1:A:590:VAL:CG1	1:A:591:ASN:N	2.82	0.42
1:A:885:GLU:HG3	1:A:886:PHE:N	2.34	0.42
1:A:128:ALA:O	1:A:138:LYS:HG2	2.19	0.42
1:A:169:PHE:CD2	1:A:170:GLY:N	2.84	0.42
1:A:256:LEU:HD12	1:A:297:ILE:HD11	2.02	0.42
1:A:327:VAL:HG11	1:A:358:ILE:HD11	1.97	0.42
1:A:789:ASN:HD22	1:A:790:ILE:N	2.17	0.42
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:HE	1.79	0.42
1:A:62:ILE:CD1	1:A:501:LEU:HD13	2.49	0.42
1:A:216:VAL:CG1	1:A:217:PHE:N	2.82	0.42
1:A:274:VAL:HG23	1:A:275:TYR:N	2.30	0.42
1:A:563:HIS:HB2	1:A:577:VAL:HG13	2.01	0.42
1:A:117:LEU:HG	1:A:126:LEU:HD11	2.01	0.42
1:A:333:LEU:HD23	1:A:358:ILE:HG13	2.00	0.42
1:A:865:VAL:CG1	1:A:866:THR:N	2.82	0.42
1:A:55:VAL:HG22	1:A:62:ILE:HG22	2.00	0.42
1:A:80:LEU:C	1:A:81:VAL:HG23	2.45	0.42
1:A:387:VAL:CG1	1:A:388:LYS:N	2.82	0.42
1:A:470:GLU:HG2	1:A:471:THR:N	2.34	0.42
1:A:562:VAL:HG22	1:A:578:LEU:HD23	1.99	0.42
1:A:605:ILE:O	1:A:608:GLN:HG2	2.20	0.42
1:A:711:VAL:HB	1:A:800:LEU:HD23	2.02	0.42
1:A:62:ILE:CD1	1:A:64:LEU:HD21	2.46	0.42
1:A:68:ASN:CB	1:A:86:GLY:HA3	2.50	0.42
1:A:706:VAL:CG2	1:A:707:ASP:N	2.83	0.42
1:A:332:ASP:O	1:A:333:LEU:HD23	2.18	0.42
1:A:543:ARG:HB2	1:A:549:ARG:NH1	2.34	0.42
1:A:555:LYS:O	1:A:582:ASN:OD1	2.38	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:628:ASP:CG	1:A:669:TYR:CE1	2.97	0.42
1:A:631:VAL:O	1:A:631:VAL:HG13	2.19	0.42
1:A:783:VAL:CG1	1:A:784:TRP:N	2.83	0.42
1:A:917:MET:HE1	1:A:948:TYR:CZ	2.54	0.42
1:A:321:LEU:HD23	1:A:333:LEU:CD1	2.50	0.42
1:A:567:ILE:N	1:A:567:ILE:CD1	2.82	0.42
1:A:597:LEU:N	1:A:597:LEU:CD2	2.83	0.42
1:A:67:VAL:CG1	1:A:111:ASN:HB3	2.50	0.41
1:A:111:ASN:O	1:A:132:LEU:HD13	2.20	0.41
1:A:471:THR:HG21	1:A:473:GLN:OE1	2.19	0.41
1:A:528:TRP:CZ2	1:A:533:ASN:OD1	2.73	0.41
1:A:778:VAL:HG12	1:A:779:GLU:O	2.20	0.41
1:A:889:ILE:CD1	1:A:907:TYR:CZ	3.01	0.41
1:A:53:LEU:CG	1:A:64:LEU:CD1	2.96	0.41
1:A:119:ILE:HG21	1:A:121:TYR:CE1	2.54	0.41
1:A:403:PHE:CE2	1:A:405:GLY:HA2	2.55	0.41
1:A:527:GLY:HA3	1:A:550:PHE:HZ	1.72	0.41
1:A:555:LYS:NZ	1:A:582:ASN:CG	2.67	0.41
1:A:773:ILE:N	1:A:773:ILE:CD1	2.82	0.41
1:A:862:ILE:HG21	1:A:877:ILE:HG12	2.03	0.41
1:A:904:VAL:CG1	1:A:905:ASP:N	2.82	0.41
1:A:93:LYS:HD2	1:A:105:GLU:CD	2.45	0.41
1:A:112:ASN:ND2	1:A:133:TYR:HE2	2.17	0.41
1:A:188:VAL:HG22	1:A:188:VAL:O	2.21	0.41
1:A:280:VAL:CG1	1:A:281:ARG:N	2.83	0.41
1:A:909:PRO:C	1:A:911:GLU:H	2.29	0.41
1:A:926:ALA:HB2	1:A:949:TYR:CD1	2.55	0.41
1:A:53:LEU:C	1:A:53:LEU:CD2	2.94	0.41
1:A:137:CYS:SG	1:A:159:LEU:CD1	3.09	0.41
1:A:159:LEU:HG	1:A:201:ARG:NH1	2.35	0.41
1:A:380:LEU:CB	1:A:386:LYS:CE	2.95	0.41
1:A:412:LEU:N	1:A:412:LEU:CD1	2.83	0.41
1:A:541:CYS:HB2	1:A:544:SER:HB3	2.01	0.41
1:A:44:GLY:O	1:A:47:ALA:HA	2.20	0.41
1:A:72:LYS:CD	1:A:80:LEU:CD1	2.97	0.41
1:A:95:TYR:CG	1:A:96:PRO:CD	3.03	0.41
1:A:177:ASN:O	1:A:178:PHE:CG	2.73	0.41
1:A:817:ASP:OD1	1:A:820:PHE:CD2	2.73	0.41
1:A:888:ASP:OD1	1:A:889:ILE:HG13	2.20	0.41
1:A:307:ARG:HD3	1:A:307:ARG:HA	1.88	0.41
1:A:370:LEU:CD1	1:A:370:LEU:C	2.94	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:396:LEU:C	1:A:396:LEU:CD1	2.94	0.41
1:A:843:ARG:CZ	1:A:843:ARG:CB	2.99	0.41
1:A:457:ILE:CG1	1:A:467:LEU:HD13	2.50	0.41
1:A:892:HIS:CD2	1:A:892:HIS:C	2.98	0.41
1:A:901:SER:HA	1:A:902:PRO:HD2	1.89	0.41
1:A:242:TYR:CE1	1:A:345:LYS:HE2	2.56	0.41
1:A:453:LYS:CE	1:A:472:VAL:HG22	2.51	0.41
1:A:662:LEU:O	1:A:666:GLU:HB3	2.20	0.41
1:A:747:GLN:HG3	1:A:766:TYR:HD1	1.86	0.41
1:A:943:ARG:CZ	1:A:943:ARG:HB2	2.51	0.41
1:A:137:CYS:O	1:A:150:GLU:HG3	2.20	0.41
1:A:239:PHE:CD1	1:A:260:PRO:CD	3.03	0.41
1:A:435:ILE:HD12	1:A:486:PHE:CE1	2.56	0.41
1:A:548:ARG:HG3	1:A:584:PRO:N	2.22	0.41
1:A:555:LYS:NZ	1:A:556:GLN:HG2	2.34	0.41
1:A:667:SER:HB3	1:A:668:PRO:CD	2.51	0.41
1:A:845:LEU:HD11	1:A:852:SER:OG	2.20	0.41
1:A:313:TYR:CZ	1:A:435:ILE:CD1	3.04	0.41
1:A:469:TYR:CZ	1:A:470:GLU:O	2.74	0.41
1:A:473:GLN:HB2	1:A:473:GLN:HE21	1.55	0.41
1:A:658:HIS:ND1	1:A:663:SER:HB3	2.36	0.41
1:A:681:THR:OG1	1:A:686:THR:HG21	2.21	0.41
1:A:845:LEU:C	1:A:845:LEU:CD1	2.94	0.41
1:A:62:ILE:HD13	1:A:77:LEU:HD23	2.02	0.40
1:A:236:ILE:CG2	1:A:239:PHE:HB2	2.51	0.40
1:A:256:LEU:CB	1:A:309:LEU:CD2	2.94	0.40
1:A:488:LYS:CG	1:A:489:ASP:N	2.84	0.40
1:A:560:LEU:CG	1:A:648:THR:CG2	2.98	0.40
1:A:560:LEU:HB3	1:A:648:THR:CG2	2.51	0.40
1:A:630:HIS:CD2	1:A:632:VAL:CG2	3.00	0.40
1:A:115:LYS:HB3	1:A:168:VAL:CG1	2.47	0.40
1:A:185:ALA:HB3	1:A:243:TYR:CD2	2.56	0.40
1:A:226:ILE:HD11	1:A:385:LEU:HD23	2.02	0.40
1:A:563:HIS:CB	1:A:577:VAL:CG1	2.95	0.40
1:A:566:ASN:CA	1:A:651:VAL:CG2	2.95	0.40
1:A:897:GLY:H	1:A:924:GLN:HE22	1.69	0.40
1:A:349:LEU:N	1:A:349:LEU:CD2	2.84	0.40
1:A:380:LEU:HD22	1:A:412:LEU:HB3	2.02	0.40
1:A:632:VAL:HG12	1:A:633:GLN:N	2.37	0.40
1:A:45:GLU:CB	1:A:46:PRO:CD	3.00	0.40
1:A:118:LEU:C	1:A:118:LEU:CD1	2.95	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:252:PHE:HE1	1:A:283:CYS:SG	2.45	0.40
1:A:412:LEU:C	1:A:412:LEU:CD2	2.94	0.40
1:A:492:GLN:CG	1:A:503:ARG:HD2	2.51	0.40
1:A:623:ILE:C	1:A:623:ILE:CD1	2.94	0.40
1:A:95:TYR:CE2	1:A:194:TYR:CD1	3.09	0.40
1:A:603:LEU:C	1:A:603:LEU:CD2	2.95	0.40
1:A:853:LYS:HG2	1:A:940:PHE:HZ	1.87	0.40
1:A:875:VAL:O	1:A:875:VAL:HG23	2.22	0.40

All (16) symmetry-related close contacts are listed below. The label for Atom-2 includes the symmetry operator and encoded unit-cell translations to be applied.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:233:PHE:O	1:A:234:THR:OG1[8_665]	1.24	0.96
1:A:285:GLU:OE2	1:A:834:ARG:NH1[6_565]	1.32	0.88
1:A:146:PHE:CD1	1:A:730:GLN:OE1[4_455]	1.46	0.74
1:A:146:PHE:CE1	1:A:730:GLN:CD[4_455]	1.54	0.66
1:A:83:HIS:CE1	1:A:731:SER:OG[4_455]	1.63	0.57
1:A:148:LEU:O	1:A:728:GLN:NE2[4_455]	1.65	0.55
1:A:146:PHE:CE1	1:A:730:GLN:OE1[4_455]	1.79	0.41
1:A:234:THR:CA	1:A:234:THR:CA[8_665]	1.89	0.31
1:A:149:GLY:CA	1:A:728:GLN:OE1[4_455]	1.91	0.29
1:A:155:LYS:NZ	1:A:220:GLU:CB[8_665]	1.94	0.26
1:A:96:PRO:CG	1:A:221:PHE:CE1[8_665]	2.03	0.17
1:A:155:LYS:NZ	1:A:220:GLU:C[8_665]	2.03	0.17
1:A:141:ARG:NH2	1:A:691:GLU:OE2[4_455]	2.05	0.15
1:A:146:PHE:CE1	1:A:730:GLN:NE2[4_455]	2.05	0.15
1:A:146:PHE:CD1	1:A:730:GLN:CD[4_455]	2.16	0.04
1:A:234:THR:O	1:A:234:THR:O[8_665]	2.17	0.03

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	911/1207 (76%)	843 (92%)	46 (5%)	22 (2%)	4	27

All (22) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	96	PRO
1	A	181	LYS
1	A	191	LYS
1	A	410	ALA
1	A	465	ASN
1	A	506	VAL
1	A	557	CYS
1	A	700	CYS
1	A	701	PRO
1	A	803	CYS
1	A	804	GLY
1	A	864	PRO
1	A	87	PRO
1	A	507	GLU
1	A	271	LYS
1	A	474	VAL
1	A	849	GLY
1	A	263	VAL
1	A	344	ARG
1	A	933	VAL
1	A	44	GLY
1	A	921	LYS

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	812/1067 (76%)	788 (97%)	24 (3%)	36	57

All (24) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	69	ARG
1	A	72	LYS
1	A	98	ARG
1	A	271	LYS
1	A	386	LYS
1	A	412	LEU
1	A	435	ILE
1	A	444	LEU
1	A	468	GLN
1	A	473	GLN
1	A	501	LEU
1	A	529	CYS
1	A	548	ARG
1	A	567	ILE
1	A	575	LEU
1	A	597	LEU
1	A	670	ARG
1	A	722	LYS
1	A	743	GLN
1	A	773	ILE
1	A	797	LYS
1	A	853	LYS
1	A	854	CYS
1	A	892	HIS

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (30) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	51	ASN
1	A	52	HIS
1	A	101	GLN
1	A	114	ASN
1	A	134	GLN
1	A	157	HIS
1	A	163	ASN
1	A	273	GLN
1	A	361	GLN
1	A	441	ASN
1	A	442	HIS
1	A	473	GLN
1	A	500	GLN
1	A	533	ASN
1	A	582	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	629	HIS
1	A	630	HIS
1	A	672	HIS
1	A	685	ASN
1	A	690	GLN
1	A	702	GLN
1	A	725	ASN
1	A	728	GLN
1	A	747	GLN
1	A	789	ASN
1	A	792	ASN
1	A	826	GLN
1	A	836	HIS
1	A	881	ASN
1	A	946	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 ⓘ

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	A	3

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	653:TYR	C	654:ASN	N	2.02
1	A	557:CYS	C	558:VAL	N	1.73
1	A	700:CYS	C	701:PRO	N	1.09

6 Fit of model and data

6.1 Protein, DNA and RNA chains

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	915/1207 (75%)	2.25	420 (45%) 0 4	145, 231, 394, 394	0

All (420) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	37	PRO	12.8
1	A	269	THR	11.5
1	A	266	PRO	11.2
1	A	270	THR	10.5
1	A	566	ASN	10.5
1	A	239	PHE	10.5
1	A	267	GLY	9.6
1	A	64	LEU	9.5
1	A	446	PHE	9.4
1	A	570	SER	9.1
1	A	53	LEU	9.0
1	A	228	ILE	8.9
1	A	647	SER	8.9
1	A	657	VAL	8.9
1	A	221	PHE	8.5
1	A	552	SER	8.4
1	A	483	ASP	8.2
1	A	174	SER	8.1
1	A	384	TRP	7.9
1	A	874	LYS	7.8
1	A	772	GLU	7.8
1	A	482	ARG	7.8
1	A	732	GLY	7.7
1	A	856	ASN	7.7
1	A	695	LYS	7.7
1	A	343	LYS	7.5
1	A	172	ILE	7.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	42	PHE	7.3
1	A	619	VAL	7.3
1	A	268	SER	7.2
1	A	858	ARG	7.2
1	A	407	ASP	7.2
1	A	271	LYS	7.2
1	A	605	ILE	7.2
1	A	210	ASP	7.2
1	A	622	ILE	7.1
1	A	808	GLU	7.1
1	A	775	ASN	7.0
1	A	545	ARG	7.0
1	A	190	GLY	7.0
1	A	381	ASP	6.9
1	A	71	TYR	6.9
1	A	163	ASN	6.9
1	A	213	PHE	6.8
1	A	261	GLU	6.8
1	A	137	CYS	6.7
1	A	183	PHE	6.7
1	A	193	GLU	6.7
1	A	250	GLY	6.7
1	A	233	PHE	6.6
1	A	58	ARG	6.6
1	A	303	GLY	6.5
1	A	170	GLY	6.4
1	A	486	PHE	6.4
1	A	620	PRO	6.3
1	A	508	SER	6.3
1	A	182	LEU	6.3
1	A	659	ASN	6.3
1	A	63	TYR	6.2
1	A	230	SER	6.2
1	A	401	ASP	6.2
1	A	415	SER	6.2
1	A	389	ASP	6.2
1	A	621	ARG	6.1
1	A	748	ARG	6.1
1	A	227	LYS	6.1
1	A	826	GLN	6.1
1	A	330	ASP	6.1
1	A	265	PRO	6.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	756	SER	6.0
1	A	586	LEU	6.0
1	A	773	ILE	5.9
1	A	205	LYS	5.9
1	A	880	GLU	5.9
1	A	563	HIS	5.9
1	A	262	MET	5.9
1	A	38	SER	5.8
1	A	705	ARG	5.7
1	A	189	ASP	5.7
1	A	416	GLU	5.7
1	A	722	LYS	5.7
1	A	843	ARG	5.6
1	A	100	VAL	5.6
1	A	354	LEU	5.6
1	A	423	VAL	5.5
1	A	84	GLN	5.4
1	A	206	ASN	5.4
1	A	636	LEU	5.4
1	A	721	LEU	5.4
1	A	787	HIS	5.3
1	A	642	GLY	5.3
1	A	96	PRO	5.3
1	A	304	VAL	5.3
1	A	164	GLU	5.3
1	A	127	ILE	5.2
1	A	842	SER	5.2
1	A	209	ALA	5.2
1	A	467	LEU	5.2
1	A	565	ASN	5.2
1	A	203	LEU	5.2
1	A	540	ARG	5.2
1	A	302	ASN	5.1
1	A	54	VAL	5.1
1	A	43	ARG	5.1
1	A	62	ILE	5.1
1	A	288	ALA	5.1
1	A	617	LYS	5.1
1	A	272	GLU	5.0
1	A	836	HIS	5.0
1	A	419	ARG	5.0
1	A	493	LEU	5.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	720	THR	5.0
1	A	489	ASP	4.9
1	A	424	PHE	4.9
1	A	627	GLY	4.8
1	A	248	SER	4.8
1	A	670	ARG	4.8
1	A	649	SER	4.8
1	A	76	ASP	4.8
1	A	763	ASN	4.8
1	A	841	GLU	4.7
1	A	479	PRO	4.7
1	A	405	GLY	4.7
1	A	853	LYS	4.7
1	A	897	GLY	4.7
1	A	610	GLN	4.6
1	A	603	LEU	4.6
1	A	891	SER	4.6
1	A	171	VAL	4.6
1	A	951	MET	4.6
1	A	310	GLN	4.6
1	A	470	GLU	4.6
1	A	285	GLU	4.6
1	A	378	GLY	4.6
1	A	476	ASP	4.6
1	A	601	ASP	4.6
1	A	594	PHE	4.6
1	A	126	LEU	4.6
1	A	129	CYS	4.6
1	A	494	TYR	4.5
1	A	383	ALA	4.5
1	A	231	ASP	4.5
1	A	238	ASP	4.5
1	A	752	LEU	4.5
1	A	75	SER	4.5
1	A	755	ASN	4.5
1	A	731	SER	4.5
1	A	719	ILE	4.4
1	A	794	ALA	4.4
1	A	815	LYS	4.4
1	A	204	THR	4.4
1	A	604	VAL	4.4
1	A	834	ARG	4.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	184	ILE	4.4
1	A	139	LEU	4.3
1	A	276	THR	4.3
1	A	485	ALA	4.3
1	A	863	ILE	4.3
1	A	578	LEU	4.2
1	A	101	GLN	4.2
1	A	264	SER	4.2
1	A	104	ASN	4.2
1	A	344	ARG	4.2
1	A	290	ASN	4.2
1	A	624	THR	4.2
1	A	328	ARG	4.2
1	A	396	LEU	4.2
1	A	409	ASN	4.1
1	A	633	GLN	4.1
1	A	379	THR	4.1
1	A	581	TYR	4.1
1	A	556	GLN	4.1
1	A	45	GLU	4.0
1	A	505	PRO	4.0
1	A	539	GLU	4.0
1	A	734	ARG	4.0
1	A	109	SER	4.0
1	A	623	ILE	4.0
1	A	628	ASP	4.0
1	A	117	LEU	4.0
1	A	435	ILE	4.0
1	A	119	ILE	3.9
1	A	590	VAL	3.9
1	A	868	PRO	3.9
1	A	943	ARG	3.9
1	A	47	ALA	3.9
1	A	511	GLN	3.9
1	A	614	PRO	3.9
1	A	938	PRO	3.9
1	A	89	GLU	3.9
1	A	249	SER	3.8
1	A	422	PRO	3.8
1	A	391	PRO	3.8
1	A	263	VAL	3.8
1	A	477	SER	3.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	106	PRO	3.8
1	A	122	LYS	3.8
1	A	153	HIS	3.8
1	A	229	PRO	3.8
1	A	406	LEU	3.7
1	A	284	LYS	3.7
1	A	675	LYS	3.7
1	A	469	TYR	3.7
1	A	779	GLU	3.7
1	A	592	CYS	3.7
1	A	218	HIS	3.7
1	A	181	LYS	3.7
1	A	55	VAL	3.6
1	A	945	SER	3.6
1	A	532	HIS	3.6
1	A	618	GLU	3.6
1	A	510	GLY	3.6
1	A	387	VAL	3.6
1	A	580	THR	3.6
1	A	767	SER	3.6
1	A	542	GLU	3.5
1	A	358	ILE	3.5
1	A	609	ILE	3.5
1	A	939	GLU	3.5
1	A	325	LEU	3.5
1	A	140	LEU	3.5
1	A	300	GLU	3.5
1	A	305	GLU	3.5
1	A	412	LEU	3.4
1	A	473	GLN	3.4
1	A	388	LYS	3.4
1	A	175	TYR	3.4
1	A	491	GLU	3.4
1	A	934	ALA	3.4
1	A	935	VAL	3.4
1	A	105	GLU	3.4
1	A	838	PRO	3.4
1	A	548	ARG	3.3
1	A	575	LEU	3.3
1	A	866	THR	3.3
1	A	408	MET	3.3
1	A	118	LEU	3.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	840	HIS	3.2
1	A	786	GLY	3.2
1	A	839	ALA	3.2
1	A	643	MET	3.2
1	A	718	PRO	3.2
1	A	428	ARG	3.2
1	A	87	PRO	3.2
1	A	79	VAL	3.2
1	A	499	ARG	3.2
1	A	572	TYR	3.2
1	A	597	LEU	3.2
1	A	402	ASN	3.2
1	A	159	LEU	3.1
1	A	48	GLU	3.1
1	A	766	TYR	3.1
1	A	631	VAL	3.1
1	A	806	MET	3.1
1	A	301	ARG	3.1
1	A	639	LYS	3.1
1	A	663	SER	3.0
1	A	278	LYS	3.0
1	A	212	MET	3.0
1	A	584	PRO	3.0
1	A	166	GLY	3.0
1	A	128	ALA	3.0
1	A	138	LYS	3.0
1	A	180	ASP	3.0
1	A	765	SER	3.0
1	A	70	ILE	3.0
1	A	52	HIS	3.0
1	A	292	TYR	3.0
1	A	93	LYS	3.0
1	A	211	GLY	3.0
1	A	864	PRO	3.0
1	A	346	MET	3.0
1	A	394	SER	3.0
1	A	86	GLY	3.0
1	A	50	PHE	3.0
1	A	441	ASN	2.9
1	A	220	GLU	2.9
1	A	356	ILE	2.9
1	A	884	LEU	2.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	698	GLU	2.9
1	A	367	LYS	2.9
1	A	896	ALA	2.9
1	A	345	LYS	2.9
1	A	312	ALA	2.9
1	A	656	SER	2.9
1	A	905	ASP	2.9
1	A	364	ASP	2.8
1	A	591	ASN	2.8
1	A	553	GLU	2.8
1	A	762	GLN	2.8
1	A	500	GLN	2.8
1	A	178	PHE	2.8
1	A	743	GLN	2.8
1	A	410	ALA	2.8
1	A	645	PHE	2.8
1	A	654	ASN	2.8
1	A	82	THR	2.8
1	A	465	ASN	2.7
1	A	577	VAL	2.7
1	A	156	GLU	2.7
1	A	916	GLU	2.7
1	A	169	PHE	2.7
1	A	821	GLU	2.7
1	A	878	ARG	2.7
1	A	634	LEU	2.7
1	A	501	LEU	2.7
1	A	741	ASN	2.7
1	A	208	GLU	2.7
1	A	365	ARG	2.7
1	A	827	SER	2.7
1	A	216	VAL	2.7
1	A	319	ALA	2.6
1	A	576	LEU	2.6
1	A	587	SER	2.6
1	A	646	ALA	2.6
1	A	95	TYR	2.6
1	A	498	GLU	2.6
1	A	829	GLY	2.6
1	A	219	ASP	2.6
1	A	329	PRO	2.6
1	A	899	GLU	2.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	522	GLY	2.6
1	A	173	VAL	2.6
1	A	504	VAL	2.6
1	A	192	PRO	2.6
1	A	911	GLU	2.6
1	A	844	TRP	2.6
1	A	648	THR	2.6
1	A	309	LEU	2.5
1	A	506	VAL	2.5
1	A	714	GLU	2.5
1	A	837	CYS	2.5
1	A	80	LEU	2.5
1	A	846	GLU	2.5
1	A	454	LEU	2.5
1	A	495	ILE	2.5
1	A	244	VAL	2.5
1	A	513	ARG	2.5
1	A	143	GLU	2.5
1	A	747	GLN	2.5
1	A	155	LYS	2.5
1	A	39	PHE	2.5
1	A	252	PHE	2.5
1	A	77	LEU	2.5
1	A	547	PRO	2.5
1	A	41	THR	2.5
1	A	259	GLN	2.5
1	A	870	GLU	2.5
1	A	894	LYS	2.5
1	A	608	GLN	2.4
1	A	201	ARG	2.4
1	A	461	GLY	2.4
1	A	824	TRP	2.4
1	A	555	LYS	2.4
1	A	152	PHE	2.4
1	A	217	PHE	2.4
1	A	102	THR	2.4
1	A	709	ILE	2.4
1	A	865	VAL	2.4
1	A	650	PHE	2.4
1	A	403	PHE	2.4
1	A	363	ASN	2.4
1	A	851	ASN	2.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	668	PRO	2.4
1	A	130	GLY	2.4
1	A	754	PHE	2.4
1	A	484	MET	2.4
1	A	883	GLY	2.3
1	A	910	ALA	2.3
1	A	411	PRO	2.3
1	A	307	ARG	2.3
1	A	251	ASN	2.3
1	A	257	THR	2.3
1	A	583	VAL	2.3
1	A	912	GLN	2.3
1	A	440	LYS	2.3
1	A	434	VAL	2.3
1	A	711	VAL	2.3
1	A	335	PHE	2.3
1	A	845	LEU	2.3
1	A	690	GLN	2.3
1	A	579	GLU	2.2
1	A	707	ASP	2.2
1	A	582	ASN	2.2
1	A	710	LEU	2.2
1	A	848	SER	2.2
1	A	56	ASP	2.2
1	A	431	MET	2.2
1	A	73	LEU	2.2
1	A	716	ILE	2.2
1	A	437	TYR	2.2
1	A	771	MET	2.2
1	A	727	PRO	2.2
1	A	466	ALA	2.1
1	A	691	GLU	2.1
1	A	395	ALA	2.1
1	A	607	ASN	2.1
1	A	830	GLN	2.1
1	A	930	GLU	2.1
1	A	749	VAL	2.1
1	A	521	SER	2.1
1	A	872	GLY	2.1
1	A	256	LEU	2.1
1	A	125	ARG	2.1
1	A	232	THR	2.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	275	TYR	2.1
1	A	114	ASN	2.1
1	A	289	PHE	2.1
1	A	908	ILE	2.1
1	A	59	THR	2.1
1	A	796	ASN	2.1
1	A	150	GLU	2.1
1	A	571	GLN	2.0
1	A	348	SER	2.0
1	A	282	LEU	2.0
1	A	520	GLY	2.0
1	A	83	HIS	2.0
1	A	277	SER	2.0
1	A	725	ASN	2.0
1	A	861	GLU	2.0

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.