



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 7, 2026 – 01:49 AM UTC

PDB ID : 1LIO / pdb_00001lio
Title : STRUCTURE OF APO T. GONDII ADENOSINE KINASE
Authors : Schumacher, M.A.; Scott, D.M.; Mathews, I.I.; Ealick, S.E.; Brennan, R.G.
Deposited on : 2002-04-17
Resolution : 2.50 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

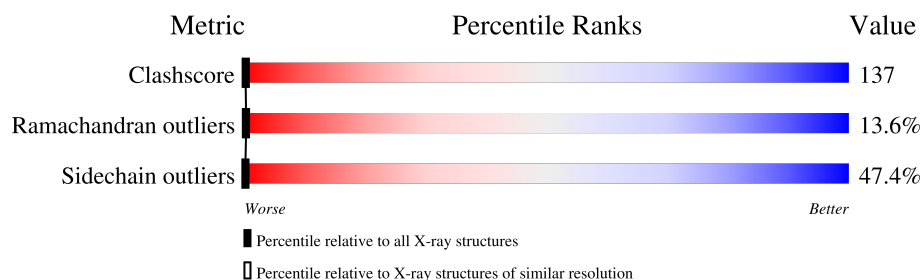
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 2.50 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	6492 (2.50-2.50)
Ramachandran outliers	187476	6378 (2.50-2.50)
Sidechain outliers	187428	6380 (2.50-2.50)

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	363	

2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2599 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 adenosine kinase.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	329	2420	1537	413	455	15	0	0	0

There are 4 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	126	THR	VAL	conflict	UNP Q9TVW2
A	150	ILE	LEU	conflict	UNP Q9TVW2
A	240	ASP	GLU	conflict	UNP Q9TVW2
A	327	GLY	ALA	conflict	UNP Q9TVW2

- Molecule 2 is water.

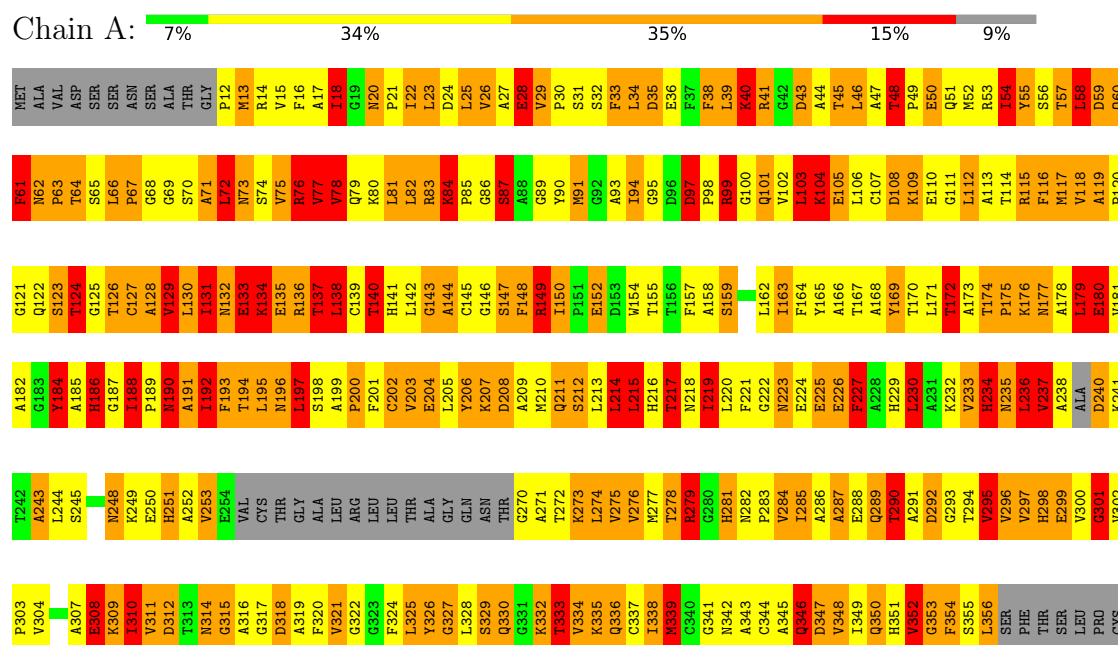
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
2	A	179	Total	O	0	0
			179	179		

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: adenosine kinase



4 Data and refinement statistics

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

Property	Value	Source
Space group	P 1 21 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	47.10 Å 68.00 Å 56.80 Å 90.00° 100.80° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	10.00 – 2.50	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	99.0 (10.00-2.50)	Depositor
R_{merge}	0.10	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
Refinement program	TNT	Depositor
R, R_{free}	0.198 , 0.260	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	2599	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	50.0	wwPDB-VP

5 Model quality ⓘ

5.1 Standard geometry ⓘ

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	1.45	28/2465 (1.1%)	2.08	121/3350 (3.6%)

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

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	6	0

All (28) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	116	PHE	CA-C	-9.84	1.40	1.52
1	A	159	SER	N-CA	8.32	1.56	1.46
1	A	148	PHE	C-N	-8.27	1.22	1.33
1	A	192	ILE	CA-CB	8.25	1.66	1.54
1	A	38	PHE	N-CA	8.20	1.56	1.46
1	A	116	PHE	C-N	-7.80	1.23	1.33
1	A	289	GLN	C-N	-7.25	1.23	1.33
1	A	137	THR	CA-CB	7.12	1.64	1.53
1	A	193	PHE	CA-CB	-7.10	1.42	1.53
1	A	39	LEU	CA-C	-7.02	1.44	1.52
1	A	149	ARG	CA-C	-6.86	1.44	1.53
1	A	73	ASN	CA-CB	-6.79	1.42	1.53
1	A	149	ARG	C-N	-6.21	1.26	1.33
1	A	290	THR	N-CA	-6.17	1.38	1.46
1	A	40	LYS	CA-C	-6.11	1.45	1.52
1	A	203	VAL	CA-CB	-6.00	1.46	1.54
1	A	124	THR	CA-CB	5.75	1.62	1.53
1	A	54	ILE	CA-CB	5.63	1.61	1.54
1	A	339	MET	CA-CB	5.63	1.63	1.53
1	A	148	PHE	N-CA	-5.55	1.39	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	154	TRP	NE1-CE2	-5.33	1.31	1.37
1	A	64	THR	CA-CB	5.28	1.59	1.52
1	A	40	LYS	N-CA	-5.26	1.39	1.45
1	A	184	TYR	CB-CG	5.16	1.63	1.51
1	A	149	ARG	N-CA	-5.14	1.40	1.46
1	A	87	SER	CA-CB	5.13	1.62	1.53
1	A	301	GLY	N-CA	5.10	1.52	1.45
1	A	105	GLU	CG-CD	5.01	1.64	1.52

All (121) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	292	ASP	CA-CB-CG	12.35	124.95	112.60
1	A	251	HIS	CB-CA-C	11.48	128.94	109.53
1	A	326	TYR	CB-CA-C	-11.10	90.28	111.03
1	A	38	PHE	CA-CB-CG	-9.25	104.55	113.80
1	A	97	ASP	CB-CA-C	9.07	122.49	108.88
1	A	40	LYS	O-C-N	9.07	134.97	123.19
1	A	64	THR	N-CA-CB	8.93	123.70	110.49
1	A	193	PHE	N-CA-CB	8.76	124.31	110.65
1	A	333	THR	N-CA-CB	8.67	125.14	110.49
1	A	180	GLU	N-CA-CB	-8.67	96.38	110.42
1	A	289	GLN	CA-C-N	8.64	133.00	120.82
1	A	289	GLN	C-N-CA	8.64	133.00	120.82
1	A	289	GLN	O-C-N	8.62	136.72	122.93
1	A	103	LEU	N-CA-CB	8.62	124.44	110.40
1	A	194	THR	N-CA-CB	-8.22	96.87	110.68
1	A	237	VAL	N-CA-CB	8.21	124.78	111.23
1	A	104	LYS	CB-CA-C	8.16	123.02	109.56
1	A	124	THR	N-CA-CB	8.14	124.80	110.07
1	A	38	PHE	N-CA-CB	7.87	123.79	110.49
1	A	219	ILE	CB-CA-C	7.80	121.72	110.33
1	A	39	LEU	CA-C-N	-7.73	110.68	122.81
1	A	39	LEU	C-N-CA	-7.73	110.68	122.81
1	A	236	LEU	N-CA-CB	-7.69	97.49	110.49
1	A	348	VAL	CB-CA-C	7.67	123.87	111.29
1	A	310	ILE	N-CA-CB	7.56	123.70	111.23
1	A	241	LYS	N-CA-CB	-7.52	97.78	110.49
1	A	290	THR	N-CA-CB	-7.50	98.22	109.69
1	A	144	ALA	N-CA-C	-7.38	103.84	112.92
1	A	338	ILE	CB-CA-C	-7.36	102.06	112.22
1	A	136	ARG	CB-CA-C	-7.25	97.84	109.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	64	THR	CB-CA-C	7.22	123.81	111.68
1	A	184	TYR	N-CA-C	-7.22	102.59	111.40
1	A	234	HIS	CB-CA-C	7.20	122.55	109.37
1	A	84	LYS	CB-CA-C	7.20	122.48	109.45
1	A	230	LEU	N-CA-C	-7.14	104.19	113.12
1	A	116	PHE	CB-CA-C	-7.13	99.26	110.74
1	A	103	LEU	CB-CA-C	7.05	124.72	109.99
1	A	248	ASN	N-CA-CB	6.95	120.45	110.16
1	A	99	ARG	N-CA-C	-6.95	104.67	113.01
1	A	129	VAL	CB-CA-C	6.92	122.64	111.29
1	A	186	HIS	CB-CA-C	6.92	124.49	110.38
1	A	202	CYS	CB-CA-C	-6.86	99.36	110.74
1	A	211	GLN	CB-CA-C	6.79	122.06	110.79
1	A	179	LEU	CB-CA-C	6.78	122.97	110.56
1	A	137	THR	N-CA-CB	6.67	121.23	110.77
1	A	61	PHE	CB-CA-C	-6.65	97.18	110.42
1	A	240	ASP	CB-CA-C	6.65	122.73	110.10
1	A	179	LEU	N-CA-CB	6.61	120.43	110.19
1	A	55	TYR	CA-CB-CG	-6.51	102.18	113.90
1	A	204	GLU	CB-CA-C	-6.50	99.80	110.85
1	A	169	TYR	O-C-N	6.42	128.93	122.12
1	A	71	ALA	N-CA-C	-6.33	104.46	111.36
1	A	329	SER	N-CA-C	-6.20	105.47	113.16
1	A	70	SER	CA-CB-OG	-6.19	98.72	111.10
1	A	55	TYR	CB-CA-C	6.18	120.70	110.81
1	A	38	PHE	O-C-N	6.16	130.78	122.59
1	A	212	SER	CB-CA-C	-6.13	100.49	110.79
1	A	236	LEU	CB-CA-C	-6.05	98.38	110.42
1	A	188	ILE	CG1-CB-CG2	6.02	128.77	110.70
1	A	136	ARG	N-CA-CB	-5.97	101.25	110.56
1	A	356	LEU	CB-CA-C	5.95	121.39	110.10
1	A	108	ASP	CB-CA-C	-5.93	101.83	110.96
1	A	295	VAL	O-C-N	5.93	130.17	122.94
1	A	229	HIS	N-CA-CB	5.91	119.48	110.44
1	A	137	THR	CA-C-N	-5.90	114.67	122.99
1	A	137	THR	C-N-CA	-5.90	114.67	122.99
1	A	234	HIS	N-CA-CB	5.89	120.27	110.85
1	A	227	PHE	N-CA-C	-5.87	104.95	111.71
1	A	39	LEU	CB-CA-C	-5.78	99.23	109.70
1	A	77	VAL	O-C-N	5.76	129.77	122.57
1	A	206	TYR	N-CA-CB	5.71	120.15	110.49
1	A	91	MET	CB-CA-C	5.69	119.62	109.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	253	VAL	CB-CA-C	-5.68	101.98	111.29
1	A	279	ARG	NE-CZ-NH2	5.68	124.31	119.20
1	A	41	ARG	NE-CZ-NH2	5.65	124.29	119.20
1	A	245	SER	CB-CA-C	5.65	119.91	110.92
1	A	40	LYS	N-CA-CB	5.61	120.67	111.08
1	A	229	HIS	N-CA-C	-5.61	106.21	113.16
1	A	78	VAL	N-CA-CB	-5.60	101.98	111.23
1	A	61	PHE	N-CA-CB	-5.59	101.04	110.49
1	A	133	GLU	CB-CA-C	5.57	120.70	110.11
1	A	144	ALA	O-C-N	5.57	129.03	122.34
1	A	132	ASN	N-CA-C	-5.57	98.94	110.80
1	A	54	ILE	CA-CB-CG1	5.55	119.84	110.40
1	A	217	THR	CB-CA-C	5.47	118.89	110.14
1	A	115	ARG	NE-CZ-NH2	5.47	124.12	119.20
1	A	219	ILE	N-CA-CB	5.44	119.46	111.52
1	A	136	ARG	NE-CZ-NH1	-5.44	116.06	121.50
1	A	110	GLU	CB-CG-CD	-5.42	103.38	112.60
1	A	193	PHE	CB-CA-C	-5.42	101.17	110.16
1	A	72	LEU	CA-CB-CG	-5.41	97.36	116.30
1	A	330	GLN	CB-CA-C	5.40	119.79	111.85
1	A	38	PHE	CB-CA-C	-5.39	99.69	110.42
1	A	200	PRO	N-CA-C	-5.38	106.52	113.57
1	A	318	ASP	N-CA-C	-5.35	106.25	112.89
1	A	140	THR	CB-CA-C	-5.35	99.28	109.66
1	A	33	PHE	O-C-N	5.33	128.24	122.11
1	A	110	GLU	N-CA-CB	-5.32	101.80	110.42
1	A	348	VAL	N-CA-CB	5.25	119.90	111.23
1	A	354	PHE	N-CA-CB	5.24	119.45	111.70
1	A	339	MET	CA-CB-CG	5.23	124.55	114.10
1	A	129	VAL	CG1-CB-CG2	5.21	122.25	110.80
1	A	290	THR	CB-CA-C	5.20	118.01	109.90
1	A	180	GLU	CB-CG-CD	-5.17	103.81	112.60
1	A	190	ASN	N-CA-CB	5.16	119.21	110.49
1	A	214	LEU	CB-CA-C	-5.13	102.32	110.84
1	A	119	ALA	CA-C-N	5.13	126.25	119.84
1	A	119	ALA	C-N-CA	5.13	126.25	119.84
1	A	138	LEU	N-CA-C	5.12	117.25	108.90
1	A	18	ILE	CB-CA-C	5.10	117.31	110.42
1	A	327	GLY	N-CA-C	-5.09	108.99	115.31
1	A	78	VAL	O-C-N	5.09	128.93	122.57
1	A	63	PRO	CB-CA-C	-5.08	103.17	111.56
1	A	149	ARG	NE-CZ-NH2	5.08	123.77	119.20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	292	ASP	N-CA-CB	5.07	121.22	110.67
1	A	128	ALA	CB-CA-C	5.04	117.07	110.06
1	A	107	CYS	N-CA-C	-5.03	105.92	111.71
1	A	67	PRO	CB-CA-C	5.02	117.45	110.17
1	A	215	LEU	CB-CA-C	5.02	119.12	110.79
1	A	33	PHE	CA-CB-CG	-5.01	108.79	113.80
1	A	346	GLN	CB-CA-C	-5.01	102.16	110.68

All (6) chirality outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atom
1	A	103	LEU	CA
1	A	124	THR	CA
1	A	179	LEU	CA
1	A	188	ILE	CA
1	A	308	GLU	CA
1	A	334	VAL	CA

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	2420	0	2385	658	4
2	A	179	0	0	39	4
All	All	2599	0	2385	658	4

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 137.

All (658) 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:150:ILE:HD11	1:A:177:ASN:CA	1.24	1.62
1:A:150:ILE:CD1	1:A:177:ASN:HA	1.26	1.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:155:THR:CG2	1:A:184:TYR:CE1	1.97	1.47
1:A:155:THR:HG21	1:A:184:TYR:CD1	1.69	1.26
1:A:150:ILE:HG13	1:A:177:ASN:ND2	1.53	1.24
1:A:162:LEU:HD21	1:A:189:PRO:CG	1.69	1.22
1:A:155:THR:CG2	1:A:184:TYR:CD1	2.21	1.21
1:A:155:THR:HG21	1:A:184:TYR:CE1	1.67	1.19
1:A:162:LEU:CD2	1:A:189:PRO:HG2	1.72	1.18
1:A:284:VAL:O	1:A:285:ILE:HD13	1.43	1.17
1:A:290:THR:OG1	1:A:294:THR:O	1.60	1.16
1:A:40:LYS:O	1:A:43:ASP:HB2	1.46	1.15
1:A:192:ILE:HD13	1:A:271:ALA:HB1	1.21	1.15
1:A:162:LEU:HD21	1:A:189:PRO:HG2	1.19	1.14
1:A:48:THR:OG1	1:A:49:PRO:HD2	1.47	1.14
1:A:201:PHE:HA	1:A:205:LEU:HD13	1.18	1.14
1:A:287:ALA:HB1	1:A:296:VAL:O	1.47	1.13
1:A:171:LEU:HD23	2:A:521:HOH:O	0.96	1.13
1:A:162:LEU:CD2	1:A:189:PRO:CG	2.28	1.12
1:A:211:GLN:HA	1:A:214:LEU:HD22	1.33	1.11
1:A:312:ASP:HB3	1:A:349:ILE:HG13	1.30	1.10
1:A:131:ILE:HG23	1:A:136:ARG:HD3	1.28	1.10
1:A:18:ILE:HG22	1:A:166:ALA:HB2	1.32	1.09
1:A:155:THR:HG22	1:A:184:TYR:CE1	1.84	1.09
1:A:115:ARG:HD2	1:A:157:PHE:CD2	1.88	1.07
1:A:28:GLU:O	1:A:28:GLU:HG2	1.55	1.06
1:A:27:ALA:HB2	1:A:58:LEU:HD21	1.38	1.04
1:A:272:THR:CG2	1:A:273:LYS:H	1.67	1.04
1:A:115:ARG:HD2	1:A:157:PHE:CE2	1.93	1.04
1:A:194:THR:HG21	2:A:542:HOH:O	1.56	1.04
1:A:272:THR:HG23	1:A:273:LYS:N	1.71	1.03
1:A:163:ILE:HD13	1:A:328:LEU:HD23	1.39	1.03
1:A:240:ASP:O	2:A:514:HOH:O	1.75	1.03
1:A:283:PRO:HB3	1:A:301:GLY:HA2	1.40	1.02
1:A:222:GLY:O	1:A:278:THR:HG23	1.60	1.01
1:A:23:LEU:HD12	1:A:24:ASP:H	1.23	1.01
1:A:285:ILE:HD12	1:A:299:GLU:HG2	1.40	1.01
1:A:272:THR:HG23	1:A:273:LYS:H	0.86	1.00
1:A:244:LEU:CB	2:A:514:HOH:O	2.09	1.00
1:A:155:THR:CB	1:A:184:TYR:CE1	2.46	0.99
1:A:302:VAL:HG22	1:A:304:VAL:HG23	1.44	0.99
1:A:115:ARG:HB2	1:A:157:PHE:CZ	1.97	0.98
1:A:194:THR:HG22	1:A:219:ILE:HB	1.44	0.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:23:LEU:HD12	1:A:24:ASP:N	1.79	0.97
1:A:18:ILE:HG22	1:A:166:ALA:CB	1.94	0.97
1:A:283:PRO:CB	1:A:301:GLY:HA2	1.96	0.96
1:A:29:VAL:HG21	1:A:33:PHE:CD2	2.00	0.96
1:A:40:LYS:HG3	1:A:41:ARG:H	1.26	0.96
1:A:91:MET:HB3	1:A:148:PHE:CZ	2.02	0.95
1:A:150:ILE:CG1	1:A:177:ASN:HD22	1.79	0.95
1:A:150:ILE:HG13	1:A:177:ASN:HD22	1.07	0.95
1:A:91:MET:HB3	1:A:148:PHE:HZ	1.31	0.94
1:A:279:ARG:HH12	1:A:283:PRO:CD	1.80	0.94
1:A:279:ARG:NH1	1:A:283:PRO:O	2.01	0.94
1:A:76:ARG:HG2	1:A:76:ARG:HH11	1.32	0.93
1:A:75:VAL:O	1:A:78:VAL:HB	1.68	0.93
1:A:277:MET:HE1	2:A:514:HOH:O	1.69	0.92
1:A:76:ARG:HH11	1:A:76:ARG:CG	1.83	0.91
1:A:155:THR:CG2	1:A:184:TYR:HE1	1.84	0.91
1:A:285:ILE:CD1	1:A:299:GLU:HG2	2.00	0.91
1:A:175:PRO:O	1:A:179:LEU:HD13	1.71	0.90
1:A:155:THR:HG22	1:A:184:TYR:CD1	1.97	0.90
1:A:48:THR:CB	1:A:49:PRO:HD2	2.02	0.90
1:A:219:ILE:HD11	1:A:274:LEU:HD23	1.52	0.89
1:A:223:ASN:ND2	1:A:225:GLU:H	1.70	0.89
1:A:29:VAL:HG23	1:A:61:PHE:CZ	2.07	0.89
1:A:90:TYR:H	1:A:114:THR:HA	1.38	0.89
1:A:283:PRO:HB3	1:A:301:GLY:CA	2.03	0.88
1:A:281:HIS:O	1:A:302:VAL:HG12	1.72	0.88
1:A:277:MET:CE	2:A:514:HOH:O	2.21	0.88
1:A:324:PHE:HE1	1:A:338:ILE:HG12	1.39	0.88
1:A:232:LYS:NZ	2:A:529:HOH:O	1.78	0.88
1:A:163:ILE:CD1	1:A:328:LEU:HD23	2.03	0.88
1:A:33:PHE:HE1	1:A:57:THR:HG21	1.39	0.88
1:A:284:VAL:C	1:A:285:ILE:HD13	1.98	0.87
1:A:119:ALA:HB1	1:A:122:GLN:HG3	1.56	0.86
1:A:155:THR:HB	1:A:184:TYR:CE1	2.08	0.86
1:A:162:LEU:HD21	1:A:189:PRO:HG3	1.57	0.86
1:A:167:THR:HG23	1:A:169:TYR:HB2	1.58	0.86
1:A:288:GLU:H	1:A:296:VAL:HG22	1.40	0.85
1:A:67:PRO:HB2	1:A:76:ARG:NH2	1.91	0.85
1:A:48:THR:CB	1:A:49:PRO:CD	2.54	0.85
1:A:283:PRO:CA	1:A:301:GLY:HA2	2.06	0.85
1:A:90:TYR:HB3	1:A:114:THR:HG22	1.59	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:29:VAL:HG21	1:A:33:PHE:CG	2.12	0.85
1:A:204:GLU:HB3	1:A:205:LEU:HD12	1.59	0.85
1:A:73:ASN:HB3	1:A:354:PHE:CE2	2.11	0.84
1:A:131:ILE:HG23	1:A:136:ARG:CD	2.07	0.84
1:A:119:ALA:HB1	1:A:122:GLN:CG	2.07	0.84
1:A:34:LEU:C	1:A:34:LEU:HD23	2.02	0.84
1:A:288:GLU:O	1:A:296:VAL:HG13	1.76	0.84
1:A:211:GLN:HA	1:A:214:LEU:CD2	2.08	0.84
1:A:31:SER:O	1:A:34:LEU:HB3	1.76	0.83
1:A:25:LEU:CD1	1:A:65:SER:HB3	2.07	0.83
1:A:279:ARG:HB3	1:A:282:ASN:HB2	1.60	0.83
1:A:287:ALA:CB	1:A:296:VAL:O	2.24	0.83
1:A:312:ASP:CB	1:A:349:ILE:HG13	2.06	0.83
1:A:192:ILE:HD13	1:A:271:ALA:CB	2.07	0.83
1:A:175:PRO:HA	2:A:521:HOH:O	1.78	0.83
1:A:201:PHE:HA	1:A:205:LEU:CD1	2.06	0.82
1:A:150:ILE:HD13	1:A:180:GLU:HG2	1.60	0.82
1:A:40:LYS:HG3	1:A:41:ARG:N	1.92	0.82
1:A:130:LEU:H	1:A:130:LEU:HD22	1.44	0.82
1:A:211:GLN:CA	1:A:214:LEU:HD22	2.10	0.81
1:A:25:LEU:HD12	1:A:65:SER:HB3	1.63	0.81
1:A:99:ARG:HH11	1:A:99:ARG:HB2	1.45	0.81
1:A:197:LEU:O	2:A:541:HOH:O	1.91	0.80
1:A:48:THR:OG1	1:A:49:PRO:CD	2.29	0.80
1:A:127:CYS:SG	1:A:138:LEU:HB3	2.22	0.80
1:A:223:ASN:ND2	1:A:225:GLU:N	2.29	0.80
1:A:84:LYS:HG2	1:A:85:PRO:HD2	1.63	0.80
1:A:131:ILE:HG22	1:A:132:ASN:H	1.46	0.80
1:A:192:ILE:CD1	1:A:271:ALA:HB1	2.07	0.80
1:A:281:HIS:HB2	2:A:525:HOH:O	1.80	0.79
1:A:72:LEU:O	1:A:76:ARG:HD3	1.81	0.79
1:A:12:PRO:C	1:A:87:SER:HA	2.07	0.79
1:A:29:VAL:HG13	1:A:33:PHE:HB3	1.65	0.79
1:A:223:ASN:HD21	1:A:225:GLU:H	1.31	0.79
1:A:29:VAL:HG23	1:A:61:PHE:HZ	1.48	0.79
1:A:127:CYS:O	1:A:129:VAL:HG12	1.82	0.78
1:A:176:LYS:O	1:A:180:GLU:HB3	1.83	0.78
1:A:298:HIS:NE2	1:A:334:VAL:HA	1.99	0.78
1:A:16:PHE:HE2	1:A:18:ILE:HD13	1.47	0.78
1:A:223:ASN:HD22	1:A:224:GLU:N	1.82	0.78
1:A:155:THR:HG21	1:A:184:TYR:HD1	1.47	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:155:THR:CB	1:A:184:TYR:HE1	1.93	0.78
1:A:14:ARG:HH12	1:A:329:SER:HB2	1.49	0.78
1:A:115:ARG:CD	1:A:157:PHE:CD2	2.66	0.78
1:A:76:ARG:HB3	1:A:356:LEU:CD1	2.13	0.77
1:A:98:PRO:HA	1:A:101:GLN:HG2	1.66	0.77
1:A:58:LEU:HD12	1:A:128:ALA:HB1	1.64	0.77
1:A:279:ARG:HH12	1:A:283:PRO:N	1.82	0.77
1:A:220:LEU:HD23	1:A:275:VAL:HG23	1.66	0.77
1:A:129:VAL:HG22	1:A:136:ARG:NH1	2.00	0.77
1:A:76:ARG:O	1:A:79:GLN:HB3	1.85	0.77
1:A:298:HIS:HD2	1:A:334:VAL:HB	1.50	0.76
1:A:14:ARG:NH1	1:A:329:SER:HB2	2.01	0.76
1:A:283:PRO:HA	1:A:301:GLY:HA2	1.65	0.76
1:A:132:ASN:HB3	1:A:135:GLU:CD	2.10	0.76
1:A:67:PRO:HB2	1:A:76:ARG:HH21	1.51	0.75
1:A:142:LEU:HD11	2:A:437:HOH:O	1.85	0.75
1:A:106:LEU:HA	1:A:109:LYS:HD2	1.67	0.75
1:A:324:PHE:O	1:A:328:LEU:HB2	1.86	0.75
1:A:40:LYS:CG	1:A:41:ARG:N	2.48	0.75
1:A:81:LEU:HB3	1:A:326:TYR:CD1	2.22	0.75
1:A:48:THR:HG1	1:A:49:PRO:HD2	1.52	0.75
1:A:22:ILE:O	1:A:68:GLY:O	2.04	0.74
1:A:119:ALA:O	1:A:122:GLN:HB2	1.87	0.74
1:A:300:VAL:HG21	1:A:338:ILE:CG2	2.17	0.74
1:A:124:THR:HG23	1:A:125:GLY:H	1.52	0.74
1:A:44:ALA:HB2	1:A:138:LEU:HD22	1.68	0.74
1:A:84:LYS:HG2	1:A:85:PRO:CD	2.16	0.74
1:A:312:ASP:HB3	1:A:349:ILE:CG1	2.15	0.74
1:A:120:PRO:HD3	2:A:418:HOH:O	1.87	0.74
1:A:105:GLU:O	1:A:108:ASP:HB3	1.88	0.73
1:A:192:ILE:HD11	1:A:218:ASN:HB3	1.70	0.73
1:A:150:ILE:H	1:A:177:ASN:ND2	1.86	0.73
1:A:192:ILE:CD1	1:A:218:ASN:HB3	2.20	0.72
1:A:197:LEU:HD23	1:A:221:PHE:O	1.89	0.72
1:A:27:ALA:CB	1:A:58:LEU:HD21	2.19	0.72
1:A:34:LEU:HD21	1:A:39:LEU:O	1.90	0.72
1:A:80:LYS:HE2	1:A:356:LEU:HB3	1.71	0.72
1:A:143:GLY:HA3	2:A:443:HOH:O	1.89	0.72
1:A:119:ALA:HA	2:A:418:HOH:O	1.89	0.72
1:A:132:ASN:HB3	1:A:135:GLU:OE1	1.90	0.72
1:A:29:VAL:CG2	1:A:33:PHE:CG	2.72	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:227:PHE:HE2	1:A:277:MET:HA	1.55	0.72
1:A:169:TYR:O	1:A:172:THR:HB	1.89	0.71
1:A:81:LEU:HD23	1:A:326:TYR:CB	2.20	0.71
1:A:171:LEU:HD22	1:A:175:PRO:HB3	1.72	0.71
1:A:150:ILE:CG1	1:A:177:ASN:ND2	2.41	0.71
1:A:284:VAL:HG11	1:A:338:ILE:HG21	1.70	0.71
1:A:230:LEU:O	1:A:233:VAL:HG12	1.90	0.71
1:A:94:ILE:O	1:A:119:ALA:N	2.24	0.71
1:A:302:VAL:HG22	1:A:304:VAL:CG2	2.20	0.71
1:A:298:HIS:CD2	1:A:334:VAL:HB	2.25	0.71
1:A:279:ARG:HH12	1:A:283:PRO:HD2	1.54	0.71
1:A:17:ALA:HB3	1:A:90:TYR:HD1	1.53	0.70
1:A:101:GLN:HG3	1:A:102:VAL:HG13	1.72	0.70
1:A:103:LEU:HD13	1:A:103:LEU:O	1.91	0.70
1:A:275:VAL:O	1:A:275:VAL:HG13	1.90	0.70
1:A:284:VAL:HG11	1:A:338:ILE:CG2	2.22	0.70
1:A:219:ILE:HD13	1:A:274:LEU:HB2	1.74	0.69
1:A:316:ALA:HB1	1:A:345:ALA:HB1	1.74	0.69
1:A:14:ARG:HG2	2:A:486:HOH:O	1.91	0.69
1:A:82:LEU:CD1	1:A:84:LYS:H	2.06	0.69
1:A:79:GLN:O	1:A:79:GLN:OE1	2.11	0.69
1:A:81:LEU:HD23	1:A:326:TYR:HB2	1.76	0.68
1:A:207:LYS:O	1:A:209:ALA:N	2.27	0.68
1:A:27:ALA:O	1:A:28:GLU:HB3	1.94	0.68
1:A:45:THR:CG2	1:A:46:LEU:N	2.56	0.68
1:A:71:ALA:HB3	1:A:90:TYR:HE1	1.56	0.68
1:A:188:ILE:HB	1:A:189:PRO:C	2.18	0.68
1:A:76:ARG:HB3	1:A:356:LEU:HD12	1.76	0.68
1:A:91:MET:CE	1:A:115:ARG:HD3	2.24	0.68
1:A:201:PHE:CA	1:A:205:LEU:HD13	2.12	0.68
1:A:13:MET:HE2	2:A:438:HOH:O	1.94	0.67
1:A:55:TYR:O	1:A:59:ASP:HB2	1.95	0.67
1:A:150:ILE:HD11	1:A:177:ASN:CB	2.21	0.67
1:A:279:ARG:HD3	1:A:285:ILE:HG12	1.75	0.67
1:A:115:ARG:HH11	1:A:157:PHE:HD2	1.41	0.67
1:A:282:ASN:ND2	2:A:400:HOH:O	2.27	0.67
1:A:20:ASN:OD1	1:A:20:ASN:N	2.27	0.67
1:A:86:GLY:HA2	1:A:113:ALA:HB2	1.77	0.67
1:A:176:LYS:O	1:A:180:GLU:N	2.26	0.67
1:A:197:LEU:CD2	1:A:197:LEU:H	2.07	0.66
1:A:249:LYS:O	1:A:251:HIS:N	2.28	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:223:ASN:HD21	1:A:225:GLU:N	1.88	0.66
1:A:281:HIS:O	1:A:302:VAL:CG1	2.42	0.66
1:A:320:PHE:HE1	1:A:338:ILE:HG23	1.60	0.66
1:A:333:THR:HB	1:A:336:GLN:HB2	1.75	0.66
1:A:150:ILE:CD1	1:A:180:GLU:HG2	2.26	0.66
1:A:29:VAL:HG13	1:A:30:PRO:O	1.96	0.66
1:A:199:ALA:HB3	1:A:201:PHE:CD2	2.31	0.66
1:A:320:PHE:CE1	1:A:338:ILE:HG23	2.31	0.66
1:A:285:ILE:HD12	1:A:299:GLU:CG	2.21	0.65
1:A:350:GLN:HB3	1:A:351:HIS:HD2	1.60	0.65
1:A:131:ILE:HA	1:A:136:ARG:HA	1.79	0.65
1:A:194:THR:HA	1:A:219:ILE:O	1.95	0.65
1:A:62:ASN:ND2	2:A:433:HOH:O	2.29	0.65
1:A:135:GLU:OE1	1:A:135:GLU:N	2.29	0.65
1:A:237:VAL:HG13	1:A:238:ALA:N	2.11	0.65
1:A:155:THR:HB	1:A:184:TYR:HE1	1.57	0.65
1:A:219:ILE:CD1	1:A:274:LEU:HB2	2.27	0.65
1:A:33:PHE:HE1	1:A:57:THR:CG2	2.08	0.65
1:A:219:ILE:CD1	1:A:274:LEU:HD23	2.26	0.65
1:A:227:PHE:CE2	1:A:277:MET:HA	2.32	0.65
1:A:277:MET:HB3	1:A:285:ILE:O	1.97	0.65
1:A:29:VAL:CG1	1:A:33:PHE:HB3	2.27	0.65
1:A:71:ALA:CB	1:A:90:TYR:HE1	2.10	0.65
1:A:16:PHE:CE2	1:A:18:ILE:HD13	2.31	0.65
1:A:177:ASN:O	1:A:181:VAL:HG23	1.96	0.64
1:A:188:ILE:HB	1:A:190:ASN:N	2.12	0.64
1:A:237:VAL:HG13	1:A:238:ALA:H	1.62	0.64
1:A:178:ALA:O	1:A:213:LEU:HD11	1.97	0.64
1:A:196:ASN:C	1:A:196:ASN:HD22	2.05	0.64
1:A:218:ASN:O	1:A:219:ILE:HG12	1.96	0.64
1:A:44:ALA:HA	1:A:138:LEU:O	1.98	0.64
1:A:21:PRO:HB3	1:A:116:PHE:CE2	2.33	0.64
1:A:29:VAL:HG22	1:A:33:PHE:CB	2.27	0.64
1:A:219:ILE:HD13	1:A:274:LEU:CB	2.28	0.64
1:A:99:ARG:HB3	1:A:124:THR:HG22	1.79	0.64
1:A:17:ALA:CB	1:A:90:TYR:HD1	2.10	0.64
1:A:142:LEU:HD22	1:A:145:CYS:SG	2.37	0.63
1:A:77:VAL:HG11	1:A:322:GLY:HA3	1.80	0.63
1:A:279:ARG:NH1	1:A:283:PRO:HD2	2.13	0.63
1:A:74:SER:HA	1:A:318:ASP:O	1.98	0.63
1:A:286:ALA:N	1:A:298:HIS:O	2.17	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:300:VAL:HG21	1:A:338:ILE:HG21	1.80	0.63
1:A:18:ILE:HD12	1:A:91:MET:HB2	1.79	0.63
1:A:341:GLY:O	1:A:344:CYS:HB2	1.99	0.63
1:A:18:ILE:CG1	1:A:148:PHE:HE2	2.12	0.62
1:A:33:PHE:CE1	1:A:57:THR:HG21	2.29	0.62
1:A:287:ALA:CB	1:A:297:VAL:HA	2.29	0.62
1:A:345:ALA:O	1:A:349:ILE:N	2.27	0.62
1:A:134:LYS:N	1:A:135:GLU:OE1	2.32	0.62
1:A:196:ASN:HA	1:A:221:PHE:O	1.99	0.62
1:A:82:LEU:HD12	1:A:84:LYS:H	1.65	0.62
1:A:276:VAL:O	1:A:276:VAL:HG22	1.99	0.62
1:A:18:ILE:HG13	1:A:148:PHE:HE2	1.65	0.62
1:A:182:ALA:HA	1:A:185:ALA:HB3	1.82	0.62
1:A:77:VAL:HG11	1:A:322:GLY:C	2.25	0.61
1:A:130:LEU:HD13	1:A:130:LEU:N	2.13	0.61
1:A:279:ARG:NH1	1:A:283:PRO:CD	2.60	0.61
1:A:133:GLU:N	1:A:135:GLU:OE1	2.34	0.61
1:A:223:ASN:ND2	1:A:224:GLU:N	2.48	0.61
1:A:284:VAL:O	1:A:285:ILE:CD1	2.35	0.61
1:A:300:VAL:O	1:A:301:GLY:O	2.18	0.61
1:A:129:VAL:HG22	1:A:136:ARG:HH12	1.66	0.61
1:A:238:ALA:CB	1:A:243:ALA:HB1	2.30	0.61
1:A:276:VAL:O	1:A:276:VAL:CG2	2.48	0.61
1:A:276:VAL:HG21	1:A:320:PHE:CE2	2.34	0.61
1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:N	2.16	0.61
1:A:127:CYS:HB2	1:A:140:THR:HG23	1.83	0.61
1:A:75:VAL:HG12	1:A:76:ARG:N	2.15	0.61
1:A:134:LYS:O	1:A:136:ARG:HD3	2.01	0.61
1:A:197:LEU:HD21	1:A:220:LEU:HG	1.82	0.61
1:A:275:VAL:O	1:A:275:VAL:CG1	2.48	0.60
1:A:48:THR:HB	1:A:49:PRO:CD	2.31	0.60
1:A:221:PHE:CD2	1:A:321:VAL:HG22	2.36	0.60
1:A:100:GLY:O	1:A:103:LEU:N	2.34	0.60
1:A:352:VAL:HG23	2:A:520:HOH:O	2.01	0.60
1:A:135:GLU:CD	1:A:135:GLU:H	2.01	0.60
1:A:201:PHE:O	1:A:205:LEU:N	2.32	0.60
1:A:314:ASN:O	1:A:316:ALA:N	2.34	0.60
1:A:17:ALA:O	1:A:90:TYR:HA	2.00	0.60
1:A:131:ILE:HD13	1:A:136:ARG:CZ	2.32	0.60
1:A:341:GLY:HA2	1:A:344:CYS:HB2	1.82	0.60
1:A:12:PRO:O	1:A:14:ARG:HG3	2.01	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:18:ILE:HG13	1:A:148:PHE:CE2	2.37	0.60
1:A:126:THR:OG1	1:A:127:CYS:N	2.29	0.60
1:A:155:THR:HG21	1:A:184:TYR:HE1	1.46	0.60
1:A:168:ALA:O	1:A:171:LEU:HG	2.02	0.60
1:A:287:ALA:HB2	1:A:297:VAL:HA	1.83	0.60
1:A:171:LEU:CD2	2:A:521:HOH:O	1.78	0.60
1:A:193:PHE:O	1:A:219:ILE:N	2.31	0.60
1:A:176:LYS:NZ	2:A:492:HOH:O	2.35	0.59
1:A:196:ASN:O	1:A:196:ASN:ND2	2.26	0.59
1:A:131:ILE:CG2	1:A:132:ASN:H	2.04	0.59
1:A:115:ARG:HB2	1:A:157:PHE:CE2	2.35	0.59
1:A:179:LEU:HB3	1:A:213:LEU:HD13	1.85	0.59
1:A:238:ALA:HB1	1:A:243:ALA:HB1	1.83	0.59
1:A:270:GLY:CA	1:A:332:LYS:HD3	2.32	0.59
1:A:162:LEU:HD22	1:A:189:PRO:HG2	1.74	0.59
1:A:223:ASN:ND2	2:A:480:HOH:O	2.34	0.59
1:A:76:ARG:CG	1:A:76:ARG:NH1	2.51	0.59
1:A:73:ASN:O	1:A:76:ARG:HB2	2.03	0.59
1:A:97:ASP:O	1:A:100:GLY:N	2.29	0.59
1:A:334:VAL:HG23	2:A:475:HOH:O	2.01	0.59
1:A:309:LYS:HD3	1:A:350:GLN:HG2	1.85	0.59
1:A:50:GLU:HG2	1:A:51:GLN:HG3	1.84	0.59
1:A:321:VAL:O	1:A:325:LEU:HG	2.03	0.59
1:A:140:THR:HG22	1:A:141:HIS:H	1.69	0.58
1:A:325:LEU:HD22	2:A:542:HOH:O	2.03	0.58
1:A:350:GLN:NE2	2:A:378:HOH:O	2.36	0.58
1:A:170:THR:HG21	1:A:178:ALA:HB2	1.85	0.58
1:A:300:VAL:CG2	1:A:338:ILE:HG21	2.34	0.58
1:A:162:LEU:CD2	1:A:189:PRO:CD	2.81	0.58
1:A:169:TYR:HE2	1:A:201:PHE:HE2	1.52	0.58
1:A:55:TYR:HE2	1:A:128:ALA:H	1.50	0.58
1:A:226:GLU:O	1:A:230:LEU:N	2.36	0.58
1:A:16:PHE:CD1	1:A:158:ALA:HB2	2.39	0.58
1:A:34:LEU:C	1:A:34:LEU:CD2	2.74	0.58
1:A:57:THR:HA	1:A:60:GLN:OE1	2.04	0.58
1:A:95:GLY:HA2	1:A:119:ALA:H	1.69	0.58
1:A:335:LYS:O	1:A:339:MET:N	2.31	0.58
1:A:73:ASN:HB3	1:A:354:PHE:CZ	2.37	0.58
1:A:202:CYS:O	1:A:206:TYR:HB2	2.04	0.58
1:A:336:GLN:HA	1:A:336:GLN:OE1	2.03	0.58
1:A:309:LYS:CD	1:A:350:GLN:HG2	2.34	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:324:PHE:CE1	1:A:338:ILE:HG12	2.31	0.57
1:A:45:THR:HG23	1:A:46:LEU:N	2.19	0.57
1:A:47:ALA:HB2	1:A:139:CYS:SG	2.44	0.57
1:A:220:LEU:HB3	1:A:275:VAL:HG23	1.86	0.57
1:A:301:GLY:O	1:A:302:VAL:HB	2.04	0.57
1:A:90:TYR:N	1:A:114:THR:HA	2.16	0.57
1:A:327:GLY:HA3	2:A:453:HOH:O	2.05	0.57
1:A:220:LEU:HB3	1:A:275:VAL:HA	1.86	0.57
1:A:279:ARG:NH1	1:A:283:PRO:N	2.53	0.57
1:A:300:VAL:HG21	1:A:338:ILE:HG22	1.86	0.57
1:A:29:VAL:HG11	1:A:33:PHE:HD2	1.70	0.57
1:A:113:ALA:CB	2:A:438:HOH:O	2.51	0.57
1:A:333:THR:CB	1:A:336:GLN:HB2	2.35	0.57
1:A:68:GLY:HA2	1:A:72:LEU:HB3	1.86	0.56
1:A:155:THR:HB	1:A:184:TYR:CZ	2.39	0.56
1:A:167:THR:CG2	1:A:169:TYR:HB2	2.34	0.56
1:A:270:GLY:N	1:A:332:LYS:HD3	2.19	0.56
1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:HD13	2.21	0.56
1:A:328:LEU:HG	1:A:328:LEU:O	2.05	0.56
1:A:75:VAL:CG1	1:A:112:LEU:HD21	2.36	0.56
1:A:102:VAL:O	1:A:106:LEU:HB2	2.06	0.56
1:A:182:ALA:HB1	1:A:216:HIS:O	2.06	0.56
1:A:79:GLN:NE2	1:A:111:GLY:O	2.39	0.55
1:A:140:THR:HG22	1:A:141:HIS:N	2.21	0.55
1:A:210:MET:O	1:A:214:LEU:HD22	2.06	0.55
1:A:18:ILE:CD1	1:A:91:MET:HB2	2.35	0.55
1:A:149:ARG:O	1:A:150:ILE:C	2.47	0.55
1:A:220:LEU:HD23	1:A:275:VAL:CG2	2.36	0.55
1:A:308:GLU:C	1:A:310:ILE:H	2.14	0.55
1:A:94:ILE:HD11	1:A:118:VAL:HG23	1.88	0.55
1:A:99:ARG:HH11	1:A:99:ARG:CB	2.15	0.55
1:A:300:VAL:HB	2:A:537:HOH:O	2.07	0.55
1:A:82:LEU:O	1:A:83:ARG:HB2	2.07	0.55
1:A:12:PRO:O	1:A:87:SER:HA	2.06	0.55
1:A:162:LEU:HD23	1:A:189:PRO:CD	2.35	0.55
1:A:284:VAL:CG1	1:A:338:ILE:HG21	2.35	0.55
1:A:91:MET:HE3	1:A:115:ARG:HD3	1.89	0.55
1:A:197:LEU:H	1:A:197:LEU:HD22	1.71	0.55
1:A:283:PRO:HA	1:A:301:GLY:CA	2.35	0.55
1:A:300:VAL:CG1	1:A:335:LYS:HG2	2.36	0.55
1:A:307:ALA:O	1:A:310:ILE:HG12	2.06	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:314:ASN:O	1:A:317:GLY:N	2.35	0.55
1:A:123:SER:O	1:A:144:ALA:HB1	2.07	0.55
1:A:181:VAL:O	1:A:185:ALA:HB2	2.07	0.55
1:A:195:LEU:N	1:A:219:ILE:O	2.34	0.55
1:A:221:PHE:CG	1:A:321:VAL:HG22	2.42	0.55
1:A:210:MET:O	1:A:214:LEU:HD13	2.07	0.54
1:A:311:VAL:O	1:A:312:ASP:HB2	2.06	0.54
1:A:316:ALA:HB2	1:A:349:ILE:HB	1.89	0.54
1:A:34:LEU:HD23	1:A:35:ASP:N	2.21	0.54
1:A:22:ILE:HG23	1:A:68:GLY:O	2.06	0.54
1:A:101:GLN:HA	1:A:104:LYS:CE	2.38	0.54
1:A:164:PHE:HE2	1:A:191:ALA:CB	2.21	0.54
1:A:127:CYS:HA	1:A:139:CYS:O	2.08	0.54
1:A:283:PRO:HB3	1:A:301:GLY:N	2.22	0.54
1:A:324:PHE:HE1	1:A:338:ILE:CG1	2.18	0.54
1:A:22:ILE:CG2	1:A:69:GLY:CA	2.86	0.54
1:A:57:THR:O	1:A:60:GLN:HG3	2.08	0.54
1:A:58:LEU:CD1	1:A:128:ALA:HB1	2.35	0.54
1:A:115:ARG:CD	1:A:157:PHE:CE2	2.81	0.54
1:A:119:ALA:CB	1:A:122:GLN:HB2	2.37	0.54
1:A:77:VAL:HG11	1:A:322:GLY:CA	2.38	0.53
1:A:162:LEU:HD23	1:A:189:PRO:CG	2.31	0.53
1:A:75:VAL:O	1:A:76:ARG:C	2.50	0.53
1:A:95:GLY:O	1:A:97:ASP:N	2.41	0.53
1:A:129:VAL:HG23	1:A:138:LEU:HD12	1.90	0.53
1:A:236:LEU:HD21	2:A:495:HOH:O	2.09	0.53
1:A:45:THR:HG23	1:A:46:LEU:H	1.73	0.53
1:A:276:VAL:HG21	1:A:320:PHE:HE2	1.73	0.53
1:A:14:ARG:O	1:A:15:VAL:HG23	2.09	0.53
1:A:16:PHE:CE1	1:A:158:ALA:HB2	2.44	0.53
1:A:82:LEU:O	1:A:83:ARG:CB	2.57	0.53
1:A:186:HIS:HD2	2:A:470:HOH:O	1.92	0.53
1:A:295:VAL:HG12	1:A:295:VAL:O	2.08	0.53
1:A:119:ALA:CB	1:A:122:GLN:CB	2.87	0.52
1:A:203:VAL:HG12	1:A:204:GLU:N	2.23	0.52
1:A:75:VAL:HG12	1:A:112:LEU:HD21	1.91	0.52
1:A:196:ASN:O	1:A:198:SER:N	2.41	0.52
1:A:223:ASN:HD21	1:A:225:GLU:CB	2.22	0.52
1:A:270:GLY:HA3	1:A:332:LYS:HD3	1.92	0.52
1:A:300:VAL:O	1:A:300:VAL:HG23	2.07	0.52
1:A:82:LEU:HD13	1:A:84:LYS:H	1.75	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:277:MET:O	1:A:277:MET:HG3	2.08	0.52
1:A:238:ALA:HB1	1:A:243:ALA:CB	2.40	0.52
1:A:288:GLU:N	1:A:296:VAL:HG22	2.18	0.52
1:A:22:ILE:CG2	1:A:68:GLY:O	2.58	0.52
1:A:32:SER:O	1:A:33:PHE:C	2.53	0.52
1:A:29:VAL:HG11	1:A:33:PHE:CD2	2.45	0.51
1:A:33:PHE:CD2	1:A:33:PHE:C	2.88	0.51
1:A:291:ALA:C	1:A:293:GLY:H	2.18	0.51
1:A:342:ASN:O	1:A:346:GLN:HB3	2.10	0.51
1:A:297:VAL:HG11	2:A:477:HOH:O	2.09	0.51
1:A:131:ILE:HG22	1:A:132:ASN:N	2.22	0.51
1:A:333:THR:CG2	1:A:336:GLN:HB2	2.40	0.51
1:A:171:LEU:HA	2:A:521:HOH:O	2.10	0.51
1:A:354:PHE:HB3	2:A:530:HOH:O	2.10	0.51
1:A:57:THR:C	1:A:59:ASP:H	2.19	0.51
1:A:79:GLN:C	1:A:79:GLN:CD	2.78	0.51
1:A:249:LYS:C	1:A:251:HIS:H	2.18	0.51
1:A:14:ARG:O	1:A:163:ILE:HG13	2.11	0.51
1:A:67:PRO:HB3	1:A:103:LEU:HD22	1.91	0.51
1:A:71:ALA:HB3	1:A:90:TYR:CE1	2.43	0.51
1:A:72:LEU:O	1:A:72:LEU:HD12	2.11	0.51
1:A:22:ILE:CG2	1:A:69:GLY:HA2	2.41	0.50
1:A:76:ARG:HG2	1:A:76:ARG:NH1	2.11	0.50
1:A:309:LYS:HB2	1:A:309:LYS:HZ2	1.76	0.50
1:A:105:GLU:O	1:A:109:LYS:HG3	2.10	0.50
1:A:223:ASN:HD21	1:A:225:GLU:HB3	1.77	0.50
1:A:21:PRO:HG3	1:A:116:PHE:CD2	2.45	0.50
1:A:341:GLY:C	1:A:344:CYS:HB2	2.37	0.50
1:A:288:GLU:OE2	1:A:334:VAL:HG21	2.11	0.50
1:A:100:GLY:C	1:A:103:LEU:H	2.19	0.50
1:A:57:THR:O	1:A:60:GLN:OE1	2.30	0.50
1:A:73:ASN:HB3	1:A:354:PHE:CD2	2.46	0.50
1:A:16:PHE:CE2	1:A:18:ILE:CD1	2.94	0.50
1:A:220:LEU:O	1:A:276:VAL:HG13	2.12	0.50
1:A:341:GLY:CA	1:A:344:CYS:HB2	2.42	0.50
1:A:137:THR:C	1:A:138:LEU:HD13	2.37	0.49
1:A:307:ALA:C	1:A:309:LYS:H	2.20	0.49
1:A:319:ALA:HB1	1:A:344:CYS:C	2.37	0.49
1:A:124:THR:O	1:A:144:ALA:HB3	2.13	0.49
1:A:168:ALA:HB3	1:A:198:SER:HB2	1.93	0.49
1:A:29:VAL:CG2	1:A:33:PHE:CB	2.90	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:119:ALA:HB3	1:A:122:GLN:HB2	1.94	0.49
1:A:345:ALA:O	1:A:348:VAL:N	2.44	0.49
1:A:23:LEU:O	1:A:126:THR:HA	2.12	0.49
1:A:55:TYR:OH	1:A:139:CYS:O	2.28	0.49
1:A:162:LEU:O	1:A:192:ILE:N	2.46	0.49
1:A:284:VAL:HB	1:A:300:VAL:HG23	1.93	0.49
1:A:309:LYS:HB2	1:A:309:LYS:NZ	2.28	0.49
1:A:333:THR:HG22	1:A:336:GLN:H	1.78	0.49
1:A:67:PRO:CB	1:A:76:ARG:NH2	2.72	0.49
1:A:272:THR:CG2	1:A:273:LYS:N	2.42	0.49
1:A:18:ILE:HG22	1:A:166:ALA:HB1	1.89	0.49
1:A:335:LYS:HB3	1:A:335:LYS:NZ	2.28	0.49
1:A:279:ARG:HH22	1:A:283:PRO:HD2	1.77	0.48
1:A:119:ALA:HB1	1:A:122:GLN:CB	2.43	0.48
1:A:207:LYS:O	1:A:210:MET:N	2.46	0.48
1:A:351:HIS:O	1:A:352:VAL:O	2.31	0.48
1:A:117:MET:HE2	1:A:147:SER:O	2.13	0.48
1:A:84:LYS:HG2	1:A:85:PRO:N	2.27	0.48
1:A:94:ILE:HG23	1:A:116:PHE:HB3	1.96	0.48
1:A:279:ARG:CD	1:A:285:ILE:HG12	2.43	0.48
1:A:103:LEU:HD13	1:A:103:LEU:C	2.38	0.48
1:A:193:PHE:O	1:A:218:ASN:N	2.44	0.48
1:A:193:PHE:H	1:A:218:ASN:HB2	1.79	0.48
1:A:77:VAL:CG1	1:A:322:GLY:HA3	2.43	0.48
1:A:193:PHE:HD1	1:A:217:THR:OG1	1.97	0.48
1:A:77:VAL:HG12	1:A:78:VAL:N	2.28	0.48
1:A:84:LYS:HA	1:A:85:PRO:HD2	1.68	0.48
1:A:179:LEU:CB	1:A:213:LEU:HD13	2.43	0.48
1:A:211:GLN:NE2	1:A:234:HIS:HD2	2.12	0.48
1:A:235:ASN:O	1:A:236:LEU:HD13	2.13	0.48
1:A:284:VAL:N	1:A:300:VAL:O	2.44	0.48
1:A:287:ALA:HA	1:A:297:VAL:HA	1.96	0.48
1:A:29:VAL:CG2	1:A:61:PHE:HZ	2.21	0.48
1:A:52:MET:C	1:A:54:ILE:H	2.22	0.48
1:A:162:LEU:O	1:A:191:ALA:HB1	2.14	0.48
1:A:234:HIS:O	1:A:236:LEU:HB2	2.13	0.48
1:A:279:ARG:HH12	1:A:283:PRO:CG	2.26	0.47
1:A:291:ALA:C	1:A:293:GLY:N	2.71	0.47
1:A:333:THR:HB	1:A:336:GLN:CB	2.43	0.47
1:A:329:SER:O	1:A:330:GLN:HG2	2.14	0.47
1:A:22:ILE:HG22	1:A:69:GLY:HA3	1.96	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:310:ILE:O	1:A:311:VAL:HB	2.12	0.47
1:A:109:LYS:HG3	1:A:109:LYS:H	1.36	0.47
1:A:165:TYR:CG	1:A:166:ALA:N	2.82	0.47
1:A:197:LEU:HD21	1:A:220:LEU:CG	2.44	0.47
1:A:326:TYR:C	1:A:328:LEU:H	2.22	0.47
1:A:345:ALA:C	1:A:348:VAL:H	2.23	0.47
1:A:58:LEU:O	1:A:63:PRO:HG3	2.15	0.47
1:A:234:HIS:C	1:A:236:LEU:HD22	2.40	0.47
1:A:98:PRO:HA	1:A:101:GLN:CG	2.42	0.47
1:A:130:LEU:HB2	1:A:137:THR:HG23	1.97	0.47
1:A:197:LEU:HD22	1:A:197:LEU:N	2.30	0.47
1:A:346:GLN:HG2	1:A:347:ASP:N	2.30	0.47
1:A:287:ALA:CA	1:A:297:VAL:HA	2.45	0.46
1:A:352:VAL:CG1	1:A:353:GLY:N	2.78	0.46
1:A:210:MET:HB3	1:A:214:LEU:HD13	1.97	0.46
1:A:29:VAL:HG22	1:A:33:PHE:CG	2.50	0.46
1:A:164:PHE:O	1:A:194:THR:OG1	2.34	0.46
1:A:171:LEU:O	1:A:173:ALA:N	2.48	0.46
1:A:279:ARG:NH2	1:A:283:PRO:HD2	2.31	0.46
1:A:307:ALA:O	1:A:309:LYS:N	2.48	0.46
1:A:94:ILE:HG12	1:A:116:PHE:HB3	1.97	0.46
1:A:167:THR:OG1	1:A:169:TYR:HD1	1.97	0.46
1:A:182:ALA:O	1:A:186:HIS:HB3	2.16	0.46
1:A:237:VAL:CG1	1:A:238:ALA:N	2.78	0.46
1:A:91:MET:HG2	1:A:115:ARG:O	2.16	0.46
1:A:356:LEU:N	2:A:406:HOH:O	2.36	0.46
1:A:73:ASN:HB2	1:A:318:ASP:OD2	2.15	0.46
1:A:91:MET:CE	1:A:115:ARG:HB3	2.45	0.46
1:A:220:LEU:CD2	1:A:275:VAL:HG23	2.43	0.46
1:A:142:LEU:HD23	1:A:142:LEU:HA	1.79	0.46
1:A:174:THR:OG1	1:A:176:LYS:CD	2.64	0.46
1:A:207:LYS:HB3	1:A:208:ASP:H	1.35	0.46
1:A:286:ALA:C	1:A:298:HIS:H	2.23	0.46
1:A:335:LYS:NZ	1:A:335:LYS:CB	2.79	0.46
1:A:77:VAL:HG12	1:A:81:LEU:HD22	1.97	0.46
1:A:215:LEU:C	1:A:217:THR:H	2.24	0.46
1:A:68:GLY:C	1:A:72:LEU:HB3	2.42	0.45
1:A:281:HIS:C	1:A:282:ASN:O	2.58	0.45
1:A:338:ILE:HG22	1:A:338:ILE:O	2.14	0.45
1:A:309:LYS:NZ	1:A:309:LYS:CB	2.80	0.45
1:A:177:ASN:C	1:A:179:LEU:H	2.24	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:272:THR:HG21	1:A:289:GLN:O	2.15	0.45
1:A:307:ALA:C	1:A:309:LYS:N	2.75	0.45
1:A:164:PHE:CE2	1:A:191:ALA:CB	3.00	0.45
1:A:162:LEU:O	1:A:191:ALA:CA	2.65	0.45
1:A:54:ILE:HD13	1:A:54:ILE:HG21	1.54	0.45
1:A:55:TYR:HE2	1:A:128:ALA:N	2.14	0.45
1:A:281:HIS:O	1:A:282:ASN:C	2.60	0.45
1:A:120:PRO:C	1:A:122:GLN:N	2.73	0.45
1:A:120:PRO:C	1:A:122:GLN:H	2.25	0.45
1:A:335:LYS:HB3	1:A:335:LYS:HZ3	1.82	0.45
1:A:81:LEU:HD23	1:A:326:TYR:CG	2.51	0.45
1:A:25:LEU:O	1:A:26:VAL:C	2.59	0.45
1:A:120:PRO:O	1:A:122:GLN:N	2.49	0.45
1:A:249:LYS:C	1:A:251:HIS:N	2.75	0.45
1:A:286:ALA:O	1:A:297:VAL:HG22	2.17	0.45
1:A:13:MET:CE	2:A:438:HOH:O	2.58	0.44
1:A:270:GLY:N	1:A:332:LYS:CD	2.79	0.44
1:A:13:MET:HE2	1:A:13:MET:HB2	1.68	0.44
1:A:97:ASP:OD2	1:A:124:THR:HA	2.17	0.44
1:A:23:LEU:CD1	1:A:66:LEU:O	2.66	0.44
1:A:54:ILE:CG2	1:A:55:TYR:N	2.79	0.44
1:A:57:THR:C	1:A:59:ASP:N	2.75	0.44
1:A:273:LYS:HB3	1:A:273:LYS:HE3	1.43	0.44
1:A:66:LEU:N	1:A:66:LEU:CD1	2.80	0.44
1:A:84:LYS:CG	1:A:85:PRO:HD2	2.40	0.44
1:A:91:MET:CG	1:A:115:ARG:HB3	2.47	0.44
1:A:101:GLN:HA	1:A:104:LYS:CD	2.48	0.44
1:A:210:MET:C	1:A:214:LEU:HD22	2.42	0.44
1:A:99:ARG:HD3	1:A:126:THR:HG21	2.00	0.44
1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CD1	2.80	0.44
1:A:180:GLU:HG3	1:A:180:GLU:O	2.16	0.44
1:A:302:VAL:HG13	1:A:302:VAL:O	2.18	0.44
1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HD2	1.71	0.44
1:A:343:ALA:O	1:A:347:ASP:HB2	2.18	0.44
1:A:77:VAL:O	1:A:81:LEU:HB2	2.17	0.44
1:A:67:PRO:C	1:A:76:ARG:NH2	2.76	0.43
1:A:89:GLY:HA2	1:A:113:ALA:C	2.43	0.43
1:A:97:ASP:HA	1:A:98:PRO:HD3	1.90	0.43
1:A:298:HIS:CD2	1:A:334:VAL:CB	2.98	0.43
1:A:169:TYR:CE2	1:A:201:PHE:CE2	3.06	0.43
1:A:21:PRO:HG2	1:A:93:ALA:O	2.18	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:84:LYS:HB3	1:A:84:LYS:HE2	1.41	0.43
1:A:146:GLY:CA	2:A:442:HOH:O	2.65	0.43
1:A:287:ALA:HA	1:A:298:HIS:H	1.83	0.43
1:A:119:ALA:HB3	1:A:122:GLN:CB	2.49	0.43
1:A:244:LEU:O	1:A:248:ASN:N	2.33	0.43
1:A:284:VAL:HG11	1:A:338:ILE:HG23	1.98	0.43
1:A:29:VAL:HG22	1:A:33:PHE:HB3	2.00	0.43
1:A:101:GLN:HA	1:A:104:LYS:HD3	2.00	0.43
1:A:297:VAL:HG12	1:A:297:VAL:O	2.17	0.43
1:A:343:ALA:HA	1:A:346:GLN:HB3	1.99	0.43
1:A:270:GLY:O	1:A:332:LYS:NZ	2.46	0.43
1:A:67:PRO:C	1:A:76:ARG:HH22	2.27	0.43
1:A:77:VAL:CB	1:A:322:GLY:HA3	2.48	0.43
1:A:78:VAL:HG23	1:A:322:GLY:HA2	2.00	0.43
1:A:344:CYS:O	1:A:348:VAL:HB	2.19	0.43
1:A:82:LEU:HD22	2:A:423:HOH:O	2.19	0.43
1:A:184:TYR:O	1:A:187:GLY:N	2.50	0.43
1:A:188:ILE:CB	1:A:189:PRO:CA	2.97	0.43
1:A:348:VAL:C	1:A:350:GLN:N	2.77	0.42
1:A:48:THR:HB	1:A:49:PRO:HD3	1.99	0.42
1:A:101:GLN:HA	1:A:104:LYS:HE2	2.00	0.42
1:A:219:ILE:CG1	1:A:274:LEU:HB2	2.49	0.42
1:A:22:ILE:CG2	1:A:69:GLY:HA3	2.50	0.42
1:A:56:SER:O	1:A:60:GLN:HG3	2.20	0.42
1:A:155:THR:HB	1:A:184:TYR:OH	2.18	0.42
1:A:205:LEU:HD12	1:A:205:LEU:N	2.34	0.42
1:A:334:VAL:HG12	1:A:334:VAL:O	2.19	0.42
1:A:223:ASN:HD22	1:A:224:GLU:H	1.63	0.42
1:A:119:ALA:HA	1:A:120:PRO:HD3	1.65	0.42
1:A:221:PHE:HA	1:A:276:VAL:HG13	2.02	0.42
1:A:277:MET:O	1:A:277:MET:CG	2.67	0.42
1:A:76:ARG:HH11	1:A:76:ARG:HG3	1.76	0.42
1:A:90:TYR:O	1:A:115:ARG:N	2.49	0.42
1:A:112:LEU:HD13	1:A:112:LEU:HA	1.86	0.42
1:A:162:LEU:O	1:A:191:ALA:HA	2.20	0.42
1:A:165:TYR:OH	1:A:196:ASN:OD1	2.28	0.42
1:A:188:ILE:HB	1:A:189:PRO:CA	2.50	0.42
1:A:177:ASN:C	1:A:179:LEU:N	2.78	0.42
1:A:314:ASN:C	1:A:316:ALA:H	2.28	0.42
1:A:356:LEU:HA	1:A:356:LEU:HD23	1.31	0.42
1:A:13:MET:C	1:A:14:ARG:HG3	2.45	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:15:VAL:HG23	2:A:427:HOH:O	2.20	0.41
1:A:98:PRO:CA	1:A:101:GLN:HG2	2.44	0.41
1:A:270:GLY:C	1:A:332:LYS:NZ	2.78	0.41
1:A:316:ALA:O	1:A:345:ALA:HB2	2.19	0.41
1:A:54:ILE:HG22	1:A:55:TYR:CD1	2.55	0.41
1:A:99:ARG:CD	1:A:126:THR:HG21	2.50	0.41
1:A:150:ILE:H	1:A:177:ASN:HD21	1.67	0.41
1:A:57:THR:HG22	1:A:58:LEU:N	2.35	0.41
1:A:33:PHE:CE1	1:A:57:THR:CG2	2.95	0.41
1:A:36:GLU:O	1:A:36:GLU:HG3	2.20	0.41
1:A:82:LEU:HD22	1:A:82:LEU:HA	1.62	0.41
1:A:95:GLY:HA2	1:A:119:ALA:N	2.34	0.41
1:A:314:ASN:C	1:A:316:ALA:N	2.79	0.41
1:A:174:THR:OG1	1:A:176:LYS:HD3	2.20	0.41
1:A:286:ALA:HB3	1:A:298:HIS:HB2	2.02	0.41
1:A:298:HIS:HD1	1:A:298:HIS:HA	1.82	0.41
1:A:346:GLN:CG	1:A:347:ASP:N	2.79	0.41
1:A:48:THR:HG23	1:A:51:GLN:OE1	2.21	0.41
1:A:77:VAL:CG1	1:A:322:GLY:C	2.93	0.41
1:A:119:ALA:C	1:A:122:GLN:HB2	2.44	0.41
1:A:127:CYS:SG	1:A:127:CYS:O	2.79	0.41
1:A:197:LEU:CD2	1:A:197:LEU:N	2.77	0.41
1:A:199:ALA:CB	1:A:201:PHE:CD2	3.03	0.41
1:A:196:ASN:C	1:A:198:SER:N	2.79	0.41
1:A:76:ARG:HD3	1:A:76:ARG:H	1.85	0.40
1:A:316:ALA:O	1:A:319:ALA:HB3	2.21	0.40
1:A:47:ALA:CB	1:A:139:CYS:SG	3.09	0.40
1:A:15:VAL:HG22	1:A:163:ILE:HB	2.03	0.40
1:A:108:ASP:OD1	1:A:109:LYS:N	2.54	0.40
1:A:277:MET:HE3	2:A:514:HOH:O	2.06	0.40
1:A:18:ILE:O	1:A:166:ALA:HB1	2.21	0.40
1:A:72:LEU:HD12	1:A:72:LEU:HA	1.39	0.40
1:A:94:ILE:HG13	1:A:118:VAL:HA	2.03	0.40
1:A:99:ARG:CD	1:A:126:THR:CG2	2.99	0.40
1:A:129:VAL:HG23	1:A:138:LEU:CD1	2.50	0.40
1:A:196:ASN:ND2	1:A:198:SER:OG	2.55	0.40
1:A:312:ASP:OD2	1:A:315:GLY:HA3	2.21	0.40
1:A:81:LEU:HD12	1:A:81:LEU:HA	1.57	0.40
1:A:171:LEU:O	1:A:172:THR:C	2.64	0.40
1:A:188:ILE:HG22	1:A:190:ASN:H	1.87	0.40
1:A:298:HIS:CD2	1:A:334:VAL:HA	2.55	0.40

All (4) 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:152:GLU:OE1	2:A:534:HOH:O[1_655]	0.85	1.35
1:A:152:GLU:CD	2:A:534:HOH:O[1_655]	1.06	1.14
1:A:152:GLU:CG	2:A:534:HOH:O[1_655]	1.93	0.27
1:A:152:GLU:OE2	2:A:534:HOH:O[1_655]	2.16	0.04

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	323/363 (89%)	224 (69%)	55 (17%)	44 (14%)	0 0

All (44) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	28	GLU
1	A	61	PHE
1	A	190	ASN
1	A	197	LEU
1	A	208	ASP
1	A	250	GLU
1	A	252	ALA
1	A	253	VAL
1	A	301	GLY
1	A	312	ASP
1	A	315	GLY
1	A	333	THR
1	A	334	VAL
1	A	352	VAL
1	A	38	PHE
1	A	77	VAL
1	A	83	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	134	LYS
1	A	147	SER
1	A	159	SER
1	A	172	THR
1	A	191	ALA
1	A	236	LEU
1	A	243	ALA
1	A	275	VAL
1	A	308	GLU
1	A	57	THR
1	A	287	ALA
1	A	76	ARG
1	A	121	GLY
1	A	143	GLY
1	A	58	LEU
1	A	175	PRO
1	A	177	ASN
1	A	225	GLU
1	A	235	ASN
1	A	311	VAL
1	A	48	THR
1	A	131	ILE
1	A	188	ILE
1	A	353	GLY
1	A	310	ILE
1	A	237	VAL
1	A	78	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	249/287 (87%)	131 (53%)	118 (47%)	0 0

All (118) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	13	MET
1	A	18	ILE
1	A	20	ASN
1	A	22	ILE
1	A	23	LEU
1	A	25	LEU
1	A	26	VAL
1	A	28	GLU
1	A	29	VAL
1	A	34	LEU
1	A	35	ASP
1	A	40	LYS
1	A	43	ASP
1	A	45	THR
1	A	46	LEU
1	A	48	THR
1	A	50	GLU
1	A	53	ARG
1	A	54	ILE
1	A	58	LEU
1	A	59	ASP
1	A	60	GLN
1	A	62	ASN
1	A	64	THR
1	A	66	LEU
1	A	72	LEU
1	A	75	VAL
1	A	76	ARG
1	A	81	LEU
1	A	82	LEU
1	A	84	LYS
1	A	87	SER
1	A	94	ILE
1	A	97	ASP
1	A	99	ARG
1	A	101	GLN
1	A	103	LEU
1	A	104	LYS
1	A	109	LYS
1	A	112	LEU
1	A	117	MET
1	A	118	VAL
1	A	123	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	124	THR
1	A	126	THR
1	A	127	CYS
1	A	129	VAL
1	A	130	LEU
1	A	131	ILE
1	A	133	GLU
1	A	134	LYS
1	A	135	GLU
1	A	137	THR
1	A	138	LEU
1	A	140	THR
1	A	149	ARG
1	A	150	ILE
1	A	152	GLU
1	A	163	ILE
1	A	172	THR
1	A	174	THR
1	A	176	LYS
1	A	179	LEU
1	A	180	GLU
1	A	184	TYR
1	A	186	HIS
1	A	188	ILE
1	A	192	ILE
1	A	195	LEU
1	A	196	ASN
1	A	197	LEU
1	A	200	PRO
1	A	207	LYS
1	A	212	SER
1	A	214	LEU
1	A	215	LEU
1	A	217	THR
1	A	219	ILE
1	A	223	ASN
1	A	226	GLU
1	A	227	PHE
1	A	230	LEU
1	A	233	VAL
1	A	234	HIS
1	A	236	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	237	VAL
1	A	273	LYS
1	A	274	LEU
1	A	276	VAL
1	A	278	THR
1	A	279	ARG
1	A	281	HIS
1	A	284	VAL
1	A	285	ILE
1	A	290	THR
1	A	292	ASP
1	A	295	VAL
1	A	296	VAL
1	A	297	VAL
1	A	298	HIS
1	A	299	GLU
1	A	303	PRO
1	A	308	GLU
1	A	309	LYS
1	A	310	ILE
1	A	314	ASN
1	A	321	VAL
1	A	325	LEU
1	A	332	LYS
1	A	335	LYS
1	A	336	GLN
1	A	337	CYS
1	A	339	MET
1	A	346	GLN
1	A	347	ASP
1	A	350	GLN
1	A	352	VAL
1	A	355	SER

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (10) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	79	GLN
1	A	122	GLN
1	A	177	ASN
1	A	211	GLN
1	A	223	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	281	HIS
1	A	298	HIS
1	A	342	ASN
1	A	346	GLN
1	A	351	HIS

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data

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.