



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 08:52 AM UTC

PDB ID : 1MVM / pdb_00001mvm
Title : MVM(STRAIN I), COMPLEX(VIRAL COAT/DNA), VP2, PH=7.5, T=4 DEGREES C
Authors : Llamas-Saiz, A.L.; Agbandje-McKenna, M.; Rossmann, M.G.
Deposited on : 1996-06-21
Resolution : 3.50 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

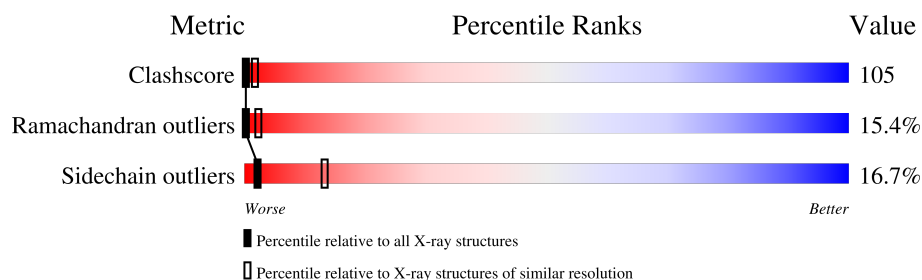
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.50 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	1140 (3.54-3.46)
Ramachandran outliers	187476	1113 (3.54-3.46)
Sidechain outliers	187428	1114 (3.54-3.46)

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	587	
2	B	11	
3	C	4	
4	D	1	

2 Entry composition [i](#)

There are 4 unique types of molecules in this entry. The entry contains 4649 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 PROTEIN (MURINE MINUTE VIRUS COAT PROTEIN).

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	549	Total	C	N	O	S	0	0	0
			4328	2727	751	830	20			

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	366	MET	VAL	variant	UNP P07302
A	455	THR	ALA	variant	UNP P07302

- Molecule 2 is a DNA chain called DNA (5'-D(*CP*CP*AP*CP*CP*CP*CP*AP*AP*CP*A)-3').

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
2	B	11	Total	C	N	O	P	0	0	0
			218	103	41	63	11			

- Molecule 3 is a DNA chain called DNA (5'-D(*CP*AP*AP*A)-3').

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
3	C	4	Total	C	N	O	P	0	0	0
			82	39	18	21	4			

- Molecule 4 is a DNA chain called DNA (5'-D(P*A)-3').

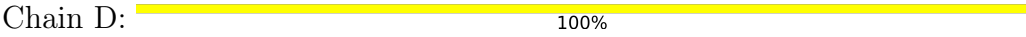
Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
4	D	1	Total	C	N	O	P	0	0	0
			21	10	5	5	1			



● Molecule 3: DNA (5'-D(*CP*AP*AP*A)-3')



● Molecule 4: DNA (5'-D(P*A)-3')



4 Data and refinement statistics

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

Property	Value	Source
Space group	C 1 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	448.70Å 416.70Å 305.30Å 90.00° 95.80° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	(Not available) – 3.50	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	(Not available) ((Not available)-3.50)	Depositor
R_{merge}	0.15	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
Refinement program	NONE	Depositor
R, R_{free}	(Not available) , (Not available)	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	4649	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	12.0	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	1.97	45/4451 (1.0%)	1.62	79/6085 (1.3%)
2	B	0.88	2/242 (0.8%)	0.98	0/364
3	C	0.75	0/92	1.45	1/139 (0.7%)
4	D	0.61	0/23	0.90	0/33
All	All	1.91	47/4808 (1.0%)	1.59	80/6621 (1.2%)

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	5

All (47) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	587	TYR	C-OXT	-46.38	0.30	1.23
1	A	344	ASP	C-N	-42.27	0.74	1.33
1	A	373	SER	C-N	-41.17	0.77	1.33
1	A	174	ALA	C-N	36.89	1.84	1.33
1	A	526	PHE	C-N	34.51	1.78	1.33
1	A	483	ILE	C-N	33.81	1.84	1.33
1	A	525	PHE	C-N	-33.06	0.87	1.33
1	A	555	GLY	CA-C	-27.40	1.13	1.51
1	A	374	VAL	C-N	19.82	1.61	1.33
1	A	553	ASP	C-N	-19.30	1.04	1.33
1	A	330	ARG	C-N	15.23	1.55	1.33
1	A	539	ALA	C-N	12.41	1.53	1.33
1	A	175	CYS	C-N	10.20	1.48	1.33
1	A	495	GLY	C-N	-10.04	1.20	1.33
1	A	574	SER	C-N	-7.46	1.27	1.33
1	A	496	GLN	N-CA	-7.44	1.36	1.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	548	GLN	CA-C	-6.84	1.44	1.52
1	A	573	GLN	C-N	-6.29	1.25	1.33
1	A	564	TRP	NE1-CE2	-6.24	1.30	1.37
1	A	549	VAL	N-CA	-6.13	1.38	1.46
1	A	527	TRP	NE1-CE2	-6.01	1.30	1.37
1	A	108	TRP	NE1-CE2	-5.98	1.30	1.37
1	A	60	TRP	NE1-CE2	-5.96	1.30	1.37
1	A	356	PRO	CA-C	-5.96	1.44	1.52
1	A	128	TRP	NE1-CE2	-5.95	1.30	1.37
1	A	203	TRP	NE1-CE2	-5.95	1.30	1.37
1	A	283	TRP	NE1-CE2	-5.92	1.30	1.37
1	A	469	TRP	NE1-CE2	-5.91	1.30	1.37
1	A	111	TRP	NE1-CE2	-5.87	1.30	1.37
1	A	398	TRP	NE1-CE2	-5.85	1.31	1.37
1	A	119	TRP	NE1-CE2	-5.85	1.31	1.37
1	A	122	TRP	NE1-CE2	-5.77	1.31	1.37
1	A	523	GLY	CA-C	5.76	1.57	1.51
1	A	324	TRP	NE1-CE2	-5.75	1.31	1.37
1	A	543	TRP	NE1-CE2	-5.75	1.31	1.37
1	A	350	ALA	N-CA	5.59	1.53	1.46
1	A	529	GLY	C-N	5.50	1.42	1.33
1	A	386	TRP	NE1-CE2	-5.50	1.31	1.37
1	A	495	GLY	CA-C	-5.38	1.47	1.52
1	A	482	HIS	CB-CG	5.30	1.57	1.50
2	B	1	DC	OP3-P	5.25	1.58	1.48
1	A	331	THR	C-N	-5.20	1.25	1.32
1	A	483	ILE	N-CA	5.15	1.53	1.46
1	A	547	TYR	C-N	-5.14	1.26	1.33
2	B	7	DC	O3'-P	5.14	1.68	1.61
1	A	345	PHE	N-CA	-5.08	1.39	1.46
1	A	494	PRO	C-N	-5.04	1.28	1.33

All (80) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	373	SER	O-C-N	-26.45	90.62	122.89
1	A	539	ALA	CA-C-N	-19.54	90.91	122.76
1	A	539	ALA	C-N-CA	-19.54	90.91	122.76
1	A	374	VAL	O-C-N	18.70	145.94	122.57
1	A	373	SER	CA-C-N	17.20	152.93	121.97
1	A	373	SER	C-N-CA	17.20	152.93	121.97
1	A	525	PHE	O-C-N	-16.43	101.55	123.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	374	VAL	CA-C-N	-15.37	92.19	121.54
1	A	374	VAL	C-N-CA	-15.37	92.19	121.54
1	A	553	ASP	O-C-N	-14.61	103.16	122.59
1	A	483	ILE	O-C-N	14.01	141.46	122.12
1	A	483	ILE	CA-C-N	-12.29	97.62	121.58
1	A	483	ILE	C-N-CA	-12.29	97.62	121.58
1	A	553	ASP	CA-C-N	12.28	144.34	121.87
1	A	553	ASP	C-N-CA	12.28	144.34	121.87
1	A	344	ASP	O-C-N	10.42	136.45	122.59
1	A	508	GLN	OE1-CD-NE2	-10.15	112.45	122.60
3	C	14	DC	OP1-P-OP2	-10.14	89.57	120.00
1	A	163	GLN	OE1-CD-NE2	-9.95	112.65	122.60
1	A	335	GLN	OE1-CD-NE2	-9.87	112.73	122.60
1	A	340	GLN	OE1-CD-NE2	-9.79	112.81	122.60
1	A	311	GLN	OE1-CD-NE2	-9.78	112.82	122.60
1	A	158	GLN	OE1-CD-NE2	-9.76	112.84	122.60
1	A	228	GLN	OE1-CD-NE2	-9.76	112.84	122.60
1	A	174	ALA	O-C-N	9.59	134.35	122.65
1	A	524	THR	O-C-N	9.37	134.35	123.29
1	A	526	PHE	O-C-N	9.23	134.87	122.59
1	A	524	THR	CA-C-N	-8.99	108.19	121.76
1	A	524	THR	C-N-CA	-8.99	108.19	121.76
1	A	350	ALA	N-CA-C	-8.82	102.65	113.15
1	A	356	PRO	O-C-N	7.83	133.21	122.64
1	A	174	ALA	CA-C-N	-7.71	109.28	123.01
1	A	174	ALA	C-N-CA	-7.71	109.28	123.01
1	A	555	GLY	N-CA-C	6.90	129.54	113.18
1	A	529	GLY	O-C-N	6.88	131.64	122.70
1	A	349	ARG	O-C-N	-6.84	113.90	122.17
1	A	163	GLN	CG-CD-NE2	6.74	126.50	116.40
1	A	158	GLN	CG-CD-NE2	6.68	126.42	116.40
1	A	335	GLN	CG-CD-NE2	6.67	126.41	116.40
1	A	228	GLN	CG-CD-NE2	6.67	126.41	116.40
1	A	340	GLN	CG-CD-NE2	6.66	126.39	116.40
1	A	311	GLN	CG-CD-NE2	6.64	126.36	116.40
1	A	508	GLN	CG-CD-NE2	6.62	126.33	116.40
1	A	573	GLN	O-C-N	6.54	130.42	123.03
1	A	538	ARG	O-C-N	6.35	130.62	122.81
1	A	548	GLN	O-C-N	6.35	130.35	122.92
1	A	511	PRO	O-C-N	6.28	130.66	122.24
1	A	537	LEU	O-C-N	-6.27	115.92	123.13
1	A	523	GLY	O-C-N	5.92	129.26	123.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	497	MET	O-C-N	5.90	130.91	123.12
1	A	500	ARG	NE-CZ-NH2	5.85	124.47	119.20
1	A	537	LEU	CA-C-N	5.79	129.49	120.75
1	A	537	LEU	C-N-CA	5.79	129.49	120.75
1	A	352	PRO	N-CA-C	5.58	120.08	111.21
1	A	584	ARG	NE-CZ-NH2	5.49	124.14	119.20
1	A	79	GLU	O-C-N	5.45	129.50	122.20
1	A	407	ARG	NE-CZ-NH2	5.44	124.09	119.20
1	A	330	ARG	NE-CZ-NH2	5.41	124.07	119.20
1	A	580	ARG	NE-CZ-NH2	5.40	124.06	119.20
1	A	85	ARG	NE-CZ-NH2	5.37	124.04	119.20
1	A	538	ARG	NE-CZ-NH2	5.36	124.02	119.20
1	A	332	ARG	NE-CZ-NH2	5.35	124.02	119.20
1	A	83	ARG	NE-CZ-NH2	5.35	124.02	119.20
1	A	344	ASP	CA-C-N	-5.34	111.34	121.54
1	A	344	ASP	C-N-CA	-5.34	111.34	121.54
1	A	480	ARG	NE-CZ-NH2	5.34	124.00	119.20
1	A	219	ARG	NE-CZ-NH2	5.32	123.99	119.20
1	A	375	ARG	NE-CZ-NH2	5.32	123.99	119.20
1	A	69	ARG	NE-CZ-NH2	5.31	123.98	119.20
1	A	395	ARG	NE-CZ-NH2	5.30	123.97	119.20
1	A	287	ARG	NE-CZ-NH2	5.28	123.95	119.20
1	A	534	ARG	NE-CZ-NH2	5.27	123.94	119.20
1	A	368	ARG	NE-CZ-NH2	5.24	123.92	119.20
1	A	410	ARG	NE-CZ-NH2	5.24	123.92	119.20
1	A	54	ARG	NE-CZ-NH2	5.24	123.91	119.20
1	A	371	ASN	O-C-N	5.14	129.43	122.59
1	A	332	ARG	O-C-N	5.11	124.82	121.14
1	A	480	ARG	N-CA-C	-5.08	105.92	111.82
1	A	71	VAL	O-C-N	5.08	128.36	123.03
1	A	551	VAL	O-C-N	5.03	127.91	123.03

There are no chirality outliers.

All (5) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	373	SER	Mainchain
1	A	525	PHE	Mainchain,Peptide
1	A	537	LEU	Mainchain
1	A	539	ALA	Mainchain

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	4328	0	4109	908	0
2	B	218	0	123	26	0
3	C	82	0	45	12	0
4	D	21	0	12	2	0
All	All	4649	0	4289	938	0

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 105.

All (938) 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:378:TYR:CE1	1:A:465:GLN:NE2	1.70	1.57
1:A:176:MET:HE1	1:A:525:PHE:CD1	1.38	1.56
1:A:344:ASP:C	1:A:345:PHE:CA	1.80	1.49
1:A:558:TYR:CA	1:A:563:LYS:HZ1	1.26	1.48
1:A:344:ASP:O	1:A:345:PHE:CD1	1.69	1.45
1:A:463:TYR:CG	1:A:464:PRO:HD3	1.49	1.45
1:A:289:LEU:HD22	1:A:587:TYR:CB	1.43	1.45
1:A:344:ASP:CA	1:A:345:PHE:N	1.78	1.44
1:A:98:MET:CE	1:A:223:VAL:HA	1.45	1.44
1:A:558:TYR:HA	1:A:563:LYS:NZ	1.28	1.44
1:A:509:TYR:CD1	1:A:516:LEU:HD12	1.53	1.42
1:A:322:VAL:HG11	1:A:324:TRP:NE1	1.27	1.41
1:A:526:PHE:C	1:A:527:TRP:N	1.78	1.41
1:A:85:ARG:HH21	1:A:237:MET:CG	1.36	1.37
1:A:509:TYR:CD1	1:A:516:LEU:CD1	2.08	1.35
1:A:159:ASP:OD1	1:A:164:ALA:N	1.60	1.35
1:A:483:ILE:C	1:A:484:THR:N	1.84	1.35
1:A:174:ALA:C	1:A:175:CYS:N	1.84	1.34
1:A:322:VAL:CG1	1:A:324:TRP:NE1	1.88	1.34
1:A:352:PRO:HA	1:A:353:PHE:N	1.41	1.34
1:A:552:GLU:OE1	1:A:553:ASP:N	1.59	1.34
1:A:289:LEU:CD2	1:A:587:TYR:HB3	1.56	1.33
1:A:385:ASN:O	1:A:387:ALA:N	1.61	1.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:525:PHE:C	1:A:526:PHE:CA	2.01	1.31
1:A:352:PRO:CA	1:A:353:PHE:N	1.93	1.31
1:A:558:TYR:C	1:A:563:LYS:HZ2	1.36	1.31
1:A:85:ARG:NH2	1:A:237:MET:HG2	1.47	1.28
1:A:129:GLN:O	1:A:133:ASN:HB2	1.23	1.28
1:A:525:PHE:O	1:A:526:PHE:N	1.65	1.28
1:A:111:TRP:CD1	1:A:250:ILE:HD12	1.67	1.27
1:A:94:VAL:O	1:A:95:LYS:HG2	1.24	1.26
1:A:386:TRP:CE3	1:A:571:ASN:HA	1.68	1.26
1:A:98:MET:HE1	1:A:223:VAL:CA	1.63	1.25
1:A:227:ASN:O	1:A:228:GLN:O	1.54	1.25
1:A:105:GLU:HB2	1:A:217:VAL:CG1	1.65	1.25
1:A:239:THR:HG22	1:A:240:PRO:CD	1.65	1.25
1:A:378:TYR:CD1	1:A:465:GLN:NE2	2.04	1.25
1:A:463:TYR:CD2	1:A:464:PRO:HD3	1.71	1.25
1:A:147:ILE:HD11	1:A:497:MET:CE	1.67	1.24
1:A:299:PRO:HB3	1:A:304:ASP:O	1.24	1.24
1:A:277:VAL:HG23	1:A:487:PHE:CE1	1.71	1.24
1:A:223:VAL:O	1:A:224:THR:HG23	1.33	1.23
1:A:558:TYR:O	1:A:563:LYS:NZ	1.69	1.23
1:A:111:TRP:NE1	1:A:251:GLU:OE2	1.71	1.23
1:A:94:VAL:O	1:A:95:LYS:CG	1.86	1.23
3:C:16:DA:C1'	3:C:17:DA:H5'	1.69	1.22
1:A:411:ASP:O	1:A:412:GLY:O	1.54	1.22
1:A:558:TYR:CA	1:A:563:LYS:NZ	1.88	1.22
1:A:463:TYR:HB3	1:A:464:PRO:CD	1.69	1.21
1:A:136:SER:O	1:A:279:LEU:HB2	1.36	1.21
1:A:98:MET:CE	1:A:223:VAL:CA	2.17	1.21
1:A:176:MET:CE	1:A:525:PHE:CD1	2.24	1.20
1:A:241:LYS:O	1:A:243:MET:N	1.74	1.20
1:A:289:LEU:CD2	1:A:587:TYR:CB	2.16	1.19
1:A:53:TYR:O	2:B:7:DC:O2	1.57	1.19
1:A:176:MET:CE	1:A:525:PHE:CE1	2.25	1.19
1:A:113:LEU:HD23	1:A:114:VAL:N	1.59	1.18
1:A:48:ASP:HB2	1:A:528:LYS:HE3	1.19	1.18
1:A:115:ASP:O	1:A:198:LEU:HD12	1.43	1.18
1:A:580:ARG:H	1:A:581:PRO:CD	1.57	1.18
1:A:56:LEU:HB2	1:A:60:TRP:O	1.45	1.17
1:A:318:THR:CG2	1:A:329:ILE:HG22	1.73	1.17
1:A:85:ARG:NH2	1:A:237:MET:CG	2.03	1.16
1:A:336:VAL:O	1:A:407:ARG:NH2	1.78	1.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:324:TRP:CZ2	1:A:421:VAL:CG2	2.29	1.16
1:A:352:PRO:C	1:A:353:PHE:N	2.03	1.16
1:A:370:ALA:O	1:A:372:GLY:N	1.79	1.16
1:A:176:MET:HE1	1:A:525:PHE:CE1	1.80	1.15
1:A:412:GLY:O	1:A:413:PHE:HB2	1.47	1.15
1:A:239:THR:CG2	1:A:240:PRO:HD2	1.74	1.15
1:A:360:ALA:O	1:A:371:ASN:HB3	1.47	1.15
1:A:417:ALA:HB3	1:A:418:PRO:HD2	1.27	1.15
1:A:218:ASP:O	1:A:237:MET:O	1.64	1.15
1:A:561:VAL:O	1:A:563:LYS:N	1.77	1.14
1:A:558:TYR:C	1:A:563:LYS:NZ	1.98	1.14
1:A:361:ASP:OD2	1:A:403:PHE:HD1	1.31	1.13
1:A:463:TYR:CB	1:A:464:PRO:CD	2.23	1.13
1:A:417:ALA:CB	1:A:418:PRO:CD	2.26	1.12
1:A:463:TYR:CG	1:A:464:PRO:CD	2.32	1.12
2:B:3:DA:H5'	2:B:9:DA:H5''	1.18	1.12
1:A:147:ILE:HD11	1:A:497:MET:HE2	1.23	1.11
1:A:111:TRP:CG	1:A:250:ILE:HD12	1.86	1.11
1:A:197:THR:HG22	1:A:198:LEU:H	0.94	1.11
1:A:463:TYR:HB3	1:A:464:PRO:HD2	1.26	1.11
1:A:417:ALA:HB3	1:A:418:PRO:CD	1.81	1.10
1:A:509:TYR:HD1	1:A:516:LEU:CD1	1.48	1.10
1:A:362:VAL:CG1	1:A:366:MET:HA	1.81	1.10
1:A:465:GLN:O	1:A:466:GLY:O	1.70	1.10
1:A:525:PHE:CA	1:A:526:PHE:N	2.13	1.10
1:A:98:MET:CE	1:A:224:THR:N	2.16	1.09
1:A:344:ASP:O	1:A:345:PHE:CG	2.04	1.09
1:A:344:ASP:O	1:A:345:PHE:N	1.85	1.09
1:A:357:LYS:CD	1:A:357:LYS:H	1.63	1.09
1:A:363:THR:HG21	1:A:408:ASP:HB2	1.29	1.09
1:A:419:LEU:O	1:A:419:LEU:HG	1.31	1.09
1:A:289:LEU:HD22	1:A:587:TYR:HB2	1.15	1.09
1:A:322:VAL:HG11	1:A:324:TRP:CE2	1.86	1.08
1:A:53:TYR:O	2:B:7:DC:C2	2.05	1.08
1:A:386:TRP:HE3	1:A:571:ASN:CA	1.65	1.08
1:A:362:VAL:O	1:A:363:THR:O	1.68	1.08
1:A:362:VAL:HG21	1:A:368:ARG:HA	1.31	1.07
1:A:367:ASP:O	1:A:369:GLU:N	1.87	1.07
1:A:105:GLU:HB2	1:A:217:VAL:HG11	1.09	1.07
1:A:318:THR:HG23	1:A:329:ILE:HG22	1.13	1.06
1:A:115:ASP:O	1:A:198:LEU:CD1	2.03	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:289:LEU:HD23	1:A:587:TYR:HB3	1.37	1.06
1:A:322:VAL:HG12	1:A:324:TRP:CD1	1.90	1.05
1:A:79:GLU:OE2	1:A:518:ARG:NH1	1.88	1.05
1:A:92:THR:HG22	1:A:235:ASN:HD21	1.20	1.04
1:A:98:MET:HE2	1:A:223:VAL:HA	1.16	1.04
1:A:386:TRP:HE3	1:A:571:ASN:HA	0.95	1.04
1:A:463:TYR:CB	1:A:464:PRO:HD3	1.84	1.04
2:B:3:DA:H5'	2:B:9:DA:C5'	1.88	1.03
1:A:98:MET:HE1	1:A:223:VAL:HA	1.23	1.03
1:A:277:VAL:CG2	1:A:487:PHE:CE1	2.41	1.03
1:A:105:GLU:CB	1:A:217:VAL:CG1	2.37	1.03
1:A:119:TRP:NE1	1:A:467:GLN:O	1.91	1.03
1:A:373:SER:OG	1:A:398:TRP:O	1.74	1.02
1:A:362:VAL:HG13	1:A:366:MET:CA	1.89	1.02
1:A:500:ARG:HG2	1:A:501:LEU:O	1.58	1.02
1:A:362:VAL:CG2	1:A:368:ARG:HA	1.90	1.01
1:A:412:GLY:O	1:A:413:PHE:CB	2.08	1.01
1:A:51:THR:HG21	1:A:127:ASP:OD2	1.60	1.01
1:A:223:VAL:O	1:A:224:THR:CG2	2.08	1.01
1:A:361:ASP:OD1	1:A:362:VAL:N	1.93	1.01
1:A:362:VAL:CG1	1:A:362:VAL:O	2.08	1.01
1:A:133:ASN:HD21	1:A:549:VAL:HB	1.23	1.01
1:A:413:PHE:CZ	1:A:415:GLN:NE2	2.26	1.01
1:A:509:TYR:CD1	1:A:516:LEU:HD11	1.95	1.01
1:A:105:GLU:CB	1:A:217:VAL:HG11	1.90	1.00
3:C:16:DA:H1'	3:C:17:DA:H5'	1.03	0.99
1:A:415:GLN:OE1	1:A:419:LEU:HD12	1.62	0.99
1:A:322:VAL:CG1	1:A:324:TRP:CD1	2.45	0.99
1:A:415:GLN:OE1	1:A:419:LEU:CD1	2.09	0.99
1:A:289:LEU:HD22	1:A:587:TYR:HB3	1.19	0.98
1:A:579:THR:O	1:A:580:ARG:HG3	1.62	0.98
1:A:141:VAL:O	1:A:272:PHE:HD2	1.46	0.98
1:A:362:VAL:O	1:A:362:VAL:HG13	1.63	0.98
1:A:128:TRP:NE1	1:A:579:THR:OG1	1.96	0.98
1:A:197:THR:HG22	1:A:198:LEU:N	1.78	0.98
1:A:232:ILE:O	1:A:233:GLU:HB2	1.63	0.98
1:A:417:ALA:HB1	1:A:418:PRO:HD3	1.41	0.98
1:A:436:GLY:O	1:A:437:THR:OG1	1.80	0.98
3:C:16:DA:H1'	3:C:17:DA:C5'	1.91	0.98
1:A:92:THR:HG22	1:A:235:ASN:ND2	1.79	0.98
1:A:357:LYS:HD3	1:A:357:LYS:O	1.63	0.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:293:PRO:HB2	1:A:308:LEU:HD13	1.45	0.98
1:A:98:MET:HE3	1:A:224:THR:N	1.77	0.98
1:A:417:ALA:CB	1:A:418:PRO:HD3	1.92	0.97
3:C:16:DA:C2'	3:C:17:DA:H5'	1.94	0.97
1:A:579:THR:O	1:A:580:ARG:CG	2.11	0.97
1:A:525:PHE:C	1:A:526:PHE:N	0.87	0.97
1:A:547:TYR:CD1	1:A:548:GLN:N	2.33	0.97
1:A:361:ASP:OD2	1:A:403:PHE:CD1	2.18	0.97
1:A:76:PRO:O	1:A:518:ARG:NH2	1.97	0.96
1:A:98:MET:CE	1:A:223:VAL:C	2.38	0.96
1:A:197:THR:CG2	1:A:198:LEU:H	1.75	0.96
1:A:280:THR:HG23	1:A:583:ALA:O	1.66	0.96
1:A:182:SER:C	1:A:184:ASN:H	1.70	0.96
1:A:318:THR:CG2	1:A:329:ILE:CG2	2.44	0.96
1:A:293:PRO:CB	1:A:308:LEU:HD13	1.95	0.96
1:A:324:TRP:HZ2	1:A:421:VAL:CG2	1.77	0.96
1:A:431:ASN:O	1:A:431:ASN:ND2	1.99	0.96
1:A:357:LYS:H	1:A:357:LYS:HD2	1.29	0.95
1:A:322:VAL:CG1	1:A:324:TRP:HE1	1.66	0.95
1:A:421:VAL:HB	1:A:422:PRO:HD3	1.46	0.95
1:A:344:ASP:O	1:A:345:PHE:CB	2.14	0.95
1:A:547:TYR:HD1	1:A:548:GLN:H	1.10	0.95
1:A:286:ASN:HD21	1:A:336:VAL:H	1.10	0.95
1:A:219:ARG:O	1:A:220:ASP:OD1	1.83	0.95
1:A:301:ALA:O	1:A:304:ASP:OD1	1.85	0.95
1:A:385:ASN:CG	1:A:573:GLN:HE21	1.75	0.95
1:A:98:MET:CE	1:A:224:THR:H	1.79	0.94
1:A:470:ASP:O	1:A:471:LYS:O	1.86	0.94
1:A:141:VAL:HG12	1:A:142:SER:N	1.83	0.94
1:A:299:PRO:CB	1:A:304:ASP:O	2.15	0.94
1:A:363:THR:HG21	1:A:408:ASP:CB	1.97	0.94
1:A:159:ASP:OD1	1:A:164:ALA:CA	2.14	0.94
1:A:413:PHE:HZ	1:A:415:GLN:NE2	1.66	0.94
1:A:580:ARG:N	1:A:581:PRO:CD	2.29	0.93
1:A:98:MET:HE1	1:A:223:VAL:CG1	1.98	0.93
1:A:270:TYR:CE2	1:A:494:PRO:HG3	2.03	0.93
1:A:128:TRP:CE2	1:A:579:THR:OG1	2.22	0.93
1:A:344:ASP:O	1:A:345:PHE:HD1	1.29	0.92
1:A:419:LEU:O	1:A:419:LEU:CG	2.15	0.92
1:A:147:ILE:CD1	1:A:497:MET:CE	2.47	0.92
1:A:132:CYS:SG	1:A:579:THR:OG1	2.26	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:217:VAL:HG23	1:A:218:ASP:H	1.32	0.92
1:A:580:ARG:H	1:A:581:PRO:HD2	1.31	0.91
1:A:370:ALA:C	1:A:372:GLY:H	1.76	0.91
1:A:401:THR:O	1:A:403:PHE:N	2.04	0.91
1:A:190:PRO:O	1:A:193:ASN:HB2	1.71	0.91
1:A:128:TRP:CE2	1:A:132:CYS:SG	2.64	0.91
1:A:547:TYR:CE1	1:A:548:GLN:O	2.24	0.91
1:A:344:ASP:C	1:A:345:PHE:CB	2.42	0.91
1:A:381:GLN:O	1:A:382:HIS:CG	2.24	0.91
1:A:85:ARG:NE	1:A:237:MET:HG3	1.86	0.90
1:A:357:LYS:HD2	1:A:357:LYS:N	1.86	0.90
1:A:159:ASP:HB3	1:A:165:ILE:H	1.35	0.90
1:A:61:VAL:HG21	1:A:135:MET:HE1	1.54	0.90
1:A:357:LYS:CD	1:A:357:LYS:N	2.26	0.89
1:A:274:THR:HG22	1:A:489:CYS:HA	1.53	0.89
1:A:360:ALA:O	1:A:361:ASP:O	1.90	0.89
1:A:176:MET:HE3	1:A:525:PHE:CE1	2.07	0.89
1:A:98:MET:HE1	1:A:223:VAL:C	1.96	0.89
1:A:98:MET:HE1	1:A:224:THR:N	1.80	0.89
1:A:564:TRP:HZ2	1:A:577:LEU:HD21	1.37	0.89
1:A:344:ASP:O	1:A:345:PHE:CA	2.19	0.89
1:A:136:SER:O	1:A:279:LEU:CB	2.21	0.89
1:A:158:GLN:O	1:A:159:ASP:HB3	1.73	0.89
1:A:324:TRP:CZ2	1:A:421:VAL:HG21	2.04	0.89
1:A:357:LYS:CG	1:A:372:GLY:HA3	2.03	0.89
1:A:309:THR:O	1:A:314:ARG:HD2	1.73	0.89
1:A:357:LYS:HG2	1:A:372:GLY:HA3	1.55	0.89
1:A:547:TYR:O	1:A:548:GLN:OE1	1.91	0.88
1:A:344:ASP:CB	1:A:345:PHE:N	2.35	0.88
3:C:15:DA:H4'	3:C:16:DA:OP1	1.74	0.88
1:A:68:THR:HG22	1:A:528:LYS:HG3	1.56	0.87
2:B:10:DC:O3'	2:B:11:DA:H5'	1.74	0.87
1:A:52:HIS:CD2	2:B:7:DC:O4'	2.27	0.87
2:B:10:DC:O3'	2:B:10:DC:OP1	1.91	0.87
2:B:8:DA:O4'	2:B:10:DC:H1'	1.74	0.87
1:A:324:TRP:CZ2	1:A:421:VAL:HG22	2.08	0.87
1:A:362:VAL:HG13	1:A:366:MET:HA	0.92	0.86
1:A:386:TRP:CZ3	1:A:570:GLY:O	2.27	0.86
1:A:318:THR:HG22	1:A:320:MET:H	1.37	0.86
1:A:280:THR:CG2	1:A:583:ALA:O	2.23	0.86
1:A:580:ARG:H	1:A:581:PRO:HD3	1.38	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:176:MET:HE1	1:A:525:PHE:CG	2.11	0.86
1:A:318:THR:HG23	1:A:329:ILE:CG2	2.02	0.86
1:A:386:TRP:HZ3	1:A:570:GLY:O	1.58	0.86
1:A:362:VAL:HG21	1:A:368:ARG:CA	2.05	0.86
1:A:434:PRO:O	1:A:435:ILE:HD13	1.74	0.86
1:A:217:VAL:O	1:A:218:ASP:HB2	1.75	0.85
1:A:357:LYS:H	1:A:357:LYS:HD3	1.39	0.85
1:A:338:PHE:HB2	1:A:449:SER:O	1.75	0.85
1:A:61:VAL:HG11	1:A:135:MET:HE1	1.58	0.85
1:A:362:VAL:HG22	1:A:368:ARG:N	1.91	0.85
1:A:318:THR:HG21	1:A:329:ILE:CG2	2.07	0.85
1:A:421:VAL:HB	1:A:422:PRO:CD	2.07	0.85
1:A:558:TYR:O	1:A:563:LYS:CE	2.24	0.85
1:A:509:TYR:HD1	1:A:516:LEU:HD12	0.68	0.84
2:B:9:DA:O3'	2:B:10:DC:H4'	1.76	0.84
1:A:344:ASP:C	1:A:345:PHE:N	0.74	0.84
1:A:483:ILE:C	1:A:484:THR:CA	2.50	0.84
1:A:191:ALA:HB1	1:A:196:GLU:O	1.78	0.84
1:A:117:ASN:OD1	1:A:468:ILE:HB	1.78	0.84
1:A:182:SER:O	1:A:184:ASN:N	2.09	0.84
1:A:196:GLU:CD	1:A:212:ARG:HH22	1.84	0.84
1:A:281:HIS:HD1	1:A:582:VAL:H	1.24	0.84
1:A:483:ILE:N	1:A:484:THR:N	2.25	0.84
1:A:47:TYR:HA	1:A:68:THR:HG21	1.60	0.83
1:A:66:LEU:HA	1:A:529:GLY:O	1.78	0.83
1:A:483:ILE:CA	1:A:484:THR:N	2.41	0.83
1:A:118:ALA:O	1:A:122:TRP:HD1	1.61	0.83
2:B:2:DC:H2'	2:B:2:DC:O2	1.79	0.83
1:A:106:GLN:HE21	1:A:212:ARG:HB2	1.41	0.83
1:A:228:GLN:HG3	1:A:229:GLU:N	1.91	0.83
1:A:280:THR:HG22	1:A:584:ARG:HB2	1.61	0.83
1:A:289:LEU:CD2	1:A:587:TYR:HB2	1.99	0.83
1:A:85:ARG:CZ	1:A:237:MET:HG3	2.09	0.82
1:A:385:ASN:C	1:A:387:ALA:N	2.37	0.82
1:A:270:TYR:HE2	1:A:494:PRO:HG3	1.43	0.82
1:A:113:LEU:CD2	1:A:114:VAL:N	2.42	0.82
1:A:128:TRP:CZ2	1:A:579:THR:OG1	2.30	0.82
1:A:159:ASP:OD1	1:A:159:ASP:O	1.97	0.82
2:B:2:DC:H4'	2:B:3:DA:OP1	1.78	0.82
1:A:48:ASP:HB2	1:A:528:LYS:CE	2.06	0.81
1:A:133:ASN:ND2	1:A:549:VAL:HB	1.95	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:270:TYR:HE2	1:A:494:PRO:CG	1.92	0.81
1:A:320:MET:HG2	1:A:419:LEU:HD22	1.62	0.81
1:A:85:ARG:HH21	1:A:237:MET:HG2	0.65	0.81
1:A:151:VAL:HB	1:A:524:THR:OG1	1.81	0.81
1:A:402:ASN:O	1:A:403:PHE:O	1.99	0.81
1:A:340:GLN:NE2	1:A:358:VAL:HG22	1.94	0.81
1:A:68:THR:HA	1:A:527:TRP:O	1.79	0.80
1:A:509:TYR:CE2	1:A:511:PRO:HG3	2.17	0.80
1:A:552:GLU:O	1:A:553:ASP:O	1.99	0.80
1:A:411:ASP:C	1:A:412:GLY:O	2.23	0.80
1:A:68:THR:HG22	1:A:528:LYS:CG	2.11	0.80
1:A:378:TYR:CZ	1:A:465:GLN:NE2	2.49	0.80
1:A:363:THR:CG2	1:A:408:ASP:HB2	2.12	0.79
1:A:352:PRO:C	1:A:353:PHE:CA	2.54	0.79
1:A:85:ARG:CZ	1:A:237:MET:CG	2.59	0.79
1:A:270:TYR:HE2	1:A:494:PRO:CD	1.96	0.79
1:A:87:HIS:HD2	1:A:237:MET:SD	2.04	0.79
1:A:525:PHE:C	1:A:526:PHE:C	2.51	0.79
1:A:281:HIS:CE1	1:A:582:VAL:H	2.01	0.79
1:A:109:THR:OG1	1:A:211:TYR:O	2.00	0.79
1:A:526:PHE:CA	1:A:527:TRP:N	2.45	0.79
1:A:113:LEU:HD23	1:A:114:VAL:CA	2.13	0.78
1:A:390:GLY:O	1:A:392:ALA:N	2.15	0.78
1:A:141:VAL:HG12	1:A:142:SER:H	1.46	0.78
1:A:322:VAL:HG11	1:A:324:TRP:HE1	1.18	0.78
1:A:370:ALA:C	1:A:372:GLY:N	2.38	0.78
1:A:68:THR:CG2	1:A:528:LYS:HG3	2.13	0.78
1:A:385:ASN:OD1	1:A:573:GLN:NE2	2.15	0.78
1:A:158:GLN:O	1:A:159:ASP:CB	2.32	0.78
1:A:119:TRP:CD1	1:A:467:GLN:O	2.37	0.78
1:A:141:VAL:O	1:A:272:PHE:CD2	2.35	0.78
1:A:386:TRP:O	1:A:571:ASN:OD1	2.02	0.77
1:A:94:VAL:HG21	1:A:97:ASN:HD22	1.50	0.77
1:A:361:ASP:O	1:A:371:ASN:CB	2.32	0.77
1:A:113:LEU:O	1:A:208:ALA:HB1	1.84	0.77
1:A:111:TRP:CG	1:A:250:ILE:CD1	2.67	0.76
1:A:223:VAL:C	1:A:224:THR:HG23	2.09	0.76
1:A:118:ALA:O	1:A:122:TRP:CD1	2.38	0.76
1:A:362:VAL:CG2	1:A:368:ARG:CA	2.61	0.76
1:A:98:MET:HE1	1:A:224:THR:H	1.40	0.76
1:A:164:ALA:O	1:A:165:ILE:HD13	1.85	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:47:TYR:CD2	1:A:68:THR:OG1	2.38	0.76
1:A:85:ARG:HE	1:A:237:MET:HG3	1.47	0.76
1:A:182:SER:C	1:A:184:ASN:N	2.37	0.76
1:A:415:GLN:OE1	1:A:419:LEU:HD11	1.85	0.76
2:B:10:DC:H2'	2:B:10:DC:O2	1.84	0.76
1:A:580:ARG:N	1:A:581:PRO:HD3	1.94	0.76
1:A:98:MET:HE1	1:A:223:VAL:CB	2.15	0.75
1:A:322:VAL:HG12	1:A:323:ASN:H	1.49	0.75
1:A:322:VAL:HG12	1:A:323:ASN:N	2.01	0.75
1:A:362:VAL:HG22	1:A:368:ARG:H	1.48	0.75
1:A:564:TRP:CZ2	1:A:577:LEU:HD21	2.22	0.75
3:C:16:DA:H2''	3:C:17:DA:H5'	1.67	0.75
1:A:124:GLN:HB3	1:A:125:PRO:HD2	1.67	0.75
1:A:277:VAL:HG23	1:A:487:PHE:HE1	1.47	0.75
1:A:158:GLN:O	1:A:165:ILE:O	2.03	0.75
1:A:142:SER:OG	1:A:532:THR:CG2	2.34	0.75
1:A:280:THR:CG2	1:A:584:ARG:HB2	2.16	0.75
1:A:381:GLN:O	1:A:382:HIS:CD2	2.39	0.75
3:C:16:DA:H2''	3:C:17:DA:C5'	2.16	0.75
1:A:571:ASN:O	1:A:572:MET:HG2	1.87	0.75
1:A:69:ARG:HH11	1:A:121:VAL:HG13	1.50	0.74
1:A:284:GLN:HB2	1:A:586:THR:HB	1.69	0.74
1:A:239:THR:HG22	1:A:240:PRO:HD2	0.82	0.74
1:A:418:PRO:O	1:A:420:VAL:N	2.17	0.74
1:A:142:SER:N	1:A:532:THR:OG1	2.19	0.74
1:A:491:ASN:O	1:A:492:ASN:O	2.06	0.74
1:A:130:TYR:HD1	1:A:130:TYR:O	1.70	0.73
1:A:132:CYS:SG	1:A:579:THR:CG2	2.76	0.73
1:A:286:ASN:ND2	1:A:336:VAL:H	1.85	0.73
1:A:284:GLN:OE1	1:A:587:TYR:N	2.22	0.73
1:A:386:TRP:HB3	1:A:571:ASN:HB3	1.71	0.73
1:A:70:LEU:HD23	1:A:205:PRO:HB3	1.70	0.73
1:A:418:PRO:O	1:A:420:VAL:HG13	1.88	0.73
1:A:293:PRO:HB2	1:A:308:LEU:CD1	2.16	0.72
1:A:92:THR:CG2	1:A:235:ASN:HD21	1.97	0.72
1:A:277:VAL:CG2	1:A:487:PHE:CZ	2.72	0.72
1:A:295:LEU:HD23	1:A:308:LEU:CD2	2.20	0.72
1:A:163:GLN:O	1:A:164:ALA:HB2	1.86	0.72
1:A:343:ASN:O	1:A:345:PHE:HD1	1.72	0.72
1:A:57:GLY:O	1:A:58:ASP:HB2	1.88	0.72
1:A:303:THR:O	1:A:303:THR:OG1	2.05	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:362:VAL:CG2	1:A:368:ARG:N	2.52	0.72
1:A:105:GLU:HB2	1:A:217:VAL:HG13	1.68	0.71
1:A:98:MET:HE2	1:A:223:VAL:CA	2.00	0.71
1:A:177:MET:HB3	1:A:256:ILE:CG2	2.18	0.71
1:A:511:PRO:C	1:A:513:GLY:H	1.97	0.71
1:A:98:MET:HE1	1:A:223:VAL:HG12	1.73	0.71
1:A:217:VAL:HG23	1:A:218:ASP:N	2.03	0.71
1:A:293:PRO:HG2	1:A:308:LEU:HD11	1.71	0.71
1:A:367:ASP:OD2	1:A:409:THR:HB	1.91	0.71
1:A:117:ASN:ND2	1:A:469:TRP:O	2.16	0.71
1:A:367:ASP:C	1:A:369:GLU:H	1.95	0.71
1:A:451:GLY:C	1:A:453:LEU:H	1.98	0.71
1:A:216:CYS:SG	1:A:244:ASN:HB2	2.30	0.71
1:A:387:ALA:HB2	1:A:571:ASN:CG	2.16	0.71
1:A:386:TRP:HE3	1:A:571:ASN:C	1.99	0.71
1:A:277:VAL:HG21	1:A:487:PHE:CZ	2.26	0.70
1:A:106:GLN:HE21	1:A:212:ARG:CB	2.04	0.70
1:A:113:LEU:HD23	1:A:114:VAL:C	2.16	0.70
1:A:94:VAL:C	1:A:95:LYS:HG2	2.15	0.70
1:A:332:ARG:HB3	1:A:333:PRO:HD2	1.72	0.70
1:A:147:ILE:HD11	1:A:497:MET:HE3	1.71	0.70
1:A:270:TYR:CE2	1:A:494:PRO:CG	2.71	0.70
2:B:8:DA:C1'	2:B:10:DC:H1'	2.22	0.70
1:A:280:THR:HG21	1:A:584:ARG:HG3	1.73	0.69
1:A:324:TRP:CZ3	1:A:329:ILE:HD11	2.27	0.69
1:A:555:GLY:C	1:A:556:ASN:ND2	2.50	0.69
1:A:85:ARG:NH2	1:A:237:MET:CB	2.54	0.69
1:A:111:TRP:HE1	1:A:251:GLU:CD	1.98	0.69
1:A:233:GLU:HB3	1:A:234:HIS:ND1	2.07	0.69
1:A:143:LEU:HA	1:A:530:LYS:O	1.91	0.69
1:A:561:VAL:C	1:A:563:LYS:N	2.49	0.69
1:A:48:ASP:H	1:A:68:THR:CG2	2.05	0.69
1:A:119:TRP:HB2	1:A:463:TYR:O	1.93	0.69
1:A:132:CYS:SG	1:A:579:THR:HG23	2.31	0.69
1:A:142:SER:HG	1:A:532:THR:CB	2.06	0.69
1:A:159:ASP:OD1	1:A:164:ALA:HA	1.92	0.69
1:A:348:SER:H	1:A:351:GLY:HA2	1.58	0.69
1:A:159:ASP:HB3	1:A:165:ILE:N	2.07	0.69
1:A:61:VAL:HG21	1:A:135:MET:CE	2.22	0.68
1:A:163:GLN:O	1:A:164:ALA:CB	2.40	0.68
1:A:381:GLN:C	1:A:382:HIS:CG	2.71	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:94:VAL:HG21	1:A:97:ASN:HB2	1.74	0.68
1:A:58:ASP:O	1:A:60:TRP:CD1	2.46	0.68
1:A:363:THR:HG21	1:A:408:ASP:CG	2.18	0.68
1:A:330:ARG:HD3	1:A:332:ARG:NH1	2.09	0.68
1:A:332:ARG:HB3	1:A:333:PRO:CD	2.24	0.68
1:A:464:PRO:HG2	1:A:576:PRO:HA	1.76	0.68
1:A:547:TYR:HD1	1:A:548:GLN:N	1.81	0.68
1:A:92:THR:CG2	1:A:235:ASN:ND2	2.56	0.67
1:A:359:PRO:HB2	1:A:400:GLU:HG3	1.76	0.67
1:A:52:HIS:CD2	2:B:7:DC:C4'	2.78	0.67
1:A:546:VAL:HG21	1:A:582:VAL:HG13	1.76	0.67
1:A:324:TRP:CH2	1:A:421:VAL:HG22	2.30	0.67
1:A:431:ASN:HD22	1:A:431:ASN:C	1.98	0.67
1:A:308:LEU:HD12	1:A:314:ARG:NH2	2.09	0.67
1:A:361:ASP:O	1:A:371:ASN:HB3	1.95	0.67
1:A:363:THR:C	1:A:365:GLY:H	2.01	0.67
1:A:105:GLU:CG	1:A:217:VAL:CG1	2.73	0.67
1:A:134:THR:O	1:A:538:ARG:HG2	1.95	0.67
1:A:558:TYR:OH	1:A:575:VAL:HG12	1.94	0.67
1:A:283:TRP:HE3	1:A:283:TRP:O	1.78	0.66
1:A:432:ALA:HA	1:A:442:HIS:NE2	2.10	0.66
1:A:69:ARG:NH1	1:A:121:VAL:HG13	2.11	0.66
1:A:239:THR:CG2	1:A:240:PRO:CD	2.51	0.66
1:A:241:LYS:C	1:A:243:MET:N	2.53	0.66
1:A:381:GLN:C	1:A:382:HIS:CD2	2.73	0.66
1:A:584:ARG:O	1:A:585:ASN:C	2.38	0.66
1:A:227:ASN:O	1:A:228:GLN:C	2.36	0.66
1:A:264:GLU:HG3	1:A:264:GLU:O	1.92	0.66
1:A:187:PRO:HD2	1:A:211:TYR:OH	1.96	0.65
1:A:411:ASP:O	1:A:412:GLY:C	2.38	0.65
1:A:428:ILE:CG2	1:A:429:LEU:N	2.60	0.65
1:A:95:LYS:O	1:A:224:THR:O	2.14	0.65
1:A:196:GLU:OE1	1:A:212:ARG:NH2	2.29	0.65
2:B:2:DC:O2	2:B:2:DC:C2'	2.42	0.65
1:A:86:VAL:O	1:A:103:ALA:HA	1.97	0.65
2:B:3:DA:C5'	2:B:9:DA:H5''	2.11	0.65
1:A:94:VAL:O	1:A:95:LYS:HG3	1.95	0.65
1:A:561:VAL:C	1:A:563:LYS:H	2.05	0.65
1:A:270:TYR:CD2	1:A:494:PRO:HG3	2.30	0.64
1:A:571:ASN:C	1:A:572:MET:HG2	2.22	0.64
1:A:62:GLU:OE2	1:A:534:ARG:NE	2.31	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:85:ARG:HB2	1:A:105:GLU:HG2	1.78	0.64
1:A:200:PHE:O	1:A:202:PRO:HD3	1.97	0.64
1:A:558:TYR:O	1:A:563:LYS:HD2	1.97	0.64
1:A:94:VAL:CG2	1:A:97:ASN:HB2	2.27	0.64
1:A:47:TYR:CE2	1:A:68:THR:O	2.50	0.64
1:A:52:HIS:HD2	2:B:7:DC:O4'	1.78	0.64
1:A:105:GLU:HG3	1:A:217:VAL:CG1	2.26	0.64
3:C:16:DA:C2'	3:C:17:DA:C5'	2.71	0.64
1:A:129:GLN:HG3	1:A:133:ASN:HD22	1.63	0.64
1:A:219:ARG:C	1:A:220:ASP:OD1	2.41	0.64
1:A:293:PRO:CB	1:A:308:LEU:CD1	2.70	0.64
1:A:402:ASN:O	1:A:405:SER:HB3	1.98	0.64
1:A:458:HIS:HE1	1:A:486:PRO:O	1.81	0.64
1:A:283:TRP:O	1:A:283:TRP:CE3	2.51	0.63
1:A:554:ASN:ND2	1:A:562:THR:HG21	2.14	0.63
1:A:362:VAL:O	1:A:362:VAL:HG12	1.94	0.63
1:A:295:LEU:HD23	1:A:308:LEU:HD23	1.81	0.63
1:A:558:TYR:O	1:A:563:LYS:CD	2.46	0.63
1:A:105:GLU:HG3	1:A:217:VAL:HG12	1.79	0.63
1:A:95:LYS:O	1:A:224:THR:OG1	2.17	0.63
1:A:174:ALA:C	1:A:175:CYS:CA	2.71	0.63
1:A:303:THR:C	1:A:304:ASP:OD1	2.41	0.63
1:A:153:LYS:HE2	1:A:170:ASN:OD1	1.98	0.63
1:A:281:HIS:CE1	1:A:582:VAL:N	2.65	0.63
1:A:367:ASP:OD2	1:A:409:THR:CB	2.46	0.63
1:A:79:GLU:CD	1:A:518:ARG:NH1	2.56	0.63
1:A:280:THR:HG21	1:A:584:ARG:CG	2.28	0.63
1:A:385:ASN:CG	1:A:573:GLN:NE2	2.53	0.63
1:A:217:VAL:O	1:A:218:ASP:CB	2.46	0.63
1:A:362:VAL:O	1:A:366:MET:HA	1.99	0.63
1:A:182:SER:HA	1:A:495:GLY:HA3	1.79	0.63
1:A:569:THR:OG1	1:A:570:GLY:N	2.30	0.63
1:A:45:GLY:HA3	1:A:148:PHE:CG	2.33	0.62
1:A:310:ALA:HB3	1:A:313:SER:HB3	1.81	0.62
1:A:85:ARG:HH21	1:A:237:MET:CB	2.08	0.62
1:A:228:GLN:HG3	1:A:229:GLU:H	1.63	0.62
1:A:417:ALA:HB1	1:A:418:PRO:CD	2.10	0.62
1:A:558:TYR:HA	1:A:563:LYS:HZ1	0.50	0.62
1:A:85:ARG:NE	1:A:237:MET:CG	2.62	0.62
1:A:118:ALA:O	1:A:468:ILE:HD11	1.98	0.62
1:A:380:LYS:C	1:A:382:HIS:H	2.07	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:401:THR:C	1:A:403:PHE:H	2.05	0.62
1:A:341:PRO:HG3	1:A:447:PHE:O	2.00	0.62
1:A:324:TRP:CH2	1:A:421:VAL:CG2	2.83	0.61
1:A:142:SER:OG	1:A:532:THR:HG21	1.99	0.61
1:A:360:ALA:HB1	1:A:406:GLY:HA2	1.81	0.61
1:A:322:VAL:CG1	1:A:323:ASN:H	2.12	0.61
1:A:51:THR:CG2	1:A:127:ASP:OD2	2.43	0.61
1:A:98:MET:C	1:A:100:LYS:H	2.08	0.61
1:A:87:HIS:ND1	1:A:89:THR:HG23	2.15	0.61
1:A:227:ASN:C	1:A:228:GLN:O	2.36	0.61
1:A:300:GLU:O	1:A:301:ALA:HB2	1.99	0.61
1:A:465:GLN:O	1:A:466:GLY:C	2.41	0.61
1:A:88:ASN:OD1	1:A:88:ASN:O	2.19	0.61
1:A:85:ARG:HE	1:A:237:MET:CG	2.14	0.61
1:A:130:TYR:O	1:A:130:TYR:CD1	2.51	0.61
1:A:509:TYR:HA	1:A:516:LEU:HD11	1.83	0.61
1:A:525:PHE:O	1:A:526:PHE:CA	2.30	0.61
1:A:159:ASP:O	1:A:159:ASP:CG	2.44	0.61
1:A:491:ASN:C	1:A:492:ASN:O	2.43	0.61
1:A:68:THR:HG22	1:A:528:LYS:CB	2.30	0.61
1:A:462:VAL:O	1:A:463:TYR:C	2.43	0.61
1:A:79:GLU:CG	1:A:518:ARG:NH1	2.64	0.60
1:A:177:MET:HB3	1:A:256:ILE:HG21	1.82	0.60
1:A:178:VAL:HG21	1:A:259:LEU:HD12	1.83	0.60
1:A:304:ASP:OD1	1:A:304:ASP:N	2.34	0.60
1:A:436:GLY:O	1:A:437:THR:CB	2.49	0.60
1:A:395:ARG:HD3	1:A:395:ARG:N	2.16	0.60
1:A:352:PRO:C	1:A:353:PHE:HB3	2.27	0.60
1:A:377:SER:OG	1:A:395:ARG:HD2	2.01	0.60
1:A:142:SER:N	1:A:532:THR:HG1	1.99	0.60
1:A:431:ASN:HD22	1:A:442:HIS:CD2	2.18	0.60
1:A:550:SER:O	1:A:559:MET:HE2	2.01	0.60
1:A:301:ALA:O	1:A:302:ASP:C	2.44	0.60
1:A:340:GLN:HE21	1:A:358:VAL:HG22	1.63	0.60
1:A:463:TYR:CD2	1:A:464:PRO:CD	2.66	0.60
1:A:318:THR:HG21	1:A:329:ILE:HG21	1.81	0.60
1:A:349:ARG:C	1:A:351:GLY:H	2.10	0.60
1:A:147:ILE:CD1	1:A:497:MET:HE3	2.28	0.59
1:A:177:MET:HE3	1:A:502:GLY:HA2	1.84	0.59
1:A:61:VAL:CG2	1:A:135:MET:HE1	2.29	0.59
1:A:138:LEU:HG	1:A:139:ASN:N	2.17	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:249:THR:HB	1:A:252:ASN:HB2	1.83	0.59
1:A:493:ALA:HB1	1:A:494:PRO:CD	2.32	0.59
1:A:287:ARG:C	1:A:288:GLN:HG3	2.26	0.59
1:A:129:GLN:HG3	1:A:133:ASN:ND2	2.18	0.59
1:A:141:VAL:CG1	1:A:142:SER:H	2.07	0.59
1:A:342:HIS:O	1:A:343:ASN:HB2	2.03	0.59
1:A:267:THR:HG22	1:A:268:GLY:H	1.67	0.59
1:A:287:ARG:HA	1:A:332:ARG:HH21	1.66	0.59
1:A:113:LEU:HD23	1:A:113:LEU:C	2.26	0.59
1:A:47:TYR:CE2	1:A:68:THR:OG1	2.48	0.59
1:A:49:ASN:ND2	1:A:67:ALA:HA	2.16	0.59
1:A:90:THR:O	1:A:91:ASP:OD1	2.21	0.59
1:A:567:THR:O	1:A:568:ALA:C	2.46	0.59
1:A:53:TYR:CE1	1:A:63:ILE:HG12	2.36	0.58
1:A:374:VAL:O	1:A:375:ARG:HB2	1.97	0.58
1:A:94:VAL:O	1:A:95:LYS:CB	2.50	0.58
1:A:352:PRO:CB	1:A:353:PHE:N	2.64	0.58
1:A:463:TYR:C	1:A:463:TYR:CD1	2.77	0.58
1:A:115:ASP:O	1:A:198:LEU:HD13	1.98	0.58
1:A:467:GLN:HG2	1:A:468:ILE:H	1.66	0.58
1:A:544:ASN:C	1:A:545:PRO:O	2.39	0.58
1:A:558:TYR:CZ	1:A:575:VAL:CG1	2.87	0.58
1:A:324:TRP:CH2	1:A:329:ILE:HD11	2.39	0.58
1:A:361:ASP:O	1:A:371:ASN:CG	2.46	0.58
1:A:359:PRO:CB	1:A:400:GLU:HG3	2.34	0.58
1:A:547:TYR:C	1:A:548:GLN:HG2	2.28	0.58
1:A:59:GLY:O	1:A:536:LYS:HA	2.04	0.58
1:A:178:VAL:HG11	1:A:265:PHE:CD2	2.39	0.58
1:A:308:LEU:CD1	1:A:314:ARG:NH2	2.66	0.58
1:A:465:GLN:C	1:A:466:GLY:O	2.46	0.58
1:A:493:ALA:HB1	1:A:494:PRO:HD2	1.86	0.58
1:A:509:TYR:O	1:A:509:TYR:CD2	2.57	0.58
1:A:543:TRP:CD1	1:A:543:TRP:C	2.82	0.58
1:A:438:LYS:HB2	1:A:441:ILE:HB	1.86	0.58
1:A:462:VAL:O	1:A:463:TYR:O	2.21	0.58
1:A:79:GLU:OE2	1:A:518:ARG:HD3	2.03	0.57
1:A:277:VAL:HG21	1:A:487:PHE:CE1	2.35	0.57
1:A:286:ASN:O	1:A:332:ARG:NE	2.37	0.57
1:A:386:TRP:CE3	1:A:571:ASN:C	2.81	0.57
1:A:401:THR:C	1:A:403:PHE:N	2.62	0.57
1:A:509:TYR:CG	1:A:516:LEU:HD11	2.39	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:67:ALA:O	1:A:528:LYS:HA	2.03	0.57
1:A:206:THR:OG1	1:A:207:ILE:N	2.36	0.57
1:A:320:MET:CG	1:A:419:LEU:HD22	2.32	0.57
1:A:386:TRP:CE3	1:A:571:ASN:CA	2.52	0.57
1:A:48:ASP:H	1:A:68:THR:HG21	1.69	0.57
1:A:61:VAL:CG1	1:A:135:MET:HE1	2.32	0.57
1:A:141:VAL:HB	1:A:532:THR:OG1	2.04	0.57
1:A:48:ASP:H	1:A:68:THR:HG23	1.68	0.57
1:A:159:ASP:CG	1:A:164:ALA:N	2.56	0.57
1:A:187:PRO:HG2	1:A:213:TYR:HB2	1.85	0.57
1:A:174:ALA:CA	1:A:175:CYS:N	2.64	0.57
1:A:547:TYR:CD1	1:A:548:GLN:O	2.57	0.57
1:A:361:ASP:HB2	1:A:403:PHE:HA	1.85	0.57
1:A:463:TYR:HB3	1:A:464:PRO:HD3	1.59	0.57
1:A:373:SER:OG	1:A:399:ASP:OD1	2.22	0.57
1:A:458:HIS:CE1	1:A:486:PRO:O	2.57	0.57
1:A:90:THR:C	1:A:91:ASP:OD1	2.48	0.57
1:A:386:TRP:CB	1:A:572:MET:H	2.18	0.57
1:A:85:ARG:NH2	1:A:237:MET:HB2	2.19	0.56
1:A:234:HIS:ND1	1:A:234:HIS:N	2.53	0.56
1:A:278:LYS:HD2	1:A:584:ARG:NH1	2.20	0.56
1:A:324:TRP:HZ2	1:A:421:VAL:HG23	1.64	0.56
1:A:420:VAL:HG23	1:A:420:VAL:O	2.05	0.56
1:A:464:PRO:HD2	1:A:576:PRO:HA	1.85	0.56
1:A:396:TYR:CE1	1:A:558:TYR:CE1	2.94	0.56
1:A:471:LYS:HG2	1:A:472:GLU:H	1.70	0.56
1:A:385:ASN:ND2	1:A:573:GLN:NE2	2.53	0.56
1:A:94:VAL:HG21	1:A:97:ASN:ND2	2.19	0.56
1:A:128:TRP:CG	1:A:132:CYS:HG	2.24	0.56
1:A:561:VAL:O	1:A:562:THR:C	2.44	0.56
1:A:128:TRP:CD1	1:A:132:CYS:HG	2.24	0.56
1:A:340:GLN:HE22	1:A:358:VAL:H	1.52	0.56
1:A:555:GLY:O	1:A:556:ASN:CG	2.49	0.56
1:A:111:TRP:CH2	1:A:177:MET:HB2	2.41	0.56
1:A:124:GLN:C	1:A:463:TYR:OH	2.49	0.55
1:A:343:ASN:O	1:A:344:ASP:O	2.23	0.55
3:C:16:DA:H2''	3:C:17:DA:O5'	2.05	0.55
1:A:126:SER:O	1:A:129:GLN:HB3	2.06	0.55
1:A:451:GLY:C	1:A:453:LEU:N	2.64	0.55
1:A:270:TYR:OH	1:A:493:ALA:HA	2.06	0.55
1:A:336:VAL:O	1:A:407:ARG:CZ	2.54	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:380:LYS:HA	1:A:383:GLY:O	2.06	0.55
1:A:399:ASP:O	1:A:400:GLU:O	2.24	0.55
1:A:511:PRO:C	1:A:513:GLY:N	2.63	0.55
1:A:579:THR:O	1:A:580:ARG:CB	2.54	0.55
1:A:483:ILE:C	1:A:484:THR:HA	2.32	0.55
1:A:95:LYS:O	1:A:224:THR:C	2.48	0.55
1:A:47:TYR:CG	1:A:68:THR:OG1	2.58	0.55
1:A:113:LEU:CD2	1:A:114:VAL:C	2.79	0.55
1:A:284:GLN:HB2	1:A:586:THR:CB	2.37	0.55
1:A:322:VAL:CG1	1:A:323:ASN:N	2.68	0.55
1:A:378:TYR:HE1	1:A:465:GLN:NE2	1.81	0.55
1:A:105:GLU:CG	1:A:217:VAL:HG11	2.34	0.55
1:A:141:VAL:CG1	1:A:142:SER:N	2.52	0.55
1:A:501:LEU:HD11	1:A:522:TYR:HA	1.88	0.55
1:A:274:THR:HG22	1:A:489:CYS:CA	2.32	0.55
1:A:105:GLU:CG	1:A:217:VAL:HG12	2.36	0.55
1:A:362:VAL:CG2	1:A:368:ARG:H	2.15	0.55
1:A:409:THR:HG22	1:A:409:THR:O	2.07	0.55
1:A:338:PHE:CZ	1:A:340:GLN:HG2	2.41	0.54
1:A:416:SER:O	1:A:417:ALA:O	2.25	0.54
1:A:464:PRO:HG2	1:A:576:PRO:CA	2.38	0.54
1:A:471:LYS:O	1:A:488:VAL:HG13	2.07	0.54
1:A:363:THR:HG22	1:A:364:GLN:N	2.23	0.54
1:A:430:THR:H	1:A:433:ASN:HD22	1.54	0.54
1:A:555:GLY:O	1:A:556:ASN:ND2	2.40	0.54
1:A:536:LYS:HG3	1:A:537:LEU:N	2.22	0.54
1:A:552:GLU:C	1:A:553:ASP:O	2.50	0.54
1:A:284:GLN:CD	1:A:587:TYR:H	2.14	0.54
1:A:417:ALA:O	1:A:419:LEU:N	2.40	0.54
2:B:9:DA:H2''	2:B:10:DC:OP2	2.08	0.54
1:A:425:LEU:C	1:A:427:GLY:H	2.16	0.54
1:A:431:ASN:ND2	1:A:431:ASN:C	2.60	0.54
2:B:4:DC:H3'	2:B:5:DC:H5'	1.88	0.54
1:A:142:SER:HG	1:A:532:THR:CG2	2.16	0.54
1:A:130:TYR:CD1	1:A:130:TYR:C	2.85	0.54
1:A:353:PHE:O	1:A:353:PHE:CD1	2.61	0.54
1:A:67:ALA:O	1:A:529:GLY:N	2.41	0.54
1:A:68:THR:HA	1:A:528:LYS:HA	1.90	0.54
1:A:320:MET:HG2	1:A:419:LEU:CD2	2.36	0.54
1:A:352:PRO:C	1:A:353:PHE:CB	2.81	0.54
1:A:69:ARG:HH21	1:A:202:PRO:CA	2.22	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:357:LYS:HD3	1:A:357:LYS:C	2.24	0.54
1:A:49:ASN:HD22	1:A:68:THR:H	1.56	0.53
1:A:342:HIS:HB3	1:A:370:ALA:HA	1.89	0.53
1:A:53:TYR:O	2:B:7:DC:N3	2.40	0.53
1:A:293:PRO:CG	1:A:308:LEU:CD1	2.86	0.53
1:A:69:ARG:HH21	1:A:202:PRO:CB	2.20	0.53
1:A:275:ASN:HD21	1:A:490:LYS:HE2	1.71	0.53
1:A:128:TRP:NE1	1:A:132:CYS:SG	2.81	0.53
1:A:144:ASP:HB3	1:A:530:LYS:HB3	1.90	0.53
1:A:448:ASN:C	1:A:448:ASN:HD22	2.17	0.53
1:A:275:ASN:ND2	1:A:490:LYS:HE2	2.23	0.53
1:A:363:THR:C	1:A:365:GLY:N	2.67	0.53
1:A:470:ASP:C	1:A:471:LYS:O	2.51	0.53
1:A:191:ALA:CB	1:A:196:GLU:O	2.53	0.53
1:A:279:LEU:HD22	1:A:579:THR:CG2	2.39	0.53
1:A:401:THR:O	1:A:403:PHE:CG	2.61	0.53
1:A:413:PHE:C	1:A:414:ILE:HG13	2.33	0.53
1:A:360:ALA:C	1:A:361:ASP:O	2.52	0.52
1:A:106:GLN:HG2	1:A:107:ILE:N	2.24	0.52
1:A:134:THR:O	1:A:538:ARG:CG	2.58	0.52
1:A:561:VAL:HG12	1:A:562:THR:N	2.24	0.52
1:A:194:SER:O	1:A:196:GLU:HG3	2.09	0.52
1:A:374:VAL:HG11	1:A:376:TYR:CE1	2.44	0.52
1:A:379:GLY:O	1:A:381:GLN:N	2.42	0.52
1:A:401:THR:O	1:A:403:PHE:CD2	2.62	0.52
1:A:491:ASN:O	1:A:492:ASN:C	2.52	0.52
1:A:40:VAL:HG11	1:A:172:LEU:HD13	1.92	0.52
1:A:362:VAL:C	1:A:363:THR:O	2.50	0.52
1:A:57:GLY:O	1:A:58:ASP:CB	2.58	0.52
1:A:264:GLU:O	1:A:264:GLU:CG	2.57	0.52
1:A:88:ASN:O	1:A:88:ASN:CG	2.52	0.52
1:A:128:TRP:CD2	1:A:132:CYS:SG	3.02	0.52
1:A:509:TYR:CE1	1:A:516:LEU:HG	2.45	0.52
1:A:111:TRP:CD1	1:A:250:ILE:CD1	2.63	0.52
1:A:387:ALA:HB2	1:A:571:ASN:ND2	2.24	0.52
1:A:183:ASN:O	1:A:184:ASN:C	2.53	0.51
1:A:286:ASN:ND2	1:A:336:VAL:HG23	2.25	0.51
1:A:274:THR:CG2	1:A:489:CYS:HA	2.33	0.51
1:A:301:ALA:O	1:A:304:ASP:CG	2.52	0.51
1:A:106:GLN:CG	1:A:107:ILE:N	2.72	0.51
1:A:218:ASP:O	1:A:237:MET:C	2.50	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:357:LYS:HG3	1:A:372:GLY:HA3	1.89	0.51
1:A:428:ILE:HG22	1:A:429:LEU:N	2.24	0.51
1:A:336:VAL:HG11	1:A:404:GLY:O	2.10	0.51
1:A:560:SER:O	1:A:563:LYS:HB2	2.11	0.51
1:A:558:TYR:OH	1:A:575:VAL:CG1	2.59	0.51
2:B:9:DA:N3	2:B:9:DA:C2'	2.73	0.51
1:A:68:THR:CA	1:A:527:TRP:O	2.53	0.51
1:A:280:THR:CG2	1:A:584:ARG:CB	2.88	0.51
2:B:9:DA:N3	2:B:9:DA:H2'	2.25	0.51
1:A:340:GLN:HE22	1:A:358:VAL:HG22	1.75	0.51
1:A:204:LYS:HE2	1:A:386:TRP:CZ2	2.45	0.51
1:A:429:LEU:HD12	1:A:433:ASN:HB2	1.92	0.51
1:A:578:ILE:HG22	1:A:581:PRO:HD3	1.92	0.51
1:A:45:GLY:HA3	1:A:148:PHE:CD2	2.46	0.50
1:A:423:PRO:C	1:A:424:PRO:O	2.53	0.50
1:A:171:ASP:C	1:A:173:THR:H	2.20	0.50
1:A:451:GLY:O	1:A:453:LEU:N	2.44	0.50
1:A:360:ALA:O	1:A:361:ASP:C	2.51	0.50
1:A:475:LEU:O	1:A:478:LYS:HE2	2.11	0.50
1:A:477:HIS:C	1:A:478:LYS:HG2	2.35	0.50
1:A:303:THR:C	1:A:304:ASP:CG	2.80	0.50
1:A:366:MET:C	1:A:368:ARG:H	2.20	0.50
1:A:414:ILE:HD11	1:A:443:PHE:CE2	2.46	0.50
1:A:419:LEU:O	1:A:420:VAL:C	2.54	0.50
1:A:455:THR:C	1:A:456:PHE:CD1	2.89	0.50
1:A:544:ASN:O	1:A:545:PRO:O	2.29	0.50
1:A:385:ASN:O	1:A:387:ALA:CA	2.53	0.50
1:A:464:PRO:CG	1:A:576:PRO:HA	2.42	0.50
1:A:182:SER:HA	1:A:495:GLY:CA	2.42	0.50
1:A:281:HIS:HD1	1:A:582:VAL:N	2.02	0.50
1:A:159:ASP:OD1	1:A:163:GLN:C	2.47	0.50
1:A:159:ASP:CB	1:A:165:ILE:N	2.75	0.50
1:A:560:SER:O	1:A:561:VAL:C	2.54	0.50
1:A:321:GLU:O	1:A:321:GLU:HG2	2.12	0.49
1:A:324:TRP:O	1:A:324:TRP:CE3	2.64	0.49
1:A:373:SER:O	1:A:374:VAL:O	2.29	0.49
1:A:379:GLY:O	1:A:380:LYS:C	2.54	0.49
1:A:55:PHE:CD1	1:A:61:VAL:HG22	2.47	0.49
1:A:270:TYR:CE2	1:A:494:PRO:N	2.81	0.49
1:A:336:VAL:HG12	1:A:405:SER:HA	1.95	0.49
1:A:455:THR:O	1:A:456:PHE:HB3	2.12	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:94:VAL:HG21	1:A:97:ASN:CB	2.40	0.49
1:A:380:LYS:HA	1:A:384:GLU:HB2	1.94	0.49
1:A:448:ASN:C	1:A:448:ASN:ND2	2.70	0.49
2:B:4:DC:H2'	3:C:14:DC:H42	1.76	0.49
1:A:386:TRP:CE3	1:A:572:MET:N	2.81	0.49
1:A:94:VAL:HG11	1:A:97:ASN:ND2	2.27	0.49
1:A:322:VAL:HG13	1:A:324:TRP:HE1	1.66	0.49
1:A:122:TRP:HD1	1:A:468:ILE:HD11	1.76	0.49
1:A:249:THR:O	1:A:252:ASN:HB2	2.13	0.49
1:A:309:THR:O	1:A:314:ARG:CD	2.56	0.49
1:A:270:TYR:CE2	1:A:494:PRO:CD	2.85	0.49
1:A:384:GLU:O	1:A:386:TRP:N	2.36	0.49
1:A:510:ASP:O	1:A:513:GLY:N	2.46	0.49
1:A:558:TYR:CZ	1:A:575:VAL:HG12	2.48	0.49
1:A:77:LYS:O	1:A:518:ARG:NH2	2.46	0.48
1:A:320:MET:SD	1:A:419:LEU:HD22	2.53	0.48
1:A:191:ALA:C	1:A:193:ASN:H	2.21	0.48
1:A:293:PRO:CG	1:A:308:LEU:HD11	2.39	0.48
1:A:555:GLY:C	1:A:556:ASN:CG	2.81	0.48
1:A:459:PRO:CD	1:A:481:LEU:HD12	2.44	0.48
1:A:281:HIS:CE1	1:A:582:VAL:C	2.92	0.48
1:A:294:LEU:HD23	1:A:294:LEU:HA	1.74	0.48
1:A:561:VAL:O	1:A:563:LYS:CA	2.59	0.48
1:A:180:VAL:HG21	1:A:265:PHE:CZ	2.48	0.48
1:A:443:PHE:O	1:A:446:VAL:HG22	2.14	0.48
1:A:506:THR:HG22	1:A:519:ILE:HG13	1.95	0.48
1:A:129:GLN:O	1:A:133:ASN:CB	2.20	0.48
1:A:326:SER:HB2	1:A:329:ILE:HG13	1.96	0.48
1:A:481:LEU:HD23	1:A:481:LEU:N	2.29	0.48
1:A:250:ILE:CD1	1:A:498:LEU:HD13	2.43	0.48
1:A:378:TYR:CD1	1:A:465:GLN:CD	2.84	0.48
1:A:468:ILE:HG22	1:A:469:TRP:N	2.28	0.48
1:A:113:LEU:CG	1:A:114:VAL:N	2.77	0.48
1:A:124:GLN:HB3	1:A:125:PRO:CD	2.40	0.48
1:A:128:TRP:NE1	1:A:132:CYS:HG	2.11	0.48
1:A:458:HIS:CE1	1:A:486:PRO:HA	2.49	0.48
1:A:568:ALA:O	1:A:569:THR:O	2.32	0.48
1:A:128:TRP:CZ2	1:A:132:CYS:SG	3.07	0.47
1:A:367:ASP:OD2	1:A:409:THR:OG1	2.29	0.47
1:A:552:GLU:OE1	1:A:553:ASP:CA	2.54	0.47
1:A:105:GLU:CB	1:A:217:VAL:HG13	2.35	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:137:GLN:CG	1:A:138:LEU:N	2.77	0.47
1:A:191:ALA:C	1:A:193:ASN:N	2.72	0.47
1:A:275:ASN:ND2	1:A:490:LYS:CE	2.77	0.47
1:A:324:TRP:CZ3	1:A:329:ILE:CD1	2.95	0.47
1:A:338:PHE:HE1	1:A:340:GLN:HE21	1.60	0.47
1:A:343:ASN:O	1:A:345:PHE:CD1	2.62	0.47
1:A:186:LEU:HB3	1:A:187:PRO:HD2	1.97	0.47
1:A:285:THR:HG22	1:A:286:ASN:H	1.80	0.47
1:A:421:VAL:CB	1:A:422:PRO:HD3	2.32	0.47
1:A:423:PRO:HB2	1:A:428:ILE:CD1	2.45	0.47
1:A:434:PRO:O	1:A:435:ILE:CD1	2.56	0.47
1:A:58:ASP:HB2	1:A:60:TRP:HD1	1.79	0.47
1:A:509:TYR:CE1	1:A:516:LEU:CD1	2.88	0.47
1:A:551:VAL:HG12	1:A:561:VAL:HG23	1.97	0.47
1:A:584:ARG:O	1:A:585:ASN:O	2.32	0.47
1:A:241:LYS:C	1:A:243:MET:H	2.08	0.47
1:A:90:THR:O	1:A:90:THR:HG22	2.14	0.47
1:A:280:THR:HG21	1:A:584:ARG:CB	2.44	0.47
1:A:344:ASP:C	1:A:345:PHE:HB2	2.36	0.47
1:A:380:LYS:O	1:A:382:HIS:N	2.47	0.47
1:A:390:GLY:C	1:A:392:ALA:N	2.73	0.47
1:A:464:PRO:CD	1:A:576:PRO:HA	2.45	0.46
1:A:318:THR:HG22	1:A:320:MET:N	2.17	0.46
1:A:259:LEU:HD11	1:A:265:PHE:HB2	1.97	0.46
1:A:284:GLN:CB	1:A:586:THR:HB	2.41	0.46
1:A:159:ASP:CG	1:A:164:ALA:CA	2.88	0.46
1:A:547:TYR:C	1:A:548:GLN:CG	2.87	0.46
1:A:73:LEU:HD22	1:A:499:VAL:HG12	1.98	0.46
1:A:280:THR:HG23	1:A:582:VAL:O	2.15	0.46
1:A:89:THR:HA	1:A:92:THR:HB	1.98	0.46
1:A:463:TYR:CG	1:A:464:PRO:N	2.74	0.46
1:A:567:THR:HG22	1:A:568:ALA:N	2.30	0.46
1:A:142:SER:HB2	1:A:269:THR:CG2	2.46	0.46
1:A:232:ILE:O	1:A:233:GLU:CB	2.46	0.46
1:A:438:LYS:CB	1:A:441:ILE:HB	2.46	0.46
1:A:204:LYS:HE2	1:A:386:TRP:HZ2	1.80	0.45
1:A:250:ILE:C	1:A:252:ASN:H	2.23	0.45
1:A:259:LEU:HD11	1:A:265:PHE:CB	2.47	0.45
1:A:324:TRP:HZ3	1:A:326:SER:HG	1.62	0.45
1:A:132:CYS:SG	1:A:579:THR:CB	3.05	0.45
1:A:270:TYR:HE2	1:A:494:PRO:HD3	1.78	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:458:HIS:CD2	1:A:459:PRO:HD2	2.51	0.45
1:A:488:VAL:O	1:A:489:CYS:C	2.59	0.45
1:A:312:GLY:HA2	1:A:324:TRP:HA	1.98	0.45
1:A:113:LEU:HD23	1:A:114:VAL:H	1.66	0.45
1:A:509:TYR:CA	1:A:516:LEU:HD11	2.45	0.45
1:A:545:PRO:C	1:A:546:VAL:HG12	2.42	0.45
1:A:367:ASP:C	1:A:369:GLU:N	2.59	0.45
1:A:458:HIS:HE1	1:A:486:PRO:HA	1.81	0.45
1:A:49:ASN:HA	1:A:67:ALA:HA	1.99	0.45
1:A:68:THR:HG22	1:A:528:LYS:HB2	1.99	0.45
1:A:186:LEU:HB3	1:A:187:PRO:CD	2.46	0.45
1:A:384:GLU:C	1:A:386:TRP:H	2.20	0.45
1:A:468:ILE:CG2	1:A:469:TRP:HE3	2.29	0.45
1:A:180:VAL:HG21	1:A:265:PHE:HZ	1.81	0.45
1:A:219:ARG:NH2	1:A:221:LEU:HD22	2.32	0.45
1:A:250:ILE:HD13	1:A:498:LEU:HD13	1.99	0.45
1:A:323:ASN:C	1:A:324:TRP:CD1	2.95	0.45
1:A:183:ASN:HB3	1:A:185:ILE:HG13	1.98	0.45
1:A:469:TRP:HA	1:A:487:PHE:O	2.17	0.45
1:A:492:ASN:ND2	1:A:493:ALA:H	2.15	0.45
1:A:561:VAL:CG1	1:A:565:LEU:HD12	2.46	0.45
1:A:217:VAL:CG2	1:A:218:ASP:H	2.05	0.44
1:A:343:ASN:C	1:A:344:ASP:O	2.60	0.44
1:A:429:LEU:HD12	1:A:433:ASN:CB	2.47	0.44
1:A:522:TYR:CD1	1:A:522:TYR:C	2.94	0.44
1:A:69:ARG:HD3	1:A:199:GLY:O	2.15	0.44
1:A:177:MET:HE3	1:A:503:PRO:HD2	1.98	0.44
1:A:386:TRP:HB3	1:A:572:MET:H	1.81	0.44
1:A:344:ASP:HB3	1:A:345:PHE:N	2.25	0.44
1:A:415:GLN:CD	1:A:419:LEU:CD1	2.88	0.44
1:A:476:GLU:H	1:A:476:GLU:HG2	1.38	0.44
1:A:547:TYR:HE1	1:A:548:GLN:O	1.89	0.44
1:A:509:TYR:HA	1:A:516:LEU:CD1	2.48	0.44
1:A:109:THR:C	1:A:111:TRP:H	2.25	0.44
1:A:399:ASP:O	1:A:400:GLU:C	2.61	0.44
1:A:552:GLU:OE1	1:A:553:ASP:CB	2.65	0.44
1:A:95:LYS:NZ	1:A:230:GLY:O	2.48	0.44
1:A:439:ASN:C	1:A:441:ILE:H	2.25	0.44
1:A:61:VAL:HG11	1:A:135:MET:CE	2.39	0.44
1:A:79:GLU:HG2	1:A:518:ARG:NH1	2.32	0.44
1:A:363:THR:O	1:A:365:GLY:N	2.50	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:49:ASN:CG	1:A:202:PRO:HB3	2.43	0.43
1:A:141:VAL:HG21	1:A:534:ARG:HG3	1.99	0.43
1:A:177:MET:HB3	1:A:256:ILE:HG23	1.99	0.43
1:A:478:LYS:HB3	1:A:479:PRO:HD2	2.00	0.43
1:A:318:THR:HA	1:A:331:THR:HG23	2.00	0.43
1:A:122:TRP:CD1	1:A:468:ILE:HD11	2.53	0.43
1:A:323:ASN:O	1:A:324:TRP:HB3	2.19	0.43
1:A:381:GLN:O	1:A:382:HIS:ND1	2.51	0.43
1:A:368:ARG:HD3	1:A:397:THR:HG21	2.00	0.43
1:A:479:PRO:HB2	1:A:481:LEU:O	2.18	0.43
1:A:481:LEU:HD23	1:A:481:LEU:H	1.83	0.43
1:A:47:TYR:OH	1:A:202:PRO:O	2.36	0.43
1:A:106:GLN:NE2	1:A:212:ARG:CB	2.78	0.43
1:A:418:PRO:C	1:A:420:VAL:H	2.17	0.43
1:A:69:ARG:HG2	1:A:206:THR:CG2	2.48	0.43
1:A:111:TRP:CZ3	1:A:177:MET:HB2	2.53	0.43
1:A:180:VAL:CG2	1:A:265:PHE:CZ	3.01	0.43
1:A:500:ARG:HG2	1:A:501:LEU:N	2.34	0.43
1:A:157:GLU:HG3	1:A:166:LYS:HG2	2.00	0.43
1:A:360:ALA:O	1:A:371:ASN:CB	2.40	0.43
1:A:459:PRO:HD3	1:A:481:LEU:HD12	1.99	0.43
1:A:79:GLU:OE2	1:A:518:ARG:CD	2.65	0.43
1:A:178:VAL:HG21	1:A:259:LEU:CD1	2.48	0.43
1:A:94:VAL:HB	1:A:95:LYS:H	1.73	0.43
1:A:128:TRP:CZ2	1:A:579:THR:CB	3.02	0.43
1:A:412:GLY:O	1:A:413:PHE:HB3	2.12	0.43
1:A:260:ARG:HB2	1:A:263:ASP:OD2	2.19	0.43
1:A:300:GLU:O	1:A:301:ALA:CB	2.64	0.43
4:D:20:DA:N3	4:D:20:DA:H2'	2.34	0.43
1:A:118:ALA:O	1:A:468:ILE:CD1	2.66	0.42
1:A:178:VAL:CG2	1:A:259:LEU:HD12	2.48	0.42
1:A:187:PRO:HG2	1:A:213:TYR:CB	2.48	0.42
1:A:202:PRO:HD2	1:A:203:TRP:CZ3	2.54	0.42
1:A:356:PRO:HA	1:A:357:LYS:HD2	2.01	0.42
1:A:421:VAL:CB	1:A:422:PRO:CD	2.84	0.42
1:A:68:THR:HG23	1:A:528:LYS:HG3	1.97	0.42
1:A:98:MET:C	1:A:100:LYS:N	2.77	0.42
1:A:237:MET:HB3	1:A:238:GLY:H	1.47	0.42
1:A:552:GLU:OE1	1:A:552:GLU:CA	2.66	0.42
2:B:9:DA:N6	4:D:20:DA:H5''	2.34	0.42
1:A:159:ASP:CB	1:A:165:ILE:H	2.18	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:509:TYR:HE2	1:A:511:PRO:HG3	1.77	0.42
1:A:55:PHE:HZ	1:A:130:TYR:OH	2.01	0.42
1:A:69:ARG:N	1:A:527:TRP:O	2.52	0.42
1:A:113:LEU:CD2	1:A:114:VAL:H	2.25	0.42
1:A:579:THR:C	1:A:580:ARG:CG	2.90	0.42
2:B:4:DC:C6	3:C:14:DC:N4	2.87	0.42
1:A:84:ILE:O	1:A:106:GLN:O	2.38	0.42
1:A:241:LYS:O	1:A:243:MET:CA	2.64	0.42
1:A:475:LEU:O	1:A:476:GLU:C	2.63	0.42
1:A:160:SER:C	1:A:162:GLY:H	2.26	0.42
1:A:98:MET:CE	1:A:223:VAL:CG1	2.83	0.41
1:A:436:GLY:C	1:A:437:THR:HG23	2.45	0.41
1:A:462:VAL:O	1:A:464:PRO:O	2.38	0.41
1:A:112:SER:HB2	1:A:499:VAL:O	2.21	0.41
1:A:465:GLN:HB2	1:A:466:GLY:H	1.58	0.41
1:A:284:GLN:NE2	1:A:289:LEU:HD23	2.35	0.41
1:A:280:THR:CG2	1:A:584:ARG:CG	2.97	0.41
1:A:284:GLN:OE1	1:A:586:THR:N	2.54	0.41
1:A:77:LYS:C	1:A:518:ARG:HH22	2.29	0.41
1:A:196:GLU:CD	1:A:212:ARG:NH2	2.66	0.41
1:A:561:VAL:O	1:A:564:TRP:N	2.46	0.41
1:A:579:THR:O	1:A:580:ARG:HG2	2.11	0.41
1:A:61:VAL:CB	1:A:135:MET:HE1	2.51	0.41
1:A:311:GLN:C	1:A:313:SER:H	2.29	0.41
1:A:91:ASP:O	1:A:97:ASN:HB3	2.20	0.41
1:A:105:GLU:HG3	1:A:217:VAL:HG11	1.96	0.41
1:A:138:LEU:HD12	1:A:535:ALA:HB2	2.02	0.41
1:A:338:PHE:CE1	1:A:340:GLN:NE2	2.85	0.41
1:A:428:ILE:HG23	1:A:429:LEU:H	1.86	0.41
1:A:441:ILE:HD13	1:A:441:ILE:HA	1.87	0.41
1:A:578:ILE:HD13	1:A:578:ILE:HG21	1.88	0.41
2:B:4:DC:C5	3:C:14:DC:C5	3.09	0.41
1:A:43:SER:HB3	1:A:149:ASN:HD21	1.85	0.41
1:A:309:THR:O	1:A:310:ALA:C	2.63	0.41
1:A:399:ASP:C	1:A:400:GLU:O	2.64	0.41
1:A:79:GLU:HG2	1:A:518:ARG:HH12	1.85	0.41
1:A:177:MET:HE3	1:A:503:PRO:CD	2.50	0.41
1:A:225:TYR:O	1:A:226:GLU:C	2.63	0.41
1:A:318:THR:HG22	1:A:319:GLN:N	2.36	0.41
1:A:416:SER:O	1:A:417:ALA:C	2.64	0.41
1:A:455:THR:O	1:A:456:PHE:CB	2.69	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:106:GLN:NE2	1:A:212:ARG:CG	2.84	0.40
1:A:312:GLY:CA	1:A:324:TRP:HB3	2.51	0.40
1:A:384:GLU:C	1:A:386:TRP:N	2.78	0.40
1:A:402:ASN:O	1:A:405:SER:CB	2.65	0.40
1:A:418:PRO:C	1:A:420:VAL:N	2.75	0.40
1:A:70:LEU:HA	1:A:526:PHE:HA	2.03	0.40
1:A:109:THR:C	1:A:111:TRP:N	2.77	0.40
1:A:458:HIS:CG	1:A:459:PRO:HD2	2.57	0.40
1:A:559:MET:HE2	1:A:559:MET:HB3	2.01	0.40
1:A:111:TRP:CE2	1:A:251:GLU:OE2	2.60	0.40
1:A:127:ASP:O	1:A:131:ILE:HG13	2.22	0.40
1:A:137:GLN:HG3	1:A:138:LEU:N	2.37	0.40
1:A:580:ARG:O	1:A:582:VAL:N	2.55	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles

5.3.1 Protein backbone

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	545/587 (93%)	374 (69%)	87 (16%)	84 (15%)	0 2

All (84) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	95	LYS
1	A	159	ASP
1	A	164	ALA
1	A	183	ASN
1	A	218	ASP
1	A	226	GLU
1	A	228	GLN
1	A	233	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	242	GLY
1	A	285	THR
1	A	301	ALA
1	A	303	THR
1	A	304	ASP
1	A	344	ASP
1	A	345	PHE
1	A	361	ASP
1	A	363	THR
1	A	368	ARG
1	A	371	ASN
1	A	372	GLY
1	A	380	LYS
1	A	382	HIS
1	A	386	TRP
1	A	400	GLU
1	A	402	ASN
1	A	403	PHE
1	A	404	GLY
1	A	412	GLY
1	A	413	PHE
1	A	417	ALA
1	A	419	LEU
1	A	463	TYR
1	A	466	GLY
1	A	471	LYS
1	A	492	ASN
1	A	526	PHE
1	A	553	ASP
1	A	561	VAL
1	A	562	THR
1	A	569	THR
1	A	580	ARG
1	A	582	VAL
1	A	583	ALA
1	A	58	ASP
1	A	237	MET
1	A	283	TRP
1	A	324	TRP
1	A	348	SER
1	A	364	GLN
1	A	381	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	584	ARG
1	A	585	ASN
1	A	172	LEU
1	A	310	ALA
1	A	374	VAL
1	A	375	ARG
1	A	384	GLU
1	A	456	PHE
1	A	509	TYR
1	A	556	ASN
1	A	141	VAL
1	A	302	ASP
1	A	424	PRO
1	A	437	THR
1	A	439	ASN
1	A	465	GLN
1	A	422	PRO
1	A	566	PRO
1	A	568	ALA
1	A	385	ASN
1	A	390	GLY
1	A	406	GLY
1	A	418	PRO
1	A	447	PHE
1	A	452	PRO
1	A	512	ASN
1	A	217	VAL
1	A	545	PRO
1	A	570	GLY
1	A	391	PRO
1	A	199	GLY
1	A	337	GLY
1	A	581	PRO
1	A	131	ILE

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	472/492 (96%)	393 (83%)	79 (17%)	2 13

All (79) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	40	VAL
1	A	44	THR
1	A	48	ASP
1	A	50	GLN
1	A	54	ARG
1	A	56	LEU
1	A	69	ARG
1	A	70	LEU
1	A	73	LEU
1	A	75	MET
1	A	77	LYS
1	A	83	ARG
1	A	85	ARG
1	A	93	SER
1	A	94	VAL
1	A	105	GLU
1	A	107	ILE
1	A	133	ASN
1	A	135	MET
1	A	139	ASN
1	A	155	VAL
1	A	163	GLN
1	A	173	THR
1	A	177	MET
1	A	183	ASN
1	A	193	ASN
1	A	198	LEU
1	A	207	ILE
1	A	212	ARG
1	A	218	ASP
1	A	219	ARG
1	A	223	VAL
1	A	226	GLU
1	A	228	GLN
1	A	229	GLU
1	A	231	THR
1	A	234	HIS
1	A	236	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	239	THR
1	A	243	MET
1	A	264	GLU
1	A	267	THR
1	A	285	THR
1	A	294	LEU
1	A	302	ASP
1	A	303	THR
1	A	304	ASP
1	A	314	ARG
1	A	320	MET
1	A	340	GLN
1	A	348	SER
1	A	357	LYS
1	A	358	VAL
1	A	362	VAL
1	A	364	GLN
1	A	367	ASP
1	A	386	TRP
1	A	389	HIS
1	A	395	ARG
1	A	405	SER
1	A	415	GLN
1	A	428	ILE
1	A	431	ASN
1	A	441	ILE
1	A	447	PHE
1	A	448	ASN
1	A	457	SER
1	A	476	GLU
1	A	478	LYS
1	A	483	ILE
1	A	489	CYS
1	A	516	LEU
1	A	541	THR
1	A	546	VAL
1	A	548	GLN
1	A	550	SER
1	A	552	GLU
1	A	556	ASN
1	A	559	MET

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (25)

such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	49	ASN
1	A	87	HIS
1	A	97	ASN
1	A	106	GLN
1	A	139	ASN
1	A	149	ASN
1	A	183	ASN
1	A	228	GLN
1	A	286	ASN
1	A	291	GLN
1	A	382	HIS
1	A	385	ASN
1	A	431	ASN
1	A	433	ASN
1	A	445	ASN
1	A	448	ASN
1	A	458	HIS
1	A	492	ASN
1	A	496	GLN
1	A	540	ASN
1	A	544	ASN
1	A	554	ASN
1	A	556	ASN
1	A	571	ASN
1	A	573	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 [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](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	A	10
2	B	1

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	B	10:DC	O3'	11:DA	P	2.98
1	A	352:PRO	C	353:PHE	N	2.03
1	A	174:ALA	C	175:CYS	N	1.84
1	A	483:ILE	C	484:THR	N	1.84
1	A	526:PHE	C	527:TRP	N	1.78
1	A	374:VAL	C	375:ARG	N	1.61
1	A	495:GLY	C	496:GLN	N	1.20
1	A	553:ASP	C	554:ASN	N	1.04
1	A	525:PHE	C	526:PHE	N	0.87
1	A	373:SER	C	374:VAL	N	0.77
1	A	344:ASP	C	345:PHE	N	0.74

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.