



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Apr 25, 2026 – 01:43 AM EDT

PDB ID : 1RYX / pdb_00001ryx
Title : Crystal structure of hen serum transferrin in apo- form
Authors : Dattagupta, J.K.; Thakurta, P.G.; Choudhury, D.; Dasgupta, R.
Deposited on : 2003-12-23
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)	:	2.0
EDS	:	3.0
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
CCP4	:	9.0.010 (Gargrove)
Density-Fitness	:	1.0.12
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

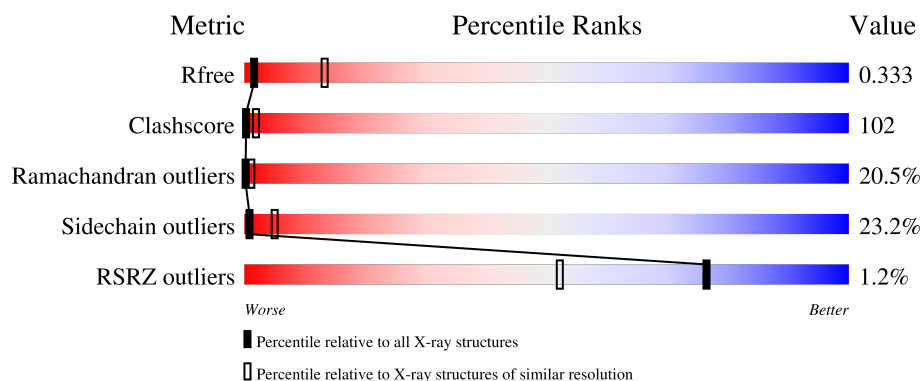
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.50 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))
R_{free}	180053	1085 (3.54-3.46)
Clashscore	190562	1140 (3.54-3.46)
Ramachandran outliers	187476	1113 (3.54-3.46)
Sidechain outliers	187428	1114 (3.54-3.46)
RSRZ outliers	180081	1084 (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 $\leq 5\%$. The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the electron density. The numeric value is given above the bar.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	686	20% 49% 27% .

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 4657 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.

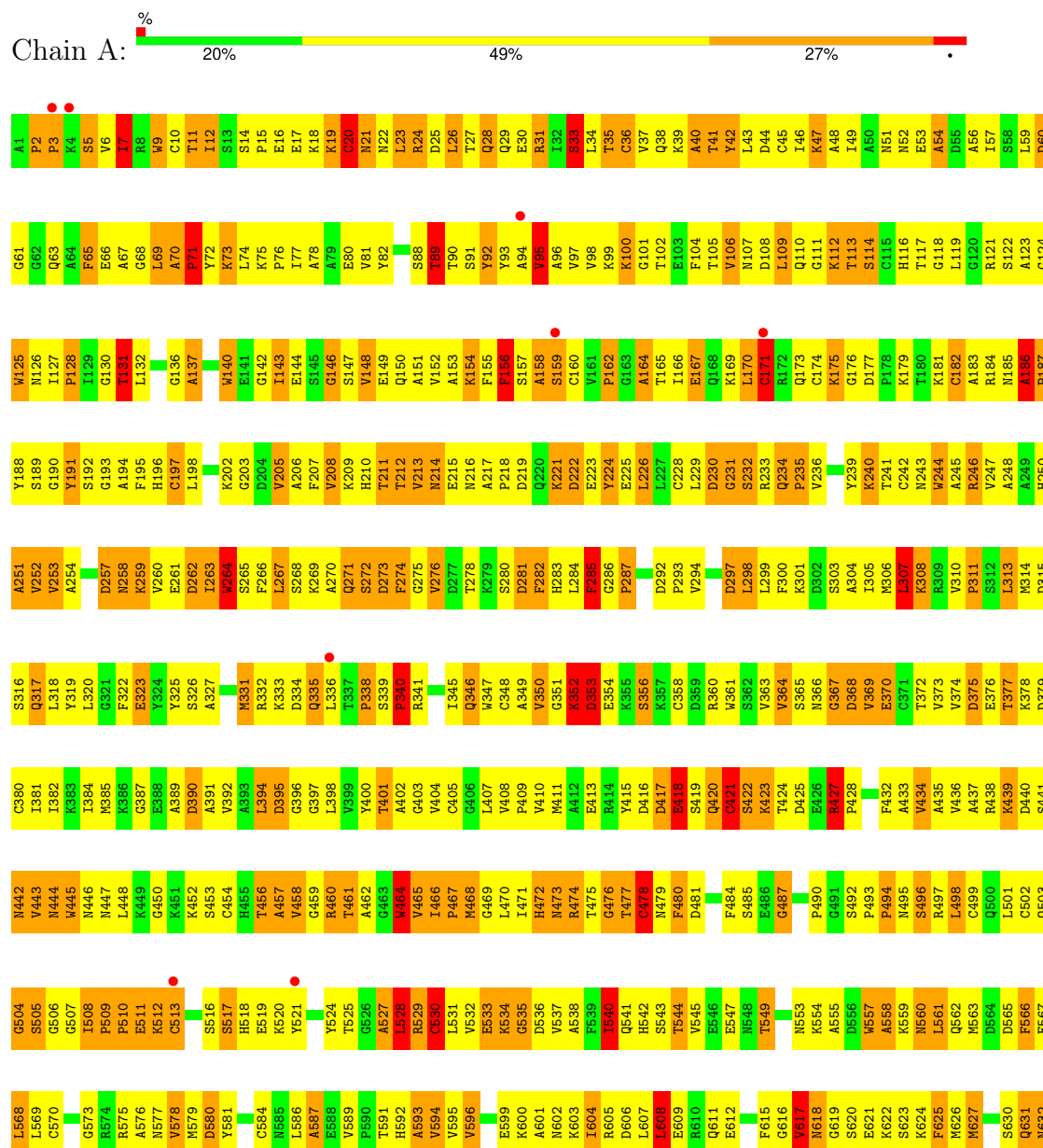
- Molecule 1 is a protein called Ovotransferrin.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	686	4657	2893	795	929	40	0	0	0

3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry and electron density. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. A red dot above a residue indicates a poor fit to the electron density ($RSRZ > 2$). Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

• Molecule 1: Ovotransferrin



K633	D634	L635	L636	F637	K638	D639	L640	T641	K642	C643	L644	F645	K646	V647	R648	E649	G650	T651	T652	Y653	D659	Y662	T663	V664	I665	S666	S667	L668	K669	T670	C671	S674	D675	I676	L677	Q678	M679	C680	S681	F682	L683	E684	G685	K686
------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 43 21 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	90.30Å 90.30Å 177.67Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	19.69 – 3.50 19.69 – 3.50	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	88.3 (19.69-3.50) 87.6 (19.69-3.50)	Depositor EDS
R_{merge}	0.10	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	2.17 (at 3.44Å)	Xtriage
Refinement program	CNS 1.0	Depositor
R, R_{free}	0.283 , 0.341 0.278 , 0.333	Depositor DCC
R_{free} test set	444 reflections (4.73%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	71.2	Xtriage
Anisotropy	0.055	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.15 , 36.6	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.45$, $\langle L^2 \rangle = 0.28$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.85	EDS
Total number of atoms	4657	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	21.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 4.22% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality [i](#)

5.1 Standard geometry [i](#)

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	0.68	0/4739	1.30	65/6478 (1.0%)

There are no bond length outliers.

All (65) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed($^{\circ}$)	Ideal($^{\circ}$)
1	A	317	GLN	N-CA-C	-11.62	98.83	113.23
1	A	182	CYS	N-CA-C	-11.07	100.53	112.93
1	A	213	VAL	N-CA-C	-10.72	98.40	110.62
1	A	573	GLY	N-CA-C	-10.46	101.55	113.79
1	A	473	ASN	N-CA-C	-10.39	99.47	112.88
1	A	418	GLU	N-CA-C	-9.76	101.58	113.19
1	A	394	LEU	N-CA-C	9.40	124.43	110.52
1	A	285	PHE	N-CA-C	-8.40	103.19	113.19
1	A	589	VAL	N-CA-C	8.30	117.85	108.05
1	A	378	LYS	N-CA-C	-7.99	102.60	113.30
1	A	89	THR	N-CA-C	7.93	121.34	108.34
1	A	264	TRP	N-CA-C	-7.92	101.36	111.02
1	A	33	SER	N-CA-C	7.79	119.49	108.74
1	A	608	LEU	N-CA-C	-7.72	103.70	113.43
1	A	263	ILE	N-CA-C	-7.38	105.79	111.62
1	A	287	PRO	N-CA-C	-7.32	101.77	110.70
1	A	95	VAL	N-CA-C	7.27	117.40	108.53
1	A	267	LEU	N-CA-C	-7.20	102.27	112.13
1	A	20	CYS	N-CA-C	-7.11	104.73	113.19
1	A	432	PHE	N-CA-C	6.83	120.57	110.46
1	A	2	PRO	N-CA-CB	6.83	109.70	103.08
1	A	659	ASP	N-CA-C	-6.71	103.28	113.89
1	A	364	VAL	N-CA-C	-6.70	102.66	112.04
1	A	346	GLN	N-CA-C	-6.64	99.44	109.79
1	A	365	SER	N-CA-C	-6.62	105.06	113.01
1	A	54	ALA	N-CA-C	6.62	118.71	109.31
1	A	140	TRP	N-CA-C	-6.60	100.69	110.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	425	ASP	N-CA-C	-6.53	104.35	112.90
1	A	186	ALA	CA-C-N	-6.49	111.73	119.84
1	A	186	ALA	C-N-CA	-6.49	111.73	119.84
1	A	131	THR	N-CA-C	-6.49	105.90	113.88
1	A	41	THR	N-CA-C	6.46	119.53	109.52
1	A	42	TYR	N-CA-C	-6.42	104.71	112.54
1	A	47	LYS	N-CA-C	-6.37	103.25	111.02
1	A	623	SER	N-CA-C	-6.34	104.42	111.71
1	A	340	PRO	N-CA-CB	6.32	109.89	103.25
1	A	31	ARG	N-CA-C	6.31	124.24	110.80
1	A	478	CYS	N-CA-C	6.15	118.40	110.65
1	A	527	ALA	N-CA-C	-6.11	104.55	111.14
1	A	540	ILE	N-CA-C	6.09	115.96	108.53
1	A	580	ASP	N-CA-C	-6.06	104.96	113.20
1	A	19	LYS	N-CA-C	-6.04	104.77	111.36
1	A	444	ASN	N-CA-C	-6.03	99.52	108.99
1	A	188	TYR	N-CA-C	-5.90	106.42	113.21
1	A	5	SER	N-CA-C	5.88	117.15	108.86
1	A	662	TYR	N-CA-C	-5.78	106.36	113.41
1	A	3	PRO	N-CA-CB	5.60	109.13	103.25
1	A	511	GLU	N-CA-C	-5.59	105.59	113.20
1	A	2	PRO	N-CA-C	5.49	117.40	110.70
1	A	356	SER	N-CA-C	-5.47	105.23	111.14
1	A	477	THR	N-CA-C	-5.47	99.16	110.80
1	A	517	SER	N-CA-C	-5.46	106.12	112.89
1	A	487	GLY	N-CA-C	5.45	118.49	110.80
1	A	71	PRO	CA-N-CD	-5.44	104.38	112.00
1	A	244	TRP	N-CA-C	-5.43	107.20	113.88
1	A	593	ALA	N-CA-C	5.42	116.88	107.93
1	A	528	LEU	N-CA-C	-5.40	104.44	111.02
1	A	252	VAL	N-CA-C	-5.39	98.14	109.34
1	A	570	CYS	N-CA-C	-5.36	102.81	110.59
1	A	558	ALA	N-CA-C	-5.29	105.28	112.26
1	A	353	ASP	N-CA-C	-5.25	106.67	114.64
1	A	480	PHE	N-CA-C	-5.15	105.67	111.28
1	A	156	PHE	N-CA-C	-5.07	101.85	109.60
1	A	589	VAL	CA-C-N	5.03	126.15	120.66
1	A	589	VAL	C-N-CA	5.03	126.15	120.66

There are no chirality outliers.

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	4657	0	4024	884	0
All	All	4657	0	4024	884	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 102.

All (884) 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:70:ALA:CB	1:A:71:PRO:HD2	1.76	1.13
1:A:208:VAL:HG12	1:A:209:LYS:H	1.06	1.13
1:A:540:ILE:HD13	1:A:544:THR:HG21	1.33	1.10
1:A:313:LEU:HD23	1:A:679:MET:HE3	1.27	1.09
1:A:493:PRO:HG2	1:A:496:SER:HB2	1.32	1.09
1:A:113:THR:HG22	1:A:158:ALA:HB3	1.34	1.07
1:A:427:ARG:HB3	1:A:428:PRO:HD2	1.31	1.07
1:A:651:THR:HG22	1:A:652:THR:H	1.20	1.07
1:A:7:ILE:HD11	1:A:263:ILE:HG12	1.35	1.06
1:A:504:GLY:HA2	1:A:519:GLU:HG3	1.38	1.05
1:A:384:ILE:HD11	1:A:392:VAL:HG23	1.39	1.05
1:A:612:GLU:HA	1:A:627:MET:HE1	1.39	1.04
1:A:305:ILE:HG22	1:A:306:MET:HG2	1.40	1.03
1:A:132:LEU:HB3	1:A:137:ALA:HB3	1.40	1.02
1:A:26:LEU:HD23	1:A:26:LEU:H	1.24	1.01
1:A:68:GLY:HA2	1:A:74:LEU:H	1.23	1.01
1:A:508:ILE:CB	1:A:509:PRO:HD2	1.93	0.99
1:A:543:SER:O	1:A:547:GLU:HG3	1.61	0.99
1:A:70:ALA:HB1	1:A:71:PRO:HD2	1.44	0.98
1:A:78:ALA:HB3	1:A:252:VAL:HB	1.47	0.96
1:A:105:THR:CG2	1:A:231:GLY:HA2	1.97	0.95
1:A:114:SER:HB2	1:A:156:PHE:CD2	2.02	0.94
1:A:492:SER:HB2	1:A:499:CYS:HB2	1.49	0.93
1:A:114:SER:HB2	1:A:156:PHE:HD2	1.32	0.93
1:A:545:VAL:O	1:A:549:THR:HG23	1.67	0.93
1:A:191:TYR:HD2	1:A:192:SER:H	0.97	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:338:PRO:HG2	1:A:339:SER:H	1.34	0.92
1:A:56:ALA:HB2	1:A:254:ALA:HB2	1.52	0.91
1:A:162:PRO:HB2	1:A:184:ARG:HA	1.52	0.90
1:A:11:THR:HG22	1:A:12:ILE:N	1.86	0.90
1:A:190:GLY:O	1:A:194:ALA:HB2	1.71	0.90
1:A:532:VAL:HG23	1:A:533:GLU:H	1.34	0.90
1:A:394:LEU:HD12	1:A:595:VAL:CG1	2.01	0.89
1:A:462:ALA:HA	1:A:466:ILE:HD12	1.53	0.89
1:A:146:GLY:O	1:A:151:ALA:HB2	1.73	0.89
1:A:408:VAL:HG13	1:A:409:PRO:HD2	1.54	0.88
1:A:662:TYR:O	1:A:666:SER:HB3	1.73	0.88
1:A:42:TYR:CB	1:A:63:GLN:HE22	1.84	0.88
1:A:208:VAL:HG12	1:A:209:LYS:N	1.87	0.88
1:A:616:GLY:HA3	1:A:627:MET:HE2	1.55	0.87
1:A:60:ASP:HB3	1:A:250:HIS:CE1	2.09	0.87
1:A:427:ARG:HB3	1:A:428:PRO:CD	2.04	0.87
1:A:576:ALA:HB1	1:A:580:ASP:HB2	1.55	0.86
1:A:604:ILE:O	1:A:608:LEU:HB2	1.76	0.86
1:A:470:LEU:HD23	1:A:664:VAL:HG21	1.57	0.85
1:A:364:VAL:HB	1:A:615:PHE:CZ	2.11	0.85
1:A:166:ILE:HG22	1:A:167:GLU:H	1.38	0.85
1:A:348:CYS:HB3	1:A:392:VAL:HG22	1.59	0.85
1:A:59:LEU:HB3	1:A:63:GLN:HB3	1.59	0.85
1:A:132:LEU:HB3	1:A:137:ALA:CB	2.07	0.85
1:A:444:ASN:HA	1:A:569:LEU:HD22	1.58	0.84
1:A:630:SER:O	1:A:632:ASN:N	2.11	0.84
1:A:281:ASP:O	1:A:282:PHE:HB2	1.77	0.83
1:A:615:PHE:HD2	1:A:625:PHE:O	1.60	0.83
1:A:363:VAL:HG23	1:A:364:VAL:H	1.43	0.83
1:A:651:THR:HG22	1:A:652:THR:N	1.89	0.83
1:A:532:VAL:HG23	1:A:533:GLU:N	1.94	0.82
1:A:297:ASP:CB	1:A:301:LYS:HA	2.10	0.82
1:A:537:VAL:HG12	1:A:538:ALA:N	1.94	0.82
1:A:405:CYS:HA	1:A:680:CYS:HB3	1.62	0.82
1:A:549:THR:OG1	1:A:563:MET:HG3	1.80	0.81
1:A:261:GLU:C	1:A:263:ILE:H	1.88	0.81
1:A:469:GLY:HA3	1:A:664:VAL:HG13	1.63	0.81
1:A:345:ILE:O	1:A:369:VAL:HA	1.80	0.80
1:A:20:CYS:HB2	1:A:299:LEU:HD11	1.61	0.80
1:A:80:GLU:OE1	1:A:301:LYS:HG2	1.81	0.80
1:A:257:ASP:CG	1:A:258:ASN:H	1.90	0.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:27:THR:HG23	1:A:33:SER:HA	1.64	0.80
1:A:474:ARG:HH11	1:A:474:ARG:HG2	1.44	0.80
1:A:676:ILE:HD12	1:A:676:ILE:H	1.47	0.79
1:A:7:ILE:HD11	1:A:263:ILE:CG1	2.11	0.79
1:A:461:THR:O	1:A:466:ILE:HG13	1.83	0.79
1:A:433:ALA:O	1:A:434:VAL:HG23	1.82	0.78
1:A:112:LYS:HD3	1:A:112:LYS:H	1.49	0.78
1:A:7:ILE:O	1:A:34:LEU:HA	1.84	0.78
1:A:70:ALA:HB3	1:A:71:PRO:HD2	1.64	0.78
1:A:191:TYR:HD2	1:A:192:SER:N	1.78	0.78
1:A:307:LEU:O	1:A:307:LEU:HD23	1.84	0.78
1:A:48:ALA:O	1:A:53:GLU:HB2	1.84	0.77
1:A:345:ILE:HG22	1:A:346:GLN:O	1.83	0.77
1:A:384:ILE:CD1	1:A:392:VAL:HG23	2.14	0.77
1:A:195:PHE:CZ	1:A:213:VAL:HG13	2.20	0.77
1:A:450:GLY:O	1:A:485:SER:HB2	1.83	0.77
1:A:258:ASN:O	1:A:260:VAL:HG23	1.84	0.77
1:A:125:TRP:CH2	1:A:152:VAL:HG21	2.20	0.77
1:A:617:VAL:O	1:A:619:GLY:N	2.18	0.77
1:A:102:THR:HG22	1:A:104:PHE:H	1.49	0.77
1:A:394:LEU:HD12	1:A:595:VAL:HG11	1.66	0.77
1:A:492:SER:CB	1:A:499:CYS:HB2	2.15	0.76
1:A:59:LEU:HD22	1:A:63:GLN:NE2	2.00	0.76
1:A:403:GLY:HA3	1:A:653:TYR:CD1	2.20	0.76
1:A:441:SER:CB	1:A:443:VAL:HG23	2.15	0.76
1:A:651:THR:CG2	1:A:652:THR:H	1.96	0.76
1:A:508:ILE:CB	1:A:509:PRO:CD	2.63	0.76
1:A:612:GLU:CA	1:A:627:MET:HE1	2.15	0.76
1:A:109:LEU:HA	1:A:112:LYS:HE2	1.66	0.75
1:A:390:ASP:OD1	1:A:600:LYS:HE2	1.86	0.75
1:A:380:CYS:HB3	1:A:392:VAL:HG21	1.68	0.75
1:A:508:ILE:O	1:A:510:PRO:N	2.18	0.75
1:A:441:SER:OG	1:A:443:VAL:HG23	1.85	0.75
1:A:11:THR:HG22	1:A:12:ILE:H	1.51	0.75
1:A:531:LEU:HA	1:A:535:GLY:HA3	1.66	0.75
1:A:540:ILE:HD13	1:A:544:THR:CG2	2.15	0.75
1:A:568:LEU:HD11	1:A:578:VAL:O	1.87	0.75
1:A:105:THR:HG23	1:A:231:GLY:HA2	1.68	0.75
1:A:118:GLY:HA2	1:A:162:PRO:HD2	1.68	0.75
1:A:132:LEU:CB	1:A:137:ALA:HB3	2.17	0.74
1:A:147:SER:O	1:A:150:GLN:N	2.19	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:285:PHE:HE1	1:A:306:MET:HA	1.50	0.74
1:A:348:CYS:CB	1:A:392:VAL:HG22	2.17	0.74
1:A:452:LYS:HB3	1:A:501:LEU:HD11	1.68	0.74
1:A:143:ILE:O	1:A:147:SER:HB2	1.88	0.74
1:A:441:SER:C	1:A:443:VAL:H	1.95	0.74
1:A:562:GLN:HG3	1:A:565:ASP:OD2	1.87	0.74
1:A:504:GLY:CA	1:A:519:GLU:HG3	2.16	0.74
1:A:90:THR:HB	1:A:686:LYS:O	1.88	0.74
1:A:284:LEU:C	1:A:286:GLY:H	1.93	0.73
1:A:427:ARG:CB	1:A:428:PRO:HD2	2.12	0.73
1:A:621:GLU:O	1:A:624:LYS:HB2	1.88	0.73
1:A:113:THR:HB	1:A:203:GLY:HA2	1.71	0.73
1:A:217:ALA:C	1:A:219:ASP:H	1.97	0.73
1:A:445:TRP:HZ3	1:A:474:ARG:NE	1.86	0.73
1:A:70:ALA:CB	1:A:71:PRO:CD	2.63	0.73
1:A:476:GLY:O	1:A:477:THR:C	2.31	0.73
1:A:348:CYS:SG	1:A:374:VAL:HG21	2.29	0.73
1:A:609:GLU:HA	1:A:612:GLU:OE2	1.88	0.73
1:A:398:LEU:HA	1:A:401:THR:CG2	2.19	0.73
1:A:434:VAL:HG11	1:A:568:LEU:HD22	1.71	0.73
1:A:475:THR:HG23	1:A:475:THR:O	1.88	0.73
1:A:363:VAL:HG23	1:A:364:VAL:N	2.03	0.73
1:A:252:VAL:HG21	1:A:307:LEU:HD11	1.71	0.73
1:A:376:GLU:HB3	1:A:379:ASP:OD1	1.89	0.72
1:A:568:LEU:HG	1:A:578:VAL:HA	1.71	0.72
1:A:78:ALA:HB1	1:A:307:LEU:HG	1.72	0.72
1:A:557:TRP:O	1:A:561:LEU:HD23	1.90	0.72
1:A:649:GLU:HG3	1:A:650:GLY:N	2.04	0.72
1:A:117:THR:HG22	1:A:190:GLY:O	1.89	0.72
1:A:537:VAL:HG12	1:A:538:ALA:H	1.54	0.72
1:A:252:VAL:HG21	1:A:307:LEU:CD1	2.20	0.72
1:A:411:MET:HB2	1:A:645:PHE:O	1.90	0.71
1:A:567:GLU:HB2	1:A:575:ARG:HH21	1.55	0.71
1:A:411:MET:HE3	1:A:644:LEU:O	1.89	0.71
1:A:616:GLY:HA3	1:A:627:MET:CE	2.20	0.71
1:A:505:SER:CB	1:A:510:PRO:HA	2.21	0.71
1:A:630:SER:C	1:A:632:ASN:H	1.98	0.71
1:A:444:ASN:ND2	1:A:446:ASN:HD22	1.88	0.71
1:A:467:PRO:C	1:A:469:GLY:H	1.97	0.71
1:A:532:VAL:CG2	1:A:533:GLU:H	2.03	0.71
1:A:558:ALA:HA	1:A:561:LEU:HD23	1.73	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:616:GLY:CA	1:A:627:MET:HE2	2.20	0.70
1:A:246:ARG:HH21	1:A:248:ALA:HB2	1.55	0.70
1:A:105:THR:HG21	1:A:231:GLY:HA2	1.73	0.70
1:A:531:LEU:O	1:A:531:LEU:HD22	1.91	0.70
1:A:59:LEU:HB3	1:A:63:GLN:CB	2.21	0.70
1:A:166:ILE:HG22	1:A:167:GLU:N	2.06	0.69
1:A:615:PHE:CD2	1:A:625:PHE:O	2.45	0.69
1:A:311:PRO:HD3	1:A:682:PHE:CD1	2.26	0.69
1:A:317:GLN:HA	1:A:325:TYR:CD1	2.25	0.69
1:A:494:PRO:HG2	1:A:495:ASN:H	1.55	0.69
1:A:612:GLU:HA	1:A:627:MET:CE	2.20	0.69
1:A:617:VAL:C	1:A:619:GLY:H	2.01	0.69
1:A:78:ALA:HB1	1:A:307:LEU:CD2	2.22	0.69
1:A:113:THR:CB	1:A:203:GLY:HA2	2.22	0.69
1:A:338:PRO:CG	1:A:339:SER:H	2.06	0.69
1:A:95:VAL:HG12	1:A:96:ALA:H	1.56	0.69
1:A:148:VAL:HG12	1:A:149:GLU:N	2.05	0.69
1:A:181:LYS:C	1:A:183:ALA:H	2.00	0.69
1:A:579:MET:C	1:A:581:TYR:H	2.00	0.69
1:A:285:PHE:N	1:A:285:PHE:CD2	2.60	0.69
1:A:97:VAL:HG12	1:A:98:VAL:H	1.58	0.68
1:A:301:LYS:HG3	1:A:304:ALA:HB2	1.75	0.68
1:A:7:ILE:CD1	1:A:263:ILE:HA	2.24	0.68
1:A:162:PRO:HB2	1:A:184:ARG:CA	2.23	0.68
1:A:121:ARG:O	1:A:126:ASN:CB	2.41	0.68
1:A:265:SER:C	1:A:267:LEU:H	2.01	0.68
1:A:567:GLU:HB2	1:A:575:ARG:NH2	2.09	0.68
1:A:616:GLY:O	1:A:619:GLY:N	2.26	0.68
1:A:549:THR:HG21	1:A:566:PHE:CE1	2.28	0.68
1:A:317:GLN:HG2	1:A:325:TYR:CD2	2.29	0.67
1:A:456:THR:O	1:A:457:ALA:HB2	1.94	0.67
1:A:70:ALA:HB1	1:A:71:PRO:CD	2.22	0.67
1:A:549:THR:HG21	1:A:566:PHE:HE1	1.58	0.67
1:A:20:CYS:HB2	1:A:299:LEU:CD1	2.23	0.67
1:A:125:TRP:O	1:A:128:PRO:HG2	1.94	0.67
1:A:292:ASP:C	1:A:294:VAL:H	2.02	0.67
1:A:7:ILE:CD1	1:A:263:ILE:HG12	2.20	0.67
1:A:118:GLY:HA2	1:A:162:PRO:CD	2.25	0.67
1:A:397:GLY:O	1:A:400:TYR:HB3	1.95	0.67
1:A:27:THR:CG2	1:A:33:SER:HA	2.24	0.67
1:A:42:TYR:CB	1:A:63:GLN:NE2	2.58	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:265:SER:O	1:A:267:LEU:N	2.28	0.67
1:A:457:ALA:HA	1:A:490:PRO:HG2	1.77	0.66
1:A:467:PRO:HG2	1:A:468:MET:H	1.59	0.66
1:A:513:CYS:O	1:A:513:CYS:SG	2.52	0.66
1:A:442:ASN:O	1:A:447:ASN:ND2	2.25	0.66
1:A:261:GLU:C	1:A:263:ILE:N	2.52	0.66
1:A:374:VAL:CG1	1:A:379:ASP:HB2	2.26	0.66
1:A:385:MET:HE2	1:A:405:CYS:HB3	1.76	0.66
1:A:616:GLY:O	1:A:617:VAL:C	2.39	0.66
1:A:420:GLN:O	1:A:421:CYS:HB2	1.95	0.66
1:A:367:GLY:C	1:A:369:VAL:H	2.01	0.66
1:A:284:LEU:C	1:A:286:GLY:N	2.53	0.66
1:A:466:ILE:H	1:A:467:PRO:HD2	1.60	0.66
1:A:470:LEU:CD1	1:A:586:LEU:HD22	2.26	0.66
1:A:468:MET:O	1:A:668:LEU:HD13	1.96	0.65
1:A:137:ALA:HB1	1:A:155:PHE:CZ	2.31	0.65
1:A:283:HIS:HD2	1:A:287:PRO:HD3	1.59	0.65
1:A:405:CYS:SG	1:A:676:ILE:HG22	2.37	0.65
1:A:493:PRO:HG2	1:A:496:SER:CB	2.19	0.65
1:A:441:SER:HB2	1:A:443:VAL:HG23	1.78	0.65
1:A:46:ILE:HD13	1:A:67:ALA:HA	1.77	0.65
1:A:434:VAL:CG1	1:A:568:LEU:HD22	2.26	0.65
1:A:496:SER:OG	1:A:497:ARG:N	2.30	0.65
1:A:232:SER:OG	1:A:233:ARG:N	2.28	0.65
1:A:234:GLN:CB	1:A:235:PRO:HD2	2.27	0.65
1:A:285:PHE:N	1:A:285:PHE:HD2	1.92	0.65
1:A:468:MET:HE2	1:A:480:PHE:CB	2.27	0.65
1:A:517:SER:C	1:A:519:GLU:H	2.05	0.65
1:A:649:GLU:CG	1:A:650:GLY:H	2.10	0.65
1:A:11:THR:CG2	1:A:12:ILE:N	2.59	0.64
1:A:195:PHE:CE1	1:A:213:VAL:HG13	2.32	0.64
1:A:540:ILE:HG23	1:A:541:GLN:N	2.11	0.64
1:A:184:ARG:N	1:A:184:ARG:CD	2.61	0.64
1:A:472:HIS:CE1	1:A:478:CYS:HB3	2.31	0.64
1:A:251:ALA:HB2	1:A:319:TYR:CE2	2.33	0.64
1:A:345:ILE:HD11	1:A:607:LEU:CB	2.28	0.64
1:A:109:LEU:O	1:A:112:LYS:HG2	1.97	0.64
1:A:221:LYS:HG3	1:A:222:ASP:H	1.62	0.64
1:A:529:ARG:O	1:A:532:VAL:HG22	1.97	0.64
1:A:78:ALA:HB3	1:A:252:VAL:CB	2.24	0.64
1:A:384:ILE:HD11	1:A:391:ALA:C	2.22	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:413:GLU:CB	1:A:638:LYS:HE2	2.28	0.64
1:A:586:LEU:O	1:A:587:ALA:HB2	1.97	0.64
1:A:649:GLU:CG	1:A:650:GLY:N	2.61	0.64
1:A:292:ASP:O	1:A:294:VAL:N	2.31	0.64
1:A:147:SER:O	1:A:148:VAL:C	2.41	0.64
1:A:470:LEU:HD23	1:A:664:VAL:CG2	2.28	0.64
1:A:543:SER:O	1:A:547:GLU:CG	2.43	0.64
1:A:633:LYS:O	1:A:639:ASP:OD2	2.16	0.64
1:A:59:LEU:HD22	1:A:63:GLN:HE21	1.62	0.64
1:A:471:ILE:C	1:A:473:ASN:H	2.06	0.64
1:A:540:ILE:CD1	1:A:544:THR:HG21	2.21	0.64
1:A:641:THR:HG22	1:A:642:LYS:N	2.13	0.64
1:A:51:ASN:C	1:A:53:GLU:H	2.05	0.63
1:A:496:SER:HB3	1:A:499:CYS:HB3	1.78	0.63
1:A:461:THR:HG22	1:A:466:ILE:HD11	1.79	0.63
1:A:112:LYS:O	1:A:156:PHE:HB3	1.98	0.63
1:A:169:LYS:O	1:A:170:LEU:HB2	1.96	0.63
1:A:456:THR:HG1	1:A:524:TYR:HD2	1.45	0.63
1:A:239:TYR:O	1:A:241:THR:N	2.32	0.63
1:A:283:HIS:CD2	1:A:287:PRO:HD3	2.33	0.63
1:A:313:LEU:HD23	1:A:679:MET:CE	2.17	0.63
1:A:466:ILE:HG21	1:A:587:ALA:HB3	1.80	0.63
1:A:230:ASP:OD1	1:A:232:SER:HB3	1.98	0.63
1:A:398:LEU:HD23	1:A:401:THR:HG21	1.80	0.63
1:A:427:ARG:CB	1:A:428:PRO:CD	2.75	0.63
1:A:283:HIS:HB2	1:A:286:GLY:HA2	1.79	0.63
1:A:317:GLN:HG2	1:A:325:TYR:CE2	2.34	0.63
1:A:358:CYS:C	1:A:360:ARG:H	2.06	0.63
1:A:65:PHE:C	1:A:65:PHE:CD2	2.77	0.62
1:A:398:LEU:HA	1:A:401:THR:HG23	1.81	0.62
1:A:265:SER:C	1:A:267:LEU:N	2.58	0.62
1:A:305:ILE:HG22	1:A:306:MET:CG	2.24	0.62
1:A:5:SER:OG	1:A:262:ASP:HB3	2.00	0.62
1:A:78:ALA:HB1	1:A:307:LEU:CG	2.30	0.62
1:A:105:THR:HG22	1:A:106:VAL:N	2.12	0.62
1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HD2	1.64	0.62
1:A:98:VAL:HG12	1:A:225:GLU:O	1.99	0.62
1:A:271:GLN:O	1:A:273:ASP:N	2.33	0.62
1:A:445:TRP:HZ3	1:A:474:ARG:HE	1.45	0.62
1:A:258:ASN:O	1:A:259:LYS:C	2.43	0.62
1:A:528:LEU:O	1:A:529:ARG:C	2.39	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:19:LYS:C	1:A:21:ASN:H	2.08	0.62
1:A:292:ASP:C	1:A:294:VAL:N	2.57	0.62
1:A:56:ALA:HB1	1:A:253:VAL:O	2.00	0.61
1:A:415:TYR:HA	1:A:641:THR:HA	1.82	0.61
1:A:59:LEU:HD12	1:A:253:VAL:HG21	1.81	0.61
1:A:27:THR:HG21	1:A:34:LEU:H	1.66	0.61
1:A:48:ALA:HA	1:A:53:GLU:OE1	2.00	0.61
1:A:56:ALA:CB	1:A:254:ALA:HB2	2.27	0.61
1:A:7:ILE:HD11	1:A:263:ILE:HA	1.82	0.61
1:A:57:ILE:O	1:A:59:LEU:HG	2.00	0.61
1:A:65:PHE:C	1:A:65:PHE:HD2	2.08	0.61
1:A:285:PHE:CE1	1:A:306:MET:HA	2.33	0.61
1:A:360:ARG:O	1:A:363:VAL:HG22	2.01	0.61
1:A:394:LEU:HD12	1:A:595:VAL:HG13	1.82	0.61
1:A:517:SER:C	1:A:519:GLU:N	2.55	0.61
1:A:537:VAL:CG1	1:A:538:ALA:N	2.63	0.61
1:A:466:ILE:N	1:A:467:PRO:HD2	2.16	0.61
1:A:48:ALA:HA	1:A:51:ASN:HD22	1.66	0.61
1:A:60:ASP:HB3	1:A:250:HIS:ND1	2.16	0.61
1:A:93:TYR:CE2	1:A:240:LYS:HA	2.36	0.61
1:A:677:LEU:O	1:A:681:SER:HB3	2.01	0.61
1:A:456:THR:OG1	1:A:524:TYR:HD2	1.84	0.60
1:A:510:PRO:C	1:A:512:LYS:H	2.09	0.60
1:A:519:GLU:CG	1:A:520:LYS:N	2.64	0.60
1:A:317:GLN:NE2	1:A:325:TYR:HB3	2.16	0.60
1:A:340:PRO:C	1:A:341:ARG:HD3	2.26	0.60
1:A:394:LEU:CD1	1:A:595:VAL:HG11	2.30	0.60
1:A:508:ILE:O	1:A:510:PRO:CD	2.49	0.60
1:A:461:THR:HG22	1:A:466:ILE:CG1	2.31	0.60
1:A:80:GLU:HG3	1:A:250:HIS:O	2.01	0.60
1:A:466:ILE:HG21	1:A:587:ALA:CB	2.31	0.60
1:A:493:PRO:HB2	1:A:494:PRO:HD2	1.82	0.60
1:A:208:VAL:CG1	1:A:209:LYS:H	1.92	0.60
1:A:96:ALA:HB2	1:A:207:PHE:CD2	2.37	0.60
1:A:46:ILE:HD11	1:A:59:LEU:CD1	2.31	0.60
1:A:349:ALA:HB1	1:A:354:GLU:CB	2.31	0.60
1:A:630:SER:C	1:A:632:ASN:N	2.59	0.60
1:A:638:LYS:HE3	1:A:641:THR:OG1	2.01	0.60
1:A:221:LYS:HG3	1:A:222:ASP:N	2.16	0.60
1:A:468:MET:O	1:A:472:HIS:HD2	1.85	0.59
1:A:98:VAL:HG21	1:A:102:THR:HG23	1.83	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:502:CYS:SG	1:A:513:CYS:HB2	2.41	0.59
1:A:70:ALA:C	1:A:72:TYR:H	2.11	0.59
1:A:229:LEU:HD11	1:A:244:TRP:HA	1.84	0.59
1:A:638:LYS:CE	1:A:641:THR:OG1	2.51	0.59
1:A:69:LEU:C	1:A:70:ALA:O	2.45	0.59
1:A:72:TYR:O	1:A:73:LYS:HB2	2.03	0.59
1:A:390:ASP:OD1	1:A:600:LYS:CE	2.51	0.59
1:A:364:VAL:CB	1:A:615:PHE:CZ	2.84	0.58
1:A:669:LYS:O	1:A:670:THR:C	2.46	0.58
1:A:261:GLU:O	1:A:263:ILE:N	2.36	0.58
1:A:345:ILE:HD13	1:A:604:ILE:HD13	1.86	0.58
1:A:461:THR:HA	1:A:465:VAL:HG12	1.84	0.58
1:A:94:ALA:O	1:A:243:ASN:HB2	2.04	0.58
1:A:576:ALA:HB1	1:A:580:ASP:CB	2.32	0.58
1:A:127:ILE:N	1:A:128:PRO:HD2	2.18	0.58
1:A:269:LYS:O	1:A:270:ALA:C	2.46	0.58
1:A:23:LEU:HD23	1:A:23:LEU:C	2.28	0.58
1:A:166:ILE:CG2	1:A:167:GLU:H	2.14	0.58
1:A:195:PHE:CE1	1:A:213:VAL:HA	2.38	0.58
1:A:306:MET:O	1:A:308:LYS:N	2.37	0.58
1:A:536:ASP:O	1:A:537:VAL:HG23	2.04	0.58
1:A:11:THR:HB	1:A:38:GLN:HA	1.85	0.58
1:A:16:GLU:O	1:A:20:CYS:HB3	2.04	0.58
1:A:468:MET:O	1:A:472:HIS:CD2	2.57	0.58
1:A:472:HIS:HA	1:A:475:THR:HG22	1.85	0.58
1:A:7:ILE:O	1:A:34:LEU:CA	2.51	0.58
1:A:212:THR:C	1:A:214:ASN:N	2.52	0.58
1:A:160:CYS:SG	1:A:160:CYS:O	2.62	0.58
1:A:193:GLY:O	1:A:196:HIS:N	2.37	0.58
1:A:410:VAL:HB	1:A:594:VAL:O	2.04	0.58
1:A:630:SER:O	1:A:633:LYS:HG3	2.04	0.57
1:A:156:PHE:CD1	1:A:156:PHE:N	2.72	0.57
1:A:461:THR:HG23	1:A:465:VAL:CG1	2.34	0.57
1:A:465:VAL:HG22	1:A:668:LEU:HD23	1.86	0.57
1:A:300:PHE:O	1:A:301:LYS:C	2.46	0.57
1:A:537:VAL:CG1	1:A:538:ALA:H	2.17	0.57
1:A:81:VAL:HG13	1:A:89:THR:O	2.04	0.57
1:A:530:CYS:SG	1:A:531:LEU:N	2.78	0.57
1:A:109:LEU:O	1:A:111:GLY:N	2.37	0.57
1:A:230:ASP:CG	1:A:230:ASP:O	2.45	0.57
1:A:99:LYS:HA	1:A:223:GLU:O	2.04	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:154:LYS:HD2	1:A:154:LYS:O	2.05	0.57
1:A:615:PHE:O	1:A:627:MET:SD	2.63	0.57
1:A:441:SER:O	1:A:443:VAL:N	2.38	0.57
1:A:553:ASN:HB3	1:A:558:ALA:HB3	1.85	0.57
1:A:372:THR:O	1:A:374:VAL:HG23	2.05	0.56
1:A:437:ALA:N	1:A:567:GLU:O	2.37	0.56
1:A:459:GLY:O	1:A:461:THR:N	2.38	0.56
1:A:361:TRP:C	1:A:363:VAL:H	2.13	0.56
1:A:100:LYS:HA	1:A:225:GLU:OE1	2.06	0.56
1:A:217:ALA:O	1:A:219:ASP:N	2.38	0.56
1:A:338:PRO:HG2	1:A:339:SER:N	2.13	0.56
1:A:366:ASN:O	1:A:368:ASP:N	2.39	0.56
1:A:405:CYS:HA	1:A:680:CYS:CB	2.34	0.56
1:A:519:GLU:CG	1:A:520:LYS:H	2.18	0.56
1:A:648:ARG:O	1:A:649:GLU:O	2.23	0.56
1:A:459:GLY:O	1:A:460:ARG:C	2.48	0.56
1:A:492:SER:HB3	1:A:493:PRO:HD2	1.88	0.56
1:A:395:ASP:OD1	1:A:397:GLY:N	2.37	0.56
1:A:481:ASP:OD1	1:A:481:ASP:O	2.24	0.56
1:A:7:ILE:O	1:A:34:LEU:C	2.49	0.56
1:A:205:VAL:CG2	1:A:206:ALA:N	2.69	0.56
1:A:649:GLU:HG3	1:A:650:GLY:H	1.67	0.56
1:A:195:PHE:HZ	1:A:213:VAL:HG13	1.69	0.56
1:A:400:TYR:HE2	1:A:677:LEU:HD11	1.70	0.56
1:A:377:THR:O	1:A:377:THR:OG1	2.24	0.56
1:A:561:LEU:HD12	1:A:566:PHE:CZ	2.41	0.56
1:A:97:VAL:HG12	1:A:98:VAL:N	2.19	0.56
1:A:164:ALA:O	1:A:165:THR:HB	2.06	0.56
1:A:205:VAL:HG22	1:A:206:ALA:N	2.21	0.55
1:A:519:GLU:HG3	1:A:520:LYS:H	1.71	0.55
1:A:45:CYS:O	1:A:48:ALA:HB3	2.06	0.55
1:A:649:GLU:CD	1:A:650:GLY:H	2.14	0.55
1:A:427:ARG:HE	1:A:428:PRO:HD3	1.71	0.55
1:A:467:PRO:C	1:A:469:GLY:N	2.63	0.55
1:A:529:ARG:O	1:A:530:CYS:C	2.49	0.55
1:A:49:ILE:HG13	1:A:54:ALA:HB3	1.87	0.55
1:A:69:LEU:O	1:A:70:ALA:O	2.25	0.55
1:A:408:VAL:HG13	1:A:409:PRO:CD	2.31	0.55
1:A:470:LEU:O	1:A:473:ASN:N	2.40	0.55
1:A:470:LEU:CD2	1:A:664:VAL:HG21	2.32	0.55
1:A:496:SER:CB	1:A:499:CYS:HB3	2.37	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:641:THR:HG21	1:A:644:LEU:HD21	1.89	0.55
1:A:93:TYR:O	1:A:210:HIS:CB	2.54	0.55
1:A:136:GLY:O	1:A:137:ALA:C	2.50	0.55
1:A:234:GLN:CB	1:A:235:PRO:CD	2.85	0.55
1:A:408:VAL:CG1	1:A:409:PRO:HD2	2.31	0.55
1:A:669:LYS:C	1:A:671:CYS:N	2.60	0.55
1:A:80:GLU:OE1	1:A:301:LYS:HE2	2.06	0.55
1:A:186:ALA:HB1	1:A:187:PRO:CD	2.36	0.55
1:A:568:LEU:HD12	1:A:577:ASN:O	2.07	0.55
1:A:113:THR:CG2	1:A:158:ALA:HB3	2.22	0.55
1:A:461:THR:HA	1:A:465:VAL:CG1	2.36	0.55
1:A:499:CYS:O	1:A:499:CYS:SG	2.65	0.55
1:A:676:ILE:O	1:A:679:MET:N	2.40	0.55
1:A:191:TYR:CD2	1:A:192:SER:N	2.62	0.55
1:A:198:LEU:HG	1:A:198:LEU:O	2.06	0.55
1:A:51:ASN:C	1:A:53:GLU:N	2.65	0.55
1:A:57:ILE:O	1:A:253:VAL:HG23	2.06	0.55
1:A:674:SER:O	1:A:678:GLN:CB	2.55	0.55
1:A:307:LEU:O	1:A:308:LYS:O	2.24	0.54
1:A:508:ILE:O	1:A:509:PRO:C	2.47	0.54
1:A:23:LEU:C	1:A:25:ASP:H	2.15	0.54
1:A:472:HIS:ND1	1:A:475:THR:HG23	2.22	0.54
1:A:142:GLY:O	1:A:144:GLU:N	2.40	0.54
1:A:212:THR:O	1:A:213:VAL:C	2.50	0.54
1:A:14:SER:N	1:A:15:PRO:HD2	2.22	0.54
1:A:117:THR:HG22	1:A:190:GLY:C	2.31	0.54
1:A:148:VAL:O	1:A:151:ALA:N	2.41	0.54
1:A:391:ALA:O	1:A:392:VAL:CG2	2.55	0.54
1:A:445:TRP:CH2	1:A:470:LEU:HB2	2.42	0.54
1:A:398:LEU:C	1:A:400:TYR:N	2.63	0.54
1:A:417:ASP:C	1:A:419:SER:H	2.13	0.54
1:A:542:HIS:CG	1:A:543:SER:N	2.75	0.54
1:A:641:THR:HG21	1:A:644:LEU:CD2	2.38	0.54
1:A:419:SER:O	1:A:420:GLN:CB	2.56	0.54
1:A:239:TYR:O	1:A:242:CYS:N	2.34	0.54
1:A:99:LYS:HA	1:A:224:TYR:HA	1.89	0.54
1:A:132:LEU:CA	1:A:137:ALA:HB3	2.38	0.54
1:A:349:ALA:HB1	1:A:354:GLU:C	2.33	0.54
1:A:434:VAL:HG12	1:A:436:VAL:CG2	2.38	0.54
1:A:475:THR:O	1:A:476:GLY:O	2.26	0.54
1:A:545:VAL:HG12	1:A:563:MET:HG2	1.89	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:322:PHE:CE2	1:A:326:SER:HB3	2.42	0.54
1:A:376:GLU:O	1:A:379:ASP:HB2	2.08	0.54
1:A:461:THR:HG22	1:A:466:ILE:CD1	2.37	0.54
1:A:631:GLN:O	1:A:632:ASN:CB	2.56	0.54
1:A:124:GLY:O	1:A:128:PRO:HD2	2.08	0.53
1:A:91:SER:HA	1:A:247:VAL:O	2.08	0.53
1:A:192:SER:OG	1:A:193:GLY:N	2.40	0.53
1:A:382:ILE:HG22	1:A:679:MET:HE1	1.90	0.53
1:A:257:ASP:CG	1:A:258:ASN:N	2.63	0.53
1:A:299:LEU:O	1:A:300:PHE:CD1	2.62	0.53
1:A:363:VAL:CG2	1:A:364:VAL:H	2.19	0.53
1:A:398:LEU:C	1:A:400:TYR:H	2.15	0.53
1:A:568:LEU:HD11	1:A:578:VAL:C	2.33	0.53
1:A:187:PRO:C	1:A:189:SER:H	2.16	0.53
1:A:326:SER:O	1:A:327:ALA:C	2.51	0.53
1:A:453:SER:HB3	1:A:484:PHE:CD2	2.43	0.53
1:A:155:PHE:HD2	1:A:156:PHE:CE1	2.26	0.53
1:A:191:TYR:CB	1:A:208:VAL:HG13	2.38	0.53
1:A:417:ASP:C	1:A:419:SER:N	2.65	0.53
1:A:6:VAL:HA	1:A:33:SER:OG	2.09	0.53
1:A:140:TRP:CB	1:A:146:GLY:O	2.57	0.53
1:A:159:SER:O	1:A:173:GLN:N	2.28	0.53
1:A:402:ALA:O	1:A:405:CYS:N	2.42	0.53
1:A:402:ALA:O	1:A:405:CYS:HB2	2.09	0.53
1:A:408:VAL:HG12	1:A:409:PRO:N	2.23	0.53
1:A:532:VAL:CG2	1:A:533:GLU:N	2.63	0.53
1:A:265:SER:O	1:A:268:SER:N	2.42	0.53
1:A:374:VAL:HG12	1:A:376:GLU:O	2.09	0.53
1:A:98:VAL:O	1:A:224:TYR:HA	2.09	0.53
1:A:126:ASN:O	1:A:130:GLY:HA3	2.07	0.53
1:A:452:LYS:O	1:A:536:ASP:HB2	2.09	0.53
1:A:461:THR:C	1:A:466:ILE:HG13	2.34	0.53
1:A:113:THR:OG1	1:A:203:GLY:HA2	2.09	0.52
1:A:462:ALA:HA	1:A:466:ILE:CD1	2.34	0.52
1:A:553:ASN:C	1:A:555:ALA:H	2.17	0.52
1:A:162:PRO:CB	1:A:184:ARG:HA	2.33	0.52
1:A:394:LEU:CD1	1:A:595:VAL:HG21	2.39	0.52
1:A:508:ILE:O	1:A:510:PRO:HD3	2.09	0.52
1:A:92:TYR:O	1:A:247:VAL:HG22	2.09	0.52
1:A:114:SER:OG	1:A:156:PHE:HE2	1.91	0.52
1:A:156:PHE:N	1:A:156:PHE:HD1	2.06	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:332:ARG:O	1:A:334:ASP:N	2.41	0.52
1:A:364:VAL:HB	1:A:615:PHE:HZ	1.70	0.52
1:A:517:SER:O	1:A:519:GLU:N	2.42	0.52
1:A:28:GLN:O	1:A:30:GLU:N	2.39	0.52
1:A:36:CYS:SG	1:A:37:VAL:N	2.81	0.52
1:A:263:ILE:O	1:A:264:TRP:C	2.51	0.52
1:A:271:GLN:O	1:A:272:SER:C	2.52	0.52
1:A:563:MET:HE2	1:A:579:MET:HE2	1.92	0.52
1:A:127:ILE:HD13	1:A:245:ALA:HB3	1.92	0.52
1:A:81:VAL:HG23	1:A:306:MET:O	2.10	0.52
1:A:112:LYS:HD3	1:A:112:LYS:N	2.21	0.52
1:A:361:TRP:HB2	1:A:625:PHE:HE2	1.75	0.52
1:A:553:ASN:O	1:A:555:ALA:N	2.40	0.52
1:A:616:GLY:N	1:A:626:MET:HA	2.25	0.52
1:A:35:THR:O	1:A:36:CYS:O	2.28	0.52
1:A:26:LEU:H	1:A:26:LEU:CD2	2.00	0.52
1:A:100:LYS:N	1:A:223:GLU:O	2.37	0.52
1:A:307:LEU:O	1:A:307:LEU:CD2	2.57	0.51
1:A:651:THR:CG2	1:A:652:THR:N	2.61	0.51
1:A:114:SER:CB	1:A:156:PHE:CD2	2.87	0.51
1:A:128:PRO:HB3	1:A:207:PHE:CD2	2.45	0.51
1:A:247:VAL:O	1:A:247:VAL:HG23	2.10	0.51
1:A:487:GLY:C	1:A:501:LEU:HB2	2.35	0.51
1:A:119:LEU:C	1:A:121:ARG:H	2.18	0.51
1:A:408:VAL:CG1	1:A:409:PRO:N	2.74	0.51
1:A:411:MET:CE	1:A:644:LEU:HB2	2.40	0.51
1:A:464:TRP:C	1:A:467:PRO:HD2	2.36	0.51
1:A:264:TRP:O	1:A:268:SER:N	2.24	0.51
1:A:452:LYS:O	1:A:536:ASP:N	2.42	0.51
1:A:527:ALA:O	1:A:528:LEU:C	2.54	0.51
1:A:536:ASP:O	1:A:537:VAL:CG2	2.59	0.51
1:A:7:ILE:HD11	1:A:263:ILE:CA	2.41	0.51
1:A:95:VAL:HG11	1:A:226:LEU:HD13	1.93	0.51
1:A:474:ARG:HG2	1:A:474:ARG:NH1	2.18	0.51
1:A:23:LEU:O	1:A:25:ASP:N	2.44	0.51
1:A:56:ALA:CB	1:A:253:VAL:O	2.59	0.51
1:A:461:THR:HG23	1:A:465:VAL:HG12	1.92	0.51
1:A:502:CYS:HB3	1:A:519:GLU:OE2	2.11	0.51
1:A:298:LEU:O	1:A:299:LEU:HB2	2.09	0.51
1:A:467:PRO:O	1:A:469:GLY:N	2.43	0.51
1:A:470:LEU:O	1:A:473:ASN:CB	2.58	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:513:CYS:HA	1:A:519:GLU:OE2	2.10	0.51
1:A:536:ASP:C	1:A:537:VAL:HG23	2.35	0.51
1:A:408:VAL:CG1	1:A:409:PRO:CD	2.88	0.51
1:A:601:ALA:O	1:A:604:ILE:N	2.41	0.51
1:A:664:VAL:HG12	1:A:665:ILE:N	2.25	0.51
1:A:78:ALA:HB1	1:A:307:LEU:HD21	1.92	0.51
1:A:528:LEU:O	1:A:529:ARG:O	2.29	0.51
1:A:155:PHE:CD2	1:A:156:PHE:HE1	2.29	0.50
1:A:381:ILE:HG22	1:A:385:MET:CE	2.41	0.50
1:A:391:ALA:C	1:A:392:VAL:HG23	2.36	0.50
1:A:531:LEU:O	1:A:531:LEU:HD13	2.10	0.50
1:A:561:LEU:HD12	1:A:566:PHE:HZ	1.76	0.50
1:A:95:VAL:HG13	1:A:242:CYS:O	2.10	0.50
1:A:39:LYS:O	1:A:41:THR:N	2.44	0.50
1:A:212:THR:O	1:A:215:GLU:N	2.44	0.50
1:A:258:ASN:O	1:A:260:VAL:N	2.44	0.50
1:A:615:PHE:CE2	1:A:624:LYS:HB3	2.46	0.50
1:A:682:PHE:O	1:A:683:LEU:C	2.53	0.50
1:A:334:ASP:O	1:A:335:GLN:CB	2.59	0.50
1:A:471:ILE:HG22	1:A:475:THR:CG2	2.42	0.50
1:A:505:SER:HB3	1:A:510:PRO:HA	1.92	0.50
1:A:641:THR:CG2	1:A:642:LYS:N	2.74	0.50
1:A:410:VAL:HG23	1:A:596:VAL:HG22	1.93	0.50
1:A:221:LYS:O	1:A:224:TYR:N	2.40	0.50
1:A:461:THR:HG22	1:A:466:ILE:HG12	1.94	0.50
1:A:475:THR:O	1:A:476:GLY:C	2.55	0.50
1:A:640:LEU:O	1:A:641:THR:C	2.55	0.50
1:A:7:ILE:HD12	1:A:263:ILE:HA	1.94	0.49
1:A:197:CYS:O	1:A:202:LYS:O	2.30	0.49
1:A:109:LEU:CA	1:A:112:LYS:HE2	2.39	0.49
1:A:164:ALA:HB2	1:A:182:CYS:SG	2.52	0.49
1:A:191:TYR:HB2	1:A:208:VAL:HG13	1.92	0.49
1:A:595:VAL:O	1:A:596:VAL:HG13	2.12	0.49
1:A:640:LEU:O	1:A:641:THR:O	2.30	0.49
1:A:67:ALA:HB1	1:A:253:VAL:HG11	1.93	0.49
1:A:311:PRO:HD3	1:A:682:PHE:CE1	2.47	0.49
1:A:456:THR:O	1:A:457:ALA:CB	2.59	0.49
1:A:7:ILE:N	1:A:33:SER:O	2.45	0.49
1:A:261:GLU:O	1:A:265:SER:N	2.42	0.49
1:A:529:ARG:CB	1:A:557:TRP:CZ2	2.95	0.49
1:A:43:LEU:C	1:A:45:CYS:N	2.68	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:78:ALA:CB	1:A:307:LEU:HD21	2.42	0.49
1:A:346:GLN:CB	1:A:390:ASP:HB2	2.42	0.49
1:A:66:GLU:O	1:A:67:ALA:C	2.55	0.49
1:A:493:PRO:CB	1:A:494:PRO:HD2	2.43	0.49
1:A:19:LYS:C	1:A:21:ASN:N	2.71	0.49
1:A:559:LYS:HB3	1:A:560:ASN:OD1	2.12	0.49
1:A:540:ILE:HG23	1:A:541:GLN:O	2.13	0.49
1:A:171:CYS:O	1:A:174:CYS:HB2	2.13	0.49
1:A:579:MET:C	1:A:581:TYR:N	2.67	0.49
1:A:675:ASP:O	1:A:679:MET:N	2.45	0.49
1:A:363:VAL:CG2	1:A:364:VAL:N	2.74	0.49
1:A:364:VAL:O	1:A:366:ASN:OD1	2.31	0.49
1:A:127:ILE:O	1:A:131:THR:HB	2.13	0.48
1:A:157:SER:O	1:A:158:ALA:HB2	2.13	0.48
1:A:73:LYS:O	1:A:74:LEU:HD23	2.13	0.48
1:A:505:SER:HB3	1:A:511:GLU:N	2.29	0.48
1:A:635:LEU:O	1:A:637:PHE:N	2.46	0.48
1:A:191:TYR:O	1:A:194:ALA:HB3	2.12	0.48
1:A:311:PRO:HD2	1:A:314:MET:HE3	1.95	0.48
1:A:392:VAL:O	1:A:594:VAL:HA	2.13	0.48
1:A:358:CYS:C	1:A:360:ARG:N	2.71	0.48
1:A:466:ILE:N	1:A:467:PRO:CD	2.76	0.48
1:A:117:THR:OG1	1:A:124:GLY:HA3	2.12	0.48
1:A:137:ALA:O	1:A:155:PHE:CE1	2.66	0.48
1:A:184:ARG:HD3	1:A:185:ASN:H	1.77	0.48
1:A:24:ARG:O	1:A:27:THR:HB	2.12	0.48
1:A:70:ALA:O	1:A:72:TYR:N	2.43	0.48
1:A:265:SER:HA	1:A:268:SER:HB2	1.96	0.48
1:A:155:PHE:CD2	1:A:156:PHE:CE1	3.02	0.48
1:A:410:VAL:CG2	1:A:596:VAL:HG22	2.43	0.48
1:A:350:VAL:H	1:A:354:GLU:CB	2.27	0.48
1:A:239:TYR:C	1:A:241:THR:N	2.71	0.48
1:A:239:TYR:C	1:A:241:THR:H	2.22	0.48
1:A:531:LEU:HD13	1:A:531:LEU:C	2.38	0.48
1:A:119:LEU:C	1:A:121:ARG:N	2.69	0.47
1:A:207:PHE:HE2	1:A:244:TRP:CZ2	2.31	0.47
1:A:221:LYS:CG	1:A:222:ASP:H	2.27	0.47
1:A:341:ARG:HD3	1:A:341:ARG:N	2.28	0.47
1:A:398:LEU:O	1:A:401:THR:HG23	2.13	0.47
1:A:473:ASN:C	1:A:474:ARG:HG2	2.39	0.47
1:A:624:LYS:O	1:A:625:PHE:CB	2.62	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:669:LYS:O	1:A:671:CYS:N	2.47	0.47
1:A:27:THR:HG21	1:A:34:LEU:N	2.29	0.47
1:A:361:TRP:CD1	1:A:361:TRP:O	2.67	0.47
1:A:476:GLY:O	1:A:478:CYS:SG	2.72	0.47
1:A:509:PRO:O	1:A:511:GLU:N	2.47	0.47
1:A:549:THR:OG1	1:A:563:MET:CG	2.58	0.47
1:A:615:PHE:CD1	1:A:615:PHE:N	2.82	0.47
1:A:51:ASN:HB2	1:A:53:GLU:HG3	1.95	0.47
1:A:593:ALA:O	1:A:594:VAL:C	2.57	0.47
1:A:56:ALA:CA	1:A:253:VAL:O	2.63	0.47
1:A:142:GLY:C	1:A:144:GLU:H	2.22	0.47
1:A:408:VAL:O	1:A:595:VAL:HA	2.14	0.47
1:A:534:LYS:O	1:A:535:GLY:O	2.32	0.47
1:A:46:ILE:HG23	1:A:74:LEU:CD1	2.44	0.47
1:A:198:LEU:HB2	1:A:206:ALA:HB2	1.96	0.47
1:A:439:LYS:CB	1:A:565:ASP:O	2.62	0.47
1:A:364:VAL:CB	1:A:615:PHE:HZ	2.24	0.47
1:A:458:VAL:HG12	1:A:458:VAL:O	2.12	0.47
1:A:487:GLY:HA2	1:A:501:LEU:HD12	1.96	0.47
1:A:10:CYS:O	1:A:11:THR:OG1	2.32	0.47
1:A:367:GLY:O	1:A:369:VAL:N	2.47	0.47
1:A:369:VAL:C	1:A:370:GLU:O	2.55	0.47
1:A:504:GLY:HA2	1:A:520:LYS:H	1.79	0.47
1:A:664:VAL:C	1:A:666:SER:H	2.21	0.47
1:A:23:LEU:C	1:A:25:ASP:N	2.71	0.47
1:A:241:THR:O	1:A:241:THR:HG22	2.15	0.47
1:A:264:TRP:O	1:A:264:TRP:HE3	1.98	0.47
1:A:298:LEU:O	1:A:299:LEU:CB	2.62	0.47
1:A:418:GLU:O	1:A:420:GLN:N	2.39	0.47
1:A:427:ARG:CD	1:A:428:PRO:HD2	2.44	0.47
1:A:467:PRO:HG2	1:A:468:MET:N	2.29	0.47
1:A:519:GLU:HG2	1:A:520:LYS:N	2.29	0.47
1:A:98:VAL:HG22	1:A:99:LYS:N	2.30	0.47
1:A:487:GLY:HA3	1:A:498:LEU:HD23	1.96	0.47
1:A:6:VAL:HA	1:A:33:SER:CB	2.44	0.47
1:A:122:SER:O	1:A:123:ALA:C	2.58	0.47
1:A:283:HIS:CD2	1:A:287:PRO:HB3	2.49	0.47
1:A:394:LEU:CD1	1:A:595:VAL:CG2	2.92	0.47
1:A:540:ILE:HG23	1:A:544:THR:HB	1.97	0.47
1:A:418:GLU:C	1:A:420:GLN:N	2.73	0.46
1:A:102:THR:CG2	1:A:104:PHE:O	2.63	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:181:LYS:C	1:A:183:ALA:N	2.70	0.46
1:A:338:PRO:CG	1:A:339:SER:N	2.70	0.46
1:A:25:ASP:C	1:A:27:THR:N	2.67	0.46
1:A:72:TYR:O	1:A:73:LYS:CB	2.63	0.46
1:A:318:LEU:O	1:A:319:TYR:C	2.57	0.46
1:A:394:LEU:O	1:A:592:HIS:HA	2.15	0.46
1:A:311:PRO:CD	1:A:682:PHE:CD1	2.96	0.46
1:A:360:ARG:O	1:A:363:VAL:CG2	2.63	0.46
1:A:664:VAL:C	1:A:666:SER:N	2.73	0.46
1:A:297:ASP:O	1:A:299:LEU:N	2.48	0.46
1:A:364:VAL:CG1	1:A:615:PHE:CE1	2.98	0.46
1:A:368:ASP:C	1:A:369:VAL:HG23	2.41	0.46
1:A:611:GLN:O	1:A:627:MET:SD	2.74	0.46
1:A:114:SER:OG	1:A:116:HIS:NE2	2.36	0.46
1:A:125:TRP:C	1:A:128:PRO:HG2	2.40	0.46
1:A:364:VAL:C	1:A:366:ASN:H	2.23	0.46
1:A:23:LEU:HD23	1:A:27:THR:OG1	2.16	0.46
1:A:444:ASN:HD22	1:A:446:ASN:HD22	1.59	0.46
1:A:10:CYS:C	1:A:11:THR:HG1	2.24	0.46
1:A:195:PHE:HE1	1:A:213:VAL:HG22	1.81	0.46
1:A:358:CYS:O	1:A:360:ARG:N	2.41	0.46
1:A:505:SER:O	1:A:506:GLY:C	2.58	0.46
1:A:557:TRP:HD1	1:A:558:ALA:N	2.13	0.46
1:A:153:ALA:HA	1:A:169:LYS:O	2.16	0.46
1:A:230:ASP:O	1:A:232:SER:N	2.49	0.46
1:A:504:GLY:O	1:A:505:SER:O	2.34	0.46
1:A:531:LEU:HD23	1:A:537:VAL:H	1.81	0.46
1:A:540:ILE:CG2	1:A:541:GLN:O	2.64	0.46
1:A:592:HIS:CD2	1:A:592:HIS:H	2.33	0.46
1:A:265:SER:HA	1:A:268:SER:CB	2.45	0.46
1:A:366:ASN:C	1:A:368:ASP:H	2.24	0.46
1:A:434:VAL:HG11	1:A:568:LEU:CD2	2.42	0.46
1:A:93:TYR:CD2	1:A:240:LYS:HA	2.51	0.45
1:A:208:VAL:CG1	1:A:209:LYS:N	2.61	0.45
1:A:125:TRP:CZ2	1:A:152:VAL:HG21	2.50	0.45
1:A:527:ALA:O	1:A:530:CYS:HB3	2.16	0.45
1:A:633:LYS:O	1:A:639:ASP:HB2	2.15	0.45
1:A:23:LEU:HD23	1:A:23:LEU:O	2.16	0.45
1:A:45:CYS:O	1:A:48:ALA:N	2.50	0.45
1:A:313:LEU:HB3	1:A:679:MET:HG3	1.98	0.45
1:A:364:VAL:O	1:A:364:VAL:HG12	2.17	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:474:ARG:NH1	1:A:474:ARG:CG	2.77	0.45
1:A:534:LYS:HB3	1:A:534:LYS:HE2	1.69	0.45
1:A:609:GLU:CD	1:A:609:GLU:O	2.60	0.45
1:A:683:LEU:O	1:A:684:GLU:C	2.59	0.45
1:A:612:GLU:CB	1:A:627:MET:HE1	2.47	0.45
1:A:45:CYS:O	1:A:46:ILE:C	2.60	0.45
1:A:51:ASN:O	1:A:53:GLU:N	2.50	0.45
1:A:56:ALA:HA	1:A:253:VAL:O	2.17	0.45
1:A:102:THR:HG22	1:A:104:PHE:O	2.17	0.45
1:A:251:ALA:HB2	1:A:319:TYR:HE2	1.78	0.45
1:A:632:ASN:C	1:A:633:LYS:CG	2.90	0.45
1:A:183:ALA:O	1:A:186:ALA:CB	2.64	0.45
1:A:322:PHE:O	1:A:323:GLU:C	2.59	0.45
1:A:606:ASP:C	1:A:608:LEU:H	2.23	0.45
1:A:211:THR:HG23	1:A:214:ASN:CB	2.47	0.45
1:A:408:VAL:HG12	1:A:409:PRO:O	2.17	0.45
1:A:531:LEU:HD23	1:A:537:VAL:N	2.31	0.45
1:A:46:ILE:HG23	1:A:74:LEU:HD12	1.98	0.45
1:A:127:ILE:N	1:A:128:PRO:CD	2.80	0.45
1:A:184:ARG:N	1:A:184:ARG:HD3	2.29	0.45
1:A:317:GLN:NE2	1:A:325:TYR:CD2	2.82	0.45
1:A:443:VAL:O	1:A:569:LEU:HD21	2.17	0.45
1:A:472:HIS:ND1	1:A:475:THR:CG2	2.80	0.45
1:A:317:GLN:HE21	1:A:325:TYR:HD2	1.61	0.44
1:A:152:VAL:HB	1:A:170:LEU:CD1	2.46	0.44
1:A:258:ASN:HB3	1:A:259:LYS:H	1.47	0.44
1:A:317:GLN:O	1:A:317:GLN:OE1	2.36	0.44
1:A:361:TRP:O	1:A:363:VAL:N	2.46	0.44
1:A:444:ASN:HD22	1:A:446:ASN:ND2	2.15	0.44
1:A:460:ARG:O	1:A:461:THR:C	2.60	0.44
1:A:39:LYS:O	1:A:40:ALA:C	2.60	0.44
1:A:106:VAL:HG21	1:A:228:CYS:O	2.18	0.44
1:A:495:ASN:O	1:A:496:SER:O	2.36	0.44
1:A:114:SER:OG	1:A:156:PHE:CE2	2.71	0.44
1:A:166:ILE:CG2	1:A:167:GLU:N	2.75	0.44
1:A:395:ASP:O	1:A:396:GLY:C	2.61	0.44
1:A:504:GLY:O	1:A:505:SER:C	2.59	0.44
1:A:540:ILE:CG2	1:A:541:GLN:N	2.78	0.44
1:A:391:ALA:O	1:A:392:VAL:HG23	2.16	0.44
1:A:562:GLN:CG	1:A:565:ASP:OD2	2.61	0.44
1:A:381:ILE:O	1:A:385:MET:HB2	2.18	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:434:VAL:HG12	1:A:436:VAL:HG23	1.99	0.44
1:A:11:THR:O	1:A:12:ILE:CB	2.64	0.44
1:A:230:ASP:C	1:A:232:SER:N	2.76	0.44
1:A:394:LEU:HD11	1:A:595:VAL:HG21	1.98	0.44
1:A:436:VAL:N	1:A:538:ALA:O	2.38	0.44
1:A:444:ASN:ND2	1:A:446:ASN:ND2	2.61	0.44
1:A:465:VAL:HG22	1:A:668:LEU:CD2	2.47	0.44
1:A:471:ILE:O	1:A:474:ARG:N	2.49	0.44
1:A:217:ALA:C	1:A:219:ASP:N	2.65	0.44
1:A:369:VAL:O	1:A:370:GLU:O	2.36	0.44
1:A:125:TRP:HH2	1:A:170:LEU:HD11	1.82	0.44
1:A:132:LEU:HD13	1:A:155:PHE:CE2	2.53	0.44
1:A:155:PHE:C	1:A:156:PHE:O	2.58	0.44
1:A:361:TRP:C	1:A:361:TRP:CD1	2.95	0.44
1:A:385:MET:HE1	1:A:680:CYS:SG	2.58	0.44
1:A:174:CYS:O	1:A:175:LYS:HB2	2.18	0.43
1:A:394:LEU:HD12	1:A:595:VAL:CG2	2.48	0.43
1:A:421:CYS:O	1:A:423:LYS:N	2.50	0.43
1:A:576:ALA:CB	1:A:580:ASP:HB2	2.37	0.43
1:A:665:ILE:O	1:A:665:ILE:HG22	2.18	0.43
1:A:675:ASP:O	1:A:679:MET:CB	2.66	0.43
1:A:128:PRO:O	1:A:132:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:225:GLU:O	1:A:226:LEU:O	2.36	0.43
1:A:352:LYS:HB2	1:A:352:LYS:HE3	1.77	0.43
1:A:441:SER:HB2	1:A:443:VAL:CG2	2.47	0.43
1:A:545:VAL:O	1:A:549:THR:CG2	2.51	0.43
1:A:225:GLU:HA	1:A:236:VAL:HG22	2.01	0.43
1:A:27:THR:O	1:A:28:GLN:C	2.62	0.43
1:A:226:LEU:HG	1:A:236:VAL:HA	1.99	0.43
1:A:273:ASP:HB3	1:A:274:PHE:H	1.68	0.43
1:A:361:TRP:C	1:A:363:VAL:N	2.74	0.43
1:A:450:GLY:O	1:A:485:SER:CB	2.60	0.43
1:A:469:GLY:HA3	1:A:664:VAL:CG1	2.41	0.43
1:A:5:SER:O	1:A:33:SER:N	2.52	0.43
1:A:88:SER:OG	1:A:686:LYS:OXT	2.37	0.43
1:A:175:LYS:NZ	1:A:202:LYS:NZ	2.67	0.43
1:A:367:GLY:C	1:A:369:VAL:N	2.69	0.43
1:A:434:VAL:CG1	1:A:436:VAL:HG22	2.49	0.43
1:A:76:PRO:HD2	1:A:315:ASP:O	2.19	0.43
1:A:221:LYS:CG	1:A:222:ASP:N	2.81	0.43
1:A:245:ALA:HB2	1:A:323:GLU:CB	2.49	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:356:SER:C	1:A:358:CYS:H	2.26	0.43
1:A:470:LEU:HD11	1:A:586:LEU:HD22	1.98	0.43
1:A:77:ILE:O	1:A:78:ALA:HB2	2.18	0.43
1:A:90:THR:CB	1:A:686:LYS:O	2.62	0.43
1:A:101:GLY:O	1:A:102:THR:C	2.62	0.43
1:A:149:GLU:OE1	1:A:166:ILE:HB	2.18	0.43
1:A:461:THR:HG23	1:A:465:VAL:HG11	2.01	0.43
1:A:567:GLU:CB	1:A:575:ARG:HH21	2.26	0.43
1:A:148:VAL:O	1:A:152:VAL:N	2.51	0.43
1:A:271:GLN:C	1:A:273:ASP:N	2.77	0.43
1:A:391:ALA:C	1:A:392:VAL:CG2	2.92	0.43
1:A:17:GLU:O	1:A:21:ASN:HB2	2.19	0.43
1:A:109:LEU:HA	1:A:112:LYS:CE	2.42	0.43
1:A:620:SER:C	1:A:622:LYS:H	2.27	0.43
1:A:16:GLU:CB	1:A:298:LEU:HD22	2.49	0.42
1:A:18:LYS:O	1:A:22:ASN:N	2.52	0.42
1:A:411:MET:HA	1:A:647:VAL:HG23	2.01	0.42
1:A:43:LEU:O	1:A:44:ASP:C	2.62	0.42
1:A:350:VAL:N	1:A:354:GLU:CB	2.82	0.42
1:A:471:ILE:HG22	1:A:475:THR:HG22	2.00	0.42
1:A:475:THR:O	1:A:477:THR:O	2.37	0.42
1:A:648:ARG:C	1:A:649:GLU:O	2.63	0.42
1:A:147:SER:O	1:A:149:GLU:N	2.52	0.42
1:A:387:GLY:C	1:A:389:ALA:N	2.77	0.42
1:A:126:ASN:O	1:A:130:GLY:CA	2.67	0.42
1:A:9:TRP:CZ3	1:A:299:LEU:HD22	2.55	0.42
1:A:25:ASP:HB2	1:A:26:LEU:HD23	2.02	0.42
1:A:143:ILE:HA	1:A:147:SER:HA	2.02	0.42
1:A:273:ASP:O	1:A:278:THR:CG2	2.67	0.42
1:A:395:ASP:OD1	1:A:395:ASP:C	2.62	0.42
1:A:435:ALA:O	1:A:568:LEU:HA	2.20	0.42
1:A:668:LEU:HD12	1:A:668:LEU:O	2.19	0.42
1:A:26:LEU:HD23	1:A:26:LEU:N	2.08	0.42
1:A:210:HIS:O	1:A:211:THR:HB	2.18	0.42
1:A:460:ARG:O	1:A:462:ALA:N	2.52	0.42
1:A:470:LEU:O	1:A:473:ASN:HB3	2.20	0.42
1:A:681:SER:O	1:A:684:GLU:CB	2.67	0.42
1:A:106:VAL:HG12	1:A:106:VAL:O	2.19	0.42
1:A:152:VAL:HB	1:A:170:LEU:HD11	2.01	0.42
1:A:184:ARG:N	1:A:184:ARG:HD2	2.28	0.42
1:A:364:VAL:C	1:A:366:ASN:N	2.74	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:466:ILE:H	1:A:467:PRO:CD	2.27	0.42
1:A:95:VAL:O	1:A:207:PHE:HA	2.20	0.42
1:A:592:HIS:CD2	1:A:592:HIS:N	2.88	0.42
1:A:65:PHE:HD2	1:A:66:GLU:N	2.17	0.42
1:A:81:VAL:HG12	1:A:82:TYR:H	1.85	0.42
1:A:162:PRO:HB2	1:A:184:ARG:N	2.35	0.42
1:A:318:LEU:O	1:A:320:LEU:N	2.53	0.42
1:A:433:ALA:O	1:A:434:VAL:CG2	2.62	0.42
1:A:487:GLY:O	1:A:501:LEU:HB2	2.19	0.42
1:A:502:CYS:O	1:A:503:GLN:NE2	2.53	0.42
1:A:528:LEU:C	1:A:528:LEU:HD22	2.45	0.42
1:A:91:SER:HA	1:A:248:ALA:HA	2.02	0.42
1:A:438:ARG:O	1:A:440:ASP:N	2.53	0.42
1:A:461:THR:CG2	1:A:465:VAL:HG12	2.50	0.42
1:A:465:VAL:O	1:A:465:VAL:HG13	2.19	0.42
1:A:471:ILE:O	1:A:473:ASN:N	2.52	0.42
1:A:528:LEU:C	1:A:528:LEU:CD2	2.92	0.42
1:A:17:GLU:HA	1:A:36:CYS:SG	2.60	0.41
1:A:345:ILE:HG23	1:A:604:ILE:HD11	2.02	0.41
1:A:494:PRO:HG2	1:A:495:ASN:N	2.30	0.41
1:A:601:ALA:O	1:A:603:LYS:N	2.53	0.41
1:A:70:ALA:C	1:A:72:TYR:N	2.78	0.41
1:A:189:SER:O	1:A:193:GLY:HA3	2.19	0.41
1:A:445:TRP:HZ3	1:A:474:ARG:CZ	2.33	0.41
1:A:510:PRO:C	1:A:512:LYS:N	2.72	0.41
1:A:65:PHE:O	1:A:66:GLU:C	2.63	0.41
1:A:114:SER:HG	1:A:116:HIS:CD2	2.34	0.41
1:A:132:LEU:O	1:A:137:ALA:HB3	2.21	0.41
1:A:175:LYS:NZ	1:A:202:LYS:HZ3	2.18	0.41
1:A:280:SER:O	1:A:281:ASP:C	2.63	0.41
1:A:509:PRO:HA	1:A:510:PRO:HD2	1.72	0.41
1:A:318:LEU:HD23	1:A:318:LEU:HA	1.77	0.41
1:A:351:GLY:C	1:A:353:ASP:H	2.28	0.41
1:A:379:ASP:O	1:A:380:CYS:C	2.63	0.41
1:A:384:ILE:N	1:A:389:ALA:HB3	2.36	0.41
1:A:473:ASN:O	1:A:474:ARG:HG2	2.20	0.41
1:A:65:PHE:CD2	1:A:66:GLU:N	2.89	0.41
1:A:100:LYS:O	1:A:101:GLY:C	2.63	0.41
1:A:105:THR:C	1:A:106:VAL:HG23	2.45	0.41
1:A:230:ASP:C	1:A:232:SER:H	2.29	0.41
1:A:364:VAL:O	1:A:364:VAL:CG1	2.68	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:407:LEU:C	1:A:408:VAL:HG23	2.45	0.41
1:A:441:SER:C	1:A:443:VAL:N	2.62	0.41
1:A:118:GLY:HA2	1:A:162:PRO:HG2	2.03	0.41
1:A:221:LYS:O	1:A:223:GLU:N	2.54	0.41
1:A:25:ASP:O	1:A:28:GLN:N	2.54	0.41
1:A:34:LEU:O	1:A:35:THR:CB	2.69	0.41
1:A:46:ILE:HD11	1:A:59:LEU:HD13	2.03	0.41
1:A:93:TYR:O	1:A:210:HIS:N	2.54	0.41
1:A:118:GLY:HA2	1:A:162:PRO:CG	2.51	0.41
1:A:379:ASP:O	1:A:382:ILE:HG12	2.20	0.41
1:A:384:ILE:HD13	1:A:391:ALA:HA	2.02	0.41
1:A:427:ARG:NE	1:A:428:PRO:HD3	2.34	0.41
1:A:452:LYS:HB3	1:A:501:LEU:CD1	2.47	0.41
1:A:470:LEU:O	1:A:471:ILE:C	2.64	0.41
1:A:524:TYR:CE1	1:A:541:GLN:HB2	2.55	0.41
1:A:617:VAL:C	1:A:619:GLY:N	2.66	0.41
1:A:98:VAL:O	1:A:224:TYR:CA	2.69	0.41
1:A:387:GLY:C	1:A:389:ALA:H	2.28	0.41
1:A:119:LEU:O	1:A:121:ARG:N	2.54	0.40
1:A:125:TRP:CH2	1:A:152:VAL:HG11	2.56	0.40
1:A:125:TRP:CH2	1:A:170:LEU:HD11	2.56	0.40
1:A:126:ASN:O	1:A:130:GLY:N	2.54	0.40
1:A:155:PHE:HD2	1:A:156:PHE:HE1	1.62	0.40
1:A:384:ILE:HA	1:A:389:ALA:HB3	2.02	0.40
1:A:434:VAL:HG12	1:A:436:VAL:HG22	2.03	0.40
1:A:461:THR:HA	1:A:465:VAL:HB	2.03	0.40
1:A:490:PRO:HB3	1:A:519:GLU:OE1	2.21	0.40
1:A:46:ILE:O	1:A:47:LYS:C	2.65	0.40
1:A:410:VAL:HG12	1:A:411:MET:N	2.36	0.40
1:A:25:ASP:C	1:A:27:THR:H	2.29	0.40
1:A:361:TRP:HB2	1:A:625:PHE:CE2	2.56	0.40
1:A:615:PHE:O	1:A:627:MET:CE	2.70	0.40
1:A:615:PHE:HE2	1:A:624:LYS:HB3	1.87	0.40
1:A:18:LYS:HA	1:A:21:ASN:HB2	2.04	0.40
1:A:100:LYS:C	1:A:102:THR:N	2.77	0.40
1:A:239:TYR:HD1	1:A:240:LYS:H	1.68	0.40
1:A:605:ARG:O	1:A:609:GLU:HB3	2.22	0.40
1:A:352:LYS:CE	1:A:352:LYS:O	2.70	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	684/686 (100%)	356 (52%)	188 (28%)	140 (20%)	0 1

All (140) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2	PRO
1	A	3	PRO
1	A	7	ILE
1	A	12	ILE
1	A	31	ARG
1	A	35	THR
1	A	36	CYS
1	A	70	ALA
1	A	71	PRO
1	A	92	TYR
1	A	106	VAL
1	A	108	ASP
1	A	110	GLN
1	A	125	TRP
1	A	143	ILE
1	A	148	VAL
1	A	170	LEU
1	A	171	CYS
1	A	187	PRO
1	A	216	ASN
1	A	226	LEU
1	A	240	LYS
1	A	251	ALA
1	A	271	GLN
1	A	272	SER
1	A	298	LEU
1	A	307	LEU
1	A	308	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	331	MET
1	A	333	LYS
1	A	335	GLN
1	A	336	LEU
1	A	340	PRO
1	A	416	ASP
1	A	420	GLN
1	A	421	CYS
1	A	423	LYS
1	A	424	THR
1	A	427	ARG
1	A	439	LYS
1	A	442	ASN
1	A	460	ARG
1	A	461	THR
1	A	476	GLY
1	A	496	SER
1	A	504	GLY
1	A	505	SER
1	A	508	ILE
1	A	535	GLY
1	A	554	LYS
1	A	594	VAL
1	A	596	VAL
1	A	617	VAL
1	A	618	ASN
1	A	631	GLN
1	A	632	ASN
1	A	641	THR
1	A	649	GLU
1	A	671	CYS
1	A	24	ARG
1	A	29	GLN
1	A	40	ALA
1	A	73	LYS
1	A	100	LYS
1	A	112	LYS
1	A	158	ALA
1	A	159	SER
1	A	179	LYS
1	A	186	ALA
1	A	197	CYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	222	ASP
1	A	257	ASP
1	A	259	LYS
1	A	262	ASP
1	A	266	PHE
1	A	273	ASP
1	A	275	GLY
1	A	281	ASP
1	A	282	PHE
1	A	338	PRO
1	A	367	GLY
1	A	368	ASP
1	A	370	GLU
1	A	422	SER
1	A	457	ALA
1	A	458	VAL
1	A	494	PRO
1	A	509	PRO
1	A	510	PRO
1	A	529	ARG
1	A	533	GLU
1	A	602	ASN
1	A	625	PHE
1	A	639	ASP
1	A	684	GLU
1	A	11	THR
1	A	28	GLN
1	A	137	ALA
1	A	164	ALA
1	A	167	GLU
1	A	274	PHE
1	A	311	PRO
1	A	369	VAL
1	A	375	ASP
1	A	464	TRP
1	A	468	MET
1	A	472	HIS
1	A	521	TYR
1	A	530	CYS
1	A	584	CYS
1	A	636	LEU
1	A	128	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	154	LYS
1	A	221	LYS
1	A	235	PRO
1	A	303	SER
1	A	323	GLU
1	A	507	GLY
1	A	518	HIS
1	A	587	ALA
1	A	633	LYS
1	A	682	PHE
1	A	52	ASN
1	A	175	LYS
1	A	211	THR
1	A	234	GLN
1	A	293	PRO
1	A	297	ASP
1	A	352	LYS
1	A	61	GLY
1	A	218	PRO
1	A	276	VAL
1	A	676	ILE
1	A	146	GLY
1	A	162	PRO
1	A	208	VAL
1	A	231	GLY
1	A	310	VAL
1	A	467	PRO
1	A	176	GLY

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	423/580 (73%)	325 (77%)	98 (23%)	1 5

All (98) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	7	ILE
1	A	9	TRP
1	A	20	CYS
1	A	21	ASN
1	A	23	LEU
1	A	26	LEU
1	A	33	SER
1	A	60	ASP
1	A	65	PHE
1	A	69	LEU
1	A	75	LYS
1	A	89	THR
1	A	95	VAL
1	A	107	ASN
1	A	109	LEU
1	A	113	THR
1	A	114	SER
1	A	131	THR
1	A	156	PHE
1	A	171	CYS
1	A	177	ASP
1	A	191	TYR
1	A	205	VAL
1	A	212	THR
1	A	214	ASN
1	A	224	TYR
1	A	230	ASP
1	A	232	SER
1	A	246	ARG
1	A	253	VAL
1	A	258	ASN
1	A	264	TRP
1	A	276	VAL
1	A	285	PHE
1	A	307	LEU
1	A	313	LEU
1	A	316	SER
1	A	331	MET
1	A	347	TRP
1	A	350	VAL
1	A	352	LYS
1	A	353	ASP
1	A	373	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	375	ASP
1	A	377	THR
1	A	390	ASP
1	A	395	ASP
1	A	401	THR
1	A	404	VAL
1	A	417	ASP
1	A	418	GLU
1	A	421	CYS
1	A	422	SER
1	A	427	ARG
1	A	434	VAL
1	A	443	VAL
1	A	445	TRP
1	A	448	LEU
1	A	454	CYS
1	A	456	THR
1	A	464	TRP
1	A	465	VAL
1	A	466	ILE
1	A	474	ARG
1	A	478	CYS
1	A	479	ASN
1	A	498	LEU
1	A	512	LYS
1	A	513	CYS
1	A	516	SER
1	A	525	THR
1	A	528	LEU
1	A	530	CYS
1	A	534	LYS
1	A	540	ILE
1	A	544	THR
1	A	549	THR
1	A	557	TRP
1	A	560	ASN
1	A	561	LEU
1	A	566	PHE
1	A	568	LEU
1	A	578	VAL
1	A	591	THR
1	A	599	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	604	ILE
1	A	608	LEU
1	A	617	VAL
1	A	618	ASN
1	A	627	MET
1	A	633	LYS
1	A	640	LEU
1	A	652	THR
1	A	653	TYR
1	A	664	VAL
1	A	666	SER
1	A	675	ASP
1	A	682	PHE

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (8) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	51	ASN
1	A	63	GLN
1	A	283	HIS
1	A	446	ASN
1	A	455	HIS
1	A	472	HIS
1	A	541	GLN
1	A	592	HIS

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.

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

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

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2		OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	686/686 (100%)	0.15	8 (1%)	76 52	6, 22, 27, 32	0

All (8) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	4	LYS	3.0
1	A	336	LEU	2.7
1	A	521	TYR	2.7
1	A	171	CYS	2.6
1	A	159	SER	2.5
1	A	513	CYS	2.4
1	A	94	ALA	2.2
1	A	3	PRO	2.1

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

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

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.