



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 6, 2026 – 01:01 PM UTC

PDB ID : 2YHX / pdb_00002yhx
Title : SEQUENCING A PROTEIN BY X-RAY CRYSTALLOGRAPHY. II. RE-FINEMENT OF YEAST HEXOKINASE B CO-ORDINATES AND SEQUENCE AT 2.1 ANGSTROMS RESOLUTION
Authors : Steitz, T.A.; Anderson, C.M.; Stenkamp, R.E.
Deposited on : 1978-03-20
Resolution : 2.10 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
Mogul	:	2022.3.0, CSD as543be (2022)
Xtrriage (Phenix)	:	NOT EXECUTED
EDS	:	NOT EXECUTED
Buster-report	:	wwPDB partial adaption of 1.1.7 (2018)
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

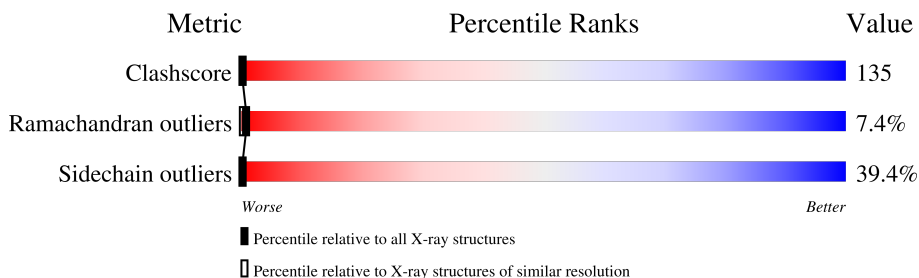
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 2.10 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	7164 (2.10-2.10)
Ramachandran outliers	187476	7099 (2.10-2.10)
Sidechain outliers	187428	7100 (2.10-2.10)

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	457	21% 45% 25% 9%

2 Entry composition [i](#)

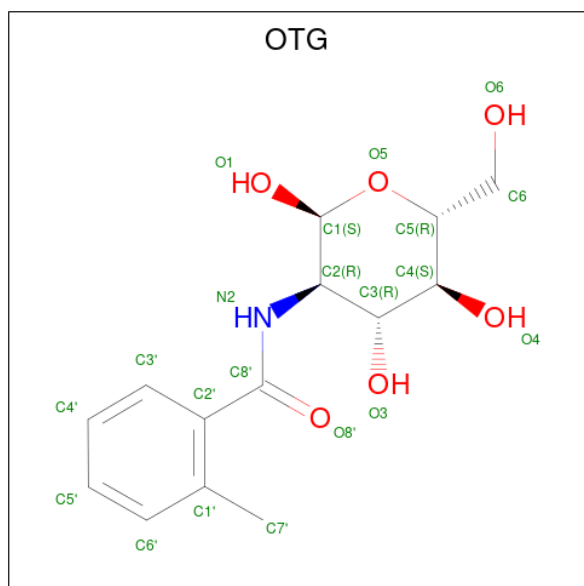
There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3311 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

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 HEXOKINASE B.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	457	3290	2126	545	606	13	0	0	0

- Molecule 2 is 2-deoxy-2-[[[(2-methylphenyl)carbonyl]amino}-alpha-D-glucopyranose (CCD ID: OTG) (formula: C₁₄H₁₉NO₆).



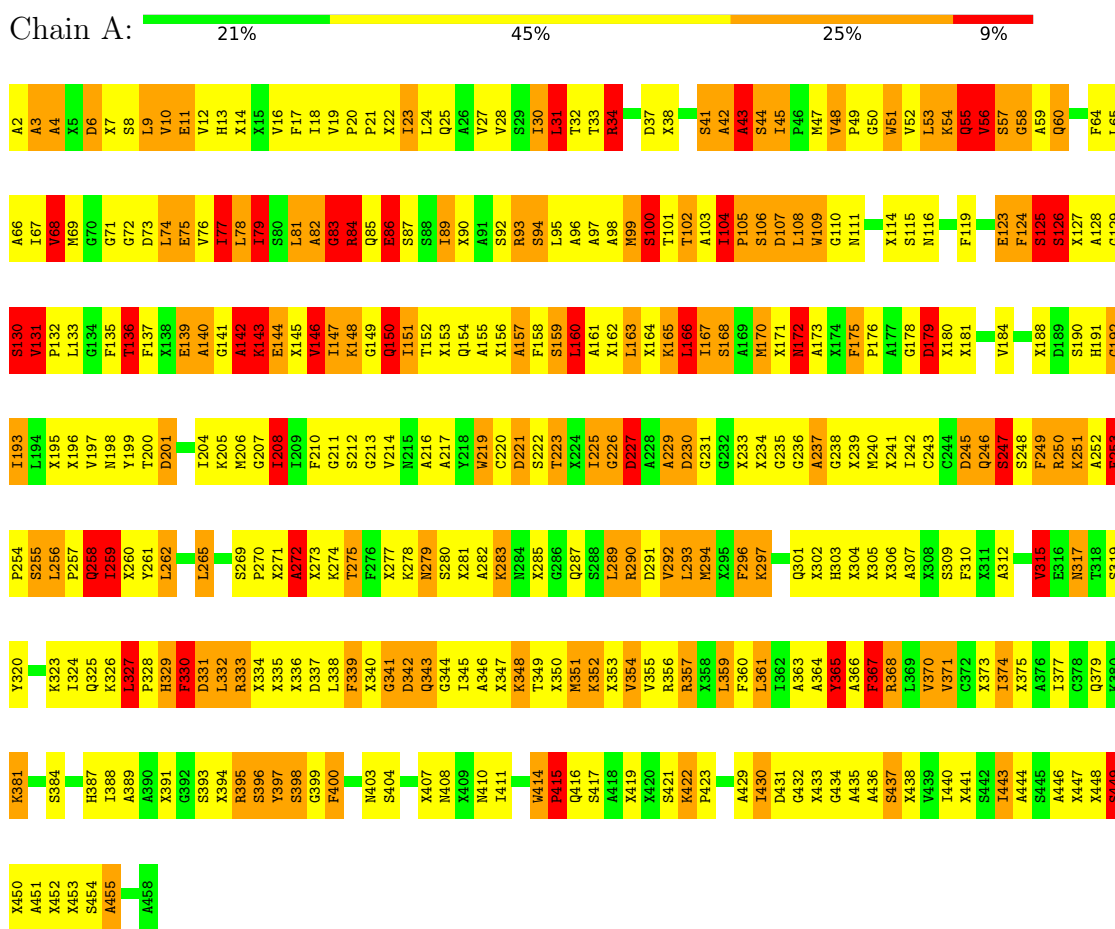
Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
			Total	C	N	O		
2	A	1	21	14	1	6	0	0

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. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

Note EDS was not executed.

• Molecule 1: HEXOKINASE B



4 Data and refinement statistics

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

Property	Value	Source
Space group	P 21 21 21	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	166.50Å 59.20Å 58.50Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	(Not available) – 2.10	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	(Not available) ((Not available)-2.10)	Depositor
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
Refinement program	PROLSQ	Depositor
R, R_{free}	(Not available) , (Not available)	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	3311	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	0.0	wwPDB-VP

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

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	1.91	79/2746 (2.9%)	1.83	82/3622 (2.3%)

All (79) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	262	LEU	CB-CG	16.95	1.87	1.53
1	A	84	ARG	N-CA	13.91	1.64	1.46
1	A	262	LEU	CG-CD1	-12.58	1.11	1.52
1	A	160	LEU	N-CA	-12.42	1.31	1.46
1	A	227	ASP	N-CA	-11.09	1.33	1.46
1	A	83	GLY	CA-C	10.17	1.66	1.51
1	A	219	TRP	CG-CD2	8.83	1.59	1.43
1	A	44	SER	N-CA	8.12	1.56	1.46
1	A	226	GLY	N-CA	8.04	1.57	1.45
1	A	365	TYR	CG-CD2	8.02	1.56	1.39
1	A	397	TYR	CG-CD2	7.92	1.55	1.39
1	A	150	GLN	N-CA	7.87	1.55	1.46
1	A	103	ALA	N-CA	-7.83	1.36	1.46
1	A	3	ALA	CA-C	7.76	1.61	1.52
1	A	142	ALA	N-CA	-7.66	1.36	1.46
1	A	315	VAL	N-CA	7.42	1.56	1.46
1	A	398	SER	CA-C	7.22	1.61	1.52
1	A	414	TRP	NE1-CE2	-7.21	1.29	1.37
1	A	75	GLU	CG-CD	7.10	1.69	1.52
1	A	208	ILE	N-CA	7.07	1.54	1.46
1	A	84	ARG	CA-C	6.94	1.61	1.52
1	A	231	GLY	N-CA	6.80	1.55	1.45
1	A	259	ILE	CB-CG1	-6.78	1.39	1.53
1	A	255	SER	N-CA	6.76	1.53	1.46
1	A	45	ILE	N-CA	6.68	1.51	1.46
1	A	379	GLN	N-CA	-6.64	1.38	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	51	TRP	CG-CD2	-6.57	1.31	1.43
1	A	146	VAL	C-N	-6.56	1.27	1.34
1	A	4	ALA	N-CA	6.51	1.58	1.46
1	A	255	SER	CA-C	6.44	1.59	1.52
1	A	211	GLY	N-CA	6.35	1.51	1.45
1	A	137	PHE	CG-CD2	-6.32	1.25	1.38
1	A	75	GLU	CA-CB	6.31	1.62	1.53
1	A	74	LEU	N-CA	-6.30	1.38	1.46
1	A	399	GLY	CA-C	6.26	1.60	1.51
1	A	219	TRP	NE1-CE2	-6.24	1.30	1.37
1	A	41	SER	CA-CB	-6.24	1.44	1.52
1	A	106	SER	N-CA	-6.20	1.38	1.46
1	A	258	GLN	CA-C	6.16	1.60	1.52
1	A	130	SER	N-CA	6.14	1.54	1.46
1	A	327	LEU	N-CA	6.14	1.54	1.46
1	A	77	ILE	N-CA	-6.14	1.39	1.46
1	A	201	ASP	N-CA	6.11	1.54	1.46
1	A	104	ILE	CA-CB	-6.09	1.47	1.54
1	A	128	ALA	N-CA	6.06	1.57	1.46
1	A	33	THR	N-CA	-6.06	1.39	1.46
1	A	32	THR	N-CA	6.04	1.53	1.46
1	A	82	ALA	N-CA	6.03	1.53	1.46
1	A	75	GLU	N-CA	-6.01	1.38	1.46
1	A	367	PHE	CG-CD2	6.00	1.51	1.38
1	A	431	ASP	N-CA	5.98	1.53	1.46
1	A	414	TRP	N-CA	-5.92	1.39	1.45
1	A	332	LEU	CA-C	5.88	1.60	1.53
1	A	192	GLY	N-CA	-5.82	1.38	1.45
1	A	109	TRP	NE1-CE2	-5.72	1.31	1.37
1	A	166	LEU	C-N	-5.62	1.27	1.34
1	A	238	GLY	N-CA	-5.61	1.36	1.45
1	A	397	TYR	N-CA	5.61	1.52	1.46
1	A	143	LYS	CA-CB	5.57	1.61	1.53
1	A	105	PRO	CG-CD	-5.52	1.31	1.50
1	A	43	ALA	N-CA	5.52	1.53	1.46
1	A	229	ALA	N-CA	-5.50	1.39	1.46
1	A	371	VAL	N-CA	5.49	1.53	1.46
1	A	400	PHE	N-CA	5.49	1.52	1.46
1	A	34	ARG	NE-CZ	5.47	1.39	1.33
1	A	307	ALA	N-CA	5.47	1.56	1.46
1	A	68	VAL	N-CA	-5.45	1.39	1.46
1	A	71	GLY	N-CA	-5.32	1.39	1.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	140	ALA	N-CA	5.31	1.52	1.46
1	A	192	GLY	CA-C	-5.30	1.45	1.52
1	A	124	PHE	C-N	-5.29	1.26	1.33
1	A	256	LEU	N-CA	5.28	1.53	1.45
1	A	86	GLU	N-CA	5.22	1.52	1.46
1	A	296	PHE	CG-CD2	-5.20	1.27	1.38
1	A	329	HIS	CA-C	-5.11	1.46	1.52
1	A	272	ALA	CA-C	5.11	1.63	1.52
1	A	422	LYS	N-CA	5.09	1.53	1.45
1	A	397	TYR	CB-CG	5.07	1.62	1.51
1	A	31	LEU	CB-CG	5.04	1.63	1.53

All (82) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	262	LEU	CD1-CG-CD2	-14.66	78.55	110.80
1	A	219	TRP	CD2-CE2-CZ2	10.18	132.57	122.40
1	A	208	ILE	CB-CA-C	-10.06	95.01	110.50
1	A	179	ASP	CB-CA-C	-10.01	91.09	110.10
1	A	330	PHE	CA-CB-CG	8.87	122.67	113.80
1	A	219	TRP	NE1-CE2-CZ2	-8.85	116.82	130.10
1	A	124	PHE	CA-CB-CG	-8.41	105.39	113.80
1	A	219	TRP	CH2-CZ2-CE2	-8.39	106.59	117.50
1	A	259	ILE	CA-CB-CG1	8.27	124.47	110.40
1	A	58	GLY	N-CA-C	-8.18	103.74	115.27
1	A	227	ASP	N-CA-C	-7.90	102.47	114.16
1	A	253	PHE	O-C-N	-7.70	112.47	121.32
1	A	329	HIS	CA-CB-CG	-7.42	106.38	113.80
1	A	315	VAL	CB-CA-C	-7.41	100.09	112.16
1	A	103	ALA	CA-C-N	-7.34	115.35	123.43
1	A	103	ALA	C-N-CA	-7.34	115.35	123.43
1	A	251	LYS	N-CA-C	-7.26	104.40	113.18
1	A	262	LEU	CB-CG-CD2	7.14	132.12	110.70
1	A	329	HIS	N-CA-C	7.01	122.01	112.68
1	A	227	ASP	N-CA-CB	-6.72	98.25	110.88
1	A	331	ASP	N-CA-C	-6.63	104.76	112.92
1	A	330	PHE	N-CA-CB	-6.56	99.41	110.49
1	A	179	ASP	CA-CB-CG	6.32	118.92	112.60
1	A	245	ASP	CA-CB-CG	-6.21	106.39	112.60
1	A	329	HIS	CA-C-N	-6.17	109.76	121.54
1	A	329	HIS	C-N-CA	-6.17	109.76	121.54
1	A	19	VAL	N-CA-CB	-6.15	105.02	111.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	143	LYS	N-CA-CB	6.08	120.10	110.55
1	A	333	ARG	N-CA-CB	-6.07	100.19	110.50
1	A	34	ARG	NE-CZ-NH2	6.06	124.66	119.20
1	A	84	ARG	NE-CZ-NH2	6.05	124.64	119.20
1	A	84	ARG	CB-CA-C	-5.95	99.81	111.06
1	A	339	PHE	CA-CB-CG	-5.91	107.89	113.80
1	A	104	ILE	CA-C-N	5.83	125.21	118.85
1	A	104	ILE	C-N-CA	5.83	125.21	118.85
1	A	227	ASP	CA-CB-CG	5.82	118.42	112.60
1	A	131	VAL	CA-C-N	5.78	125.69	119.85
1	A	131	VAL	C-N-CA	5.78	125.69	119.85
1	A	296	PHE	CA-CB-CG	-5.75	108.05	113.80
1	A	41	SER	N-CA-CB	5.75	118.86	110.58
1	A	226	GLY	O-C-N	5.66	130.06	122.70
1	A	262	LEU	CB-CG-CD1	5.63	127.58	110.70
1	A	395	ARG	CA-C-N	5.61	132.25	121.54
1	A	395	ARG	C-N-CA	5.61	132.25	121.54
1	A	396	SER	O-C-N	5.60	130.04	122.59
1	A	227	ASP	O-C-N	5.59	127.61	121.85
1	A	44	SER	CA-C-N	-5.58	118.57	122.59
1	A	44	SER	C-N-CA	-5.58	118.57	122.59
1	A	341	GLY	O-C-N	5.49	131.78	123.00
1	A	57	SER	N-CA-C	5.47	120.06	112.45
1	A	160	LEU	N-CA-CB	-5.43	101.56	110.68
1	A	143	LYS	O-C-N	5.42	129.67	123.27
1	A	100	SER	O-C-N	5.42	129.79	122.59
1	A	329	HIS	O-C-N	-5.40	115.11	122.19
1	A	125	SER	O-C-N	5.34	128.68	122.00
1	A	226	GLY	CA-C-N	5.33	129.40	120.70
1	A	226	GLY	C-N-CA	5.33	129.40	120.70
1	A	333	ARG	CA-CB-CG	-5.25	103.59	114.10
1	A	172	ASN	OD1-CG-ND2	-5.25	117.35	122.60
1	A	395	ARG	NE-CZ-NH2	5.22	123.90	119.20
1	A	227	ASP	CB-CA-C	5.20	118.38	110.37
1	A	415	PRO	N-CA-C	-5.20	101.76	112.47
1	A	136	THR	O-C-N	5.19	129.10	123.13
1	A	131	VAL	N-CA-CB	-5.17	103.97	111.21
1	A	147	ILE	CA-CB-CG1	5.16	119.17	110.40
1	A	78	LEU	CA-C-N	-5.15	115.95	123.06
1	A	78	LEU	C-N-CA	-5.15	115.95	123.06
1	A	221	ASP	CB-CA-C	5.13	118.63	109.65
1	A	208	ILE	N-CA-C	5.11	116.07	108.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	249	PHE	O-C-N	5.08	129.25	122.95
1	A	368	ARG	NE-CZ-NH2	5.08	123.78	119.20
1	A	104	ILE	N-CA-C	5.06	113.41	107.89
1	A	331	ASP	O-C-N	5.05	128.40	122.34
1	A	247	SER	N-CA-C	-5.04	107.20	113.19
1	A	395	ARG	O-C-N	5.03	131.05	123.00
1	A	79	ILE	O-C-N	5.02	128.60	123.18
1	A	367	PHE	CB-CA-C	-5.02	102.45	110.79
1	A	83	GLY	CA-C-N	5.01	132.68	124.31
1	A	83	GLY	C-N-CA	5.01	132.68	124.31
1	A	67	ILE	O-C-N	5.01	128.68	123.02
1	A	135	PHE	CA-C-N	-5.00	115.55	122.30
1	A	135	PHE	C-N-CA	-5.00	115.55	122.30

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	3290	0	3145	873	5
2	A	21	0	19	0	0
All	All	3311	0	3164	873	5

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 135.

All (873) 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:54:LYS:HE3	1:A:443:ILE:CG2	1.32	1.52
1:A:9:LEU:HD13	1:A:296:PHE:CZ	1.42	1.51
1:A:262:LEU:CB	1:A:262:LEU:CG	1.87	1.51
1:A:324:ILE:CG2	1:A:359:LEU:HD13	1.41	1.50
1:A:13:HIS:CE1	1:A:292:VAL:CG1	1.92	1.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:324:ILE:CG2	1:A:359:LEU:CD1	1.87	1.47
1:A:143:LYS:HG2	1:A:148:LYS:NZ	1.21	1.45
1:A:303:HIS:H	1:A:351:MET:CE	1.30	1.44
1:A:184:VAL:CG2	1:A:441:UNK:HG3	1.48	1.43
1:A:367:PHE:CE2	1:A:403:ASN:ND2	1.81	1.41
1:A:271:UNK:CG	1:A:272:ALA:H	1.24	1.41
1:A:143:LYS:CG	1:A:148:LYS:NZ	1.87	1.37
1:A:324:ILE:HG22	1:A:359:LEU:CD1	1.44	1.37
1:A:148:LYS:HD3	1:A:148:LYS:C	1.31	1.36
1:A:327:LEU:CD1	1:A:335:UNK:HG2	1.54	1.35
1:A:367:PHE:CD2	1:A:403:ASN:ND2	1.86	1.35
1:A:31:LEU:HD21	1:A:373:UNK:CG	1.58	1.33
1:A:34:ARG:O	1:A:34:ARG:NH1	1.62	1.30
1:A:271:UNK:CG	1:A:272:ALA:N	1.82	1.30
1:A:37:ASP:O	1:A:43:ALA:HB2	1.20	1.29
1:A:64:PHE:HB2	1:A:438:UNK:CG	1.63	1.29
1:A:140:ALA:HB1	1:A:152:THR:CB	1.63	1.28
1:A:142:ALA:HB1	1:A:150:GLN:CG	1.63	1.27
1:A:172:ASN:O	1:A:176:PRO:HD2	1.28	1.27
1:A:367:PHE:HD2	1:A:403:ASN:CB	1.48	1.27
1:A:84:ARG:CD	1:A:199:TYR:O	1.85	1.24
1:A:140:ALA:CB	1:A:152:THR:HB	1.68	1.24
1:A:13:HIS:CE1	1:A:292:VAL:HG12	1.65	1.23
1:A:143:LYS:CB	1:A:148:LYS:HZ2	1.53	1.22
1:A:327:LEU:CD2	1:A:334:UNK:HB2	1.68	1.22
1:A:329:HIS:O	1:A:330:PHE:CB	1.82	1.22
1:A:37:ASP:C	1:A:43:ALA:HB2	1.65	1.22
1:A:356:ARG:HA	1:A:359:LEU:CD1	1.70	1.22
1:A:247:SER:CB	1:A:277:UNK:HG2	1.70	1.21
1:A:375:UNK:CD	1:A:411:ILE:HD13	1.70	1.21
1:A:148:LYS:HD3	1:A:149:GLY:N	1.53	1.21
1:A:191:HIS:NE2	1:A:243:CYS:HB2	1.53	1.21
1:A:192:GLY:O	1:A:436:ALA:HB1	1.35	1.21
1:A:303:HIS:N	1:A:351:MET:HE3	1.54	1.20
1:A:38:UNK:HA	1:A:43:ALA:CB	1.70	1.20
1:A:13:HIS:CE1	1:A:292:VAL:HG11	1.73	1.20
1:A:144:GLU:OE2	1:A:148:LYS:HB2	1.41	1.20
1:A:34:ARG:NH2	1:A:44:SER:N	1.90	1.19
1:A:145:UNK:CD	1:A:147:ILE:CG2	2.19	1.19
1:A:324:ILE:CG2	1:A:359:LEU:HD11	1.66	1.18
1:A:148:LYS:C	1:A:148:LYS:CD	2.11	1.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:34:ARG:HH21	1:A:44:SER:N	1.41	1.18
1:A:89:ILE:C	1:A:89:ILE:HD12	1.69	1.18
1:A:149:GLY:O	1:A:166:LEU:HD23	1.41	1.18
1:A:31:LEU:HD11	1:A:373:UNK:HG3	1.26	1.17
1:A:191:HIS:CG	1:A:241:UNK:CE	2.26	1.17
1:A:192:GLY:O	1:A:436:ALA:CB	1.91	1.17
1:A:262:LEU:HD21	1:A:365:TYR:OH	1.41	1.17
1:A:89:ILE:HD12	1:A:90:UNK:N	1.59	1.16
1:A:51:TRP:HA	1:A:240:MET:HE1	1.24	1.16
1:A:54:LYS:CE	1:A:443:ILE:CG2	2.24	1.16
1:A:143:LYS:HA	1:A:148:LYS:HG2	1.25	1.16
1:A:247:SER:HB3	1:A:277:UNK:CG	1.74	1.16
1:A:294:MET:HA	1:A:294:MET:CE	1.70	1.16
1:A:54:LYS:CE	1:A:443:ILE:HG23	1.77	1.15
1:A:324:ILE:HG21	1:A:359:LEU:CD1	1.63	1.15
1:A:251:LYS:HE3	1:A:274:LYS:H	1.12	1.15
1:A:339:PHE:O	1:A:340:UNK:O	1.64	1.14
1:A:327:LEU:HD12	1:A:335:UNK:CG	1.76	1.14
1:A:79:ILE:HG23	1:A:438:UNK:HG1	1.16	1.13
1:A:452:UNK:O	1:A:453:UNK:HB1	1.46	1.13
1:A:38:UNK:HB1	1:A:45:ILE:O	1.47	1.12
1:A:271:UNK:HG2	1:A:272:ALA:H	1.06	1.12
1:A:225:ILE:CG2	1:A:226:GLY:H	1.63	1.11
1:A:99:MET:O	1:A:100:SER:HB2	1.50	1.11
1:A:37:ASP:C	1:A:43:ALA:CB	2.24	1.11
1:A:303:HIS:N	1:A:351:MET:CE	2.11	1.11
1:A:9:LEU:CD1	1:A:296:PHE:CZ	2.33	1.10
1:A:64:PHE:HB2	1:A:438:UNK:HG3	1.34	1.10
1:A:58:GLY:O	1:A:84:ARG:N	1.84	1.09
1:A:251:LYS:HE3	1:A:274:LYS:N	1.66	1.09
1:A:367:PHE:HD2	1:A:403:ASN:CG	1.61	1.09
1:A:197:VAL:HG11	1:A:389:ALA:CB	1.83	1.09
1:A:184:VAL:HG22	1:A:441:UNK:HG3	1.15	1.09
1:A:251:LYS:HA	1:A:275:THR:HG21	1.33	1.08
1:A:31:LEU:CD2	1:A:373:UNK:HG2	1.81	1.08
1:A:234:UNK:C	1:A:236:GLY:H	1.65	1.08
1:A:225:ILE:HG22	1:A:226:GLY:H	1.10	1.08
1:A:140:ALA:CB	1:A:152:THR:H	1.66	1.08
1:A:327:LEU:HD12	1:A:335:UNK:HG2	1.10	1.07
1:A:367:PHE:CD2	1:A:403:ASN:CB	2.38	1.07
1:A:191:HIS:CD2	1:A:241:UNK:CE	2.37	1.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:324:ILE:HG21	1:A:359:LEU:HD11	1.20	1.07
1:A:197:VAL:HG22	1:A:430:ILE:H	1.02	1.06
1:A:34:ARG:NH2	1:A:44:SER:H	1.48	1.06
1:A:79:ILE:HD11	1:A:86:GLU:HB2	1.37	1.06
1:A:184:VAL:HG22	1:A:441:UNK:CG	1.83	1.06
1:A:234:UNK:O	1:A:236:GLY:N	1.87	1.06
1:A:325:GLN:HE22	1:A:363:ALA:CB	1.68	1.05
1:A:38:UNK:HG1	1:A:45:ILE:CB	1.85	1.05
1:A:269:SER:O	1:A:271:UNK:N	1.90	1.05
1:A:84:ARG:HD3	1:A:199:TYR:O	1.56	1.04
1:A:356:ARG:HA	1:A:359:LEU:HD11	1.39	1.04
1:A:84:ARG:HH11	1:A:84:ARG:CG	1.67	1.04
1:A:142:ALA:CB	1:A:150:GLN:HG3	1.86	1.04
1:A:184:VAL:CG2	1:A:441:UNK:CG	2.33	1.04
1:A:38:UNK:HB2	1:A:47:MET:HG3	1.34	1.04
1:A:167:ILE:HD12	1:A:170:MET:HE3	1.37	1.03
1:A:262:LEU:CB	1:A:262:LEU:HG	1.82	1.03
1:A:145:UNK:O	1:A:148:LYS:HG3	1.56	1.03
1:A:271:UNK:HG3	1:A:272:ALA:N	1.31	1.03
1:A:271:UNK:HG3	1:A:272:ALA:CB	1.89	1.03
1:A:191:HIS:CB	1:A:241:UNK:CE	2.37	1.02
1:A:191:HIS:HB3	1:A:241:UNK:CE	1.89	1.02
1:A:9:LEU:HD13	1:A:296:PHE:CE1	1.94	1.02
1:A:37:ASP:O	1:A:43:ALA:CB	2.06	1.02
1:A:366:ALA:O	1:A:370:VAL:HB	1.60	1.02
1:A:143:LYS:HB3	1:A:148:LYS:HZ2	1.19	1.02
1:A:142:ALA:CB	1:A:150:GLN:CG	2.36	1.02
1:A:145:UNK:CD	1:A:147:ILE:HG23	1.86	1.02
1:A:144:GLU:HG3	1:A:145:UNK:HG3	1.37	1.01
1:A:247:SER:HB3	1:A:277:UNK:HG2	1.03	1.01
1:A:38:UNK:CA	1:A:43:ALA:HB3	1.91	1.01
1:A:64:PHE:CB	1:A:438:UNK:CG	2.38	1.01
1:A:164:UNK:O	1:A:164:UNK:HG3	1.61	1.00
1:A:34:ARG:HH12	1:A:38:UNK:CG	1.73	1.00
1:A:197:VAL:CG2	1:A:430:ILE:H	1.74	1.00
1:A:271:UNK:HG3	1:A:272:ALA:CA	1.91	1.00
1:A:38:UNK:CG	1:A:45:ILE:HB	1.90	1.00
1:A:370:VAL:HG11	1:A:400:PHE:CZ	1.95	1.00
1:A:34:ARG:C	1:A:34:ARG:HH11	1.67	1.00
1:A:367:PHE:CD2	1:A:403:ASN:CG	2.36	1.00
1:A:14:UNK:O	1:A:18:ILE:HG12	1.62	0.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:31:LEU:CD1	1:A:373:UNK:HG3	1.91	0.99
1:A:38:UNK:CA	1:A:43:ALA:CB	2.39	0.99
1:A:327:LEU:HD21	1:A:334:UNK:HB2	1.43	0.99
1:A:143:LYS:CG	1:A:148:LYS:HZ1	1.62	0.99
1:A:251:LYS:CE	1:A:274:LYS:H	1.76	0.99
1:A:151:ILE:HG22	1:A:164:UNK:HA	1.39	0.99
1:A:294:MET:HE3	1:A:294:MET:CA	1.91	0.98
1:A:367:PHE:HD2	1:A:403:ASN:HB2	1.25	0.98
1:A:99:MET:HE1	1:A:111:ASN:HB2	1.43	0.98
1:A:38:UNK:HA	1:A:43:ALA:HB3	0.99	0.98
1:A:143:LYS:CG	1:A:148:LYS:CE	2.41	0.98
1:A:223:THR:HG21	1:A:237:ALA:HB1	1.45	0.97
1:A:367:PHE:HE2	1:A:403:ASN:ND2	1.48	0.97
1:A:31:LEU:HD21	1:A:373:UNK:HG2	0.97	0.97
1:A:148:LYS:CD	1:A:149:GLY:N	2.24	0.97
1:A:197:VAL:CG1	1:A:204:ILE:HD12	1.95	0.97
1:A:143:LYS:CB	1:A:148:LYS:NZ	2.21	0.97
1:A:225:ILE:HG22	1:A:226:GLY:N	1.73	0.97
1:A:34:ARG:O	1:A:38:UNK:HG2	1.65	0.96
1:A:363:ALA:O	1:A:367:PHE:CD1	2.17	0.96
1:A:317:ASN:ND2	1:A:319:SER:H	1.64	0.96
1:A:31:LEU:CD2	1:A:373:UNK:CG	2.42	0.96
1:A:188:UNK:CD	1:A:190:SER:HB2	1.96	0.95
1:A:303:HIS:H	1:A:351:MET:HE3	0.80	0.95
1:A:57:SER:H	1:A:60:GLN:HE22	0.98	0.95
1:A:197:VAL:HG22	1:A:430:ILE:N	1.82	0.95
1:A:325:GLN:HE22	1:A:363:ALA:HB2	1.29	0.95
1:A:142:ALA:HB1	1:A:150:GLN:HG3	0.95	0.95
1:A:84:ARG:HH11	1:A:84:ARG:HG3	1.31	0.95
1:A:188:UNK:CD	1:A:190:SER:H	1.79	0.95
1:A:57:SER:N	1:A:60:GLN:HE22	1.62	0.95
1:A:356:ARG:HA	1:A:359:LEU:HD12	1.47	0.94
1:A:223:THR:HG22	1:A:237:ALA:HA	1.45	0.94
1:A:327:LEU:HD11	1:A:335:UNK:HG2	1.47	0.94
1:A:57:SER:H	1:A:60:GLN:NE2	1.63	0.94
1:A:143:LYS:HB3	1:A:148:LYS:NZ	1.80	0.94
1:A:34:ARG:HH12	1:A:38:UNK:HG2	1.33	0.94
1:A:143:LYS:CG	1:A:148:LYS:HZ2	1.65	0.94
1:A:197:VAL:HG12	1:A:204:ILE:HD12	1.50	0.94
1:A:140:ALA:HB1	1:A:152:THR:HB	0.96	0.94
1:A:259:ILE:HB	1:A:262:LEU:CD1	1.98	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:34:ARG:HH11	1:A:34:ARG:CA	1.80	0.93
1:A:192:GLY:C	1:A:436:ALA:HB1	1.92	0.93
1:A:34:ARG:NH1	1:A:37:ASP:HB3	1.84	0.93
1:A:363:ALA:HB1	1:A:367:PHE:CZ	2.03	0.93
1:A:370:VAL:HG11	1:A:400:PHE:HZ	1.27	0.93
1:A:294:MET:HA	1:A:294:MET:HE3	0.96	0.93
1:A:38:UNK:HB2	1:A:47:MET:CG	1.99	0.93
1:A:83:GLY:O	1:A:85:GLN:OE1	1.87	0.93
1:A:184:VAL:HG21	1:A:441:UNK:HG3	1.51	0.93
1:A:367:PHE:CD2	1:A:403:ASN:HB2	2.02	0.93
1:A:197:VAL:HG11	1:A:389:ALA:HB2	1.48	0.92
1:A:143:LYS:HB3	1:A:148:LYS:CE	1.99	0.92
1:A:51:TRP:H	1:A:240:MET:HE2	1.34	0.92
1:A:223:THR:HG21	1:A:237:ALA:CB	1.99	0.92
1:A:140:ALA:HB3	1:A:152:THR:H	1.34	0.92
1:A:327:LEU:HD23	1:A:334:UNK:HB2	1.50	0.92
1:A:38:UNK:HG1	1:A:45:ILE:HB	0.94	0.92
1:A:280:SER:HB2	1:A:370:VAL:HG23	1.49	0.92
1:A:325:GLN:NE2	1:A:363:ALA:HB2	1.84	0.92
1:A:79:ILE:HG23	1:A:438:UNK:CG	1.99	0.91
1:A:21:PRO:O	1:A:25:GLN:HG3	1.70	0.91
1:A:165:LYS:CB	1:A:170:MET:HE2	2.00	0.91
1:A:64:PHE:CB	1:A:438:UNK:HG2	2.00	0.91
1:A:206:MET:HE2	1:A:216:ALA:CB	2.01	0.91
1:A:34:ARG:HH21	1:A:44:SER:H	0.99	0.90
1:A:171:UNK:HG3	1:A:175:PHE:HE1	1.32	0.90
1:A:9:LEU:HD13	1:A:296:PHE:CE2	2.06	0.90
1:A:34:ARG:HH22	1:A:38:UNK:HG3	1.36	0.90
1:A:196:UNK:HB2	1:A:436:ALA:HA	1.50	0.90
1:A:259:ILE:HB	1:A:262:LEU:HD12	1.50	0.89
1:A:31:LEU:HD11	1:A:373:UNK:CG	2.02	0.89
1:A:144:GLU:O	1:A:455:ALA:HB1	1.73	0.89
1:A:250:ARG:HD2	1:A:255:SER:H	1.37	0.89
1:A:9:LEU:CD1	1:A:296:PHE:CE1	2.55	0.89
1:A:338:LEU:O	1:A:342:ASP:HB2	1.71	0.89
1:A:54:LYS:HE3	1:A:443:ILE:HG21	1.50	0.89
1:A:51:TRP:CA	1:A:240:MET:HE1	2.03	0.89
1:A:175:PHE:HB2	1:A:176:PRO:HD3	1.52	0.89
1:A:250:ARG:CD	1:A:255:SER:H	1.87	0.88
1:A:172:ASN:O	1:A:176:PRO:CD	2.20	0.88
1:A:324:ILE:HG22	1:A:359:LEU:HD13	1.04	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:250:ARG:NH2	1:A:253:PHE:HD2	1.71	0.88
1:A:89:ILE:C	1:A:89:ILE:CD1	2.45	0.88
1:A:317:ASN:C	1:A:317:ASN:HD22	1.82	0.88
1:A:14:UNK:O	1:A:18:ILE:CG1	2.22	0.87
1:A:143:LYS:CB	1:A:148:LYS:CE	2.52	0.87
1:A:171:UNK:HG3	1:A:175:PHE:CE1	2.08	0.87
1:A:355:VAL:O	1:A:359:LEU:HG	1.74	0.86
1:A:175:PHE:HB2	1:A:176:PRO:CD	2.04	0.86
1:A:262:LEU:CD2	1:A:365:TYR:OH	2.23	0.86
1:A:51:TRP:HA	1:A:240:MET:CE	2.06	0.86
1:A:102:THR:CG2	1:A:104:ILE:O	2.23	0.86
1:A:104:ILE:HG12	1:A:105:PRO:CD	2.06	0.86
1:A:206:MET:HE2	1:A:216:ALA:HB1	1.56	0.86
1:A:143:LYS:HA	1:A:148:LYS:CG	2.06	0.86
1:A:165:LYS:HB2	1:A:170:MET:CE	2.06	0.86
1:A:251:LYS:HA	1:A:275:THR:CG2	2.04	0.86
1:A:54:LYS:O	1:A:219:TRP:CH2	2.29	0.86
1:A:432:GLY:O	1:A:436:ALA:HB3	1.76	0.85
1:A:196:UNK:HB2	1:A:436:ALA:CA	2.06	0.85
1:A:34:ARG:HH21	1:A:44:SER:CA	1.89	0.85
1:A:225:ILE:CG2	1:A:227:ASP:HB3	2.06	0.85
1:A:212:SER:O	1:A:281:UNK:CG	2.24	0.85
1:A:324:ILE:CB	1:A:359:LEU:HD13	2.06	0.85
1:A:230:ASP:OD2	1:A:230:ASP:N	2.05	0.84
1:A:250:ARG:CZ	1:A:253:PHE:HD2	1.89	0.84
1:A:329:HIS:O	1:A:330:PHE:HB2	0.97	0.84
1:A:348:LYS:HE3	1:A:349:THR:OG1	1.77	0.84
1:A:247:SER:CB	1:A:277:UNK:CG	2.45	0.84
1:A:327:LEU:HD13	1:A:332:LEU:HA	1.60	0.84
1:A:327:LEU:HD21	1:A:334:UNK:N	1.92	0.84
1:A:143:LYS:HG2	1:A:148:LYS:HZ1	0.72	0.84
1:A:171:UNK:O	1:A:175:PHE:CD1	2.31	0.84
1:A:89:ILE:CD1	1:A:90:UNK:N	2.41	0.84
1:A:20:PRO:HB2	1:A:22:UNK:CD	2.08	0.83
1:A:84:ARG:NE	1:A:199:TYR:O	2.09	0.83
1:A:449:SER:OG	1:A:450:UNK:N	2.05	0.83
1:A:13:HIS:HE1	1:A:292:VAL:CG1	1.51	0.83
1:A:143:LYS:CG	1:A:148:LYS:HE3	2.08	0.83
1:A:145:UNK:O	1:A:148:LYS:CG	2.27	0.83
1:A:327:LEU:HD13	1:A:332:LEU:CA	2.09	0.83
1:A:303:HIS:ND1	1:A:351:MET:HE2	1.94	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:172:ASN:HA	1:A:175:PHE:CD1	2.13	0.82
1:A:54:LYS:HE3	1:A:443:ILE:HG23	0.84	0.82
1:A:38:UNK:N	1:A:43:ALA:CB	2.42	0.82
1:A:143:LYS:HB3	1:A:148:LYS:CG	2.10	0.82
1:A:23:ILE:N	1:A:23:ILE:CD1	2.43	0.82
1:A:68:VAL:HG23	1:A:136:THR:OG1	1.77	0.82
1:A:55:GLN:O	1:A:56:VAL:HG12	1.78	0.82
1:A:250:ARG:NH2	1:A:253:PHE:CD2	2.47	0.82
1:A:271:UNK:CG	1:A:272:ALA:CB	2.58	0.82
1:A:305:UNK:O	1:A:306:UNK:O	1.96	0.82
1:A:327:LEU:CD1	1:A:332:LEU:HB3	2.10	0.82
1:A:312:ALA:HB3	1:A:315:VAL:HG13	1.62	0.81
1:A:192:GLY:O	1:A:436:ALA:HB2	1.80	0.81
1:A:303:HIS:H	1:A:351:MET:HE1	1.43	0.81
1:A:163:LEU:HD23	1:A:167:ILE:CD1	2.10	0.81
1:A:179:ASP:O	1:A:180:UNK:HB2	1.79	0.81
1:A:148:LYS:HD3	1:A:148:LYS:O	1.78	0.81
1:A:145:UNK:CD	1:A:147:ILE:HG22	2.07	0.81
1:A:304:UNK:O	1:A:305:UNK:HB2	1.80	0.81
1:A:251:LYS:HG2	1:A:275:THR:HG22	1.61	0.81
1:A:145:UNK:HB1	1:A:455:ALA:HB2	1.63	0.80
1:A:212:SER:O	1:A:281:UNK:HG2	1.81	0.80
1:A:273:UNK:O	1:A:278:LYS:HE3	1.80	0.80
1:A:167:ILE:CD1	1:A:170:MET:HE3	2.12	0.80
1:A:347:UNK:N	1:A:347:UNK:CD	2.43	0.80
1:A:142:ALA:CB	1:A:150:GLN:HG2	2.10	0.80
1:A:143:LYS:HG3	1:A:148:LYS:HE3	1.63	0.80
1:A:16:VAL:HG13	1:A:259:ILE:HG12	1.62	0.80
1:A:141:GLY:O	1:A:142:ALA:HB3	1.81	0.80
1:A:31:LEU:CG	1:A:373:UNK:HG3	2.12	0.80
1:A:145:UNK:HB1	1:A:455:ALA:CB	2.12	0.80
1:A:206:MET:SD	1:A:377:ILE:HD12	2.21	0.80
1:A:416:GLN:NE2	1:A:423:PRO:HD3	1.96	0.80
1:A:23:ILE:O	1:A:27:VAL:HG23	1.82	0.79
1:A:163:LEU:CD2	1:A:167:ILE:HD11	2.12	0.79
1:A:13:HIS:HE1	1:A:292:VAL:HG13	1.46	0.79
1:A:79:ILE:CD1	1:A:86:GLU:HB2	2.12	0.79
1:A:143:LYS:HB3	1:A:148:LYS:HG3	1.64	0.79
1:A:163:LEU:HD23	1:A:167:ILE:HD11	1.65	0.79
1:A:195:UNK:HG1	1:A:440:ILE:HG13	1.64	0.79
1:A:250:ARG:HD3	1:A:256:LEU:H	1.47	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:338:LEU:O	1:A:342:ASP:CB	2.31	0.79
1:A:357:ARG:O	1:A:360:PHE:HB2	1.83	0.79
1:A:407:UNK:O	1:A:410:ASN:HB2	1.83	0.78
1:A:58:GLY:O	1:A:83:GLY:HA2	1.84	0.78
1:A:165:LYS:HB3	1:A:170:MET:HE2	1.63	0.78
1:A:348:LYS:HE3	1:A:349:THR:H	1.49	0.78
1:A:142:ALA:O	1:A:150:GLN:HG2	1.83	0.78
1:A:151:ILE:HG22	1:A:164:UNK:CA	2.13	0.78
1:A:165:LYS:HB2	1:A:170:MET:HE2	1.66	0.78
1:A:171:UNK:O	1:A:175:PHE:HD1	1.67	0.78
1:A:97:ALA:O	1:A:98:ALA:HB3	1.84	0.78
1:A:236:GLY:O	1:A:237:ALA:HB2	1.83	0.78
1:A:325:GLN:NE2	1:A:397:TYR:OH	2.16	0.78
1:A:225:ILE:HG22	1:A:227:ASP:HB3	1.64	0.77
1:A:250:ARG:CZ	1:A:253:PHE:HA	2.13	0.77
1:A:84:ARG:HH11	1:A:84:ARG:HG2	1.49	0.77
1:A:143:LYS:HG2	1:A:148:LYS:HZ2	1.31	0.77
1:A:367:PHE:HZ	1:A:397:TYR:HE2	1.31	0.77
1:A:282:ALA:HB3	1:A:394:UNK:CD	2.15	0.77
1:A:414:TRP:CE3	1:A:422:LYS:HG2	2.19	0.77
1:A:104:ILE:HG12	1:A:105:PRO:HD2	1.66	0.77
1:A:201:ASP:O	1:A:204:ILE:HG12	1.85	0.77
1:A:20:PRO:HD2	1:A:23:ILE:HG12	1.66	0.77
1:A:271:UNK:CG	1:A:272:ALA:HB2	2.15	0.77
1:A:34:ARG:NH1	1:A:34:ARG:C	2.32	0.76
1:A:141:GLY:O	1:A:142:ALA:CB	2.31	0.76
1:A:197:VAL:HG12	1:A:204:ILE:CD1	2.13	0.76
1:A:129:GLY:O	1:A:130:SER:HB3	1.85	0.76
1:A:51:TRP:CA	1:A:240:MET:CE	2.64	0.76
1:A:375:UNK:CD	1:A:411:ILE:CD1	2.59	0.76
1:A:356:ARG:NE	1:A:360:PHE:CE1	2.53	0.76
1:A:110:GLY:O	1:A:114:UNK:HG2	1.85	0.75
1:A:259:ILE:HG22	1:A:261:TYR:H	1.52	0.75
1:A:367:PHE:CD2	1:A:400:PHE:HA	2.21	0.75
1:A:72:GLY:C	1:A:95:LEU:HD23	2.11	0.75
1:A:102:THR:HG23	1:A:104:ILE:H	1.52	0.75
1:A:317:ASN:ND2	1:A:319:SER:N	2.34	0.75
1:A:193:ILE:HD12	1:A:429:ALA:CB	2.17	0.75
1:A:452:UNK:O	1:A:453:UNK:CB	2.31	0.74
1:A:34:ARG:HH12	1:A:38:UNK:HG3	1.52	0.74
1:A:269:SER:C	1:A:271:UNK:N	2.42	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:192:GLY:C	1:A:436:ALA:CB	2.53	0.74
1:A:223:THR:CG2	1:A:237:ALA:HA	2.17	0.74
1:A:327:LEU:HD21	1:A:334:UNK:CB	2.16	0.74
1:A:104:ILE:HD13	1:A:106:SER:HB2	1.68	0.74
1:A:79:ILE:HD11	1:A:86:GLU:CB	2.16	0.73
1:A:283:LYS:HD3	1:A:283:LYS:C	2.13	0.73
1:A:102:THR:HG21	1:A:104:ILE:O	1.87	0.73
1:A:192:GLY:CA	1:A:436:ALA:HB1	2.17	0.73
1:A:340:UNK:HA	1:A:345:ILE:O	1.88	0.73
1:A:156:UNK:O	1:A:157:ALA:HB3	1.87	0.73
1:A:22:UNK:HG2	1:A:23:ILE:CD1	2.18	0.73
1:A:84:ARG:HD2	1:A:199:TYR:O	1.88	0.73
1:A:155:ALA:O	1:A:157:ALA:N	2.22	0.73
1:A:34:ARG:HH11	1:A:34:ARG:HA	1.54	0.73
1:A:140:ALA:CB	1:A:152:THR:N	2.48	0.73
1:A:55:GLN:C	1:A:56:VAL:HG12	2.12	0.73
1:A:164:UNK:O	1:A:164:UNK:CG	2.36	0.73
1:A:42:ALA:O	1:A:43:ALA:CB	2.37	0.72
1:A:64:PHE:CB	1:A:438:UNK:HG3	2.09	0.72
1:A:9:LEU:CD1	1:A:296:PHE:CE2	2.68	0.72
1:A:143:LYS:CB	1:A:148:LYS:HE3	2.19	0.72
1:A:327:LEU:HD13	1:A:332:LEU:CB	2.18	0.72
1:A:143:LYS:CA	1:A:148:LYS:HG2	2.14	0.72
1:A:206:MET:HE3	1:A:377:ILE:CD1	2.19	0.72
1:A:38:UNK:N	1:A:43:ALA:HB1	2.05	0.72
1:A:368:ARG:HH12	1:A:410:ASN:ND2	1.87	0.72
1:A:368:ARG:HH22	1:A:410:ASN:HD22	1.34	0.72
1:A:34:ARG:NH1	1:A:38:UNK:CG	2.52	0.72
1:A:259:ILE:CB	1:A:262:LEU:HD12	2.19	0.72
1:A:16:VAL:CG1	1:A:259:ILE:HG12	2.20	0.72
1:A:51:TRP:N	1:A:240:MET:HE2	2.06	0.71
1:A:102:THR:O	1:A:160:LEU:HD13	1.90	0.71
1:A:223:THR:CG2	1:A:237:ALA:CB	2.68	0.71
1:A:180:UNK:O	1:A:180:UNK:CD	2.39	0.71
1:A:148:LYS:CG	1:A:149:GLY:N	2.46	0.71
1:A:167:ILE:HA	1:A:170:MET:HG3	1.72	0.71
1:A:281:UNK:HG3	1:A:283:LYS:H	1.55	0.71
1:A:23:ILE:HD13	1:A:23:ILE:H	1.56	0.71
1:A:367:PHE:CZ	1:A:397:TYR:CE2	2.78	0.71
1:A:102:THR:HG23	1:A:104:ILE:N	2.06	0.70
1:A:289:LEU:HD22	1:A:293:LEU:HD22	1.72	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:259:ILE:CG2	1:A:260:UNK:N	2.54	0.70
1:A:250:ARG:HD3	1:A:256:LEU:N	2.06	0.70
1:A:367:PHE:HE2	1:A:403:ASN:HD22	1.05	0.70
1:A:145:UNK:CB	1:A:455:ALA:HB2	2.21	0.70
1:A:259:ILE:HG22	1:A:261:TYR:N	2.07	0.70
1:A:212:SER:O	1:A:281:UNK:HG1	1.90	0.70
1:A:58:GLY:O	1:A:83:GLY:CA	2.40	0.69
1:A:108:LEU:O	1:A:111:ASN:HB3	1.92	0.69
1:A:416:GLN:HE21	1:A:423:PRO:HD3	1.57	0.69
1:A:143:LYS:NZ	1:A:191:HIS:HE1	1.89	0.69
1:A:282:ALA:HA	1:A:285:UNK:CD	2.22	0.69
1:A:13:HIS:CE1	1:A:292:VAL:HG13	2.17	0.69
1:A:64:PHE:CD2	1:A:81:LEU:HD22	2.27	0.69
1:A:2:ALA:HB1	1:A:350:UNK:CG	2.23	0.69
1:A:96:ALA:O	1:A:97:ALA:C	2.34	0.69
1:A:355:VAL:O	1:A:359:LEU:CG	2.40	0.69
1:A:367:PHE:HZ	1:A:397:TYR:CE2	2.10	0.69
1:A:34:ARG:NH2	1:A:38:UNK:HG3	2.06	0.69
1:A:89:ILE:HD12	1:A:90:UNK:CA	2.21	0.68
1:A:367:PHE:CZ	1:A:397:TYR:HE2	2.12	0.68
1:A:64:PHE:HB3	1:A:438:UNK:HG2	1.74	0.68
1:A:84:ARG:HD2	1:A:200:THR:HA	1.75	0.68
1:A:357:ARG:O	1:A:361:LEU:HD22	1.92	0.68
1:A:34:ARG:NH2	1:A:45:ILE:H	1.91	0.68
1:A:53:LEU:O	1:A:239:UNK:HB1	1.93	0.68
1:A:140:ALA:HB1	1:A:152:THR:H	1.55	0.68
1:A:371:VAL:CG1	1:A:404:SER:HB2	2.24	0.68
1:A:143:LYS:HZ1	1:A:191:HIS:HE1	1.42	0.68
1:A:34:ARG:HH22	1:A:45:ILE:H	1.42	0.67
1:A:197:VAL:CG1	1:A:204:ILE:CD1	2.70	0.67
1:A:206:MET:CE	1:A:216:ALA:CB	2.73	0.67
1:A:208:ILE:CD1	1:A:374:ILE:HD11	2.24	0.67
1:A:100:SER:O	1:A:159:SER:N	2.28	0.67
1:A:349:THR:HA	1:A:352:LYS:HE2	1.76	0.67
1:A:363:ALA:O	1:A:367:PHE:CE1	2.46	0.67
1:A:188:UNK:CD	1:A:190:SER:N	2.56	0.67
1:A:327:LEU:CD2	1:A:334:UNK:CB	2.60	0.67
1:A:84:ARG:CG	1:A:84:ARG:NH1	2.39	0.67
1:A:343:GLN:HB2	1:A:345:ILE:HG12	1.76	0.67
1:A:48:VAL:HG22	1:A:243:CYS:HB3	1.77	0.67
1:A:72:GLY:O	1:A:94:SER:HA	1.94	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:252:ALA:C	1:A:254:PRO:HD3	2.20	0.67
1:A:54:LYS:CE	1:A:443:ILE:HG21	2.13	0.67
1:A:196:UNK:HG3	1:A:430:ILE:HB	1.77	0.66
1:A:259:ILE:CG2	1:A:261:TYR:H	2.08	0.66
1:A:223:THR:HG22	1:A:237:ALA:CA	2.24	0.66
1:A:38:UNK:HG3	1:A:45:ILE:H	1.60	0.66
1:A:99:MET:O	1:A:100:SER:CB	2.32	0.66
1:A:148:LYS:HD3	1:A:149:GLY:CA	2.25	0.66
1:A:165:LYS:HB2	1:A:170:MET:HE1	1.77	0.66
1:A:208:ILE:HD11	1:A:388:ILE:CG2	2.25	0.66
1:A:89:ILE:HD12	1:A:90:UNK:H	1.57	0.66
1:A:22:UNK:HG2	1:A:23:ILE:HD13	1.78	0.66
1:A:271:UNK:CG	1:A:272:ALA:CA	2.64	0.66
1:A:343:GLN:HB2	1:A:345:ILE:CG1	2.25	0.66
1:A:89:ILE:CD1	1:A:90:UNK:H	2.07	0.65
1:A:250:ARG:CD	1:A:256:LEU:H	2.09	0.65
1:A:166:LEU:HD22	1:A:168:SER:H	1.60	0.65
1:A:250:ARG:NE	1:A:253:PHE:HA	2.12	0.65
1:A:13:HIS:ND1	1:A:292:VAL:HG11	2.08	0.65
1:A:97:ALA:O	1:A:98:ALA:CB	2.43	0.65
1:A:206:MET:CE	1:A:216:ALA:HB1	2.26	0.65
1:A:236:GLY:O	1:A:237:ALA:CB	2.45	0.65
1:A:327:LEU:CD1	1:A:332:LEU:CB	2.75	0.65
1:A:2:ALA:CB	1:A:350:UNK:HB1	2.27	0.65
1:A:149:GLY:O	1:A:166:LEU:CD2	2.34	0.65
1:A:54:LYS:O	1:A:219:TRP:HH2	1.79	0.65
1:A:155:ALA:C	1:A:157:ALA:H	2.05	0.65
1:A:84:ARG:HG2	1:A:84:ARG:NH1	2.07	0.65
1:A:340:UNK:O	1:A:344:GLY:N	2.29	0.65
1:A:222:SER:HA	1:A:225:ILE:HD12	1.79	0.65
1:A:13:HIS:NE2	1:A:292:VAL:HG12	2.07	0.64
1:A:210:PHE:HD1	1:A:395:ARG:HD2	1.61	0.64
1:A:66:ALA:HB1	1:A:437:SER:OG	1.97	0.64
1:A:145:UNK:HA	1:A:455:ALA:HB2	1.80	0.64
1:A:20:PRO:HG2	1:A:23:ILE:HD13	1.79	0.64
1:A:37:ASP:C	1:A:43:ALA:HB1	2.19	0.64
1:A:259:ILE:H	1:A:262:LEU:HD13	1.63	0.64
1:A:294:MET:CE	1:A:294:MET:CA	2.63	0.64
1:A:23:ILE:N	1:A:23:ILE:HD12	2.12	0.64
1:A:129:GLY:O	1:A:130:SER:CB	2.45	0.64
1:A:320:TYR:HD2	1:A:338:LEU:HD21	1.62	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:414:TRP:HB3	1:A:416:GLN:OE1	1.98	0.64
1:A:449:SER:C	1:A:451:ALA:H	2.04	0.63
1:A:206:MET:HE3	1:A:377:ILE:HD11	1.78	0.63
1:A:22:UNK:CD	1:A:22:UNK:N	2.61	0.63
1:A:196:UNK:CB	1:A:436:ALA:HA	2.26	0.63
1:A:227:ASP:O	1:A:230:ASP:OD2	2.16	0.63
1:A:38:UNK:CA	1:A:43:ALA:HB1	2.26	0.63
1:A:306:UNK:CE	1:A:346:ALA:H	2.11	0.63
1:A:59:ALA:HA	1:A:83:GLY:HA2	1.80	0.63
1:A:282:ALA:HB3	1:A:394:UNK:CG	2.28	0.63
1:A:368:ARG:HH22	1:A:410:ASN:ND2	1.95	0.63
1:A:348:LYS:HG3	1:A:349:THR:H	1.64	0.63
1:A:144:GLU:CD	1:A:148:LYS:HB2	2.24	0.63
1:A:325:GLN:NE2	1:A:363:ALA:CB	2.45	0.63
1:A:55:GLN:C	1:A:56:VAL:CG1	2.72	0.62
1:A:136:THR:HG21	1:A:433:UNK:O	2.00	0.62
1:A:144:GLU:HG2	1:A:145:UNK:N	2.14	0.62
1:A:208:ILE:HD13	1:A:374:ILE:HD11	1.81	0.62
1:A:143:LYS:HB3	1:A:148:LYS:CD	2.28	0.62
1:A:225:ILE:HG21	1:A:227:ASP:HB3	1.78	0.62
1:A:250:ARG:CD	1:A:253:PHE:HA	2.30	0.62
1:A:208:ILE:HG23	1:A:216:ALA:HB2	1.82	0.62
1:A:38:UNK:CB	1:A:45:ILE:O	2.37	0.62
1:A:319:SER:O	1:A:323:LYS:HD3	1.99	0.62
1:A:259:ILE:HB	1:A:262:LEU:HD13	1.80	0.62
1:A:193:ILE:HG22	1:A:432:GLY:HA3	1.81	0.61
1:A:283:LYS:HD3	1:A:283:LYS:O	2.00	0.61
1:A:172:ASN:O	1:A:175:PHE:N	2.29	0.61
1:A:233:UNK:HG1	1:A:452:UNK:O	1.99	0.61
1:A:197:VAL:HG21	1:A:429:ALA:HB1	1.83	0.61
1:A:262:LEU:HD22	1:A:279:ASN:HD21	1.64	0.61
1:A:363:ALA:HB1	1:A:367:PHE:CE1	2.35	0.61
1:A:133:LEU:C	1:A:441:UNK:HG1	2.24	0.61
1:A:149:GLY:C	1:A:166:LEU:HD23	2.22	0.61
1:A:193:ILE:HD12	1:A:429:ALA:HB2	1.82	0.61
1:A:312:ALA:HB3	1:A:315:VAL:CG1	2.29	0.61
1:A:49:PRO:HA	1:A:242:ILE:HD13	1.82	0.61
1:A:166:LEU:HD22	1:A:168:SER:HB2	1.83	0.61
1:A:34:ARG:NH2	1:A:44:SER:CA	2.57	0.61
1:A:143:LYS:CA	1:A:148:LYS:CG	2.77	0.60
1:A:163:LEU:HD23	1:A:167:ILE:HD12	1.82	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:223:THR:CG2	1:A:237:ALA:CA	2.79	0.60
1:A:175:PHE:O	1:A:176:PRO:C	2.45	0.60
1:A:251:LYS:HG2	1:A:275:THR:CG2	2.30	0.60
1:A:327:LEU:CD1	1:A:335:UNK:CG	2.45	0.60
1:A:24:LEU:O	1:A:28:VAL:HG23	2.01	0.60
1:A:320:TYR:CD2	1:A:338:LEU:HD21	2.35	0.60
1:A:143:LYS:HG3	1:A:148:LYS:CE	2.21	0.60
1:A:13:HIS:NE2	1:A:296:PHE:CZ	2.69	0.60
1:A:197:VAL:CG1	1:A:389:ALA:HB2	2.28	0.60
1:A:324:ILE:HG22	1:A:359:LEU:HD12	1.72	0.60
1:A:140:ALA:HB1	1:A:152:THR:N	2.16	0.60
1:A:262:LEU:HG	1:A:262:LEU:CA	2.31	0.60
1:A:336:UNK:O	1:A:340:UNK:HB2	2.01	0.59
1:A:156:UNK:O	1:A:157:ALA:CB	2.50	0.59
1:A:167:ILE:CA	1:A:170:MET:HG3	2.32	0.59
1:A:171:UNK:O	1:A:175:PHE:CE1	2.55	0.59
1:A:339:PHE:C	1:A:340:UNK:O	2.42	0.59
1:A:193:ILE:O	1:A:197:VAL:HB	2.02	0.59
1:A:30:ILE:HG23	1:A:249:PHE:HZ	1.66	0.59
1:A:144:GLU:CG	1:A:145:UNK:HG3	2.23	0.59
1:A:191:HIS:CD2	1:A:243:CYS:HB2	2.33	0.59
1:A:30:ILE:HG23	1:A:249:PHE:CZ	2.38	0.59
1:A:51:TRP:H	1:A:240:MET:CE	2.13	0.59
1:A:66:ALA:CB	1:A:437:SER:OG	2.51	0.59
1:A:84:ARG:HG3	1:A:84:ARG:NH1	2.11	0.59
1:A:171:UNK:C	1:A:175:PHE:CE1	2.84	0.59
1:A:23:ILE:N	1:A:23:ILE:HD13	2.15	0.59
1:A:82:ALA:O	1:A:85:GLN:CD	2.46	0.59
1:A:37:ASP:OD1	1:A:43:ALA:HA	2.01	0.59
1:A:143:LYS:CB	1:A:148:LYS:CG	2.81	0.59
1:A:163:LEU:HD22	1:A:167:ILE:HD11	1.85	0.59
1:A:250:ARG:CZ	1:A:253:PHE:CD2	2.80	0.59
1:A:20:PRO:HG2	1:A:23:ILE:CD1	2.32	0.59
1:A:51:TRP:N	1:A:240:MET:CE	2.66	0.58
1:A:197:VAL:CG2	1:A:430:ILE:N	2.55	0.58
1:A:262:LEU:HD11	1:A:365:TYR:OH	2.03	0.58
1:A:303:HIS:CA	1:A:351:MET:CE	2.80	0.58
1:A:34:ARG:NH1	1:A:37:ASP:CB	2.63	0.58
1:A:281:UNK:HG3	1:A:283:LYS:HB3	1.85	0.58
1:A:50:GLY:HA3	1:A:241:UNK:CD	2.33	0.58
1:A:364:ALA:O	1:A:368:ARG:HG3	2.04	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:83:GLY:O	1:A:85:GLN:CD	2.46	0.58
1:A:206:MET:CE	1:A:377:ILE:HD12	2.34	0.58
1:A:93:ARG:HD2	1:A:115:SER:HB3	1.85	0.58
1:A:17:PHE:CE2	1:A:259:ILE:CD1	2.87	0.58
1:A:250:ARG:HD2	1:A:253:PHE:HA	1.84	0.58
1:A:251:LYS:NZ	1:A:274:LYS:H	2.02	0.58
1:A:259:ILE:HG23	1:A:260:UNK:N	2.19	0.58
1:A:16:VAL:HG12	1:A:259:ILE:HD11	1.84	0.58
1:A:282:ALA:CB	1:A:394:UNK:CG	2.81	0.58
1:A:175:PHE:O	1:A:178:GLY:N	2.34	0.57
1:A:2:ALA:HB1	1:A:350:UNK:HG3	1.86	0.57
1:A:37:ASP:O	1:A:42:ALA:O	2.22	0.57
1:A:454:SER:O	1:A:455:ALA:HB2	2.04	0.57
1:A:367:PHE:CE2	1:A:400:PHE:HA	2.40	0.57
1:A:34:ARG:HH21	1:A:44:SER:CB	2.17	0.57
1:A:163:LEU:HD23	1:A:170:MET:CE	2.34	0.57
1:A:274:LYS:O	1:A:278:LYS:HG3	2.04	0.57
1:A:327:LEU:CD1	1:A:332:LEU:CA	2.82	0.57
1:A:175:PHE:CB	1:A:176:PRO:CD	2.82	0.57
1:A:250:ARG:CZ	1:A:256:LEU:HB2	2.35	0.57
1:A:31:LEU:CG	1:A:373:UNK:CG	2.80	0.57
1:A:144:GLU:CG	1:A:145:UNK:N	2.68	0.57
1:A:140:ALA:HB2	1:A:152:THR:HB	1.79	0.56
1:A:206:MET:HE3	1:A:377:ILE:HD12	1.87	0.56
1:A:348:LYS:CE	1:A:349:THR:OG1	2.51	0.56
1:A:356:ARG:HE	1:A:360:PHE:HE1	1.45	0.56
1:A:53:LEU:HA	1:A:239:UNK:O	2.04	0.56
1:A:104:ILE:CD1	1:A:106:SER:HB2	2.35	0.56
1:A:136:THR:HG22	1:A:437:SER:HB2	1.86	0.56
1:A:196:UNK:HB2	1:A:436:ALA:N	2.19	0.56
1:A:197:VAL:HG11	1:A:389:ALA:HB3	1.85	0.56
1:A:368:ARG:NH2	1:A:410:ASN:HD22	2.02	0.56
1:A:17:PHE:CD2	1:A:259:ILE:HD11	2.41	0.56
1:A:145:UNK:CA	1:A:455:ALA:HB2	2.36	0.56
1:A:140:ALA:HB3	1:A:151:ILE:HD13	1.87	0.56
1:A:192:GLY:CA	1:A:436:ALA:CB	2.83	0.56
1:A:163:LEU:CD2	1:A:167:ILE:CD1	2.77	0.56
1:A:259:ILE:HG21	1:A:261:TYR:HD2	1.70	0.56
1:A:262:LEU:HD21	1:A:365:TYR:CZ	2.37	0.56
1:A:312:ALA:O	1:A:315:VAL:HG22	2.06	0.56
1:A:327:LEU:CG	1:A:334:UNK:HB2	2.33	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:42:ALA:O	1:A:43:ALA:HB3	2.06	0.56
1:A:34:ARG:NH2	1:A:45:ILE:N	2.55	0.55
1:A:146:VAL:HG23	1:A:454:SER:HB3	1.89	0.55
1:A:208:ILE:HD11	1:A:388:ILE:HG22	1.88	0.55
1:A:225:ILE:HG23	1:A:226:GLY:H	1.64	0.55
1:A:34:ARG:NH1	1:A:38:UNK:HG2	2.13	0.55
1:A:250:ARG:HD3	1:A:255:SER:H	1.68	0.55
1:A:259:ILE:HD12	1:A:262:LEU:CD1	2.37	0.55
1:A:348:LYS:HG3	1:A:349:THR:N	2.21	0.55
1:A:143:LYS:CB	1:A:148:LYS:HG3	2.36	0.55
1:A:251:LYS:CG	1:A:275:THR:CG2	2.84	0.55
1:A:363:ALA:HB2	1:A:397:TYR:OH	2.06	0.55
1:A:192:GLY:HA2	1:A:436:ALA:HB1	1.88	0.55
1:A:201:ASP:OD1	1:A:387:HIS:ND1	2.32	0.55
1:A:144:GLU:HG2	1:A:148:LYS:CB	2.37	0.55
1:A:167:ILE:O	1:A:170:MET:HB2	2.07	0.55
1:A:271:UNK:HG3	1:A:272:ALA:HB3	1.86	0.55
1:A:136:THR:CG2	1:A:433:UNK:O	2.55	0.55
1:A:31:LEU:CD2	1:A:373:UNK:HG3	2.27	0.54
1:A:166:LEU:O	1:A:170:MET:HG3	2.08	0.54
1:A:250:ARG:NH1	1:A:253:PHE:HA	2.21	0.54
1:A:24:LEU:HD13	1:A:407:UNK:HG2	1.87	0.54
1:A:140:ALA:HB1	1:A:152:THR:CA	2.36	0.54
1:A:34:ARG:NH1	1:A:38:UNK:HG3	2.18	0.54
1:A:368:ARG:HH12	1:A:410:ASN:HD22	1.52	0.54
1:A:34:ARG:HH22	1:A:44:SER:N	1.97	0.54
1:A:208:ILE:HD11	1:A:388:ILE:HG21	1.89	0.54
1:A:151:ILE:HD12	1:A:153:UNK:H	1.72	0.54
1:A:143:LYS:NZ	1:A:191:HIS:CE1	2.74	0.53
1:A:317:ASN:ND2	1:A:317:ASN:C	2.54	0.53
1:A:16:VAL:HG12	1:A:259:ILE:CD1	2.39	0.53
1:A:179:ASP:O	1:A:180:UNK:CB	2.55	0.53
1:A:10:VAL:HG23	1:A:354:VAL:CG2	2.38	0.53
1:A:64:PHE:HB3	1:A:438:UNK:CG	2.35	0.53
1:A:23:ILE:CD1	1:A:23:ILE:H	2.14	0.53
1:A:317:ASN:HD21	1:A:319:SER:CB	2.21	0.53
1:A:58:GLY:O	1:A:83:GLY:C	2.50	0.53
1:A:131:VAL:O	1:A:181:UNK:HB2	2.09	0.53
1:A:142:ALA:HB3	1:A:150:GLN:HG2	1.87	0.53
1:A:172:ASN:CA	1:A:175:PHE:CD1	2.90	0.52
1:A:196:UNK:HB1	1:A:436:ALA:HB2	1.90	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:86:GLU:O	1:A:86:GLU:HG2	2.09	0.52
1:A:294:MET:HE2	1:A:297:LYS:HG2	1.91	0.52
1:A:166:LEU:CD2	1:A:168:SER:HB2	2.40	0.52
1:A:68:VAL:CG1	1:A:68:VAL:O	2.58	0.52
1:A:78:LEU:HB2	1:A:119:PHE:HE2	1.75	0.52
1:A:171:UNK:CG	1:A:175:PHE:HE1	2.13	0.52
1:A:356:ARG:CA	1:A:359:LEU:HD12	2.31	0.52
1:A:188:UNK:CD	1:A:190:SER:CB	2.81	0.52
1:A:302:UNK:C	1:A:351:MET:HE3	2.33	0.51
1:A:77:ILE:HD13	1:A:434:GLY:HA2	1.92	0.51
1:A:250:ARG:HD2	1:A:253:PHE:C	2.35	0.51
1:A:391:UNK:CE	1:A:432:GLY:H	2.24	0.51
1:A:281:UNK:CG	1:A:283:LYS:HB3	2.39	0.51
1:A:302:UNK:CA	1:A:351:MET:HE3	2.41	0.51
1:A:54:LYS:C	1:A:55:GLN:O	2.54	0.51
1:A:57:SER:HB2	1:A:60:GLN:NE2	2.26	0.51
1:A:247:SER:HB2	1:A:277:UNK:CG	2.37	0.51
1:A:355:VAL:O	1:A:359:LEU:CD2	2.58	0.51
1:A:79:ILE:CD1	1:A:86:GLU:HG3	2.41	0.51
1:A:367:PHE:O	1:A:370:VAL:HG12	2.11	0.51
1:A:52:VAL:O	1:A:219:TRP:HZ3	1.93	0.51
1:A:327:LEU:HD21	1:A:334:UNK:CA	2.41	0.51
1:A:184:VAL:HG23	1:A:441:UNK:CG	2.37	0.50
1:A:251:LYS:HE2	1:A:273:UNK:HA	1.93	0.50
1:A:339:PHE:O	1:A:340:UNK:C	2.44	0.50
1:A:348:LYS:CE	1:A:349:THR:H	2.20	0.50
1:A:167:ILE:HD12	1:A:170:MET:CE	2.25	0.50
1:A:41:SER:O	1:A:42:ALA:CB	2.59	0.50
1:A:251:LYS:CA	1:A:275:THR:CG2	2.84	0.50
1:A:259:ILE:HD12	1:A:262:LEU:HD11	1.94	0.50
1:A:367:PHE:HB2	1:A:403:ASN:HB3	1.92	0.50
1:A:414:TRP:HE3	1:A:422:LYS:HG2	1.72	0.50
1:A:34:ARG:HH21	1:A:44:SER:HB3	1.76	0.50
1:A:331:ASP:O	1:A:352:LYS:HE3	2.10	0.50
1:A:23:ILE:HG21	1:A:257:PRO:HG3	1.93	0.50
1:A:206:MET:CE	1:A:377:ILE:CD1	2.89	0.50
1:A:142:ALA:HB3	1:A:150:GLN:CG	2.34	0.50
1:A:34:ARG:CZ	1:A:37:ASP:HB3	2.41	0.50
1:A:38:UNK:HB2	1:A:47:MET:HG2	1.92	0.50
1:A:234:UNK:C	1:A:236:GLY:N	2.40	0.50
1:A:197:VAL:CG2	1:A:429:ALA:HB1	2.41	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:38:UNK:CG	1:A:45:ILE:H	2.24	0.49
1:A:287:GLN:HE22	1:A:290:ARG:NH1	2.10	0.49
1:A:52:VAL:O	1:A:219:TRP:CZ3	2.66	0.49
1:A:126:SER:O	1:A:127:UNK:HB1	2.11	0.49
1:A:9:LEU:HD12	1:A:296:PHE:CE2	2.48	0.49
1:A:191:HIS:CD2	1:A:241:UNK:CD	2.94	0.49
1:A:371:VAL:CG2	1:A:407:UNK:CG	2.90	0.49
1:A:448:UNK:O	1:A:451:ALA:HA	2.13	0.49
1:A:448:UNK:O	1:A:451:ALA:N	2.40	0.49
1:A:151:ILE:O	1:A:164:UNK:HA	2.13	0.49
1:A:208:ILE:HD13	1:A:210:PHE:CZ	2.48	0.49
1:A:144:GLU:HG2	1:A:145:UNK:H	1.75	0.49
1:A:440:ILE:CG2	1:A:440:ILE:O	2.59	0.49
1:A:73:ASP:N	1:A:95:LEU:HD23	2.27	0.49
1:A:82:ALA:O	1:A:83:GLY:C	2.55	0.49
1:A:247:SER:HB3	1:A:277:UNK:CD	2.41	0.49
1:A:151:ILE:O	1:A:151:ILE:CG2	2.59	0.49
1:A:161:ALA:C	1:A:162:UNK:HG2	2.38	0.49
1:A:440:ILE:O	1:A:440:ILE:HG22	2.13	0.49
1:A:124:PHE:O	1:A:125:SER:CB	2.61	0.48
1:A:294:MET:CE	1:A:297:LYS:HB3	2.43	0.48
1:A:246:GLN:C	1:A:248:SER:H	2.19	0.48
1:A:294:MET:CE	1:A:297:LYS:HG2	2.44	0.48
1:A:338:LEU:O	1:A:342:ASP:HB3	2.11	0.48
1:A:57:SER:HB2	1:A:60:GLN:HE21	1.79	0.48
1:A:262:LEU:HD22	1:A:279:ASN:ND2	2.29	0.48
1:A:363:ALA:HB1	1:A:397:TYR:HE2	1.79	0.48
1:A:367:PHE:HE2	1:A:403:ASN:HD21	1.53	0.48
1:A:54:LYS:HB2	1:A:54:LYS:HE2	1.54	0.48
1:A:447:UNK:CE	1:A:453:UNK:O	2.62	0.48
1:A:148:LYS:CG	1:A:149:GLY:H	2.25	0.48
1:A:151:ILE:HG22	1:A:164:UNK:N	2.29	0.48
1:A:259:ILE:HG22	1:A:260:UNK:N	2.28	0.48
1:A:201:ASP:O	1:A:204:ILE:CG1	2.58	0.48
1:A:250:ARG:HD2	1:A:253:PHE:CA	2.43	0.48
1:A:294:MET:HE3	1:A:297:LYS:HB3	1.96	0.48
1:A:100:SER:HA	1:A:158:PHE:CD1	2.49	0.47
1:A:171:UNK:C	1:A:175:PHE:HE1	2.25	0.47
1:A:196:UNK:CB	1:A:436:ALA:CA	2.84	0.47
1:A:356:ARG:NE	1:A:360:PHE:HE1	2.05	0.47
1:A:370:VAL:CG1	1:A:400:PHE:HZ	2.12	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:101:THR:HG22	1:A:101:THR:O	2.14	0.47
1:A:343:GLN:HB2	1:A:345:ILE:HG13	1.94	0.47
1:A:51:TRP:HA	1:A:51:TRP:CE3	2.50	0.47
1:A:50:GLY:O	1:A:51:TRP:HB2	2.14	0.47
1:A:2:ALA:CB	1:A:350:UNK:CB	2.93	0.47
1:A:109:TRP:HZ2	1:A:163:LEU:HD21	1.79	0.47
1:A:207:GLY:O	1:A:217:ALA:N	2.43	0.47
1:A:259:ILE:HG21	1:A:261:TYR:CD2	2.49	0.47
1:A:347:UNK:CD	1:A:347:UNK:O	2.62	0.47
1:A:371:VAL:HG22	1:A:407:UNK:HG1	1.95	0.47
1:A:371:VAL:HG11	1:A:404:SER:HB2	1.92	0.47
1:A:21:PRO:HD3	1:A:368:ARG:NH2	2.30	0.47
1:A:51:TRP:CZ3	1:A:455:ALA:HA	2.49	0.47
1:A:149:GLY:O	1:A:166:LEU:HA	2.15	0.47
1:A:31:LEU:HD22	1:A:249:PHE:CD2	2.50	0.47
1:A:96:ALA:C	1:A:97:ALA:O	2.55	0.47
1:A:208:ILE:HD11	1:A:374:ILE:HD11	1.96	0.47
1:A:449:SER:C	1:A:451:ALA:N	2.73	0.47
1:A:2:ALA:HB2	1:A:350:UNK:HB1	1.95	0.46
1:A:3:ALA:O	1:A:6:ASP:HB2	2.15	0.46
1:A:324:ILE:HD13	1:A:359:LEU:CD2	2.44	0.46
1:A:327:LEU:HD12	1:A:335:UNK:HG1	1.86	0.46
1:A:79:ILE:HG23	1:A:438:UNK:CB	2.44	0.46
1:A:104:ILE:HA	1:A:105:PRO:HD3	1.59	0.46
1:A:248:SER:HB2	1:A:251:LYS:HD2	1.98	0.46
1:A:305:UNK:O	1:A:306:UNK:C	2.64	0.46
1:A:336:UNK:HB2	1:A:352:LYS:HD3	1.97	0.46
1:A:7:UNK:O	1:A:11:GLU:HG3	2.15	0.46
1:A:175:PHE:O	1:A:179:ASP:N	2.31	0.46
1:A:373:UNK:O	1:A:377:ILE:HG13	2.15	0.46
1:A:54:LYS:O	1:A:55:GLN:O	2.33	0.46
1:A:79:ILE:CG2	1:A:438:UNK:CB	2.94	0.46
1:A:340:UNK:HB1	1:A:341:GLY:H	1.44	0.46
1:A:151:ILE:HD12	1:A:153:UNK:N	2.30	0.46
1:A:367:PHE:CD1	1:A:400:PHE:CD1	3.03	0.46
1:A:55:GLN:O	1:A:56:VAL:CG1	2.58	0.46
1:A:148:LYS:C	1:A:166:LEU:HD21	2.39	0.46
1:A:197:VAL:HG21	1:A:429:ALA:CB	2.45	0.46
1:A:348:LYS:CG	1:A:349:THR:H	2.26	0.46
1:A:34:ARG:HB3	1:A:45:ILE:CD1	2.46	0.46
1:A:327:LEU:HD23	1:A:334:UNK:CB	2.35	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:330:PHE:C	1:A:332:LEU:H	2.23	0.46
1:A:363:ALA:C	1:A:367:PHE:CE1	2.93	0.46
1:A:2:ALA:CB	1:A:350:UNK:CG	2.93	0.46
1:A:20:PRO:O	1:A:23:ILE:N	2.47	0.46
1:A:48:VAL:O	1:A:48:VAL:CG2	2.64	0.46
1:A:38:UNK:CB	1:A:47:MET:CG	2.85	0.46
1:A:312:ALA:CB	1:A:315:VAL:HG13	2.41	0.45
1:A:357:ARG:O	1:A:361:LEU:CD2	2.61	0.45
1:A:124:PHE:O	1:A:125:SER:OG	2.30	0.45
1:A:324:ILE:HB	1:A:359:LEU:HD13	1.93	0.45
1:A:389:ALA:HB1	1:A:429:ALA:HA	1.98	0.45
1:A:328:PRO:HB2	1:A:329:HIS:CD2	2.52	0.45
1:A:42:ALA:O	1:A:43:ALA:HB2	2.13	0.45
1:A:250:ARG:NH1	1:A:253:PHE:CA	2.79	0.45
1:A:371:VAL:CG2	1:A:407:UNK:HG1	2.47	0.45
1:A:448:UNK:O	1:A:451:ALA:CA	2.64	0.45
1:A:31:LEU:HD22	1:A:249:PHE:CE2	2.51	0.45
1:A:144:GLU:HG2	1:A:148:LYS:HB3	1.98	0.45
1:A:246:GLN:H	1:A:246:GLN:HG3	1.42	0.45
1:A:248:SER:O	1:A:251:LYS:HG3	2.17	0.45
1:A:251:LYS:HE3	1:A:273:UNK:C	2.38	0.45
1:A:136:THR:HG22	1:A:437:SER:CB	2.47	0.45
1:A:371:VAL:HG21	1:A:407:UNK:HG3	1.98	0.45
1:A:446:ALA:O	1:A:447:UNK:C	2.63	0.45
1:A:213:GLY:HA2	1:A:277:UNK:CE	2.47	0.45
1:A:324:ILE:HD13	1:A:359:LEU:HD22	1.98	0.45
1:A:414:TRP:HB3	1:A:416:GLN:CD	2.41	0.45
1:A:105:PRO:O	1:A:106:SER:C	2.59	0.45
1:A:191:HIS:NE2	1:A:243:CYS:CB	2.48	0.45
1:A:197:VAL:O	1:A:204:ILE:HG13	2.16	0.45
1:A:198:ASN:HD22	1:A:204:ILE:HB	1.82	0.45
1:A:210:PHE:CD1	1:A:395:ARG:HD2	2.47	0.45
1:A:251:LYS:CE	1:A:273:UNK:HA	2.46	0.45
1:A:99:MET:HE1	1:A:111:ASN:CB	2.32	0.45
1:A:324:ILE:HG21	1:A:359:LEU:CD2	2.46	0.45
1:A:41:SER:O	1:A:42:ALA:HB2	2.17	0.44
1:A:251:LYS:CA	1:A:275:THR:HG21	2.24	0.44
1:A:16:VAL:CG1	1:A:259:ILE:CG1	2.94	0.44
1:A:368:ARG:NH1	1:A:410:ASN:HD22	2.15	0.44
1:A:84:ARG:HD2	1:A:200:THR:CA	2.46	0.44
1:A:363:ALA:HB1	1:A:397:TYR:CE2	2.53	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:356:ARG:CA	1:A:359:LEU:HD11	2.28	0.44
1:A:220:CYS:HA	1:A:381:LYS:HD2	2.00	0.44
1:A:259:ILE:HG21	1:A:259:ILE:HD13	1.36	0.44
1:A:367:PHE:HA	1:A:400:PHE:CE1	2.52	0.44
1:A:367:PHE:CB	1:A:403:ASN:HB3	2.48	0.44
1:A:74:LEU:O	1:A:92:SER:HA	2.17	0.44
1:A:95:LEU:O	1:A:96:ALA:C	2.61	0.44
1:A:225:ILE:CG2	1:A:226:GLY:N	2.34	0.44
1:A:17:PHE:CE2	1:A:259:ILE:HD11	2.52	0.44
1:A:281:UNK:HG3	1:A:283:LYS:N	2.28	0.44
1:A:142:ALA:O	1:A:150:GLN:CG	2.61	0.43
1:A:147:ILE:HG21	1:A:147:ILE:HD13	1.51	0.43
1:A:368:ARG:O	1:A:371:VAL:HG22	2.18	0.43
1:A:197:VAL:HG12	1:A:204:ILE:CG1	2.47	0.43
1:A:210:PHE:O	1:A:394:UNK:HB2	2.18	0.43
1:A:252:ALA:O	1:A:254:PRO:HD3	2.18	0.43
1:A:261:TYR:CZ	1:A:292:VAL:HG13	2.53	0.43
1:A:34:ARG:HB3	1:A:45:ILE:HD12	1.99	0.43
1:A:304:UNK:O	1:A:305:UNK:CB	2.52	0.43
1:A:327:LEU:CD1	1:A:332:LEU:HD23	2.49	0.43
1:A:247:SER:CB	1:A:277:UNK:CD	2.96	0.43
1:A:163:LEU:C	1:A:165:LYS:HD2	2.44	0.43
1:A:367:PHE:CE1	1:A:397:TYR:CE2	3.07	0.43
1:A:419:UNK:HA	1:A:422:LYS:HD2	2.00	0.43
1:A:448:UNK:O	1:A:449:SER:C	2.62	0.43
1:A:13:HIS:NE2	1:A:296:PHE:CE2	2.86	0.43
1:A:172:ASN:O	1:A:173:ALA:C	2.59	0.43
1:A:327:LEU:HD13	1:A:332:LEU:HD23	2.00	0.43
1:A:207:GLY:O	1:A:216:ALA:HA	2.19	0.43
1:A:196:UNK:HG1	1:A:435:ALA:HB3	2.01	0.42
1:A:68:VAL:HG12	1:A:75:GLU:HB3	2.01	0.42
1:A:363:ALA:HB1	1:A:367:PHE:HZ	1.71	0.42
1:A:10:VAL:CG2	1:A:354:VAL:CG2	2.98	0.42
1:A:48:VAL:HG22	1:A:48:VAL:O	2.19	0.42
1:A:163:LEU:O	1:A:165:LYS:HD2	2.19	0.42
1:A:359:LEU:HG	1:A:359:LEU:H	1.34	0.42
1:A:367:PHE:CD2	1:A:403:ASN:HB3	2.46	0.42
1:A:2:ALA:CB	1:A:350:UNK:HG3	2.48	0.42
1:A:58:GLY:H	1:A:60:GLN:NE2	2.17	0.42
1:A:265:LEU:HD21	1:A:291:ASP:OD1	2.20	0.42
1:A:415:PRO:HD2	1:A:416:GLN:OE1	2.19	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:57:SER:N	1:A:60:GLN:NE2	2.38	0.42
1:A:3:ALA:O	1:A:6:ASP:N	2.47	0.42
1:A:140:ALA:CB	1:A:151:ILE:HD13	2.50	0.42
1:A:247:SER:HB2	1:A:274:LYS:NZ	2.35	0.42
1:A:356:ARG:CA	1:A:359:LEU:CD1	2.65	0.42
1:A:155:ALA:C	1:A:157:ALA:N	2.68	0.41
1:A:145:UNK:CD	1:A:147:ILE:HG21	2.33	0.41
1:A:166:LEU:O	1:A:170:MET:CG	2.68	0.41
1:A:234:UNK:O	1:A:236:GLY:CA	2.67	0.41
1:A:282:ALA:CA	1:A:285:UNK:CD	2.97	0.41
1:A:175:PHE:CD1	1:A:175:PHE:N	2.88	0.41
1:A:302:UNK:HB2	1:A:351:MET:HE3	2.02	0.41
1:A:64:PHE:CE2	1:A:81:LEU:HD22	2.55	0.41
1:A:96:ALA:HB3	1:A:99:MET:HG3	2.02	0.41
1:A:131:VAL:HA	1:A:132:PRO:HD3	1.64	0.41
1:A:371:VAL:CG2	1:A:407:UNK:HG3	2.51	0.41
1:A:250:ARG:C	1:A:252:ALA:N	2.78	0.41
1:A:333:ARG:H	1:A:333:ARG:HG3	1.07	0.41
1:A:193:ILE:HD11	1:A:389:ALA:O	2.20	0.41
1:A:250:ARG:HD3	1:A:255:SER:N	2.34	0.41
1:A:422:LYS:HA	1:A:423:PRO:HD3	1.97	0.41
1:A:28:VAL:O	1:A:31:LEU:HB3	2.21	0.41
1:A:144:GLU:HG2	1:A:144:GLU:H	1.47	0.41
1:A:34:ARG:NH1	1:A:34:ARG:CA	2.65	0.41
1:A:246:GLN:C	1:A:248:SER:N	2.79	0.41
1:A:82:ALA:O	1:A:85:GLN:NE2	2.54	0.41
1:A:105:PRO:C	1:A:107:ASP:N	2.76	0.41
1:A:119:PHE:O	1:A:123:GLU:HB2	2.21	0.41
1:A:327:LEU:HD23	1:A:327:LEU:HA	1.85	0.41
1:A:350:UNK:O	1:A:353:UNK:HB2	2.20	0.41
1:A:13:HIS:CD2	1:A:296:PHE:CE2	3.09	0.40
1:A:277:UNK:O	1:A:281:UNK:CB	2.69	0.40
1:A:281:UNK:HG3	1:A:283:LYS:CB	2.50	0.40
1:A:348:LYS:CG	1:A:349:THR:N	2.83	0.40
1:A:10:VAL:HG23	1:A:354:VAL:HG23	2.03	0.40
1:A:21:PRO:O	1:A:22:UNK:C	2.67	0.40
1:A:303:HIS:N	1:A:351:MET:HE1	2.14	0.40
1:A:324:ILE:CD1	1:A:359:LEU:HD22	2.52	0.40
1:A:327:LEU:HD11	1:A:332:LEU:C	2.46	0.40
1:A:79:ILE:CD1	1:A:86:GLU:CG	2.99	0.40
1:A:84:ARG:HD3	1:A:84:ARG:HA	1.92	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:247:SER:CA	1:A:277:UNK:HG2	2.44	0.40
1:A:367:PHE:CZ	1:A:397:TYR:CD2	3.09	0.40
1:A:96:ALA:O	1:A:97:ALA:O	2.39	0.40
1:A:175:PHE:HD1	1:A:175:PHE:N	2.20	0.40
1:A:294:MET:SD	1:A:310:PHE:HD2	2.44	0.40
1:A:9:LEU:HD11	1:A:296:PHE:CE1	2.51	0.40
1:A:371:VAL:HG21	1:A:407:UNK:CG	2.51	0.40

All (5) symmetry-related close contacts are listed below. The label for Atom-2 includes the symmetry operator and encoded unit-cell translations to be applied.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:258:GLN:NE2	1:A:330:PHE:CZ[2_555]	1.78	0.42
1:A:258:GLN:NE2	1:A:330:PHE:CE2[2_555]	1.84	0.36
1:A:258:GLN:O	1:A:329:HIS:O[2_555]	1.90	0.30
1:A:107:ASP:OD1	1:A:415:PRO:CD[1_545]	1.97	0.23
1:A:107:ASP:OD1	1:A:415:PRO:CG[1_545]	2.10	0.10

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	377/457 (82%)	304 (81%)	45 (12%)	28 (7%)	1 0

All (28) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	42	ALA
1	A	43	ALA
1	A	55	GLN
1	A	130	SER
1	A	142	ALA

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	229	ALA
1	A	235	GLY
1	A	237	ALA
1	A	272	ALA
1	A	396	SER
1	A	83	GLY
1	A	100	SER
1	A	126	SER
1	A	253	PHE
1	A	330	PHE
1	A	342	ASP
1	A	4	ALA
1	A	157	ALA
1	A	449	SER
1	A	455	ALA
1	A	139	GLU
1	A	159	SER
1	A	179	ASP
1	A	444	ALA
1	A	270	PRO
1	A	415	PRO
1	A	56	VAL
1	A	225	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	287/287 (100%)	174 (61%)	113 (39%)	0 0

All (113) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	6	ASP
1	A	8	SER
1	A	9	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	10	VAL
1	A	11	GLU
1	A	12	VAL
1	A	23	ILE
1	A	30	ILE
1	A	31	LEU
1	A	34	ARG
1	A	48	VAL
1	A	53	LEU
1	A	54	LYS
1	A	55	GLN
1	A	56	VAL
1	A	60	GLN
1	A	65	LEU
1	A	68	VAL
1	A	69	MET
1	A	76	VAL
1	A	77	ILE
1	A	79	ILE
1	A	81	LEU
1	A	84	ARG
1	A	86	GLU
1	A	87	SER
1	A	89	ILE
1	A	93	ARG
1	A	94	SER
1	A	99	MET
1	A	100	SER
1	A	102	THR
1	A	104	ILE
1	A	107	ASP
1	A	108	LEU
1	A	116	ASN
1	A	123	GLU
1	A	125	SER
1	A	126	SER
1	A	130	SER
1	A	131	VAL
1	A	136	THR
1	A	139	GLU
1	A	143	LYS
1	A	144	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	146	VAL
1	A	148	LYS
1	A	150	GLN
1	A	151	ILE
1	A	154	GLN
1	A	160	LEU
1	A	163	LEU
1	A	165	LYS
1	A	166	LEU
1	A	167	ILE
1	A	168	SER
1	A	170	MET
1	A	172	ASN
1	A	175	PHE
1	A	193	ILE
1	A	205	LYS
1	A	208	ILE
1	A	214	VAL
1	A	221	ASP
1	A	223	THR
1	A	227	ASP
1	A	230	ASP
1	A	245	ASP
1	A	246	GLN
1	A	247	SER
1	A	250	ARG
1	A	258	GLN
1	A	259	ILE
1	A	265	LEU
1	A	275	THR
1	A	279	ASN
1	A	283	LYS
1	A	289	LEU
1	A	290	ARG
1	A	292	VAL
1	A	293	LEU
1	A	294	MET
1	A	297	LYS
1	A	301	GLN
1	A	309	SER
1	A	315	VAL
1	A	317	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	326	LYS
1	A	327	LEU
1	A	337	ASP
1	A	343	GLN
1	A	348	LYS
1	A	351	MET
1	A	352	LYS
1	A	354	VAL
1	A	357	ARG
1	A	359	LEU
1	A	361	LEU
1	A	365	TYR
1	A	367	PHE
1	A	370	VAL
1	A	374	ILE
1	A	381	LYS
1	A	384	SER
1	A	393	SER
1	A	398	SER
1	A	408	ASN
1	A	417	SER
1	A	421	SER
1	A	430	ILE
1	A	437	SER
1	A	443	ILE
1	A	449	SER

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (13) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	55	GLN
1	A	60	GLN
1	A	116	ASN
1	A	154	GLN
1	A	172	ASN
1	A	191	HIS
1	A	198	ASN
1	A	279	ASN
1	A	317	ASN
1	A	325	GLN
1	A	329	HIS
1	A	408	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	410	ASN

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry ⓘ

1 ligand is modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the Chemical Component Dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. 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 $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	$\# Z > 2$	Counts	RMSZ	$\# Z > 2$
2	OTG	A	1	-	22,22,22	0.78	0	31,31,31	0.99	2 (6%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the Chemical Component Dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	OTG	A	1	-	-	1/10/30/30	0/2/2/2

There are no bond length outliers.

All (2) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	A	1	OTG	C7'-C1'-C2'	-2.26	119.46	122.81
2	A	1	OTG	C1-O5-C5	-2.23	109.34	113.65

There are no chirality outliers.

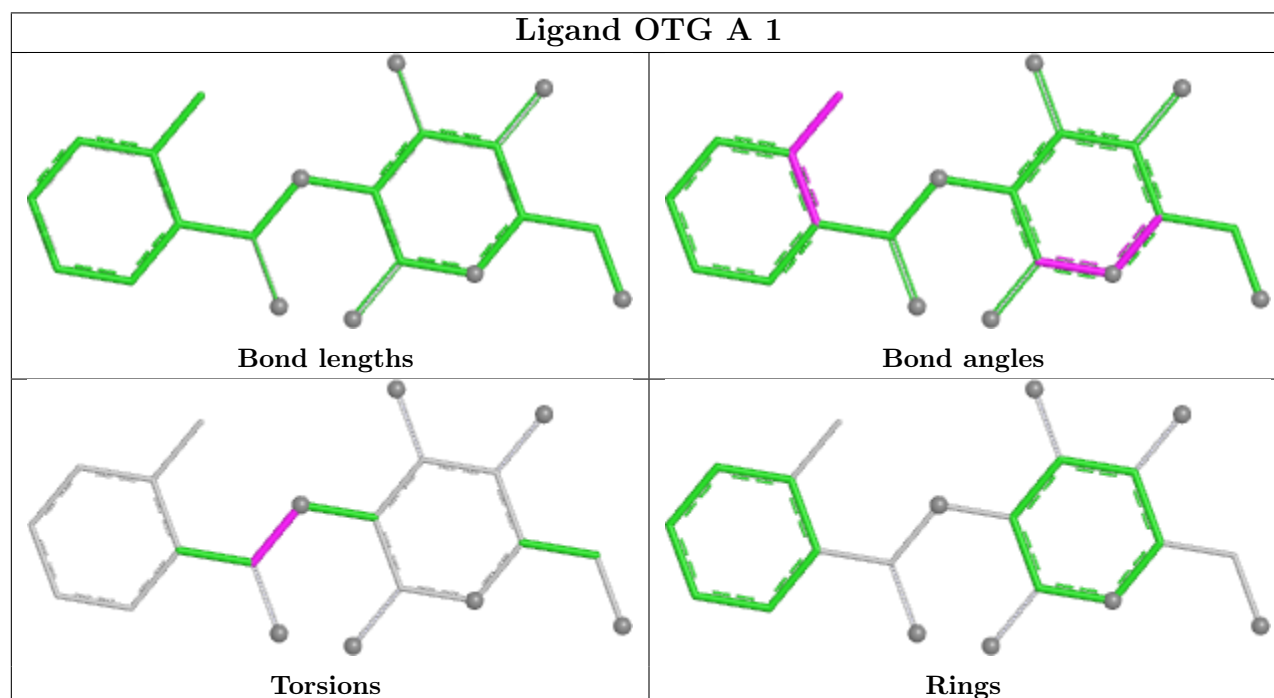
All (1) torsion outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
2	A	1	OTG	C2'-C8'-N2-C2

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less than 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient equivalents in the CSD to analyse the geometry.



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

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.