



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Jan 31, 2016 – 07:27 PM GMT

PDB ID : 1FPV
Title : STRUCTURE DETERMINATION OF FELINE PANLEUKOPENIA VIRUS
EMPTY PARTICLES
Authors : Agbandje, M.; Rossmann, M.G.
Deposited on : 1993-03-04
Resolution : 3.30 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
<http://wwpdb.org/validation/2016/XrayValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

MolProbity : 4.02b-467
Mogul : 1.7 (RC4), CSD as536be (2015)
Xtriage (Phenix) : **NOT EXECUTED**
EDS : **NOT EXECUTED**
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : trunk26865

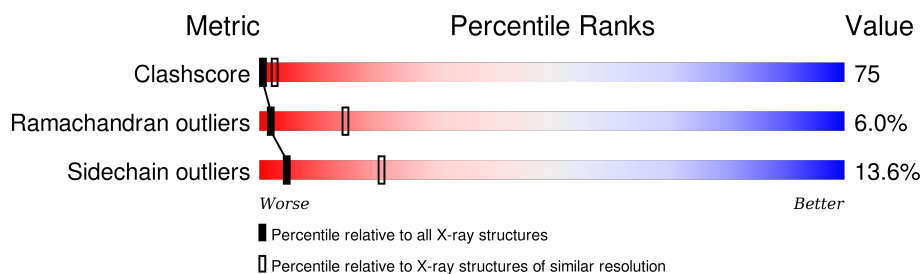
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.30 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	102246	1058 (3.38-3.22)
Ramachandran outliers	100387	1038 (3.38-3.22)
Sidechain outliers	100360	1037 (3.38-3.22)

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 on the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. 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.

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	584	

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 4350 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 FELINE PANLEUKOPENIA VIRUS (STRAIN B) VIRAL PROTEIN 2.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	548	Total	C	N	O	S	0	0	0
			4350	2766	739	829	16			

There are 3 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	104	GLU	GLN	CONFLICT	UNP P24840
A	484	ILE	VAL	CONFLICT	UNP P24840
A	509	GLN	GLU	CONFLICT	UNP P24840

Note EDS was not executed.

- Chain A:  29% 49% 12% 6%



4 Data and refinement statistics

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

Property	Value	Source
Space group	P 21 21 21	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	380.10Å 379.30Å 350.90Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	(Not available) – 3.30	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	(Not available) ((Not available)-3.30)	Depositor
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
Refinement program	unknown	Depositor
R, R_{free}	(Not available) , (Not available)	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	4350	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	0.0	wwPDB-VP

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	1.08	7/4479 (0.2%)	1.40	48/6128 (0.8%)

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

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	2

All (7) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	264	GLY	N-CA	8.97	1.59	1.46
1	A	263	THR	C-O	8.21	1.39	1.23
1	A	239	ASP	C-N	-8.09	1.15	1.34
1	A	228	THR	CA-C	6.21	1.69	1.52
1	A	203	THR	N-CA	5.79	1.57	1.46
1	A	208	TRP	NE1-CE2	-5.20	1.30	1.37
1	A	47	ASN	C-N	-5.10	1.22	1.34

All (48) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	342	TYR	O-C-N	17.42	150.57	122.70
1	A	39	GLY	CA-C-N	-12.52	89.66	117.20
1	A	342	TYR	CA-C-N	-11.85	91.14	117.20
1	A	263	THR	CA-C-N	10.66	137.52	116.20
1	A	39	GLY	C-N-CA	-9.88	97.01	121.70
1	A	39	GLY	O-C-N	9.49	137.88	122.70
1	A	342	TYR	C-N-CA	8.51	142.98	121.70
1	A	228	THR	CA-C-O	-8.46	102.33	120.10
1	A	520	ARG	NE-CZ-NH2	8.24	124.42	120.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	492	ASN	CA-CB-CG	-7.80	96.25	113.40
1	A	216	ARG	NE-CZ-NH2	7.58	124.09	120.30
1	A	209	ARG	NE-CZ-NH2	7.57	124.08	120.30
1	A	314	ARG	NE-CZ-NH2	7.56	124.08	120.30
1	A	361	ARG	NE-CZ-NH2	7.56	124.08	120.30
1	A	263	THR	N-CA-CB	-7.55	95.95	110.30
1	A	274	ARG	NE-CZ-NH2	7.50	124.05	120.30
1	A	67	ARG	NE-CZ-NH2	7.45	124.03	120.30
1	A	397	ARG	NE-CZ-NH2	7.45	124.03	120.30
1	A	191	ARG	NE-CZ-NH2	7.44	124.02	120.30
1	A	283	ARG	NE-CZ-NH2	7.42	124.01	120.30
1	A	540	ARG	NE-CZ-NH2	7.38	123.99	120.30
1	A	382	ARG	NE-CZ-NH2	7.36	123.98	120.30
1	A	481	ARG	NE-CZ-NH2	7.35	123.97	120.30
1	A	332	ARG	NE-CZ-NH2	7.35	123.97	120.30
1	A	313	ARG	NE-CZ-NH2	7.32	123.96	120.30
1	A	408	ARG	NE-CZ-NH2	7.28	123.94	120.30
1	A	81	ARG	NE-CZ-NH2	7.15	123.88	120.30
1	A	377	ARG	NE-CZ-NH2	7.13	123.87	120.30
1	A	581	ARG	NE-CZ-NH2	7.02	123.81	120.30
1	A	260	GLU	OE1-CD-OE2	6.51	131.12	123.30
1	A	263	THR	O-C-N	-6.38	112.36	123.20
1	A	228	THR	CA-C-N	6.31	134.77	117.10
1	A	518	MET	CG-SD-CE	6.28	110.25	100.20
1	A	551	MET	CG-SD-CE	6.26	110.22	100.20
1	A	190	MET	CG-SD-CE	6.25	110.20	100.20
1	A	96	MET	CG-SD-CE	6.18	110.09	100.20
1	A	319	MET	CG-SD-CE	6.14	110.02	100.20
1	A	174	MET	CG-SD-CE	6.12	110.00	100.20
1	A	73	MET	CG-SD-CE	6.10	109.96	100.20
1	A	331	MET	CG-SD-CE	6.09	109.95	100.20
1	A	87	MET	CG-SD-CE	6.04	109.86	100.20
1	A	183	MET	CG-SD-CE	6.03	109.85	100.20
1	A	569	MET	CG-SD-CE	6.00	109.80	100.20
1	A	486	ALA	CB-CA-C	-5.79	101.42	110.10
1	A	263	THR	OG1-CB-CG2	5.34	122.27	110.00
1	A	257	THR	CA-CB-OG1	-5.31	97.85	109.00
1	A	130	VAL	N-CA-CB	-5.23	99.99	111.50
1	A	263	THR	C-N-CA	-5.18	111.42	122.30

There are no chirality outliers.

All (2) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	228	THR	Mainchain
1	A	39	GLY	Mainchain

5.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	4350	0	4150	637	0
All	All	4350	0	4150	637	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 75.

All (637) 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:96:MET:CE	1:A:221:SER:H	1.01	1.57
1:A:424:VAL:HG21	1:A:429:VAL:CG2	1.37	1.50
1:A:150:LEU:CD2	1:A:525:SER:HB3	1.42	1.49
1:A:77:GLU:CG	1:A:518:MET:HE3	1.49	1.40
1:A:424:VAL:CG2	1:A:429:VAL:CG2	2.00	1.39
1:A:361:ARG:NH1	1:A:401:ILE:HG22	1.10	1.39
1:A:276:THR:HG21	1:A:581:ARG:CB	1.51	1.38
1:A:77:GLU:HG3	1:A:518:MET:CE	1.53	1.37
1:A:96:MET:CE	1:A:221:SER:N	1.83	1.37
1:A:359:ALA:CB	1:A:373:ASP:O	1.69	1.35
1:A:159:GLN:HB2	1:A:160:PRO:CD	1.53	1.32
1:A:150:LEU:HD23	1:A:525:SER:CB	1.56	1.32
1:A:276:THR:CG2	1:A:581:ARG:HB3	1.61	1.29
1:A:158:THR:O	1:A:160:PRO:HD2	1.25	1.28
1:A:516:ALA:O	1:A:517:ASN:ND2	1.66	1.28
1:A:361:ARG:O	1:A:407:GLY:HA3	1.19	1.28
1:A:564:ASN:OD1	1:A:568:ALA:HB3	1.16	1.27
1:A:113:ASP:O	1:A:195:LEU:CD1	1.84	1.26
1:A:113:ASP:O	1:A:195:LEU:HD12	1.33	1.25
1:A:77:GLU:CG	1:A:518:MET:CE	2.12	1.24
1:A:111:LEU:HD23	1:A:112:VAL:N	1.52	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:505:ASN:OD1	1:A:521:ILE:HD12	1.37	1.23
1:A:361:ARG:NH1	1:A:401:ILE:CG2	2.02	1.23
1:A:160:PRO:CB	1:A:161:PRO:O	1.87	1.21
1:A:77:GLU:CB	1:A:518:MET:CE	2.20	1.20
1:A:359:ALA:HB1	1:A:373:ASP:CB	1.72	1.19
1:A:359:ALA:CB	1:A:373:ASP:HB2	1.72	1.19
1:A:516:ALA:C	1:A:517:ASN:ND2	1.95	1.17
1:A:424:VAL:CG2	1:A:429:VAL:HG23	1.63	1.16
1:A:276:THR:HG22	1:A:581:ARG:HB3	1.27	1.16
1:A:369:ASN:O	1:A:371:ALA:N	1.78	1.16
1:A:276:THR:CG2	1:A:581:ARG:CB	2.20	1.15
1:A:564:ASN:OD1	1:A:568:ALA:CB	1.92	1.14
1:A:424:VAL:HG22	1:A:429:VAL:HG23	1.25	1.13
1:A:193:GLU:HB3	1:A:206:THR:HG21	1.21	1.12
1:A:109:TRP:NE1	1:A:247:GLU:OE2	1.82	1.12
1:A:70:HIS:HD2	1:A:526:ASP:OD1	1.30	1.11
1:A:96:MET:HE2	1:A:221:SER:N	1.49	1.11
1:A:160:PRO:HB2	1:A:161:PRO:O	0.95	1.11
1:A:99:ASP:OD1	1:A:216:ARG:NH1	1.83	1.09
1:A:194:THR:HG22	1:A:195:LEU:H	1.12	1.07
1:A:382:ARG:HH11	1:A:382:ARG:HG2	1.17	1.06
1:A:276:THR:HG21	1:A:581:ARG:HB2	1.07	1.06
1:A:361:ARG:O	1:A:407:GLY:CA	2.03	1.06
1:A:361:ARG:CZ	1:A:401:ILE:HG22	1.83	1.05
1:A:465:PRO:HG3	1:A:571:ILE:CG2	1.85	1.05
1:A:365:GLN:HA	1:A:365:GLN:OE1	1.53	1.05
1:A:359:ALA:HB3	1:A:373:ASP:C	1.77	1.05
1:A:424:VAL:HG21	1:A:429:VAL:HG21	1.34	1.05
1:A:193:GLU:HB3	1:A:206:THR:CG2	1.87	1.04
1:A:96:MET:HE2	1:A:221:SER:H	0.99	1.03
1:A:96:MET:HE3	1:A:221:SER:H	1.20	1.03
1:A:174:MET:HE3	1:A:503:ALA:HA	1.39	1.03
1:A:118:GLY:HA3	1:A:197:PHE:CE2	1.94	1.03
1:A:74:PRO:O	1:A:520:ARG:NH2	1.92	1.02
1:A:157:ALA:HA	1:A:161:PRO:HB3	1.34	1.02
1:A:309:GLN:O	1:A:313:ARG:HG3	1.58	1.02
1:A:99:ASP:CG	1:A:216:ARG:NH1	2.12	1.02
1:A:424:VAL:HG21	1:A:429:VAL:HG22	1.36	1.02
1:A:77:GLU:CB	1:A:518:MET:HE3	1.85	1.02
1:A:159:GLN:CB	1:A:160:PRO:HD3	1.88	1.01
1:A:381:GLY:HA2	1:A:386:GLN:HE21	1.22	1.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:465:PRO:HG3	1:A:571:ILE:HG21	1.43	1.00
1:A:93:LYS:NZ	1:A:227:GLY:O	1.94	1.00
1:A:381:GLY:HA2	1:A:386:GLN:NE2	1.78	0.99
1:A:576:SER:O	1:A:578:LEU:CD2	2.11	0.99
1:A:96:MET:HE1	1:A:221:SER:H	1.24	0.99
1:A:213:GLN:OE1	1:A:237:ASP:HB3	1.63	0.97
1:A:359:ALA:HB3	1:A:373:ASP:O	0.79	0.96
1:A:516:ALA:C	1:A:517:ASN:HD22	1.59	0.94
1:A:359:ALA:CB	1:A:373:ASP:C	2.35	0.94
1:A:158:THR:O	1:A:160:PRO:CD	2.15	0.94
1:A:429:VAL:HG12	1:A:431:LEU:CD1	1.97	0.94
1:A:70:HIS:CD2	1:A:526:ASP:OD1	2.19	0.94
1:A:96:MET:HE1	1:A:221:SER:N	1.79	0.94
1:A:516:ALA:O	1:A:517:ASN:CG	2.04	0.94
1:A:197:PHE:HE2	1:A:465:PRO:HB2	1.33	0.93
1:A:322:THR:CG2	1:A:420:PHE:CD2	2.52	0.93
1:A:466:ASN:O	1:A:467:GLY:O	1.88	0.92
1:A:443:ASN:HB2	1:A:446:ASN:OD1	1.68	0.92
1:A:77:GLU:HB2	1:A:518:MET:CE	1.97	0.92
1:A:431:LEU:HB3	1:A:432:PRO:HD2	1.52	0.91
1:A:159:GLN:HB2	1:A:160:PRO:HD3	0.92	0.91
1:A:38:VAL:O	1:A:38:VAL:CG2	2.18	0.91
1:A:193:GLU:CB	1:A:206:THR:HG21	2.01	0.90
1:A:361:ARG:NH1	1:A:402:ALA:O	2.05	0.90
1:A:219:ILE:HG13	1:A:230:THR:HB	1.54	0.90
1:A:73:MET:HE3	1:A:520:ARG:NE	1.87	0.89
1:A:378:TYR:O	1:A:397:ARG:CB	2.21	0.89
1:A:469:ILE:CG2	1:A:470:TRP:HE3	1.86	0.89
1:A:96:MET:HE1	1:A:220:PRO:CB	2.02	0.89
1:A:565:ASN:ND2	1:A:566:ILE:HG13	1.88	0.88
1:A:370:GLN:NE2	1:A:399:THR:HG21	1.87	0.88
1:A:77:GLU:HG3	1:A:518:MET:HE3	0.88	0.88
1:A:150:LEU:CD2	1:A:525:SER:CB	2.29	0.88
1:A:416:GLN:HB3	1:A:429:VAL:HG22	1.55	0.88
1:A:194:THR:HG22	1:A:195:LEU:N	1.89	0.88
1:A:99:ASP:OD2	1:A:216:ARG:NH1	2.08	0.87
1:A:322:THR:HG21	1:A:420:PHE:CE2	2.08	0.87
1:A:361:ARG:HH11	1:A:401:ILE:HG22	1.05	0.87
1:A:415:ILE:HD11	1:A:444:TYR:CE2	2.10	0.87
1:A:359:ALA:CB	1:A:373:ASP:CA	2.53	0.87
1:A:77:GLU:HG2	1:A:520:ARG:NH1	1.90	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:424:VAL:CG2	1:A:429:VAL:HG21	1.90	0.86
1:A:157:ALA:HA	1:A:161:PRO:CB	2.05	0.86
1:A:279:TRP:O	1:A:279:TRP:HE3	1.58	0.86
1:A:505:ASN:OD1	1:A:521:ILE:CD1	2.23	0.86
1:A:77:GLU:CG	1:A:518:MET:HE1	2.04	0.86
1:A:469:ILE:CG2	1:A:470:TRP:CE3	2.59	0.85
1:A:266:PHE:HZ	1:A:493:ASN:O	1.58	0.85
1:A:174:MET:HE3	1:A:504:PRO:CD	2.07	0.85
1:A:233:TYR:HD1	1:A:233:TYR:O	1.60	0.85
1:A:517:ASN:O	1:A:519:SER:N	2.10	0.85
1:A:111:LEU:CD2	1:A:112:VAL:N	2.37	0.85
1:A:99:ASP:CG	1:A:216:ARG:HH12	1.74	0.85
1:A:364:ALA:O	1:A:367:ASP:HB3	1.76	0.84
1:A:194:THR:CG2	1:A:195:LEU:H	1.83	0.84
1:A:378:TYR:O	1:A:397:ARG:HB3	1.76	0.84
1:A:53:PHE:CD1	1:A:59:VAL:CG1	2.61	0.84
1:A:38:VAL:O	1:A:38:VAL:HG22	1.76	0.84
1:A:365:GLN:CA	1:A:365:GLN:OE1	2.26	0.84
1:A:159:GLN:CB	1:A:160:PRO:CD	2.42	0.83
1:A:160:PRO:HB2	1:A:161:PRO:C	1.98	0.83
1:A:111:LEU:HD23	1:A:112:VAL:CA	2.09	0.83
1:A:197:PHE:CE2	1:A:465:PRO:HB2	2.13	0.83
1:A:343:TYR:OH	1:A:371:ALA:HB2	1.79	0.82
1:A:93:LYS:CE	1:A:227:GLY:O	2.26	0.82
1:A:313:ARG:O	1:A:325:ILE:HD12	1.79	0.82
1:A:429:VAL:HG12	1:A:431:LEU:HD11	1.60	0.82
1:A:465:PRO:HG3	1:A:571:ILE:HG22	1.60	0.82
1:A:233:TYR:O	1:A:233:TYR:CD1	2.32	0.82
1:A:382:ARG:HG2	1:A:382:ARG:NH1	1.89	0.81
1:A:340:ALA:HB1	1:A:341:PRO:HD2	1.62	0.81
1:A:359:ALA:CB	1:A:373:ASP:CB	2.44	0.81
1:A:53:PHE:CD1	1:A:59:VAL:HG12	2.15	0.81
1:A:118:GLY:HA3	1:A:197:PHE:CD2	2.16	0.81
1:A:576:SER:O	1:A:578:LEU:HD22	1.81	0.81
1:A:370:GLN:HE22	1:A:399:THR:HG21	1.44	0.81
1:A:193:GLU:CD	1:A:209:ARG:HH22	1.85	0.80
1:A:158:THR:CG2	1:A:158:THR:O	2.30	0.80
1:A:89:LYS:O	1:A:95:ASN:HB2	1.82	0.80
1:A:415:ILE:HD11	1:A:444:TYR:CD2	2.16	0.80
1:A:121:PHE:CE2	1:A:129:ILE:HD11	2.17	0.80
1:A:380:PHE:CD1	1:A:466:ASN:OD1	2.35	0.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:464:TYR:HA	1:A:465:PRO:O	1.82	0.80
1:A:415:ILE:CD1	1:A:444:TYR:CE2	2.64	0.80
1:A:340:ALA:HB3	1:A:357:ILE:HD11	1.63	0.80
1:A:193:GLU:OE1	1:A:209:ARG:NH2	2.16	0.79
1:A:578:LEU:H	1:A:578:LEU:HD23	1.45	0.79
1:A:278:THR:HG21	1:A:583:LEU:HD12	1.64	0.79
1:A:184:PRO:HD3	1:A:244:TYR:CE2	2.18	0.79
1:A:99:ASP:OD1	1:A:101:ILE:HG22	1.82	0.79
1:A:469:ILE:HG21	1:A:470:TRP:CE3	2.18	0.78
1:A:341:PRO:HB2	1:A:344:SER:OG	1.84	0.78
1:A:432:PRO:O	1:A:443:ASN:ND2	2.16	0.77
1:A:359:ALA:HB1	1:A:373:ASP:HB2	0.85	0.77
1:A:322:THR:HG21	1:A:420:PHE:CD2	2.19	0.77
1:A:471:ASP:O	1:A:472:LYS:O	2.01	0.77
1:A:469:ILE:HG22	1:A:470:TRP:HE3	1.50	0.77
1:A:361:ARG:NH1	1:A:401:ILE:O	2.18	0.77
1:A:279:TRP:O	1:A:279:TRP:CE3	2.38	0.77
1:A:73:MET:CE	1:A:520:ARG:HG3	2.15	0.76
1:A:86:ASN:ND2	1:A:100:ASP:HB2	1.99	0.76
1:A:77:GLU:CB	1:A:518:MET:HE2	2.16	0.76
1:A:77:GLU:CG	1:A:520:ARG:NH1	2.48	0.76
1:A:66:SER:HA	1:A:530:LYS:HA	1.67	0.76
1:A:429:VAL:HG12	1:A:431:LEU:HD12	1.67	0.76
1:A:122:ASN:ND2	1:A:125:ASP:OD2	2.18	0.76
1:A:576:SER:O	1:A:578:LEU:HD23	1.86	0.76
1:A:174:MET:CE	1:A:504:PRO:HD2	2.15	0.76
1:A:130:VAL:HG13	1:A:578:LEU:HD21	1.67	0.75
1:A:276:THR:O	1:A:577:GLN:NE2	2.19	0.75
1:A:96:MET:CE	1:A:220:PRO:CA	2.65	0.75
1:A:448:PHE:CE2	1:A:450:THR:CG2	2.70	0.75
1:A:413:ASP:O	1:A:414:TRP:HB3	1.87	0.75
1:A:68:LEU:HB2	1:A:528:TRP:CE3	2.22	0.75
1:A:146:PHE:HD2	1:A:147:ASN:HD22	1.32	0.74
1:A:564:ASN:O	1:A:567:GLY:N	2.18	0.74
1:A:415:ILE:CD1	1:A:444:TYR:CD2	2.70	0.74
1:A:69:VAL:HG13	1:A:205:PRO:HD3	1.68	0.74
1:A:139:VAL:HG12	1:A:140:SER:N	2.02	0.74
1:A:429:VAL:CG1	1:A:431:LEU:HD11	2.18	0.74
1:A:138:LEU:HD13	1:A:535:PHE:CE1	2.22	0.74
1:A:152:THR:HG23	1:A:521:ILE:HG22	1.69	0.74
1:A:77:GLU:HB2	1:A:518:MET:HE2	1.68	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:361:ARG:HH21	1:A:365:GLN:HE21	1.34	0.74
1:A:113:ASP:O	1:A:195:LEU:HD13	1.86	0.74
1:A:533:LEU:CD2	1:A:535:PHE:CZ	2.71	0.74
1:A:111:LEU:HD23	1:A:112:VAL:H	1.52	0.73
1:A:96:MET:HE1	1:A:220:PRO:CA	2.18	0.73
1:A:465:PRO:CG	1:A:571:ILE:HG22	2.19	0.73
1:A:424:VAL:HG22	1:A:429:VAL:CG2	1.93	0.73
1:A:444:TYR:O	1:A:448:PHE:HB2	1.89	0.73
1:A:511:ASP:OD2	1:A:513:ASP:C	2.27	0.73
1:A:533:LEU:HD21	1:A:535:PHE:HZ	1.53	0.72
1:A:174:MET:HE3	1:A:504:PRO:HD3	1.69	0.72
1:A:417:ASN:OD1	1:A:419:ASN:ND2	2.20	0.72
1:A:68:LEU:HD23	1:A:202:PRO:HB3	1.70	0.72
1:A:47:ASN:ND2	1:A:65:SER:HA	2.05	0.72
1:A:116:ALA:O	1:A:120:TRP:HD1	1.73	0.72
1:A:343:TYR:CE1	1:A:371:ALA:HB1	2.24	0.72
1:A:578:LEU:HD23	1:A:578:LEU:N	2.05	0.72
1:A:533:LEU:HD21	1:A:535:PHE:CZ	2.25	0.72
1:A:515:SER:O	1:A:516:ALA:C	2.28	0.72
1:A:390:THR:HG22	1:A:391:THR:N	2.04	0.72
1:A:464:TYR:C	1:A:464:TYR:CD1	2.64	0.71
1:A:343:TYR:OH	1:A:371:ALA:CB	2.38	0.71
1:A:121:PHE:CE2	1:A:129:ILE:CD1	2.73	0.71
1:A:422:LEU:HA	1:A:424:VAL:N	2.06	0.71
1:A:339:SER:HB2	1:A:450:THR:OG1	1.91	0.71
1:A:84:VAL:HG21	1:A:102:HIS:CE1	2.25	0.70
1:A:139:VAL:O	1:A:268:PHE:HD1	1.74	0.70
1:A:424:VAL:HG11	1:A:429:VAL:HG21	1.73	0.70
1:A:424:VAL:CG1	1:A:429:VAL:HG21	2.21	0.70
1:A:422:LEU:HA	1:A:423:PRO:C	2.11	0.70
1:A:217:THR:O	1:A:231:ASN:HA	1.90	0.70
1:A:84:VAL:O	1:A:101:ILE:HA	1.92	0.70
1:A:361:ARG:NH1	1:A:401:ILE:C	2.46	0.69
1:A:309:GLN:O	1:A:313:ARG:CG	2.38	0.69
1:A:518:MET:HG3	1:A:518:MET:O	1.92	0.69
1:A:158:THR:HG22	1:A:158:THR:O	1.92	0.69
1:A:283:ARG:HE	1:A:327:GLU:HB3	1.57	0.69
1:A:448:PHE:CE2	1:A:450:THR:HG23	2.28	0.69
1:A:409:TYR:CE1	1:A:411:GLU:HB2	2.27	0.69
1:A:322:THR:CG2	1:A:420:PHE:HD2	2.05	0.69
1:A:152:THR:HG23	1:A:521:ILE:CG2	2.22	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:77:GLU:HB3	1:A:518:MET:CE	2.22	0.69
1:A:103:VAL:HG12	1:A:212:PHE:HB3	1.73	0.69
1:A:361:ARG:HH21	1:A:365:GLN:NE2	1.91	0.69
1:A:49:THR:HG22	1:A:51:PHE:CE1	2.27	0.69
1:A:482:LEU:HD23	1:A:482:LEU:N	2.08	0.69
1:A:77:GLU:HG2	1:A:520:ARG:HH12	1.55	0.69
1:A:174:MET:HE3	1:A:504:PRO:HD2	1.73	0.69
1:A:93:LYS:O	1:A:221:SER:O	2.10	0.69
1:A:64:ASN:HA	1:A:531:GLY:O	1.93	0.69
1:A:378:TYR:CE2	1:A:463:VAL:HG11	2.27	0.68
1:A:266:PHE:HZ	1:A:493:ASN:C	1.95	0.68
1:A:111:LEU:HD23	1:A:112:VAL:C	2.12	0.68
1:A:109:TRP:CE3	1:A:501:LYS:HB2	2.29	0.68
1:A:157:ALA:CA	1:A:161:PRO:HB3	2.18	0.68
1:A:116:ALA:O	1:A:120:TRP:CD1	2.47	0.68
1:A:501:LYS:HG2	1:A:502:VAL:N	2.09	0.68
1:A:101:ILE:HG21	1:A:216:ARG:HD2	1.76	0.67
1:A:562:VAL:HG13	1:A:563:PRO:HD2	1.76	0.67
1:A:80:LYS:O	1:A:105:ILE:HG23	1.95	0.67
1:A:103:VAL:CG2	1:A:214:TRP:HB3	2.25	0.66
1:A:77:GLU:HB2	1:A:518:MET:HE3	1.65	0.66
1:A:409:TYR:C	1:A:411:GLU:H	1.99	0.66
1:A:65:SER:OG	1:A:67:ARG:NH2	2.23	0.66
1:A:431:LEU:HB3	1:A:432:PRO:CD	2.24	0.66
1:A:150:LEU:HD23	1:A:525:SER:HB3	0.70	0.65
1:A:96:MET:HE2	1:A:220:PRO:C	2.16	0.65
1:A:73:MET:CE	1:A:520:ARG:CG	2.75	0.65
1:A:96:MET:CE	1:A:220:PRO:C	2.62	0.65
1:A:121:PHE:HE2	1:A:129:ILE:HD11	1.58	0.65
1:A:150:LEU:HD21	1:A:525:SER:HB3	1.67	0.65
1:A:155:GLU:OE2	1:A:163:LYS:HE2	1.97	0.65
1:A:115:ASN:OD1	1:A:469:ILE:HB	1.97	0.65
1:A:361:ARG:HA	1:A:368:GLU:OE2	1.96	0.64
1:A:174:MET:CE	1:A:504:PRO:CD	2.72	0.64
1:A:469:ILE:HG22	1:A:470:TRP:CE3	2.27	0.64
1:A:313:ARG:O	1:A:325:ILE:CD1	2.43	0.64
1:A:403:HIS:CE1	1:A:575:LYS:HD2	2.32	0.64
1:A:414:TRP:HE1	1:A:416:GLN:NE2	1.95	0.64
1:A:431:LEU:HD12	1:A:431:LEU:N	2.13	0.64
1:A:99:ASP:CG	1:A:216:ARG:HH11	1.97	0.64
1:A:42:THR:CG2	1:A:260:GLU:HB2	2.28	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:414:TRP:HE1	1:A:416:GLN:HE21	1.46	0.63
1:A:53:PHE:CE1	1:A:59:VAL:HG11	2.33	0.63
1:A:109:TRP:CZ3	1:A:501:LYS:HB3	2.32	0.63
1:A:364:ALA:O	1:A:367:ASP:CB	2.45	0.63
1:A:158:THR:C	1:A:159:GLN:HG2	2.18	0.63
1:A:430:LEU:HD11	1:A:436:ILE:HD11	1.79	0.63
1:A:452:GLY:C	1:A:454:LEU:H	2.00	0.63
1:A:203:THR:OG1	1:A:204:ILE:N	2.32	0.63
1:A:564:ASN:O	1:A:566:ILE:N	2.32	0.63
1:A:103:VAL:HG23	1:A:214:TRP:CB	2.29	0.63
1:A:469:ILE:HG21	1:A:470:TRP:HE3	1.56	0.63
1:A:533:LEU:HG	1:A:535:PHE:CE2	2.33	0.62
1:A:49:THR:HG22	1:A:51:PHE:HE1	1.64	0.62
1:A:564:ASN:ND2	1:A:566:ILE:H	1.97	0.62
1:A:245:THR:O	1:A:249:SER:OG	2.16	0.62
1:A:180:ASN:O	1:A:181:ASN:C	2.37	0.62
1:A:548:ILE:HG23	1:A:580:PRO:HD2	1.80	0.62
1:A:385:GLY:O	1:A:386:GLN:O	2.17	0.62
1:A:557:ASN:HB3	1:A:561:TYR:HE2	1.64	0.62
1:A:107:THR:OG1	1:A:208:TRP:HB3	1.99	0.62
1:A:508:ASN:ND2	1:A:509:GLN:HG3	2.15	0.62
1:A:390:THR:CG2	1:A:391:THR:N	2.62	0.62
1:A:93:LYS:O	1:A:222:HIS:O	2.18	0.62
1:A:158:THR:C	1:A:160:PRO:HD2	2.16	0.62
1:A:396:GLU:HG3	1:A:397:ARG:N	2.14	0.62
1:A:443:ASN:HB3	1:A:445:THR:H	1.65	0.61
1:A:500:VAL:HG11	1:A:527:PHE:CZ	2.35	0.61
1:A:465:PRO:CG	1:A:571:ILE:CG2	2.68	0.61
1:A:292:ASN:HB2	1:A:306:ILE:O	2.00	0.61
1:A:138:LEU:CD1	1:A:535:PHE:CE1	2.83	0.61
1:A:359:ALA:HB2	1:A:373:ASP:CA	2.31	0.61
1:A:505:ASN:O	1:A:520:ARG:HB2	2.01	0.61
1:A:77:GLU:CB	1:A:518:MET:HE1	2.25	0.61
1:A:533:LEU:CD2	1:A:535:PHE:HZ	2.11	0.61
1:A:482:LEU:HD23	1:A:482:LEU:H	1.66	0.60
1:A:266:PHE:CZ	1:A:493:ASN:O	2.48	0.60
1:A:459:ASN:HA	1:A:482:LEU:HD12	1.83	0.60
1:A:219:ILE:HG13	1:A:230:THR:CB	2.28	0.60
1:A:197:PHE:HE2	1:A:465:PRO:CB	2.11	0.60
1:A:317:THR:HG23	1:A:329:THR:HG22	1.84	0.60
1:A:578:LEU:O	1:A:578:LEU:HG	2.01	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:343:TYR:CZ	1:A:371:ALA:HB1	2.37	0.59
1:A:96:MET:CE	1:A:220:PRO:HA	2.31	0.59
1:A:390:THR:CG2	1:A:391:THR:H	2.14	0.59
1:A:409:TYR:O	1:A:411:GLU:N	2.35	0.59
1:A:361:ARG:CZ	1:A:401:ILE:CG2	2.64	0.59
1:A:326:THR:H	1:A:329:THR:HB	1.65	0.59
1:A:322:THR:HG22	1:A:420:PHE:HD2	1.67	0.59
1:A:84:VAL:O	1:A:101:ILE:HG13	2.01	0.59
1:A:299:GLY:C	1:A:301:THR:H	2.06	0.59
1:A:174:MET:CE	1:A:503:ALA:HA	2.25	0.59
1:A:417:ASN:HB2	1:A:428:ASN:HD22	1.68	0.59
1:A:369:ASN:OD1	1:A:410:PRO:HG2	2.03	0.59
1:A:103:VAL:HG23	1:A:214:TRP:HB3	1.84	0.59
1:A:470:TRP:HA	1:A:488:PHE:O	2.02	0.59
1:A:222:HIS:CE1	1:A:225:THR:N	2.71	0.58
1:A:368:GLU:HG2	1:A:369:ASN:H	1.67	0.58
1:A:160:PRO:HG2	1:A:162:THR:OG1	2.04	0.58
1:A:369:ASN:HB3	1:A:372:ALA:HB3	1.84	0.58
1:A:377:ARG:CZ	1:A:397:ARG:HG3	2.32	0.58
1:A:279:TRP:C	1:A:279:TRP:CE3	2.76	0.58
1:A:73:MET:HE3	1:A:520:ARG:HE	1.68	0.58
1:A:213:GLN:OE1	1:A:237:ASP:CB	2.46	0.58
1:A:111:LEU:O	1:A:205:PRO:CB	2.52	0.58
1:A:324:TYR:O	1:A:329:THR:HG21	2.04	0.58
1:A:448:PHE:CE2	1:A:450:THR:HG21	2.37	0.58
1:A:96:MET:HE1	1:A:220:PRO:HB2	1.82	0.58
1:A:511:ASP:C	1:A:513:ASP:H	2.06	0.58
1:A:160:PRO:CB	1:A:161:PRO:C	2.65	0.58
1:A:152:THR:CG2	1:A:521:ILE:CG2	2.81	0.58
1:A:73:MET:HE1	1:A:520:ARG:HG3	1.86	0.58
1:A:471:ASP:C	1:A:472:LYS:O	2.42	0.58
1:A:361:ARG:HG3	1:A:368:GLU:OE2	2.04	0.57
1:A:184:PRO:HD3	1:A:244:TYR:CD2	2.38	0.57
1:A:183:MET:HG2	1:A:208:TRP:HH2	1.68	0.57
1:A:560:ASN:OD1	1:A:572:VAL:HG21	2.03	0.57
1:A:361:ARG:HH11	1:A:401:ILE:CG2	1.91	0.57
1:A:390:THR:HG22	1:A:391:THR:H	1.70	0.57
1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CD1	2.66	0.57
1:A:447:ILE:O	1:A:447:ILE:HG22	2.05	0.57
1:A:38:VAL:O	1:A:38:VAL:HG23	2.02	0.57
1:A:295:PRO:HB3	1:A:302:ASN:HB3	1.87	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:188:ALA:HB1	1:A:193:GLU:O	2.05	0.57
1:A:111:LEU:O	1:A:205:PRO:HB3	2.04	0.57
1:A:538:LYS:HG3	1:A:539:LEU:N	2.20	0.57
1:A:115:ASN:ND2	1:A:470:TRP:O	2.30	0.57
1:A:140:SER:H	1:A:534:VAL:HB	1.70	0.57
1:A:47:ASN:HD22	1:A:66:SER:H	1.53	0.56
1:A:232:VAL:HG23	1:A:233:TYR:N	2.21	0.56
1:A:198:TYR:OH	1:A:570:LYS:HA	2.06	0.56
1:A:250:VAL:HG13	1:A:251:PRO:HD2	1.85	0.56
1:A:219:ILE:CG1	1:A:230:THR:HB	2.29	0.56
1:A:109:TRP:CE3	1:A:501:LYS:CB	2.89	0.56
1:A:213:GLN:O	1:A:236:THR:HG23	2.05	0.56
1:A:515:SER:O	1:A:516:ALA:O	2.23	0.56
1:A:461:PRO:HB3	1:A:577:GLN:OE1	2.06	0.56
1:A:77:GLU:CG	1:A:520:ARG:HH11	2.17	0.56
1:A:301:THR:HG22	1:A:301:THR:O	2.06	0.56
1:A:68:LEU:HB2	1:A:528:TRP:CZ3	2.41	0.56
1:A:86:ASN:ND2	1:A:100:ASP:H	2.04	0.56
1:A:511:ASP:OD2	1:A:513:ASP:HB2	2.07	0.56
1:A:42:THR:HG22	1:A:260:GLU:HB2	1.87	0.56
1:A:110:SER:HB2	1:A:500:VAL:O	2.05	0.56
1:A:54:LEU:HD13	1:A:54:LEU:N	2.20	0.56
1:A:75:GLU:O	1:A:520:ARG:NH2	2.39	0.55
1:A:361:ARG:NH1	1:A:401:ILE:CB	2.68	0.55
1:A:53:PHE:CE1	1:A:59:VAL:CG1	2.89	0.55
1:A:118:GLY:CA	1:A:465:PRO:HB3	2.36	0.55
1:A:548:ILE:HG23	1:A:580:PRO:CD	2.37	0.55
1:A:111:LEU:CD2	1:A:112:VAL:C	2.75	0.55
1:A:415:ILE:HD12	1:A:444:TYR:CD2	2.41	0.55
1:A:354:LYS:HD2	1:A:355:THR:N	2.21	0.55
1:A:369:ASN:C	1:A:371:ALA:H	1.97	0.54
1:A:565:ASN:HD21	1:A:566:ILE:HG13	1.70	0.54
1:A:103:VAL:CG2	1:A:214:TRP:CB	2.85	0.54
1:A:426:ASN:C	1:A:428:ASN:H	2.09	0.54
1:A:511:ASP:OD2	1:A:513:ASP:CA	2.55	0.54
1:A:366:THR:O	1:A:366:THR:HG22	2.07	0.54
1:A:133:MET:SD	1:A:539:LEU:HD23	2.47	0.54
1:A:409:TYR:CE1	1:A:411:GLU:CB	2.90	0.54
1:A:194:THR:HB	1:A:384:HIS:CE1	2.42	0.54
1:A:86:ASN:HD21	1:A:100:ASP:H	1.54	0.54
1:A:472:LYS:HG2	1:A:473:GLU:H	1.72	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:482:LEU:N	1:A:482:LEU:CD2	2.71	0.54
1:A:47:ASN:HA	1:A:64:ASN:O	2.07	0.54
1:A:501:LYS:CG	1:A:502:VAL:N	2.71	0.54
1:A:52:LYS:O	1:A:54:LEU:HD13	2.08	0.54
1:A:73:MET:HE1	1:A:520:ARG:CG	2.37	0.54
1:A:216:ARG:HG2	1:A:232:VAL:O	2.08	0.54
1:A:578:LEU:CD2	1:A:578:LEU:N	2.71	0.54
1:A:139:VAL:O	1:A:268:PHE:CD1	2.59	0.54
1:A:551:MET:HE3	1:A:574:GLU:OE1	2.07	0.54
1:A:340:ALA:HB1	1:A:341:PRO:CD	2.35	0.53
1:A:62:THR:HG21	1:A:532:LYS:HE3	1.88	0.53
1:A:341:PRO:HB2	1:A:344:SER:CB	2.38	0.53
1:A:103:VAL:CG1	1:A:212:PHE:HB3	2.38	0.53
1:A:278:THR:CG2	1:A:583:LEU:HD12	2.35	0.53
1:A:118:GLY:HA3	1:A:465:PRO:HB3	1.91	0.53
1:A:52:LYS:HG2	1:A:52:LYS:O	2.08	0.53
1:A:89:LYS:O	1:A:95:ASN:CB	2.55	0.53
1:A:110:SER:O	1:A:500:VAL:O	2.27	0.53
1:A:339:SER:O	1:A:449:ASN:HA	2.09	0.53
1:A:150:LEU:HD21	1:A:525:SER:CB	2.29	0.52
1:A:77:GLU:OE2	1:A:520:ARG:NH1	2.43	0.52
1:A:459:ASN:HD22	1:A:482:LEU:HB2	1.74	0.52
1:A:119:VAL:O	1:A:119:VAL:HG12	2.08	0.52
1:A:343:TYR:CZ	1:A:371:ALA:CB	2.92	0.52
1:A:276:THR:HG23	1:A:579:ALA:O	2.09	0.52
1:A:400:TYR:OH	1:A:575:LYS:HA	2.09	0.52
1:A:96:MET:HE2	1:A:220:PRO:HA	1.92	0.52
1:A:193:GLU:HB3	1:A:206:THR:HG22	1.86	0.52
1:A:247:GLU:CD	1:A:247:GLU:H	2.13	0.52
1:A:382:ARG:NH1	1:A:382:ARG:CG	2.67	0.52
1:A:432:PRO:HA	1:A:443:ASN:ND2	2.24	0.52
1:A:381:GLY:CA	1:A:386:GLN:NE2	2.64	0.52
1:A:326:THR:HG22	1:A:327:GLU:N	2.25	0.52
1:A:422:LEU:HB2	1:A:423:PRO:HA	1.91	0.52
1:A:197:PHE:CE2	1:A:465:PRO:CB	2.89	0.52
1:A:426:ASN:O	1:A:428:ASN:N	2.43	0.52
1:A:468:GLN:OE1	1:A:471:ASP:HB2	2.10	0.52
1:A:562:VAL:CG1	1:A:563:PRO:HD2	2.40	0.51
1:A:93:LYS:O	1:A:222:HIS:C	2.49	0.51
1:A:443:ASN:CB	1:A:445:THR:OG1	2.58	0.51
1:A:158:THR:H	1:A:161:PRO:HB3	1.76	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:101:ILE:HG23	1:A:101:ILE:O	2.10	0.51
1:A:452:GLY:C	1:A:454:LEU:N	2.64	0.51
1:A:557:ASN:O	1:A:560:ASN:HB2	2.11	0.51
1:A:222:HIS:CD2	1:A:225:THR:OG1	2.64	0.51
1:A:224:GLY:O	1:A:225:THR:C	2.49	0.51
1:A:308:VAL:HG12	1:A:309:GLN:N	2.26	0.51
1:A:484:ILE:CG2	1:A:484:ILE:O	2.56	0.51
1:A:96:MET:HE2	1:A:220:PRO:CA	2.38	0.51
1:A:361:ARG:NH2	1:A:365:GLN:NE2	2.59	0.51
1:A:516:ALA:CA	1:A:517:ASN:HD22	2.23	0.51
1:A:67:ARG:N	1:A:529:TRP:O	2.44	0.50
1:A:111:LEU:CD2	1:A:112:VAL:H	2.14	0.50
1:A:45:PHE:HE1	1:A:47:ASN:HB2	1.76	0.50
1:A:511:ASP:OD2	1:A:513:ASP:CB	2.59	0.50
1:A:198:TYR:CE1	1:A:571:ILE:HG13	2.46	0.50
1:A:122:ASN:HB2	1:A:123:PRO:HD2	1.93	0.50
1:A:511:ASP:C	1:A:513:ASP:N	2.64	0.50
1:A:359:ALA:HB2	1:A:373:ASP:HA	1.92	0.50
1:A:360:GLY:O	1:A:373:ASP:OD2	2.30	0.50
1:A:564:ASN:HD22	1:A:566:ILE:H	1.60	0.50
1:A:233:TYR:CE1	1:A:235:GLY:HA2	2.47	0.50
1:A:266:PHE:CE1	1:A:495:PRO:HD3	2.47	0.50
1:A:554:ASN:HB2	1:A:557:ASN:HD22	1.77	0.50
1:A:113:ASP:OD2	1:A:188:ALA:N	2.43	0.50
1:A:282:ASN:O	1:A:332:ARG:NE	2.45	0.50
1:A:139:VAL:CG1	1:A:140:SER:N	2.69	0.50
1:A:73:MET:HE3	1:A:520:ARG:CG	2.41	0.49
1:A:216:ARG:HG2	1:A:217:THR:H	1.77	0.49
1:A:378:TYR:O	1:A:397:ARG:HB2	2.11	0.49
1:A:73:MET:HB2	1:A:523:THR:O	2.12	0.49
1:A:158:THR:HG23	1:A:158:THR:O	2.10	0.49
1:A:484:ILE:HG23	1:A:484:ILE:O	2.13	0.49
1:A:383:GLN:HB3	1:A:384:HIS:CD2	2.47	0.49
1:A:183:MET:HG2	1:A:208:TRP:CH2	2.48	0.49
1:A:42:THR:HG21	1:A:260:GLU:HB2	1.95	0.49
1:A:313:ARG:C	1:A:325:ILE:HD12	2.32	0.49
1:A:326:THR:O	1:A:330:ILE:HG13	2.13	0.49
1:A:364:ALA:HB3	1:A:367:ASP:CB	2.42	0.49
1:A:463:VAL:O	1:A:465:PRO:O	2.31	0.48
1:A:213:GLN:HG3	1:A:240:ASP:HB2	1.94	0.48
1:A:216:ARG:CG	1:A:232:VAL:O	2.62	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:96:MET:HE1	1:A:220:PRO:C	2.28	0.48
1:A:381:GLY:O	1:A:383:GLN:N	2.37	0.48
1:A:109:TRP:CG	1:A:246:ILE:HD12	2.48	0.48
1:A:435:PRO:HB3	1:A:439:LYS:O	2.12	0.48
1:A:136:LEU:HD12	1:A:537:ALA:HB2	1.94	0.48
1:A:219:ILE:HG22	1:A:220:PRO:HD2	1.95	0.48
1:A:430:LEU:HD21	1:A:436:ILE:HD11	1.96	0.48
1:A:93:LYS:HE2	1:A:227:GLY:O	2.10	0.48
1:A:65:SER:O	1:A:529:TRP:CZ3	2.67	0.48
1:A:96:MET:CE	1:A:220:PRO:CB	2.84	0.48
1:A:442:ILE:HG22	1:A:443:ASN:N	2.29	0.48
1:A:472:LYS:HG2	1:A:473:GLU:N	2.29	0.48
1:A:368:GLU:HG2	1:A:369:ASN:N	2.28	0.47
1:A:377:ARG:NE	1:A:397:ARG:HG3	2.29	0.47
1:A:111:LEU:CG	1:A:112:VAL:N	2.77	0.47
1:A:432:PRO:HA	1:A:443:ASN:HD22	1.79	0.47
1:A:341:PRO:CB	1:A:344:SER:OG	2.57	0.47
1:A:410:PRO:HA	1:A:413:ASP:OD1	2.14	0.47
1:A:422:LEU:CA	1:A:423:PRO:C	2.81	0.47
1:A:109:TRP:HZ3	1:A:174:MET:O	1.98	0.47
1:A:126:TRP:O	1:A:130:VAL:HB	2.13	0.47
1:A:233:TYR:CD1	1:A:233:TYR:C	2.87	0.47
1:A:361:ARG:HE	1:A:365:GLN:HE22	1.61	0.47
1:A:540:ARG:O	1:A:540:ARG:HG3	2.15	0.47
1:A:342:TYR:CE1	1:A:446:ASN:HA	2.50	0.47
1:A:469:ILE:HG22	1:A:470:TRP:N	2.29	0.47
1:A:243:PHE:CD1	1:A:243:PHE:C	2.86	0.47
1:A:221:SER:CB	1:A:229:PRO:HG3	2.45	0.46
1:A:73:MET:HE3	1:A:520:ARG:CD	2.45	0.46
1:A:380:PHE:CE1	1:A:398:PHE:CE1	3.04	0.46
1:A:572:VAL:HG12	1:A:573:TYR:O	2.15	0.46
1:A:361:ARG:HH11	1:A:401:ILE:C	2.16	0.46
1:A:518:MET:O	1:A:519:SER:C	2.54	0.46
1:A:158:THR:N	1:A:161:PRO:HB3	2.31	0.46
1:A:420:PHE:O	1:A:421:ASN:C	2.53	0.46
1:A:409:TYR:C	1:A:411:GLU:N	2.67	0.46
1:A:494:CYS:HB3	1:A:495:PRO:HD2	1.98	0.46
1:A:283:ARG:HD2	1:A:327:GLU:O	2.15	0.46
1:A:75:GLU:C	1:A:520:ARG:HH22	2.19	0.46
1:A:364:ALA:C	1:A:367:ASP:HB3	2.34	0.46
1:A:222:HIS:CE1	1:A:225:THR:H	2.34	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:552:SER:OG	1:A:553:ILE:N	2.49	0.46
1:A:408:ARG:O	1:A:410:PRO:HD3	2.16	0.46
1:A:151:LYS:HE2	1:A:167:ASN:OD1	2.16	0.46
1:A:111:LEU:HD23	1:A:111:LEU:C	2.27	0.45
1:A:400:TYR:CE1	1:A:575:LYS:HA	2.52	0.45
1:A:177:LEU:CD1	1:A:179:SER:OG	2.64	0.45
1:A:466:ASN:O	1:A:467:GLY:C	2.53	0.45
1:A:426:ASN:C	1:A:428:ASN:N	2.69	0.45
1:A:67:ARG:NH1	1:A:196:GLY:O	2.50	0.45
1:A:443:ASN:HB3	1:A:445:THR:OG1	2.17	0.45
1:A:216:ARG:HG2	1:A:217:THR:N	2.32	0.45
1:A:342:TYR:CD1	1:A:342:TYR:N	2.85	0.45
1:A:459:ASN:CG	1:A:460:VAL:N	2.70	0.45
1:A:368:GLU:CG	1:A:369:ASN:H	2.30	0.45
1:A:109:TRP:CD1	1:A:246:ILE:HD12	2.51	0.45
1:A:103:VAL:HG23	1:A:214:TRP:HB2	1.98	0.45
1:A:120:TRP:CD1	1:A:469:ILE:HD11	2.52	0.45
1:A:347:ALA:HB2	1:A:352:PRO:HA	1.98	0.45
1:A:77:GLU:CD	1:A:520:ARG:NH1	2.71	0.44
1:A:191:ARG:O	1:A:193:GLU:HG3	2.17	0.44
1:A:45:PHE:CD1	1:A:46:ASN:N	2.86	0.44
1:A:231:ASN:CG	1:A:231:ASN:O	2.55	0.44
1:A:471:ASP:O	1:A:472:LYS:C	2.55	0.44
1:A:533:LEU:CD2	1:A:535:PHE:CE2	2.99	0.44
1:A:431:LEU:CD1	1:A:431:LEU:N	2.79	0.44
1:A:160:PRO:CG	1:A:161:PRO:C	2.86	0.44
1:A:174:MET:HE3	1:A:503:ALA:CA	2.28	0.44
1:A:138:LEU:HD11	1:A:533:LEU:HD11	1.98	0.44
1:A:160:PRO:HG2	1:A:161:PRO:C	2.37	0.44
1:A:221:SER:HB3	1:A:229:PRO:HG3	1.99	0.44
1:A:93:LYS:C	1:A:221:SER:O	2.55	0.44
1:A:174:MET:CE	1:A:504:PRO:HD3	2.43	0.44
1:A:286:GLY:O	1:A:288:PRO:HD3	2.17	0.44
1:A:416:GLN:CB	1:A:429:VAL:HG22	2.35	0.44
1:A:266:PHE:CZ	1:A:493:ASN:C	2.83	0.44
1:A:361:ARG:NE	1:A:365:GLN:HE22	2.16	0.44
1:A:369:ASN:HB3	1:A:372:ALA:CB	2.48	0.44
1:A:538:LYS:HG3	1:A:539:LEU:H	1.81	0.44
1:A:474:PHE:N	1:A:474:PHE:CD1	2.85	0.44
1:A:369:ASN:C	1:A:371:ALA:N	2.61	0.44
1:A:158:THR:O	1:A:159:GLN:CB	2.65	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:419:ASN:O	1:A:421:ASN:N	2.50	0.44
1:A:551:MET:CE	1:A:574:GLU:OE1	2.66	0.44
1:A:266:PHE:CZ	1:A:494:CYS:HA	2.53	0.43
1:A:338:TYR:CE1	1:A:357:ILE:HD13	2.53	0.43
1:A:140:SER:HB2	1:A:534:VAL:CG2	2.47	0.43
1:A:409:TYR:CD1	1:A:411:GLU:HB2	2.54	0.43
1:A:448:PHE:CZ	1:A:450:THR:CG2	3.01	0.43
1:A:383:GLN:HG2	1:A:383:GLN:O	2.18	0.43
1:A:325:ILE:HG23	1:A:330:ILE:HG12	2.00	0.43
1:A:255:LEU:HB3	1:A:259:ASP:HB2	2.01	0.43
1:A:317:THR:HG22	1:A:318:GLN:N	2.34	0.43
1:A:517:ASN:O	1:A:518:MET:C	2.56	0.43
1:A:572:VAL:HG12	1:A:573:TYR:N	2.34	0.43
1:A:177:LEU:HD22	1:A:178:ASP:N	2.33	0.43
1:A:105:ILE:HD11	1:A:212:PHE:CD2	2.53	0.43
1:A:283:ARG:NE	1:A:327:GLU:HB3	2.28	0.43
1:A:266:PHE:CZ	1:A:494:CYS:CA	3.01	0.43
1:A:510:TYR:HE1	1:A:518:MET:HB3	1.84	0.43
1:A:68:LEU:HB2	1:A:528:TRP:CD2	2.54	0.43
1:A:71:LEU:HD21	1:A:502:VAL:HG23	2.01	0.43
1:A:118:GLY:CA	1:A:197:PHE:CD2	2.96	0.43
1:A:62:THR:CG2	1:A:532:LYS:HE3	2.48	0.43
1:A:368:GLU:OE1	1:A:375:ASP:OD2	2.37	0.42
1:A:378:TYR:O	1:A:397:ARG:CA	2.66	0.42
1:A:138:LEU:HD13	1:A:535:PHE:HE1	1.77	0.42
1:A:219:ILE:CD1	1:A:230:THR:HB	2.50	0.42
1:A:77:GLU:HG3	1:A:518:MET:HE1	1.67	0.42
1:A:158:THR:HG23	1:A:159:GLN:HG2	2.01	0.42
1:A:111:LEU:CG	1:A:112:VAL:H	2.32	0.42
1:A:71:LEU:HD12	1:A:72:ASN:N	2.35	0.42
1:A:110:SER:O	1:A:500:VAL:N	2.50	0.42
1:A:212:PHE:HE1	1:A:236:THR:HG21	1.85	0.42
1:A:45:PHE:CD1	1:A:45:PHE:C	2.92	0.42
1:A:45:PHE:HD1	1:A:46:ASN:N	2.17	0.42
1:A:265:THR:HG21	1:A:267:PHE:CZ	2.54	0.42
1:A:425:THR:O	1:A:428:ASN:HB2	2.20	0.42
1:A:184:PRO:O	1:A:497:GLN:NE2	2.53	0.42
1:A:557:ASN:O	1:A:558:GLN:C	2.57	0.42
1:A:545:TRP:C	1:A:545:TRP:CD1	2.92	0.42
1:A:86:ASN:C	1:A:88:ASP:H	2.23	0.42
1:A:562:VAL:HG12	1:A:563:PRO:O	2.20	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:101:ILE:HD11	1:A:233:TYR:HB2	2.01	0.41
1:A:380:PHE:HE1	1:A:398:PHE:CE1	2.38	0.41
1:A:53:PHE:HD1	1:A:59:VAL:CG1	2.25	0.41
1:A:121:PHE:CE2	1:A:129:ILE:HD12	2.55	0.41
1:A:162:THR:HG22	1:A:163:LYS:N	2.35	0.41
1:A:173:LEU:HD23	1:A:175:VAL:HG23	2.02	0.41
1:A:73:MET:SD	1:A:520:ARG:HG3	2.60	0.41
1:A:359:ALA:HB2	1:A:373:ASP:C	2.34	0.41
1:A:308:VAL:CG1	1:A:309:GLN:N	2.84	0.41
1:A:361:ARG:CZ	1:A:402:ALA:O	2.65	0.41
1:A:440:THR:O	1:A:442:ILE:N	2.53	0.41
1:A:44:THR:HG22	1:A:45:PHE:N	2.35	0.41
1:A:84:VAL:CG1	1:A:100:ASP:O	2.68	0.41
1:A:465:PRO:HB2	1:A:466:ASN:H	1.64	0.41
1:A:197:PHE:HB3	1:A:571:ILE:HD12	2.02	0.41
1:A:250:VAL:CG1	1:A:251:PRO:HD2	2.51	0.41
1:A:346:GLU:O	1:A:352:PRO:HA	2.21	0.41
1:A:61:ILE:N	1:A:535:PHE:O	2.52	0.41
1:A:160:PRO:CG	1:A:161:PRO:O	2.62	0.41
1:A:564:ASN:C	1:A:566:ILE:N	2.74	0.41
1:A:47:ASN:HD22	1:A:66:SER:N	2.17	0.41
1:A:237:ASP:HB3	1:A:240:ASP:OD1	2.21	0.41
1:A:68:LEU:HD13	1:A:528:TRP:CE2	2.56	0.41
1:A:299:GLY:C	1:A:301:THR:N	2.73	0.41
1:A:54:LEU:HB3	1:A:55:GLU:H	1.76	0.41
1:A:196:GLY:HA2	1:A:383:GLN:HG2	2.01	0.41
1:A:326:THR:HG22	1:A:327:GLU:H	1.86	0.41
1:A:126:TRP:NE1	1:A:130:VAL:HG21	2.36	0.41
1:A:452:GLY:O	1:A:454:LEU:N	2.54	0.41
1:A:54:LEU:HB2	1:A:58:TRP:O	2.21	0.41
1:A:380:PHE:CE1	1:A:398:PHE:HE1	2.40	0.40
1:A:555:VAL:O	1:A:555:VAL:HG12	2.21	0.40
1:A:317:THR:HG23	1:A:329:THR:CG2	2.51	0.40
1:A:533:LEU:CG	1:A:535:PHE:CE2	3.02	0.40
1:A:75:GLU:C	1:A:520:ARG:NH2	2.75	0.40
1:A:571:ILE:HG21	1:A:571:ILE:HD13	1.85	0.40
1:A:408:ARG:C	1:A:410:PRO:HD3	2.42	0.40
1:A:517:ASN:HD22	1:A:517:ASN:N	2.14	0.40
1:A:66:SER:HA	1:A:529:TRP:O	2.22	0.40
1:A:464:TYR:CD1	1:A:465:PRO:N	2.89	0.40
1:A:213:GLN:HB2	1:A:240:ASP:O	2.22	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:187:PRO:HB2	1:A:468:GLN:NE2	2.36	0.40

There are no symmetry-related clashes.

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	546/584 (94%)	448 (82%)	65 (12%)	33 (6%)	2	15

All (33) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	159	GLN
1	A	370	GLN
1	A	386	GLN
1	A	402	ALA
1	A	465	PRO
1	A	466	ASN
1	A	467	GLY
1	A	472	LYS
1	A	516	ALA
1	A	518	MET
1	A	558	GLN
1	A	565	ASN
1	A	38	VAL
1	A	157	ALA
1	A	181	ASN
1	A	229	PRO
1	A	343	TYR
1	A	374	GLY
1	A	382	ARG
1	A	421	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	427	ASP
1	A	522	VAL
1	A	221	SER
1	A	414	TRP
1	A	441	GLY
1	A	426	ASN
1	A	230	THR
1	A	300	ALA
1	A	362	GLY
1	A	410	PRO
1	A	517	ASN
1	A	453	PRO
1	A	94	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	477/496 (96%)	412 (86%)	65 (14%)	5 21

All (65) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	38	VAL
1	A	41	SER
1	A	42	THR
1	A	45	PHE
1	A	48	GLN
1	A	54	LEU
1	A	65	SER
1	A	66	SER
1	A	67	ARG
1	A	68	LEU
1	A	78	ASN
1	A	85	ASN
1	A	87	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	96	MET
1	A	130	VAL
1	A	158	THR
1	A	170	THR
1	A	173	LEU
1	A	177	LEU
1	A	179	SER
1	A	180	ASN
1	A	182	THR
1	A	183	MET
1	A	191	ARG
1	A	203	THR
1	A	208	TRP
1	A	213	GLN
1	A	215	ASP
1	A	219	ILE
1	A	228	THR
1	A	231	ASN
1	A	232	VAL
1	A	233	TYR
1	A	240	ASP
1	A	243	PHE
1	A	249	SER
1	A	255	LEU
1	A	263	THR
1	A	342	TYR
1	A	344	SER
1	A	361	ARG
1	A	365	GLN
1	A	369	ASN
1	A	382	ARG
1	A	387	LYS
1	A	396	GLU
1	A	397	ARG
1	A	404	GLN
1	A	417	ASN
1	A	420	PHE
1	A	421	ASN
1	A	422	LEU
1	A	464	TYR
1	A	482	LEU
1	A	484	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	490	CYS
1	A	491	GLN
1	A	493	ASN
1	A	517	ASN
1	A	520	ARG
1	A	560	ASN
1	A	564	ASN
1	A	578	LEU
1	A	581	ARG
1	A	582	LYS

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (27) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	47	ASN
1	A	48	GLN
1	A	64	ASN
1	A	70	HIS
1	A	85	ASN
1	A	86	ASN
1	A	95	ASN
1	A	102	HIS
1	A	122	ASN
1	A	147	ASN
1	A	180	ASN
1	A	282	ASN
1	A	292	ASN
1	A	370	GLN
1	A	384	HIS
1	A	386	GLN
1	A	403	HIS
1	A	428	ASN
1	A	443	ASN
1	A	491	GLN
1	A	493	ASN
1	A	508	ASN
1	A	517	ASN
1	A	549	GLN
1	A	554	ASN
1	A	557	ASN
1	A	565	ASN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data

6.1 Protein, DNA and RNA chains

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

6.2 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

6.3 Carbohydrates

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

6.4 Ligands

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

6.5 Other polymers

EDS was not executed - this section will therefore be empty.