



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Jan 30, 2017 – 05:16 PM EST

PDB ID : 1JKY  
Title : Crystal Structure of the Anthrax Lethal Factor (LF): Wild-type LF Complexed with the N-terminal Sequence of MAPKK2  
Authors : Pannifer, A.D.; Wong, T.Y.; Schwarzenbacher, R.; Renatus, M.; Petosa, C.; Collier, R.J.; Bienkowska, J.; Lacy, D.B.; Park, S.; Leppla, S.H.; Hanna, P.; Liddington, R.C.  
Deposited on : 2001-07-13  
Resolution : 3.90 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](mailto: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	:	unknown
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)	:	rb-20028442

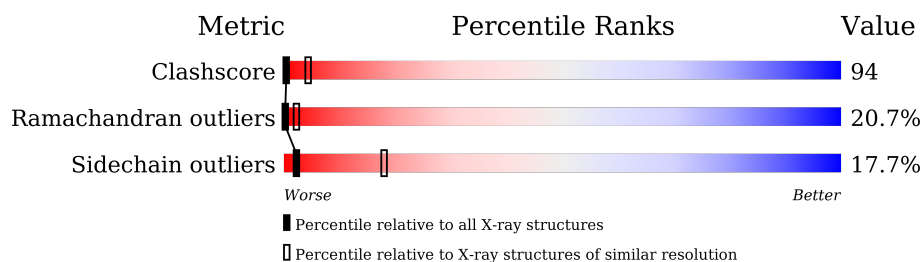
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*X-RAY DIFFRACTION*

The reported resolution of this entry is 3.90 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	1031 (4.24-3.56)
Ramachandran outliers	100387	1012 (4.26-3.54)
Sidechain outliers	100360	1004 (4.26-3.54)

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  $\geq 3$ , 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	776	
2	B	16	

## 2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 5734 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 Lethal Factor.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	748	Total	C	N	O	S	0	0	0
			5614	3526	953	1128	7			

- Molecule 2 is a protein called mitogen-activated protein kinase kinase 2.

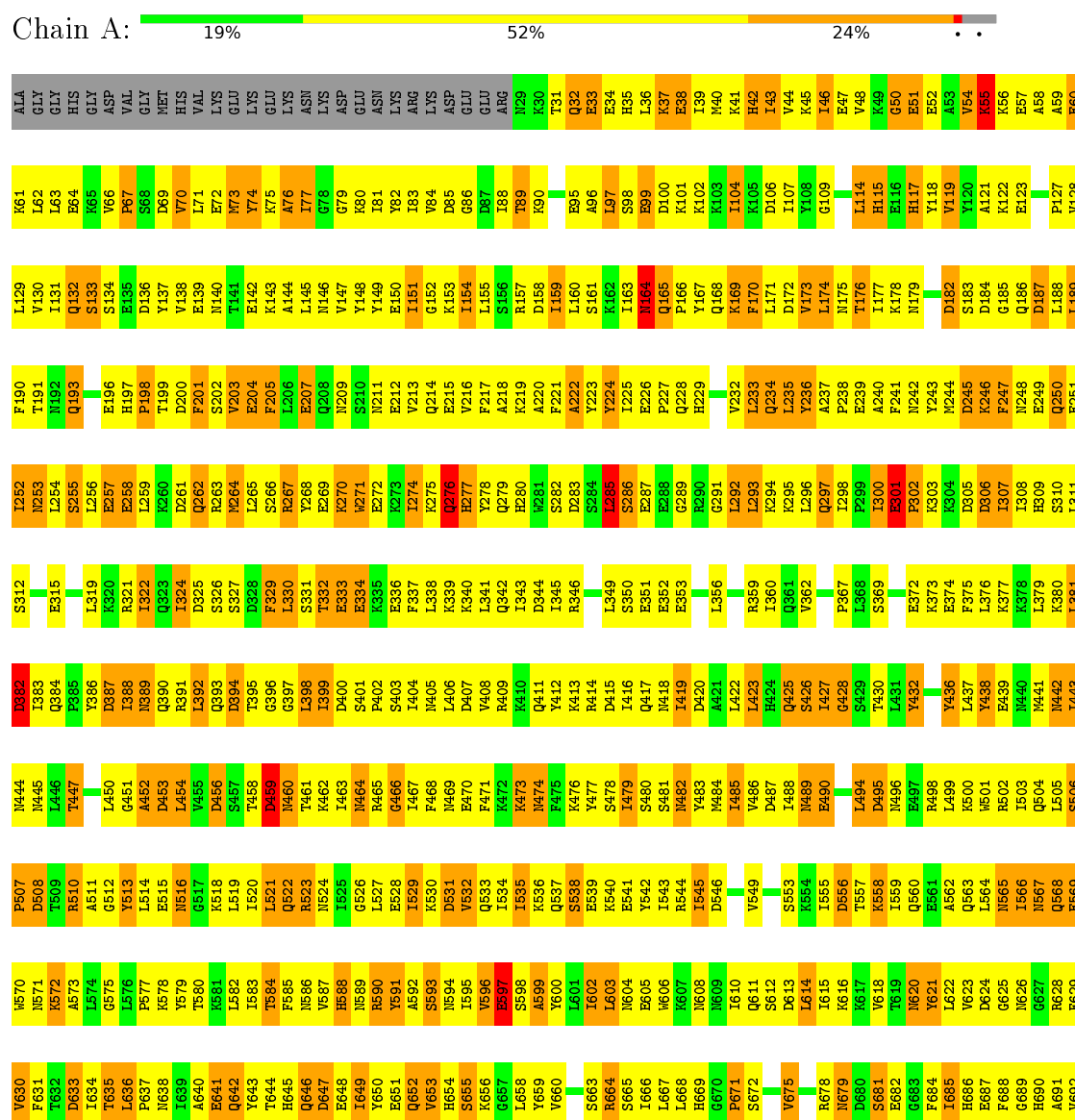
Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
2	B	16	Total	C	N	O	S	0	0	0
			120	76	24	19	1			

### 3 Residue-property plots

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

Note EDS was not executed.

- Molecule 1: Lethal Factor





• Molecule 2: mitogen-activated protein kinase kinase 2



## 4 Data and refinement statistics

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

Property	Value	Source
Space group	I 41 3 2	Depositor
Cell constants a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	330.70 Å   330.70 Å   330.70 Å 90.00°   90.00°   90.00°	Depositor
Resolution (Å)	50.60 – 3.90	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	85.0 (50.60-3.90)	Depositor
$R_{merge}$	(Not available)	Depositor
$R_{sym}$	0.10	Depositor
Refinement program	REFMAC 5	Depositor
R, $R_{free}$	0.296 , 0.316	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	5734	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	118.0	wwPDB-VP

## 5 Model quality [i](#)

### 5.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z  > 5$	RMSZ	$\# Z  > 5$
1	A	0.44	0/5710	0.74	0/7771
2	B	0.64	0/122	1.41	2/164 (1.2%)
All	All	0.44	0/5832	0.76	2/7935 (0.0%)

There are no bond length outliers.

All (2) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	B	5	ARG	N-CA-C	7.81	132.10	111.00
2	B	14	ILE	N-CA-C	5.32	125.35	111.00

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	5614	0	5058	1010	0
2	B	120	0	131	20	0
All	All	5734	0	5189	1025	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 94.

All (1025) 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:427:ILE:HG23	1:A:428:GLY:H	1.07	1.19
1:A:324:ILE:HG23	1:A:325:ASP:H	1.13	1.10
2:B:5:ARG:O	2:B:5:ARG:HG3	1.29	1.09
1:A:229:HIS:HA	1:A:232:VAL:HG12	1.31	1.08
1:A:628:ARG:H	1:A:665:SER:HB3	1.19	1.07
1:A:31:THR:HG22	1:A:32:GLN:H	1.21	1.05
1:A:515:GLU:O	1:A:516:ASN:HB2	1.55	1.04
1:A:247:PHE:HA	1:A:251:GLU:HB2	1.40	1.02
1:A:592:ALA:O	1:A:594:ASN:N	1.93	1.01
1:A:188:LEU:HD11	1:A:223:TYR:HE1	1.22	1.01
1:A:264:MET:HE3	1:A:264:MET:H	1.26	0.99
1:A:384:GLN:HE22	2:B:4:ARG:HH21	1.07	0.98
1:A:73:MET:HB2	1:A:256:LEU:HD23	1.47	0.97
1:A:535:ILE:H	1:A:535:ILE:HD13	1.30	0.97
1:A:438:TYR:CE2	1:A:490:GLU:HG2	2.01	0.95
1:A:121:ALA:HA	1:A:129:LEU:HA	1.48	0.95
2:B:5:ARG:CG	2:B:5:ARG:O	2.16	0.94
1:A:148:TYR:HB3	1:A:225:ILE:HD12	1.47	0.94
1:A:352:GLU:HG3	1:A:356:LEU:HB2	1.46	0.94
1:A:432:TYR:H	1:A:432:TYR:HD2	1.12	0.94
1:A:659:TYR:HB2	1:A:664:ARG:HH22	1.33	0.93
1:A:264:MET:CE	1:A:264:MET:H	1.81	0.93
1:A:246:LYS:HE3	1:A:250:GLN:HE22	1.32	0.92
1:A:596:VAL:HG22	1:A:597:GLU:N	1.83	0.92
1:A:81:ILE:HG12	1:A:129:LEU:HD21	1.49	0.91
1:A:222:ALA:HA	1:A:225:ILE:HD11	1.49	0.91
1:A:403:SER:HB3	1:A:638:ASN:ND2	1.85	0.91
1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:ILE:HD12	1.52	0.91
1:A:102:LYS:HG2	1:A:114:LEU:HD23	1.54	0.90
1:A:563:GLN:NE2	1:A:584:THR:HA	1.85	0.90
1:A:254:LEU:HD13	1:A:502:ARG:NH1	1.86	0.90
1:A:427:ILE:HG23	1:A:428:GLY:N	1.87	0.90
1:A:168:GLN:HE22	1:A:171:LEU:HD23	1.37	0.89
1:A:592:ALA:C	1:A:594:ASN:H	1.76	0.89
1:A:545:ILE:HG22	1:A:545:ILE:O	1.71	0.88
1:A:395:THR:HG22	1:A:638:ASN:OD1	1.73	0.87
1:A:188:LEU:HD11	1:A:223:TYR:CE1	2.10	0.87
1:A:511:ALA:HB2	1:A:521:LEU:HB3	1.57	0.87
1:A:330:LEU:HD12	1:A:330:LEU:H	1.37	0.87
1:A:31:THR:HG22	1:A:32:GLN:N	1.89	0.86
1:A:142:GLU:C	1:A:144:ALA:H	1.79	0.86
1:A:123:GLU:HB3	1:A:157:ARG:HH21	1.39	0.86

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:148:TYR:HB3	1:A:225:ILE:CD1	2.06	0.86
1:A:324:ILE:HG23	1:A:325:ASP:N	1.90	0.86
1:A:560:GLN:HA	1:A:563:GLN:HB3	1.57	0.86
1:A:172:ASP:HA	1:A:175:ASN:ND2	1.89	0.85
1:A:442:ASN:H	1:A:442:ASN:HD22	1.24	0.85
1:A:40:MET:O	1:A:43:ILE:HD12	1.77	0.84
1:A:274:ILE:HG21	1:A:488:ILE:HD11	1.59	0.84
1:A:507:PRO:O	1:A:508:ASP:HB2	1.77	0.84
1:A:123:GLU:HB3	1:A:157:ARG:NH2	1.92	0.84
1:A:700:LEU:HD13	1:A:700:LEU:O	1.79	0.82
1:A:532:VAL:O	1:A:532:VAL:HG12	1.79	0.82
1:A:691:ALA:O	1:A:694:ASP:HB3	1.80	0.82
1:A:63:LEU:O	1:A:66:VAL:HG12	1.79	0.81
1:A:478:SER:OG	1:A:590:ARG:HA	1.80	0.81
1:A:55:LYS:HD3	1:A:134:SER:N	1.95	0.81
1:A:510:ARG:HD3	1:A:522:GLN:NE2	1.96	0.81
1:A:620:ASN:HA	1:A:623:VAL:HG12	1.63	0.81
1:A:71:LEU:O	1:A:74:TYR:HB3	1.79	0.81
1:A:307:ILE:HG23	1:A:308:ILE:H	1.46	0.81
1:A:756:GLN:O	1:A:760:PRO:HG3	1.80	0.81
1:A:589:ASN:O	1:A:591:TYR:N	2.14	0.80
1:A:395:THR:HB	1:A:398:LEU:HB2	1.63	0.80
1:A:640:ALA:HA	1:A:643:TYR:CE1	2.17	0.80
1:A:264:MET:HA	1:A:267:ARG:HB2	1.63	0.80
1:A:41:LYS:O	1:A:44:VAL:HG12	1.81	0.80
1:A:254:LEU:O	1:A:257:GLU:N	2.16	0.79
1:A:163:ILE:O	1:A:164:ASN:HB2	1.83	0.79
1:A:129:LEU:H	1:A:129:LEU:HD23	1.48	0.79
1:A:389:ASN:ND2	1:A:483:TYR:HB2	1.97	0.79
1:A:67:PRO:HG2	1:A:248:ASN:OD1	1.82	0.79
1:A:384:GLN:HE22	2:B:4:ARG:NH2	1.79	0.79
1:A:459:ASP:O	1:A:461:THR:N	2.16	0.79
1:A:221:PHE:CE1	1:A:225:ILE:HD13	2.18	0.79
1:A:563:GLN:HE21	1:A:584:THR:HA	1.48	0.78
1:A:732:ASN:ND2	1:A:734:ALA:HB3	1.99	0.78
1:A:420:ASP:OD2	1:A:523:ARG:NH2	2.17	0.78
1:A:55:LYS:HE2	1:A:58:ALA:HB3	1.67	0.77
1:A:166:PRO:HB3	1:A:170:PHE:HB3	1.66	0.77
1:A:274:ILE:HG21	1:A:488:ILE:CD1	2.14	0.77
1:A:453:ASP:HB2	1:A:467:ILE:HG13	1.66	0.77
1:A:642:GLN:HG3	1:A:660:VAL:HG21	1.67	0.77

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:443:ILE:HD13	1:A:499:LEU:HD21	1.65	0.76
1:A:175:ASN:O	1:A:178:LYS:N	2.18	0.76
1:A:319:LEU:O	1:A:322:ILE:HD12	1.84	0.76
1:A:324:ILE:CG2	1:A:325:ASP:H	1.96	0.76
1:A:264:MET:C	1:A:266:SER:H	1.87	0.76
1:A:459:ASP:O	1:A:461:THR:HG22	1.85	0.76
1:A:732:ASN:HD22	1:A:734:ALA:HB3	1.50	0.76
1:A:760:PRO:HA	1:A:763:PHE:HB3	1.66	0.76
1:A:669:HIS:CE1	1:A:671:PRO:HD2	2.20	0.76
1:A:398:LEU:O	1:A:400:ASP:N	2.18	0.76
1:A:274:ILE:HD13	1:A:274:ILE:O	1.86	0.76
1:A:427:ILE:CG2	1:A:428:GLY:H	1.93	0.76
1:A:384:GLN:NE2	2:B:4:ARG:HH21	1.81	0.75
1:A:46:ILE:H	1:A:46:ILE:HD13	1.51	0.75
1:A:45:LYS:O	1:A:83:ILE:HG22	1.85	0.75
1:A:395:THR:O	1:A:397:GLY:N	2.20	0.75
1:A:476:LYS:N	1:A:593:SER:OG	2.16	0.75
1:A:635:THR:HG22	1:A:654:HIS:HE2	1.52	0.75
1:A:654:HIS:ND1	1:A:655:SER:N	2.35	0.75
1:A:165:GLN:CB	1:A:166:PRO:CD	2.66	0.74
1:A:498:ARG:HG2	1:A:498:ARG:HH11	1.51	0.74
1:A:285:LEU:O	1:A:286:SER:HB3	1.86	0.74
1:A:403:SER:HB3	1:A:638:ASN:HD21	1.51	0.74
1:A:467:ILE:HD13	1:A:467:ILE:N	2.02	0.74
1:A:473:LYS:C	1:A:474:ASN:HD22	1.91	0.74
1:A:254:LEU:HD13	1:A:502:ARG:HH12	1.51	0.74
1:A:474:ASN:HD22	1:A:474:ASN:N	1.85	0.74
1:A:658:LEU:HD12	1:A:667:LEU:HD12	1.68	0.74
1:A:664:ARG:NH1	1:A:691:ALA:HA	2.02	0.74
1:A:46:ILE:HA	1:A:83:ILE:HG23	1.69	0.74
1:A:257:GLU:C	1:A:259:LEU:H	1.89	0.74
1:A:456:ASP:HB2	1:A:462:LYS:O	1.87	0.73
1:A:44:VAL:HG13	1:A:44:VAL:O	1.87	0.73
1:A:616:LYS:NZ	1:A:616:LYS:HB3	2.02	0.73
1:A:229:HIS:CA	1:A:232:VAL:HG12	2.14	0.73
1:A:235:LEU:HD13	1:A:236:TYR:N	2.03	0.73
1:A:535:ILE:N	1:A:535:ILE:HD13	2.04	0.73
1:A:621:TYR:C	1:A:621:TYR:CD1	2.63	0.73
1:A:504:GLN:O	1:A:504:GLN:HG2	1.89	0.72
1:A:258:GLU:HG2	1:A:258:GLU:O	1.88	0.72
1:A:387:ASP:O	1:A:389:ASN:N	2.20	0.72

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:172:ASP:HA	1:A:175:ASN:HD21	1.49	0.72
1:A:653:VAL:HG12	1:A:654:HIS:N	2.03	0.72
1:A:592:ALA:O	1:A:595:ILE:N	2.22	0.72
1:A:77:ILE:O	1:A:77:ILE:HG22	1.88	0.72
1:A:296:LEU:HB2	1:A:388:ILE:HD11	1.70	0.72
1:A:477:TYR:H	1:A:593:SER:HB2	1.54	0.72
1:A:628:ARG:H	1:A:665:SER:CB	2.01	0.71
1:A:89:THR:CG2	1:A:114:LEU:HB3	2.19	0.71
1:A:102:LYS:CG	1:A:114:LEU:HD23	2.20	0.71
1:A:298:ILE:O	1:A:298:ILE:HD12	1.90	0.71
1:A:515:GLU:O	1:A:516:ASN:CB	2.37	0.71
1:A:221:PHE:O	1:A:225:ILE:HG12	1.90	0.71
1:A:628:ARG:HH11	1:A:628:ARG:HG3	1.56	0.71
1:A:233:LEU:HD13	1:A:237:ALA:HB3	1.73	0.71
1:A:586:ASN:OD1	1:A:588:HIS:HE1	1.74	0.71
1:A:169:LYS:O	1:A:171:LEU:N	2.24	0.71
1:A:443:ILE:CG2	1:A:451:GLY:HA2	2.21	0.71
1:A:511:ALA:HA	1:A:521:LEU:HA	1.71	0.71
1:A:610:ILE:HG22	1:A:611:GLN:H	1.55	0.70
1:A:640:ALA:O	1:A:642:GLN:N	2.24	0.70
1:A:443:ILE:HG12	1:A:454:LEU:HD23	1.73	0.70
1:A:596:VAL:CG2	1:A:597:GLU:N	2.53	0.70
1:A:701:ASP:CG	1:A:704:GLN:HB2	2.12	0.70
1:A:73:MET:HG3	1:A:259:LEU:HD23	1.72	0.69
1:A:256:LEU:HD13	1:A:256:LEU:C	2.12	0.69
1:A:150:GLU:O	1:A:152:GLY:N	2.25	0.69
1:A:443:ILE:HG21	1:A:454:LEU:HD23	1.74	0.69
1:A:488:ILE:HG12	1:A:488:ILE:O	1.92	0.69
1:A:530:LYS:O	1:A:531:ASP:HB2	1.92	0.69
1:A:692:VAL:C	1:A:694:ASP:H	1.93	0.69
1:A:46:ILE:C	1:A:48:VAL:H	1.96	0.69
1:A:381:LEU:O	1:A:384:GLN:HG2	1.93	0.69
1:A:669:HIS:ND1	1:A:671:PRO:HD2	2.08	0.69
1:A:321:ARG:HA	1:A:360:ILE:HD13	1.74	0.68
1:A:567:ASN:HD21	1:A:583:ILE:H	1.41	0.68
1:A:584:THR:HB	1:A:628:ARG:HD3	1.75	0.68
1:A:319:LEU:HD23	1:A:319:LEU:O	1.92	0.68
1:A:520:ILE:O	1:A:520:ILE:HG23	1.93	0.68
1:A:565:ASN:O	1:A:569:GLU:HB3	1.92	0.68
1:A:46:ILE:HA	1:A:83:ILE:CG2	2.23	0.68
1:A:686:HIS:HB2	1:A:742:ARG:HG3	1.76	0.68

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:600:TYR:O	1:A:604:ASN:HB2	1.93	0.68
1:A:526:GLY:O	1:A:527:LEU:HD23	1.94	0.68
1:A:621:TYR:HD1	1:A:621:TYR:O	1.76	0.68
1:A:584:THR:HG22	1:A:630:VAL:HG13	1.75	0.68
1:A:168:GLN:HE22	1:A:171:LEU:CD2	2.06	0.68
1:A:498:ARG:NH1	1:A:498:ARG:HG2	2.08	0.68
1:A:104:ILE:HD11	1:A:114:LEU:HD13	1.76	0.68
1:A:412:TYR:O	1:A:416:ILE:N	2.25	0.68
1:A:642:GLN:CG	1:A:660:VAL:HG21	2.24	0.68
1:A:685:ILE:HD11	1:A:742:ARG:HA	1.76	0.68
1:A:82:TYR:O	1:A:130:VAL:HA	1.93	0.68
1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:ILE:CD1	2.24	0.68
1:A:150:GLU:C	1:A:152:GLY:H	1.98	0.68
1:A:442:ASN:HD22	1:A:442:ASN:N	1.91	0.68
1:A:769:GLN:O	1:A:773:ILE:HG12	1.93	0.68
1:A:172:ASP:O	1:A:175:ASN:N	2.24	0.67
1:A:621:TYR:O	1:A:624:ASP:HB2	1.94	0.67
1:A:646:GLN:O	1:A:647:ASP:HB2	1.94	0.67
1:A:89:THR:HG21	1:A:114:LEU:HB3	1.76	0.67
1:A:587:VAL:HG21	1:A:592:ALA:HB1	1.77	0.67
1:A:266:SER:O	1:A:268:TYR:N	2.27	0.66
1:A:709:THR:HG21	1:A:734:ALA:HA	1.76	0.66
1:A:249:GLU:O	1:A:250:GLN:HB2	1.93	0.66
1:A:178:LYS:HD3	1:A:201:PHE:CE1	2.31	0.66
1:A:41:LYS:C	1:A:43:ILE:H	1.97	0.66
1:A:70:VAL:HG13	1:A:155:LEU:HD21	1.78	0.66
1:A:119:VAL:HA	1:A:130:VAL:O	1.95	0.66
1:A:447:THR:HB	1:A:450:LEU:HD13	1.76	0.66
1:A:458:THR:O	1:A:458:THR:HG22	1.96	0.66
1:A:658:LEU:HD22	1:A:659:TYR:H	1.60	0.66
1:A:566:ILE:HB	1:A:600:TYR:HE1	1.61	0.66
1:A:74:TYR:HE1	1:A:154:ILE:CD1	2.07	0.66
1:A:168:GLN:NE2	1:A:171:LEU:HD23	2.11	0.66
1:A:404:ILE:HG13	1:A:405:ASN:H	1.61	0.66
1:A:443:ILE:HG23	1:A:451:GLY:HA2	1.76	0.66
1:A:168:GLN:NE2	1:A:168:GLN:HA	2.11	0.66
1:A:170:PHE:O	1:A:174:LEU:HB2	1.96	0.66
1:A:224:TYR:CE2	1:A:245:ASP:HA	2.31	0.66
1:A:437:LEU:HD23	1:A:486:VAL:HG21	1.78	0.66
1:A:81:ILE:CG1	1:A:129:LEU:HD21	2.22	0.65
1:A:229:HIS:HA	1:A:232:VAL:CG1	2.18	0.65

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:247:PHE:O	1:A:252:ILE:HG12	1.96	0.65
1:A:233:LEU:O	1:A:235:LEU:N	2.29	0.65
1:A:264:MET:N	1:A:264:MET:HE3	2.06	0.65
1:A:307:ILE:HG23	1:A:308:ILE:N	2.11	0.65
1:A:465:ARG:O	1:A:468:PHE:HB3	1.96	0.65
1:A:686:HIS:ND1	1:A:687:GLU:N	2.44	0.65
2:B:6:LYS:HG3	2:B:6:LYS:O	1.95	0.65
1:A:55:LYS:HD3	1:A:134:SER:H	1.61	0.65
1:A:182:ASP:O	1:A:184:ASP:N	2.29	0.65
1:A:404:ILE:HG12	1:A:408:VAL:HG11	1.77	0.65
1:A:721:GLU:HG3	1:A:761:LYS:CB	2.26	0.65
1:A:79:GLY:O	1:A:80:LYS:HG3	1.96	0.65
1:A:398:LEU:C	1:A:400:ASP:H	2.00	0.65
1:A:389:ASN:HD21	1:A:483:TYR:HB2	1.62	0.65
1:A:566:ILE:HG23	1:A:567:ASN:N	2.12	0.65
1:A:153:LYS:C	1:A:155:LEU:H	1.98	0.65
1:A:178:LYS:HD3	1:A:201:PHE:HE1	1.60	0.65
1:A:346:ARG:O	1:A:353:GLU:HG3	1.97	0.65
1:A:405:ASN:O	1:A:409:ARG:HB2	1.98	0.64
1:A:615:ILE:HG13	1:A:616:LYS:N	2.10	0.64
1:A:744:MET:HG2	1:A:763:PHE:HE2	1.62	0.64
1:A:84:VAL:HG22	1:A:85:ASP:N	2.12	0.64
1:A:149:TYR:HA	1:A:222:ALA:HB2	1.79	0.64
1:A:264:MET:N	1:A:264:MET:CE	2.58	0.64
1:A:275:LYS:O	1:A:276:GLN:C	2.35	0.64
1:A:500:LYS:HZ2	1:A:537:GLN:HE21	1.45	0.64
1:A:55:LYS:HA	1:A:55:LYS:HE2	1.79	0.64
1:A:706:ASP:C	1:A:707:LEU:HD12	2.17	0.64
1:A:165:GLN:CB	1:A:166:PRO:HD3	2.27	0.64
1:A:148:TYR:CB	1:A:225:ILE:HD12	2.25	0.64
1:A:388:ILE:O	1:A:388:ILE:HG13	1.97	0.64
1:A:280:HIS:O	1:A:280:HIS:ND1	2.30	0.64
1:A:653:VAL:HG12	1:A:654:HIS:H	1.63	0.64
1:A:436:TYR:N	1:A:436:TYR:CD1	2.64	0.64
1:A:599:ALA:HB2	1:A:631:PHE:HD1	1.63	0.64
1:A:81:ILE:HA	1:A:129:LEU:CD2	2.28	0.64
1:A:391:ARG:HA	1:A:394:ASP:HB2	1.80	0.64
1:A:395:THR:HG22	1:A:638:ASN:CG	2.18	0.64
1:A:658:LEU:CD1	1:A:667:LEU:HD12	2.27	0.64
1:A:610:ILE:HG22	1:A:611:GLN:N	2.13	0.63
1:A:411:GLN:O	1:A:412:TYR:C	2.35	0.63

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:566:ILE:HG23	1:A:567:ASN:H	1.63	0.63
1:A:658:LEU:HD12	1:A:667:LEU:HB2	1.81	0.63
1:A:742:ARG:O	1:A:745:HIS:ND1	2.31	0.63
1:A:81:ILE:HG12	1:A:129:LEU:CD2	2.27	0.63
1:A:118:TYR:O	1:A:119:VAL:HB	1.98	0.63
1:A:223:TYR:O	1:A:225:ILE:N	2.31	0.63
1:A:300:ILE:O	1:A:301:GLU:O	2.16	0.63
1:A:654:HIS:O	1:A:655:SER:HB3	1.98	0.63
1:A:88:ILE:C	1:A:90:LYS:H	2.01	0.63
1:A:169:LYS:C	1:A:171:LEU:H	2.02	0.63
1:A:268:TYR:O	1:A:269:GLU:C	2.37	0.63
1:A:640:ALA:C	1:A:642:GLN:H	2.00	0.63
1:A:628:ARG:N	1:A:665:SER:HB3	2.03	0.63
1:A:252:ILE:O	1:A:254:LEU:N	2.32	0.63
1:A:468:PHE:O	1:A:471:PHE:HB3	1.99	0.63
1:A:474:ASN:ND2	1:A:474:ASN:N	2.44	0.63
1:A:245:ASP:O	1:A:246:LYS:C	2.37	0.62
1:A:69:ASP:O	1:A:71:LEU:N	2.31	0.62
1:A:597:GLU:O	1:A:597:GLU:OE1	2.18	0.62
1:A:70:VAL:O	1:A:70:VAL:HG12	1.98	0.62
1:A:83:ILE:O	1:A:83:ILE:HG23	1.99	0.62
1:A:379:LEU:O	1:A:381:LEU:N	2.32	0.62
1:A:432:TYR:N	1:A:432:TYR:CD2	2.62	0.62
1:A:442:ASN:O	1:A:444:ASN:N	2.33	0.62
1:A:245:ASP:O	1:A:248:ASN:N	2.29	0.62
1:A:722:GLY:O	1:A:723:SER:HB2	2.00	0.62
1:A:300:ILE:HD12	1:A:300:ILE:O	2.00	0.62
1:A:704:GLN:O	1:A:706:ASP:N	2.33	0.62
1:A:191:THR:HG23	1:A:193:GLN:HB3	1.82	0.62
1:A:527:LEU:CD2	1:A:549:VAL:HG12	2.29	0.62
1:A:142:GLU:C	1:A:144:ALA:N	2.49	0.62
1:A:164:ASN:ND2	1:A:536:LYS:O	2.32	0.61
1:A:745:HIS:ND1	1:A:746:SER:N	2.46	0.61
1:A:244:MET:HE2	1:A:248:ASN:ND2	2.15	0.61
1:A:381:LEU:HD21	1:A:405:ASN:ND2	2.14	0.61
1:A:640:ALA:HA	1:A:643:TYR:CD1	2.35	0.61
1:A:621:TYR:HD1	1:A:621:TYR:C	2.01	0.61
1:A:292:LEU:C	1:A:294:LYS:N	2.52	0.61
1:A:379:LEU:C	1:A:381:LEU:N	2.52	0.61
1:A:739:GLU:HG3	1:A:742:ARG:HH21	1.65	0.61
1:A:171:LEU:O	1:A:174:LEU:HB3	2.00	0.61

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:172:ASP:O	1:A:173:VAL:C	2.39	0.61
1:A:38:GLU:O	1:A:41:LYS:N	2.32	0.61
1:A:280:HIS:HD1	1:A:280:HIS:C	2.03	0.61
1:A:72:GLU:O	1:A:74:TYR:N	2.29	0.61
1:A:760:PRO:C	1:A:762:THR:H	2.01	0.61
1:A:411:GLN:O	1:A:414:ARG:N	2.34	0.61
2:B:11:ALA:O	2:B:12:LEU:HB2	2.00	0.61
1:A:270:LYS:O	1:A:271:TRP:C	2.40	0.61
1:A:340:LYS:C	1:A:342:GLN:H	2.05	0.61
1:A:39:ILE:C	1:A:41:LYS:H	2.03	0.61
1:A:224:TYR:CD1	1:A:224:TYR:C	2.75	0.60
1:A:403:SER:CB	1:A:638:ASN:HD21	2.13	0.60
1:A:293:LEU:HD11	1:A:514:LEU:HD11	1.81	0.60
1:A:264:MET:O	1:A:266:SER:N	2.34	0.60
1:A:635:THR:HB	1:A:637:PRO:HD2	1.83	0.60
1:A:246:LYS:HE3	1:A:250:GLN:NE2	2.09	0.60
1:A:535:ILE:HD12	1:A:544:ARG:HB2	1.83	0.60
1:A:585:PHE:CE1	1:A:596:VAL:HG23	2.37	0.60
1:A:307:ILE:HD13	1:A:308:ILE:N	2.16	0.60
1:A:423:LEU:H	1:A:423:LEU:HD12	1.66	0.60
1:A:557:THR:O	1:A:559:ILE:N	2.34	0.60
1:A:586:ASN:OD1	1:A:588:HIS:CE1	2.53	0.60
1:A:654:HIS:O	1:A:655:SER:CB	2.47	0.60
1:A:521:LEU:O	1:A:522:GLN:O	2.19	0.60
2:B:8:VAL:O	2:B:9:LEU:HD13	2.01	0.60
1:A:374:GLU:HA	1:A:377:LYS:HD3	1.84	0.60
1:A:442:ASN:C	1:A:444:ASN:H	2.02	0.60
1:A:307:ILE:HG23	1:A:308:ILE:HG13	1.83	0.60
1:A:46:ILE:HG12	1:A:46:ILE:O	2.02	0.60
1:A:235:LEU:HD22	1:A:235:LEU:O	2.01	0.60
1:A:480:SER:HB3	1:A:590:ARG:HE	1.67	0.60
1:A:701:ASP:OD1	1:A:704:GLN:HB2	2.02	0.60
1:A:32:GLN:C	1:A:34:GLU:H	2.05	0.60
1:A:507:PRO:O	1:A:508:ASP:CB	2.49	0.60
1:A:588:HIS:ND1	1:A:588:HIS:N	2.50	0.60
1:A:592:ALA:C	1:A:594:ASN:N	2.43	0.60
1:A:170:PHE:O	1:A:174:LEU:CB	2.50	0.60
1:A:307:ILE:C	1:A:307:ILE:HD13	2.22	0.60
1:A:356:LEU:HG	1:A:360:ILE:CD1	2.31	0.60
1:A:81:ILE:HA	1:A:129:LEU:HD23	1.85	0.59
1:A:81:ILE:HG23	1:A:129:LEU:HD21	1.84	0.59

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:391:ARG:HD3	1:A:391:ARG:O	2.02	0.59
1:A:512:GLY:N	1:A:520:ILE:O	2.35	0.59
1:A:537:GLN:HB2	1:A:542:TYR:CD2	2.38	0.59
1:A:618:VAL:O	1:A:622:LEU:HD12	2.02	0.59
1:A:188:LEU:C	1:A:188:LEU:HD13	2.22	0.59
1:A:437:LEU:HD21	1:A:519:LEU:HD22	1.83	0.59
1:A:603:LEU:O	1:A:606:TRP:N	2.33	0.59
1:A:584:THR:CG2	1:A:630:VAL:HG13	2.32	0.59
1:A:177:ILE:C	1:A:177:ILE:HD12	2.23	0.59
1:A:660:VAL:O	1:A:664:ARG:HA	2.03	0.59
1:A:160:LEU:O	1:A:165:GLN:HA	2.03	0.59
1:A:249:GLU:O	1:A:250:GLN:CB	2.49	0.59
1:A:73:MET:CB	1:A:256:LEU:HD23	2.28	0.59
1:A:419:ILE:O	1:A:422:LEU:HB3	2.03	0.59
1:A:559:ILE:O	1:A:562:ALA:N	2.32	0.59
1:A:175:ASN:OD1	1:A:176:THR:N	2.35	0.59
1:A:266:SER:HA	1:A:269:GLU:HB2	1.84	0.59
1:A:339:LYS:O	1:A:342:GLN:HB3	2.02	0.59
1:A:61:LYS:HA	1:A:64:GLU:CG	2.33	0.59
1:A:685:ILE:CD1	1:A:742:ARG:HA	2.32	0.59
1:A:43:ILE:HD13	1:A:44:VAL:N	2.17	0.59
1:A:495:ASP:N	1:A:495:ASP:OD2	2.36	0.59
1:A:73:MET:HG2	1:A:159:ILE:CG2	2.32	0.58
1:A:237:ALA:HB1	1:A:240:ALA:HB3	1.85	0.58
1:A:499:LEU:HD13	1:A:545:ILE:CD1	2.33	0.58
1:A:55:LYS:CE	1:A:58:ALA:HB3	2.32	0.58
1:A:616:LYS:HB3	1:A:616:LYS:HZ2	1.66	0.58
1:A:69:ASP:HB2	1:A:252:ILE:HG21	1.85	0.58
1:A:119:VAL:HG21	1:A:147:VAL:HG22	1.85	0.58
1:A:168:GLN:HE21	1:A:168:GLN:HA	1.69	0.58
1:A:55:LYS:O	1:A:59:ALA:N	2.32	0.58
1:A:73:MET:CG	1:A:259:LEU:HD23	2.32	0.58
1:A:264:MET:C	1:A:266:SER:N	2.55	0.58
1:A:266:SER:C	1:A:268:TYR:N	2.53	0.58
1:A:118:TYR:O	1:A:132:GLN:HB2	2.04	0.58
1:A:300:ILE:CG1	1:A:300:ILE:O	2.51	0.58
1:A:618:VAL:C	1:A:620:ASN:N	2.57	0.58
1:A:235:LEU:HD22	1:A:235:LEU:C	2.24	0.58
1:A:247:PHE:CD1	1:A:247:PHE:O	2.57	0.58
1:A:387:ASP:CG	1:A:390:GLN:HB3	2.23	0.58
1:A:266:SER:O	1:A:269:GLU:N	2.37	0.58

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:395:THR:C	1:A:397:GLY:H	2.06	0.58
1:A:40:MET:C	1:A:42:HIS:H	2.07	0.58
1:A:438:TYR:O	1:A:486:VAL:HB	2.04	0.58
1:A:499:LEU:HD13	1:A:545:ILE:HD12	1.86	0.58
1:A:532:VAL:CG1	1:A:532:VAL:O	2.52	0.58
1:A:55:LYS:O	1:A:58:ALA:N	2.35	0.58
1:A:292:LEU:C	1:A:294:LYS:H	2.06	0.58
1:A:393:GLN:HG2	1:A:393:GLN:O	2.04	0.58
1:A:375:PHE:O	1:A:379:LEU:HD13	2.04	0.57
1:A:759:ALA:C	1:A:761:LYS:H	2.07	0.57
1:A:331:SER:HB3	2:B:6:LYS:HB3	1.85	0.57
1:A:545:ILE:CG2	1:A:545:ILE:O	2.44	0.57
1:A:494:LEU:HB3	1:A:495:ASP:OD2	2.05	0.57
1:A:635:THR:HG22	1:A:654:HIS:NE2	2.17	0.57
2:B:7:PRO:O	2:B:8:VAL:CB	2.52	0.57
1:A:148:TYR:HA	1:A:151:ILE:HG22	1.86	0.57
1:A:477:TYR:H	1:A:593:SER:CB	2.18	0.57
1:A:599:ALA:HB2	1:A:631:PHE:CD1	2.39	0.57
1:A:718:PHE:HZ	1:A:730:ARG:HA	1.69	0.57
1:A:55:LYS:HZ1	1:A:137:TYR:HE2	1.50	0.57
1:A:155:LEU:HD13	1:A:155:LEU:O	2.04	0.57
1:A:658:LEU:C	1:A:658:LEU:HD13	2.25	0.57
1:A:76:ALA:O	1:A:77:ILE:HG12	2.04	0.57
1:A:257:GLU:O	1:A:259:LEU:N	2.37	0.57
1:A:308:ILE:O	1:A:311:LEU:HD13	2.05	0.57
1:A:398:LEU:C	1:A:400:ASP:N	2.58	0.57
1:A:664:ARG:HE	1:A:664:ARG:HA	1.69	0.57
1:A:685:ILE:HG13	1:A:686:HIS:N	2.20	0.57
1:A:107:ILE:HD13	1:A:145:LEU:HG	1.87	0.57
1:A:201:PHE:CD1	1:A:201:PHE:N	2.71	0.57
1:A:170:PHE:HB2	1:A:243:TYR:CE1	2.40	0.57
1:A:36:LEU:HA	1:A:40:MET:HE1	1.86	0.57
1:A:596:VAL:HG22	1:A:597:GLU:H	1.67	0.57
1:A:61:LYS:HA	1:A:64:GLU:HG3	1.86	0.57
1:A:698:TYR:C	1:A:700:LEU:H	2.08	0.57
1:A:222:ALA:CA	1:A:225:ILE:HD11	2.30	0.56
1:A:254:LEU:O	1:A:256:LEU:N	2.37	0.56
1:A:479:ILE:O	1:A:590:ARG:N	2.37	0.56
1:A:706:ASP:OD2	1:A:710:ASN:HB3	2.05	0.56
1:A:98:SER:O	1:A:101:LYS:N	2.37	0.56
1:A:744:MET:O	1:A:745:HIS:HB3	2.05	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:330:LEU:N	1:A:330:LEU:HD12	2.17	0.56
1:A:218:ALA:O	1:A:222:ALA:N	2.37	0.56
1:A:381:LEU:O	1:A:383:ILE:N	2.38	0.56
1:A:598:SER:O	1:A:600:TYR:N	2.39	0.56
1:A:759:ALA:C	1:A:761:LYS:N	2.56	0.56
1:A:557:THR:HG22	1:A:558:LYS:N	2.20	0.56
1:A:658:LEU:HD13	1:A:659:TYR:N	2.19	0.56
1:A:69:ASP:C	1:A:71:LEU:H	2.08	0.56
1:A:95:GLU:C	1:A:97:LEU:H	2.08	0.56
1:A:373:LYS:O	1:A:377:LYS:HG3	2.06	0.56
1:A:419:ILE:O	1:A:423:LEU:HD12	2.05	0.56
1:A:75:LYS:C	1:A:77:ILE:H	2.08	0.56
1:A:442:ASN:C	1:A:444:ASN:N	2.59	0.56
1:A:717:ILE:HG23	1:A:761:LYS:O	2.06	0.56
1:A:402:PRO:HG3	1:A:409:ARG:NH1	2.21	0.56
1:A:43:ILE:O	1:A:81:ILE:N	2.31	0.56
1:A:635:THR:O	1:A:638:ASN:HB2	2.06	0.56
1:A:226:GLU:OE1	1:A:227:PRO:HD2	2.06	0.56
1:A:329:PHE:N	1:A:329:PHE:CD1	2.74	0.56
1:A:471:PHE:HD2	1:A:591:TYR:HH	1.54	0.56
1:A:633:ASP:C	1:A:633:ASP:OD2	2.44	0.56
1:A:756:GLN:HA	1:A:763:PHE:CD1	2.41	0.56
1:A:297:GLN:HE21	1:A:297:GLN:HA	1.71	0.56
1:A:297:GLN:HE21	1:A:297:GLN:CA	2.19	0.56
1:A:150:GLU:C	1:A:152:GLY:N	2.60	0.55
1:A:356:LEU:HG	1:A:360:ILE:HD11	1.88	0.55
1:A:526:GLY:O	1:A:549:VAL:HA	2.06	0.55
1:A:560:GLN:C	1:A:562:ALA:H	2.09	0.55
1:A:594:ASN:O	1:A:598:SER:HB2	2.06	0.55
1:A:656:LYS:HD3	1:A:672:SER:O	2.05	0.55
1:A:289:GLY:C	1:A:291:GLY:H	2.10	0.55
1:A:119:VAL:O	1:A:119:VAL:HG13	2.07	0.55
1:A:462:LYS:HA	1:A:541:GLU:OE1	2.06	0.55
1:A:438:TYR:CD2	1:A:490:GLU:HG2	2.41	0.55
1:A:77:ILE:CG2	1:A:77:ILE:O	2.55	0.55
1:A:381:LEU:HG	1:A:382:ASP:N	2.21	0.55
1:A:560:GLN:C	1:A:562:ALA:N	2.59	0.55
1:A:592:ALA:HA	1:A:595:ILE:CB	2.37	0.55
1:A:142:GLU:O	1:A:144:ALA:N	2.40	0.55
1:A:279:GLN:O	1:A:282:SER:N	2.40	0.55
1:A:376:LEU:O	1:A:379:LEU:HB2	2.07	0.55

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:73:MET:HG2	1:A:159:ILE:HG21	1.89	0.55
1:A:182:ASP:CG	1:A:182:ASP:O	2.45	0.55
1:A:263:ARG:HA	1:A:264:MET:HE2	1.89	0.55
1:A:40:MET:O	1:A:43:ILE:HG23	2.07	0.55
1:A:39:ILE:C	1:A:41:LYS:N	2.59	0.55
1:A:513:TYR:CD2	1:A:513:TYR:C	2.79	0.55
1:A:520:ILE:CG2	1:A:520:ILE:O	2.55	0.54
1:A:173:VAL:O	1:A:175:ASN:N	2.40	0.54
1:A:329:PHE:N	1:A:329:PHE:HD1	2.05	0.54
1:A:484:MET:O	1:A:520:ILE:HA	2.08	0.54
1:A:585:PHE:CZ	1:A:596:VAL:HG23	2.42	0.54
1:A:244:MET:HA	1:A:244:MET:HE3	1.89	0.54
1:A:303:LYS:HD2	1:A:306:ASP:CB	2.37	0.54
1:A:336:GLU:OE2	1:A:336:GLU:HA	2.08	0.54
1:A:387:ASP:OD1	1:A:387:ASP:N	2.39	0.54
1:A:40:MET:C	1:A:42:HIS:N	2.60	0.54
1:A:215:GLU:O	1:A:218:ALA:N	2.41	0.54
1:A:289:GLY:C	1:A:291:GLY:N	2.60	0.54
1:A:44:VAL:CG1	1:A:44:VAL:O	2.56	0.54
1:A:158:ASP:O	1:A:159:ILE:C	2.45	0.54
1:A:201:PHE:H	1:A:201:PHE:HD1	1.55	0.54
1:A:745:HIS:O	1:A:746:SER:O	2.26	0.54
2:B:2:LEU:HD22	2:B:2:LEU:O	2.07	0.54
1:A:692:VAL:C	1:A:694:ASP:N	2.59	0.54
1:A:72:GLU:C	1:A:74:TYR:H	2.10	0.54
1:A:768:ASP:O	1:A:772:PHE:HB2	2.08	0.54
1:A:83:ILE:HA	1:A:131:ILE:O	2.08	0.54
1:A:202:SER:O	1:A:203:VAL:C	2.46	0.54
1:A:148:TYR:CD1	1:A:225:ILE:HD12	2.42	0.54
1:A:151:ILE:HA	1:A:154:ILE:CG2	2.38	0.54
1:A:70:VAL:HG13	1:A:155:LEU:CD2	2.38	0.54
1:A:280:HIS:C	1:A:280:HIS:ND1	2.62	0.54
1:A:31:THR:CG2	1:A:32:GLN:N	2.61	0.54
1:A:605:GLU:HG2	1:A:681:SER:OG	2.08	0.54
1:A:741:PHE:O	1:A:742:ARG:C	2.46	0.54
1:A:178:LYS:HE2	1:A:200:ASP:HA	1.88	0.54
2:B:12:LEU:O	2:B:12:LEU:HD23	2.08	0.54
1:A:138:VAL:HG13	1:A:139:GLU:H	1.72	0.53
1:A:152:GLY:O	1:A:155:LEU:HB3	2.08	0.53
1:A:254:LEU:O	1:A:255:SER:C	2.46	0.53
1:A:618:VAL:C	1:A:620:ASN:H	2.11	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:244:MET:HE2	1:A:248:ASN:HD21	1.73	0.53
1:A:55:LYS:HZ2	1:A:133:SER:HA	1.72	0.53
1:A:556:ASP:HA	1:A:559:ILE:HD12	1.91	0.53
1:A:559:ILE:O	1:A:562:ALA:HB3	2.08	0.53
1:A:653:VAL:CG1	1:A:654:HIS:N	2.70	0.53
1:A:266:SER:C	1:A:268:TYR:H	2.11	0.53
1:A:498:ARG:CG	1:A:498:ARG:HH11	2.21	0.53
1:A:163:ILE:O	1:A:164:ASN:CB	2.56	0.53
1:A:173:VAL:C	1:A:175:ASN:H	2.12	0.53
1:A:54:VAL:O	1:A:57:GLU:N	2.39	0.53
1:A:603:LEU:HD11	1:A:629:PHE:HD2	1.73	0.53
1:A:114:LEU:O	1:A:115:HIS:C	2.47	0.53
1:A:163:ILE:HD11	1:A:259:LEU:HB2	1.90	0.53
1:A:474:ASN:O	1:A:593:SER:O	2.26	0.53
1:A:31:THR:CG2	1:A:32:GLN:H	1.96	0.53
1:A:587:VAL:C	1:A:588:HIS:ND1	2.62	0.53
1:A:122:LYS:N	1:A:128:VAL:O	2.41	0.53
1:A:161:SER:C	1:A:163:ILE:H	2.12	0.53
1:A:221:PHE:HA	1:A:244:MET:SD	2.49	0.53
1:A:564:LEU:O	1:A:567:ASN:N	2.42	0.53
1:A:645:HIS:CD2	1:A:645:HIS:N	2.77	0.53
1:A:745:HIS:CG	1:A:746:SER:N	2.76	0.53
1:A:221:PHE:CD1	1:A:225:ILE:HD13	2.44	0.53
1:A:308:ILE:HA	1:A:311:LEU:HD13	1.91	0.53
1:A:36:LEU:HA	1:A:40:MET:CE	2.38	0.53
1:A:419:ILE:HG13	1:A:423:LEU:HD11	1.90	0.53
1:A:461:THR:O	1:A:541:GLU:HB2	2.09	0.53
1:A:82:TYR:O	1:A:131:ILE:N	2.41	0.53
1:A:502:ARG:HH21	1:A:544:ARG:NH2	2.06	0.53
1:A:166:PRO:CB	1:A:170:PHE:HD1	2.22	0.52
1:A:46:ILE:O	1:A:48:VAL:N	2.37	0.52
1:A:55:LYS:CE	1:A:55:LYS:HA	2.37	0.52
1:A:564:LEU:O	1:A:566:ILE:N	2.43	0.52
1:A:762:THR:C	1:A:764:GLN:H	2.12	0.52
1:A:104:ILE:HD11	1:A:114:LEU:HD22	1.91	0.52
1:A:334:GLU:HG3	1:A:383:ILE:HD12	1.91	0.52
1:A:263:ARG:HE	1:A:264:MET:CE	2.21	0.52
1:A:489:ASN:O	1:A:490:GLU:C	2.48	0.52
1:A:658:LEU:HD22	1:A:659:TYR:N	2.23	0.52
1:A:86:GLY:O	1:A:88:ILE:HG12	2.10	0.52
1:A:186:GLN:O	1:A:188:LEU:N	2.42	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:289:GLY:O	1:A:291:GLY:N	2.42	0.52
1:A:392:LEU:HD23	1:A:482:ASN:CB	2.39	0.52
1:A:169:LYS:C	1:A:171:LEU:N	2.60	0.52
1:A:300:ILE:HG13	1:A:300:ILE:O	2.10	0.52
1:A:478:SER:OG	1:A:590:ARG:CA	2.55	0.52
1:A:484:MET:SD	1:A:590:ARG:NH2	2.82	0.52
1:A:664:ARG:HH11	1:A:691:ALA:HA	1.75	0.52
1:A:308:ILE:HD11	1:A:341:LEU:HA	1.90	0.52
1:A:145:LEU:HD21	1:A:223:TYR:HE2	1.75	0.52
1:A:321:ARG:CA	1:A:360:ILE:HD13	2.39	0.52
1:A:442:ASN:HB3	1:A:496:ASN:O	2.10	0.52
1:A:506:SER:O	1:A:507:PRO:C	2.48	0.52
1:A:537:GLN:HB2	1:A:542:TYR:HD2	1.74	0.52
1:A:117:HIS:CG	1:A:118:TYR:N	2.78	0.52
1:A:437:LEU:C	1:A:438:TYR:CD1	2.84	0.52
1:A:577:PRO:HD2	1:A:580:THR:HG21	1.91	0.52
1:A:84:VAL:HG22	1:A:85:ASP:H	1.75	0.52
1:A:758:ASN:ND2	1:A:758:ASN:C	2.64	0.52
1:A:765:PHE:CE1	1:A:769:GLN:HG3	2.45	0.52
1:A:158:ASP:O	1:A:161:SER:HB3	2.10	0.51
1:A:170:PHE:HB2	1:A:243:TYR:CZ	2.45	0.51
1:A:398:LEU:HB3	1:A:401:SER:HB2	1.92	0.51
1:A:686:HIS:O	1:A:689:GLY:N	2.43	0.51
1:A:707:LEU:O	1:A:710:ASN:N	2.41	0.51
1:A:223:TYR:O	1:A:224:TYR:C	2.48	0.51
1:A:379:LEU:C	1:A:381:LEU:H	2.11	0.51
1:A:486:VAL:N	1:A:519:LEU:O	2.41	0.51
1:A:532:VAL:HG22	1:A:545:ILE:HA	1.91	0.51
1:A:739:GLU:CG	1:A:742:ARG:HH21	2.22	0.51
1:A:98:SER:O	1:A:100:ASP:N	2.43	0.51
1:A:664:ARG:HD2	1:A:694:ASP:OD1	2.10	0.51
1:A:74:TYR:O	1:A:77:ILE:HB	2.10	0.51
1:A:769:GLN:O	1:A:772:PHE:HB3	2.10	0.51
1:A:170:PHE:CE1	1:A:217:PHE:HB2	2.45	0.51
1:A:668:LEU:C	1:A:668:LEU:HD23	2.30	0.51
1:A:218:ALA:O	1:A:219:LYS:C	2.49	0.51
1:A:534:ILE:HG22	1:A:543:ILE:HA	1.91	0.51
1:A:653:VAL:CG1	1:A:654:HIS:H	2.24	0.51
1:A:189:LEU:O	1:A:190:PHE:CD1	2.63	0.51
1:A:205:PHE:C	1:A:207:GLU:H	2.12	0.51
1:A:744:MET:CG	1:A:763:PHE:HE2	2.24	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:151:ILE:HA	1:A:154:ILE:HG22	1.92	0.51
1:A:153:LYS:C	1:A:155:LEU:N	2.65	0.51
1:A:248:ASN:HA	1:A:252:ILE:HG12	1.93	0.51
1:A:300:ILE:CD1	1:A:300:ILE:O	2.59	0.51
1:A:488:ILE:O	1:A:489:ASN:CG	2.50	0.51
1:A:425:GLN:O	1:A:426:SER:O	2.29	0.50
1:A:392:LEU:HD23	1:A:482:ASN:HA	1.92	0.50
1:A:127:PRO:O	1:A:128:VAL:HG13	2.12	0.50
1:A:287:GLU:O	1:A:291:GLY:N	2.44	0.50
1:A:603:LEU:HD13	1:A:631:PHE:HZ	1.76	0.50
1:A:635:THR:O	1:A:638:ASN:N	2.44	0.50
1:A:117:HIS:CG	1:A:118:TYR:H	2.30	0.50
1:A:233:LEU:CD1	1:A:237:ALA:HB3	2.40	0.50
1:A:293:LEU:HD13	1:A:293:LEU:O	2.10	0.50
1:A:715:ILE:HG23	1:A:716:ASP:N	2.26	0.50
1:A:709:THR:HA	1:A:714:PHE:CD2	2.47	0.50
1:A:331:SER:HB3	2:B:6:LYS:CB	2.42	0.50
1:A:603:LEU:O	1:A:606:TRP:HB3	2.12	0.50
1:A:129:LEU:N	1:A:129:LEU:HD23	2.17	0.50
1:A:196:GLU:O	1:A:197:HIS:C	2.50	0.50
1:A:73:MET:SD	1:A:256:LEU:HA	2.52	0.50
1:A:41:LYS:C	1:A:43:ILE:N	2.65	0.50
1:A:456:ASP:OD2	1:A:458:THR:HB	2.12	0.50
1:A:274:ILE:C	1:A:274:ILE:HD13	2.32	0.50
1:A:334:GLU:CG	1:A:383:ILE:HD12	2.42	0.50
1:A:774:ILE:HG22	1:A:774:ILE:O	2.12	0.50
1:A:427:ILE:O	1:A:428:GLY:C	2.49	0.49
1:A:704:GLN:O	1:A:706:ASP:HB2	2.11	0.49
1:A:245:ASP:O	1:A:247:PHE:N	2.45	0.49
1:A:41:LYS:O	1:A:43:ILE:N	2.44	0.49
1:A:511:ALA:HB1	1:A:520:ILE:O	2.11	0.49
1:A:218:ALA:O	1:A:221:PHE:N	2.45	0.49
1:A:252:ILE:O	1:A:253:ASN:C	2.49	0.49
1:A:275:LYS:O	1:A:278:TYR:N	2.45	0.49
1:A:151:ILE:C	1:A:154:ILE:HG22	2.32	0.49
1:A:292:LEU:HA	1:A:295:LYS:CB	2.42	0.49
1:A:437:LEU:HD23	1:A:486:VAL:CG2	2.42	0.49
1:A:46:ILE:C	1:A:48:VAL:N	2.61	0.49
1:A:769:GLN:HA	1:A:772:PHE:HB3	1.94	0.49
1:A:620:ASN:O	1:A:621:TYR:C	2.50	0.49
1:A:603:LEU:HD12	1:A:684:PHE:HE1	1.77	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:334:GLU:HG2	1:A:383:ILE:CD1	2.42	0.49
1:A:432:TYR:N	1:A:432:TYR:HD2	1.95	0.49
1:A:56:LYS:O	1:A:60:GLU:N	2.43	0.49
1:A:233:LEU:O	1:A:234:GLN:C	2.50	0.49
1:A:563:GLN:NE2	1:A:585:PHE:H	2.10	0.49
1:A:589:ASN:HB2	1:A:633:ASP:OD1	2.12	0.49
1:A:104:ILE:CD1	1:A:114:LEU:HD22	2.41	0.49
1:A:132:GLN:CD	1:A:133:SER:H	2.15	0.49
1:A:166:PRO:HB3	1:A:170:PHE:CD1	2.48	0.49
1:A:307:ILE:CG2	1:A:308:ILE:H	2.23	0.49
1:A:510:ARG:HD3	1:A:522:GLN:HE22	1.78	0.49
1:A:758:ASN:HD22	1:A:758:ASN:C	2.16	0.49
1:A:336:GLU:C	1:A:338:LEU:H	2.16	0.49
1:A:436:TYR:HD1	1:A:436:TYR:H	1.61	0.49
1:A:486:VAL:O	1:A:518:LYS:HA	2.12	0.49
1:A:572:LYS:O	1:A:573:ALA:C	2.52	0.49
1:A:630:VAL:HG23	1:A:666:ILE:O	2.13	0.49
1:A:118:TYR:O	1:A:119:VAL:CB	2.60	0.49
1:A:411:GLN:O	1:A:413:LYS:N	2.46	0.49
1:A:451:GLY:O	1:A:452:ALA:C	2.51	0.49
1:A:578:LYS:O	1:A:579:TYR:HB2	2.12	0.49
1:A:74:TYR:CE1	1:A:154:ILE:CD1	2.94	0.48
1:A:46:ILE:HB	1:A:48:VAL:HG23	1.95	0.48
1:A:474:ASN:O	1:A:594:ASN:HB2	2.13	0.48
1:A:436:TYR:CD2	1:A:504:GLN:HB2	2.48	0.48
1:A:72:GLU:C	1:A:74:TYR:N	2.67	0.48
2:B:9:LEU:CB	2:B:10:PRO:CD	2.90	0.48
1:A:205:PHE:HD2	1:A:205:PHE:O	1.96	0.48
1:A:325:ASP:N	1:A:325:ASP:OD2	2.44	0.48
1:A:340:LYS:C	1:A:342:GLN:N	2.65	0.48
1:A:502:ARG:O	1:A:502:ARG:HG2	2.13	0.48
1:A:514:LEU:O	1:A:515:GLU:C	2.50	0.48
1:A:487:ASP:OD1	1:A:518:LYS:HE2	2.14	0.48
1:A:658:LEU:HD11	1:A:660:VAL:HG23	1.96	0.48
1:A:70:VAL:HG23	1:A:252:ILE:HG13	1.95	0.48
1:A:142:GLU:O	1:A:145:LEU:N	2.41	0.48
1:A:566:ILE:CB	1:A:600:TYR:HE1	2.24	0.48
1:A:630:VAL:HG11	1:A:641:GLU:OE1	2.13	0.48
1:A:81:ILE:HA	1:A:129:LEU:HD21	1.94	0.48
1:A:167:TYR:CE2	1:A:203:VAL:HG13	2.48	0.48
1:A:663:SER:O	1:A:665:SER:N	2.47	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:170:PHE:O	1:A:170:PHE:CG	2.66	0.48
1:A:252:ILE:HG22	1:A:253:ASN:N	2.28	0.48
1:A:372:GLU:O	1:A:373:LYS:C	2.51	0.48
1:A:387:ASP:C	1:A:389:ASN:N	2.67	0.48
1:A:482:ASN:C	1:A:482:ASN:HD22	2.16	0.48
1:A:191:THR:CG2	1:A:193:GLN:HB3	2.44	0.48
1:A:292:LEU:HD23	1:A:293:LEU:H	1.78	0.48
1:A:294:LYS:HA	1:A:297:GLN:HB2	1.94	0.48
1:A:599:ALA:CB	1:A:631:PHE:CE1	2.96	0.48
1:A:666:ILE:HG21	1:A:684:PHE:CE2	2.49	0.48
1:A:709:THR:HG22	1:A:714:PHE:CE2	2.49	0.48
1:A:88:ILE:O	1:A:90:LYS:N	2.47	0.48
1:A:177:ILE:HD12	1:A:177:ILE:O	2.14	0.48
1:A:188:LEU:HD13	1:A:188:LEU:O	2.14	0.48
1:A:264:MET:HA	1:A:267:ARG:CB	2.40	0.48
1:A:459:ASP:C	1:A:461:THR:N	2.67	0.48
1:A:201:PHE:HD1	1:A:201:PHE:N	2.10	0.47
1:A:242:ASN:O	1:A:245:ASP:HB3	2.14	0.47
1:A:275:LYS:O	1:A:279:GLN:N	2.46	0.47
1:A:337:PHE:CD2	1:A:337:PHE:O	2.67	0.47
1:A:392:LEU:CD2	1:A:482:ASN:HA	2.43	0.47
1:A:660:VAL:H	1:A:664:ARG:HH21	1.61	0.47
1:A:166:PRO:HB3	1:A:170:PHE:HD1	1.79	0.47
1:A:292:LEU:HD23	1:A:293:LEU:N	2.29	0.47
1:A:436:TYR:N	1:A:436:TYR:HD1	2.11	0.47
1:A:686:HIS:O	1:A:687:GLU:C	2.50	0.47
1:A:247:PHE:CG	1:A:247:PHE:O	2.67	0.47
1:A:381:LEU:HG	1:A:382:ASP:H	1.78	0.47
1:A:308:ILE:CG2	1:A:345:ILE:HD11	2.45	0.47
1:A:481:SER:O	1:A:523:ARG:HG2	2.13	0.47
1:A:500:LYS:NZ	1:A:537:GLN:HE21	2.12	0.47
1:A:628:ARG:NH1	1:A:628:ARG:HG3	2.26	0.47
1:A:337:PHE:CG	1:A:337:PHE:O	2.67	0.47
1:A:756:GLN:O	1:A:760:PRO:CG	2.57	0.47
1:A:773:ILE:O	1:A:775:ASN:N	2.48	0.47
1:A:84:VAL:CG2	1:A:85:ASP:N	2.76	0.47
1:A:107:ILE:HD12	1:A:149:TYR:HB2	1.96	0.47
1:A:186:GLN:HA	1:A:190:PHE:CD1	2.50	0.47
1:A:386:TYR:O	1:A:386:TYR:CG	2.67	0.47
1:A:81:ILE:CB	1:A:129:LEU:HD21	2.44	0.47
1:A:119:VAL:HG23	1:A:131:ILE:HA	1.97	0.47

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:148:TYR:CG	1:A:225:ILE:HD12	2.50	0.47
1:A:387:ASP:C	1:A:389:ASN:H	2.13	0.47
1:A:392:LEU:C	1:A:394:ASP:H	2.17	0.47
1:A:461:THR:HG23	1:A:462:LYS:N	2.30	0.47
1:A:622:LEU:HD23	1:A:664:ARG:HG3	1.95	0.47
1:A:752:ARG:O	1:A:755:VAL:HG23	2.15	0.47
1:A:75:LYS:O	1:A:77:ILE:N	2.43	0.47
1:A:119:VAL:HG11	1:A:147:VAL:HG23	1.96	0.47
1:A:134:SER:C	1:A:136:ASP:N	2.65	0.47
1:A:168:GLN:O	1:A:171:LEU:HB3	2.14	0.47
1:A:174:LEU:CD1	1:A:216:VAL:HG11	2.45	0.47
1:A:279:GLN:O	1:A:280:HIS:C	2.53	0.47
1:A:479:ILE:HG12	1:A:588:HIS:O	2.14	0.47
1:A:679:ASN:HD22	1:A:679:ASN:N	2.12	0.47
1:A:70:VAL:O	1:A:70:VAL:CG1	2.61	0.47
1:A:104:ILE:HG13	1:A:114:LEU:HD22	1.96	0.47
1:A:161:SER:C	1:A:163:ILE:N	2.68	0.47
1:A:392:LEU:HD23	1:A:482:ASN:CA	2.44	0.47
1:A:744:MET:HG2	1:A:763:PHE:CE2	2.48	0.47
1:A:151:ILE:HG12	1:A:151:ILE:O	2.14	0.47
1:A:168:GLN:NE2	1:A:168:GLN:CA	2.78	0.47
1:A:500:LYS:NZ	1:A:537:GLN:HG3	2.30	0.47
1:A:731:THR:O	1:A:732:ASN:HB2	2.14	0.47
1:A:184:ASP:HA	1:A:187:ASP:OD1	2.15	0.46
1:A:38:GLU:C	1:A:40:MET:N	2.69	0.46
1:A:659:TYR:HB2	1:A:664:ARG:NH2	2.16	0.46
1:A:718:PHE:CZ	1:A:730:ARG:HA	2.50	0.46
1:A:294:LYS:C	1:A:296:LEU:N	2.68	0.46
1:A:322:ILE:C	1:A:324:ILE:H	2.16	0.46
1:A:563:GLN:HE22	1:A:584:THR:HA	1.76	0.46
1:A:465:ARG:O	1:A:466:GLY:C	2.52	0.46
1:A:485:ILE:HA	1:A:519:LEU:O	2.15	0.46
1:A:119:VAL:HG11	1:A:147:VAL:CG2	2.45	0.46
1:A:129:LEU:CD2	1:A:129:LEU:N	2.78	0.46
1:A:321:ARG:HA	1:A:360:ILE:HG21	1.96	0.46
1:A:566:ILE:CG2	1:A:567:ASN:N	2.78	0.46
1:A:692:VAL:O	1:A:694:ASP:N	2.48	0.46
1:A:184:ASP:O	1:A:185:GLY:C	2.54	0.46
1:A:278:TYR:CE2	1:A:511:ALA:O	2.68	0.46
1:A:295:LYS:O	1:A:298:ILE:O	2.33	0.46
1:A:494:LEU:N	1:A:494:LEU:HD12	2.31	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:6:LYS:N	2:B:7:PRO:HD3	2.31	0.46
1:A:173:VAL:HG21	1:A:243:TYR:HB2	1.98	0.46
1:A:416:ILE:O	1:A:420:ASP:OD2	2.33	0.46
1:A:484:MET:CE	1:A:590:ARG:NH2	2.79	0.46
1:A:138:VAL:HG13	1:A:139:GLU:N	2.30	0.46
1:A:145:LEU:O	1:A:149:TYR:N	2.45	0.46
1:A:303:LYS:HD2	1:A:306:ASP:HB3	1.97	0.46
1:A:640:ALA:C	1:A:642:GLN:N	2.65	0.46
1:A:69:ASP:HB2	1:A:252:ILE:CG2	2.45	0.46
1:A:386:TYR:CD2	1:A:386:TYR:C	2.88	0.46
1:A:531:ASP:O	1:A:532:VAL:HG23	2.16	0.46
1:A:564:LEU:O	1:A:565:ASN:C	2.54	0.46
1:A:636:LEU:N	1:A:636:LEU:CD1	2.78	0.46
1:A:658:LEU:N	1:A:687:GLU:CD	2.69	0.46
1:A:182:ASP:OD2	1:A:184:ASP:HB3	2.15	0.46
1:A:566:ILE:CG2	1:A:567:ASN:H	2.26	0.46
1:A:651:GLU:O	1:A:652:GLN:CG	2.64	0.46
1:A:688:PHE:O	1:A:691:ALA:N	2.46	0.46
1:A:728:TYR:CD1	1:A:739:GLU:OE2	2.68	0.46
1:A:737:PHE:O	1:A:738:ALA:C	2.54	0.46
1:A:343:ILE:HG13	1:A:344:ASP:N	2.31	0.46
1:A:33:GLU:O	1:A:37:LYS:CB	2.64	0.46
1:A:468:PHE:CZ	1:A:534:ILE:HG23	2.51	0.46
1:A:557:THR:C	1:A:559:ILE:N	2.69	0.46
1:A:599:ALA:CB	1:A:631:PHE:CD1	2.98	0.46
1:A:679:ASN:ND2	1:A:679:ASN:N	2.63	0.46
1:A:736:PHE:O	1:A:740:ALA:HB2	2.16	0.46
1:A:278:TYR:HE2	1:A:511:ALA:O	1.99	0.45
1:A:401:SER:HA	1:A:402:PRO:HD3	1.69	0.45
1:A:587:VAL:HG23	1:A:587:VAL:O	2.15	0.45
1:A:69:ASP:C	1:A:71:LEU:N	2.67	0.45
1:A:728:TYR:O	1:A:730:ARG:N	2.49	0.45
1:A:88:ILE:C	1:A:90:LYS:N	2.68	0.45
1:A:327:SER:C	1:A:329:PHE:H	2.20	0.45
1:A:408:VAL:CG1	1:A:412:TYR:HE1	2.30	0.45
1:A:54:VAL:O	1:A:56:LYS:N	2.49	0.45
1:A:572:LYS:O	1:A:575:GLY:N	2.49	0.45
1:A:651:GLU:O	1:A:652:GLN:HG2	2.17	0.45
1:A:762:THR:C	1:A:764:GLN:N	2.69	0.45
1:A:285:LEU:O	1:A:286:SER:CB	2.62	0.45
1:A:591:TYR:O	1:A:595:ILE:N	2.49	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:9:LEU:HG	2:B:10:PRO:HD2	1.99	0.45
1:A:301:GLU:CB	1:A:302:PRO:HD2	2.46	0.45
1:A:426:SER:O	1:A:427:ILE:HB	2.16	0.45
1:A:538:SER:O	1:A:540:LYS:N	2.49	0.45
1:A:132:GLN:CD	1:A:133:SER:N	2.70	0.45
1:A:168:GLN:HE21	1:A:168:GLN:CA	2.29	0.45
1:A:221:PHE:O	1:A:223:TYR:N	2.50	0.45
1:A:403:SER:O	1:A:652:GLN:NE2	2.44	0.45
1:A:46:ILE:HG22	1:A:83:ILE:HG21	1.99	0.45
1:A:170:PHE:CZ	1:A:217:PHE:HA	2.52	0.45
1:A:203:VAL:O	1:A:205:PHE:N	2.50	0.45
1:A:263:ARG:HE	1:A:264:MET:HE3	1.81	0.45
1:A:454:LEU:CD1	1:A:463:ILE:HG23	2.47	0.45
1:A:488:ILE:CG1	1:A:488:ILE:O	2.61	0.45
1:A:564:LEU:C	1:A:566:ILE:N	2.70	0.45
1:A:773:ILE:C	1:A:775:ASN:H	2.19	0.45
1:A:107:ILE:CD1	1:A:145:LEU:HG	2.47	0.45
1:A:209:ASN:C	1:A:211:ASN:N	2.69	0.45
1:A:46:ILE:CD1	1:A:46:ILE:H	2.23	0.45
1:A:622:LEU:HD12	1:A:622:LEU:H	1.82	0.45
1:A:104:ILE:HD11	1:A:114:LEU:CD1	2.44	0.45
1:A:289:GLY:O	1:A:292:LEU:HD23	2.17	0.45
1:A:294:LYS:O	1:A:295:LYS:C	2.55	0.45
1:A:311:LEU:CD2	1:A:319:LEU:HD12	2.47	0.45
1:A:471:PHE:HD2	1:A:591:TYR:OH	2.00	0.45
1:A:718:PHE:O	1:A:722:GLY:HA3	2.17	0.45
2:B:15:ASN:HB3	2:B:16:PRO:HD2	1.99	0.45
1:A:308:ILE:HG23	1:A:345:ILE:HD11	1.99	0.45
1:A:415:ASP:O	1:A:419:ILE:HG22	2.17	0.45
1:A:737:PHE:HA	1:A:740:ALA:HB3	1.99	0.45
1:A:134:SER:C	1:A:136:ASP:H	2.19	0.44
1:A:415:ASP:C	1:A:417:GLN:N	2.70	0.44
1:A:442:ASN:ND2	1:A:442:ASN:N	2.63	0.44
1:A:454:LEU:HD11	1:A:543:ILE:CD1	2.47	0.44
1:A:459:ASP:O	1:A:460:ASN:C	2.54	0.44
1:A:615:ILE:HA	1:A:618:VAL:CG1	2.48	0.44
1:A:213:VAL:O	1:A:214:GLN:C	2.56	0.44
1:A:145:LEU:HD21	1:A:223:TYR:CE2	2.52	0.44
1:A:224:TYR:CD1	1:A:224:TYR:O	2.69	0.44
1:A:229:HIS:CD2	1:A:229:HIS:N	2.83	0.44
1:A:533:GLN:OE1	1:A:533:GLN:HA	2.17	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:598:SER:O	1:A:599:ALA:C	2.55	0.44
1:A:649:ILE:C	1:A:651:GLU:N	2.71	0.44
1:A:43:ILE:HB	1:A:80:LYS:N	2.32	0.44
1:A:157:ARG:HG3	1:A:158:ASP:OD2	2.17	0.44
1:A:209:ASN:O	1:A:212:GLU:N	2.39	0.44
1:A:336:GLU:C	1:A:338:LEU:N	2.70	0.44
1:A:599:ALA:HB1	1:A:631:PHE:CE1	2.53	0.44
1:A:262:GLN:HA	1:A:262:GLN:OE1	2.17	0.44
1:A:278:TYR:HH	1:A:511:ALA:H	1.65	0.44
1:A:559:ILE:O	1:A:563:GLN:N	2.50	0.44
1:A:478:SER:HG	1:A:590:ARG:CA	2.30	0.44
1:A:770:ILE:C	1:A:772:PHE:H	2.20	0.44
1:A:244:MET:CE	1:A:248:ASN:ND2	2.80	0.44
1:A:271:TRP:CD1	1:A:271:TRP:C	2.90	0.44
1:A:443:ILE:HD11	1:A:471:PHE:CE2	2.53	0.44
1:A:322:ILE:HD13	1:A:322:ILE:O	2.18	0.44
1:A:319:LEU:HD13	1:A:345:ILE:CD1	2.47	0.44
1:A:369:SER:HB3	1:A:372:GLU:CB	2.47	0.44
1:A:603:LEU:HD12	1:A:684:PHE:CE1	2.53	0.44
2:B:15:ASN:HB3	2:B:16:PRO:CD	2.47	0.44
1:A:239:GLU:O	1:A:240:ALA:C	2.56	0.44
1:A:270:LYS:O	1:A:272:GLU:N	2.50	0.44
1:A:278:TYR:HE2	1:A:512:GLY:HA2	1.82	0.44
1:A:303:LYS:HD2	1:A:306:ASP:CG	2.38	0.44
1:A:616:LYS:HZ3	1:A:616:LYS:HB3	1.79	0.44
1:A:630:VAL:HB	1:A:667:LEU:HD23	1.99	0.44
1:A:660:VAL:N	1:A:664:ARG:HH21	2.16	0.44
1:A:150:GLU:O	1:A:153:LYS:N	2.51	0.44
1:A:256:LEU:HD13	1:A:256:LEU:O	2.18	0.44
1:A:263:ARG:NE	1:A:264:MET:CE	2.81	0.44
1:A:620:ASN:HA	1:A:623:VAL:CG1	2.38	0.44
1:A:649:ILE:O	1:A:651:GLU:N	2.51	0.44
1:A:730:ARG:C	1:A:732:ASN:H	2.21	0.44
1:A:153:LYS:O	1:A:155:LEU:N	2.51	0.44
1:A:106:ASP:O	1:A:109:GLY:N	2.51	0.43
1:A:340:LYS:O	1:A:343:ILE:HG12	2.18	0.43
1:A:387:ASP:OD1	1:A:390:GLN:HB3	2.18	0.43
1:A:544:ARG:O	1:A:544:ARG:CG	2.66	0.43
1:A:148:TYR:HB3	1:A:225:ILE:HD11	1.93	0.43
1:A:404:ILE:HG23	1:A:405:ASN:N	2.31	0.43
1:A:546:ASP:C	1:A:546:ASP:OD2	2.56	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:55:LYS:CA	1:A:55:LYS:HE2	2.48	0.43
1:A:560:GLN:HA	1:A:563:GLN:CB	2.39	0.43
1:A:704:GLN:O	1:A:705:SER:C	2.56	0.43
1:A:99:GLU:O	1:A:102:LYS:HB2	2.18	0.43
2:B:8:VAL:O	2:B:9:LEU:CD1	2.66	0.43
1:A:636:LEU:HD22	1:A:655:SER:H	1.83	0.43
1:A:259:LEU:O	1:A:259:LEU:HD12	2.18	0.43
1:A:294:LYS:O	1:A:297:GLN:N	2.51	0.43
1:A:438:TYR:CD1	1:A:438:TYR:N	2.87	0.43
1:A:535:ILE:N	1:A:535:ILE:CD1	2.75	0.43
1:A:81:ILE:CG2	1:A:129:LEU:HD21	2.48	0.43
1:A:330:LEU:CD1	1:A:330:LEU:N	2.81	0.43
1:A:415:ASP:O	1:A:418:ASN:N	2.49	0.43
1:A:419:ILE:O	1:A:422:LEU:CB	2.67	0.43
1:A:567:ASN:O	1:A:568:GLN:C	2.56	0.43
1:A:568:GLN:O	1:A:570:TRP:N	2.52	0.43
1:A:74:TYR:HE1	1:A:154:ILE:HD11	1.80	0.43
1:A:55:LYS:CD	1:A:134:SER:H	2.27	0.43
1:A:383:ILE:HG13	1:A:383:ILE:O	2.18	0.43
1:A:477:TYR:CE1	1:A:593:SER:HA	2.54	0.43
2:B:4:ARG:C	2:B:4:ARG:HD2	2.38	0.43
1:A:296:LEU:HD11	1:A:389:ASN:HD22	1.83	0.43
1:A:477:TYR:HB2	1:A:555:ILE:HD12	2.01	0.43
1:A:275:LYS:O	1:A:277:HIS:N	2.52	0.43
1:A:441:MET:SD	1:A:501:TRP:NE1	2.92	0.43
1:A:612:SER:O	1:A:614:LEU:N	2.51	0.43
1:A:740:ALA:O	1:A:743:LEU:HB2	2.18	0.43
1:A:762:THR:O	1:A:764:GLN:N	2.52	0.43
1:A:134:SER:O	1:A:136:ASP:N	2.52	0.43
1:A:312:SER:HB3	1:A:315:GLU:CB	2.49	0.43
1:A:450:LEU:O	1:A:451:GLY:C	2.57	0.43
1:A:484:MET:CB	1:A:521:LEU:HD12	2.49	0.43
1:A:529:ILE:O	1:A:529:ILE:HG22	2.17	0.43
1:A:70:VAL:CG2	1:A:252:ILE:HG13	2.49	0.43
1:A:716:ASP:O	1:A:717:ILE:C	2.57	0.43
1:A:166:PRO:HB3	1:A:170:PHE:CB	2.43	0.43
1:A:219:LYS:O	1:A:220:ALA:C	2.57	0.43
1:A:233:LEU:HB3	1:A:234:GLN:H	1.70	0.43
1:A:264:MET:SD	1:A:264:MET:N	2.91	0.43
1:A:501:TRP:CZ2	1:A:545:ILE:HG21	2.53	0.43
1:A:625:GLY:C	1:A:626:ASN:OD1	2.57	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:66:VAL:O	1:A:67:PRO:C	2.57	0.43
1:A:707:LEU:C	1:A:709:THR:N	2.71	0.43
1:A:759:ALA:O	1:A:761:LYS:N	2.52	0.43
1:A:301:GLU:CG	1:A:302:PRO:HD2	2.49	0.42
1:A:311:LEU:HD21	1:A:319:LEU:HD12	2.01	0.42
1:A:423:LEU:N	1:A:423:LEU:HD12	2.32	0.42
1:A:423:LEU:HD23	1:A:520:ILE:HG23	2.00	0.42
1:A:469:ASN:O	1:A:470:GLU:C	2.56	0.42
1:A:392:LEU:HD23	1:A:482:ASN:HB2	2.01	0.42
1:A:488:ILE:O	1:A:489:ASN:CB	2.67	0.42
1:A:535:ILE:HD13	1:A:542:TYR:O	2.19	0.42
1:A:170:PHE:CD1	1:A:217:PHE:HD1	2.37	0.42
1:A:32:GLN:C	1:A:34:GLU:N	2.72	0.42
1:A:648:GLU:OE1	1:A:648:GLU:HA	2.18	0.42
1:A:75:LYS:C	1:A:77:ILE:N	2.72	0.42
1:A:293:LEU:HA	1:A:293:LEU:HD22	1.87	0.42
1:A:308:ILE:C	1:A:310:SER:H	2.22	0.42
1:A:406:LEU:O	1:A:409:ARG:HB3	2.19	0.42
1:A:760:PRO:C	1:A:762:THR:N	2.70	0.42
1:A:151:ILE:CA	1:A:154:ILE:HG22	2.49	0.42
1:A:391:ARG:O	1:A:391:ARG:CD	2.68	0.42
1:A:463:ILE:N	1:A:541:GLU:OE1	2.43	0.42
1:A:663:SER:O	1:A:664:ARG:C	2.57	0.42
1:A:715:ILE:CG2	1:A:716:ASP:N	2.82	0.42
1:A:175:ASN:C	1:A:177:ILE:N	2.72	0.42
1:A:178:LYS:CD	1:A:201:PHE:HE1	2.31	0.42
1:A:84:VAL:CG2	1:A:85:ASP:H	2.32	0.42
1:A:178:LYS:NZ	1:A:179:ASN:HB3	2.35	0.42
1:A:359:ARG:HA	1:A:362:VAL:HG23	2.02	0.42
1:A:570:TRP:O	1:A:571:ASN:C	2.58	0.42
1:A:773:ILE:C	1:A:775:ASN:N	2.73	0.42
1:A:151:ILE:O	1:A:151:ILE:HG23	2.19	0.42
1:A:307:ILE:CG2	1:A:308:ILE:N	2.81	0.42
1:A:351:GLU:C	1:A:353:GLU:N	2.72	0.42
1:A:477:TYR:O	1:A:593:SER:HB2	2.18	0.42
1:A:63:LEU:O	1:A:64:GLU:C	2.58	0.42
1:A:205:PHE:O	1:A:209:ASN:HB2	2.19	0.42
1:A:332:THR:O	1:A:333:GLU:C	2.57	0.42
1:A:398:LEU:O	1:A:401:SER:N	2.36	0.42
1:A:393:GLN:HG3	1:A:589:ASN:OD1	2.20	0.42
1:A:620:ASN:O	1:A:623:VAL:HG12	2.18	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:263:ARG:NE	1:A:264:MET:HE1	2.35	0.42
1:A:75:LYS:HA	1:A:79:GLY:CA	2.49	0.42
1:A:96:ALA:O	1:A:98:SER:N	2.52	0.42
1:A:186:GLN:HA	1:A:190:PHE:CE1	2.55	0.42
1:A:276:GLN:HA	1:A:276:GLN:HE21	1.85	0.42
1:A:331:SER:O	1:A:332:THR:C	2.57	0.42
1:A:397:GLY:C	1:A:399:ILE:H	2.22	0.42
1:A:443:ILE:HG12	1:A:454:LEU:CD2	2.43	0.42
1:A:453:ASP:N	1:A:453:ASP:OD1	2.51	0.42
1:A:527:LEU:HD23	1:A:549:VAL:HG12	1.99	0.42
1:A:566:ILE:HB	1:A:600:TYR:CE1	2.50	0.41
1:A:620:ASN:CA	1:A:623:VAL:HG12	2.40	0.41
1:A:697:GLY:HA3	1:A:706:ASP:O	2.20	0.41
1:A:723:SER:C	1:A:724:ASN:OD1	2.58	0.41
1:A:72:GLU:O	1:A:75:LYS:N	2.52	0.41
1:A:139:GLU:O	1:A:140:ASN:C	2.57	0.41
1:A:266:SER:O	1:A:267:ARG:C	2.57	0.41
1:A:305:ASP:O	1:A:308:ILE:N	2.52	0.41
1:A:147:VAL:O	1:A:147:VAL:CG1	2.68	0.41
1:A:146:ASN:C	1:A:148:TYR:N	2.73	0.41
1:A:215:GLU:O	1:A:216:VAL:C	2.57	0.41
1:A:456:ASP:OD2	1:A:458:THR:C	2.59	0.41
1:A:50:GLY:O	1:A:52:GLU:N	2.54	0.41
1:A:596:VAL:O	1:A:598:SER:N	2.53	0.41
1:A:649:ILE:C	1:A:651:GLU:H	2.23	0.41
1:A:102:LYS:O	1:A:104:ILE:HG13	2.21	0.41
1:A:55:LYS:CE	1:A:134:SER:H	2.33	0.41
1:A:32:GLN:O	1:A:34:GLU:N	2.53	0.41
1:A:55:LYS:O	1:A:56:LYS:C	2.57	0.41
1:A:587:VAL:CG2	1:A:587:VAL:O	2.68	0.41
1:A:636:LEU:HB2	1:A:654:HIS:HA	2.02	0.41
1:A:746:SER:C	1:A:748:ASP:N	2.73	0.41
1:A:221:PHE:CA	1:A:244:MET:SD	3.08	0.41
1:A:173:VAL:C	1:A:175:ASN:N	2.72	0.41
1:A:190:PHE:HB3	1:A:191:THR:H	1.48	0.41
1:A:223:TYR:O	1:A:226:GLU:N	2.53	0.41
1:A:305:ASP:O	1:A:309:HIS:N	2.38	0.41
1:A:465:ARG:O	1:A:466:GLY:O	2.38	0.41
1:A:501:TRP:CE2	1:A:545:ILE:HG21	2.56	0.41
1:A:54:VAL:O	1:A:55:LYS:C	2.58	0.41
1:A:134:SER:HB2	1:A:136:ASP:OD2	2.20	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:164:ASN:OD1	1:A:536:LYS:HE2	2.20	0.41
1:A:557:THR:C	1:A:559:ILE:H	2.24	0.41
1:A:585:PHE:CE1	1:A:596:VAL:CG2	3.03	0.41
1:A:599:ALA:O	1:A:602:ILE:N	2.54	0.41
1:A:62:LEU:O	1:A:148:TYR:OH	2.23	0.41
1:A:60:GLU:O	1:A:64:GLU:HG2	2.21	0.41
1:A:257:GLU:C	1:A:259:LEU:N	2.56	0.41
1:A:560:GLN:O	1:A:562:ALA:N	2.54	0.41
1:A:631:PHE:N	1:A:631:PHE:CD2	2.88	0.41
1:A:188:LEU:HD12	1:A:189:LEU:HG	2.03	0.41
1:A:252:ILE:C	1:A:254:LEU:N	2.74	0.41
1:A:407:ASP:O	1:A:408:VAL:C	2.59	0.41
1:A:202:SER:O	1:A:204:GLU:N	2.54	0.41
1:A:167:TYR:HE2	1:A:203:VAL:HG13	1.86	0.41
1:A:351:GLU:C	1:A:353:GLU:H	2.23	0.41
1:A:464:ASN:O	1:A:465:ARG:C	2.58	0.41
1:A:278:TYR:OH	1:A:511:ALA:O	2.38	0.41
1:A:599:ALA:O	1:A:600:TYR:C	2.60	0.41
1:A:294:LYS:O	1:A:296:LEU:N	2.54	0.41
1:A:467:ILE:HD13	1:A:467:ILE:H	1.83	0.41
1:A:102:LYS:HA	1:A:114:LEU:CD2	2.50	0.40
1:A:119:VAL:CG2	1:A:131:ILE:HA	2.51	0.40
1:A:170:PHE:O	1:A:174:LEU:HB3	2.20	0.40
1:A:226:GLU:OE2	1:A:228:GLN:N	2.54	0.40
1:A:267:ARG:NH2	1:A:490:GLU:O	2.54	0.40
1:A:494:LEU:N	1:A:494:LEU:CD1	2.84	0.40
1:A:567:ASN:HD21	1:A:583:ILE:N	2.14	0.40
1:A:96:ALA:O	1:A:97:LEU:C	2.59	0.40
1:A:104:ILE:CG1	1:A:114:LEU:HD22	2.50	0.40
1:A:197:HIS:HA	1:A:198:PRO:HD3	1.92	0.40
1:A:276:GLN:HE21	1:A:276:GLN:CA	2.34	0.40
1:A:386:TYR:OH	1:A:415:ASP:OD1	2.39	0.40
1:A:628:ARG:NH1	1:A:628:ARG:CG	2.79	0.40
1:A:292:LEU:O	1:A:294:LYS:N	2.54	0.40
1:A:38:GLU:O	1:A:40:MET:N	2.54	0.40
1:A:205:PHE:O	1:A:205:PHE:CD2	2.74	0.40
1:A:461:THR:CG2	1:A:462:LYS:N	2.84	0.40
1:A:599:ALA:HB1	1:A:631:PHE:HE1	1.85	0.40
1:A:714:PHE:O	1:A:715:ILE:C	2.59	0.40
1:A:59:ALA:HB2	1:A:83:ILE:HD12	2.02	0.40

There are no symmetry-related clashes.



## 5.3 Torsion angles

### 5.3.1 Protein backbone

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	746/776 (96%)	376 (50%)	219 (29%)	151 (20%)	0	2
2	B	14/16 (88%)	5 (36%)	3 (21%)	6 (43%)	0	0
All	All	760/792 (96%)	381 (50%)	222 (29%)	157 (21%)	0	2

All (157) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	55	LYS
1	A	70	VAL
1	A	97	LEU
1	A	114	LEU
1	A	119	VAL
1	A	159	ILE
1	A	164	ASN
1	A	169	LYS
1	A	170	PHE
1	A	183	SER
1	A	198	PRO
1	A	199	THR
1	A	203	VAL
1	A	234	GLN
1	A	238	PRO
1	A	246	LYS
1	A	253	ASN
1	A	276	GLN
1	A	301	GLU
1	A	324	ILE
1	A	350	SER
1	A	382	ASP
1	A	388	ILE
1	A	396	GLY
1	A	399	ILE

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	426	SER
1	A	427	ILE
1	A	443	ILE
1	A	460	ASN
1	A	489	ASN
1	A	494	LEU
1	A	522	GLN
1	A	539	GLU
1	A	572	LYS
1	A	590	ARG
1	A	593	SER
1	A	599	ALA
1	A	641	GLU
1	A	646	GLN
1	A	647	ASP
1	A	653	VAL
1	A	655	SER
1	A	664	ARG
1	A	705	SER
1	A	723	SER
1	A	730	ARG
1	A	745	HIS
1	A	746	SER
2	B	8	VAL
2	B	10	PRO
2	B	11	ALA
2	B	12	LEU
2	B	14	ILE
1	A	32	GLN
1	A	33	GLU
1	A	37	LYS
1	A	77	ILE
1	A	89	THR
1	A	99	GLU
1	A	115	HIS
1	A	117	HIS
1	A	151	ILE
1	A	154	ILE
1	A	165	GLN
1	A	174	LEU
1	A	187	ASP
1	A	207	GLU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	222	ALA
1	A	224	TYR
1	A	241	PHE
1	A	250	GLN
1	A	255	SER
1	A	258	GLU
1	A	265	LEU
1	A	267	ARG
1	A	277	HIS
1	A	286	SER
1	A	326	SER
1	A	367	PRO
1	A	380	LYS
1	A	389	ASN
1	A	398	LEU
1	A	428	GLY
1	A	456	ASP
1	A	459	ASP
1	A	466	GLY
1	A	508	ASP
1	A	516	ASN
1	A	531	ASP
1	A	558	LYS
1	A	569	GLU
1	A	602	ILE
1	A	681	SER
1	A	729	GLY
1	A	758	ASN
1	A	38	GLU
1	A	42	HIS
1	A	51	GLU
1	A	193	GLN
1	A	204	GLU
1	A	233	LEU
1	A	245	ASP
1	A	247	PHE
1	A	270	LYS
1	A	283	ASP
1	A	439	GLU
1	A	452	ALA
1	A	473	LYS
1	A	505	LEU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	565	ASN
1	A	613	ASP
1	A	671	PRO
1	A	682	GLU
1	A	693	ASP
1	A	731	THR
1	A	761	LYS
1	A	762	THR
1	A	774	ILE
1	A	76	ALA
1	A	143	LYS
1	A	306	ASP
1	A	392	LEU
1	A	524	ASN
1	A	597	GLU
1	A	634	ILE
1	A	650	TYR
1	A	652	GLN
1	A	700	LEU
1	A	763	PHE
2	B	4	ARG
1	A	74	TYR
1	A	271	TRP
1	A	285	LEU
1	A	302	PRO
1	A	332	THR
1	A	381	LEU
1	A	490	GLU
1	A	529	ILE
1	A	532	VAL
1	A	545	ILE
1	A	568	GLN
1	A	608	ASN
1	A	732	ASN
1	A	766	ILE
1	A	47	GLU
1	A	73	MET
1	A	333	GLU
1	A	614	LEU
1	A	636	LEU
1	A	770	ILE
1	A	50	GLY

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	67	PRO
1	A	104	ILE
1	A	173	VAL
1	A	300	ILE
1	A	54	VAL
1	A	675	VAL

### 5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	553/710 (78%)	457 (83%)	96 (17%)	2	18
2	B	12/14 (86%)	8 (67%)	4 (33%)	0	3
All	All	565/724 (78%)	465 (82%)	100 (18%)	2	18

All (100) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	35	HIS
1	A	43	ILE
1	A	46	ILE
1	A	51	GLU
1	A	55	LYS
1	A	60	GLU
1	A	132	GLN
1	A	133	SER
1	A	164	ASN
1	A	176	THR
1	A	182	ASP
1	A	189	LEU
1	A	201	PHE
1	A	205	PHE
1	A	235	LEU
1	A	236	TYR
1	A	252	ILE

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	257	GLU
1	A	261	ASP
1	A	262	GLN
1	A	264	MET
1	A	274	ILE
1	A	276	GLN
1	A	285	LEU
1	A	292	LEU
1	A	293	LEU
1	A	297	GLN
1	A	301	GLU
1	A	307	ILE
1	A	322	ILE
1	A	329	PHE
1	A	330	LEU
1	A	334	GLU
1	A	349	LEU
1	A	382	ASP
1	A	387	ASP
1	A	394	ASP
1	A	419	ILE
1	A	423	LEU
1	A	425	GLN
1	A	430	THR
1	A	432	TYR
1	A	436	TYR
1	A	438	TYR
1	A	442	ASN
1	A	445	ASN
1	A	447	THR
1	A	453	ASP
1	A	454	LEU
1	A	459	ASP
1	A	464	ASN
1	A	474	ASN
1	A	479	ILE
1	A	482	ASN
1	A	485	ILE
1	A	495	ASP
1	A	503	ILE
1	A	506	SER
1	A	507	PRO

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	510	ARG
1	A	513	TYR
1	A	521	LEU
1	A	523	ARG
1	A	528	GLU
1	A	535	ILE
1	A	538	SER
1	A	553	SER
1	A	556	ASP
1	A	566	ILE
1	A	567	ASN
1	A	582	LEU
1	A	584	THR
1	A	588	HIS
1	A	591	TYR
1	A	596	VAL
1	A	597	GLU
1	A	603	LEU
1	A	620	ASN
1	A	621	TYR
1	A	630	VAL
1	A	633	ASP
1	A	635	THR
1	A	642	GLN
1	A	644	THR
1	A	649	ILE
1	A	675	VAL
1	A	678	ARG
1	A	679	ASN
1	A	685	ILE
1	A	690	HIS
1	A	701	ASP
1	A	706	ASP
1	A	728	TYR
1	A	744	MET
1	A	758	ASN
1	A	767	ASN
2	B	2	LEU
2	B	4	ARG
2	B	5	ARG
2	B	9	LEU

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (31) such

sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	168	GLN
1	A	276	GLN
1	A	277	HIS
1	A	279	GLN
1	A	297	GLN
1	A	384	GLN
1	A	389	ASN
1	A	393	GLN
1	A	405	ASN
1	A	417	GLN
1	A	425	GLN
1	A	442	ASN
1	A	445	ASN
1	A	464	ASN
1	A	469	ASN
1	A	474	ASN
1	A	482	ASN
1	A	504	GLN
1	A	522	GLN
1	A	537	GLN
1	A	563	GLN
1	A	567	ASN
1	A	571	ASN
1	A	588	HIS
1	A	638	ASN
1	A	645	HIS
1	A	679	ASN
1	A	710	ASN
1	A	732	ASN
1	A	756	GLN
2	B	15	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 [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 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.