



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Feb 1, 2016 – 12:46 PM GMT

PDB ID : 3S4D  
Title : Lactose phosphorylase in a ternary complex with cellobiose and sulfate  
Authors : Van Hoorebeke, A.; Stout, J.; Soetaert, W.; Van Beeumen, J.; Desmet, T.; Savvides, S.  
Deposited on : 2011-05-19  
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](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 : 1.7 (RC4), CSD as536be (2015)  
Xtriage (Phenix) : 1.9-1692  
EDS : rb-20026688  
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)  
Refmac : 5.8.0135  
CCP4 : 6.5.0  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : trunk26865

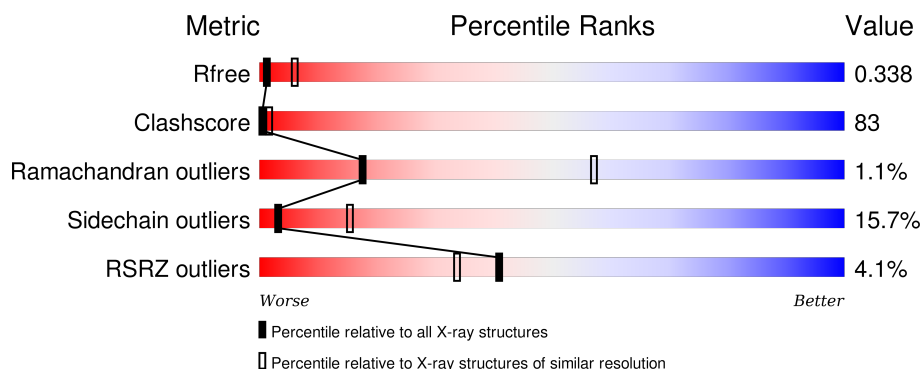
# 1 Overall quality at a glance

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))
$R_{free}$	91344	2060 (3.40-3.20)
Clashscore	102246	1058 (3.38-3.22)
Ramachandran outliers	100387	1038 (3.38-3.22)
Sidechain outliers	100360	1037 (3.38-3.22)
RSRZ outliers	91569	2070 (3.40-3.20)

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.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	822	

The following table lists non-polymeric compounds, carbohydrate monomers and non-standard residues in protein, DNA, RNA chains that are outliers for geometric or electron-density-fit criteria:

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
2	SO4	A	823	-	-	X	-

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
3	CBI	A	824	-	-	X	-

## 2 Entry composition [i](#)

There are 4 unique types of molecules in this entry. The entry contains 6328 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 Lactose Phosphorylase.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	822	6296	3985	1069	1225	17	1	0	0

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

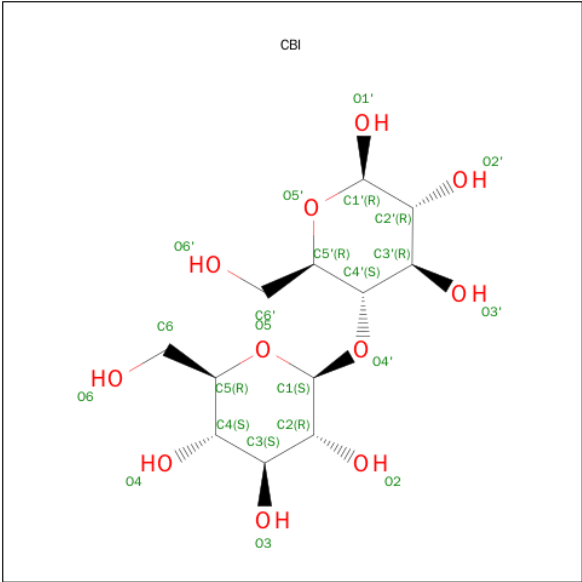
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	508	ILE	THR	ENGINEERED MUTATION	UNP Q7WTR6
A	667	ALA	ASN	ENGINEERED MUTATION	UNP Q7WTR6

- Molecule 2 is SULFATE ION (three-letter code: SO<sub>4</sub>) (formula: O<sub>4</sub>S).



Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
			Total	O	S		
2	A	1	5	4	1	0	0

- Molecule 3 is SUGAR (CELLOBIOSE) (three-letter code: CBI) (formula: C<sub>12</sub>H<sub>22</sub>O<sub>11</sub>).



Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
3	A	1	Total	C	O	0	0
			23	12	11		

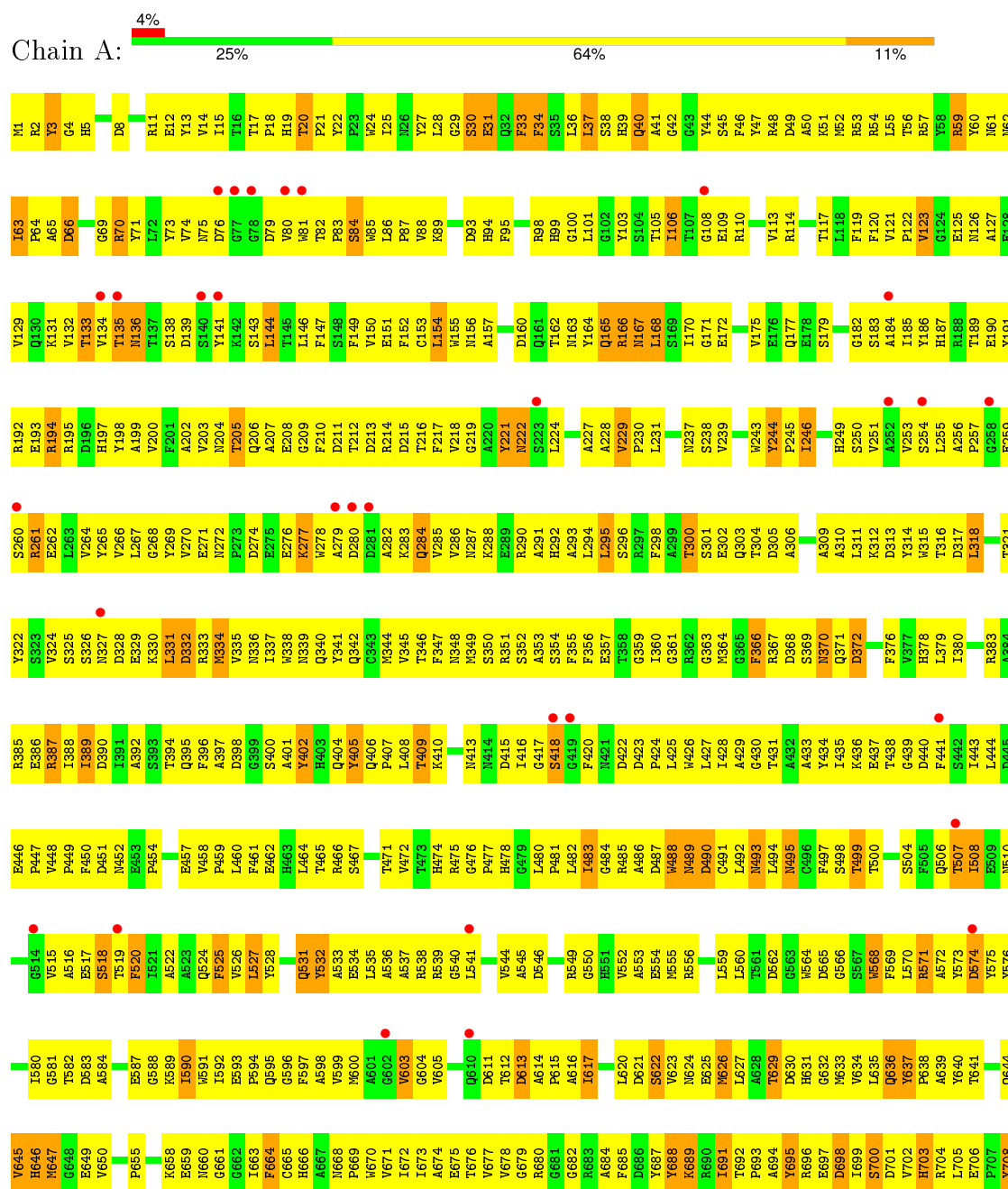
- Molecule 4 is water.

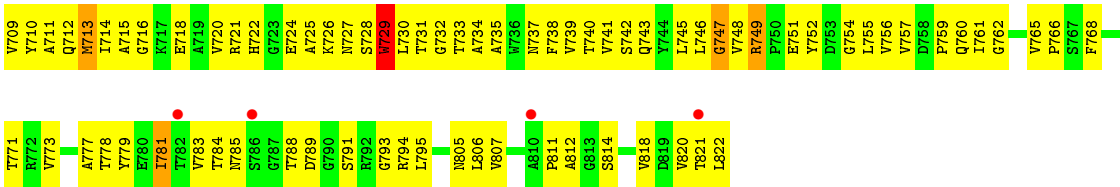
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	A	4	Total	O	0	0
			4	4		

### 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.

#### • Molecule 1: Lactose Phosphorylase





## 4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 21 21 2	Depositor
Cell constants a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	84.71 Å 92.88 Å 104.42 Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	38.54 – 3.30 38.54 – 3.30	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	98.9 (38.54-3.30) 98.9 (38.54-3.30)	Depositor EDS
$R_{merge}$	(Not available)	Depositor
$R_{sym}$	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ <sup>1</sup>	3.45 (at 3.32 Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX (phenix.refine: 1.6.4_486)	Depositor
R, $R_{free}$	0.296 , 0.340 0.292 , 0.338	Depositor DCC
$R_{free}$ test set	127 reflections (1.00%)	DCC
Wilson B-factor (Å <sup>2</sup> )	41.9	Xtriage
Anisotropy	0.675	Xtriage
Bulk solvent $k_{sol}$ (e/Å <sup>3</sup> ), $B_{sol}$ (Å <sup>2</sup> )	0.30 , 46.7	EDS
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
L-test for twinning <sup>2</sup>	$\langle  L  \rangle = 0.50$ , $\langle L^2 \rangle = 0.33$	Xtriage
Outliers	2 of 12781 reflections (0.016%)	Xtriage
$F_o, F_c$ correlation	0.83	EDS
Total number of atoms	6328	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	27.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 16.17% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

<sup>1</sup>Intensities estimated from amplitudes.

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



## 5 Model quality

### 5.1 Standard geometry

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: CBI, SO4

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	0.46	0/6468	0.67	0/8843

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

### 5.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	6296	0	5801	1006	0
2	A	5	0	0	2	0
3	A	23	0	22	11	0
4	A	4	0	0	1	0
All	All	6328	0	5823	1008	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 83.

All (1008) 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:31:GLU:HA	1:A:383:ARG:HH22	1.09	1.14
1:A:334:MET:HG3	1:A:694:ALA:HB2	1.24	1.13
1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:PRO:HB3	1.12	1.06
1:A:672:ILE:HG23	1:A:684:ALA:HB1	1.37	1.05
1:A:73:TYR:HB2	1:A:147:PHE:HB2	1.39	1.04
1:A:740:THR:HG22	1:A:745:LEU:HD13	1.41	1.03
1:A:369:SER:HA	1:A:372:ASP:HB2	1.39	1.02
1:A:322:TYR:CE1	1:A:748:VAL:HG11	1.95	1.02
1:A:334:MET:CG	1:A:694:ALA:HB2	1.90	1.01
1:A:334:MET:O	1:A:339:ASN:HB3	1.62	0.99
1:A:71:TYR:HD1	1:A:84:SER:HG	1.07	0.99
1:A:436:LYS:HG2	1:A:752:TYR:CE1	1.99	0.98
1:A:28:LEU:HB3	1:A:121:VAL:HG23	1.46	0.98
1:A:766:PRO:HA	1:A:785:ASN:HB3	1.44	0.97
1:A:524:GLN:HA	1:A:597:PHE:HE2	1.29	0.97
1:A:418:SER:O	1:A:485:ARG:HD2	1.63	0.97
1:A:120:PHE:CE1	1:A:122:PRO:HB3	2.00	0.97
1:A:25:ILE:HG22	1:A:38:SER:HA	1.42	0.97
1:A:350:SER:HB2	1:A:364:MET:HG2	1.46	0.96
1:A:436:LYS:CG	1:A:752:TYR:HE1	1.79	0.95
1:A:31:GLU:HA	1:A:383:ARG:NH2	1.81	0.95
1:A:155:TRP:CB	1:A:195:ARG:HH12	1.78	0.94
1:A:633:MET:H	1:A:668:ASN:HD21	1.13	0.94
1:A:191:TYR:OH	1:A:277:LYS:HG2	1.67	0.94
1:A:598:ALA:O	1:A:603:VAL:HG23	1.68	0.94
1:A:568:TRP:HZ3	1:A:626:MET:SD	1.91	0.94
1:A:340:GLN:NE2	1:A:378:HIS:NE2	2.16	0.93
1:A:42:GLY:HA2	1:A:69:GLY:HA3	1.50	0.93
1:A:44:TYR:CE1	1:A:54:ARG:HD2	2.04	0.93
1:A:743:GLN:HB3	1:A:749:ARG:HB2	1.51	0.93
1:A:531:GLN:O	1:A:535:LEU:HD13	1.69	0.92
1:A:788:THR:HB	1:A:791:SER:HB3	1.51	0.92
1:A:629:THR:HG23	1:A:631:HIS:H	1.34	0.92
1:A:388:ILE:HG21	1:A:443:ILE:HD11	1.52	0.92
1:A:52:MET:O	1:A:155:TRP:O	1.89	0.91
1:A:448:VAL:HG21	1:A:460:LEU:HD12	1.51	0.91
1:A:366:PHE:CE1	1:A:401:ALA:HB1	2.05	0.90
1:A:675:GLU:HB2	1:A:684:ALA:HB2	1.55	0.89
1:A:186:TYR:CE2	1:A:288:LYS:HD3	2.07	0.89
1:A:494:LEU:HD12	1:A:516:ALA:HB1	1.53	0.89
1:A:748:VAL:HG13	1:A:748:VAL:O	1.69	0.88
1:A:435:ILE:HG21	1:A:441:PHE:CE2	2.09	0.88

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:164:TYR:O	1:A:168:LEU:HD12	1.74	0.88
1:A:3:TYR:HE2	1:A:700:SER:HB2	1.37	0.87
1:A:350:SER:CB	1:A:364:MET:HG2	2.04	0.87
1:A:322:TYR:HE1	1:A:748:VAL:CG1	1.88	0.87
1:A:18:PRO:HD3	1:A:95:PHE:CD2	2.09	0.87
1:A:629:THR:HG22	1:A:632:GLY:H	1.40	0.87
1:A:185:ILE:O	1:A:186:TYR:HD1	1.58	0.87
1:A:186:TYR:HE2	1:A:288:LYS:HD3	1.40	0.86
1:A:568:TRP:CZ3	1:A:626:MET:SD	2.68	0.86
1:A:12:GLU:HG2	1:A:100:GLY:HA2	1.57	0.86
1:A:101:LEU:HB3	1:A:315:TRP:CD1	2.10	0.86
1:A:754:GLY:HA3	1:A:806:LEU:HD11	1.58	0.85
1:A:665:CYS:SG	1:A:714:ILE:HD11	2.16	0.85
1:A:621:ASP:O	1:A:624:ASN:HB3	1.76	0.85
1:A:25:ILE:HG22	1:A:38:SER:CA	2.05	0.85
1:A:488:TRP:CE3	1:A:489:ASN:HB3	2.11	0.85
1:A:350:SER:O	1:A:730:LEU:HD22	1.77	0.85
1:A:520:PHE:HB2	1:A:571:ARG:HH12	1.41	0.85
1:A:462:GLU:O	1:A:466:ARG:HG2	1.78	0.84
1:A:705:LEU:HD13	1:A:725:ALA:O	1.76	0.84
1:A:735:ALA:O	1:A:739:VAL:HG23	1.76	0.84
1:A:366:PHE:HE1	1:A:401:ALA:CB	1.91	0.84
1:A:524:GLN:HA	1:A:597:PHE:CE2	2.12	0.84
1:A:155:TRP:HB3	1:A:195:ARG:HH12	1.40	0.84
1:A:685:PHE:CE1	1:A:761:ILE:HD11	2.13	0.84
1:A:629:THR:HG22	1:A:632:GLY:N	1.93	0.83
1:A:385:ARG:HB2	1:A:434:TYR:OH	1.78	0.83
1:A:48:ARG:NH2	1:A:408:LEU:O	2.11	0.83
1:A:3:TYR:CE2	1:A:700:SER:HB2	2.13	0.83
1:A:417:GLY:HA2	1:A:506:GLN:O	1.79	0.83
1:A:315:TRP:CZ2	1:A:341:TYR:HE2	1.97	0.82
1:A:671:VAL:O	1:A:674:ALA:HB3	1.79	0.82
1:A:322:TYR:CE1	1:A:748:VAL:CG1	2.60	0.82
1:A:729:TRP:HE3	1:A:729:TRP:O	1.60	0.82
1:A:675:GLU:HA	1:A:675:GLU:OE2	1.80	0.82
1:A:342:GLN:HG2	1:A:734:ALA:HB1	1.61	0.82
1:A:28:LEU:HD11	1:A:37:LEU:HD23	1.60	0.82
1:A:184:ALA:HB2	1:A:202:ALA:HB2	1.61	0.82
1:A:728:SER:O	1:A:729:TRP:HB2	1.78	0.82
1:A:435:ILE:HG21	1:A:441:PHE:HE2	1.43	0.82
1:A:186:TYR:HE2	1:A:288:LYS:CD	1.94	0.81

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:519:THR:HG21	1:A:570:LEU:O	1.80	0.81
1:A:749:ARG:O	1:A:756:VAL:HB	1.81	0.81
1:A:528:TYR:HA	1:A:531:GLN:HB2	1.63	0.81
1:A:194:ARG:HD3	1:A:194:ARG:H	1.46	0.80
1:A:483:ILE:HG13	1:A:518:SER:HB2	1.63	0.80
1:A:693:PRO:HA	1:A:696:ARG:CB	2.10	0.80
1:A:11:ARG:O	1:A:12:GLU:HG3	1.81	0.80
1:A:216:THR:HG21	1:A:238:SER:HB3	1.63	0.80
1:A:783:VAL:HG22	1:A:820:VAL:HG12	1.64	0.80
1:A:335:VAL:HG22	1:A:741:VAL:HG21	1.63	0.80
1:A:692:THR:HG23	1:A:693:PRO:HD2	1.64	0.79
1:A:194:ARG:CD	1:A:194:ARG:H	1.93	0.79
1:A:31:GLU:CA	1:A:383:ARG:HH22	1.91	0.79
1:A:71:TYR:HE1	1:A:84:SER:HB2	1.46	0.79
1:A:339:ASN:HD21	1:A:738:PHE:HA	1.46	0.79
1:A:423:ASP:HB2	1:A:424:PRO:HD3	1.63	0.79
1:A:218:VAL:HG13	1:A:227:ALA:HA	1.65	0.79
1:A:623:VAL:HG23	1:A:627:LEU:HD22	1.65	0.78
1:A:79:ASP:OD1	1:A:110:ARG:NH2	2.17	0.78
1:A:106:ILE:HD12	1:A:119:PHE:HE2	1.49	0.78
1:A:370:ASN:OD1	1:A:427:LEU:HA	1.83	0.78
1:A:153:CYS:O	1:A:155:TRP:N	2.16	0.78
1:A:11:ARG:HH22	1:A:316:THR:HG23	1.48	0.78
1:A:520:PHE:HB2	1:A:571:ARG:NH1	1.99	0.78
1:A:596:GLY:O	1:A:600:MET:HG3	1.84	0.78
1:A:494:LEU:CD1	1:A:516:ALA:HB1	2.13	0.78
1:A:106:ILE:CD1	1:A:119:PHE:HE2	1.97	0.78
1:A:604:GLY:O	1:A:616:ALA:HB2	1.84	0.78
1:A:592:ILE:HB	1:A:627:LEU:HD23	1.66	0.77
1:A:152:PHE:CD2	1:A:187:HIS:HB2	2.19	0.77
1:A:366:PHE:HE1	1:A:401:ALA:HB1	1.44	0.77
1:A:614:ALA:HB3	1:A:617:ILE:CG1	2.14	0.77
1:A:672:ILE:CG2	1:A:684:ALA:HB1	2.14	0.77
1:A:574:ASP:HB3	1:A:580:ILE:HD11	1.67	0.77
1:A:536:ALA:O	1:A:539:ARG:HB3	1.84	0.77
1:A:436:LYS:HG3	1:A:752:TYR:HE1	1.50	0.77
1:A:425:LEU:HD11	1:A:525:PHE:HB2	1.66	0.77
1:A:541:LEU:HB3	1:A:544:VAL:HG12	1.65	0.77
1:A:385:ARG:HB2	1:A:434:TYR:CZ	2.19	0.77
1:A:12:GLU:HA	1:A:338:TRP:CZ2	2.20	0.77
1:A:328:ASP:OD1	1:A:330:LYS:HB2	1.84	0.77

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:685:PHE:CE2	1:A:689:LYS:HD2	2.20	0.76
1:A:272:ASN:ND2	1:A:287:ASN:HB3	2.01	0.76
1:A:59:ARG:HH12	1:A:214:ARG:HH12	1.34	0.76
1:A:189:THR:O	1:A:190:GLU:HB2	1.86	0.76
1:A:429:ALA:HB2	1:A:528:TYR:CZ	2.20	0.76
1:A:552:VAL:O	1:A:556:ARG:N	2.18	0.76
1:A:315:TRP:CZ2	1:A:341:TYR:CE2	2.74	0.75
1:A:674:ALA:O	1:A:678:VAL:HG23	1.87	0.75
1:A:388:ILE:CG2	1:A:443:ILE:HD11	2.16	0.75
1:A:571:ARG:HG2	1:A:591:TRP:CG	2.22	0.75
1:A:131:LYS:HB2	1:A:304:THR:HG21	1.67	0.75
1:A:806:LEU:HD12	1:A:807:VAL:H	1.51	0.75
1:A:218:VAL:O	1:A:222:ASN:OD1	2.04	0.75
1:A:44:TYR:CE1	1:A:54:ARG:CD	2.69	0.75
1:A:685:PHE:O	1:A:689:LYS:HG2	1.86	0.75
1:A:564:TRP:NE1	1:A:566:GLY:HA2	2.02	0.75
1:A:227:ALA:O	1:A:231:LEU:HD13	1.87	0.75
1:A:495:ASN:N	1:A:495:ASN:HD22	1.84	0.74
1:A:342:GLN:HG2	1:A:734:ALA:CB	2.17	0.74
1:A:759:PRO:O	1:A:760:GLN:HG2	1.87	0.74
1:A:477:PRO:HG3	1:A:515:VAL:CG1	2.17	0.74
1:A:367:ARG:O	1:A:371:GLN:HG3	1.88	0.74
1:A:520:PHE:CB	1:A:571:ARG:HH12	2.01	0.74
1:A:689:LYS:HE2	1:A:695:TYR:CE1	2.21	0.74
1:A:366:PHE:CE1	1:A:401:ALA:CB	2.70	0.74
1:A:689:LYS:HE2	1:A:695:TYR:HE1	1.52	0.74
1:A:685:PHE:CD2	1:A:689:LYS:HD2	2.23	0.73
1:A:278:TRP:HE3	1:A:285:VAL:O	1.71	0.73
1:A:378:HIS:HA	1:A:437:GLU:OE2	1.88	0.73
1:A:617:ILE:CG2	1:A:680:ARG:HH21	2.01	0.73
1:A:489:ASN:HB2	3:A:824:CBI:O6	1.88	0.73
1:A:221:TYR:N	1:A:221:TYR:CD1	2.51	0.73
1:A:291:ALA:O	1:A:295:LEU:HD12	1.86	0.73
1:A:187:HIS:O	1:A:198:TYR:HB2	1.88	0.73
1:A:478:HIS:HB2	1:A:480:LEU:HD12	1.70	0.73
1:A:28:LEU:CD1	1:A:37:LEU:HD23	2.18	0.73
1:A:75:ASN:HA	1:A:79:ASP:O	1.87	0.73
1:A:694:ALA:HB3	1:A:695:TYR:CD2	2.24	0.73
1:A:322:TYR:HE1	1:A:748:VAL:HG11	1.44	0.72
1:A:665:CYS:SG	1:A:714:ILE:CD1	2.77	0.72
1:A:587:GLU:OE2	1:A:641:THR:OG1	2.06	0.72

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:684:ALA:O	1:A:687:TYR:HB2	1.90	0.72
1:A:436:LYS:HG2	1:A:752:TYR:CD1	2.23	0.72
1:A:448:VAL:HG21	1:A:460:LEU:CD1	2.19	0.72
1:A:673:ILE:O	1:A:677:VAL:N	2.18	0.72
1:A:185:ILE:O	1:A:186:TYR:CD1	2.42	0.72
1:A:28:LEU:CB	1:A:121:VAL:HG23	2.19	0.72
1:A:637:TYR:CD2	1:A:637:TYR:C	2.64	0.71
1:A:187:HIS:NE2	1:A:189:THR:OG1	2.23	0.71
1:A:694:ALA:HB3	1:A:695:TYR:HD2	1.55	0.71
1:A:475:ARG:HA	1:A:482:LEU:HD13	1.73	0.71
1:A:345:VAL:HB	1:A:729:TRP:CZ3	2.25	0.71
1:A:617:ILE:HG22	1:A:680:ARG:HH21	1.56	0.71
1:A:673:ILE:O	1:A:677:VAL:HG23	1.91	0.71
1:A:535:LEU:HD11	1:A:752:TYR:OH	1.91	0.71
1:A:28:LEU:HB3	1:A:121:VAL:CG2	2.20	0.71
1:A:806:LEU:HD12	1:A:807:VAL:N	2.06	0.71
1:A:106:ILE:CD1	1:A:119:PHE:CE2	2.73	0.71
1:A:99:HIS:CD2	1:A:708:TYR:OH	2.43	0.71
1:A:215:ASP:O	1:A:219:GLY:N	2.21	0.71
1:A:614:ALA:HB3	1:A:617:ILE:HG12	1.73	0.70
1:A:322:TYR:CZ	1:A:748:VAL:HG11	2.26	0.70
1:A:138:SER:O	1:A:257:PRO:HB3	1.90	0.70
1:A:664:PHE:HE2	3:A:824:CBI:H62	1.56	0.70
1:A:342:GLN:OE1	1:A:710:TYR:N	2.20	0.70
1:A:450:PHE:O	1:A:451:ASP:HB3	1.88	0.70
1:A:348:ASN:O	1:A:364:MET:CE	2.39	0.70
1:A:436:LYS:CG	1:A:752:TYR:CE1	2.62	0.69
1:A:33:PHE:O	1:A:33:PHE:HD2	1.75	0.69
1:A:339:ASN:HD21	1:A:738:PHE:CA	2.06	0.69
1:A:751:GLU:HG3	1:A:752:TYR:N	2.07	0.69
1:A:423:ASP:HA	1:A:426:TRP:HD1	1.58	0.69
1:A:175:VAL:HG21	1:A:210:PHE:CE1	2.28	0.69
1:A:191:TYR:HA	1:A:195:ARG:HB2	1.74	0.69
1:A:203:VAL:HG23	1:A:265:TYR:CE2	2.28	0.69
1:A:98:ARG:H	1:A:105:THR:HG23	1.56	0.69
1:A:794:ARG:O	1:A:820:VAL:HA	1.93	0.69
1:A:706:GLU:HB2	1:A:709:VAL:HG22	1.75	0.69
1:A:40:GLN:HA	1:A:40:GLN:OE1	1.91	0.69
1:A:370:ASN:OD1	1:A:426:TRP:C	2.32	0.69
1:A:565:ASP:HB3	1:A:568:TRP:CD1	2.28	0.69
1:A:695:TYR:N	1:A:695:TYR:CD2	2.59	0.68

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:370:ASN:OD1	1:A:427:LEU:N	2.27	0.68
1:A:171:GLY:HA2	1:A:189:THR:HG23	1.73	0.68
1:A:705:LEU:CD1	1:A:725:ALA:O	2.41	0.68
1:A:351:ARG:NH2	1:A:732:GLY:CA	2.56	0.68
1:A:311:LEU:HD12	1:A:312:LYS:N	2.08	0.68
1:A:600:MET:HE3	1:A:673:ILE:HD11	1.75	0.68
1:A:370:ASN:OD1	1:A:427:LEU:CA	2.41	0.68
1:A:522:ALA:O	1:A:526:VAL:HG23	1.94	0.68
1:A:748:VAL:CG1	1:A:748:VAL:O	2.42	0.68
1:A:12:GLU:CA	1:A:338:TRP:HZ2	2.06	0.68
1:A:167:ASN:OD1	1:A:167:ASN:C	2.32	0.68
1:A:313:ASP:HA	1:A:316:THR:HB	1.76	0.68
1:A:646:HIS:CD2	1:A:646:HIS:H	2.11	0.67
1:A:71:TYR:CE1	1:A:84:SER:HB2	2.28	0.67
1:A:286:VAL:O	1:A:288:LYS:HG2	1.95	0.67
1:A:12:GLU:HA	1:A:338:TRP:HZ2	1.57	0.67
1:A:519:THR:HG23	1:A:594:PRO:HB3	1.76	0.67
1:A:592:ILE:HG22	1:A:635:LEU:O	1.93	0.67
1:A:711:ALA:CB	1:A:728:SER:HA	2.24	0.67
1:A:424:PRO:O	1:A:467:SER:HB3	1.95	0.67
1:A:565:ASP:OD2	1:A:568:TRP:NE1	2.27	0.67
1:A:354:SER:H	1:A:357:GLU:HB2	1.60	0.67
1:A:520:PHE:HE1	1:A:670:TRP:CZ3	2.12	0.67
1:A:600:MET:SD	1:A:673:ILE:HD11	2.34	0.67
1:A:740:THR:HG22	1:A:745:LEU:CD1	2.21	0.67
1:A:44:TYR:CD1	1:A:54:ARG:HD2	2.30	0.67
1:A:350:SER:O	1:A:730:LEU:CD2	2.42	0.67
1:A:693:PRO:C	1:A:696:ARG:H	1.98	0.67
1:A:185:ILE:C	1:A:186:TYR:CD1	2.68	0.67
1:A:28:LEU:HD11	1:A:37:LEU:CD2	2.25	0.67
1:A:172:GLU:OE2	1:A:192:ARG:NE	2.28	0.67
1:A:184:ALA:CB	1:A:202:ALA:HB2	2.25	0.67
1:A:378:HIS:CE1	1:A:379:LEU:HD12	2.29	0.67
1:A:520:PHE:CD2	1:A:520:PHE:C	2.68	0.67
1:A:695:TYR:N	1:A:695:TYR:HD2	1.92	0.67
1:A:462:GLU:OE1	1:A:462:GLU:HA	1.94	0.67
1:A:200:VAL:HG21	1:A:291:ALA:HB1	1.77	0.67
1:A:71:TYR:HE1	1:A:84:SER:CB	2.08	0.66
1:A:79:ASP:CG	1:A:110:ARG:HH21	1.99	0.66
1:A:34:PHE:HE1	1:A:348:ASN:ND2	1.92	0.66
1:A:221:TYR:N	1:A:221:TYR:HD1	1.91	0.66

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:475:ARG:CA	1:A:482:LEU:HD13	2.25	0.66
1:A:675:GLU:CB	1:A:684:ALA:HB2	2.26	0.66
1:A:205:THR:OG1	1:A:261:ARG:NH2	2.28	0.66
1:A:216:THR:CG2	1:A:238:SER:HB3	2.24	0.66
1:A:520:PHE:HD1	1:A:593:GLU:HB3	1.61	0.65
1:A:422:ASP:OD2	1:A:426:TRP:NE1	2.28	0.65
1:A:582:THR:HG22	1:A:584:ALA:H	1.61	0.65
1:A:639:ALA:HB3	1:A:718:GLU:OE2	1.94	0.65
1:A:385:ARG:NH2	1:A:440:ASP:OD2	2.29	0.65
1:A:202:ALA:HB3	1:A:295:LEU:CD2	2.25	0.65
1:A:721:ARG:O	1:A:724:GLU:CB	2.44	0.65
1:A:155:TRP:CZ2	1:A:198:TYR:HA	2.32	0.65
1:A:388:ILE:HG21	1:A:443:ILE:CD1	2.26	0.65
1:A:81:TRP:HZ2	1:A:113:VAL:HG23	1.61	0.65
1:A:106:ILE:HD12	1:A:119:PHE:CE2	2.29	0.64
1:A:639:ALA:HB2	1:A:661:GLY:HA3	1.79	0.64
1:A:629:THR:CG2	1:A:631:HIS:H	2.08	0.64
1:A:269:TYR:CE2	1:A:271:GLU:OE1	2.50	0.64
1:A:185:ILE:HG22	1:A:186:TYR:N	2.12	0.64
1:A:18:PRO:HB3	1:A:40:GLN:HE22	1.62	0.64
1:A:673:ILE:HG22	1:A:740:THR:HG23	1.79	0.64
1:A:345:VAL:HG21	1:A:729:TRP:CH2	2.32	0.64
1:A:699:ILE:O	1:A:701:ASP:N	2.31	0.64
1:A:292:HIS:ND1	4:A:827:HOH:O	2.08	0.64
1:A:243:TRP:O	1:A:245:PRO:HD3	1.98	0.63
1:A:42:GLY:HA2	1:A:69:GLY:CA	2.25	0.63
1:A:54:ARG:NH1	1:A:157:ALA:HB2	2.13	0.63
1:A:378:HIS:CB	1:A:437:GLU:OE2	2.46	0.63
1:A:378:HIS:CA	1:A:437:GLU:OE2	2.46	0.63
1:A:73:TYR:N	1:A:147:PHE:O	2.28	0.63
1:A:150:VAL:O	1:A:246:ILE:HB	1.99	0.63
1:A:475:ARG:HB2	1:A:480:LEU:O	1.99	0.63
1:A:731:THR:HA	2:A:823:SO4:O4	1.99	0.63
1:A:163:ASN:O	1:A:167:ASN:HB3	1.97	0.63
1:A:396:PHE:HB2	1:A:400:SER:O	1.99	0.63
1:A:170:ILE:O	1:A:189:THR:HG23	1.98	0.63
1:A:164:TYR:HB3	1:A:168:LEU:HD11	1.81	0.63
1:A:478:HIS:CB	1:A:480:LEU:HD12	2.28	0.63
1:A:517:GLU:O	1:A:572:ALA:HB1	1.99	0.63
1:A:81:TRP:CZ2	1:A:113:VAL:HG23	2.33	0.63
1:A:5:HIS:HA	1:A:697:GLU:OE1	1.99	0.63

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:614:ALA:HB3	1:A:617:ILE:HG13	1.79	0.62
1:A:565:ASP:CB	1:A:568:TRP:CD1	2.81	0.62
1:A:629:THR:HG23	1:A:631:HIS:N	2.11	0.62
1:A:526:VAL:HA	1:A:552:VAL:HG13	1.81	0.62
1:A:25:ILE:CG2	1:A:38:SER:HA	2.26	0.62
1:A:106:ILE:HD11	1:A:119:PHE:CE2	2.33	0.62
1:A:217:PHE:HD2	1:A:218:VAL:HG23	1.63	0.62
1:A:354:SER:N	1:A:357:GLU:HB2	2.13	0.62
1:A:487:ASP:O	1:A:488:TRP:C	2.37	0.62
1:A:71:TYR:CE1	1:A:84:SER:CB	2.83	0.62
1:A:423:ASP:HA	1:A:426:TRP:CD1	2.34	0.62
1:A:54:ARG:NH1	1:A:157:ALA:CB	2.63	0.62
1:A:3:TYR:CD2	1:A:3:TYR:N	2.66	0.62
1:A:69:GLY:N	1:A:71:TYR:CE2	2.68	0.62
1:A:311:LEU:O	1:A:314:TYR:HB3	1.99	0.62
1:A:793:GLY:HA3	1:A:820:VAL:HG22	1.82	0.62
1:A:490:ASP:HB2	1:A:506:GLN:HE21	1.64	0.62
1:A:483:ILE:HG23	1:A:484:GLY:O	2.00	0.62
1:A:685:PHE:CD2	1:A:689:LYS:CD	2.82	0.62
1:A:450:PHE:O	1:A:451:ASP:CB	2.45	0.62
1:A:715:ALA:N	1:A:724:GLU:O	2.32	0.62
1:A:711:ALA:HA	1:A:728:SER:HA	1.81	0.62
1:A:366:PHE:CD1	1:A:401:ALA:HB1	2.34	0.62
1:A:640:TYR:H	1:A:660:ASN:HD21	1.48	0.62
1:A:408:LEU:HD23	1:A:409:THR:N	2.15	0.62
1:A:751:GLU:HG3	1:A:752:TYR:H	1.63	0.61
1:A:274:ASP:O	1:A:277:LYS:HB2	1.99	0.61
1:A:574:ASP:HB3	1:A:580:ILE:CD1	2.29	0.61
1:A:448:VAL:CG1	1:A:449:PRO:HD2	2.30	0.61
1:A:337:ILE:HG22	1:A:338:TRP:N	2.14	0.61
1:A:12:GLU:C	1:A:338:TRP:HZ2	2.04	0.61
1:A:278:TRP:CE3	1:A:285:VAL:O	2.53	0.61
1:A:754:GLY:CA	1:A:806:LEU:HD11	2.28	0.61
1:A:536:ALA:O	1:A:539:ARG:CB	2.49	0.61
1:A:33:PHE:O	1:A:33:PHE:CD2	2.54	0.61
1:A:353:ALA:O	1:A:730:LEU:CD1	2.49	0.61
1:A:710:TYR:CE1	1:A:737:ASN:ND2	2.69	0.61
1:A:504:SER:HB3	1:A:507:THR:HG23	1.81	0.61
1:A:420:PHE:HB2	1:A:423:ASP:OD2	2.01	0.61
1:A:101:LEU:O	1:A:315:TRP:CD1	2.54	0.61
1:A:418:SER:O	1:A:485:ARG:CD	2.45	0.61

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:532:TYR:C	1:A:532:TYR:CD2	2.74	0.61
1:A:184:ALA:HB2	1:A:202:ALA:CB	2.29	0.61
1:A:483:ILE:HG13	1:A:518:SER:CB	2.29	0.61
1:A:329:GLU:HG3	1:A:330:LYS:H	1.66	0.60
1:A:714:ILE:HA	1:A:725:ALA:HA	1.81	0.60
1:A:191:TYR:CE2	1:A:278:TRP:CH2	2.89	0.60
1:A:743:GLN:O	1:A:747:GLY:HA2	2.00	0.60
1:A:369:SER:O	1:A:372:ASP:N	2.34	0.60
1:A:47:TYR:O	1:A:49:ASP:N	2.31	0.60
1:A:300:THR:OG1	1:A:303:GLN:OE1	2.10	0.60
1:A:334:MET:HG3	1:A:694:ALA:CB	2.17	0.60
1:A:564:TRP:HE1	1:A:566:GLY:HA2	1.65	0.60
1:A:623:VAL:HG23	1:A:627:LEU:CD2	2.32	0.60
1:A:22:TYR:HB2	1:A:704:ARG:HG2	1.83	0.60
1:A:24:TRP:HB2	1:A:39:HIS:HD2	1.65	0.60
1:A:742:SER:O	1:A:748:VAL:HG12	2.02	0.60
1:A:62:ASN:OD1	1:A:63:ILE:N	2.34	0.60
1:A:101:LEU:CB	1:A:315:TRP:CD1	2.85	0.60
1:A:600:MET:CE	1:A:673:ILE:HD11	2.32	0.60
1:A:378:HIS:CE1	1:A:379:LEU:CD1	2.84	0.60
1:A:448:VAL:HG13	1:A:449:PRO:HD2	1.84	0.60
1:A:435:ILE:O	1:A:439:GLY:N	2.32	0.60
1:A:556:ARG:O	1:A:560:LEU:HD12	2.01	0.60
1:A:191:TYR:CZ	1:A:277:LYS:HG2	2.37	0.59
1:A:743:GLN:HB3	1:A:749:ARG:CB	2.29	0.59
1:A:191:TYR:CE2	1:A:286:VAL:HG12	2.37	0.59
1:A:22:TYR:O	1:A:24:TRP:CD1	2.55	0.59
1:A:703:HIS:O	1:A:704:ARG:HB3	2.02	0.59
1:A:623:VAL:HG23	1:A:627:LEU:HB2	1.84	0.59
1:A:741:VAL:HA	1:A:745:LEU:HB2	1.84	0.59
1:A:793:GLY:HA2	1:A:822:LEU:HB3	1.84	0.59
1:A:524:GLN:CA	1:A:597:PHE:CE2	2.85	0.59
1:A:525:PHE:CD2	1:A:555:MET:HG2	2.37	0.59
1:A:200:VAL:O	1:A:267:LEU:HA	2.02	0.59
1:A:360:ILE:HG13	1:A:361:GLY:H	1.68	0.59
1:A:136:ASN:OD1	1:A:136:ASN:C	2.42	0.59
1:A:495:ASN:N	1:A:495:ASN:ND2	2.49	0.59
1:A:327:ASN:OD1	1:A:328:ASP:N	2.36	0.58
1:A:541:LEU:HB3	1:A:544:VAL:CG1	2.32	0.58
1:A:590:ILE:HG23	1:A:627:LEU:HD11	1.85	0.58
1:A:31:GLU:CA	1:A:383:ARG:NH2	2.60	0.58

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:571:ARG:HG2	1:A:591:TRP:CB	2.32	0.58
1:A:82:THR:HG22	1:A:84:SER:OG	2.03	0.58
1:A:665:CYS:O	1:A:669:PRO:HD2	2.03	0.58
1:A:535:LEU:HD11	1:A:752:TYR:CE2	2.38	0.58
1:A:575:TYR:HD2	1:A:576:TYR:CE2	2.21	0.58
1:A:635:LEU:HD13	1:A:659:GLU:HA	1.85	0.58
1:A:497:PHE:CE2	1:A:646:HIS:HA	2.39	0.58
1:A:195:ARG:HD2	1:A:197:HIS:NE2	2.18	0.58
1:A:788:THR:HG22	1:A:789:ASP:O	2.04	0.58
1:A:634:VAL:HA	1:A:663:ILE:HA	1.85	0.58
1:A:62:ASN:OD1	1:A:64:PRO:O	2.22	0.58
1:A:481:PRO:CD	1:A:522:ALA:HB2	2.34	0.58
1:A:527:LEU:O	1:A:527:LEU:HD12	2.03	0.58
1:A:152:PHE:CE2	1:A:187:HIS:HB2	2.39	0.58
1:A:446:GLU:O	1:A:459:PRO:HA	2.04	0.58
1:A:494:LEU:HB2	1:A:495:ASN:ND2	2.19	0.58
1:A:360:ILE:HG13	1:A:361:GLY:N	2.19	0.58
1:A:356:PHE:CD2	1:A:727:ASN:HA	2.38	0.58
1:A:79:ASP:CG	1:A:110:ARG:NH2	2.57	0.58
1:A:29:GLY:O	1:A:34:PHE:CD1	2.56	0.58
1:A:569:PHE:HD2	1:A:595:GLN:OE1	1.86	0.58
1:A:504:SER:O	1:A:508:ILE:HB	2.04	0.57
1:A:4:GLY:HA3	1:A:14:VAL:O	2.04	0.57
1:A:525:PHE:CD2	1:A:525:PHE:C	2.78	0.57
1:A:276:GLU:O	1:A:287:ASN:ND2	2.37	0.57
1:A:135:THR:HG23	1:A:260:SER:CB	2.34	0.57
1:A:351:ARG:HH21	1:A:732:GLY:N	2.02	0.57
1:A:428:ILE:HG13	1:A:464:LEU:HD22	1.86	0.57
1:A:429:ALA:CB	1:A:528:TYR:CZ	2.88	0.57
1:A:622:SER:O	1:A:626:MET:HG3	2.03	0.57
1:A:535:LEU:CD1	1:A:752:TYR:HE2	2.17	0.57
1:A:212:THR:HA	1:A:246:ILE:O	2.05	0.57
1:A:74:VAL:O	1:A:80:VAL:HA	2.05	0.57
1:A:471:THR:O	1:A:474:HIS:N	2.37	0.57
1:A:19:HIS:HE1	1:A:85:TRP:CZ2	2.23	0.57
1:A:262:GLU:OE1	1:A:301:SER:CB	2.53	0.57
1:A:202:ALA:HB3	1:A:295:LEU:HD23	1.85	0.57
1:A:185:ILE:HG22	1:A:186:TYR:H	1.69	0.57
1:A:451:ASP:O	1:A:452:ASN:HB2	2.04	0.57
1:A:117:THR:HG21	1:A:119:PHE:CZ	2.40	0.57
1:A:497:PHE:CE2	1:A:646:HIS:HB3	2.40	0.57

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:266:VAL:O	1:A:266:VAL:HG12	2.04	0.57
1:A:84:SER:HB2	1:A:86:LEU:O	2.05	0.56
1:A:729:TRP:CE3	1:A:729:TRP:O	2.51	0.56
1:A:36:LEU:O	1:A:70:ARG:NH1	2.39	0.56
1:A:11:ARG:NH1	1:A:316:THR:OG1	2.34	0.56
1:A:415:ASP:O	1:A:416:ILE:HD13	2.04	0.56
1:A:46:PHE:CG	1:A:50:ALA:HB2	2.41	0.56
1:A:40:GLN:O	1:A:41:ALA:HB3	2.06	0.56
1:A:191:TYR:HE2	1:A:278:TRP:CZ3	2.22	0.56
1:A:202:ALA:CB	1:A:295:LEU:CD2	2.83	0.56
1:A:721:ARG:O	1:A:724:GLU:HB2	2.05	0.56
1:A:334:MET:SD	1:A:694:ALA:HB2	2.46	0.56
1:A:394:THR:HG21	1:A:405:TYR:HB3	1.87	0.56
1:A:752:TYR:N	1:A:752:TYR:CD1	2.73	0.56
1:A:604:GLY:O	1:A:616:ALA:CB	2.53	0.56
1:A:571:ARG:HD2	1:A:571:ARG:O	2.05	0.56
1:A:120:PHE:CE1	1:A:122:PRO:CB	2.84	0.56
1:A:699:ILE:HD13	1:A:702:VAL:HB	1.86	0.56
1:A:293:ALA:O	1:A:296:SER:HB3	2.06	0.56
1:A:380:ILE:CG2	1:A:383:ARG:HB2	2.36	0.56
1:A:99:HIS:HD2	1:A:708:TYR:CZ	2.24	0.56
1:A:330:LYS:HB3	1:A:695:TYR:CE2	2.41	0.56
1:A:519:THR:CG2	1:A:570:LEU:O	2.51	0.56
1:A:761:ILE:CG2	1:A:785:ASN:ND2	2.69	0.56
1:A:18:PRO:HB3	1:A:40:GLN:NE2	2.21	0.56
1:A:322:TYR:HE1	1:A:748:VAL:HG13	1.69	0.55
1:A:177:GLN:O	1:A:183:SER:HB3	2.06	0.55
1:A:33:PHE:C	1:A:33:PHE:CD2	2.79	0.55
1:A:673:ILE:CG2	1:A:740:THR:HG23	2.36	0.55
1:A:79:ASP:OD2	1:A:110:ARG:NH2	2.40	0.55
1:A:389:ILE:CG1	1:A:448:VAL:HG22	2.36	0.55
1:A:57:ARG:NH1	1:A:151:GLU:OE2	2.39	0.55
1:A:244:TYR:N	1:A:244:TYR:CD2	2.73	0.55
1:A:117:THR:HG21	1:A:119:PHE:CE2	2.42	0.55
1:A:322:TYR:OH	1:A:748:VAL:CG1	2.55	0.55
1:A:695:TYR:HD2	1:A:695:TYR:H	1.53	0.55
1:A:147:PHE:CE2	1:A:230:PRO:HA	2.41	0.55
1:A:41:ALA:O	1:A:70:ARG:HG2	2.07	0.55
1:A:535:LEU:HD11	1:A:752:TYR:CZ	2.42	0.55
1:A:397:ALA:HA	1:A:450:PHE:CE1	2.42	0.55
1:A:3:TYR:CE2	1:A:700:SER:CB	2.88	0.55

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:293:ALA:HA	1:A:296:SER:HB3	1.88	0.55
1:A:349:MET:HB2	1:A:730:LEU:HD21	1.89	0.55
1:A:728:SER:O	1:A:729:TRP:CB	2.51	0.55
1:A:85:TRP:O	1:A:89:LYS:N	2.40	0.55
1:A:460:LEU:O	1:A:460:LEU:HG	2.06	0.55
1:A:646:HIS:H	1:A:646:HIS:HD2	1.53	0.55
1:A:218:VAL:HA	1:A:228:ALA:H	1.71	0.55
1:A:165:GLN:HG3	1:A:166:ARG:H	1.72	0.55
1:A:202:ALA:CB	1:A:295:LEU:HD22	2.37	0.55
1:A:524:GLN:CB	1:A:597:PHE:CE2	2.90	0.54
1:A:31:GLU:OE1	1:A:123:VAL:HG12	2.06	0.54
1:A:429:ALA:HB2	1:A:528:TYR:CE2	2.42	0.54
1:A:425:LEU:CD1	1:A:525:PHE:HB2	2.36	0.54
1:A:582:THR:HG22	1:A:583:ASP:N	2.22	0.54
1:A:544:VAL:O	1:A:544:VAL:HG22	2.07	0.54
1:A:743:GLN:CB	1:A:749:ARG:HB2	2.31	0.54
1:A:57:ARG:HD2	1:A:151:GLU:OE2	2.07	0.54
1:A:668:ASN:ND2	1:A:691:ILE:HG21	2.23	0.54
1:A:171:GLY:HA2	1:A:189:THR:CG2	2.38	0.54
1:A:339:ASN:HD21	1:A:738:PHE:CB	2.20	0.54
1:A:433:ALA:O	1:A:434:TYR:C	2.44	0.54
1:A:199:ALA:HA	1:A:268:GLY:O	2.08	0.54
1:A:452:ASN:O	1:A:454:PRO:HD3	2.08	0.54
1:A:778:THR:C	1:A:779:TYR:HD2	2.11	0.54
1:A:334:MET:O	1:A:339:ASN:CB	2.47	0.54
1:A:155:TRP:HB3	1:A:195:ARG:NH1	2.18	0.54
1:A:788:THR:O	1:A:791:SER:HB3	2.08	0.54
1:A:202:ALA:O	1:A:265:TYR:HA	2.07	0.54
1:A:705:LEU:HD22	1:A:728:SER:HB3	1.90	0.54
1:A:710:TYR:CD1	1:A:733:THR:HG22	2.43	0.54
1:A:604:GLY:O	1:A:616:ALA:N	2.38	0.54
1:A:255:LEU:HD13	1:A:260:SER:HA	1.90	0.54
1:A:621:ASP:OD1	1:A:680:ARG:NH2	2.40	0.54
1:A:685:PHE:CD1	1:A:761:ILE:HD11	2.42	0.54
1:A:49:ASP:HB2	1:A:408:LEU:HB2	1.90	0.54
1:A:272:ASN:OD1	1:A:290:ARG:HD3	2.08	0.53
1:A:321:THR:HG23	1:A:773:VAL:HB	1.88	0.53
1:A:449:PRO:HB3	1:A:457:GLU:HG3	1.90	0.53
1:A:11:ARG:NH2	1:A:316:THR:HG23	2.21	0.53
1:A:478:HIS:HE1	1:A:573:TYR:CD1	2.26	0.53
1:A:560:LEU:HD11	1:A:603:VAL:HG12	1.91	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:398:ASP:OD2	1:A:400:SER:HB2	2.07	0.53
1:A:788:THR:HB	1:A:791:SER:CB	2.34	0.53
1:A:125:GLU:CD	1:A:298:PHE:CE2	2.81	0.53
1:A:620:LEU:CD1	1:A:678:VAL:HG21	2.39	0.53
1:A:11:ARG:HH12	1:A:316:THR:CB	2.21	0.53
1:A:131:LYS:HB2	1:A:304:THR:CG2	2.38	0.53
1:A:175:VAL:HG21	1:A:210:PHE:HE1	1.74	0.53
1:A:210:PHE:O	1:A:237:ASN:HA	2.07	0.53
1:A:203:VAL:HG13	1:A:205:THR:H	1.73	0.53
1:A:612:THR:O	1:A:612:THR:HG22	2.09	0.53
1:A:698:ASP:N	1:A:698:ASP:OD1	2.39	0.53
1:A:423:ASP:HB2	1:A:424:PRO:CD	2.36	0.53
1:A:591:TRP:HA	1:A:636:GLN:HB2	1.91	0.53
1:A:711:ALA:CA	1:A:728:SER:HA	2.39	0.53
1:A:360:ILE:CG1	1:A:361:GLY:N	2.72	0.53
1:A:793:GLY:CA	1:A:822:LEU:HB3	2.39	0.53
1:A:185:ILE:C	1:A:186:TYR:HD1	2.09	0.53
1:A:591:TRP:HA	1:A:636:GLN:CB	2.39	0.52
1:A:664:PHE:O	1:A:665:CYS:C	2.48	0.52
1:A:186:TYR:HE2	1:A:288:LYS:HD2	1.74	0.52
1:A:76:ASP:OD2	1:A:144:LEU:CD2	2.56	0.52
1:A:623:VAL:CG2	1:A:627:LEU:HB2	2.40	0.52
1:A:420:PHE:CB	1:A:423:ASP:OD2	2.58	0.52
1:A:716:GLY:O	1:A:722:HIS:CB	2.58	0.52
1:A:329:GLU:HG3	1:A:330:LYS:N	2.25	0.52
1:A:590:ILE:O	1:A:636:GLN:HB2	2.08	0.52
1:A:571:ARG:HG2	1:A:591:TRP:CD2	2.44	0.52
1:A:389:ILE:HG13	1:A:448:VAL:CG2	2.39	0.52
1:A:69:GLY:H	1:A:71:TYR:HE2	1.52	0.52
1:A:553:ALA:O	1:A:554:GLU:C	2.46	0.52
1:A:149:PHE:HE2	1:A:224:LEU:HD21	1.75	0.52
1:A:428:ILE:CG2	1:A:531:GLN:HB3	2.38	0.52
1:A:55:LEU:HD12	1:A:155:TRP:CZ3	2.44	0.52
1:A:165:GLN:HG3	1:A:166:ARG:N	2.25	0.52
1:A:302:GLU:O	1:A:306:ALA:HB2	2.08	0.52
1:A:339:ASN:ND2	1:A:738:PHE:HA	2.19	0.52
1:A:581:GLY:O	1:A:589:LYS:O	2.28	0.52
1:A:592:ILE:HB	1:A:627:LEU:CD2	2.37	0.52
1:A:659:GLU:OE1	3:A:824:CBI:O2'	2.21	0.52
1:A:427:LEU:O	1:A:431:THR:HB	2.09	0.52
1:A:428:ILE:HG21	1:A:531:GLN:HB3	1.91	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:153:CYS:C	1:A:155:TRP:H	2.05	0.52
1:A:342:GLN:NE2	1:A:734:ALA:HB2	2.25	0.52
1:A:487:ASP:O	1:A:488:TRP:O	2.28	0.52
1:A:666:HIS:O	1:A:669:PRO:HD2	2.10	0.52
1:A:270:VAL:HG21	1:A:291:ALA:HB2	1.92	0.52
1:A:562:ASP:O	1:A:573:TYR:OH	2.19	0.52
1:A:269:TYR:HE2	1:A:271:GLU:OE1	1.93	0.51
1:A:94:HIS:CD2	1:A:95:PHE:N	2.78	0.51
1:A:483:ILE:HD11	1:A:492:LEU:HD23	1.91	0.51
1:A:135:THR:HG23	1:A:260:SER:HB3	1.90	0.51
1:A:629:THR:CG2	1:A:631:HIS:N	2.71	0.51
1:A:8:ASP:O	1:A:11:ARG:N	2.42	0.51
1:A:282:ALA:C	1:A:283:LYS:HG3	2.31	0.51
1:A:793:GLY:HA2	1:A:821:THR:O	2.10	0.51
1:A:490:ASP:OD1	1:A:490:ASP:N	2.44	0.51
1:A:66:ASP:CG	1:A:66:ASP:O	2.49	0.51
1:A:731:THR:CG2	1:A:733:THR:HB	2.40	0.51
1:A:741:VAL:O	1:A:742:SER:C	2.49	0.51
1:A:475:ARG:C	1:A:482:LEU:HD13	2.31	0.51
1:A:135:THR:CG2	1:A:260:SER:HB3	2.41	0.51
1:A:757:VAL:HB	1:A:795:LEU:HD21	1.92	0.51
1:A:617:ILE:HG23	1:A:680:ARG:HH21	1.75	0.51
1:A:100:GLY:N	1:A:103:TYR:O	2.43	0.51
1:A:156:ASN:O	1:A:160:ASP:CB	2.59	0.51
1:A:395:GLN:O	1:A:450:PHE:HD1	1.93	0.51
1:A:15:ILE:HD11	1:A:24:TRP:HE3	1.76	0.51
1:A:156:ASN:OD1	1:A:156:ASN:C	2.49	0.51
1:A:60:TYR:O	1:A:61:ASN:C	2.49	0.51
1:A:633:MET:H	1:A:668:ASN:ND2	1.96	0.51
1:A:351:ARG:NH2	1:A:732:GLY:HA2	2.26	0.51
1:A:19:HIS:HE1	1:A:85:TRP:CH2	2.29	0.51
1:A:435:ILE:CG2	1:A:441:PHE:HE2	2.20	0.51
1:A:552:VAL:O	1:A:555:MET:HB3	2.11	0.51
1:A:380:ILE:HG22	1:A:383:ARG:H	1.76	0.50
1:A:731:THR:HG23	1:A:733:THR:HB	1.93	0.50
1:A:389:ILE:HD13	1:A:446:GLU:HG2	1.92	0.50
1:A:611:ASP:OD1	1:A:613:ASP:N	2.43	0.50
1:A:209:GLY:HA3	1:A:250:SER:CB	2.40	0.50
1:A:101:LEU:HB3	1:A:315:TRP:CG	2.46	0.50
1:A:627:LEU:HD12	1:A:637:TYR:HB3	1.91	0.50
1:A:664:PHE:CE2	3:A:824:CBI:H62	2.41	0.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:106:ILE:HD11	1:A:119:PHE:CD2	2.47	0.50
1:A:22:TYR:HB3	1:A:704:ARG:O	2.12	0.50
1:A:779:TYR:N	1:A:779:TYR:HD2	2.09	0.50
1:A:488:TRP:CZ3	1:A:489:ASN:HB3	2.45	0.50
1:A:714:ILE:HG23	1:A:725:ALA:HB2	1.92	0.50
1:A:666:HIS:HB2	2:A:823:SO4:O3	2.11	0.50
1:A:424:PRO:O	1:A:467:SER:CB	2.60	0.50
1:A:535:LEU:CD1	1:A:752:TYR:CE2	2.94	0.50
1:A:55:LEU:CD1	1:A:155:TRP:CZ3	2.94	0.50
1:A:191:TYR:HE2	1:A:278:TRP:CH2	2.27	0.50
1:A:575:TYR:HE2	1:A:576:TYR:CE1	2.27	0.50
1:A:101:LEU:C	1:A:315:TRP:NE1	2.65	0.50
1:A:29:GLY:O	1:A:34:PHE:HD1	1.92	0.50
1:A:34:PHE:CD2	1:A:34:PHE:N	2.79	0.50
1:A:350:SER:HB2	1:A:364:MET:CG	2.30	0.50
1:A:688:TYR:CE1	1:A:741:VAL:CG1	2.95	0.50
1:A:426:TRP:HA	1:A:426:TRP:CE3	2.47	0.50
1:A:49:ASP:OD1	1:A:51:LYS:N	2.42	0.50
1:A:227:ALA:O	1:A:231:LEU:CD1	2.58	0.50
1:A:779:TYR:N	1:A:779:TYR:CD2	2.80	0.50
1:A:525:PHE:CE2	1:A:552:VAL:HA	2.46	0.50
1:A:582:THR:HG22	1:A:584:ALA:N	2.25	0.50
1:A:47:TYR:CE1	1:A:126:ASN:ND2	2.79	0.50
1:A:761:ILE:O	1:A:761:ILE:HG13	2.12	0.50
1:A:25:ILE:HG22	1:A:38:SER:N	2.26	0.50
1:A:186:TYR:CD2	1:A:288:LYS:HD3	2.46	0.50
1:A:200:VAL:CG1	1:A:295:LEU:HD21	2.42	0.50
1:A:219:GLY:O	1:A:222:ASN:HB2	2.12	0.50
1:A:345:VAL:CB	1:A:729:TRP:CZ3	2.94	0.50
1:A:568:TRP:HZ2	1:A:583:ASP:HB2	1.77	0.50
1:A:519:THR:CG2	1:A:594:PRO:HG3	2.42	0.49
1:A:783:VAL:HG22	1:A:820:VAL:CG1	2.39	0.49
1:A:40:GLN:OE1	1:A:40:GLN:CA	2.59	0.49
1:A:164:TYR:O	1:A:168:LEU:CD1	2.55	0.49
1:A:217:PHE:HD2	1:A:218:VAL:CG2	2.25	0.49
1:A:65:ALA:O	1:A:66:ASP:HB3	2.10	0.49
1:A:363:GLY:HA3	1:A:407:PRO:HD3	1.94	0.49
1:A:204:ASN:CG	1:A:264:VAL:HG12	2.33	0.49
1:A:688:TYR:O	1:A:692:THR:HB	2.12	0.49
1:A:322:TYR:CZ	1:A:748:VAL:CG1	2.94	0.49
1:A:480:LEU:HB2	1:A:517:GLU:OE2	2.12	0.49

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:655:PRO:HA	1:A:660:ASN:OD1	2.12	0.49
1:A:633:MET:N	1:A:668:ASN:HD21	1.96	0.49
1:A:261:ARG:HG3	1:A:262:GLU:N	2.26	0.49
1:A:20:THR:HG21	1:A:39:HIS:CE1	2.48	0.49
1:A:280:ASP:HB2	1:A:283:LYS:H	1.75	0.49
1:A:31:GLU:HB3	1:A:383:ARG:NH2	2.28	0.49
1:A:481:PRO:HD3	1:A:522:ALA:HB2	1.93	0.49
1:A:2:ARG:C	1:A:3:TYR:CD2	2.85	0.49
1:A:480:LEU:HB2	1:A:517:GLU:CD	2.33	0.49
1:A:31:GLU:HB3	1:A:383:ARG:HH21	1.77	0.49
1:A:581:GLY:HA2	1:A:588:GLY:O	2.11	0.49
1:A:591:TRP:CD2	1:A:636:GLN:HG3	2.48	0.49
1:A:742:SER:HB3	1:A:743:GLN:HG3	1.95	0.49
1:A:12:GLU:OE2	1:A:103:TYR:OH	2.18	0.49
1:A:20:THR:HG21	1:A:39:HIS:NE2	2.27	0.49
1:A:329:GLU:O	1:A:333:ARG:HG2	2.13	0.49
1:A:632:GLY:HA3	1:A:691:ILE:HG22	1.94	0.49
1:A:351:ARG:NH2	1:A:732:GLY:N	2.60	0.49
1:A:699:ILE:O	1:A:700:SER:C	2.49	0.49
1:A:721:ARG:O	1:A:724:GLU:HB3	2.10	0.49
1:A:342:GLN:NE2	1:A:710:TYR:HB2	2.28	0.49
1:A:693:PRO:O	1:A:696:ARG:N	2.40	0.49
1:A:390:ASP:OD2	1:A:410:LYS:HE3	2.13	0.49
1:A:322:TYR:OH	1:A:748:VAL:HG12	2.13	0.49
1:A:187:HIS:CD2	1:A:189:THR:OG1	2.66	0.49
1:A:392:ALA:O	1:A:395:GLN:HB2	2.12	0.49
1:A:326:SER:OG	1:A:327:ASN:N	2.45	0.49
1:A:94:HIS:ND1	1:A:114:ARG:NH1	2.59	0.49
1:A:99:HIS:HD2	1:A:708:TYR:OH	1.91	0.49
1:A:755:LEU:O	1:A:807:VAL:HG23	2.13	0.49
1:A:489:ASN:O	1:A:489:ASN:ND2	2.46	0.48
1:A:177:GLN:O	1:A:183:SER:CB	2.61	0.48
1:A:152:PHE:CD1	1:A:152:PHE:N	2.80	0.48
1:A:675:GLU:O	1:A:679:GLY:N	2.45	0.48
1:A:705:LEU:HD23	1:A:728:SER:OG	2.13	0.48
1:A:785:ASN:OD1	1:A:822:LEU:HD11	2.13	0.48
1:A:562:ASP:O	1:A:573:TYR:CE2	2.66	0.48
1:A:132:VAL:HG21	1:A:265:TYR:HE1	1.79	0.48
1:A:272:ASN:HD22	1:A:287:ASN:HB3	1.74	0.48
1:A:146:LEU:N	1:A:251:VAL:O	2.29	0.48
1:A:345:VAL:HB	1:A:729:TRP:HZ3	1.75	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:637:TYR:CD2	1:A:638:PRO:N	2.81	0.48
1:A:351:ARG:HH21	1:A:732:GLY:CA	2.27	0.48
1:A:761:ILE:HG23	1:A:785:ASN:ND2	2.28	0.48
1:A:149:PHE:CE2	1:A:224:LEU:HD21	2.48	0.48
1:A:386:GLU:O	1:A:390:ASP:N	2.44	0.48
1:A:560:LEU:O	1:A:564:TRP:HB2	2.14	0.48
1:A:485:ARG:O	1:A:486:ALA:HB2	2.13	0.48
1:A:59:ARG:HH12	1:A:214:ARG:NH1	2.07	0.48
1:A:739:VAL:O	1:A:742:SER:HB3	2.14	0.48
1:A:788:THR:CB	1:A:791:SER:HB3	2.34	0.48
1:A:194:ARG:HD3	1:A:194:ARG:N	2.24	0.48
1:A:15:ILE:HD13	1:A:24:TRP:CE3	2.49	0.48
1:A:101:LEU:C	1:A:315:TRP:HE1	2.15	0.48
1:A:571:ARG:C	1:A:571:ARG:HD2	2.34	0.48
1:A:448:VAL:CG2	1:A:460:LEU:HD12	2.35	0.48
1:A:781:ILE:HG23	1:A:818:VAL:HB	1.94	0.48
1:A:389:ILE:HG13	1:A:448:VAL:HG22	1.96	0.47
1:A:644:GLN:N	1:A:644:GLN:OE1	2.47	0.47
1:A:346:THR:O	1:A:347:PHE:C	2.52	0.47
1:A:685:PHE:CD1	1:A:761:ILE:CD1	2.96	0.47
1:A:389:ILE:HG12	1:A:448:VAL:HG22	1.96	0.47
1:A:537:ALA:O	1:A:540:GLY:N	2.34	0.47
1:A:125:GLU:CD	1:A:298:PHE:HE2	2.17	0.47
1:A:134:VAL:O	1:A:134:VAL:HG13	2.13	0.47
1:A:533:ALA:O	1:A:545:ALA:HB1	2.14	0.47
1:A:493:ASN:N	1:A:647:MET:O	2.47	0.47
1:A:385:ARG:CB	1:A:434:TYR:OH	2.57	0.47
1:A:406:GLN:HB3	1:A:409:THR:HG23	1.96	0.47
1:A:127:ALA:HB1	1:A:267:LEU:O	2.14	0.47
1:A:575:TYR:HD2	1:A:576:TYR:CD2	2.32	0.47
1:A:74:VAL:HG13	1:A:146:LEU:CD2	2.44	0.47
1:A:394:THR:HG21	1:A:405:TYR:CB	2.44	0.47
1:A:688:TYR:O	1:A:692:THR:CB	2.62	0.47
1:A:147:PHE:CD2	1:A:230:PRO:HA	2.49	0.47
1:A:351:ARG:HH12	1:A:372:ASP:CG	2.17	0.47
1:A:392:ALA:O	1:A:395:GLN:CB	2.63	0.47
1:A:342:GLN:NE2	1:A:710:TYR:O	2.38	0.47
1:A:224:LEU:HD23	1:A:224:LEU:HA	1.66	0.47
1:A:13:TYR:N	1:A:338:TRP:CZ2	2.83	0.47
1:A:444:LEU:HD23	1:A:539:ARG:HH11	1.79	0.47
1:A:538:ARG:NH1	1:A:752:TYR:HB2	2.30	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:325:SER:O	1:A:768:PHE:HA	2.13	0.47
1:A:520:PHE:CD1	1:A:593:GLU:HB3	2.44	0.47
1:A:569:PHE:CD2	1:A:595:GLN:OE1	2.67	0.47
1:A:3:TYR:CE1	1:A:21:PRO:HD3	2.50	0.47
1:A:706:GLU:HB3	1:A:708:TYR:CE1	2.50	0.47
1:A:646:HIS:CD2	1:A:646:HIS:N	2.82	0.47
1:A:575:TYR:CE2	1:A:576:TYR:CE1	3.02	0.47
1:A:757:VAL:HG12	1:A:757:VAL:O	2.13	0.47
1:A:328:ASP:O	1:A:332:ASP:OD1	2.32	0.47
1:A:387:ARG:HG3	1:A:387:ARG:HH11	1.80	0.47
1:A:186:TYR:O	1:A:187:HIS:C	2.53	0.47
1:A:195:ARG:O	1:A:277:LYS:NZ	2.41	0.47
1:A:185:ILE:HD13	1:A:212:THR:HG22	1.97	0.47
1:A:214:ARG:HB3	1:A:214:ARG:HE	1.52	0.47
1:A:214:ARG:HG3	1:A:246:ILE:HG21	1.97	0.47
1:A:216:THR:HG21	1:A:238:SER:CB	2.40	0.47
1:A:478:HIS:ND1	1:A:573:TYR:CD2	2.82	0.47
1:A:314:TYR:O	1:A:318:LEU:HB2	2.15	0.47
1:A:83:PRO:C	1:A:85:TRP:H	2.18	0.47
1:A:537:ALA:C	1:A:539:ARG:N	2.67	0.47
1:A:57:ARG:HH12	1:A:244:TYR:HD1	1.62	0.47
1:A:647:MET:HB3	1:A:650:VAL:CG1	2.44	0.47
1:A:499:THR:O	1:A:499:THR:OG1	2.33	0.47
1:A:793:GLY:CA	1:A:820:VAL:HG22	2.44	0.47
1:A:449:PRO:HA	1:A:457:GLU:HA	1.96	0.47
1:A:671:VAL:O	1:A:674:ALA:CB	2.59	0.46
1:A:425:LEU:HB2	1:A:524:GLN:NE2	2.30	0.46
1:A:315:TRP:HH2	1:A:344:MET:HG2	1.80	0.46
1:A:244:TYR:HA	1:A:245:PRO:HD3	1.57	0.46
1:A:685:PHE:CE2	1:A:689:LYS:CD	2.94	0.46
1:A:369:SER:CA	1:A:372:ASP:HB2	2.28	0.46
1:A:422:ASP:O	1:A:423:ASP:C	2.53	0.46
1:A:475:ARG:C	1:A:482:LEU:CD1	2.84	0.46
1:A:31:GLU:OE1	1:A:123:VAL:CG1	2.64	0.46
1:A:387:ARG:HD3	1:A:387:ARG:HA	1.47	0.46
1:A:519:THR:CG2	1:A:594:PRO:CG	2.94	0.46
1:A:525:PHE:CE2	1:A:555:MET:HG2	2.50	0.46
1:A:218:VAL:O	1:A:228:ALA:HB2	2.16	0.46
1:A:131:LYS:HE2	1:A:305:ASP:OD1	2.15	0.46
1:A:331:LEU:CD2	1:A:335:VAL:HG23	2.46	0.46
1:A:345:VAL:CG2	1:A:729:TRP:CH2	2.98	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:40:GLN:O	1:A:84:SER:HB3	2.16	0.46
1:A:74:VAL:HG13	1:A:146:LEU:HD21	1.97	0.46
1:A:620:LEU:O	1:A:623:VAL:HG12	2.16	0.46
1:A:426:TRP:O	1:A:427:LEU:C	2.54	0.46
1:A:366:PHE:HD2	1:A:366:PHE:O	1.99	0.46
1:A:699:ILE:C	1:A:701:ASP:N	2.68	0.46
1:A:15:ILE:CD1	1:A:24:TRP:HE3	2.29	0.46
1:A:575:TYR:CD2	1:A:576:TYR:CE2	3.03	0.46
1:A:74:VAL:HG22	1:A:146:LEU:HD22	1.98	0.46
1:A:471:THR:HG22	1:A:472:VAL:N	2.31	0.46
1:A:752:TYR:N	1:A:752:TYR:HD1	2.12	0.46
1:A:186:TYR:CE2	1:A:288:LYS:CD	2.79	0.46
1:A:203:VAL:CG2	1:A:265:TYR:CE2	2.98	0.46
1:A:344:MET:CE	1:A:348:ASN:ND2	2.79	0.46
1:A:665:CYS:SG	1:A:714:ILE:HD12	2.55	0.46
1:A:741:VAL:HG23	1:A:742:SER:N	2.31	0.46
1:A:444:LEU:HD23	1:A:539:ARG:NH1	2.31	0.46
1:A:15:ILE:CD1	1:A:24:TRP:CE3	2.99	0.46
1:A:771:THR:HA	1:A:779:TYR:O	2.16	0.46
1:A:487:ASP:OD2	1:A:571:ARG:NH2	2.45	0.46
1:A:99:HIS:CD2	1:A:708:TYR:CZ	3.04	0.46
1:A:324:VAL:HG22	1:A:325:SER:N	2.31	0.46
1:A:822:LEU:C	1:A:822:LEU:HD12	2.37	0.45
1:A:56:THR:C	1:A:153:CYS:HB2	2.36	0.45
1:A:659:GLU:OE2	3:A:824:CBI:O6	2.26	0.45
1:A:688:TYR:CD2	1:A:688:TYR:C	2.90	0.45
1:A:688:TYR:CE1	1:A:741:VAL:HG11	2.51	0.45
1:A:280:ASP:HB3	1:A:282:ALA:H	1.81	0.45
1:A:330:LYS:NZ	1:A:695:TYR:HA	2.32	0.45
1:A:44:TYR:CE1	1:A:54:ARG:HD3	2.52	0.45
1:A:795:LEU:N	1:A:795:LEU:HD12	2.31	0.45
1:A:339:ASN:HD21	1:A:738:PHE:HB2	1.81	0.45
1:A:394:THR:O	1:A:402:TYR:HB2	2.16	0.45
1:A:688:TYR:O	1:A:692:THR:OG1	2.32	0.45
1:A:765:VAL:O	1:A:785:ASN:ND2	2.48	0.45
1:A:559:LEU:HD23	1:A:603:VAL:HG11	1.97	0.45
1:A:36:LEU:HD23	1:A:355:PHE:CE1	2.51	0.45
1:A:751:GLU:CG	1:A:752:TYR:N	2.77	0.45
1:A:435:ILE:CG2	1:A:441:PHE:CE2	2.90	0.45
1:A:253:VAL:HG11	1:A:261:ARG:HB3	1.98	0.45
1:A:497:PHE:HD2	1:A:645:VAL:HG13	1.81	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:322:TYR:OH	1:A:748:VAL:HG11	2.15	0.45
1:A:599:VAL:O	1:A:677:VAL:HG11	2.17	0.45
1:A:83:PRO:C	1:A:85:TRP:N	2.69	0.45
1:A:40:GLN:NE2	1:A:84:SER:O	2.50	0.45
1:A:47:TYR:HE1	1:A:126:ASN:ND2	2.13	0.45
1:A:350:SER:HB3	1:A:364:MET:HG2	1.91	0.45
1:A:665:CYS:O	1:A:668:ASN:HB2	2.16	0.45
1:A:733:THR:O	1:A:737:ASN:HB2	2.17	0.45
1:A:98:ARG:O	1:A:105:THR:HG22	2.17	0.45
1:A:488:TRP:CE2	3:A:824:CBI:O4	2.70	0.45
1:A:495:ASN:HD22	1:A:495:ASN:H	1.58	0.45
1:A:164:TYR:CD1	1:A:167:ASN:ND2	2.85	0.45
1:A:759:PRO:C	1:A:760:GLN:HG2	2.37	0.45
1:A:162:THR:CG2	1:A:162:THR:O	2.64	0.45
1:A:284:GLN:HE21	1:A:284:GLN:HB2	1.51	0.45
1:A:101:LEU:HD12	1:A:101:LEU:N	2.32	0.44
1:A:629:THR:HB	1:A:632:GLY:O	2.17	0.44
1:A:45:SER:OG	1:A:70:ARG:NH2	2.49	0.44
1:A:37:LEU:HG	1:A:37:LEU:O	2.17	0.44
1:A:812:ALA:C	1:A:814:SER:H	2.20	0.44
1:A:693:PRO:O	1:A:694:ALA:C	2.52	0.44
1:A:793:GLY:HA3	1:A:820:VAL:CG2	2.45	0.44
1:A:185:ILE:CG2	1:A:186:TYR:N	2.81	0.44
1:A:75:ASN:OD1	1:A:79:ASP:N	2.50	0.44
1:A:545:ALA:O	1:A:549:ARG:HB2	2.17	0.44
1:A:347:PHE:HB2	1:A:376:PHE:CD2	2.53	0.44
1:A:614:ALA:O	1:A:617:ILE:N	2.50	0.44
1:A:56:THR:HA	1:A:153:CYS:H	1.82	0.44
1:A:156:ASN:O	1:A:160:ASP:HB3	2.18	0.44
1:A:342:GLN:HG2	1:A:734:ALA:HB2	1.98	0.44
1:A:570:LEU:HD23	1:A:570:LEU:HA	1.66	0.44
1:A:712:GLN:HG2	1:A:713:MET:N	2.32	0.44
1:A:746:LEU:O	1:A:748:VAL:N	2.50	0.44
1:A:69:GLY:N	1:A:71:TYR:HE2	2.14	0.44
1:A:83:PRO:HB3	1:A:108:GLY:HA3	1.99	0.44
1:A:28:LEU:HD23	1:A:121:VAL:HG23	2.00	0.44
1:A:706:GLU:HB2	1:A:709:VAL:CG2	2.45	0.44
1:A:364:MET:HB2	1:A:405:TYR:CE1	2.52	0.44
1:A:488:TRP:CH2	3:A:824:CBI:H61	2.53	0.44
1:A:353:ALA:O	1:A:730:LEU:HD12	2.17	0.44
1:A:213:ASP:OD1	1:A:214:ARG:N	2.51	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:389:ILE:CD1	1:A:446:GLU:HG2	2.47	0.44
1:A:534:GLU:O	1:A:537:ALA:N	2.49	0.44
1:A:478:HIS:HE1	1:A:573:TYR:CE1	2.35	0.44
1:A:660:ASN:OD1	1:A:660:ASN:O	2.35	0.44
1:A:591:TRP:CE2	1:A:636:GLN:HG3	2.52	0.44
1:A:645:VAL:HG12	1:A:646:HIS:N	2.33	0.44
1:A:721:ARG:HB3	1:A:724:GLU:HB2	1.98	0.44
1:A:87:PRO:HD2	1:A:88:VAL:H	1.82	0.44
1:A:179:SER:HB2	1:A:182:GLY:O	2.18	0.44
1:A:673:ILE:HA	1:A:676:THR:HG23	1.99	0.44
1:A:788:THR:O	1:A:791:SER:CB	2.66	0.44
1:A:46:PHE:CD2	1:A:50:ALA:HB2	2.53	0.44
1:A:44:TYR:CD1	1:A:54:ARG:CD	2.99	0.44
1:A:98:ARG:H	1:A:105:THR:CG2	2.28	0.44
1:A:22:TYR:CB	1:A:704:ARG:O	2.65	0.44
1:A:27:TYR:HB2	1:A:345:VAL:CG2	2.48	0.44
1:A:17:THR:OG1	1:A:18:PRO:HD2	2.17	0.44
1:A:428:ILE:HG22	1:A:531:GLN:HG2	1.99	0.44
3:A:824:CBI:H3'	3:A:824:CBI:O5	2.17	0.43
1:A:751:GLU:CG	1:A:752:TYR:H	2.28	0.43
1:A:478:HIS:ND1	1:A:573:TYR:CE2	2.86	0.43
1:A:575:TYR:CD2	1:A:576:TYR:CZ	3.06	0.43
1:A:135:THR:HG23	1:A:260:SER:HB2	1.99	0.43
1:A:692:THR:HA	1:A:693:PRO:HD3	1.88	0.43
1:A:526:VAL:HG13	1:A:552:VAL:HG12	2.01	0.43
1:A:389:ILE:HD11	1:A:446:GLU:HB3	2.00	0.43
1:A:715:ALA:HB2	1:A:724:GLU:HB3	2.00	0.43
1:A:46:PHE:HB2	1:A:53:ARG:O	2.17	0.43
1:A:546:ASP:O	1:A:550:GLY:N	2.47	0.43
1:A:378:HIS:NE2	1:A:379:LEU:HD12	2.34	0.43
1:A:27:TYR:HB2	1:A:345:VAL:HG21	2.00	0.43
1:A:668:ASN:N	1:A:669:PRO:HD2	2.33	0.43
1:A:696:ARG:C	1:A:698:ASP:OD1	2.57	0.43
1:A:710:TYR:O	1:A:731:THR:HG22	2.18	0.43
1:A:270:VAL:HG21	1:A:291:ALA:CB	2.47	0.43
1:A:271:GLU:O	1:A:290:ARG:NE	2.50	0.43
1:A:575:TYR:CE2	1:A:576:TYR:CZ	3.06	0.43
1:A:324:VAL:N	1:A:336:ASN:OD1	2.51	0.43
1:A:560:LEU:O	1:A:564:TRP:CB	2.66	0.43
1:A:663:ILE:HD12	1:A:715:ALA:O	2.18	0.43
1:A:101:LEU:HB3	1:A:315:TRP:NE1	2.32	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:591:TRP:O	1:A:594:PRO:HD2	2.18	0.43
1:A:229:VAL:N	1:A:230:PRO:CD	2.81	0.43
1:A:494:LEU:HD13	1:A:574:ASP:HA	1.99	0.43
1:A:30:SER:O	1:A:383:ARG:NH1	2.48	0.43
1:A:689:LYS:HB3	1:A:695:TYR:CE1	2.54	0.43
1:A:568:TRP:HZ2	1:A:583:ASP:CB	2.31	0.43
1:A:622:SER:O	1:A:626:MET:CG	2.65	0.43
1:A:378:HIS:HB2	1:A:437:GLU:OE2	2.18	0.43
1:A:345:VAL:O	1:A:349:MET:HG2	2.19	0.43
1:A:525:PHE:HE2	1:A:552:VAL:HA	1.84	0.43
1:A:622:SER:O	1:A:625:GLU:N	2.52	0.43
1:A:200:VAL:HG21	1:A:291:ALA:CB	2.48	0.43
1:A:93:ASP:N	1:A:109:GLU:O	2.45	0.43
1:A:672:ILE:O	1:A:675:GLU:N	2.52	0.43
1:A:155:TRP:HB2	1:A:195:ARG:HH12	1.75	0.43
1:A:430:GLY:O	1:A:433:ALA:HB3	2.19	0.43
1:A:205:THR:HG22	1:A:206:GLN:O	2.19	0.43
1:A:537:ALA:C	1:A:539:ARG:H	2.22	0.43
1:A:569:PHE:HB2	1:A:594:PRO:HB2	2.01	0.43
1:A:489:ASN:HA	3:A:824:CBI:H4	1.99	0.43
1:A:388:ILE:O	1:A:392:ALA:HB2	2.19	0.43
1:A:266:VAL:HG13	1:A:294:LEU:CD2	2.49	0.43
1:A:162:THR:HG22	1:A:162:THR:O	2.18	0.43
1:A:693:PRO:CA	1:A:696:ARG:CB	2.91	0.43
1:A:24:TRP:HB2	1:A:39:HIS:CD2	2.51	0.43
1:A:756:VAL:HG13	1:A:805:ASN:HB3	2.00	0.42
1:A:553:ALA:C	1:A:555:MET:N	2.71	0.42
1:A:12:GLU:HG2	1:A:99:HIS:O	2.19	0.42
1:A:309:ALA:O	1:A:312:LYS:N	2.52	0.42
1:A:489:ASN:CB	3:A:824:CBI:O6	2.63	0.42
1:A:582:THR:C	1:A:584:ALA:H	2.23	0.42
1:A:465:THR:O	1:A:466:ARG:C	2.57	0.42
1:A:183:SER:OG	1:A:207:ALA:HB2	2.18	0.42
1:A:380:ILE:HG22	1:A:383:ARG:HB2	2.00	0.42
1:A:673:ILE:O	1:A:677:VAL:CG2	2.66	0.42
1:A:370:ASN:HB3	1:A:426:TRP:HB3	2.01	0.42
1:A:682:GLY:HA2	1:A:762:GLY:HA3	2.01	0.42
1:A:712:GLN:O	1:A:726:LYS:O	2.37	0.42
1:A:524:GLN:O	1:A:527:LEU:HB3	2.19	0.42
1:A:366:PHE:C	1:A:366:PHE:CD2	2.90	0.42
1:A:34:PHE:CE1	1:A:348:ASN:HB3	2.55	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:595:GLN:O	1:A:599:VAL:HG23	2.19	0.42
3:A:824:CBI:C3'	3:A:824:CBI:O5	2.67	0.42
1:A:527:LEU:C	1:A:527:LEU:HD12	2.39	0.42
1:A:254:SER:O	1:A:255:LEU:HD23	2.20	0.42
1:A:590:ILE:HG23	1:A:627:LEU:CD1	2.49	0.42
1:A:525:PHE:O	1:A:525:PHE:CD2	2.73	0.42
1:A:132:VAL:HG12	1:A:133:THR:N	2.35	0.42
1:A:207:ALA:CB	1:A:249:HIS:HB3	2.50	0.42
1:A:665:CYS:O	1:A:669:PRO:CD	2.68	0.42
1:A:418:SER:H	1:A:485:ARG:CD	2.33	0.42
1:A:291:ALA:O	1:A:295:LEU:CD1	2.64	0.42
1:A:271:GLU:O	1:A:290:ARG:CZ	2.67	0.42
1:A:101:LEU:CD1	1:A:101:LEU:N	2.83	0.42
1:A:519:THR:CG2	1:A:594:PRO:HB3	2.47	0.42
1:A:588:GLY:H	1:A:638:PRO:HD2	1.84	0.42
1:A:149:PHE:CE1	1:A:246:ILE:HD12	2.55	0.42
1:A:491:CYS:O	1:A:650:VAL:HB	2.19	0.42
1:A:396:PHE:CE1	1:A:402:TYR:CE2	3.07	0.42
1:A:672:ILE:CD1	1:A:688:TYR:HB2	2.50	0.42
1:A:120:PHE:O	1:A:129:VAL:N	2.49	0.42
1:A:538:ARG:NH1	1:A:752:TYR:CB	2.82	0.42
1:A:360:ILE:HD12	1:A:361:GLY:N	2.34	0.42
1:A:184:ALA:HA	1:A:249:HIS:NE2	2.35	0.42
1:A:309:ALA:O	1:A:310:ALA:C	2.58	0.42
1:A:404:GLN:HG3	1:A:413:ASN:HB2	2.02	0.42
1:A:387:ARG:HH11	1:A:387:ARG:CG	2.33	0.41
1:A:82:THR:CG2	1:A:84:SER:OG	2.66	0.41
1:A:426:TRP:O	1:A:429:ALA:N	2.52	0.41
1:A:54:ARG:HH11	1:A:157:ALA:CB	2.33	0.41
1:A:611:ASP:C	1:A:611:ASP:OD1	2.59	0.41
1:A:101:LEU:O	1:A:315:TRP:NE1	2.54	0.41
1:A:620:LEU:O	1:A:621:ASP:C	2.56	0.41
1:A:13:TYR:N	1:A:338:TRP:HZ2	2.17	0.41
1:A:327:ASN:C	1:A:327:ASN:OD1	2.58	0.41
1:A:672:ILE:O	1:A:676:THR:HG23	2.20	0.41
1:A:526:VAL:HG12	1:A:526:VAL:O	2.20	0.41
1:A:565:ASP:CG	1:A:568:TRP:HE1	2.23	0.41
1:A:582:THR:CG2	1:A:584:ALA:H	2.30	0.41
1:A:497:PHE:HE2	1:A:646:HIS:HB3	1.85	0.41
1:A:279:ALA:C	1:A:280:ASP:OD1	2.59	0.41
1:A:342:GLN:O	1:A:346:THR:HG23	2.20	0.41

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:669:PRO:HB3	1:A:737:ASN:OD1	2.21	0.41
1:A:477:PRO:HG3	1:A:515:VAL:HG13	1.99	0.41
1:A:327:ASN:ND2	1:A:766:PRO:HD2	2.35	0.41
1:A:685:PHE:O	1:A:688:TYR:N	2.54	0.41
1:A:685:PHE:CD2	1:A:689:LYS:HD3	2.54	0.41
1:A:84:SER:O	1:A:85:TRP:HB3	2.21	0.41
1:A:559:LEU:HD21	1:A:603:VAL:HG21	2.02	0.41
1:A:574:ASP:C	1:A:574:ASP:OD1	2.59	0.41
1:A:811:PRO:O	1:A:814:SER:HB2	2.20	0.41
1:A:489:ASN:C	1:A:489:ASN:ND2	2.73	0.41
1:A:425:LEU:HB2	1:A:524:GLN:HE21	1.85	0.41
1:A:153:CYS:C	1:A:155:TRP:N	2.70	0.41
1:A:459:PRO:C	1:A:461:PHE:H	2.24	0.41
1:A:207:ALA:HB2	1:A:249:HIS:HB3	2.02	0.41
1:A:649:GLU:HG2	1:A:649:GLU:O	2.20	0.41
1:A:347:PHE:CZ	1:A:387:ARG:HG2	2.56	0.41
1:A:737:ASN:O	1:A:738:PHE:C	2.57	0.41
1:A:481:PRO:HG3	1:A:522:ALA:N	2.36	0.41
1:A:190:GLU:O	1:A:193:GLU:CB	2.68	0.41
1:A:200:VAL:HG21	1:A:270:VAL:HG21	2.03	0.41
1:A:262:GLU:OE1	1:A:301:SER:HB3	2.20	0.41
1:A:352:SER:O	1:A:359:GLY:HA2	2.20	0.41
1:A:488:TRP:CG	1:A:489:ASN:N	2.89	0.41
1:A:713:MET:O	1:A:725:ALA:HA	2.20	0.41
1:A:458:VAL:O	1:A:459:PRO:C	2.59	0.41
1:A:715:ALA:HB3	1:A:722:HIS:HA	2.02	0.41
1:A:84:SER:O	1:A:86:LEU:N	2.53	0.41
1:A:214:ARG:HG3	1:A:246:ILE:CG2	2.51	0.41
1:A:446:GLU:HG3	1:A:447:PRO:HD2	2.03	0.41
1:A:438:THR:OG1	1:A:440:ASP:HB2	2.21	0.41
1:A:98:ARG:CB	1:A:105:THR:CG2	2.99	0.41
1:A:497:PHE:CD2	1:A:646:HIS:HA	2.56	0.41
1:A:357:GLU:C	1:A:359:GLY:N	2.74	0.41
1:A:647:MET:HB3	1:A:650:VAL:HG11	2.02	0.41
1:A:387:ARG:NH1	1:A:387:ARG:CG	2.84	0.41
1:A:615:PRO:O	1:A:616:ALA:C	2.58	0.41
1:A:658:LYS:C	1:A:660:ASN:H	2.25	0.41
1:A:520:PHE:C	1:A:520:PHE:HD2	2.19	0.40
1:A:82:THR:HG22	1:A:84:SER:H	1.86	0.40
1:A:564:TRP:NE1	1:A:566:GLY:CA	2.77	0.40
1:A:218:VAL:HG12	1:A:222:ASN:HB3	2.02	0.40

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:476:GLY:N	1:A:480:LEU:O	2.35	0.40
1:A:256:ALA:O	1:A:259:GLU:CB	2.68	0.40
1:A:348:ASN:O	1:A:364:MET:HE2	2.19	0.40
1:A:520:PHE:HE1	1:A:670:TRP:CH2	2.39	0.40
1:A:363:GLY:CA	1:A:407:PRO:HD3	2.50	0.40
1:A:31:GLU:CB	1:A:383:ARG:NH2	2.84	0.40
1:A:762:GLY:O	1:A:785:ASN:ND2	2.49	0.40
1:A:42:GLY:CA	1:A:69:GLY:HA3	2.38	0.40
1:A:154:LEU:HA	1:A:187:HIS:HE1	1.87	0.40
1:A:629:THR:HG23	1:A:630:ASP:N	2.35	0.40
1:A:44:TYR:HE1	1:A:54:ARG:CD	2.29	0.40
1:A:11:ARG:C	1:A:12:GLU:HG3	2.38	0.40
1:A:645:VAL:CG1	1:A:646:HIS:N	2.83	0.40
1:A:293:ALA:O	1:A:294:LEU:C	2.60	0.40
1:A:777:ALA:HB3	1:A:779:TYR:HE2	1.86	0.40
1:A:379:LEU:C	1:A:380:ILE:HG13	2.42	0.40
1:A:520:PHE:CB	1:A:571:ARG:NH1	2.72	0.40
1:A:629:THR:HG22	1:A:632:GLY:O	2.22	0.40
1:A:711:ALA:HB2	1:A:728:SER:HA	2.01	0.40
1:A:761:ILE:HG23	1:A:762:GLY:O	2.21	0.40
1:A:183:SER:OG	1:A:207:ALA:CB	2.70	0.40
1:A:138:SER:O	1:A:257:PRO:CB	2.63	0.40
1:A:354:SER:HB3	1:A:357:GLU:HG2	2.02	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	820/822 (100%)	715 (87%)	96 (12%)	9 (1%)	17 57

All (9) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	154	LEU
1	A	488	TRP
1	A	66	ASP
1	A	700	SER
1	A	729	TRP
1	A	574	ASP
1	A	508	ILE
1	A	713	MET
1	A	747	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	636/674 (94%)	536 (84%)	100 (16%)	3 15

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

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1	MET
1	A	3	TYR
1	A	20	THR
1	A	30	SER
1	A	31	GLU
1	A	33	PHE
1	A	34	PHE
1	A	37	LEU
1	A	40	GLN
1	A	59	ARG
1	A	63	ILE
1	A	70	ARG
1	A	84	SER
1	A	106	ILE
1	A	123	VAL
1	A	133	THR
1	A	135	THR
1	A	136	ASN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	139	ASP
1	A	141	TYR
1	A	143	SER
1	A	144	LEU
1	A	165	GLN
1	A	166	ARG
1	A	167	ASN
1	A	168	LEU
1	A	194	ARG
1	A	205	THR
1	A	208	GLU
1	A	211	ASP
1	A	221	TYR
1	A	222	ASN
1	A	229	VAL
1	A	239	VAL
1	A	244	TYR
1	A	246	ILE
1	A	261	ARG
1	A	277	LYS
1	A	284	GLN
1	A	295	LEU
1	A	300	THR
1	A	317	ASP
1	A	318	LEU
1	A	331	LEU
1	A	332	ASP
1	A	334	MET
1	A	366	PHE
1	A	368	ASP
1	A	370	ASN
1	A	372	ASP
1	A	387	ARG
1	A	389	ILE
1	A	402	TYR
1	A	405	TYR
1	A	409	THR
1	A	418	SER
1	A	483	ILE
1	A	489	ASN
1	A	490	ASP
1	A	493	ASN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	495	ASN
1	A	498	SER
1	A	499	THR
1	A	500	THR
1	A	507	THR
1	A	510	ASN
1	A	518	SER
1	A	520	PHE
1	A	525	PHE
1	A	527	LEU
1	A	531	GLN
1	A	532	TYR
1	A	568	TRP
1	A	571	ARG
1	A	590	ILE
1	A	603	VAL
1	A	605	VAL
1	A	613	ASP
1	A	617	ILE
1	A	622	SER
1	A	626	MET
1	A	629	THR
1	A	636	GLN
1	A	637	TYR
1	A	645	VAL
1	A	646	HIS
1	A	647	MET
1	A	664	PHE
1	A	688	TYR
1	A	689	LYS
1	A	691	ILE
1	A	695	TYR
1	A	698	ASP
1	A	703	HIS
1	A	708	TYR
1	A	720	VAL
1	A	729	TRP
1	A	749	ARG
1	A	781	ILE
1	A	784	THR

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

Mol	Chain	Res	Type
1	A	19	HIS
1	A	99	HIS
1	A	222	ASN
1	A	237	ASN
1	A	284	GLN
1	A	339	ASN
1	A	340	GLN
1	A	348	ASN
1	A	403	HIS
1	A	495	ASN
1	A	646	HIS
1	A	668	ASN
1	A	703	HIS

### 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](#)

2 ligands are modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with  $|Z| > 2$  is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	$\# Z  > 2$	Counts	RMSZ	$\# Z  > 2$
2	SO4	A	823	-	4,4,4	0.34	0	6,6,6	0.17	0
3	CBI	A	824	-	24,24,24	1.27	4 (16%)	35,35,35	1.64	7 (20%)

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	SO4	A	823	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
3	CBI	A	824	-	-	0/8/48/48	0/2/2/2

All (4) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
3	A	824	CBI	O5'-C1'	-2.69	1.38	1.43
3	A	824	CBI	O5-C5	-2.36	1.38	1.44
3	A	824	CBI	O3-C3	-2.28	1.37	1.43
3	A	824	CBI	C4-C5	-2.24	1.48	1.53

All (7) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
3	A	824	CBI	C6-C5-C4	-3.52	104.33	113.02
3	A	824	CBI	O6-C6-C5	-2.35	103.55	111.33
3	A	824	CBI	C3'-C4'-C5'	2.05	115.47	110.84
3	A	824	CBI	O4'-C4'-C3'	2.13	112.66	107.17
3	A	824	CBI	O5'-C5'-C4'	2.42	114.86	109.75
3	A	824	CBI	C1-C2-C3	3.43	116.74	109.97
3	A	824	CBI	O5-C1-C2	4.88	120.28	110.28

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

2 monomers are involved in 13 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
2	A	823	SO4	2	0
3	A	824	CBI	11	0

## 5.7 Other polymers ⓘ

There are no such residues in this entry.

## 5.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.



## 6 Fit of model and data

### 6.1 Protein, DNA and RNA chains

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å <sup>2</sup> )	Q<0.9
1	A	822/822 (100%)	0.55	34 (4%) 41 34	16, 27, 43, 62	1 (0%)

All (34) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	610	GLN	4.5
1	A	602	GLY	4.4
1	A	135	THR	4.1
1	A	786	SER	3.9
1	A	280	ASP	3.6
1	A	281	ASP	3.3
1	A	184	ALA	2.9
1	A	81	TRP	2.8
1	A	327	ASN	2.7
1	A	141	TYR	2.7
1	A	441	PHE	2.7
1	A	519	THR	2.7
1	A	254	SER	2.7
1	A	108	GLY	2.6
1	A	541	LEU	2.6
1	A	134	VAL	2.5
1	A	418	SER	2.5
1	A	223	SER	2.5
1	A	810	ALA	2.5
1	A	76	ASP	2.5
1	A	140	SER	2.4
1	A	821	THR	2.3
1	A	574	ASP	2.3
1	A	80	VAL	2.3
1	A	77	GLY	2.2
1	A	260	SER	2.2
1	A	507	THR	2.2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	514	GLY	2.2
1	A	258	GLY	2.1
1	A	419	GLY	2.1
1	A	252	ALA	2.1
1	A	782	THR	2.1
1	A	78	GLY	2.0
1	A	279	ALA	2.0

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

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

## 6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

## 6.4 Ligands [i](#)

In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. LLDF column lists the quality of electron density of the group with respect to its neighbouring residues in protein, DNA or RNA chains. The B-factors column lists the minimum, median, 95<sup>th</sup> percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled 'Q< 0.9' lists the number of atoms with occupancy less than 0.9.

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	LLDF	B-factors(Å <sup>2</sup> )	Q<0.9
3	CBI	A	824	23/23	0.71	0.34	0.79	20,24,27,29	0
2	SO4	A	823	5/5	0.95	0.23	-1.28	23,24,25,27	0

## 6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.