



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 17, 2026 – 10:57 PM UTC

PDB ID : 1DNV / pdb_00001dnv
Title : PARVOVIRUS (DENSOVIRUS) FROM GALLERIA MELLONELLA
Authors : Simpson, A.A.; Chipmann, P.R.; Baker, T.S.; Tijssen, P.; Rossmann, M.G.
Deposited on : 1998-07-22
Resolution : 3.60 Å(reported)

This is a Full wwPDB X-ray Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/XrayValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

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

MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.0
Xtriage (Phenix)	:	2.0
EDS	:	3.0
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
CCP4	:	9.0.010 (Gargrove)
Density-Fitness	:	1.0.12
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

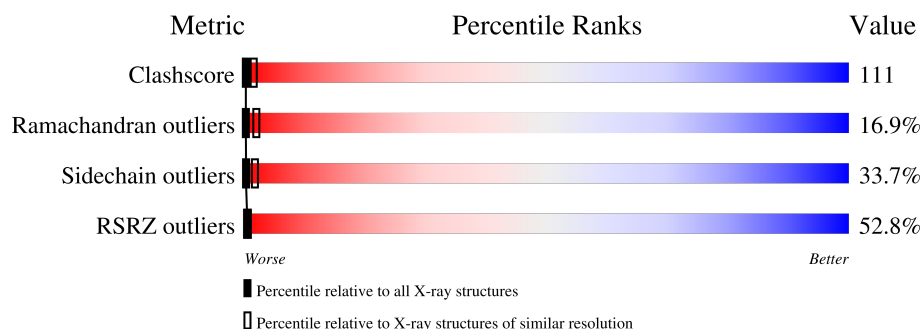
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

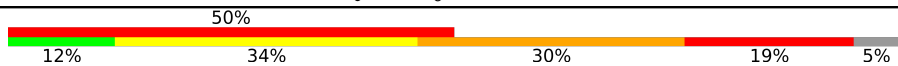
The reported resolution of this entry is 3.60 Å.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	190562	1827 (3.70-3.50)
Ramachandran outliers	187476	1773 (3.70-3.50)
Sidechain outliers	187428	1772 (3.70-3.50)
RSRZ outliers	180081	1745 (3.70-3.50)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments of the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria respectively. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$. The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the electron density. The numeric value is given above the bar.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	437	

2 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3197 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 GALLERIA MELLONELLA DENSOVIRUS CAPSID PROTEIN.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	415	Total	C	N	O	S	0	0	0
			3197	2024	544	613	16			

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 41 21 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	264.44Å 264.44Å 683.45Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	9.00 – 3.60 9.00 – 3.60	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	35.6 (9.00-3.60) 34.4 (9.00-3.60)	Depositor EDS
R_{merge}	0.11	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	1.57 (at 3.49Å)	Xtriage
Refinement program	X-PLOR 3.1	Depositor
R, R_{free}	0.271 , (Not available) 0.301 , (Not available)	Depositor DCC
R_{free} test set	No test flags present.	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	55.9	Xtriage
Anisotropy	0.430	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.16 , 0.6	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.45$, $\langle L^2 \rangle = 0.28$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.08	EDS
Total number of atoms	3197	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	26.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.77% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality [i](#)

5.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# $ Z > 5$	RMSZ	# $ Z > 5$
1	A	2.60	104/3278 (3.2%)	3.12	201/4477 (4.5%)

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

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	34

All (104) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	322	ILE	C-N	46.27	1.90	1.33
1	A	321	ASN	C-N	-35.66	0.85	1.33
1	A	366	ASN	C-N	-28.93	0.85	1.33
1	A	250	LEU	C-N	-28.54	0.95	1.33
1	A	400	THR	C-N	-28.09	0.94	1.33
1	A	317	ALA	C-N	24.14	1.67	1.33
1	A	387	THR	C-N	-23.88	1.01	1.33
1	A	128	ASN	C-N	-23.22	1.01	1.33
1	A	251	ILE	C-N	-22.42	1.02	1.33
1	A	121	VAL	CA-C	-22.16	1.25	1.53
1	A	121	VAL	C-N	-21.75	1.03	1.33
1	A	324	SER	C-N	-21.68	1.03	1.33
1	A	427	LEU	C-N	-20.93	1.04	1.33
1	A	408	ASN	C-N	-20.76	1.04	1.33
1	A	214	GLN	C-N	-17.99	1.08	1.33
1	A	123	LYS	N-CA	-17.02	1.24	1.46
1	A	121	VAL	N-CA	-15.64	1.29	1.46
1	A	317	ALA	CA-C	15.47	1.72	1.52
1	A	420	LEU	C-N	15.01	1.53	1.33
1	A	424	PHE	C-N	-14.97	1.13	1.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	347	SER	C-N	13.92	1.60	1.33
1	A	122	THR	CA-C	-13.55	1.34	1.52
1	A	129	GLN	C-N	-13.05	1.17	1.33
1	A	371	ASN	N-CA	-12.85	1.32	1.46
1	A	224	ASN	C-N	-12.08	1.18	1.33
1	A	215	ASN	C-N	-12.01	1.16	1.33
1	A	149	ALA	N-CA	-12.00	1.30	1.46
1	A	223	THR	CA-C	11.53	1.65	1.52
1	A	274	PRO	C-N	-11.21	1.18	1.33
1	A	426	GLY	C-N	-11.00	1.18	1.33
1	A	306	GLU	C-N	-10.90	1.18	1.33
1	A	122	THR	C-N	-10.80	1.18	1.33
1	A	420	LEU	CA-C	10.74	1.65	1.53
1	A	196	PHE	CA-C	10.70	1.67	1.52
1	A	148	ARG	C-N	-10.36	1.19	1.33
1	A	162	THR	C-N	-10.25	1.19	1.33
1	A	367	SER	CA-C	-9.83	1.40	1.53
1	A	197	GLY	N-CA	9.57	1.59	1.45
1	A	209	SER	CA-C	-9.30	1.41	1.52
1	A	209	SER	C-N	-8.79	1.21	1.33
1	A	121	VAL	CA-CB	-8.78	1.45	1.54
1	A	210	PHE	N-CA	-8.73	1.34	1.45
1	A	346	PRO	C-N	-8.27	1.21	1.33
1	A	320	PHE	N-CA	-8.22	1.35	1.46
1	A	163	ALA	C-N	-7.95	1.22	1.33
1	A	252	ASP	N-CA	-7.85	1.36	1.46
1	A	117	THR	C-N	7.84	1.44	1.33
1	A	275	THR	C-O	7.74	1.33	1.24
1	A	225	GLN	N-CA	-7.54	1.36	1.46
1	A	197	GLY	C-N	-7.51	1.23	1.33
1	A	199	ALA	N-CA	-7.45	1.36	1.46
1	A	370	LEU	C-N	-7.42	1.21	1.34
1	A	198	ASN	C-N	-7.35	1.23	1.33
1	A	433	THR	CA-CB	7.33	1.66	1.53
1	A	120	THR	CA-C	-7.28	1.43	1.52
1	A	194	THR	CA-CB	7.25	1.65	1.53
1	A	209	SER	N-CA	-7.21	1.36	1.46
1	A	368	SER	N-CA	-7.11	1.36	1.46
1	A	312	THR	CA-CB	7.11	1.65	1.53
1	A	387	THR	CA-CB	-7.10	1.42	1.53
1	A	305	ALA	C-N	-7.09	1.23	1.33
1	A	274	PRO	CA-C	-6.71	1.44	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	182	ILE	CA-CB	6.63	1.63	1.54
1	A	369	PRO	N-CA	6.57	1.54	1.46
1	A	433	THR	N-CA	6.49	1.54	1.46
1	A	46	MET	SD-CE	6.43	1.95	1.79
1	A	133	VAL	CA-CB	6.40	1.60	1.54
1	A	369	PRO	CA-C	6.33	1.59	1.52
1	A	423	ALA	C-N	6.33	1.42	1.33
1	A	322	ILE	C-O	-6.31	1.16	1.24
1	A	141	LYS	N-CA	-6.25	1.39	1.46
1	A	434	LEU	N-CA	6.13	1.54	1.46
1	A	53	ASN	N-CA	-6.10	1.38	1.46
1	A	427	LEU	N-CA	-6.08	1.38	1.46
1	A	137	ILE	CA-CB	-5.95	1.46	1.54
1	A	224	ASN	N-CA	5.95	1.53	1.46
1	A	201	ASN	CA-C	5.91	1.60	1.52
1	A	205	HIS	C-N	-5.89	1.26	1.33
1	A	357	ALA	CA-CB	5.87	1.63	1.53
1	A	370	LEU	CA-C	-5.76	1.45	1.53
1	A	350	ILE	CA-CB	-5.70	1.46	1.54
1	A	119	SER	C-N	-5.69	1.25	1.33
1	A	367	SER	C-N	-5.65	1.21	1.33
1	A	428	TYR	C-N	-5.65	1.25	1.33
1	A	346	PRO	CA-C	5.62	1.60	1.52
1	A	123	LYS	C-N	-5.62	1.25	1.33
1	A	119	SER	CA-CB	-5.61	1.44	1.53
1	A	196	PHE	C-N	5.53	1.41	1.33
1	A	207	VAL	C-N	-5.45	1.26	1.33
1	A	148	ARG	CA-C	-5.45	1.45	1.52
1	A	150	PHE	C-N	-5.39	1.26	1.33
1	A	355	VAL	N-CA	5.33	1.53	1.46
1	A	409	THR	C-N	-5.27	1.26	1.33
1	A	226	GLY	C-N	5.26	1.40	1.33
1	A	119	SER	N-CA	-5.20	1.40	1.46
1	A	45	PHE	N-CA	-5.19	1.39	1.45
1	A	53	ASN	CA-C	-5.17	1.45	1.52
1	A	150	PHE	CA-C	-5.16	1.45	1.52
1	A	152	ALA	C-N	5.14	1.40	1.33
1	A	342	PRO	CA-C	5.13	1.59	1.52
1	A	31	ASN	CA-C	-5.13	1.46	1.52
1	A	84	TYR	CA-C	-5.10	1.48	1.53
1	A	433	THR	CA-C	5.10	1.59	1.52
1	A	208	SER	C-N	-5.06	1.26	1.33

All (201) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	321	ASN	O-C-N	-47.63	71.44	121.93
1	A	400	THR	O-C-N	-45.73	61.76	122.59
1	A	250	LEU	O-C-N	-39.81	69.64	122.59
1	A	346	PRO	O-C-N	-31.37	80.30	122.64
1	A	128	ASN	O-C-N	-28.51	84.68	122.59
1	A	427	LEU	CA-C-N	27.64	174.32	121.54
1	A	427	LEU	C-N-CA	27.64	174.32	121.54
1	A	387	THR	O-C-N	-25.42	88.89	122.19
1	A	366	ASN	O-C-N	-25.17	89.11	122.59
1	A	408	ASN	O-C-N	-23.34	97.36	122.10
1	A	324	SER	O-C-N	-23.14	91.82	122.59
1	A	424	PHE	O-C-N	-23.03	91.96	122.59
1	A	317	ALA	CA-C-N	22.84	165.17	121.54
1	A	317	ALA	C-N-CA	22.84	165.17	121.54
1	A	122	THR	O-C-N	21.92	151.75	122.59
1	A	317	ALA	O-C-N	-20.81	101.40	123.04
1	A	319	LEU	CA-C-N	20.61	160.91	121.54
1	A	319	LEU	C-N-CA	20.61	160.91	121.54
1	A	121	VAL	CB-CA-C	-20.16	84.74	112.36
1	A	401	GLU	O-C-N	-19.89	98.18	122.65
1	A	121	VAL	N-CA-C	19.21	132.24	111.88
1	A	121	VAL	CA-C-N	-19.16	84.94	121.54
1	A	121	VAL	C-N-CA	-19.16	84.94	121.54
1	A	427	LEU	O-C-N	-19.15	97.12	122.59
1	A	162	THR	CA-C-N	19.01	157.86	121.54
1	A	162	THR	C-N-CA	19.01	157.86	121.54
1	A	366	ASN	CA-C-N	18.09	148.00	122.85
1	A	366	ASN	C-N-CA	18.09	148.00	122.85
1	A	324	SER	CA-C-N	18.05	156.01	121.54
1	A	324	SER	C-N-CA	18.05	156.01	121.54
1	A	424	PHE	CA-C-N	17.46	148.36	120.94
1	A	424	PHE	C-N-CA	17.46	148.36	120.94
1	A	305	ALA	CA-C-N	17.20	154.69	121.66
1	A	305	ALA	C-N-CA	17.20	154.69	121.66
1	A	387	THR	CA-C-N	17.14	152.83	121.97
1	A	387	THR	C-N-CA	17.14	152.83	121.97
1	A	278	GLY	N-CA-C	-16.66	92.73	112.73
1	A	121	VAL	O-C-N	-16.11	101.19	122.14
1	A	322	ILE	CA-C-N	-16.10	90.72	121.63
1	A	322	ILE	C-N-CA	-16.10	90.72	121.63
1	A	319	LEU	O-C-N	-16.03	103.10	122.81
1	A	196	PHE	O-C-N	-15.95	101.37	122.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	346	PRO	CA-C-N	15.90	150.32	121.70
1	A	346	PRO	C-N-CA	15.90	150.32	121.70
1	A	153	PHE	N-CA-C	15.37	131.86	108.96
1	A	118	SER	CA-C-N	-15.15	100.66	120.65
1	A	118	SER	C-N-CA	-15.15	100.66	120.65
1	A	118	SER	O-C-N	-14.40	103.43	122.59
1	A	214	GLN	O-C-N	-14.20	103.64	122.38
1	A	305	ALA	O-C-N	-13.93	104.07	122.59
1	A	157	GLN	O-C-N	13.31	136.63	121.32
1	A	408	ASN	CA-C-N	13.10	146.57	121.54
1	A	408	ASN	C-N-CA	13.10	146.57	121.54
1	A	214	GLN	CA-C-N	12.95	146.28	121.54
1	A	214	GLN	C-N-CA	12.95	146.28	121.54
1	A	128	ASN	CA-C-N	12.88	146.15	121.54
1	A	128	ASN	C-N-CA	12.88	146.15	121.54
1	A	147	ASN	CA-C-N	12.76	145.92	121.54
1	A	147	ASN	C-N-CA	12.76	145.92	121.54
1	A	400	THR	CA-C-N	12.35	147.88	121.45
1	A	400	THR	C-N-CA	12.35	147.88	121.45
1	A	120	THR	CA-C-N	-12.29	99.34	122.69
1	A	120	THR	C-N-CA	-12.29	99.34	122.69
1	A	368	SER	CB-CA-C	12.18	134.16	110.17
1	A	328	LYS	N-CA-C	-11.72	97.27	111.69
1	A	429	GLY	N-CA-C	-10.96	95.83	112.60
1	A	315	PHE	CA-C-N	10.85	133.41	119.84
1	A	315	PHE	C-N-CA	10.85	133.41	119.84
1	A	224	ASN	CA-C-N	-10.82	106.03	122.05
1	A	224	ASN	C-N-CA	-10.82	106.03	122.05
1	A	158	PRO	CB-CA-C	-10.54	94.17	111.56
1	A	274	PRO	CA-C-N	10.47	141.54	121.54
1	A	274	PRO	C-N-CA	10.47	141.54	121.54
1	A	434	LEU	N-CA-C	10.40	125.98	108.20
1	A	117	THR	CA-C-N	-10.20	102.07	121.54
1	A	117	THR	C-N-CA	-10.20	102.07	121.54
1	A	147	ASN	O-C-N	-10.11	106.23	122.41
1	A	250	LEU	N-CA-C	-9.84	89.85	110.80
1	A	224	ASN	N-CA-CB	9.66	126.81	110.49
1	A	435	GLY	N-CA-C	9.61	124.54	112.14
1	A	227	THR	N-CA-C	9.58	122.93	108.46
1	A	396	PHE	CA-C-N	9.53	131.75	119.84
1	A	396	PHE	C-N-CA	9.53	131.75	119.84
1	A	223	THR	CA-C-N	9.49	139.67	121.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	223	THR	C-N-CA	9.49	139.67	121.54
1	A	121	VAL	N-CA-CB	9.34	124.08	111.94
1	A	224	ASN	O-C-N	-9.17	110.39	122.59
1	A	197	GLY	O-C-N	-8.92	111.10	122.70
1	A	157	GLN	CA-C-N	8.84	130.89	119.84
1	A	157	GLN	C-N-CA	8.84	130.89	119.84
1	A	316	PRO	N-CA-C	8.77	130.54	112.47
1	A	162	THR	O-C-N	-8.68	111.05	122.59
1	A	154	GLN	N-CA-C	8.63	129.19	110.80
1	A	347	SER	CA-C-O	8.56	135.35	120.80
1	A	358	LEU	N-CA-C	8.51	122.72	109.96
1	A	264	SER	CA-C-N	8.46	130.42	119.84
1	A	264	SER	C-N-CA	8.46	130.42	119.84
1	A	142	LEU	N-CA-C	8.46	120.27	111.14
1	A	117	THR	O-C-N	8.38	134.70	122.13
1	A	352	ILE	N-CA-C	8.35	120.35	108.17
1	A	224	ASN	CA-CB-CG	-8.21	104.39	112.60
1	A	422	SER	O-C-N	8.07	133.45	122.48
1	A	369	PRO	CB-CA-C	-8.05	97.57	110.21
1	A	373	TRP	N-CA-C	7.85	121.21	108.41
1	A	276	VAL	N-CA-C	-7.75	93.23	109.34
1	A	343	GLN	N-CA-C	7.65	127.09	110.80
1	A	285	ASN	N-CA-C	7.63	120.97	108.99
1	A	274	PRO	N-CA-C	-7.62	100.43	111.33
1	A	117	THR	N-CA-C	-7.62	103.94	113.55
1	A	207	VAL	O-C-N	7.57	132.03	122.57
1	A	262	ILE	N-CA-C	7.53	119.37	112.29
1	A	427	LEU	N-CA-C	-7.41	95.02	110.80
1	A	344	ILE	N-CA-C	7.40	124.73	109.34
1	A	150	PHE	CA-CB-CG	-7.35	106.45	113.80
1	A	295	THR	N-CA-C	7.28	120.27	108.32
1	A	120	THR	CB-CA-C	-7.24	96.00	110.42
1	A	273	GLN	O-C-N	-7.21	113.03	121.32
1	A	196	PHE	N-CA-C	-7.16	95.55	110.80
1	A	209	SER	CA-C-N	-7.14	109.54	121.39
1	A	209	SER	C-N-CA	-7.14	109.54	121.39
1	A	345	GLN	CA-C-N	7.09	128.71	119.84
1	A	345	GLN	C-N-CA	7.09	128.71	119.84
1	A	157	GLN	CB-CA-C	7.04	124.03	110.17
1	A	224	ASN	CB-CA-C	-6.99	96.51	110.42
1	A	156	ASP	O-C-N	6.93	131.43	123.12
1	A	25	ILE	N-CA-C	-6.91	100.78	107.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	174	GLY	N-CA-C	-6.86	96.92	113.18
1	A	251	ILE	CA-C-O	-6.85	114.48	121.67
1	A	434	LEU	CA-C-N	6.83	126.83	120.34
1	A	434	LEU	C-N-CA	6.83	126.83	120.34
1	A	368	SER	O-C-N	-6.75	113.56	121.32
1	A	232	CYS	N-CA-C	6.73	120.62	107.57
1	A	129	GLN	O-C-N	-6.68	113.71	122.59
1	A	202	TYR	N-CA-C	6.67	119.50	110.29
1	A	186	TYR	N-CA-C	6.67	123.39	114.12
1	A	250	LEU	CA-C-N	6.65	133.18	122.68
1	A	250	LEU	C-N-CA	6.65	133.18	122.68
1	A	124	GLN	O-C-N	6.63	131.40	122.59
1	A	294	VAL	N-CA-C	6.62	116.89	108.82
1	A	70	THR	N-CA-C	6.61	120.46	109.95
1	A	148	ARG	CA-C-N	-6.55	109.02	121.54
1	A	148	ARG	C-N-CA	-6.55	109.02	121.54
1	A	355	VAL	CB-CA-C	-6.52	99.50	111.36
1	A	405	ASN	N-CA-CB	-6.51	105.15	111.27
1	A	76	ILE	CA-C-N	6.47	127.93	119.84
1	A	76	ILE	C-N-CA	6.47	127.93	119.84
1	A	126	THR	N-CA-C	6.25	118.67	108.55
1	A	123	LYS	N-CA-C	6.23	124.08	110.80
1	A	251	ILE	CA-C-N	6.21	133.40	121.54
1	A	251	ILE	C-N-CA	6.21	133.40	121.54
1	A	322	ILE	O-C-N	6.14	130.24	122.57
1	A	25	ILE	CA-C-N	6.13	126.34	119.90
1	A	25	ILE	C-N-CA	6.13	126.34	119.90
1	A	431	GLY	N-CA-C	-6.06	104.96	111.93
1	A	119	SER	N-CA-C	-6.02	104.41	110.97
1	A	122	THR	N-CA-C	-6.02	97.99	110.80
1	A	414	ASN	N-CA-C	5.97	119.32	110.48
1	A	41	LYS	O-C-N	5.95	130.51	122.59
1	A	207	VAL	CB-CA-C	-5.87	101.67	111.29
1	A	323	TYR	N-CA-C	5.81	117.94	108.76
1	A	166	ALA	CA-C-N	5.81	125.83	119.90
1	A	166	ALA	C-N-CA	5.81	125.83	119.90
1	A	69	LEU	N-CA-C	-5.80	101.06	109.59
1	A	342	PRO	N-CA-C	5.79	124.40	112.47
1	A	127	LEU	N-CA-C	-5.73	106.14	113.02
1	A	282	VAL	N-CA-C	5.72	121.24	109.34
1	A	151	THR	N-CA-CB	-5.71	100.85	110.49
1	A	365	ILE	CB-CA-C	-5.69	101.96	111.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	118	SER	CB-CA-C	5.68	121.73	110.42
1	A	355	VAL	N-CA-C	5.68	121.15	108.88
1	A	54	VAL	N-CA-C	-5.66	97.57	109.34
1	A	197	GLY	N-CA-C	5.61	126.48	113.18
1	A	358	LEU	CA-CB-CG	-5.61	96.68	116.30
1	A	101	GLU	N-CA-C	-5.59	100.23	108.79
1	A	67	ARG	N-CA-C	5.55	117.22	108.96
1	A	215	ASN	CA-C-N	5.54	132.97	123.05
1	A	215	ASN	C-N-CA	5.54	132.97	123.05
1	A	178	TYR	N-CA-C	-5.45	100.44	108.99
1	A	107	ILE	CB-CA-C	-5.44	102.58	110.63
1	A	132	ASN	N-CA-C	5.44	117.49	108.13
1	A	147	ASN	N-CA-C	5.40	119.62	113.19
1	A	353	GLN	N-CA-C	5.38	118.18	109.40
1	A	124	GLN	CA-C-N	5.33	128.34	120.82
1	A	124	GLN	C-N-CA	5.33	128.34	120.82
1	A	163	ALA	N-CA-CB	5.31	119.46	110.49
1	A	153	PHE	CB-CA-C	-5.28	99.10	111.09
1	A	157	GLN	N-CA-C	-5.28	98.13	109.81
1	A	179	ARG	N-CA-C	5.26	122.01	110.80
1	A	302	GLN	N-CA-C	5.25	116.26	108.60
1	A	72	CYS	N-CA-C	-5.22	106.95	113.38
1	A	410	ILE	N-CA-C	-5.19	98.55	109.34
1	A	225	GLN	O-C-N	5.18	129.18	122.71
1	A	105	LYS	N-CA-C	-5.17	100.28	109.06
1	A	92	LEU	N-CA-C	5.16	119.29	113.15
1	A	151	THR	CB-CA-C	5.14	120.65	110.42
1	A	406	PRO	N-CA-C	-5.14	107.16	113.84
1	A	382	VAL	N-CA-C	5.12	115.28	108.11
1	A	118	SER	CA-C-O	5.10	127.80	120.51
1	A	193	ASP	N-CA-C	5.08	116.50	110.97
1	A	279	THR	CB-CA-C	-5.03	99.67	111.09
1	A	218	CYS	N-CA-C	5.02	115.67	108.74

There are no chirality outliers.

All (34) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	117	THR	Mainchain
1	A	121	VAL	Peptide
1	A	122	THR	Peptide
1	A	128	ASN	Mainchain,Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	129	GLN	Mainchain
1	A	153	PHE	Mainchain
1	A	162	THR	Peptide
1	A	178	TYR	Sidechain
1	A	214	GLN	Mainchain,Peptide
1	A	250	LEU	Mainchain,Peptide
1	A	273	GLN	Peptide
1	A	274	PRO	Peptide
1	A	305	ALA	Mainchain,Peptide
1	A	319	LEU	Peptide
1	A	321	ASN	Mainchain
1	A	324	SER	Mainchain,Peptide
1	A	366	ASN	Mainchain
1	A	387	THR	Mainchain,Peptide
1	A	388	VAL	Mainchain
1	A	400	THR	Mainchain,Peptide
1	A	401	GLU	Mainchain,Peptide
1	A	408	ASN	Mainchain,Peptide
1	A	424	PHE	Mainchain,Peptide
1	A	427	LEU	Peptide

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	3197	0	3092	697	0
All	All	3197	0	3092	697	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 111.

All (697) 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:421:THR:CB	1:A:424:PHE:HE1	1.05	1.66
1:A:421:THR:HB	1:A:424:PHE:CE1	1.11	1.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:317:ALA:C	1:A:318:ASP:N	1.67	1.48
1:A:148:ARG:NH1	1:A:167:PRO:HD3	1.31	1.42
1:A:123:LYS:HG3	1:A:157:GLN:NE2	1.29	1.40
1:A:322:ILE:C	1:A:323:TYR:N	1.90	1.29
1:A:99:VAL:CA	1:A:388:VAL:HG22	1.62	1.27
1:A:421:THR:O	1:A:424:PHE:CE1	1.89	1.26
1:A:40:THR:O	1:A:41:LYS:HG2	1.29	1.25
1:A:319:LEU:O	1:A:412:ARG:HD2	1.35	1.25
1:A:148:ARG:HD3	1:A:165:THR:O	1.39	1.22
1:A:157:GLN:H	1:A:158:PRO:CD	1.53	1.22
1:A:421:THR:O	1:A:424:PHE:CD1	1.94	1.21
1:A:157:GLN:N	1:A:158:PRO:CD	1.96	1.20
1:A:148:ARG:NH1	1:A:167:PRO:CD	2.08	1.17
1:A:333:HIS:CE1	1:A:347:SER:O	1.98	1.17
1:A:157:GLN:N	1:A:158:PRO:HD3	1.23	1.16
1:A:98:ARG:C	1:A:388:VAL:HG13	1.68	1.16
1:A:421:THR:CB	1:A:424:PHE:CE1	1.93	1.16
1:A:47:ILE:HG21	1:A:355:VAL:HG12	1.24	1.15
1:A:421:THR:HB	1:A:424:PHE:CZ	1.82	1.15
1:A:321:ASN:O	1:A:322:ILE:HG13	1.42	1.14
1:A:418:ASN:ND2	1:A:421:THR:OG1	1.80	1.14
1:A:198:ASN:O	1:A:199:ALA:HB3	1.50	1.10
1:A:148:ARG:HH11	1:A:148:ARG:HA	1.15	1.10
1:A:148:ARG:NH1	1:A:148:ARG:HA	1.66	1.09
1:A:99:VAL:HA	1:A:388:VAL:CG2	1.81	1.08
1:A:420:LEU:HD22	1:A:430:ASN:O	1.54	1.08
1:A:54:VAL:HB	1:A:160:ILE:HG21	1.36	1.07
1:A:99:VAL:HG22	1:A:388:VAL:CG2	1.84	1.07
1:A:406:PRO:HA	1:A:409:THR:HG23	1.09	1.07
1:A:406:PRO:HA	1:A:409:THR:CG2	1.84	1.06
1:A:321:ASN:O	1:A:322:ILE:CG1	1.84	1.05
1:A:418:ASN:CG	1:A:421:THR:OG1	2.00	1.05
1:A:40:THR:O	1:A:41:LYS:CG	2.07	1.03
1:A:421:THR:HG21	1:A:434:LEU:HD13	1.37	1.02
1:A:148:ARG:CD	1:A:165:THR:O	2.07	1.01
1:A:363:LEU:HD11	1:A:370:LEU:HD13	1.40	1.01
1:A:123:LYS:CG	1:A:157:GLN:NE2	2.24	1.00
1:A:53:ASN:HB2	1:A:70:THR:HB	1.43	0.98
1:A:149:ALA:O	1:A:165:THR:OG1	1.81	0.97
1:A:36:LEU:HD23	1:A:389:MET:HB3	1.41	0.97
1:A:99:VAL:HG22	1:A:388:VAL:HG21	1.45	0.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:406:PRO:CA	1:A:409:THR:HG23	1.93	0.97
1:A:53:ASN:HB2	1:A:70:THR:CB	1.94	0.97
1:A:421:THR:C	1:A:424:PHE:CE1	2.43	0.96
1:A:198:ASN:O	1:A:199:ALA:CB	2.09	0.96
1:A:149:ALA:C	1:A:150:PHE:O	2.03	0.95
1:A:50:LEU:HD12	1:A:161:PRO:HG3	1.44	0.95
1:A:150:PHE:O	1:A:164:THR:O	1.84	0.95
1:A:273:GLN:HB3	1:A:274:PRO:CD	1.96	0.95
1:A:98:ARG:O	1:A:388:VAL:HG13	1.67	0.94
1:A:273:GLN:HB3	1:A:274:PRO:HD3	1.45	0.94
1:A:421:THR:CA	1:A:424:PHE:CE1	2.50	0.94
1:A:225:GLN:OE1	1:A:225:GLN:HA	1.65	0.94
1:A:363:LEU:HD12	1:A:367:SER:OG	1.67	0.94
1:A:268:TYR:HB2	1:A:409:THR:HG22	1.49	0.94
1:A:51:ALA:HB3	1:A:160:ILE:HG12	1.50	0.93
1:A:322:ILE:C	1:A:323:TYR:CA	2.41	0.93
1:A:224:ASN:OD1	1:A:225:GLN:OE1	1.85	0.93
1:A:122:THR:O	1:A:124:GLN:OE1	1.87	0.93
1:A:148:ARG:HH12	1:A:167:PRO:CD	1.73	0.93
1:A:149:ALA:O	1:A:150:PHE:O	1.86	0.93
1:A:49:GLY:HA3	1:A:358:LEU:HD13	1.50	0.92
1:A:121:VAL:HG12	1:A:121:VAL:O	1.70	0.92
1:A:421:THR:CG2	1:A:424:PHE:HE1	1.81	0.92
1:A:142:LEU:HD12	1:A:428:TYR:CE2	2.04	0.92
1:A:118:SER:O	1:A:119:SER:C	1.92	0.92
1:A:123:LYS:HG3	1:A:157:GLN:HE21	1.23	0.91
1:A:421:THR:CG2	1:A:434:LEU:HD13	1.99	0.91
1:A:99:VAL:HA	1:A:388:VAL:HG22	0.91	0.91
1:A:106:VAL:HG22	1:A:251:ILE:HB	1.52	0.90
1:A:421:THR:CA	1:A:424:PHE:HE1	1.84	0.90
1:A:145:GLY:O	1:A:425:ASN:CG	2.14	0.89
1:A:295:THR:HB	1:A:313:ARG:HB2	1.54	0.89
1:A:333:HIS:ND1	1:A:347:SER:O	2.05	0.89
1:A:148:ARG:HH12	1:A:167:PRO:HD3	1.27	0.88
1:A:273:GLN:CB	1:A:274:PRO:HD3	2.03	0.87
1:A:358:LEU:HD23	1:A:373:TRP:HB3	1.56	0.87
1:A:41:LYS:HB3	1:A:205:HIS:NE2	1.89	0.87
1:A:268:TYR:CB	1:A:409:THR:HG22	2.05	0.87
1:A:188:ALA:HB2	1:A:195:ALA:HB3	1.56	0.87
1:A:54:VAL:HG23	1:A:160:ILE:HD12	1.57	0.86
1:A:140:ASN:OD1	1:A:141:LYS:HG2	1.76	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:302:GLN:CB	1:A:306:GLU:HA	2.06	0.86
1:A:40:THR:C	1:A:41:LYS:CG	2.45	0.86
1:A:46:MET:HE3	1:A:379:TYR:HB2	1.56	0.86
1:A:336:PRO:HG2	1:A:420:LEU:HD12	1.56	0.85
1:A:222:GLN:HG2	1:A:223:THR:H	1.40	0.85
1:A:195:ALA:HB2	1:A:201:ASN:HB2	1.57	0.85
1:A:153:PHE:HB3	1:A:162:THR:N	1.92	0.85
1:A:420:LEU:HD13	1:A:430:ASN:H	1.41	0.85
1:A:250:LEU:HD22	1:A:250:LEU:H	1.40	0.84
1:A:195:ALA:CB	1:A:201:ASN:HB2	2.08	0.84
1:A:204:HIS:HD2	1:A:209:SER:CB	1.90	0.83
1:A:333:HIS:HE1	1:A:347:SER:O	1.58	0.83
1:A:60:THR:HG23	1:A:63:THR:H	1.44	0.83
1:A:55:ILE:HG22	1:A:69:LEU:HA	1.60	0.83
1:A:172:VAL:HG23	1:A:178:TYR:HD1	1.43	0.83
1:A:368:SER:H	1:A:369:PRO:CD	1.92	0.83
1:A:151:THR:HA	1:A:163:ALA:O	1.78	0.82
1:A:197:GLY:O	1:A:198:ASN:HB3	1.79	0.82
1:A:420:LEU:HB3	1:A:430:ASN:HB2	1.61	0.82
1:A:123:LYS:HG3	1:A:157:GLN:HE22	1.38	0.81
1:A:148:ARG:NH1	1:A:167:PRO:CG	2.43	0.81
1:A:72:CYS:O	1:A:355:VAL:HG11	1.81	0.81
1:A:233:LEU:HD22	1:A:237:LEU:HD23	1.62	0.81
1:A:68:LEU:HG	1:A:220:TYR:HD1	1.46	0.80
1:A:118:SER:O	1:A:119:SER:O	1.99	0.80
1:A:265:PRO:HB3	1:A:410:ILE:HD13	1.61	0.80
1:A:288:ASN:O	1:A:289:MET:SD	2.39	0.80
1:A:68:LEU:HG	1:A:220:TYR:CD1	2.16	0.80
1:A:418:ASN:CB	1:A:421:THR:OG1	2.29	0.80
1:A:122:THR:N	1:A:123:LYS:HG2	1.97	0.80
1:A:273:GLN:CG	1:A:274:PRO:HD3	2.12	0.79
1:A:121:VAL:HG12	1:A:122:THR:HA	1.63	0.79
1:A:157:GLN:H	1:A:158:PRO:HD3	0.68	0.79
1:A:368:SER:H	1:A:369:PRO:HD2	1.48	0.79
1:A:29:PHE:CZ	1:A:31:ASN:HB2	2.17	0.79
1:A:66:ASN:HA	1:A:222:GLN:HA	1.65	0.79
1:A:421:THR:CG2	1:A:424:PHE:CE1	2.61	0.79
1:A:156:ASP:HA	1:A:158:PRO:HD3	1.64	0.78
1:A:154:GLN:CD	1:A:158:PRO:HA	2.09	0.78
1:A:190:SER:HA	1:A:196:PHE:CZ	2.17	0.78
1:A:152:ALA:HB3	1:A:163:ALA:CB	2.13	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:148:ARG:HH12	1:A:167:PRO:CG	1.97	0.78
1:A:127:LEU:H	1:A:127:LEU:HD12	1.47	0.78
1:A:53:ASN:HB2	1:A:70:THR:OG1	1.85	0.77
1:A:273:GLN:O	1:A:274:PRO:O	2.03	0.77
1:A:107:ILE:HA	1:A:249:CYS:HA	1.65	0.77
1:A:99:VAL:CG2	1:A:388:VAL:CG2	2.62	0.77
1:A:53:ASN:CB	1:A:70:THR:HB	2.14	0.76
1:A:168:LYS:HD3	1:A:172:VAL:HG21	1.67	0.76
1:A:50:LEU:HB3	1:A:53:ASN:HD21	1.48	0.76
1:A:204:HIS:CD2	1:A:209:SER:CB	2.69	0.76
1:A:141:LYS:HB2	1:A:142:LEU:HD22	1.66	0.76
1:A:358:LEU:HG	1:A:359:THR:N	2.00	0.76
1:A:156:ASP:C	1:A:158:PRO:HD3	2.08	0.76
1:A:322:ILE:CG2	1:A:327:GLU:HB2	2.16	0.76
1:A:409:THR:O	1:A:410:ILE:HB	1.85	0.76
1:A:54:VAL:HB	1:A:160:ILE:CG2	2.16	0.75
1:A:173:THR:HG23	1:A:177:GLY:N	2.00	0.75
1:A:273:GLN:O	1:A:274:PRO:C	2.29	0.75
1:A:121:VAL:O	1:A:121:VAL:CG1	2.10	0.75
1:A:416:THR:HB	1:A:417:PRO:HD3	1.69	0.75
1:A:156:ASP:HA	1:A:158:PRO:HG3	1.68	0.75
1:A:87:GLN:HE21	1:A:328:LYS:HD2	1.51	0.75
1:A:302:GLN:HB2	1:A:306:GLU:HA	1.67	0.75
1:A:350:ILE:HG22	1:A:351:GLY:N	2.02	0.75
1:A:73:LEU:HA	1:A:355:VAL:HG21	1.68	0.74
1:A:273:GLN:CB	1:A:274:PRO:CD	2.56	0.74
1:A:418:ASN:HD21	1:A:433:THR:N	1.86	0.74
1:A:322:ILE:HG12	1:A:330:GLN:OE1	1.86	0.74
1:A:222:GLN:HG2	1:A:223:THR:N	2.03	0.74
1:A:241:ASP:O	1:A:243:LYS:HG2	1.87	0.74
1:A:58:THR:HG22	1:A:60:THR:H	1.52	0.74
1:A:169:TYR:O	1:A:181:MET:HB2	1.88	0.74
1:A:39:TYR:O	1:A:385:SER:HA	1.88	0.74
1:A:107:ILE:N	1:A:107:ILE:HD12	2.03	0.73
1:A:87:GLN:NE2	1:A:87:GLN:HA	2.02	0.73
1:A:297:PRO:HD2	1:A:311:LEU:H	1.51	0.73
1:A:258:LYS:HB3	1:A:333:HIS:CE1	2.24	0.73
1:A:108:PHE:CD2	1:A:246:ASN:HA	2.24	0.73
1:A:302:GLN:HB3	1:A:306:GLU:HA	1.71	0.73
1:A:424:PHE:O	1:A:424:PHE:CD2	2.41	0.73
1:A:317:ALA:HB1	1:A:411:TYR:HB3	1.70	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:123:LYS:CG	1:A:157:GLN:HE21	1.97	0.72
1:A:153:PHE:HB3	1:A:162:THR:H	1.54	0.72
1:A:259:MET:HE1	1:A:261:LEU:CB	2.20	0.72
1:A:280:ILE:HG13	1:A:280:ILE:O	1.90	0.72
1:A:412:ARG:HG3	1:A:412:ARG:HH11	1.53	0.72
1:A:73:LEU:HD12	1:A:355:VAL:HG21	1.72	0.72
1:A:224:ASN:OD1	1:A:225:GLN:CD	2.32	0.72
1:A:360:THR:HG23	1:A:373:TRP:CZ3	2.23	0.72
1:A:99:VAL:CB	1:A:388:VAL:HG22	2.19	0.71
1:A:409:THR:O	1:A:410:ILE:CB	2.39	0.71
1:A:49:GLY:CA	1:A:358:LEU:HD13	2.21	0.71
1:A:319:LEU:O	1:A:412:ARG:CD	2.29	0.71
1:A:58:THR:HB	1:A:64:ALA:HA	1.73	0.71
1:A:146:ILE:HB	1:A:425:ASN:OD1	1.90	0.71
1:A:261:LEU:O	1:A:334:LYS:HE3	1.91	0.71
1:A:50:LEU:HD13	1:A:159:MET:O	1.90	0.71
1:A:148:ARG:HH11	1:A:167:PRO:HD3	1.54	0.70
1:A:153:PHE:CB	1:A:161:PRO:HA	2.20	0.70
1:A:255:TYR:CE2	1:A:257:PRO:HA	2.26	0.70
1:A:108:PHE:HD2	1:A:246:ASN:HA	1.57	0.70
1:A:43:HIS:HE1	1:A:83:LEU:O	1.74	0.70
1:A:140:ASN:CG	1:A:351:GLY:HA3	2.17	0.70
1:A:250:LEU:O	1:A:250:LEU:CD2	2.40	0.70
1:A:270:ILE:O	1:A:277:LYS:HG3	1.91	0.70
1:A:203:PRO:HG2	1:A:207:VAL:CG2	2.21	0.70
1:A:270:ILE:HG13	1:A:277:LYS:CG	2.21	0.70
1:A:389:MET:SD	1:A:389:MET:C	2.74	0.70
1:A:73:LEU:HA	1:A:355:VAL:CG2	2.21	0.69
1:A:358:LEU:HD11	1:A:376:SER:OG	1.92	0.69
1:A:368:SER:N	1:A:369:PRO:CD	2.54	0.69
1:A:51:ALA:O	1:A:53:ASN:N	2.26	0.69
1:A:154:GLN:OE1	1:A:160:ILE:N	2.26	0.69
1:A:99:VAL:CG2	1:A:388:VAL:HG22	2.22	0.69
1:A:258:LYS:HB3	1:A:333:HIS:NE2	2.06	0.69
1:A:204:HIS:CD2	1:A:209:SER:HB3	2.27	0.69
1:A:418:ASN:CG	1:A:421:THR:HG1	1.99	0.69
1:A:178:TYR:O	1:A:179:ARG:HB2	1.93	0.68
1:A:322:ILE:C	1:A:323:TYR:HA	2.17	0.68
1:A:40:THR:C	1:A:41:LYS:HG3	2.18	0.68
1:A:188:ALA:CB	1:A:195:ALA:HB3	2.23	0.68
1:A:36:LEU:HA	1:A:389:MET:HB3	1.74	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:156:ASP:HA	1:A:158:PRO:CD	2.24	0.68
1:A:204:HIS:HD2	1:A:209:SER:HB3	1.59	0.68
1:A:51:ALA:CB	1:A:160:ILE:HG12	2.22	0.68
1:A:109:ARG:HB3	1:A:379:TYR:O	1.95	0.67
1:A:259:MET:HE1	1:A:261:LEU:HB2	1.76	0.67
1:A:425:ASN:OD1	1:A:425:ASN:N	2.26	0.67
1:A:173:THR:HG22	1:A:175:ASP:N	2.09	0.67
1:A:156:ASP:CA	1:A:158:PRO:HD3	2.24	0.67
1:A:173:THR:HG22	1:A:175:ASP:H	1.58	0.67
1:A:250:LEU:HD13	1:A:250:LEU:N	2.09	0.67
1:A:87:GLN:HE21	1:A:87:GLN:HA	1.60	0.67
1:A:113:ILE:HD11	1:A:131:SER:HB2	1.76	0.67
1:A:156:ASP:C	1:A:157:GLN:HG2	2.19	0.67
1:A:153:PHE:CG	1:A:161:PRO:HA	2.30	0.67
1:A:418:ASN:HB2	1:A:421:THR:OG1	1.95	0.67
1:A:350:ILE:HG22	1:A:351:GLY:H	1.60	0.66
1:A:315:PHE:HB2	1:A:316:PRO:HD2	1.76	0.66
1:A:51:ALA:HB3	1:A:160:ILE:CG1	2.25	0.66
1:A:53:ASN:OD1	1:A:70:THR:HB	1.94	0.66
1:A:49:GLY:HA3	1:A:358:LEU:CD1	2.25	0.66
1:A:364:LEU:HD22	1:A:365:ILE:HG13	1.77	0.66
1:A:68:LEU:HA	1:A:219:MET:O	1.94	0.66
1:A:294:VAL:HG12	1:A:295:THR:N	2.11	0.66
1:A:152:ALA:CB	1:A:163:ALA:HB3	2.26	0.65
1:A:182:ILE:HG12	1:A:183:ALA:N	2.11	0.65
1:A:84:TYR:N	1:A:84:TYR:CD1	2.64	0.65
1:A:87:GLN:NE2	1:A:328:LYS:HD2	2.11	0.65
1:A:354:ALA:O	1:A:355:VAL:HG13	1.96	0.65
1:A:58:THR:HG21	1:A:63:THR:C	2.21	0.65
1:A:268:TYR:CB	1:A:409:THR:CG2	2.75	0.65
1:A:50:LEU:HB3	1:A:53:ASN:ND2	2.12	0.65
1:A:197:GLY:O	1:A:198:ASN:CB	2.29	0.65
1:A:315:PHE:N	1:A:315:PHE:CD1	2.63	0.64
1:A:40:THR:HA	1:A:384:SER:O	1.97	0.64
1:A:47:ILE:CG2	1:A:355:VAL:HG12	2.15	0.64
1:A:58:THR:HG21	1:A:64:ALA:N	2.12	0.64
1:A:325:ASP:C	1:A:327:GLU:H	2.06	0.64
1:A:124:GLN:HE22	1:A:363:LEU:HA	1.62	0.64
1:A:197:GLY:O	1:A:198:ASN:O	2.16	0.64
1:A:51:ALA:O	1:A:160:ILE:HD13	1.97	0.64
1:A:99:VAL:HG22	1:A:388:VAL:HG22	1.75	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:389:MET:O	1:A:390:GLU:HB3	1.97	0.64
1:A:259:MET:H	1:A:333:HIS:CD2	2.15	0.64
1:A:288:ASN:C	1:A:289:MET:SD	2.81	0.64
1:A:368:SER:N	1:A:369:PRO:HD2	2.11	0.64
1:A:139:LEU:HD23	1:A:140:ASN:H	1.63	0.64
1:A:156:ASP:HA	1:A:158:PRO:CG	2.27	0.64
1:A:273:GLN:HG2	1:A:274:PRO:HD3	1.79	0.64
1:A:250:LEU:HD22	1:A:250:LEU:O	1.98	0.63
1:A:63:THR:O	1:A:65:VAL:N	2.30	0.63
1:A:118:SER:HB2	1:A:120:THR:OG1	1.99	0.63
1:A:420:LEU:HD13	1:A:430:ASN:N	2.13	0.63
1:A:152:ALA:HB3	1:A:163:ALA:HB3	1.81	0.63
1:A:273:GLN:O	1:A:276:VAL:O	2.17	0.63
1:A:109:ARG:O	1:A:110:THR:HB	1.99	0.62
1:A:51:ALA:O	1:A:53:ASN:ND2	2.31	0.62
1:A:124:GLN:HE22	1:A:363:LEU:CA	2.13	0.62
1:A:154:GLN:HG2	1:A:160:ILE:O	1.99	0.62
1:A:318:ASP:OD1	1:A:318:ASP:O	2.18	0.62
1:A:49:GLY:O	1:A:159:MET:HE3	1.99	0.62
1:A:363:LEU:HD11	1:A:370:LEU:CD1	2.23	0.62
1:A:66:ASN:OD1	1:A:220:TYR:CE1	2.53	0.62
1:A:137:ILE:O	1:A:140:ASN:ND2	2.33	0.62
1:A:274:PRO:C	1:A:276:VAL:H	2.06	0.62
1:A:119:SER:O	1:A:120:THR:C	2.38	0.61
1:A:148:ARG:HD2	1:A:165:THR:N	2.15	0.61
1:A:116:GLU:HG3	1:A:123:LYS:O	2.01	0.61
1:A:124:GLN:NE2	1:A:362:ALA:C	2.59	0.61
1:A:148:ARG:CZ	1:A:167:PRO:HD3	2.23	0.61
1:A:299:GLU:HB3	1:A:309:HIS:ND1	2.15	0.61
1:A:70:THR:HA	1:A:218:CYS:HB3	1.82	0.61
1:A:315:PHE:N	1:A:315:PHE:HD1	1.99	0.61
1:A:93:LEU:HB2	1:A:263:LYS:HE3	1.82	0.61
1:A:344:ILE:N	1:A:344:ILE:HD12	2.16	0.61
1:A:421:THR:HG21	1:A:434:LEU:CD1	2.23	0.61
1:A:78:TRP:CE3	1:A:352:ILE:HG12	2.36	0.60
1:A:152:ALA:HB3	1:A:162:THR:O	2.01	0.60
1:A:132:ASN:HB2	1:A:240:PHE:O	2.01	0.60
1:A:328:LYS:C	1:A:330:GLN:H	2.08	0.60
1:A:41:LYS:CE	1:A:85:MET:HA	2.16	0.60
1:A:82:PRO:HG2	1:A:181:MET:HE2	1.83	0.60
1:A:245:VAL:HG22	1:A:250:LEU:HD12	1.82	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:106:VAL:HG22	1:A:250:LEU:O	2.00	0.60
1:A:53:ASN:HB3	1:A:161:PRO:CD	2.31	0.60
1:A:273:GLN:HG2	1:A:274:PRO:CD	2.30	0.60
1:A:317:ALA:O	1:A:318:ASP:N	2.28	0.60
1:A:270:ILE:O	1:A:270:ILE:HG23	2.00	0.60
1:A:363:LEU:CD1	1:A:367:SER:OG	2.46	0.60
1:A:47:ILE:HG22	1:A:48:PHE:N	2.15	0.60
1:A:233:LEU:HD22	1:A:237:LEU:CD2	2.32	0.60
1:A:294:VAL:HG12	1:A:295:THR:H	1.65	0.60
1:A:396:PHE:HB2	1:A:399:SER:HB3	1.84	0.60
1:A:343:GLN:HB3	1:A:344:ILE:HD12	1.84	0.59
1:A:53:ASN:HB3	1:A:161:PRO:HD3	1.84	0.59
1:A:259:MET:HE1	1:A:261:LEU:HB3	1.84	0.59
1:A:140:ASN:CG	1:A:141:LYS:H	2.10	0.59
1:A:145:GLY:O	1:A:425:ASN:ND2	2.36	0.59
1:A:78:TRP:HH2	1:A:350:ILE:HB	1.67	0.59
1:A:394:THR:HA	1:A:403:ASN:OD1	2.03	0.59
1:A:400:THR:HG23	1:A:401:GLU:HG3	1.85	0.58
1:A:109:ARG:NH1	1:A:109:ARG:HG2	2.18	0.58
1:A:139:LEU:HD21	1:A:353:GLN:OE1	2.02	0.58
1:A:241:ASP:O	1:A:243:LYS:N	2.35	0.58
1:A:325:ASP:O	1:A:327:GLU:N	2.35	0.58
1:A:123:LYS:O	1:A:124:GLN:C	2.46	0.58
1:A:188:ALA:HB2	1:A:195:ALA:CB	2.30	0.58
1:A:217:TYR:CD1	1:A:217:TYR:C	2.82	0.58
1:A:268:TYR:CD1	1:A:406:PRO:HD3	2.38	0.58
1:A:159:MET:HG3	1:A:358:LEU:CD2	2.33	0.58
1:A:197:GLY:O	1:A:198:ASN:C	2.37	0.58
1:A:203:PRO:HG2	1:A:207:VAL:HG21	1.85	0.58
1:A:270:ILE:HG13	1:A:277:LYS:CD	2.34	0.58
1:A:295:THR:N	1:A:313:ARG:O	2.37	0.58
1:A:101:GLU:HB2	1:A:256:LYS:HG3	1.86	0.58
1:A:159:MET:SD	1:A:375:ASP:HA	2.44	0.58
1:A:363:LEU:HD12	1:A:367:SER:HG	1.69	0.58
1:A:100:VAL:HB	1:A:387:THR:OG1	2.04	0.57
1:A:243:LYS:NZ	1:A:243:LYS:HB3	2.19	0.57
1:A:322:ILE:HG23	1:A:327:GLU:CB	2.34	0.57
1:A:55:ILE:HG22	1:A:69:LEU:HD23	1.86	0.57
1:A:47:ILE:HG21	1:A:355:VAL:CG1	2.15	0.57
1:A:138:GLY:O	1:A:139:LEU:C	2.48	0.57
1:A:315:PHE:HB2	1:A:316:PRO:CD	2.34	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:418:ASN:CB	1:A:421:THR:HG1	2.17	0.57
1:A:164:THR:C	1:A:165:THR:HG23	2.30	0.57
1:A:204:HIS:CD2	1:A:209:SER:HB2	2.39	0.57
1:A:98:ARG:NH2	1:A:261:LEU:HB2	2.19	0.56
1:A:140:ASN:ND2	1:A:351:GLY:C	2.63	0.56
1:A:268:TYR:CE1	1:A:406:PRO:HD3	2.40	0.56
1:A:46:MET:C	1:A:47:ILE:HD13	2.29	0.56
1:A:53:ASN:HA	1:A:160:ILE:HG23	1.87	0.56
1:A:109:ARG:HD2	1:A:247:ASN:OD1	2.04	0.56
1:A:268:TYR:HB3	1:A:409:THR:CG2	2.35	0.56
1:A:68:LEU:CG	1:A:220:TYR:CD1	2.86	0.56
1:A:85:MET:HE2	1:A:93:LEU:HD11	1.86	0.56
1:A:195:ALA:O	1:A:196:PHE:HB2	2.05	0.56
1:A:268:TYR:HB3	1:A:409:THR:HG22	1.87	0.56
1:A:418:ASN:HD21	1:A:433:THR:H	1.52	0.56
1:A:48:PHE:HB2	1:A:50:LEU:CD2	2.35	0.56
1:A:159:MET:CB	1:A:358:LEU:HD22	2.35	0.56
1:A:215:ASN:O	1:A:216:TYR:HD1	1.88	0.56
1:A:137:ILE:HG23	1:A:352:ILE:HG22	1.88	0.56
1:A:150:PHE:O	1:A:165:THR:OG1	2.24	0.56
1:A:423:ALA:O	1:A:424:PHE:HB3	2.06	0.56
1:A:122:THR:N	1:A:123:LYS:CG	2.66	0.56
1:A:251:ILE:O	1:A:252:ASP:HB2	2.06	0.56
1:A:106:VAL:CG1	1:A:382:VAL:HG22	2.36	0.55
1:A:156:ASP:OD1	1:A:157:GLN:OE1	2.23	0.55
1:A:46:MET:O	1:A:47:ILE:HD13	2.06	0.55
1:A:111:ASN:HA	1:A:378:GLY:HA2	1.87	0.55
1:A:273:GLN:HG2	1:A:274:PRO:N	2.22	0.55
1:A:412:ARG:HG3	1:A:412:ARG:NH1	2.17	0.55
1:A:53:ASN:CG	1:A:70:THR:HB	2.32	0.55
1:A:140:ASN:HD21	1:A:351:GLY:C	2.15	0.55
1:A:317:ALA:HB1	1:A:411:TYR:CG	2.42	0.55
1:A:22:VAL:HG13	1:A:23:TYR:N	2.22	0.55
1:A:271:ILE:HG13	1:A:396:PHE:CE2	2.42	0.55
1:A:302:GLN:HB2	1:A:306:GLU:CA	2.35	0.55
1:A:306:GLU:N	1:A:306:GLU:CD	2.64	0.55
1:A:413:ILE:HG23	1:A:413:ILE:O	2.07	0.55
1:A:136:ALA:C	1:A:137:ILE:HD13	2.32	0.55
1:A:159:MET:HG3	1:A:358:LEU:HD21	1.88	0.55
1:A:81:LEU:N	1:A:82:PRO:HD2	2.22	0.55
1:A:326:ILE:O	1:A:326:ILE:HG22	2.07	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:36:LEU:HD23	1:A:389:MET:CB	2.26	0.54
1:A:340:GLU:HA	1:A:410:ILE:HA	1.89	0.54
1:A:149:ALA:HB3	1:A:215:ASN:OD1	2.08	0.54
1:A:50:LEU:HA	1:A:159:MET:O	2.08	0.54
1:A:210:PHE:CD1	1:A:210:PHE:N	2.75	0.54
1:A:242:SER:HA	1:A:245:VAL:HG12	1.88	0.54
1:A:322:ILE:HG21	1:A:327:GLU:HB2	1.90	0.54
1:A:90:PHE:O	1:A:93:LEU:HG	2.08	0.54
1:A:294:VAL:HG13	1:A:314:ASN:ND2	2.23	0.54
1:A:126:THR:HG23	1:A:128:ASN:H	1.73	0.54
1:A:137:ILE:HD12	1:A:352:ILE:HG22	1.90	0.53
1:A:173:THR:OG1	1:A:177:GLY:HA2	2.09	0.53
1:A:106:VAL:HG12	1:A:382:VAL:HG22	1.90	0.53
1:A:72:CYS:C	1:A:355:VAL:HG11	2.33	0.53
1:A:124:GLN:H	1:A:124:GLN:CD	2.16	0.53
1:A:274:PRO:C	1:A:276:VAL:N	2.67	0.53
1:A:406:PRO:O	1:A:407:GLY:C	2.52	0.53
1:A:152:ALA:HB3	1:A:163:ALA:HB2	1.91	0.53
1:A:51:ALA:HB1	1:A:373:TRP:CD1	2.44	0.53
1:A:58:THR:HG22	1:A:60:THR:O	2.08	0.53
1:A:148:ARG:HA	1:A:148:ARG:CZ	2.36	0.53
1:A:424:PHE:CZ	1:A:431:GLY:O	2.62	0.53
1:A:133:VAL:HG12	1:A:134:GLN:N	2.24	0.52
1:A:139:LEU:O	1:A:140:ASN:C	2.52	0.52
1:A:279:THR:OG1	1:A:280:ILE:N	2.41	0.52
1:A:98:ARG:O	1:A:388:VAL:CG1	2.50	0.52
1:A:124:GLN:HE22	1:A:363:LEU:N	2.07	0.52
1:A:35:LYS:O	1:A:389:MET:HB2	2.09	0.52
1:A:90:PHE:CD2	1:A:328:LYS:HB3	2.45	0.52
1:A:416:THR:HB	1:A:417:PRO:CD	2.39	0.52
1:A:317:ALA:HB1	1:A:411:TYR:CB	2.37	0.52
1:A:424:PHE:CE2	1:A:431:GLY:O	2.62	0.52
1:A:268:TYR:CE2	1:A:406:PRO:HG3	2.45	0.52
1:A:309:HIS:ND1	1:A:309:HIS:N	2.58	0.52
1:A:242:SER:O	1:A:245:VAL:HG12	2.10	0.52
1:A:350:ILE:CG2	1:A:351:GLY:N	2.73	0.51
1:A:130:ILE:CG2	1:A:130:ILE:O	2.59	0.51
1:A:173:THR:HA	1:A:178:TYR:CE1	2.45	0.51
1:A:341:ASN:C	1:A:411:TYR:HE2	2.18	0.51
1:A:82:PRO:HA	1:A:85:MET:O	2.10	0.51
1:A:167:PRO:HA	1:A:215:ASN:OD1	2.11	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:308:THR:C	1:A:309:HIS:ND1	2.68	0.51
1:A:294:VAL:CG1	1:A:295:THR:H	2.23	0.51
1:A:299:GLU:HB3	1:A:309:HIS:HD1	1.75	0.51
1:A:270:ILE:HG13	1:A:277:LYS:HG2	1.92	0.51
1:A:95:PRO:HB3	1:A:264:SER:O	2.11	0.51
1:A:145:GLY:O	1:A:425:ASN:CB	2.58	0.51
1:A:322:ILE:CG2	1:A:327:GLU:CB	2.85	0.51
1:A:107:ILE:O	1:A:109:ARG:N	2.44	0.51
1:A:195:ALA:HB1	1:A:201:ASN:HB2	1.90	0.51
1:A:86:ASN:OD1	1:A:89:GLU:HG2	2.10	0.51
1:A:273:GLN:CG	1:A:274:PRO:CD	2.83	0.51
1:A:188:ALA:HB1	1:A:192:ASN:HB3	1.93	0.51
1:A:409:THR:O	1:A:410:ILE:HG22	2.11	0.51
1:A:294:VAL:HG22	1:A:314:ASN:CG	2.36	0.51
1:A:47:ILE:CD1	1:A:213:LEU:HB2	2.41	0.50
1:A:106:VAL:HG13	1:A:251:ILE:CG2	2.41	0.50
1:A:142:LEU:CD1	1:A:428:TYR:CE2	2.88	0.50
1:A:58:THR:HG22	1:A:60:THR:N	2.24	0.50
1:A:78:TRP:CG	1:A:78:TRP:O	2.64	0.50
1:A:215:ASN:C	1:A:216:TYR:HD1	2.19	0.50
1:A:54:VAL:CG2	1:A:160:ILE:HD12	2.38	0.50
1:A:93:LEU:HB2	1:A:263:LYS:CE	2.41	0.50
1:A:182:ILE:HG12	1:A:183:ALA:H	1.76	0.50
1:A:294:VAL:CG1	1:A:295:THR:N	2.75	0.50
1:A:49:GLY:O	1:A:159:MET:HB3	2.10	0.50
1:A:408:ASN:O	1:A:410:ILE:N	2.45	0.50
1:A:148:ARG:O	1:A:148:ARG:HG3	2.11	0.50
1:A:363:LEU:CD1	1:A:370:LEU:HD13	2.29	0.50
1:A:152:ALA:CB	1:A:162:THR:O	2.60	0.50
1:A:152:ALA:CB	1:A:163:ALA:CB	2.84	0.50
1:A:164:THR:OG1	1:A:165:THR:N	2.43	0.50
1:A:409:THR:O	1:A:410:ILE:CG2	2.60	0.50
1:A:421:THR:HG22	1:A:424:PHE:CE1	2.46	0.50
1:A:193:ASP:O	1:A:195:ALA:N	2.45	0.50
1:A:248:GLN:O	1:A:250:LEU:HD13	2.12	0.50
1:A:286:LEU:HD22	1:A:286:LEU:H	1.76	0.50
1:A:148:ARG:NH1	1:A:167:PRO:HG3	2.26	0.49
1:A:159:MET:HE2	1:A:376:SER:H	1.77	0.49
1:A:245:VAL:CG2	1:A:250:LEU:HD12	2.42	0.49
1:A:51:ALA:HB1	1:A:373:TRP:NE1	2.28	0.49
1:A:55:ILE:CG2	1:A:69:LEU:HA	2.39	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:190:SER:HA	1:A:196:PHE:CE1	2.46	0.49
1:A:49:GLY:O	1:A:358:LEU:HD13	2.13	0.49
1:A:78:TRP:HB2	1:A:104:VAL:HG21	1.93	0.49
1:A:102:CYS:O	1:A:102:CYS:SG	2.70	0.49
1:A:343:GLN:C	1:A:344:ILE:HG13	2.38	0.49
1:A:154:GLN:NE2	1:A:157:GLN:O	2.45	0.49
1:A:410:ILE:O	1:A:411:TYR:CG	2.65	0.49
1:A:88:SER:O	1:A:89:GLU:C	2.54	0.49
1:A:364:LEU:HD22	1:A:365:ILE:CG1	2.43	0.49
1:A:55:ILE:O	1:A:55:ILE:HG12	2.12	0.49
1:A:325:ASP:C	1:A:327:GLU:N	2.71	0.49
1:A:358:LEU:CD1	1:A:376:SER:OG	2.59	0.49
1:A:60:THR:OG1	1:A:62:THR:N	2.42	0.48
1:A:78:TRP:CH2	1:A:350:ILE:HB	2.48	0.48
1:A:406:PRO:C	1:A:408:ASN:N	2.69	0.48
1:A:301:THR:O	1:A:307:SER:HB3	2.12	0.48
1:A:328:LYS:C	1:A:330:GLN:N	2.71	0.48
1:A:57:PRO:HB3	1:A:67:ARG:NH1	2.28	0.48
1:A:66:ASN:HB2	1:A:222:GLN:HB2	1.96	0.48
1:A:238:GLN:CD	1:A:238:GLN:H	2.22	0.48
1:A:268:TYR:CE1	1:A:269:LYS:O	2.66	0.48
1:A:148:ARG:CD	1:A:165:THR:C	2.83	0.48
1:A:233:LEU:O	1:A:236:HIS:N	2.47	0.48
1:A:104:VAL:O	1:A:252:ASP:HA	2.14	0.48
1:A:315:PHE:HD1	1:A:315:PHE:H	1.61	0.48
1:A:246:ASN:CG	1:A:247:ASN:N	2.71	0.48
1:A:421:THR:H	1:A:424:PHE:HZ	1.60	0.48
1:A:47:ILE:HG22	1:A:48:PHE:O	2.14	0.47
1:A:80:LYS:HB2	1:A:181:MET:HE1	1.96	0.47
1:A:130:ILE:O	1:A:130:ILE:HG23	2.15	0.47
1:A:246:ASN:C	1:A:248:GLN:N	2.72	0.47
1:A:149:ALA:CB	1:A:215:ASN:HA	2.43	0.47
1:A:73:LEU:CA	1:A:355:VAL:HG21	2.39	0.47
1:A:101:GLU:HA	1:A:256:LYS:HA	1.96	0.47
1:A:109:ARG:NH1	1:A:381:ASP:OD2	2.47	0.47
1:A:172:VAL:O	1:A:177:GLY:HA2	2.14	0.47
1:A:47:ILE:CG2	1:A:48:PHE:N	2.78	0.47
1:A:268:TYR:OH	1:A:270:ILE:HD12	2.15	0.47
1:A:358:LEU:HD12	1:A:358:LEU:HA	1.66	0.47
1:A:74:ALA:H	1:A:355:VAL:HG13	1.79	0.47
1:A:149:ALA:O	1:A:164:THR:O	2.33	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:123:LYS:CD	1:A:157:GLN:HE21	2.28	0.47
1:A:316:PRO:O	1:A:317:ALA:HB2	2.15	0.47
1:A:66:ASN:OD1	1:A:66:ASN:C	2.58	0.46
1:A:68:LEU:CG	1:A:220:TYR:HD1	2.23	0.46
1:A:364:LEU:HD22	1:A:365:ILE:CD1	2.45	0.46
1:A:54:VAL:H	1:A:160:ILE:HD12	1.80	0.46
1:A:112:ARG:HH21	1:A:377:MET:HE3	1.80	0.46
1:A:142:LEU:HD22	1:A:142:LEU:N	2.31	0.46
1:A:241:ASP:O	1:A:242:SER:C	2.59	0.46
1:A:103:ASN:HB2	1:A:254:THR:HB	1.97	0.46
1:A:144:TRP:CZ2	1:A:231:PRO:HB2	2.50	0.46
1:A:233:LEU:O	1:A:235:GLU:N	2.49	0.46
1:A:322:ILE:O	1:A:323:TYR:HB2	2.15	0.46
1:A:65:VAL:O	1:A:222:GLN:HB2	2.14	0.46
1:A:168:LYS:HD3	1:A:172:VAL:CG2	2.41	0.46
1:A:322:ILE:C	1:A:323:TYR:CB	2.89	0.46
1:A:324:SER:HB3	1:A:327:GLU:HG2	1.97	0.46
1:A:421:THR:N	1:A:424:PHE:CZ	2.83	0.46
1:A:73:LEU:HD12	1:A:355:VAL:CG2	2.45	0.46
1:A:141:LYS:HG3	1:A:349:HIS:O	2.15	0.46
1:A:153:PHE:CD2	1:A:161:PRO:HA	2.49	0.46
1:A:246:ASN:C	1:A:248:GLN:H	2.23	0.46
1:A:406:PRO:CA	1:A:409:THR:CG2	2.70	0.46
1:A:78:TRP:O	1:A:349:HIS:CE1	2.68	0.46
1:A:93:LEU:HA	1:A:94:PRO:HD3	1.71	0.46
1:A:250:LEU:O	1:A:250:LEU:HD23	2.14	0.46
1:A:379:TYR:CD1	1:A:379:TYR:C	2.93	0.46
1:A:48:PHE:HB2	1:A:50:LEU:HD21	1.98	0.46
1:A:51:ALA:CB	1:A:373:TRP:CD1	2.99	0.46
1:A:255:TYR:CZ	1:A:349:HIS:HA	2.51	0.46
1:A:261:LEU:HD11	1:A:263:LYS:O	2.15	0.46
1:A:364:LEU:CD1	1:A:364:LEU:C	2.89	0.46
1:A:50:LEU:CD2	1:A:50:LEU:N	2.78	0.46
1:A:58:THR:CG2	1:A:60:THR:O	2.63	0.46
1:A:139:LEU:O	1:A:143:GLY:N	2.45	0.46
1:A:193:ASP:C	1:A:195:ALA:H	2.23	0.46
1:A:202:TYR:HB3	1:A:203:PRO:HD2	1.97	0.46
1:A:179:ARG:HH22	1:A:181:MET:CA	2.28	0.45
1:A:248:GLN:NE2	1:A:249:CYS:N	2.64	0.45
1:A:293:VAL:HB	1:A:315:PHE:CE1	2.51	0.45
1:A:78:TRP:CZ3	1:A:352:ILE:HG12	2.51	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:105:LYS:HA	1:A:251:ILE:HG22	1.99	0.45
1:A:108:PHE:O	1:A:247:ASN:N	2.49	0.45
1:A:124:GLN:HE21	1:A:362:ALA:C	2.24	0.45
1:A:150:PHE:HE2	1:A:214:GLN:HE21	1.63	0.45
1:A:251:ILE:CG2	1:A:252:ASP:N	2.76	0.45
1:A:321:ASN:C	1:A:322:ILE:HG13	2.32	0.45
1:A:336:PRO:CG	1:A:420:LEU:HD12	2.38	0.45
1:A:36:LEU:CD2	1:A:389:MET:HB3	2.29	0.45
1:A:318:ASP:HA	1:A:411:TYR:HA	1.98	0.45
1:A:172:VAL:HG23	1:A:178:TYR:CD1	2.35	0.45
1:A:58:THR:N	1:A:66:ASN:O	2.50	0.45
1:A:66:ASN:HB2	1:A:222:GLN:CB	2.47	0.45
1:A:152:ALA:HB2	1:A:163:ALA:HB3	1.96	0.45
1:A:108:PHE:HB2	1:A:250:LEU:HD11	1.99	0.45
1:A:212:PHE:N	1:A:212:PHE:CD1	2.85	0.45
1:A:154:GLN:CG	1:A:158:PRO:HA	2.46	0.45
1:A:170:GLU:HB2	1:A:171:PRO:HD2	1.99	0.45
1:A:47:ILE:HD11	1:A:213:LEU:HD12	1.99	0.45
1:A:60:THR:OG1	1:A:62:THR:HG23	2.17	0.45
1:A:130:ILE:HD12	1:A:130:ILE:HA	1.78	0.45
1:A:333:HIS:CE1	1:A:335:GLY:HA3	2.51	0.45
1:A:133:VAL:CG1	1:A:134:GLN:N	2.79	0.45
1:A:193:ASP:C	1:A:195:ALA:N	2.75	0.45
1:A:413:ILE:HD12	1:A:413:ILE:HA	1.73	0.45
1:A:60:THR:HG21	1:A:62:THR:OG1	2.17	0.44
1:A:60:THR:C	1:A:62:THR:H	2.26	0.44
1:A:69:LEU:HB2	1:A:230:TRP:CH2	2.52	0.44
1:A:80:LYS:C	1:A:82:PRO:HD2	2.42	0.44
1:A:213:LEU:HD23	1:A:213:LEU:HA	1.83	0.44
1:A:255:TYR:CZ	1:A:257:PRO:HA	2.52	0.44
1:A:261:LEU:C	1:A:261:LEU:HD13	2.43	0.44
1:A:122:THR:O	1:A:124:GLN:CD	2.58	0.44
1:A:137:ILE:HG22	1:A:138:GLY:N	2.31	0.44
1:A:178:TYR:CD1	1:A:178:TYR:N	2.83	0.44
1:A:214:GLN:H	1:A:214:GLN:HG2	1.58	0.44
1:A:299:GLU:O	1:A:308:THR:HA	2.18	0.44
1:A:109:ARG:O	1:A:110:THR:CB	2.65	0.44
1:A:167:PRO:HB3	1:A:215:ASN:OD1	2.18	0.44
1:A:306:GLU:N	1:A:306:GLU:OE2	2.50	0.44
1:A:395:HIS:H	1:A:403:ASN:HD21	1.65	0.44
1:A:92:LEU:HD12	1:A:92:LEU:N	2.32	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:297:PRO:HG2	1:A:311:LEU:HD13	2.00	0.44
1:A:137:ILE:HG23	1:A:352:ILE:CG2	2.48	0.44
1:A:106:VAL:HG23	1:A:250:LEU:CD2	2.47	0.44
1:A:146:ILE:HB	1:A:425:ASN:CG	2.43	0.44
1:A:322:ILE:CA	1:A:323:TYR:N	2.74	0.44
1:A:237:LEU:O	1:A:237:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:246:ASN:O	1:A:248:GLN:N	2.50	0.43
1:A:358:LEU:CD2	1:A:373:TRP:HB3	2.38	0.43
1:A:99:VAL:CG2	1:A:388:VAL:HG21	2.30	0.43
1:A:263:LYS:O	1:A:264:SER:C	2.60	0.43
1:A:277:LYS:HD3	1:A:277:LYS:HA	1.59	0.43
1:A:371:ASN:HD22	1:A:371:ASN:H	1.64	0.43
1:A:50:LEU:CB	1:A:53:ASN:HD21	2.23	0.43
1:A:148:ARG:HH11	1:A:167:PRO:CD	2.16	0.43
1:A:195:ALA:O	1:A:196:PHE:CB	2.66	0.43
1:A:268:TYR:CZ	1:A:406:PRO:HG3	2.53	0.43
1:A:339:HIS:CD2	1:A:411:TYR:HB2	2.52	0.43
1:A:154:GLN:OE1	1:A:159:MET:N	2.51	0.43
1:A:155:SER:O	1:A:156:ASP:C	2.61	0.43
1:A:170:GLU:H	1:A:170:GLU:CD	2.26	0.43
1:A:219:MET:H	1:A:219:MET:HG2	1.55	0.43
1:A:266:LEU:HD13	1:A:267:ASN:H	1.83	0.43
1:A:153:PHE:HB3	1:A:161:PRO:C	2.43	0.43
1:A:203:PRO:HG2	1:A:207:VAL:HG22	1.99	0.43
1:A:242:SER:O	1:A:246:ASN:N	2.51	0.43
1:A:238:GLN:CD	1:A:238:GLN:N	2.77	0.43
1:A:341:ASN:HB2	1:A:408:ASN:HA	2.01	0.43
1:A:362:ALA:O	1:A:363:LEU:C	2.61	0.43
1:A:406:PRO:O	1:A:408:ASN:N	2.51	0.43
1:A:413:ILE:O	1:A:413:ILE:CG2	2.67	0.43
1:A:418:ASN:ND2	1:A:421:THR:CB	2.78	0.43
1:A:103:ASN:CG	1:A:104:VAL:N	2.76	0.43
1:A:127:LEU:H	1:A:127:LEU:CD1	2.19	0.43
1:A:149:ALA:HB3	1:A:215:ASN:HA	1.99	0.43
1:A:342:PRO:C	1:A:343:GLN:NE2	2.77	0.43
1:A:41:LYS:HE2	1:A:85:MET:HA	2.00	0.43
1:A:68:LEU:CD2	1:A:220:TYR:CD1	3.02	0.43
1:A:193:ASP:O	1:A:195:ALA:O	2.37	0.43
1:A:371:ASN:HD22	1:A:371:ASN:C	2.27	0.43
1:A:73:LEU:HB3	1:A:353:GLN:HG2	2.01	0.42
1:A:85:MET:HB2	1:A:89:GLU:HG3	2.00	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:182:ILE:CG1	1:A:183:ALA:N	2.81	0.42
1:A:200:GLY:O	1:A:201:ASN:C	2.62	0.42
1:A:36:LEU:HA	1:A:389:MET:CB	2.44	0.42
1:A:45:PHE:HB3	1:A:213:LEU:HG	2.00	0.42
1:A:107:ILE:N	1:A:107:ILE:CD1	2.74	0.42
1:A:124:GLN:NE2	1:A:363:LEU:N	2.67	0.42
1:A:173:THR:OG1	1:A:177:GLY:CA	2.67	0.42
1:A:322:ILE:C	1:A:323:TYR:HB2	2.43	0.42
1:A:367:SER:O	1:A:368:SER:OG	2.27	0.42
1:A:69:LEU:HB3	1:A:219:MET:HG3	2.01	0.42
1:A:266:LEU:HD11	1:A:402:ALA:CB	2.48	0.42
1:A:84:TYR:HD1	1:A:84:TYR:H	1.64	0.42
1:A:297:PRO:HG2	1:A:311:LEU:CD1	2.50	0.42
1:A:45:PHE:HZ	1:A:83:LEU:HD11	1.84	0.42
1:A:22:VAL:HG22	1:A:23:TYR:H	1.84	0.42
1:A:49:GLY:C	1:A:358:LEU:HD13	2.43	0.42
1:A:60:THR:CG2	1:A:63:THR:OG1	2.67	0.42
1:A:96:GLY:HA2	1:A:261:LEU:HD21	2.01	0.42
1:A:105:LYS:HA	1:A:252:ASP:HA	2.01	0.42
1:A:108:PHE:CB	1:A:250:LEU:HD11	2.49	0.42
1:A:57:PRO:HG3	1:A:67:ARG:NH1	2.34	0.42
1:A:76:ILE:HG12	1:A:213:LEU:HD11	2.01	0.42
1:A:352:ILE:HD13	1:A:352:ILE:HG21	1.73	0.42
1:A:49:GLY:O	1:A:358:LEU:HD22	2.20	0.42
1:A:70:THR:CG2	1:A:218:CYS:HB3	2.49	0.42
1:A:250:LEU:H	1:A:250:LEU:CD2	2.17	0.42
1:A:317:ALA:C	1:A:318:ASP:H	2.02	0.42
1:A:323:TYR:CG	1:A:324:SER:N	2.87	0.42
1:A:87:GLN:O	1:A:91:ASP:HB2	2.19	0.42
1:A:107:ILE:HG23	1:A:248:GLN:C	2.45	0.42
1:A:109:ARG:HG2	1:A:109:ARG:HH11	1.83	0.42
1:A:123:LYS:HE3	1:A:157:GLN:HE21	1.85	0.42
1:A:146:ILE:HG13	1:A:424:PHE:HA	2.02	0.42
1:A:315:PHE:CB	1:A:316:PRO:CD	2.97	0.42
1:A:341:ASN:OD1	1:A:342:PRO:HD2	2.20	0.42
1:A:122:THR:HB	1:A:123:LYS:HD3	1.41	0.42
1:A:421:THR:O	1:A:423:ALA:N	2.53	0.41
1:A:78:TRP:HA	1:A:84:TYR:OH	2.19	0.41
1:A:103:ASN:HD21	1:A:105:LYS:HG2	1.84	0.41
1:A:303:ASN:O	1:A:304:VAL:HB	2.21	0.41
1:A:123:LYS:O	1:A:124:GLN:O	2.38	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:242:SER:OG	1:A:243:LYS:N	2.50	0.41
1:A:179:ARG:HH22	1:A:181:MET:HA	1.85	0.41
1:A:255:TYR:CE2	1:A:257:PRO:CA	3.01	0.41
1:A:44:LYS:HD3	1:A:379:TYR:OH	2.20	0.41
1:A:54:VAL:HG23	1:A:160:ILE:CD1	2.38	0.41
1:A:120:THR:HB	1:A:121:VAL:H	1.13	0.41
1:A:148:ARG:HD2	1:A:165:THR:C	2.45	0.41
1:A:258:LYS:HE3	1:A:258:LYS:HB2	1.92	0.41
1:A:259:MET:H	1:A:333:HIS:HD2	1.65	0.41
1:A:363:LEU:HG	1:A:367:SER:CB	2.50	0.41
1:A:84:TYR:CE2	1:A:102:CYS:HB2	2.55	0.41
1:A:365:ILE:HB	1:A:366:ASN:H	1.35	0.41
1:A:184:ASP:O	1:A:204:HIS:HB2	2.21	0.41
1:A:128:ASN:O	1:A:129:GLN:HG3	2.21	0.41
1:A:169:TYR:CE1	1:A:215:ASN:ND2	2.89	0.41
1:A:269:LYS:HD3	1:A:269:LYS:HA	1.89	0.41
1:A:140:ASN:OD1	1:A:351:GLY:HA3	2.21	0.41
1:A:317:ALA:HA	1:A:412:ARG:O	2.21	0.41
1:A:322:ILE:HG21	1:A:322:ILE:HD13	1.88	0.41
1:A:328:LYS:HG3	1:A:329:SER:N	2.36	0.41
1:A:354:ALA:C	1:A:355:VAL:HG22	2.46	0.41
1:A:202:TYR:HD1	1:A:202:TYR:HA	1.64	0.41
1:A:270:ILE:HD12	1:A:270:ILE:HA	1.81	0.41
1:A:53:ASN:HB3	1:A:161:PRO:HD2	2.00	0.40
1:A:370:LEU:HD13	1:A:370:LEU:HA	1.82	0.40
1:A:371:ASN:H	1:A:371:ASN:ND2	2.17	0.40
1:A:79:GLN:O	1:A:332:LEU:HB2	2.21	0.40
1:A:148:ARG:HD2	1:A:165:THR:O	2.10	0.40
1:A:344:ILE:N	1:A:344:ILE:CD1	2.79	0.40
1:A:424:PHE:O	1:A:424:PHE:CG	2.74	0.40
1:A:58:THR:HB	1:A:64:ALA:CA	2.44	0.40
1:A:85:MET:HG3	1:A:89:GLU:HB2	2.03	0.40
1:A:87:GLN:O	1:A:88:SER:C	2.64	0.40
1:A:39:TYR:O	1:A:385:SER:CA	2.66	0.40
1:A:78:TRP:O	1:A:349:HIS:NE2	2.55	0.40
1:A:166:ALA:HA	1:A:167:PRO:HD3	1.92	0.40
1:A:248:GLN:NE2	1:A:249:CYS:H	2.20	0.40
1:A:308:THR:C	1:A:309:HIS:CG	2.99	0.40
1:A:421:THR:CB	1:A:424:PHE:CZ	2.69	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	413/437 (94%)	257 (62%)	86 (21%)	70 (17%)	0 2

All (70) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	52	ASN
1	A	64	ALA
1	A	110	THR
1	A	128	ASN
1	A	140	ASN
1	A	148	ARG
1	A	150	PHE
1	A	154	GLN
1	A	164	THR
1	A	201	ASN
1	A	204	HIS
1	A	208	SER
1	A	242	SER
1	A	247	ASN
1	A	252	ASP
1	A	273	GLN
1	A	275	THR
1	A	297	PRO
1	A	316	PRO
1	A	324	SER
1	A	325	ASP
1	A	346	PRO
1	A	365	ILE
1	A	410	ILE
1	A	423	ALA
1	A	428	TYR
1	A	73	LEU
1	A	79	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	124	GLN
1	A	129	GLN
1	A	143	GLY
1	A	163	ALA
1	A	179	ARG
1	A	194	THR
1	A	199	ALA
1	A	207	VAL
1	A	234	ALA
1	A	283	GLY
1	A	304	VAL
1	A	318	ASP
1	A	320	PHE
1	A	326	ILE
1	A	342	PRO
1	A	345	GLN
1	A	356	PRO
1	A	363	LEU
1	A	364	LEU
1	A	402	ALA
1	A	53	ASN
1	A	161	PRO
1	A	221	GLN
1	A	424	PHE
1	A	139	LEU
1	A	228	GLY
1	A	265	PRO
1	A	400	THR
1	A	120	THR
1	A	305	ALA
1	A	341	ASN
1	A	87	GLN
1	A	88	SER
1	A	165	THR
1	A	246	ASN
1	A	344	ILE
1	A	368	SER
1	A	417	PRO
1	A	137	ILE
1	A	407	GLY
1	A	157	GLN
1	A	355	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	356/371 (96%)	236 (66%)	120 (34%)	0 2

All (120) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	22	VAL
1	A	27	ARG
1	A	36	LEU
1	A	40	THR
1	A	50	LEU
1	A	53	ASN
1	A	54	VAL
1	A	55	ILE
1	A	63	THR
1	A	65	VAL
1	A	66	ASN
1	A	67	ARG
1	A	69	LEU
1	A	70	THR
1	A	75	GLU
1	A	78	TRP
1	A	79	GLN
1	A	81	LEU
1	A	85	MET
1	A	87	GLN
1	A	89	GLU
1	A	91	ASP
1	A	98	ARG
1	A	105	LYS
1	A	106	VAL
1	A	107	ILE
1	A	117	THR
1	A	120	THR
1	A	121	VAL
1	A	122	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	124	GLN
1	A	126	THR
1	A	127	LEU
1	A	130	ILE
1	A	132	ASN
1	A	139	LEU
1	A	140	ASN
1	A	142	LEU
1	A	144	TRP
1	A	146	ILE
1	A	151	THR
1	A	154	GLN
1	A	156	ASP
1	A	162	THR
1	A	170	GLU
1	A	172	VAL
1	A	176	THR
1	A	178	TYR
1	A	182	ILE
1	A	191	THR
1	A	196	PHE
1	A	208	SER
1	A	214	GLN
1	A	217	TYR
1	A	219	MET
1	A	220	TYR
1	A	224	ASN
1	A	225	GLN
1	A	227	THR
1	A	233	LEU
1	A	237	LEU
1	A	238	GLN
1	A	243	LYS
1	A	246	ASN
1	A	247	ASN
1	A	248	GLN
1	A	249	CYS
1	A	250	LEU
1	A	251	ILE
1	A	259	MET
1	A	266	LEU
1	A	268	TYR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	270	ILE
1	A	271	ILE
1	A	277	LYS
1	A	279	THR
1	A	281	SER
1	A	285	ASN
1	A	286	LEU
1	A	287	VAL
1	A	289	MET
1	A	290	ARG
1	A	293	VAL
1	A	302	GLN
1	A	306	GLU
1	A	309	HIS
1	A	311	LEU
1	A	315	PHE
1	A	316	PRO
1	A	329	SER
1	A	332	LEU
1	A	339	HIS
1	A	340	GLU
1	A	341	ASN
1	A	342	PRO
1	A	344	ILE
1	A	355	VAL
1	A	360	THR
1	A	363	LEU
1	A	364	LEU
1	A	367	SER
1	A	370	LEU
1	A	371	ASN
1	A	379	TYR
1	A	381	ASP
1	A	383	MET
1	A	389	MET
1	A	390	GLU
1	A	392	GLN
1	A	393	PRO
1	A	394	THR
1	A	400	THR
1	A	404	THR
1	A	412	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	415	LEU
1	A	420	LEU
1	A	422	SER
1	A	425	ASN
1	A	428	TYR
1	A	433	THR

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (20) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	43	HIS
1	A	52	ASN
1	A	53	ASN
1	A	87	GLN
1	A	124	GLN
1	A	132	ASN
1	A	147	ASN
1	A	157	GLN
1	A	192	ASN
1	A	204	HIS
1	A	214	GLN
1	A	248	GLN
1	A	285	ASN
1	A	288	ASN
1	A	296	ASN
1	A	314	ASN
1	A	371	ASN
1	A	392	GLN
1	A	405	ASN
1	A	418	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 oligosaccharides 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](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	A	25

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	322:ILE	C	323:TYR	N	1.90
1	A	317:ALA	C	318:ASP	N	1.67
1	A	347:SER	C	348:VAL	N	1.60
1	A	148:ARG	C	149:ALA	N	1.19
1	A	162:THR	C	163:ALA	N	1.19
1	A	122:THR	C	123:LYS	N	1.18
1	A	224:ASN	C	225:GLN	N	1.18
1	A	274:PRO	C	275:THR	N	1.18
1	A	306:GLU	C	307:SER	N	1.18
1	A	426:GLY	C	427:LEU	N	1.18
1	A	129:GLN	C	130:ILE	N	1.17
1	A	215:ASN	C	216:TYR	N	1.16
1	A	424:PHE	C	425:ASN	N	1.13
1	A	214:GLN	C	215:ASN	N	1.08
1	A	408:ASN	C	409:THR	N	1.04
1	A	427:LEU	C	428:TYR	N	1.04
1	A	121:VAL	C	122:THR	N	1.03
1	A	324:SER	C	325:ASP	N	1.03
1	A	251:ILE	C	252:ASP	N	1.02
1	A	128:ASN	C	129:GLN	N	1.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	387:THR	C	388:VAL	N	1.01
1	A	250:LEU	C	251:ILE	N	0.95
1	A	400:THR	C	401:GLU	N	0.94
1	A	321:ASN	C	322:ILE	N	0.85
1	A	366:ASN	C	367:SER	N	0.85

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, 95th percentile and maximum values of the occupancy-weighted average B-factor per residue. The column labelled ‘Q< 0.9’ lists the number of (and percentage) of residues with an average occupancy less than 0.9.

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	415/437 (94%)	2.44	219 (52%) 0 0	2, 21, 63, 92	0

All (219) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	193	ASP	9.4
1	A	174	GLY	9.0
1	A	91	ASP	9.0
1	A	58	THR	8.6
1	A	154	GLN	8.1
1	A	155	SER	7.9
1	A	226	GLY	7.5
1	A	314	ASN	6.9
1	A	303	ASN	6.7
1	A	175	ASP	6.6
1	A	215	ASN	6.5
1	A	183	ALA	6.4
1	A	49	GLY	6.3
1	A	97	SER	6.3
1	A	30	SER	6.0
1	A	254	THR	5.9
1	A	228	GLY	5.9
1	A	96	GLY	5.8
1	A	368	SER	5.8
1	A	29	PHE	5.6
1	A	177	GLY	5.6
1	A	255	TYR	5.5
1	A	197	GLY	5.5
1	A	260	GLY	5.3
1	A	43	HIS	5.1
1	A	302	GLN	5.0
1	A	31	ASN	5.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	119	SER	4.9
1	A	114	ALA	4.9
1	A	245	VAL	4.9
1	A	42	SER	4.8
1	A	218	CYS	4.8
1	A	162	THR	4.7
1	A	39	TYR	4.7
1	A	241	ASP	4.7
1	A	288	ASN	4.7
1	A	178	TYR	4.6
1	A	435	GLY	4.4
1	A	60	THR	4.3
1	A	345	GLN	4.3
1	A	406	PRO	4.3
1	A	102	CYS	4.3
1	A	153	PHE	4.3
1	A	140	ASN	4.3
1	A	421	THR	4.3
1	A	194	THR	4.2
1	A	395	HIS	4.2
1	A	267	ASN	4.2
1	A	366	ASN	4.2
1	A	359	THR	4.2
1	A	367	SER	4.2
1	A	436	ASN	4.0
1	A	176	THR	4.0
1	A	52	ASN	4.0
1	A	40	THR	4.0
1	A	98	ARG	3.9
1	A	83	LEU	3.9
1	A	235	GLU	3.9
1	A	390	GLU	3.9
1	A	369	PRO	3.9
1	A	150	PHE	3.9
1	A	365	ILE	3.9
1	A	208	SER	3.8
1	A	33	GLY	3.8
1	A	374	THR	3.8
1	A	269	LYS	3.8
1	A	323	TYR	3.8
1	A	384	SER	3.8
1	A	173	THR	3.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	156	ASP	3.8
1	A	77	PRO	3.8
1	A	351	GLY	3.7
1	A	339	HIS	3.7
1	A	189	ASP	3.7
1	A	320	PHE	3.7
1	A	103	ASN	3.6
1	A	355	VAL	3.6
1	A	53	ASN	3.6
1	A	310	ASN	3.6
1	A	213	LEU	3.6
1	A	301	THR	3.6
1	A	207	VAL	3.5
1	A	186	TYR	3.5
1	A	203	PRO	3.5
1	A	170	GLU	3.5
1	A	376	SER	3.4
1	A	418	ASN	3.4
1	A	101	GLU	3.4
1	A	232	CYS	3.4
1	A	394	THR	3.4
1	A	407	GLY	3.4
1	A	72	CYS	3.4
1	A	187	GLY	3.3
1	A	145	GLY	3.3
1	A	411	TYR	3.3
1	A	75	GLU	3.3
1	A	319	LEU	3.2
1	A	152	ALA	3.2
1	A	209	SER	3.2
1	A	296	ASN	3.2
1	A	86	ASN	3.2
1	A	364	LEU	3.2
1	A	326	ILE	3.2
1	A	341	ASN	3.2
1	A	244	THR	3.2
1	A	192	ASN	3.1
1	A	128	ASN	3.1
1	A	234	ALA	3.1
1	A	416	THR	3.1
1	A	107	ILE	3.1
1	A	315	PHE	3.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	138	GLY	3.0
1	A	165	THR	3.0
1	A	295	THR	3.0
1	A	417	PRO	3.0
1	A	131	SER	3.0
1	A	95	PRO	2.9
1	A	361	GLY	2.9
1	A	375	ASP	2.9
1	A	370	LEU	2.9
1	A	404	THR	2.9
1	A	337	TRP	2.9
1	A	118	SER	2.9
1	A	382	VAL	2.9
1	A	169	TYR	2.9
1	A	123	LYS	2.9
1	A	160	ILE	2.9
1	A	89	GLU	2.8
1	A	205	HIS	2.8
1	A	206	GLN	2.8
1	A	64	ALA	2.8
1	A	274	PRO	2.8
1	A	343	GLN	2.8
1	A	289	MET	2.8
1	A	34	LYS	2.8
1	A	263	LYS	2.8
1	A	243	LYS	2.8
1	A	45	PHE	2.8
1	A	87	GLN	2.8
1	A	305	ALA	2.8
1	A	334	LYS	2.8
1	A	148	ARG	2.7
1	A	281	SER	2.7
1	A	386	CYS	2.7
1	A	412	ARG	2.7
1	A	151	THR	2.7
1	A	383	MET	2.7
1	A	109	ARG	2.6
1	A	346	PRO	2.6
1	A	195	ALA	2.6
1	A	161	PRO	2.6
1	A	55	ILE	2.6
1	A	184	ASP	2.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	313	ARG	2.5
1	A	371	ASN	2.5
1	A	342	PRO	2.5
1	A	70	THR	2.5
1	A	158	PRO	2.5
1	A	393	PRO	2.5
1	A	420	LEU	2.5
1	A	54	VAL	2.5
1	A	373	TRP	2.5
1	A	246	ASN	2.5
1	A	265	PRO	2.5
1	A	278	GLY	2.5
1	A	352	ILE	2.4
1	A	157	GLN	2.4
1	A	238	GLN	2.4
1	A	204	HIS	2.4
1	A	74	ALA	2.4
1	A	272	GLY	2.4
1	A	110	THR	2.4
1	A	307	SER	2.4
1	A	63	THR	2.4
1	A	166	ALA	2.4
1	A	280	ILE	2.4
1	A	360	THR	2.4
1	A	149	ALA	2.4
1	A	349	HIS	2.3
1	A	298	PRO	2.3
1	A	358	LEU	2.3
1	A	210	PHE	2.3
1	A	251	ILE	2.3
1	A	37	SER	2.3
1	A	61	GLY	2.3
1	A	309	HIS	2.3
1	A	279	THR	2.3
1	A	182	ILE	2.3
1	A	242	SER	2.3
1	A	259	MET	2.3
1	A	144	TRP	2.3
1	A	268	TYR	2.3
1	A	413	ILE	2.2
1	A	122	THR	2.2
1	A	287	VAL	2.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	120	THR	2.2
1	A	419	SER	2.2
1	A	121	VAL	2.2
1	A	50	LEU	2.2
1	A	340	GLU	2.2
1	A	408	ASN	2.2
1	A	253	VAL	2.1
1	A	212	PHE	2.1
1	A	163	ALA	2.1
1	A	356	PRO	2.1
1	A	403	ASN	2.1
1	A	405	ASN	2.1
1	A	236	HIS	2.1
1	A	387	THR	2.1
1	A	222	GLN	2.1
1	A	297	PRO	2.1
1	A	299	GLU	2.1
1	A	147	ASN	2.1
1	A	59	GLY	2.0
1	A	108	PHE	2.0
1	A	378	GLY	2.0
1	A	252	ASP	2.0
1	A	41	LYS	2.0
1	A	290	ARG	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 oligosaccharides in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.