



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Oct 26, 2023 – 02:09 AM EDT

PDB ID : 3AGQ
Title : Structure of viral polymerase form II
Authors : Takeshita, D.; Tomita, K.
Deposited on : 2010-04-06
Resolution : 3.22 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 : 4.02b-467
Xtriage (Phenix) : 1.13
EDS : 2.36
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Refmac : 5.8.0158
CCP4 : 7.0.044 (Gargrove)
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.36

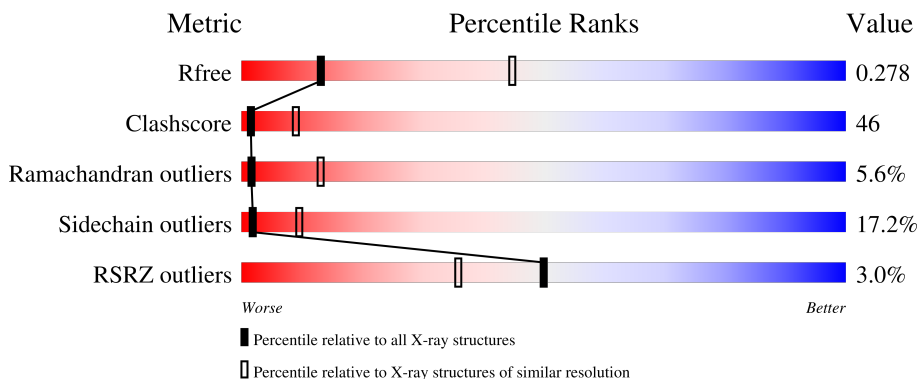
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.22 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}	130704	1335 (3.24-3.20)
Clashscore	141614	1460 (3.24-3.20)
Ramachandran outliers	138981	1437 (3.24-3.20)
Sidechain outliers	138945	1436 (3.24-3.20)
RSRZ outliers	127900	1291 (3.24-3.20)

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 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	1289	

2 Entry composition

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 9257 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 Elongation factor Ts, Elongation factor Tu 1, LINKER, Q beta replicase.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	1199	9252	5843	1600	1764	45	0	0	0

There are 7 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	284	HIS	-	linker	UNP P0A6P3
A	1284	HIS	-	expression tag	UNP Q8LTE0
A	1285	HIS	-	expression tag	UNP Q8LTE0
A	1286	HIS	-	expression tag	UNP Q8LTE0
A	1287	HIS	-	expression tag	UNP Q8LTE0
A	1288	HIS	-	expression tag	UNP Q8LTE0
A	1289	HIS	-	expression tag	UNP Q8LTE0

- Molecule 2 is MAGNESIUM ION (three-letter code: MG) (formula: Mg).

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
2	A	1	Total	Mg	0	0
			1	1		

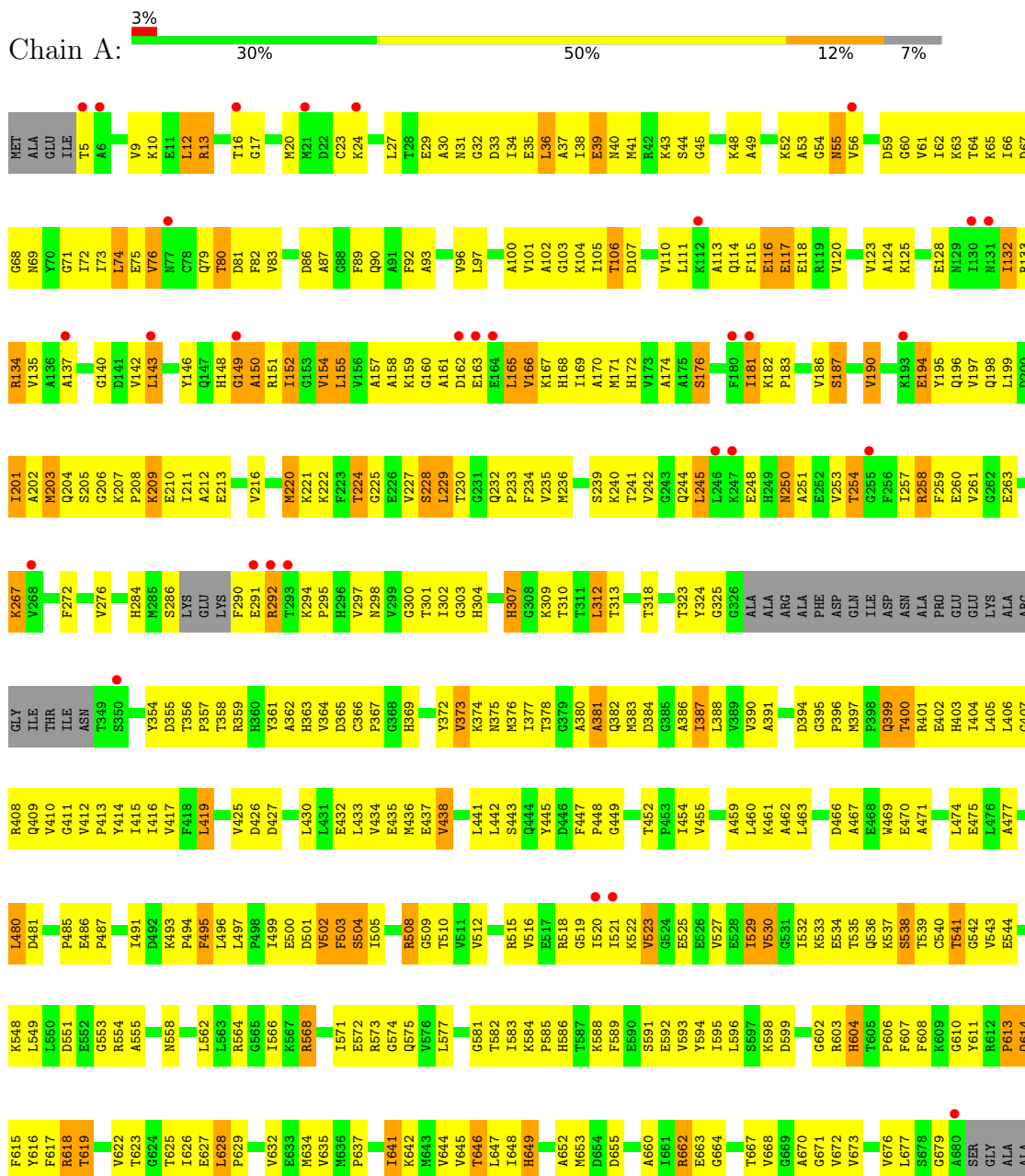
- Molecule 3 is water.

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

3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry 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: Elongation factor Ts, Elongation factor Tu 1, LINKER, Q beta replicase



GLN	L1207	D1134	Y1071	V1008	D944	P875	S810	E745	GLY	S700
GLY	F1208	P1135	V1072	V1009	L945	R876	E811	C746	GLY	S701
THR	R1209	A1136	G1073	T1010	Q948	A877	D812	F747	GLY	R702
LYS	R1210	A1137	F1074	Y1011	T949	L878	F813	S748	GLY	N703
VAL	C1211	H1138	T1075	K1012	K982	K879	N814	F749	SER	S704
ALA	L1212	S1139	L1076	K1013	R983	Y880	L817	F750	GLY	L705
SER	S1213	V1140	M1077	I1014	R984	V881	G818	D754	GLY	L706
LEU	E1214	K1143	T1078	S1015	R985	L884	G819	T756	GLY	S706
HIS	S1215	Y1144	K1079	S1016	A955	R885	E819		SER	A707
GLU	N1216	K1080	K1080	G1018	H956	A886	C821		SER	Q708
ALA	ASP	P1149	F1081	G1019	E957	S887	I822	D759	SER	L709
HIS	LEU	K1150	F1082	G1020	V960	T888	H823	F760	LYS	R710
HIS	PRO	Q1151	S1083	Y1021	T961	H889	M824	K761	THR	R711
HIS	LEU	L1152	E1084	Y1022	P990	P990	I762	I762	ALA	S702
HIS	LEU	I1157	G1085	F1023	D891	K828	K828	N763		
HIS	ARG	P1158	F1086	F1024	I892	I829	I829	M764		
HIS	GLY	P1159	F1087	E1025	R893	L832	L832	L765		
HIS	PRO	D1159	R1088	L1026	I894	I833	I833	K766		
HIS	SER	G1160	E1089	S1027	S895	G834	G834	A767		
HIS	GLY	Y1161	S1090	L1028	D896	D896	D896	E768		
HIS	CYS	I1162	K1093	I1029	I897	D835	D835	I769		
HIS	ASP	D1163	H1094	F1030	S898	V836	V836	M770		
HIS	ALA	G1164	H1094	A1031	P899	P837	P837	S771		
HIS	ASP	A1165	Y1095	S1032	F900	F900	F900	S771		
HIS	LEU	L1166	Y1096	L1033	N901	N901	N901	K772		
HIS	PHE	V1167	V1099	A1034	V904	V904	V904	Y773		
HIS	ASP	L1171	D1100	R1035	D974	D974	D974	D774		
HIS	GLY	I1172	Y1101	S1036	S975	S905	S905	D775		
HIS	GLY	N1173	T1102	V1037	I976	V906	V906	F776		
HIS	GLY	P1174	P1103	C1038	S977	V906	V906	F777		
HIS	LEU	F1175	I1106	E1039	L978	D813	D813	L778		
HIS	LEU	A1176	L1107	I1040	A979	R914	R914	G779		
HIS	LEU	K1177	H1108	L1041	L980	C915	C915	L780		
HIS	LEU	R1178	R1109	D1042	C981	F848	F848	D781		
HIS	LEU	R1179	R1110	L1043	E982	A917	A917	T782		
HIS	LEU	G1180	I1110	D1044	L983	G851	G851	V719		
HIS	LEU	W1181	V1111	S1045	L984	I918	I918	E720		
HIS	LEU	I1182	S1112	S1046	L985	G821	G821	G721		
HIS	LEU	R1183	D1115	E1047	P986	W922	W922	N722		
HIS	LEU	Y1184	L1116	V1048	P987	N923	N923	L723		
HIS	LEU	V1185	L1117	T1049	P988	N924	N924	L725		
HIS	LEU	P1186	L1118	G1050	W989	F925	F925	S726		
HIS	LEU	V1187	L1119	Y1051	E990	F926	F926	I727		
HIS	LEU	I1188	V1120	G1052	E991	Q927	Q927	L727		
HIS	LEU	T1189	L1120	D1053	V992	L928	L928	A728		
HIS	LEU	D1190	N1121	D1054	L993	L928	L928	A729		
HIS	LEU	H1191	N1122	I1055	N994	C929	C929	L731		
HIS	LEU	T1192	L1123	I1056	D995	I930	I930	L732		
HIS	LEU	E1196	Y1124	L1057	L996	G932	G932	L733		
HIS	LEU	L1200	R1125	P1058	R997	I933	I933	A734		
HIS	LEU	G1201	M1126	P1059	S998	L934	L934	Y735		
HIS	LEU	S1202	T1128	C1060	P999	K937	K937	G736		
HIS	PRO	Y1203	I1129	P1063	K1000	L938	L938	Q737		
HIS	TYR	Y1203	D1130	A1064	L1003	R939	R939	S738		
HIS	GLY	L1204	L1131	L1065	P1004	P940	P940	P739		
HIS	VAL	Y1205	V1132	E1066	P1004	C940	C940	Y805		
HIS	PHE	R1264	M1133	V1068	G1006	G942	G942	Y806		
HIS	PHE				S1007	I943	I943	S806		
HIS								D807		
HIS								E743		
HIS								Y809		

4 Data and refinement statistics i

Property	Value	Source
Space group	C 2 2 21	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	138.77Å 255.12Å 100.97Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	20.00 – 3.22 30.28 – 3.22	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	97.6 (20.00-3.22) 97.6 (30.28-3.22)	Depositor EDS
R_{merge}	0.11	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	2.44 (at 3.24Å)	Xtrriage
Refinement program	PHENIX	Depositor
R, R_{free}	0.251 , 0.317 0.222 , 0.278	Depositor DCC
R_{free} test set	1452 reflections (5.07%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	86.5	Xtrriage
Anisotropy	0.572	Xtrriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.25 , 58.6	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.38$, $\langle L^2 \rangle = 0.21$	Xtrriage
Estimated twinning fraction	0.077 for 1/2*h-1/2*k,-3/2*h-1/2*k,-l 0.022 for 1/2*h+1/2*k,3/2*h-1/2*k,-l	Xtrriage
F_o, F_c correlation	0.92	EDS
Total number of atoms	9257	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	132.0	wwPDB-VP

Xtrriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 4.26% 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](#)

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

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	0.40	0/9421	0.62	1/12741 (0.0%)

There are no bond length outliers.

All (1) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	286	SER	CA-C-O	-18.36	81.55	120.10

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	9252	0	9234	845	0
2	A	1	0	0	0	0
3	A	4	0	0	0	0
All	All	9257	0	9234	845	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 46.

All (845) 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:930:ILE:HD11	1:A:1021:TYR:HD2	1.17	1.07
1:A:893:ARG:HH11	1:A:893:ARG:HB3	1.20	1.06
1:A:133:ARG:HG2	1:A:134:ARG:H	1.20	1.04
1:A:198:GLN:HA	1:A:201:ILE:HG12	1.37	1.04
1:A:399:GLN:H	1:A:399:GLN:HE21	1.06	1.02
1:A:202:ALA:HB1	1:A:207:LYS:HD2	1.42	1.01
1:A:520:ILE:HD11	1:A:554:ARG:HG3	1.44	0.99
1:A:930:ILE:HD11	1:A:1021:TYR:CD2	1.99	0.97
1:A:800:THR:HG22	1:A:803:ARG:HH11	1.30	0.95
1:A:544:GLU:HB3	1:A:549:LEU:HG	1.48	0.95
1:A:208:PRO:HG2	1:A:211:ILE:HD13	1.47	0.94
1:A:806:ARG:H	1:A:807:PRO:HD2	1.30	0.93
1:A:1121:ASN:HD21	1:A:1167:VAL:H	1.10	0.92
1:A:212:ALA:O	1:A:216:VAL:HG23	1.69	0.91
1:A:1035:ARG:HG3	1:A:1048:VAL:HG11	1.52	0.91
1:A:747:ILE:HG22	1:A:771:SER:HA	1.56	0.88
1:A:968:ASP:H	1:A:1081:THR:HG22	1.38	0.88
1:A:734:ALA:HB1	1:A:1136:ARG:O	1.74	0.88
1:A:801:ASN:HA	1:A:979:ALA:HB2	1.55	0.87
1:A:220:MET:O	1:A:224:THR:HG22	1.75	0.87
1:A:749:PHE:CE1	1:A:766:LYS:HG2	2.09	0.87
1:A:1100:ASP:OD1	1:A:1102:THR:HG23	1.74	0.86
1:A:894:ILE:HG13	1:A:895:SER:O	1.75	0.85
1:A:969:LEU:HB2	1:A:1053:ASP:HB2	1.58	0.85
1:A:302:ILE:HD13	1:A:366:CYS:HB2	1.59	0.84
1:A:491:ILE:HG22	1:A:555:ALA:HB3	1.59	0.84
1:A:508:ARG:HD3	1:A:562:LEU:HD21	1.59	0.84
1:A:49:ALA:HB2	1:A:123:VAL:HG11	1.59	0.84
1:A:800:THR:HG22	1:A:803:ARG:NH1	1.93	0.84
1:A:797:CYS:HB3	1:A:1012:GLU:HB3	1.59	0.83
1:A:893:ARG:HB3	1:A:893:ARG:NH1	1.94	0.83
1:A:849:SER:HA	1:A:863:PRO:HG3	1.59	0.83
1:A:298:ASN:HB3	1:A:362:ALA:HB3	1.61	0.82
1:A:743:GLU:HB2	1:A:778:LEU:HD22	1.61	0.82
1:A:499:ILE:HD13	1:A:512:VAL:HG11	1.60	0.81
1:A:529:ILE:HG12	1:A:529:ILE:O	1.80	0.81
1:A:837:PRO:HG3	1:A:992:VAL:HG11	1.63	0.81
1:A:134:ARG:HH21	1:A:134:ARG:HG3	1.44	0.81
1:A:1110:ILE:HD11	1:A:1116:LEU:HA	1.61	0.81
1:A:1060:CYS:O	1:A:1063:PRO:HD2	1.82	0.79
1:A:1057:LEU:HD13	1:A:1065:LEU:HD22	1.64	0.78
1:A:272:PHE:HE1	1:A:310:THR:HG22	1.48	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1151:GLN:HE21	1:A:1151:GLN:H	1.30	0.77
1:A:169:ILE:HD11	1:A:229:LEU:HD11	1.65	0.77
1:A:165:LEU:O	1:A:169:ILE:HG22	1.84	0.76
1:A:874:THR:HG22	1:A:877:ALA:H	1.50	0.76
1:A:1068:VAL:O	1:A:1072:VAL:HG13	1.84	0.76
1:A:1180:GLY:O	1:A:1181:TRP:HB2	1.86	0.76
1:A:62:ILE:HG13	1:A:261:VAL:HG23	1.67	0.75
1:A:1094:HIS:H	1:A:1102:THR:HG22	1.51	0.75
1:A:846:CYS:SG	1:A:926:PHE:HA	2.26	0.75
1:A:948:GLN:O	1:A:952:GLN:HG3	1.87	0.75
1:A:955:ALA:HB2	1:A:1090:SER:HB3	1.69	0.75
1:A:133:ARG:HG2	1:A:134:ARG:N	1.97	0.74
1:A:233:PRO:HA	1:A:241:THR:HA	1.70	0.74
1:A:1121:ASN:ND2	1:A:1167:VAL:H	1.82	0.74
1:A:1110:ILE:HD11	1:A:1116:LEU:CA	2.17	0.74
1:A:897:ILE:O	1:A:897:ILE:HG23	1.86	0.74
1:A:356:THR:HG21	1:A:481:ASP:OD1	1.88	0.73
1:A:981:CYS:O	1:A:985:LEU:HD12	1.88	0.73
1:A:991:GLU:C	1:A:993:LEU:H	1.91	0.73
1:A:1026:GLU:O	1:A:1030:PHE:CD1	2.41	0.73
1:A:741:ASN:HD22	1:A:742:SER:N	1.86	0.73
1:A:852:ALA:HB1	1:A:918:ILE:HG12	1.71	0.73
1:A:749:PHE:HD1	1:A:767:ALA:HA	1.53	0.72
1:A:356:THR:HG23	1:A:357:PRO:HD2	1.69	0.72
1:A:92:PHE:CE1	1:A:132:ILE:HD11	2.25	0.72
1:A:930:ILE:HA	1:A:933:ILE:HG23	1.71	0.71
1:A:589:PHE:CZ	1:A:645:VAL:HB	2.24	0.71
1:A:773:TYR:HB3	1:A:776:PHE:CE1	2.25	0.71
1:A:386:ALA:HB3	1:A:415:ILE:HG12	1.71	0.71
1:A:361:TYR:CZ	1:A:480:LEU:HB3	2.24	0.71
1:A:967:VAL:HG22	1:A:1055:ILE:HB	1.72	0.71
1:A:991:GLU:O	1:A:993:LEU:N	2.23	0.71
1:A:388:LEU:HB3	1:A:417:VAL:HG22	1.71	0.71
1:A:628:LEU:HB3	1:A:632:VAL:HG13	1.71	0.71
1:A:166:VAL:HA	1:A:169:ILE:CG2	2.21	0.70
1:A:113:ALA:HA	1:A:116:GLU:HB2	1.72	0.70
1:A:307:HIS:CD2	1:A:391:ALA:H	2.09	0.70
1:A:466:ASP:OD2	1:A:469:TRP:HD1	1.74	0.70
1:A:926:PHE:HB3	1:A:996:LEU:HD21	1.71	0.70
1:A:1151:GLN:H	1:A:1151:GLN:NE2	1.90	0.70
1:A:96:VAL:HG22	1:A:111:LEU:HD12	1.74	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:837:PRO:CG	1:A:992:VAL:HG11	2.20	0.70
1:A:967:VAL:CG2	1:A:1055:ILE:HB	2.22	0.70
1:A:988:GLY:O	1:A:992:VAL:HG12	1.92	0.70
1:A:221:LYS:O	1:A:224:THR:HG23	1.91	0.69
1:A:598:LYS:HE3	1:A:604:HIS:HB2	1.74	0.69
1:A:1189:THR:HG22	1:A:1190:ASP:O	1.92	0.69
1:A:502:VAL:HG13	1:A:512:VAL:HG12	1.72	0.69
1:A:853:THR:CG2	1:A:866:LYS:HE2	2.22	0.69
1:A:717:ILE:HD13	1:A:717:ILE:C	2.13	0.69
1:A:417:VAL:HB	1:A:454:ILE:HD13	1.75	0.68
1:A:111:LEU:HD23	1:A:111:LEU:H	1.58	0.68
1:A:158:ALA:HA	1:A:253:VAL:HA	1.75	0.68
1:A:627:GLU:HG3	1:A:644:VAL:HB	1.76	0.68
1:A:199:LEU:HA	1:A:216:VAL:HG21	1.75	0.68
1:A:361:TYR:OH	1:A:480:LEU:HB3	1.93	0.68
1:A:754:ASP:O	1:A:755:GLY:O	2.12	0.68
1:A:900:PHE:HE2	1:A:1008:VAL:HG12	1.56	0.68
1:A:610:GLY:H	1:A:1181:TRP:HE1	1.42	0.68
1:A:132:ILE:HD12	1:A:132:ILE:H	1.59	0.68
1:A:864:SER:HB2	1:A:1202:SER:HA	1.75	0.68
1:A:930:ILE:CD1	1:A:1021:TYR:HD2	2.03	0.68
1:A:276:VAL:HG21	1:A:313:THR:HG23	1.75	0.68
1:A:169:ILE:CD1	1:A:229:LEU:HD21	2.24	0.67
1:A:400:THR:O	1:A:404:ILE:HG13	1.95	0.67
1:A:945:LEU:O	1:A:1051:TYR:HE1	1.77	0.67
1:A:356:THR:HG22	1:A:358:THR:H	1.60	0.67
1:A:783:GLU:O	1:A:786:ALA:HB3	1.95	0.67
1:A:172:HIS:O	1:A:176:SER:HB2	1.95	0.67
1:A:591:SER:HB2	1:A:672:VAL:O	1.95	0.67
1:A:583:ILE:HD11	1:A:652:ALA:C	2.15	0.67
1:A:1030:PHE:HE2	1:A:1074:PHE:CE1	2.13	0.67
1:A:618:ARG:NH1	1:A:652:ALA:O	2.28	0.66
1:A:574:GLY:HA2	1:A:619:THR:CG2	2.24	0.66
1:A:717:ILE:HD13	1:A:717:ILE:O	1.95	0.66
1:A:168:HIS:HA	1:A:171:MET:HE2	1.77	0.66
1:A:724:ALA:HB1	1:A:1106:ILE:HG21	1.76	0.66
1:A:589:PHE:CE1	1:A:645:VAL:HB	2.29	0.66
1:A:442:LEU:HD12	1:A:452:THR:HG21	1.78	0.66
1:A:503:PHE:CE2	1:A:1203:TYR:HA	2.30	0.66
1:A:199:LEU:HD23	1:A:199:LEU:O	1.97	0.65
1:A:523:VAL:HA	1:A:540:CYS:SG	2.35	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:596:LEU:HD12	1:A:668:VAL:HA	1.77	0.65
1:A:1096:TYR:O	1:A:1099:VAL:HG22	1.95	0.65
1:A:530:VAL:HG21	1:A:585:PRO:HD3	1.77	0.65
1:A:399:GLN:HE21	1:A:399:GLN:N	1.86	0.65
1:A:181:ILE:HG13	1:A:253:VAL:HG23	1.77	0.65
1:A:779:GLY:C	1:A:781:ASP:H	2.00	0.65
1:A:229:LEU:HD23	1:A:229:LEU:O	1.97	0.65
1:A:1021:TYR:C	1:A:1021:TYR:HD1	2.00	0.65
1:A:199:LEU:HD23	1:A:203:MET:HG3	1.77	0.65
1:A:741:ASN:HD22	1:A:742:SER:H	1.44	0.65
1:A:369:HIS:CE1	1:A:406:LEU:HD23	2.32	0.64
1:A:544:GLU:CB	1:A:549:LEU:HG	2.24	0.64
1:A:1050:VAL:CG1	1:A:1051:TYR:N	2.59	0.64
1:A:1151:GLN:HE21	1:A:1151:GLN:N	1.95	0.64
1:A:194:GLU:HA	1:A:197:VAL:HG12	1.77	0.64
1:A:806:ARG:N	1:A:807:PRO:HD2	2.05	0.64
1:A:725:LEU:O	1:A:725:LEU:HD12	1.96	0.64
1:A:195:TYR:CZ	1:A:199:LEU:HD12	2.32	0.64
1:A:471:ALA:HA	1:A:474:LEU:HD13	1.80	0.64
1:A:229:LEU:O	1:A:242:VAL:HB	1.97	0.64
1:A:617:PHE:O	1:A:618:ARG:HG2	1.97	0.64
1:A:1050:VAL:HG22	1:A:1055:ILE:HA	1.79	0.64
1:A:221:LYS:HD3	1:A:222:LYS:HG2	1.80	0.64
1:A:1021:TYR:C	1:A:1021:TYR:CD1	2.71	0.64
1:A:606:PRO:HA	1:A:637:PRO:HD3	1.80	0.64
1:A:991:GLU:C	1:A:993:LEU:N	2.50	0.64
1:A:1035:ARG:HG3	1:A:1048:VAL:CG1	2.27	0.64
1:A:505:ILE:HD12	1:A:1200:LEU:HD23	1.80	0.64
1:A:852:ALA:CB	1:A:918:ILE:HG12	2.27	0.64
1:A:980:LEU:HD13	1:A:1072:VAL:HB	1.78	0.64
1:A:66:ILE:HG22	1:A:71:GLY:HA3	1.80	0.63
1:A:1047:GLU:OE2	1:A:1047:GLU:HA	1.97	0.63
1:A:989:TRP:O	1:A:991:GLU:N	2.31	0.63
1:A:784:ALA:O	1:A:788:GLU:HG3	1.97	0.63
1:A:836:VAL:CG2	1:A:837:PRO:HD2	2.28	0.63
1:A:968:ASP:N	1:A:1081:THR:HG22	2.13	0.63
1:A:1157:ILE:HG12	1:A:1165:ALA:HB3	1.81	0.63
1:A:732:LEU:HD12	1:A:739:PRO:HA	1.80	0.63
1:A:1129:ILE:O	1:A:1129:ILE:HG22	1.98	0.63
1:A:530:VAL:CG2	1:A:585:PRO:HD3	2.29	0.62
1:A:75:GLU:O	1:A:75:GLU:HG3	1.97	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:477:ALA:HA	1:A:480:LEU:HD22	1.80	0.62
1:A:1110:ILE:CD1	1:A:1116:LEU:HA	2.29	0.62
1:A:62:ILE:HG13	1:A:261:VAL:CG2	2.30	0.62
1:A:775:ASP:OD2	1:A:1109:ARG:HD3	2.00	0.62
1:A:1057:LEU:CD1	1:A:1065:LEU:HD22	2.29	0.62
1:A:955:ALA:O	1:A:1088:ARG:HB2	1.99	0.62
1:A:125:LYS:HZ2	1:A:125:LYS:HB3	1.65	0.62
1:A:234:PHE:HZ	1:A:236:MET:HE3	1.65	0.62
1:A:72:ILE:HG12	1:A:73:ILE:N	2.15	0.61
1:A:390:VAL:HG22	1:A:419:LEU:HD12	1.82	0.61
1:A:863:PRO:HB2	1:A:1205:TYR:CD2	2.35	0.61
1:A:836:VAL:HG23	1:A:988:GLY:C	2.21	0.61
1:A:9:VAL:CG2	1:A:430:LEU:HD21	2.31	0.61
1:A:158:ALA:HB2	1:A:253:VAL:HG12	1.82	0.61
1:A:541:THR:HG21	1:A:564:ARG:HB3	1.83	0.61
1:A:655:ASP:HA	1:A:673:VAL:HG23	1.82	0.61
1:A:745:GLU:O	1:A:747:ILE:N	2.33	0.61
1:A:904:VAL:HG23	1:A:916:ILE:HG22	1.82	0.61
1:A:878:LEU:O	1:A:881:VAL:HG13	2.01	0.61
1:A:1133:TRP:HB3	1:A:1138:HIS:HB2	1.83	0.61
1:A:1173:ASN:HD22	1:A:1175:PHE:H	1.49	0.61
1:A:865:PHE:HA	1:A:868:ALA:HB3	1.82	0.61
1:A:221:LYS:NZ	1:A:222:LYS:HE2	2.15	0.61
1:A:941:TRP:HZ3	1:A:1032:SER:N	1.98	0.61
1:A:181:ILE:HD13	1:A:182:LYS:HD2	1.82	0.61
1:A:365:ASP:O	1:A:367:PRO:HD3	2.00	0.61
1:A:515:ARG:HB2	1:A:558:ASN:ND2	2.16	0.61
1:A:1234:ALA:HB3	1:A:1236:ASP:OD2	2.01	0.61
1:A:92:PHE:CZ	1:A:132:ILE:HD11	2.36	0.60
1:A:120:VAL:HA	1:A:123:VAL:HG12	1.82	0.60
1:A:529:ILE:HD12	1:A:571:ILE:HG12	1.83	0.60
1:A:746:CYS:HB3	1:A:770:MET:HB3	1.83	0.60
1:A:284:HIS:CE1	1:A:318:THR:HG22	2.35	0.60
1:A:1019:ASN:O	1:A:1021:TYR:N	2.34	0.60
1:A:1176:ALA:HB2	1:A:1185:VAL:HG23	1.83	0.60
1:A:836:VAL:HG23	1:A:988:GLY:O	2.02	0.60
1:A:1093:LYS:HB3	1:A:1095:TYR:CE2	2.36	0.60
1:A:167:LYS:O	1:A:171:MET:HG3	2.01	0.60
1:A:407:GLY:O	1:A:412:VAL:HG12	2.01	0.60
1:A:1118:LEU:O	1:A:1121:ASN:N	2.33	0.60
1:A:1173:ASN:ND2	1:A:1175:PHE:H	1.99	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:769:ILE:HG23	1:A:770:MET:N	2.16	0.60
1:A:899:PRO:O	1:A:999:PRO:HD2	2.00	0.60
1:A:1121:ASN:HD21	1:A:1167:VAL:N	1.92	0.60
1:A:434:VAL:O	1:A:438:VAL:HG12	2.01	0.60
1:A:532:ILE:HD12	1:A:572:GLU:HB2	1.82	0.60
1:A:1055:ILE:O	1:A:1056:ILE:HD12	2.01	0.60
1:A:1047:GLU:HB3	1:A:1058:PRO:HD3	1.84	0.59
1:A:134:ARG:HH21	1:A:134:ARG:CG	2.15	0.59
1:A:503:PHE:CD1	1:A:1203:TYR:HD2	2.20	0.59
1:A:782:THR:OG1	1:A:783:GLU:N	2.35	0.59
1:A:898:SER:OG	1:A:899:PRO:HD2	2.02	0.59
1:A:836:VAL:HG22	1:A:837:PRO:HD2	1.83	0.59
1:A:1121:ASN:O	1:A:1124:TYR:HB3	2.02	0.59
1:A:1112:SER:O	1:A:1115:ASP:HB2	2.03	0.59
1:A:63:LYS:O	1:A:73:ILE:HA	2.02	0.59
1:A:86:ASP:HA	1:A:402:GLU:CD	2.23	0.59
1:A:425:VAL:HG12	1:A:427:ASP:O	2.03	0.59
1:A:159:LYS:H	1:A:254:THR:HG22	1.67	0.59
1:A:199:LEU:O	1:A:203:MET:HB2	2.03	0.59
1:A:627:GLU:CG	1:A:644:VAL:HB	2.32	0.58
1:A:805:TYR:O	1:A:806:ARG:HB3	2.02	0.58
1:A:20:MET:HE3	1:A:20:MET:HA	1.84	0.58
1:A:38:ILE:HD12	1:A:39:GLU:N	2.18	0.58
1:A:642:LYS:HZ2	1:A:642:LYS:HB3	1.66	0.58
1:A:863:PRO:HB2	1:A:1205:TYR:CE2	2.38	0.58
1:A:272:PHE:CE1	1:A:310:THR:HG22	2.33	0.58
1:A:75:GLU:HG2	1:A:134:ARG:NH2	2.19	0.58
1:A:1263:SER:O	1:A:1264:ARG:CB	2.52	0.58
1:A:945:LEU:HD23	1:A:1051:TYR:CD1	2.39	0.57
1:A:861:GLY:O	1:A:866:LYS:NZ	2.28	0.57
1:A:1019:ASN:HB3	1:A:1022:THR:HB	1.85	0.57
1:A:400:THR:HG22	1:A:441:LEU:HD13	1.84	0.57
1:A:783:GLU:OE1	1:A:905:THR:HG21	2.04	0.57
1:A:250:ASN:H	1:A:250:ASN:ND2	2.02	0.57
1:A:801:ASN:OD1	1:A:977:SER:HB2	2.04	0.57
1:A:938:LEU:HD11	1:A:1028:LEU:HB2	1.87	0.57
1:A:954:ARG:HH11	1:A:1049:THR:CG2	2.18	0.57
1:A:1157:ILE:HG22	1:A:1185:VAL:HG11	1.87	0.57
1:A:408:ARG:O	1:A:408:ARG:HD3	2.04	0.57
1:A:592:GLU:HG2	1:A:642:LYS:HG2	1.85	0.57
1:A:734:ALA:O	1:A:1136:ARG:HG2	2.05	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:829:ILE:CD1	1:A:984:LEU:HB3	2.35	0.57
1:A:954:ARG:HH11	1:A:1049:THR:HG22	1.70	0.57
1:A:1150:LYS:O	1:A:1152:LEU:N	2.37	0.57
1:A:221:LYS:HZ3	1:A:222:LYS:HE2	1.70	0.57
1:A:55:ASN:HB2	1:A:79:GLN:HE22	1.70	0.57
1:A:945:LEU:HD21	1:A:1051:TYR:HA	1.87	0.57
1:A:930:ILE:HA	1:A:933:ILE:CG2	2.35	0.56
1:A:74:LEU:HB3	1:A:135:VAL:HG23	1.87	0.56
1:A:722:ASN:HB3	1:A:725:LEU:HB3	1.87	0.56
1:A:924:MET:HG2	1:A:927:GLN:OE1	2.05	0.56
1:A:304:HIS:ND1	1:A:397:MET:HG3	2.21	0.56
1:A:662:ARG:HD2	1:A:667:THR:HG23	1.88	0.56
1:A:72:ILE:HG13	1:A:137:ALA:HB2	1.87	0.56
1:A:227:VAL:HG22	1:A:227:VAL:O	2.05	0.56
1:A:1030:PHE:CE2	1:A:1074:PHE:CE1	2.93	0.56
1:A:641:ILE:HD13	1:A:642:LYS:N	2.20	0.56
1:A:1143:LYS:HE2	1:A:1144:TYR:CE1	2.41	0.56
1:A:404:ILE:CD1	1:A:441:LEU:HB3	2.36	0.56
1:A:596:LEU:HB2	1:A:602:GLY:HA3	1.87	0.56
1:A:12:LEU:HD21	1:A:23:CYS:O	2.05	0.56
1:A:60:GLY:O	1:A:261:VAL:HG11	2.05	0.56
1:A:65:LYS:HG3	1:A:97:LEU:HD11	1.87	0.56
1:A:250:ASN:ND2	1:A:250:ASN:N	2.53	0.56
1:A:399:GLN:H	1:A:399:GLN:NE2	1.90	0.56
1:A:593:VAL:HG22	1:A:641:ILE:HG22	1.87	0.56
1:A:870:PRO:O	1:A:895:SER:HB3	2.04	0.56
1:A:806:ARG:H	1:A:807:PRO:CD	2.11	0.56
1:A:169:ILE:HD11	1:A:229:LEU:HD21	1.89	0.55
1:A:1037:VAL:HG21	1:A:1065:LEU:HD12	1.88	0.55
1:A:194:GLU:OE2	1:A:198:GLN:HG3	2.05	0.55
1:A:1021:TYR:HD1	1:A:1022:THR:N	2.04	0.55
1:A:301:THR:HA	1:A:387:ILE:HG23	1.89	0.55
1:A:307:HIS:HD2	1:A:391:ALA:H	1.54	0.55
1:A:839:VAL:HG12	1:A:843:LEU:HD23	1.87	0.55
1:A:945:LEU:CD2	1:A:1051:TYR:HA	2.37	0.55
1:A:300:GLY:HA3	1:A:383:MET:SD	2.47	0.55
1:A:1093:LYS:HB3	1:A:1095:TYR:HE2	1.70	0.55
1:A:648:ILE:HG13	1:A:649:HIS:CD2	2.42	0.55
1:A:991:GLU:O	1:A:994:MET:N	2.39	0.55
1:A:774:ASP:OD2	1:A:1108:HIS:ND1	2.31	0.55
1:A:829:ILE:HD13	1:A:984:LEU:HB3	1.88	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:916:ILE:HG12	1:A:917:ALA:H	1.72	0.55
1:A:1150:LYS:HD2	1:A:1150:LYS:N	2.21	0.55
1:A:290:PHE:N	1:A:292:ARG:CZ	2.70	0.55
1:A:945:LEU:O	1:A:1051:TYR:CE1	2.59	0.55
1:A:523:VAL:HG22	1:A:551:ASP:O	2.06	0.55
1:A:1022:THR:O	1:A:1026:GLU:HG2	2.06	0.55
1:A:1158:PRO:O	1:A:1167:VAL:HG13	2.06	0.55
1:A:208:PRO:O	1:A:209:LYS:C	2.45	0.55
1:A:232:GLN:O	1:A:242:VAL:HG23	2.07	0.55
1:A:1182:ILE:HD11	1:A:1260:ALA:HB1	1.90	0.55
1:A:374:LYS:HE3	1:A:594:TYR:CE2	2.41	0.54
1:A:864:SER:HB2	1:A:1202:SER:CA	2.37	0.54
1:A:166:VAL:HA	1:A:169:ILE:HG22	1.89	0.54
1:A:746:CYS:HB3	1:A:770:MET:CB	2.36	0.54
1:A:808:ASP:O	1:A:808:ASP:OD2	2.24	0.54
1:A:117:GLU:O	1:A:120:VAL:HG22	2.07	0.54
1:A:82:PHE:HE1	1:A:406:LEU:HB2	1.72	0.54
1:A:523:VAL:HG13	1:A:551:ASP:O	2.07	0.54
1:A:234:PHE:CE1	1:A:236:MET:HB2	2.42	0.54
1:A:103:GLY:O	1:A:105:ILE:HG13	2.08	0.54
1:A:387:ILE:HG23	1:A:387:ILE:O	2.08	0.54
1:A:467:ALA:HA	1:A:470:GLU:HB2	1.89	0.54
1:A:731:LEU:HA	1:A:1140:VAL:HG21	1.90	0.54
1:A:982:GLU:HB3	1:A:990:PHE:CD1	2.43	0.54
1:A:365:ASP:C	1:A:367:PRO:HD3	2.28	0.54
1:A:1151:GLN:HB3	1:A:1175:PHE:CZ	2.43	0.54
1:A:629:PRO:HG2	1:A:632:VAL:HG12	1.89	0.53
1:A:1096:TYR:HB2	1:A:1101:VAL:HG11	1.89	0.53
1:A:300:GLY:O	1:A:387:ILE:HG22	2.07	0.53
1:A:700:SER:N	1:A:1179:ARG:HG3	2.23	0.53
1:A:801:ASN:HA	1:A:979:ALA:CB	2.34	0.53
1:A:1034:ALA:HB3	1:A:1048:VAL:HG21	1.89	0.53
1:A:56:VAL:HG11	1:A:267:LYS:HD3	1.91	0.53
1:A:729:ASN:HD21	1:A:740:PHE:HB2	1.72	0.53
1:A:1128:THR:HG22	1:A:1130:ASP:H	1.73	0.53
1:A:183:PRO:HD3	1:A:230:THR:CB	2.39	0.53
1:A:387:ILE:HA	1:A:416:ILE:O	2.09	0.53
1:A:1055:ILE:C	1:A:1056:ILE:HD12	2.28	0.53
1:A:75:GLU:HG2	1:A:134:ARG:HH22	1.74	0.53
1:A:198:GLN:CA	1:A:201:ILE:HG12	2.26	0.53
1:A:1208:PHE:O	1:A:1211:CYS:HB3	2.09	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:384:ASP:O	1:A:413:PRO:HG2	2.09	0.53
1:A:494:PRO:O	1:A:495:PHE:O	2.27	0.53
1:A:731:LEU:HD21	1:A:1123:LEU:HD11	1.90	0.53
1:A:1085:GLY:C	1:A:1087:PHE:H	2.11	0.53
1:A:1040:ILE:HG22	1:A:1040:ILE:O	2.09	0.53
1:A:1183:ARG:HG2	1:A:1183:ARG:O	2.09	0.53
1:A:155:LEU:O	1:A:257:ILE:N	2.40	0.53
1:A:804:LEU:HB2	1:A:979:ALA:HB1	1.91	0.53
1:A:848:PHE:O	1:A:849:SER:CB	2.56	0.53
1:A:922:TRP:O	1:A:926:PHE:HD2	1.92	0.53
1:A:229:LEU:CD2	1:A:242:VAL:HG11	2.39	0.52
1:A:732:LEU:CD1	1:A:739:PRO:HA	2.38	0.52
1:A:762:ILE:CG2	1:A:763:ASN:N	2.73	0.52
1:A:900:PHE:CE2	1:A:1008:VAL:HG12	2.40	0.52
1:A:938:LEU:HD21	1:A:1028:LEU:N	2.23	0.52
1:A:1017:MET:HA	1:A:1022:THR:HG21	1.91	0.52
1:A:152:ILE:HB	1:A:260:GLU:HG3	1.90	0.52
1:A:401:ARG:HB2	1:A:445:TYR:OH	2.10	0.52
1:A:245:LEU:O	1:A:245:LEU:HD22	2.09	0.52
1:A:250:ASN:N	1:A:250:ASN:HD22	2.06	0.52
1:A:973:SER:HA	1:A:976:ILE:HD11	1.91	0.52
1:A:105:ILE:CG2	1:A:110:VAL:HB	2.39	0.52
1:A:634:MET:HG2	1:A:635:VAL:N	2.24	0.52
1:A:63:LYS:HB3	1:A:97:LEU:HG	1.90	0.52
1:A:833:ILE:CG2	1:A:989:TRP:CE2	2.93	0.52
1:A:965:ALA:CB	1:A:1083:SER:HA	2.39	0.52
1:A:160:GLY:O	1:A:251:ALA:HB2	2.09	0.52
1:A:820:SER:O	1:A:824:MET:HE2	2.10	0.52
1:A:115:PHE:O	1:A:117:GLU:N	2.43	0.51
1:A:133:ARG:HD3	1:A:134:ARG:HG2	1.92	0.51
1:A:864:SER:O	1:A:868:ALA:HB2	2.10	0.51
1:A:533:LYS:O	1:A:534:GLU:C	2.48	0.51
1:A:905:THR:CG2	1:A:905:THR:O	2.58	0.51
1:A:968:ASP:H	1:A:1081:THR:CG2	2.19	0.51
1:A:1032:SER:OG	1:A:1033:LEU:N	2.43	0.51
1:A:1041:LEU:HB2	1:A:1043:LEU:CD1	2.40	0.51
1:A:9:VAL:HG21	1:A:430:LEU:HD21	1.92	0.51
1:A:48:LYS:HE2	1:A:124:ALA:HA	1.93	0.51
1:A:83:VAL:HG21	1:A:128:GLU:CD	2.30	0.51
1:A:495:PHE:HA	1:A:518:ARG:O	2.10	0.51
1:A:875:PRO:HG2	1:A:876:ARG:H	1.75	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:97:LEU:O	1:A:101:VAL:HG23	2.10	0.51
1:A:174:ALA:O	1:A:258:ARG:NH1	2.44	0.51
1:A:374:LYS:HE3	1:A:594:TYR:CZ	2.46	0.51
1:A:662:ARG:HD2	1:A:667:THR:CG2	2.40	0.51
1:A:874:THR:HB	1:A:923:ASN:HD21	1.75	0.51
1:A:1078:THR:HG23	1:A:1079:LYS:HE3	1.91	0.51
1:A:1157:ILE:CD1	1:A:1165:ALA:HB3	2.41	0.51
1:A:1189:THR:HG22	1:A:1190:ASP:N	2.26	0.51
1:A:111:LEU:HA	1:A:114:GLN:HB3	1.92	0.51
1:A:1110:ILE:CD1	1:A:1116:LEU:HD23	2.40	0.51
1:A:1128:THR:HG21	1:A:1131:GLY:H	1.75	0.51
1:A:1196:GLU:O	1:A:1196:GLU:HG3	2.11	0.51
1:A:927:GLN:O	1:A:1021:TYR:HB3	2.11	0.51
1:A:558:ASN:HB2	1:A:1214:GLU:OE1	2.11	0.51
1:A:154:VAL:HG21	1:A:170:ALA:O	2.11	0.51
1:A:1048:VAL:HG13	1:A:1048:VAL:O	2.10	0.51
1:A:161:ALA:HB2	1:A:251:ALA:CB	2.42	0.50
1:A:1143:LYS:HG2	1:A:1144:TYR:CD1	2.46	0.50
1:A:760:PHE:O	1:A:763:ASN:N	2.45	0.50
1:A:1247:ILE:HG22	1:A:1248:SER:N	2.26	0.50
1:A:183:PRO:HD3	1:A:230:THR:HB	1.93	0.50
1:A:735:TYR:CD1	1:A:1136:ARG:HD2	2.46	0.50
1:A:877:ALA:O	1:A:878:LEU:C	2.50	0.50
1:A:1030:PHE:HB3	1:A:1055:ILE:HD11	1.94	0.50
1:A:1182:ILE:HG13	1:A:1184:TYR:CE2	2.46	0.50
1:A:502:VAL:HG11	1:A:571:ILE:HB	1.94	0.50
1:A:611:TYR:HB3	1:A:626:ILE:CG1	2.40	0.50
1:A:67:ASP:O	1:A:69:ASN:N	2.44	0.50
1:A:149:GLY:O	1:A:150:ALA:HB2	2.11	0.50
1:A:312:LEU:HA	1:A:459:ALA:HB1	1.92	0.50
1:A:447:PHE:O	1:A:449:GLY:N	2.45	0.50
1:A:837:PRO:HD3	1:A:989:TRP:CD2	2.47	0.50
1:A:1050:VAL:HG13	1:A:1051:TYR:H	1.76	0.50
1:A:30:ALA:C	1:A:32:GLY:H	2.15	0.50
1:A:202:ALA:HB1	1:A:207:LYS:CD	2.28	0.50
1:A:272:PHE:CZ	1:A:313:THR:HG21	2.46	0.50
1:A:740:PHE:CE2	1:A:746:CYS:HA	2.47	0.50
1:A:806:ARG:NH1	1:A:806:ARG:HG2	2.25	0.50
1:A:990:PHE:CD2	1:A:990:PHE:O	2.64	0.50
1:A:1048:VAL:CG1	1:A:1048:VAL:O	2.60	0.50
1:A:161:ALA:HB2	1:A:251:ALA:HB2	1.94	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:588:LYS:HB2	1:A:679:GLY:HA2	1.94	0.50
1:A:960:VAL:HG22	1:A:961:THR:N	2.26	0.50
1:A:1173:ASN:HD22	1:A:1175:PHE:N	2.09	0.50
1:A:743:GLU:CB	1:A:778:LEU:HD22	2.36	0.50
1:A:187:SER:O	1:A:190:VAL:HG12	2.12	0.49
1:A:727:ILE:HG12	1:A:1144:TYR:CD2	2.47	0.49
1:A:806:ARG:N	1:A:807:PRO:CD	2.73	0.49
1:A:1122:ASN:ND2	1:A:1125:ARG:HH21	2.09	0.49
1:A:613:PRO:HG2	1:A:615:PHE:CE2	2.47	0.49
1:A:845:HIS:CE1	1:A:932:GLY:O	2.65	0.49
1:A:968:ASP:O	1:A:969:LEU:HD23	2.11	0.49
1:A:195:TYR:O	1:A:199:LEU:HB2	2.12	0.49
1:A:1015:SER:OG	1:A:1022:THR:HB	2.12	0.49
1:A:804:LEU:CB	1:A:979:ALA:HB1	2.43	0.49
1:A:460:LEU:HD13	1:A:463:LEU:HD12	1.94	0.49
1:A:105:ILE:HG21	1:A:111:LEU:HD22	1.93	0.49
1:A:166:VAL:HA	1:A:169:ILE:HG23	1.94	0.49
1:A:400:THR:HA	1:A:403:HIS:CD2	2.48	0.49
1:A:503:PHE:CD1	1:A:503:PHE:N	2.80	0.49
1:A:793:ALA:O	1:A:797:CYS:HB2	2.12	0.49
1:A:952:GLN:HB3	1:A:1093:LYS:HB2	1.95	0.49
1:A:1014:ILE:O	1:A:1015:SER:HB2	2.11	0.49
1:A:1121:ASN:OD1	1:A:1167:VAL:HG23	2.13	0.49
1:A:1249:ARG:NH1	1:A:1251:THR:HG22	2.28	0.49
1:A:614:GLN:HE22	1:A:664:GLY:H	1.61	0.49
1:A:809:TYR:CZ	1:A:814:ASN:O	2.66	0.49
1:A:888:THR:HG21	1:A:892:ILE:HD11	1.95	0.49
1:A:9:VAL:HG12	1:A:27:LEU:CD2	2.43	0.49
1:A:49:ALA:CB	1:A:123:VAL:HG11	2.35	0.49
1:A:187:SER:HB3	1:A:190:VAL:HB	1.94	0.49
1:A:1121:ASN:CG	1:A:1167:VAL:HG23	2.33	0.49
1:A:406:LEU:O	1:A:410:VAL:HG12	2.13	0.49
1:A:809:TYR:C	1:A:811:GLU:H	2.16	0.49
1:A:37:ALA:O	1:A:41:MET:HG3	2.12	0.49
1:A:76:VAL:HG22	1:A:89:PHE:CZ	2.48	0.49
1:A:181:ILE:HG12	1:A:181:ILE:O	2.13	0.49
1:A:982:GLU:HB3	1:A:990:PHE:CE1	2.48	0.49
1:A:140:GLY:HA3	1:A:157:ALA:HB1	1.94	0.48
1:A:187:SER:HB3	1:A:190:VAL:CG1	2.43	0.48
1:A:749:PHE:CD1	1:A:766:LYS:HG2	2.46	0.48
1:A:848:PHE:HD2	1:A:867:PHE:CE1	2.31	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:848:PHE:HD2	1:A:867:PHE:CZ	2.30	0.48
1:A:13:ARG:NH1	1:A:394:ASP:O	2.45	0.48
1:A:617:PHE:O	1:A:619:THR:N	2.44	0.48
1:A:768:GLU:O	1:A:770:MET:N	2.46	0.48
1:A:822:ILE:HD12	1:A:983:LEU:HB3	1.95	0.48
1:A:1118:LEU:O	1:A:1119:VAL:C	2.51	0.48
1:A:1157:ILE:O	1:A:1158:PRO:O	2.32	0.48
1:A:558:ASN:HB3	1:A:1210:ARG:CG	2.43	0.48
1:A:1088:ARG:HA	1:A:1088:ARG:HD3	1.72	0.48
1:A:1118:LEU:HD11	1:A:1122:ASN:OD1	2.13	0.48
1:A:234:PHE:CZ	1:A:236:MET:HE3	2.47	0.48
1:A:869:LEU:H	1:A:869:LEU:HD22	1.79	0.48
1:A:957:GLU:O	1:A:961:THR:HB	2.13	0.48
1:A:1021:TYR:CD1	1:A:1022:THR:N	2.81	0.48
1:A:1243:ASN:HB2	1:A:1244:PRO:HD2	1.96	0.48
1:A:521:ILE:HG23	1:A:521:ILE:O	2.14	0.48
1:A:583:ILE:HD11	1:A:653:MET:N	2.28	0.48
1:A:1021:TYR:C	1:A:1023:PHE:H	2.17	0.48
1:A:310:THR:HA	1:A:313:THR:HG22	1.95	0.48
1:A:461:LYS:O	1:A:466:ASP:HB3	2.14	0.48
1:A:522:LYS:O	1:A:525:GLU:HG3	2.13	0.48
1:A:13:ARG:NH1	1:A:395:GLY:HA3	2.29	0.48
1:A:372:TYR:O	1:A:373:VAL:C	2.52	0.48
1:A:324:TYR:CE2	1:A:357:PRO:HG3	2.49	0.48
1:A:593:VAL:HB	1:A:670:ALA:O	2.13	0.48
1:A:897:ILE:O	1:A:897:ILE:CG2	2.56	0.48
1:A:558:ASN:HB3	1:A:1210:ARG:HB3	1.95	0.47
1:A:906:VAL:HG13	1:A:914:ARG:HB3	1.96	0.47
1:A:80:THR:HG22	1:A:83:VAL:H	1.78	0.47
1:A:442:LEU:CD1	1:A:452:THR:HG21	2.45	0.47
1:A:558:ASN:HB3	1:A:1210:ARG:HG3	1.95	0.47
1:A:764:TYR:OH	1:A:1094:HIS:CD2	2.66	0.47
1:A:731:LEU:HD21	1:A:1123:LEU:CD1	2.44	0.47
1:A:778:LEU:H	1:A:778:LEU:HD12	1.79	0.47
1:A:1057:LEU:HD23	1:A:1057:LEU:O	2.14	0.47
1:A:133:ARG:CG	1:A:134:ARG:H	2.07	0.47
1:A:625:THR:O	1:A:646:THR:HG23	2.14	0.47
1:A:1050:VAL:HG13	1:A:1051:TYR:N	2.27	0.47
1:A:20:MET:HA	1:A:20:MET:CE	2.44	0.47
1:A:295:PRO:HG2	1:A:359:ARG:HB3	1.96	0.47
1:A:818:GLY:HA3	1:A:1071:TYR:CD1	2.50	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:941:TRP:CE3	1:A:1035:ARG:HD2	2.49	0.47
1:A:198:GLN:HA	1:A:201:ILE:CG1	2.28	0.47
1:A:356:THR:HG21	1:A:481:ASP:CG	2.35	0.47
1:A:404:ILE:HD11	1:A:441:LEU:HB3	1.97	0.47
1:A:582:THR:HG22	1:A:583:ILE:HG22	1.96	0.47
1:A:749:PHE:HD1	1:A:767:ALA:CA	2.23	0.47
1:A:924:MET:HA	1:A:927:GLN:HB2	1.96	0.47
1:A:1118:LEU:HD13	1:A:1163:ASP:OD1	2.14	0.47
1:A:1192:THR:HG22	1:A:1250:SER:CB	2.45	0.47
1:A:1243:ASN:CB	1:A:1244:PRO:HD2	2.44	0.47
1:A:125:LYS:HB3	1:A:125:LYS:NZ	2.24	0.47
1:A:301:THR:HG23	1:A:365:ASP:OD2	2.14	0.47
1:A:880:TYR:HB3	1:A:926:PHE:CE1	2.50	0.47
1:A:961:THR:HG22	1:A:963:ASN:H	1.79	0.47
1:A:769:ILE:CG2	1:A:770:MET:N	2.78	0.47
1:A:35:GLU:O	1:A:38:ILE:HG13	2.15	0.47
1:A:92:PHE:HE1	1:A:132:ILE:HD11	1.75	0.47
1:A:923:ASN:O	1:A:927:GLN:N	2.41	0.47
1:A:1100:ASP:CG	1:A:1102:THR:HG23	2.33	0.47
1:A:204:GLN:C	1:A:206:GLY:H	2.18	0.46
1:A:610:GLY:C	1:A:1181:TRP:HD1	2.18	0.46
1:A:832:LEU:HD12	1:A:941:TRP:CE2	2.50	0.46
1:A:848:PHE:O	1:A:849:SER:HB2	2.16	0.46
1:A:837:PRO:C	1:A:838:SER:O	2.54	0.46
1:A:530:VAL:HG22	1:A:652:ALA:HB2	1.97	0.46
1:A:588:LYS:HG3	1:A:646:THR:HB	1.97	0.46
1:A:727:ILE:HG12	1:A:1144:TYR:CE2	2.50	0.46
1:A:892:ILE:HG23	1:A:922:TRP:CZ2	2.50	0.46
1:A:930:ILE:HD13	1:A:930:ILE:H	1.81	0.46
1:A:33:ASP:OD1	1:A:36:LEU:HB2	2.15	0.46
1:A:208:PRO:HG2	1:A:211:ILE:CD1	2.32	0.46
1:A:967:VAL:HA	1:A:1081:THR:HG22	1.97	0.46
1:A:194:GLU:O	1:A:194:GLU:HG3	2.15	0.46
1:A:895:SER:O	1:A:896:ASP:O	2.32	0.46
1:A:979:ALA:O	1:A:983:LEU:HG	2.16	0.46
1:A:749:PHE:CE2	1:A:766:LYS:HE2	2.51	0.46
1:A:987:PRO:HD2	1:A:988:GLY:H	1.81	0.46
1:A:1181:TRP:HA	1:A:1181:TRP:CE3	2.49	0.46
1:A:134:ARG:HG3	1:A:134:ARG:NH2	2.23	0.46
1:A:629:PRO:HD3	1:A:642:LYS:O	2.16	0.46
1:A:760:PHE:CE1	1:A:764:TYR:HB2	2.51	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:937:ARG:O	1:A:939:ARG:N	2.49	0.46
1:A:155:LEU:HD12	1:A:155:LEU:HA	1.57	0.46
1:A:500:GLU:HA	1:A:573:ARG:HG3	1.97	0.46
1:A:878:LEU:O	1:A:879:LYS:C	2.54	0.46
1:A:1118:LEU:HG	1:A:1119:VAL:N	2.30	0.46
1:A:783:GLU:HB2	1:A:913:ASP:HB2	1.96	0.46
1:A:856:ASN:ND2	1:A:865:PHE:O	2.34	0.46
1:A:863:PRO:HA	1:A:866:LYS:HG3	1.97	0.46
1:A:878:LEU:O	1:A:881:VAL:CG1	2.64	0.46
1:A:56:VAL:CG1	1:A:267:LYS:HD3	2.46	0.46
1:A:228:SER:O	1:A:230:THR:N	2.49	0.46
1:A:399:GLN:O	1:A:399:GLN:HG2	2.16	0.46
1:A:756:THR:N	1:A:759:ASP:HB2	2.31	0.46
1:A:1128:THR:CG2	1:A:1131:GLY:H	2.29	0.46
1:A:23:CYS:O	1:A:27:LEU:HB2	2.16	0.45
1:A:756:THR:HG23	1:A:759:ASP:OD1	2.16	0.45
1:A:66:ILE:HA	1:A:71:GLY:HA2	1.98	0.45
1:A:96:VAL:CG2	1:A:111:LEU:HD12	2.45	0.45
1:A:172:HIS:CD2	1:A:172:HIS:C	2.89	0.45
1:A:455:VAL:CG1	1:A:475:GLU:HG2	2.46	0.45
1:A:986:PRO:HB2	1:A:989:TRP:HD1	1.80	0.45
1:A:992:VAL:CG2	1:A:992:VAL:O	2.64	0.45
1:A:589:PHE:HB3	1:A:653:MET:HE3	1.99	0.45
1:A:836:VAL:HG22	1:A:837:PRO:CD	2.46	0.45
1:A:965:ALA:HB1	1:A:1083:SER:HA	1.99	0.45
1:A:1172:ILE:O	1:A:1174:PRO:HD3	2.16	0.45
1:A:1239:ILE:H	1:A:1239:ILE:HG12	1.63	0.45
1:A:12:LEU:HD22	1:A:27:LEU:HD13	1.97	0.45
1:A:106:THR:HG23	1:A:107:ASP:H	1.81	0.45
1:A:610:GLY:C	1:A:1181:TRP:CD1	2.89	0.45
1:A:779:GLY:C	1:A:781:ASP:N	2.68	0.45
1:A:992:VAL:O	1:A:992:VAL:HG22	2.17	0.45
1:A:1030:PHE:HE2	1:A:1074:PHE:CD1	2.34	0.45
1:A:1077:ASN:O	1:A:1081:THR:HG23	2.16	0.45
1:A:134:ARG:NH2	1:A:259:PHE:CD2	2.85	0.45
1:A:462:ALA:HB2	1:A:469:TRP:O	2.15	0.45
1:A:714:ASN:HD21	1:A:1254:PHE:H	1.64	0.45
1:A:1050:VAL:HG12	1:A:1051:TYR:N	2.30	0.45
1:A:5:THR:O	1:A:9:VAL:HG13	2.17	0.45
1:A:148:HIS:O	1:A:150:ALA:N	2.49	0.45
1:A:806:ARG:HG2	1:A:806:ARG:HH11	1.80	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1074:PHE:N	1:A:1074:PHE:CD2	2.82	0.45
1:A:82:PHE:CE1	1:A:406:LEU:HB2	2.51	0.45
1:A:276:VAL:CG2	1:A:313:THR:HG23	2.46	0.45
1:A:302:ILE:CD1	1:A:366:CYS:HB2	2.37	0.45
1:A:323:THR:HG22	1:A:324:TYR:CE1	2.52	0.45
1:A:704:SER:C	1:A:708:GLN:HB2	2.36	0.45
1:A:711:ARG:O	1:A:712:ALA:C	2.55	0.45
1:A:845:HIS:O	1:A:929:GLY:HA2	2.16	0.45
1:A:998:SER:HA	1:A:999:PRO:HD3	1.41	0.45
1:A:1040:ILE:O	1:A:1040:ILE:CG2	2.65	0.45
1:A:1149:PRO:HB2	1:A:1152:LEU:HD22	1.99	0.45
1:A:617:PHE:C	1:A:618:ARG:HG2	2.37	0.45
1:A:1041:LEU:HB2	1:A:1043:LEU:HD12	1.99	0.45
1:A:1100:ASP:OD1	1:A:1100:ASP:C	2.55	0.45
1:A:1123:LEU:HD12	1:A:1123:LEU:HA	1.79	0.45
1:A:36:LEU:HD23	1:A:40:ASN:HD21	1.81	0.45
1:A:143:LEU:HB2	1:A:157:ALA:HA	1.97	0.45
1:A:291:GLU:HG3	1:A:294:LYS:HD2	1.98	0.45
1:A:504:SER:HB2	1:A:568:ARG:HG2	1.99	0.45
1:A:629:PRO:HG2	1:A:632:VAL:CG1	2.47	0.45
1:A:818:GLY:O	1:A:819:GLU:C	2.55	0.45
1:A:937:ARG:C	1:A:939:ARG:H	2.20	0.45
1:A:1150:LYS:C	1:A:1152:LEU:N	2.70	0.45
1:A:24:LYS:O	1:A:24:LYS:HG3	2.17	0.45
1:A:100:ALA:O	1:A:104:LYS:HA	2.17	0.45
1:A:354:TYR:CE2	1:A:361:TYR:HB2	2.52	0.45
1:A:700:SER:N	1:A:1179:ARG:CG	2.80	0.45
1:A:934:LEU:CB	1:A:1024:GLU:HB3	2.47	0.45
1:A:49:ALA:HA	1:A:123:VAL:HG21	1.98	0.44
1:A:152:ILE:HG13	1:A:260:GLU:HG3	1.98	0.44
1:A:539:THR:HG23	1:A:564:ARG:HG2	1.99	0.44
1:A:969:LEU:HD23	1:A:969:LEU:HA	1.55	0.44
1:A:973:SER:HA	1:A:976:ILE:CD1	2.47	0.44
1:A:1180:GLY:O	1:A:1181:TRP:CB	2.61	0.44
1:A:171:MET:CE	1:A:236:MET:HE1	2.47	0.44
1:A:310:THR:O	1:A:313:THR:HG22	2.17	0.44
1:A:777:SER:O	1:A:778:LEU:C	2.55	0.44
1:A:844:ARG:O	1:A:1212:LEU:HD13	2.17	0.44
1:A:846:CYS:SG	1:A:929:GLY:HA3	2.57	0.44
1:A:876:ARG:HE	1:A:876:ARG:HB3	1.43	0.44
1:A:989:TRP:C	1:A:991:GLU:N	2.71	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:169:ILE:HD13	1:A:229:LEU:HD21	1.99	0.44
1:A:508:ARG:HD3	1:A:562:LEU:CD2	2.41	0.44
1:A:629:PRO:HD2	1:A:632:VAL:HG11	2.00	0.44
1:A:737:GLN:O	1:A:738:SER:C	2.55	0.44
1:A:851:GLY:HA2	1:A:861:GLY:HA3	1.99	0.44
1:A:857:ASN:O	1:A:858:ARG:C	2.56	0.44
1:A:1064:ALA:C	1:A:1066:ARG:N	2.70	0.44
1:A:377:ILE:HG23	1:A:671:GLY:HA2	2.00	0.44
1:A:523:VAL:CG1	1:A:542:GLY:HA2	2.47	0.44
1:A:833:ILE:CG2	1:A:989:TRP:NE1	2.81	0.44
1:A:941:TRP:CZ3	1:A:1032:SER:CA	3.01	0.44
1:A:1172:ILE:HD13	1:A:1172:ILE:HA	1.68	0.44
1:A:301:THR:HG22	1:A:363:HIS:NE2	2.32	0.44
1:A:617:PHE:C	1:A:619:THR:H	2.21	0.44
1:A:1057:LEU:HD23	1:A:1057:LEU:H	1.83	0.44
1:A:49:ALA:O	1:A:52:LYS:HB2	2.18	0.44
1:A:105:ILE:HG21	1:A:110:VAL:HB	1.99	0.44
1:A:158:ALA:CB	1:A:253:VAL:HG12	2.46	0.44
1:A:715:THR:HG21	1:A:1149:PRO:HG3	1.99	0.44
1:A:790:PHE:CD1	1:A:790:PHE:C	2.91	0.44
1:A:923:ASN:O	1:A:927:GLN:HG3	2.17	0.44
1:A:930:ILE:HD11	1:A:1021:TYR:HB3	1.98	0.44
1:A:1013:LYS:HE3	1:A:1016:SER:HB3	1.98	0.44
1:A:493:LYS:HB3	1:A:494:PRO:HD2	2.00	0.44
1:A:765:LEU:HD22	1:A:1126:TRP:CE2	2.52	0.44
1:A:777:SER:O	1:A:779:GLY:N	2.51	0.44
1:A:1173:ASN:ND2	1:A:1176:ALA:H	2.16	0.44
1:A:406:LEU:O	1:A:406:LEU:HD22	2.16	0.44
1:A:516:VAL:HG22	1:A:555:ALA:HA	2.00	0.44
1:A:874:THR:CG2	1:A:877:ALA:H	2.25	0.44
1:A:928:LEU:HD23	1:A:1020:GLY:O	2.17	0.44
1:A:1004:PRO:O	1:A:1006:GLY:N	2.51	0.44
1:A:571:ILE:HA	1:A:575:GLN:OE1	2.18	0.44
1:A:765:LEU:O	1:A:769:ILE:HB	2.18	0.44
1:A:884:LEU:O	1:A:887:SER:OG	2.28	0.44
1:A:206:GLY:HA3	1:A:756:THR:OG1	2.18	0.43
1:A:523:VAL:HG23	1:A:523:VAL:O	2.18	0.43
1:A:941:TRP:HZ3	1:A:1032:SER:CA	2.30	0.43
1:A:954:ARG:NH1	1:A:1049:THR:HB	2.33	0.43
1:A:142:VAL:HG21	1:A:161:ALA:O	2.17	0.43
1:A:291:GLU:HG3	1:A:291:GLU:O	2.17	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:616:TYR:HB3	1:A:660:ALA:HB3	2.00	0.43
1:A:833:ILE:HG23	1:A:989:TRP:CE2	2.53	0.43
1:A:837:PRO:O	1:A:838:SER:O	2.36	0.43
1:A:1184:TYR:CD1	1:A:1259:ILE:O	2.71	0.43
1:A:1187:VAL:HG21	1:A:1259:ILE:HD13	2.00	0.43
1:A:1245:THR:O	1:A:1246:LYS:HD3	2.18	0.43
1:A:72:ILE:CG2	1:A:101:VAL:HG22	2.48	0.43
1:A:566:ILE:O	1:A:566:ILE:HG23	2.18	0.43
1:A:720:GLU:H	1:A:720:GLU:HG2	1.61	0.43
1:A:735:TYR:HA	1:A:1136:ARG:HD2	2.01	0.43
1:A:817:LEU:HD21	1:A:1064:ALA:HB1	2.01	0.43
1:A:824:MET:O	1:A:828:LYS:HG2	2.18	0.43
1:A:1179:ARG:O	1:A:1181:TRP:N	2.51	0.43
1:A:436:MET:CE	1:A:436:MET:HA	2.48	0.43
1:A:805:TYR:O	1:A:806:ARG:CB	2.64	0.43
1:A:874:THR:HA	1:A:898:SER:O	2.19	0.43
1:A:1157:ILE:CG1	1:A:1165:ALA:HB3	2.46	0.43
1:A:16:THR:O	1:A:125:LYS:HD2	2.19	0.43
1:A:372:TYR:O	1:A:375:ASN:N	2.51	0.43
1:A:871:GLN:O	1:A:922:TRP:HD1	2.02	0.43
1:A:1150:LYS:C	1:A:1152:LEU:H	2.22	0.43
1:A:365:ASP:OD1	1:A:367:PRO:HG3	2.19	0.43
1:A:376:MET:HG3	1:A:410:VAL:HG23	2.01	0.43
1:A:441:LEU:O	1:A:445:TYR:HD1	2.01	0.43
1:A:791:LEU:HD12	1:A:791:LEU:HA	1.67	0.43
1:A:244:GLN:O	1:A:248:GLU:HG2	2.18	0.43
1:A:927:GLN:O	1:A:930:ILE:HD13	2.18	0.43
1:A:1021:TYR:O	1:A:1023:PHE:N	2.52	0.43
1:A:1037:VAL:HG21	1:A:1065:LEU:CD1	2.49	0.43
1:A:1178:ASN:HD22	1:A:1183:ARG:HB2	1.81	0.43
1:A:1183:ARG:O	1:A:1183:ARG:CG	2.66	0.43
1:A:17:GLY:HA3	1:A:125:LYS:HG2	1.99	0.43
1:A:502:VAL:HG11	1:A:571:ILE:HD12	2.01	0.43
1:A:864:SER:CB	1:A:1202:SER:HA	2.47	0.43
1:A:924:MET:O	1:A:928:LEU:HG	2.19	0.43
1:A:963:ASN:O	1:A:1059:SER:N	2.42	0.43
1:A:973:SER:O	1:A:976:ILE:HD12	2.18	0.43
1:A:1110:ILE:HD11	1:A:1116:LEU:HD23	2.00	0.43
1:A:369:HIS:CD2	1:A:406:LEU:HB2	2.54	0.43
1:A:603:ARG:O	1:A:637:PRO:HB3	2.18	0.43
1:A:822:ILE:CD1	1:A:983:LEU:HB3	2.49	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:890:PHE:CD1	1:A:1204:LEU:HD21	2.54	0.43
1:A:1000:LYS:HA	1:A:1010:THR:HA	1.99	0.43
1:A:1159:ASP:OD1	1:A:1160:GLY:N	2.51	0.43
1:A:1172:ILE:O	1:A:1172:ILE:CG2	2.66	0.43
1:A:61:VAL:HG11	1:A:90:GLN:NE2	2.34	0.43
1:A:195:TYR:O	1:A:195:TYR:CG	2.71	0.43
1:A:204:GLN:C	1:A:206:GLY:N	2.73	0.43
1:A:224:THR:HG23	1:A:225:GLY:H	1.83	0.43
1:A:260:GLU:O	1:A:263:GLU:HG3	2.19	0.43
1:A:471:ALA:HA	1:A:474:LEU:CD1	2.47	0.43
1:A:543:VAL:O	1:A:549:LEU:HD23	2.19	0.43
1:A:871:GLN:O	1:A:872:ALA:O	2.36	0.43
1:A:892:ILE:HG23	1:A:922:TRP:CH2	2.54	0.43
1:A:724:ALA:CB	1:A:1106:ILE:HG21	2.46	0.42
1:A:195:TYR:OH	1:A:213:GLU:HG3	2.18	0.42
1:A:297:VAL:HG22	1:A:487:PRO:CD	2.49	0.42
1:A:414:TYR:CE1	1:A:485:PRO:HG2	2.54	0.42
1:A:496:LEU:HD23	1:A:497:LEU:N	2.34	0.42
1:A:520:ILE:HG13	1:A:553:GLY:O	2.19	0.42
1:A:839:VAL:HG12	1:A:843:LEU:CD2	2.50	0.42
1:A:980:LEU:HD22	1:A:1072:VAL:HG23	2.00	0.42
1:A:1065:LEU:HD12	1:A:1065:LEU:HA	1.89	0.42
1:A:1110:ILE:HD13	1:A:1116:LEU:HD23	2.01	0.42
1:A:33:ASP:HB3	1:A:36:LEU:CB	2.48	0.42
1:A:55:ASN:ND2	1:A:55:ASN:N	2.66	0.42
1:A:234:PHE:CZ	1:A:236:MET:HB2	2.55	0.42
1:A:961:THR:O	1:A:962:ASN:CB	2.66	0.42
1:A:1004:PRO:C	1:A:1006:GLY:H	2.22	0.42
1:A:1185:VAL:HG22	1:A:1186:PRO:HD2	2.02	0.42
1:A:154:VAL:HG12	1:A:258:ARG:HB3	2.01	0.42
1:A:396:PRO:HG3	1:A:437:GLU:HB3	2.01	0.42
1:A:405:LEU:O	1:A:408:ARG:N	2.52	0.42
1:A:409:GLN:C	1:A:411:GLY:H	2.22	0.42
1:A:486:GLU:HA	1:A:487:PRO:HD2	1.87	0.42
1:A:495:PHE:CE1	1:A:577:LEU:O	2.72	0.42
1:A:501:ASP:CG	1:A:1244:PRO:HB3	2.39	0.42
1:A:608:PHE:O	1:A:628:LEU:HD21	2.19	0.42
1:A:1191:HIS:HD2	1:A:1255:ASP:OD2	2.02	0.42
1:A:64:THR:HA	1:A:72:ILE:O	2.20	0.42
1:A:73:ILE:HB	1:A:155:LEU:HD22	2.02	0.42
1:A:76:VAL:HG11	1:A:93:ALA:HB1	2.00	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:378:THR:HG23	1:A:380:ALA:H	1.84	0.42
1:A:596:LEU:HD12	1:A:668:VAL:CA	2.48	0.42
1:A:1025:LEU:HG	1:A:1029:ILE:HD12	2.02	0.42
1:A:165:LEU:HA	1:A:165:LEU:HD22	1.71	0.42
1:A:474:LEU:H	1:A:474:LEU:HD12	1.84	0.42
1:A:704:SER:HA	1:A:707:ALA:HB3	2.01	0.42
1:A:938:LEU:CD1	1:A:1028:LEU:HB2	2.49	0.42
1:A:33:ASP:HB3	1:A:36:LEU:HB2	2.02	0.42
1:A:851:GLY:HA2	1:A:861:GLY:CA	2.49	0.42
1:A:965:ALA:HB2	1:A:1083:SER:HA	2.02	0.42
1:A:1050:VAL:CG2	1:A:1055:ILE:HG12	2.49	0.42
1:A:1138:HIS:O	1:A:1138:HIS:ND1	2.53	0.42
1:A:1188:ILE:H	1:A:1188:ILE:HG12	1.64	0.42
1:A:211:ILE:HD12	1:A:211:ILE:N	2.35	0.42
1:A:611:TYR:HB3	1:A:626:ILE:HD11	2.01	0.42
1:A:162:ASP:OD1	1:A:162:ASP:N	2.50	0.42
1:A:745:GLU:C	1:A:747:ILE:N	2.73	0.42
1:A:833:ILE:HG22	1:A:834:GLY:N	2.34	0.42
1:A:853:THR:O	1:A:856:ASN:O	2.38	0.42
1:A:1044:ASP:HB3	1:A:1047:GLU:HG2	2.00	0.42
1:A:93:ALA:HA	1:A:96:VAL:HG12	2.02	0.42
1:A:169:ILE:O	1:A:169:ILE:HG13	2.18	0.42
1:A:705:LEU:O	1:A:709:LEU:HD12	2.20	0.42
1:A:934:LEU:HB3	1:A:1024:GLU:HB3	2.02	0.42
1:A:1171:LEU:HD11	1:A:1263:SER:HB3	2.02	0.42
1:A:134:ARG:CG	1:A:134:ARG:NH2	2.77	0.41
1:A:495:PHE:HA	1:A:519:GLY:HA3	2.02	0.41
1:A:500:GLU:O	1:A:573:ARG:HG3	2.20	0.41
1:A:519:GLY:O	1:A:520:ILE:HD12	2.20	0.41
1:A:778:LEU:H	1:A:778:LEU:CD1	2.33	0.41
1:A:899:PRO:HG2	1:A:900:PHE:CD1	2.55	0.41
1:A:998:SER:O	1:A:1011:TYR:HD2	2.03	0.41
1:A:1064:ALA:O	1:A:1066:ARG:N	2.52	0.41
1:A:1162:GLY:O	1:A:1163:ASP:OD2	2.37	0.41
1:A:43:LYS:C	1:A:45:GLY:H	2.23	0.41
1:A:529:ILE:CD1	1:A:571:ILE:HG12	2.47	0.41
1:A:614:GLN:HE22	1:A:664:GLY:N	2.18	0.41
1:A:1209:SER:O	1:A:1210:ARG:C	2.59	0.41
1:A:163:GLU:H	1:A:163:GLU:CD	2.23	0.41
1:A:229:LEU:HD21	1:A:242:VAL:HG11	2.01	0.41
1:A:589:PHE:CD1	1:A:589:PHE:C	2.93	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:224:THR:O	1:A:225:GLY:C	2.59	0.41
1:A:522:LYS:O	1:A:523:VAL:C	2.59	0.41
1:A:534:GLU:O	1:A:536:GLN:HG3	2.21	0.41
1:A:35:GLU:HA	1:A:38:ILE:HG12	2.02	0.41
1:A:1157:ILE:HG12	1:A:1165:ALA:CB	2.49	0.41
1:A:30:ALA:HB1	1:A:36:LEU:HD13	2.02	0.41
1:A:195:TYR:HD2	1:A:216:VAL:CG1	2.34	0.41
1:A:300:GLY:HA2	1:A:364:VAL:O	2.21	0.41
1:A:409:GLN:C	1:A:411:GLY:N	2.72	0.41
1:A:523:VAL:HG13	1:A:551:ASP:C	2.41	0.41
1:A:581:GLY:HA2	1:A:584:LYS:NZ	2.36	0.41
1:A:871:GLN:NE2	1:A:921:GLY:HA3	2.35	0.41
1:A:927:GLN:CB	1:A:1020:GLY:HA3	2.51	0.41
1:A:1116:LEU:HA	1:A:1116:LEU:HD23	1.98	0.41
1:A:1210:ARG:O	1:A:1214:GLU:HB2	2.21	0.41
1:A:52:LYS:C	1:A:54:GLY:H	2.24	0.41
1:A:303:GLY:N	1:A:309:LYS:HD3	2.36	0.41
1:A:584:LYS:O	1:A:586:HIS:CD2	2.73	0.41
1:A:964:LEU:O	1:A:1088:ARG:NH2	2.53	0.41
1:A:41:MET:HA	1:A:44:SER:OG	2.20	0.41
1:A:143:LEU:HD23	1:A:143:LEU:O	2.21	0.41
1:A:216:VAL:HG12	1:A:220:MET:HG3	2.02	0.41
1:A:324:TYR:CD2	1:A:357:PRO:HD3	2.55	0.41
1:A:410:VAL:O	1:A:410:VAL:HG22	2.19	0.41
1:A:414:TYR:CD1	1:A:485:PRO:HD3	2.56	0.41
1:A:929:GLY:O	1:A:933:ILE:HG22	2.21	0.41
1:A:86:ASP:OD1	1:A:87:ALA:N	2.53	0.41
1:A:203:MET:HG2	1:A:212:ALA:CB	2.51	0.41
1:A:380:ALA:O	1:A:381:ALA:HB2	2.21	0.41
1:A:432:GLU:HA	1:A:435:GLU:HB2	2.03	0.41
1:A:538:SER:OG	1:A:539:THR:N	2.52	0.41
1:A:705:LEU:HD22	1:A:705:LEU:HA	1.91	0.41
1:A:1047:GLU:OE2	1:A:1047:GLU:CA	2.65	0.41
1:A:1157:ILE:CG2	1:A:1185:VAL:HG11	2.50	0.41
1:A:1173:ASN:HA	1:A:1174:PRO:HD2	1.75	0.41
1:A:1207:LEU:HD23	1:A:1207:LEU:HA	1.94	0.41
1:A:745:GLU:C	1:A:747:ILE:H	2.23	0.41
1:A:762:ILE:HD13	1:A:762:ILE:HA	1.82	0.41
1:A:790:PHE:HD1	1:A:791:LEU:HD13	1.86	0.41
1:A:1189:THR:CG2	1:A:1190:ASP:N	2.84	0.41
1:A:69:ASN:OD1	1:A:69:ASN:O	2.39	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:146:TYR:HB3	1:A:154:VAL:CG2	2.51	0.40
1:A:820:SER:O	1:A:823:HIS:HB2	2.21	0.40
1:A:997:ARG:HH12	1:A:1011:TYR:HB2	1.86	0.40
1:A:1118:LEU:CD1	1:A:1163:ASP:OD1	2.69	0.40
1:A:1135:PRO:O	1:A:1136:ARG:C	2.60	0.40
1:A:235:VAL:CG2	1:A:606:PRO:HG2	2.51	0.40
1:A:301:THR:CG2	1:A:363:HIS:NE2	2.85	0.40
1:A:607:PHE:CD1	1:A:607:PHE:C	2.95	0.40
1:A:845:HIS:HB3	1:A:929:GLY:O	2.21	0.40
1:A:885:ARG:C	1:A:887:SER:H	2.25	0.40
1:A:1085:GLY:C	1:A:1087:PHE:N	2.75	0.40
1:A:115:PHE:O	1:A:118:GLU:N	2.54	0.40
1:A:9:VAL:HG12	1:A:27:LEU:HD22	2.03	0.40
1:A:500:GLU:C	1:A:573:ARG:HG3	2.42	0.40
1:A:606:PRO:CA	1:A:637:PRO:HD3	2.48	0.40
1:A:990:PHE:CD2	1:A:990:PHE:C	2.94	0.40
1:A:1033:LEU:HD12	1:A:1033:LEU:HA	1.35	0.40
1:A:1204:LEU:HD23	1:A:1204:LEU:HA	1.90	0.40
1:A:52:LYS:O	1:A:54:GLY:N	2.55	0.40
1:A:152:ILE:CG1	1:A:260:GLU:HG3	2.52	0.40
1:A:663:GLU:O	1:A:664:GLY:C	2.60	0.40
1:A:989:TRP:O	1:A:990:PHE:C	2.60	0.40
1:A:1137:ALA:C	1:A:1139:SER:N	2.75	0.40
1:A:1176:ALA:CB	1:A:1185:VAL:HG23	2.50	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	1189/1289 (92%)	944 (79%)	179 (15%)	66 (6%)	2 13

All (66) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	116	GLU
1	A	134	ARG
1	A	150	ALA
1	A	176	SER
1	A	209	LYS
1	A	495	PHE
1	A	746	CYS
1	A	755	GLY
1	A	769	ILE
1	A	771	SER
1	A	778	LEU
1	A	806	ARG
1	A	838	SER
1	A	872	ALA
1	A	896	ASP
1	A	970	SER
1	A	1158	PRO
1	A	149	GLY
1	A	267	LYS
1	A	325	GLY
1	A	510	THR
1	A	618	ARG
1	A	703	ASN
1	A	780	ILE
1	A	849	SER
1	A	854	THR
1	A	897	ILE
1	A	971	ALA
1	A	990	PHE
1	A	992	VAL
1	A	1005	ASP
1	A	1020	GLY
1	A	1180	GLY
1	A	31	ASN
1	A	53	ALA
1	A	68	GLY
1	A	102	ALA
1	A	205	SER
1	A	229	LEU
1	A	381	ALA
1	A	523	VAL
1	A	809	TYR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1035	ARG
1	A	1065	LEU
1	A	1084	GLU
1	A	187	SER
1	A	538	SER
1	A	711	ARG
1	A	448	PRO
1	A	619	THR
1	A	677	LEU
1	A	975	SER
1	A	979	ALA
1	A	1022	THR
1	A	1151	GLN
1	A	1186	PRO
1	A	132	ILE
1	A	373	VAL
1	A	999	PRO
1	A	807	PRO
1	A	1119	VAL
1	A	1239	ILE
1	A	1244	PRO
1	A	201	ILE
1	A	509	GLY
1	A	1103	PRO

5.3.2 Protein sidechains [i](#)

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	991/1060 (94%)	821 (83%)	170 (17%)	2 9

All (170) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	10	LYS
1	A	12	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	13	ARG
1	A	29	GLU
1	A	34	ILE
1	A	36	LEU
1	A	39	GLU
1	A	55	ASN
1	A	59	ASP
1	A	74	LEU
1	A	76	VAL
1	A	80	THR
1	A	81	ASP
1	A	106	THR
1	A	117	GLU
1	A	143	LEU
1	A	151	ARG
1	A	152	ILE
1	A	154	VAL
1	A	155	LEU
1	A	165	LEU
1	A	166	VAL
1	A	181	ILE
1	A	186	VAL
1	A	190	VAL
1	A	194	GLU
1	A	196	GLN
1	A	203	MET
1	A	210	GLU
1	A	220	MET
1	A	224	THR
1	A	228	SER
1	A	239	SER
1	A	240	LYS
1	A	245	LEU
1	A	250	ASN
1	A	254	THR
1	A	258	ARG
1	A	292	ARG
1	A	307	HIS
1	A	312	LEU
1	A	355	ASP
1	A	382	GLN
1	A	387	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	399	GLN
1	A	400	THR
1	A	419	LEU
1	A	426	ASP
1	A	433	LEU
1	A	438	VAL
1	A	443	SER
1	A	480	LEU
1	A	502	VAL
1	A	503	PHE
1	A	504	SER
1	A	508	ARG
1	A	527	VAL
1	A	529	ILE
1	A	530	VAL
1	A	535	THR
1	A	537	LYS
1	A	541	THR
1	A	548	LYS
1	A	568	ARG
1	A	595	ILE
1	A	599	ASP
1	A	604	HIS
1	A	613	PRO
1	A	614	GLN
1	A	622	VAL
1	A	623	THR
1	A	628	LEU
1	A	641	ILE
1	A	646	THR
1	A	647	LEU
1	A	649	HIS
1	A	662	ARG
1	A	676	VAL
1	A	704	SER
1	A	705	LEU
1	A	706	SER
1	A	715	THR
1	A	717	ILE
1	A	719	VAL
1	A	720	GLU
1	A	733	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	741	ASN
1	A	750	SER
1	A	754	ASP
1	A	756	THR
1	A	762	ILE
1	A	777	SER
1	A	780	ILE
1	A	782	THR
1	A	790	PHE
1	A	791	LEU
1	A	796	GLU
1	A	797	CYS
1	A	806	ARG
1	A	809	TYR
1	A	820	SER
1	A	822	ILE
1	A	832	LEU
1	A	840	GLU
1	A	847	ARG
1	A	853	THR
1	A	855	THR
1	A	859	SER
1	A	869	LEU
1	A	874	THR
1	A	876	ARG
1	A	881	VAL
1	A	893	ARG
1	A	894	ILE
1	A	901	ASN
1	A	905	THR
1	A	916	ILE
1	A	924	MET
1	A	930	ILE
1	A	933	ILE
1	A	938	LEU
1	A	943	ILE
1	A	949	THR
1	A	952	GLN
1	A	956	HIS
1	A	960	VAL
1	A	962	ASN
1	A	973	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	981	CYS
1	A	985	LEU
1	A	991	GLU
1	A	992	VAL
1	A	1003	LEU
1	A	1008	VAL
1	A	1012	GLU
1	A	1014	ILE
1	A	1021	TYR
1	A	1028	LEU
1	A	1033	LEU
1	A	1039	GLU
1	A	1043	LEU
1	A	1046	SER
1	A	1047	GLU
1	A	1049	THR
1	A	1072	VAL
1	A	1074	PHE
1	A	1076	THR
1	A	1077	ASN
1	A	1088	ARG
1	A	1093	LYS
1	A	1102	THR
1	A	1116	LEU
1	A	1117	ILE
1	A	1138	HIS
1	A	1151	GLN
1	A	1152	LEU
1	A	1171	LEU
1	A	1172	ILE
1	A	1173	ASN
1	A	1177	LYS
1	A	1182	ILE
1	A	1185	VAL
1	A	1188	ILE
1	A	1200	LEU
1	A	1210	ARG
1	A	1212	LEU
1	A	1215	SER
1	A	1239	ILE
1	A	1249	ARG
1	A	1261	CYS

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (29) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	55	ASN
1	A	69	ASN
1	A	77	ASN
1	A	79	GLN
1	A	114	GLN
1	A	147	GLN
1	A	250	ASN
1	A	284	HIS
1	A	307	HIS
1	A	399	GLN
1	A	536	GLN
1	A	558	ASN
1	A	586	HIS
1	A	614	GLN
1	A	649	HIS
1	A	703	ASN
1	A	729	ASN
1	A	741	ASN
1	A	763	ASN
1	A	871	GLN
1	A	901	ASN
1	A	946	ASN
1	A	952	GLN
1	A	1077	ASN
1	A	1094	HIS
1	A	1121	ASN
1	A	1151	GLN
1	A	1155	ASN
1	A	1173	ASN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 1 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data

6.1 Protein, DNA and RNA chains

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	1199/1289 (93%)	-0.02	36 (3%) 50 36	72, 137, 182, 211	0

All (36) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	700	SER	5.3
1	A	5	THR	4.3
1	A	701	SER	4.0
1	A	6	ALA	3.6
1	A	812	ASP	3.5
1	A	293	THR	3.5
1	A	255	GLY	3.4
1	A	291	GLU	3.3
1	A	21	MET	3.3
1	A	112	LYS	3.0
1	A	246	LEU	2.9
1	A	268	VAL	2.8
1	A	680	ALA	2.7
1	A	24	LYS	2.6
1	A	131	ASN	2.6
1	A	520	ILE	2.6
1	A	521	ILE	2.6
1	A	77	ASN	2.6
1	A	149	GLY	2.5
1	A	807	PRO	2.5
1	A	193	LYS	2.4
1	A	130	ILE	2.2
1	A	143	LEU	2.2
1	A	813	PHE	2.2
1	A	16	THR	2.2
1	A	292	ARG	2.2
1	A	180	PHE	2.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	181	ILE	2.2
1	A	137	ALA	2.1
1	A	350	SER	2.1
1	A	56	VAL	2.1
1	A	164	GLU	2.1
1	A	1019	ASN	2.1
1	A	162	ASP	2.0
1	A	247	LYS	2.0
1	A	163	GLU	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 monosaccharides 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. The B-factors column lists the minimum, median, 95th 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	B-factors(\AA^2)	Q<0.9
2	MG	A	2001	1/1	0.67	0.34	84,84,84,84	0

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.