

Full wwPDB X-ray Structure Validation Report (i)

Oct 17, 2021 – 08:33 AM EDT

| PDB ID | : | 1JDE |
|--------------|---|---|
| Title | : | K22A mutant of pyruvate, phosphate dikinase |
| Authors | : | Ye, D.; Wei, M.; McGuire, M.; Huang, K.; Kapadia, G.; Herzberg, O.; Martin, |
| | | B.M.; Dunaway-Mariano, D. |
| Deposited on | : | 2001-06-13 |
| Resolution | : | 2.80 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 (i) symbol.

The following versions of software and data (see references (1)) were used in the production of this report:

| MolProbity | : | 4.02b-467 |
|--------------------------------|---|--|
| Mogul | : | 1.8.5 (274361), CSD as541be (2020) |
| Xtriage (Phenix) | : | 1.13 |
| EDS | : | 2.23.2 |
| 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) | : | 2.23.2 |

1 Overall quality at a glance (i)

The following experimental techniques were used to determine the structure: $X\text{-}RAY \, DIFFRACTION$

The reported resolution of this entry is 2.80 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 | $egin{array}{c} { m Whole \ archive} \ (\#{ m Entries}) \end{array}$ | ${f Similar\ resolution}\ (\#{ m Entries,\ resolution\ range}({ m \AA}))$ | |
|-----------------------|--|---|--|
| Clashscore | 141614 | 3569(2.80-2.80) | |
| Ramachandran outliers | 138981 | 3498 (2.80-2.80) | |
| Sidechain outliers | 138945 | 3500 (2.80-2.80) | |

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 <=5%

| Mol | Chain | Length | Quality of chain | | | | | |
|-----|-------|--------|------------------|-----|-----|------|--|--|
| 1 | А | 873 | 11% | 57% | 25% | 6% • | | |

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

| Mol | Type | Chain | Res | Chirality | Geometry | Clashes | Electron density |
|-----|------|-------|-----|-----------|----------|---------|------------------|
| 2 | SO4 | А | 902 | - | - | Х | - |



2 Entry composition (i)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 6768 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 PYRUVATE, PHOSPHATE DIKINASE.

| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | ZeroOcc | AltConf | Trace | |
|-----|-------|----------|---------------|-----------|-----------|-----------|--------------|---------|-------|---|
| 1 | А | 868 | Total 6717 | C 4226 | N 1138 | O 1302 | ${ m S}{51}$ | 0 | 0 | 0 |

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

| Chain | n Residue Modelled | | Actual | Comment | Reference |
|-------|--------------------|-----|--------|---------------------|------------|
| А | 22 | ALA | LYS | engineered mutation | UNP P22983 |

• Molecule 2 is SULFATE ION (three-letter code: SO4) (formula: O_4S).



| Mol | Chain | Residues | Atoms | ZeroOcc | AltConf |
|-----|-------|----------|--|---------|---------|
| 2 | А | 1 | $\begin{array}{ccc} \text{Total} & \text{O} & \text{S} \\ 5 & 4 & 1 \end{array}$ | 0 | 0 |
| 2 | А | 1 | $\begin{array}{ccc} \text{Total} & \text{O} & \text{S} \\ 5 & 4 & 1 \end{array}$ | 0 | 0 |

• Molecule 3 is water.





| Mol | Chain | Residues | Atoms | ZeroOcc | AltConf |
|-----|-------|----------|---|---------|---------|
| 3 | А | 41 | Total O 41 41 | 0 | 0 |



3 Residue-property plots (i)

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. 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. 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: PYRUVATE, PHOSPHATE DIKINASE



V859 E796 D735 1861 5797 7793 1861 7793 7733 1861 7793 7733 1861 8802 7734 1864 8802 7734 1864 8802 773 1864 8802 773 1864 8802 741 1864 1740 743 1867 1806 741 1871 8812 744 1871 8813 744 1871 8813 744 1871 8813 744 1871 8813 745 1873 8813 776 1873 8813 776 1873 8813 776 1873 8813 776 1834 777 776 1835 776 776 1834 776 776 1834 776 776 1835<



4 Data and refinement statistics (i)

| Property | Value | Source |
|---|---|-----------|
| Space group | P 1 2 1 | Depositor |
| Cell constants | 89.90Å 58.60Å 102.30Å | Depositor |
| a, b, c, α , β , γ | 90.00° 95.10° 90.00° | Depositor |
| Bosolution(A) | 10.00 - 2.80 | Depositor |
| Resolution (A) | 49.03 - 2.75 | EDS |
| % Data completeness | (Not available) $(10.00-2.80)$ | Depositor |
| (in resolution range) | 86.8 (49.03-2.75) | EDS |
| R_{merge} | 0.07 | Depositor |
| R_{sym} | (Not available) | Depositor |
| $< I/\sigma(I) > 1$ | $2.18 (at 2.77 \text{\AA})$ | Xtriage |
| Refinement program | X-PLOR | Depositor |
| B B. | 0.193 , (Not available) | Depositor |
| Λ, Λ_{free} | 0.259 , (Not available) | DCC |
| R_{free} test set | No test flags present. | wwPDB-VP |
| Wilson B-factor $(Å^2)$ | 32.9 | Xtriage |
| Anisotropy | 0.573 | Xtriage |
| Bulk solvent $k_{sol}(e/Å^3), B_{sol}(Å^2)$ | 0.38 , 139.1 | EDS |
| L-test for twinning ² | $ < L >=0.42, < L^2>=0.25$ | Xtriage |
| Estimated twinning fraction | No twinning to report. | Xtriage |
| F_o, F_c correlation | 0.79 | EDS |
| Total number of atoms | 6768 | wwPDB-VP |
| Average B, all atoms $(Å^2)$ | 28.0 | wwPDB-VP |

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: The largest off-origin peak in the Patterson function is 16.30% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.

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.



¹Intensities estimated from amplitudes.

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: SO4

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

| Mol | Chain | Bo | nd lengths | Bond angles | | |
|-----|-------|------|----------------|-------------|----------------|--|
| | Chain | RMSZ | # Z > 5 | RMSZ | # Z > 5 | |
| 1 | А | 1.25 | 76/6839~(1.1%) | 1.59 | 90/9217~(1.0%) | |

All (76) bond length outliers are listed below:

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z | Observed(Å) | Ideal(Å) |
|-----|-------|-----|------|--------|------|-------------|----------|
| 1 | А | 146 | GLU | CD-OE2 | 9.95 | 1.36 | 1.25 |
| 1 | А | 694 | GLU | CD-OE2 | 9.32 | 1.35 | 1.25 |
| 1 | А | 249 | GLU | CD-OE2 | 8.99 | 1.35 | 1.25 |
| 1 | А | 153 | GLU | CD-OE2 | 8.88 | 1.35 | 1.25 |
| 1 | А | 419 | GLU | CD-OE2 | 8.71 | 1.35 | 1.25 |
| 1 | А | 710 | GLU | CD-OE2 | 8.48 | 1.34 | 1.25 |
| 1 | А | 702 | GLU | CD-OE2 | 8.36 | 1.34 | 1.25 |
| 1 | А | 194 | GLU | CD-OE2 | 8.24 | 1.34 | 1.25 |
| 1 | А | 726 | GLU | CD-OE2 | 8.22 | 1.34 | 1.25 |
| 1 | А | 796 | GLU | CD-OE2 | 8.02 | 1.34 | 1.25 |
| 1 | А | 390 | GLU | CD-OE2 | 8.00 | 1.34 | 1.25 |
| 1 | А | 723 | GLU | CD-OE2 | 7.97 | 1.34 | 1.25 |
| 1 | А | 422 | GLU | CD-OE2 | 7.86 | 1.34 | 1.25 |
| 1 | А | 759 | GLU | CD-OE2 | 7.86 | 1.34 | 1.25 |
| 1 | А | 625 | GLU | CD-OE2 | 7.74 | 1.34 | 1.25 |
| 1 | А | 522 | GLU | CD-OE2 | 7.53 | 1.33 | 1.25 |
| 1 | А | 84 | GLU | CD-OE2 | 7.48 | 1.33 | 1.25 |
| 1 | А | 195 | GLU | CD-OE2 | 7.46 | 1.33 | 1.25 |
| 1 | А | 514 | GLU | CD-OE2 | 7.37 | 1.33 | 1.25 |
| 1 | А | 633 | GLU | CD-OE2 | 7.32 | 1.33 | 1.25 |
| 1 | А | 610 | GLU | CD-OE2 | 7.25 | 1.33 | 1.25 |
| 1 | А | 162 | GLU | CD-OE2 | 7.15 | 1.33 | 1.25 |
| 1 | А | 181 | GLU | CD-OE2 | 7.15 | 1.33 | 1.25 |
| 1 | А | 271 | GLU | CD-OE2 | 7.12 | 1.33 | 1.25 |
| 1 | А | 328 | GLU | CD-OE2 | 7.06 | 1.33 | 1.25 |
| 1 | А | 758 | GLU | CD-OE2 | 7.03 | 1.33 | 1.25 |



| Conti | Continuea from previous page | | | | | | |
|-------|------------------------------|-----|------|--------|------|-------------|----------|
| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z | Observed(Å) | Ideal(Å) |
| 1 | А | 511 | GLU | CD-OE2 | 6.91 | 1.33 | 1.25 |
| 1 | А | 74 | GLU | CD-OE2 | 6.90 | 1.33 | 1.25 |
| 1 | А | 675 | GLU | CD-OE2 | 6.83 | 1.33 | 1.25 |
| 1 | А | 60 | GLU | CD-OE2 | 6.79 | 1.33 | 1.25 |
| 1 | А | 484 | GLU | CD-OE2 | 6.79 | 1.33 | 1.25 |
| 1 | А | 279 | GLU | CD-OE2 | 6.69 | 1.33 | 1.25 |
| 1 | А | 49 | GLU | CD-OE2 | 6.60 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 265 | GLU | CD-OE2 | 6.58 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 544 | GLU | CD-OE2 | 6.48 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 761 | GLU | CD-OE2 | 6.43 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 479 | GLU | CD-OE2 | 6.42 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 323 | GLU | CD-OE2 | 6.41 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 434 | GLU | CD-OE2 | 6.40 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 362 | GLU | CD-OE2 | 6.35 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 28 | GLU | CD-OE2 | 6.29 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 437 | GLU | CD-OE2 | 6.26 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 632 | GLU | CD-OE2 | 6.23 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 117 | GLU | CD-OE2 | 6.22 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 647 | GLU | CD-OE2 | 6.18 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 813 | GLU | CD-OE2 | 6.17 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 363 | GLU | CD-OE2 | 6.07 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 833 | GLU | CD-OE2 | 6.01 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 585 | GLU | CD-OE2 | 6.00 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 654 | GLU | CD-OE2 | 5.98 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 745 | GLU | CD-OE2 | 5.97 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 369 | GLU | CD-OE2 | 5.89 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 295 | GLU | CD-OE2 | 5.81 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 178 | GLU | CD-OE2 | 5.79 | 1.32 | 1.25 |
| 1 | А | 45 | GLU | CD-OE2 | 5.67 | 1.31 | 1.25 |
| 1 | А | 161 | GLU | CD-OE2 | 5.67 | 1.31 | 1.25 |
| 1 | А | 588 | GLU | CD-OE2 | 5.67 | 1.31 | 1.25 |
| 1 | А | 413 | GLU | CD-OE2 | 5.63 | 1.31 | 1.25 |
| 1 | А | 563 | GLU | CD-OE2 | 5.59 | 1.31 | 1.25 |
| 1 | А | 361 | GLU | CD-OE2 | 5.53 | 1.31 | 1.25 |
| 1 | А | 589 | GLU | CD-OE2 | 5.52 | 1.31 | 1.25 |
| 1 | А | 568 | GLU | CD-OE2 | 5.49 | 1.31 | 1.25 |
| 1 | А | 10 | GLU | CD-OE2 | 5.46 | 1.31 | 1.25 |
| 1 | А | 73 | GLU | CD-OE2 | 5.44 | 1.31 | 1.25 |
| 1 | А | 555 | GLU | CD-OE2 | 5.42 | 1.31 | 1.25 |
| 1 | А | 631 | GLU | CD-OE2 | 5.35 | 1.31 | 1.25 |
| 1 | А | 731 | GLU | CD-OE2 | 5.33 | 1.31 | 1.25 |
| 1 | A | 67 | GLU | CD-OE2 | 5.31 | 1.31 | 1.25 |
| | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |

Continued from previous page...



| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z | Observed(Å) | $\mathrm{Ideal}(\mathrm{\AA})$ |
|-----|-------|-----|------|--------|------|-------------|--------------------------------|
| 1 | А | 693 | GLU | CD-OE2 | 5.31 | 1.31 | 1.25 |
| 1 | А | 430 | GLU | CD-OE2 | 5.29 | 1.31 | 1.25 |
| 1 | А | 636 | GLU | CD-OE2 | 5.23 | 1.31 | 1.25 |
| 1 | А | 593 | GLU | CD-OE2 | 5.22 | 1.31 | 1.25 |
| 1 | А | 199 | GLU | CD-OE2 | 5.22 | 1.31 | 1.25 |
| 1 | А | 473 | GLU | CD-OE2 | 5.19 | 1.31 | 1.25 |
| 1 | А | 189 | GLU | CD-OE2 | 5.17 | 1.31 | 1.25 |
| 1 | А | 492 | GLU | CD-OE2 | 5.09 | 1.31 | 1.25 |

All (90) bond angle outliers are listed below:

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z | $Observed(^{o})$ | $Ideal(^{o})$ |
|-----|-------|-----|------|-----------|--------|------------------|---------------|
| 1 | А | 196 | PHE | C-N-CD | -11.04 | 96.32 | 120.60 |
| 1 | А | 202 | ASP | CB-CG-OD2 | -9.67 | 109.60 | 118.30 |
| 1 | А | 601 | ASP | CB-CG-OD2 | -9.55 | 109.70 | 118.30 |
| 1 | А | 719 | ASP | CB-CG-OD1 | 8.99 | 126.39 | 118.30 |
| 1 | А | 682 | ARG | NE-CZ-NH1 | 8.73 | 124.66 | 120.30 |
| 1 | А | 620 | ASP | CB-CG-OD2 | -8.43 | 110.72 | 118.30 |
| 1 | А | 224 | ARG | NE-CZ-NH1 | 8.36 | 124.48 | 120.30 |
| 1 | А | 63 | ASP | CB-CG-OD2 | -8.09 | 111.02 | 118.30 |
| 1 | А | 142 | ASP | CB-CG-OD2 | -8.08 | 111.02 | 118.30 |
| 1 | А | 321 | ASP | CB-CG-OD1 | 8.08 | 125.57 | 118.30 |
| 1 | А | 541 | ASP | CB-CG-OD2 | -8.04 | 111.06 | 118.30 |
| 1 | А | 665 | ARG | NE-CZ-NH1 | 7.88 | 124.24 | 120.30 |
| 1 | А | 617 | ARG | NE-CZ-NH1 | 7.88 | 124.24 | 120.30 |
| 1 | А | 781 | ASP | CB-CG-OD1 | 7.86 | 125.38 | 118.30 |
| 1 | А | 168 | ASP | CB-CG-OD1 | 7.84 | 125.36 | 118.30 |
| 1 | А | 798 | ASP | CB-CG-OD2 | -7.83 | 111.25 | 118.30 |
| 1 | А | 617 | ARG | NE-CZ-NH2 | -7.81 | 116.39 | 120.30 |
| 1 | А | 529 | ASP | CB-CG-OD1 | 7.80 | 125.32 | 118.30 |
| 1 | А | 798 | ASP | CB-CG-OD1 | 7.68 | 125.22 | 118.30 |
| 1 | А | 665 | ARG | NE-CZ-NH2 | -7.58 | 116.51 | 120.30 |
| 1 | А | 719 | ASP | CB-CG-OD2 | -7.42 | 111.62 | 118.30 |
| 1 | А | 337 | ARG | NE-CZ-NH2 | -7.42 | 116.59 | 120.30 |
| 1 | А | 216 | ASP | CB-CG-OD2 | -7.33 | 111.71 | 118.30 |
| 1 | А | 280 | ASP | CB-CG-OD2 | -7.22 | 111.80 | 118.30 |
| 1 | А | 216 | ASP | CB-CG-OD1 | 7.17 | 124.76 | 118.30 |
| 1 | А | 754 | ASP | CB-CG-OD2 | -7.17 | 111.85 | 118.30 |
| 1 | А | 570 | ASP | CB-CG-OD2 | -7.13 | 111.88 | 118.30 |
| 1 | А | 131 | ASP | CB-CG-OD2 | -7.12 | 111.89 | 118.30 |
| 1 | А | 653 | ASP | CB-CG-OD2 | -6.82 | 112.17 | 118.30 |
| 1 | А | 170 | ASP | CB-CG-OD2 | -6.80 | 112.18 | 118.30 |



| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Ζ | $Observed(^{o})$ | $Ideal(^{o})$ |
|-----|-------|-----|------|-----------------------------------|-------|---------------------|---------------|
| 1 | А | 837 | ASP | CB-CG-OD2 | -6.75 | 112.23 | 118.30 |
| 1 | А | 259 | ARG | NE-CZ-NH2 | -6.70 | 116.95 | 120.30 |
| 1 | А | 384 | ALA | N-CA-CB | 6.67 | 119.43 | 110.10 |
| 1 | А | 412 | ASP | CB-CG-OD2 | -6.62 | 112.34 | 118.30 |
| 1 | А | 259 | ARG | NE-CZ-NH1 | 6.61 | 123.60 | 120.30 |
| 1 | А | 449 | ARG | NE-CZ-NH1 | 6.58 | 123.59 | 120.30 |
| 1 | А | 355 | ASP | CB-CG-OD1 | 6.57 | 124.21 | 118.30 |
| 1 | А | 601 | ASP | CB-CG-OD1 | 6.56 | 124.20 | 118.30 |
| 1 | А | 668 | ARG | NE-CZ-NH1 | 6.55 | 123.58 | 120.30 |
| 1 | А | 668 | ARG | NE-CZ-NH2 | -6.54 | 117.03 | 120.30 |
| 1 | А | 804 | ASP | CB-CG-OD1 | 6.49 | 124.14 | 118.30 |
| 1 | А | 582 | ASP | CB-CG-OD2 | -6.24 | 112.68 | 118.30 |
| 1 | А | 280 | ASP | CB-CG-OD1 | 6.20 | 123.88 | 118.30 |
| 1 | А | 537 | ARG | NE-CZ-NH2 | -6.18 | 117.21 | 120.30 |
| 1 | А | 243 | VAL | CB-CA-C | 6.07 | 122.92 | 111.40 |
| 1 | А | 168 | ASP | CB-CG-OD2 | -6.05 | 112.86 | 118.30 |
| 1 | А | 50 | TYR | CB-CG-CD2 | -5.99 | 117.41 | 121.00 |
| 1 | А | 113 | ASP | CB-CG-OD2 | -5.97 | 112.93 | 118.30 |
| 1 | А | 355 | ASP | CB-CG-OD2 | -5.95 | 112.94 | 118.30 |
| 1 | А | 769 | ASP | CB-CG-OD1 | 5.95 | 123.66 | 118.30 |
| 1 | А | 541 | ASP | CB-CG-OD1 | 5.90 | 123.61 | 118.30 |
| 1 | А | 104 | ASP | CB-CG-OD2 | -5.87 | 113.02 | 118.30 |
| 1 | А | 612 | ARG | NE-CZ-NH2 | -5.85 | 117.38 | 120.30 |
| 1 | А | 780 | ASP | CB-CG-OD2 | -5.81 | 113.07 | 118.30 |
| 1 | А | 780 | ASP | CB-CG-OD1 | 5.74 | 123.47 | 118.30 |
| 1 | А | 157 | ASP | CB-CG-OD1 | 5.72 | 123.45 | 118.30 |
| 1 | А | 232 | ASP | CB-CG-OD1 | 5.71 | 123.44 | 118.30 |
| 1 | А | 570 | ASP | CB-CG-OD1 | 5.69 | 123.42 | 118.30 |
| 1 | А | 307 | ASP | CB-CG-OD2 | -5.59 | 113.27 | 118.30 |
| 1 | А | 779 | ARG | NE-CZ-NH1 | 5.55 | 123.08 | 120.30 |
| 1 | A | 672 | THR | $CA-\overline{CB}-\overline{CG2}$ | -5.55 | 104.63 | 112.40 |
| 1 | A | 529 | ASP | CB-CG-OD2 | -5.53 | 113.33 | 118.30 |
| 1 | A | 95 | ALA | N-CA-CB | 5.52 | 117.82 | 110.10 |
| 1 | A | 476 | ILE | CB-CA-C | -5.50 | 100.60 | 111.60 |
| 1 | A | 537 | ARG | NE-CZ-NH1 | 5.49 | 123.04 | 120.30 |
| 1 | A | 435 | ASP | CB-CG-OD2 | -5.45 | 113.40 | 118.30 |
| 1 | A | 698 | ASP | CB-CG-OD2 | -5.42 | 113.42 | 118.30 |
| 1 | A | 837 | ASP | CB-CG-OD1 | 5.41 | 123.17 | 118.30 |
| 1 | A | 225 | ARG | NE-CZ-NH1 | -5.31 | $117.6\overline{5}$ | 120.30 |
| 1 | A | 321 | ASP | CB-CG-OD2 | -5.30 | 113.53 | 118.30 |
| 1 | A | 582 | ASP | CB-CG-OD1 | 5.26 | 123.04 | 118.30 |
| 1 | A | 300 | ASP | CB-CG-OD2 | -5.26 | 113.57 | 118.30 |

Continued from previous page...



| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z | $Observed(^{o})$ | $Ideal(^{o})$ |
|-----|-------|-----|------|-----------|-------|------------------|---------------|
| 1 | А | 175 | ASP | CB-CG-OD2 | -5.22 | 113.60 | 118.30 |
| 1 | А | 157 | ASP | CB-CG-OD2 | -5.20 | 113.62 | 118.30 |
| 1 | А | 63 | ASP | CB-CG-OD1 | 5.17 | 122.96 | 118.30 |
| 1 | А | 190 | ALA | CB-CA-C | 5.17 | 117.86 | 110.10 |
| 1 | А | 472 | GLY | C-N-CA | 5.17 | 134.63 | 121.70 |
| 1 | А | 224 | ARG | NE-CZ-NH2 | -5.17 | 117.72 | 120.30 |
| 1 | А | 494 | ASP | CB-CG-OD1 | 5.16 | 122.95 | 118.30 |
| 1 | А | 781 | ASP | CB-CG-OD2 | -5.16 | 113.66 | 118.30 |
| 1 | А | 842 | GLU | N-CA-CB | 5.15 | 119.88 | 110.60 |
| 1 | А | 754 | ASP | CB-CG-OD1 | 5.11 | 122.90 | 118.30 |
| 1 | А | 277 | GLN | N-CA-CB | 5.10 | 119.78 | 110.60 |
| 1 | А | 113 | ASP | CB-CG-OD1 | 5.09 | 122.88 | 118.30 |
| 1 | А | 352 | ASP | CB-CG-OD1 | 5.08 | 122.88 | 118.30 |
| 1 | А | 735 | ASP | CB-CG-OD1 | 5.07 | 122.87 | 118.30 |
| 1 | А | 142 | ASP | CB-CG-OD1 | 5.06 | 122.86 | 118.30 |
| 1 | А | 667 | CYS | CA-CB-SG | -5.04 | 104.93 | 114.00 |
| 1 | А | 297 | ASP | CB-CG-OD2 | -5.02 | 113.79 | 118.30 |
| 1 | А | 312 | LEU | N-CA-CB | 5.01 | 120.43 | 110.40 |

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 | А | 6717 | 0 | 6632 | 1241 | 0 |
| 2 | А | 10 | 0 | 0 | 6 | 0 |
| 3 | А | 41 | 0 | 0 | 5 | 0 |
| All | All | 6768 | 0 | 6632 | 1241 | 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 93.

All (1241) close contacts within the same asymmetric unit are listed below, sorted by their clash magnitude.



| Atom 1 | Atom 2 | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:219:ARG:NH2 | 1:A:437:GLU:H | 1.41 | 1.18 |
| 1:A:276:ALA:HB1 | 1:A:281:VAL:HG21 | 1.27 | 1.14 |
| 1:A:219:ARG:HH21 | 1:A:437:GLU:N | 1.46 | 1.13 |
| 1:A:574:LYS:HD3 | 1:A:593:GLU:HB2 | 1.20 | 1.13 |
| 1:A:5:VAL:HG22 | 1:A:42:VAL:HA | 1.27 | 1.12 |
| 1:A:401:GLY:H | 1:A:499:ASP:HB3 | 1.11 | 1.11 |
| 1:A:105:THR:HG21 | 1:A:279:GLU:HG2 | 1.25 | 1.10 |
| 1:A:429:LEU:HD23 | 1:A:430:GLU:HG2 | 1.35 | 1.07 |
| 1:A:285:VAL:HG23 | 1:A:449:ARG:HH12 | 1.16 | 1.07 |
| 1:A:244:PHE:H | 1:A:327:GLU:HG3 | 1.12 | 1.07 |
| 1:A:419:GLU:HA | 1:A:441:ALA:HB1 | 1.36 | 1.06 |
| 1:A:373:LEU:HD21 | 1:A:864:LEU:HD12 | 1.39 | 1.05 |
| 1:A:477:ASN:HD21 | 1:A:480:ALA:HB3 | 1.19 | 1.04 |
| 1:A:732:LYS:HG2 | 1:A:734:SER:H | 1.22 | 1.04 |
| 1:A:137:ILE:HG21 | 1:A:183:PHE:HB3 | 1.40 | 1.03 |
| 1:A:580:LEU:HD13 | 1:A:648:VAL:HG22 | 1.36 | 1.02 |
| 1:A:754:ASP:HB3 | 1:A:818:LYS:HB3 | 1.40 | 1.00 |
| 1:A:682:ARG:HH12 | 1:A:730:LYS:HE3 | 1.23 | 0.99 |
| 1:A:147:VAL:HG12 | 1:A:151:HIS:HD2 | 1.27 | 0.99 |
| 1:A:406:LYS:HD2 | 1:A:493:GLY:HA2 | 1.43 | 0.97 |
| 1:A:342:THR:HG22 | 1:A:344:PRO:HD2 | 1.45 | 0.96 |
| 1:A:844:CYS:HB3 | 1:A:849:LEU:HD12 | 1.45 | 0.95 |
| 1:A:700:VAL:HG13 | 1:A:737:GLN:HB3 | 1.48 | 0.95 |
| 1:A:685:MET:HB3 | 1:A:728:VAL:HG11 | 1.45 | 0.94 |
| 1:A:308:LEU:HD13 | 1:A:333:PHE:HE1 | 1.27 | 0.93 |
| 1:A:477:ASN:ND2 | 1:A:480:ALA:HB3 | 1.83 | 0.93 |
| 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:111:LEU:HG | 1.51 | 0.93 |
| 1:A:619:LEU:HB2 | 1:A:680:GLN:HE22 | 1.34 | 0.92 |
| 1:A:536:VAL:HG11 | 1:A:859:VAL:HG13 | 1.52 | 0.92 |
| 1:A:4:TRP:CE3 | 1:A:61:ILE:HD11 | 2.05 | 0.92 |
| 1:A:682:ARG:NH1 | 1:A:730:LYS:HE3 | 1.82 | 0.92 |
| 1:A:562:THR:HG1 | 1:A:566:PHE:HE1 | 1.06 | 0.92 |
| 1:A:48:THR:HG22 | 1:A:52:ASN:ND2 | 1.85 | 0.92 |
| 1:A:156:ILE:HG13 | 1:A:183:PHE:HZ | 1.36 | 0.91 |
| 1:A:700:VAL:HG13 | 1:A:737:GLN:CB | 2.01 | 0.91 |
| 1:A:6:TYR:HD1 | 1:A:43:THR:HG1 | 1.16 | 0.91 |
| 1:A:308:LEU:HD13 | 1:A:333:PHE:CE1 | 2.05 | 0.90 |
| 1:A:74:GLU:HG3 | 1:A:75:LEU:H | 1.37 | 0.90 |
| 1:A:83:THR:HA | 1:A:115:ALA:HB2 | 1.54 | 0.90 |
| 1:A:140:TYR:CE1 | 1:A:197:PRO:HG3 | 2.07 | 0.90 |
| 1:A:401:GLY:N | 1:A:499:ASP:HB3 | 1.86 | 0.90 |
| 1:A:410:THR:HG22 | 1:A:412:ASP:H | 1.37 | 0.89 |



| | lo ao pagom | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:572:ILE:HG23 | 1:A:573:MET:H | 1.36 | 0.89 |
| 1:A:65:ILE:HG21 | 1:A:204:LEU:HD21 | 1.54 | 0.88 |
| 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:111:LEU:CD2 | 2.03 | 0.88 |
| 1:A:276:ALA:HB1 | 1:A:281:VAL:CG2 | 2.02 | 0.88 |
| 1:A:48:THR:HG22 | 1:A:52:ASN:HD21 | 1.38 | 0.88 |
| 1:A:105:THR:CG2 | 1:A:279:GLU:HG2 | 2.05 | 0.87 |
| 1:A:92:ARG:HB3 | 1:A:105:THR:HB | 1.54 | 0.87 |
| 1:A:224:ARG:HG2 | 1:A:229:ILE:HB | 1.56 | 0.87 |
| 1:A:342:THR:HG21 | 1:A:400:PRO:HG2 | 1.56 | 0.87 |
| 1:A:262:SER:HB3 | 1:A:400:PRO:HD3 | 1.57 | 0.86 |
| 1:A:134:ARG:HA | 1:A:180:ALA:HB2 | 1.57 | 0.86 |
| 1:A:251:SER:HB3 | 1:A:328:GLU:H | 1.39 | 0.86 |
| 1:A:381:PHE:CD2 | 1:A:402:ALA:HB1 | 2.10 | 0.86 |
| 1:A:137:ILE:HA | 1:A:196:PHE:CZ | 2.10 | 0.85 |
| 1:A:402:ALA:CB | 1:A:498:LEU:HG | 2.06 | 0.85 |
| 1:A:429:LEU:HD23 | 1:A:430:GLU:CG | 2.06 | 0.85 |
| 1:A:580:LEU:HD13 | 1:A:648:VAL:CG2 | 2.06 | 0.85 |
| 1:A:243:VAL:HA | 1:A:327:GLU:OE2 | 1.76 | 0.84 |
| 1:A:603:LYS:HG2 | 1:A:687:ALA:HB1 | 1.59 | 0.84 |
| 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:111:LEU:HD23 | 1.55 | 0.84 |
| 1:A:786:LEU:HG | 1:A:790:TYR:CE2 | 2.13 | 0.84 |
| 1:A:268:ILE:HG13 | 1:A:306:MET:SD | 2.19 | 0.83 |
| 1:A:837:ASP:H | 1:A:841:VAL:HG23 | 1.44 | 0.82 |
| 1:A:191:MET:CE | 1:A:191:MET:HA | 2.10 | 0.82 |
| 1:A:272:TYR:CE2 | 1:A:289:GLN:HB2 | 2.15 | 0.82 |
| 1:A:285:VAL:HB | 1:A:449:ARG:HH22 | 1.43 | 0.82 |
| 1:A:574:LYS:CD | 1:A:593:GLU:HB2 | 2.08 | 0.82 |
| 1:A:402:ALA:HB2 | 1:A:498:LEU:HG | 1.61 | 0.82 |
| 1:A:732:LYS:HG2 | 1:A:734:SER:N | 1.93 | 0.82 |
| 1:A:575:ILE:O | 1:A:579:ILE:HG13 | 1.79 | 0.82 |
| 1:A:352:ASP:O | 1:A:356:GLU:HG3 | 1.80 | 0.81 |
| 1:A:258:THR:HG21 | 1:A:320:GLN:HB2 | 1.62 | 0.81 |
| 1:A:270:GLY:O | 1:A:291:ILE:HG22 | 1.80 | 0.81 |
| 1:A:426:LEU:O | 1:A:445:ILE:HG22 | 1.79 | 0.81 |
| 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:200:PRO:HG2 | 1.63 | 0.81 |
| 1:A:260:ASN:HB2 | 3:A:908:HOH:O | 1.81 | 0.81 |
| 1:A:488:HIS:HB2 | 1:A:490:PHE:CZ | 2.14 | 0.81 |
| 1:A:373:LEU:CD2 | 1:A:864:LEU:HD12 | 2.11 | 0.81 |
| 1:A:842:GLU:O | 1:A:846:LYS:HG2 | 1.81 | 0.80 |
| 1:A:88:LEU:CD1 | 1:A:111:LEU:HG | 2.11 | 0.80 |
| 1:A:137:ILE:HD12 | 1:A:180:ALA:HB1 | 1.64 | 0.80 |



| | | Interatomic | Clash | |
|------------------|------------------|--------------|-------------|--|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) | |
| 1:A:845:HIS:CE1 | 1:A:870:ALA:HB2 | 2.16 | 0.80 | |
| 1:A:392:ILE:HG22 | 1:A:488:HIS:CE1 | 2.16 | 0.80 | |
| 1:A:460:ALA:HB1 | 1:A:465:THR:O | 1.82 | 0.80 | |
| 1:A:71:TRP:CZ2 | 1:A:75:LEU:HD22 | 2.17 | 0.80 | |
| 1:A:28:GLU:O | 1:A:32:LEU:HG | 1.82 | 0.80 | |
| 1:A:136:PHE:HE2 | 1:A:196:PHE:HE1 | 1.30 | 0.80 | |
| 1:A:244:PHE:N | 1:A:327:GLU:HG3 | 1.96 | 0.80 | |
| 1:A:83:THR:HB | 1:A:114:VAL:HG12 | 1.63 | 0.79 | |
| 1:A:148:PRO:HB2 | 1:A:150:SER:OG | 1.82 | 0.79 | |
| 1:A:496:ILE:HB | 1:A:504:LYS:HB2 | 1.64 | 0.79 | |
| 1:A:107:LEU:HD13 | 1:A:277:GLN:CG | 2.11 | 0.79 | |
| 1:A:141:SER:OG | 1:A:147:VAL:HG23 | 1.82 | 0.79 | |
| 1:A:278:GLY:O | 1:A:280:ASP:N | 2.16 | 0.79 | |
| 1:A:285:VAL:HG23 | 1:A:449:ARG:NH1 | 1.96 | 0.79 | |
| 1:A:404:ALA:HB2 | 1:A:496:ILE:HG23 | 1.65 | 0.79 | |
| 1:A:92:ARG:HB3 | 1:A:105:THR:CB | 2.12 | 0.79 | |
| 1:A:359:ILE:HG22 | 1:A:363:GLU:HB3 | 1.64 | 0.79 | |
| 1:A:359:ILE:HG22 | 1:A:363:GLU:CB | 2.12 | 0.78 | |
| 1:A:765:PHE:CD1 | 1:A:812:VAL:HG22 | 2.19 | 0.78 | |
| 1:A:301:CYS:SG | 1:A:326:ILE:HD13 | 2.23 | 0.78 | |
| 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:111:LEU:CG | 2.14 | 0.78 | |
| 1:A:745:GLU:C | 1:A:770:LEU:HD13 | 2.04 | 0.78 | |
| 1:A:754:ASP:CB | 1:A:818:LYS:HB3 | 2.14 | 0.78 | |
| 1:A:350:ALA:O | 1:A:354:VAL:HG23 | 1.84 | 0.78 | |
| 1:A:312:LEU:HB2 | 1:A:316:PHE:HE2 | 1.50 | 0.77 | |
| 1:A:574:LYS:HB2 | 1:A:574:LYS:NZ | 2.00 | 0.77 | |
| 1:A:97:ALA:O | 1:A:99:MET:HG3 | 1.85 | 0.77 | |
| 1:A:366:VAL:HG11 | 1:A:872:ASN:HB3 | 1.67 | 0.77 | |
| 1:A:480:ALA:O | 1:A:482:THR:HG23 | 1.84 | 0.77 | |
| 1:A:439:MET:HB3 | 1:A:463:MET:CE | 2.15 | 0.77 | |
| 1:A:854:CYS:SG | 1:A:859:VAL:HA | 2.25 | 0.77 | |
| 1:A:73:GLU:HA | 1:A:76:ASN:ND2 | 2.00 | 0.76 | |
| 1:A:107:LEU:HD11 | 1:A:279:GLU:HB2 | 1.66 | 0.76 | |
| 1:A:386:LEU:HD21 | 1:A:498:LEU:CD1 | 2.15 | 0.76 | |
| 1:A:76:ASN:O | 1:A:78:LYS:HG2 | 1.85 | 0.76 | |
| 1:A:225:ARG:HD2 | 1:A:226:MET:N | 2.01 | 0.76 | |
| 1:A:131:ASP:O | 1:A:134:ARG:HG3 | 1.85 | 0.76 | |
| 1:A:73:GLU:CD | 1:A:79:LYS:HE2 | 2.06 | 0.76 | |
| 1:A:255:VAL:HG21 | 1:A:453:THR:OG1 | 1.86 | 0.76 | |
| 1:A:269:TYR:HA | 3:A:904:HOH:O | 1.85 | 0.76 | |
| 1:A:767:THR:OG1 | 1:A:832:GLY:HA3 | 1.85 | 0.76 | |



| | lo uo pugo | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:584:VAL:O | 1:A:588:GLU:HG3 | 1.84 | 0.76 |
| 1:A:214:SER:O | 1:A:217:ASN:HB3 | 1.85 | 0.75 |
| 1:A:261:PRO:HD2 | 1:A:269:TYR:CD1 | 2.20 | 0.75 |
| 1:A:107:LEU:HD12 | 1:A:139:MET:CE | 2.16 | 0.75 |
| 1:A:100:PRO:HA | 2:A:902:SO4:O1 | 1.86 | 0.75 |
| 1:A:254:GLY:HA3 | 1:A:324:PHE:CZ | 2.22 | 0.75 |
| 1:A:779:ARG:HG3 | 1:A:779:ARG:HH11 | 1.51 | 0.75 |
| 1:A:419:GLU:HA | 1:A:441:ALA:CB | 2.13 | 0.75 |
| 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:111:LEU:HG | 1.69 | 0.75 |
| 1:A:191:MET:HA | 1:A:191:MET:HE3 | 1.69 | 0.75 |
| 1:A:405:GLY:C | 1:A:494:ASP:HA | 2.06 | 0.75 |
| 1:A:427:VAL:CG2 | 1:A:446:LEU:HD13 | 2.16 | 0.75 |
| 1:A:767:THR:O | 1:A:771:THR:HB | 1.87 | 0.75 |
| 1:A:223:TYR:HD2 | 1:A:436:ILE:HG12 | 1.49 | 0.75 |
| 1:A:571:ARG:HB3 | 1:A:594:LEU:HD21 | 1.68 | 0.74 |
| 1:A:483:PHE:CE1 | 1:A:490:PHE:HB2 | 2.23 | 0.74 |
| 1:A:476:ILE:HG23 | 1:A:483:PHE:HB3 | 1.67 | 0.74 |
| 1:A:155:ILE:O | 1:A:159:MET:HB2 | 1.88 | 0.74 |
| 1:A:312:LEU:HB2 | 1:A:316:PHE:CE2 | 2.22 | 0.74 |
| 1:A:83:THR:HB | 1:A:114:VAL:CG1 | 2.18 | 0.74 |
| 1:A:386:LEU:CD1 | 1:A:510:ILE:HD12 | 2.18 | 0.74 |
| 1:A:36:ILE:HG22 | 1:A:333:PHE:O | 1.86 | 0.74 |
| 1:A:255:VAL:HG11 | 1:A:453:THR:HB | 1.70 | 0.74 |
| 1:A:378:HIS:HB3 | 1:A:379:PRO:HD2 | 1.68 | 0.74 |
| 1:A:406:LYS:HA | 1:A:494:ASP:H | 1.52 | 0.74 |
| 1:A:127:ARG:HD2 | 1:A:171:LEU:O | 1.87 | 0.74 |
| 1:A:134:ARG:CA | 1:A:180:ALA:HB2 | 2.17 | 0.74 |
| 1:A:439:MET:HB3 | 1:A:463:MET:HE2 | 1.69 | 0.74 |
| 1:A:692:LYS:HG2 | 1:A:697:ILE:O | 1.88 | 0.74 |
| 1:A:147:VAL:HG12 | 1:A:151:HIS:CD2 | 2.19 | 0.74 |
| 1:A:134:ARG:HB3 | 1:A:180:ALA:HB2 | 1.69 | 0.73 |
| 1:A:183:PHE:O | 1:A:186:VAL:HG12 | 1.88 | 0.73 |
| 1:A:670:ALA:HA | 1:A:673:TYR:O | 1.88 | 0.73 |
| 1:A:244:PHE:H | 1:A:327:GLU:CG | 1.99 | 0.73 |
| 1:A:658:PHE:C | 1:A:659:ASN:HD22 | 1.90 | 0.73 |
| 1:A:698:ASP:O | 1:A:699:ILE:HD13 | 1.87 | 0.73 |
| 1:A:181:GLU:HG2 | 1:A:184:LYS:NZ | 2.02 | 0.73 |
| 1:A:230:PRO:HG2 | 1:A:233:TRP:NE1 | 2.04 | 0.73 |
| 1:A:571:ARG:HB3 | 1:A:594:LEU:CD2 | 2.17 | 0.73 |
| 1:A:200:PRO:HA | 1:A:203:GLN:HG3 | 1.70 | 0.73 |
| 1:A:622:PRO:HB3 | 1:A:664:HIS:O | 1.87 | 0.73 |



| | lo uo pugo | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:400:PRO:HA | 1:A:499:ASP:CB | 2.18 | 0.73 |
| 1:A:197:PRO:O | 1:A:203:GLN:HG2 | 1.87 | 0.73 |
| 1:A:692:LYS:O | 1:A:692:LYS:HD3 | 1.88 | 0.73 |
| 1:A:186:VAL:HA | 1:A:189:GLU:CD | 2.09 | 0.73 |
| 1:A:134:ARG:CB | 1:A:180:ALA:HB2 | 2.19 | 0.72 |
| 1:A:207:ALA:O | 1:A:211:VAL:HG23 | 1.89 | 0.72 |
| 1:A:213:ARG:O | 1:A:213:ARG:HD3 | 1.88 | 0.72 |
| 1:A:547:LEU:O | 1:A:550:VAL:HG22 | 1.89 | 0.72 |
| 1:A:779:ARG:HG2 | 1:A:800:PHE:CG | 2.24 | 0.72 |
| 1:A:326:ILE:HG12 | 1:A:331:LEU:HD12 | 1.70 | 0.72 |
| 1:A:566:PHE:HZ | 1:A:680:GLN:HE21 | 1.34 | 0.72 |
| 1:A:657:GLU:OE1 | 1:A:663:GLY:HA3 | 1.90 | 0.72 |
| 1:A:667:CYS:O | 1:A:671:VAL:HG23 | 1.89 | 0.72 |
| 1:A:319:MET:HB3 | 1:A:341:ARG:NH1 | 2.04 | 0.72 |
| 1:A:92:ARG:CB | 1:A:105:THR:HB | 2.18 | 0.72 |
| 1:A:156:ILE:HG13 | 1:A:183:PHE:CZ | 2.24 | 0.72 |
| 1:A:199:GLU:HB3 | 1:A:202:ASP:HB2 | 1.71 | 0.71 |
| 1:A:148:PRO:HD2 | 1:A:151:HIS:CD2 | 2.25 | 0.71 |
| 1:A:13:ALA:HA | 1:A:24:CYS:SG | 2.30 | 0.71 |
| 1:A:298:MET:HG2 | 1:A:301:CYS:SG | 2.30 | 0.71 |
| 1:A:768:ASN:O | 1:A:772:GLN:HG3 | 1.89 | 0.71 |
| 1:A:775:PHE:HD2 | 1:A:777:PHE:CZ | 2.07 | 0.71 |
| 1:A:109:LEU:HB2 | 1:A:136:PHE:HE1 | 1.54 | 0.71 |
| 1:A:157:ASP:O | 1:A:161:GLU:HB2 | 1.89 | 0.71 |
| 1:A:406:LYS:HA | 1:A:494:ASP:N | 2.06 | 0.71 |
| 1:A:259:ARG:NH2 | 1:A:353:LEU:HD21 | 2.05 | 0.71 |
| 1:A:652:VAL:HA | 1:A:655:LEU:HD12 | 1.72 | 0.71 |
| 1:A:317:ARG:HH11 | 1:A:317:ARG:HB3 | 1.56 | 0.71 |
| 1:A:668:ARG:H | 1:A:668:ARG:HD2 | 1.56 | 0.71 |
| 1:A:136:PHE:CE2 | 1:A:196:PHE:HE1 | 2.08 | 0.70 |
| 1:A:691:VAL:HA | 1:A:694:GLU:OE1 | 1.91 | 0.70 |
| 1:A:519:GLY:O | 1:A:523:ARG:HG3 | 1.91 | 0.70 |
| 1:A:100:PRO:HA | 2:A:902:SO4:S | 2.32 | 0.70 |
| 1:A:599:LYS:O | 1:A:603:LYS:HG3 | 1.91 | 0.70 |
| 1:A:678:LYS:HG2 | 1:A:724:VAL:HG21 | 1.73 | 0.70 |
| 1:A:766:GLY:O | 1:A:770:LEU:HB2 | 1.91 | 0.70 |
| 1:A:55:LYS:HD2 | 1:A:213:ARG:HH12 | 1.56 | 0.70 |
| 1:A:4:TRP:CZ3 | 1:A:49:GLU:HG2 | 2.26 | 0.70 |
| 1:A:55:LYS:HD2 | 1:A:213:ARG:NH1 | 2.06 | 0.70 |
| 1:A:291:ILE:HD12 | 1:A:291:ILE:O | 1.90 | 0.70 |
| 1:A:546:THR:O | 1:A:550:VAL:HG13 | 1.92 | 0.70 |



| | | Interatomic | Clash | |
|------------------|------------------|--------------|-------------|--|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) | |
| 1:A:93:SER:OG | 1:A:103:MET:HB3 | 1.92 | 0.70 | |
| 1:A:107:LEU:HD12 | 1:A:139:MET:SD | 2.30 | 0.70 | |
| 1:A:772:GLN:NE2 | 1:A:779:ARG:HB2 | 2.06 | 0.70 | |
| 1:A:823:ARG:O | 1:A:826:LEU:HB2 | 1.91 | 0.69 | |
| 1:A:7:LYS:HE3 | 1:A:10:GLU:OE1 | 1.92 | 0.69 | |
| 1:A:334:LEU:N | 1:A:334:LEU:HD23 | 2.07 | 0.69 | |
| 1:A:258:THR:CG2 | 1:A:320:GLN:HB2 | 2.22 | 0.69 | |
| 1:A:665:ARG:O | 1:A:707:LEU:HD23 | 1.91 | 0.69 | |
| 1:A:18:LEU:HA | 1:A:44:THR:OG1 | 1.92 | 0.69 | |
| 1:A:370:ALA:HB2 | 1:A:868:GLN:OE1 | 1.92 | 0.69 | |
| 1:A:693:GLU:O | 1:A:695:THR:N | 2.26 | 0.69 | |
| 1:A:517:VAL:HG23 | 1:A:522:GLU:OE2 | 1.93 | 0.69 | |
| 1:A:621:PRO:HB3 | 1:A:625:GLU:CD | 2.13 | 0.69 | |
| 1:A:644:THR:HG22 | 1:A:646:ALA:H | 1.57 | 0.69 | |
| 1:A:25:ASN:O | 1:A:29:MET:HG3 | 1.93 | 0.69 | |
| 1:A:81:GLY:HA2 | 1:A:110:GLY:O | 1.93 | 0.69 | |
| 1:A:146:GLU:CB | 1:A:187:TYR:HE2 | 2.06 | 0.69 | |
| 1:A:728:VAL:O | 1:A:730:LYS:HG2 | 1.93 | 0.68 | |
| 1:A:176:LEU:O | 1:A:179:LEU:N | 2.26 | 0.68 | |
| 1:A:472:GLY:O | 1:A:474:ILE:HG13 | 1.93 | 0.68 | |
| 1:A:728:VAL:O | 1:A:730:LYS:N | 2.27 | 0.68 | |
| 1:A:572:ILE:HG23 | 1:A:573:MET:N | 2.08 | 0.68 | |
| 1:A:595:ILE:N | 1:A:596:PRO:HD2 | 2.09 | 0.68 | |
| 1:A:63:ASP:O | 1:A:67:GLU:N | 2.27 | 0.68 | |
| 1:A:71:TRP:CE2 | 1:A:75:LEU:HD22 | 2.29 | 0.68 | |
| 1:A:127:ARG:HG3 | 1:A:176:LEU:CD1 | 2.24 | 0.68 | |
| 1:A:401:GLY:H | 1:A:499:ASP:CB | 1.98 | 0.68 | |
| 1:A:753:ALA:CB | 1:A:815:ALA:HA | 2.24 | 0.68 | |
| 1:A:37:PRO:O | 1:A:240:GLN:NE2 | 2.26 | 0.68 | |
| 1:A:382:ASN:ND2 | 1:A:511:GLU:OE2 | 2.27 | 0.68 | |
| 1:A:580:LEU:HD11 | 1:A:637:LEU:HD21 | 1.74 | 0.68 | |
| 1:A:16:ARG:HG3 | 1:A:20:GLY:O | 1.93 | 0.67 | |
| 1:A:386:LEU:HD12 | 1:A:510:ILE:HD12 | 1.76 | 0.67 | |
| 1:A:803:LEU:HG | 1:A:803:LEU:O | 1.94 | 0.67 | |
| 1:A:107:LEU:HB2 | 1:A:139:MET:HE1 | 1.76 | 0.67 | |
| 1:A:487:GLY:H | 1:A:488:HIS:HD2 | 1.41 | 0.67 | |
| 1:A:35:PRO:O | 1:A:332:TYR:HA | 1.93 | 0.67 | |
| 1:A:224:ARG:CG | 1:A:229:ILE:HB | 2.25 | 0.67 | |
| 1:A:758:GLU:O | 1:A:823:ARG:NH2 | 2.27 | 0.67 | |
| 1:A:535:LYS:O | 1:A:852:VAL:HG23 | 1.93 | 0.67 | |
| 1:A:76:ASN:OD1 | 1:A:87:LEU:HD13 | 1.94 | 0.67 | |



| | hi a | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:574:LYS:HD3 | 1:A:593:GLU:CB | 2.11 | 0.67 |
| 1:A:644:THR:O | 1:A:647:GLU:N | 2.27 | 0.67 |
| 1:A:73:GLU:O | 1:A:77:GLY:N | 2.28 | 0.67 |
| 1:A:100:PRO:HB2 | 1:A:458:VAL:CG1 | 2.25 | 0.67 |
| 1:A:104:ASP:HB3 | 1:A:143:VAL:CG1 | 2.25 | 0.67 |
| 1:A:18:LEU:HB3 | 1:A:43:THR:HG23 | 1.76 | 0.67 |
| 1:A:37:PRO:HD2 | 1:A:240:GLN:HE22 | 1.60 | 0.67 |
| 1:A:211:VAL:HG11 | 1:A:237:VAL:HB | 1.76 | 0.67 |
| 1:A:251:SER:HB3 | 1:A:328:GLU:N | 2.09 | 0.67 |
| 1:A:282:VAL:HG12 | 1:A:453:THR:HG21 | 1.75 | 0.67 |
| 1:A:317:ARG:O | 1:A:367:ARG:NH1 | 2.27 | 0.67 |
| 1:A:419:GLU:CA | 1:A:441:ALA:HB1 | 2.20 | 0.67 |
| 1:A:532:ARG:NH1 | 1:A:534:LEU:O | 2.28 | 0.67 |
| 1:A:429:LEU:HA | 1:A:448:VAL:HG23 | 1.75 | 0.66 |
| 1:A:80:PHE:HA | 1:A:87:LEU:HB3 | 1.78 | 0.66 |
| 1:A:400:PRO:HA | 1:A:499:ASP:HB2 | 1.77 | 0.66 |
| 1:A:253:THR:HG21 | 1:A:278:GLY:N | 2.10 | 0.66 |
| 1:A:272:TYR:HD1 | 1:A:291:ILE:HA | 1.60 | 0.66 |
| 1:A:743:MET:HA | 1:A:764:SER:O | 1.96 | 0.66 |
| 1:A:260:ASN:HB3 | 1:A:265:GLU:HB2 | 1.77 | 0.66 |
| 1:A:396:LEU:H | 1:A:468:VAL:HG12 | 1.61 | 0.66 |
| 1:A:408:TYR:O | 1:A:426:LEU:HD12 | 1.96 | 0.66 |
| 1:A:537:ARG:NH2 | 1:A:557:ILE:O | 2.27 | 0.66 |
| 1:A:66:PHE:HD2 | 1:A:201:LYS:HZ3 | 1.44 | 0.66 |
| 1:A:109:LEU:HB2 | 1:A:136:PHE:CE1 | 2.29 | 0.66 |
| 1:A:57:ILE:HD12 | 1:A:57:ILE:H | 1.59 | 0.66 |
| 1:A:398:ALA:HB3 | 1:A:467:CYS:O | 1.95 | 0.66 |
| 1:A:213:ARG:HG2 | 1:A:213:ARG:HH11 | 1.61 | 0.66 |
| 1:A:732:LYS:CG | 1:A:734:SER:H | 2.06 | 0.66 |
| 1:A:803:LEU:CD2 | 1:A:843:PHE:HD2 | 2.08 | 0.66 |
| 1:A:259:ARG:HG2 | 1:A:266:LYS:HA | 1.77 | 0.66 |
| 1:A:137:ILE:HG22 | 1:A:152:PHE:HE1 | 1.61 | 0.65 |
| 1:A:674:PRO:O | 1:A:677:ALA:HB3 | 1.97 | 0.65 |
| 1:A:219:ARG:HH21 | 1:A:437:GLU:H | 0.70 | 0.65 |
| 1:A:386:LEU:HD13 | 1:A:510:ILE:HG21 | 1.78 | 0.65 |
| 1:A:543:PRO:HD3 | 1:A:605:MET:SD | 2.36 | 0.65 |
| 1:A:596:PRO:O | 1:A:599:LYS:HB3 | 1.96 | 0.65 |
| 1:A:366:VAL:CG1 | 1:A:872:ASN:HB3 | 2.26 | 0.65 |
| 1:A:718:LYS:HG3 | 1:A:740:ILE:HD13 | 1.78 | 0.65 |
| 1:A:126:PRO:O | 1:A:130:TYR:HB2 | 1.97 | 0.65 |
| 1:A:211:VAL:O | 1:A:213:ARG:N | 2.29 | 0.65 |



| | | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:213:ARG:HH11 | 1:A:213:ARG:CG | 2.10 | 0.65 |
| 1:A:524:ILE:HD12 | 1:A:527:TRP:CE3 | 2.32 | 0.65 |
| 1:A:169:THR:OG1 | 1:A:275:ASN:ND2 | 2.29 | 0.65 |
| 1:A:301:CYS:O | 1:A:304:GLN:HB2 | 1.96 | 0.65 |
| 1:A:837:ASP:H | 1:A:841:VAL:CG2 | 2.09 | 0.65 |
| 1:A:603:LYS:HD3 | 1:A:691:VAL:HG23 | 1.78 | 0.65 |
| 1:A:40:PHE:CE1 | 1:A:69:ILE:HD13 | 2.32 | 0.65 |
| 1:A:131:ASP:O | 1:A:135:ARG:HD3 | 1.97 | 0.65 |
| 1:A:735:ASP:OD1 | 1:A:735:ASP:N | 2.26 | 0.65 |
| 1:A:253:THR:CG2 | 1:A:278:GLY:HA2 | 2.27 | 0.65 |
| 1:A:155:ILE:HB | 1:A:183:PHE:HE1 | 1.62 | 0.65 |
| 1:A:516:SER:OG | 1:A:517:VAL:N | 2.28 | 0.65 |
| 1:A:270:GLY:C | 1:A:291:ILE:HG22 | 2.16 | 0.64 |
| 1:A:117:GLU:O | 1:A:120:ALA:HB3 | 1.97 | 0.64 |
| 1:A:223:TYR:HD2 | 1:A:436:ILE:CG1 | 2.09 | 0.64 |
| 1:A:27:ALA:O | 1:A:30:THR:HB | 1.96 | 0.64 |
| 1:A:341:ARG:NH1 | 3:A:922:HOH:O | 2.29 | 0.64 |
| 1:A:80:PHE:HB2 | 1:A:87:LEU:HD23 | 1.80 | 0.64 |
| 1:A:392:ILE:HD12 | 1:A:485:LEU:HB3 | 1.78 | 0.64 |
| 1:A:576:ARG:NH2 | 1:A:633:GLU:OE1 | 2.30 | 0.64 |
| 1:A:750:ALA:HB1 | 1:A:811:LEU:O | 1.97 | 0.64 |
| 1:A:88:LEU:CD2 | 1:A:111:LEU:HG | 2.27 | 0.64 |
| 1:A:146:GLU:HB3 | 1:A:187:TYR:HE2 | 1.62 | 0.64 |
| 1:A:689:ILE:O | 1:A:693:GLU:HG3 | 1.97 | 0.64 |
| 1:A:251:SER:CB | 1:A:328:GLU:H | 2.07 | 0.64 |
| 1:A:537:ARG:HD3 | 1:A:851:TYR:CD1 | 2.32 | 0.64 |
| 1:A:771:THR:HA | 1:A:808:VAL:HG21 | 1.80 | 0.64 |
| 1:A:337:ARG:NH1 | 2:A:902:SO4:O3 | 2.30 | 0.64 |
| 1:A:368:ILE:HB | 1:A:864:LEU:HD11 | 1.78 | 0.64 |
| 1:A:386:LEU:HD21 | 1:A:498:LEU:HD11 | 1.80 | 0.64 |
| 1:A:70:THR:O | 1:A:74:GLU:HG2 | 1.97 | 0.64 |
| 1:A:318:ASP:OD2 | 1:A:341:ARG:NH2 | 2.31 | 0.64 |
| 1:A:592:ASN:HA | 1:A:595:ILE:HD12 | 1.79 | 0.63 |
| 1:A:316:PHE:HB2 | 1:A:320:GLN:NE2 | 2.14 | 0.63 |
| 1:A:485:LEU:HD23 | 1:A:486:GLY:H | 1.64 | 0.63 |
| 1:A:433:PRO:HD3 | 1:A:455:HIS:NE2 | 2.13 | 0.63 |
| 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:10:GLU:HB2 | 1.80 | 0.63 |
| 1:A:12:ASN:O | 1:A:24:CYS:HB2 | 1.99 | 0.63 |
| 1:A:474:ILE:HG22 | 1:A:476:ILE:HG13 | 1.81 | 0.63 |
| 1:A:708:VAL:HG21 | 1:A:714:LEU:HB2 | 1.81 | 0.63 |
| 1:A:39:GLY:HA2 | 1:A:72:LEU:HD21 | 1.78 | 0.63 |



| | lo ao pagom | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:386:LEU:HA | 1:A:510:ILE:HD12 | 1.80 | 0.63 |
| 1:A:578:MET:CG | 1:A:587:ARG:HB3 | 2.29 | 0.63 |
| 1:A:89:VAL:O | 1:A:109:LEU:N | 2.26 | 0.63 |
| 1:A:609:LEU:O | 1:A:612:ARG:HB2 | 1.98 | 0.63 |
| 1:A:645:LEU:O | 1:A:649:LYS:HG3 | 1.98 | 0.63 |
| 1:A:728:VAL:HA | 1:A:730:LYS:HE2 | 1.81 | 0.63 |
| 1:A:411:ALA:O | 1:A:414:ALA:HB3 | 1.99 | 0.62 |
| 1:A:272:TYR:HE2 | 1:A:289:GLN:NE2 | 1.97 | 0.62 |
| 1:A:107:LEU:HD13 | 1:A:277:GLN:OE1 | 1.99 | 0.62 |
| 1:A:392:ILE:CD1 | 1:A:485:LEU:HD13 | 2.29 | 0.62 |
| 1:A:395:ALA:O | 1:A:396:LEU:HD12 | 1.99 | 0.62 |
| 1:A:828:CYS:N | 1:A:850:ASN:OD1 | 2.28 | 0.62 |
| 1:A:74:GLU:HG3 | 1:A:75:LEU:N | 2.10 | 0.62 |
| 1:A:404:ALA:O | 1:A:423:ARG:HB3 | 2.00 | 0.62 |
| 1:A:104:ASP:HB3 | 1:A:143:VAL:HG11 | 1.81 | 0.62 |
| 1:A:324:PHE:HA | 1:A:332:TYR:O | 1.99 | 0.62 |
| 1:A:558:GLY:HA3 | 1:A:853:SER:OG | 1.99 | 0.62 |
| 1:A:621:PRO:HB3 | 1:A:625:GLU:OE1 | 2.00 | 0.62 |
| 1:A:779:ARG:HG3 | 1:A:779:ARG:NH1 | 2.12 | 0.62 |
| 1:A:431:THR:OG1 | 1:A:456:ALA:HB2 | 2.00 | 0.62 |
| 1:A:578:MET:HA | 1:A:581:SER:OG | 2.00 | 0.62 |
| 1:A:578:MET:HB2 | 1:A:590:ALA:CB | 2.30 | 0.62 |
| 1:A:592:ASN:HA | 1:A:595:ILE:CD1 | 2.29 | 0.62 |
| 1:A:732:LYS:HG2 | 1:A:734:SER:CA | 2.28 | 0.62 |
| 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:200:PRO:CG | 2.29 | 0.62 |
| 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:111:LEU:CG | 2.27 | 0.62 |
| 1:A:20:GLY:HA2 | 1:A:96:ARG:HA | 1.81 | 0.62 |
| 1:A:685:MET:CE | 1:A:736:MET:HG2 | 2.30 | 0.62 |
| 1:A:427:VAL:O | 1:A:428:ARG:HG2 | 2.00 | 0.61 |
| 1:A:713:GLU:O | 1:A:716:PHE:N | 2.31 | 0.61 |
| 1:A:76:ASN:O | 1:A:78:LYS:N | 2.33 | 0.61 |
| 1:A:400:PRO:HA | 1:A:499:ASP:HB3 | 1.81 | 0.61 |
| 1:A:427:VAL:HG22 | 1:A:446:LEU:HD13 | 1.80 | 0.61 |
| 1:A:550:VAL:HA | 1:A:554:ALA:HB3 | 1.81 | 0.61 |
| 1:A:548:ASN:O | 1:A:551:LYS:HB3 | 2.00 | 0.61 |
| 1:A:704:MET:SD | 1:A:764:SER:HB3 | 2.40 | 0.61 |
| 1:A:344:PRO:O | 1:A:347:LEU:HB2 | 2.01 | 0.61 |
| 1:A:476:ILE:HA | 1:A:483:PHE:HA | 1.82 | 0.61 |
| 1:A:5:VAL:CG2 | 1:A:42:VAL:HA | 2.18 | 0.61 |
| 1:A:185:ALA:HA | 1:A:188:LYS:HB3 | 1.81 | 0.61 |
| 1:A:331:LEU:HG | 1:A:332:TYR:N | 2.15 | 0.61 |



| | A h o | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|-------------------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (\AA) | overlap (Å) |
| 1:A:616:VAL:HG23 | 1:A:702:GLU:O | 2.00 | 0.61 |
| 1:A:618:TYR:N | 1:A:704:MET:O | 2.29 | 0.61 |
| 1:A:180:ALA:HA | 1:A:183:PHE:HB2 | 1.82 | 0.61 |
| 1:A:269:TYR:OH | 1:A:452:MET:HB3 | 2.01 | 0.61 |
| 1:A:620:ASP:O | 1:A:665:ARG:HB2 | 2.01 | 0.61 |
| 1:A:842:GLU:HG3 | 1:A:869:ALA:HA | 1.82 | 0.61 |
| 1:A:65:ILE:HG21 | 1:A:204:LEU:CD2 | 2.30 | 0.61 |
| 1:A:155:ILE:HD11 | 1:A:186:VAL:HG21 | 1.82 | 0.61 |
| 1:A:472:GLY:O | 1:A:474:ILE:N | 2.27 | 0.61 |
| 1:A:34:MET:O | 1:A:36:ILE:N | 2.30 | 0.61 |
| 1:A:748:ARG:O | 1:A:751:LEU:HB2 | 2.00 | 0.61 |
| 1:A:779:ARG:HG2 | 1:A:800:PHE:CD2 | 2.35 | 0.61 |
| 1:A:123:THR:HG23 | 1:A:123:THR:O | 2.01 | 0.61 |
| 1:A:143:VAL:C | 1:A:145:MET:H | 2.04 | 0.61 |
| 1:A:803:LEU:HD23 | 1:A:843:PHE:HD2 | 1.64 | 0.61 |
| 1:A:271:GLU:HB3 | 1:A:288:PRO:HB2 | 1.83 | 0.60 |
| 1:A:603:LYS:O | 1:A:607:LYS:HG3 | 2.01 | 0.60 |
| 1:A:765:PHE:CE1 | 1:A:812:VAL:HG22 | 2.36 | 0.60 |
| 1:A:786:LEU:HG | 1:A:790:TYR:HE2 | 1.64 | 0.60 |
| 1:A:4:TRP:O | 1:A:43:THR:HB | 2.01 | 0.60 |
| 1:A:364:ALA:O | 1:A:368:ILE:HD12 | 2.00 | 0.60 |
| 1:A:648:VAL:O | 1:A:652:VAL:N | 2.33 | 0.60 |
| 1:A:661:MET:CE | 1:A:772:GLN:HB2 | 2.32 | 0.60 |
| 1:A:685:MET:HE3 | 1:A:736:MET:HG2 | 1.83 | 0.60 |
| 1:A:6:TYR:HD1 | 1:A:43:THR:OG1 | 1.83 | 0.60 |
| 1:A:305:PHE:O | 1:A:309:ALA:N | 2.31 | 0.60 |
| 1:A:401:GLY:O | 1:A:499:ASP:N | 2.27 | 0.60 |
| 1:A:775:PHE:CD2 | 1:A:777:PHE:CZ | 2.88 | 0.60 |
| 1:A:181:GLU:HG2 | 1:A:184:LYS:HZ1 | 1.66 | 0.60 |
| 1:A:386:LEU:HD13 | 1:A:510:ILE:HD12 | 1.84 | 0.60 |
| 1:A:820:ARG:HG2 | 1:A:826:LEU:HB3 | 1.82 | 0.60 |
| 1:A:420:LYS:HG3 | 1:A:442:ALA:C | 2.22 | 0.60 |
| 1:A:518:SER:O | 1:A:522:GLU:HG2 | 2.02 | 0.60 |
| 1:A:603:LYS:CG | 1:A:687:ALA:HB1 | 2.31 | 0.60 |
| 1:A:732:LYS:O | 1:A:734:SER:N | 2.34 | 0.60 |
| 1:A:294:LEU:HB3 | 1:A:302:TYR:HD1 | 1.67 | 0.60 |
| 1:A:392:ILE:HD11 | 1:A:485:LEU:HD13 | 1.83 | 0.60 |
| 1:A:138:GLN:HA | 1:A:152:PHE:CE1 | 2.37 | 0.60 |
| 1:A:434:GLU:HG3 | 1:A:434:GLU:O | 2.01 | 0.60 |
| 1:A:83:THR:HA | 1:A:115:ALA:CB | 2.30 | 0.59 |
| 1:A:405:GLY:O | 1:A:494:ASP:HA | 2.02 | 0.59 |



| | lo do pagom | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:563:GLU:OE1 | 1:A:617:ARG:NH1 | 2.35 | 0.59 |
| 1:A:140:TYR:HE2 | 1:A:203:GLN:O | 1.84 | 0.59 |
| 1:A:381:PHE:HB3 | 1:A:386:LEU:HD22 | 1.85 | 0.59 |
| 1:A:397:PRO:O | 1:A:452:MET:HE1 | 2.02 | 0.59 |
| 1:A:537:ARG:HD3 | 1:A:851:TYR:CG | 2.37 | 0.59 |
| 1:A:700:VAL:HG13 | 1:A:737:GLN:HB2 | 1.83 | 0.59 |
| 1:A:857:PHE:O | 1:A:860:PRO:HD2 | 2.02 | 0.59 |
| 1:A:559:LEU:CD1 | 1:A:617:ARG:HB3 | 2.32 | 0.59 |
| 1:A:689:ILE:HG21 | 1:A:731:GLU:HB2 | 1.83 | 0.59 |
| 1:A:790:TYR:OH | 1:A:798:ASP:HA | 2.02 | 0.59 |
| 1:A:827:LYS:HA | 1:A:850:ASN:OD1 | 2.03 | 0.59 |
| 1:A:12:ASN:OD1 | 1:A:13:ALA:N | 2.35 | 0.59 |
| 1:A:187:TYR:CE1 | 1:A:196:PHE:HA | 2.37 | 0.59 |
| 1:A:872:ASN:C | 1:A:872:ASN:HD22 | 2.06 | 0.59 |
| 1:A:33:GLY:O | 1:A:34:MET:HG2 | 2.03 | 0.59 |
| 1:A:603:LYS:CD | 1:A:691:VAL:HG23 | 2.32 | 0.59 |
| 1:A:668:ARG:HD2 | 1:A:668:ARG:N | 2.18 | 0.59 |
| 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:239:VAL:HG13 | 1.84 | 0.59 |
| 1:A:701:PRO:HD2 | 1:A:737:GLN:O | 2.02 | 0.59 |
| 1:A:732:LYS:HG2 | 1:A:734:SER:HA | 1.85 | 0.59 |
| 1:A:151:HIS:O | 1:A:154:LYS:N | 2.35 | 0.59 |
| 1:A:379:PRO:HB2 | 1:A:512:THR:HB | 1.85 | 0.59 |
| 1:A:718:LYS:HG3 | 1:A:740:ILE:CD1 | 2.33 | 0.59 |
| 1:A:109:LEU:HD11 | 1:A:203:GLN:HB2 | 1.84 | 0.58 |
| 1:A:225:ARG:NH1 | 1:A:225:ARG:HG3 | 2.18 | 0.58 |
| 1:A:477:ASN:OD1 | 1:A:480:ALA:N | 2.28 | 0.58 |
| 1:A:841:VAL:HB | 1:A:865:ALA:HB1 | 1.85 | 0.58 |
| 1:A:563:GLU:HG3 | 1:A:621:PRO:CD | 2.34 | 0.58 |
| 1:A:359:ILE:HG22 | 1:A:363:GLU:HB2 | 1.85 | 0.58 |
| 1:A:258:THR:HG23 | 1:A:320:GLN:O | 2.01 | 0.58 |
| 1:A:291:ILE:O | 1:A:302:TYR:HE1 | 1.86 | 0.58 |
| 1:A:290:PRO:HD2 | 1:A:293:GLN:OE1 | 2.03 | 0.58 |
| 1:A:445:ILE:O | 1:A:467:CYS:HA | 2.03 | 0.58 |
| 1:A:222:VAL:HG11 | 1:A:437:GLU:HG3 | 1.86 | 0.58 |
| 1:A:402:ALA:HA | 1:A:498:LEU:HA | 1.86 | 0.58 |
| 1:A:845:HIS:NE2 | 1:A:870:ALA:HB2 | 2.19 | 0.58 |
| 1:A:27:ALA:O | 1:A:31:ILE:HG12 | 2.04 | 0.58 |
| 1:A:71:TRP:CZ3 | 1:A:72:LEU:HD23 | 2.39 | 0.58 |
| 1:A:152:PHE:H | 1:A:152:PHE:HD2 | 1.49 | 0.58 |
| 1:A:294:LEU:CD2 | 1:A:298:MET:HB3 | 2.33 | 0.58 |
| 1:A:5:VAL:HG22 | 1:A:42:VAL:CA | 2.18 | 0.58 |



| | | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:867:ALA:O | 1:A:871:LEU:HB2 | 2.04 | 0.58 |
| 1:A:127:ARG:HG3 | 1:A:176:LEU:HD11 | 1.84 | 0.58 |
| 1:A:614:MET:O | 1:A:702:GLU:HB2 | 2.04 | 0.58 |
| 1:A:661:MET:HE1 | 1:A:772:GLN:HB2 | 1.86 | 0.58 |
| 1:A:130:TYR:O | 1:A:133:TYR:N | 2.36 | 0.57 |
| 1:A:261:PRO:HD2 | 1:A:269:TYR:CE1 | 2.38 | 0.57 |
| 1:A:591:LEU:HD22 | 1:A:679:MET:HE3 | 1.86 | 0.57 |
| 1:A:627:VAL:HB | 1:A:628:PRO:HD2 | 1.85 | 0.57 |
| 1:A:326:ILE:HA | 1:A:330:LYS:O | 2.05 | 0.57 |
| 1:A:669:LEU:O | 1:A:673:TYR:HD2 | 1.87 | 0.57 |
| 1:A:41:THR:OG1 | 1:A:238:ASN:HB3 | 2.04 | 0.57 |
| 1:A:617:ARG:HB2 | 1:A:704:MET:HE2 | 1.86 | 0.57 |
| 1:A:59:GLN:O | 1:A:61:ILE:N | 2.37 | 0.57 |
| 1:A:253:THR:HG21 | 1:A:278:GLY:CA | 2.35 | 0.57 |
| 1:A:138:GLN:HA | 1:A:152:PHE:CD1 | 2.40 | 0.57 |
| 1:A:409:PHE:O | 1:A:428:ARG:HD3 | 2.05 | 0.57 |
| 1:A:665:ARG:HG3 | 1:A:707:LEU:CD2 | 2.34 | 0.57 |
| 1:A:128:PHE:CE2 | 1:A:247:LYS:HD3 | 2.39 | 0.57 |
| 1:A:538:THR:CG2 | 1:A:540:ALA:HB2 | 2.34 | 0.57 |
| 1:A:718:LYS:O | 1:A:722:VAL:HB | 2.05 | 0.57 |
| 1:A:187:TYR:HE1 | 1:A:196:PHE:HA | 1.70 | 0.57 |
| 1:A:407:VAL:O | 1:A:492:GLU:HB3 | 2.04 | 0.57 |
| 1:A:563:GLU:OE2 | 1:A:620:ASP:N | 2.37 | 0.57 |
| 1:A:316:PHE:HD2 | 1:A:320:GLN:NE2 | 2.03 | 0.57 |
| 1:A:368:ILE:HG22 | 1:A:369:GLU:N | 2.19 | 0.57 |
| 1:A:701:PRO:O | 1:A:738:TYR:HA | 2.05 | 0.57 |
| 1:A:359:ILE:CG2 | 1:A:363:GLU:HB3 | 2.32 | 0.57 |
| 1:A:534:LEU:HD11 | 1:A:845:HIS:HA | 1.86 | 0.57 |
| 1:A:564:HIS:C | 1:A:566:PHE:H | 2.08 | 0.57 |
| 1:A:343:ALA:HB3 | 1:A:344:PRO:HD3 | 1.87 | 0.57 |
| 1:A:425:ILE:HG22 | 1:A:426:LEU:N | 2.19 | 0.57 |
| 1:A:474:ILE:HG23 | 1:A:484:GLU:O | 2.04 | 0.57 |
| 1:A:816:VAL:O | 1:A:820:ARG:HG3 | 2.05 | 0.57 |
| 1:A:826:LEU:HD23 | 1:A:827:LYS:O | 2.05 | 0.57 |
| 1:A:224:ARG:HG3 | 1:A:229:ILE:CG2 | 2.35 | 0.56 |
| 1:A:444:GLY:HA3 | 1:A:466:CYS:SG | 2.45 | 0.56 |
| 1:A:488:HIS:HB2 | 1:A:490:PHE:CE1 | 2.40 | 0.56 |
| 1:A:518:SER:HG | 1:A:520:SER:HG | 1.51 | 0.56 |
| 1:A:869:ALA:O | 1:A:873:ASN:HB2 | 2.04 | 0.56 |
| 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:201:LYS:HD3 | 1.70 | 0.56 |
| 1:A:155:ILE:HD11 | 1:A:186:VAL:CG2 | 2.35 | 0.56 |



| | A h o | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:224:ARG:HG3 | 1:A:229:ILE:HG21 | 1.87 | 0.56 |
| 1:A:379:PRO:HB2 | 1:A:512:THR:CG2 | 2.34 | 0.56 |
| 1:A:578:MET:HG2 | 1:A:587:ARG:HB3 | 1.87 | 0.56 |
| 1:A:840:SER:O | 1:A:842:GLU:N | 2.38 | 0.56 |
| 1:A:106:ILE:HG12 | 1:A:140:TYR:HA | 1.87 | 0.56 |
| 1:A:122:LYS:O | 1:A:122:LYS:HD3 | 2.04 | 0.56 |
| 1:A:386:LEU:O | 1:A:389:GLY:N | 2.37 | 0.56 |
| 1:A:458:VAL:HG22 | 1:A:461:ARG:NH2 | 2.20 | 0.56 |
| 1:A:602:PHE:CZ | 1:A:684:VAL:HG22 | 2.40 | 0.56 |
| 1:A:680:GLN:O | 1:A:684:VAL:HG23 | 2.05 | 0.56 |
| 1:A:178:GLU:O | 1:A:181:GLU:HB3 | 2.05 | 0.56 |
| 1:A:272:TYR:CD2 | 1:A:289:GLN:HB2 | 2.40 | 0.56 |
| 1:A:439:MET:O | 1:A:463:MET:HE1 | 2.06 | 0.56 |
| 1:A:864:LEU:HD22 | 1:A:868:GLN:NE2 | 2.20 | 0.56 |
| 1:A:109:LEU:CB | 1:A:136:PHE:HE1 | 2.18 | 0.56 |
| 1:A:8:PHE:O | 1:A:27:ALA:HB1 | 2.05 | 0.56 |
| 1:A:386:LEU:HA | 1:A:510:ILE:CD1 | 2.35 | 0.56 |
| 1:A:411:ALA:HB1 | 1:A:438:GLY:HA3 | 1.87 | 0.56 |
| 1:A:754:ASP:O | 1:A:822:THR:HG21 | 2.05 | 0.56 |
| 1:A:11:GLY:HA2 | 1:A:15:MET:CE | 2.36 | 0.56 |
| 1:A:771:THR:HG22 | 1:A:772:GLN:N | 2.21 | 0.56 |
| 1:A:57:ILE:CG2 | 1:A:61:ILE:HG21 | 2.35 | 0.56 |
| 1:A:107:LEU:HD12 | 1:A:139:MET:HE1 | 1.88 | 0.56 |
| 1:A:365:VAL:HG13 | 1:A:864:LEU:CD2 | 2.36 | 0.56 |
| 1:A:660:PRO:O | 1:A:665:ARG:NH2 | 2.34 | 0.56 |
| 1:A:781:ASP:O | 1:A:783:GLY:N | 2.39 | 0.56 |
| 1:A:71:TRP:O | 1:A:74:GLU:HG3 | 2.07 | 0.55 |
| 1:A:109:LEU:HG | 1:A:110:GLY:H | 1.70 | 0.55 |
| 1:A:498:LEU:C | 1:A:500:GLY:H | 2.07 | 0.55 |
| 1:A:134:ARG:HA | 1:A:180:ALA:CB | 2.33 | 0.55 |
| 1:A:584:VAL:HG13 | 1:A:675:GLU:CD | 2.27 | 0.55 |
| 1:A:11:GLY:HA2 | 1:A:15:MET:SD | 2.46 | 0.55 |
| 1:A:91:VAL:O | 1:A:105:THR:HA | 2.06 | 0.55 |
| 1:A:9:GLU:CD | 1:A:38:GLN:HE22 | 2.09 | 0.55 |
| 1:A:66:PHE:HD2 | 1:A:201:LYS:NZ | 2.03 | 0.55 |
| 1:A:331:LEU:HD23 | 1:A:333:PHE:CE1 | 2.42 | 0.55 |
| 1:A:21:GLY:O | 1:A:25:ASN:HB2 | 2.06 | 0.55 |
| 1:A:405:GLY:O | 1:A:495:TYR:N | 2.38 | 0.55 |
| 1:A:523:ARG:NH1 | 3:A:907:HOH:O | 2.39 | 0.55 |
| 1:A:574:LYS:HB2 | 1:A:574:LYS:HZ2 | 1.69 | 0.55 |
| 1:A:18:LEU:HB3 | 1:A:43:THR:CG2 | 2.36 | 0.55 |



| | | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|-------------------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (\AA) | overlap (Å) |
| 1:A:84:GLU:O | 1:A:118:GLY:O | 2.24 | 0.55 |
| 1:A:272:TYR:CD1 | 1:A:291:ILE:HA | 2.42 | 0.55 |
| 1:A:379:PRO:HB2 | 1:A:512:THR:CB | 2.36 | 0.55 |
| 1:A:566:PHE:HE2 | 1:A:679:MET:CE | 2.20 | 0.55 |
| 1:A:840:SER:O | 1:A:843:PHE:N | 2.39 | 0.55 |
| 1:A:51:TYR:O | 1:A:53:SER:N | 2.34 | 0.55 |
| 1:A:54:GLY:O | 1:A:55:LYS:HB2 | 2.07 | 0.55 |
| 1:A:311:LYS:HG2 | 1:A:312:LEU:N | 2.21 | 0.55 |
| 1:A:500:GLY:O | 1:A:502:THR:OG1 | 2.24 | 0.55 |
| 1:A:649:LYS:O | 1:A:653:ASP:N | 2.40 | 0.55 |
| 1:A:106:ILE:HD13 | 1:A:207:ALA:HB1 | 1.88 | 0.55 |
| 1:A:310:MET:O | 1:A:313:GLU:N | 2.39 | 0.55 |
| 1:A:386:LEU:HD12 | 1:A:510:ILE:CD1 | 2.35 | 0.55 |
| 1:A:536:VAL:CG1 | 1:A:859:VAL:HG13 | 2.33 | 0.55 |
| 1:A:37:PRO:HG2 | 1:A:240:GLN:CD | 2.27 | 0.54 |
| 1:A:410:THR:HG22 | 1:A:412:ASP:N | 2.14 | 0.54 |
| 1:A:424:VAL:HG22 | 1:A:441:ALA:O | 2.08 | 0.54 |
| 1:A:812:VAL:O | 1:A:816:VAL:HG23 | 2.07 | 0.54 |
| 1:A:57:ILE:H | 1:A:57:ILE:CD1 | 2.12 | 0.54 |
| 1:A:628:PRO:HB3 | 1:A:633:GLU:HB3 | 1.88 | 0.54 |
| 1:A:667:CYS:SG | 1:A:668:ARG:HD2 | 2.47 | 0.54 |
| 1:A:132:SER:O | 1:A:135:ARG:HB2 | 2.07 | 0.54 |
| 1:A:348:GLN:NE2 | 1:A:352:ASP:OD1 | 2.40 | 0.54 |
| 1:A:484:GLU:HG2 | 1:A:485:LEU:H | 1.72 | 0.54 |
| 1:A:107:LEU:HB2 | 1:A:139:MET:CE | 2.37 | 0.54 |
| 1:A:310:MET:O | 1:A:313:GLU:HB3 | 2.08 | 0.54 |
| 1:A:392:ILE:HD12 | 1:A:490:PHE:CZ | 2.42 | 0.54 |
| 1:A:522:GLU:O | 1:A:526:VAL:HG23 | 2.07 | 0.54 |
| 1:A:844:CYS:CB | 1:A:849:LEU:HD12 | 2.28 | 0.54 |
| 1:A:852:VAL:HG12 | 1:A:853:SER:H | 1.71 | 0.54 |
| 1:A:40:PHE:O | 1:A:239:VAL:N | 2.37 | 0.54 |
| 1:A:379:PRO:HB2 | 1:A:512:THR:HG21 | 1.89 | 0.54 |
| 1:A:829:GLY:HA3 | 1:A:851:TYR:CE2 | 2.41 | 0.54 |
| 1:A:101:GLY:O | 1:A:455:HIS:NE2 | 2.37 | 0.54 |
| 1:A:159:MET:HE2 | 1:A:175:ASP:O | 2.07 | 0.54 |
| 1:A:196:PHE:CD1 | 1:A:197:PRO:HD2 | 2.43 | 0.54 |
| 1:A:427:VAL:HG23 | 1:A:446:LEU:HD13 | 1.90 | 0.54 |
| 1:A:852:VAL:HG12 | 1:A:853:SER:N | 2.22 | 0.54 |
| 1:A:623:LEU:N | 1:A:623:LEU:HD23 | 2.23 | 0.54 |
| 1:A:378:HIS:HB3 | 1:A:379:PRO:CD | 2.38 | 0.54 |
| 1:A:420:LYS:HG2 | 1:A:443:GLU:OE1 | 2.07 | 0.54 |



| | A L O | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|-------------------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (\AA) | overlap (Å) |
| 1:A:440:HIS:HA | 1:A:463:MET:SD | 2.48 | 0.54 |
| 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:212:PHE:HZ | 1.73 | 0.53 |
| 1:A:79:LYS:HG2 | 1:A:82:ASP:HB2 | 1.90 | 0.53 |
| 1:A:262:SER:HB3 | 1:A:400:PRO:CD | 2.34 | 0.53 |
| 1:A:835:GLY:O | 1:A:841:VAL:HG22 | 2.07 | 0.53 |
| 1:A:107:LEU:HD13 | 1:A:277:GLN:HG3 | 1.88 | 0.53 |
| 1:A:392:ILE:HG13 | 1:A:485:LEU:HD13 | 1.90 | 0.53 |
| 1:A:479:GLU:HA | 1:A:479:GLU:OE2 | 2.09 | 0.53 |
| 1:A:844:CYS:HB3 | 1:A:849:LEU:CD1 | 2.29 | 0.53 |
| 1:A:140:TYR:OH | 1:A:206:GLY:HA3 | 2.08 | 0.53 |
| 1:A:375:GLN:HA | 1:A:378:HIS:CE1 | 2.43 | 0.53 |
| 1:A:119:PHE:CD2 | 1:A:129:ALA:HB2 | 2.44 | 0.53 |
| 1:A:837:ASP:HB3 | 1:A:840:SER:CB | 2.39 | 0.53 |
| 1:A:469:SER:O | 1:A:471:CYS:N | 2.42 | 0.53 |
| 1:A:578:MET:HG3 | 1:A:587:ARG:HB3 | 1.90 | 0.53 |
| 1:A:272:TYR:CE2 | 1:A:289:GLN:NE2 | 2.76 | 0.53 |
| 1:A:478:GLU:OE2 | 1:A:481:LYS:HG2 | 2.09 | 0.53 |
| 1:A:797:SER:OG | 1:A:802:ARG:HD3 | 2.09 | 0.53 |
| 1:A:106:ILE:CD1 | 1:A:207:ALA:HB1 | 2.39 | 0.53 |
| 1:A:489:THR:HG22 | 1:A:489:THR:O | 2.08 | 0.53 |
| 1:A:253:THR:HG21 | 1:A:278:GLY:HA2 | 1.90 | 0.53 |
| 1:A:312:LEU:HD12 | 1:A:320:GLN:HG3 | 1.90 | 0.53 |
| 1:A:317:ARG:HH12 | 1:A:359:ILE:HG23 | 1.74 | 0.53 |
| 1:A:564:HIS:HA | 1:A:567:PHE:HB2 | 1.90 | 0.53 |
| 1:A:257:PHE:CD1 | 1:A:321:ASP:HB2 | 2.43 | 0.53 |
| 1:A:609:LEU:O | 1:A:612:ARG:HD2 | 2.08 | 0.53 |
| 1:A:805:GLN:HB3 | 1:A:843:PHE:CE2 | 2.43 | 0.53 |
| 1:A:30:THR:OG1 | 1:A:36:ILE:HD11 | 2.07 | 0.53 |
| 1:A:64:GLN:HA | 1:A:67:GLU:HB2 | 1.90 | 0.53 |
| 1:A:66:PHE:CD2 | 1:A:201:LYS:NZ | 2.78 | 0.53 |
| 1:A:66:PHE:CE2 | 1:A:201:LYS:HD3 | 2.44 | 0.53 |
| 1:A:66:PHE:N | 1:A:66:PHE:HD1 | 2.07 | 0.53 |
| 1:A:235:THR:HG22 | 1:A:236:ALA:N | 2.24 | 0.53 |
| 1:A:692:LYS:HD3 | 1:A:692:LYS:C | 2.29 | 0.53 |
| 1:A:745:GLU:OE1 | 1:A:769:ASP:OD2 | 2.27 | 0.53 |
| 1:A:74:GLU:O | 1:A:77:GLY:N | 2.26 | 0.52 |
| 1:A:222:VAL:HG11 | 1:A:437:GLU:CG | 2.39 | 0.52 |
| 1:A:563:GLU:OE2 | 1:A:621:PRO:HD3 | 2.09 | 0.52 |
| 1:A:564:HIS:CE1 | 1:A:565:MET:HG2 | 2.42 | 0.52 |
| 1:A:748:ARG:HA | 1:A:751:LEU:HD12 | 1.90 | 0.52 |
| 1:A:107:LEU:HD13 | 1:A:277:GLN:CD | 2.29 | 0.52 |



| | | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:872:ASN:HD22 | 1:A:873:ASN:N | 2.06 | 0.52 |
| 1:A:347:LEU:HD12 | 1:A:376:LEU:HD21 | 1.91 | 0.52 |
| 1:A:541:ASP:OD2 | 1:A:561:ARG:HB2 | 2.08 | 0.52 |
| 1:A:574:LYS:HB2 | 1:A:574:LYS:HZ3 | 1.72 | 0.52 |
| 1:A:335:GLN:HG2 | 1:A:336:THR:H | 1.72 | 0.52 |
| 1:A:420:LYS:HG3 | 1:A:442:ALA:O | 2.10 | 0.52 |
| 1:A:677:ALA:O | 1:A:681:THR:OG1 | 2.27 | 0.52 |
| 1:A:771:THR:HA | 1:A:808:VAL:CG2 | 2.39 | 0.52 |
| 1:A:16:ARG:NE | 1:A:21:GLY:HA2 | 2.24 | 0.52 |
| 1:A:104:ASP:HB3 | 1:A:143:VAL:HG13 | 1.92 | 0.52 |
| 1:A:86:PRO:HG3 | 1:A:115:ALA:HB1 | 1.91 | 0.52 |
| 1:A:119:PHE:O | 1:A:123:THR:HB | 2.10 | 0.52 |
| 1:A:451:GLY:H | 1:A:454:SER:HB3 | 1.74 | 0.52 |
| 1:A:500:GLY:O | 1:A:502:THR:N | 2.43 | 0.52 |
| 1:A:591:LEU:HD22 | 1:A:679:MET:CE | 2.40 | 0.52 |
| 1:A:57:ILE:C | 1:A:62:GLN:HE21 | 2.12 | 0.52 |
| 1:A:105:THR:HG21 | 1:A:279:GLU:CG | 2.18 | 0.52 |
| 1:A:117:GLU:HG2 | 1:A:130:TYR:OH | 2.10 | 0.52 |
| 1:A:179:LEU:HD11 | 1:A:183:PHE:CE1 | 2.45 | 0.52 |
| 1:A:336:THR:C | 1:A:337:ARG:HG2 | 2.30 | 0.52 |
| 1:A:540:ALA:O | 1:A:541:ASP:OD1 | 2.28 | 0.52 |
| 1:A:106:ILE:HD13 | 1:A:207:ALA:CB | 2.39 | 0.52 |
| 1:A:330:LYS:HB3 | 1:A:332:TYR:CE2 | 2.45 | 0.52 |
| 1:A:668:ARG:NE | 1:A:707:LEU:HG | 2.25 | 0.52 |
| 1:A:710:GLU:HA | 1:A:756:ILE:HD11 | 1.92 | 0.52 |
| 1:A:837:ASP:HB3 | 1:A:840:SER:HB2 | 1.92 | 0.52 |
| 1:A:223:TYR:CD2 | 1:A:436:ILE:HG12 | 2.37 | 0.52 |
| 1:A:272:TYR:OH | 1:A:293:GLN:HB3 | 2.10 | 0.52 |
| 1:A:396:LEU:O | 1:A:468:VAL:HG13 | 2.10 | 0.52 |
| 1:A:566:PHE:CE1 | 1:A:619:LEU:HD13 | 2.45 | 0.52 |
| 1:A:567:PHE:CE2 | 1:A:626:PHE:CE1 | 2.98 | 0.52 |
| 1:A:471:CYS:O | 1:A:472:GLY:O | 2.28 | 0.52 |
| 1:A:571:ARG:HB3 | 1:A:594:LEU:HD22 | 1.92 | 0.52 |
| 1:A:4:TRP:NE1 | 1:A:60:GLU:OE1 | 2.42 | 0.51 |
| 1:A:41:THR:HA | 1:A:238:ASN:HA | 1.92 | 0.51 |
| 1:A:315:HIS:O | 1:A:315:HIS:ND1 | 2.44 | 0.51 |
| 1:A:382:ASN:HD22 | 1:A:511:GLU:CD | 2.14 | 0.51 |
| 1:A:403:ALA:HB1 | 1:A:443:GLU:HB3 | 1.91 | 0.51 |
| 1:A:538:THR:O | 1:A:557:ILE:HG23 | 2.10 | 0.51 |
| 1:A:712:LYS:HA | 1:A:715:LYS:HE2 | 1.92 | 0.51 |
| 1:A:732:LYS:C | 1:A:734:SER:N | 2.64 | 0.51 |



| | louo pugom | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:750:ALA:O | 1:A:753:ALA:HB2 | 2.10 | 0.51 |
| 1:A:124:GLY:O | 1:A:125:ASN:HB2 | 2.09 | 0.51 |
| 1:A:194:GLU:OE1 | 1:A:195:GLU:O | 2.28 | 0.51 |
| 1:A:789:TYR:CE2 | 1:A:794:ILE:HG21 | 2.45 | 0.51 |
| 1:A:16:ARG:HE | 1:A:21:GLY:HA2 | 1.76 | 0.51 |
| 1:A:111:LEU:HB3 | 1:A:133:TYR:HD1 | 1.75 | 0.51 |
| 1:A:189:GLU:HG3 | 1:A:190:ALA:N | 2.24 | 0.51 |
| 1:A:587:ARG:O | 1:A:591:LEU:HG | 2.10 | 0.51 |
| 1:A:708:VAL:O | 1:A:749:ALA:HB2 | 2.11 | 0.51 |
| 1:A:27:ALA:O | 1:A:31:ILE:N | 2.42 | 0.51 |
| 1:A:420:LYS:HG2 | 1:A:443:GLU:CD | 2.31 | 0.51 |
| 1:A:485:LEU:HD23 | 1:A:486:GLY:N | 2.26 | 0.51 |
| 1:A:574:LYS:HA | 1:A:577:LYS:HE3 | 1.92 | 0.51 |
| 1:A:840:SER:C | 1:A:842:GLU:H | 2.14 | 0.51 |
| 1:A:859:VAL:O | 1:A:862:ALA:N | 2.42 | 0.51 |
| 1:A:281:VAL:O | 1:A:284:GLY:O | 2.27 | 0.51 |
| 1:A:381:PHE:CZ | 1:A:496:ILE:HG23 | 2.46 | 0.51 |
| 1:A:410:THR:HB | 1:A:413:GLU:HB2 | 1.92 | 0.51 |
| 1:A:667:CYS:SG | 1:A:668:ARG:N | 2.84 | 0.51 |
| 1:A:754:ASP:HB3 | 1:A:818:LYS:HE2 | 1.91 | 0.51 |
| 1:A:859:VAL:N | 1:A:860:PRO:CD | 2.73 | 0.51 |
| 1:A:109:LEU:CB | 1:A:136:PHE:CE1 | 2.92 | 0.51 |
| 1:A:521:PHE:O | 1:A:525:MET:HG2 | 2.10 | 0.51 |
| 1:A:19:LEU:O | 1:A:24:CYS:N | 2.43 | 0.51 |
| 1:A:99:MET:O | 2:A:902:SO4:O2 | 2.29 | 0.51 |
| 1:A:106:ILE:HG23 | 1:A:140:TYR:N | 2.25 | 0.51 |
| 1:A:563:GLU:CG | 1:A:621:PRO:HD3 | 2.41 | 0.51 |
| 1:A:705:ILE:HG22 | 1:A:708:VAL:HG23 | 1.93 | 0.51 |
| 1:A:71:TRP:CZ3 | 1:A:72:LEU:CD2 | 2.94 | 0.51 |
| 1:A:488:HIS:N | 1:A:488:HIS:CD2 | 2.78 | 0.51 |
| 1:A:140:TYR:O | 1:A:144:VAL:HG23 | 2.11 | 0.51 |
| 1:A:66:PHE:N | 1:A:66:PHE:CD1 | 2.77 | 0.50 |
| 1:A:111:LEU:HB3 | 1:A:133:TYR:CD1 | 2.46 | 0.50 |
| 1:A:476:ILE:HG23 | 1:A:482:THR:O | 2.11 | 0.50 |
| 1:A:708:VAL:HB | 1:A:742:THR:OG1 | 2.11 | 0.50 |
| 1:A:851:TYR:HD1 | 1:A:852:VAL:O | 1.92 | 0.50 |
| 1:A:106:ILE:HG21 | 1:A:140:TYR:HA | 1.92 | 0.50 |
| 1:A:223:TYR:CD2 | 1:A:436:ILE:HD11 | 2.46 | 0.50 |
| 1:A:326:ILE:CG1 | 1:A:331:LEU:HD12 | 2.41 | 0.50 |
| 1:A:543:PRO:O | 1:A:546:THR:N | 2.44 | 0.50 |
| 1:A:803:LEU:O | 1:A:805:GLN:N | 2.44 | 0.50 |



| | louo pugom | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:159:MET:CE | 1:A:179:LEU:HB2 | 2.41 | 0.50 |
| 1:A:316:PHE:HD2 | 1:A:320:GLN:CD | 2.15 | 0.50 |
| 1:A:381:PHE:HD2 | 1:A:402:ALA:HB1 | 1.71 | 0.50 |
| 1:A:439:MET:HE1 | 1:A:456:ALA:HA | 1.93 | 0.50 |
| 1:A:732:LYS:C | 1:A:734:SER:H | 2.15 | 0.50 |
| 1:A:222:VAL:HG11 | 1:A:437:GLU:CD | 2.32 | 0.50 |
| 1:A:402:ALA:HB1 | 1:A:498:LEU:HG | 1.93 | 0.50 |
| 1:A:112:ASN:O | 1:A:116:VAL:N | 2.42 | 0.50 |
| 1:A:223:TYR:CE2 | 1:A:436:ILE:HD11 | 2.47 | 0.50 |
| 1:A:439:MET:HB3 | 1:A:463:MET:HE1 | 1.91 | 0.50 |
| 1:A:493:GLY:O | 1:A:494:ASP:O | 2.29 | 0.50 |
| 1:A:109:LEU:HG | 1:A:110:GLY:N | 2.27 | 0.50 |
| 1:A:119:PHE:O | 1:A:123:THR:N | 2.34 | 0.50 |
| 1:A:198:GLN:O | 1:A:200:PRO:HD3 | 2.12 | 0.50 |
| 1:A:255:VAL:CG1 | 1:A:453:THR:HB | 2.41 | 0.50 |
| 1:A:316:PHE:CD2 | 1:A:320:GLN:NE2 | 2.79 | 0.50 |
| 1:A:433:PRO:HD3 | 1:A:455:HIS:CE1 | 2.46 | 0.50 |
| 1:A:545:ASP:O | 1:A:549:ALA:N | 2.44 | 0.50 |
| 1:A:61:ILE:N | 1:A:61:ILE:HD12 | 2.26 | 0.50 |
| 1:A:473:GLU:CD | 1:A:473:GLU:H | 2.15 | 0.50 |
| 1:A:803:LEU:HD23 | 1:A:843:PHE:CD2 | 2.47 | 0.50 |
| 1:A:429:LEU:HA | 1:A:448:VAL:CG2 | 2.42 | 0.50 |
| 1:A:859:VAL:O | 1:A:862:ALA:HB3 | 2.12 | 0.50 |
| 1:A:9:GLU:HA | 1:A:31:ILE:HD11 | 1.94 | 0.49 |
| 1:A:34:MET:CE | 1:A:312:LEU:HD23 | 2.42 | 0.49 |
| 1:A:73:GLU:OE2 | 1:A:79:LYS:HE2 | 2.12 | 0.49 |
| 1:A:221:ILE:CD1 | 1:A:224:ARG:NH2 | 2.75 | 0.49 |
| 1:A:417:ALA:O | 1:A:418:HIS:HB2 | 2.11 | 0.49 |
| 1:A:834:HIS:N | 1:A:834:HIS:CD2 | 2.79 | 0.49 |
| 1:A:619:LEU:HB2 | 1:A:680:GLN:NE2 | 2.16 | 0.49 |
| 1:A:181:GLU:HG2 | 1:A:184:LYS:HZ2 | 1.74 | 0.49 |
| 1:A:323:GLU:O | 1:A:334:LEU:N | 2.44 | 0.49 |
| 1:A:578:MET:HB2 | 1:A:590:ALA:HB3 | 1.93 | 0.49 |
| 1:A:368:ILE:CG2 | 1:A:369:GLU:N | 2.76 | 0.49 |
| 1:A:408:TYR:HE1 | 1:A:424:VAL:HG12 | 1.77 | 0.49 |
| 1:A:571:ARG:CB | 1:A:594:LEU:HD21 | 2.40 | 0.49 |
| 1:A:588:GLU:O | 1:A:592:ASN:N | 2.35 | 0.49 |
| 1:A:245:GLY:O | 1:A:275:ASN:HA | 2.13 | 0.49 |
| 1:A:380:THR:O | 1:A:512:THR:HG22 | 2.12 | 0.49 |
| 1:A:403:ALA:HB1 | 1:A:443:GLU:CB | 2.41 | 0.49 |
| 1:A:685:MET:HG3 | 1:A:725:ALA:CB | 2.42 | 0.49 |



| | lo uo pugom | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:722:VAL:HG12 | 1:A:723:GLU:N | 2.27 | 0.49 |
| 1:A:749:ALA:HA | 1:A:756:ILE:HD12 | 1.95 | 0.49 |
| 1:A:66:PHE:CD2 | 1:A:201:LYS:CE | 2.95 | 0.49 |
| 1:A:106:ILE:HG21 | 1:A:140:TYR:CA | 2.42 | 0.49 |
| 1:A:135:ARG:CZ | 1:A:277:GLN:HB3 | 2.42 | 0.49 |
| 1:A:424:VAL:HG23 | 1:A:424:VAL:O | 2.12 | 0.49 |
| 1:A:623:LEU:HB2 | 1:A:655:LEU:HD22 | 1.93 | 0.49 |
| 1:A:774:THR:OG1 | 1:A:811:LEU:HD12 | 2.13 | 0.49 |
| 1:A:123:THR:HG23 | 1:A:125:ASN:HB3 | 1.94 | 0.49 |
| 1:A:134:ARG:HD3 | 1:A:179:LEU:CD2 | 2.43 | 0.49 |
| 1:A:248:GLY:O | 1:A:275:ASN:HB2 | 2.11 | 0.49 |
| 1:A:496:ILE:N | 1:A:496:ILE:HD12 | 2.26 | 0.49 |
| 1:A:623:LEU:HD21 | 1:A:669:LEU:HD21 | 1.93 | 0.49 |
| 1:A:51:TYR:C | 1:A:53:SER:H | 2.16 | 0.49 |
| 1:A:65:ILE:C | 1:A:66:PHE:HD1 | 2.16 | 0.49 |
| 1:A:189:GLU:HG3 | 1:A:190:ALA:H | 1.78 | 0.49 |
| 1:A:487:GLY:H | 1:A:488:HIS:CD2 | 2.25 | 0.49 |
| 1:A:353:LEU:HB3 | 1:A:359:ILE:HG12 | 1.94 | 0.49 |
| 1:A:572:ILE:CG2 | 1:A:573:MET:H | 2.19 | 0.49 |
| 1:A:634:GLN:OE1 | 1:A:649:LYS:HG2 | 2.13 | 0.49 |
| 1:A:771:THR:CG2 | 1:A:772:GLN:N | 2.75 | 0.49 |
| 1:A:110:GLY:HA2 | 1:A:200:PRO:HB3 | 1.94 | 0.49 |
| 1:A:230:PRO:HG2 | 1:A:233:TRP:CD1 | 2.48 | 0.49 |
| 1:A:495:TYR:CD2 | 1:A:496:ILE:N | 2.81 | 0.49 |
| 1:A:675:GLU:HA | 1:A:678:LYS:HB2 | 1.94 | 0.49 |
| 1:A:33:GLY:C | 1:A:34:MET:HG2 | 2.33 | 0.48 |
| 1:A:51:TYR:CE1 | 1:A:55:LYS:HD3 | 2.47 | 0.48 |
| 1:A:221:ILE:HD13 | 1:A:224:ARG:NH2 | 2.28 | 0.48 |
| 1:A:244:PHE:N | 1:A:244:PHE:CD1 | 2.81 | 0.48 |
| 1:A:255:VAL:HG11 | 1:A:453:THR:CB | 2.40 | 0.48 |
| 1:A:394:SER:O | 1:A:395:ALA:HB2 | 2.12 | 0.48 |
| 1:A:523:ARG:NE | 2:A:901:SO4:O3 | 2.47 | 0.48 |
| 1:A:40:PHE:CZ | 1:A:69:ILE:CD1 | 2.96 | 0.48 |
| 1:A:43:THR:HG22 | 1:A:44:THR:N | 2.28 | 0.48 |
| 1:A:91:VAL:HG22 | 1:A:239:VAL:CG1 | 2.43 | 0.48 |
| 1:A:232:ASP:N | 1:A:232:ASP:OD1 | 2.46 | 0.48 |
| 1:A:290:PRO:O | 1:A:292:THR:N | 2.46 | 0.48 |
| 1:A:325:THR:O | 1:A:332:TYR:N | 2.46 | 0.48 |
| 1:A:536:VAL:O | 1:A:555:GLU:HB2 | 2.13 | 0.48 |
| 1:A:739:HIS:HB3 | 1:A:761:GLU:HG3 | 1.95 | 0.48 |
| 1:A:211:VAL:C | 1:A:213:ARG:H | 2.17 | 0.48 |



| | A de la construction de la const | Interatomic | Clash |
|------------------|--|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:316:PHE:HB2 | 1:A:320:GLN:HE22 | 1.78 | 0.48 |
| 1:A:485:LEU:CD2 | 1:A:486:GLY:H | 2.25 | 0.48 |
| 1:A:704:MET:SD | 1:A:764:SER:CB | 3.02 | 0.48 |
| 1:A:65:ILE:O | 1:A:69:ILE:HG12 | 2.14 | 0.48 |
| 1:A:392:ILE:CG1 | 1:A:485:LEU:HD13 | 2.43 | 0.48 |
| 1:A:584:VAL:HG12 | 1:A:588:GLU:HG3 | 1.94 | 0.48 |
| 1:A:5:VAL:CG2 | 1:A:42:VAL:HG13 | 2.44 | 0.48 |
| 1:A:110:GLY:N | 1:A:203:GLN:OE1 | 2.41 | 0.48 |
| 1:A:403:ALA:O | 1:A:404:ALA:HB2 | 2.12 | 0.48 |
| 1:A:724:VAL:O | 1:A:728:VAL:N | 2.41 | 0.48 |
| 1:A:826:LEU:HD23 | 1:A:826:LEU:C | 2.33 | 0.48 |
| 1:A:73:GLU:HG2 | 1:A:79:LYS:HA | 1.96 | 0.48 |
| 1:A:93:SER:HB2 | 1:A:103:MET:HE2 | 1.94 | 0.48 |
| 1:A:381:PHE:CD1 | 1:A:510:ILE:CG2 | 2.97 | 0.48 |
| 1:A:420:LYS:HG2 | 1:A:420:LYS:O | 2.14 | 0.48 |
| 1:A:40:PHE:HE1 | 1:A:69:ILE:HD13 | 1.76 | 0.48 |
| 1:A:307:ASP:OD1 | 1:A:307:ASP:N | 2.47 | 0.48 |
| 1:A:325:THR:N | 1:A:332:TYR:O | 2.45 | 0.48 |
| 1:A:396:LEU:HD23 | 1:A:452:MET:SD | 2.54 | 0.48 |
| 1:A:521:PHE:CE1 | 1:A:525:MET:HG3 | 2.49 | 0.48 |
| 1:A:48:THR:CG2 | 1:A:52:ASN:HD21 | 2.16 | 0.48 |
| 1:A:381:PHE:CD1 | 1:A:510:ILE:HG22 | 2.48 | 0.48 |
| 1:A:427:VAL:O | 1:A:427:VAL:HG12 | 2.07 | 0.48 |
| 1:A:718:LYS:NZ | 1:A:740:ILE:HB | 2.28 | 0.48 |
| 1:A:106:ILE:HG23 | 1:A:139:MET:HB3 | 1.96 | 0.48 |
| 1:A:179:LEU:CD1 | 1:A:183:PHE:CE1 | 2.97 | 0.48 |
| 1:A:295:GLU:O | 1:A:299:PRO:HB3 | 2.13 | 0.48 |
| 1:A:756:ILE:O | 1:A:758:GLU:N | 2.46 | 0.48 |
| 1:A:13:ALA:HA | 1:A:24:CYS:CB | 2.43 | 0.48 |
| 1:A:225:ARG:O | 1:A:228:ASP:N | 2.46 | 0.48 |
| 1:A:747:PRO:O | 1:A:751:LEU:HG | 2.13 | 0.48 |
| 1:A:90:SER:HB3 | 1:A:242:MET:SD | 2.54 | 0.47 |
| 1:A:144:VAL:HG12 | 1:A:144:VAL:O | 2.13 | 0.47 |
| 1:A:285:VAL:HB | 1:A:449:ARG:NH2 | 2.20 | 0.47 |
| 1:A:395:ALA:HB2 | 1:A:471:CYS:SG | 2.54 | 0.47 |
| 1:A:596:PRO:HA | 1:A:599:LYS:HE3 | 1.96 | 0.47 |
| 1:A:177:LYS:O | 1:A:177:LYS:HG2 | 2.14 | 0.47 |
| 1:A:427:VAL:HG23 | 1:A:446:LEU:CD1 | 2.44 | 0.47 |
| 1:A:616:VAL:O | 1:A:704:MET:N | 2.35 | 0.47 |
| 1:A:149:LYS:HB2 | 1:A:149:LYS:HE2 | 1.77 | 0.47 |
| 1:A:220:ALA:O | 1:A:224:ARG:HB3 | 2.13 | 0.47 |



| | lous page | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|----------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance $(Å)$ | overlan (Å) |
| 1.A.377.LEU.HD13 | 1:A:857:PHE:HD1 | 1.80 | 0.47 |
| 1:A:381:PHE:CB | 1:A:386:LEU:HD22 | 2.44 | 0.47 |
| 1:A:492:GLU:OE2 | 1:A:492:GLU:N | 2.48 | 0.47 |
| 1:A:4:TRP:HZ3 | 1:A:49:GLU:HB3 | 1.79 | 0.47 |
| 1:A:119:PHE:CZ | 1:A:128:PHE:CE2 | 3.02 | 0.47 |
| 1:A:148:PRO:HD2 | 1:A:151:HIS:HD2 | 1.74 | 0.47 |
| 1:A:566:PHE:HE2 | 1:A:679:MET:HE1 | 1.79 | 0.47 |
| 1:A:4:TRP:HZ3 | 1:A:49:GLU:HG2 | 1.74 | 0.47 |
| 1:A:24:CYS:O | 1:A:28:GLU:HB2 | 2.15 | 0.47 |
| 1:A:116:VAL:O | 1:A:120:ALA:N | 2.39 | 0.47 |
| 1:A:167:PHE:O | 1:A:170:ASP:OD2 | 2.33 | 0.47 |
| 1:A:471:CYS:SG | 1:A:474:ILE:HD11 | 2.55 | 0.47 |
| 1:A:564:HIS:CG | 1:A:565:MET:N | 2.82 | 0.47 |
| 1:A:700:VAL:HG12 | 1:A:700:VAL:O | 2.12 | 0.47 |
| 1:A:19:LEU:HD22 | 1:A:41:THR:CG2 | 2.44 | 0.47 |
| 1:A:22:ALA:O | 1:A:26:LEU:HD12 | 2.14 | 0.47 |
| 1:A:66:PHE:CE1 | 1:A:205:MET:SD | 3.08 | 0.47 |
| 1:A:109:LEU:HD12 | 1:A:136:PHE:HE1 | 1.80 | 0.47 |
| 1:A:583:SER:O | 1:A:587:ARG:HG3 | 2.15 | 0.47 |
| 1:A:4:TRP:CD2 | 1:A:61:ILE:HD11 | 2.49 | 0.47 |
| 1:A:107:LEU:HD22 | 1:A:277:GLN:OE1 | 2.14 | 0.47 |
| 1:A:116:VAL:HG13 | 1:A:117:GLU:N | 2.30 | 0.47 |
| 1:A:126:PRO:O | 1:A:130:TYR:HD2 | 1.97 | 0.47 |
| 1:A:165:VAL:HG13 | 1:A:170:ASP:OD2 | 2.14 | 0.47 |
| 1:A:172:THR:OG1 | 1:A:175:ASP:OD1 | 2.32 | 0.47 |
| 1:A:189:GLU:CG | 1:A:190:ALA:H | 2.28 | 0.47 |
| 1:A:541:ASP:OD1 | 1:A:561:ARG:HG3 | 2.15 | 0.47 |
| 1:A:566:PHE:O | 1:A:571:ARG:HB2 | 2.15 | 0.47 |
| 1:A:617:ARG:HB2 | 1:A:704:MET:CE | 2.44 | 0.47 |
| 1:A:789:TYR:CD2 | 1:A:794:ILE:CG2 | 2.98 | 0.47 |
| 1:A:5:VAL:HG23 | 1:A:42:VAL:HG13 | 1.97 | 0.47 |
| 1:A:73:GLU:CA | 1:A:76:ASN:ND2 | 2.75 | 0.47 |
| 1:A:707:LEU:CD1 | 1:A:746:ILE:HD11 | 2.45 | 0.47 |
| 1:A:728:VAL:CG1 | 1:A:729:LYS:N | 2.78 | 0.47 |
| 1:A:189:GLU:CG | 1:A:190:ALA:N | 2.78 | 0.47 |
| 1:A:224:ARG:HH11 | 1:A:231:GLY:N | 2.13 | 0.47 |
| 1:A:230:PRO:HG2 | 1:A:233:TRP:CE2 | 2.50 | 0.47 |
| 1:A:317:ARG:HB3 | 1:A:317:ARG:NH1 | 2.25 | 0.47 |
| 1:A:392:ILE:HD12 | 1:A:490:PHE:HZ | 1.79 | 0.47 |
| 1:A:460:ALA:O | 1:A:464:GLY:N | 2.47 | 0.47 |
| 1:A:536:VAL:CG1 | 1:A:537:ARG:N | 2.78 | 0.47 |



| | | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:718:LYS:HZ2 | 1:A:740:ILE:HB | 1.79 | 0.47 |
| 1:A:70:THR:HB | 3:A:919:HOH:O | 2.15 | 0.47 |
| 1:A:91:VAL:O | 1:A:106:ILE:N | 2.47 | 0.47 |
| 1:A:109:LEU:HD23 | 1:A:109:LEU:C | 2.34 | 0.46 |
| 1:A:179:LEU:HD11 | 1:A:183:PHE:CZ | 2.51 | 0.46 |
| 1:A:345:ALA:O | 1:A:349:ILE:HG13 | 2.16 | 0.46 |
| 1:A:474:ILE:O | 1:A:476:ILE:N | 2.49 | 0.46 |
| 1:A:763:PHE:HB2 | 1:A:826:LEU:HD21 | 1.97 | 0.46 |
| 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:212:PHE:CZ | 2.49 | 0.46 |
| 1:A:76:ASN:ND2 | 1:A:78:LYS:H | 2.14 | 0.46 |
| 1:A:102:MET:CE | 1:A:436:ILE:HD13 | 2.44 | 0.46 |
| 1:A:791:LYS:HA | 1:A:791:LYS:HD3 | 1.76 | 0.46 |
| 1:A:797:SER:CB | 1:A:802:ARG:HD3 | 2.45 | 0.46 |
| 1:A:43:THR:CG2 | 1:A:44:THR:N | 2.78 | 0.46 |
| 1:A:230:PRO:HB2 | 1:A:232:ASP:OD1 | 2.15 | 0.46 |
| 1:A:246:ASN:OD1 | 1:A:246:ASN:N | 2.47 | 0.46 |
| 1:A:304:GLN:NE2 | 1:A:304:GLN:HA | 2.31 | 0.46 |
| 1:A:591:LEU:HD12 | 1:A:675:GLU:HB2 | 1.97 | 0.46 |
| 1:A:659:ASN:HD22 | 1:A:659:ASN:N | 2.13 | 0.46 |
| 1:A:729:LYS:HE2 | 1:A:736:MET:HB3 | 1.96 | 0.46 |
| 1:A:774:THR:O | 1:A:774:THR:HG22 | 2.16 | 0.46 |
| 1:A:34:MET:HE1 | 1:A:312:LEU:HD23 | 1.97 | 0.46 |
| 1:A:85:ASP:OD1 | 1:A:122:LYS:HG3 | 2.15 | 0.46 |
| 1:A:147:VAL:CG1 | 1:A:151:HIS:HD2 | 2.13 | 0.46 |
| 1:A:341:ARG:HH11 | 1:A:349:ILE:HD13 | 1.78 | 0.46 |
| 1:A:485:LEU:CD2 | 1:A:486:GLY:N | 2.78 | 0.46 |
| 1:A:710:GLU:OE2 | 1:A:712:LYS:HB2 | 2.16 | 0.46 |
| 1:A:744:ILE:O | 1:A:770:LEU:HD22 | 2.16 | 0.46 |
| 1:A:66:PHE:CD2 | 1:A:201:LYS:HE2 | 2.51 | 0.46 |
| 1:A:131:ASP:OD1 | 1:A:134:ARG:NH2 | 2.46 | 0.46 |
| 1:A:188:LYS:O | 1:A:191:MET:O | 2.34 | 0.46 |
| 1:A:392:ILE:CD1 | 1:A:490:PHE:CZ | 2.98 | 0.46 |
| 1:A:690:GLU:O | 1:A:694:GLU:HG3 | 2.15 | 0.46 |
| 1:A:744:ILE:HG21 | 1:A:765:PHE:CE1 | 2.51 | 0.46 |
| 1:A:65:ILE:O | 1:A:69:ILE:HB | 2.16 | 0.46 |
| 1:A:109:LEU:CG | 1:A:110:GLY:N | 2.79 | 0.46 |
| 1:A:145:MET:SD | 1:A:146:GLU:N | 2.89 | 0.46 |
| 1:A:787:ASP:O | 1:A:790:TYR:HB2 | 2.15 | 0.46 |
| 1:A:146:GLU:O | 1:A:147:VAL:HG22 | 2.16 | 0.46 |
| 1:A:243:VAL:HG21 | 1:A:332:TYR:HB2 | 1.98 | 0.46 |
| 1:A:285:VAL:CB | 1:A:449:ARG:HH22 | 2.20 | 0.46 |



| | | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:422:GLU:O | 1:A:423:ARG:HG3 | 2.15 | 0.46 |
| 1:A:744:ILE:CG2 | 1:A:765:PHE:CE1 | 2.99 | 0.46 |
| 1:A:199:GLU:O | 1:A:202:ASP:HB2 | 2.14 | 0.46 |
| 1:A:317:ARG:NH1 | 1:A:317:ARG:CB | 2.79 | 0.46 |
| 1:A:406:LYS:O | 1:A:425:ILE:N | 2.27 | 0.46 |
| 1:A:17:ASN:O | 1:A:44:THR:OG1 | 2.24 | 0.46 |
| 1:A:37:PRO:HG2 | 1:A:240:GLN:NE2 | 2.31 | 0.46 |
| 1:A:116:VAL:CG1 | 1:A:117:GLU:N | 2.79 | 0.46 |
| 1:A:186:VAL:HG23 | 1:A:189:GLU:OE1 | 2.16 | 0.46 |
| 1:A:195:GLU:O | 1:A:197:PRO:N | 2.49 | 0.46 |
| 1:A:368:ILE:HD12 | 1:A:368:ILE:H | 1.81 | 0.46 |
| 1:A:534:LEU:HD11 | 1:A:845:HIS:CA | 2.45 | 0.46 |
| 1:A:566:PHE:CZ | 1:A:680:GLN:NE2 | 2.81 | 0.46 |
| 1:A:66:PHE:O | 1:A:70:THR:HG23 | 2.16 | 0.46 |
| 1:A:277:GLN:HE21 | 1:A:277:GLN:HB2 | 1.56 | 0.46 |
| 1:A:373:LEU:HB2 | 1:A:861:ILE:HG13 | 1.97 | 0.46 |
| 1:A:517:VAL:HG23 | 1:A:517:VAL:O | 2.16 | 0.46 |
| 1:A:12:ASN:N | 1:A:15:MET:SD | 2.89 | 0.45 |
| 1:A:272:TYR:CZ | 1:A:289:GLN:HB2 | 2.49 | 0.45 |
| 1:A:349:ILE:HG22 | 1:A:349:ILE:O | 2.16 | 0.45 |
| 1:A:381:PHE:CZ | 1:A:496:ILE:CG2 | 2.99 | 0.45 |
| 1:A:396:LEU:O | 1:A:398:ALA:N | 2.44 | 0.45 |
| 1:A:472:GLY:C | 1:A:474:ILE:H | 2.08 | 0.45 |
| 1:A:591:LEU:HD23 | 1:A:591:LEU:HA | 1.63 | 0.45 |
| 1:A:843:PHE:O | 1:A:847:VAL:N | 2.48 | 0.45 |
| 1:A:331:LEU:CD2 | 1:A:333:PHE:CE1 | 2.99 | 0.45 |
| 1:A:409:PHE:HA | 1:A:427:VAL:O | 2.16 | 0.45 |
| 1:A:805:GLN:HB3 | 1:A:843:PHE:CD2 | 2.51 | 0.45 |
| 1:A:854:CYS:HB2 | 1:A:858:ARG:HB2 | 1.97 | 0.45 |
| 1:A:134:ARG:HD3 | 1:A:179:LEU:HD23 | 1.98 | 0.45 |
| 1:A:251:SER:HA | 1:A:326:ILE:O | 2.17 | 0.45 |
| 1:A:9:GLU:HA | 1:A:31:ILE:CD1 | 2.46 | 0.45 |
| 1:A:79:LYS:C | 1:A:87:LEU:HB3 | 2.37 | 0.45 |
| 1:A:208:VAL:O | 1:A:211:VAL:HB | 2.16 | 0.45 |
| 1:A:298:MET:HG2 | 1:A:301:CYS:HB2 | 1.99 | 0.45 |
| 1:A:418:HIS:HB2 | 1:A:422:GLU:HB2 | 1.97 | 0.45 |
| 1:A:591:LEU:O | 1:A:679:MET:HG3 | 2.17 | 0.45 |
| 1:A:707:LEU:HD13 | 1:A:746:ILE:HD11 | 1.97 | 0.45 |
| 1:A:709:GLY:O | 1:A:756:ILE:HD11 | 2.17 | 0.45 |
| 1:A:93:SER:HB2 | 1:A:103:MET:CE | 2.47 | 0.45 |
| 1:A:140:TYR:CE2 | 1:A:203:GLN:HA | 2.51 | 0.45 |



| | | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:291:ILE:O | 1:A:294:LEU:HB2 | 2.17 | 0.45 |
| 1:A:352:ASP:OD1 | 1:A:352:ASP:N | 2.49 | 0.45 |
| 1:A:536:VAL:C | 1:A:537:ARG:HG3 | 2.36 | 0.45 |
| 1:A:155:ILE:HB | 1:A:183:PHE:CE1 | 2.49 | 0.45 |
| 1:A:191:MET:HA | 1:A:191:MET:HE2 | 1.95 | 0.45 |
| 1:A:210:ALA:O | 1:A:214:SER:OG | 2.28 | 0.45 |
| 1:A:213:ARG:NH1 | 1:A:213:ARG:CG | 2.76 | 0.45 |
| 1:A:311:LYS:CG | 1:A:312:LEU:N | 2.79 | 0.45 |
| 1:A:223:TYR:HD2 | 1:A:436:ILE:CD1 | 2.29 | 0.45 |
| 1:A:226:MET:SD | 1:A:440:HIS:CD2 | 3.10 | 0.45 |
| 1:A:328:GLU:O | 1:A:330:LYS:N | 2.50 | 0.45 |
| 1:A:403:ALA:O | 1:A:496:ILE:HG23 | 2.17 | 0.45 |
| 1:A:422:GLU:C | 1:A:423:ARG:HG3 | 2.37 | 0.45 |
| 1:A:557:ILE:HG13 | 1:A:609:LEU:HD21 | 1.98 | 0.45 |
| 1:A:579:ILE:C | 1:A:581:SER:H | 2.20 | 0.45 |
| 1:A:61:ILE:O | 1:A:65:ILE:HG13 | 2.17 | 0.45 |
| 1:A:185:ALA:O | 1:A:189:GLU:HG2 | 2.17 | 0.45 |
| 1:A:270:GLY:CA | 1:A:291:ILE:HG22 | 2.46 | 0.45 |
| 1:A:349:ILE:HG22 | 1:A:353:LEU:HD12 | 1.99 | 0.45 |
| 1:A:361:GLU:HB3 | 1:A:531:PHE:HZ | 1.82 | 0.45 |
| 1:A:700:VAL:HG22 | 1:A:737:GLN:CD | 2.37 | 0.45 |
| 1:A:741:GLY:HA3 | 1:A:762:PHE:CD2 | 2.52 | 0.45 |
| 1:A:271:GLU:OE1 | 1:A:453:THR:HG22 | 2.17 | 0.45 |
| 1:A:303:LYS:O | 1:A:304:GLN:O | 2.35 | 0.45 |
| 1:A:667:CYS:HB3 | 1:A:706:PRO:O | 2.17 | 0.45 |
| 1:A:485:LEU:HD23 | 1:A:485:LEU:HA | 1.59 | 0.45 |
| 1:A:25:ASN:O | 1:A:28:GLU:HB3 | 2.16 | 0.44 |
| 1:A:47:CYS:O | 1:A:50:TYR:HB3 | 2.17 | 0.44 |
| 1:A:59:GLN:O | 1:A:62:GLN:N | 2.50 | 0.44 |
| 1:A:301:CYS:O | 1:A:304:GLN:N | 2.51 | 0.44 |
| 1:A:319:MET:HB3 | 1:A:341:ARG:HH12 | 1.80 | 0.44 |
| 1:A:347:LEU:HA | 1:A:347:LEU:HD23 | 1.71 | 0.44 |
| 1:A:398:ALA:HB2 | 1:A:469:SER:OG | 2.16 | 0.44 |
| 1:A:487:GLY:N | 1:A:488:HIS:HD2 | 2.11 | 0.44 |
| 1:A:57:ILE:HD11 | 1:A:209:LYS:HB3 | 1.99 | 0.44 |
| 1:A:319:MET:CE | 1:A:341:ARG:HG3 | 2.47 | 0.44 |
| 1:A:722:VAL:HG22 | 1:A:738:TYR:OH | 2.17 | 0.44 |
| 1:A:845:HIS:CB | 1:A:869:ALA:HB1 | 2.47 | 0.44 |
| 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:94:GLY:HA2 | 1.99 | 0.44 |
| 1:A:99:MET:N | 1:A:100:PRO:CD | 2.80 | 0.44 |
| 1:A:106:ILE:CG2 | 1:A:140:TYR:N | 2.80 | 0.44 |



| | louis page | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|-------------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:159:MET:HE2 | 1:A:179:LEU:HB2 | 1.98 | 0.44 |
| 1:A:223:TYR:CD2 | 1:A:436:ILE:CD1 | 3.01 | 0.44 |
| 1:A:229:ILE:HG22 | 1:A:230:PRO:N | 2.33 | 0.44 |
| 1:A:253:THR:HG23 | 1:A:278:GLY:HA2 | 2.00 | 0.44 |
| 1:A:319:MET:HE3 | 1:A:341:ARG:HG3 | 1.99 | 0.44 |
| 1:A:496:ILE:O | 1:A:504:LYS:N | 2.50 | 0.44 |
| 1:A:579:ILE:HG22 | 1:A:651:LYS:NZ | 2.32 | 0.44 |
| 1:A:595:ILE:N | 1:A:596:PRO:CD | 2.79 | 0.44 |
| 1:A:627:VAL:HG21 | 1:A:652:VAL:HG13 | 1.98 | 0.44 |
| 1:A:225:ARG:HG3 | 1:A:225:ARG:HH11 | 1.83 | 0.44 |
| 1:A:280:ASP:OD2 | 1:A:281:VAL:HG13 | 2.17 | 0.44 |
| 1:A:563:GLU:CG | 1:A:621:PRO:CD | 2.95 | 0.44 |
| 1:A:854:CYS:SG | 1:A:862:ALA:HB2 | 2.57 | 0.44 |
| 1:A:119:PHE:CD2 | 1:A:129:ALA:CB | 3.00 | 0.44 |
| 1:A:176:LEU:O | 1:A:179:LEU:HB3 | 2.17 | 0.44 |
| 1:A:200:PRO:C | 1:A:202:ASP:H | 2.20 | 0.44 |
| 1:A:207:ALA:HA | 1:A:210:ALA:HB3 | 1.99 | 0.44 |
| 1:A:298:MET:HB3 | 1:A:301:CYS:HB2 | 1.98 | 0.44 |
| 1:A:447:THR:OG1 | 1:A:469:SER:HA | 2.17 | 0.44 |
| 1:A:817:LYS:HD3 | 1:A:817:LYS:C | 2.38 | 0.44 |
| 1:A:837:ASP:HB3 | 1:A:840:SER:OG | 2.17 | 0.44 |
| 1:A:73:GLU:HA | 1:A:76:ASN:HD21 | 1.80 | 0.44 |
| 1:A:818:LYS:O | 1:A:821:GLN:HB2 | 2.17 | 0.44 |
| 1:A:837:ASP:O | 1:A:839:SER:N | 2.50 | 0.44 |
| 1:A:122:LYS:HD3 | 1:A:122:LYS:C | 2.38 | 0.44 |
| 1:A:196:PHE:CG | 1:A:197:PRO:HD2 | 2.53 | 0.44 |
| 1:A:204:LEU:HD22 | 1:A:205:MET:SD | 2.58 | 0.44 |
| 1:A:225:ARG:CD | 1:A:226:MET:N | 2.78 | 0.44 |
| 1:A:365:VAL:HG11 | 1:A:867:ALA:HB1 | 1.99 | 0.44 |
| 1:A:536:VAL:HG12 | 1:A:537:ARG:N | 2.32 | 0.44 |
| 1:A:128:PHE:CG | 1:A:129:ALA:N | 2.86 | 0.44 |
| 1:A:138:GLN:HB2 | 1:A:152:PHE:CD1 | 2.52 | 0.44 |
| 1:A:156:ILE:CG1 | 1:A:183:PHE:CZ | 2.98 | 0.44 |
| 1:A:298:MET:HG2 | 1:A:301:CYS:CB | 2.48 | 0.44 |
| 1:A:624:HIS:CE1 | 1:A:629:HIS:CD2 | 3.05 | 0.44 |
| 1:A:141:SER:O | 1:A:145:MET:N | 2.51 | 0.44 |
| 1:A:141:SER:HG | 1:A:147:VAL:HG23 | 1.79 | 0.44 |
| 1:A:270:GLY:CA | 1:A:291:ILE:CG2 | 2.96 | 0.44 |
| 1:A:741:GLY:HA3 | 1:A:762:PHE:CG | 2.52 | 0.44 |
| 1:A:23:GLY:CA | 1:A:238:ASN:ND2 | 2.81 | 0.43 |
| 1:A:352:ASP:O | 1:A:356:GLU:N | $2.\overline{48}$ | 0.43 |



| | | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:517:VAL:HG21 | 1:A:521:PHE:CD2 | 2.53 | 0.43 |
| 1:A:866:ALA:HA | 1:A:869:ALA:HB3 | 2.00 | 0.43 |
| 1:A:224:ARG:NH1 | 1:A:231:GLY:N | 2.66 | 0.43 |
| 1:A:362:GLU:O | 1:A:366:VAL:HG23 | 2.18 | 0.43 |
| 1:A:466:CYS:SG | 1:A:467:CYS:N | 2.88 | 0.43 |
| 1:A:119:PHE:CD1 | 1:A:123:THR:HB | 2.53 | 0.43 |
| 1:A:298:MET:HG2 | 1:A:301:CYS:HG | 1.82 | 0.43 |
| 1:A:386:LEU:HD21 | 1:A:498:LEU:HD12 | 1.99 | 0.43 |
| 1:A:420:LYS:O | 1:A:443:GLU:OE1 | 2.37 | 0.43 |
| 1:A:741:GLY:N | 1:A:762:PHE:CE2 | 2.86 | 0.43 |
| 1:A:4:TRP:HZ3 | 1:A:49:GLU:CB | 2.30 | 0.43 |
| 1:A:109:LEU:HA | 1:A:136:PHE:CD1 | 2.54 | 0.43 |
| 1:A:243:VAL:HG21 | 1:A:332:TYR:CB | 2.48 | 0.43 |
| 1:A:574:LYS:NZ | 1:A:574:LYS:CB | 2.77 | 0.43 |
| 1:A:661:MET:SD | 1:A:772:GLN:OE1 | 2.77 | 0.43 |
| 1:A:686:GLU:HG3 | 1:A:728:VAL:CG2 | 2.48 | 0.43 |
| 1:A:103:MET:HB2 | 2:A:902:SO4:O4 | 2.18 | 0.43 |
| 1:A:251:SER:CB | 1:A:328:GLU:N | 2.77 | 0.43 |
| 1:A:415:LYS:C | 1:A:417:ALA:H | 2.21 | 0.43 |
| 1:A:564:HIS:O | 1:A:566:PHE:N | 2.51 | 0.43 |
| 1:A:582:ASP:O | 1:A:583:SER:HB3 | 2.18 | 0.43 |
| 1:A:652:VAL:HG12 | 1:A:652:VAL:O | 2.18 | 0.43 |
| 1:A:707:LEU:HD12 | 1:A:746:ILE:CD1 | 2.48 | 0.43 |
| 1:A:782:ALA:HA | 1:A:785:PHE:CE2 | 2.53 | 0.43 |
| 1:A:864:LEU:HD13 | 1:A:868:GLN:HE22 | 1.82 | 0.43 |
| 1:A:74:GLU:CG | 1:A:75:LEU:H | 2.17 | 0.43 |
| 1:A:362:GLU:HG3 | 1:A:531:PHE:CE1 | 2.53 | 0.43 |
| 1:A:477:ASN:CG | 1:A:480:ALA:HB3 | 2.37 | 0.43 |
| 1:A:648:VAL:O | 1:A:652:VAL:HG23 | 2.18 | 0.43 |
| 1:A:79:LYS:O | 1:A:87:LEU:HB3 | 2.19 | 0.43 |
| 1:A:359:ILE:HD12 | 1:A:364:ALA:HB2 | 2.01 | 0.43 |
| 1:A:408:TYR:HD1 | 1:A:414:ALA:HA | 1.84 | 0.43 |
| 1:A:628:PRO:CB | 1:A:633:GLU:HB3 | 2.48 | 0.43 |
| 1:A:109:LEU:HD12 | 1:A:136:PHE:CE1 | 2.53 | 0.43 |
| 1:A:271:GLU:O | 1:A:282:VAL:HG11 | 2.19 | 0.43 |
| 1:A:368:ILE:HD12 | 1:A:368:ILE:N | 2.33 | 0.43 |
| 1:A:529:ASP:HA | 1:A:532:ARG:HG2 | 2.00 | 0.43 |
| 1:A:549:ALA:O | 1:A:554:ALA:HB2 | 2.19 | 0.43 |
| 1:A:141:SER:OG | 1:A:146:GLU:HB2 | 2.18 | 0.43 |
| 1:A:327:GLU:O | 1:A:327:GLU:HG2 | 2.19 | 0.43 |
| 1:A:490:PHE:N | 1:A:490:PHE:CD1 | 2.86 | 0.43 |



| | lo uo pugom | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:618:TYR:CZ | 1:A:703:ILE:HG23 | 2.54 | 0.43 |
| 1:A:694:GLU:HG3 | 1:A:694:GLU:H | 1.41 | 0.43 |
| 1:A:830:ILE:HD13 | 1:A:844:CYS:SG | 2.59 | 0.43 |
| 1:A:102:MET:SD | 1:A:223:TYR:CD2 | 3.11 | 0.43 |
| 1:A:107:LEU:CD1 | 1:A:139:MET:HE1 | 2.49 | 0.43 |
| 1:A:177:LYS:O | 1:A:181:GLU:HB2 | 2.19 | 0.43 |
| 1:A:27:ALA:HA | 1:A:30:THR:HB | 2.01 | 0.42 |
| 1:A:72:LEU:O | 1:A:75:LEU:N | 2.52 | 0.42 |
| 1:A:156:ILE:HG12 | 1:A:179:LEU:HD21 | 2.01 | 0.42 |
| 1:A:317:ARG:HH22 | 1:A:363:GLU:CD | 2.22 | 0.42 |
| 1:A:399:SER:OG | 1:A:466:CYS:HA | 2.19 | 0.42 |
| 1:A:708:VAL:CG2 | 1:A:714:LEU:HB2 | 2.49 | 0.42 |
| 1:A:834:HIS:CD2 | 1:A:834:HIS:H | 2.37 | 0.42 |
| 1:A:583:SER:OG | 1:A:586:ALA:HB2 | 2.19 | 0.42 |
| 1:A:637:LEU:HD12 | 1:A:637:LEU:O | 2.20 | 0.42 |
| 1:A:685:MET:CB | 1:A:728:VAL:HG11 | 2.34 | 0.42 |
| 1:A:725:ALA:O | 1:A:728:VAL:HG12 | 2.19 | 0.42 |
| 1:A:8:PHE:CZ | 1:A:26:LEU:HD22 | 2.54 | 0.42 |
| 1:A:107:LEU:HB2 | 1:A:139:MET:SD | 2.59 | 0.42 |
| 1:A:253:THR:CG2 | 1:A:282:VAL:HG23 | 2.49 | 0.42 |
| 1:A:466:CYS:O | 1:A:467:CYS:HB2 | 2.19 | 0.42 |
| 1:A:484:GLU:CG | 1:A:485:LEU:H | 2.32 | 0.42 |
| 1:A:700:VAL:HG22 | 1:A:737:GLN:OE1 | 2.19 | 0.42 |
| 1:A:244:PHE:C | 1:A:246:ASN:H | 2.22 | 0.42 |
| 1:A:272:TYR:CE2 | 1:A:289:GLN:CB | 2.96 | 0.42 |
| 1:A:272:TYR:CD1 | 1:A:289:GLN:O | 2.72 | 0.42 |
| 1:A:515:ALA:O | 1:A:516:SER:O | 2.37 | 0.42 |
| 1:A:539:ASN:HD21 | 1:A:853:SER:C | 2.21 | 0.42 |
| 1:A:547:LEU:HD23 | 1:A:547:LEU:HA | 1.57 | 0.42 |
| 1:A:602:PHE:CE1 | 1:A:616:VAL:HG11 | 2.55 | 0.42 |
| 1:A:659:ASN:HA | 1:A:660:PRO:HD2 | 1.74 | 0.42 |
| 1:A:685:MET:HE1 | 1:A:736:MET:HG2 | 2.02 | 0.42 |
| 1:A:712:LYS:HG2 | 1:A:715:LYS:NZ | 2.34 | 0.42 |
| 1:A:728:VAL:HG13 | 1:A:729:LYS:N | 2.35 | 0.42 |
| 1:A:4:TRP:CH2 | 1:A:49:GLU:HG2 | 2.54 | 0.42 |
| 1:A:630:THR:O | 1:A:634:GLN:HB2 | 2.19 | 0.42 |
| 1:A:805:GLN:CB | 1:A:843:PHE:CE2 | 3.03 | 0.42 |
| 1:A:143:VAL:C | 1:A:145:MET:N | 2.72 | 0.42 |
| 1:A:374:ASP:N | 1:A:861:ILE:HD11 | 2.35 | 0.42 |
| 1:A:543:PRO:HA | 1:A:546:THR:OG1 | 2.19 | 0.42 |
| 1:A:749:ALA:HA | 1:A:756:ILE:CD1 | 2.50 | 0.42 |



| | | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:3:LYS:HB3 | 1:A:6:TYR:CZ | 2.55 | 0.42 |
| 1:A:34:MET:CE | 1:A:312:LEU:CD2 | 2.98 | 0.42 |
| 1:A:57:ILE:CG2 | 1:A:61:ILE:CG2 | 2.98 | 0.42 |
| 1:A:259:ARG:NH2 | 1:A:353:LEU:CD2 | 2.80 | 0.42 |
| 1:A:603:LYS:CD | 1:A:691:VAL:CG2 | 2.97 | 0.42 |
| 1:A:619:LEU:HD11 | 1:A:626:PHE:HZ | 1.84 | 0.42 |
| 1:A:678:LYS:NZ | 1:A:720:VAL:HG13 | 2.35 | 0.42 |
| 1:A:74:GLU:O | 1:A:76:ASN:N | 2.53 | 0.42 |
| 1:A:219:ARG:HG3 | 1:A:434:GLU:HA | 2.00 | 0.42 |
| 1:A:361:GLU:HG3 | 1:A:527:TRP:CD2 | 2.54 | 0.42 |
| 1:A:675:GLU:H | 1:A:675:GLU:HG3 | 1.61 | 0.42 |
| 1:A:775:PHE:HE1 | 1:A:804:ASP:OD2 | 2.02 | 0.42 |
| 1:A:224:ARG:CG | 1:A:229:ILE:CB | 2.97 | 0.42 |
| 1:A:319:MET:O | 1:A:319:MET:SD | 2.77 | 0.42 |
| 1:A:559:LEU:CD1 | 1:A:617:ARG:CB | 2.98 | 0.42 |
| 1:A:591:LEU:CD1 | 1:A:675:GLU:HB2 | 2.50 | 0.42 |
| 1:A:700:VAL:CG1 | 1:A:737:GLN:HB3 | 2.35 | 0.42 |
| 1:A:45:GLU:OE1 | 1:A:46:ALA:N | 2.50 | 0.42 |
| 1:A:76:ASN:ND2 | 1:A:76:ASN:C | 2.72 | 0.42 |
| 1:A:88:LEU:HA | 1:A:109:LEU:O | 2.20 | 0.42 |
| 1:A:186:VAL:HA | 1:A:189:GLU:OE2 | 2.20 | 0.42 |
| 1:A:251:SER:OG | 1:A:328:GLU:HA | 2.20 | 0.42 |
| 1:A:667:CYS:SG | 1:A:668:ARG:CD | 3.07 | 0.42 |
| 1:A:19:LEU:HD22 | 1:A:41:THR:HG21 | 2.02 | 0.41 |
| 1:A:40:PHE:CE1 | 1:A:69:ILE:CD1 | 3.01 | 0.41 |
| 1:A:79:LYS:CG | 1:A:82:ASP:HB2 | 2.50 | 0.41 |
| 1:A:95:ALA:O | 1:A:96:ARG:O | 2.38 | 0.41 |
| 1:A:100:PRO:HB2 | 1:A:458:VAL:HG11 | 1.99 | 0.41 |
| 1:A:144:VAL:O | 1:A:145:MET:O | 2.37 | 0.41 |
| 1:A:185:ALA:HA | 1:A:188:LYS:CB | 2.48 | 0.41 |
| 1:A:523:ARG:O | 1:A:527:TRP:CD2 | 2.74 | 0.41 |
| 1:A:693:GLU:C | 1:A:695:THR:H | 2.20 | 0.41 |
| 1:A:812:VAL:O | 1:A:812:VAL:CG1 | 2.68 | 0.41 |
| 1:A:179:LEU:C | 1:A:181:GLU:H | 2.22 | 0.41 |
| 1:A:248:GLY:HA2 | 1:A:275:ASN:OD1 | 2.20 | 0.41 |
| 1:A:260:ASN:N | 1:A:265:GLU:O | 2.53 | 0.41 |
| 1:A:277:GLN:H | 1:A:281:VAL:HG21 | 1.84 | 0.41 |
| 1:A:279:GLU:OE1 | 1:A:279:GLU:N | 2.53 | 0.41 |
| 1:A:408:TYR:O | 1:A:426:LEU:HA | 2.20 | 0.41 |
| 1:A:410:THR:HB | 1:A:413:GLU:HG3 | 2.02 | 0.41 |
| 1:A:517:VAL:CG2 | 1:A:521:PHE:CD2 | 3.03 | 0.41 |



| | lo uo pugom | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:539:ASN:ND2 | 1:A:853:SER:O | 2.46 | 0.41 |
| 1:A:707:LEU:CD1 | 1:A:746:ILE:CD1 | 2.98 | 0.41 |
| 1:A:745:GLU:O | 1:A:770:LEU:HD13 | 2.21 | 0.41 |
| 1:A:757:ALA:HB2 | 1:A:763:PHE:CZ | 2.55 | 0.41 |
| 1:A:82:ASP:OD2 | 1:A:84:GLU:N | 2.46 | 0.41 |
| 1:A:117:GLU:OE2 | 1:A:130:TYR:OH | 2.36 | 0.41 |
| 1:A:448:VAL:HG22 | 1:A:476:ILE:HD11 | 2.02 | 0.41 |
| 1:A:498:LEU:C | 1:A:500:GLY:N | 2.73 | 0.41 |
| 1:A:538:THR:HG22 | 1:A:540:ALA:HB2 | 2.01 | 0.41 |
| 1:A:715:LYS:HE2 | 1:A:715:LYS:HB3 | 1.83 | 0.41 |
| 1:A:92:ARG:HA | 1:A:104:ASP:O | 2.20 | 0.41 |
| 1:A:137:ILE:O | 1:A:196:PHE:CZ | 2.74 | 0.41 |
| 1:A:392:ILE:HD11 | 1:A:485:LEU:CD1 | 2.48 | 0.41 |
| 1:A:407:VAL:O | 1:A:408:TYR:CD2 | 2.74 | 0.41 |
| 1:A:471:CYS:O | 1:A:474:ILE:HG13 | 2.19 | 0.41 |
| 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:94:GLY:CA | 2.50 | 0.41 |
| 1:A:76:ASN:C | 1:A:78:LYS:H | 2.24 | 0.41 |
| 1:A:78:LYS:HE2 | 1:A:78:LYS:HB3 | 1.57 | 0.41 |
| 1:A:137:ILE:HG22 | 1:A:152:PHE:CE1 | 2.49 | 0.41 |
| 1:A:235:THR:HG22 | 1:A:236:ALA:O | 2.21 | 0.41 |
| 1:A:335:GLN:HG2 | 1:A:336:THR:N | 2.35 | 0.41 |
| 1:A:370:ALA:O | 1:A:373:LEU:HD22 | 2.21 | 0.41 |
| 1:A:380:THR:O | 1:A:512:THR:HA | 2.20 | 0.41 |
| 1:A:584:VAL:O | 1:A:588:GLU:N | 2.51 | 0.41 |
| 1:A:592:ASN:CA | 1:A:595:ILE:HD12 | 2.48 | 0.41 |
| 1:A:653:ASP:C | 1:A:655:LEU:H | 2.23 | 0.41 |
| 1:A:846:LYS:HD3 | 1:A:873:ASN:HD21 | 1.85 | 0.41 |
| 1:A:103:MET:N | 1:A:103:MET:SD | 2.89 | 0.41 |
| 1:A:107:LEU:CD1 | 1:A:139:MET:SD | 3.05 | 0.41 |
| 1:A:373:LEU:HD12 | 1:A:376:LEU:HD11 | 2.02 | 0.41 |
| 1:A:4:TRP:HE3 | 1:A:46:ALA:CB | 2.33 | 0.41 |
| 1:A:59:GLN:CD | 1:A:59:GLN:H | 2.24 | 0.41 |
| 1:A:147:VAL:HG12 | 1:A:148:PRO:HD2 | 2.02 | 0.41 |
| 1:A:224:ARG:HG2 | 1:A:224:ARG:O | 2.21 | 0.41 |
| 1:A:224:ARG:HH11 | 1:A:230:PRO:C | 2.24 | 0.41 |
| 1:A:260:ASN:CB | 1:A:265:GLU:HB2 | 2.49 | 0.41 |
| 1:A:285:VAL:O | 1:A:286:ARG:HB2 | 2.21 | 0.41 |
| 1:A:668:ARG:CZ | 1:A:707:LEU:HG | 2.50 | 0.41 |
| 1:A:855:SER:HB3 | 1:A:856:PRO:HD2 | 2.02 | 0.41 |
| 1:A:4:TRP:CZ3 | 1:A:61:ILE:HD11 | 2.51 | 0.41 |
| 1:A:93:SER:HG | 1:A:104:ASP:H | 1.67 | 0.41 |



| | A i a | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|--------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance (Å) | overlap (Å) |
| 1:A:157:ASP:HA | 1:A:160:LYS:HE3 | 2.02 | 0.41 |
| 1:A:224:ARG:CG | 1:A:229:ILE:CG2 | 2.97 | 0.41 |
| 1:A:261:PRO:CD | 1:A:269:TYR:CD1 | 2.97 | 0.41 |
| 1:A:298:MET:CG | 1:A:301:CYS:HG | 2.33 | 0.41 |
| 1:A:353:LEU:HD23 | 1:A:353:LEU:HA | 1.93 | 0.41 |
| 1:A:603:LYS:HG2 | 1:A:687:ALA:CB | 2.40 | 0.41 |
| 1:A:627:VAL:HB | 1:A:628:PRO:CD | 2.50 | 0.41 |
| 1:A:748:ARG:HA | 1:A:751:LEU:HB2 | 2.03 | 0.41 |
| 1:A:160:LYS:HG3 | 1:A:161:GLU:N | 2.36 | 0.41 |
| 1:A:204:LEU:CD2 | 1:A:205:MET:SD | 3.09 | 0.41 |
| 1:A:251:SER:O | 1:A:275:ASN:N | 2.51 | 0.41 |
| 1:A:377:LEU:HD13 | 1:A:857:PHE:CD1 | 2.56 | 0.41 |
| 1:A:432:SER:C | 1:A:455:HIS:CE1 | 2.94 | 0.41 |
| 1:A:439:MET:O | 1:A:463:MET:SD | 2.79 | 0.41 |
| 1:A:811:LEU:HD23 | 1:A:811:LEU:HA | 1.64 | 0.41 |
| 1:A:415:LYS:HE3 | 1:A:415:LYS:HB2 | 1.64 | 0.40 |
| 1:A:420:LYS:HG2 | 1:A:443:GLU:OE2 | 2.21 | 0.40 |
| 1:A:445:ILE:HG13 | 1:A:467:CYS:SG | 2.60 | 0.40 |
| 1:A:584:VAL:HG12 | 1:A:588:GLU:CG | 2.51 | 0.40 |
| 1:A:741:GLY:HA3 | 1:A:762:PHE:CE2 | 2.56 | 0.40 |
| 1:A:11:GLY:CA | 1:A:15:MET:SD | 3.09 | 0.40 |
| 1:A:136:PHE:C | 1:A:136:PHE:CD2 | 2.94 | 0.40 |
| 1:A:151:HIS:HB3 | 1:A:186:VAL:HG21 | 2.03 | 0.40 |
| 1:A:157:ASP:O | 1:A:160:LYS:HG3 | 2.21 | 0.40 |
| 1:A:252:GLY:N | 1:A:326:ILE:O | 2.54 | 0.40 |
| 1:A:571:ARG:NH2 | 1:A:601:ASP:OD1 | 2.52 | 0.40 |
| 1:A:790:TYR:OH | 1:A:799:PRO:HD3 | 2.21 | 0.40 |
| 1:A:107:LEU:CG | 1:A:139:MET:SD | 3.09 | 0.40 |
| 1:A:137:ILE:CG2 | 1:A:183:PHE:HB3 | 2.29 | 0.40 |
| 1:A:140:TYR:CE2 | 1:A:203:GLN:O | 2.71 | 0.40 |
| 1:A:143:VAL:O | 1:A:145:MET:N | 2.55 | 0.40 |
| 1:A:199:GLU:O | 1:A:202:ASP:N | 2.54 | 0.40 |
| 1:A:303:LYS:HE3 | 1:A:303:LYS:HB2 | 1.77 | 0.40 |
| 1:A:741:GLY:HA3 | 1:A:762:PHE:CD1 | 2.56 | 0.40 |
| 1:A:741:GLY:HA3 | 1:A:762:PHE:CE1 | 2.56 | 0.40 |
| 1:A:829:GLY:HA3 | 1:A:851:TYR:CD2 | 2.56 | 0.40 |
| 1:A:843:PHE:O | 1:A:847:VAL:HB | 2.20 | 0.40 |
| 1:A:72:LEU:HD23 | 1:A:72:LEU:HA | 1.63 | 0.40 |
| 1:A:145:MET:C | 1:A:146:GLU:HG2 | 2.41 | 0.40 |
| 1:A:287:THR:HA | 1:A:288:PRO:HD2 | 1.96 | 0.40 |
| 1:A:439:MET:C | 1:A:463:MET:SD | 3.00 | 0.40 |



| Atom_1 | Atom-2 | Interatomic | Clash |
|------------------|------------------|----------------|-------------|
| Atom-1 | Atom-2 | distance $(Å)$ | overlap (Å) |
| 1:A:580:LEU:CD1 | 1:A:637:LEU:HD21 | 2.46 | 0.40 |
| 1:A:834:HIS:HB3 | 1:A:840:SER:HG | 1.86 | 0.40 |
| 1:A:20:GLY:HA3 | 1:A:94:GLY:O | 2.21 | 0.40 |
| 1:A:183:PHE:HA | 1:A:186:VAL:HG12 | 2.02 | 0.40 |
| 1:A:224:ARG:O | 1:A:229:ILE:HB | 2.22 | 0.40 |
| 1:A:341:ARG:HB3 | 1:A:342:THR:H | 1.65 | 0.40 |
| 1:A:373:LEU:HD21 | 1:A:864:LEU:CD1 | 2.28 | 0.40 |
| 1:A:518:SER:OG | 1:A:519:GLY:N | 2.55 | 0.40 |
| 1:A:564:HIS:CD2 | 1:A:564:HIS:H | 2.39 | 0.40 |
| 1:A:775:PHE:CE1 | 1:A:804:ASP:OD2 | 2.73 | 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 | А | 864/873~(99%) | 628 (73%) | 149 (17%) | 87 (10%) | 0 1 |

All (87) Ramachandran outliers are listed below:

| Mol | Chain | Res | Type |
|-----|-------|-----|------|
| 1 | А | 38 | GLN |
| 1 | А | 55 | LYS |
| 1 | А | 59 | GLN |
| 1 | А | 60 | GLU |
| 1 | А | 96 | ARG |
| 1 | А | 108 | ASN |
| 1 | А | 145 | MET |
| 1 | А | 197 | PRO |
| 1 | А | 212 | PHE |
| 1 | А | 278 | GLY |
| 1 | А | 279 | GLU |



| Mol | Chain | Res | Type |
|-----|-------|-----|------|
| 1 | А | 291 | ILE |
| 1 | А | 337 | ARG |
| 1 | А | 395 | ALA |
| 1 | А | 419 | GLU |
| 1 | А | 423 | ARG |
| 1 | А | 472 | GLY |
| 1 | А | 473 | GLU |
| 1 | А | 494 | ASP |
| 1 | А | 501 | SER |
| 1 | А | 516 | SER |
| 1 | А | 518 | SER |
| 1 | А | 569 | ALA |
| 1 | А | 572 | ILE |
| 1 | А | 583 | SER |
| 1 | А | 694 | GLU |
| 1 | А | 732 | LYS |
| 1 | А | 734 | SER |
| 1 | А | 782 | ALA |
| 1 | А | 75 | LEU |
| 1 | А | 77 | GLY |
| 1 | А | 139 | MET |
| 1 | А | 151 | HIS |
| 1 | А | 162 | GLU |
| 1 | А | 165 | VAL |
| 1 | А | 180 | ALA |
| 1 | А | 225 | ARG |
| 1 | А | 226 | MET |
| 1 | А | 286 | ARG |
| 1 | А | 304 | GLN |
| 1 | А | 319 | MET |
| 1 | A | 329 | GLY |
| 1 | А | 470 | GLY |
| 1 | A | 486 | GLY |
| 1 | А | 492 | GLU |
| 1 | А | 499 | ASP |
| 1 | A | 565 | MET |
| 1 | А | 729 | LYS |
| 1 | A | 757 | ALA |
| 1 | А | 841 | VAL |
| 1 | А | 15 | MET |
| 1 | А | 72 | LEU |
| 1 | A | 73 | GLU |



| Mol | Chain | Res | Type |
|-----|-------|-----|------|
| 1 | А | 80 | PHE |
| 1 | А | 475 | LYS |
| 1 | А | 485 | LEU |
| 1 | А | 502 | THR |
| 1 | А | 636 | GLU |
| 1 | А | 733 | GLY |
| 1 | А | 784 | LYS |
| 1 | А | 804 | ASP |
| 1 | А | 52 | ASN |
| 1 | А | 150 | SER |
| 1 | А | 204 | LEU |
| 1 | А | 421 | GLY |
| 1 | А | 711 | LYS |
| 1 | А | 712 | LYS |
| 1 | А | 871 | LEU |
| 1 | А | 53 | SER |
| 1 | А | 176 | LEU |
| 1 | А | 179 | LEU |
| 1 | А | 218 | PRO |
| 1 | А | 285 | VAL |
| 1 | А | 517 | VAL |
| 1 | А | 620 | ASP |
| 1 | А | 785 | PHE |
| 1 | А | 230 | PRO |
| 1 | А | 265 | GLU |
| 1 | А | 418 | HIS |
| 1 | А | 610 | GLU |
| 1 | А | 832 | GLY |
| 1 | А | 299 | PRO |
| 1 | А | 838 | PRO |
| 1 | А | 20 | GLY |
| 1 | А | 436 | ILE |
| 1 | А | 144 | VAL |
| 1 | А | 125 | ASN |

Continued from previous page...

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 | А | 709/713~(99%) | 550~(78%) | 159~(22%) | 1 2 |

All (159) residues with a non-rotameric side chain are listed below:

| Mol | Chain | Res | Type |
|-----|-------|-----|------|
| 1 | А | 14 | SER |
| 1 | А | 15 | MET |
| 1 | А | 16 | ARG |
| 1 | А | 24 | CYS |
| 1 | А | 26 | LEU |
| 1 | А | 45 | GLU |
| 1 | А | 47 | CYS |
| 1 | А | 57 | ILE |
| 1 | А | 63 | ASP |
| 1 | А | 66 | PHE |
| 1 | А | 69 | ILE |
| 1 | А | 72 | LEU |
| 1 | А | 74 | GLU |
| 1 | А | 76 | ASN |
| 1 | А | 78 | LYS |
| 1 | А | 92 | ARG |
| 1 | А | 98 | SER |
| 1 | А | 111 | LEU |
| 1 | А | 123 | THR |
| 1 | А | 131 | ASP |
| 1 | А | 135 | ARG |
| 1 | А | 138 | GLN |
| 1 | А | 147 | VAL |
| 1 | А | 149 | LYS |
| 1 | А | 150 | SER |
| 1 | А | 155 | ILE |
| 1 | А | 161 | GLU |
| 1 | А | 166 | HIS |
| 1 | А | 167 | PHE |
| 1 | А | 168 | ASP |
| 1 | A | 169 | THR |
| 1 | A | 170 | ASP |
| 1 | А | 174 | ASP |
| 1 | A | 181 | GLU |
| 1 | А | 191 | MET |
| 1 | A | 194 | GLU |
| 1 | А | 199 | GLU |
| 1 | А | 202 | ASP |



| Mol | Chain | Res | Type |
|-----|-------|-----|------|
| 1 | А | 209 | LYS |
| 1 | А | 213 | ARG |
| 1 | А | 214 | SER |
| 1 | А | 215 | TRP |
| 1 | А | 217 | ASN |
| 1 | А | 224 | ARG |
| 1 | А | 227 | ASN |
| 1 | А | 232 | ASP |
| 1 | А | 238 | ASN |
| 1 | А | 239 | VAL |
| 1 | А | 240 | GLN |
| 1 | А | 241 | THR |
| 1 | А | 244 | PHE |
| 1 | А | 249 | GLU |
| 1 | А | 251 | SER |
| 1 | А | 253 | THR |
| 1 | А | 277 | GLN |
| 1 | А | 280 | ASP |
| 1 | А | 285 | VAL |
| 1 | А | 287 | THR |
| 1 | А | 291 | ILE |
| 1 | А | 294 | LEU |
| 1 | А | 297 | ASP |
| 1 | А | 298 | MET |
| 1 | А | 300 | ASP |
| 1 | А | 303 | LYS |
| 1 | А | 304 | GLN |
| 1 | А | 307 | ASP |
| 1 | А | 310 | MET |
| 1 | А | 311 | LYS |
| 1 | А | 312 | LEU |
| 1 | А | 313 | GLU |
| 1 | А | 321 | ASP |
| 1 | А | 322 | MET |
| 1 | А | 330 | LYS |
| 1 | А | 335 | GLN |
| 1 | А | 338 | ASN |
| 1 | А | 341 | ARG |
| 1 | А | 359 | ILE |
| 1 | А | 361 | GLU |
| 1 | А | 366 | VAL |
| 1 | А | 369 | GLU |



| Mol | Chain | Res | Type |
|-----|-------|-----|------|
| 1 | А | 373 | LEU |
| 1 | А | 374 | ASP |
| 1 | А | 377 | LEU |
| 1 | А | 380 | THR |
| 1 | А | 386 | LEU |
| 1 | А | 391 | VAL |
| 1 | А | 394 | SER |
| 1 | А | 420 | LYS |
| 1 | А | 422 | GLU |
| 1 | А | 427 | VAL |
| 1 | А | 428 | ARG |
| 1 | А | 430 | GLU |
| 1 | А | 440 | HIS |
| 1 | A | 445 | ILE |
| 1 | А | 446 | LEU |
| 1 | A | 447 | THR |
| 1 | А | 448 | VAL |
| 1 | А | 463 | MET |
| 1 | А | 466 | CYS |
| 1 | А | 468 | VAL |
| 1 | А | 469 | SER |
| 1 | А | 475 | LYS |
| 1 | А | 477 | ASN |
| 1 | А | 478 | GLU |
| 1 | А | 485 | LEU |
| 1 | А | 488 | HIS |
| 1 | А | 490 | PHE |
| 1 | А | 492 | GLU |
| 1 | А | 512 | THR |
| 1 | A | 513 | GLN |
| 1 | A | 516 | SER |
| 1 | A | 518 | SER |
| 1 | А | 520 | SER |
| 1 | A | 538 | THR |
| 1 | A | 542 | THR |
| 1 | A | 545 | ASP |
| 1 | А | 551 | LYS |
| 1 | А | 562 | THR |
| 1 | A | 570 | ASP |
| 1 | A | 578 | MET |
| 1 | A | 585 | GLU |
| 1 | A | 616 | VAL |



| Mol | Chain | Res | Type |
|-----|-------|-----|------|
| 1 | А | 633 | GLU |
| 1 | А | 636 | GLU |
| 1 | А | 641 | MET |
| 1 | А | 653 | ASP |
| 1 | А | 659 | ASN |
| 1 | А | 669 | LEU |
| 1 | А | 692 | LYS |
| 1 | А | 694 | GLU |
| 1 | А | 710 | GLU |
| 1 | А | 711 | LYS |
| 1 | А | 714 | LEU |
| 1 | А | 719 | ASP |
| 1 | А | 730 | LYS |
| 1 | А | 743 | MET |
| 1 | А | 752 | THR |
| 1 | А | 754 | ASP |
| 1 | А | 761 | GLU |
| 1 | А | 771 | THR |
| 1 | А | 773 | MET |
| 1 | А | 777 | PHE |
| 1 | А | 779 | ARG |
| 1 | А | 784 | LYS |
| 1 | А | 796 | GLU |
| 1 | А | 802 | ARG |
| 1 | А | 804 | ASP |
| 1 | А | 817 | LYS |
| 1 | А | 821 | GLN |
| 1 | А | 822 | THR |
| 1 | А | 823 | ARG |
| 1 | А | 834 | HIS |
| 1 | A | 837 | ASP |
| 1 | А | 853 | SER |
| 1 | A | 864 | LEU |
| 1 | А | 868 | GLN |
| 1 | А | 871 | LEU |
| 1 | A | 872 | ASN |
| 1 | А | 874 | LYS |

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (22) such sidechains are listed below:

| WIOI | Chain | Res | Type |
|------|-------|-----|------|
| 1 | А | 38 | GLN |



| Mol | Chain | Res | Type |
|-----|-------|-----|------|
| 1 | А | 52 | ASN |
| 1 | А | 56 | GLN |
| 1 | А | 62 | GLN |
| 1 | А | 76 | ASN |
| 1 | А | 151 | HIS |
| 1 | А | 238 | ASN |
| 1 | А | 240 | GLN |
| 1 | А | 289 | GLN |
| 1 | А | 320 | GLN |
| 1 | А | 338 | ASN |
| 1 | А | 348 | GLN |
| 1 | А | 378 | HIS |
| 1 | А | 488 | HIS |
| 1 | А | 564 | HIS |
| 1 | А | 624 | HIS |
| 1 | A | 656 | HIS |
| 1 | А | 659 | ASN |
| 1 | А | 680 | GLN |
| 1 | А | 768 | ASN |
| 1 | А | 772 | GLN |
| 1 | А | 845 | HIS |

5.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates (i)

There are no monosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry (i)

2 ligands are modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the Chemical Component Dictionary. The



Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with |Z| > 2 is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

| Mol | Type | Chain | Res | Link | Bond lengths | | | Bond angles | | |
|-----|------|-------|-----|------|--------------|------|---------|-------------|------|----------|
| | | | | | Counts | RMSZ | # Z >2 | Counts | RMSZ | # Z > 2 |
| 2 | SO4 | А | 901 | - | 4,4,4 | 0.79 | 0 | $6,\!6,\!6$ | 0.49 | 0 |
| 2 | SO4 | А | 902 | - | 4,4,4 | 1.24 | 1 (25%) | 6,6,6 | 0.27 | 0 |

All (1) bond length outliers are listed below:

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Ζ | Observed(Å) | $\mathrm{Ideal}(\mathrm{\AA})$ |
|-----|-------|-----|------|-------|------|-------------|--------------------------------|
| 2 | А | 902 | SO4 | O2-S | 2.18 | 1.57 | 1.46 |

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

2 monomers are involved in 6 short contacts:

| Mol | Chain | Res | Type | Clashes | Symm-Clashes |
|-----|-------|-----|------|---------|--------------|
| 2 | А | 901 | SO4 | 1 | 0 |
| 2 | А | 902 | SO4 | 5 | 0 |

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 (i)

6.1 Protein, DNA and RNA chains (i)

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.

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

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.

6.3 Carbohydrates (i)

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.

6.4 Ligands (i)

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.

6.5 Other polymers (i)

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.

