

Full wwPDB X-ray Structure Validation Report (i)

Sep 5, 2023 – 03:30 AM EDT

PDB ID	:	3V0C
Title	:	4.3 angstrom crystal structure of an inactive BoNT/A (E224Q/R363A/Y366F)
Authors	:	Gu, S.; Rumpel, S.; Zhou, J.; Strotmeier, J.; Bigalke, H.; Perry, K.; Shoemaker,
		C.B.; Rummel, A.; Jin, R.
Deposited on	:	2011-12-07
Resolution	:	4.30 Å(reported)

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

We welcome your comments at *validation@mail.wwpdb.org* A user guide is available at https://www.wwpdb.org/validation/2017/XrayValidationReportHelp with specific help available everywhere you see the (i) symbol.

The types of validation reports are described at http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types.

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

MolProbity	:	4.02b-467
Xtriage (Phenix)	:	1.13
EDS	:	2.35
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)	:	2.35

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 4.30 Å.

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



Metric	$egin{array}{c} { m Whole \ archive} \ (\#{ m Entries}) \end{array}$	${f Similar\ resolution}\ (\#{ m Entries,\ resolution\ range}({ m \AA}))$
R _{free}	130704	1014 (4.80-3.80)
Clashscore	141614	1077 (4.80-3.80)
Ramachandran outliers	138981	1029 (4.80-3.80)
Sidechain outliers	138945	1012 (4.80-3.80)
RSRZ outliers	127900	1075 (4.90-3.70)

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% The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the electron density. The numeric value is given above the bar.

Mol	Chain	Length	Quality of chain									
			3%									
1	А	1312	28%	59%	9%	•						



2 Entry composition (i)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 10390 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 BoNT/A.

Mol	Chain	Residues		\mathbf{A}	toms		ZeroOcc	AltConf	Trace	
1	А	1277	Total 10389	C 6664	N 1714	O 1979	S 32	0	0	0

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
А	224	GLN	GLU	engineered mutation	UNP Q7B8V4
А	363	ALA	ARG	engineered mutation	UNP Q7B8V4
А	366	PHE	TYR	engineered mutation	UNP Q7B8V4
А	1158	ALA	THR	conflict	UNP Q7B8V4
А	1297	VAL	-	expression tag	UNP Q7B8V4
А	1298	PRO	-	expression tag	UNP Q7B8V4
А	1299	PRO	-	expression tag	UNP Q7B8V4
А	1300	THR	-	expression tag	UNP Q7B8V4
А	1301	PRO	-	expression tag	UNP Q7B8V4
А	1302	GLY	-	expression tag	UNP Q7B8V4
А	1303	SER	-	expression tag	UNP Q7B8V4
А	1304	ALA	-	expression tag	UNP Q7B8V4
А	1305	TRP	-	expression tag	UNP Q7B8V4
А	1306	SER	-	expression tag	UNP Q7B8V4
А	1307	HIS	-	expression tag	UNP Q7B8V4
А	1308	PRO	-	expression tag	UNP Q7B8V4
А	1309	GLN	-	expression tag	UNP Q7B8V4
A	1310	PHE	- expression tag		UNP Q7B8V4
А	1311	GLU	- expression tag		UNP Q7B8V4
A 1312		LYS	-	expression tag	UNP Q7B8V4

There are 20 discrepancies between the modelled and reference sequences:

• Molecule 2 is ZINC ION (three-letter code: ZN) (formula: Zn).

Mol	Chain	Residues	Atoms	ZeroOcc	AltConf
2	А	1	Total Zn 1 1	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 and electron density. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. A red dot above a residue indicates a poor fit to the electron density (RSRZ > 2). Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.



• Molecule 1: BoNT/A

I671	A672	P674	V675	L676	G677 T678	F679	A680	L681 V682	S683	Y684		X688 V689	L690	T691	V692	1 693	D696	N697	A698		R/UZ	K705	W706		K/11 Y712	1713		N/16	A719	K720	V721 N722	T723	<u> 202 1</u>	1728	R729	K730 K731	M732	K733	E734	A735	E737	N738	ц739 А740	E741	A742 T743
K7 44	A745	1747	N7 48	Y749	4750 751	N752	Q753	Y754 T755	E756	E757	E758	K/59 N760	N761	I762	N7 63	F764 N765	1766 1766	D767	D768	L769	с <u>77</u> х	L773	N774	E775	5775 1777	N778	K779	A780 M781	1782	N783	1784 N785	K786	M7 00	0620 01200	C791	S792 V793	S794	Y7 95	L796	N797 N798		1801	P802 Y803		K806 R807
L808	E809	D812	-	L815	918 1	L819	L820	K821 V822	1823	Y824	D825	N826 B827	G828	T829	L830	1831	0833	V834	D835	0001	8838 D839	K840	V841	N842	1843 1844	L845	S846	1847 D848	0	<mark>0852</mark>	K855	Y856	V857 Defe	N859	0860	R861 L862	L863	S864	T865	F.866	Y869	1870	K871 N872	1873	I874 N875
T876	1070	Lorg N880	L881	R882	Y883 F884	S885	N886	H887 1.888	1889	D890	L891	8892 8893		K8 <mark>97</mark>	I898	N899	1900 (1901	S902	K903			P908	606I	D910	K911 N912	0913	1914	1915 1016	F917	N918	L919 E920	<mark>S921</mark>	5922 7073	1924	E925	V926 1927	L928	K929	000+	1932 V033	Y934	N935	5936 M937		N940 F941
S942	T943	5945 F945	W946	1947	1948 1949	P950	K951	Y952 F953	N954	S955	1956	5957 1958	N959	096N	E961	1962 T062	1903 1964	1965	N966	C967	M908 F060	N970	N971	S972	6973 11974	K975	V976	5977 1 078	N979	Y980	G981 E982	I983	I984 More	T986	L987	0988 D989	T990	Q991	E992	1993 KoqA	0995 0	R996	7997 V998	F999	K1000 Y1001
S1002	Q1003	11005	-	S1008	V1010	11011	N1012	R1013 W1014	11015	F1016	V1017	11018	T1020	N1021	N1022	R1023	N1 025	N1026	S1027	K1028	11029 V1030	I1031		R1034	L1035 11036		K1039	P1040	S1042	N1043	L1044 G1045	N1046	I1047	A1049	S1050	N1051 N1052	I1053	M1054	F1055	K1056 11057		C1060	R1061 D1062	T1063	H1064 R1065
Y1066	11067	11069 III	K1070	Y1071	F1072	L1074	F1075	D1076 K1077	E1078	L1079	N1080	E1081 K1082	E1083	I1084	K1085	D1086	V1088	D1089	N1090	Q1091	T 1096	L1097	K1098	D1099	W1101	G1102	D1103	Y1104 T1105	Q1106		K1109 P1110	Y1111	Y1112 M1113	L1114	N1115	L1116 V1117	D1118	P1119	00111	V1122	D1124	V1125	N1126 N1127	V1128	G1129 11130
R1131	G1132	M1134	Y1135	L1136	K113/ G1138	P1139		V1143 M1144	T1145	T1146	N1147	11148 V1149	L1150	N1151		L1154 V1155	R1156		K1159	F1160	11161 11162	K1163	K1164	Y1165	A1166	G1168	N1169	K1170	N1172	11173	V1174 R1175	N1176	11100	Y1181	I1182	N1183	V1186		K1189	E1190 V1101	R1192	L1193	A1194 T1195	N1196	A1197 • S1198
1199		204	1205	1206	000	1210	1211	1212	1214	1215	1216	121/	219	1220	1221	700	228	1229	1230	1231	1232 1233	1234	1235	1236	238	1239	1240	1241	1243	1244	1245	1247	1248	1250	1251	1252	1254	1255	1256	250	1260	1261	1262 263	1264	1265 1266
Y1267	N1268	01270 K	11271 I	E1272 L	K12/3	R1276	T1277	L1278 C1 279	C1280	S1281 G	W1282	E1283	11285 0	P1286	V1287	D1288	G1 290	W1291	G1292 G	E1293		VAL	PRO C	PRO K	THK PRO	GLY L	SER Q	TED D	SER	HIS C	GLN D	PHE I	GLU GLU		8	<u>4</u> 1		E4	N	V	X	<u>ц</u> :		<u>0</u>	N N

4 Data and refinement statistics (i)

Property	Value	Source
Space group	P 31 2 1	Depositor
Cell constants	167.52Å 167.52 Å 158.73 Å	Deperitor
a, b, c, α , β , γ	90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
$\mathbf{P}_{\text{assolution}}(\hat{\mathbf{A}})$	45.11 - 4.30	Depositor
Resolution (A)	45.11 - 4.30	EDS
% Data completeness	99.9 (45.11-4.30)	Depositor
(in resolution range)	99.9(45.11-4.30)	EDS
R _{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$< I/\sigma(I) > 1$	$2.96 (at 4.28 \text{\AA})$	Xtriage
Refinement program	PHENIX (phenix.refine: 1.7.2_869)	Depositor
D D	0.322 , 0.349	Depositor
Λ, Λ_{free}	0.312 , 0.330	DCC
R_{free} test set	913 reflections (5.11%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor $(Å^2)$	161.8	Xtriage
Anisotropy	0.203	Xtriage
Bulk solvent $k_{sol}(e/Å^3), B_{sol}(Å^2)$	0.32, 241.0	EDS
L-test for twinning ²	$< L > = 0.48, < L^2 > = 0.31$	Xtriage
Estimated twinning fraction	0.021 for -h,-k,l	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.83	EDS
Total number of atoms	10390	wwPDB-VP
Average B, all atoms $(Å^2)$	235.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: The largest off-origin peak in the Patterson function is 2.53% 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: ZN

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

Mol	Chain	Bond	lengths	Bond angles					
	Chain	RMSZ	# Z > 5	RMSZ	# Z > 5				
1	А	1.16	0/10610	0.66	1/14367~(0.0%)				

There are no bond length outliers.

All (1) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Ζ	$Observed(^{o})$	$Ideal(^{o})$
1	А	151	LEU	CA-CB-CG	6.20	129.55	115.30

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	10389	0	10255	1168	9
2	А	1	0	0	0	0
All	All	10390	0	10255	1168	9

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 57.

All (1168) close contacts within the same asymmetric unit are listed below, sorted by their clash magnitude.

•	٢7	'n	\cap
Э	v	υ	U

Atom 1	Atom 2	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:277:LEU:HD22	1:A:474:ASP:HB3	1.24	1.13
1:A:872:ASN:HD21	1:A:874:ILE:HB	1.12	1.11
1:A:948:ARG:HB3	1:A:1068:TRP:HB2	1.28	1.10
1:A:310:LEU:HD11	1:A:314:LYS:HE3	1.38	1.05
1:A:969:GLU:H	1:A:972:SER:HB3	1.24	1.02
1:A:1027:SER:HB2	1:A:1041:ILE:HD11	1.37	1.02
1:A:1248:GLY:HA2	1:A:1268:ASN:HD21	1.16	1.02
1:A:927:ILE:HG12	1:A:1052:ASN:HB3	1.36	1.01
1:A:346:THR:HG22	1:A:347:GLU:HG3	1.41	1.01
1:A:1010:TYR:HB3	1:A:1015:ILE:HD11	1.41	0.99
1:A:52:THR:HG22	1:A:528:LEU:HD11	1.47	0.96
1:A:806:LYS:HD2	1:A:934:TYR:HB3	1.48	0.95
1:A:910:ASP:HB3	1:A:913:GLN:HE21	1.30	0.95
1:A:566:ILE:HG12	1:A:749:TYR:CD1	2.02	0.95
1:A:576:LEU:HA	1:A:581:ARG:HB2	1.49	0.95
1:A:763:ASN:HB2	1:A:765:ASN:ND2	1.82	0.95
1:A:2:PRO:HG2	1:A:39:HIS:CD2	2.03	0.94
1:A:629:ASP:OD1	1:A:630:ILE:HG13	1.71	0.91
1:A:264:ARG:HG2	1:A:264:ARG:HH11	1.33	0.91
1:A:217:PRO:HG2	1:A:378:ILE:HD11	1.49	0.90
1:A:584:THR:HG22	1:A:586:PHE:H	1.38	0.89
1:A:242:VAL:HG11	1:A:257:GLU:HB2	1.53	0.89
1:A:1027:SER:HB2	1:A:1041:ILE:CD1	2.02	0.89
1:A:21:TYR:HE1	1:A:34:LYS:HB2	1.36	0.88
1:A:418:ASN:HD21	1:A:420:THR:HB	1.36	0.88
1:A:17:VAL:HG12	1:A:145:ARG:HH22	1.39	0.87
1:A:428:LEU:HB3	1:A:542:LYS:HA	1.57	0.87
1:A:559:PHE:HB3	1:A:582:VAL:HG22	1.57	0.86
1:A:41:LYS:HB3	1:A:150:ASN:HB2	1.58	0.85
1:A:49:ASP:HB3	1:A:187:ARG:HE	1.41	0.85
1:A:815:LEU:HD23	1:A:845:LEU:HD11	1.58	0.85
1:A:575:ALA:O	1:A:581:ARG:HB2	1.77	0.85
1:A:426:TYR:CE1	1:A:540:GLY:HA2	2.11	0.84
1:A:984:ILE:HG12	1:A:998:VAL:HG22	1.60	0.84
1:A:24:ILE:HD11	1:A:45:ILE:HD11	1.59	0.84
1:A:556:ALA:O	1:A:583:TYR:HB3	1.78	0.84
1:A:969:GLU:N	1:A:972:SER:HB3	1.93	0.84
1:A:755:THR:O	1:A:756:GLU:HB2	1.78	0.84
1:A:968:MET:HG2	1:A:972:SER:O	1.78	0.84
1:A:969:GLU:H	1:A:972:SER:CB	1.90	0.84
1:A:968:MET:HA	1:A:972:SER:HB3	1.59	0.83
1:A:1019:ILE:HG12	1:A:1029:ILE:HD12	1.59	0.83

		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:122:THR:O	1:A:126:GLU:HB3	1.79	0.83
1:A:952:TYR:HB2	1:A:1003:GLN:HE22	1.43	0.83
1:A:605:GLY:HA2	1:A:608:GLU:OE1	1.77	0.83
1:A:22:ILE:HD13	1:A:35:ALA:HB3	1.61	0.83
1:A:35:ALA:HB2	1:A:45:ILE:HG12	1.61	0.83
1:A:43:TRP:HD1	1:A:149:LEU:HD21	1.44	0.83
1:A:306:THR:HG22	1:A:516:SER:O	1.78	0.82
1:A:872:ASN:ND2	1:A:874:ILE:HB	1.93	0.82
1:A:1163:LYS:HB2	1:A:1181:TYR:HB2	1.61	0.82
1:A:789:ASN:HD21	1:A:861:ARG:HE	1.26	0.82
1:A:872:ASN:ND2	1:A:874:ILE:H	1.78	0.82
1:A:713:ILE:HD11	1:A:796:LEU:HD21	1.61	0.82
1:A:594:VAL:HG12	1:A:746:ILE:HG21	1.59	0.82
1:A:21:TYR:CE1	1:A:34:LYS:HB2	2.15	0.82
1:A:573:ASN:O	1:A:576:LEU:HG	1.80	0.82
1:A:1248:GLY:HA2	1:A:1268:ASN:ND2	1.95	0.82
1:A:979:ASN:O	1:A:982:GLU:HG2	1.79	0.82
1:A:52:THR:CG2	1:A:528:LEU:HD11	2.09	0.81
1:A:70:VAL:HG12	1:A:161:ILE:HD11	1.62	0.81
1:A:624:THR:HB	1:A:627:ILE:HD13	1.62	0.81
1:A:927:ILE:HG12	1:A:1052:ASN:CB	2.10	0.81
1:A:397:LEU:HA	1:A:402:ASN:HB2	1.60	0.81
1:A:487:ILE:HG23	1:A:488:GLU:OE1	1.81	0.81
1:A:344:MET:HE3	1:A:502:TYR:HD2	1.43	0.81
1:A:702:ARG:HG3	1:A:702:ARG:HH11	1.46	0.81
1:A:473:ASN:OD1	1:A:475:LEU:HD12	1.79	0.81
1:A:610:LEU:HD12	1:A:747:ILE:HD11	1.63	0.80
1:A:1110:PRO:HB2	1:A:1159:LYS:HD3	1.63	0.80
1:A:872:ASN:HD21	1:A:874:ILE:CB	1.94	0.80
1:A:1013:ARG:HG2	1:A:1101:TRP:HA	1.64	0.80
1:A:391:ASN:HD21	1:A:404:GLN:HE21	1.25	0.80
1:A:464:PHE:CE2	1:A:466:PRO:HG3	2.17	0.80
1:A:277:LEU:HD23	1:A:472:THR:HG22	1.62	0.80
1:A:763:ASN:HD22	1:A:765:ASN:HD21	1.29	0.80
1:A:1203:GLU:O	1:A:1204:LYS:HD3	1.81	0.80
1:A:385:THR:HG23	1:A:388:ASP:H	1.47	0.79
1:A:643:ILE:HG21	1:A:664:LEU:HD23	1.64	0.79
1:A:986:THR:HG22	1:A:996:ARG:HB3	1.63	0.79
1:A:929:LYS:O	1:A:932:ILE:HG22	1.82	0.79
1:A:277:LEU:CD2	1:A:474:ASP:HB3	2.10	0.79
1:A:1099:ASP:HB2	1:A:1103:ASP:H	1.47	0.78

		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (Å)	overlap (Å)
1:A:375:LYS:HB3	1:A:414:THR:HB	1.63	0.78
1:A:18:ASP:HA	1:A:37:LYS:HB2	1.65	0.78
1:A:122:THR:HB	1:A:126:GLU:OE1	1.84	0.78
1:A:344:MET:HE3	1:A:502:TYR:CD2	2.19	0.78
1:A:961:GLU:HB2	1:A:979:ASN:HD22	1.46	0.78
1:A:306:THR:HG21	1:A:515:ILE:HG22	1.66	0.78
1:A:798:ASN:ND2	1:A:893:ARG:HG3	1.99	0.77
1:A:962:TYR:HD1	1:A:962:TYR:H	1.32	0.77
1:A:1057:LEU:H	1:A:1057:LEU:HD12	1.48	0.77
1:A:590:TYR:O	1:A:594:VAL:HG23	1.84	0.77
1:A:1227:ASN:ND2	1:A:1229:GLN:HB3	2.00	0.77
1:A:1196:ASN:O	1:A:1199:GLN:HG3	1.85	0.76
1:A:170:HIS:CD2	1:A:172:VAL:H	2.02	0.76
1:A:2:PRO:O	1:A:39:HIS:HD2	1.69	0.76
1:A:1265:ASN:HA	1:A:1268:ASN:HD22	1.48	0.76
1:A:935:ASN:HA	1:A:1049:ALA:HB2	1.67	0.76
1:A:1233:ASN:ND2	1:A:1271:ILE:HG23	2.01	0.76
1:A:1211:ILE:HD12	1:A:1211:ILE:H	1.51	0.75
1:A:547:LYS:NZ	1:A:646:MET:HB3	2.02	0.75
1:A:985:TRP:CD2	1:A:1019:ILE:HG21	2.22	0.75
1:A:11:LYS:NZ	1:A:81:ASP:HB3	2.01	0.75
1:A:935:ASN:HA	1:A:1049:ALA:CB	2.16	0.75
1:A:42:ILE:HD12	1:A:151:LEU:HD12	1.68	0.75
1:A:1020:THR:HG23	1:A:1078:GLU:HG3	1.67	0.75
1:A:873:ILE:O	1:A:876:THR:HB	1.85	0.74
1:A:154:ILE:HD12	1:A:154:ILE:H	1.51	0.74
1:A:987:LEU:HD12	1:A:1041:ILE:HD13	1.68	0.74
1:A:1203:GLU:HB3	1:A:1262:VAL:HG11	1.70	0.74
1:A:14:VAL:HG13	1:A:20:ALA:HA	1.69	0.74
1:A:39:HIS:ND1	1:A:40:ASN:N	2.35	0.74
1:A:903:LYS:HB2	1:A:922:SER:HB3	1.69	0.74
1:A:264:ARG:HG2	1:A:264:ARG:NH1	1.98	0.74
1:A:634:ILE:HG22	1:A:637:ILE:HG13	1.68	0.74
1:A:952:TYR:CE2	1:A:980:TYR:HA	2.23	0.74
1:A:1248:GLY:CA	1:A:1268:ASN:HD21	1.98	0.74
1:A:713:ILE:HG12	1:A:801:ILE:HD13	1.69	0.73
1:A:765:ASN:HB3	1:A:768:ASP:HB2	1.69	0.73
1:A:417:LYS:HE3	1:A:419:PHE:CE1	2.23	0.73
1:A:418:ASN:ND2	1:A:420:THR:H	1.86	0.73
1:A:1100:PHE:HD1	1:A:1283:GLU:HG2	1.54	0.73
1:A:584:THR:HG22	1:A:586:PHE:N	2.02	0.73

	A A	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:809:GLU:HG2	1:A:934:TYR:CE2	2.23	0.73
1:A:641:LEU:HB2	1:A:643:ILE:HG12	1.68	0.73
1:A:584:THR:HG22	1:A:585:PHE:N	2.01	0.73
1:A:984:ILE:HG23	1:A:998:VAL:HG22	1.69	0.73
1:A:622:SER:HB2	1:A:633:ILE:HB	1.70	0.73
1:A:918:ASN:ND2	1:A:1065:ARG:HB3	2.03	0.73
1:A:17:VAL:HG12	1:A:145:ARG:NH2	2.03	0.73
1:A:102:ASP:HB2	1:A:357:PHE:HE2	1.54	0.73
1:A:882:ARG:HH22	1:A:1073:ASN:ND2	1.86	0.73
1:A:790:GLN:O	1:A:794:SER:HB3	1.89	0.72
1:A:420:THR:O	1:A:420:THR:HG22	1.90	0.72
1:A:1155:TYR:CE2	1:A:1287:VAL:HG13	2.23	0.72
1:A:395:THR:C	1:A:397:LEU:H	1.93	0.72
1:A:201:GLU:HG3	1:A:361:LEU:CD1	2.20	0.72
1:A:644:GLY:O	1:A:647:LEU:HG	1.90	0.72
1:A:167:SER:HB3	1:A:231:ARG:HH12	1.53	0.72
1:A:626:LYS:C	1:A:627:ILE:HD12	2.10	0.72
1:A:210:ALA:H	1:A:405:ASN:ND2	1.88	0.72
1:A:755:THR:OG1	1:A:757:GLU:HG2	1.89	0.72
1:A:429:LEU:HD23	1:A:543:TYR:HB2	1.72	0.71
1:A:702:ARG:O	1:A:705:LYS:HB3	1.89	0.71
1:A:18:ASP:HA	1:A:37:LYS:CB	2.20	0.71
1:A:153:ILE:HD13	1:A:186:ILE:HB	1.69	0.71
1:A:1011:ILE:HG21	1:A:1291:TRP:HZ3	1.54	0.71
1:A:306:THR:HG21	1:A:515:ILE:CG2	2.21	0.71
1:A:226:ILE:HD13	1:A:350:THR:HA	1.73	0.71
1:A:946:TRP:HB2	1:A:1070:LYS:HB3	1.73	0.70
1:A:249:ALA:HB3	1:A:252:GLU:HG3	1.72	0.70
1:A:481:ILE:HD13	1:A:698:ALA:HA	1.74	0.70
1:A:201:GLU:HG3	1:A:361:LEU:HD11	1.73	0.70
1:A:974:TRP:HB2	1:A:985:TRP:CH2	2.27	0.70
1:A:798:ASN:HD22	1:A:893:ARG:CG	2.05	0.70
1:A:210:ALA:N	1:A:405:ASN:ND2	2.40	0.70
1:A:264:ARG:HH11	1:A:264:ARG:CG	2.05	0.70
1:A:598:THR:HG22	1:A:602:MET:O	1.92	0.70
1:A:210:ALA:N	1:A:405:ASN:HD21	1.90	0.70
1:A:1249:PHE:CE2	1:A:1271:ILE:HD12	2.27	0.69
1:A:1044:LEU:HD23	1:A:1047:ILE:HD11	1.74	0.69
1:A:990:THR:C	1:A:992:GLU:H	1.95	0.69
1:A:1193:LEU:HD11	1:A:1206:LEU:HD13	1.73	0.69
1:A:549:THR:H	1:A:552:HIS:HD2	1.41	0.69

		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:49:ASP:CB	1:A:187:ARG:HE	2.05	0.69
1:A:184:GLN:OE1	1:A:231:ARG:HD3	1.92	0.69
1:A:575:ALA:HB1	1:A:582:VAL:O	1.92	0.69
1:A:757:GLU:HB2	1:A:760:ASN:ND2	2.08	0.69
1:A:181:GLY:HA2	1:A:231:ARG:O	1.93	0.68
1:A:749:TYR:O	1:A:752:ASN:HB3	1.92	0.68
1:A:1096:ILE:O	1:A:1098:LYS:HE3	1.93	0.68
1:A:789:ASN:ND2	1:A:861:ARG:HE	1.92	0.68
1:A:1041:ILE:O	1:A:1041:ILE:HG22	1.93	0.68
1:A:202:VAL:HG11	1:A:778:ASN:O	1.93	0.68
1:A:745:ALA:O	1:A:748:ASN:HB3	1.94	0.68
1:A:967:CYS:SG	1:A:1050:SER:HB2	2.34	0.68
1:A:1168:GLY:C	1:A:1170:LYS:H	1.95	0.68
1:A:1210:GLU:HG3	1:A:1212:PRO:HD2	1.75	0.68
1:A:944:SER:HB3	1:A:1018:THR:HG23	1.75	0.68
1:A:193:THR:HG21	1:A:215:THR:O	1.93	0.68
1:A:1227:ASN:O	1:A:1230:GLY:N	2.27	0.68
1:A:310:LEU:CD1	1:A:314:LYS:HE3	2.20	0.68
1:A:1010:TYR:CB	1:A:1015:ILE:HD11	2.19	0.68
1:A:212:LYS:HE2	1:A:371:LYS:HB2	1.76	0.67
1:A:463:PHE:CE1	1:A:727:LEU:HD23	2.29	0.67
1:A:23:LYS:HB2	1:A:23:LYS:NZ	2.09	0.67
1:A:409:ASN:OD1	1:A:412:ASN:HB2	1.94	0.67
1:A:426:TYR:CZ	1:A:540:GLY:HA2	2.28	0.67
1:A:105:ARG:HG2	1:A:508:PHE:CE1	2.28	0.67
1:A:585:PHE:HB3	1:A:639:PRO:O	1.95	0.67
1:A:656:LEU:HA	1:A:663:ILE:HD12	1.76	0.67
1:A:1023:ARG:HD3	1:A:1023:ARG:O	1.95	0.67
1:A:1241:ASP:OD2	1:A:1245:ASN:HB2	1.95	0.67
1:A:984:ILE:HG23	1:A:998:VAL:CG2	2.24	0.67
1:A:43:TRP:CD1	1:A:149:LEU:HD21	2.29	0.67
1:A:820:LEU:HD21	1:A:842:ASN:OD1	1.94	0.66
1:A:1099:ASP:OD2	1:A:1103:ASP:HB2	1.96	0.66
1:A:22:ILE:HD11	1:A:43:TRP:CZ3	2.30	0.66
1:A:30:MET:HE2	1:A:33:VAL:HG23	1.76	0.66
1:A:646:MET:O	1:A:647:LEU:HD23	1.96	0.66
1:A:713:ILE:HD11	1:A:796:LEU:CD2	2.25	0.66
1:A:145:ARG:HA	1:A:519:ASN:OD1	1.96	0.66
1:A:176:THR:CG2	1:A:236:ALA:HB3	2.26	0.66
1:A:455:ILE:CG2	1:A:555:ARG:HD2	2.26	0.66
1:A:275:ASP:OD2	1:A:472:THR:HB	1.95	0.66

	A L O	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:500:GLN:HE22	1:A:504:LEU:HD21	1.60	0.66
1:A:830:LEU:HB2	1:A:834:VAL:HG13	1.76	0.66
1:A:209:GLY:HA3	1:A:405:ASN:HD22	1.61	0.66
1:A:1193:LEU:C	1:A:1193:LEU:HD12	2.16	0.66
1:A:181:GLY:HA3	1:A:232:LEU:O	1.97	0.65
1:A:839:ASP:O	1:A:843:ASN:HB2	1.97	0.65
1:A:986:THR:HG22	1:A:996:ARG:CB	2.26	0.65
1:A:1155:TYR:CD2	1:A:1287:VAL:HG22	2.31	0.65
1:A:1101:TRP:CZ3	1:A:1286:PRO:O	2.49	0.65
1:A:643:ILE:O	1:A:645:ASN:N	2.28	0.65
1:A:671:ILE:HD12	1:A:671:ILE:N	2.12	0.65
1:A:253:MET:HG3	1:A:463:PHE:O	1.97	0.65
1:A:485:THR:HB	1:A:697:ASN:HD22	1.60	0.65
1:A:985:TRP:HB2	1:A:1019:ILE:HD13	1.77	0.65
1:A:576:LEU:HA	1:A:581:ARG:CB	2.27	0.65
1:A:754:TYR:OH	1:A:757:GLU:HG3	1.96	0.65
1:A:798:ASN:HD22	1:A:893:ARG:HG3	1.58	0.65
1:A:968:MET:CA	1:A:972:SER:HB3	2.27	0.65
1:A:115:ILE:HG22	1:A:317:PHE:HE1	1.62	0.64
1:A:526:GLY:O	1:A:527:GLN:HB2	1.95	0.64
1:A:557:GLN:O	1:A:738:ASN:HB3	1.95	0.64
1:A:22:ILE:CD1	1:A:35:ALA:HB3	2.26	0.64
1:A:22:ILE:HD12	1:A:22:ILE:N	2.12	0.64
1:A:1145:THR:HG22	1:A:1145:THR:O	1.96	0.64
1:A:356:LYS:HD2	1:A:496:LEU:HD21	1.79	0.64
1:A:1061:ARG:HH11	1:A:1061:ARG:HG2	1.61	0.64
1:A:948:ARG:HG2	1:A:948:ARG:HH11	1.62	0.64
1:A:406:THR:HG22	1:A:413:PHE:CG	2.33	0.64
1:A:634:ILE:HD11	1:A:783:ASN:HB3	1.79	0.64
1:A:634:ILE:HG12	1:A:784:ILE:HG12	1.78	0.64
1:A:1265:ASN:HA	1:A:1268:ASN:ND2	2.12	0.64
1:A:11:LYS:HZ1	1:A:81:ASP:CB	2.11	0.64
1:A:463:PHE:CZ	1:A:727:LEU:HD23	2.33	0.64
1:A:882:ARG:HA	1:A:912:ASN:HD21	1.61	0.64
1:A:464:PHE:O	1:A:465:SER:HB3	1.96	0.64
1:A:628:ALA:O	1:A:629:ASP:HB2	1.97	0.64
1:A:1296:LEU:H	1:A:1296:LEU:HD23	1.62	0.64
1:A:306:THR:HG23	1:A:517:ILE:HG22	1.80	0.64
1:A:1080:ASN:O	1:A:1084:ILE:HG12	1.97	0.64
1:A:733:LYS:HB2	1:A:781:MET:CE	2.28	0.63
1:A:1195:THR:HB	1:A:1206:LEU:HD23	1.80	0.63

		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:24:ILE:CD1	1:A:45:ILE:HD11	2.28	0.63
1:A:167:SER:HB3	1:A:231:ARG:NH1	2.13	0.63
1:A:913:GLN:HG2	1:A:1070:LYS:HE2	1.79	0.63
1:A:1192:ARG:HD3	1:A:1219:GLN:OE1	1.98	0.63
1:A:336:LEU:O	1:A:336:LEU:HD12	1.99	0.63
1:A:458:ASN:HB3	1:A:461:ASP:HB2	1.79	0.63
1:A:965:ILE:HD12	1:A:976:VAL:HG21	1.80	0.63
1:A:987:LEU:HD12	1:A:1041:ILE:CD1	2.28	0.63
1:A:740:ALA:O	1:A:744:LYS:HG3	1.98	0.63
1:A:881:LEU:HD11	1:A:1072:PHE:HB3	1.79	0.63
1:A:819:LEU:HD23	1:A:841:VAL:HB	1.80	0.63
1:A:397:LEU:O	1:A:398:ALA:HB2	1.98	0.63
1:A:744:LYS:O	1:A:748:ASN:HB2	1.99	0.62
1:A:547:LYS:HE2	1:A:646:MET:SD	2.39	0.62
1:A:122:THR:O	1:A:123:ILE:HB	1.99	0.62
1:A:572:VAL:HG12	1:A:574:GLU:H	1.64	0.62
1:A:918:ASN:HD22	1:A:1065:ARG:HB3	1.61	0.62
1:A:1062:ASP:OD1	1:A:1064:HIS:N	2.32	0.62
1:A:1117:TYR:HD2	1:A:1252:PHE:HZ	1.47	0.62
1:A:161:ILE:HD12	1:A:194:PHE:CE2	2.34	0.62
1:A:320:LYS:HD3	1:A:321:TYR:CE2	2.35	0.62
1:A:53:ASN:HB3	1:A:56:GLU:HB2	1.80	0.62
1:A:115:ILE:HA	1:A:150:ASN:HD21	1.64	0.62
1:A:549:THR:H	1:A:552:HIS:CD2	2.18	0.62
1:A:98:ILE:O	1:A:104:GLY:HA3	1.98	0.62
1:A:940:ASN:HA	1:A:1021:ASN:O	1.99	0.62
1:A:951:LYS:HG3	1:A:952:TYR:N	2.14	0.62
1:A:85:ASP:O	1:A:89:LYS:HD3	2.00	0.62
1:A:1011:ILE:CG2	1:A:1291:TRP:HZ3	2.13	0.62
1:A:223:HIS:ND1	1:A:351:GLU:OE1	2.32	0.61
1:A:917:PHE:O	1:A:1057:LEU:HD13	2.00	0.61
1:A:1255:PHE:CD2	1:A:1260:LYS:HD2	2.35	0.61
1:A:500:GLN:NE2	1:A:504:LEU:HD21	2.14	0.61
1:A:637:ILE:HD11	1:A:784:ILE:HG23	1.82	0.61
1:A:764:PHE:CZ	1:A:769:LEU:HD22	2.34	0.61
1:A:1168:GLY:O	1:A:1170:LYS:HG2	1.99	0.61
1:A:556:ALA:HB2	1:A:576:LEU:HD23	1.81	0.61
1:A:747:ILE:HG21	1:A:764:PHE:CZ	2.36	0.61
1:A:361:LEU:H	1:A:404:GLN:HE22	1.48	0.61
1:A:23:LYS:HB2	1:A:23:LYS:HZ2	1.64	0.61
1:A:789:ASN:OD1	1:A:861:ARG:HG2	2.00	0.61

	AL O	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (Å)	overlap (Å)
1:A:962:TYR:CE2	1:A:1057:LEU:HD23	2.35	0.61
1:A:682:VAL:HG12	1:A:684:TYR:CE1	2.35	0.61
1:A:731:LYS:O	1:A:734:GLU:HB3	2.01	0.61
1:A:287:TYR:CE2	1:A:291:LYS:HD2	2.36	0.61
1:A:643:ILE:C	1:A:645:ASN:H	2.04	0.61
1:A:1101:TRP:HZ3	1:A:1286:PRO:O	1.84	0.61
1:A:325:GLU:HB3	1:A:331:PHE:CD1	2.36	0.60
1:A:455:ILE:HG21	1:A:555:ARG:HD2	1.81	0.60
1:A:584:THR:HG22	1:A:585:PHE:H	1.64	0.60
1:A:15:ASN:OD1	1:A:17:VAL:O	2.19	0.60
1:A:250:TYR:HB2	1:A:429:LEU:CD2	2.31	0.60
1:A:306:THR:HG22	1:A:517:ILE:HA	1.82	0.60
1:A:406:THR:O	1:A:410:ASN:HA	2.01	0.60
1:A:618:THR:HG23	1:A:780:ALA:HB2	1.83	0.60
1:A:769:LEU:O	1:A:772:LYS:HB2	2.01	0.60
1:A:872:ASN:HD22	1:A:874:ILE:H	1.47	0.60
1:A:49:ASP:OD1	1:A:52:THR:HB	2.01	0.60
1:A:135:ILE:CG2	1:A:149:LEU:HD12	2.31	0.60
1:A:593:LYS:HD3	1:A:609:GLN:CD	2.21	0.60
1:A:325:GLU:HB3	1:A:331:PHE:CE1	2.36	0.60
1:A:348:ILE:HG23	1:A:499:ILE:HG12	1.83	0.60
1:A:1128:VAL:HG11	1:A:1191:TYR:CE2	2.37	0.60
1:A:903:LYS:HG3	1:A:921:SER:HB2	1.83	0.60
1:A:702:ARG:HG3	1:A:702:ARG:NH1	2.17	0.59
1:A:961:GLU:HA	1:A:978:LEU:O	2.02	0.59
1:A:1075:PHE:CD2	1:A:1079:LEU:HD11	2.36	0.59
1:A:52:THR:HG23	1:A:528:LEU:HD21	1.82	0.59
1:A:163:PHE:HA	1:A:187:ARG:O	2.01	0.59
1:A:250:TYR:HB2	1:A:429:LEU:HD22	1.84	0.59
1:A:591:VAL:HG12	1:A:595:ASN:HD22	1.66	0.59
1:A:852:GLN:OE1	1:A:855:LYS:HE3	2.01	0.59
1:A:974:TRP:HA	1:A:986:THR:O	2.01	0.59
1:A:1099:ASP:HB2	1:A:1103:ASP:N	2.15	0.59
1:A:134:CYS:HB3	1:A:147:GLU:O	2.02	0.59
1:A:170:HIS:HD2	1:A:172:VAL:H	1.45	0.59
1:A:249:ALA:HB3	1:A:252:GLU:CG	2.32	0.59
1:A:336:LEU:CD1	1:A:340:LYS:HE3	2.32	0.59
1:A:634:ILE:CG2	1:A:637:ILE:HG13	2.31	0.59
1:A:872:ASN:ND2	1:A:874:ILE:N	2.50	0.59
1:A:535:GLU:HG3	1:A:537:PHE:CZ	2.37	0.59
1:A:961:GLU:CB	1:A:979:ASN:HD22	2.13	0.59

	A L O	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (Å)	overlap (Å)
1:A:8:PHE:HD1	1:A:19:ILE:HD11	1.67	0.59
1:A:906:PHE:O	1:A:907:ASP:C	2.41	0.59
1:A:923:LYS:HD3	1:A:1056:LYS:HD3	1.84	0.59
1:A:277:LEU:HD23	1:A:472:THR:CG2	2.30	0.59
1:A:802:PRO:HB3	1:A:932:ILE:HD11	1.84	0.59
1:A:949:ILE:O	1:A:1012:ASN:HA	2.03	0.59
1:A:428:LEU:O	1:A:543:TYR:N	2.35	0.59
1:A:706:TRP:CZ3	1:A:848:ASP:HB2	2.38	0.59
1:A:576:LEU:HA	1:A:581:ARG:HD2	1.85	0.59
1:A:636:TYR:C	1:A:639:PRO:HD2	2.23	0.59
1:A:995:GLN:OE1	1:A:996:ARG:N	2.35	0.59
1:A:1016:PHE:CE2	1:A:1088:TYR:HB2	2.38	0.59
1:A:1241:ASP:CG	1:A:1245:ASN:HB2	2.23	0.59
1:A:97:ARG:HG2	1:A:386:ILE:O	2.03	0.58
1:A:498:LEU:O	1:A:502:TYR:HD1	1.85	0.58
1:A:1101:TRP:CZ3	1:A:1288:ASP:HB2	2.38	0.58
1:A:934:TYR:O	1:A:937:MET:HB2	2.03	0.58
1:A:952:TYR:CE1	1:A:1065:ARG:CZ	2.86	0.58
1:A:566:ILE:HG12	1:A:749:TYR:CG	2.39	0.58
1:A:658:PHE:CD1	1:A:889:ILE:HG21	2.38	0.58
1:A:1014:TRP:CH2	1:A:1070:LYS:HE3	2.38	0.58
1:A:1193:LEU:CD1	1:A:1206:LEU:HD13	2.33	0.58
1:A:1255:PHE:O	1:A:1256:ASN:HB2	2.03	0.58
1:A:578:ASN:O	1:A:581:ARG:HB3	2.04	0.58
1:A:857:VAL:O	1:A:863:LEU:HD11	2.01	0.58
1:A:950:PRO:O	1:A:1065:ARG:NH2	2.36	0.58
1:A:1164:LYS:HD3	1:A:1168:GLY:HA2	1.86	0.58
1:A:1211:ILE:HD12	1:A:1211:ILE:N	2.18	0.58
1:A:312:TYR:CE2	1:A:515:ILE:HG13	2.39	0.58
1:A:584:THR:CG2	1:A:585:PHE:N	2.66	0.58
1:A:984:ILE:HG22	1:A:985:TRP:N	2.18	0.58
1:A:11:LYS:HZ1	1:A:81:ASP:HB3	1.69	0.58
1:A:425:PHE:CZ	1:A:537:PHE:HB2	2.39	0.58
1:A:226:ILE:CG2	1:A:265:THR:HG23	2.34	0.58
1:A:455:ILE:HD12	1:A:552:HIS:ND1	2.19	0.58
1:A:566:ILE:HD13	1:A:749:TYR:HB3	1.86	0.58
1:A:764:PHE:HZ	1:A:769:LEU:HD22	1.68	0.58
1:A:1234:LYS:O	1:A:1236:LYS:HG3	2.04	0.58
1:A:1239:LEU:HD13	1:A:1240:GLN:N	2.19	0.58
1:A:952:TYR:CD2	1:A:980:TYR:HA	2.39	0.57
1:A:242:VAL:HG13	1:A:258:VAL:O	2.03	0.57

		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:258:VAL:HG21	1:A:367:LEU:HD21	1.87	0.57
1:A:1097:LEU:HD23	1:A:1236:LYS:HD2	1.87	0.57
1:A:624:THR:HG21	1:A:633:ILE:HD12	1.85	0.57
1:A:487:ILE:CG2	1:A:488:GLU:N	2.66	0.57
1:A:960:ASN:HD21	1:A:1061:ARG:H	1.52	0.57
1:A:229:GLY:O	1:A:233:TYR:HD1	1.88	0.57
1:A:542:LYS:HE2	1:A:544:GLU:HG3	1.87	0.57
1:A:2:PRO:O	1:A:4:VAL:N	2.37	0.57
1:A:193:THR:HG22	1:A:194:PHE:H	1.70	0.57
1:A:866:PHE:O	1:A:870:ILE:HG12	2.05	0.57
1:A:903:LYS:CB	1:A:922:SER:HB3	2.34	0.57
1:A:72:TYR:CE2	1:A:160:ILE:HD12	2.39	0.57
1:A:861:ARG:NH2	1:A:862:LEU:HD21	2.19	0.57
1:A:574:GLU:C	1:A:576:LEU:H	2.07	0.57
1:A:963:THR:O	1:A:1057:LEU:HA	2.04	0.57
1:A:1155:TYR:CE2	1:A:1287:VAL:HG22	2.40	0.57
1:A:1296:LEU:HD23	1:A:1296:LEU:N	2.20	0.57
1:A:30:MET:CE	1:A:33:VAL:HG23	2.35	0.56
1:A:473:ASN:ND2	1:A:475:LEU:H	2.03	0.56
1:A:669:PRO:HB3	1:A:720:LYS:HB3	1.87	0.56
1:A:1168:GLY:O	1:A:1170:LYS:N	2.37	0.56
1:A:72:TYR:CZ	1:A:416:LEU:HD13	2.40	0.56
1:A:80:THR:OG1	1:A:83:GLU:HG3	2.06	0.56
1:A:259:SER:OG	1:A:262:GLU:HB2	2.05	0.56
1:A:362:ASN:ND2	1:A:363:ALA:O	2.38	0.56
1:A:395:THR:O	1:A:397:LEU:N	2.37	0.56
1:A:480:GLU:HA	1:A:680:ALA:HB3	1.86	0.56
1:A:948:ARG:HB3	1:A:1068:TRP:CB	2.19	0.56
1:A:195:GLY:HA3	1:A:374:PHE:HE1	1.70	0.56
1:A:395:THR:C	1:A:397:LEU:N	2.58	0.56
1:A:918:ASN:OD1	1:A:1060:CYS:HB3	2.04	0.56
1:A:1080:ASN:HD21	1:A:1082:LYS:HB3	1.69	0.56
1:A:1096:ILE:HG21	1:A:1104:TYR:CD1	2.41	0.56
1:A:1210:GLU:HB3	1:A:1213:ASP:OD2	2.05	0.56
1:A:935:ASN:OD1	1:A:1049:ALA:HB3	2.06	0.56
1:A:1075:PHE:CE2	1:A:1079:LEU:HD11	2.41	0.56
1:A:1114:LEU:HD12	1:A:1115:ASN:N	2.20	0.56
1:A:8:PHE:CD1	1:A:19:ILE:HD11	2.41	0.56
1:A:594:VAL:CG1	1:A:746:ILE:HG21	2.32	0.56
1:A:963:THR:HA	1:A:977:SER:HA	1.88	0.56
1:A:1127:ASN:O	1:A:1132:GLY:HA3	2.06	0.56

	A L O	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:115:ILE:HD12	1:A:316:VAL:HG11	1.86	0.56
1:A:628:ALA:O	1:A:629:ASP:CB	2.53	0.56
1:A:1155:TYR:OH	1:A:1291:TRP:HB3	2.06	0.56
1:A:733:LYS:O	1:A:737:GLU:HG3	2.06	0.56
1:A:1227:ASN:HB3	1:A:1231:ILE:O	2.06	0.56
1:A:660:GLY:O	1:A:662:VAL:N	2.39	0.56
1:A:269:HIS:O	1:A:272:LYS:N	2.35	0.56
1:A:879:LEU:HB3	1:A:1074:LEU:HB3	1.88	0.56
1:A:154:ILE:HD13	1:A:187:ARG:HG3	1.87	0.56
1:A:856:TYR:O	1:A:857:VAL:HG23	2.06	0.56
1:A:1029:ILE:HG23	1:A:1029:ILE:O	2.05	0.56
1:A:337:LYS:HA	1:A:340:LYS:HD2	1.88	0.55
1:A:573:ASN:C	1:A:575:ALA:H	2.10	0.55
1:A:575:ALA:O	1:A:581:ARG:CB	2.53	0.55
1:A:952:TYR:HB2	1:A:1003:GLN:NE2	2.18	0.55
1:A:1136:LEU:HD11	1:A:1252:PHE:CD2	2.41	0.55
1:A:1085:LYS:HE3	1:A:1089:ASP:OD2	2.06	0.55
1:A:1137:LYS:HG3	1:A:1138:GLY:H	1.70	0.55
1:A:1173:ILE:HB	1:A:1175:ARG:HH12	1.71	0.55
1:A:176:THR:HG22	1:A:236:ALA:HB3	1.88	0.55
1:A:951:LYS:NZ	1:A:1151:ASN:OD1	2.40	0.55
1:A:643:ILE:C	1:A:645:ASN:N	2.58	0.55
1:A:1167:SER:HB3	1:A:1170:LYS:NZ	2.21	0.55
1:A:559:PHE:CD1	1:A:559:PHE:C	2.79	0.55
1:A:1204:LYS:H	1:A:1262:VAL:HG13	1.71	0.55
1:A:9:ASN:HB2	1:A:12:ASP:OD1	2.06	0.55
1:A:542:LYS:HE2	1:A:544:GLU:CG	2.36	0.55
1:A:706:TRP:CD2	1:A:808:LEU:HD13	2.41	0.55
1:A:972:SER:HB2	1:A:1048:HIS:HB2	1.88	0.55
1:A:1130:ILE:HD12	1:A:1131:ARG:N	2.22	0.55
1:A:555:ARG:O	1:A:558:GLU:HG3	2.07	0.55
1:A:702:ARG:HE	1:A:812:ASP:CG	2.09	0.55
1:A:1155:TYR:CZ	1:A:1287:VAL:HA	2.41	0.55
1:A:1211:ILE:H	1:A:1211:ILE:CD1	2.18	0.55
1:A:22:ILE:CG2	1:A:24:ILE:HD12	2.37	0.55
1:A:888:LEU:HB3	1:A:900:ILE:HD11	1.89	0.55
1:A:243:PHE:CZ	1:A:273:PHE:HB3	2.41	0.55
1:A:429:LEU:O	1:A:454:CYS:HA	2.06	0.55
1:A:1276:ARG:O	1:A:1278:LEU:HG	2.07	0.55
1:A:1022:ASN:HB2	1:A:1078:GLU:OE2	2.07	0.55
1:A:226:ILE:HD13	1:A:350:THR:CA	2.36	0.54

	A + O	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:754:TYR:OH	1:A:757:GLU:O	2.23	0.54
1:A:1013:ARG:HG3	1:A:1101:TRP:HD1	1.72	0.54
1:A:1277:THR:HG22	1:A:1277:THR:O	2.07	0.54
1:A:2:PRO:HG2	1:A:39:HIS:NE2	2.22	0.54
1:A:212:LYS:CE	1:A:371:LYS:HB2	2.37	0.54
1:A:458:ASN:HD22	1:A:459:ASN:H	1.55	0.54
1:A:1020:THR:CG2	1:A:1078:GLU:HG3	2.36	0.54
1:A:48:ARG:CZ	1:A:59:LEU:HD13	2.36	0.54
1:A:422:LEU:HD23	1:A:423:PHE:CE1	2.42	0.54
1:A:888:LEU:HD21	1:A:914:ILE:HD11	1.89	0.54
1:A:984:ILE:HG12	1:A:998:VAL:CG2	2.32	0.54
1:A:1034:ARG:CZ	1:A:1036:ILE:HD11	2.36	0.54
1:A:322:LEU:HD12	1:A:341:LEU:HB2	1.88	0.54
1:A:632:ILE:HD12	1:A:786:LYS:HB3	1.89	0.54
1:A:815:LEU:HD23	1:A:845:LEU:CD1	2.36	0.54
1:A:1112:TYR:CZ	1:A:1159:LYS:HE2	2.42	0.54
1:A:566:ILE:CD1	1:A:749:TYR:HB3	2.37	0.54
1:A:72:TYR:CE1	1:A:416:LEU:HD13	2.43	0.54
1:A:115:ILE:CG2	1:A:317:PHE:HE1	2.21	0.54
1:A:584:THR:CG2	1:A:585:PHE:H	2.21	0.54
1:A:669:PRO:HG3	1:A:721:VAL:HG22	1.89	0.54
1:A:1077:LYS:HE3	1:A:1083:GLU:OE1	2.08	0.54
1:A:11:LYS:HZ2	1:A:81:ASP:HB3	1.72	0.54
1:A:97:ARG:HD3	1:A:358:PHE:CE1	2.43	0.54
1:A:178:ASN:O	1:A:289:LYS:HB3	2.08	0.54
1:A:625:ASP:C	1:A:627:ILE:H	2.10	0.54
1:A:816:LYS:O	1:A:820:LEU:HD23	2.08	0.54
1:A:11:LYS:NZ	1:A:81:ASP:CB	2.70	0.54
1:A:587:SER:H	1:A:617:GLU:CD	2.10	0.54
1:A:663:ILE:O	1:A:663:ILE:HG22	2.08	0.54
1:A:903:LYS:CG	1:A:921:SER:HB2	2.38	0.53
1:A:309:SER:O	1:A:312:TYR:N	2.41	0.53
1:A:754:TYR:CG	1:A:755:THR:N	2.76	0.53
1:A:123:ILE:HD12	1:A:123:ILE:N	2.23	0.53
1:A:515:ILE:HG22	1:A:515:ILE:O	2.08	0.53
1:A:418:ASN:ND2	1:A:420:THR:N	2.56	0.53
1:A:423:PHE:O	1:A:426:TYR:HD2	1.90	0.53
1:A:909:ILE:HD11	1:A:1106:GLN:OE1	2.08	0.53
1:A:1163:LYS:HD3	1:A:1183:ASN:ND2	2.24	0.53
1:A:658:PHE:HD1	1:A:889:ILE:HG21	1.72	0.53
1:A:661:ALA:HB1	1:A:791:CYS:HB3	1.89	0.53

A 4 1		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:17:VAL:O	1:A:18:ASP:OD1	2.27	0.53
1:A:458:ASN:ND2	1:A:459:ASN:N	2.57	0.53
1:A:772:LYS:O	1:A:774:ASN:N	2.41	0.53
1:A:925:GLU:HB2	1:A:1054:MET:SD	2.49	0.53
1:A:432:ARG:N	1:A:545:LEU:O	2.42	0.53
1:A:797:MET:CE	1:A:866:PHE:HE1	2.22	0.53
1:A:1005:ILE:O	1:A:1151:ASN:HA	2.09	0.53
1:A:1164:LYS:HD3	1:A:1168:GLY:CA	2.39	0.53
1:A:52:THR:CG2	1:A:528:LEU:HD21	2.39	0.53
1:A:269:HIS:O	1:A:272:LYS:HB2	2.09	0.53
1:A:318:LYS:CG	1:A:331:PHE:CE1	2.92	0.53
1:A:535:GLU:HG3	1:A:535:GLU:O	2.09	0.53
1:A:824:TYR:O	1:A:827:ARG:HG2	2.09	0.53
1:A:549:THR:N	1:A:552:HIS:HD2	2.05	0.53
1:A:573:ASN:C	1:A:575:ALA:N	2.63	0.53
1:A:641:LEU:HD11	1:A:732:MET:SD	2.49	0.53
1:A:816:LYS:HE3	1:A:842:ASN:HA	1.89	0.53
1:A:1116:LEU:HB2	1:A:1281:SER:O	2.09	0.53
1:A:594:VAL:HG12	1:A:746:ILE:HD13	1.91	0.52
1:A:1146:THR:O	1:A:1147:ASN:HB2	2.09	0.52
1:A:1241:ASP:HB3	1:A:1247:ILE:HD11	1.91	0.52
1:A:405:ASN:CG	1:A:408:ILE:HD13	2.30	0.52
1:A:903:LYS:HA	1:A:903:LYS:HE2	1.89	0.52
1:A:22:ILE:HD12	1:A:22:ILE:H	1.72	0.52
1:A:226:ILE:HG21	1:A:265:THR:HG23	1.90	0.52
1:A:407:GLU:O	1:A:410:ASN:HB2	2.08	0.52
1:A:552:HIS:O	1:A:555:ARG:HB3	2.09	0.52
1:A:1112:TYR:CE1	1:A:1159:LYS:HE2	2.44	0.52
1:A:1205:ILE:O	1:A:1206:LEU:HB2	2.08	0.52
1:A:906:PHE:CE2	1:A:914:ILE:HG12	2.44	0.52
1:A:140:PRO:C	1:A:142:GLY:H	2.13	0.52
1:A:318:LYS:NZ	1:A:325:GLU:HG2	2.25	0.52
1:A:348:ILE:HD13	1:A:494:ILE:HG23	1.90	0.52
1:A:589:ASP:OD1	1:A:593:LYS:HE3	2.10	0.52
1:A:947:ILE:CG2	1:A:1015:ILE:HB	2.40	0.52
1:A:562:GLY:C	1:A:564:SER:H	2.13	0.52
1:A:1163:LYS:HG3	1:A:1183:ASN:ND2	2.24	0.52
1:A:238:ASN:HD21	1:A:240:ASN:HD22	1.58	0.52
1:A:669:PRO:HG3	1:A:721:VAL:CG2	2.39	0.52
1:A:684:TYR:CD2	1:A:690:LEU:HD23	2.44	0.52
1:A:735:ALA:O	1:A:738:ASN:N	2.42	0.52

		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:952:TYR:HE2	1:A:981:GLY:H	1.56	0.52
1:A:1009:ASP:HA	1:A:1013:ARG:HH11	1.73	0.52
1:A:614:PHE:CD2	1:A:773:LEU:HD22	2.45	0.52
1:A:15:ASN:O	1:A:17:VAL:N	2.42	0.52
1:A:197:GLU:CG	1:A:212:LYS:HG2	2.39	0.52
1:A:989:ASP:HB2	1:A:1046:ASN:O	2.10	0.52
1:A:3:PHE:O	1:A:4:VAL:HB	2.10	0.52
1:A:267:GLY:O	1:A:268:GLY:C	2.48	0.51
1:A:872:ASN:HD22	1:A:874:ILE:N	2.05	0.51
1:A:872:ASN:HB3	1:A:875:ASN:ND2	2.26	0.51
1:A:1154:LEU:O	1:A:1156:ARG:N	2.40	0.51
1:A:1163:LYS:HD3	1:A:1183:ASN:HD22	1.75	0.51
1:A:46:PRO:O	1:A:84:LYS:HD3	2.09	0.51
1:A:258:VAL:HG22	1:A:366:PHE:HE2	1.74	0.51
1:A:282:PHE:O	1:A:285:TYR:HB3	2.10	0.51
1:A:547:LYS:HZ3	1:A:646:MET:HB3	1.75	0.51
1:A:554:LEU:HA	1:A:557:GLN:NE2	2.26	0.51
1:A:763:ASN:ND2	1:A:765:ASN:HD21	2.04	0.51
1:A:139:GLN:NE2	1:A:145:ARG:NH1	2.59	0.51
1:A:948:ARG:HG2	1:A:948:ARG:NH1	2.23	0.51
1:A:17:VAL:C	1:A:19:ILE:H	2.13	0.51
1:A:973:GLY:N	1:A:988:GLN:O	2.44	0.51
1:A:114:GLY:O	1:A:320:LYS:HD2	2.11	0.51
1:A:146:SER:OG	1:A:520:LEU:N	2.42	0.51
1:A:193:THR:OG1	1:A:376:ILE:HD13	2.11	0.51
1:A:258:VAL:HG13	1:A:366:PHE:CE2	2.46	0.51
1:A:275:ASP:OD1	1:A:278:GLN:HG3	2.11	0.51
1:A:336:LEU:HD12	1:A:340:LYS:HE3	1.93	0.51
1:A:649:LYS:O	1:A:650:ASP:O	2.28	0.51
1:A:1114:LEU:HD12	1:A:1114:LEU:C	2.30	0.51
1:A:755:THR:O	1:A:756:GLU:CB	2.55	0.51
1:A:9:ASN:HB2	1:A:12:ASP:CG	2.31	0.51
1:A:310:LEU:O	1:A:314:LYS:HG3	2.11	0.51
1:A:547:LYS:HZ2	1:A:646:MET:HB3	1.74	0.51
1:A:614:PHE:O	1:A:618:THR:HB	2.10	0.51
1:A:35:ALA:CB	1:A:45:ILE:HG12	2.38	0.50
1:A:429:LEU:CD2	1:A:543:TYR:HB2	2.39	0.50
1:A:972:SER:O	1:A:973:GLY:O	2.30	0.50
1:A:74:ASP:O	1:A:76:THR:N	2.44	0.50
1:A:351:GLU:O	1:A:355:VAL:HG23	2.10	0.50
1:A:487:ILE:HG22	1:A:488:GLU:N	2.26	0.50

		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:929:LYS:O	1:A:933:VAL:HG23	2.12	0.50
1:A:1041:ILE:HG23	1:A:1044:LEU:HB2	1.92	0.50
1:A:1197:ALA:HB2	1:A:1247:ILE:CD1	2.42	0.50
1:A:167:SER:HB2	1:A:184:GLN:NE2	2.26	0.50
1:A:763:ASN:HB2	1:A:765:ASN:HD21	1.73	0.50
1:A:962:TYR:CE1	1:A:978:LEU:HB2	2.46	0.50
1:A:1130:ILE:HD12	1:A:1130:ILE:C	2.32	0.50
1:A:36:PHE:CD1	1:A:36:PHE:N	2.79	0.50
1:A:947:ILE:O	1:A:1014:TRP:HA	2.11	0.50
1:A:21:TYR:O	1:A:138:ILE:HB	2.12	0.50
1:A:1161:ILE:HG22	1:A:1163:LYS:HD3	1.93	0.50
1:A:70:VAL:HG12	1:A:71:SER:N	2.27	0.50
1:A:150:ASN:O	1:A:232:LEU:HD21	2.12	0.50
1:A:428:LEU:HD23	1:A:542:LYS:HG3	1.92	0.50
1:A:431:VAL:HB	1:A:453:LEU:HD23	1.94	0.50
1:A:746:ILE:HG22	1:A:747:ILE:N	2.26	0.50
1:A:827:ARG:C	1:A:829:THR:H	2.14	0.50
1:A:1010:TYR:HB3	1:A:1015:ILE:CD1	2.29	0.50
1:A:1133:TYR:CD2	1:A:1260:LYS:NZ	2.80	0.50
1:A:38:ILE:O	1:A:39:HIS:HB2	2.11	0.50
1:A:247:THR:HG21	1:A:254:SER:O	2.12	0.50
1:A:355:VAL:HG12	1:A:355:VAL:O	2.12	0.50
1:A:1026:ASN:HB3	1:A:1040:PRO:HA	1.94	0.50
1:A:1122:TYR:CE1	1:A:1137:LYS:HB3	2.47	0.50
1:A:422:LEU:HD23	1:A:423:PHE:HE1	1.77	0.50
1:A:458:ASN:ND2	1:A:459:ASN:H	2.10	0.50
1:A:481:ILE:CD1	1:A:698:ALA:HA	2.40	0.50
1:A:624:THR:CG2	1:A:633:ILE:HD12	2.41	0.50
1:A:1104:TYR:CD2	1:A:1173:ILE:HD13	2.47	0.50
1:A:1288:ASP:O	1:A:1290:GLY:N	2.45	0.50
1:A:201:GLU:HG3	1:A:361:LEU:HD13	1.92	0.49
1:A:537:PHE:HB3	1:A:538:PRO:HD2	1.94	0.49
1:A:673:ILE:O	1:A:807:ARG:NH1	2.45	0.49
1:A:920:GLU:O	1:A:920:GLU:HG3	2.12	0.49
1:A:10:TYR:HA	1:A:36:PHE:HZ	1.76	0.49
1:A:379:VAL:N	1:A:380:PRO:HD2	2.28	0.49
1:A:641:LEU:HD11	1:A:732:MET:HG2	1.95	0.49
1:A:1236:LYS:NZ	1:A:1282:TRP:O	2.43	0.49
1:A:156:PRO:HD3	1:A:189:SER:HB2	1.93	0.49
1:A:247:THR:HG23	1:A:254:SER:HA	1.93	0.49
1:A:638:GLY:N	1:A:639:PRO:HD2	2.27	0.49

		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:746:ILE:O	1:A:747:ILE:C	2.49	0.49
1:A:965:ILE:O	1:A:976:VAL:N	2.45	0.49
1:A:114:GLY:O	1:A:320:LYS:CE	2.60	0.49
1:A:235:ILE:HG23	1:A:235:ILE:O	2.12	0.49
1:A:394:ASN:O	1:A:395:THR:C	2.51	0.49
1:A:571:SER:OG	1:A:572:VAL:N	2.44	0.49
1:A:743:THR:CG2	1:A:743:THR:O	2.61	0.49
1:A:1233:ASN:HD22	1:A:1271:ILE:HG23	1.75	0.49
1:A:1291:TRP:O	1:A:1293:GLU:N	2.46	0.49
1:A:79:SER:N	1:A:83:GLU:OE1	2.45	0.49
1:A:318:LYS:HG3	1:A:331:PHE:HE1	1.77	0.49
1:A:380:PRO:HG2	1:A:383:ASN:HB2	1.95	0.49
1:A:647:LEU:O	1:A:648:TYR:C	2.51	0.49
1:A:1209:LEU:CD1	1:A:1217:LEU:HD12	2.43	0.49
1:A:1255:PHE:HD2	1:A:1260:LYS:HD2	1.76	0.49
1:A:72:TYR:CD2	1:A:160:ILE:HD12	2.48	0.49
1:A:269:HIS:HE1	1:A:859:ASN:HD22	1.59	0.49
1:A:872:ASN:ND2	1:A:874:ILE:CB	2.64	0.49
1:A:986:THR:HG21	1:A:996:ARG:NH2	2.27	0.49
1:A:22:ILE:HD13	1:A:35:ALA:CB	2.37	0.49
1:A:961:GLU:CA	1:A:979:ASN:HD22	2.26	0.49
1:A:962:TYR:CD2	1:A:1057:LEU:HD23	2.48	0.49
1:A:1241:ASP:OD1	1:A:1241:ASP:C	2.51	0.49
1:A:172:VAL:HG12	1:A:172:VAL:O	2.12	0.49
1:A:209:GLY:HA3	1:A:213:PHE:CZ	2.48	0.49
1:A:243:PHE:HD1	1:A:260:PHE:HE1	1.59	0.49
1:A:378:ILE:HG23	1:A:384:TYR:CD1	2.48	0.49
1:A:583:TYR:CG	1:A:584:THR:N	2.80	0.49
1:A:540:GLY:O	1:A:541:LYS:C	2.50	0.49
1:A:733:LYS:HB2	1:A:781:MET:HE1	1.95	0.49
1:A:526:GLY:O	1:A:527:GLN:CB	2.61	0.48
1:A:559:PHE:HB3	1:A:582:VAL:CG2	2.37	0.48
1:A:966:ASN:HD22	1:A:975:LYS:HG3	1.78	0.48
1:A:3:PHE:HA	1:A:96:GLU:OE1	2.12	0.48
1:A:702:ARG:NH1	1:A:702:ARG:CG	2.76	0.48
1:A:954:ASN:O	1:A:1148:ILE:HD13	2.13	0.48
1:A:966:ASN:HA	1:A:975:LYS:HB2	1.95	0.48
1:A:1105:LEU:HD21	1:A:1162:ILE:CD1	2.43	0.48
1:A:1109:LYS:NZ	1:A:1286:PRO:CB	2.76	0.48
1:A:45:ILE:HG22	1:A:47:GLU:HG2	1.96	0.48
1:A:1111:TYR:CD1	1:A:1286:PRO:HB3	2.47	0.48

		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:135:ILE:HG21	1:A:149:LEU:HD12	1.94	0.48
1:A:306:THR:CG2	1:A:517:ILE:HG22	2.42	0.48
1:A:384:TYR:HA	1:A:389:GLY:O	2.12	0.48
1:A:1171:ASP:OD2	1:A:1173:ILE:HB	2.13	0.48
1:A:1173:ILE:HB	1:A:1175:ARG:NH1	2.28	0.48
1:A:555:ARG:HE	1:A:555:ARG:HA	1.78	0.48
1:A:647:LEU:O	1:A:649:LYS:N	2.46	0.48
1:A:974:TRP:H	1:A:987:LEU:HA	1.77	0.48
1:A:1027:SER:CB	1:A:1041:ILE:HD11	2.24	0.48
1:A:17:VAL:O	1:A:19:ILE:N	2.46	0.48
1:A:609:GLN:HG2	1:A:613:ASP:OD2	2.14	0.48
1:A:621:VAL:CG1	1:A:632:ILE:HG23	2.44	0.48
1:A:214:ALA:CB	1:A:413:PHE:CE1	2.97	0.48
1:A:641:LEU:HB2	1:A:643:ILE:CG1	2.39	0.48
1:A:676:LEU:CD1	1:A:808:LEU:HD23	2.44	0.48
1:A:1117:TYR:C	1:A:1119:PRO:HD3	2.34	0.48
1:A:1137:LYS:HG3	1:A:1138:GLY:N	2.28	0.48
1:A:118:TRP:CD1	1:A:317:PHE:HZ	2.31	0.48
1:A:210:ALA:H	1:A:405:ASN:HD21	1.51	0.48
1:A:1253:HIS:O	1:A:1259:ALA:HA	2.14	0.48
1:A:171:GLU:HG2	1:A:172:VAL:CG2	2.43	0.48
1:A:311:GLN:NE2	1:A:312:TYR:N	2.61	0.48
1:A:559:PHE:CD1	1:A:559:PHE:O	2.67	0.48
1:A:903:LYS:HB2	1:A:922:SER:CB	2.41	0.48
1:A:760:ASN:O	1:A:761:ASN:CB	2.62	0.48
1:A:1135:TYR:CD1	1:A:1135:TYR:N	2.81	0.48
1:A:22:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HD12	1.96	0.47
1:A:33:VAL:HG12	1:A:34:LYS:N	2.29	0.47
1:A:144:TYR:CD1	1:A:144:TYR:C	2.87	0.47
1:A:970:ASN:O	1:A:971:ASN:HB2	2.13	0.47
1:A:569:THR:O	1:A:595:ASN:ND2	2.45	0.47
1:A:796:LEU:CD2	1:A:801:ILE:HG12	2.44	0.47
1:A:838:LYS:NZ	1:A:838:LYS:HB3	2.29	0.47
1:A:1104:TYR:HB3	1:A:1173:ILE:HG23	1.96	0.47
1:A:1113:MET:CE	1:A:1160:PHE:HB2	2.44	0.47
1:A:1199:GLN:NE2	1:A:1204:LYS:HA	2.29	0.47
1:A:225:LEU:C	1:A:227:HIS:N	2.68	0.47
1:A:304:VAL:HG23	1:A:304:VAL:O	2.14	0.47
1:A:455:ILE:CD1	1:A:552:HIS:ND1	2.78	0.47
1:A:702:ARG:C	1:A:702:ARG:HD2	2.35	0.47
1:A:874:ILE:C	1:A:876:THR:H	2.17	0.47

Atom 1	Atom 2	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:420:THR:O	1:A:421:GLY:C	2.51	0.47
1:A:974:TRP:HB2	1:A:985:TRP:CZ2	2.50	0.47
1:A:1100:PHE:CD1	1:A:1283:GLU:HG2	2.43	0.47
1:A:1296:LEU:H	1:A:1296:LEU:CD2	2.27	0.47
1:A:135:ILE:HG23	1:A:149:LEU:HD12	1.96	0.47
1:A:757:GLU:HB2	1:A:760:ASN:HD22	1.76	0.47
1:A:997:VAL:HG11	1:A:1027:SER:O	2.14	0.47
1:A:1009:ASP:HA	1:A:1013:ARG:NH1	2.29	0.47
1:A:1269:ARG:NH1	1:A:1273:ARG:HH11	2.11	0.47
1:A:93:LYS:NZ	1:A:378:ILE:O	2.34	0.47
1:A:671:ILE:HG22	1:A:673:ILE:HD11	1.97	0.47
1:A:705:LYS:O	1:A:705:LYS:HD3	2.15	0.47
1:A:1193:LEU:HD12	1:A:1194:ALA:N	2.28	0.47
1:A:149:LEU:HD13	1:A:152:VAL:CG2	2.45	0.47
1:A:212:LYS:HE2	1:A:371:LYS:CB	2.43	0.47
1:A:217:PRO:CG	1:A:378:ILE:HD11	2.33	0.47
1:A:248:ASN:O	1:A:249:ALA:HB2	2.14	0.47
1:A:299:LYS:HE3	1:A:299:LYS:HB2	1.74	0.47
1:A:660:GLY:C	1:A:662:VAL:H	2.18	0.47
1:A:944:SER:HA	1:A:1017:VAL:O	2.15	0.47
1:A:974:TRP:CE3	1:A:985:TRP:CZ3	3.02	0.47
1:A:1010:TYR:HD2	1:A:1015:ILE:CD1	2.28	0.47
1:A:554:LEU:HD11	1:A:734:GLU:HG2	1.97	0.47
1:A:802:PRO:CB	1:A:932:ILE:HD11	2.45	0.47
1:A:968:MET:HA	1:A:972:SER:CB	2.39	0.47
1:A:92:THR:HG22	1:A:93:LYS:N	2.29	0.47
1:A:145:ARG:HG3	1:A:145:ARG:O	2.15	0.47
1:A:197:GLU:HG2	1:A:212:LYS:HG2	1.96	0.47
1:A:627:ILE:HD12	1:A:627:ILE:N	2.30	0.47
1:A:947:ILE:HG22	1:A:1015:ILE:HB	1.97	0.47
1:A:948:ARG:HA	1:A:1013:ARG:O	2.15	0.47
1:A:168:PHE:HA	1:A:528:LEU:HA	1.96	0.47
1:A:420:THR:O	1:A:420:THR:CG2	2.59	0.47
1:A:574:GLU:HA	1:A:574:GLU:OE1	2.15	0.47
1:A:574:GLU:N	1:A:574:GLU:CD	2.66	0.47
1:A:576:LEU:CA	1:A:581:ARG:HB2	2.35	0.47
1:A:585:PHE:CE1	1:A:586:PHE:CE1	3.03	0.47
1:A:663:ILE:O	1:A:663:ILE:CG2	2.62	0.47
1:A:702:ARG:O	1:A:702:ARG:HD2	2.14	0.47
1:A:1041:ILE:C	1:A:1043:ASN:H	2.18	0.47
1:A:1205:ILE:O	1:A:1261:LEU:O	2.33	0.47

		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:18:ASP:HA	1:A:37:LYS:HB3	1.97	0.46
1:A:105:ARG:NH1	1:A:508:PHE:CZ	2.83	0.46
1:A:171:GLU:HG2	1:A:172:VAL:HG23	1.97	0.46
1:A:742:ALA:C	1:A:744:LYS:H	2.18	0.46
1:A:757:GLU:CB	1:A:760:ASN:ND2	2.78	0.46
1:A:987:LEU:CD1	1:A:1041:ILE:HD13	2.43	0.46
1:A:1014:TRP:HD1	1:A:1102:GLY:HA3	1.80	0.46
1:A:1096:ILE:HD12	1:A:1104:TYR:CE1	2.50	0.46
1:A:1124:ASP:HB2	1:A:1137:LYS:HB2	1.97	0.46
1:A:195:GLY:HA3	1:A:374:PHE:CE1	2.49	0.46
1:A:674:PRO:C	1:A:807:ARG:NH1	2.69	0.46
1:A:761:ASN:C	1:A:763:ASN:H	2.16	0.46
1:A:954:ASN:HB3	1:A:956:ILE:HG13	1.97	0.46
1:A:1233:ASN:OD1	1:A:1235:CYS:N	2.43	0.46
1:A:1288:ASP:C	1:A:1290:GLY:H	2.18	0.46
1:A:167:SER:HB2	1:A:184:GLN:HE22	1.81	0.46
1:A:227:HIS:CE1	1:A:261:GLU:OE1	2.68	0.46
1:A:346:THR:HG22	1:A:347:GLU:N	2.30	0.46
1:A:553:TYR:CD2	1:A:642:ASN:HB2	2.51	0.46
1:A:915:GLN:HB2	1:A:1068:TRP:CZ3	2.50	0.46
1:A:21:TYR:HD1	1:A:21:TYR:HA	1.68	0.46
1:A:729:ARG:HH22	1:A:789:ASN:ND2	2.12	0.46
1:A:757:GLU:CB	1:A:760:ASN:HD22	2.28	0.46
1:A:2:PRO:HA	1:A:108:LEU:HD13	1.98	0.46
1:A:6:LYS:HD2	1:A:18:ASP:OD2	2.16	0.46
1:A:29:GLN:CD	1:A:29:GLN:N	2.68	0.46
1:A:943:THR:CG2	1:A:1019:ILE:HB	2.46	0.46
1:A:1018:THR:HG21	1:A:1084:ILE:HD12	1.97	0.46
1:A:1041:ILE:O	1:A:1041:ILE:CG2	2.62	0.46
1:A:1111:TYR:CE1	1:A:1286:PRO:HB3	2.50	0.46
1:A:161:ILE:HB	1:A:194:PHE:CZ	2.51	0.46
1:A:1028:LYS:HB3	1:A:1035:LEU:CD1	2.46	0.46
1:A:119:GLY:O	1:A:121:SER:N	2.48	0.46
1:A:397:LEU:O	1:A:398:ALA:CB	2.62	0.46
1:A:671:ILE:HD13	1:A:803:TYR:CD2	2.50	0.46
1:A:719:ALA:HA	1:A:723:THR:HG23	1.98	0.46
1:A:24:ILE:CD1	1:A:45:ILE:CD1	2.94	0.46
1:A:65:ALA:O	1:A:536:ARG:NH2	2.48	0.46
1:A:139:GLN:CD	1:A:145:ARG:NH1	2.69	0.46
1:A:535:GLU:O	1:A:536:ARG:C	2.54	0.46
1:A:643:ILE:CG2	1:A:664:LEU:HD23	2.40	0.46

	A h o	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:1080:ASN:OD1	1:A:1083:GLU:HG3	2.16	0.46
1:A:318:LYS:HG3	1:A:331:PHE:CE1	2.51	0.46
1:A:534:ILE:HG22	1:A:534:ILE:O	2.15	0.46
1:A:586:PHE:HB3	1:A:617:GLU:OE2	2.15	0.46
1:A:696:ASP:OD1	1:A:840:LYS:NZ	2.41	0.46
1:A:757:GLU:HG3	1:A:757:GLU:O	2.16	0.46
1:A:965:ILE:HB	1:A:976:VAL:HG23	1.97	0.46
1:A:984:ILE:CG2	1:A:998:VAL:HG22	2.44	0.46
1:A:1205:ILE:HA	1:A:1262:VAL:HG22	1.98	0.46
1:A:105:ARG:HG2	1:A:508:PHE:HE1	1.78	0.46
1:A:207:LEU:HD21	1:A:775:GLU:OE2	2.16	0.46
1:A:706:TRP:CE3	1:A:808:LEU:HD13	2.51	0.46
1:A:964:ILE:HG13	1:A:965:ILE:N	2.31	0.46
1:A:1062:ASP:OD1	1:A:1062:ASP:C	2.54	0.46
1:A:1199:GLN:HE22	1:A:1204:LYS:HB3	1.80	0.46
1:A:115:ILE:HG22	1:A:317:PHE:CE1	2.48	0.45
1:A:318:LYS:HG2	1:A:331:PHE:CE1	2.51	0.45
1:A:326:ASP:OD1	1:A:328:SER:N	2.49	0.45
1:A:492:GLU:C	1:A:494:ILE:H	2.18	0.45
1:A:566:ILE:HG23	1:A:749:TYR:CB	2.46	0.45
1:A:1099:ASP:N	1:A:1103:ASP:O	2.47	0.45
1:A:1143:VAL:HG12	1:A:1149:TYR:HE1	1.81	0.45
1:A:3:PHE:O	1:A:96:GLU:OE2	2.35	0.45
1:A:39:HIS:HE1	1:A:511:GLU:OE2	1.97	0.45
1:A:48:ARG:NH1	1:A:77:TYR:HB3	2.32	0.45
1:A:62:PRO:HG2	1:A:64:GLU:O	2.16	0.45
1:A:798:ASN:HD22	1:A:893:ARG:HG2	1.81	0.45
1:A:1197:ALA:HB2	1:A:1247:ILE:HD13	1.98	0.45
1:A:1203:GLU:HB3	1:A:1262:VAL:CG1	2.44	0.45
1:A:1238:ASN:HA	1:A:1249:PHE:HA	1.97	0.45
1:A:315:ASN:O	1:A:318:LYS:HB3	2.16	0.45
1:A:390:PHE:O	1:A:392:LEU:N	2.48	0.45
1:A:674:PRO:C	1:A:807:ARG:HH11	2.19	0.45
1:A:123:ILE:O	1:A:124:ASP:C	2.53	0.45
1:A:458:ASN:HD22	1:A:459:ASN:N	2.13	0.45
1:A:661:ALA:CB	1:A:791:CYS:HB3	2.46	0.45
1:A:906:PHE:HD2	1:A:911:LYS:O	2.00	0.45
1:A:1109:LYS:HA	1:A:1110:PRO:HD2	1.79	0.45
1:A:1268:ASN:O	1:A:1272:GLU:HG3	2.16	0.45
1:A:102:ASP:HB2	1:A:357:PHE:CE2	2.44	0.45
1:A:566:ILE:HG23	1:A:749:TYR:CG	2.51	0.45

	A L O	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:671:ILE:HD13	1:A:803:TYR:HD2	1.82	0.45
1:A:683:SER:HA	1:A:822:TYR:OH	2.17	0.45
1:A:764:PHE:O	1:A:764:PHE:CD1	2.70	0.45
1:A:1100:PHE:CB	1:A:1285:ILE:HG12	2.47	0.45
1:A:14:VAL:HA	1:A:19:ILE:HG22	1.99	0.45
1:A:74:ASP:O	1:A:75:SER:C	2.55	0.45
1:A:144:TYR:OH	1:A:520:LEU:O	2.27	0.45
1:A:606:TRP:O	1:A:609:GLN:HB3	2.16	0.45
1:A:610:LEU:HD12	1:A:747:ILE:CD1	2.41	0.45
1:A:943:THR:HG22	1:A:1019:ILE:HB	1.99	0.45
1:A:1186:VAL:N	1:A:1189:LYS:O	2.49	0.45
1:A:289:LYS:HD3	1:A:289:LYS:HA	1.71	0.45
1:A:598:THR:HG23	1:A:602:MET:CE	2.46	0.45
1:A:998:VAL:CG1	1:A:999:PHE:N	2.80	0.45
1:A:1012:ASN:CG	1:A:1012:ASN:O	2.53	0.45
1:A:1130:ILE:HG23	1:A:1209:LEU:HD22	1.99	0.45
1:A:1161:ILE:HG22	1:A:1163:LYS:CD	2.47	0.45
1:A:70:VAL:CG1	1:A:71:SER:N	2.80	0.45
1:A:143:SER:O	1:A:144:TYR:HB3	2.16	0.45
1:A:567:ALA:O	1:A:746:ILE:HG12	2.17	0.45
1:A:574:GLU:C	1:A:576:LEU:N	2.70	0.45
1:A:593:LYS:NZ	1:A:613:ASP:OD2	2.40	0.45
1:A:599:GLU:O	1:A:602:MET:O	2.35	0.45
1:A:999:PHE:CG	1:A:1031:ILE:HG13	2.52	0.45
1:A:1008:SER:O	1:A:1013:ARG:NH1	2.50	0.45
1:A:455:ILE:HD12	1:A:552:HIS:HA	1.99	0.45
1:A:487:ILE:HG23	1:A:488:GLU:CD	2.37	0.45
1:A:984:ILE:CG1	1:A:998:VAL:HG22	2.39	0.45
1:A:1109:LYS:NZ	1:A:1286:PRO:HB3	2.32	0.45
1:A:306:THR:CG2	1:A:517:ILE:HA	2.47	0.44
1:A:737:GLU:O	1:A:741:GLU:HB2	2.16	0.44
1:A:869:TYR:CD1	1:A:869:TYR:C	2.91	0.44
1:A:902:SER:O	1:A:903:LYS:HE2	2.17	0.44
1:A:935:ASN:C	1:A:937:MET:H	2.20	0.44
1:A:952:TYR:CD1	1:A:1065:ARG:CZ	3.00	0.44
1:A:979:ASN:O	1:A:980:TYR:C	2.55	0.44
1:A:985:TRP:CG	1:A:1019:ILE:HG21	2.51	0.44
1:A:2:PRO:O	1:A:39:HIS:CD2	2.60	0.44
1:A:581:ARG:O	1:A:581:ARG:HG3	2.17	0.44
1:A:760:ASN:O	1:A:761:ASN:HB2	2.17	0.44
1:A:883:TYR:H	1:A:912:ASN:CG	2.21	0.44

		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:1168:GLY:C	1:A:1170:LYS:N	2.64	0.44
1:A:1269:ARG:CZ	1:A:1270:GLN:NE2	2.80	0.44
1:A:36:PHE:CZ	1:A:88:LEU:HD22	2.52	0.44
1:A:425:PHE:HZ	1:A:537:PHE:HB2	1.80	0.44
1:A:719:ALA:HA	1:A:723:THR:CG2	2.46	0.44
1:A:955:SER:HA	1:A:958:LEU:HG	1.99	0.44
1:A:1104:TYR:CD2	1:A:1173:ILE:CD1	3.00	0.44
1:A:1288:ASP:C	1:A:1290:GLY:N	2.68	0.44
1:A:122:THR:CB	1:A:126:GLU:OE1	2.61	0.44
1:A:227:HIS:ND1	1:A:261:GLU:OE1	2.50	0.44
1:A:318:LYS:CG	1:A:331:PHE:HE1	2.31	0.44
1:A:431:VAL:HG11	1:A:548:TYR:CE1	2.53	0.44
1:A:632:ILE:CD1	1:A:786:LYS:HD3	2.47	0.44
1:A:1029:ILE:HG23	1:A:1036:ILE:HB	1.98	0.44
1:A:1146:THR:HG22	1:A:1147:ASN:ND2	2.33	0.44
1:A:153:ILE:CD1	1:A:186:ILE:HB	2.42	0.44
1:A:238:ASN:OD1	1:A:239:PRO:HD2	2.16	0.44
1:A:659:SER:HB2	1:A:663:ILE:HG13	1.98	0.44
1:A:688:LYS:O	1:A:689:VAL:C	2.55	0.44
1:A:964:ILE:HG13	1:A:965:ILE:HG13	2.00	0.44
1:A:2:PRO:HD3	1:A:108:LEU:HD22	2.00	0.44
1:A:11:LYS:HZ1	1:A:81:ASP:CG	2.19	0.44
1:A:269:HIS:CE1	1:A:859:ASN:HD22	2.36	0.44
1:A:455:ILE:HG23	1:A:555:ARG:HD2	1.98	0.44
1:A:504:LEU:C	1:A:506:PHE:H	2.21	0.44
1:A:764:PHE:CE2	1:A:766:ILE:HG12	2.52	0.44
1:A:923:LYS:HB2	1:A:1056:LYS:HB2	1.99	0.44
1:A:1012:ASN:O	1:A:1101:TRP:CD1	2.70	0.44
1:A:1163:LYS:CD	1:A:1183:ASN:ND2	2.80	0.44
1:A:42:ILE:CD1	1:A:151:LEU:HB3	2.48	0.44
1:A:603:PHE:O	1:A:606:TRP:HB3	2.17	0.44
1:A:621:VAL:HG11	1:A:632:ILE:HG23	1.98	0.44
1:A:742:ALA:C	1:A:744:LYS:N	2.71	0.44
1:A:1180:VAL:HG22	1:A:1221:VAL:O	2.18	0.44
1:A:1206:LEU:HD11	1:A:1250:ILE:HG12	2.00	0.44
1:A:430:CYS:HA	1:A:454:CYS:HA	2.00	0.44
1:A:485:THR:HG22	1:A:486:ASN:N	2.33	0.44
1:A:610:LEU:CD1	1:A:747:ILE:HD11	2.41	0.44
1:A:754:TYR:CD1	1:A:755:THR:N	2.78	0.44
1:A:843:ASN:O	1:A:846:SER:OG	2.34	0.44
1:A:948:ARG:CB	1:A:1068:TRP:HB2	2.20	0.44

	A h o	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (Å)	overlap (Å)
1:A:1057:LEU:HD12	1:A:1057:LEU:N	2.23	0.44
1:A:1211:ILE:HB	1:A:1212:PRO:HD3	1.99	0.44
1:A:22:ILE:CD1	1:A:22:ILE:N	2.79	0.44
1:A:198:GLU:OE2	1:A:200:LEU:HB2	2.18	0.44
1:A:202:VAL:HA	1:A:205:ASN:O	2.18	0.44
1:A:403:GLY:HA2	1:A:409:ASN:HD22	1.83	0.44
1:A:417:LYS:HE3	1:A:419:PHE:CZ	2.53	0.44
1:A:458:ASN:HB3	1:A:461:ASP:CB	2.45	0.44
1:A:844:THR:O	1:A:846:SER:N	2.40	0.44
1:A:891:LEU:HD23	1:A:891:LEU:HA	1.81	0.44
1:A:949:ILE:HG22	1:A:950:PRO:O	2.17	0.44
1:A:990:THR:C	1:A:992:GLU:N	2.65	0.44
1:A:1194:ALA:O	1:A:1206:LEU:HA	2.18	0.44
1:A:1199:GLN:NE2	1:A:1204:LYS:HB3	2.32	0.44
1:A:97:ARG:NH1	1:A:358:PHE:CD1	2.86	0.43
1:A:167:SER:CB	1:A:184:GLN:HE22	2.31	0.43
1:A:176:THR:CG2	1:A:176:THR:O	2.65	0.43
1:A:195:GLY:HA2	1:A:213:PHE:O	2.18	0.43
1:A:234:GLY:O	1:A:235:ILE:HD12	2.17	0.43
1:A:515:ILE:HD13	1:A:515:ILE:HA	1.82	0.43
1:A:549:THR:HG23	1:A:552:HIS:CD2	2.53	0.43
1:A:575:ALA:O	1:A:581:ARG:CA	2.66	0.43
1:A:763:ASN:HB2	1:A:765:ASN:HD22	1.75	0.43
1:A:859:ASN:HD21	1:A:861:ARG:HH12	1.66	0.43
1:A:991:GLN:O	1:A:993:ILE:N	2.50	0.43
1:A:192:PHE:HA	1:A:374:PHE:O	2.18	0.43
1:A:591:VAL:HG12	1:A:595:ASN:ND2	2.32	0.43
1:A:748:ASN:O	1:A:749:TYR:C	2.56	0.43
1:A:1025:ASN:HB3	1:A:1026:ASN:H	1.50	0.43
1:A:1144:MET:HB3	1:A:1150:LEU:HD13	2.00	0.43
1:A:15:ASN:C	1:A:17:VAL:H	2.20	0.43
1:A:24:ILE:HG23	1:A:25:PRO:N	2.33	0.43
1:A:67:GLN:HB3	1:A:425:PHE:CD2	2.53	0.43
1:A:119:GLY:C	1:A:121:SER:N	2.70	0.43
1:A:126:GLU:OE2	1:A:304:VAL:CG1	2.66	0.43
1:A:159:ASP:C	1:A:159:ASP:OD1	2.57	0.43
1:A:562:GLY:O	1:A:564:SER:N	2.51	0.43
1:A:772:LYS:C	1:A:774:ASN:N	2.70	0.43
1:A:907:ASP:O	1:A:911:LYS:HG2	2.17	0.43
1:A:1113:MET:HE3	1:A:1160:PHE:HB2	2.01	0.43
1:A:1233:ASN:OD1	1:A:1235:CYS:HB2	2.18	0.43

<u> </u>	A 4 9	Interatomic Clash			
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)		
1:A:1267:TYR:O	1:A:1268:ASN:C	2.57	0.43		
1:A:243:PHE:HD1	1:A:260:PHE:CE1	2.36	0.43		
1:A:408:ILE:C	1:A:410:ASN:H	2.22	0.43		
1:A:105:ARG:NH1	1:A:508:PHE:CE1	2.86	0.43		
1:A:309:SER:C	1:A:311:GLN:N	2.69	0.43		
1:A:203:ASP:OD1	1:A:204:THR:N	2.52	0.43		
1:A:346:THR:CG2	1:A:347:GLU:HG3	2.29	0.43		
1:A:411:MET:O	1:A:411:MET:HG3	2.19	0.43		
1:A:429:LEU:O	1:A:552:HIS:HE1	2.02	0.43		
1:A:981:GLY:HA2	1:A:1001:TYR:CZ	2.54	0.43		
1:A:1034:ARG:NH1	1:A:1036:ILE:CD1	2.81	0.43		
1:A:1199:GLN:HE22	1:A:1204:LYS:CA	2.31	0.43		
1:A:310:LEU:HD13	1:A:314:LYS:HG3	2.00	0.43		
1:A:778:ASN:O	1:A:782:ILE:HG13	2.18	0.43		
1:A:1087:LEU:O	1:A:1091:GLN:HG3	2.18	0.43		
1:A:162:GLN:HE21	1:A:162:GLN:HB3	1.56	0.43		
1:A:320:LYS:HD3	1:A:321:TYR:CZ	2.53	0.43		
1:A:540:GLY:O	1:A:541:LYS:O	2.37	0.43		
1:A:566:ILE:HG12	1:A:749:TYR:HB3	2.00	0.43		
1:A:648:TYR:O	1:A:649:LYS:O	2.36	0.43		
1:A:722:ASN:ND2	1:A:792:SER:OG	2.52	0.43		
1:A:809:GLU:HG2	1:A:934:TYR:CD2	2.53	0.43		
1:A:874:ILE:HD13	1:A:874:ILE:HA	1.73	0.43		
1:A:388:ASP:HB3	1:A:391:ASN:O	2.18	0.43		
1:A:473:ASN:OD1	1:A:475:LEU:CD1	2.60	0.43		
1:A:585:PHE:HZ	1:A:736:LEU:HD23	1.84	0.43		
1:A:1010:TYR:CD1	1:A:1010:TYR:N	2.86	0.43		
1:A:1061:ARG:HH11	1:A:1061:ARG:CG	2.27	0.43		
1:A:995:GLN:NE2	1:A:1039:LYS:HB3	2.34	0.43		
1:A:1070:LYS:HG2	1:A:1071:TYR:CG	2.53	0.43		
1:A:1125:VAL:HG22	1:A:1134:MET:SD	2.59	0.43		
1:A:491:GLU:OE2	1:A:711:LYS:HD2	2.19	0.42		
1:A:558:GLU:O	1:A:559:PHE:CG	2.72	0.42		
1:A:716:ASN:OD1	1:A:720:LYS:HE3	2.19	0.42		
1:A:1242:ASN:C	1:A:1244:GLY:H	2.22	0.42		
1:A:132:THR:HG23	1:A:132:THR:O	2.17	0.42		
1:A:196:PHE:CZ	1:A:362:ASN:HA	2.54	0.42		
1:A:343:LYS:HD3	1:A:502:TYR:OH	2.19	0.42		
1:A:464:PHE:O	1:A:465:SER:CB	2.65	0.42		
1:A:571:SER:O	1:A:572:VAL:HB	2.19	0.42		
1:A:634:ILE:HD12	1:A:634:ILE:N	2.34	0.42		

		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:885:SER:OG	1:A:886:ASN:N	2.52	0.42
1:A:973:GLY:HA2	1:A:988:GLN:H	1.83	0.42
1:A:1026:ASN:ND2	1:A:1028:LYS:HE2	2.34	0.42
1:A:1099:ASP:C	1:A:1101:TRP:N	2.71	0.42
1:A:22:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HD12	2.00	0.42
1:A:459:ASN:C	1:A:461:ASP:H	2.21	0.42
1:A:471:PHE:CE2	1:A:720:LYS:HE2	2.54	0.42
1:A:584:THR:HG21	1:A:586:PHE:HB2	2.01	0.42
1:A:879:LEU:HD23	1:A:1072:PHE:HE2	1.83	0.42
1:A:913:GLN:OE1	1:A:1014:TRP:CZ2	2.72	0.42
1:A:115:ILE:HD12	1:A:316:VAL:CG1	2.50	0.42
1:A:194:PHE:CD1	1:A:194:PHE:N	2.87	0.42
1:A:235:ILE:HD11	1:A:286:TYR:HB3	2.01	0.42
1:A:244:LYS:HB2	1:A:467:SER:OG	2.20	0.42
1:A:459:ASN:O	1:A:461:ASP:N	2.45	0.42
1:A:711:LYS:HB2	1:A:856:TYR:CE2	2.54	0.42
1:A:729:ARG:HH22	1:A:789:ASN:HD22	1.66	0.42
1:A:869:TYR:HD1	1:A:870:ILE:HD13	1.84	0.42
1:A:874:ILE:C	1:A:876:THR:N	2.73	0.42
1:A:917:PHE:O	1:A:1057:LEU:CD1	2.67	0.42
1:A:969:GLU:O	1:A:970:ASN:HB3	2.17	0.42
1:A:1221:VAL:CG2	1:A:1239:LEU:HD23	2.49	0.42
1:A:325:GLU:HA	1:A:330:LYS:O	2.20	0.42
1:A:535:GLU:OE2	1:A:537:PHE:CE2	2.73	0.42
1:A:559:PHE:HE2	1:A:742:ALA:HA	1.84	0.42
1:A:662:VAL:C	1:A:664:LEU:H	2.22	0.42
1:A:923:LYS:CD	1:A:1056:LYS:HD3	2.50	0.42
1:A:357:PHE:N	1:A:357:PHE:CD1	2.87	0.42
1:A:374:PHE:CE2	1:A:406:THR:HG21	2.53	0.42
1:A:491:GLU:O	1:A:492:GLU:C	2.58	0.42
1:A:494:ILE:N	1:A:494:ILE:HD12	2.35	0.42
1:A:758:GLU:C	1:A:760:ASN:H	2.22	0.42
1:A:761:ASN:C	1:A:763:ASN:N	2.73	0.42
1:A:882:ARG:HB3	1:A:912:ASN:OD1	2.19	0.42
1:A:915:GLN:HB2	1:A:1068:TRP:CE3	2.54	0.42
1:A:1023:ARG:HD3	1:A:1023:ARG:C	2.38	0.42
1:A:1221:VAL:HG23	1:A:1239:LEU:HD23	2.02	0.42
1:A:40:ASN:O	1:A:112:VAL:HG23	2.20	0.42
1:A:68:VAL:CG1	1:A:69:PRO:HD2	2.50	0.42
1:A:170:HIS:HD2	1:A:173:LEU:N	2.18	0.42
1:A:1163:LYS:CG	1:A:1183:ASN:ND2	2.83	0.42

	• • • • •	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:125:THR:O	1:A:300:ALA:HA	2.20	0.42
1:A:430:CYS:HA	1:A:453:LEU:O	2.20	0.42
1:A:487:ILE:O	1:A:488:GLU:O	2.37	0.42
1:A:498:LEU:HG	1:A:502:TYR:CE1	2.55	0.42
1:A:638:GLY:O	1:A:642:ASN:CA	2.68	0.42
1:A:675:VAL:HA	1:A:807:ARG:HD2	2.02	0.42
1:A:1061:ARG:HG2	1:A:1061:ARG:NH1	2.32	0.42
1:A:1062:ASP:OD1	1:A:1063:THR:N	2.53	0.42
1:A:1115:ASN:HB2	1:A:1282:TRP:CZ3	2.55	0.42
1:A:1209:LEU:HD11	1:A:1217:LEU:HD12	2.01	0.42
1:A:1235:CYS:HA	1:A:1280:CYS:O	2.19	0.42
1:A:114:GLY:O	1:A:320:LYS:CD	2.68	0.42
1:A:154:ILE:HD12	1:A:186:ILE:O	2.19	0.42
1:A:198:GLU:CD	1:A:201:GLU:HG2	2.40	0.42
1:A:405:ASN:OD1	1:A:407:GLU:N	2.51	0.42
1:A:638:GLY:N	1:A:639:PRO:CD	2.83	0.42
1:A:641:LEU:CD1	1:A:732:MET:SD	3.08	0.42
1:A:659:SER:HB2	1:A:663:ILE:CD1	2.49	0.42
1:A:660:GLY:C	1:A:662:VAL:N	2.73	0.42
1:A:779:LYS:HA	1:A:782:ILE:HD12	2.02	0.42
1:A:1128:VAL:CG1	1:A:1129:GLY:N	2.83	0.42
1:A:1155:TYR:CD1	1:A:1155:TYR:N	2.87	0.42
1:A:1166:ALA:O	1:A:1167:SER:HB2	2.20	0.42
1:A:1252:PHE:O	1:A:1253:HIS:HB2	2.19	0.42
1:A:74:ASP:O	1:A:74:ASP:OD1	2.38	0.42
1:A:170:HIS:CG	1:A:173:LEU:HB2	2.55	0.42
1:A:373:VAL:HG12	1:A:374:PHE:N	2.35	0.42
1:A:568:LEU:HB3	1:A:595:ASN:OD1	2.19	0.42
1:A:907:ASP:O	1:A:911:LYS:HA	2.20	0.42
1:A:910:ASP:C	1:A:912:ASN:H	2.24	0.42
1:A:927:ILE:HA	1:A:1052:ASN:HB3	2.02	0.42
1:A:961:GLU:HB2	1:A:979:ASN:ND2	2.23	0.42
1:A:1061:ARG:CG	1:A:1061:ARG:NH1	2.82	0.42
1:A:149:LEU:CD2	1:A:150:ASN:H	2.33	0.41
1:A:303:ILE:HG22	1:A:310:LEU:HB2	2.02	0.41
1:A:502:TYR:O	1:A:506:PHE:HB2	2.20	0.41
1:A:566:ILE:CG1	1:A:749:TYR:HB3	2.50	0.41
1:A:588:SER:O	1:A:591:VAL:N	2.53	0.41
1:A:684:TYR:N	1:A:684:TYR:CD1	2.87	0.41
1:A:794:SER:O	1:A:798:ASN:OD1	2.38	0.41
1:A:862:LEU:O	1:A:865:THR:HB	2.20	0.41

		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:1144:MET:HB3	1:A:1150:LEU:CD1	2.50	0.41
1:A:163:PHE:CD1	1:A:188:PHE:HA	2.55	0.41
1:A:217:PRO:HG2	1:A:378:ILE:CD1	2.35	0.41
1:A:290:PHE:O	1:A:293:ILE:N	2.53	0.41
1:A:309:SER:O	1:A:312:TYR:HB3	2.19	0.41
1:A:322:LEU:HD23	1:A:322:LEU:HA	1.83	0.41
1:A:565:ARG:O	1:A:566:ILE:C	2.58	0.41
1:A:585:PHE:CE1	1:A:586:PHE:HE1	2.37	0.41
1:A:797:MET:CE	1:A:866:PHE:CE1	3.01	0.41
1:A:965:ILE:HD12	1:A:976:VAL:CG2	2.48	0.41
1:A:66:LYS:HE2	1:A:68:VAL:HG21	2.02	0.41
1:A:265:THR:O	1:A:265:THR:HG22	2.20	0.41
1:A:385:THR:HG23	1:A:388:ASP:N	2.24	0.41
1:A:560:GLU:O	1:A:561:HIS:C	2.59	0.41
1:A:919:LEU:C	1:A:921:SER:H	2.21	0.41
1:A:1227:ASN:HD21	1:A:1229:GLN:HB3	1.80	0.41
1:A:22:ILE:CD1	1:A:22:ILE:H	2.32	0.41
1:A:430:CYS:HB2	1:A:544:GLU:HA	2.02	0.41
1:A:742:ALA:O	1:A:745:ALA:N	2.48	0.41
1:A:801:ILE:HB	1:A:802:PRO:HD3	2.01	0.41
1:A:897:LYS:HG3	1:A:899:ASN:OD1	2.20	0.41
1:A:927:ILE:HG23	1:A:1051:ASN:ND2	2.35	0.41
1:A:1026:ASN:OD1	1:A:1026:ASN:N	2.53	0.41
1:A:23:LYS:NZ	1:A:23:LYS:CB	2.81	0.41
1:A:70:VAL:CG1	1:A:161:ILE:HD11	2.42	0.41
1:A:174:ASN:C	1:A:176:THR:H	2.24	0.41
1:A:473:ASN:HD21	1:A:674:PRO:HG3	1.86	0.41
1:A:638:GLY:HA2	1:A:643:ILE:HB	2.02	0.41
1:A:662:VAL:O	1:A:664:LEU:N	2.53	0.41
1:A:684:TYR:HD2	1:A:690:LEU:HD23	1.85	0.41
1:A:819:LEU:O	1:A:823:ILE:HG13	2.21	0.41
1:A:884:GLU:HG3	1:A:891:LEU:HD11	2.02	0.41
1:A:941:PHE:O	1:A:1021:ASN:HB2	2.20	0.41
1:A:942:SER:HA	1:A:1019:ILE:O	2.20	0.41
1:A:1241:ASP:OD1	1:A:1241:ASP:O	2.39	0.41
1:A:93:LYS:NZ	1:A:384:TYR:O	2.53	0.41
1:A:93:LYS:HE2	1:A:384:TYR:HD1	1.86	0.41
1:A:119:GLY:C	1:A:121:SER:H	2.23	0.41
1:A:131:ASP:N	1:A:131:ASP:OD1	2.53	0.41
1:A:342:TYR:O	1:A:346:THR:HB	2.19	0.41
1:A:763:ASN:C	1:A:765:ASN:N	2.72	0.41

		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:205:ASN:ND2	1:A:401:PHE:HE2	2.18	0.41
1:A:303:ILE:O	1:A:303:ILE:HG12	2.19	0.41
1:A:588:SER:O	1:A:591:VAL:HG23	2.20	0.41
1:A:757:GLU:CG	1:A:760:ASN:ND2	2.84	0.41
1:A:765:ASN:CB	1:A:768:ASP:HB2	2.45	0.41
1:A:772:LYS:O	1:A:773:LEU:C	2.59	0.41
1:A:824:TYR:C	1:A:826:ASN:H	2.24	0.41
1:A:903:LYS:HB2	1:A:922:SER:CA	2.51	0.41
1:A:919:LEU:HD23	1:A:919:LEU:N	2.36	0.41
1:A:1267:TYR:CD2	1:A:1280:CYS:SG	3.14	0.41
1:A:3:PHE:O	1:A:96:GLU:CD	2.58	0.41
1:A:88:LEU:HD12	1:A:88:LEU:HA	1.82	0.41
1:A:250:TYR:HB2	1:A:429:LEU:HD21	2.01	0.41
1:A:566:ILE:HG12	1:A:749:TYR:HD1	1.74	0.41
1:A:594:VAL:HG12	1:A:746:ILE:CD1	2.50	0.41
1:A:758:GLU:O	1:A:759:LYS:HB2	2.21	0.41
1:A:996:ARG:O	1:A:1039:LYS:HD2	2.20	0.41
1:A:1018:THR:HG21	1:A:1084:ILE:CD1	2.51	0.41
1:A:1138:GLY:HA3	1:A:1139:PRO:HD2	1.73	0.41
1:A:25:PRO:HD2	1:A:185:TYR:OH	2.20	0.41
1:A:193:THR:CG2	1:A:215:THR:O	2.65	0.41
1:A:289:LYS:O	1:A:293:ILE:HG12	2.21	0.41
1:A:554:LEU:HD23	1:A:641:LEU:CD2	2.51	0.41
1:A:691:THR:C	1:A:693:GLN:N	2.75	0.41
1:A:975:LYS:O	1:A:975:LYS:HD3	2.20	0.41
1:A:1029:ILE:O	1:A:1029:ILE:CG2	2.67	0.41
1:A:1065:ARG:HD2	1:A:1065:ARG:HA	1.85	0.41
1:A:494:ILE:O	1:A:494:ILE:HG22	2.21	0.41
1:A:747:ILE:CG2	1:A:764:PHE:CZ	3.02	0.41
1:A:754:TYR:OH	1:A:757:GLU:CG	2.65	0.41
1:A:950:PRO:CD	1:A:1066:TYR:O	2.69	0.41
1:A:1022:ASN:HD22	1:A:1025:ASN:N	2.19	0.41
1:A:141:ASP:OD2	1:A:143:SER:OG	2.40	0.40
1:A:553:TYR:CG	1:A:642:ASN:HB2	2.56	0.40
1:A:761:ASN:O	1:A:763:ASN:N	2.42	0.40
1:A:78:LEU:H	1:A:83:GLU:CD	2.24	0.40
1:A:583:TYR:O	1:A:739:GLN:NE2	2.53	0.40
1:A:619:SER:O	1:A:621:VAL:HG23	2.20	0.40
1:A:740:ALA:HB2	1:A:777:ILE:HD11	2.03	0.40
1:A:1077:LYS:HE2	1:A:1079:LEU:HD23	2.03	0.40
1:A:1137:LYS:CG	1:A:1138:GLY:H	2.34	0.40

Atom 1	Atom 2	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (Å)	overlap (Å)
1:A:94:LEU:O	1:A:98:ILE:HG13	2.20	0.40
1:A:192:PHE:CZ	1:A:375:LYS:NZ	2.78	0.40
1:A:226:ILE:O	1:A:226:ILE:HG22	2.20	0.40
1:A:336:LEU:HD11	1:A:340:LYS:HE3	2.03	0.40
1:A:392:LEU:HB2	1:A:395:THR:OG1	2.22	0.40
1:A:426:TYR:CD1	1:A:426:TYR:C	2.94	0.40
1:A:492:GLU:O	1:A:494:ILE:N	2.51	0.40
1:A:506:PHE:HB3	1:A:508:PHE:CE2	2.57	0.40
1:A:568:LEU:HA	1:A:595:ASN:OD1	2.21	0.40
1:A:690:LEU:HD12	1:A:690:LEU:HA	1.80	0.40
1:A:1193:LEU:C	1:A:1193:LEU:CD1	2.87	0.40
1:A:1198:SER:O	1:A:1199:GLN:O	2.38	0.40
1:A:471:PHE:CE2	1:A:720:LYS:CE	3.05	0.40
1:A:497:ASP:O	1:A:500:GLN:HB3	2.22	0.40
1:A:1269:ARG:CZ	1:A:1270:GLN:HE22	2.35	0.40
1:A:815:LEU:O	1:A:819:LEU:HB2	2.21	0.40
1:A:880:ASN:C	1:A:880:ASN:ND2	2.74	0.40
1:A:962:TYR:HE2	1:A:1057:LEU:HD23	1.81	0.40
1:A:1030:TYR:CE1	1:A:1035:LEU:HB2	2.57	0.40

All (9) symmetry-related close contacts are listed below. The label for Atom-2 includes the symmetry operator and encoded unit-cell translations to be applied.

Atom-1	Atom-2	Interatomic	Clash
2100III-1	1100111-2	distance $(Å)$	overlap (Å)
1:A:486:ASN:OD1	1:A:1273:ARG:NH2[6_555]	1.12	1.08
1:A:63:PRO:O	1:A:309:SER:N[3_564]	1.82	0.38
1:A:486:ASN:CG	1:A:1273:ARG:NH2[6_555]	1.90	0.30
1:A:693:GLN:NE2	1:A:1276:ARG:CB[6_555]	1.96	0.24
1:A:697:ASN:ND2	1:A:1276:ARG:NH2[6_555]	2.00	0.20
1:A:486:ASN:OD1	1:A:1273:ARG:CZ[6_555]	2.02	0.18
1:A:64:GLU:CG	1:A:307:THR:O[3_564]	2.07	0.13
1:A:693:GLN:NE2	1:A:1276:ARG:CG[6_555]	2.17	0.03
1:A:63:PRO:O	1:A:308:ALA:CA[3_564]	2.18	0.02

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	1273/1312~(97%)	1008 (79%)	177 (14%)	88 (7%)	1 17

All (88) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	А	121	SER
1	А	398	ALA
1	А	488	GLU
1	А	541	LYS
1	А	559	PHE
1	А	561	HIS
1	А	566	ILE
1	А	571	SER
1	А	629	ASP
1	А	649	LYS
1	А	650	ASP
1	А	831	ILE
1	А	973	GLY
1	А	974	TRP
1	А	992	GLU
1	А	1146	THR
1	А	1199	GLN
1	А	1245	ASN
1	А	1273	ARG
1	А	16	GLY
1	А	18	ASP
1	А	75	SER
1	А	123	ILE
1	А	160	ILE
1	А	209	GLY
1	А	256	LEU
1	А	396	ASN
1	А	464	PHE
1	А	490	ALA
1	A	492	GLU
1	А	493	ASN
1	А	510	ASN
1	A	527	GLN
1	A	556	ALA

Mol	Chain	Res	Type
1	А	563	LYS
1	А	572	VAL
1	А	644	GLY
1	А	648	TYR
1	А	661	ALA
1	А	763	ASN
1	А	773	LEU
1	А	980	TYR
1	А	1138	GLY
1	А	1176	ASN
1	А	1292	GLY
1	А	3	PHE
1	А	30	MET
1	A	115	ILE
1	А	124	ASP
1	A	157	SER
1	А	249	ALA
1	А	562	GLY
1	А	689	VAL
1	А	859	ASN
1	А	891	LEU
1	А	911	LYS
1	А	1155	TYR
1	А	1206	LEU
1	А	1216	ASN
1	А	1289	ASP
1	А	19	ILE
1	A	125	THR
1	А	453	LEU
1	А	646	MET
1	А	663	ILE
1	А	688	LYS
1	А	761	ASN
1	А	762	ILE
1	A	845	LEU
1	A	848	ASP
1	A	885	SER
1	A	1145	THR
1	A	4	VAL
1	A	74	ASP
1	А	141	ASP
1	А	175	LEU

Mol	Chain	\mathbf{Res}	Type
1	А	395	THR
1	А	735	ALA
1	А	825	ASP
1	А	1165	TYR
1	А	1169	ASN
1	А	674	PRO
1	А	677	GLY
1	А	120	GLY
1	А	746	ILE
1	А	494	ILE
1	А	172	VAL
1	А	627	ILE

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	1158/1190~(97%)	1082 (93%)	76 (7%)	16 43

All (76) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	А	18	ASP
1	А	21	TYR
1	А	50	THR
1	А	51	PHE
1	А	78	LEU
1	А	81	ASP
1	А	89	LYS
1	А	97	ARG
1	А	122	THR
1	А	129	VAL
1	А	132	THR
1	А	144	TYR
1	А	149	LEU
1	А	150	ASN

Mol	Chain	Res	Type
1	А	154	ILE
1	А	162	GLN
1	А	165	CYS
1	А	167	SER
1	А	193	THR
1	А	231	ARG
1	А	235	ILE
1	А	241	ARG
1	А	261	GLU
1	А	264	ARG
1	А	303	ILE
1	А	311	GLN
1	А	318	LYS
1	A	345	LEU
1	А	346	THR
1	А	362	ASN
1	А	382	VAL
1	А	412	ASN
1	А	425	PHE
1	А	474	ASP
1	А	554	LEU
1	А	555	ARG
1	А	559	PHE
1	А	561	HIS
1	А	570	ASN
1	А	574	GLU
1	А	576	LEU
1	А	589	ASP
1	А	602	MET
1	A	615	THR
1	A	618	THR
1	A	671	ILE
1	А	702	ARG
1	A	713	ILE
1	A	743	THR
1	A	750	GLN
1	А	763	ASN
1	А	796	LEU
1	A	812	ASP
1	А	825	ASP
1	A	833	GLN
1	А	834	VAL

Mol	Chain	Res	Type
1	А	835	ASP
1	А	843	ASN
1	А	872	ASN
1	А	874	ILE
1	А	880	ASN
1	А	881	LEU
1	А	912	ASN
1	А	918	ASN
1	А	962	TYR
1	А	974	TRP
1	А	975	LYS
1	А	1018	THR
1	А	1022	ASN
1	А	1026	ASN
1	А	1057	LEU
1	A	1077	LYS
1	А	1114	LEU
1	А	1193	LEU
1	А	1243	ASN
1	А	1277	THR

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (47) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	\mathbf{Res}	Type
1	А	39	HIS
1	А	150	ASN
1	А	162	GLN
1	А	170	HIS
1	А	205	ASN
1	А	227	HIS
1	А	240	ASN
1	А	269	HIS
1	А	311	GLN
1	А	315	ASN
1	А	362	ASN
1	А	377	ASN
1	А	402	ASN
1	А	404	GLN
1	А	418	ASN
1	А	458	ASN
1	А	500	GLN
1	А	552	HIS

Mol	Chain	Res	Type
1	А	557	GLN
1	А	645	ASN
1	А	697	ASN
1	А	722	ASN
1	А	760	ASN
1	А	765	ASN
1	А	789	ASN
1	А	872	ASN
1	А	880	ASN
1	A	913	GLN
1	А	915	GLN
1	А	960	ASN
1	А	966	ASN
1	А	971	ASN
1	А	979	ASN
1	А	988	GLN
1	А	1003	GLN
1	А	1012	ASN
1	А	1022	ASN
1	А	1026	ASN
1	А	1073	ASN
1	А	1120	ASN
1	А	1126	ASN
1	А	1147	ASN
1	А	1199	GLN
1	A	1243	ASN
1	А	1254	GLN
1	А	1268	ASN
1	А	1270	GLN

5.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates (i)

There are no monosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry (i)

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

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

5.7 Other polymers (i)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data (i)

6.1 Protein, DNA and RNA chains (i)

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ $>$	# RSRZ > 2		$\mathbf{OWAB}(\mathbf{A}^2)$	Q<0.9
1	А	1277/1312~(97%)	0.14	37 (2%) 51	41	119, 222, 356, 750	0

All (37) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	А	590	TYR	5.5
1	А	569	THR	5.1
1	А	594	VAL	4.7
1	А	1044	LEU	4.1
1	А	625	ASP	4.1
1	А	564	SER	3.6
1	А	610	LEU	3.5
1	А	1219	GLN	3.5
1	А	600	ALA	3.3
1	А	1264	SER	3.3
1	А	593	LYS	3.1
1	А	611	VAL	3.0
1	А	1229	GLN	3.0
1	А	589	ASP	3.0
1	А	591	VAL	2.9
1	А	1249	PHE	2.9
1	А	679	PHE	2.8
1	А	607	VAL	2.7
1	А	623	THR	2.6
1	А	756	GLU	2.6
1	А	598	THR	2.6
1	А	525	ILE	2.5
1	А	762	ILE	2.5
1	А	1167	SER	2.5
1	А	1166	ALA	2.5
1	А	990	THR	2.3
1	А	297	LEU	2.3

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	А	763	ASN	2.3
1	А	670	GLU	2.2
1	А	951	LYS	2.2
1	А	1214	VAL	2.1
1	А	34	LYS	2.1
1	А	565	ARG	2.1
1	А	1197	ALA	2.1
1	А	267	GLY	2.1
1	А	1296	LEU	2.0
1	А	192	PHE	2.0

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

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

6.3 Carbohydrates (i)

There are no monosaccharides in this entry.

6.4 Ligands (i)

In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. The B-factors column lists the minimum, median, 95^{th} percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled 'Q< 0.9' lists the number of atoms with occupancy less than 0.9.

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	$B-factors(A^2)$	Q<0.9
2	ZN	A	1313	1/1	0.93	0.47	147,147,147,147	0

6.5 Other polymers (i)

There are no such residues in this entry.

