



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Jun 21, 2017 – 10:57 PM EDT

PDB ID : 3AGQ  
Title : Structure of viral polymerase form II  
Authors : Takeshita, D.; Tomita, K.  
Deposited on : 2010-04-06  
Resolution : 3.22 Å(reported)

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

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)

A user guide is available at

<http://wwpdb.org/validation/2016/XrayValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

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

MolProbity : 4.02b-467  
Xtriage (Phenix) : 1.9-1692  
EDS : rb-20029077  
Percentile statistics : 20161228.v01 (using entries in the PDB archive December 28th 2016)  
Refmac : 5.8.0135  
CCP4 : 6.5.0  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20029077

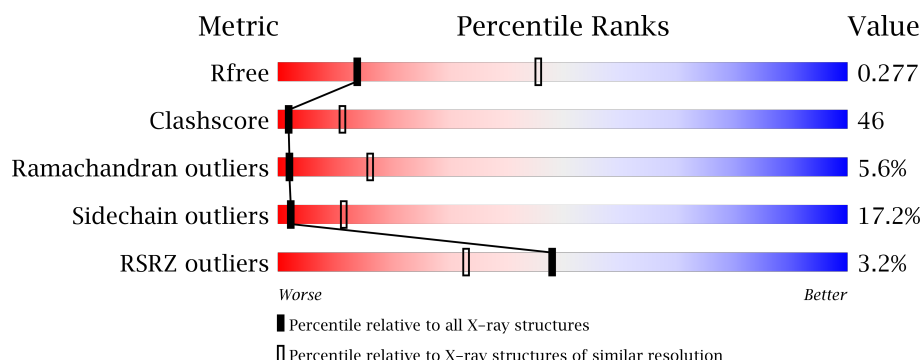
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*X-RAY DIFFRACTION*

The reported resolution of this entry is 3.22 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
$R_{free}$	100719	1036 (3.24-3.20)
Clashscore	112137	1161 (3.24-3.20)
Ramachandran outliers	110173	1140 (3.24-3.20)
Sidechain outliers	110143	1139 (3.24-3.20)
RSRZ outliers	101464	1040 (3.24-3.20)

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	1289	

## 2 Entry composition [i](#)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 9257 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

In the tables below, the ZeroOcc column contains the number of atoms modelled with zero occupancy, the AltConf column contains the number of residues with at least one atom in alternate conformation and the Trace column contains the number of residues modelled with at most 2 atoms.

- Molecule 1 is a protein called Elongation factor Ts, Elongation factor Tu 1, LINKER, Q beta replicase.

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

There are 7 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	284	HIS	-	LINKER	UNP P0A6P3
A	1284	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8LTE0
A	1285	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8LTE0
A	1286	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8LTE0
A	1287	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8LTE0
A	1288	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8LTE0
A	1289	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8LTE0

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

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

- Molecule 3 is water.

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



GLN	L1207	D1134	Y1071	V1008	D944	P875	S810	E745
GLY	F1208	P1135	V1072	V1009	L945	R876	E811	C746
THR	S1209	R1136	G1073	T1010	Q948	L878	D812	I747
LYS	R1210	A1137	F1074	Y1011	T949	K379	F813	S748
VAL	C1211	H1138	T1075	K1013	T949	Y880	N814	F749
ALA	L1212	S1139	T1076	L1014	Q952	V881	L817	S750
SER	S1213	V1140	M1077	S1015	R953	L884	G818	D754
LEU	E1214	K1143	T1078	S1016	R954	R885	E819	G755
HIS	S1215	Y1144	M1079	M1017	A955	A886	S820	T756
ALA	N1216	G1080	K1080	G1018	R956	S887	C821	F759
ASP	ASP	P1149	T1081	N1019	E957	T888	I822	D760
GLY	LEU	K1150	F1082	G1020	V960	H889	T883	R761
HIS	LEU	Q1151	S1083	Y1021	T961	F890	N824	I762
HIS	LEU	L1152	E1084	T1022	N962	D891	K828	N763
HIS	ARG	G1085	G1085	F1023	N963	I892	I829	I764
HIS	GLY	P1086	P1086	E1024	L964	R893	L765	L765
PRO	PRO	I1157	F1087	L1025	A965	I894	I832	K766
GLY	SER	D1159	R1088	E1026	T966	S895	I833	A767
GLY	GLY	G1160	E1089	S1027	V967	I896	G834	E768
CYS	CYS	Y1161	S1090	L1028	D968	I897	D835	I769
ASP	ASP	G1162	T1029	F1030	L969	S898	V836	M770
ALA	ALA	D1163	F1030	A1031	L969	P899	P837	S771
ASP	ASP	G1164	A1031	S1032	S970	F900	S838	K772
LEU	LEU	A1165	Y1095	L1033	A971	N901	V839	Y773
LEU	LEU	L1166	Y1096	L1033	A972	V904	E840	D774
PHE	PHE	V1167	V1099	A1034	S973	T905	L843	D775
A1234	A1234	L1171	D1100	R1035	D974	V906	R844	F776
I1235	I1235	L1172	D1100	S1036	S975	D913	R844	S777
D1236	D1236	N1173	V1101	V1037	I976	C915	H845	L778
I1238	I1238	P1174	T1102	C1038	S977	D846	C846	G779
N1243	N1243	F1175	P1103	E1039	L978	R847	F848	I780
P1244	P1244	K1176	I1106	L1040	A979	C915	I916	D781
T1245	T1245	A1177	R1107	L1041	L980	I916	S849	T782
K1246	K1246	N1178	H1108	L1043	E981	A917	G850	E783
L1247	L1247	R1179	R1109	D1044	E982	I918	G851	A784
S1248	S1248	G1180	L1110	S1045	L984	G921	A852	V785
R1249	R1249	W1181	V1111	S1046	L985	G922	T853	A786
T1251	T1251	S1182	S1112	E1047	P986	N922	T854	A787
F1254	F1254	R1183	T1115	V1048	P987	N923	T855	E788
D1255	D1255	Y1184	T1049	T1048	G988	N924	N856	K789
I1259	I1259	V1185	V1050	V1050	W989	F925	N857	F790
A1260	A1260	P1186	Y1051	Y1051	F990	F926	R858	L791
C1261	C1261	V1187	L1117	G1052	E991	Q927	S859	A792
S1263	S1263	I1188	L1118	D1053	V992	L928	Y860	A793
S1264	S1264	T1189	V1119	D1054	L993	G929	G861	E796
VAL	VAL	E1196	L1120	I1055	M994	I930	H862	C797
LEU	LEU	L1200	N1121	L1056	D995	G931	P863	T800
ALA	ALA	G1201	N1122	L1057	L996	I932	S864	N801
PRO	PRO	S1202	Y1124	P1058	A997	I933	F865	R802
TYR	TYR	Y1203	R1125	S1059	S998	L934	K866	L804
GLY	GLY	L1204	W1126	C1060	P999	R937	F867	R803
VAL	VAL	Y1205	A1127	P1063	K1000	L869	A868	L804
PHE	PHE	D1206	T1128	A1064	L1003	R939	L869	Y805
			I1129	L1065	C940	C940	P870	S806
			D1130	R1066	P1004	Q941	Q871	P807
			G1131	E1067	D1005	G942	A872	D808
			V1132	S1067	G1006	G942	C873	Y809
			W1133	V1068	S1007	I943	T874	

## 4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	C 2 2 21	Depositor
Cell constants a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	138.77Å 255.12Å 100.97Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	20.00 – 3.22 30.28 – 3.22	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	97.6 (20.00-3.22) 97.6 (30.28-3.22)	Depositor EDS
$R_{merge}$	0.11	Depositor
$R_{sym}$	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ <sup>1</sup>	2.44 (at 3.24Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX	Depositor
R, $R_{free}$	0.251 , 0.317 0.221 , 0.277	Depositor DCC
$R_{free}$ test set	1451 reflections (5.07%)	DCC
Wilson B-factor (Å <sup>2</sup> )	86.5	Xtriage
Anisotropy	0.572	Xtriage
Bulk solvent $k_{sol}$ (e/Å <sup>3</sup> ), $B_{sol}$ (Å <sup>2</sup> )	0.25 , 58.6	EDS
L-test for twinning <sup>2</sup>	$\langle  L  \rangle = 0.38$ , $\langle L^2 \rangle = 0.21$	Xtriage
Estimated twinning fraction	0.077 for 1/2*h-1/2*k,-3/2*h-1/2*k,-l 0.022 for 1/2*h+1/2*k,3/2*h-1/2*k,-l	Xtriage
$F_o, F_c$ correlation	0.92	EDS
Total number of atoms	9257	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	132.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 4.26% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

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

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

## 5 Model quality [i](#)

### 5.1 Standard geometry [i](#)

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z  > 5$	RMSZ	$\# Z  > 5$
1	A	0.40	0/9421	0.62	1/12741 (0.0%)

There are no bond length outliers.

All (1) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed( $^{\circ}$ )	Ideal( $^{\circ}$ )
1	A	286	SER	CA-C-O	-18.36	81.55	120.10

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

### 5.2 Too-close contacts [i](#)

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

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

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 46.

All (845) close contacts within the same asymmetric unit are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:930:ILE:HD11	1:A:1021:TYR:HD2	1.17	1.07
1:A:893:ARG:HB3	1:A:893:ARG:HH11	1.20	1.06
1:A:133:ARG:HG2	1:A:134:ARG:H	1.20	1.04
1:A:198:GLN:HA	1:A:201:ILE:HG12	1.37	1.04
1:A:399:GLN:H	1:A:399:GLN:HE21	1.06	1.02
1:A:202:ALA:HB1	1:A:207:LYS:HD2	1.42	1.01
1:A:520:ILE:HD11	1:A:554:ARG:HG3	1.44	0.99
1:A:930:ILE:HD11	1:A:1021:TYR:CD2	1.99	0.97
1:A:800:THR:HG22	1:A:803:ARG:HH11	1.30	0.95
1:A:544:GLU:HB3	1:A:549:LEU:HG	1.48	0.95
1:A:208:PRO:HG2	1:A:211:ILE:HD13	1.47	0.94
1:A:806:ARG:H	1:A:807:PRO:HD2	1.30	0.93
1:A:1121:ASN:HD21	1:A:1167:VAL:H	1.10	0.92
1:A:1035:ARG:HG3	1:A:1048:VAL:HG11	1.52	0.91
1:A:212:ALA:O	1:A:216:VAL:HG23	1.69	0.91
1:A:968:ASP:H	1:A:1081:THR:HG22	1.38	0.88
1:A:747:ILE:HG22	1:A:771:SER:HA	1.56	0.88
1:A:734:ALA:HB1	1:A:1136:ARG:O	1.74	0.88
1:A:801:ASN:HA	1:A:979:ALA:HB2	1.55	0.87
1:A:220:MET:O	1:A:224:THR:HG22	1.75	0.87
1:A:749:PHE:CE1	1:A:766:LYS:HG2	2.09	0.87
1:A:1100:ASP:OD1	1:A:1102:THR:HG23	1.74	0.86
1:A:894:ILE:HG13	1:A:895:SER:O	1.75	0.85
1:A:969:LEU:HB2	1:A:1053:ASP:HB2	1.58	0.85
1:A:302:ILE:HD13	1:A:366:CYS:HB2	1.59	0.84
1:A:508:ARG:HD3	1:A:562:LEU:HD21	1.59	0.84
1:A:491:ILE:HG22	1:A:555:ALA:HB3	1.59	0.84
1:A:49:ALA:HB2	1:A:123:VAL:HG11	1.59	0.84
1:A:800:THR:HG22	1:A:803:ARG:NH1	1.93	0.84
1:A:797:CYS:HB3	1:A:1012:GLU:HB3	1.59	0.83
1:A:893:ARG:HB3	1:A:893:ARG:NH1	1.94	0.83
1:A:849:SER:HA	1:A:863:PRO:HG3	1.59	0.83
1:A:298:ASN:HB3	1:A:362:ALA:HB3	1.61	0.82
1:A:743:GLU:HB2	1:A:778:LEU:HD22	1.61	0.82
1:A:499:ILE:HD13	1:A:512:VAL:HG11	1.60	0.81
1:A:529:ILE:O	1:A:529:ILE:HG12	1.80	0.81
1:A:837:PRO:HG3	1:A:992:VAL:HG11	1.63	0.81
1:A:134:ARG:HH21	1:A:134:ARG:HG3	1.44	0.81
1:A:1110:ILE:HD11	1:A:1116:LEU:HA	1.61	0.81
1:A:1060:CYS:O	1:A:1063:PRO:HD2	1.82	0.79
1:A:1057:LEU:HD13	1:A:1065:LEU:HD22	1.64	0.78
1:A:1151:GLN:H	1:A:1151:GLN:HE21	1.30	0.77

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:272:PHE:HE1	1:A:310:THR:HG22	1.48	0.77
1:A:169:ILE:HD11	1:A:229:LEU:HD11	1.65	0.77
1:A:165:LEU:O	1:A:169:ILE:HG22	1.84	0.76
1:A:874:THR:HG22	1:A:877:ALA:H	1.50	0.76
1:A:1068:VAL:O	1:A:1072:VAL:HG13	1.84	0.76
1:A:1180:GLY:O	1:A:1181:TRP:HB2	1.86	0.76
1:A:62:ILE:HG13	1:A:261:VAL:HG23	1.67	0.75
1:A:1094:HIS:H	1:A:1102:THR:HG22	1.51	0.75
1:A:846:CYS:SG	1:A:926:PHE:HA	2.26	0.75
1:A:955:ALA:HB2	1:A:1090:SER:HB3	1.69	0.75
1:A:948:GLN:O	1:A:952:GLN:HG3	1.87	0.75
1:A:133:ARG:HG2	1:A:134:ARG:N	1.97	0.74
1:A:1121:ASN:ND2	1:A:1167:VAL:H	1.82	0.74
1:A:233:PRO:HA	1:A:241:THR:HA	1.70	0.74
1:A:1110:ILE:HD11	1:A:1116:LEU:CA	2.17	0.74
1:A:897:ILE:HG23	1:A:897:ILE:O	1.86	0.74
1:A:356:THR:HG21	1:A:481:ASP:OD1	1.88	0.73
1:A:981:CYS:O	1:A:985:LEU:HD12	1.88	0.73
1:A:991:GLU:C	1:A:993:LEU:H	1.91	0.73
1:A:1026:GLU:O	1:A:1030:PHE:CD1	2.41	0.73
1:A:741:ASN:HD22	1:A:742:SER:N	1.86	0.73
1:A:852:ALA:HB1	1:A:918:ILE:HG12	1.71	0.73
1:A:749:PHE:HD1	1:A:767:ALA:HA	1.53	0.72
1:A:356:THR:HG23	1:A:357:PRO:HD2	1.69	0.72
1:A:92:PHE:CE1	1:A:132:ILE:HD11	2.25	0.72
1:A:930:ILE:HA	1:A:933:ILE:HG23	1.71	0.71
1:A:589:PHE:CZ	1:A:645:VAL:HB	2.24	0.71
1:A:773:TYR:HB3	1:A:776:PHE:CE1	2.25	0.71
1:A:386:ALA:HB3	1:A:415:ILE:HG12	1.71	0.71
1:A:361:TYR:CZ	1:A:480:LEU:HB3	2.24	0.71
1:A:967:VAL:HG22	1:A:1055:ILE:HB	1.72	0.71
1:A:991:GLU:O	1:A:993:LEU:N	2.23	0.71
1:A:388:LEU:HB3	1:A:417:VAL:HG22	1.71	0.71
1:A:628:LEU:HB3	1:A:632:VAL:HG13	1.71	0.71
1:A:166:VAL:HA	1:A:169:ILE:CG2	2.21	0.70
1:A:113:ALA:HA	1:A:116:GLU:HB2	1.72	0.70
1:A:307:HIS:CD2	1:A:391:ALA:H	2.09	0.70
1:A:466:ASP:OD2	1:A:469:TRP:HD1	1.74	0.70
1:A:926:PHE:HB3	1:A:996:LEU:HD21	1.71	0.70
1:A:1151:GLN:H	1:A:1151:GLN:NE2	1.90	0.70
1:A:96:VAL:HG22	1:A:111:LEU:HD12	1.74	0.70

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:967:VAL:CG2	1:A:1055:ILE:HB	2.22	0.70
1:A:988:GLY:O	1:A:992:VAL:HG12	1.92	0.70
1:A:837:PRO:CG	1:A:992:VAL:HG11	2.20	0.70
1:A:221:LYS:O	1:A:224:THR:HG23	1.91	0.69
1:A:1189:THR:HG22	1:A:1190:ASP:O	1.92	0.69
1:A:598:LYS:HE3	1:A:604:HIS:HB2	1.74	0.69
1:A:502:VAL:HG13	1:A:512:VAL:HG12	1.72	0.69
1:A:853:THR:CG2	1:A:866:LYS:HE2	2.22	0.69
1:A:717:ILE:C	1:A:717:ILE:HD13	2.13	0.69
1:A:417:VAL:HB	1:A:454:ILE:HD13	1.75	0.68
1:A:111:LEU:HD23	1:A:111:LEU:H	1.58	0.68
1:A:158:ALA:HA	1:A:253:VAL:HA	1.75	0.68
1:A:627:GLU:HG3	1:A:644:VAL:HB	1.76	0.68
1:A:199:LEU:HA	1:A:216:VAL:HG21	1.75	0.68
1:A:361:TYR:OH	1:A:480:LEU:HB3	1.93	0.68
1:A:754:ASP:O	1:A:755:GLY:O	2.12	0.68
1:A:900:PHE:HE2	1:A:1008:VAL:HG12	1.56	0.68
1:A:610:GLY:H	1:A:1181:TRP:HE1	1.42	0.68
1:A:930:ILE:CD1	1:A:1021:TYR:HD2	2.03	0.68
1:A:864:SER:HB2	1:A:1202:SER:HA	1.75	0.68
1:A:132:ILE:H	1:A:132:ILE:HD12	1.59	0.68
1:A:276:VAL:HG21	1:A:313:THR:HG23	1.75	0.68
1:A:169:ILE:CD1	1:A:229:LEU:HD21	2.24	0.67
1:A:400:THR:O	1:A:404:ILE:HG13	1.95	0.67
1:A:945:LEU:O	1:A:1051:TYR:HE1	1.77	0.67
1:A:356:THR:HG22	1:A:358:THR:H	1.60	0.67
1:A:783:GLU:O	1:A:786:ALA:HB3	1.95	0.67
1:A:172:HIS:O	1:A:176:SER:HB2	1.95	0.67
1:A:591:SER:HB2	1:A:672:VAL:O	1.95	0.67
1:A:1030:PHE:HE2	1:A:1074:PHE:CE1	2.13	0.67
1:A:583:ILE:HD11	1:A:652:ALA:C	2.15	0.67
1:A:618:ARG:NH1	1:A:652:ALA:O	2.28	0.66
1:A:574:GLY:HA2	1:A:619:THR:CG2	2.24	0.66
1:A:717:ILE:O	1:A:717:ILE:HD13	1.95	0.66
1:A:168:HIS:HA	1:A:171:MET:HE2	1.77	0.66
1:A:724:ALA:HB1	1:A:1106:ILE:HG21	1.76	0.66
1:A:589:PHE:CE1	1:A:645:VAL:HB	2.29	0.66
1:A:442:LEU:HD12	1:A:452:THR:HG21	1.78	0.66
1:A:503:PHE:CE2	1:A:1203:TYR:HA	2.30	0.66
1:A:1096:TYR:O	1:A:1099:VAL:HG22	1.95	0.65
1:A:199:LEU:HD23	1:A:199:LEU:O	1.97	0.65

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:523:VAL:HA	1:A:540:CYS:SG	2.35	0.65
1:A:596:LEU:HD12	1:A:668:VAL:HA	1.77	0.65
1:A:530:VAL:HG21	1:A:585:PRO:HD3	1.77	0.65
1:A:399:GLN:N	1:A:399:GLN:HE21	1.86	0.65
1:A:181:ILE:HG13	1:A:253:VAL:HG23	1.77	0.65
1:A:779:GLY:C	1:A:781:ASP:H	2.00	0.65
1:A:1021:TYR:C	1:A:1021:TYR:HD1	2.00	0.65
1:A:229:LEU:O	1:A:229:LEU:HD23	1.97	0.65
1:A:199:LEU:HD23	1:A:203:MET:HG3	1.77	0.65
1:A:741:ASN:HD22	1:A:742:SER:H	1.44	0.65
1:A:1050:VAL:CG1	1:A:1051:TYR:N	2.59	0.64
1:A:1151:GLN:N	1:A:1151:GLN:HE21	1.95	0.64
1:A:369:HIS:CE1	1:A:406:LEU:HD23	2.32	0.64
1:A:544:GLU:CB	1:A:549:LEU:HG	2.24	0.64
1:A:194:GLU:HA	1:A:197:VAL:HG12	1.77	0.64
1:A:806:ARG:N	1:A:807:PRO:HD2	2.05	0.64
1:A:725:LEU:HD12	1:A:725:LEU:O	1.96	0.64
1:A:195:TYR:CZ	1:A:199:LEU:HD12	2.32	0.64
1:A:471:ALA:HA	1:A:474:LEU:HD13	1.80	0.64
1:A:229:LEU:O	1:A:242:VAL:HB	1.97	0.64
1:A:617:PHE:O	1:A:618:ARG:HG2	1.97	0.64
1:A:1050:VAL:HG22	1:A:1055:ILE:HA	1.79	0.64
1:A:1021:TYR:C	1:A:1021:TYR:CD1	2.71	0.64
1:A:221:LYS:HD3	1:A:222:LYS:HG2	1.80	0.64
1:A:1035:ARG:HG3	1:A:1048:VAL:CG1	2.27	0.64
1:A:606:PRO:HA	1:A:637:PRO:HD3	1.80	0.64
1:A:991:GLU:C	1:A:993:LEU:N	2.50	0.64
1:A:980:LEU:HD13	1:A:1072:VAL:HB	1.78	0.64
1:A:505:ILE:HD12	1:A:1200:LEU:HD23	1.80	0.64
1:A:852:ALA:CB	1:A:918:ILE:HG12	2.27	0.64
1:A:1047:GLU:OE2	1:A:1047:GLU:HA	1.97	0.63
1:A:66:ILE:HG22	1:A:71:GLY:HA3	1.80	0.63
1:A:989:TRP:O	1:A:991:GLU:N	2.31	0.63
1:A:784:ALA:O	1:A:788:GLU:HG3	1.97	0.63
1:A:836:VAL:CG2	1:A:837:PRO:HD2	2.28	0.63
1:A:968:ASP:N	1:A:1081:THR:HG22	2.13	0.63
1:A:1157:ILE:HG12	1:A:1165:ALA:HB3	1.81	0.63
1:A:1129:ILE:O	1:A:1129:ILE:HG22	1.98	0.63
1:A:732:LEU:HD12	1:A:739:PRO:HA	1.80	0.63
1:A:530:VAL:CG2	1:A:585:PRO:HD3	2.29	0.62
1:A:75:GLU:O	1:A:75:GLU:HG3	1.97	0.62

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

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

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:769:ILE:HG23	1:A:770:MET:N	2.16	0.60
1:A:899:PRO:O	1:A:999:PRO:HD2	2.00	0.60
1:A:1121:ASN:HD21	1:A:1167:VAL:N	1.92	0.60
1:A:434:VAL:O	1:A:438:VAL:HG12	2.01	0.60
1:A:1055:ILE:O	1:A:1056:ILE:HD12	2.01	0.60
1:A:532:ILE:HD12	1:A:572:GLU:HB2	1.82	0.60
1:A:1047:GLU:HB3	1:A:1058:PRO:HD3	1.84	0.59
1:A:134:ARG:CG	1:A:134:ARG:HH21	2.15	0.59
1:A:503:PHE:CD1	1:A:1203:TYR:HD2	2.20	0.59
1:A:782:THR:OG1	1:A:783:GLU:N	2.35	0.59
1:A:898:SER:OG	1:A:899:PRO:HD2	2.02	0.59
1:A:1121:ASN:O	1:A:1124:TYR:HB3	2.02	0.59
1:A:836:VAL:HG22	1:A:837:PRO:HD2	1.83	0.59
1:A:1112:SER:O	1:A:1115:ASP:HB2	2.03	0.59
1:A:425:VAL:HG12	1:A:427:ASP:O	2.03	0.59
1:A:63:LYS:O	1:A:73:ILE:HA	2.02	0.59
1:A:86:ASP:HA	1:A:402:GLU:CD	2.23	0.59
1:A:199:LEU:O	1:A:203:MET:HB2	2.03	0.59
1:A:159:LYS:H	1:A:254:THR:HG22	1.67	0.59
1:A:627:GLU:CG	1:A:644:VAL:HB	2.32	0.58
1:A:805:TYR:O	1:A:806:ARG:HB3	2.02	0.58
1:A:20:MET:HA	1:A:20:MET:HE3	1.84	0.58
1:A:38:ILE:HD12	1:A:39:GLU:N	2.18	0.58
1:A:642:LYS:HZ2	1:A:642:LYS:HB3	1.66	0.58
1:A:863:PRO:HB2	1:A:1205:TYR:CE2	2.38	0.58
1:A:272:PHE:CE1	1:A:310:THR:HG22	2.33	0.58
1:A:1263:SER:O	1:A:1264:ARG:CB	2.52	0.58
1:A:75:GLU:HG2	1:A:134:ARG:NH2	2.19	0.58
1:A:945:LEU:HD23	1:A:1051:TYR:CD1	2.39	0.57
1:A:1019:ASN:HB3	1:A:1022:THR:HB	1.85	0.57
1:A:861:GLY:O	1:A:866:LYS:NZ	2.28	0.57
1:A:400:THR:HG22	1:A:441:LEU:HD13	1.84	0.57
1:A:783:GLU:OE1	1:A:905:THR:HG21	2.04	0.57
1:A:250:ASN:ND2	1:A:250:ASN:H	2.02	0.57
1:A:954:ARG:HH11	1:A:1049:THR:CG2	2.18	0.57
1:A:1157:ILE:HG22	1:A:1185:VAL:HG11	1.87	0.57
1:A:801:ASN:OD1	1:A:977:SER:HB2	2.04	0.57
1:A:938:LEU:HD11	1:A:1028:LEU:HB2	1.87	0.57
1:A:954:ARG:HH11	1:A:1049:THR:HG22	1.70	0.57
1:A:1150:LYS:O	1:A:1152:LEU:N	2.37	0.57
1:A:408:ARG:O	1:A:408:ARG:HD3	2.04	0.57

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:592:GLU:HG2	1:A:642:LYS:HG2	1.85	0.57
1:A:734:ALA:O	1:A:1136:ARG:HG2	2.05	0.57
1:A:829:ILE:CD1	1:A:984:LEU:HB3	2.35	0.57
1:A:221:LYS:HZ3	1:A:222:LYS:HE2	1.70	0.57
1:A:55:ASN:HB2	1:A:79:GLN:HE22	1.70	0.57
1:A:945:LEU:HD21	1:A:1051:TYR:HA	1.87	0.57
1:A:930:ILE:HA	1:A:933:ILE:CG2	2.35	0.56
1:A:74:LEU:HB3	1:A:135:VAL:HG23	1.87	0.56
1:A:722:ASN:HB3	1:A:725:LEU:HB3	1.87	0.56
1:A:924:MET:HG2	1:A:927:GLN:OE1	2.05	0.56
1:A:304:HIS:ND1	1:A:397:MET:HG3	2.21	0.56
1:A:662:ARG:HD2	1:A:667:THR:HG23	1.88	0.56
1:A:1030:PHE:CE2	1:A:1074:PHE:CE1	2.93	0.56
1:A:72:ILE:HG13	1:A:137:ALA:HB2	1.87	0.56
1:A:227:VAL:HG22	1:A:227:VAL:O	2.05	0.56
1:A:641:ILE:HD13	1:A:642:LYS:N	2.20	0.56
1:A:1143:LYS:HE2	1:A:1144:TYR:CE1	2.41	0.56
1:A:404:ILE:CD1	1:A:441:LEU:HB3	2.36	0.56
1:A:596:LEU:HB2	1:A:602:GLY:HA3	1.87	0.56
1:A:12:LEU:HD21	1:A:23:CYS:O	2.05	0.56
1:A:250:ASN:ND2	1:A:250:ASN:N	2.53	0.56
1:A:399:GLN:H	1:A:399:GLN:NE2	1.90	0.56
1:A:60:GLY:O	1:A:261:VAL:HG11	2.05	0.56
1:A:593:VAL:HG22	1:A:641:ILE:HG22	1.87	0.56
1:A:870:PRO:O	1:A:895:SER:HB3	2.04	0.56
1:A:65:LYS:HG3	1:A:97:LEU:HD11	1.87	0.56
1:A:806:ARG:H	1:A:807:PRO:CD	2.11	0.56
1:A:1037:VAL:HG21	1:A:1065:LEU:HD12	1.88	0.55
1:A:169:ILE:HD11	1:A:229:LEU:HD21	1.89	0.55
1:A:1021:TYR:HD1	1:A:1022:THR:N	2.04	0.55
1:A:194:GLU:OE2	1:A:198:GLN:HG3	2.05	0.55
1:A:945:LEU:CD2	1:A:1051:TYR:HA	2.37	0.55
1:A:301:THR:HA	1:A:387:ILE:HG23	1.89	0.55
1:A:307:HIS:HD2	1:A:391:ALA:H	1.54	0.55
1:A:839:VAL:HG12	1:A:843:LEU:HD23	1.87	0.55
1:A:1093:LYS:HB3	1:A:1095:TYR:HE2	1.70	0.55
1:A:300:GLY:HA3	1:A:383:MET:SD	2.47	0.55
1:A:648:ILE:HG13	1:A:649:HIS:CD2	2.42	0.55
1:A:991:GLU:O	1:A:994:MET:N	2.39	0.55
1:A:1150:LYS:HD2	1:A:1150:LYS:N	2.21	0.55
1:A:774:ASP:OD2	1:A:1108:HIS:ND1	2.31	0.55

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:829:ILE:HD13	1:A:984:LEU:HB3	1.88	0.55
1:A:916:ILE:HG12	1:A:917:ALA:H	1.72	0.55
1:A:290:PHE:N	1:A:292:ARG:CZ	2.70	0.55
1:A:945:LEU:O	1:A:1051:TYR:CE1	2.59	0.55
1:A:1022:THR:O	1:A:1026:GLU:HG2	2.06	0.55
1:A:1158:PRO:O	1:A:1167:VAL:HG13	2.06	0.55
1:A:523:VAL:HG22	1:A:551:ASP:O	2.06	0.55
1:A:1182:ILE:HD11	1:A:1260:ALA:HB1	1.90	0.55
1:A:208:PRO:O	1:A:209:LYS:C	2.45	0.55
1:A:232:GLN:O	1:A:242:VAL:HG23	2.07	0.55
1:A:374:LYS:HE3	1:A:594:TYR:CE2	2.41	0.54
1:A:864:SER:HB2	1:A:1202:SER:CA	2.37	0.54
1:A:166:VAL:HA	1:A:169:ILE:HG22	1.89	0.54
1:A:746:CYS:HB3	1:A:770:MET:CB	2.36	0.54
1:A:808:ASP:OD2	1:A:808:ASP:O	2.24	0.54
1:A:117:GLU:O	1:A:120:VAL:HG22	2.07	0.54
1:A:523:VAL:HG13	1:A:551:ASP:O	2.07	0.54
1:A:82:PHE:HE1	1:A:406:LEU:HB2	1.72	0.54
1:A:234:PHE:CE1	1:A:236:MET:HB2	2.42	0.54
1:A:103:GLY:O	1:A:105:ILE:HG13	2.08	0.54
1:A:387:ILE:HG23	1:A:387:ILE:O	2.08	0.54
1:A:467:ALA:HA	1:A:470:GLU:HB2	1.89	0.54
1:A:731:LEU:HA	1:A:1140:VAL:HG21	1.90	0.54
1:A:982:GLU:HB3	1:A:990:PHE:CD1	2.43	0.54
1:A:1151:GLN:HB3	1:A:1175:PHE:CZ	2.43	0.54
1:A:365:ASP:C	1:A:367:PRO:HD3	2.28	0.54
1:A:1096:TYR:HB2	1:A:1101:VAL:HG11	1.89	0.53
1:A:629:PRO:HG2	1:A:632:VAL:HG12	1.89	0.53
1:A:1034:ALA:HB3	1:A:1048:VAL:HG21	1.89	0.53
1:A:700:SER:N	1:A:1179:ARG:HG3	2.23	0.53
1:A:300:GLY:O	1:A:387:ILE:HG22	2.07	0.53
1:A:801:ASN:HA	1:A:979:ALA:CB	2.34	0.53
1:A:1128:THR:HG22	1:A:1130:ASP:H	1.73	0.53
1:A:56:VAL:HG11	1:A:267:LYS:HD3	1.91	0.53
1:A:729:ASN:HD21	1:A:740:PHE:HB2	1.72	0.53
1:A:1055:ILE:C	1:A:1056:ILE:HD12	2.28	0.53
1:A:183:PRO:HD3	1:A:230:THR:CB	2.39	0.53
1:A:387:ILE:HA	1:A:416:ILE:O	2.09	0.53
1:A:1208:PHE:O	1:A:1211:CYS:HB3	2.09	0.53
1:A:198:GLN:CA	1:A:201:ILE:HG12	2.26	0.53
1:A:75:GLU:HG2	1:A:134:ARG:HH22	1.74	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

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

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1078:THR:HG23	1:A:1079:LYS:HE3	1.91	0.51
1:A:1157:ILE:CD1	1:A:1165:ALA:HB3	2.41	0.51
1:A:1189:THR:HG22	1:A:1190:ASP:N	2.26	0.51
1:A:174:ALA:O	1:A:258:ARG:NH1	2.44	0.51
1:A:374:LYS:HE3	1:A:594:TYR:CZ	2.46	0.51
1:A:662:ARG:HD2	1:A:667:THR:CG2	2.40	0.51
1:A:874:THR:HB	1:A:923:ASN:HD21	1.75	0.51
1:A:97:LEU:O	1:A:101:VAL:HG23	2.10	0.51
1:A:1110:ILE:CD1	1:A:1116:LEU:HD23	2.40	0.51
1:A:1128:THR:HG21	1:A:1131:GLY:H	1.75	0.51
1:A:111:LEU:HA	1:A:114:GLN:HB3	1.92	0.51
1:A:1196:GLU:O	1:A:1196:GLU:HG3	2.11	0.51
1:A:927:GLN:O	1:A:1021:TYR:HB3	2.11	0.51
1:A:558:ASN:HB2	1:A:1214:GLU:OE1	2.11	0.51
1:A:1048:VAL:HG13	1:A:1048:VAL:O	2.10	0.51
1:A:154:VAL:HG21	1:A:170:ALA:O	2.11	0.51
1:A:1143:LYS:HG2	1:A:1144:TYR:CD1	2.46	0.50
1:A:161:ALA:HB2	1:A:251:ALA:CB	2.42	0.50
1:A:1247:ILE:HG22	1:A:1248:SER:N	2.26	0.50
1:A:760:PHE:O	1:A:763:ASN:N	2.45	0.50
1:A:735:TYR:CD1	1:A:1136:ARG:HD2	2.46	0.50
1:A:183:PRO:HD3	1:A:230:THR:HB	1.93	0.50
1:A:877:ALA:O	1:A:878:LEU:C	2.50	0.50
1:A:1030:PHE:HB3	1:A:1055:ILE:HD11	1.94	0.50
1:A:1182:ILE:HG13	1:A:1184:TYR:CE2	2.46	0.50
1:A:502:VAL:HG11	1:A:571:ILE:HB	1.94	0.50
1:A:611:TYR:HB3	1:A:626:ILE:CG1	2.40	0.50
1:A:1050:VAL:HG13	1:A:1051:TYR:H	1.76	0.50
1:A:149:GLY:O	1:A:150:ALA:HB2	2.11	0.50
1:A:312:LEU:HA	1:A:459:ALA:HB1	1.92	0.50
1:A:447:PHE:O	1:A:449:GLY:N	2.45	0.50
1:A:67:ASP:O	1:A:69:ASN:N	2.44	0.50
1:A:837:PRO:HD3	1:A:989:TRP:CD2	2.47	0.50
1:A:1048:VAL:O	1:A:1048:VAL:CG1	2.60	0.50
1:A:202:ALA:HB1	1:A:207:LYS:CD	2.28	0.50
1:A:272:PHE:CZ	1:A:313:THR:HG21	2.46	0.50
1:A:30:ALA:C	1:A:32:GLY:H	2.15	0.50
1:A:740:PHE:CE2	1:A:746:CYS:HA	2.47	0.50
1:A:806:ARG:HG2	1:A:806:ARG:NH1	2.25	0.50
1:A:990:PHE:O	1:A:990:PHE:CD2	2.64	0.50
1:A:1173:ASN:HD22	1:A:1175:PHE:N	2.09	0.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:161:ALA:HB2	1:A:251:ALA:HB2	1.94	0.50
1:A:588:LYS:HB2	1:A:679:GLY:HA2	1.94	0.50
1:A:960:VAL:HG22	1:A:961:THR:N	2.26	0.50
1:A:743:GLU:CB	1:A:778:LEU:HD22	2.36	0.50
1:A:1122:ASN:ND2	1:A:1125:ARG:HH21	2.09	0.49
1:A:187:SER:O	1:A:190:VAL:HG12	2.12	0.49
1:A:727:ILE:HG12	1:A:1144:TYR:CD2	2.47	0.49
1:A:806:ARG:N	1:A:807:PRO:CD	2.73	0.49
1:A:613:PRO:HG2	1:A:615:PHE:CE2	2.47	0.49
1:A:845:HIS:CE1	1:A:932:GLY:O	2.65	0.49
1:A:968:ASP:O	1:A:969:LEU:HD23	2.11	0.49
1:A:1015:SER:OG	1:A:1022:THR:HB	2.12	0.49
1:A:195:TYR:O	1:A:199:LEU:HB2	2.12	0.49
1:A:804:LEU:CB	1:A:979:ALA:HB1	2.43	0.49
1:A:460:LEU:HD13	1:A:463:LEU:HD12	1.94	0.49
1:A:1014:ILE:O	1:A:1015:SER:HB2	2.11	0.49
1:A:105:ILE:HG21	1:A:111:LEU:HD22	1.93	0.49
1:A:1121:ASN:OD1	1:A:1167:VAL:HG23	2.13	0.49
1:A:1249:ARG:NH1	1:A:1251:THR:HG22	2.28	0.49
1:A:166:VAL:HA	1:A:169:ILE:HG23	1.94	0.49
1:A:400:THR:HA	1:A:403:HIS:CD2	2.48	0.49
1:A:503:PHE:N	1:A:503:PHE:CD1	2.80	0.49
1:A:793:ALA:O	1:A:797:CYS:HB2	2.12	0.49
1:A:952:GLN:HB3	1:A:1093:LYS:HB2	1.95	0.49
1:A:614:GLN:HE22	1:A:664:GLY:H	1.61	0.49
1:A:809:TYR:CZ	1:A:814:ASN:O	2.66	0.49
1:A:888:THR:HG21	1:A:892:ILE:HD11	1.95	0.49
1:A:1121:ASN:CG	1:A:1167:VAL:HG23	2.33	0.49
1:A:49:ALA:CB	1:A:123:VAL:HG11	2.35	0.49
1:A:187:SER:HB3	1:A:190:VAL:HB	1.94	0.49
1:A:9:VAL:HG12	1:A:27:LEU:CD2	2.43	0.49
1:A:406:LEU:O	1:A:410:VAL:HG12	2.13	0.49
1:A:809:TYR:C	1:A:811:GLU:H	2.16	0.49
1:A:181:ILE:HG12	1:A:181:ILE:O	2.13	0.49
1:A:37:ALA:O	1:A:41:MET:HG3	2.12	0.49
1:A:76:VAL:HG22	1:A:89:PHE:CZ	2.48	0.49
1:A:982:GLU:HB3	1:A:990:PHE:CE1	2.48	0.49
1:A:140:GLY:HA3	1:A:157:ALA:HB1	1.94	0.48
1:A:187:SER:HB3	1:A:190:VAL:CG1	2.43	0.48
1:A:749:PHE:CD1	1:A:766:LYS:HG2	2.46	0.48
1:A:848:PHE:HD2	1:A:867:PHE:CE1	2.31	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

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

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

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

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:937:ARG:O	1:A:939:ARG:N	2.49	0.46
1:A:1118:LEU:HG	1:A:1119:VAL:N	2.30	0.46
1:A:155:LEU:HD12	1:A:155:LEU:HA	1.57	0.46
1:A:500:GLU:HA	1:A:573:ARG:HG3	1.97	0.46
1:A:878:LEU:O	1:A:879:LYS:C	2.54	0.46
1:A:783:GLU:HB2	1:A:913:ASP:HB2	1.96	0.46
1:A:863:PRO:HA	1:A:866:LYS:HG3	1.97	0.46
1:A:856:ASN:ND2	1:A:865:PHE:O	2.34	0.46
1:A:878:LEU:O	1:A:881:VAL:CG1	2.64	0.46
1:A:1128:THR:CG2	1:A:1131:GLY:H	2.29	0.46
1:A:228:SER:O	1:A:230:THR:N	2.49	0.46
1:A:399:GLN:HG2	1:A:399:GLN:O	2.16	0.46
1:A:56:VAL:CG1	1:A:267:LYS:HD3	2.46	0.46
1:A:756:THR:N	1:A:759:ASP:HB2	2.31	0.46
1:A:23:CYS:O	1:A:27:LEU:HB2	2.16	0.45
1:A:756:THR:HG23	1:A:759:ASP:OD1	2.16	0.45
1:A:96:VAL:CG2	1:A:111:LEU:HD12	2.45	0.45
1:A:172:HIS:C	1:A:172:HIS:CD2	2.89	0.45
1:A:455:VAL:CG1	1:A:475:GLU:HG2	2.46	0.45
1:A:66:ILE:HA	1:A:71:GLY:HA2	1.98	0.45
1:A:986:PRO:HB2	1:A:989:TRP:HD1	1.80	0.45
1:A:992:VAL:CG2	1:A:992:VAL:O	2.64	0.45
1:A:965:ALA:HB1	1:A:1083:SER:HA	1.99	0.45
1:A:1172:ILE:O	1:A:1174:PRO:HD3	2.16	0.45
1:A:1239:ILE:H	1:A:1239:ILE:HG12	1.63	0.45
1:A:589:PHE:HB3	1:A:653:MET:HE3	1.99	0.45
1:A:836:VAL:HG22	1:A:837:PRO:CD	2.46	0.45
1:A:1030:PHE:HE2	1:A:1074:PHE:CD1	2.34	0.45
1:A:106:THR:HG23	1:A:107:ASP:H	1.81	0.45
1:A:1077:ASN:O	1:A:1081:THR:HG23	2.16	0.45
1:A:610:GLY:C	1:A:1181:TRP:CD1	2.89	0.45
1:A:12:LEU:HD22	1:A:27:LEU:HD13	1.97	0.45
1:A:779:GLY:C	1:A:781:ASP:N	2.68	0.45
1:A:992:VAL:HG22	1:A:992:VAL:O	2.17	0.45
1:A:1050:VAL:HG12	1:A:1051:TYR:N	2.30	0.45
1:A:134:ARG:NH2	1:A:259:PHE:CD2	2.85	0.45
1:A:462:ALA:HB2	1:A:469:TRP:O	2.15	0.45
1:A:714:ASN:HD21	1:A:1254:PHE:H	1.64	0.45
1:A:1074:PHE:CD2	1:A:1074:PHE:N	2.82	0.45
1:A:148:HIS:O	1:A:150:ALA:N	2.49	0.45
1:A:5:THR:O	1:A:9:VAL:HG13	2.17	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:806:ARG:HH11	1:A:806:ARG:HG2	1.80	0.45
1:A:1040:ILE:CG2	1:A:1040:ILE:O	2.65	0.45
1:A:1149:PRO:HB2	1:A:1152:LEU:HD22	1.99	0.45
1:A:276:VAL:CG2	1:A:313:THR:HG23	2.46	0.45
1:A:323:THR:HG22	1:A:324:TYR:CE1	2.52	0.45
1:A:302:ILE:CD1	1:A:366:CYS:HB2	2.37	0.45
1:A:82:PHE:CE1	1:A:406:LEU:HB2	2.51	0.45
1:A:704:SER:C	1:A:708:GLN:HB2	2.36	0.45
1:A:711:ARG:O	1:A:712:ALA:C	2.55	0.45
1:A:845:HIS:O	1:A:929:GLY:HA2	2.16	0.45
1:A:998:SER:HA	1:A:999:PRO:HD3	1.41	0.45
1:A:1041:LEU:HB2	1:A:1043:LEU:HD12	1.99	0.45
1:A:1100:ASP:C	1:A:1100:ASP:OD1	2.55	0.45
1:A:1123:LEU:HA	1:A:1123:LEU:HD12	1.79	0.45
1:A:617:PHE:C	1:A:618:ARG:HG2	2.37	0.45
1:A:1150:LYS:C	1:A:1152:LEU:N	2.70	0.45
1:A:143:LEU:HB2	1:A:157:ALA:HA	1.97	0.45
1:A:291:GLU:HG3	1:A:294:LYS:HD2	1.98	0.45
1:A:36:LEU:HD23	1:A:40:ASN:HD21	1.81	0.45
1:A:504:SER:HB2	1:A:568:ARG:HG2	1.99	0.45
1:A:629:PRO:HG2	1:A:632:VAL:CG1	2.47	0.45
1:A:818:GLY:O	1:A:819:GLU:C	2.55	0.45
1:A:937:ARG:C	1:A:939:ARG:H	2.20	0.45
1:A:100:ALA:O	1:A:104:LYS:HA	2.17	0.45
1:A:934:LEU:CB	1:A:1024:GLU:HB3	2.47	0.45
1:A:24:LYS:HG3	1:A:24:LYS:O	2.17	0.45
1:A:354:TYR:CE2	1:A:361:TYR:HB2	2.52	0.45
1:A:700:SER:N	1:A:1179:ARG:CG	2.80	0.45
1:A:1180:GLY:O	1:A:1181:TRP:CB	2.61	0.44
1:A:49:ALA:HA	1:A:123:VAL:HG21	1.98	0.44
1:A:152:ILE:HG13	1:A:260:GLU:HG3	1.98	0.44
1:A:539:THR:HG23	1:A:564:ARG:HG2	1.99	0.44
1:A:969:LEU:HD23	1:A:969:LEU:HA	1.55	0.44
1:A:973:SER:HA	1:A:976:ILE:CD1	2.47	0.44
1:A:844:ARG:O	1:A:1212:LEU:HD13	2.17	0.44
1:A:171:MET:CE	1:A:236:MET:HE1	2.47	0.44
1:A:310:THR:O	1:A:313:THR:HG22	2.17	0.44
1:A:777:SER:O	1:A:778:LEU:C	2.55	0.44
1:A:876:ARG:HE	1:A:876:ARG:HB3	1.43	0.44
1:A:846:CYS:SG	1:A:929:GLY:HA3	2.57	0.44
1:A:989:TRP:C	1:A:991:GLU:N	2.71	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1064:ALA:C	1:A:1066:ARG:N	2.70	0.44
1:A:169:ILE:HD13	1:A:229:LEU:HD21	1.99	0.44
1:A:508:ARG:HD3	1:A:562:LEU:CD2	2.41	0.44
1:A:629:PRO:HD2	1:A:632:VAL:HG11	2.00	0.44
1:A:737:GLN:O	1:A:738:SER:C	2.55	0.44
1:A:857:ASN:O	1:A:858:ARG:C	2.56	0.44
1:A:851:GLY:HA2	1:A:861:GLY:HA3	1.99	0.44
1:A:941:TRP:CZ3	1:A:1032:SER:CA	3.01	0.44
1:A:1172:ILE:HD13	1:A:1172:ILE:HA	1.68	0.44
1:A:377:ILE:HG23	1:A:671:GLY:HA2	2.00	0.44
1:A:523:VAL:CG1	1:A:542:GLY:HA2	2.47	0.44
1:A:833:ILE:CG2	1:A:989:TRP:NE1	2.81	0.44
1:A:1057:LEU:H	1:A:1057:LEU:HD23	1.83	0.44
1:A:301:THR:HG22	1:A:363:HIS:NE2	2.32	0.44
1:A:617:PHE:C	1:A:619:THR:H	2.21	0.44
1:A:1013:LYS:HE3	1:A:1016:SER:HB3	1.98	0.44
1:A:930:ILE:HD11	1:A:1021:TYR:HB3	1.98	0.44
1:A:105:ILE:HG21	1:A:110:VAL:HB	1.99	0.44
1:A:158:ALA:CB	1:A:253:VAL:HG12	2.46	0.44
1:A:49:ALA:O	1:A:52:LYS:HB2	2.18	0.44
1:A:715:THR:HG21	1:A:1149:PRO:HG3	1.99	0.44
1:A:790:PHE:C	1:A:790:PHE:CD1	2.91	0.44
1:A:923:ASN:O	1:A:927:GLN:HG3	2.17	0.44
1:A:1173:ASN:ND2	1:A:1176:ALA:H	2.16	0.44
1:A:493:LYS:HB3	1:A:494:PRO:HD2	2.00	0.44
1:A:765:LEU:HD22	1:A:1126:TRP:CE2	2.52	0.44
1:A:777:SER:O	1:A:779:GLY:N	2.51	0.44
1:A:1004:PRO:O	1:A:1006:GLY:N	2.51	0.44
1:A:406:LEU:O	1:A:406:LEU:HD22	2.16	0.44
1:A:516:VAL:HG22	1:A:555:ALA:HA	2.00	0.44
1:A:874:THR:CG2	1:A:877:ALA:H	2.25	0.44
1:A:928:LEU:HD23	1:A:1020:GLY:O	2.17	0.44
1:A:571:ILE:HA	1:A:575:GLN:OE1	2.18	0.44
1:A:765:LEU:O	1:A:769:ILE:HB	2.18	0.44
1:A:884:LEU:O	1:A:887:SER:OG	2.28	0.44
1:A:941:TRP:HZ3	1:A:1032:SER:CA	2.30	0.43
1:A:954:ARG:NH1	1:A:1049:THR:HB	2.33	0.43
1:A:523:VAL:HG23	1:A:523:VAL:O	2.18	0.43
1:A:206:GLY:HA3	1:A:756:THR:OG1	2.18	0.43
1:A:1184:TYR:CD1	1:A:1259:ILE:O	2.71	0.43
1:A:1245:THR:O	1:A:1246:LYS:HD3	2.18	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1187:VAL:HG21	1:A:1259:ILE:HD13	2.00	0.43
1:A:142:VAL:HG21	1:A:161:ALA:O	2.17	0.43
1:A:291:GLU:HG3	1:A:291:GLU:O	2.17	0.43
1:A:616:TYR:HB3	1:A:660:ALA:HB3	2.00	0.43
1:A:833:ILE:HG23	1:A:989:TRP:CE2	2.53	0.43
1:A:837:PRO:O	1:A:838:SER:O	2.36	0.43
1:A:817:LEU:HD21	1:A:1064:ALA:HB1	2.01	0.43
1:A:1179:ARG:O	1:A:1181:TRP:N	2.51	0.43
1:A:566:ILE:HG23	1:A:566:ILE:O	2.18	0.43
1:A:720:GLU:HG2	1:A:720:GLU:H	1.61	0.43
1:A:72:ILE:CG2	1:A:101:VAL:HG22	2.48	0.43
1:A:735:TYR:HA	1:A:1136:ARG:HD2	2.01	0.43
1:A:824:MET:O	1:A:828:LYS:HG2	2.18	0.43
1:A:1157:ILE:CG1	1:A:1165:ALA:HB3	2.46	0.43
1:A:436:MET:CE	1:A:436:MET:HA	2.48	0.43
1:A:805:TYR:O	1:A:806:ARG:CB	2.64	0.43
1:A:874:THR:HA	1:A:898:SER:O	2.19	0.43
1:A:1150:LYS:C	1:A:1152:LEU:H	2.22	0.43
1:A:16:THR:O	1:A:125:LYS:HD2	2.19	0.43
1:A:372:TYR:O	1:A:375:ASN:N	2.51	0.43
1:A:871:GLN:O	1:A:922:TRP:HD1	2.02	0.43
1:A:365:ASP:OD1	1:A:367:PRO:HG3	2.19	0.43
1:A:376:MET:HG3	1:A:410:VAL:HG23	2.01	0.43
1:A:441:LEU:O	1:A:445:TYR:HD1	2.01	0.43
1:A:791:LEU:HD12	1:A:791:LEU:HA	1.67	0.43
1:A:1021:TYR:O	1:A:1023:PHE:N	2.52	0.43
1:A:1037:VAL:HG21	1:A:1065:LEU:CD1	2.49	0.43
1:A:1178:ASN:HD22	1:A:1183:ARG:HB2	1.81	0.43
1:A:1183:ARG:O	1:A:1183:ARG:CG	2.66	0.43
1:A:244:GLN:O	1:A:248:GLU:HG2	2.18	0.43
1:A:927:GLN:O	1:A:930:ILE:HD13	2.18	0.43
1:A:1110:ILE:HD11	1:A:1116:LEU:HD23	2.00	0.43
1:A:864:SER:CB	1:A:1202:SER:HA	2.47	0.43
1:A:17:GLY:HA3	1:A:125:LYS:HG2	1.99	0.43
1:A:502:VAL:HG11	1:A:571:ILE:HD12	2.01	0.43
1:A:924:MET:O	1:A:928:LEU:HG	2.19	0.43
1:A:963:ASN:O	1:A:1059:SER:N	2.42	0.43
1:A:973:SER:O	1:A:976:ILE:HD12	2.18	0.43
1:A:1000:LYS:HA	1:A:1010:THR:HA	1.99	0.43
1:A:1159:ASP:OD1	1:A:1160:GLY:N	2.51	0.43
1:A:1172:ILE:CG2	1:A:1172:ILE:O	2.66	0.43

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:369:HIS:CD2	1:A:406:LEU:HB2	2.54	0.43
1:A:603:ARG:O	1:A:637:PRO:HB3	2.18	0.43
1:A:822:ILE:CD1	1:A:983:LEU:HB3	2.49	0.43
1:A:890:PHE:CD1	1:A:1204:LEU:HD21	2.54	0.43
1:A:195:TYR:O	1:A:195:TYR:CG	2.71	0.43
1:A:204:GLN:C	1:A:206:GLY:N	2.73	0.43
1:A:224:THR:HG23	1:A:225:GLY:H	1.83	0.43
1:A:260:GLU:O	1:A:263:GLU:HG3	2.19	0.43
1:A:471:ALA:HA	1:A:474:LEU:CD1	2.47	0.43
1:A:543:VAL:O	1:A:549:LEU:HD23	2.19	0.43
1:A:871:GLN:O	1:A:872:ALA:O	2.36	0.43
1:A:61:VAL:HG11	1:A:90:GLN:NE2	2.34	0.43
1:A:892:ILE:HG23	1:A:922:TRP:CH2	2.54	0.43
1:A:724:ALA:CB	1:A:1106:ILE:HG21	2.46	0.42
1:A:1065:LEU:HD12	1:A:1065:LEU:HA	1.89	0.42
1:A:1110:ILE:HD13	1:A:1116:LEU:HD23	2.01	0.42
1:A:195:TYR:OH	1:A:213:GLU:HG3	2.18	0.42
1:A:414:TYR:CE1	1:A:485:PRO:HG2	2.54	0.42
1:A:297:VAL:HG22	1:A:487:PRO:CD	2.49	0.42
1:A:496:LEU:HD23	1:A:497:LEU:N	2.34	0.42
1:A:520:ILE:HG13	1:A:553:GLY:O	2.19	0.42
1:A:839:VAL:HG12	1:A:843:LEU:CD2	2.50	0.42
1:A:980:LEU:HD22	1:A:1072:VAL:HG23	2.00	0.42
1:A:1004:PRO:C	1:A:1006:GLY:H	2.22	0.42
1:A:1185:VAL:HG22	1:A:1186:PRO:HD2	2.02	0.42
1:A:234:PHE:CZ	1:A:236:MET:HB2	2.55	0.42
1:A:33:ASP:HB3	1:A:36:LEU:CB	2.48	0.42
1:A:55:ASN:ND2	1:A:55:ASN:N	2.66	0.42
1:A:961:THR:O	1:A:962:ASN:CB	2.66	0.42
1:A:1191:HIS:HD2	1:A:1255:ASP:OD2	2.02	0.42
1:A:501:ASP:CG	1:A:1244:PRO:HB3	2.39	0.42
1:A:154:VAL:HG12	1:A:258:ARG:HB3	2.01	0.42
1:A:396:PRO:HG3	1:A:437:GLU:HB3	2.01	0.42
1:A:405:LEU:O	1:A:408:ARG:N	2.52	0.42
1:A:409:GLN:C	1:A:411:GLY:H	2.22	0.42
1:A:486:GLU:HA	1:A:487:PRO:HD2	1.87	0.42
1:A:495:PHE:CE1	1:A:577:LEU:O	2.72	0.42
1:A:608:PHE:O	1:A:628:LEU:HD21	2.19	0.42
1:A:1025:LEU:HG	1:A:1029:ILE:HD12	2.02	0.42
1:A:378:THR:HG23	1:A:380:ALA:H	1.84	0.42
1:A:596:LEU:HD12	1:A:668:VAL:CA	2.48	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:64:THR:HA	1:A:72:ILE:O	2.20	0.42
1:A:73:ILE:HB	1:A:155:LEU:HD22	2.02	0.42
1:A:76:VAL:HG11	1:A:93:ALA:HB1	2.00	0.42
1:A:938:LEU:CD1	1:A:1028:LEU:HB2	2.49	0.42
1:A:165:LEU:HA	1:A:165:LEU:HD22	1.71	0.42
1:A:474:LEU:HD12	1:A:474:LEU:H	1.84	0.42
1:A:704:SER:HA	1:A:707:ALA:HB3	2.01	0.42
1:A:1050:VAL:CG2	1:A:1055:ILE:HG12	2.49	0.42
1:A:965:ALA:HB2	1:A:1083:SER:HA	2.02	0.42
1:A:1138:HIS:ND1	1:A:1138:HIS:O	2.53	0.42
1:A:1188:ILE:HG12	1:A:1188:ILE:H	1.64	0.42
1:A:33:ASP:HB3	1:A:36:LEU:HB2	2.02	0.42
1:A:851:GLY:HA2	1:A:861:GLY:CA	2.49	0.42
1:A:211:ILE:HD12	1:A:211:ILE:N	2.35	0.42
1:A:611:TYR:HB3	1:A:626:ILE:HD11	2.01	0.42
1:A:1044:ASP:HB3	1:A:1047:GLU:HG2	2.00	0.42
1:A:162:ASP:OD1	1:A:162:ASP:N	2.50	0.42
1:A:745:GLU:C	1:A:747:ILE:N	2.73	0.42
1:A:833:ILE:HG22	1:A:834:GLY:N	2.34	0.42
1:A:853:THR:O	1:A:856:ASN:O	2.38	0.42
1:A:1171:LEU:HD11	1:A:1263:SER:HB3	2.02	0.42
1:A:169:ILE:HG13	1:A:169:ILE:O	2.18	0.42
1:A:705:LEU:O	1:A:709:LEU:HD12	2.20	0.42
1:A:934:LEU:HB3	1:A:1024:GLU:HB3	2.02	0.42
1:A:93:ALA:HA	1:A:96:VAL:HG12	2.02	0.42
1:A:1064:ALA:O	1:A:1066:ARG:N	2.52	0.41
1:A:1162:GLY:O	1:A:1163:ASP:OD2	2.37	0.41
1:A:134:ARG:NH2	1:A:134:ARG:CG	2.77	0.41
1:A:500:GLU:O	1:A:573:ARG:HG3	2.20	0.41
1:A:495:PHE:HA	1:A:519:GLY:HA3	2.02	0.41
1:A:519:GLY:O	1:A:520:ILE:HD12	2.20	0.41
1:A:778:LEU:CD1	1:A:778:LEU:H	2.33	0.41
1:A:899:PRO:HG2	1:A:900:PHE:CD1	2.55	0.41
1:A:998:SER:O	1:A:1011:TYR:HD2	2.03	0.41
1:A:1209:SER:O	1:A:1210:ARG:C	2.59	0.41
1:A:43:LYS:C	1:A:45:GLY:H	2.23	0.41
1:A:529:ILE:CD1	1:A:571:ILE:HG12	2.47	0.41
1:A:614:GLN:HE22	1:A:664:GLY:N	2.18	0.41
1:A:163:GLU:H	1:A:163:GLU:CD	2.23	0.41
1:A:229:LEU:HD21	1:A:242:VAL:HG11	2.01	0.41
1:A:589:PHE:CD1	1:A:589:PHE:C	2.93	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:224:THR:O	1:A:225:GLY:C	2.59	0.41
1:A:522:LYS:O	1:A:523:VAL:C	2.59	0.41
1:A:534:GLU:O	1:A:536:GLN:HG3	2.21	0.41
1:A:1157:ILE:HG12	1:A:1165:ALA:CB	2.49	0.41
1:A:35:GLU:HA	1:A:38:ILE:HG12	2.02	0.41
1:A:1116:LEU:HD23	1:A:1116:LEU:HA	1.98	0.41
1:A:1210:ARG:O	1:A:1214:GLU:HB2	2.21	0.41
1:A:195:TYR:HD2	1:A:216:VAL:CG1	2.34	0.41
1:A:30:ALA:HB1	1:A:36:LEU:HD13	2.02	0.41
1:A:300:GLY:HA2	1:A:364:VAL:O	2.21	0.41
1:A:409:GLN:C	1:A:411:GLY:N	2.72	0.41
1:A:523:VAL:HG13	1:A:551:ASP:C	2.41	0.41
1:A:581:GLY:HA2	1:A:584:LYS:NZ	2.36	0.41
1:A:871:GLN:NE2	1:A:921:GLY:HA3	2.35	0.41
1:A:927:GLN:CB	1:A:1020:GLY:HA3	2.51	0.41
1:A:303:GLY:N	1:A:309:LYS:HD3	2.36	0.41
1:A:52:LYS:C	1:A:54:GLY:H	2.24	0.41
1:A:584:LYS:O	1:A:586:HIS:CD2	2.73	0.41
1:A:964:LEU:O	1:A:1088:ARG:NH2	2.53	0.41
1:A:143:LEU:HD23	1:A:143:LEU:O	2.21	0.41
1:A:216:VAL:HG12	1:A:220:MET:HG3	2.02	0.41
1:A:324:TYR:CD2	1:A:357:PRO:HD3	2.55	0.41
1:A:410:VAL:HG22	1:A:410:VAL:O	2.19	0.41
1:A:41:MET:HA	1:A:44:SER:OG	2.20	0.41
1:A:414:TYR:CD1	1:A:485:PRO:HD3	2.56	0.41
1:A:929:GLY:O	1:A:933:ILE:HG22	2.21	0.41
1:A:1047:GLU:OE2	1:A:1047:GLU:CA	2.65	0.41
1:A:1207:LEU:HD23	1:A:1207:LEU:HA	1.94	0.41
1:A:380:ALA:O	1:A:381:ALA:HB2	2.21	0.41
1:A:1173:ASN:HA	1:A:1174:PRO:HD2	1.75	0.41
1:A:1157:ILE:CG2	1:A:1185:VAL:HG11	2.50	0.41
1:A:203:MET:HG2	1:A:212:ALA:CB	2.51	0.41
1:A:432:GLU:HA	1:A:435:GLU:HB2	2.03	0.41
1:A:538:SER:OG	1:A:539:THR:N	2.52	0.41
1:A:705:LEU:HD22	1:A:705:LEU:HA	1.91	0.41
1:A:86:ASP:OD1	1:A:87:ALA:N	2.53	0.41
1:A:1189:THR:CG2	1:A:1190:ASP:N	2.84	0.41
1:A:745:GLU:C	1:A:747:ILE:H	2.23	0.41
1:A:762:ILE:HD13	1:A:762:ILE:HA	1.82	0.41
1:A:790:PHE:HD1	1:A:791:LEU:HD13	1.86	0.41
1:A:1135:PRO:O	1:A:1136:ARG:C	2.60	0.40

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1118:LEU:CD1	1:A:1163:ASP:OD1	2.69	0.40
1:A:146:TYR:HB3	1:A:154:VAL:CG2	2.51	0.40
1:A:69:ASN:O	1:A:69:ASN:OD1	2.39	0.40
1:A:820:SER:O	1:A:823:HIS:HB2	2.21	0.40
1:A:997:ARG:HH12	1:A:1011:TYR:HB2	1.86	0.40
1:A:1085:GLY:C	1:A:1087:PHE:N	2.75	0.40
1:A:235:VAL:CG2	1:A:606:PRO:HG2	2.51	0.40
1:A:301:THR:CG2	1:A:363:HIS:NE2	2.85	0.40
1:A:607:PHE:C	1:A:607:PHE:CD1	2.95	0.40
1:A:845:HIS:HB3	1:A:929:GLY:O	2.21	0.40
1:A:885:ARG:C	1:A:887:SER:H	2.25	0.40
1:A:115:PHE:O	1:A:118:GLU:N	2.54	0.40
1:A:1033:LEU:HA	1:A:1033:LEU:HD12	1.35	0.40
1:A:1204:LEU:HD23	1:A:1204:LEU:HA	1.90	0.40
1:A:500:GLU:C	1:A:573:ARG:HG3	2.42	0.40
1:A:606:PRO:CA	1:A:637:PRO:HD3	2.48	0.40
1:A:990:PHE:CD2	1:A:990:PHE:C	2.94	0.40
1:A:9:VAL:HG12	1:A:27:LEU:HD22	2.03	0.40
1:A:1137:ALA:C	1:A:1139:SER:N	2.75	0.40
1:A:1176:ALA:CB	1:A:1185:VAL:HG23	2.50	0.40
1:A:152:ILE:CG1	1:A:260:GLU:HG3	2.52	0.40
1:A:52:LYS:O	1:A:54:GLY:N	2.55	0.40
1:A:663:GLU:O	1:A:664:GLY:C	2.60	0.40
1:A:989:TRP:O	1:A:990:PHE:C	2.60	0.40

There are no symmetry-related clashes.

## 5.3 Torsion angles [i](#)

### 5.3.1 Protein backbone [i](#)

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all X-ray entries followed by that with respect to entries of similar resolution.

The Analysed column shows the number of residues for which the backbone conformation was analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	1189/1289 (92%)	944 (79%)	179 (15%)	66 (6%)	<b>2</b> <b>16</b>

All (66) Ramachandran outliers are listed below:

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

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

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

### 5.3.2 Protein sidechains ⓘ

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all X-ray entries followed by that with respect to entries of similar resolution.

The Analysed column shows the number of residues for which the sidechain conformation was analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	991/1060 (94%)	821 (83%)	170 (17%)	2 11

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

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

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

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

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

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

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

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

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

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

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

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

### 5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

## 5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

## 5.6 Ligand geometry [i](#)

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

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

## 5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

## 5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

## 6 Fit of model and data

### 6.1 Protein, DNA and RNA chains

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å <sup>2</sup> )	Q<0.9
1	A	1199/1289 (93%)	-0.02	38 (3%) 48 33	72, 137, 182, 211	0

All (38) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	700	SER	5.2
1	A	5	THR	4.3
1	A	701	SER	4.0
1	A	6	ALA	3.6
1	A	812	ASP	3.6
1	A	293	THR	3.5
1	A	255	GLY	3.4
1	A	291	GLU	3.3
1	A	21	MET	3.2
1	A	112	LYS	3.0
1	A	246	LEU	2.9
1	A	268	VAL	2.8
1	A	680	ALA	2.7
1	A	24	LYS	2.6
1	A	520	ILE	2.6
1	A	521	ILE	2.6
1	A	77	ASN	2.6
1	A	131	ASN	2.6
1	A	149	GLY	2.5
1	A	807	PRO	2.5
1	A	193	LYS	2.4
1	A	130	ILE	2.2
1	A	16	THR	2.2
1	A	181	ILE	2.2
1	A	143	LEU	2.2
1	A	292	ARG	2.2
1	A	813	PHE	2.2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	137	ALA	2.2
1	A	180	PHE	2.2
1	A	56	VAL	2.1
1	A	350	SER	2.1
1	A	164	GLU	2.1
1	A	1019	ASN	2.0
1	A	17	GLY	2.0
1	A	162	ASP	2.0
1	A	247	LYS	2.0
1	A	290	PHE	2.0
1	A	163	GLU	2.0

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

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

## 6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

## 6.4 Ligands [i](#)

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

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	LLDF	B-factors( $\text{\AA}^2$ )	Q<0.9
2	MG	A	2001	1/1	0.67	0.34	-	84,84,84,84	0

## 6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.