



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Feb 14, 2017 – 10:20 pm GMT

PDB ID : 3BTA
Title : CRYSTAL STRUCTURE OF BOTULINUM NEUROTOXIN SEROTYPE A
Authors : Stevens, R.C.; Lacy, D.B.
Deposited on : 1998-08-12
Resolution : 3.20 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

<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 : trunk28620
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) : recalc28949

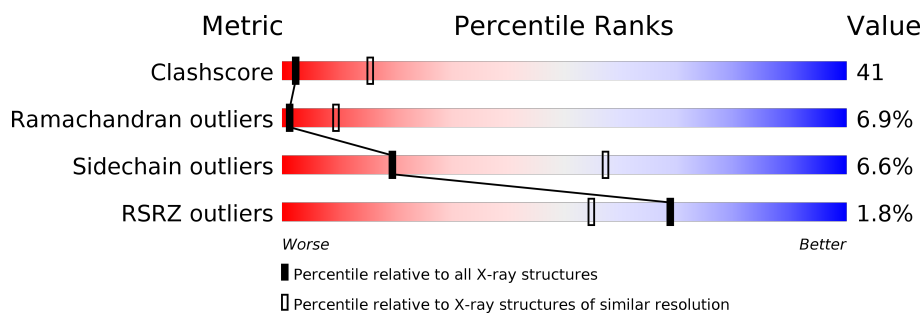
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.20 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	112137	1009 (3.20-3.20)
Ramachandran outliers	110173	1118 (3.22-3.18)
Sidechain outliers	110143	1117 (3.22-3.18)
RSRZ outliers	101464	1020 (3.22-3.18)

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 ≥ 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	1295	

2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 10402 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 PROTEIN (BOTULINUM NEUROTOXIN TYPE A).

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	1277	Total	C	N	O	S	0	0	0
			10401	6670	1716	1983	32			

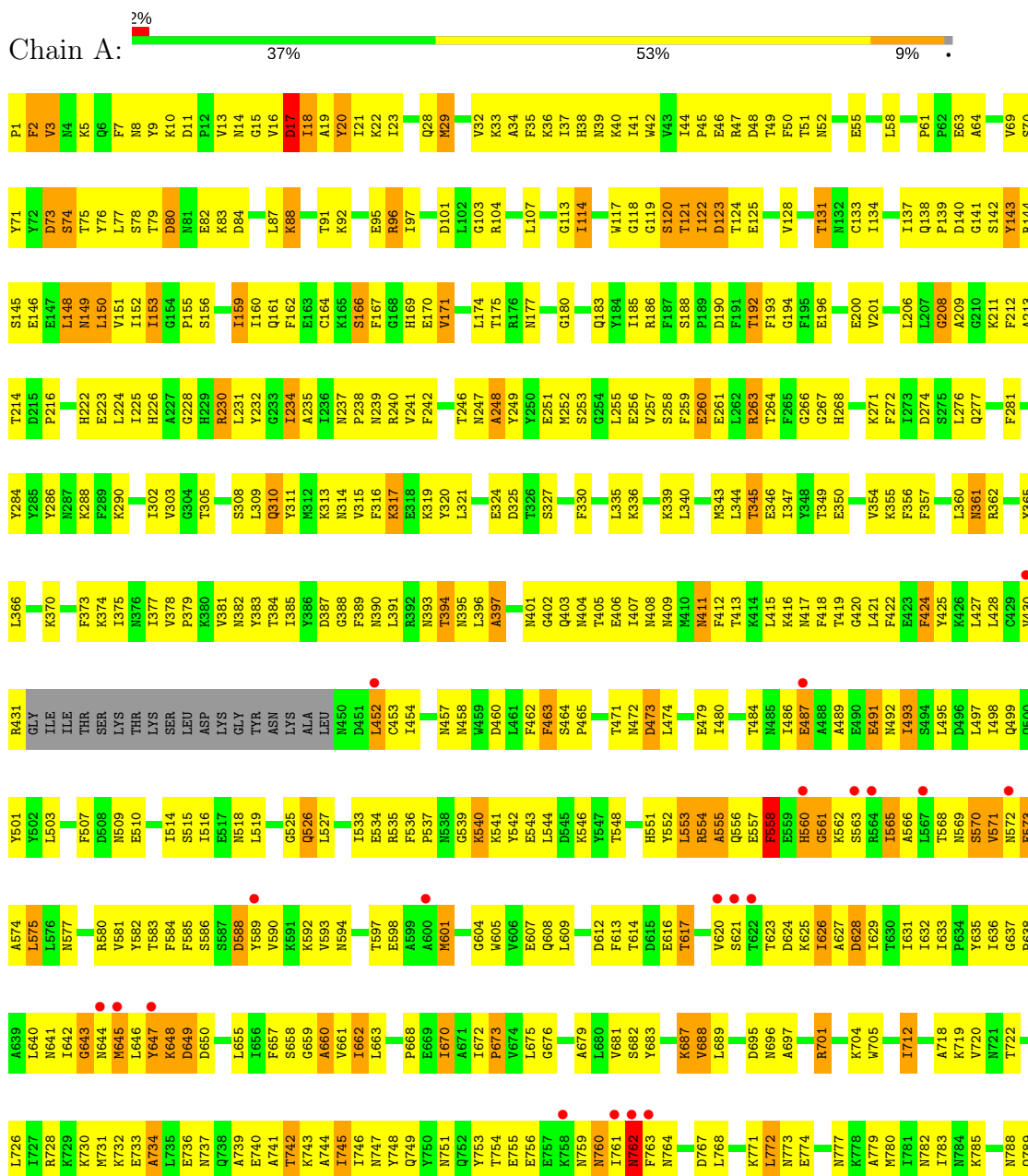
- Molecule 2 is ZINC ION (three-letter code: ZN) (formula: Zn).

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

3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA and DNA 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: PROTEIN (BOTULINUM NEUROTOXIN TYPE A)



G1289	N1215	T1144	Q1002	N934	R860	C790
W1290	L1216	T1145	Q1002	S935	L861	
E1291	S1217	N1072	M1003	N936	L862	S793
E1292	Q1218	N1146	I1004	N939	F865	Y794
L1295	M1226	I1147	S1007	T942	L869	L795
	D1227	F1074	D1008	S943	N870	M796
	Q1228	K1076	Y1009	S944	N871	W797
	G1229	E1077	I1010	N945	N872	T800
	G1230	L1078	N1011	N946	I873	P801
	I1230	N1079	R1012	N947	I874	Y802
	T1231	E1080	W1013	N948	N874	
	N1232	K1081	I1014	P949	T875	K805
	K1233	E1082	F1015	N950	L878	R806
	C1234	I1083	V1016	Y951	N879	L807
	K1235	K1084	T1017	N952	L880	E808
	L1238	Y1087	I1018	N953	R881	
	Q1239	D1088	T1019	N954	L881	D811
	D1240	Y1164	N1020	N955	S884	
	N1241	A1185	N1021		L814	K815
	N1242	S1166	R1022	N959	L887	
	G1243	K1167	L1023	E960	I888	L818
	N1244	N1168	N1024	N961	D889	L819
	D1245	K1169	N1025	N962	L890	K820
	I1246	D1170	S1026	N963	S891	Y821
	G1247	N1171	K1027	N964	R892	L822
	F1248	I1172	I1028	N965	I899	Y823
		V1173	R1033	N966		D824
	F1251	N1174	L1034	N967	K902	N825
	H1252	N1175	L1034	N968		K826
	Q1253	Y1180	I1035	N969	F905	R827
	F1254	T1181	P1039	N970	L828	
	N1255	N1182	I1040	S971	D906	L829
	A1258	V1185	S1041	G972	P907	L830
	K1259	K1188	N1042	N973	I908	D831
	L1260	E1189	L1043	N974	D909	D832
	V1261	R1191	G1044	N975	K910	Y833
		L1192	N1045	S976	N911	D834
	N1264	L1193	I1046	N977	Q912	
	N1267	T1194	H1047	N978	I913	
	R1268	N1195	A1048	N979	Q914	
	Q1269	A1196	S1049	N980	I915	K837
	I1270	S1197	N1050	N981	F916	D838
	E1271	Q1198	N1051	N982	N917	K839
	R1272	E1202	I1052	N983	N841	W840
		K1203	M1053	N984	L918	N842
	R1275	L1204	F1054	N985	S920	L844
	T1276	L1205	K1055	N986	S921	S845
	L1277	L1206	L1056	N987	K922	T846
	S1280	L1209	C1059	N988	I923	D847
	W1281	I1210	R1060	N989	E924	
	E1282	E1209	D1061	N990	V925	Q851
		I1211	T1062	N991	I926	
	P1285	D1212	Y1133	N992	K928	K854
	V1286		Y1134	N993		Y855
	D1287		L1135	N994	I931	D857
	D1288		K1136	N995	V932	N858
			G1137	N997	Y933	Q859

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 31 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	170.12Å 170.12Å 161.00Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	20.00 – 3.20 45.39 – 3.20	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	98.0 (20.00-3.20) 87.2 (45.39-3.20)	Depositor EDS
R_{merge}	0.11	Depositor
R_{sym}	0.11	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	1.55 (at 3.19Å)	Xtriage
Refinement program	CNS 0.3	Depositor
R, R_{free}	0.220 , 0.280 0.234 , (Not available)	Depositor DCC
R_{free} test set	No test flags present.	DCC
Wilson B-factor (Å ²)	82.3	Xtriage
Anisotropy	0.078	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.26 , 66.8	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.50$, $\langle L^2 \rangle = 0.33$	Xtriage
Estimated twinning fraction	0.022 for -h,-k,l	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.91	EDS
Total number of atoms	10402	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	59.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.14% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality [i](#)

5.1 Standard geometry [i](#)

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: 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	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	0.38	0/10622	0.66	1/14382 (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	150	LEU	CA-CB-CG	6.22	129.60	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	A	10401	0	10269	854	0
2	A	1	0	0	0	0
All	All	10402	0	10269	854	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 41.

All (854) 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:276:LEU:HD22	1:A:473:ASP:HB3	1.29	1.11
1:A:871:ASN:HD21	1:A:873:ILE:HB	1.16	1.08
1:A:947:ARG:HB3	1:A:1067:TRP:HB2	1.32	1.07
1:A:1247:GLY:HA2	1:A:1267:ASN:HD21	1.20	1.01
1:A:309:LEU:HD11	1:A:313:LYS:HE3	1.43	1.01
1:A:1026:SER:HB2	1:A:1040:ILE:HD11	1.42	1.00
1:A:968:GLU:H	1:A:971:SER:HB3	1.27	0.98
1:A:926:ILE:HG12	1:A:1051:ASN:HB3	1.40	0.98
1:A:345:THR:HG22	1:A:346:GLU:HG3	1.46	0.97
1:A:1009:TYR:HB3	1:A:1014:ILE:HD11	1.46	0.95
1:A:51:THR:HG22	1:A:527:LEU:HD11	1.51	0.92
1:A:805:LYS:HD2	1:A:933:TYR:HB3	1.53	0.91
1:A:565:ILE:HG12	1:A:748:TYR:CD1	2.06	0.91
1:A:762:ASN:HB2	1:A:764:ASN:ND2	1.86	0.91
1:A:575:LEU:HA	1:A:580:ARG:HB2	1.53	0.89
1:A:1:PRO:HG2	1:A:38:HIS:CD2	2.08	0.89
1:A:909:ASP:HB3	1:A:912:GLN:HE21	1.35	0.89
1:A:628:ASP:OD1	1:A:629:ILE:HG13	1.75	0.87
1:A:216:PRO:HG2	1:A:377:ILE:HD11	1.54	0.87
1:A:263:ARG:HG2	1:A:263:ARG:HH11	1.37	0.87
1:A:417:ASN:HD21	1:A:419:THR:HB	1.40	0.85
1:A:583:THR:HG22	1:A:585:PHE:H	1.42	0.85
1:A:1026:SER:HB2	1:A:1040:ILE:CD1	2.06	0.83
1:A:241:VAL:HG11	1:A:256:GLU:HB2	1.58	0.83
1:A:20:TYR:HE1	1:A:33:LYS:HB2	1.40	0.82
1:A:558:PHE:HB3	1:A:581:VAL:HG22	1.62	0.82
1:A:16:VAL:HG12	1:A:144:ARG:HH22	1.43	0.81
1:A:427:LEU:HB3	1:A:541:LYS:HA	1.62	0.81
1:A:48:ASP:HB3	1:A:186:ARG:HE	1.45	0.81
1:A:967:MET:HA	1:A:971:SER:HB3	1.63	0.81
1:A:425:TYR:CE1	1:A:539:GLY:HA2	2.16	0.80
1:A:343:MET:HE3	1:A:501:TYR:HD2	1.47	0.80
1:A:968:GLU:H	1:A:971:SER:CB	1.94	0.80
1:A:983:ILE:HG12	1:A:997:VAL:HG22	1.64	0.80
1:A:814:LEU:HD23	1:A:844:LEU:HD11	1.63	0.80
1:A:555:ALA:O	1:A:582:TYR:HB3	1.82	0.80
1:A:574:ALA:O	1:A:580:ARG:HB2	1.81	0.80
1:A:788:ASN:HD21	1:A:860:ARG:HE	1.30	0.80
1:A:40:LYS:HB3	1:A:149:ASN:HB2	1.63	0.80
1:A:1018:ILE:HG12	1:A:1028:ILE:HD12	1.64	0.80
1:A:121:THR:O	1:A:125:GLU:HB3	1.82	0.79
1:A:951:TYR:HB2	1:A:1002:GLN:HE22	1.48	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:968:GLU:N	1:A:971:SER:HB3	1.97	0.79
1:A:305:THR:HG22	1:A:515:SER:O	1.82	0.79
1:A:593:VAL:HG12	1:A:745:ILE:HG21	1.64	0.79
1:A:604:GLY:HA2	1:A:607:GLU:OE1	1.81	0.79
1:A:21:ILE:HD13	1:A:34:ALA:HB3	1.65	0.79
1:A:23:ILE:HD11	1:A:44:ILE:HD11	1.64	0.79
1:A:754:THR:O	1:A:755:GLU:HB2	1.82	0.79
1:A:712:ILE:HD11	1:A:795:LEU:HD21	1.65	0.79
1:A:472:ASN:OD1	1:A:474:LEU:HD12	1.83	0.78
1:A:967:MET:HG2	1:A:971:SER:O	1.82	0.78
1:A:34:ALA:HB2	1:A:44:ILE:HG12	1.66	0.78
1:A:42:TRP:HD1	1:A:148:LEU:HD21	1.49	0.78
1:A:69:VAL:HG12	1:A:160:ILE:HD11	1.66	0.78
1:A:871:ASN:ND2	1:A:873:ILE:H	1.81	0.78
1:A:871:ASN:ND2	1:A:873:ILE:HB	1.97	0.78
1:A:390:ASN:HD21	1:A:403:GLN:HE21	1.30	0.78
1:A:572:ASN:O	1:A:575:LEU:HG	1.84	0.78
1:A:51:THR:CG2	1:A:527:LEU:HD11	2.14	0.77
1:A:486:ILE:HG23	1:A:487:GLU:OE1	1.85	0.77
1:A:20:TYR:CE1	1:A:33:LYS:HB2	2.19	0.77
1:A:978:ASN:O	1:A:981:GLU:HG2	1.83	0.77
1:A:1162:LYS:HB2	1:A:1180:TYR:HB2	1.66	0.77
1:A:276:LEU:HD23	1:A:471:THR:HG22	1.66	0.77
1:A:926:ILE:HG12	1:A:1051:ASN:CB	2.15	0.77
1:A:701:ARG:HH11	1:A:701:ARG:HG3	1.50	0.77
1:A:871:ASN:HD21	1:A:873:ILE:CB	1.98	0.76
1:A:623:THR:HB	1:A:626:ILE:HD13	1.67	0.76
1:A:985:THR:HG22	1:A:995:ARG:HB3	1.67	0.76
1:A:928:LYS:O	1:A:931:ILE:HG22	1.86	0.76
1:A:1012:ARG:HG2	1:A:1100:TRP:HA	1.69	0.76
1:A:1202:GLU:O	1:A:1203:LYS:HD3	1.85	0.75
1:A:609:LEU:HD12	1:A:746:ILE:HD11	1.67	0.75
1:A:960:GLU:HB2	1:A:978:ASN:HD22	1.50	0.75
1:A:1098:ASP:HB2	1:A:1102:ASP:H	1.51	0.75
1:A:396:LEU:HA	1:A:401:ASN:HB2	1.66	0.75
1:A:374:LYS:HB3	1:A:413:THR:HB	1.69	0.75
1:A:762:ASN:HD22	1:A:764:ASN:HD21	1.33	0.74
1:A:121:THR:HB	1:A:125:GLU:OE1	1.88	0.74
1:A:642:ILE:HG21	1:A:663:LEU:HD23	1.68	0.74
1:A:463:PHE:CE2	1:A:465:PRO:HG3	2.21	0.74
1:A:797:ASN:ND2	1:A:892:ARG:HG3	2.03	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1109:PRO:HB2	1:A:1158:LYS:HD3	1.69	0.74
1:A:1247:GLY:HA2	1:A:1267:ASN:ND2	1.99	0.74
1:A:17:ASP:HA	1:A:36:LYS:HB2	1.70	0.74
1:A:1264:ASN:HA	1:A:1267:ASN:HD22	1.52	0.73
1:A:305:THR:HG21	1:A:514:ILE:HG22	1.71	0.73
1:A:384:THR:HG23	1:A:387:ASP:H	1.52	0.73
1:A:1056:LEU:HD12	1:A:1056:LEU:H	1.53	0.73
1:A:589:TYR:O	1:A:593:VAL:HG23	1.89	0.73
1:A:961:TYR:H	1:A:961:TYR:HD1	1.37	0.73
1:A:1195:ASN:O	1:A:1198:GLN:HG3	1.89	0.73
1:A:276:LEU:CD2	1:A:473:ASP:HB3	2.14	0.73
1:A:343:MET:HE3	1:A:501:TYR:CD2	2.25	0.72
1:A:1226:ASN:ND2	1:A:1228:GLN:HB3	2.05	0.72
1:A:169:HIS:CD2	1:A:171:VAL:H	2.07	0.72
1:A:1:PRO:O	1:A:38:HIS:HD2	1.73	0.72
1:A:10:LYS:NZ	1:A:80:ASP:HB3	2.05	0.71
1:A:872:ILE:O	1:A:875:THR:HB	1.90	0.71
1:A:1232:ASN:ND2	1:A:1270:ILE:HG23	2.05	0.71
1:A:1210:ILE:HD12	1:A:1210:ILE:H	1.56	0.71
1:A:38:HIS:ND1	1:A:39:ASN:N	2.39	0.71
1:A:263:ARG:HG2	1:A:263:ARG:NH1	2.02	0.71
1:A:583:THR:HG22	1:A:584:PHE:N	2.05	0.70
1:A:934:ASN:HA	1:A:1048:ALA:HB2	1.71	0.70
1:A:986:LEU:HD12	1:A:1040:ILE:HD13	1.72	0.70
1:A:1019:THR:HG23	1:A:1077:GLU:HG3	1.72	0.70
1:A:984:TRP:CD2	1:A:1018:ILE:HG21	2.26	0.70
1:A:153:ILE:H	1:A:153:ILE:HD12	1.56	0.70
1:A:546:LYS:NZ	1:A:645:MET:HB3	2.06	0.70
1:A:633:ILE:HG22	1:A:636:ILE:HG13	1.73	0.70
1:A:934:ASN:HA	1:A:1048:ALA:CB	2.20	0.70
1:A:417:ASN:ND2	1:A:419:THR:H	1.89	0.70
1:A:983:ILE:HG23	1:A:997:VAL:HG22	1.73	0.70
1:A:41:ILE:HD12	1:A:150:LEU:HD12	1.73	0.70
1:A:808:GLU:HG2	1:A:933:TYR:CE2	2.27	0.70
1:A:902:LYS:HB2	1:A:921:SER:HB3	1.73	0.70
1:A:1247:GLY:CA	1:A:1267:ASN:HD21	2.02	0.69
1:A:416:LYS:HE3	1:A:418:PHE:CE1	2.28	0.69
1:A:640:LEU:HB2	1:A:642:ILE:HG12	1.73	0.69
1:A:712:ILE:HG12	1:A:800:ILE:HD13	1.74	0.69
1:A:881:ARG:HH22	1:A:1072:ASN:ND2	1.90	0.69
1:A:1202:GLU:HB3	1:A:1261:VAL:HG11	1.75	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:917:ASN:ND2	1:A:1064:ARG:HB3	2.07	0.69
1:A:419:THR:HG22	1:A:419:THR:O	1.93	0.69
1:A:789:GLN:O	1:A:793:SER:HB3	1.93	0.69
1:A:13:VAL:HG13	1:A:19:ALA:HA	1.75	0.69
1:A:754:THR:OG1	1:A:756:GLU:HG2	1.93	0.69
1:A:209:ALA:H	1:A:404:ASN:ND2	1.91	0.68
1:A:166:SER:HB3	1:A:230:ARG:HH12	1.57	0.68
1:A:1099:PHE:HD1	1:A:1282:GLU:HG2	1.58	0.68
1:A:16:VAL:HG12	1:A:144:ARG:NH2	2.08	0.68
1:A:1154:TYR:CE2	1:A:1286:VAL:HG13	2.28	0.68
1:A:764:ASN:HB3	1:A:767:ASP:HB2	1.74	0.68
1:A:951:TYR:CE2	1:A:979:TYR:HA	2.28	0.68
1:A:701:ARG:O	1:A:704:LYS:HB3	1.93	0.68
1:A:643:GLY:O	1:A:646:LEU:HG	1.94	0.68
1:A:428:LEU:HD23	1:A:542:TYR:HB2	1.76	0.68
1:A:621:SER:HB2	1:A:632:ILE:HB	1.76	0.67
1:A:152:ILE:HD13	1:A:185:ILE:HB	1.74	0.67
1:A:200:GLU:HG3	1:A:360:LEU:CD1	2.25	0.67
1:A:583:THR:HG22	1:A:585:PHE:N	2.07	0.67
1:A:625:LYS:C	1:A:626:ILE:HD12	2.15	0.67
1:A:101:ASP:HB2	1:A:356:PHE:HE2	1.59	0.67
1:A:209:ALA:N	1:A:404:ASN:HD21	1.93	0.67
1:A:1010:ILE:HG21	1:A:1290:TRP:HZ3	1.58	0.66
1:A:225:ILE:HD13	1:A:349:THR:HA	1.77	0.66
1:A:394:THR:C	1:A:396:LEU:H	1.97	0.66
1:A:797:ASN:HD22	1:A:892:ARG:CG	2.09	0.66
1:A:209:ALA:N	1:A:404:ASN:ND2	2.44	0.66
1:A:17:ASP:HA	1:A:36:LYS:CB	2.25	0.66
1:A:248:ALA:HB3	1:A:251:GLU:HG3	1.76	0.66
1:A:597:THR:HG22	1:A:601:MET:O	1.96	0.66
1:A:1192:LEU:HD11	1:A:1205:LEU:HD13	1.78	0.66
1:A:200:GLU:HG3	1:A:360:LEU:HD11	1.77	0.66
1:A:480:ILE:HD13	1:A:697:ALA:HA	1.79	0.65
1:A:192:THR:HG21	1:A:214:THR:O	1.97	0.65
1:A:548:THR:H	1:A:551:HIS:HD2	1.45	0.65
1:A:748:TYR:O	1:A:751:ASN:HB3	1.96	0.65
1:A:945:TRP:HB2	1:A:1069:LYS:HB3	1.78	0.65
1:A:989:THR:C	1:A:991:GLU:H	1.99	0.65
1:A:201:VAL:HG11	1:A:777:ASN:O	1.97	0.65
1:A:1248:PHE:CE2	1:A:1270:ILE:HD12	2.32	0.65
1:A:183:GLN:OE1	1:A:230:ARG:HD3	1.96	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:973:TRP:HB2	1:A:984:TRP:CH2	2.31	0.65
1:A:305:THR:HG21	1:A:514:ILE:CG2	2.25	0.64
1:A:48:ASP:CB	1:A:186:ARG:HE	2.09	0.64
1:A:574:ALA:HB1	1:A:581:VAL:O	1.96	0.64
1:A:756:GLU:HB2	1:A:759:ASN:ND2	2.12	0.64
1:A:1043:LEU:HD23	1:A:1046:ILE:HD11	1.80	0.64
1:A:1226:ASN:O	1:A:1229:GLY:N	2.30	0.64
1:A:263:ARG:CG	1:A:263:ARG:HH11	2.09	0.64
1:A:1167:GLY:C	1:A:1169:LYS:H	1.99	0.64
1:A:788:ASN:ND2	1:A:860:ARG:HE	1.96	0.64
1:A:1095:ILE:O	1:A:1097:LYS:HE3	1.97	0.64
1:A:744:ALA:O	1:A:747:ASN:HB3	1.98	0.64
1:A:180:GLY:HA2	1:A:230:ARG:O	1.98	0.63
1:A:425:TYR:CZ	1:A:539:GLY:HA2	2.32	0.63
1:A:732:LYS:HB2	1:A:780:MET:HE1	1.80	0.63
1:A:797:ASN:HD22	1:A:892:ARG:HG3	1.61	0.63
1:A:943:SER:HB3	1:A:1017:THR:HG23	1.80	0.63
1:A:104:ARG:HG2	1:A:507:PHE:CE1	2.33	0.63
1:A:22:LYS:HB2	1:A:22:LYS:NZ	2.14	0.63
1:A:1040:ILE:HG22	1:A:1040:ILE:O	1.96	0.63
1:A:525:GLY:O	1:A:526:GLN:HB2	1.99	0.63
1:A:966:CYS:SG	1:A:1049:SER:HB2	2.39	0.63
1:A:211:LYS:HE2	1:A:370:LYS:HB2	1.81	0.63
1:A:21:ILE:HD11	1:A:42:TRP:CZ3	2.34	0.63
1:A:819:LEU:HD21	1:A:841:ASN:OD1	1.99	0.63
1:A:462:PHE:CE1	1:A:726:LEU:HD23	2.34	0.62
1:A:1209:GLU:HG3	1:A:1211:PRO:HD2	1.80	0.62
1:A:408:ASN:OD1	1:A:411:ASN:HB2	1.98	0.62
1:A:1100:TRP:CZ3	1:A:1285:PRO:O	2.53	0.62
1:A:1240:ASP:OD2	1:A:1244:ASN:HB2	1.99	0.62
1:A:584:PHE:HB3	1:A:638:PRO:O	1.99	0.62
1:A:144:ARG:HA	1:A:518:ASN:OD1	2.00	0.62
1:A:829:LEU:HB2	1:A:833:VAL:HG13	1.81	0.62
1:A:42:TRP:CD1	1:A:148:LEU:HD21	2.34	0.62
1:A:655:LEU:HA	1:A:662:ILE:HD12	1.81	0.62
1:A:1098:ASP:OD2	1:A:1102:ASP:HB2	2.00	0.62
1:A:642:ILE:O	1:A:644:ASN:N	2.32	0.62
1:A:645:MET:O	1:A:646:LEU:HD23	2.00	0.62
1:A:1022:ARG:HD3	1:A:1022:ARG:O	1.99	0.62
1:A:499:GLN:HE22	1:A:503:LEU:HD21	1.64	0.62
1:A:208:GLY:HA3	1:A:404:ASN:HD22	1.65	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1009:TYR:CB	1:A:1014:ILE:HD11	2.23	0.61
1:A:1192:LEU:HD12	1:A:1192:LEU:C	2.20	0.61
1:A:175:THR:CG2	1:A:235:ALA:HB3	2.31	0.61
1:A:484:THR:HB	1:A:696:ASN:HD22	1.64	0.61
1:A:983:ILE:HG23	1:A:997:VAL:CG2	2.29	0.61
1:A:1144:THR:HG22	1:A:1144:THR:O	1.99	0.61
1:A:463:PHE:O	1:A:464:SER:HB3	2.00	0.61
1:A:454:ILE:CG2	1:A:554:ARG:HD2	2.31	0.61
1:A:627:ALA:O	1:A:628:ASP:HB2	2.01	0.61
1:A:838:ASP:O	1:A:842:ASN:HB2	2.01	0.61
1:A:274:ASP:OD2	1:A:471:THR:HB	2.00	0.61
1:A:556:GLN:O	1:A:737:ASN:HB3	1.99	0.61
1:A:712:ILE:HD11	1:A:795:LEU:CD2	2.30	0.61
1:A:985:THR:HG22	1:A:995:ARG:CB	2.31	0.61
1:A:252:MET:HG3	1:A:462:PHE:O	2.01	0.60
1:A:917:ASN:HD22	1:A:1064:ARG:HB3	1.65	0.60
1:A:670:ILE:HD12	1:A:670:ILE:N	2.16	0.60
1:A:1060:ARG:HG2	1:A:1060:ARG:HH11	1.65	0.60
1:A:1079:ASN:O	1:A:1083:ILE:HG12	2.01	0.60
1:A:1295:LEU:H	1:A:1295:LEU:HD23	1.66	0.60
1:A:169:HIS:HD2	1:A:171:VAL:H	1.49	0.60
1:A:984:TRP:HB2	1:A:1018:ILE:HD13	1.82	0.60
1:A:1154:TYR:CD2	1:A:1286:VAL:HG22	2.36	0.60
1:A:10:LYS:HZ1	1:A:80:ASP:CB	2.15	0.60
1:A:21:ILE:HD12	1:A:21:ILE:N	2.16	0.60
1:A:180:GLY:HA3	1:A:231:LEU:O	2.01	0.60
1:A:881:ARG:HA	1:A:911:ASN:HD21	1.67	0.60
1:A:753:TYR:OH	1:A:756:GLU:HG3	2.00	0.59
1:A:355:LYS:HD2	1:A:495:LEU:HD21	1.84	0.59
1:A:633:ILE:HD11	1:A:782:ASN:HB3	1.85	0.59
1:A:1191:ARG:HD3	1:A:1218:GLN:OE1	2.02	0.59
1:A:633:ILE:HG12	1:A:783:ILE:HG12	1.83	0.59
1:A:739:ALA:O	1:A:743:LYS:HG3	2.02	0.59
1:A:947:ARG:HG2	1:A:947:ARG:HH11	1.67	0.59
1:A:97:ILE:O	1:A:103:GLY:HA3	2.03	0.59
1:A:912:GLN:HG2	1:A:1069:LYS:HE2	1.84	0.59
1:A:114:ILE:HG22	1:A:316:PHE:HE1	1.66	0.59
1:A:396:LEU:O	1:A:397:ALA:HB2	2.02	0.59
1:A:732:LYS:HB2	1:A:780:MET:CE	2.33	0.59
1:A:1264:ASN:HA	1:A:1267:ASN:ND2	2.17	0.59
1:A:21:ILE:CD1	1:A:34:ALA:HB3	2.31	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:457:ASN:HB3	1:A:460:ASP:HB2	1.84	0.59
1:A:52:ASN:HB3	1:A:55:GLU:HB2	1.85	0.59
1:A:462:PHE:CZ	1:A:726:LEU:HD23	2.38	0.59
1:A:309:LEU:CD1	1:A:313:LYS:HE3	2.25	0.59
1:A:335:LEU:HD12	1:A:335:LEU:O	2.03	0.58
1:A:405:THR:HG22	1:A:412:PHE:CG	2.38	0.58
1:A:950:LYS:HG3	1:A:951:TYR:N	2.18	0.58
1:A:305:THR:HG23	1:A:516:ILE:HG22	1.84	0.58
1:A:964:ILE:HD12	1:A:975:VAL:HG21	1.84	0.58
1:A:114:ILE:HA	1:A:149:ASN:HD21	1.69	0.58
1:A:1061:ASP:OD1	1:A:1063:HIS:N	2.36	0.58
1:A:880:LEU:HD11	1:A:1071:PHE:HB3	1.84	0.58
1:A:1194:THR:HB	1:A:1205:LEU:HD23	1.85	0.58
1:A:84:ASP:O	1:A:88:LYS:HD3	2.04	0.58
1:A:166:SER:HB3	1:A:230:ARG:NH1	2.17	0.58
1:A:23:ILE:CD1	1:A:44:ILE:HD11	2.32	0.58
1:A:571:VAL:HG12	1:A:573:GLU:H	1.69	0.58
1:A:818:LEU:HD23	1:A:840:VAL:HB	1.85	0.58
1:A:548:THR:H	1:A:551:HIS:CD2	2.22	0.58
1:A:743:LYS:O	1:A:747:ASN:HB2	2.04	0.58
1:A:1167:GLY:O	1:A:1169:LYS:HG2	2.03	0.58
1:A:14:ASN:OD1	1:A:16:VAL:O	2.23	0.57
1:A:555:ALA:HB2	1:A:575:LEU:HD23	1.86	0.57
1:A:160:ILE:HD12	1:A:193:PHE:CE2	2.39	0.57
1:A:546:LYS:HE2	1:A:645:MET:SD	2.43	0.57
1:A:499:GLN:NE2	1:A:503:LEU:HD21	2.18	0.57
1:A:583:THR:HG22	1:A:584:PHE:H	1.68	0.57
1:A:360:LEU:H	1:A:403:GLN:HE22	1.52	0.57
1:A:788:ASN:OD1	1:A:860:ARG:HG2	2.04	0.57
1:A:1100:TRP:HZ3	1:A:1285:PRO:O	1.88	0.57
1:A:319:LYS:HD3	1:A:320:TYR:CE2	2.40	0.57
1:A:763:PHE:CZ	1:A:768:LEU:HD22	2.39	0.57
1:A:1010:ILE:CG2	1:A:1290:TRP:HZ3	2.18	0.57
1:A:1116:TYR:HD2	1:A:1251:PHE:HZ	1.52	0.57
1:A:986:LEU:HD12	1:A:1040:ILE:CD1	2.33	0.57
1:A:121:THR:O	1:A:122:ILE:HB	2.03	0.57
1:A:961:TYR:CE2	1:A:1056:LEU:HD23	2.40	0.57
1:A:916:PHE:O	1:A:1056:LEU:HD13	2.03	0.57
1:A:454:ILE:HG21	1:A:554:ARG:HD2	1.86	0.57
1:A:642:ILE:C	1:A:644:ASN:H	2.08	0.57
1:A:939:ASN:HA	1:A:1020:ASN:O	2.04	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:973:TRP:HA	1:A:985:THR:O	2.05	0.56
1:A:305:THR:HG22	1:A:516:ILE:HA	1.87	0.56
1:A:730:LYS:O	1:A:733:GLU:HB3	2.05	0.56
1:A:967:MET:CA	1:A:971:SER:HB3	2.32	0.56
1:A:1254:PHE:CD2	1:A:1259:LYS:HD2	2.40	0.56
1:A:681:VAL:HG12	1:A:683:TYR:CE1	2.40	0.56
1:A:871:ASN:HD22	1:A:873:ILE:H	1.50	0.56
1:A:162:PHE:HA	1:A:186:ARG:O	2.05	0.56
1:A:48:ASP:OD1	1:A:51:THR:HB	2.05	0.56
1:A:51:THR:HG23	1:A:527:LEU:HD21	1.86	0.56
1:A:746:ILE:HG21	1:A:763:PHE:CZ	2.40	0.56
1:A:222:HIS:ND1	1:A:350:GLU:OE1	2.35	0.56
1:A:592:LYS:HD3	1:A:608:GLN:CD	2.26	0.56
1:A:768:LEU:O	1:A:771:LYS:HB2	2.05	0.56
1:A:871:ASN:ND2	1:A:873:ILE:N	2.54	0.56
1:A:324:GLU:HB3	1:A:330:PHE:CE1	2.41	0.56
1:A:851:GLN:OE1	1:A:854:LYS:HE3	2.05	0.56
1:A:856:VAL:O	1:A:862:LEU:HD11	2.05	0.56
1:A:902:LYS:HG3	1:A:920:SER:HB2	1.87	0.56
1:A:324:GLU:HB3	1:A:330:PHE:CD1	2.41	0.56
1:A:134:ILE:CG2	1:A:148:LEU:HD12	2.36	0.55
1:A:249:TYR:HB2	1:A:428:LEU:HD22	1.88	0.55
1:A:590:VAL:HG12	1:A:594:ASN:HD22	1.71	0.55
1:A:636:ILE:HD11	1:A:783:ILE:HG23	1.87	0.55
1:A:1127:VAL:HG11	1:A:1190:TYR:CE2	2.41	0.55
1:A:249:TYR:HB2	1:A:428:LEU:CD2	2.36	0.55
1:A:286:TYR:CE2	1:A:290:LYS:HD2	2.41	0.55
1:A:994:GLN:OE1	1:A:995:ARG:N	2.39	0.55
1:A:1254:PHE:O	1:A:1255:ASN:HB2	2.07	0.55
1:A:1098:ASP:HB2	1:A:1102:ASP:N	2.20	0.55
1:A:405:THR:O	1:A:409:ASN:HA	2.06	0.55
1:A:983:ILE:HG22	1:A:984:TRP:N	2.22	0.55
1:A:497:LEU:O	1:A:501:TYR:HD1	1.90	0.55
1:A:534:GLU:HG3	1:A:536:PHE:CZ	2.42	0.55
1:A:960:GLU:HA	1:A:977:LEU:O	2.06	0.55
1:A:335:LEU:CD1	1:A:339:LYS:HE3	2.37	0.55
1:A:347:ILE:HG23	1:A:498:ILE:HG12	1.88	0.55
1:A:7:PHE:HD1	1:A:18:ILE:HD11	1.72	0.55
1:A:633:ILE:CG2	1:A:636:ILE:HG13	2.36	0.55
1:A:1074:PHE:CD2	1:A:1078:LEU:HD11	2.41	0.54
1:A:635:TYR:C	1:A:638:PRO:HD2	2.27	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:949:PRO:O	1:A:1064:ARG:NH2	2.39	0.54
1:A:248:ALA:HB3	1:A:251:GLU:CG	2.36	0.54
1:A:617:THR:HG23	1:A:779:ALA:HB2	1.88	0.54
1:A:801:PRO:HB3	1:A:931:ILE:HD11	1.88	0.54
1:A:905:PHE:O	1:A:906:ASP:C	2.44	0.54
1:A:933:TYR:O	1:A:936:MET:HB2	2.07	0.54
1:A:1240:ASP:CG	1:A:1244:ASN:HB2	2.28	0.54
1:A:133:CYS:HB3	1:A:146:GLU:O	2.06	0.54
1:A:583:THR:CG2	1:A:584:PHE:N	2.70	0.54
1:A:948:ILE:O	1:A:1011:ASN:HA	2.07	0.54
1:A:1163:LYS:HD3	1:A:1167:GLY:HA2	1.90	0.54
1:A:241:VAL:HG13	1:A:257:VAL:O	2.08	0.54
1:A:96:ARG:HG2	1:A:385:ILE:O	2.08	0.54
1:A:575:LEU:HA	1:A:580:ARG:CB	2.32	0.54
1:A:960:GLU:CB	1:A:978:ASN:HD22	2.17	0.54
1:A:1100:TRP:CZ3	1:A:1287:ASP:HB2	2.43	0.54
1:A:276:LEU:HD23	1:A:471:THR:CG2	2.35	0.54
1:A:577:ASN:O	1:A:580:ARG:HB3	2.08	0.54
1:A:454:ILE:HD12	1:A:551:HIS:ND1	2.23	0.54
1:A:575:LEU:HA	1:A:580:ARG:HD2	1.90	0.54
1:A:705:TRP:CZ3	1:A:847:ASP:HB2	2.43	0.54
1:A:565:ILE:HG12	1:A:748:TYR:CG	2.43	0.54
1:A:951:TYR:CE1	1:A:1064:ARG:CZ	2.90	0.54
1:A:657:PHE:CD1	1:A:888:ILE:HG21	2.43	0.54
1:A:311:TYR:CE2	1:A:514:ILE:HG13	2.43	0.54
1:A:763:PHE:HZ	1:A:768:LEU:HD22	1.72	0.54
1:A:962:THR:O	1:A:1056:LEU:HA	2.08	0.53
1:A:1192:LEU:CD1	1:A:1205:LEU:HD13	2.38	0.53
1:A:573:GLU:C	1:A:575:LEU:H	2.11	0.53
1:A:922:LYS:HD3	1:A:1055:LYS:HD3	1.89	0.53
1:A:1015:PHE:CE2	1:A:1087:TYR:HB2	2.43	0.53
1:A:1:PRO:O	1:A:3:VAL:N	2.41	0.53
1:A:565:ILE:HD13	1:A:748:TYR:HB3	1.91	0.53
1:A:394:THR:O	1:A:396:LEU:N	2.41	0.53
1:A:1028:ILE:O	1:A:1028:ILE:HG23	2.09	0.53
1:A:1167:GLY:O	1:A:1169:LYS:N	2.41	0.53
1:A:1233:LYS:O	1:A:1235:LYS:HG3	2.08	0.53
1:A:394:THR:C	1:A:396:LEU:N	2.62	0.53
1:A:486:ILE:CG2	1:A:487:GLU:N	2.70	0.53
1:A:623:THR:HG21	1:A:632:ILE:HD12	1.89	0.53
1:A:959:ASN:HD21	1:A:1060:ARG:H	1.56	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1210:ILE:HD12	1:A:1210:ILE:N	2.23	0.53
1:A:361:ASN:ND2	1:A:362:ARG:O	2.42	0.53
1:A:1013:TRP:CH2	1:A:1069:LYS:HE3	2.43	0.53
1:A:424:PHE:CZ	1:A:536:PHE:HB2	2.44	0.53
1:A:627:ALA:O	1:A:628:ASP:CB	2.57	0.53
1:A:860:ARG:NH2	1:A:861:LEU:HD21	2.23	0.53
1:A:1238:LEU:HD13	1:A:1239:GLN:N	2.24	0.53
1:A:225:ILE:CG2	1:A:264:THR:HG23	2.39	0.53
1:A:902:LYS:CB	1:A:921:SER:HB3	2.39	0.53
1:A:192:THR:HG22	1:A:193:PHE:H	1.74	0.52
1:A:114:ILE:HD12	1:A:315:VAL:HG11	1.91	0.52
1:A:472:ASN:ND2	1:A:474:LEU:H	2.07	0.52
1:A:1209:GLU:HB3	1:A:1212:ASP:OD2	2.09	0.52
1:A:228:GLY:O	1:A:232:TYR:HD1	1.92	0.52
1:A:642:ILE:C	1:A:644:ASN:N	2.62	0.52
1:A:1295:LEU:HD23	1:A:1295:LEU:N	2.24	0.52
1:A:22:LYS:HZ2	1:A:22:LYS:HB2	1.74	0.52
1:A:79:THR:OG1	1:A:82:GLU:HG3	2.10	0.52
1:A:917:ASN:OD1	1:A:1059:CYS:HB3	2.08	0.52
1:A:257:VAL:HG21	1:A:366:LEU:HD21	1.92	0.52
1:A:153:ILE:HD13	1:A:186:ARG:HG3	1.91	0.52
1:A:541:LYS:HE2	1:A:543:GLU:HG3	1.92	0.52
1:A:659:GLY:O	1:A:661:VAL:N	2.43	0.52
1:A:865:PHE:O	1:A:869:ILE:HG12	2.10	0.52
1:A:29:MET:CE	1:A:32:VAL:HG23	2.40	0.52
1:A:1079:ASN:HD21	1:A:1081:LYS:HB3	1.74	0.52
1:A:1096:LEU:HD23	1:A:1235:LYS:HD2	1.92	0.52
1:A:258:SER:OG	1:A:261:GLU:HB2	2.09	0.52
1:A:268:HIS:O	1:A:271:LYS:N	2.38	0.52
1:A:951:TYR:CD2	1:A:979:TYR:HA	2.44	0.52
1:A:934:ASN:OD1	1:A:1048:ALA:HB3	2.10	0.52
1:A:1136:LYS:HG3	1:A:1137:GLY:H	1.74	0.51
1:A:1154:TYR:CE2	1:A:1286:VAL:HG22	2.45	0.51
1:A:1126:ASN:O	1:A:1131:GLY:HA3	2.10	0.51
1:A:593:VAL:CG1	1:A:745:ILE:HG21	2.37	0.51
1:A:1084:LYS:HE3	1:A:1088:ASP:OD2	2.11	0.51
1:A:668:PRO:HB3	1:A:719:LYS:HB3	1.92	0.51
1:A:1113:LEU:HD12	1:A:1114:ASN:N	2.25	0.51
1:A:1172:ILE:HB	1:A:1174:ARG:HH12	1.75	0.51
1:A:1226:ASN:HB3	1:A:1230:ILE:O	2.10	0.51
1:A:1154:TYR:OH	1:A:1290:TRP:HB3	2.10	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:558:PHE:CD1	1:A:558:PHE:C	2.83	0.51
1:A:71:TYR:CZ	1:A:415:LEU:HD13	2.45	0.51
1:A:871:ASN:HD22	1:A:873:ILE:N	2.09	0.51
1:A:1095:ILE:HG21	1:A:1103:TYR:CD1	2.46	0.51
1:A:950:LYS:NZ	1:A:1150:ASN:OD1	2.43	0.51
1:A:71:TYR:CE2	1:A:159:ILE:HD12	2.45	0.51
1:A:175:THR:HG22	1:A:235:ALA:HB3	1.93	0.51
1:A:10:LYS:HZ2	1:A:80:ASP:HB3	1.76	0.51
1:A:1135:LEU:HD11	1:A:1251:PHE:CD2	2.46	0.51
1:A:572:ASN:C	1:A:574:ALA:H	2.14	0.51
1:A:983:ILE:HG12	1:A:997:VAL:CG2	2.36	0.51
1:A:428:LEU:O	1:A:453:CYS:HA	2.10	0.51
1:A:7:PHE:CD1	1:A:18:ILE:HD11	2.46	0.51
1:A:705:TRP:CD2	1:A:807:LEU:HD13	2.46	0.51
1:A:855:TYR:O	1:A:856:VAL:HG23	2.10	0.51
1:A:1074:PHE:CE2	1:A:1078:LEU:HD11	2.45	0.51
1:A:1210:ILE:CD1	1:A:1210:ILE:H	2.22	0.51
1:A:8:ASN:HB2	1:A:11:ASP:OD1	2.11	0.51
1:A:1:PRO:HG2	1:A:38:HIS:NE2	2.26	0.51
1:A:962:THR:HA	1:A:976:SER:HA	1.93	0.51
1:A:1166:SER:HB3	1:A:1169:LYS:NZ	2.26	0.50
1:A:1111:TYR:CZ	1:A:1158:LYS:HE2	2.46	0.50
1:A:662:ILE:O	1:A:662:ILE:HG22	2.12	0.50
1:A:732:LYS:O	1:A:736:GLU:HG3	2.10	0.50
1:A:771:LYS:O	1:A:773:ASN:N	2.44	0.50
1:A:1203:LYS:H	1:A:1261:VAL:HG13	1.76	0.50
1:A:1276:THR:HG22	1:A:1276:THR:O	2.11	0.50
1:A:242:PHE:CZ	1:A:272:PHE:HB3	2.46	0.50
1:A:457:ASN:HD22	1:A:458:ASN:H	1.59	0.50
1:A:479:GLU:HA	1:A:679:ALA:HB3	1.92	0.50
1:A:1129:ILE:HD12	1:A:1130:ARG:N	2.27	0.50
1:A:47:ARG:CZ	1:A:58:LEU:HD13	2.41	0.50
1:A:668:PRO:HG3	1:A:720:VAL:HG22	1.94	0.50
1:A:701:ARG:HE	1:A:811:ASP:CG	2.14	0.50
1:A:971:SER:HB2	1:A:1047:HIS:HB2	1.93	0.50
1:A:1012:ARG:HG3	1:A:1100:TRP:HD1	1.77	0.50
1:A:1204:ILE:O	1:A:1205:LEU:HB2	2.12	0.50
1:A:225:ILE:HD13	1:A:349:THR:CA	2.41	0.50
1:A:1033:ARG:CZ	1:A:1035:ILE:HD11	2.41	0.50
1:A:554:ARG:O	1:A:557:GLU:HG3	2.12	0.50
1:A:586:SER:H	1:A:616:GLU:CD	2.15	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:951:TYR:HB2	1:A:1002:GLN:NE2	2.23	0.50
1:A:541:LYS:HE2	1:A:543:GLU:CG	2.42	0.50
1:A:548:THR:N	1:A:551:HIS:HD2	2.10	0.50
1:A:878:LEU:HB3	1:A:1073:LEU:HB3	1.93	0.50
1:A:947:ARG:HB3	1:A:1067:TRP:CB	2.23	0.50
1:A:1275:ARG:O	1:A:1277:LEU:HG	2.12	0.50
1:A:194:GLY:HA3	1:A:373:PHE:HE1	1.75	0.50
1:A:422:PHE:O	1:A:425:TYR:HD2	1.95	0.50
1:A:427:LEU:O	1:A:542:TYR:N	2.39	0.50
1:A:565:ILE:CD1	1:A:748:TYR:HB3	2.42	0.50
1:A:546:LYS:HZ2	1:A:645:MET:HB3	1.75	0.50
1:A:1154:TYR:CZ	1:A:1286:VAL:HA	2.46	0.50
1:A:431:ARG:N	1:A:544:LEU:O	2.45	0.50
1:A:583:THR:CG2	1:A:584:PHE:H	2.25	0.50
1:A:308:SER:O	1:A:311:TYR:N	2.45	0.49
1:A:887:LEU:HB3	1:A:899:ILE:HD11	1.94	0.49
1:A:16:VAL:O	1:A:17:ASP:OD1	2.30	0.49
1:A:1076:LYS:HE3	1:A:1082:GLU:OE1	2.13	0.49
1:A:1153:LEU:O	1:A:1155:ARG:N	2.43	0.49
1:A:268:HIS:O	1:A:271:LYS:HB2	2.13	0.49
1:A:114:ILE:CG2	1:A:316:PHE:HE1	2.26	0.49
1:A:753:TYR:CG	1:A:754:THR:N	2.80	0.49
1:A:631:ILE:HD12	1:A:785:LYS:HB3	1.94	0.49
1:A:902:LYS:HE2	1:A:902:LYS:HA	1.93	0.49
1:A:1019:THR:CG2	1:A:1077:GLU:HG3	2.41	0.49
1:A:21:ILE:HD12	1:A:21:ILE:H	1.76	0.49
1:A:209:ALA:H	1:A:404:ASN:HD21	1.53	0.49
1:A:887:LEU:HD21	1:A:913:ILE:HD11	1.94	0.49
1:A:177:ASN:O	1:A:288:LYS:HB3	2.13	0.49
1:A:321:LEU:HD12	1:A:340:LEU:HB2	1.94	0.49
1:A:908:ILE:HD11	1:A:1105:GLN:OE1	2.13	0.49
1:A:624:ASP:C	1:A:626:ILE:H	2.14	0.49
1:A:71:TYR:CE1	1:A:415:LEU:HD13	2.48	0.49
1:A:21:ILE:CG2	1:A:23:ILE:HD12	2.42	0.49
1:A:336:LYS:HA	1:A:339:LYS:HD2	1.94	0.49
1:A:211:LYS:CE	1:A:370:LYS:HB2	2.42	0.49
1:A:1145:THR:O	1:A:1146:ASN:HB2	2.13	0.49
1:A:1162:LYS:HG3	1:A:1182:ASN:ND2	2.28	0.49
1:A:347:ILE:HD13	1:A:493:ILE:HG23	1.95	0.49
1:A:122:ILE:HD12	1:A:122:ILE:N	2.28	0.49
1:A:406:GLU:O	1:A:409:ASN:HB2	2.13	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:421:LEU:HD23	1:A:422:PHE:CE1	2.47	0.49
1:A:534:GLU:HG3	1:A:534:GLU:O	2.13	0.49
1:A:1162:LYS:HD3	1:A:1182:ASN:ND2	2.28	0.49
1:A:815:LYS:O	1:A:819:LEU:HD23	2.12	0.49
1:A:657:PHE:HD1	1:A:888:ILE:HG21	1.76	0.49
1:A:1021:ASN:HB2	1:A:1077:GLU:OE2	2.12	0.48
1:A:317:LYS:CG	1:A:330:PHE:CE1	2.96	0.48
1:A:457:ASN:ND2	1:A:458:ASN:N	2.61	0.48
1:A:871:ASN:ND2	1:A:873:ILE:CB	2.68	0.48
1:A:902:LYS:CG	1:A:920:SER:HB2	2.43	0.48
1:A:14:ASN:O	1:A:16:VAL:N	2.46	0.48
1:A:225:ILE:HG21	1:A:264:THR:HG23	1.94	0.48
1:A:96:ARG:HD3	1:A:357:PHE:CE1	2.48	0.48
1:A:514:ILE:O	1:A:514:ILE:HG22	2.12	0.48
1:A:947:ARG:NH1	1:A:947:ARG:HG2	2.28	0.48
1:A:1004:ILE:O	1:A:1150:ASN:HA	2.13	0.48
1:A:734:ALA:O	1:A:737:ASN:N	2.46	0.48
1:A:951:TYR:HE2	1:A:980:GLY:H	1.60	0.48
1:A:701:ARG:NH1	1:A:701:ARG:HG3	2.22	0.48
1:A:1235:LYS:NZ	1:A:1281:TRP:O	2.47	0.48
1:A:796:MET:CE	1:A:865:PHE:HE1	2.26	0.48
1:A:551:HIS:O	1:A:554:ARG:HB3	2.14	0.48
1:A:660:ALA:HB1	1:A:790:CYS:HB3	1.94	0.48
1:A:1163:LYS:HD3	1:A:1167:GLY:CA	2.44	0.48
1:A:588:ASP:OD1	1:A:592:LYS:HE3	2.14	0.48
1:A:463:PHE:HE2	1:A:465:PRO:HG3	1.78	0.48
1:A:593:VAL:HG12	1:A:745:ILE:HD13	1.96	0.48
1:A:823:TYR:O	1:A:826:ARG:HG2	2.14	0.48
1:A:1008:ASP:HA	1:A:1012:ARG:HH11	1.78	0.48
1:A:1113:LEU:HD12	1:A:1113:LEU:C	2.34	0.48
1:A:2:PHE:O	1:A:3:VAL:HB	2.14	0.48
1:A:561:GLY:C	1:A:563:SER:H	2.17	0.48
1:A:640:LEU:HD11	1:A:731:MET:SD	2.54	0.48
1:A:648:LYS:O	1:A:649:ASP:O	2.31	0.48
1:A:1240:ASP:HB3	1:A:1246:ILE:HD11	1.96	0.47
1:A:16:VAL:C	1:A:18:ILE:H	2.17	0.47
1:A:404:ASN:CG	1:A:407:ILE:HD13	2.35	0.47
1:A:572:ASN:C	1:A:574:ALA:N	2.67	0.47
1:A:756:GLU:HB2	1:A:759:ASN:HD22	1.79	0.47
1:A:988:ASP:HB2	1:A:1045:ASN:O	2.15	0.47
1:A:1111:TYR:CE1	1:A:1158:LYS:HE2	2.49	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:428:LEU:CD2	1:A:542:TYR:HB2	2.43	0.47
1:A:237:ASN:HD21	1:A:239:ASN:HD22	1.62	0.47
1:A:317:LYS:NZ	1:A:324:GLU:HG2	2.29	0.47
1:A:1115:LEU:HB2	1:A:1280:SER:O	2.13	0.47
1:A:1162:LYS:HD3	1:A:1182:ASN:HD22	1.80	0.47
1:A:266:GLY:O	1:A:267:GLY:C	2.52	0.47
1:A:73:ASP:O	1:A:75:THR:N	2.47	0.47
1:A:924:GLU:HB2	1:A:1053:MET:SD	2.54	0.47
1:A:683:TYR:CD2	1:A:689:LEU:HD23	2.49	0.47
1:A:762:ASN:HB2	1:A:764:ASN:HD21	1.76	0.47
1:A:972:GLY:N	1:A:987:GLN:O	2.47	0.47
1:A:196:GLU:CG	1:A:211:LYS:HG2	2.45	0.47
1:A:281:PHE:O	1:A:284:TYR:HB3	2.15	0.47
1:A:613:PHE:CD2	1:A:772:LEU:HD22	2.50	0.47
1:A:668:PRO:HG3	1:A:720:VAL:CG2	2.44	0.47
1:A:815:LYS:HE3	1:A:841:ASN:HA	1.95	0.47
1:A:826:ARG:C	1:A:828:THR:H	2.18	0.47
1:A:905:PHE:CE2	1:A:913:ILE:HG12	2.49	0.47
1:A:145:SER:OG	1:A:519:LEU:N	2.46	0.47
1:A:274:ASP:OD1	1:A:277:GLN:HG3	2.15	0.47
1:A:113:GLY:O	1:A:319:LYS:HD2	2.15	0.47
1:A:350:GLU:O	1:A:354:VAL:HG23	2.15	0.47
1:A:640:LEU:HB2	1:A:642:ILE:CG1	2.45	0.47
1:A:419:THR:CG2	1:A:419:THR:O	2.63	0.47
1:A:51:THR:CG2	1:A:527:LEU:HD21	2.43	0.47
1:A:971:SER:O	1:A:972:GLY:O	2.33	0.47
1:A:138:GLN:NE2	1:A:144:ARG:NH1	2.63	0.47
1:A:192:THR:OG1	1:A:375:ILE:HD13	2.15	0.47
1:A:354:VAL:O	1:A:354:VAL:HG12	2.15	0.46
1:A:745:ILE:O	1:A:746:ILE:C	2.53	0.46
1:A:946:ILE:CG2	1:A:1014:ILE:HB	2.45	0.46
1:A:8:ASN:HB2	1:A:11:ASP:CG	2.36	0.46
1:A:139:PRO:C	1:A:141:GLY:H	2.17	0.46
1:A:553:LEU:HA	1:A:556:GLN:NE2	2.31	0.46
1:A:166:SER:HB2	1:A:183:GLN:NE2	2.31	0.46
1:A:672:ILE:O	1:A:806:ARG:NH1	2.49	0.46
1:A:45:PRO:O	1:A:83:LYS:HD3	2.14	0.46
1:A:964:ILE:O	1:A:975:VAL:N	2.48	0.46
1:A:1232:ASN:HD22	1:A:1270:ILE:HG23	1.80	0.46
1:A:486:ILE:HG22	1:A:487:GLU:N	2.30	0.46
1:A:745:ILE:HG22	1:A:746:ILE:N	2.30	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:246:THR:HG21	1:A:253:SER:O	2.16	0.46
1:A:613:PHE:O	1:A:617:THR:HB	2.15	0.46
1:A:919:GLU:O	1:A:919:GLU:HG3	2.16	0.46
1:A:34:ALA:CB	1:A:44:ILE:HG12	2.43	0.46
1:A:570:SER:OG	1:A:571:VAL:N	2.48	0.46
1:A:1167:GLY:C	1:A:1169:LYS:N	2.68	0.46
1:A:871:ASN:HB3	1:A:874:ASN:ND2	2.31	0.46
1:A:928:LYS:O	1:A:932:VAL:HG23	2.16	0.46
1:A:268:HIS:HE1	1:A:858:ASN:HD22	1.64	0.46
1:A:37:ILE:O	1:A:38:HIS:HB2	2.15	0.46
1:A:574:ALA:O	1:A:580:ARG:CB	2.57	0.46
1:A:701:ARG:CG	1:A:701:ARG:HH11	2.23	0.46
1:A:762:ASN:ND2	1:A:764:ASN:HD21	2.09	0.46
1:A:1132:TYR:CD2	1:A:1259:LYS:NZ	2.84	0.46
1:A:417:ASN:ND2	1:A:419:THR:N	2.60	0.46
1:A:539:GLY:O	1:A:540:LYS:C	2.54	0.46
1:A:1121:TYR:CE1	1:A:1136:LYS:HB3	2.52	0.45
1:A:1160:ILE:HG22	1:A:1162:LYS:HD3	1.98	0.45
1:A:21:ILE:HD13	1:A:34:ALA:CB	2.41	0.45
1:A:814:LEU:HD23	1:A:844:LEU:CD1	2.41	0.45
1:A:1024:ASN:HB3	1:A:1025:ASN:H	1.54	0.45
1:A:171:VAL:HG12	1:A:171:VAL:O	2.16	0.45
1:A:646:LEU:O	1:A:647:TYR:C	2.55	0.45
1:A:78:SER:N	1:A:82:GLU:OE1	2.49	0.45
1:A:234:ILE:HG23	1:A:234:ILE:O	2.16	0.45
1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CD1	2.84	0.45
1:A:69:VAL:HG12	1:A:70:SER:N	2.31	0.45
1:A:961:TYR:CE1	1:A:977:LEU:HB2	2.50	0.45
1:A:1026:SER:CB	1:A:1040:ILE:HD11	2.29	0.45
1:A:317:LYS:HG3	1:A:330:PHE:HE1	1.82	0.45
1:A:1129:ILE:C	1:A:1129:ILE:HD12	2.37	0.45
1:A:1287:ASP:O	1:A:1289:GLY:N	2.49	0.45
1:A:20:TYR:O	1:A:137:ILE:HB	2.17	0.45
1:A:200:GLU:HG3	1:A:360:LEU:HD13	1.96	0.45
1:A:378:VAL:N	1:A:379:PRO:HD2	2.32	0.45
1:A:419:THR:O	1:A:420:GLY:C	2.55	0.45
1:A:430:VAL:HB	1:A:452:LEU:HD23	1.99	0.45
1:A:623:THR:CG2	1:A:632:ILE:HD12	2.46	0.45
1:A:701:ARG:CG	1:A:701:ARG:NH1	2.80	0.45
1:A:9:TYR:HA	1:A:35:PHE:HZ	1.81	0.45
1:A:1040:ILE:HG23	1:A:1043:LEU:HB2	1.97	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1290:TRP:O	1:A:1292:GLU:N	2.50	0.45
1:A:149:ASN:O	1:A:231:LEU:HD21	2.16	0.45
1:A:2:PHE:HA	1:A:95:GLU:OE1	2.16	0.45
1:A:393:ASN:O	1:A:394:THR:C	2.55	0.45
1:A:457:ASN:ND2	1:A:458:ASN:H	2.13	0.45
1:A:427:LEU:HD23	1:A:541:LYS:HG3	1.97	0.45
1:A:646:LEU:O	1:A:648:LYS:N	2.49	0.45
1:A:843:THR:O	1:A:845:SER:N	2.44	0.45
1:A:1196:ALA:HB2	1:A:1246:ILE:CD1	2.46	0.45
1:A:309:LEU:O	1:A:313:LYS:HG3	2.15	0.45
1:A:335:LEU:HD12	1:A:339:LYS:HE3	1.97	0.45
1:A:582:TYR:CG	1:A:583:THR:N	2.84	0.45
1:A:969:ASN:O	1:A:970:ASN:HB2	2.17	0.45
1:A:1240:ASP:OD1	1:A:1240:ASP:C	2.55	0.45
1:A:155:PRO:HD3	1:A:188:SER:HB2	1.98	0.45
1:A:246:THR:HG23	1:A:253:SER:HA	1.97	0.45
1:A:525:GLY:O	1:A:526:GLN:CB	2.65	0.45
1:A:946:ILE:O	1:A:1013:TRP:HA	2.16	0.45
1:A:1110:TYR:CD1	1:A:1285:PRO:HB3	2.52	0.45
1:A:573:GLU:N	1:A:573:GLU:CD	2.70	0.45
1:A:637:GLY:N	1:A:638:PRO:HD2	2.32	0.45
1:A:310:GLN:NE2	1:A:311:TYR:N	2.65	0.45
1:A:305:THR:CG2	1:A:516:ILE:HG22	2.46	0.45
1:A:568:THR:O	1:A:594:ASN:ND2	2.49	0.45
1:A:1244:ASN:HB3	1:A:1245:ASP:H	1.59	0.44
1:A:113:GLY:O	1:A:319:LYS:CE	2.64	0.44
1:A:421:LEU:HD23	1:A:422:PHE:HE1	1.82	0.44
1:A:143:TYR:OH	1:A:519:LEU:O	2.31	0.44
1:A:742:THR:O	1:A:742:THR:CG2	2.65	0.44
1:A:1103:TYR:CD2	1:A:1172:ILE:HD13	2.51	0.44
1:A:134:ILE:HG21	1:A:148:LEU:HD12	1.98	0.44
1:A:960:GLU:CA	1:A:978:ASN:HD22	2.31	0.44
1:A:1035:ILE:HA	1:A:1035:ILE:HD13	1.79	0.44
1:A:1136:LYS:HG3	1:A:1137:GLY:N	2.32	0.44
1:A:953:ASN:O	1:A:1147:ILE:HD13	2.17	0.44
1:A:546:LYS:HZ3	1:A:645:MET:HB3	1.83	0.44
1:A:383:TYR:HA	1:A:388:GLY:O	2.17	0.44
1:A:973:TRP:H	1:A:986:LEU:HA	1.82	0.44
1:A:985:THR:HG21	1:A:995:ARG:NH2	2.32	0.44
1:A:1025:ASN:HB3	1:A:1039:PRO:HA	2.00	0.44
1:A:16:VAL:O	1:A:18:ILE:N	2.50	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:965:ASN:HD22	1:A:974:LYS:HG3	1.83	0.44
1:A:1134:TYR:N	1:A:1134:TYR:CD1	2.85	0.44
1:A:1254:PHE:HD2	1:A:1259:LYS:HD2	1.80	0.44
1:A:377:ILE:HG23	1:A:383:TYR:CD1	2.53	0.44
1:A:640:LEU:HD11	1:A:731:MET:HG2	1.99	0.44
1:A:71:TYR:CD2	1:A:159:ILE:HD12	2.53	0.44
1:A:806:ARG:HA	1:A:806:ARG:HD3	1.82	0.44
1:A:1170:ASP:OD2	1:A:1172:ILE:HB	2.18	0.44
1:A:242:PHE:HD1	1:A:259:PHE:HE1	1.64	0.44
1:A:536:PHE:HB3	1:A:537:PRO:HD2	1.99	0.44
1:A:989:THR:C	1:A:991:GLU:N	2.69	0.44
1:A:961:TYR:CD2	1:A:1056:LEU:HD23	2.53	0.44
1:A:1295:LEU:H	1:A:1295:LEU:CD2	2.31	0.44
1:A:247:ASN:O	1:A:248:ALA:HB2	2.18	0.44
1:A:379:PRO:HG2	1:A:382:ASN:HB2	2.00	0.44
1:A:1208:LEU:CD1	1:A:1216:LEU:HD12	2.47	0.43
1:A:143:TYR:C	1:A:143:TYR:CD1	2.91	0.43
1:A:1011:ASN:O	1:A:1011:ASN:CG	2.56	0.43
1:A:1108:LYS:NZ	1:A:1285:PRO:CB	2.81	0.43
1:A:573:GLU:OE1	1:A:573:GLU:HA	2.19	0.43
1:A:608:GLN:HG2	1:A:612:ASP:OD2	2.18	0.43
1:A:753:TYR:CD1	1:A:754:THR:N	2.82	0.43
1:A:1098:ASP:N	1:A:1102:ASP:O	2.51	0.43
1:A:134:ILE:HG23	1:A:148:LEU:HD12	2.01	0.43
1:A:216:PRO:CG	1:A:377:ILE:HD11	2.38	0.43
1:A:554:ARG:HE	1:A:554:ARG:HA	1.83	0.43
1:A:558:PHE:CD1	1:A:558:PHE:O	2.71	0.43
1:A:759:ASN:O	1:A:760:ASN:CB	2.66	0.43
1:A:1104:LEU:HD21	1:A:1161:ILE:CD1	2.48	0.43
1:A:1198:GLN:NE2	1:A:1203:LYS:HA	2.33	0.43
1:A:208:GLY:HA3	1:A:212:PHE:CZ	2.53	0.43
1:A:64:ALA:O	1:A:535:ARG:NH2	2.51	0.43
1:A:1204:ILE:O	1:A:1260:LEU:O	2.37	0.43
1:A:1268:ARG:NH1	1:A:1272:ARG:HH11	2.16	0.43
1:A:213:ALA:CB	1:A:412:PHE:CE1	3.02	0.43
1:A:1040:ILE:C	1:A:1042:ASN:H	2.22	0.43
1:A:675:LEU:CD1	1:A:807:LEU:HD23	2.48	0.43
1:A:760:ASN:C	1:A:762:ASN:H	2.20	0.43
1:A:795:LEU:CD2	1:A:800:ILE:HG12	2.49	0.43
1:A:873:ILE:C	1:A:875:THR:H	2.21	0.43
1:A:1232:ASN:OD1	1:A:1234:CYS:N	2.47	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:21:ILE:HG21	1:A:23:ILE:HD12	2.00	0.43
1:A:117:TRP:CD1	1:A:316:PHE:HZ	2.36	0.43
1:A:659:GLY:C	1:A:661:VAL:H	2.22	0.43
1:A:662:ILE:O	1:A:662:ILE:CG2	2.66	0.43
1:A:701:ARG:C	1:A:701:ARG:HD2	2.39	0.43
1:A:1172:ILE:HB	1:A:1174:ARG:NH1	2.33	0.43
1:A:728:ARG:HH22	1:A:788:ASN:ND2	2.16	0.43
1:A:32:VAL:HG12	1:A:33:LYS:N	2.33	0.43
1:A:642:ILE:CG2	1:A:663:LEU:HD23	2.45	0.43
1:A:996:VAL:HG11	1:A:1026:SER:O	2.18	0.43
1:A:1198:GLN:HE22	1:A:1203:LYS:HB3	1.84	0.43
1:A:28:GLN:CD	1:A:28:GLN:N	2.72	0.43
1:A:801:PRO:CB	1:A:931:ILE:HD11	2.49	0.43
1:A:947:ARG:CB	1:A:1067:TRP:HB2	2.24	0.42
1:A:1116:TYR:C	1:A:1118:PRO:HD3	2.39	0.42
1:A:1192:LEU:HD12	1:A:1193:ALA:N	2.33	0.42
1:A:118:GLY:O	1:A:120:SER:N	2.52	0.42
1:A:44:ILE:HG22	1:A:46:GLU:HG2	2.01	0.42
1:A:454:ILE:CD1	1:A:551:HIS:ND1	2.82	0.42
1:A:626:ILE:HD12	1:A:626:ILE:N	2.34	0.42
1:A:704:LYS:HD3	1:A:704:LYS:O	2.19	0.42
1:A:741:ALA:C	1:A:743:LYS:H	2.22	0.42
1:A:1252:HIS:O	1:A:1258:ALA:HA	2.19	0.42
1:A:170:GLU:HG2	1:A:171:VAL:HG23	2.01	0.42
1:A:491:GLU:C	1:A:493:ILE:H	2.22	0.42
1:A:584:PHE:CE1	1:A:585:PHE:CE1	3.08	0.42
1:A:620:VAL:CG1	1:A:631:ILE:HG23	2.49	0.42
1:A:480:ILE:CD1	1:A:697:ALA:HA	2.45	0.42
1:A:1009:TYR:HD2	1:A:1014:ILE:CD1	2.33	0.42
1:A:1017:THR:HG21	1:A:1083:ILE:HD12	2.01	0.42
1:A:1108:LYS:HA	1:A:1109:PRO:HD2	1.83	0.42
1:A:1112:MET:CE	1:A:1159:PHE:HB2	2.48	0.42
1:A:122:ILE:O	1:A:123:ASP:C	2.57	0.42
1:A:76:TYR:OH	1:A:190:ASP:OD2	2.30	0.42
1:A:317:LYS:HZ2	1:A:324:GLU:HG2	1.83	0.42
1:A:1079:ASN:OD1	1:A:1082:GLU:HG3	2.20	0.42
1:A:167:PHE:HA	1:A:527:LEU:HA	2.01	0.42
1:A:609:LEU:CD1	1:A:746:ILE:HD11	2.46	0.42
1:A:756:GLU:CB	1:A:759:ASN:HD22	2.32	0.42
1:A:91:THR:HG22	1:A:92:LYS:N	2.33	0.42
1:A:170:GLU:HG2	1:A:171:VAL:CG2	2.48	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:670:ILE:HG22	1:A:672:ILE:HD11	2.02	0.42
1:A:965:ASN:HA	1:A:974:LYS:HB2	2.00	0.42
1:A:973:TRP:HB2	1:A:984:TRP:CZ2	2.54	0.42
1:A:973:TRP:CE3	1:A:984:TRP:CZ3	3.06	0.42
1:A:1103:TYR:HB3	1:A:1172:ILE:HG23	2.01	0.42
1:A:148:LEU:HD13	1:A:151:VAL:CG2	2.50	0.42
1:A:166:SER:HB2	1:A:183:GLN:HE22	1.84	0.42
1:A:194:GLY:HA3	1:A:373:PHE:CE1	2.54	0.42
1:A:224:LEU:C	1:A:226:HIS:N	2.72	0.42
1:A:303:VAL:HG23	1:A:303:VAL:O	2.19	0.42
1:A:673:PRO:C	1:A:806:ARG:NH1	2.73	0.42
1:A:689:LEU:HA	1:A:689:LEU:HD12	1.84	0.42
1:A:701:ARG:O	1:A:701:ARG:HD2	2.19	0.42
1:A:754:THR:O	1:A:755:GLU:CB	2.59	0.42
1:A:673:PRO:C	1:A:806:ARG:HH11	2.23	0.42
1:A:837:LYS:HB3	1:A:837:LYS:NZ	2.33	0.42
1:A:17:ASP:HA	1:A:36:LYS:HB3	2.01	0.42
1:A:61:PRO:HG2	1:A:63:GLU:O	2.20	0.42
1:A:756:GLU:HG3	1:A:756:GLU:O	2.19	0.42
1:A:1008:ASP:HA	1:A:1012:ARG:NH1	2.34	0.42
1:A:1056:LEU:HD12	1:A:1056:LEU:N	2.27	0.42
1:A:1061:ASP:C	1:A:1061:ASP:OD1	2.58	0.42
1:A:314:ASN:O	1:A:317:LYS:HB3	2.20	0.42
1:A:325:ASP:OD1	1:A:327:SER:N	2.52	0.42
1:A:92:LYS:NZ	1:A:377:ILE:O	2.37	0.42
1:A:138:GLN:CD	1:A:144:ARG:NH1	2.73	0.42
1:A:144:ARG:HG3	1:A:144:ARG:O	2.19	0.42
1:A:206:LEU:HD21	1:A:774:GLU:OE2	2.20	0.42
1:A:226:HIS:CE1	1:A:260:GLU:OE1	2.73	0.42
1:A:38:HIS:HE1	1:A:510:GLU:OE2	2.02	0.42
1:A:5:LYS:HD2	1:A:17:ASP:OD2	2.20	0.42
1:A:585:PHE:HB3	1:A:616:GLU:OE2	2.20	0.42
1:A:946:ILE:HG22	1:A:1014:ILE:HB	2.02	0.42
1:A:104:ARG:NH1	1:A:507:PHE:CZ	2.87	0.42
1:A:1287:ASP:C	1:A:1289:GLY:H	2.22	0.42
1:A:317:LYS:HG3	1:A:330:PHE:CE1	2.55	0.42
1:A:317:LYS:HG2	1:A:330:PHE:CE1	2.55	0.42
1:A:196:GLU:HG2	1:A:211:LYS:HG2	2.01	0.41
1:A:2:PHE:O	1:A:95:GLU:OE2	2.38	0.41
1:A:983:ILE:CG1	1:A:997:VAL:HG22	2.43	0.41
1:A:1123:ASP:HB2	1:A:1136:LYS:HB2	2.02	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:534:GLU:O	1:A:535:ARG:C	2.58	0.41
1:A:797:ASN:HD22	1:A:892:ARG:HG2	1.85	0.41
1:A:947:ARG:HA	1:A:1012:ARG:O	2.20	0.41
1:A:953:ASN:HB3	1:A:955:ILE:HG13	2.03	0.41
1:A:943:SER:HA	1:A:1016:VAL:O	2.19	0.41
1:A:1287:ASP:C	1:A:1289:GLY:N	2.73	0.41
1:A:142:SER:O	1:A:143:TYR:HB3	2.20	0.41
1:A:597:THR:HG23	1:A:601:MET:CE	2.51	0.41
1:A:763:PHE:O	1:A:763:PHE:CD1	2.74	0.41
1:A:842:ASN:O	1:A:845:SER:OG	2.38	0.41
1:A:10:LYS:HZ1	1:A:80:ASP:HB3	1.73	0.41
1:A:1185:VAL:N	1:A:1188:LYS:O	2.53	0.41
1:A:552:TYR:CD2	1:A:641:ASN:HB2	2.56	0.41
1:A:695:ASP:OD1	1:A:839:LYS:NZ	2.45	0.41
1:A:1013:TRP:HD1	1:A:1101:GLY:HA3	1.85	0.41
1:A:1110:TYR:CE1	1:A:1285:PRO:HB3	2.55	0.41
1:A:598:GLU:O	1:A:601:MET:O	2.39	0.41
1:A:736:GLU:O	1:A:740:GLU:HB2	2.21	0.41
1:A:759:ASN:O	1:A:760:ASN:HB2	2.21	0.41
1:A:963:ILE:HG13	1:A:964:ILE:N	2.35	0.41
1:A:978:ASN:O	1:A:979:TYR:C	2.59	0.41
1:A:237:ASN:OD1	1:A:238:PRO:HD2	2.20	0.41
1:A:1267:ASN:O	1:A:1271:GLU:HG3	2.21	0.41
1:A:687:LYS:O	1:A:688:VAL:C	2.59	0.41
1:A:718:ALA:HA	1:A:722:THR:HG23	2.03	0.41
1:A:73:ASP:O	1:A:74:SER:C	2.59	0.41
1:A:942:THR:CG2	1:A:1018:ILE:HB	2.51	0.41
1:A:211:LYS:HE2	1:A:370:LYS:CB	2.48	0.41
1:A:580:ARG:O	1:A:580:ARG:HG3	2.21	0.41
1:A:605:TRP:O	1:A:608:GLN:HB3	2.21	0.41
1:A:566:ALA:O	1:A:745:ILE:HG12	2.21	0.41
1:A:964:ILE:HB	1:A:975:VAL:HG23	2.02	0.41
1:A:1040:ILE:CG2	1:A:1040:ILE:O	2.66	0.41
1:A:345:THR:HG22	1:A:346:GLU:N	2.35	0.41
1:A:533:ILE:HG22	1:A:533:ILE:O	2.20	0.41
1:A:553:LEU:HD11	1:A:733:GLU:HG2	2.02	0.41
1:A:660:ALA:CB	1:A:790:CYS:HB3	2.51	0.41
1:A:670:ILE:HD13	1:A:802:TYR:CD2	2.55	0.41
1:A:87:LEU:HA	1:A:87:LEU:HD12	1.86	0.41
1:A:1007:SER:O	1:A:1012:ARG:NH1	2.54	0.41
1:A:1095:ILE:HD12	1:A:1103:TYR:CE1	2.55	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:514:ILE:HA	1:A:514:ILE:HD13	1.86	0.41
1:A:69:VAL:CG1	1:A:70:SER:N	2.84	0.41
1:A:914:GLN:HB2	1:A:1067:TRP:CZ3	2.56	0.41
1:A:565:ILE:HG23	1:A:748:TYR:CB	2.51	0.41
1:A:990:GLN:O	1:A:992:ILE:N	2.54	0.41
1:A:983:ILE:CG2	1:A:997:VAL:HG22	2.48	0.41
1:A:1027:LYS:HB3	1:A:1034:LEU:CD1	2.51	0.40
1:A:1108:LYS:NZ	1:A:1285:PRO:HB3	2.36	0.40
1:A:1204:ILE:HA	1:A:1261:VAL:HG22	2.03	0.40
1:A:1268:ARG:CZ	1:A:1269:GLN:NE2	2.85	0.40
1:A:1:PRO:HA	1:A:107:LEU:HD13	2.03	0.40
1:A:261:GLU:HG3	1:A:365:TYR:CE2	2.56	0.40
1:A:389:PHE:O	1:A:391:LEU:N	2.52	0.40
1:A:705:TRP:CE3	1:A:807:LEU:HD13	2.56	0.40
1:A:682:SER:HA	1:A:821:TYR:OH	2.21	0.40
1:A:934:ASN:C	1:A:936:MET:H	2.25	0.40
1:A:1160:ILE:HG22	1:A:1162:LYS:CD	2.52	0.40
1:A:160:ILE:HB	1:A:193:PHE:CZ	2.56	0.40
1:A:396:LEU:O	1:A:397:ALA:CB	2.66	0.40
1:A:620:VAL:HG11	1:A:631:ILE:HG23	2.03	0.40
1:A:658:SER:HB2	1:A:662:ILE:HG13	2.03	0.40
1:A:565:ILE:HG23	1:A:748:TYR:CG	2.56	0.40
1:A:1011:ASN:O	1:A:1100:TRP:CD1	2.74	0.40
1:A:131:THR:O	1:A:131:THR:HG23	2.22	0.40
1:A:321:LEU:HA	1:A:321:LEU:HD23	1.88	0.40
1:A:454:ILE:HD12	1:A:551:HIS:HA	2.04	0.40
1:A:649:ASP:HB3	1:A:650:ASP:H	1.73	0.40
1:A:670:ILE:HD13	1:A:802:TYR:HD2	1.87	0.40
1:A:718:ALA:HA	1:A:722:THR:CG2	2.51	0.40
1:A:942:THR:HG22	1:A:1018:ILE:HB	2.03	0.40
1:A:402:GLY:HA2	1:A:408:ASN:HD22	1.87	0.40
1:A:305:THR:CG2	1:A:516:ILE:HA	2.52	0.40
1:A:558:PHE:HB3	1:A:581:VAL:CG2	2.42	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles

5.3.1 Protein backbone

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	1273/1295 (98%)	1007 (79%)	178 (14%)	88 (7%)	1 9

All (88) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	120	SER
1	A	397	ALA
1	A	487	GLU
1	A	540	LYS
1	A	558	PHE
1	A	560	HIS
1	A	565	ILE
1	A	570	SER
1	A	628	ASP
1	A	647	TYR
1	A	648	LYS
1	A	649	ASP
1	A	830	ILE
1	A	972	GLY
1	A	973	TRP
1	A	991	GLU
1	A	1198	GLN
1	A	1244	ASN
1	A	1272	ARG
1	A	15	GLY
1	A	17	ASP
1	A	74	SER
1	A	122	ILE
1	A	159	ILE
1	A	208	GLY
1	A	255	LEU
1	A	395	ASN
1	A	463	PHE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	489	ALA
1	A	491	GLU
1	A	492	ASN
1	A	509	ASN
1	A	526	GLN
1	A	555	ALA
1	A	562	LYS
1	A	571	VAL
1	A	643	GLY
1	A	660	ALA
1	A	762	ASN
1	A	772	LEU
1	A	979	TYR
1	A	1137	GLY
1	A	1145	THR
1	A	1154	TYR
1	A	1175	ASN
1	A	1291	GLY
1	A	2	PHE
1	A	29	MET
1	A	114	ILE
1	A	123	ASP
1	A	156	SER
1	A	248	ALA
1	A	561	GLY
1	A	688	VAL
1	A	858	ASN
1	A	890	LEU
1	A	910	LYS
1	A	1205	LEU
1	A	1215	ASN
1	A	1288	ASP
1	A	18	ILE
1	A	124	THR
1	A	452	LEU
1	A	645	MET
1	A	662	ILE
1	A	687	LYS
1	A	761	ILE
1	A	844	LEU
1	A	847	ASP
1	A	884	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1144	THR
1	A	3	VAL
1	A	73	ASP
1	A	140	ASP
1	A	174	LEU
1	A	394	THR
1	A	734	ALA
1	A	760	ASN
1	A	824	ASP
1	A	1164	TYR
1	A	1168	ASN
1	A	673	PRO
1	A	676	GLY
1	A	119	GLY
1	A	745	ILE
1	A	171	VAL
1	A	493	ILE
1	A	626	ILE

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	1161/1178 (99%)	1084 (93%)	77 (7%)	19 57

All (77) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	17	ASP
1	A	20	TYR
1	A	49	THR
1	A	50	PHE
1	A	77	LEU
1	A	80	ASP
1	A	88	LYS
1	A	96	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	121	THR
1	A	128	VAL
1	A	131	THR
1	A	143	TYR
1	A	148	LEU
1	A	149	ASN
1	A	153	ILE
1	A	161	GLN
1	A	164	CYS
1	A	166	SER
1	A	192	THR
1	A	223	GLU
1	A	230	ARG
1	A	234	ILE
1	A	240	ARG
1	A	260	GLU
1	A	263	ARG
1	A	302	ILE
1	A	310	GLN
1	A	317	LYS
1	A	344	LEU
1	A	345	THR
1	A	361	ASN
1	A	381	VAL
1	A	411	ASN
1	A	424	PHE
1	A	473	ASP
1	A	553	LEU
1	A	554	ARG
1	A	558	PHE
1	A	560	HIS
1	A	569	ASN
1	A	573	GLU
1	A	575	LEU
1	A	588	ASP
1	A	601	MET
1	A	614	THR
1	A	617	THR
1	A	670	ILE
1	A	701	ARG
1	A	712	ILE
1	A	742	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	749	GLN
1	A	762	ASN
1	A	795	LEU
1	A	811	ASP
1	A	824	ASP
1	A	832	GLN
1	A	833	VAL
1	A	834	ASP
1	A	842	ASN
1	A	871	ASN
1	A	873	ILE
1	A	879	ASN
1	A	880	LEU
1	A	911	ASN
1	A	917	ASN
1	A	961	TYR
1	A	973	TRP
1	A	974	LYS
1	A	1017	THR
1	A	1021	ASN
1	A	1025	ASN
1	A	1056	LEU
1	A	1076	LYS
1	A	1113	LEU
1	A	1192	LEU
1	A	1242	ASN
1	A	1276	THR

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (45) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	38	HIS
1	A	149	ASN
1	A	161	GLN
1	A	169	HIS
1	A	204	ASN
1	A	226	HIS
1	A	239	ASN
1	A	268	HIS
1	A	310	GLN
1	A	314	ASN
1	A	361	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	376	ASN
1	A	401	ASN
1	A	403	GLN
1	A	417	ASN
1	A	457	ASN
1	A	499	GLN
1	A	551	HIS
1	A	644	ASN
1	A	696	ASN
1	A	721	ASN
1	A	759	ASN
1	A	764	ASN
1	A	788	ASN
1	A	871	ASN
1	A	879	ASN
1	A	912	GLN
1	A	914	GLN
1	A	959	ASN
1	A	965	ASN
1	A	970	ASN
1	A	978	ASN
1	A	987	GLN
1	A	1002	GLN
1	A	1011	ASN
1	A	1021	ASN
1	A	1025	ASN
1	A	1072	ASN
1	A	1119	ASN
1	A	1125	ASN
1	A	1146	ASN
1	A	1198	GLN
1	A	1253	GLN
1	A	1267	ASN
1	A	1269	GLN

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	1277/1295 (98%)	-0.33	23 (1%) 69 55	11, 57, 100, 100	0

All (23) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	645	MET	5.5
1	A	1168	ASN	4.7
1	A	644	ASN	4.2
1	A	763	PHE	3.8
1	A	761	ILE	3.3
1	A	758	LYS	3.0
1	A	564	ARG	3.0
1	A	762	ASN	2.9
1	A	563	SER	2.9
1	A	622	THR	2.8
1	A	572	ASN	2.8
1	A	621	SER	2.7
1	A	487	GLU	2.6
1	A	647	TYR	2.3
1	A	430	VAL	2.3
1	A	567	LEU	2.2
1	A	589	TYR	2.2
1	A	1295	LEU	2.1
1	A	560	HIS	2.1
1	A	600	ALA	2.0
1	A	620	VAL	2.0
1	A	452	LEU	2.0
1	A	1167	GLY	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, 95th percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled 'Q< 0.9' lists the number of atoms with occupancy less than 0.9.

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	LLDF	B-factors(\AA^2)	Q<0.9
2	ZN	A	1311	1/1	0.97	0.33	-	57,57,57,57	0

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.