



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 09:25 pm GMT

PDB ID : 3CNA
Title : STRUCTURE OF CONCAVALIN A AT 2.4 ANGSTROMS RESOLUTION
Authors : Hardman, K.D.; Ainsworth, C.F.
Deposited on : 1976-09-15
Resolution : 2.40 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) : **NOT EXECUTED**
EDS : **NOT EXECUTED**
Percentile statistics : 20161228.v01 (using entries in the PDB archive December 28th 2016)
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : recalc28949

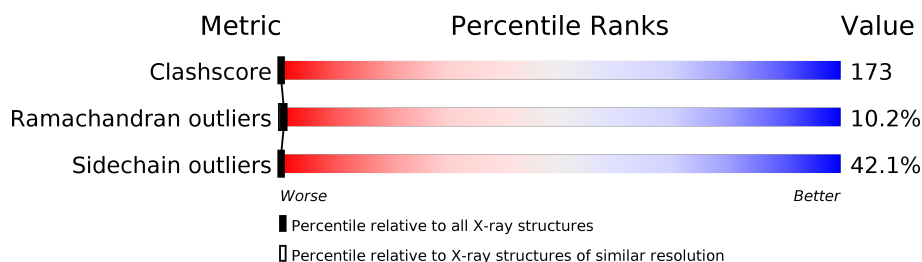
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 2.40 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	3674 (2.40-2.40)
Ramachandran outliers	110173	3616 (2.40-2.40)
Sidechain outliers	110143	3617 (2.40-2.40)

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.

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	237	

2 Entry composition

There are 4 unique types of molecules in this entry. The entry contains 1813 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 CONCANAVALIN A.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	237	Total	C	N	O	S	0	0	0
			1807	1139	300	366	2			

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	186	ALA	-	INSERTION	UNP P02866
A	?	-	ALA	DELETION	UNP P02866

- Molecule 2 is MANGANESE (II) ION (three-letter code: MN) (formula: Mn).

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

- Molecule 3 is CALCIUM ION (three-letter code: CA) (formula: Ca).

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	A	1	Total	Ca	0	0
			1	1		

- Molecule 4 is water.

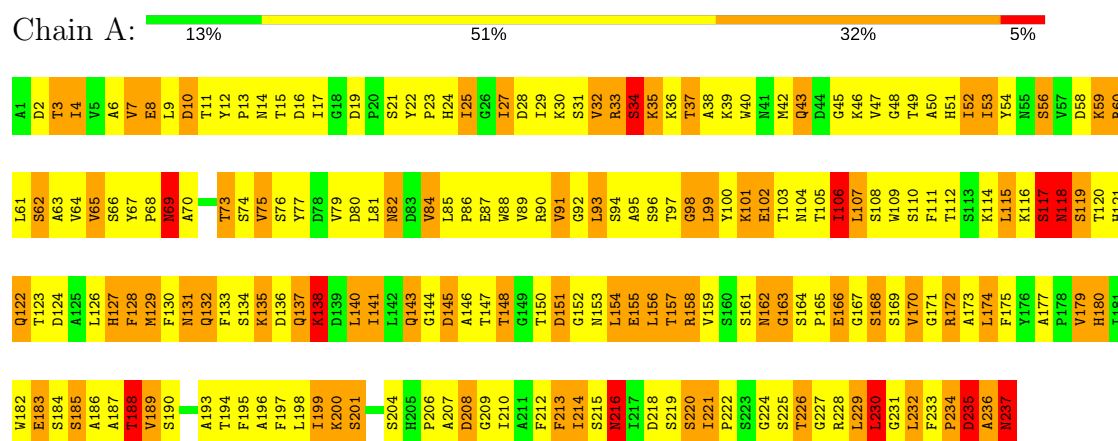
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	A	4	Total	O	0	0
			4	4		

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.

Note EDS was not executed.

• Molecule 1: CONCAVALIN A



4 Data and refinement statistics

Xtriage (Phenix) and EDS were not executed - this section is therefore incomplete.

Property	Value	Source
Space group	I 2 2 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	63.15Å 86.91Å 89.25Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	(Not available) – 2.40	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	(Not available) ((Not available)-2.40)	Depositor
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
Refinement program	unknown	Depositor
R, R_{free}	(Not available) , (Not available)	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	1813	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	0.0	wwPDB-VP

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

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	0.73	1/1849 (0.1%)	1.24	2/2519 (0.1%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	2	0

All (1) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	237	ASN	C-O	7.84	1.38	1.23

All (2) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	106	ILE	CA-CB-CG2	9.43	129.76	110.90
1	A	106	ILE	N-CA-CB	-5.64	97.83	110.80

All (2) chirality outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atom
1	A	106	ILE	CB
1	A	157	THR	CB

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts ⓘ

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	1807	0	1747	616	4
2	A	1	0	0	0	0
3	A	1	0	0	0	0
4	A	4	0	0	2	0
All	All	1813	0	1747	616	4

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 173.

All (616) 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:87:GLU:HG3	1:A:182:TRP:CB	1.30	1.53
1:A:180:HIS:HB2	1:A:182:TRP:CZ3	1.40	1.52
1:A:115:LEU:CD1	1:A:180:HIS:CE1	1.87	1.52
1:A:115:LEU:HD13	1:A:180:HIS:CE1	1.00	1.51
1:A:175:PHE:CE1	1:A:177:ALA:HB3	1.47	1.48
1:A:14:ASN:O	1:A:19:ASP:CB	1.72	1.38
1:A:182:TRP:CD1	1:A:183:GLU:N	1.92	1.34
1:A:115:LEU:CD1	1:A:180:HIS:HE1	1.29	1.33
1:A:180:HIS:HB2	1:A:182:TRP:CH2	1.63	1.33
1:A:87:GLU:CG	1:A:182:TRP:CB	2.08	1.31
1:A:173:ALA:C	1:A:174:LEU:HD23	1.46	1.30
1:A:115:LEU:HD13	1:A:180:HIS:ND1	1.43	1.30
1:A:87:GLU:CG	1:A:182:TRP:HB3	1.62	1.27
1:A:106:ILE:CD1	1:A:156:LEU:HD21	1.62	1.27
1:A:4:ILE:O	1:A:4:ILE:HD13	1.29	1.27
1:A:235:ASP:CG	1:A:236:ALA:H	1.37	1.27
1:A:102:GLU:HG2	1:A:207:ALA:O	1.17	1.26
1:A:58:ASP:O	1:A:59:LYS:HG3	1.25	1.26
1:A:133:PHE:CD1	1:A:154:LEU:HB2	1.70	1.24
1:A:15:THR:HA	1:A:19:ASP:O	1.32	1.22
1:A:14:ASN:O	1:A:19:ASP:HB2	1.16	1.22
1:A:137:GLN:CG	1:A:140:LEU:HD23	1.70	1.22
1:A:87:GLU:OE2	1:A:182:TRP:CD1	1.91	1.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:137:GLN:CB	1:A:140:LEU:HB2	1.69	1.21
1:A:180:HIS:CB	1:A:182:TRP:CZ3	2.24	1.21
1:A:87:GLU:CG	1:A:182:TRP:CG	2.25	1.19
1:A:51:HIS:C	1:A:52:ILE:HD12	1.62	1.19
1:A:53:ILE:H	1:A:53:ILE:HD12	1.10	1.17
1:A:53:ILE:HD11	1:A:62:SER:HB2	1.18	1.17
1:A:106:ILE:HD11	1:A:156:LEU:CD2	1.75	1.16
1:A:6:ALA:HB2	1:A:213:PHE:HB3	1.27	1.15
1:A:137:GLN:HB3	1:A:140:LEU:HB2	1.16	1.15
1:A:93:LEU:HD21	1:A:109:TRP:CE2	1.82	1.14
1:A:222:PRO:HB2	1:A:225:SER:CB	1.77	1.14
1:A:118:ASN:O	1:A:120:THR:N	1.80	1.13
1:A:87:GLU:OE2	1:A:182:TRP:CG	2.01	1.13
1:A:88:TRP:CZ2	1:A:182:TRP:HH2	1.67	1.13
1:A:213:PHE:CD1	1:A:232:LEU:HD22	1.84	1.11
1:A:87:GLU:HG3	1:A:182:TRP:HB2	1.32	1.11
1:A:88:TRP:CE2	1:A:182:TRP:CH2	2.39	1.11
1:A:145:ASP:CG	1:A:169:SER:HB2	1.72	1.10
1:A:104:ASN:HB2	1:A:157:THR:CG2	1.81	1.10
1:A:141:ILE:HG22	1:A:174:LEU:N	1.67	1.10
1:A:134:SER:O	1:A:148:THR:CG2	1.98	1.09
1:A:228:ARG:HG3	1:A:229:LEU:HD12	1.20	1.09
1:A:14:ASN:C	1:A:19:ASP:HB3	1.72	1.09
1:A:102:GLU:CG	1:A:207:ALA:O	2.00	1.08
1:A:2:ASP:HA	1:A:216:ASN:HD21	0.97	1.08
1:A:141:ILE:HG22	1:A:174:LEU:H	1.09	1.08
1:A:68:PRO:HB2	1:A:69:ASN:HD21	1.18	1.08
1:A:235:ASP:CG	1:A:236:ALA:N	2.03	1.07
1:A:234:PRO:O	1:A:235:ASP:HB3	1.48	1.07
1:A:175:PHE:CE1	1:A:177:ALA:CB	2.38	1.07
1:A:93:LEU:HD11	1:A:109:TRP:CH2	1.90	1.06
1:A:222:PRO:HG2	1:A:225:SER:CB	1.86	1.06
1:A:174:LEU:N	1:A:174:LEU:HD23	1.66	1.05
1:A:137:GLN:HG3	1:A:140:LEU:HD23	1.08	1.04
1:A:6:ALA:HB1	1:A:212:PHE:O	1.56	1.04
1:A:54:TYR:OH	1:A:80:ASP:O	1.74	1.03
1:A:87:GLU:HG2	1:A:182:TRP:CD2	1.93	1.03
1:A:2:ASP:HA	1:A:216:ASN:ND2	1.74	1.03
1:A:87:GLU:HG2	1:A:182:TRP:CE3	1.93	1.03
1:A:222:PRO:CB	1:A:225:SER:HB3	1.89	1.02
1:A:166:GLU:HG2	1:A:167:GLY:N	1.74	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:56:SER:HB2	1:A:189:VAL:HG12	1.40	1.02
1:A:53:ILE:N	1:A:53:ILE:HD12	1.71	1.02
1:A:53:ILE:HD11	1:A:62:SER:CB	1.91	1.01
1:A:115:LEU:CG	1:A:180:HIS:HE1	1.74	1.00
1:A:141:ILE:HB	1:A:174:LEU:O	1.61	1.00
1:A:87:GLU:HG3	1:A:182:TRP:HB3	1.03	1.00
1:A:115:LEU:HD21	1:A:182:TRP:O	1.58	1.00
1:A:87:GLU:OE2	1:A:182:TRP:CE2	2.15	0.99
1:A:222:PRO:HB2	1:A:225:SER:OG	1.61	0.99
1:A:180:HIS:C	1:A:180:HIS:ND1	2.15	0.99
1:A:68:PRO:HB2	1:A:69:ASN:ND2	1.78	0.99
1:A:116:LYS:O	1:A:117:SER:OG	1.78	0.99
1:A:111:PHE:HB3	1:A:128:PHE:CE2	1.99	0.98
1:A:180:HIS:ND1	1:A:180:HIS:O	1.95	0.98
1:A:222:PRO:HB2	1:A:225:SER:HB3	1.41	0.98
1:A:137:GLN:O	1:A:138:LYS:HB2	1.64	0.98
1:A:38:ALA:HB2	1:A:75:VAL:HG13	1.42	0.98
1:A:222:PRO:CB	1:A:225:SER:CB	2.40	0.98
1:A:106:ILE:HD11	1:A:156:LEU:HD21	1.00	0.97
1:A:224:GLY:O	1:A:229:LEU:HD22	1.63	0.97
1:A:87:GLU:OE2	1:A:182:TRP:CD2	2.16	0.97
1:A:4:ILE:C	1:A:4:ILE:HD13	1.80	0.97
1:A:104:ASN:HB2	1:A:157:THR:HG22	1.44	0.97
1:A:228:ARG:HG3	1:A:229:LEU:H	1.29	0.96
1:A:150:THR:OG1	1:A:151:ASP:OD2	1.83	0.96
1:A:14:ASN:O	1:A:19:ASP:HB3	1.65	0.96
1:A:175:PHE:CD1	1:A:177:ALA:HB3	2.00	0.96
1:A:182:TRP:HD1	1:A:183:GLU:H	1.06	0.96
1:A:58:ASP:O	1:A:59:LYS:CG	2.12	0.95
1:A:52:ILE:CD1	1:A:52:ILE:N	2.29	0.95
1:A:118:ASN:C	1:A:120:THR:H	1.67	0.95
1:A:133:PHE:CD1	1:A:154:LEU:CB	2.50	0.95
1:A:89:VAL:HG12	1:A:90:ARG:N	1.81	0.94
1:A:93:LEU:HD21	1:A:109:TRP:CZ2	2.02	0.94
1:A:6:ALA:HB2	1:A:213:PHE:CB	1.96	0.94
1:A:145:ASP:OD2	1:A:158:ARG:HG3	1.67	0.94
1:A:112:THR:HG23	1:A:127:HIS:HB2	1.49	0.94
1:A:182:TRP:CG	1:A:183:GLU:N	2.30	0.94
1:A:141:ILE:CG2	1:A:174:LEU:HG	1.98	0.94
1:A:222:PRO:CG	1:A:225:SER:CB	2.46	0.93
1:A:141:ILE:O	1:A:141:ILE:CG2	2.16	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:9:LEU:HB3	1:A:40:TRP:CH2	2.03	0.93
1:A:229:LEU:O	1:A:230:LEU:HB2	1.67	0.93
1:A:141:ILE:CB	1:A:174:LEU:O	2.16	0.92
1:A:51:HIS:C	1:A:52:ILE:CD1	2.38	0.92
1:A:94:SER:OG	1:A:232:LEU:HD21	1.68	0.92
1:A:230:LEU:HB3	1:A:232:LEU:HD12	1.48	0.92
1:A:182:TRP:CD1	1:A:183:GLU:CA	2.51	0.92
1:A:222:PRO:CB	1:A:225:SER:OG	2.18	0.92
1:A:200:LYS:O	1:A:201:SER:HB3	1.65	0.91
1:A:95:ALA:HB1	1:A:209:GLY:O	1.70	0.91
1:A:127:HIS:ND1	1:A:128:PHE:N	2.19	0.91
1:A:213:PHE:HD1	1:A:232:LEU:HD22	1.31	0.91
1:A:154:LEU:C	1:A:154:LEU:HD22	1.91	0.91
1:A:143:GLN:CD	1:A:144:GLY:N	2.24	0.90
1:A:6:ALA:CB	1:A:213:PHE:HB3	2.01	0.90
1:A:88:TRP:CZ2	1:A:182:TRP:CH2	2.53	0.90
1:A:116:LYS:HB2	1:A:188:THR:HG23	1.53	0.90
1:A:15:THR:CA	1:A:19:ASP:O	2.19	0.90
1:A:145:ASP:OD1	1:A:169:SER:HB2	1.71	0.90
1:A:4:ILE:HD11	1:A:233:PHE:HE1	1.37	0.90
1:A:87:GLU:CD	1:A:182:TRP:CG	2.46	0.89
1:A:14:ASN:C	1:A:19:ASP:CB	2.36	0.89
1:A:28:ASP:HB3	1:A:233:PHE:CZ	2.07	0.89
1:A:143:GLN:NE2	1:A:144:GLY:N	2.20	0.89
1:A:87:GLU:OE2	1:A:182:TRP:NE1	2.04	0.89
1:A:141:ILE:HG21	1:A:174:LEU:HB2	1.55	0.89
1:A:228:ARG:O	1:A:230:LEU:N	2.06	0.89
1:A:134:SER:O	1:A:148:THR:HG21	1.72	0.89
1:A:104:ASN:HB2	1:A:157:THR:HG21	1.54	0.88
1:A:141:ILE:HG21	1:A:174:LEU:CB	2.04	0.88
1:A:141:ILE:HG22	1:A:174:LEU:CA	2.02	0.88
1:A:166:GLU:HG2	1:A:167:GLY:H	1.31	0.88
1:A:154:LEU:HD22	1:A:155:GLU:N	1.88	0.88
1:A:213:PHE:CD1	1:A:232:LEU:CD2	2.56	0.88
1:A:87:GLU:CG	1:A:182:TRP:CD2	2.56	0.88
1:A:11:THR:HA	1:A:23:PRO:HB3	1.56	0.87
1:A:56:SER:CB	1:A:189:VAL:HG12	2.03	0.87
1:A:137:GLN:HG3	1:A:140:LEU:CD2	2.00	0.87
1:A:53:ILE:CD1	1:A:62:SER:HB2	2.02	0.87
1:A:180:HIS:CB	1:A:182:TRP:CH2	2.54	0.86
1:A:143:GLN:C	1:A:143:GLN:NE2	2.28	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:182:TRP:HD1	1:A:183:GLU:N	1.58	0.86
1:A:53:ILE:HD12	1:A:62:SER:O	1.75	0.86
1:A:229:LEU:HD12	1:A:229:LEU:H	1.41	0.85
1:A:48:GLY:HA3	1:A:197:PHE:CE2	2.11	0.85
1:A:89:VAL:CG1	1:A:90:ARG:H	1.89	0.85
1:A:93:LEU:HD21	1:A:109:TRP:NE1	1.91	0.85
1:A:2:ASP:CA	1:A:216:ASN:HD21	1.87	0.84
1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:HD12	1.87	0.84
1:A:213:PHE:CE1	1:A:232:LEU:CD2	2.59	0.84
1:A:102:GLU:HG2	1:A:207:ALA:C	1.97	0.84
1:A:216:ASN:OD1	1:A:216:ASN:N	2.10	0.84
1:A:65:VAL:HG23	1:A:73:THR:HG23	1.58	0.84
1:A:183:GLU:O	1:A:186:ALA:CB	2.26	0.84
1:A:141:ILE:O	1:A:141:ILE:HG23	1.77	0.83
1:A:89:VAL:CG1	1:A:90:ARG:N	2.41	0.83
1:A:228:ARG:CG	1:A:229:LEU:HD12	2.07	0.83
1:A:175:PHE:HE1	1:A:177:ALA:CB	1.79	0.83
1:A:88:TRP:CE3	1:A:179:VAL:O	2.31	0.83
1:A:200:LYS:O	1:A:201:SER:CB	2.27	0.83
1:A:53:ILE:CD1	1:A:62:SER:O	2.27	0.83
1:A:225:SER:HB2	1:A:231:GLY:HA2	1.61	0.82
1:A:51:HIS:O	1:A:52:ILE:HD12	1.78	0.82
1:A:115:LEU:CD2	1:A:180:HIS:HE1	1.92	0.82
1:A:228:ARG:O	1:A:230:LEU:HD23	1.80	0.82
1:A:53:ILE:O	1:A:53:ILE:HD13	1.80	0.82
1:A:234:PRO:O	1:A:235:ASP:CB	2.24	0.81
1:A:87:GLU:HG2	1:A:182:TRP:HB3	1.62	0.81
1:A:162:ASN:ND2	1:A:164:SER:OG	2.13	0.81
1:A:194:THR:HG23	1:A:194:THR:O	1.78	0.81
1:A:4:ILE:HD11	1:A:233:PHE:CE1	2.15	0.81
1:A:133:PHE:CE1	1:A:154:LEU:HB2	2.16	0.81
1:A:32:VAL:HA	1:A:233:PHE:CE2	2.16	0.81
1:A:51:HIS:CD2	1:A:194:THR:OG1	2.34	0.81
1:A:173:ALA:C	1:A:174:LEU:CD2	2.41	0.81
1:A:93:LEU:HD11	1:A:109:TRP:CZ2	2.16	0.80
1:A:91:VAL:HG21	1:A:111:PHE:CZ	2.17	0.80
1:A:28:ASP:CB	1:A:233:PHE:HZ	1.94	0.80
1:A:107:LEU:HD21	1:A:153:ASN:HD21	1.47	0.79
1:A:222:PRO:HG2	1:A:225:SER:HB2	1.63	0.79
1:A:141:ILE:CG2	1:A:174:LEU:O	2.30	0.79
1:A:166:GLU:OE2	1:A:169:SER:HB3	1.82	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:147:THR:O	1:A:154:LEU:HD23	1.82	0.79
1:A:221:ILE:HG23	1:A:222:PRO:O	1.83	0.79
1:A:106:ILE:HA	1:A:196:ALA:O	1.83	0.79
1:A:174:LEU:CD2	1:A:174:LEU:N	2.42	0.79
1:A:222:PRO:CG	1:A:225:SER:OG	2.31	0.79
1:A:32:VAL:HG22	1:A:233:PHE:CD2	2.18	0.78
1:A:28:ASP:HB3	1:A:31:SER:O	1.83	0.78
1:A:42:MET:CE	1:A:206:PRO:HG2	2.13	0.78
1:A:182:TRP:CD1	1:A:183:GLU:HA	2.17	0.78
1:A:53:ILE:O	1:A:53:ILE:CD1	2.32	0.78
1:A:230:LEU:HD12	1:A:232:LEU:HD11	1.64	0.78
1:A:120:THR:O	1:A:121:HIS:CG	2.37	0.78
1:A:11:THR:CA	1:A:23:PRO:HB3	2.14	0.77
1:A:106:ILE:HD12	1:A:154:LEU:HD13	1.67	0.77
1:A:143:GLN:C	1:A:143:GLN:CD	2.42	0.77
1:A:6:ALA:CB	1:A:212:PHE:O	2.31	0.77
1:A:141:ILE:CG2	1:A:174:LEU:H	1.95	0.77
1:A:120:THR:O	1:A:121:HIS:CD2	2.39	0.76
1:A:107:LEU:CD2	1:A:153:ASN:HD21	1.99	0.76
1:A:137:GLN:CG	1:A:140:LEU:CD2	2.59	0.76
1:A:141:ILE:CG2	1:A:174:LEU:CB	2.63	0.76
1:A:112:THR:HG23	1:A:127:HIS:CB	2.16	0.76
1:A:87:GLU:HG2	1:A:182:TRP:CG	2.10	0.76
1:A:222:PRO:HG2	1:A:231:GLY:HA2	1.67	0.76
1:A:32:VAL:HG13	1:A:233:PHE:HD2	1.51	0.75
1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:ND2	2.31	0.75
1:A:68:PRO:C	1:A:69:ASN:ND2	2.39	0.75
1:A:42:MET:HE3	1:A:206:PRO:HG3	1.67	0.75
1:A:17:ILE:CG2	1:A:237:ASN:OD1	2.35	0.75
1:A:115:LEU:CD1	1:A:180:HIS:ND1	2.24	0.75
1:A:42:MET:HE1	1:A:206:PRO:HG2	1.68	0.75
1:A:17:ILE:HB	1:A:237:ASN:OD1	1.87	0.74
1:A:90:ARG:HD2	1:A:175:PHE:O	1.87	0.74
1:A:222:PRO:HG2	1:A:225:SER:OG	1.88	0.74
1:A:127:HIS:O	1:A:128:PHE:HB3	1.85	0.74
1:A:51:HIS:NE2	1:A:194:THR:OG1	2.20	0.74
1:A:117:SER:HB3	1:A:187:ALA:HB3	1.70	0.74
1:A:9:LEU:HB3	1:A:40:TRP:CZ3	2.23	0.74
1:A:159:VAL:HA	1:A:165:PRO:HA	1.70	0.73
1:A:143:GLN:HE22	1:A:144:GLY:CA	2.01	0.73
1:A:25:ILE:HG23	1:A:40:TRP:CE3	2.23	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:88:TRP:NE1	1:A:182:TRP:CH2	2.57	0.73
1:A:137:GLN:HG2	1:A:140:LEU:HD23	1.67	0.73
1:A:141:ILE:CG2	1:A:174:LEU:CG	2.65	0.73
1:A:228:ARG:O	1:A:229:LEU:C	2.26	0.73
1:A:28:ASP:HB3	1:A:233:PHE:HZ	1.49	0.73
1:A:110:SER:HB3	1:A:194:THR:HG22	1.71	0.73
1:A:51:HIS:CD2	1:A:194:THR:HG1	2.05	0.73
1:A:158:ARG:HB3	1:A:158:ARG:HH11	1.52	0.73
1:A:112:THR:CG2	1:A:127:HIS:HB2	2.19	0.73
1:A:10:ASP:O	1:A:24:HIS:N	2.21	0.73
1:A:175:PHE:HE1	1:A:177:ALA:HB3	0.98	0.72
1:A:93:LEU:CD1	1:A:109:TRP:CH2	2.71	0.72
1:A:115:LEU:HD22	1:A:180:HIS:CE1	2.23	0.72
1:A:88:TRP:CE2	1:A:182:TRP:CZ3	2.76	0.72
1:A:183:GLU:O	1:A:186:ALA:HB2	1.88	0.72
1:A:53:ILE:N	1:A:53:ILE:CD1	2.45	0.72
1:A:38:ALA:HB2	1:A:75:VAL:CG1	2.18	0.72
1:A:93:LEU:CD2	1:A:109:TRP:CZ2	2.73	0.72
1:A:141:ILE:HG22	1:A:174:LEU:O	1.90	0.72
1:A:28:ASP:CB	1:A:233:PHE:CZ	2.70	0.71
1:A:237:ASN:HD22	1:A:237:ASN:N	1.87	0.71
1:A:154:LEU:CD2	1:A:154:LEU:C	2.58	0.71
1:A:194:THR:CG2	1:A:194:THR:O	2.39	0.71
1:A:208:ASP:OD2	4:A:242:HOH:O	2.07	0.71
1:A:56:SER:HB2	1:A:189:VAL:CG1	2.20	0.71
1:A:58:ASP:C	1:A:59:LYS:HG3	2.10	0.71
1:A:111:PHE:O	1:A:127:HIS:HA	1.90	0.70
1:A:134:SER:O	1:A:148:THR:HG23	1.91	0.70
1:A:117:SER:O	1:A:119:SER:N	2.25	0.70
1:A:180:HIS:CA	1:A:182:TRP:CZ3	2.74	0.70
1:A:213:PHE:CD2	1:A:213:PHE:C	2.64	0.70
1:A:32:VAL:HG13	1:A:233:PHE:CD2	2.26	0.70
1:A:172:ARG:HB2	1:A:221:ILE:HD11	1.73	0.70
1:A:141:ILE:HG21	1:A:174:LEU:CG	2.23	0.69
1:A:82:ASN:N	1:A:82:ASN:OD1	2.24	0.69
1:A:120:THR:C	1:A:121:HIS:CG	2.66	0.69
1:A:9:LEU:HG	1:A:210:ILE:O	1.91	0.69
1:A:127:HIS:C	1:A:127:HIS:ND1	2.46	0.69
1:A:11:THR:C	1:A:23:PRO:HB3	2.13	0.69
1:A:93:LEU:HD11	1:A:109:TRP:CZ3	2.27	0.69
1:A:32:VAL:HG22	1:A:233:PHE:CG	2.28	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:42:MET:HE3	1:A:206:PRO:CG	2.23	0.68
1:A:133:PHE:CE1	1:A:154:LEU:CB	2.75	0.68
1:A:106:ILE:HD11	1:A:156:LEU:CG	2.22	0.68
1:A:42:MET:CE	1:A:206:PRO:CG	2.71	0.68
1:A:135:LYS:CB	1:A:135:LYS:NZ	2.56	0.68
1:A:213:PHE:CD2	1:A:213:PHE:O	2.46	0.68
1:A:68:PRO:C	1:A:70:ALA:H	1.96	0.68
1:A:135:LYS:HB3	1:A:135:LYS:NZ	2.08	0.68
1:A:175:PHE:HD1	1:A:177:ALA:O	1.77	0.68
1:A:189:VAL:CG1	1:A:189:VAL:O	2.41	0.67
1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:HD13	2.08	0.67
1:A:141:ILE:HG21	1:A:174:LEU:HG	1.75	0.67
1:A:229:LEU:O	1:A:230:LEU:CB	2.43	0.67
1:A:93:LEU:CG	1:A:109:TRP:CZ2	2.78	0.67
1:A:225:SER:HB2	1:A:231:GLY:CA	2.24	0.67
1:A:145:ASP:OD2	1:A:158:ARG:CG	2.42	0.67
1:A:180:HIS:HA	1:A:182:TRP:CZ3	2.30	0.67
1:A:182:TRP:HD1	1:A:183:GLU:CA	1.96	0.67
1:A:154:LEU:CD2	1:A:155:GLU:N	2.56	0.66
1:A:65:VAL:HG23	1:A:73:THR:CG2	2.26	0.66
1:A:24:HIS:HA	1:A:40:TRP:HB3	1.78	0.66
1:A:117:SER:C	1:A:119:SER:H	1.99	0.66
1:A:162:ASN:CG	1:A:163:GLY:N	2.48	0.66
1:A:9:LEU:N	1:A:210:ILE:O	2.27	0.66
1:A:104:ASN:OD1	1:A:210:ILE:CG1	2.42	0.66
1:A:116:LYS:C	1:A:117:SER:OG	2.34	0.66
1:A:143:GLN:NE2	1:A:144:GLY:CA	2.58	0.66
1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:HD22	1.94	0.66
1:A:87:GLU:HG3	1:A:182:TRP:CG	2.01	0.65
1:A:111:PHE:HB3	1:A:128:PHE:CZ	2.31	0.65
1:A:236:ALA:O	1:A:237:ASN:OXT	2.14	0.65
1:A:43:GLN:HB2	1:A:67:TYR:CE2	2.31	0.65
1:A:141:ILE:O	1:A:141:ILE:HG22	1.97	0.65
1:A:115:LEU:CD2	1:A:180:HIS:CE1	2.73	0.65
1:A:135:LYS:HA	1:A:148:THR:HG22	1.78	0.65
1:A:172:ARG:HH12	1:A:220:SER:C	1.99	0.65
1:A:117:SER:HB2	1:A:185:SER:O	1.97	0.65
1:A:29:ILE:C	1:A:31:SER:H	1.99	0.65
1:A:182:TRP:O	1:A:183:GLU:HB3	1.96	0.65
1:A:141:ILE:CG2	1:A:174:LEU:CA	2.73	0.65
1:A:221:ILE:CG2	1:A:222:PRO:O	2.45	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:137:GLN:CB	1:A:140:LEU:CB	2.61	0.64
1:A:92:GLY:O	1:A:212:PHE:HD1	1.80	0.64
1:A:172:ARG:CZ	1:A:221:ILE:HD13	2.27	0.64
1:A:46:LYS:HD2	1:A:46:LYS:N	2.12	0.64
1:A:95:ALA:HB2	1:A:210:ILE:HA	1.78	0.64
1:A:111:PHE:CB	1:A:128:PHE:CZ	2.81	0.64
1:A:172:ARG:CZ	1:A:221:ILE:CD1	2.76	0.64
1:A:53:ILE:HD11	1:A:62:SER:C	2.18	0.63
1:A:172:ARG:NH1	1:A:221:ILE:HD12	2.12	0.63
1:A:25:ILE:HD11	1:A:38:ALA:HB3	1.80	0.63
1:A:213:PHE:C	1:A:213:PHE:HD2	2.02	0.63
1:A:117:SER:C	1:A:119:SER:N	2.50	0.63
1:A:141:ILE:HG23	1:A:174:LEU:HG	1.77	0.63
1:A:115:LEU:CD2	1:A:182:TRP:O	2.43	0.63
1:A:8:GLU:C	1:A:9:LEU:HD23	2.18	0.63
1:A:230:LEU:HD12	1:A:232:LEU:CD1	2.29	0.62
1:A:60:ARG:HD3	1:A:62:SER:OG	1.99	0.62
1:A:118:ASN:ND2	1:A:183:GLU:OE1	2.32	0.62
1:A:97:THR:O	1:A:226:THR:HG22	2.00	0.62
1:A:53:ILE:HD11	1:A:62:SER:CA	2.28	0.62
1:A:8:GLU:OE1	1:A:10:ASP:OD1	2.17	0.62
1:A:13:PRO:HG3	1:A:22:TYR:HA	1.80	0.62
1:A:9:LEU:N	1:A:9:LEU:HD23	2.15	0.62
1:A:12:TYR:CD2	1:A:14:ASN:ND2	2.68	0.62
1:A:9:LEU:CA	1:A:40:TRP:HZ3	2.13	0.62
1:A:213:PHE:CE1	1:A:232:LEU:HD23	2.35	0.61
1:A:107:LEU:CD2	1:A:153:ASN:ND2	2.63	0.61
1:A:130:PHE:O	1:A:131:ASN:CG	2.39	0.61
1:A:183:GLU:O	1:A:186:ALA:HB3	1.98	0.61
1:A:87:GLU:CD	1:A:182:TRP:CD2	2.71	0.61
1:A:136:ASP:O	1:A:136:ASP:CG	2.39	0.61
1:A:143:GLN:OE1	1:A:144:GLY:N	2.33	0.61
1:A:49:THR:HG22	1:A:51:HIS:CE1	2.35	0.61
1:A:118:ASN:C	1:A:120:THR:N	2.31	0.61
1:A:110:SER:HB3	1:A:194:THR:CG2	2.29	0.61
1:A:11:THR:O	1:A:23:PRO:HB3	2.01	0.61
1:A:115:LEU:CG	1:A:180:HIS:CE1	2.60	0.61
1:A:237:ASN:H	1:A:237:ASN:HD22	1.47	0.61
1:A:17:ILE:CB	1:A:237:ASN:OD1	2.49	0.61
1:A:107:LEU:HG	1:A:153:ASN:ND2	2.15	0.61
1:A:97:THR:C	1:A:167:GLY:O	2.38	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:141:ILE:CG2	1:A:174:LEU:N	2.56	0.60
1:A:213:PHE:O	1:A:213:PHE:HD2	1.84	0.60
1:A:93:LEU:CD1	1:A:109:TRP:CZ2	2.84	0.60
1:A:141:ILE:HG22	1:A:174:LEU:C	2.21	0.60
1:A:222:PRO:HG2	1:A:231:GLY:CA	2.31	0.60
1:A:68:PRO:CB	1:A:69:ASN:ND2	2.59	0.60
1:A:68:PRO:O	1:A:70:ALA:N	2.35	0.60
1:A:56:SER:HB2	1:A:189:VAL:H	1.66	0.60
1:A:228:ARG:HG3	1:A:229:LEU:N	2.10	0.60
1:A:182:TRP:O	1:A:183:GLU:CB	2.48	0.60
1:A:120:THR:HG21	1:A:122:GLN:OE1	2.02	0.59
1:A:137:GLN:OE1	1:A:137:GLN:HA	2.01	0.59
1:A:145:ASP:OD1	1:A:169:SER:CB	2.49	0.59
1:A:102:GLU:CB	1:A:207:ALA:O	2.50	0.59
1:A:137:GLN:CG	1:A:140:LEU:HB2	2.32	0.59
1:A:80:ASP:OD1	1:A:82:ASN:OD1	2.20	0.59
1:A:147:THR:O	1:A:154:LEU:CD2	2.51	0.59
1:A:54:TYR:CE2	1:A:59:LYS:HA	2.38	0.59
1:A:228:ARG:CG	1:A:229:LEU:H	2.06	0.58
1:A:32:VAL:HG22	1:A:233:PHE:CB	2.34	0.58
1:A:33:ARG:HE	1:A:237:ASN:HB3	1.68	0.58
1:A:109:TRP:O	1:A:129:MET:HA	2.04	0.58
1:A:79:VAL:O	1:A:79:VAL:HG13	2.04	0.58
1:A:106:ILE:CD1	1:A:156:LEU:CD2	2.53	0.58
1:A:107:LEU:HD23	1:A:153:ASN:OD1	2.03	0.58
1:A:103:THR:CG2	1:A:165:PRO:HG3	2.34	0.58
1:A:180:HIS:CD2	1:A:182:TRP:CZ2	2.91	0.58
1:A:118:ASN:HA	1:A:185:SER:HB2	1.86	0.57
1:A:53:ILE:HD11	1:A:62:SER:O	2.02	0.57
1:A:101:LYS:O	1:A:102:GLU:HB3	2.03	0.57
1:A:230:LEU:HB3	1:A:232:LEU:CD1	2.27	0.57
1:A:27:ILE:CG2	1:A:29:ILE:HD11	2.34	0.57
1:A:27:ILE:O	1:A:27:ILE:HG22	2.04	0.57
1:A:183:GLU:HB3	1:A:186:ALA:HB2	1.86	0.57
1:A:51:HIS:O	1:A:63:ALA:HA	2.05	0.57
1:A:111:PHE:CE1	1:A:193:ALA:HB2	2.40	0.57
1:A:88:TRP:CD2	1:A:182:TRP:CZ3	2.92	0.57
1:A:45:GLY:C	1:A:46:LYS:HD2	2.25	0.57
1:A:225:SER:CB	1:A:231:GLY:HA2	2.31	0.57
1:A:10:ASP:HB3	1:A:24:HIS:CE1	2.40	0.57
1:A:105:THR:O	1:A:197:PHE:HA	2.05	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:49:THR:CG2	1:A:51:HIS:CE1	2.88	0.57
1:A:133:PHE:CG	1:A:154:LEU:HB2	2.38	0.56
1:A:53:ILE:CD1	1:A:53:ILE:C	2.73	0.56
1:A:29:ILE:C	1:A:31:SER:N	2.57	0.56
1:A:89:VAL:HG12	1:A:90:ARG:H	1.47	0.56
1:A:36:LYS:HD2	1:A:76:SER:O	2.06	0.56
1:A:137:GLN:HB2	1:A:140:LEU:HB2	1.77	0.56
1:A:67:TYR:HB3	1:A:68:PRO:HD2	1.88	0.56
1:A:11:THR:HA	1:A:23:PRO:CB	2.34	0.56
1:A:166:GLU:CG	1:A:167:GLY:N	2.61	0.55
1:A:189:VAL:O	1:A:189:VAL:HG13	2.04	0.55
1:A:10:ASP:N	1:A:24:HIS:O	2.38	0.55
1:A:28:ASP:HB2	1:A:233:PHE:HZ	1.68	0.55
1:A:145:ASP:CG	1:A:158:ARG:HG3	2.26	0.55
1:A:222:PRO:CG	1:A:225:SER:HB3	2.24	0.55
1:A:7:VAL:O	1:A:7:VAL:CG2	2.53	0.55
1:A:91:VAL:HG21	1:A:111:PHE:HZ	1.72	0.55
1:A:131:ASN:O	1:A:152:GLY:O	2.24	0.55
1:A:173:ALA:CA	1:A:174:LEU:HD23	2.33	0.55
1:A:89:VAL:HG13	1:A:215:SER:O	2.06	0.55
1:A:53:ILE:CD1	1:A:62:SER:CB	2.74	0.55
1:A:53:ILE:O	1:A:53:ILE:HD12	2.07	0.55
1:A:8:GLU:O	1:A:25:ILE:HA	2.07	0.55
1:A:173:ALA:O	1:A:174:LEU:HD23	1.99	0.54
1:A:195:PHE:CD1	1:A:195:PHE:C	2.81	0.54
1:A:229:LEU:HD23	1:A:235:ASP:HA	1.89	0.54
1:A:25:ILE:HD13	1:A:75:VAL:HG21	1.89	0.54
1:A:104:ASN:OD1	1:A:210:ILE:HG12	2.06	0.54
1:A:119:SER:O	1:A:121:HIS:ND1	2.40	0.54
1:A:81:LEU:HA	1:A:84:VAL:HG23	1.89	0.54
1:A:145:ASP:OD2	1:A:158:ARG:HD2	2.07	0.54
1:A:115:LEU:HD22	1:A:183:GLU:HB2	1.89	0.54
1:A:94:SER:HB2	1:A:171:GLY:O	2.08	0.53
1:A:43:GLN:HB2	1:A:67:TYR:CZ	2.43	0.53
1:A:9:LEU:HB3	1:A:40:TRP:HH2	1.64	0.53
1:A:116:LYS:HB2	1:A:188:THR:CG2	2.29	0.53
1:A:229:LEU:N	1:A:229:LEU:HD12	2.19	0.53
1:A:228:ARG:C	1:A:230:LEU:N	2.62	0.53
1:A:14:ASN:CA	1:A:19:ASP:HB3	2.38	0.53
1:A:92:GLY:O	1:A:212:PHE:CD1	2.61	0.53
1:A:158:ARG:NH1	1:A:158:ARG:HB3	2.21	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2:ASP:OD2	1:A:219:SER:HA	2.08	0.53
1:A:35:LYS:HB3	1:A:77:TYR:CE2	2.43	0.53
1:A:64:VAL:HG23	1:A:64:VAL:O	2.07	0.53
1:A:213:PHE:HE1	1:A:232:LEU:CD2	2.21	0.53
1:A:68:PRO:C	1:A:70:ALA:N	2.63	0.53
1:A:68:PRO:C	1:A:69:ASN:CG	2.68	0.52
1:A:141:ILE:CG2	1:A:174:LEU:C	2.77	0.52
1:A:144:GLY:C	1:A:146:ALA:H	2.13	0.52
1:A:29:ILE:O	1:A:31:SER:N	2.42	0.52
1:A:92:GLY:C	1:A:93:LEU:HG	2.28	0.52
1:A:95:ALA:CB	1:A:209:GLY:O	2.49	0.52
1:A:235:ASP:OD2	1:A:236:ALA:N	2.42	0.52
1:A:105:THR:OG1	1:A:155:GLU:HG2	2.09	0.52
1:A:104:ASN:CB	1:A:157:THR:HG21	2.36	0.52
1:A:98:GLY:N	1:A:167:GLY:O	2.42	0.52
1:A:118:ASN:CA	1:A:185:SER:HB2	2.40	0.51
1:A:230:LEU:CD1	1:A:232:LEU:HD11	2.38	0.51
1:A:143:GLN:HE22	1:A:144:GLY:HA3	1.72	0.51
1:A:115:LEU:CD2	1:A:183:GLU:HB3	2.41	0.51
1:A:89:VAL:CG1	1:A:214:ILE:HG22	2.40	0.51
1:A:25:ILE:CD1	1:A:38:ALA:HB3	2.39	0.51
1:A:172:ARG:CB	1:A:221:ILE:HD11	2.40	0.51
1:A:25:ILE:CD1	1:A:75:VAL:HG21	2.41	0.51
1:A:89:VAL:HG13	1:A:90:ARG:H	1.74	0.51
1:A:80:ASP:O	1:A:81:LEU:CB	2.59	0.51
1:A:115:LEU:HD11	1:A:180:HIS:CE1	2.25	0.50
1:A:90:ARG:O	1:A:214:ILE:HA	2.12	0.50
1:A:9:LEU:CD2	1:A:25:ILE:HG22	2.41	0.50
1:A:102:GLU:OE1	1:A:104:ASN:OD1	2.29	0.50
1:A:9:LEU:HD22	1:A:25:ILE:HG22	1.92	0.50
1:A:58:ASP:C	1:A:59:LYS:CG	2.74	0.50
1:A:9:LEU:CB	1:A:40:TRP:CZ3	2.94	0.50
1:A:111:PHE:N	1:A:128:PHE:O	2.38	0.49
1:A:107:LEU:CG	1:A:153:ASN:ND2	2.75	0.49
1:A:56:SER:HB2	1:A:189:VAL:N	2.26	0.49
1:A:96:SER:O	1:A:208:ASP:HB2	2.11	0.49
1:A:36:LYS:CD	1:A:76:SER:O	2.61	0.49
1:A:180:HIS:CG	1:A:182:TRP:CZ3	2.99	0.49
1:A:231:GLY:C	1:A:232:LEU:HG	2.33	0.49
1:A:9:LEU:CA	1:A:40:TRP:CZ3	2.93	0.49
1:A:106:ILE:HD13	1:A:156:LEU:HD21	1.81	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:17:ILE:HG13	1:A:17:ILE:O	2.13	0.49
1:A:94:SER:HA	1:A:171:GLY:O	2.13	0.48
1:A:228:ARG:CG	1:A:229:LEU:N	2.74	0.48
1:A:14:ASN:N	1:A:19:ASP:HB3	2.28	0.48
1:A:108:SER:HB2	1:A:131:ASN:ND2	2.28	0.48
1:A:107:LEU:O	1:A:131:ASN:HA	2.14	0.48
1:A:28:ASP:CB	1:A:31:SER:O	2.58	0.48
1:A:93:LEU:HG	1:A:109:TRP:CZ2	2.49	0.48
1:A:133:PHE:CE1	1:A:154:LEU:HB3	2.48	0.47
1:A:52:ILE:O	1:A:53:ILE:HG23	2.14	0.47
1:A:237:ASN:ND2	1:A:237:ASN:N	2.59	0.47
1:A:147:THR:HG22	1:A:148:THR:N	2.29	0.47
1:A:237:ASN:H	1:A:237:ASN:ND2	2.10	0.47
1:A:118:ASN:O	1:A:119:SER:C	2.50	0.47
1:A:120:THR:HB	1:A:122:GLN:HG3	1.96	0.47
1:A:136:ASP:OD1	1:A:136:ASP:O	2.33	0.47
1:A:101:LYS:HG2	1:A:101:LYS:H	1.58	0.47
1:A:111:PHE:HB2	1:A:128:PHE:CZ	2.49	0.47
1:A:48:GLY:HA3	1:A:197:PHE:CZ	2.50	0.47
1:A:117:SER:CB	1:A:185:SER:O	2.63	0.47
1:A:145:ASP:OD2	1:A:158:ARG:CD	2.64	0.46
1:A:222:PRO:CG	1:A:231:GLY:C	2.84	0.46
1:A:145:ASP:CB	1:A:169:SER:HB2	2.41	0.46
1:A:228:ARG:HG3	1:A:229:LEU:CD1	2.15	0.46
1:A:170:VAL:O	1:A:170:VAL:HG22	2.15	0.46
1:A:172:ARG:NH1	1:A:221:ILE:CD1	2.78	0.46
1:A:25:ILE:HD12	1:A:25:ILE:O	2.15	0.46
1:A:114:LYS:N	1:A:190:SER:O	2.38	0.46
1:A:109:TRP:O	1:A:130:PHE:N	2.48	0.46
1:A:115:LEU:HD22	1:A:183:GLU:CB	2.46	0.46
1:A:85:LEU:HB3	1:A:86:PRO:HD2	1.97	0.46
1:A:89:VAL:HG11	1:A:214:ILE:CG2	2.46	0.46
1:A:99:LEU:HD22	1:A:99:LEU:HA	1.70	0.46
1:A:158:ARG:HB2	1:A:169:SER:HB3	1.97	0.46
1:A:115:LEU:CD2	1:A:183:GLU:CB	2.94	0.46
1:A:137:GLN:HG2	1:A:140:LEU:CD2	2.36	0.45
1:A:7:VAL:O	1:A:7:VAL:HG22	2.16	0.45
1:A:212:PHE:CD1	1:A:213:PHE:N	2.85	0.45
1:A:214:ILE:HG12	1:A:214:ILE:H	1.46	0.45
1:A:108:SER:O	1:A:195:PHE:HB2	2.16	0.45
1:A:50:ALA:O	1:A:194:THR:HA	2.15	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:9:LEU:HA	1:A:40:TRP:HZ3	1.82	0.45
1:A:17:ILE:HG22	1:A:237:ASN:OD1	2.16	0.45
1:A:87:GLU:O	1:A:182:TRP:HE3	2.00	0.45
1:A:228:ARG:H	1:A:228:ARG:HG2	1.54	0.45
1:A:42:MET:HG2	1:A:43:GLN:N	2.31	0.45
1:A:52:ILE:HG22	1:A:53:ILE:N	2.31	0.45
1:A:53:ILE:C	1:A:53:ILE:HD13	2.34	0.45
1:A:112:THR:CB	1:A:127:HIS:HB2	2.47	0.45
1:A:97:THR:OG1	1:A:167:GLY:C	2.56	0.45
1:A:105:THR:OG1	1:A:155:GLU:CD	2.56	0.44
1:A:96:SER:OG	1:A:227:GLY:O	2.35	0.44
1:A:103:THR:HG22	1:A:165:PRO:HG3	1.99	0.44
1:A:36:LYS:C	1:A:37:THR:HG22	2.38	0.44
1:A:87:GLU:HG2	1:A:182:TRP:CB	2.16	0.44
1:A:222:PRO:HG2	1:A:231:GLY:C	2.38	0.44
1:A:135:LYS:HZ1	1:A:135:LYS:HB3	1.80	0.44
1:A:88:TRP:HE3	1:A:179:VAL:O	1.94	0.44
1:A:25:ILE:HD13	1:A:75:VAL:CG2	2.47	0.44
1:A:209:GLY:C	1:A:210:ILE:HG13	2.37	0.44
1:A:8:GLU:HG2	1:A:8:GLU:O	2.17	0.44
1:A:135:LYS:HG3	1:A:135:LYS:H	1.40	0.44
1:A:9:LEU:HA	1:A:40:TRP:CZ3	2.52	0.44
1:A:175:PHE:CD1	1:A:177:ALA:CB	2.85	0.44
1:A:137:GLN:HB3	1:A:140:LEU:CB	2.11	0.44
1:A:144:GLY:C	1:A:146:ALA:N	2.70	0.44
1:A:162:ASN:ND2	1:A:163:GLY:N	2.66	0.44
1:A:184:SER:C	1:A:186:ALA:H	2.21	0.44
1:A:51:HIS:CD2	1:A:194:THR:CB	3.01	0.44
1:A:115:LEU:CD1	1:A:189:VAL:HG23	2.47	0.43
1:A:150:THR:C	1:A:151:ASP:CG	2.76	0.43
1:A:13:PRO:HB3	1:A:22:TYR:N	2.33	0.43
1:A:114:LYS:HB2	1:A:190:SER:OG	2.18	0.43
1:A:86:PRO:HD2	1:A:89:VAL:CG2	2.49	0.43
1:A:112:THR:OG1	1:A:127:HIS:HB2	2.19	0.43
1:A:111:PHE:CB	1:A:128:PHE:CE2	2.85	0.43
1:A:172:ARG:HE	1:A:172:ARG:HB3	1.59	0.43
1:A:86:PRO:HG2	1:A:89:VAL:HG22	1.99	0.43
1:A:118:ASN:HA	1:A:185:SER:CB	2.48	0.43
1:A:3:THR:O	1:A:4:ILE:HG22	2.18	0.43
1:A:120:THR:C	1:A:121:HIS:ND1	2.72	0.43
1:A:162:ASN:ND2	1:A:163:GLY:H	2.17	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:166:GLU:HG2	1:A:168:SER:H	1.84	0.43
1:A:180:HIS:HA	1:A:182:TRP:HZ3	1.77	0.43
1:A:104:ASN:HA	1:A:210:ILE:HD11	2.01	0.43
1:A:111:PHE:O	1:A:128:PHE:N	2.52	0.43
1:A:120:THR:HG21	1:A:122:GLN:CD	2.39	0.43
1:A:152:GLY:O	1:A:153:ASN:OD1	2.37	0.43
1:A:140:LEU:HA	1:A:140:LEU:HD13	1.76	0.42
1:A:12:TYR:HD2	1:A:14:ASN:ND2	2.17	0.42
1:A:9:LEU:CG	1:A:210:ILE:O	2.64	0.42
1:A:38:ALA:O	1:A:39:LYS:C	2.58	0.42
1:A:33:ARG:O	1:A:34:SER:C	2.56	0.42
1:A:47:VAL:O	1:A:67:TYR:HD1	2.01	0.42
1:A:94:SER:HB3	1:A:172:ARG:CG	2.49	0.42
1:A:180:HIS:CB	1:A:182:TRP:CE3	2.96	0.42
1:A:89:VAL:HG12	1:A:214:ILE:HG22	2.00	0.42
1:A:112:THR:HA	1:A:127:HIS:HA	2.00	0.42
1:A:13:PRO:HG3	1:A:23:PRO:HD3	2.01	0.42
1:A:166:GLU:CD	1:A:168:SER:H	2.23	0.42
1:A:17:ILE:HD13	1:A:228:ARG:HD3	2.01	0.42
1:A:54:TYR:HD2	1:A:60:ARG:O	2.02	0.42
1:A:89:VAL:O	1:A:179:VAL:HG23	2.20	0.42
1:A:180:HIS:CG	1:A:182:TRP:CH2	3.07	0.42
1:A:102:GLU:HB3	1:A:207:ALA:O	2.18	0.42
1:A:89:VAL:HG11	1:A:214:ILE:HG22	2.01	0.42
1:A:141:ILE:O	1:A:173:ALA:HA	2.19	0.42
1:A:33:ARG:HH11	1:A:33:ARG:HD3	1.65	0.42
1:A:43:GLN:HB3	1:A:46:LYS:HB2	2.00	0.42
1:A:43:GLN:OE1	1:A:46:LYS:HG2	2.20	0.42
1:A:130:PHE:C	1:A:131:ASN:CG	2.78	0.42
1:A:166:GLU:OE2	1:A:169:SER:N	2.53	0.42
1:A:90:ARG:O	1:A:214:ILE:HG22	2.20	0.42
1:A:25:ILE:HG23	1:A:40:TRP:CZ3	2.54	0.42
1:A:100:TYR:HB2	1:A:207:ALA:HB3	2.01	0.42
1:A:17:ILE:HD11	1:A:228:ARG:HB2	2.01	0.42
1:A:89:VAL:HG12	1:A:90:ARG:O	2.19	0.42
1:A:189:VAL:O	1:A:189:VAL:HG12	2.18	0.41
1:A:9:LEU:HD22	1:A:25:ILE:CG2	2.50	0.41
1:A:225:SER:HB2	1:A:231:GLY:N	2.34	0.41
1:A:233:PHE:HA	1:A:234:PRO:HD3	1.72	0.41
1:A:37:THR:C	1:A:75:VAL:HG11	2.40	0.41
1:A:135:LYS:HZ2	1:A:135:LYS:HB3	1.81	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:172:ARG:NE	1:A:221:ILE:CD1	2.84	0.41
1:A:228:ARG:O	1:A:230:LEU:CA	2.69	0.41
1:A:46:LYS:CD	1:A:46:LYS:N	2.82	0.41
1:A:3:THR:C	1:A:4:ILE:CG2	2.89	0.41
1:A:24:HIS:C	1:A:40:TRP:HE3	2.23	0.41
1:A:9:LEU:C	1:A:40:TRP:HZ3	2.23	0.41
1:A:109:TRP:HE3	1:A:133:PHE:HZ	1.68	0.41
1:A:150:THR:OG1	1:A:151:ASP:N	2.54	0.41
1:A:228:ARG:HA	4:A:242:HOH:O	2.21	0.41
1:A:4:ILE:CD1	1:A:4:ILE:N	2.83	0.41
1:A:214:ILE:O	1:A:215:SER:HB3	2.21	0.41
1:A:24:HIS:ND1	1:A:24:HIS:N	2.68	0.41
1:A:135:LYS:HE3	1:A:135:LYS:HB2	1.77	0.41
1:A:141:ILE:N	1:A:174:LEU:O	2.54	0.41
1:A:103:THR:O	1:A:199:ILE:HG23	2.21	0.40
1:A:110:SER:HA	1:A:129:MET:HA	2.03	0.40
1:A:40:TRP:C	1:A:40:TRP:CD1	2.94	0.40
1:A:93:LEU:CD2	1:A:109:TRP:CE2	2.77	0.40
1:A:143:GLN:NE2	1:A:144:GLY:HA3	2.33	0.40

All (4) symmetry-related close contacts are listed below. The label for Atom-2 includes the symmetry operator and encoded unit-cell translations to be applied.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:58:ASP:OD1	1:A:60:ARG:CD[3_555]	1.44	0.76
1:A:122:GLN:NE2	1:A:132:GLN:OE1[4_555]	1.49	0.71
1:A:58:ASP:OD1	1:A:60:ARG:NH1[3_555]	1.88	0.32
1:A:58:ASP:OD1	1:A:60:ARG:NE[3_555]	2.06	0.14

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	235/237 (99%)	179 (76%)	32 (14%)	24 (10%)	1 0

All (24) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	118	ASN
1	A	119	SER
1	A	201	SER
1	A	229	LEU
1	A	235	ASP
1	A	34	SER
1	A	69	ASN
1	A	98	GLY
1	A	117	SER
1	A	138	LYS
1	A	183	GLU
1	A	236	ALA
1	A	33	ARG
1	A	128	PHE
1	A	131	ASN
1	A	163	GLY
1	A	200	LYS
1	A	230	LEU
1	A	30	LYS
1	A	102	GLU
1	A	145	ASP
1	A	216	ASN
1	A	188	THR
1	A	234	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	202/202 (100%)	117 (58%)	85 (42%)	0 0

All (85) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	3	THR
1	A	4	ILE
1	A	7	VAL
1	A	8	GLU
1	A	10	ASP
1	A	16	ASP
1	A	21	SER
1	A	25	ILE
1	A	27	ILE
1	A	32	VAL
1	A	34	SER
1	A	35	LYS
1	A	37	THR
1	A	43	GLN
1	A	52	ILE
1	A	53	ILE
1	A	56	SER
1	A	59	LYS
1	A	60	ARG
1	A	61	LEU
1	A	62	SER
1	A	65	VAL
1	A	66	SER
1	A	69	ASN
1	A	73	THR
1	A	74	SER
1	A	75	VAL
1	A	82	ASN
1	A	84	VAL
1	A	91	VAL
1	A	93	LEU
1	A	99	LEU
1	A	101	LYS
1	A	106	ILE
1	A	107	LEU
1	A	115	LEU
1	A	117	SER
1	A	118	ASN
1	A	122	GLN
1	A	123	THR
1	A	124	ASP
1	A	126	LEU
1	A	127	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	129	MET
1	A	132	GLN
1	A	135	LYS
1	A	137	GLN
1	A	138	LYS
1	A	140	LEU
1	A	141	ILE
1	A	143	GLN
1	A	148	THR
1	A	151	ASP
1	A	154	LEU
1	A	155	GLU
1	A	156	LEU
1	A	157	THR
1	A	158	ARG
1	A	161	SER
1	A	162	ASN
1	A	166	GLU
1	A	168	SER
1	A	170	VAL
1	A	172	ARG
1	A	174	LEU
1	A	179	VAL
1	A	180	HIS
1	A	185	SER
1	A	188	THR
1	A	189	VAL
1	A	198	LEU
1	A	199	ILE
1	A	204	SER
1	A	208	ASP
1	A	213	PHE
1	A	214	ILE
1	A	216	ASN
1	A	218	ASP
1	A	220	SER
1	A	221	ILE
1	A	226	THR
1	A	230	LEU
1	A	232	LEU
1	A	235	ASP
1	A	237	ASN

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (5) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	69	ASN
1	A	143	GLN
1	A	153	ASN
1	A	162	ASN
1	A	180	HIS

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 2 ligands modelled in this entry, 2 are 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 ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data

6.1 Protein, DNA and RNA chains

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.2 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.3 Carbohydrates

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.4 Ligands

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.5 Other polymers

EDS was not executed - this section is therefore empty.