



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Feb 14, 2017 – 01:42 pm GMT

PDB ID : 2I6W  
Title : Crystal structure of the multidrug efflux transporter AcrB  
Authors : Das, D.; Xu, Q.S.; Kim, S.H.  
Deposited on : 2006-08-29  
Resolution : 3.10 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

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

MolProbity : 4.02b-467  
Xtriage (Phenix) : 1.9-1692  
EDS : 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

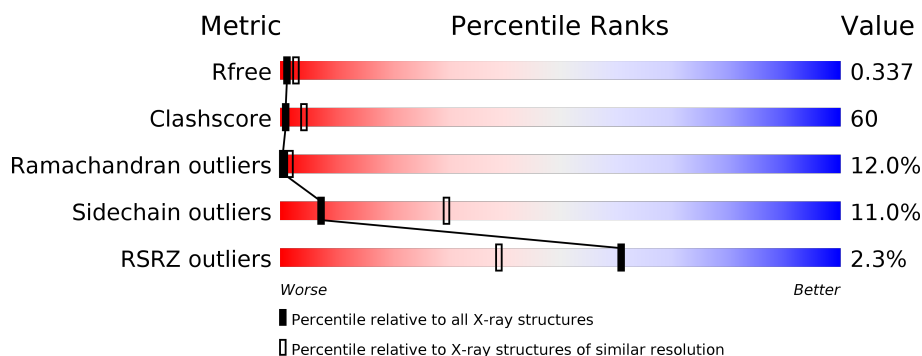
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*X-RAY DIFFRACTION*

The reported resolution of this entry is 3.10 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
$R_{free}$	100719	1001 (3.12-3.08)
Clashscore	112137	1099 (3.12-3.08)
Ramachandran outliers	110173	1057 (3.12-3.08)
Sidechain outliers	110143	1057 (3.12-3.08)
RSRZ outliers	101464	1006 (3.12-3.08)

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	1049	

## 2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 7737 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.

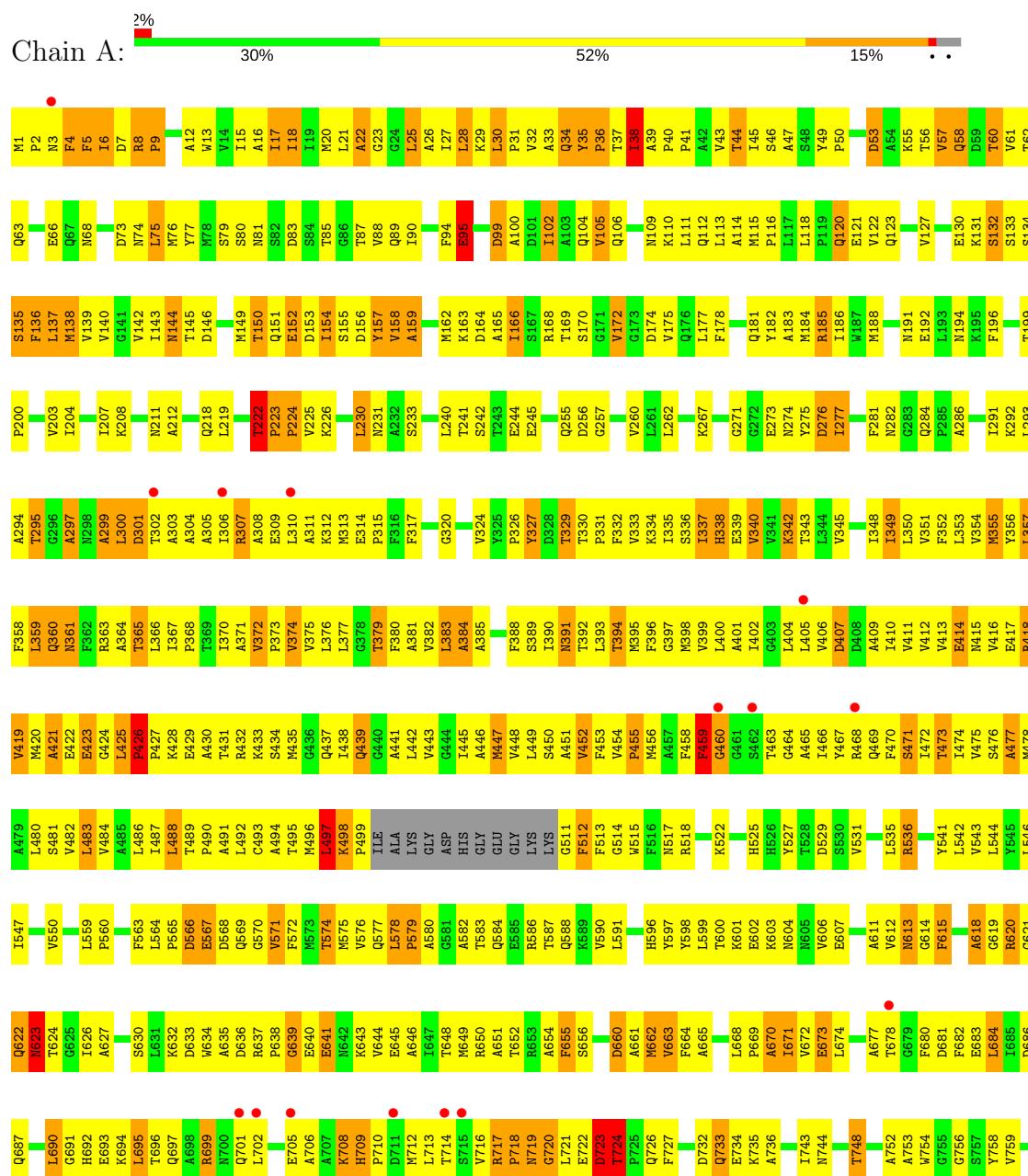
- Molecule 1 is a protein called Acriflavine resistance protein B.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	1019	7737	4983	1270	1440	44	0	0	0

### 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: Acriflavine resistance protein B



F1026	F762	Q830	E893	L960
V1027	I763	A831	S894	I961
V1028	D764	A832	W895	
V1029	R765	P833	S896	T964
R1030	G766	K834	I897	L965
ARG	R767	K835	P898	D966
ARG	W768	S836	F899	A967
PHE	K769	T837	S900	V968
SER	K770	G838	V901	V969
ARG		E839	M902	M970
ARG		A840	L903	R971
LYS		E841	L904	L972
ASN	W774	M842	V905	R973
GLU	S775	E843	P906	P974
ASP		L843	L907	I975
ASP	K778	M844	G908	L976
ILE	Y779	Q846	V909	M977
GLU	R780	L847	I910	T978
HIS	W781		G911	S979
HIS	L782	L851		L980
SER	P783	P852	L914	A981
HIS	D784	T853	T917	F982
THR	D785	G854	F918	I983
VAL	I786	V855	R919	L984
ASP			G920	G985
HIS		D858	L921	V986
HIS	W789	W859	V925	M987
	Y790	T860		P988
	V791	G861		L989
	R792	M862		V990
	A793	S863		I991
	A794	Y864	Q928	S992
	D795	Q865	V929	T993
	G796	E866	G930	G994
	Q797	E867	L931	A995
	W798	L868	L932	G996
	V799	S869	T933	S997
	P800	G870	T934	G998
	F801	M871	I935	A999
		Q872		Q1000
	F804	A873	S938	N1001
		W809	A939	A1002
		E810	K940	A1003
		Y811	N941	V1003
		G812	A942	G1004
		P814	I943	T1005
		S813	L944	G1006
		R815	I945	V1007
		L816	M1008	M1008
		L817	V946	G1009
		R818		
		Y819	A949	
			K950	V1016
			D951	L1017
			L952	A1018
			M953	I1019
			L866	F1020
			F885	F1021
			C887	V1022
			L888	P1023
			L825	V1024
			A889	F1025
			A890	
			L891	
			L828	
			Y892	

## 4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	H 3 2	Depositor
Cell constants a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	146.30Å 146.30Å 514.30Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	45.12 – 3.10 45.12 – 3.10	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.6 (45.12-3.10) 99.7 (45.12-3.10)	Depositor EDS
$R_{merge}$	0.07	Depositor
$R_{sym}$	0.12	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ <sup>1</sup>	2.57 (at 3.12Å)	Xtriage
Refinement program	CNS 1.1	Depositor
R, $R_{free}$	0.305 , 0.341 0.300 , 0.337	Depositor DCC
$R_{free}$ test set	1952 reflections (5.02%)	DCC
Wilson B-factor (Å <sup>2</sup> )	84.8	Xtriage
Anisotropy	0.281	Xtriage
Bulk solvent $k_{sol}$ (e/Å <sup>3</sup> ), $B_{sol}$ (Å <sup>2</sup> )	0.28 , 66.8	EDS
L-test for twinning <sup>2</sup>	$\langle  L  \rangle = 0.53$ , $\langle L^2 \rangle = 0.37$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
$F_o, F_c$ correlation	0.89	EDS
Total number of atoms	7737	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	69.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 2.58% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

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

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

## 5 Model quality [i](#)

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

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	0.46	0/7884	0.74	5/10712 (0.0%)

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	0	1

There are no bond length outliers.

All (5) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	8	ARG	N-CA-C	-6.93	92.29	111.00
1	A	497	LEU	N-CA-C	6.33	128.08	111.00
1	A	972	LEU	CA-CB-CG	5.37	127.66	115.30
1	A	497	LEU	CA-CB-CG	-5.17	103.40	115.30
1	A	300	LEU	CA-CB-CG	5.02	126.85	115.30

There are no chirality outliers.

All (1) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	157	TYR	Sidechain

### 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	7737	0	7884	934	3
All	All	7737	0	7884	934	3

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 60.

All (934) 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:104:GLN:HG3	1:A:131:LYS:HG3	1.19	1.14
1:A:472:ILE:HD12	1:A:473:THR:H	1.11	1.11
1:A:684:LEU:HD11	1:A:855:VAL:HG13	1.30	1.10
1:A:291:ILE:HD13	1:A:306:ILE:HD13	1.23	1.08
1:A:363:ARG:HB3	1:A:497:LEU:HD13	1.35	1.06
1:A:945:ILE:HG12	1:A:971:ARG:HD3	1.40	1.01
1:A:968:VAL:HA	1:A:971:ARG:NE	1.74	1.00
1:A:953:MET:HG3	1:A:959:GLY:HA3	1.44	0.99
1:A:671:ILE:HG22	1:A:674:LEU:HB3	1.41	0.99
1:A:945:ILE:HG23	1:A:971:ARG:CZ	1.95	0.95
1:A:705:GLU:HA	1:A:708:LYS:HE2	1.48	0.94
1:A:363:ARG:HD3	1:A:497:LEU:HD22	1.50	0.94
1:A:449:LEU:HD12	1:A:478:MET:SD	2.06	0.94
1:A:32:VAL:HG12	1:A:33:ALA:H	1.32	0.93
1:A:34:GLN:H	1:A:392:THR:HG23	1.34	0.93
1:A:971:ARG:O	1:A:975:ILE:HG13	1.69	0.93
1:A:38:ILE:HD12	1:A:674:LEU:HB2	1.51	0.92
1:A:104:GLN:CG	1:A:131:LYS:HG3	1.99	0.92
1:A:144:ASN:H	1:A:144:ASN:HD22	1.10	0.92
1:A:409:ALA:O	1:A:413:VAL:HG23	1.69	0.91
1:A:402:ILE:HA	1:A:405:LEU:HD12	1.51	0.91
1:A:686:ASP:HB3	1:A:823:PRO:HG2	1.49	0.91
1:A:968:VAL:HG23	1:A:971:ARG:HH21	1.32	0.91
1:A:367:ILE:HB	1:A:368:PRO:HD3	1.52	0.91
1:A:574:THR:HG23	1:A:627:ALA:HB3	1.52	0.91
1:A:53:ASP:OD1	1:A:56:THR:HG23	1.71	0.91
1:A:300:LEU:HD12	1:A:304:ALA:HB2	1.50	0.90
1:A:945:ILE:HG23	1:A:971:ARG:NH2	1.86	0.90
1:A:400:LEU:HD11	1:A:933:THR:HG21	1.52	0.90
1:A:451:ALA:HB1	1:A:883:VAL:HG13	1.54	0.89
1:A:144:ASN:H	1:A:144:ASN:ND2	1.64	0.89

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:438:ILE:HG22	1:A:442:LEU:HG	1.54	0.88
1:A:743:ILE:HD12	1:A:743:ILE:H	1.34	0.88
1:A:431:THR:HG21	1:A:494:ALA:HB2	1.53	0.88
1:A:32:VAL:HG12	1:A:33:ALA:N	1.89	0.88
1:A:307:ARG:HH21	1:A:311:ALA:HA	1.39	0.87
1:A:580:ALA:HB1	1:A:724:THR:HB	1.56	0.87
1:A:445:ILE:HD13	1:A:940:LYS:HE2	1.56	0.87
1:A:600:THR:HG23	1:A:601:LYS:H	1.40	0.86
1:A:971:ARG:HH11	1:A:971:ARG:HG2	1.39	0.86
1:A:979:SER:O	1:A:983:ILE:HG13	1.75	0.86
1:A:47:ALA:HB3	1:A:88:VAL:HG12	1.57	0.86
1:A:56:THR:O	1:A:60:THR:HB	1.74	0.86
1:A:691:GLY:O	1:A:695:LEU:HB2	1.76	0.86
1:A:762:PHE:CE1	1:A:764:ASP:HB2	2.12	0.85
1:A:451:ALA:O	1:A:455:PRO:HG3	1.77	0.85
1:A:546:LEU:O	1:A:550:VAL:HG23	1.77	0.85
1:A:118:LEU:HB3	1:A:122:VAL:HG21	1.58	0.84
1:A:291:ILE:HG21	1:A:306:ILE:HD11	1.58	0.84
1:A:418:ARG:HG3	1:A:419:VAL:N	1.90	0.84
1:A:677:ALA:HB2	1:A:867:ARG:HH21	1.40	0.84
1:A:648:THR:O	1:A:652:THR:HG23	1.77	0.84
1:A:111:LEU:CD2	1:A:115:MET:HG2	2.07	0.84
1:A:907:LEU:O	1:A:910:ILE:HG22	1.76	0.84
1:A:904:VAL:CG1	1:A:938:SER:HB3	2.08	0.84
1:A:375:VAL:HG22	1:A:484:VAL:HG21	1.59	0.84
1:A:596:HIS:O	1:A:600:THR:HG22	1.78	0.84
1:A:783:PRO:O	1:A:786:ILE:HG12	1.77	0.83
1:A:291:ILE:CD1	1:A:306:ILE:HD13	2.07	0.83
1:A:424:GLY:C	1:A:426:PRO:HD3	1.98	0.83
1:A:894:SER:OG	1:A:897:ILE:HB	1.79	0.83
1:A:945:ILE:HA	1:A:971:ARG:NH1	1.94	0.83
1:A:721:LEU:HD22	1:A:825:MET:CE	2.07	0.83
1:A:696:THR:HG22	1:A:825:MET:SD	2.18	0.83
1:A:144:ASN:HD22	1:A:144:ASN:N	1.76	0.83
1:A:477:ALA:HA	1:A:480:LEU:HD12	1.61	0.82
1:A:162:MET:HA	1:A:313:MET:SD	2.19	0.82
1:A:366:LEU:O	1:A:370:ILE:HG13	1.79	0.82
1:A:143:ILE:HG22	1:A:286:ALA:HB2	1.59	0.82
1:A:418:ARG:HG3	1:A:419:VAL:H	1.45	0.82
1:A:172:VAL:HB	1:A:294:ALA:HB2	1.60	0.82
1:A:361:ASN:HD21	1:A:363:ARG:HB2	1.43	0.82

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:652:THR:HG22	1:A:664:PHE:O	1.79	0.82
1:A:903:LEU:HD12	1:A:1025:PHE:HB2	1.61	0.82
1:A:463:THR:HG21	1:A:868:LEU:HD11	1.61	0.81
1:A:472:ILE:HD12	1:A:473:THR:N	1.94	0.81
1:A:879:ILE:HA	1:A:882:ILE:HB	1.63	0.81
1:A:568:ASP:OD1	1:A:644:VAL:HB	1.80	0.81
1:A:880:SER:O	1:A:884:VAL:HG23	1.81	0.81
1:A:612:VAL:HB	1:A:626:ILE:HG22	1.62	0.81
1:A:41:PRO:HB3	1:A:295:THR:HG21	1.62	0.80
1:A:873:ALA:O	1:A:877:TYR:HB2	1.81	0.80
1:A:470:PHE:CE2	1:A:929:VAL:HG13	2.16	0.80
1:A:6:ILE:HG23	1:A:7:ASP:N	1.97	0.80
1:A:489:THR:HB	1:A:490:PRO:HD3	1.63	0.80
1:A:721:LEU:HD22	1:A:825:MET:HE3	1.64	0.80
1:A:677:ALA:HB2	1:A:867:ARG:NH2	1.97	0.80
1:A:662:MET:O	1:A:664:PHE:N	2.15	0.79
1:A:448:VAL:HG22	1:A:887:CYS:HB2	1.64	0.79
1:A:363:ARG:HB3	1:A:497:LEU:CD1	2.11	0.79
1:A:894:SER:OG	1:A:898:PRO:HD3	1.82	0.79
1:A:363:ARG:CB	1:A:497:LEU:HD13	2.13	0.79
1:A:222:THR:HB	1:A:223:PRO:HD3	1.64	0.79
1:A:172:VAL:HB	1:A:294:ALA:CB	2.12	0.79
1:A:903:LEU:O	1:A:906:PRO:HD2	1.83	0.78
1:A:966:ASP:O	1:A:970:MET:HG2	1.83	0.78
1:A:170:SER:OG	1:A:305:ALA:HB3	1.82	0.78
1:A:577:GLN:H	1:A:662:MET:HB2	1.46	0.78
1:A:95:GLU:H	1:A:95:GLU:CD	1.85	0.77
1:A:291:ILE:HD13	1:A:306:ILE:CD1	2.11	0.77
1:A:613:ASN:HD22	1:A:614:GLY:N	1.83	0.76
1:A:765:ARG:HG3	1:A:765:ARG:HH11	1.48	0.76
1:A:343:THR:HG21	1:A:989:LEU:HD21	1.67	0.76
1:A:945:ILE:HG12	1:A:971:ARG:CD	2.13	0.76
1:A:53:ASP:O	1:A:57:VAL:HG13	1.85	0.76
1:A:904:VAL:HG12	1:A:938:SER:HB3	1.67	0.76
1:A:732:ASP:OD2	1:A:735:LYS:HE3	1.85	0.76
1:A:480:LEU:O	1:A:484:VAL:HG23	1.84	0.76
1:A:37:THR:O	1:A:38:ILE:HG23	1.86	0.75
1:A:544:LEU:O	1:A:547:ILE:HB	1.86	0.75
1:A:599:LEU:O	1:A:603:LYS:HB3	1.87	0.74
1:A:158:VAL:HG22	1:A:162:MET:CE	2.17	0.74
1:A:393:LEU:HD21	1:A:466:ILE:HG23	1.69	0.74

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:407:ASP:O	1:A:411:VAL:HG23	1.86	0.74
1:A:414:GLU:HA	1:A:417:GLU:HB3	1.68	0.74
1:A:527:TYR:O	1:A:531:VAL:HG23	1.87	0.74
1:A:32:VAL:CG1	1:A:33:ALA:H	1.99	0.74
1:A:860:THR:HG22	1:A:861:GLY:H	1.52	0.74
1:A:307:ARG:NH2	1:A:311:ALA:HA	2.02	0.73
1:A:613:ASN:HD22	1:A:613:ASN:C	1.89	0.73
1:A:712:MET:HG2	1:A:835:LYS:HE3	1.70	0.73
1:A:1029:VAL:HG12	1:A:1029:VAL:O	1.87	0.73
1:A:166:ILE:HD11	1:A:310:LEU:HG	1.70	0.73
1:A:186:ILE:HD12	1:A:262:LEU:HD21	1.69	0.73
1:A:574:THR:HB	1:A:665:ALA:HB2	1.71	0.73
1:A:792:ARG:HH11	1:A:792:ARG:HG2	1.52	0.73
1:A:399:VAL:HA	1:A:402:ILE:HG13	1.71	0.73
1:A:574:THR:HA	1:A:665:ALA:HA	1.68	0.73
1:A:61:VAL:HG13	1:A:118:LEU:HD22	1.70	0.73
1:A:393:LEU:O	1:A:393:LEU:HD23	1.89	0.73
1:A:445:ILE:HD12	1:A:446:ALA:N	2.04	0.72
1:A:39:ALA:HB2	1:A:673:GLU:CG	2.20	0.72
1:A:404:LEU:HD22	1:A:449:LEU:HG	1.70	0.72
1:A:393:LEU:HD11	1:A:466:ILE:HG23	1.71	0.72
1:A:170:SER:O	1:A:302:THR:HG23	1.89	0.71
1:A:383:LEU:HD22	1:A:388:PHE:HB2	1.73	0.71
1:A:429:GLU:HA	1:A:432:ARG:HD2	1.71	0.71
1:A:360:GLN:HB3	1:A:513:PHE:CD2	2.25	0.71
1:A:181:GLN:NE2	1:A:767:ARG:HE	1.89	0.71
1:A:38:ILE:HG21	1:A:674:LEU:HD22	1.72	0.71
1:A:488:LEU:O	1:A:492:LEU:N	2.22	0.71
1:A:567:GLU:HG2	1:A:998:GLY:HA3	1.73	0.71
1:A:135:SER:OG	1:A:672:VAL:HG13	1.90	0.71
1:A:600:THR:HG23	1:A:601:LYS:N	2.05	0.71
1:A:158:VAL:HG22	1:A:162:MET:HE3	1.72	0.71
1:A:300:LEU:CD1	1:A:304:ALA:HB2	2.20	0.71
1:A:293:LEU:HD22	1:A:297:ALA:CB	2.21	0.70
1:A:170:SER:HB2	1:A:302:THR:HA	1.73	0.70
1:A:568:ASP:HB2	1:A:644:VAL:HG12	1.72	0.70
1:A:60:THR:HG22	1:A:61:VAL:HG23	1.71	0.70
1:A:662:MET:SD	1:A:662:MET:C	2.69	0.70
1:A:111:LEU:HD21	1:A:115:MET:HG2	1.72	0.70
1:A:68:ASN:OD1	1:A:114:ALA:HB2	1.91	0.70
1:A:62:THR:O	1:A:66:GLU:HG3	1.92	0.70

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:525:HIS:NE2	1:A:529:ASP:OD2	2.23	0.70
1:A:972:LEU:O	1:A:976:LEU:HB2	1.90	0.70
1:A:466:ILE:HD12	1:A:466:ILE:N	2.07	0.70
1:A:470:PHE:O	1:A:472:ILE:N	2.24	0.70
1:A:576:VAL:HA	1:A:662:MET:CG	2.22	0.70
1:A:281:PHE:CE2	1:A:324:VAL:HG21	2.27	0.69
1:A:488:LEU:O	1:A:492:LEU:HG	1.92	0.69
1:A:395:MET:O	1:A:398:MET:HB2	1.93	0.69
1:A:618:ALA:O	1:A:620:ARG:N	2.25	0.69
1:A:169:THR:HG22	1:A:170:SER:H	1.57	0.69
1:A:110:LYS:HZ3	1:A:113:LEU:HD12	1.57	0.69
1:A:172:VAL:HG23	1:A:293:LEU:HA	1.75	0.68
1:A:222:THR:O	1:A:224:PRO:HD3	1.94	0.68
1:A:446:ALA:CB	1:A:482:VAL:HG21	2.23	0.68
1:A:25:LEU:O	1:A:25:LEU:HD12	1.92	0.68
1:A:968:VAL:HA	1:A:971:ARG:HE	1.56	0.68
1:A:357:LEU:HD13	1:A:357:LEU:O	1.93	0.68
1:A:41:PRO:CB	1:A:295:THR:HG21	2.22	0.68
1:A:682:PHE:HB3	1:A:827:ILE:HB	1.75	0.68
1:A:477:ALA:CA	1:A:480:LEU:HD12	2.23	0.68
1:A:890:ALA:C	1:A:891:LEU:HD22	2.15	0.68
1:A:5:PHE:CZ	1:A:6:ILE:HG22	2.29	0.67
1:A:90:ILE:HD12	1:A:90:ILE:H	1.59	0.67
1:A:655:PHE:O	1:A:663:VAL:HG22	1.94	0.67
1:A:671:ILE:CG2	1:A:674:LEU:HB3	2.20	0.67
1:A:904:VAL:HG21	1:A:942:ALA:HB2	1.77	0.66
1:A:434:SER:O	1:A:438:ILE:HG13	1.95	0.66
1:A:861:GLY:O	1:A:862:MET:HB3	1.94	0.66
1:A:873:ALA:HB1	1:A:877:TYR:HD2	1.61	0.66
1:A:430:ALA:HA	1:A:433:LYS:HD2	1.78	0.66
1:A:102:ILE:O	1:A:105:VAL:HG12	1.95	0.66
1:A:111:LEU:HD11	1:A:127:VAL:HG11	1.78	0.66
1:A:584:GLN:H	1:A:622:GLN:HE21	1.44	0.66
1:A:188:MET:N	1:A:775:SER:HA	2.10	0.65
1:A:670:ALA:O	1:A:671:ILE:HB	1.96	0.65
1:A:430:ALA:O	1:A:433:LYS:HB2	1.97	0.65
1:A:487:ILE:O	1:A:489:THR:N	2.30	0.65
1:A:890:ALA:O	1:A:891:LEU:HD22	1.96	0.65
1:A:359:LEU:HD21	1:A:977:MET:HE3	1.77	0.65
1:A:112:GLN:C	1:A:114:ALA:H	1.99	0.65
1:A:407:ASP:OD1	1:A:978:THR:HG21	1.96	0.65

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:32:VAL:HB	1:A:389:SER:OG	1.98	0.64
1:A:359:LEU:HD21	1:A:977:MET:CE	2.28	0.64
1:A:300:LEU:O	1:A:303:ALA:N	2.31	0.64
1:A:484:VAL:O	1:A:487:ILE:O	2.15	0.64
1:A:38:ILE:HD12	1:A:674:LEU:CB	2.27	0.64
1:A:32:VAL:HG13	1:A:299:ALA:HB1	1.79	0.64
1:A:859:TRP:HB3	1:A:863:SER:O	1.97	0.64
1:A:726:GLN:NE2	1:A:812:GLY:HA3	2.12	0.64
1:A:792:ARG:HG3	1:A:793:ALA:N	2.12	0.64
1:A:953:MET:HG3	1:A:959:GLY:CA	2.26	0.64
1:A:905:VAL:O	1:A:909:VAL:HG23	1.97	0.64
1:A:151:GLN:HG3	1:A:152:GLU:OE1	1.97	0.64
1:A:620:ARG:HH11	1:A:620:ARG:HG2	1.63	0.64
1:A:142:VAL:HG21	1:A:162:MET:HE3	1.79	0.63
1:A:472:ILE:CD1	1:A:473:THR:H	1.98	0.63
1:A:37:THR:HG22	1:A:38:ILE:H	1.62	0.63
1:A:862:MET:O	1:A:863:SER:HB3	1.98	0.63
1:A:600:THR:HG23	1:A:601:LYS:HG3	1.80	0.63
1:A:693:GLU:O	1:A:697:GLN:HB2	1.98	0.63
1:A:445:ILE:HG22	1:A:943:ILE:HD13	1.80	0.63
1:A:134:SER:O	1:A:135:SER:HB2	1.99	0.63
1:A:448:VAL:O	1:A:452:VAL:HG13	1.99	0.63
1:A:705:GLU:CB	1:A:847:LEU:HD22	2.28	0.63
1:A:137:LEU:HD11	1:A:293:LEU:HG	1.81	0.63
1:A:559:LEU:HD12	1:A:560:PRO:HD2	1.81	0.63
1:A:569:GLN:OE1	1:A:668:LEU:HD12	1.98	0.63
1:A:576:VAL:HA	1:A:662:MET:HG2	1.80	0.63
1:A:337:ILE:HG22	1:A:338:HIS:N	2.13	0.62
1:A:361:ASN:ND2	1:A:363:ARG:H	1.98	0.62
1:A:851:LEU:HD13	1:A:855:VAL:HG11	1.81	0.62
1:A:471:SER:O	1:A:475:VAL:HG23	2.00	0.62
1:A:905:VAL:HB	1:A:906:PRO:HD3	1.81	0.62
1:A:13:TRP:O	1:A:16:ALA:HB3	2.00	0.62
1:A:582:ALA:HA	1:A:586:ARG:CZ	2.30	0.62
1:A:897:ILE:HD11	1:A:1030:ARG:NH1	2.15	0.62
1:A:453:PHE:CZ	1:A:474:ILE:HG21	2.35	0.62
1:A:5:PHE:CE2	1:A:6:ILE:HG22	2.35	0.62
1:A:435:MET:HB3	1:A:439:GLN:HG3	1.82	0.62
1:A:451:ALA:HB1	1:A:883:VAL:CG1	2.28	0.62
1:A:174:ASP:OD1	1:A:292:LYS:HD2	2.00	0.61
1:A:281:PHE:O	1:A:282:ASN:HB2	1.98	0.61

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:276:ASP:OD2	1:A:621:GLY:HA2	2.00	0.61
1:A:181:GLN:NE2	1:A:767:ARG:HH21	1.97	0.61
1:A:930:GLY:O	1:A:933:THR:HG23	2.00	0.61
1:A:314:GLU:HA	1:A:317:PHE:CD2	2.35	0.61
1:A:181:GLN:HE22	1:A:767:ARG:HH21	1.47	0.61
1:A:159:ALA:HB1	1:A:181:GLN:HB2	1.82	0.61
1:A:655:PHE:HB3	1:A:662:MET:HE1	1.82	0.61
1:A:987:MET:N	1:A:988:PRO:HD2	2.15	0.61
1:A:487:ILE:HG22	1:A:488:LEU:H	1.65	0.61
1:A:607:GLU:HB3	1:A:630:SER:O	1.99	0.61
1:A:817:GLU:O	1:A:818:ARG:HD2	2.01	0.61
1:A:971:ARG:HG2	1:A:971:ARG:NH1	2.06	0.61
1:A:222:THR:CB	1:A:223:PRO:CD	2.78	0.61
1:A:299:ALA:HB3	1:A:301:ASP:OD2	2.01	0.61
1:A:873:ALA:HB1	1:A:877:TYR:CD2	2.35	0.61
1:A:1022:VAL:HA	1:A:1025:PHE:CE1	2.36	0.61
1:A:391:ASN:C	1:A:393:LEU:H	2.01	0.61
1:A:399:VAL:HA	1:A:402:ILE:CG1	2.31	0.61
1:A:563:PHE:O	1:A:564:LEU:HD12	2.00	0.61
1:A:732:ASP:OD2	1:A:735:LYS:HB2	2.01	0.61
1:A:393:LEU:HD21	1:A:466:ILE:CG2	2.30	0.60
1:A:582:ALA:HA	1:A:586:ARG:NH2	2.16	0.60
1:A:293:LEU:HD22	1:A:297:ALA:HB3	1.83	0.60
1:A:337:ILE:O	1:A:338:HIS:C	2.40	0.60
1:A:445:ILE:CG2	1:A:943:ILE:HG21	2.31	0.60
1:A:775:SER:HB2	1:A:789:TRP:HH2	1.66	0.60
1:A:144:ASN:HD21	1:A:284:GLN:HG2	1.67	0.60
1:A:456:MET:CE	1:A:932:LEU:HD21	2.30	0.60
1:A:1004:GLY:O	1:A:1007:VAL:HB	2.02	0.60
1:A:181:GLN:HE22	1:A:767:ARG:HE	1.49	0.60
1:A:431:THR:O	1:A:435:MET:HE2	2.01	0.60
1:A:644:VAL:HG13	1:A:645:GLU:N	2.17	0.60
1:A:470:PHE:CG	1:A:471:SER:N	2.68	0.60
1:A:5:PHE:CG	1:A:6:ILE:N	2.69	0.60
1:A:47:ALA:HB3	1:A:88:VAL:CG1	2.29	0.60
1:A:713:LEU:HD21	1:A:840:ALA:O	2.02	0.60
1:A:894:SER:O	1:A:895:TRP:HB2	2.02	0.60
1:A:312:LYS:O	1:A:315:PRO:HD2	2.00	0.60
1:A:368:PRO:O	1:A:372:VAL:HG22	2.02	0.60
1:A:705:GLU:O	1:A:708:LYS:HG2	2.02	0.60
1:A:27:ILE:C	1:A:29:LYS:H	2.05	0.59

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:453:PHE:CE1	1:A:474:ILE:HG21	2.36	0.59
1:A:490:PRO:HA	1:A:493:CYS:SG	2.42	0.59
1:A:904:VAL:HG11	1:A:938:SER:HB3	1.84	0.59
1:A:921:LEU:CD1	1:A:1005:THR:HG21	2.31	0.59
1:A:946:VAL:O	1:A:949:ALA:HB3	2.02	0.59
1:A:514:GLY:O	1:A:518:ARG:HB3	2.02	0.59
1:A:399:VAL:HA	1:A:402:ILE:CD1	2.33	0.59
1:A:445:ILE:HD13	1:A:940:LYS:CE	2.31	0.59
1:A:883:VAL:O	1:A:886:LEU:HB2	2.01	0.59
1:A:886:LEU:O	1:A:889:ALA:N	2.33	0.59
1:A:166:ILE:CD1	1:A:309:GLU:HB2	2.33	0.59
1:A:424:GLY:O	1:A:426:PRO:HD3	2.01	0.59
1:A:983:ILE:HG23	1:A:1008:MET:HG3	1.84	0.59
1:A:104:GLN:HE21	1:A:130:GLU:HA	1.67	0.59
1:A:35:TYR:HB3	1:A:36:PRO:HD2	1.83	0.59
1:A:980:LEU:HG	1:A:984:LEU:HD12	1.84	0.59
1:A:446:ALA:HB1	1:A:482:VAL:HG21	1.84	0.59
1:A:596:HIS:CD2	1:A:600:THR:HG21	2.37	0.59
1:A:32:VAL:HG13	1:A:299:ALA:CB	2.33	0.58
1:A:463:THR:CB	1:A:868:LEU:HD21	2.33	0.58
1:A:426:PRO:O	1:A:430:ALA:HB2	2.02	0.58
1:A:451:ALA:O	1:A:880:SER:HA	2.03	0.58
1:A:692:HIS:O	1:A:696:THR:HG23	2.03	0.58
1:A:861:GLY:O	1:A:862:MET:CB	2.50	0.58
1:A:622:GLN:O	1:A:623:ASN:HB2	2.04	0.58
1:A:73:ASP:O	1:A:74:ASN:HB2	2.02	0.58
1:A:702:LEU:HB2	1:A:851:LEU:HD21	1.84	0.58
1:A:925:VAL:O	1:A:929:VAL:HG23	2.04	0.58
1:A:921:LEU:HD12	1:A:1005:THR:HG21	1.86	0.58
1:A:166:ILE:HD12	1:A:309:GLU:HB2	1.85	0.58
1:A:355:MET:CE	1:A:410:ILE:HG12	2.34	0.58
1:A:222:THR:HB	1:A:223:PRO:CD	2.32	0.58
1:A:720:GLY:O	1:A:722:GLU:HG2	2.03	0.58
1:A:415:ASN:O	1:A:419:VAL:HG23	2.04	0.58
1:A:632:LYS:HB3	1:A:632:LYS:NZ	2.19	0.58
1:A:650:ARG:HH11	1:A:650:ARG:HG3	1.69	0.58
1:A:656:SER:HA	1:A:663:VAL:CG1	2.34	0.58
1:A:294:ALA:O	1:A:297:ALA:HB2	2.03	0.58
1:A:360:GLN:HB3	1:A:513:PHE:CE2	2.38	0.58
1:A:32:VAL:CG1	1:A:33:ALA:N	2.58	0.58
1:A:454:VAL:N	1:A:455:PRO:HD2	2.19	0.58

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:542:LEU:O	1:A:542:LEU:HD23	2.04	0.58
1:A:968:VAL:CG2	1:A:971:ARG:HH21	2.12	0.58
1:A:860:THR:HG22	1:A:861:GLY:N	2.17	0.58
1:A:291:ILE:HG21	1:A:306:ILE:CD1	2.32	0.57
1:A:456:MET:C	1:A:458:PHE:H	2.07	0.57
1:A:58:GLN:O	1:A:63:GLN:HG3	2.04	0.57
1:A:765:ARG:HG3	1:A:765:ARG:NH1	2.18	0.57
1:A:25:LEU:CD1	1:A:29:LYS:HD2	2.34	0.57
1:A:361:ASN:ND2	1:A:363:ARG:HB2	2.17	0.57
1:A:416:VAL:HG12	1:A:420:MET:HE2	1.86	0.57
1:A:568:ASP:O	1:A:634:TRP:HZ3	1.85	0.57
1:A:33:ALA:HB1	1:A:392:THR:HG23	1.86	0.57
1:A:705:GLU:HB3	1:A:847:LEU:HD22	1.86	0.57
1:A:878:ALA:O	1:A:882:ILE:HG13	2.03	0.57
1:A:412:VAL:HG13	1:A:435:MET:CE	2.34	0.57
1:A:453:PHE:O	1:A:471:SER:OG	2.22	0.57
1:A:860:THR:O	1:A:864:TYR:HB2	2.03	0.57
1:A:456:MET:HE3	1:A:932:LEU:HD21	1.86	0.57
1:A:162:MET:O	1:A:313:MET:HE1	2.04	0.57
1:A:337:ILE:O	1:A:340:VAL:N	2.38	0.57
1:A:447:MET:HG3	1:A:887:CYS:SG	2.44	0.57
1:A:60:THR:HG22	1:A:61:VAL:CG2	2.34	0.57
1:A:267:LYS:NZ	1:A:267:LYS:HB2	2.19	0.57
1:A:527:TYR:CE2	1:A:968:VAL:CG1	2.88	0.57
1:A:859:TRP:HE3	1:A:863:SER:HG	1.53	0.57
1:A:881:LEU:HD23	1:A:884:VAL:HG21	1.87	0.57
1:A:468:ARG:O	1:A:472:ILE:HG13	2.05	0.57
1:A:158:VAL:HG22	1:A:162:MET:HE2	1.87	0.57
1:A:429:GLU:O	1:A:433:LYS:HG3	2.05	0.57
1:A:169:THR:OG1	1:A:309:GLU:HG3	2.05	0.57
1:A:241:THR:HG22	1:A:763:ILE:O	2.04	0.56
1:A:372:VAL:HG23	1:A:373:PRO:CD	2.35	0.56
1:A:396:PHE:O	1:A:398:MET:N	2.38	0.56
1:A:222:THR:CB	1:A:223:PRO:HD3	2.31	0.56
1:A:620:ARG:NH1	1:A:620:ARG:HG2	2.18	0.56
1:A:717:ARG:HB2	1:A:718:PRO:HD2	1.87	0.56
1:A:85:THR:OG1	1:A:87:THR:HG22	2.05	0.56
1:A:95:GLU:CD	1:A:95:GLU:N	2.57	0.56
1:A:433:LYS:O	1:A:437:GLN:HG3	2.06	0.56
1:A:600:THR:CG2	1:A:601:LYS:H	2.15	0.56
1:A:33:ALA:HA	1:A:391:ASN:HA	1.87	0.56

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:448:VAL:HG13	1:A:884:VAL:HG22	1.87	0.56
1:A:111:LEU:HD23	1:A:111:LEU:C	2.25	0.56
1:A:12:ALA:O	1:A:15:ILE:N	2.38	0.56
1:A:367:ILE:HB	1:A:368:PRO:CD	2.33	0.56
1:A:38:ILE:HG13	1:A:39:ALA:H	1.69	0.56
1:A:879:ILE:O	1:A:883:VAL:HG12	2.05	0.56
1:A:1024:VAL:O	1:A:1026:PHE:N	2.36	0.56
1:A:489:THR:HB	1:A:490:PRO:CD	2.35	0.56
1:A:967:ALA:HB1	1:A:971:ARG:HH12	1.71	0.56
1:A:813:SER:HB3	1:A:816:LEU:HD23	1.87	0.56
1:A:897:ILE:HD11	1:A:1030:ARG:HH12	1.69	0.56
1:A:143:ILE:HG22	1:A:286:ALA:CB	2.33	0.56
1:A:100:ALA:HB1	1:A:131:LYS:HE3	1.88	0.56
1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:HD12	2.20	0.56
1:A:951:ASP:C	1:A:953:MET:H	2.09	0.56
1:A:30:LEU:HD11	1:A:389:SER:HB2	1.87	0.56
1:A:345:VAL:O	1:A:348:ILE:HB	2.06	0.56
1:A:701:GLN:O	1:A:705:GLU:HG2	2.06	0.55
1:A:971:ARG:O	1:A:975:ILE:CG1	2.49	0.55
1:A:99:ASP:HB3	1:A:102:ILE:HG22	1.89	0.55
1:A:351:VAL:O	1:A:355:MET:HB2	2.06	0.55
1:A:402:ILE:O	1:A:406:VAL:HG22	2.06	0.55
1:A:455:PRO:HG3	1:A:880:SER:HA	1.88	0.55
1:A:968:VAL:HG23	1:A:971:ARG:NH2	2.13	0.55
1:A:299:ALA:HB3	1:A:301:ASP:CG	2.27	0.55
1:A:895:TRP:HA	1:A:895:TRP:CE3	2.42	0.55
1:A:357:LEU:HD22	1:A:357:LEU:O	2.06	0.55
1:A:577:GLN:OE1	1:A:624:THR:HG22	2.05	0.55
1:A:578:LEU:HD21	1:A:590:VAL:HG21	1.89	0.55
1:A:981:ALA:O	1:A:985:GLY:N	2.39	0.55
1:A:448:VAL:HG21	1:A:888:LEU:CD2	2.37	0.55
1:A:240:LEU:HG	1:A:245:GLU:HB3	1.89	0.55
1:A:43:VAL:HG12	1:A:44:THR:H	1.72	0.55
1:A:664:PHE:O	1:A:665:ALA:HB3	2.07	0.55
1:A:674:LEU:HG	1:A:674:LEU:O	2.06	0.55
1:A:301:ASP:HA	1:A:304:ALA:HB3	1.89	0.54
1:A:641:GLU:OE1	1:A:641:GLU:HA	2.06	0.54
1:A:756:GLY:HA2	1:A:774:MET:HG3	1.89	0.54
1:A:81:ASN:O	1:A:88:VAL:HG23	2.08	0.54
1:A:230:LEU:HG	1:A:231:ASN:N	2.22	0.54
1:A:372:VAL:HG23	1:A:373:PRO:HD3	1.89	0.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:417:GLU:HA	1:A:420:MET:HE3	1.90	0.54
1:A:6:ILE:HG23	1:A:7:ASP:H	1.72	0.54
1:A:412:VAL:HG12	1:A:412:VAL:O	2.08	0.54
1:A:118:LEU:HB3	1:A:122:VAL:CG2	2.33	0.54
1:A:299:ALA:C	1:A:301:ASP:N	2.54	0.54
1:A:445:ILE:HG22	1:A:943:ILE:CD1	2.37	0.54
1:A:37:THR:HG22	1:A:38:ILE:N	2.22	0.54
1:A:810:GLU:HG2	1:A:811:TYR:H	1.72	0.54
1:A:953:MET:CG	1:A:959:GLY:HA3	2.29	0.54
1:A:30:LEU:N	1:A:31:PRO:CD	2.71	0.54
1:A:400:LEU:HD12	1:A:400:LEU:O	2.08	0.54
1:A:646:ALA:HB1	1:A:650:ARG:HH12	1.73	0.54
1:A:373:PRO:HG2	1:A:374:VAL:H	1.72	0.54
1:A:429:GLU:HB2	1:A:433:LYS:HZ3	1.73	0.54
1:A:895:TRP:HA	1:A:895:TRP:HE3	1.72	0.54
1:A:157:TYR:HE2	1:A:317:PHE:CE1	2.24	0.54
1:A:66:GLU:OE1	1:A:80:SER:HB2	2.08	0.54
1:A:144:ASN:HB2	1:A:146:ASP:O	2.07	0.54
1:A:463:THR:C	1:A:465:ALA:N	2.61	0.54
1:A:5:PHE:C	1:A:6:ILE:O	2.45	0.54
1:A:576:VAL:HA	1:A:662:MET:HB2	1.89	0.54
1:A:155:SER:O	1:A:158:VAL:HB	2.08	0.53
1:A:185:ARG:HH22	1:A:774:MET:HE1	1.74	0.53
1:A:25:LEU:HD12	1:A:29:LYS:HD2	1.89	0.53
1:A:300:LEU:O	1:A:302:THR:N	2.41	0.53
1:A:418:ARG:O	1:A:420:MET:N	2.41	0.53
1:A:6:ILE:CG2	1:A:7:ASP:N	2.67	0.53
1:A:111:LEU:HD23	1:A:111:LEU:O	2.08	0.53
1:A:30:LEU:HG	1:A:30:LEU:O	2.08	0.53
1:A:308:ALA:O	1:A:311:ALA:HB3	2.08	0.53
1:A:314:GLU:HA	1:A:317:PHE:CE2	2.43	0.53
1:A:987:MET:O	1:A:991:ILE:HG13	2.08	0.53
1:A:294:ALA:O	1:A:295:THR:C	2.46	0.53
1:A:406:VAL:HG23	1:A:407:ASP:N	2.23	0.53
1:A:663:VAL:O	1:A:664:PHE:CD2	2.62	0.53
1:A:458:PHE:C	1:A:460:GLY:H	2.10	0.53
1:A:474:ILE:N	1:A:474:ILE:HD12	2.23	0.53
1:A:35:TYR:N	1:A:391:ASN:OD1	2.41	0.53
1:A:66:GLU:OE1	1:A:80:SER:CB	2.56	0.53
1:A:165:ALA:HB3	1:A:313:MET:HE2	1.91	0.53
1:A:4:PHE:O	1:A:5:PHE:O	2.27	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:104:GLN:NE2	1:A:130:GLU:HA	2.24	0.53
1:A:144:ASN:HB3	1:A:149:MET:HB2	1.90	0.53
1:A:527:TYR:CE2	1:A:968:VAL:HG13	2.44	0.53
1:A:635:ALA:C	1:A:637:ARG:H	2.13	0.52
1:A:33:ALA:HB3	1:A:333:VAL:HG13	1.91	0.52
1:A:426:PRO:HB2	1:A:429:GLU:HG2	1.91	0.52
1:A:571:VAL:O	1:A:572:PHE:HB3	2.08	0.52
1:A:576:VAL:HG13	1:A:662:MET:HG3	1.90	0.52
1:A:705:GLU:HB2	1:A:847:LEU:HD22	1.89	0.52
1:A:405:LEU:CD2	1:A:481:SER:HB3	2.39	0.52
1:A:456:MET:C	1:A:458:PHE:N	2.62	0.52
1:A:185:ARG:HH22	1:A:774:MET:CE	2.22	0.52
1:A:919:ARG:NH2	1:A:990:VAL:HG12	2.24	0.52
1:A:967:ALA:HB1	1:A:971:ARG:NH1	2.24	0.52
1:A:416:VAL:HG12	1:A:420:MET:CE	2.40	0.52
1:A:671:ILE:HG21	1:A:674:LEU:HD23	1.91	0.52
1:A:712:MET:O	1:A:713:LEU:HD23	2.08	0.52
1:A:743:ILE:CD1	1:A:743:ILE:H	2.11	0.52
1:A:879:ILE:CA	1:A:882:ILE:HB	2.38	0.52
1:A:330:THR:HG22	1:A:334:LYS:HD2	1.91	0.52
1:A:722:GLU:O	1:A:723:ASP:HB2	2.10	0.52
1:A:792:ARG:NH1	1:A:792:ARG:HG2	2.22	0.52
1:A:402:ILE:HA	1:A:405:LEU:CD1	2.34	0.52
1:A:468:ARG:C	1:A:470:PHE:N	2.62	0.52
1:A:587:THR:HG23	1:A:613:ASN:OD1	2.09	0.52
1:A:39:ALA:HB2	1:A:673:GLU:CD	2.29	0.52
1:A:683:GLU:HG3	1:A:824:SER:OG	2.10	0.52
1:A:112:GLN:C	1:A:114:ALA:N	2.63	0.52
1:A:27:ILE:HD11	1:A:380:PHE:CD1	2.44	0.52
1:A:472:ILE:O	1:A:474:ILE:N	2.42	0.52
1:A:706:ALA:HB2	1:A:844:MET:HE1	1.91	0.52
1:A:364:ALA:C	1:A:366:LEU:N	2.62	0.52
1:A:492:LEU:O	1:A:496:MET:N	2.43	0.52
1:A:371:ALA:O	1:A:375:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:774:MET:O	1:A:775:SER:CB	2.57	0.52
1:A:372:VAL:N	1:A:373:PRO:HD2	2.25	0.51
1:A:405:LEU:HD23	1:A:481:SER:HB3	1.90	0.51
1:A:844:MET:HE3	1:A:847:LEU:HD12	1.91	0.51
1:A:41:PRO:HA	1:A:295:THR:CG2	2.41	0.51
1:A:27:ILE:HD11	1:A:380:PHE:CE1	2.45	0.51
1:A:468:ARG:O	1:A:470:PHE:N	2.43	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:968:VAL:N	1:A:971:ARG:CZ	2.74	0.51
1:A:27:ILE:HG22	1:A:28:LEU:HD12	1.92	0.51
1:A:892:TYR:CD2	1:A:897:ILE:HG22	2.45	0.51
1:A:5:PHE:O	1:A:6:ILE:O	2.28	0.51
1:A:600:THR:O	1:A:603:LYS:HG2	2.11	0.51
1:A:686:ASP:HB2	1:A:695:LEU:HG	1.91	0.51
1:A:778:LYS:HG3	1:A:779:TYR:CD1	2.45	0.51
1:A:277:ILE:O	1:A:277:ILE:HG13	2.10	0.51
1:A:305:ALA:HA	1:A:308:ALA:HB2	1.93	0.51
1:A:145:THR:N	1:A:320:GLY:O	2.36	0.51
1:A:422:GLU:O	1:A:423:GLU:HG2	2.11	0.51
1:A:662:MET:O	1:A:662:MET:SD	2.69	0.51
1:A:17:ILE:HG22	1:A:21:LEU:HD12	1.93	0.51
1:A:576:VAL:HA	1:A:662:MET:CB	2.41	0.51
1:A:110:LYS:NZ	1:A:113:LEU:HD12	2.25	0.50
1:A:349:ILE:HD13	1:A:349:ILE:N	2.26	0.50
1:A:68:ASN:CG	1:A:114:ALA:HB2	2.31	0.50
1:A:74:ASN:O	1:A:75:LEU:HB2	2.11	0.50
1:A:763:ILE:HD12	1:A:763:ILE:N	2.26	0.50
1:A:458:PHE:O	1:A:460:GLY:N	2.40	0.50
1:A:463:THR:OG1	1:A:868:LEU:HD21	2.12	0.50
1:A:818:ARG:HG3	1:A:818:ARG:HH11	1.76	0.50
1:A:446:ALA:HB2	1:A:482:VAL:HG21	1.91	0.50
1:A:476:SER:OG	1:A:477:ALA:N	2.44	0.50
1:A:577:GLN:N	1:A:662:MET:HB2	2.23	0.50
1:A:83:ASP:HB2	1:A:87:THR:HG22	1.93	0.50
1:A:448:VAL:CG2	1:A:887:CYS:HB2	2.36	0.50
1:A:764:ASP:O	1:A:765:ARG:HB2	2.11	0.50
1:A:892:TYR:HD2	1:A:897:ILE:HG22	1.76	0.50
1:A:172:VAL:HG21	1:A:297:ALA:HB1	1.91	0.50
1:A:399:VAL:HG12	1:A:402:ILE:HD12	1.94	0.50
1:A:383:LEU:O	1:A:385:ALA:N	2.44	0.50
1:A:43:VAL:HG12	1:A:44:THR:N	2.26	0.50
1:A:379:THR:HG21	1:A:477:ALA:HB2	1.94	0.50
1:A:274:ASN:HD22	1:A:276:ASP:H	1.60	0.50
1:A:364:ALA:O	1:A:366:LEU:N	2.45	0.50
1:A:178:PHE:C	1:A:277:ILE:HD11	2.31	0.50
1:A:721:LEU:HD22	1:A:825:MET:HE1	1.91	0.50
1:A:722:GLU:O	1:A:723:ASP:CB	2.59	0.50
1:A:684:LEU:CD1	1:A:855:VAL:HG13	2.21	0.50
1:A:898:PRO:O	1:A:902:MET:HG2	2.11	0.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:170:SER:CB	1:A:305:ALA:HB3	2.42	0.49
1:A:68:ASN:O	1:A:110:LYS:HG3	2.12	0.49
1:A:743:ILE:HD12	1:A:743:ILE:N	2.16	0.49
1:A:762:PHE:CZ	1:A:764:ASP:HB2	2.47	0.49
1:A:754:TRP:CE3	1:A:780:ARG:HB2	2.47	0.49
1:A:1017:LEU:H	1:A:1019:ILE:HG22	1.78	0.49
1:A:391:ASN:HB2	1:A:394:THR:OG1	2.12	0.49
1:A:396:PHE:CD2	1:A:1003:VAL:HG21	2.47	0.49
1:A:109:ASN:HA	1:A:112:GLN:HG2	1.94	0.49
1:A:359:LEU:HD23	1:A:359:LEU:N	2.27	0.49
1:A:396:PHE:C	1:A:398:MET:N	2.65	0.49
1:A:708:LYS:NZ	1:A:708:LYS:HB3	2.28	0.49
1:A:734:GLU:C	1:A:736:ALA:H	2.15	0.49
1:A:88:VAL:HG22	1:A:89:GLN:N	2.27	0.49
1:A:591:LEU:HD22	1:A:611:ALA:HB1	1.95	0.49
1:A:782:LEU:O	1:A:785:ASP:HB2	2.12	0.49
1:A:686:ASP:CB	1:A:823:PRO:HG2	2.31	0.49
1:A:166:ILE:HD12	1:A:309:GLU:CB	2.43	0.49
1:A:541:TYR:C	1:A:543:VAL:N	2.65	0.49
1:A:612:VAL:HB	1:A:626:ILE:CG2	2.38	0.49
1:A:383:LEU:CD2	1:A:388:PHE:HB2	2.42	0.49
1:A:439:GLN:O	1:A:443:VAL:HG23	2.12	0.49
1:A:987:MET:HG3	1:A:991:ILE:CD1	2.42	0.49
1:A:435:MET:HB3	1:A:439:GLN:CG	2.42	0.49
1:A:568:ASP:HA	1:A:644:VAL:HG11	1.95	0.49
1:A:756:GLY:CA	1:A:774:MET:HG3	2.43	0.49
1:A:1016:VAL:O	1:A:1017:LEU:HB2	2.13	0.49
1:A:39:ALA:HB2	1:A:673:GLU:HG2	1.94	0.49
1:A:564:LEU:HD22	1:A:671:ILE:HD12	1.95	0.49
1:A:76:MET:HG3	1:A:95:GLU:OE1	2.13	0.49
1:A:643:LYS:NZ	1:A:993:THR:HG22	2.28	0.49
1:A:30:LEU:H	1:A:31:PRO:CD	2.26	0.49
1:A:181:GLN:HE22	1:A:767:ARG:NH2	2.10	0.49
1:A:892:TYR:HD2	1:A:897:ILE:CG2	2.25	0.49
1:A:968:VAL:CA	1:A:971:ARG:NE	2.63	0.49
1:A:30:LEU:HD11	1:A:389:SER:CB	2.42	0.48
1:A:566:ASP:O	1:A:567:GLU:C	2.51	0.48
1:A:149:MET:C	1:A:150:THR:HG22	2.33	0.48
1:A:391:ASN:C	1:A:393:LEU:N	2.67	0.48
1:A:463:THR:HG21	1:A:868:LEU:CD1	2.36	0.48
1:A:613:ASN:ND2	1:A:613:ASN:C	2.61	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:656:SER:HA	1:A:663:VAL:HG11	1.94	0.48
1:A:363:ARG:CD	1:A:497:LEU:HD22	2.33	0.48
1:A:717:ARG:NH1	1:A:829:GLY:HA2	2.28	0.48
1:A:867:ARG:O	1:A:871:ASN:HB3	2.14	0.48
1:A:1003:VAL:O	1:A:1007:VAL:HG23	2.12	0.48
1:A:359:LEU:O	1:A:360:GLN:C	2.52	0.48
1:A:762:PHE:HE1	1:A:764:ASP:HB2	1.72	0.48
1:A:30:LEU:HD21	1:A:389:SER:HA	1.96	0.48
1:A:454:VAL:HG22	1:A:475:VAL:HG21	1.96	0.48
1:A:375:VAL:O	1:A:379:THR:OG1	2.30	0.48
1:A:459:PHE:C	1:A:464:GLY:HA3	2.34	0.48
1:A:646:ALA:O	1:A:649:MET:HB3	2.13	0.48
1:A:888:LEU:O	1:A:898:PRO:HG3	2.13	0.48
1:A:299:ALA:C	1:A:301:ASP:H	2.16	0.48
1:A:414:GLU:HA	1:A:417:GLU:CB	2.41	0.48
1:A:488:LEU:HA	1:A:491:ALA:HB3	1.95	0.48
1:A:732:ASP:O	1:A:733:GLN:C	2.51	0.48
1:A:736:ALA:HB2	1:A:804:PHE:HB2	1.95	0.48
1:A:807:SER:O	1:A:808:ARG:HB3	2.13	0.48
1:A:934:THR:O	1:A:938:SER:OG	2.30	0.48
1:A:622:GLN:HG3	1:A:622:GLN:O	2.14	0.48
1:A:683:GLU:HG2	1:A:819:TYR:CG	2.49	0.48
1:A:332:PHE:O	1:A:336:SER:N	2.38	0.48
1:A:111:LEU:HD22	1:A:112:GLN:NE2	2.29	0.47
1:A:380:PHE:HA	1:A:383:LEU:HD12	1.96	0.47
1:A:928:GLN:O	1:A:929:VAL:C	2.50	0.47
1:A:426:PRO:O	1:A:430:ALA:CB	2.62	0.47
1:A:894:SER:C	1:A:896:SER:H	2.17	0.47
1:A:951:ASP:O	1:A:953:MET:N	2.48	0.47
1:A:110:LYS:HD2	1:A:113:LEU:HD11	1.95	0.47
1:A:578:LEU:HB3	1:A:579:PRO:HD2	1.96	0.47
1:A:650:ARG:NH1	1:A:650:ARG:HG3	2.29	0.47
1:A:12:ALA:O	1:A:13:TRP:C	2.53	0.47
1:A:137:LEU:O	1:A:138:MET:HB2	2.14	0.47
1:A:294:ALA:O	1:A:297:ALA:N	2.48	0.47
1:A:866:GLU:O	1:A:867:ARG:HB2	2.14	0.47
1:A:971:ARG:CG	1:A:971:ARG:NH1	2.77	0.47
1:A:211:ASN:HB2	1:A:240:LEU:HD22	1.96	0.47
1:A:364:ALA:C	1:A:366:LEU:H	2.16	0.47
1:A:382:VAL:O	1:A:385:ALA:HB3	2.15	0.47
1:A:518:ARG:O	1:A:522:LYS:HD3	2.15	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:904:VAL:O	1:A:905:VAL:C	2.53	0.47
1:A:53:ASP:OD2	1:A:55:LYS:N	2.47	0.47
1:A:875:SER:O	1:A:878:ALA:HB3	2.13	0.47
1:A:376:LEU:O	1:A:377:LEU:C	2.53	0.47
1:A:416:VAL:HG22	1:A:434:SER:HB2	1.97	0.47
1:A:393:LEU:CD2	1:A:466:ILE:HG23	2.42	0.47
1:A:458:PHE:HB2	1:A:876:LEU:HD13	1.95	0.47
1:A:904:VAL:HA	1:A:907:LEU:HD22	1.97	0.47
1:A:999:ALA:O	1:A:1002:ALA:HB3	2.14	0.47
1:A:1027:VAL:O	1:A:1030:ARG:HB2	2.14	0.47
1:A:169:THR:CG2	1:A:170:SER:H	2.20	0.47
1:A:329:THR:O	1:A:329:THR:HG23	2.14	0.47
1:A:41:PRO:CA	1:A:295:THR:HG21	2.44	0.47
1:A:900:SER:OG	1:A:901:VAL:N	2.47	0.47
1:A:169:THR:HG22	1:A:170:SER:N	2.26	0.47
1:A:654:ALA:C	1:A:656:SER:H	2.17	0.47
1:A:400:LEU:CD2	1:A:929:VAL:HG12	2.45	0.47
1:A:431:THR:CG2	1:A:494:ALA:HB2	2.37	0.47
1:A:5:PHE:CE1	1:A:432:ARG:HG2	2.50	0.47
1:A:754:TRP:CZ2	1:A:786:ILE:HD13	2.50	0.47
1:A:463:THR:HB	1:A:868:LEU:HD21	1.97	0.47
1:A:1019:ILE:O	1:A:1019:ILE:HG13	2.15	0.47
1:A:398:MET:O	1:A:402:ILE:HG13	2.16	0.47
1:A:692:HIS:NE2	1:A:813:SER:HB2	2.30	0.47
1:A:441:ALA:O	1:A:445:ILE:HG23	2.14	0.46
1:A:489:THR:CB	1:A:490:PRO:HD3	2.38	0.46
1:A:130:GLU:OE2	1:A:174:ASP:HB3	2.15	0.46
1:A:41:PRO:HA	1:A:295:THR:HG21	1.97	0.46
1:A:43:VAL:C	1:A:44:THR:HG22	2.35	0.46
1:A:522:LYS:O	1:A:525:HIS:N	2.48	0.46
1:A:716:VAL:O	1:A:716:VAL:HG23	2.16	0.46
1:A:144:ASN:N	1:A:144:ASN:ND2	2.37	0.46
1:A:219:LEU:O	1:A:231:ASN:HA	2.16	0.46
1:A:324:VAL:HG13	1:A:326:PRO:HD3	1.97	0.46
1:A:360:GLN:HB3	1:A:513:PHE:HD2	1.77	0.46
1:A:459:PHE:HA	1:A:464:GLY:HA3	1.98	0.46
1:A:513:PHE:O	1:A:517:ASN:N	2.35	0.46
1:A:1021:PHE:N	1:A:1021:PHE:CD1	2.84	0.46
1:A:144:ASN:HA	1:A:320:GLY:O	2.15	0.46
1:A:373:PRO:O	1:A:374:VAL:C	2.54	0.46
1:A:541:TYR:C	1:A:543:VAL:H	2.19	0.46

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:639:GLY:C	1:A:641:GLU:N	2.69	0.46
1:A:892:TYR:HE2	1:A:946:VAL:HG11	1.80	0.46
1:A:470:PHE:CZ	1:A:929:VAL:HG13	2.49	0.46
1:A:449:LEU:CD1	1:A:478:MET:SD	2.93	0.46
1:A:218:GLN:HB3	1:A:233:SER:HA	1.98	0.46
1:A:468:ARG:C	1:A:470:PHE:H	2.18	0.46
1:A:110:LYS:HD2	1:A:113:LEU:CD1	2.46	0.46
1:A:181:GLN:HE22	1:A:767:ARG:NE	2.13	0.46
1:A:420:MET:O	1:A:421:ALA:HB2	2.16	0.46
1:A:535:LEU:O	1:A:536:ARG:C	2.54	0.46
1:A:672:VAL:C	1:A:674:LEU:H	2.19	0.46
1:A:886:LEU:O	1:A:888:LEU:N	2.48	0.46
1:A:172:VAL:HG21	1:A:297:ALA:CB	2.46	0.46
1:A:330:THR:O	1:A:332:PHE:N	2.48	0.46
1:A:452:VAL:HG12	1:A:884:VAL:CG2	2.45	0.46
1:A:574:THR:HB	1:A:665:ALA:CB	2.41	0.46
1:A:968:VAL:HG22	1:A:971:ARG:HE	1.81	0.46
1:A:340:VAL:HG11	1:A:395:MET:HB3	1.98	0.46
1:A:512:PHE:O	1:A:515:TRP:N	2.49	0.46
1:A:6:ILE:HD12	1:A:6:ILE:HA	1.73	0.46
1:A:6:ILE:HD11	1:A:431:THR:CG2	2.46	0.46
1:A:708:LYS:HG3	1:A:709:HIS:N	2.30	0.46
1:A:450:SER:O	1:A:455:PRO:HD2	2.16	0.45
1:A:678:THR:HG22	1:A:678:THR:O	2.15	0.45
1:A:734:GLU:C	1:A:736:ALA:N	2.68	0.45
1:A:445:ILE:HG22	1:A:943:ILE:HG21	1.98	0.45
1:A:449:LEU:O	1:A:453:PHE:HD2	1.99	0.45
1:A:465:ALA:HB3	1:A:466:ILE:HD12	1.98	0.45
1:A:393:LEU:CD1	1:A:466:ILE:HG23	2.45	0.45
1:A:4:PHE:C	1:A:5:PHE:O	2.54	0.45
1:A:692:HIS:CE1	1:A:721:LEU:HD21	2.51	0.45
1:A:170:SER:C	1:A:172:VAL:H	2.17	0.45
1:A:27:ILE:HG12	1:A:390:ILE:HD11	1.98	0.45
1:A:383:LEU:O	1:A:384:ALA:C	2.54	0.45
1:A:404:LEU:CD2	1:A:449:LEU:HG	2.45	0.45
1:A:486:LEU:O	1:A:490:PRO:HG2	2.16	0.45
1:A:987:MET:HG3	1:A:991:ILE:HD11	1.98	0.45
1:A:527:TYR:CZ	1:A:1019:ILE:HG13	2.52	0.45
1:A:928:GLN:O	1:A:931:LEU:N	2.49	0.45
1:A:968:VAL:HA	1:A:971:ARG:CZ	2.43	0.45
1:A:705:GLU:HA	1:A:708:LYS:CE	2.35	0.45

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:356:TYR:O	1:A:358:PHE:N	2.50	0.45
1:A:668:LEU:O	1:A:669:PRO:C	2.53	0.45
1:A:945:ILE:HG12	1:A:971:ARG:NE	2.31	0.45
1:A:399:VAL:HA	1:A:402:ILE:HD12	1.98	0.45
1:A:583:THR:O	1:A:587:THR:HG22	2.16	0.45
1:A:639:GLY:O	1:A:641:GLU:N	2.49	0.45
1:A:717:ARG:H	1:A:717:ARG:HD3	1.82	0.45
1:A:780:ARG:O	1:A:780:ARG:HG3	2.16	0.45
1:A:957:GLY:O	1:A:958:LYS:O	2.35	0.45
1:A:203:VAL:O	1:A:207:ILE:HG13	2.16	0.45
1:A:635:ALA:O	1:A:637:ARG:N	2.49	0.45
1:A:973:ARG:N	1:A:974:PRO:HD2	2.32	0.45
1:A:406:VAL:HG23	1:A:407:ASP:H	1.82	0.45
1:A:307:ARG:HH21	1:A:311:ALA:CA	2.20	0.45
1:A:309:GLU:O	1:A:313:MET:HG3	2.17	0.45
1:A:569:GLN:HA	1:A:634:TRP:HH2	1.82	0.45
1:A:39:ALA:CB	1:A:673:GLU:CD	2.85	0.45
1:A:758:TYR:CE1	1:A:770:LYS:HB3	2.52	0.45
1:A:30:LEU:H	1:A:31:PRO:HD3	1.81	0.44
1:A:454:VAL:HB	1:A:455:PRO:CD	2.47	0.44
1:A:614:GLY:O	1:A:615:PHE:HB2	2.16	0.44
1:A:726:GLN:HE22	1:A:812:GLY:HA3	1.82	0.44
1:A:121:GLU:N	1:A:121:GLU:OE2	2.48	0.44
1:A:18:ILE:O	1:A:22:ALA:N	2.27	0.44
1:A:331:PRO:O	1:A:335:ILE:HD13	2.17	0.44
1:A:342:LYS:HA	1:A:342:LYS:HE3	1.98	0.44
1:A:451:ALA:HB1	1:A:883:VAL:HG22	1.99	0.44
1:A:565:PRO:O	1:A:567:GLU:HG3	2.17	0.44
1:A:150:THR:HG23	1:A:153:ASP:OD1	2.17	0.44
1:A:186:ILE:CD1	1:A:262:LEU:HD21	2.43	0.44
1:A:456:MET:HE2	1:A:932:LEU:HD21	1.99	0.44
1:A:1024:VAL:C	1:A:1026:PHE:H	2.18	0.44
1:A:439:GLN:O	1:A:442:LEU:HB2	2.17	0.44
1:A:587:THR:HG23	1:A:588:GLN:N	2.33	0.44
1:A:454:VAL:HG22	1:A:475:VAL:HG11	1.99	0.44
1:A:488:LEU:CA	1:A:491:ALA:HB3	2.46	0.44
1:A:669:PRO:O	1:A:670:ALA:C	2.54	0.44
1:A:109:ASN:O	1:A:112:GLN:HG2	2.18	0.44
1:A:16:ALA:O	1:A:17:ILE:C	2.56	0.44
1:A:271:GLY:HA3	1:A:275:TYR:OH	2.18	0.44
1:A:137:LEU:CG	1:A:293:LEU:HG	2.48	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:5:PHE:HE1	1:A:432:ARG:HG2	1.82	0.44
1:A:767:ARG:HG2	1:A:769:LYS:HE3	1.99	0.44
1:A:972:LEU:HD22	1:A:976:LEU:HD13	1.99	0.44
1:A:448:VAL:CG1	1:A:884:VAL:HG22	2.47	0.44
1:A:905:VAL:HG22	1:A:935:ILE:HG23	1.99	0.44
1:A:102:ILE:O	1:A:106:GLN:HG3	2.18	0.44
1:A:112:GLN:O	1:A:116:PRO:HD3	2.18	0.44
1:A:137:LEU:CD1	1:A:293:LEU:HG	2.45	0.44
1:A:200:PRO:O	1:A:204:ILE:HG13	2.17	0.44
1:A:456:MET:O	1:A:458:PHE:N	2.51	0.44
1:A:483:LEU:O	1:A:486:LEU:HB2	2.18	0.44
1:A:598:TYR:HB3	1:A:606:VAL:HG21	2.00	0.44
1:A:744:ASN:O	1:A:748:THR:HG23	2.18	0.44
1:A:752:ALA:O	1:A:774:MET:HA	2.17	0.44
1:A:807:SER:O	1:A:808:ARG:CB	2.64	0.44
1:A:862:MET:HG2	1:A:862:MET:O	2.18	0.44
1:A:899:PHE:HB2	1:A:1029:VAL:HG11	2.00	0.44
1:A:894:SER:HG	1:A:898:PRO:HD3	1.81	0.44
1:A:17:ILE:O	1:A:18:ILE:C	2.57	0.43
1:A:294:ALA:H	1:A:297:ALA:HB2	1.83	0.43
1:A:477:ALA:N	1:A:480:LEU:HD12	2.33	0.43
1:A:360:GLN:O	1:A:361:ASN:HB2	2.18	0.43
1:A:587:THR:O	1:A:590:VAL:HB	2.18	0.43
1:A:632:LYS:HZ3	1:A:632:LYS:HB3	1.82	0.43
1:A:656:SER:N	1:A:663:VAL:HG13	2.32	0.43
1:A:1022:VAL:HB	1:A:1023:PRO:HD3	2.00	0.43
1:A:131:LYS:O	1:A:132:SER:O	2.36	0.43
1:A:355:MET:HE1	1:A:410:ILE:HG12	2.01	0.43
1:A:454:VAL:C	1:A:456:MET:H	2.21	0.43
1:A:459:PHE:HB3	1:A:468:ARG:HE	1.83	0.43
1:A:498:LYS:HA	1:A:499:PRO:HD3	1.54	0.43
1:A:578:LEU:HD13	1:A:660:ASP:CG	2.38	0.43
1:A:931:LEU:HD23	1:A:931:LEU:HA	1.79	0.43
1:A:997:SER:HA	1:A:1000:GLN:HB2	2.00	0.43
1:A:225:VAL:O	1:A:226:LYS:C	2.56	0.43
1:A:335:ILE:HD12	1:A:335:ILE:N	2.33	0.43
1:A:357:LEU:HD13	1:A:357:LEU:C	2.39	0.43
1:A:406:VAL:O	1:A:409:ALA:HB3	2.18	0.43
1:A:753:ALA:O	1:A:774:MET:O	2.35	0.43
1:A:790:TYR:HB3	1:A:798:MET:HB3	2.00	0.43
1:A:842:GLU:O	1:A:846:GLN:HG3	2.18	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:9:PRO:HB3	1:A:495:THR:HG21	1.98	0.43
1:A:330:THR:O	1:A:331:PRO:C	2.55	0.43
1:A:401:ALA:HB2	1:A:474:ILE:HG13	2.00	0.43
1:A:422:GLU:C	1:A:423:GLU:HG2	2.39	0.43
1:A:438:ILE:O	1:A:439:GLN:C	2.56	0.43
1:A:135:SER:CB	1:A:672:VAL:HG13	2.48	0.43
1:A:708:LYS:O	1:A:710:PRO:HD3	2.18	0.43
1:A:618:ALA:HB1	1:A:815:ARG:CZ	2.49	0.43
1:A:914:LEU:HD12	1:A:914:LEU:HA	1.80	0.43
1:A:943:ILE:HG22	1:A:944:LEU:N	2.34	0.43
1:A:514:GLY:O	1:A:518:ARG:CB	2.65	0.43
1:A:568:ASP:O	1:A:634:TRP:CZ3	2.70	0.43
1:A:795:ASP:CG	1:A:797:GLN:NE2	2.71	0.43
1:A:138:MET:HG2	1:A:139:VAL:N	2.33	0.43
1:A:28:LEU:N	1:A:28:LEU:HD12	2.34	0.43
1:A:32:VAL:O	1:A:390:ILE:O	2.36	0.43
1:A:355:MET:HB3	1:A:365:THR:OG1	2.19	0.43
1:A:363:ARG:HH11	1:A:497:LEU:HD22	1.84	0.43
1:A:396:PHE:C	1:A:398:MET:H	2.22	0.43
1:A:35:TYR:CD1	1:A:671:ILE:HG12	2.54	0.43
1:A:1028:VAL:C	1:A:1030:ARG:H	2.20	0.43
1:A:27:ILE:O	1:A:29:LYS:N	2.46	0.43
1:A:352:PHE:CE1	1:A:365:THR:HG23	2.54	0.43
1:A:380:PHE:O	1:A:383:LEU:HB2	2.18	0.43
1:A:418:ARG:C	1:A:420:MET:N	2.70	0.43
1:A:600:THR:CG2	1:A:601:LYS:N	2.75	0.43
1:A:291:ILE:HG22	1:A:292:LYS:N	2.34	0.43
1:A:527:TYR:HE2	1:A:968:VAL:HG13	1.81	0.43
1:A:435:MET:C	1:A:437:GLN:H	2.22	0.42
1:A:451:ALA:CB	1:A:883:VAL:HG22	2.49	0.42
1:A:208:LYS:HE3	1:A:208:LYS:HB2	1.91	0.42
1:A:25:LEU:HD12	1:A:25:LEU:C	2.40	0.42
1:A:361:ASN:C	1:A:363:ARG:H	2.23	0.42
1:A:489:THR:CB	1:A:490:PRO:CD	2.97	0.42
1:A:832:ALA:HB3	1:A:835:LYS:HB2	2.01	0.42
1:A:168:ARG:HG3	1:A:168:ARG:O	2.19	0.42
1:A:452:VAL:HA	1:A:880:SER:HB3	2.01	0.42
1:A:644:VAL:CG1	1:A:645:GLU:N	2.82	0.42
1:A:722:GLU:O	1:A:723:ASP:OD1	2.38	0.42
1:A:542:LEU:CD1	1:A:1028:VAL:HG11	2.50	0.42
1:A:122:VAL:HG23	1:A:123:GLN:N	2.35	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:37:THR:C	1:A:38:ILE:HG12	2.39	0.42
1:A:45:ILE:HG22	1:A:46:SER:N	2.34	0.42
1:A:904:VAL:O	1:A:906:PRO:N	2.52	0.42
1:A:910:ILE:O	1:A:914:LEU:HB2	2.19	0.42
1:A:111:LEU:HD23	1:A:115:MET:HG2	1.95	0.42
1:A:150:THR:O	1:A:154:ILE:HG13	2.20	0.42
1:A:162:MET:HG2	1:A:313:MET:SD	2.60	0.42
1:A:211:ASN:O	1:A:212:ALA:HB2	2.20	0.42
1:A:223:PRO:HG2	1:A:223:PRO:O	2.20	0.42
1:A:241:THR:N	1:A:245:GLU:OE1	2.37	0.42
1:A:255:GLN:O	1:A:257:GLY:N	2.52	0.42
1:A:372:VAL:O	1:A:373:PRO:C	2.55	0.42
1:A:575:MET:O	1:A:662:MET:HG2	2.19	0.42
1:A:694:LYS:HA	1:A:697:GLN:HB3	2.00	0.42
1:A:873:ALA:HB3	1:A:874:PRO:HD3	2.02	0.42
1:A:291:ILE:HG13	1:A:291:ILE:H	1.68	0.42
1:A:497:LEU:O	1:A:498:LYS:O	2.38	0.42
1:A:839:GLU:O	1:A:842:GLU:HG2	2.20	0.42
1:A:989:LEU:CD2	1:A:1000:GLN:HE21	2.33	0.42
1:A:136:PHE:HA	1:A:291:ILE:O	2.19	0.42
1:A:222:THR:OG1	1:A:223:PRO:CD	2.68	0.42
1:A:415:ASN:HD22	1:A:438:ILE:HD11	1.85	0.42
1:A:656:SER:HA	1:A:663:VAL:CG2	2.50	0.42
1:A:684:LEU:O	1:A:824:SER:HA	2.20	0.42
1:A:792:ARG:HG3	1:A:793:ALA:H	1.82	0.42
1:A:30:LEU:CG	1:A:30:LEU:O	2.68	0.42
1:A:467:TYR:O	1:A:471:SER:N	2.53	0.42
1:A:655:PHE:HB2	1:A:663:VAL:HA	2.02	0.42
1:A:890:ALA:O	1:A:891:LEU:HD13	2.20	0.42
1:A:1:MET:HG3	1:A:1:MET:O	2.19	0.42
1:A:267:LYS:HZ3	1:A:267:LYS:HB2	1.85	0.42
1:A:396:PHE:HE2	1:A:1000:GLN:HG2	1.85	0.42
1:A:474:ILE:N	1:A:474:ILE:CD1	2.83	0.42
1:A:578:LEU:HD13	1:A:660:ASP:OD2	2.19	0.42
1:A:73:ASP:HB2	1:A:106:GLN:HE22	1.84	0.42
1:A:831:ALA:O	1:A:832:ALA:HB2	2.20	0.42
1:A:681:ASP:O	1:A:859:TRP:CE3	2.73	0.42
1:A:892:TYR:CD2	1:A:897:ILE:CG2	3.03	0.42
1:A:968:VAL:N	1:A:971:ARG:NH2	2.68	0.42
1:A:1028:VAL:O	1:A:1030:ARG:N	2.47	0.41
1:A:393:LEU:HD11	1:A:466:ILE:CG2	2.46	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:512:PHE:O	1:A:513:PHE:C	2.56	0.41
1:A:621:GLY:O	1:A:623:ASN:N	2.53	0.41
1:A:764:ASP:HB3	1:A:769:LYS:HD2	2.02	0.41
1:A:696:THR:HA	1:A:825:MET:SD	2.60	0.41
1:A:155:SER:O	1:A:158:VAL:N	2.53	0.41
1:A:166:ILE:HG22	1:A:175:VAL:HG21	2.02	0.41
1:A:181:GLN:NE2	1:A:767:ARG:NE	2.65	0.41
1:A:361:ASN:C	1:A:363:ARG:N	2.73	0.41
1:A:459:PHE:CA	1:A:464:GLY:HA3	2.50	0.41
1:A:734:GLU:O	1:A:736:ALA:N	2.52	0.41
1:A:162:MET:SD	1:A:317:PHE:CZ	3.13	0.41
1:A:196:PHE:CD2	1:A:260:VAL:HG21	2.55	0.41
1:A:355:MET:HE2	1:A:410:ILE:HG12	2.02	0.41
1:A:424:GLY:C	1:A:426:PRO:CD	2.81	0.41
1:A:90:ILE:CD1	1:A:90:ILE:H	2.29	0.41
1:A:1008:MET:O	1:A:1009:GLY:C	2.57	0.41
1:A:651:ALA:O	1:A:654:ALA:HB3	2.20	0.41
1:A:719:ASN:HA	1:A:719:ASN:HD22	1.68	0.41
1:A:156:ASP:CG	1:A:182:TYR:CD2	2.93	0.41
1:A:183:ALA:HB2	1:A:273:GLU:HG2	2.03	0.41
1:A:300:LEU:C	1:A:302:THR:N	2.73	0.41
1:A:353:LEU:O	1:A:354:VAL:C	2.57	0.41
1:A:356:TYR:C	1:A:358:PHE:H	2.23	0.41
1:A:399:VAL:HG23	1:A:400:LEU:N	2.34	0.41
1:A:455:PRO:HG2	1:A:880:SER:OG	2.21	0.41
1:A:568:ASP:HB2	1:A:644:VAL:CG1	2.45	0.41
1:A:886:LEU:O	1:A:887:CYS:C	2.59	0.41
1:A:910:ILE:HD12	1:A:910:ILE:HA	1.79	0.41
1:A:931:LEU:O	1:A:934:THR:HB	2.20	0.41
1:A:974:PRO:O	1:A:975:ILE:C	2.59	0.41
1:A:134:SER:O	1:A:135:SER:CB	2.65	0.41
1:A:418:ARG:O	1:A:419:VAL:C	2.58	0.41
1:A:199:THR:HG21	1:A:792:ARG:H	1.86	0.41
1:A:930:GLY:O	1:A:933:THR:CG2	2.67	0.41
1:A:951:ASP:C	1:A:953:MET:N	2.73	0.41
1:A:274:ASN:HD22	1:A:276:ASP:HB2	1.86	0.41
1:A:681:ASP:O	1:A:859:TRP:HE3	2.03	0.41
1:A:910:ILE:CG2	1:A:911:GLY:N	2.84	0.41
1:A:76:MET:CG	1:A:95:GLU:OE1	2.68	0.41
1:A:120:GLN:HE21	1:A:120:GLN:HB2	1.52	0.41
1:A:162:MET:SD	1:A:317:PHE:HZ	2.44	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:584:GLN:HA	1:A:587:THR:CG2	2.51	0.41
1:A:903:LEU:HD12	1:A:1025:PHE:CB	2.41	0.41
1:A:40:PRO:HB2	1:A:94:PHE:O	2.21	0.41
1:A:23:GLY:O	1:A:26:ALA:HB3	2.20	0.41
1:A:255:GLN:C	1:A:257:GLY:H	2.22	0.41
1:A:370:ILE:O	1:A:374:VAL:HG23	2.21	0.41
1:A:512:PHE:O	1:A:515:TRP:HB3	2.21	0.41
1:A:790:TYR:CE1	1:A:800:PRO:HB3	2.56	0.41
1:A:131:LYS:O	1:A:294:ALA:HA	2.21	0.41
1:A:326:PRO:O	1:A:327:TYR:O	2.38	0.41
1:A:412:VAL:HG13	1:A:435:MET:HE1	2.01	0.41
1:A:672:VAL:O	1:A:673:GLU:HB3	2.21	0.41
1:A:795:ASP:OD2	1:A:796:GLY:N	2.53	0.41
1:A:868:LEU:HD23	1:A:868:LEU:N	2.36	0.41
1:A:391:ASN:N	1:A:394:THR:OG1	2.50	0.41
1:A:2:PRO:O	1:A:3:ASN:HB2	2.21	0.41
1:A:463:THR:C	1:A:465:ALA:H	2.22	0.41
1:A:49:TYR:CE1	1:A:60:THR:HG21	2.55	0.41
1:A:727:PHE:HE2	1:A:786:ILE:HG13	1.85	0.41
1:A:450:SER:O	1:A:454:VAL:N	2.53	0.40
1:A:388:PHE:CE1	1:A:472:ILE:HG12	2.56	0.40
1:A:427:PRO:CG	1:A:499:PRO:HG3	2.50	0.40
1:A:571:VAL:CG1	1:A:668:LEU:HD11	2.52	0.40
1:A:472:ILE:C	1:A:474:ILE:N	2.75	0.40
1:A:511:GLY:O	1:A:513:PHE:N	2.53	0.40
1:A:535:LEU:HD22	1:A:1027:VAL:HG21	2.03	0.40
1:A:699:ARG:HB3	1:A:699:ARG:HE	1.61	0.40
1:A:400:LEU:HD21	1:A:929:VAL:HG12	2.02	0.40
1:A:995:ALA:C	1:A:997:SER:H	2.24	0.40
1:A:163:LYS:HD2	1:A:177:LEU:HB2	2.02	0.40
1:A:177:LEU:HD13	1:A:177:LEU:C	2.41	0.40
1:A:327:TYR:HA	1:A:571:VAL:CG2	2.51	0.40
1:A:425:LEU:N	1:A:426:PRO:CD	2.84	0.40
1:A:932:LEU:O	1:A:935:ILE:N	2.54	0.40
1:A:191:ASN:O	1:A:192:GLU:C	2.60	0.40
1:A:242:SER:C	1:A:244:GLU:N	2.74	0.40
1:A:473:THR:HB	1:A:474:ILE:HD12	2.03	0.40
1:A:680:PHE:HD2	1:A:859:TRP:HZ3	1.69	0.40
1:A:1022:VAL:C	1:A:1024:VAL:N	2.75	0.40
1:A:20:MET:HG2	1:A:377:LEU:HD13	2.04	0.40
1:A:446:ALA:HB2	1:A:482:VAL:CG2	2.51	0.40

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:843:LEU:HD12	1:A:847:LEU:HG	2.03	0.40

All (3) 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:529:ASP:OD1	1:A:529:ASP:OD1[11_445]	1.93	0.27
1:A:529:ASP:OD2	1:A:529:ASP:OD2[11_445]	2.12	0.08
1:A:525:HIS:NE2	1:A:529:ASP:OD2[11_445]	2.18	0.02

## 5.3 Torsion angles [i](#)

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

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	1015/1049 (97%)	688 (68%)	205 (20%)	122 (12%)	<b>0</b> <b>2</b>

All (122) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	5	PHE
1	A	6	ILE
1	A	17	ILE
1	A	38	ILE
1	A	132	SER
1	A	135	SER
1	A	136	PHE
1	A	222	THR
1	A	299	ALA
1	A	327	TYR
1	A	383	LEU
1	A	421	ALA
1	A	423	GLU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	425	LEU
1	A	426	PRO
1	A	428	LYS
1	A	459	PHE
1	A	471	SER
1	A	497	LEU
1	A	498	LYS
1	A	615	PHE
1	A	619	GLY
1	A	623	ASN
1	A	638	PRO
1	A	663	VAL
1	A	723	ASP
1	A	733	GLN
1	A	831	ALA
1	A	862	MET
1	A	863	SER
1	A	868	LEU
1	A	921	LEU
1	A	958	LYS
1	A	995	ALA
1	A	1003	VAL
1	A	22	ALA
1	A	36	PRO
1	A	75	LEU
1	A	133	SER
1	A	172	VAL
1	A	256	ASP
1	A	301	ASP
1	A	337	ILE
1	A	338	HIS
1	A	360	GLN
1	A	361	ASN
1	A	384	ALA
1	A	439	GLN
1	A	460	GLY
1	A	473	THR
1	A	566	ASP
1	A	620	ARG
1	A	622	GLN
1	A	636	ASP
1	A	639	GLY

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	661	ALA
1	A	690	LEU
1	A	720	GLY
1	A	808	ARG
1	A	869	SER
1	A	952	LEU
1	A	957	GLY
1	A	1017	LEU
1	A	1029	VAL
1	A	18	ILE
1	A	28	LEU
1	A	95	GLU
1	A	159	ALA
1	A	295	THR
1	A	357	LEU
1	A	365	THR
1	A	397	GLY
1	A	407	ASP
1	A	469	GLN
1	A	488	LEU
1	A	536	ARG
1	A	567	GLU
1	A	670	ALA
1	A	887	CYS
1	A	905	VAL
1	A	967	ALA
1	A	50	PRO
1	A	99	ASP
1	A	138	MET
1	A	374	VAL
1	A	419	VAL
1	A	455	PRO
1	A	477	ALA
1	A	597	TYR
1	A	618	ALA
1	A	640	GLU
1	A	655	PHE
1	A	833	PRO
1	A	871	ASN
1	A	872	GLN
1	A	940	LYS
1	A	30	LEU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	34	GLN
1	A	35	TYR
1	A	297	ALA
1	A	339	GLU
1	A	381	ALA
1	A	570	GLY
1	A	579	PRO
1	A	602	GLU
1	A	633	ASP
1	A	671	ILE
1	A	718	PRO
1	A	851	LEU
1	A	852	PRO
1	A	894	SER
1	A	77	TYR
1	A	223	PRO
1	A	512	PHE
1	A	832	ALA
1	A	724	THR
1	A	759	VAL
1	A	9	PRO
1	A	154	ILE
1	A	961	ILE
1	A	158	VAL
1	A	340	VAL

### 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	829/855 (97%)	738 (89%)	91 (11%)	7 30

All (91) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	4	PHE

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	8	ARG
1	A	25	LEU
1	A	38	ILE
1	A	44	THR
1	A	53	ASP
1	A	57	VAL
1	A	58	GLN
1	A	60	THR
1	A	79	SER
1	A	95	GLU
1	A	102	ILE
1	A	105	VAL
1	A	120	GLN
1	A	137	LEU
1	A	140	VAL
1	A	144	ASN
1	A	150	THR
1	A	152	GLU
1	A	164	ASP
1	A	166	ILE
1	A	184	MET
1	A	185	ARG
1	A	194	ASN
1	A	222	THR
1	A	224	PRO
1	A	230	LEU
1	A	276	ASP
1	A	277	ILE
1	A	307	ARG
1	A	329	THR
1	A	342	LYS
1	A	349	ILE
1	A	350	LEU
1	A	355	MET
1	A	359	LEU
1	A	372	VAL
1	A	379	THR
1	A	391	ASN
1	A	394	THR
1	A	414	GLU
1	A	418	ARG
1	A	426	PRO

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	447	MET
1	A	452	VAL
1	A	459	PHE
1	A	483	LEU
1	A	571	VAL
1	A	574	THR
1	A	578	LEU
1	A	604	ASN
1	A	613	ASN
1	A	623	ASN
1	A	641	GLU
1	A	660	ASP
1	A	662	MET
1	A	673	GLU
1	A	684	LEU
1	A	687	GLN
1	A	690	LEU
1	A	695	LEU
1	A	699	ARG
1	A	708	LYS
1	A	709	HIS
1	A	714	THR
1	A	717	ARG
1	A	719	ASN
1	A	723	ASP
1	A	724	THR
1	A	748	THR
1	A	775	SER
1	A	792	ARG
1	A	801	PHE
1	A	817	GLU
1	A	818	ARG
1	A	837	THR
1	A	853	THR
1	A	858	ASP
1	A	877	TYR
1	A	895	TRP
1	A	907	LEU
1	A	914	LEU
1	A	917	THR
1	A	933	THR
1	A	958	LYS

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	964	THR
1	A	965	LEU
1	A	971	ARG
1	A	990	VAL
1	A	993	THR
1	A	1025	PHE

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (33) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	34	GLN
1	A	67	GLN
1	A	70	ASN
1	A	89	GLN
1	A	104	GLN
1	A	106	GLN
1	A	108	GLN
1	A	112	GLN
1	A	120	GLN
1	A	123	GLN
1	A	125	GLN
1	A	144	ASN
1	A	181	GLN
1	A	191	ASN
1	A	210	GLN
1	A	213	GLN
1	A	231	ASN
1	A	274	ASN
1	A	284	GLN
1	A	361	ASN
1	A	415	ASN
1	A	584	GLN
1	A	596	HIS
1	A	605	ASN
1	A	613	ASN
1	A	622	GLN
1	A	623	ASN
1	A	701	GLN
1	A	719	ASN
1	A	737	GLN
1	A	871	ASN
1	A	1000	GLN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1001	ASN

### 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](#)

There are no ligands in this entry.

### 5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

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

There are no chain breaks in this entry.

## 6 Fit of model and data

### 6.1 Protein, DNA and RNA chains

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å <sup>2</sup> )	Q<0.9
1	A	1019/1049 (97%)	-0.14	23 (2%) 61 39	23, 66, 111, 160	0

All (23) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	306	ILE	4.0
1	A	714	THR	3.9
1	A	678	THR	3.4
1	A	833	PRO	3.3
1	A	702	LEU	2.9
1	A	874	PRO	2.8
1	A	705	GLU	2.7
1	A	835	LYS	2.6
1	A	302	THR	2.4
1	A	851	LEU	2.4
1	A	955	LYS	2.4
1	A	460	GLY	2.4
1	A	405	LEU	2.4
1	A	715	SER	2.3
1	A	836	SER	2.2
1	A	468	ARG	2.2
1	A	711	ASP	2.2
1	A	852	PRO	2.2
1	A	3	ASN	2.2
1	A	310	LEU	2.1
1	A	701	GLN	2.1
1	A	462	SER	2.1
1	A	834	GLY	2.1

## 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](#)

There are no ligands in this entry.

## 6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.