



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Oct 25, 2017 – 09:23 PM EDT

PDB ID : 3KSS  
Title : Structure and Mechanism of the Heavy Metal Transporter CusA  
Authors : Su, C.-C.  
Deposited on : unknown  
Resolution : 3.88 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

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

MolProbity	:	4.02b-467
Xtriage (Phenix)	:	1.9-1692
EDS	:	rb-20030345
Percentile statistics	:	20161228.v01 (using entries in the PDB archive December 28th 2016)
Refmac	:	5.8.0135
CCP4	:	6.5.0
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	rb-20030345

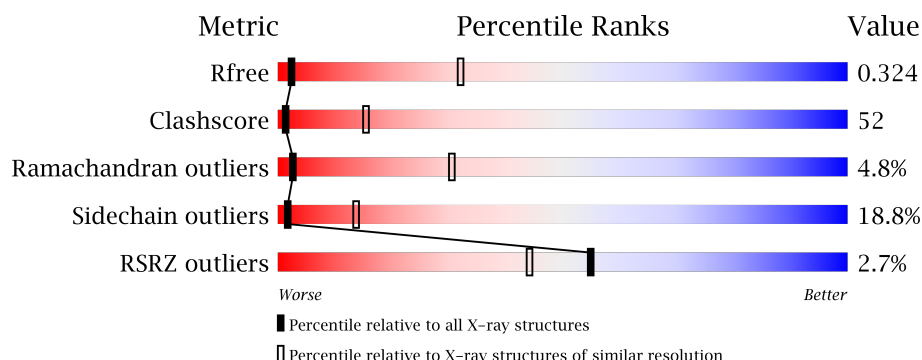
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

## *X-RAY DIFFRACTION*

The reported resolution of this entry is 3.88 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	1065 (4.20-3.56)
Clashscore	112137	1038 (4.16-3.60)
Ramachandran outliers	110173	1001 (4.16-3.60)
Sidechain outliers	110143	1024 (4.18-3.58)
RSRZ outliers	101464	1079 (4.20-3.56)

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	1055	

## 2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 7803 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 Cation efflux system protein cusA.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	1015	Total	C	N	O	S	0	0	0
			7802	5047	1305	1414	36			

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-7	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054
A	-6	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054
A	-5	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054
A	-4	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054
A	-3	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054
A	-2	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054
A	-1	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054
A	0	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054

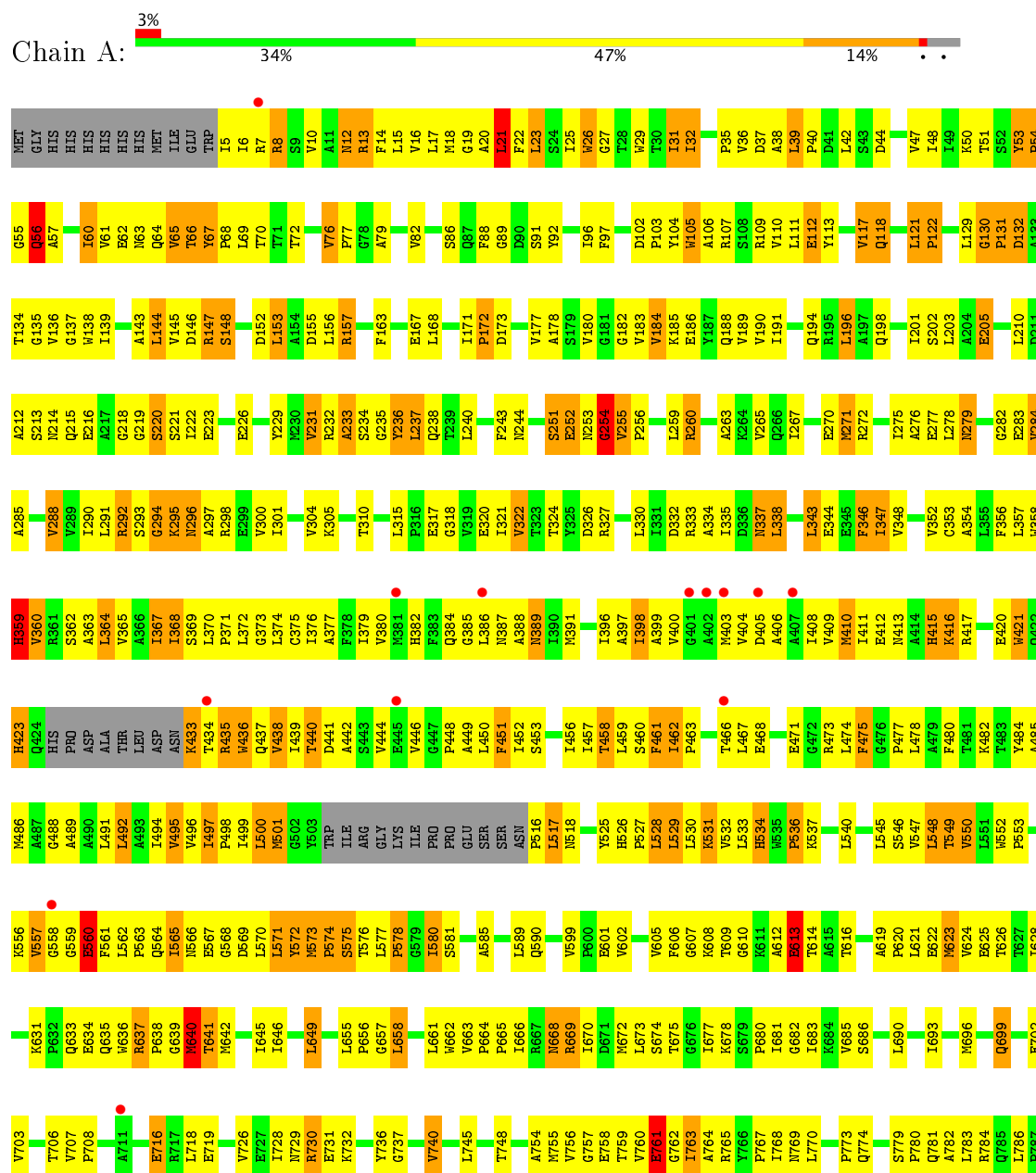
- Molecule 2 is COPPER (I) ION (three-letter code: CU1) (formula: Cu).

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

### 3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA and DNA chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry and electron density. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. A red dot above a residue indicates a poor fit to the electron density ( $RSRZ > 2$ ). Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

- Molecule 1: Cation efflux system protein *cusA*



V990	I788	R867	G929	I789	R867	G929	V990
I991	L789	R870	F930	T790	R870	F930	I991
I992	P791	K871	I931	P791	K871	I931	I992
	M792	L872	A932	L872	L872	A932	
I995	K793	K873	L933	K793	K873	L933	I995
L996	Q794	L874	A934	Q794	L874	A934	L996
P997	I795	M875	G935	I795	M875	G935	P997
I998	I796	M876	V936	I796	M876	V936	I998
L999	D800	M877	E939	D800	M877	E939	L999
W1000		M878	F940		M878	F940	W1000
G1001		T879	G941		T879	G941	G1001
T1002	I804	L880	V942	I804	L880	V942	T1002
G1003	K905	M881	V943	K905	M881	V943	G1003
A1004		I882	M944		I882	M944	A1004
G1005	P810	I883	L945	P810	I883	L945	G1005
S1006	S811	F884	M946	S811	F884	M946	S1006
E1007	M812	V885	Y947	M812	V885	Y947	E1007
V1008	L813	L886	L948	L813	L886	L948	V1008
M1009	K814	L887	R949	K814	L887	R949	M1009
S1010	T815	Y888	H950	T815	Y888	H950	S1010
I1011	E816	L889	A951	E816	L889	A951	I1011
I1012	N817	F891	I952	N817	F891	I952	I1012
A1013	A818	R892	E953	A818	R892	E953	A1013
A1014	R819	R893	A954	R819	R893	A954	A1014
P1015	F820	V894	V955	P1015	F820	V894	P1015
M1016	T821	G895	P956	M1016	T821	G895	M1016
I1017	S822	E896	S957	I1017	S822	E896	I1017
G1018	W823	A897	L958	G1018	W823	A897	G1018
G1019	I824	L898	N959	G1019	I824	L898	G1019
M1020	Y825	L899	M960	M1020	Y825	L899	M1020
I1021	I826	R900	P961	I1021	I826	R900	I1021
T1022	D827		Q962	T1022	D827		T1022
A1023	A828		T963	A1023	A828		A1023
P1024	R829	S903	F964	P1024	R829	S903	P1024
L1025	D830	V904	S965	L1025	D830	V904	L1025
I1026	R831	P905	E966	I1026	R831	P905	I1026
S1027	D832	F906	Q967	S1027	D832	F906	S1027
L1028	M833	K968	K968	L1028	M833	K968	L1028
F1029		L969	L969	F1029		L969	F1029
I1030	V837	V909	D970	I1030	V837	V909	I1030
I1031	H838	G910	E971	I1031	H838	G910	I1031
P1032		G911	A972	P1032		G911	P1032
A1033	K842	I912	L973	A1033	K842	I912	A1033
A1034	A843	W913	Y974	A1034	A843	W913	A1034
Y1035	I844	L914	H975	Y1035	I844	L914	Y1035
K1036	A845	L915	G976	K1036	A845	L915	K1036
L1037	E846	W916	A977	L1037	E846	W916	L1037
M1038	K847	W917	V978	M1038	K847	W917	M1038
W1039	V848	W918	L979	W1039	V848	W918	W1039
ILEU	Q849	G919	R980	ILEU	Q849	G919	ILEU
HIS	L850	F920	V981	HIS	L850	F920	HIS
ARG		H921	R982	ARG		H921	ARG
HIS	G860	L922	P983	HIS	G860	L922	HIS
ARG	Q861	S923	K984	ARG	Q861	S923	ARG
VAL	F862	Y924	A985	VAL	F862	Y924	VAL
ARG	E863	A925	M986	ARG	E863	A925	ARG
LYS	L864	T926	V987	LYS	L864	T926	LYS
	L865	G927	V988		L865	G927	
	E866	T928	A989		E866	T928	

## 4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	H 3 2	Depositor
Cell constants a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	180.36 Å   180.36 Å   287.98 Å 90.00°   90.00°   120.00°	Depositor
Resolution (Å)	35.28 – 3.88 35.29 – 3.88	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	92.7 (35.28-3.88) 98.4 (35.29-3.88)	Depositor EDS
$R_{merge}$	0.09	Depositor
$R_{sym}$	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ <sup>1</sup>	2.89 (at 3.87 Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX	Depositor
R, $R_{free}$	0.260   ,   0.325 0.266   ,   0.324	Depositor DCC
$R_{free}$ test set	848 reflections (5.09%)	DCC
Wilson B-factor (Å <sup>2</sup> )	143.3	Xtriage
Anisotropy	0.240	Xtriage
Bulk solvent $k_{sol}$ (e/Å <sup>3</sup> ), $B_{sol}$ (Å <sup>2</sup> )	0.26   ,   146.1	EDS
L-test for twinning <sup>2</sup>	$\langle  L  \rangle = 0.47$ , $\langle L^2 \rangle = 0.30$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
$F_o, F_c$ correlation	0.90	EDS
Total number of atoms	7803	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	193.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.08% 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

### 5.1 Standard geometry

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: CU1

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	0.33	1/7960 (0.0%)	0.64	12/10834 (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	0	1

All (1) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	233	ALA	C-O	11.35	1.45	1.23

All (12) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	254	GLY	N-CA-C	22.13	168.42	113.10
1	A	255	VAL	C-N-CD	-21.21	73.93	120.60
1	A	255	VAL	N-CA-CB	-13.02	82.86	111.50
1	A	235	GLY	N-CA-C	-9.04	90.50	113.10
1	A	254	GLY	C-N-CA	6.80	138.71	121.70
1	A	761	GLU	N-CA-C	-6.41	93.69	111.00
1	A	575	SER	N-CA-C	-5.95	94.94	111.00
1	A	251	SER	O-C-N	5.71	131.84	122.70
1	A	251	SER	CA-C-N	-5.34	105.44	117.20
1	A	21	LEU	CA-CB-CG	5.30	127.49	115.30
1	A	1026	LEU	CA-CB-CG	5.15	127.15	115.30
1	A	573	MET	C-N-CD	-5.07	109.45	120.60

There are no chirality outliers.

All (1) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	254	GLY	Peptide

## 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	7802	0	8064	830	0
2	A	1	0	0	0	0
All	All	7803	0	8064	830	0

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 52.

All (830) 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:530:LEU:CA	1:A:533:LEU:HD12	1.41	1.51
1:A:529:LEU:HD12	1:A:530:LEU:N	1.28	1.43
1:A:677:ILE:HG22	1:A:825:TYR:CE1	1.53	1.43
1:A:530:LEU:HA	1:A:533:LEU:CD1	1.48	1.41
1:A:572:TYR:CE1	1:A:574:PRO:HD3	1.66	1.29
1:A:529:LEU:CD1	1:A:530:LEU:N	2.06	1.19
1:A:529:LEU:CD1	1:A:530:LEU:H	1.56	1.17
1:A:526:HIS:CE1	1:A:978:VAL:HB	1.78	1.17
1:A:531:LYS:NZ	1:A:531:LYS:HB2	1.48	1.15
1:A:62:GLU:HA	1:A:66:THR:HG23	1.28	1.10
1:A:292:ARG:HH21	1:A:292:ARG:HG3	1.04	1.09
1:A:1023:ALA:HA	1:A:1026:LEU:HD12	1.34	1.09
1:A:677:ILE:CG2	1:A:825:TYR:CE1	2.35	1.08
1:A:658:LEU:HD23	1:A:658:LEU:N	1.68	1.08
1:A:529:LEU:O	1:A:532:VAL:HG22	1.53	1.07
1:A:412:GLU:HG2	1:A:983:PRO:HG3	1.36	1.05
1:A:417:ARG:HE	1:A:442:ALA:HB1	1.18	1.03
1:A:572:TYR:CD1	1:A:574:PRO:HD3	1.93	1.02

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:980:ARG:HH21	1:A:984:LYS:HG2	1.22	1.02
1:A:995:LEU:HD12	1:A:1017:ILE:HG13	1.42	1.01
1:A:572:TYR:HE1	1:A:574:PRO:HD3	1.18	1.00
1:A:526:HIS:HE1	1:A:978:VAL:HB	1.21	1.00
1:A:572:TYR:HE1	1:A:574:PRO:CD	1.75	1.00
1:A:572:TYR:CE1	1:A:574:PRO:CD	2.44	0.99
1:A:529:LEU:O	1:A:533:LEU:HG	1.62	0.98
1:A:876:VAL:HG23	1:A:877:PRO:HD3	1.46	0.98
1:A:948:LEU:HD23	1:A:1031:ILE:HG23	1.48	0.95
1:A:917:TRP:CE3	1:A:918:MET:HG2	2.03	0.94
1:A:531:LYS:NZ	1:A:531:LYS:CB	2.30	0.94
1:A:657:GLY:C	1:A:658:LEU:HD23	1.86	0.93
1:A:410:MET:HE3	1:A:411:ILE:HA	1.50	0.92
1:A:960:ASN:H	1:A:961:PRO:HD3	1.34	0.91
1:A:531:LYS:HB2	1:A:531:LYS:HZ3	1.10	0.91
1:A:216:GLU:OE1	1:A:236:TYR:HE1	1.52	0.89
1:A:63:ASN:HA	1:A:67:TYR:HD2	1.37	0.89
1:A:758:GLU:HG2	1:A:767:PRO:HA	1.55	0.89
1:A:410:MET:SD	1:A:500:LEU:HD13	2.11	0.89
1:A:497:ILE:HA	1:A:500:LEU:CD1	2.03	0.88
1:A:921:HIS:O	1:A:922:LEU:HB3	1.73	0.88
1:A:1023:ALA:O	1:A:1026:LEU:HD13	1.74	0.88
1:A:292:ARG:HG3	1:A:292:ARG:NH2	1.84	0.87
1:A:758:GLU:OE1	1:A:765:ARG:HG2	1.74	0.87
1:A:212:ALA:HA	1:A:215:GLN:HE22	1.39	0.87
1:A:550:VAL:HG22	1:A:912:ILE:HD12	1.57	0.85
1:A:375:CYS:O	1:A:379:ILE:HG13	1.76	0.85
1:A:677:ILE:HG22	1:A:825:TYR:HE1	0.96	0.85
1:A:462:ILE:HG23	1:A:463:PRO:HD3	1.58	0.84
1:A:529:LEU:O	1:A:533:LEU:CD1	2.25	0.84
1:A:35:PRO:HA	1:A:296:ASN:HB3	1.57	0.84
1:A:607:GLY:HA2	1:A:626:THR:HG22	1.59	0.84
1:A:458:THR:HG22	1:A:486:MET:HB3	1.60	0.84
1:A:762:GLY:O	1:A:763:ILE:HG22	1.78	0.84
1:A:763:ILE:O	1:A:763:ILE:HG12	1.76	0.83
1:A:496:VAL:HA	1:A:499:ILE:HD12	1.59	0.83
1:A:277:GLU:HG3	1:A:282:GLY:HA2	1.61	0.82
1:A:572:TYR:HE1	1:A:574:PRO:CG	1.92	0.82
1:A:26:TRP:NE1	1:A:379:ILE:HG12	1.95	0.82
1:A:529:LEU:O	1:A:533:LEU:CG	2.28	0.81
1:A:376:ILE:HD13	1:A:488:GLY:HA3	1.63	0.81

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:360:VAL:HG12	1:A:362:SER:H	1.46	0.81
1:A:526:HIS:O	1:A:530:LEU:HD13	1.79	0.81
1:A:367:ILE:O	1:A:371:PRO:HD2	1.81	0.81
1:A:370:LEU:HB2	1:A:371:PRO:HD3	1.63	0.81
1:A:960:ASN:H	1:A:961:PRO:CD	1.93	0.81
1:A:525:TYR:C	1:A:527:PRO:HD2	2.02	0.81
1:A:292:ARG:HH21	1:A:292:ARG:CG	1.93	0.80
1:A:762:GLY:O	1:A:763:ILE:CG2	2.30	0.80
1:A:531:LYS:HB2	1:A:531:LYS:HZ2	1.43	0.80
1:A:763:ILE:O	1:A:763:ILE:CG1	2.30	0.80
1:A:459:LEU:O	1:A:462:ILE:HG22	1.81	0.80
1:A:526:HIS:O	1:A:529:LEU:CD1	2.30	0.80
1:A:530:LEU:HD12	1:A:530:LEU:N	1.95	0.80
1:A:925:ALA:HB1	1:A:1012:ILE:HG22	1.61	0.80
1:A:530:LEU:N	1:A:533:LEU:HD12	1.96	0.80
1:A:26:TRP:HE1	1:A:379:ILE:HG12	1.46	0.79
1:A:553:PRO:HA	1:A:916:TRP:CZ2	2.17	0.79
1:A:528:LEU:O	1:A:532:VAL:HG13	1.82	0.79
1:A:416:LYS:HD3	1:A:417:ARG:HD3	1.64	0.79
1:A:906:PHE:HD2	1:A:907:ALA:N	1.80	0.79
1:A:497:ILE:HA	1:A:500:LEU:HD12	1.62	0.79
1:A:525:TYR:CE1	1:A:977:ALA:HB1	2.18	0.79
1:A:658:LEU:CD2	1:A:658:LEU:N	2.45	0.78
1:A:178:ALA:HB3	1:A:288:VAL:HG13	1.65	0.78
1:A:251:SER:OG	1:A:252:GLU:HG2	1.84	0.78
1:A:452:ILE:HD11	1:A:889:LEU:HD11	1.63	0.78
1:A:547:VAL:O	1:A:550:VAL:HG12	1.83	0.78
1:A:1023:ALA:HA	1:A:1026:LEU:CD1	2.14	0.78
1:A:531:LYS:HZ3	1:A:531:LYS:CB	1.95	0.77
1:A:536:PRO:HB3	1:A:1037:LEU:HD21	1.67	0.77
1:A:995:LEU:CD1	1:A:1016:MET:HB3	2.15	0.76
1:A:526:HIS:O	1:A:529:LEU:HD11	1.84	0.76
1:A:525:TYR:CE2	1:A:1028:LEU:HD22	2.20	0.76
1:A:1033:ALA:HA	1:A:1036:LYS:HE2	1.67	0.76
1:A:933:LEU:HD11	1:A:1019:GLY:HA3	1.67	0.76
1:A:668:ASN:C	1:A:668:ASN:HD22	1.88	0.76
1:A:614:THR:HG22	1:A:616:THR:H	1.51	0.75
1:A:144:LEU:HD12	1:A:156:LEU:HD22	1.69	0.75
1:A:13:ARG:HD2	1:A:13:ARG:H	1.51	0.75
1:A:995:LEU:HD13	1:A:1016:MET:HB3	1.66	0.75
1:A:730:ARG:HD3	1:A:731:GLU:N	2.01	0.75

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:922:LEU:HA	1:A:926:THR:HG21	1.69	0.75
1:A:948:LEU:HD12	1:A:949:ARG:N	2.02	0.75
1:A:404:VAL:HG11	1:A:990:VAL:HG21	1.68	0.75
1:A:530:LEU:CA	1:A:533:LEU:CD1	2.30	0.75
1:A:1002:THR:HG21	1:A:1006:SER:HB2	1.67	0.74
1:A:27:GLY:O	1:A:31:ILE:HG22	1.85	0.74
1:A:216:GLU:OE1	1:A:236:TYR:CE1	2.39	0.74
1:A:410:MET:HE2	1:A:411:ILE:HG12	1.69	0.74
1:A:412:GLU:CG	1:A:983:PRO:HG3	2.16	0.73
1:A:417:ARG:HG2	1:A:442:ALA:HB3	1.70	0.73
1:A:943:VAL:HG11	1:A:984:LYS:NZ	2.03	0.73
1:A:550:VAL:CG2	1:A:912:ILE:HD12	2.17	0.73
1:A:908:LEU:HD23	1:A:933:LEU:HD22	1.69	0.73
1:A:914:LEU:O	1:A:918:MET:HG3	1.89	0.73
1:A:930:PHE:CD1	1:A:1015:PRO:HB3	2.24	0.73
1:A:847:LYS:HE3	1:A:847:LYS:HA	1.71	0.73
1:A:18:MET:HA	1:A:21:LEU:HD13	1.69	0.73
1:A:572:TYR:HD1	1:A:572:TYR:C	1.92	0.73
1:A:254:GLY:O	1:A:255:VAL:HG13	1.88	0.72
1:A:37:ASP:O	1:A:389:ASN:HA	1.89	0.72
1:A:216:GLU:HG3	1:A:233:ALA:O	1.89	0.72
1:A:889:LEU:HD23	1:A:890:ALA:N	2.03	0.72
1:A:106:ALA:O	1:A:110:VAL:HG23	1.90	0.72
1:A:278:LEU:HD11	1:A:322:VAL:HG21	1.72	0.72
1:A:398:ILE:HG21	1:A:1012:ILE:HD11	1.72	0.72
1:A:529:LEU:C	1:A:533:LEU:CD1	2.58	0.72
1:A:76:VAL:HG12	1:A:79:ALA:HB2	1.71	0.72
1:A:529:LEU:O	1:A:532:VAL:CG2	2.33	0.71
1:A:550:VAL:HG21	1:A:909:VAL:HA	1.72	0.71
1:A:452:ILE:HD13	1:A:889:LEU:HD21	1.71	0.71
1:A:959:ASN:HB2	1:A:968:LYS:HG3	1.72	0.71
1:A:62:GLU:HA	1:A:66:THR:CG2	2.15	0.71
1:A:72:THR:HG22	1:A:113:TYR:HB3	1.72	0.71
1:A:620:PRO:HD2	1:A:623:MET:HG3	1.71	0.71
1:A:356:PHE:CD2	1:A:986:MET:HB2	2.25	0.71
1:A:433:LYS:HB2	1:A:436:TRP:CD1	2.25	0.71
1:A:461:PHE:HZ	1:A:928:THR:HG23	1.55	0.71
1:A:525:TYR:HE1	1:A:977:ALA:HB1	1.54	0.71
1:A:251:SER:OG	1:A:252:GLU:N	2.23	0.71
1:A:944:MET:CG	1:A:1031:ILE:HG13	2.21	0.71
1:A:216:GLU:HG3	1:A:234:SER:HA	1.72	0.71

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1014:ALA:HB3	1:A:1015:PRO:HD3	1.72	0.70
1:A:530:LEU:HA	1:A:533:LEU:HD12	0.72	0.70
1:A:569:ASP:O	1:A:570:LEU:HD23	1.91	0.70
1:A:61:VAL:HG21	1:A:89:GLY:H	1.56	0.70
1:A:546:SER:O	1:A:549:THR:HG22	1.92	0.70
1:A:517:LEU:H	1:A:517:LEU:HD22	1.54	0.70
1:A:370:LEU:HB2	1:A:371:PRO:CD	2.22	0.70
1:A:572:TYR:CE1	1:A:574:PRO:CG	2.72	0.70
1:A:145:VAL:HG12	1:A:284:VAL:HG21	1.71	0.70
1:A:564:GLN:NE2	1:A:664:PRO:HD3	2.06	0.70
1:A:60:ILE:O	1:A:64:GLN:HB2	1.92	0.70
1:A:730:ARG:HD3	1:A:731:GLU:H	1.55	0.70
1:A:619:ALA:HB1	1:A:623:MET:CB	2.22	0.69
1:A:240:LEU:HD22	1:A:265:VAL:CG1	2.22	0.69
1:A:254:GLY:C	1:A:255:VAL:HG13	2.12	0.69
1:A:462:ILE:HD11	1:A:875:MET:SD	2.32	0.69
1:A:980:ARG:C	1:A:983:PRO:HD2	2.13	0.69
1:A:899:LEU:HD11	1:A:1030:ILE:HD12	1.75	0.69
1:A:6:ILE:HD11	1:A:497:ILE:HG13	1.74	0.69
1:A:577:LEU:HD23	1:A:578:PRO:HD2	1.75	0.69
1:A:147:ARG:H	1:A:147:ARG:HD3	1.58	0.68
1:A:380:VAL:HG21	1:A:484:TYR:CD2	2.28	0.68
1:A:980:ARG:NH2	1:A:984:LYS:HG2	2.03	0.68
1:A:876:VAL:HA	1:A:879:THR:HG22	1.75	0.68
1:A:526:HIS:O	1:A:529:LEU:HG	1.94	0.68
1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD2	1.76	0.68
1:A:553:PRO:CB	1:A:912:ILE:HD11	2.24	0.68
1:A:121:LEU:HB2	1:A:122:PRO:CD	2.24	0.68
1:A:927:GLY:O	1:A:931:ILE:HG12	1.94	0.68
1:A:216:GLU:CG	1:A:233:ALA:O	2.42	0.67
1:A:887:LEU:HD22	1:A:900:ILE:HG21	1.75	0.67
1:A:906:PHE:HD2	1:A:907:ALA:H	1.39	0.67
1:A:76:VAL:HG23	1:A:113:TYR:HD1	1.59	0.67
1:A:637:ARG:HG2	1:A:640:MET:HG3	1.75	0.67
1:A:572:TYR:CE1	1:A:574:PRO:HG3	2.30	0.67
1:A:833:MET:H	1:A:833:MET:HE2	1.59	0.67
1:A:118:GLN:HA	1:A:118:GLN:HE21	1.58	0.67
1:A:571:LEU:HD22	1:A:626:THR:O	1.95	0.67
1:A:823:TRP:N	1:A:823:TRP:CD1	2.60	0.67
1:A:912:ILE:HA	1:A:915:LEU:HG	1.77	0.67
1:A:398:ILE:HD11	1:A:482:LYS:HD2	1.76	0.67

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:943:VAL:HG11	1:A:984:LYS:HZ1	1.59	0.67
1:A:18:MET:HA	1:A:21:LEU:CD1	2.25	0.66
1:A:66:THR:HG21	1:A:86:SER:HB3	1.76	0.66
1:A:365:VAL:O	1:A:368:ILE:HG22	1.94	0.66
1:A:530:LEU:HA	1:A:533:LEU:HD13	1.72	0.66
1:A:569:ASP:HB3	1:A:628:ILE:O	1.94	0.66
1:A:180:VAL:HG22	1:A:276:ALA:HB2	1.75	0.66
1:A:441:ASP:O	1:A:444:VAL:HB	1.96	0.66
1:A:221:SER:HA	1:A:229:TYR:O	1.96	0.66
1:A:518:ASN:HD22	1:A:982:ARG:HG2	1.60	0.66
1:A:526:HIS:O	1:A:529:LEU:CG	2.45	0.65
1:A:143:ALA:HB2	1:A:606:PHE:HE2	1.61	0.65
1:A:790:THR:OG1	1:A:794:GLN:HB2	1.96	0.65
1:A:991:ILE:HG21	1:A:1020:MET:HG2	1.78	0.65
1:A:572:TYR:HD1	1:A:573:MET:N	1.94	0.65
1:A:468:GLU:O	1:A:864:LEU:HD21	1.95	0.65
1:A:404:VAL:HG12	1:A:408:ILE:HG12	1.78	0.65
1:A:138:TRP:HE1	1:A:616:THR:HG21	1.61	0.65
1:A:214:ASN:C	1:A:215:GLN:HG3	2.16	0.65
1:A:410:MET:HG3	1:A:411:ILE:N	2.12	0.65
1:A:932:ALA:HB3	1:A:1016:MET:HE1	1.78	0.65
1:A:189:VAL:HG22	1:A:265:VAL:HG22	1.79	0.65
1:A:399:ALA:HB2	1:A:482:LYS:HE3	1.79	0.65
1:A:944:MET:HG3	1:A:1031:ILE:HG13	1.78	0.65
1:A:891:PHE:HB2	1:A:896:GLU:OE2	1.96	0.65
1:A:610:GLY:HA2	1:A:620:PRO:O	1.97	0.64
1:A:833:MET:CE	1:A:833:MET:H	2.09	0.64
1:A:433:LYS:HB2	1:A:436:TRP:NE1	2.13	0.64
1:A:686:SER:HA	1:A:821:THR:HG22	1.80	0.64
1:A:948:LEU:CD2	1:A:1031:ILE:HG23	2.26	0.64
1:A:572:TYR:C	1:A:572:TYR:CD1	2.66	0.64
1:A:980:ARG:HD2	1:A:1028:LEU:HD21	1.80	0.64
1:A:36:VAL:HA	1:A:388:ALA:HB3	1.80	0.64
1:A:18:MET:O	1:A:21:LEU:HD22	1.97	0.63
1:A:758:GLU:HB2	1:A:765:ARG:NE	2.13	0.63
1:A:410:MET:CE	1:A:411:ILE:HA	2.25	0.63
1:A:812:MET:HG2	1:A:813:LEU:N	2.12	0.63
1:A:213:SER:O	1:A:237:LEU:HD13	1.99	0.63
1:A:40:PRO:HG3	1:A:389:ASN:ND2	2.13	0.63
1:A:56:GLN:HA	1:A:56:GLN:NE2	2.14	0.63
1:A:5:ILE:HA	1:A:8:ARG:CZ	2.29	0.63

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:987:THR:O	1:A:991:ILE:HD13	1.98	0.63
1:A:526:HIS:N	1:A:527:PRO:HD2	2.14	0.63
1:A:599:VAL:HG12	1:A:601:GLU:H	1.64	0.63
1:A:888:TYR:O	1:A:889:LEU:HB3	1.98	0.63
1:A:891:PHE:O	1:A:892:ARG:HB3	1.99	0.62
1:A:417:ARG:NE	1:A:442:ALA:HB1	2.03	0.62
1:A:324:THR:HG21	1:A:606:PHE:HB2	1.81	0.62
1:A:363:ALA:O	1:A:367:ILE:HG22	1.99	0.62
1:A:530:LEU:N	1:A:533:LEU:CD1	2.59	0.62
1:A:297:ALA:O	1:A:301:ILE:HG13	1.99	0.62
1:A:412:GLU:HG2	1:A:983:PRO:CG	2.22	0.62
1:A:47:VAL:HG21	1:A:110:VAL:HG21	1.80	0.62
1:A:368:ILE:HD13	1:A:368:ILE:O	2.00	0.62
1:A:991:ILE:O	1:A:995:LEU:HG	2.00	0.62
1:A:536:PRO:CB	1:A:1037:LEU:HD21	2.29	0.61
1:A:762:GLY:C	1:A:763:ILE:HG22	2.20	0.61
1:A:991:ILE:CG2	1:A:1020:MET:HG2	2.30	0.61
1:A:145:VAL:HG12	1:A:284:VAL:HG11	1.81	0.61
1:A:65:VAL:C	1:A:68:PRO:HD2	2.20	0.61
1:A:903:SER:C	1:A:905:PRO:HD2	2.20	0.61
1:A:1026:LEU:C	1:A:1026:LEU:HD22	2.20	0.61
1:A:940:PHE:CD1	1:A:984:LYS:HE3	2.36	0.61
1:A:212:ALA:HA	1:A:215:GLN:NE2	2.12	0.61
1:A:631:LYS:HZ3	1:A:631:LYS:HB2	1.66	0.61
1:A:995:LEU:HD12	1:A:1017:ILE:CG1	2.25	0.61
1:A:185:LYS:HE3	1:A:267:ILE:HD13	1.82	0.61
1:A:145:VAL:HG11	1:A:278:LEU:HD13	1.83	0.61
1:A:405:ASP:OD2	1:A:406:ALA:N	2.34	0.61
1:A:324:THR:HG21	1:A:606:PHE:CD2	2.36	0.61
1:A:900:ILE:O	1:A:903:SER:HB3	2.01	0.61
1:A:637:ARG:HG3	1:A:638:PRO:HD2	1.83	0.60
1:A:758:GLU:OE1	1:A:765:ARG:CG	2.47	0.60
1:A:369:SER:O	1:A:492:LEU:HD11	1.99	0.60
1:A:277:GLU:CG	1:A:282:GLY:HA2	2.30	0.60
1:A:53:TYR:HD1	1:A:54:PRO:HD2	1.64	0.60
1:A:272:ARG:HH11	1:A:275:ILE:HG23	1.65	0.60
1:A:466:THR:OG1	1:A:875:MET:HG3	2.02	0.60
1:A:968:LYS:HA	1:A:971:GLU:HG2	1.83	0.60
1:A:202:SER:N	1:A:205:GLU:HG3	2.16	0.60
1:A:453:SER:O	1:A:457:ILE:HG13	2.02	0.60
1:A:459:LEU:HD23	1:A:882:ILE:HG12	1.84	0.60

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:564:GLN:HE21	1:A:664:PRO:HD3	1.66	0.60
1:A:76:VAL:HG23	1:A:113:TYR:CD1	2.36	0.60
1:A:184:VAL:HB	1:A:270:GLU:HB3	1.84	0.60
1:A:240:LEU:HD22	1:A:265:VAL:HG12	1.83	0.59
1:A:433:LYS:HD3	1:A:436:TRP:NE1	2.16	0.59
1:A:529:LEU:C	1:A:533:LEU:HD11	2.22	0.59
1:A:5:ILE:HA	1:A:8:ARG:NH1	2.16	0.59
1:A:14:PHE:O	1:A:18:MET:HG2	2.02	0.59
1:A:729:ASN:HB3	1:A:732:LYS:HG3	1.83	0.59
1:A:756:VAL:HG22	1:A:756:VAL:O	2.02	0.59
1:A:191:ILE:HD11	1:A:770:LEU:HD11	1.85	0.59
1:A:139:ILE:HD11	1:A:291:LEU:HB2	1.82	0.59
1:A:601:GLU:HA	1:A:631:LYS:HZ1	1.67	0.59
1:A:900:ILE:HA	1:A:903:SER:HB3	1.84	0.59
1:A:1026:LEU:HD22	1:A:1027:SER:N	2.17	0.59
1:A:570:LEU:HD11	1:A:646:ILE:HD11	1.82	0.59
1:A:105:TRP:CD1	1:A:106:ALA:N	2.70	0.59
1:A:435:ARG:HD3	1:A:436:TRP:N	2.17	0.59
1:A:56:GLN:HB3	1:A:60:ILE:HD11	1.84	0.59
1:A:912:ILE:HD13	1:A:912:ILE:C	2.23	0.59
1:A:964:PHE:CD2	1:A:964:PHE:C	2.76	0.59
1:A:453:SER:OG	1:A:939:GLU:HB2	2.03	0.59
1:A:631:LYS:NZ	1:A:631:LYS:HB2	2.18	0.59
1:A:759:THR:HG22	1:A:768:ILE:HD11	1.84	0.58
1:A:960:ASN:N	1:A:961:PRO:CD	2.64	0.58
1:A:343:LEU:O	1:A:346:PHE:HD1	1.87	0.58
1:A:438:VAL:HA	1:A:441:ASP:OD2	2.03	0.58
1:A:526:HIS:NE2	1:A:978:VAL:HB	2.15	0.58
1:A:497:ILE:HA	1:A:500:LEU:HD11	1.85	0.58
1:A:891:PHE:CE2	1:A:946:MET:HG2	2.38	0.58
1:A:893:ARG:HG3	1:A:894:VAL:N	2.17	0.58
1:A:876:VAL:CG2	1:A:877:PRO:HD3	2.28	0.58
1:A:210:LEU:HD23	1:A:756:VAL:HG11	1.86	0.58
1:A:951:ALA:HB2	1:A:975:HIS:HE1	1.69	0.58
1:A:449:ALA:O	1:A:452:ILE:HG22	2.04	0.58
1:A:48:ILE:H	1:A:48:ILE:HD12	1.69	0.58
1:A:829:ARG:NE	1:A:829:ARG:HA	2.17	0.58
1:A:559:GLY:O	1:A:560:GLU:HB2	2.02	0.57
1:A:460:SER:O	1:A:463:PRO:HD2	2.04	0.57
1:A:829:ARG:HA	1:A:829:ARG:HE	1.68	0.57
1:A:870:HIS:ND1	1:A:871:LYS:HD2	2.18	0.57

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:451:PHE:HD1	1:A:494:ILE:CG1	2.18	0.57
1:A:891:PHE:HE2	1:A:946:MET:HG2	1.69	0.57
1:A:229:TYR:CD1	1:A:229:TYR:N	2.71	0.57
1:A:373:GLY:HA3	1:A:492:LEU:HD12	1.87	0.57
1:A:55:GLY:O	1:A:56:GLN:HG2	2.03	0.57
1:A:645:ILE:HG22	1:A:649:LEU:CD2	2.35	0.57
1:A:601:GLU:HA	1:A:631:LYS:NZ	2.20	0.57
1:A:556:LYS:O	1:A:557:VAL:HG22	2.04	0.57
1:A:877:PRO:O	1:A:881:MET:HG2	2.03	0.57
1:A:51:THR:HG21	1:A:65:VAL:HG21	1.86	0.57
1:A:202:SER:H	1:A:205:GLU:HG3	1.70	0.57
1:A:461:PHE:CZ	1:A:928:THR:HG23	2.38	0.57
1:A:889:LEU:HD23	1:A:890:ALA:H	1.69	0.57
1:A:933:LEU:CD1	1:A:1019:GLY:HA3	2.35	0.56
1:A:214:ASN:HB2	1:A:237:LEU:HD22	1.86	0.56
1:A:894:VAL:HG22	1:A:898:LEU:HD23	1.87	0.56
1:A:357:LEU:HG	1:A:415:HIS:CD2	2.40	0.56
1:A:525:TYR:CZ	1:A:1028:LEU:HD22	2.40	0.56
1:A:655:LEU:HB3	1:A:656:PRO:HD2	1.87	0.56
1:A:301:ILE:HG21	1:A:326:ASP:OD1	2.04	0.56
1:A:433:LYS:HB2	1:A:436:TRP:HE1	1.69	0.56
1:A:553:PRO:HB2	1:A:912:ILE:HD11	1.87	0.56
1:A:191:ILE:O	1:A:773:PRO:HD3	2.05	0.56
1:A:923:SER:OG	1:A:925:ALA:HB3	2.05	0.56
1:A:599:VAL:O	1:A:602:VAL:HG22	2.05	0.56
1:A:696:MET:O	1:A:699:GLN:HG3	2.05	0.56
1:A:878:MET:O	1:A:882:ILE:HG22	2.05	0.56
1:A:50:LYS:HD2	1:A:92:TYR:CE2	2.40	0.56
1:A:649:LEU:HB3	1:A:662:TRP:CZ2	2.41	0.56
1:A:728:ILE:HG21	1:A:740:VAL:HG12	1.86	0.56
1:A:685:VAL:HG21	1:A:696:MET:HG3	1.88	0.56
1:A:416:LYS:CD	1:A:417:ARG:HD3	2.35	0.56
1:A:955:VAL:N	1:A:956:PRO:HD2	2.21	0.56
1:A:537:LYS:HD2	1:A:540:LEU:HD23	1.88	0.56
1:A:526:HIS:N	1:A:527:PRO:CD	2.68	0.55
1:A:534:HIS:O	1:A:536:PRO:HD3	2.06	0.55
1:A:494:ILE:O	1:A:497:ILE:HG12	2.06	0.55
1:A:173:ASP:CG	1:A:295:LYS:HD3	2.26	0.55
1:A:930:PHE:CE1	1:A:1015:PRO:HB3	2.42	0.55
1:A:194:GLN:O	1:A:198:GLN:HG3	2.05	0.55
1:A:491:LEU:O	1:A:495:VAL:HG12	2.06	0.55

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:529:LEU:C	1:A:533:LEU:HD12	2.25	0.55
1:A:963:THR:O	1:A:964:PHE:CG	2.59	0.55
1:A:139:ILE:CD1	1:A:291:LEU:HB2	2.36	0.55
1:A:730:ARG:CD	1:A:731:GLU:H	2.19	0.55
1:A:277:GLU:OE1	1:A:590:GLN:HG3	2.06	0.55
1:A:634:GLU:HG2	1:A:635:GLN:HG3	1.87	0.55
1:A:219:GLY:O	1:A:220:SER:CB	2.55	0.55
1:A:494:ILE:HA	1:A:497:ILE:HD11	1.88	0.55
1:A:608:LYS:HE2	1:A:625:GLU:HB3	1.88	0.55
1:A:736:TYR:CE1	1:A:796:ILE:HG21	2.42	0.55
1:A:82:VAL:O	1:A:82:VAL:HG12	2.06	0.55
1:A:862:PHE:HA	1:A:865:LEU:HB3	1.88	0.55
1:A:152:ASP:HB3	1:A:155:ASP:HB2	1.89	0.54
1:A:291:LEU:CD2	1:A:300:VAL:HG21	2.36	0.54
1:A:399:ALA:O	1:A:403:MET:HG3	2.06	0.54
1:A:449:ALA:HB1	1:A:942:VAL:CG1	2.37	0.54
1:A:61:VAL:O	1:A:65:VAL:HG13	2.07	0.54
1:A:998:ILE:HD11	1:A:1010:SER:HA	1.89	0.54
1:A:420:GLU:HB2	1:A:421:TRP:CE3	2.42	0.54
1:A:65:VAL:O	1:A:68:PRO:HD2	2.07	0.54
1:A:1026:LEU:HD23	1:A:1030:ILE:HG21	1.90	0.54
1:A:13:ARG:HD2	1:A:13:ARG:N	2.21	0.54
1:A:380:VAL:HG11	1:A:484:TYR:HB3	1.88	0.54
1:A:214:ASN:O	1:A:215:GLN:HG3	2.07	0.54
1:A:7:ARG:O	1:A:10:VAL:HG22	2.08	0.54
1:A:240:LEU:HD22	1:A:265:VAL:HG11	1.90	0.54
1:A:492:LEU:O	1:A:495:VAL:HG13	2.08	0.54
1:A:452:ILE:CD1	1:A:889:LEU:HD21	2.37	0.54
1:A:955:VAL:HB	1:A:956:PRO:HD3	1.90	0.54
1:A:1033:ALA:O	1:A:1037:LEU:HD23	2.07	0.54
1:A:157:ARG:HG2	1:A:182:GLY:HA3	1.89	0.54
1:A:315:LEU:HD11	1:A:321:ILE:HD11	1.89	0.54
1:A:458:THR:CG2	1:A:486:MET:HB3	2.36	0.54
1:A:354:ALA:O	1:A:358:TRP:HA	2.07	0.54
1:A:333:ARG:HH12	1:A:568:GLY:HA3	1.72	0.53
1:A:529:LEU:CD1	1:A:529:LEU:C	2.76	0.53
1:A:243:PHE:HB3	1:A:265:VAL:HG21	1.90	0.53
1:A:940:PHE:O	1:A:943:VAL:HG12	2.07	0.53
1:A:995:LEU:CD1	1:A:1017:ILE:HG13	2.29	0.53
1:A:533:LEU:HA	1:A:1036:LYS:NZ	2.24	0.53
1:A:580:ILE:HD11	1:A:585:ALA:HB2	1.90	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:718:LEU:O	1:A:811:SER:HB3	2.07	0.53
1:A:781:GLN:HA	1:A:781:GLN:OE1	2.08	0.53
1:A:138:TRP:NE1	1:A:616:THR:HG21	2.24	0.53
1:A:906:PHE:CD2	1:A:907:ALA:N	2.70	0.53
1:A:896:GLU:O	1:A:900:ILE:HG22	2.08	0.53
1:A:930:PHE:HD1	1:A:1015:PRO:HB3	1.71	0.53
1:A:435:ARG:O	1:A:439:ILE:HG12	2.09	0.53
1:A:589:LEU:HD13	1:A:609:THR:OG1	2.09	0.53
1:A:19:GLY:HA2	1:A:22:PHE:CD2	2.44	0.53
1:A:368:ILE:HD12	1:A:499:ILE:HD13	1.91	0.53
1:A:956:PRO:HG3	1:A:972:ALA:HB1	1.90	0.53
1:A:137:GLY:O	1:A:290:ILE:HA	2.09	0.52
1:A:952:ILE:HG23	1:A:957:SER:HB2	1.91	0.52
1:A:277:GLU:OE2	1:A:590:GLN:HA	2.08	0.52
1:A:440:THR:HG23	1:A:501:MET:CE	2.39	0.52
1:A:758:GLU:OE1	1:A:765:ARG:HD3	2.09	0.52
1:A:489:ALA:O	1:A:492:LEU:HB3	2.09	0.52
1:A:637:ARG:CG	1:A:640:MET:HG3	2.39	0.52
1:A:716:GLU:HG2	1:A:716:GLU:O	2.08	0.52
1:A:121:LEU:HB2	1:A:122:PRO:HD2	1.92	0.52
1:A:324:THR:CG2	1:A:606:PHE:HB2	2.40	0.52
1:A:364:LEU:HA	1:A:367:ILE:CG2	2.39	0.52
1:A:434:THR:O	1:A:437:GLN:HB3	2.10	0.52
1:A:451:PHE:C	1:A:451:PHE:CD2	2.83	0.52
1:A:668:ASN:C	1:A:668:ASN:ND2	2.58	0.52
1:A:143:ALA:HB2	1:A:606:PHE:CE2	2.43	0.52
1:A:223:GLU:O	1:A:223:GLU:HG2	2.10	0.52
1:A:440:THR:O	1:A:444:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:552:TRP:HB3	1:A:553:PRO:HD3	1.92	0.52
1:A:19:GLY:HA2	1:A:22:PHE:HD2	1.74	0.52
1:A:417:ARG:HE	1:A:442:ALA:CB	2.07	0.52
1:A:906:PHE:O	1:A:1022:THR:HG21	2.10	0.52
1:A:954:ALA:O	1:A:958:LEU:HD23	2.09	0.52
1:A:1030:ILE:O	1:A:1034:ALA:HB3	2.09	0.52
1:A:56:GLN:HA	1:A:56:GLN:HE21	1.74	0.52
1:A:951:ALA:C	1:A:956:PRO:HG2	2.30	0.52
1:A:574:PRO:O	1:A:575:SER:C	2.44	0.52
1:A:926:THR:HA	1:A:1011:ARG:O	2.10	0.52
1:A:20:ALA:O	1:A:23:LEU:HB2	2.11	0.51
1:A:334:ALA:HA	1:A:1004:ALA:CB	2.39	0.51
1:A:371:PRO:HA	1:A:374:LEU:HB3	1.91	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:894:VAL:HG22	1:A:898:LEU:CD2	2.40	0.51
1:A:988:VAL:O	1:A:992:ILE:HG12	2.09	0.51
1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:CD	2.12	0.51
1:A:677:ILE:HD13	1:A:860:GLY:HA2	1.93	0.51
1:A:971:GLU:HA	1:A:974:TYR:CD1	2.45	0.51
1:A:536:PRO:HG3	1:A:1036:LYS:HE3	1.91	0.51
1:A:26:TRP:CD1	1:A:26:TRP:C	2.83	0.51
1:A:48:ILE:N	1:A:48:ILE:HD12	2.25	0.51
1:A:16:VAL:HG21	1:A:498:PRO:CB	2.40	0.51
1:A:729:ASN:CG	1:A:732:LYS:HG3	2.30	0.51
1:A:888:TYR:CG	1:A:888:TYR:O	2.64	0.51
1:A:974:TYR:HD2	1:A:975:HIS:N	2.09	0.51
1:A:1016:MET:O	1:A:1020:MET:HB2	2.11	0.51
1:A:410:MET:CG	1:A:411:ILE:N	2.74	0.51
1:A:614:THR:HG22	1:A:616:THR:N	2.23	0.51
1:A:229:TYR:HD1	1:A:229:TYR:N	2.06	0.51
1:A:716:GLU:C	1:A:718:LEU:H	2.14	0.51
1:A:139:ILE:HG21	1:A:301:ILE:HG12	1.92	0.51
1:A:178:ALA:HB2	1:A:614:THR:OG1	2.11	0.51
1:A:642:MET:O	1:A:646:ILE:HD13	2.11	0.51
1:A:948:LEU:HD23	1:A:1031:ILE:CG2	2.30	0.51
1:A:956:PRO:HB3	1:A:972:ALA:CB	2.41	0.51
1:A:196:LEU:HG	1:A:201:ILE:O	2.11	0.51
1:A:887:LEU:HD21	1:A:900:ILE:HD12	1.93	0.51
1:A:906:PHE:CZ	1:A:1030:ILE:HG21	2.46	0.51
1:A:171:ILE:CD1	1:A:304:VAL:HA	2.41	0.50
1:A:433:LYS:HD3	1:A:436:TRP:CD1	2.45	0.50
1:A:529:LEU:C	1:A:532:VAL:HG22	2.26	0.50
1:A:526:HIS:HA	1:A:529:LEU:HG	1.92	0.50
1:A:76:VAL:HA	1:A:113:TYR:CE1	2.46	0.50
1:A:433:LYS:CD	1:A:433:LYS:N	2.75	0.50
1:A:683:ILE:O	1:A:823:TRP:HA	2.11	0.50
1:A:874:LEU:O	1:A:877:PRO:HD2	2.11	0.50
1:A:887:LEU:CD2	1:A:900:ILE:HD12	2.41	0.50
1:A:1026:LEU:O	1:A:1030:ILE:HG12	2.10	0.50
1:A:139:ILE:CG2	1:A:301:ILE:HG12	2.40	0.50
1:A:332:ASP:O	1:A:335:ILE:HG22	2.11	0.50
1:A:580:ILE:HG13	1:A:581:SER:N	2.27	0.50
1:A:962:GLN:HG3	1:A:963:THR:N	2.26	0.50
1:A:762:GLY:O	1:A:763:ILE:HG23	2.11	0.50
1:A:812:MET:HG2	1:A:813:LEU:H	1.74	0.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:844:ILE:HG23	1:A:848:VAL:HG22	1.94	0.50
1:A:906:PHE:CE2	1:A:1026:LEU:HG	2.46	0.50
1:A:1031:ILE:O	1:A:1035:TYR:HB2	2.11	0.50
1:A:633:GLN:OE1	1:A:633:GLN:HA	2.12	0.50
1:A:446:VAL:O	1:A:446:VAL:HG22	2.11	0.50
1:A:758:GLU:OE1	1:A:765:ARG:CD	2.59	0.50
1:A:822:SER:C	1:A:823:TRP:HD1	2.15	0.50
1:A:910:GLY:HA3	1:A:1018:GLY:O	2.10	0.50
1:A:69:LEU:CD1	1:A:117:VAL:HG11	2.42	0.50
1:A:468:GLU:HG3	1:A:473:ARG:HE	1.77	0.50
1:A:218:GLY:CA	1:A:231:VAL:O	2.60	0.49
1:A:278:LEU:C	1:A:278:LEU:HD23	2.33	0.49
1:A:944:MET:HE1	1:A:977:ALA:HA	1.94	0.49
1:A:988:VAL:HG21	1:A:1024:PRO:HG3	1.94	0.49
1:A:221:SER:CA	1:A:229:TYR:O	2.58	0.49
1:A:377:ALA:HB2	1:A:485:ALA:HB2	1.94	0.49
1:A:703:VAL:HA	1:A:706:THR:HG22	1.93	0.49
1:A:980:ARG:NH1	1:A:1028:LEU:HD23	2.28	0.49
1:A:359:HIS:O	1:A:360:VAL:HG23	2.12	0.49
1:A:453:SER:O	1:A:456:ILE:HG22	2.11	0.49
1:A:944:MET:HE1	1:A:980:ARG:HG2	1.94	0.49
1:A:435:ARG:O	1:A:438:VAL:HG13	2.12	0.49
1:A:186:GLU:OE2	1:A:769:ASN:HB2	2.13	0.49
1:A:614:THR:CG2	1:A:616:THR:H	2.23	0.49
1:A:916:TRP:HA	1:A:916:TRP:CE3	2.48	0.49
1:A:270:GLU:O	1:A:271:MET:C	2.51	0.49
1:A:619:ALA:HB1	1:A:623:MET:HB2	1.93	0.49
1:A:685:VAL:HG22	1:A:693:ILE:HG22	1.94	0.49
1:A:881:MET:O	1:A:885:VAL:HG23	2.12	0.49
1:A:963:THR:O	1:A:964:PHE:CD1	2.66	0.49
1:A:177:VAL:HG12	1:A:177:VAL:O	2.12	0.49
1:A:468:GLU:CD	1:A:473:ARG:HH21	2.15	0.49
1:A:147:ARG:NH2	1:A:320:GLU:HB3	2.27	0.49
1:A:996:LEU:HA	1:A:999:LEU:HD12	1.95	0.49
1:A:252:GLU:O	1:A:253:ASN:HB2	2.13	0.49
1:A:35:PRO:CA	1:A:296:ASN:HB3	2.35	0.49
1:A:343:LEU:O	1:A:347:ILE:HG22	2.13	0.49
1:A:382:HIS:C	1:A:382:HIS:CD2	2.87	0.49
1:A:526:HIS:HA	1:A:529:LEU:CD2	2.43	0.49
1:A:846:GLU:O	1:A:847:LYS:CB	2.60	0.49
1:A:370:LEU:HD13	1:A:400:VAL:HG13	1.95	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:871:LYS:O	1:A:875:MET:HG2	2.12	0.48
1:A:32:ILE:HD13	1:A:32:ILE:O	2.13	0.48
1:A:577:LEU:CD2	1:A:578:PRO:HD2	2.42	0.48
1:A:823:TRP:HD1	1:A:823:TRP:N	2.06	0.48
1:A:416:LYS:HD3	1:A:417:ARG:CD	2.40	0.48
1:A:368:ILE:HD12	1:A:499:ILE:CD1	2.43	0.48
1:A:729:ASN:CB	1:A:732:LYS:HG3	2.43	0.48
1:A:134:THR:OG1	1:A:135:GLY:N	2.45	0.48
1:A:396:ILE:O	1:A:400:VAL:HG23	2.13	0.48
1:A:549:THR:HG1	1:A:913:TRP:HZ2	1.60	0.48
1:A:910:GLY:C	1:A:1018:GLY:HA3	2.33	0.48
1:A:72:THR:CG2	1:A:113:TYR:HB3	2.43	0.48
1:A:259:LEU:CD2	1:A:263:ALA:HB3	2.43	0.48
1:A:1030:ILE:HG13	1:A:1031:ILE:N	2.29	0.48
1:A:147:ARG:O	1:A:148:SER:HB3	2.14	0.48
1:A:495:VAL:O	1:A:498:PRO:HD2	2.13	0.48
1:A:726:VAL:HG12	1:A:728:ILE:HD12	1.96	0.48
1:A:182:GLY:CA	1:A:285:ALA:HB2	2.43	0.48
1:A:294:GLY:O	1:A:295:LYS:HG3	2.13	0.48
1:A:405:ASP:OD1	1:A:939:GLU:HG3	2.14	0.48
1:A:562:LEU:HA	1:A:563:PRO:HD3	1.77	0.48
1:A:104:TYR:OH	1:A:292:ARG:HD3	2.14	0.48
1:A:244:ASN:HB3	1:A:260:ARG:HB3	1.95	0.48
1:A:301:ILE:HD11	1:A:327:ARG:HB3	1.95	0.48
1:A:368:ILE:HD13	1:A:372:LEU:HG	1.94	0.48
1:A:565:ILE:HG22	1:A:566:ASN:N	2.27	0.48
1:A:831:ARG:HD3	1:A:832:ASP:N	2.28	0.48
1:A:980:ARG:HD2	1:A:1028:LEU:CD2	2.44	0.48
1:A:398:ILE:CD1	1:A:482:LYS:HD2	2.43	0.48
1:A:420:GLU:O	1:A:423:HIS:ND1	2.44	0.48
1:A:42:LEU:CD1	1:A:670:ILE:HG21	2.43	0.48
1:A:912:ILE:HD13	1:A:913:TRP:N	2.29	0.48
1:A:410:MET:CE	1:A:411:ILE:HG12	2.40	0.48
1:A:450:LEU:C	1:A:450:LEU:HD23	2.34	0.48
1:A:324:THR:HG21	1:A:606:PHE:CB	2.44	0.48
1:A:62:GLU:OE2	1:A:815:THR:HG21	2.14	0.48
1:A:134:THR:HG23	1:A:136:VAL:H	1.78	0.47
1:A:435:ARG:HA	1:A:438:VAL:CG1	2.44	0.47
1:A:899:LEU:CD1	1:A:1030:ILE:HD12	2.43	0.47
1:A:529:LEU:HD12	1:A:530:LEU:H	0.60	0.47
1:A:564:GLN:O	1:A:565:ILE:HB	2.14	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:779:SER:O	1:A:782:ALA:HB3	2.14	0.47
1:A:525:TYR:HE1	1:A:977:ALA:CB	2.23	0.47
1:A:681:ILE:HG22	1:A:682:GLY:N	2.29	0.47
1:A:699:GLN:O	1:A:702:GLU:HG2	2.13	0.47
1:A:7:ARG:HG3	1:A:444:VAL:HG21	1.95	0.47
1:A:732:LYS:HE3	1:A:800:ASP:O	2.13	0.47
1:A:719:GLU:HA	1:A:810:PRO:HA	1.96	0.47
1:A:152:ASP:OD1	1:A:153:LEU:N	2.48	0.47
1:A:384:GLN:HG3	1:A:386:LEU:HG	1.95	0.47
1:A:410:MET:SD	1:A:410:MET:C	2.92	0.47
1:A:453:SER:HA	1:A:456:ILE:HG22	1.97	0.47
1:A:362:SER:HA	1:A:365:VAL:HB	1.96	0.47
1:A:925:ALA:O	1:A:928:THR:HB	2.14	0.47
1:A:42:LEU:HD11	1:A:670:ILE:HG21	1.96	0.47
1:A:545:LEU:O	1:A:548:LEU:HB3	2.15	0.47
1:A:960:ASN:N	1:A:961:PRO:HD3	2.15	0.47
1:A:974:TYR:HD2	1:A:974:TYR:C	2.18	0.47
1:A:565:ILE:CG2	1:A:566:ASN:N	2.77	0.47
1:A:67:TYR:N	1:A:68:PRO:CD	2.77	0.47
1:A:706:THR:HG23	1:A:707:VAL:N	2.29	0.47
1:A:974:TYR:CD2	1:A:974:TYR:C	2.88	0.47
1:A:277:GLU:HG3	1:A:282:GLY:CA	2.41	0.47
1:A:357:LEU:HD21	1:A:411:ILE:HG21	1.96	0.47
1:A:417:ARG:CG	1:A:442:ALA:HB3	2.43	0.47
1:A:620:PRO:HD2	1:A:623:MET:CG	2.43	0.47
1:A:793:LYS:HE3	1:A:793:LYS:N	2.30	0.47
1:A:525:TYR:CZ	1:A:977:ALA:HB1	2.49	0.47
1:A:234:SER:OG	1:A:234:SER:O	2.30	0.47
1:A:416:LYS:HD2	1:A:417:ARG:NH2	2.30	0.47
1:A:530:LEU:C	1:A:533:LEU:HD12	2.24	0.47
1:A:864:LEU:HD13	1:A:867:ARG:NH2	2.30	0.47
1:A:899:LEU:O	1:A:903:SER:N	2.48	0.47
1:A:371:PRO:O	1:A:375:CYS:SG	2.72	0.47
1:A:451:PHE:HB2	1:A:494:ILE:HD11	1.97	0.47
1:A:964:PHE:HD2	1:A:964:PHE:C	2.18	0.47
1:A:153:LEU:CD2	1:A:182:GLY:HA2	2.45	0.47
1:A:755:MET:CE	1:A:758:GLU:HG3	2.44	0.47
1:A:451:PHE:HD1	1:A:494:ILE:HG13	1.80	0.46
1:A:528:LEU:O	1:A:528:LEU:CD1	2.63	0.46
1:A:975:HIS:ND1	1:A:976:GLY:N	2.63	0.46
1:A:933:LEU:HD12	1:A:1015:PRO:O	2.15	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:56:GLN:CB	1:A:60:ILE:HD11	2.46	0.46
1:A:838:HIS:HE1	1:A:842:LYS:HE3	1.80	0.46
1:A:406:ALA:O	1:A:410:MET:HB3	2.16	0.46
1:A:420:GLU:C	1:A:421:TRP:HE3	2.18	0.46
1:A:955:VAL:N	1:A:956:PRO:CD	2.79	0.46
1:A:965:SER:O	1:A:966:GLU:HB2	2.16	0.46
1:A:914:LEU:HD23	1:A:1014:ALA:O	2.16	0.46
1:A:334:ALA:HA	1:A:1004:ALA:HB1	1.98	0.46
1:A:995:LEU:HD11	1:A:1016:MET:HB3	1.94	0.46
1:A:1025:LEU:O	1:A:1028:LEU:HB2	2.16	0.46
1:A:908:LEU:O	1:A:912:ILE:HG22	2.16	0.46
1:A:252:GLU:H	1:A:252:GLU:HG2	1.30	0.46
1:A:404:VAL:HG12	1:A:408:ILE:CG1	2.44	0.46
1:A:369:SER:HA	1:A:492:LEU:HD21	1.98	0.46
1:A:874:LEU:C	1:A:877:PRO:HD2	2.35	0.46
1:A:333:ARG:HH12	1:A:568:GLY:CA	2.29	0.46
1:A:220:SER:O	1:A:231:VAL:HG12	2.16	0.46
1:A:364:LEU:HA	1:A:367:ILE:HG22	1.96	0.46
1:A:452:ILE:CD1	1:A:889:LEU:HD11	2.41	0.46
1:A:996:LEU:N	1:A:997:PRO:CD	2.79	0.46
1:A:948:LEU:HD11	1:A:1035:TYR:CE1	2.51	0.46
1:A:109:ARG:O	1:A:112:GLU:HB2	2.15	0.46
1:A:118:GLN:CA	1:A:118:GLN:HE21	2.25	0.46
1:A:367:ILE:O	1:A:371:PRO:CD	2.58	0.45
1:A:417:ARG:HG2	1:A:442:ALA:CB	2.41	0.45
1:A:761:GLU:O	1:A:764:ALA:O	2.34	0.45
1:A:805:LYS:HB2	1:A:805:LYS:HE3	1.77	0.45
1:A:118:GLN:HA	1:A:118:GLN:NE2	2.29	0.45
1:A:301:ILE:HG22	1:A:305:LYS:HE3	1.99	0.45
1:A:475:PHE:CE1	1:A:478:LEU:HD13	2.51	0.45
1:A:716:GLU:O	1:A:716:GLU:CG	2.64	0.45
1:A:971:GLU:HA	1:A:974:TYR:CE1	2.51	0.45
1:A:346:PHE:CD1	1:A:347:ILE:N	2.84	0.45
1:A:391:MET:HB2	1:A:477:PRO:HB2	1.97	0.45
1:A:40:PRO:HG3	1:A:389:ASN:CG	2.37	0.45
1:A:758:GLU:HB3	1:A:765:ARG:CG	2.46	0.45
1:A:612:ALA:O	1:A:613:GLU:C	2.53	0.45
1:A:645:ILE:HG22	1:A:649:LEU:HD23	1.98	0.45
1:A:780:PRO:CB	1:A:784:ARG:HH22	2.29	0.45
1:A:413:ASN:HB3	1:A:446:VAL:HG11	1.98	0.45
1:A:1033:ALA:O	1:A:1036:LYS:HG2	2.16	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:451:PHE:HD2	1:A:452:ILE:N	2.14	0.45
1:A:570:LEU:HD11	1:A:646:ILE:CD1	2.47	0.45
1:A:572:TYR:HB3	1:A:626:THR:OG1	2.17	0.45
1:A:829:ARG:HE	1:A:829:ARG:CA	2.29	0.45
1:A:904:VAL:N	1:A:905:PRO:HD2	2.32	0.45
1:A:995:LEU:O	1:A:999:LEU:HG	2.17	0.45
1:A:525:TYR:HE2	1:A:1028:LEU:HD22	1.78	0.45
1:A:163:PHE:O	1:A:167:GLU:HG2	2.17	0.45
1:A:435:ARG:HD3	1:A:436:TRP:H	1.82	0.45
1:A:757:GLY:O	1:A:768:ILE:HB	2.16	0.45
1:A:681:ILE:C	1:A:826:ILE:HD12	2.37	0.45
1:A:50:LYS:HD2	1:A:92:TYR:HE2	1.82	0.45
1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:CD	2.46	0.45
1:A:360:VAL:C	1:A:362:SER:H	2.19	0.45
1:A:672:MET:O	1:A:673:LEU:HD23	2.16	0.45
1:A:900:ILE:CA	1:A:903:SER:HB3	2.47	0.45
1:A:437:GLN:HA	1:A:440:THR:OG1	2.17	0.45
1:A:406:ALA:HA	1:A:450:LEU:HD11	1.99	0.45
1:A:55:GLY:O	1:A:56:GLN:CG	2.64	0.45
1:A:561:PHE:HB3	1:A:562:LEU:H	1.61	0.45
1:A:1014:ALA:HB3	1:A:1015:PRO:CD	2.44	0.44
1:A:1018:GLY:O	1:A:1021:ILE:HG22	2.18	0.44
1:A:536:PRO:HB3	1:A:1036:LYS:HE3	1.99	0.44
1:A:259:LEU:HD23	1:A:263:ALA:HB3	1.98	0.44
1:A:330:LEU:O	1:A:330:LEU:HD12	2.18	0.44
1:A:57:ALA:H	1:A:61:VAL:HG23	1.83	0.44
1:A:786:LEU:HD12	1:A:788:ILE:CD1	2.46	0.44
1:A:817:ASN:O	1:A:818:ALA:HB3	2.17	0.44
1:A:15:LEU:C	1:A:15:LEU:HD23	2.38	0.44
1:A:478:LEU:O	1:A:478:LEU:HD23	2.17	0.44
1:A:992:ILE:HD11	1:A:1020:MET:HB3	1.99	0.44
1:A:19:GLY:O	1:A:23:LEU:HD23	2.17	0.44
1:A:409:VAL:CG1	1:A:450:LEU:HD12	2.48	0.44
1:A:781:GLN:OE1	1:A:784:ARG:HD2	2.16	0.44
1:A:549:THR:HG23	1:A:913:TRP:NE1	2.32	0.44
1:A:829:ARG:HE	1:A:830:ASP:H	1.65	0.44
1:A:131:PRO:HB2	1:A:132:ASP:H	1.49	0.44
1:A:216:GLU:HG2	1:A:233:ALA:O	2.15	0.44
1:A:529:LEU:O	1:A:533:LEU:HD11	2.16	0.44
1:A:56:GLN:HB3	1:A:57:ALA:H	1.51	0.44
1:A:60:ILE:HG12	1:A:60:ILE:O	2.17	0.44

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:657:GLY:C	1:A:658:LEU:CD2	2.73	0.44
1:A:571:LEU:HD12	1:A:668:ASN:OD1	2.18	0.44
1:A:933:LEU:O	1:A:936:VAL:HG12	2.17	0.44
1:A:396:ILE:HD12	1:A:397:ALA:N	2.31	0.44
1:A:42:LEU:HD23	1:A:474:LEU:HD13	1.99	0.44
1:A:564:GLN:HE21	1:A:664:PRO:CD	2.31	0.44
1:A:948:LEU:C	1:A:948:LEU:HD12	2.36	0.44
1:A:146:ASP:HA	1:A:318:GLY:O	2.18	0.44
1:A:221:SER:HB2	1:A:229:TYR:O	2.17	0.44
1:A:292:ARG:CG	1:A:292:ARG:NH2	2.61	0.44
1:A:420:GLU:HB2	1:A:421:TRP:HE3	1.83	0.44
1:A:577:LEU:O	1:A:578:PRO:C	2.56	0.44
1:A:641:THR:OG1	1:A:642:MET:N	2.50	0.44
1:A:893:ARG:HG3	1:A:895:GLY:H	1.82	0.44
1:A:952:ILE:HG23	1:A:957:SER:CB	2.47	0.44
1:A:1002:THR:CG2	1:A:1006:SER:HB2	2.42	0.44
1:A:435:ARG:HD2	1:A:436:TRP:CE2	2.52	0.44
1:A:279:ASN:HD21	1:A:605:VAL:H	1.64	0.44
1:A:639:GLY:O	1:A:640:MET:C	2.56	0.44
1:A:831:ARG:O	1:A:833:MET:HG3	2.18	0.44
1:A:346:PHE:CG	1:A:347:ILE:N	2.86	0.43
1:A:451:PHE:CD1	1:A:494:ILE:HG13	2.53	0.43
1:A:903:SER:O	1:A:906:PHE:CE2	2.71	0.43
1:A:1023:ALA:N	1:A:1024:PRO:CD	2.82	0.43
1:A:380:VAL:HG21	1:A:484:TYR:CG	2.53	0.43
1:A:5:ILE:HG23	1:A:8:ARG:NH2	2.33	0.43
1:A:102:ASP:HB3	1:A:105:TRP:HB3	1.99	0.43
1:A:372:LEU:O	1:A:376:ILE:HG22	2.18	0.43
1:A:516:PRO:HB2	1:A:517:LEU:H	1.60	0.43
1:A:191:ILE:HD13	1:A:263:ALA:HB2	2.01	0.43
1:A:518:ASN:HD22	1:A:982:ARG:CG	2.30	0.43
1:A:6:ILE:HG23	1:A:444:VAL:HG22	2.01	0.43
1:A:550:VAL:HG23	1:A:913:TRP:HD1	1.84	0.43
1:A:556:LYS:HG2	1:A:558:GLY:H	1.83	0.43
1:A:55:GLY:O	1:A:56:GLN:NE2	2.49	0.43
1:A:61:VAL:HG21	1:A:89:GLY:N	2.30	0.43
1:A:762:GLY:C	1:A:763:ILE:CG2	2.82	0.43
1:A:933:LEU:HD23	1:A:933:LEU:C	2.39	0.43
1:A:966:GLU:HB3	1:A:967:GLN:OE1	2.18	0.43
1:A:347:ILE:HD13	1:A:348:VAL:N	2.34	0.43
1:A:354:ALA:HA	1:A:359:HIS:H	1.83	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:837:VAL:HG11	1:A:862:PHE:CE1	2.52	0.43
1:A:183:VAL:HB	1:A:272:ARG:HH22	1.84	0.43
1:A:38:ALA:O	1:A:39:LEU:HB2	2.19	0.43
1:A:66:THR:HB	1:A:91:SER:OG	2.19	0.43
1:A:984:LYS:O	1:A:987:THR:HG22	2.18	0.43
1:A:334:ALA:O	1:A:337:ASN:HB3	2.19	0.42
1:A:88:PHE:CD2	1:A:88:PHE:C	2.91	0.42
1:A:926:THR:HG22	1:A:1011:ARG:O	2.19	0.42
1:A:77:PRO:HD3	1:A:113:TYR:HE1	1.83	0.42
1:A:157:ARG:CG	1:A:182:GLY:HA3	2.49	0.42
1:A:435:ARG:HD3	1:A:436:TRP:CD1	2.54	0.42
1:A:468:GLU:O	1:A:468:GLU:HG2	2.19	0.42
1:A:421:TRP:N	1:A:421:TRP:HE3	2.17	0.42
1:A:635:GLN:HA	1:A:636:TRP:HA	1.86	0.42
1:A:567:GLU:OE1	1:A:666:ILE:HD12	2.19	0.42
1:A:635:GLN:HB3	1:A:636:TRP:CE3	2.54	0.42
1:A:109:ARG:HD3	1:A:112:GLU:OE1	2.19	0.42
1:A:449:ALA:HA	1:A:452:ILE:HG22	2.00	0.42
1:A:496:VAL:O	1:A:500:LEU:HG	2.19	0.42
1:A:678:LYS:HB3	1:A:678:LYS:NZ	2.35	0.42
1:A:748:THR:HG22	1:A:754:ALA:HB2	2.02	0.42
1:A:978:VAL:HG22	1:A:982:ARG:NH1	2.35	0.42
1:A:525:TYR:OH	1:A:1028:LEU:HD22	2.20	0.42
1:A:433:LYS:N	1:A:433:LYS:HD2	2.34	0.42
1:A:685:VAL:O	1:A:685:VAL:HG13	2.20	0.42
1:A:758:GLU:HB2	1:A:765:ARG:CZ	2.49	0.42
1:A:525:TYR:OH	1:A:977:ALA:HB1	2.19	0.42
1:A:907:ALA:HA	1:A:1022:THR:HG22	2.02	0.42
1:A:102:ASP:HA	1:A:103:PRO:HD2	1.87	0.42
1:A:210:LEU:HD23	1:A:756:VAL:CG1	2.50	0.42
1:A:847:LYS:HE3	1:A:847:LYS:CA	2.46	0.42
1:A:956:PRO:HB2	1:A:957:SER:H	1.69	0.42
1:A:929:GLY:O	1:A:1016:MET:HE1	2.20	0.42
1:A:109:ARG:HD3	1:A:109:ARG:HA	1.78	0.42
1:A:761:GLU:O	1:A:762:GLY:C	2.52	0.42
1:A:774:GLN:CD	1:A:774:GLN:H	2.22	0.42
1:A:76:VAL:CG1	1:A:79:ALA:HB2	2.45	0.42
1:A:221:SER:CB	1:A:229:TYR:O	2.68	0.42
1:A:471:GLU:O	1:A:474:LEU:HB3	2.19	0.42
1:A:815:THR:HB	1:A:819:ARG:O	2.20	0.42
1:A:968:LYS:O	1:A:971:GLU:HG2	2.20	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:109:ARG:HH21	1:A:109:ARG:HA	1.85	0.41
1:A:294:GLY:O	1:A:295:LYS:CG	2.68	0.41
1:A:51:THR:CG2	1:A:65:VAL:HG21	2.51	0.41
1:A:737:GLY:O	1:A:791:PRO:HG2	2.20	0.41
1:A:922:LEU:HA	1:A:926:THR:CG2	2.46	0.41
1:A:904:VAL:HG21	1:A:934:ALA:HB1	2.02	0.41
1:A:563:PRO:HG3	1:A:1011:ARG:NH2	2.35	0.41
1:A:844:ILE:HG22	1:A:845:ALA:N	2.35	0.41
1:A:968:LYS:O	1:A:968:LYS:HD3	2.19	0.41
1:A:956:PRO:CG	1:A:972:ALA:HB1	2.50	0.41
1:A:97:PHE:CD1	1:A:106:ALA:HB1	2.54	0.41
1:A:1031:ILE:N	1:A:1032:PRO:CD	2.83	0.41
1:A:335:ILE:HA	1:A:335:ILE:HD12	1.80	0.41
1:A:463:PRO:O	1:A:466:THR:HB	2.20	0.41
1:A:719:GLU:O	1:A:719:GLU:HG3	2.20	0.41
1:A:977:ALA:O	1:A:980:ARG:HG3	2.20	0.41
1:A:944:MET:CE	1:A:980:ARG:HG2	2.49	0.41
1:A:1031:ILE:HA	1:A:1031:ILE:HD13	1.93	0.41
1:A:129:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HA	1.92	0.41
1:A:236:TYR:O	1:A:238:GLN:HG2	2.21	0.41
1:A:343:LEU:HD12	1:A:343:LEU:C	2.41	0.41
1:A:357:LEU:HD21	1:A:411:ILE:CG2	2.50	0.41
1:A:925:ALA:HB1	1:A:1012:ILE:CG2	2.42	0.41
1:A:416:LYS:HD2	1:A:417:ARG:HH21	1.85	0.41
1:A:680:PRO:HA	1:A:861:GLN:OE1	2.20	0.41
1:A:66:THR:O	1:A:70:THR:HG23	2.20	0.41
1:A:900:ILE:C	1:A:903:SER:HB3	2.40	0.41
1:A:1008:VAL:HG13	1:A:1009:MET:N	2.36	0.41
1:A:147:ARG:HD2	1:A:320:GLU:CG	2.51	0.41
1:A:451:PHE:CD2	1:A:452:ILE:N	2.89	0.41
1:A:468:GLU:HG3	1:A:473:ARG:NE	2.34	0.41
1:A:957:SER:HA	1:A:960:ASN:ND2	2.35	0.41
1:A:352:VAL:HG12	1:A:986:MET:HG3	2.02	0.41
1:A:517:LEU:N	1:A:517:LEU:HD13	2.35	0.41
1:A:573:MET:O	1:A:661:LEU:HB3	2.21	0.41
1:A:988:VAL:CG2	1:A:1024:PRO:HG3	2.50	0.41
1:A:171:ILE:CG2	1:A:172:PRO:HD2	2.49	0.41
1:A:22:PHE:O	1:A:26:TRP:HB3	2.21	0.41
1:A:291:LEU:HD23	1:A:300:VAL:HG21	2.02	0.41
1:A:952:ILE:O	1:A:957:SER:HB3	2.21	0.41
1:A:134:THR:HG23	1:A:136:VAL:HB	2.03	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:186:GLU:HG2	1:A:188:GLN:HG3	2.03	0.41
1:A:203:LEU:HA	1:A:203:LEU:HD23	1.85	0.41
1:A:12:ASN:O	1:A:15:LEU:HB3	2.21	0.41
1:A:446:VAL:CG2	1:A:446:VAL:O	2.68	0.41
1:A:482:LYS:HE2	1:A:482:LYS:HB3	1.88	0.41
1:A:16:VAL:HG21	1:A:498:PRO:HB2	2.02	0.40
1:A:6:ILE:CG2	1:A:444:VAL:HG13	2.50	0.40
1:A:786:LEU:HD12	1:A:788:ILE:HD12	2.03	0.40
1:A:914:LEU:HG	1:A:918:MET:HE1	2.04	0.40
1:A:980:ARG:HD3	1:A:981:VAL:N	2.36	0.40
1:A:1025:LEU:HD23	1:A:1025:LEU:C	2.42	0.40
1:A:368:ILE:HG21	1:A:499:ILE:HG21	2.02	0.40
1:A:57:ALA:O	1:A:61:VAL:HG23	2.22	0.40
1:A:838:HIS:CE1	1:A:842:LYS:HE3	2.56	0.40
1:A:874:LEU:O	1:A:874:LEU:HD22	2.21	0.40
1:A:998:ILE:O	1:A:998:ILE:HD12	2.21	0.40
1:A:17:LEU:O	1:A:21:LEU:HD13	2.21	0.40
1:A:153:LEU:HD21	1:A:182:GLY:HA2	2.03	0.40
1:A:609:THR:HG22	1:A:621:LEU:HD12	2.04	0.40
1:A:956:PRO:HB3	1:A:972:ALA:HB2	2.02	0.40
1:A:980:ARG:O	1:A:983:PRO:HD2	2.20	0.40
1:A:940:PHE:CZ	1:A:987:THR:HG21	2.56	0.40
1:A:135:GLY:O	1:A:669:ARG:HB3	2.21	0.40
1:A:338:LEU:HA	1:A:338:LEU:HD22	1.83	0.40
1:A:453:SER:OG	1:A:939:GLU:CB	2.70	0.40
1:A:758:GLU:HB3	1:A:765:ARG:HG3	2.02	0.40
1:A:956:PRO:HG3	1:A:972:ALA:CB	2.51	0.40
1:A:111:LEU:O	1:A:112:GLU:C	2.60	0.40
1:A:322:VAL:O	1:A:322:VAL:CG2	2.69	0.40
1:A:371:PRO:O	1:A:375:CYS:N	2.46	0.40
1:A:48:ILE:O	1:A:130:GLY:N	2.55	0.40
1:A:572:TYR:CD1	1:A:573:MET:N	2.84	0.40
1:A:759:THR:CG2	1:A:768:ILE:HD11	2.51	0.40

There are no symmetry-related clashes.

## 5.3 Torsion angles

### 5.3.1 Protein backbone

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	1009/1055 (96%)	867 (86%)	94 (9%)	48 (5%)	2	30

All (48) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	172	PRO
1	A	220	SER
1	A	254	GLY
1	A	256	PRO
1	A	283	GLU
1	A	293	SER
1	A	565	ILE
1	A	578	PRO
1	A	613	GLU
1	A	889	LEU
1	A	921	HIS
1	A	956	PRO
1	A	960	ASN
1	A	56	GLN
1	A	131	PRO
1	A	132	ASP
1	A	294	GLY
1	A	295	LYS
1	A	296	ASN
1	A	387	ASN
1	A	389	ASN
1	A	623	MET
1	A	763	ILE
1	A	847	LYS
1	A	922	LEU
1	A	1005	GLY
1	A	148	SER
1	A	574	PRO

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	640	MET
1	A	967	GLN
1	A	983	PRO
1	A	1032	PRO
1	A	39	LEU
1	A	122	PRO
1	A	271	MET
1	A	359	HIS
1	A	448	PRO
1	A	708	PRO
1	A	965	SER
1	A	279	ASN
1	A	385	GLY
1	A	557	VAL
1	A	560	GLU
1	A	665	PRO
1	A	674	SER
1	A	54	PRO
1	A	130	GLY
1	A	536	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	835/872 (96%)	678 (81%)	157 (19%)	2 14

All (157) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	8	ARG
1	A	12	ASN
1	A	13	ARG
1	A	21	LEU
1	A	23	LEU
1	A	25	ILE

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	26	TRP
1	A	29	TRP
1	A	31	ILE
1	A	32	ILE
1	A	44	ASP
1	A	53	TYR
1	A	56	GLN
1	A	60	ILE
1	A	65	VAL
1	A	66	THR
1	A	67	TYR
1	A	76	VAL
1	A	96	ILE
1	A	105	TRP
1	A	107	ARG
1	A	112	GLU
1	A	117	VAL
1	A	118	GLN
1	A	121	LEU
1	A	144	LEU
1	A	147	ARG
1	A	153	LEU
1	A	157	ARG
1	A	168	LEU
1	A	184	VAL
1	A	190	VAL
1	A	196	LEU
1	A	205	GLU
1	A	222	ILE
1	A	226	GLU
1	A	231	VAL
1	A	232	ARG
1	A	236	TYR
1	A	237	LEU
1	A	252	GLU
1	A	260	ARG
1	A	284	VAL
1	A	288	VAL
1	A	292	ARG
1	A	298	ARG
1	A	310	THR
1	A	317	GLU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	322	VAL
1	A	337	ASN
1	A	338	LEU
1	A	343	LEU
1	A	344	GLU
1	A	346	PHE
1	A	347	ILE
1	A	353	CYS
1	A	359	HIS
1	A	360	VAL
1	A	364	LEU
1	A	367	ILE
1	A	368	ILE
1	A	398	ILE
1	A	410	MET
1	A	415	HIS
1	A	416	LYS
1	A	421	TRP
1	A	423	HIS
1	A	433	LYS
1	A	435	ARG
1	A	436	TRP
1	A	438	VAL
1	A	440	THR
1	A	451	PHE
1	A	458	THR
1	A	461	PHE
1	A	462	ILE
1	A	467	LEU
1	A	475	PHE
1	A	480	PHE
1	A	492	LEU
1	A	495	VAL
1	A	497	ILE
1	A	500	LEU
1	A	501	MET
1	A	517	LEU
1	A	528	LEU
1	A	529	LEU
1	A	531	LYS
1	A	534	HIS
1	A	548	LEU

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	549	THR
1	A	550	VAL
1	A	560	GLU
1	A	571	LEU
1	A	572	TYR
1	A	576	THR
1	A	580	ILE
1	A	613	GLU
1	A	622	GLU
1	A	624	VAL
1	A	637	ARG
1	A	640	MET
1	A	641	THR
1	A	649	LEU
1	A	658	LEU
1	A	663	VAL
1	A	668	ASN
1	A	669	ARG
1	A	675	THR
1	A	690	LEU
1	A	699	GLN
1	A	716	GLU
1	A	730	ARG
1	A	740	VAL
1	A	745	LEU
1	A	760	VAL
1	A	761	GLU
1	A	783	LEU
1	A	793	LYS
1	A	804	ILE
1	A	813	LEU
1	A	823	TRP
1	A	826	ILE
1	A	829	ARG
1	A	831	ARG
1	A	833	MET
1	A	847	LYS
1	A	850	LEU
1	A	872	LEU
1	A	883	ILE
1	A	884	PHE
1	A	888	TYR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	889	LEU
1	A	893	ARG
1	A	894	VAL
1	A	898	LEU
1	A	900	ILE
1	A	906	PHE
1	A	912	ILE
1	A	916	TRP
1	A	920	PHE
1	A	921	HIS
1	A	922	LEU
1	A	945	LEU
1	A	946	MET
1	A	948	LEU
1	A	949	ARG
1	A	964	PHE
1	A	969	LEU
1	A	970	ASP
1	A	974	TYR
1	A	980	ARG
1	A	998	ILE
1	A	1012	ILE
1	A	1016	MET
1	A	1026	LEU
1	A	1031	ILE

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (13) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	87	GLN
1	A	118	GLN
1	A	198	GLN
1	A	215	GLN
1	A	238	GLN
1	A	279	ASN
1	A	337	ASN
1	A	382	HIS
1	A	437	GLN
1	A	526	HIS
1	A	564	GLN
1	A	744	GLN
1	A	838	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 1 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

## 5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

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

There are no chain breaks in this entry.

## 6 Fit of model and data ⓘ

### 6.1 Protein, DNA and RNA chains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å <sup>2</sup> )	Q<0.9
1	A	1015/1055 (96%)	-0.09	27 (2%) 55 44	75, 176, 334, 611	0

All (27) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	1000	TRP	4.3
1	A	827	ASP	4.2
1	A	434	THR	3.4
1	A	939	GLU	3.3
1	A	1001	GLY	3.3
1	A	405	ASP	3.2
1	A	1038	MET	3.1
1	A	407	ALA	3.0
1	A	445	GLU	3.0
1	A	386	LEU	2.8
1	A	849	GLN	2.6
1	A	863	GLU	2.6
1	A	964	PHE	2.6
1	A	466	THR	2.5
1	A	960	ASN	2.4
1	A	965	SER	2.4
1	A	956	PRO	2.3
1	A	558	GLY	2.3
1	A	828	ALA	2.2
1	A	892	ARG	2.2
1	A	711	ALA	2.2
1	A	403	MET	2.1
1	A	873	LYS	2.1
1	A	7	ARG	2.1
1	A	401	GLY	2.1
1	A	381	MET	2.0
1	A	402	ALA	2.0

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

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

## 6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

## 6.4 Ligands [i](#)

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

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	LLDF	B-factors( $\text{\AA}^2$ )	Q<0.9
2	CU1	A	1048	1/1	0.97	0.09	-	124,124,124,124	0

## 6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.