



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

May 29, 2020 – 02:06 am BST

PDB ID : 3AVV  
Title : Structure of viral RNA polymerase complex 3  
Authors : Takeshita, D.; Tomita, K.  
Deposited on : 2011-03-08  
Resolution : 3.12 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

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/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)	:	1.13
EDS	:	2.11
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Refmac	:	5.8.0158
CCP4	:	7.0.044 (Gargrove)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.11

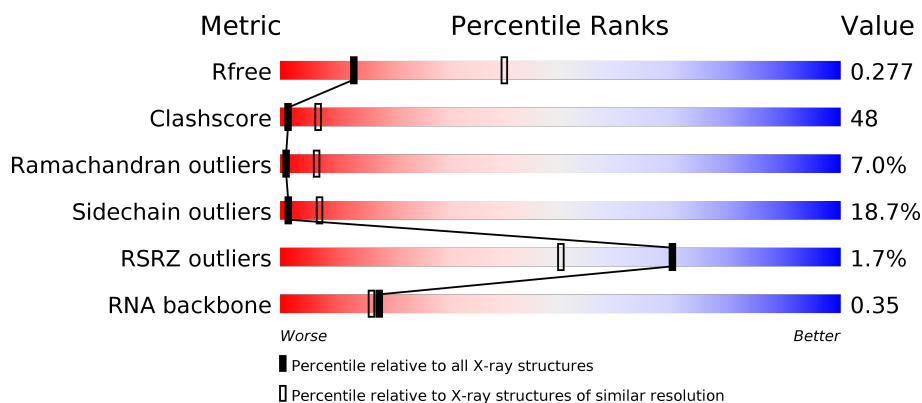
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*X-RAY DIFFRACTION*

The reported resolution of this entry is 3.12 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))
$R_{free}$	130704	1292 (3.14-3.10)
Clashscore	141614	1389 (3.14-3.10)
Ramachandran outliers	138981	1337 (3.14-3.10)
Sidechain outliers	138945	1337 (3.14-3.10)
RSRZ outliers	127900	1260 (3.14-3.10)
RNA backbone	3102	1134 (3.44-2.80)

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 respectively. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions  $\leq 5\%$ . The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the electron density. The numeric value is given above the bar.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	1289	<div> <div>2%</div> <div>31% 48% 13% 7%</div> </div>
2	G	8	<div> <div>50% 38% 13%</div> </div>
3	T	13	<div> <div>8% 15% 38% 31% 15%</div> </div>

## 2 Entry composition

There are 5 unique types of molecules in this entry. The entry contains 9702 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

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

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

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	1203	Total	C	N	O	S	0	0	0
			9287	5865	1605	1772	45			

There are 7 discrepancies between the modelled and reference sequences:

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

- Molecule 2 is a RNA chain called RNA (5'-R(\*GP\*GP\*GP\*UP\*CP\*CP\*AP\*U)-3').

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
2	G	8	Total	C	N	O	P	0	0	0
			168	76	30	55	7			

- Molecule 3 is a RNA chain called RNA (5'-R(\*AP\*AP\*CP\*GP\*AP\*UP\*GP\*GP\*AP\*CP\*CP\*CP\*A)-3').

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
3	T	11	Total	C	N	O	P	0	0	0
			235	105	44	75	11			

- Molecule 4 is CALCIUM ION (three-letter code: CA) (formula: Ca).

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	A	2	Total	Ca	0	0
			2	2		

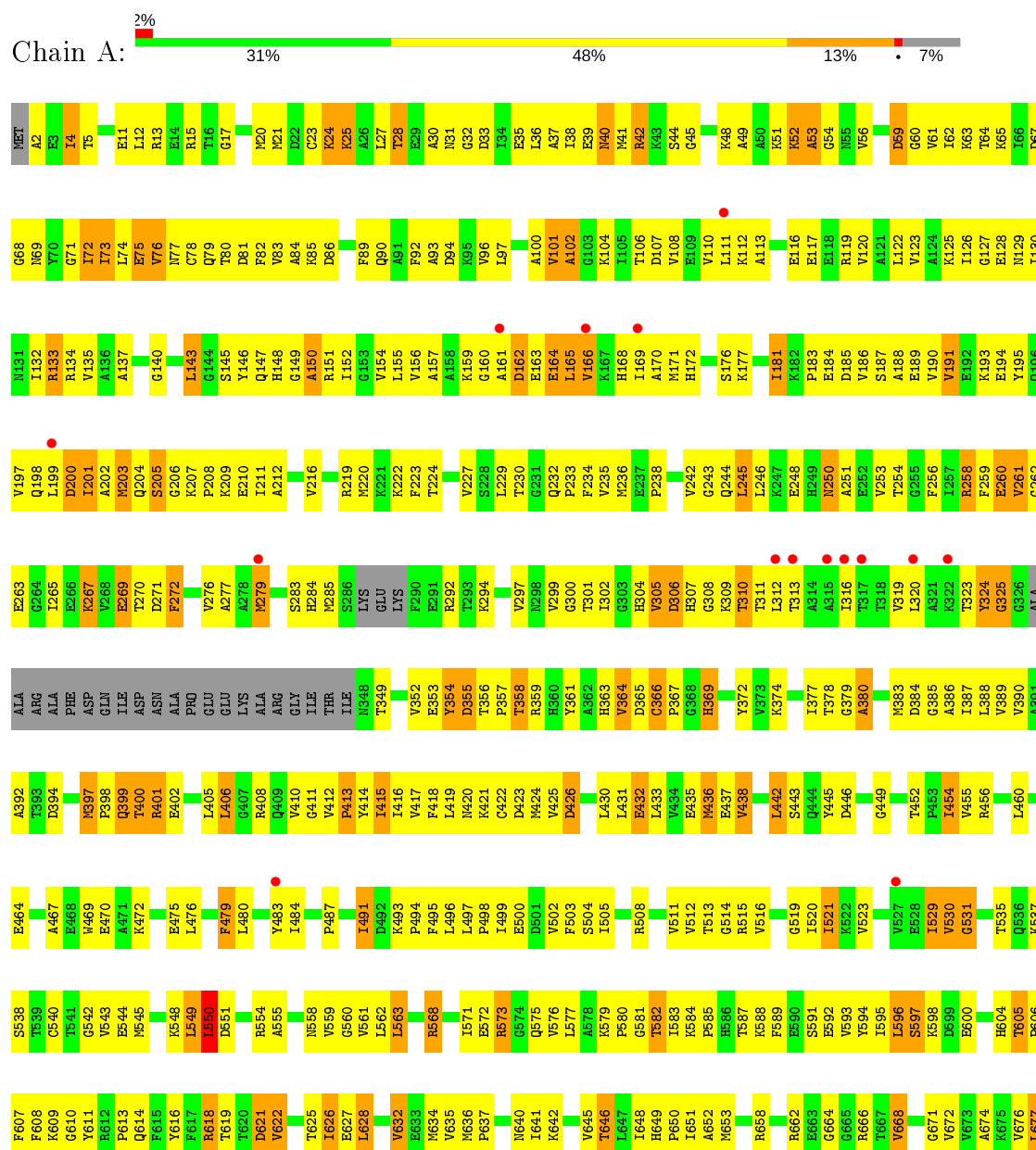
- Molecule 5 is water.

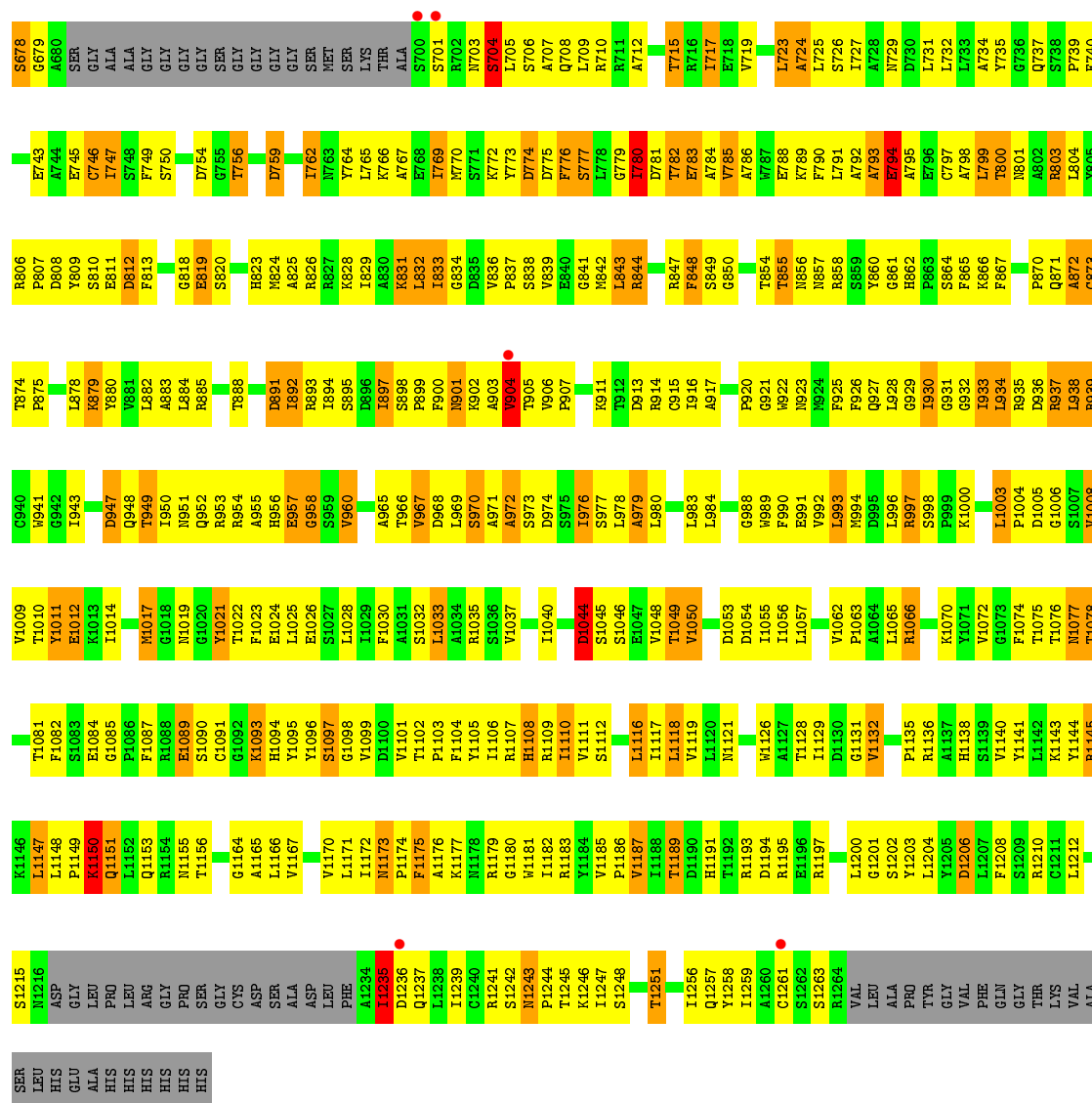
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
5	A	10	Total	O	0	0
			10	10		

### 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: Elongation factor Ts, Elongation factor Tu, LINKER, Q beta replicase





## 4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	C 2 2 21	Depositor
Cell constants a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	138.99Å 255.09Å 101.06Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	20.00 – 3.12 47.89 – 3.12	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	90.4 (20.00-3.12) 95.8 (47.89-3.12)	Depositor EDS
$R_{merge}$	(Not available)	Depositor
$R_{sym}$	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ <sup>1</sup>	1.65 (at 3.12Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX (phenix.refine: 1.6.4_486)	Depositor
R, $R_{free}$	0.226 , 0.298 0.214 , 0.277	Depositor DCC
$R_{free}$ test set	1571 reflections (5.06%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å <sup>2</sup> )	69.7	Xtriage
Anisotropy	0.483	Xtriage
Bulk solvent $k_{sol}$ (e/Å <sup>3</sup> ), $B_{sol}$ (Å <sup>2</sup> )	0.23 , 13.4	EDS
L-test for twinning <sup>2</sup>	$\langle  L  \rangle = 0.38$ , $\langle L^2 \rangle = 0.21$	Xtriage
Estimated twinning fraction	0.079 for 1/2*h-1/2*k,-3/2*h-1/2*k,-l 0.057 for 1/2*h+1/2*k,3/2*h-1/2*k,-l	Xtriage
$F_o, F_c$ correlation	0.89	EDS
Total number of atoms	9702	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	68.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 2.97% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

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

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

## 5 Model quality [i](#)

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

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

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	0.52	1/9456 (0.0%)	0.65	1/12787 (0.0%)
2	G	0.55	0/187	0.94	0/290
3	T	0.73	0/262	1.31	2/406 (0.5%)
All	All	0.53	1/9905 (0.0%)	0.69	3/13483 (0.0%)

All (1) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	1091	CYS	CB-SG	-5.36	1.73	1.81

All (3) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1148	LEU	CA-CB-CG	6.67	130.64	115.30
3	T	2103	C	C2-N1-C1'	6.29	125.72	118.80
3	T	2103	C	C6-N1-C2	-5.71	118.02	120.30

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

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

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	9287	0	9273	896	0

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
2	G	168	0	88	9	0
3	T	235	0	121	17	0
4	A	2	0	0	0	0
5	A	10	0	0	0	0
All	All	9702	0	9482	915	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 48.

All (915) 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:1189:THR:HG21	1:A:1257:GLN:HE21	1.05	1.11
1:A:72:ILE:HG12	1:A:137:ALA:HB2	1.37	1.07
1:A:198:GLN:HA	1:A:201:ILE:HG12	1.37	1.05
1:A:930:ILE:HD13	1:A:931:GLY:N	1.70	1.05
1:A:930:ILE:HD11	1:A:1021:TYR:HB3	1.32	1.04
1:A:968:ASP:H	1:A:1081:THR:HG22	1.18	1.04
1:A:611:TYR:HB3	1:A:626:ILE:HD11	1.40	1.04
1:A:618:ARG:HG2	1:A:618:ARG:HH21	1.25	0.98
1:A:399:GLN:H	1:A:399:GLN:HE21	1.07	0.97
1:A:756:THR:HG23	1:A:759:ASP:HB2	1.46	0.94
1:A:847:ARG:HH22	1:A:849:SER:HB2	1.34	0.93
1:A:49:ALA:HB2	1:A:123:VAL:HG11	1.48	0.93
1:A:930:ILE:HD13	1:A:931:GLY:H	1.23	0.93
1:A:386:ALA:HB3	1:A:415:ILE:HG12	1.51	0.93
1:A:1094:HIS:H	1:A:1102:THR:CG2	1.82	0.91
1:A:1189:THR:HG21	1:A:1257:GLN:NE2	1.86	0.90
1:A:76:VAL:HG11	1:A:93:ALA:HB1	1.53	0.90
1:A:930:ILE:CD1	1:A:1021:TYR:HB3	2.01	0.90
1:A:930:ILE:HD11	1:A:1021:TYR:CD2	2.07	0.90
1:A:780:ILE:HD13	1:A:780:ILE:H	1.38	0.88
1:A:202:ALA:HA	1:A:205:SER:HB2	1.54	0.88
1:A:955:ALA:HB2	1:A:1090:SER:HB3	1.56	0.88
1:A:75:GLU:HG2	1:A:134:ARG:HG2	1.57	0.87
1:A:583:ILE:HD12	1:A:584:LYS:H	1.38	0.87
1:A:588:LYS:HE2	1:A:646:THR:HB	1.57	0.87
1:A:1243:ASN:HB2	1:A:1244:PRO:HD2	1.55	0.86
1:A:803:ARG:C	1:A:803:ARG:HD2	1.96	0.86
1:A:803:ARG:HD2	1:A:803:ARG:O	1.76	0.86
1:A:1093:LYS:HA	1:A:1102:THR:HG21	1.58	0.86

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:598:LYS:HD2	1:A:604:HIS:HB2	1.56	0.86
1:A:1050:VAL:HG23	1:A:1055:ILE:HG23	1.58	0.85
1:A:502:VAL:HG21	1:A:571:ILE:HB	1.59	0.85
1:A:1057:LEU:CD1	1:A:1065:LEU:HD22	2.07	0.85
1:A:372:TYR:HE1	1:A:410:VAL:HG21	1.42	0.85
1:A:449:GLY:O	1:A:452:THR:HG22	1.78	0.84
1:A:229:LEU:HG	1:A:242:VAL:HG11	1.58	0.84
1:A:930:ILE:HD11	1:A:1021:TYR:CB	2.07	0.84
1:A:701:SER:OG	1:A:1179:ARG:HD2	1.77	0.84
1:A:491:ILE:HG13	1:A:491:ILE:O	1.75	0.84
1:A:1003:LEU:N	1:A:1003:LEU:HD12	1.91	0.83
1:A:1057:LEU:HD11	1:A:1065:LEU:HD22	1.61	0.83
1:A:73:ILE:HG22	1:A:155:LEU:HD22	1.61	0.83
1:A:797:CYS:O	1:A:801:ASN:HB2	1.77	0.83
1:A:930:ILE:HD11	1:A:1021:TYR:HD2	1.44	0.82
1:A:365:ASP:O	1:A:367:PRO:HD3	1.79	0.82
1:A:529:ILE:O	1:A:529:ILE:HD13	1.79	0.82
1:A:836:VAL:HG12	1:A:988:GLY:HA3	1.62	0.82
1:A:878:LEU:HD12	1:A:897:ILE:HD12	1.63	0.81
1:A:1174:PRO:HG2	1:A:1175:PHE:CD1	2.16	0.81
1:A:709:LEU:HD21	1:A:1175:PHE:CD2	2.16	0.80
1:A:709:LEU:HD21	1:A:1175:PHE:HD2	1.45	0.80
1:A:1174:PRO:HG2	1:A:1175:PHE:CE1	2.16	0.80
1:A:811:GLU:HG3	1:A:812:ASP:H	1.48	0.79
1:A:1096:TYR:O	1:A:1099:VAL:HG22	1.83	0.79
1:A:735:TYR:CD2	1:A:762:ILE:HD11	2.18	0.79
1:A:1094:HIS:H	1:A:1102:THR:HG22	1.47	0.78
1:A:558:ASN:HB3	1:A:1210:ARG:HD3	1.64	0.78
1:A:154:VAL:HG21	1:A:170:ALA:O	1.84	0.78
1:A:234:PHE:HE1	1:A:236:MET:HB2	1.47	0.77
1:A:916:ILE:HG22	1:A:917:ALA:N	1.97	0.77
1:A:276:VAL:HG11	1:A:352:VAL:HG21	1.65	0.77
1:A:79:GLN:HG2	1:A:128:GLU:HB3	1.66	0.77
1:A:229:LEU:O	1:A:242:VAL:HB	1.85	0.77
1:A:929:GLY:O	1:A:933:ILE:HG22	1.85	0.77
1:A:1066:ARG:HG2	1:A:1076:THR:HG21	1.63	0.76
1:A:75:GLU:O	1:A:75:GLU:HG3	1.85	0.76
1:A:250:ASN:N	1:A:250:ASN:HD22	1.83	0.76
1:A:968:ASP:N	1:A:1081:THR:HG22	2.00	0.75
1:A:847:ARG:NH2	1:A:849:SER:HB2	2.01	0.75
1:A:90:GLN:O	1:A:94:ASP:HB2	1.86	0.75

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:145:SER:OG	1:A:155:LEU:HD12	1.87	0.75
1:A:765:LEU:HD22	1:A:1126:TRP:CZ2	2.22	0.74
1:A:35:GLU:O	1:A:38:ILE:HG12	1.86	0.74
1:A:198:GLN:HG3	1:A:201:ILE:HG13	1.68	0.74
1:A:386:ALA:HB2	1:A:412:VAL:HG21	1.70	0.74
1:A:836:VAL:HB	1:A:837:PRO:HD2	1.68	0.74
1:A:874:THR:CG2	1:A:923:ASN:HD21	1.99	0.74
1:A:250:ASN:ND2	1:A:250:ASN:H	1.84	0.74
1:A:1145:ARG:HB3	1:A:1145:ARG:HH11	1.52	0.74
1:A:152:ILE:HG13	1:A:260:GLU:HG3	1.68	0.74
1:A:294:LYS:HG2	1:A:358:THR:O	1.87	0.73
1:A:874:THR:HA	1:A:898:SER:O	1.88	0.73
1:A:1003:LEU:H	1:A:1003:LEU:HD12	1.53	0.73
1:A:749:PHE:CZ	1:A:766:LYS:HD3	2.24	0.73
1:A:1128:THR:CG2	1:A:1131:GLY:H	2.02	0.73
1:A:120:VAL:HA	1:A:123:VAL:HG12	1.70	0.73
1:A:234:PHE:CE1	1:A:236:MET:HB2	2.24	0.73
1:A:870:PRO:HB2	1:A:895:SER:HB3	1.71	0.73
1:A:467:ALA:HA	1:A:470:GLU:HB2	1.71	0.73
1:A:159:LYS:O	1:A:251:ALA:HA	1.89	0.72
1:A:312:LEU:HD23	1:A:389:VAL:HG22	1.72	0.72
1:A:301:THR:HB	1:A:363:HIS:CE1	2.25	0.72
2:G:2006:C:H2'	2:G:2007:A:H8	1.53	0.72
1:A:198:GLN:HA	1:A:201:ILE:CG1	2.18	0.72
1:A:773:TYR:HA	1:A:1107:ARG:O	1.90	0.72
1:A:932:GLY:O	1:A:935:ARG:HB3	1.89	0.72
1:A:955:ALA:HB2	1:A:1090:SER:CB	2.20	0.71
1:A:1019:ASN:HB3	1:A:1022:THR:HB	1.71	0.71
1:A:392:ALA:HB2	1:A:419:LEU:HD12	1.72	0.71
1:A:166:VAL:HA	1:A:169:ILE:CG1	2.20	0.71
1:A:543:VAL:HG22	1:A:561:VAL:HG22	1.72	0.71
1:A:618:ARG:CG	1:A:618:ARG:HH21	2.03	0.71
1:A:972:ALA:HB3	2:G:2008:U:O3'	1.90	0.71
1:A:300:GLY:H	1:A:383:MET:HE3	1.56	0.71
1:A:1077:ASN:O	1:A:1081:THR:HG23	1.91	0.70
1:A:870:PRO:CB	1:A:895:SER:HB3	2.21	0.70
1:A:59:ASP:O	1:A:77:ASN:HB2	1.90	0.70
2:G:2006:C:H2'	2:G:2007:A:C8	2.26	0.70
1:A:583:ILE:HD12	1:A:584:LYS:N	2.06	0.69
1:A:949:THR:HG23	1:A:953:ARG:NH1	2.07	0.69
1:A:514:GLY:HA2	1:A:1210:ARG:HH11	1.57	0.69

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:550:LEU:HD13	1:A:550:LEU:H	1.56	0.69
1:A:1145:ARG:HD2	1:A:1153:GLN:HG2	1.74	0.69
1:A:74:LEU:HB2	1:A:97:LEU:HD23	1.75	0.69
1:A:312:LEU:HD23	1:A:389:VAL:CG2	2.23	0.69
1:A:76:VAL:HG11	1:A:93:ALA:CB	2.22	0.69
1:A:1093:LYS:HD2	1:A:1102:THR:HG21	1.75	0.69
1:A:304:HIS:HB3	1:A:307:HIS:CD2	2.27	0.69
1:A:411:GLY:O	1:A:412:VAL:C	2.31	0.69
1:A:967:VAL:HG23	1:A:1055:ILE:HB	1.74	0.68
1:A:93:ALA:HA	1:A:96:VAL:HG12	1.75	0.68
1:A:836:VAL:CG1	1:A:988:GLY:HA3	2.23	0.68
1:A:1128:THR:HG23	1:A:1131:GLY:H	1.58	0.68
1:A:703:ASN:C	1:A:705:LEU:H	1.97	0.68
1:A:33:ASP:HB3	1:A:36:LEU:HB3	1.74	0.68
1:A:414:TYR:HB3	1:A:483:TYR:CE2	2.28	0.68
1:A:947:ASP:OD1	1:A:949:THR:HB	1.93	0.68
1:A:1129:ILE:O	1:A:1129:ILE:HG22	1.92	0.68
1:A:800:THR:O	1:A:804:LEU:HB2	1.94	0.68
1:A:62:ILE:HG12	1:A:75:GLU:HB2	1.74	0.68
1:A:1117:ILE:HD13	1:A:1165:ALA:HA	1.77	0.67
1:A:837:PRO:HG3	1:A:992:VAL:HG11	1.76	0.67
1:A:847:ARG:NH1	3:T:2107:G:OP1	2.27	0.67
1:A:194:GLU:HA	1:A:197:VAL:HG12	1.77	0.67
1:A:197:VAL:HG13	1:A:198:GLN:N	2.07	0.67
1:A:399:GLN:H	1:A:399:GLN:NE2	1.86	0.67
1:A:69:ASN:HB2	1:A:140:GLY:O	1.93	0.67
1:A:937:ARG:C	1:A:939:ARG:H	1.96	0.67
1:A:272:PHE:CE2	1:A:365:ASP:HB2	2.29	0.67
1:A:523:VAL:HG12	1:A:542:GLY:HA2	1.76	0.67
1:A:579:LYS:O	1:A:582:THR:HB	1.93	0.67
3:T:2108:G:H8	3:T:2108:G:C5'	2.07	0.67
1:A:377:ILE:HG23	1:A:671:GLY:HA2	1.76	0.67
1:A:765:LEU:O	1:A:765:LEU:HG	1.95	0.67
1:A:49:ALA:CB	1:A:123:VAL:HG11	2.22	0.67
1:A:1206:ASP:OD1	1:A:1206:ASP:C	2.33	0.67
1:A:900:PHE:HE1	1:A:1008:VAL:CG1	2.09	0.66
1:A:593:VAL:HG12	1:A:671:GLY:HA3	1.78	0.66
1:A:1066:ARG:CG	1:A:1076:THR:HG21	2.25	0.66
1:A:1175:PHE:CD1	1:A:1175:PHE:N	2.59	0.66
1:A:930:ILE:CD1	1:A:1021:TYR:HD2	2.09	0.66
1:A:1189:THR:HG21	1:A:1257:GLN:HB2	1.78	0.66

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:166:VAL:HA	1:A:169:ILE:HG12	1.77	0.66
1:A:250:ASN:ND2	1:A:250:ASN:N	2.43	0.66
1:A:931:GLY:O	1:A:1024:GLU:HG2	1.95	0.66
1:A:628:LEU:HD12	1:A:641:ILE:CD1	2.25	0.66
1:A:874:THR:HB	1:A:923:ASN:HD21	1.61	0.66
1:A:132:ILE:N	1:A:132:ILE:HD12	2.11	0.66
1:A:227:VAL:HG22	1:A:227:VAL:O	1.94	0.66
3:T:2108:G:H8	3:T:2108:G:H5'	1.61	0.65
1:A:73:ILE:HD11	1:A:259:PHE:HB2	1.77	0.65
1:A:97:LEU:O	1:A:101:VAL:HG23	1.96	0.65
1:A:1110:ILE:HD11	1:A:1116:LEU:HG	1.79	0.65
1:A:648:ILE:HG23	1:A:649:HIS:CD2	2.31	0.65
1:A:1093:LYS:HA	1:A:1102:THR:CG2	2.25	0.65
1:A:356:THR:HG22	1:A:359:ARG:O	1.96	0.65
1:A:836:VAL:HG12	1:A:988:GLY:CA	2.26	0.65
1:A:202:ALA:CA	1:A:205:SER:HB2	2.26	0.65
1:A:795:ALA:O	1:A:799:LEU:HD13	1.96	0.65
1:A:861:GLY:O	1:A:866:LYS:HE3	1.97	0.65
1:A:493:LYS:HB3	1:A:494:PRO:HD2	1.78	0.65
1:A:589:PHE:HA	1:A:677:LEU:H	1.62	0.65
1:A:782:THR:HG23	1:A:785:VAL:H	1.61	0.65
1:A:833:ILE:HG22	1:A:989:TRP:NE1	2.11	0.65
1:A:1062:VAL:O	1:A:1066:ARG:HB2	1.98	0.64
1:A:1181:TRP:HA	1:A:1181:TRP:CE3	2.31	0.64
1:A:735:TYR:O	1:A:737:GLN:HG2	1.97	0.64
1:A:930:ILE:HA	1:A:933:ILE:HG23	1.79	0.64
1:A:83:VAL:HG21	1:A:128:GLU:CD	2.17	0.64
1:A:512:VAL:HG21	1:A:577:LEU:HD22	1.79	0.64
1:A:521:ILE:HD11	1:A:540:CYS:SG	2.37	0.64
1:A:649:HIS:HB2	1:A:650:PRO:HD2	1.80	0.64
1:A:75:GLU:O	1:A:75:GLU:CG	2.45	0.64
1:A:709:LEU:HB2	1:A:1256:ILE:HG13	1.79	0.64
1:A:782:THR:HG23	1:A:784:ALA:H	1.62	0.64
1:A:833:ILE:CG2	1:A:989:TRP:CE2	2.79	0.64
1:A:765:LEU:HD22	1:A:1126:TRP:CE2	2.33	0.64
1:A:143:LEU:CB	1:A:157:ALA:HA	2.27	0.64
1:A:230:THR:HG23	1:A:243:GLY:HA3	1.79	0.64
1:A:954:ARG:HH11	1:A:1049:THR:CG2	2.10	0.64
1:A:717:ILE:HG23	1:A:1111:VAL:O	1.98	0.64
1:A:177:LYS:HG2	1:A:258:ARG:NH2	2.13	0.63
1:A:550:LEU:HD13	1:A:550:LEU:N	2.13	0.63

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:520:ILE:HD12	1:A:554:ARG:HA	1.79	0.63
1:A:764:TYR:HE2	1:A:1094:HIS:CD2	2.14	0.63
1:A:782:THR:HG23	1:A:784:ALA:N	2.13	0.63
1:A:194:GLU:HA	1:A:197:VAL:CG1	2.28	0.63
1:A:916:ILE:CG2	1:A:917:ALA:N	2.61	0.63
1:A:1026:GLU:O	1:A:1030:PHE:CD1	2.52	0.63
1:A:626:ILE:HG22	1:A:645:VAL:HG22	1.79	0.63
1:A:1189:THR:CG2	1:A:1257:GLN:HE21	1.97	0.63
1:A:1057:LEU:HD13	1:A:1065:LEU:HD22	1.81	0.62
1:A:36:LEU:HG	1:A:40:ASN:HD21	1.62	0.62
1:A:901:ASN:H	1:A:901:ASN:HD22	1.47	0.62
1:A:1094:HIS:N	1:A:1102:THR:HG22	2.14	0.62
1:A:354:TYR:CE2	1:A:361:TYR:HB2	2.33	0.62
1:A:65:LYS:HG2	1:A:101:VAL:HG21	1.80	0.62
1:A:1094:HIS:H	1:A:1102:THR:HG23	1.63	0.62
1:A:900:PHE:HE1	1:A:1008:VAL:HG12	1.63	0.62
1:A:948:GLN:O	1:A:952:GLN:HG2	2.00	0.62
1:A:312:LEU:CD2	1:A:389:VAL:HG22	2.30	0.62
1:A:618:ARG:HG2	1:A:618:ARG:NH2	2.03	0.62
2:G:2006:C:H1'	3:T:2108:G:N2	2.14	0.62
1:A:1026:GLU:HB2	1:A:1030:PHE:CE1	2.34	0.61
1:A:1048:VAL:O	1:A:1048:VAL:HG12	2.00	0.61
1:A:529:ILE:HD11	1:A:575:GLN:OE1	2.00	0.61
1:A:606:PRO:HB3	1:A:636:MET:HB3	1.81	0.61
1:A:628:LEU:HB3	1:A:632:VAL:HG12	1.82	0.61
1:A:384:ASP:O	1:A:413:PRO:HG2	2.01	0.61
1:A:676:VAL:HG13	1:A:676:VAL:O	2.00	0.61
1:A:111:LEU:C	1:A:113:ALA:H	2.03	0.61
1:A:1121:ASN:HD21	1:A:1167:VAL:H	1.48	0.61
1:A:967:VAL:HG12	1:A:1081:THR:HB	1.82	0.61
1:A:608:PHE:CE1	1:A:634:MET:HG3	2.35	0.61
1:A:947:ASP:C	1:A:949:THR:H	2.01	0.61
1:A:65:LYS:HB2	1:A:97:LEU:HD11	1.83	0.61
1:A:76:VAL:CG1	1:A:93:ALA:HB1	2.29	0.61
1:A:262:GLY:HA2	1:A:265:ILE:HD12	1.82	0.60
1:A:930:ILE:HD11	1:A:1021:TYR:CG	2.35	0.60
1:A:148:HIS:HB3	1:A:152:ILE:HG22	1.82	0.60
1:A:949:THR:HG23	1:A:953:ARG:CZ	2.31	0.60
1:A:712:ALA:O	1:A:715:THR:HB	2.01	0.60
1:A:888:THR:HG21	1:A:892:ILE:HD11	1.84	0.60
1:A:610:GLY:H	1:A:1181:TRP:HE1	1.50	0.60

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:246:LEU:HD21	1:A:253:VAL:H	1.66	0.60
1:A:833:ILE:CG2	1:A:989:TRP:NE1	2.64	0.60
1:A:1243:ASN:HB2	1:A:1244:PRO:CD	2.31	0.60
1:A:25:LYS:O	1:A:28:THR:HG22	2.01	0.60
1:A:399:GLN:N	1:A:399:GLN:HE21	1.91	0.60
1:A:573:ARG:NH1	1:A:1243:ASN:HA	2.16	0.60
1:A:608:PHE:HE1	1:A:634:MET:SD	2.24	0.60
1:A:12:LEU:HD22	1:A:27:LEU:CD1	2.32	0.60
1:A:743:GLU:HB2	1:A:776:PHE:CE2	2.36	0.60
1:A:372:TYR:CE1	1:A:410:VAL:HG21	2.31	0.60
1:A:92:PHE:CE1	1:A:132:ILE:HD11	2.36	0.60
1:A:356:THR:CG2	1:A:359:ARG:H	2.15	0.59
1:A:305:VAL:HG22	1:A:305:VAL:O	2.02	0.59
1:A:794:GLU:O	1:A:795:ALA:C	2.40	0.59
1:A:1177:LYS:HE2	1:A:1177:LYS:HA	1.84	0.59
1:A:874:THR:CB	1:A:923:ASN:HD21	2.14	0.59
1:A:301:THR:HA	1:A:387:ILE:HG23	1.83	0.59
1:A:497:LEU:HD12	1:A:516:VAL:HB	1.83	0.59
1:A:819:GLU:O	1:A:823:HIS:ND1	2.35	0.59
2:G:2006:C:O2	3:T:2108:G:N1	2.35	0.59
1:A:1094:HIS:O	1:A:1095:TYR:CG	2.56	0.59
1:A:250:ASN:HD22	1:A:250:ASN:H	1.44	0.59
1:A:383:MET:CE	1:A:386:ALA:HA	2.33	0.59
1:A:993:LEU:HD23	1:A:1021:TYR:CZ	2.37	0.59
1:A:119:ARG:HG2	1:A:119:ARG:O	2.03	0.59
1:A:200:ASP:HA	1:A:203:MET:HB2	1.85	0.59
1:A:323:THR:O	1:A:324:TYR:O	2.21	0.59
1:A:433:LEU:O	1:A:436:MET:HB2	2.03	0.59
1:A:604:HIS:NE2	1:A:1263:SER:HB2	2.18	0.59
1:A:773:TYR:HD2	1:A:1106:ILE:O	1.85	0.59
1:A:930:ILE:CD1	1:A:931:GLY:N	2.57	0.59
1:A:511:VAL:HB	1:A:562:LEU:HD22	1.85	0.58
1:A:500:GLU:HA	1:A:573:ARG:HG2	1.84	0.58
1:A:300:GLY:CA	1:A:364:VAL:HG23	2.33	0.58
1:A:442:LEU:HD12	1:A:452:THR:HG21	1.83	0.58
1:A:828:LYS:O	1:A:831:LYS:HG3	2.04	0.58
1:A:1094:HIS:N	1:A:1102:THR:CG2	2.63	0.58
1:A:591:SER:HB2	1:A:672:VAL:O	2.02	0.58
1:A:717:ILE:O	1:A:717:ILE:HD13	2.04	0.58
1:A:651:ILE:HG22	1:A:652:ALA:N	2.17	0.58
1:A:780:ILE:H	1:A:780:ILE:CD1	2.12	0.58

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1003:LEU:H	1:A:1003:LEU:CD1	2.14	0.58
1:A:108:VAL:O	1:A:111:LEU:HD23	2.04	0.58
1:A:212:ALA:O	1:A:216:VAL:HG23	2.04	0.58
1:A:549:LEU:O	1:A:550:LEU:O	2.22	0.58
1:A:172:HIS:HE1	1:A:233:PRO:O	1.86	0.58
1:A:160:GLY:HA3	1:A:250:ASN:O	2.03	0.58
1:A:618:ARG:CG	1:A:618:ARG:NH2	2.65	0.58
1:A:74:LEU:HD12	1:A:75:GLU:H	1.68	0.58
1:A:797:CYS:HB2	1:A:1012:GLU:HB3	1.86	0.58
1:A:990:PHE:O	1:A:990:PHE:CD2	2.57	0.58
1:A:954:ARG:HH11	1:A:1049:THR:HG22	1.68	0.58
1:A:558:ASN:HB3	1:A:1210:ARG:CD	2.34	0.58
1:A:790:PHE:HB2	1:A:915:CYS:SG	2.43	0.58
1:A:199:LEU:HD23	1:A:203:MET:HG3	1.85	0.58
1:A:161:ALA:HB2	1:A:251:ALA:CB	2.34	0.58
1:A:594:TYR:HD1	1:A:640:ASN:HB3	1.68	0.58
1:A:432:GLU:O	1:A:436:MET:HG2	2.04	0.57
1:A:74:LEU:CB	1:A:97:LEU:HD23	2.33	0.57
1:A:116:GLU:OE1	1:A:119:ARG:HD3	2.05	0.57
1:A:310:THR:O	1:A:313:THR:HG22	2.03	0.57
1:A:324:TYR:CD1	1:A:357:PRO:HD3	2.39	0.57
1:A:73:ILE:O	1:A:73:ILE:HG12	2.04	0.57
1:A:626:ILE:CG2	1:A:645:VAL:HG22	2.35	0.57
1:A:1175:PHE:HD1	1:A:1175:PHE:N	2.01	0.57
1:A:1089:GLU:O	1:A:1089:GLU:HG3	2.04	0.57
1:A:238:PRO:O	1:A:1171:LEU:HD23	2.04	0.57
1:A:72:ILE:HD11	1:A:135:VAL:HG22	1.85	0.57
1:A:513:THR:HG22	1:A:560:GLY:CA	2.35	0.57
1:A:75:GLU:HG2	1:A:134:ARG:CG	2.33	0.57
1:A:938:LEU:HD13	1:A:1028:LEU:HD12	1.86	0.57
1:A:62:ILE:HD12	1:A:261:VAL:N	2.19	0.57
1:A:892:ILE:HD13	1:A:892:ILE:N	2.19	0.57
1:A:930:ILE:CD1	1:A:1021:TYR:CD2	2.86	0.57
1:A:719:VAL:HG11	1:A:1147:LEU:CD1	2.33	0.57
1:A:300:GLY:N	1:A:383:MET:HE3	2.20	0.57
1:A:833:ILE:HG23	1:A:989:TRP:CE2	2.40	0.57
1:A:764:TYR:CE2	1:A:1094:HIS:CD2	2.93	0.57
1:A:616:TYR:OH	1:A:619:THR:HA	2.04	0.57
1:A:857:ASN:O	1:A:858:ARG:C	2.41	0.57
1:A:269:GLU:HG3	1:A:270:THR:N	2.19	0.56
1:A:356:THR:HG23	1:A:359:ARG:H	1.70	0.56

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:378:THR:HG23	1:A:380:ALA:H	1.69	0.56
1:A:383:MET:HE2	1:A:386:ALA:HA	1.87	0.56
1:A:706:SER:HA	1:A:709:LEU:CD1	2.34	0.56
1:A:1056:ILE:HD11	1:A:1090:SER:OG	2.05	0.56
1:A:592:GLU:HG3	1:A:642:LYS:HG3	1.86	0.56
1:A:324:TYR:CG	1:A:357:PRO:HG3	2.40	0.56
1:A:1032:SER:OG	1:A:1033:LEU:N	2.37	0.56
1:A:162:ASP:OD1	1:A:162:ASP:N	2.37	0.56
1:A:1243:ASN:CB	1:A:1244:PRO:HD2	2.32	0.56
1:A:621:ASP:OD1	1:A:662:ARG:NH2	2.38	0.56
1:A:956:HIS:O	1:A:960:VAL:HG13	2.06	0.56
1:A:219:ARG:HD3	1:A:1132:VAL:CG2	2.36	0.56
1:A:1187:VAL:HG21	1:A:1259:ILE:HD13	1.87	0.56
1:A:991:GLU:C	1:A:993:LEU:N	2.56	0.56
3:T:2105:A:C2'	3:T:2106:U:H5'	2.36	0.56
1:A:67:ASP:O	1:A:69:ASN:N	2.39	0.56
1:A:970:SER:O	1:A:972:ALA:N	2.39	0.56
1:A:75:GLU:CG	1:A:134:ARG:HG2	2.33	0.56
1:A:1014:ILE:HG13	1:A:1014:ILE:O	2.07	0.55
1:A:246:LEU:HD21	1:A:253:VAL:HG22	1.87	0.55
1:A:181:ILE:HD11	1:A:253:VAL:O	2.06	0.55
1:A:476:LEU:O	1:A:479:PHE:HB2	2.06	0.55
1:A:607:PHE:CD1	1:A:611:TYR:HB2	2.41	0.55
1:A:937:ARG:O	1:A:939:ARG:N	2.39	0.55
1:A:782:THR:CG2	1:A:785:VAL:H	2.20	0.55
1:A:276:VAL:HG13	1:A:277:ALA:N	2.22	0.55
1:A:21:MET:HE2	1:A:21:MET:HA	1.89	0.55
1:A:545:MET:HG2	1:A:559:VAL:HG12	1.87	0.55
1:A:605:THR:HG22	1:A:606:PRO:HD2	1.87	0.55
1:A:1180:GLY:O	1:A:1181:TRP:HB2	2.07	0.55
1:A:519:GLY:O	1:A:520:ILE:HD13	2.07	0.55
1:A:312:LEU:HD12	1:A:312:LEU:O	2.07	0.55
1:A:49:ALA:HB2	1:A:123:VAL:CG1	2.31	0.55
1:A:65:LYS:HB2	1:A:97:LEU:CD1	2.37	0.55
1:A:969:LEU:CD2	1:A:1076:THR:HA	2.36	0.55
1:A:199:LEU:O	1:A:203:MET:HB2	2.06	0.55
1:A:628:LEU:HD12	1:A:641:ILE:HD11	1.88	0.55
1:A:937:ARG:C	1:A:939:ARG:N	2.60	0.55
1:A:818:GLY:O	1:A:820:SER:N	2.40	0.54
1:A:1003:LEU:HB3	1:A:1004:PRO:HD2	1.89	0.54
1:A:148:HIS:HB3	1:A:152:ILE:CG2	2.37	0.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:740:PHE:CD2	1:A:746:CYS:HA	2.42	0.54
1:A:520:ILE:HD12	1:A:554:ARG:HD3	1.89	0.54
1:A:703:ASN:C	1:A:705:LEU:N	2.60	0.54
1:A:732:LEU:HD12	1:A:739:PRO:HA	1.90	0.54
1:A:978:LEU:HD12	1:A:1012:GLU:O	2.08	0.54
1:A:197:VAL:CG1	1:A:198:GLN:N	2.71	0.54
1:A:731:LEU:HA	1:A:1140:VAL:HG21	1.88	0.54
1:A:1181:TRP:HE3	1:A:1181:TRP:HA	1.72	0.54
1:A:117:GLU:O	1:A:120:VAL:HG22	2.08	0.54
1:A:545:MET:CE	1:A:548:LYS:HD2	2.38	0.54
1:A:872:ALA:O	1:A:873:CYS:HB2	2.08	0.54
1:A:438:VAL:CG2	1:A:438:VAL:O	2.55	0.54
1:A:729:ASN:HD21	1:A:740:PHE:H	1.55	0.54
1:A:954:ARG:O	1:A:955:ALA:C	2.46	0.54
1:A:500:GLU:OE1	1:A:1241:ARG:CZ	2.56	0.54
1:A:862:HIS:NE2	1:A:1245:THR:HG23	2.23	0.54
1:A:260:GLU:O	1:A:263:GLU:HG3	2.07	0.54
1:A:871:GLN:HE21	1:A:921:GLY:HA3	1.71	0.54
1:A:107:ASP:OD1	1:A:110:VAL:HG23	2.08	0.54
1:A:1143:LYS:HD3	1:A:1144:TYR:CE1	2.43	0.54
1:A:1247:ILE:CG2	1:A:1248:SER:N	2.69	0.54
1:A:206:GLY:O	1:A:207:LYS:C	2.46	0.54
1:A:377:ILE:HD11	1:A:592:GLU:HB3	1.90	0.54
1:A:386:ALA:CB	1:A:412:VAL:HG21	2.38	0.54
1:A:589:PHE:CZ	1:A:645:VAL:HB	2.43	0.54
1:A:20:MET:O	1:A:23:CYS:HB2	2.08	0.53
1:A:523:VAL:HG22	1:A:551:ASP:O	2.08	0.53
1:A:405:LEU:HD13	1:A:445:TYR:CE2	2.44	0.53
1:A:64:THR:HA	1:A:72:ILE:O	2.08	0.53
1:A:1164:GLY:O	1:A:1165:ALA:HB2	2.07	0.53
1:A:219:ARG:HD3	1:A:1132:VAL:HG21	1.90	0.53
1:A:735:TYR:CD1	1:A:1136:ARG:HD2	2.43	0.53
1:A:244:GLN:O	1:A:244:GLN:HG3	2.08	0.53
1:A:503:PHE:HE2	1:A:1197:ARG:HH22	1.55	0.53
1:A:588:LYS:HE2	1:A:646:THR:CB	2.33	0.53
1:A:923:ASN:O	1:A:927:GLN:HG3	2.09	0.53
1:A:1189:THR:HG21	1:A:1257:GLN:CB	2.38	0.53
1:A:132:ILE:N	1:A:132:ILE:CD1	2.71	0.53
1:A:1003:LEU:N	1:A:1003:LEU:CD1	2.62	0.53
1:A:301:THR:HB	1:A:363:HIS:NE2	2.23	0.53
1:A:871:GLN:O	1:A:872:ALA: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:878:LEU:CD2	1:A:882:LEU:HD11	2.38	0.53
1:A:418:PHE:HE2	1:A:420:ASN:HA	1.74	0.53
1:A:740:PHE:CE2	1:A:746:CYS:HA	2.44	0.53
1:A:397:MET:O	1:A:400:THR:HB	2.08	0.53
3:T:2108:G:C8	3:T:2108:G:H5'	2.43	0.53
1:A:216:VAL:O	1:A:219:ARG:HB3	2.10	0.52
1:A:872:ALA:HB3	1:A:920:PRO:HB3	1.91	0.52
1:A:100:ALA:O	1:A:104:LYS:HA	2.09	0.52
1:A:1121:ASN:ND2	1:A:1167:VAL:H	2.06	0.52
1:A:73:ILE:CG2	1:A:155:LEU:HD22	2.38	0.52
1:A:304:HIS:O	1:A:306:ASP:N	2.36	0.52
1:A:723:LEU:O	1:A:724:ALA:C	2.47	0.52
1:A:856:ASN:OD1	1:A:871:GLN:OE1	2.27	0.52
1:A:874:THR:CG2	1:A:923:ASN:ND2	2.69	0.52
1:A:892:ILE:HG23	1:A:922:TRP:CH2	2.44	0.52
1:A:608:PHE:CE1	1:A:634:MET:CG	2.92	0.52
1:A:749:PHE:CE1	1:A:766:LYS:HD3	2.44	0.52
1:A:926:PHE:HB3	1:A:996:LEU:HD21	1.91	0.52
1:A:423:ASP:C	1:A:425:VAL:H	2.13	0.52
1:A:581:GLY:HA2	1:A:584:LYS:HZ1	1.75	0.52
1:A:783:GLU:O	1:A:786:ALA:HB3	2.09	0.52
1:A:898:SER:OG	1:A:899:PRO:HD2	2.09	0.52
1:A:969:LEU:HB2	1:A:1053:ASP:OD1	2.09	0.52
1:A:204:GLN:C	1:A:206:GLY:H	2.12	0.52
1:A:523:VAL:CG1	1:A:542:GLY:HA2	2.38	0.52
1:A:954:ARG:O	1:A:956:HIS:N	2.43	0.52
1:A:960:VAL:HG12	1:A:1098:GLY:N	2.25	0.52
1:A:980:LEU:O	1:A:984:LEU:HD12	2.09	0.52
1:A:828:LYS:NZ	1:A:1035:ARG:HB3	2.25	0.52
1:A:1156:THR:HA	1:A:1166:LEU:O	2.10	0.52
1:A:62:ILE:HD12	1:A:261:VAL:H	1.75	0.52
1:A:125:LYS:HZ3	1:A:398:PRO:HG3	1.75	0.52
1:A:874:THR:OG1	1:A:875:PRO:HD2	2.10	0.52
3:T:2105:A:O2'	3:T:2106:U:H5'	2.10	0.52
1:A:245:LEU:HD22	1:A:245:LEU:O	2.10	0.52
1:A:72:ILE:HD13	1:A:73:ILE:N	2.25	0.52
1:A:773:TYR:HB3	1:A:776:PHE:CE1	2.45	0.52
1:A:78:CYS:HB3	1:A:89:PHE:CE2	2.45	0.52
1:A:81:ASP:O	1:A:85:LYS:HG2	2.10	0.52
1:A:234:PHE:O	1:A:238:PRO:HA	2.10	0.51
1:A:187:SER:C	1:A:189:GLU:H	2.14	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:514:GLY:HA2	1:A:1210:ARG:NH1	2.24	0.51
3:T:2108:G:C8	3:T:2108:G:C5'	2.92	0.51
1:A:420:ASN:ND2	1:A:421:LYS:HG3	2.26	0.51
1:A:545:MET:HG3	1:A:550:LEU:HD11	1.93	0.51
1:A:735:TYR:CG	1:A:762:ILE:HD11	2.45	0.51
1:A:189:GLU:O	1:A:193:LYS:HB2	2.09	0.51
1:A:12:LEU:HD23	1:A:23:CYS:HB3	1.93	0.51
1:A:1066:ARG:HH11	1:A:1078:THR:HG22	1.75	0.51
1:A:30:ALA:O	1:A:32:GLY:N	2.44	0.51
1:A:903:ALA:HA	1:A:916:ILE:O	2.11	0.51
1:A:132:ILE:CD1	1:A:132:ILE:H	2.23	0.51
1:A:38:ILE:HG13	1:A:39:GLU:N	2.26	0.51
1:A:17:GLY:O	1:A:125:LYS:HG3	2.10	0.51
1:A:74:LEU:CD2	1:A:96:VAL:HG13	2.41	0.51
1:A:884:LEU:HG	1:A:892:ILE:HG13	1.92	0.51
1:A:79:GLN:CG	1:A:128:GLU:HB3	2.39	0.51
1:A:516:VAL:HG13	1:A:555:ALA:HA	1.91	0.51
1:A:125:LYS:NZ	1:A:398:PRO:HG3	2.26	0.50
1:A:181:ILE:HG23	1:A:185:ASP:OD1	2.10	0.50
1:A:747:ILE:HG22	1:A:770:MET:O	2.10	0.50
1:A:980:LEU:O	1:A:984:LEU:HB2	2.12	0.50
1:A:143:LEU:H	1:A:143:LEU:HD23	1.76	0.50
1:A:792:ALA:O	1:A:793:ALA:C	2.50	0.50
1:A:1170:VAL:O	1:A:1170:VAL:HG22	2.11	0.50
1:A:365:ASP:O	1:A:367:PRO:CD	2.57	0.50
1:A:435:GLU:OE1	1:A:456:ARG:NE	2.43	0.50
1:A:520:ILE:CD1	1:A:554:ARG:HD3	2.42	0.50
1:A:1077:ASN:ND2	1:A:1077:ASN:C	2.64	0.50
1:A:89:PHE:HE2	1:A:130:ILE:CG2	2.24	0.50
1:A:45:GLY:O	1:A:48:LYS:HB3	2.12	0.50
1:A:74:LEU:HB2	1:A:97:LEU:CD2	2.41	0.50
1:A:947:ASP:C	1:A:949:THR:N	2.65	0.50
1:A:30:ALA:C	1:A:32:GLY:H	2.15	0.50
1:A:980:LEU:HD22	1:A:1072:VAL:HB	1.94	0.50
1:A:1085:GLY:C	1:A:1087:PHE:H	2.15	0.50
1:A:12:LEU:HG	1:A:23:CYS:SG	2.52	0.50
1:A:529:ILE:HD11	1:A:575:GLN:CD	2.33	0.50
1:A:1033:LEU:O	1:A:1037:VAL:HG23	2.12	0.49
1:A:1050:VAL:HG23	1:A:1055:ILE:HA	1.93	0.49
1:A:1099:VAL:HG23	1:A:1101:VAL:HG13	1.94	0.49
1:A:628:LEU:HB3	1:A:632:VAL:CG1	2.41	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:998:SER:O	1:A:1011:TYR:HD2	1.94	0.49
1:A:272:PHE:CZ	1:A:365:ASP:HB2	2.48	0.49
1:A:12:LEU:HD22	1:A:27:LEU:HD13	1.93	0.49
1:A:839:VAL:O	1:A:843:LEU:HB2	2.12	0.49
1:A:916:ILE:CG2	1:A:917:ALA:H	2.25	0.49
1:A:74:LEU:HD21	1:A:96:VAL:HG13	1.93	0.49
1:A:993:LEU:CD2	1:A:1021:TYR:CZ	2.95	0.49
1:A:1189:THR:CG2	1:A:1257:GLN:HB2	2.41	0.49
1:A:21:MET:C	1:A:23:CYS:H	2.15	0.49
1:A:261:VAL:O	1:A:261:VAL:HG12	2.12	0.49
1:A:372:TYR:C	1:A:372:TYR:CD1	2.84	0.49
1:A:418:PHE:C	1:A:418:PHE:CD2	2.86	0.49
1:A:491:ILE:CG1	1:A:491:ILE:O	2.54	0.49
1:A:966:THR:HG22	1:A:1056:ILE:HG13	1.95	0.49
1:A:222:LYS:C	1:A:224:THR:H	2.16	0.49
1:A:302:ILE:HG13	1:A:366:CYS:HB2	1.95	0.49
1:A:1236:ASP:O	1:A:1239:ILE:HG13	2.12	0.49
1:A:416:ILE:CD1	1:A:480:LEU:HD12	2.43	0.49
1:A:505:ILE:HB	1:A:508:ARG:HB2	1.94	0.49
1:A:836:VAL:HG12	1:A:988:GLY:C	2.32	0.49
1:A:1062:VAL:N	1:A:1063:PRO:HD2	2.28	0.49
1:A:306:ASP:OD1	1:A:306:ASP:O	2.31	0.49
1:A:134:ARG:HG3	1:A:259:PHE:CE1	2.48	0.48
1:A:951:ASN:OD1	1:A:1049:THR:HG23	2.13	0.48
1:A:954:ARG:NH1	1:A:1049:THR:HG22	2.27	0.48
1:A:306:ASP:C	1:A:308:GLY:H	2.16	0.48
1:A:841:GLY:C	1:A:843:LEU:N	2.66	0.48
1:A:193:LYS:O	1:A:197:VAL:HG12	2.13	0.48
1:A:301:THR:HG23	1:A:365:ASP:OD1	2.13	0.48
1:A:862:HIS:HD2	1:A:864:SER:OG	1.95	0.48
1:A:93:ALA:HA	1:A:96:VAL:CG1	2.41	0.48
1:A:949:THR:HG22	1:A:950:ILE:N	2.28	0.48
2:G:2004:U:H3'	2:G:2004:U:C6	2.49	0.48
1:A:183:PRO:HD3	1:A:230:THR:CB	2.43	0.48
1:A:405:LEU:HB2	1:A:445:TYR:CE2	2.49	0.48
1:A:515:ARG:H	1:A:1241:ARG:HH22	1.61	0.48
1:A:611:TYR:CD2	1:A:613:PRO:HD3	2.48	0.48
2:G:2006:C:O2	3:T:2108:G:C2	2.66	0.48
1:A:980:LEU:HD22	1:A:1072:VAL:O	2.13	0.48
1:A:40:ASN:H	1:A:40:ASN:ND2	2.11	0.48
1:A:635:VAL:HG21	1:A:641:ILE:HD12	1.95	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:732:LEU:CD1	1:A:739:PRO:HA	2.43	0.48
1:A:960:VAL:HG12	1:A:1098:GLY:H	1.78	0.48
1:A:73:ILE:HD11	1:A:259:PHE:CB	2.43	0.48
1:A:312:LEU:O	1:A:312:LEU:HG	2.13	0.48
1:A:297:VAL:HG22	1:A:487:PRO:HG2	1.94	0.48
1:A:934:LEU:O	1:A:938:LEU:HB2	2.13	0.48
1:A:774:ASP:OD1	1:A:1108:HIS:HB3	2.14	0.48
1:A:1141:TYR:OH	1:A:1166:LEU:HD22	2.14	0.48
1:A:433:LEU:O	1:A:437:GLU:HG3	2.13	0.48
1:A:936:ASP:O	1:A:939:ARG:HB2	2.14	0.48
1:A:581:GLY:HA2	1:A:584:LYS:NZ	2.28	0.48
1:A:302:ILE:O	1:A:388:LEU:HA	2.13	0.48
1:A:706:SER:HA	1:A:709:LEU:HD12	1.95	0.48
1:A:72:ILE:HD11	1:A:135:VAL:CG2	2.43	0.48
1:A:772:LYS:HB2	1:A:1107:ARG:HG3	1.94	0.48
1:A:166:VAL:O	1:A:170:ALA:HB2	2.14	0.48
1:A:431:LEU:C	1:A:433:LEU:H	2.17	0.48
1:A:297:VAL:HG22	1:A:487:PRO:CG	2.44	0.48
1:A:589:PHE:CD1	1:A:589:PHE:C	2.87	0.48
1:A:900:PHE:CE1	1:A:1008:VAL:CG1	2.92	0.48
1:A:954:ARG:C	1:A:956:HIS:N	2.65	0.48
1:A:211:ILE:HG23	1:A:1135:PRO:HD2	1.96	0.47
1:A:172:HIS:HA	1:A:235:VAL:HG11	1.95	0.47
1:A:202:ALA:O	1:A:207:LYS:HB2	2.14	0.47
1:A:39:GLU:O	1:A:42:ARG:HB3	2.15	0.47
1:A:901:ASN:N	1:A:901:ASN:HD22	2.06	0.47
1:A:12:LEU:HD22	1:A:27:LEU:HD11	1.96	0.47
1:A:279:MET:HE2	1:A:311:THR:HA	1.97	0.47
1:A:521:ILE:O	1:A:521:ILE:HG23	2.12	0.47
1:A:614:GLN:HB3	1:A:621:ASP:HB3	1.97	0.47
1:A:784:ALA:O	1:A:788:GLU:HG3	2.14	0.47
1:A:871:GLN:NE2	1:A:921:GLY:HA3	2.28	0.47
1:A:1055:ILE:C	1:A:1056:ILE:HD12	2.35	0.47
1:A:184:GLU:N	1:A:184:GLU:OE2	2.47	0.47
1:A:724:ALA:O	1:A:726:SER:N	2.48	0.47
1:A:806:ARG:N	1:A:807:PRO:CD	2.77	0.47
3:T:2110:C:H2'	3:T:2111:C:H5'	1.97	0.47
1:A:1024:GLU:N	1:A:1024:GLU:OE1	2.32	0.47
1:A:300:GLY:HA2	1:A:364:VAL:HG23	1.96	0.47
1:A:991:GLU:C	1:A:993:LEU:H	2.17	0.47
1:A:900:PHE:CE1	1:A:1008:VAL:HG11	2.49	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1111:VAL:CG2	1:A:1112:SER:N	2.78	0.47
1:A:774:ASP:C	1:A:776:PHE:H	2.18	0.47
1:A:111:LEU:HD23	1:A:111:LEU:H	1.78	0.47
1:A:388:LEU:HB3	1:A:417:VAL:HG22	1.95	0.47
1:A:531:GLY:O	1:A:650:PRO:HB2	2.14	0.47
1:A:595:ILE:O	1:A:596:LEU:C	2.53	0.47
1:A:801:ASN:HA	1:A:979:ALA:HB2	1.96	0.47
1:A:500:GLU:OE1	1:A:1210:ARG:NH1	2.48	0.47
1:A:765:LEU:CD2	1:A:1126:TRP:CZ2	2.95	0.47
1:A:589:PHE:CE1	1:A:591:SER:HB3	2.50	0.47
1:A:806:ARG:C	1:A:808:ASP:H	2.18	0.47
1:A:82:PHE:O	1:A:402:GLU:HG3	2.15	0.47
1:A:848:PHE:HD2	1:A:867:PHE:CE1	2.33	0.47
1:A:901:ASN:HB3	1:A:920:PRO:HD3	1.97	0.47
1:A:163:GLU:H	1:A:163:GLU:CD	2.18	0.47
1:A:724:ALA:O	1:A:727:ILE:N	2.47	0.47
1:A:1023:PHE:HA	1:A:1026:GLU:OE2	2.14	0.46
1:A:377:ILE:CG2	1:A:671:GLY:HA2	2.45	0.46
1:A:907:PRO:HD2	3:T:2104:G:H21	1.80	0.46
1:A:949:THR:CG2	1:A:953:ARG:HH22	2.28	0.46
1:A:949:THR:CG2	1:A:953:ARG:NH2	2.78	0.46
1:A:949:THR:CG2	1:A:950:ILE:N	2.77	0.46
1:A:1077:ASN:C	1:A:1077:ASN:HD22	2.18	0.46
1:A:1087:PHE:HD2	1:A:1095:TYR:O	1.98	0.46
1:A:312:LEU:HD13	1:A:418:PHE:CE1	2.50	0.46
1:A:571:ILE:HG22	1:A:572:GLU:N	2.30	0.46
1:A:585:PRO:HB2	1:A:650:PRO:HB3	1.96	0.46
1:A:1004:PRO:C	1:A:1006:GLY:H	2.18	0.46
1:A:161:ALA:HB2	1:A:251:ALA:HB2	1.97	0.46
1:A:187:SER:O	1:A:189:GLU:N	2.48	0.46
1:A:299:VAL:O	1:A:363:HIS:HA	2.15	0.46
1:A:415:ILE:HG22	1:A:415:ILE:O	2.16	0.46
1:A:608:PHE:HE1	1:A:634:MET:CG	2.28	0.46
1:A:1110:ILE:HD12	1:A:1116:LEU:HA	1.97	0.46
1:A:155:LEU:O	1:A:256:PHE:HA	2.15	0.46
1:A:369:HIS:CD2	1:A:406:LEU:HD23	2.50	0.46
1:A:460:LEU:O	1:A:464:GLU:HG3	2.15	0.46
1:A:589:PHE:HE1	1:A:591:SER:HB3	1.79	0.46
1:A:143:LEU:HB2	1:A:157:ALA:HA	1.98	0.46
1:A:4:ILE:HD11	1:A:28:THR:HA	1.98	0.46
1:A:745:GLU:O	1:A:747:ILE:N	2.48	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:116:GLU:HG3	1:A:116:GLU:O	2.16	0.46
1:A:222:LYS:O	1:A:224:THR:N	2.49	0.46
1:A:579:LYS:HG3	1:A:580:PRO:HD2	1.97	0.46
1:A:847:ARG:HH22	1:A:849:SER:CB	2.18	0.46
1:A:930:ILE:C	1:A:930:ILE:HD13	2.23	0.46
1:A:1128:THR:O	1:A:1129:ILE:HD12	2.15	0.46
1:A:1145:ARG:CB	1:A:1145:ARG:HH11	2.27	0.46
1:A:499:ILE:HG23	1:A:512:VAL:HB	1.97	0.46
1:A:515:ARG:H	1:A:1241:ARG:NH2	2.14	0.46
1:A:779:GLY:O	1:A:781:ASP:N	2.42	0.46
1:A:765:LEU:O	1:A:765:LEU:CG	2.63	0.46
2:G:2004:U:H3'	2:G:2004:U:H6	1.80	0.46
1:A:1118:LEU:O	1:A:1121:ASN:N	2.49	0.46
1:A:37:ALA:HA	1:A:40:ASN:OD1	2.16	0.46
1:A:704:SER:HA	1:A:707:ALA:CB	2.45	0.46
1:A:855:THR:O	1:A:855:THR:HG23	2.16	0.46
1:A:938:LEU:CD1	1:A:1028:LEU:HD12	2.46	0.46
1:A:37:ALA:O	1:A:41:MET:HG3	2.16	0.46
1:A:62:ILE:HD13	1:A:259:PHE:O	2.16	0.46
1:A:804:LEU:HD12	1:A:804:LEU:HA	1.82	0.46
1:A:156:VAL:HG22	1:A:256:PHE:HB3	1.98	0.45
1:A:78:CYS:HA	1:A:130:ILE:HG22	1.98	0.45
1:A:880:TYR:O	1:A:883:ALA:HB3	2.15	0.45
1:A:775:ASP:OD2	1:A:1109:ARG:HD3	2.16	0.45
1:A:147:GLN:HA	1:A:147:GLN:OE1	2.16	0.45
1:A:394:ASP:HB3	1:A:397:MET:CE	2.47	0.45
1:A:616:TYR:HB2	1:A:662:ARG:HD3	1.98	0.45
1:A:65:LYS:O	1:A:71:GLY:HA2	2.16	0.45
1:A:891:ASP:O	1:A:893:ARG:N	2.50	0.45
1:A:925:PHE:HE1	1:A:1208:PHE:CZ	2.34	0.45
1:A:976:ILE:O	1:A:1014:ILE:HG22	2.15	0.45
1:A:21:MET:C	1:A:23:CYS:N	2.70	0.45
1:A:312:LEU:O	1:A:312:LEU:CG	2.64	0.45
1:A:794:GLU:O	1:A:797:CYS:N	2.49	0.45
1:A:892:ILE:HG23	1:A:922:TRP:CZ2	2.52	0.45
1:A:1021:TYR:CD1	1:A:1021:TYR:C	2.90	0.45
1:A:222:LYS:C	1:A:224:THR:N	2.70	0.45
1:A:455:VAL:HG12	1:A:475:GLU:HG2	1.98	0.45
1:A:496:LEU:HD11	1:A:576:VAL:HG21	1.98	0.45
1:A:965:ALA:HB1	1:A:1082:PHE:O	2.16	0.45
1:A:132:ILE:HD12	1:A:132:ILE:H	1.81	0.45

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:309:LYS:O	1:A:313:THR:HB	2.16	0.45
1:A:773:TYR:OH	1:A:1109:ARG:HA	2.16	0.45
1:A:841:GLY:HA2	1:A:844:ARG:HG2	1.98	0.45
1:A:232:GLN:O	1:A:233:PRO:C	2.54	0.45
1:A:2:ALA:N	1:A:426:ASP:HB3	2.32	0.45
1:A:608:PHE:HD2	1:A:1181:TRP:CZ2	2.34	0.45
1:A:943:ILE:CG2	1:A:1050:VAL:O	2.65	0.45
1:A:500:GLU:OE1	1:A:1241:ARG:NH2	2.49	0.45
1:A:349:THR:HG22	1:A:349:THR:O	2.17	0.45
1:A:83:VAL:HG12	1:A:89:PHE:CD2	2.52	0.45
1:A:900:PHE:HE1	1:A:1008:VAL:HG11	1.81	0.45
1:A:1173:ASN:HB3	1:A:1176:ALA:HB2	1.99	0.45
1:A:227:VAL:CG2	1:A:227:VAL:O	2.65	0.45
1:A:1033:LEU:HA	1:A:1033:LEU:HD12	1.59	0.45
1:A:1087:PHE:CD2	1:A:1095:TYR:O	2.70	0.45
1:A:1105:TYR:N	1:A:1105:TYR:CD2	2.83	0.45
1:A:354:TYR:CE2	1:A:361:TYR:CB	3.00	0.45
1:A:957:GLU:O	1:A:958:GLY:C	2.55	0.45
1:A:1000:LYS:HG2	1:A:1010:THR:HG22	2.00	0.45
1:A:101:VAL:O	1:A:102:ALA:C	2.56	0.45
1:A:1156:THR:N	1:A:1173:ASN:OD1	2.50	0.45
1:A:1177:LYS:CA	1:A:1177:LYS:HE2	2.46	0.45
1:A:498:PRO:HA	1:A:576:VAL:HG12	1.98	0.45
1:A:4:ILE:HG22	1:A:5:THR:N	2.32	0.45
1:A:596:LEU:HB2	1:A:668:VAL:O	2.17	0.45
1:A:97:LEU:HD13	1:A:97:LEU:O	2.17	0.45
1:A:143:LEU:HB3	1:A:157:ALA:HA	1.98	0.44
1:A:825:ALA:O	1:A:829:ILE:HG13	2.17	0.44
1:A:379:GLY:O	1:A:380:ALA:O	2.34	0.44
1:A:495:PHE:CE1	1:A:577:LEU:O	2.69	0.44
1:A:743:GLU:HA	1:A:746:CYS:SG	2.57	0.44
1:A:804:LEU:HB3	1:A:979:ALA:HB1	1.99	0.44
1:A:833:ILE:HG22	1:A:834:GLY:N	2.33	0.44
1:A:841:GLY:C	1:A:843:LEU:H	2.19	0.44
1:A:971:ALA:HB1	1:A:974:ASP:HB2	1.99	0.44
1:A:1050:VAL:HG23	1:A:1055:ILE:CG2	2.38	0.44
1:A:168:HIS:HA	1:A:171:MET:CE	2.47	0.44
1:A:198:GLN:O	1:A:198:GLN:HG2	2.18	0.44
1:A:316:ILE:O	1:A:316:ILE:HG22	2.17	0.44
1:A:60:GLY:HA2	1:A:84:ALA:HB2	2.00	0.44
1:A:934:LEU:HD22	1:A:1028:LEU:HD13	1.99	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:25:LYS:HA	1:A:28:THR:HB	2.00	0.44
1:A:929:GLY:O	1:A:933:ILE:CG2	2.61	0.44
1:A:832:LEU:HD12	1:A:941:TRP:CE2	2.52	0.44
1:A:953:ARG:O	1:A:956:HIS:HB3	2.16	0.44
1:A:166:VAL:O	1:A:170:ALA:CB	2.66	0.44
1:A:854:THR:HG22	1:A:920:PRO:HA	1.99	0.44
1:A:906:VAL:HG13	1:A:914:ARG:HB3	1.99	0.44
1:A:1050:VAL:CG2	1:A:1055:ILE:HG23	2.39	0.44
1:A:1093:LYS:HA	1:A:1093:LYS:HD2	1.64	0.44
1:A:163:GLU:C	1:A:165:LEU:H	2.20	0.44
1:A:61:VAL:HG12	1:A:150:ALA:HB1	1.99	0.44
1:A:544:GLU:OE1	1:A:1203:TYR:HE1	2.00	0.44
1:A:191:VAL:O	1:A:195:TYR:HB3	2.17	0.44
1:A:195:TYR:O	1:A:195:TYR:CG	2.71	0.44
1:A:431:LEU:O	1:A:433:LEU:N	2.51	0.44
1:A:878:LEU:HD12	1:A:897:ILE:CD1	2.43	0.44
1:A:111:LEU:C	1:A:113:ALA:N	2.70	0.44
1:A:61:VAL:HG22	1:A:89:PHE:HE1	1.83	0.44
1:A:776:PHE:O	1:A:777:SER:O	2.36	0.44
1:A:836:VAL:HA	1:A:989:TRP:CD1	2.53	0.44
1:A:874:THR:HG22	1:A:923:ASN:OD1	2.17	0.44
1:A:926:PHE:C	1:A:928:LEU:N	2.72	0.44
1:A:952:GLN:NE2	1:A:1093:LYS:HG2	2.32	0.44
1:A:991:GLU:O	1:A:994:MET:N	2.51	0.44
1:A:1186:PRO:HG3	1:A:1258:TYR:CE2	2.53	0.43
1:A:122:LEU:O	1:A:125:LYS:N	2.51	0.43
1:A:195:TYR:O	1:A:195:TYR:CD1	2.70	0.43
1:A:207:LYS:HA	1:A:208:PRO:HD2	1.90	0.43
1:A:21:MET:HE2	1:A:24:LYS:HB3	1.99	0.43
1:A:519:GLY:C	1:A:520:ILE:HD13	2.39	0.43
1:A:236:MET:HG2	1:A:608:PHE:CE2	2.53	0.43
1:A:704:SER:HA	1:A:707:ALA:HB3	1.99	0.43
1:A:63:LYS:O	1:A:74:LEU:N	2.50	0.43
1:A:769:ILE:HA	1:A:1104:PHE:O	2.17	0.43
1:A:818:GLY:C	1:A:820:SER:N	2.70	0.43
1:A:126:ILE:HG22	1:A:127:GLY:N	2.32	0.43
1:A:92:PHE:HE1	1:A:132:ILE:HD11	1.83	0.43
1:A:197:VAL:HG13	1:A:198:GLN:H	1.80	0.43
1:A:62:ILE:HD13	1:A:259:PHE:C	2.38	0.43
1:A:419:LEU:HD23	1:A:454:ILE:CG2	2.48	0.43
1:A:968:ASP:OD2	1:A:969:LEU:O	2.36	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:435:GLU:O	1:A:436:MET:C	2.57	0.43
1:A:502:VAL:CG1	1:A:568:ARG:HB2	2.49	0.43
1:A:706:SER:HB3	1:A:1258:TYR:HE1	1.83	0.43
1:A:244:GLN:O	1:A:248:GLU:HG3	2.18	0.43
1:A:86:ASP:HA	1:A:402:GLU:OE1	2.19	0.43
1:A:904:VAL:HB	1:A:905:THR:H	1.67	0.43
1:A:949:THR:HG23	1:A:953:ARG:NH2	2.33	0.43
1:A:165:LEU:HD13	1:A:169:ILE:HD13	2.00	0.43
1:A:872:ALA:O	1:A:873:CYS:CB	2.66	0.43
1:A:949:THR:HG23	1:A:953:ARG:HH12	1.81	0.43
3:T:2110:C:C2'	3:T:2111:C:H5'	2.49	0.43
1:A:53:ALA:HA	1:A:129:ASN:OD1	2.18	0.43
1:A:969:LEU:HD13	1:A:1074:PHE:HB3	2.00	0.43
2:G:2004:U:C3'	2:G:2004:U:C6	3.01	0.43
1:A:997:ARG:HB3	1:A:1021:TYR:OH	2.19	0.43
1:A:1025:LEU:HA	1:A:1025:LEU:HD12	1.74	0.43
1:A:1040:ILE:HG22	1:A:1040:ILE:O	2.17	0.43
1:A:769:ILE:O	1:A:1105:TYR:HA	2.18	0.43
1:A:1126:TRP:O	1:A:1126:TRP:CG	2.71	0.43
1:A:359:ARG:NH2	1:A:480:LEU:O	2.52	0.43
1:A:405:LEU:HD13	1:A:445:TYR:HE2	1.84	0.43
1:A:628:LEU:H	1:A:628:LEU:HD22	1.83	0.43
1:A:1243:ASN:CB	1:A:1244:PRO:CD	2.94	0.43
1:A:197:VAL:CG1	1:A:198:GLN:H	2.32	0.43
1:A:40:ASN:ND2	1:A:40:ASN:N	2.66	0.43
1:A:1170:VAL:HG22	1:A:1183:ARG:HD3	2.00	0.43
1:A:11:GLU:O	1:A:15:ARG:HB2	2.18	0.43
1:A:183:PRO:HD3	1:A:230:THR:HB	2.00	0.43
1:A:195:TYR:C	1:A:195:TYR:CD1	2.92	0.43
1:A:596:LEU:HD12	1:A:600:GLU:O	2.19	0.43
1:A:798:ALA:O	1:A:799:LEU:C	2.57	0.43
1:A:811:GLU:OE2	1:A:811:GLU:HA	2.19	0.43
1:A:860:TYR:HA	1:A:865:PHE:CD1	2.53	0.43
1:A:956:HIS:CD2	1:A:1098:GLY:HA2	2.54	0.43
1:A:941:TRP:CH2	1:A:1032:SER:HB3	2.54	0.43
1:A:649:HIS:HB2	1:A:650:PRO:CD	2.47	0.43
1:A:63:LYS:O	1:A:73:ILE:HA	2.17	0.43
1:A:857:ASN:O	1:A:860:TYR:N	2.52	0.43
1:A:850:GLY:HA3	3:T:2106:U:OP1	2.19	0.43
1:A:1023:PHE:O	1:A:1026:GLU:HG2	2.19	0.42
1:A:1149:PRO:O	1:A:1150:LYS:C	2.57	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:187:SER:C	1:A:189:GLU:N	2.72	0.42
1:A:354:TYR:CD2	1:A:361:TYR:HB2	2.54	0.42
1:A:418:PHE:CE2	1:A:420:ASN:HA	2.53	0.42
1:A:497:LEU:HA	1:A:498:PRO:HD3	1.75	0.42
1:A:4:ILE:HD12	1:A:4:ILE:H	1.82	0.42
1:A:1151:GLN:HB2	1:A:1151:GLN:HE21	1.64	0.42
1:A:229:LEU:HD23	1:A:253:VAL:HG21	2.01	0.42
1:A:374:LYS:HD2	1:A:594:TYR:CE1	2.54	0.42
1:A:1212:LEU:HD23	1:A:1212:LEU:HA	1.77	0.42
1:A:265:ILE:HG13	1:A:265:ILE:H	1.70	0.42
1:A:583:ILE:HD11	1:A:653:MET:O	2.19	0.42
1:A:879:LYS:HB2	1:A:879:LYS:HE3	1.48	0.42
1:A:163:GLU:C	1:A:165:LEU:N	2.72	0.42
1:A:198:GLN:O	1:A:216:VAL:HG22	2.20	0.42
1:A:152:ILE:HD11	1:A:258:ARG:NH1	2.34	0.42
1:A:320:LEU:HD12	1:A:355:ASP:O	2.19	0.42
1:A:515:ARG:HB2	1:A:558:ASN:ND2	2.34	0.42
1:A:562:LEU:C	1:A:563:LEU:HD13	2.39	0.42
1:A:791:LEU:HD12	1:A:791:LEU:HA	1.90	0.42
1:A:874:THR:HG22	1:A:923:ASN:ND2	2.35	0.42
1:A:1116:LEU:O	1:A:1118:LEU:N	2.52	0.42
1:A:1155:ASN:HD21	1:A:1186:PRO:HD2	1.84	0.42
1:A:161:ALA:HB1	1:A:165:LEU:HB3	2.01	0.42
1:A:414:TYR:HB3	1:A:483:TYR:HE2	1.82	0.42
1:A:41:MET:HA	1:A:44:SER:OG	2.19	0.42
1:A:422:CYS:SG	1:A:456:ARG:HB3	2.59	0.42
1:A:611:TYR:HB3	1:A:626:ILE:CD1	2.30	0.42
1:A:724:ALA:HA	1:A:727:ILE:HD12	2.01	0.42
1:A:836:VAL:HB	1:A:837:PRO:CD	2.39	0.42
1:A:899:PRO:HD2	1:A:900:PHE:HD2	1.84	0.42
1:A:801:ASN:OD1	1:A:979:ALA:HB2	2.19	0.42
1:A:980:LEU:HG	1:A:984:LEU:HD12	2.02	0.42
1:A:513:THR:HG22	1:A:560:GLY:HA3	2.00	0.42
1:A:52:LYS:HD2	1:A:52:LYS:HA	1.60	0.42
1:A:397:MET:HG3	1:A:398:PRO:HD2	2.02	0.42
1:A:417:VAL:HB	1:A:454:ILE:HD13	2.00	0.42
1:A:636:MET:O	1:A:637:PRO:C	2.55	0.42
1:A:734:ALA:HB1	1:A:1136:ARG:O	2.18	0.42
1:A:833:ILE:HG23	1:A:989:TRP:CZ2	2.54	0.42
1:A:841:GLY:O	1:A:843:LEU:N	2.52	0.42
1:A:1082:PHE:CZ	1:A:1087:PHE:CE1	3.07	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1118:LEU:HA	1:A:1118:LEU:HD12	1.56	0.42
1:A:1206:ASP:OD1	1:A:1206:ASP:O	2.37	0.42
1:A:1235:ILE:HG12	1:A:1235:ILE:H	1.62	0.42
1:A:140:GLY:HA3	1:A:157:ALA:HB1	2.01	0.42
1:A:369:HIS:NE2	1:A:406:LEU:HD23	2.35	0.42
1:A:385:GLY:HA3	1:A:484:ILE:HD13	2.00	0.42
1:A:1082:PHE:CZ	1:A:1087:PHE:HE1	2.38	0.42
1:A:611:TYR:N	1:A:1181:TRP:HD1	2.18	0.42
1:A:176:SER:O	1:A:177:LYS:C	2.58	0.42
1:A:30:ALA:C	1:A:32:GLY:N	2.74	0.42
1:A:864:SER:HB3	1:A:1202:SER:HA	2.01	0.42
1:A:21:MET:HA	1:A:21:MET:CE	2.50	0.42
1:A:491:ILE:CD1	1:A:554:ARG:NH2	2.83	0.42
1:A:641:ILE:HG12	1:A:642:LYS:O	2.20	0.42
1:A:729:ASN:ND2	1:A:740:PHE:H	2.17	0.42
1:A:117:GLU:HA	1:A:117:GLU:OE1	2.20	0.41
1:A:1191:HIS:ND1	1:A:1251:THR:HG21	2.35	0.41
1:A:13:ARG:HD2	1:A:20:MET:SD	2.60	0.41
1:A:312:LEU:CD1	1:A:312:LEU:O	2.67	0.41
1:A:33:ASP:HB3	1:A:36:LEU:CB	2.48	0.41
1:A:508:ARG:HG2	1:A:562:LEU:HD13	2.02	0.41
1:A:78:CYS:HB3	1:A:130:ILE:HG22	2.01	0.41
1:A:246:LEU:CD2	1:A:253:VAL:HG22	2.50	0.41
1:A:28:THR:O	1:A:28:THR:HG23	2.20	0.41
1:A:719:VAL:HG11	1:A:1147:LEU:HD11	2.01	0.41
1:A:882:LEU:O	1:A:885:ARG:N	2.53	0.41
1:A:1246:LYS:C	1:A:1247:ILE:HD12	2.40	0.41
1:A:438:VAL:O	1:A:438:VAL:HG22	2.21	0.41
1:A:472:LYS:HA	1:A:475:GLU:HB3	2.01	0.41
1:A:609:LYS:HA	1:A:628:LEU:CD2	2.50	0.41
1:A:801:ASN:CG	1:A:977:SER:HB2	2.40	0.41
1:A:927:GLN:O	1:A:930:ILE:CD1	2.69	0.41
1:A:941:TRP:HH2	1:A:1032:SER:CB	2.33	0.41
1:A:941:TRP:HH2	1:A:1032:SER:HB3	1.85	0.41
3:T:2107:G:C3'	3:T:2108:G:H5''	2.51	0.41
1:A:1099:VAL:HG23	1:A:1099:VAL:O	2.20	0.41
1:A:1121:ASN:HA	1:A:1121:ASN:HD22	1.57	0.41
1:A:394:ASP:HB3	1:A:397:MET:HE3	2.02	0.41
1:A:705:LEU:HA	1:A:708:GLN:HE21	1.84	0.41
1:A:789:LYS:HA	1:A:789:LYS:HD2	1.81	0.41
1:A:89:PHE:HE2	1:A:130:ILE:HG21	1.85	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:911:LYS:HE3	1:A:911:LYS:HB2	1.80	0.41
1:A:1200:LEU:O	1:A:1201:GLY:C	2.59	0.41
1:A:13:ARG:C	1:A:15:ARG:H	2.23	0.41
1:A:165:LEU:HA	1:A:165:LEU:HD22	1.59	0.41
1:A:431:LEU:C	1:A:433:LEU:N	2.74	0.41
1:A:991:GLU:O	1:A:993:LEU:N	2.53	0.41
1:A:1017:MET:HA	1:A:1022:THR:HG21	2.02	0.41
1:A:1044:ASP:O	1:A:1045:SER:C	2.58	0.41
1:A:1206:ASP:OD1	1:A:1210:ARG:NH2	2.53	0.41
1:A:168:HIS:HA	1:A:171:MET:HE2	2.02	0.41
1:A:52:LYS:C	1:A:54:GLY:H	2.24	0.41
1:A:735:TYR:O	1:A:737:GLN:CG	2.67	0.41
1:A:900:PHE:CE1	1:A:1008:VAL:HG12	2.50	0.41
1:A:283:SER:C	1:A:285:MET:H	2.24	0.41
1:A:469:TRP:CE3	1:A:469:TRP:HA	2.56	0.41
1:A:548:LYS:HB2	1:A:550:LEU:CD1	2.50	0.41
1:A:1040:ILE:HD13	1:A:1040:ILE:HG21	1.74	0.41
1:A:152:ILE:CG1	1:A:260:GLU:HG3	2.45	0.41
1:A:412:VAL:HA	1:A:413:PRO:HD2	1.86	0.41
1:A:953:ARG:HG3	1:A:953:ARG:HH11	1.85	0.41
1:A:790:PHE:C	1:A:790:PHE:CD1	2.93	0.41
1:A:92:PHE:CZ	1:A:132:ILE:HD11	2.55	0.41
1:A:931:GLY:O	1:A:1024:GLU:CG	2.65	0.41
1:A:134:ARG:NH1	1:A:263:GLU:OE1	2.54	0.41
1:A:232:GLN:HA	1:A:233:PRO:HD2	1.93	0.41
1:A:313:THR:OG1	1:A:363:HIS:CD2	2.74	0.41
1:A:324:TYR:O	1:A:325:GLY:O	2.39	0.41
1:A:41:MET:HA	1:A:44:SER:HG	1.86	0.41
1:A:916:ILE:HD13	1:A:916:ILE:HA	1.84	0.41
1:A:1048:VAL:HG22	1:A:1057:LEU:CB	2.51	0.41
1:A:1074:PHE:CD2	1:A:1074:PHE:N	2.85	0.41
1:A:1111:VAL:HG23	1:A:1112:SER:N	2.36	0.41
1:A:162:ASP:O	1:A:166:VAL:HG22	2.21	0.41
1:A:423:ASP:C	1:A:425:VAL:N	2.74	0.41
1:A:749:PHE:HD1	1:A:767:ALA:HA	1.86	0.41
1:A:811:GLU:HG3	1:A:812:ASP:N	2.25	0.41
1:A:941:TRP:CH2	1:A:1032:SER:CB	3.04	0.40
1:A:1050:VAL:CG2	1:A:1055:ILE:HG12	2.51	0.40
1:A:505:ILE:HD12	1:A:1200:LEU:HD23	2.02	0.40
1:A:551:ASP:OD1	1:A:551:ASP:N	2.54	0.40
1:A:756:THR:HG23	1:A:759:ASP:CB	2.34	0.40

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:765:LEU:O	1:A:769:ILE:HB	2.20	0.40
1:A:842:MET:HE1	1:A:930:ILE:HG22	2.03	0.40
1:A:990:PHE:O	1:A:990:PHE:CG	2.74	0.40
1:A:1099:VAL:CG2	1:A:1099:VAL:O	2.69	0.40
1:A:304:HIS:ND1	1:A:304:HIS:C	2.75	0.40
1:A:356:THR:HG22	1:A:359:ARG:C	2.41	0.40
1:A:513:THR:HG22	1:A:560:GLY:HA2	2.03	0.40
1:A:971:ALA:O	1:A:972:ALA:C	2.59	0.40
3:T:2105:A:HO2'	3:T:2106:U:H5'	1.85	0.40
3:T:2107:G:H3'	3:T:2108:G:H5''	2.02	0.40
1:A:1208:PHE:C	1:A:1208:PHE:CD2	2.94	0.40
1:A:12:LEU:CD2	1:A:27:LEU:HD13	2.51	0.40
1:A:401:ARG:O	1:A:405:LEU:N	2.54	0.40
1:A:416:ILE:HD12	1:A:480:LEU:HD12	2.03	0.40
1:A:1010:THR:O	1:A:1011:TYR:C	2.58	0.40
1:A:1087:PHE:HE2	1:A:1094:HIS:HB3	1.87	0.40
1:A:146:TYR:HH	1:A:148:HIS:HD1	1.64	0.40
1:A:312:LEU:HD23	1:A:389:VAL:HG21	2.01	0.40
1:A:967:VAL:HA	1:A:1081:THR:HB	2.02	0.40
1:A:194:GLU:CA	1:A:197:VAL:HG12	2.50	0.40
1:A:530:VAL:HG23	1:A:585:PRO:HD3	2.03	0.40
1:A:594:TYR:C	1:A:595:ILE:HD12	2.42	0.40
1:A:818:GLY:C	1:A:820:SER:H	2.25	0.40
1:A:83:VAL:HG21	1:A:128:GLU:OE2	2.21	0.40
1:A:997:ARG:HD2	1:A:1014:ILE:O	2.21	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	1193/1289 (93%)	910 (76%)	200 (17%)	83 (7%)	<b>1</b> <b>6</b>

All (83) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	4	ILE
1	A	31	ASN
1	A	101	VAL
1	A	150	ALA
1	A	261	VAL
1	A	305	VAL
1	A	324	TYR
1	A	325	GLY
1	A	380	ALA
1	A	550	LEU
1	A	674	ALA
1	A	777	SER
1	A	780	ILE
1	A	872	ALA
1	A	873	CYS
1	A	970	SER
1	A	972	ALA
1	A	1011	TYR
1	A	68	GLY
1	A	102	ALA
1	A	149	GLY
1	A	188	ALA
1	A	205	SER
1	A	223	PHE
1	A	269	GLU
1	A	271	ASP
1	A	306	ASP
1	A	413	PRO
1	A	446	ASP
1	A	664	GLY
1	A	677	LEU
1	A	679	GLY
1	A	746	CYS
1	A	793	ALA
1	A	838	SER
1	A	934	LEU
1	A	938	LEU
1	A	958	GLY
1	A	1070	LYS
1	A	1150	LYS
1	A	53	ALA
1	A	201	ILE

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	209	LYS
1	A	424	MET
1	A	597	SER
1	A	704	SER
1	A	723	LEU
1	A	810	SER
1	A	819	GLU
1	A	957	GLU
1	A	979	ALA
1	A	1005	ASP
1	A	1046	SER
1	A	1084	GLU
1	A	112	LYS
1	A	133	ARG
1	A	432	GLU
1	A	596	LEU
1	A	678	SER
1	A	725	LEU
1	A	892	ILE
1	A	1044	ASP
1	A	1118	LEU
1	A	42	ARG
1	A	366	CYS
1	A	369	HIS
1	A	724	ALA
1	A	794	GLU
1	A	947	ASP
1	A	1097	SER
1	A	1235	ILE
1	A	164	GLU
1	A	267	LYS
1	A	436	MET
1	A	621	ASP
1	A	976	ILE
1	A	319	VAL
1	A	622	VAL
1	A	833	ILE
1	A	1119	VAL
1	A	1103	PRO
1	A	531	GLY
1	A	904	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	995/1060 (94%)	809 (81%)	186 (19%)	<b>1</b> <b>7</b>

All (186) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	24	LYS
1	A	25	LYS
1	A	28	THR
1	A	40	ASN
1	A	51	LYS
1	A	52	LYS
1	A	56	VAL
1	A	59	ASP
1	A	72	ILE
1	A	73	ILE
1	A	75	GLU
1	A	76	VAL
1	A	80	THR
1	A	106	THR
1	A	133	ARG
1	A	143	LEU
1	A	151	ARG
1	A	162	ASP
1	A	164	GLU
1	A	165	LEU
1	A	166	VAL
1	A	181	ILE
1	A	186	VAL
1	A	190	VAL
1	A	191	VAL
1	A	200	ASP
1	A	203	MET
1	A	210	GLU
1	A	220	MET
1	A	245	LEU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	250	ASN
1	A	254	THR
1	A	258	ARG
1	A	260	GLU
1	A	267	LYS
1	A	272	PHE
1	A	279	MET
1	A	284	HIS
1	A	292	ARG
1	A	310	THR
1	A	353	GLU
1	A	354	TYR
1	A	355	ASP
1	A	358	THR
1	A	364	VAL
1	A	390	VAL
1	A	397	MET
1	A	399	GLN
1	A	400	THR
1	A	401	ARG
1	A	406	LEU
1	A	408	ARG
1	A	415	ILE
1	A	426	ASP
1	A	430	LEU
1	A	438	VAL
1	A	442	LEU
1	A	443	SER
1	A	454	ILE
1	A	479	PHE
1	A	491	ILE
1	A	504	SER
1	A	521	ILE
1	A	529	ILE
1	A	530	VAL
1	A	535	THR
1	A	537	LYS
1	A	538	SER
1	A	549	LEU
1	A	550	LEU
1	A	563	LEU
1	A	568	ARG

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	573	ARG
1	A	582	THR
1	A	587	THR
1	A	597	SER
1	A	605	THR
1	A	618	ARG
1	A	622	VAL
1	A	625	THR
1	A	626	ILE
1	A	627	GLU
1	A	628	LEU
1	A	632	VAL
1	A	646	THR
1	A	658	ARG
1	A	666	ARG
1	A	668	VAL
1	A	678	SER
1	A	704	SER
1	A	710	ARG
1	A	715	THR
1	A	717	ILE
1	A	747	ILE
1	A	750	SER
1	A	754	ASP
1	A	756	THR
1	A	759	ASP
1	A	762	ILE
1	A	769	ILE
1	A	774	ASP
1	A	776	PHE
1	A	780	ILE
1	A	782	THR
1	A	783	GLU
1	A	785	VAL
1	A	794	GLU
1	A	799	LEU
1	A	800	THR
1	A	803	ARG
1	A	809	TYR
1	A	812	ASP
1	A	813	PHE
1	A	824	MET

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	826	ARG
1	A	831	LYS
1	A	832	LEU
1	A	843	LEU
1	A	844	ARG
1	A	848	PHE
1	A	855	THR
1	A	879	LYS
1	A	891	ASP
1	A	894	ILE
1	A	897	ILE
1	A	901	ASN
1	A	902	LYS
1	A	904	VAL
1	A	913	ASP
1	A	930	ILE
1	A	933	ILE
1	A	937	ARG
1	A	939	ARG
1	A	949	THR
1	A	960	VAL
1	A	967	VAL
1	A	973	SER
1	A	983	LEU
1	A	993	LEU
1	A	997	ARG
1	A	1003	LEU
1	A	1008	VAL
1	A	1009	VAL
1	A	1012	GLU
1	A	1017	MET
1	A	1021	TYR
1	A	1033	LEU
1	A	1044	ASP
1	A	1049	THR
1	A	1050	VAL
1	A	1054	ASP
1	A	1066	ARG
1	A	1075	THR
1	A	1077	ASN
1	A	1078	THR
1	A	1089	GLU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1093	LYS
1	A	1097	SER
1	A	1108	HIS
1	A	1110	ILE
1	A	1116	LEU
1	A	1132	VAL
1	A	1138	HIS
1	A	1145	ARG
1	A	1147	LEU
1	A	1150	LYS
1	A	1151	GLN
1	A	1172	ILE
1	A	1173	ASN
1	A	1175	PHE
1	A	1182	ILE
1	A	1185	VAL
1	A	1187	VAL
1	A	1189	THR
1	A	1193	ARG
1	A	1194	ASP
1	A	1195	ARG
1	A	1204	LEU
1	A	1206	ASP
1	A	1215	SER
1	A	1235	ILE
1	A	1237	GLN
1	A	1242	SER
1	A	1243	ASN
1	A	1251	THR
1	A	1261	CYS

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (22) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	40	ASN
1	A	55	ASN
1	A	168	HIS
1	A	198	GLN
1	A	250	ASN
1	A	399	GLN
1	A	558	ASN
1	A	708	GLN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	714	ASN
1	A	729	ASN
1	A	763	ASN
1	A	862	HIS
1	A	871	GLN
1	A	901	ASN
1	A	952	GLN
1	A	1077	ASN
1	A	1121	ASN
1	A	1122	ASN
1	A	1151	GLN
1	A	1155	ASN
1	A	1173	ASN
1	A	1257	GLN

### 5.3.3 RNA ⓘ

Mol	Chain	Analysed	Backbone Outliers	Pucker Outliers
2	G	7/8 (87%)	1 (14%)	0
3	T	10/13 (76%)	5 (50%)	0
All	All	17/21 (80%)	6 (35%)	0

All (6) RNA backbone outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
2	G	2008	U
3	T	2106	U
3	T	2108	G
3	T	2109	A
3	T	2110	C
3	T	2111	C

There are no RNA pucker outliers to report.

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

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

## 5.5 Carbohydrates

There are no carbohydrates in this entry.

## 5.6 Ligand geometry

Of 2 ligands modelled in this entry, 2 are monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

## 5.7 Other polymers

There are no such residues in this entry.

## 5.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.



## 6 Fit of model and data

### 6.1 Protein, DNA and RNA chains

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	1203/1289 (93%)	-0.14	20 (1%) 70 50	26, 65, 111, 136	0
2	G	8/8 (100%)	-0.01	0 100 100	68, 87, 110, 112	0
3	T	11/13 (84%)	0.55	1 (9%) 9 3	66, 84, 110, 124	0
All	All	1222/1310 (93%)	-0.14	21 (1%) 70 50	26, 66, 111, 136	0

All (21) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	316	ILE	4.6
1	A	313	THR	4.5
1	A	169	ILE	3.3
1	A	317	THR	3.2
1	A	483	TYR	3.0
1	A	111	LEU	2.9
1	A	166	VAL	2.9
1	A	315	ALA	2.7
1	A	700	SER	2.7
3	T	2104	G	2.7
1	A	1261	CYS	2.6
1	A	161	ALA	2.4
1	A	701	SER	2.4
1	A	312	LEU	2.4
1	A	322	LYS	2.2
1	A	279	MET	2.1
1	A	904	VAL	2.1
1	A	199	LEU	2.1
1	A	1236	ASP	2.0
1	A	320	LEU	2.0
1	A	527	VAL	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. 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	B-factors( $\text{\AA}^2$ )	Q<0.9
4	CA	A	3001	1/1	0.91	0.28	65,65,65,65	0
4	CA	A	3002	1/1	0.98	0.30	45,45,45,45	0

## 6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.