



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

May 22, 2020 – 05:09 pm BST

PDB ID : 2BY4
Title : SR Ca(2+)-ATPase in the HnE2 state complexed with the thapsigargin derivative Boc-12ADT.
Authors : Jensen, A.L.; Moller, J.V.; Soehoel, H.; Denmeade, S.R.; Isaacs, J.T.; Olsen, C.E.; Christensen, S.B.; Nissen, P.
Deposited on : 2005-07-28
Resolution : 3.30 Å(reported)

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

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<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
Mogul : 1.8.5 (274361), CSD as541be (2020)
Xtriage (Phenix) : 1.13
EDS : 2.11
buster-report : 1.1.7 (2018)
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

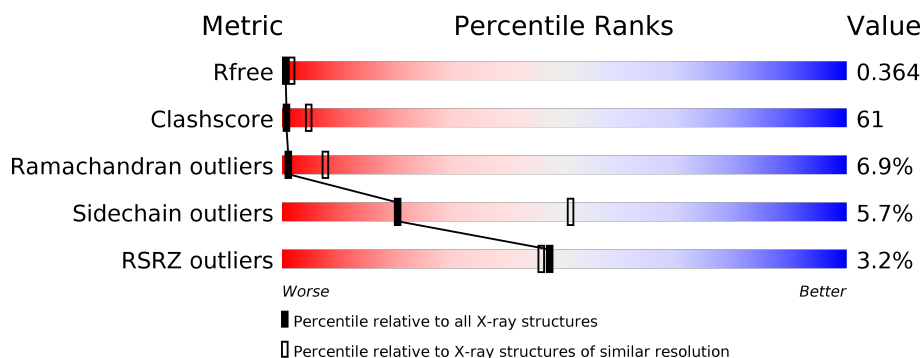
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.30 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	1149 (3.34-3.26)
Clashscore	141614	1205 (3.34-3.26)
Ramachandran outliers	138981	1183 (3.34-3.26)
Sidechain outliers	138945	1182 (3.34-3.26)
RSRZ outliers	127900	1115 (3.34-3.26)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments on the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria 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	994	<div> <div>3%</div> <div>27%</div> <div>64%</div> <div>8%</div> </div>

The following table lists non-polymeric compounds, carbohydrate monomers and non-standard residues in protein, DNA, RNA chains that are outliers for geometric or electron-density-fit criteria:

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
4	MG	A	1997	-	-	-	X
4	MG	A	1998	-	-	-	X

2 Entry composition [i](#)

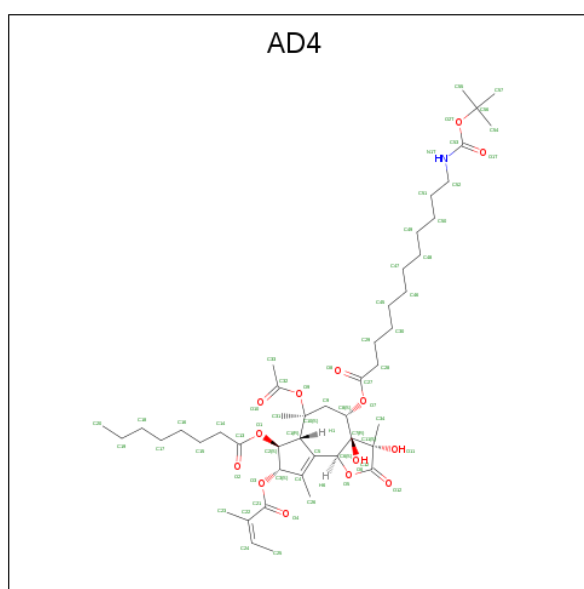
There are 5 unique types of molecules in this entry. The entry contains 7767 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

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 SARCOPLASMIC/ENDOPLASMIC RETICULUM CALCIUM ATPASE 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	994	7671	4876	1287	1451	57	0	0	0

- Molecule 2 is (3S,3AR,4S,6S,6AR,7S,8S,9BS)-6-(ACETYLOXY)-3,3A-DIHYDROXY-3,6,9-TRIMETHYL-8-{[(2Z)-2-METHYLBUT-2-ENOYL]OXY}-7-(OCTANOYLOXY)-2-OXO-2,3,3A,4,5,6,6A,7,8,9B-DECAHYDROAZULENO[4,5-B]FURAN-4-YL 12-[(TER T-BUTOXYCARBONYL)AMINO]DODECANOATE (three-letter code: AD4) (formula: C₄₇H₇₅NO₁₄).



Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
			Total	C	N	O		
2	A	1	62	47	1	14	0	0

- Molecule 3 is PHOSPHOMETHYLPHOSPHONIC ACID ADENYLATE ESTER (three-letter code: ACP) (formula: C₁₁H₁₈N₅O₁₂P₃).



Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
3	A	1	Total	C	N	O	P	0	0
			31	11	5	12	3		

- Molecule 4 is MAGNESIUM ION (three-letter code: MG) (formula: Mg).

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

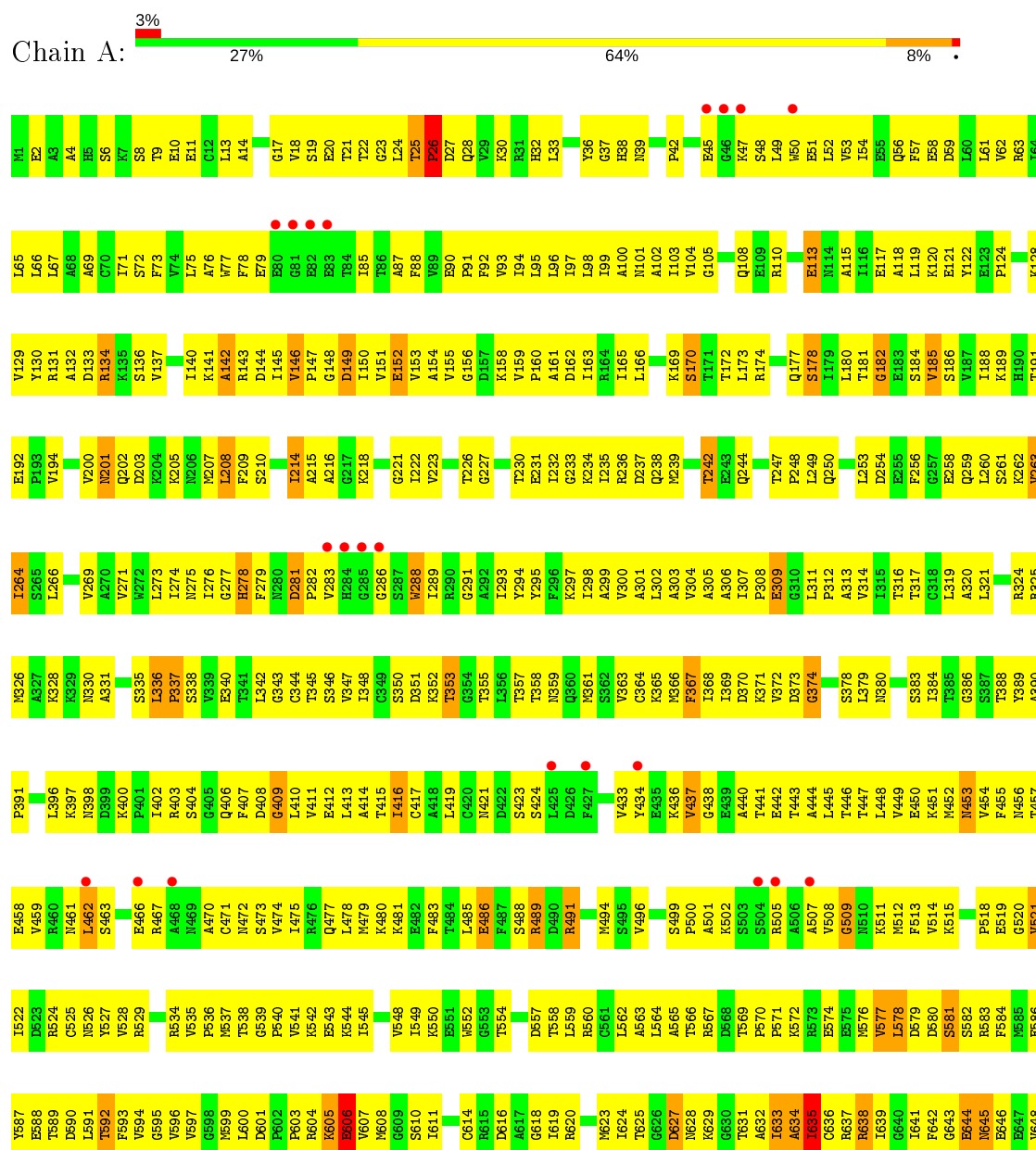
- Molecule 5 is SODIUM ION (three-letter code: NA) (formula: Na).

Mol	Chain	Residues	Atoms	ZeroOcc	AltConf
5	A	1	Total Na 1 1	0	0

3 Residue-property plots

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

- Molecule 1: SARCOPLASMIC/ENDOPLASMIC RETICULUM CALCIUM ATPASE 1



1973	S974	P976	V977	G979	L980	D981	E982	I983	L984	K985	F986	A988	R989	L992	E993	G994	G845	T848	V849	G850	A851	A852	A853	W854	F855	M857	Y858	D861	G862	P863	G864	W865	T866	F867	H868	Q869	L870	T871	H872	F873	M874	Q875	C876	T877	D878	H880	P881	H882	F883	E884	G885	L886	D887	C888	E889	L890	A893	P894	E895	P896	M897	T898	M899	A900	L901	S902	V903	L904	V905	T906	I907	E908	C910	I911	A912	L913	I914	S915	L916	S917	Q920	R924	M925	P926	P927	W928	V929	M932	L933	L934	G935	S936	I937	C938	L939	S940	L943	H944	F945	L946	I947	L948	V949	D950	P952	L953	P954	W955	I956	F957	K958	L959	K960	A961	L962	D963	L964	T965	Q966	W967	L968	W969	V970	L971	K972	A714	E715	I716	G717	I718	G721	S722	G723	T724	A725	V726	A727	K728	T729	A730	W731	E732	A669	C670	R671	R672	A673	C674	C675	F676	A677	R678	V679	E680	P681	S682	H683	K684	S685	K686	I687	V688	E689	V690	L691	Q692	S693	Y694	D695	E696	I697	T698	A699	W700	T701	G702	V705	A708	P709	A710	L711	K712	K713	A779	A780	G782	L783	P784	E785	A786	L787	I788	P789	V790	Q791	L792	L793	W794	V795	W796	L797	W798	T799	D800	G801	L802	P803	A804	T805	A806	L807	G808	F809	I810	P811	P812	I816	M817	D818	R819	R822	S823	P824	K825	L828	I829	S830	G831	L832	L833	F834	R835	R836	Y837	I840	Y843	V844	T778	C774	V772	E771	G770	W769	L764	I765	S766	S767	M768	T770	I761	R762	Y763	L764	A754	I753	A752	R751	G750	E749	E748	V747	I743	T742	S741	F740	W739	D738	A737	L735	W734	M733	E732	W731	A668	E667	Q666	E665	A664	L663	P662	F658	E657	R656	G655	T654	Y653	A652	R651	
------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	--

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 41 21 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	71.74Å 71.74Å 593.66Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	15.00 – 3.30 29.97 – 3.30	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	81.9 (15.00-3.30) 82.1 (29.97-3.30)	Depositor EDS
R_{merge}	0.16	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	1.51 (at 3.31Å)	Xtriage
Refinement program	CNS 1.1	Depositor
R, R_{free}	0.254 , 0.314 0.254 , 0.364	Depositor DCC
R_{free} test set	782 reflections (3.15%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	93.2	Xtriage
Anisotropy	0.171	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.29 , 66.2	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.40$, $\langle L^2 \rangle = 0.23$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.88	EDS
Total number of atoms	7767	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	80.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.02% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality [i](#)

5.1 Standard geometry [i](#)

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: NA, MG, ACP, AD4

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	0.48	0/7812	0.77	5/10592 (0.0%)

There are no bond length outliers.

All (5) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed($^{\circ}$)	Ideal($^{\circ}$)
1	A	336	LEU	C-N-CD	-17.84	81.36	120.60
1	A	336	LEU	C-N-CA	6.87	150.86	122.00
1	A	185	VAL	N-CA-C	-5.96	94.91	111.00
1	A	885	GLY	N-CA-C	-5.36	99.69	113.10
1	A	964	LEU	CA-CB-CG	5.13	127.10	115.30

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	7671	0	7764	956	0
2	A	62	0	75	11	0
3	A	31	0	14	8	0
4	A	2	0	0	0	0
5	A	1	0	0	0	0
All	All	7767	0	7853	958	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 61.

All (958) 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:247:THR:HG22	1:A:250:GLN:HG3	1.20	1.13
1:A:865:VAL:HG21	1:A:869:GLN:HB2	1.22	1.13
1:A:894:PRO:HA	1:A:958:LYS:HE3	1.26	1.11
1:A:453:ASN:HB3	1:A:471:CYS:SG	1.91	1.10
1:A:273:LEU:HD12	1:A:276:ILE:HD11	1.34	1.04
1:A:347:VAL:HG22	1:A:620:ARG:HB3	1.39	1.03
1:A:865:VAL:HG11	1:A:869:GLN:C	1.79	1.03
1:A:909:MET:HE3	1:A:937:ILE:HG23	1.42	1.01
1:A:963:ASP:HA	1:A:967:TRP:CD1	1.95	1.00
1:A:100:ALA:HA	1:A:103:ILE:HD12	1.40	1.00
1:A:963:ASP:HA	1:A:967:TRP:HD1	1.22	0.99
1:A:680:GLU:H	1:A:683:HIS:HD2	1.11	0.98
1:A:314:VAL:HG13	1:A:805:THR:HG22	1.43	0.98
1:A:281:ASP:H	1:A:282:PRO:HD2	1.28	0.98
1:A:155:VAL:HA	1:A:214:ILE:HD11	1.43	0.98
1:A:331:ALA:HB1	1:A:733:MET:HE1	1.46	0.97
1:A:227:GLY:O	1:A:230:THR:HG22	1.66	0.95
1:A:350:SER:HA	1:A:701:THR:CG2	1.96	0.94
1:A:964:LEU:O	1:A:965:THR:HG23	1.67	0.94
1:A:153:VAL:HG11	1:A:214:ILE:HG21	1.50	0.94
1:A:894:PRO:HA	1:A:958:LYS:CE	1.98	0.94
1:A:500:PRO:HB2	1:A:505:ARG:HB2	1.48	0.94
1:A:527:TYR:HB2	1:A:592:THR:HG23	1.51	0.93
1:A:281:ASP:H	1:A:282:PRO:CD	1.81	0.93
1:A:301:ALA:HA	1:A:789:PRO:HG3	1.49	0.93
1:A:350:SER:HA	1:A:701:THR:HG22	1.51	0.92
1:A:783:LEU:HD12	1:A:784:PRO:HD2	1.49	0.92
1:A:129:VAL:HG12	1:A:151:VAL:HG22	1.52	0.92
1:A:898:THR:HG22	1:A:958:LYS:CB	1.99	0.91
1:A:23:GLY:HA2	1:A:150:ILE:HD13	1.52	0.91
1:A:130:TYR:CE1	1:A:137:VAL:HG22	2.05	0.90
1:A:526:ASN:HD22	1:A:590:ASP:HA	1.37	0.90
1:A:964:LEU:HA	1:A:968:LEU:HG	1.53	0.89
1:A:549:ILE:HD11	1:A:596:VAL:HG11	1.54	0.89
1:A:581:SER:HA	1:A:584:PHE:CD2	2.08	0.88
1:A:311:LEU:HD23	2:A:1995:AD4:H491	1.53	0.88
1:A:337:PRO:HD2	1:A:338:SER:N	1.87	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:331:ALA:HB1	1:A:733:MET:CE	2.04	0.87
1:A:535:VAL:HG13	1:A:536:PRO:HD2	1.56	0.86
1:A:337:PRO:HD2	1:A:338:SER:H	1.40	0.86
1:A:397:LYS:O	1:A:400:LYS:HG2	1.76	0.85
1:A:39:ASN:HB2	1:A:226:THR:OG1	1.76	0.85
1:A:408:ASP:O	1:A:411:VAL:HG22	1.76	0.85
1:A:363:VAL:HG11	1:A:448:LEU:HD22	1.57	0.84
1:A:155:VAL:CA	1:A:214:ILE:HD11	2.07	0.84
1:A:480:LYS:N	1:A:499:SER:O	2.11	0.83
1:A:133:ASP:O	1:A:134:ARG:HG3	1.80	0.82
1:A:478:LEU:O	1:A:479:MET:HG2	1.79	0.82
1:A:189:LYS:HD2	1:A:205:LYS:O	1.80	0.82
1:A:342:LEU:O	1:A:345:THR:HG23	1.80	0.82
1:A:898:THR:HG22	1:A:958:LYS:HB3	1.62	0.81
1:A:57:PHE:HE1	1:A:102:ALA:HB2	1.43	0.81
1:A:386:GLY:HA3	1:A:451:LYS:NZ	1.96	0.81
1:A:128:LYS:O	1:A:151:VAL:HG13	1.81	0.80
1:A:413:LEU:HD12	1:A:564:LEU:HD12	1.64	0.80
1:A:140:ILE:HD11	1:A:145:ILE:HG12	1.64	0.80
1:A:926:PRO:O	1:A:929:VAL:HG23	1.80	0.80
1:A:898:THR:HG22	1:A:958:LYS:HB2	1.62	0.79
1:A:424:SER:OG	1:A:437:VAL:HG11	1.81	0.79
1:A:304:VAL:HB	1:A:793:LEU:HD21	1.65	0.79
1:A:963:ASP:CA	1:A:967:TRP:HD1	1.96	0.79
1:A:560:ARG:CZ	3:A:1996:ACP:H8	2.13	0.79
1:A:337:PRO:CD	1:A:338:SER:H	1.94	0.79
1:A:607:VAL:O	1:A:611:ILE:HG12	1.83	0.79
1:A:872:HIS:HB3	1:A:875:GLN:HE21	1.47	0.78
1:A:337:PRO:CD	1:A:338:SER:N	2.43	0.78
1:A:680:GLU:H	1:A:683:HIS:CD2	2.01	0.78
1:A:840:ILE:O	1:A:844:VAL:HG13	1.84	0.78
1:A:501:ALA:H	1:A:505:ARG:NH2	1.81	0.77
1:A:836:ARG:HG2	1:A:984:LEU:HD13	1.66	0.77
1:A:263:VAL:HA	1:A:266:LEU:HD12	1.66	0.77
1:A:402:ILE:HG22	1:A:403:ARG:O	1.84	0.77
1:A:638:ARG:HH11	1:A:638:ARG:HG3	1.50	0.77
1:A:369:ILE:HD11	1:A:545:ILE:HD11	1.68	0.76
1:A:155:VAL:HA	1:A:214:ILE:CD1	2.15	0.76
1:A:336:LEU:N	1:A:337:PRO:HD3	1.99	0.76
1:A:538:THR:OG1	1:A:541:VAL:HG23	1.85	0.76
1:A:909:MET:HE2	1:A:940:SER:HB2	1.69	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:565:ALA:HA	1:A:594:VAL:HG23	1.67	0.75
1:A:389:TYR:HE2	1:A:436:LYS:HB2	1.51	0.75
1:A:900:ALA:O	1:A:903:VAL:HG12	1.86	0.75
1:A:397:LYS:HB3	1:A:402:ILE:CD1	2.17	0.75
1:A:725:ALA:O	1:A:729:THR:HG23	1.87	0.75
1:A:671:ARG:HB3	1:A:694:TYR:CE2	2.21	0.74
1:A:404:SER:OG	1:A:452:MET:HB2	1.87	0.74
1:A:757:MET:HA	1:A:760:PHE:CE2	2.21	0.74
1:A:19:SER:OG	1:A:22:THR:HB	1.87	0.74
1:A:254:ASP:O	1:A:258:GLU:HG2	1.88	0.74
1:A:49:LEU:O	1:A:53:VAL:HG23	1.87	0.74
1:A:397:LYS:HB3	1:A:402:ILE:HD11	1.69	0.74
1:A:388:THR:HG22	1:A:390:ALA:H	1.52	0.74
1:A:500:PRO:CB	1:A:505:ARG:HB2	2.17	0.74
1:A:56:GLN:OE1	1:A:105:GLY:HA3	1.88	0.74
1:A:654:THR:HG22	1:A:657:GLU:CG	2.18	0.74
1:A:560:ARG:NH2	3:A:1996:ACP:H8	2.03	0.73
1:A:69:ALA:HB2	1:A:94:ILE:CG2	2.18	0.73
1:A:950:VAL:O	1:A:954:PRO:HD2	1.88	0.73
1:A:367:PHE:HZ	1:A:545:ILE:HG23	1.54	0.73
1:A:317:THR:O	1:A:321:LEU:HG	1.89	0.73
1:A:759:GLN:HE22	1:A:762:ARG:HH11	1.33	0.73
1:A:298:ILE:CD1	1:A:779:ALA:HB2	2.19	0.73
1:A:367:PHE:CD2	1:A:596:VAL:HG22	2.23	0.73
1:A:446:THR:O	1:A:449:VAL:HG22	1.87	0.73
1:A:897:MET:SD	1:A:958:LYS:HE2	2.27	0.73
1:A:470:ALA:O	1:A:474:VAL:HG13	1.89	0.73
1:A:25:THR:HA	1:A:132:ALA:HB3	1.71	0.72
1:A:281:ASP:N	1:A:282:PRO:HD2	2.04	0.72
1:A:471:CYS:O	1:A:474:VAL:HG22	1.88	0.72
1:A:913:LEU:C	1:A:915:SER:H	1.92	0.72
1:A:130:TYR:HE1	1:A:137:VAL:HG22	1.55	0.72
1:A:909:MET:HE3	1:A:937:ILE:CG2	2.19	0.71
1:A:518:PRO:O	1:A:522:ILE:HB	1.90	0.71
1:A:298:ILE:HD11	1:A:779:ALA:HB2	1.73	0.71
1:A:170:SER:OG	1:A:218:LYS:N	2.23	0.71
1:A:411:VAL:HA	1:A:454:VAL:HG11	1.72	0.71
1:A:336:LEU:HD12	1:A:336:LEU:O	1.91	0.71
1:A:763:TYR:CZ	1:A:912:ALA:HB2	2.25	0.71
1:A:783:LEU:HD12	1:A:784:PRO:CD	2.20	0.71
1:A:24:LEU:HD13	1:A:149:ASP:HA	1.73	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:368:ILE:HD13	1:A:410:LEU:HD23	1.71	0.71
1:A:508:VAL:O	1:A:509:GLY:O	2.08	0.71
1:A:249:LEU:O	1:A:253:LEU:HD23	1.90	0.70
1:A:386:GLY:HA3	1:A:451:LYS:HZ3	1.52	0.70
1:A:69:ALA:HB2	1:A:94:ILE:HG21	1.71	0.70
1:A:383:SER:C	1:A:384:ILE:HD12	2.12	0.70
1:A:680:GLU:CB	1:A:681:PRO:HD2	2.22	0.70
1:A:608:MET:SD	1:A:639:ILE:HA	2.32	0.70
1:A:897:MET:HB2	1:A:958:LYS:HE2	1.74	0.69
1:A:99:ILE:O	1:A:103:ILE:HG13	1.92	0.69
1:A:759:GLN:HE22	1:A:762:ARG:NH1	1.90	0.69
1:A:764:LEU:HD21	1:A:804:ALA:HB2	1.74	0.69
1:A:947:ILE:HG22	1:A:947:ILE:O	1.92	0.69
1:A:99:ILE:HG22	1:A:103:ILE:HD11	1.73	0.69
1:A:39:ASN:O	1:A:143:ARG:HA	1.92	0.69
1:A:32:HIS:HB3	1:A:146:VAL:HG11	1.73	0.69
1:A:155:VAL:N	1:A:214:ILE:HD11	2.07	0.69
1:A:389:TYR:CE2	1:A:436:LYS:HB2	2.27	0.69
1:A:743:ILE:O	1:A:747:VAL:HG23	1.92	0.69
1:A:966:GLN:O	1:A:970:VAL:HG23	1.93	0.69
1:A:855:TRP:CZ2	1:A:895:GLU:HG3	2.27	0.68
1:A:473:SER:O	1:A:477:GLN:HG3	1.93	0.68
1:A:833:LEU:HD11	1:A:837:TYR:CE2	2.28	0.68
1:A:185:VAL:HG12	1:A:186:SER:N	2.09	0.68
1:A:312:PRO:HD3	2:A:1995:AD4:H512	1.75	0.68
1:A:24:LEU:HA	1:A:28:GLN:OE1	1.93	0.68
1:A:909:MET:CE	1:A:940:SER:HB2	2.23	0.68
1:A:925:MET:HE3	1:A:929:VAL:HG11	1.75	0.68
1:A:940:SER:O	1:A:943:LEU:HB2	1.93	0.68
1:A:925:MET:CE	1:A:929:VAL:HG11	2.24	0.68
1:A:979:GLY:O	1:A:983:ILE:HG13	1.93	0.68
1:A:150:ILE:HD12	1:A:150:ILE:N	2.08	0.68
1:A:174:ARG:HD2	1:A:186:SER:HB2	1.74	0.68
1:A:474:VAL:O	1:A:478:LEU:HG	1.93	0.68
1:A:791:GLN:HE22	1:A:897:MET:HE3	1.58	0.68
1:A:901:LEU:O	1:A:905:VAL:HG23	1.93	0.68
1:A:563:ALA:C	1:A:564:LEU:HD23	2.14	0.67
1:A:147:PRO:HA	1:A:223:VAL:HG12	1.76	0.67
1:A:522:ILE:CG2	1:A:542:LYS:HE3	2.23	0.67
1:A:680:GLU:HB3	1:A:681:PRO:HD2	1.76	0.67
1:A:188:ILE:HG22	1:A:189:LYS:N	2.10	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:309:GLU:O	1:A:312:PRO:HD2	1.95	0.67
1:A:355:THR:HG22	1:A:738:ASP:O	1.94	0.67
1:A:286:GLY:C	1:A:288:TRP:H	1.96	0.67
1:A:521:VAL:HG21	1:A:563:ALA:HB3	1.75	0.67
1:A:214:ILE:HG13	1:A:214:ILE:O	1.95	0.67
1:A:898:THR:HG21	1:A:959:LEU:O	1.95	0.67
1:A:513:PHE:HD1	1:A:566:THR:HG22	1.61	0.66
1:A:526:ASN:ND2	1:A:590:ASP:HA	2.10	0.66
1:A:788:ILE:HG23	1:A:789:PRO:HD2	1.77	0.66
1:A:901:LEU:O	1:A:901:LEU:HD23	1.95	0.66
1:A:801:GLY:O	1:A:805:THR:HG23	1.94	0.66
1:A:894:PRO:CA	1:A:958:LYS:HE3	2.17	0.66
1:A:927:PRO:HB2	1:A:934:LEU:HD21	1.78	0.66
1:A:475:ILE:HA	1:A:478:LEU:HD12	1.77	0.66
1:A:896:PRO:O	1:A:899:MET:HB2	1.96	0.66
1:A:911:ASN:HA	1:A:914:ASN:HD22	1.60	0.66
1:A:638:ARG:NH1	1:A:638:ARG:HG3	2.10	0.66
1:A:737:ASP:OD2	1:A:739:ASN:HB2	1.96	0.66
1:A:273:LEU:HD12	1:A:276:ILE:CD1	2.20	0.65
1:A:879:ASP:CB	1:A:882:HIS:HB2	2.25	0.65
1:A:247:THR:HG23	1:A:249:LEU:H	1.61	0.65
1:A:879:ASP:HB3	1:A:882:HIS:HB2	1.78	0.65
1:A:914:ASN:HB3	1:A:981:ASP:OD2	1.95	0.65
1:A:909:MET:HE1	1:A:937:ILE:HA	1.79	0.65
1:A:32:HIS:CB	1:A:146:VAL:HG11	2.27	0.65
1:A:749:GLU:O	1:A:753:ILE:HG12	1.97	0.65
1:A:781:LEU:O	1:A:871:THR:HG23	1.97	0.65
1:A:49:LEU:HD23	1:A:49:LEU:N	2.12	0.65
1:A:900:ALA:HA	1:A:903:VAL:HG12	1.79	0.65
1:A:314:VAL:CG1	1:A:805:THR:HG22	2.23	0.64
1:A:865:VAL:HG11	1:A:869:GLN:O	1.96	0.64
1:A:188:ILE:HD12	1:A:188:ILE:N	2.13	0.64
1:A:788:ILE:HB	1:A:791:GLN:NE2	2.13	0.64
1:A:791:GLN:NE2	1:A:897:MET:HE3	2.12	0.64
1:A:8:SER:OG	1:A:11:GLU:HG3	1.97	0.64
1:A:247:THR:HG22	1:A:250:GLN:CG	2.14	0.64
1:A:515:LYS:O	1:A:515:LYS:HG3	1.97	0.64
1:A:943:LEU:O	1:A:946:LEU:N	2.31	0.63
1:A:986:PHE:CE1	1:A:989:ARG:HD2	2.32	0.63
1:A:247:THR:O	1:A:249:LEU:N	2.32	0.63
1:A:335:SER:O	1:A:338:SER:HB3	1.98	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:643:GLY:O	1:A:644:GLU:C	2.35	0.63
1:A:90:GLU:HB3	1:A:91:PRO:CD	2.29	0.63
1:A:478:LEU:HA	1:A:505:ARG:NH1	2.13	0.63
1:A:910:CYS:HA	1:A:913:LEU:HD12	1.80	0.63
1:A:288:TRP:O	1:A:291:GLY:N	2.31	0.63
1:A:203:ASP:OD1	1:A:489:ARG:HD3	1.98	0.63
1:A:56:GLN:C	1:A:57:PHE:HD1	2.02	0.63
1:A:963:ASP:CA	1:A:967:TRP:CD1	2.77	0.63
1:A:247:THR:C	1:A:249:LEU:H	2.02	0.63
1:A:415:THR:HA	1:A:475:ILE:HG21	1.79	0.63
1:A:416:ILE:HD11	1:A:566:THR:HG23	1.79	0.63
1:A:946:LEU:O	1:A:953:LEU:HD12	1.99	0.63
1:A:325:ARG:NH1	1:A:753:ILE:HD11	2.14	0.62
1:A:867:TYR:O	1:A:868:HIS:HB2	1.99	0.62
1:A:250:GLN:O	1:A:253:LEU:HB2	1.99	0.62
1:A:708:ALA:N	1:A:709:PRO:HD2	2.14	0.62
1:A:629:LYS:HE3	1:A:652:ALA:O	1.99	0.62
1:A:488:SER:OG	1:A:491:ARG:HG2	2.00	0.62
1:A:897:MET:CE	1:A:958:LYS:HE2	2.29	0.62
1:A:249:LEU:HB2	1:A:340:GLU:OE1	1.99	0.62
1:A:370:ASP:HB2	1:A:380:ASN:OD1	1.99	0.62
1:A:853:ALA:O	1:A:856:PHE:HB2	1.99	0.62
1:A:879:ASP:O	1:A:882:HIS:N	2.30	0.62
1:A:909:MET:CE	1:A:937:ILE:HA	2.30	0.62
1:A:72:SER:OG	1:A:91:PRO:HD3	1.99	0.62
1:A:178:SER:HA	1:A:184:SER:HB3	1.82	0.62
1:A:643:GLY:H	1:A:646:GLU:HG3	1.64	0.62
1:A:717:GLY:O	1:A:731:SER:HB2	2.00	0.62
1:A:231:GLU:HA	1:A:234:LYS:HD3	1.82	0.62
1:A:247:THR:CG2	1:A:250:GLN:HG3	2.14	0.62
1:A:515:LYS:HE3	3:A:1996:ACP:N1	2.14	0.62
1:A:130:TYR:CZ	1:A:137:VAL:HG22	2.34	0.61
1:A:457:THR:O	1:A:459:VAL:HG13	1.99	0.61
1:A:501:ALA:N	1:A:505:ARG:NH2	2.48	0.61
1:A:536:PRO:O	1:A:538:THR:HG23	2.00	0.61
1:A:751:ARG:HD2	1:A:817:MET:HE2	1.83	0.61
1:A:485:LEU:HD22	1:A:584:PHE:CE1	2.36	0.61
1:A:424:SER:HA	1:A:446:THR:HG21	1.82	0.61
1:A:174:ARG:NH1	1:A:186:SER:OG	2.34	0.61
1:A:658:PHE:CZ	1:A:666:GLN:HG3	2.36	0.61
1:A:848:THR:HA	1:A:903:VAL:HG11	1.83	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:185:VAL:HG12	1:A:186:SER:H	1.65	0.60
1:A:795:VAL:HA	1:A:799:THR:OG1	2.00	0.60
1:A:178:SER:HB3	1:A:184:SER:CB	2.31	0.60
1:A:654:THR:HG22	1:A:657:GLU:HG3	1.83	0.60
1:A:984:LEU:HA	1:A:987:ILE:HG12	1.81	0.60
1:A:18:VAL:CG2	1:A:24:LEU:HD12	2.31	0.60
1:A:203:ASP:HA	1:A:205:LYS:HE3	1.84	0.60
1:A:350:SER:HA	1:A:701:THR:HG21	1.82	0.60
1:A:494:MET:O	1:A:514:VAL:HG23	2.01	0.60
1:A:772:VAL:HG21	2:A:1995:AD4:H231	1.84	0.60
1:A:855:TRP:CE2	1:A:895:GLU:HB2	2.36	0.60
1:A:32:HIS:HB3	1:A:146:VAL:CG1	2.30	0.60
1:A:986:PHE:C	1:A:988:ALA:H	2.04	0.60
1:A:122:TYR:HE2	1:A:726:VAL:HG21	1.67	0.60
1:A:13:LEU:HD11	1:A:166:LEU:HD22	1.84	0.60
1:A:830:SER:O	1:A:833:LEU:HB3	2.01	0.59
1:A:263:VAL:HG12	1:A:264:ILE:N	2.16	0.59
1:A:311:LEU:HB3	1:A:312:PRO:HD3	1.84	0.59
1:A:283:VAL:O	1:A:283:VAL:HG12	2.02	0.59
1:A:57:PHE:CE1	1:A:102:ALA:HB2	2.33	0.59
1:A:403:ARG:HB3	1:A:406:GLN:HG3	1.84	0.59
1:A:319:LEU:HG	1:A:757:MET:HE1	1.85	0.59
1:A:748:GLU:HG3	1:A:817:MET:CG	2.33	0.59
1:A:147:PRO:HA	1:A:223:VAL:CG1	2.33	0.59
1:A:178:SER:CA	1:A:184:SER:HB3	2.33	0.59
1:A:483:PHE:HE1	1:A:485:LEU:HD21	1.68	0.59
1:A:560:ARG:HH21	3:A:1996:ACP:H3'	1.67	0.59
1:A:483:PHE:CE1	1:A:578:LEU:HD22	2.38	0.59
1:A:623:MET:SD	1:A:625:THR:HG21	2.43	0.59
1:A:784:PRO:CD	1:A:870:LEU:HD11	2.33	0.59
1:A:113:GLU:HB2	1:A:117:GLU:OE1	2.03	0.58
1:A:667:ARG:HA	1:A:690:TYR:CD1	2.39	0.58
1:A:757:MET:O	1:A:761:ILE:HG13	2.03	0.58
1:A:475:ILE:HA	1:A:478:LEU:CD1	2.34	0.58
1:A:527:TYR:HB3	1:A:534:ARG:HG2	1.85	0.58
1:A:525:CYS:HA	1:A:591:LEU:O	2.03	0.58
1:A:648:VAL:O	1:A:648:VAL:HG12	2.02	0.58
1:A:153:VAL:CG1	1:A:214:ILE:HG21	2.30	0.58
1:A:436:LYS:HG3	1:A:443:THR:HG21	1.86	0.58
1:A:363:VAL:HG21	1:A:448:LEU:HB2	1.86	0.58
1:A:6:SER:HA	1:A:194:VAL:O	2.04	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:522:ILE:HG22	1:A:542:LYS:HE3	1.85	0.58
1:A:939:LEU:O	1:A:943:LEU:HD12	2.03	0.58
1:A:433:VAL:HG12	1:A:434:TYR:N	2.18	0.58
1:A:232:ILE:O	1:A:235:ILE:N	2.35	0.58
1:A:368:ILE:HG22	1:A:594:VAL:O	2.04	0.58
1:A:155:VAL:HG23	1:A:216:ALA:HA	1.86	0.57
1:A:478:LEU:O	1:A:479:MET:CG	2.51	0.57
1:A:524:ARG:HD2	1:A:588:GLU:O	2.04	0.57
1:A:791:GLN:HE22	1:A:897:MET:CE	2.16	0.57
1:A:188:ILE:HD12	1:A:188:ILE:H	1.68	0.57
1:A:348:ILE:HD13	1:A:743:ILE:CG2	2.34	0.57
1:A:72:SER:HB3	1:A:91:PRO:HB3	1.87	0.57
1:A:586:GLU:O	1:A:589:THR:HG23	2.04	0.57
1:A:642:PHE:CZ	1:A:648:VAL:HG13	2.39	0.57
1:A:822:ARG:HG2	1:A:823:SER:O	2.05	0.57
1:A:271:VAL:O	1:A:274:ILE:HG13	2.04	0.57
1:A:920:GLN:HB3	1:A:924:ARG:HD3	1.86	0.57
1:A:943:LEU:O	1:A:946:LEU:HB3	2.03	0.57
1:A:314:VAL:HG13	1:A:805:THR:CG2	2.28	0.57
1:A:367:PHE:CE2	1:A:596:VAL:HG22	2.40	0.57
1:A:756:ASN:O	1:A:757:MET:C	2.42	0.57
1:A:728:LYS:C	1:A:730:ALA:H	2.07	0.57
1:A:119:LEU:C	1:A:121:GLU:H	2.08	0.57
1:A:59:ASP:OD2	1:A:61:LEU:HB2	2.04	0.57
1:A:230:THR:HG23	1:A:233:GLY:H	1.69	0.57
1:A:242:THR:HG23	1:A:712:LYS:HD3	1.87	0.57
1:A:501:ALA:N	1:A:505:ARG:HH21	2.03	0.57
1:A:521:VAL:CG2	1:A:563:ALA:HB3	2.35	0.57
1:A:359:ASN:HA	1:A:601:ASP:OD1	2.05	0.57
1:A:558:THR:HG22	1:A:634:ALA:HB1	1.87	0.57
1:A:933:LEU:O	1:A:937:ILE:HG13	2.05	0.57
1:A:897:MET:HB2	1:A:958:LYS:HG3	1.87	0.56
1:A:192:GLU:OE1	1:A:580:ASP:HB3	2.05	0.56
1:A:512:MET:HB3	1:A:567:ARG:HB3	1.87	0.56
1:A:666:GLN:HG2	1:A:690:TYR:OH	2.05	0.56
1:A:915:SER:C	1:A:917:SER:N	2.59	0.56
1:A:61:LEU:HD12	2:A:1995:AD4:H522	1.87	0.56
1:A:809:PHE:HD2	1:A:932:TRP:CD1	2.24	0.56
1:A:308:PRO:HG2	2:A:1995:AD4:H511	1.87	0.56
1:A:388:THR:HG22	1:A:389:TYR:N	2.20	0.56
1:A:783:LEU:CD2	1:A:849:VAL:HG13	2.35	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:462:LEU:HB3	1:A:466:GLU:OE1	2.05	0.56
1:A:680:GLU:N	1:A:683:HIS:HD2	1.93	0.56
1:A:964:LEU:O	1:A:965:THR:CG2	2.50	0.56
1:A:357:THR:HA	1:A:603:PRO:HA	1.87	0.56
1:A:453:ASN:CB	1:A:471:CYS:SG	2.81	0.56
1:A:564:LEU:HD23	1:A:564:LEU:N	2.21	0.56
1:A:38:HIS:CD2	1:A:143:ARG:HH21	2.23	0.56
1:A:581:SER:HA	1:A:584:PHE:CE2	2.41	0.56
1:A:624:ILE:HG23	1:A:679:VAL:HG21	1.88	0.56
1:A:760:PHE:C	1:A:760:PHE:CD1	2.79	0.56
1:A:894:PRO:HG2	1:A:895:GLU:OE2	2.05	0.56
1:A:534:ARG:O	1:A:535:VAL:HG23	2.06	0.56
1:A:691:LEU:O	1:A:696:GLU:HB2	2.06	0.56
1:A:791:GLN:NE2	1:A:897:MET:CE	2.69	0.56
1:A:311:LEU:HD13	1:A:764:LEU:HD12	1.86	0.55
1:A:540:PRO:HG2	1:A:541:VAL:H	1.72	0.55
1:A:727:ALA:O	1:A:730:ALA:HB3	2.06	0.55
1:A:483:PHE:CZ	1:A:578:LEU:HD22	2.41	0.55
1:A:856:PHE:O	1:A:864:GLY:HA3	2.06	0.55
1:A:440:ALA:HA	1:A:443:THR:HG22	1.89	0.55
1:A:800:ASP:C	1:A:803:PRO:HD2	2.27	0.55
1:A:95:LEU:O	1:A:99:ILE:HG13	2.06	0.55
1:A:748:GLU:HG3	1:A:817:MET:HE3	1.88	0.55
1:A:911:ASN:HA	1:A:914:ASN:ND2	2.21	0.55
1:A:458:GLU:H	1:A:458:GLU:CD	2.10	0.55
1:A:47:LYS:HB3	1:A:51:GLU:HB2	1.87	0.55
1:A:413:LEU:CD1	1:A:564:LEU:HD12	2.36	0.55
1:A:905:VAL:HG21	1:A:944:HIS:CD2	2.42	0.55
1:A:763:TYR:CE1	1:A:912:ALA:HB2	2.42	0.55
1:A:242:THR:CG2	1:A:712:LYS:HD3	2.36	0.55
1:A:483:PHE:CE1	1:A:485:LEU:HD21	2.42	0.55
1:A:856:PHE:HB3	1:A:870:LEU:HD22	1.89	0.55
1:A:160:PRO:O	1:A:160:PRO:HG2	2.07	0.55
1:A:2:GLU:C	1:A:4:ALA:H	2.09	0.55
1:A:950:VAL:O	1:A:954:PRO:CD	2.55	0.55
1:A:75:LEU:C	1:A:77:TRP:H	2.11	0.55
1:A:305:ALA:O	1:A:772:VAL:HG23	2.07	0.55
1:A:718:ILE:HD12	1:A:743:ILE:HD13	1.89	0.54
1:A:244:GLN:H	1:A:244:GLN:CD	2.10	0.54
1:A:535:VAL:HG13	1:A:536:PRO:CD	2.33	0.54
1:A:636:CYS:HB3	1:A:641:ILE:HB	1.88	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:644:GLU:O	1:A:645:ASN:HB2	2.07	0.54
1:A:165:ILE:HD11	1:A:208:LEU:CD2	2.37	0.54
1:A:260:LEU:HD11	1:A:306:ALA:HB1	1.89	0.54
1:A:373:ASP:O	1:A:374:GLY:C	2.45	0.54
1:A:266:LEU:O	1:A:269:VAL:HB	2.07	0.54
1:A:643:GLY:O	1:A:646:GLU:HG2	2.06	0.54
1:A:386:GLY:HA3	1:A:451:LYS:HZ1	1.72	0.54
1:A:355:THR:O	1:A:604:ARG:NH2	2.40	0.54
1:A:654:THR:HG22	1:A:657:GLU:OE1	2.08	0.54
1:A:122:TYR:O	1:A:158:LYS:HD3	2.08	0.54
1:A:180:LEU:C	1:A:180:LEU:HD12	2.28	0.54
1:A:163:ILE:HB	1:A:208:LEU:HB2	1.90	0.54
1:A:273:LEU:O	1:A:276:ILE:HG13	2.07	0.54
1:A:783:LEU:HD23	1:A:849:VAL:HG13	1.90	0.54
1:A:854:TRP:C	1:A:856:PHE:N	2.61	0.54
1:A:101:ASN:O	1:A:104:VAL:N	2.41	0.54
1:A:577:VAL:CG2	1:A:583:ARG:HD3	2.38	0.54
1:A:584:PHE:O	1:A:588:GLU:HG3	2.07	0.54
1:A:788:ILE:HG22	1:A:790:VAL:H	1.73	0.54
1:A:174:ARG:HH11	1:A:186:SER:CB	2.21	0.53
1:A:865:VAL:O	1:A:865:VAL:HG13	2.07	0.53
1:A:644:GLU:O	1:A:645:ASN:CB	2.55	0.53
1:A:788:ILE:HG22	1:A:790:VAL:N	2.23	0.53
1:A:804:ALA:O	1:A:807:LEU:HB2	2.08	0.53
1:A:915:SER:O	1:A:917:SER:N	2.41	0.53
1:A:33:LEU:HD12	1:A:37:GLY:O	2.08	0.53
1:A:758:LYS:HG2	1:A:759:GLN:N	2.23	0.53
1:A:162:ASP:OD1	1:A:209:PHE:HA	2.08	0.53
1:A:166:LEU:HD11	1:A:222:ILE:HB	1.89	0.53
1:A:529:ARG:HG3	1:A:529:ARG:HH11	1.73	0.53
1:A:534:ARG:HG3	1:A:592:THR:CG2	2.38	0.53
1:A:748:GLU:HG3	1:A:817:MET:SD	2.48	0.53
1:A:968:LEU:O	1:A:972:LYS:HG2	2.07	0.53
1:A:774:CYS:SG	1:A:787:LEU:HD12	2.47	0.53
1:A:348:ILE:HA	1:A:699:ALA:HB3	1.90	0.53
1:A:11:GLU:O	1:A:14:ALA:HB3	2.09	0.53
1:A:442:GLU:CG	3:A:1996:ACP:HN62	2.22	0.53
1:A:791:GLN:HB3	1:A:901:LEU:HD12	1.91	0.53
1:A:572:LYS:HB3	1:A:574:GLU:OE2	2.07	0.53
1:A:67:LEU:O	1:A:71:ILE:HG13	2.09	0.53
1:A:200:VAL:O	1:A:201:ASN:C	2.48	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:444:ALA:O	1:A:447:THR:HB	2.09	0.53
1:A:848:THR:HG22	1:A:903:VAL:HG13	1.89	0.53
1:A:901:LEU:C	1:A:901:LEU:HD23	2.29	0.53
1:A:150:ILE:HD12	1:A:150:ILE:H	1.74	0.53
1:A:325:ARG:HH12	1:A:753:ILE:CD1	2.21	0.53
1:A:478:LEU:O	1:A:505:ARG:CD	2.56	0.53
1:A:894:PRO:O	1:A:898:THR:HG23	2.09	0.53
1:A:90:GLU:HB3	1:A:91:PRO:HD3	1.91	0.53
1:A:528:VAL:HG23	1:A:528:VAL:O	2.07	0.52
1:A:889:GLU:O	1:A:889:GLU:HG2	2.09	0.52
1:A:974:SER:C	1:A:976:PRO:HD2	2.29	0.52
1:A:320:ALA:O	1:A:324:ARG:HG3	2.09	0.52
1:A:71:ILE:O	1:A:75:LEU:HG	2.09	0.52
1:A:85:ILE:C	1:A:87:ALA:H	2.11	0.52
1:A:391:PRO:HD2	1:A:434:TYR:CD2	2.44	0.52
1:A:24:LEU:HD13	1:A:149:ASP:CA	2.40	0.52
1:A:319:LEU:HG	1:A:757:MET:CE	2.39	0.52
1:A:449:VAL:HG23	1:A:450:GLU:N	2.24	0.52
1:A:352:LYS:NZ	1:A:627:ASP:OD2	2.36	0.52
1:A:947:ILE:CG2	1:A:947:ILE:O	2.58	0.52
1:A:75:LEU:HD13	1:A:297:LYS:HB3	1.91	0.52
1:A:421:ASN:ND2	1:A:446:THR:HG23	2.25	0.52
1:A:754:TYR:HA	1:A:757:MET:HB3	1.90	0.52
1:A:788:ILE:H	1:A:791:GLN:CD	2.12	0.52
1:A:442:GLU:HG2	1:A:515:LYS:NZ	2.24	0.52
1:A:141:LYS:O	1:A:144:ASP:N	2.41	0.52
1:A:913:LEU:C	1:A:915:SER:N	2.63	0.52
1:A:950:VAL:HG12	1:A:952:PRO:HD2	1.90	0.52
1:A:119:LEU:O	1:A:121:GLU:N	2.43	0.52
1:A:286:GLY:C	1:A:288:TRP:N	2.62	0.52
1:A:560:ARG:NH2	3:A:1996:ACP:H3'	2.24	0.52
1:A:662:PRO:O	1:A:664:ALA:N	2.43	0.52
1:A:794:TRP:HZ2	1:A:943:LEU:HD22	1.73	0.52
1:A:9:THR:HG22	1:A:10:GLU:OE1	2.09	0.52
1:A:400:LYS:O	1:A:402:ILE:HG13	2.10	0.52
1:A:676:PHE:CE2	1:A:687:ILE:HD13	2.45	0.51
1:A:539:GLY:N	1:A:540:PRO:HD2	2.25	0.51
1:A:876:CYS:SG	1:A:884:GLU:HG3	2.51	0.51
1:A:643:GLY:H	1:A:646:GLU:CG	2.24	0.51
1:A:65:LEU:HD12	1:A:98:LEU:HD21	1.93	0.51
1:A:710:ALA:O	1:A:712:LYS:N	2.44	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:836:ARG:NH2	1:A:981:ASP:OD2	2.43	0.51
1:A:20:GLU:HG3	1:A:166:LEU:HD13	1.92	0.51
1:A:155:VAL:HG23	1:A:215:ALA:O	2.09	0.51
1:A:247:THR:C	1:A:249:LEU:N	2.63	0.51
1:A:481:LYS:HE2	1:A:496:VAL:HG11	1.92	0.51
1:A:737:ASP:OD2	1:A:739:ASN:CB	2.58	0.51
1:A:298:ILE:HD13	1:A:779:ALA:HB2	1.92	0.51
1:A:974:SER:O	1:A:976:PRO:N	2.44	0.51
1:A:528:VAL:HG12	1:A:593:PHE:HB3	1.93	0.51
1:A:101:ASN:O	1:A:102:ALA:C	2.49	0.51
1:A:259:GLN:C	1:A:261:SER:N	2.64	0.51
1:A:593:PHE:CE2	1:A:595:GLY:HA2	2.46	0.51
1:A:73:PHE:N	1:A:91:PRO:HB3	2.26	0.51
1:A:832:TRP:CZ2	1:A:987:ILE:HG13	2.46	0.51
1:A:986:PHE:C	1:A:988:ALA:N	2.63	0.51
1:A:689:GLU:HG2	1:A:713:LYS:NZ	2.26	0.51
1:A:857:MET:HE3	1:A:866:THR:HA	1.91	0.51
1:A:304:VAL:HA	1:A:309:GLU:OE2	2.11	0.51
1:A:680:GLU:HG2	1:A:681:PRO:HD2	1.93	0.50
1:A:947:ILE:HG12	1:A:953:LEU:HD13	1.92	0.50
1:A:119:LEU:C	1:A:121:GLU:N	2.65	0.50
1:A:235:ILE:O	1:A:236:ARG:C	2.48	0.50
1:A:698:THR:HG23	1:A:715:GLU:OE1	2.11	0.50
1:A:364:CYS:O	1:A:383:SER:HA	2.12	0.50
1:A:766:SER:O	1:A:769:VAL:HB	2.10	0.50
1:A:795:VAL:O	1:A:800:ASP:HB2	2.11	0.50
1:A:894:PRO:HB2	1:A:959:LEU:H	1.75	0.50
1:A:236:ARG:HG2	1:A:236:ARG:NH1	2.25	0.50
1:A:277:GLY:C	1:A:279:PHE:H	2.14	0.50
1:A:419:LEU:HD13	1:A:513:PHE:CE2	2.47	0.50
1:A:623:MET:SD	1:A:625:THR:CG2	2.99	0.50
1:A:689:GLU:CG	1:A:713:LYS:NZ	2.73	0.50
1:A:870:LEU:O	1:A:873:PHE:HB3	2.10	0.50
1:A:897:MET:HB2	1:A:958:LYS:CE	2.41	0.50
1:A:263:VAL:HG11	2:A:1995:AD4:O4	2.12	0.50
1:A:485:LEU:N	1:A:485:LEU:HD23	2.25	0.50
2:A:1995:AD4:H541	2:A:1995:AD4:O1T	2.11	0.50
1:A:914:ASN:HA	1:A:985:LYS:NZ	2.26	0.50
1:A:178:SER:HB3	1:A:184:SER:HB3	1.92	0.50
1:A:185:VAL:CG1	1:A:186:SER:N	2.74	0.50
1:A:304:VAL:HG11	1:A:789:PRO:HB3	1.94	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:642:PHE:CE2	1:A:648:VAL:HG11	2.47	0.50
1:A:971:LEU:HB3	1:A:975:LEU:HD12	1.94	0.50
1:A:154:ALA:C	1:A:214:ILE:HD11	2.32	0.50
1:A:33:LEU:O	1:A:33:LEU:HG	2.11	0.50
1:A:415:THR:HA	1:A:475:ILE:HD13	1.94	0.50
1:A:895:GLU:N	1:A:896:PRO:HD2	2.27	0.50
1:A:115:ALA:O	1:A:118:ALA:HB3	2.12	0.50
1:A:303:ALA:C	1:A:305:ALA:H	2.14	0.50
1:A:689:GLU:HG2	1:A:713:LYS:HZ1	1.77	0.50
1:A:721:GLY:N	1:A:735:LEU:O	2.45	0.50
1:A:962:LEU:O	1:A:965:THR:OG1	2.30	0.50
1:A:237:ASP:O	1:A:238:GLN:C	2.48	0.49
1:A:39:ASN:HB2	1:A:226:THR:HG1	1.74	0.49
1:A:702:GLY:H	1:A:711:LEU:HD21	1.77	0.49
1:A:239:MET:CE	1:A:708:ALA:HB1	2.42	0.49
1:A:23:GLY:HA2	1:A:150:ILE:CD1	2.34	0.49
1:A:342:LEU:HD12	1:A:342:LEU:O	2.12	0.49
1:A:459:VAL:HA	1:A:462:LEU:CD1	2.41	0.49
1:A:513:PHE:CD1	1:A:566:THR:HG22	2.46	0.49
1:A:348:ILE:HD13	1:A:743:ILE:HG21	1.93	0.49
1:A:836:ARG:O	1:A:840:ILE:HG12	2.12	0.49
1:A:854:TRP:C	1:A:856:PHE:H	2.16	0.49
1:A:920:GLN:OE1	1:A:924:ARG:CZ	2.59	0.49
1:A:249:LEU:HB2	1:A:340:GLU:CD	2.32	0.49
1:A:407:PHE:O	1:A:411:VAL:HG13	2.13	0.49
1:A:623:MET:HE3	1:A:635:ILE:HG22	1.94	0.49
1:A:122:TYR:HE2	1:A:726:VAL:CG2	2.24	0.49
1:A:848:THR:HA	1:A:903:VAL:CG1	2.42	0.49
1:A:977:VAL:O	1:A:980:LEU:HB3	2.12	0.49
1:A:274:ILE:HD12	1:A:275:ASN:OD1	2.11	0.49
1:A:71:ILE:HB	1:A:300:VAL:CG1	2.42	0.49
1:A:829:ILE:HG23	1:A:833:LEU:HG	1.94	0.49
1:A:92:PHE:CZ	1:A:96:LEU:HD11	2.48	0.49
1:A:185:VAL:CG1	1:A:186:SER:H	2.25	0.49
1:A:453:ASN:HB3	1:A:471:CYS:HG	1.75	0.49
1:A:472:ASN:O	1:A:475:ILE:N	2.45	0.49
1:A:346:SER:N	1:A:697:ILE:O	2.45	0.49
1:A:969:MET:O	1:A:972:LYS:HG3	2.13	0.49
1:A:222:ILE:HG23	1:A:222:ILE:O	2.12	0.49
1:A:449:VAL:CG2	1:A:450:GLU:N	2.76	0.49
1:A:567:ARG:NE	1:A:571:PRO:HD3	2.27	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:701:THR:HG23	1:A:701:THR:O	2.12	0.49
1:A:897:MET:HE1	1:A:958:LYS:HD3	1.95	0.49
1:A:455:PHE:O	1:A:456:ASN:C	2.51	0.49
1:A:155:VAL:HG13	1:A:156:GLY:N	2.28	0.49
1:A:600:LEU:HG	1:A:601:ASP:N	2.26	0.49
1:A:442:GLU:HG3	3:A:1996:ACP:HN62	1.78	0.49
1:A:358:THR:O	1:A:359:ASN:HB3	2.12	0.49
1:A:384:ILE:HD12	1:A:384:ILE:N	2.27	0.49
1:A:527:TYR:CB	1:A:592:THR:HG23	2.35	0.49
1:A:654:THR:HG22	1:A:657:GLU:CD	2.34	0.49
1:A:654:THR:HG23	1:A:657:GLU:H	1.78	0.49
1:A:324:ARG:O	1:A:328:LYS:HG3	2.12	0.48
1:A:461:ASN:C	1:A:462:LEU:HD23	2.34	0.48
1:A:614:CYS:O	1:A:618:GLY:N	2.46	0.48
1:A:634:ALA:O	1:A:635:ILE:C	2.51	0.48
1:A:718:ILE:CD1	1:A:743:ILE:HD13	2.43	0.48
1:A:880:HIS:HB3	1:A:881:PRO:HD3	1.95	0.48
1:A:948:LEU:HB3	1:A:960:LYS:HG2	1.95	0.48
1:A:18:VAL:HG23	1:A:24:LEU:HD12	1.95	0.48
1:A:311:LEU:O	1:A:312:PRO:C	2.51	0.48
1:A:371:LYS:HE3	1:A:373:ASP:HB2	1.95	0.48
1:A:508:VAL:O	1:A:509:GLY:C	2.51	0.48
1:A:326:MET:CE	1:A:749:GLU:HB2	2.44	0.48
1:A:792:LEU:O	1:A:796:ASN:ND2	2.47	0.48
1:A:299:ALA:O	1:A:302:LEU:HB3	2.14	0.48
1:A:146:VAL:HG13	1:A:147:PRO:HD2	1.94	0.48
1:A:352:LYS:HB2	1:A:625:THR:HG22	1.95	0.48
1:A:397:LYS:O	1:A:398:ASN:HB2	2.14	0.48
1:A:576:MET:HE3	1:A:587:TYR:HB3	1.95	0.48
1:A:440:ALA:O	1:A:443:THR:HG22	2.13	0.48
1:A:529:ARG:CZ	1:A:529:ARG:HB2	2.44	0.48
1:A:97:ILE:HD11	1:A:797:LEU:HD11	1.95	0.48
1:A:872:HIS:C	1:A:874:MET:N	2.67	0.48
1:A:452:MET:O	1:A:453:ASN:C	2.50	0.48
1:A:604:ARG:O	1:A:607:VAL:HG23	2.14	0.48
1:A:63:ARG:O	1:A:66:LEU:N	2.45	0.48
1:A:688:VAL:HG12	1:A:688:VAL:O	2.13	0.48
1:A:879:ASP:HB2	1:A:882:HIS:HB2	1.93	0.48
1:A:14:ALA:O	1:A:17:GLY:N	2.46	0.48
1:A:178:SER:CB	1:A:184:SER:HB3	2.43	0.48
1:A:48:SER:OG	1:A:50:TRP:HB3	2.13	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:491:ARG:NH2	1:A:494:MET:HA	2.29	0.48
1:A:605:LYS:O	1:A:607:VAL:N	2.47	0.48
1:A:619:ILE:CD1	1:A:747:VAL:HG11	2.44	0.48
1:A:740:PHE:O	1:A:743:ILE:HB	2.13	0.48
1:A:783:LEU:CD1	1:A:784:PRO:HD2	2.34	0.48
1:A:848:THR:O	1:A:851:ALA:HB3	2.14	0.48
1:A:188:ILE:CG2	1:A:189:LYS:N	2.76	0.48
1:A:424:SER:H	1:A:437:VAL:HG12	1.77	0.48
1:A:666:GLN:HG2	1:A:690:TYR:CZ	2.49	0.48
1:A:790:VAL:O	1:A:957:PHE:HE1	1.96	0.48
1:A:239:MET:O	1:A:242:THR:HG23	2.13	0.48
1:A:295:TYR:HA	1:A:298:ILE:HG22	1.95	0.48
1:A:654:THR:CG2	1:A:657:GLU:HG3	2.44	0.48
1:A:680:GLU:CG	1:A:681:PRO:HD2	2.44	0.48
1:A:916:LEU:CD1	1:A:927:PRO:HA	2.43	0.48
1:A:388:THR:CG2	1:A:390:ALA:H	2.23	0.47
1:A:545:ILE:O	1:A:549:ILE:HG12	2.14	0.47
1:A:977:VAL:O	1:A:980:LEU:N	2.47	0.47
1:A:153:VAL:O	1:A:218:LYS:HA	2.14	0.47
1:A:637:ARG:HH21	1:A:645:ASN:H	1.61	0.47
1:A:748:GLU:HG3	1:A:817:MET:CE	2.44	0.47
1:A:946:LEU:HG	1:A:953:LEU:CD1	2.44	0.47
1:A:133:ASP:O	1:A:134:ARG:CG	2.58	0.47
1:A:411:VAL:O	1:A:415:THR:HG23	2.14	0.47
1:A:722:SER:OG	1:A:738:ASP:OD2	2.31	0.47
1:A:940:SER:HA	1:A:943:LEU:HD12	1.95	0.47
1:A:945:PHE:CE2	1:A:967:TRP:CH2	3.03	0.47
1:A:230:THR:O	1:A:233:GLY:N	2.47	0.47
1:A:662:PRO:O	1:A:663:LEU:C	2.52	0.47
1:A:717:GLY:N	1:A:732:GLU:OE1	2.30	0.47
1:A:371:LYS:HG2	1:A:372:VAL:N	2.28	0.47
1:A:852:ALA:HA	1:A:896:PRO:O	2.14	0.47
1:A:914:ASN:HA	1:A:985:LYS:HZ2	1.80	0.47
1:A:442:GLU:HG3	3:A:1996:ACP:N6	2.30	0.47
1:A:437:VAL:CG1	1:A:438:GLY:N	2.77	0.47
1:A:71:ILE:HB	1:A:300:VAL:HG11	1.96	0.47
1:A:717:GLY:C	1:A:731:SER:HB2	2.35	0.47
1:A:915:SER:C	1:A:917:SER:H	2.18	0.47
1:A:311:LEU:HD21	1:A:761:ILE:HG23	1.97	0.47
1:A:343:GLY:O	1:A:751:ARG:HG2	2.14	0.47
1:A:536:PRO:O	1:A:537:MET:C	2.53	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:148:GLY:O	1:A:222:ILE:HG13	2.15	0.47
1:A:452:MET:O	1:A:454:VAL:N	2.48	0.47
1:A:642:PHE:CZ	1:A:648:VAL:CG1	2.98	0.47
1:A:843:TYR:CE2	1:A:977:VAL:HG22	2.50	0.47
1:A:436:LYS:HD2	1:A:440:ALA:HB2	1.97	0.47
1:A:534:ARG:HG3	1:A:592:THR:HG21	1.97	0.47
1:A:633:ILE:O	1:A:636:CYS:HB2	2.14	0.47
1:A:173:LEU:O	1:A:188:ILE:HA	2.15	0.47
1:A:277:GLY:O	1:A:279:PHE:N	2.47	0.47
1:A:544:LYS:O	1:A:548:VAL:HG23	2.15	0.47
1:A:654:THR:O	1:A:655:GLY:C	2.53	0.47
1:A:366:MET:O	1:A:552:TRP:HH2	1.98	0.47
1:A:577:VAL:HG23	1:A:587:TYR:OH	2.15	0.47
1:A:52:LEU:O	1:A:56:GLN:HG2	2.15	0.46
1:A:648:VAL:O	1:A:648:VAL:CG1	2.63	0.46
1:A:679:VAL:HG12	1:A:680:GLU:N	2.31	0.46
1:A:687:ILE:C	1:A:689:GLU:N	2.67	0.46
1:A:75:LEU:HD22	1:A:293:ILE:HG13	1.96	0.46
1:A:869:GLN:OE1	1:A:872:HIS:CD2	2.68	0.46
1:A:953:LEU:N	1:A:954:PRO:HD2	2.30	0.46
1:A:718:ILE:HD13	1:A:743:ILE:HG12	1.96	0.46
1:A:686:LYS:O	1:A:689:GLU:HB2	2.14	0.46
1:A:917:SER:OG	1:A:920:GLN:HB2	2.15	0.46
1:A:88:PHE:O	1:A:92:PHE:HB2	2.16	0.46
1:A:593:PHE:HZ	1:A:596:VAL:HG13	1.80	0.46
1:A:758:LYS:O	1:A:761:ILE:HB	2.16	0.46
1:A:788:ILE:O	1:A:791:GLN:HB2	2.16	0.46
1:A:975:LEU:HB2	1:A:976:PRO:HD3	1.98	0.46
1:A:415:THR:HG22	1:A:475:ILE:HG23	1.96	0.46
1:A:607:VAL:O	1:A:608:MET:C	2.52	0.46
1:A:698:THR:CG2	1:A:715:GLU:OE1	2.63	0.46
1:A:214:ILE:O	1:A:214:ILE:CG1	2.62	0.46
1:A:352:LYS:HG2	1:A:353:THR:N	2.29	0.46
1:A:480:LYS:HB3	1:A:499:SER:HB3	1.98	0.46
1:A:62:VAL:HG23	1:A:98:LEU:HD22	1.98	0.46
1:A:710:ALA:O	1:A:711:LEU:C	2.54	0.46
1:A:348:ILE:HD13	1:A:743:ILE:HG22	1.98	0.46
1:A:26:PRO:O	1:A:30:LYS:HG3	2.15	0.46
1:A:577:VAL:HG21	1:A:583:ARG:HD3	1.98	0.46
1:A:724:THR:O	1:A:725:ALA:C	2.53	0.46
1:A:8:SER:OG	1:A:11:GLU:CG	2.64	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:313:ALA:O	1:A:317:THR:HG23	2.16	0.46
1:A:352:LYS:CB	1:A:625:THR:HG22	2.45	0.46
1:A:400:LYS:O	1:A:400:LYS:HG3	2.16	0.46
1:A:202:GLN:HG3	1:A:489:ARG:HH11	1.81	0.46
1:A:512:MET:HE1	1:A:576:MET:HE3	1.98	0.46
1:A:200:VAL:O	1:A:203:ASP:N	2.49	0.46
1:A:388:THR:HB	1:A:390:ALA:HB3	1.98	0.46
1:A:653:TYR:CE2	1:A:669:ALA:HB1	2.50	0.46
1:A:728:LYS:O	1:A:730:ALA:N	2.49	0.46
1:A:759:GLN:NE2	1:A:762:ARG:HH11	2.07	0.46
1:A:25:THR:O	1:A:27:ASP:N	2.49	0.46
1:A:404:SER:HG	1:A:452:MET:HB2	1.79	0.46
1:A:662:PRO:C	1:A:664:ALA:N	2.69	0.46
1:A:697:ILE:HA	1:A:715:GLU:HG2	1.98	0.46
1:A:748:GLU:HG3	1:A:817:MET:HG2	1.98	0.46
1:A:865:VAL:HG11	1:A:870:LEU:N	2.29	0.46
1:A:491:ARG:HE	1:A:588:GLU:CD	2.18	0.45
1:A:632:ALA:HB1	1:A:675:CYS:SG	2.55	0.45
1:A:687:ILE:O	1:A:689:GLU:N	2.49	0.45
1:A:319:LEU:HB3	1:A:336:LEU:HD13	1.99	0.45
1:A:412:GLU:CD	1:A:529:ARG:HE	2.19	0.45
1:A:18:VAL:HG22	1:A:150:ILE:HD11	1.99	0.45
1:A:259:GLN:O	1:A:262:LYS:N	2.49	0.45
1:A:260:LEU:O	1:A:264:ILE:HG13	2.15	0.45
1:A:331:ALA:HB1	1:A:733:MET:HE2	1.90	0.45
1:A:56:GLN:C	1:A:57:PHE:CD1	2.86	0.45
1:A:809:PHE:N	1:A:809:PHE:CD1	2.81	0.45
1:A:916:LEU:HD12	1:A:927:PRO:HA	1.98	0.45
1:A:124:PRO:O	1:A:142:ALA:HB2	2.17	0.45
1:A:397:LYS:HB3	1:A:402:ILE:HD12	1.97	0.45
1:A:424:SER:O	1:A:437:VAL:HG12	2.17	0.45
1:A:59:ASP:O	1:A:62:VAL:HG12	2.16	0.45
1:A:728:LYS:C	1:A:730:ALA:N	2.70	0.45
1:A:75:LEU:O	1:A:77:TRP:N	2.48	0.45
1:A:771:GLU:O	1:A:774:CYS:HB3	2.17	0.45
1:A:803:PRO:O	1:A:807:LEU:HG	2.17	0.45
1:A:326:MET:HE3	1:A:749:GLU:HB2	1.98	0.45
1:A:342:LEU:HD12	1:A:345:THR:CG2	2.47	0.45
1:A:563:ALA:O	1:A:564:LEU:HD23	2.17	0.45
1:A:549:ILE:HD13	1:A:596:VAL:HG21	1.99	0.45
1:A:687:ILE:HG22	1:A:691:LEU:CD1	2.47	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:790:VAL:O	1:A:957:PHE:CE1	2.70	0.45
1:A:170:SER:HG	1:A:218:LYS:H	1.59	0.45
1:A:325:ARG:NH1	1:A:753:ILE:CD1	2.78	0.45
1:A:352:LYS:NZ	1:A:627:ASP:HB2	2.31	0.45
1:A:351:ASP:OD2	1:A:701:THR:O	2.35	0.45
1:A:747:VAL:HG12	1:A:747:VAL:O	2.17	0.45
1:A:751:ARG:NH1	1:A:819:ARG:O	2.45	0.45
1:A:174:ARG:HA	1:A:174:ARG:HD3	1.65	0.45
1:A:153:VAL:HG12	1:A:214:ILE:HG12	1.99	0.45
1:A:259:GLN:C	1:A:261:SER:H	2.19	0.45
1:A:36:TYR:CG	1:A:147:PRO:HG2	2.52	0.45
1:A:415:THR:O	1:A:416:ILE:C	2.54	0.45
1:A:85:ILE:O	1:A:85:ILE:HD12	2.16	0.45
1:A:153:VAL:HG11	1:A:214:ILE:CG2	2.33	0.45
1:A:235:ILE:O	1:A:237:ASP:N	2.49	0.45
1:A:459:VAL:HA	1:A:462:LEU:HG	1.98	0.45
1:A:50:TRP:CE3	1:A:50:TRP:HA	2.52	0.45
1:A:638:ARG:O	1:A:638:ARG:HD3	2.16	0.45
1:A:688:VAL:HG23	1:A:700:MET:HE3	1.99	0.45
1:A:791:GLN:O	1:A:794:TRP:N	2.49	0.45
1:A:969:MET:O	1:A:973:ILE:HG13	2.17	0.45
1:A:259:GLN:O	1:A:261:SER:N	2.50	0.45
1:A:274:ILE:HD13	1:A:780:ALA:O	2.17	0.45
1:A:445:LEU:O	1:A:448:LEU:N	2.50	0.45
1:A:606:GLU:H	1:A:606:GLU:CD	2.20	0.45
1:A:748:GLU:O	1:A:749:GLU:C	2.55	0.45
1:A:832:TRP:CH2	1:A:987:ILE:HG21	2.52	0.45
1:A:188:ILE:O	1:A:189:LYS:HD3	2.16	0.44
1:A:274:ILE:HD12	1:A:275:ASN:CG	2.38	0.44
1:A:307:ILE:O	1:A:768:ASN:ND2	2.51	0.44
1:A:549:ILE:CD1	1:A:596:VAL:HG21	2.48	0.44
1:A:687:ILE:O	1:A:690:TYR:N	2.49	0.44
1:A:754:TYR:O	1:A:758:LYS:HB3	2.17	0.44
1:A:202:GLN:O	1:A:205:LYS:CE	2.66	0.44
1:A:202:GLN:O	1:A:205:LYS:HE2	2.17	0.44
1:A:69:ALA:HB2	1:A:94:ILE:HG22	1.96	0.44
1:A:408:ASP:O	1:A:409:GLY:C	2.55	0.44
1:A:412:GLU:O	1:A:413:LEU:C	2.56	0.44
1:A:421:ASN:OD1	1:A:423:SER:N	2.47	0.44
1:A:449:VAL:CG2	1:A:472:ASN:ND2	2.80	0.44
1:A:529:ARG:HH11	1:A:529:ARG:CG	2.30	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:90:GLU:HG3	1:A:790:VAL:HG22	1.99	0.44
1:A:926:PRO:HB2	1:A:928:TRP:CE3	2.52	0.44
1:A:174:ARG:NE	1:A:188:ILE:HG13	2.32	0.44
1:A:275:ASN:HB3	1:A:278:HIS:HD2	1.82	0.44
1:A:408:ASP:O	1:A:411:VAL:N	2.50	0.44
1:A:676:PHE:HB3	1:A:679:VAL:HG22	1.99	0.44
1:A:767:SER:O	1:A:771:GLU:HG3	2.17	0.44
1:A:263:VAL:O	1:A:264:ILE:C	2.56	0.44
1:A:459:VAL:HG21	1:A:467:ARG:NH2	2.33	0.44
1:A:485:LEU:HD13	1:A:584:PHE:CD1	2.53	0.44
1:A:331:ALA:CB	1:A:733:MET:HE1	2.33	0.44
1:A:900:ALA:CA	1:A:903:VAL:HG12	2.47	0.44
1:A:19:SER:C	1:A:21:THR:H	2.20	0.44
1:A:844:VAL:HG12	1:A:907:ILE:HG21	1.99	0.44
1:A:101:ASN:ND2	2:A:1995:AD4:H572	2.33	0.44
1:A:235:ILE:O	1:A:238:GLN:N	2.51	0.44
1:A:256:PHE:CE2	1:A:260:LEU:HD22	2.52	0.44
1:A:442:GLU:HG2	1:A:515:LYS:HZ1	1.82	0.44
1:A:611:ILE:HD13	1:A:740:PHE:CE2	2.53	0.44
1:A:633:ILE:O	1:A:634:ALA:C	2.55	0.44
1:A:48:SER:O	1:A:52:LEU:HG	2.18	0.44
1:A:656:ARG:O	1:A:657:GLU:C	2.56	0.44
1:A:784:PRO:O	1:A:785:GLU:C	2.56	0.44
1:A:177:GLN:O	1:A:178:SER:C	2.56	0.44
1:A:174:ARG:HB2	1:A:216:ALA:N	2.33	0.44
1:A:307:ILE:O	1:A:309:GLU:OE1	2.36	0.44
1:A:368:ILE:HD13	1:A:410:LEU:CD2	2.43	0.44
1:A:802:LEU:N	1:A:803:PRO:HD2	2.33	0.44
1:A:810:ASN:HA	1:A:811:PRO:HD2	1.86	0.44
1:A:897:MET:CB	1:A:958:LYS:HE2	2.47	0.44
1:A:141:LYS:O	1:A:142:ALA:C	2.56	0.43
1:A:130:TYR:OH	1:A:137:VAL:HG22	2.18	0.43
1:A:151:VAL:HG12	1:A:152:GLU:N	2.33	0.43
1:A:188:ILE:CD1	1:A:188:ILE:N	2.81	0.43
1:A:303:ALA:C	1:A:305:ALA:N	2.71	0.43
1:A:335:SER:C	1:A:337:PRO:HD3	2.39	0.43
1:A:433:VAL:HG12	1:A:434:TYR:H	1.83	0.43
1:A:448:LEU:C	1:A:448:LEU:HD12	2.39	0.43
1:A:689:GLU:CG	1:A:713:LYS:HZ3	2.31	0.43
1:A:903:VAL:O	1:A:907:ILE:HG13	2.18	0.43
1:A:304:VAL:HG23	1:A:304:VAL:O	2.16	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:352:LYS:HB3	1:A:352:LYS:HE2	1.86	0.43
1:A:417:CYS:O	1:A:421:ASN:HB2	2.18	0.43
1:A:445:LEU:O	1:A:446:THR:C	2.56	0.43
1:A:748:GLU:HA	1:A:817:MET:CE	2.48	0.43
1:A:870:LEU:HD12	1:A:870:LEU:O	2.18	0.43
1:A:836:ARG:HH21	1:A:981:ASP:CG	2.21	0.43
1:A:903:VAL:HG21	1:A:973:ILE:HG21	2.00	0.43
1:A:367:PHE:CZ	1:A:545:ILE:HG23	2.44	0.43
1:A:668:GLU:O	1:A:669:ALA:C	2.57	0.43
1:A:836:ARG:HG2	1:A:984:LEU:HB3	2.01	0.43
1:A:165:ILE:HD11	1:A:208:LEU:HD23	2.00	0.43
1:A:181:THR:O	1:A:182:GLY:C	2.57	0.43
1:A:244:GLN:N	1:A:244:GLN:CD	2.72	0.43
1:A:58:GLU:HA	1:A:63:ARG:NH1	2.33	0.43
1:A:687:ILE:C	1:A:689:GLU:H	2.20	0.43
1:A:259:GLN:HE22	1:A:262:LYS:CE	2.31	0.43
1:A:294:TYR:HD2	1:A:295:TYR:CD1	2.36	0.43
1:A:455:PHE:HE2	1:A:475:ILE:HG12	1.83	0.43
1:A:521:VAL:HG23	1:A:522:ILE:N	2.33	0.43
1:A:557:ASP:HB3	1:A:559:LEU:HG	2.01	0.43
1:A:239:MET:HE3	1:A:708:ALA:HB1	2.00	0.43
1:A:893:ALA:O	1:A:896:PRO:HG2	2.19	0.43
1:A:911:ASN:C	1:A:913:LEU:H	2.22	0.43
1:A:943:LEU:O	1:A:944:HIS:C	2.57	0.43
1:A:147:PRO:HG3	1:A:226:THR:HB	2.01	0.43
1:A:23:GLY:HA3	1:A:131:ARG:HA	2.00	0.43
1:A:347:VAL:HG22	1:A:620:ARG:CB	2.28	0.43
1:A:538:THR:OG1	1:A:541:VAL:CG2	2.62	0.43
1:A:654:THR:HG22	1:A:657:GLU:CB	2.48	0.43
1:A:677:ALA:O	1:A:678:ARG:HB2	2.18	0.43
1:A:96:LEU:HA	1:A:99:ILE:HD12	2.01	0.43
1:A:967:TRP:HA	1:A:970:VAL:HG23	1.99	0.43
1:A:610:SER:OG	1:A:741:SER:HB2	2.19	0.43
1:A:133:ASP:N	1:A:133:ASP:OD1	2.52	0.42
1:A:143:ARG:HE	1:A:143:ARG:HB2	1.53	0.42
1:A:324:ARG:H	1:A:324:ARG:HG3	1.57	0.42
1:A:437:VAL:HG13	1:A:438:GLY:N	2.34	0.42
1:A:474:VAL:HG23	1:A:475:ILE:N	2.34	0.42
1:A:713:LYS:HB2	1:A:713:LYS:HE3	1.84	0.42
1:A:844:VAL:CG2	1:A:845:GLY:N	2.81	0.42
1:A:93:VAL:O	1:A:94:ILE:C	2.58	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:363:VAL:CG1	1:A:448:LEU:HD22	2.40	0.42
1:A:627:ASP:OD1	1:A:631:THR:HG21	2.19	0.42
1:A:913:LEU:HD21	1:A:937:ILE:HD11	2.01	0.42
1:A:128:LYS:HB2	1:A:128:LYS:HE3	1.91	0.42
1:A:365:LYS:HB2	1:A:552:TRP:CZ3	2.55	0.42
1:A:449:VAL:HG21	1:A:472:ASN:ND2	2.34	0.42
1:A:45:GLU:HG2	1:A:45:GLU:O	2.19	0.42
1:A:577:VAL:HG23	1:A:583:ARG:HD3	2.01	0.42
1:A:637:ARG:HA	1:A:642:PHE:O	2.20	0.42
1:A:984:LEU:CA	1:A:987:ILE:HG12	2.46	0.42
1:A:236:ARG:HH11	1:A:236:ARG:HG2	1.83	0.42
1:A:471:CYS:C	1:A:474:VAL:HG22	2.39	0.42
1:A:514:VAL:CG2	1:A:515:LYS:N	2.82	0.42
1:A:680:GLU:CB	1:A:681:PRO:CD	2.96	0.42
1:A:832:TRP:O	1:A:835:PHE:HB3	2.20	0.42
1:A:855:TRP:CZ3	1:A:896:PRO:HD3	2.54	0.42
1:A:879:ASP:O	1:A:880:HIS:C	2.56	0.42
1:A:934:LEU:O	1:A:935:GLY:C	2.57	0.42
1:A:967:TRP:O	1:A:970:VAL:HB	2.19	0.42
1:A:277:GLY:C	1:A:279:PHE:N	2.73	0.42
1:A:542:LYS:O	1:A:543:GLU:C	2.57	0.42
1:A:788:ILE:HG12	1:A:897:MET:HE3	2.02	0.42
1:A:19:SER:C	1:A:21:THR:N	2.72	0.42
1:A:347:VAL:HG12	1:A:348:ILE:N	2.34	0.42
1:A:445:LEU:C	1:A:447:THR:N	2.72	0.42
1:A:50:TRP:HE3	1:A:50:TRP:HA	1.85	0.42
1:A:558:THR:HG22	1:A:634:ALA:CB	2.48	0.42
1:A:748:GLU:CG	1:A:817:MET:HE3	2.49	0.42
1:A:50:TRP:O	1:A:54:ILE:HG13	2.20	0.42
1:A:56:GLN:HB3	1:A:102:ALA:HA	2.01	0.42
1:A:790:VAL:C	1:A:957:PHE:HE1	2.23	0.42
1:A:901:LEU:CD2	1:A:901:LEU:O	2.67	0.42
1:A:951:ASP:HB2	1:A:952:PRO:HD3	2.02	0.42
1:A:379:LEU:CD1	1:A:379:LEU:N	2.83	0.42
1:A:550:LYS:O	1:A:554:THR:HB	2.19	0.42
1:A:927:PRO:C	1:A:929:VAL:H	2.23	0.42
1:A:959:LEU:HG	1:A:960:LYS:N	2.35	0.42
1:A:188:ILE:HG22	1:A:189:LYS:H	1.84	0.42
1:A:419:LEU:HD13	1:A:513:PHE:HE2	1.83	0.42
1:A:521:VAL:HG21	1:A:563:ALA:CB	2.46	0.42
1:A:802:LEU:O	1:A:936:SER:HB2	2.19	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:854:TRP:CH2	1:A:969:MET:HG2	2.54	0.42
1:A:857:MET:O	1:A:858:TYR:CG	2.73	0.42
1:A:170:SER:HB2	1:A:172:THR:O	2.20	0.42
1:A:188:ILE:H	1:A:188:ILE:CD1	2.32	0.42
1:A:679:VAL:HG13	1:A:683:HIS:HB2	2.01	0.42
1:A:699:ALA:HA	1:A:716:ILE:O	2.19	0.42
1:A:840:ILE:O	1:A:843:TYR:HB3	2.20	0.42
1:A:953:LEU:O	1:A:956:ILE:HB	2.20	0.42
1:A:353:THR:O	1:A:357:THR:O	2.38	0.41
1:A:521:VAL:CG2	1:A:522:ILE:N	2.83	0.41
1:A:577:VAL:O	1:A:579:ASP:N	2.53	0.41
1:A:865:VAL:HG11	1:A:869:GLN:CA	2.47	0.41
1:A:865:VAL:HG21	1:A:869:GLN:CB	2.16	0.41
1:A:872:HIS:O	1:A:874:MET:N	2.52	0.41
1:A:886:LEU:HG	1:A:887:ASP:N	2.35	0.41
1:A:104:VAL:O	1:A:108:GLN:HB2	2.19	0.41
1:A:174:ARG:HB2	1:A:216:ALA:H	1.84	0.41
1:A:253:LEU:O	1:A:254:ASP:C	2.59	0.41
1:A:308:PRO:O	1:A:309:GLU:C	2.58	0.41
1:A:511:LYS:HA	1:A:570:PRO:HG3	2.03	0.41
1:A:683:HIS:O	1:A:685:SER:N	2.53	0.41
1:A:759:GLN:O	1:A:762:ARG:N	2.54	0.41
1:A:801:GLY:C	1:A:803:PRO:HD2	2.40	0.41
1:A:9:THR:CG2	1:A:10:GLU:OE1	2.68	0.41
1:A:174:ARG:HH11	1:A:186:SER:HB2	1.84	0.41
1:A:307:ILE:CG2	2:A:1995:AD4:O1T	2.68	0.41
1:A:52:LEU:O	1:A:53:VAL:C	2.59	0.41
1:A:848:THR:HB	1:A:900:ALA:HB1	2.02	0.41
1:A:128:LYS:HE3	1:A:152:GLU:O	2.20	0.41
2:A:1995:AD4:H551	2:A:1995:AD4:O1T	2.20	0.41
1:A:519:GLU:OE1	1:A:519:GLU:N	2.37	0.41
1:A:359:ASN:CA	1:A:601:ASP:OD1	2.67	0.41
1:A:802:LEU:N	1:A:803:PRO:CD	2.83	0.41
1:A:880:HIS:O	1:A:884:GLU:O	2.38	0.41
1:A:969:MET:SD	1:A:972:LYS:HD2	2.59	0.41
1:A:702:GLY:N	1:A:711:LEU:HD21	2.36	0.41
1:A:912:ALA:O	1:A:933:LEU:HD21	2.21	0.41
1:A:163:ILE:CG2	1:A:221:GLY:HA3	2.50	0.41
1:A:38:HIS:CD2	1:A:143:ARG:NH2	2.87	0.41
1:A:403:ARG:HB3	1:A:406:GLN:CG	2.50	0.41
1:A:416:ILE:HG21	1:A:564:LEU:HB3	2.03	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:889:GLU:O	1:A:889:GLU:CG	2.67	0.41
1:A:810:ASN:ND2	1:A:916:LEU:HD23	2.36	0.41
1:A:72:SER:CB	1:A:91:PRO:HB3	2.49	0.41
1:A:159:VAL:O	1:A:210:SER:HA	2.20	0.41
1:A:174:ARG:HB3	1:A:215:ALA:HB3	2.02	0.41
1:A:471:CYS:O	1:A:474:VAL:CG2	2.64	0.41
1:A:752:ALA:O	1:A:753:ILE:C	2.58	0.41
1:A:759:GLN:C	1:A:761:ILE:N	2.74	0.41
1:A:785:GLU:OE1	1:A:788:ILE:HD11	2.21	0.41
1:A:253:LEU:HD13	2:A:1995:AD4:C47	2.50	0.41
1:A:38:HIS:CG	1:A:143:ARG:HH21	2.39	0.41
1:A:580:ASP:O	1:A:582:SER:N	2.54	0.41
1:A:828:LEU:HD23	1:A:828:LEU:HA	1.83	0.41
1:A:414:ALA:O	1:A:417:CYS:HB2	2.21	0.41
1:A:811:PRO:HA	1:A:812:PRO:HD3	1.90	0.41
1:A:872:HIS:C	1:A:874:MET:H	2.23	0.41
1:A:872:HIS:HB3	1:A:875:GLN:NE2	2.26	0.41
1:A:149:ASP:OD1	1:A:149:ASP:N	2.52	0.41
1:A:169:LYS:HB2	1:A:218:LYS:O	2.20	0.41
1:A:370:ASP:HB3	1:A:378:SER:O	2.21	0.41
1:A:361:MET:CB	1:A:444:ALA:HB2	2.51	0.41
1:A:361:MET:HE1	1:A:599:MET:HG3	2.03	0.41
1:A:65:LEU:HB3	1:A:98:LEU:HD11	2.03	0.41
1:A:894:PRO:O	1:A:898:THR:CG2	2.69	0.41
1:A:986:PHE:O	1:A:988:ALA:N	2.54	0.41
1:A:146:VAL:HG13	1:A:147:PRO:CD	2.51	0.40
1:A:24:LEU:O	1:A:131:ARG:HB3	2.22	0.40
1:A:524:ARG:HH11	1:A:588:GLU:HB2	1.86	0.40
1:A:788:ILE:HA	1:A:788:ILE:HD13	1.84	0.40
1:A:890:ILE:O	1:A:893:ALA:HB2	2.21	0.40
1:A:160:PRO:O	1:A:160:PRO:CG	2.69	0.40
1:A:239:MET:O	1:A:242:THR:CG2	2.69	0.40
1:A:300:VAL:O	1:A:304:VAL:HG13	2.21	0.40
1:A:340:GLU:O	1:A:343:GLY:N	2.54	0.40
1:A:408:ASP:O	1:A:410:LEU:N	2.54	0.40
1:A:692:GLN:HG2	1:A:715:GLU:OE2	2.21	0.40
1:A:797:LEU:HA	1:A:797:LEU:HD23	1.87	0.40
1:A:501:ALA:CB	1:A:505:ARG:NH2	2.84	0.40
1:A:365:LYS:HB3	1:A:552:TRP:CH2	2.57	0.40
1:A:651:ARG:O	1:A:673:ALA:HA	2.21	0.40
1:A:79:GLU:CD	1:A:79:GLU:N	2.75	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:854:TRP:O	1:A:857:MET:N	2.52	0.40
1:A:295:TYR:O	1:A:298:ILE:HG22	2.21	0.40
1:A:788:ILE:HG23	1:A:789:PRO:CD	2.47	0.40
1:A:915:SER:O	1:A:916:LEU:C	2.60	0.40
1:A:959:LEU:HG	1:A:960:LYS:H	1.87	0.40
1:A:150:ILE:CD1	1:A:150:ILE:N	2.76	0.40
1:A:189:LYS:HE3	1:A:207:MET:O	2.22	0.40
1:A:235:ILE:C	1:A:237:ASP:N	2.75	0.40
1:A:388:THR:HG22	1:A:389:TYR:H	1.87	0.40
1:A:467:ARG:NH1	1:A:467:ARG:O	2.55	0.40
1:A:535:VAL:CG1	1:A:536:PRO:N	2.85	0.40
1:A:57:PHE:CD1	1:A:57:PHE:N	2.89	0.40
1:A:562:LEU:O	1:A:596:VAL:HA	2.21	0.40
1:A:628:ASN:HB3	1:A:678:ARG:HH21	1.85	0.40
1:A:636:CYS:O	1:A:639:ILE:HG12	2.22	0.40
1:A:735:LEU:HD22	1:A:742:THR:CG2	2.51	0.40
1:A:822:ARG:HG2	1:A:823:SER:N	2.36	0.40
1:A:824:PRO:HD2	1:A:825:LYS:H	1.86	0.40
1:A:968:LEU:HD23	1:A:968:LEU:HA	1.82	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	992/994 (100%)	760 (77%)	164 (16%)	68 (7%)	1 8

All (68) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	182	GLY
1	A	281	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	337	PRO
1	A	374	GLY
1	A	502	LYS
1	A	509	GLY
1	A	581	SER
1	A	605	LYS
1	A	878	GLU
1	A	882	HIS
1	A	76	ALA
1	A	178	SER
1	A	278	HIS
1	A	289	ILE
1	A	453	ASN
1	A	463	SER
1	A	507	ALA
1	A	606	GLU
1	A	633	ILE
1	A	645	ASN
1	A	965	THR
1	A	993	GLU
1	A	120	LYS
1	A	134	ARG
1	A	142	ALA
1	A	161	ALA
1	A	248	PRO
1	A	288	TRP
1	A	353	THR
1	A	578	LEU
1	A	635	ILE
1	A	663	LEU
1	A	711	LEU
1	A	729	THR
1	A	916	LEU
1	A	309	GLU
1	A	330	ASN
1	A	489	ARG
1	A	520	GLY
1	A	634	ALA
1	A	725	ALA
1	A	738	ASP
1	A	811	PRO
1	A	822	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	862	GLY
1	A	905	VAL
1	A	975	LEU
1	A	149	ASP
1	A	486	GLU
1	A	705	VAL
1	A	861	ASP
1	A	201	ASN
1	A	644	GLU
1	A	664	ALA
1	A	684	LYS
1	A	803	PRO
1	A	816	ILE
1	A	26	PRO
1	A	263	VAL
1	A	416	ILE
1	A	865	VAL
1	A	264	ILE
1	A	824	PRO
1	A	409	GLY
1	A	978	ILE
1	A	42	PRO
1	A	521	VAL
1	A	681	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	840/840 (100%)	792 (94%)	48 (6%)	20	51

All (48) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	25	THR
1	A	26	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	78	PHE
1	A	110	ARG
1	A	113	GLU
1	A	136	SER
1	A	146	VAL
1	A	152	GLU
1	A	170	SER
1	A	191	THR
1	A	208	LEU
1	A	214	ILE
1	A	242	THR
1	A	316	THR
1	A	344	CYS
1	A	367	PHE
1	A	396	LEU
1	A	437	VAL
1	A	441	THR
1	A	462	LEU
1	A	486	GLU
1	A	491	ARG
1	A	569	THR
1	A	577	VAL
1	A	592	THR
1	A	597	VAL
1	A	606	GLU
1	A	616	ASP
1	A	627	ASP
1	A	635	ILE
1	A	638	ARG
1	A	666	GLN
1	A	698	THR
1	A	738	ASP
1	A	760	PHE
1	A	767	SER
1	A	778	THR
1	A	805	THR
1	A	816	ILE
1	A	844	VAL
1	A	870	LEU
1	A	875	GLN
1	A	884	GLU
1	A	895	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	898	THR
1	A	964	LEU
1	A	969	MET
1	A	981	ASP

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (15) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	38	HIS
1	A	101	ASN
1	A	177	GLN
1	A	259	GLN
1	A	278	HIS
1	A	398	ASN
1	A	453	ASN
1	A	461	ASN
1	A	526	ASN
1	A	683	HIS
1	A	759	GLN
1	A	768	ASN
1	A	791	GLN
1	A	796	ASN
1	A	875	GLN

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 5 ligands modelled in this entry, 3 are monoatomic - leaving 2 for Mogul analysis.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the Chemical Component Dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. 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 $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	AD4	A	1995	-	59,64,64	1.84	14 (23%)	64,92,92	2.01	13 (20%)
3	ACP	A	1996	4	27,33,33	2.14	8 (29%)	32,52,52	2.09	10 (31%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the Chemical Component Dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	AD4	A	1995	-	-	24/50/116/116	0/3/3/3
3	ACP	A	1996	4	-	4/15/38/38	0/3/3/3

All (22) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
3	A	1996	ACP	PB-O3A	6.79	1.65	1.58
2	A	1995	AD4	C4-C5	6.00	1.39	1.34
2	A	1995	AD4	O4-C21	5.31	1.32	1.21
2	A	1995	AD4	O3-C3	4.26	1.52	1.44
3	A	1996	ACP	PB-O2B	-3.98	1.47	1.56
2	A	1995	AD4	O6-C7	3.43	1.48	1.43
3	A	1996	ACP	C2'-C1'	-3.31	1.48	1.53
3	A	1996	ACP	C2-N3	3.22	1.37	1.32
2	A	1995	AD4	O1-C13	3.12	1.43	1.34
2	A	1995	AD4	O7-C27	3.05	1.42	1.34
2	A	1995	AD4	C34-C11	3.00	1.57	1.53
2	A	1995	AD4	C31-C10	2.72	1.58	1.52
2	A	1995	AD4	C9-C10	2.68	1.58	1.54
2	A	1995	AD4	C11-C7	2.66	1.59	1.55
2	A	1995	AD4	O11-C11	2.61	1.47	1.42
3	A	1996	ACP	PG-O2G	-2.57	1.49	1.54
2	A	1995	AD4	C21-C22	2.56	1.58	1.50
2	A	1995	AD4	O2T-C53	2.21	1.39	1.34
2	A	1995	AD4	C9-C8	2.20	1.55	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
3	A	1996	ACP	C3'-C4'	-2.20	1.47	1.53
3	A	1996	ACP	C4-N3	2.04	1.38	1.35
3	A	1996	ACP	C2-N1	2.01	1.37	1.33

All (23) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	A	1995	AD4	O2T-C53-N1T	6.81	120.09	109.99
2	A	1995	AD4	C10-O9-C32	5.86	135.44	121.53
2	A	1995	AD4	C56-O2T-C53	-5.00	113.29	120.99
3	A	1996	ACP	O5'-C5'-C4'	4.95	126.05	108.99
3	A	1996	ACP	O3G-PG-C3B	-4.22	96.16	106.40
3	A	1996	ACP	C5'-C4'-C3'	-4.04	100.04	115.18
2	A	1995	AD4	O2T-C53-O1T	-3.92	118.47	125.62
3	A	1996	ACP	N3-C2-N1	-3.75	122.82	128.68
2	A	1995	AD4	C11-C7-C6	-3.55	96.18	103.03
2	A	1995	AD4	C7-C6-C5	3.53	124.43	115.41
3	A	1996	ACP	C4-C5-N7	3.39	112.93	109.40
2	A	1995	AD4	O12-C12-C11	-3.36	124.90	128.28
2	A	1995	AD4	C24-C22-C21	3.22	133.50	120.78
3	A	1996	ACP	PA-O3A-PB	3.12	142.47	132.56
2	A	1995	AD4	O5-C12-O12	2.94	125.52	121.62
2	A	1995	AD4	C2-O1-C13	-2.89	112.71	117.53
3	A	1996	ACP	O2A-PA-O5'	2.88	121.12	107.75
2	A	1995	AD4	C23-C22-C21	-2.87	108.93	116.09
3	A	1996	ACP	O2B-PB-C3B	2.75	117.82	106.58
2	A	1995	AD4	C26-C4-C3	-2.44	117.32	121.27
2	A	1995	AD4	O1T-C53-N1T	-2.30	121.44	124.96
3	A	1996	ACP	O1B-PB-C3B	-2.19	103.28	109.07
3	A	1996	ACP	O2G-PG-C3B	2.13	111.57	106.40

There are no chirality outliers.

All (28) torsion outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
3	A	1996	ACP	C5'-O5'-PA-O1A
3	A	1996	ACP	C5'-O5'-PA-O2A
2	A	1995	AD4	C33-C32-O9-C10
2	A	1995	AD4	O10-C32-O9-C10
2	A	1995	AD4	C27-C28-C29-C30
2	A	1995	AD4	C30-C45-C46-C47
2	A	1995	AD4	C47-C48-C49-C50

Continued on next page...

Continued from previous page...

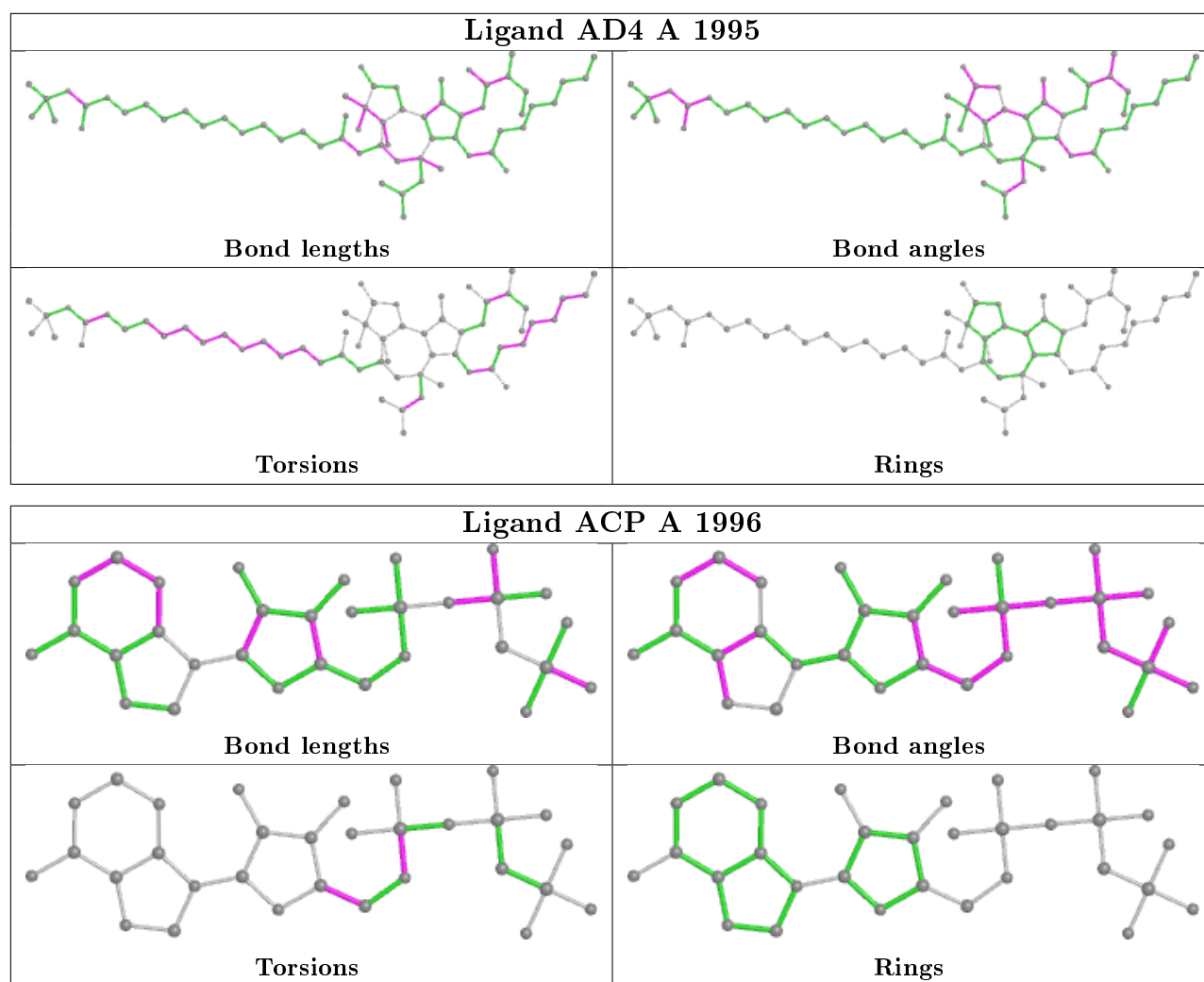
Mol	Chain	Res	Type	Atoms
2	A	1995	AD4	C16-C17-C18-C19
2	A	1995	AD4	C14-C13-O1-C2
2	A	1995	AD4	O2-C13-O1-C2
2	A	1995	AD4	O2T-C53-N1T-C52
2	A	1995	AD4	C15-C16-C17-C18
2	A	1995	AD4	C13-C14-C15-C16
2	A	1995	AD4	O1T-C53-N1T-C52
2	A	1995	AD4	C14-C15-C16-C17
2	A	1995	AD4	C46-C47-C48-C49
2	A	1995	AD4	C17-C18-C19-C20
2	A	1995	AD4	C45-C46-C47-C48
3	A	1996	ACP	O4'-C4'-C5'-O5'
2	A	1995	AD4	O4-C21-C22-C23
2	A	1995	AD4	C28-C29-C30-C45
3	A	1996	ACP	C5'-O5'-PA-O3A
2	A	1995	AD4	C49-C50-C51-C52
2	A	1995	AD4	O3-C21-C22-C23
2	A	1995	AD4	C48-C49-C50-C51
2	A	1995	AD4	O4-C21-C22-C24
2	A	1995	AD4	O3-C21-C22-C24
2	A	1995	AD4	C29-C30-C45-C46

There are no ring outliers.

2 monomers are involved in 19 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
2	A	1995	AD4	11	0
3	A	1996	ACP	8	0

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less than 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient equivalents in the CSD to analyse the geometry.



5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data ⓘ

6.1 Protein, DNA and RNA chains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2		OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	994/994 (100%)	-0.17	32 (3%)	47 46	32, 71, 140, 188	0

All (32) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	285	GLY	8.5
1	A	994	GLY	7.6
1	A	284	HIS	6.7
1	A	80	GLU	6.1
1	A	877	THR	4.6
1	A	867	TYR	4.3
1	A	878	GLU	4.0
1	A	81	GLY	3.9
1	A	434	TYR	3.3
1	A	286	GLY	3.1
1	A	888	CYS	3.1
1	A	50	TRP	3.1
1	A	82	GLU	3.0
1	A	466	GLU	2.8
1	A	879	ASP	2.8
1	A	507	ALA	2.7
1	A	283	VAL	2.7
1	A	427	PHE	2.6
1	A	46	GLY	2.6
1	A	504	SER	2.6
1	A	505	ARG	2.5
1	A	924	ARG	2.4
1	A	47	LYS	2.4
1	A	993	GLU	2.4
1	A	468	ALA	2.4
1	A	425	LEU	2.3
1	A	866	THR	2.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	992	LEU	2.3
1	A	876	CYS	2.2
1	A	45	GLU	2.2
1	A	83	GLU	2.1
1	A	462	LEU	2.1

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

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

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

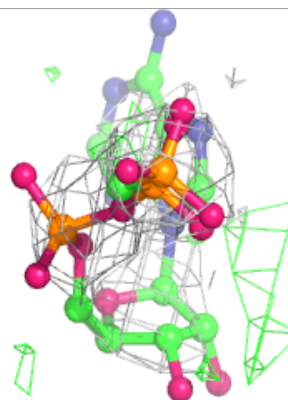
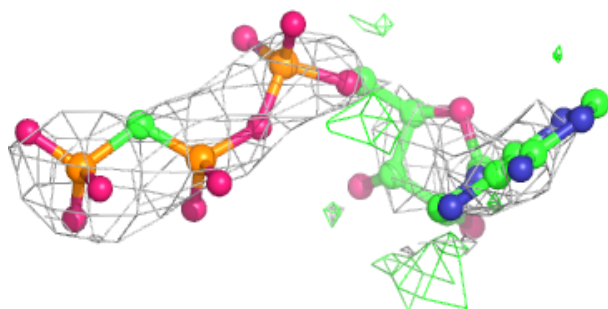
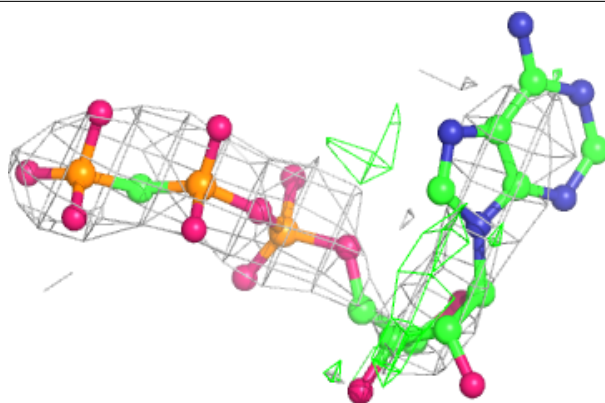
In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. The B-factors column lists the minimum, median, 95th percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled 'Q< 0.9' lists the number of atoms with occupancy less than 0.9.

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors(\AA^2)	Q<0.9
4	MG	A	1997	1/1	0.47	1.34	69,69,69,69	1
4	MG	A	1998	1/1	0.75	0.68	67,67,67,67	0
5	NA	A	1999	1/1	0.81	0.59	49,49,49,49	0
3	ACP	A	1996	31/31	0.81	0.41	68,69,75,76	31
2	AD4	A	1995	62/62	0.91	0.30	68,71,73,76	0

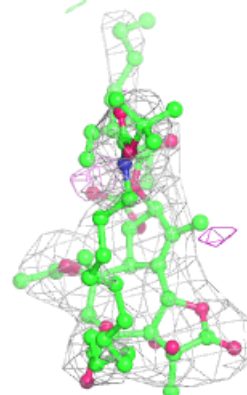
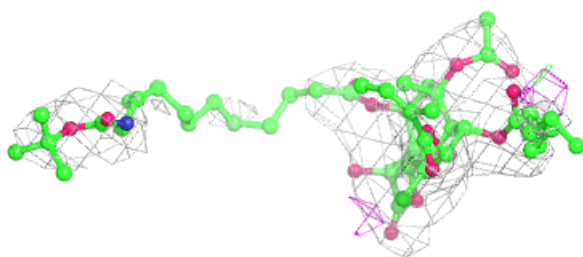
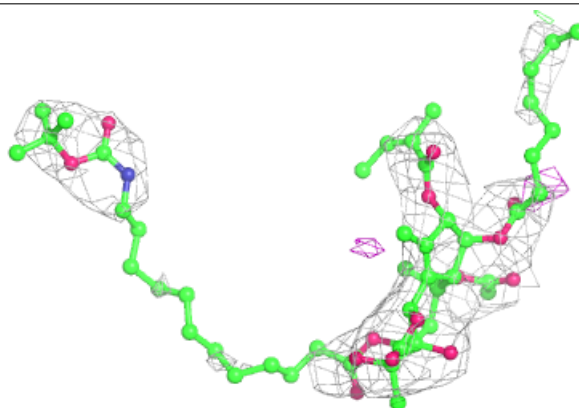
The following is a graphical depiction of the model fit to experimental electron density of all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the geometry validation Tables will also be included. Each fit is shown from different orientation to approximate a three-dimensional view.

Electron density around ACP A 1996:

$2mF_o-DF_c$ (at 0.7 rmsd) in gray
 mF_o-DF_c (at 3 rmsd) in purple (negative)
and green (positive)

**Electron density around AD4 A 1995:**

$2mF_o-DF_c$ (at 0.7 rmsd) in gray
 mF_o-DF_c (at 3 rmsd) in purple (negative)
and green (positive)



6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.