



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Oct 23, 2021 – 03:21 PM EDT

PDB ID : 2DIK
Title : R337A MUTANT OF PYRUVATE PHOSPHATE DIKINASE
Authors : Huang, K.; Herzberg, O.
Deposited on : 1998-09-03
Resolution : 2.50 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) : **NOT EXECUTED**
EDS : **NOT EXECUTED**
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.23.2

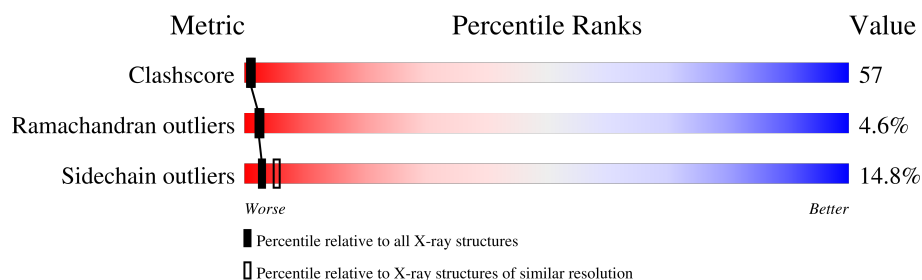
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 2.50 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	141614	5346 (2.50-2.50)
Ramachandran outliers	138981	5231 (2.50-2.50)
Sidechain outliers	138945	5233 (2.50-2.50)

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 of 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 $\leq 5\%$.

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	873	<div> <div></div> <div>30%</div> <div>49%</div> <div>17%</div> <div>.</div> </div>

2 Entry composition [i](#)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 6778 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.

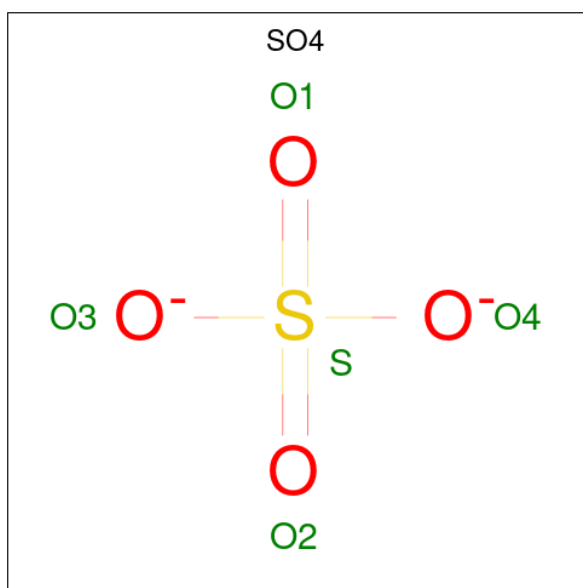
- Molecule 1 is a protein called PROTEIN (PYRUVATE PHOSPHATE DIKINASE).

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	869	6724	4233	1137	1303	51	0	0	0

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	337	ALA	ARG	engineered mutation	UNP P22983

- Molecule 2 is SULFATE ION (three-letter code: SO4) (formula: O₄S).



Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
			Total	O	S		
2	A	1	5	4	1	0	0
2	A	1	5	4	1	0	0

- Molecule 3 is water.

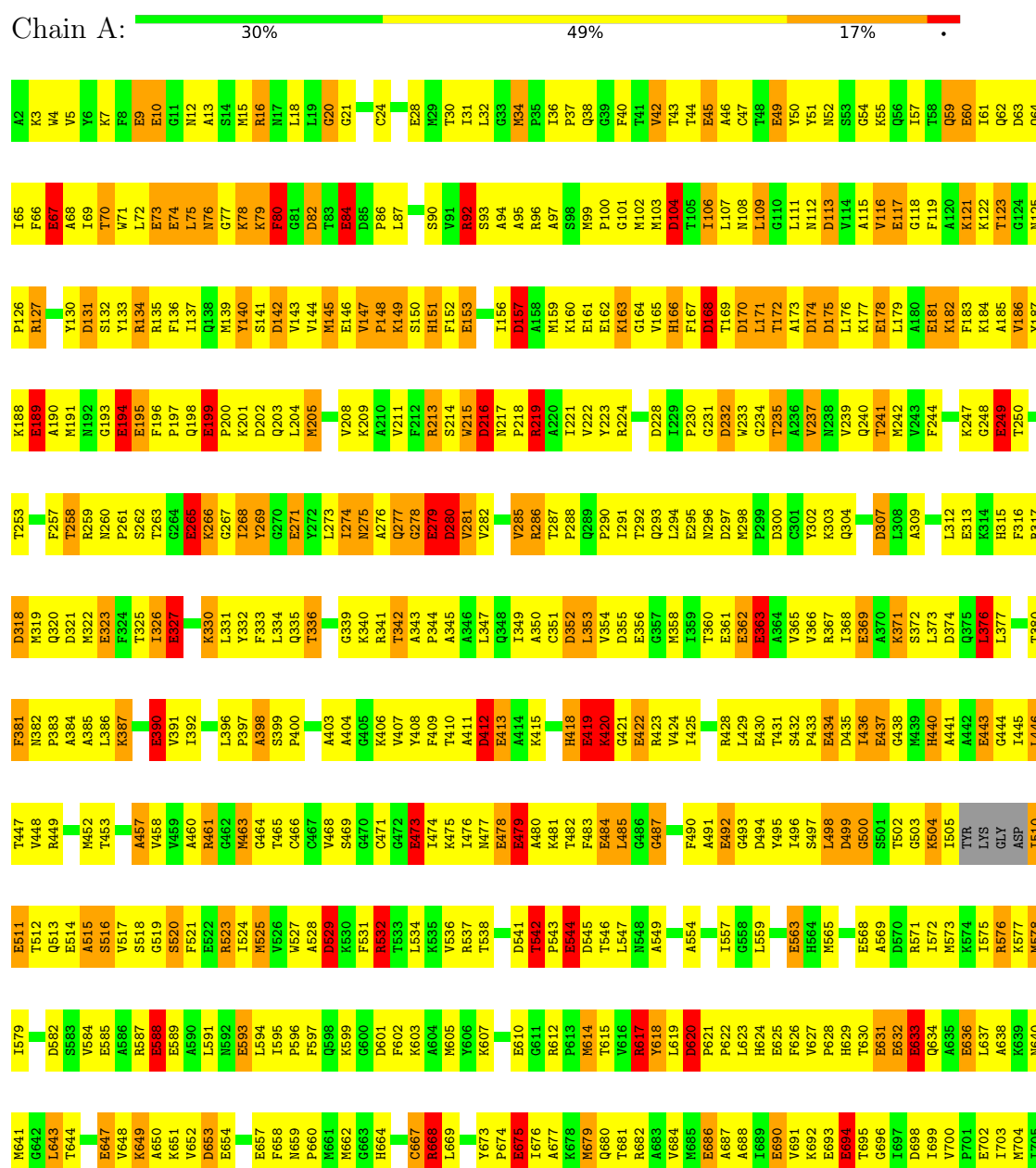
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	A	44	Total 44	O 44	0	0

3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide 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. 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. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

Note EDS was not executed.

• Molecule 1: PROTEIN (PYRUVATE PHOSPHATE DIKINASE)



Q868	K764	P706
A869	F785	L707
N873	L786	F708
K874	D787	G709
	Y790	G710
	E796	K711
	S797	K712
	F800	E713
	L803	D719
	D804	V722
	V808	E723
	L811	E726
	V812	Q727
	E813	V728
	M814	K729
	K817	K730
	R820	E731
	T821	K732
	T822	G733
	K827	S734
	C828	D735
	G829	M736
	L830	Q737
	E833	T742
	P838	M743
	S839	I744
	S840	E745
	V841	I746
	E842	P747
	F843	A750
	K846	L751
	V847	T752
	G848	A753
	L849	D754
	N850	A755
	V851	E758
	V852	E761
	S855	F762
	P856	F763
	F857	T767
	P860	M768
	R863	D769
	L864	L770
		T771
		G772
		M773
		R779
		D780
		A781
		A782
		C783

4 Data and refinement statistics

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

Property	Value	Source
Space group	P 1 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	89.80 Å 58.80 Å 102.00 Å 90.00° 94.80° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	8.00 – 2.50	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	75.0 (8.00-2.50)	Depositor
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	9.90	Depositor
Refinement program	TNT	Depositor
R, R_{free}	0.185 , (Not available)	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	6778	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	29.0	wwPDB-VP

5 Model quality

5.1 Standard geometry

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: SO4

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	1.34	78/6846 (1.1%)	1.59	103/9227 (1.1%)

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

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

All (78) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	265	GLU	CD-OE1	10.08	1.36	1.25
1	A	625	GLU	CD-OE1	9.88	1.36	1.25
1	A	249	GLU	CD-OE1	9.53	1.36	1.25
1	A	610	GLU	CD-OE2	9.26	1.35	1.25
1	A	323	GLU	CD-OE2	9.15	1.35	1.25
1	A	833	GLU	CD-OE1	9.09	1.35	1.25
1	A	437	GLU	CD-OE1	8.32	1.34	1.25
1	A	363	GLU	CD-OE1	8.26	1.34	1.25
1	A	758	GLU	CD-OE2	8.20	1.34	1.25
1	A	723	GLU	CD-OE1	8.11	1.34	1.25
1	A	434	GLU	CD-OE1	8.07	1.34	1.25
1	A	369	GLU	CD-OE1	7.95	1.34	1.25
1	A	813	GLU	CD-OE2	7.94	1.34	1.25
1	A	60	GLU	CD-OE1	7.92	1.34	1.25
1	A	636	GLU	CD-OE2	7.89	1.34	1.25
1	A	568	GLU	CD-OE2	7.85	1.34	1.25
1	A	675	GLU	CD-OE2	7.71	1.34	1.25
1	A	67	GLU	CD-OE2	7.69	1.34	1.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	295	GLU	CD-OE1	7.67	1.34	1.25
1	A	361	GLU	CD-OE1	7.67	1.34	1.25
1	A	796	GLU	CD-OE1	7.59	1.34	1.25
1	A	178	GLU	CD-OE2	7.44	1.33	1.25
1	A	9	GLU	CD-OE2	7.43	1.33	1.25
1	A	181	GLU	CD-OE2	7.40	1.33	1.25
1	A	731	GLU	CD-OE2	7.39	1.33	1.25
1	A	686	GLU	CD-OE1	7.32	1.33	1.25
1	A	633	GLU	CD-OE1	7.28	1.33	1.25
1	A	430	GLU	CD-OE1	7.27	1.33	1.25
1	A	761	GLU	CD-OE1	7.24	1.33	1.25
1	A	28	GLU	CD-OE2	7.18	1.33	1.25
1	A	632	GLU	CD-OE2	7.17	1.33	1.25
1	A	117	GLU	CD-OE2	7.12	1.33	1.25
1	A	589	GLU	CD-OE1	7.03	1.33	1.25
1	A	390	GLU	CD-OE2	7.02	1.33	1.25
1	A	585	GLU	CD-OE2	7.00	1.33	1.25
1	A	194	GLU	CD-OE2	6.94	1.33	1.25
1	A	443	GLU	CD-OE2	6.92	1.33	1.25
1	A	313	GLU	CD-OE1	-6.87	1.18	1.25
1	A	544	GLU	CD-OE2	6.76	1.33	1.25
1	A	842	GLU	CD-OE2	6.71	1.33	1.25
1	A	593	GLU	CD-OE2	6.67	1.32	1.25
1	A	271	GLU	CD-OE2	6.67	1.32	1.25
1	A	654	GLU	CD-OE1	6.64	1.32	1.25
1	A	484	GLU	CD-OE2	6.63	1.32	1.25
1	A	153	GLU	CD-OE2	6.62	1.32	1.25
1	A	694	GLU	CD-OE1	6.60	1.32	1.25
1	A	195	GLU	CD-OE2	6.54	1.32	1.25
1	A	10	GLU	CD-OE1	6.51	1.32	1.25
1	A	473	GLU	CD-OE2	6.41	1.32	1.25
1	A	162	GLU	CD-OE2	6.39	1.32	1.25
1	A	49	GLU	CD-OE1	6.38	1.32	1.25
1	A	647	GLU	CD-OE1	6.38	1.32	1.25
1	A	279	GLU	CD-OE2	6.34	1.32	1.25
1	A	84	GLU	CD-OE2	6.29	1.32	1.25
1	A	199	GLU	CD-OE1	6.29	1.32	1.25
1	A	479	GLU	CD-OE2	6.28	1.32	1.25
1	A	511	GLU	CD-OE1	6.28	1.32	1.25
1	A	731	GLU	CB-CG	6.22	1.64	1.52
1	A	419	GLU	CD-OE1	6.16	1.32	1.25
1	A	327	GLU	CD-OE2	6.11	1.32	1.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	478	GLU	CD-OE2	6.04	1.32	1.25
1	A	74	GLU	CD-OE1	5.92	1.32	1.25
1	A	413	GLU	CD-OE1	5.89	1.32	1.25
1	A	73	GLU	CD-OE2	5.83	1.32	1.25
1	A	657	GLU	CD-OE1	-5.81	1.19	1.25
1	A	362	GLU	CD-OE1	5.79	1.32	1.25
1	A	161	GLU	CD-OE2	5.76	1.31	1.25
1	A	588	GLU	CD-OE2	5.74	1.31	1.25
1	A	189	GLU	CD-OE1	5.73	1.31	1.25
1	A	657	GLU	CD-OE2	5.58	1.31	1.25
1	A	631	GLU	CD-OE2	5.50	1.31	1.25
1	A	710	GLU	CD-OE1	5.49	1.31	1.25
1	A	492	GLU	CD-OE1	5.49	1.31	1.25
1	A	327	GLU	CD-OE1	-5.40	1.19	1.25
1	A	693	GLU	CD-OE2	5.37	1.31	1.25
1	A	731	GLU	CG-CD	-5.35	1.44	1.51
1	A	563	GLU	CD-OE2	5.22	1.31	1.25
1	A	45	GLU	CD-OE1	5.07	1.31	1.25

All (103) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	804	ASP	CB-CG-OD1	11.14	128.32	118.30
1	A	529	ASP	CB-CG-OD1	10.94	128.15	118.30
1	A	804	ASP	CB-CG-OD2	-9.29	109.94	118.30
1	A	131	ASP	CB-CG-OD1	-8.97	110.23	118.30
1	A	461	ARG	NE-CZ-NH2	-8.69	115.96	120.30
1	A	92	ARG	NE-CZ-NH2	-8.66	115.97	120.30
1	A	617	ARG	NE-CZ-NH1	8.52	124.56	120.30
1	A	355	ASP	CB-CG-OD2	-8.47	110.67	118.30
1	A	582	ASP	CB-CG-OD2	-8.22	110.90	118.30
1	A	232	ASP	CB-CG-OD1	-8.02	111.08	118.30
1	A	82	ASP	CB-CG-OD1	7.97	125.47	118.30
1	A	250	THR	CA-CB-CG2	-7.93	101.30	112.40
1	A	82	ASP	CB-CG-OD2	-7.90	111.19	118.30
1	A	175	ASP	CB-CG-OD1	-7.90	111.19	118.30
1	A	612	ARG	NE-CZ-NH1	7.78	124.19	120.30
1	A	617	ARG	NE-CZ-NH2	-7.68	116.46	120.30
1	A	104	ASP	CB-CG-OD1	7.41	124.97	118.30
1	A	523	ARG	NE-CZ-NH2	7.31	123.95	120.30
1	A	318	ASP	CB-CG-OD2	-7.28	111.75	118.30
1	A	612	ARG	NE-CZ-NH2	-7.24	116.68	120.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	147	VAL	C-N-CD	-7.24	104.68	120.60
1	A	787	ASP	CB-CG-OD2	-7.23	111.79	118.30
1	A	297	ASP	CB-CG-OD1	-7.22	111.80	118.30
1	A	529	ASP	CB-CG-OD2	-7.20	111.82	118.30
1	A	281	VAL	CA-CB-CG1	7.14	121.62	110.90
1	A	104	ASP	CB-CG-OD2	-6.89	112.09	118.30
1	A	369	GLU	N-CA-CB	6.81	122.85	110.60
1	A	653	ASP	CB-CG-OD2	6.70	124.33	118.30
1	A	731	GLU	N-CA-CB	6.67	122.61	110.60
1	A	216	ASP	CB-CG-OD2	-6.61	112.35	118.30
1	A	668	ARG	NE-CZ-NH2	6.57	123.58	120.30
1	A	576	ARG	NE-CZ-NH1	6.49	123.54	120.30
1	A	157	ASP	CB-CG-OD2	-6.47	112.48	118.30
1	A	228	ASP	CB-CG-OD1	6.46	124.11	118.30
1	A	318	ASP	N-CA-CB	-6.42	99.05	110.60
1	A	494	ASP	CB-CG-OD1	-6.40	112.54	118.30
1	A	219	ARG	NE-CZ-NH1	6.32	123.46	120.30
1	A	63	ASP	CB-CG-OD2	-6.31	112.62	118.30
1	A	787	ASP	CB-CG-OD1	6.28	123.95	118.30
1	A	174	ASP	CB-CG-OD2	6.27	123.95	118.30
1	A	690	GLU	CG-CD-OE2	-6.24	105.81	118.30
1	A	412	ASP	CB-CG-OD1	-6.21	112.71	118.30
1	A	719	ASP	CB-CG-OD2	-6.15	112.76	118.30
1	A	280	ASP	CB-CG-OD1	6.15	123.83	118.30
1	A	852	VAL	CG1-CB-CG2	6.13	120.71	110.90
1	A	16	ARG	NE-CZ-NH1	6.10	123.35	120.30
1	A	698	ASP	CB-CG-OD2	6.09	123.78	118.30
1	A	376	LEU	CB-CA-C	-6.06	98.68	110.20
1	A	428	ARG	NE-CZ-NH2	-6.05	117.28	120.30
1	A	175	ASP	CB-CG-OD2	5.98	123.69	118.30
1	A	582	ASP	CB-CG-OD1	5.98	123.68	118.30
1	A	297	ASP	CB-CG-OD2	5.93	123.64	118.30
1	A	63	ASP	CB-CG-OD1	5.93	123.63	118.30
1	A	352	ASP	CB-CG-OD2	-5.92	112.97	118.30
1	A	258	THR	CA-CB-CG2	-5.92	104.11	112.40
1	A	174	ASP	CB-CG-OD1	-5.91	112.98	118.30
1	A	576	ARG	NE-CZ-NH2	-5.89	117.36	120.30
1	A	113	ASP	CB-CG-OD2	-5.86	113.03	118.30
1	A	542	THR	OG1-CB-CG2	5.85	123.45	110.00
1	A	92	ARG	NE-CZ-NH1	5.83	123.21	120.30
1	A	269	TYR	CA-CB-CG	5.82	124.46	113.40
1	A	668	ARG	NE-CZ-NH1	-5.82	117.39	120.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	800	PHE	CB-CG-CD2	-5.82	116.73	120.80
1	A	736	MET	N-CA-C	-5.75	95.46	111.00
1	A	412	ASP	CB-CG-OD2	5.73	123.46	118.30
1	A	142	ASP	CB-CG-OD1	-5.71	113.16	118.30
1	A	731	GLU	CG-CD-OE1	5.70	129.69	118.30
1	A	353	LEU	CA-CB-CG	-5.66	102.28	115.30
1	A	280	ASP	CB-CG-OD2	-5.66	113.20	118.30
1	A	318	ASP	CB-CG-OD1	5.63	123.37	118.30
1	A	735	ASP	CB-CG-OD1	5.55	123.29	118.30
1	A	532	ARG	CG-CD-NE	5.54	123.44	111.80
1	A	170	ASP	CB-CG-OD2	-5.54	113.32	118.30
1	A	820	ARG	NE-CZ-NH1	5.52	123.06	120.30
1	A	277	GLN	N-CA-CB	5.45	120.41	110.60
1	A	232	ASP	CB-CG-OD2	5.45	123.20	118.30
1	A	719	ASP	CB-CG-OD1	5.44	123.19	118.30
1	A	620	ASP	CB-CG-OD2	-5.43	113.41	118.30
1	A	541	ASP	CB-CG-OD2	-5.37	113.46	118.30
1	A	113	ASP	CB-CG-OD1	5.35	123.12	118.30
1	A	228	ASP	CB-CG-OD2	-5.32	113.51	118.30
1	A	852	VAL	CA-CB-CG2	5.28	118.82	110.90
1	A	42	VAL	CA-CB-CG1	-5.23	103.06	110.90
1	A	708	VAL	CA-CB-CG1	-5.22	103.07	110.90
1	A	355	ASP	CB-CG-OD1	5.21	122.98	118.30
1	A	216	ASP	CB-CG-OD1	5.20	122.98	118.30
1	A	494	ASP	CB-CG-OD2	5.17	122.96	118.30
1	A	307	ASP	CB-CG-OD1	5.16	122.95	118.30
1	A	90	SER	N-CA-CB	5.15	118.22	110.50
1	A	168	ASP	CB-CG-OD1	-5.14	113.67	118.30
1	A	326	ILE	CB-CA-C	-5.14	101.32	111.60
1	A	735	ASP	N-CA-C	-5.14	97.13	111.00
1	A	168	ASP	CB-CG-OD2	5.10	122.89	118.30
1	A	822	THR	CA-CB-CG2	-5.10	105.26	112.40
1	A	300	ASP	CB-CG-OD2	5.09	122.88	118.30
1	A	542	THR	N-CA-CB	-5.09	100.63	110.30
1	A	529	ASP	O-C-N	-5.08	114.57	122.70
1	A	127	ARG	NE-CZ-NH2	-5.07	117.77	120.30
1	A	166	HIS	N-CA-C	5.07	124.68	111.00
1	A	500	GLY	N-CA-C	-5.07	100.43	113.10
1	A	131	ASP	CB-CG-OD2	5.05	122.84	118.30
1	A	80	PHE	CB-CA-C	5.05	120.49	110.40
1	A	781	ASP	CB-CG-OD1	-5.01	113.79	118.30

There are no chirality outliers.

All (2) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	422	GLU	Sidechain
1	A	457	ALA	Mainchain

5.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	6724	0	6645	761	4
2	A	10	0	0	2	0
3	A	44	0	0	2	0
All	All	6778	0	6645	761	4

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 57.

All (761) 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:828:CYS:H	1:A:850:ASN:ND2	1.40	1.19
1:A:107:LEU:HD21	1:A:279:GLU:HG3	1.34	1.10
1:A:253:THR:HG21	1:A:278:GLY:HA2	1.37	1.06
1:A:276:ALA:HB1	1:A:281:VAL:HG21	1.07	1.03
1:A:734:SER:HB3	1:A:736:MET:H	1.26	1.00
1:A:107:LEU:HB3	1:A:242:MET:HE1	1.46	0.97
1:A:84:GLU:HG2	1:A:118:GLY:HA2	1.47	0.96
1:A:43:THR:HG22	1:A:45:GLU:H	1.31	0.94
1:A:262:SER:HB3	1:A:461:ARG:HD2	1.48	0.94
1:A:330:LYS:HD2	1:A:331:LEU:N	1.84	0.93
1:A:84:GLU:HA	1:A:118:GLY:HA3	1.50	0.92
1:A:146:GLU:HG3	1:A:187:TYR:CE1	2.04	0.92
1:A:108:ASN:HD21	1:A:277:GLN:HE22	1.16	0.91
1:A:167:PHE:HB3	1:A:169:THR:HG22	1.51	0.91
1:A:276:ALA:CB	1:A:281:VAL:HG21	1.99	0.91
1:A:578:MET:HG2	1:A:587:ARG:HG3	1.49	0.90
1:A:828:CYS:H	1:A:850:ASN:HD22	1.02	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:408:TYR:HE1	1:A:424:VAL:HG22	1.35	0.89
1:A:102:MET:HE1	1:A:436:ILE:HD13	1.52	0.89
1:A:57:ILE:HD11	1:A:209:LYS:HG3	1.53	0.88
1:A:408:TYR:CE1	1:A:424:VAL:HG22	2.09	0.87
1:A:163:LYS:HB3	1:A:165:VAL:HG12	1.58	0.86
1:A:253:THR:HG21	1:A:278:GLY:CA	2.06	0.86
1:A:107:LEU:HB3	1:A:242:MET:CE	2.06	0.85
1:A:165:VAL:HG22	1:A:170:ASP:HB3	1.58	0.85
1:A:263:THR:OG1	1:A:265:GLU:HB2	1.75	0.85
1:A:159:MET:HE3	1:A:179:LEU:HD13	1.56	0.84
1:A:342:THR:HG22	1:A:345:ALA:CB	2.07	0.84
1:A:400:PRO:HA	1:A:499:ASP:HB3	1.60	0.84
1:A:57:ILE:CD1	1:A:209:LYS:HG3	2.08	0.84
1:A:400:PRO:HA	1:A:499:ASP:CB	2.08	0.83
1:A:213:ARG:HH11	1:A:213:ARG:HB2	1.42	0.83
1:A:43:THR:HG21	1:A:45:GLU:HG2	1.60	0.83
1:A:224:ARG:NH1	1:A:231:GLY:HA3	1.94	0.83
1:A:107:LEU:HD21	1:A:279:GLU:CG	2.09	0.82
1:A:196:PHE:CD1	1:A:197:PRO:HD2	2.15	0.82
1:A:318:ASP:HB2	1:A:367:ARG:HH12	1.43	0.82
1:A:857:PHE:HB2	3:A:918:HOH:O	1.78	0.81
1:A:828:CYS:N	1:A:850:ASN:HD22	1.79	0.81
1:A:16:ARG:HG3	1:A:24:CYS:SG	2.20	0.81
1:A:30:THR:OG1	1:A:36:ILE:HD11	1.80	0.81
1:A:179:LEU:HD11	1:A:183:PHE:CE1	2.16	0.80
1:A:219:ARG:HG3	1:A:436:ILE:HG21	1.63	0.80
1:A:172:THR:HG23	1:A:175:ASP:OD2	1.80	0.80
1:A:73:GLU:HG2	1:A:79:LYS:HA	1.62	0.79
1:A:43:THR:CG2	1:A:45:GLU:HG2	2.12	0.79
1:A:644:THR:HG23	1:A:647:GLU:OE1	1.82	0.79
1:A:842:GLU:HG2	1:A:846:LYS:HD2	1.62	0.79
1:A:165:VAL:CG2	1:A:170:ASP:HB3	2.14	0.78
1:A:119:PHE:O	1:A:123:THR:HB	1.83	0.78
1:A:828:CYS:N	1:A:850:ASN:ND2	2.26	0.78
1:A:156:ILE:HD11	1:A:168:ASP:HB3	1.63	0.78
1:A:102:MET:CE	1:A:436:ILE:HD13	2.14	0.77
1:A:519:GLY:O	1:A:523:ARG:HG3	1.82	0.77
1:A:277:GLN:O	1:A:281:VAL:HG22	1.83	0.77
1:A:345:ALA:O	1:A:349:ILE:HG13	1.84	0.77
1:A:542:THR:CG2	1:A:545:ASP:H	1.96	0.77
1:A:429:LEU:HD11	1:A:449:ARG:HE	1.50	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:42:VAL:HB	1:A:237:VAL:HG23	1.67	0.77
1:A:381:PHE:CG	1:A:386:LEU:HD11	2.20	0.76
1:A:478:GLU:O	1:A:481:LYS:HG3	1.84	0.76
1:A:584:VAL:O	1:A:588:GLU:HB2	1.85	0.76
1:A:71:TRP:O	1:A:75:LEU:HB2	1.84	0.75
1:A:532:ARG:HD2	1:A:534:LEU:O	1.86	0.75
1:A:99:MET:HE3	1:A:102:MET:HG3	1.67	0.75
1:A:253:THR:CG2	1:A:278:GLY:HA2	2.17	0.75
1:A:330:LYS:HD2	1:A:331:LEU:H	1.50	0.75
1:A:5:VAL:HG22	1:A:42:VAL:HG22	1.67	0.74
1:A:257:PHE:HD2	1:A:269:TYR:HD1	1.35	0.74
1:A:432:SER:HB2	1:A:433:PRO:HD2	1.69	0.74
1:A:643:LEU:HD23	1:A:643:LEU:N	2.02	0.74
1:A:729:LYS:HD3	1:A:734:SER:HB3	1.70	0.74
1:A:106:ILE:HD11	1:A:143:VAL:HB	1.70	0.74
1:A:109:LEU:HD23	1:A:109:LEU:O	1.88	0.74
1:A:707:LEU:CD2	1:A:746:ILE:HD11	2.18	0.74
1:A:349:ILE:HG22	1:A:353:LEU:CD1	2.19	0.73
1:A:680:GLN:O	1:A:684:VAL:HG23	1.87	0.73
1:A:156:ILE:HD11	1:A:168:ASP:CB	2.19	0.73
1:A:733:GLY:O	1:A:735:ASP:N	2.21	0.73
1:A:12:ASN:OD1	1:A:15:MET:HG3	1.89	0.73
1:A:429:LEU:HA	1:A:448:VAL:HB	1.69	0.73
1:A:266:LYS:HD2	1:A:267:GLY:H	1.53	0.72
1:A:271:GLU:CG	1:A:453:THR:HG23	2.19	0.72
1:A:649:LYS:HG3	1:A:650:ALA:N	2.02	0.72
1:A:325:THR:O	1:A:332:TYR:N	2.22	0.72
1:A:381:PHE:HB3	1:A:386:LEU:CD1	2.20	0.72
1:A:664:HIS:HD2	1:A:668:ARG:HB3	1.54	0.72
1:A:349:ILE:HG22	1:A:353:LEU:HD11	1.71	0.72
1:A:147:VAL:HB	1:A:190:ALA:CB	2.19	0.72
1:A:285:VAL:HG13	1:A:286:ARG:H	1.54	0.72
1:A:342:THR:HG22	1:A:345:ALA:HB2	1.71	0.71
1:A:513:GLN:HG3	1:A:514:GLU:H	1.51	0.71
1:A:159:MET:CE	1:A:179:LEU:HD13	2.19	0.71
1:A:362:GLU:OE1	1:A:362:GLU:N	2.18	0.71
1:A:149:LYS:NZ	1:A:153:GLU:HG3	2.05	0.71
1:A:196:PHE:CG	1:A:197:PRO:HD2	2.26	0.71
1:A:318:ASP:HB2	1:A:367:ARG:NH1	2.06	0.71
1:A:729:LYS:HB3	1:A:733:GLY:C	2.11	0.71
1:A:131:ASP:HB2	1:A:176:LEU:CD1	2.19	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:146:GLU:HG3	1:A:187:TYR:HE1	1.50	0.70
1:A:278:GLY:O	1:A:280:ASP:N	2.25	0.70
1:A:595:ILE:N	1:A:596:PRO:HD2	2.06	0.70
1:A:149:LYS:HZ3	1:A:153:GLU:HG3	1.56	0.70
1:A:153:GLU:O	1:A:157:ASP:HB2	1.92	0.70
1:A:59:GLN:HG2	1:A:60:GLU:H	1.55	0.70
1:A:679:MET:O	1:A:679:MET:HG2	1.92	0.69
1:A:7:LYS:HB2	1:A:10:GLU:HG2	1.73	0.69
1:A:73:GLU:OE2	1:A:80:PHE:N	2.24	0.69
1:A:167:PHE:CB	1:A:169:THR:HG22	2.22	0.69
1:A:529:ASP:CG	1:A:863:ARG:HH21	1.94	0.69
1:A:429:LEU:HD12	1:A:449:ARG:HG2	1.72	0.69
1:A:386:LEU:CD1	1:A:510:ILE:HG21	2.22	0.69
1:A:351:CYS:O	1:A:354:VAL:HB	1.91	0.69
1:A:532:ARG:HH11	1:A:532:ARG:CG	2.06	0.69
1:A:101:GLY:O	1:A:102:MET:HE2	1.92	0.69
1:A:167:PHE:O	1:A:170:ASP:HB2	1.93	0.69
1:A:213:ARG:HB2	1:A:213:ARG:NH1	2.07	0.68
1:A:377:LEU:HD23	1:A:515:ALA:CB	2.23	0.68
1:A:312:LEU:O	1:A:315:HIS:N	2.27	0.68
1:A:322:MET:HB3	1:A:336:THR:HG23	1.74	0.68
1:A:682:ARG:NH1	1:A:728:VAL:HG22	2.09	0.68
1:A:347:LEU:HD22	1:A:524:ILE:HG13	1.76	0.68
1:A:688:ALA:O	1:A:692:LYS:HB2	1.92	0.68
1:A:59:GLN:HG2	1:A:60:GLU:N	2.08	0.68
1:A:97:ALA:HB2	1:A:233:TRP:HZ3	1.59	0.68
1:A:588:GLU:O	1:A:591:LEU:HB2	1.93	0.68
1:A:690:GLU:O	1:A:694:GLU:HG2	1.94	0.68
1:A:156:ILE:O	1:A:160:LYS:HG3	1.93	0.68
1:A:60:GLU:O	1:A:64:GLN:HG3	1.93	0.67
1:A:84:GLU:HG2	1:A:118:GLY:CA	2.22	0.67
1:A:285:VAL:HG13	1:A:286:ARG:N	2.09	0.67
1:A:257:PHE:CD2	1:A:269:TYR:HD1	2.13	0.67
1:A:495:TYR:O	1:A:496:ILE:HG13	1.94	0.67
1:A:156:ILE:HD11	1:A:168:ASP:CG	2.15	0.67
1:A:271:GLU:HG2	1:A:453:THR:HG23	1.77	0.67
1:A:407:VAL:O	1:A:492:GLU:HA	1.95	0.67
1:A:106:ILE:CD1	1:A:143:VAL:HB	2.25	0.67
1:A:230:PRO:HG2	1:A:233:TRP:NE1	2.10	0.67
1:A:495:TYR:C	1:A:496:ILE:HG13	2.14	0.67
1:A:727:GLN:O	1:A:730:LYS:HD3	1.94	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:578:MET:CE	1:A:587:ARG:HD3	2.24	0.67
1:A:342:THR:HG22	1:A:345:ALA:HB3	1.77	0.66
1:A:384:ALA:HA	1:A:387:LYS:HE3	1.77	0.66
1:A:478:GLU:O	1:A:481:LYS:N	2.28	0.66
1:A:330:LYS:NZ	1:A:331:LEU:O	2.26	0.66
1:A:440:HIS:HA	1:A:463:MET:SD	2.35	0.66
1:A:525:MET:HE3	1:A:860:PRO:CA	2.24	0.66
1:A:659:ASN:N	1:A:660:PRO:HD3	2.10	0.66
1:A:116:VAL:HG11	1:A:130:TYR:CE1	2.30	0.66
1:A:410:THR:OG1	1:A:413:GLU:HG2	1.96	0.66
1:A:471:CYS:SG	1:A:474:ILE:HG13	2.36	0.66
1:A:123:THR:HG22	1:A:125:ASN:H	1.61	0.66
1:A:285:VAL:HG22	1:A:286:ARG:N	2.11	0.66
1:A:94:ALA:C	1:A:235:THR:HG22	2.16	0.66
1:A:673:TYR:O	1:A:676:ILE:HG13	1.96	0.66
1:A:40:PHE:CZ	1:A:239:VAL:HB	2.31	0.66
1:A:603:LYS:O	1:A:607:LYS:HG3	1.96	0.66
1:A:208:VAL:HA	1:A:237:VAL:HG11	1.76	0.65
1:A:261:PRO:HA	1:A:319:MET:CE	2.26	0.65
1:A:126:PRO:HB2	1:A:173:ALA:HB1	1.77	0.65
1:A:71:TRP:NE1	1:A:75:LEU:HD23	2.12	0.65
1:A:107:LEU:CB	1:A:242:MET:HE1	2.26	0.65
1:A:349:ILE:O	1:A:353:LEU:HD12	1.97	0.65
1:A:165:VAL:HG22	1:A:170:ASP:CB	2.26	0.65
1:A:630:THR:O	1:A:634:GLN:HG3	1.96	0.65
1:A:380:THR:O	1:A:512:THR:HA	1.97	0.64
1:A:381:PHE:CD2	1:A:386:LEU:HD21	2.32	0.64
1:A:109:LEU:HB2	1:A:136:PHE:CE1	2.32	0.64
1:A:189:GLU:OE1	1:A:190:ALA:N	2.30	0.64
1:A:347:LEU:O	1:A:350:ALA:HB3	1.98	0.64
1:A:184:LYS:HZ3	1:A:196:PHE:N	1.96	0.64
1:A:691:VAL:O	1:A:695:THR:HG23	1.98	0.63
1:A:729:LYS:HB3	1:A:733:GLY:HA2	1.79	0.63
1:A:732:LYS:O	1:A:732:LYS:HG2	1.98	0.63
1:A:96:ARG:HG2	1:A:96:ARG:O	1.98	0.63
1:A:617:ARG:NH2	2:A:902:SO4:O3	2.29	0.63
1:A:726:GLU:OE1	1:A:729:LYS:HE3	1.99	0.63
1:A:523:ARG:NE	2:A:901:SO4:O3	2.30	0.63
1:A:751:LEU:HD23	1:A:814:MET:CE	2.29	0.63
1:A:354:VAL:HG11	1:A:527:TRP:CH2	2.33	0.63
1:A:368:ILE:HB	1:A:864:LEU:HD11	1.81	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:390:GLU:CB	1:A:505:ILE:HG22	2.29	0.63
1:A:515:ALA:O	1:A:516:SER:HB3	1.97	0.63
1:A:404:ALA:HB2	1:A:496:ILE:HG23	1.80	0.62
1:A:373:LEU:HA	1:A:376:LEU:HD23	1.80	0.62
1:A:386:LEU:HD11	1:A:510:ILE:HG21	1.81	0.62
1:A:159:MET:CE	1:A:179:LEU:HB2	2.30	0.62
1:A:479:GLU:OE1	1:A:479:GLU:N	2.27	0.62
1:A:376:LEU:N	1:A:376:LEU:HD22	2.15	0.62
1:A:418:HIS:HB2	1:A:422:GLU:HG3	1.81	0.62
1:A:323:GLU:HB3	1:A:334:LEU:HB2	1.80	0.62
1:A:258:THR:HA	1:A:268:ILE:HD13	1.82	0.62
1:A:599:LYS:HD3	1:A:686:GLU:CB	2.30	0.62
1:A:323:GLU:OE1	1:A:335:GLN:NE2	2.33	0.62
1:A:542:THR:HG22	1:A:545:ASP:H	1.65	0.62
1:A:147:VAL:CG2	1:A:148:PRO:HD2	2.28	0.61
1:A:317:ARG:NH2	1:A:363:GLU:OE1	2.33	0.61
1:A:729:LYS:HB3	1:A:733:GLY:CA	2.30	0.61
1:A:32:LEU:HD21	1:A:315:HIS:CE1	2.35	0.61
1:A:92:ARG:HH22	1:A:279:GLU:CD	2.03	0.61
1:A:163:LYS:O	1:A:165:VAL:N	2.32	0.61
1:A:644:THR:H	1:A:647:GLU:HB2	1.65	0.61
1:A:159:MET:HE1	1:A:179:LEU:HB2	1.83	0.61
1:A:842:GLU:CD	1:A:873:ASN:HD21	2.02	0.61
1:A:147:VAL:HB	1:A:190:ALA:HB3	1.80	0.61
1:A:211:VAL:O	1:A:214:SER:N	2.33	0.61
1:A:285:VAL:HG22	1:A:286:ARG:H	1.66	0.61
1:A:84:GLU:OE1	1:A:122:LYS:HG2	2.01	0.61
1:A:599:LYS:CD	1:A:686:GLU:HB3	2.30	0.61
1:A:73:GLU:CG	1:A:80:PHE:H	2.13	0.60
1:A:196:PHE:O	1:A:198:GLN:HG2	2.00	0.60
1:A:43:THR:HG22	1:A:45:GLU:N	2.10	0.60
1:A:86:PRO:HG3	1:A:115:ALA:HB1	1.82	0.60
1:A:5:VAL:HG11	1:A:68:ALA:HB2	1.83	0.60
1:A:16:ARG:HG3	1:A:21:GLY:HA2	1.83	0.60
1:A:199:GLU:OE2	1:A:201:LYS:HB2	2.01	0.60
1:A:423:ARG:HA	1:A:443:GLU:HG2	1.83	0.60
1:A:420:LYS:HA	1:A:441:ALA:O	2.01	0.60
1:A:424:VAL:O	1:A:425:ILE:HD13	2.01	0.60
1:A:326:ILE:HA	1:A:330:LYS:O	2.01	0.60
1:A:93:SER:HB2	1:A:235:THR:HG21	1.83	0.60
1:A:549:ALA:HB1	1:A:554:ALA:HB2	1.83	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:363:GLU:O	1:A:367:ARG:HG3	2.01	0.60
1:A:525:MET:HE3	1:A:860:PRO:CB	2.32	0.60
1:A:591:LEU:HD12	1:A:675:GLU:HB3	1.84	0.60
1:A:381:PHE:HB3	1:A:386:LEU:HD11	1.82	0.59
1:A:637:LEU:O	1:A:641:MET:HG3	2.01	0.59
1:A:649:LYS:O	1:A:653:ASP:OD1	2.20	0.59
1:A:73:GLU:HG2	1:A:80:PHE:H	1.66	0.59
1:A:473:GLU:CD	1:A:473:GLU:H	2.04	0.59
1:A:869:ALA:O	1:A:873:ASN:ND2	2.34	0.59
1:A:396:LEU:HB2	1:A:469:SER:O	2.01	0.59
1:A:347:LEU:CD2	1:A:524:ILE:HG13	2.33	0.59
1:A:360:THR:OG1	1:A:363:GLU:HG3	2.03	0.59
1:A:109:LEU:HB2	1:A:136:PHE:HE1	1.65	0.59
1:A:419:GLU:HA	1:A:441:ALA:HB1	1.84	0.59
1:A:779:ARG:NH2	1:A:833:GLU:OE2	2.35	0.59
1:A:79:LYS:HB3	1:A:82:ASP:HB2	1.85	0.59
1:A:599:LYS:HD3	1:A:686:GLU:HB3	1.83	0.59
1:A:726:GLU:OE1	1:A:726:GLU:HA	2.02	0.59
1:A:781:ASP:O	1:A:784:LYS:HG2	2.02	0.59
1:A:707:LEU:HD22	1:A:746:ILE:HD11	1.83	0.59
1:A:131:ASP:HA	1:A:176:LEU:HD13	1.85	0.59
1:A:276:ALA:HB2	1:A:286:ARG:HH22	1.68	0.58
1:A:278:GLY:HA3	3:A:930:HOH:O	2.02	0.58
1:A:420:LYS:HB3	1:A:440:HIS:O	2.02	0.58
1:A:84:GLU:CG	1:A:118:GLY:HA2	2.28	0.58
1:A:429:LEU:CD1	1:A:449:ARG:HG2	2.33	0.58
1:A:330:LYS:HD2	1:A:330:LYS:C	2.17	0.58
1:A:572:ILE:O	1:A:575:ILE:HG22	2.03	0.58
1:A:578:MET:HE3	1:A:587:ARG:HD3	1.84	0.58
1:A:100:PRO:HB3	1:A:458:VAL:HG12	1.85	0.58
1:A:730:LYS:HG3	1:A:730:LYS:O	2.04	0.58
1:A:219:ARG:HD3	1:A:436:ILE:HG22	1.86	0.58
1:A:131:ASP:CA	1:A:176:LEU:HD13	2.33	0.57
1:A:68:ALA:O	1:A:71:TRP:HB3	2.04	0.57
1:A:73:GLU:OE2	1:A:79:LYS:HG2	2.04	0.57
1:A:108:ASN:HB2	1:A:136:PHE:HB2	1.86	0.57
1:A:215:TRP:HH2	1:A:232:ASP:N	2.03	0.57
1:A:396:LEU:O	1:A:468:VAL:HA	2.04	0.57
1:A:403:ALA:O	1:A:496:ILE:HG23	2.03	0.57
1:A:572:ILE:O	1:A:576:ARG:HG3	2.03	0.57
1:A:46:ALA:HA	1:A:49:GLU:HB3	1.86	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:168:ASP:OD1	1:A:168:ASP:N	2.37	0.57
1:A:183:PHE:HA	1:A:186:VAL:HG23	1.87	0.57
1:A:84:GLU:OE2	1:A:121:LYS:HB2	2.05	0.57
1:A:262:SER:O	1:A:342:THR:HG21	2.05	0.57
1:A:529:ASP:OD2	1:A:863:ARG:NH2	2.35	0.57
1:A:449:ARG:HG3	1:A:449:ARG:O	2.04	0.57
1:A:140:TYR:O	1:A:144:VAL:HB	2.05	0.57
1:A:51:TYR:OH	1:A:216:ASP:HB2	2.03	0.57
1:A:104:ASP:HB3	1:A:143:VAL:HG13	1.87	0.57
1:A:392:ILE:CD1	1:A:490:PHE:HZ	2.18	0.57
1:A:460:ALA:O	1:A:464:GLY:N	2.37	0.57
1:A:191:MET:C	1:A:193:GLY:H	2.07	0.56
1:A:99:MET:SD	1:A:103:MET:HE2	2.45	0.56
1:A:141:SER:CB	1:A:187:TYR:HD1	2.18	0.56
1:A:343:ALA:HB3	1:A:344:PRO:HD3	1.86	0.56
1:A:371:LYS:HG2	1:A:838:PRO:HG2	1.85	0.56
1:A:595:ILE:N	1:A:596:PRO:CD	2.69	0.56
1:A:631:GLU:O	1:A:631:GLU:HG3	2.04	0.56
1:A:658:PHE:C	1:A:660:PRO:HD3	2.25	0.56
1:A:4:TRP:H	1:A:64:GLN:NE2	2.02	0.56
1:A:390:GLU:HB3	1:A:505:ILE:HG22	1.87	0.56
1:A:131:ASP:OD1	1:A:134:ARG:NH1	2.39	0.56
1:A:376:LEU:H	1:A:376:LEU:CD2	2.17	0.56
1:A:398:ALA:HB1	1:A:457:ALA:HA	1.88	0.56
1:A:478:GLU:C	1:A:481:LYS:H	2.08	0.56
1:A:729:LYS:CB	1:A:733:GLY:HA2	2.35	0.56
1:A:140:TYR:CD2	1:A:144:VAL:HG21	2.41	0.56
1:A:840:SER:O	1:A:843:PHE:HB3	2.05	0.56
1:A:578:MET:HE2	1:A:587:ARG:HD3	1.88	0.56
1:A:111:LEU:HB3	1:A:133:TYR:HD1	1.70	0.56
1:A:148:PRO:O	1:A:150:SER:N	2.39	0.56
1:A:66:PHE:CE1	1:A:201:LYS:HG2	2.41	0.55
1:A:386:LEU:HD12	1:A:510:ILE:HG21	1.87	0.55
1:A:711:LYS:HE3	1:A:758:GLU:OE1	2.05	0.55
1:A:178:GLU:O	1:A:181:GLU:HB3	2.07	0.55
1:A:432:SER:O	1:A:435:ASP:N	2.39	0.55
1:A:495:TYR:OH	1:A:503:GLY:HA3	2.06	0.55
1:A:126:PRO:HB2	1:A:173:ALA:CB	2.36	0.55
1:A:260:ASN:OD1	1:A:261:PRO:HD2	2.07	0.55
1:A:603:LYS:HE3	1:A:690:GLU:HB3	1.89	0.55
1:A:615:THR:OG1	1:A:702:GLU:OE1	2.24	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:744:ILE:HD13	1:A:744:ILE:N	2.22	0.55
1:A:9:GLU:OE1	1:A:38:GLN:OE1	2.25	0.55
1:A:12:ASN:O	1:A:24:CYS:HB2	2.07	0.55
1:A:184:LYS:HZ3	1:A:196:PHE:H	1.55	0.55
1:A:244:PHE:HB2	1:A:247:LYS:HG2	1.89	0.55
1:A:782:ALA:HB1	1:A:786:LEU:HD22	1.88	0.55
1:A:513:GLN:HG3	1:A:514:GLU:N	2.22	0.55
1:A:391:VAL:HA	1:A:504:LYS:HB3	1.88	0.54
1:A:728:VAL:O	1:A:730:LYS:N	2.39	0.54
1:A:787:ASP:HA	1:A:790:TYR:HD2	1.72	0.54
1:A:376:LEU:HD22	1:A:376:LEU:H	1.72	0.54
1:A:542:THR:HG22	1:A:545:ASP:HB2	1.88	0.54
1:A:121:LYS:C	1:A:123:THR:H	2.09	0.54
1:A:163:LYS:C	1:A:165:VAL:H	2.11	0.54
1:A:381:PHE:CB	1:A:386:LEU:HD11	2.37	0.54
1:A:106:ILE:HD11	1:A:143:VAL:CB	2.36	0.54
1:A:369:GLU:O	1:A:372:SER:OG	2.25	0.54
1:A:618:TYR:CE1	1:A:703:ILE:HG23	2.42	0.54
1:A:842:GLU:CG	1:A:873:ASN:HD21	2.19	0.54
1:A:392:ILE:HD11	1:A:495:TYR:HE2	1.73	0.54
1:A:638:ALA:HB2	1:A:648:VAL:HG21	1.89	0.54
1:A:849:LEU:N	1:A:849:LEU:HD23	2.22	0.54
1:A:215:TRP:CZ2	1:A:234:GLY:N	2.76	0.54
1:A:221:ILE:HG12	1:A:224:ARG:NH2	2.22	0.54
1:A:385:ALA:HB1	1:A:510:ILE:HG23	1.89	0.53
1:A:411:ALA:O	1:A:413:GLU:N	2.40	0.53
1:A:174:ASP:O	1:A:177:LYS:N	2.40	0.53
1:A:190:ALA:O	1:A:191:MET:HG2	2.07	0.53
1:A:699:ILE:HG22	1:A:700:VAL:N	2.23	0.53
1:A:43:THR:HG22	1:A:44:THR:N	2.22	0.53
1:A:408:TYR:HD1	1:A:424:VAL:HG13	1.73	0.53
1:A:390:GLU:HB2	1:A:505:ILE:HG22	1.90	0.53
1:A:418:HIS:HB2	1:A:422:GLU:CG	2.38	0.53
1:A:55:LYS:HD2	1:A:213:ARG:HH22	1.74	0.53
1:A:197:PRO:O	1:A:203:GLN:NE2	2.42	0.53
1:A:219:ARG:NH2	1:A:437:GLU:OE1	2.42	0.53
1:A:436:ILE:HG23	1:A:437:GLU:N	2.24	0.53
1:A:422:GLU:OE1	1:A:422:GLU:O	2.26	0.52
1:A:16:ARG:CG	1:A:21:GLY:HA2	2.39	0.52
1:A:38:GLN:O	1:A:241:THR:HG22	2.08	0.52
1:A:667:CYS:HB3	1:A:706:PRO:O	2.09	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:386:LEU:HA	1:A:510:ILE:CD1	2.40	0.52
1:A:514:GLU:O	1:A:515:ALA:O	2.28	0.52
1:A:563:GLU:CG	1:A:621:PRO:HD3	2.40	0.52
1:A:199:GLU:O	1:A:202:ASP:N	2.42	0.52
1:A:271:GLU:HB2	1:A:288:PRO:HB2	1.91	0.52
1:A:273:LEU:HD11	1:A:286:ARG:O	2.10	0.52
1:A:447:THR:OG1	1:A:469:SER:HA	2.09	0.52
1:A:599:LYS:HG3	1:A:687:ALA:HB2	1.90	0.52
1:A:133:TYR:CE2	1:A:137:ILE:HD11	2.45	0.52
1:A:159:MET:HE1	1:A:179:LEU:CB	2.39	0.52
1:A:188:LYS:HA	1:A:191:MET:HB2	1.92	0.52
1:A:318:ASP:CG	1:A:341:ARG:HH22	2.13	0.52
1:A:525:MET:O	1:A:528:ALA:HB3	2.09	0.52
1:A:597:PHE:CD1	1:A:597:PHE:N	2.78	0.52
1:A:532:ARG:HE	1:A:536:VAL:HG23	1.73	0.52
1:A:285:VAL:CG1	1:A:286:ARG:H	2.17	0.52
1:A:373:LEU:HA	1:A:376:LEU:CD2	2.40	0.52
1:A:360:THR:HG23	1:A:363:GLU:OE2	2.10	0.52
1:A:814:MET:HA	1:A:817:LYS:HE2	1.93	0.51
1:A:386:LEU:HD12	1:A:386:LEU:N	2.26	0.51
1:A:182:LYS:O	1:A:185:ALA:HB3	2.09	0.51
1:A:92:ARG:HH11	1:A:92:ARG:CB	2.24	0.51
1:A:320:GLN:HB2	1:A:322:MET:CE	2.41	0.51
1:A:382:ASN:O	1:A:385:ALA:HB3	2.10	0.51
1:A:407:VAL:HG12	1:A:425:ILE:HB	1.91	0.51
1:A:771:THR:HA	1:A:808:VAL:HG21	1.93	0.51
1:A:219:ARG:HG2	1:A:433:PRO:O	2.10	0.51
1:A:352:ASP:O	1:A:356:GLU:HG3	2.09	0.51
1:A:377:LEU:HA	1:A:515:ALA:HB2	1.91	0.51
1:A:4:TRP:H	1:A:64:GLN:HE22	1.59	0.51
1:A:131:ASP:HB2	1:A:176:LEU:HD13	1.92	0.51
1:A:261:PRO:HD3	1:A:269:TYR:CD1	2.46	0.51
1:A:291:ILE:O	1:A:302:TYR:HE1	1.93	0.51
1:A:578:MET:HG2	1:A:587:ARG:CG	2.32	0.51
1:A:73:GLU:HA	1:A:78:LYS:O	2.11	0.51
1:A:257:PHE:CD2	1:A:269:TYR:CD1	2.97	0.51
1:A:593:GLU:O	1:A:596:PRO:HD2	2.10	0.51
1:A:621:PRO:HG2	1:A:626:PHE:CE2	2.45	0.51
1:A:208:VAL:HG13	1:A:237:VAL:HG21	1.93	0.51
1:A:392:ILE:HD11	1:A:495:TYR:CE2	2.46	0.51
1:A:122:LYS:HE3	1:A:122:LYS:CA	2.41	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:557:ILE:HB	1:A:614:MET:HA	1.93	0.51
1:A:259:ARG:HD3	1:A:266:LYS:HD3	1.92	0.50
1:A:651:LYS:HD2	1:A:651:LYS:O	2.11	0.50
1:A:16:ARG:O	1:A:20:GLY:N	2.44	0.50
1:A:734:SER:OG	1:A:736:MET:HB2	2.11	0.50
1:A:135:ARG:CD	1:A:277:GLN:NE2	2.74	0.50
1:A:187:TYR:O	1:A:191:MET:HG2	2.11	0.50
1:A:327:GLU:N	1:A:330:LYS:O	2.41	0.50
1:A:350:ALA:O	1:A:354:VAL:HG23	2.11	0.50
1:A:135:ARG:HD2	1:A:277:GLN:NE2	2.26	0.50
1:A:80:PHE:HA	1:A:87:LEU:HB3	1.92	0.50
1:A:349:ILE:HG22	1:A:353:LEU:HD12	1.92	0.50
1:A:109:LEU:HD23	1:A:109:LEU:C	2.32	0.50
1:A:485:LEU:O	1:A:487:GLY:N	2.43	0.50
1:A:141:SER:HB3	1:A:187:TYR:HD1	1.77	0.50
1:A:122:LYS:HE3	1:A:122:LYS:HA	1.92	0.49
1:A:135:ARG:O	1:A:139:MET:HG3	2.12	0.49
1:A:171:LEU:HB3	1:A:175:ASP:HB2	1.93	0.49
1:A:100:PRO:O	1:A:102:MET:HG2	2.12	0.49
1:A:474:ILE:HG12	1:A:485:LEU:CD1	2.42	0.49
1:A:711:LYS:HG3	1:A:755:ALA:O	2.12	0.49
1:A:381:PHE:HZ	1:A:496:ILE:CG2	2.25	0.49
1:A:498:LEU:N	1:A:498:LEU:HD13	2.28	0.49
1:A:510:ILE:CG2	1:A:511:GLU:N	2.74	0.49
1:A:563:GLU:HG2	1:A:621:PRO:HD3	1.94	0.49
1:A:107:LEU:HG	1:A:139:MET:SD	2.52	0.49
1:A:316:PHE:N	1:A:316:PHE:CD1	2.80	0.49
1:A:733:GLY:O	1:A:735:ASP:OD1	2.31	0.49
1:A:67:GLU:O	1:A:70:THR:HG23	2.12	0.49
1:A:141:SER:CB	1:A:187:TYR:CD1	2.96	0.49
1:A:175:ASP:O	1:A:179:LEU:N	2.38	0.49
1:A:322:MET:SD	1:A:333:PHE:HE2	2.36	0.49
1:A:294:LEU:O	1:A:294:LEU:HD23	2.13	0.49
1:A:76:ASN:HD22	1:A:76:ASN:C	2.15	0.49
1:A:135:ARG:HH12	1:A:281:VAL:CG1	2.26	0.49
1:A:141:SER:HB3	1:A:187:TYR:CD1	2.47	0.49
1:A:222:VAL:HG11	1:A:437:GLU:HG3	1.95	0.49
1:A:376:LEU:N	1:A:376:LEU:CD2	2.75	0.49
1:A:491:ALA:O	1:A:492:GLU:HB2	2.13	0.49
1:A:496:ILE:HG21	1:A:510:ILE:HB	1.95	0.49
1:A:677:ALA:O	1:A:681:THR:OG1	2.22	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:444:GLY:HA2	1:A:465:THR:HG22	1.94	0.49
1:A:734:SER:CB	1:A:736:MET:H	2.10	0.49
1:A:130:TYR:CE1	1:A:177:LYS:HD3	2.48	0.49
1:A:177:LYS:HD2	1:A:177:LYS:O	2.13	0.49
1:A:542:THR:HG23	1:A:544:GLU:HG2	1.95	0.49
1:A:13:ALA:HA	1:A:24:CYS:HB2	1.95	0.48
1:A:49:GLU:HG2	1:A:61:ILE:HD11	1.95	0.48
1:A:569:ALA:C	1:A:571:ARG:H	2.15	0.48
1:A:830:ILE:CG2	1:A:852:VAL:HG12	2.43	0.48
1:A:99:MET:HB2	1:A:223:TYR:CE1	2.49	0.48
1:A:411:ALA:HB1	1:A:438:GLY:H	1.78	0.48
1:A:253:THR:HG21	1:A:278:GLY:N	2.28	0.48
1:A:448:VAL:HG22	1:A:474:ILE:HB	1.95	0.48
1:A:474:ILE:CG2	1:A:483:PHE:HB2	2.43	0.48
1:A:498:LEU:N	1:A:498:LEU:CD1	2.76	0.48
1:A:563:GLU:OE2	1:A:620:ASP:N	2.41	0.48
1:A:42:VAL:HB	1:A:237:VAL:CG2	2.41	0.48
1:A:44:THR:O	1:A:47:CYS:HB3	2.12	0.48
1:A:73:GLU:HG2	1:A:80:PHE:N	2.29	0.48
1:A:184:LYS:NZ	1:A:196:PHE:H	2.12	0.48
1:A:187:TYR:HE2	1:A:194:GLU:OE1	1.96	0.48
1:A:107:LEU:CD2	1:A:279:GLU:HG3	2.24	0.48
1:A:320:GLN:HB3	1:A:336:THR:HG22	1.96	0.48
1:A:377:LEU:HD23	1:A:515:ALA:HB2	1.93	0.48
1:A:407:VAL:CG1	1:A:495:TYR:HB3	2.43	0.48
1:A:699:ILE:HB	1:A:736:MET:HE1	1.94	0.48
1:A:864:LEU:HD13	1:A:868:GLN:NE2	2.28	0.48
1:A:73:GLU:CD	1:A:80:PHE:H	2.16	0.48
1:A:319:MET:SD	1:A:339:GLY:HA3	2.54	0.48
1:A:147:VAL:HG23	1:A:148:PRO:HD2	1.94	0.48
1:A:418:HIS:HB2	1:A:422:GLU:CB	2.44	0.48
1:A:71:TRP:O	1:A:74:GLU:HG2	2.14	0.48
1:A:97:ALA:HB2	1:A:233:TRP:CZ3	2.45	0.48
1:A:400:PRO:HA	1:A:499:ASP:HB2	1.92	0.48
1:A:803:LEU:CD2	1:A:843:PHE:CD2	2.97	0.48
1:A:384:ALA:HA	1:A:387:LYS:HB3	1.96	0.48
1:A:573:MET:O	1:A:577:LYS:N	2.46	0.48
1:A:864:LEU:O	1:A:867:ALA:HB3	2.14	0.48
1:A:392:ILE:CD1	1:A:490:PHE:CZ	2.95	0.47
1:A:649:LYS:O	1:A:652:VAL:HB	2.14	0.47
1:A:857:PHE:O	1:A:860:PRO:HD2	2.14	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:73:GLU:CG	1:A:79:LYS:HA	2.39	0.47
1:A:137:ILE:HD13	1:A:184:LYS:HB2	1.95	0.47
1:A:579:ILE:HG12	1:A:623:LEU:HD13	1.95	0.47
1:A:754:ASP:O	1:A:822:THR:HG21	2.13	0.47
1:A:127:ARG:HD2	1:A:171:LEU:O	2.13	0.47
1:A:43:THR:CG2	1:A:44:THR:N	2.77	0.47
1:A:94:ALA:N	1:A:235:THR:HG22	2.30	0.47
1:A:99:MET:O	1:A:99:MET:HG3	2.14	0.47
1:A:107:LEU:HB3	1:A:242:MET:HE3	1.95	0.47
1:A:130:TYR:CD1	1:A:177:LYS:HB2	2.48	0.47
1:A:248:GLY:C	1:A:275:ASN:HB2	2.34	0.47
1:A:520:SER:O	1:A:524:ILE:HG12	2.15	0.47
1:A:617:ARG:HB2	1:A:704:MET:CE	2.44	0.47
1:A:281:VAL:HG23	1:A:282:VAL:N	2.28	0.47
1:A:415:LYS:O	1:A:418:HIS:N	2.48	0.47
1:A:429:LEU:HD21	1:A:449:ARG:HH21	1.79	0.47
1:A:495:TYR:CD1	1:A:496:ILE:N	2.82	0.47
1:A:224:ARG:HH11	1:A:231:GLY:HA3	1.77	0.47
1:A:259:ARG:CZ	1:A:266:LYS:HD3	2.44	0.47
1:A:381:PHE:CB	1:A:386:LEU:HD21	2.45	0.47
1:A:132:SER:O	1:A:135:ARG:HB2	2.14	0.47
1:A:200:PRO:O	1:A:203:GLN:HB2	2.13	0.47
1:A:258:THR:O	1:A:259:ARG:HG2	2.14	0.47
1:A:429:LEU:HD11	1:A:449:ARG:NE	2.25	0.47
1:A:440:HIS:HB2	1:A:463:MET:HE1	1.97	0.47
1:A:538:THR:HG21	1:A:549:ALA:CB	2.44	0.47
1:A:747:PRO:O	1:A:751:LEU:HG	2.15	0.47
1:A:864:LEU:HD23	1:A:864:LEU:HA	1.71	0.47
1:A:72:LEU:O	1:A:75:LEU:HB3	2.15	0.47
1:A:285:VAL:CG1	1:A:286:ARG:N	2.76	0.47
1:A:40:PHE:CE2	1:A:239:VAL:HB	2.50	0.47
1:A:97:ALA:CB	1:A:233:TRP:HZ3	2.25	0.47
1:A:342:THR:HG23	1:A:344:PRO:HD2	1.96	0.47
1:A:347:LEU:HD12	1:A:376:LEU:HD11	1.96	0.47
1:A:633:GLU:O	1:A:633:GLU:OE1	2.33	0.47
1:A:811:LEU:HD23	1:A:814:MET:CE	2.45	0.47
1:A:84:GLU:HA	1:A:118:GLY:CA	2.33	0.47
1:A:271:GLU:CG	1:A:453:THR:CG2	2.92	0.47
1:A:381:PHE:HD2	1:A:386:LEU:HD21	1.79	0.47
1:A:34:MET:HE3	1:A:34:MET:HB3	1.76	0.46
1:A:149:LYS:HG2	1:A:149:LYS:O	2.15	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:729:LYS:HD3	1:A:734:SER:CB	2.44	0.46
1:A:277:GLN:H	1:A:281:VAL:CG1	2.28	0.46
1:A:381:PHE:HB3	1:A:386:LEU:HD13	1.95	0.46
1:A:734:SER:HB3	1:A:736:MET:N	2.10	0.46
1:A:855:SER:HB3	1:A:856:PRO:HD2	1.96	0.46
1:A:695:THR:OG1	1:A:696:GLY:N	2.48	0.46
1:A:373:LEU:O	1:A:376:LEU:HD23	2.15	0.46
1:A:420:LYS:NZ	1:A:420:LYS:CB	2.79	0.46
1:A:587:ARG:HD2	1:A:675:GLU:OE1	2.15	0.46
1:A:601:ASP:O	1:A:605:MET:HG2	2.16	0.46
1:A:668:ARG:HH11	1:A:668:ARG:CG	2.28	0.46
1:A:842:GLU:HG3	1:A:873:ASN:HD21	1.79	0.46
1:A:230:PRO:HG2	1:A:233:TRP:CE2	2.50	0.46
1:A:65:ILE:CG2	1:A:204:LEU:HD21	2.45	0.46
1:A:100:PRO:HD2	1:A:223:TYR:OH	2.15	0.46
1:A:627:VAL:HB	1:A:628:PRO:HD2	1.97	0.46
1:A:782:ALA:HA	1:A:785:PHE:CZ	2.50	0.46
1:A:108:ASN:ND2	1:A:277:GLN:HE22	1.98	0.46
1:A:111:LEU:HB3	1:A:133:TYR:CD1	2.49	0.46
1:A:391:VAL:O	1:A:391:VAL:HG12	2.15	0.46
1:A:532:ARG:CG	1:A:532:ARG:NH1	2.76	0.46
1:A:599:LYS:HD3	1:A:686:GLU:HB2	1.96	0.46
1:A:92:ARG:HH11	1:A:92:ARG:HB3	1.81	0.46
1:A:117:GLU:O	1:A:121:LYS:HG2	2.16	0.46
1:A:199:GLU:HA	1:A:200:PRO:HD2	1.80	0.46
1:A:482:THR:HA	1:A:490:PHE:O	2.16	0.46
1:A:543:PRO:O	1:A:546:THR:HB	2.15	0.46
1:A:205:MET:O	1:A:209:LYS:HB2	2.15	0.46
1:A:214:SER:O	1:A:217:ASN:HB2	2.16	0.46
1:A:274:ILE:HD11	1:A:298:MET:HE3	1.98	0.46
1:A:321:ASP:HB2	1:A:339:GLY:HA2	1.98	0.46
1:A:603:LYS:HE3	1:A:690:GLU:CB	2.46	0.46
1:A:215:TRP:CH2	1:A:231:GLY:C	2.89	0.46
1:A:221:ILE:CG1	1:A:224:ARG:NH2	2.78	0.46
1:A:445:ILE:HD13	1:A:460:ALA:HB2	1.97	0.46
1:A:476:ILE:HG22	1:A:477:ASN:N	2.31	0.46
1:A:624:HIS:CE1	1:A:629:HIS:CD2	3.04	0.46
1:A:525:MET:HE3	1:A:860:PRO:HA	1.96	0.45
1:A:710:GLU:O	1:A:713:GLU:HB3	2.14	0.45
1:A:527:TRP:O	1:A:531:PHE:CD2	2.69	0.45
1:A:662:MET:HG2	1:A:773:MET:CE	2.47	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:751:LEU:HD23	1:A:814:MET:HE3	1.96	0.45
1:A:159:MET:HE1	1:A:179:LEU:CA	2.46	0.45
1:A:263:THR:C	1:A:265:GLU:H	2.19	0.45
1:A:404:ALA:HB1	1:A:496:ILE:HG12	1.98	0.45
1:A:649:LYS:HG3	1:A:650:ALA:H	1.76	0.45
1:A:707:LEU:HD21	1:A:746:ILE:HD11	1.94	0.45
1:A:627:VAL:HB	1:A:628:PRO:CD	2.46	0.45
1:A:117:GLU:OE1	1:A:117:GLU:HA	2.16	0.45
1:A:159:MET:HE2	1:A:159:MET:HB2	1.79	0.45
1:A:189:GLU:OE1	1:A:190:ALA:HB2	2.17	0.45
1:A:285:VAL:CG2	1:A:286:ARG:H	2.25	0.45
1:A:436:ILE:CG2	1:A:437:GLU:N	2.79	0.45
1:A:591:LEU:HA	1:A:591:LEU:HD23	1.62	0.45
1:A:842:GLU:HG3	1:A:873:ASN:ND2	2.32	0.45
1:A:4:TRP:CB	1:A:61:ILE:HG12	2.46	0.45
1:A:542:THR:CG2	1:A:544:GLU:HG2	2.46	0.45
1:A:557:ILE:HG22	1:A:559:LEU:H	1.82	0.45
1:A:643:LEU:HD23	1:A:643:LEU:H	1.78	0.45
1:A:662:MET:HG2	1:A:773:MET:HE2	1.98	0.45
1:A:165:VAL:HG21	1:A:170:ASP:HB3	1.96	0.45
1:A:217:ASN:OD1	1:A:218:PRO:HD2	2.17	0.45
1:A:102:MET:SD	1:A:223:TYR:CD2	3.10	0.45
1:A:159:MET:O	1:A:163:LYS:HB2	2.16	0.45
1:A:258:THR:HG23	1:A:322:MET:HE3	1.99	0.45
1:A:69:ILE:HA	1:A:69:ILE:HD13	1.51	0.45
1:A:290:PRO:O	1:A:292:THR:N	2.50	0.45
1:A:381:PHE:CZ	1:A:496:ILE:CG2	3.00	0.45
1:A:386:LEU:HD12	1:A:510:ILE:HD13	1.99	0.45
1:A:406:LYS:O	1:A:424:VAL:HA	2.16	0.45
1:A:699:ILE:HB	1:A:736:MET:CE	2.46	0.45
1:A:127:ARG:O	1:A:176:LEU:HD12	2.17	0.44
1:A:386:LEU:CD1	1:A:386:LEU:N	2.80	0.44
1:A:418:HIS:HB2	1:A:422:GLU:HB2	1.98	0.44
1:A:559:LEU:CD1	1:A:617:ARG:HB3	2.46	0.44
1:A:751:LEU:CD2	1:A:814:MET:HE1	2.47	0.44
1:A:99:MET:HE3	1:A:102:MET:CG	2.40	0.44
1:A:140:TYR:C	1:A:140:TYR:CD1	2.90	0.44
1:A:222:VAL:HG22	1:A:222:VAL:O	2.17	0.44
1:A:258:THR:HG23	1:A:322:MET:CE	2.47	0.44
1:A:268:ILE:HD13	1:A:268:ILE:HA	1.41	0.44
1:A:342:THR:CG2	1:A:345:ALA:H	2.30	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:432:SER:OG	1:A:434:GLU:HG2	2.17	0.44
1:A:753:ALA:HB1	1:A:763:PHE:CE2	2.52	0.44
1:A:99:MET:HA	1:A:100:PRO:HD2	1.54	0.44
1:A:106:ILE:HD11	1:A:143:VAL:CG1	2.47	0.44
1:A:266:LYS:HD2	1:A:267:GLY:N	2.26	0.44
1:A:278:GLY:C	1:A:280:ASP:H	2.21	0.44
1:A:649:LYS:CB	1:A:649:LYS:NZ	2.80	0.44
1:A:259:ARG:HB2	1:A:319:MET:HG3	2.00	0.44
1:A:309:ALA:O	1:A:312:LEU:HB2	2.17	0.44
1:A:722:VAL:HG12	1:A:723:GLU:N	2.32	0.44
1:A:72:LEU:HB3	1:A:87:LEU:HD21	1.98	0.44
1:A:219:ARG:CG	1:A:436:ILE:HG21	2.40	0.44
1:A:381:PHE:CE2	1:A:498:LEU:HB3	2.53	0.44
1:A:747:PRO:HB3	1:A:811:LEU:HD13	1.98	0.44
1:A:281:VAL:CG2	1:A:282:VAL:N	2.80	0.44
1:A:353:LEU:CD2	1:A:358:MET:SD	3.05	0.44
1:A:411:ALA:HA	1:A:438:GLY:HA3	1.99	0.44
1:A:72:LEU:HD23	1:A:72:LEU:HA	1.91	0.44
1:A:557:ILE:HD13	1:A:557:ILE:HG21	1.61	0.44
1:A:573:MET:O	1:A:577:LYS:HG3	2.17	0.44
1:A:159:MET:HE1	1:A:179:LEU:HA	2.00	0.44
1:A:262:SER:CB	1:A:461:ARG:HD2	2.33	0.44
1:A:143:VAL:C	1:A:145:MET:H	2.20	0.44
1:A:150:SER:HB2	1:A:151:HIS:ND1	2.33	0.44
1:A:320:GLN:HB2	1:A:322:MET:HE1	1.99	0.44
1:A:474:ILE:HG12	1:A:485:LEU:HD11	2.00	0.44
1:A:50:TYR:OH	1:A:213:ARG:NH1	2.51	0.43
1:A:147:VAL:HA	1:A:148:PRO:HD3	1.46	0.43
1:A:390:GLU:HB3	1:A:505:ILE:CG2	2.48	0.43
1:A:418:HIS:O	1:A:419:GLU:O	2.36	0.43
1:A:577:LYS:NZ	1:A:577:LYS:HB3	2.33	0.43
1:A:643:LEU:N	1:A:643:LEU:CD2	2.75	0.43
1:A:4:TRP:CG	1:A:61:ILE:HG12	2.52	0.43
1:A:99:MET:CG	1:A:103:MET:CE	2.96	0.43
1:A:382:ASN:O	1:A:386:LEU:HD13	2.18	0.43
1:A:429:LEU:O	1:A:449:ARG:HG2	2.17	0.43
1:A:537:ARG:NH2	1:A:702:GLU:OE1	2.46	0.43
1:A:594:LEU:C	1:A:596:PRO:HD2	2.37	0.43
1:A:172:THR:C	1:A:174:ASP:N	2.71	0.43
1:A:278:GLY:C	1:A:280:ASP:N	2.71	0.43
1:A:160:LYS:O	1:A:165:VAL: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:382:ASN:OD1	1:A:383:PRO:HD2	2.17	0.43
1:A:465:THR:HG22	1:A:466:CYS:N	2.33	0.43
1:A:145:MET:O	1:A:145:MET:HG3	2.18	0.43
1:A:525:MET:HE3	1:A:860:PRO:HB3	2.01	0.43
1:A:496:ILE:HD13	1:A:510:ILE:N	2.33	0.43
1:A:621:PRO:HB2	1:A:622:PRO:HD2	2.01	0.43
1:A:274:ILE:HD11	1:A:298:MET:CE	2.48	0.43
1:A:547:LEU:HD23	1:A:547:LEU:HA	1.70	0.43
1:A:782:ALA:HA	1:A:785:PHE:CE2	2.53	0.43
1:A:121:LYS:C	1:A:123:THR:N	2.72	0.43
1:A:477:ASN:O	1:A:481:LYS:N	2.52	0.43
1:A:445:ILE:HD12	1:A:466:CYS:O	2.19	0.43
1:A:732:LYS:C	1:A:734:SER:N	2.68	0.43
1:A:92:ARG:HB3	1:A:92:ARG:NH1	2.34	0.43
1:A:261:PRO:HA	1:A:319:MET:HE1	1.99	0.43
1:A:312:LEU:O	1:A:315:HIS:HB3	2.19	0.43
1:A:381:PHE:HD1	1:A:381:PHE:HA	1.69	0.43
1:A:747:PRO:HB3	1:A:811:LEU:CD1	2.49	0.43
1:A:87:LEU:HD12	1:A:87:LEU:HA	1.92	0.42
1:A:112:ASN:HA	1:A:133:TYR:HE1	1.84	0.42
1:A:215:TRP:CE2	1:A:234:GLY:HA2	2.53	0.42
1:A:390:GLU:CB	1:A:505:ILE:CG2	2.95	0.42
1:A:399:SER:HB3	1:A:461:ARG:HG3	2.01	0.42
1:A:514:GLU:HG2	1:A:515:ALA:N	2.33	0.42
1:A:641:MET:O	1:A:643:LEU:HD23	2.19	0.42
1:A:253:THR:O	1:A:282:VAL:HG21	2.19	0.42
1:A:411:ALA:HB1	1:A:438:GLY:HA3	2.01	0.42
1:A:474:ILE:HA	1:A:484:GLU:O	2.19	0.42
1:A:478:GLU:O	1:A:480:ALA:N	2.52	0.42
1:A:565:MET:HE1	1:A:602:PHE:CE1	2.54	0.42
1:A:95:ALA:N	1:A:235:THR:CG2	2.82	0.42
1:A:172:THR:C	1:A:174:ASP:H	2.22	0.42
1:A:730:LYS:O	1:A:730:LYS:CG	2.67	0.42
1:A:43:THR:O	1:A:46:ALA:HB3	2.19	0.42
1:A:386:LEU:HD12	1:A:510:ILE:CG2	2.50	0.42
1:A:599:LYS:HD2	1:A:686:GLU:HB3	2.01	0.42
1:A:61:ILE:HG22	1:A:62:GLN:N	2.35	0.42
1:A:135:ARG:HD3	1:A:277:GLN:HE21	1.84	0.42
1:A:373:LEU:CA	1:A:376:LEU:HD23	2.49	0.42
1:A:409:PHE:O	1:A:410:THR:HG22	2.19	0.42
1:A:446:LEU:HD23	1:A:446:LEU:HA	1.53	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:750:ALA:HB1	1:A:811:LEU:O	2.19	0.42
1:A:830:ILE:HG22	1:A:852:VAL:HA	2.02	0.42
1:A:130:TYR:CE1	1:A:177:LYS:HB2	2.55	0.42
1:A:147:VAL:HB	1:A:190:ALA:HB1	1.98	0.42
1:A:640:ASN:O	1:A:641:MET:HG2	2.20	0.42
1:A:842:GLU:CG	1:A:846:LYS:HD2	2.42	0.42
1:A:131:ASP:CB	1:A:176:LEU:HD13	2.49	0.42
1:A:160:LYS:HD2	1:A:166:HIS:C	2.40	0.42
1:A:261:PRO:HG3	1:A:269:TYR:CE1	2.55	0.42
1:A:557:ILE:HB	1:A:614:MET:HB2	2.02	0.42
1:A:617:ARG:HB2	1:A:704:MET:HE2	2.02	0.42
1:A:182:LYS:O	1:A:185:ALA:N	2.46	0.42
1:A:183:PHE:O	1:A:186:VAL:HG23	2.19	0.42
1:A:463:MET:HG3	1:A:465:THR:OG1	2.20	0.42
1:A:219:ARG:O	1:A:222:VAL:HG12	2.20	0.42
1:A:219:ARG:CD	1:A:436:ILE:HG22	2.50	0.42
1:A:259:ARG:CD	1:A:266:LYS:HD3	2.50	0.42
1:A:309:ALA:HA	1:A:312:LEU:HD12	2.02	0.42
1:A:372:SER:H	1:A:372:SER:HG	1.55	0.42
1:A:706:PRO:HA	1:A:743:MET:HB2	2.02	0.42
1:A:767:THR:HA	1:A:770:LEU:HB3	2.02	0.42
1:A:71:TRP:HA	1:A:74:GLU:HG2	2.02	0.42
1:A:257:PHE:HA	1:A:320:GLN:O	2.20	0.42
1:A:293:GLN:O	1:A:296:ASN:HB2	2.20	0.42
1:A:497:SER:O	1:A:498:LEU:HB3	2.19	0.42
1:A:587:ARG:O	1:A:591:LEU:HG	2.20	0.42
1:A:675:GLU:H	1:A:675:GLU:HG3	1.41	0.42
1:A:4:TRP:HB3	1:A:61:ILE:HG12	2.02	0.41
1:A:37:PRO:HB2	1:A:240:GLN:HG2	2.02	0.41
1:A:51:TYR:CZ	1:A:216:ASP:HB2	2.55	0.41
1:A:387:LYS:HE3	1:A:387:LYS:HB3	1.63	0.41
1:A:396:LEU:HA	1:A:397:PRO:HD2	1.85	0.41
1:A:543:PRO:HA	1:A:546:THR:HB	2.02	0.41
1:A:140:TYR:CE2	1:A:144:VAL:HG21	2.55	0.41
1:A:303:LYS:NZ	1:A:303:LYS:CB	2.84	0.41
1:A:521:PHE:CD1	1:A:521:PHE:C	2.94	0.41
1:A:729:LYS:HD3	1:A:735:ASP:H	1.85	0.41
1:A:52:ASN:C	1:A:54:GLY:H	2.24	0.41
1:A:121:LYS:O	1:A:123:THR:N	2.53	0.41
1:A:188:LYS:HB3	1:A:194:GLU:O	2.20	0.41
1:A:276:ALA:HB2	1:A:286:ARG:NH2	2.32	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:477:ASN:OD1	1:A:479:GLU:HB2	2.20	0.41
1:A:565:MET:O	1:A:571:ARG:HD3	2.21	0.41
1:A:673:TYR:N	1:A:674:PRO:HD3	2.35	0.41
1:A:591:LEU:CD1	1:A:675:GLU:CB	2.98	0.41
1:A:390:GLU:HA	1:A:390:GLU:OE1	2.21	0.41
1:A:36:ILE:HG21	1:A:36:ILE:HD13	1.65	0.41
1:A:274:ILE:CD1	1:A:298:MET:CE	2.98	0.41
1:A:5:VAL:HG13	1:A:40:PHE:HB2	2.02	0.41
1:A:18:LEU:HD23	1:A:18:LEU:HA	1.76	0.41
1:A:542:THR:HG23	1:A:543:PRO:N	2.36	0.41
1:A:619:LEU:HD12	1:A:619:LEU:HA	1.81	0.41
1:A:99:MET:CE	1:A:102:MET:CB	2.99	0.41
1:A:127:ARG:HA	1:A:173:ALA:HA	2.02	0.41
1:A:643:LEU:HB3	1:A:647:GLU:CB	2.51	0.41
1:A:659:ASN:HA	1:A:660:PRO:HD2	1.88	0.41
1:A:742:THR:N	1:A:762:PHE:O	2.50	0.41
1:A:141:SER:HB2	1:A:187:TYR:CD1	2.56	0.41
1:A:542:THR:HG22	1:A:545:ASP:CB	2.50	0.41
1:A:649:LYS:NZ	1:A:649:LYS:HB3	2.36	0.41
1:A:782:ALA:O	1:A:784:LYS:N	2.54	0.41
1:A:847:VAL:HG12	1:A:849:LEU:HD23	2.03	0.41
1:A:7:LYS:HB2	1:A:10:GLU:CG	2.45	0.41
1:A:107:LEU:HD11	1:A:279:GLU:HG2	2.03	0.41
1:A:95:ALA:N	1:A:235:THR:HG22	2.36	0.40
1:A:163:LYS:HB2	1:A:163:LYS:HE3	1.83	0.40
1:A:304:GLN:OE1	1:A:331:LEU:HB3	2.21	0.40
1:A:431:THR:HA	1:A:435:ASP:OD2	2.21	0.40
1:A:537:ARG:HH22	1:A:702:GLU:CD	2.25	0.40
1:A:482:THR:HB	1:A:490:PHE:O	2.20	0.40
1:A:623:LEU:HA	1:A:623:LEU:HD23	1.70	0.40
1:A:746:ILE:HD13	1:A:773:MET:SD	2.61	0.40
1:A:37:PRO:O	1:A:240:GLN:HG3	2.21	0.40
1:A:67:GLU:HA	1:A:70:THR:HG23	2.03	0.40
1:A:149:LYS:NZ	1:A:153:GLU:CG	2.81	0.40
1:A:179:LEU:CD1	1:A:183:PHE:CE1	2.97	0.40
1:A:189:GLU:CD	1:A:190:ALA:N	2.75	0.40
1:A:444:GLY:HA3	1:A:466:CYS:HB3	2.02	0.40
1:A:187:TYR:CE2	1:A:191:MET:HG3	2.57	0.40
1:A:353:LEU:O	1:A:358:MET:N	2.48	0.40
1:A:365:VAL:HG13	1:A:864:LEU:CD2	2.51	0.40
1:A:543:PRO:O	1:A:547:LEU:N	2.48	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:584:VAL:H	1:A:584:VAL:HG23	1.63	0.40
1:A:599:LYS:O	1:A:603:LYS:HG3	2.22	0.40
1:A:669:LEU:HD23	1:A:669:LEU:HA	1.65	0.40
1:A:707:LEU:HA	1:A:707:LEU:HD23	1.66	0.40
1:A:106:ILE:HD12	1:A:140:TYR:HA	2.04	0.40
1:A:415:LYS:NZ	1:A:437:GLU:OE2	2.45	0.40

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



Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:121:LYS:CE	1:A:732:LYS:NZ[1_554]	1.65	0.55
1:A:117:GLU:CG	1:A:732:LYS:CG[1_554]	1.79	0.41
1:A:117:GLU:OE1	1:A:732:LYS:CE[1_554]	1.84	0.36
1:A:117:GLU:CD	1:A:732:LYS:CD[1_554]	2.00	0.20

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	865/873 (99%)	732 (85%)	93 (11%)	40 (5%)	 

All (40) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	113	ASP
1	A	145	MET
1	A	265	GLU
1	A	279	GLU
1	A	419	GLU
1	A	420	LYS
1	A	515	ALA

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	516	SER
1	A	734	SER
1	A	77	GLY
1	A	149	LYS
1	A	215	TRP
1	A	266	LYS
1	A	278	GLY
1	A	285	VAL
1	A	412	ASP
1	A	436	ILE
1	A	473	GLU
1	A	493	GLY
1	A	3	LYS
1	A	275	ASN
1	A	286	ARG
1	A	500	GLY
1	A	618	TYR
1	A	80	PHE
1	A	148	PRO
1	A	398	ALA
1	A	418	HIS
1	A	487	GLY
1	A	518	SER
1	A	529	ASP
1	A	152	PHE
1	A	249	GLU
1	A	479	GLU
1	A	20	GLY
1	A	421	GLY
1	A	620	ASP
1	A	783	GLY
1	A	164	GLY
1	A	517	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	710/713 (100%)	605 (85%)	105 (15%)	3 5

All (105) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	31	ILE
1	A	34	MET
1	A	59	GLN
1	A	67	GLU
1	A	70	THR
1	A	75	LEU
1	A	76	ASN
1	A	78	LYS
1	A	79	LYS
1	A	84	GLU
1	A	92	ARG
1	A	104	ASP
1	A	106	ILE
1	A	109	LEU
1	A	116	VAL
1	A	121	LYS
1	A	123	THR
1	A	134	ARG
1	A	140	TYR
1	A	142	ASP
1	A	151	HIS
1	A	157	ASP
1	A	163	LYS
1	A	168	ASP
1	A	171	LEU
1	A	172	THR
1	A	182	LYS
1	A	186	VAL
1	A	189	GLU
1	A	194	GLU
1	A	195	GLU
1	A	199	GLU
1	A	205	MET
1	A	213	ARG
1	A	216	ASP
1	A	219	ARG
1	A	235	THR
1	A	237	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	241	THR
1	A	249	GLU
1	A	268	ILE
1	A	274	ILE
1	A	280	ASP
1	A	287	THR
1	A	307	ASP
1	A	327	GLU
1	A	330	LYS
1	A	336	THR
1	A	340	LYS
1	A	342	THR
1	A	363	GLU
1	A	366	VAL
1	A	371	LYS
1	A	374	ASP
1	A	376	LEU
1	A	381	PHE
1	A	387	LYS
1	A	390	GLU
1	A	412	ASP
1	A	419	GLU
1	A	420	LYS
1	A	440	HIS
1	A	446	LEU
1	A	452	MET
1	A	463	MET
1	A	475	LYS
1	A	485	LEU
1	A	498	LEU
1	A	499	ASP
1	A	502	THR
1	A	504	LYS
1	A	510	ILE
1	A	520	SER
1	A	525	MET
1	A	532	ARG
1	A	542	THR
1	A	544	GLU
1	A	578	MET
1	A	588	GLU
1	A	614	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	617	ARG
1	A	632	GLU
1	A	633	GLU
1	A	636	GLU
1	A	643	LEU
1	A	649	LYS
1	A	667	CYS
1	A	668	ARG
1	A	675	GLU
1	A	679	MET
1	A	694	GLU
1	A	711	LYS
1	A	727	GLN
1	A	734	SER
1	A	737	GLN
1	A	769	ASP
1	A	784	LYS
1	A	786	LEU
1	A	796	GLU
1	A	797	SER
1	A	827	LYS
1	A	839	SER
1	A	849	LEU
1	A	855	SER
1	A	864	LEU

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

Mol	Chain	Res	Type
1	A	52	ASN
1	A	59	GLN
1	A	64	GLN
1	A	76	ASN
1	A	227	ASN
1	A	277	GLN
1	A	335	GLN
1	A	513	GLN
1	A	624	HIS
1	A	664	HIS
1	A	737	GLN
1	A	821	GLN
1	A	845	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	850	ASN
1	A	873	ASN

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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 monosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry ⓘ

2 ligands are modelled in this entry.

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	SO4	A	902	-	4,4,4	2.34	2 (50%)	6,6,6	0.58	0
2	SO4	A	901	-	4,4,4	0.99	0	6,6,6	0.33	0

All (2) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	A	902	SO4	O1-S	3.75	1.66	1.46
2	A	902	SO4	O4-S	2.27	1.66	1.47

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

2 monomers are involved in 2 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
2	A	902	SO4	1	0
2	A	901	SO4	1	0

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

EDS was not executed - this section is therefore empty.

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

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.3 Carbohydrates

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.4 Ligands

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.5 Other polymers

EDS was not executed - this section is therefore empty.