



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

May 16, 2020 – 05:40 pm BST

PDB ID : 1DQU  
Title : CRYSTAL STRUCTURE OF THE ISOCITRATE LYASE FROM AS-  
PERGILLUS NIDULANS  
Authors : Britton, K.L.; Langridge, S.J.; Baker, P.J.; Weeradechapon, K.; Sedelnikova,  
S.E.; De Lucas, J.R.; Rice, D.W.; Turner, G.  
Deposited on : 2000-01-05  
Resolution : 2.80 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/XrayValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

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

MolProbity	:	4.02b-467
Xtriage (Phenix)	:	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)	:	2.11

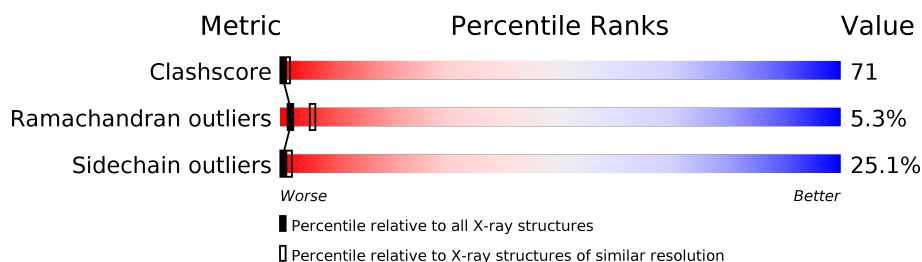
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

## *X-RAY DIFFRACTION*

The reported resolution of this entry is 2.80 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	3569 (2.80-2.80)
Ramachandran outliers	138981	3498 (2.80-2.80)
Sidechain outliers	138945	3500 (2.80-2.80)

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

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	538	

## 2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 4069 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 ISOCITRATE LYASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	513	Total	C	N	O	S	3	0	0
			4069	2579	706	767	17			

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

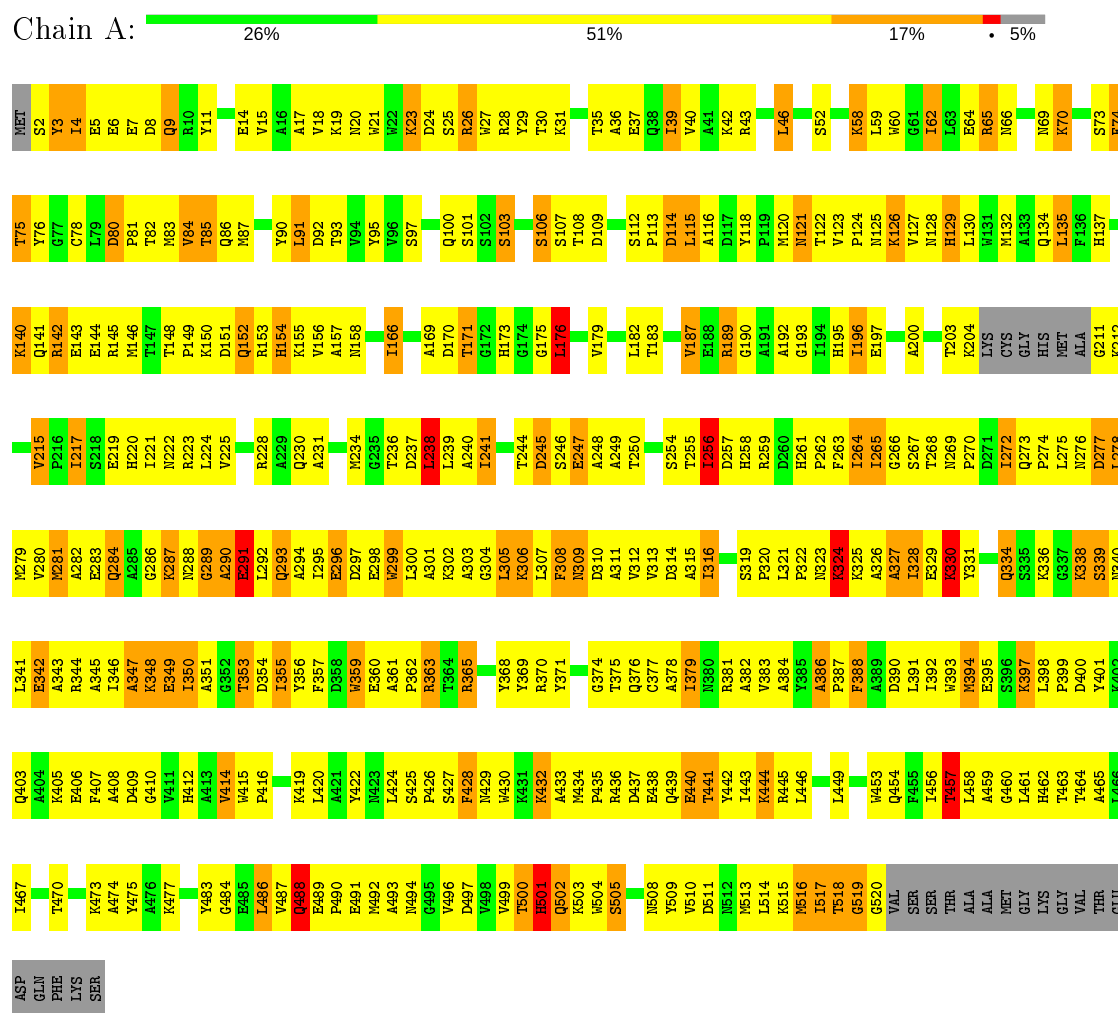
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	17	ALA	-	INSERTION	UNP P28298
A	157	ALA	THR	SEE REMARK 999	UNP P28298

### 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. 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: ISOCITRATE LYASE



## 4 Data and refinement statistics

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

Property	Value	Source
Space group	P 42 21 2	Depositor
Cell constants a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	91.93 Å 91.93 Å 152.77 Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	10.00 – 2.80	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	97.0 (10.00-2.80)	Depositor
$R_{merge}$	0.05	Depositor
$R_{sym}$	(Not available)	Depositor
Refinement program	TNT	Depositor
R, $R_{free}$	0.273 , 0.376	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	4069	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	20.0	wwPDB-VP

## 5 Model quality

### 5.1 Standard geometry

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	0.76	0/4164	0.93	4/5647 (0.1%)

There are no bond length outliers.

All (4) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed( $^{\circ}$ )	Ideal( $^{\circ}$ )
1	A	176	LEU	CA-CB-CG	-5.42	102.84	115.30
1	A	289	GLY	N-CA-C	-5.35	99.73	113.10
1	A	488	GLN	N-CA-C	5.22	125.11	111.00
1	A	414	VAL	CB-CA-C	-5.06	101.78	111.40

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

### 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	4069	0	4001	574	3
All	All	4069	0	4001	574	3

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 71.

All (574) 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:277:ASP:CB	1:A:281:MET:HE1	1.53	1.37
1:A:355:ILE:CD1	1:A:355:ILE:H	1.35	1.26
1:A:355:ILE:N	1:A:355:ILE:HD13	1.35	1.25
1:A:291:GLU:O	1:A:295:ILE:HD12	1.06	1.23
1:A:273:GLN:CG	1:A:278:LEU:HD11	1.69	1.22
1:A:277:ASP:HB2	1:A:281:MET:CE	1.71	1.21
1:A:273:GLN:HG2	1:A:278:LEU:CD1	1.75	1.16
1:A:80:ASP:OD1	1:A:81:PRO:N	1.77	1.15
1:A:489:GLU:HG3	1:A:490:PRO:HD3	1.21	1.15
1:A:273:GLN:HG3	1:A:274:PRO:HD2	1.23	1.12
1:A:287:LYS:HG3	1:A:291:GLU:HG2	1.13	1.12
1:A:489:GLU:CG	1:A:490:PRO:HD3	1.78	1.11
1:A:278:LEU:CD1	1:A:278:LEU:H	1.64	1.10
1:A:291:GLU:C	1:A:295:ILE:HD12	1.72	1.10
1:A:291:GLU:O	1:A:295:ILE:CD1	1.98	1.09
1:A:273:GLN:CG	1:A:274:PRO:HD2	1.82	1.09
1:A:435:PRO:HG2	1:A:438:GLU:HG3	1.09	1.09
1:A:221:ILE:O	1:A:225:VAL:HG23	1.52	1.07
1:A:277:ASP:CB	1:A:281:MET:CE	2.30	1.07
1:A:432:LYS:O	1:A:432:LYS:HG2	1.53	1.07
1:A:187:VAL:CB	1:A:234:MET:HE1	1.84	1.06
1:A:379:ILE:O	1:A:383:VAL:HG23	1.56	1.05
1:A:187:VAL:HB	1:A:234:MET:HE1	1.05	1.05
1:A:85:THR:HG22	1:A:86:GLN:NE2	1.71	1.05
1:A:278:LEU:N	1:A:278:LEU:HD12	1.68	1.04
1:A:4:ILE:HG22	1:A:5:GLU:N	1.69	1.03
1:A:330:LYS:HE2	1:A:334:GLN:OE1	1.62	1.00
1:A:291:GLU:C	1:A:295:ILE:CD1	2.29	1.00
1:A:266:GLY:O	1:A:305:LEU:HD12	1.60	0.99
1:A:365:ARG:HH11	1:A:365:ARG:HG3	1.25	0.99
1:A:435:PRO:CG	1:A:438:GLU:HG3	1.93	0.99
1:A:76:TYR:HE2	1:A:83:MET:HE1	1.26	0.99
1:A:474:ALA:O	1:A:477:LYS:N	1.95	0.98
1:A:435:PRO:HG2	1:A:438:GLU:CG	1.94	0.98
1:A:383:VAL:CG1	1:A:414:VAL:HG21	1.94	0.98
1:A:76:TYR:CE2	1:A:83:MET:HE1	2.00	0.97
1:A:299:TRP:CD2	1:A:299:TRP:O	2.19	0.96
1:A:183:THR:O	1:A:187:VAL:HG23	1.62	0.96
1:A:383:VAL:HG11	1:A:414:VAL:HG21	1.45	0.96
1:A:120:MET:HE3	1:A:182:LEU:HD13	1.47	0.96
1:A:76:TYR:HE2	1:A:83:MET:CE	1.78	0.95
1:A:137:HIS:CD2	1:A:140:LYS:HE3	2.01	0.95

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:289:GLY:O	1:A:292:LEU:HB2	1.67	0.94
1:A:353:THR:HG23	1:A:354:ASP:H	1.29	0.94
1:A:489:GLU:HG3	1:A:490:PRO:CD	1.97	0.94
1:A:277:ASP:OD2	1:A:278:LEU:CD1	2.14	0.94
1:A:353:THR:HG23	1:A:354:ASP:N	1.81	0.94
1:A:85:THR:HG22	1:A:86:GLN:HE21	1.27	0.94
1:A:149:PRO:HG2	1:A:152:GLN:HB2	1.48	0.92
1:A:264:ILE:HG22	1:A:370:ARG:O	1.68	0.92
1:A:276:ASN:O	1:A:280:VAL:HG23	1.70	0.91
1:A:31:LYS:HE2	1:A:388:PHE:CE2	2.05	0.91
1:A:287:LYS:HG3	1:A:291:GLU:CG	1.98	0.91
1:A:31:LYS:HE2	1:A:388:PHE:HE2	1.36	0.91
1:A:488:GLN:HG2	1:A:492:MET:CE	2.00	0.91
1:A:299:TRP:CZ3	1:A:300:LEU:HD23	2.05	0.90
1:A:299:TRP:O	1:A:299:TRP:CE3	2.24	0.90
1:A:76:TYR:CE2	1:A:83:MET:CE	2.55	0.89
1:A:267:SER:HA	1:A:305:LEU:CD1	2.04	0.88
1:A:355:ILE:N	1:A:355:ILE:CD1	2.10	0.88
1:A:277:ASP:CA	1:A:281:MET:HE1	2.06	0.86
1:A:187:VAL:HB	1:A:234:MET:CE	1.99	0.86
1:A:4:ILE:CG2	1:A:5:GLU:N	2.38	0.86
1:A:171:THR:O	1:A:196:ILE:HD11	1.75	0.85
1:A:392:ILE:HB	1:A:420:LEU:HD23	1.58	0.85
1:A:277:ASP:OD2	1:A:278:LEU:HD13	1.74	0.85
1:A:353:THR:CG2	1:A:354:ASP:N	2.39	0.85
1:A:85:THR:CG2	1:A:86:GLN:NE2	2.40	0.84
1:A:277:ASP:C	1:A:281:MET:CE	2.45	0.84
1:A:264:ILE:CG2	1:A:370:ARG:O	2.25	0.84
1:A:219:GLU:O	1:A:222:ASN:HB2	1.77	0.84
1:A:278:LEU:H	1:A:278:LEU:HD13	1.43	0.84
1:A:254:SER:HB3	1:A:256:ILE:HG22	1.58	0.83
1:A:74:PHE:N	1:A:74:PHE:CD2	2.46	0.83
1:A:361:ALA:N	1:A:362:PRO:CD	2.42	0.83
1:A:290:ALA:O	1:A:291:GLU:C	2.16	0.83
1:A:289:GLY:HA2	1:A:292:LEU:HD12	1.58	0.83
1:A:316:ILE:N	1:A:316:ILE:HD13	1.94	0.83
1:A:273:GLN:HG3	1:A:274:PRO:CD	2.04	0.82
1:A:277:ASP:CA	1:A:281:MET:CE	2.56	0.82
1:A:274:PRO:O	1:A:278:LEU:HD13	1.80	0.82
1:A:28:ARG:NE	1:A:29:TYR:CE1	2.48	0.82
1:A:18:VAL:HG21	1:A:40:VAL:CG2	2.10	0.82

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:137:HIS:HD2	1:A:140:LYS:HE3	1.45	0.82
1:A:513:MET:O	1:A:516:MET:HB3	1.79	0.82
1:A:399:PRO:CG	1:A:428:PHE:CD1	2.64	0.81
1:A:365:ARG:NH1	1:A:365:ARG:HG3	1.95	0.81
1:A:435:PRO:HD2	1:A:438:GLU:HB2	1.63	0.81
1:A:287:LYS:CG	1:A:291:GLU:HG2	2.05	0.81
1:A:316:ILE:H	1:A:316:ILE:HD13	1.44	0.80
1:A:342:GLU:O	1:A:345:ALA:N	2.14	0.80
1:A:269:ASN:HB3	1:A:272:ILE:HD12	1.64	0.79
1:A:290:ALA:O	1:A:293:GLN:N	2.14	0.79
1:A:361:ALA:N	1:A:362:PRO:HD3	1.96	0.79
1:A:299:TRP:CE3	1:A:300:LEU:HD23	2.17	0.79
1:A:277:ASP:HB2	1:A:281:MET:HE1	0.81	0.79
1:A:365:ARG:CG	1:A:365:ARG:HH11	1.96	0.78
1:A:76:TYR:CD2	1:A:459:ALA:HB3	2.18	0.78
1:A:328:ILE:H	1:A:328:ILE:CD1	1.96	0.78
1:A:83:MET:HG2	1:A:87:MET:CE	2.14	0.78
1:A:486:LEU:HD23	1:A:486:LEU:N	1.98	0.78
1:A:66:ASN:O	1:A:70:LYS:N	2.16	0.78
1:A:247:GLU:O	1:A:247:GLU:HG2	1.82	0.78
1:A:78:CYS:CB	1:A:87:MET:HE1	2.13	0.77
1:A:140:LYS:NZ	1:A:504:TRP:O	2.16	0.77
1:A:75:THR:HG21	1:A:93:THR:O	1.85	0.77
1:A:258:HIS:HA	1:A:261:HIS:CE1	2.20	0.77
1:A:363:ARG:HD2	1:A:369:TYR:CE2	2.20	0.76
1:A:491:GLU:HG2	1:A:499:VAL:HG22	1.67	0.76
1:A:488:GLN:HG2	1:A:492:MET:HE3	1.65	0.76
1:A:171:THR:C	1:A:196:ILE:HD11	2.05	0.76
1:A:273:GLN:HB3	1:A:278:LEU:HD21	1.68	0.76
1:A:328:ILE:H	1:A:328:ILE:HD12	1.51	0.76
1:A:80:ASP:OD1	1:A:81:PRO:CD	2.34	0.75
1:A:428:PHE:CE2	1:A:433:ALA:HB3	2.22	0.75
1:A:267:SER:HA	1:A:305:LEU:HD12	1.66	0.75
1:A:116:ALA:HB1	1:A:173:HIS:CE1	2.21	0.74
1:A:488:GLN:HG2	1:A:492:MET:HE2	1.67	0.74
1:A:18:VAL:O	1:A:21:TRP:HB3	1.88	0.74
1:A:348:LYS:HD2	1:A:354:ASP:OD1	1.87	0.74
1:A:319:SER:C	1:A:321:LEU:H	1.90	0.74
1:A:246:SER:HB3	1:A:377:CYS:HB3	1.69	0.74
1:A:269:ASN:O	1:A:272:ILE:HD13	1.88	0.74
1:A:338:LYS:HD2	1:A:338:LYS:N	2.02	0.74

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:78:CYS:HA	1:A:87:MET:HE1	1.70	0.73
1:A:221:ILE:O	1:A:225:VAL:CG2	2.33	0.73
1:A:277:ASP:C	1:A:281:MET:HE1	2.08	0.73
1:A:293:GLN:NE2	1:A:297:ASP:OD1	2.21	0.73
1:A:121:ASN:N	1:A:121:ASN:HD22	1.86	0.72
1:A:379:ILE:HD13	1:A:410:GLY:HA3	1.69	0.72
1:A:355:ILE:HD13	1:A:355:ILE:H	0.56	0.71
1:A:78:CYS:CA	1:A:87:MET:HE1	2.21	0.71
1:A:76:TYR:HB2	1:A:459:ALA:HB3	1.72	0.71
1:A:74:PHE:HA	1:A:454:GLN:O	1.91	0.71
1:A:269:ASN:HB3	1:A:272:ILE:CD1	2.21	0.70
1:A:78:CYS:HB2	1:A:87:MET:HE1	1.73	0.70
1:A:247:GLU:CG	1:A:247:GLU:O	2.40	0.70
1:A:309:ASN:ND2	1:A:331:TYR:CE2	2.58	0.70
1:A:268:THR:HA	1:A:356:TYR:HD2	1.55	0.70
1:A:274:PRO:HG2	1:A:277:ASP:OD1	1.91	0.70
1:A:290:ALA:O	1:A:292:LEU:N	2.24	0.70
1:A:120:MET:CE	1:A:182:LEU:HD13	2.22	0.70
1:A:428:PHE:CE2	1:A:430:TRP:HA	2.27	0.70
1:A:137:HIS:CD2	1:A:140:LYS:CE	2.73	0.69
1:A:514:LEU:O	1:A:518:THR:HB	1.91	0.69
1:A:496:VAL:O	1:A:499:VAL:HG23	1.91	0.69
1:A:95:TYR:OH	1:A:195:HIS:HE1	1.74	0.69
1:A:299:TRP:HZ3	1:A:300:LEU:HD23	1.53	0.69
1:A:363:ARG:HA	1:A:368:TYR:O	1.92	0.69
1:A:308:PHE:HZ	1:A:344:ARG:HA	1.57	0.69
1:A:137:HIS:HD2	1:A:140:LYS:CE	2.06	0.69
1:A:435:PRO:HD2	1:A:438:GLU:CB	2.23	0.69
1:A:379:ILE:CD1	1:A:410:GLY:HA3	2.22	0.69
1:A:329:GLU:O	1:A:330:LYS:C	2.32	0.68
1:A:489:GLU:N	1:A:490:PRO:CD	2.56	0.68
1:A:113:PRO:HG2	1:A:115:LEU:HD22	1.74	0.68
1:A:273:GLN:HG2	1:A:278:LEU:HD11	0.81	0.68
1:A:401:TYR:CD2	1:A:401:TYR:O	2.45	0.68
1:A:120:MET:HE1	1:A:182:LEU:CA	2.23	0.68
1:A:106:SER:O	1:A:109:ASP:N	2.20	0.68
1:A:489:GLU:HG2	1:A:490:PRO:HD3	1.75	0.68
1:A:510:VAL:O	1:A:513:MET:HB2	1.92	0.68
1:A:274:PRO:O	1:A:278:LEU:CD1	2.41	0.68
1:A:308:PHE:O	1:A:311:ALA:N	2.26	0.68
1:A:406:GLU:O	1:A:410:GLY:N	2.23	0.68

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:434:MET:HB2	1:A:435:PRO:HD2	1.76	0.68
1:A:187:VAL:CB	1:A:234:MET:CE	2.66	0.68
1:A:28:ARG:NE	1:A:29:TYR:CZ	2.56	0.68
1:A:276:ASN:O	1:A:280:VAL:CG2	2.42	0.67
1:A:371:TYR:HE2	1:A:377:CYS:SG	2.17	0.67
1:A:39:ILE:HG22	1:A:40:VAL:N	2.08	0.67
1:A:502:GLN:HA	1:A:505:SER:OG	1.94	0.67
1:A:78:CYS:SG	1:A:87:MET:HE3	2.35	0.67
1:A:287:LYS:HE3	1:A:287:LYS:H	1.60	0.67
1:A:308:PHE:O	1:A:310:ASP:N	2.27	0.67
1:A:307:LEU:O	1:A:309:ASN:N	2.28	0.67
1:A:320:PRO:HD2	1:A:321:LEU:N	2.10	0.67
1:A:83:MET:HG2	1:A:87:MET:HE2	1.77	0.67
1:A:3:TYR:HD1	1:A:3:TYR:O	1.77	0.66
1:A:153:ARG:O	1:A:155:LYS:N	2.27	0.66
1:A:316:ILE:HG21	1:A:328:ILE:HD11	1.78	0.66
1:A:319:SER:OG	1:A:320:PRO:CD	2.44	0.66
1:A:428:PHE:CZ	1:A:433:ALA:HB3	2.31	0.66
1:A:83:MET:HG2	1:A:87:MET:HE3	1.76	0.66
1:A:193:GLY:HA2	1:A:238:LEU:CD2	2.26	0.66
1:A:328:ILE:N	1:A:328:ILE:HD12	2.11	0.65
1:A:18:VAL:HG21	1:A:40:VAL:HG22	1.77	0.65
1:A:428:PHE:HE2	1:A:430:TRP:HA	1.60	0.65
1:A:316:ILE:N	1:A:316:ILE:CD1	2.60	0.65
1:A:361:ALA:H	1:A:362:PRO:HD3	1.59	0.65
1:A:277:ASP:O	1:A:281:MET:HE3	1.97	0.65
1:A:40:VAL:HG12	1:A:40:VAL:O	1.96	0.65
1:A:330:LYS:O	1:A:331:TYR:C	2.35	0.65
1:A:80:ASP:C	1:A:80:ASP:OD1	2.34	0.65
1:A:274:PRO:O	1:A:277:ASP:OD2	2.15	0.65
1:A:64:GLU:HG2	1:A:419:LYS:NZ	2.11	0.65
1:A:277:ASP:CA	1:A:281:MET:HE3	2.26	0.64
1:A:114:ASP:O	1:A:115:LEU:HD13	1.96	0.64
1:A:342:GLU:O	1:A:343:ALA:C	2.36	0.64
1:A:400:ASP:OD1	1:A:403:GLN:N	2.21	0.64
1:A:486:LEU:CD2	1:A:486:LEU:N	2.61	0.64
1:A:491:GLU:HG2	1:A:499:VAL:CG2	2.28	0.64
1:A:436:ARG:O	1:A:440:GLU:CG	2.45	0.64
1:A:348:LYS:O	1:A:349:GLU:C	2.36	0.64
1:A:284:GLN:N	1:A:284:GLN:OE1	2.31	0.64
1:A:405:LYS:HG2	1:A:409:ASP:OD2	1.98	0.64

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:26:ARG:HD2	1:A:27:TRP:CH2	2.33	0.63
1:A:246:SER:O	1:A:248:ALA:N	2.31	0.63
1:A:399:PRO:HG3	1:A:428:PHE:CD1	2.32	0.63
1:A:291:GLU:O	1:A:294:ALA:HB3	1.98	0.63
1:A:327:ALA:O	1:A:328:ILE:C	2.37	0.63
1:A:374:GLY:O	1:A:377:CYS:N	2.32	0.63
1:A:295:ILE:H	1:A:295:ILE:HD12	1.64	0.63
1:A:320:PRO:CD	1:A:321:LEU:N	2.60	0.63
1:A:281:MET:HA	1:A:284:GLN:HG2	1.81	0.62
1:A:142:ARG:O	1:A:142:ARG:HG3	2.00	0.62
1:A:324:LYS:O	1:A:327:ALA:N	2.32	0.62
1:A:428:PHE:CD2	1:A:430:TRP:N	2.67	0.62
1:A:75:THR:CG2	1:A:93:THR:O	2.46	0.62
1:A:329:GLU:O	1:A:330:LYS:O	2.17	0.62
1:A:401:TYR:CD2	1:A:401:TYR:C	2.72	0.62
1:A:299:TRP:C	1:A:299:TRP:CE3	2.72	0.62
1:A:81:PRO:HG2	1:A:129:HIS:CE1	2.35	0.62
1:A:436:ARG:O	1:A:440:GLU:HG2	2.00	0.62
1:A:381:ARG:O	1:A:384:ALA:N	2.31	0.62
1:A:153:ARG:O	1:A:156:VAL:N	2.32	0.61
1:A:428:PHE:HD2	1:A:430:TRP:N	1.99	0.61
1:A:428:PHE:CD2	1:A:428:PHE:C	2.73	0.61
1:A:126:LYS:NZ	1:A:129:HIS:HD2	1.98	0.61
1:A:488:GLN:C	1:A:490:PRO:HD2	2.21	0.61
1:A:517:ILE:HG13	1:A:518:THR:H	1.66	0.61
1:A:390:ASP:C	1:A:391:LEU:HD12	2.21	0.61
1:A:277:ASP:C	1:A:281:MET:HE3	2.20	0.61
1:A:264:ILE:HD12	1:A:359:TRP:CZ3	2.35	0.60
1:A:81:PRO:CG	1:A:129:HIS:CE1	2.84	0.60
1:A:277:ASP:O	1:A:281:MET:CE	2.49	0.60
1:A:130:LEU:O	1:A:134:GLN:HG3	2.01	0.60
1:A:26:ARG:HD2	1:A:27:TRP:CZ2	2.35	0.60
1:A:309:ASN:ND2	1:A:331:TYR:OH	2.35	0.60
1:A:240:ALA:O	1:A:390:ASP:HB2	2.01	0.60
1:A:308:PHE:O	1:A:309:ASN:C	2.39	0.60
1:A:489:GLU:O	1:A:493:ALA:N	2.29	0.60
1:A:289:GLY:CA	1:A:292:LEU:HD12	2.31	0.59
1:A:340:ASN:O	1:A:341:LEU:C	2.41	0.59
1:A:145:ARG:O	1:A:148:THR:HB	2.03	0.59
1:A:435:PRO:CD	1:A:438:GLU:HB2	2.32	0.59
1:A:399:PRO:HD2	1:A:428:PHE:HD1	1.66	0.59

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:26:ARG:HA	1:A:60:TRP:CZ2	2.38	0.59
1:A:386:ALA:N	1:A:387:PRO:HD2	2.18	0.59
1:A:383:VAL:HG13	1:A:414:VAL:HG21	1.81	0.59
1:A:197:GLU:O	1:A:220:HIS:CD2	2.56	0.59
1:A:489:GLU:O	1:A:493:ALA:CB	2.51	0.59
1:A:187:VAL:CG1	1:A:234:MET:CE	2.81	0.58
1:A:187:VAL:HG11	1:A:234:MET:HE2	1.85	0.58
1:A:20:ASN:O	1:A:23:LYS:HB2	2.03	0.58
1:A:405:LYS:HG3	1:A:449:LEU:CD2	2.33	0.58
1:A:187:VAL:CG1	1:A:234:MET:HE1	2.33	0.58
1:A:78:CYS:CB	1:A:87:MET:CE	2.81	0.58
1:A:273:GLN:CG	1:A:274:PRO:CD	2.71	0.58
1:A:319:SER:C	1:A:321:LEU:N	2.57	0.58
1:A:299:TRP:O	1:A:299:TRP:CG	2.57	0.58
1:A:141:GLN:NE2	1:A:157:ALA:O	2.37	0.58
1:A:464:THR:HG22	1:A:465:ALA:N	2.19	0.58
1:A:121:ASN:HD22	1:A:122:THR:N	2.02	0.57
1:A:121:ASN:N	1:A:121:ASN:ND2	2.46	0.57
1:A:316:ILE:HG21	1:A:328:ILE:CD1	2.34	0.57
1:A:59:LEU:HD11	1:A:166:ILE:HD11	1.85	0.57
1:A:91:LEU:N	1:A:91:LEU:HD13	2.19	0.57
1:A:489:GLU:CG	1:A:490:PRO:CD	2.67	0.57
1:A:458:LEU:N	1:A:458:LEU:HD23	2.19	0.57
1:A:298:GLU:HG2	1:A:299:TRP:N	2.19	0.57
1:A:309:ASN:ND2	1:A:331:TYR:CZ	2.73	0.57
1:A:78:CYS:HB2	1:A:87:MET:CE	2.33	0.57
1:A:120:MET:HE1	1:A:182:LEU:HA	1.85	0.57
1:A:266:GLY:C	1:A:305:LEU:HD12	2.22	0.56
1:A:121:ASN:H	1:A:121:ASN:ND2	2.02	0.56
1:A:280:VAL:O	1:A:283:GLU:HB2	2.05	0.56
1:A:313:VAL:O	1:A:314:ASP:C	2.42	0.56
1:A:319:SER:OG	1:A:320:PRO:HD2	2.04	0.56
1:A:299:TRP:C	1:A:299:TRP:CD2	2.78	0.56
1:A:183:THR:O	1:A:187:VAL:CG2	2.48	0.56
1:A:187:VAL:HG11	1:A:234:MET:CE	2.35	0.56
1:A:114:ASP:C	1:A:115:LEU:HD13	2.26	0.56
1:A:517:ILE:O	1:A:518:THR:C	2.44	0.56
1:A:153:ARG:C	1:A:155:LYS:N	2.57	0.56
1:A:291:GLU:CG	1:A:295:ILE:HD11	2.36	0.56
1:A:484:GLY:HA2	1:A:488:GLN:HB2	1.88	0.56
1:A:52:SER:HB3	1:A:190:GLY:HA2	1.88	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:322:PRO:O	1:A:323:ASN:HB2	2.05	0.56
1:A:371:TYR:CE2	1:A:377:CYS:SG	2.98	0.56
1:A:281:MET:O	1:A:284:GLN:N	2.39	0.55
1:A:514:LEU:HA	1:A:517:ILE:CG1	2.36	0.55
1:A:74:PHE:HD2	1:A:74:PHE:N	2.00	0.55
1:A:65:ARG:O	1:A:69:ASN:ND2	2.39	0.55
1:A:269:ASN:ND2	1:A:272:ILE:HG23	2.21	0.55
1:A:59:LEU:O	1:A:60:TRP:C	2.45	0.55
1:A:28:ARG:NH2	1:A:64:GLU:OE2	2.39	0.55
1:A:59:LEU:HD11	1:A:166:ILE:CD1	2.36	0.55
1:A:312:VAL:HG22	1:A:355:ILE:HG13	1.89	0.55
1:A:391:LEU:HD12	1:A:391:LEU:N	2.22	0.55
1:A:496:VAL:O	1:A:499:VAL:CG2	2.55	0.55
1:A:320:PRO:CD	1:A:321:LEU:H	2.20	0.55
1:A:436:ARG:O	1:A:440:GLU:HG3	2.07	0.55
1:A:267:SER:CA	1:A:305:LEU:CD1	2.83	0.55
1:A:64:GLU:HG2	1:A:419:LYS:HZ1	1.71	0.55
1:A:95:TYR:OH	1:A:195:HIS:CE1	2.58	0.55
1:A:265:ILE:HG23	1:A:305:LEU:HB3	1.89	0.55
1:A:443:ILE:HG23	1:A:454:GLN:CD	2.27	0.55
1:A:175:GLY:O	1:A:179:VAL:HG23	2.07	0.54
1:A:257:ASP:OD2	1:A:258:HIS:N	2.41	0.54
1:A:399:PRO:CD	1:A:428:PHE:CD1	2.91	0.54
1:A:319:SER:OG	1:A:320:PRO:HD3	2.08	0.54
1:A:3:TYR:CD1	1:A:3:TYR:O	2.59	0.54
1:A:394:MET:HB2	1:A:407:PHE:CZ	2.43	0.54
1:A:121:ASN:HD22	1:A:122:THR:H	1.54	0.54
1:A:264:ILE:HG23	1:A:370:ARG:O	2.05	0.53
1:A:428:PHE:CD2	1:A:429:ASN:N	2.77	0.53
1:A:321:LEU:O	1:A:324:LYS:HE2	2.08	0.53
1:A:339:SER:O	1:A:342:GLU:HB2	2.08	0.53
1:A:434:MET:HB2	1:A:435:PRO:CD	2.37	0.53
1:A:325:LYS:O	1:A:326:ALA:C	2.44	0.53
1:A:287:LYS:HE2	1:A:291:GLU:OE2	2.08	0.53
1:A:112:SER:HB2	1:A:113:PRO:HD2	1.90	0.53
1:A:169:ALA:HB3	1:A:195:HIS:O	2.08	0.52
1:A:405:LYS:NZ	1:A:409:ASP:OD2	2.37	0.52
1:A:261:HIS:N	1:A:262:PRO:CD	2.72	0.52
1:A:319:SER:HB3	1:A:321:LEU:HB2	1.91	0.52
1:A:348:LYS:CD	1:A:354:ASP:OD1	2.57	0.52
1:A:261:HIS:CD2	1:A:359:TRP:HH2	2.28	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:254:SER:CB	1:A:256:ILE:HG22	2.36	0.52
1:A:114:ASP:O	1:A:115:LEU:CD1	2.58	0.52
1:A:123:VAL:O	1:A:127:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:359:TRP:CD1	1:A:359:TRP:O	2.63	0.52
1:A:517:ILE:CG1	1:A:518:THR:H	2.22	0.52
1:A:121:ASN:C	1:A:124:PRO:HD2	2.30	0.52
1:A:211:GLY:HA2	1:A:250:THR:CG2	2.40	0.51
1:A:278:LEU:H	1:A:278:LEU:HD12	1.32	0.51
1:A:309:ASN:HD22	1:A:331:TYR:HE2	1.56	0.51
1:A:114:ASP:O	1:A:204:LYS:NZ	2.30	0.51
1:A:268:THR:HA	1:A:356:TYR:CD2	2.41	0.51
1:A:456:ILE:O	1:A:456:ILE:HG22	2.10	0.51
1:A:381:ARG:O	1:A:382:ALA:C	2.48	0.51
1:A:46:LEU:C	1:A:46:LEU:CD2	2.78	0.51
1:A:62:ILE:HD13	1:A:92:ASP:OD1	2.10	0.51
1:A:273:GLN:HG2	1:A:274:PRO:HD2	1.82	0.51
1:A:223:ARG:O	1:A:224:LEU:C	2.47	0.51
1:A:308:PHE:CZ	1:A:344:ARG:HA	2.41	0.51
1:A:14:GLU:O	1:A:18:VAL:HG23	2.11	0.51
1:A:115:LEU:HA	1:A:204:LYS:NZ	2.26	0.51
1:A:247:GLU:HB2	1:A:394:MET:CE	2.40	0.51
1:A:517:ILE:O	1:A:519:GLY:N	2.44	0.50
1:A:24:ASP:OD1	1:A:26:ARG:HB2	2.12	0.50
1:A:58:LYS:O	1:A:62:ILE:HG23	2.12	0.50
1:A:76:TYR:CE2	1:A:83:MET:HE2	2.45	0.50
1:A:26:ARG:HH22	1:A:390:ASP:CG	2.13	0.50
1:A:307:LEU:HD12	1:A:307:LEU:N	2.25	0.50
1:A:193:GLY:HA2	1:A:238:LEU:HD22	1.91	0.50
1:A:245:ASP:OD2	1:A:245:ASP:N	2.44	0.50
1:A:261:HIS:CD2	1:A:359:TRP:CH2	2.99	0.50
1:A:279:MET:CE	1:A:296:GLU:HB2	2.42	0.50
1:A:280:VAL:HG12	1:A:281:MET:N	2.27	0.50
1:A:399:PRO:HG2	1:A:428:PHE:CD1	2.46	0.50
1:A:443:ILE:HG23	1:A:454:GLN:NE2	2.27	0.50
1:A:78:CYS:SG	1:A:87:MET:CE	3.00	0.50
1:A:429:ASN:O	1:A:429:ASN:OD1	2.30	0.50
1:A:80:ASP:OD1	1:A:81:PRO:HD2	2.11	0.50
1:A:76:TYR:OH	1:A:83:MET:HE2	2.11	0.50
1:A:83:MET:O	1:A:85:THR:N	2.45	0.50
1:A:26:ARG:HA	1:A:60:TRP:CE2	2.47	0.49
1:A:435:PRO:CG	1:A:438:GLU:CG	2.73	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:344:ARG:NH2	1:A:357:PHE:O	2.41	0.49
1:A:76:TYR:CB	1:A:459:ALA:HB3	2.42	0.49
1:A:4:ILE:HG22	1:A:5:GLU:H	1.64	0.49
1:A:11:TYR:O	1:A:15:VAL:HG23	2.12	0.49
1:A:276:ASN:O	1:A:280:VAL:N	2.33	0.49
1:A:287:LYS:HE3	1:A:287:LYS:N	2.26	0.49
1:A:106:SER:O	1:A:108:THR:N	2.45	0.49
1:A:153:ARG:C	1:A:155:LYS:H	2.15	0.49
1:A:443:ILE:HG23	1:A:454:GLN:OE1	2.12	0.49
1:A:514:LEU:HA	1:A:517:ILE:HD11	1.94	0.49
1:A:122:THR:HG22	1:A:123:VAL:N	2.28	0.49
1:A:230:GLN:O	1:A:231:ALA:C	2.51	0.49
1:A:359:TRP:C	1:A:360:GLU:HG2	2.33	0.49
1:A:405:LYS:O	1:A:409:ASP:HB2	2.12	0.48
1:A:338:LYS:CD	1:A:338:LYS:N	2.72	0.48
1:A:192:ALA:O	1:A:238:LEU:HD23	2.14	0.48
1:A:316:ILE:HG22	1:A:324:LYS:HG2	1.94	0.48
1:A:428:PHE:HD2	1:A:428:PHE:C	2.17	0.48
1:A:277:ASP:O	1:A:280:VAL:HB	2.14	0.48
1:A:483:TYR:O	1:A:487:VAL:N	2.47	0.48
1:A:148:THR:HG23	1:A:149:PRO:HD2	1.95	0.48
1:A:320:PRO:HD2	1:A:321:LEU:H	1.77	0.48
1:A:26:ARG:CD	1:A:27:TRP:CZ3	2.97	0.48
1:A:8:ASP:O	1:A:9:GLN:C	2.50	0.48
1:A:83:MET:C	1:A:85:THR:N	2.64	0.47
1:A:128:ASN:HB2	1:A:189:ARG:HB3	1.97	0.47
1:A:278:LEU:CD1	1:A:278:LEU:N	2.26	0.47
1:A:59:LEU:HD13	1:A:239:LEU:HD22	1.96	0.47
1:A:137:HIS:HD2	1:A:140:LYS:NZ	2.12	0.47
1:A:40:VAL:O	1:A:40:VAL:CG1	2.62	0.47
1:A:435:PRO:O	1:A:438:GLU:HB2	2.14	0.47
1:A:240:ALA:O	1:A:241:ILE:HG12	2.14	0.47
1:A:277:ASP:OD2	1:A:277:ASP:N	2.48	0.47
1:A:275:LEU:HD12	1:A:362:PRO:HA	1.97	0.47
1:A:81:PRO:HG2	1:A:129:HIS:HE1	1.80	0.47
1:A:435:PRO:HG2	1:A:438:GLU:CB	2.45	0.47
1:A:357:PHE:CE2	1:A:359:TRP:HB3	2.50	0.47
1:A:517:ILE:H	1:A:517:ILE:HG12	1.45	0.47
1:A:262:PRO:O	1:A:307:LEU:HD23	2.15	0.47
1:A:120:MET:HE1	1:A:182:LEU:CB	2.46	0.46
1:A:120:MET:HE1	1:A:182:LEU:HB2	1.97	0.46

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:211:GLY:HA2	1:A:250:THR:HG23	1.97	0.46
1:A:76:TYR:CG	1:A:459:ALA:HB3	2.48	0.46
1:A:425:SER:O	1:A:430:TRP:NE1	2.30	0.46
1:A:108:THR:O	1:A:109:ASP:HB2	2.14	0.46
1:A:200:ALA:HB2	1:A:215:VAL:HG23	1.96	0.46
1:A:315:ALA:O	1:A:316:ILE:C	2.53	0.46
1:A:321:LEU:HD23	1:A:321:LEU:HA	1.48	0.46
1:A:474:ALA:O	1:A:477:LYS:CA	2.62	0.46
1:A:517:ILE:C	1:A:519:GLY:N	2.67	0.46
1:A:378:ALA:HB1	1:A:394:MET:HG3	1.97	0.46
1:A:508:ASN:O	1:A:511:ASP:HB3	2.16	0.46
1:A:430:TRP:HB3	1:A:439:GLN:HE21	1.81	0.46
1:A:240:ALA:C	1:A:241:ILE:HG12	2.35	0.46
1:A:15:VAL:HA	1:A:40:VAL:HG21	1.96	0.46
1:A:121:ASN:O	1:A:122:THR:C	2.53	0.46
1:A:306:LYS:C	1:A:307:LEU:HD12	2.36	0.46
1:A:308:PHE:CZ	1:A:344:ARG:HG2	2.50	0.46
1:A:460:GLY:O	1:A:461:LEU:C	2.53	0.46
1:A:15:VAL:O	1:A:17:ALA:N	2.49	0.46
1:A:220:HIS:HD2	1:A:223:ARG:HH11	1.63	0.46
1:A:26:ARG:CD	1:A:27:TRP:CH2	2.99	0.46
1:A:500:THR:O	1:A:501:HIS:C	2.54	0.46
1:A:76:TYR:HB2	1:A:459:ALA:CB	2.43	0.46
1:A:187:VAL:HG11	1:A:236:THR:HG21	1.98	0.46
1:A:412:HIS:HA	1:A:415:TRP:O	2.16	0.46
1:A:428:PHE:CZ	1:A:433:ALA:CB	2.99	0.46
1:A:483:TYR:O	1:A:487:VAL:HB	2.16	0.46
1:A:341:LEU:O	1:A:344:ARG:HB2	2.15	0.45
1:A:83:MET:C	1:A:85:THR:H	2.20	0.45
1:A:269:ASN:CB	1:A:272:ILE:HD12	2.40	0.45
1:A:384:ALA:O	1:A:387:PRO:HD2	2.15	0.45
1:A:489:GLU:N	1:A:490:PRO:HD2	2.31	0.45
1:A:76:TYR:CD2	1:A:459:ALA:CB	2.96	0.45
1:A:325:LYS:HB3	1:A:325:LYS:HE3	1.53	0.45
1:A:200:ALA:HB3	1:A:203:THR:HG21	1.97	0.45
1:A:488:GLN:C	1:A:490:PRO:CD	2.84	0.45
1:A:100:GLN:O	1:A:103:SER:N	2.48	0.45
1:A:324:LYS:O	1:A:325:LYS:C	2.55	0.45
1:A:399:PRO:HA	1:A:422:TYR:OH	2.17	0.45
1:A:176:LEU:HD12	1:A:176:LEU:HA	1.54	0.45
1:A:36:ALA:O	1:A:37:GLU:C	2.55	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:26:ARG:HD3	1:A:27:TRP:CE3	2.52	0.45
1:A:3:TYR:CD1	1:A:7:GLU:HB2	2.51	0.45
1:A:441:THR:O	1:A:442:TYR:C	2.55	0.45
1:A:40:VAL:HA	1:A:43:ARG:HG3	1.97	0.45
1:A:115:LEU:HA	1:A:204:LYS:HZ2	1.81	0.44
1:A:267:SER:HB2	1:A:305:LEU:HD11	1.99	0.44
1:A:424:LEU:O	1:A:426:PRO:HD3	2.17	0.44
1:A:143:GLU:HG3	1:A:509:TYR:HD1	1.81	0.44
1:A:26:ARG:NH2	1:A:390:ASP:OD1	2.38	0.44
1:A:153:ARG:O	1:A:154:HIS:C	2.56	0.44
1:A:312:VAL:CG2	1:A:355:ILE:HG13	2.46	0.44
1:A:387:PRO:HG2	1:A:388:PHE:CE1	2.53	0.44
1:A:126:LYS:HA	1:A:126:LYS:HD3	1.31	0.44
1:A:141:GLN:NE2	1:A:157:ALA:C	2.71	0.44
1:A:276:ASN:O	1:A:280:VAL:CB	2.66	0.44
1:A:310:ASP:O	1:A:311:ALA:C	2.56	0.44
1:A:3:TYR:C	1:A:3:TYR:CD1	2.89	0.44
1:A:200:ALA:O	1:A:203:THR:HG23	2.17	0.44
1:A:270:PRO:HG3	1:A:356:TYR:CG	2.52	0.44
1:A:308:PHE:C	1:A:310:ASP:N	2.71	0.44
1:A:269:ASN:CG	1:A:272:ILE:HG23	2.38	0.44
1:A:267:SER:CA	1:A:305:LEU:HD12	2.42	0.44
1:A:415:TRP:HA	1:A:416:PRO:HD2	1.85	0.44
1:A:457:THR:C	1:A:458:LEU:HD23	2.38	0.44
1:A:290:ALA:C	1:A:292:LEU:N	2.70	0.44
1:A:407:PHE:O	1:A:408:ALA:C	2.54	0.44
1:A:244:THR:HG23	1:A:244:THR:O	2.18	0.44
1:A:405:LYS:HG3	1:A:449:LEU:HD21	2.00	0.44
1:A:456:ILE:O	1:A:457:THR:C	2.56	0.44
1:A:348:LYS:HG3	1:A:353:THR:O	2.18	0.44
1:A:81:PRO:O	1:A:82:THR:C	2.56	0.44
1:A:121:ASN:HA	1:A:124:PRO:HG2	2.00	0.43
1:A:399:PRO:HG2	1:A:428:PHE:CE1	2.53	0.43
1:A:435:PRO:HB2	1:A:437:ASP:OD1	2.18	0.43
1:A:59:LEU:HA	1:A:59:LEU:HD23	1.66	0.43
1:A:81:PRO:CD	1:A:129:HIS:CE1	3.01	0.43
1:A:126:LYS:HZ1	1:A:129:HIS:HD2	1.63	0.43
1:A:307:LEU:O	1:A:308:PHE:C	2.55	0.43
1:A:314:ASP:O	1:A:315:ALA:C	2.56	0.43
1:A:490:PRO:O	1:A:494:ASN:N	2.44	0.43
1:A:247:GLU:HB2	1:A:394:MET:HE3	2.00	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:247:GLU:OE2	1:A:397:LYS:HB2	2.19	0.43
1:A:305:LEU:C	1:A:306:LYS:HG2	2.30	0.43
1:A:149:PRO:O	1:A:152:GLN:N	2.31	0.43
1:A:212:LYS:HB2	1:A:249:ALA:HA	2.00	0.43
1:A:405:LYS:HG3	1:A:449:LEU:HD22	2.01	0.43
1:A:132:MET:HA	1:A:135:LEU:HD12	2.01	0.43
1:A:143:GLU:HG3	1:A:509:TYR:CD1	2.54	0.43
1:A:311:ALA:O	1:A:314:ASP:HB2	2.17	0.43
1:A:342:GLU:O	1:A:344:ARG:N	2.52	0.43
1:A:293:GLN:O	1:A:297:ASP:OD2	2.36	0.43
1:A:359:TRP:CD1	1:A:359:TRP:C	2.93	0.43
1:A:123:VAL:N	1:A:124:PRO:CD	2.81	0.43
1:A:222:ASN:HA	1:A:222:ASN:HD22	1.53	0.43
1:A:339:SER:OG	1:A:342:GLU:HG3	2.18	0.43
1:A:474:ALA:O	1:A:475:TYR:C	2.57	0.43
1:A:8:ASP:O	1:A:11:TYR:HB3	2.19	0.43
1:A:121:ASN:ND2	1:A:122:THR:N	2.66	0.42
1:A:31:LYS:O	1:A:31:LYS:HG2	2.16	0.42
1:A:120:MET:CE	1:A:182:LEU:HB2	2.49	0.42
1:A:261:HIS:N	1:A:262:PRO:HD3	2.34	0.42
1:A:346:ILE:O	1:A:347:ALA:C	2.56	0.42
1:A:489:GLU:O	1:A:493:ALA:HB2	2.19	0.42
1:A:58:LYS:O	1:A:62:ILE:CG2	2.68	0.42
1:A:275:LEU:HD12	1:A:361:ALA:O	2.19	0.42
1:A:309:ASN:HA	1:A:309:ASN:HD22	1.60	0.42
1:A:375:THR:O	1:A:379:ILE:HG13	2.19	0.42
1:A:64:GLU:HG2	1:A:419:LYS:CE	2.48	0.42
1:A:120:MET:HE2	1:A:120:MET:HB3	1.73	0.42
1:A:149:PRO:O	1:A:150:LYS:C	2.57	0.42
1:A:282:ALA:O	1:A:286:GLY:O	2.36	0.42
1:A:324:LYS:O	1:A:327:ALA:HB3	2.19	0.42
1:A:277:ASP:HA	1:A:280:VAL:HB	2.02	0.42
1:A:85:THR:CG2	1:A:86:GLN:HE21	2.08	0.42
1:A:35:THR:O	1:A:36:ALA:C	2.57	0.42
1:A:299:TRP:HE3	1:A:300:LEU:HD23	1.79	0.42
1:A:76:TYR:HD2	1:A:459:ALA:HB3	1.76	0.42
1:A:291:GLU:C	1:A:295:ILE:HD13	2.31	0.42
1:A:255:THR:HG21	1:A:359:TRP:NE1	2.35	0.42
1:A:234:MET:HB3	1:A:234:MET:HE3	1.75	0.42
1:A:328:ILE:N	1:A:328:ILE:CD1	2.65	0.42
1:A:340:ASN:C	1:A:342:GLU:N	2.73	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:514:LEU:HA	1:A:517:ILE:HG12	2.02	0.42
1:A:137:HIS:HD2	1:A:140:LYS:HZ2	1.67	0.41
1:A:246:SER:C	1:A:248:ALA:H	2.23	0.41
1:A:319:SER:OG	1:A:321:LEU:HG	2.20	0.41
1:A:15:VAL:C	1:A:17:ALA:N	2.72	0.41
1:A:31:LYS:HE2	1:A:388:PHE:CZ	2.54	0.41
1:A:343:ALA:HA	1:A:346:ILE:HD13	2.02	0.41
1:A:313:VAL:O	1:A:314:ASP:O	2.38	0.41
1:A:430:TRP:HB3	1:A:439:GLN:NE2	2.35	0.41
1:A:428:PHE:CE2	1:A:430:TRP:N	2.88	0.41
1:A:83:MET:O	1:A:84:VAL:C	2.57	0.41
1:A:113:PRO:HG2	1:A:115:LEU:CD2	2.48	0.41
1:A:125:ASN:OD1	1:A:189:ARG:NH1	2.53	0.41
1:A:212:LYS:HE2	1:A:245:ASP:OD1	2.20	0.41
1:A:445:ARG:O	1:A:446:LEU:C	2.58	0.41
1:A:25:SER:O	1:A:28:ARG:HG2	2.20	0.41
1:A:393:TRP:NE1	1:A:395:GLU:HA	2.35	0.41
1:A:195:HIS:HB3	1:A:241:ILE:HB	2.02	0.41
1:A:462:HIS:O	1:A:463:THR:C	2.59	0.41
1:A:287:LYS:HB3	1:A:291:GLU:HB3	2.02	0.41
1:A:515:LYS:O	1:A:519:GLY:CA	2.69	0.41
1:A:496:VAL:O	1:A:497:ASP:C	2.59	0.41
1:A:170:ASP:OD2	1:A:173:HIS:NE2	2.47	0.40
1:A:224:LEU:HG	1:A:224:LEU:H	1.57	0.40
1:A:95:TYR:CD1	1:A:453:TRP:HH2	2.39	0.40
1:A:121:ASN:O	1:A:124:PRO:HD2	2.20	0.40
1:A:141:GLN:HE22	1:A:157:ALA:C	2.24	0.40
1:A:217:ILE:O	1:A:221:ILE:HG13	2.21	0.40
1:A:19:LYS:HE2	1:A:36:ALA:HB3	2.02	0.40
1:A:39:ILE:HA	1:A:39:ILE:HD12	1.47	0.40
1:A:237:ASP:O	1:A:238:LEU:C	2.59	0.40
1:A:261:HIS:O	1:A:263:PHE:N	2.55	0.40
1:A:298:GLU:O	1:A:301:ALA:N	2.52	0.40
1:A:350:ILE:HG22	1:A:351:ALA:N	2.36	0.40
1:A:428:PHE:CE2	1:A:430:TRP:CA	3.01	0.40
1:A:443:ILE:O	1:A:444:LYS:C	2.59	0.40
1:A:502:GLN:H	1:A:502:GLN:HG2	1.55	0.40
1:A:502:GLN:O	1:A:503:LYS:C	2.59	0.40
1:A:15:VAL:C	1:A:17:ALA:H	2.24	0.40
1:A:414:VAL:HB	1:A:415:TRP:CD1	2.56	0.40

All (3) symmetry-related close contacts are listed below. The label for Atom-2 includes the sym-

metry operator and encoded unit-cell translations to be applied.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:14:GLU:OE1	1:A:142:ARG:NH2[7_555]	1.90	0.30
1:A:283:GLU:OE2	1:A:520:GLY:O[8_665]	2.02	0.18
1:A:39:ILE:CD1	1:A:516:MET:CE[7_555]	2.03	0.17

## 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	509/538 (95%)	388 (76%)	94 (18%)	27 (5%)	<b>2</b> <b>6</b>

All (27) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	154	HIS
1	A	238	LEU
1	A	247	GLU
1	A	288	ASN
1	A	457	THR
1	A	501	HIS
1	A	519	GLY
1	A	114	ASP
1	A	256	ILE
1	A	290	ALA
1	A	291	GLU
1	A	303	ALA
1	A	304	GLY
1	A	309	ASN
1	A	327	ALA
1	A	330	LYS
1	A	347	ALA
1	A	107	SER
1	A	308	PHE

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	328	ILE
1	A	386	ALA
1	A	488	GLN
1	A	350	ILE
1	A	299	TRP
1	A	324	LYS
1	A	342	GLU
1	A	518	THR

### 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	423/442 (96%)	317 (75%)	106 (25%)	<b>0</b> <b>1</b>

All (106) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2	SER
1	A	3	TYR
1	A	4	ILE
1	A	6	GLU
1	A	9	GLN
1	A	23	LYS
1	A	26	ARG
1	A	30	THR
1	A	39	ILE
1	A	42	LYS
1	A	46	LEU
1	A	58	LYS
1	A	62	ILE
1	A	65	ARG
1	A	70	LYS
1	A	73	SER
1	A	74	PHE
1	A	75	THR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	80	ASP
1	A	84	VAL
1	A	85	THR
1	A	90	TYR
1	A	91	LEU
1	A	97	SER
1	A	101	SER
1	A	103	SER
1	A	106	SER
1	A	115	LEU
1	A	118	TYR
1	A	121	ASN
1	A	126	LYS
1	A	129	HIS
1	A	135	LEU
1	A	140	LYS
1	A	142	ARG
1	A	144	GLU
1	A	146	MET
1	A	151	ASP
1	A	152	GLN
1	A	158	ASN
1	A	166	ILE
1	A	171	THR
1	A	176	LEU
1	A	187	VAL
1	A	189	ARG
1	A	196	ILE
1	A	215	VAL
1	A	217	ILE
1	A	228	ARG
1	A	238	LEU
1	A	241	ILE
1	A	245	ASP
1	A	256	ILE
1	A	259	ARG
1	A	264	ILE
1	A	265	ILE
1	A	272	ILE
1	A	277	ASP
1	A	278	LEU
1	A	281	MET

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	284	GLN
1	A	287	LYS
1	A	291	GLU
1	A	293	GLN
1	A	296	GLU
1	A	302	LYS
1	A	305	LEU
1	A	306	LYS
1	A	316	ILE
1	A	324	LYS
1	A	330	LYS
1	A	334	GLN
1	A	336	LYS
1	A	338	LYS
1	A	339	SER
1	A	348	LYS
1	A	349	GLU
1	A	353	THR
1	A	355	ILE
1	A	359	TRP
1	A	363	ARG
1	A	365	ARG
1	A	376	GLN
1	A	379	ILE
1	A	388	PHE
1	A	394	MET
1	A	397	LYS
1	A	398	LEU
1	A	427	SER
1	A	428	PHE
1	A	432	LYS
1	A	440	GLU
1	A	441	THR
1	A	444	LYS
1	A	457	THR
1	A	467	ILE
1	A	470	THR
1	A	473	LYS
1	A	486	LEU
1	A	488	GLN
1	A	500	THR
1	A	501	HIS

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	502	GLN
1	A	505	SER
1	A	516	MET
1	A	517	ILE

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	86	GLN
1	A	121	ASN
1	A	129	HIS
1	A	137	HIS
1	A	141	GLN
1	A	158	ASN
1	A	195	HIS
1	A	220	HIS
1	A	222	ASN
1	A	258	HIS
1	A	261	HIS
1	A	276	ASN
1	A	309	ASN
1	A	439	GLN
1	A	502	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](#)

There are no ligands in this entry.

## 5.7 Other polymers

There are no such residues in this entry.

## 5.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.

## 6 Fit of model and data ⓘ

### 6.1 Protein, DNA and RNA chains ⓘ

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.