



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

May 22, 2020 – 03:39 am BST

PDB ID : 1LM1
Title : Structural studies on the synchronization of catalytic centers in glutamate synthase: native enzyme
Authors : van Den Heuvel, R.H.; Ferrari, D.; Bossi, R.T.; Ravasio, S.; Curti, B.; Vanoni, M.A.; Florencio, F.J.; Mattevi, A.
Deposited on : 2002-04-30
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

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

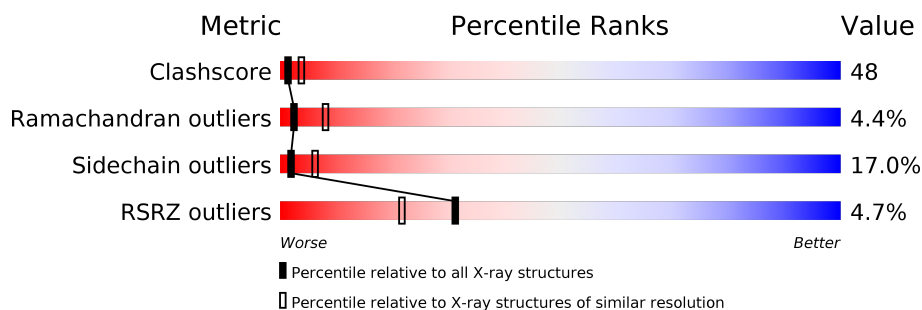
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 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)
RSRZ outliers	127900	3078 (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 ≥ 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	1520	

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
2	ACT	A	2074	-	-	X	-
2	ACT	A	2075	-	-	X	-
4	F3S	A	2072	-	-	X	-

2 Entry composition [i](#)

There are 5 unique types of molecules in this entry. The entry contains 11395 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.

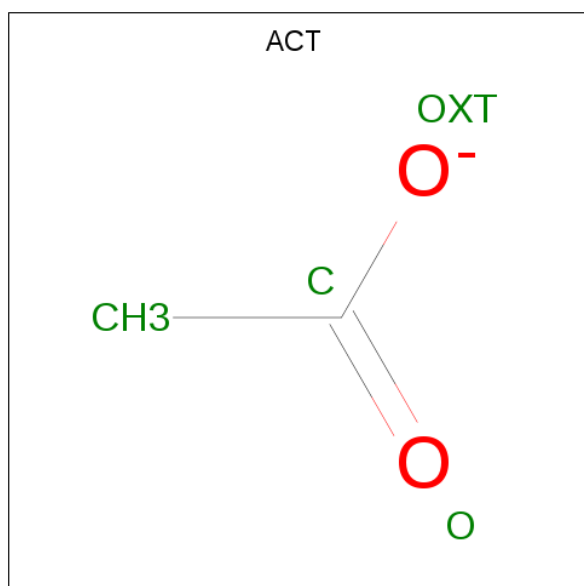
- Molecule 1 is a protein called Ferredoxin-dependent glutamate synthase.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	1475	11311	7137	1970	2148	56	0	0	0

There are 3 discrepancies between the modelled and reference sequences:

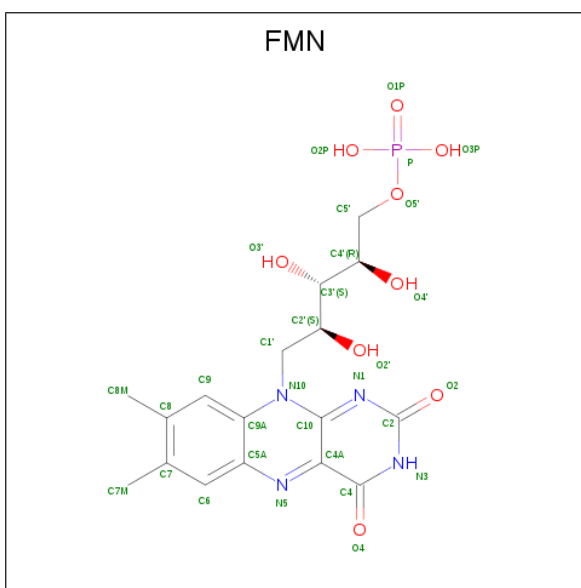
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	578	ASP	THR	CONFLICT	UNP P55038
A	581	THR	ASP	CONFLICT	UNP P55038
A	1507	ASN	GLY	CONFLICT	UNP P55038

- Molecule 2 is ACETATE ION (three-letter code: ACT) (formula: $C_2H_3O_2$).



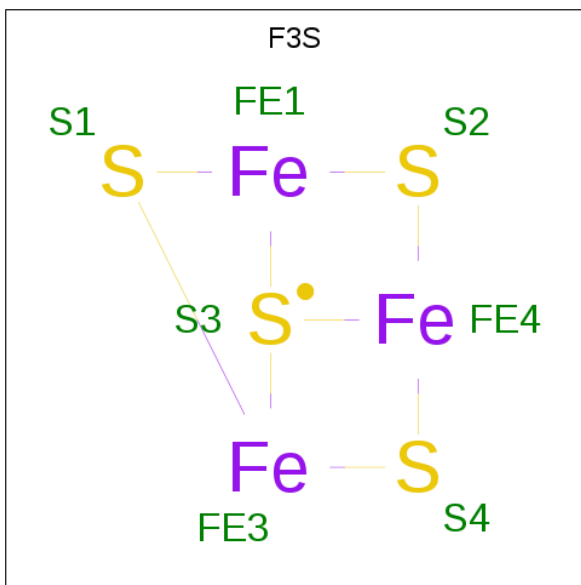
Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
2	A	1	Total	C	O	0	0
			4	2	2		
2	A	1	Total	C	O	0	0
			4	2	2		

- Molecule 3 is FLAVIN MONONUCLEOTIDE (three-letter code: FMN) (formula: $C_{17}H_{21}N_4O_9P$).



Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
3	A	1	Total	C	N	O	P	0	0
			31	17	4	9	1		

- Molecule 4 is FE3-S4 CLUSTER (three-letter code: F3S) (formula: Fe_3S_4).



Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
4	A	1	Total	Fe	S	0	0
			7	3	4		

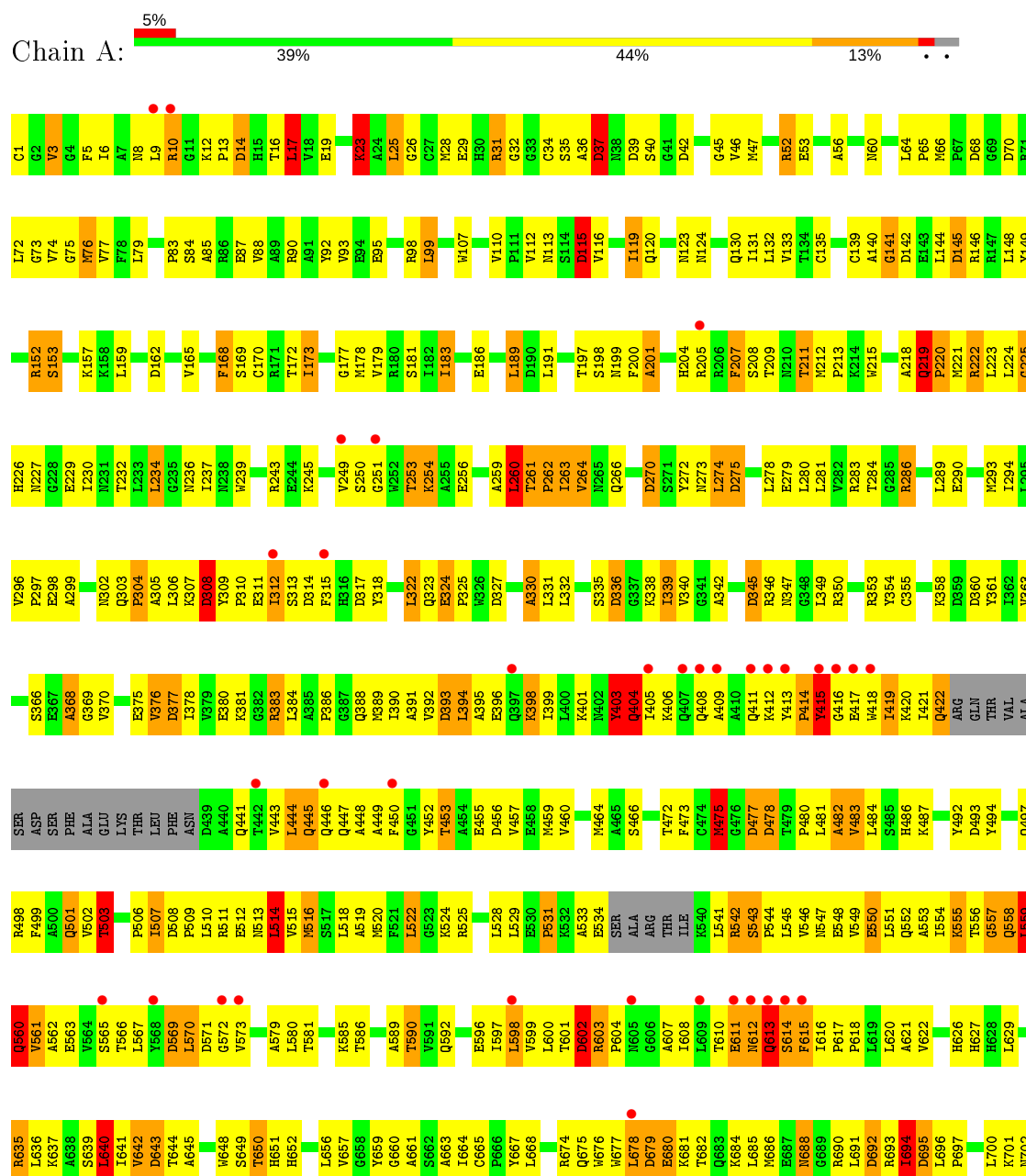
- Molecule 5 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
5	A	38	Total 38	O 38	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: Ferredoxin-dependent glutamate synthase





4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 43 21 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	166.08Å 166.08Å 219.58Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	129.10 – 2.80 61.52 – 2.79	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.7 (129.10-2.80) 99.4 (61.52-2.79)	Depositor EDS
R_{merge}	0.12	Depositor
R_{sym}	0.12	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	1.36 (at 2.77Å)	Xtriage
Refinement program	REFMAC 5.1.06	Depositor
R, R_{free}	0.236 , 0.287 0.229 , (Not available)	Depositor DCC
R_{free} test set	No test flags present.	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	72.0	Xtriage
Anisotropy	0.535	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.33 , 58.0	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.49$, $\langle L^2 \rangle = 0.32$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.93	EDS
Total number of atoms	11395	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	35.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 2.57% 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

5.1 Standard geometry

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: FMN, F3S, ACT

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	0.95	13/11533 (0.1%)	1.18	88/15639 (0.6%)

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	11

All (13) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	1433	ASP	CB-CG	6.96	1.66	1.51
1	A	615	PHE	CE1-CZ	6.10	1.49	1.37
1	A	911	TYR	CD2-CE2	5.83	1.48	1.39
1	A	1008	ASP	CB-CG	-5.70	1.39	1.51
1	A	272	TYR	CE1-CZ	5.67	1.46	1.38
1	A	1445	GLU	CG-CD	5.59	1.60	1.51
1	A	23	LYS	CD-CE	5.50	1.65	1.51
1	A	615	PHE	CB-CG	-5.44	1.42	1.51
1	A	692	ASP	CB-CG	5.38	1.63	1.51
1	A	415	TYR	CD2-CE2	5.30	1.47	1.39
1	A	415	TYR	CD1-CE1	5.24	1.47	1.39
1	A	1231	ASN	CB-CG	5.14	1.62	1.51
1	A	768	PHE	CB-CG	5.01	1.59	1.51

All (88) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	162	ASP	CB-CG-OD2	11.88	129.00	118.30
1	A	498	ARG	NE-CZ-NH1	-10.11	115.25	120.30
1	A	220	PRO	N-CD-CG	-8.50	90.45	103.20
1	A	1399	ASP	CB-CG-OD2	8.50	125.95	118.30
1	A	949	ARG	NE-CZ-NH2	-8.19	116.20	120.30
1	A	383	ARG	NE-CZ-NH1	-8.01	116.30	120.30
1	A	327	ASP	CB-CG-OD2	7.98	125.48	118.30
1	A	847	ASP	CB-CG-OD2	7.97	125.48	118.30
1	A	877	LEU	CA-CB-CG	-7.86	97.22	115.30
1	A	542	ARG	NE-CZ-NH2	7.84	124.22	120.30
1	A	973	PRO	C-N-CA	-7.77	105.97	122.30
1	A	1191	ARG	NE-CZ-NH1	-7.68	116.46	120.30
1	A	478	ASP	CB-CG-OD2	7.49	125.04	118.30
1	A	1437	ASP	CB-CG-OD2	7.47	125.03	118.30
1	A	1008	ASP	CB-CG-OD2	7.23	124.81	118.30
1	A	1062	ASP	CB-CG-OD1	-7.05	111.95	118.30
1	A	760	ASP	CB-CG-OD2	7.05	124.64	118.30
1	A	679	ASP	CB-CG-OD2	6.98	124.58	118.30
1	A	692	ASP	CB-CG-OD2	6.96	124.56	118.30
1	A	1256	ASP	CB-CG-OD2	6.95	124.56	118.30
1	A	1195	ASP	CB-CG-OD2	6.95	124.55	118.30
1	A	493	ASP	CB-CG-OD2	6.94	124.54	118.30
1	A	643	ASP	CB-CG-OD2	6.91	124.52	118.30
1	A	37	ASP	CB-CG-OD2	6.79	124.41	118.30
1	A	1062	ASP	CB-CG-OD2	6.70	124.33	118.30
1	A	1249	ASP	CB-CG-OD2	6.68	124.32	118.30
1	A	70	ASP	CB-CG-OD2	6.68	124.31	118.30
1	A	1201	ASP	CB-CG-OD2	6.65	124.29	118.30
1	A	844	ASP	CB-CG-OD2	6.62	124.25	118.30
1	A	219	GLN	N-CA-C	6.61	128.84	111.00
1	A	640	LEU	CB-CG-CD2	-6.57	99.84	111.00
1	A	695	ASP	CB-CG-OD2	6.52	124.16	118.30
1	A	345	ASP	CB-CG-OD2	6.49	124.14	118.30
1	A	98	ARG	NE-CZ-NH2	-6.47	117.06	120.30
1	A	145	ASP	CB-CG-OD2	6.41	124.07	118.30
1	A	17	LEU	CA-CB-CG	6.40	130.03	115.30
1	A	1154	THR	CB-CA-C	-6.35	94.45	111.60
1	A	1248	ASP	CB-CG-OD2	6.33	124.00	118.30
1	A	907	ASP	CB-CG-OD2	6.32	123.98	118.30
1	A	1103	ARG	NE-CZ-NH1	6.28	123.44	120.30
1	A	275	ASP	CB-CG-OD2	6.24	123.91	118.30
1	A	1021	ASP	CB-CG-OD2	6.23	123.91	118.30
1	A	1014	ASP	CB-CG-OD1	6.22	123.90	118.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1433	ASP	CB-CG-OD2	6.21	123.89	118.30
1	A	903	GLU	CB-CA-C	-6.21	97.99	110.40
1	A	694	ILE	CG1-CB-CG2	-6.13	97.90	111.40
1	A	1497	PRO	N-CA-C	-6.08	96.30	112.10
1	A	39	ASP	CB-CG-OD2	6.03	123.72	118.30
1	A	1399	ASP	CB-CG-OD1	-5.97	112.93	118.30
1	A	1250	ASP	CB-CG-OD2	5.96	123.67	118.30
1	A	825	ASP	CB-CG-OD2	5.94	123.65	118.30
1	A	522	LEU	CA-CB-CG	-5.94	101.64	115.30
1	A	1103	ARG	NE-CZ-NH2	-5.87	117.36	120.30
1	A	162	ASP	CB-CG-OD1	-5.87	113.02	118.30
1	A	31	ARG	NE-CZ-NH2	-5.82	117.39	120.30
1	A	602	ASP	CB-CG-OD2	5.81	123.53	118.30
1	A	225	GLY	N-CA-C	-5.81	98.58	113.10
1	A	14	ASP	CB-CG-OD2	5.75	123.48	118.30
1	A	477	ASP	CB-CG-OD2	5.72	123.45	118.30
1	A	915	ASP	CB-CG-OD2	5.71	123.44	118.30
1	A	829	LEU	CA-CB-CG	5.69	128.39	115.30
1	A	918	ASP	CB-CG-OD2	5.69	123.42	118.30
1	A	1277	ASP	CB-CG-OD2	5.68	123.41	118.30
1	A	115	ASP	CB-CG-OD2	5.61	123.35	118.30
1	A	383	ARG	NE-CZ-NH2	5.61	123.11	120.30
1	A	1105	ASP	CB-CG-OD1	5.59	123.33	118.30
1	A	1227	ASP	CB-CG-OD2	5.58	123.33	118.30
1	A	1386	ARG	NE-CZ-NH1	-5.58	117.51	120.30
1	A	501	GLN	C-N-CA	-5.47	108.03	121.70
1	A	478	ASP	CB-CG-OD1	-5.45	113.40	118.30
1	A	1240	VAL	CB-CA-C	-5.44	101.06	111.40
1	A	270	ASP	CB-CG-OD2	5.43	123.19	118.30
1	A	1015	LEU	CB-CG-CD2	5.34	120.07	111.00
1	A	877	LEU	CB-CG-CD2	5.32	120.05	111.00
1	A	1220	ASP	CB-CG-OD1	5.31	123.08	118.30
1	A	68	ASP	CB-CG-OD2	5.28	123.06	118.30
1	A	219	GLN	CB-CA-C	-5.26	99.88	110.40
1	A	142	ASP	CB-CG-OD2	5.22	123.00	118.30
1	A	508	ASP	CB-CG-OD2	5.15	122.93	118.30
1	A	1363	THR	OG1-CB-CG2	-5.14	98.18	110.00
1	A	336	ASP	CB-CG-OD2	5.13	122.92	118.30
1	A	1008	ASP	CB-CG-OD1	-5.11	113.70	118.30
1	A	752	ARG	NE-CZ-NH2	-5.10	117.75	120.30
1	A	503	THR	N-CA-CB	-5.07	100.67	110.30
1	A	25	LEU	CB-CG-CD2	-5.05	102.41	111.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1486	ASP	CB-CG-OD2	5.02	122.82	118.30
1	A	308	ASP	CB-CG-OD2	5.01	122.81	118.30
1	A	973	PRO	O-C-N	-5.01	114.69	123.20

There are no chirality outliers.

All (11) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	123	ASN	Peptide
1	A	1421	GLY	Peptide
1	A	1491	PHE	Peptide
1	A	219	GLN	Peptide
1	A	403	TYR	Peptide
1	A	445	GLN	Peptide
1	A	559	LEU	Peptide
1	A	560	GLN	Peptide
1	A	791	GLY	Peptide
1	A	99	LEU	Peptide
1	A	997	GLY	Peptide

5.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	11311	0	11256	1070	0
2	A	8	0	6	6	0
3	A	31	0	19	4	0
4	A	7	0	0	3	0
5	A	38	0	0	7	0
All	All	11395	0	11281	1077	0

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 48.

All (1077) 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:293:MET:SD	1:A:293:MET:CE	2.03	1.46
1:A:875:MET:CE	1:A:875:MET:SD	2.04	1.45
1:A:768:PHE:CE2	1:A:771:MET:HG2	1.55	1.42
1:A:686:MET:CE	1:A:692:ASP:HA	1.61	1.31
1:A:885:HIS:HD2	1:A:910:ARG:NH2	1.32	1.25
1:A:413:TYR:O	1:A:415:TYR:N	1.68	1.25
1:A:243:ARG:HH12	1:A:323:GLN:NE2	1.35	1.23
1:A:1148:CYS:SG	5:A:2113:HOH:O	1.93	1.22
1:A:1442:ILE:HD12	1:A:1449:LEU:CD2	1.70	1.22
1:A:768:PHE:HE2	1:A:771:MET:CG	1.55	1.20
1:A:1442:ILE:CD1	1:A:1449:LEU:HD22	1.73	1.18
1:A:1424:MET:O	1:A:1446:ILE:HD11	1.40	1.18
1:A:28:MET:CE	1:A:31:ARG:HD2	1.73	1.17
1:A:1447:ILE:HD11	1:A:1494:ALA:CB	1.75	1.17
1:A:383:ARG:NH1	1:A:1380:GLY:HA2	1.57	1.16
1:A:1387:ASN:HB3	1:A:1405:MET:HE2	1.27	1.16
1:A:768:PHE:CE2	1:A:771:MET:CG	2.26	1.16
1:A:1318:LEU:HB2	1:A:1321:MET:HE3	1.26	1.16
1:A:567:LEU:HD21	1:A:615:PHE:CE2	1.81	1.15
1:A:1263:HIS:CE1	1:A:1297:PHE:HA	1.82	1.14
1:A:1347:HIS:CG	1:A:1348:PRO:HD2	1.82	1.14
1:A:907:ASP:OD2	1:A:909:VAL:HG23	1.45	1.14
1:A:885:HIS:CD2	1:A:910:ARG:HH22	1.66	1.13
1:A:1447:ILE:CD1	1:A:1494:ALA:HB1	1.79	1.11
1:A:768:PHE:CD2	1:A:771:MET:HG2	1.85	1.10
1:A:234:LEU:HD12	1:A:234:LEU:C	1.66	1.10
1:A:1138:ILE:HG22	1:A:1139:MET:N	1.54	1.09
1:A:559:LEU:CD2	1:A:560:GLN:O	2.01	1.08
1:A:558:GLN:HA	1:A:558:GLN:OE1	1.33	1.08
1:A:773:PHE:HB2	1:A:774:PRO:CD	1.84	1.08
1:A:1347:HIS:ND1	1:A:1348:PRO:HD2	1.68	1.08
1:A:1263:HIS:CE1	1:A:1298:GLU:H	1.71	1.08
1:A:1263:HIS:HE1	1:A:1297:PHE:HA	1.15	1.07
1:A:261:THR:HB	1:A:262:PRO:HD3	1.09	1.07
1:A:953:THR:HG23	1:A:1294:ASN:HD21	1.08	1.06
1:A:511:ARG:HG3	1:A:1422:ALA:HB1	1.36	1.06
1:A:686:MET:HE2	1:A:692:ASP:CA	1.86	1.06
1:A:1148:CYS:HB3	5:A:2113:HOH:O	1.51	1.05
1:A:219:GLN:HG2	1:A:219:GLN:O	1.29	1.05
1:A:635:ARG:HG3	1:A:635:ARG:NH1	1.63	1.04
1:A:1497:PRO:O	1:A:1498:SER:HB3	1.52	1.03
1:A:1387:ASN:HD22	1:A:1405:MET:HE1	1.23	1.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1491:PHE:CD1	1:A:1491:PHE:O	2.13	1.02
1:A:1491:PHE:HD1	1:A:1491:PHE:O	1.42	1.02
1:A:885:HIS:CD2	1:A:910:ARG:NH2	2.25	1.01
1:A:635:ARG:CG	1:A:635:ARG:HH11	1.73	1.01
1:A:1138:ILE:CG2	1:A:1139:MET:H	1.73	1.01
1:A:219:GLN:CG	1:A:219:GLN:O	2.04	1.01
1:A:809:VAL:HG11	1:A:1169:GLN:O	1.59	1.01
1:A:773:PHE:HB2	1:A:774:PRO:HD3	1.40	1.00
1:A:443:VAL:HG11	1:A:675:GLN:HG3	1.44	1.00
1:A:318:TYR:HD1	1:A:418:TRP:CZ2	1.78	1.00
1:A:635:ARG:HG3	1:A:635:ARG:HH11	0.86	0.99
1:A:146:ARG:NH2	1:A:256:GLU:OE1	1.94	0.99
1:A:404:GLN:HA	1:A:404:GLN:OE1	1.58	0.99
1:A:1355:GLU:HG3	1:A:1476:LYS:HB2	1.45	0.99
1:A:677:TRP:HE3	1:A:678:LEU:HD23	1.26	0.99
1:A:1130:ILE:H	1:A:1130:ILE:HD13	1.29	0.98
1:A:1447:ILE:HD11	1:A:1494:ALA:HB1	0.99	0.98
1:A:1491:PHE:HD1	1:A:1491:PHE:C	1.64	0.97
1:A:377:ASP:OD1	1:A:377:ASP:O	1.83	0.97
1:A:1318:LEU:HB2	1:A:1321:MET:CE	1.95	0.96
1:A:369:GLY:HA3	1:A:1308:ALA:CB	1.95	0.96
1:A:450:PHE:CD2	1:A:645:ALA:HB3	2.00	0.96
1:A:222:ARG:HH11	1:A:222:ARG:HG2	1.30	0.96
1:A:1138:ILE:HG22	1:A:1139:MET:H	0.80	0.96
1:A:567:LEU:CD2	1:A:615:PHE:CE2	2.47	0.96
1:A:403:TYR:H	1:A:403:TYR:HD1	1.13	0.96
1:A:601:THR:HG22	1:A:603:ARG:H	1.30	0.95
1:A:261:THR:CB	1:A:262:PRO:HD3	1.97	0.95
1:A:686:MET:HE2	1:A:692:ASP:HA	0.96	0.94
1:A:222:ARG:HG2	1:A:222:ARG:NH1	1.83	0.94
1:A:388:GLN:HG2	1:A:401:LYS:HD3	1.47	0.94
1:A:558:GLN:CA	1:A:558:GLN:OE1	2.14	0.94
1:A:1424:MET:O	1:A:1446:ILE:CD1	2.16	0.94
1:A:1347:HIS:CE1	1:A:1348:PRO:HD2	2.03	0.93
1:A:827:TYR:O	1:A:831:ARG:HB2	1.68	0.93
1:A:1081:GLU:HB3	1:A:1120:MET:HE3	1.50	0.93
1:A:1101:LEU:HD13	1:A:1123:GLU:HB2	1.51	0.93
1:A:399:ILE:HG22	1:A:404:GLN:HG2	1.47	0.92
1:A:509:PRO:HA	1:A:516:MET:CE	1.99	0.92
1:A:797:ASN:HA	1:A:801:MET:CE	1.99	0.92
1:A:693:ARG:O	1:A:694:ILE:HG12	1.69	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:A:2074:ACT:H2	2:A:2075:ACT:H3	1.52	0.92
1:A:771:MET:CE	1:A:775:GLU:HG3	1.98	0.92
1:A:234:LEU:O	1:A:234:LEU:HD12	1.69	0.91
1:A:243:ARG:NH1	1:A:323:GLN:NE2	2.17	0.91
1:A:1148:CYS:CB	5:A:2113:HOH:O	1.98	0.91
1:A:312:ILE:HG21	1:A:405:ILE:HD13	1.52	0.91
1:A:414:PRO:O	1:A:417:GLU:N	2.03	0.91
1:A:1387:ASN:HD22	1:A:1405:MET:CE	1.84	0.91
1:A:993:ARG:HG3	1:A:993:ARG:HH11	1.35	0.91
1:A:1101:LEU:CD1	1:A:1123:GLU:HB2	2.01	0.90
1:A:757:THR:H	1:A:760:ASP:HB2	1.36	0.90
1:A:1385:VAL:O	1:A:1404:TYR:N	2.05	0.90
1:A:686:MET:HB3	1:A:692:ASP:HB2	1.51	0.90
1:A:415:TYR:CD1	1:A:416:GLY:N	2.39	0.90
1:A:1254:ASP:CB	1:A:1255:PRO:HD2	2.02	0.89
1:A:311:GLU:HB2	1:A:409:ALA:HB1	1.53	0.89
1:A:878:GLY:HA2	1:A:988:ILE:HD12	1.54	0.89
1:A:243:ARG:HH12	1:A:323:GLN:HE22	1.19	0.89
1:A:953:THR:CG2	1:A:1294:ASN:HD21	1.86	0.89
1:A:677:TRP:CE3	1:A:678:LEU:HD23	2.09	0.88
1:A:797:ASN:HA	1:A:801:MET:HE3	1.55	0.88
1:A:286:ARG:NH2	1:A:528:LEU:O	2.05	0.88
1:A:455:GLU:HG2	1:A:459:MET:CE	2.03	0.88
1:A:1254:ASP:CG	1:A:1255:PRO:HD2	1.93	0.88
1:A:1387:ASN:HB3	1:A:1405:MET:CE	2.03	0.88
1:A:1461:LEU:HD21	1:A:1491:PHE:CZ	2.09	0.88
1:A:261:THR:HB	1:A:262:PRO:CD	1.99	0.87
1:A:1263:HIS:HE1	1:A:1297:PHE:CA	1.86	0.87
1:A:567:LEU:HD21	1:A:615:PHE:HE2	1.38	0.87
1:A:559:LEU:HD21	1:A:560:GLN:O	1.74	0.87
1:A:567:LEU:HD12	1:A:604:PRO:CD	2.04	0.87
1:A:1442:ILE:HD12	1:A:1449:LEU:HD22	0.88	0.87
1:A:289:LEU:HD22	1:A:404:GLN:HE22	1.39	0.87
1:A:811:ALA:O	1:A:812:TYR:HB2	1.73	0.87
1:A:404:GLN:OE1	1:A:404:GLN:CA	2.17	0.87
1:A:234:LEU:CD1	1:A:234:LEU:C	2.43	0.86
1:A:770:GLY:O	1:A:774:PRO:HG2	1.75	0.86
1:A:318:TYR:CD1	1:A:418:TRP:CZ2	2.64	0.86
1:A:453:THR:HB	1:A:456:ASP:OD2	1.75	0.85
1:A:1322:THR:O	1:A:1323:LEU:HD23	1.75	0.85
1:A:686:MET:CE	1:A:694:ILE:HB	2.05	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:383:ARG:NH1	1:A:1380:GLY:CA	2.37	0.85
1:A:522:LEU:HD11	1:A:541:LEU:HD22	1.56	0.85
1:A:809:VAL:CG1	1:A:1169:GLN:O	2.24	0.85
1:A:230:ILE:HD13	1:A:270:ASP:HB2	1.59	0.84
1:A:1263:HIS:HE1	1:A:1298:GLU:H	1.25	0.84
1:A:827:TYR:HD2	1:A:831:ARG:HG3	1.43	0.84
1:A:314:ASP:HB2	1:A:415:TYR:HB2	1.58	0.84
1:A:885:HIS:HD2	1:A:910:ARG:HH22	0.87	0.84
1:A:827:TYR:HE1	1:A:1176:PHE:CD1	1.94	0.84
1:A:688:ASN:OD1	1:A:688:ASN:O	1.96	0.84
1:A:1497:PRO:O	1:A:1498:SER:CB	2.25	0.83
1:A:843:ARG:HG3	1:A:1112:TRP:CZ3	2.13	0.83
1:A:421:ILE:O	1:A:422:GLN:O	1.95	0.82
1:A:560:GLN:OE1	1:A:560:GLN:HA	1.76	0.82
1:A:1311:GLN:HA	1:A:1311:GLN:OE1	1.78	0.82
1:A:1338:ASN:HA	1:A:1369:THR:HG22	1.60	0.82
1:A:450:PHE:CZ	1:A:615:PHE:CE1	2.67	0.82
1:A:1491:PHE:CD1	1:A:1491:PHE:C	2.43	0.82
1:A:311:GLU:CB	1:A:409:ALA:HB1	2.08	0.82
1:A:978:GLN:HE22	1:A:1068:SER:HA	1.42	0.82
1:A:135:CYS:CB	1:A:139:CYS:HB2	2.09	0.82
1:A:253:THR:HB	1:A:256:GLU:HG3	1.58	0.82
1:A:1461:LEU:HD21	1:A:1491:PHE:HZ	1.43	0.82
1:A:45:GLY:HA3	1:A:220:PRO:HD3	1.59	0.82
1:A:230:ILE:HD11	1:A:274:LEU:HD12	1.60	0.81
1:A:56:ALA:HA	1:A:66:MET:CE	2.09	0.81
1:A:152:ARG:HH12	1:A:168:PHE:N	1.78	0.81
1:A:253:THR:CB	1:A:256:GLU:HG3	2.09	0.81
1:A:1145:THR:HG21	1:A:1147:ASN:ND2	1.95	0.81
1:A:1263:HIS:CE1	1:A:1298:GLU:N	2.47	0.81
1:A:616:ILE:CG2	1:A:621:ALA:HB2	2.11	0.81
1:A:773:PHE:CB	1:A:774:PRO:CD	2.56	0.81
1:A:768:PHE:HE2	1:A:771:MET:HG3	1.44	0.80
1:A:1472:THR:HG22	1:A:1474:SER:H	1.47	0.80
1:A:771:MET:HE1	1:A:775:GLU:HG3	1.62	0.80
1:A:881:SER:HB2	1:A:1160:ARG:HD3	1.64	0.80
1:A:1216:ASN:HD22	1:A:1216:ASN:N	1.75	0.80
1:A:1347:HIS:CD2	1:A:1348:PRO:HD2	2.16	0.80
1:A:1355:GLU:CG	1:A:1476:LYS:HB2	2.12	0.80
1:A:1065:THR:HG22	2:A:2074:ACT:OXT	1.81	0.80
1:A:312:ILE:HG21	1:A:405:ILE:CD1	2.12	0.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:771:MET:HE3	1:A:775:GLU:HG3	1.64	0.80
1:A:455:GLU:HG2	1:A:459:MET:HE3	1.60	0.80
1:A:553:ALA:O	1:A:556:THR:HB	1.81	0.80
1:A:1254:ASP:HB2	1:A:1255:PRO:HD2	1.62	0.80
1:A:581:THR:O	1:A:585:LYS:HG3	1.82	0.80
1:A:73:GLY:HA2	1:A:170:CYS:HA	1.64	0.79
1:A:551:LEU:HG	1:A:555:LYS:HE2	1.64	0.79
1:A:1216:ASN:H	1:A:1216:ASN:HD22	1.30	0.79
1:A:686:MET:CB	1:A:692:ASP:HB2	2.12	0.79
1:A:686:MET:CA	1:A:692:ASP:HB2	2.12	0.79
1:A:1024:GLN:HE22	1:A:1246:VAL:HG11	1.48	0.79
1:A:1110:THR:HG22	1:A:1113:ASP:H	1.46	0.79
1:A:383:ARG:HH12	1:A:1380:GLY:C	1.86	0.79
1:A:414:PRO:CB	1:A:418:TRP:HB3	2.13	0.79
1:A:686:MET:HE1	1:A:694:ILE:HB	1.65	0.79
1:A:629:LEU:HD23	1:A:635:ARG:HD3	1.62	0.78
1:A:856:SER:HB3	1:A:859:GLU:HG3	1.64	0.78
1:A:994:SER:HA	1:A:1406:THR:HG23	1.65	0.78
1:A:1065:THR:HG21	1:A:1068:SER:OG	1.82	0.78
2:A:2074:ACT:H2	2:A:2075:ACT:CH3	2.13	0.78
1:A:243:ARG:HH12	1:A:323:GLN:HE21	1.28	0.78
1:A:908:VAL:HA	1:A:911:TYR:CE1	2.18	0.78
1:A:1130:ILE:CD1	1:A:1130:ILE:H	1.95	0.78
1:A:1382:ARG:O	1:A:1385:VAL:HG22	1.84	0.78
1:A:10:ARG:HH11	1:A:10:ARG:CG	1.97	0.78
1:A:559:LEU:HD23	1:A:560:GLN:O	1.82	0.78
1:A:445:GLN:OE1	1:A:777:ALA:HB2	1.84	0.78
1:A:28:MET:HE1	1:A:31:ARG:HD2	1.66	0.77
1:A:135:CYS:HB3	1:A:139:CYS:HB2	1.67	0.77
1:A:660:GLY:O	1:A:727:HIS:HE1	1.66	0.77
1:A:883:GLU:OE1	1:A:1160:ARG:HD2	1.85	0.77
2:A:2074:ACT:CH3	2:A:2075:ACT:CH3	2.63	0.77
1:A:677:TRP:HE3	1:A:678:LEU:CD2	1.98	0.77
1:A:1142:VAL:O	1:A:1145:THR:HB	1.85	0.76
1:A:290:GLU:OE1	1:A:408:GLN:HG3	1.85	0.76
1:A:1224:ASN:O	1:A:1225:LEU:HD23	1.86	0.76
1:A:567:LEU:HD12	1:A:604:PRO:CG	2.16	0.76
1:A:1085:THR:HG22	1:A:1086:GLU:N	2.01	0.76
1:A:186:GLU:HA	1:A:186:GLU:OE1	1.84	0.76
1:A:318:TYR:HD1	1:A:418:TRP:HZ2	1.33	0.76
1:A:953:THR:HG23	1:A:1294:ASN:ND2	1.93	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:875:MET:SD	1:A:1132:MET:HE1	2.26	0.76
1:A:1263:HIS:HE1	1:A:1298:GLU:N	1.80	0.76
1:A:414:PRO:HB2	1:A:418:TRP:HB3	1.67	0.75
1:A:509:PRO:HA	1:A:516:MET:HE3	1.67	0.75
1:A:383:ARG:HH12	1:A:1380:GLY:CA	1.98	0.75
1:A:383:ARG:HH11	1:A:1380:GLY:HA2	1.48	0.75
1:A:561:VAL:HG12	1:A:599:VAL:HG23	1.69	0.75
1:A:768:PHE:HE2	1:A:771:MET:HG2	1.06	0.75
1:A:1224:ASN:C	1:A:1225:LEU:HD23	2.07	0.75
1:A:1130:ILE:HD13	1:A:1130:ILE:N	1.99	0.75
1:A:1259:GLU:HA	1:A:1265:THR:HB	1.69	0.74
1:A:9:LEU:HD12	1:A:360:ASP:HB3	1.69	0.74
1:A:1387:ASN:CB	1:A:1405:MET:HE2	2.13	0.74
1:A:28:MET:HE3	1:A:31:ARG:HD2	1.66	0.74
1:A:827:TYR:O	1:A:831:ARG:N	2.19	0.74
1:A:570:LEU:HD22	1:A:571:ASP:H	1.52	0.74
1:A:239:TRP:CD1	1:A:324:GLU:OE2	2.40	0.74
1:A:888:LEU:HG	1:A:1135:GLU:OE2	1.87	0.74
1:A:349:LEU:O	1:A:350:ARG:HD2	1.87	0.74
1:A:234:LEU:O	1:A:234:LEU:CD1	2.35	0.74
1:A:1081:GLU:CB	1:A:1120:MET:HE3	2.18	0.74
1:A:232:THR:HG21	1:A:725:SER:HB3	1.69	0.74
1:A:1338:ASN:OD1	1:A:1369:THR:CG2	2.37	0.73
1:A:843:ARG:HG3	1:A:1112:TRP:CH2	2.24	0.73
1:A:152:ARG:HH12	1:A:168:PHE:H	1.36	0.73
1:A:23:LYS:HE3	1:A:23:LYS:HA	1.70	0.73
1:A:1184:LEU:N	1:A:1184:LEU:HD23	2.04	0.73
1:A:1451:ARG:CZ	1:A:1490:LYS:HD2	2.17	0.73
1:A:686:MET:O	1:A:692:ASP:CB	2.37	0.73
1:A:1008:ASP:HB2	1:A:1366:TYR:HE1	1.53	0.72
1:A:773:PHE:HB2	1:A:774:PRO:HD2	1.71	0.72
1:A:384:LEU:HD21	1:A:390:ILE:HG22	1.70	0.72
1:A:478:ASP:OD2	1:A:1141:ARG:NH2	2.23	0.72
1:A:561:VAL:HG13	1:A:597:ILE:HG22	1.70	0.72
1:A:561:VAL:CG1	1:A:599:VAL:HG23	2.19	0.72
1:A:602:ASP:OD2	1:A:644:THR:HA	1.88	0.72
1:A:1447:ILE:HG12	1:A:1448:THR:N	2.05	0.72
1:A:846:LEU:HB2	1:A:1116:MET:HE1	1.72	0.72
1:A:567:LEU:CD2	1:A:615:PHE:HE2	1.97	0.72
1:A:686:MET:HE3	1:A:692:ASP:HA	1.71	0.72
1:A:1386:ARG:HG2	1:A:1404:TYR:HB2	1.72	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:686:MET:HB3	1:A:692:ASP:CB	2.19	0.71
1:A:1446:ILE:HG12	1:A:1447:ILE:N	2.05	0.71
1:A:445:GLN:HB3	1:A:772:ALA:HB1	1.72	0.71
1:A:622:VAL:HG21	1:A:642:VAL:HG11	1.70	0.71
1:A:444:LEU:O	1:A:445:GLN:HG2	1.91	0.71
1:A:827:TYR:HE1	1:A:1176:PHE:HD1	1.37	0.71
1:A:559:LEU:CD2	1:A:596:GLU:H	2.04	0.71
1:A:611:GLU:C	1:A:613:GLN:N	2.44	0.71
1:A:443:VAL:HG21	1:A:675:GLN:HE21	1.54	0.70
1:A:657:VAL:HG11	1:A:723:LEU:HD11	1.72	0.70
1:A:901:SER:O	1:A:902:GLY:O	2.09	0.70
1:A:781:GLU:HG3	1:A:782:ASN:H	1.57	0.70
1:A:954:PRO:O	1:A:958:MET:HG2	1.91	0.70
1:A:1442:ILE:HD11	1:A:1449:LEU:HD13	1.72	0.70
1:A:443:VAL:HG21	1:A:675:GLN:NE2	2.06	0.70
1:A:369:GLY:HA3	1:A:1308:ALA:HB3	1.72	0.70
1:A:1355:GLU:H	1:A:1355:GLU:CD	1.95	0.70
1:A:1419:ASN:ND2	1:A:1443:ASN:HD22	1.88	0.70
1:A:12:LYS:HB3	1:A:13:PRO:HD2	1.74	0.69
1:A:445:GLN:CD	1:A:777:ALA:HA	2.12	0.69
1:A:1147:ASN:O	1:A:1148:CYS:C	2.28	0.69
1:A:1148:CYS:HG	4:A:2072:F3S:FE3	1.07	0.69
1:A:418:TRP:O	1:A:418:TRP:CE3	2.44	0.69
1:A:445:GLN:OE1	1:A:777:ALA:CA	2.39	0.69
1:A:486:HIS:HD2	1:A:1212:SER:OG	1.75	0.69
1:A:1081:GLU:CG	1:A:1120:MET:CE	2.70	0.69
1:A:686:MET:C	1:A:692:ASP:HB2	2.13	0.69
1:A:445:GLN:OE1	1:A:777:ALA:CB	2.40	0.69
1:A:10:ARG:HG3	1:A:10:ARG:HH11	1.57	0.69
1:A:1142:VAL:O	1:A:1142:VAL:HG12	1.93	0.69
1:A:1148:CYS:SG	4:A:2072:F3S:S3	2.91	0.69
1:A:797:ASN:HA	1:A:801:MET:HE1	1.74	0.68
1:A:560:GLN:CA	1:A:560:GLN:OE1	2.41	0.68
1:A:781:GLU:HG3	1:A:782:ASN:N	2.09	0.68
1:A:1347:HIS:CE1	1:A:1348:PRO:CD	2.76	0.68
1:A:1352:PHE:O	1:A:1354:PRO:HD3	1.92	0.68
1:A:677:TRP:CE3	1:A:678:LEU:CD2	2.74	0.68
1:A:45:GLY:HA3	1:A:220:PRO:CD	2.24	0.68
1:A:222:ARG:HH11	1:A:222:ARG:CG	2.04	0.68
1:A:314:ASP:OD2	1:A:415:TYR:CD1	2.46	0.68
1:A:418:TRP:CD2	1:A:418:TRP:C	2.67	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:995:LYS:HD2	1:A:1498:SER:OG	1.94	0.68
1:A:306:LEU:HD13	1:A:312:ILE:CD1	2.24	0.68
1:A:1101:LEU:HD12	1:A:1102:LEU:N	2.09	0.68
1:A:28:MET:CE	1:A:31:ARG:CD	2.64	0.68
1:A:1254:ASP:CB	1:A:1255:PRO:CD	2.71	0.68
1:A:1403:GLU:O	1:A:1422:ALA:O	2.12	0.68
1:A:1451:ARG:NH2	1:A:1490:LYS:HD2	2.08	0.68
1:A:618:PRO:HG3	1:A:644:THR:OG1	1.94	0.68
1:A:601:THR:HG21	1:A:603:ARG:HG2	1.77	0.67
1:A:450:PHE:CE2	1:A:615:PHE:CE1	2.82	0.67
1:A:399:ILE:CG2	1:A:404:GLN:HG2	2.22	0.67
1:A:52:ARG:HD2	5:A:2082:HOH:O	1.95	0.67
1:A:1065:THR:HB	1:A:1067:ALA:H	1.60	0.67
1:A:289:LEU:CD2	1:A:389:MET:HE3	2.24	0.67
1:A:601:THR:HG22	1:A:603:ARG:N	2.07	0.67
1:A:827:TYR:CD2	1:A:831:ARG:HG3	2.30	0.67
1:A:1081:GLU:CG	1:A:1120:MET:HE1	2.25	0.67
1:A:1145:THR:CG2	1:A:1147:ASN:ND2	2.56	0.67
1:A:603:ARG:HD2	1:A:667:TYR:CE2	2.30	0.67
1:A:1447:ILE:HG12	1:A:1448:THR:H	1.60	0.67
1:A:28:MET:HE2	1:A:31:ARG:HD2	1.71	0.67
1:A:1254:ASP:HB2	1:A:1255:PRO:CD	2.26	0.66
1:A:1442:ILE:CD1	1:A:1449:LEU:CD2	2.51	0.66
1:A:1490:LYS:CE	1:A:1492:TRP:HZ2	2.09	0.66
1:A:1138:ILE:O	1:A:1139:MET:HG2	1.94	0.66
1:A:917:VAL:HG11	1:A:932:LEU:O	1.96	0.66
1:A:635:ARG:O	1:A:635:ARG:HD2	1.95	0.66
1:A:450:PHE:CZ	1:A:615:PHE:CZ	2.84	0.66
1:A:475:MET:CE	1:A:1129:SER:OG	2.44	0.66
1:A:478:ASP:HB3	1:A:795:HIS:ND1	2.10	0.66
1:A:946:ALA:O	1:A:949:ARG:HD3	1.94	0.66
1:A:993:ARG:HH11	1:A:993:ARG:CG	2.09	0.66
1:A:414:PRO:O	1:A:418:TRP:N	2.26	0.66
1:A:303:GLN:HE21	1:A:305:ALA:H	1.44	0.65
1:A:908:VAL:HG22	1:A:911:TYR:CE1	2.31	0.65
1:A:1360:ILE:HG23	1:A:1364:CYS:SG	2.36	0.65
1:A:1419:ASN:HD21	1:A:1443:ASN:ND2	1.93	0.65
1:A:686:MET:HE3	1:A:694:ILE:HB	1.78	0.65
1:A:314:ASP:OD2	1:A:415:TYR:HD1	1.80	0.65
1:A:567:LEU:HD12	1:A:604:PRO:HD2	1.79	0.65
1:A:1490:LYS:CE	1:A:1492:TRP:CZ2	2.80	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:17:LEU:HD21	1:A:200:PHE:HA	1.77	0.65
1:A:237:ILE:HG23	1:A:264:VAL:HG13	1.76	0.65
1:A:907:ASP:OD2	1:A:909:VAL:CG2	2.35	0.65
1:A:224:LEU:HD11	1:A:226:HIS:HB2	1.77	0.65
1:A:77:VAL:HG22	1:A:165:VAL:HG22	1.79	0.65
1:A:1081:GLU:HG3	1:A:1120:MET:HE1	1.79	0.65
1:A:450:PHE:CE2	1:A:645:ALA:HB3	2.31	0.64
1:A:676:TRP:HE1	1:A:690:ARG:HH12	1.44	0.64
1:A:770:GLY:O	1:A:774:PRO:CG	2.43	0.64
1:A:1118:ALA:O	1:A:1197:ILE:HA	1.96	0.64
1:A:497:GLN:HE21	1:A:651:HIS:CD2	2.16	0.64
1:A:36:ALA:N	1:A:120:GLN:HE22	1.95	0.64
1:A:589:ALA:HA	1:A:592:GLN:OE1	1.97	0.64
1:A:1346:PRO:HD3	1:A:1376:ASN:HB3	1.78	0.64
1:A:524:LYS:HB3	1:A:637:LYS:O	1.97	0.64
1:A:550:GLU:OE2	1:A:704:ARG:NH2	2.31	0.64
1:A:916:ASP:HB2	1:A:924:PRO:HD2	1.79	0.64
1:A:1311:GLN:CA	1:A:1311:GLN:OE1	2.46	0.64
1:A:567:LEU:CD2	1:A:615:PHE:CD2	2.81	0.64
1:A:663:ALA:C	1:A:664:ILE:HG13	2.17	0.64
1:A:1024:GLN:HA	1:A:1283:ARG:HH21	1.62	0.64
1:A:1419:ASN:ND2	1:A:1443:ASN:ND2	2.46	0.63
1:A:686:MET:O	1:A:692:ASP:HB3	1.97	0.63
1:A:499:PHE:CG	1:A:973:PRO:HB2	2.32	0.63
1:A:826:HIS:O	1:A:830:TYR:N	2.32	0.63
1:A:863:VAL:HG13	1:A:1175:TYR:CD2	2.34	0.63
1:A:294:ILE:HG21	1:A:528:LEU:HD11	1.81	0.63
1:A:497:GLN:OE1	1:A:717:LYS:HE3	1.99	0.63
1:A:9:LEU:HD21	1:A:392:VAL:HG11	1.79	0.63
1:A:1431:PHE:O	1:A:1491:PHE:CE1	2.52	0.63
1:A:893:ASN:ND2	1:A:937:THR:HG23	2.12	0.63
1:A:603:ARG:HD2	1:A:667:TYR:CD2	2.33	0.63
1:A:744:TYR:CD2	1:A:744:TYR:C	2.72	0.63
1:A:1432:LEU:HD12	1:A:1432:LEU:C	2.19	0.63
1:A:567:LEU:CG	1:A:615:PHE:HE2	2.11	0.62
1:A:1251:ILE:HD13	1:A:1271:TYR:CZ	2.34	0.62
1:A:445:GLN:OE1	1:A:777:ALA:HA	1.99	0.62
1:A:1081:GLU:HB3	1:A:1120:MET:CE	2.28	0.62
1:A:415:TYR:CG	1:A:416:GLY:N	2.64	0.62
1:A:1023:HIS:HE1	1:A:1054:ASP:OD2	1.82	0.62
1:A:1136:GLY:O	1:A:1150:VAL:HG11	1.99	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:23:LYS:HE3	1:A:23:LYS:CA	2.29	0.62
1:A:507:ILE:O	1:A:716:SER:HB2	1.99	0.62
1:A:834:LEU:O	1:A:837:ARG:HG2	2.00	0.62
1:A:783:PHE:O	1:A:785:PHE:N	2.32	0.62
1:A:1333:VAL:HG21	1:A:1360:ILE:HG12	1.81	0.62
1:A:1325:LEU:HD23	1:A:1344:ILE:HG23	1.82	0.62
1:A:649:SER:HB3	1:A:652:HIS:CG	2.34	0.62
1:A:910:ARG:HD3	1:A:938:ALA:O	1.99	0.62
1:A:501:GLN:HE22	1:A:1035:LEU:HB3	1.62	0.62
1:A:209:THR:OG1	1:A:1043:THR:HG23	1.99	0.62
1:A:1081:GLU:CB	1:A:1120:MET:CE	2.77	0.62
1:A:908:VAL:HG22	1:A:911:TYR:HE1	1.63	0.62
1:A:418:TRP:CZ2	1:A:419:ILE:HG13	2.34	0.62
1:A:891:ALA:CB	1:A:1170:VAL:HG22	2.29	0.62
1:A:1214:THR:HG22	1:A:1215:GLN:N	2.15	0.62
1:A:1490:LYS:HE3	1:A:1492:TRP:CZ2	2.35	0.62
1:A:686:MET:O	1:A:692:ASP:HB2	2.00	0.62
1:A:306:LEU:HD13	1:A:312:ILE:HD11	1.80	0.61
1:A:601:THR:CG2	1:A:603:ARG:HG2	2.30	0.61
1:A:773:PHE:CB	1:A:774:PRO:HD3	2.21	0.61
1:A:1347:HIS:ND1	1:A:1348:PRO:CD	2.55	0.61
1:A:445:GLN:HG3	1:A:777:ALA:HB1	1.82	0.61
1:A:1503:PRO:HD2	1:A:1504:GLU:OE2	2.01	0.61
1:A:622:VAL:HG21	1:A:642:VAL:CG1	2.30	0.61
1:A:559:LEU:HD22	1:A:596:GLU:CB	2.30	0.61
1:A:1006:HIS:C	1:A:1008:ASP:H	2.02	0.61
1:A:1103:ARG:HG2	1:A:1124:GLU:HB2	1.82	0.61
1:A:559:LEU:HG	1:A:560:GLN:N	2.16	0.61
1:A:239:TRP:HD1	1:A:324:GLU:OE2	1.81	0.61
1:A:1234:TRP:CZ3	1:A:1235:LEU:HD13	2.35	0.61
1:A:1502:SER:HB2	1:A:1503:PRO:CD	2.31	0.61
1:A:224:LEU:CD1	1:A:226:HIS:HB2	2.31	0.61
1:A:3:VAL:HG23	1:A:331:LEU:HD23	1.83	0.61
1:A:1442:ILE:CD1	1:A:1449:LEU:HD13	2.30	0.61
1:A:1456:LYS:HB3	1:A:1503:PRO:O	2.01	0.61
1:A:891:ALA:HB1	1:A:1170:VAL:HG22	1.82	0.61
1:A:1251:ILE:CD1	1:A:1271:TYR:CE1	2.84	0.60
1:A:1119:LEU:O	1:A:1198:GLY:HA2	2.00	0.60
1:A:685:LEU:HD12	1:A:690:ARG:HD2	1.82	0.60
1:A:1279:THR:HG22	1:A:1282:THR:HB	1.81	0.60
1:A:608:ILE:HG21	1:A:615:PHE:HZ	1.65	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:315:PHE:HE2	1:A:408:GLN:HE22	1.50	0.60
1:A:561:VAL:HG13	1:A:597:ILE:CG2	2.30	0.60
1:A:668:LEU:O	1:A:668:LEU:HD23	2.02	0.60
1:A:616:ILE:HG22	1:A:621:ALA:HB2	1.83	0.60
1:A:64:LEU:HD12	1:A:65:PRO:HD2	1.84	0.60
1:A:973:PRO:HG2	1:A:1076:ALA:HB1	1.82	0.60
1:A:52:ARG:CD	5:A:2082:HOH:O	2.50	0.60
1:A:559:LEU:HD21	1:A:596:GLU:H	1.67	0.60
1:A:546:VAL:HA	1:A:550:GLU:HG3	1.84	0.60
1:A:1346:PRO:HD2	1:A:1376:ASN:HD22	1.66	0.59
1:A:14:ASP:O	1:A:197:THR:HA	2.02	0.59
1:A:414:PRO:HB3	1:A:418:TRP:HB3	1.81	0.59
1:A:1472:THR:CG2	1:A:1474:SER:H	2.14	0.59
1:A:1216:ASN:N	1:A:1216:ASN:ND2	2.47	0.59
1:A:657:VAL:HG11	1:A:723:LEU:CD1	2.33	0.59
1:A:308:ASP:N	1:A:308:ASP:OD1	2.35	0.59
1:A:1032:SER:HB2	1:A:1055:ILE:HG22	1.85	0.59
1:A:802:SER:HB2	1:A:1133:ILE:HG23	1.84	0.58
2:A:2074:ACT:H3	2:A:2075:ACT:CH3	2.31	0.58
1:A:512:GLU:OE1	1:A:1382:ARG:NH2	2.36	0.58
1:A:832:GLN:O	1:A:835:LYS:N	2.32	0.58
1:A:1442:ILE:HD11	1:A:1449:LEU:CD1	2.33	0.58
1:A:907:ASP:CG	1:A:909:VAL:HG23	2.21	0.58
1:A:447:GLN:HB3	1:A:780:LEU:HD21	1.85	0.58
1:A:1130:ILE:CD1	1:A:1130:ILE:N	2.63	0.58
1:A:1138:ILE:CG2	1:A:1139:MET:N	2.32	0.58
1:A:1194:ASP:O	1:A:1232:ARG:NH1	2.36	0.58
1:A:56:ALA:HA	1:A:66:MET:HE3	1.85	0.58
1:A:1366:TYR:CD2	1:A:1366:TYR:C	2.77	0.58
1:A:1399:ASP:OD1	1:A:1417:GLY:HA3	2.03	0.58
1:A:418:TRP:HB2	1:A:533:ALA:HB1	1.85	0.58
1:A:781:GLU:CG	1:A:782:ASN:N	2.67	0.58
1:A:827:TYR:CE1	1:A:1176:PHE:CD1	2.85	0.58
1:A:1190:TYR:CD1	1:A:1196:ILE:HD11	2.39	0.58
1:A:450:PHE:CZ	1:A:608:ILE:HD12	2.38	0.57
1:A:953:THR:O	1:A:956:TYR:HB3	2.03	0.57
1:A:514:LEU:N	1:A:514:LEU:HD12	2.18	0.57
1:A:406:LYS:HA	1:A:409:ALA:HB3	1.87	0.57
1:A:829:LEU:HD13	1:A:833:TYR:HE1	1.69	0.57
1:A:383:ARG:HG2	1:A:1358:VAL:HG21	1.85	0.57
1:A:460:VAL:HG12	1:A:464:MET:CE	2.35	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:547:ASN:H	1:A:550:GLU:HG3	1.69	0.57
1:A:559:LEU:CG	1:A:560:GLN:O	2.52	0.57
1:A:757:THR:HB	1:A:760:ASP:HB2	1.86	0.57
1:A:1254:ASP:OD2	1:A:1255:PRO:HD2	2.03	0.57
1:A:1259:GLU:HB3	1:A:1265:THR:HB	1.86	0.57
1:A:310:PRO:O	1:A:314:ASP:OD2	2.22	0.57
1:A:243:ARG:NH1	1:A:323:GLN:HE21	1.92	0.57
1:A:243:ARG:NH1	1:A:323:GLN:HE22	1.92	0.57
1:A:311:GLU:HB3	1:A:409:ALA:HB1	1.87	0.57
1:A:608:ILE:CG2	1:A:615:PHE:HZ	2.17	0.57
1:A:677:TRP:HE1	1:A:694:ILE:HG22	1.70	0.57
1:A:289:LEU:HD22	1:A:389:MET:HE3	1.85	0.57
1:A:1228:THR:HG21	1:A:1232:ARG:HH21	1.70	0.57
1:A:1387:ASN:ND2	1:A:1405:MET:CE	2.62	0.57
1:A:1178:ALA:O	1:A:1181:VAL:HB	2.05	0.57
1:A:336:ASP:HB3	1:A:339:ILE:H	1.70	0.57
1:A:877:LEU:HG	1:A:877:LEU:O	2.00	0.57
1:A:994:SER:HA	1:A:1406:THR:CG2	2.33	0.57
1:A:696:LEU:N	1:A:697:PRO:CD	2.66	0.57
1:A:794:TYR:CG	1:A:795:HIS:N	2.72	0.57
1:A:1119:LEU:HD13	1:A:1203:LEU:HD21	1.87	0.56
1:A:8:ASN:OD1	1:A:361:TYR:CE1	2.58	0.56
1:A:9:LEU:HD21	1:A:392:VAL:CG1	2.34	0.56
1:A:481:LEU:O	1:A:484:LEU:N	2.35	0.56
1:A:484:LEU:HB3	1:A:839:VAL:HG13	1.86	0.56
1:A:1081:GLU:O	1:A:1085:THR:HB	2.05	0.56
1:A:1085:THR:CG2	1:A:1086:GLU:N	2.66	0.56
1:A:286:ARG:HH12	1:A:531:PRO:HG3	1.71	0.56
1:A:547:ASN:OD1	1:A:549:VAL:HB	2.05	0.56
1:A:715:LEU:HD22	1:A:726:TYR:CD1	2.40	0.56
1:A:1289:ALA:HB2	1:A:1318:LEU:HD11	1.87	0.56
1:A:346:ARG:HG3	1:A:347:ASN:N	2.21	0.56
1:A:627:HIS:CE1	1:A:730:GLN:HE22	2.22	0.56
1:A:75:GLY:O	1:A:130:GLN:HA	2.06	0.56
1:A:635:ARG:CG	1:A:635:ARG:NH1	2.43	0.56
1:A:1032:SER:CB	1:A:1055:ILE:HB	2.35	0.56
1:A:223:LEU:CD1	1:A:335:SER:O	2.54	0.56
1:A:559:LEU:HD22	1:A:596:GLU:H	1.69	0.56
1:A:1419:ASN:HD22	1:A:1443:ASN:HB2	1.70	0.56
1:A:13:PRO:HB2	1:A:197:THR:OG1	2.06	0.56
1:A:1:CYS:HB2	1:A:227:ASN:OD1	2.06	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:567:LEU:CG	1:A:615:PHE:CE2	2.88	0.56
1:A:1094:ASN:O	1:A:1095:GLN:HB2	2.05	0.56
1:A:475:MET:HE1	1:A:1129:SER:OG	2.05	0.56
1:A:1455:SER:O	1:A:1459:GLU:HG2	2.05	0.56
1:A:290:GLU:O	1:A:294:ILE:HD12	2.06	0.56
1:A:794:TYR:CD2	1:A:795:HIS:N	2.74	0.56
1:A:750:THR:HG21	1:A:1039:ILE:HG21	1.86	0.55
1:A:1251:ILE:CD1	1:A:1271:TYR:CZ	2.88	0.55
1:A:1403:GLU:HG2	1:A:1404:TYR:CE1	2.41	0.55
1:A:1451:ARG:HG2	1:A:1490:LYS:HG3	1.87	0.55
1:A:403:TYR:CD1	1:A:403:TYR:N	2.68	0.55
1:A:17:LEU:HD11	1:A:201:ALA:HB2	1.86	0.55
1:A:377:ASP:OD1	1:A:377:ASP:C	2.45	0.55
1:A:460:VAL:CG1	1:A:464:MET:CE	2.83	0.55
1:A:757:THR:H	1:A:760:ASP:CB	2.15	0.55
1:A:1009:ILE:HA	1:A:1014:ASP:HB3	1.88	0.55
1:A:1110:THR:CG2	1:A:1112:TRP:HB3	2.36	0.55
1:A:1272:ARG:NH1	1:A:1306:GLN:HG2	2.21	0.55
1:A:1402:CYS:O	1:A:1403:GLU:C	2.44	0.55
1:A:302:ASN:O	1:A:1418:ARG:NH1	2.40	0.55
1:A:441:GLN:N	1:A:441:GLN:OE1	2.39	0.55
1:A:940:SER:HB2	1:A:943:LYS:HE3	1.87	0.55
1:A:1420:VAL:O	1:A:1420:VAL:HG12	2.06	0.55
1:A:145:ASP:O	1:A:149:TYR:N	2.37	0.55
1:A:414:PRO:O	1:A:417:GLU:CA	2.54	0.55
1:A:901:SER:O	1:A:902:GLY:C	2.43	0.55
1:A:916:ASP:N	1:A:916:ASP:OD1	2.30	0.55
1:A:384:LEU:HD21	1:A:390:ILE:CG2	2.36	0.55
1:A:444:LEU:O	1:A:445:GLN:CG	2.55	0.55
1:A:827:TYR:O	1:A:831:ARG:CB	2.48	0.55
1:A:796:MET:O	1:A:801:MET:CE	2.54	0.55
1:A:1251:ILE:HD12	1:A:1271:TYR:CE1	2.42	0.55
1:A:419:ILE:HG22	1:A:420:LYS:N	2.21	0.55
1:A:450:PHE:HZ	1:A:608:ILE:HD12	1.72	0.55
1:A:601:THR:HG23	1:A:643:ASP:OD2	2.06	0.55
1:A:1038:GLU:O	1:A:1041:ILE:HG22	2.07	0.55
1:A:1146:ASN:O	1:A:1154:THR:CG2	2.55	0.55
1:A:1288:ILE:HD12	1:A:1321:MET:HE1	1.88	0.55
1:A:1302:THR:HG23	1:A:1322:THR:HB	1.89	0.55
1:A:1378:ARG:HG2	1:A:1396:GLY:HA3	1.89	0.55
1:A:529:LEU:O	1:A:531:PRO:HD3	2.06	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:809:VAL:HG13	1:A:1172:ASN:HB2	1.88	0.55
1:A:1081:GLU:CG	1:A:1120:MET:HE3	2.37	0.54
1:A:455:GLU:HG2	1:A:459:MET:HE1	1.89	0.54
1:A:518:LEU:HD13	1:A:712:PHE:CE2	2.42	0.54
1:A:1318:LEU:CB	1:A:1321:MET:HE3	2.18	0.54
1:A:450:PHE:CG	1:A:645:ALA:HB3	2.43	0.54
1:A:497:GLN:HE21	1:A:651:HIS:HD2	1.55	0.54
1:A:867:VAL:CG1	1:A:895:LEU:HB3	2.37	0.54
1:A:110:VAL:O	1:A:112:VAL:HG13	2.08	0.54
1:A:1146:ASN:O	1:A:1154:THR:HG23	2.07	0.54
1:A:1238:GLU:HG2	1:A:1241:HIS:CE1	2.43	0.54
1:A:480:PRO:HB3	1:A:840:THR:HA	1.89	0.54
1:A:547:ASN:H	1:A:550:GLU:CG	2.20	0.54
1:A:809:VAL:HG12	1:A:1169:GLN:HA	1.90	0.54
1:A:1145:THR:HG22	1:A:1145:THR:O	2.08	0.54
1:A:1366:TYR:HD2	1:A:1366:TYR:C	2.11	0.54
1:A:149:TYR:CD2	1:A:283:ARG:HG3	2.41	0.54
1:A:73:GLY:CA	1:A:170:CYS:HA	2.36	0.54
1:A:322:LEU:O	1:A:525:ARG:HD3	2.06	0.54
1:A:693:ARG:C	1:A:694:ILE:HG12	2.28	0.54
1:A:1377:GLY:H	1:A:1395:GLU:HG3	1.71	0.54
1:A:1449:LEU:HG	1:A:1492:TRP:CE3	2.42	0.54
1:A:413:TYR:C	1:A:415:TYR:N	2.53	0.54
1:A:313:SER:O	1:A:317:ASP:HB2	2.07	0.54
1:A:767:VAL:O	1:A:768:PHE:CD2	2.61	0.54
1:A:1094:ASN:O	1:A:1095:GLN:CB	2.55	0.54
1:A:475:MET:HE3	1:A:1129:SER:OG	2.08	0.54
1:A:1325:LEU:HB3	1:A:1344:ILE:HG23	1.89	0.54
1:A:1403:GLU:HG2	1:A:1404:TYR:CD1	2.43	0.54
1:A:200:PHE:CD1	1:A:201:ALA:N	2.76	0.54
1:A:448:ALA:HB3	1:A:772:ALA:HB2	1.89	0.54
1:A:509:PRO:CA	1:A:516:MET:HE3	2.38	0.53
1:A:559:LEU:HD22	1:A:596:GLU:HB2	1.89	0.53
1:A:696:LEU:N	1:A:697:PRO:HD2	2.23	0.53
1:A:472:THR:HG22	1:A:473:PHE:N	2.23	0.53
1:A:567:LEU:HD23	1:A:614:SER:O	2.09	0.53
1:A:768:PHE:CE2	1:A:771:MET:CB	2.91	0.53
1:A:888:LEU:CG	1:A:1135:GLU:OE2	2.56	0.53
1:A:1473:GLY:O	1:A:1474:SER:C	2.47	0.53
1:A:1490:LYS:HE3	1:A:1492:TRP:NE1	2.23	0.53
1:A:280:LEU:O	1:A:284:THR:OG1	2.21	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:417:GLU:O	1:A:421:ILE:HD12	2.07	0.53
1:A:668:LEU:C	1:A:668:LEU:HD23	2.28	0.53
1:A:1060:GLY:C	1:A:1062:ASP:H	2.07	0.53
1:A:829:LEU:O	1:A:832:GLN:N	2.41	0.53
1:A:1435:VAL:HB	1:A:1437:ASP:OD1	2.09	0.53
1:A:449:ALA:HA	1:A:768:PHE:O	2.08	0.53
1:A:611:GLU:O	1:A:613:GLN:N	2.32	0.53
1:A:1246:VAL:O	1:A:1249:ASP:HB2	2.09	0.53
1:A:1263:HIS:HE1	1:A:1297:PHE:C	2.12	0.53
1:A:481:LEU:O	1:A:482:ALA:C	2.46	0.53
1:A:618:PRO:O	1:A:622:VAL:HG23	2.09	0.53
1:A:486:HIS:CD2	1:A:1212:SER:OG	2.60	0.53
1:A:1490:LYS:CD	1:A:1492:TRP:CZ2	2.92	0.53
1:A:309:TYR:N	1:A:310:PRO:CD	2.71	0.53
1:A:602:ASP:O	1:A:608:ILE:CD1	2.56	0.53
1:A:232:THR:O	1:A:236:ASN:ND2	2.42	0.53
1:A:1119:LEU:CD2	1:A:1196:ILE:CG2	2.87	0.52
1:A:413:TYR:O	1:A:415:TYR:CA	2.55	0.52
1:A:660:GLY:O	1:A:727:HIS:CE1	2.56	0.52
1:A:1472:THR:HG22	1:A:1474:SER:N	2.21	0.52
1:A:851:ASP:O	1:A:852:GLN:HG3	2.09	0.52
1:A:1132:MET:HE1	3:A:2070:FMN:HM83	1.92	0.52
1:A:1142:VAL:O	1:A:1142:VAL:CG1	2.58	0.52
1:A:514:LEU:HD13	1:A:515:VAL:HG23	1.91	0.52
1:A:649:SER:HB2	1:A:652:HIS:CD2	2.45	0.52
1:A:1476:LYS:O	1:A:1480:ILE:HG13	2.09	0.52
1:A:290:GLU:CD	1:A:408:GLN:HG3	2.29	0.52
1:A:566:THR:HB	1:A:601:THR:O	2.09	0.52
1:A:1259:GLU:CD	1:A:1267:ALA:HB2	2.30	0.52
1:A:179:VAL:HB	1:A:183:ILE:HG22	1.91	0.52
1:A:324:GLU:OE1	1:A:324:GLU:O	2.27	0.52
1:A:398:LYS:HD3	1:A:398:LYS:O	2.10	0.52
1:A:418:TRP:CE2	1:A:419:ILE:HG13	2.44	0.52
1:A:596:GLU:O	1:A:597:ILE:HG13	2.09	0.52
1:A:993:ARG:HG3	1:A:993:ARG:NH1	2.16	0.52
1:A:1025:ILE:HG13	1:A:1282:THR:HG23	1.91	0.52
1:A:230:ILE:CD1	1:A:270:ASP:HB2	2.35	0.52
1:A:680:GLU:HG3	1:A:681:LYS:H	1.75	0.52
1:A:1227:ASP:OD2	1:A:1229:LYS:HD3	2.09	0.52
1:A:1462:LYS:HB2	1:A:1484:TRP:CZ2	2.45	0.52
1:A:831:ARG:O	1:A:835:LYS:HG3	2.09	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1365:LEU:N	1:A:1365:LEU:HD23	2.23	0.52
1:A:514:LEU:HD13	1:A:514:LEU:C	2.29	0.52
1:A:10:ARG:HG3	1:A:10:ARG:NH1	2.23	0.52
1:A:224:LEU:HD12	1:A:225:GLY:C	2.30	0.52
1:A:1461:LEU:HD12	1:A:1465:ILE:HG13	1.92	0.51
1:A:648:TRP:H	1:A:652:HIS:HD2	1.56	0.51
1:A:1259:GLU:HA	1:A:1265:THR:CB	2.39	0.51
1:A:256:GLU:O	1:A:259:ALA:HB3	2.11	0.51
1:A:314:ASP:CG	1:A:415:TYR:HD1	2.14	0.51
1:A:769:HIS:CD2	1:A:769:HIS:C	2.83	0.51
1:A:875:MET:HA	3:A:2070:FMN:N5	2.26	0.51
1:A:878:GLY:HA2	1:A:988:ILE:CD1	2.36	0.51
1:A:1279:THR:HG22	1:A:1282:THR:CB	2.40	0.51
1:A:800:GLU:HG2	1:A:833:TYR:CE2	2.46	0.51
1:A:299:ALA:HB2	1:A:346:ARG:HH21	1.76	0.51
1:A:315:PHE:CE2	1:A:408:GLN:NE2	2.78	0.51
1:A:325:PRO:HD2	1:A:725:SER:OG	2.10	0.51
1:A:1058:ILE:HD13	1:A:1084:VAL:HA	1.93	0.51
1:A:1368:ALA:HB3	1:A:1387:ASN:OD1	2.11	0.51
1:A:331:LEU:HD12	1:A:332:LEU:N	2.26	0.51
1:A:453:THR:HG22	1:A:455:GLU:H	1.75	0.51
1:A:626:HIS:ND1	1:A:635:ARG:NH1	2.58	0.51
1:A:627:HIS:CD2	1:A:747:ALA:H	2.28	0.51
1:A:737:LEU:O	1:A:754:GLY:HA2	2.11	0.51
1:A:757:THR:N	1:A:760:ASP:HB2	2.16	0.51
1:A:695:ASP:OD2	1:A:697:PRO:HB2	2.11	0.51
1:A:770:GLY:C	1:A:771:MET:SD	2.88	0.51
1:A:1273:LEU:HG	1:A:1305:PHE:CD2	2.46	0.51
1:A:1432:LEU:O	1:A:1432:LEU:HG	2.11	0.51
1:A:565:SER:C	1:A:567:LEU:H	2.14	0.51
1:A:602:ASP:O	1:A:608:ILE:HD13	2.11	0.51
1:A:757:THR:HG22	1:A:758:ILE:N	2.26	0.51
1:A:828:GLU:O	1:A:832:GLN:HB2	2.11	0.51
1:A:1008:ASP:HB2	1:A:1366:TYR:CE1	2.40	0.51
1:A:1032:SER:HB2	1:A:1055:ILE:CG2	2.40	0.51
1:A:483:VAL:HG23	1:A:494:TYR:HE2	1.76	0.51
1:A:1490:LYS:HE3	1:A:1492:TRP:HE1	1.76	0.51
1:A:499:PHE:CD2	1:A:973:PRO:HB2	2.45	0.51
1:A:1259:GLU:CA	1:A:1265:THR:HB	2.39	0.50
1:A:368:ALA:O	1:A:370:VAL:N	2.44	0.50
1:A:502:VAL:HG11	1:A:1015:LEU:HD12	1.93	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:681:LYS:O	1:A:685:LEU:HG	2.11	0.50
1:A:1363:THR:HG23	1:A:1385:VAL:HG21	1.93	0.50
1:A:1046:ALA:O	1:A:1050:LYS:HG3	2.12	0.50
1:A:581:THR:HG22	1:A:585:LYS:HE3	1.93	0.50
1:A:211:THR:HG22	1:A:212:MET:HG3	1.93	0.50
1:A:35:SER:HB3	1:A:211:THR:O	2.12	0.50
1:A:401:LYS:O	1:A:404:GLN:HB2	2.12	0.50
1:A:547:ASN:N	1:A:550:GLU:HG3	2.27	0.50
1:A:620:LEU:CD1	1:A:745:ALA:HB2	2.41	0.50
1:A:915:ASP:O	1:A:934:ASN:OD1	2.30	0.50
1:A:37:ASP:H	1:A:120:GLN:NE2	2.09	0.50
1:A:1216:ASN:O	1:A:1217:LEU:HD12	2.12	0.50
1:A:1421:GLY:HA3	1:A:1443:ASN:HB3	1.93	0.50
1:A:306:LEU:CD1	1:A:312:ILE:HD11	2.42	0.50
1:A:601:THR:HA	1:A:643:ASP:HB3	1.92	0.50
1:A:567:LEU:HD23	1:A:615:PHE:CD2	2.46	0.50
1:A:1228:THR:HG23	1:A:1232:ARG:HE	1.76	0.50
1:A:563:GLU:HA	1:A:599:VAL:O	2.11	0.50
1:A:640:LEU:N	1:A:640:LEU:HD13	2.27	0.50
1:A:677:TRP:NE1	1:A:694:ILE:O	2.41	0.50
1:A:1101:LEU:HA	1:A:1123:GLU:OE2	2.11	0.50
1:A:1316:PHE:CE2	1:A:1336:GLY:HA3	2.47	0.50
1:A:304:PRO:HG3	1:A:1440:GLU:HG2	1.93	0.50
1:A:1325:LEU:HD23	1:A:1344:ILE:CG2	2.41	0.49
1:A:207:PHE:CD2	1:A:207:PHE:C	2.85	0.49
1:A:403:TYR:O	1:A:406:LYS:N	2.45	0.49
1:A:5:PHE:C	1:A:5:PHE:CD1	2.86	0.49
1:A:607:ALA:C	1:A:608:ILE:HG12	2.32	0.49
1:A:829:LEU:O	1:A:830:TYR:C	2.51	0.49
1:A:750:THR:HG21	1:A:1039:ILE:HG13	1.94	0.49
1:A:484:LEU:HB3	1:A:839:VAL:CG1	2.41	0.49
1:A:1119:LEU:HD23	1:A:1196:ILE:HG22	1.95	0.49
1:A:1154:THR:HG21	1:A:1159:LEU:HD12	1.94	0.49
1:A:1282:THR:OG1	1:A:1315:ALA:HB3	2.13	0.49
1:A:603:ARG:HD3	1:A:643:ASP:OD2	2.11	0.49
1:A:610:THR:HG23	1:A:773:PHE:HB3	1.92	0.49
1:A:1228:THR:HG23	1:A:1228:THR:O	2.13	0.49
1:A:1369:THR:O	1:A:1389:VAL:HB	2.13	0.49
1:A:559:LEU:O	1:A:561:VAL:HG22	2.12	0.49
1:A:744:TYR:HD2	1:A:744:TYR:C	2.14	0.49
1:A:953:THR:HG22	1:A:956:TYR:H	1.77	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1489:GLY:O	1:A:1490:LYS:C	2.50	0.49
1:A:3:VAL:CG2	1:A:331:LEU:HD23	2.42	0.49
1:A:336:ASP:HB3	1:A:338:LYS:H	1.76	0.49
1:A:567:LEU:HD12	1:A:604:PRO:HG3	1.93	0.49
1:A:542:ARG:O	1:A:542:ARG:HD2	2.13	0.49
1:A:1129:SER:O	1:A:1133:ILE:HG12	2.12	0.49
1:A:1399:ASP:OD1	1:A:1399:ASP:N	2.44	0.49
1:A:253:THR:HB	1:A:256:GLU:CG	2.38	0.49
1:A:29:GLU:CD	1:A:205:ARG:HH21	2.16	0.49
1:A:702:ASN:O	1:A:706:SER:HB3	2.12	0.49
1:A:152:ARG:HD3	1:A:222:ARG:NH1	2.28	0.49
1:A:253:THR:OG1	1:A:256:GLU:HG3	2.13	0.49
1:A:875:MET:CE	1:A:875:MET:CG	2.89	0.49
1:A:847:ASP:CG	1:A:848:PHE:H	2.16	0.49
1:A:1060:GLY:C	1:A:1062:ASP:N	2.65	0.48
1:A:1490:LYS:HE3	1:A:1492:TRP:CE2	2.47	0.48
1:A:1499:GLU:O	1:A:1500:LYS:C	2.52	0.48
1:A:421:ILE:O	1:A:422:GLN:C	2.51	0.48
1:A:546:VAL:HB	1:A:550:GLU:HB2	1.95	0.48
1:A:1442:ILE:CD1	1:A:1449:LEU:CD1	2.91	0.48
1:A:289:LEU:HD23	1:A:389:MET:HE3	1.95	0.48
1:A:559:LEU:O	1:A:561:VAL:CG2	2.61	0.48
1:A:1154:THR:CG2	1:A:1156:GLN:HG3	2.43	0.48
1:A:1451:ARG:CZ	1:A:1490:LYS:CD	2.89	0.48
1:A:35:SER:O	1:A:36:ALA:C	2.51	0.48
1:A:674:ARG:O	1:A:678:LEU:HB2	2.13	0.48
1:A:1490:LYS:NZ	1:A:1492:TRP:HZ2	2.12	0.48
1:A:1431:PHE:O	1:A:1491:PHE:CD1	2.66	0.48
1:A:354:TYR:HA	1:A:363:VAL:O	2.14	0.48
1:A:369:GLY:HA3	1:A:1308:ALA:HB2	1.90	0.48
1:A:53:GLU:O	1:A:56:ALA:CB	2.61	0.48
1:A:1023:HIS:CE1	1:A:1054:ASP:OD2	2.65	0.48
1:A:243:ARG:HG2	1:A:636:LEU:HD21	1.96	0.48
1:A:567:LEU:HG	1:A:615:PHE:CE2	2.49	0.48
1:A:722:LEU:O	1:A:725:SER:N	2.45	0.48
1:A:768:PHE:CD2	1:A:771:MET:CG	2.75	0.48
1:A:1416:VAL:HG12	1:A:1417:GLY:O	2.14	0.48
1:A:542:ARG:CD	1:A:542:ARG:O	2.61	0.48
1:A:1133:ILE:O	1:A:1136:GLY:N	2.32	0.48
1:A:289:LEU:HD22	1:A:404:GLN:NE2	2.20	0.48
1:A:264:VAL:HG22	1:A:273:ASN:OD1	2.13	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:311:GLU:HB2	1:A:409:ALA:CB	2.36	0.48
1:A:299:ALA:HB2	1:A:346:ARG:NH2	2.29	0.48
1:A:338:LYS:O	1:A:394:LEU:HD23	2.14	0.48
1:A:1273:LEU:HG	1:A:1305:PHE:HD2	1.77	0.47
1:A:598:LEU:N	1:A:598:LEU:HD12	2.29	0.47
1:A:445:GLN:HB3	1:A:772:ALA:CB	2.43	0.47
1:A:546:VAL:HG23	1:A:665:CYS:HB2	1.96	0.47
1:A:695:ASP:HB2	1:A:697:PRO:HD2	1.96	0.47
1:A:90:ARG:HG3	1:A:90:ARG:HH11	1.78	0.47
1:A:843:ARG:HB2	1:A:1116:MET:HE2	1.96	0.47
1:A:1259:GLU:CB	1:A:1265:THR:HB	2.43	0.47
1:A:47:MET:O	1:A:201:ALA:HA	2.14	0.47
1:A:178:MET:HG3	1:A:213:PRO:HB2	1.96	0.47
1:A:757:THR:O	1:A:761:VAL:HG13	2.14	0.47
1:A:1154:THR:HG22	1:A:1156:GLN:HG3	1.97	0.47
1:A:120:GLN:O	1:A:124:ASN:HB2	2.15	0.47
1:A:1332:TYR:HB3	1:A:1335:LYS:HE3	1.96	0.47
1:A:413:TYR:C	1:A:415:TYR:H	2.00	0.47
1:A:450:PHE:HZ	1:A:608:ILE:CD1	2.28	0.47
1:A:487:LYS:HD2	1:A:783:PHE:HD2	1.79	0.47
1:A:519:ALA:O	1:A:520:MET:SD	2.72	0.47
1:A:579:ALA:HB3	1:A:616:ILE:HD11	1.96	0.47
1:A:84:SER:O	1:A:88:VAL:HG23	2.14	0.47
1:A:750:THR:CG2	1:A:1039:ILE:HG21	2.44	0.47
1:A:17:LEU:HD11	1:A:201:ALA:CB	2.44	0.47
1:A:460:VAL:HG13	1:A:464:MET:HE2	1.95	0.47
1:A:767:VAL:O	1:A:768:PHE:HD2	1.97	0.47
1:A:1254:ASP:CG	1:A:1255:PRO:CD	2.75	0.47
1:A:393:ASP:C	1:A:393:ASP:OD1	2.52	0.47
1:A:412:LYS:C	1:A:414:PRO:HD2	2.34	0.47
1:A:965:ILE:HD13	1:A:1018:LEU:HD23	1.96	0.47
1:A:1119:LEU:HD23	1:A:1196:ILE:CG2	2.45	0.47
1:A:501:GLN:NE2	1:A:1035:LEU:HB3	2.27	0.47
1:A:113:ASN:OD1	1:A:115:ASP:HB2	2.15	0.47
1:A:1347:HIS:CG	1:A:1348:PRO:CD	2.75	0.47
1:A:522:LEU:HA	1:A:522:LEU:HD23	1.48	0.47
1:A:893:ASN:HD22	1:A:937:THR:HG23	1.77	0.47
1:A:1238:GLU:OE2	1:A:1241:HIS:ND1	2.41	0.47
1:A:1355:GLU:HG3	1:A:1476:LYS:CB	2.29	0.47
1:A:25:LEU:HD23	1:A:25:LEU:HA	1.74	0.47
1:A:1268:THR:O	1:A:1269:LYS:HD3	2.15	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1346:PRO:CD	1:A:1376:ASN:HD22	2.27	0.47
1:A:307:LYS:HE2	1:A:1440:GLU:OE2	2.15	0.47
1:A:501:GLN:NE2	1:A:1036:VAL:H	2.13	0.47
1:A:332:LEU:O	1:A:342:ALA:HA	2.15	0.46
1:A:1200:THR:HG22	1:A:1223:LEU:O	2.15	0.46
1:A:330:ALA:HB3	1:A:345:ASP:HB3	1.96	0.46
1:A:460:VAL:CG1	1:A:464:MET:HE2	2.45	0.46
1:A:682:THR:HG23	1:A:690:ARG:HH11	1.80	0.46
1:A:296:VAL:N	1:A:297:PRO:CD	2.78	0.46
1:A:445:GLN:CD	1:A:777:ALA:CA	2.82	0.46
1:A:1360:ILE:HG21	1:A:1360:ILE:HD13	1.66	0.46
1:A:1372:ASN:N	1:A:1372:ASN:ND2	2.63	0.46
1:A:28:MET:HE1	1:A:31:ARG:CD	2.37	0.46
1:A:318:TYR:CD1	1:A:418:TRP:CE2	3.04	0.46
1:A:512:GLU:CD	1:A:1382:ARG:HH21	2.19	0.46
1:A:626:HIS:CE1	1:A:635:ARG:HH12	2.33	0.46
1:A:949:ARG:NH1	1:A:1006:HIS:ND1	2.63	0.46
1:A:472:THR:CG2	1:A:473:PHE:N	2.79	0.46
1:A:514:LEU:CD1	1:A:514:LEU:C	2.83	0.46
1:A:1032:SER:HA	1:A:1055:ILE:O	2.15	0.46
1:A:1347:HIS:NE2	1:A:1348:PRO:HD2	2.27	0.46
1:A:483:VAL:CB	1:A:494:TYR:HE2	2.28	0.46
1:A:650:THR:CG2	1:A:651:HIS:N	2.78	0.46
1:A:888:LEU:CD2	1:A:1135:GLU:OE2	2.64	0.46
1:A:90:ARG:HG3	1:A:107:TRP:CZ2	2.51	0.46
1:A:972:LYS:HE3	1:A:976:GLY:O	2.15	0.46
1:A:207:PHE:HD2	1:A:207:PHE:C	2.19	0.46
1:A:518:LEU:HB3	1:A:544:PRO:HD3	1.98	0.46
1:A:1393:VAL:HG22	1:A:1411:VAL:HB	1.98	0.46
1:A:1490:LYS:HD2	1:A:1492:TRP:CZ2	2.51	0.46
1:A:1199:ARG:CD	1:A:1228:THR:HG22	2.46	0.46
1:A:1228:THR:CG2	1:A:1228:THR:O	2.64	0.46
1:A:1257:ILE:HG12	1:A:1257:ILE:H	1.51	0.46
1:A:144:LEU:HD23	1:A:170:CYS:HB3	1.98	0.46
1:A:401:LYS:O	1:A:404:GLN:CB	2.63	0.46
1:A:686:MET:HE2	1:A:686:MET:HB3	1.78	0.46
1:A:762:ALA:O	1:A:765:VAL:HG22	2.16	0.46
1:A:1258:GLN:HG2	1:A:1258:GLN:H	1.60	0.45
1:A:354:TYR:C	1:A:354:TYR:CD1	2.90	0.45
1:A:1188:LEU:HA	1:A:1188:LEU:HD23	1.74	0.45
1:A:1254:ASP:O	1:A:1256:ASP:N	2.43	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:37:ASP:OD1	1:A:119:ILE:HG22	2.15	0.45
1:A:637:LYS:HD3	1:A:637:LYS:N	2.29	0.45
1:A:731:ILE:HG22	1:A:731:ILE:O	2.17	0.45
1:A:875:MET:HB2	1:A:880:LEU:HD11	1.98	0.45
1:A:1502:SER:HB2	1:A:1503:PRO:HD2	1.96	0.45
1:A:1145:THR:HG22	1:A:1147:ASN:CG	2.37	0.45
1:A:223:LEU:O	1:A:223:LEU:HD12	2.16	0.45
1:A:421:ILE:C	1:A:422:GLN:O	2.54	0.45
1:A:773:PHE:H	1:A:774:PRO:HD2	1.81	0.45
1:A:892:MET:CE	1:A:1174:PHE:CE1	2.99	0.45
1:A:969:GLN:NE2	1:A:1065:THR:CG2	2.80	0.45
1:A:1372:ASN:N	1:A:1372:ASN:HD22	2.14	0.45
1:A:481:LEU:O	1:A:483:VAL:N	2.49	0.45
1:A:546:VAL:CA	1:A:550:GLU:HG3	2.46	0.45
1:A:1146:ASN:C	1:A:1154:THR:HG23	2.37	0.45
1:A:1387:ASN:CB	1:A:1405:MET:CE	2.85	0.45
1:A:9:LEU:CD2	1:A:392:VAL:CG1	2.95	0.45
1:A:406:LYS:O	1:A:409:ALA:HB3	2.17	0.45
1:A:566:THR:CB	1:A:601:THR:O	2.64	0.45
1:A:766:MET:CE	1:A:769:HIS:CD2	2.99	0.45
1:A:1173:PHE:O	1:A:1176:PHE:HB2	2.17	0.45
1:A:1256:ASP:O	1:A:1259:GLU:HG2	2.17	0.45
1:A:727:HIS:O	1:A:728:GLY:C	2.52	0.45
1:A:336:ASP:HB3	1:A:338:LYS:N	2.31	0.45
1:A:73:GLY:HA2	1:A:169:SER:O	2.17	0.45
1:A:12:LYS:HA	1:A:12:LYS:HD3	1.61	0.45
1:A:412:LYS:O	1:A:414:PRO:HD2	2.17	0.45
1:A:8:ASN:OD1	1:A:361:TYR:CZ	2.70	0.45
1:A:1003:PRO:HB3	1:A:1404:TYR:CZ	2.52	0.45
1:A:1097:ARG:NH1	1:A:1100:VAL:O	2.49	0.45
1:A:1489:GLY:O	1:A:1491:PHE:HB3	2.17	0.45
1:A:37:ASP:OD2	1:A:40:SER:OG	2.35	0.45
1:A:418:TRP:C	1:A:418:TRP:CE3	2.90	0.45
1:A:447:GLN:O	1:A:452:TYR:HB2	2.17	0.45
1:A:602:ASP:C	1:A:604:PRO:HD3	2.37	0.45
1:A:1039:ILE:HD12	1:A:1040:GLY:N	2.32	0.44
1:A:1382:ARG:HB3	1:A:1385:VAL:HG22	1.99	0.44
1:A:12:LYS:CB	1:A:13:PRO:HD2	2.46	0.44
1:A:293:MET:CE	1:A:293:MET:CG	2.93	0.44
1:A:541:LEU:HD23	1:A:663:ALA:HB2	1.98	0.44
1:A:1092:MET:CE	1:A:1226:PRO:HB2	2.47	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1325:LEU:HD21	1:A:1328:GLU:C	2.37	0.44
1:A:358:LYS:HD2	1:A:377:ASP:OD2	2.17	0.44
1:A:586:THR:O	1:A:590:THR:OG1	2.32	0.44
1:A:867:VAL:HG13	1:A:895:LEU:HB3	1.97	0.44
1:A:796:MET:HE1	1:A:1107:GLY:HA3	1.99	0.44
1:A:1247:LEU:HD12	1:A:1247:LEU:O	2.16	0.44
1:A:381:LYS:N	1:A:1357:ASN:OD1	2.47	0.44
1:A:354:TYR:OH	1:A:380:GLU:OE1	2.34	0.44
1:A:1030:GLN:NE2	1:A:1239:PRO:O	2.51	0.44
1:A:1348:PRO:C	1:A:1350:ALA:H	2.20	0.44
1:A:649:SER:CB	1:A:652:HIS:CD2	3.00	0.44
1:A:993:ARG:NH1	1:A:993:ARG:CG	2.75	0.44
1:A:930:HIS:O	1:A:1166:VAL:HG12	2.17	0.44
1:A:336:ASP:CB	1:A:339:ILE:H	2.30	0.44
1:A:581:THR:CG2	1:A:585:LYS:HE3	2.47	0.44
1:A:1008:ASP:HB3	1:A:1009:ILE:HG13	1.99	0.44
1:A:1081:GLU:HG2	1:A:1120:MET:CE	2.48	0.44
1:A:1145:THR:CG2	1:A:1147:ASN:CG	2.86	0.44
1:A:243:ARG:NH2	1:A:322:LEU:O	2.51	0.44
1:A:550:GLU:O	1:A:554:ILE:HD13	2.17	0.44
1:A:608:ILE:HG21	1:A:615:PHE:CZ	2.50	0.44
1:A:744:TYR:CD2	1:A:744:TYR:O	2.70	0.44
1:A:84:SER:OG	1:A:85:ALA:N	2.50	0.44
1:A:1366:TYR:HD2	1:A:1366:TYR:O	2.00	0.44
1:A:1421:GLY:CA	1:A:1443:ASN:HB3	2.47	0.44
1:A:32:GLY:HA2	1:A:207:PHE:HB2	2.00	0.44
1:A:399:ILE:HG22	1:A:404:GLN:CG	2.33	0.44
1:A:562:ALA:HB3	1:A:590:THR:HG21	2.00	0.44
1:A:1409:VAL:HG21	1:A:1460:GLN:NE2	2.33	0.44
1:A:1456:LYS:CB	1:A:1503:PRO:O	2.66	0.44
1:A:826:HIS:O	1:A:829:LEU:CB	2.66	0.44
1:A:1024:GLN:HA	1:A:1283:ARG:NH2	2.32	0.43
1:A:1397:ALA:O	1:A:1416:VAL:HA	2.18	0.43
1:A:455:GLU:O	1:A:459:MET:HB2	2.18	0.43
1:A:509:PRO:CA	1:A:516:MET:CE	2.83	0.43
1:A:686:MET:HE2	1:A:692:ASP:CB	2.45	0.43
1:A:1133:ILE:HA	1:A:1137:CYS:HB3	1.99	0.43
1:A:1409:VAL:HA	1:A:1428:LEU:O	2.18	0.43
1:A:229:GLU:HG3	1:A:503:THR:O	2.18	0.43
1:A:254:LYS:HB2	1:A:254:LYS:HE3	1.90	0.43
1:A:728:GLY:O	1:A:729:ALA: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:1344:ILE:HD12	1:A:1360:ILE:HD11	2.00	0.43
1:A:650:THR:HG22	1:A:651:HIS:H	1.82	0.43
1:A:937:THR:HG23	1:A:937:THR:O	2.18	0.43
1:A:1254:ASP:OD2	1:A:1269:LYS:HE3	2.17	0.43
1:A:1434:GLU:C	1:A:1436:GLY:N	2.70	0.43
1:A:152:ARG:HG2	1:A:152:ARG:NH1	2.32	0.43
1:A:475:MET:HB3	1:A:475:MET:HE2	1.25	0.43
1:A:403:TYR:N	1:A:403:TYR:HD1	1.93	0.43
1:A:639:SER:C	1:A:640:LEU:HD13	2.39	0.43
1:A:962:GLN:O	1:A:963:LEU:HD23	2.18	0.43
1:A:1071:SER:O	1:A:1075:HIS:N	2.52	0.43
1:A:1109:LYS:HB2	1:A:1130:ILE:HG21	2.01	0.43
1:A:1449:LEU:HA	1:A:1449:LEU:HD12	1.89	0.43
1:A:312:ILE:HD13	1:A:313:SER:N	2.33	0.43
1:A:648:TRP:CD1	1:A:649:SER:N	2.87	0.43
1:A:805:LEU:HB2	1:A:830:TYR:CD1	2.54	0.43
1:A:1119:LEU:HD21	1:A:1196:ILE:CG2	2.48	0.43
1:A:547:ASN:O	1:A:550:GLU:N	2.52	0.43
1:A:968:ALA:HB1	1:A:973:PRO:HA	2.01	0.43
1:A:506:PRO:HD2	1:A:1005:PRO:HB3	2.00	0.43
1:A:74:VAL:HG22	1:A:132:LEU:HD23	2.01	0.43
1:A:1452:ILE:HD11	1:A:1461:LEU:HD22	2.00	0.43
1:A:29:GLU:OE2	1:A:205:ARG:NH2	2.52	0.43
1:A:37:ASP:H	1:A:120:GLN:HE21	1.67	0.43
1:A:42:ASP:O	1:A:178:MET:HE1	2.18	0.43
1:A:603:ARG:HG2	1:A:603:ARG:O	2.19	0.43
1:A:445:GLN:CD	1:A:777:ALA:CB	2.87	0.43
1:A:1119:LEU:HD21	1:A:1196:ILE:HG23	2.01	0.43
1:A:1268:THR:O	1:A:1269:LYS:CD	2.66	0.43
1:A:559:LEU:HG	1:A:560:GLN:O	2.19	0.43
1:A:766:MET:HE3	1:A:769:HIS:CD2	2.53	0.43
1:A:979:LEU:HD23	1:A:984:VAL:HG22	2.00	0.43
1:A:1214:THR:CG2	1:A:1215:GLN:N	2.81	0.43
1:A:560:GLN:C	1:A:561:VAL:CG2	2.87	0.43
1:A:570:LEU:HD13	1:A:571:ASP:OD1	2.18	0.43
1:A:768:PHE:CE2	1:A:771:MET:HG3	2.29	0.43
1:A:826:HIS:O	1:A:829:LEU:HB2	2.19	0.43
1:A:263:ILE:O	1:A:263:ILE:HG12	2.06	0.42
1:A:1419:ASN:HD21	1:A:1443:ASN:HD22	1.53	0.42
3:A:2070:FMN:H1'2	3:A:2070:FMN:H9	1.86	0.42
1:A:544:PRO:HG3	1:A:711:LEU:HD13	2.00	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:10:ARG:NH1	1:A:10:ARG:CG	2.68	0.42
1:A:1322:THR:C	1:A:1323:LEU:HD23	2.36	0.42
1:A:1438:LEU:N	1:A:1439:PRO:CD	2.82	0.42
1:A:34:CYS:HA	1:A:40:SER:O	2.19	0.42
1:A:560:GLN:C	1:A:561:VAL:HG23	2.39	0.42
1:A:570:LEU:HG	1:A:613:GLN:HG2	2.00	0.42
1:A:678:LEU:HA	1:A:678:LEU:HD23	1.63	0.42
1:A:1197:ILE:O	1:A:1232:ARG:NH2	2.53	0.42
1:A:1201:ASP:OD1	1:A:1201:ASP:N	2.52	0.42
1:A:460:VAL:HG13	1:A:464:MET:CE	2.49	0.42
1:A:617:PRO:HA	1:A:618:PRO:HD3	1.94	0.42
1:A:696:LEU:HD12	1:A:696:LEU:HA	1.75	0.42
1:A:77:VAL:HG12	1:A:79:LEU:HG	2.01	0.42
1:A:1110:THR:O	1:A:1111:GLY:C	2.57	0.42
1:A:567:LEU:CD1	1:A:604:PRO:HD2	2.47	0.42
1:A:1484:TRP:O	1:A:1488:LEU:HB2	2.20	0.42
1:A:1502:SER:CB	1:A:1503:PRO:CD	2.95	0.42
1:A:1137:CYS:SG	4:A:2072:F3S:S1	3.00	0.42
1:A:124:ASN:ND2	1:A:213:PRO:O	2.52	0.42
1:A:260:LEU:O	1:A:261:THR:C	2.58	0.42
1:A:386:PRO:HD3	1:A:1381:GLU:OE2	2.19	0.42
1:A:552:GLN:O	1:A:553:ALA:C	2.58	0.42
1:A:544:PRO:HB3	1:A:723:LEU:HD21	2.02	0.42
1:A:1017:GLN:NE2	1:A:1311:GLN:HB3	2.35	0.42
1:A:223:LEU:HB3	1:A:275:ASP:OD2	2.19	0.42
1:A:501:GLN:HE21	1:A:1035:LEU:HA	1.85	0.42
1:A:556:THR:O	1:A:557:GLY:O	2.37	0.42
1:A:715:LEU:HD22	1:A:726:TYR:CG	2.55	0.42
1:A:107:TRP:CZ3	1:A:131:ILE:HB	2.54	0.42
1:A:569:ASP:N	1:A:569:ASP:OD1	2.50	0.42
1:A:1259:GLU:OE1	1:A:1267:ALA:HB2	2.19	0.42
1:A:1384:ALA:HB1	1:A:1387:ASN:HB2	2.02	0.42
1:A:76:MET:HG2	1:A:173:ILE:HD11	2.00	0.42
1:A:9:LEU:CD2	1:A:392:VAL:HG11	2.46	0.42
1:A:452:TYR:CZ	1:A:668:LEU:HD22	2.55	0.42
1:A:6:ILE:O	1:A:200:PHE:HA	2.20	0.42
1:A:776:MET:CE	1:A:778:LYS:NZ	2.83	0.42
1:A:239:TRP:NE1	1:A:728:GLY:HA3	2.35	0.41
1:A:543:SER:CB	1:A:544:PRO:HD2	2.50	0.41
1:A:637:LYS:HA	1:A:637:LYS:HD3	1.57	0.41
1:A:657:VAL:HA	1:A:661:ALA:O	2.20	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:892:MET:HB2	1:A:899:SER:HB3	2.02	0.41
1:A:954:PRO:HG3	1:A:1316:PHE:HB3	2.02	0.41
1:A:629:LEU:HD12	1:A:629:LEU:HA	1.73	0.41
1:A:492:TYR:HE2	1:A:656:LEU:HD13	1.84	0.41
1:A:953:THR:CG2	1:A:1294:ASN:ND2	2.69	0.41
1:A:1200:THR:CG2	1:A:1223:LEU:O	2.68	0.41
1:A:1405:MET:HE1	1:A:1410:ILE:HG12	2.02	0.41
1:A:419:ILE:O	1:A:422:GLN:HG2	2.20	0.41
1:A:607:ALA:O	1:A:608:ILE:HG12	2.20	0.41
1:A:867:VAL:HG11	1:A:895:LEU:HB3	2.01	0.41
1:A:1321:MET:HB2	1:A:1321:MET:HE2	1.89	0.41
2:A:2074:ACT:H3	2:A:2075:ACT:H2	2.02	0.41
1:A:204:HIS:CG	1:A:219:GLN:O	2.73	0.41
1:A:511:ARG:HD2	1:A:1423:GLY:CA	2.50	0.41
1:A:612:ASN:O	1:A:614:SER:N	2.53	0.41
1:A:650:THR:OG1	1:A:710:GLY:HA3	2.21	0.41
1:A:1228:THR:CG2	1:A:1232:ARG:HH21	2.32	0.41
1:A:353:ARG:NH2	1:A:1329:ALA:O	2.53	0.41
1:A:1434:GLU:C	1:A:1436:GLY:H	2.22	0.41
1:A:1464:LEU:O	1:A:1465:ILE:C	2.58	0.41
1:A:281:LEU:O	1:A:286:ARG:HG3	2.21	0.41
1:A:413:TYR:O	1:A:415:TYR:HB3	2.21	0.41
1:A:519:ALA:O	1:A:520:MET:CG	2.68	0.41
1:A:875:MET:SD	1:A:1132:MET:CE	3.05	0.41
1:A:1021:ASP:OD2	1:A:1335:LYS:NZ	2.39	0.41
1:A:1101:LEU:HD13	1:A:1123:GLU:CB	2.37	0.41
1:A:1452:ILE:HD11	1:A:1461:LEU:CD2	2.51	0.41
1:A:177:GLY:HA3	1:A:215:TRP:CZ3	2.56	0.41
1:A:483:VAL:CG2	1:A:494:TYR:HE2	2.33	0.41
1:A:715:LEU:CD2	1:A:726:TYR:CD1	3.04	0.41
1:A:1032:SER:HB3	1:A:1055:ILE:HB	2.02	0.41
1:A:1110:THR:HG23	1:A:1112:TRP:H	1.85	0.41
1:A:1430:TYR:CE2	1:A:1493:GLN:OE1	2.73	0.41
1:A:659:TYR:CE2	1:A:746:PHE:HB3	2.56	0.41
1:A:87:GLU:O	1:A:88:VAL:C	2.58	0.41
1:A:969:GLN:NE2	1:A:1065:THR:HG23	2.35	0.41
1:A:278:LEU:HA	1:A:278:LEU:HD12	1.89	0.41
1:A:322:LEU:HD12	1:A:322:LEU:HA	1.94	0.41
1:A:513:ASN:O	1:A:515:VAL:N	2.53	0.41
1:A:1256:ASP:HA	1:A:1259:GLU:HG2	2.01	0.41
1:A:355:CYS:SG	1:A:378:ILE:CG2	3.09	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:548:GLU:CD	1:A:603:ARG:HH22	2.21	0.41
1:A:788:TYR:C	1:A:788:TYR:CD2	2.93	0.41
1:A:1303:LEU:HB2	1:A:1323:LEU:CD2	2.50	0.41
1:A:1303:LEU:HB2	1:A:1323:LEU:HD22	2.03	0.41
1:A:545:LEU:HD13	1:A:704:ARG:HB2	2.03	0.41
1:A:1006:HIS:O	1:A:1008:ASP:N	2.52	0.41
1:A:1039:ILE:HA	1:A:1039:ILE:HD13	1.93	0.41
1:A:993:ARG:O	1:A:1406:THR:CG2	2.69	0.41
1:A:289:LEU:HD21	1:A:391:ALA:HB2	2.03	0.41
1:A:759:ALA:O	1:A:762:ALA:N	2.54	0.41
1:A:796:MET:O	1:A:801:MET:HE2	2.20	0.41
1:A:842:LEU:HD23	1:A:842:LEU:HA	1.91	0.41
1:A:877:LEU:O	1:A:878:GLY:C	2.59	0.41
1:A:872:THR:HG22	1:A:899:SER:HA	2.02	0.41
1:A:1021:ASP:O	1:A:1024:GLN:HB3	2.21	0.40
1:A:1092:MET:HE2	1:A:1226:PRO:HB2	2.03	0.40
1:A:1225:LEU:HB3	1:A:1226:PRO:HD2	2.02	0.40
1:A:26:GLY:HA2	1:A:181:SER:OG	2.21	0.40
1:A:603:ARG:CG	1:A:603:ARG:O	2.69	0.40
1:A:1360:ILE:CG2	1:A:1364:CYS:SG	3.08	0.40
1:A:140:ALA:O	1:A:141:GLY:C	2.60	0.40
1:A:1432:LEU:O	1:A:1432:LEU:CG	2.69	0.40
3:A:2070:FMN:HM71	3:A:2070:FMN:HM82	1.65	0.40
1:A:511:ARG:NH2	5:A:2079:HOH:O	2.54	0.40
1:A:559:LEU:HD22	1:A:596:GLU:CG	2.51	0.40
1:A:694:ILE:O	1:A:694:ILE:HG22	2.21	0.40
1:A:827:TYR:HA	1:A:830:TYR:HB3	2.03	0.40
1:A:834:LEU:HD12	1:A:834:LEU:HA	1.63	0.40
1:A:860:VAL:HG11	1:A:1182:ARG:HA	2.04	0.40
1:A:1119:LEU:CD2	1:A:1196:ILE:HG23	2.51	0.40
1:A:1228:THR:CG2	1:A:1232:ARG:HE	2.34	0.40
1:A:1292:TYR:HB3	1:A:1296:GLY:HA3	2.03	0.40
1:A:1377:GLY:N	1:A:1395:GLU:HG3	2.36	0.40
1:A:1447:ILE:HD11	1:A:1494:ALA:CA	2.42	0.40
1:A:189:LEU:HD23	1:A:189:LEU:N	2.36	0.40
1:A:446:GLN:O	1:A:447:GLN:C	2.59	0.40
1:A:551:LEU:HA	1:A:551:LEU:HD12	1.84	0.40
1:A:640:LEU:CD1	1:A:640:LEU:N	2.84	0.40
1:A:887:THR:O	1:A:888:LEU:C	2.59	0.40
1:A:989:ALA:HB1	1:A:994:SER:O	2.21	0.40
1:A:1420:VAL:O	1:A:1420:VAL:CG1	2.70	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:16:THR:O	1:A:19:GLU:HB2	2.21	0.40
1:A:375:GLU:C	1:A:377:ASP:H	2.24	0.40
1:A:92:TYR:O	1:A:93:VAL:C	2.59	0.40
1:A:1224:ASN:O	1:A:1225:LEU:CD2	2.61	0.40
1:A:1394:ILE:CG1	1:A:1412:VAL:HG22	2.52	0.40
1:A:1449:LEU:CD1	1:A:1492:TRP:HB3	2.52	0.40
1:A:153:SER:HB2	5:A:2092:HOH:O	2.20	0.40
1:A:263:ILE:HD12	1:A:263:ILE:HG21	1.82	0.40
1:A:263:ILE:CG1	1:A:263:ILE:O	2.65	0.40
1:A:83:PRO:O	1:A:84:SER:C	2.59	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	1467/1520 (96%)	1232 (84%)	171 (12%)	64 (4%)	2 8

All (64) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	37	ASP
1	A	395	ALA
1	A	403	TYR
1	A	414	PRO
1	A	415	TYR
1	A	557	GLY
1	A	560	GLN
1	A	561	VAL
1	A	902	GLY
1	A	1138	ILE
1	A	1254	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1316	PHE
1	A	141	GLY
1	A	221	MET
1	A	250	SER
1	A	404	GLN
1	A	475	MET
1	A	572	GLY
1	A	613	GLN
1	A	694	ILE
1	A	754	GLY
1	A	775	GLU
1	A	829	LEU
1	A	863	VAL
1	A	1134	ALA
1	A	1376	ASN
1	A	1423	GLY
1	A	1432	LEU
1	A	1484	TRP
1	A	1498	SER
1	A	201	ALA
1	A	251	GLY
1	A	260	LEU
1	A	298	GLU
1	A	368	ALA
1	A	376	VAL
1	A	514	LEU
1	A	773	PHE
1	A	1067	ALA
1	A	1403	GLU
1	A	1500	LYS
1	A	72	LEU
1	A	218	ALA
1	A	482	ALA
1	A	555	LYS
1	A	614	SER
1	A	691	LEU
1	A	1474	SER
1	A	1491	PHE
1	A	330	ALA
1	A	688	ASN
1	A	729	ALA
1	A	784	GLY

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1366	TYR
1	A	477	ASP
1	A	1389	VAL
1	A	774	PRO
1	A	1106	GLY
1	A	531	PRO
1	A	1255	PRO
1	A	261	THR
1	A	262	PRO
1	A	573	VAL
1	A	731	ILE

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	1200/1236 (97%)	996 (83%)	204 (17%)	2 6

All (204) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	3	VAL
1	A	10	ARG
1	A	17	LEU
1	A	23	LYS
1	A	46	VAL
1	A	52	ARG
1	A	60	ASN
1	A	76	MET
1	A	95	GLU
1	A	99	LEU
1	A	115	ASP
1	A	116	VAL
1	A	119	ILE
1	A	133	VAL
1	A	148	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	152	ARG
1	A	153	SER
1	A	157	LYS
1	A	159	LEU
1	A	168	PHE
1	A	172	THR
1	A	173	ILE
1	A	183	ILE
1	A	189	LEU
1	A	191	LEU
1	A	198	SER
1	A	199	ASN
1	A	207	PHE
1	A	208	SER
1	A	211	THR
1	A	222	ARG
1	A	234	LEU
1	A	245	LYS
1	A	249	VAL
1	A	253	THR
1	A	254	LYS
1	A	260	LEU
1	A	263	ILE
1	A	264	VAL
1	A	266	GLN
1	A	274	LEU
1	A	279	GLU
1	A	286	ARG
1	A	304	PRO
1	A	308	ASP
1	A	312	ILE
1	A	322	LEU
1	A	324	GLU
1	A	339	ILE
1	A	340	VAL
1	A	366	SER
1	A	376	VAL
1	A	377	ASP
1	A	393	ASP
1	A	394	LEU
1	A	396	GLU
1	A	398	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	403	TYR
1	A	404	GLN
1	A	411	GLN
1	A	419	ILE
1	A	422	GLN
1	A	444	LEU
1	A	453	THR
1	A	457	VAL
1	A	466	SER
1	A	475	MET
1	A	483	VAL
1	A	503	THR
1	A	507	ILE
1	A	510	LEU
1	A	514	LEU
1	A	516	MET
1	A	534	GLU
1	A	543	SER
1	A	550	GLU
1	A	558	GLN
1	A	559	LEU
1	A	560	GLN
1	A	569	ASP
1	A	570	LEU
1	A	580	LEU
1	A	590	THR
1	A	598	LEU
1	A	600	LEU
1	A	602	ASP
1	A	603	ARG
1	A	611	GLU
1	A	612	ASN
1	A	613	GLN
1	A	635	ARG
1	A	640	LEU
1	A	641	ILE
1	A	642	VAL
1	A	650	THR
1	A	678	LEU
1	A	679	ASP
1	A	680	GLU
1	A	684	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	700	LEU
1	A	701	LYS
1	A	704	ARG
1	A	706	SER
1	A	750	THR
1	A	753	VAL
1	A	756	LEU
1	A	771	MET
1	A	778	LYS
1	A	780	LEU
1	A	797	ASN
1	A	824	TYR
1	A	827	TYR
1	A	829	LEU
1	A	832	GLN
1	A	834	LEU
1	A	837	ARG
1	A	855	ILE
1	A	857	LEU
1	A	863	VAL
1	A	867	VAL
1	A	872	THR
1	A	899	SER
1	A	909	VAL
1	A	919	SER
1	A	923	SER
1	A	939	ASN
1	A	949	ARG
1	A	953	THR
1	A	991	LEU
1	A	993	ARG
1	A	1013	GLU
1	A	1015	LEU
1	A	1017	GLN
1	A	1025	ILE
1	A	1028	GLU
1	A	1039	ILE
1	A	1052	ASN
1	A	1062	ASP
1	A	1065	THR
1	A	1085	THR
1	A	1089	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1095	GLN
1	A	1099	ARG
1	A	1100	VAL
1	A	1101	LEU
1	A	1110	THR
1	A	1120	MET
1	A	1130	ILE
1	A	1150	VAL
1	A	1154	THR
1	A	1161	GLN
1	A	1166	VAL
1	A	1170	VAL
1	A	1177	ILE
1	A	1193	LEU
1	A	1208	ASP
1	A	1211	LEU
1	A	1215	GLN
1	A	1216	ASN
1	A	1225	LEU
1	A	1228	THR
1	A	1229	LYS
1	A	1235	LEU
1	A	1246	VAL
1	A	1256	ASP
1	A	1257	ILE
1	A	1258	GLN
1	A	1259	GLU
1	A	1274	VAL
1	A	1276	THR
1	A	1295	ASN
1	A	1298	GLU
1	A	1304	ASN
1	A	1306	GLN
1	A	1322	THR
1	A	1324	HIS
1	A	1332	TYR
1	A	1360	ILE
1	A	1366	TYR
1	A	1369	THR
1	A	1372	ASN
1	A	1373	LEU
1	A	1381	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1386	ARG
1	A	1388	SER
1	A	1391	LYS
1	A	1406	THR
1	A	1419	ASN
1	A	1425	THR
1	A	1432	LEU
1	A	1433	ASP
1	A	1442	ILE
1	A	1446	ILE
1	A	1447	ILE
1	A	1448	THR
1	A	1453	THR
1	A	1456	LYS
1	A	1463	SER
1	A	1464	LEU
1	A	1480	ILE
1	A	1488	LEU
1	A	1491	PHE
1	A	1498	SER
1	A	1504	GLU

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (34) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	8	ASN
1	A	120	GLN
1	A	199	ASN
1	A	236	ASN
1	A	303	GLN
1	A	323	GLN
1	A	486	HIS
1	A	501	GLN
1	A	552	GLN
1	A	613	GLN
1	A	651	HIS
1	A	652	HIS
1	A	675	GLN
1	A	688	ASN
1	A	727	HIS
1	A	730	GLN
1	A	769	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	885	HIS
1	A	969	GLN
1	A	978	GLN
1	A	1017	GLN
1	A	1023	HIS
1	A	1052	ASN
1	A	1147	ASN
1	A	1216	ASN
1	A	1263	HIS
1	A	1304	ASN
1	A	1306	GLN
1	A	1372	ASN
1	A	1376	ASN
1	A	1387	ASN
1	A	1419	ASN
1	A	1493	GLN
1	A	1506	ASN

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](#)

4 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
3	FMN	A	2070	-	31,33,33	1.42	4 (12%)	40,50,50	1.77	9 (22%)
2	ACT	A	2074	-	1,3,3	0.87	0	0,3,3	0.00	-
2	ACT	A	2075	-	1,3,3	1.74	0	0,3,3	0.00	-
4	F3S	A	2072	1	0,9,9	0.00	-	-	-	-

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
3	FMN	A	2070	-	-	6/18/18/18	0/3/3/3
4	F3S	A	2072	1	-	-	0/3/3/3

All (4) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
3	A	2070	FMN	C4-N3	3.60	1.39	1.33
3	A	2070	FMN	C4A-C10	-2.92	1.35	1.38
3	A	2070	FMN	C4A-N5	2.22	1.36	1.33
3	A	2070	FMN	C6-C5A	-2.11	1.38	1.41

All (9) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
3	A	2070	FMN	C4-N3-C2	5.83	120.06	115.14
3	A	2070	FMN	C8M-C8-C7	-3.67	113.21	120.74
3	A	2070	FMN	C4A-C4-N3	-3.54	118.59	123.43
3	A	2070	FMN	C4A-N5-C5A	3.16	119.93	116.77
3	A	2070	FMN	C1'-N10-C9A	2.87	120.55	118.29
3	A	2070	FMN	O4'-C4'-C3'	2.20	114.46	109.10
3	A	2070	FMN	O3P-P-O5'	2.18	112.53	106.73
3	A	2070	FMN	C7M-C7-C8	-2.09	116.46	120.74
3	A	2070	FMN	C10-C4A-N5	-2.02	119.86	121.26

There are no chirality outliers.

All (6) torsion outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
3	A	2070	FMN	C5'-O5'-P-O2P
3	A	2070	FMN	C5'-O5'-P-O3P

Continued on next page...

Continued from previous page...

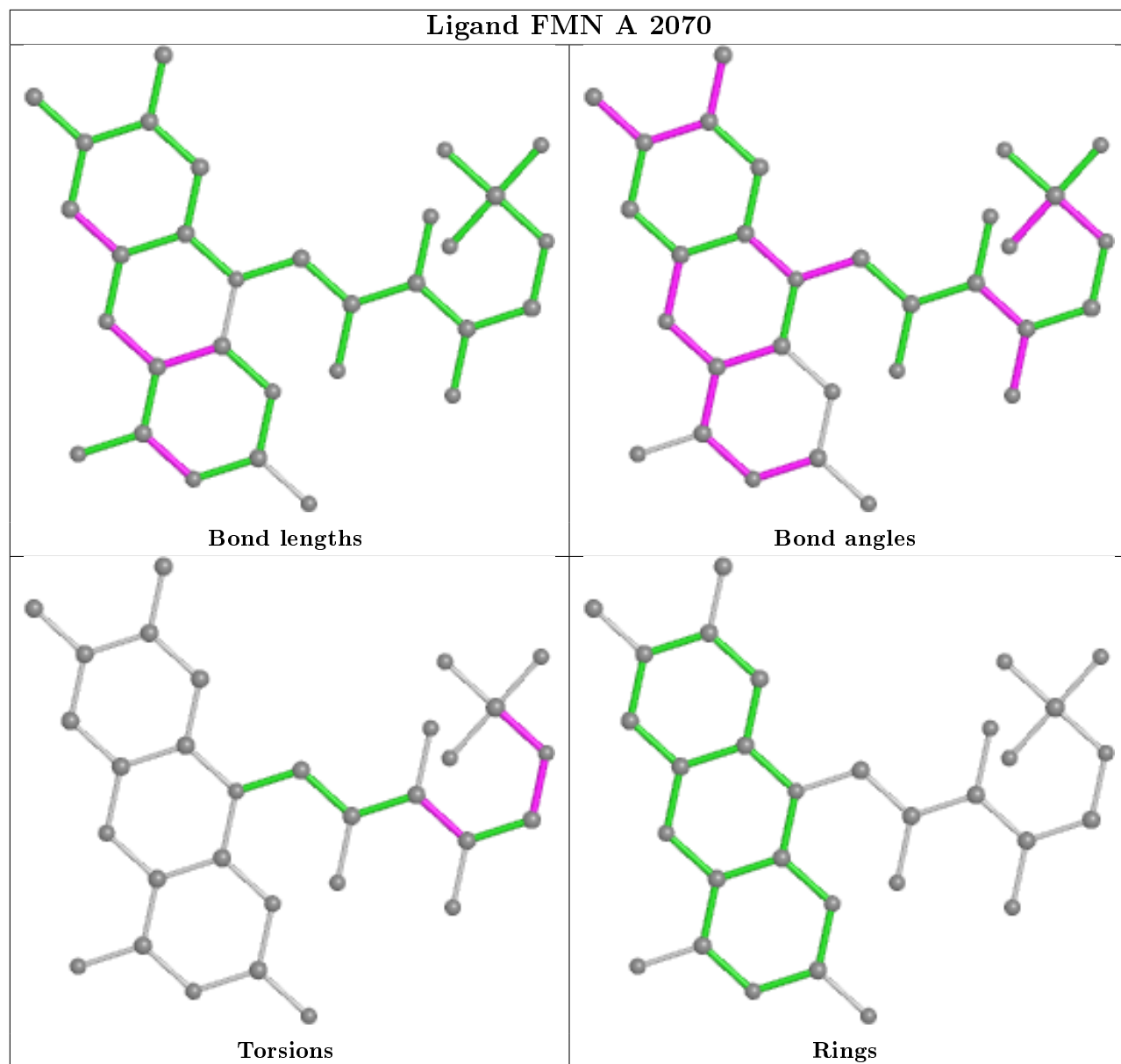
Mol	Chain	Res	Type	Atoms
3	A	2070	FMN	C5'-O5'-P-O1P
3	A	2070	FMN	C4'-C5'-O5'-P
3	A	2070	FMN	O3'-C3'-C4'-O4'
3	A	2070	FMN	C2'-C3'-C4'-O4'

There are no ring outliers.

4 monomers are involved in 13 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
3	A	2070	FMN	4	0
2	A	2074	ACT	6	0
2	A	2075	ACT	5	0
4	A	2072	F3S	3	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	1475/1520 (97%)	0.12	70 (4%)	31 22	24, 34, 41, 85	0

All (70) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	413	TYR	5.8
1	A	415	TYR	5.6
1	A	613	GLN	5.4
1	A	1487	TYR	5.0
1	A	411	GLN	4.8
1	A	418	TRP	4.6
1	A	251	GLY	4.4
1	A	615	PHE	4.3
1	A	10	ARG	4.2
1	A	9	LEU	4.1
1	A	777	ALA	4.0
1	A	827	TYR	4.0
1	A	776	MET	3.9
1	A	409	ALA	3.6
1	A	573	VAL	3.6
1	A	911	TYR	3.5
1	A	859	GLU	3.5
1	A	775	GLU	3.4
1	A	1480	ILE	3.4
1	A	446	GLN	3.4
1	A	312	ILE	3.3
1	A	769	HIS	3.3
1	A	412	LYS	3.2
1	A	605	ASN	3.1
1	A	856	SER	3.1
1	A	416	GLY	3.1
1	A	1486	ASP	3.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	315	PHE	3.1
1	A	826	HIS	3.0
1	A	397	GLN	3.0
1	A	598	LEU	2.9
1	A	572	GLY	2.9
1	A	1490	LYS	2.8
1	A	614	SER	2.7
1	A	1484	TRP	2.7
1	A	408	GLN	2.7
1	A	568	TYR	2.7
1	A	612	ASN	2.7
1	A	857	LEU	2.7
1	A	768	PHE	2.5
1	A	249	VAL	2.5
1	A	450	PHE	2.5
1	A	611	GLU	2.4
1	A	778	LYS	2.4
1	A	774	PRO	2.4
1	A	914	LEU	2.4
1	A	772	ALA	2.3
1	A	771	MET	2.3
1	A	1477	GLY	2.3
1	A	1263	HIS	2.2
1	A	863	VAL	2.2
1	A	405	ILE	2.2
1	A	417	GLU	2.2
1	A	860	VAL	2.2
1	A	1320	GLY	2.2
1	A	1435	VAL	2.2
1	A	1264	GLN	2.1
1	A	442	THR	2.1
1	A	1456	LYS	2.1
1	A	828	GLU	2.1
1	A	678	LEU	2.1
1	A	773	PHE	2.1
1	A	1297	PHE	2.1
1	A	1452	ILE	2.1
1	A	609	LEU	2.1
1	A	797	ASN	2.1
1	A	205	ARG	2.0
1	A	565	SER	2.0
1	A	833	TYR	2.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	407	GLN	2.0

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

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

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

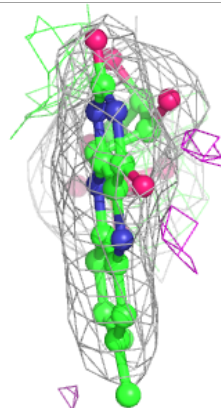
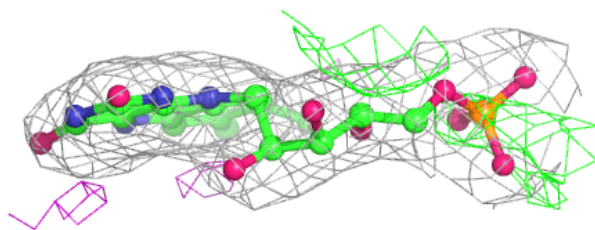
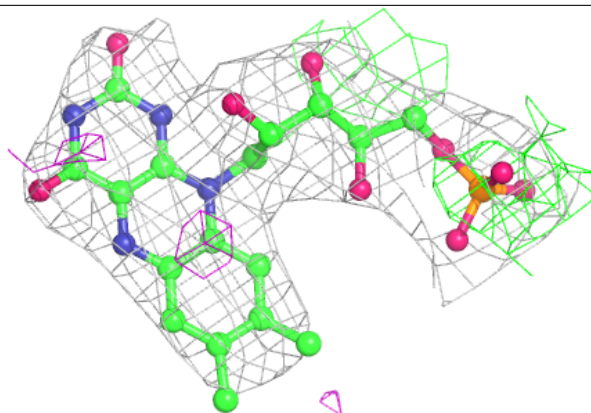
In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. The B-factors column lists the minimum, median, 95th percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled 'Q< 0.9' lists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

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors(\AA^2)	Q<0.9
2	ACT	A	2074	4/4	0.84	0.39	61,62,63,63	0
2	ACT	A	2075	4/4	0.93	0.25	59,60,62,62	0
3	FMN	A	2070	31/31	0.98	0.22	53,57,60,62	0
4	F3S	A	2072	7/7	1.00	0.15	60,63,68,70	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 FMN A 2070:

$2mF_o - DF_c$ (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.