



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

May 25, 2020 – 12:19 pm BST

PDB ID : 1U1U
Title : A. thaliana cobalamine independent methionine synthase
Authors : Ferrer, J.-L.; Ravanel, S.; Robert, M.; Dumas, R.
Deposited on : 2004-07-16
Resolution : 2.95 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
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

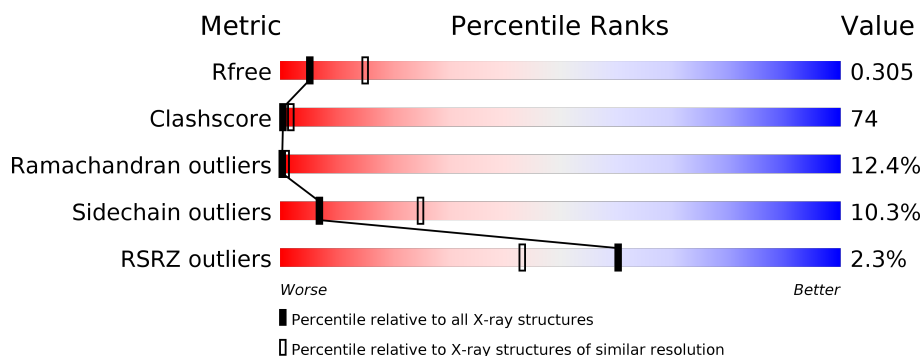
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 2.95 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
R_{free}	130704	3104 (3.00-2.92)
Clashscore	141614	3462 (3.00-2.92)
Ramachandran outliers	138981	3340 (3.00-2.92)
Sidechain outliers	138945	3343 (3.00-2.92)
RSRZ outliers	127900	2986 (3.00-2.92)

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	765	

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
3	SO4	A	771	-	-	X	-

2 Entry composition

There are 4 unique types of molecules in this entry. The entry contains 6093 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 5-methyltetrahydropteroyltriglutamate--homocysteine methyltransferase.

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	746	Total	C	N	O	S	Se	0	0	0
			5783	3686	974	1099	6	18			

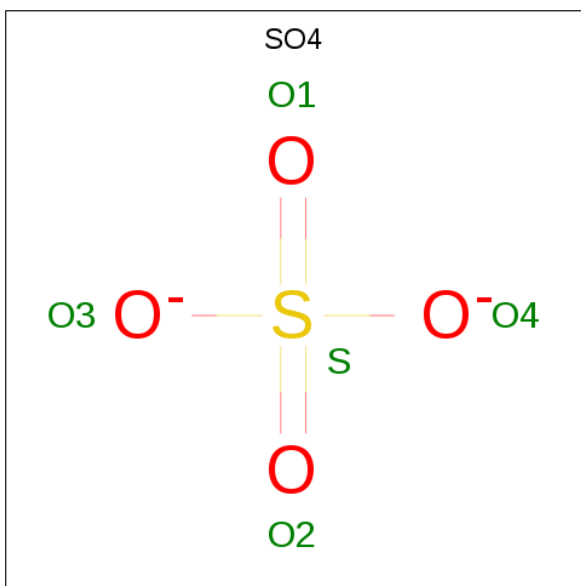
There are 19 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	MSE	MET	MODIFIED RESIDUE	UNP O50008
A	11	MSE	MET	MODIFIED RESIDUE	UNP O50008
A	49	MSE	MET	MODIFIED RESIDUE	UNP O50008
A	74	MSE	MET	MODIFIED RESIDUE	UNP O50008
A	97	MSE	MET	MODIFIED RESIDUE	UNP O50008
A	107	MSE	MET	MODIFIED RESIDUE	UNP O50008
A	109	MSE	MET	MODIFIED RESIDUE	UNP O50008
A	212	MSE	MET	MODIFIED RESIDUE	UNP O50008
A	351	MSE	LEU	MODIFIED RESIDUE	UNP O50008
A	496	MSE	MET	MODIFIED RESIDUE	UNP O50008
A	538	MSE	MET	MODIFIED RESIDUE	UNP O50008
A	545	MSE	MET	MODIFIED RESIDUE	UNP O50008
A	549	MSE	MET	MODIFIED RESIDUE	UNP O50008
A	554	MSE	MET	MODIFIED RESIDUE	UNP O50008
A	557	MSE	MET	MODIFIED RESIDUE	UNP O50008
A	648	MSE	MET	MODIFIED RESIDUE	UNP O50008
A	663	MSE	MET	MODIFIED RESIDUE	UNP O50008
A	718	MSE	MET	MODIFIED RESIDUE	UNP O50008
A	750	MSE	MET	MODIFIED RESIDUE	UNP O50008

- Molecule 2 is ZINC ION (three-letter code: ZN) (formula: Zn).

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
2	A	2	Total	Zn	0	0
			2	2		

- Molecule 3 is SULFATE ION (three-letter code: SO4) (formula: O₄S).



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

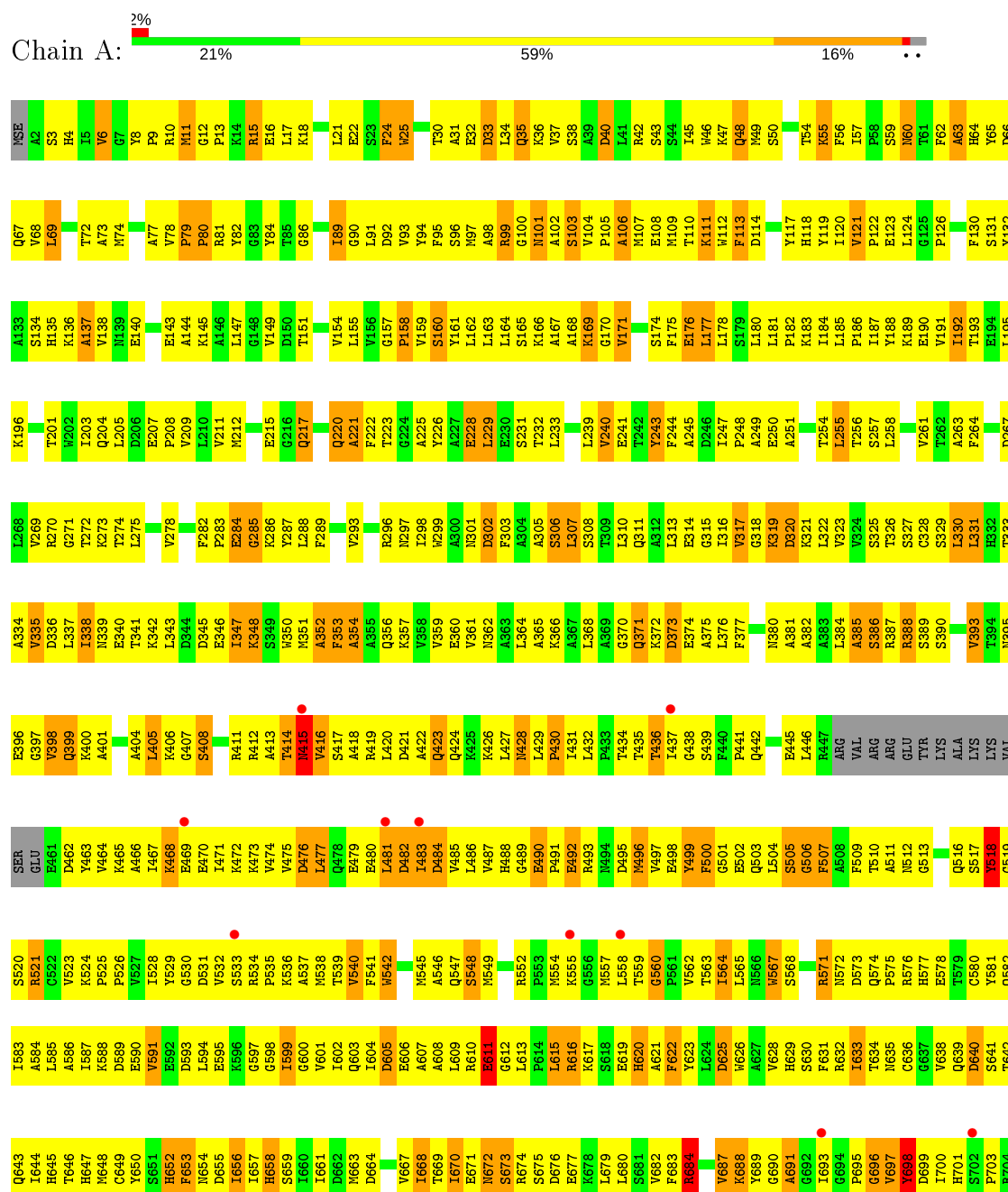
- Molecule 4 is water.

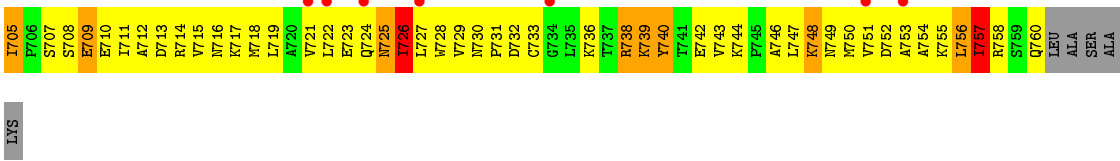
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	A	288	Total	O	0	0
			288	288		

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: 5-methyltetrahydropteroyltriglutamate--homocysteine methyltransferase





LYS

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 65	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	123.17Å 123.17Å 132.90Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	45.17 – 2.95 45.17 – 2.80	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	100.0 (45.17-2.95) 99.7 (45.17-2.80)	Depositor EDS
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	0.18	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	2.09 (at 2.81Å)	Xtriage
Refinement program	CNS	Depositor
R, R_{free}	0.191 , 0.306 0.193 , 0.305	Depositor DCC
R_{free} test set	2485 reflections (8.83%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	53.2	Xtriage
Anisotropy	0.282	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.35 , 125.8	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.34$, $\langle L^2 \rangle = 0.17$	Xtriage
Estimated twinning fraction	0.164 for h,-h-k,-l	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.90	EDS
Total number of atoms	6093	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	53.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 2.31% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality [i](#)

5.1 Standard geometry [i](#)

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

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	0.42	0/5884	0.69	1/7949 (0.0%)

There are no bond length outliers.

All (1) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	285	GLY	N-CA-C	-5.06	100.46	113.10

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	5783	0	5795	860	0
2	A	2	0	0	0	0
3	A	20	0	0	2	0
4	A	288	0	0	48	0
All	All	6093	0	5795	860	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 74.

All (860) 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:703:PRO:HA	1:A:738:ARG:HE	1.11	1.08
1:A:477:LEU:HD22	1:A:486:LEU:HD22	1.36	1.07
1:A:534:ARG:HH21	1:A:537:ALA:HA	1.25	1.02
1:A:628:VAL:HG13	1:A:663:MSE:HG2	1.42	1.00
1:A:599:ILE:HD12	1:A:599:ILE:H	1.25	0.99
1:A:646:THR:HG22	1:A:668:ILE:HG22	1.45	0.98
1:A:670:ILE:HD11	1:A:695:PRO:HA	1.49	0.94
1:A:521:ARG:NE	1:A:521:ARG:HA	1.82	0.94
1:A:546:ALA:HB3	1:A:554:MSE:HE2	1.52	0.92
1:A:693:ILE:HG12	1:A:695:PRO:HD3	1.51	0.91
1:A:707:SER:HB2	1:A:710:GLU:HG3	1.51	0.91
1:A:703:PRO:CA	1:A:738:ARG:HE	1.83	0.90
1:A:565:LEU:HD22	1:A:580:CYS:HB2	1.52	0.90
1:A:604:ILE:O	1:A:646:THR:HA	1.71	0.90
1:A:645:HIS:HA	1:A:667:VAL:O	1.71	0.90
1:A:107:MSE:HE3	1:A:120:ILE:HG21	1.50	0.90
1:A:534:ARG:HG2	1:A:586:ALA:HB1	1.54	0.90
1:A:716:ASN:HA	1:A:719:LEU:HG	1.53	0.90
1:A:97:MSE:HB3	1:A:107:MSE:HE2	1.54	0.89
1:A:191:VAL:HG12	1:A:195:LEU:HD11	1.53	0.88
1:A:497:VAL:HG21	1:A:567:TRP:HE3	1.37	0.88
1:A:357:LYS:HA	1:A:360:GLU:HG3	1.56	0.88
1:A:558:LEU:HD11	1:A:591:VAL:HG13	1.54	0.87
1:A:343:LEU:O	1:A:348:LYS:HE2	1.75	0.87
1:A:699:ASP:HA	1:A:732:ASP:HB2	1.57	0.85
1:A:185:LEU:HD23	1:A:228:GLU:HG2	1.57	0.85
1:A:575:PRO:HB3	1:A:577:HIS:CE1	2.11	0.85
1:A:273:LYS:HB3	1:A:273:LYS:NZ	1.92	0.85
1:A:609:LEU:HD23	1:A:650:TYR:HE2	1.41	0.83
1:A:343:LEU:O	1:A:348:LYS:CE	2.27	0.83
1:A:397:GLY:C	1:A:399:GLN:H	1.82	0.83
1:A:700:ILE:HD11	1:A:733:CYS:HB2	1.61	0.83
1:A:212:MSE:HE1	1:A:615:LEU:HB3	1.60	0.83
1:A:263:ALA:CB	1:A:287:TYR:HB2	2.07	0.83
1:A:676:ASP:OD2	1:A:679:LEU:HD12	1.79	0.82
1:A:703:PRO:HA	1:A:738:ARG:NE	1.92	0.81
1:A:608:ALA:HA	1:A:611:GLU:OE2	1.81	0.81
1:A:247:ILE:H	1:A:247:ILE:HD12	1.44	0.80
1:A:343:LEU:HD21	1:A:509:PHE:O	1.81	0.80
1:A:436:THR:HG22	1:A:731:PRO:HG2	1.62	0.79
1:A:521:ARG:HA	1:A:521:ARG:HE	1.43	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:191:VAL:O	1:A:195:LEU:HD12	1.83	0.79
1:A:208:PRO:O	1:A:211:VAL:HG22	1.82	0.79
1:A:517:SER:O	1:A:518:TYR:HB3	1.83	0.78
1:A:432:LEU:HD11	1:A:727:LEU:HD23	1.64	0.78
1:A:415:ASN:O	1:A:417:SER:N	2.16	0.78
1:A:586:ALA:O	1:A:589:ASP:HB2	1.83	0.78
1:A:462:ASP:O	1:A:466:ALA:HB2	1.83	0.78
1:A:45:ILE:HG22	1:A:49:MSE:HE2	1.67	0.77
1:A:610:ARG:HH22	1:A:653:PHE:HA	1.49	0.77
1:A:752:ASP:O	1:A:756:LEU:HD13	1.84	0.77
1:A:534:ARG:HH21	1:A:537:ALA:CA	1.96	0.77
1:A:263:ALA:HB2	1:A:287:TYR:HB2	1.65	0.77
1:A:581:TYR:OH	1:A:626:TRP:HA	1.84	0.77
1:A:646:THR:HG22	1:A:668:ILE:CG2	2.13	0.77
1:A:35:GLN:HA	1:A:35:GLN:HE21	1.49	0.76
1:A:700:ILE:HD12	1:A:701:HIS:N	2.00	0.76
1:A:523:VAL:HG23	1:A:525:PRO:HD3	1.66	0.76
1:A:581:TYR:CE1	1:A:630:SER:HB2	2.21	0.76
1:A:33:ASP:O	1:A:37:VAL:HG23	1.85	0.76
1:A:481:LEU:HD22	1:A:751:VAL:HG12	1.68	0.76
1:A:188:TYR:O	1:A:192:ILE:HG12	1.87	0.75
1:A:470:GLU:O	1:A:474:VAL:HG23	1.86	0.75
1:A:231:SER:HB3	4:A:963:HOH:O	1.85	0.75
1:A:384:LEU:HD13	1:A:388:ARG:NH2	2.00	0.75
1:A:697:VAL:O	1:A:698:TYR:HB3	1.84	0.75
1:A:18:LYS:HG3	1:A:520:SER:HB2	1.69	0.75
1:A:488:HIS:HB3	1:A:554:MSE:HE1	1.68	0.75
1:A:757:ILE:HD13	1:A:757:ILE:H	1.52	0.75
1:A:178:LEU:HD21	1:A:221:ALA:CB	2.17	0.75
1:A:477:LEU:HD11	1:A:487:VAL:HG22	1.69	0.74
1:A:160:SER:HB2	1:A:207:GLU:OE1	1.88	0.74
1:A:419:ARG:HG3	1:A:640:ASP:O	1.86	0.74
1:A:671:GLU:HG3	1:A:732:ASP:OD2	1.87	0.74
1:A:738:ARG:HG2	1:A:743:VAL:HG12	1.69	0.74
1:A:82:TYR:CZ	1:A:97:MSE:HA	2.23	0.74
1:A:718:MSE:HE2	1:A:727:LEU:HD11	1.68	0.74
1:A:335:VAL:HG12	1:A:336:ASP:N	2.02	0.73
1:A:647:HIS:HB2	4:A:885:HOH:O	1.87	0.73
1:A:605:ASP:HB3	1:A:647:HIS:HB3	1.69	0.73
1:A:212:MSE:HE1	1:A:615:LEU:HD13	1.71	0.72
1:A:107:MSE:HE3	1:A:120:ILE:CG2	2.19	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:330:LEU:HD22	1:A:357:LYS:HD3	1.71	0.72
1:A:676:ASP:HB2	1:A:679:LEU:HB2	1.71	0.72
1:A:747:LEU:C	1:A:749:ASN:H	1.90	0.72
1:A:672:ASN:O	1:A:673:SER:HB3	1.87	0.72
1:A:673:SER:HB2	1:A:696:GLY:O	1.90	0.72
1:A:633:ILE:HG22	1:A:633:ILE:O	1.89	0.72
1:A:634:THR:HB	4:A:986:HOH:O	1.90	0.72
1:A:477:LEU:CD1	1:A:487:VAL:H	2.02	0.72
1:A:114:ASP:HB3	1:A:615:LEU:HD21	1.71	0.72
1:A:477:LEU:HD13	1:A:486:LEU:HB3	1.70	0.72
1:A:463:TYR:HA	1:A:466:ALA:HB3	1.72	0.71
1:A:314:GLU:OE1	1:A:322:LEU:HG	1.89	0.71
1:A:497:VAL:HG21	1:A:567:TRP:CE3	2.23	0.71
1:A:670:ILE:HD11	1:A:695:PRO:CA	2.20	0.71
1:A:62:PHE:HB2	4:A:983:HOH:O	1.91	0.71
1:A:689:TYR:CE2	1:A:691:ALA:HB3	2.26	0.71
1:A:111:LYS:N	1:A:111:LYS:NZ	2.38	0.70
1:A:578:GLU:O	1:A:582:GLN:HG3	1.90	0.70
1:A:441:PRO:HB2	1:A:740:TYR:CE2	2.25	0.70
1:A:303:PHE:HB2	1:A:380:ASN:OD1	1.90	0.70
1:A:65:TYR:CE2	1:A:519:GLY:HA2	2.25	0.70
1:A:670:ILE:CD1	1:A:695:PRO:HA	2.21	0.70
1:A:350:TRP:CH2	1:A:387:ARG:HA	2.27	0.70
1:A:565:LEU:CD2	1:A:580:CYS:HB2	2.20	0.70
1:A:740:TYR:HA	1:A:743:VAL:HG22	1.72	0.70
1:A:84:TYR:CZ	1:A:86:GLY:HA2	2.26	0.70
1:A:310:LEU:HB3	1:A:368:LEU:HD11	1.74	0.70
1:A:16:GLU:N	1:A:16:GLU:OE1	2.21	0.70
1:A:670:ILE:N	1:A:670:ILE:HD13	2.07	0.70
1:A:143:GLU:O	1:A:147:LEU:HD13	1.92	0.69
1:A:644:ILE:HD12	1:A:644:ILE:N	2.07	0.69
1:A:504:LEU:CD2	1:A:534:ARG:HB3	2.22	0.69
1:A:384:LEU:HD11	4:A:792:HOH:O	1.91	0.69
1:A:191:VAL:HG12	1:A:195:LEU:CD1	2.22	0.69
1:A:500:PHE:HE2	1:A:559:THR:HG1	1.40	0.69
1:A:162:LEU:H	1:A:162:LEU:HD12	1.55	0.69
1:A:247:ILE:N	1:A:247:ILE:HD12	2.07	0.69
1:A:477:LEU:O	1:A:483:ILE:HD12	1.93	0.69
1:A:725:ASN:O	1:A:726:ILE:HG23	1.93	0.69
1:A:74:MSE:HE1	1:A:155:LEU:HD22	1.75	0.69
1:A:178:LEU:HD21	1:A:221:ALA:HB2	1.74	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:401:ALA:O	1:A:405:LEU:HD22	1.93	0.68
1:A:165:SER:O	1:A:166:LYS:HD3	1.92	0.68
1:A:723:GLU:HB3	1:A:726:ILE:HG13	1.75	0.68
1:A:467:ILE:O	1:A:471:ILE:HG22	1.94	0.68
1:A:480:GLU:O	1:A:483:ILE:HG13	1.94	0.68
1:A:112:TRP:O	1:A:113:PHE:HB2	1.93	0.68
1:A:504:LEU:HD23	1:A:534:ARG:HB3	1.76	0.68
1:A:414:THR:O	1:A:416:VAL:N	2.27	0.67
1:A:477:LEU:HD11	1:A:487:VAL:H	1.59	0.67
1:A:506:GLY:HA3	1:A:530:GLY:O	1.94	0.67
1:A:565:LEU:HD22	1:A:580:CYS:CB	2.24	0.67
1:A:749:ASN:HA	1:A:752:ASP:OD2	1.94	0.67
1:A:130:PHE:HD2	1:A:183:LYS:HG2	1.59	0.67
1:A:435:THR:O	1:A:750:MSE:HE1	1.95	0.67
1:A:632:ARG:C	1:A:634:THR:H	1.95	0.67
1:A:411:ARG:O	1:A:413:ALA:N	2.28	0.67
1:A:533:SER:O	1:A:535:PRO:HD3	1.95	0.67
1:A:228:GLU:O	1:A:228:GLU:HG3	1.95	0.66
1:A:464:VAL:HG13	1:A:465:LYS:HG2	1.75	0.66
1:A:3:SER:O	1:A:55:LYS:HB3	1.95	0.66
1:A:92:ASP:O	1:A:96:SER:HB3	1.95	0.66
1:A:154:VAL:HA	1:A:204:GLN:HB3	1.78	0.66
1:A:505:SER:O	1:A:507:PHE:N	2.28	0.66
1:A:542:TRP:HA	1:A:542:TRP:CE3	2.30	0.66
1:A:611:GLU:H	1:A:611:GLU:CD	1.99	0.66
1:A:353:PHE:HD1	1:A:353:PHE:N	1.94	0.66
1:A:45:ILE:CG2	1:A:49:MSE:HE2	2.25	0.66
1:A:539:THR:HG23	4:A:1006:HOH:O	1.95	0.65
1:A:547:GLN:NE2	1:A:554:MSE:HB2	2.10	0.65
1:A:157:GLY:HA2	1:A:205:LEU:HD22	1.76	0.65
1:A:225:ALA:O	1:A:229:LEU:HD13	1.97	0.65
1:A:18:LYS:O	1:A:22:GLU:HG3	1.96	0.65
1:A:496:MSE:HA	4:A:974:HOH:O	1.95	0.65
1:A:495:ASP:HB3	1:A:498:GLU:CG	2.26	0.65
1:A:632:ARG:O	1:A:634:THR:N	2.29	0.65
1:A:680:LEU:HB3	1:A:722:LEU:HD21	1.76	0.65
1:A:572:ASN:HB3	4:A:896:HOH:O	1.97	0.65
1:A:136:LYS:HG3	4:A:789:HOH:O	1.97	0.65
1:A:723:GLU:HG2	1:A:725:ASN:OD1	1.97	0.64
1:A:222:PHE:O	1:A:226:TYR:HD1	1.79	0.64
1:A:648:MSE:HE3	1:A:670:ILE:HG22	1.79	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:756:LEU:O	1:A:758:ARG:N	2.31	0.64
1:A:336:ASP:OD1	1:A:338:ILE:HG22	1.98	0.64
1:A:476:ASP:O	1:A:480:GLU:HB2	1.97	0.64
1:A:500:PHE:HD1	1:A:538:MSE:HE3	1.63	0.64
1:A:137:ALA:HB3	4:A:970:HOH:O	1.98	0.64
1:A:674:ARG:CZ	1:A:699:ASP:HB3	2.27	0.64
1:A:318:GLY:C	1:A:320:ASP:H	2.01	0.64
1:A:350:TRP:HZ2	1:A:386:SER:HB2	1.63	0.64
1:A:330:LEU:HD22	1:A:357:LYS:CD	2.28	0.64
1:A:212:MSE:HE1	1:A:615:LEU:CB	2.28	0.64
1:A:9:PRO:HD3	1:A:330:LEU:O	1.96	0.64
1:A:167:ALA:N	1:A:177:LEU:HD21	2.14	0.63
1:A:437:ILE:HG13	1:A:733:CYS:O	1.97	0.63
1:A:273:LYS:HB3	1:A:273:LYS:HZ3	1.62	0.63
1:A:337:LEU:HB2	1:A:353:PHE:CD1	2.33	0.63
1:A:654:ASN:ND2	1:A:682:VAL:HG11	2.12	0.63
1:A:119:TYR:HE1	1:A:121:VAL:HA	1.63	0.63
1:A:395:ASN:C	1:A:397:GLY:H	2.02	0.63
1:A:319:LYS:O	1:A:320:ASP:HB2	1.97	0.63
1:A:581:TYR:O	1:A:585:LEU:HD23	1.99	0.63
1:A:715:VAL:HG12	1:A:719:LEU:HD21	1.79	0.63
1:A:43:SER:HB3	4:A:881:HOH:O	1.99	0.63
1:A:606:GLU:HA	1:A:606:GLU:OE1	1.98	0.63
1:A:657:ILE:HD11	1:A:687:VAL:HG11	1.81	0.63
1:A:335:VAL:HA	1:A:354:ALA:HB3	1.81	0.62
1:A:212:MSE:CE	1:A:615:LEU:HB3	2.28	0.62
1:A:705:ILE:H	1:A:705:ILE:HD13	1.64	0.62
1:A:423:GLN:NE2	1:A:643:GLN:HA	2.13	0.62
1:A:8:TYR:CE2	1:A:45:ILE:HD12	2.34	0.62
1:A:338:ILE:C	1:A:339:ASN:HD22	2.03	0.62
1:A:699:ASP:HA	1:A:732:ASP:CB	2.27	0.62
1:A:399:GLN:C	1:A:399:GLN:HE21	2.03	0.62
1:A:547:GLN:HE21	1:A:547:GLN:HA	1.65	0.62
1:A:760:GLN:H	1:A:760:GLN:NE2	1.98	0.62
1:A:506:GLY:HA2	1:A:529:TYR:CD1	2.34	0.62
1:A:111:LYS:HZ2	1:A:111:LYS:HB2	1.65	0.62
1:A:11:MSE:HA	1:A:17:LEU:HB3	1.80	0.62
1:A:204:GLN:HG3	1:A:239:LEU:HD12	1.80	0.62
1:A:599:ILE:CD1	1:A:599:ILE:H	2.06	0.62
1:A:422:ALA:C	1:A:424:GLN:H	2.02	0.62
1:A:506:GLY:HA2	1:A:529:TYR:CE1	2.36	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:350:TRP:HH2	1:A:390:SER:HB3	1.65	0.61
1:A:353:PHE:N	1:A:353:PHE:CD1	2.65	0.61
1:A:162:LEU:HD11	1:A:184:ILE:HD11	1.81	0.61
1:A:616:ARG:O	1:A:619:GLU:HB2	2.01	0.61
1:A:713:ASP:HA	1:A:716:ASN:HB2	1.81	0.61
1:A:329:SER:C	1:A:331:LEU:H	2.02	0.61
1:A:387:ARG:O	1:A:393:VAL:HG21	1.99	0.61
1:A:661:ILE:HG13	1:A:689:TYR:HD1	1.65	0.61
1:A:628:VAL:CG1	1:A:663:MSE:HG2	2.25	0.61
1:A:247:ILE:HD13	1:A:274:THR:HG21	1.83	0.61
1:A:397:GLY:C	1:A:399:GLN:N	2.53	0.61
1:A:79:PRO:HB2	1:A:82:TYR:CD2	2.36	0.61
1:A:130:PHE:CD2	1:A:183:LYS:HG2	2.36	0.61
1:A:698:TYR:OH	1:A:700:ILE:HG22	1.99	0.61
1:A:385:ALA:HB3	4:A:1047:HOH:O	2.00	0.60
1:A:423:GLN:HE21	1:A:643:GLN:HA	1.66	0.60
1:A:62:PHE:CD1	1:A:63:ALA:N	2.67	0.60
1:A:698:TYR:CZ	1:A:700:ILE:HG22	2.37	0.60
1:A:377:PHE:HA	1:A:380:ASN:HB3	1.84	0.60
1:A:4:HIS:O	1:A:325:SER:HA	2.01	0.60
1:A:111:LYS:N	1:A:111:LYS:HZ1	2.00	0.60
1:A:477:LEU:HD23	1:A:483:ILE:CD1	2.31	0.60
1:A:343:LEU:O	1:A:348:LYS:HE3	2.02	0.60
1:A:674:ARG:NE	1:A:699:ASP:HB3	2.17	0.60
1:A:298:ILE:HD11	1:A:353:PHE:CG	2.37	0.60
1:A:480:GLU:O	1:A:482:ASP:N	2.35	0.60
1:A:293:VAL:HB	1:A:326:THR:HA	1.84	0.60
1:A:571:ARG:HB2	1:A:573:ASP:OD1	2.02	0.60
1:A:605:ASP:CB	1:A:647:HIS:HB3	2.32	0.60
1:A:240:VAL:CG2	1:A:261:VAL:HG11	2.32	0.60
1:A:366:LYS:HB3	1:A:371:GLN:O	2.01	0.60
1:A:11:MSE:HG3	1:A:17:LEU:HB3	1.84	0.60
1:A:477:LEU:HD23	1:A:483:ILE:HD12	1.84	0.59
1:A:220:GLN:HE21	1:A:220:GLN:HA	1.67	0.59
1:A:622:PHE:O	1:A:622:PHE:HD2	1.83	0.59
1:A:542:TRP:HE3	1:A:542:TRP:HA	1.67	0.59
1:A:760:GLN:HA	4:A:1003:HOH:O	2.02	0.59
1:A:271:GLY:HA3	4:A:804:HOH:O	2.03	0.59
1:A:341:THR:HG23	1:A:342:LYS:N	2.17	0.59
1:A:100:GLY:N	1:A:106:ALA:HB2	2.18	0.59
1:A:215:GLU:OE1	1:A:217:GLN:HB2	2.02	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:162:LEU:HD11	1:A:184:ILE:CD1	2.31	0.59
1:A:124:LEU:O	1:A:167:ALA:HA	2.03	0.59
1:A:229:LEU:HB3	1:A:233:LEU:CD2	2.33	0.59
1:A:471:ILE:O	1:A:474:VAL:HB	2.02	0.59
1:A:554:MSE:O	1:A:599:ILE:HG23	2.03	0.59
1:A:611:GLU:N	1:A:611:GLU:OE1	2.36	0.59
1:A:446:LEU:HD22	1:A:446:LEU:N	2.17	0.59
1:A:620:HIS:O	1:A:622:PHE:N	2.35	0.59
1:A:695:PRO:HD2	1:A:718:MSE:HE1	1.85	0.59
1:A:534:ARG:HG3	1:A:534:ARG:O	2.03	0.58
1:A:62:PHE:O	1:A:63:ALA:HB2	2.02	0.58
1:A:655:ASP:HB3	4:A:925:HOH:O	2.03	0.58
1:A:599:ILE:N	1:A:599:ILE:HD12	2.07	0.58
1:A:658:HIS:O	1:A:661:ILE:N	2.35	0.58
1:A:187:ILE:O	1:A:191:VAL:HG23	2.03	0.58
1:A:302:ASP:OD2	1:A:305:ALA:HB2	2.03	0.58
1:A:399:GLN:NE2	1:A:400:LYS:HD3	2.18	0.58
1:A:653:PHE:HB2	1:A:656:ILE:CG2	2.33	0.58
1:A:108:GLU:O	1:A:121:VAL:HG23	2.03	0.58
1:A:34:LEU:O	1:A:37:VAL:N	2.35	0.58
1:A:483:ILE:HG22	1:A:485:VAL:O	2.04	0.58
1:A:32:GLU:HB3	4:A:1043:HOH:O	2.02	0.58
1:A:229:LEU:HB3	1:A:233:LEU:HD23	1.85	0.58
1:A:298:ILE:O	1:A:298:ILE:HG23	2.04	0.57
1:A:404:ALA:C	1:A:406:LYS:H	2.07	0.57
1:A:674:ARG:HB2	4:A:818:HOH:O	2.04	0.57
1:A:8:TYR:CD2	1:A:9:PRO:HD2	2.38	0.57
1:A:411:ARG:NH2	1:A:419:ARG:HD2	2.18	0.57
1:A:42:ARG:HG2	4:A:983:HOH:O	2.02	0.57
1:A:548:SER:HA	4:A:976:HOH:O	2.03	0.57
1:A:131:SER:HB3	4:A:933:HOH:O	2.03	0.57
1:A:540:VAL:HG12	1:A:541:PHE:N	2.20	0.57
1:A:700:ILE:CG1	1:A:733:CYS:H	2.18	0.57
1:A:644:ILE:HD12	1:A:644:ILE:H	1.68	0.57
1:A:726:ILE:HD11	4:A:921:HOH:O	2.04	0.57
1:A:30:THR:C	1:A:32:GLU:H	2.06	0.57
1:A:35:GLN:HA	1:A:35:GLN:NE2	2.19	0.57
1:A:3:SER:HB2	1:A:361:VAL:HG12	1.86	0.57
1:A:490:GLU:HG2	1:A:493:ARG:NH1	2.20	0.57
1:A:560:GLY:HA3	1:A:606:GLU:CD	2.25	0.57
1:A:336:ASP:CG	1:A:338:ILE:HG22	2.26	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:469:GLU:OE1	1:A:472:LYS:HD2	2.05	0.56
1:A:673:SER:OG	1:A:699:ASP:HB2	2.05	0.56
1:A:93:VAL:HA	1:A:96:SER:OG	2.05	0.56
1:A:534:ARG:NH2	1:A:537:ALA:HA	2.09	0.56
1:A:157:GLY:HA3	1:A:207:GLU:CD	2.26	0.56
1:A:631:PHE:CG	1:A:663:MSE:HE2	2.40	0.56
1:A:477:LEU:CD2	1:A:483:ILE:HG21	2.35	0.56
1:A:577:HIS:O	1:A:580:CYS:HB3	2.06	0.56
1:A:647:HIS:NE2	1:A:649:CYS:SG	2.69	0.56
1:A:399:GLN:HE22	1:A:400:LYS:HD3	1.70	0.56
1:A:693:ILE:HG12	1:A:695:PRO:CD	2.30	0.56
1:A:701:HIS:NE2	1:A:733:CYS:SG	2.78	0.56
1:A:333:THR:HG23	1:A:334:ALA:N	2.20	0.56
1:A:558:LEU:HD12	1:A:604:ILE:HG12	1.88	0.56
1:A:310:LEU:HD12	1:A:364:LEU:HD13	1.87	0.56
1:A:721:VAL:HG23	1:A:722:LEU:HG	1.87	0.56
1:A:101:ASN:HB3	4:A:857:HOH:O	2.06	0.56
1:A:330:LEU:HD13	1:A:357:LYS:HB2	1.87	0.56
1:A:17:LEU:HD12	1:A:21:LEU:HG	1.88	0.55
1:A:126:PRO:HD2	1:A:171:VAL:HG22	1.88	0.55
1:A:674:ARG:NE	1:A:699:ASP:CB	2.70	0.55
1:A:700:ILE:CG2	1:A:731:PRO:HB3	2.37	0.55
1:A:646:THR:H	1:A:668:ILE:HA	1.72	0.55
1:A:416:VAL:O	1:A:420:LEU:HG	2.07	0.55
1:A:729:VAL:CG1	1:A:750:MSE:HG2	2.36	0.55
1:A:322:LEU:HD13	1:A:323:VAL:N	2.22	0.55
1:A:658:HIS:O	1:A:661:ILE:HG22	2.07	0.55
1:A:747:LEU:C	1:A:749:ASN:N	2.59	0.55
1:A:620:HIS:O	1:A:623:TYR:N	2.39	0.55
1:A:102:ALA:O	1:A:103:SER:CB	2.55	0.55
1:A:574:GLN:NE2	1:A:578:GLU:HB3	2.22	0.55
1:A:684:ARG:HH11	1:A:684:ARG:HG2	1.71	0.55
1:A:610:ARG:HH22	1:A:653:PHE:CA	2.20	0.55
1:A:185:LEU:HD23	1:A:228:GLU:CG	2.35	0.55
1:A:263:ALA:HB1	1:A:287:TYR:HB2	1.86	0.55
1:A:271:GLY:HA2	4:A:961:HOH:O	2.06	0.54
1:A:334:ALA:HB3	1:A:353:PHE:CD2	2.40	0.54
1:A:278:VAL:CG1	1:A:316:ILE:HG21	2.38	0.54
1:A:473:LYS:O	1:A:477:LEU:HB2	2.07	0.54
1:A:588:LYS:HA	1:A:591:VAL:HG23	1.88	0.54
1:A:99:ARG:C	1:A:106:ALA:HB2	2.27	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:431:ILE:HG22	1:A:432:LEU:HD13	1.88	0.54
1:A:11:MSE:HE1	1:A:516:GLN:NE2	2.22	0.54
1:A:4:HIS:CE1	1:A:6:VAL:HG12	2.42	0.54
1:A:278:VAL:HG12	1:A:316:ILE:HG21	1.90	0.54
1:A:616:ARG:NE	1:A:616:ARG:HA	2.23	0.54
1:A:162:LEU:HD21	1:A:184:ILE:CD1	2.37	0.54
1:A:510:THR:CG2	1:A:511:ALA:N	2.71	0.54
1:A:517:SER:O	1:A:518:TYR:CB	2.54	0.54
1:A:563:THR:HA	1:A:608:ALA:HB3	1.90	0.54
1:A:659:SER:O	1:A:663:MSE:HG3	2.07	0.54
1:A:744:LYS:C	1:A:746:ALA:H	2.09	0.54
1:A:69:LEU:HD21	1:A:97:MSE:CE	2.37	0.54
1:A:121:VAL:HG12	1:A:166:LYS:HG2	1.88	0.54
1:A:34:LEU:O	1:A:37:VAL:HB	2.08	0.54
1:A:353:PHE:O	1:A:357:LYS:HG3	2.06	0.54
1:A:376:LEU:O	1:A:380:ASN:N	2.39	0.54
1:A:404:ALA:C	1:A:406:LYS:N	2.59	0.54
1:A:130:PHE:HB3	1:A:187:ILE:HD12	1.87	0.54
1:A:66:ASP:OD2	1:A:68:VAL:HB	2.07	0.54
1:A:301:ASN:O	1:A:303:PHE:N	2.41	0.54
1:A:422:ALA:O	1:A:424:GLN:N	2.41	0.54
1:A:55:LYS:HG2	1:A:56:PHE:CE2	2.43	0.54
1:A:707:SER:HB3	1:A:709:GLU:HG3	1.90	0.54
1:A:243:TYR:HA	1:A:267:ASP:HB2	1.89	0.53
1:A:398:VAL:HG12	1:A:398:VAL:O	2.08	0.53
1:A:119:TYR:CE1	1:A:121:VAL:HA	2.44	0.53
1:A:167:ALA:H	1:A:177:LEU:HD21	1.72	0.53
1:A:428:ASN:O	1:A:429:LEU:HB2	2.08	0.53
1:A:610:ARG:NH2	1:A:653:PHE:HB3	2.23	0.53
1:A:648:MSE:O	1:A:670:ILE:HA	2.07	0.53
1:A:282:PHE:CD1	1:A:283:PRO:HD2	2.44	0.53
1:A:338:ILE:HG23	1:A:338:ILE:O	2.08	0.53
1:A:477:LEU:HB3	1:A:486:LEU:HD13	1.90	0.53
1:A:571:ARG:HD2	1:A:573:ASP:OD1	2.08	0.53
1:A:581:TYR:OH	1:A:629:HIS:HB3	2.08	0.53
1:A:680:LEU:C	1:A:682:VAL:H	2.12	0.53
1:A:136:LYS:NZ	1:A:140:GLU:OE2	2.33	0.53
1:A:639:GLN:C	1:A:641:SER:H	2.11	0.53
1:A:557:MSE:SE	1:A:603:GLN:HE21	2.41	0.53
1:A:591:VAL:HG21	1:A:634:THR:O	2.08	0.53
1:A:739:LYS:HG2	1:A:740:TYR:N	2.24	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:485:VAL:C	1:A:486:LEU:HD23	2.28	0.53
1:A:638:VAL:HG22	1:A:642:THR:HB	1.90	0.53
1:A:373:ASP:C	1:A:375:ALA:H	2.11	0.53
1:A:696:GLY:HA3	1:A:731:PRO:O	2.09	0.53
1:A:703:PRO:HD3	1:A:738:ARG:HH21	1.74	0.53
1:A:43:SER:O	1:A:47:LYS:HD2	2.09	0.53
1:A:646:THR:O	1:A:669:THR:HG22	2.08	0.53
1:A:373:ASP:OD2	1:A:376:LEU:HG	2.09	0.53
1:A:601:VAL:HG13	1:A:643:GLN:O	2.08	0.53
1:A:437:ILE:HG21	1:A:733:CYS:C	2.29	0.53
1:A:738:ARG:CG	1:A:743:VAL:HG12	2.39	0.53
1:A:123:GLU:HB3	1:A:168:ALA:HB2	1.89	0.53
1:A:598:GLY:O	1:A:599:ILE:C	2.47	0.53
1:A:718:MSE:HB3	1:A:722:LEU:HD12	1.91	0.52
1:A:729:VAL:HG12	1:A:750:MSE:HE3	1.91	0.52
1:A:178:LEU:HD21	1:A:221:ALA:HB1	1.89	0.52
1:A:289:PHE:HA	1:A:323:VAL:O	2.10	0.52
1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:VAL:N	2.23	0.52
1:A:439:SER:OG	1:A:736:LYS:HB2	2.09	0.52
1:A:469:GLU:O	1:A:473:LYS:HG3	2.10	0.52
1:A:559:THR:HA	1:A:605:ASP:OD1	2.09	0.52
1:A:180:LEU:O	1:A:184:ILE:HG12	2.10	0.52
1:A:481:LEU:O	1:A:482:ASP:HB2	2.09	0.52
1:A:562:VAL:HB	1:A:606:GLU:OE2	2.09	0.52
1:A:740:TYR:HA	1:A:743:VAL:CG2	2.39	0.52
1:A:22:GLU:HA	1:A:25:TRP:HB2	1.92	0.52
1:A:49:MSE:O	1:A:54:THR:OG1	2.22	0.52
1:A:67:GLN:HB3	4:A:940:HOH:O	2.10	0.52
1:A:73:ALA:O	1:A:134:SER:HB2	2.10	0.52
1:A:490:GLU:HB3	1:A:493:ARG:HD2	1.92	0.52
1:A:495:ASP:HB3	1:A:498:GLU:HG2	1.91	0.52
1:A:534:ARG:HG2	1:A:586:ALA:CB	2.33	0.52
1:A:437:ILE:CG1	1:A:731:PRO:HB2	2.40	0.52
1:A:111:LYS:NZ	1:A:111:LYS:H	2.08	0.52
1:A:163:LEU:HD13	1:A:209:VAL:HG11	1.92	0.52
1:A:244:PHE:O	1:A:245:ALA:HB2	2.10	0.52
1:A:650:TYR:HB2	1:A:653:PHE:CD2	2.45	0.52
1:A:712:ALA:O	1:A:716:ASN:ND2	2.42	0.52
1:A:712:ALA:HA	1:A:753:ALA:HB1	1.91	0.51
1:A:203:ILE:HG12	1:A:204:GLN:N	2.26	0.51
1:A:220:GLN:O	1:A:223:THR:N	2.43	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:680:LEU:HB2	1:A:721:VAL:HG21	1.92	0.51
1:A:258:LEU:HA	4:A:907:HOH:O	2.09	0.51
1:A:414:THR:HG21	1:A:419:ARG:HB2	1.92	0.51
1:A:357:LYS:HA	1:A:360:GLU:CG	2.37	0.51
1:A:632:ARG:C	1:A:634:THR:N	2.63	0.51
1:A:610:ARG:O	1:A:612:GLY:N	2.44	0.51
1:A:101:ASN:ND2	1:A:104:VAL:O	2.44	0.51
1:A:110:THR:O	1:A:118:HIS:HA	2.11	0.51
1:A:500:PHE:HD1	1:A:538:MSE:CE	2.24	0.51
1:A:84:TYR:CE2	1:A:86:GLY:HA2	2.45	0.51
1:A:389:SER:O	1:A:390:SER:C	2.50	0.51
1:A:298:ILE:HD11	1:A:353:PHE:CD2	2.46	0.51
1:A:477:LEU:CD2	1:A:486:LEU:HD22	2.25	0.51
1:A:111:LYS:N	1:A:111:LYS:HZ2	2.09	0.50
1:A:162:LEU:HD21	1:A:184:ILE:HD11	1.93	0.50
1:A:45:ILE:HG22	1:A:49:MSE:CE	2.40	0.50
1:A:712:ALA:CA	1:A:753:ALA:HB1	2.41	0.50
1:A:747:LEU:O	1:A:749:ASN:N	2.44	0.50
1:A:467:ILE:O	1:A:468:LYS:C	2.50	0.50
1:A:437:ILE:HG12	1:A:731:PRO:HD2	1.93	0.50
1:A:95:PHE:HA	1:A:98:ALA:HB3	1.93	0.50
1:A:467:ILE:HA	1:A:470:GLU:HB2	1.92	0.50
1:A:55:LYS:HA	1:A:55:LYS:HE2	1.93	0.50
1:A:700:ILE:HD11	1:A:701:HIS:CE1	2.47	0.50
1:A:18:LYS:CG	1:A:520:SER:HB2	2.41	0.50
1:A:645:HIS:CD2	1:A:667:VAL:HB	2.47	0.50
1:A:337:LEU:HD12	1:A:353:PHE:CE1	2.47	0.50
1:A:341:THR:HG23	1:A:342:LYS:HD3	1.93	0.50
1:A:395:ASN:OD1	1:A:397:GLY:N	2.44	0.50
1:A:739:LYS:CG	1:A:740:TYR:H	2.24	0.50
1:A:59:SER:HB3	1:A:151:THR:OG1	2.11	0.50
1:A:17:LEU:CD1	1:A:21:LEU:HG	2.41	0.50
1:A:229:LEU:O	1:A:232:THR:N	2.44	0.50
1:A:352:ALA:C	1:A:353:PHE:HD1	2.15	0.50
1:A:381:ALA:HA	1:A:384:LEU:HD12	1.93	0.50
1:A:426:LYS:O	1:A:427:LEU:HG	2.11	0.50
1:A:622:PHE:O	1:A:625:ASP:CB	2.59	0.50
1:A:631:PHE:CD2	1:A:663:MSE:HE2	2.47	0.50
1:A:181:LEU:O	1:A:185:LEU:HB2	2.11	0.50
1:A:160:SER:CB	1:A:207:GLU:OE1	2.60	0.50
1:A:445:GLU:C	1:A:446:LEU:HD22	2.32	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:158:PRO:O	1:A:162:LEU:HD12	2.11	0.50
1:A:122:PRO:HD2	1:A:165:SER:HA	1.94	0.50
1:A:48:GLN:O	1:A:48:GLN:HG2	2.12	0.50
1:A:581:TYR:HE1	1:A:630:SER:CA	2.24	0.50
1:A:700:ILE:HD13	4:A:836:HOH:O	2.12	0.50
1:A:399:GLN:HE21	1:A:400:LYS:N	2.10	0.50
1:A:510:THR:CG2	1:A:513:GLY:H	2.24	0.50
1:A:657:ILE:HG23	1:A:658:HIS:N	2.27	0.50
1:A:738:ARG:CZ	1:A:738:ARG:HA	2.41	0.50
1:A:176:GLU:C	1:A:178:LEU:H	2.16	0.49
1:A:396:GLU:O	1:A:399:GLN:HB2	2.12	0.49
1:A:677:GLU:O	1:A:721:VAL:HG21	2.12	0.49
1:A:318:GLY:O	1:A:320:ASP:N	2.44	0.49
1:A:347:ILE:O	1:A:350:TRP:N	2.40	0.49
1:A:575:PRO:CB	1:A:577:HIS:CE1	2.89	0.49
1:A:212:MSE:HE1	1:A:615:LEU:CD1	2.41	0.49
1:A:587:ILE:HG22	1:A:634:THR:HG23	1.93	0.49
1:A:687:VAL:O	1:A:688:LYS:HB2	2.11	0.49
1:A:223:THR:HG23	4:A:907:HOH:O	2.11	0.49
1:A:684:ARG:HA	1:A:688:LYS:H	1.77	0.49
1:A:359:VAL:O	1:A:362:ASN:N	2.45	0.49
1:A:416:VAL:HG13	1:A:417:SER:N	2.27	0.49
1:A:700:ILE:HG12	1:A:733:CYS:C	2.32	0.49
1:A:581:TYR:HE1	1:A:630:SER:HB2	1.69	0.49
1:A:431:ILE:HG22	1:A:432:LEU:CD1	2.42	0.49
1:A:541:PHE:O	1:A:545:MSE:HB2	2.13	0.49
1:A:558:LEU:HB2	1:A:604:ILE:HG12	1.94	0.49
1:A:587:ILE:CG2	1:A:634:THR:HG23	2.43	0.49
1:A:657:ILE:CD1	1:A:687:VAL:HG21	2.43	0.49
1:A:679:LEU:O	1:A:682:VAL:HG13	2.12	0.49
1:A:414:THR:HG22	1:A:418:ALA:HB3	1.95	0.49
1:A:463:TYR:HA	1:A:466:ALA:CB	2.41	0.49
1:A:464:VAL:HG13	1:A:465:LYS:HE2	1.94	0.49
1:A:748:LYS:NZ	1:A:748:LYS:HB2	2.28	0.49
1:A:341:THR:C	1:A:343:LEU:N	2.65	0.49
1:A:422:ALA:C	1:A:424:GLN:N	2.65	0.49
1:A:468:LYS:O	1:A:472:LYS:HG3	2.13	0.49
1:A:89:ILE:HG23	1:A:93:VAL:HB	1.95	0.49
1:A:111:LYS:HZ2	1:A:111:LYS:H	1.61	0.49
1:A:239:LEU:O	1:A:239:LEU:HD13	2.13	0.49
1:A:370:GLY:O	1:A:371:GLN:C	2.51	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:VAL:H	1.77	0.49
1:A:760:GLN:N	1:A:760:GLN:NE2	2.60	0.49
1:A:89:ILE:HG22	1:A:90:GLY:N	2.28	0.49
1:A:593:ASP:O	1:A:597:GLY:N	2.45	0.48
1:A:695:PRO:HD2	1:A:718:MSE:CE	2.43	0.48
1:A:30:THR:O	1:A:32:GLU:N	2.46	0.48
1:A:667:VAL:HG21	1:A:728:TRP:CE2	2.48	0.48
1:A:755:LYS:O	1:A:758:ARG:HB3	2.13	0.48
1:A:107:MSE:SE	1:A:123:GLU:OE2	2.81	0.48
1:A:436:THR:HA	1:A:731:PRO:CD	2.44	0.48
1:A:639:GLN:HA	1:A:639:GLN:NE2	2.28	0.48
1:A:319:LYS:O	1:A:320:ASP:CB	2.62	0.48
1:A:359:VAL:O	1:A:360:GLU:C	2.51	0.48
1:A:442:GLN:HB3	1:A:445:GLU:CG	2.43	0.48
1:A:600:GLY:O	1:A:642:THR:HG23	2.13	0.48
1:A:757:ILE:HB	4:A:826:HOH:O	2.13	0.48
1:A:114:ASP:OD1	1:A:296:ARG:NH2	2.46	0.48
1:A:24:PHE:HB2	4:A:848:HOH:O	2.13	0.48
1:A:499:TYR:O	1:A:501:GLY:N	2.46	0.48
1:A:516:GLN:N	4:A:838:HOH:O	2.45	0.48
1:A:486:LEU:O	1:A:555:LYS:HG2	2.13	0.48
1:A:112:TRP:HB2	1:A:117:TYR:HD2	1.78	0.48
1:A:700:ILE:HG12	1:A:733:CYS:H	1.78	0.48
1:A:192:ILE:HG21	1:A:232:THR:HG22	1.96	0.48
1:A:471:ILE:HD13	1:A:549:MSE:HE2	1.94	0.48
1:A:437:ILE:HD11	1:A:731:PRO:O	2.14	0.48
1:A:754:ALA:O	1:A:755:LYS:C	2.52	0.48
1:A:311:GLN:HA	1:A:314:GLU:HG2	1.96	0.48
1:A:526:PRO:HA	4:A:814:HOH:O	2.14	0.48
1:A:484:ASP:O	1:A:552:ARG:HB3	2.13	0.48
1:A:90:GLY:O	1:A:92:ASP:N	2.46	0.48
1:A:64:HIS:HB3	1:A:95:PHE:CZ	2.49	0.48
1:A:62:PHE:CG	1:A:63:ALA:N	2.78	0.48
1:A:609:LEU:HB3	1:A:650:TYR:OH	2.14	0.48
1:A:656:ILE:HG23	1:A:656:ILE:O	2.14	0.48
1:A:30:THR:C	1:A:32:GLU:N	2.67	0.48
1:A:6:VAL:HG13	1:A:326:THR:OG1	2.13	0.48
1:A:588:LYS:HE3	1:A:636:CYS:SG	2.54	0.48
1:A:590:GLU:O	1:A:594:LEU:HD12	2.14	0.48
1:A:672:ASN:CG	1:A:673:SER:H	2.16	0.48
1:A:49:MSE:O	1:A:54:THR:CB	2.62	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:145:LYS:HA	1:A:149:VAL:O	2.13	0.47
1:A:273:LYS:HZ2	1:A:273:LYS:HB3	1.75	0.47
1:A:46:TRP:CE2	1:A:144:ALA:HB2	2.49	0.47
1:A:397:GLY:O	1:A:399:GLN:N	2.47	0.47
1:A:705:ILE:HD13	1:A:705:ILE:N	2.29	0.47
1:A:158:PRO:O	1:A:161:TYR:HB3	2.14	0.47
1:A:205:LEU:O	1:A:240:VAL:HA	2.13	0.47
1:A:333:THR:HG23	1:A:334:ALA:O	2.14	0.47
1:A:547:GLN:HB2	1:A:554:MSE:CB	2.44	0.47
1:A:395:ASN:OD1	1:A:396:GLU:N	2.48	0.47
1:A:436:THR:HA	1:A:731:PRO:HD3	1.96	0.47
1:A:240:VAL:HG22	1:A:261:VAL:CG1	2.44	0.47
1:A:558:LEU:HD12	1:A:604:ILE:CD1	2.44	0.47
1:A:723:GLU:HG3	1:A:724:GLN:H	1.79	0.47
1:A:69:LEU:HD21	1:A:97:MSE:HE3	1.96	0.47
1:A:217:GLN:HE21	1:A:217:GLN:H	1.63	0.47
1:A:311:GLN:O	1:A:314:GLU:HG2	2.15	0.47
1:A:335:VAL:HG12	1:A:336:ASP:H	1.78	0.47
1:A:109:MSE:HE1	1:A:518:TYR:CE1	2.50	0.47
1:A:583:ILE:HG22	1:A:583:ILE:O	2.14	0.47
1:A:647:HIS:HE2	1:A:649:CYS:HG	1.41	0.47
1:A:59:SER:HB3	1:A:151:THR:CB	2.44	0.47
1:A:432:LEU:CD1	1:A:727:LEU:HB3	2.45	0.47
1:A:69:LEU:HD13	1:A:94:TYR:CE1	2.50	0.47
1:A:510:THR:HG22	1:A:524:LYS:HD3	1.97	0.47
1:A:559:THR:HG22	1:A:559:THR:O	2.15	0.47
1:A:622:PHE:O	1:A:625:ASP:HB3	2.14	0.47
1:A:744:LYS:C	1:A:746:ALA:N	2.67	0.47
1:A:667:VAL:HG21	1:A:728:TRP:NE1	2.30	0.47
1:A:573:ASP:N	1:A:573:ASP:OD1	2.48	0.46
1:A:602:ILE:O	1:A:644:ILE:HG23	2.15	0.46
1:A:680:LEU:O	1:A:683:PHE:HD2	1.98	0.46
1:A:700:ILE:HG13	1:A:733:CYS:H	1.79	0.46
1:A:204:GLN:HG3	1:A:239:LEU:CD1	2.45	0.46
1:A:347:ILE:O	1:A:350:TRP:HB2	2.15	0.46
1:A:471:ILE:HD12	1:A:474:VAL:HB	1.97	0.46
1:A:4:HIS:HE1	1:A:6:VAL:HG12	1.80	0.46
1:A:547:GLN:NE2	1:A:547:GLN:HA	2.28	0.46
1:A:191:VAL:CG1	1:A:195:LEU:HD11	2.37	0.46
1:A:492:GLU:C	1:A:493:ARG:HG3	2.35	0.46
1:A:18:LYS:CE	1:A:521:ARG:NH2	2.78	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:698:TYR:HE2	1:A:731:PRO:HG3	1.79	0.46
1:A:751:VAL:O	1:A:755:LYS:HG3	2.15	0.46
1:A:12:GLY:HA2	4:A:966:HOH:O	2.15	0.46
1:A:322:LEU:C	1:A:322:LEU:HD13	2.35	0.46
1:A:341:THR:CG2	1:A:342:LYS:NZ	2.79	0.46
1:A:468:LYS:HG2	1:A:472:LYS:NZ	2.30	0.46
1:A:507:PHE:N	1:A:529:TYR:CE2	2.83	0.46
1:A:717:LYS:O	1:A:721:VAL:HG22	2.15	0.46
1:A:723:GLU:HG3	1:A:724:GLN:N	2.30	0.46
1:A:421:ASP:O	1:A:424:GLN:HB2	2.16	0.46
1:A:699:ASP:OD1	1:A:732:ASP:OD1	2.33	0.46
1:A:739:LYS:HB3	1:A:742:GLU:HG2	1.97	0.46
1:A:193:THR:HA	1:A:196:LYS:HB2	1.98	0.46
1:A:185:LEU:CD2	1:A:228:GLU:HG2	2.37	0.46
1:A:555:LYS:HA	1:A:601:VAL:O	2.15	0.46
1:A:558:LEU:HD12	1:A:604:ILE:HD11	1.98	0.46
1:A:411:ARG:NH2	1:A:419:ARG:CD	2.78	0.46
1:A:581:TYR:HE1	1:A:630:SER:CB	2.28	0.46
1:A:247:ILE:CD1	1:A:247:ILE:H	2.20	0.46
1:A:255:LEU:C	1:A:257:SER:H	2.18	0.46
1:A:529:TYR:CD1	1:A:530:GLY:N	2.83	0.46
1:A:558:LEU:HD12	1:A:604:ILE:CG1	2.46	0.46
1:A:757:ILE:CD1	1:A:757:ILE:H	2.15	0.46
1:A:9:PRO:HA	1:A:331:LEU:HD23	1.98	0.46
1:A:195:LEU:HD12	1:A:195:LEU:H	1.81	0.46
1:A:283:PRO:O	1:A:284:GLU:O	2.33	0.46
1:A:340:GLU:OE2	1:A:512:ASN:N	2.37	0.46
1:A:405:LEU:HD13	1:A:405:LEU:N	2.31	0.46
1:A:525:PRO:HB3	1:A:568:SER:HA	1.98	0.46
1:A:670:ILE:CD1	1:A:670:ILE:N	2.76	0.46
1:A:711:ILE:O	1:A:715:VAL:HG23	2.16	0.46
1:A:372:LYS:O	1:A:374:GLU:N	2.49	0.46
1:A:416:VAL:C	1:A:418:ALA:H	2.18	0.46
1:A:495:ASP:HB3	1:A:498:GLU:CB	2.45	0.46
1:A:679:LEU:O	1:A:682:VAL:HG22	2.16	0.46
1:A:254:THR:O	1:A:258:LEU:HG	2.15	0.45
1:A:9:PRO:HG3	1:A:331:LEU:HA	1.98	0.45
1:A:36:LYS:HB2	4:A:1010:HOH:O	2.15	0.45
1:A:653:PHE:CZ	1:A:670:ILE:HG21	2.49	0.45
1:A:189:LYS:O	1:A:190:GLU:C	2.55	0.45
1:A:254:THR:HG23	4:A:1055:HOH:O	2.15	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:240:VAL:HG22	1:A:261:VAL:HG11	1.98	0.45
1:A:437:ILE:HG12	1:A:731:PRO:HB2	1.98	0.45
1:A:217:GLN:NE2	1:A:217:GLN:H	2.14	0.45
1:A:250:GLU:HB2	4:A:856:HOH:O	2.16	0.45
1:A:310:LEU:CD1	1:A:364:LEU:HD13	2.47	0.45
1:A:492:GLU:O	1:A:493:ARG:HG3	2.16	0.45
1:A:577:HIS:HA	1:A:580:CYS:HB3	1.99	0.45
1:A:661:ILE:HG13	1:A:689:TYR:CD1	2.50	0.45
1:A:361:VAL:O	1:A:365:ALA:HB2	2.17	0.45
1:A:373:ASP:C	1:A:375:ALA:N	2.69	0.45
1:A:408:SER:HA	1:A:629:HIS:CE1	2.51	0.45
1:A:411:ARG:NH1	1:A:644:ILE:HD13	2.31	0.45
1:A:79:PRO:HB3	1:A:80:PRO:HD2	1.99	0.45
1:A:13:PRO:HD3	4:A:966:HOH:O	2.16	0.45
1:A:50:SER:HB3	1:A:57:ILE:CD1	2.47	0.45
1:A:350:TRP:HH2	1:A:390:SER:CB	2.29	0.45
1:A:373:ASP:OD2	1:A:375:ALA:HB3	2.17	0.45
1:A:516:GLN:HG2	1:A:518:TYR:H	1.80	0.45
1:A:610:ARG:NH2	1:A:653:PHE:HA	2.27	0.45
1:A:705:ILE:CD1	1:A:705:ILE:H	2.29	0.45
1:A:337:LEU:HB3	1:A:356:GLN:CD	2.38	0.45
1:A:632:ARG:HH11	1:A:632:ARG:CB	2.29	0.45
1:A:656:ILE:HG12	1:A:656:ILE:O	2.17	0.45
1:A:186:PRO:O	1:A:190:GLU:HG2	2.17	0.45
1:A:220:GLN:O	1:A:222:PHE:N	2.49	0.45
1:A:420:LEU:HA	1:A:423:GLN:OE1	2.17	0.45
1:A:434:THR:HA	1:A:729:VAL:HB	1.99	0.45
1:A:577:HIS:HB3	1:A:626:TRP:CG	2.52	0.45
1:A:684:ARG:HA	1:A:688:LYS:N	2.32	0.45
1:A:105:PRO:HA	4:A:877:HOH:O	2.16	0.45
1:A:419:ARG:HD3	4:A:888:HOH:O	2.16	0.45
1:A:652:HIS:NE2	1:A:679:LEU:HD13	2.32	0.45
1:A:101:ASN:HD22	1:A:101:ASN:C	2.19	0.44
1:A:272:THR:HA	1:A:275:LEU:CD1	2.47	0.44
1:A:437:ILE:HG13	1:A:731:PRO:HB2	1.99	0.44
1:A:59:SER:O	1:A:60:ASN:CB	2.64	0.44
1:A:417:SER:HA	1:A:420:LEU:HD12	1.99	0.44
1:A:489:GLY:C	1:A:491:PRO:HD3	2.37	0.44
1:A:700:ILE:HG23	1:A:731:PRO:HB3	1.99	0.44
1:A:739:LYS:CG	1:A:740:TYR:N	2.80	0.44
1:A:299:TRP:HA	1:A:351:MSE:HA	1.98	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:335:VAL:HG23	4:A:884:HOH:O	2.16	0.44
1:A:357:LYS:O	1:A:360:GLU:HB2	2.17	0.44
1:A:471:ILE:O	1:A:475:VAL:HG23	2.18	0.44
1:A:638:VAL:CG2	1:A:642:THR:HB	2.47	0.44
1:A:653:PHE:CE2	1:A:670:ILE:HG21	2.52	0.44
1:A:176:GLU:O	1:A:178:LEU:N	2.50	0.44
1:A:318:GLY:C	1:A:320:ASP:N	2.70	0.44
1:A:581:TYR:CE1	1:A:633:ILE:HD12	2.52	0.44
1:A:6:VAL:HG22	1:A:329:SER:HA	2.00	0.44
1:A:341:THR:HG23	1:A:342:LYS:H	1.83	0.44
1:A:576:ARG:HG3	3:A:771:SO4:O1	2.17	0.44
1:A:159:VAL:HG11	1:A:222:PHE:CD2	2.53	0.44
1:A:364:LEU:O	1:A:368:LEU:HB2	2.17	0.44
1:A:62:PHE:O	1:A:63:ALA:CB	2.65	0.44
1:A:680:LEU:O	1:A:683:PHE:CD2	2.71	0.44
1:A:399:GLN:C	1:A:399:GLN:NE2	2.69	0.44
1:A:495:ASP:HB3	1:A:498:GLU:HB2	1.99	0.44
1:A:650:TYR:HB2	1:A:653:PHE:HD2	1.82	0.44
1:A:35:GLN:CA	1:A:35:GLN:HE21	2.17	0.44
1:A:350:TRP:CZ2	1:A:386:SER:HB2	2.48	0.44
1:A:471:ILE:HD13	1:A:549:MSE:CE	2.48	0.44
1:A:307:LEU:HD12	1:A:377:PHE:HE2	1.83	0.44
1:A:345:ASP:O	1:A:347:ILE:N	2.51	0.44
1:A:653:PHE:HB2	1:A:656:ILE:HG23	1.98	0.44
1:A:107:MSE:CE	1:A:120:ILE:HG21	2.35	0.43
1:A:305:ALA:O	1:A:308:SER:HB3	2.18	0.43
1:A:331:LEU:C	1:A:331:LEU:HD13	2.39	0.43
1:A:395:ASN:C	1:A:397:GLY:N	2.70	0.43
1:A:519:GLY:HA3	4:A:829:HOH:O	2.17	0.43
1:A:67:GLN:HG2	1:A:68:VAL:HG23	2.00	0.43
1:A:111:LYS:HZ2	1:A:111:LYS:CB	2.31	0.43
1:A:307:LEU:HD21	1:A:368:LEU:HG	1.99	0.43
1:A:503:GLN:O	1:A:504:LEU:HD23	2.18	0.43
1:A:684:ARG:NH1	1:A:684:ARG:HG2	2.32	0.43
1:A:687:VAL:O	1:A:688:LYS:CB	2.66	0.43
1:A:64:HIS:HB3	1:A:95:PHE:HZ	1.82	0.43
1:A:329:SER:O	1:A:331:LEU:N	2.45	0.43
1:A:362:ASN:HA	1:A:365:ALA:HB3	1.99	0.43
1:A:68:VAL:HG21	1:A:119:TYR:CG	2.53	0.43
1:A:157:GLY:O	1:A:158:PRO:C	2.54	0.43
1:A:15:ARG:O	1:A:18:LYS:HB3	2.18	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:126:PRO:HG3	1:A:175:PHE:CE1	2.53	0.43
1:A:220:GLN:O	1:A:221:ALA:C	2.56	0.43
1:A:521:ARG:CA	1:A:521:ARG:HE	2.23	0.43
1:A:102:ALA:O	1:A:103:SER:HB3	2.18	0.43
1:A:477:LEU:HD13	1:A:487:VAL:H	1.82	0.43
1:A:546:ALA:O	1:A:548:SER:N	2.50	0.43
1:A:562:VAL:HG23	1:A:606:GLU:OE2	2.18	0.43
1:A:636:CYS:HB2	4:A:847:HOH:O	2.18	0.43
1:A:725:ASN:C	1:A:726:ILE:HG12	2.37	0.43
1:A:79:PRO:HB2	1:A:82:TYR:CE2	2.53	0.43
1:A:739:LYS:HG2	1:A:740:TYR:H	1.83	0.43
1:A:387:ARG:C	1:A:389:SER:H	2.22	0.43
1:A:562:VAL:CG2	1:A:606:GLU:OE2	2.66	0.43
1:A:340:GLU:OE2	1:A:511:ALA:HB3	2.18	0.43
1:A:406:LYS:HB3	1:A:406:LYS:HE2	1.80	0.43
1:A:476:ASP:OD1	1:A:476:ASP:C	2.57	0.43
1:A:145:LYS:C	1:A:147:LEU:H	2.22	0.43
1:A:329:SER:C	1:A:331:LEU:N	2.70	0.43
1:A:407:GLY:O	1:A:408:SER:O	2.37	0.43
1:A:475:VAL:O	1:A:479:GLU:HG2	2.19	0.43
1:A:610:ARG:O	1:A:613:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:632:ARG:HB2	1:A:632:ARG:NH1	2.34	0.43
1:A:341:THR:CG2	1:A:342:LYS:N	2.82	0.43
1:A:37:VAL:O	1:A:40:ASP:N	2.52	0.43
1:A:430:PRO:HB2	1:A:758:ARG:HH22	1.84	0.43
1:A:534:ARG:HH21	1:A:537:ALA:N	2.16	0.43
1:A:647:HIS:C	1:A:648:MSE:HG3	2.39	0.43
1:A:680:LEU:HD23	1:A:683:PHE:HE2	1.84	0.43
1:A:120:ILE:HG22	4:A:834:HOH:O	2.18	0.42
1:A:697:VAL:O	1:A:698:TYR:CB	2.63	0.42
1:A:77:ALA:O	1:A:78:VAL:C	2.58	0.42
1:A:170:GLY:O	1:A:171:VAL:C	2.58	0.42
1:A:481:LEU:O	1:A:482:ASP:CB	2.66	0.42
1:A:521:ARG:CA	1:A:521:ARG:NE	2.68	0.42
1:A:18:LYS:HE2	1:A:521:ARG:NH2	2.35	0.42
1:A:521:ARG:NH2	4:A:997:HOH:O	2.52	0.42
1:A:560:GLY:O	1:A:564:ILE:HG13	2.19	0.42
1:A:605:ASP:HA	1:A:647:HIS:HB3	2.01	0.42
1:A:689:TYR:O	1:A:690:GLY:C	2.57	0.42
1:A:689:TYR:CD2	1:A:691:ALA:HB3	2.53	0.42
1:A:162:LEU:O	1:A:165:SER:N	2.50	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:181:LEU:HA	1:A:181:LEU:HD23	1.82	0.42
1:A:528:ILE:N	1:A:528:ILE:HD12	2.34	0.42
1:A:631:PHE:O	1:A:634:THR:HB	2.19	0.42
1:A:698:TYR:CD1	1:A:698:TYR:C	2.92	0.42
1:A:708:SER:HB2	1:A:749:ASN:HB3	2.01	0.42
1:A:311:GLN:O	1:A:314:GLU:N	2.50	0.42
1:A:269:VAL:CG2	1:A:327:SER:HB3	2.50	0.42
1:A:341:THR:O	1:A:343:LEU:N	2.52	0.42
1:A:481:LEU:HD13	1:A:751:VAL:CG1	2.50	0.42
1:A:541:PHE:O	1:A:545:MSE:N	2.52	0.42
1:A:607:ALA:HB1	1:A:649:CYS:SG	2.59	0.42
1:A:388:ARG:HB2	4:A:831:HOH:O	2.20	0.42
1:A:468:LYS:O	1:A:472:LYS:NZ	2.41	0.42
1:A:594:LEU:HB2	1:A:602:ILE:CD1	2.49	0.42
1:A:730:ASN:HB2	1:A:731:PRO:CD	2.49	0.42
1:A:79:PRO:HB2	1:A:82:TYR:HD2	1.80	0.42
1:A:273:LYS:CB	1:A:273:LYS:NZ	2.76	0.42
1:A:341:THR:CG2	1:A:342:LYS:HZ2	2.33	0.42
1:A:690:GLY:O	1:A:691:ALA:HB2	2.19	0.42
1:A:181:LEU:HB2	1:A:182:PRO:HD3	2.02	0.42
1:A:37:VAL:O	1:A:38:SER:C	2.58	0.42
1:A:217:GLN:NE2	1:A:217:GLN:N	2.68	0.42
1:A:373:ASP:HB3	1:A:376:LEU:HG	2.02	0.42
1:A:380:ASN:C	1:A:382:ALA:N	2.73	0.42
1:A:501:GLY:C	1:A:503:GLN:H	2.22	0.42
1:A:615:LEU:HA	4:A:914:HOH:O	2.19	0.42
1:A:78:VAL:HG11	1:A:84:TYR:CG	2.55	0.42
1:A:119:TYR:OH	1:A:164:LEU:O	2.36	0.42
1:A:211:VAL:HG12	1:A:247:ILE:HG13	2.01	0.42
1:A:350:TRP:CZ2	1:A:387:ARG:HA	2.54	0.42
1:A:423:GLN:HE21	1:A:643:GLN:CA	2.33	0.42
1:A:500:PHE:CD1	1:A:538:MSE:CE	3.03	0.42
1:A:669:THR:C	1:A:670:ILE:HG23	2.40	0.42
1:A:434:THR:HG22	1:A:729:VAL:HB	2.01	0.42
1:A:286:LYS:HD3	1:A:286:LYS:HA	1.88	0.42
1:A:297:ASN:HB3	1:A:298:ILE:H	1.71	0.42
1:A:416:VAL:HG23	1:A:419:ARG:NH2	2.34	0.42
1:A:513:GLY:O	1:A:524:LYS:HG3	2.20	0.42
1:A:557:MSE:SE	1:A:603:GLN:NE2	3.03	0.42
1:A:609:LEU:HD23	1:A:650:TYR:CE2	2.33	0.42
1:A:709:GLU:H	1:A:709:GLU:HG3	1.57	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:18:LYS:HE3	1:A:521:ARG:NH2	2.34	0.41
1:A:501:GLY:O	1:A:503:GLN:N	2.47	0.41
1:A:54:THR:CG2	1:A:57:ILE:HG12	2.50	0.41
1:A:581:TYR:O	1:A:584:ALA:HB3	2.20	0.41
1:A:65:TYR:CD1	1:A:98:ALA:HB1	2.55	0.41
1:A:303:PHE:CD1	1:A:380:ASN:ND2	2.88	0.41
1:A:675:SER:HB3	1:A:676:ASP:H	1.69	0.41
1:A:693:ILE:HD11	1:A:695:PRO:HG3	2.02	0.41
1:A:205:LEU:HA	1:A:205:LEU:HD23	1.87	0.41
1:A:313:LEU:C	1:A:315:GLY:N	2.73	0.41
1:A:49:MSE:O	1:A:54:THR:HB	2.20	0.41
1:A:760:GLN:N	1:A:760:GLN:CD	2.73	0.41
1:A:11:MSE:HE3	4:A:903:HOH:O	2.20	0.41
1:A:264:PHE:N	1:A:264:PHE:CD2	2.88	0.41
1:A:35:GLN:CA	1:A:35:GLN:NE2	2.83	0.41
1:A:617:LYS:C	1:A:619:GLU:N	2.74	0.41
1:A:633:ILE:CG2	1:A:633:ILE:O	2.62	0.41
1:A:635:ASN:O	1:A:638:VAL:HG12	2.20	0.41
1:A:647:HIS:HA	1:A:669:THR:HG22	2.02	0.41
1:A:158:PRO:O	1:A:159:VAL:C	2.59	0.41
1:A:239:LEU:HD11	1:A:241:GLU:OE2	2.20	0.41
1:A:284:GLU:HB2	1:A:285:GLY:H	1.52	0.41
1:A:301:ASN:HB3	1:A:360:GLU:OE1	2.21	0.41
1:A:604:ILE:CG2	1:A:631:PHE:HE1	2.33	0.41
1:A:576:ARG:HG3	3:A:771:SO4:S	2.60	0.41
1:A:187:ILE:O	1:A:187:ILE:HG22	2.20	0.41
1:A:625:ASP:HB3	1:A:626:TRP:H	1.74	0.41
1:A:667:VAL:CG1	1:A:668:ILE:N	2.83	0.41
1:A:135:HIS:HB3	1:A:138:VAL:CG1	2.50	0.41
1:A:755:LYS:O	1:A:756:LEU:O	2.39	0.41
1:A:270:ARG:NH1	1:A:296:ARG:CZ	2.83	0.41
1:A:327:SER:OG	1:A:328:CYS:N	2.54	0.41
1:A:381:ALA:HA	1:A:384:LEU:CD1	2.51	0.41
1:A:470:GLU:HG2	1:A:491:PRO:HG3	2.01	0.41
1:A:505:SER:OG	1:A:533:SER:HB3	2.20	0.41
1:A:339:ASN:HB3	1:A:512:ASN:HD22	1.85	0.41
1:A:595:GLU:OE1	1:A:638:VAL:HG23	2.21	0.41
1:A:725:ASN:O	1:A:725:ASN:CG	2.59	0.41
1:A:79:PRO:HG2	1:A:107:MSE:SE	2.71	0.41
1:A:111:LYS:HE3	1:A:118:HIS:CD2	2.56	0.41
1:A:176:GLU:C	1:A:178:LEU:N	2.74	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:341:THR:O	1:A:342:LYS:C	2.59	0.41
1:A:424:GLN:O	1:A:427:LEU:O	2.38	0.41
1:A:648:MSE:HE3	1:A:648:MSE:HB2	1.99	0.41
1:A:647:HIS:CE1	1:A:649:CYS:HG	2.33	0.41
1:A:693:ILE:C	1:A:695:PRO:HD3	2.41	0.41
1:A:81:ARG:O	1:A:104:VAL:HG11	2.20	0.41
1:A:286:LYS:O	1:A:321:LYS:HB3	2.20	0.41
1:A:581:TYR:CE1	1:A:630:SER:CB	2.97	0.41
1:A:723:GLU:HG3	1:A:725:ASN:H	1.85	0.41
1:A:411:ARG:HH21	1:A:419:ARG:HD2	1.86	0.41
1:A:534:ARG:NH2	1:A:536:LYS:C	2.74	0.41
1:A:11:MSE:O	1:A:16:GLU:N	2.54	0.40
1:A:136:LYS:O	1:A:137:ALA:C	2.58	0.40
1:A:305:ALA:O	1:A:306:SER:C	2.59	0.40
1:A:430:PRO:HB2	1:A:758:ARG:NH2	2.36	0.40
1:A:431:ILE:O	1:A:432:LEU:C	2.59	0.40
1:A:427:LEU:HD11	1:A:641:SER:O	2.21	0.40
1:A:718:MSE:HG2	1:A:722:LEU:HD11	2.02	0.40
1:A:248:PRO:O	1:A:249:ALA:C	2.60	0.40
1:A:504:LEU:HD21	1:A:538:MSE:SE	2.71	0.40
1:A:506:GLY:O	1:A:528:ILE:HA	2.21	0.40
1:A:610:ARG:N	1:A:650:TYR:OH	2.39	0.40
1:A:664:ASP:N	4:A:1046:HOH:O	2.55	0.40
1:A:715:VAL:O	1:A:718:MSE:HB2	2.21	0.40
1:A:247:ILE:HG22	1:A:251:ALA:HB3	2.03	0.40
1:A:272:THR:O	1:A:275:LEU:HD13	2.21	0.40
1:A:307:LEU:HD12	1:A:377:PHE:CE2	2.56	0.40
1:A:352:ALA:HA	1:A:356:GLN:HG2	2.03	0.40
1:A:123:GLU:HA	1:A:166:LYS:O	2.20	0.40
1:A:557:MSE:HE1	4:A:987:HOH:O	2.21	0.40
1:A:558:LEU:CD1	1:A:591:VAL:HG13	2.38	0.40
1:A:698:TYR:O	1:A:698:TYR:CG	2.73	0.40
1:A:69:LEU:HD23	1:A:72:THR:HB	2.03	0.40
1:A:700:ILE:HG12	1:A:733:CYS:N	2.37	0.40
1:A:175:PHE:CE2	1:A:177:LEU:HA	2.57	0.40
1:A:609:LEU:N	1:A:650:TYR:OH	2.54	0.40
1:A:629:HIS:HA	1:A:632:ARG:CZ	2.52	0.40
1:A:711:ILE:HA	1:A:714:ARG:HB2	2.03	0.40
1:A:78:VAL:HA	1:A:97:MSE:SE	2.72	0.40
1:A:84:TYR:CZ	1:A:86:GLY:CA	3.00	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles

5.3.1 Protein backbone

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	742/765 (97%)	478 (64%)	172 (23%)	92 (12%)	0 1

All (92) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	63	ALA
1	A	79	PRO
1	A	91	LEU
1	A	169	LYS
1	A	171	VAL
1	A	284	GLU
1	A	302	ASP
1	A	408	SER
1	A	412	ARG
1	A	416	VAL
1	A	428	ASN
1	A	481	LEU
1	A	499	TYR
1	A	505	SER
1	A	518	TYR
1	A	599	ILE
1	A	611	GLU
1	A	621	ALA
1	A	633	ILE
1	A	698	TYR
1	A	726	ILE
1	A	756	LEU
1	A	757	ILE
1	A	25	TRP
1	A	31	ALA
1	A	103	SER
1	A	113	PHE
1	A	137	ALA

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	192	ILE
1	A	319	LYS
1	A	320	ASP
1	A	371	GLN
1	A	398	VAL
1	A	415	ASN
1	A	423	GLN
1	A	500	PHE
1	A	502	GLU
1	A	506	GLY
1	A	531	ASP
1	A	540	VAL
1	A	548	SER
1	A	560	GLY
1	A	615	LEU
1	A	672	ASN
1	A	687	VAL
1	A	688	LYS
1	A	696	GLY
1	A	739	LYS
1	A	748	LYS
1	A	158	PRO
1	A	174	SER
1	A	177	LEU
1	A	221	ALA
1	A	306	SER
1	A	317	VAL
1	A	338	ILE
1	A	346	GLU
1	A	352	ALA
1	A	373	ASP
1	A	385	ALA
1	A	414	THR
1	A	482	ASP
1	A	496	MSE
1	A	571	ARG
1	A	625	ASP
1	A	673	SER
1	A	691	ALA
1	A	24	PHE
1	A	60	ASN
1	A	330	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	354	ALA
1	A	484	ASP
1	A	567	TRP
1	A	620	HIS
1	A	684	ARG
1	A	106	ALA
1	A	256	THR
1	A	388	ARG
1	A	483	ILE
1	A	490	GLU
1	A	658	HIS
1	A	393	VAL
1	A	430	PRO
1	A	468	LYS
1	A	532	VAL
1	A	335	VAL
1	A	438	GLY
1	A	564	ILE
1	A	80	PRO
1	A	656	ILE
1	A	668	ILE
1	A	89	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	622/619 (100%)	558 (90%)	64 (10%)	7 25

All (64) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	6	VAL
1	A	10	ARG
1	A	11	MSE
1	A	15	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	33	ASP
1	A	35	GLN
1	A	40	ASP
1	A	48	GLN
1	A	55	LYS
1	A	69	LEU
1	A	99	ARG
1	A	101	ASN
1	A	111	LYS
1	A	121	VAL
1	A	132	TYR
1	A	160	SER
1	A	169	LYS
1	A	176	GLU
1	A	201	THR
1	A	217	GLN
1	A	220	GLN
1	A	228	GLU
1	A	229	LEU
1	A	240	VAL
1	A	243	TYR
1	A	255	LEU
1	A	288	LEU
1	A	307	LEU
1	A	317	VAL
1	A	331	LEU
1	A	347	ILE
1	A	348	LYS
1	A	353	PHE
1	A	386	SER
1	A	399	GLN
1	A	405	LEU
1	A	415	ASN
1	A	436	THR
1	A	476	ASP
1	A	477	LEU
1	A	492	GLU
1	A	507	PHE
1	A	518	TYR
1	A	521	ARG
1	A	542	TRP
1	A	591	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	605	ASP
1	A	611	GLU
1	A	616	ARG
1	A	622	PHE
1	A	640	ASP
1	A	652	HIS
1	A	653	PHE
1	A	670	ILE
1	A	684	ARG
1	A	697	VAL
1	A	698	TYR
1	A	705	ILE
1	A	709	GLU
1	A	725	ASN
1	A	726	ILE
1	A	738	ARG
1	A	740	TYR
1	A	757	ILE

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (19) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	35	GLN
1	A	48	GLN
1	A	101	ASN
1	A	217	GLN
1	A	220	GLN
1	A	311	GLN
1	A	339	ASN
1	A	399	GLN
1	A	415	ASN
1	A	428	ASN
1	A	478	GLN
1	A	547	GLN
1	A	574	GLN
1	A	577	HIS
1	A	639	GLN
1	A	645	HIS
1	A	652	HIS
1	A	654	ASN
1	A	760	GLN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 6 ligands modelled in this entry, 2 are monoatomic - leaving 4 for Mogul analysis.

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	$\# Z > 2$	Counts	RMSZ	$\# Z > 2$
3	SO4	A	771	-	4,4,4	0.26	0	6,6,6	0.06	0
3	SO4	A	769	-	4,4,4	0.27	0	6,6,6	0.09	0
3	SO4	A	770	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.08	0
3	SO4	A	768	-	4,4,4	0.25	0	6,6,6	0.09	0

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

1 monomer is involved in 2 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
3	A	771	SO4	2	0

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 [i](#)

6.1 Protein, DNA and RNA chains [i](#)

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	728/765 (95%)	0.01	17 (2%) 60 43	12, 52, 86, 100	0

All (17) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	721	VAL	3.5
1	A	533	SER	3.5
1	A	481	LEU	3.4
1	A	751	VAL	3.4
1	A	724	GLN	3.3
1	A	483	ILE	3.0
1	A	437	ILE	2.7
1	A	722	LEU	2.5
1	A	702	SER	2.5
1	A	693	ILE	2.3
1	A	558	LEU	2.3
1	A	727	LEU	2.2
1	A	753	ALA	2.1
1	A	734	GLY	2.1
1	A	415	ASN	2.1
1	A	555	LYS	2.1
1	A	469	GLU	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(Å ²)	Q<0.9
3	SO4	A	771	5/5	0.67	0.26	133,134,134,134	0
3	SO4	A	769	5/5	0.76	0.19	124,124,124,125	0
3	SO4	A	768	5/5	0.92	0.16	94,95,95,96	0
3	SO4	A	770	5/5	0.94	0.26	105,105,106,106	0
2	ZN	A	766	1/1	0.95	0.07	65,65,65,65	0
2	ZN	A	767	1/1	0.99	0.17	37,37,37,37	0

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.