Full wwPDB Geometry-Only Validation Report (i)

Feb 11, 2024 – 05:26 PM EST

PDB ID	:	3GAU
Title	:	Solution structure of Human Complement Factor H in 50 mM NaCl buffer
Authors	:	Okemefuna, A.I.; Nan, R.; Gor, J.; Perkins, S.J.
Deposited on	:	2009-02-18
Resolution	:	Not provided

This is a Full wwPDB Geometry-Only 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 (i) symbol.

The types of validation reports are described at
http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types.

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

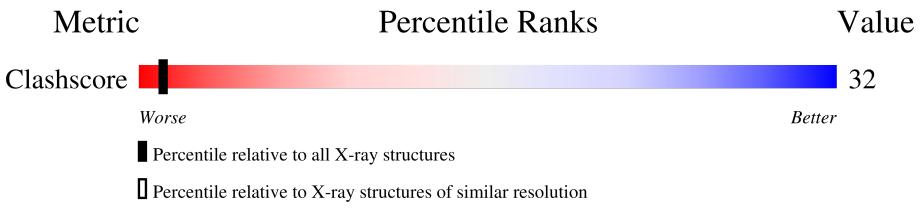
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.36

1 Overall quality at a glance (i)

The following experimental techniques were used to determine the structure:
SOLUTION SCATTERING

The reported resolution of this entry is unknown.

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	-

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

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	1-A	1213	95% 5%
1	2-A	1213	91% 9%
1	3-A	1213	97% .
1	4-A	1213	94% 6%
1	5-A	1213	94% 6%
1	6-A	1213	94% 6%
1	7-A	1213	95% 5%
1	8-A	1213	95% 5%

2 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 9704 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 Complement factor H.

Mol	Chain	Residues	Atoms	ZeroOcc	AltConf	Trace
1	1-A	1213	Total C 1213 1213	0	0	1213
1	2-A	1213	Total C 1213 1213	0	0	1213
1	3-A	1213	Total C 1213 1213	0	0	1213
1	4-A	1213	Total C 1213 1213	0	0	1213
1	5-A	1213	Total C 1213 1213	0	0	1213
1	6-A	1213	Total C 1213 1213	0	0	1213
1	7-A	1213	Total C 1213 1213	0	0	1213
1	8-A	1213	Total C 1213 1213	0	0	1213

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	402	HIS	TYR	variant	UNP P08603

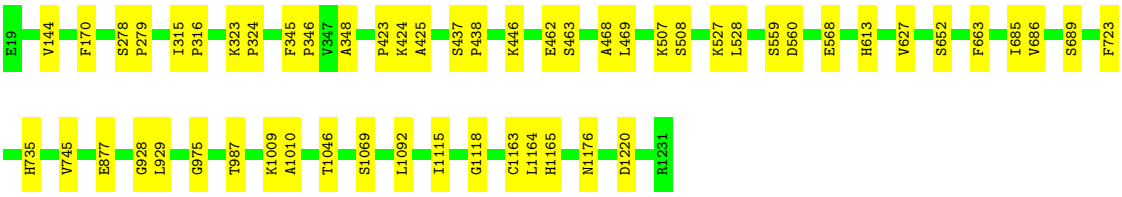
3 Residue-property plots (i)

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

Note EDS was not executed.

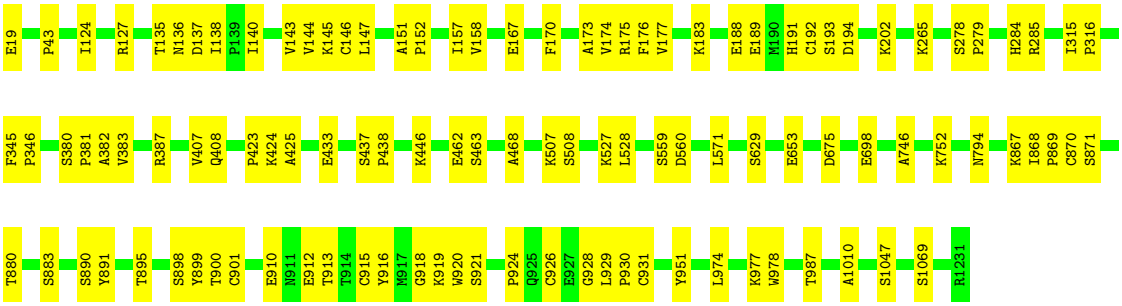
• Molecule 1: Complement factor H

Chain 1-A: 95% 5%



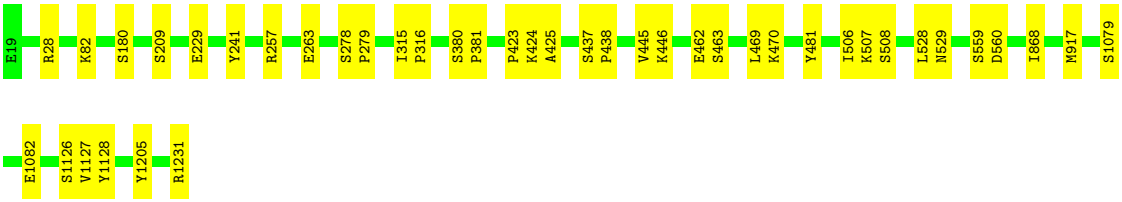
• Molecule 1: Complement factor H

Chain 2-A: 91% 9%



• Molecule 1: Complement factor H

Chain 3-A: 97%



• Molecule 1: Complement factor H

Chain 4-A: 94% 6%

E19 V144 L147 P148 V149 T150 A151 N154 H169 E189 G196 F197 W198 V206 K228 S266 S278 P279 R285 I315 P316 F345 P346 P423 K424 A425 S437 P438 E462 S463 L479 G480 Y481 K507 S508 K527 L528 N529 N543 T544

G545 G554 S559 D560 Y565 E566 R567 E568 H613 F614 V641 E647 E656 P661 P668 N669 K670 F723 A746 K751 N794 P869 A892 T1020 Y1021 Y1022 C1043 R1044 D1045 T1046 N1093 H1165 R1192 Y1205 K1230 R1231

• Molecule 1: Complement factor H

Chain 5-A: 94% 6%

E19 G45 P92 Y118 V143 E153 E207 S266 S278 P279 G287 D288 A301 T302 R303 G304 A307 K308 C309 T310 S311 T312 G313 W314 I315 P316 A317 P318 T321 L322 K323 G333 G334 L335 Y336 F345 P346 V347 A348 V349 G350 K351 Y352 Y353 S354 Y355

Y356 C357 T363 I372 H373 S380 P381 P423 K424 A425 G435 W436 S437 P438 E462 S463 D485 G486 G490 S559 D560 F601 E625 T690 H735 P930 G975 T987 D988 A1010 K1230 R1231

• Molecule 1: Complement factor H

Chain 6-A: 94% 6%

E19 S209 E229 E264 S278 P279 K283 A301 I315 P316 T321 F345 P346 H360 F361 N396 P423 K424 A425 E433 N434 S437 P438 R444 N457 E462 S463 I506 K507 S559 D560 E568 H613 T690 H735 K752

S755 S756 I759 N767 K768 K769 N794 W797 Q809 G856 P869 H878 G918 G928 L929 G975 T987 A1019 T1020 Y1021 Y1022 N1034 C1043 R1044 D1045 T1046 S1047 S1069 R1072 V1073 E1087 E1088 C1091 G1094 N1095 E1098 R1231

• Molecule 1: Complement factor H

Chain 7-A: 95% 5%

E19 P92 V144 I208 S209 E229 S278 P279 I315 P316 K323 F345 P346 V347 A348 V349 S380 P381 L422 P423 K424 A425 Q426 W436 S437 P438 R441 C442 K446 E462 S463 S491 G495 S500 S508 K527 S559 D560 F723

V745 C753 K768 F771 D772 H773 N774 S775 W797 D798 P799 N802 C803 S804 P930 C931 K932 G975 D988 K1009 A1027 A1229 K1230 R1231

• Molecule 1: Complement factor H

Chain 8-A: 95% 5%

E19 F93 V143 E153 N154 V206 E207 K265 S278 P279 R285 I315 P316 K331 F345 P346 R387 P423 K424 A425 S437 P438 E462 S463 N543 S559 D560 Y565 E566 R567 E568 H613 N638 V686 T690 H735 I868

Y891 A892 H893 M917 Y1021 Y1022 C1043 R1044 D1045 T1046 P1130 A1131 L1141 Y1142 C1163 L1164 H1165 W1219 D1220 R1231

4 Model quality (i)

4.1 Standard geometry (i)

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).

There are no protein, RNA or DNA chains available to summarize Z scores of covalent bonds and angles.

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

4.2 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	1-A	1213	0	0	30	0
1	2-A	1213	0	0	68	0
1	3-A	1213	0	0	23	0
1	4-A	1213	0	0	44	0
1	5-A	1213	0	0	45	0
1	6-A	1213	0	0	37	0
1	7-A	1213	0	0	34	0
1	8-A	1213	0	0	31	0
All	All	9704	0	0	312	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 32.

All (312) 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:568:GLU:CA	1:A:613:HIS:CA	1.76	1.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:311:SER:CA	1:A:357:CYS:CA	1.78	1.59
1:A:387:ARG:CA	1:A:408:GLN:CA	1.76	1.58
1:A:480:GLY:CA	1:A:508:SER:CA	1.82	1.55
1:A:265:LYS:CA	1:A:284:HIS:CA	1.83	1.55
1:A:543:ASN:CA	1:A:565:TYR:CA	1.86	1.54
1:A:507:LYS:CA	1:A:528:LEU:CA	1.87	1.51
1:A:151:ALA:CA	1:A:891:TYR:CA	1.87	1.50
1:A:317:ALA:CA	1:A:373:HIS:CA	1.87	1.47
1:A:318:PRO:CA	1:A:352:TYR:CA	1.89	1.47
1:A:302:THR:CA	1:A:349:VAL:CA	1.89	1.47
1:A:445:VAL:CA	1:A:470:LYS:CA	1.92	1.46
1:A:154:ASN:CA	1:A:206:VAL:CA	1.91	1.45
1:A:436:TRP:CA	1:A:768:LYS:CA	1.95	1.45
1:A:446:LYS:CA	1:A:468:ALA:CA	1.93	1.45
1:A:157:ILE:CA	1:A:870:CYS:CA	1.91	1.45
1:A:426:GLN:CA	1:A:772:ASP:CA	1.95	1.44
1:A:987:THR:CA	1:A:1010:ALA:CA	1.94	1.43
1:A:545:GLY:CA	1:A:565:TYR:CA	1.95	1.43
1:A:154:ASN:CA	1:A:206:VAL:CA	1.97	1.43
1:A:146:CYS:CA	1:A:899:TYR:CA	1.96	1.42
1:A:1022:TYR:CA	1:A:1045:ASP:CA	1.95	1.42
1:A:481:TYR:CA	1:A:507:LYS:CA	1.99	1.40
1:A:323:LYS:CA	1:A:349:VAL:CA	1.98	1.40
1:A:1046:THR:CA	1:A:1093:ASN:CA	1.95	1.40
1:A:19:GLU:CA	1:A:486:GLY:CA	1.97	1.39
1:A:145:LYS:CA	1:A:899:TYR:CA	2.02	1.38
1:A:507:LYS:CA	1:A:529:ASN:CA	2.02	1.37
1:A:601:PHE:CA	1:A:625:GLU:CA	2.03	1.37
1:A:302:THR:CA	1:A:350:GLY:CA	2.02	1.36
1:A:929:LEU:CA	1:A:975:GLY:CA	2.00	1.36
1:A:723:PHE:CA	1:A:746:ALA:CA	2.04	1.34
1:A:301:ALA:CA	1:A:350:GLY:CA	2.05	1.34
1:A:322:LEU:CA	1:A:350:GLY:CA	2.06	1.34
1:A:173:ALA:CA	1:A:921:SER:CA	2.04	1.32
1:A:383:VAL:CA	1:A:408:GLN:CA	2.07	1.32
1:A:769:LYS:CA	1:A:1088:GLU:CA	2.06	1.32
1:A:508:SER:CA	1:A:528:LEU:CA	2.07	1.32
1:A:387:ARG:CA	1:A:407:VAL:CA	2.05	1.32
1:A:751:LYS:CA	1:A:794:ASN:CA	2.06	1.32
1:A:124:ILE:CA	1:A:951:TYR:CA	2.09	1.30
1:A:1020:THR:CA	1:A:1046:THR:CA	2.08	1.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:287:GLY:CA	1:A:334:GLY:CA	2.09	1.30
1:A:1020:THR:CA	1:A:1093:ASN:CA	2.12	1.27
1:A:929:LEU:CA	1:A:975:GLY:CA	2.14	1.26
1:A:136:ASN:CA	1:A:931:CYS:CA	2.13	1.26
1:A:180:SER:CA	1:A:257:ARG:CA	2.13	1.26
1:A:507:LYS:CA	1:A:528:LEU:CA	2.13	1.26
1:A:446:LYS:CA	1:A:469:LEU:CA	2.14	1.25
1:A:543:ASN:CA	1:A:566:GLU:CA	2.14	1.24
1:A:266:SER:CA	1:A:357:CYS:CA	2.14	1.24
1:A:752:LYS:CA	1:A:794:ASN:CA	2.17	1.23
1:A:507:LYS:CA	1:A:528:LEU:CA	2.16	1.23
1:A:1205:TYR:CA	1:A:1231:ARG:CA	2.17	1.22
1:A:144:VAL:CA	1:A:901:CYS:CA	2.16	1.22
1:A:988:ASP:CA	1:A:1010:ALA:CA	2.17	1.21
1:A:361:PHE:CA	1:A:433:GLU:CA	2.18	1.21
1:A:508:SER:CA	1:A:527:LYS:CA	2.19	1.20
1:A:1019:ALA:CA	1:A:1046:THR:CA	2.20	1.19
1:A:1141:LEU:CA	1:A:1220:ASP:CA	2.21	1.19
1:A:149:VAL:CA	1:A:656:GLU:CA	2.21	1.17
1:A:1115:ILE:CA	1:A:1220:ASP:CA	2.22	1.17
1:A:508:SER:CA	1:A:527:LYS:CA	2.22	1.16
1:A:567:ARG:CA	1:A:613:HIS:CA	2.23	1.15
1:A:568:GLU:CA	1:A:614:PHE:CA	2.25	1.14
1:A:175:ARG:CA	1:A:915:CYS:CA	2.25	1.14
1:A:93:PHE:CA	1:A:143:VAL:CA	2.26	1.14
1:A:323:LYS:CA	1:A:348:ALA:CA	2.26	1.12
1:A:309:CYS:CA	1:A:355:TYR:CA	2.29	1.11
1:A:304:GLY:CA	1:A:348:ALA:CA	2.29	1.09
1:A:690:THR:CA	1:A:735:HIS:CA	2.29	1.09
1:A:457:ASN:CA	1:A:506:ILE:CA	2.29	1.09
1:A:265:LYS:CA	1:A:285:ARG:CA	2.31	1.08
1:A:877:GLU:CA	1:A:928:GLY:CA	2.32	1.07
1:A:288:ASP:CA	1:A:335:LEU:CA	2.32	1.07
1:A:891:TYR:CA	1:A:1131:ALA:CA	2.32	1.07
1:A:769:LYS:CA	1:A:1087:GLU:CA	2.33	1.07
1:A:442:CYS:CA	1:A:774:ASN:CA	2.32	1.06
1:A:148:PRO:CA	1:A:656:GLU:CA	2.33	1.06
1:A:446:LYS:CA	1:A:469:LEU:CA	2.34	1.05
1:A:479:LEU:CA	1:A:554:GLY:CA	2.35	1.05
1:A:157:ILE:CA	1:A:871:SER:CA	2.34	1.04
1:A:869:PRO:CA	1:A:918:GLY:CA	2.36	1.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:567:ARG:CA	1:A:613:HIS:CA	2.36	1.04
1:A:265:LYS:CA	1:A:285:ARG:CA	2.37	1.03
1:A:759:ILE:CA	1:A:1094:GLY:CA	2.37	1.02
1:A:987:THR:CA	1:A:1010:ALA:CA	2.38	1.00
1:A:264:GLU:CA	1:A:283:LYS:CA	2.39	0.99
1:A:481:TYR:CA	1:A:528:LEU:CA	2.40	0.99
1:A:437:SER:CA	1:A:768:LYS:CA	2.41	0.99
1:A:360:HIS:CA	1:A:434:ASN:CA	2.41	0.98
1:A:167:GLU:CA	1:A:880:THR:CA	2.42	0.97
1:A:1022:TYR:CA	1:A:1045:ASP:CA	2.43	0.96
1:A:755:SER:CA	1:A:1073:VAL:CA	2.43	0.96
1:A:191:HIS:CA	1:A:913:THR:CA	2.45	0.95
1:A:317:ALA:CA	1:A:352:TYR:CA	2.45	0.94
1:A:189:GLU:CA	1:A:915:CYS:CA	2.44	0.94
1:A:307:ALA:CA	1:A:353:TYR:CA	2.46	0.93
1:A:767:ASN:CA	1:A:1098:GLU:CA	2.47	0.92
1:A:331:LYS:CA	1:A:387:ARG:CA	2.47	0.92
1:A:209:SER:CA	1:A:229:GLU:CA	2.48	0.91
1:A:480:GLY:CA	1:A:528:LEU:CA	2.48	0.91
1:A:135:THR:CA	1:A:977:LYS:CA	2.49	0.90
1:A:174:VAL:CA	1:A:920:TRP:CA	2.49	0.90
1:A:508:SER:CA	1:A:527:LYS:CA	2.49	0.90
1:A:177:VAL:CA	1:A:869:PRO:CA	2.50	0.90
1:A:19:GLU:CA	1:A:43:PRO:CA	2.49	0.89
1:A:127:ARG:CA	1:A:974:LEU:CA	2.51	0.89
1:A:441:ARG:CA	1:A:775:SER:CA	2.51	0.89
1:A:868:ILE:CA	1:A:917:MET:CA	2.52	0.87
1:A:137:ASP:CA	1:A:931:CYS:CA	2.53	0.86
1:A:930:PRO:CA	1:A:975:GLY:CA	2.53	0.86
1:A:543:ASN:CA	1:A:566:GLU:CA	2.53	0.86
1:A:196:GLY:CA	1:A:668:PRO:CA	2.54	0.85
1:A:446:LYS:CA	1:A:468:ALA:CA	2.54	0.85
1:A:424:LYS:CA	1:A:753:CYS:CA	2.55	0.85
1:A:183:LYS:CA	1:A:867:LYS:CA	2.55	0.85
1:A:144:VAL:CA	1:A:900:THR:CA	2.55	0.84
1:A:809:GLN:CA	1:A:856:GLY:CA	2.55	0.84
1:A:209:SER:CA	1:A:229:GLU:CA	2.55	0.84
1:A:312:THR:CA	1:A:363:THR:CA	2.56	0.82
1:A:756:SER:CA	1:A:1091:CYS:CA	2.57	0.82
1:A:188:GLU:CA	1:A:916:TYR:CA	2.58	0.82
1:A:1079:SER:CA	1:A:1127:VAL:CA	2.58	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:323:LYS:CA	1:A:350:GLY:CA	2.58	0.81
1:A:146:CYS:CA	1:A:898:SER:CA	2.58	0.81
1:A:301:ALA:CA	1:A:321:THR:CA	2.58	0.81
1:A:1047:SER:CA	1:A:1069:SER:CA	2.60	0.79
1:A:177:VAL:CA	1:A:918:GLY:CA	2.60	0.79
1:A:507:LYS:CA	1:A:528:LEU:CA	2.60	0.78
1:A:1043:CYS:CA	1:A:1044:ARG:CA	2.61	0.78
1:A:309:CYS:CA	1:A:335:LEU:CA	2.61	0.78
1:A:755:SER:CA	1:A:1072:ARG:CA	2.62	0.77
1:A:1118:GLY:CA	1:A:1165:HIS:CA	2.63	0.77
1:A:500:SER:CA	1:A:802:ASN:CA	2.63	0.76
1:A:1229:ALA:CA	1:A:1231:ARG:CA	2.63	0.76
1:A:144:VAL:CA	1:A:169:HIS:CA	2.63	0.76
1:A:1079:SER:CA	1:A:1128:TYR:CA	2.64	0.76
1:A:304:GLY:CA	1:A:347:VAL:CA	2.65	0.75
1:A:1022:TYR:CA	1:A:1045:ASP:CA	0.75	0.75
1:A:508:SER:CA	1:A:528:LEU:CA	2.66	0.74
1:A:202:LYS:CA	1:A:895:THR:CA	2.66	0.73
1:A:176:PHE:CA	1:A:918:GLY:CA	2.67	0.73
1:A:627:VAL:CA	1:A:652:SER:CA	2.68	0.71
1:A:508:SER:CA	1:A:527:LYS:CA	2.69	0.70
1:A:135:THR:CA	1:A:978:TRP:CA	2.70	0.69
1:A:153:GLU:CA	1:A:207:GLU:CA	2.70	0.69
1:A:144:VAL:CA	1:A:170:PHE:CA	2.70	0.69
1:A:892:ALA:CA	1:A:1131:ALA:CA	2.70	0.69
1:A:1082:GLU:CA	1:A:1126:SER:CA	2.71	0.69
1:A:690:THR:CA	1:A:735:HIS:CA	2.71	0.68
1:A:323:LYS:CA	1:A:349:VAL:CA	2.72	0.68
1:A:310:THR:CA	1:A:333:GLY:CA	2.71	0.67
1:A:638:ASN:CA	1:A:686:VAL:CA	0.67	0.67
1:A:301:ALA:CA	1:A:321:THR:CA	2.73	0.67
1:A:92:PRO:CA	1:A:435:GLY:CA	2.73	0.66
1:A:118:TYR:CA	1:A:143:VAL:CA	2.74	0.66
1:A:208:ILE:CA	1:A:229:GLU:CA	2.73	0.66
1:A:1163:CYS:CA	1:A:1164:LEU:CA	2.74	0.66
1:A:491:SER:CA	1:A:804:SER:CA	2.75	0.64
1:A:481:TYR:CA	1:A:507:LYS:CA	2.76	0.63
1:A:177:VAL:CA	1:A:868:ILE:CA	2.77	0.63
1:A:381:PRO:CA	1:A:433:GLU:CA	2.77	0.63
1:A:241:TYR:CA	1:A:263:GLU:CA	2.77	0.61
1:A:45:GLY:CA	1:A:490:GLY:CA	2.79	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:987:THR:CA	1:A:1010:ALA:CA	2.79	0.61
1:A:323:LYS:CA	1:A:348:ALA:CA	2.78	0.61
1:A:324:PRO:CA	1:A:348:ALA:CA	2.79	0.61
1:A:266:SER:CA	1:A:285:ARG:CA	2.78	0.61
1:A:446:LYS:CA	1:A:798:ASP:CA	2.79	0.60
1:A:893:HIS:CA	1:A:1130:PRO:CA	2.80	0.60
1:A:1046:THR:CA	1:A:1069:SER:CA	2.79	0.60
1:A:147:LEU:CA	1:A:670:LYS:CA	2.81	0.59
1:A:438:PRO:CA	1:A:771:PHE:CA	2.80	0.59
1:A:1043:CYS:CA	1:A:1044:ARG:CA	2.80	0.59
1:A:140:ILE:CA	1:A:928:GLY:CA	2.80	0.59
1:A:506:ILE:CA	1:A:529:ASN:CA	2.81	0.59
1:A:422:LEU:CA	1:A:774:ASN:CA	2.81	0.58
1:A:568:GLU:CA	1:A:613:HIS:CA	2.82	0.58
1:A:988:ASP:CA	1:A:1009:LYS:CA	2.81	0.58
1:A:92:PRO:CA	1:A:144:VAL:CA	2.82	0.58
1:A:158:VAL:CA	1:A:919:LYS:CA	2.82	0.57
1:A:382:ALA:CA	1:A:433:GLU:CA	2.82	0.57
1:A:690:THR:CA	1:A:735:HIS:CA	2.82	0.57
1:A:175:ARG:CA	1:A:920:TRP:CA	2.83	0.57
1:A:151:ALA:CA	1:A:890:SER:CA	2.83	0.57
1:A:209:SER:CA	1:A:229:GLU:CA	2.84	0.56
1:A:1141:LEU:CA	1:A:1219:TRP:CA	2.84	0.56
1:A:124:ILE:CA	1:A:929:LEU:CA	2.84	0.56
1:A:423:PRO:CA	1:A:773:HIS:CA	2.84	0.56
1:A:698:GLU:CA	1:A:746:ALA:CA	2.84	0.55
1:A:559:SER:CA	1:A:560:ASP:CA	2.85	0.55
1:A:192:CYS:CA	1:A:912:GLU:CA	0.55	0.55
1:A:559:SER:CA	1:A:560:ASP:CA	2.84	0.55
1:A:559:SER:CA	1:A:560:ASP:CA	2.84	0.55
1:A:559:SER:CA	1:A:560:ASP:CA	2.84	0.55
1:A:723:PHE:CA	1:A:745:VAL:CA	2.85	0.55
1:A:559:SER:CA	1:A:560:ASP:CA	2.85	0.55
1:A:559:SER:CA	1:A:560:ASP:CA	2.85	0.55
1:A:559:SER:CA	1:A:560:ASP:CA	2.84	0.54
1:A:559:SER:CA	1:A:560:ASP:CA	2.84	0.54
1:A:170:PHE:CA	1:A:924:PRO:CA	2.85	0.54
1:A:629:SER:CA	1:A:675:ASP:CA	2.85	0.54
1:A:495:GLY:CA	1:A:799:PRO:CA	2.86	0.54
1:A:396:ASN:CA	1:A:444:ARG:CA	2.86	0.53
1:A:315:ILE:CA	1:A:316:PRO:CA	2.87	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:315:ILE:CA	1:A:316:PRO:CA	2.87	0.53
1:A:315:ILE:CA	1:A:316:PRO:CA	2.87	0.53
1:A:151:ALA:CA	1:A:641:VAL:CA	2.86	0.53
1:A:315:ILE:CA	1:A:316:PRO:CA	2.87	0.53
1:A:315:ILE:CA	1:A:316:PRO:CA	2.87	0.53
1:A:315:ILE:CA	1:A:316:PRO:CA	2.87	0.53
1:A:154:ASN:CA	1:A:207:GLU:CA	2.87	0.52
1:A:176:PHE:CA	1:A:870:CYS:CA	2.87	0.52
1:A:315:ILE:CA	1:A:316:PRO:CA	2.87	0.52
1:A:315:ILE:CA	1:A:316:PRO:CA	2.87	0.52
1:A:568:GLU:CA	1:A:613:HIS:CA	2.87	0.52
1:A:424:LYS:CA	1:A:425:ALA:CA	2.88	0.52
1:A:278:SER:CA	1:A:279:PRO:CA	2.88	0.52
1:A:930:PRO:CA	1:A:975:GLY:CA	2.87	0.52
1:A:278:SER:CA	1:A:279:PRO:CA	2.88	0.52
1:A:424:LYS:CA	1:A:425:ALA:CA	2.88	0.52
1:A:1205:TYR:CA	1:A:1231:ARG:CA	2.87	0.52
1:A:303:ARG:CA	1:A:349:VAL:CA	2.87	0.52
1:A:424:LYS:CA	1:A:425:ALA:CA	2.88	0.52
1:A:278:SER:CA	1:A:279:PRO:CA	2.88	0.52
1:A:278:SER:CA	1:A:279:PRO:CA	2.88	0.52
1:A:278:SER:CA	1:A:279:PRO:CA	2.88	0.52
1:A:424:LYS:CA	1:A:425:ALA:CA	2.88	0.52
1:A:278:SER:CA	1:A:279:PRO:CA	2.88	0.51
1:A:278:SER:CA	1:A:279:PRO:CA	2.88	0.51
1:A:689:SER:CA	1:A:735:HIS:CA	2.87	0.51
1:A:424:LYS:CA	1:A:425:ALA:CA	2.88	0.51
1:A:424:LYS:CA	1:A:425:ALA:CA	2.88	0.51
1:A:189:GLU:CA	1:A:661:PRO:CA	2.88	0.51
1:A:424:LYS:CA	1:A:425:ALA:CA	2.88	0.51
1:A:1020:THR:CA	1:A:1047:SER:CA	2.88	0.51
1:A:278:SER:CA	1:A:279:PRO:CA	2.88	0.51
1:A:198:TRP:CA	1:A:669:ASN:CA	2.89	0.51
1:A:446:LYS:CA	1:A:797:TRP:CA	2.89	0.51
1:A:424:LYS:CA	1:A:425:ALA:CA	2.88	0.51
1:A:176:PHE:CA	1:A:869:PRO:CA	2.90	0.50
1:A:1142:TYR:CA	1:A:1165:HIS:CA	2.90	0.50
1:A:1092:LEU:CA	1:A:1176:ASN:CA	2.90	0.49
1:A:152:PRO:CA	1:A:891:TYR:CA	2.89	0.49
1:A:987:THR:CA	1:A:1009:LYS:CA	2.90	0.49
1:A:437:SER:CA	1:A:438:PRO:CA	2.91	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:150:THR:CA	1:A:641:VAL:CA	2.90	0.49
1:A:878:HIS:CA	1:A:928:GLY:CA	2.90	0.49
1:A:868:ILE:CA	1:A:917:MET:CA	2.90	0.49
1:A:437:SER:CA	1:A:438:PRO:CA	2.91	0.49
1:A:437:SER:CA	1:A:438:PRO:CA	2.91	0.49
1:A:1230:LYS:CA	1:A:1231:ARG:CA	2.90	0.49
1:A:437:SER:CA	1:A:438:PRO:CA	2.91	0.49
1:A:437:SER:CA	1:A:438:PRO:CA	2.91	0.48
1:A:437:SER:CA	1:A:438:PRO:CA	2.91	0.48
1:A:437:SER:CA	1:A:438:PRO:CA	2.91	0.48
1:A:437:SER:CA	1:A:438:PRO:CA	2.91	0.48
1:A:663:PHE:CA	1:A:685:ILE:CA	2.92	0.48
1:A:723:PHE:CA	1:A:745:VAL:CA	2.92	0.48
1:A:869:PRO:CA	1:A:892:ALA:CA	2.91	0.48
1:A:797:TRP:CA	1:A:1069:SER:CA	2.91	0.48
1:A:423:PRO:CA	1:A:424:LYS:CA	2.93	0.47
1:A:932:LYS:CA	1:A:1027:ALA:CA	2.92	0.47
1:A:663:PHE:CA	1:A:686:VAL:CA	2.92	0.47
1:A:228:LYS:CA	1:A:647:GLU:CA	2.91	0.47
1:A:423:PRO:CA	1:A:424:LYS:CA	2.93	0.47
1:A:1230:LYS:CA	1:A:1231:ARG:CA	2.92	0.47
1:A:423:PRO:CA	1:A:424:LYS:CA	2.93	0.47
1:A:138:ILE:CA	1:A:930:PRO:CA	2.92	0.47
1:A:423:PRO:CA	1:A:424:LYS:CA	2.93	0.47
1:A:423:PRO:CA	1:A:424:LYS:CA	2.93	0.47
1:A:423:PRO:CA	1:A:424:LYS:CA	2.93	0.47
1:A:752:LYS:CA	1:A:794:ASN:CA	2.92	0.47
1:A:987:THR:CA	1:A:1034:ASN:CA	2.92	0.47
1:A:423:PRO:CA	1:A:424:LYS:CA	2.93	0.46
1:A:1021:TYR:CA	1:A:1046:THR:CA	2.93	0.46
1:A:423:PRO:CA	1:A:424:LYS:CA	2.93	0.46
1:A:571:LEU:CA	1:A:653:GLU:CA	2.93	0.46
1:A:759:ILE:CA	1:A:1095:ASN:CA	2.94	0.46
1:A:28:ARG:CA	1:A:82:LYS:CA	2.94	0.46
1:A:314:TRP:CA	1:A:372:ILE:CA	2.94	0.46
1:A:1043:CYS:CA	1:A:1044:ARG:CA	2.94	0.45
1:A:143:VAL:CA	1:A:926:CYS:CA	2.94	0.45
1:A:193:SER:CA	1:A:910:GLU:CA	2.95	0.44
1:A:457:ASN:CA	1:A:507:LYS:CA	2.94	0.44
1:A:194:ASP:CA	1:A:910:GLU:CA	2.96	0.44
1:A:462:GLU:CA	1:A:463:SER:CA	2.96	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:462:GLU:CA	1:A:463:SER:CA	2.96	0.43
1:A:462:GLU:CA	1:A:463:SER:CA	2.96	0.43
1:A:462:GLU:CA	1:A:463:SER:CA	2.96	0.43
1:A:1163:CYS:CA	1:A:1164:LEU:CA	2.96	0.43
1:A:462:GLU:CA	1:A:463:SER:CA	2.96	0.43
1:A:462:GLU:CA	1:A:463:SER:CA	2.96	0.43
1:A:462:GLU:CA	1:A:463:SER:CA	2.96	0.42
1:A:1165:HIS:CA	1:A:1192:ARG:CA	2.98	0.42
1:A:153:GLU:CA	1:A:207:GLU:CA	2.96	0.42
1:A:462:GLU:CA	1:A:463:SER:CA	2.96	0.42
1:A:345:PHE:CA	1:A:346:PRO:CA	2.99	0.41
1:A:147:LEU:CA	1:A:883:SER:CA	2.99	0.41
1:A:19:GLU:CA	1:A:485:ASP:CA	2.99	0.41
1:A:380:SER:CA	1:A:381:PRO:CA	3.00	0.40
1:A:345:PHE:CA	1:A:346:PRO:CA	2.99	0.40
1:A:380:SER:CA	1:A:381:PRO:CA	2.99	0.40
1:A:345:PHE:CA	1:A:346:PRO:CA	2.99	0.40
1:A:380:SER:CA	1:A:381:PRO:CA	2.99	0.40
1:A:345:PHE:CA	1:A:346:PRO:CA	2.99	0.40
1:A:345:PHE:CA	1:A:346:PRO:CA	2.99	0.40
1:A:345:PHE:CA	1:A:346:PRO:CA	2.99	0.40
1:A:345:PHE:CA	1:A:346:PRO:CA	2.99	0.40
1:A:380:SER:CA	1:A:381:PRO:CA	3.00	0.40
1:A:288:ASP:CA	1:A:336:TYR:CA	2.99	0.40

There are no symmetry-related clashes.

4.3 Torsion angles (i)

4.3.1 Protein backbone (i)

There are no protein backbone outliers to report in this entry.

4.3.2 Protein sidechains (i)

There are no protein residues with a non-rotameric sidechain to report in this entry.

4.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

4.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains (i)

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

4.5 Carbohydrates (i)

There are no monosaccharides in this entry.

4.6 Ligand geometry (i)

There are no ligands in this entry.

4.7 Other polymers (i)

There are no such residues in this entry.

4.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.