Full wwPDB X-ray Structure Validation Report (i)

Aug 27, 2023 – 05:17 PM EDT

PDB ID	:	3I7O
Title	:	Crystal Structure of DDB1 in Complex with the H-Box Motif of IQWD1
Authors	:	Li, T.; Robert, E.I.; Breugel, P.C.V.; Strubin, M.; Zheng, N.
Deposited on	:	2009-07-08
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 (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 (1)) were used in the production of this report:

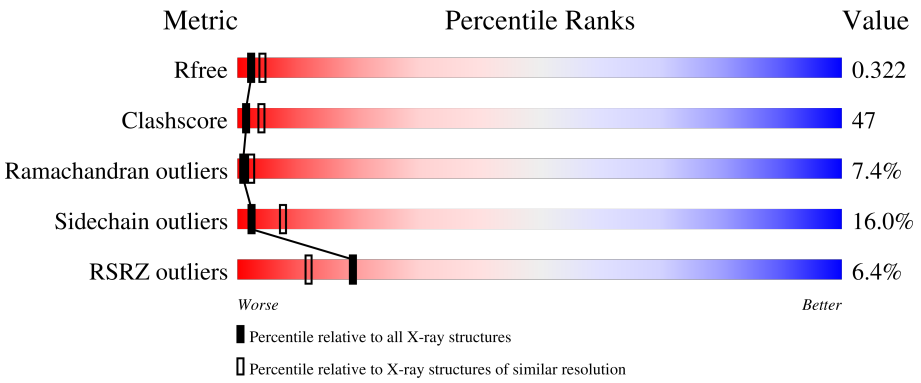
MolProbity	:	4.02b-467
Xtriage (Phenix)	:	1.13
EDS	:	2.35
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Refmac	:	5.8.0158
CCP4	:	7.0.044 (Gargrove)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.35

1 Overall quality at a glance (i)

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))
R_{free}	130704	3140 (2.80-2.80)
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 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% 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	1143	6%; 36%; 46%; 14%; • •
2	B	13	8%; 15%; 54%; 31%

2 Entry composition (i)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 8838 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 DNA damage-binding protein 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	1114	8726	5529	1472	1677	48	0	0	0

There are 6 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-2	GLY	-	expression tag	UNP Q16531
A	-1	SER	-	expression tag	UNP Q16531
A	0	HIS	-	expression tag	UNP Q16531
A	422	TYR	ASP	SEE REMARK 999	UNP Q16531
A	898	ASP	GLU	SEE REMARK 999	UNP Q16531
A	899	VAL	LEU	SEE REMARK 999	UNP Q16531

- Molecule 2 is a protein called IQ motif and WD repeat-containing protein 1.

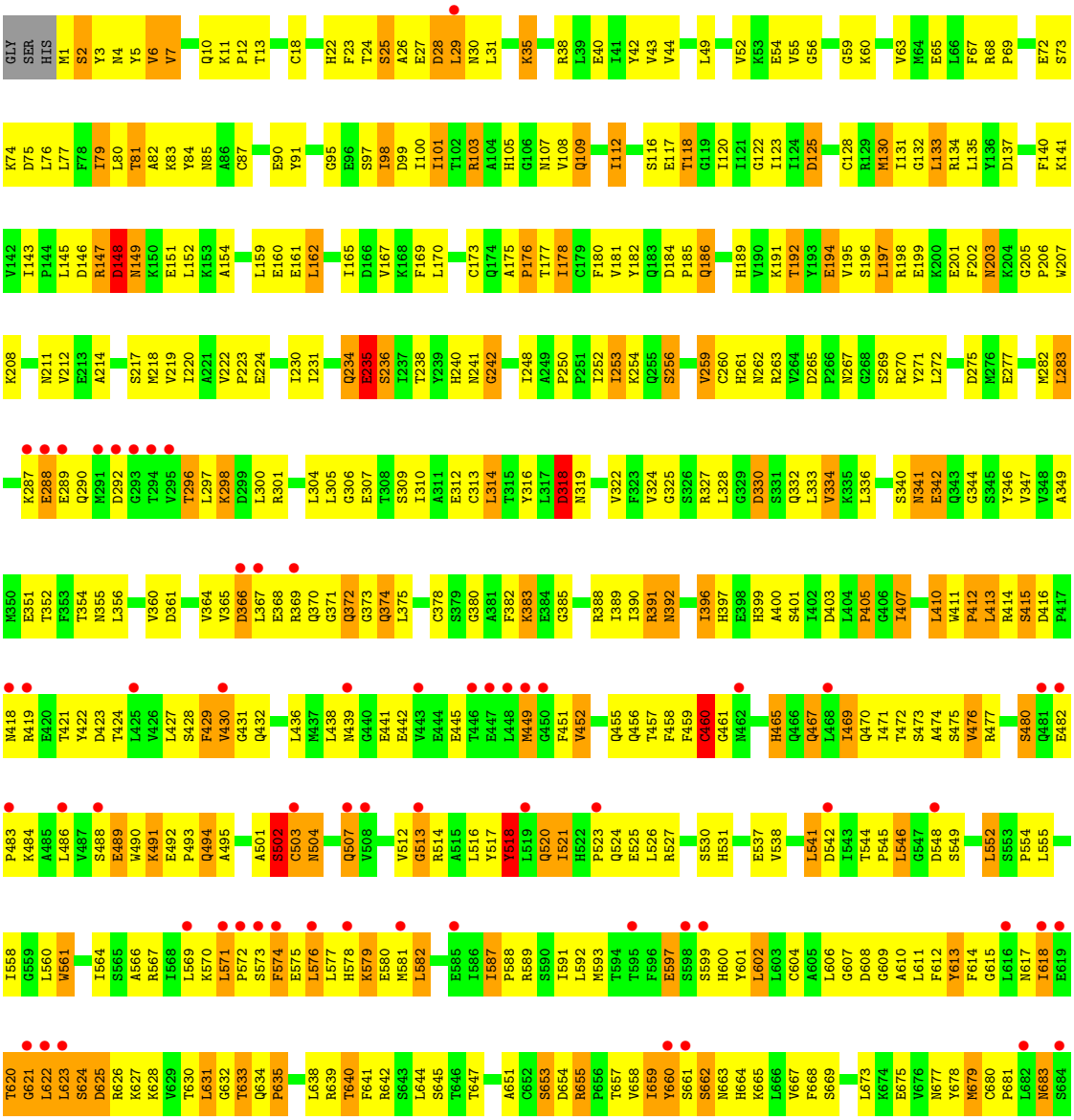
Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O			
2	B	13	112	73	23	16	0	0	0

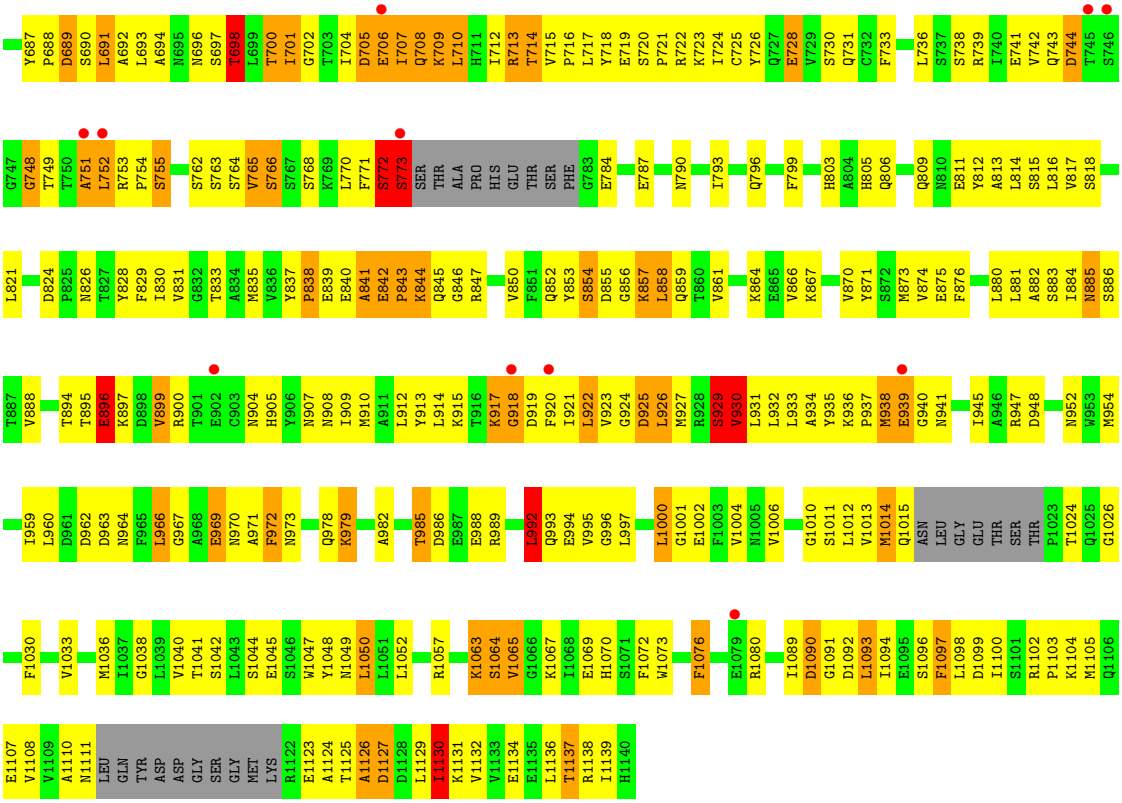
3 Residue-property plots (i)

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 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: DNA damage-binding protein 1

Chain A:





- Molecule 2: IQ motif and WD repeat-containing protein 1

Chain B:

4 Data and refinement statistics (i)

Property	Value	Source
Space group	P 21 21 21	Depositor
Cell constants a, b, c, α, β, γ	63.76Å 131.94Å 181.27Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	44.46 – 2.80 42.86 – 2.64	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	83.3 (44.46-2.80) 78.0 (42.86-2.64)	Depositor EDS
R_{merge}	0.07	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$< I/\sigma(I) >$ [1]	1.54 (at 2.65Å)	Xtriage
Refinement program	REFMAC 5.2.0019	Depositor
R, R_{free}	0.256 , 0.320 0.265 , 0.322	Depositor DCC
R_{free} test set	1714 reflections (4.52%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å^2)	64.7	Xtriage
Anisotropy	0.278	Xtriage
Bulk solvent k_{sol}(e/Å^3), B_{sol}(Å^2)	0.30 , 59.9	EDS
L-test for twinning[2]	$< \|L\| > = 0.49$, $< L^2 > = 0.33$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o,F_c correlation	0.91	EDS
Total number of atoms	8838	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å^2)	83.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.77% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

[1]Intensities estimated from amplitudes.

[2]Theoretical values of $< |L| >$, $< L^2 >$ 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)

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	0.83	3/8885 (0.0%)	0.92	22/12034 (0.2%)
2	B	1.83	1/114 (0.9%)	1.76	1/152 (0.7%)
All	All	0.85	4/8999 (0.0%)	0.94	23/12186 (0.2%)

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	1
2	B	0	1
All	All	0	2

All (4) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	773	SER	C-O	31.00	1.82	1.23
1	A	725	CYS	CB-SG	-7.06	1.70	1.82
2	B	12	TRP	CE3-CZ3	6.25	1.49	1.38
1	A	201	GLU	CD-OE2	5.71	1.31	1.25

All (23) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})
1	A	413	LEU	N-CA-CB	-15.27	79.85	110.40
1	A	29	LEU	N-CA-CB	-14.74	80.92	110.40
1	A	330	ASP	CB-CG-OD1	11.39	128.55	118.30
1	A	930	VAL	N-CA-C	9.05	135.44	111.00
1	A	413	LEU	N-CA-C	8.96	135.20	111.00
1	A	330	ASP	CB-CG-OD2	-8.01	111.09	118.30
1	A	561	TRP	N-CA-C	7.79	132.03	111.00
2	B	13	ASP	CB-CG-OD1	-7.28	111.75	118.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})
1	A	773	SER	CA-C-O	-7.15	105.09	120.10
1	A	412	PRO	N-CA-C	6.72	129.58	112.10
1	A	929	SER	N-CA-C	6.66	128.99	111.00
1	A	514	ARG	N-CA-CB	-6.51	98.88	110.60
1	A	938	MET	N-CA-C	-6.43	93.62	111.00
1	A	162	LEU	CA-CB-CG	6.42	130.06	115.30
1	A	992	LEU	CA-CB-CG	6.39	129.99	115.30
1	A	514	ARG	N-CA-C	-6.24	94.16	111.00
1	A	773	SER	N-CA-C	-6.11	94.50	111.00
1	A	710	LEU	CA-CB-CG	6.09	129.31	115.30
1	A	576	LEU	CA-CB-CG	5.64	128.28	115.30
1	A	513	GLY	N-CA-C	5.48	126.79	113.10
1	A	714	THR	N-CA-C	5.38	125.52	111.00
1	A	922	LEU	CA-CB-CG	5.37	127.66	115.30
1	A	29	LEU	N-CA-C	5.11	124.79	111.00

There are no chirality outliers.

All (2) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	194	GLU	Mainchain
2	B	20	GLY	Peptide

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	8726	0	8706	827	0
2	B	112	0	120	43	0
All	All	8838	0	8826	833	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 47.

All (833) 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:365:VAL:HA	1:A:366:ASP:CB	1.46	1.38
1:A:365:VAL:CA	1:A:366:ASP:HB2	1.54	1.35
1:A:660:TYR:CE1	1:A:707:ILE:HG21	1.66	1.30
1:A:660:TYR:HB3	1:A:667:VAL:CB	1.66	1.25
1:A:660:TYR:CB	1:A:667:VAL:HB	1.74	1.17
1:A:365:VAL:CG1	1:A:367:LEU:HG	1.73	1.17
1:A:773:SER:O	1:A:773:SER:C	1.82	1.16
1:A:613:TYR:HD1	1:A:614:PHE:N	1.44	1.16
1:A:1024:THR:HB	1:A:1041:THR:HG21	1.20	1.15
1:A:368:GLU:HG3	1:A:370:GLN:NE2	1.60	1.15
1:A:493:PRO:O	1:A:494:GLN:HG2	1.45	1.15
1:A:929:SER:CB	1:A:952:ASN:HB2	1.73	1.15
1:A:660:TYR:CD1	1:A:707:ILE:HG21	1.81	1.14
1:A:660:TYR:CD1	1:A:707:ILE:HG12	1.83	1.14
1:A:707:ILE:HG23	1:A:708:GLN:H	0.99	1.11
1:A:288:GLU:OE1	1:A:298:LYS:HB2	1.51	1.10
1:A:587:ILE:HD13	1:A:587:ILE:H	1.13	1.09
1:A:365:VAL:HG11	1:A:367:LEU:CD2	1.81	1.09
1:A:812:TYR:HD1	2:B:15:ARG:NH2	1.51	1.08
1:A:197:LEU:H	1:A:197:LEU:CD2	1.62	1.07
1:A:368:GLU:HG2	1:A:370:GLN:HG3	1.09	1.07
1:A:368:GLU:HG2	1:A:370:GLN:CG	1.85	1.06
1:A:365:VAL:HG13	1:A:366:ASP:C	1.77	1.04
1:A:812:TYR:CE1	2:B:15:ARG:NH1	2.24	1.04
1:A:659:ILE:O	1:A:659:ILE:HG22	1.56	1.04
1:A:969:GLU:HG2	1:A:970:ASN:N	1.72	1.04
1:A:365:VAL:HG11	1:A:367:LEU:HG	1.39	1.03
1:A:365:VAL:HG11	1:A:367:LEU:CG	1.89	1.02
1:A:197:LEU:H	1:A:197:LEU:HD23	0.87	1.02
1:A:969:GLU:CG	1:A:970:ASN:H	1.72	1.02
1:A:626:ARG:O	1:A:627:LYS:HG3	1.59	1.01
1:A:639:ARG:HG3	1:A:640:THR:H	1.25	1.01
1:A:707:ILE:HG23	1:A:708:GLN:N	1.72	1.01
1:A:98:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	1.17	1.01
1:A:482:GLU:HB2	1:A:483:PRO:HD3	1.40	1.01
1:A:2:SER:HB3	1:A:995:VAL:HG23	1.44	1.00
1:A:197:LEU:HD23	1:A:197:LEU:N	1.72	1.00
1:A:929:SER:HB3	1:A:952:ASN:HB2	1.38	1.00
1:A:660:TYR:CG	1:A:707:ILE:HG12	1.97	0.99
1:A:256:SER:HB3	1:A:275:ASP:OD2	1.62	0.99
1:A:929:SER:OG	1:A:952:ASN:HB2	1.60	0.99
1:A:660:TYR:HD2	1:A:667:VAL:HG23	1.25	0.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:910:MET:SD	2:B:10:LEU:HD12	2.03	0.98
1:A:382:PHE:H	1:A:720:SER:HB3	1.24	0.98
1:A:641:PHE:HA	1:A:681:PRO:HG3	1.42	0.97
1:A:365:VAL:CG1	1:A:366:ASP:C	2.32	0.97
1:A:707:ILE:CG2	1:A:708:GLN:H	1.76	0.97
1:A:175:ALA:HB3	1:A:194:GLU:HG2	1.43	0.96
1:A:632:GLY:HA3	1:A:653:SER:HB3	1.46	0.95
1:A:660:TYR:HB3	1:A:667:VAL:HB	0.97	0.95
1:A:103:ARG:HH11	1:A:103:ARG:HB3	1.29	0.95
1:A:365:VAL:HG12	1:A:367:LEU:HG	1.46	0.94
1:A:289:GLU:HG2	1:A:290:GLN:H	1.32	0.93
1:A:396:ILE:HD13	1:A:396:ILE:O	1.68	0.93
1:A:969:GLU:CG	1:A:970:ASN:N	2.30	0.93
1:A:969:GLU:CD	1:A:970:ASN:H	1.72	0.93
1:A:613:TYR:CD1	1:A:614:PHE:N	2.36	0.93
1:A:614:PHE:CE2	1:A:625:ASP:O	2.22	0.93
1:A:838:PRO:HA	2:B:9:HIS:HE2	1.31	0.93
1:A:613:TYR:CD1	1:A:613:TYR:C	2.37	0.93
1:A:25:SER:HB2	1:A:28:ASP:OD1	1.68	0.92
1:A:587:ILE:H	1:A:587:ILE:CD1	1.81	0.92
1:A:632:GLY:HA3	1:A:653:SER:CB	1.99	0.92
1:A:660:TYR:HB2	1:A:707:ILE:HG12	1.50	0.91
1:A:396:ILE:HD11	1:A:673:LEU:HD21	1.52	0.91
1:A:840:GLU:O	2:B:9:HIS:CE1	2.23	0.91
1:A:1024:THR:HB	1:A:1041:THR:CG2	2.00	0.90
1:A:613:TYR:HD1	1:A:613:TYR:C	1.73	0.90
1:A:614:PHE:HE2	1:A:625:ASP:O	1.53	0.89
1:A:713:ARG:CG	1:A:713:ARG:HH11	1.82	0.89
1:A:660:TYR:CD2	1:A:667:VAL:CG2	2.55	0.89
1:A:660:TYR:HB2	1:A:707:ILE:CG1	2.02	0.89
1:A:876:PHE:HZ	1:A:920:PHE:HA	1.35	0.89
1:A:571:LEU:HB3	1:A:572:PRO:HD3	1.55	0.89
1:A:660:TYR:CD2	1:A:667:VAL:HG23	2.07	0.88
1:A:400:ALA:H	1:A:701:ILE:HD11	1.38	0.88
1:A:876:PHE:CZ	1:A:920:PHE:HA	2.09	0.87
1:A:382:PHE:N	1:A:720:SER:HB3	1.90	0.87
1:A:513:GLY:O	1:A:537:GLU:HA	1.74	0.87
1:A:617:ASN:HB2	1:A:621:GLY:H	1.38	0.87
1:A:626:ARG:O	1:A:627:LYS:CG	2.22	0.87
1:A:309:SER:H	1:A:332:GLN:HE22	1.23	0.87
1:A:660:TYR:HB3	1:A:667:VAL:CG2	2.05	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:812:TYR:HE1	2:B:15:ARG:NH1	1.71	0.87
1:A:288:GLU:OE1	1:A:298:LYS:CB	2.23	0.86
1:A:660:TYR:CB	1:A:707:ILE:HG12	2.05	0.86
1:A:644:LEU:HG	1:A:645:SER:H	1.39	0.86
1:A:844:LYS:HE2	1:A:845:GLN:HG2	1.55	0.86
1:A:929:SER:HB3	1:A:952:ASN:CB	2.05	0.86
1:A:469:ILE:HD11	1:A:471:ILE:HG13	1.54	0.86
1:A:289:GLU:HG2	1:A:290:GLN:N	1.90	0.86
1:A:812:TYR:HD1	2:B:15:ARG:HH22	0.86	0.85
1:A:365:VAL:CG1	1:A:367:LEU:CG	2.50	0.85
1:A:368:GLU:CG	1:A:370:GLN:NE2	2.39	0.84
1:A:267:ASN:HD21	1:A:269:SER:HB3	1.42	0.84
1:A:365:VAL:HG13	1:A:366:ASP:O	1.76	0.84
1:A:98:ILE:H	1:A:98:ILE:CD1	1.91	0.84
1:A:771:PHE:O	1:A:772:SER:HB2	1.78	0.84
1:A:969:GLU:HG2	1:A:970:ASN:H	1.31	0.84
1:A:368:GLU:HG3	1:A:370:GLN:HE21	1.40	0.83
1:A:655:ARG:HG3	1:A:655:ARG:HH11	1.43	0.83
1:A:414:ARG:HA	1:A:422:TYR:HA	1.60	0.83
1:A:309:SER:H	1:A:332:GLN:NE2	1.77	0.83
1:A:690:SER:C	1:A:691:LEU:HD23	1.99	0.83
1:A:660:TYR:CD1	1:A:707:ILE:CG2	2.62	0.83
1:A:364:VAL:HG21	1:A:1010:GLY:HA3	1.61	0.82
1:A:744:ASP:N	1:A:748:GLY:O	2.12	0.82
1:A:841:ALA:HA	2:B:9:HIS:ND1	1.95	0.82
1:A:714:THR:O	1:A:716:PRO:HD3	1.81	0.81
1:A:1063:LYS:H	1:A:1063:LYS:HD3	1.45	0.80
1:A:660:TYR:HD2	1:A:667:VAL:CG2	1.94	0.80
1:A:884:ILE:N	1:A:884:ILE:HD12	1.97	0.80
1:A:938:MET:HG2	1:A:939:GLU:H	1.46	0.80
1:A:493:PRO:O	1:A:494:GLN:CG	2.30	0.79
1:A:484:LYS:O	1:A:484:LYS:HG3	1.79	0.79
1:A:660:TYR:CD1	1:A:707:ILE:CG1	2.65	0.79
1:A:396:ILE:CD1	1:A:673:LEU:HD21	2.12	0.79
1:A:742:VAL:O	1:A:749:THR:HA	1.81	0.79
1:A:639:ARG:HG3	1:A:640:THR:N	1.99	0.78
1:A:579:LYS:NZ	1:A:581:MET:SD	2.56	0.78
1:A:659:ILE:O	1:A:659:ILE:CG2	2.30	0.78
1:A:365:VAL:HA	1:A:366:ASP:CG	2.04	0.77
1:A:23:PHE:H	1:A:30:ASN:ND2	1.82	0.77
1:A:838:PRO:HA	2:B:9:HIS:NE2	1.99	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:289:GLU:CG	1:A:290:GLN:H	1.97	0.77
1:A:812:TYR:CD1	2:B:15:ARG:NH2	2.42	0.77
1:A:854:SER:HB2	1:A:857:LYS:HG3	1.66	0.77
1:A:69:PRO:HD2	1:A:72:GLU:HG3	1.65	0.77
1:A:883:SER:C	1:A:884:ILE:HD12	2.05	0.76
1:A:192:THR:HB	1:A:205:GLY:HA3	1.67	0.76
1:A:364:VAL:HG12	1:A:365:VAL:N	1.98	0.76
1:A:883:SER:HB3	1:A:914:LEU:HD11	1.68	0.76
1:A:365:VAL:HG12	1:A:367:LEU:N	2.01	0.76
1:A:365:VAL:O	1:A:373:GLY:HA2	1.85	0.76
1:A:570:LYS:NZ	1:A:572:PRO:HD2	2.00	0.75
1:A:611:LEU:O	1:A:628:LYS:HA	1.85	0.75
1:A:871:TYR:CE2	2:B:11:LEU:HD21	2.22	0.75
1:A:84:TYR:CE2	1:A:135:LEU:HD12	2.20	0.75
1:A:587:ILE:HD13	1:A:587:ILE:N	1.97	0.75
1:A:267:ASN:ND2	1:A:269:SER:HB3	2.01	0.74
1:A:365:VAL:CB	1:A:366:ASP:HB2	2.16	0.74
1:A:612:PHE:CE2	1:A:628:LYS:HB2	2.23	0.74
1:A:660:TYR:CD2	1:A:667:VAL:HG21	2.22	0.74
1:A:894:THR:HB	1:A:896:GLU:HG3	1.70	0.74
1:A:853:TYR:HA	1:A:857:LYS:O	1.88	0.73
1:A:1125:THR:HG22	1:A:1126:ALA:N	2.03	0.73
1:A:55:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD12	1.70	0.73
1:A:385:GLY:HA3	1:A:719:GLU:O	1.88	0.73
1:A:469:ILE:CD1	1:A:471:ILE:HG13	2.17	0.73
1:A:708:GLN:HG3	1:A:710:LEU:O	1.88	0.73
1:A:98:ILE:HD13	1:A:98:ILE:N	1.99	0.73
1:A:197:LEU:CD2	1:A:197:LEU:N	2.36	0.73
1:A:480:SER:HB3	1:A:483:PRO:HD2	1.71	0.73
1:A:610:ALA:CB	1:A:628:LYS:HD2	2.18	0.73
1:A:658:VAL:HG12	1:A:659:ILE:N	2.03	0.73
1:A:713:ARG:HH11	1:A:713:ARG:HG3	1.52	0.72
1:A:923:VAL:HG13	1:A:923:VAL:O	1.89	0.72
1:A:1044:SER:HG	1:A:1047:TRP:HD1	1.32	0.72
1:A:886:SER:O	1:A:908:ASN:HB2	1.89	0.72
1:A:288:GLU:OE1	1:A:298:LYS:CA	2.37	0.72
1:A:482:GLU:HB2	1:A:483:PRO:CD	2.19	0.72
2:B:9:HIS:N	2:B:9:HIS:CD2	2.56	0.72
1:A:367:LEU:HD12	1:A:374:GLN:HG3	1.71	0.72
1:A:722:ARG:HH12	2:B:15:ARG:CZ	2.02	0.72
1:A:1024:THR:CB	1:A:1041:THR:HG21	2.11	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:917:LYS:O	1:A:919:ASP:N	2.23	0.72
1:A:1030:PHE:CZ	1:A:1038:GLY:HA3	2.25	0.72
1:A:235:GLU:HB3	1:A:254:LYS:HG3	1.72	0.72
1:A:602:LEU:HD23	1:A:614:PHE:HB2	1.72	0.72
1:A:920:PHE:HB3	1:A:935:TYR:HB3	1.72	0.71
1:A:1097:PHE:O	1:A:1100:ILE:HB	1.89	0.71
1:A:929:SER:HB2	1:A:954:MET:SD	2.29	0.71
1:A:117:GLU:O	1:A:118:THR:HB	1.88	0.71
1:A:365:VAL:HG12	1:A:366:ASP:C	2.09	0.71
1:A:504:ASN:HD21	1:A:507:GLN:HB3	1.56	0.71
1:A:309:SER:N	1:A:332:GLN:HE22	1.89	0.70
1:A:469:ILE:HD11	1:A:471:ILE:CG1	2.22	0.70
1:A:812:TYR:CD1	2:B:15:ARG:NH1	2.54	0.70
1:A:854:SER:N	1:A:857:LYS:O	2.23	0.70
1:A:175:ALA:CB	1:A:194:GLU:HG2	2.21	0.70
1:A:374:GLN:OE1	1:A:391:ARG:HG3	1.92	0.70
1:A:844:LYS:H	1:A:844:LYS:HD3	1.56	0.70
1:A:365:VAL:HA	1:A:366:ASP:HB2	0.75	0.70
1:A:27:GLU:C	1:A:28:ASP:OD1	2.30	0.70
1:A:81:THR:HG23	1:A:82:ALA:N	2.06	0.69
1:A:2:SER:CB	1:A:995:VAL:HG23	2.20	0.69
1:A:368:GLU:CG	1:A:370:GLN:HG3	2.04	0.69
1:A:492:GLU:C	1:A:492:GLU:OE1	2.30	0.69
1:A:287:LYS:O	1:A:288:GLU:HB2	1.92	0.69
1:A:691:LEU:HD23	1:A:691:LEU:N	2.06	0.69
1:A:256:SER:CB	1:A:277:GLU:HG2	2.23	0.69
1:A:871:TYR:CE2	2:B:11:LEU:CD2	2.75	0.69
1:A:591:ILE:HD12	1:A:604:CYS:HB2	1.75	0.69
1:A:920:PHE:O	1:A:934:ALA:HA	1.93	0.69
1:A:701:ILE:N	1:A:701:ILE:HD13	2.07	0.69
1:A:841:ALA:HA	2:B:9:HIS:HB3	1.75	0.68
1:A:844:LYS:HD3	1:A:844:LYS:N	2.08	0.68
1:A:669:SER:OG	1:A:709:LYS:HA	1.94	0.68
1:A:40:GLU:HG3	1:A:54:GLU:HG2	1.75	0.68
1:A:103:ARG:HH11	1:A:103:ARG:CB	2.03	0.68
1:A:202:PHE:O	1:A:203:ASN:HB2	1.94	0.68
1:A:661:SER:HA	1:A:665:LYS:O	1.94	0.68
1:A:68:ARG:NH1	1:A:73:SER:O	2.27	0.67
1:A:932:LEU:C	1:A:933:LEU:HD12	2.14	0.67
1:A:391:ARG:NH2	1:A:705:ASP:OD2	2.27	0.67
1:A:692:ALA:C	1:A:693:LEU:HD12	2.14	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:597:GLU:OE1	1:A:664:HIS:HA	1.95	0.67
1:A:1000:LEU:HD13	1:A:1002:GLU:HB2	1.75	0.67
1:A:693:LEU:HD12	1:A:693:LEU:N	2.10	0.67
1:A:762:SER:O	1:A:763:SER:HB3	1.93	0.67
1:A:614:PHE:HE2	1:A:625:ASP:C	1.98	0.66
1:A:630:THR:O	1:A:631:LEU:HD23	1.95	0.66
1:A:659:ILE:HA	1:A:667:VAL:O	1.94	0.66
1:A:803:HIS:CD2	1:A:858:LEU:HB2	2.30	0.66
1:A:971:ALA:O	1:A:972:PHE:HB2	1.95	0.66
1:A:507:GLN:HE22	1:A:552:LEU:HG	1.60	0.66
1:A:613:TYR:O	1:A:614:PHE:CD2	2.48	0.66
1:A:641:PHE:HB3	1:A:679:MET:CE	2.26	0.66
1:A:985:THR:HB	1:A:989:ARG:HE	1.61	0.66
1:A:365:VAL:HG11	1:A:367:LEU:HD23	1.74	0.66
1:A:289:GLU:CG	1:A:290:GLN:N	2.58	0.66
1:A:1011:SER:OG	1:A:1013:VAL:HG22	1.96	0.66
1:A:654:ASP:HA	1:A:675:GLU:HG3	1.76	0.66
1:A:707:ILE:O	1:A:708:GLN:C	2.33	0.66
1:A:611:LEU:O	1:A:628:LYS:HG3	1.96	0.65
1:A:571:LEU:HB3	1:A:572:PRO:CD	2.26	0.65
1:A:81:THR:CG2	1:A:82:ALA:N	2.60	0.65
1:A:98:ILE:CD1	1:A:98:ILE:N	2.58	0.65
1:A:639:ARG:CG	1:A:640:THR:H	2.04	0.65
1:A:610:ALA:HB1	1:A:628:LYS:HD2	1.78	0.65
1:A:27:GLU:N	1:A:27:GLU:OE2	2.30	0.65
1:A:969:GLU:OE2	1:A:970:ASN:N	2.30	0.65
1:A:996:GLY:O	1:A:997:LEU:HD23	1.96	0.65
1:A:118:THR:O	1:A:118:THR:CG2	2.45	0.65
1:A:368:GLU:CG	1:A:370:GLN:CD	2.65	0.65
1:A:641:PHE:HB3	1:A:679:MET:HE3	1.79	0.65
2:B:10:LEU:O	2:B:14:VAL:N	2.23	0.65
1:A:492:GLU:OE1	1:A:494:GLN:N	2.30	0.64
1:A:455:GLN:HB3	1:A:472:THR:OG1	1.97	0.64
1:A:1127:ASP:O	1:A:1130:ILE:HG22	1.98	0.64
1:A:840:GLU:O	2:B:9:HIS:ND1	2.29	0.64
1:A:660:TYR:CG	1:A:661:SER:N	2.62	0.64
1:A:660:TYR:HD1	1:A:707:ILE:HG12	1.55	0.64
1:A:688:PRO:O	1:A:689:ASP:C	2.36	0.64
1:A:482:GLU:CB	1:A:483:PRO:HD3	2.24	0.64
1:A:726:TYR:CE2	1:A:728:GLU:HB2	2.33	0.64
1:A:884:ILE:HG22	1:A:884:ILE:O	1.98	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:969:GLU:OE2	1:A:971:ALA:N	2.24	0.63
1:A:969:GLU:CD	1:A:970:ASN:N	2.48	0.63
1:A:173:CYS:HB3	1:A:175:ALA:O	1.98	0.63
1:A:642:ARG:NH2	1:A:683:ASN:HB2	2.14	0.63
1:A:929:SER:CB	1:A:954:MET:SD	2.87	0.63
1:A:143:ILE:HG12	1:A:154:ALA:HB2	1.80	0.62
1:A:431:GLY:HA2	1:A:456:GLN:HB2	1.79	0.62
1:A:573:SER:O	1:A:574:PHE:HB2	1.98	0.62
1:A:763:SER:C	1:A:803:HIS:HE1	2.01	0.62
1:A:1026:GLY:O	1:A:1041:THR:HG23	1.99	0.62
1:A:364:VAL:CG1	1:A:365:VAL:N	2.61	0.62
1:A:713:ARG:HH11	1:A:713:ARG:HG2	1.61	0.62
1:A:871:TYR:HE2	2:B:11:LEU:CD2	2.12	0.62
1:A:679:MET:SD	1:A:679:MET:C	2.78	0.62
1:A:118:THR:O	1:A:118:THR:HG22	1.99	0.62
1:A:330:ASP:OD1	1:A:388:ARG:NH2	2.33	0.62
1:A:356:LEU:HD21	1:A:712:ILE:HD13	1.82	0.62
1:A:365:VAL:HG11	1:A:367:LEU:HD21	1.79	0.62
1:A:367:LEU:HB2	1:A:368:GLU:OE1	1.99	0.62
1:A:105:HIS:HA	1:A:152:LEU:HD12	1.82	0.62
1:A:658:VAL:CG1	1:A:659:ILE:N	2.62	0.61
1:A:558:ILE:O	1:A:566:ALA:HA	2.00	0.61
1:A:626:ARG:C	1:A:627:LYS:HG3	2.19	0.61
1:A:830:ILE:HD13	1:A:880:LEU:HD22	1.82	0.61
1:A:846:GLY:O	1:A:866:VAL:HG22	2.00	0.61
1:A:364:VAL:HG12	1:A:365:VAL:H	1.65	0.61
1:A:835:MET:HB2	1:A:845:GLN:HG3	1.83	0.61
1:A:708:GLN:O	1:A:709:LYS:C	2.39	0.61
1:A:615:GLY:H	1:A:624:SER:CB	2.14	0.61
1:A:691:LEU:O	1:A:693:LEU:CD1	2.49	0.61
1:A:731:GLN:HA	1:A:796:GLN:NE2	2.15	0.61
1:A:818:SER:HA	1:A:828:TYR:O	2.01	0.61
1:A:885:ASN:C	1:A:885:ASN:HD22	2.03	0.61
1:A:361:ASP:OD1	1:A:723:LYS:HD2	2.00	0.61
1:A:400:ALA:N	1:A:701:ILE:HD11	2.14	0.61
1:A:1044:SER:OG	1:A:1047:TRP:HD1	1.83	0.61
1:A:1100:ILE:O	1:A:1105:MET:CE	2.49	0.61
1:A:476:VAL:HG13	1:A:490:TRP:HB3	1.82	0.61
1:A:923:VAL:HA	1:A:931:LEU:O	2.00	0.61
1:A:591:ILE:HD12	1:A:604:CYS:CB	2.30	0.61
1:A:884:ILE:N	1:A:884:ILE:CD1	2.64	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:122:GLY:O	1:A:123:ILE:HG23	2.01	0.60
1:A:368:GLU:CG	1:A:370:GLN:CG	2.70	0.60
1:A:314:LEU:HD11	1:A:324:VAL:HG22	1.83	0.60
1:A:929:SER:CB	1:A:952:ASN:CB	2.62	0.60
1:A:971:ALA:O	1:A:972:PHE:CB	2.48	0.60
1:A:364:VAL:O	1:A:365:VAL:HG23	2.01	0.60
1:A:368:GLU:OE1	1:A:368:GLU:N	2.30	0.60
1:A:458:PHE:CE2	1:A:473:SER:HA	2.36	0.60
1:A:812:TYR:O	1:A:833:THR:HA	2.01	0.60
1:A:250:PRO:HB2	1:A:252:ILE:HG22	1.83	0.60
1:A:416:ASP:HB3	1:A:419:ARG:HG2	1.82	0.60
1:A:718:TYR:HB2	1:A:755:SER:HA	1.82	0.60
1:A:812:TYR:CD1	2:B:15:ARG:CZ	2.85	0.60
1:A:844:LYS:H	1:A:844:LYS:CD	2.14	0.60
1:A:372:GLN:H	1:A:372:GLN:HE21	1.50	0.60
1:A:909:ILE:HG22	1:A:925:ASP:OD2	2.02	0.60
1:A:342:GLU:C	1:A:344:GLY:H	2.06	0.60
1:A:546:LEU:HD11	1:A:593:MET:SD	2.42	0.60
1:A:614:PHE:CE2	1:A:626:ARG:HA	2.36	0.60
1:A:644:LEU:CG	1:A:645:SER:H	2.13	0.60
1:A:917:LYS:NZ	1:A:917:LYS:HB3	2.17	0.60
1:A:412:PRO:O	1:A:422:TYR:CD2	2.55	0.59
1:A:707:ILE:O	1:A:708:GLN:O	2.20	0.59
1:A:81:THR:CG2	1:A:83:LYS:H	2.15	0.59
1:A:313:CYS:HB3	1:A:325:GLY:HA3	1.84	0.59
1:A:701:ILE:HD13	1:A:701:ILE:H	1.68	0.59
1:A:925:ASP:OD2	1:A:926:LEU:N	2.36	0.59
1:A:1123:GLU:HG2	1:A:1124:ALA:H	1.66	0.59
1:A:11:LYS:HZ3	1:A:38:ARG:HE	1.51	0.59
1:A:364:VAL:CG1	1:A:365:VAL:H	2.15	0.59
1:A:389:ILE:HD12	1:A:389:ILE:N	2.18	0.59
1:A:23:PHE:H	1:A:30:ASN:HD22	1.51	0.59
1:A:715:VAL:HG21	1:A:799:PHE:HB3	1.84	0.59
1:A:570:LYS:HZ1	1:A:572:PRO:HD2	1.65	0.58
1:A:885:ASN:O	1:A:886:SER:HB3	2.02	0.58
1:A:330:ASP:CG	1:A:388:ARG:HH22	2.05	0.58
1:A:642:ARG:HH21	1:A:683:ASN:HB2	1.67	0.58
1:A:662:SER:HB3	1:A:665:LYS:HB2	1.84	0.58
1:A:452:VAL:HG13	1:A:477:ARG:NH1	2.18	0.58
1:A:488:SER:O	1:A:489:GLU:HB3	2.03	0.58
1:A:108:VAL:O	1:A:141:LYS:NZ	2.35	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:314:LEU:CD1	1:A:324:VAL:HG22	2.34	0.58
1:A:122:GLY:HA2	1:A:133:LEU:HD12	1.85	0.58
1:A:364:VAL:O	1:A:365:VAL:CG2	2.52	0.58
1:A:458:PHE:HE2	1:A:473:SER:HA	1.66	0.58
1:A:571:LEU:CB	1:A:572:PRO:HD3	2.31	0.58
1:A:692:ALA:HA	1:A:700:THR:O	2.04	0.57
1:A:296:THR:OG1	1:A:297:LEU:N	2.37	0.57
1:A:368:GLU:HG2	1:A:370:GLN:CD	2.24	0.57
1:A:368:GLU:H	1:A:368:GLU:CD	2.06	0.57
1:A:856:GLY:H	1:A:857:LYS:HG2	1.68	0.57
1:A:905:HIS:HD2	1:A:908:ASN:ND2	2.03	0.57
1:A:84:TYR:HE2	1:A:135:LEU:HD12	1.63	0.57
1:A:38:ARG:NH1	1:A:56:GLY:HA3	2.19	0.57
1:A:614:PHE:HE2	1:A:626:ARG:HA	1.68	0.57
1:A:167:VAL:HG13	1:A:180:PHE:HB3	1.85	0.57
1:A:917:LYS:HB2	1:A:959:ILE:HG21	1.87	0.57
1:A:936:LYS:C	1:A:938:MET:H	2.06	0.57
1:A:68:ARG:NH1	1:A:74:LYS:HA	2.19	0.57
1:A:480:SER:CB	1:A:483:PRO:HD2	2.33	0.57
1:A:22:HIS:HB3	1:A:25:SER:O	2.03	0.57
1:A:375:LEU:HB2	1:A:1012:LEU:HD21	1.86	0.57
1:A:185:PRO:O	1:A:186:GLN:HG3	2.04	0.57
1:A:265:ASP:OD2	1:A:270:ARG:HB2	2.05	0.57
1:A:787:GLU:OE1	2:B:12:TRP:CZ3	2.58	0.56
1:A:947:ARG:O	1:A:992:LEU:HD12	2.05	0.56
1:A:1076:PHE:C	1:A:1076:PHE:CD2	2.79	0.56
1:A:1090:ASP:HB2	1:A:1092:ASP:HB2	1.87	0.56
1:A:24:THR:H	1:A:30:ASN:ND2	2.03	0.56
1:A:176:PRO:O	1:A:195:VAL:N	2.36	0.56
1:A:787:GLU:HG3	2:B:12:TRP:HH2	1.69	0.56
1:A:871:TYR:HE2	2:B:11:LEU:HD23	1.70	0.56
1:A:365:VAL:CG1	1:A:367:LEU:N	2.65	0.56
1:A:634:GLN:O	1:A:635:PRO:C	2.42	0.56
1:A:660:TYR:CE1	1:A:707:ILE:CG2	2.62	0.56
1:A:693:LEU:N	1:A:700:THR:O	2.31	0.56
1:A:938:MET:C	1:A:940:GLY:H	2.08	0.56
1:A:1136:LEU:O	1:A:1138:ARG:N	2.38	0.56
1:A:549:SER:HB2	1:A:552:LEU:O	2.06	0.56
1:A:365:VAL:CA	1:A:366:ASP:CB	2.30	0.56
1:A:614:PHE:CD2	1:A:625:ASP:O	2.56	0.56
1:A:812:TYR:N	1:A:812:TYR:HD2	2.04	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:194:GLU:O	1:A:202:PHE:O	2.23	0.56
1:A:332:GLN:HB2	1:A:351:GLU:O	2.06	0.56
1:A:600:HIS:CD2	1:A:618:ILE:HG12	2.40	0.56
1:A:134:ARG:HD2	1:A:134:ARG:C	2.25	0.56
1:A:469:ILE:HD13	1:A:470:GLN:N	2.20	0.55
1:A:736:LEU:HD13	1:A:813:ALA:HB1	1.88	0.55
1:A:198:ARG:HG3	1:A:198:ARG:HH11	1.72	0.55
1:A:365:VAL:CG1	1:A:366:ASP:CA	2.84	0.55
1:A:938:MET:HG2	1:A:939:GLU:N	2.19	0.55
1:A:964:ASN:OD1	1:A:978:GLN:NE2	2.40	0.55
1:A:660:TYR:CD1	1:A:707:ILE:CB	2.90	0.55
1:A:763:SER:HA	1:A:803:HIS:CE1	2.42	0.55
1:A:1136:LEU:C	1:A:1138:ARG:N	2.60	0.55
1:A:655:ARG:HH11	1:A:655:ARG:CG	2.16	0.55
1:A:912:LEU:HB2	1:A:913:TYR:CE1	2.42	0.55
1:A:38:ARG:HH11	1:A:56:GLY:HA3	1.71	0.55
1:A:610:ALA:HB3	1:A:628:LYS:HD2	1.88	0.55
1:A:812:TYR:N	1:A:812:TYR:CD2	2.73	0.55
1:A:914:LEU:O	1:A:915:LYS:HG2	2.07	0.55
1:A:475:SER:HB2	1:A:490:TRP:O	2.06	0.55
1:A:688:PRO:O	1:A:690:SER:HB3	2.06	0.55
1:A:803:HIS:HD2	1:A:858:LEU:HG	1.71	0.55
1:A:24:THR:H	1:A:30:ASN:HD21	1.55	0.54
1:A:587:ILE:CD1	1:A:587:ILE:N	2.60	0.54
1:A:424:THR:HA	1:A:436:LEU:O	2.07	0.54
1:A:982:ALA:HB1	1:A:988:GLU:OE1	2.07	0.54
1:A:610:ALA:HB1	1:A:628:LYS:CD	2.38	0.54
1:A:632:GLY:HA3	1:A:653:SER:HB2	1.85	0.54
1:A:793:ILE:HD12	1:A:829:PHE:HE2	1.73	0.54
1:A:1102:ARG:N	1:A:1103:PRO:HD2	2.22	0.54
1:A:365:VAL:CG1	1:A:367:LEU:CD2	2.70	0.54
1:A:993:GLN:O	1:A:995:VAL:HG13	2.07	0.54
1:A:971:ALA:O	1:A:972:PHE:CD1	2.60	0.54
1:A:477:ARG:HA	1:A:489:GLU:HA	1.89	0.54
1:A:256:SER:OG	1:A:277:GLU:HG2	2.06	0.54
1:A:241:ASN:O	1:A:242:GLY:C	2.46	0.54
1:A:365:VAL:HG13	1:A:366:ASP:CA	2.38	0.54
1:A:517:TYR:O	1:A:518:TYR:HB2	2.07	0.54
1:A:610:ALA:HB1	1:A:628:LYS:CG	2.38	0.54
1:A:751:ALA:O	1:A:752:LEU:C	2.44	0.54
1:A:1033:VAL:HG22	2:B:18:SER:O	2.08	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1090:ASP:OD2	1:A:1090:ASP:N	2.38	0.54
1:A:609:GLY:HA2	1:A:632:GLY:O	2.08	0.53
1:A:630:THR:HG22	1:A:1134:GLU:OE2	2.07	0.53
1:A:753:ARG:HB2	1:A:754:PRO:HD2	1.90	0.53
1:A:793:ILE:HD12	1:A:829:PHE:CE2	2.43	0.53
1:A:841:ALA:HA	2:B:9:HIS:CG	2.43	0.53
1:A:184:ASP:OD1	1:A:186:GLN:HB2	2.08	0.53
1:A:503:CYS:SG	1:A:504:ASN:N	2.81	0.53
1:A:741:GLU:HB3	1:A:749:THR:HB	1.90	0.53
1:A:1125:THR:HG22	1:A:1126:ALA:H	1.71	0.53
1:A:614:PHE:CE2	1:A:625:ASP:C	2.78	0.53
1:A:368:GLU:O	1:A:369:ARG:C	2.46	0.53
1:A:400:ALA:HB2	1:A:687:TYR:OH	2.09	0.53
1:A:917:LYS:HE3	1:A:962:ASP:HA	1.90	0.53
1:A:407:ILE:HG21	1:A:410:LEU:HD23	1.91	0.53
1:A:84:TYR:CD2	1:A:135:LEU:HD12	2.43	0.53
1:A:107:ASN:OD1	1:A:109:GLN:HG2	2.08	0.53
1:A:161:GLU:CD	1:A:191:LYS:HZ3	2.11	0.53
1:A:256:SER:HB2	1:A:277:GLU:HG2	1.90	0.53
1:A:365:VAL:HG13	1:A:366:ASP:CB	2.38	0.53
1:A:365:VAL:O	1:A:374:GLN:N	2.37	0.53
1:A:415:SER:HB2	1:A:423:ASP:OD2	2.08	0.53
1:A:480:SER:HB2	1:A:484:LYS:H	1.73	0.53
1:A:1104:LYS:O	1:A:1108:VAL:HG23	2.08	0.53
1:A:392:ASN:ND2	1:A:710:LEU:HD23	2.24	0.53
1:A:439:ASN:HB3	1:A:442:GLU:HB3	1.90	0.53
1:A:701:ILE:N	1:A:701:ILE:CD1	2.71	0.53
1:A:140:PHE:HB2	1:A:159:LEU:HD12	1.90	0.53
1:A:660:TYR:HB2	1:A:707:ILE:CD1	2.39	0.52
1:A:885:ASN:C	1:A:885:ASN:ND2	2.61	0.52
1:A:938:MET:CG	1:A:939:GLU:H	2.18	0.52
1:A:283:LEU:HD21	1:A:300:LEU:HD12	1.89	0.52
1:A:923:VAL:O	1:A:923:VAL:CG1	2.58	0.52
1:A:383:LYS:HA	1:A:718:TYR:O	2.09	0.52
1:A:494:GLN:O	1:A:495:ALA:HB3	2.08	0.52
1:A:814:LEU:CD2	2:B:15:ARG:NH2	2.72	0.52
1:A:512:VAL:HG12	1:A:512:VAL:O	2.09	0.52
1:A:490:TRP:O	1:A:491:LYS:HB2	2.09	0.52
1:A:518:TYR:C	1:A:518:TYR:CD2	2.83	0.52
1:A:518:TYR:C	1:A:518:TYR:HD2	2.13	0.52
1:A:538:VAL:HG11	1:A:541:LEU:HD11	1.92	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:842:GLU:O	1:A:842:GLU:HG2	2.09	0.52
1:A:378:CYS:HB3	1:A:721:PRO:HB2	1.91	0.52
1:A:55:VAL:CG1	1:A:100:ILE:HD12	2.39	0.52
1:A:396:ILE:HG13	1:A:673:LEU:HD11	1.90	0.52
1:A:131:ILE:HG13	1:A:145:LEU:HD11	1.92	0.52
1:A:206:PRO:HB2	1:A:207:TRP:CE3	2.45	0.52
1:A:476:VAL:HG22	1:A:476:VAL:O	2.09	0.52
1:A:513:GLY:O	1:A:538:VAL:N	2.41	0.52
1:A:841:ALA:HA	2:B:9:HIS:CB	2.39	0.52
1:A:713:ARG:CG	1:A:713:ARG:NH1	2.55	0.52
1:A:18:CYS:N	1:A:313:CYS:SG	2.83	0.52
1:A:660:TYR:CD2	1:A:661:SER:N	2.61	0.52
1:A:693:LEU:N	1:A:693:LEU:CD1	2.72	0.52
1:A:731:GLN:HA	1:A:796:GLN:HE21	1.74	0.52
1:A:1049:ASN:O	1:A:1050:LEU:C	2.47	0.52
1:A:6:VAL:HG12	1:A:1040:VAL:HG22	1.92	0.51
1:A:932:LEU:O	1:A:933:LEU:HD12	2.10	0.51
1:A:429:PHE:HB3	1:A:432:GLN:HB2	1.92	0.51
1:A:578:HIS:CE1	1:A:623:LEU:HG	2.45	0.51
1:A:876:PHE:HZ	1:A:920:PHE:CA	2.15	0.51
1:A:1057:ARG:HH22	1:A:1111:ASN:H	1.58	0.51
1:A:367:LEU:HD12	1:A:374:GLN:CG	2.37	0.51
1:A:996:GLY:C	1:A:997:LEU:HD23	2.30	0.51
1:A:234:GLN:O	1:A:236:SER:N	2.44	0.51
1:A:411:TRP:CB	1:A:460:CYS:HB3	2.41	0.51
1:A:133:LEU:HB3	1:A:135:LEU:CD2	2.40	0.51
1:A:578:HIS:CG	1:A:579:LYS:N	2.78	0.51
1:A:739:ARG:NH1	1:A:790:ASN:HD21	2.09	0.51
1:A:513:GLY:O	1:A:537:GLU:CA	2.53	0.51
1:A:81:THR:HG21	1:A:85:ASN:OD1	2.11	0.51
1:A:588:PRO:HA	1:A:606:LEU:HA	1.93	0.51
1:A:633:THR:N	1:A:654:ASP:OD1	2.43	0.51
1:A:841:ALA:CA	2:B:9:HIS:ND1	2.72	0.51
1:A:6:VAL:CG1	1:A:1040:VAL:HG22	2.41	0.51
1:A:708:GLN:O	1:A:710:LEU:N	2.44	0.51
1:A:910:MET:CE	1:A:912:LEU:HD21	2.41	0.51
1:A:921:ILE:HG23	1:A:932:LEU:HD11	1.93	0.51
1:A:1:MET:HB2	1:A:3:TYR:OH	2.11	0.50
1:A:81:THR:HG23	1:A:83:LYS:H	1.75	0.50
1:A:591:ILE:HD12	1:A:604:CYS:SG	2.51	0.50
1:A:934:ALA:HB2	1:A:945:ILE:HD11	1.93	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:60:LYS:NZ	1:A:1001:GLY:O	2.42	0.50
1:A:135:LEU:N	1:A:135:LEU:HD22	2.27	0.50
1:A:569:LEU:HG	1:A:576:LEU:HA	1.92	0.50
1:A:602:LEU:CD2	1:A:614:PHE:HB2	2.41	0.50
1:A:610:ALA:HA	1:A:630:THR:HA	1.92	0.50
1:A:691:LEU:O	1:A:693:LEU:HD12	2.12	0.50
1:A:765:VAL:HG23	1:A:806:GLN:HB3	1.93	0.50
1:A:842:GLU:O	1:A:843:PRO:O	2.30	0.50
1:A:414:ARG:CA	1:A:422:TYR:HA	2.39	0.50
1:A:963:ASP:HA	1:A:979:LYS:HD3	1.93	0.50
1:A:452:VAL:HG22	1:A:477:ARG:HD2	1.93	0.50
1:A:492:GLU:OE2	1:A:494:GLN:HB2	2.11	0.50
1:A:1014:MET:SD	1:A:1015:GLN:N	2.85	0.50
1:A:364:VAL:C	1:A:365:VAL:HG23	2.32	0.50
1:A:578:HIS:NE2	1:A:623:LEU:HG	2.27	0.50
1:A:1057:ARG:HH12	1:A:1110:ALA:HB3	1.77	0.50
1:A:1125:THR:CG2	1:A:1126:ALA:N	2.72	0.50
1:A:411:TRP:HB2	1:A:460:CYS:HB3	1.94	0.50
2:B:17:ARG:C	2:B:19:LEU:N	2.65	0.50
1:A:5:TYR:CZ	1:A:1091:GLY:HA3	2.47	0.49
1:A:231:ILE:HD13	1:A:240:HIS:HD2	1.76	0.49
1:A:411:TRP:HH2	1:A:428:SER:HB2	1.77	0.49
1:A:803:HIS:HD2	1:A:858:LEU:HB2	1.77	0.49
1:A:960:LEU:HD12	1:A:964:ASN:HB3	1.94	0.49
1:A:141:LYS:HD2	1:A:154:ALA:HB3	1.93	0.49
1:A:372:GLN:O	1:A:372:GLN:NE2	2.45	0.49
1:A:812:TYR:OH	2:B:12:TRP:CZ2	2.60	0.49
1:A:81:THR:CG2	1:A:83:LYS:N	2.75	0.49
1:A:288:GLU:CD	1:A:298:LYS:HB2	2.29	0.49
1:A:743:GLN:HB3	1:A:784:GLU:HB2	1.93	0.49
1:A:1064:SER:O	1:A:1065:VAL:C	2.50	0.49
1:A:288:GLU:HG2	1:A:296:THR:HG23	1.93	0.49
1:A:660:TYR:O	1:A:661:SER:OG	2.30	0.49
1:A:170:LEU:HD12	1:A:177:THR:HG22	1.94	0.49
1:A:261:HIS:HA	1:A:272:LEU:O	2.12	0.49
1:A:449:MET:HG3	1:A:484:LYS:HG3	1.94	0.49
1:A:612:PHE:CZ	1:A:628:LYS:HD3	2.47	0.49
1:A:905:HIS:CD2	1:A:908:ASN:ND2	2.80	0.49
1:A:459:PHE:CD2	1:A:460:CYS:N	2.78	0.49
1:A:910:MET:HE1	2:B:10:LEU:HB3	1.93	0.49
1:A:917:LYS:HB3	1:A:917:LYS:HZ2	1.77	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:11:LYS:NZ	1:A:54:GLU:OE2	2.46	0.49
1:A:263:ARG:HB2	1:A:271:TYR:CE2	2.48	0.49
1:A:722:ARG:HH22	2:B:15:ARG:HH11	1.60	0.49
1:A:811:GLU:OE2	1:A:847:ARG:NE	2.45	0.49
1:A:288:GLU:OE1	1:A:298:LYS:N	2.45	0.49
1:A:429:PHE:HD1	1:A:430:VAL:H	1.59	0.49
1:A:492:GLU:OE1	1:A:492:GLU:O	2.30	0.49
1:A:882:ALA:O	1:A:884:ILE:CD1	2.60	0.49
1:A:704:ILE:O	1:A:705:ASP:O	2.30	0.49
1:A:874:VAL:HG22	1:A:875:GLU:O	2.13	0.49
1:A:814:LEU:CD2	2:B:15:ARG:HH21	2.26	0.49
1:A:26:ALA:HB3	1:A:27:GLU:OE2	2.13	0.48
1:A:27:GLU:O	1:A:28:ASP:OD1	2.30	0.48
1:A:105:HIS:CA	1:A:152:LEU:HD12	2.43	0.48
1:A:364:VAL:CG2	1:A:1010:GLY:HA3	2.38	0.48
1:A:480:SER:CB	1:A:484:LYS:H	2.26	0.48
1:A:120:ILE:HG12	1:A:135:LEU:HD13	1.95	0.48
1:A:516:LEU:O	1:A:531:HIS:HA	2.14	0.48
1:A:644:LEU:HG	1:A:645:SER:N	2.19	0.48
1:A:824:ASP:OD1	1:A:826:ASN:HB2	2.12	0.48
1:A:939:GLU:HG3	1:A:941:ASN:HB2	1.95	0.48
1:A:43:VAL:HG23	1:A:52:VAL:HG21	1.96	0.48
1:A:389:ILE:HD12	1:A:389:ILE:H	1.78	0.48
1:A:591:ILE:CD1	1:A:604:CYS:HB2	2.41	0.48
1:A:930:VAL:O	1:A:930:VAL:HG23	2.13	0.48
1:A:287:LYS:O	1:A:288:GLU:CB	2.59	0.48
1:A:715:VAL:CG2	1:A:799:PHE:HB3	2.43	0.48
1:A:971:ALA:C	1:A:972:PHE:CG	2.85	0.48
1:A:1105:MET:SD	1:A:1130:ILE:HD12	2.53	0.48
1:A:538:VAL:HG11	1:A:541:LEU:CD1	2.44	0.48
1:A:921:ILE:HA	1:A:933:LEU:O	2.14	0.48
1:A:116:SER:OG	1:A:134:ARG:CZ	2.62	0.48
1:A:161:GLU:OE1	1:A:191:LYS:NZ	2.45	0.48
1:A:340:SER:HB3	1:A:346:TYR:CE1	2.49	0.48
1:A:632:GLY:O	1:A:634:GLN:N	2.46	0.48
1:A:662:SER:OG	1:A:663:ASN:N	2.46	0.48
1:A:123:ILE:N	1:A:132:GLY:O	2.41	0.48
1:A:507:GLN:NE2	1:A:552:LEU:HA	2.29	0.48
1:A:1136:LEU:O	1:A:1139:ILE:HG13	2.14	0.48
1:A:397:HIS:O	1:A:702:GLY:HA3	2.14	0.48
1:A:852:GLN:O	1:A:859:GLN:N	2.34	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:912:LEU:HB2	1:A:913:TYR:CD1	2.49	0.48
1:A:196:SER:OG	1:A:198:ARG:HB3	2.14	0.47
1:A:222:VAL:HG13	1:A:223:PRO:HD2	1.95	0.47
1:A:336:LEU:HD23	1:A:347:VAL:HG22	1.95	0.47
1:A:365:VAL:CG1	1:A:366:ASP:HB2	2.44	0.47
1:A:467:GLN:HE22	1:A:524:GLN:HA	1.79	0.47
1:A:521:ILE:HD13	1:A:526:LEU:HD23	1.96	0.47
1:A:67:PHE:HD1	1:A:128:CYS:SG	2.37	0.47
1:A:677:ASN:HB3	1:A:678:TYR:CE1	2.49	0.47
1:A:985:THR:HB	1:A:989:ARG:HH21	1.79	0.47
1:A:304:LEU:HD12	1:A:306:GLY:H	1.78	0.47
1:A:340:SER:HB3	1:A:346:TYR:CD1	2.48	0.47
1:A:828:TYR:CE2	1:A:861:VAL:HG21	2.49	0.47
1:A:811:GLU:C	1:A:812:TYR:HD2	2.18	0.47
1:A:1093:LEU:O	1:A:1094:ILE:C	2.52	0.47
1:A:116:SER:HB3	1:A:137:ASP:OD1	2.13	0.47
1:A:334:VAL:HG13	1:A:347:VAL:HG13	1.96	0.47
1:A:328:LEU:O	1:A:380:GLY:HA2	2.14	0.47
1:A:365:VAL:CG1	1:A:367:LEU:HD23	2.42	0.47
1:A:765:VAL:HG13	1:A:766:SER:O	2.13	0.47
1:A:821:LEU:O	1:A:824:ASP:HB3	2.14	0.47
1:A:842:GLU:O	1:A:843:PRO:C	2.53	0.47
1:A:913:TYR:O	1:A:914:LEU:HD23	2.15	0.47
1:A:79:ILE:HB	1:A:87:CYS:SG	2.55	0.47
1:A:429:PHE:O	1:A:431:GLY:N	2.48	0.47
1:A:236:SER:N	1:A:253:ILE:HD11	2.30	0.47
1:A:936:LYS:C	1:A:938:MET:N	2.68	0.47
1:A:316:TYR:HA	1:A:322:VAL:HG22	1.97	0.47
1:A:910:MET:CE	2:B:10:LEU:HD12	2.45	0.47
1:A:1136:LEU:C	1:A:1138:ARG:H	2.18	0.47
1:A:68:ARG:HD3	1:A:74:LYS:C	2.36	0.46
1:A:403:ASP:OD2	1:A:403:ASP:N	2.45	0.46
1:A:1041:THR:HG22	1:A:1042:SER:N	2.31	0.46
1:A:1063:LYS:H	1:A:1063:LYS:CD	2.19	0.46
1:A:411:TRP:CH2	1:A:428:SER:HB2	2.50	0.46
1:A:722:ARG:HH22	2:B:15:ARG:NH1	2.12	0.46
1:A:925:ASP:CG	1:A:926:LEU:H	2.19	0.46
1:A:399:HIS:HB2	1:A:687:TYR:HE1	1.80	0.46
1:A:660:TYR:CB	1:A:667:VAL:CG2	2.84	0.46
1:A:719:GLU:OE2	1:A:755:SER:HB2	2.14	0.46
1:A:969:GLU:O	1:A:970:ASN:OD1	2.33	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:690:SER:HA	1:A:702:GLY:O	2.14	0.46
1:A:38:ARG:NE	1:A:54:GLU:OE2	2.48	0.46
1:A:81:THR:HG22	1:A:84:TYR:H	1.81	0.46
1:A:369:ARG:O	1:A:369:ARG:HG2	2.16	0.46
1:A:1048:TYR:CE2	1:A:1052:LEU:HD12	2.51	0.46
1:A:235:GLU:HB3	1:A:254:LYS:CG	2.44	0.46
1:A:667:VAL:HG12	1:A:668:PHE:N	2.31	0.46
1:A:1063:LYS:HD3	1:A:1063:LYS:N	2.23	0.46
1:A:593:MET:HA	1:A:601:TYR:O	2.16	0.46
1:A:706:GLU:HG3	1:A:707:ILE:N	2.31	0.46
1:A:905:HIS:CE1	1:A:907:ASN:HB3	2.51	0.46
1:A:4:ASN:O	1:A:1089:ILE:HG13	2.16	0.46
1:A:364:VAL:HG21	1:A:1010:GLY:CA	2.39	0.46
1:A:542:ASP:OD2	1:A:592:LEU:HD12	2.16	0.46
1:A:651:ALA:HB3	1:A:657:THR:HB	1.97	0.46
1:A:707:ILE:CG2	1:A:708:GLN:N	2.44	0.46
1:A:1134:GLU:O	1:A:1137:THR:OG1	2.28	0.46
1:A:660:TYR:CG	1:A:667:VAL:CG2	2.99	0.46
1:A:1139:ILE:HG22	1:A:1139:ILE:O	2.16	0.46
1:A:262:ASN:ND2	1:A:316:TYR:H	2.14	0.45
1:A:620:THR:OG1	1:A:622:LEU:HD12	2.16	0.45
1:A:817:VAL:HG22	1:A:830:ILE:HB	1.97	0.45
1:A:880:LEU:HD23	1:A:899:VAL:HG11	1.96	0.45
1:A:354:THR:HG22	1:A:388:ARG:HH12	1.81	0.45
1:A:537:GLU:O	1:A:561:TRP:HB2	2.16	0.45
1:A:570:LYS:HZ3	1:A:572:PRO:HD2	1.80	0.45
1:A:405:PRO:HA	1:A:696:ASN:O	2.16	0.45
1:A:763:SER:C	1:A:803:HIS:CE1	2.87	0.45
1:A:697:SER:O	1:A:698:THR:CB	2.63	0.45
1:A:787:GLU:OE1	2:B:12:TRP:HZ3	2.00	0.45
1:A:632:GLY:C	1:A:634:GLN:N	2.68	0.45
1:A:939:GLU:O	1:A:940:GLY:C	2.55	0.45
1:A:564:ILE:HG22	1:A:564:ILE:O	2.17	0.45
1:A:599:SER:HB2	1:A:664:HIS:CE1	2.52	0.45
1:A:620:THR:OG1	1:A:622:LEU:CD1	2.64	0.45
1:A:630:THR:O	1:A:631:LEU:CD2	2.63	0.45
1:A:921:ILE:CG2	1:A:932:LEU:HD11	2.47	0.45
1:A:926:LEU:HG	1:A:927:MET:N	2.24	0.45
1:A:5:TYR:CZ	1:A:1091:GLY:CA	3.00	0.45
1:A:169:PHE:CE2	1:A:178:ILE:HG23	2.52	0.45
1:A:606:LEU:HB2	1:A:608:ASP:OD2	2.17	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:181:VAL:HG23	1:A:219:VAL:HG22	1.99	0.45
1:A:844:LYS:O	1:A:867:LYS:HA	2.17	0.45
1:A:122:GLY:CA	1:A:133:LEU:HD12	2.47	0.45
1:A:22:HIS:O	1:A:75:ASP:HB2	2.17	0.44
1:A:334:VAL:HG22	1:A:349:ALA:HA	1.99	0.44
1:A:731:GLN:CA	1:A:796:GLN:HE21	2.30	0.44
1:A:881:LEU:HD11	1:A:888:VAL:CG1	2.46	0.44
1:A:938:MET:C	1:A:940:GLY:N	2.70	0.44
1:A:630:THR:HG22	1:A:1134:GLU:CD	2.37	0.44
1:A:830:ILE:HG12	1:A:850:VAL:HG22	1.98	0.44
1:A:1093:LEU:HD22	1:A:1096:SER:OG	2.17	0.44
1:A:181:VAL:HG13	1:A:212:VAL:HG21	1.98	0.44
1:A:1098:LEU:C	1:A:1100:ILE:H	2.20	0.44
1:A:764:SER:HB2	1:A:805:HIS:HA	1.99	0.44
1:A:910:MET:HE2	1:A:912:LEU:HD21	1.98	0.44
1:A:1103:PRO:O	1:A:1107:GLU:HG3	2.17	0.44
1:A:367:LEU:CD1	1:A:374:GLN:HG3	2.44	0.44
1:A:924:GLY:O	1:A:925:ASP:HB2	2.17	0.44
1:A:971:ALA:O	1:A:972:PHE:CG	2.70	0.44
1:A:223:PRO:HG2	1:A:267:ASN:O	2.18	0.44
1:A:370:GLN:HB2	1:A:372:GLN:NE2	2.33	0.44
1:A:378:CYS:SG	1:A:724:ILE:CG2	3.05	0.44
1:A:520:GLN:OE1	1:A:527:ARG:O	2.36	0.44
1:A:763:SER:CA	1:A:803:HIS:CE1	3.00	0.44
1:A:816:LEU:CD1	1:A:831:VAL:HG22	2.47	0.44
1:A:29:LEU:O	1:A:44:VAL:HG23	2.17	0.44
1:A:38:ARG:HH11	1:A:56:GLY:CA	2.31	0.44
1:A:76:LEU:CD2	1:A:90:GLU:HG3	2.48	0.44
1:A:837:TYR:HA	1:A:838:PRO:HD3	1.87	0.44
1:A:341:ASN:O	1:A:342:GLU:C	2.56	0.44
1:A:341:ASN:O	1:A:342:GLU:O	2.35	0.44
1:A:492:GLU:OE1	1:A:494:GLN:HB2	2.18	0.44
1:A:615:GLY:N	1:A:624:SER:OG	2.49	0.44
1:A:135:LEU:CD2	1:A:135:LEU:N	2.81	0.44
1:A:220:ILE:HB	1:A:230:ILE:HB	1.98	0.44
1:A:427:LEU:HD12	1:A:427:LEU:O	2.17	0.44
1:A:492:GLU:CD	1:A:494:GLN:HB2	2.38	0.44
1:A:742:VAL:HG23	1:A:743:GLN:O	2.18	0.44
1:A:837:TYR:O	2:B:9:HIS:CE1	2.71	0.44
1:A:839:GLU:OE1	1:A:839:GLU:HA	2.18	0.44
1:A:12:PRO:HD3	1:A:1036:MET:HG3	1.99	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:112:ILE:HD12	1:A:112:ILE:HA	1.75	0.43
1:A:895:THR:C	1:A:897:LYS:H	2.21	0.43
1:A:40:GLU:HB3	1:A:42:TYR:CE1	2.53	0.43
1:A:63:VAL:HB	1:A:80:LEU:HB3	1.99	0.43
1:A:342:GLU:OE1	1:A:342:GLU:HA	2.18	0.43
1:A:610:ALA:HB1	1:A:628:LYS:HG2	2.00	0.43
1:A:677:ASN:HB2	1:A:694:ALA:O	2.18	0.43
1:A:917:LYS:O	1:A:918:GLY:C	2.56	0.43
1:A:1070:HIS:CD2	1:A:1070:HIS:C	2.89	0.43
1:A:542:ASP:OD2	1:A:593:MET:HG2	2.18	0.43
1:A:763:SER:HA	1:A:803:HIS:ND1	2.32	0.43
1:A:1047:TRP:HZ3	1:A:1132:VAL:HG13	1.84	0.43
1:A:125:ASP:OD2	1:A:128:CYS:N	2.51	0.43
1:A:486:LEU:HD11	1:A:489:GLU:HB2	1.99	0.43
1:A:582:LEU:H	1:A:582:LEU:HG	1.59	0.43
1:A:787:GLU:HG3	2:B:12:TRP:CH2	2.52	0.43
1:A:27:GLU:O	1:A:28:ASP:CG	2.56	0.43
1:A:634:GLN:O	1:A:635:PRO:O	2.35	0.43
1:A:660:TYR:CE2	1:A:661:SER:O	2.71	0.43
1:A:342:GLU:C	1:A:344:GLY:N	2.71	0.43
1:A:342:GLU:O	1:A:344:GLY:N	2.51	0.43
1:A:717:LEU:C	1:A:719:GLU:H	2.22	0.43
1:A:816:LEU:HD12	1:A:831:VAL:HG22	2.00	0.43
1:A:864:LYS:HD3	1:A:899:VAL:O	2.19	0.43
1:A:7:VAL:HG13	1:A:1091:GLY:HA3	2.01	0.43
1:A:65:GLU:O	1:A:77:LEU:HD12	2.18	0.43
1:A:660:TYR:CD2	1:A:661:SER:C	2.92	0.43
1:A:5:TYR:CE2	1:A:7:VAL:HG22	2.53	0.43
1:A:81:THR:HB	1:A:85:ASN:HB2	2.01	0.43
1:A:318:ASP:HB3	1:A:319:ASN:H	1.58	0.43
1:A:465:HIS:N	1:A:465:HIS:ND1	2.67	0.43
1:A:517:TYR:O	1:A:518:TYR:CB	2.66	0.43
1:A:38:ARG:HH11	1:A:38:ARG:HD3	1.69	0.43
1:A:146:ASP:O	1:A:147:ARG:C	2.55	0.43
1:A:609:GLY:CA	1:A:632:GLY:O	2.67	0.43
1:A:391:ARG:HG3	1:A:391:ARG:HH11	1.84	0.42
1:A:507:GLN:HE22	1:A:552:LEU:HA	1.83	0.42
1:A:611:LEU:O	1:A:628:LYS:CA	2.61	0.42
1:A:885:ASN:O	1:A:886:SER:CB	2.67	0.42
1:A:13:THR:HB	1:A:355:ASN:HA	2.00	0.42
1:A:81:THR:HG22	1:A:83:LYS:N	2.34	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:457:THR:CG2	1:A:459:PHE:O	2.67	0.42
1:A:660:TYR:HB2	1:A:707:ILE:HD11	2.01	0.42
1:A:934:ALA:HB2	1:A:945:ILE:CD1	2.48	0.42
1:A:105:HIS:CD2	1:A:1067:LYS:HB2	2.55	0.42
1:A:230:ILE:C	1:A:231:ILE:HD12	2.39	0.42
1:A:501:ALA:O	1:A:502:SER:HB2	2.19	0.42
1:A:679:MET:SD	1:A:679:MET:O	2.77	0.42
1:A:131:ILE:HG22	1:A:133:LEU:HD13	2.01	0.42
1:A:611:LEU:HG	1:A:612:PHE:H	1.84	0.42
1:A:843:PRO:HG2	2:B:11:LEU:CD1	2.49	0.42
1:A:1013:VAL:HB	1:A:1014:MET:H	1.70	0.42
1:A:1090:ASP:C	1:A:1092:ASP:N	2.69	0.42
1:A:607:GLY:HA2	1:A:635:PRO:HA	2.01	0.42
1:A:641:PHE:HB3	1:A:679:MET:HE1	1.99	0.42
1:A:706:GLU:HG3	1:A:707:ILE:HG22	2.01	0.42
1:A:733:PHE:HE1	1:A:799:PHE:CZ	2.37	0.42
1:A:1052:LEU:HD23	1:A:1052:LEU:O	2.20	0.42
2:B:9:HIS:O	2:B:10:LEU:C	2.58	0.42
1:A:312:GLU:HG3	1:A:327:ARG:HB3	2.01	0.42
1:A:449:MET:HG3	1:A:484:LYS:O	2.20	0.42
1:A:451:PHE:HA	1:A:470:GLN:OE1	2.19	0.42
1:A:571:LEU:CB	1:A:572:PRO:CD	2.93	0.42
1:A:575:GLU:O	1:A:577:LEU:HD12	2.19	0.42
1:A:185:PRO:O	1:A:186:GLN:CG	2.67	0.42
1:A:476:VAL:O	1:A:476:VAL:CG2	2.68	0.42
1:A:655:ARG:CG	1:A:655:ARG:NH1	2.80	0.42
1:A:680:CYS:O	1:A:691:LEU:HA	2.20	0.42
1:A:122:GLY:O	1:A:123:ILE:CG2	2.67	0.42
1:A:537:GLU:HB3	1:A:561:TRP:CD1	2.55	0.42
1:A:304:LEU:HD12	1:A:305:LEU:N	2.35	0.41
1:A:938:MET:O	1:A:940:GLY:N	2.40	0.41
1:A:148:ASP:HB2	1:A:149:ASN:H	1.63	0.41
1:A:472:THR:O	1:A:473:SER:C	2.57	0.41
1:A:580:GLU:HG3	1:A:582:LEU:HD23	2.00	0.41
1:A:706:GLU:HA	1:A:706:GLU:OE1	2.20	0.41
1:A:118:THR:HG21	1:A:165:ILE:O	2.20	0.41
1:A:218:MET:SD	1:A:261:HIS:HD2	2.43	0.41
1:A:764:SER:OG	1:A:803:HIS:CE1	2.73	0.41
1:A:971:ALA:HB3	1:A:973:ASN:ND2	2.35	0.41
1:A:256:SER:CB	1:A:275:ASP:OD2	2.52	0.41
1:A:282:MET:HB2	1:A:305:LEU:HD11	2.02	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:133:LEU:HB3	1:A:135:LEU:HD21	2.03	0.41
1:A:846:GLY:C	1:A:866:VAL:HG22	2.41	0.41
1:A:917:LYS:HZ3	1:A:921:ILE:HD12	1.86	0.41
1:A:413:LEU:C	1:A:422:TYR:HB3	2.41	0.41
1:A:449:MET:H	1:A:449:MET:HG2	1.48	0.41
1:A:663:ASN:OD1	1:A:665:LYS:HG3	2.21	0.41
1:A:966:LEU:HD23	1:A:967:GLY:H	1.86	0.41
1:A:332:GLN:HG3	1:A:334:VAL:HG23	2.02	0.41
1:A:613:TYR:HD1	1:A:614:PHE:CA	2.26	0.41
1:A:920:PHE:O	1:A:935:TYR:N	2.53	0.41
1:A:925:ASP:CG	1:A:926:LEU:N	2.74	0.41
1:A:936:LYS:O	1:A:940:GLY:HA2	2.21	0.41
2:B:17:ARG:O	2:B:19:LEU:N	2.54	0.41
1:A:80:LEU:HD23	1:A:120:ILE:HG21	2.02	0.41
1:A:80:LEU:HD11	1:A:84:TYR:HA	2.02	0.41
1:A:336:LEU:CD2	1:A:347:VAL:HG22	2.51	0.41
1:A:492:GLU:C	1:A:492:GLU:CD	2.80	0.41
1:A:803:HIS:CD2	1:A:858:LEU:CB	3.02	0.41
1:A:222:VAL:CG1	1:A:223:PRO:HD2	2.51	0.41
1:A:1013:VAL:O	1:A:1014:MET:HG3	2.20	0.41
2:B:17:ARG:O	2:B:18:SER:C	2.58	0.41
1:A:365:VAL:HG13	1:A:366:ASP:HB2	2.03	0.41
1:A:416:ASP:HB3	1:A:419:ARG:CG	2.51	0.41
1:A:492:GLU:HA	1:A:493:PRO:HD3	1.92	0.41
1:A:921:ILE:HG23	1:A:932:LEU:CD1	2.51	0.41
1:A:130:MET:HE2	1:A:176:PRO:HB3	2.03	0.40
1:A:713:ARG:HG2	1:A:713:ARG:NH1	2.32	0.40
1:A:809:GLN:HE21	1:A:809:GLN:HB2	1.62	0.40
1:A:10:GLN:HG3	1:A:11:LYS:O	2.20	0.40
1:A:81:THR:HG22	1:A:84:TYR:N	2.36	0.40
1:A:161:GLU:HG2	1:A:182:TYR:CD2	2.55	0.40
1:A:324:VAL:HB	1:A:332:GLN:HG2	2.03	0.40
1:A:840:GLU:C	2:B:9:HIS:ND1	2.75	0.40
1:A:1004:VAL:HG13	1:A:1030:PHE:HB2	2.02	0.40
1:A:1047:TRP:O	1:A:1048:TYR:C	2.60	0.40
1:A:23:PHE:CE2	1:A:91:TYR:HB2	2.56	0.40
1:A:59:GLY:HA2	1:A:1073:TRP:CZ3	2.56	0.40
1:A:90:GLU:HB3	1:A:101:ILE:HG22	2.03	0.40
1:A:189:HIS:HD2	1:A:211:ASN:OD1	2.03	0.40
1:A:352:THR:O	1:A:352:THR:HG22	2.18	0.40
1:A:467:GLN:OE1	1:A:521:ILE:HG22	2.21	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:667:VAL:CG1	1:A:668:PHE:N	2.85	0.40
1:A:997:LEU:HB3	1:A:1076:PHE:HB2	2.04	0.40
1:A:105:HIS:O	1:A:151:GLU:HA	2.20	0.40
1:A:488:SER:O	1:A:489:GLU:CB	2.69	0.40
1:A:673:LEU:CD1	1:A:693:LEU:CD2	3.00	0.40
1:A:828:TYR:HE2	1:A:861:VAL:HG21	1.84	0.40
1:A:852:GLN:O	1:A:858:LEU:HA	2.22	0.40
1:A:948:ASP:HB2	1:A:992:LEU:HD12	2.04	0.40
1:A:1057:ARG:HH12	1:A:1110:ALA:H	1.70	0.40
1:A:1069:GLU:HG3	1:A:1072:PHE:H	1.86	0.40
1:A:793:ILE:CD1	1:A:829:PHE:CE2	3.04	0.40
1:A:813:ALA:HA	1:A:833:THR:HG22	2.03	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	1106/1143 (97%)	851 (77%)	172 (16%)	83 (8%)	1 2
2	B	11/13 (85%)	10 (91%)	1 (9%)	0	100 100
All	All	1117/1156 (97%)	861 (77%)	173 (16%)	83 (7%)	1 2

All (83) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	148	ASP
1	A	186	GLN
1	A	235	GLU
1	A	242	GLY
1	A	366	ASP
1	A	407	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	430	VAL
1	A	460	CYS
1	A	494	GLN
1	A	502	SER
1	A	518	TYR
1	A	546	LEU
1	A	554	PRO
1	A	571	LEU
1	A	647	THR
1	A	662	SER
1	A	698	THR
1	A	705	ASP
1	A	707	ILE
1	A	708	GLN
1	A	752	LEU
1	A	768	SER
1	A	772	SER
1	A	841	ALA
1	A	843	PRO
1	A	918	GLY
1	A	1065	VAL
1	A	1080	ARG
1	A	288	GLU
1	A	292	ASP
1	A	318	ASP
1	A	342	GLU
1	A	461	GLY
1	A	474	ALA
1	A	623	LEU
1	A	660	TYR
1	A	683	ASN
1	A	689	ASP
1	A	706	GLU
1	A	709	LYS
1	A	751	ALA
1	A	925	ASP
1	A	939	GLU
1	A	1126	ALA
1	A	1137	THR
1	A	35	LYS
1	A	118	THR
1	A	217	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	341	ASN
1	A	491	LYS
1	A	503	CYS
1	A	574	PHE
1	A	635	PRO
1	A	748	GLY
1	A	770	LEU
1	A	929	SER
1	A	972	PHE
1	A	1127	ASP
1	A	149	ASN
1	A	214	ALA
1	A	489	GLU
1	A	523	PRO
1	A	631	LEU
1	A	633	THR
1	A	896	GLU
1	A	994	GLU
1	A	203	ASN
1	A	208	LYS
1	A	371	GLY
1	A	624	SER
1	A	838	PRO
1	A	930	VAL
1	A	1097	PHE
1	A	224	GLU
1	A	545	PRO
1	A	842	GLU
1	A	259	VAL
1	A	176	PRO
1	A	621	GLY
1	A	1130	ILE
1	A	405	PRO
1	A	937	PRO
1	A	95	GLY

5.3.2 Protein sidechains (i)

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	977/1001 (98%)	822 (84%)	155 (16%)	2 7
2	B	12/12 (100%)	9 (75%)	3 (25%)	0 2
All	All	989/1013 (98%)	831 (84%)	158 (16%)	2 7

All (158) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2	SER
1	A	6	VAL
1	A	7	VAL
1	A	25	SER
1	A	28	ASP
1	A	31	LEU
1	A	35	LYS
1	A	49	LEU
1	A	79	ILE
1	A	81	THR
1	A	97	SER
1	A	98	ILE
1	A	99	ASP
1	A	101	ILE
1	A	103	ARG
1	A	109	GLN
1	A	112	ILE
1	A	125	ASP
1	A	130	MET
1	A	133	LEU
1	A	147	ARG
1	A	148	ASP
1	A	160	GLU
1	A	162	LEU
1	A	178	ILE
1	A	192	THR
1	A	197	LEU
1	A	199	GLU
1	A	234	GLN
1	A	235	GLU
1	A	236	SER
1	A	238	THR
1	A	248	ILE
1	A	253	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	256	SER
1	A	259	VAL
1	A	260	CYS
1	A	283	LEU
1	A	296	THR
1	A	298	LYS
1	A	301	ARG
1	A	307	GLU
1	A	310	ILE
1	A	314	LEU
1	A	318	ASP
1	A	333	LEU
1	A	334	VAL
1	A	360	VAL
1	A	372	GLN
1	A	374	GLN
1	A	383	LYS
1	A	390	ILE
1	A	391	ARG
1	A	392	ASN
1	A	396	ILE
1	A	401	SER
1	A	410	LEU
1	A	415	SER
1	A	418	ASN
1	A	421	THR
1	A	429	PHE
1	A	438	LEU
1	A	441	GLU
1	A	445	GLU
1	A	449	MET
1	A	452	VAL
1	A	460	CYS
1	A	465	HIS
1	A	467	GLN
1	A	469	ILE
1	A	476	VAL
1	A	480	SER
1	A	502	SER
1	A	504	ASN
1	A	507	GLN
1	A	518	TYR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	520	GLN
1	A	521	ILE
1	A	525	GLU
1	A	530	SER
1	A	541	LEU
1	A	544	THR
1	A	548	ASP
1	A	552	LEU
1	A	555	LEU
1	A	560	LEU
1	A	567	ARG
1	A	579	LYS
1	A	582	LEU
1	A	587	ILE
1	A	589	ARG
1	A	597	GLU
1	A	602	LEU
1	A	613	TYR
1	A	618	ILE
1	A	620	THR
1	A	622	LEU
1	A	625	ASP
1	A	638	LEU
1	A	640	THR
1	A	653	SER
1	A	655	ARG
1	A	659	ILE
1	A	679	MET
1	A	691	LEU
1	A	698	THR
1	A	700	THR
1	A	701	ILE
1	A	713	ARG
1	A	728	GLU
1	A	730	SER
1	A	738	SER
1	A	744	ASP
1	A	755	SER
1	A	765	VAL
1	A	766	SER
1	A	772	SER
1	A	773	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	815	SER
1	A	844	LYS
1	A	854	SER
1	A	855	ASP
1	A	857	LYS
1	A	858	LEU
1	A	870	VAL
1	A	873	MET
1	A	885	ASN
1	A	896	GLU
1	A	899	VAL
1	A	900	ARG
1	A	904	ASN
1	A	917	LYS
1	A	922	LEU
1	A	926	LEU
1	A	930	VAL
1	A	966	LEU
1	A	969	GLU
1	A	979	LYS
1	A	985	THR
1	A	986	ASP
1	A	992	LEU
1	A	1000	LEU
1	A	1006	VAL
1	A	1014	MET
1	A	1045	GLU
1	A	1050	LEU
1	A	1063	LYS
1	A	1064	SER
1	A	1076	PHE
1	A	1090	ASP
1	A	1093	LEU
1	A	1099	ASP
1	A	1129	LEU
1	A	1130	ILE
1	A	1131	LYS
2	B	9	HIS
2	B	13	ASP
2	B	15	ARG

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (30) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	16	ASN
1	A	30	ASN
1	A	109	GLN
1	A	189	HIS
1	A	240	HIS
1	A	261	HIS
1	A	262	ASN
1	A	332	GLN
1	A	370	GLN
1	A	372	GLN
1	A	397	HIS
1	A	418	ASN
1	A	456	GLN
1	A	504	ASN
1	A	520	GLN
1	A	522	HIS
1	A	790	ASN
1	A	796	GLN
1	A	803	HIS
1	A	809	GLN
1	A	826	ASN
1	A	845	GLN
1	A	885	ASN
1	A	905	HIS
1	A	907	ASN
1	A	908	ASN
1	A	941	ASN
1	A	991	HIS
1	A	1056	ASN
1	A	1070	HIS

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 monosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry (i)

There are no ligands in this entry.

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 (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	1114/1143 (97%)	0.19	71 (6%)	19	12	21, 70, 163, 211	0
2	B	13/13 (100%)	0.46	1 (7%)	13	7	32, 34, 34, 50	0
All	All	1127/1156 (97%)	0.20	72 (6%)	19	12	21, 70, 162, 211	0

All (72) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	462	ASN	8.9
1	A	483	PRO	8.6
1	A	294	THR	6.8
1	A	616	LEU	5.7
1	A	366	ASP	5.6
1	A	295	VAL	5.2
1	A	291	MET	5.1
1	A	443	VAL	4.8
1	A	439	ASN	4.6
1	A	508	VAL	4.6
1	A	519	LEU	4.4
1	A	618	ILE	4.3
1	A	369	ARG	4.3
1	A	581	MET	4.1
1	A	569	LEU	4.1
1	A	486	LEU	4.0
1	A	548	ASP	4.0
1	A	660	TYR	4.0
1	A	430	VAL	4.0
1	A	902	GLU	3.9
1	A	939	GLU	3.8
1	A	622	LEU	3.7
1	A	706	GLU	3.6
2	B	21	LEU	3.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	751	ALA	3.6
1	A	288	GLU	3.5
1	A	367	LEU	3.4
1	A	446	THR	3.4
1	A	752	LEU	3.4
1	A	523	PRO	3.4
1	A	448	LEU	3.3
1	A	773	SER	3.3
1	A	488	SER	3.2
1	A	746	SER	3.2
1	A	621	GLY	3.2
1	A	293	GLY	3.1
1	A	289	GLU	3.0
1	A	29	LEU	3.0
1	A	599	SER	2.9
1	A	482	GLU	2.9
1	A	576	LEU	2.9
1	A	585	GLU	2.9
1	A	918	GLY	2.8
1	A	573	SER	2.7
1	A	572	PRO	2.7
1	A	292	ASP	2.7
1	A	623	LEU	2.7
1	A	542	ASP	2.6
1	A	419	ARG	2.5
1	A	745	THR	2.5
1	A	571	LEU	2.4
1	A	619	GLU	2.4
1	A	481	GLN	2.4
1	A	287	LYS	2.4
1	A	574	PHE	2.4
1	A	468	LEU	2.3
1	A	513	GLY	2.3
1	A	449	MET	2.2
1	A	447	GLU	2.2
1	A	598	SER	2.2
1	A	578	HIS	2.2
1	A	920	PHE	2.2
1	A	503	CYS	2.2
1	A	661	SER	2.2
1	A	684	SER	2.1
1	A	682	LEU	2.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	1079	GLU	2.1
1	A	450	GLY	2.1
1	A	418	ASN	2.0
1	A	507	GLN	2.0
1	A	595	THR	2.0
1	A	425	LEU	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 monosaccharides in this entry.

6.4 Ligands (i)

There are no ligands in this entry.

6.5 Other polymers (i)

There are no such residues in this entry.