



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 12, 2026 – 03:42 PM UTC

PDB ID : 2I6W / pdb_00002i6w
Title : Crystal structure of the multidrug efflux transporter AcrB
Authors : Das, D.; Xu, Q.S.; Kim, S.H.
Deposited on : 2006-08-29
Resolution : 3.10 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 types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

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

MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.0
Xtriage (Phenix)	:	2.0
EDS	:	3.0
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
CCP4	:	9.0.010 (Gargrove)
Density-Fitness	:	1.0.12
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

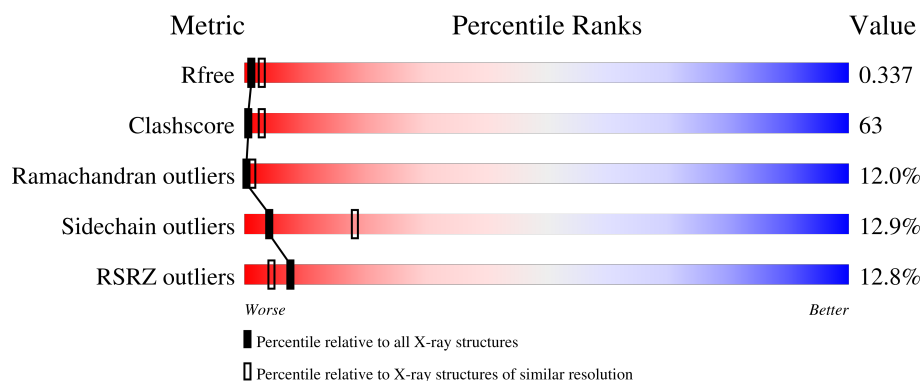
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.10 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}	180053	1456 (3.10-3.10)
Clashscore	190562	1539 (3.10-3.10)
Ramachandran outliers	187476	1467 (3.10-3.10)
Sidechain outliers	187428	1467 (3.10-3.10)
RSRZ outliers	180081	1456 (3.10-3.10)

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 $\leq 5\%$. 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	1049	

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 7737 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.

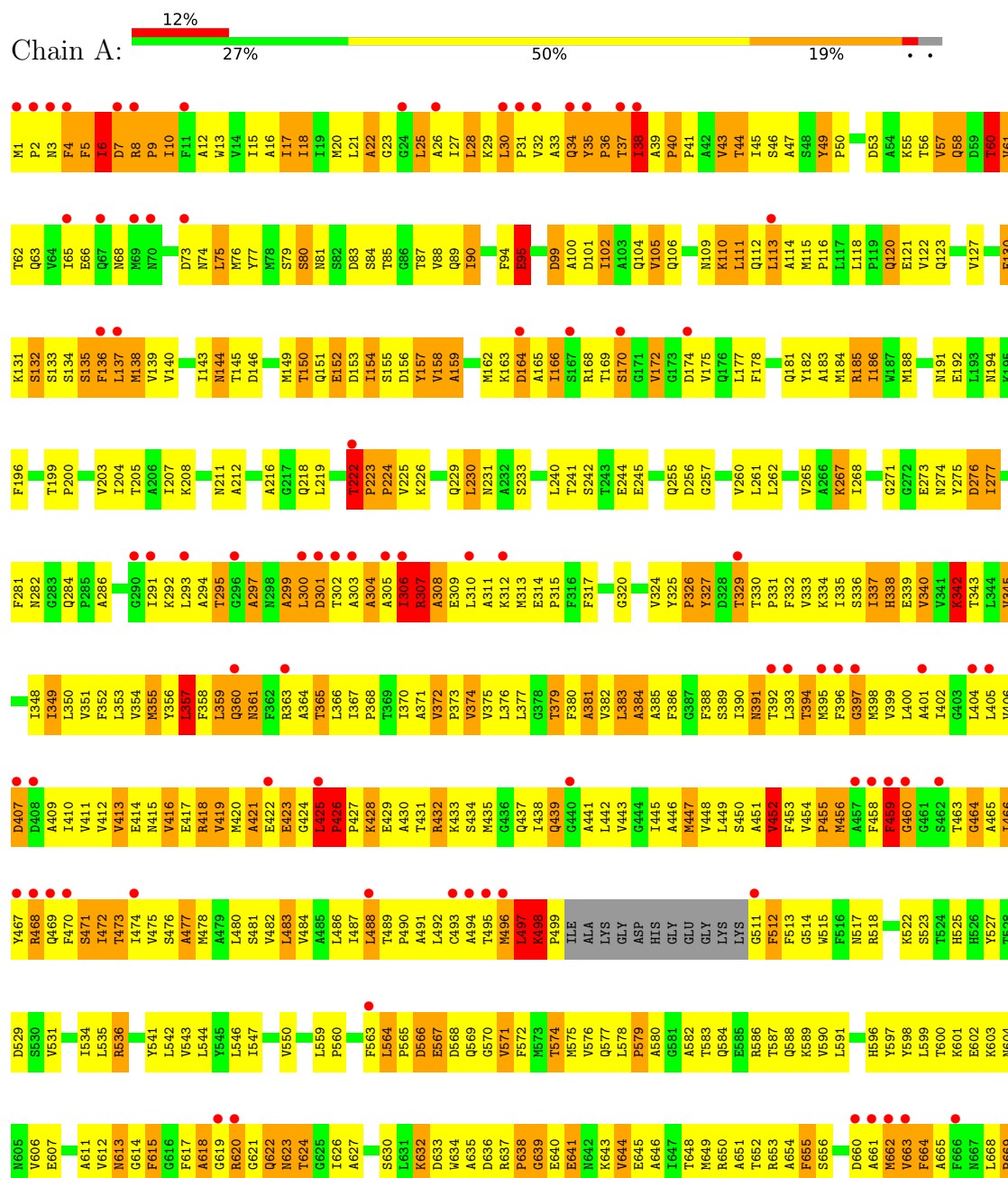
- Molecule 1 is a protein called Acriflavine resistance protein B.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	1019	7737	4983	1270	1440	44	0	0	0

3 Residue-property plots

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: Acriflavine resistance protein B





4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	H 3 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	146.30Å 146.30Å 514.30Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	45.12 – 3.10 45.12 – 3.10	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.6 (45.12-3.10) 99.7 (45.12-3.10)	Depositor EDS
R_{merge}	0.07	Depositor
R_{sym}	0.12	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	2.57 (at 3.12Å)	Xtriage
Refinement program	CNS 1.1	Depositor
R, R_{free}	0.305 , 0.341 0.300 , 0.337	Depositor DCC
R_{free} test set	1952 reflections (5.02%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	84.8	Xtriage
Anisotropy	0.281	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.29 , 61.5	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.53$, $\langle L^2 \rangle = 0.37$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.89	EDS
Total number of atoms	7737	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	69.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 2.58% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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	0.60	0/7884	1.14	59/10712 (0.6%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	1

There are no bond length outliers.

All (59) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed($^{\circ}$)	Ideal($^{\circ}$)
1	A	7	ASP	N-CA-C	10.38	122.40	108.07
1	A	306	ILE	N-CA-C	-10.37	102.90	111.81
1	A	416	VAL	N-CA-C	-10.35	101.84	111.67
1	A	456	MET	N-CA-C	-9.33	102.71	114.56
1	A	300	LEU	N-CA-C	-9.06	101.33	112.38
1	A	497	LEU	N-CA-C	8.11	128.08	110.80
1	A	8	ARG	N-CA-C	-7.89	92.29	109.11
1	A	464	GLY	N-CA-C	-7.64	104.21	113.99
1	A	130	GLU	N-CA-C	7.60	119.97	107.73
1	A	342	LYS	N-CA-C	-7.57	102.96	111.14
1	A	37	THR	N-CA-C	-7.55	98.82	109.69
1	A	564	LEU	CA-C-N	7.41	127.83	119.83
1	A	564	LEU	C-N-CA	7.41	127.83	119.83
1	A	496	MET	N-CA-C	7.18	121.14	109.59
1	A	857	TYR	N-CA-C	7.16	117.47	108.45
1	A	589	LYS	N-CA-C	-7.09	103.64	111.36
1	A	325	TYR	N-CA-C	6.98	121.68	108.97
1	A	1027	VAL	N-CA-C	-6.87	103.09	110.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	304	ALA	N-CA-C	-6.76	103.84	111.07
1	A	425	LEU	CA-C-N	-6.76	113.42	120.38
1	A	425	LEU	C-N-CA	-6.76	113.42	120.38
1	A	864	TYR	N-CA-C	-6.74	105.34	113.97
1	A	101	ASP	N-CA-C	6.69	118.65	111.36
1	A	468	ARG	N-CA-C	-6.59	103.72	111.03
1	A	644	VAL	N-CA-C	6.51	117.19	110.36
1	A	110	LYS	N-CA-C	-6.49	105.33	113.18
1	A	10	ILE	N-CA-C	6.37	116.86	110.23
1	A	698	ALA	N-CA-C	-6.28	104.88	113.30
1	A	753	ALA	N-CA-C	6.24	117.88	111.14
1	A	432	ARG	N-CA-C	-6.23	103.42	111.02
1	A	308	ALA	N-CA-C	-6.17	104.47	112.68
1	A	326	PRO	N-CA-C	-5.97	102.49	111.57
1	A	43	VAL	N-CA-C	-5.89	101.63	108.82
1	A	867	ARG	N-CA-C	5.85	123.26	110.80
1	A	664	PHE	N-CA-C	5.72	122.98	110.80
1	A	737	GLN	N-CA-C	-5.72	104.41	111.33
1	A	307	ARG	N-CA-C	-5.71	106.53	112.93
1	A	60	THR	N-CA-C	5.66	117.45	111.28
1	A	413	VAL	CB-CA-C	-5.61	106.94	111.71
1	A	49	TYR	CA-C-N	5.59	126.83	119.84
1	A	49	TYR	C-N-CA	5.59	126.83	119.84
1	A	216	ALA	N-CA-C	-5.59	100.77	109.72
1	A	927	PHE	N-CA-C	-5.55	105.14	111.07
1	A	700	ASN	N-CA-C	-5.54	105.32	111.36
1	A	84	SER	N-CA-C	-5.51	105.65	112.38
1	A	40	PRO	N-CA-C	-5.51	103.98	110.70
1	A	268	ILE	N-CA-C	5.46	115.97	107.28
1	A	80	SER	N-CA-C	5.42	117.68	110.53
1	A	617	PHE	N-CA-C	-5.37	106.57	113.02
1	A	759	VAL	N-CA-C	5.27	120.30	109.34
1	A	498	LYS	N-CA-C	5.25	121.41	109.81
1	A	265	VAL	CB-CA-C	-5.21	105.30	111.65
1	A	816	LEU	N-CA-C	-5.11	102.72	110.28
1	A	452	VAL	N-CA-C	-5.09	107.87	112.96
1	A	970	MET	N-CA-C	5.09	118.32	112.57
1	A	170	SER	N-CA-C	-5.07	107.05	113.18
1	A	966	ASP	N-CA-C	-5.06	105.04	111.11
1	A	4	PHE	N-CA-C	5.05	116.71	108.63
1	A	692	HIS	N-CA-C	-5.02	106.00	111.82

There are no chirality outliers.

All (1) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	157	TYR	Sidechain

5.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	7737	0	7884	988	3
All	All	7737	0	7884	988	3

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 63.

All (988) 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:721:LEU:HD22	1:A:825:MET:HE3	1.27	1.15
1:A:104:GLN:HG3	1:A:131:LYS:HG3	1.19	1.14
1:A:158:VAL:HG22	1:A:162:MET:HE3	1.25	1.13
1:A:472:ILE:HD12	1:A:473:THR:H	1.11	1.11
1:A:684:LEU:HD11	1:A:855:VAL:HG13	1.30	1.10
1:A:291:ILE:HD13	1:A:306:ILE:HD13	1.23	1.08
1:A:363:ARG:HB3	1:A:497:LEU:HD13	1.35	1.06
1:A:945:ILE:HG12	1:A:971:ARG:HD3	1.40	1.01
1:A:968:VAL:HA	1:A:971:ARG:NE	1.74	1.00
1:A:953:MET:HG3	1:A:959:GLY:HA3	1.44	0.99
1:A:671:ILE:HG22	1:A:674:LEU:HB3	1.41	0.99
1:A:945:ILE:HG23	1:A:971:ARG:CZ	1.95	0.95
1:A:705:GLU:HA	1:A:708:LYS:HE2	1.48	0.94
1:A:363:ARG:HD3	1:A:497:LEU:HD22	1.50	0.94
1:A:449:LEU:HD12	1:A:478:MET:SD	2.06	0.94
1:A:32:VAL:HG12	1:A:33:ALA:H	1.32	0.93
1:A:34:GLN:H	1:A:392:THR:HG23	1.34	0.93
1:A:971:ARG:O	1:A:975:ILE:HG13	1.69	0.93
1:A:38:ILE:HD12	1:A:674:LEU:HB2	1.51	0.92
1:A:104:GLN:CG	1:A:131:LYS:HG3	1.99	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:144:ASN:H	1:A:144:ASN:HD22	1.10	0.92
1:A:409:ALA:O	1:A:413:VAL:HG23	1.69	0.91
1:A:355:MET:HE1	1:A:410:ILE:HG12	1.52	0.91
1:A:402:ILE:HA	1:A:405:LEU:HD12	1.51	0.91
1:A:686:ASP:HB3	1:A:823:PRO:HG2	1.49	0.91
1:A:968:VAL:HG23	1:A:971:ARG:HH21	1.32	0.91
1:A:367:ILE:HB	1:A:368:PRO:HD3	1.52	0.91
1:A:574:THR:HG23	1:A:627:ALA:HB3	1.52	0.91
1:A:412:VAL:HG13	1:A:435:MET:HE1	1.51	0.91
1:A:53:ASP:OD1	1:A:56:THR:HG23	1.71	0.91
1:A:300:LEU:HD12	1:A:304:ALA:HB2	1.50	0.90
1:A:945:ILE:HG23	1:A:971:ARG:NH2	1.86	0.90
1:A:400:LEU:HD11	1:A:933:THR:HG21	1.52	0.90
1:A:451:ALA:HB1	1:A:883:VAL:HG13	1.54	0.89
1:A:144:ASN:H	1:A:144:ASN:ND2	1.64	0.89
1:A:438:ILE:HG22	1:A:442:LEU:HG	1.54	0.88
1:A:743:ILE:HD12	1:A:743:ILE:H	1.34	0.88
1:A:431:THR:HG21	1:A:494:ALA:HB2	1.53	0.88
1:A:32:VAL:HG12	1:A:33:ALA:N	1.89	0.88
1:A:424:GLY:C	1:A:426:PRO:HD3	1.98	0.88
1:A:307:ARG:HH21	1:A:311:ALA:HA	1.39	0.87
1:A:580:ALA:HB1	1:A:724:THR:HB	1.56	0.87
1:A:445:ILE:HD13	1:A:940:LYS:HE2	1.56	0.87
1:A:600:THR:HG23	1:A:601:LYS:H	1.40	0.86
1:A:971:ARG:HG2	1:A:971:ARG:HH11	1.39	0.86
1:A:416:VAL:HG12	1:A:420:MET:HE2	1.57	0.86
1:A:979:SER:O	1:A:983:ILE:HG13	1.75	0.86
1:A:47:ALA:HB3	1:A:88:VAL:HG12	1.57	0.86
1:A:56:THR:O	1:A:60:THR:HB	1.74	0.86
1:A:691:GLY:O	1:A:695:LEU:HB2	1.76	0.86
1:A:762:PHE:CE1	1:A:764:ASP:HB2	2.12	0.85
1:A:451:ALA:O	1:A:455:PRO:HG3	1.77	0.85
1:A:546:LEU:O	1:A:550:VAL:HG23	1.77	0.85
1:A:118:LEU:HB3	1:A:122:VAL:HG21	1.58	0.84
1:A:291:ILE:HG21	1:A:306:ILE:HD11	1.58	0.84
1:A:418:ARG:HG3	1:A:419:VAL:N	1.90	0.84
1:A:677:ALA:HB2	1:A:867:ARG:HH21	1.40	0.84
1:A:648:THR:O	1:A:652:THR:HG23	1.77	0.84
1:A:111:LEU:CD2	1:A:115:MET:HG2	2.07	0.84
1:A:907:LEU:O	1:A:910:ILE:HG22	1.76	0.84
1:A:904:VAL:CG1	1:A:938:SER:HB3	2.08	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:375:VAL:HG22	1:A:484:VAL:HG21	1.59	0.84
1:A:596:HIS:O	1:A:600:THR:HG22	1.78	0.84
1:A:783:PRO:O	1:A:786:ILE:HG12	1.77	0.83
1:A:291:ILE:CD1	1:A:306:ILE:HD13	2.07	0.83
1:A:894:SER:OG	1:A:897:ILE:HB	1.79	0.83
1:A:945:ILE:HA	1:A:971:ARG:NH1	1.94	0.83
1:A:696:THR:HG22	1:A:825:MET:SD	2.18	0.83
1:A:144:ASN:HD22	1:A:144:ASN:N	1.76	0.83
1:A:477:ALA:HA	1:A:480:LEU:HD12	1.61	0.82
1:A:162:MET:HA	1:A:313:MET:SD	2.19	0.82
1:A:366:LEU:O	1:A:370:ILE:HG13	1.79	0.82
1:A:143:ILE:HG22	1:A:286:ALA:HB2	1.59	0.82
1:A:721:LEU:HD22	1:A:825:MET:CE	2.07	0.82
1:A:418:ARG:HG3	1:A:419:VAL:H	1.45	0.82
1:A:172:VAL:HB	1:A:294:ALA:HB2	1.60	0.82
1:A:361:ASN:HD21	1:A:363:ARG:HB2	1.43	0.82
1:A:652:THR:HG22	1:A:664:PHE:O	1.79	0.82
1:A:903:LEU:HD12	1:A:1025:PHE:HB2	1.61	0.82
1:A:463:THR:HG21	1:A:868:LEU:HD11	1.61	0.81
1:A:472:ILE:HD12	1:A:473:THR:N	1.94	0.81
1:A:879:ILE:HA	1:A:882:ILE:HB	1.63	0.81
1:A:568:ASP:OD1	1:A:644:VAL:HB	1.80	0.81
1:A:880:SER:O	1:A:884:VAL:HG23	1.81	0.81
1:A:95:GLU:H	1:A:95:GLU:CD	1.85	0.81
1:A:612:VAL:HB	1:A:626:ILE:HG22	1.62	0.81
1:A:41:PRO:HB3	1:A:295:THR:HG21	1.62	0.80
1:A:873:ALA:O	1:A:877:TYR:HB2	1.81	0.80
1:A:470:PHE:CE2	1:A:929:VAL:HG13	2.16	0.80
1:A:6:ILE:HG23	1:A:7:ASP:N	1.97	0.80
1:A:489:THR:HB	1:A:490:PRO:HD3	1.63	0.80
1:A:677:ALA:HB2	1:A:867:ARG:NH2	1.97	0.80
1:A:662:MET:O	1:A:664:PHE:N	2.15	0.79
1:A:448:VAL:HG22	1:A:887:CYS:HB2	1.64	0.79
1:A:363:ARG:HB3	1:A:497:LEU:CD1	2.11	0.79
1:A:894:SER:OG	1:A:898:PRO:HD3	1.82	0.79
1:A:363:ARG:CB	1:A:497:LEU:HD13	2.13	0.79
1:A:172:VAL:HB	1:A:294:ALA:CB	2.12	0.79
1:A:222:THR:HB	1:A:223:PRO:HD3	1.64	0.79
1:A:903:LEU:O	1:A:906:PRO:HD2	1.83	0.78
1:A:966:ASP:O	1:A:970:MET:HG2	1.83	0.78
1:A:185:ARG:HH22	1:A:774:MET:HE3	1.48	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:110:LYS:HZ3	1:A:113:LEU:HD12	1.48	0.78
1:A:170:SER:OG	1:A:305:ALA:HB3	1.82	0.78
1:A:577:GLN:H	1:A:662:MET:HB2	1.46	0.78
1:A:613:ASN:C	1:A:613:ASN:HD22	1.89	0.78
1:A:291:ILE:HD13	1:A:306:ILE:CD1	2.11	0.77
1:A:456:MET:HE3	1:A:932:LEU:HD21	1.67	0.77
1:A:613:ASN:HD22	1:A:614:GLY:N	1.83	0.76
1:A:765:ARG:HG3	1:A:765:ARG:HH11	1.48	0.76
1:A:343:THR:HG21	1:A:989:LEU:HD21	1.67	0.76
1:A:945:ILE:HG12	1:A:971:ARG:CD	2.13	0.76
1:A:53:ASP:O	1:A:57:VAL:HG13	1.85	0.76
1:A:904:VAL:HG12	1:A:938:SER:HB3	1.67	0.76
1:A:732:ASP:OD2	1:A:735:LYS:HE3	1.85	0.76
1:A:480:LEU:O	1:A:484:VAL:HG23	1.84	0.76
1:A:37:THR:O	1:A:38:ILE:HG23	1.86	0.75
1:A:662:MET:SD	1:A:662:MET:C	2.69	0.75
1:A:544:LEU:O	1:A:547:ILE:HB	1.86	0.75
1:A:599:LEU:O	1:A:603:LYS:HB3	1.87	0.74
1:A:393:LEU:HD21	1:A:466:ILE:HG23	1.69	0.74
1:A:407:ASP:O	1:A:411:VAL:HG23	1.86	0.74
1:A:414:GLU:HA	1:A:417:GLU:HB3	1.68	0.74
1:A:527:TYR:O	1:A:531:VAL:HG23	1.87	0.74
1:A:32:VAL:CG1	1:A:33:ALA:H	1.99	0.74
1:A:860:THR:HG22	1:A:861:GLY:H	1.52	0.74
1:A:307:ARG:NH2	1:A:311:ALA:HA	2.02	0.73
1:A:712:MET:HG2	1:A:835:LYS:HE3	1.70	0.73
1:A:166:ILE:HD11	1:A:310:LEU:HG	1.70	0.73
1:A:186:ILE:HD12	1:A:262:LEU:HD21	1.69	0.73
1:A:574:THR:HB	1:A:665:ALA:HB2	1.71	0.73
1:A:792:ARG:HH11	1:A:792:ARG:HG2	1.52	0.73
1:A:399:VAL:HA	1:A:402:ILE:HG13	1.71	0.73
1:A:574:THR:HA	1:A:665:ALA:HA	1.68	0.73
1:A:61:VAL:HG13	1:A:118:LEU:HD22	1.70	0.73
1:A:393:LEU:O	1:A:393:LEU:HD23	1.89	0.73
1:A:445:ILE:HD12	1:A:446:ALA:N	2.04	0.72
1:A:39:ALA:HB2	1:A:673:GLU:CG	2.20	0.72
1:A:404:LEU:HD22	1:A:449:LEU:HG	1.70	0.72
1:A:890:ALA:C	1:A:891:LEU:HD22	2.15	0.72
1:A:393:LEU:HD11	1:A:466:ILE:HG23	1.71	0.72
1:A:1029:VAL:HG12	1:A:1029:VAL:O	1.87	0.72
1:A:170:SER:O	1:A:302:THR:HG23	1.89	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:383:LEU:HD22	1:A:388:PHE:HB2	1.73	0.71
1:A:429:GLU:HA	1:A:432:ARG:HD2	1.71	0.71
1:A:360:GLN:HB3	1:A:513:PHE:CD2	2.25	0.71
1:A:181:GLN:NE2	1:A:767:ARG:HE	1.89	0.71
1:A:38:ILE:HG21	1:A:674:LEU:HD22	1.72	0.71
1:A:488:LEU:O	1:A:492:LEU:N	2.22	0.71
1:A:567:GLU:HG2	1:A:998:GLY:HA3	1.73	0.71
1:A:135:SER:OG	1:A:672:VAL:HG13	1.90	0.71
1:A:600:THR:HG23	1:A:601:LYS:N	2.05	0.71
1:A:300:LEU:CD1	1:A:304:ALA:HB2	2.20	0.71
1:A:293:LEU:HD22	1:A:297:ALA:CB	2.21	0.70
1:A:60:THR:HG22	1:A:61:VAL:HG23	1.71	0.70
1:A:170:SER:HB2	1:A:302:THR:HA	1.73	0.70
1:A:568:ASP:HB2	1:A:644:VAL:HG12	1.72	0.70
1:A:68:ASN:OD1	1:A:114:ALA:HB2	1.91	0.70
1:A:111:LEU:HD21	1:A:115:MET:HG2	1.72	0.70
1:A:62:THR:O	1:A:66:GLU:HG3	1.92	0.70
1:A:525:HIS:NE2	1:A:529:ASP:OD2	2.23	0.70
1:A:972:LEU:O	1:A:976:LEU:HB2	1.90	0.70
1:A:466:ILE:HD12	1:A:466:ILE:N	2.07	0.70
1:A:470:PHE:O	1:A:472:ILE:N	2.24	0.70
1:A:576:VAL:HA	1:A:662:MET:CG	2.22	0.70
1:A:281:PHE:CE2	1:A:324:VAL:HG21	2.27	0.69
1:A:488:LEU:O	1:A:492:LEU:HG	1.92	0.69
1:A:395:MET:O	1:A:398:MET:HB2	1.93	0.69
1:A:618:ALA:O	1:A:620:ARG:N	2.25	0.69
1:A:169:THR:HG22	1:A:170:SER:H	1.57	0.69
1:A:172:VAL:HG23	1:A:293:LEU:HA	1.75	0.68
1:A:222:THR:O	1:A:224:PRO:HD3	1.94	0.68
1:A:446:ALA:CB	1:A:482:VAL:HG21	2.23	0.68
1:A:25:LEU:HD12	1:A:25:LEU:O	1.92	0.68
1:A:968:VAL:HA	1:A:971:ARG:HE	1.56	0.68
1:A:41:PRO:CB	1:A:295:THR:HG21	2.22	0.68
1:A:357:LEU:HD13	1:A:357:LEU:O	1.93	0.68
1:A:682:PHE:HB3	1:A:827:ILE:HB	1.75	0.68
1:A:477:ALA:CA	1:A:480:LEU:HD12	2.23	0.68
1:A:391:ASN:C	1:A:393:LEU:H	2.01	0.67
1:A:112:GLN:C	1:A:114:ALA:H	1.99	0.67
1:A:5:PHE:CZ	1:A:6:ILE:HG22	2.29	0.67
1:A:90:ILE:HD12	1:A:90:ILE:H	1.59	0.67
1:A:655:PHE:O	1:A:663:VAL:HG22	1.94	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:671:ILE:CG2	1:A:674:LEU:HB3	2.20	0.67
1:A:904:VAL:HG21	1:A:942:ALA:HB2	1.77	0.66
1:A:434:SER:O	1:A:438:ILE:HG13	1.95	0.66
1:A:861:GLY:O	1:A:862:MET:HB3	1.94	0.66
1:A:873:ALA:HB1	1:A:877:TYR:HD2	1.61	0.66
1:A:430:ALA:HA	1:A:433:LYS:HD2	1.78	0.66
1:A:412:VAL:CG1	1:A:435:MET:HE1	2.23	0.66
1:A:102:ILE:O	1:A:105:VAL:HG12	1.95	0.66
1:A:111:LEU:HD11	1:A:127:VAL:HG11	1.78	0.66
1:A:584:GLN:H	1:A:622:GLN:HE21	1.44	0.66
1:A:188:MET:N	1:A:775:SER:HA	2.10	0.65
1:A:337:ILE:O	1:A:338:HIS:C	2.40	0.65
1:A:670:ALA:O	1:A:671:ILE:HB	1.96	0.65
1:A:430:ALA:O	1:A:433:LYS:HB2	1.97	0.65
1:A:487:ILE:O	1:A:489:THR:N	2.30	0.65
1:A:890:ALA:O	1:A:891:LEU:HD22	1.96	0.65
1:A:407:ASP:OD1	1:A:978:THR:HG21	1.96	0.65
1:A:27:ILE:C	1:A:29:LYS:H	2.05	0.64
1:A:32:VAL:HB	1:A:389:SER:OG	1.98	0.64
1:A:359:LEU:HD21	1:A:977:MET:CE	2.28	0.64
1:A:655:PHE:HB3	1:A:662:MET:HE1	1.78	0.64
1:A:300:LEU:O	1:A:303:ALA:N	2.31	0.64
1:A:484:VAL:O	1:A:487:ILE:O	2.15	0.64
1:A:38:ILE:HD12	1:A:674:LEU:CB	2.27	0.64
1:A:32:VAL:HG13	1:A:299:ALA:HB1	1.79	0.64
1:A:355:MET:HE1	1:A:410:ILE:CG1	2.26	0.64
1:A:859:TRP:HB3	1:A:863:SER:O	1.97	0.64
1:A:726:GLN:NE2	1:A:812:GLY:HA3	2.12	0.64
1:A:953:MET:HG3	1:A:959:GLY:CA	2.26	0.64
1:A:713:LEU:CD1	1:A:844:MET:HE3	2.28	0.64
1:A:905:VAL:O	1:A:909:VAL:HG23	1.97	0.64
1:A:151:GLN:HG3	1:A:152:GLU:OE1	1.97	0.64
1:A:620:ARG:HG2	1:A:620:ARG:HH11	1.63	0.64
1:A:158:VAL:HG22	1:A:162:MET:CE	2.17	0.63
1:A:792:ARG:HG3	1:A:793:ALA:N	2.12	0.63
1:A:359:LEU:HD21	1:A:977:MET:HE1	1.80	0.63
1:A:472:ILE:CD1	1:A:473:THR:H	1.98	0.63
1:A:37:THR:HG22	1:A:38:ILE:H	1.62	0.63
1:A:445:ILE:HG22	1:A:943:ILE:HD13	1.80	0.63
1:A:600:THR:HG23	1:A:601:LYS:HG3	1.80	0.63
1:A:693:GLU:O	1:A:697:GLN:HB2	1.98	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:134:SER:O	1:A:135:SER:HB2	1.99	0.63
1:A:448:VAL:O	1:A:452:VAL:HG13	1.99	0.63
1:A:705:GLU:CB	1:A:847:LEU:HD22	2.28	0.63
1:A:862:MET:O	1:A:863:SER:HB3	1.98	0.63
1:A:137:LEU:HD11	1:A:293:LEU:HG	1.81	0.63
1:A:559:LEU:HD12	1:A:560:PRO:HD2	1.81	0.63
1:A:569:GLN:OE1	1:A:668:LEU:HD12	1.98	0.63
1:A:576:VAL:HA	1:A:662:MET:HG2	1.80	0.63
1:A:337:ILE:HG22	1:A:338:HIS:N	2.13	0.62
1:A:361:ASN:ND2	1:A:363:ARG:H	1.98	0.62
1:A:851:LEU:HD13	1:A:855:VAL:HG11	1.81	0.62
1:A:456:MET:C	1:A:458:PHE:H	2.07	0.62
1:A:471:SER:O	1:A:475:VAL:HG23	2.00	0.62
1:A:905:VAL:HB	1:A:906:PRO:HD3	1.81	0.62
1:A:13:TRP:O	1:A:16:ALA:HB3	2.00	0.62
1:A:582:ALA:HA	1:A:586:ARG:CZ	2.30	0.62
1:A:5:PHE:CE2	1:A:6:ILE:HG22	2.35	0.62
1:A:453:PHE:CZ	1:A:474:ILE:HG21	2.35	0.62
1:A:897:ILE:HD11	1:A:1030:ARG:NH1	2.15	0.62
1:A:435:MET:HB3	1:A:439:GLN:HG3	1.82	0.62
1:A:451:ALA:HB1	1:A:883:VAL:CG1	2.28	0.62
1:A:174:ASP:OD1	1:A:292:LYS:HD2	2.00	0.61
1:A:181:GLN:NE2	1:A:767:ARG:HH21	1.97	0.61
1:A:276:ASP:OD2	1:A:621:GLY:HA2	2.00	0.61
1:A:281:PHE:O	1:A:282:ASN:HB2	1.98	0.61
1:A:930:GLY:O	1:A:933:THR:HG23	2.00	0.61
1:A:314:GLU:HA	1:A:317:PHE:CD2	2.35	0.61
1:A:181:GLN:HE22	1:A:767:ARG:HH21	1.47	0.61
1:A:159:ALA:HB1	1:A:181:GLN:HB2	1.82	0.61
1:A:987:MET:N	1:A:988:PRO:HD2	2.15	0.61
1:A:487:ILE:HG22	1:A:488:LEU:H	1.65	0.61
1:A:607:GLU:HB3	1:A:630:SER:O	1.99	0.61
1:A:817:GLU:O	1:A:818:ARG:HD2	2.01	0.61
1:A:971:ARG:HG2	1:A:971:ARG:NH1	2.06	0.61
1:A:95:GLU:CD	1:A:95:GLU:N	2.57	0.61
1:A:222:THR:CB	1:A:223:PRO:CD	2.78	0.61
1:A:447:MET:HE3	1:A:447:MET:HA	1.83	0.61
1:A:299:ALA:HB3	1:A:301:ASP:OD2	2.01	0.61
1:A:873:ALA:HB1	1:A:877:TYR:CD2	2.35	0.61
1:A:1022:VAL:HA	1:A:1025:PHE:CE1	2.36	0.61
1:A:399:VAL:HA	1:A:402:ILE:CG1	2.31	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:563:PHE:O	1:A:564:LEU:HD12	2.00	0.61
1:A:732:ASP:OD2	1:A:735:LYS:HB2	2.01	0.61
1:A:393:LEU:HD21	1:A:466:ILE:CG2	2.30	0.60
1:A:582:ALA:HA	1:A:586:ARG:NH2	2.16	0.60
1:A:111:LEU:HD23	1:A:111:LEU:C	2.25	0.60
1:A:293:LEU:HD22	1:A:297:ALA:HB3	1.83	0.60
1:A:445:ILE:CG2	1:A:943:ILE:HG21	2.31	0.60
1:A:775:SER:HB2	1:A:789:TRP:HH2	1.66	0.60
1:A:144:ASN:HD21	1:A:284:GLN:HG2	1.67	0.60
1:A:951:ASP:C	1:A:953:MET:H	2.09	0.60
1:A:1004:GLY:O	1:A:1007:VAL:HB	2.02	0.60
1:A:181:GLN:HE22	1:A:767:ARG:HE	1.49	0.60
1:A:456:MET:CE	1:A:932:LEU:HD21	2.30	0.60
1:A:644:VAL:HG13	1:A:645:GLU:N	2.17	0.60
1:A:5:PHE:CG	1:A:6:ILE:N	2.69	0.60
1:A:470:PHE:CG	1:A:471:SER:N	2.68	0.60
1:A:47:ALA:HB3	1:A:88:VAL:CG1	2.29	0.60
1:A:649:MET:HE3	1:A:653:ARG:NH2	2.17	0.60
1:A:299:ALA:HB3	1:A:301:ASP:CG	2.27	0.60
1:A:713:LEU:HD21	1:A:840:ALA:O	2.02	0.60
1:A:894:SER:O	1:A:895:TRP:HB2	2.02	0.60
1:A:299:ALA:C	1:A:301:ASP:N	2.54	0.60
1:A:312:LYS:O	1:A:315:PRO:HD2	2.00	0.60
1:A:368:PRO:O	1:A:372:VAL:HG22	2.02	0.60
1:A:705:GLU:O	1:A:708:LYS:HG2	2.02	0.60
1:A:453:PHE:CE1	1:A:474:ILE:HG21	2.36	0.59
1:A:490:PRO:HA	1:A:493:CYS:SG	2.42	0.59
1:A:904:VAL:HG11	1:A:938:SER:HB3	1.84	0.59
1:A:921:LEU:CD1	1:A:1005:THR:HG21	2.31	0.59
1:A:946:VAL:O	1:A:949:ALA:HB3	2.02	0.59
1:A:514:GLY:O	1:A:518:ARG:HB3	2.02	0.59
1:A:399:VAL:HA	1:A:402:ILE:CD1	2.33	0.59
1:A:445:ILE:HD13	1:A:940:LYS:CE	2.31	0.59
1:A:883:VAL:O	1:A:886:LEU:HB2	2.01	0.59
1:A:886:LEU:O	1:A:889:ALA:N	2.33	0.59
1:A:166:ILE:CD1	1:A:309:GLU:HB2	2.33	0.59
1:A:424:GLY:O	1:A:426:PRO:HD3	2.01	0.59
1:A:983:ILE:HG23	1:A:1008:MET:HG3	1.84	0.59
1:A:35:TYR:HB3	1:A:36:PRO:HD2	1.83	0.59
1:A:104:GLN:HE21	1:A:130:GLU:HA	1.67	0.59
1:A:980:LEU:HG	1:A:984:LEU:HD12	1.84	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:446:ALA:HB1	1:A:482:VAL:HG21	1.84	0.59
1:A:596:HIS:CD2	1:A:600:THR:HG21	2.37	0.59
1:A:613:ASN:C	1:A:613:ASN:ND2	2.61	0.59
1:A:32:VAL:HG13	1:A:299:ALA:CB	2.33	0.58
1:A:463:THR:CB	1:A:868:LEU:HD21	2.33	0.58
1:A:426:PRO:O	1:A:430:ALA:HB2	2.02	0.58
1:A:451:ALA:O	1:A:880:SER:HA	2.03	0.58
1:A:692:HIS:O	1:A:696:THR:HG23	2.03	0.58
1:A:861:GLY:O	1:A:862:MET:CB	2.50	0.58
1:A:73:ASP:O	1:A:74:ASN:HB2	2.02	0.58
1:A:622:GLN:O	1:A:623:ASN:HB2	2.04	0.58
1:A:702:LEU:HB2	1:A:851:LEU:HD21	1.84	0.58
1:A:925:VAL:O	1:A:929:VAL:HG23	2.04	0.58
1:A:5:PHE:C	1:A:6:ILE:O	2.45	0.58
1:A:166:ILE:HD12	1:A:309:GLU:HB2	1.85	0.58
1:A:921:LEU:HD12	1:A:1005:THR:HG21	1.86	0.58
1:A:222:THR:HB	1:A:223:PRO:CD	2.32	0.58
1:A:720:GLY:O	1:A:722:GLU:HG2	2.03	0.58
1:A:456:MET:C	1:A:458:PHE:N	2.62	0.58
1:A:294:ALA:O	1:A:295:THR:C	2.46	0.58
1:A:415:ASN:O	1:A:419:VAL:HG23	2.04	0.58
1:A:632:LYS:NZ	1:A:632:LYS:HB3	2.19	0.58
1:A:650:ARG:HG3	1:A:650:ARG:HH11	1.69	0.58
1:A:656:SER:HA	1:A:663:VAL:CG1	2.34	0.58
1:A:294:ALA:O	1:A:297:ALA:HB2	2.03	0.58
1:A:360:GLN:HB3	1:A:513:PHE:CE2	2.38	0.58
1:A:458:PHE:C	1:A:460:GLY:H	2.10	0.58
1:A:162:MET:O	1:A:313:MET:HE1	2.03	0.58
1:A:454:VAL:N	1:A:455:PRO:HD2	2.19	0.58
1:A:542:LEU:HD23	1:A:542:LEU:O	2.04	0.58
1:A:968:VAL:CG2	1:A:971:ARG:HH21	2.12	0.58
1:A:860:THR:HG22	1:A:861:GLY:N	2.17	0.58
1:A:58:GLN:O	1:A:63:GLN:HG3	2.04	0.57
1:A:291:ILE:HG21	1:A:306:ILE:CD1	2.32	0.57
1:A:765:ARG:HG3	1:A:765:ARG:NH1	2.18	0.57
1:A:25:LEU:CD1	1:A:29:LYS:HD2	2.34	0.57
1:A:361:ASN:ND2	1:A:363:ARG:HB2	2.17	0.57
1:A:568:ASP:O	1:A:634:TRP:HZ3	1.85	0.57
1:A:33:ALA:HB1	1:A:392:THR:HG23	1.86	0.57
1:A:705:GLU:HB3	1:A:847:LEU:HD22	1.86	0.57
1:A:878:ALA:O	1:A:882:ILE:HG13	2.03	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:453:PHE:O	1:A:471:SER:OG	2.22	0.57
1:A:860:THR:O	1:A:864:TYR:HB2	2.03	0.57
1:A:60:THR:HG22	1:A:61:VAL:CG2	2.34	0.57
1:A:337:ILE:O	1:A:340:VAL:N	2.38	0.57
1:A:447:MET:HG3	1:A:887:CYS:SG	2.44	0.57
1:A:635:ALA:C	1:A:637:ARG:H	2.13	0.57
1:A:267:LYS:HB2	1:A:267:LYS:NZ	2.19	0.57
1:A:112:GLN:C	1:A:114:ALA:N	2.63	0.57
1:A:527:TYR:CE2	1:A:968:VAL:CG1	2.88	0.57
1:A:881:LEU:HD23	1:A:884:VAL:HG21	1.87	0.57
1:A:468:ARG:O	1:A:472:ILE:HG13	2.05	0.57
1:A:429:GLU:O	1:A:433:LYS:HG3	2.05	0.57
1:A:169:THR:OG1	1:A:309:GLU:HG3	2.05	0.57
1:A:39:ALA:HB2	1:A:673:GLU:CD	2.29	0.56
1:A:241:THR:HG22	1:A:763:ILE:O	2.04	0.56
1:A:372:VAL:HG23	1:A:373:PRO:CD	2.35	0.56
1:A:396:PHE:O	1:A:398:MET:N	2.38	0.56
1:A:468:ARG:C	1:A:470:PHE:N	2.62	0.56
1:A:85:THR:OG1	1:A:87:THR:HG22	2.05	0.56
1:A:222:THR:CB	1:A:223:PRO:HD3	2.31	0.56
1:A:620:ARG:HG2	1:A:620:ARG:NH1	2.18	0.56
1:A:717:ARG:HB2	1:A:718:PRO:HD2	1.87	0.56
1:A:33:ALA:HA	1:A:391:ASN:HA	1.87	0.56
1:A:433:LYS:O	1:A:437:GLN:HG3	2.06	0.56
1:A:448:VAL:HG13	1:A:884:VAL:HG22	1.87	0.56
1:A:600:THR:CG2	1:A:601:LYS:H	2.15	0.56
1:A:713:LEU:HD13	1:A:844:MET:HE3	1.88	0.56
1:A:12:ALA:O	1:A:15:ILE:N	2.38	0.56
1:A:38:ILE:HG13	1:A:39:ALA:H	1.69	0.56
1:A:367:ILE:HB	1:A:368:PRO:CD	2.33	0.56
1:A:879:ILE:O	1:A:883:VAL:HG12	2.05	0.56
1:A:489:THR:HB	1:A:490:PRO:CD	2.35	0.56
1:A:967:ALA:HB1	1:A:971:ARG:HH12	1.71	0.56
1:A:1024:VAL:O	1:A:1026:PHE:N	2.36	0.56
1:A:813:SER:HB3	1:A:816:LEU:HD23	1.87	0.56
1:A:143:ILE:HG22	1:A:286:ALA:CB	2.33	0.56
1:A:897:ILE:HD11	1:A:1030:ARG:HH12	1.69	0.56
1:A:90:ILE:HD12	1:A:90:ILE:N	2.20	0.56
1:A:100:ALA:HB1	1:A:131:LYS:HE3	1.88	0.56
1:A:30:LEU:HD11	1:A:389:SER:HB2	1.87	0.56
1:A:345:VAL:O	1:A:348:ILE:HB	2.06	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:68:ASN:CG	1:A:114:ALA:HB2	2.31	0.55
1:A:701:GLN:O	1:A:705:GLU:HG2	2.06	0.55
1:A:971:ARG:O	1:A:975:ILE:CG1	2.49	0.55
1:A:99:ASP:HB3	1:A:102:ILE:HG22	1.89	0.55
1:A:351:VAL:O	1:A:355:MET:HB2	2.06	0.55
1:A:402:ILE:O	1:A:406:VAL:HG22	2.06	0.55
1:A:455:PRO:HG3	1:A:880:SER:HA	1.88	0.55
1:A:968:VAL:HG23	1:A:971:ARG:NH2	2.13	0.55
1:A:895:TRP:HA	1:A:895:TRP:CE3	2.42	0.55
1:A:357:LEU:O	1:A:357:LEU:HD22	2.06	0.55
1:A:434:SER:HB3	1:A:435:MET:HE2	1.88	0.55
1:A:577:GLN:OE1	1:A:624:THR:HG22	2.05	0.55
1:A:578:LEU:HD21	1:A:590:VAL:HG21	1.89	0.55
1:A:981:ALA:O	1:A:985:GLY:N	2.39	0.55
1:A:448:VAL:HG21	1:A:888:LEU:CD2	2.37	0.55
1:A:43:VAL:HG12	1:A:44:THR:H	1.72	0.55
1:A:240:LEU:HG	1:A:245:GLU:HB3	1.89	0.55
1:A:664:PHE:O	1:A:665:ALA:HB3	2.07	0.55
1:A:301:ASP:HA	1:A:304:ALA:HB3	1.89	0.54
1:A:364:ALA:C	1:A:366:LEU:N	2.62	0.54
1:A:81:ASN:O	1:A:88:VAL:HG23	2.08	0.54
1:A:178:PHE:C	1:A:277:ILE:HD11	2.31	0.54
1:A:641:GLU:OE1	1:A:641:GLU:HA	2.06	0.54
1:A:756:GLY:HA2	1:A:774:MET:HG3	1.89	0.54
1:A:6:ILE:HG23	1:A:7:ASP:H	1.72	0.54
1:A:230:LEU:HG	1:A:231:ASN:N	2.22	0.54
1:A:372:VAL:HG23	1:A:373:PRO:HD3	1.89	0.54
1:A:355:MET:CE	1:A:410:ILE:HG12	2.34	0.54
1:A:118:LEU:HB3	1:A:122:VAL:CG2	2.33	0.54
1:A:396:PHE:C	1:A:398:MET:N	2.65	0.54
1:A:445:ILE:HG22	1:A:943:ILE:CD1	2.37	0.54
1:A:37:THR:HG22	1:A:38:ILE:N	2.22	0.54
1:A:734:GLU:C	1:A:736:ALA:H	2.15	0.54
1:A:810:GLU:HG2	1:A:811:TYR:H	1.72	0.54
1:A:953:MET:CG	1:A:959:GLY:HA3	2.29	0.54
1:A:30:LEU:N	1:A:31:PRO:CD	2.71	0.54
1:A:400:LEU:HD12	1:A:400:LEU:O	2.08	0.54
1:A:646:ALA:HB1	1:A:650:ARG:HH12	1.73	0.54
1:A:373:PRO:HG2	1:A:374:VAL:H	1.72	0.54
1:A:429:GLU:HB2	1:A:433:LYS:HZ3	1.73	0.54
1:A:895:TRP:HA	1:A:895:TRP:HE3	1.72	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:66:GLU:OE1	1:A:80:SER:HB2	2.08	0.54
1:A:157:TYR:HE2	1:A:317:PHE:CE1	2.24	0.54
1:A:144:ASN:HB2	1:A:146:ASP:O	2.07	0.54
1:A:576:VAL:HA	1:A:662:MET:HB2	1.89	0.54
1:A:674:LEU:O	1:A:674:LEU:HG	2.06	0.54
1:A:25:LEU:HD12	1:A:29:LYS:HD2	1.89	0.53
1:A:155:SER:O	1:A:158:VAL:HB	2.08	0.53
1:A:6:ILE:CG2	1:A:7:ASP:N	2.67	0.53
1:A:300:LEU:O	1:A:302:THR:N	2.41	0.53
1:A:418:ARG:O	1:A:420:MET:N	2.41	0.53
1:A:30:LEU:HG	1:A:30:LEU:O	2.08	0.53
1:A:111:LEU:HD23	1:A:111:LEU:O	2.08	0.53
1:A:308:ALA:O	1:A:311:ALA:HB3	2.08	0.53
1:A:314:GLU:HA	1:A:317:PHE:CE2	2.43	0.53
1:A:412:VAL:HG12	1:A:412:VAL:O	2.08	0.53
1:A:463:THR:C	1:A:465:ALA:N	2.61	0.53
1:A:566:ASP:O	1:A:567:GLU:C	2.51	0.53
1:A:987:MET:O	1:A:991:ILE:HG13	2.08	0.53
1:A:149:MET:C	1:A:150:THR:HG22	2.33	0.53
1:A:406:VAL:HG23	1:A:407:ASP:N	2.23	0.53
1:A:663:VAL:O	1:A:664:PHE:CD2	2.62	0.53
1:A:359:LEU:O	1:A:360:GLN:C	2.52	0.53
1:A:474:ILE:HD12	1:A:474:ILE:N	2.23	0.53
1:A:35:TYR:N	1:A:391:ASN:OD1	2.41	0.53
1:A:66:GLU:OE1	1:A:80:SER:CB	2.56	0.53
1:A:541:TYR:C	1:A:543:VAL:N	2.65	0.53
1:A:459:PHE:C	1:A:464:GLY:HA3	2.34	0.53
1:A:4:PHE:O	1:A:5:PHE:O	2.27	0.53
1:A:104:GLN:NE2	1:A:130:GLU:HA	2.24	0.53
1:A:144:ASN:HB3	1:A:149:MET:HB2	1.90	0.53
1:A:527:TYR:CE2	1:A:968:VAL:HG13	2.44	0.53
1:A:732:ASP:O	1:A:733:GLN:C	2.51	0.53
1:A:33:ALA:HB3	1:A:333:VAL:HG13	1.91	0.52
1:A:426:PRO:HB2	1:A:429:GLU:HG2	1.91	0.52
1:A:571:VAL:O	1:A:572:PHE:HB3	2.08	0.52
1:A:576:VAL:HG13	1:A:662:MET:HG3	1.90	0.52
1:A:705:GLU:HB2	1:A:847:LEU:HD22	1.89	0.52
1:A:405:LEU:CD2	1:A:481:SER:HB3	2.39	0.52
1:A:654:ALA:C	1:A:656:SER:H	2.17	0.52
1:A:928:GLN:O	1:A:929:VAL:C	2.50	0.52
1:A:919:ARG:NH2	1:A:990:VAL:HG12	2.24	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:967:ALA:HB1	1:A:971:ARG:NH1	2.24	0.52
1:A:671:ILE:HG21	1:A:674:LEU:HD23	1.91	0.52
1:A:712:MET:O	1:A:713:LEU:HD23	2.08	0.52
1:A:743:ILE:H	1:A:743:ILE:CD1	2.11	0.52
1:A:879:ILE:CA	1:A:882:ILE:HB	2.38	0.52
1:A:894:SER:C	1:A:896:SER:H	2.17	0.52
1:A:12:ALA:O	1:A:13:TRP:C	2.53	0.52
1:A:330:THR:HG22	1:A:334:LYS:HD2	1.91	0.52
1:A:722:GLU:O	1:A:723:ASP:HB2	2.10	0.52
1:A:792:ARG:HG2	1:A:792:ARG:NH1	2.22	0.52
1:A:299:ALA:C	1:A:301:ASP:H	2.16	0.52
1:A:364:ALA:C	1:A:366:LEU:H	2.16	0.52
1:A:402:ILE:HA	1:A:405:LEU:CD1	2.34	0.52
1:A:587:THR:HG23	1:A:613:ASN:OD1	2.09	0.52
1:A:683:GLU:HG3	1:A:824:SER:OG	2.10	0.52
1:A:904:VAL:O	1:A:905:VAL:C	2.53	0.52
1:A:27:ILE:HD11	1:A:380:PHE:CD1	2.44	0.52
1:A:472:ILE:O	1:A:474:ILE:N	2.42	0.52
1:A:376:LEU:O	1:A:377:LEU:C	2.53	0.52
1:A:492:LEU:O	1:A:496:MET:N	2.43	0.52
1:A:371:ALA:O	1:A:375:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:774:MET:O	1:A:775:SER:CB	2.57	0.52
1:A:165:ALA:HB3	1:A:313:MET:HE2	1.92	0.51
1:A:372:VAL:N	1:A:373:PRO:HD2	2.25	0.51
1:A:405:LEU:HD23	1:A:481:SER:HB3	1.90	0.51
1:A:43:VAL:C	1:A:44:THR:HG22	2.35	0.51
1:A:41:PRO:HA	1:A:295:THR:CG2	2.41	0.51
1:A:672:VAL:C	1:A:674:LEU:H	2.19	0.51
1:A:27:ILE:HD11	1:A:380:PHE:CE1	2.45	0.51
1:A:468:ARG:O	1:A:470:PHE:N	2.43	0.51
1:A:968:VAL:N	1:A:971:ARG:CZ	2.74	0.51
1:A:27:ILE:HG22	1:A:28:LEU:HD12	1.92	0.51
1:A:892:TYR:CD2	1:A:897:ILE:HG22	2.45	0.51
1:A:5:PHE:O	1:A:6:ILE:O	2.28	0.51
1:A:600:THR:O	1:A:603:LYS:HG2	2.11	0.51
1:A:686:ASP:HB2	1:A:695:LEU:HG	1.91	0.51
1:A:778:LYS:HG3	1:A:779:TYR:CD1	2.45	0.51
1:A:373:PRO:O	1:A:374:VAL:C	2.54	0.51
1:A:541:TYR:C	1:A:543:VAL:H	2.19	0.51
1:A:639:GLY:C	1:A:641:GLU:N	2.69	0.51
1:A:145:THR:N	1:A:320:GLY:O	2.36	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:277:ILE:O	1:A:277:ILE:HG13	2.10	0.51
1:A:305:ALA:HA	1:A:308:ALA:HB2	1.93	0.51
1:A:422:GLU:O	1:A:423:GLU:HG2	2.11	0.51
1:A:662:MET:O	1:A:662:MET:SD	2.69	0.51
1:A:17:ILE:HG22	1:A:21:LEU:HD12	1.93	0.51
1:A:17:ILE:HD13	1:A:20:MET:HE3	1.92	0.51
1:A:576:VAL:HA	1:A:662:MET:CB	2.41	0.51
1:A:349:ILE:HD13	1:A:349:ILE:N	2.26	0.50
1:A:74:ASN:O	1:A:75:LEU:HB2	2.11	0.50
1:A:763:ILE:HD12	1:A:763:ILE:N	2.26	0.50
1:A:458:PHE:O	1:A:460:GLY:N	2.40	0.50
1:A:463:THR:OG1	1:A:868:LEU:HD21	2.12	0.50
1:A:818:ARG:HG3	1:A:818:ARG:HH11	1.76	0.50
1:A:83:ASP:HB2	1:A:87:THR:HG22	1.93	0.50
1:A:446:ALA:HB2	1:A:482:VAL:HG21	1.91	0.50
1:A:448:VAL:CG2	1:A:887:CYS:HB2	2.36	0.50
1:A:468:ARG:C	1:A:470:PHE:H	2.18	0.50
1:A:476:SER:OG	1:A:477:ALA:N	2.44	0.50
1:A:577:GLN:N	1:A:662:MET:HB2	2.23	0.50
1:A:734:GLU:C	1:A:736:ALA:N	2.68	0.50
1:A:383:LEU:O	1:A:384:ALA:C	2.54	0.50
1:A:764:ASP:O	1:A:765:ARG:HB2	2.11	0.50
1:A:892:TYR:HD2	1:A:897:ILE:HG22	1.76	0.50
1:A:170:SER:C	1:A:172:VAL:H	2.17	0.50
1:A:172:VAL:HG21	1:A:297:ALA:HB1	1.91	0.50
1:A:391:ASN:C	1:A:393:LEU:N	2.67	0.50
1:A:399:VAL:HG12	1:A:402:ILE:HD12	1.94	0.50
1:A:43:VAL:HG12	1:A:44:THR:N	2.26	0.50
1:A:379:THR:HG21	1:A:477:ALA:HB2	1.94	0.50
1:A:383:LEU:O	1:A:385:ALA:N	2.44	0.50
1:A:110:LYS:NZ	1:A:113:LEU:HD12	2.25	0.50
1:A:274:ASN:HD22	1:A:276:ASP:H	1.60	0.50
1:A:364:ALA:O	1:A:366:LEU:N	2.45	0.50
1:A:668:LEU:O	1:A:669:PRO:C	2.53	0.50
1:A:684:LEU:CD1	1:A:855:VAL:HG13	2.21	0.50
1:A:722:GLU:O	1:A:723:ASP:CB	2.59	0.50
1:A:898:PRO:O	1:A:902:MET:HG2	2.11	0.50
1:A:68:ASN:O	1:A:110:LYS:HG3	2.12	0.49
1:A:170:SER:CB	1:A:305:ALA:HB3	2.42	0.49
1:A:535:LEU:O	1:A:536:ARG:C	2.54	0.49
1:A:634:TRP:H	1:A:634:TRP:CD1	2.29	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:743:ILE:HD12	1:A:743:ILE:N	2.16	0.49
1:A:754:TRP:CE3	1:A:780:ARG:HB2	2.47	0.49
1:A:762:PHE:CZ	1:A:764:ASP:HB2	2.47	0.49
1:A:894:SER:HG	1:A:898:PRO:HD3	1.75	0.49
1:A:391:ASN:HB2	1:A:394:THR:OG1	2.12	0.49
1:A:396:PHE:CD2	1:A:1003:VAL:HG21	2.47	0.49
1:A:1017:LEU:H	1:A:1019:ILE:HG22	1.78	0.49
1:A:109:ASN:HA	1:A:112:GLN:HG2	1.94	0.49
1:A:359:LEU:N	1:A:359:LEU:HD23	2.27	0.49
1:A:88:VAL:HG22	1:A:89:GLN:N	2.27	0.49
1:A:708:LYS:NZ	1:A:708:LYS:HB3	2.28	0.49
1:A:4:PHE:C	1:A:5:PHE:O	2.54	0.49
1:A:39:ALA:CB	1:A:673:GLU:CD	2.85	0.49
1:A:591:LEU:HD22	1:A:611:ALA:HB1	1.95	0.49
1:A:686:ASP:CB	1:A:823:PRO:HG2	2.31	0.49
1:A:782:LEU:O	1:A:785:ASP:HB2	2.12	0.49
1:A:1028:VAL:C	1:A:1030:ARG:H	2.20	0.49
1:A:166:ILE:HD12	1:A:309:GLU:CB	2.43	0.49
1:A:612:VAL:HB	1:A:626:ILE:CG2	2.38	0.49
1:A:185:ARG:HH22	1:A:774:MET:CE	2.22	0.49
1:A:383:LEU:CD2	1:A:388:PHE:HB2	2.42	0.49
1:A:439:GLN:O	1:A:443:VAL:HG23	2.12	0.49
1:A:987:MET:HG3	1:A:991:ILE:CD1	2.42	0.49
1:A:380:PHE:CZ	1:A:398:MET:HE2	2.48	0.49
1:A:435:MET:HB3	1:A:439:GLN:CG	2.42	0.49
1:A:568:ASP:HA	1:A:644:VAL:HG11	1.95	0.49
1:A:756:GLY:CA	1:A:774:MET:HG3	2.43	0.49
1:A:1024:VAL:C	1:A:1026:PHE:H	2.18	0.49
1:A:39:ALA:HB2	1:A:673:GLU:HG2	1.94	0.49
1:A:76:MET:HG3	1:A:95:GLU:OE1	2.13	0.49
1:A:564:LEU:HD22	1:A:671:ILE:HD12	1.95	0.49
1:A:643:LYS:NZ	1:A:993:THR:HG22	2.28	0.49
1:A:1016:VAL:O	1:A:1017:LEU:HB2	2.13	0.49
1:A:16:ALA:O	1:A:17:ILE:C	2.56	0.49
1:A:30:LEU:H	1:A:31:PRO:CD	2.26	0.49
1:A:181:GLN:HE22	1:A:767:ARG:NH2	2.10	0.49
1:A:892:TYR:HD2	1:A:897:ILE:CG2	2.25	0.49
1:A:968:VAL:CA	1:A:971:ARG:NE	2.63	0.49
1:A:30:LEU:HD11	1:A:389:SER:CB	2.42	0.48
1:A:463:THR:HG21	1:A:868:LEU:CD1	2.36	0.48
1:A:656:SER:HA	1:A:663:VAL:HG11	1.94	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:17:ILE:O	1:A:18:ILE:C	2.57	0.48
1:A:363:ARG:CD	1:A:497:LEU:HD22	2.33	0.48
1:A:717:ARG:NH1	1:A:829:GLY:HA2	2.28	0.48
1:A:867:ARG:O	1:A:871:ASN:HB3	2.14	0.48
1:A:422:GLU:C	1:A:423:GLU:HG2	2.39	0.48
1:A:762:PHE:HE1	1:A:764:ASP:HB2	1.72	0.48
1:A:1003:VAL:O	1:A:1007:VAL:HG23	2.12	0.48
1:A:30:LEU:HD21	1:A:389:SER:HA	1.96	0.48
1:A:454:VAL:HG22	1:A:475:VAL:HG21	1.96	0.48
1:A:357:LEU:HD13	1:A:357:LEU:C	2.39	0.48
1:A:454:VAL:C	1:A:456:MET:H	2.21	0.48
1:A:578:LEU:HD13	1:A:660:ASP:CG	2.38	0.48
1:A:646:ALA:O	1:A:649:MET:HB3	2.13	0.48
1:A:888:LEU:O	1:A:898:PRO:HG3	2.13	0.48
1:A:225:VAL:O	1:A:226:LYS:C	2.56	0.48
1:A:795:ASP:CG	1:A:797:GLN:NE2	2.71	0.48
1:A:330:THR:O	1:A:331:PRO:C	2.55	0.48
1:A:414:GLU:HA	1:A:417:GLU:CB	2.41	0.48
1:A:488:LEU:HA	1:A:491:ALA:HB3	1.95	0.48
1:A:736:ALA:HB2	1:A:804:PHE:HB2	1.95	0.48
1:A:807:SER:O	1:A:808:ARG:HB3	2.13	0.48
1:A:934:THR:O	1:A:938:SER:OG	2.30	0.48
1:A:622:GLN:O	1:A:622:GLN:HG3	2.14	0.48
1:A:683:GLU:HG2	1:A:819:TYR:CG	2.49	0.48
1:A:332:PHE:O	1:A:336:SER:N	2.38	0.48
1:A:111:LEU:HD22	1:A:112:GLN:NE2	2.29	0.47
1:A:380:PHE:HA	1:A:383:LEU:HD12	1.96	0.47
1:A:396:PHE:C	1:A:398:MET:H	2.22	0.47
1:A:438:ILE:O	1:A:439:GLN:C	2.56	0.47
1:A:669:PRO:O	1:A:670:ALA:C	2.54	0.47
1:A:426:PRO:O	1:A:430:ALA:CB	2.62	0.47
1:A:951:ASP:O	1:A:953:MET:N	2.48	0.47
1:A:110:LYS:HD2	1:A:113:LEU:HD11	1.95	0.47
1:A:424:GLY:C	1:A:426:PRO:CD	2.81	0.47
1:A:578:LEU:HB3	1:A:579:PRO:HD2	1.96	0.47
1:A:650:ARG:HG3	1:A:650:ARG:NH1	2.29	0.47
1:A:137:LEU:O	1:A:138:MET:HB2	2.14	0.47
1:A:294:ALA:O	1:A:297:ALA:N	2.48	0.47
1:A:866:GLU:O	1:A:867:ARG:HB2	2.14	0.47
1:A:971:ARG:NH1	1:A:971:ARG:CG	2.77	0.47
1:A:25:LEU:HD12	1:A:25:LEU:C	2.40	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:211:ASN:HB2	1:A:240:LEU:HD22	1.96	0.47
1:A:382:VAL:O	1:A:385:ALA:HB3	2.15	0.47
1:A:518:ARG:O	1:A:522:LYS:HD3	2.15	0.47
1:A:53:ASP:OD2	1:A:55:LYS:N	2.47	0.47
1:A:418:ARG:C	1:A:420:MET:N	2.70	0.47
1:A:875:SER:O	1:A:878:ALA:HB3	2.13	0.47
1:A:27:ILE:C	1:A:29:LYS:N	2.72	0.47
1:A:41:PRO:CA	1:A:295:THR:HG21	2.44	0.47
1:A:169:THR:CG2	1:A:170:SER:H	2.20	0.47
1:A:329:THR:O	1:A:329:THR:HG23	2.14	0.47
1:A:375:VAL:O	1:A:379:THR:OG1	2.30	0.47
1:A:393:LEU:CD2	1:A:466:ILE:HG23	2.42	0.47
1:A:416:VAL:HG22	1:A:434:SER:HB2	1.97	0.47
1:A:458:PHE:HB2	1:A:876:LEU:HD13	1.95	0.47
1:A:900:SER:OG	1:A:901:VAL:N	2.47	0.47
1:A:904:VAL:HA	1:A:907:LEU:HD22	1.97	0.47
1:A:951:ASP:C	1:A:953:MET:N	2.73	0.47
1:A:999:ALA:O	1:A:1002:ALA:HB3	2.14	0.47
1:A:1027:VAL:O	1:A:1030:ARG:HB2	2.14	0.47
1:A:169:THR:HG22	1:A:170:SER:N	2.26	0.47
1:A:372:VAL:O	1:A:373:PRO:C	2.55	0.47
1:A:412:VAL:HG13	1:A:435:MET:CE	2.34	0.47
1:A:5:PHE:CE1	1:A:432:ARG:HG2	2.50	0.47
1:A:400:LEU:CD2	1:A:929:VAL:HG12	2.45	0.47
1:A:431:THR:CG2	1:A:494:ALA:HB2	2.37	0.47
1:A:463:THR:HB	1:A:868:LEU:HD21	1.97	0.47
1:A:754:TRP:CZ2	1:A:786:ILE:HD13	2.50	0.47
1:A:355:MET:HE3	1:A:977:MET:CE	2.45	0.47
1:A:398:MET:O	1:A:402:ILE:HG13	2.16	0.47
1:A:692:HIS:NE2	1:A:813:SER:HB2	2.30	0.47
1:A:1019:ILE:HG13	1:A:1019:ILE:O	2.15	0.47
1:A:431:THR:HG22	1:A:435:MET:HE3	1.97	0.46
1:A:435:MET:C	1:A:437:GLN:H	2.22	0.46
1:A:441:ALA:O	1:A:445:ILE:HG23	2.14	0.46
1:A:489:THR:CB	1:A:490:PRO:HD3	2.38	0.46
1:A:37:THR:C	1:A:38:ILE:HG12	2.39	0.46
1:A:41:PRO:HA	1:A:295:THR:HG21	1.97	0.46
1:A:130:GLU:OE2	1:A:174:ASP:HB3	2.15	0.46
1:A:361:ASN:C	1:A:363:ARG:H	2.23	0.46
1:A:522:LYS:O	1:A:525:HIS:N	2.48	0.46
1:A:512:PHE:O	1:A:513:PHE:C	2.56	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:716:VAL:HG23	1:A:716:VAL:O	2.16	0.46
1:A:144:ASN:ND2	1:A:144:ASN:N	2.37	0.46
1:A:219:LEU:O	1:A:231:ASN:HA	2.16	0.46
1:A:267:LYS:HB2	1:A:267:LYS:HZ2	1.80	0.46
1:A:324:VAL:HG13	1:A:326:PRO:HD3	1.97	0.46
1:A:360:GLN:HB3	1:A:513:PHE:HD2	1.77	0.46
1:A:361:ASN:C	1:A:363:ARG:N	2.73	0.46
1:A:459:PHE:HA	1:A:464:GLY:HA3	1.98	0.46
1:A:513:PHE:O	1:A:517:ASN:N	2.35	0.46
1:A:844:MET:HA	1:A:844:MET:HE2	1.96	0.46
1:A:144:ASN:HA	1:A:320:GLY:O	2.15	0.46
1:A:470:PHE:CZ	1:A:929:VAL:HG13	2.49	0.46
1:A:892:TYR:HE2	1:A:946:VAL:HG11	1.80	0.46
1:A:1021:PHE:N	1:A:1021:PHE:CD1	2.84	0.46
1:A:449:LEU:CD1	1:A:478:MET:SD	2.93	0.46
1:A:463:THR:C	1:A:465:ALA:H	2.22	0.46
1:A:1008:MET:O	1:A:1009:GLY:C	2.57	0.46
1:A:218:GLN:HB3	1:A:233:SER:HA	1.98	0.46
1:A:353:LEU:O	1:A:354:VAL:C	2.57	0.46
1:A:356:TYR:C	1:A:358:PHE:H	2.23	0.46
1:A:886:LEU:O	1:A:887:CYS:C	2.59	0.46
1:A:974:PRO:O	1:A:975:ILE:C	2.59	0.46
1:A:995:ALA:C	1:A:997:SER:H	2.24	0.46
1:A:110:LYS:HD2	1:A:113:LEU:CD1	2.46	0.46
1:A:156:ASP:CG	1:A:182:TYR:CD2	2.93	0.46
1:A:181:GLN:HE22	1:A:767:ARG:NE	2.13	0.46
1:A:300:LEU:C	1:A:302:THR:N	2.73	0.46
1:A:418:ARG:O	1:A:419:VAL:C	2.58	0.46
1:A:420:MET:O	1:A:421:ALA:HB2	2.16	0.46
1:A:886:LEU:O	1:A:888:LEU:N	2.48	0.46
1:A:172:VAL:HG21	1:A:297:ALA:CB	2.46	0.46
1:A:330:THR:O	1:A:332:PHE:N	2.48	0.46
1:A:452:VAL:HG12	1:A:884:VAL:CG2	2.45	0.46
1:A:574:THR:HB	1:A:665:ALA:CB	2.41	0.46
1:A:575:MET:HE2	1:A:664:PHE:CD1	2.51	0.46
1:A:968:VAL:HG22	1:A:971:ARG:HE	1.81	0.46
1:A:6:ILE:HA	1:A:6:ILE:HD12	1.73	0.46
1:A:6:ILE:HD11	1:A:431:THR:CG2	2.46	0.46
1:A:340:VAL:HG11	1:A:395:MET:HB3	1.98	0.46
1:A:512:PHE:O	1:A:515:TRP:N	2.49	0.46
1:A:575:MET:HE2	1:A:664:PHE:HD1	1.81	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:708:LYS:HG3	1:A:709:HIS:N	2.30	0.46
1:A:445:ILE:HG22	1:A:943:ILE:HG21	1.98	0.45
1:A:450:SER:O	1:A:455:PRO:HD2	2.16	0.45
1:A:678:THR:O	1:A:678:THR:HG22	2.15	0.45
1:A:393:LEU:CD1	1:A:466:ILE:HG23	2.45	0.45
1:A:449:LEU:O	1:A:453:PHE:HD2	1.99	0.45
1:A:465:ALA:HB3	1:A:466:ILE:HD12	1.98	0.45
1:A:692:HIS:CE1	1:A:721:LEU:HD21	2.51	0.45
1:A:27:ILE:HG12	1:A:390:ILE:HD11	1.98	0.45
1:A:404:LEU:CD2	1:A:449:LEU:HG	2.45	0.45
1:A:486:LEU:O	1:A:490:PRO:HG2	2.16	0.45
1:A:987:MET:HG3	1:A:991:ILE:HD11	1.98	0.45
1:A:255:GLN:C	1:A:257:GLY:H	2.22	0.45
1:A:527:TYR:CZ	1:A:1019:ILE:HG13	2.52	0.45
1:A:928:GLN:O	1:A:931:LEU:N	2.49	0.45
1:A:968:VAL:HA	1:A:971:ARG:CZ	2.43	0.45
1:A:705:GLU:HA	1:A:708:LYS:CE	2.35	0.45
1:A:356:TYR:O	1:A:358:PHE:N	2.50	0.45
1:A:945:ILE:HG12	1:A:971:ARG:NE	2.31	0.45
1:A:177:LEU:HD13	1:A:177:LEU:C	2.41	0.45
1:A:191:ASN:O	1:A:192:GLU:C	2.60	0.45
1:A:242:SER:C	1:A:244:GLU:N	2.74	0.45
1:A:399:VAL:HA	1:A:402:ILE:HD12	1.98	0.45
1:A:583:THR:O	1:A:587:THR:HG22	2.16	0.45
1:A:639:GLY:O	1:A:641:GLU:N	2.49	0.45
1:A:717:ARG:H	1:A:717:ARG:HD3	1.82	0.45
1:A:780:ARG:O	1:A:780:ARG:HG3	2.16	0.45
1:A:957:GLY:O	1:A:958:LYS:O	2.35	0.45
1:A:203:VAL:O	1:A:207:ILE:HG13	2.16	0.45
1:A:635:ALA:O	1:A:637:ARG:N	2.49	0.45
1:A:973:ARG:N	1:A:974:PRO:HD2	2.32	0.45
1:A:406:VAL:HG23	1:A:407:ASP:H	1.82	0.45
1:A:307:ARG:HH21	1:A:311:ALA:CA	2.20	0.45
1:A:309:GLU:O	1:A:313:MET:HG3	2.17	0.45
1:A:569:GLN:HA	1:A:634:TRP:HH2	1.82	0.45
1:A:758:TYR:CE1	1:A:770:LYS:HB3	2.52	0.45
1:A:1022:VAL:C	1:A:1024:VAL:N	2.75	0.45
1:A:30:LEU:H	1:A:31:PRO:HD3	1.81	0.44
1:A:454:VAL:HB	1:A:455:PRO:CD	2.47	0.44
1:A:614:GLY:O	1:A:615:PHE:HB2	2.16	0.44
1:A:692:HIS:HE2	1:A:813:SER:HB2	1.81	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:726:GLN:HE22	1:A:812:GLY:HA3	1.82	0.44
1:A:965:LEU:O	1:A:966:ASP:C	2.60	0.44
1:A:18:ILE:O	1:A:22:ALA:N	2.27	0.44
1:A:121:GLU:N	1:A:121:GLU:OE2	2.48	0.44
1:A:331:PRO:O	1:A:335:ILE:HD13	2.17	0.44
1:A:342:LYS:HE3	1:A:342:LYS:HA	1.98	0.44
1:A:451:ALA:HB1	1:A:883:VAL:HG22	1.99	0.44
1:A:565:PRO:O	1:A:567:GLU:HG3	2.17	0.44
1:A:150:THR:HG23	1:A:153:ASP:OD1	2.17	0.44
1:A:186:ILE:CD1	1:A:262:LEU:HD21	2.43	0.44
1:A:472:ILE:C	1:A:474:ILE:N	2.75	0.44
1:A:997:SER:O	1:A:998:GLY:C	2.58	0.44
1:A:439:GLN:O	1:A:442:LEU:HB2	2.17	0.44
1:A:587:THR:HG23	1:A:588:GLN:N	2.33	0.44
1:A:986:VAL:C	1:A:988:PRO:HD2	2.42	0.44
1:A:300:LEU:O	1:A:301:ASP:C	2.61	0.44
1:A:454:VAL:HG22	1:A:475:VAL:HG11	1.99	0.44
1:A:488:LEU:CA	1:A:491:ALA:HB3	2.46	0.44
1:A:5:PHE:HE1	1:A:432:ARG:HG2	1.82	0.44
1:A:35:TYR:C	1:A:391:ASN:ND2	2.75	0.44
1:A:109:ASN:O	1:A:112:GLN:HG2	2.18	0.44
1:A:137:LEU:CG	1:A:293:LEU:HG	2.48	0.44
1:A:271:GLY:HA3	1:A:275:TYR:OH	2.18	0.44
1:A:385:ALA:C	1:A:386:PHE:HD2	2.26	0.44
1:A:767:ARG:HG2	1:A:769:LYS:HE3	1.99	0.44
1:A:783:PRO:O	1:A:784:ASP:C	2.59	0.44
1:A:972:LEU:HD22	1:A:976:LEU:HD13	1.99	0.44
1:A:448:VAL:CG1	1:A:884:VAL:HG22	2.47	0.44
1:A:905:VAL:HG22	1:A:935:ILE:HG23	1.99	0.44
1:A:102:ILE:O	1:A:106:GLN:HG3	2.18	0.44
1:A:112:GLN:O	1:A:116:PRO:HD3	2.18	0.44
1:A:137:LEU:CD1	1:A:293:LEU:HG	2.45	0.44
1:A:200:PRO:O	1:A:204:ILE:HG13	2.17	0.44
1:A:356:TYR:C	1:A:358:PHE:N	2.75	0.44
1:A:456:MET:O	1:A:458:PHE:N	2.51	0.44
1:A:483:LEU:O	1:A:486:LEU:HB2	2.18	0.44
1:A:598:TYR:HB3	1:A:606:VAL:HG21	2.00	0.44
1:A:744:ASN:O	1:A:748:THR:HG23	2.18	0.44
1:A:752:ALA:O	1:A:774:MET:HA	2.17	0.44
1:A:807:SER:O	1:A:808:ARG:CB	2.64	0.44
1:A:862:MET:O	1:A:862:MET:HG2	2.18	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:899:PHE:HB2	1:A:1029:VAL:HG11	2.00	0.44
1:A:381:ALA:O	1:A:382:VAL:C	2.60	0.44
1:A:435:MET:C	1:A:437:GLN:N	2.76	0.44
1:A:635:ALA:C	1:A:637:ARG:N	2.76	0.44
1:A:817:GLU:C	1:A:818:ARG:HD2	2.43	0.44
1:A:294:ALA:H	1:A:297:ALA:HB2	1.83	0.43
1:A:477:ALA:N	1:A:480:LEU:HD12	2.33	0.43
1:A:360:GLN:O	1:A:361:ASN:HB2	2.18	0.43
1:A:587:THR:O	1:A:590:VAL:HB	2.18	0.43
1:A:632:LYS:HB3	1:A:632:LYS:HZ3	1.82	0.43
1:A:656:SER:N	1:A:663:VAL:HG13	2.32	0.43
1:A:131:LYS:O	1:A:132:SER:O	2.36	0.43
1:A:459:PHE:HB3	1:A:468:ARG:HE	1.83	0.43
1:A:498:LYS:HA	1:A:499:PRO:HD3	1.54	0.43
1:A:654:ALA:C	1:A:656:SER:N	2.75	0.43
1:A:931:LEU:HD23	1:A:931:LEU:HA	1.79	0.43
1:A:997:SER:HA	1:A:1000:GLN:HB2	2.00	0.43
1:A:1022:VAL:HB	1:A:1023:PRO:HD3	2.00	0.43
1:A:9:PRO:HB3	1:A:495:THR:HG21	1.98	0.43
1:A:170:SER:C	1:A:172:VAL:N	2.76	0.43
1:A:335:ILE:N	1:A:335:ILE:HD12	2.33	0.43
1:A:406:VAL:O	1:A:409:ALA:HB3	2.18	0.43
1:A:753:ALA:O	1:A:774:MET:O	2.35	0.43
1:A:790:TYR:HB3	1:A:798:MET:HB3	2.00	0.43
1:A:842:GLU:O	1:A:846:GLN:HG3	2.18	0.43
1:A:1020:PHE:C	1:A:1023:PRO:HD2	2.44	0.43
1:A:135:SER:CB	1:A:672:VAL:HG13	2.48	0.43
1:A:401:ALA:HB2	1:A:474:ILE:HG13	2.00	0.43
1:A:618:ALA:HB1	1:A:815:ARG:CZ	2.49	0.43
1:A:708:LYS:O	1:A:710:PRO:HD3	2.18	0.43
1:A:914:LEU:HD12	1:A:914:LEU:HA	1.80	0.43
1:A:943:ILE:HG22	1:A:944:LEU:N	2.34	0.43
1:A:163:LYS:O	1:A:164:ASP:C	2.61	0.43
1:A:514:GLY:O	1:A:518:ARG:CB	2.65	0.43
1:A:568:ASP:O	1:A:634:TRP:CZ3	2.70	0.43
1:A:28:LEU:HD12	1:A:28:LEU:N	2.34	0.43
1:A:32:VAL:O	1:A:390:ILE:O	2.36	0.43
1:A:138:MET:HG2	1:A:139:VAL:N	2.33	0.43
1:A:355:MET:HB3	1:A:365:THR:OG1	2.19	0.43
1:A:363:ARG:HH11	1:A:497:LEU:HD22	1.84	0.43
1:A:35:TYR:CD1	1:A:671:ILE:HG12	2.54	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:27:ILE:O	1:A:29:LYS:N	2.46	0.43
1:A:352:PHE:CE1	1:A:365:THR:HG23	2.54	0.43
1:A:380:PHE:O	1:A:383:LEU:HB2	2.18	0.43
1:A:600:THR:CG2	1:A:601:LYS:N	2.75	0.43
1:A:291:ILE:HG22	1:A:292:LYS:N	2.34	0.43
1:A:527:TYR:HE2	1:A:968:VAL:HG13	1.81	0.43
1:A:306:ILE:C	1:A:308:ALA:H	2.27	0.42
1:A:451:ALA:CB	1:A:883:VAL:HG22	2.49	0.42
1:A:458:PHE:C	1:A:460:GLY:N	2.77	0.42
1:A:522:LYS:O	1:A:523:SER:C	2.61	0.42
1:A:208:LYS:HE3	1:A:208:LYS:HB2	1.91	0.42
1:A:489:THR:CB	1:A:490:PRO:CD	2.97	0.42
1:A:832:ALA:HB3	1:A:835:LYS:HB2	2.01	0.42
1:A:168:ARG:O	1:A:168:ARG:HG3	2.19	0.42
1:A:452:VAL:HA	1:A:880:SER:HB3	2.01	0.42
1:A:644:VAL:CG1	1:A:645:GLU:N	2.82	0.42
1:A:722:GLU:O	1:A:723:ASP:OD1	2.38	0.42
1:A:45:ILE:HG22	1:A:46:SER:N	2.34	0.42
1:A:122:VAL:HG23	1:A:123:GLN:N	2.35	0.42
1:A:542:LEU:CD1	1:A:1028:VAL:HG11	2.50	0.42
1:A:904:VAL:O	1:A:906:PRO:N	2.52	0.42
1:A:910:ILE:O	1:A:914:LEU:HB2	2.19	0.42
1:A:111:LEU:HD23	1:A:115:MET:HG2	1.95	0.42
1:A:150:THR:O	1:A:154:ILE:HG13	2.20	0.42
1:A:162:MET:HG2	1:A:313:MET:SD	2.60	0.42
1:A:211:ASN:O	1:A:212:ALA:HB2	2.20	0.42
1:A:223:PRO:O	1:A:223:PRO:HG2	2.20	0.42
1:A:241:THR:N	1:A:245:GLU:OE1	2.37	0.42
1:A:255:GLN:O	1:A:257:GLY:N	2.52	0.42
1:A:355:MET:HE3	1:A:977:MET:HE2	2.00	0.42
1:A:426:PRO:O	1:A:427:PRO:C	2.63	0.42
1:A:575:MET:O	1:A:662:MET:HG2	2.19	0.42
1:A:694:LYS:HA	1:A:697:GLN:HB3	2.00	0.42
1:A:873:ALA:HB3	1:A:874:PRO:HD3	2.02	0.42
1:A:291:ILE:H	1:A:291:ILE:HG13	1.68	0.42
1:A:361:ASN:ND2	1:A:361:ASN:C	2.78	0.42
1:A:497:LEU:O	1:A:498:LYS:O	2.38	0.42
1:A:839:GLU:O	1:A:842:GLU:HG2	2.20	0.42
1:A:136:PHE:HA	1:A:291:ILE:O	2.19	0.42
1:A:222:THR:OG1	1:A:223:PRO:CD	2.68	0.42
1:A:415:ASN:HD22	1:A:438:ILE:HD11	1.85	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:639:GLY:C	1:A:641:GLU:H	2.27	0.42
1:A:656:SER:HA	1:A:663:VAL:CG2	2.50	0.42
1:A:684:LEU:O	1:A:824:SER:HA	2.20	0.42
1:A:792:ARG:HG3	1:A:793:ALA:H	1.82	0.42
1:A:886:LEU:C	1:A:888:LEU:N	2.77	0.42
1:A:989:LEU:CD2	1:A:1000:GLN:HE21	2.33	0.42
1:A:204:ILE:O	1:A:205:THR:C	2.62	0.42
1:A:467:TYR:O	1:A:471:SER:N	2.53	0.42
1:A:655:PHE:HB2	1:A:663:VAL:HA	2.02	0.42
1:A:708:LYS:C	1:A:710:PRO:HD3	2.45	0.42
1:A:709:HIS:C	1:A:711:ASP:H	2.27	0.42
1:A:890:ALA:O	1:A:891:LEU:HD13	2.20	0.42
1:A:1:MET:O	1:A:1:MET:HG3	2.19	0.42
1:A:73:ASP:HB2	1:A:106:GLN:HE22	1.84	0.42
1:A:396:PHE:HE2	1:A:1000:GLN:HG2	1.85	0.42
1:A:474:ILE:N	1:A:474:ILE:CD1	2.83	0.42
1:A:578:LEU:HD13	1:A:660:ASP:OD2	2.19	0.42
1:A:681:ASP:O	1:A:859:TRP:CE3	2.73	0.42
1:A:831:ALA:O	1:A:832:ALA:HB2	2.20	0.42
1:A:892:TYR:CD2	1:A:897:ILE:CG2	3.03	0.42
1:A:968:VAL:N	1:A:971:ARG:NH2	2.68	0.42
1:A:393:LEU:HD11	1:A:466:ILE:CG2	2.46	0.41
1:A:621:GLY:O	1:A:623:ASN:N	2.53	0.41
1:A:696:THR:HA	1:A:825:MET:SD	2.60	0.41
1:A:764:ASP:HB3	1:A:769:LYS:HD2	2.02	0.41
1:A:1028:VAL:O	1:A:1030:ARG:N	2.47	0.41
1:A:155:SER:O	1:A:158:VAL:N	2.53	0.41
1:A:166:ILE:HG22	1:A:175:VAL:HG21	2.02	0.41
1:A:181:GLN:NE2	1:A:767:ARG:NE	2.65	0.41
1:A:381:ALA:C	1:A:383:LEU:N	2.78	0.41
1:A:396:PHE:O	1:A:397:GLY:C	2.62	0.41
1:A:459:PHE:CA	1:A:464:GLY:HA3	2.50	0.41
1:A:476:SER:C	1:A:478:MET:N	2.78	0.41
1:A:734:GLU:O	1:A:736:ALA:N	2.52	0.41
1:A:966:ASP:O	1:A:967:ALA:C	2.63	0.41
1:A:1008:MET:HE2	1:A:1008:MET:HB3	1.95	0.41
1:A:90:ILE:H	1:A:90:ILE:CD1	2.29	0.41
1:A:162:MET:SD	1:A:317:PHE:CZ	3.13	0.41
1:A:196:PHE:CD2	1:A:260:VAL:HG21	2.55	0.41
1:A:426:PRO:C	1:A:428:LYS:N	2.75	0.41
1:A:475:VAL:O	1:A:478:MET:HE2	2.20	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1001:ASN:O	1:A:1002:ALA:C	2.64	0.41
1:A:30:LEU:O	1:A:30:LEU:CG	2.68	0.41
1:A:383:LEU:C	1:A:385:ALA:N	2.78	0.41
1:A:651:ALA:O	1:A:654:ALA:HB3	2.20	0.41
1:A:719:ASN:HD22	1:A:719:ASN:HA	1.68	0.41
1:A:183:ALA:HB2	1:A:273:GLU:HG2	2.03	0.41
1:A:399:VAL:HG23	1:A:400:LEU:N	2.34	0.41
1:A:455:PRO:HG2	1:A:880:SER:OG	2.21	0.41
1:A:568:ASP:HB2	1:A:644:VAL:CG1	2.45	0.41
1:A:910:ILE:HD12	1:A:910:ILE:HA	1.79	0.41
1:A:931:LEU:O	1:A:934:THR:HB	2.20	0.41
1:A:134:SER:O	1:A:135:SER:CB	2.65	0.41
1:A:199:THR:HG21	1:A:792:ARG:H	1.86	0.41
1:A:230:LEU:HD23	1:A:230:LEU:C	2.45	0.41
1:A:405:LEU:O	1:A:406:VAL:C	2.64	0.41
1:A:930:GLY:O	1:A:933:THR:CG2	2.67	0.41
1:A:76:MET:CG	1:A:95:GLU:OE1	2.68	0.41
1:A:274:ASN:HD22	1:A:276:ASP:HB2	1.86	0.41
1:A:681:ASP:O	1:A:859:TRP:HE3	2.03	0.41
1:A:910:ILE:CG2	1:A:911:GLY:N	2.84	0.41
1:A:40:PRO:HB2	1:A:94:PHE:O	2.21	0.41
1:A:120:GLN:HE21	1:A:120:GLN:HB2	1.52	0.41
1:A:162:MET:SD	1:A:317:PHE:HZ	2.44	0.41
1:A:414:GLU:CD	1:A:414:GLU:C	2.88	0.41
1:A:584:GLN:HA	1:A:587:THR:CG2	2.51	0.41
1:A:903:LEU:HD12	1:A:1025:PHE:CB	2.41	0.41
1:A:23:GLY:O	1:A:26:ALA:HB3	2.20	0.41
1:A:131:LYS:O	1:A:294:ALA:HA	2.21	0.41
1:A:326:PRO:O	1:A:327:TYR:O	2.38	0.41
1:A:330:THR:C	1:A:332:PHE:N	2.79	0.41
1:A:370:ILE:O	1:A:374:VAL:HG23	2.21	0.41
1:A:512:PHE:O	1:A:515:TRP:HB3	2.21	0.41
1:A:638:PRO:O	1:A:639:GLY:C	2.64	0.41
1:A:672:VAL:O	1:A:673:GLU:HB3	2.21	0.41
1:A:790:TYR:CE1	1:A:800:PRO:HB3	2.56	0.41
1:A:795:ASP:OD2	1:A:796:GLY:N	2.53	0.41
1:A:868:LEU:N	1:A:868:LEU:HD23	2.36	0.41
1:A:2:PRO:O	1:A:3:ASN:HB2	2.21	0.41
1:A:49:TYR:CE1	1:A:60:THR:HG21	2.55	0.41
1:A:391:ASN:N	1:A:394:THR:OG1	2.50	0.41
1:A:727:PHE:HE2	1:A:786:ILE:HG13	1.85	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:261:LEU:O	1:A:262:LEU:C	2.63	0.40
1:A:388:PHE:CE1	1:A:472:ILE:HG12	2.56	0.40
1:A:427:PRO:CG	1:A:499:PRO:HG3	2.50	0.40
1:A:450:SER:O	1:A:454:VAL:N	2.53	0.40
1:A:571:VAL:CG1	1:A:668:LEU:HD11	2.52	0.40
1:A:358:PHE:C	1:A:359:LEU:HD23	2.46	0.40
1:A:400:LEU:HD21	1:A:929:VAL:HG12	2.02	0.40
1:A:511:GLY:O	1:A:513:PHE:N	2.53	0.40
1:A:535:LEU:HD22	1:A:1027:VAL:HG21	2.03	0.40
1:A:699:ARG:HE	1:A:699:ARG:HB3	1.61	0.40
1:A:900:SER:O	1:A:901:VAL:C	2.64	0.40
1:A:163:LYS:HD2	1:A:177:LEU:HB2	2.02	0.40
1:A:327:TYR:HA	1:A:571:VAL:CG2	2.51	0.40
1:A:425:LEU:N	1:A:426:PRO:CD	2.84	0.40
1:A:713:LEU:HD11	1:A:844:MET:HE3	2.01	0.40
1:A:932:LEU:O	1:A:935:ILE:N	2.54	0.40
1:A:40:PRO:O	1:A:41:PRO:C	2.64	0.40
1:A:417:GLU:HA	1:A:420:MET:HE3	2.03	0.40
1:A:473:THR:HB	1:A:474:ILE:HD12	2.03	0.40
1:A:680:PHE:HD2	1:A:859:TRP:HZ3	1.69	0.40
1:A:20:MET:HG2	1:A:377:LEU:HD13	2.04	0.40
1:A:446:ALA:HB2	1:A:482:VAL:CG2	2.51	0.40
1:A:684:LEU:O	1:A:824:SER:OG	2.32	0.40
1:A:843:LEU:HD12	1:A:847:LEU:HG	2.03	0.40
1:A:932:LEU:O	1:A:933:THR:C	2.64	0.40

All (3) symmetry-related close contacts are listed below. The label for Atom-2 includes the symmetry operator and encoded unit-cell translations to be applied.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:529:ASP:OD1	1:A:529:ASP:OD1[11_445]	1.93	0.27
1:A:529:ASP:OD2	1:A:529:ASP:OD2[11_445]	2.12	0.08
1:A:525:HIS:NE2	1:A:529:ASP:OD2[11_445]	2.18	0.02

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	1015/1049 (97%)	688 (68%)	205 (20%)	122 (12%)	0 1

All (122) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	5	PHE
1	A	6	ILE
1	A	17	ILE
1	A	38	ILE
1	A	132	SER
1	A	135	SER
1	A	136	PHE
1	A	222	THR
1	A	299	ALA
1	A	327	TYR
1	A	383	LEU
1	A	421	ALA
1	A	423	GLU
1	A	425	LEU
1	A	426	PRO
1	A	428	LYS
1	A	459	PHE
1	A	471	SER
1	A	497	LEU
1	A	498	LYS
1	A	615	PHE
1	A	619	GLY
1	A	623	ASN
1	A	638	PRO
1	A	663	VAL
1	A	723	ASP
1	A	733	GLN
1	A	831	ALA
1	A	862	MET
1	A	863	SER
1	A	868	LEU
1	A	921	LEU
1	A	958	LYS
1	A	995	ALA

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1003	VAL
1	A	22	ALA
1	A	36	PRO
1	A	75	LEU
1	A	133	SER
1	A	172	VAL
1	A	256	ASP
1	A	301	ASP
1	A	337	ILE
1	A	338	HIS
1	A	360	GLN
1	A	361	ASN
1	A	384	ALA
1	A	439	GLN
1	A	460	GLY
1	A	473	THR
1	A	566	ASP
1	A	620	ARG
1	A	622	GLN
1	A	636	ASP
1	A	639	GLY
1	A	661	ALA
1	A	690	LEU
1	A	720	GLY
1	A	808	ARG
1	A	869	SER
1	A	952	LEU
1	A	957	GLY
1	A	1017	LEU
1	A	1029	VAL
1	A	18	ILE
1	A	28	LEU
1	A	95	GLU
1	A	159	ALA
1	A	295	THR
1	A	357	LEU
1	A	365	THR
1	A	397	GLY
1	A	407	ASP
1	A	469	GLN
1	A	488	LEU
1	A	536	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	567	GLU
1	A	670	ALA
1	A	887	CYS
1	A	905	VAL
1	A	967	ALA
1	A	50	PRO
1	A	99	ASP
1	A	138	MET
1	A	374	VAL
1	A	419	VAL
1	A	455	PRO
1	A	477	ALA
1	A	597	TYR
1	A	618	ALA
1	A	640	GLU
1	A	655	PHE
1	A	833	PRO
1	A	871	ASN
1	A	872	GLN
1	A	940	LYS
1	A	30	LEU
1	A	34	GLN
1	A	35	TYR
1	A	297	ALA
1	A	339	GLU
1	A	381	ALA
1	A	570	GLY
1	A	579	PRO
1	A	602	GLU
1	A	633	ASP
1	A	671	ILE
1	A	718	PRO
1	A	851	LEU
1	A	852	PRO
1	A	894	SER
1	A	77	TYR
1	A	223	PRO
1	A	512	PHE
1	A	832	ALA
1	A	724	THR
1	A	759	VAL
1	A	9	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	154	ILE
1	A	961	ILE
1	A	158	VAL
1	A	340	VAL

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	829/855 (97%)	722 (87%)	107 (13%)	4 18

All (107) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	6	ILE
1	A	8	ARG
1	A	10	ILE
1	A	25	LEU
1	A	38	ILE
1	A	44	THR
1	A	57	VAL
1	A	58	GLN
1	A	60	THR
1	A	61	VAL
1	A	65	ILE
1	A	79	SER
1	A	90	ILE
1	A	95	GLU
1	A	102	ILE
1	A	105	VAL
1	A	111	LEU
1	A	113	LEU
1	A	120	GLN
1	A	137	LEU
1	A	140	VAL
1	A	144	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	150	THR
1	A	152	GLU
1	A	164	ASP
1	A	166	ILE
1	A	184	MET
1	A	185	ARG
1	A	186	ILE
1	A	194	ASN
1	A	222	THR
1	A	224	PRO
1	A	229	GLN
1	A	230	LEU
1	A	267	LYS
1	A	276	ASP
1	A	277	ILE
1	A	306	ILE
1	A	307	ARG
1	A	329	THR
1	A	342	LYS
1	A	345	VAL
1	A	349	ILE
1	A	350	LEU
1	A	355	MET
1	A	357	LEU
1	A	359	LEU
1	A	372	VAL
1	A	379	THR
1	A	391	ASN
1	A	394	THR
1	A	418	ARG
1	A	426	PRO
1	A	447	MET
1	A	452	VAL
1	A	459	PHE
1	A	466	ILE
1	A	472	ILE
1	A	483	LEU
1	A	534	ILE
1	A	571	VAL
1	A	574	THR
1	A	604	ASN
1	A	613	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	624	THR
1	A	632	LYS
1	A	641	GLU
1	A	662	MET
1	A	669	PRO
1	A	673	GLU
1	A	684	LEU
1	A	687	GLN
1	A	690	LEU
1	A	693	GLU
1	A	695	LEU
1	A	703	LEU
1	A	708	LYS
1	A	709	HIS
1	A	714	THR
1	A	719	ASN
1	A	723	ASP
1	A	724	THR
1	A	743	ILE
1	A	748	THR
1	A	775	SER
1	A	797	GLN
1	A	817	GLU
1	A	818	ARG
1	A	837	THR
1	A	853	THR
1	A	858	ASP
1	A	883	VAL
1	A	895	TRP
1	A	907	LEU
1	A	914	LEU
1	A	917	THR
1	A	933	THR
1	A	958	LYS
1	A	964	THR
1	A	965	LEU
1	A	971	ARG
1	A	972	LEU
1	A	976	LEU
1	A	990	VAL
1	A	991	ILE
1	A	993	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1025	PHE

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (35) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	34	GLN
1	A	67	GLN
1	A	70	ASN
1	A	89	GLN
1	A	104	GLN
1	A	106	GLN
1	A	108	GLN
1	A	112	GLN
1	A	120	GLN
1	A	123	GLN
1	A	125	GLN
1	A	144	ASN
1	A	181	GLN
1	A	191	ASN
1	A	210	GLN
1	A	213	GLN
1	A	274	ASN
1	A	284	GLN
1	A	361	ASN
1	A	415	ASN
1	A	437	GLN
1	A	439	GLN
1	A	584	GLN
1	A	605	ASN
1	A	613	ASN
1	A	622	GLN
1	A	623	ASN
1	A	697	GLN
1	A	701	GLN
1	A	719	ASN
1	A	737	GLN
1	A	871	ASN
1	A	928	GLN
1	A	1000	GLN
1	A	1001	ASN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides 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 ⓘ

6.1 Protein, DNA and RNA chains ⓘ

In the following table, the column labelled ‘#RSRZ > 2’ contains the number (and percentage) of RSRZ outliers, followed by percent RSRZ outliers for the chain as percentile scores relative to all X-ray entries and entries of similar resolution. The OWAB column contains the minimum, median, 95th percentile and maximum values of the occupancy-weighted average B-factor per residue. The column labelled ‘Q < 0.9’ lists the number of (and percentage) of residues with an average occupancy less than 0.9.

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	1019/1049 (97%)	0.69	130 (12%) 7 4	23, 66, 111, 160	0

All (130) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	306	ILE	5.8
1	A	408	ASP	4.7
1	A	404	LEU	4.6
1	A	714	THR	4.5
1	A	833	PRO	4.5
1	A	392	THR	4.4
1	A	7	ASP	4.4
1	A	829	GLY	4.3
1	A	678	THR	4.2
1	A	302	THR	4.2
1	A	460	GLY	4.0
1	A	303	ALA	4.0
1	A	470	PHE	4.0
1	A	495	THR	4.0
1	A	459	PHE	4.0
1	A	468	ARG	3.9
1	A	305	ALA	3.9
1	A	401	ALA	3.9
1	A	407	ASP	3.9
1	A	462	SER	3.9
1	A	11	PHE	3.9
1	A	174	ASP	3.8
1	A	397	GLY	3.8
1	A	458	PHE	3.7
1	A	891	LEU	3.6
1	A	869	SER	3.6
1	A	1	MET	3.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	405	LEU	3.5
1	A	494	ALA	3.4
1	A	851	LEU	3.4
1	A	291	ILE	3.4
1	A	893	GLU	3.4
1	A	70	ASN	3.4
1	A	290	GLY	3.4
1	A	677	ALA	3.3
1	A	892	TYR	3.3
1	A	895	TRP	3.3
1	A	493	CYS	3.2
1	A	675	GLY	3.2
1	A	676	THR	3.2
1	A	2	PRO	3.2
1	A	38	ILE	3.1
1	A	457	ALA	3.1
1	A	848	ALA	3.1
1	A	663	VAL	3.1
1	A	65	ILE	3.1
1	A	301	ASP	3.1
1	A	113	LEU	3.0
1	A	881	LEU	3.0
1	A	874	PRO	3.0
1	A	30	LEU	3.0
1	A	712	MET	3.0
1	A	870	GLY	2.9
1	A	310	LEU	2.9
1	A	69	MET	2.9
1	A	474	ILE	2.9
1	A	662	MET	2.9
1	A	1026	PHE	2.9
1	A	136	PHE	2.9
1	A	222	THR	2.8
1	A	293	LEU	2.8
1	A	395	MET	2.8
1	A	840	ALA	2.8
1	A	31	PRO	2.8
1	A	563	PHE	2.8
1	A	811	TYR	2.8
1	A	363	ARG	2.7
1	A	715	SER	2.7
1	A	393	LEU	2.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	674	LEU	2.7
1	A	35	TYR	2.7
1	A	137	LEU	2.7
1	A	67	GLN	2.7
1	A	329	THR	2.7
1	A	661	ALA	2.7
1	A	830	GLN	2.6
1	A	885	PHE	2.6
1	A	660	ASP	2.6
1	A	862	MET	2.6
1	A	170	SER	2.6
1	A	469	GLN	2.6
1	A	4	PHE	2.6
1	A	875	SER	2.5
1	A	425	LEU	2.5
1	A	702	LEU	2.5
1	A	852	PRO	2.5
1	A	26	ALA	2.4
1	A	1030	ARG	2.4
1	A	960	LEU	2.4
1	A	672	VAL	2.4
1	A	8	ARG	2.4
1	A	681	ASP	2.4
1	A	360	GLN	2.4
1	A	666	PHE	2.4
1	A	888	LEU	2.4
1	A	32	VAL	2.4
1	A	396	PHE	2.3
1	A	73	ASP	2.3
1	A	34	GLN	2.3
1	A	866	GLU	2.3
1	A	861	GLY	2.3
1	A	164	ASP	2.3
1	A	300	LEU	2.2
1	A	312	LYS	2.2
1	A	876	LEU	2.2
1	A	889	ALA	2.2
1	A	167	SER	2.2
1	A	836	SER	2.2
1	A	619	GLY	2.2
1	A	1023	PRO	2.2
1	A	3	ASN	2.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	422	GLU	2.2
1	A	679	GLY	2.2
1	A	467	TYR	2.2
1	A	958	LYS	2.2
1	A	620	ARG	2.2
1	A	703	LEU	2.1
1	A	673	GLU	2.1
1	A	440	GLY	2.1
1	A	496	MET	2.1
1	A	488	LEU	2.1
1	A	37	THR	2.1
1	A	971	ARG	2.1
1	A	511	GLY	2.1
1	A	882	ILE	2.1
1	A	24	GLY	2.1
1	A	296	GLY	2.1
1	A	705	GLU	2.1
1	A	723	ASP	2.0
1	A	894	SER	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 oligosaccharides 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.