



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 05:29 PM UTC

PDB ID : 3I89 / pdb_00003i89
Title : Crystal Structure of DDB1 in Complex with the H-Box Motif of WDR22
Authors : Li, T.; Robert, E.I.; Breugel, P.C.V.; Strubin, M.; Zheng, N.
Deposited on : 2009-07-09
Resolution : 3.00 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

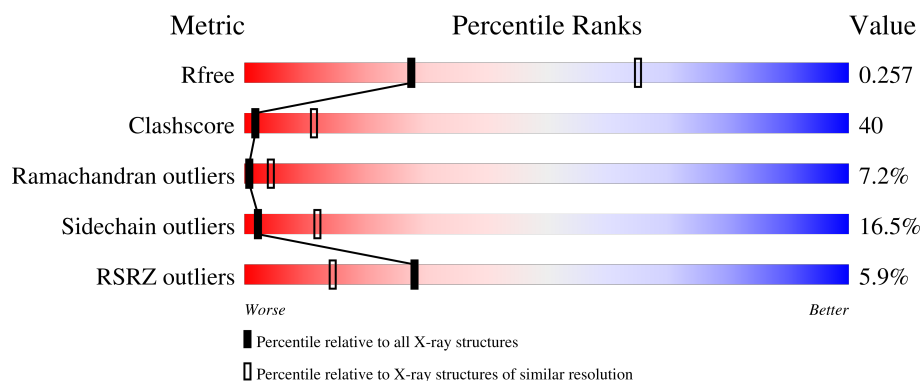
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.00 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	2672 (3.00-3.00)
Clashscore	190562	2977 (3.00-3.00)
Ramachandran outliers	187476	2877 (3.00-3.00)
Sidechain outliers	187428	2880 (3.00-3.00)
RSRZ outliers	180081	2671 (3.00-3.00)

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	1143	5% 40% 43% 13% ..
2	B	13	15% 38% 31% 46% 8%

2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 8821 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.

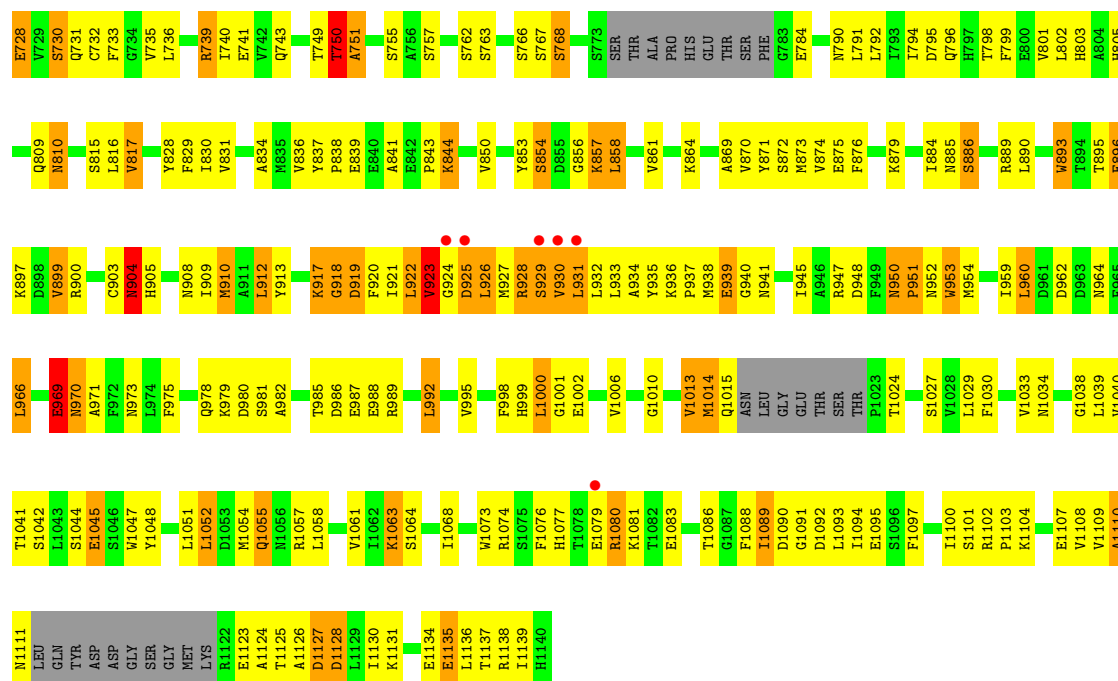
Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	1114	Total	C	N	O	S	0	0	0
			8726	5529	1472	1677	48			

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 WD repeat-containing protein 22.

Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf	Trace
2	B	13	Total	C	N	O	0	0	0
			95	60	19	16			



● Molecule 2: WD repeat-containing protein 22



4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 21 21 21	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	63.29Å 133.67Å 184.34Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	45.22 – 3.00 45.22 – 3.00	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	94.7 (45.22-3.00) 94.7 (45.22-3.00)	Depositor EDS
R_{merge}	0.09	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	2.83 (at 2.91Å)	Xtriage
Refinement program	REFMAC 5.2.0019	Depositor
R, R_{free}	0.251 , 0.304 (Not available) , 0.257	Depositor DCC
R_{free} test set	1590 reflections (4.48%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	69.7	Xtriage
Anisotropy	0.338	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.29 , 55.6	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.49$, $\langle L^2 \rangle = 0.32$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.91	EDS
Total number of atoms	8821	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	88.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.90% 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	0.87	13/8885 (0.1%)	1.12	49/12034 (0.4%)
2	B	1.78	1/96 (1.0%)	1.51	2/127 (1.6%)
All	All	0.89	14/8981 (0.2%)	1.13	51/12161 (0.4%)

All (14) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	1135	GLU	CD-OE1	11.61	1.47	1.25
2	B	16	GLY	CA-C	10.41	1.66	1.51
1	A	939	GLU	CD-OE2	8.97	1.42	1.25
1	A	928	ARG	C-N	-8.72	1.21	1.33
1	A	899	VAL	CA-CB	6.77	1.61	1.53
1	A	939	GLU	CD-OE1	6.66	1.38	1.25
1	A	950	ASN	CA-C	-6.66	1.44	1.52
1	A	368	GLU	C-N	-6.19	1.25	1.33
1	A	925	ASP	N-CA	5.83	1.54	1.46
1	A	924	GLY	N-CA	5.58	1.51	1.45
1	A	385	GLY	N-CA	5.50	1.52	1.45
1	A	951	PRO	CA-C	-5.48	1.44	1.52
1	A	834	ALA	CA-CB	-5.32	1.45	1.53
1	A	383	LYS	C-N	5.03	1.40	1.33

All (51) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	561	TRP	N-CA-C	14.48	132.38	111.96
1	A	205	GLY	CA-C-N	10.71	133.23	119.84
1	A	205	GLY	C-N-CA	10.71	133.23	119.84
1	A	514	ARG	N-CA-C	-9.76	101.03	113.72
1	A	203	ASN	N-CA-C	-8.03	93.69	110.80
1	A	556	CYS	N-CA-C	7.91	119.06	108.38
1	A	924	GLY	N-CA-C	7.79	120.23	110.96
1	A	1110	ALA	N-CA-C	-7.49	104.65	114.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	202	PHE	N-CA-C	-7.23	95.40	110.80
1	A	928	ARG	CA-C-O	-7.18	110.23	120.51
1	A	969	GLU	N-CA-C	6.93	119.39	108.79
1	A	207	TRP	N-CA-C	6.92	119.95	109.23
1	A	950	ASN	CA-C-N	-6.67	111.50	119.84
1	A	950	ASN	C-N-CA	-6.67	111.50	119.84
1	A	167	VAL	CB-CA-C	-6.67	101.53	111.80
2	B	16	GLY	CA-C-O	-6.64	109.02	120.57
1	A	309	SER	N-CA-C	-6.57	102.33	110.41
1	A	925	ASP	N-CA-C	6.54	118.47	108.07
1	A	664	HIS	N-CA-C	-6.27	103.16	113.50
1	A	1077	HIS	N-CA-C	6.21	118.51	108.32
1	A	1001	GLY	N-CA-C	-6.17	106.19	115.32
1	A	749	THR	N-CA-C	5.96	118.13	108.41
2	B	21	ARG	N-CA-C	-5.95	105.16	113.37
1	A	222	VAL	N-CA-C	5.76	113.58	108.63
1	A	648	ASN	N-CA-C	5.73	117.32	109.18
1	A	108	VAL	N-CA-C	5.69	117.64	112.29
1	A	904	ASN	N-CA-C	5.64	118.40	108.75
1	A	34	ALA	O-C-N	-5.62	116.65	123.29
1	A	398	GLU	N-CA-C	5.54	117.72	109.25
1	A	964	ASN	N-CA-C	5.52	117.73	108.73
1	A	114	ARG	CA-C-N	5.48	125.41	119.76
1	A	114	ARG	C-N-CA	5.48	125.41	119.76
1	A	926	LEU	N-CA-C	5.48	117.11	111.03
1	A	594	THR	N-CA-C	5.42	115.39	108.24
1	A	950	ASN	N-CA-C	-5.40	97.88	109.81
1	A	368	GLU	CA-C-N	5.37	131.79	121.54
1	A	368	GLU	C-N-CA	5.37	131.79	121.54
1	A	928	ARG	CB-CA-C	5.34	121.04	110.42
1	A	411	TRP	CA-C-N	5.30	126.46	119.84
1	A	411	TRP	C-N-CA	5.30	126.46	119.84
1	A	613	TYR	N-CA-C	-5.28	101.28	109.72
1	A	130	MET	N-CA-C	5.23	116.08	108.14
1	A	500	VAL	O-C-N	5.22	128.46	123.14
1	A	939	GLU	N-CA-C	-5.19	107.12	112.93
1	A	247	ALA	N-CA-C	5.17	117.11	108.99
1	A	928	ARG	O-C-N	5.11	129.38	122.59
1	A	1089	ILE	CA-C-N	-5.09	114.40	121.99
1	A	1089	ILE	C-N-CA	-5.09	114.40	121.99
1	A	301	ARG	N-CA-C	5.09	116.54	108.96
1	A	374	GLN	N-CA-C	-5.09	102.93	110.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	135	LEU	N-CA-C	-5.05	107.77	114.04

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

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	8726	0	8706	682	0
2	B	95	0	95	32	0
All	All	8821	0	8801	704	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 40.

All (704) 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:368:GLU:CG	1:A:370:GLN:HE21	1.50	1.24
2:B:18:LEU:HD23	2:B:18:LEU:O	1.37	1.18
1:A:613:TYR:HD1	1:A:614:PHE:N	1.40	1.17
1:A:621:GLY:C	1:A:622:LEU:HD12	1.70	1.17
1:A:459:PHE:CE2	1:A:503:CYS:HB3	1.78	1.15
1:A:615:GLY:H	1:A:624:SER:CB	1.61	1.14
2:B:18:LEU:HD23	2:B:18:LEU:C	1.66	1.13
1:A:482:GLU:HB2	1:A:483:PRO:HD3	1.13	1.13
1:A:504:ASN:HD21	1:A:545:PRO:CD	1.63	1.11
1:A:630:THR:HG23	1:A:631:LEU:H	1.05	1.10
1:A:157:ILE:HD13	1:A:201:GLU:O	1.51	1.09
2:B:23:LEU:HD13	2:B:23:LEU:N	1.62	1.08
1:A:614:PHE:HB3	1:A:624:SER:OG	1.54	1.07
1:A:713:ARG:CG	1:A:713:ARG:HH11	1.67	1.07
1:A:642:ARG:HH22	1:A:683:ASN:HB2	1.01	1.07
1:A:112:ILE:HG22	1:A:113:GLY:H	1.17	1.06
1:A:368:GLU:HG3	1:A:370:GLN:NE2	1.70	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:482:GLU:HB2	1:A:483:PRO:CD	1.88	1.04
1:A:368:GLU:HG3	1:A:370:GLN:HE21	0.88	1.03
1:A:909:ILE:HG12	1:A:927:MET:CE	1.86	1.03
1:A:613:TYR:CD1	1:A:613:TYR:C	2.30	1.03
1:A:400:ALA:H	1:A:701:ILE:HD11	1.17	1.03
1:A:929:SER:O	1:A:930:VAL:HG22	1.61	1.00
1:A:611:LEU:HB3	1:A:629:VAL:CG2	1.91	1.00
1:A:537:GLU:O	1:A:561:TRP:HD1	1.45	1.00
1:A:504:ASN:HD21	1:A:545:PRO:HD2	1.22	0.99
1:A:929:SER:O	1:A:930:VAL:HG13	1.61	0.99
1:A:613:TYR:CD1	1:A:614:PHE:N	2.30	0.98
1:A:614:PHE:HB3	1:A:624:SER:HG	1.27	0.98
1:A:1024:THR:HB	1:A:1041:THR:HG21	1.45	0.97
1:A:641:PHE:HA	1:A:681:PRO:HG3	1.43	0.97
1:A:909:ILE:HG12	1:A:927:MET:HE3	1.45	0.96
2:B:23:LEU:HD13	2:B:23:LEU:H	1.21	0.96
1:A:642:ARG:NH2	1:A:683:ASN:HB2	1.80	0.95
1:A:98:ILE:HD13	1:A:98:ILE:H	1.32	0.95
1:A:870:VAL:HG11	1:A:873:MET:CE	1.96	0.94
1:A:614:PHE:CE1	1:A:626:ARG:HA	2.03	0.93
1:A:81:THR:HG22	1:A:83:LYS:H	1.32	0.93
2:B:23:LEU:N	2:B:23:LEU:CD1	2.29	0.93
1:A:713:ARG:HH11	1:A:713:ARG:HG2	1.33	0.92
1:A:368:GLU:CG	1:A:370:GLN:NE2	2.29	0.91
1:A:23:PHE:H	1:A:30:ASN:ND2	1.68	0.91
1:A:1024:THR:HB	1:A:1041:THR:CG2	2.00	0.91
1:A:1125:THR:HG22	1:A:1126:ALA:H	1.34	0.91
1:A:560:LEU:HD12	1:A:567:ARG:NH1	1.86	0.91
1:A:364:VAL:O	1:A:365:VAL:HG23	1.70	0.90
1:A:1125:THR:HG22	1:A:1126:ALA:N	1.87	0.90
1:A:385:GLY:HA3	1:A:719:GLU:O	1.71	0.89
1:A:630:THR:HG23	1:A:631:LEU:N	1.84	0.89
1:A:642:ARG:HH22	1:A:683:ASN:CB	1.86	0.89
1:A:611:LEU:HB3	1:A:629:VAL:HG21	1.54	0.89
1:A:197:LEU:HD23	1:A:197:LEU:H	1.36	0.89
1:A:611:LEU:HD23	1:A:612:PHE:C	1.97	0.89
1:A:662:SER:HB3	1:A:665:LYS:HB2	1.53	0.88
1:A:23:PHE:H	1:A:30:ASN:HD22	1.22	0.87
1:A:112:ILE:HD12	1:A:112:ILE:N	1.90	0.87
1:A:480:SER:HB2	1:A:484:LYS:H	1.40	0.86
1:A:611:LEU:HD23	1:A:612:PHE:N	1.90	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:170:LEU:HD12	1:A:177:THR:HG22	1.57	0.86
2:B:18:LEU:C	2:B:18:LEU:CD2	2.48	0.86
1:A:612:PHE:CE2	1:A:628:LYS:HB2	2.11	0.85
1:A:614:PHE:CB	1:A:624:SER:OG	2.23	0.85
1:A:184:ASP:HB2	1:A:185:PRO:HD2	1.58	0.85
1:A:614:PHE:CD1	1:A:625:ASP:O	2.30	0.85
1:A:2:SER:CB	1:A:995:VAL:HG23	2.07	0.84
1:A:2:SER:HB3	1:A:995:VAL:HG23	1.59	0.84
1:A:611:LEU:HD23	1:A:612:PHE:O	1.76	0.84
1:A:107:ASN:OD1	1:A:109:GLN:HG2	1.78	0.84
1:A:929:SER:C	1:A:930:VAL:HG22	2.03	0.84
1:A:184:ASP:HB2	1:A:185:PRO:CD	2.08	0.84
1:A:1014:MET:SD	1:A:1015:GLN:HG2	2.18	0.84
1:A:641:PHE:CZ	1:A:648:ASN:HB2	2.12	0.83
1:A:644:LEU:HG	1:A:645:SER:H	1.43	0.83
1:A:400:ALA:N	1:A:701:ILE:HD11	1.93	0.83
1:A:504:ASN:HD21	1:A:545:PRO:HD3	1.39	0.83
1:A:909:ILE:HG12	1:A:927:MET:HE2	1.60	0.83
1:A:1127:ASP:O	1:A:1130:ILE:HG22	1.78	0.83
1:A:611:LEU:CB	1:A:629:VAL:CG2	2.57	0.83
1:A:98:ILE:H	1:A:98:ILE:CD1	1.91	0.82
1:A:613:TYR:HD1	1:A:613:TYR:C	1.77	0.82
1:A:611:LEU:H	1:A:629:VAL:CG2	1.92	0.82
1:A:620:THR:OG1	1:A:622:LEU:HD13	1.80	0.82
1:A:630:THR:CG2	1:A:631:LEU:H	1.89	0.82
1:A:571:LEU:HB3	1:A:572:PRO:HD3	1.60	0.82
1:A:609:GLY:O	1:A:631:LEU:HB2	1.79	0.82
1:A:368:GLU:HG2	1:A:370:GLN:CG	2.08	0.81
1:A:537:GLU:O	1:A:561:TRP:CD1	2.33	0.81
1:A:910:MET:HE1	2:B:14:VAL:HG11	1.61	0.81
1:A:364:VAL:O	1:A:365:VAL:CG2	2.28	0.81
1:A:561:TRP:CZ3	1:A:587:ILE:HD12	2.14	0.81
1:A:170:LEU:HD12	1:A:177:THR:CG2	2.11	0.80
1:A:561:TRP:CZ3	1:A:587:ILE:CD1	2.64	0.80
1:A:614:PHE:HE1	1:A:626:ARG:HA	1.44	0.80
1:A:611:LEU:HB3	1:A:629:VAL:HG22	1.63	0.80
1:A:929:SER:O	1:A:930:VAL:CG1	2.30	0.80
1:A:368:GLU:HG2	1:A:370:GLN:HG3	1.61	0.80
1:A:727:GLN:HB2	1:A:829:PHE:CE1	2.17	0.79
1:A:81:THR:CG2	1:A:83:LYS:H	1.96	0.79
1:A:396:ILE:CD1	1:A:673:LEU:HD21	2.13	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:929:SER:O	1:A:930:VAL:CG2	2.30	0.79
1:A:507:GLN:HE22	1:A:553:SER:HB2	1.46	0.79
1:A:936:LYS:C	1:A:938:MET:H	1.91	0.78
1:A:112:ILE:HG22	1:A:113:GLY:N	1.97	0.78
1:A:1033:VAL:HG11	2:B:24:HIS:CB	2.14	0.78
1:A:238:THR:HG22	1:A:247:ALA:HB2	1.64	0.78
1:A:610:ALA:CB	1:A:628:LYS:CE	2.61	0.78
1:A:504:ASN:ND2	1:A:545:PRO:CD	2.46	0.78
1:A:507:GLN:HE22	1:A:553:SER:CB	1.96	0.78
1:A:614:PHE:CE1	1:A:625:ASP:O	2.37	0.77
1:A:713:ARG:HH11	1:A:713:ARG:HG3	1.47	0.77
1:A:610:ALA:CB	1:A:628:LYS:HE2	2.15	0.77
1:A:250:PRO:HB2	1:A:252:ILE:HG22	1.65	0.76
1:A:1134:GLU:C	1:A:1136:LEU:H	1.93	0.76
1:A:1051:LEU:HD22	1:A:1094:ILE:HD12	1.66	0.76
1:A:185:PRO:HB2	1:A:186:GLN:OE1	1.84	0.76
2:B:23:LEU:O	2:B:24:HIS:HB3	1.82	0.76
1:A:328:LEU:O	1:A:380:GLY:HA2	1.86	0.76
1:A:1024:THR:CB	1:A:1041:THR:HG21	2.16	0.76
1:A:14:ALA:HB1	1:A:327:ARG:HB3	1.66	0.75
1:A:614:PHE:HE1	1:A:626:ARG:CA	1.99	0.75
1:A:1125:THR:HB	1:A:1128:ASP:HB2	1.66	0.75
1:A:342:GLU:O	1:A:343:GLN:HB3	1.85	0.75
1:A:610:ALA:HB3	1:A:628:LYS:HE3	1.67	0.75
1:A:611:LEU:H	1:A:629:VAL:HG23	1.50	0.75
1:A:396:ILE:HD12	1:A:673:LEU:HD21	1.68	0.75
1:A:476:VAL:HG13	1:A:490:TRP:HB3	1.67	0.75
1:A:412:PRO:O	1:A:413:LEU:HB2	1.87	0.74
1:A:537:GLU:C	1:A:561:TRP:HD1	1.95	0.74
1:A:143:ILE:HG12	1:A:154:ALA:HB2	1.69	0.74
1:A:514:ARG:O	1:A:533:GLU:HA	1.87	0.74
1:A:342:GLU:O	1:A:343:GLN:CB	2.35	0.74
1:A:701:ILE:N	1:A:701:ILE:HD13	2.02	0.74
1:A:117:GLU:OE1	1:A:117:GLU:HA	1.87	0.74
1:A:504:ASN:ND2	1:A:545:PRO:HD3	2.01	0.74
1:A:909:ILE:CG1	1:A:927:MET:HE2	2.18	0.74
1:A:482:GLU:CB	1:A:483:PRO:HD3	2.08	0.73
2:B:15:VAL:O	2:B:16:GLY:C	2.31	0.73
1:A:615:GLY:N	1:A:624:SER:CB	2.46	0.73
1:A:1033:VAL:HG11	2:B:24:HIS:HB2	1.69	0.73
1:A:701:ILE:HD13	1:A:701:ILE:H	1.54	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:272:LEU:O	1:A:273:LEU:HD23	1.88	0.72
1:A:112:ILE:HD12	1:A:112:ILE:H	1.51	0.72
1:A:304:LEU:HD12	1:A:305:LEU:N	2.05	0.72
1:A:537:GLU:HB3	1:A:561:TRP:CD1	2.25	0.72
1:A:844:LYS:H	1:A:844:LYS:HD3	1.55	0.72
1:A:762:SER:O	1:A:763:SER:HB3	1.89	0.72
1:A:928:ARG:O	1:A:929:SER:HB3	1.89	0.72
1:A:1090:ASP:HB2	1:A:1092:ASP:HB2	1.71	0.72
1:A:69:PRO:HD2	1:A:72:GLU:HG3	1.70	0.72
1:A:713:ARG:CG	1:A:713:ARG:NH1	2.40	0.72
2:B:20:GLN:HA	2:B:23:LEU:HD22	1.72	0.71
1:A:615:GLY:H	1:A:624:SER:HB2	1.55	0.71
1:A:854:SER:HB2	1:A:857:LYS:HG3	1.72	0.71
1:A:63:VAL:HB	1:A:80:LEU:HB3	1.72	0.71
1:A:366:ASP:O	1:A:369:ARG:N	2.23	0.71
1:A:917:LYS:O	1:A:919:ASP:N	2.24	0.71
1:A:167:VAL:HG13	1:A:180:PHE:HB3	1.73	0.71
1:A:610:ALA:CB	1:A:628:LYS:HE3	2.21	0.71
1:A:304:LEU:HD12	1:A:305:LEU:H	1.55	0.71
1:A:870:VAL:HG11	1:A:873:MET:HE3	1.69	0.71
1:A:611:LEU:CA	1:A:629:VAL:HG22	2.21	0.70
1:A:719:GLU:OE2	1:A:755:SER:HB3	1.90	0.70
1:A:621:GLY:O	1:A:622:LEU:HD12	1.91	0.70
1:A:546:LEU:HD11	1:A:593:MET:SD	2.31	0.70
1:A:871:TYR:OH	2:B:14:VAL:HG21	1.91	0.70
1:A:611:LEU:CB	1:A:629:VAL:HG22	2.21	0.70
2:B:18:LEU:O	2:B:18:LEU:CD2	2.30	0.70
1:A:388:ARG:HD3	1:A:714:THR:OG1	1.92	0.70
1:A:1000:LEU:HD13	1:A:1002:GLU:HB2	1.72	0.70
1:A:459:PHE:CD2	1:A:503:CYS:HB3	2.26	0.70
1:A:366:ASP:O	1:A:367:LEU:C	2.34	0.69
1:A:691:LEU:O	1:A:701:ILE:HA	1.93	0.69
1:A:238:THR:HG22	1:A:247:ALA:CB	2.21	0.69
1:A:49:LEU:O	1:A:51:PRO:HD3	1.91	0.69
1:A:520:GLN:NE2	1:A:529:ILE:HD11	2.08	0.69
2:B:20:GLN:C	2:B:22:GLY:H	2.00	0.69
1:A:284:LEU:O	1:A:300:LEU:HA	1.93	0.68
1:A:611:LEU:CD2	1:A:612:PHE:O	2.41	0.68
1:A:931:LEU:HD12	1:A:931:LEU:N	2.09	0.68
1:A:623:LEU:HG	1:A:624:SER:N	2.09	0.68
1:A:909:ILE:CG1	1:A:927:MET:CE	2.68	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:948:ASP:HB2	1:A:992:LEU:CD1	2.24	0.68
1:A:382:PHE:H	1:A:720:SER:HB3	1.58	0.67
1:A:184:ASP:O	1:A:185:PRO:C	2.37	0.67
1:A:364:VAL:C	1:A:365:VAL:HG23	2.19	0.67
1:A:513:GLY:O	1:A:538:VAL:HG23	1.93	0.67
1:A:530:SER:HB2	1:A:574:PHE:HE1	1.59	0.67
1:A:312:GLU:HG3	1:A:327:ARG:HG3	1.77	0.67
1:A:931:LEU:HG	1:A:947:ARG:HB3	1.74	0.67
1:A:713:ARG:HG2	1:A:713:ARG:NH1	2.04	0.67
2:B:23:LEU:O	2:B:24:HIS:CB	2.42	0.67
1:A:5:TYR:CE2	1:A:7:VAL:HG22	2.30	0.67
1:A:133:LEU:HD23	1:A:135:LEU:HD21	1.77	0.67
1:A:81:THR:CG2	1:A:82:ALA:N	2.58	0.66
1:A:184:ASP:CB	1:A:185:PRO:HD2	2.25	0.66
1:A:622:LEU:HD12	1:A:622:LEU:N	2.10	0.66
1:A:452:VAL:HB	1:A:455:GLN:HB2	1.76	0.66
1:A:202:PHE:O	1:A:203:ASN:ND2	2.30	0.65
1:A:518:TYR:HD2	1:A:519:LEU:N	1.94	0.65
1:A:679:MET:SD	1:A:679:MET:C	2.80	0.65
1:A:953:TRP:HB2	1:A:970:ASN:HB2	1.77	0.65
1:A:1123:GLU:HG2	1:A:1124:ALA:H	1.62	0.65
2:B:22:GLY:O	2:B:23:LEU:C	2.39	0.65
1:A:24:THR:H	1:A:30:ASN:HD21	1.45	0.65
1:A:611:LEU:N	1:A:629:VAL:CG2	2.59	0.65
1:A:296:THR:OG1	1:A:297:LEU:N	2.29	0.65
1:A:587:ILE:HB	1:A:588:PRO:HD2	1.79	0.65
1:A:614:PHE:CA	1:A:624:SER:OG	2.45	0.65
1:A:611:LEU:CD2	1:A:612:PHE:C	2.69	0.64
1:A:615:GLY:H	1:A:624:SER:HB3	1.59	0.64
1:A:978:GLN:O	1:A:992:LEU:HB2	1.97	0.64
2:B:20:GLN:C	2:B:22:GLY:N	2.52	0.64
1:A:294:THR:HG22	1:A:295:VAL:HG22	1.80	0.64
1:A:556:CYS:N	1:A:569:LEU:O	2.29	0.64
1:A:186:GLN:OE1	1:A:186:GLN:N	2.30	0.64
1:A:936:LYS:O	1:A:940:GLY:HA2	1.96	0.64
1:A:921:ILE:C	1:A:922:LEU:HD12	2.22	0.64
1:A:345:SER:C	1:A:347:VAL:H	2.04	0.64
1:A:112:ILE:CG2	1:A:113:GLY:H	1.98	0.64
1:A:391:ARG:HD2	1:A:392:ASN:O	1.97	0.64
1:A:478:LEU:HD13	1:A:526:LEU:HD21	1.79	0.63
1:A:920:PHE:O	1:A:934:ALA:HA	1.97	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1136:LEU:HD23	1:A:1139:ILE:HD12	1.80	0.63
1:A:1057:ARG:HH22	1:A:1111:ASN:C	2.05	0.63
1:A:197:LEU:HD23	1:A:197:LEU:N	2.09	0.63
1:A:1002:GLU:OE2	1:A:1034:ASN:HB2	1.98	0.63
1:A:613:TYR:HD1	1:A:614:PHE:CA	2.11	0.63
1:A:701:ILE:N	1:A:701:ILE:CD1	2.61	0.63
1:A:1091:GLY:HA2	1:A:1094:ILE:HB	1.80	0.63
1:A:112:ILE:H	1:A:112:ILE:CD1	2.10	0.63
1:A:424:THR:HA	1:A:436:LEU:O	1.98	0.63
1:A:186:GLN:CD	1:A:186:GLN:H	2.07	0.62
1:A:81:THR:HG23	1:A:82:ALA:N	2.14	0.62
1:A:98:ILE:CD1	1:A:98:ILE:N	2.58	0.62
1:A:530:SER:HB2	1:A:574:PHE:CE1	2.34	0.62
1:A:273:LEU:HB2	1:A:281:PHE:HB2	1.81	0.62
1:A:982:ALA:HB1	1:A:988:GLU:OE1	2.00	0.62
1:A:874:VAL:HG22	1:A:875:GLU:O	1.98	0.62
2:B:14:VAL:O	2:B:18:LEU:CB	2.48	0.62
1:A:828:TYR:HE2	1:A:861:VAL:HG21	1.64	0.62
1:A:265:ASP:O	1:A:268:GLY:N	2.33	0.62
1:A:929:SER:O	1:A:930:VAL:CB	2.46	0.61
1:A:909:ILE:HG21	1:A:927:MET:HG2	1.82	0.61
1:A:1057:ARG:HH12	1:A:1110:ALA:H	1.48	0.61
1:A:611:LEU:H	1:A:629:VAL:HG22	1.65	0.61
1:A:617:ASN:HB2	1:A:621:GLY:H	1.66	0.61
1:A:741:GLU:HG2	1:A:751:ALA:HA	1.83	0.61
1:A:480:SER:CB	1:A:483:PRO:HD2	2.31	0.61
2:B:14:VAL:O	2:B:18:LEU:HB3	2.01	0.61
1:A:220:ILE:HB	1:A:230:ILE:HB	1.81	0.61
1:A:378:CYS:HB3	1:A:721:PRO:HB2	1.82	0.61
1:A:1134:GLU:O	1:A:1136:LEU:N	2.34	0.60
1:A:81:THR:HG22	1:A:83:LYS:N	2.09	0.60
1:A:367:LEU:HB2	1:A:368:GLU:OE1	2.01	0.60
1:A:708:GLN:CD	1:A:710:LEU:O	2.44	0.60
1:A:856:GLY:H	1:A:857:LYS:HG2	1.66	0.60
1:A:287:LYS:O	1:A:288:GLU:HB2	2.00	0.60
1:A:449:MET:HG3	1:A:484:LYS:O	2.02	0.60
1:A:726:TYR:CE2	1:A:728:GLU:HB2	2.37	0.60
1:A:18:CYS:N	1:A:313:CYS:SG	2.75	0.60
1:A:654:ASP:HA	1:A:675:GLU:HG3	1.83	0.60
1:A:438:LEU:C	1:A:440:GLY:H	2.09	0.59
1:A:639:ARG:HG3	1:A:640:THR:N	2.18	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:480:SER:HB3	1:A:483:PRO:HD2	1.85	0.59
1:A:560:LEU:HD12	1:A:567:ARG:HH11	1.67	0.59
1:A:613:TYR:CD1	1:A:614:PHE:CA	2.84	0.59
1:A:623:LEU:HG	1:A:624:SER:H	1.66	0.59
1:A:917:LYS:HZ1	1:A:921:ILE:HD12	1.66	0.59
1:A:923:VAL:HG11	1:A:959:ILE:HD11	1.84	0.59
1:A:969:GLU:O	1:A:971:ALA:N	2.36	0.59
1:A:262:ASN:ND2	1:A:316:TYR:H	2.01	0.59
1:A:414:ARG:HA	1:A:422:TYR:HA	1.85	0.59
1:A:184:ASP:CB	1:A:185:PRO:CD	2.74	0.59
1:A:928:ARG:O	1:A:929:SER:CB	2.50	0.59
1:A:828:TYR:CE2	1:A:861:VAL:HG21	2.37	0.59
1:A:611:LEU:N	1:A:629:VAL:HG22	2.17	0.58
1:A:844:LYS:HD3	1:A:844:LYS:N	2.17	0.58
1:A:84:TYR:CE2	1:A:135:LEU:HD12	2.38	0.58
1:A:611:LEU:CB	1:A:629:VAL:HG21	2.28	0.58
1:A:614:PHE:CE1	1:A:625:ASP:C	2.82	0.58
1:A:5:TYR:HE2	1:A:7:VAL:CG2	2.17	0.58
1:A:6:VAL:HG12	1:A:1040:VAL:HG22	1.84	0.58
1:A:157:ILE:HG22	1:A:158:ARG:N	2.17	0.58
1:A:885:ASN:O	1:A:886:SER:HB2	2.03	0.58
1:A:571:LEU:CB	1:A:572:PRO:HD3	2.32	0.57
1:A:616:LEU:HG	1:A:617:ASN:N	2.19	0.57
1:A:312:GLU:HG3	1:A:327:ARG:CG	2.34	0.57
1:A:500:VAL:HG11	1:A:541:LEU:HD12	1.86	0.57
1:A:1125:THR:CG2	1:A:1126:ALA:N	2.58	0.57
1:A:836:VAL:HG22	2:B:15:VAL:HG21	1.86	0.57
1:A:539:ALA:HA	1:A:561:TRP:NE1	2.19	0.57
1:A:1134:GLU:C	1:A:1136:LEU:N	2.58	0.57
1:A:368:GLU:HG2	1:A:370:GLN:HE21	1.57	0.57
1:A:504:ASN:ND2	1:A:545:PRO:HD2	2.06	0.57
1:A:918:GLY:O	1:A:919:ASP:O	2.23	0.57
1:A:197:LEU:H	1:A:197:LEU:CD2	2.14	0.57
1:A:930:VAL:C	1:A:931:LEU:HD12	2.29	0.57
1:A:803:HIS:HD2	1:A:858:LEU:HG	1.70	0.57
1:A:185:PRO:O	1:A:186:GLN:C	2.48	0.57
1:A:365:VAL:HG12	1:A:367:LEU:H	1.70	0.57
1:A:452:VAL:HG22	1:A:477:ARG:HH11	1.70	0.57
1:A:611:LEU:C	1:A:629:VAL:HG22	2.30	0.56
1:A:24:THR:H	1:A:30:ASN:ND2	2.04	0.56
1:A:659:ILE:HG12	1:A:668:PHE:CE1	2.41	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:660:TYR:CG	1:A:707:ILE:HG23	2.40	0.56
1:A:828:TYR:CD2	1:A:850:VAL:CG1	2.87	0.56
1:A:364:VAL:HG12	1:A:365:VAL:N	2.20	0.56
1:A:609:GLY:HA3	1:A:632:GLY:O	2.05	0.56
1:A:909:ILE:HG22	1:A:925:ASP:OD2	2.04	0.56
1:A:591:ILE:HD12	1:A:604:CYS:HB2	1.85	0.56
1:A:611:LEU:O	1:A:629:VAL:HG22	2.06	0.56
1:A:727:GLN:HB2	1:A:829:PHE:HE1	1.66	0.56
1:A:368:GLU:H	1:A:368:GLU:CD	2.13	0.56
1:A:366:ASP:OD1	1:A:372:GLN:O	2.24	0.56
1:A:22:HIS:CD2	1:A:28:ASP:O	2.59	0.56
1:A:876:PHE:CZ	1:A:922:LEU:HD11	2.40	0.56
1:A:938:MET:HG2	1:A:939:GLU:N	2.21	0.56
1:A:1127:ASP:N	1:A:1127:ASP:OD1	2.37	0.56
1:A:925:ASP:OD2	1:A:926:LEU:N	2.39	0.56
1:A:621:GLY:C	1:A:622:LEU:CD1	2.63	0.55
1:A:537:GLU:CB	1:A:561:TRP:CD1	2.89	0.55
1:A:978:GLN:HE21	1:A:995:VAL:HG21	1.70	0.55
1:A:611:LEU:HD23	1:A:612:PHE:H	1.69	0.55
1:A:2:SER:HB2	1:A:995:VAL:HG23	1.88	0.55
1:A:33:ILE:HD12	1:A:42:TYR:CE1	2.41	0.55
1:A:367:LEU:C	1:A:369:ARG:H	2.14	0.55
1:A:518:TYR:C	1:A:518:TYR:CD2	2.85	0.55
1:A:998:PHE:CZ	1:A:1074:ARG:HD2	2.41	0.55
1:A:658:VAL:CG1	1:A:659:ILE:N	2.70	0.55
1:A:954:MET:O	2:B:21:ARG:NH2	2.40	0.55
1:A:2:SER:CB	1:A:995:VAL:CG2	2.82	0.55
1:A:55:VAL:HG21	1:A:100:ILE:HD13	1.89	0.55
1:A:108:VAL:O	1:A:141:LYS:NZ	2.40	0.55
1:A:427:LEU:HD13	1:A:429:PHE:CD2	2.42	0.54
1:A:617:ASN:C	1:A:619:GLU:H	2.15	0.54
2:B:15:VAL:O	2:B:18:LEU:N	2.40	0.54
1:A:53:LYS:HE2	1:A:98:ILE:HG12	1.89	0.54
1:A:364:VAL:HG21	1:A:1010:GLY:HA3	1.89	0.54
1:A:480:SER:OG	1:A:487:VAL:HG21	2.06	0.54
1:A:484:LYS:O	1:A:484:LYS:HG3	2.07	0.54
1:A:512:VAL:HB	1:A:515:ALA:HB3	1.89	0.54
1:A:22:HIS:HD2	1:A:28:ASP:O	1.90	0.54
1:A:459:PHE:CE2	1:A:503:CYS:CB	2.72	0.54
1:A:660:TYR:CD1	1:A:707:ILE:HG23	2.42	0.54
1:A:938:MET:CG	1:A:939:GLU:H	2.19	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:402:ILE:HD11	1:A:443:VAL:HG21	1.90	0.54
1:A:561:TRP:HZ3	1:A:587:ILE:HD12	1.71	0.54
1:A:1024:THR:HB	1:A:1041:THR:HG22	1.85	0.54
1:A:429:PHE:O	1:A:431:GLY:N	2.39	0.53
1:A:644:LEU:HG	1:A:645:SER:N	2.18	0.53
1:A:368:GLU:O	1:A:369:ARG:C	2.50	0.53
1:A:931:LEU:N	1:A:931:LEU:CD1	2.72	0.53
1:A:31:LEU:HD21	1:A:33:ILE:HD11	1.89	0.53
1:A:384:GLU:OE1	1:A:384:GLU:HA	2.08	0.53
1:A:611:LEU:N	1:A:629:VAL:HG23	2.22	0.53
1:A:2:SER:HB3	1:A:995:VAL:CG2	2.37	0.53
1:A:593:MET:HA	1:A:601:TYR:O	2.09	0.53
1:A:947:ARG:O	1:A:992:LEU:HD12	2.09	0.53
1:A:985:THR:HG22	1:A:989:ARG:HH21	1.72	0.53
1:A:155:PHE:CE1	1:A:200:LYS:HB3	2.44	0.53
1:A:661:SER:HA	1:A:666:LEU:HA	1.90	0.53
1:A:843:PRO:HG2	1:A:869:ALA:HB2	1.89	0.53
1:A:853:TYR:HA	1:A:857:LYS:O	2.08	0.53
1:A:197:LEU:N	1:A:197:LEU:CD2	2.70	0.53
1:A:368:GLU:HG2	1:A:370:GLN:NE2	2.18	0.53
1:A:1102:ARG:N	1:A:1103:PRO:HD2	2.24	0.53
1:A:611:LEU:O	1:A:629:VAL:N	2.41	0.53
1:A:622:LEU:N	1:A:622:LEU:CD1	2.72	0.53
1:A:658:VAL:HG12	1:A:659:ILE:N	2.23	0.53
1:A:876:PHE:CZ	1:A:920:PHE:HA	2.43	0.53
1:A:2:SER:HB2	1:A:995:VAL:CG2	2.39	0.52
1:A:1057:ARG:NH1	1:A:1110:ALA:H	2.06	0.52
1:A:1101:SER:OG	1:A:1104:LYS:HG2	2.09	0.52
1:A:598:SER:O	1:A:599:SER:HB2	2.09	0.52
1:A:610:ALA:HB1	1:A:628:LYS:CE	2.38	0.52
1:A:809:GLN:O	1:A:810:ASN:HB2	2.09	0.52
1:A:615:GLY:N	1:A:624:SER:OG	2.40	0.52
1:A:909:ILE:HG21	1:A:927:MET:CG	2.38	0.52
1:A:5:TYR:HE2	1:A:7:VAL:HG22	1.75	0.52
1:A:411:TRP:CE2	1:A:459:PHE:HA	2.44	0.52
1:A:614:PHE:CD1	1:A:625:ASP:C	2.88	0.52
1:A:403:ASP:HA	1:A:698:THR:HA	1.92	0.52
1:A:948:ASP:HB2	1:A:992:LEU:HD12	1.90	0.52
1:A:518:TYR:HD2	1:A:518:TYR:C	2.16	0.52
1:A:65:GLU:O	1:A:77:LEU:HD12	2.09	0.52
1:A:343:GLN:O	1:A:343:GLN:HG2	2.08	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:399:HIS:CB	1:A:687:TYR:HE1	2.23	0.52
1:A:654:ASP:O	1:A:656:PRO:HD3	2.09	0.52
1:A:692:ALA:C	1:A:693:LEU:HD12	2.35	0.52
1:A:938:MET:HG2	1:A:939:GLU:H	1.75	0.52
1:A:406:GLY:O	1:A:407:ILE:C	2.53	0.52
1:A:612:PHE:HB3	1:A:614:PHE:CE2	2.45	0.52
1:A:231:ILE:HD13	1:A:240:HIS:HD2	1.73	0.51
2:B:20:GLN:O	2:B:20:GLN:HG3	1.93	0.51
1:A:40:GLU:HB3	1:A:42:TYR:CE1	2.45	0.51
1:A:234:GLN:O	1:A:236:SER:N	2.42	0.51
1:A:469:ILE:HD11	1:A:471:ILE:HG12	1.92	0.51
1:A:660:TYR:HB2	1:A:667:VAL:HB	1.93	0.51
1:A:876:PHE:HZ	1:A:920:PHE:HA	1.75	0.51
1:A:268:GLY:O	1:A:285:LEU:HD12	2.10	0.51
1:A:504:ASN:C	1:A:506:SER:H	2.18	0.51
1:A:870:VAL:HG11	1:A:873:MET:HE2	1.85	0.51
1:A:905:HIS:HD2	1:A:908:ASN:ND2	2.09	0.51
1:A:234:GLN:C	1:A:236:SER:H	2.18	0.51
1:A:499:SER:OG	1:A:511:ALA:O	2.28	0.51
1:A:623:LEU:CG	1:A:624:SER:N	2.74	0.51
1:A:570:LYS:NZ	1:A:572:PRO:HD2	2.26	0.51
1:A:922:LEU:HD12	1:A:922:LEU:N	2.26	0.51
1:A:83:LYS:NZ	1:A:1073:TRP:O	2.42	0.51
1:A:931:LEU:HG	1:A:947:ARG:CB	2.41	0.51
1:A:141:LYS:HD2	1:A:154:ALA:HB3	1.93	0.50
1:A:1030:PHE:CZ	1:A:1038:GLY:HA3	2.46	0.50
1:A:556:CYS:SG	1:A:557:ALA:N	2.68	0.50
1:A:623:LEU:CG	1:A:624:SER:H	2.24	0.50
1:A:25:SER:HB2	1:A:27:GLU:O	2.11	0.50
1:A:610:ALA:HB1	1:A:629:VAL:O	2.11	0.50
1:A:697:SER:O	1:A:698:THR:CB	2.59	0.50
1:A:936:LYS:C	1:A:938:MET:N	2.60	0.50
1:A:224:GLU:CB	1:A:225:PRO:HD3	2.42	0.50
1:A:1136:LEU:O	1:A:1137:THR:C	2.53	0.50
1:A:185:PRO:O	1:A:186:GLN:O	2.30	0.50
1:A:659:ILE:HG12	1:A:668:PHE:HE1	1.75	0.50
1:A:727:GLN:HB2	1:A:829:PHE:CZ	2.45	0.50
1:A:37:THR:HG22	1:A:59:GLY:O	2.11	0.50
1:A:879:LYS:HB2	1:A:890:LEU:HD11	1.93	0.50
1:A:912:LEU:HG	1:A:926:LEU:HB2	1.93	0.50
1:A:84:TYR:CD2	1:A:135:LEU:HD12	2.47	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:81:THR:HB	1:A:85:ASN:HB2	1.93	0.50
1:A:117:GLU:OE1	1:A:117:GLU:CA	2.59	0.50
1:A:276:MET:O	1:A:310:ILE:HD12	2.11	0.50
1:A:345:SER:C	1:A:347:VAL:N	2.70	0.50
1:A:570:LYS:HG2	1:A:571:LEU:H	1.77	0.50
1:A:389:ILE:HB	1:A:713:ARG:HB3	1.94	0.49
1:A:706:GLU:HG2	1:A:708:GLN:OE1	2.12	0.49
1:A:1048:TYR:CE2	1:A:1052:LEU:HD12	2.47	0.49
1:A:1063:LYS:H	1:A:1063:LYS:HD3	1.76	0.49
1:A:142:VAL:O	1:A:144:PRO:HD3	2.11	0.49
1:A:987:GLU:C	1:A:989:ARG:H	2.20	0.49
1:A:870:VAL:CG1	1:A:873:MET:HE3	2.41	0.49
1:A:912:LEU:HB3	1:A:913:TYR:CE1	2.47	0.49
1:A:919:ASP:CG	1:A:920:PHE:H	2.20	0.49
1:A:1058:LEU:HD11	1:A:1097:PHE:HB2	1.93	0.49
1:A:421:THR:HB	1:A:684:SER:HA	1.92	0.49
1:A:973:ASN:OD1	1:A:999:HIS:ND1	2.44	0.49
1:A:459:PHE:CE2	1:A:461:GLY:N	2.77	0.49
1:A:230:ILE:C	1:A:231:ILE:HD12	2.37	0.49
1:A:611:LEU:HB2	1:A:631:LEU:CD1	2.42	0.49
1:A:922:LEU:N	1:A:922:LEU:CD1	2.75	0.49
1:A:985:THR:CG2	1:A:989:ARG:HH21	2.26	0.49
1:A:157:ILE:HG21	1:A:201:GLU:O	2.13	0.49
1:A:998:PHE:HB2	1:A:1088:PHE:CD1	2.47	0.49
1:A:260:CYS:SG	1:A:274:GLY:HA3	2.52	0.49
1:A:340:SER:HB2	1:A:344:GLY:HA2	1.94	0.49
1:A:438:LEU:HD23	1:A:442:GLU:O	2.12	0.49
1:A:476:VAL:HG11	1:A:519:LEU:HD11	1.95	0.49
1:A:500:VAL:HB	1:A:511:ALA:HB3	1.95	0.49
1:A:234:GLN:O	1:A:235:GLU:CD	2.56	0.48
1:A:368:GLU:OE1	1:A:368:GLU:N	2.30	0.48
1:A:620:THR:OG1	1:A:622:LEU:CD1	2.58	0.48
1:A:917:LYS:NZ	1:A:921:ILE:HD12	2.28	0.48
1:A:374:GLN:OE1	1:A:391:ARG:HG3	2.13	0.48
1:A:817:VAL:HG23	1:A:830:ILE:HB	1.95	0.48
1:A:375:LEU:HB3	1:A:390:ILE:HG13	1.94	0.48
1:A:903:CYS:C	1:A:904:ASN:HD22	2.22	0.48
1:A:449:MET:HG3	1:A:484:LYS:HG3	1.96	0.48
1:A:727:GLN:HG2	1:A:730:SER:OG	2.13	0.48
1:A:739:ARG:HD3	1:A:757:SER:OG	2.14	0.48
1:A:69:PRO:O	1:A:72:GLU:HB2	2.14	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:466:GLN:O	1:A:481:GLN:HG2	2.14	0.48
1:A:5:TYR:CE2	1:A:7:VAL:CG2	2.94	0.48
1:A:304:LEU:HD12	1:A:306:GLY:H	1.78	0.48
1:A:213:GLU:OE1	1:A:236:SER:HB3	2.14	0.48
1:A:932:LEU:O	1:A:933:LEU:HD12	2.13	0.48
2:B:24:HIS:O	2:B:24:HIS:ND1	2.47	0.48
1:A:365:VAL:HG21	1:A:733:PHE:HE2	1.78	0.47
1:A:467:GLN:HE22	1:A:524:GLN:HG2	1.77	0.47
1:A:611:LEU:HD23	1:A:612:PHE:CA	2.44	0.47
1:A:1044:SER:O	1:A:1047:TRP:N	2.47	0.47
1:A:522:HIS:O	1:A:523:PRO:C	2.56	0.47
1:A:705:ASP:O	1:A:706:GLU:O	2.32	0.47
1:A:241:ASN:O	1:A:242:GLY:C	2.58	0.47
1:A:611:LEU:CA	1:A:629:VAL:CG2	2.89	0.47
1:A:740:ILE:O	1:A:741:GLU:HG3	2.15	0.47
1:A:288:GLU:OE1	1:A:298:LYS:HB2	2.14	0.47
1:A:329:GLY:HA3	1:A:384:GLU:HB3	1.97	0.47
1:A:426:VAL:HB	1:A:460:CYS:SG	2.54	0.47
1:A:500:VAL:CG1	1:A:541:LEU:HD12	2.45	0.47
1:A:587:ILE:HD13	1:A:587:ILE:H	1.78	0.47
1:A:952:ASN:HB3	1:A:969:GLU:HG3	1.96	0.47
1:A:1033:VAL:CG1	2:B:24:HIS:CB	2.91	0.47
1:A:263:ARG:HB2	1:A:271:TYR:CE2	2.50	0.47
1:A:364:VAL:C	1:A:365:VAL:CG2	2.84	0.47
1:A:415:SER:HB2	1:A:423:ASP:OD2	2.14	0.47
1:A:643:SER:OG	1:A:647:THR:HA	2.13	0.47
1:A:889:ARG:CG	1:A:904:ASN:HB3	2.44	0.47
1:A:1091:GLY:O	1:A:1095:GLU:N	2.35	0.47
1:A:40:GLU:HB3	1:A:42:TYR:HE1	1.78	0.47
1:A:252:ILE:HG23	1:A:253:ILE:HG23	1.96	0.47
1:A:365:VAL:CG1	1:A:367:LEU:HD23	2.45	0.47
1:A:376:VAL:HG13	1:A:389:ILE:HG13	1.96	0.47
1:A:641:PHE:HB3	1:A:679:MET:CE	2.44	0.47
1:A:975:PHE:CD1	1:A:975:PHE:C	2.92	0.47
1:A:1063:LYS:H	1:A:1063:LYS:CD	2.27	0.47
1:A:81:THR:HG23	1:A:82:ALA:H	1.77	0.47
1:A:938:MET:CG	1:A:939:GLU:N	2.78	0.47
1:A:411:TRP:CZ2	1:A:459:PHE:HA	2.50	0.47
1:A:724:ILE:HG23	1:A:724:ILE:O	2.15	0.47
1:A:730:SER:HB2	1:A:732:CYS:SG	2.55	0.47
1:A:365:VAL:HG21	1:A:733:PHE:CE2	2.50	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:447:GLU:O	1:A:448:LEU:HD12	2.15	0.47
1:A:713:ARG:HG3	1:A:713:ARG:NH1	2.18	0.47
1:A:224:GLU:O	1:A:226:PHE:N	2.49	0.46
1:A:345:SER:O	1:A:347:VAL:N	2.48	0.46
1:A:452:VAL:CB	1:A:455:GLN:HB2	2.43	0.46
1:A:905:HIS:ND1	1:A:933:LEU:HD21	2.30	0.46
1:A:58:TYR:HB3	1:A:1073:TRP:HB2	1.97	0.46
1:A:116:SER:OG	1:A:134:ARG:CZ	2.64	0.46
1:A:936:LYS:O	1:A:940:GLY:CA	2.63	0.46
1:A:987:GLU:C	1:A:989:ARG:N	2.73	0.46
1:A:438:LEU:C	1:A:440:GLY:N	2.74	0.46
1:A:791:LEU:HD12	1:A:792:LEU:H	1.80	0.46
1:A:917:LYS:O	1:A:918:GLY:C	2.58	0.46
1:A:1107:GLU:C	1:A:1109:VAL:N	2.74	0.46
1:A:539:ALA:HA	1:A:561:TRP:HE1	1.80	0.46
1:A:592:LEU:O	1:A:602:LEU:HA	2.15	0.46
1:A:614:PHE:CB	1:A:624:SER:HG	2.10	0.46
1:A:715:VAL:HG21	1:A:799:PHE:HB3	1.97	0.46
1:A:838:PRO:HD2	1:A:839:GLU:OE2	2.16	0.46
1:A:884:ILE:CD1	1:A:889:ARG:HB2	2.45	0.46
1:A:920:PHE:HB3	1:A:935:TYR:HB3	1.97	0.46
1:A:929:SER:C	1:A:930:VAL:CG2	2.74	0.46
1:A:1033:VAL:HG11	2:B:24:HIS:CG	2.51	0.46
1:A:1054:MET:O	1:A:1054:MET:HG3	2.16	0.46
1:A:184:ASP:HB2	1:A:185:PRO:HD3	1.91	0.46
1:A:213:GLU:HG3	1:A:215:GLU:H	1.81	0.46
1:A:432:GLN:O	1:A:456:GLN:HA	2.16	0.46
1:A:560:LEU:HD12	1:A:567:ARG:CZ	2.46	0.46
1:A:1013:VAL:O	1:A:1014:MET:HG3	2.16	0.46
1:A:582:LEU:H	1:A:582:LEU:HG	1.45	0.46
1:A:267:ASN:ND2	1:A:287:LYS:NZ	2.64	0.46
1:A:923:VAL:CG1	1:A:959:ILE:HD11	2.46	0.46
1:A:335:LYS:HB2	1:A:350:MET:SD	2.56	0.46
1:A:451:PHE:CE2	1:A:470:GLN:HB2	2.51	0.46
1:A:611:LEU:HB2	1:A:631:LEU:HD12	1.98	0.46
1:A:364:VAL:CG1	1:A:365:VAL:N	2.78	0.45
1:A:459:PHE:CD2	1:A:460:CYS:N	2.84	0.45
1:A:707:ILE:O	1:A:708:GLN:O	2.33	0.45
1:A:716:PRO:HB2	1:A:718:TYR:CE1	2.52	0.45
1:A:893:TRP:HA	1:A:893:TRP:CE3	2.50	0.45
1:A:170:LEU:HD12	1:A:177:THR:HG21	1.96	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:427:LEU:HD11	1:A:434:ARG:HB2	1.97	0.45
1:A:617:ASN:C	1:A:619:GLU:N	2.74	0.45
1:A:731:GLN:HA	1:A:796:GLN:NE2	2.32	0.45
1:A:595:THR:HG22	1:A:596:PHE:N	2.31	0.45
1:A:610:ALA:HB3	1:A:628:LYS:CE	2.34	0.45
1:A:740:ILE:HG22	1:A:741:GLU:N	2.32	0.45
1:A:1064:SER:OG	1:A:1068:ILE:N	2.50	0.45
1:A:161:GLU:N	1:A:161:GLU:CD	2.75	0.45
1:A:365:VAL:HG12	1:A:367:LEU:HD23	1.99	0.45
1:A:816:LEU:CD1	1:A:831:VAL:HG22	2.46	0.45
1:A:932:LEU:C	1:A:933:LEU:HD12	2.42	0.45
1:A:1091:GLY:O	1:A:1092:ASP:C	2.59	0.45
1:A:45:THR:N	1:A:48:GLY:O	2.48	0.45
1:A:265:ASP:O	1:A:266:PRO:C	2.58	0.45
1:A:537:GLU:C	1:A:561:TRP:CD1	2.85	0.45
1:A:609:GLY:O	1:A:630:THR:O	2.34	0.45
1:A:419:ARG:HD3	1:A:421:THR:OG1	2.17	0.45
1:A:105:HIS:HA	1:A:152:LEU:HD12	1.99	0.44
1:A:717:LEU:HD23	1:A:717:LEU:HA	1.80	0.44
1:A:561:TRP:HZ3	1:A:587:ILE:CD1	2.26	0.44
1:A:1076:PHE:CD2	1:A:1076:PHE:C	2.95	0.44
1:A:610:ALA:HB2	1:A:628:LYS:HE2	1.99	0.44
1:A:909:ILE:HG13	1:A:927:MET:HE2	1.98	0.44
1:A:930:VAL:HG13	1:A:954:MET:HE2	1.97	0.44
1:A:19:VAL:HG12	1:A:64:MET:HE3	1.99	0.44
1:A:794:ILE:HG23	1:A:799:PHE:HA	1.98	0.44
1:A:1027:SER:OG	1:A:1039:LEU:HD11	2.18	0.44
1:A:1051:LEU:HB2	1:A:1089:ILE:HD13	1.99	0.44
1:A:578:HIS:CG	1:A:579:LYS:N	2.85	0.44
1:A:624:SER:O	1:A:625:ASP:OD1	2.36	0.44
1:A:202:PHE:O	1:A:203:ASN:CB	2.66	0.44
1:A:803:HIS:CD2	1:A:858:LEU:HB2	2.53	0.44
1:A:815:SER:HB3	1:A:872:SER:HA	1.99	0.44
1:A:895:THR:C	1:A:897:LYS:H	2.26	0.44
1:A:1079:GLU:O	1:A:1080:ARG:HB3	2.18	0.44
1:A:98:ILE:HD13	1:A:98:ILE:N	2.12	0.44
1:A:288:GLU:HB3	1:A:296:THR:HG23	1.99	0.44
1:A:424:THR:CG2	1:A:435:VAL:HG12	2.48	0.44
1:A:479:VAL:HG12	1:A:480:SER:N	2.33	0.44
1:A:570:LYS:HG2	1:A:571:LEU:N	2.33	0.44
1:A:613:TYR:CE2	1:A:666:LEU:HD12	2.53	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:736:LEU:HD23	1:A:736:LEU:HA	1.82	0.44
1:A:795:ASP:HB3	1:A:798:THR:OG1	2.18	0.44
1:A:366:ASP:OD1	1:A:373:GLY:HA2	2.18	0.44
1:A:614:PHE:HA	1:A:624:SER:OG	2.17	0.44
1:A:1111:ASN:OD1	1:A:1111:ASN:N	2.51	0.44
1:A:361:ASP:OD2	1:A:362:MET:N	2.50	0.43
1:A:590:SER:O	1:A:604:CYS:HA	2.18	0.43
1:A:624:SER:C	1:A:625:ASP:OD1	2.61	0.43
1:A:1107:GLU:C	1:A:1109:VAL:H	2.24	0.43
1:A:571:LEU:HB3	1:A:572:PRO:CD	2.42	0.43
1:A:636:THR:HA	1:A:652:CYS:O	2.17	0.43
1:A:5:TYR:OH	1:A:1091:GLY:HA3	2.18	0.43
1:A:31:LEU:CD2	1:A:33:ILE:HD11	2.48	0.43
1:A:610:ALA:HB1	1:A:628:LYS:HE2	1.92	0.43
1:A:679:MET:HA	1:A:692:ALA:O	2.19	0.43
1:A:57:MET:HE2	1:A:57:MET:HB3	1.82	0.43
1:A:451:PHE:CD1	1:A:479:VAL:HG21	2.53	0.43
1:A:413:LEU:C	1:A:422:TYR:HB3	2.43	0.43
1:A:871:TYR:OH	2:B:14:VAL:CG2	2.62	0.43
1:A:250:PRO:O	1:A:251:PRO:C	2.62	0.43
1:A:731:GLN:HA	1:A:796:GLN:HE21	1.83	0.43
1:A:841:ALA:O	2:B:13:SER:HA	2.18	0.43
1:A:342:GLU:OE1	1:A:342:GLU:HA	2.18	0.43
1:A:399:HIS:HB3	1:A:687:TYR:HE1	1.84	0.43
1:A:1139:ILE:O	1:A:1139:ILE:CG2	2.66	0.43
1:A:611:LEU:O	1:A:628:LYS:HA	2.19	0.43
1:A:630:THR:O	1:A:631:LEU:HB2	2.19	0.43
1:A:905:HIS:CD2	1:A:908:ASN:ND2	2.86	0.43
1:A:1102:ARG:NH2	1:A:1127:ASP:OD2	2.52	0.43
1:A:579:LYS:HE3	1:A:579:LYS:C	2.44	0.42
1:A:608:ASP:OD2	1:A:609:GLY:N	2.52	0.42
1:A:569:LEU:HG	1:A:576:LEU:HA	2.01	0.42
1:A:641:PHE:CD2	1:A:650:PHE:HB2	2.54	0.42
1:A:1061:VAL:HG21	1:A:1108:VAL:HG22	2.00	0.42
1:A:507:GLN:HE22	1:A:553:SER:HB3	1.82	0.42
1:A:719:GLU:OE2	1:A:755:SER:CB	2.62	0.42
1:A:72:GLU:OE1	1:A:103:ARG:NH2	2.53	0.42
1:A:512:VAL:O	1:A:512:VAL:HG12	2.18	0.42
1:A:912:LEU:CB	1:A:913:TYR:CE1	3.02	0.42
1:A:1051:LEU:CB	1:A:1089:ILE:HD13	2.50	0.42
1:A:22:HIS:O	1:A:75:ASP:HB2	2.19	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:299:ASP:CG	1:A:300:LEU:H	2.28	0.42
1:A:534:MET:O	1:A:535:GLU:C	2.61	0.42
1:A:767:SER:O	1:A:768:SER:O	2.37	0.42
1:A:953:TRP:N	1:A:953:TRP:CD1	2.86	0.42
1:A:384:GLU:OE1	1:A:384:GLU:CA	2.65	0.42
1:A:403:ASP:OD2	1:A:403:ASP:N	2.45	0.42
1:A:131:ILE:HG22	1:A:133:LEU:HD13	2.02	0.42
1:A:231:ILE:HD13	1:A:240:HIS:CD2	2.53	0.42
1:A:399:HIS:HB2	1:A:687:TYR:HE1	1.83	0.42
1:A:1137:THR:C	1:A:1139:ILE:H	2.28	0.42
1:A:305:LEU:HD13	1:A:336:LEU:HD22	2.02	0.42
1:A:309:SER:H	1:A:332:GLN:NE2	2.18	0.42
2:B:14:VAL:O	2:B:18:LEU:HB2	2.19	0.42
1:A:253:ILE:O	1:A:254:LYS:C	2.61	0.42
1:A:308:THR:HB	1:A:324:VAL:HG11	2.01	0.42
1:A:482:GLU:CB	1:A:483:PRO:CD	2.73	0.42
1:A:850:VAL:HG12	1:A:861:VAL:HB	2.02	0.42
1:A:896:GLU:H	1:A:896:GLU:HG3	1.60	0.42
1:A:265:ASP:HB3	1:A:267:ASN:OD1	2.20	0.41
1:A:109:GLN:HE21	1:A:109:GLN:HB2	1.64	0.41
1:A:561:TRP:CZ3	1:A:587:ILE:HD11	2.51	0.41
1:A:1013:VAL:HB	1:A:1014:MET:H	1.68	0.41
1:A:614:PHE:CZ	1:A:626:ARG:HA	2.52	0.41
1:A:750:THR:O	1:A:751:ALA:HB2	2.20	0.41
1:A:41:ILE:HD12	1:A:53:LYS:HB3	2.01	0.41
1:A:171:TYR:CG	1:A:223:PRO:HA	2.55	0.41
1:A:396:ILE:HD13	1:A:396:ILE:O	2.20	0.41
1:A:570:LYS:CG	1:A:571:LEU:H	2.33	0.41
1:A:740:ILE:O	1:A:741:GLU:CG	2.68	0.41
1:A:889:ARG:HG3	1:A:904:ASN:HB3	2.03	0.41
1:A:174:GLN:H	1:A:174:GLN:HG2	1.54	0.41
1:A:196:SER:OG	1:A:199:GLU:OE1	2.33	0.41
1:A:512:VAL:O	1:A:512:VAL:CG1	2.69	0.41
1:A:641:PHE:HB3	1:A:679:MET:HE1	2.02	0.41
1:A:449:MET:O	1:A:479:VAL:HG21	2.20	0.41
1:A:471:ILE:HG23	1:A:476:VAL:HB	2.01	0.41
1:A:503:CYS:HG	1:A:504:ASN:N	2.19	0.41
1:A:610:ALA:CB	1:A:629:VAL:O	2.69	0.41
1:A:642:ARG:NH2	1:A:682:LEU:O	2.54	0.41
1:A:234:GLN:C	1:A:235:GLU:HG3	2.46	0.41
1:A:503:CYS:SG	1:A:504:ASN:N	2.94	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:568:ILE:HB	1:A:577:LEU:HB2	2.03	0.41
1:A:927:MET:O	1:A:928:ARG:HG3	2.20	0.41
1:A:84:TYR:HE2	1:A:135:LEU:HD12	1.82	0.41
1:A:407:ILE:HG21	1:A:410:LEU:HD23	2.02	0.41
1:A:918:GLY:C	1:A:919:ASP:O	2.62	0.41
1:A:953:TRP:CD1	1:A:953:TRP:H	2.39	0.41
2:B:21:ARG:O	2:B:21:ARG:HG3	2.20	0.41
1:A:27:GLU:H	1:A:27:GLU:CD	2.28	0.41
1:A:110:ASP:OD1	1:A:141:LYS:NZ	2.43	0.41
1:A:493:PRO:O	1:A:494:GLN:CB	2.68	0.41
1:A:549:SER:HB2	1:A:552:LEU:O	2.21	0.41
2:B:23:LEU:H	2:B:23:LEU:CD1	1.98	0.41
1:A:173:CYS:SG	1:A:177:THR:HB	2.61	0.40
1:A:451:PHE:HA	1:A:470:GLN:OE1	2.20	0.40
1:A:603:LEU:HA	1:A:613:TYR:HA	2.03	0.40
1:A:805:HIS:HB2	1:A:858:LEU:HD12	2.03	0.40
1:A:980:ASP:O	1:A:989:ARG:NH1	2.54	0.40
1:A:1041:THR:HG22	1:A:1042:SER:N	2.36	0.40
1:A:1081:LYS:HG3	1:A:1083:GLU:OE1	2.22	0.40
1:A:234:GLN:C	1:A:236:SER:N	2.79	0.40
1:A:642:ARG:HH12	1:A:683:ASN:ND2	2.18	0.40
1:A:837:TYR:HB3	1:A:839:GLU:OE2	2.21	0.40
1:A:659:ILE:HA	1:A:667:VAL:O	2.21	0.40
1:A:743:GLN:HB3	1:A:784:GLU:HB2	2.02	0.40
1:A:960:LEU:HD21	1:A:966:LEU:HB2	2.02	0.40
1:A:1052:LEU:O	1:A:1055:GLN:HB2	2.21	0.40
1:A:157:ILE:CG2	1:A:158:ARG:N	2.82	0.40
1:A:939:GLU:HG3	1:A:941:ASN:HB2	2.02	0.40
1:A:978:GLN:NE2	1:A:995:VAL:HG21	2.33	0.40
1:A:614:PHE:HE1	1:A:626:ARG:N	2.19	0.40
1:A:739:ARG:NH1	1:A:790:ASN:HD21	2.20	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%)	867 (78%)	162 (15%)	77 (7%)	1	4
2	B	11/13 (85%)	5 (46%)	3 (27%)	3 (27%)	0	0
All	All	1117/1156 (97%)	872 (78%)	165 (15%)	80 (7%)	1	4

All (80) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	185	PRO
1	A	186	GLN
1	A	202	PHE
1	A	203	ASN
1	A	224	GLU
1	A	235	GLU
1	A	291	MET
1	A	341	ASN
1	A	367	LEU
1	A	407	ILE
1	A	430	VAL
1	A	494	GLN
1	A	502	SER
1	A	554	PRO
1	A	571	LEU
1	A	689	ASP
1	A	698	THR
1	A	706	GLU
1	A	708	GLN
1	A	751	ALA
1	A	768	SER
1	A	810	ASN
1	A	886	SER
1	A	918	GLY
1	A	919	ASP
1	A	930	VAL
1	A	950	ASN
1	A	951	PRO
1	A	970	ASN
1	A	1080	ARG
2	B	24	HIS
1	A	28	ASP
1	A	288	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	294	THR
1	A	343	GLN
1	A	346	TYR
1	A	368	GLU
1	A	369	ARG
1	A	413	LEU
1	A	518	TYR
1	A	523	PRO
1	A	644	LEU
1	A	864	LYS
1	A	929	SER
1	A	1135	GLU
2	B	15	VAL
1	A	176	PRO
1	A	296	THR
1	A	412	PRO
1	A	461	GLY
1	A	546	LEU
1	A	923	VAL
1	A	962	ASP
1	A	1138	ARG
1	A	149	ASN
1	A	482	GLU
1	A	750	THR
1	A	802	LEU
1	A	937	PRO
1	A	1045	GLU
1	A	118	THR
1	A	200	LYS
1	A	206	PRO
1	A	489	GLU
1	A	564	ILE
1	A	696	ASN
1	A	148	ASP
1	A	214	ALA
1	A	287	LYS
1	A	618	ILE
1	A	707	ILE
1	A	953	TRP
2	B	16	GLY
1	A	112	ILE
1	A	259	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	371	GLY
1	A	405	PRO
1	A	521	ILE
1	A	801	VAL
1	A	113	GLY

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	977/1001 (98%)	818 (84%)	159 (16%)	2	12
2	B	10/10 (100%)	6 (60%)	4 (40%)	0	1
All	All	987/1011 (98%)	824 (84%)	163 (16%)	2	12

All (163) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2	SER
1	A	7	VAL
1	A	25	SER
1	A	27	GLU
1	A	32	LEU
1	A	49	LEU
1	A	52	VAL
1	A	55	VAL
1	A	79	ILE
1	A	81	THR
1	A	96	GLU
1	A	98	ILE
1	A	101	ILE
1	A	103	ARG
1	A	109	GLN
1	A	112	ILE
1	A	117	GLU
1	A	125	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	130	MET
1	A	135	LEU
1	A	139	LEU
1	A	147	ARG
1	A	148	ASP
1	A	158	ARG
1	A	159	LEU
1	A	162	LEU
1	A	167	VAL
1	A	174	GLN
1	A	177	THR
1	A	190	VAL
1	A	197	LEU
1	A	199	GLU
1	A	224	GLU
1	A	235	GLU
1	A	237	ILE
1	A	243	ASP
1	A	259	VAL
1	A	283	LEU
1	A	286	GLU
1	A	294	THR
1	A	295	VAL
1	A	301	ARG
1	A	302	VAL
1	A	304	LEU
1	A	310	ILE
1	A	312	GLU
1	A	327	ARG
1	A	334	VAL
1	A	352	THR
1	A	354	THR
1	A	372	GLN
1	A	374	GLN
1	A	376	VAL
1	A	383	LYS
1	A	386	SER
1	A	390	ILE
1	A	392	ASN
1	A	396	ILE
1	A	397	HIS
1	A	415	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	427	LEU
1	A	429	PHE
1	A	430	VAL
1	A	435	VAL
1	A	439	ASN
1	A	441	GLU
1	A	448	LEU
1	A	449	MET
1	A	452	VAL
1	A	460	CYS
1	A	467	GLN
1	A	469	ILE
1	A	472	THR
1	A	476	VAL
1	A	481	GLN
1	A	482	GLU
1	A	502	SER
1	A	518	TYR
1	A	519	LEU
1	A	520	GLN
1	A	521	ILE
1	A	529	ILE
1	A	530	SER
1	A	534	MET
1	A	536	HIS
1	A	543	ILE
1	A	544	THR
1	A	549	SER
1	A	555	LEU
1	A	564	ILE
1	A	567	ARG
1	A	579	LYS
1	A	581	MET
1	A	582	LEU
1	A	587	ILE
1	A	589	ARG
1	A	590	SER
1	A	594	THR
1	A	597	GLU
1	A	602	LEU
1	A	606	LEU
1	A	613	TYR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	618	ILE
1	A	619	GLU
1	A	620	THR
1	A	622	LEU
1	A	640	THR
1	A	653	SER
1	A	663	ASN
1	A	668	PHE
1	A	679	MET
1	A	701	ILE
1	A	708	GLN
1	A	713	ARG
1	A	728	GLU
1	A	730	SER
1	A	735	VAL
1	A	739	ARG
1	A	750	THR
1	A	766	SER
1	A	817	VAL
1	A	844	LYS
1	A	854	SER
1	A	857	LYS
1	A	858	LEU
1	A	893	TRP
1	A	896	GLU
1	A	899	VAL
1	A	900	ARG
1	A	904	ASN
1	A	910	MET
1	A	912	LEU
1	A	917	LYS
1	A	922	LEU
1	A	923	VAL
1	A	931	LEU
1	A	945	ILE
1	A	960	LEU
1	A	966	LEU
1	A	969	GLU
1	A	979	LYS
1	A	981	SER
1	A	986	ASP
1	A	992	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1000	LEU
1	A	1006	VAL
1	A	1013	VAL
1	A	1014	MET
1	A	1029	LEU
1	A	1045	GLU
1	A	1052	LEU
1	A	1055	GLN
1	A	1063	LYS
1	A	1086	THR
1	A	1093	LEU
1	A	1100	ILE
1	A	1127	ASP
1	A	1128	ASP
1	A	1131	LYS
2	B	18	LEU
2	B	19	SER
2	B	20	GLN
2	B	23	LEU

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (38) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	16	ASN
1	A	22	HIS
1	A	30	ASN
1	A	105	HIS
1	A	109	GLN
1	A	174	GLN
1	A	189	HIS
1	A	240	HIS
1	A	262	ASN
1	A	267	ASN
1	A	332	GLN
1	A	337	ASN
1	A	370	GLN
1	A	372	GLN
1	A	374	GLN
1	A	439	ASN
1	A	455	GLN
1	A	456	GLN
1	A	466	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	481	GLN
1	A	504	ASN
1	A	507	GLN
1	A	520	GLN
1	A	790	ASN
1	A	796	GLN
1	A	809	GLN
1	A	904	ASN
1	A	905	HIS
1	A	907	ASN
1	A	908	ASN
1	A	941	ASN
1	A	978	GLN
1	A	990	GLN
1	A	993	GLN
1	A	1055	GLN
1	A	1056	ASN
1	A	1059	ASN
1	A	1070	HIS

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

5.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

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

5.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry ⓘ

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers ⓘ

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data

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	1114/1143 (97%)	0.33	61 (5%) 30 15	26, 76, 168, 216	0
2	B	13/13 (100%)	1.94	5 (38%) 1 1	38, 39, 42, 73	0
All	All	1127/1156 (97%)	0.35	66 (5%) 28 14	26, 75, 168, 216	0

All (66) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	502	SER	7.3
1	A	508	VAL	6.5
2	B	25	GLY	5.3
1	A	929	SER	5.2
2	B	24	HIS	4.9
1	A	462	ASN	4.7
1	A	613	TYR	4.5
1	A	503	CYS	4.4
1	A	616	LEU	4.4
1	A	519	LEU	4.1
2	B	17	PHE	4.1
2	B	22	GLY	3.9
1	A	924	GLY	3.9
1	A	561	TRP	3.8
1	A	501	ALA	3.8
1	A	510	VAL	3.6
1	A	602	LEU	3.6
1	A	425	LEU	3.5
1	A	714	THR	3.5
1	A	571	LEU	3.4
1	A	925	ASP	3.4
1	A	468	LEU	3.3
1	A	426	VAL	3.2
1	A	557	ALA	3.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	292	ASP	3.2
1	A	569	LEU	3.2
1	A	572	PRO	3.1
1	A	2	SER	3.1
1	A	614	PHE	3.0
1	A	521	ILE	3.0
1	A	660	TYR	2.9
1	A	574	PHE	2.9
1	A	413	LEU	2.8
1	A	930	VAL	2.8
1	A	297	LEU	2.8
1	A	357	GLY	2.7
1	A	513	GLY	2.7
1	A	630	THR	2.6
2	B	15	VAL	2.6
1	A	931	LEU	2.5
1	A	542	ASP	2.4
1	A	603	LEU	2.4
1	A	555	LEU	2.4
1	A	367	LEU	2.4
1	A	581	MET	2.3
1	A	1079	GLU	2.3
1	A	447	GLU	2.3
1	A	313	CYS	2.3
1	A	518	TYR	2.3
1	A	568	ILE	2.2
1	A	460	CYS	2.2
1	A	294	THR	2.2
1	A	517	TYR	2.2
1	A	505	SER	2.2
1	A	623	LEU	2.2
1	A	663	ASN	2.2
1	A	509	VAL	2.1
1	A	615	GLY	2.1
1	A	458	PHE	2.1
1	A	111	ARG	2.1
1	A	629	VAL	2.1
1	A	436	LEU	2.1
1	A	461	GLY	2.1
1	A	621	GLY	2.1
1	A	444	GLU	2.0
1	A	412	PRO	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.