



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 09:39 PM UTC

PDB ID : 1JDE / pdb_00001jde
Title : K22A mutant of pyruvate, phosphate dikinase
Authors : Ye, D.; Wei, M.; McGuire, M.; Huang, K.; Kapadia, G.; Herzberg, O.; Martin, B.M.; Dunaway-Mariano, D.
Deposited on : 2001-06-13
Resolution : 2.80 Å(reported)

This is a Full wwPDB X-ray Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/XrayValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ 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
Mogul	:	2022.3.0, CSD as543be (2022)
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

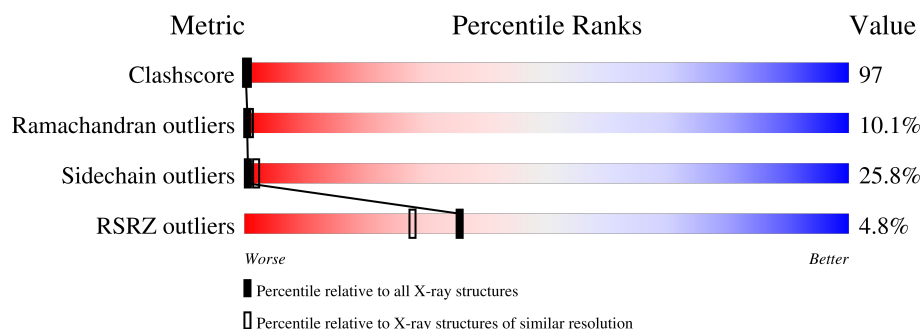
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 2.80 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	190562	4276 (2.80-2.80)
Ramachandran outliers	187476	4196 (2.80-2.80)
Sidechain outliers	187428	4198 (2.80-2.80)
RSRZ outliers	180081	3869 (2.80-2.80)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments of the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria respectively. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$. 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	873	5% 11% 53% 29% 6%

The following table lists non-polymeric compounds, carbohydrate monomers and non-standard residues in protein, DNA, RNA chains that are outliers for geometric or electron-density-fit criteria:

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
2	SO4	A	902	-	-	X	-

2 Entry composition [i](#)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 6768 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.

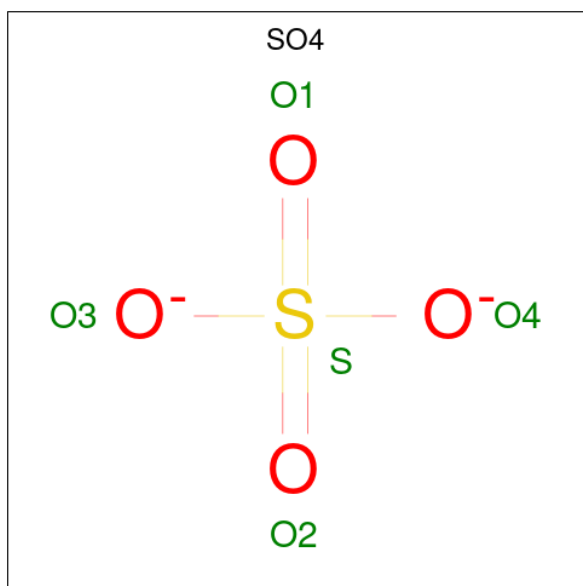
- Molecule 1 is a protein called PYRUVATE, PHOSPHATE DIKINASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	868	6717	4226	1138	1302	51	0	0	0

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	22	ALA	LYS	engineered mutation	UNP P22983

- Molecule 2 is SULFATE ION (CCD ID: SO4) (formula: O₄S).



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

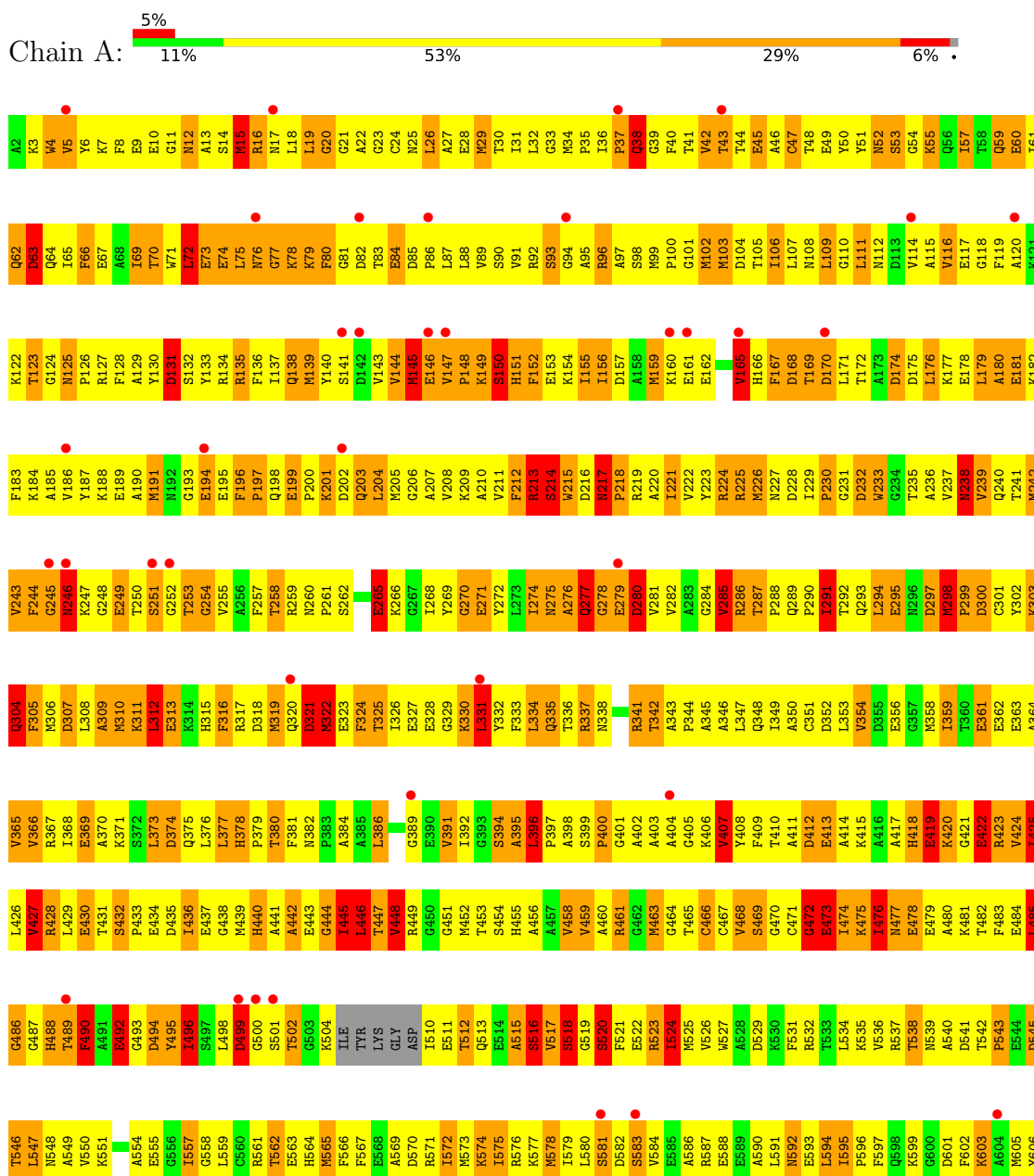
- Molecule 3 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	A	41	Total	O	0	0
			41	41		

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: PYRUVATE, PHOSPHATE DIKINASE



F857	K607	V671	G732	I794
R858	A608	T672	G733	T795
V859	L609	P673	S734	E796
P860	E610	P674	D735	S797
I861	G611	E675	M736	D798
A862	R612	T676	Q737	P799
R863	P613	A677	Y738	F800
L864	M614	K678	H739	A801
A865	T615	M679	I740	R802
A866	V616	Q680	G741	L803
A867	R617	T681	T742	D804
Q868	Y618	R682	M743	Q805
A869	L619	A683	I744	V806
A870	D620	V684	E745	
L871	P621	M685	I746	
N872	P622	E686	P747	L811
N873	L623	A687	R748	V812
K874	H624	A688	A749	E813
	E625	I689	A750	M814
	F626	E690	L751	A815
	V627	V691	T752	V816
	P628	K692	A753	K817
	H629	E693	D754	K818
	T630	E694	A755	E819
		T695	I756	K820
		G696	A757	Q821
		I697	E758	T822
		T699		R823
		V700		
		P701	E761	L826
		E702	F762	K827
		I703	F763	C828
		M704	F764	G829
		T705	G766	I830
		P706	T767	C831
		L707	N768	Q832
		V708	D769	E833
		G709	L770	H834
		E710	I771	G835
		K711	Q772	C836
		K712	M773	D837
		V652	T774	P838
		E713	F775	S839
		L714	G776	S840
		K715	F777	V841
		H656	S778	E842
		E657	R779	F843
		F658	D780	C844
		D719	V781	H845
		P660	A782	K846
		M661	G783	V847
		R662	K784	C848
		G663	F785	L849
		H664	L786	N850
		R665	D787	Y851
		G666	S788	V852
		C667	Y789	S853
		R668	Y790	C854
		L669	K791	S855
		A670	E731	P856

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 1 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	89.90Å 58.60Å 102.30Å 90.00° 95.10° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	10.00 – 2.80 10.00 – 2.80	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	(Not available) (10.00-2.80) 88.8 (10.00-2.80)	Depositor EDS
R_{merge}	0.07	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	2.18 (at 2.77Å)	Xtriage
Refinement program	X-PLOR	Depositor
R, R_{free}	0.193 , (Not available) 0.260 , (Not available)	Depositor DCC
R_{free} test set	No test flags present.	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	32.9	Xtriage
Anisotropy	0.573	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.56 , 166.2	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.42$, $\langle L^2 \rangle = 0.25$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.80	EDS
Total number of atoms	6768	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	28.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 16.30% 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

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	1.46	22/6839 (0.3%)	1.96	184/9217 (2.0%)

All (22) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	798	ASP	CA-C	6.24	1.60	1.52
1	A	547	LEU	N-CA	-5.96	1.40	1.46
1	A	146	GLU	CD-OE2	5.92	1.36	1.25
1	A	70	THR	C-N	-5.90	1.26	1.33
1	A	473	GLU	C-N	-5.76	1.28	1.33
1	A	412	ASP	CG-OD2	5.66	1.36	1.25
1	A	221	ILE	CA-CB	-5.60	1.47	1.54
1	A	694	GLU	CD-OE2	5.55	1.35	1.25
1	A	859	VAL	CA-CB	-5.55	1.51	1.54
1	A	682	ARG	NE-CZ	5.53	1.39	1.33
1	A	778	SER	N-CA	-5.48	1.39	1.46
1	A	249	GLU	CD-OE2	5.36	1.35	1.25
1	A	131	ASP	CG-OD2	5.35	1.35	1.25
1	A	496	ILE	CG1-CD1	-5.33	1.30	1.51
1	A	153	GLU	CD-OE2	5.30	1.35	1.25
1	A	653	ASP	CG-OD2	5.29	1.35	1.25
1	A	271	GLU	CA-C	5.24	1.58	1.52
1	A	419	GLU	CD-OE2	5.20	1.35	1.25
1	A	444	GLY	C-N	5.12	1.40	1.33
1	A	710	GLU	CD-OE2	5.07	1.34	1.25
1	A	297	ASP	CG-OD2	5.06	1.34	1.25
1	A	42	VAL	CA-C	5.03	1.57	1.53

All (184) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	474	ILE	N-CA-C	10.17	117.10	106.21
1	A	672	THR	CA-C-N	9.87	130.97	122.28
1	A	672	THR	C-N-CA	9.87	130.97	122.28
1	A	300	ASP	N-CA-C	-9.59	103.69	114.62
1	A	575	ILE	N-CA-C	-9.40	103.56	112.96
1	A	771	THR	N-CA-C	-8.87	101.30	110.97
1	A	490	PHE	N-CA-C	8.87	123.60	107.99
1	A	476	ILE	CB-CA-C	-8.31	100.60	110.91
1	A	305	PHE	CA-C-N	8.22	131.50	120.65
1	A	305	PHE	C-N-CA	8.22	131.50	120.65
1	A	748	ARG	CA-C-N	8.17	131.22	120.28
1	A	748	ARG	C-N-CA	8.17	131.22	120.28
1	A	676	ILE	N-CA-C	-8.11	102.90	110.53
1	A	62	GLN	N-CA-C	-8.10	102.41	111.07
1	A	43	THR	N-CA-C	8.08	121.66	110.35
1	A	243	VAL	CB-CA-C	8.07	122.92	110.50
1	A	12	ASN	CA-CB-CG	8.03	120.63	112.60
1	A	196	PHE	CA-C-N	7.82	129.62	119.84
1	A	196	PHE	C-N-CA	7.82	129.62	119.84
1	A	351	CYS	N-CA-C	-7.75	102.78	111.07
1	A	63	ASP	CA-CB-CG	7.69	120.29	112.60
1	A	280	ASP	CA-CB-CG	7.35	119.95	112.60
1	A	769	ASP	CA-CB-CG	7.27	119.87	112.60
1	A	704	MET	N-CA-C	7.09	120.08	108.52
1	A	859	VAL	O-C-N	7.05	124.93	120.42
1	A	238	ASN	CA-C-N	-7.00	114.06	123.10
1	A	238	ASN	C-N-CA	-7.00	114.06	123.10
1	A	196	PHE	C-N-CD	-7.00	96.32	125.00
1	A	821	GLN	N-CA-C	-6.97	104.41	113.12
1	A	312	LEU	N-CA-CB	6.94	120.43	110.16
1	A	233	TRP	CA-C-O	6.90	121.94	117.94
1	A	472	GLY	CA-C-N	6.85	134.63	121.54
1	A	472	GLY	C-N-CA	6.85	134.63	121.54
1	A	422	GLU	N-CA-C	-6.81	103.86	111.28
1	A	250	THR	CA-C-O	6.77	125.89	118.65
1	A	106	ILE	N-CA-CB	6.69	117.82	110.53
1	A	270	GLY	N-CA-C	6.68	119.98	111.09
1	A	275	ASN	CA-CB-CG	6.68	119.28	112.60
1	A	342	THR	N-CA-C	-6.66	100.60	110.46
1	A	84	GLU	CA-C-N	6.65	129.79	122.74
1	A	84	GLU	C-N-CA	6.65	129.79	122.74
1	A	276	ALA	CA-C-N	-6.64	114.21	122.84
1	A	276	ALA	C-N-CA	-6.64	114.21	122.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	787	ASP	CA-CB-CG	-6.59	106.01	112.60
1	A	448	VAL	N-CA-C	6.55	117.31	110.62
1	A	798	ASP	CA-C-O	6.48	125.53	119.76
1	A	103	MET	N-CA-C	6.47	119.89	109.86
1	A	322	MET	N-CA-C	6.43	119.49	109.52
1	A	658	PHE	N-CA-C	-6.36	104.45	111.82
1	A	297	ASP	CA-CB-CG	6.32	118.92	112.60
1	A	400	PRO	N-CA-CB	6.30	108.92	103.31
1	A	445	ILE	CA-C-N	6.27	131.83	123.05
1	A	445	ILE	C-N-CA	6.27	131.83	123.05
1	A	706	PRO	CB-CA-C	-6.22	101.15	110.17
1	A	258	THR	N-CA-C	6.14	118.05	111.36
1	A	203	GLN	N-CA-C	-6.13	103.92	111.40
1	A	592	ASN	CA-CB-CG	-6.12	106.48	112.60
1	A	424	VAL	N-CA-C	6.12	116.62	107.51
1	A	116	VAL	CA-C-N	6.10	128.37	120.44
1	A	116	VAL	C-N-CA	6.10	128.37	120.44
1	A	594	LEU	N-CA-C	-6.08	105.12	112.54
1	A	221	ILE	CA-C-N	6.05	128.75	120.46
1	A	221	ILE	C-N-CA	6.05	128.75	120.46
1	A	346	ALA	O-C-N	6.04	129.29	122.22
1	A	37	PRO	CB-CA-C	-6.02	104.99	111.56
1	A	358	MET	N-CA-C	6.02	118.36	111.02
1	A	413	GLU	N-CA-C	-6.00	105.79	113.23
1	A	214	SER	CA-C-N	5.98	132.96	121.54
1	A	214	SER	C-N-CA	5.98	132.96	121.54
1	A	814	MET	N-CA-C	-5.96	104.36	111.69
1	A	42	VAL	CA-C-N	5.95	130.17	121.31
1	A	42	VAL	C-N-CA	5.95	130.17	121.31
1	A	84	GLU	O-C-N	5.94	129.20	122.19
1	A	730	LYS	N-CA-C	-5.92	104.19	113.02
1	A	4	TRP	N-CA-C	-5.91	106.20	113.41
1	A	765	PHE	N-CA-C	5.89	118.26	109.59
1	A	515	ALA	N-CA-C	5.89	118.36	109.23
1	A	427	VAL	N-CA-CB	5.88	117.54	110.95
1	A	495	TYR	CA-C-N	-5.86	113.73	122.70
1	A	495	TYR	C-N-CA	-5.86	113.73	122.70
1	A	174	ASP	CA-CB-CG	5.86	118.46	112.60
1	A	729	LYS	CA-C-N	5.86	131.39	122.08
1	A	729	LYS	C-N-CA	5.86	131.39	122.08
1	A	245	GLY	N-CA-C	-5.83	106.47	115.73
1	A	446	LEU	CA-C-N	-5.83	113.77	122.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	446	LEU	C-N-CA	-5.83	113.77	122.74
1	A	246	ASN	N-CA-CB	5.80	119.08	110.49
1	A	321	ASP	CA-CB-CG	5.75	118.35	112.60
1	A	597	PHE	N-CA-C	5.72	117.98	111.11
1	A	432	SER	O-C-N	5.71	125.36	121.71
1	A	277	GLN	N-CA-CB	5.71	119.78	110.37
1	A	703	ILE	N-CA-C	5.70	116.63	107.73
1	A	378	HIS	N-CA-CB	5.66	116.88	110.03
1	A	557	ILE	N-CA-C	5.66	116.01	107.75
1	A	254	GLY	N-CA-C	5.64	120.58	111.38
1	A	201	LYS	N-CA-C	-5.63	105.54	113.20
1	A	499	ASP	CA-CB-CG	5.63	118.23	112.60
1	A	446	LEU	N-CA-CB	-5.62	101.72	110.55
1	A	425	ILE	N-CA-CB	5.61	120.31	110.49
1	A	595	ILE	N-CA-CB	5.61	119.06	111.21
1	A	109	LEU	N-CA-C	5.60	118.81	110.52
1	A	653	ASP	CA-CB-CG	5.60	118.20	112.60
1	A	396	LEU	CA-C-O	5.56	123.93	119.59
1	A	445	ILE	O-C-N	5.56	129.05	123.10
1	A	102	MET	CA-C-N	-5.56	112.33	122.12
1	A	102	MET	C-N-CA	-5.56	112.33	122.12
1	A	216	ASP	CA-CB-CG	5.53	118.13	112.60
1	A	182	LYS	CA-C-N	5.52	128.12	120.29
1	A	182	LYS	C-N-CA	5.52	128.12	120.29
1	A	842	GLU	N-CA-CB	5.51	119.88	110.51
1	A	365	VAL	N-CA-C	5.49	115.69	110.42
1	A	324	PHE	N-CA-C	-5.48	101.93	110.42
1	A	805	GLN	N-CA-C	5.43	119.76	113.18
1	A	546	THR	CA-CB-OG1	-5.42	101.47	109.60
1	A	316	PHE	CA-CB-CG	-5.41	108.39	113.80
1	A	148	PRO	N-CA-CB	5.40	108.92	103.25
1	A	701	PRO	N-CA-CB	5.40	108.92	103.25
1	A	747	PRO	N-CA-CB	5.38	108.99	103.23
1	A	656	HIS	N-CA-C	5.37	117.47	109.25
1	A	524	ILE	CB-CA-C	5.37	119.22	111.65
1	A	543	PRO	N-CA-CB	5.33	109.15	103.39
1	A	442	ALA	CA-C-N	5.31	128.37	120.31
1	A	442	ALA	C-N-CA	5.31	128.37	120.31
1	A	762	PHE	N-CA-C	5.30	117.03	108.34
1	A	804	ASP	N-CA-CB	5.30	119.45	110.49
1	A	218	PRO	N-CA-C	5.30	123.38	112.47
1	A	396	LEU	N-CA-C	5.29	118.76	107.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	258	THR	CA-C-N	5.29	130.23	122.77
1	A	258	THR	C-N-CA	5.29	130.23	122.77
1	A	608	ALA	CA-C-N	5.28	129.13	120.63
1	A	608	ALA	C-N-CA	5.28	129.13	120.63
1	A	422	GLU	O-C-N	5.27	127.71	122.12
1	A	152	PHE	CA-CB-CG	-5.27	108.53	113.80
1	A	715	LYS	N-CA-C	-5.27	105.54	111.28
1	A	407	VAL	N-CA-C	5.27	115.68	107.99
1	A	699	ILE	CB-CA-C	-5.26	104.41	110.41
1	A	695	THR	CB-CA-C	-5.26	102.37	109.16
1	A	629	HIS	CA-CB-CG	-5.26	108.54	113.80
1	A	615	THR	CA-C-N	-5.23	116.00	123.11
1	A	615	THR	C-N-CA	-5.23	116.00	123.11
1	A	156	ILE	N-CA-C	-5.21	105.24	110.30
1	A	391	VAL	N-CA-C	-5.21	102.86	109.58
1	A	298	MET	CA-C-N	5.20	126.33	119.84
1	A	298	MET	C-N-CA	5.20	126.33	119.84
1	A	233	TRP	CA-C-N	-5.19	113.19	121.03
1	A	233	TRP	C-N-CA	-5.19	113.19	121.03
1	A	29	MET	N-CA-C	-5.19	105.52	111.07
1	A	750	ALA	N-CA-C	-5.19	105.71	111.36
1	A	193	GLY	CA-C-N	-5.18	115.41	122.93
1	A	193	GLY	C-N-CA	-5.18	115.41	122.93
1	A	274	ILE	N-CA-CB	5.18	117.27	111.21
1	A	681	THR	CA-C-N	5.18	127.48	120.65
1	A	681	THR	C-N-CA	5.18	127.48	120.65
1	A	384	ALA	N-CA-CB	5.17	119.43	110.39
1	A	627	VAL	O-C-N	5.15	126.97	121.10
1	A	242	MET	O-C-N	5.14	128.82	123.06
1	A	131	ASP	N-CA-C	-5.14	105.11	111.33
1	A	309	ALA	O-C-N	5.12	127.36	122.03
1	A	145	MET	N-CA-CB	5.12	119.14	110.49
1	A	277	GLN	O-C-N	5.11	129.13	123.05
1	A	703	ILE	CA-C-N	-5.09	115.92	123.05
1	A	703	ILE	C-N-CA	-5.09	115.92	123.05
1	A	461	ARG	CB-CA-C	5.09	119.29	110.84
1	A	694	GLU	N-CA-C	5.09	121.64	110.80
1	A	354	VAL	N-CA-C	-5.08	106.19	111.58
1	A	581	SER	N-CA-C	5.08	115.71	107.23
1	A	196	PHE	O-C-N	5.06	127.14	121.32
1	A	93	SER	N-CA-C	5.06	117.50	109.96
1	A	346	ALA	N-CA-C	-5.06	105.89	111.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	168	ASP	CA-CB-CG	5.06	117.66	112.60
1	A	342	THR	CA-C-O	-5.06	115.46	121.89
1	A	674	PRO	N-CA-CB	5.05	108.29	102.33
1	A	217	ASN	CA-C-N	5.05	126.16	119.84
1	A	217	ASN	C-N-CA	5.05	126.16	119.84
1	A	265	GLU	CB-CG-CD	-5.05	104.01	112.60
1	A	19	LEU	N-CA-C	5.05	118.58	112.93
1	A	804	ASP	CA-CB-CG	5.04	117.64	112.60
1	A	606	TYR	O-C-N	5.04	127.27	122.03
1	A	116	VAL	O-C-N	5.04	127.14	121.90
1	A	331	LEU	N-CA-CB	5.03	117.74	109.95
1	A	575	ILE	O-C-N	5.03	127.42	122.04
1	A	213	ARG	CA-C-N	-5.01	113.63	120.44
1	A	213	ARG	C-N-CA	-5.01	113.63	120.44
1	A	520	SER	N-CA-C	-5.00	104.78	111.24

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	6717	0	6632	1290	0
2	A	10	0	0	6	0
3	A	41	0	0	5	0
All	All	6768	0	6632	1290	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 97.

All (1290) 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:219:ARG:NH2	1:A:437:GLU:H	1.41	1.18
1:A:276:ALA:HB1	1:A:281:VAL:HG21	1.27	1.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:219:ARG:HH21	1:A:437:GLU:N	1.46	1.13
1:A:574:LYS:HD3	1:A:593:GLU:HB2	1.20	1.13
1:A:5:VAL:HG22	1:A:42:VAL:HA	1.27	1.12
1:A:401:GLY:H	1:A:499:ASP:HB3	1.11	1.11
1:A:105:THR:HG21	1:A:279:GLU:HG2	1.25	1.10
1:A:429:LEU:HD23	1:A:430:GLU:HG2	1.35	1.07
1:A:285:VAL:HG23	1:A:449:ARG:HH12	1.16	1.07
1:A:244:PHE:H	1:A:327:GLU:HG3	1.12	1.07
1:A:419:GLU:HA	1:A:441:ALA:HB1	1.36	1.06
1:A:373:LEU:HD21	1:A:864:LEU:HD12	1.39	1.05
1:A:477:ASN:HD21	1:A:480:ALA:HB3	1.19	1.04
1:A:732:LYS:HG2	1:A:734:SER:H	1.22	1.04
1:A:661:MET:HE1	1:A:772:GLN:HB2	1.37	1.04
1:A:137:ILE:HG21	1:A:183:PHE:HB3	1.40	1.03
1:A:580:LEU:HD13	1:A:648:VAL:HG22	1.36	1.02
1:A:754:ASP:HB3	1:A:818:LYS:HB3	1.40	1.00
1:A:682:ARG:HH12	1:A:730:LYS:HE3	1.23	0.99
1:A:147:VAL:HG12	1:A:151:HIS:HD2	1.27	0.99
1:A:406:LYS:HD2	1:A:493:GLY:HA2	1.43	0.97
1:A:342:THR:HG22	1:A:344:PRO:HD2	1.45	0.96
1:A:844:CYS:HB3	1:A:849:LEU:HD12	1.45	0.95
1:A:700:VAL:HG13	1:A:737:GLN:HB3	1.48	0.95
1:A:685:MET:HB3	1:A:728:VAL:HG11	1.45	0.94
1:A:308:LEU:HD13	1:A:333:PHE:HE1	1.27	0.93
1:A:477:ASN:ND2	1:A:480:ALA:HB3	1.83	0.93
1:A:88:LEU:HD11	1:A:111:LEU:HG	1.51	0.93
1:A:685:MET:HE1	1:A:736:MET:HG2	1.50	0.92
1:A:619:LEU:HB2	1:A:680:GLN:HE22	1.34	0.92
1:A:536:VAL:HG11	1:A:859:VAL:HG13	1.52	0.92
1:A:4:TRP:CE3	1:A:61:ILE:HD11	2.05	0.92
1:A:682:ARG:NH1	1:A:730:LYS:HE3	1.82	0.92
1:A:48:THR:HG22	1:A:52:ASN:ND2	1.85	0.92
1:A:566:PHE:HE2	1:A:679:MET:HE1	1.35	0.91
1:A:156:ILE:HG13	1:A:183:PHE:HZ	1.36	0.91
1:A:700:VAL:HG13	1:A:737:GLN:CB	2.01	0.91
1:A:308:LEU:HD13	1:A:333:PHE:CE1	2.05	0.90
1:A:74:GLU:HG3	1:A:75:LEU:H	1.37	0.90
1:A:83:THR:HA	1:A:115:ALA:HB2	1.54	0.90
1:A:140:TYR:CE1	1:A:197:PRO:HG3	2.07	0.90
1:A:401:GLY:N	1:A:499:ASP:HB3	1.86	0.90
1:A:410:THR:HG22	1:A:412:ASP:H	1.37	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:572:ILE:HG23	1:A:573:MET:H	1.36	0.89
1:A:65:ILE:HG21	1:A:204:LEU:HD21	1.54	0.88
1:A:88:LEU:HD21	1:A:111:LEU:CD2	2.03	0.88
1:A:276:ALA:HB1	1:A:281:VAL:CG2	2.02	0.88
1:A:48:THR:HG22	1:A:52:ASN:HD21	1.38	0.88
1:A:105:THR:CG2	1:A:279:GLU:HG2	2.05	0.87
1:A:92:ARG:HB3	1:A:105:THR:HB	1.54	0.87
1:A:224:ARG:HG2	1:A:229:ILE:HB	1.56	0.87
1:A:342:THR:HG21	1:A:400:PRO:HG2	1.56	0.87
1:A:262:SER:HB3	1:A:400:PRO:HD3	1.57	0.86
1:A:134:ARG:HA	1:A:180:ALA:HB2	1.57	0.86
1:A:251:SER:HB3	1:A:328:GLU:H	1.39	0.86
1:A:381:PHE:CD2	1:A:402:ALA:HB1	2.10	0.86
1:A:137:ILE:HA	1:A:196:PHE:CZ	2.10	0.85
1:A:402:ALA:CB	1:A:498:LEU:HG	2.06	0.85
1:A:429:LEU:HD23	1:A:430:GLU:CG	2.06	0.85
1:A:580:LEU:HD13	1:A:648:VAL:CG2	2.06	0.85
1:A:243:VAL:HA	1:A:327:GLU:OE2	1.76	0.84
1:A:603:LYS:HG2	1:A:687:ALA:HB1	1.59	0.84
1:A:88:LEU:HD21	1:A:111:LEU:HD23	1.55	0.84
1:A:786:LEU:HG	1:A:790:TYR:CE2	2.13	0.84
1:A:268:ILE:HG13	1:A:306:MET:SD	2.19	0.83
1:A:745:GLU:C	1:A:770:LEU:HD13	2.04	0.82
1:A:837:ASP:H	1:A:841:VAL:HG23	1.44	0.82
1:A:191:MET:CE	1:A:191:MET:HA	2.10	0.82
1:A:272:TYR:CE2	1:A:289:GLN:HB2	2.15	0.82
1:A:285:VAL:HB	1:A:449:ARG:HH22	1.43	0.82
1:A:574:LYS:CD	1:A:593:GLU:HB2	2.08	0.82
1:A:402:ALA:HB2	1:A:498:LEU:HG	1.61	0.82
1:A:732:LYS:HG2	1:A:734:SER:N	1.93	0.82
1:A:575:ILE:O	1:A:579:ILE:HG13	1.79	0.82
1:A:352:ASP:O	1:A:356:GLU:HG3	1.80	0.81
1:A:258:THR:HG21	1:A:320:GLN:HB2	1.62	0.81
1:A:270:GLY:O	1:A:291:ILE:HG22	1.80	0.81
1:A:426:LEU:O	1:A:445:ILE:HG22	1.79	0.81
1:A:81:GLY:HA3	1:A:200:PRO:HG2	1.63	0.81
1:A:260:ASN:HB2	3:A:908:HOH:O	1.81	0.81
1:A:488:HIS:HB2	1:A:490:PHE:CZ	2.14	0.81
1:A:73:GLU:CD	1:A:79:LYS:HE2	2.06	0.81
1:A:373:LEU:CD2	1:A:864:LEU:HD12	2.11	0.81
1:A:842:GLU:O	1:A:846:LYS:HG2	1.81	0.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:88:LEU:CD1	1:A:111:LEU:HG	2.11	0.80
1:A:137:ILE:HD12	1:A:180:ALA:HB1	1.64	0.80
1:A:845:HIS:CE1	1:A:870:ALA:HB2	2.16	0.80
1:A:392:ILE:HG22	1:A:488:HIS:CE1	2.16	0.80
1:A:460:ALA:HB1	1:A:465:THR:O	1.82	0.80
1:A:71:TRP:CZ2	1:A:75:LEU:HD22	2.17	0.80
1:A:28:GLU:O	1:A:32:LEU:HG	1.82	0.80
1:A:136:PHE:HE2	1:A:196:PHE:HE1	1.30	0.80
1:A:244:PHE:N	1:A:327:GLU:HG3	1.96	0.80
1:A:405:GLY:C	1:A:494:ASP:HA	2.06	0.80
1:A:83:THR:HB	1:A:114:VAL:HG12	1.63	0.79
1:A:148:PRO:HB2	1:A:150:SER:OG	1.82	0.79
1:A:496:ILE:HB	1:A:504:LYS:HB2	1.64	0.79
1:A:107:LEU:HD13	1:A:277:GLN:CG	2.11	0.79
1:A:141:SER:OG	1:A:147:VAL:HG23	1.82	0.79
1:A:278:GLY:O	1:A:280:ASP:N	2.16	0.79
1:A:285:VAL:HG23	1:A:449:ARG:NH1	1.96	0.79
1:A:404:ALA:HB2	1:A:496:ILE:HG23	1.65	0.79
1:A:92:ARG:HB3	1:A:105:THR:CB	2.12	0.79
1:A:359:ILE:HG22	1:A:363:GLU:HB3	1.64	0.79
1:A:359:ILE:HG22	1:A:363:GLU:CB	2.12	0.78
1:A:658:PHE:C	1:A:659:ASN:HD22	1.90	0.78
1:A:765:PHE:CD1	1:A:812:VAL:HG22	2.19	0.78
1:A:301:CYS:SG	1:A:326:ILE:HD13	2.23	0.78
1:A:88:LEU:HD21	1:A:111:LEU:CG	2.14	0.78
1:A:754:ASP:CB	1:A:818:LYS:HB3	2.14	0.78
1:A:186:VAL:HA	1:A:189:GLU:CD	2.09	0.78
1:A:350:ALA:O	1:A:354:VAL:HG23	1.84	0.78
1:A:312:LEU:HB2	1:A:316:PHE:HE2	1.50	0.77
1:A:574:LYS:HB2	1:A:574:LYS:NZ	2.00	0.77
1:A:97:ALA:O	1:A:99:MET:HG3	1.85	0.77
1:A:366:VAL:HG11	1:A:872:ASN:HB3	1.67	0.77
1:A:480:ALA:O	1:A:482:THR:HG23	1.84	0.77
1:A:566:PHE:CE2	1:A:679:MET:HE1	2.20	0.77
1:A:439:MET:HB3	1:A:463:MET:CE	2.15	0.77
1:A:854:CYS:SG	1:A:859:VAL:HA	2.25	0.77
1:A:73:GLU:HA	1:A:76:ASN:ND2	2.00	0.76
1:A:107:LEU:HD11	1:A:279:GLU:HB2	1.66	0.76
1:A:386:LEU:HD21	1:A:498:LEU:CD1	2.15	0.76
1:A:76:ASN:O	1:A:78:LYS:HG2	1.85	0.76
1:A:225:ARG:HD2	1:A:226:MET:N	2.01	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:131:ASP:O	1:A:134:ARG:HG3	1.85	0.76
1:A:255:VAL:HG21	1:A:453:THR:OG1	1.86	0.76
1:A:269:TYR:HA	3:A:904:HOH:O	1.85	0.76
1:A:767:THR:OG1	1:A:832:GLY:HA3	1.85	0.76
1:A:584:VAL:O	1:A:588:GLU:HG3	1.84	0.76
1:A:214:SER:O	1:A:217:ASN:HB3	1.85	0.75
1:A:261:PRO:HD2	1:A:269:TYR:CD1	2.20	0.75
1:A:439:MET:HE1	1:A:456:ALA:HA	1.69	0.75
1:A:107:LEU:HD12	1:A:139:MET:CE	2.16	0.75
1:A:100:PRO:HA	2:A:902:SO4:O1	1.86	0.75
1:A:254:GLY:HA3	1:A:324:PHE:CZ	2.22	0.75
1:A:779:ARG:HG3	1:A:779:ARG:HH11	1.51	0.75
1:A:419:GLU:HA	1:A:441:ALA:CB	2.13	0.75
1:A:88:LEU:HD21	1:A:111:LEU:HG	1.69	0.75
1:A:427:VAL:CG2	1:A:446:LEU:HD13	2.16	0.75
1:A:767:THR:O	1:A:771:THR:HB	1.87	0.75
1:A:223:TYR:HD2	1:A:436:ILE:HG12	1.49	0.75
1:A:571:ARG:HB3	1:A:594:LEU:HD21	1.68	0.74
1:A:397:PRO:O	1:A:452:MET:HE1	1.86	0.74
1:A:483:PHE:CE1	1:A:490:PHE:HB2	2.23	0.74
1:A:476:ILE:HG23	1:A:483:PHE:HB3	1.67	0.74
1:A:155:ILE:O	1:A:159:MET:HB2	1.88	0.74
1:A:312:LEU:HB2	1:A:316:PHE:CE2	2.22	0.74
1:A:83:THR:HB	1:A:114:VAL:CG1	2.18	0.74
1:A:386:LEU:CD1	1:A:510:ILE:HD12	2.18	0.74
1:A:36:ILE:HG22	1:A:333:PHE:O	1.86	0.74
1:A:255:VAL:HG11	1:A:453:THR:HB	1.70	0.74
1:A:378:HIS:HB3	1:A:379:PRO:HD2	1.68	0.74
1:A:406:LYS:HA	1:A:494:ASP:H	1.52	0.74
1:A:127:ARG:HD2	1:A:171:LEU:O	1.87	0.74
1:A:134:ARG:CA	1:A:180:ALA:HB2	2.17	0.74
1:A:692:LYS:HG2	1:A:697:ILE:O	1.88	0.74
1:A:147:VAL:HG12	1:A:151:HIS:CD2	2.19	0.74
1:A:621:PRO:HB3	1:A:625:GLU:CD	2.13	0.74
1:A:134:ARG:HB3	1:A:180:ALA:HB2	1.69	0.73
1:A:183:PHE:O	1:A:186:VAL:HG12	1.88	0.73
1:A:670:ALA:HA	1:A:673:TYR:O	1.88	0.73
1:A:244:PHE:H	1:A:327:GLU:CG	1.99	0.73
1:A:698:ASP:O	1:A:699:ILE:HD13	1.87	0.73
1:A:181:GLU:HG2	1:A:184:LYS:NZ	2.02	0.73
1:A:230:PRO:HG2	1:A:233:TRP:NE1	2.04	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:571:ARG:HB3	1:A:594:LEU:CD2	2.17	0.73
1:A:200:PRO:HA	1:A:203:GLN:HG3	1.70	0.73
1:A:622:PRO:HB3	1:A:664:HIS:O	1.87	0.73
1:A:400:PRO:HA	1:A:499:ASP:CB	2.18	0.73
1:A:197:PRO:O	1:A:203:GLN:HG2	1.87	0.73
1:A:692:LYS:O	1:A:692:LYS:HD3	1.88	0.73
1:A:134:ARG:CB	1:A:180:ALA:HB2	2.19	0.72
1:A:207:ALA:O	1:A:211:VAL:HG23	1.89	0.72
1:A:213:ARG:O	1:A:213:ARG:HD3	1.88	0.72
1:A:547:LEU:O	1:A:550:VAL:HG22	1.89	0.72
1:A:779:ARG:HG2	1:A:800:PHE:CG	2.24	0.72
1:A:107:LEU:HD12	1:A:139:MET:HE1	1.69	0.72
1:A:326:ILE:HG12	1:A:331:LEU:HD12	1.70	0.72
1:A:566:PHE:HZ	1:A:680:GLN:HE21	1.34	0.72
1:A:657:GLU:OE1	1:A:663:GLY:HA3	1.90	0.72
1:A:667:CYS:O	1:A:671:VAL:HG23	1.89	0.72
1:A:319:MET:HB3	1:A:341:ARG:NH1	2.04	0.72
1:A:92:ARG:CB	1:A:105:THR:HB	2.18	0.72
1:A:156:ILE:HG13	1:A:183:PHE:CZ	2.24	0.72
1:A:199:GLU:HB3	1:A:202:ASP:HB2	1.71	0.71
1:A:11:GLY:HA2	1:A:15:MET:HE1	1.72	0.71
1:A:148:PRO:HD2	1:A:151:HIS:CD2	2.25	0.71
1:A:13:ALA:HA	1:A:24:CYS:SG	2.30	0.71
1:A:298:MET:HG2	1:A:301:CYS:SG	2.30	0.71
1:A:768:ASN:O	1:A:772:GLN:HG3	1.89	0.71
1:A:775:PHE:HD2	1:A:777:PHE:CZ	2.07	0.71
1:A:109:LEU:HB2	1:A:136:PHE:HE1	1.54	0.71
1:A:157:ASP:O	1:A:161:GLU:HB2	1.89	0.71
1:A:406:LYS:HA	1:A:494:ASP:N	2.06	0.71
1:A:259:ARG:NH2	1:A:353:LEU:HD21	2.05	0.71
1:A:652:VAL:HA	1:A:655:LEU:HD12	1.72	0.71
1:A:317:ARG:HH11	1:A:317:ARG:HB3	1.56	0.71
1:A:668:ARG:H	1:A:668:ARG:HD2	1.56	0.71
1:A:136:PHE:CE2	1:A:196:PHE:HE1	2.08	0.70
1:A:691:VAL:HA	1:A:694:GLU:OE1	1.91	0.70
1:A:519:GLY:O	1:A:523:ARG:HG3	1.91	0.70
1:A:100:PRO:HA	2:A:902:SO4:S	2.32	0.70
1:A:599:LYS:O	1:A:603:LYS:HG3	1.91	0.70
1:A:678:LYS:HG2	1:A:724:VAL:HG21	1.73	0.70
1:A:766:GLY:O	1:A:770:LEU:HB2	1.91	0.70
1:A:55:LYS:HD2	1:A:213:ARG:HH12	1.56	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4:TRP:CZ3	1:A:49:GLU:HG2	2.26	0.70
1:A:55:LYS:HD2	1:A:213:ARG:NH1	2.06	0.70
1:A:291:ILE:HD12	1:A:291:ILE:O	1.90	0.70
1:A:546:THR:O	1:A:550:VAL:HG13	1.92	0.70
1:A:93:SER:OG	1:A:103:MET:HB3	1.92	0.70
1:A:107:LEU:HD12	1:A:139:MET:SD	2.30	0.70
1:A:772:GLN:NE2	1:A:779:ARG:HB2	2.06	0.70
1:A:823:ARG:O	1:A:826:LEU:HB2	1.91	0.69
1:A:7:LYS:HE3	1:A:10:GLU:OE1	1.92	0.69
1:A:334:LEU:N	1:A:334:LEU:HD23	2.07	0.69
1:A:258:THR:CG2	1:A:320:GLN:HB2	2.22	0.69
1:A:665:ARG:O	1:A:707:LEU:HD23	1.91	0.69
1:A:18:LEU:HA	1:A:44:THR:OG1	1.92	0.69
1:A:270:GLY:C	1:A:291:ILE:HG22	2.16	0.69
1:A:370:ALA:HB2	1:A:868:GLN:OE1	1.92	0.69
1:A:693:GLU:O	1:A:695:THR:N	2.26	0.69
1:A:517:VAL:HG23	1:A:522:GLU:OE2	1.93	0.69
1:A:644:THR:HG22	1:A:646:ALA:H	1.57	0.69
1:A:25:ASN:O	1:A:29:MET:HG3	1.93	0.69
1:A:81:GLY:HA2	1:A:110:GLY:O	1.93	0.69
1:A:146:GLU:CB	1:A:187:TYR:HE2	2.06	0.69
1:A:685:MET:HE1	1:A:736:MET:CG	2.24	0.68
1:A:728:VAL:O	1:A:730:LYS:HG2	1.93	0.68
1:A:176:LEU:O	1:A:179:LEU:N	2.26	0.68
1:A:472:GLY:O	1:A:474:ILE:HG13	1.93	0.68
1:A:728:VAL:O	1:A:730:LYS:N	2.27	0.68
1:A:572:ILE:HG23	1:A:573:MET:N	2.08	0.68
1:A:595:ILE:N	1:A:596:PRO:HD2	2.09	0.68
1:A:63:ASP:O	1:A:67:GLU:N	2.27	0.68
1:A:71:TRP:CE2	1:A:75:LEU:HD22	2.29	0.68
1:A:127:ARG:HG3	1:A:176:LEU:CD1	2.24	0.68
1:A:401:GLY:H	1:A:499:ASP:CB	1.98	0.68
1:A:753:ALA:CB	1:A:815:ALA:HA	2.24	0.68
1:A:37:PRO:O	1:A:240:GLN:NE2	2.26	0.68
1:A:382:ASN:ND2	1:A:511:GLU:OE2	2.27	0.68
1:A:580:LEU:HD11	1:A:637:LEU:HD21	1.74	0.68
1:A:16:ARG:HG3	1:A:20:GLY:O	1.93	0.67
1:A:159:MET:HE2	1:A:179:LEU:HB2	1.77	0.67
1:A:386:LEU:HD12	1:A:510:ILE:HD12	1.76	0.67
1:A:487:GLY:H	1:A:488:HIS:HD2	1.41	0.67
1:A:35:PRO:O	1:A:332:TYR:HA	1.93	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:224:ARG:CG	1:A:229:ILE:HB	2.25	0.67
1:A:758:GLU:O	1:A:823:ARG:NH2	2.27	0.67
1:A:535:LYS:O	1:A:852:VAL:HG23	1.93	0.67
1:A:76:ASN:OD1	1:A:87:LEU:HD13	1.94	0.67
1:A:574:LYS:HD3	1:A:593:GLU:CB	2.11	0.67
1:A:644:THR:O	1:A:647:GLU:N	2.27	0.67
1:A:73:GLU:O	1:A:77:GLY:N	2.28	0.67
1:A:100:PRO:HB2	1:A:458:VAL:CG1	2.25	0.67
1:A:104:ASP:HB3	1:A:143:VAL:CG1	2.25	0.67
1:A:18:LEU:HB3	1:A:43:THR:HG23	1.76	0.67
1:A:37:PRO:HD2	1:A:240:GLN:HE22	1.60	0.67
1:A:211:VAL:HG11	1:A:237:VAL:HB	1.76	0.67
1:A:251:SER:HB3	1:A:328:GLU:N	2.09	0.67
1:A:282:VAL:HG12	1:A:453:THR:HG21	1.75	0.67
1:A:317:ARG:O	1:A:367:ARG:NH1	2.27	0.67
1:A:419:GLU:CA	1:A:441:ALA:HB1	2.20	0.67
1:A:532:ARG:NH1	1:A:534:LEU:O	2.28	0.67
1:A:429:LEU:HA	1:A:448:VAL:HG23	1.75	0.66
1:A:80:PHE:HA	1:A:87:LEU:HB3	1.78	0.66
1:A:400:PRO:HA	1:A:499:ASP:HB2	1.77	0.66
1:A:253:THR:HG21	1:A:278:GLY:N	2.10	0.66
1:A:272:TYR:HD1	1:A:291:ILE:HA	1.60	0.66
1:A:743:MET:HA	1:A:764:SER:O	1.96	0.66
1:A:260:ASN:HB3	1:A:265:GLU:HB2	1.77	0.66
1:A:396:LEU:H	1:A:468:VAL:HG12	1.61	0.66
1:A:408:TYR:O	1:A:426:LEU:HD12	1.96	0.66
1:A:537:ARG:NH2	1:A:557:ILE:O	2.27	0.66
1:A:66:PHE:HD2	1:A:201:LYS:HZ3	1.44	0.66
1:A:109:LEU:HB2	1:A:136:PHE:CE1	2.29	0.66
1:A:57:ILE:HD12	1:A:57:ILE:H	1.59	0.66
1:A:398:ALA:HB3	1:A:467:CYS:O	1.95	0.66
1:A:213:ARG:HG2	1:A:213:ARG:HH11	1.61	0.66
1:A:732:LYS:CG	1:A:734:SER:H	2.06	0.66
1:A:803:LEU:CD2	1:A:843:PHE:HD2	2.08	0.66
1:A:439:MET:HB3	1:A:463:MET:HE1	1.77	0.66
1:A:259:ARG:HG2	1:A:266:LYS:HA	1.77	0.66
1:A:137:ILE:HG22	1:A:152:PHE:HE1	1.61	0.65
1:A:674:PRO:O	1:A:677:ALA:HB3	1.97	0.65
1:A:219:ARG:HH21	1:A:437:GLU:H	0.70	0.65
1:A:386:LEU:HD13	1:A:510:ILE:HG21	1.78	0.65
1:A:543:PRO:HD3	1:A:605:MET:SD	2.36	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:596:PRO:O	1:A:599:LYS:HB3	1.96	0.65
1:A:143:VAL:C	1:A:145:MET:H	2.04	0.65
1:A:366:VAL:CG1	1:A:872:ASN:HB3	2.26	0.65
1:A:718:LYS:HG3	1:A:740:ILE:HD13	1.78	0.65
1:A:126:PRO:O	1:A:130:TYR:HB2	1.97	0.65
1:A:211:VAL:O	1:A:213:ARG:N	2.29	0.65
1:A:746:ILE:HG13	1:A:773:MET:HE2	1.79	0.65
1:A:191:MET:HA	1:A:191:MET:HE2	1.77	0.65
1:A:213:ARG:HH11	1:A:213:ARG:CG	2.10	0.65
1:A:524:ILE:HD12	1:A:527:TRP:CE3	2.32	0.65
1:A:169:THR:OG1	1:A:275:ASN:ND2	2.29	0.65
1:A:301:CYS:O	1:A:304:GLN:HB2	1.96	0.65
1:A:837:ASP:H	1:A:841:VAL:CG2	2.09	0.65
1:A:603:LYS:HD3	1:A:691:VAL:HG23	1.78	0.65
1:A:40:PHE:CE1	1:A:69:ILE:HD13	2.32	0.65
1:A:131:ASP:O	1:A:135:ARG:HD3	1.97	0.65
1:A:735:ASP:OD1	1:A:735:ASP:N	2.26	0.65
1:A:253:THR:CG2	1:A:278:GLY:HA2	2.27	0.65
1:A:420:LYS:HG3	1:A:442:ALA:C	2.22	0.65
1:A:155:ILE:HB	1:A:183:PHE:HE1	1.62	0.65
1:A:516:SER:OG	1:A:517:VAL:N	2.28	0.65
1:A:117:GLU:O	1:A:120:ALA:HB3	1.97	0.64
1:A:223:TYR:HD2	1:A:436:ILE:CG1	2.09	0.64
1:A:27:ALA:O	1:A:30:THR:HB	1.96	0.64
1:A:341:ARG:NH1	3:A:922:HOH:O	2.29	0.64
1:A:80:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HD23	1.80	0.64
1:A:392:ILE:HD12	1:A:485:LEU:HB3	1.78	0.64
1:A:576:ARG:NH2	1:A:633:GLU:OE1	2.30	0.64
1:A:750:ALA:HB1	1:A:811:LEU:O	1.97	0.64
1:A:88:LEU:CD2	1:A:111:LEU:HG	2.27	0.64
1:A:146:GLU:HB3	1:A:187:TYR:HE2	1.62	0.64
1:A:689:ILE:O	1:A:693:GLU:HG3	1.97	0.64
1:A:251:SER:CB	1:A:328:GLU:H	2.07	0.64
1:A:537:ARG:HD3	1:A:851:TYR:CD1	2.32	0.64
1:A:771:THR:HA	1:A:808:VAL:HG21	1.80	0.64
1:A:337:ARG:NH1	2:A:902:SO4:O3	2.30	0.64
1:A:368:ILE:HB	1:A:864:LEU:HD11	1.78	0.64
1:A:386:LEU:HD21	1:A:498:LEU:HD11	1.80	0.64
1:A:70:THR:O	1:A:74:GLU:HG2	1.97	0.64
1:A:318:ASP:OD2	1:A:341:ARG:NH2	2.31	0.64
1:A:591:LEU:HD22	1:A:679:MET:HE2	1.80	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:872:ASN:C	1:A:872:ASN:HD22	2.06	0.64
1:A:592:ASN:HA	1:A:595:ILE:HD12	1.79	0.63
1:A:316:PHE:HB2	1:A:320:GLN:NE2	2.14	0.63
1:A:485:LEU:HD23	1:A:486:GLY:H	1.64	0.63
1:A:433:PRO:HD3	1:A:455:HIS:NE2	2.13	0.63
1:A:7:LYS:HB2	1:A:10:GLU:HB2	1.80	0.63
1:A:12:ASN:O	1:A:24:CYS:HB2	1.99	0.63
1:A:474:ILE:HG22	1:A:476:ILE:HG13	1.81	0.63
1:A:708:VAL:HG21	1:A:714:LEU:HB2	1.81	0.63
1:A:39:GLY:HA2	1:A:72:LEU:HD21	1.78	0.63
1:A:386:LEU:HA	1:A:510:ILE:HD12	1.80	0.63
1:A:578:MET:CG	1:A:587:ARG:HB3	2.29	0.63
1:A:89:VAL:O	1:A:109:LEU:N	2.26	0.63
1:A:609:LEU:O	1:A:612:ARG:HB2	1.98	0.63
1:A:645:LEU:O	1:A:649:LYS:HG3	1.98	0.63
1:A:728:VAL:HA	1:A:730:LYS:HE2	1.81	0.63
1:A:411:ALA:O	1:A:414:ALA:HB3	1.99	0.62
1:A:272:TYR:HE2	1:A:289:GLN:NE2	1.97	0.62
1:A:107:LEU:HD13	1:A:277:GLN:OE1	1.99	0.62
1:A:392:ILE:CD1	1:A:485:LEU:HD13	2.29	0.62
1:A:395:ALA:O	1:A:396:LEU:HD12	1.99	0.62
1:A:828:CYS:N	1:A:850:ASN:OD1	2.28	0.62
1:A:404:ALA:O	1:A:423:ARG:HB3	2.00	0.62
1:A:104:ASP:HB3	1:A:143:VAL:HG11	1.81	0.62
1:A:324:PHE:HA	1:A:332:TYR:O	1.99	0.62
1:A:558:GLY:HA3	1:A:853:SER:OG	1.99	0.62
1:A:621:PRO:HB3	1:A:625:GLU:OE1	2.00	0.62
1:A:779:ARG:HG3	1:A:779:ARG:NH1	2.12	0.62
1:A:431:THR:OG1	1:A:456:ALA:HB2	2.00	0.62
1:A:578:MET:HA	1:A:581:SER:OG	2.00	0.62
1:A:578:MET:HB2	1:A:590:ALA:CB	2.30	0.62
1:A:592:ASN:HA	1:A:595:ILE:CD1	2.29	0.62
1:A:732:LYS:HG2	1:A:734:SER:CA	2.28	0.62
1:A:81:GLY:HA3	1:A:200:PRO:CG	2.29	0.62
1:A:88:LEU:HD11	1:A:111:LEU:CG	2.27	0.62
1:A:20:GLY:HA2	1:A:96:ARG:HA	1.81	0.62
1:A:427:VAL:O	1:A:428:ARG:HG2	2.00	0.61
1:A:713:GLU:O	1:A:716:PHE:N	2.31	0.61
1:A:76:ASN:O	1:A:78:LYS:N	2.33	0.61
1:A:400:PRO:HA	1:A:499:ASP:HB3	1.81	0.61
1:A:427:VAL:HG22	1:A:446:LEU:HD13	1.80	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:550:VAL:HA	1:A:554:ALA:HB3	1.81	0.61
1:A:564:HIS:C	1:A:566:PHE:H	2.08	0.61
1:A:548:ASN:O	1:A:551:LYS:HB3	2.00	0.61
1:A:704:MET:SD	1:A:764:SER:HB3	2.40	0.61
1:A:344:PRO:O	1:A:347:LEU:HB2	2.01	0.61
1:A:476:ILE:HA	1:A:483:PHE:HA	1.82	0.61
1:A:5:VAL:CG2	1:A:42:VAL:HA	2.18	0.61
1:A:185:ALA:HA	1:A:188:LYS:HB3	1.81	0.61
1:A:616:VAL:HG23	1:A:702:GLU:O	2.00	0.61
1:A:618:TYR:N	1:A:704:MET:O	2.29	0.61
1:A:180:ALA:HA	1:A:183:PHE:HB2	1.82	0.61
1:A:269:TYR:OH	1:A:452:MET:HB3	2.01	0.61
1:A:620:ASP:O	1:A:665:ARG:HB2	2.01	0.61
1:A:842:GLU:HG3	1:A:869:ALA:HA	1.82	0.61
1:A:65:ILE:HG21	1:A:204:LEU:CD2	2.30	0.61
1:A:155:ILE:HD11	1:A:186:VAL:HG21	1.82	0.61
1:A:472:GLY:O	1:A:474:ILE:N	2.27	0.61
1:A:34:MET:O	1:A:36:ILE:N	2.30	0.61
1:A:439:MET:HB3	1:A:463:MET:HE2	1.83	0.61
1:A:748:ARG:O	1:A:751:LEU:HB2	2.00	0.61
1:A:779:ARG:HG2	1:A:800:PHE:CD2	2.35	0.61
1:A:123:THR:HG23	1:A:123:THR:O	2.01	0.61
1:A:803:LEU:HD23	1:A:843:PHE:HD2	1.64	0.61
1:A:6:TYR:HD1	1:A:43:THR:OG1	1.83	0.60
1:A:271:GLU:HB3	1:A:288:PRO:HB2	1.83	0.60
1:A:603:LYS:O	1:A:607:LYS:HG3	2.01	0.60
1:A:765:PHE:CE1	1:A:812:VAL:HG22	2.36	0.60
1:A:786:LEU:HG	1:A:790:TYR:HE2	1.64	0.60
1:A:4:TRP:O	1:A:43:THR:HB	2.01	0.60
1:A:364:ALA:O	1:A:368:ILE:HD12	2.00	0.60
1:A:648:VAL:O	1:A:652:VAL:N	2.33	0.60
1:A:305:PHE:O	1:A:309:ALA:N	2.31	0.60
1:A:401:GLY:O	1:A:499:ASP:N	2.27	0.60
1:A:498:LEU:C	1:A:500:GLY:H	2.07	0.60
1:A:775:PHE:CD2	1:A:777:PHE:CZ	2.88	0.60
1:A:181:GLU:HG2	1:A:184:LYS:HZ1	1.66	0.60
1:A:386:LEU:HD13	1:A:510:ILE:HD12	1.84	0.60
1:A:584:VAL:HG13	1:A:675:GLU:CD	2.27	0.60
1:A:820:ARG:HG2	1:A:826:LEU:HB3	1.82	0.60
1:A:518:SER:O	1:A:522:GLU:HG2	2.02	0.60
1:A:9:GLU:CD	1:A:38:GLN:HE22	2.09	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:603:LYS:CG	1:A:687:ALA:HB1	2.31	0.60
1:A:732:LYS:O	1:A:734:SER:N	2.34	0.60
1:A:294:LEU:HB3	1:A:302:TYR:HD1	1.67	0.60
1:A:331:LEU:HG	1:A:332:TYR:N	2.15	0.60
1:A:392:ILE:HD11	1:A:485:LEU:HD13	1.83	0.60
1:A:138:GLN:HA	1:A:152:PHE:CE1	2.37	0.60
1:A:93:SER:HB2	1:A:103:MET:HE3	1.84	0.59
1:A:434:GLU:HG3	1:A:434:GLU:O	2.01	0.59
1:A:83:THR:HA	1:A:115:ALA:CB	2.30	0.59
1:A:563:GLU:OE1	1:A:617:ARG:NH1	2.35	0.59
1:A:93:SER:CB	1:A:103:MET:HE3	2.33	0.59
1:A:140:TYR:HE2	1:A:203:GLN:O	1.84	0.59
1:A:381:PHE:HB3	1:A:386:LEU:HD22	1.85	0.59
1:A:537:ARG:HD3	1:A:851:TYR:CG	2.37	0.59
1:A:700:VAL:HG13	1:A:737:GLN:HB2	1.83	0.59
1:A:857:PHE:O	1:A:860:PRO:HD2	2.02	0.59
1:A:37:PRO:HG2	1:A:240:GLN:CD	2.27	0.59
1:A:559:LEU:CD1	1:A:617:ARG:HB3	2.32	0.59
1:A:689:ILE:HG21	1:A:731:GLU:HB2	1.83	0.59
1:A:790:TYR:OH	1:A:798:ASP:HA	2.02	0.59
1:A:827:LYS:HA	1:A:850:ASN:OD1	2.03	0.59
1:A:12:ASN:OD1	1:A:13:ALA:N	2.35	0.59
1:A:187:TYR:CE1	1:A:196:PHE:HA	2.37	0.59
1:A:405:GLY:O	1:A:494:ASP:HA	2.02	0.59
1:A:33:GLY:O	1:A:34:MET:HG2	2.03	0.59
1:A:603:LYS:CD	1:A:691:VAL:HG23	2.32	0.59
1:A:668:ARG:HD2	1:A:668:ARG:N	2.18	0.59
1:A:91:VAL:HG22	1:A:239:VAL:HG13	1.84	0.59
1:A:701:PRO:HD2	1:A:737:GLN:O	2.02	0.59
1:A:732:LYS:HG2	1:A:734:SER:HA	1.85	0.59
1:A:151:HIS:O	1:A:154:LYS:N	2.35	0.59
1:A:379:PRO:HB2	1:A:512:THR:HB	1.85	0.59
1:A:718:LYS:HG3	1:A:740:ILE:CD1	2.33	0.59
1:A:109:LEU:HD11	1:A:203:GLN:HB2	1.84	0.58
1:A:225:ARG:NH1	1:A:225:ARG:HG3	2.18	0.58
1:A:477:ASN:OD1	1:A:480:ALA:N	2.28	0.58
1:A:841:VAL:HB	1:A:865:ALA:HB1	1.85	0.58
1:A:563:GLU:HG3	1:A:621:PRO:CD	2.34	0.58
1:A:359:ILE:HG22	1:A:363:GLU:HB2	1.85	0.58
1:A:258:THR:HG23	1:A:320:GLN:O	2.01	0.58
1:A:291:ILE:O	1:A:302:TYR:HE1	1.86	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:290:PRO:HD2	1:A:293:GLN:OE1	2.03	0.58
1:A:445:ILE:O	1:A:467:CYS:HA	2.03	0.58
1:A:222:VAL:HG11	1:A:437:GLU:HG3	1.86	0.58
1:A:402:ALA:HA	1:A:498:LEU:HA	1.86	0.58
1:A:845:HIS:NE2	1:A:870:ALA:HB2	2.19	0.58
1:A:27:ALA:O	1:A:31:ILE:HG12	2.04	0.58
1:A:71:TRP:CZ3	1:A:72:LEU:HD23	2.39	0.58
1:A:152:PHE:H	1:A:152:PHE:HD2	1.49	0.58
1:A:294:LEU:CD2	1:A:298:MET:HB3	2.33	0.58
1:A:5:VAL:HG22	1:A:42:VAL:CA	2.18	0.58
1:A:867:ALA:O	1:A:871:LEU:HB2	2.04	0.58
1:A:127:ARG:HG3	1:A:176:LEU:HD11	1.84	0.58
1:A:614:MET:O	1:A:702:GLU:HB2	2.04	0.58
1:A:130:TYR:O	1:A:133:TYR:N	2.36	0.57
1:A:261:PRO:HD2	1:A:269:TYR:CE1	2.38	0.57
1:A:269:TYR:OH	1:A:452:MET:HE3	2.04	0.57
1:A:627:VAL:HB	1:A:628:PRO:HD2	1.85	0.57
1:A:326:ILE:HA	1:A:330:LYS:O	2.05	0.57
1:A:669:LEU:O	1:A:673:TYR:HD2	1.87	0.57
1:A:41:THR:OG1	1:A:238:ASN:HB3	2.04	0.57
1:A:191:MET:HA	1:A:191:MET:HE3	1.86	0.57
1:A:685:MET:CE	1:A:736:MET:HG2	2.30	0.57
1:A:59:GLN:O	1:A:61:ILE:N	2.37	0.57
1:A:253:THR:HG21	1:A:278:GLY:CA	2.35	0.57
1:A:692:LYS:HD3	1:A:692:LYS:C	2.29	0.57
1:A:138:GLN:HA	1:A:152:PHE:CD1	2.40	0.57
1:A:409:PHE:O	1:A:428:ARG:HD3	2.05	0.57
1:A:665:ARG:HG3	1:A:707:LEU:CD2	2.34	0.57
1:A:107:LEU:HD13	1:A:277:GLN:CD	2.29	0.57
1:A:128:PHE:CE2	1:A:247:LYS:HD3	2.39	0.57
1:A:538:THR:CG2	1:A:540:ALA:HB2	2.34	0.57
1:A:718:LYS:O	1:A:722:VAL:HB	2.05	0.57
1:A:187:TYR:HE1	1:A:196:PHE:HA	1.70	0.57
1:A:407:VAL:O	1:A:492:GLU:HB3	2.04	0.57
1:A:563:GLU:OE2	1:A:620:ASP:N	2.37	0.57
1:A:107:LEU:CD1	1:A:139:MET:HE1	2.34	0.57
1:A:316:PHE:HD2	1:A:320:GLN:NE2	2.03	0.57
1:A:701:PRO:O	1:A:738:TYR:HA	2.05	0.57
1:A:359:ILE:CG2	1:A:363:GLU:HB3	2.32	0.57
1:A:368:ILE:HG22	1:A:369:GLU:N	2.19	0.57
1:A:534:LEU:HD11	1:A:845:HIS:HA	1.86	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:343:ALA:HB3	1:A:344:PRO:HD3	1.87	0.57
1:A:425:ILE:HG22	1:A:426:LEU:N	2.19	0.57
1:A:474:ILE:HG23	1:A:484:GLU:O	2.04	0.57
1:A:816:VAL:O	1:A:820:ARG:HG3	2.05	0.57
1:A:826:LEU:HD23	1:A:827:LYS:O	2.05	0.57
1:A:57:ILE:C	1:A:62:GLN:HE21	2.12	0.56
1:A:224:ARG:HG3	1:A:229:ILE:CG2	2.35	0.56
1:A:336:THR:C	1:A:337:ARG:HG2	2.30	0.56
1:A:444:GLY:HA3	1:A:466:CYS:SG	2.45	0.56
1:A:488:HIS:HB2	1:A:490:PHE:CE1	2.40	0.56
1:A:518:SER:HG	1:A:520:SER:HG	1.51	0.56
1:A:869:ALA:O	1:A:873:ASN:HB2	2.04	0.56
1:A:66:PHE:HE2	1:A:201:LYS:HD3	1.70	0.56
1:A:155:ILE:HD11	1:A:186:VAL:CG2	2.35	0.56
1:A:224:ARG:HG3	1:A:229:ILE:HG21	1.87	0.56
1:A:379:PRO:HB2	1:A:512:THR:CG2	2.34	0.56
1:A:578:MET:HG2	1:A:587:ARG:HB3	1.87	0.56
1:A:840:SER:O	1:A:842:GLU:N	2.38	0.56
1:A:106:ILE:HG12	1:A:140:TYR:HA	1.87	0.56
1:A:122:LYS:O	1:A:122:LYS:HD3	2.04	0.56
1:A:382:ASN:HD22	1:A:511:GLU:CD	2.14	0.56
1:A:386:LEU:O	1:A:389:GLY:N	2.37	0.56
1:A:458:VAL:HG22	1:A:461:ARG:NH2	2.20	0.56
1:A:602:PHE:CZ	1:A:684:VAL:HG22	2.40	0.56
1:A:680:GLN:O	1:A:684:VAL:HG23	2.05	0.56
1:A:178:GLU:O	1:A:181:GLU:HB3	2.05	0.56
1:A:272:TYR:CD2	1:A:289:GLN:HB2	2.40	0.56
1:A:864:LEU:HD22	1:A:868:GLN:NE2	2.20	0.56
1:A:109:LEU:CB	1:A:136:PHE:HE1	2.18	0.56
1:A:8:PHE:O	1:A:27:ALA:HB1	2.05	0.56
1:A:386:LEU:HA	1:A:510:ILE:CD1	2.35	0.56
1:A:411:ALA:HB1	1:A:438:GLY:HA3	1.87	0.56
1:A:754:ASP:O	1:A:822:THR:HG21	2.05	0.56
1:A:803:LEU:O	1:A:803:LEU:HG	1.94	0.56
1:A:11:GLY:HA2	1:A:15:MET:CE	2.36	0.56
1:A:420:LYS:HG2	1:A:443:GLU:CD	2.31	0.56
1:A:771:THR:HG22	1:A:772:GLN:N	2.21	0.56
1:A:840:SER:C	1:A:842:GLU:H	2.14	0.56
1:A:732:LYS:C	1:A:734:SER:N	2.64	0.56
1:A:57:ILE:CG2	1:A:61:ILE:HG21	2.35	0.56
1:A:365:VAL:HG13	1:A:864:LEU:CD2	2.36	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:660:PRO:O	1:A:665:ARG:NH2	2.34	0.56
1:A:781:ASP:O	1:A:783:GLY:N	2.39	0.56
1:A:71:TRP:O	1:A:74:GLU:HG3	2.07	0.55
1:A:109:LEU:HG	1:A:110:GLY:H	1.70	0.55
1:A:134:ARG:HA	1:A:180:ALA:CB	2.33	0.55
1:A:11:GLY:HA2	1:A:15:MET:SD	2.46	0.55
1:A:91:VAL:O	1:A:105:THR:HA	2.06	0.55
1:A:66:PHE:HD2	1:A:201:LYS:NZ	2.03	0.55
1:A:331:LEU:HD23	1:A:333:PHE:CE1	2.42	0.55
1:A:21:GLY:O	1:A:25:ASN:HB2	2.06	0.55
1:A:405:GLY:O	1:A:495:TYR:N	2.38	0.55
1:A:523:ARG:NH1	3:A:907:HOH:O	2.39	0.55
1:A:574:LYS:HB2	1:A:574:LYS:HZ2	1.69	0.55
1:A:18:LEU:HB3	1:A:43:THR:CG2	2.36	0.55
1:A:84:GLU:O	1:A:118:GLY:O	2.24	0.55
1:A:272:TYR:CD1	1:A:291:ILE:HA	2.42	0.55
1:A:316:PHE:HD2	1:A:320:GLN:CD	2.15	0.55
1:A:379:PRO:HB2	1:A:512:THR:CB	2.36	0.55
1:A:473:GLU:CD	1:A:473:GLU:H	2.15	0.55
1:A:840:SER:O	1:A:843:PHE:N	2.39	0.55
1:A:51:TYR:O	1:A:53:SER:N	2.34	0.55
1:A:54:GLY:O	1:A:55:LYS:HB2	2.07	0.55
1:A:222:VAL:HG11	1:A:437:GLU:CD	2.32	0.55
1:A:311:LYS:HG2	1:A:312:LEU:N	2.21	0.55
1:A:500:GLY:O	1:A:502:THR:OG1	2.24	0.55
1:A:649:LYS:O	1:A:653:ASP:N	2.40	0.55
1:A:106:ILE:HD13	1:A:207:ALA:HB1	1.88	0.55
1:A:310:MET:O	1:A:313:GLU:N	2.39	0.55
1:A:386:LEU:HD12	1:A:510:ILE:CD1	2.35	0.55
1:A:536:VAL:CG1	1:A:859:VAL:HG13	2.33	0.55
1:A:562:THR:OG1	1:A:566:PHE:HE1	1.90	0.55
1:A:410:THR:HG22	1:A:412:ASP:N	2.14	0.54
1:A:424:VAL:HG22	1:A:441:ALA:O	2.08	0.54
1:A:812:VAL:O	1:A:816:VAL:HG23	2.07	0.54
1:A:57:ILE:H	1:A:57:ILE:CD1	2.12	0.54
1:A:628:PRO:HB3	1:A:633:GLU:HB3	1.88	0.54
1:A:667:CYS:SG	1:A:668:ARG:HD2	2.47	0.54
1:A:132:SER:O	1:A:135:ARG:HB2	2.07	0.54
1:A:348:GLN:NE2	1:A:352:ASP:OD1	2.40	0.54
1:A:484:GLU:HG2	1:A:485:LEU:H	1.72	0.54
1:A:107:LEU:HB2	1:A:139:MET:CE	2.37	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:310:MET:O	1:A:313:GLU:HB3	2.08	0.54
1:A:392:ILE:HD12	1:A:490:PHE:CZ	2.42	0.54
1:A:522:GLU:O	1:A:526:VAL:HG23	2.07	0.54
1:A:844:CYS:CB	1:A:849:LEU:HD12	2.28	0.54
1:A:852:VAL:HG12	1:A:853:SER:H	1.71	0.54
1:A:40:PHE:O	1:A:239:VAL:N	2.37	0.54
1:A:379:PRO:HB2	1:A:512:THR:HG21	1.89	0.54
1:A:829:GLY:HA3	1:A:851:TYR:CE2	2.41	0.54
1:A:101:GLY:O	1:A:455:HIS:NE2	2.37	0.54
1:A:196:PHE:CD1	1:A:197:PRO:HD2	2.43	0.54
1:A:427:VAL:HG23	1:A:446:LEU:HD13	1.90	0.54
1:A:852:VAL:HG12	1:A:853:SER:N	2.22	0.54
1:A:33:GLY:C	1:A:34:MET:HG2	2.33	0.54
1:A:623:LEU:N	1:A:623:LEU:HD23	2.23	0.54
1:A:51:TYR:C	1:A:53:SER:H	2.16	0.54
1:A:378:HIS:HB3	1:A:379:PRO:CD	2.38	0.54
1:A:420:LYS:HG2	1:A:443:GLU:OE1	2.07	0.54
1:A:440:HIS:HA	1:A:463:MET:SD	2.48	0.54
1:A:42:VAL:HG12	1:A:212:PHE:HZ	1.73	0.53
1:A:79:LYS:HG2	1:A:82:ASP:HB2	1.90	0.53
1:A:262:SER:HB3	1:A:400:PRO:CD	2.34	0.53
1:A:661:MET:HE2	1:A:773:MET:SD	2.48	0.53
1:A:835:GLY:O	1:A:841:VAL:HG22	2.07	0.53
1:A:107:LEU:HD13	1:A:277:GLN:HG3	1.88	0.53
1:A:392:ILE:HG13	1:A:485:LEU:HD13	1.90	0.53
1:A:479:GLU:HA	1:A:479:GLU:OE2	2.09	0.53
1:A:844:CYS:HB3	1:A:849:LEU:CD1	2.29	0.53
1:A:140:TYR:OH	1:A:206:GLY:HA3	2.08	0.53
1:A:375:GLN:HA	1:A:378:HIS:CE1	2.43	0.53
1:A:119:PHE:CD2	1:A:129:ALA:HB2	2.44	0.53
1:A:837:ASP:HB3	1:A:840:SER:CB	2.39	0.53
1:A:211:VAL:C	1:A:213:ARG:H	2.17	0.53
1:A:469:SER:O	1:A:471:CYS:N	2.42	0.53
1:A:578:MET:HG3	1:A:587:ARG:HB3	1.90	0.53
1:A:272:TYR:CE2	1:A:289:GLN:NE2	2.76	0.53
1:A:439:MET:O	1:A:463:MET:HE1	2.09	0.53
1:A:478:GLU:OE2	1:A:481:LYS:HG2	2.09	0.53
1:A:797:SER:OG	1:A:802:ARG:HD3	2.09	0.53
1:A:106:ILE:CD1	1:A:207:ALA:HB1	2.39	0.53
1:A:489:THR:HG22	1:A:489:THR:O	2.08	0.53
1:A:826:LEU:HD23	1:A:826:LEU:C	2.33	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:253:THR:HG21	1:A:278:GLY:HA2	1.90	0.53
1:A:312:LEU:HD12	1:A:320:GLN:HG3	1.90	0.53
1:A:317:ARG:HH12	1:A:359:ILE:HG23	1.74	0.53
1:A:564:HIS:HA	1:A:567:PHE:HB2	1.90	0.53
1:A:732:LYS:C	1:A:734:SER:H	2.15	0.53
1:A:257:PHE:CD1	1:A:321:ASP:HB2	2.43	0.53
1:A:609:LEU:O	1:A:612:ARG:HD2	2.08	0.53
1:A:805:GLN:HB3	1:A:843:PHE:CE2	2.43	0.53
1:A:30:THR:OG1	1:A:36:ILE:HD11	2.07	0.53
1:A:64:GLN:HA	1:A:67:GLU:HB2	1.90	0.53
1:A:65:ILE:C	1:A:66:PHE:HD1	2.16	0.53
1:A:66:PHE:HD1	1:A:66:PHE:N	2.07	0.53
1:A:66:PHE:CD2	1:A:201:LYS:NZ	2.78	0.53
1:A:66:PHE:CE2	1:A:201:LYS:HD3	2.44	0.53
1:A:235:THR:HG22	1:A:236:ALA:N	2.24	0.53
1:A:745:GLU:OE1	1:A:769:ASP:OD2	2.27	0.53
1:A:74:GLU:O	1:A:77:GLY:N	2.26	0.52
1:A:222:VAL:HG11	1:A:437:GLU:CG	2.39	0.52
1:A:563:GLU:OE2	1:A:621:PRO:HD3	2.09	0.52
1:A:564:HIS:CE1	1:A:565:MET:HG2	2.42	0.52
1:A:748:ARG:HA	1:A:751:LEU:HD12	1.90	0.52
1:A:93:SER:HG	1:A:103:MET:HB3	1.73	0.52
1:A:872:ASN:HD22	1:A:873:ASN:N	2.06	0.52
1:A:347:LEU:HD12	1:A:376:LEU:HD21	1.91	0.52
1:A:541:ASP:OD2	1:A:561:ARG:HB2	2.08	0.52
1:A:574:LYS:HB2	1:A:574:LYS:HZ3	1.72	0.52
1:A:335:GLN:HG2	1:A:336:THR:H	1.72	0.52
1:A:420:LYS:HG3	1:A:442:ALA:O	2.10	0.52
1:A:677:ALA:O	1:A:681:THR:OG1	2.27	0.52
1:A:771:THR:HA	1:A:808:VAL:CG2	2.39	0.52
1:A:16:ARG:NE	1:A:21:GLY:HA2	2.24	0.52
1:A:104:ASP:HB3	1:A:143:VAL:HG13	1.92	0.52
1:A:86:PRO:HG3	1:A:115:ALA:HB1	1.91	0.52
1:A:119:PHE:O	1:A:123:THR:HB	2.10	0.52
1:A:451:GLY:H	1:A:454:SER:HB3	1.74	0.52
1:A:500:GLY:O	1:A:502:THR:N	2.43	0.52
1:A:591:LEU:HD22	1:A:679:MET:CE	2.40	0.52
1:A:105:THR:HG21	1:A:279:GLU:CG	2.18	0.52
1:A:109:LEU:HD23	1:A:109:LEU:C	2.34	0.52
1:A:117:GLU:HG2	1:A:130:TYR:OH	2.10	0.52
1:A:179:LEU:HD11	1:A:183:PHE:CE1	2.45	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:540:ALA:O	1:A:541:ASP:OD1	2.28	0.52
1:A:106:ILE:HD13	1:A:207:ALA:CB	2.39	0.52
1:A:330:LYS:HB3	1:A:332:TYR:CE2	2.45	0.52
1:A:668:ARG:NE	1:A:707:LEU:HG	2.25	0.52
1:A:710:GLU:HA	1:A:756:ILE:HD11	1.92	0.52
1:A:837:ASP:HB3	1:A:840:SER:HB2	1.92	0.52
1:A:223:TYR:CD2	1:A:436:ILE:HG12	2.37	0.52
1:A:272:TYR:OH	1:A:293:GLN:HB3	2.10	0.52
1:A:396:LEU:O	1:A:468:VAL:HG13	2.10	0.52
1:A:566:PHE:CE1	1:A:619:LEU:HD13	2.45	0.52
1:A:567:PHE:CE2	1:A:626:PHE:CE1	2.98	0.52
1:A:471:CYS:O	1:A:472:GLY:O	2.28	0.52
1:A:571:ARG:HB3	1:A:594:LEU:HD22	1.92	0.52
1:A:4:TRP:NE1	1:A:60:GLU:OE1	2.42	0.51
1:A:41:THR:HA	1:A:238:ASN:HA	1.92	0.51
1:A:315:HIS:O	1:A:315:HIS:ND1	2.44	0.51
1:A:403:ALA:HB1	1:A:443:GLU:HB3	1.91	0.51
1:A:538:THR:O	1:A:557:ILE:HG23	2.10	0.51
1:A:712:LYS:HA	1:A:715:LYS:HE2	1.92	0.51
1:A:750:ALA:O	1:A:753:ALA:HB2	2.10	0.51
1:A:74:GLU:HG3	1:A:75:LEU:N	2.10	0.51
1:A:124:GLY:O	1:A:125:ASN:HB2	2.09	0.51
1:A:194:GLU:OE1	1:A:195:GLU:O	2.28	0.51
1:A:789:TYR:CE2	1:A:794:ILE:HG21	2.45	0.51
1:A:16:ARG:HE	1:A:21:GLY:HA2	1.76	0.51
1:A:111:LEU:HB3	1:A:133:TYR:HD1	1.75	0.51
1:A:189:GLU:HG3	1:A:190:ALA:N	2.24	0.51
1:A:587:ARG:O	1:A:591:LEU:HG	2.10	0.51
1:A:708:VAL:O	1:A:749:ALA:HB2	2.11	0.51
1:A:27:ALA:O	1:A:31:ILE:N	2.42	0.51
1:A:485:LEU:HD23	1:A:486:GLY:N	2.26	0.51
1:A:574:LYS:HA	1:A:577:LYS:HE3	1.92	0.51
1:A:859:VAL:O	1:A:862:ALA:N	2.42	0.51
1:A:281:VAL:O	1:A:284:GLY:O	2.27	0.51
1:A:381:PHE:CZ	1:A:496:ILE:HG23	2.46	0.51
1:A:410:THR:HB	1:A:413:GLU:HB2	1.92	0.51
1:A:439:MET:HE3	1:A:459:VAL:CG1	2.40	0.51
1:A:667:CYS:SG	1:A:668:ARG:N	2.84	0.51
1:A:754:ASP:HB3	1:A:818:LYS:HE2	1.91	0.51
1:A:859:VAL:N	1:A:860:PRO:CD	2.73	0.51
1:A:109:LEU:CB	1:A:136:PHE:CE1	2.92	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:521:PHE:O	1:A:525:MET:HG2	2.10	0.51
1:A:19:LEU:O	1:A:24:CYS:N	2.43	0.51
1:A:99:MET:O	2:A:902:SO4:O2	2.29	0.51
1:A:106:ILE:HG23	1:A:140:TYR:N	2.25	0.51
1:A:563:GLU:CG	1:A:621:PRO:HD3	2.41	0.51
1:A:705:ILE:HG22	1:A:708:VAL:HG23	1.93	0.51
1:A:71:TRP:CZ3	1:A:72:LEU:CD2	2.94	0.51
1:A:488:HIS:N	1:A:488:HIS:CD2	2.78	0.51
1:A:140:TYR:O	1:A:144:VAL:HG23	2.11	0.51
1:A:66:PHE:N	1:A:66:PHE:CD1	2.77	0.50
1:A:111:LEU:HB3	1:A:133:TYR:CD1	2.46	0.50
1:A:476:ILE:HG23	1:A:482:THR:O	2.11	0.50
1:A:708:VAL:HB	1:A:742:THR:OG1	2.11	0.50
1:A:851:TYR:HD1	1:A:852:VAL:O	1.92	0.50
1:A:106:ILE:HG21	1:A:140:TYR:HA	1.92	0.50
1:A:223:TYR:CD2	1:A:436:ILE:HD11	2.46	0.50
1:A:326:ILE:CG1	1:A:331:LEU:HD12	2.41	0.50
1:A:543:PRO:O	1:A:546:THR:N	2.44	0.50
1:A:803:LEU:O	1:A:805:GLN:N	2.44	0.50
1:A:381:PHE:HD2	1:A:402:ALA:HB1	1.71	0.50
1:A:472:GLY:C	1:A:474:ILE:H	2.08	0.50
1:A:402:ALA:HB1	1:A:498:LEU:HG	1.93	0.50
1:A:112:ASN:O	1:A:116:VAL:N	2.42	0.50
1:A:223:TYR:CE2	1:A:436:ILE:HD11	2.47	0.50
1:A:493:GLY:O	1:A:494:ASP:O	2.29	0.50
1:A:109:LEU:HG	1:A:110:GLY:N	2.27	0.50
1:A:119:PHE:O	1:A:123:THR:N	2.34	0.50
1:A:198:GLN:O	1:A:200:PRO:HD3	2.12	0.50
1:A:255:VAL:CG1	1:A:453:THR:HB	2.41	0.50
1:A:316:PHE:CD2	1:A:320:GLN:NE2	2.79	0.50
1:A:433:PRO:HD3	1:A:455:HIS:CE1	2.46	0.50
1:A:545:ASP:O	1:A:549:ALA:N	2.44	0.50
1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:HD12	2.26	0.50
1:A:79:LYS:C	1:A:87:LEU:HB3	2.37	0.50
1:A:536:VAL:C	1:A:537:ARG:HG3	2.36	0.50
1:A:803:LEU:HD23	1:A:843:PHE:CD2	2.47	0.50
1:A:200:PRO:C	1:A:202:ASP:H	2.20	0.50
1:A:429:LEU:HA	1:A:448:VAL:CG2	2.42	0.50
1:A:579:ILE:C	1:A:581:SER:H	2.20	0.50
1:A:859:VAL:O	1:A:862:ALA:HB3	2.12	0.50
1:A:9:GLU:HA	1:A:31:ILE:HD11	1.94	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:34:MET:CE	1:A:312:LEU:HD23	2.42	0.49
1:A:73:GLU:OE2	1:A:79:LYS:HE2	2.12	0.49
1:A:221:ILE:CD1	1:A:224:ARG:NH2	2.75	0.49
1:A:417:ALA:O	1:A:418:HIS:HB2	2.11	0.49
1:A:834:HIS:N	1:A:834:HIS:CD2	2.79	0.49
1:A:619:LEU:HB2	1:A:680:GLN:NE2	2.16	0.49
1:A:700:VAL:HG22	1:A:737:GLN:CD	2.37	0.49
1:A:181:GLU:HG2	1:A:184:LYS:HZ2	1.74	0.49
1:A:323:GLU:O	1:A:334:LEU:N	2.44	0.49
1:A:422:GLU:C	1:A:423:ARG:HG3	2.37	0.49
1:A:578:MET:HB2	1:A:590:ALA:HB3	1.93	0.49
1:A:368:ILE:CG2	1:A:369:GLU:N	2.76	0.49
1:A:408:TYR:HE1	1:A:424:VAL:HG12	1.77	0.49
1:A:571:ARG:CB	1:A:594:LEU:HD21	2.40	0.49
1:A:588:GLU:O	1:A:592:ASN:N	2.35	0.49
1:A:811:LEU:HD23	1:A:814:MET:HE3	1.94	0.49
1:A:245:GLY:O	1:A:275:ASN:HA	2.13	0.49
1:A:380:THR:O	1:A:512:THR:HG22	2.12	0.49
1:A:403:ALA:HB1	1:A:443:GLU:CB	2.41	0.49
1:A:685:MET:HG3	1:A:725:ALA:CB	2.42	0.49
1:A:722:VAL:HG12	1:A:723:GLU:N	2.27	0.49
1:A:749:ALA:HA	1:A:756:ILE:HD12	1.95	0.49
1:A:66:PHE:CD2	1:A:201:LYS:CE	2.95	0.49
1:A:106:ILE:HG21	1:A:140:TYR:CA	2.42	0.49
1:A:135:ARG:CZ	1:A:277:GLN:HB3	2.42	0.49
1:A:623:LEU:HB2	1:A:655:LEU:HD22	1.93	0.49
1:A:774:THR:OG1	1:A:811:LEU:HD12	2.13	0.49
1:A:123:THR:HG23	1:A:125:ASN:HB3	1.94	0.49
1:A:134:ARG:HD3	1:A:179:LEU:CD2	2.43	0.49
1:A:248:GLY:O	1:A:275:ASN:HB2	2.11	0.49
1:A:496:ILE:N	1:A:496:ILE:HD12	2.26	0.49
1:A:623:LEU:HD21	1:A:669:LEU:HD21	1.93	0.49
1:A:189:GLU:HG3	1:A:190:ALA:H	1.78	0.49
1:A:487:GLY:H	1:A:488:HIS:CD2	2.25	0.49
1:A:817:LYS:HD3	1:A:817:LYS:C	2.38	0.49
1:A:353:LEU:HB3	1:A:359:ILE:HG12	1.94	0.49
1:A:572:ILE:CG2	1:A:573:MET:H	2.19	0.49
1:A:634:GLN:OE1	1:A:649:LYS:HG2	2.13	0.49
1:A:771:THR:CG2	1:A:772:GLN:N	2.75	0.49
1:A:110:GLY:HA2	1:A:200:PRO:HB3	1.94	0.49
1:A:230:PRO:HG2	1:A:233:TRP:CD1	2.48	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:495:TYR:CD2	1:A:496:ILE:N	2.81	0.49
1:A:675:GLU:HA	1:A:678:LYS:HB2	1.94	0.49
1:A:51:TYR:CE1	1:A:55:LYS:HD3	2.47	0.48
1:A:122:LYS:HD3	1:A:122:LYS:C	2.38	0.48
1:A:221:ILE:HD13	1:A:224:ARG:NH2	2.28	0.48
1:A:244:PHE:N	1:A:244:PHE:CD1	2.81	0.48
1:A:255:VAL:HG11	1:A:453:THR:CB	2.40	0.48
1:A:394:SER:O	1:A:395:ALA:HB2	2.12	0.48
1:A:424:VAL:HG23	1:A:424:VAL:O	2.12	0.48
1:A:523:ARG:NE	2:A:901:SO4:O3	2.47	0.48
1:A:40:PHE:CZ	1:A:69:ILE:CD1	2.96	0.48
1:A:43:THR:HG22	1:A:44:THR:N	2.28	0.48
1:A:91:VAL:HG22	1:A:239:VAL:CG1	2.43	0.48
1:A:232:ASP:N	1:A:232:ASP:OD1	2.46	0.48
1:A:290:PRO:O	1:A:292:THR:N	2.46	0.48
1:A:325:THR:O	1:A:332:TYR:N	2.46	0.48
1:A:536:VAL:O	1:A:555:GLU:HB2	2.13	0.48
1:A:739:HIS:HB3	1:A:761:GLU:HG3	1.95	0.48
1:A:316:PHE:HB2	1:A:320:GLN:HE22	1.78	0.48
1:A:485:LEU:CD2	1:A:486:GLY:H	2.25	0.48
1:A:704:MET:SD	1:A:764:SER:CB	3.02	0.48
1:A:65:ILE:O	1:A:69:ILE:HG12	2.14	0.48
1:A:392:ILE:CG1	1:A:485:LEU:HD13	2.43	0.48
1:A:584:VAL:HG12	1:A:588:GLU:HG3	1.94	0.48
1:A:5:VAL:CG2	1:A:42:VAL:HG13	2.44	0.48
1:A:107:LEU:HB2	1:A:139:MET:HE1	1.94	0.48
1:A:110:GLY:N	1:A:203:GLN:OE1	2.41	0.48
1:A:403:ALA:O	1:A:404:ALA:HB2	2.12	0.48
1:A:724:VAL:O	1:A:728:VAL:N	2.41	0.48
1:A:73:GLU:HG2	1:A:79:LYS:HA	1.96	0.48
1:A:381:PHE:CD1	1:A:510:ILE:CG2	2.97	0.48
1:A:420:LYS:HG2	1:A:420:LYS:O	2.14	0.48
1:A:40:PHE:HE1	1:A:69:ILE:HD13	1.76	0.48
1:A:307:ASP:OD1	1:A:307:ASP:N	2.47	0.48
1:A:325:THR:N	1:A:332:TYR:O	2.45	0.48
1:A:396:LEU:HD23	1:A:452:MET:SD	2.54	0.48
1:A:521:PHE:CE1	1:A:525:MET:HG3	2.49	0.48
1:A:48:THR:CG2	1:A:52:ASN:HD21	2.16	0.48
1:A:93:SER:OG	1:A:103:MET:HE3	2.13	0.48
1:A:381:PHE:CD1	1:A:510:ILE:HG22	2.48	0.48
1:A:415:LYS:C	1:A:417:ALA:H	2.21	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:427:VAL:O	1:A:427:VAL:HG12	2.07	0.48
1:A:477:ASN:CG	1:A:480:ALA:HB3	2.37	0.48
1:A:718:LYS:NZ	1:A:740:ILE:HB	2.28	0.48
1:A:106:ILE:HG23	1:A:139:MET:HB3	1.96	0.48
1:A:179:LEU:CD1	1:A:183:PHE:CE1	2.97	0.48
1:A:295:GLU:O	1:A:299:PRO:HB3	2.13	0.48
1:A:301:CYS:HG	1:A:326:ILE:HD13	1.75	0.48
1:A:756:ILE:O	1:A:758:GLU:N	2.46	0.48
1:A:13:ALA:HA	1:A:24:CYS:CB	2.43	0.48
1:A:159:MET:CE	1:A:179:LEU:HB2	2.41	0.48
1:A:179:LEU:C	1:A:181:GLU:H	2.22	0.48
1:A:225:ARG:O	1:A:228:ASP:N	2.46	0.48
1:A:747:PRO:O	1:A:751:LEU:HG	2.13	0.48
1:A:90:SER:HB3	1:A:242:MET:SD	2.54	0.47
1:A:144:VAL:HG12	1:A:144:VAL:O	2.13	0.47
1:A:285:VAL:HB	1:A:449:ARG:NH2	2.20	0.47
1:A:395:ALA:HB2	1:A:471:CYS:SG	2.54	0.47
1:A:596:PRO:HA	1:A:599:LYS:HE3	1.96	0.47
1:A:177:LYS:O	1:A:177:LYS:HG2	2.14	0.47
1:A:427:VAL:HG23	1:A:446:LEU:CD1	2.44	0.47
1:A:616:VAL:O	1:A:704:MET:N	2.35	0.47
1:A:149:LYS:HB2	1:A:149:LYS:HE2	1.77	0.47
1:A:220:ALA:O	1:A:224:ARG:HB3	2.13	0.47
1:A:377:LEU:HD13	1:A:857:PHE:HD1	1.80	0.47
1:A:381:PHE:CB	1:A:386:LEU:HD22	2.44	0.47
1:A:492:GLU:OE2	1:A:492:GLU:N	2.48	0.47
1:A:4:TRP:HZ3	1:A:49:GLU:HB3	1.79	0.47
1:A:119:PHE:CZ	1:A:128:PHE:CE2	3.02	0.47
1:A:148:PRO:HD2	1:A:151:HIS:HD2	1.74	0.47
1:A:317:ARG:HH22	1:A:363:GLU:CD	2.22	0.47
1:A:811:LEU:CD2	1:A:814:MET:HE3	2.45	0.47
1:A:4:TRP:HZ3	1:A:49:GLU:HG2	1.74	0.47
1:A:24:CYS:O	1:A:28:GLU:HB2	2.15	0.47
1:A:116:VAL:O	1:A:120:ALA:N	2.39	0.47
1:A:167:PHE:O	1:A:170:ASP:OD2	2.33	0.47
1:A:471:CYS:SG	1:A:474:ILE:HD11	2.55	0.47
1:A:564:HIS:CG	1:A:565:MET:N	2.82	0.47
1:A:700:VAL:HG12	1:A:700:VAL:O	2.12	0.47
1:A:19:LEU:HD22	1:A:41:THR:CG2	2.44	0.47
1:A:22:ALA:O	1:A:26:LEU:HD12	2.14	0.47
1:A:66:PHE:CE1	1:A:205:MET:SD	3.08	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:109:LEU:HD12	1:A:136:PHE:HE1	1.80	0.47
1:A:539:ASN:HD21	1:A:853:SER:C	2.21	0.47
1:A:583:SER:O	1:A:587:ARG:HG3	2.15	0.47
1:A:4:TRP:CD2	1:A:61:ILE:HD11	2.49	0.47
1:A:107:LEU:HD22	1:A:277:GLN:OE1	2.14	0.47
1:A:116:VAL:HG13	1:A:117:GLU:N	2.30	0.47
1:A:126:PRO:O	1:A:130:TYR:HD2	1.97	0.47
1:A:165:VAL:HG13	1:A:170:ASP:OD2	2.14	0.47
1:A:172:THR:OG1	1:A:175:ASP:OD1	2.32	0.47
1:A:189:GLU:CG	1:A:190:ALA:H	2.28	0.47
1:A:541:ASP:OD1	1:A:561:ARG:HG3	2.15	0.47
1:A:566:PHE:O	1:A:571:ARG:HB2	2.15	0.47
1:A:617:ARG:HB2	1:A:704:MET:CE	2.44	0.47
1:A:789:TYR:CD2	1:A:794:ILE:CG2	2.98	0.47
1:A:5:VAL:HG23	1:A:42:VAL:HG13	1.97	0.47
1:A:73:GLU:CA	1:A:76:ASN:ND2	2.75	0.47
1:A:707:LEU:CD1	1:A:746:ILE:HD11	2.45	0.47
1:A:728:VAL:CG1	1:A:729:LYS:N	2.78	0.47
1:A:143:VAL:C	1:A:145:MET:N	2.72	0.47
1:A:159:MET:HE3	1:A:171:LEU:HD13	1.97	0.47
1:A:189:GLU:CG	1:A:190:ALA:N	2.78	0.47
1:A:224:ARG:HH11	1:A:231:GLY:N	2.13	0.47
1:A:230:PRO:HG2	1:A:233:TRP:CE2	2.50	0.47
1:A:317:ARG:HB3	1:A:317:ARG:NH1	2.25	0.47
1:A:392:ILE:HD12	1:A:490:PHE:HZ	1.79	0.47
1:A:460:ALA:O	1:A:464:GLY:N	2.47	0.47
1:A:536:VAL:CG1	1:A:537:ARG:N	2.78	0.47
1:A:718:LYS:HZ2	1:A:740:ILE:HB	1.79	0.47
1:A:70:THR:HB	3:A:919:HOH:O	2.15	0.47
1:A:91:VAL:O	1:A:106:ILE:N	2.47	0.47
1:A:439:MET:C	1:A:463:MET:HE1	2.40	0.47
1:A:179:LEU:HD11	1:A:183:PHE:CZ	2.51	0.46
1:A:345:ALA:O	1:A:349:ILE:HG13	2.16	0.46
1:A:474:ILE:O	1:A:476:ILE:N	2.49	0.46
1:A:763:PHE:HB2	1:A:826:LEU:HD21	1.97	0.46
1:A:42:VAL:HG12	1:A:212:PHE:CZ	2.49	0.46
1:A:76:ASN:ND2	1:A:76:ASN:C	2.72	0.46
1:A:76:ASN:ND2	1:A:78:LYS:H	2.14	0.46
1:A:102:MET:CE	1:A:436:ILE:HD13	2.44	0.46
1:A:791:LYS:HA	1:A:791:LYS:HD3	1.76	0.46
1:A:797:SER:CB	1:A:802:ARG:HD3	2.45	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:43:THR:CG2	1:A:44:THR:N	2.78	0.46
1:A:230:PRO:HB2	1:A:232:ASP:OD1	2.15	0.46
1:A:244:PHE:C	1:A:246:ASN:H	2.22	0.46
1:A:246:ASN:OD1	1:A:246:ASN:N	2.47	0.46
1:A:304:GLN:NE2	1:A:304:GLN:HA	2.31	0.46
1:A:580:LEU:O	1:A:641:MET:HE1	2.15	0.46
1:A:591:LEU:HD12	1:A:675:GLU:HB2	1.97	0.46
1:A:659:ASN:HD22	1:A:659:ASN:N	2.13	0.46
1:A:729:LYS:HE2	1:A:736:MET:HB3	1.96	0.46
1:A:85:ASP:OD1	1:A:122:LYS:HG3	2.15	0.46
1:A:147:VAL:CG1	1:A:151:HIS:HD2	2.13	0.46
1:A:341:ARG:HH11	1:A:349:ILE:HD13	1.78	0.46
1:A:485:LEU:CD2	1:A:486:GLY:N	2.78	0.46
1:A:693:GLU:C	1:A:695:THR:H	2.20	0.46
1:A:710:GLU:OE2	1:A:712:LYS:HB2	2.16	0.46
1:A:744:ILE:O	1:A:770:LEU:HD22	2.16	0.46
1:A:774:THR:O	1:A:774:THR:HG22	2.16	0.46
1:A:66:PHE:CD2	1:A:201:LYS:HE2	2.51	0.46
1:A:131:ASP:OD1	1:A:134:ARG:NH2	2.46	0.46
1:A:188:LYS:O	1:A:191:MET:O	2.34	0.46
1:A:392:ILE:CD1	1:A:490:PHE:CZ	2.98	0.46
1:A:498:LEU:C	1:A:500:GLY:N	2.73	0.46
1:A:690:GLU:O	1:A:694:GLU:HG3	2.15	0.46
1:A:744:ILE:HG21	1:A:765:PHE:CE1	2.51	0.46
1:A:65:ILE:O	1:A:69:ILE:HB	2.16	0.46
1:A:109:LEU:CG	1:A:110:GLY:N	2.79	0.46
1:A:145:MET:SD	1:A:146:GLU:N	2.89	0.46
1:A:751:LEU:CD2	1:A:814:MET:HE1	2.46	0.46
1:A:787:ASP:O	1:A:790:TYR:HB2	2.15	0.46
1:A:146:GLU:O	1:A:147:VAL:HG22	2.16	0.46
1:A:243:VAL:HG21	1:A:332:TYR:HB2	1.98	0.46
1:A:285:VAL:CB	1:A:449:ARG:HH22	2.20	0.46
1:A:422:GLU:O	1:A:423:ARG:HG3	2.15	0.46
1:A:744:ILE:CG2	1:A:765:PHE:CE1	2.99	0.46
1:A:34:MET:HE2	1:A:312:LEU:HD23	1.98	0.46
1:A:76:ASN:C	1:A:78:LYS:H	2.24	0.46
1:A:199:GLU:O	1:A:202:ASP:HB2	2.14	0.46
1:A:317:ARG:NH1	1:A:317:ARG:CB	2.79	0.46
1:A:406:LYS:O	1:A:425:ILE:N	2.27	0.46
1:A:17:ASN:O	1:A:44:THR:OG1	2.24	0.46
1:A:37:PRO:HG2	1:A:240:GLN:NE2	2.31	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:59:GLN:CD	1:A:59:GLN:H	2.24	0.46
1:A:116:VAL:CG1	1:A:117:GLU:N	2.79	0.46
1:A:186:VAL:HG23	1:A:189:GLU:OE1	2.16	0.46
1:A:195:GLU:O	1:A:197:PRO:N	2.49	0.46
1:A:368:ILE:HD12	1:A:368:ILE:H	1.81	0.46
1:A:534:LEU:HD11	1:A:845:HIS:CA	2.45	0.46
1:A:566:PHE:CZ	1:A:680:GLN:NE2	2.81	0.46
1:A:653:ASP:C	1:A:655:LEU:H	2.23	0.46
1:A:66:PHE:O	1:A:70:THR:HG23	2.16	0.46
1:A:224:ARG:HH11	1:A:230:PRO:C	2.24	0.46
1:A:277:GLN:HE21	1:A:277:GLN:HB2	1.56	0.46
1:A:373:LEU:HB2	1:A:861:ILE:HG13	1.97	0.46
1:A:517:VAL:HG23	1:A:517:VAL:O	2.16	0.46
1:A:12:ASN:N	1:A:15:MET:SD	2.89	0.45
1:A:272:TYR:CZ	1:A:289:GLN:HB2	2.49	0.45
1:A:349:ILE:HG22	1:A:349:ILE:O	2.16	0.45
1:A:381:PHE:CZ	1:A:496:ILE:CG2	2.99	0.45
1:A:396:LEU:O	1:A:398:ALA:N	2.44	0.45
1:A:591:LEU:HD23	1:A:591:LEU:HA	1.63	0.45
1:A:843:PHE:O	1:A:847:VAL:N	2.48	0.45
1:A:331:LEU:CD2	1:A:333:PHE:CE1	2.99	0.45
1:A:409:PHE:HA	1:A:427:VAL:O	2.16	0.45
1:A:805:GLN:HB3	1:A:843:PHE:CD2	2.51	0.45
1:A:854:CYS:HB2	1:A:858:ARG:HB2	1.97	0.45
1:A:134:ARG:HD3	1:A:179:LEU:HD23	1.98	0.45
1:A:251:SER:HA	1:A:326:ILE:O	2.17	0.45
1:A:432:SER:C	1:A:455:HIS:CE1	2.94	0.45
1:A:9:GLU:HA	1:A:31:ILE:CD1	2.46	0.45
1:A:208:VAL:O	1:A:211:VAL:HB	2.16	0.45
1:A:298:MET:HG2	1:A:301:CYS:HB2	1.99	0.45
1:A:418:HIS:HB2	1:A:422:GLU:HB2	1.97	0.45
1:A:591:LEU:O	1:A:679:MET:HG3	2.17	0.45
1:A:707:LEU:HD13	1:A:746:ILE:HD11	1.97	0.45
1:A:709:GLY:O	1:A:756:ILE:HD11	2.17	0.45
1:A:93:SER:HB2	1:A:103:MET:CE	2.47	0.45
1:A:136:PHE:C	1:A:136:PHE:CD2	2.94	0.45
1:A:140:TYR:CE2	1:A:203:GLN:HA	2.51	0.45
1:A:291:ILE:O	1:A:294:LEU:HB2	2.17	0.45
1:A:352:ASP:OD1	1:A:352:ASP:N	2.49	0.45
1:A:439:MET:HE3	1:A:459:VAL:HG11	1.98	0.45
1:A:155:ILE:HB	1:A:183:PHE:CE1	2.49	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:213:ARG:NH1	1:A:213:ARG:CG	2.76	0.45
1:A:311:LYS:CG	1:A:312:LEU:N	2.79	0.45
1:A:439:MET:C	1:A:463:MET:SD	3.00	0.45
1:A:564:HIS:C	1:A:566:PHE:N	2.73	0.45
1:A:223:TYR:HD2	1:A:436:ILE:CD1	2.29	0.45
1:A:226:MET:SD	1:A:440:HIS:CD2	3.10	0.45
1:A:328:GLU:O	1:A:330:LYS:N	2.50	0.45
1:A:403:ALA:O	1:A:496:ILE:HG23	2.17	0.45
1:A:557:ILE:HG13	1:A:609:LEU:HD21	1.98	0.45
1:A:61:ILE:O	1:A:65:ILE:HG13	2.17	0.45
1:A:185:ALA:O	1:A:189:GLU:HG2	2.17	0.45
1:A:270:GLY:CA	1:A:291:ILE:HG22	2.46	0.45
1:A:349:ILE:HG22	1:A:353:LEU:HD12	1.99	0.45
1:A:361:GLU:HB3	1:A:531:PHE:HZ	1.82	0.45
1:A:741:GLY:HA3	1:A:762:PHE:CD2	2.52	0.45
1:A:94:GLY:C	1:A:236:ALA:HB3	2.42	0.45
1:A:271:GLU:OE1	1:A:453:THR:HG22	2.17	0.45
1:A:303:LYS:O	1:A:304:GLN:O	2.35	0.45
1:A:667:CYS:HB3	1:A:706:PRO:O	2.17	0.45
1:A:485:LEU:HD23	1:A:485:LEU:HA	1.59	0.45
1:A:25:ASN:O	1:A:28:GLU:HB3	2.16	0.44
1:A:47:CYS:O	1:A:50:TYR:HB3	2.17	0.44
1:A:59:GLN:O	1:A:62:GLN:N	2.50	0.44
1:A:141:SER:HG	1:A:147:VAL:HG23	1.79	0.44
1:A:301:CYS:O	1:A:304:GLN:N	2.51	0.44
1:A:319:MET:HB3	1:A:341:ARG:HH12	1.80	0.44
1:A:347:LEU:HA	1:A:347:LEU:HD23	1.71	0.44
1:A:398:ALA:HB2	1:A:469:SER:OG	2.16	0.44
1:A:487:GLY:N	1:A:488:HIS:HD2	2.11	0.44
1:A:57:ILE:HD11	1:A:209:LYS:HB3	1.99	0.44
1:A:319:MET:CE	1:A:341:ARG:HG3	2.47	0.44
1:A:722:VAL:HG22	1:A:738:TYR:OH	2.17	0.44
1:A:845:HIS:CB	1:A:869:ALA:HB1	2.47	0.44
1:A:872:ASN:C	1:A:872:ASN:ND2	2.74	0.44
1:A:22:ALA:HB3	1:A:94:GLY:HA2	1.99	0.44
1:A:34:MET:C	1:A:36:ILE:H	2.21	0.44
1:A:99:MET:N	1:A:100:PRO:CD	2.80	0.44
1:A:106:ILE:CG2	1:A:140:TYR:N	2.80	0.44
1:A:223:TYR:CD2	1:A:436:ILE:CD1	3.01	0.44
1:A:229:ILE:HG22	1:A:230:PRO:N	2.33	0.44
1:A:253:THR:HG23	1:A:278:GLY:HA2	2.00	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:496:ILE:O	1:A:504:LYS:N	2.50	0.44
1:A:579:ILE:HG22	1:A:651:LYS:NZ	2.32	0.44
1:A:595:ILE:N	1:A:596:PRO:CD	2.79	0.44
1:A:627:VAL:HG21	1:A:652:VAL:HG13	1.98	0.44
1:A:145:MET:C	1:A:146:GLU:HG2	2.41	0.44
1:A:225:ARG:HG3	1:A:225:ARG:HH11	1.83	0.44
1:A:280:ASP:OD2	1:A:281:VAL:HG13	2.17	0.44
1:A:298:MET:HE3	1:A:298:MET:HB2	1.83	0.44
1:A:563:GLU:CG	1:A:621:PRO:CD	2.95	0.44
1:A:854:CYS:SG	1:A:862:ALA:HB2	2.57	0.44
1:A:119:PHE:CD2	1:A:129:ALA:CB	3.00	0.44
1:A:176:LEU:O	1:A:179:LEU:HB3	2.17	0.44
1:A:207:ALA:HA	1:A:210:ALA:HB3	1.99	0.44
1:A:298:MET:HB3	1:A:301:CYS:HB2	1.98	0.44
1:A:447:THR:OG1	1:A:469:SER:HA	2.17	0.44
1:A:837:ASP:HB3	1:A:840:SER:OG	2.17	0.44
1:A:73:GLU:HA	1:A:76:ASN:HD21	1.80	0.44
1:A:818:LYS:O	1:A:821:GLN:HB2	2.17	0.44
1:A:837:ASP:O	1:A:839:SER:N	2.50	0.44
1:A:840:SER:C	1:A:842:GLU:N	2.76	0.44
1:A:196:PHE:CG	1:A:197:PRO:HD2	2.53	0.44
1:A:204:LEU:HD22	1:A:205:MET:SD	2.58	0.44
1:A:225:ARG:CD	1:A:226:MET:N	2.78	0.44
1:A:365:VAL:HG11	1:A:867:ALA:HB1	1.99	0.44
1:A:536:VAL:HG12	1:A:537:ARG:N	2.32	0.44
1:A:73:GLU:C	1:A:76:ASN:HD22	2.26	0.44
1:A:128:PHE:CG	1:A:129:ALA:N	2.86	0.44
1:A:138:GLN:HB2	1:A:152:PHE:CD1	2.52	0.44
1:A:156:ILE:CG1	1:A:183:PHE:CZ	2.98	0.44
1:A:298:MET:HG2	1:A:301:CYS:CB	2.48	0.44
1:A:624:HIS:CE1	1:A:629:HIS:CD2	3.05	0.44
1:A:751:LEU:HD23	1:A:814:MET:HE1	1.99	0.44
1:A:141:SER:O	1:A:145:MET:N	2.51	0.44
1:A:270:GLY:CA	1:A:291:ILE:CG2	2.96	0.44
1:A:741:GLY:HA3	1:A:762:PHE:CG	2.52	0.44
1:A:23:GLY:CA	1:A:238:ASN:ND2	2.81	0.43
1:A:352:ASP:O	1:A:356:GLU:N	2.48	0.43
1:A:517:VAL:HG21	1:A:521:PHE:CD2	2.53	0.43
1:A:866:ALA:HA	1:A:869:ALA:HB3	2.00	0.43
1:A:224:ARG:NH1	1:A:231:GLY:N	2.66	0.43
1:A:362:GLU:O	1:A:366:VAL:HG23	2.18	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:745:GLU:C	1:A:746:ILE:HD12	2.42	0.43
1:A:119:PHE:CD1	1:A:123:THR:HB	2.53	0.43
1:A:322:MET:HE2	1:A:322:MET:H	1.83	0.43
1:A:386:LEU:HD21	1:A:498:LEU:HD12	1.99	0.43
1:A:420:LYS:O	1:A:443:GLU:OE1	2.37	0.43
1:A:741:GLY:N	1:A:762:PHE:CE2	2.86	0.43
1:A:4:TRP:HZ3	1:A:49:GLU:CB	2.30	0.43
1:A:109:LEU:HA	1:A:136:PHE:CD1	2.54	0.43
1:A:243:VAL:HG21	1:A:332:TYR:CB	2.48	0.43
1:A:574:LYS:NZ	1:A:574:LYS:CB	2.77	0.43
1:A:661:MET:SD	1:A:772:GLN:OE1	2.77	0.43
1:A:686:GLU:HG3	1:A:728:VAL:CG2	2.48	0.43
1:A:102:MET:C	1:A:103:MET:SD	3.01	0.43
1:A:103:MET:HB2	2:A:902:SO4:O4	2.18	0.43
1:A:251:SER:CB	1:A:328:GLU:N	2.77	0.43
1:A:564:HIS:O	1:A:566:PHE:N	2.51	0.43
1:A:582:ASP:O	1:A:583:SER:HB3	2.18	0.43
1:A:652:VAL:HG12	1:A:652:VAL:O	2.18	0.43
1:A:707:LEU:HD12	1:A:746:ILE:CD1	2.48	0.43
1:A:782:ALA:HA	1:A:785:PHE:CE2	2.53	0.43
1:A:864:LEU:HD13	1:A:868:GLN:HE22	1.82	0.43
1:A:74:GLU:CG	1:A:75:LEU:H	2.17	0.43
1:A:362:GLU:HG3	1:A:531:PHE:CE1	2.53	0.43
1:A:648:VAL:O	1:A:652:VAL:HG23	2.18	0.43
1:A:79:LYS:O	1:A:87:LEU:HB3	2.19	0.43
1:A:359:ILE:HD12	1:A:364:ALA:HB2	2.01	0.43
1:A:408:TYR:HD1	1:A:414:ALA:HA	1.84	0.43
1:A:628:PRO:CB	1:A:633:GLU:HB3	2.48	0.43
1:A:826:LEU:HD23	1:A:827:LYS:C	2.44	0.43
1:A:109:LEU:HD12	1:A:136:PHE:CE1	2.53	0.43
1:A:271:GLU:O	1:A:282:VAL:HG11	2.19	0.43
1:A:368:ILE:HD12	1:A:368:ILE:N	2.33	0.43
1:A:529:ASP:HA	1:A:532:ARG:HG2	2.00	0.43
1:A:549:ALA:O	1:A:554:ALA:HB2	2.19	0.43
1:A:565:MET:HE1	1:A:602:PHE:CE1	2.53	0.43
1:A:102:MET:HE1	1:A:433:PRO:HA	2.00	0.43
1:A:141:SER:OG	1:A:146:GLU:HB2	2.18	0.43
1:A:327:GLU:O	1:A:327:GLU:HG2	2.19	0.43
1:A:490:PHE:N	1:A:490:PHE:CD1	2.86	0.43
1:A:618:TYR:CZ	1:A:703:ILE:HG23	2.54	0.43
1:A:694:GLU:HG3	1:A:694:GLU:H	1.41	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:830:ILE:HD13	1:A:844:CYS:SG	2.59	0.43
1:A:102:MET:SD	1:A:223:TYR:CD2	3.11	0.43
1:A:177:LYS:O	1:A:181:GLU:HB2	2.19	0.43
1:A:27:ALA:HA	1:A:30:THR:HB	2.01	0.42
1:A:72:LEU:O	1:A:75:LEU:N	2.52	0.42
1:A:156:ILE:HG12	1:A:179:LEU:HD21	2.01	0.42
1:A:399:SER:OG	1:A:466:CYS:HA	2.19	0.42
1:A:708:VAL:CG2	1:A:714:LEU:HB2	2.49	0.42
1:A:834:HIS:CD2	1:A:834:HIS:H	2.37	0.42
1:A:16:ARG:C	1:A:18:LEU:N	2.76	0.42
1:A:583:SER:OG	1:A:586:ALA:HB2	2.19	0.42
1:A:637:LEU:HD12	1:A:637:LEU:O	2.20	0.42
1:A:685:MET:CB	1:A:728:VAL:HG11	2.34	0.42
1:A:725:ALA:O	1:A:728:VAL:HG12	2.19	0.42
1:A:8:PHE:CZ	1:A:26:LEU:HD22	2.54	0.42
1:A:107:LEU:HB2	1:A:139:MET:SD	2.59	0.42
1:A:145:MET:SD	1:A:145:MET:C	3.00	0.42
1:A:253:THR:CG2	1:A:282:VAL:HG23	2.49	0.42
1:A:466:CYS:O	1:A:467:CYS:HB2	2.19	0.42
1:A:484:GLU:CG	1:A:485:LEU:H	2.32	0.42
1:A:700:VAL:HG22	1:A:737:GLN:OE1	2.19	0.42
1:A:223:TYR:CD1	1:A:223:TYR:C	2.97	0.42
1:A:272:TYR:CE2	1:A:289:GLN:CB	2.96	0.42
1:A:272:TYR:CD1	1:A:289:GLN:O	2.72	0.42
1:A:348:GLN:HE21	1:A:352:ASP:CG	2.26	0.42
1:A:515:ALA:O	1:A:516:SER:O	2.37	0.42
1:A:547:LEU:HD23	1:A:547:LEU:HA	1.57	0.42
1:A:602:PHE:CE1	1:A:616:VAL:HG11	2.55	0.42
1:A:659:ASN:HA	1:A:660:PRO:HD2	1.74	0.42
1:A:712:LYS:HG2	1:A:715:LYS:NZ	2.34	0.42
1:A:728:VAL:HG13	1:A:729:LYS:N	2.35	0.42
1:A:4:TRP:CH2	1:A:49:GLU:HG2	2.54	0.42
1:A:630:THR:O	1:A:634:GLN:HB2	2.19	0.42
1:A:805:GLN:CB	1:A:843:PHE:CE2	3.03	0.42
1:A:211:VAL:C	1:A:213:ARG:N	2.77	0.42
1:A:374:ASP:N	1:A:861:ILE:HD11	2.35	0.42
1:A:543:PRO:HA	1:A:546:THR:OG1	2.19	0.42
1:A:653:ASP:C	1:A:655:LEU:N	2.77	0.42
1:A:749:ALA:HA	1:A:756:ILE:CD1	2.50	0.42
1:A:3:LYS:HB3	1:A:6:TYR:CZ	2.55	0.42
1:A:34:MET:CE	1:A:312:LEU:CD2	2.98	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:57:ILE:CG2	1:A:61:ILE:CG2	2.98	0.42
1:A:259:ARG:NH2	1:A:353:LEU:CD2	2.80	0.42
1:A:603:LYS:CD	1:A:691:VAL:CG2	2.97	0.42
1:A:619:LEU:HD11	1:A:626:PHE:HZ	1.84	0.42
1:A:678:LYS:NZ	1:A:720:VAL:HG13	2.35	0.42
1:A:74:GLU:O	1:A:76:ASN:N	2.53	0.42
1:A:219:ARG:HG3	1:A:434:GLU:HA	2.00	0.42
1:A:343:ALA:HB2	1:A:375:GLN:CD	2.44	0.42
1:A:361:GLU:HG3	1:A:527:TRP:CD2	2.54	0.42
1:A:675:GLU:H	1:A:675:GLU:HG3	1.61	0.42
1:A:775:PHE:HE1	1:A:804:ASP:OD2	2.02	0.42
1:A:224:ARG:CG	1:A:229:ILE:CB	2.97	0.42
1:A:319:MET:O	1:A:319:MET:SD	2.77	0.42
1:A:463:MET:C	1:A:465:THR:H	2.26	0.42
1:A:559:LEU:CD1	1:A:617:ARG:CB	2.98	0.42
1:A:591:LEU:CD1	1:A:675:GLU:HB2	2.50	0.42
1:A:700:VAL:CG1	1:A:737:GLN:HB3	2.35	0.42
1:A:45:GLU:OE1	1:A:46:ALA:N	2.50	0.42
1:A:88:LEU:HA	1:A:109:LEU:O	2.20	0.42
1:A:186:VAL:HA	1:A:189:GLU:OE2	2.20	0.42
1:A:251:SER:OG	1:A:328:GLU:HA	2.20	0.42
1:A:667:CYS:SG	1:A:668:ARG:CD	3.07	0.42
1:A:19:LEU:HD22	1:A:41:THR:HG21	2.02	0.41
1:A:40:PHE:CE1	1:A:69:ILE:CD1	3.01	0.41
1:A:79:LYS:CG	1:A:82:ASP:HB2	2.50	0.41
1:A:95:ALA:O	1:A:96:ARG:O	2.38	0.41
1:A:100:PRO:HB2	1:A:458:VAL:HG11	1.99	0.41
1:A:128:PHE:CD1	1:A:128:PHE:C	2.98	0.41
1:A:144:VAL:O	1:A:145:MET:O	2.37	0.41
1:A:185:ALA:HA	1:A:188:LYS:CB	2.48	0.41
1:A:259:ARG:O	1:A:260:ASN:C	2.63	0.41
1:A:523:ARG:O	1:A:527:TRP:CD2	2.74	0.41
1:A:812:VAL:O	1:A:812:VAL:CG1	2.68	0.41
1:A:833:GLU:C	1:A:835:GLY:H	2.28	0.41
1:A:248:GLY:HA2	1:A:275:ASN:OD1	2.20	0.41
1:A:260:ASN:N	1:A:265:GLU:O	2.53	0.41
1:A:277:GLN:H	1:A:281:VAL:HG21	1.84	0.41
1:A:279:GLU:OE1	1:A:279:GLU:N	2.53	0.41
1:A:319:MET:HE3	1:A:341:ARG:HG3	2.01	0.41
1:A:408:TYR:O	1:A:426:LEU:HA	2.20	0.41
1:A:410:THR:HB	1:A:413:GLU:HG3	2.02	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:472:GLY:C	1:A:474:ILE:N	2.76	0.41
1:A:517:VAL:CG2	1:A:521:PHE:CD2	3.03	0.41
1:A:539:ASN:ND2	1:A:853:SER:O	2.46	0.41
1:A:707:LEU:CD1	1:A:746:ILE:CD1	2.98	0.41
1:A:757:ALA:HB2	1:A:763:PHE:CZ	2.55	0.41
1:A:34:MET:C	1:A:36:ILE:N	2.78	0.41
1:A:82:ASP:OD2	1:A:84:GLU:N	2.46	0.41
1:A:117:GLU:OE2	1:A:130:TYR:OH	2.36	0.41
1:A:448:VAL:HG22	1:A:476:ILE:HD11	2.02	0.41
1:A:538:THR:HG22	1:A:540:ALA:HB2	2.01	0.41
1:A:715:LYS:HE2	1:A:715:LYS:HB3	1.83	0.41
1:A:92:ARG:HA	1:A:104:ASP:O	2.20	0.41
1:A:137:ILE:O	1:A:196:PHE:CZ	2.74	0.41
1:A:392:ILE:HD11	1:A:485:LEU:CD1	2.48	0.41
1:A:407:VAL:O	1:A:408:TYR:CD2	2.74	0.41
1:A:471:CYS:O	1:A:474:ILE:HG13	2.19	0.41
1:A:22:ALA:HB3	1:A:94:GLY:CA	2.50	0.41
1:A:78:LYS:HE2	1:A:78:LYS:HB3	1.57	0.41
1:A:137:ILE:HG22	1:A:152:PHE:CE1	2.49	0.41
1:A:215:TRP:CH2	1:A:233:TRP:C	2.98	0.41
1:A:235:THR:HG22	1:A:236:ALA:O	2.21	0.41
1:A:335:GLN:HG2	1:A:336:THR:N	2.35	0.41
1:A:370:ALA:O	1:A:373:LEU:HD22	2.21	0.41
1:A:380:THR:O	1:A:512:THR:HA	2.20	0.41
1:A:584:VAL:O	1:A:588:GLU:N	2.51	0.41
1:A:592:ASN:CA	1:A:595:ILE:HD12	2.48	0.41
1:A:846:LYS:HD3	1:A:873:ASN:HD21	1.85	0.41
1:A:103:MET:SD	1:A:103:MET:N	2.89	0.41
1:A:107:LEU:CD1	1:A:139:MET:SD	3.05	0.41
1:A:219:ARG:NH2	1:A:435:ASP:C	2.78	0.41
1:A:373:LEU:HD12	1:A:376:LEU:HD11	2.02	0.41
1:A:4:TRP:HE3	1:A:46:ALA:CB	2.33	0.41
1:A:65:ILE:HD12	1:A:205:MET:HE1	2.02	0.41
1:A:147:VAL:HG12	1:A:148:PRO:HD2	2.02	0.41
1:A:260:ASN:CB	1:A:265:GLU:HB2	2.49	0.41
1:A:285:VAL:O	1:A:286:ARG:HB2	2.21	0.41
1:A:594:LEU:C	1:A:596:PRO:HD2	2.46	0.41
1:A:668:ARG:CZ	1:A:707:LEU:HG	2.50	0.41
1:A:855:SER:HB3	1:A:856:PRO:HD2	2.02	0.41
1:A:4:TRP:CZ3	1:A:61:ILE:HD11	2.51	0.41
1:A:157:ASP:HA	1:A:160:LYS:HE3	2.02	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:224:ARG:CG	1:A:229:ILE:CG2	2.97	0.41
1:A:261:PRO:CD	1:A:269:TYR:CD1	2.97	0.41
1:A:317:ARG:NH2	1:A:363:GLU:CD	2.78	0.41
1:A:353:LEU:HD23	1:A:353:LEU:HA	1.93	0.41
1:A:579:ILE:C	1:A:581:SER:N	2.79	0.41
1:A:603:LYS:HG2	1:A:687:ALA:CB	2.40	0.41
1:A:627:VAL:HB	1:A:628:PRO:CD	2.50	0.41
1:A:748:ARG:HA	1:A:751:LEU:HB2	2.03	0.41
1:A:160:LYS:HG3	1:A:161:GLU:N	2.36	0.41
1:A:204:LEU:CD2	1:A:205:MET:SD	3.09	0.41
1:A:251:SER:O	1:A:275:ASN:N	2.51	0.41
1:A:377:LEU:HD13	1:A:857:PHE:CD1	2.56	0.41
1:A:439:MET:O	1:A:463:MET:SD	2.79	0.41
1:A:539:ASN:ND2	1:A:853:SER:C	2.79	0.41
1:A:617:ARG:HB2	1:A:704:MET:HE3	2.03	0.41
1:A:811:LEU:HD23	1:A:811:LEU:HA	1.64	0.41
1:A:213:ARG:HD3	1:A:213:ARG:C	2.46	0.40
1:A:415:LYS:HE3	1:A:415:LYS:HB2	1.64	0.40
1:A:445:ILE:HG13	1:A:467:CYS:SG	2.60	0.40
1:A:584:VAL:HG12	1:A:588:GLU:CG	2.51	0.40
1:A:641:MET:HE2	1:A:641:MET:HB3	1.98	0.40
1:A:741:GLY:HA3	1:A:762:PHE:CE2	2.56	0.40
1:A:11:GLY:CA	1:A:15:MET:SD	3.09	0.40
1:A:151:HIS:HB3	1:A:186:VAL:HG21	2.03	0.40
1:A:157:ASP:O	1:A:160:LYS:HG3	2.21	0.40
1:A:252:GLY:N	1:A:326:ILE:O	2.54	0.40
1:A:420:LYS:HG2	1:A:443:GLU:OE2	2.21	0.40
1:A:571:ARG:NH2	1:A:601:ASP:OD1	2.52	0.40
1:A:790:TYR:OH	1:A:799:PRO:HD3	2.21	0.40
1:A:107:LEU:CG	1:A:139:MET:SD	3.09	0.40
1:A:137:ILE:CG2	1:A:183:PHE:HB3	2.29	0.40
1:A:140:TYR:CE2	1:A:203:GLN:O	2.71	0.40
1:A:143:VAL:O	1:A:145:MET:N	2.55	0.40
1:A:159:MET:HE1	1:A:175:ASP:C	2.46	0.40
1:A:199:GLU:O	1:A:202:ASP:N	2.54	0.40
1:A:303:LYS:HE3	1:A:303:LYS:HB2	1.77	0.40
1:A:316:PHE:CD2	1:A:320:GLN:CD	2.96	0.40
1:A:741:GLY:HA3	1:A:762:PHE:CD1	2.56	0.40
1:A:741:GLY:HA3	1:A:762:PHE:CE1	2.56	0.40
1:A:829:GLY:HA3	1:A:851:TYR:CD2	2.56	0.40
1:A:843:PHE:O	1:A:847:VAL:HB	2.20	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:51:TYR:C	1:A:53:SER:N	2.78	0.40
1:A:72:LEU:HD23	1:A:72:LEU:HA	1.63	0.40
1:A:102:MET:HE3	1:A:436:ILE:HD13	2.03	0.40
1:A:287:THR:HA	1:A:288:PRO:HD2	1.96	0.40
1:A:466:CYS:SG	1:A:467:CYS:N	2.88	0.40
1:A:580:LEU:CD1	1:A:637:LEU:HD21	2.46	0.40
1:A:656:HIS:CD2	1:A:656:HIS:C	2.99	0.40
1:A:20:GLY:HA3	1:A:94:GLY:O	2.21	0.40
1:A:183:PHE:HA	1:A:186:VAL:HG12	2.02	0.40
1:A:224:ARG:O	1:A:229:ILE:HB	2.22	0.40
1:A:341:ARG:HB3	1:A:342:THR:H	1.65	0.40
1:A:373:LEU:HD21	1:A:864:LEU:CD1	2.28	0.40
1:A:520:SER:C	1:A:522:GLU:N	2.78	0.40
1:A:564:HIS:CD2	1:A:564:HIS:H	2.39	0.40
1:A:615:THR:CG2	1:A:704:MET:HE2	2.51	0.40
1:A:644:THR:C	1:A:646:ALA:N	2.78	0.40
1:A:775:PHE:CE1	1:A:804:ASP:OD2	2.73	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles

5.3.1 Protein backbone

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	864/873 (99%)	628 (73%)	149 (17%)	87 (10%)	0 1

All (87) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	38	GLN
1	A	55	LYS
1	A	59	GLN
1	A	60	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	96	ARG
1	A	108	ASN
1	A	145	MET
1	A	197	PRO
1	A	212	PHE
1	A	278	GLY
1	A	279	GLU
1	A	291	ILE
1	A	337	ARG
1	A	395	ALA
1	A	419	GLU
1	A	423	ARG
1	A	472	GLY
1	A	473	GLU
1	A	494	ASP
1	A	501	SER
1	A	516	SER
1	A	518	SER
1	A	569	ALA
1	A	572	ILE
1	A	583	SER
1	A	694	GLU
1	A	732	LYS
1	A	734	SER
1	A	782	ALA
1	A	75	LEU
1	A	77	GLY
1	A	139	MET
1	A	151	HIS
1	A	162	GLU
1	A	165	VAL
1	A	180	ALA
1	A	225	ARG
1	A	226	MET
1	A	286	ARG
1	A	304	GLN
1	A	319	MET
1	A	329	GLY
1	A	470	GLY
1	A	486	GLY
1	A	492	GLU
1	A	499	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	565	MET
1	A	729	LYS
1	A	757	ALA
1	A	841	VAL
1	A	15	MET
1	A	72	LEU
1	A	73	GLU
1	A	80	PHE
1	A	475	LYS
1	A	485	LEU
1	A	502	THR
1	A	636	GLU
1	A	733	GLY
1	A	784	LYS
1	A	804	ASP
1	A	52	ASN
1	A	150	SER
1	A	204	LEU
1	A	421	GLY
1	A	711	LYS
1	A	712	LYS
1	A	871	LEU
1	A	53	SER
1	A	176	LEU
1	A	179	LEU
1	A	218	PRO
1	A	285	VAL
1	A	517	VAL
1	A	620	ASP
1	A	785	PHE
1	A	230	PRO
1	A	265	GLU
1	A	418	HIS
1	A	610	GLU
1	A	832	GLY
1	A	299	PRO
1	A	838	PRO
1	A	20	GLY
1	A	436	ILE
1	A	144	VAL
1	A	125	ASN

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	709/713 (99%)	526 (74%)	183 (26%)	0 2

All (183) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	5	VAL
1	A	14	SER
1	A	15	MET
1	A	16	ARG
1	A	26	LEU
1	A	38	GLN
1	A	45	GLU
1	A	47	CYS
1	A	57	ILE
1	A	63	ASP
1	A	66	PHE
1	A	69	ILE
1	A	72	LEU
1	A	74	GLU
1	A	76	ASN
1	A	78	LYS
1	A	79	LYS
1	A	98	SER
1	A	111	LEU
1	A	123	THR
1	A	131	ASP
1	A	135	ARG
1	A	138	GLN
1	A	147	VAL
1	A	149	LYS
1	A	150	SER
1	A	155	ILE
1	A	159	MET
1	A	165	VAL
1	A	166	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	167	PHE
1	A	168	ASP
1	A	169	THR
1	A	170	ASP
1	A	174	ASP
1	A	181	GLU
1	A	191	MET
1	A	194	GLU
1	A	199	GLU
1	A	213	ARG
1	A	214	SER
1	A	215	TRP
1	A	217	ASN
1	A	224	ARG
1	A	227	ASN
1	A	232	ASP
1	A	238	ASN
1	A	239	VAL
1	A	241	THR
1	A	244	PHE
1	A	246	ASN
1	A	249	GLU
1	A	251	SER
1	A	253	THR
1	A	274	ILE
1	A	277	GLN
1	A	280	ASP
1	A	285	VAL
1	A	287	THR
1	A	291	ILE
1	A	294	LEU
1	A	295	GLU
1	A	297	ASP
1	A	298	MET
1	A	300	ASP
1	A	303	LYS
1	A	304	GLN
1	A	307	ASP
1	A	310	MET
1	A	311	LYS
1	A	312	LEU
1	A	313	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	321	ASP
1	A	322	MET
1	A	325	THR
1	A	330	LYS
1	A	331	LEU
1	A	334	LEU
1	A	335	GLN
1	A	338	ASN
1	A	341	ARG
1	A	359	ILE
1	A	361	GLU
1	A	366	VAL
1	A	369	GLU
1	A	371	LYS
1	A	373	LEU
1	A	374	ASP
1	A	377	LEU
1	A	380	THR
1	A	386	LEU
1	A	391	VAL
1	A	394	SER
1	A	396	LEU
1	A	407	VAL
1	A	420	LYS
1	A	422	GLU
1	A	425	ILE
1	A	427	VAL
1	A	428	ARG
1	A	430	GLU
1	A	440	HIS
1	A	445	ILE
1	A	446	LEU
1	A	447	THR
1	A	448	VAL
1	A	458	VAL
1	A	459	VAL
1	A	463	MET
1	A	466	CYS
1	A	468	VAL
1	A	469	SER
1	A	473	GLU
1	A	475	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	476	ILE
1	A	477	ASN
1	A	478	GLU
1	A	485	LEU
1	A	488	HIS
1	A	489	THR
1	A	490	PHE
1	A	492	GLU
1	A	496	ILE
1	A	512	THR
1	A	513	GLN
1	A	516	SER
1	A	518	SER
1	A	520	SER
1	A	523	ARG
1	A	524	ILE
1	A	538	THR
1	A	542	THR
1	A	545	ASP
1	A	562	THR
1	A	570	ASP
1	A	574	LYS
1	A	578	MET
1	A	603	LYS
1	A	615	THR
1	A	616	VAL
1	A	633	GLU
1	A	636	GLU
1	A	641	MET
1	A	653	ASP
1	A	654	GLU
1	A	659	ASN
1	A	669	LEU
1	A	675	GLU
1	A	692	LYS
1	A	694	GLU
1	A	708	VAL
1	A	710	GLU
1	A	711	LYS
1	A	714	LEU
1	A	719	ASP
1	A	722	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	730	LYS
1	A	732	LYS
1	A	743	MET
1	A	752	THR
1	A	754	ASP
1	A	761	GLU
1	A	771	THR
1	A	773	MET
1	A	777	PHE
1	A	779	ARG
1	A	796	GLU
1	A	802	ARG
1	A	804	ASP
1	A	817	LYS
1	A	822	THR
1	A	827	LYS
1	A	834	HIS
1	A	837	ASP
1	A	841	VAL
1	A	846	LYS
1	A	847	VAL
1	A	853	SER
1	A	864	LEU
1	A	868	GLN
1	A	871	LEU
1	A	872	ASN
1	A	874	LYS

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (24) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	38	GLN
1	A	52	ASN
1	A	56	GLN
1	A	62	GLN
1	A	76	ASN
1	A	151	HIS
1	A	238	ASN
1	A	240	GLN
1	A	289	GLN
1	A	320	GLN
1	A	338	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	348	GLN
1	A	378	HIS
1	A	488	HIS
1	A	564	HIS
1	A	598	GLN
1	A	624	HIS
1	A	659	ASN
1	A	680	GLN
1	A	768	ASN
1	A	772	GLN
1	A	845	HIS
1	A	868	GLN
1	A	873	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](#)

2 ligands are modelled in this entry.

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	$\# Z > 2$	Counts	RMSZ	$\# Z > 2$
2	SO4	A	901	-	4,4,4	0.80	0	6,6,6	0.46	0

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	SO4	A	902	-	4,4,4	1.26	1 (25%)	6,6,6	0.20	0

All (1) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	A	902	SO4	O2-S	2.18	1.57	1.44

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

2 monomers are involved in 6 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
2	A	901	SO4	1	0
2	A	902	SO4	5	0

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	868/873 (99%)	0.50	42 (4%) 35 28	8, 28, 41, 53	0

All (42) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	76	ASN	4.5
1	A	501	SER	3.7
1	A	146	GLU	3.4
1	A	389	GLY	3.4
1	A	120	ALA	3.3
1	A	43	THR	3.3
1	A	252	GLY	3.2
1	A	165	VAL	3.2
1	A	17	ASN	3.1
1	A	86	PRO	2.8
1	A	186	VAL	2.8
1	A	404	ALA	2.8
1	A	733	GLY	2.8
1	A	170	ASP	2.7
1	A	82	ASP	2.7
1	A	194	GLU	2.7
1	A	764	SER	2.7
1	A	499	ASP	2.6
1	A	581	SER	2.5
1	A	245	GLY	2.5
1	A	583	SER	2.5
1	A	94	GLY	2.5
1	A	141	SER	2.4
1	A	246	ASN	2.4
1	A	142	ASP	2.3
1	A	644	THR	2.3
1	A	5	VAL	2.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	279	GLU	2.3
1	A	37	PRO	2.3
1	A	161	GLU	2.2
1	A	114	VAL	2.2
1	A	489	THR	2.2
1	A	160	LYS	2.2
1	A	147	VAL	2.1
1	A	859	VAL	2.1
1	A	202	ASP	2.1
1	A	331	LEU	2.1
1	A	500	GLY	2.1
1	A	734	SER	2.1
1	A	320	GLN	2.0
1	A	251	SER	2.0
1	A	604	ALA	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](#)

In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. The B-factors column lists the minimum, median, 95th percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled 'Q< 0.9' lists the number of atoms with occupancy less than 0.9.

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
2	SO4	A	902	5/5	0.88	0.17	59,61,63,64	0
2	SO4	A	901	5/5	0.94	0.08	45,45,54,56	5

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.