



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 6, 2026 – 02:55 AM UTC

PDB ID : 3KSS / pdb_00003kss
Title : Structure and Mechanism of the Heavy Metal Transporter CusA
Authors : Su, C.-C.
Deposited on : 2009-11-23
Resolution : 3.88 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

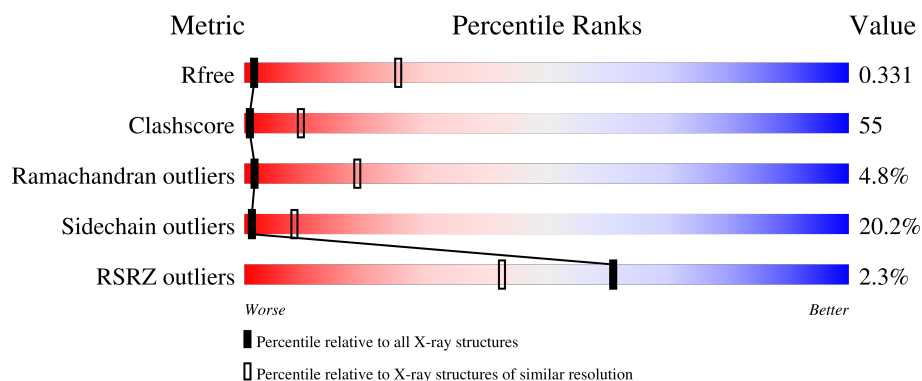
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.88 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	1186 (4.06-3.70)
Clashscore	190562	1012 (4.04-3.72)
Ramachandran outliers	187476	1167 (4.06-3.70)
Sidechain outliers	187428	1160 (4.06-3.70)
RSRZ outliers	180081	1185 (4.06-3.70)

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	1055	

2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 7803 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 Cation efflux system protein cusA.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	1015	Total	C	N	O	S	0	0	0
			7802	5047	1305	1414	36			

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-7	MET	-	expression tag	UNP P38054
A	-6	GLY	-	expression tag	UNP P38054
A	-5	HIS	-	expression tag	UNP P38054
A	-4	HIS	-	expression tag	UNP P38054
A	-3	HIS	-	expression tag	UNP P38054
A	-2	HIS	-	expression tag	UNP P38054
A	-1	HIS	-	expression tag	UNP P38054
A	0	HIS	-	expression tag	UNP P38054

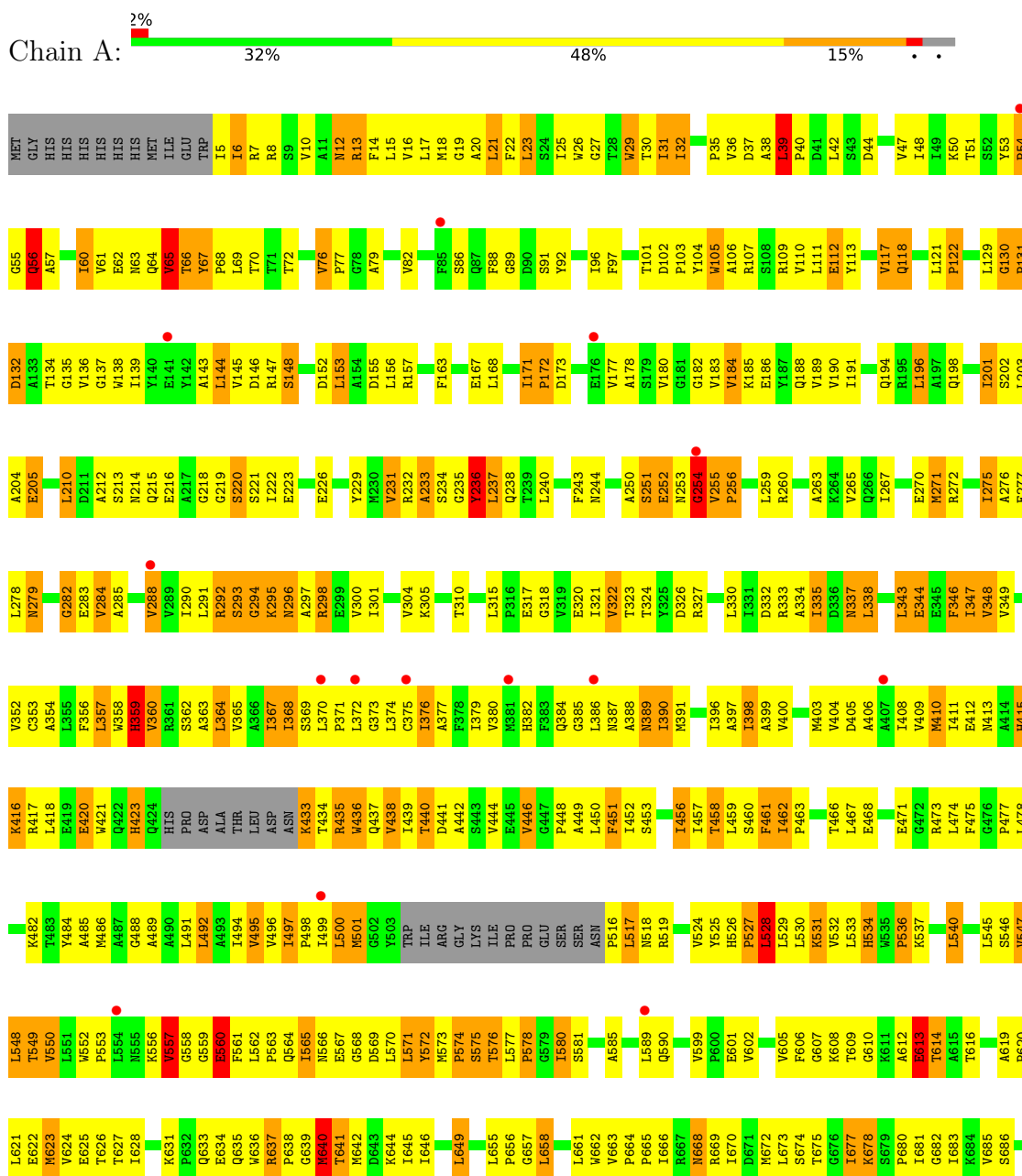
- Molecule 2 is COPPER (I) ION (CCD ID: CU1) (formula: Cu).

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
2	A	1	Total	Cu	0	0
			1	1		

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: Cation efflux system protein *cusA*



W1039	A977	H917	R847	S775	L690
LEU	V978	M918	V848	W776	
HIS	V979	G919	Q849		T693
ARG	R980	F920	L850	S779	M696
HIS	V981	H921		P780	
ARG	V982	L922	G660	Q781	Q699
VAL	P983	S923	Q861	A782	I700
ARG	K984	V924	F862	L783	E701
LYS	A985	A925	E863	R784	E702
	M986	T926	L864	Q785	E703
	T987	G927	L865	L786	
	V988	T928	E866	P787	
	A989	G929	R867	I788	T706
	V990	F930		L789	V707
	I991	A931	H870	T790	P708
	T992	A932	K871	P791	
		L933	L872	M792	E716
		A934	K873	K793	R717
	L995	G935	L874	Q794	L718
	L996	V936	H875	Q795	E719
	P997	A937	V876	I796	
	I998	A938	P877		V726
	L999	E939	H878	D800	E727
		F940	T879		I728
	T1002	G941	L880	I804	N729
	G1003	V942	H881	K805	E730
	A1004	V943	I882		E731
	G1005	M944	I883	G809	K732
	S1006	L945	F884	P810	
	E1007	M946	V885	S811	R735
	V1008	Y947	L886	N812	Y736
	M1009	L948	L887	L813	Q737
	S1010	R949	Y888	K814	
	I1011	H950	L889	T815	V740
	I1012	A1013	A890	E816	
	A1014	I952	F891	N817	L745
	P1015	E953	R892	A818	F746
	M1016	A854	R893	R819	V747
	I1017	V955	V894	P820	T748
	G1018	P956	G895	T821	
	G1019	S957	E896	S822	A754
	M1020	L958	A897	W823	M755
	T1021	N959	L898	I824	V756
	T1022	N960	L899	Y825	G757
	A1023	P961	I900	I826	E758
	P1024	Q962			T759
	L1025	T963	S903	R829	V760
	L1026	F964	V904	D830	E761
	L1027	S965	P905	R831	G762
	S1027	E966	F906	D832	I763
	L1028	Q967	A907	H833	A764
	F1029	K968	L908		R765
	I1030	L969	V909	W837	Y766
	T1031	D970	G910	H838	P767
	P1032	E971	G911		I768
	A1033	A972	I912	K842	N769
	A1034	L973	W913	K843	L770
	Y1035	Y974	L914	I844	
	K1036	H975	L915	A845	P773
	L1037	G976		E846	Q774
	M1038				

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	H 3 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	180.36Å 180.36Å 287.98Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	35.28 – 3.88 35.28 – 3.88	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	92.7 (35.28-3.88) 98.2 (35.28-3.88)	Depositor EDS
R_{merge}	0.09	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	2.89 (at 3.87Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX	Depositor
R, R_{free}	0.260 , 0.325 0.268 , 0.331	Depositor DCC
R_{free} test set	849 reflections (5.09%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	143.3	Xtriage
Anisotropy	0.240	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.27 , 153.2	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.47$, $\langle L^2 \rangle = 0.30$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.90	EDS
Total number of atoms	7803	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	193.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.08% 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: CU1

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	0.46	3/7960 (0.0%)	0.99	30/10834 (0.3%)

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

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

All (3) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	233	ALA	C-O	16.29	1.45	1.23
1	A	236	TYR	CA-C	-5.56	1.46	1.52
1	A	256	PRO	CA-C	-5.53	1.44	1.52

All (30) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	255	VAL	N-CA-CB	-26.37	82.86	111.87
1	A	254	GLY	N-CA-C	23.31	168.42	113.18
1	A	255	VAL	C-N-CD	-12.46	73.93	125.00
1	A	255	VAL	N-CA-C	12.15	122.74	109.01
1	A	254	GLY	CA-C-N	10.67	138.71	122.17
1	A	254	GLY	C-N-CA	10.67	138.71	122.17
1	A	575	SER	N-CA-C	-10.41	94.94	110.24
1	A	761	GLU	N-CA-C	-9.88	93.69	109.59
1	A	235	GLY	N-CA-C	-9.57	90.50	113.18
1	A	282	GLY	N-CA-C	8.17	120.37	112.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	251	SER	O-C-N	7.62	131.84	122.92
1	A	235	GLY	CA-C-N	-7.15	112.91	122.99
1	A	235	GLY	C-N-CA	-7.15	112.91	122.99
1	A	255	VAL	CA-C-N	-6.60	111.59	119.84
1	A	255	VAL	C-N-CA	-6.60	111.59	119.84
1	A	256	PRO	CA-C-N	-6.42	112.80	121.66
1	A	256	PRO	C-N-CA	-6.42	112.80	121.66
1	A	250	ALA	CA-C-N	-6.34	112.03	122.11
1	A	250	ALA	C-N-CA	-6.34	112.03	122.11
1	A	809	GLY	CA-C-N	6.16	126.10	119.76
1	A	809	GLY	C-N-CA	6.16	126.10	119.76
1	A	576	THR	N-CA-C	-6.07	100.12	109.52
1	A	171	ILE	CA-C-N	5.82	127.12	119.84
1	A	171	ILE	C-N-CA	5.82	127.12	119.84
1	A	528	LEU	N-CA-C	5.63	117.42	111.28
1	A	255	VAL	O-C-N	-5.56	117.83	121.72
1	A	527	PRO	N-CA-C	-5.53	105.85	113.53
1	A	954	ALA	CA-C-O	5.43	121.09	117.94
1	A	65	VAL	N-CA-C	5.38	116.26	111.90
1	A	954	ALA	N-CA-C	5.09	112.96	108.78

There are no chirality outliers.

All (1) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	254	GLY	Peptide

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	7802	0	8064	870	0
2	A	1	0	0	0	0
All	All	7803	0	8064	870	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 55.

All (870) 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:530:LEU:CA	1:A:533:LEU:HD12	1.41	1.51
1:A:529:LEU:HD12	1:A:530:LEU:N	1.28	1.43
1:A:677:ILE:HG22	1:A:825:TYR:CE1	1.53	1.43
1:A:530:LEU:HA	1:A:533:LEU:CD1	1.48	1.41
1:A:572:TYR:CE1	1:A:574:PRO:HD3	1.66	1.29
1:A:529:LEU:CD1	1:A:530:LEU:N	2.06	1.19
1:A:529:LEU:CD1	1:A:530:LEU:H	1.56	1.17
1:A:526:HIS:CE1	1:A:978:VAL:HB	1.78	1.17
1:A:531:LYS:NZ	1:A:531:LYS:HB2	1.48	1.15
1:A:62:GLU:HA	1:A:66:THR:HG23	1.28	1.10
1:A:292:ARG:HG3	1:A:292:ARG:HH21	1.04	1.09
1:A:1023:ALA:HA	1:A:1026:LEU:HD12	1.34	1.09
1:A:677:ILE:CG2	1:A:825:TYR:CE1	2.35	1.08
1:A:658:LEU:N	1:A:658:LEU:HD23	1.68	1.08
1:A:529:LEU:O	1:A:532:VAL:HG22	1.53	1.07
1:A:410:MET:HE3	1:A:411:ILE:HA	1.34	1.07
1:A:412:GLU:HG2	1:A:983:PRO:HG3	1.36	1.05
1:A:417:ARG:HE	1:A:442:ALA:HB1	1.18	1.03
1:A:572:TYR:CD1	1:A:574:PRO:HD3	1.93	1.02
1:A:980:ARG:HH21	1:A:984:LYS:HG2	1.22	1.02
1:A:995:LEU:HD12	1:A:1017:ILE:HG13	1.42	1.01
1:A:526:HIS:HE1	1:A:978:VAL:HB	1.21	1.00
1:A:572:TYR:HE1	1:A:574:PRO:HD3	1.18	1.00
1:A:572:TYR:HE1	1:A:574:PRO:CD	1.75	1.00
1:A:572:TYR:CE1	1:A:574:PRO:CD	2.44	0.99
1:A:529:LEU:O	1:A:533:LEU:HG	1.62	0.98
1:A:657:GLY:C	1:A:658:LEU:HD23	1.86	0.98
1:A:876:VAL:HG23	1:A:877:PRO:HD3	1.46	0.98
1:A:948:LEU:HD23	1:A:1031:ILE:HG23	1.48	0.95
1:A:917:TRP:CE3	1:A:918:MET:HG2	2.03	0.94
1:A:531:LYS:NZ	1:A:531:LYS:CB	2.30	0.94
1:A:960:ASN:H	1:A:961:PRO:HD3	1.34	0.91
1:A:531:LYS:HB2	1:A:531:LYS:HZ3	1.10	0.91
1:A:440:THR:HG23	1:A:501:MET:HE2	1.53	0.90
1:A:216:GLU:OE1	1:A:236:TYR:HE1	1.52	0.89
1:A:63:ASN:HA	1:A:67:TYR:HD2	1.37	0.89
1:A:758:GLU:HG2	1:A:767:PRO:HA	1.55	0.89
1:A:410:MET:SD	1:A:500:LEU:HD13	2.11	0.89
1:A:497:ILE:HA	1:A:500:LEU:CD1	2.03	0.88
1:A:921:HIS:O	1:A:922:LEU:HB3	1.73	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1023:ALA:O	1:A:1026:LEU:HD13	1.74	0.88
1:A:292:ARG:HG3	1:A:292:ARG:NH2	1.84	0.87
1:A:758:GLU:OE1	1:A:765:ARG:HG2	1.74	0.87
1:A:212:ALA:HA	1:A:215:GLN:HE22	1.39	0.87
1:A:550:VAL:HG22	1:A:912:ILE:HD12	1.57	0.85
1:A:525:TYR:C	1:A:527:PRO:HD2	2.02	0.85
1:A:375:CYS:O	1:A:379:ILE:HG13	1.76	0.85
1:A:677:ILE:HG22	1:A:825:TYR:HE1	0.96	0.85
1:A:462:ILE:HG23	1:A:463:PRO:HD3	1.58	0.84
1:A:529:LEU:O	1:A:533:LEU:CD1	2.25	0.84
1:A:35:PRO:HA	1:A:296:ASN:HB3	1.57	0.84
1:A:607:GLY:HA2	1:A:626:THR:HG22	1.59	0.84
1:A:458:THR:HG22	1:A:486:MET:HB3	1.60	0.84
1:A:762:GLY:O	1:A:763:ILE:HG22	1.78	0.84
1:A:763:ILE:HG12	1:A:763:ILE:O	1.76	0.83
1:A:496:VAL:HA	1:A:499:ILE:HD12	1.59	0.83
1:A:277:GLU:HG3	1:A:282:GLY:HA2	1.61	0.82
1:A:572:TYR:HE1	1:A:574:PRO:CG	1.92	0.82
1:A:26:TRP:NE1	1:A:379:ILE:HG12	1.95	0.82
1:A:529:LEU:O	1:A:533:LEU:CG	2.28	0.81
1:A:376:ILE:HD13	1:A:488:GLY:HA3	1.63	0.81
1:A:360:VAL:HG12	1:A:362:SER:H	1.46	0.81
1:A:991:ILE:HG12	1:A:1020:MET:HE2	1.61	0.81
1:A:526:HIS:O	1:A:530:LEU:HD13	1.79	0.81
1:A:367:ILE:O	1:A:371:PRO:HD2	1.81	0.81
1:A:370:LEU:HB2	1:A:371:PRO:HD3	1.63	0.81
1:A:960:ASN:H	1:A:961:PRO:CD	1.93	0.81
1:A:292:ARG:HH21	1:A:292:ARG:CG	1.93	0.80
1:A:668:ASN:C	1:A:668:ASN:HD22	1.88	0.80
1:A:762:GLY:O	1:A:763:ILE:CG2	2.30	0.80
1:A:531:LYS:HB2	1:A:531:LYS:HZ2	1.43	0.80
1:A:763:ILE:O	1:A:763:ILE:CG1	2.30	0.80
1:A:459:LEU:O	1:A:462:ILE:HG22	1.81	0.80
1:A:526:HIS:O	1:A:529:LEU:CD1	2.30	0.80
1:A:530:LEU:N	1:A:530:LEU:HD12	1.95	0.80
1:A:530:LEU:N	1:A:533:LEU:HD12	1.96	0.80
1:A:925:ALA:HB1	1:A:1012:ILE:HG22	1.61	0.80
1:A:26:TRP:HE1	1:A:379:ILE:HG12	1.46	0.79
1:A:833:MET:HE2	1:A:833:MET:H	1.46	0.79
1:A:553:PRO:HA	1:A:916:TRP:CZ2	2.17	0.79
1:A:528:LEU:O	1:A:532:VAL:HG13	1.82	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:416:LYS:HD3	1:A:417:ARG:HD3	1.64	0.79
1:A:906:PHE:HD2	1:A:907:ALA:N	1.80	0.79
1:A:497:ILE:HA	1:A:500:LEU:HD12	1.62	0.79
1:A:525:TYR:CE1	1:A:977:ALA:HB1	2.18	0.79
1:A:658:LEU:N	1:A:658:LEU:CD2	2.45	0.78
1:A:178:ALA:HB3	1:A:288:VAL:HG13	1.65	0.78
1:A:251:SER:OG	1:A:252:GLU:HG2	1.84	0.78
1:A:452:ILE:HD11	1:A:889:LEU:HD11	1.63	0.78
1:A:547:VAL:O	1:A:550:VAL:HG12	1.83	0.78
1:A:1023:ALA:HA	1:A:1026:LEU:CD1	2.14	0.78
1:A:531:LYS:CB	1:A:531:LYS:HZ3	1.95	0.77
1:A:572:TYR:C	1:A:572:TYR:HD1	1.92	0.77
1:A:536:PRO:HB3	1:A:1037:LEU:HD21	1.67	0.77
1:A:529:LEU:C	1:A:533:LEU:CD1	2.58	0.76
1:A:995:LEU:CD1	1:A:1016:MET:HB3	2.15	0.76
1:A:526:HIS:O	1:A:529:LEU:HD11	1.84	0.76
1:A:525:TYR:CE2	1:A:1028:LEU:HD22	2.20	0.76
1:A:933:LEU:HD11	1:A:1019:GLY:HA3	1.67	0.76
1:A:1033:ALA:HA	1:A:1036:LYS:HE2	1.67	0.76
1:A:614:THR:HG22	1:A:616:THR:H	1.51	0.75
1:A:144:LEU:HD12	1:A:156:LEU:HD22	1.69	0.75
1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HD2	1.51	0.75
1:A:995:LEU:HD13	1:A:1016:MET:HB3	1.66	0.75
1:A:730:ARG:HD3	1:A:731:GLU:N	2.01	0.75
1:A:404:VAL:HG11	1:A:990:VAL:HG21	1.68	0.75
1:A:922:LEU:HA	1:A:926:THR:HG21	1.69	0.75
1:A:948:LEU:HD12	1:A:949:ARG:N	2.02	0.75
1:A:530:LEU:CA	1:A:533:LEU:CD1	2.30	0.75
1:A:1002:THR:HG21	1:A:1006:SER:HB2	1.67	0.74
1:A:27:GLY:O	1:A:31:ILE:HG22	1.85	0.74
1:A:254:GLY:C	1:A:255:VAL:HG13	2.12	0.74
1:A:980:ARG:C	1:A:983:PRO:HD2	2.13	0.74
1:A:216:GLU:OE1	1:A:236:TYR:CE1	2.39	0.74
1:A:572:TYR:CD1	1:A:572:TYR:C	2.66	0.74
1:A:412:GLU:CG	1:A:983:PRO:HG3	2.16	0.73
1:A:417:ARG:HG2	1:A:442:ALA:HB3	1.70	0.73
1:A:943:VAL:HG11	1:A:984:LYS:NZ	2.03	0.73
1:A:550:VAL:CG2	1:A:912:ILE:HD12	2.17	0.73
1:A:908:LEU:HD23	1:A:933:LEU:HD22	1.69	0.73
1:A:914:LEU:O	1:A:918:MET:HG3	1.89	0.73
1:A:930:PHE:CD1	1:A:1015:PRO:HB3	2.24	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:847:LYS:HE3	1:A:847:LYS:HA	1.71	0.73
1:A:18:MET:HA	1:A:21:LEU:HD13	1.69	0.73
1:A:410:MET:HE3	1:A:411:ILE:CA	2.18	0.72
1:A:37:ASP:O	1:A:389:ASN:HA	1.89	0.72
1:A:254:GLY:O	1:A:255:VAL:HG13	1.88	0.72
1:A:216:GLU:HG3	1:A:233:ALA:O	1.89	0.72
1:A:889:LEU:HD23	1:A:890:ALA:N	2.03	0.72
1:A:76:VAL:HG12	1:A:79:ALA:HB2	1.71	0.72
1:A:106:ALA:O	1:A:110:VAL:HG23	1.90	0.72
1:A:278:LEU:HD11	1:A:322:VAL:HG21	1.72	0.72
1:A:398:ILE:HG21	1:A:1012:ILE:HD11	1.72	0.72
1:A:529:LEU:O	1:A:532:VAL:CG2	2.33	0.71
1:A:550:VAL:HG21	1:A:909:VAL:HA	1.72	0.71
1:A:452:ILE:HD13	1:A:889:LEU:HD21	1.71	0.71
1:A:959:ASN:HB2	1:A:968:LYS:HG3	1.72	0.71
1:A:62:GLU:HA	1:A:66:THR:CG2	2.15	0.71
1:A:72:THR:HG22	1:A:113:TYR:HB3	1.72	0.71
1:A:620:PRO:HD2	1:A:623:MET:HG3	1.71	0.71
1:A:356:PHE:CD2	1:A:986:MET:HB2	2.25	0.71
1:A:433:LYS:HB2	1:A:436:TRP:CD1	2.25	0.71
1:A:461:PHE:HZ	1:A:928:THR:HG23	1.55	0.71
1:A:525:TYR:HE1	1:A:977:ALA:HB1	1.54	0.71
1:A:251:SER:OG	1:A:252:GLU:N	2.23	0.71
1:A:944:MET:CG	1:A:1031:ILE:HG13	2.21	0.71
1:A:216:GLU:HG3	1:A:234:SER:HA	1.72	0.71
1:A:61:VAL:HG21	1:A:89:GLY:H	1.56	0.70
1:A:530:LEU:HA	1:A:533:LEU:HD12	0.72	0.70
1:A:569:ASP:O	1:A:570:LEU:HD23	1.91	0.70
1:A:1014:ALA:HB3	1:A:1015:PRO:HD3	1.72	0.70
1:A:546:SER:O	1:A:549:THR:HG22	1.92	0.70
1:A:517:LEU:H	1:A:517:LEU:HD22	1.54	0.70
1:A:370:LEU:HB2	1:A:371:PRO:CD	2.22	0.70
1:A:572:TYR:CE1	1:A:574:PRO:CG	2.72	0.70
1:A:60:ILE:O	1:A:64:GLN:HB2	1.92	0.70
1:A:145:VAL:HG12	1:A:284:VAL:HG21	1.71	0.70
1:A:564:GLN:NE2	1:A:664:PRO:HD3	2.06	0.70
1:A:730:ARG:HD3	1:A:731:GLU:H	1.55	0.70
1:A:619:ALA:HB1	1:A:623:MET:CB	2.22	0.69
1:A:240:LEU:HD22	1:A:265:VAL:CG1	2.22	0.69
1:A:214:ASN:C	1:A:215:GLN:HG3	2.16	0.69
1:A:462:ILE:HD11	1:A:875:MET:SD	2.32	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:899:LEU:HD11	1:A:1030:ILE:HD12	1.75	0.69
1:A:6:ILE:HD11	1:A:497:ILE:HG13	1.74	0.69
1:A:577:LEU:HD23	1:A:578:PRO:HD2	1.75	0.69
1:A:147:ARG:HD3	1:A:147:ARG:H	1.58	0.68
1:A:380:VAL:HG21	1:A:484:TYR:CD2	2.28	0.68
1:A:980:ARG:NH2	1:A:984:LYS:HG2	2.03	0.68
1:A:876:VAL:HA	1:A:879:THR:HG22	1.75	0.68
1:A:914:LEU:HG	1:A:918:MET:HE3	1.76	0.68
1:A:526:HIS:O	1:A:529:LEU:HG	1.94	0.68
1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD2	1.76	0.68
1:A:553:PRO:CB	1:A:912:ILE:HD11	2.24	0.68
1:A:932:ALA:HB3	1:A:1016:MET:HE1	1.76	0.68
1:A:121:LEU:HB2	1:A:122:PRO:CD	2.24	0.68
1:A:927:GLY:O	1:A:931:ILE:HG12	1.94	0.68
1:A:216:GLU:CG	1:A:233:ALA:O	2.42	0.67
1:A:887:LEU:HD22	1:A:900:ILE:HG21	1.75	0.67
1:A:906:PHE:HD2	1:A:907:ALA:H	1.39	0.67
1:A:76:VAL:HG23	1:A:113:TYR:HD1	1.59	0.67
1:A:637:ARG:HG2	1:A:640:MET:HG3	1.75	0.67
1:A:572:TYR:CE1	1:A:574:PRO:HG3	2.30	0.67
1:A:118:GLN:HE21	1:A:118:GLN:HA	1.58	0.67
1:A:571:LEU:HD22	1:A:626:THR:O	1.95	0.67
1:A:823:TRP:CD1	1:A:823:TRP:N	2.60	0.67
1:A:912:ILE:HA	1:A:915:LEU:HG	1.77	0.67
1:A:398:ILE:HD11	1:A:482:LYS:HD2	1.76	0.67
1:A:943:VAL:HG11	1:A:984:LYS:HZ1	1.59	0.67
1:A:18:MET:HA	1:A:21:LEU:CD1	2.25	0.66
1:A:66:THR:HG21	1:A:86:SER:HB3	1.76	0.66
1:A:365:VAL:O	1:A:368:ILE:HG22	1.94	0.66
1:A:530:LEU:HA	1:A:533:LEU:HD13	1.72	0.66
1:A:569:ASP:HB3	1:A:628:ILE:O	1.94	0.66
1:A:762:GLY:C	1:A:763:ILE:HG22	2.20	0.66
1:A:65:VAL:C	1:A:68:PRO:HD2	2.20	0.66
1:A:180:VAL:HG22	1:A:276:ALA:HB2	1.75	0.66
1:A:903:SER:C	1:A:905:PRO:HD2	2.20	0.66
1:A:1026:LEU:C	1:A:1026:LEU:HD22	2.20	0.66
1:A:441:ASP:O	1:A:444:VAL:HB	1.96	0.66
1:A:221:SER:HA	1:A:229:TYR:O	1.96	0.66
1:A:518:ASN:HD22	1:A:982:ARG:HG2	1.60	0.66
1:A:526:HIS:O	1:A:529:LEU:CG	2.45	0.65
1:A:143:ALA:HB2	1:A:606:PHE:HE2	1.61	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:790:THR:OG1	1:A:794:GLN:HB2	1.96	0.65
1:A:991:ILE:HG21	1:A:1020:MET:HG2	1.78	0.65
1:A:468:GLU:O	1:A:864:LEU:HD21	1.95	0.65
1:A:138:TRP:HE1	1:A:616:THR:HG21	1.61	0.65
1:A:404:VAL:HG12	1:A:408:ILE:HG12	1.78	0.65
1:A:410:MET:HG3	1:A:411:ILE:N	2.12	0.65
1:A:189:VAL:HG22	1:A:265:VAL:HG22	1.79	0.65
1:A:399:ALA:HB2	1:A:482:LYS:HE3	1.79	0.65
1:A:891:PHE:HB2	1:A:896:GLU:OE2	1.96	0.65
1:A:944:MET:HG3	1:A:1031:ILE:HG13	1.78	0.65
1:A:610:GLY:HA2	1:A:620:PRO:O	1.97	0.64
1:A:433:LYS:HB2	1:A:436:TRP:NE1	2.13	0.64
1:A:572:TYR:HD1	1:A:573:MET:N	1.94	0.64
1:A:686:SER:HA	1:A:821:THR:HG22	1.80	0.64
1:A:529:LEU:C	1:A:533:LEU:HD11	2.22	0.64
1:A:833:MET:H	1:A:833:MET:CE	2.09	0.64
1:A:948:LEU:CD2	1:A:1031:ILE:HG23	2.26	0.64
1:A:36:VAL:HA	1:A:388:ALA:HB3	1.80	0.64
1:A:912:ILE:HD13	1:A:912:ILE:C	2.23	0.64
1:A:964:PHE:C	1:A:964:PHE:CD2	2.76	0.64
1:A:980:ARG:HD2	1:A:1028:LEU:HD21	1.80	0.64
1:A:18:MET:O	1:A:21:LEU:HD22	1.97	0.63
1:A:758:GLU:HB2	1:A:765:ARG:NE	2.13	0.63
1:A:812:MET:HG2	1:A:813:LEU:N	2.12	0.63
1:A:40:PRO:HG3	1:A:389:ASN:ND2	2.13	0.63
1:A:56:GLN:HA	1:A:56:GLN:NE2	2.14	0.63
1:A:213:SER:O	1:A:237:LEU:HD13	1.99	0.63
1:A:5:ILE:HA	1:A:8:ARG:CZ	2.29	0.63
1:A:410:MET:HE3	1:A:411:ILE:HG12	1.81	0.63
1:A:987:THR:O	1:A:991:ILE:HD13	1.98	0.63
1:A:526:HIS:N	1:A:527:PRO:HD2	2.14	0.63
1:A:599:VAL:HG12	1:A:601:GLU:H	1.64	0.63
1:A:888:TYR:O	1:A:889:LEU:HB3	1.98	0.63
1:A:891:PHE:O	1:A:892:ARG:HB3	1.99	0.62
1:A:324:THR:HG21	1:A:606:PHE:HB2	1.81	0.62
1:A:417:ARG:NE	1:A:442:ALA:HB1	2.03	0.62
1:A:363:ALA:O	1:A:367:ILE:HG22	1.99	0.62
1:A:530:LEU:N	1:A:533:LEU:CD1	2.59	0.62
1:A:47:VAL:HG21	1:A:110:VAL:HG21	1.80	0.62
1:A:297:ALA:O	1:A:301:ILE:HG13	1.99	0.62
1:A:412:GLU:HG2	1:A:983:PRO:CG	2.22	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:368:ILE:HD13	1:A:368:ILE:O	2.00	0.62
1:A:530:LEU:C	1:A:533:LEU:HD12	2.24	0.62
1:A:991:ILE:O	1:A:995:LEU:HG	2.00	0.62
1:A:536:PRO:CB	1:A:1037:LEU:HD21	2.29	0.61
1:A:991:ILE:CG2	1:A:1020:MET:HG2	2.30	0.61
1:A:145:VAL:HG12	1:A:284:VAL:HG11	1.81	0.61
1:A:940:PHE:CD1	1:A:984:LYS:HE3	2.36	0.61
1:A:212:ALA:HA	1:A:215:GLN:NE2	2.12	0.61
1:A:995:LEU:HD12	1:A:1017:ILE:CG1	2.25	0.61
1:A:145:VAL:HG11	1:A:278:LEU:HD13	1.83	0.61
1:A:185:LYS:HE3	1:A:267:ILE:HD13	1.82	0.61
1:A:324:THR:HG21	1:A:606:PHE:CD2	2.36	0.61
1:A:405:ASP:OD2	1:A:406:ALA:N	2.34	0.61
1:A:900:ILE:O	1:A:903:SER:HB3	2.01	0.61
1:A:601:GLU:HA	1:A:631:LYS:HZ1	1.66	0.60
1:A:637:ARG:HG3	1:A:638:PRO:HD2	1.83	0.60
1:A:758:GLU:OE1	1:A:765:ARG:CG	2.47	0.60
1:A:369:SER:O	1:A:492:LEU:HD11	1.99	0.60
1:A:53:TYR:HD1	1:A:54:PRO:HD2	1.64	0.60
1:A:277:GLU:CG	1:A:282:GLY:HA2	2.30	0.60
1:A:272:ARG:HH11	1:A:275:ILE:HG23	1.65	0.60
1:A:466:THR:OG1	1:A:875:MET:HG3	2.02	0.60
1:A:968:LYS:HA	1:A:971:GLU:HG2	1.83	0.60
1:A:173:ASP:CG	1:A:295:LYS:HD3	2.26	0.60
1:A:202:SER:N	1:A:205:GLU:HG3	2.16	0.60
1:A:453:SER:O	1:A:457:ILE:HG13	2.02	0.60
1:A:459:LEU:HD23	1:A:882:ILE:HG12	1.84	0.60
1:A:529:LEU:C	1:A:533:LEU:HD12	2.25	0.60
1:A:564:GLN:HE21	1:A:664:PRO:HD3	1.66	0.60
1:A:76:VAL:HG23	1:A:113:TYR:CD1	2.36	0.60
1:A:184:VAL:HB	1:A:270:GLU:HB3	1.84	0.60
1:A:631:LYS:HZ3	1:A:631:LYS:HB2	1.67	0.60
1:A:240:LEU:HD22	1:A:265:VAL:HG12	1.83	0.59
1:A:433:LYS:HD3	1:A:436:TRP:NE1	2.16	0.59
1:A:5:ILE:HA	1:A:8:ARG:NH1	2.16	0.59
1:A:14:PHE:O	1:A:18:MET:HG2	2.02	0.59
1:A:729:ASN:HB3	1:A:732:LYS:HG3	1.83	0.59
1:A:139:ILE:HD11	1:A:291:LEU:HB2	1.82	0.59
1:A:191:ILE:HD11	1:A:770:LEU:HD11	1.85	0.59
1:A:756:VAL:HG22	1:A:756:VAL:O	2.02	0.59
1:A:900:ILE:HA	1:A:903:SER:HB3	1.84	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:570:LEU:HD11	1:A:646:ILE:HD11	1.82	0.59
1:A:1026:LEU:HD22	1:A:1027:SER:N	2.17	0.59
1:A:105:TRP:CD1	1:A:106:ALA:N	2.70	0.59
1:A:435:ARG:HD3	1:A:436:TRP:N	2.17	0.59
1:A:56:GLN:HB3	1:A:60:ILE:HD11	1.84	0.59
1:A:453:SER:OG	1:A:939:GLU:HB2	2.03	0.59
1:A:631:LYS:HB2	1:A:631:LYS:NZ	2.18	0.59
1:A:759:THR:HG22	1:A:768:ILE:HD11	1.84	0.58
1:A:960:ASN:N	1:A:961:PRO:CD	2.64	0.58
1:A:343:LEU:O	1:A:346:PHE:HD1	1.87	0.58
1:A:438:VAL:HA	1:A:441:ASP:OD2	2.03	0.58
1:A:526:HIS:NE2	1:A:978:VAL:HB	2.15	0.58
1:A:497:ILE:HA	1:A:500:LEU:HD11	1.85	0.58
1:A:891:PHE:CE2	1:A:946:MET:HG2	2.38	0.58
1:A:893:ARG:HG3	1:A:894:VAL:N	2.17	0.58
1:A:529:LEU:CD1	1:A:529:LEU:C	2.76	0.58
1:A:876:VAL:CG2	1:A:877:PRO:HD3	2.28	0.58
1:A:210:LEU:HD23	1:A:756:VAL:HG11	1.86	0.58
1:A:951:ALA:HB2	1:A:975:HIS:HE1	1.69	0.58
1:A:48:ILE:HD12	1:A:48:ILE:H	1.69	0.58
1:A:449:ALA:O	1:A:452:ILE:HG22	2.04	0.58
1:A:829:ARG:HA	1:A:829:ARG:NE	2.17	0.58
1:A:917:TRP:CZ3	1:A:918:MET:HE2	2.39	0.58
1:A:559:GLY:O	1:A:560:GLU:HB2	2.02	0.57
1:A:460:SER:O	1:A:463:PRO:HD2	2.04	0.57
1:A:829:ARG:HA	1:A:829:ARG:HE	1.68	0.57
1:A:870:HIS:ND1	1:A:871:LYS:HD2	2.18	0.57
1:A:451:PHE:HD1	1:A:494:ILE:CG1	2.18	0.57
1:A:891:PHE:HE2	1:A:946:MET:HG2	1.69	0.57
1:A:55:GLY:O	1:A:56:GLN:HG2	2.03	0.57
1:A:229:TYR:CD1	1:A:229:TYR:N	2.71	0.57
1:A:373:GLY:HA3	1:A:492:LEU:HD12	1.87	0.57
1:A:645:ILE:HG22	1:A:649:LEU:CD2	2.35	0.57
1:A:917:TRP:HZ3	1:A:918:MET:HE2	1.70	0.57
1:A:601:GLU:HA	1:A:631:LYS:NZ	2.20	0.57
1:A:556:LYS:O	1:A:557:VAL:HG22	2.04	0.57
1:A:877:PRO:O	1:A:881:MET:HG2	2.03	0.57
1:A:51:THR:HG21	1:A:65:VAL:HG21	1.86	0.57
1:A:451:PHE:C	1:A:451:PHE:CD2	2.83	0.57
1:A:202:SER:H	1:A:205:GLU:HG3	1.70	0.57
1:A:461:PHE:CZ	1:A:928:THR:HG23	2.38	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:889:LEU:HD23	1:A:890:ALA:H	1.69	0.57
1:A:214:ASN:HB2	1:A:237:LEU:HD22	1.86	0.56
1:A:410:MET:HE2	1:A:500:LEU:HD22	1.85	0.56
1:A:894:VAL:HG22	1:A:898:LEU:HD23	1.87	0.56
1:A:933:LEU:CD1	1:A:1019:GLY:HA3	2.35	0.56
1:A:357:LEU:HG	1:A:415:HIS:CD2	2.40	0.56
1:A:525:TYR:CZ	1:A:1028:LEU:HD22	2.40	0.56
1:A:574:PRO:O	1:A:575:SER:C	2.44	0.56
1:A:655:LEU:HB3	1:A:656:PRO:HD2	1.87	0.56
1:A:951:ALA:C	1:A:956:PRO:HG2	2.30	0.56
1:A:191:ILE:O	1:A:773:PRO:HD3	2.05	0.56
1:A:301:ILE:HG21	1:A:326:ASP:OD1	2.04	0.56
1:A:433:LYS:HB2	1:A:436:TRP:HE1	1.69	0.56
1:A:553:PRO:HB2	1:A:912:ILE:HD11	1.87	0.56
1:A:923:SER:OG	1:A:925:ALA:HB3	2.05	0.56
1:A:14:PHE:HB2	1:A:18:MET:HE3	1.87	0.56
1:A:599:VAL:O	1:A:602:VAL:HG22	2.05	0.56
1:A:696:MET:O	1:A:699:GLN:HG3	2.05	0.56
1:A:878:MET:O	1:A:882:ILE:HG22	2.05	0.56
1:A:26:TRP:CD1	1:A:26:TRP:C	2.83	0.56
1:A:50:LYS:HD2	1:A:92:TYR:CE2	2.40	0.56
1:A:649:LEU:HB3	1:A:662:TRP:CZ2	2.41	0.56
1:A:728:ILE:HG21	1:A:740:VAL:HG12	1.86	0.56
1:A:729:ASN:CG	1:A:732:LYS:HG3	2.30	0.56
1:A:685:VAL:HG21	1:A:696:MET:HG3	1.88	0.56
1:A:416:LYS:CD	1:A:417:ARG:HD3	2.35	0.56
1:A:955:VAL:N	1:A:956:PRO:HD2	2.21	0.56
1:A:537:LYS:HD2	1:A:540:LEU:HD23	1.88	0.56
1:A:526:HIS:N	1:A:527:PRO:CD	2.68	0.55
1:A:534:HIS:O	1:A:536:PRO:HD3	2.06	0.55
1:A:716:GLU:C	1:A:718:LEU:H	2.14	0.55
1:A:494:ILE:O	1:A:497:ILE:HG12	2.06	0.55
1:A:930:PHE:CE1	1:A:1015:PRO:HB3	2.42	0.55
1:A:944:MET:HE1	1:A:976:GLY:O	2.05	0.55
1:A:29:TRP:CD1	1:A:30:THR:HG1	2.24	0.55
1:A:529:LEU:C	1:A:532:VAL:HG22	2.26	0.55
1:A:194:GLN:O	1:A:198:GLN:HG3	2.05	0.55
1:A:491:LEU:O	1:A:495:VAL:HG12	2.06	0.55
1:A:963:THR:O	1:A:964:PHE:CG	2.59	0.55
1:A:139:ILE:CD1	1:A:291:LEU:HB2	2.36	0.55
1:A:730:ARG:CD	1:A:731:GLU:H	2.19	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:277:GLU:OE1	1:A:590:GLN:HG3	2.06	0.55
1:A:634:GLU:HG2	1:A:635:GLN:HG3	1.87	0.55
1:A:219:GLY:O	1:A:220:SER:CB	2.55	0.55
1:A:82:VAL:HG12	1:A:82:VAL:O	2.06	0.55
1:A:494:ILE:HA	1:A:497:ILE:HD11	1.88	0.55
1:A:608:LYS:HE2	1:A:625:GLU:HB3	1.88	0.55
1:A:736:TYR:CE1	1:A:796:ILE:HG21	2.42	0.55
1:A:822:SER:C	1:A:823:TRP:HD1	2.15	0.55
1:A:862:PHE:HA	1:A:865:LEU:HB3	1.88	0.55
1:A:152:ASP:HB3	1:A:155:ASP:HB2	1.89	0.54
1:A:291:LEU:CD2	1:A:300:VAL:HG21	2.36	0.54
1:A:61:VAL:O	1:A:65:VAL:HG13	2.07	0.54
1:A:399:ALA:O	1:A:403:MET:HG3	2.06	0.54
1:A:449:ALA:HB1	1:A:942:VAL:CG1	2.37	0.54
1:A:998:ILE:HD11	1:A:1010:SER:HA	1.89	0.54
1:A:65:VAL:O	1:A:68:PRO:HD2	2.07	0.54
1:A:278:LEU:C	1:A:278:LEU:HD23	2.33	0.54
1:A:420:GLU:HB2	1:A:421:TRP:CE3	2.42	0.54
1:A:910:GLY:C	1:A:1018:GLY:HA3	2.33	0.54
1:A:13:ARG:HD2	1:A:13:ARG:N	2.21	0.54
1:A:380:VAL:HG11	1:A:484:TYR:HB3	1.88	0.54
1:A:657:GLY:C	1:A:658:LEU:CD2	2.73	0.54
1:A:1026:LEU:HD23	1:A:1030:ILE:HG21	1.90	0.54
1:A:214:ASN:O	1:A:215:GLN:HG3	2.07	0.54
1:A:7:ARG:O	1:A:10:VAL:HG22	2.08	0.54
1:A:240:LEU:HD22	1:A:265:VAL:HG11	1.90	0.54
1:A:270:GLU:O	1:A:271:MET:C	2.51	0.54
1:A:452:ILE:CD1	1:A:889:LEU:HD21	2.37	0.54
1:A:492:LEU:O	1:A:495:VAL:HG13	2.08	0.54
1:A:955:VAL:HB	1:A:956:PRO:HD3	1.90	0.54
1:A:157:ARG:HG2	1:A:182:GLY:HA3	1.89	0.54
1:A:315:LEU:HD11	1:A:321:ILE:HD11	1.89	0.54
1:A:458:THR:CG2	1:A:486:MET:HB3	2.36	0.54
1:A:1033:ALA:O	1:A:1037:LEU:HD23	2.07	0.54
1:A:354:ALA:O	1:A:358:TRP:HA	2.07	0.54
1:A:468:GLU:CD	1:A:473:ARG:HH21	2.15	0.54
1:A:333:ARG:HH12	1:A:568:GLY:HA3	1.72	0.53
1:A:382:HIS:C	1:A:382:HIS:CD2	2.87	0.53
1:A:243:PHE:HB3	1:A:265:VAL:HG21	1.90	0.53
1:A:436:TRP:CD1	1:A:436:TRP:H	2.25	0.53
1:A:940:PHE:O	1:A:943:VAL:HG12	2.07	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:533:LEU:HA	1:A:1036:LYS:NZ	2.24	0.53
1:A:580:ILE:HD11	1:A:585:ALA:HB2	1.90	0.53
1:A:718:LEU:O	1:A:811:SER:HB3	2.07	0.53
1:A:781:GLN:HA	1:A:781:GLN:OE1	2.08	0.53
1:A:995:LEU:CD1	1:A:1017:ILE:HG13	2.29	0.53
1:A:138:TRP:NE1	1:A:616:THR:HG21	2.24	0.53
1:A:906:PHE:CD2	1:A:907:ALA:N	2.70	0.53
1:A:896:GLU:O	1:A:900:ILE:HG22	2.08	0.53
1:A:930:PHE:HD1	1:A:1015:PRO:HB3	1.71	0.53
1:A:435:ARG:O	1:A:439:ILE:HG12	2.09	0.53
1:A:589:LEU:HD13	1:A:609:THR:OG1	2.09	0.53
1:A:19:GLY:HA2	1:A:22:PHE:CD2	2.44	0.53
1:A:368:ILE:HD12	1:A:499:ILE:HD13	1.91	0.53
1:A:956:PRO:HG3	1:A:972:ALA:HB1	1.90	0.53
1:A:137:GLY:O	1:A:290:ILE:HA	2.09	0.52
1:A:952:ILE:HG23	1:A:957:SER:HB2	1.91	0.52
1:A:277:GLU:OE2	1:A:590:GLN:HA	2.08	0.52
1:A:450:LEU:HD23	1:A:450:LEU:C	2.34	0.52
1:A:758:GLU:OE1	1:A:765:ARG:HD3	2.09	0.52
1:A:489:ALA:O	1:A:492:LEU:HB3	2.09	0.52
1:A:637:ARG:CG	1:A:640:MET:HG3	2.39	0.52
1:A:716:GLU:O	1:A:716:GLU:HG2	2.08	0.52
1:A:121:LEU:HB2	1:A:122:PRO:HD2	1.92	0.52
1:A:324:THR:CG2	1:A:606:PHE:HB2	2.40	0.52
1:A:364:LEU:HA	1:A:367:ILE:CG2	2.39	0.52
1:A:434:THR:O	1:A:437:GLN:HB3	2.10	0.52
1:A:143:ALA:HB2	1:A:606:PHE:CE2	2.43	0.52
1:A:223:GLU:HG2	1:A:223:GLU:O	2.10	0.52
1:A:410:MET:SD	1:A:410:MET:C	2.92	0.52
1:A:440:THR:O	1:A:444:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:552:TRP:HB3	1:A:553:PRO:HD3	1.92	0.52
1:A:19:GLY:HA2	1:A:22:PHE:HD2	1.74	0.52
1:A:417:ARG:HE	1:A:442:ALA:CB	2.07	0.52
1:A:906:PHE:O	1:A:1022:THR:HG21	2.10	0.52
1:A:954:ALA:O	1:A:958:LEU:HD23	2.09	0.52
1:A:974:TYR:HD2	1:A:974:TYR:C	2.18	0.52
1:A:56:GLN:HA	1:A:56:GLN:HE21	1.74	0.52
1:A:974:TYR:C	1:A:974:TYR:CD2	2.88	0.52
1:A:1030:ILE:O	1:A:1034:ALA:HB3	2.09	0.52
1:A:410:MET:CE	1:A:411:ILE:HG12	2.40	0.52
1:A:926:THR:HA	1:A:1011:ARG:O	2.10	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:20:ALA:O	1:A:23:LEU:HB2	2.11	0.51
1:A:334:ALA:HA	1:A:1004:ALA:CB	2.39	0.51
1:A:371:PRO:HA	1:A:374:LEU:HB3	1.91	0.51
1:A:894:VAL:HG22	1:A:898:LEU:CD2	2.40	0.51
1:A:988:VAL:O	1:A:992:ILE:HG12	2.09	0.51
1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:CD	2.12	0.51
1:A:420:GLU:C	1:A:421:TRP:HE3	2.18	0.51
1:A:677:ILE:HD13	1:A:860:GLY:HA2	1.93	0.51
1:A:755:MET:HE3	1:A:758:GLU:HG3	1.92	0.51
1:A:964:PHE:C	1:A:964:PHE:HD2	2.18	0.51
1:A:971:GLU:HA	1:A:974:TYR:CD1	2.45	0.51
1:A:48:ILE:HD12	1:A:48:ILE:N	2.25	0.51
1:A:536:PRO:HG3	1:A:1036:LYS:HE3	1.91	0.51
1:A:16:VAL:HG21	1:A:498:PRO:CB	2.40	0.51
1:A:888:TYR:O	1:A:888:TYR:CG	2.64	0.51
1:A:974:TYR:HD2	1:A:975:HIS:N	2.09	0.51
1:A:1016:MET:O	1:A:1020:MET:HB2	2.11	0.51
1:A:410:MET:CG	1:A:411:ILE:N	2.74	0.51
1:A:614:THR:HG22	1:A:616:THR:N	2.23	0.51
1:A:229:TYR:N	1:A:229:TYR:HD1	2.06	0.51
1:A:139:ILE:HG21	1:A:301:ILE:HG12	1.92	0.51
1:A:178:ALA:HB2	1:A:614:THR:OG1	2.11	0.51
1:A:642:MET:O	1:A:646:ILE:HD13	2.11	0.51
1:A:948:LEU:HD23	1:A:1031:ILE:CG2	2.30	0.51
1:A:956:PRO:HB3	1:A:972:ALA:CB	2.41	0.51
1:A:196:LEU:HG	1:A:201:ILE:O	2.11	0.51
1:A:874:LEU:C	1:A:877:PRO:HD2	2.35	0.51
1:A:887:LEU:HD21	1:A:900:ILE:HD12	1.93	0.51
1:A:906:PHE:CZ	1:A:1030:ILE:HG21	2.46	0.51
1:A:171:ILE:CD1	1:A:304:VAL:HA	2.41	0.50
1:A:433:LYS:HD3	1:A:436:TRP:CD1	2.45	0.50
1:A:526:HIS:HA	1:A:529:LEU:HG	1.92	0.50
1:A:76:VAL:HA	1:A:113:TYR:CE1	2.46	0.50
1:A:433:LYS:CD	1:A:433:LYS:N	2.75	0.50
1:A:683:ILE:O	1:A:823:TRP:HA	2.11	0.50
1:A:874:LEU:O	1:A:877:PRO:HD2	2.11	0.50
1:A:887:LEU:CD2	1:A:900:ILE:HD12	2.41	0.50
1:A:139:ILE:CG2	1:A:301:ILE:HG12	2.40	0.50
1:A:332:ASP:O	1:A:335:ILE:HG22	2.11	0.50
1:A:962:GLN:HG3	1:A:963:THR:N	2.26	0.50
1:A:1026:LEU:O	1:A:1030:ILE:HG12	2.10	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:762:GLY:O	1:A:763:ILE:HG23	2.11	0.50
1:A:812:MET:HG2	1:A:813:LEU:H	1.74	0.50
1:A:844:ILE:HG23	1:A:848:VAL:HG22	1.94	0.50
1:A:906:PHE:CE2	1:A:1026:LEU:HG	2.46	0.50
1:A:40:PRO:HG3	1:A:389:ASN:CG	2.37	0.50
1:A:633:GLN:HA	1:A:633:GLN:OE1	2.12	0.50
1:A:1031:ILE:O	1:A:1035:TYR:HB2	2.11	0.50
1:A:446:VAL:HG22	1:A:446:VAL:O	2.11	0.50
1:A:612:ALA:O	1:A:613:GLU:C	2.53	0.50
1:A:758:GLU:OE1	1:A:765:ARG:CD	2.59	0.50
1:A:910:GLY:HA3	1:A:1018:GLY:O	2.10	0.50
1:A:360:VAL:C	1:A:362:SER:H	2.19	0.50
1:A:69:LEU:CD1	1:A:117:VAL:HG11	2.42	0.50
1:A:468:GLU:HG3	1:A:473:ARG:HE	1.77	0.50
1:A:218:GLY:CA	1:A:231:VAL:O	2.60	0.49
1:A:221:SER:CA	1:A:229:TYR:O	2.58	0.49
1:A:377:ALA:HB2	1:A:485:ALA:HB2	1.94	0.49
1:A:681:ILE:C	1:A:826:ILE:HD12	2.37	0.49
1:A:703:VAL:HA	1:A:706:THR:HG22	1.93	0.49
1:A:988:VAL:HG21	1:A:1024:PRO:HG3	1.94	0.49
1:A:359:HIS:O	1:A:360:VAL:HG23	2.12	0.49
1:A:453:SER:O	1:A:456:ILE:HG22	2.11	0.49
1:A:980:ARG:NH1	1:A:1028:LEU:HD23	2.28	0.49
1:A:186:GLU:OE2	1:A:769:ASN:HB2	2.13	0.49
1:A:435:ARG:O	1:A:438:VAL:HG13	2.12	0.49
1:A:614:THR:CG2	1:A:616:THR:H	2.23	0.49
1:A:916:TRP:CE3	1:A:916:TRP:HA	2.48	0.49
1:A:15:LEU:HD23	1:A:15:LEU:C	2.38	0.49
1:A:619:ALA:HB1	1:A:623:MET:HB2	1.93	0.49
1:A:685:VAL:HG22	1:A:693:ILE:HG22	1.94	0.49
1:A:881:MET:O	1:A:885:VAL:HG23	2.12	0.49
1:A:963:THR:O	1:A:964:PHE:CD1	2.66	0.49
1:A:177:VAL:HG12	1:A:177:VAL:O	2.12	0.49
1:A:640:MET:HE3	1:A:644:LYS:CG	2.41	0.49
1:A:147:ARG:NH2	1:A:320:GLU:HB3	2.27	0.49
1:A:996:LEU:HA	1:A:999:LEU:HD12	1.95	0.49
1:A:35:PRO:CA	1:A:296:ASN:HB3	2.35	0.49
1:A:343:LEU:O	1:A:347:ILE:HG22	2.13	0.49
1:A:526:HIS:HA	1:A:529:LEU:CD2	2.43	0.49
1:A:846:GLU:O	1:A:847:LYS:CB	2.60	0.49
1:A:370:LEU:HD13	1:A:400:VAL:HG13	1.95	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:871:LYS:O	1:A:875:MET:HG2	2.12	0.48
1:A:948:LEU:HD12	1:A:948:LEU:C	2.36	0.48
1:A:32:ILE:HD13	1:A:32:ILE:O	2.13	0.48
1:A:577:LEU:CD2	1:A:578:PRO:HD2	2.42	0.48
1:A:577:LEU:O	1:A:578:PRO:C	2.56	0.48
1:A:368:ILE:HD12	1:A:499:ILE:CD1	2.43	0.48
1:A:416:LYS:HD3	1:A:417:ARG:CD	2.40	0.48
1:A:639:GLY:O	1:A:640:MET:C	2.56	0.48
1:A:729:ASN:CB	1:A:732:LYS:HG3	2.43	0.48
1:A:396:ILE:O	1:A:400:VAL:HG23	2.13	0.48
1:A:410:MET:CE	1:A:411:ILE:HA	2.25	0.48
1:A:549:THR:HG1	1:A:913:TRP:HZ2	1.60	0.48
1:A:72:THR:CG2	1:A:113:TYR:HB3	2.43	0.48
1:A:259:LEU:CD2	1:A:263:ALA:HB3	2.43	0.48
1:A:147:ARG:O	1:A:148:SER:HB3	2.14	0.48
1:A:495:VAL:O	1:A:498:PRO:HD2	2.13	0.48
1:A:726:VAL:HG12	1:A:728:ILE:HD12	1.96	0.48
1:A:1030:ILE:HG13	1:A:1031:ILE:N	2.29	0.48
1:A:182:GLY:CA	1:A:285:ALA:HB2	2.43	0.48
1:A:294:GLY:O	1:A:295:LYS:HG3	2.13	0.48
1:A:405:ASP:OD1	1:A:939:GLU:HG3	2.14	0.48
1:A:562:LEU:HA	1:A:563:PRO:HD3	1.77	0.48
1:A:104:TYR:OH	1:A:292:ARG:HD3	2.14	0.48
1:A:244:ASN:HB3	1:A:260:ARG:HB3	1.95	0.48
1:A:301:ILE:HD11	1:A:327:ARG:HB3	1.95	0.48
1:A:368:ILE:HD13	1:A:372:LEU:HG	1.94	0.48
1:A:565:ILE:HG22	1:A:566:ASN:N	2.27	0.48
1:A:831:ARG:HD3	1:A:832:ASP:N	2.28	0.48
1:A:980:ARG:HD2	1:A:1028:LEU:CD2	2.44	0.48
1:A:42:LEU:CD1	1:A:670:ILE:HG21	2.43	0.48
1:A:398:ILE:CD1	1:A:482:LYS:HD2	2.43	0.48
1:A:420:GLU:O	1:A:423:HIS:ND1	2.44	0.48
1:A:912:ILE:HD13	1:A:913:TRP:N	2.29	0.48
1:A:933:LEU:C	1:A:933:LEU:HD23	2.39	0.48
1:A:62:GLU:OE2	1:A:815:THR:HG21	2.14	0.48
1:A:324:THR:HG21	1:A:606:PHE:CB	2.44	0.48
1:A:134:THR:OG1	1:A:135:GLY:N	2.45	0.47
1:A:134:THR:HG23	1:A:136:VAL:H	1.78	0.47
1:A:435:ARG:HA	1:A:438:VAL:CG1	2.44	0.47
1:A:529:LEU:HD12	1:A:530:LEU:H	0.60	0.47
1:A:779:SER:O	1:A:782:ALA:HB3	2.14	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:899:LEU:CD1	1:A:1030:ILE:HD12	2.43	0.47
1:A:7:ARG:HG3	1:A:444:VAL:HG21	1.95	0.47
1:A:525:TYR:HE1	1:A:977:ALA:CB	2.23	0.47
1:A:699:GLN:O	1:A:702:GLU:HG2	2.13	0.47
1:A:719:GLU:HA	1:A:810:PRO:HA	1.96	0.47
1:A:732:LYS:HE3	1:A:800:ASP:O	2.13	0.47
1:A:88:PHE:C	1:A:88:PHE:CD2	2.91	0.47
1:A:152:ASP:OD1	1:A:153:LEU:N	2.48	0.47
1:A:252:GLU:O	1:A:253:ASN:HB2	2.13	0.47
1:A:384:GLN:HG3	1:A:386:LEU:HG	1.95	0.47
1:A:453:SER:HA	1:A:456:ILE:HG22	1.97	0.47
1:A:362:SER:HA	1:A:365:VAL:HB	1.96	0.47
1:A:925:ALA:O	1:A:928:THR:HB	2.14	0.47
1:A:42:LEU:HD11	1:A:670:ILE:HG21	1.96	0.47
1:A:545:LEU:O	1:A:548:LEU:HB3	2.15	0.47
1:A:960:ASN:N	1:A:961:PRO:HD3	2.15	0.47
1:A:67:TYR:N	1:A:68:PRO:CD	2.77	0.47
1:A:277:GLU:HG3	1:A:282:GLY:CA	2.41	0.47
1:A:357:LEU:HD21	1:A:411:ILE:HG21	1.96	0.47
1:A:417:ARG:CG	1:A:442:ALA:HB3	2.43	0.47
1:A:525:TYR:CZ	1:A:977:ALA:HB1	2.49	0.47
1:A:565:ILE:CG2	1:A:566:ASN:N	2.77	0.47
1:A:620:PRO:HD2	1:A:623:MET:CG	2.43	0.47
1:A:706:THR:HG23	1:A:707:VAL:N	2.29	0.47
1:A:793:LYS:N	1:A:793:LYS:HE3	2.30	0.47
1:A:234:SER:O	1:A:234:SER:OG	2.30	0.47
1:A:416:LYS:HD2	1:A:417:ARG:NH2	2.30	0.47
1:A:864:LEU:HD13	1:A:867:ARG:NH2	2.30	0.47
1:A:899:LEU:O	1:A:903:SER:N	2.48	0.47
1:A:371:PRO:O	1:A:375:CYS:SG	2.72	0.47
1:A:451:PHE:HB2	1:A:494:ILE:HD11	1.97	0.47
1:A:153:LEU:CD2	1:A:182:GLY:HA2	2.45	0.47
1:A:681:ILE:HG22	1:A:682:GLY:N	2.29	0.47
1:A:755:MET:CE	1:A:758:GLU:HG3	2.44	0.47
1:A:451:PHE:HD1	1:A:494:ILE:HG13	1.80	0.46
1:A:528:LEU:O	1:A:528:LEU:CD1	2.63	0.46
1:A:774:GLN:H	1:A:774:GLN:CD	2.22	0.46
1:A:975:HIS:ND1	1:A:976:GLY:N	2.63	0.46
1:A:933:LEU:HD12	1:A:1015:PRO:O	2.15	0.46
1:A:56:GLN:CB	1:A:60:ILE:HD11	2.46	0.46
1:A:838:HIS:HE1	1:A:842:LYS:HE3	1.80	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:406:ALA:O	1:A:410:MET:HB3	2.16	0.46
1:A:955:VAL:N	1:A:956:PRO:CD	2.79	0.46
1:A:965:SER:O	1:A:966:GLU:HB2	2.16	0.46
1:A:334:ALA:HA	1:A:1004:ALA:HB1	1.98	0.46
1:A:914:LEU:HD23	1:A:1014:ALA:O	2.16	0.46
1:A:761:GLU:O	1:A:762:GLY:C	2.52	0.46
1:A:908:LEU:O	1:A:912:ILE:HG22	2.16	0.46
1:A:995:LEU:HD11	1:A:1016:MET:HB3	1.94	0.46
1:A:1025:LEU:O	1:A:1028:LEU:HB2	2.16	0.46
1:A:252:GLU:HG2	1:A:252:GLU:H	1.30	0.46
1:A:343:LEU:HD12	1:A:343:LEU:C	2.41	0.46
1:A:369:SER:HA	1:A:492:LEU:HD21	1.98	0.46
1:A:404:VAL:HG12	1:A:408:ILE:CG1	2.44	0.46
1:A:333:ARG:HH12	1:A:568:GLY:CA	2.29	0.46
1:A:900:ILE:C	1:A:903:SER:HB3	2.40	0.46
1:A:220:SER:O	1:A:231:VAL:HG12	2.16	0.46
1:A:364:LEU:HA	1:A:367:ILE:HG22	1.96	0.46
1:A:452:ILE:CD1	1:A:889:LEU:HD11	2.41	0.46
1:A:823:TRP:N	1:A:823:TRP:HD1	2.06	0.46
1:A:996:LEU:N	1:A:997:PRO:CD	2.79	0.46
1:A:109:ARG:O	1:A:112:GLU:HB2	2.15	0.46
1:A:118:GLN:HE21	1:A:118:GLN:CA	2.25	0.46
1:A:948:LEU:HD11	1:A:1035:TYR:CE1	2.51	0.46
1:A:367:ILE:O	1:A:371:PRO:CD	2.58	0.45
1:A:417:ARG:HG2	1:A:442:ALA:CB	2.41	0.45
1:A:761:GLU:O	1:A:764:ALA:O	2.34	0.45
1:A:805:LYS:HE3	1:A:805:LYS:HB2	1.77	0.45
1:A:118:GLN:HA	1:A:118:GLN:NE2	2.29	0.45
1:A:301:ILE:HG22	1:A:305:LYS:HE3	1.99	0.45
1:A:475:PHE:CE1	1:A:478:LEU:HD13	2.51	0.45
1:A:716:GLU:O	1:A:716:GLU:CG	2.64	0.45
1:A:971:GLU:HA	1:A:974:TYR:CE1	2.51	0.45
1:A:346:PHE:CD1	1:A:347:ILE:N	2.84	0.45
1:A:391:MET:HB2	1:A:477:PRO:HB2	1.97	0.45
1:A:758:GLU:HB3	1:A:765:ARG:CG	2.46	0.45
1:A:550:VAL:C	1:A:553:PRO:HD2	2.41	0.45
1:A:645:ILE:HG22	1:A:649:LEU:HD23	1.98	0.45
1:A:780:PRO:CB	1:A:784:ARG:HH22	2.29	0.45
1:A:1026:LEU:C	1:A:1026:LEU:CD2	2.89	0.45
1:A:413:ASN:HB3	1:A:446:VAL:HG11	1.98	0.45
1:A:580:ILE:HG13	1:A:581:SER:N	2.27	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1025:LEU:HD23	1:A:1025:LEU:C	2.42	0.45
1:A:564:GLN:O	1:A:565:ILE:HB	2.14	0.45
1:A:1033:ALA:O	1:A:1036:LYS:HG2	2.16	0.45
1:A:451:PHE:HD2	1:A:452:ILE:N	2.14	0.45
1:A:570:LEU:HD11	1:A:646:ILE:CD1	2.47	0.45
1:A:572:TYR:HB3	1:A:626:THR:OG1	2.17	0.45
1:A:829:ARG:HE	1:A:829:ARG:CA	2.29	0.45
1:A:904:VAL:N	1:A:905:PRO:HD2	2.32	0.45
1:A:995:LEU:O	1:A:999:LEU:HG	2.17	0.45
1:A:50:LYS:HD2	1:A:92:TYR:HE2	1.82	0.45
1:A:111:LEU:O	1:A:112:GLU:C	2.60	0.45
1:A:163:PHE:O	1:A:167:GLU:HG2	2.17	0.45
1:A:295:LYS:O	1:A:296:ASN:C	2.59	0.45
1:A:435:ARG:HD3	1:A:436:TRP:H	1.82	0.45
1:A:525:TYR:HE2	1:A:1028:LEU:HD22	1.78	0.45
1:A:757:GLY:O	1:A:768:ILE:HB	2.16	0.45
1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:CD	2.46	0.45
1:A:568:GLY:C	1:A:569:ASP:OD2	2.60	0.45
1:A:672:MET:O	1:A:673:LEU:HD23	2.16	0.45
1:A:900:ILE:CA	1:A:903:SER:HB3	2.47	0.45
1:A:27:GLY:C	1:A:31:ILE:HG22	2.42	0.45
1:A:55:GLY:O	1:A:56:GLN:CG	2.64	0.45
1:A:406:ALA:HA	1:A:450:LEU:HD11	1.99	0.45
1:A:437:GLN:HA	1:A:440:THR:OG1	2.17	0.45
1:A:561:PHE:HB3	1:A:562:LEU:H	1.61	0.45
1:A:10:VAL:C	1:A:12:ASN:H	2.25	0.44
1:A:915:LEU:C	1:A:916:TRP:HE3	2.26	0.44
1:A:57:ALA:H	1:A:61:VAL:HG23	1.83	0.44
1:A:259:LEU:HD23	1:A:263:ALA:HB3	1.98	0.44
1:A:330:LEU:HD12	1:A:330:LEU:O	2.18	0.44
1:A:536:PRO:HB3	1:A:1036:LYS:HE3	1.99	0.44
1:A:786:LEU:HD12	1:A:788:ILE:CD1	2.46	0.44
1:A:817:ASN:O	1:A:818:ALA:HB3	2.17	0.44
1:A:1014:ALA:HB3	1:A:1015:PRO:CD	2.44	0.44
1:A:1018:GLY:O	1:A:1021:ILE:HG22	2.18	0.44
1:A:478:LEU:HD23	1:A:478:LEU:O	2.17	0.44
1:A:992:ILE:HD11	1:A:1020:MET:HB3	1.99	0.44
1:A:996:LEU:HD13	1:A:996:LEU:C	2.42	0.44
1:A:19:GLY:O	1:A:23:LEU:HD23	2.17	0.44
1:A:409:VAL:CG1	1:A:450:LEU:HD12	2.48	0.44
1:A:781:GLN:OE1	1:A:784:ARG:HD2	2.16	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:549:THR:HG23	1:A:913:TRP:NE1	2.32	0.44
1:A:668:ASN:C	1:A:668:ASN:ND2	2.58	0.44
1:A:829:ARG:HE	1:A:830:ASP:H	1.65	0.44
1:A:56:GLN:HB3	1:A:57:ALA:H	1.51	0.44
1:A:131:PRO:HB2	1:A:132:ASP:H	1.49	0.44
1:A:216:GLU:HG2	1:A:233:ALA:O	2.15	0.44
1:A:571:LEU:HD12	1:A:668:ASN:OD1	2.18	0.44
1:A:933:LEU:O	1:A:936:VAL:HG12	2.17	0.44
1:A:42:LEU:HD23	1:A:474:LEU:HD13	1.99	0.44
1:A:252:GLU:C	1:A:254:GLY:H	2.24	0.44
1:A:396:ILE:HD12	1:A:397:ALA:N	2.31	0.44
1:A:564:GLN:HE21	1:A:664:PRO:CD	2.31	0.44
1:A:146:ASP:HA	1:A:318:GLY:O	2.18	0.44
1:A:221:SER:HB2	1:A:229:TYR:O	2.17	0.44
1:A:292:ARG:NH2	1:A:292:ARG:CG	2.61	0.44
1:A:420:GLU:HB2	1:A:421:TRP:HE3	1.83	0.44
1:A:641:THR:OG1	1:A:642:MET:N	2.50	0.44
1:A:893:ARG:HG3	1:A:895:GLY:H	1.82	0.44
1:A:952:ILE:HG23	1:A:957:SER:CB	2.47	0.44
1:A:279:ASN:HD21	1:A:605:VAL:H	1.64	0.44
1:A:435:ARG:HD2	1:A:436:TRP:CE2	2.52	0.44
1:A:831:ARG:O	1:A:833:MET:HG3	2.18	0.44
1:A:1002:THR:CG2	1:A:1006:SER:HB2	2.42	0.44
1:A:451:PHE:CD1	1:A:494:ILE:HG13	2.53	0.43
1:A:903:SER:O	1:A:906:PHE:CE2	2.71	0.43
1:A:912:ILE:C	1:A:912:ILE:CD1	2.88	0.43
1:A:5:ILE:HG23	1:A:8:ARG:NH2	2.33	0.43
1:A:292:ARG:O	1:A:293:SER:C	2.61	0.43
1:A:380:VAL:HG21	1:A:484:TYR:CG	2.53	0.43
1:A:1023:ALA:N	1:A:1024:PRO:CD	2.82	0.43
1:A:102:ASP:HB3	1:A:105:TRP:HB3	1.99	0.43
1:A:701:GLU:C	1:A:701:GLU:CD	2.87	0.43
1:A:372:LEU:O	1:A:376:ILE:HG22	2.18	0.43
1:A:516:PRO:HB2	1:A:517:LEU:H	1.60	0.43
1:A:191:ILE:HD13	1:A:263:ALA:HB2	2.01	0.43
1:A:518:ASN:HD22	1:A:982:ARG:CG	2.30	0.43
1:A:6:ILE:HG23	1:A:444:VAL:HG22	2.01	0.43
1:A:55:GLY:O	1:A:56:GLN:NE2	2.49	0.43
1:A:61:VAL:HG21	1:A:89:GLY:N	2.30	0.43
1:A:550:VAL:HG23	1:A:913:TRP:HD1	1.84	0.43
1:A:556:LYS:HG2	1:A:558:GLY:H	1.83	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:966:GLU:HB3	1:A:967:GLN:OE1	2.18	0.43
1:A:347:ILE:HD13	1:A:348:VAL:N	2.34	0.43
1:A:354:ALA:HA	1:A:359:HIS:H	1.83	0.43
1:A:837:VAL:HG11	1:A:862:PHE:CE1	2.52	0.43
1:A:38:ALA:O	1:A:39:LEU:HB2	2.19	0.43
1:A:66:THR:HB	1:A:91:SER:OG	2.19	0.43
1:A:183:VAL:HB	1:A:272:ARG:HH22	1.84	0.43
1:A:495:VAL:C	1:A:498:PRO:HD2	2.44	0.43
1:A:984:LYS:O	1:A:987:THR:HG22	2.18	0.43
1:A:920:PHE:O	1:A:921:HIS:C	2.62	0.43
1:A:334:ALA:O	1:A:337:ASN:HB3	2.19	0.42
1:A:914:LEU:C	1:A:916:TRP:H	2.27	0.42
1:A:929:GLY:O	1:A:1016:MET:HE1	2.19	0.42
1:A:18:MET:HE2	1:A:18:MET:HB3	1.87	0.42
1:A:77:PRO:HD3	1:A:113:TYR:HE1	1.83	0.42
1:A:157:ARG:CG	1:A:182:GLY:HA3	2.49	0.42
1:A:368:ILE:HD13	1:A:368:ILE:C	2.44	0.42
1:A:435:ARG:HD3	1:A:436:TRP:CD1	2.54	0.42
1:A:468:GLU:O	1:A:468:GLU:HG2	2.19	0.42
1:A:926:THR:HG22	1:A:1011:ARG:O	2.19	0.42
1:A:421:TRP:HE3	1:A:421:TRP:N	2.17	0.42
1:A:635:GLN:HA	1:A:636:TRP:HA	1.86	0.42
1:A:390:ILE:C	1:A:390:ILE:HD12	2.45	0.42
1:A:567:GLU:OE1	1:A:666:ILE:HD12	2.19	0.42
1:A:635:GLN:HB3	1:A:636:TRP:CE3	2.54	0.42
1:A:109:ARG:HD3	1:A:112:GLU:OE1	2.19	0.42
1:A:449:ALA:HA	1:A:452:ILE:HG22	2.00	0.42
1:A:496:VAL:O	1:A:500:LEU:HG	2.19	0.42
1:A:678:LYS:HB3	1:A:678:LYS:NZ	2.35	0.42
1:A:748:THR:HG22	1:A:754:ALA:HB2	2.02	0.42
1:A:978:VAL:HG22	1:A:982:ARG:NH1	2.35	0.42
1:A:433:LYS:N	1:A:433:LYS:HD2	2.34	0.42
1:A:525:TYR:OH	1:A:977:ALA:HB1	2.19	0.42
1:A:525:TYR:OH	1:A:1028:LEU:HD22	2.20	0.42
1:A:685:VAL:HG13	1:A:685:VAL:O	2.20	0.42
1:A:758:GLU:HB2	1:A:765:ARG:CZ	2.49	0.42
1:A:998:ILE:HD12	1:A:998:ILE:C	2.45	0.42
1:A:298:ARG:C	1:A:298:ARG:HD2	2.45	0.42
1:A:907:ALA:HA	1:A:1022:THR:HG22	2.02	0.42
1:A:944:MET:CE	1:A:980:ARG:HG2	2.49	0.42
1:A:102:ASP:HA	1:A:103:PRO:HD2	1.87	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:210:LEU:HD23	1:A:756:VAL:CG1	2.50	0.42
1:A:847:LYS:HE3	1:A:847:LYS:CA	2.46	0.42
1:A:956:PRO:HB2	1:A:957:SER:H	1.69	0.42
1:A:76:VAL:CG1	1:A:79:ALA:HB2	2.45	0.42
1:A:109:ARG:HD3	1:A:109:ARG:HA	1.78	0.42
1:A:850:LEU:HD23	1:A:850:LEU:C	2.44	0.42
1:A:221:SER:CB	1:A:229:TYR:O	2.68	0.42
1:A:471:GLU:O	1:A:474:LEU:HB3	2.19	0.42
1:A:815:THR:HB	1:A:819:ARG:O	2.20	0.42
1:A:968:LYS:O	1:A:971:GLU:HG2	2.20	0.42
1:A:51:THR:CG2	1:A:65:VAL:HG21	2.51	0.41
1:A:109:ARG:HA	1:A:109:ARG:HH21	1.85	0.41
1:A:294:GLY:O	1:A:295:LYS:CG	2.68	0.41
1:A:337:ASN:C	1:A:337:ASN:ND2	2.78	0.41
1:A:526:HIS:C	1:A:529:LEU:HG	2.45	0.41
1:A:737:GLY:O	1:A:791:PRO:HG2	2.20	0.41
1:A:900:ILE:C	1:A:900:ILE:HD13	2.44	0.41
1:A:904:VAL:HG21	1:A:934:ALA:HB1	2.02	0.41
1:A:922:LEU:HA	1:A:926:THR:CG2	2.46	0.41
1:A:97:PHE:CD1	1:A:106:ALA:HB1	2.54	0.41
1:A:563:PRO:HG3	1:A:1011:ARG:NH2	2.35	0.41
1:A:844:ILE:HG22	1:A:845:ALA:N	2.35	0.41
1:A:956:PRO:CG	1:A:972:ALA:HB1	2.50	0.41
1:A:968:LYS:O	1:A:968:LYS:HD3	2.19	0.41
1:A:335:ILE:HD12	1:A:335:ILE:HA	1.80	0.41
1:A:463:PRO:O	1:A:466:THR:HB	2.20	0.41
1:A:719:GLU:O	1:A:719:GLU:HG3	2.20	0.41
1:A:1031:ILE:N	1:A:1032:PRO:CD	2.83	0.41
1:A:977:ALA:O	1:A:980:ARG:HG3	2.20	0.41
1:A:129:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HA	1.92	0.41
1:A:236:TYR:O	1:A:238:GLN:HG2	2.21	0.41
1:A:344:GLU:C	1:A:344:GLU:OE1	2.64	0.41
1:A:357:LEU:HD21	1:A:411:ILE:CG2	2.50	0.41
1:A:517:LEU:C	1:A:519:ARG:H	2.28	0.41
1:A:925:ALA:HB1	1:A:1012:ILE:CG2	2.42	0.41
1:A:1031:ILE:HD13	1:A:1031:ILE:HA	1.93	0.41
1:A:66:THR:O	1:A:70:THR:HG23	2.20	0.41
1:A:101:THR:O	1:A:102:ASP:C	2.64	0.41
1:A:416:LYS:HD2	1:A:417:ARG:HH21	1.85	0.41
1:A:680:PRO:HA	1:A:861:GLN:OE1	2.20	0.41
1:A:147:ARG:HD2	1:A:320:GLU:CG	2.51	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:352:VAL:HG12	1:A:986:MET:HG3	2.02	0.41
1:A:451:PHE:CD2	1:A:452:ILE:N	2.89	0.41
1:A:468:GLU:HG3	1:A:473:ARG:NE	2.34	0.41
1:A:716:GLU:C	1:A:718:LEU:N	2.79	0.41
1:A:957:SER:HA	1:A:960:ASN:ND2	2.35	0.41
1:A:1008:VAL:HG13	1:A:1009:MET:N	2.36	0.41
1:A:517:LEU:C	1:A:519:ARG:N	2.78	0.41
1:A:517:LEU:N	1:A:517:LEU:HD13	2.35	0.41
1:A:573:MET:O	1:A:661:LEU:HB3	2.21	0.41
1:A:790:THR:C	1:A:792:MET:N	2.79	0.41
1:A:988:VAL:CG2	1:A:1024:PRO:HG3	2.50	0.41
1:A:22:PHE:O	1:A:26:TRP:HB3	2.21	0.41
1:A:134:THR:HG23	1:A:136:VAL:HB	2.03	0.41
1:A:171:ILE:CG2	1:A:172:PRO:HD2	2.49	0.41
1:A:186:GLU:HG2	1:A:188:GLN:HG3	2.03	0.41
1:A:203:LEU:HD23	1:A:203:LEU:HA	1.85	0.41
1:A:291:LEU:HD23	1:A:300:VAL:HG21	2.02	0.41
1:A:367:ILE:HD13	1:A:367:ILE:C	2.46	0.41
1:A:862:PHE:O	1:A:863:GLU:C	2.63	0.41
1:A:952:ILE:O	1:A:957:SER:HB3	2.21	0.41
1:A:12:ASN:O	1:A:15:LEU:HB3	2.21	0.41
1:A:446:VAL:O	1:A:446:VAL:CG2	2.68	0.41
1:A:482:LYS:HE2	1:A:482:LYS:HB3	1.88	0.41
1:A:960:ASN:C	1:A:962:GLN:H	2.29	0.41
1:A:6:ILE:CG2	1:A:444:VAL:HG13	2.50	0.40
1:A:16:VAL:HG21	1:A:498:PRO:HB2	2.02	0.40
1:A:786:LEU:HD12	1:A:788:ILE:HD12	2.03	0.40
1:A:980:ARG:HD3	1:A:981:VAL:N	2.36	0.40
1:A:57:ALA:O	1:A:61:VAL:HG23	2.22	0.40
1:A:368:ILE:HG21	1:A:499:ILE:HG21	2.02	0.40
1:A:838:HIS:CE1	1:A:842:LYS:HE3	2.56	0.40
1:A:874:LEU:O	1:A:874:LEU:HD22	2.21	0.40
1:A:998:ILE:HD12	1:A:998:ILE:O	2.21	0.40
1:A:17:LEU:O	1:A:21:LEU:HD13	2.21	0.40
1:A:153:LEU:HD21	1:A:182:GLY:HA2	2.03	0.40
1:A:609:THR:HG22	1:A:621:LEU:HD12	2.04	0.40
1:A:940:PHE:CZ	1:A:987:THR:HG21	2.56	0.40
1:A:956:PRO:HB3	1:A:972:ALA:HB2	2.02	0.40
1:A:980:ARG:O	1:A:983:PRO:HD2	2.20	0.40
1:A:135:GLY:O	1:A:669:ARG:HB3	2.21	0.40
1:A:338:LEU:HA	1:A:338:LEU:HD22	1.83	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:453:SER:OG	1:A:939:GLU:CB	2.70	0.40
1:A:758:GLU:HB3	1:A:765:ARG:HG3	2.02	0.40
1:A:870:HIS:ND1	1:A:870:HIS:C	2.78	0.40
1:A:956:PRO:HG3	1:A:972:ALA:CB	2.51	0.40
1:A:979:LEU:C	1:A:979:LEU:HD12	2.46	0.40
1:A:48:ILE:O	1:A:130:GLY:N	2.55	0.40
1:A:203:LEU:O	1:A:204:ALA:C	2.64	0.40
1:A:371:PRO:O	1:A:375:CYS:N	2.46	0.40
1:A:572:TYR:CD1	1:A:573:MET:N	2.84	0.40
1:A:759:THR:CG2	1:A:768:ILE:HD11	2.51	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	1009/1055 (96%)	867 (86%)	94 (9%)	48 (5%)	2 19

All (48) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	172	PRO
1	A	220	SER
1	A	254	GLY
1	A	256	PRO
1	A	283	GLU
1	A	293	SER
1	A	565	ILE
1	A	578	PRO
1	A	613	GLU
1	A	889	LEU
1	A	921	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	956	PRO
1	A	960	ASN
1	A	56	GLN
1	A	131	PRO
1	A	132	ASP
1	A	294	GLY
1	A	295	LYS
1	A	296	ASN
1	A	387	ASN
1	A	389	ASN
1	A	623	MET
1	A	763	ILE
1	A	847	LYS
1	A	922	LEU
1	A	1005	GLY
1	A	148	SER
1	A	574	PRO
1	A	640	MET
1	A	967	GLN
1	A	983	PRO
1	A	1032	PRO
1	A	39	LEU
1	A	122	PRO
1	A	271	MET
1	A	359	HIS
1	A	448	PRO
1	A	708	PRO
1	A	965	SER
1	A	279	ASN
1	A	385	GLY
1	A	557	VAL
1	A	560	GLU
1	A	665	PRO
1	A	674	SER
1	A	54	PRO
1	A	130	GLY
1	A	536	PRO

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	835/872 (96%)	666 (80%)	169 (20%)	1 8

All (169) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	6	ILE
1	A	12	ASN
1	A	13	ARG
1	A	21	LEU
1	A	23	LEU
1	A	25	ILE
1	A	29	TRP
1	A	31	ILE
1	A	32	ILE
1	A	39	LEU
1	A	44	ASP
1	A	56	GLN
1	A	60	ILE
1	A	65	VAL
1	A	66	THR
1	A	67	TYR
1	A	76	VAL
1	A	96	ILE
1	A	105	TRP
1	A	107	ARG
1	A	112	GLU
1	A	117	VAL
1	A	118	GLN
1	A	144	LEU
1	A	153	LEU
1	A	168	LEU
1	A	184	VAL
1	A	190	VAL
1	A	196	LEU
1	A	201	ILE
1	A	205	GLU
1	A	210	LEU
1	A	222	ILE
1	A	226	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	231	VAL
1	A	232	ARG
1	A	236	TYR
1	A	237	LEU
1	A	252	GLU
1	A	275	ILE
1	A	284	VAL
1	A	288	VAL
1	A	292	ARG
1	A	298	ARG
1	A	310	THR
1	A	317	GLU
1	A	322	VAL
1	A	323	THR
1	A	335	ILE
1	A	337	ASN
1	A	338	LEU
1	A	343	LEU
1	A	344	GLU
1	A	346	PHE
1	A	347	ILE
1	A	348	VAL
1	A	349	VAL
1	A	353	CYS
1	A	357	LEU
1	A	359	HIS
1	A	360	VAL
1	A	364	LEU
1	A	367	ILE
1	A	368	ILE
1	A	376	ILE
1	A	390	ILE
1	A	398	ILE
1	A	410	MET
1	A	415	HIS
1	A	416	LYS
1	A	418	LEU
1	A	420	GLU
1	A	423	HIS
1	A	433	LYS
1	A	435	ARG
1	A	436	TRP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	438	VAL
1	A	440	THR
1	A	446	VAL
1	A	451	PHE
1	A	456	ILE
1	A	458	THR
1	A	461	PHE
1	A	462	ILE
1	A	467	LEU
1	A	492	LEU
1	A	495	VAL
1	A	497	ILE
1	A	500	LEU
1	A	501	MET
1	A	517	LEU
1	A	524	VAL
1	A	528	LEU
1	A	531	LYS
1	A	534	HIS
1	A	540	LEU
1	A	547	VAL
1	A	548	LEU
1	A	549	THR
1	A	550	VAL
1	A	557	VAL
1	A	560	GLU
1	A	571	LEU
1	A	572	TYR
1	A	576	THR
1	A	580	ILE
1	A	613	GLU
1	A	614	THR
1	A	622	GLU
1	A	624	VAL
1	A	627	THR
1	A	637	ARG
1	A	640	MET
1	A	641	THR
1	A	649	LEU
1	A	658	LEU
1	A	663	VAL
1	A	668	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	675	THR
1	A	677	ILE
1	A	678	LYS
1	A	690	LEU
1	A	699	GLN
1	A	716	GLU
1	A	730	ARG
1	A	740	VAL
1	A	745	LEU
1	A	747	VAL
1	A	760	VAL
1	A	761	GLU
1	A	783	LEU
1	A	788	ILE
1	A	793	LYS
1	A	804	ILE
1	A	813	LEU
1	A	823	TRP
1	A	824	ILE
1	A	826	ILE
1	A	829	ARG
1	A	833	MET
1	A	844	ILE
1	A	847	LYS
1	A	848	VAL
1	A	850	LEU
1	A	872	LEU
1	A	874	LEU
1	A	883	ILE
1	A	888	TYR
1	A	889	LEU
1	A	894	VAL
1	A	898	LEU
1	A	900	ILE
1	A	906	PHE
1	A	912	ILE
1	A	916	TRP
1	A	920	PHE
1	A	921	HIS
1	A	922	LEU
1	A	945	LEU
1	A	949	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	964	PHE
1	A	969	LEU
1	A	973	LEU
1	A	974	TYR
1	A	998	ILE
1	A	1012	ILE
1	A	1016	MET
1	A	1026	LEU
1	A	1031	ILE

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (15) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	12	ASN
1	A	46	GLN
1	A	87	GLN
1	A	118	GLN
1	A	198	GLN
1	A	215	GLN
1	A	238	GLN
1	A	245	HIS
1	A	279	ASN
1	A	337	ASN
1	A	413	ASN
1	A	415	HIS
1	A	564	GLN
1	A	744	GLN
1	A	838	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

Of 1 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

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	1015/1055 (96%)	0.08	23 (2%) 61 42	75, 176, 334, 611	0

All (23) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	141	GLU	4.5
1	A	370	LEU	3.4
1	A	776	TRP	2.9
1	A	938	ALA	2.9
1	A	386	LEU	2.9
1	A	761	GLU	2.9
1	A	407	ALA	2.9
1	A	176	GLU	2.8
1	A	866	GLU	2.7
1	A	54	PRO	2.7
1	A	554	LEU	2.7
1	A	381	MET	2.6
1	A	254	GLY	2.5
1	A	946	MET	2.5
1	A	372	LEU	2.2
1	A	823	TRP	2.2
1	A	735	ARG	2.2
1	A	765	ARG	2.2
1	A	499	ILE	2.1
1	A	589	LEU	2.1
1	A	85	PHE	2.1
1	A	375	CYS	2.0
1	A	288	VAL	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	CU1	A	1048	1/1	0.98	0.07	124,124,124,124	0

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.