



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Feb 1, 2016 – 12:50 AM GMT

PDB ID : 2BY4  
Title : SR CA(2+)-ATPASE IN THE HNE2 STATE COMPLEXED WITH THE THAPSIGARGIN DERIVATIVE BOC-12ADT.  
Authors : Jensen, A.L.; Moller, J.V.; Soehoel, H.; Denmeade, S.R.; Isaacs, J.T.; Olsen, C.E.; Christensen, S.B.; Nissen, P.  
Deposited on : 2005-07-28  
Resolution : 3.30 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](mailto:validation@mail.wwpdb.org)  
A user guide is available at  
<http://wwpdb.org/validation/2016/XrayValidationReportHelp>  
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

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

MolProbity : 4.02b-467  
Mogul : 1.7 (RC4), CSD as536be (2015)  
Xtriage (Phenix) : 1.9-1692  
EDS : rb-20026688  
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)  
Refmac : 5.8.0135  
CCP4 : 6.5.0  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : trunk26865

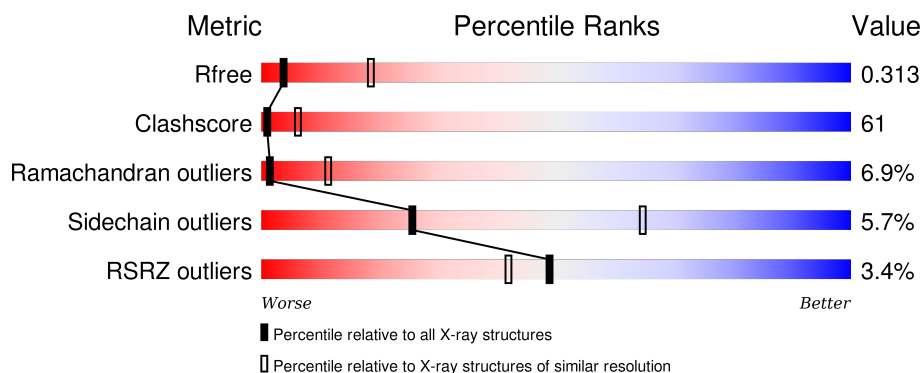
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

## *X-RAY DIFFRACTION*

The reported resolution of this entry is 3.30 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))
$R_{free}$	91344	2060 (3.40-3.20)
Clashscore	102246	1058 (3.38-3.22)
Ramachandran outliers	100387	1038 (3.38-3.22)
Sidechain outliers	100360	1037 (3.38-3.22)
RSRZ outliers	91569	2070 (3.40-3.20)

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 on the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for  $\geq 3$ , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. 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	994	<div> <div>3%</div> <div>27%</div> <div>64%</div> <div>8%</div> </div>

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
3	ACP	A	1996	-	-	-	X

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
5	NA	A	1999	-	-	-	X

## 2 Entry composition [i](#)

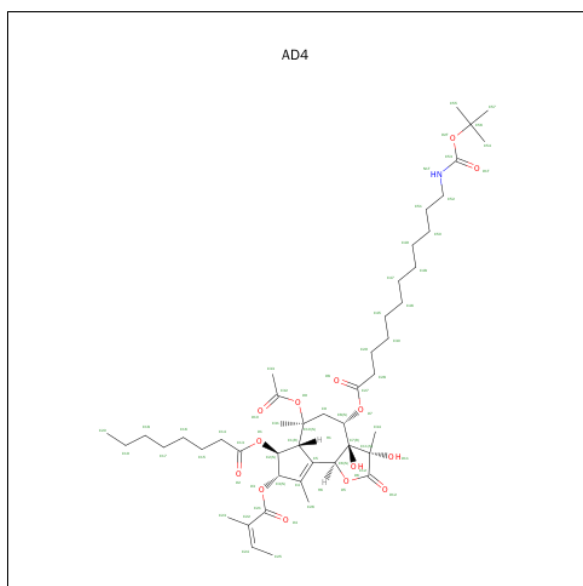
There are 5 unique types of molecules in this entry. The entry contains 7767 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

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 SARCOPLASMIC/ENDOPLASMIC RETICULUM CALCIUM ATPASE 1.

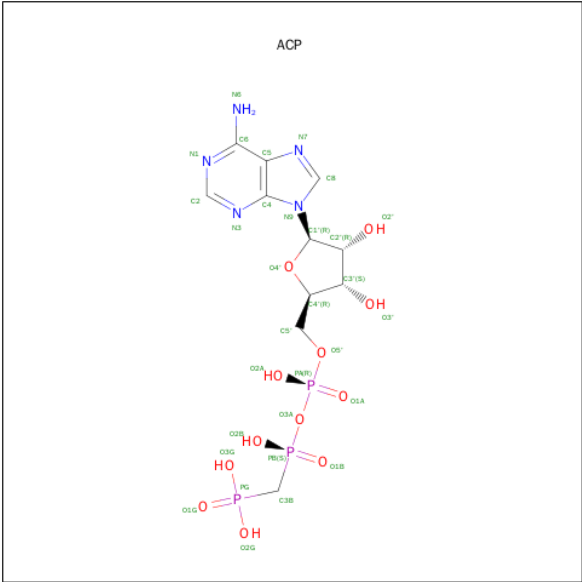
Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	994	7671	4876	1287	1451	57	0	0	0

- Molecule 2 is (3S,3AR,4S,6S,6AR,7S,8S,9BS)-6-(ACETYLOXY)-3,3A-DIHYDROXY-3,6,9-TRIMETHYL-8-{[(2Z)-2-METHYLBUT-2-ENOYL]OXY}-7-(OCTANOYLOXY)-2-OXO-2,3,3A,4,5,6,6A,7,8,9B-DECAHYDROAZULENO[4,5-B]FURAN-4-YL 12-[(TERT-BUTOXYCARBONYL)AMINO]DODECANOATE (three-letter code: AD4) (formula: C<sub>47</sub>H<sub>75</sub>NO<sub>14</sub>).



Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
			Total	C	N	O		
2	A	1	62	47	1	14	0	0

- Molecule 3 is PHOSPHOMETHYLPHOSPHONIC ACID ADENYLATE ESTER (three-letter code: ACP) (formula: C<sub>11</sub>H<sub>18</sub>N<sub>5</sub>O<sub>12</sub>P<sub>3</sub>).



Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
3	A	1	Total	C	N	O	P	0	0
			31	11	5	12	3		

- Molecule 4 is MAGNESIUM ION (three-letter code: MG) (formula: Mg).

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	A	2	Total	Mg	0	0
			2	2		

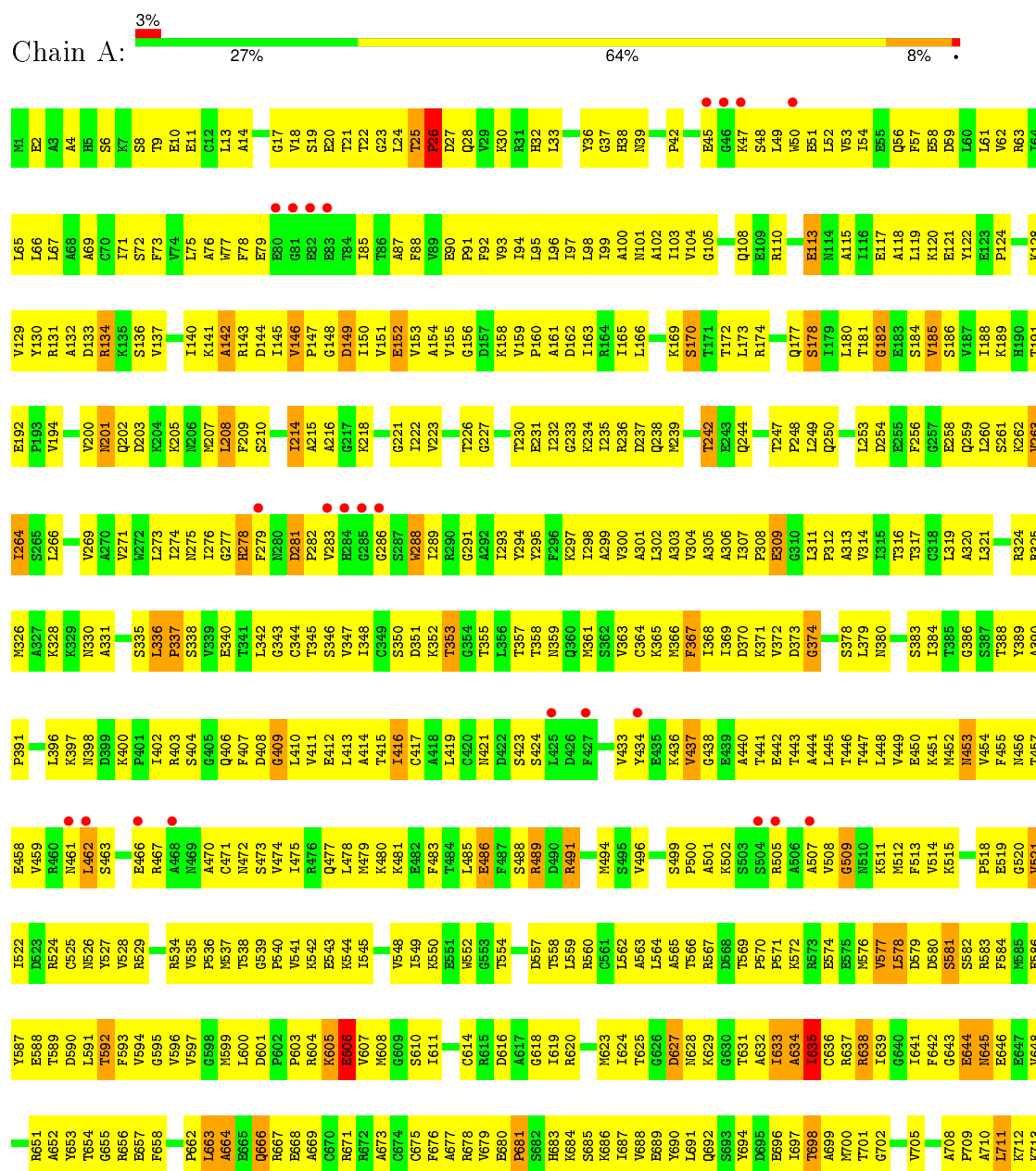
- Molecule 5 is SODIUM ION (three-letter code: NA) (formula: Na).

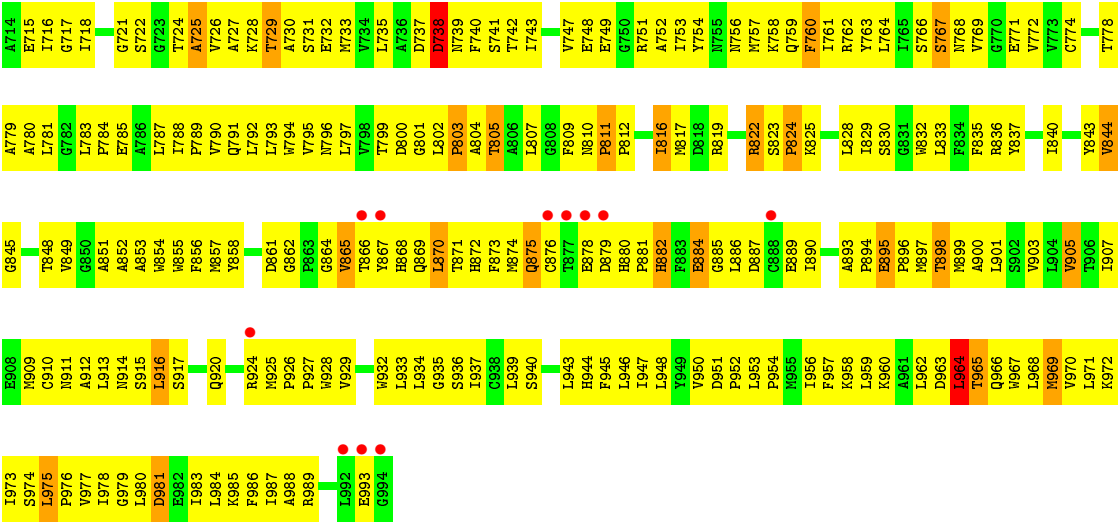
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
5	A	1	Total	Na	0	0
			1	1		

### 3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA and DNA chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of errors 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 ( $\text{RSRZ} > 2$ ). 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: SARCOPLASMIC/ENDOPLASMIC RETICULUM CALCIUM ATPASE 1





## 4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 41 21 2	Depositor
Cell constants a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	71.74Å 71.74Å 593.66Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	15.00 – 3.30 29.97 – 3.30	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	81.9 (15.00-3.30) 82.1 (29.97-3.30)	Depositor EDS
$R_{merge}$	0.16	Depositor
$R_{sym}$	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ <sup>1</sup>	1.51 (at 3.31Å)	Xtriage
Refinement program	CNS 1.1	Depositor
R, $R_{free}$	0.254 , 0.314 0.252 , 0.313	Depositor DCC
$R_{free}$ test set	610 reflections (3.03%)	DCC
Wilson B-factor (Å <sup>2</sup> )	93.2	Xtriage
Anisotropy	0.171	Xtriage
Bulk solvent $k_{sol}$ (e/Å <sup>3</sup> ), $B_{sol}$ (Å <sup>2</sup> )	0.29 , 66.2	EDS
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
L-test for twinning <sup>2</sup>	$\langle  L  \rangle = 0.40$ , $\langle L^2 \rangle = 0.23$	Xtriage
Outliers	0 of 24858 reflections	Xtriage
$F_o, F_c$ correlation	0.88	EDS
Total number of atoms	7767	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	80.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.02% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

<sup>1</sup>Intensities estimated from amplitudes.

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



## 5 Model quality [i](#)

### 5.1 Standard geometry [i](#)

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: NA, MG, ACP, AD4

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	0.48	0/7812	0.77	5/10592 (0.0%)

There are no bond length outliers.

All (5) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed( $^{\circ}$ )	Ideal( $^{\circ}$ )
1	A	336	LEU	C-N-CD	-17.84	81.36	120.60
1	A	336	LEU	C-N-CA	6.87	150.86	122.00
1	A	185	VAL	N-CA-C	-5.96	94.91	111.00
1	A	885	GLY	N-CA-C	-5.36	99.69	113.10
1	A	964	LEU	CA-CB-CG	5.13	127.10	115.30

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

### 5.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	7671	0	7764	956	0
2	A	62	0	75	11	0
3	A	31	0	14	8	0
4	A	2	0	0	0	0
5	A	1	0	0	0	0
All	All	7767	0	7853	958	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 61.

All (958) 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:247:THR:HG22	1:A:250:GLN:HG3	1.20	1.13
1:A:865:VAL:HG21	1:A:869:GLN:HB2	1.22	1.13
1:A:894:PRO:HA	1:A:958:LYS:HE3	1.26	1.11
1:A:453:ASN:HB3	1:A:471:CYS:SG	1.91	1.10
1:A:273:LEU:HD12	1:A:276:ILE:HD11	1.34	1.04
1:A:347:VAL:HG22	1:A:620:ARG:HB3	1.39	1.03
1:A:865:VAL:HG11	1:A:869:GLN:C	1.79	1.03
1:A:909:MET:HE3	1:A:937:ILE:HG23	1.42	1.01
1:A:963:ASP:HA	1:A:967:TRP:CD1	1.95	1.00
1:A:100:ALA:HA	1:A:103:ILE:HD12	1.40	1.00
1:A:963:ASP:HA	1:A:967:TRP:HD1	1.22	0.99
1:A:680:GLU:H	1:A:683:HIS:HD2	1.11	0.98
1:A:314:VAL:HG13	1:A:805:THR:HG22	1.43	0.98
1:A:281:ASP:H	1:A:282:PRO:HD2	1.28	0.98
1:A:155:VAL:HA	1:A:214:ILE:HD11	1.43	0.98
1:A:331:ALA:HB1	1:A:733:MET:HE1	1.46	0.97
1:A:227:GLY:O	1:A:230:THR:HG22	1.66	0.95
1:A:964:LEU:O	1:A:965:THR:HG23	1.67	0.94
1:A:350:SER:HA	1:A:701:THR:CG2	1.96	0.94
1:A:153:VAL:HG11	1:A:214:ILE:HG21	1.50	0.94
1:A:894:PRO:HA	1:A:958:LYS:CE	1.98	0.94
1:A:500:PRO:HB2	1:A:505:ARG:HB2	1.48	0.94
1:A:527:TYR:HB2	1:A:592:THR:HG23	1.51	0.93
1:A:281:ASP:H	1:A:282:PRO:CD	1.81	0.93
1:A:301:ALA:HA	1:A:789:PRO:HG3	1.49	0.93
1:A:350:SER:HA	1:A:701:THR:HG22	1.51	0.92
1:A:783:LEU:HD12	1:A:784:PRO:HD2	1.49	0.92
1:A:129:VAL:HG12	1:A:151:VAL:HG22	1.52	0.92
1:A:898:THR:HG22	1:A:958:LYS:CB	1.99	0.91
1:A:23:GLY:HA2	1:A:150:ILE:HD13	1.52	0.91
1:A:130:TYR:CE1	1:A:137:VAL:HG22	2.05	0.90
1:A:526:ASN:HD22	1:A:590:ASP:HA	1.37	0.90
1:A:964:LEU:HA	1:A:968:LEU:HG	1.53	0.89
1:A:549:ILE:HD11	1:A:596:VAL:HG11	1.54	0.89
1:A:581:SER:HA	1:A:584:PHE:CD2	2.08	0.88
1:A:311:LEU:HD23	2:A:1995:AD4:H491	1.53	0.88
1:A:337:PRO:HD2	1:A:338:SER:N	1.87	0.87

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:331:ALA:HB1	1:A:733:MET:CE	2.04	0.87
1:A:535:VAL:HG13	1:A:536:PRO:HD2	1.56	0.86
1:A:337:PRO:HD2	1:A:338:SER:H	1.40	0.86
1:A:397:LYS:O	1:A:400:LYS:HG2	1.76	0.85
1:A:39:ASN:HB2	1:A:226:THR:OG1	1.76	0.85
1:A:408:ASP:O	1:A:411:VAL:HG22	1.76	0.85
1:A:363:VAL:HG11	1:A:448:LEU:HD22	1.57	0.84
1:A:155:VAL:CA	1:A:214:ILE:HD11	2.07	0.84
1:A:480:LYS:N	1:A:499:SER:O	2.11	0.83
1:A:133:ASP:O	1:A:134:ARG:HG3	1.80	0.82
1:A:478:LEU:O	1:A:479:MET:HG2	1.79	0.82
1:A:189:LYS:HD2	1:A:205:LYS:O	1.80	0.82
1:A:342:LEU:O	1:A:345:THR:HG23	1.80	0.82
1:A:898:THR:HG22	1:A:958:LYS:HB3	1.62	0.81
1:A:57:PHE:HE1	1:A:102:ALA:HB2	1.43	0.81
1:A:386:GLY:HA3	1:A:451:LYS:NZ	1.96	0.81
1:A:128:LYS:O	1:A:151:VAL:HG13	1.81	0.80
1:A:413:LEU:HD12	1:A:564:LEU:HD12	1.64	0.80
1:A:926:PRO:O	1:A:929:VAL:HG23	1.80	0.80
1:A:140:ILE:HD11	1:A:145:ILE:HG12	1.64	0.80
1:A:898:THR:HG22	1:A:958:LYS:HB2	1.62	0.79
1:A:304:VAL:HB	1:A:793:LEU:HD21	1.65	0.79
1:A:424:SER:OG	1:A:437:VAL:HG11	1.81	0.79
1:A:963:ASP:CA	1:A:967:TRP:HD1	1.96	0.79
1:A:560:ARG:CZ	3:A:1996:ACP:H8	2.13	0.79
1:A:337:PRO:CD	1:A:338:SER:H	1.94	0.79
1:A:607:VAL:O	1:A:611:ILE:HG12	1.83	0.79
1:A:872:HIS:HB3	1:A:875:GLN:HE21	1.47	0.78
1:A:337:PRO:CD	1:A:338:SER:N	2.43	0.78
1:A:680:GLU:H	1:A:683:HIS:CD2	2.01	0.78
1:A:840:ILE:O	1:A:844:VAL:HG13	1.84	0.78
1:A:501:ALA:H	1:A:505:ARG:NH2	1.81	0.77
1:A:836:ARG:HG2	1:A:984:LEU:HD13	1.66	0.77
1:A:263:VAL:HA	1:A:266:LEU:HD12	1.66	0.77
1:A:402:ILE:HG22	1:A:403:ARG:O	1.84	0.77
1:A:638:ARG:HH11	1:A:638:ARG:HG3	1.50	0.77
1:A:369:ILE:HD11	1:A:545:ILE:HD11	1.68	0.76
1:A:155:VAL:HA	1:A:214:ILE:CD1	2.15	0.76
1:A:336:LEU:N	1:A:337:PRO:HD3	1.99	0.76
1:A:538:THR:OG1	1:A:541:VAL:HG23	1.85	0.76
1:A:909:MET:HE2	1:A:940:SER:HB2	1.69	0.75

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:565:ALA:HA	1:A:594:VAL:HG23	1.67	0.75
1:A:389:TYR:HE2	1:A:436:LYS:HB2	1.51	0.75
1:A:900:ALA:O	1:A:903:VAL:HG12	1.86	0.75
1:A:397:LYS:HB3	1:A:402:ILE:CD1	2.17	0.75
1:A:725:ALA:O	1:A:729:THR:HG23	1.87	0.75
1:A:671:ARG:HB3	1:A:694:TYR:CE2	2.21	0.74
1:A:404:SER:OG	1:A:452:MET:HB2	1.87	0.74
1:A:757:MET:HA	1:A:760:PHE:CE2	2.21	0.74
1:A:254:ASP:O	1:A:258:GLU:HG2	1.88	0.74
1:A:49:LEU:O	1:A:53:VAL:HG23	1.87	0.74
1:A:19:SER:OG	1:A:22:THR:HB	1.87	0.74
1:A:397:LYS:HB3	1:A:402:ILE:HD11	1.69	0.74
1:A:500:PRO:CB	1:A:505:ARG:HB2	2.17	0.74
1:A:388:THR:HG22	1:A:390:ALA:H	1.52	0.74
1:A:56:GLN:OE1	1:A:105:GLY:HA3	1.88	0.74
1:A:654:THR:HG22	1:A:657:GLU:CG	2.18	0.74
1:A:950:VAL:O	1:A:954:PRO:HD2	1.88	0.73
1:A:560:ARG:NH2	3:A:1996:ACP:H8	2.03	0.73
1:A:69:ALA:HB2	1:A:94:ILE:CG2	2.18	0.73
1:A:367:PHE:HZ	1:A:545:ILE:HG23	1.54	0.73
1:A:759:GLN:HE22	1:A:762:ARG:HH11	1.33	0.73
1:A:317:THR:O	1:A:321:LEU:HG	1.89	0.73
1:A:298:ILE:CD1	1:A:779:ALA:HB2	2.19	0.73
1:A:897:MET:SD	1:A:958:LYS:HE2	2.27	0.73
1:A:446:THR:O	1:A:449:VAL:HG22	1.87	0.73
1:A:367:PHE:CD2	1:A:596:VAL:HG22	2.23	0.73
1:A:470:ALA:O	1:A:474:VAL:HG13	1.89	0.73
1:A:25:THR:HA	1:A:132:ALA:HB3	1.71	0.72
1:A:281:ASP:N	1:A:282:PRO:HD2	2.04	0.72
1:A:913:LEU:C	1:A:915:SER:H	1.92	0.72
1:A:471:CYS:O	1:A:474:VAL:HG22	1.88	0.72
1:A:130:TYR:HE1	1:A:137:VAL:HG22	1.55	0.72
1:A:909:MET:HE3	1:A:937:ILE:CG2	2.19	0.71
1:A:518:PRO:O	1:A:522:ILE:HB	1.90	0.71
1:A:298:ILE:HD11	1:A:779:ALA:HB2	1.73	0.71
1:A:170:SER:OG	1:A:218:LYS:N	2.23	0.71
1:A:411:VAL:HA	1:A:454:VAL:HG11	1.72	0.71
1:A:336:LEU:HD12	1:A:336:LEU:O	1.91	0.71
1:A:763:TYR:CZ	1:A:912:ALA:HB2	2.25	0.71
1:A:783:LEU:HD12	1:A:784:PRO:CD	2.20	0.71
1:A:368:ILE:HD13	1:A:410:LEU:HD23	1.71	0.71

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:24:LEU:HD13	1:A:149:ASP:HA	1.73	0.71
1:A:508:VAL:O	1:A:509:GLY:O	2.08	0.71
1:A:249:LEU:O	1:A:253:LEU:HD23	1.90	0.70
1:A:386:GLY:HA3	1:A:451:LYS:HZ3	1.52	0.70
1:A:69:ALA:HB2	1:A:94:ILE:HG21	1.71	0.70
1:A:680:GLU:CB	1:A:681:PRO:HD2	2.22	0.70
1:A:383:SER:C	1:A:384:ILE:HD12	2.12	0.70
1:A:608:MET:SD	1:A:639:ILE:HA	2.32	0.70
1:A:897:MET:HB2	1:A:958:LYS:HE2	1.74	0.69
1:A:99:ILE:O	1:A:103:ILE:HG13	1.92	0.69
1:A:759:GLN:HE22	1:A:762:ARG:NH1	1.90	0.69
1:A:764:LEU:HD21	1:A:804:ALA:HB2	1.74	0.69
1:A:947:ILE:HG22	1:A:947:ILE:O	1.92	0.69
1:A:99:ILE:HG22	1:A:103:ILE:HD11	1.73	0.69
1:A:39:ASN:O	1:A:143:ARG:HA	1.92	0.69
1:A:32:HIS:HB3	1:A:146:VAL:HG11	1.73	0.69
1:A:155:VAL:N	1:A:214:ILE:HD11	2.07	0.69
1:A:389:TYR:CE2	1:A:436:LYS:HB2	2.27	0.69
1:A:743:ILE:O	1:A:747:VAL:HG23	1.92	0.69
1:A:966:GLN:O	1:A:970:VAL:HG23	1.93	0.69
1:A:855:TRP:CZ2	1:A:895:GLU:HG3	2.27	0.68
1:A:833:LEU:HD11	1:A:837:TYR:CE2	2.28	0.68
1:A:473:SER:O	1:A:477:GLN:HG3	1.93	0.68
1:A:185:VAL:HG12	1:A:186:SER:N	2.09	0.68
1:A:312:PRO:HD3	2:A:1995:AD4:H512	1.75	0.68
1:A:909:MET:CE	1:A:940:SER:HB2	2.23	0.68
1:A:24:LEU:HA	1:A:28:GLN:OE1	1.93	0.68
1:A:925:MET:HE3	1:A:929:VAL:HG11	1.75	0.68
1:A:940:SER:O	1:A:943:LEU:HB2	1.93	0.68
1:A:925:MET:CE	1:A:929:VAL:HG11	2.24	0.68
1:A:979:GLY:O	1:A:983:ILE:HG13	1.93	0.68
1:A:174:ARG:HD2	1:A:186:SER:HB2	1.74	0.68
1:A:150:ILE:HD12	1:A:150:ILE:N	2.08	0.68
1:A:791:GLN:HE22	1:A:897:MET:HE3	1.58	0.68
1:A:474:VAL:O	1:A:478:LEU:HG	1.93	0.68
1:A:901:LEU:O	1:A:905:VAL:HG23	1.93	0.68
1:A:563:ALA:C	1:A:564:LEU:HD23	2.14	0.67
1:A:522:ILE:CG2	1:A:542:LYS:HE3	2.23	0.67
1:A:680:GLU:HB3	1:A:681:PRO:HD2	1.76	0.67
1:A:147:PRO:HA	1:A:223:VAL:HG12	1.76	0.67
1:A:309:GLU:O	1:A:312:PRO:HD2	1.95	0.67

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:188:ILE:HG22	1:A:189:LYS:N	2.10	0.67
1:A:355:THR:HG22	1:A:738:ASP:O	1.94	0.67
1:A:286:GLY:C	1:A:288:TRP:H	1.96	0.67
1:A:521:VAL:HG21	1:A:563:ALA:HB3	1.75	0.67
1:A:214:ILE:HG13	1:A:214:ILE:O	1.95	0.67
1:A:898:THR:HG21	1:A:959:LEU:O	1.95	0.67
1:A:513:PHE:HD1	1:A:566:THR:HG22	1.61	0.66
1:A:788:ILE:HG23	1:A:789:PRO:HD2	1.77	0.66
1:A:901:LEU:O	1:A:901:LEU:HD23	1.95	0.66
1:A:526:ASN:ND2	1:A:590:ASP:HA	2.10	0.66
1:A:801:GLY:O	1:A:805:THR:HG23	1.94	0.66
1:A:894:PRO:CA	1:A:958:LYS:HE3	2.17	0.66
1:A:927:PRO:HB2	1:A:934:LEU:HD21	1.78	0.66
1:A:896:PRO:O	1:A:899:MET:HB2	1.96	0.66
1:A:911:ASN:HA	1:A:914:ASN:HD22	1.60	0.66
1:A:475:ILE:HA	1:A:478:LEU:HD12	1.77	0.66
1:A:638:ARG:NH1	1:A:638:ARG:HG3	2.10	0.66
1:A:737:ASP:OD2	1:A:739:ASN:HB2	1.96	0.66
1:A:273:LEU:HD12	1:A:276:ILE:CD1	2.20	0.65
1:A:879:ASP:CB	1:A:882:HIS:HB2	2.25	0.65
1:A:247:THR:HG23	1:A:249:LEU:H	1.61	0.65
1:A:914:ASN:HB3	1:A:981:ASP:OD2	1.95	0.65
1:A:879:ASP:HB3	1:A:882:HIS:HB2	1.78	0.65
1:A:909:MET:HE1	1:A:937:ILE:HA	1.79	0.65
1:A:749:GLU:O	1:A:753:ILE:HG12	1.97	0.65
1:A:32:HIS:CB	1:A:146:VAL:HG11	2.27	0.65
1:A:781:LEU:O	1:A:871:THR:HG23	1.97	0.65
1:A:49:LEU:HD23	1:A:49:LEU:N	2.12	0.65
1:A:900:ALA:HA	1:A:903:VAL:HG12	1.79	0.65
1:A:314:VAL:CG1	1:A:805:THR:HG22	2.23	0.64
1:A:865:VAL:HG11	1:A:869:GLN:O	1.96	0.64
1:A:788:ILE:HB	1:A:791:GLN:NE2	2.13	0.64
1:A:188:ILE:HD12	1:A:188:ILE:N	2.13	0.64
1:A:791:GLN:NE2	1:A:897:MET:HE3	2.12	0.64
1:A:247:THR:HG22	1:A:250:GLN:CG	2.14	0.64
1:A:8:SER:OG	1:A:11:GLU:HG3	1.97	0.64
1:A:515:LYS:O	1:A:515:LYS:HG3	1.97	0.64
1:A:943:LEU:O	1:A:946:LEU:N	2.31	0.63
1:A:986:PHE:CE1	1:A:989:ARG:HD2	2.32	0.63
1:A:247:THR:O	1:A:249:LEU:N	2.32	0.63
1:A:335:SER:O	1:A:338:SER:HB3	1.98	0.63

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:90:GLU:HB3	1:A:91:PRO:CD	2.29	0.63
1:A:643:GLY:O	1:A:644:GLU:C	2.35	0.63
1:A:910:CYS:HA	1:A:913:LEU:HD12	1.80	0.63
1:A:478:LEU:HA	1:A:505:ARG:NH1	2.13	0.63
1:A:56:GLN:C	1:A:57:PHE:HD1	2.02	0.63
1:A:963:ASP:CA	1:A:967:TRP:CD1	2.77	0.63
1:A:203:ASP:OD1	1:A:489:ARG:HD3	1.98	0.63
1:A:288:TRP:O	1:A:291:GLY:N	2.31	0.63
1:A:247:THR:C	1:A:249:LEU:H	2.02	0.63
1:A:415:THR:HA	1:A:475:ILE:HG21	1.79	0.63
1:A:946:LEU:O	1:A:953:LEU:HD12	1.99	0.63
1:A:416:ILE:HD11	1:A:566:THR:HG23	1.79	0.63
1:A:325:ARG:NH1	1:A:753:ILE:HD11	2.14	0.62
1:A:867:TYR:O	1:A:868:HIS:HB2	1.99	0.62
1:A:250:GLN:O	1:A:253:LEU:HB2	1.99	0.62
1:A:708:ALA:N	1:A:709:PRO:HD2	2.14	0.62
1:A:629:LYS:HE3	1:A:652:ALA:O	1.99	0.62
1:A:897:MET:CE	1:A:958:LYS:HE2	2.29	0.62
1:A:488:SER:OG	1:A:491:ARG:HG2	2.00	0.62
1:A:249:LEU:HB2	1:A:340:GLU:OE1	1.99	0.62
1:A:853:ALA:O	1:A:856:PHE:HB2	1.99	0.62
1:A:370:ASP:HB2	1:A:380:ASN:OD1	1.99	0.62
1:A:909:MET:CE	1:A:937:ILE:HA	2.30	0.62
1:A:879:ASP:O	1:A:882:HIS:N	2.30	0.62
1:A:72:SER:OG	1:A:91:PRO:HD3	1.99	0.62
1:A:643:GLY:H	1:A:646:GLU:HG3	1.64	0.62
1:A:717:GLY:O	1:A:731:SER:HB2	2.00	0.62
1:A:178:SER:HA	1:A:184:SER:HB3	1.82	0.62
1:A:247:THR:CG2	1:A:250:GLN:HG3	2.14	0.62
1:A:515:LYS:HE3	3:A:1996:ACP:N1	2.14	0.62
1:A:231:GLU:HA	1:A:234:LYS:HD3	1.82	0.62
1:A:130:TYR:CZ	1:A:137:VAL:HG22	2.34	0.61
1:A:457:THR:O	1:A:459:VAL:HG13	1.99	0.61
1:A:501:ALA:N	1:A:505:ARG:NH2	2.48	0.61
1:A:751:ARG:HD2	1:A:817:MET:HE2	1.83	0.61
1:A:536:PRO:O	1:A:538:THR:HG23	2.00	0.61
1:A:485:LEU:HD22	1:A:584:PHE:CE1	2.36	0.61
1:A:424:SER:HA	1:A:446:THR:HG21	1.82	0.61
1:A:174:ARG:NH1	1:A:186:SER:OG	2.34	0.61
1:A:848:THR:HA	1:A:903:VAL:HG11	1.83	0.61
1:A:658:PHE:CZ	1:A:666:GLN:HG3	2.36	0.61

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:795:VAL:HA	1:A:799:THR:OG1	2.00	0.60
1:A:185:VAL:HG12	1:A:186:SER:H	1.65	0.60
1:A:654:THR:HG22	1:A:657:GLU:HG3	1.83	0.60
1:A:178:SER:HB3	1:A:184:SER:CB	2.31	0.60
1:A:984:LEU:HA	1:A:987:ILE:HG12	1.81	0.60
1:A:18:VAL:CG2	1:A:24:LEU:HD12	2.31	0.60
1:A:203:ASP:HA	1:A:205:LYS:HE3	1.84	0.60
1:A:350:SER:HA	1:A:701:THR:HG21	1.82	0.60
1:A:772:VAL:HG21	2:A:1995:AD4:H231	1.84	0.60
1:A:494:MET:O	1:A:514:VAL:HG23	2.01	0.60
1:A:855:TRP:CE2	1:A:895:GLU:HB2	2.36	0.60
1:A:32:HIS:HB3	1:A:146:VAL:CG1	2.30	0.60
1:A:986:PHE:C	1:A:988:ALA:H	2.04	0.60
1:A:13:LEU:HD11	1:A:166:LEU:HD22	1.84	0.60
1:A:122:TYR:HE2	1:A:726:VAL:HG21	1.67	0.60
1:A:830:SER:O	1:A:833:LEU:HB3	2.01	0.59
1:A:263:VAL:HG12	1:A:264:ILE:N	2.16	0.59
1:A:311:LEU:HB3	1:A:312:PRO:HD3	1.84	0.59
1:A:283:VAL:O	1:A:283:VAL:HG12	2.02	0.59
1:A:57:PHE:CE1	1:A:102:ALA:HB2	2.33	0.59
1:A:319:LEU:HG	1:A:757:MET:HE1	1.85	0.59
1:A:403:ARG:HB3	1:A:406:GLN:HG3	1.84	0.59
1:A:748:GLU:HG3	1:A:817:MET:CG	2.33	0.59
1:A:147:PRO:HA	1:A:223:VAL:CG1	2.33	0.59
1:A:560:ARG:HH21	3:A:1996:ACP:H3'	1.67	0.59
1:A:483:PHE:HE1	1:A:485:LEU:HD21	1.68	0.59
1:A:178:SER:CA	1:A:184:SER:HB3	2.33	0.59
1:A:784:PRO:CD	1:A:870:LEU:HD11	2.33	0.59
1:A:623:MET:SD	1:A:625:THR:HG21	2.43	0.59
1:A:483:PHE:CE1	1:A:578:LEU:HD22	2.38	0.59
1:A:113:GLU:HB2	1:A:117:GLU:OE1	2.03	0.58
1:A:667:ARG:HA	1:A:690:TYR:CD1	2.39	0.58
1:A:757:MET:O	1:A:761:ILE:HG13	2.03	0.58
1:A:475:ILE:HA	1:A:478:LEU:CD1	2.34	0.58
1:A:527:TYR:HB3	1:A:534:ARG:HG2	1.85	0.58
1:A:648:VAL:O	1:A:648:VAL:HG12	2.02	0.58
1:A:525:CYS:HA	1:A:591:LEU:O	2.03	0.58
1:A:153:VAL:CG1	1:A:214:ILE:HG21	2.30	0.58
1:A:436:LYS:HG3	1:A:443:THR:HG21	1.86	0.58
1:A:363:VAL:HG21	1:A:448:LEU:HB2	1.86	0.58
1:A:939:LEU:O	1:A:943:LEU:HD12	2.03	0.58

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:522:ILE:HG22	1:A:542:LYS:HE3	1.85	0.58
1:A:6:SER:HA	1:A:194:VAL:O	2.04	0.58
1:A:433:VAL:HG12	1:A:434:TYR:N	2.18	0.58
1:A:368:ILE:HG22	1:A:594:VAL:O	2.04	0.58
1:A:232:ILE:O	1:A:235:ILE:N	2.35	0.58
1:A:791:GLN:HE22	1:A:897:MET:CE	2.16	0.57
1:A:478:LEU:O	1:A:479:MET:CG	2.51	0.57
1:A:155:VAL:HG23	1:A:216:ALA:HA	1.86	0.57
1:A:524:ARG:HD2	1:A:588:GLU:O	2.04	0.57
1:A:72:SER:HB3	1:A:91:PRO:HB3	1.87	0.57
1:A:348:ILE:HD13	1:A:743:ILE:CG2	2.34	0.57
1:A:188:ILE:HD12	1:A:188:ILE:H	1.68	0.57
1:A:642:PHE:CZ	1:A:648:VAL:HG13	2.39	0.57
1:A:586:GLU:O	1:A:589:THR:HG23	2.04	0.57
1:A:822:ARG:HG2	1:A:823:SER:O	2.05	0.57
1:A:920:GLN:HB3	1:A:924:ARG:HD3	1.86	0.57
1:A:943:LEU:O	1:A:946:LEU:HB3	2.03	0.57
1:A:271:VAL:O	1:A:274:ILE:HG13	2.04	0.57
1:A:314:VAL:HG13	1:A:805:THR:CG2	2.28	0.57
1:A:756:ASN:O	1:A:757:MET:C	2.42	0.57
1:A:367:PHE:CE2	1:A:596:VAL:HG22	2.40	0.57
1:A:728:LYS:C	1:A:730:ALA:H	2.07	0.57
1:A:119:LEU:C	1:A:121:GLU:H	2.08	0.57
1:A:59:ASP:OD2	1:A:61:LEU:HB2	2.04	0.57
1:A:933:LEU:O	1:A:937:ILE:HG13	2.05	0.57
1:A:501:ALA:N	1:A:505:ARG:HH21	2.03	0.57
1:A:521:VAL:CG2	1:A:563:ALA:HB3	2.35	0.57
1:A:558:THR:HG22	1:A:634:ALA:HB1	1.87	0.57
1:A:230:THR:HG23	1:A:233:GLY:H	1.69	0.57
1:A:242:THR:HG23	1:A:712:LYS:HD3	1.87	0.57
1:A:359:ASN:HA	1:A:601:ASP:OD1	2.05	0.57
1:A:897:MET:HB2	1:A:958:LYS:HG3	1.87	0.56
1:A:915:SER:C	1:A:917:SER:N	2.59	0.56
1:A:666:GLN:HG2	1:A:690:TYR:OH	2.05	0.56
1:A:512:MET:HB3	1:A:567:ARG:HB3	1.87	0.56
1:A:192:GLU:OE1	1:A:580:ASP:HB3	2.05	0.56
1:A:61:LEU:HD12	2:A:1995:AD4:H522	1.87	0.56
1:A:308:PRO:HG2	2:A:1995:AD4:H511	1.87	0.56
1:A:783:LEU:CD2	1:A:849:VAL:HG13	2.35	0.56
1:A:388:THR:HG22	1:A:389:TYR:N	2.20	0.56
1:A:809:PHE:HD2	1:A:932:TRP:CD1	2.24	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:964:LEU:O	1:A:965:THR:CG2	2.50	0.56
1:A:680:GLU:N	1:A:683:HIS:HD2	1.93	0.56
1:A:462:LEU:HB3	1:A:466:GLU:OE1	2.05	0.56
1:A:453:ASN:CB	1:A:471:CYS:SG	2.81	0.56
1:A:357:THR:HA	1:A:603:PRO:HA	1.87	0.56
1:A:564:LEU:HD23	1:A:564:LEU:N	2.21	0.56
1:A:760:PHE:C	1:A:760:PHE:CD1	2.79	0.56
1:A:624:ILE:HG23	1:A:679:VAL:HG21	1.88	0.56
1:A:581:SER:HA	1:A:584:PHE:CE2	2.41	0.56
1:A:38:HIS:CD2	1:A:143:ARG:HH21	2.23	0.56
1:A:894:PRO:HG2	1:A:895:GLU:OE2	2.05	0.56
1:A:791:GLN:NE2	1:A:897:MET:CE	2.69	0.56
1:A:691:LEU:O	1:A:696:GLU:HB2	2.06	0.56
1:A:534:ARG:O	1:A:535:VAL:HG23	2.06	0.56
1:A:311:LEU:HD13	1:A:764:LEU:HD12	1.86	0.55
1:A:540:PRO:HG2	1:A:541:VAL:H	1.72	0.55
1:A:727:ALA:O	1:A:730:ALA:HB3	2.06	0.55
1:A:856:PHE:O	1:A:864:GLY:HA3	2.06	0.55
1:A:483:PHE:CZ	1:A:578:LEU:HD22	2.41	0.55
1:A:800:ASP:C	1:A:803:PRO:HD2	2.27	0.55
1:A:95:LEU:O	1:A:99:ILE:HG13	2.06	0.55
1:A:440:ALA:HA	1:A:443:THR:HG22	1.89	0.55
1:A:748:GLU:HG3	1:A:817:MET:HE3	1.88	0.55
1:A:911:ASN:HA	1:A:914:ASN:ND2	2.21	0.55
1:A:905:VAL:HG21	1:A:944:HIS:CD2	2.42	0.55
1:A:763:TYR:CE1	1:A:912:ALA:HB2	2.42	0.55
1:A:413:LEU:CD1	1:A:564:LEU:HD12	2.36	0.55
1:A:458:GLU:H	1:A:458:GLU:CD	2.10	0.55
1:A:47:LYS:HB3	1:A:51:GLU:HB2	1.87	0.55
1:A:856:PHE:HB3	1:A:870:LEU:HD22	1.89	0.55
1:A:483:PHE:CE1	1:A:485:LEU:HD21	2.42	0.55
1:A:242:THR:CG2	1:A:712:LYS:HD3	2.36	0.55
1:A:950:VAL:O	1:A:954:PRO:CD	2.55	0.55
1:A:160:PRO:O	1:A:160:PRO:HG2	2.07	0.55
1:A:2:GLU:C	1:A:4:ALA:H	2.09	0.55
1:A:305:ALA:O	1:A:772:VAL:HG23	2.07	0.55
1:A:75:LEU:C	1:A:77:TRP:H	2.11	0.55
1:A:718:ILE:HD12	1:A:743:ILE:HD13	1.89	0.54
1:A:244:GLN:CD	1:A:244:GLN:H	2.10	0.54
1:A:636:CYS:HB3	1:A:641:ILE:HB	1.88	0.54
1:A:535:VAL:HG13	1:A:536:PRO:CD	2.33	0.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:644:GLU:O	1:A:645:ASN:HB2	2.07	0.54
1:A:260:LEU:HD11	1:A:306:ALA:HB1	1.89	0.54
1:A:165:ILE:HD11	1:A:208:LEU:CD2	2.37	0.54
1:A:373:ASP:O	1:A:374:GLY:C	2.45	0.54
1:A:266:LEU:O	1:A:269:VAL:HB	2.07	0.54
1:A:643:GLY:O	1:A:646:GLU:HG2	2.06	0.54
1:A:355:THR:O	1:A:604:ARG:NH2	2.40	0.54
1:A:386:GLY:HA3	1:A:451:LYS:HZ1	1.72	0.54
1:A:654:THR:HG22	1:A:657:GLU:OE1	2.08	0.54
1:A:273:LEU:O	1:A:276:ILE:HG13	2.07	0.54
1:A:122:TYR:O	1:A:158:LYS:HD3	2.08	0.54
1:A:163:ILE:HB	1:A:208:LEU:HB2	1.90	0.54
1:A:180:LEU:HD12	1:A:180:LEU:C	2.28	0.54
1:A:783:LEU:HD23	1:A:849:VAL:HG13	1.90	0.54
1:A:854:TRP:C	1:A:856:PHE:N	2.61	0.54
1:A:101:ASN:O	1:A:104:VAL:N	2.41	0.54
1:A:788:ILE:HG22	1:A:790:VAL:H	1.73	0.54
1:A:584:PHE:O	1:A:588:GLU:HG3	2.07	0.54
1:A:577:VAL:CG2	1:A:583:ARG:HD3	2.38	0.54
1:A:865:VAL:O	1:A:865:VAL:HG13	2.07	0.53
1:A:174:ARG:HH11	1:A:186:SER:CB	2.21	0.53
1:A:788:ILE:HG22	1:A:790:VAL:N	2.23	0.53
1:A:804:ALA:O	1:A:807:LEU:HB2	2.08	0.53
1:A:915:SER:O	1:A:917:SER:N	2.41	0.53
1:A:644:GLU:O	1:A:645:ASN:CB	2.55	0.53
1:A:758:LYS:HG2	1:A:759:GLN:N	2.23	0.53
1:A:33:LEU:HD12	1:A:37:GLY:O	2.08	0.53
1:A:748:GLU:HG3	1:A:817:MET:SD	2.48	0.53
1:A:968:LEU:O	1:A:972:LYS:HG2	2.07	0.53
1:A:529:ARG:HG3	1:A:529:ARG:HH11	1.73	0.53
1:A:534:ARG:HG3	1:A:592:THR:CG2	2.38	0.53
1:A:166:LEU:HD11	1:A:222:ILE:HB	1.89	0.53
1:A:162:ASP:OD1	1:A:209:PHE:HA	2.08	0.53
1:A:774:CYS:SG	1:A:787:LEU:HD12	2.47	0.53
1:A:348:ILE:HA	1:A:699:ALA:HB3	1.90	0.53
1:A:791:GLN:HB3	1:A:901:LEU:HD12	1.91	0.53
1:A:442:GLU:CG	3:A:1996:ACP:HN62	2.22	0.53
1:A:11:GLU:O	1:A:14:ALA:HB3	2.09	0.53
1:A:67:LEU:O	1:A:71:ILE:HG13	2.09	0.53
1:A:572:LYS:HB3	1:A:574:GLU:OE2	2.07	0.53
1:A:901:LEU:C	1:A:901:LEU:HD23	2.29	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:848:THR:HG22	1:A:903:VAL:HG13	1.89	0.53
1:A:444:ALA:O	1:A:447:THR:HB	2.09	0.53
1:A:200:VAL:O	1:A:201:ASN:C	2.48	0.53
1:A:325:ARG:HH12	1:A:753:ILE:CD1	2.21	0.53
1:A:894:PRO:O	1:A:898:THR:HG23	2.09	0.53
1:A:90:GLU:HB3	1:A:91:PRO:HD3	1.91	0.53
1:A:478:LEU:O	1:A:505:ARG:CD	2.56	0.53
1:A:150:ILE:HD12	1:A:150:ILE:H	1.74	0.53
1:A:528:VAL:HG23	1:A:528:VAL:O	2.07	0.52
1:A:889:GLU:O	1:A:889:GLU:HG2	2.09	0.52
1:A:974:SER:C	1:A:976:PRO:HD2	2.29	0.52
1:A:71:ILE:O	1:A:75:LEU:HG	2.09	0.52
1:A:320:ALA:O	1:A:324:ARG:HG3	2.09	0.52
1:A:85:ILE:C	1:A:87:ALA:H	2.11	0.52
1:A:391:PRO:HD2	1:A:434:TYR:CD2	2.44	0.52
1:A:319:LEU:HG	1:A:757:MET:CE	2.39	0.52
1:A:947:ILE:CG2	1:A:947:ILE:O	2.58	0.52
1:A:449:VAL:HG23	1:A:450:GLU:N	2.24	0.52
1:A:352:LYS:NZ	1:A:627:ASP:OD2	2.36	0.52
1:A:24:LEU:HD13	1:A:149:ASP:CA	2.40	0.52
1:A:75:LEU:HD13	1:A:297:LYS:HB3	1.91	0.52
1:A:754:TYR:HA	1:A:757:MET:HB3	1.90	0.52
1:A:788:ILE:H	1:A:791:GLN:CD	2.12	0.52
1:A:421:ASN:ND2	1:A:446:THR:HG23	2.25	0.52
1:A:442:GLU:HG2	1:A:515:LYS:NZ	2.24	0.52
1:A:913:LEU:C	1:A:915:SER:N	2.63	0.52
1:A:950:VAL:HG12	1:A:952:PRO:HD2	1.90	0.52
1:A:141:LYS:O	1:A:144:ASP:N	2.41	0.52
1:A:286:GLY:C	1:A:288:TRP:N	2.62	0.52
1:A:119:LEU:O	1:A:121:GLU:N	2.43	0.52
1:A:794:TRP:HZ2	1:A:943:LEU:HD22	1.73	0.52
1:A:560:ARG:NH2	3:A:1996:ACP:H3'	2.24	0.52
1:A:9:THR:HG22	1:A:10:GLU:OE1	2.09	0.52
1:A:662:PRO:O	1:A:664:ALA:N	2.43	0.52
1:A:400:LYS:O	1:A:402:ILE:HG13	2.10	0.52
1:A:676:PHE:CE2	1:A:687:ILE:HD13	2.45	0.51
1:A:539:GLY:N	1:A:540:PRO:HD2	2.25	0.51
1:A:876:CYS:SG	1:A:884:GLU:HG3	2.51	0.51
1:A:836:ARG:NH2	1:A:981:ASP:OD2	2.43	0.51
1:A:65:LEU:HD12	1:A:98:LEU:HD21	1.93	0.51
1:A:643:GLY:H	1:A:646:GLU:CG	2.24	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:710:ALA:O	1:A:712:LYS:N	2.44	0.51
1:A:20:GLU:HG3	1:A:166:LEU:HD13	1.92	0.51
1:A:247:THR:C	1:A:249:LEU:N	2.63	0.51
1:A:155:VAL:HG23	1:A:215:ALA:O	2.09	0.51
1:A:298:ILE:HD13	1:A:779:ALA:HB2	1.92	0.51
1:A:737:ASP:OD2	1:A:739:ASN:CB	2.58	0.51
1:A:974:SER:O	1:A:976:PRO:N	2.44	0.51
1:A:481:LYS:HE2	1:A:496:VAL:HG11	1.92	0.51
1:A:528:VAL:HG12	1:A:593:PHE:HB3	1.93	0.51
1:A:101:ASN:O	1:A:102:ALA:C	2.49	0.51
1:A:73:PHE:N	1:A:91:PRO:HB3	2.26	0.51
1:A:832:TRP:CZ2	1:A:987:ILE:HG13	2.46	0.51
1:A:593:PHE:CE2	1:A:595:GLY:HA2	2.46	0.51
1:A:986:PHE:C	1:A:988:ALA:N	2.63	0.51
1:A:259:GLN:C	1:A:261:SER:N	2.64	0.51
1:A:857:MET:HE3	1:A:866:THR:HA	1.91	0.51
1:A:689:GLU:HG2	1:A:713:LYS:NZ	2.26	0.51
1:A:304:VAL:HA	1:A:309:GLU:OE2	2.11	0.51
1:A:947:ILE:HG12	1:A:953:LEU:HD13	1.92	0.50
1:A:680:GLU:HG2	1:A:681:PRO:HD2	1.93	0.50
1:A:235:ILE:O	1:A:236:ARG:C	2.48	0.50
1:A:119:LEU:C	1:A:121:GLU:N	2.65	0.50
1:A:698:THR:HG23	1:A:715:GLU:OE1	2.11	0.50
1:A:795:VAL:O	1:A:800:ASP:HB2	2.11	0.50
1:A:894:PRO:HB2	1:A:959:LEU:H	1.75	0.50
1:A:364:CYS:O	1:A:383:SER:HA	2.12	0.50
1:A:766:SER:O	1:A:769:VAL:HB	2.10	0.50
1:A:870:LEU:O	1:A:873:PHE:HB3	2.10	0.50
1:A:897:MET:HB2	1:A:958:LYS:CE	2.41	0.50
1:A:419:LEU:HD13	1:A:513:PHE:CE2	2.47	0.50
1:A:623:MET:SD	1:A:625:THR:CG2	2.99	0.50
1:A:689:GLU:CG	1:A:713:LYS:NZ	2.73	0.50
1:A:236:ARG:HG2	1:A:236:ARG:NH1	2.25	0.50
1:A:277:GLY:C	1:A:279:PHE:H	2.14	0.50
1:A:263:VAL:HG11	2:A:1995:AD4:O4	2.12	0.50
1:A:485:LEU:N	1:A:485:LEU:HD23	2.25	0.50
2:A:1995:AD4:H541	2:A:1995:AD4:O1T	2.11	0.50
1:A:914:ASN:HA	1:A:985:LYS:NZ	2.26	0.50
1:A:304:VAL:HG11	1:A:789:PRO:HB3	1.94	0.50
1:A:185:VAL:CG1	1:A:186:SER:N	2.74	0.50
1:A:642:PHE:CE2	1:A:648:VAL:HG11	2.47	0.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:178:SER:HB3	1:A:184:SER:HB3	1.92	0.50
1:A:971:LEU:HB3	1:A:975:LEU:HD12	1.94	0.50
1:A:895:GLU:N	1:A:896:PRO:HD2	2.27	0.50
1:A:415:THR:HA	1:A:475:ILE:HD13	1.94	0.50
1:A:154:ALA:C	1:A:214:ILE:HD11	2.32	0.50
1:A:33:LEU:O	1:A:33:LEU:HG	2.11	0.50
1:A:303:ALA:C	1:A:305:ALA:H	2.14	0.50
1:A:962:LEU:O	1:A:965:THR:OG1	2.30	0.50
1:A:689:GLU:HG2	1:A:713:LYS:HZ1	1.77	0.50
1:A:115:ALA:O	1:A:118:ALA:HB3	2.12	0.50
1:A:721:GLY:N	1:A:735:LEU:O	2.45	0.50
1:A:39:ASN:HB2	1:A:226:THR:HG1	1.74	0.49
1:A:702:GLY:H	1:A:711:LEU:HD21	1.77	0.49
1:A:237:ASP:O	1:A:238:GLN:C	2.48	0.49
1:A:836:ARG:O	1:A:840:ILE:HG12	2.12	0.49
1:A:854:TRP:C	1:A:856:PHE:H	2.16	0.49
1:A:920:GLN:OE1	1:A:924:ARG:CZ	2.59	0.49
1:A:513:PHE:CD1	1:A:566:THR:HG22	2.46	0.49
1:A:348:ILE:HD13	1:A:743:ILE:HG21	1.93	0.49
1:A:23:GLY:HA2	1:A:150:ILE:CD1	2.34	0.49
1:A:342:LEU:HD12	1:A:342:LEU:O	2.12	0.49
1:A:239:MET:CE	1:A:708:ALA:HB1	2.42	0.49
1:A:459:VAL:HA	1:A:462:LEU:CD1	2.41	0.49
1:A:249:LEU:HB2	1:A:340:GLU:CD	2.32	0.49
1:A:848:THR:HA	1:A:903:VAL:CG1	2.42	0.49
1:A:977:VAL:O	1:A:980:LEU:HB3	2.12	0.49
1:A:407:PHE:O	1:A:411:VAL:HG13	2.13	0.49
1:A:623:MET:HE3	1:A:635:ILE:HG22	1.94	0.49
1:A:122:TYR:HE2	1:A:726:VAL:CG2	2.24	0.49
1:A:71:ILE:HB	1:A:300:VAL:CG1	2.42	0.49
1:A:92:PHE:CZ	1:A:96:LEU:HD11	2.48	0.49
1:A:829:ILE:HG23	1:A:833:LEU:HG	1.94	0.49
1:A:274:ILE:HD12	1:A:275:ASN:OD1	2.11	0.49
1:A:453:ASN:HB3	1:A:471:CYS:HG	1.75	0.49
1:A:185:VAL:CG1	1:A:186:SER:H	2.25	0.49
1:A:969:MET:O	1:A:972:LYS:HG3	2.13	0.49
1:A:472:ASN:O	1:A:475:ILE:N	2.45	0.49
1:A:346:SER:N	1:A:697:ILE:O	2.45	0.49
1:A:897:MET:HE1	1:A:958:LYS:HD3	1.95	0.49
1:A:449:VAL:CG2	1:A:450:GLU:N	2.76	0.49
1:A:701:THR:HG23	1:A:701:THR:O	2.12	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:222:ILE:HG23	1:A:222:ILE:O	2.12	0.49
1:A:567:ARG:NE	1:A:571:PRO:HD3	2.27	0.49
1:A:455:PHE:O	1:A:456:ASN:C	2.51	0.49
1:A:155:VAL:HG13	1:A:156:GLY:N	2.28	0.49
1:A:600:LEU:HG	1:A:601:ASP:N	2.26	0.49
1:A:527:TYR:CB	1:A:592:THR:HG23	2.35	0.49
1:A:442:GLU:HG3	3:A:1996:ACP:HN62	1.78	0.49
1:A:654:THR:HG23	1:A:657:GLU:H	1.78	0.49
1:A:654:THR:HG22	1:A:657:GLU:CD	2.34	0.49
1:A:384:ILE:HD12	1:A:384:ILE:N	2.27	0.49
1:A:358:THR:O	1:A:359:ASN:HB3	2.12	0.49
1:A:634:ALA:O	1:A:635:ILE:C	2.51	0.48
1:A:718:ILE:CD1	1:A:743:ILE:HD13	2.43	0.48
1:A:880:HIS:HB3	1:A:881:PRO:HD3	1.95	0.48
1:A:461:ASN:C	1:A:462:LEU:HD23	2.34	0.48
1:A:324:ARG:O	1:A:328:LYS:HG3	2.12	0.48
1:A:614:CYS:O	1:A:618:GLY:N	2.46	0.48
1:A:948:LEU:HB3	1:A:960:LYS:HG2	1.95	0.48
1:A:311:LEU:O	1:A:312:PRO:C	2.51	0.48
1:A:326:MET:CE	1:A:749:GLU:HB2	2.44	0.48
1:A:18:VAL:HG23	1:A:24:LEU:HD12	1.95	0.48
1:A:508:VAL:O	1:A:509:GLY:C	2.51	0.48
1:A:371:LYS:HE3	1:A:373:ASP:HB2	1.95	0.48
1:A:792:LEU:O	1:A:796:ASN:ND2	2.47	0.48
1:A:299:ALA:O	1:A:302:LEU:HB3	2.14	0.48
1:A:352:LYS:HB2	1:A:625:THR:HG22	1.95	0.48
1:A:397:LYS:O	1:A:398:ASN:HB2	2.14	0.48
1:A:146:VAL:HG13	1:A:147:PRO:HD2	1.94	0.48
1:A:576:MET:HE3	1:A:587:TYR:HB3	1.95	0.48
1:A:872:HIS:C	1:A:874:MET:N	2.67	0.48
1:A:529:ARG:CZ	1:A:529:ARG:HB2	2.44	0.48
1:A:440:ALA:O	1:A:443:THR:HG22	2.13	0.48
1:A:97:ILE:HD11	1:A:797:LEU:HD11	1.95	0.48
1:A:452:MET:O	1:A:453:ASN:C	2.50	0.48
1:A:604:ARG:O	1:A:607:VAL:HG23	2.14	0.48
1:A:879:ASP:HB2	1:A:882:HIS:HB2	1.93	0.48
1:A:63:ARG:O	1:A:66:LEU:N	2.45	0.48
1:A:688:VAL:HG12	1:A:688:VAL:O	2.13	0.48
1:A:48:SER:OG	1:A:50:TRP:HB3	2.13	0.48
1:A:783:LEU:CD1	1:A:784:PRO:HD2	2.34	0.48
1:A:848:THR:O	1:A:851:ALA:HB3	2.14	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:605:LYS:O	1:A:607:VAL:N	2.47	0.48
1:A:740:PHE:O	1:A:743:ILE:HB	2.13	0.48
1:A:619:ILE:CD1	1:A:747:VAL:HG11	2.44	0.48
1:A:491:ARG:NH2	1:A:494:MET:HA	2.29	0.48
1:A:14:ALA:O	1:A:17:GLY:N	2.46	0.48
1:A:178:SER:CB	1:A:184:SER:HB3	2.43	0.48
1:A:790:VAL:O	1:A:957:PHE:HE1	1.96	0.48
1:A:424:SER:H	1:A:437:VAL:HG12	1.77	0.48
1:A:666:GLN:HG2	1:A:690:TYR:CZ	2.49	0.48
1:A:188:ILE:CG2	1:A:189:LYS:N	2.76	0.48
1:A:916:LEU:CD1	1:A:927:PRO:HA	2.43	0.48
1:A:680:GLU:CG	1:A:681:PRO:HD2	2.44	0.48
1:A:654:THR:CG2	1:A:657:GLU:HG3	2.44	0.48
1:A:295:TYR:HA	1:A:298:ILE:HG22	1.95	0.48
1:A:239:MET:O	1:A:242:THR:HG23	2.13	0.48
1:A:977:VAL:O	1:A:980:LEU:N	2.47	0.47
1:A:545:ILE:O	1:A:549:ILE:HG12	2.14	0.47
1:A:388:THR:CG2	1:A:390:ALA:H	2.23	0.47
1:A:748:GLU:HG3	1:A:817:MET:CE	2.44	0.47
1:A:946:LEU:HG	1:A:953:LEU:CD1	2.44	0.47
1:A:153:VAL:O	1:A:218:LYS:HA	2.14	0.47
1:A:637:ARG:HH21	1:A:645:ASN:H	1.61	0.47
1:A:940:SER:HA	1:A:943:LEU:HD12	1.95	0.47
1:A:411:VAL:O	1:A:415:THR:HG23	2.14	0.47
1:A:722:SER:OG	1:A:738:ASP:OD2	2.31	0.47
1:A:945:PHE:CE2	1:A:967:TRP:CH2	3.03	0.47
1:A:133:ASP:O	1:A:134:ARG:CG	2.58	0.47
1:A:230:THR:O	1:A:233:GLY:N	2.47	0.47
1:A:717:GLY:N	1:A:732:GLU:OE1	2.30	0.47
1:A:662:PRO:O	1:A:663:LEU:C	2.52	0.47
1:A:852:ALA:HA	1:A:896:PRO:O	2.14	0.47
1:A:914:ASN:HA	1:A:985:LYS:HZ2	1.80	0.47
1:A:371:LYS:HG2	1:A:372:VAL:N	2.28	0.47
1:A:71:ILE:HB	1:A:300:VAL:HG11	1.96	0.47
1:A:915:SER:C	1:A:917:SER:H	2.18	0.47
1:A:437:VAL:CG1	1:A:438:GLY:N	2.77	0.47
1:A:442:GLU:HG3	3:A:1996:ACP:N6	2.30	0.47
1:A:717:GLY:C	1:A:731:SER:HB2	2.35	0.47
1:A:311:LEU:HD21	1:A:761:ILE:HG23	1.97	0.47
1:A:343:GLY:O	1:A:751:ARG:HG2	2.14	0.47
1:A:843:TYR:CE2	1:A:977:VAL:HG22	2.50	0.47

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:452:MET:O	1:A:454:VAL:N	2.48	0.47
1:A:536:PRO:O	1:A:537:MET:C	2.53	0.47
1:A:642:PHE:CZ	1:A:648:VAL:CG1	2.98	0.47
1:A:148:GLY:O	1:A:222:ILE:HG13	2.15	0.47
1:A:633:ILE:O	1:A:636:CYS:HB2	2.14	0.47
1:A:534:ARG:HG3	1:A:592:THR:HG21	1.97	0.47
1:A:436:LYS:HD2	1:A:440:ALA:HB2	1.97	0.47
1:A:173:LEU:O	1:A:188:ILE:HA	2.15	0.47
1:A:654:THR:O	1:A:655:GLY:C	2.53	0.47
1:A:277:GLY:O	1:A:279:PHE:N	2.47	0.47
1:A:544:LYS:O	1:A:548:VAL:HG23	2.15	0.47
1:A:577:VAL:HG23	1:A:587:TYR:OH	2.15	0.47
1:A:366:MET:O	1:A:552:TRP:HH2	1.98	0.47
1:A:52:LEU:O	1:A:56:GLN:HG2	2.15	0.46
1:A:75:LEU:HD22	1:A:293:ILE:HG13	1.96	0.46
1:A:869:GLN:OE1	1:A:872:HIS:CD2	2.68	0.46
1:A:953:LEU:N	1:A:954:PRO:HD2	2.30	0.46
1:A:679:VAL:HG12	1:A:680:GLU:N	2.31	0.46
1:A:687:ILE:C	1:A:689:GLU:N	2.67	0.46
1:A:648:VAL:O	1:A:648:VAL:CG1	2.63	0.46
1:A:718:ILE:HD13	1:A:743:ILE:HG12	1.96	0.46
1:A:917:SER:OG	1:A:920:GLN:HB2	2.15	0.46
1:A:88:PHE:O	1:A:92:PHE:HB2	2.16	0.46
1:A:686:LYS:O	1:A:689:GLU:HB2	2.14	0.46
1:A:758:LYS:O	1:A:761:ILE:HB	2.16	0.46
1:A:788:ILE:O	1:A:791:GLN:HB2	2.16	0.46
1:A:593:PHE:HZ	1:A:596:VAL:HG13	1.80	0.46
1:A:975:LEU:HB2	1:A:976:PRO:HD3	1.98	0.46
1:A:415:THR:HG22	1:A:475:ILE:HG23	1.96	0.46
1:A:607:VAL:O	1:A:608:MET:C	2.52	0.46
1:A:698:THR:CG2	1:A:715:GLU:OE1	2.63	0.46
1:A:62:VAL:HG23	1:A:98:LEU:HD22	1.98	0.46
1:A:348:ILE:HD13	1:A:743:ILE:HG22	1.98	0.46
1:A:352:LYS:HG2	1:A:353:THR:N	2.29	0.46
1:A:214:ILE:O	1:A:214:ILE:CG1	2.62	0.46
1:A:480:LYS:HB3	1:A:499:SER:HB3	1.98	0.46
1:A:710:ALA:O	1:A:711:LEU:C	2.54	0.46
1:A:724:THR:O	1:A:725:ALA:C	2.53	0.46
1:A:577:VAL:HG21	1:A:583:ARG:HD3	1.98	0.46
1:A:26:PRO:O	1:A:30:LYS:HG3	2.15	0.46
1:A:352:LYS:CB	1:A:625:THR:HG22	2.45	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:202:GLN:HG3	1:A:489:ARG:HH11	1.81	0.46
1:A:400:LYS:O	1:A:400:LYS:HG3	2.16	0.46
1:A:313:ALA:O	1:A:317:THR:HG23	2.16	0.46
1:A:8:SER:OG	1:A:11:GLU:CG	2.64	0.46
1:A:512:MET:HE1	1:A:576:MET:HE3	1.98	0.46
1:A:759:GLN:NE2	1:A:762:ARG:HH11	2.07	0.46
1:A:200:VAL:O	1:A:203:ASP:N	2.49	0.46
1:A:388:THR:HB	1:A:390:ALA:HB3	1.98	0.46
1:A:728:LYS:O	1:A:730:ALA:N	2.49	0.46
1:A:653:TYR:CE2	1:A:669:ALA:HB1	2.50	0.46
1:A:748:GLU:HG3	1:A:817:MET:HG2	1.98	0.46
1:A:865:VAL:HG11	1:A:870:LEU:N	2.29	0.46
1:A:404:SER:HG	1:A:452:MET:HB2	1.79	0.46
1:A:25:THR:O	1:A:27:ASP:N	2.49	0.46
1:A:662:PRO:C	1:A:664:ALA:N	2.69	0.46
1:A:697:ILE:HA	1:A:715:GLU:HG2	1.98	0.46
1:A:687:ILE:O	1:A:689:GLU:N	2.49	0.45
1:A:491:ARG:HE	1:A:588:GLU:CD	2.18	0.45
1:A:632:ALA:HB1	1:A:675:CYS:SG	2.55	0.45
1:A:319:LEU:HB3	1:A:336:LEU:HD13	1.99	0.45
1:A:412:GLU:CD	1:A:529:ARG:HE	2.19	0.45
1:A:260:LEU:O	1:A:264:ILE:HG13	2.15	0.45
1:A:56:GLN:C	1:A:57:PHE:CD1	2.86	0.45
1:A:916:LEU:HD12	1:A:927:PRO:HA	1.98	0.45
1:A:331:ALA:HB1	1:A:733:MET:HE2	1.90	0.45
1:A:18:VAL:HG22	1:A:150:ILE:HD11	1.99	0.45
1:A:809:PHE:N	1:A:809:PHE:CD1	2.81	0.45
1:A:259:GLN:O	1:A:262:LYS:N	2.49	0.45
1:A:59:ASP:O	1:A:62:VAL:HG12	2.16	0.45
1:A:75:LEU:O	1:A:77:TRP:N	2.48	0.45
1:A:803:PRO:O	1:A:807:LEU:HG	2.17	0.45
1:A:424:SER:O	1:A:437:VAL:HG12	2.17	0.45
1:A:397:LYS:HB3	1:A:402:ILE:HD12	1.97	0.45
1:A:728:LYS:C	1:A:730:ALA:N	2.70	0.45
1:A:771:GLU:O	1:A:774:CYS:HB3	2.17	0.45
1:A:124:PRO:O	1:A:142:ALA:HB2	2.17	0.45
1:A:326:MET:HE3	1:A:749:GLU:HB2	1.98	0.45
1:A:790:VAL:O	1:A:957:PHE:CE1	2.70	0.45
1:A:563:ALA:O	1:A:564:LEU:HD23	2.17	0.45
1:A:687:ILE:HG22	1:A:691:LEU:CD1	2.47	0.45
1:A:549:ILE:HD13	1:A:596:VAL:HG21	1.99	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:342:LEU:HD12	1:A:345:THR:CG2	2.47	0.45
1:A:325:ARG:NH1	1:A:753:ILE:CD1	2.78	0.45
1:A:751:ARG:NH1	1:A:819:ARG:O	2.45	0.45
1:A:352:LYS:NZ	1:A:627:ASP:HB2	2.31	0.45
1:A:747:VAL:HG12	1:A:747:VAL:O	2.17	0.45
1:A:170:SER:HG	1:A:218:LYS:H	1.59	0.45
1:A:351:ASP:OD2	1:A:701:THR:O	2.35	0.45
1:A:174:ARG:HA	1:A:174:ARG:HD3	1.65	0.45
1:A:415:THR:O	1:A:416:ILE:C	2.54	0.45
1:A:153:VAL:HG12	1:A:214:ILE:HG12	1.99	0.45
1:A:36:TYR:CG	1:A:147:PRO:HG2	2.52	0.45
1:A:85:ILE:O	1:A:85:ILE:HD12	2.16	0.45
1:A:259:GLN:C	1:A:261:SER:H	2.19	0.45
1:A:50:TRP:HA	1:A:50:TRP:CE3	2.52	0.45
1:A:791:GLN:O	1:A:794:TRP:N	2.49	0.45
1:A:969:MET:O	1:A:973:ILE:HG13	2.17	0.45
1:A:153:VAL:HG11	1:A:214:ILE:CG2	2.33	0.45
1:A:638:ARG:O	1:A:638:ARG:HD3	2.16	0.45
1:A:459:VAL:HA	1:A:462:LEU:HG	1.98	0.45
1:A:235:ILE:O	1:A:237:ASP:N	2.49	0.45
1:A:688:VAL:HG23	1:A:700:MET:HE3	1.99	0.45
1:A:748:GLU:O	1:A:749:GLU:C	2.55	0.45
1:A:832:TRP:CH2	1:A:987:ILE:HG21	2.52	0.45
1:A:445:LEU:O	1:A:448:LEU:N	2.50	0.45
1:A:274:ILE:HD13	1:A:780:ALA:O	2.17	0.45
1:A:259:GLN:O	1:A:261:SER:N	2.50	0.45
1:A:606:GLU:H	1:A:606:GLU:CD	2.20	0.45
1:A:307:ILE:O	1:A:768:ASN:ND2	2.51	0.44
1:A:754:TYR:O	1:A:758:LYS:HB3	2.17	0.44
1:A:687:ILE:O	1:A:690:TYR:N	2.49	0.44
1:A:188:ILE:O	1:A:189:LYS:HD3	2.16	0.44
1:A:549:ILE:CD1	1:A:596:VAL:HG21	2.48	0.44
1:A:274:ILE:HD12	1:A:275:ASN:CG	2.38	0.44
1:A:202:GLN:O	1:A:205:LYS:CE	2.66	0.44
1:A:202:GLN:O	1:A:205:LYS:HE2	2.17	0.44
1:A:69:ALA:HB2	1:A:94:ILE:HG22	1.96	0.44
1:A:90:GLU:HG3	1:A:790:VAL:HG22	1.99	0.44
1:A:926:PRO:HB2	1:A:928:TRP:CE3	2.52	0.44
1:A:408:ASP:O	1:A:409:GLY:C	2.55	0.44
1:A:412:GLU:O	1:A:413:LEU:C	2.56	0.44
1:A:421:ASN:OD1	1:A:423:SER:N	2.47	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:449:VAL:CG2	1:A:472:ASN:ND2	2.80	0.44
1:A:529:ARG:HH11	1:A:529:ARG:CG	2.30	0.44
1:A:408:ASP:O	1:A:411:VAL:N	2.50	0.44
1:A:676:PHE:HB3	1:A:679:VAL:HG22	1.99	0.44
1:A:174:ARG:NE	1:A:188:ILE:HG13	2.32	0.44
1:A:275:ASN:HB3	1:A:278:HIS:HD2	1.82	0.44
1:A:767:SER:O	1:A:771:GLU:HG3	2.17	0.44
1:A:263:VAL:O	1:A:264:ILE:C	2.56	0.44
1:A:900:ALA:CA	1:A:903:VAL:HG12	2.47	0.44
1:A:331:ALA:CB	1:A:733:MET:HE1	2.33	0.44
1:A:485:LEU:HD13	1:A:584:PHE:CD1	2.53	0.44
1:A:459:VAL:HG21	1:A:467:ARG:NH2	2.33	0.44
1:A:844:VAL:HG12	1:A:907:ILE:HG21	1.99	0.44
1:A:19:SER:C	1:A:21:THR:H	2.20	0.44
1:A:101:ASN:ND2	2:A:1995:AD4:H572	2.33	0.44
1:A:256:PHE:CE2	1:A:260:LEU:HD22	2.52	0.44
1:A:633:ILE:O	1:A:634:ALA:C	2.55	0.44
1:A:611:ILE:HD13	1:A:740:PHE:CE2	2.53	0.44
1:A:442:GLU:HG2	1:A:515:LYS:HZ1	1.82	0.44
1:A:235:ILE:O	1:A:238:GLN:N	2.51	0.44
1:A:48:SER:O	1:A:52:LEU:HG	2.18	0.44
1:A:784:PRO:O	1:A:785:GLU:C	2.56	0.44
1:A:656:ARG:O	1:A:657:GLU:C	2.56	0.44
1:A:307:ILE:O	1:A:309:GLU:OE1	2.36	0.44
1:A:802:LEU:N	1:A:803:PRO:HD2	2.33	0.44
1:A:810:ASN:HA	1:A:811:PRO:HD2	1.86	0.44
1:A:897:MET:CB	1:A:958:LYS:HE2	2.47	0.44
1:A:368:ILE:HD13	1:A:410:LEU:CD2	2.43	0.44
1:A:174:ARG:HB2	1:A:216:ALA:N	2.33	0.44
1:A:177:GLN:O	1:A:178:SER:C	2.56	0.44
1:A:141:LYS:O	1:A:142:ALA:C	2.56	0.43
1:A:303:ALA:C	1:A:305:ALA:N	2.71	0.43
1:A:335:SER:C	1:A:337:PRO:HD3	2.39	0.43
1:A:903:VAL:O	1:A:907:ILE:HG13	2.18	0.43
1:A:448:LEU:C	1:A:448:LEU:HD12	2.39	0.43
1:A:689:GLU:CG	1:A:713:LYS:HZ3	2.31	0.43
1:A:188:ILE:CD1	1:A:188:ILE:N	2.81	0.43
1:A:151:VAL:HG12	1:A:152:GLU:N	2.33	0.43
1:A:130:TYR:OH	1:A:137:VAL:HG22	2.18	0.43
1:A:433:VAL:HG12	1:A:434:TYR:H	1.83	0.43
1:A:304:VAL:HG23	1:A:304:VAL:O	2.16	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:748:GLU:HA	1:A:817:MET:CE	2.48	0.43
1:A:870:LEU:HD12	1:A:870:LEU:O	2.18	0.43
1:A:417:CYS:O	1:A:421:ASN:HB2	2.18	0.43
1:A:445:LEU:O	1:A:446:THR:C	2.56	0.43
1:A:352:LYS:HB3	1:A:352:LYS:HE2	1.86	0.43
1:A:903:VAL:HG21	1:A:973:ILE:HG21	2.00	0.43
1:A:836:ARG:HH21	1:A:981:ASP:CG	2.21	0.43
1:A:836:ARG:HG2	1:A:984:LEU:HB3	2.01	0.43
1:A:367:PHE:CZ	1:A:545:ILE:HG23	2.44	0.43
1:A:668:GLU:O	1:A:669:ALA:C	2.57	0.43
1:A:687:ILE:C	1:A:689:GLU:H	2.20	0.43
1:A:244:GLN:CD	1:A:244:GLN:N	2.72	0.43
1:A:165:ILE:HD11	1:A:208:LEU:HD23	2.00	0.43
1:A:58:GLU:HA	1:A:63:ARG:NH1	2.33	0.43
1:A:181:THR:O	1:A:182:GLY:C	2.57	0.43
1:A:893:ALA:O	1:A:896:PRO:HG2	2.19	0.43
1:A:911:ASN:C	1:A:913:LEU:H	2.22	0.43
1:A:943:LEU:O	1:A:944:HIS:C	2.57	0.43
1:A:455:PHE:HE2	1:A:475:ILE:HG12	1.83	0.43
1:A:521:VAL:HG23	1:A:522:ILE:N	2.33	0.43
1:A:294:TYR:HD2	1:A:295:TYR:CD1	2.36	0.43
1:A:239:MET:HE3	1:A:708:ALA:HB1	2.00	0.43
1:A:259:GLN:HE22	1:A:262:LYS:CE	2.31	0.43
1:A:557:ASP:HB3	1:A:559:LEU:HG	2.01	0.43
1:A:23:GLY:HA3	1:A:131:ARG:HA	2.00	0.43
1:A:147:PRO:HG3	1:A:226:THR:HB	2.01	0.43
1:A:347:VAL:HG22	1:A:620:ARG:CB	2.28	0.43
1:A:967:TRP:HA	1:A:970:VAL:HG23	1.99	0.43
1:A:96:LEU:HA	1:A:99:ILE:HD12	2.01	0.43
1:A:538:THR:OG1	1:A:541:VAL:CG2	2.62	0.43
1:A:654:THR:HG22	1:A:657:GLU:CB	2.48	0.43
1:A:677:ALA:O	1:A:678:ARG:HB2	2.18	0.43
1:A:610:SER:OG	1:A:741:SER:HB2	2.19	0.43
1:A:844:VAL:CG2	1:A:845:GLY:N	2.81	0.42
1:A:437:VAL:HG13	1:A:438:GLY:N	2.34	0.42
1:A:474:VAL:HG23	1:A:475:ILE:N	2.34	0.42
1:A:713:LYS:HB2	1:A:713:LYS:HE3	1.84	0.42
1:A:143:ARG:HE	1:A:143:ARG:HB2	1.53	0.42
1:A:133:ASP:N	1:A:133:ASP:OD1	2.52	0.42
1:A:93:VAL:O	1:A:94:ILE:C	2.58	0.42
1:A:324:ARG:H	1:A:324:ARG:HG3	1.57	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:913:LEU:HD21	1:A:937:ILE:HD11	2.01	0.42
1:A:363:VAL:CG1	1:A:448:LEU:HD22	2.40	0.42
1:A:627:ASP:OD1	1:A:631:THR:HG21	2.19	0.42
1:A:984:LEU:CA	1:A:987:ILE:HG12	2.46	0.42
1:A:449:VAL:HG21	1:A:472:ASN:ND2	2.34	0.42
1:A:128:LYS:HB2	1:A:128:LYS:HE3	1.91	0.42
1:A:637:ARG:HA	1:A:642:PHE:O	2.20	0.42
1:A:577:VAL:HG23	1:A:583:ARG:HD3	2.01	0.42
1:A:365:LYS:HB2	1:A:552:TRP:CZ3	2.55	0.42
1:A:45:GLU:HG2	1:A:45:GLU:O	2.19	0.42
1:A:832:TRP:O	1:A:835:PHE:HB3	2.20	0.42
1:A:855:TRP:CZ3	1:A:896:PRO:HD3	2.54	0.42
1:A:934:LEU:O	1:A:935:GLY:C	2.57	0.42
1:A:471:CYS:C	1:A:474:VAL:HG22	2.39	0.42
1:A:967:TRP:O	1:A:970:VAL:HB	2.19	0.42
1:A:680:GLU:CB	1:A:681:PRO:CD	2.96	0.42
1:A:514:VAL:CG2	1:A:515:LYS:N	2.82	0.42
1:A:879:ASP:O	1:A:880:HIS:C	2.56	0.42
1:A:236:ARG:HH11	1:A:236:ARG:HG2	1.83	0.42
1:A:788:ILE:HG12	1:A:897:MET:HE3	2.02	0.42
1:A:542:LYS:O	1:A:543:GLU:C	2.57	0.42
1:A:277:GLY:C	1:A:279:PHE:N	2.73	0.42
1:A:50:TRP:HE3	1:A:50:TRP:HA	1.85	0.42
1:A:748:GLU:CG	1:A:817:MET:HE3	2.49	0.42
1:A:445:LEU:C	1:A:447:THR:N	2.72	0.42
1:A:347:VAL:HG12	1:A:348:ILE:N	2.34	0.42
1:A:558:THR:HG22	1:A:634:ALA:CB	2.48	0.42
1:A:19:SER:C	1:A:21:THR:N	2.72	0.42
1:A:50:TRP:O	1:A:54:ILE:HG13	2.20	0.42
1:A:56:GLN:HB3	1:A:102:ALA:HA	2.01	0.42
1:A:790:VAL:C	1:A:957:PHE:HE1	2.23	0.42
1:A:901:LEU:CD2	1:A:901:LEU:O	2.67	0.42
1:A:951:ASP:HB2	1:A:952:PRO:HD3	2.02	0.42
1:A:927:PRO:C	1:A:929:VAL:H	2.23	0.42
1:A:959:LEU:HG	1:A:960:LYS:N	2.35	0.42
1:A:379:LEU:CD1	1:A:379:LEU:N	2.83	0.42
1:A:550:LYS:O	1:A:554:THR:HB	2.19	0.42
1:A:802:LEU:O	1:A:936:SER:HB2	2.19	0.42
1:A:857:MET:O	1:A:858:TYR:CG	2.73	0.42
1:A:854:TRP:CH2	1:A:969:MET:HG2	2.54	0.42
1:A:419:LEU:HD13	1:A:513:PHE:HE2	1.83	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:521:VAL:HG21	1:A:563:ALA:CB	2.46	0.42
1:A:188:ILE:HG22	1:A:189:LYS:H	1.84	0.42
1:A:840:ILE:O	1:A:843:TYR:HB3	2.20	0.42
1:A:953:LEU:O	1:A:956:ILE:HB	2.20	0.42
1:A:699:ALA:HA	1:A:716:ILE:O	2.19	0.42
1:A:679:VAL:HG13	1:A:683:HIS:HB2	2.01	0.42
1:A:170:SER:HB2	1:A:172:THR:O	2.20	0.42
1:A:188:ILE:H	1:A:188:ILE:CD1	2.32	0.42
1:A:865:VAL:HG11	1:A:869:GLN:CA	2.47	0.41
1:A:865:VAL:HG21	1:A:869:GLN:CB	2.16	0.41
1:A:872:HIS:O	1:A:874:MET:N	2.52	0.41
1:A:521:VAL:CG2	1:A:522:ILE:N	2.83	0.41
1:A:353:THR:O	1:A:357:THR:O	2.38	0.41
1:A:577:VAL:O	1:A:579:ASP:N	2.53	0.41
1:A:886:LEU:HG	1:A:887:ASP:N	2.35	0.41
1:A:104:VAL:O	1:A:108:GLN:HB2	2.19	0.41
1:A:253:LEU:O	1:A:254:ASP:C	2.59	0.41
1:A:308:PRO:O	1:A:309:GLU:C	2.58	0.41
1:A:759:GLN:O	1:A:762:ARG:N	2.54	0.41
1:A:801:GLY:C	1:A:803:PRO:HD2	2.40	0.41
1:A:683:HIS:O	1:A:685:SER:N	2.53	0.41
1:A:174:ARG:HB2	1:A:216:ALA:H	1.84	0.41
1:A:511:LYS:HA	1:A:570:PRO:HG3	2.03	0.41
1:A:307:ILE:CG2	2:A:1995:AD4:O1T	2.68	0.41
1:A:52:LEU:O	1:A:53:VAL:C	2.59	0.41
1:A:848:THR:HB	1:A:900:ALA:HB1	2.02	0.41
1:A:174:ARG:HH11	1:A:186:SER:HB2	1.84	0.41
1:A:9:THR:CG2	1:A:10:GLU:OE1	2.68	0.41
2:A:1995:AD4:H551	2:A:1995:AD4:O1T	2.20	0.41
1:A:802:LEU:N	1:A:803:PRO:CD	2.83	0.41
1:A:969:MET:SD	1:A:972:LYS:HD2	2.59	0.41
1:A:128:LYS:HE3	1:A:152:GLU:O	2.20	0.41
1:A:880:HIS:O	1:A:884:GLU:O	2.38	0.41
1:A:359:ASN:CA	1:A:601:ASP:OD1	2.67	0.41
1:A:519:GLU:OE1	1:A:519:GLU:N	2.37	0.41
1:A:912:ALA:O	1:A:933:LEU:HD21	2.21	0.41
1:A:702:GLY:N	1:A:711:LEU:HD21	2.36	0.41
1:A:810:ASN:ND2	1:A:916:LEU:HD23	2.36	0.41
1:A:72:SER:CB	1:A:91:PRO:HB3	2.49	0.41
1:A:416:ILE:HG21	1:A:564:LEU:HB3	2.03	0.41
1:A:403:ARG:HB3	1:A:406:GLN:CG	2.50	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:38:HIS:CD2	1:A:143:ARG:NH2	2.87	0.41
1:A:163:ILE:CG2	1:A:221:GLY:HA3	2.50	0.41
1:A:889:GLU:O	1:A:889:GLU:CG	2.67	0.41
1:A:752:ALA:O	1:A:753:ILE:C	2.58	0.41
1:A:759:GLN:C	1:A:761:ILE:N	2.74	0.41
1:A:785:GLU:OE1	1:A:788:ILE:HD11	2.21	0.41
1:A:471:CYS:O	1:A:474:VAL:CG2	2.64	0.41
1:A:174:ARG:HB3	1:A:215:ALA:HB3	2.02	0.41
1:A:159:VAL:O	1:A:210:SER:HA	2.20	0.41
1:A:253:LEU:HD13	2:A:1995:AD4:C47	2.50	0.41
1:A:38:HIS:CG	1:A:143:ARG:HH21	2.39	0.41
1:A:580:ASP:O	1:A:582:SER:N	2.54	0.41
1:A:828:LEU:HD23	1:A:828:LEU:HA	1.83	0.41
1:A:811:PRO:HA	1:A:812:PRO:HD3	1.90	0.41
1:A:872:HIS:C	1:A:874:MET:H	2.23	0.41
1:A:872:HIS:HB3	1:A:875:GLN:NE2	2.26	0.41
1:A:65:LEU:HB3	1:A:98:LEU:HD11	2.03	0.41
1:A:414:ALA:O	1:A:417:CYS:HB2	2.21	0.41
1:A:361:MET:HE1	1:A:599:MET:HG3	2.03	0.41
1:A:361:MET:CB	1:A:444:ALA:HB2	2.51	0.41
1:A:169:LYS:HB2	1:A:218:LYS:O	2.20	0.41
1:A:149:ASP:N	1:A:149:ASP:OD1	2.52	0.41
1:A:370:ASP:HB3	1:A:378:SER:O	2.21	0.41
1:A:894:PRO:O	1:A:898:THR:CG2	2.69	0.41
1:A:986:PHE:O	1:A:988:ALA:N	2.54	0.41
1:A:788:ILE:HA	1:A:788:ILE:HD13	1.84	0.40
1:A:890:ILE:O	1:A:893:ALA:HB2	2.21	0.40
1:A:24:LEU:O	1:A:131:ARG:HB3	2.22	0.40
1:A:524:ARG:HH11	1:A:588:GLU:HB2	1.86	0.40
1:A:146:VAL:HG13	1:A:147:PRO:CD	2.51	0.40
1:A:300:VAL:O	1:A:304:VAL:HG13	2.21	0.40
1:A:340:GLU:O	1:A:343:GLY:N	2.54	0.40
1:A:408:ASP:O	1:A:410:LEU:N	2.54	0.40
1:A:239:MET:O	1:A:242:THR:CG2	2.69	0.40
1:A:160:PRO:O	1:A:160:PRO:CG	2.69	0.40
1:A:692:GLN:HG2	1:A:715:GLU:OE2	2.21	0.40
1:A:797:LEU:HA	1:A:797:LEU:HD23	1.87	0.40
1:A:854:TRP:O	1:A:857:MET:N	2.52	0.40
1:A:501:ALA:CB	1:A:505:ARG:NH2	2.84	0.40
1:A:365:LYS:HB3	1:A:552:TRP:CH2	2.57	0.40
1:A:651:ARG:O	1:A:673:ALA:HA	2.21	0.40

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:79:GLU:CD	1:A:79:GLU:N	2.75	0.40
1:A:788:ILE:HG23	1:A:789:PRO:CD	2.47	0.40
1:A:915:SER:O	1:A:916:LEU:C	2.60	0.40
1:A:959:LEU:HG	1:A:960:LYS:H	1.87	0.40
1:A:295:TYR:O	1:A:298:ILE:HG22	2.21	0.40
1:A:57:PHE:CD1	1:A:57:PHE:N	2.89	0.40
1:A:968:LEU:HD23	1:A:968:LEU:HA	1.82	0.40
1:A:636:CYS:O	1:A:639:ILE:HG12	2.22	0.40
1:A:189:LYS:HE3	1:A:207:MET:O	2.22	0.40
1:A:535:VAL:CG1	1:A:536:PRO:N	2.85	0.40
1:A:150:ILE:N	1:A:150:ILE:CD1	2.76	0.40
1:A:562:LEU:O	1:A:596:VAL:HA	2.21	0.40
1:A:388:THR:HG22	1:A:389:TYR:H	1.87	0.40
1:A:467:ARG:NH1	1:A:467:ARG:O	2.55	0.40
1:A:235:ILE:C	1:A:237:ASP:N	2.75	0.40
1:A:822:ARG:HG2	1:A:823:SER:N	2.36	0.40
1:A:735:LEU:HD22	1:A:742:THR:CG2	2.51	0.40
1:A:628:ASN:HB3	1:A:678:ARG:HH21	1.85	0.40
1:A:824:PRO:HD2	1:A:825:LYS:H	1.86	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	992/994 (100%)	760 (77%)	164 (16%)	68 (7%)	<b>1</b>	<b>11</b>

All (68) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	182	GLY
1	A	281	ASP

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	337	PRO
1	A	374	GLY
1	A	502	LYS
1	A	509	GLY
1	A	581	SER
1	A	605	LYS
1	A	878	GLU
1	A	882	HIS
1	A	76	ALA
1	A	178	SER
1	A	278	HIS
1	A	289	ILE
1	A	453	ASN
1	A	463	SER
1	A	507	ALA
1	A	606	GLU
1	A	633	ILE
1	A	645	ASN
1	A	965	THR
1	A	993	GLU
1	A	120	LYS
1	A	134	ARG
1	A	142	ALA
1	A	161	ALA
1	A	248	PRO
1	A	288	TRP
1	A	353	THR
1	A	578	LEU
1	A	635	ILE
1	A	663	LEU
1	A	711	LEU
1	A	729	THR
1	A	916	LEU
1	A	309	GLU
1	A	330	ASN
1	A	489	ARG
1	A	520	GLY
1	A	634	ALA
1	A	725	ALA
1	A	738	ASP
1	A	811	PRO
1	A	822	ARG

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	862	GLY
1	A	905	VAL
1	A	975	LEU
1	A	149	ASP
1	A	486	GLU
1	A	705	VAL
1	A	861	ASP
1	A	201	ASN
1	A	644	GLU
1	A	664	ALA
1	A	684	LYS
1	A	803	PRO
1	A	816	ILE
1	A	26	PRO
1	A	263	VAL
1	A	416	ILE
1	A	865	VAL
1	A	264	ILE
1	A	824	PRO
1	A	409	GLY
1	A	978	ILE
1	A	42	PRO
1	A	521	VAL
1	A	681	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	840/840 (100%)	792 (94%)	48 (6%)	25	65

All (48) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	25	THR
1	A	26	PRO

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	78	PHE
1	A	110	ARG
1	A	113	GLU
1	A	136	SER
1	A	146	VAL
1	A	152	GLU
1	A	170	SER
1	A	191	THR
1	A	208	LEU
1	A	214	ILE
1	A	242	THR
1	A	316	THR
1	A	344	CYS
1	A	367	PHE
1	A	396	LEU
1	A	437	VAL
1	A	441	THR
1	A	462	LEU
1	A	486	GLU
1	A	491	ARG
1	A	569	THR
1	A	577	VAL
1	A	592	THR
1	A	597	VAL
1	A	606	GLU
1	A	616	ASP
1	A	627	ASP
1	A	635	ILE
1	A	638	ARG
1	A	666	GLN
1	A	698	THR
1	A	738	ASP
1	A	760	PHE
1	A	767	SER
1	A	778	THR
1	A	805	THR
1	A	816	ILE
1	A	844	VAL
1	A	870	LEU
1	A	875	GLN
1	A	884	GLU
1	A	895	GLU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	898	THR
1	A	964	LEU
1	A	969	MET
1	A	981	ASP

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

Mol	Chain	Res	Type
1	A	38	HIS
1	A	101	ASN
1	A	177	GLN
1	A	259	GLN
1	A	278	HIS
1	A	398	ASN
1	A	453	ASN
1	A	461	ASN
1	A	526	ASN
1	A	683	HIS
1	A	759	GLN
1	A	768	ASN
1	A	791	GLN
1	A	796	ASN
1	A	875	GLN

### 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 carbohydrates in this entry.

### 5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 5 ligands modelled in this entry, 3 are monoatomic - leaving 2 for Mogul analysis.

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	AD4	A	1995	-	59,64,64	1.76	14 (23%)	62,92,92	2.11	13 (20%)
3	ACP	A	1996	4	25,33,33	2.05	5 (20%)	31,52,52	2.48	11 (35%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	AD4	A	1995	-	-	0/50/116/116	0/3/3/3
3	ACP	A	1996	4	-	0/15/38/38	0/3/3/3

All (19) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
3	A	1996	ACP	PB-O2B	-3.83	1.47	1.56
3	A	1996	ACP	PG-O2G	-2.42	1.49	1.54
3	A	1996	ACP	C3'-C4'	-2.09	1.47	1.53
2	A	1995	AD4	O2T-C53	2.05	1.39	1.34
2	A	1995	AD4	C21-C22	2.30	1.58	1.50
2	A	1995	AD4	O11-C11	2.50	1.47	1.42
2	A	1995	AD4	C31-C10	2.56	1.58	1.52
2	A	1995	AD4	C4-C5	2.59	1.39	1.33
2	A	1995	AD4	C9-C8	2.77	1.55	1.52
2	A	1995	AD4	C34-C11	2.82	1.57	1.53
2	A	1995	AD4	O7-C27	2.88	1.42	1.34
3	A	1996	ACP	C2-N3	2.88	1.37	1.32
2	A	1995	AD4	O1-C13	2.95	1.43	1.34
2	A	1995	AD4	C11-C7	2.98	1.59	1.55
2	A	1995	AD4	O6-C7	3.31	1.48	1.43
2	A	1995	AD4	O3-C3	4.06	1.52	1.44
2	A	1995	AD4	C7-C8	4.94	1.60	1.53
2	A	1995	AD4	O4-C21	5.21	1.32	1.21
3	A	1996	ACP	PB-O3A	6.67	1.65	1.58

All (24) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
3	A	1996	ACP	N3-C2-N1	-7.94	122.82	128.89
2	A	1995	AD4	O5-C6-C7	-5.31	99.38	104.08
2	A	1995	AD4	C56-O2T-C53	-4.80	113.29	121.05
3	A	1996	ACP	O3G-PG-C3B	-4.22	96.16	106.40
3	A	1996	ACP	C5'-C4'-C3'	-3.82	100.04	115.21
2	A	1995	AD4	O12-C12-C11	-3.65	124.90	128.26
2	A	1995	AD4	O2T-C53-O1T	-3.51	118.47	125.55
2	A	1995	AD4	C26-C4-C3	-3.23	117.32	121.51
2	A	1995	AD4	C2-O1-C13	-2.84	112.71	117.75
2	A	1995	AD4	C23-C22-C21	-2.74	108.93	116.04
2	A	1995	AD4	O1T-C53-N1T	-2.28	121.44	124.97
3	A	1996	ACP	O1B-PB-C3B	-2.28	103.28	109.02
3	A	1996	ACP	O5'-PA-O1A	-2.06	101.62	109.62
3	A	1996	ACP	O2G-PG-C3B	2.13	111.57	106.40
2	A	1995	AD4	C3-O3-C21	2.38	119.74	116.30
3	A	1996	ACP	O2A-PA-O5'	2.51	121.12	108.46
3	A	1996	ACP	O2B-PB-C3B	2.51	117.82	106.88
2	A	1995	AD4	O5-C12-O12	2.68	125.52	121.62
2	A	1995	AD4	C24-C22-C21	3.00	133.50	120.67
3	A	1996	ACP	PA-O3A-PB	3.47	142.47	132.73
3	A	1996	ACP	C4-C5-N7	3.75	112.93	109.48
3	A	1996	ACP	O5'-C5'-C4'	4.59	126.05	109.12
2	A	1995	AD4	C10-O9-C32	6.60	135.44	121.90
2	A	1995	AD4	O2T-C53-N1T	7.44	120.09	109.95

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

2 monomers are involved in 19 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
2	A	1995	AD4	11	0
3	A	1996	ACP	8	0

## 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, 95<sup>th</sup> 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 <sup>2</sup> )	Q<0.9
1	A	994/994 (100%)	-0.16	34 (3%)	49 42	32, 71, 140, 188	0

All (34) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	285	GLY	8.7
1	A	994	GLY	7.9
1	A	284	HIS	6.8
1	A	80	GLU	6.2
1	A	867	TYR	4.8
1	A	877	THR	4.5
1	A	81	GLY	4.3
1	A	878	GLU	3.9
1	A	434	TYR	3.3
1	A	888	CYS	3.2
1	A	50	TRP	3.1
1	A	286	GLY	3.1
1	A	82	GLU	3.1
1	A	507	ALA	3.0
1	A	504	SER	2.8
1	A	427	PHE	2.8
1	A	46	GLY	2.7
1	A	283	VAL	2.7
1	A	466	GLU	2.7
1	A	879	ASP	2.6
1	A	866	THR	2.6
1	A	993	GLU	2.6
1	A	924	ARG	2.6
1	A	47	LYS	2.5
1	A	505	ARG	2.5
1	A	45	GLU	2.4
1	A	992	LEU	2.4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	83	GLU	2.3
1	A	425	LEU	2.3
1	A	468	ALA	2.2
1	A	279	PHE	2.2
1	A	876	CYS	2.1
1	A	462	LEU	2.0
1	A	461	ASN	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 carbohydrates 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. LLDF column lists the quality of electron density of the group with respect to its neighbouring residues in protein, DNA or RNA chains. The B-factors column lists the minimum, median, 95<sup>th</sup> 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	LLDF	B-factors(Å <sup>2</sup> )	Q<0.9
5	NA	A	1999	1/1	0.82	0.60	9.94	49,49,49,49	0
3	ACP	A	1996	31/31	0.81	0.38	4.66	68,69,75,76	31
2	AD4	A	1995	62/62	0.92	0.30	1.60	68,71,73,76	0
4	MG	A	1997	1/1	0.47	1.21	-	69,69,69,69	1
4	MG	A	1998	1/1	0.76	0.69	-	67,67,67,67	0

## 6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.