



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Jan 31, 2016 – 08:07 PM GMT

PDB ID : 1IWG  
Title : Crystal structure of Bacterial Multidrug Efflux transporter AcrB  
Authors : Murakami, S.; Nakashima, R.; Yamashita, E.; Yamaguchi, A.  
Deposited on : 2002-05-15  
Resolution : 3.50 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) : **NOT EXECUTED**  
EDS : **NOT EXECUTED**  
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : trunk26865

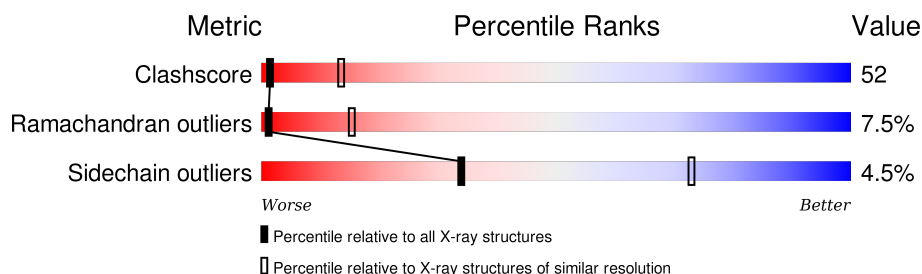
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*X-RAY DIFFRACTION*

The reported resolution of this entry is 3.50 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	102246	1157 (3.60-3.40)
Ramachandran outliers	100387	1120 (3.60-3.40)
Sidechain outliers	100360	1121 (3.60-3.40)

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.

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	1053	

## 2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 7639 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 AcrB.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	1006	Total	C	N	O	S	0	0	0
			7639	4916	1262	1419	42			

There are 4 discrepancies between the modelled and reference sequences:

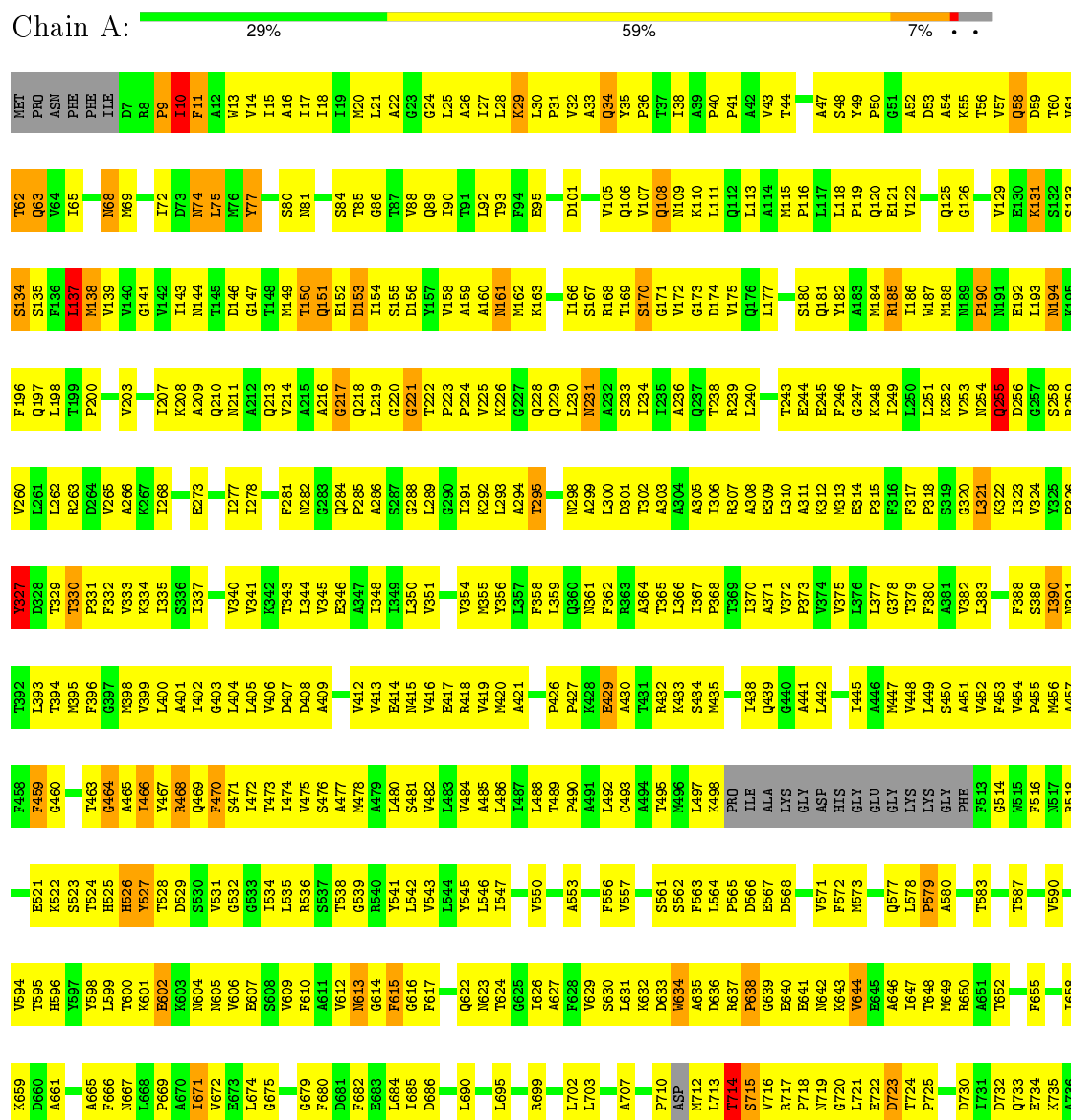
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1050	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P31224
A	1051	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P31224
A	1052	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P31224
A	1053	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P31224

### 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 ( $RSRZ > 2$ ). 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.

Note EDS was not executed.

#### • Molecule 1: AcrB



M1008	I943	A878	F804	Q737
G1009	I944	L879	S805	A738
G1010	I945	S880	S806	L739
M1011	V946	L881		G740
V1012	F947	L882	S813	V741
T1013	F948	L883	P814	S742
A1014	A949	L884	R815	L743
T1015	K950	F885	L816	N744
V1016	D951	L886	E817	D745
L1017	L952	C887	R818	
A1018	M953	L888	Y819	T748
I1019	D954	L889		T749
F1020	K955	A890	P823	
T1021	E956	L891	S824	A752
F1022	K957	L892	M825	A753
V1023	K958	C893	E826	N754
P1024	G959	S894	L827	
F1025	L960	L895	L828	Y758
F1026	I961	S896	G829	V759
T1027		L897	Q830	N760
V1028	T964	F898	A831	D761
V1029	L965	F899	A832	F762
R1030	D966	S900	P833	L763
R1031	A967	V901	G834	D764
R1032	V968	M902	K835	
F1033	R969	L903	S836	R767
S1034	M970	V904	T837	V768
R1035	R971	P905		K769
K1036	L972	V906	E842	K770
ASN	R973	L907	L843	V771
G101	P974	G908	M844	V772
ASP	T975	V909	E845	V773
ILE	L976	L910	Q846	M774
GLU	M977	G911	L847	S775
HIS	T978	A912		E776
SER	S979	L913	L851	A777
HIS	L980	L914	P852	K778
THR	A981	A915		Y779
VAL	F982		V855	R780
ASP	L983	R919		
HIS	L984	G920	D858	M781
HIS	G985	L921	M859	F783
HIS	V986	T922	THR	
HIS	N987	N923	GLY	I786
HIS	P988	D924	MET	
HIS	L989	V925	SER	W789
	V990	V926	TYR	Y790
	L991	F927	GLN	V791
	S992	Q928	GLU	R792
		V929	ARG	A793
	S997		LEU	A794
	G998	L932	S869	D795
	A999	T933	G870	G796
			N871	Q797
	A1002	L937	Q872	W798
	V1003	S938	A873	V799
	G1004	A939	P874	P800
	T1005	K940	S875	F801
	G1006	N941	L876	S802
	V1007	L942	L877	A803

## 4 Data and refinement statistics

Xtriage (Phenix) and EDS were not executed - this section will therefore be incomplete.

Property	Value	Source
Space group	H 3 2	Depositor
Cell constants a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	144.54Å 144.54Å 519.18Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	8.00 – 3.50	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	(Not available) (8.00-3.50)	Depositor
$R_{merge}$	0.09	Depositor
$R_{sym}$	(Not available)	Depositor
Refinement program	CNS	Depositor
R, $R_{free}$	0.290 , 0.355	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	7639	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	105.0	wwPDB-VP

## 5 Model quality [i](#)

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

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	0.27	0/7779	0.51	3/10563 (0.0%)

There are no bond length outliers.

All (3) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	949	ALA	C-N-CA	-11.25	93.58	121.70
1	A	949	ALA	CA-C-N	5.73	129.80	117.20
1	A	950	LYS	CB-CA-C	5.27	120.95	110.40

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	7639	0	7800	805	1
All	All	7639	0	7800	805	1

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 52.

All (805) 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:598:TYR:HB3	1:A:606:VAL:HG21	1.39	1.05
1:A:108:GLN:HB3	1:A:129:VAL:HG11	1.42	0.99
1:A:151:GLN:HB3	1:A:285:PRO:HB3	1.45	0.97
1:A:240:LEU:HD12	1:A:245:GLU:HB3	1.42	0.97
1:A:904:VAL:HG21	1:A:942:ALA:HB2	1.46	0.96
1:A:686:ASP:HB3	1:A:823:PRO:HG2	1.47	0.94
1:A:367:ILE:HG12	1:A:492:LEU:HD22	1.50	0.93
1:A:800:PRO:HG2	1:A:803:ALA:HB2	1.47	0.93
1:A:32:VAL:HG12	1:A:390:ILE:HD12	1.47	0.93
1:A:905:VAL:HB	1:A:906:PRO:HD3	1.49	0.92
1:A:743:ILE:HD12	1:A:743:ILE:H	1.32	0.92
1:A:1027:VAL:HG23	1:A:1028:VAL:H	1.34	0.92
1:A:991:ILE:HG22	1:A:992:SER:H	1.34	0.90
1:A:1018:ALA:HB1	1:A:1024:VAL:HG21	1.54	0.89
1:A:351:VAL:HG21	1:A:406:VAL:HG11	1.50	0.89
1:A:562:SER:O	1:A:924:ASP:HA	1.72	0.89
1:A:946:VAL:O	1:A:950:LYS:N	2.07	0.87
1:A:561:SER:HA	1:A:923:ASN:HB3	1.57	0.87
1:A:60:THR:HG23	1:A:61:VAL:HG23	1.56	0.87
1:A:110:LYS:HD3	1:A:113:LEU:HD12	1.57	0.87
1:A:200:PRO:HD2	1:A:749:THR:HG22	1.57	0.87
1:A:1022:VAL:HG13	1:A:1023:PRO:HD2	1.55	0.85
1:A:949:ALA:O	1:A:950:LYS:HD3	1.76	0.85
1:A:137:LEU:HG	1:A:138:MET:H	1.42	0.85
1:A:985:GLY:O	1:A:988:PRO:HD2	1.78	0.82
1:A:904:VAL:HG22	1:A:1024:VAL:HG22	1.61	0.81
1:A:181:GLN:HE22	1:A:767:ARG:HH21	1.29	0.81
1:A:945:ILE:HA	1:A:971:ARG:NH1	1.95	0.81
1:A:222:THR:HB	1:A:223:PRO:HD3	1.62	0.81
1:A:987:MET:HB3	1:A:988:PRO:HD3	1.63	0.80
1:A:141:GLY:HA2	1:A:288:GLY:HA3	1.64	0.80
1:A:568:ASP:OD1	1:A:644:VAL:HG23	1.80	0.79
1:A:1023:PRO:HB3	1:A:1027:VAL:HG13	1.63	0.79
1:A:950:LYS:NZ	1:A:1028:VAL:HG11	1.95	0.79
1:A:459:PHE:HB2	1:A:464:GLY:HA2	1.63	0.79
1:A:367:ILE:HB	1:A:368:PRO:HD3	1.64	0.79
1:A:330:THR:HB	1:A:331:PRO:HD3	1.65	0.78
1:A:158:VAL:HG22	1:A:162:MET:HE3	1.66	0.78
1:A:790:TYR:CD1	1:A:800:PRO:HA	2.20	0.77
1:A:125:GLN:HG3	1:A:126:GLY:H	1.49	0.77
1:A:300:LEU:HD22	1:A:333:VAL:HG11	1.65	0.77
1:A:580:ALA:HB1	1:A:724:THR:HG22	1.66	0.77

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:919:ARG:HG2	1:A:920:GLY:H	1.50	0.76
1:A:489:THR:HB	1:A:490:PRO:HD3	1.66	0.76
1:A:247:GLY:HA2	1:A:268:ILE:HD12	1.68	0.76
1:A:213:GLN:HG3	1:A:239:ARG:HG3	1.67	0.76
1:A:948:PHE:O	1:A:952:LEU:HG	1.85	0.75
1:A:613:ASN:HD22	1:A:614:GLY:N	1.84	0.75
1:A:57:VAL:HA	1:A:60:THR:HG22	1.68	0.75
1:A:253:VAL:HG12	1:A:259:ARG:HA	1.67	0.75
1:A:904:VAL:HA	1:A:907:LEU:HD22	1.67	0.74
1:A:897:ILE:HG23	1:A:946:VAL:HG11	1.69	0.74
1:A:456:MET:HA	1:A:876:LEU:HB3	1.68	0.74
1:A:484:VAL:HG13	1:A:488:LEU:HB3	1.70	0.74
1:A:465:ALA:HA	1:A:468:ARG:HB3	1.68	0.74
1:A:32:VAL:HA	1:A:390:ILE:HB	1.70	0.73
1:A:973:ARG:HB3	1:A:974:PRO:HD3	1.70	0.73
1:A:398:MET:O	1:A:402:ILE:HG13	1.89	0.73
1:A:903:LEU:O	1:A:907:LEU:HD13	1.88	0.73
1:A:790:TYR:HD1	1:A:800:PRO:HA	1.53	0.73
1:A:723:ASP:HA	1:A:813:SER:HA	1.70	0.72
1:A:596:HIS:HA	1:A:599:LEU:HB2	1.71	0.72
1:A:26:ALA:O	1:A:30:LEU:HB2	1.88	0.72
1:A:903:LEU:O	1:A:906:PRO:HD2	1.90	0.72
1:A:90:ILE:HD12	1:A:90:ILE:H	1.55	0.72
1:A:713:LEU:O	1:A:714:THR:HG23	1.89	0.72
1:A:291:ILE:HG21	1:A:306:ILE:HD11	1.72	0.72
1:A:730:ASP:HB2	1:A:806:SER:HB3	1.72	0.72
1:A:641:GLU:HB3	1:A:650:ARG:HH22	1.55	0.71
1:A:1035:ARG:HD3	1:A:1035:ARG:H	1.55	0.71
1:A:194:ASN:ND2	1:A:798:MET:HG2	2.05	0.71
1:A:686:ASP:OD1	1:A:690:LEU:HB2	1.89	0.71
1:A:162:MET:HG2	1:A:313:MET:SD	2.29	0.71
1:A:596:HIS:O	1:A:600:THR:HG22	1.90	0.71
1:A:583:THR:HA	1:A:622:GLN:NE2	2.03	0.71
1:A:475:VAL:O	1:A:478:MET:HB3	1.91	0.71
1:A:101:ASP:O	1:A:105:VAL:HG23	1.90	0.71
1:A:602:GLU:HG3	1:A:605:ASN:HB2	1.73	0.71
1:A:281:PHE:CZ	1:A:324:VAL:HG21	2.25	0.71
1:A:789:TRP:O	1:A:801:PHE:HB2	1.91	0.70
1:A:842:GLU:O	1:A:846:GLN:HG3	1.90	0.70
1:A:470:PHE:CD1	1:A:929:VAL:HG21	2.26	0.70
1:A:888:LEU:O	1:A:898:PRO:HG3	1.92	0.70

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:405:LEU:HD22	1:A:481:SER:HB3	1.73	0.70
1:A:1015:THR:O	1:A:1019:ILE:HG22	1.91	0.70
1:A:222:THR:HB	1:A:223:PRO:CD	2.21	0.70
1:A:712:MET:HB3	1:A:835:LYS:HE2	1.72	0.69
1:A:904:VAL:HG12	1:A:938:SER:HB3	1.73	0.69
1:A:802:SER:HA	1:A:805:SER:HB3	1.74	0.69
1:A:682:PHE:HE2	1:A:702:LEU:HD11	1.56	0.69
1:A:143:ILE:HG22	1:A:286:ALA:HB2	1.75	0.69
1:A:1027:VAL:HG23	1:A:1028:VAL:N	2.08	0.68
1:A:408:ASP:HA	1:A:940:LYS:HZ1	1.57	0.68
1:A:273:GLU:HG3	1:A:772:TYR:HE2	1.57	0.68
1:A:950:LYS:HZ2	1:A:1028:VAL:HG11	1.56	0.68
1:A:583:THR:HA	1:A:622:GLN:HE21	1.59	0.68
1:A:438:ILE:HG22	1:A:442:LEU:HG	1.75	0.68
1:A:534:ILE:HB	1:A:1026:PHE:HZ	1.58	0.67
1:A:710:PRO:C	1:A:713:LEU:HA	2.15	0.67
1:A:10:ILE:HD13	1:A:11:PHE:CD2	2.29	0.67
1:A:314:GLU:HA	1:A:317:PHE:CD2	2.28	0.67
1:A:401:ALA:O	1:A:405:LEU:HG	1.95	0.67
1:A:671:ILE:HG13	1:A:672:VAL:H	1.58	0.67
1:A:907:LEU:HD23	1:A:1018:ALA:HB2	1.76	0.67
1:A:452:VAL:HG23	1:A:453:PHE:HD1	1.58	0.67
1:A:744:ASN:O	1:A:748:THR:HG22	1.93	0.67
1:A:115:MET:HB2	1:A:116:PRO:HD3	1.77	0.67
1:A:846:GLN:OE1	1:A:847:LEU:HG	1.95	0.66
1:A:979:SER:HB2	1:A:1015:THR:HG21	1.78	0.66
1:A:975:ILE:HG13	1:A:1019:ILE:HD13	1.78	0.66
1:A:890:ALA:C	1:A:891:LEU:HD22	2.16	0.66
1:A:695:LEU:HD22	1:A:825:MET:SD	2.36	0.66
1:A:9:PRO:HG3	1:A:495:THR:OG1	1.96	0.65
1:A:564:LEU:HG	1:A:565:PRO:HD2	1.78	0.65
1:A:36:PRO:O	1:A:38:ILE:HG13	1.96	0.65
1:A:632:LYS:HD2	1:A:633:ASP:OD1	1.97	0.65
1:A:450:SER:N	1:A:478:MET:HE1	2.11	0.65
1:A:310:LEU:O	1:A:310:LEU:HD23	1.95	0.65
1:A:532:GLY:HA2	1:A:535:LEU:HD12	1.78	0.65
1:A:186:ILE:HD13	1:A:262:LEU:HD21	1.77	0.65
1:A:564:LEU:HB3	1:A:671:ILE:HG22	1.79	0.65
1:A:904:VAL:HG21	1:A:942:ALA:CB	2.25	0.65
1:A:986:VAL:HG12	1:A:990:VAL:HG23	1.78	0.65
1:A:173:GLY:HA2	1:A:294:ALA:HB2	1.78	0.65

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:143:ILE:HG22	1:A:286:ALA:CB	2.26	0.64
1:A:228:GLN:HE21	1:A:230:LEU:H	1.45	0.64
1:A:900:SER:HA	1:A:1027:VAL:HB	1.79	0.64
1:A:945:ILE:HG23	1:A:971:ARG:NH2	2.13	0.64
1:A:911:GLY:HA3	1:A:1013:THR:HB	1.80	0.64
1:A:1022:VAL:CG1	1:A:1023:PRO:HD2	2.28	0.64
1:A:531:VAL:O	1:A:535:LEU:HG	1.96	0.64
1:A:960:LEU:HD22	1:A:961:ILE:HG23	1.78	0.64
1:A:432:ARG:HD2	1:A:433:LYS:NZ	2.13	0.64
1:A:210:GLN:O	1:A:240:LEU:HD21	1.98	0.64
1:A:390:ILE:HG23	1:A:395:MET:SD	2.38	0.63
1:A:724:THR:HB	1:A:725:PRO:HD2	1.80	0.63
1:A:356:TYR:HD1	1:A:365:THR:HG21	1.63	0.63
1:A:108:GLN:HB2	1:A:129:VAL:HG21	1.80	0.63
1:A:986:VAL:O	1:A:990:VAL:HG23	1.98	0.63
1:A:991:ILE:HG22	1:A:992:SER:N	2.11	0.63
1:A:777:ALA:O	1:A:781:MET:HG2	1.99	0.63
1:A:203:VAL:O	1:A:207:ILE:HG13	1.98	0.63
1:A:527:TYR:OH	1:A:1019:ILE:HG13	1.99	0.63
1:A:327:TYR:CD2	1:A:571:VAL:HG11	2.34	0.63
1:A:403:GLY:HA3	1:A:982:PHE:CD1	2.33	0.63
1:A:358:PHE:HB3	1:A:977:MET:HE2	1.81	0.63
1:A:354:VAL:CG2	1:A:984:LEU:HD12	2.29	0.62
1:A:193:LEU:HD23	1:A:265:VAL:HB	1.80	0.62
1:A:778:LYS:HG3	1:A:779:TYR:CD1	2.33	0.62
1:A:532:GLY:O	1:A:536:ARG:HG3	1.99	0.62
1:A:721:LEU:HD12	1:A:721:LEU:H	1.64	0.62
1:A:538:THR:HG23	1:A:1030:ARG:HH21	1.65	0.62
1:A:969:ARG:O	1:A:969:ARG:HD2	1.99	0.62
1:A:493:CYS:SG	1:A:497:LEU:HD22	2.40	0.62
1:A:56:THR:HG22	1:A:60:THR:HG21	1.81	0.62
1:A:950:LYS:HZ2	1:A:1028:VAL:CG1	2.12	0.62
1:A:399:VAL:HA	1:A:402:ILE:HD12	1.81	0.62
1:A:454:VAL:O	1:A:457:ALA:HB3	2.00	0.62
1:A:131:LYS:HB3	1:A:295:THR:H	1.65	0.62
1:A:418:ARG:NH1	1:A:418:ARG:HB2	2.15	0.62
1:A:971:ARG:HH11	1:A:971:ARG:HG3	1.65	0.61
1:A:527:TYR:O	1:A:531:VAL:HG23	2.00	0.61
1:A:435:MET:HA	1:A:438:ILE:HB	1.80	0.61
1:A:255:GLN:NE2	1:A:256:ASP:N	2.48	0.61
1:A:719:ASN:HB2	1:A:826:GLU:HB3	1.83	0.61

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:553:ALA:O	1:A:557:VAL:HG23	2.00	0.61
1:A:29:LYS:HB3	1:A:29:LYS:NZ	2.15	0.61
1:A:451:ALA:O	1:A:455:PRO:HG2	2.00	0.61
1:A:455:PRO:HG3	1:A:883:VAL:HG21	1.81	0.61
1:A:149:MET:HB2	1:A:153:ASP:HB3	1.83	0.61
1:A:682:PHE:CE2	1:A:702:LEU:HD11	2.36	0.60
1:A:546:LEU:O	1:A:550:VAL:HG23	2.01	0.60
1:A:298:ASN:HB2	1:A:301:ASP:HB2	1.83	0.60
1:A:733:GLN:OE1	1:A:743:ILE:HG12	2.01	0.60
1:A:671:ILE:HG13	1:A:672:VAL:N	2.16	0.60
1:A:573:MET:HE3	1:A:626:ILE:HD11	1.82	0.60
1:A:901:VAL:HG21	1:A:939:ALA:HA	1.82	0.60
1:A:447:MET:HB3	1:A:887:CYS:HB3	1.83	0.60
1:A:463:THR:O	1:A:466:ILE:HB	2.02	0.60
1:A:478:MET:O	1:A:482:VAL:HG23	2.02	0.60
1:A:600:THR:HG23	1:A:601:LYS:H	1.67	0.60
1:A:774:MET:O	1:A:775:SER:HB3	2.01	0.60
1:A:172:VAL:HG13	1:A:291:ILE:HG23	1.83	0.60
1:A:455:PRO:HB2	1:A:880:SER:OG	2.01	0.60
1:A:877:TYR:O	1:A:881:LEU:HG	2.01	0.60
1:A:638:PRO:HG2	1:A:639:GLY:H	1.65	0.60
1:A:30:LEU:HD11	1:A:388:PHE:O	2.02	0.60
1:A:354:VAL:HG21	1:A:984:LEU:HD12	1.83	0.60
1:A:600:THR:HG23	1:A:601:LYS:N	2.17	0.60
1:A:31:PRO:O	1:A:389:SER:HB2	2.02	0.59
1:A:904:VAL:O	1:A:907:LEU:HB2	2.02	0.59
1:A:945:ILE:HG22	1:A:945:ILE:O	2.01	0.59
1:A:719:ASN:ND2	1:A:815:ARG:HH21	1.99	0.59
1:A:493:CYS:O	1:A:497:LEU:HB2	2.03	0.59
1:A:655:PHE:HA	1:A:659:LYS:HD3	1.85	0.59
1:A:984:LEU:O	1:A:988:PRO:HD3	2.03	0.59
1:A:378:GLY:O	1:A:382:VAL:HG23	2.03	0.59
1:A:945:ILE:HD12	1:A:1024:VAL:CG1	2.33	0.59
1:A:92:LEU:HD13	1:A:107:VAL:HG21	1.84	0.59
1:A:332:PHE:HA	1:A:335:ILE:HG22	1.83	0.59
1:A:343:THR:HG21	1:A:989:LEU:HD21	1.83	0.59
1:A:213:GLN:HG2	1:A:239:ARG:H	1.68	0.59
1:A:1010:GLY:O	1:A:1014:ALA:HB2	2.02	0.59
1:A:358:PHE:HB3	1:A:977:MET:CE	2.33	0.59
1:A:658:ILE:O	1:A:659:LYS:HD2	2.02	0.59
1:A:447:MET:O	1:A:451:ALA:HB2	2.03	0.59

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:452:VAL:HG23	1:A:453:PHE:CD1	2.37	0.58
1:A:873:ALA:HB3	1:A:874:PRO:HD3	1.85	0.58
1:A:721:LEU:HD12	1:A:721:LEU:N	2.18	0.58
1:A:832:ALA:HB3	1:A:835:LYS:HB2	1.86	0.58
1:A:792:ARG:HA	1:A:798:MET:HE3	1.84	0.58
1:A:150:THR:C	1:A:152:GLU:H	2.07	0.58
1:A:20:MET:HA	1:A:377:LEU:HD13	1.85	0.58
1:A:396:PHE:HE1	1:A:999:ALA:HB1	1.69	0.58
1:A:166:ILE:H	1:A:166:ILE:HD12	1.69	0.58
1:A:707:ALA:O	1:A:710:PRO:HD3	2.03	0.58
1:A:198:LEU:HA	1:A:792:ARG:HH21	1.68	0.58
1:A:375:VAL:HG11	1:A:405:LEU:HD22	1.85	0.58
1:A:990:VAL:HG22	1:A:1005:THR:N	2.19	0.58
1:A:990:VAL:HG22	1:A:1004:GLY:C	2.23	0.58
1:A:43:VAL:HG11	1:A:107:VAL:HG11	1.85	0.58
1:A:166:ILE:C	1:A:168:ARG:H	2.07	0.57
1:A:90:ILE:N	1:A:90:ILE:HD12	2.18	0.57
1:A:420:MET:HG2	1:A:426:PRO:HA	1.85	0.57
1:A:945:ILE:HG12	1:A:971:ARG:NE	2.19	0.57
1:A:291:ILE:HG21	1:A:306:ILE:CD1	2.34	0.57
1:A:426:PRO:N	1:A:427:PRO:CD	2.67	0.57
1:A:185:ARG:HG3	1:A:185:ARG:HH11	1.68	0.57
1:A:524:THR:O	1:A:528:THR:HB	2.04	0.57
1:A:166:ILE:HG22	1:A:175:VAL:HG21	1.86	0.57
1:A:192:GLU:HB3	1:A:265:VAL:HA	1.86	0.57
1:A:792:ARG:HD3	1:A:798:MET:HE3	1.86	0.57
1:A:680:PHE:HB2	1:A:859:TRP:HZ3	1.70	0.57
1:A:983:ILE:HG22	1:A:983:ILE:O	2.04	0.57
1:A:341:VAL:O	1:A:344:LEU:HB3	2.04	0.57
1:A:399:VAL:HA	1:A:402:ILE:CD1	2.34	0.57
1:A:160:ALA:O	1:A:161:ASN:HB2	2.04	0.57
1:A:882:ILE:O	1:A:886:LEU:HD23	2.05	0.57
1:A:10:ILE:HD13	1:A:11:PHE:H	1.70	0.57
1:A:915:ALA:HB2	1:A:1009:GLY:HA3	1.86	0.57
1:A:1030:ARG:O	1:A:1034:SER:HB3	2.05	0.57
1:A:246:PHE:O	1:A:249:ILE:HG12	2.05	0.56
1:A:904:VAL:CG1	1:A:938:SER:HB3	2.35	0.56
1:A:16:ALA:O	1:A:20:MET:HG2	2.04	0.56
1:A:732:ASP:OD2	1:A:735:LYS:HG3	2.05	0.56
1:A:27:ILE:CD1	1:A:390:ILE:HD11	2.35	0.56
1:A:919:ARG:HG2	1:A:920:GLY:N	2.19	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:752:ALA:O	1:A:774:MET:HA	2.05	0.56
1:A:188:MET:HA	1:A:266:ALA:HB2	1.88	0.56
1:A:851:LEU:HB3	1:A:852:PRO:HD2	1.87	0.56
1:A:14:VAL:O	1:A:18:ILE:HG13	2.06	0.56
1:A:629:VAL:HG12	1:A:630:SER:N	2.21	0.56
1:A:448:VAL:HG21	1:A:943:ILE:HD11	1.88	0.56
1:A:606:VAL:HA	1:A:631:LEU:HD23	1.88	0.56
1:A:945:ILE:HD12	1:A:1024:VAL:HG12	1.88	0.56
1:A:467:TYR:CE2	1:A:925:VAL:HG13	2.41	0.56
1:A:402:ILE:O	1:A:406:VAL:HG23	2.05	0.56
1:A:166:ILE:HG22	1:A:175:VAL:CG2	2.36	0.56
1:A:641:GLU:HA	1:A:646:ALA:CB	2.36	0.56
1:A:190:PRO:HG3	1:A:789:TRP:CE2	2.41	0.56
1:A:312:LYS:O	1:A:315:PRO:HD2	2.05	0.56
1:A:169:THR:HG22	1:A:170:SER:N	2.21	0.56
1:A:255:GLN:NE2	1:A:256:ASP:H	2.04	0.55
1:A:905:VAL:HB	1:A:906:PRO:CD	2.29	0.55
1:A:456:MET:CE	1:A:932:LEU:HD11	2.35	0.55
1:A:901:VAL:CG2	1:A:939:ALA:HA	2.35	0.55
1:A:41:PRO:HA	1:A:295:THR:HG21	1.88	0.55
1:A:58:GLN:O	1:A:62:THR:HB	2.07	0.55
1:A:80:SER:HB3	1:A:818:ARG:HB2	1.89	0.55
1:A:514:GLY:O	1:A:518:ARG:HG3	2.07	0.55
1:A:151:GLN:HB3	1:A:285:PRO:CB	2.29	0.55
1:A:713:LEU:O	1:A:832:ALA:HB2	2.07	0.55
1:A:538:THR:HG23	1:A:1030:ARG:NH2	2.22	0.55
1:A:778:LYS:HG3	1:A:779:TYR:CE1	2.41	0.55
1:A:658:ILE:C	1:A:659:LYS:HD2	2.27	0.55
1:A:743:ILE:CD1	1:A:743:ILE:H	2.08	0.55
1:A:451:ALA:HB1	1:A:884:VAL:HA	1.89	0.55
1:A:207:ILE:C	1:A:209:ALA:H	2.10	0.55
1:A:1026:PHE:O	1:A:1030:ARG:HG2	2.07	0.55
1:A:190:PRO:HG3	1:A:789:TRP:CZ2	2.42	0.55
1:A:773:VAL:O	1:A:773:VAL:HG13	2.06	0.55
1:A:685:ILE:HD11	1:A:819:TYR:HD2	1.72	0.54
1:A:801:PHE:O	1:A:805:SER:HB2	2.07	0.54
1:A:528:THR:O	1:A:531:VAL:HB	2.08	0.54
1:A:291:ILE:HG12	1:A:306:ILE:HD13	1.89	0.54
1:A:432:ARG:HD2	1:A:433:LYS:HZ1	1.71	0.54
1:A:75:LEU:HD11	1:A:92:LEU:HB3	1.89	0.54
1:A:254:ASN:HB2	1:A:258:SER:OG	2.07	0.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:159:ALA:HA	1:A:163:LYS:HB3	1.89	0.54
1:A:277:ILE:HA	1:A:613:ASN:O	2.07	0.54
1:A:1028:VAL:O	1:A:1032:ARG:HB3	2.07	0.54
1:A:984:LEU:O	1:A:987:MET:HB3	2.07	0.54
1:A:897:ILE:N	1:A:898:PRO:CD	2.71	0.54
1:A:594:VAL:HA	1:A:655:PHE:HE1	1.73	0.54
1:A:721:LEU:HD22	1:A:825:MET:CE	2.38	0.54
1:A:403:GLY:HA3	1:A:982:PHE:CE1	2.43	0.54
1:A:521:GLU:O	1:A:525:HIS:HB2	2.08	0.54
1:A:218:GLN:NE2	1:A:231:ASN:HD21	2.06	0.54
1:A:990:VAL:HG13	1:A:1005:THR:OG1	2.08	0.54
1:A:426:PRO:CD	1:A:427:PRO:HD3	2.38	0.54
1:A:133:SER:O	1:A:135:SER:N	2.41	0.54
1:A:1025:PHE:N	1:A:1027:VAL:HG22	2.23	0.53
1:A:426:PRO:N	1:A:427:PRO:HD3	2.23	0.53
1:A:414:GLU:CD	1:A:974:PRO:HG3	2.29	0.53
1:A:162:MET:HA	1:A:313:MET:SD	2.48	0.53
1:A:10:ILE:CD1	1:A:11:PHE:H	2.21	0.53
1:A:441:ALA:O	1:A:445:ILE:HG12	2.09	0.53
1:A:216:ALA:O	1:A:217:GLY:O	2.26	0.53
1:A:903:LEU:HD12	1:A:1027:VAL:HG12	1.90	0.53
1:A:334:LYS:HB3	1:A:334:LYS:NZ	2.24	0.53
1:A:1025:PHE:O	1:A:1029:VAL:HG23	2.09	0.53
1:A:36:PRO:HG3	1:A:469:GLN:OE1	2.08	0.53
1:A:1027:VAL:CG2	1:A:1028:VAL:H	2.16	0.53
1:A:27:ILE:HD11	1:A:390:ILE:HD11	1.90	0.53
1:A:92:LEU:HD22	1:A:107:VAL:HG23	1.90	0.53
1:A:332:PHE:O	1:A:335:ILE:HG22	2.08	0.53
1:A:111:LEU:HD23	1:A:111:LEU:O	2.08	0.53
1:A:699:ARG:HE	1:A:718:PRO:HB3	1.72	0.53
1:A:1035:ARG:HE	1:A:1036:LYS:HZ3	1.55	0.53
1:A:197:GLN:HA	1:A:798:MET:SD	2.49	0.53
1:A:61:VAL:HG22	1:A:122:VAL:HG21	1.91	0.53
1:A:1035:ARG:HG2	1:A:1036:LYS:HG3	1.91	0.53
1:A:871:ASN:O	1:A:874:PRO:HD2	2.09	0.53
1:A:318:PRO:HG2	1:A:321:LEU:HB2	1.91	0.53
1:A:743:ILE:HD12	1:A:743:ILE:N	2.12	0.52
1:A:170:SER:OG	1:A:305:ALA:HB3	2.09	0.52
1:A:982:PHE:CD2	1:A:1011:MET:HG3	2.44	0.52
1:A:964:THR:HB	1:A:1025:PHE:CE2	2.44	0.52
1:A:371:ALA:O	1:A:375:VAL:HG23	2.09	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:188:MET:HA	1:A:266:ALA:CB	2.39	0.52
1:A:485:ALA:HA	1:A:489:THR:HB	1.90	0.52
1:A:716:VAL:O	1:A:717:ARG:HG2	2.08	0.52
1:A:647:ILE:HA	1:A:650:ARG:NH1	2.25	0.52
1:A:648:THR:O	1:A:652:THR:HG23	2.10	0.52
1:A:578:LEU:HB3	1:A:579:PRO:HD2	1.92	0.52
1:A:875:SER:O	1:A:879:ILE:HG13	2.09	0.52
1:A:200:PRO:HD2	1:A:749:THR:CG2	2.36	0.52
1:A:476:SER:O	1:A:480:LEU:HG	2.09	0.52
1:A:218:GLN:HA	1:A:234:ILE:HG13	1.91	0.52
1:A:616:GLY:HA3	1:A:624:THR:HB	1.92	0.52
1:A:370:ILE:O	1:A:370:ILE:HG22	2.09	0.52
1:A:372:VAL:CG2	1:A:373:PRO:HD3	2.40	0.52
1:A:792:ARG:HG3	1:A:793:ALA:N	2.25	0.52
1:A:950:LYS:NZ	1:A:1028:VAL:CG1	2.70	0.52
1:A:291:ILE:N	1:A:291:ILE:HD12	2.24	0.52
1:A:713:LEU:H	1:A:833:PRO:HD2	1.74	0.52
1:A:1003:VAL:O	1:A:1007:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:471:SER:O	1:A:475:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:230:LEU:HD23	1:A:230:LEU:C	2.29	0.52
1:A:762:PHE:CE1	1:A:764:ASP:HB2	2.44	0.52
1:A:979:SER:O	1:A:983:ILE:HG13	2.10	0.52
1:A:448:VAL:O	1:A:451:ALA:HB3	2.10	0.52
1:A:895:TRP:HA	1:A:895:TRP:CE3	2.44	0.52
1:A:655:PHE:O	1:A:659:LYS:HB2	2.08	0.52
1:A:399:VAL:HG12	1:A:989:LEU:HD11	1.91	0.52
1:A:190:PRO:HD2	1:A:779:TYR:CD2	2.45	0.52
1:A:960:LEU:CD2	1:A:961:ILE:HG23	2.39	0.52
1:A:34:GLN:HG2	1:A:333:VAL:HG22	1.92	0.52
1:A:343:THR:HG21	1:A:989:LEU:CD2	2.39	0.52
1:A:919:ARG:HH22	1:A:990:VAL:HG12	1.75	0.52
1:A:169:THR:OG1	1:A:309:GLU:HG2	2.10	0.52
1:A:310:LEU:HD21	1:A:323:ILE:HD13	1.91	0.52
1:A:326:PRO:O	1:A:327:TYR:C	2.48	0.51
1:A:1023:PRO:C	1:A:1025:PHE:N	2.63	0.51
1:A:60:THR:CG2	1:A:61:VAL:HG23	2.34	0.51
1:A:542:LEU:O	1:A:546:LEU:HG	2.11	0.51
1:A:214:VAL:O	1:A:236:ALA:HB3	2.11	0.51
1:A:594:VAL:HA	1:A:655:PHE:CE1	2.45	0.51
1:A:247:GLY:HA2	1:A:268:ILE:CD1	2.39	0.51
1:A:219:LEU:O	1:A:231:ASN:HA	2.09	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:945:ILE:HA	1:A:971:ARG:CZ	2.40	0.51
1:A:156:ASP:HA	1:A:181:GLN:HA	1.92	0.51
1:A:609:VAL:HG12	1:A:610:PHE:N	2.25	0.51
1:A:979:SER:CB	1:A:1015:THR:HG21	2.40	0.51
1:A:680:PHE:HB2	1:A:859:TRP:CZ3	2.45	0.51
1:A:75:LEU:CD1	1:A:92:LEU:HB3	2.41	0.51
1:A:375:VAL:HG11	1:A:481:SER:HB3	1.91	0.51
1:A:84:SER:C	1:A:86:GLY:H	2.13	0.51
1:A:1033:PHE:O	1:A:1034:SER:C	2.48	0.51
1:A:926:TYR:CE1	1:A:999:ALA:HB1	2.46	0.51
1:A:32:VAL:HB	1:A:337:ILE:HD11	1.93	0.51
1:A:344:LEU:HD23	1:A:402:ILE:HD11	1.93	0.51
1:A:68:ASN:O	1:A:110:LYS:HD2	2.11	0.51
1:A:595:THR:O	1:A:599:LEU:HG	2.11	0.51
1:A:194:ASN:C	1:A:196:PHE:H	2.13	0.51
1:A:626:ILE:HG13	1:A:627:ALA:N	2.26	0.51
1:A:901:VAL:HG23	1:A:942:ALA:HB3	1.93	0.51
1:A:723:ASP:H	1:A:814:PRO:HD2	1.76	0.51
1:A:777:ALA:C	1:A:779:TYR:H	2.15	0.51
1:A:180:SER:OG	1:A:273:GLU:HB3	2.11	0.51
1:A:721:LEU:HD22	1:A:825:MET:HE3	1.93	0.51
1:A:945:ILE:HG12	1:A:971:ARG:CZ	2.41	0.50
1:A:950:LYS:HZ1	1:A:1028:VAL:HG11	1.71	0.50
1:A:13:TRP:O	1:A:17:ILE:HG13	2.11	0.50
1:A:760:ASN:O	1:A:771:VAL:HB	2.12	0.50
1:A:580:ALA:HB1	1:A:724:THR:CG2	2.38	0.50
1:A:892:TYR:CE2	1:A:943:ILE:HG23	2.47	0.50
1:A:281:PHE:CE2	1:A:324:VAL:HG21	2.46	0.50
1:A:173:GLY:HA3	1:A:293:LEU:O	2.11	0.50
1:A:463:THR:HG22	1:A:463:THR:O	2.11	0.50
1:A:598:TYR:CB	1:A:606:VAL:HG21	2.27	0.50
1:A:240:LEU:N	1:A:240:LEU:HD22	2.27	0.50
1:A:472:ILE:HG23	1:A:473:THR:N	2.27	0.50
1:A:221:GLY:O	1:A:222:THR:C	2.50	0.50
1:A:372:VAL:HG11	1:A:406:VAL:HG22	1.93	0.50
1:A:741:VAL:HG12	1:A:792:ARG:O	2.12	0.50
1:A:174:ASP:O	1:A:292:LYS:HB3	2.12	0.50
1:A:1026:PHE:HB3	1:A:1030:ARG:NH2	2.27	0.50
1:A:1030:ARG:C	1:A:1034:SER:HB3	2.32	0.50
1:A:351:VAL:HG23	1:A:981:ALA:HB1	1.92	0.50
1:A:721:LEU:HD11	1:A:817:GLU:CD	2.32	0.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:545:TYR:CE2	1:A:903:LEU:HB3	2.47	0.50
1:A:613:ASN:HD22	1:A:614:GLY:H	1.58	0.50
1:A:647:ILE:HA	1:A:650:ARG:HH11	1.77	0.50
1:A:925:VAL:O	1:A:929:VAL:HG23	2.12	0.50
1:A:9:PRO:C	1:A:10:ILE:HD12	2.32	0.50
1:A:745:ASP:HA	1:A:748:THR:CG2	2.42	0.50
1:A:403:GLY:HA3	1:A:982:PHE:HD1	1.76	0.50
1:A:1026:PHE:CB	1:A:1030:ARG:HH12	2.25	0.49
1:A:74:ASN:O	1:A:75:LEU:HB2	2.11	0.49
1:A:652:THR:CG2	1:A:665:ALA:HB3	2.42	0.49
1:A:635:ALA:C	1:A:637:ARG:H	2.16	0.49
1:A:949:ALA:HB1	1:A:950:LYS:HZ3	1.77	0.49
1:A:710:PRO:O	1:A:713:LEU:HA	2.11	0.49
1:A:438:ILE:HG22	1:A:442:LEU:CG	2.41	0.49
1:A:795:ASP:OD2	1:A:797:GLN:HG2	2.11	0.49
1:A:949:ALA:C	1:A:950:LYS:HD3	2.30	0.49
1:A:29:LYS:HZ3	1:A:29:LYS:HB3	1.77	0.49
1:A:372:VAL:HG11	1:A:406:VAL:CG2	2.42	0.49
1:A:453:PHE:HE2	1:A:474:ILE:HD12	1.77	0.49
1:A:314:GLU:HA	1:A:317:PHE:CE2	2.46	0.49
1:A:985:GLY:C	1:A:988:PRO:HD2	2.33	0.49
1:A:587:THR:HG21	1:A:613:ASN:HD21	1.78	0.49
1:A:88:VAL:HG22	1:A:89:GLN:N	2.26	0.49
1:A:539:GLY:O	1:A:543:VAL:HG23	2.13	0.49
1:A:556:PHE:HD1	1:A:913:LEU:HD21	1.78	0.49
1:A:903:LEU:HD12	1:A:1027:VAL:CG1	2.43	0.49
1:A:61:VAL:CG2	1:A:122:VAL:HG21	2.42	0.49
1:A:480:LEU:O	1:A:484:VAL:HG23	2.13	0.49
1:A:400:LEU:HD21	1:A:933:THR:OG1	2.12	0.49
1:A:949:ALA:O	1:A:950:LYS:C	2.34	0.49
1:A:72:ILE:HD13	1:A:107:VAL:HA	1.95	0.49
1:A:47:ALA:HB3	1:A:88:VAL:CG1	2.43	0.49
1:A:543:VAL:O	1:A:547:ILE:HG13	2.13	0.49
1:A:44:THR:O	1:A:129:VAL:HA	2.13	0.49
1:A:137:LEU:HD23	1:A:137:LEU:N	2.28	0.49
1:A:172:VAL:HG11	1:A:175:VAL:HG22	1.93	0.49
1:A:702:LEU:HD12	1:A:851:LEU:HD11	1.94	0.49
1:A:671:ILE:CG1	1:A:672:VAL:H	2.20	0.49
1:A:358:PHE:HD2	1:A:977:MET:HE3	1.77	0.49
1:A:1013:THR:O	1:A:1013:THR:HG22	2.13	0.49
1:A:754:TRP:CZ2	1:A:786:ILE:HD13	2.48	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1026:PHE:H	1:A:1026:PHE:HD1	1.60	0.49
1:A:379:THR:O	1:A:383:LEU:HG	2.13	0.49
1:A:826:GLU:OE1	1:A:828:LEU:HD21	2.13	0.49
1:A:54:ALA:O	1:A:816:LEU:HD12	2.13	0.49
1:A:450:SER:O	1:A:455:PRO:HD3	2.13	0.48
1:A:20:MET:HA	1:A:377:LEU:CD1	2.43	0.48
1:A:139:VAL:HA	1:A:289:LEU:O	2.13	0.48
1:A:211:ASN:CB	1:A:240:LEU:HD23	2.43	0.48
1:A:577:GLN:OE1	1:A:624:THR:HG22	2.13	0.48
1:A:344:LEU:HD13	1:A:344:LEU:C	2.34	0.48
1:A:972:LEU:C	1:A:972:LEU:HD13	2.34	0.48
1:A:327:TYR:C	1:A:327:TYR:CD2	2.87	0.48
1:A:433:LYS:HD2	1:A:433:LYS:N	2.28	0.48
1:A:899:PHE:O	1:A:902:MET:HB2	2.13	0.48
1:A:713:LEU:N	1:A:713:LEU:HD12	2.29	0.48
1:A:435:MET:HA	1:A:438:ILE:CG1	2.44	0.48
1:A:419:VAL:C	1:A:421:ALA:H	2.17	0.48
1:A:742:SER:HB3	1:A:745:ASP:OD2	2.13	0.48
1:A:322:LYS:NZ	1:A:322:LYS:HB3	2.29	0.48
1:A:388:PHE:HE1	1:A:472:ILE:HG21	1.79	0.48
1:A:919:ARG:HB3	1:A:921:LEU:HD23	1.95	0.48
1:A:138:MET:O	1:A:291:ILE:HD13	2.14	0.48
1:A:166:ILE:H	1:A:166:ILE:CD1	2.26	0.48
1:A:632:LYS:HD3	1:A:633:ASP:H	1.79	0.47
1:A:27:ILE:HD13	1:A:380:PHE:CD1	2.49	0.47
1:A:173:GLY:CA	1:A:294:ALA:HB2	2.42	0.47
1:A:1019:ILE:HG23	1:A:1020:PHE:N	2.29	0.47
1:A:907:LEU:O	1:A:910:ILE:HG22	2.14	0.47
1:A:41:PRO:HA	1:A:295:THR:CG2	2.43	0.47
1:A:418:ARG:HE	1:A:970:MET:HB2	1.79	0.47
1:A:62:THR:OG1	1:A:88:VAL:HG21	2.14	0.47
1:A:1023:PRO:C	1:A:1025:PHE:H	2.16	0.47
1:A:942:ALA:HA	1:A:1024:VAL:HG13	1.96	0.47
1:A:34:GLN:CD	1:A:333:VAL:HG22	2.34	0.47
1:A:456:MET:HE2	1:A:932:LEU:HD11	1.96	0.47
1:A:10:ILE:O	1:A:11:PHE:C	2.53	0.47
1:A:911:GLY:CA	1:A:1013:THR:HB	2.43	0.47
1:A:567:GLU:OE1	1:A:997:SER:HA	2.14	0.47
1:A:55:LYS:N	1:A:55:LYS:HD2	2.29	0.47
1:A:21:LEU:O	1:A:22:ALA:C	2.52	0.47
1:A:952:LEU:O	1:A:956:GLU:HB2	2.14	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:166:ILE:N	1:A:166:ILE:HD12	2.28	0.47
1:A:893:GLU:O	1:A:894:SER:HB3	2.14	0.47
1:A:11:PHE:O	1:A:15:ILE:HG13	2.14	0.47
1:A:684:LEU:HD11	1:A:855:VAL:CG1	2.45	0.47
1:A:211:ASN:HB2	1:A:240:LEU:HD23	1.97	0.47
1:A:986:VAL:HA	1:A:989:LEU:HD12	1.95	0.47
1:A:305:ALA:HA	1:A:308:ALA:HB3	1.96	0.47
1:A:482:VAL:O	1:A:486:LEU:HG	2.14	0.47
1:A:470:PHE:CD2	1:A:929:VAL:HG11	2.49	0.47
1:A:968:VAL:HB	1:A:1025:PHE:CZ	2.49	0.47
1:A:449:LEU:HB2	1:A:478:MET:HE1	1.97	0.47
1:A:445:ILE:HG22	1:A:943:ILE:CD1	2.45	0.47
1:A:641:GLU:HB3	1:A:650:ARG:NH2	2.27	0.47
1:A:844:MET:CE	1:A:847:LEU:HD12	2.45	0.47
1:A:972:LEU:HD11	1:A:976:LEU:HD22	1.97	0.47
1:A:77:TYR:CE1	1:A:93:THR:HB	2.50	0.47
1:A:144:ASN:HA	1:A:320:GLY:O	2.15	0.47
1:A:531:VAL:O	1:A:534:ILE:HG12	2.14	0.47
1:A:971:ARG:O	1:A:974:PRO:HD2	2.15	0.47
1:A:399:VAL:CG1	1:A:989:LEU:HD11	2.45	0.47
1:A:137:LEU:HG	1:A:138:MET:N	2.22	0.47
1:A:172:VAL:HG11	1:A:175:VAL:CG2	2.45	0.47
1:A:303:ALA:HA	1:A:306:ILE:HD12	1.97	0.47
1:A:312:LYS:C	1:A:315:PRO:HD2	2.35	0.47
1:A:783:PRO:O	1:A:786:ILE:HG12	2.15	0.47
1:A:965:LEU:HD23	1:A:965:LEU:C	2.35	0.47
1:A:598:TYR:HH	1:A:655:PHE:HE2	1.62	0.47
1:A:637:ARG:HD2	1:A:642:ASN:O	2.15	0.47
1:A:1021:PHE:O	1:A:1022:VAL:O	2.32	0.47
1:A:986:VAL:HG13	1:A:1004:GLY:HA2	1.96	0.47
1:A:924:ASP:OD2	1:A:926:TYR:HB2	2.15	0.47
1:A:68:ASN:HA	1:A:68:ASN:HD22	1.52	0.47
1:A:35:TYR:HD1	1:A:35:TYR:H	1.59	0.47
1:A:897:ILE:HB	1:A:898:PRO:HD3	1.97	0.46
1:A:57:VAL:CA	1:A:60:THR:HG22	2.43	0.46
1:A:713:LEU:H	1:A:832:ALA:HB1	1.80	0.46
1:A:34:GLN:CG	1:A:333:VAL:HG22	2.46	0.46
1:A:710:PRO:HB2	1:A:713:LEU:HB3	1.97	0.46
1:A:966:ASP:O	1:A:969:ARG:HB3	2.16	0.46
1:A:686:ASP:CB	1:A:823:PRO:HG2	2.33	0.46
1:A:24:GLY:O	1:A:27:ILE:HG22	2.15	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:222:THR:O	1:A:224:PRO:HD3	2.15	0.46
1:A:263:ARG:HG2	1:A:263:ARG:O	2.14	0.46
1:A:905:VAL:O	1:A:909:VAL:HG23	2.15	0.46
1:A:372:VAL:HG23	1:A:373:PRO:HD3	1.95	0.46
1:A:391:ASN:O	1:A:395:MET:HG2	2.15	0.46
1:A:170:SER:O	1:A:302:THR:HG23	2.14	0.46
1:A:456:MET:SD	1:A:932:LEU:HD11	2.55	0.46
1:A:435:MET:HA	1:A:438:ILE:CB	2.44	0.46
1:A:412:VAL:O	1:A:416:VAL:HG23	2.16	0.46
1:A:449:LEU:O	1:A:452:VAL:HG22	2.16	0.46
1:A:577:GLN:HE22	1:A:623:ASN:HB3	1.80	0.46
1:A:25:LEU:C	1:A:25:LEU:HD13	2.35	0.46
1:A:604:ASN:C	1:A:605:ASN:HD22	2.19	0.46
1:A:919:ARG:HD2	1:A:921:LEU:CD2	2.46	0.46
1:A:218:GLN:CB	1:A:233:SER:HA	2.46	0.46
1:A:685:ILE:HG22	1:A:686:ASP:N	2.31	0.46
1:A:921:LEU:HD12	1:A:1002:ALA:HA	1.98	0.46
1:A:880:SER:C	1:A:882:ILE:H	2.19	0.46
1:A:27:ILE:C	1:A:29:LYS:H	2.19	0.46
1:A:324:VAL:HG13	1:A:326:PRO:HD3	1.98	0.46
1:A:721:LEU:HD11	1:A:817:GLU:OE1	2.16	0.46
1:A:605:ASN:HB3	1:A:631:LEU:HD22	1.98	0.46
1:A:348:ILE:O	1:A:351:VAL:HG12	2.16	0.46
1:A:641:GLU:O	1:A:646:ALA:HB3	2.16	0.46
1:A:416:VAL:O	1:A:420:MET:HG3	2.16	0.46
1:A:1032:ARG:HH11	1:A:1032:ARG:HG2	1.81	0.45
1:A:468:ARG:O	1:A:472:ILE:HG22	2.16	0.45
1:A:792:ARG:HH11	1:A:792:ARG:HG2	1.80	0.45
1:A:980:LEU:O	1:A:984:LEU:HG	2.16	0.45
1:A:768:VAL:HG13	1:A:768:VAL:O	2.16	0.45
1:A:605:ASN:HD21	1:A:642:ASN:ND2	2.13	0.45
1:A:240:LEU:HB2	1:A:246:PHE:CE1	2.51	0.45
1:A:27:ILE:CG2	1:A:28:LEU:N	2.80	0.45
1:A:846:GLN:OE1	1:A:847:LEU:N	2.49	0.45
1:A:463:THR:HA	1:A:466:ILE:HG13	1.97	0.45
1:A:1025:PHE:HD2	1:A:1025:PHE:HA	1.65	0.45
1:A:192:GLU:O	1:A:196:PHE:HD1	2.00	0.45
1:A:418:ARG:HH11	1:A:418:ARG:CB	2.30	0.45
1:A:154:ILE:O	1:A:155:SER:C	2.55	0.45
1:A:1018:ALA:CB	1:A:1024:VAL:HG21	2.38	0.45
1:A:643:LYS:O	1:A:644:VAL:C	2.55	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:194:ASN:C	1:A:196:PHE:N	2.69	0.45
1:A:185:ARG:HG2	1:A:187:TRP:CZ2	2.52	0.45
1:A:278:ILE:O	1:A:278:ILE:HG13	2.16	0.45
1:A:355:MET:SD	1:A:368:PRO:HG2	2.57	0.45
1:A:362:PHE:HA	1:A:365:THR:HG22	1.97	0.45
1:A:307:ARG:O	1:A:311:ALA:HB2	2.17	0.45
1:A:590:VAL:O	1:A:594:VAL:HG23	2.16	0.45
1:A:1026:PHE:HB3	1:A:1030:ARG:HH22	1.82	0.45
1:A:715:SER:O	1:A:829:GLY:HA2	2.17	0.45
1:A:105:VAL:HG12	1:A:109:ASN:ND2	2.32	0.45
1:A:527:TYR:OH	1:A:968:VAL:HG21	2.17	0.45
1:A:58:GLN:O	1:A:63:GLN:HG3	2.17	0.45
1:A:652:THR:HG23	1:A:665:ALA:HB3	1.98	0.45
1:A:679:GLY:HA2	1:A:830:GLN:HA	1.99	0.45
1:A:379:THR:HG21	1:A:398:MET:SD	2.57	0.45
1:A:372:VAL:HG12	1:A:405:LEU:CB	2.47	0.45
1:A:880:SER:O	1:A:884:VAL:HG23	2.17	0.45
1:A:430:ALA:O	1:A:434:SER:HB3	2.17	0.45
1:A:719:ASN:ND2	1:A:815:ARG:NH2	2.65	0.44
1:A:525:HIS:O	1:A:526:HIS:C	2.55	0.44
1:A:896:SER:N	1:A:898:PRO:HD2	2.32	0.44
1:A:944:LEU:C	1:A:946:VAL:H	2.21	0.44
1:A:213:GLN:HG2	1:A:238:THR:HA	1.98	0.44
1:A:792:ARG:HG3	1:A:793:ALA:H	1.82	0.44
1:A:703:LEU:HD21	1:A:827:ILE:HG23	1.99	0.44
1:A:9:PRO:O	1:A:10:ILE:C	2.55	0.44
1:A:429:GLU:OE1	1:A:429:GLU:N	2.51	0.44
1:A:522:LYS:HA	1:A:526:HIS:CD2	2.53	0.44
1:A:163:LYS:HD2	1:A:177:LEU:HB2	1.98	0.44
1:A:914:LEU:HD23	1:A:914:LEU:C	2.37	0.44
1:A:29:LYS:O	1:A:29:LYS:HG2	2.18	0.44
1:A:447:MET:HB3	1:A:887:CYS:SG	2.57	0.44
1:A:393:LEU:CD1	1:A:466:ILE:HA	2.47	0.44
1:A:566:ASP:HB3	1:A:667:ASN:ND2	2.32	0.44
1:A:85:THR:O	1:A:85:THR:HG22	2.18	0.44
1:A:612:VAL:CG1	1:A:615:PHE:HB3	2.48	0.44
1:A:1026:PHE:HB3	1:A:1030:ARG:NH1	2.31	0.44
1:A:733:GLN:HB3	1:A:737:GLN:HE21	1.82	0.44
1:A:525:HIS:HA	1:A:529:ASP:OD1	2.17	0.44
1:A:366:LEU:O	1:A:370:ILE:HG13	2.17	0.44
1:A:456:MET:HG2	1:A:876:LEU:HD13	2.00	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:81:ASN:O	1:A:88:VAL:HA	2.18	0.44
1:A:133:SER:HB2	1:A:292:LYS:CG	2.47	0.44
1:A:516:PHE:HD1	1:A:516:PHE:H	1.66	0.44
1:A:243:THR:HG23	1:A:244:GLU:N	2.33	0.44
1:A:1024:VAL:HG12	1:A:1024:VAL:O	2.17	0.44
1:A:27:ILE:HG22	1:A:28:LEU:N	2.32	0.44
1:A:921:LEU:HD22	1:A:921:LEU:N	2.33	0.44
1:A:445:ILE:O	1:A:449:LEU:HG	2.17	0.44
1:A:467:TYR:CZ	1:A:928:GLN:HG2	2.52	0.44
1:A:937:LEU:O	1:A:940:LYS:HB3	2.18	0.44
1:A:367:ILE:HD11	1:A:497:LEU:HD13	2.00	0.44
1:A:646:ALA:O	1:A:649:MET:HB2	2.18	0.44
1:A:11:PHE:N	1:A:11:PHE:CD2	2.81	0.44
1:A:714:THR:HB	1:A:715:SER:H	1.64	0.44
1:A:680:PHE:HZ	1:A:716:VAL:HG12	1.83	0.44
1:A:314:GLU:N	1:A:315:PRO:CD	2.80	0.44
1:A:578:LEU:HD13	1:A:661:ALA:HB2	1.99	0.44
1:A:895:TRP:HA	1:A:895:TRP:HE3	1.82	0.44
1:A:836:SER:O	1:A:837:THR:C	2.57	0.44
1:A:971:ARG:HD2	1:A:971:ARG:O	2.18	0.43
1:A:367:ILE:HG12	1:A:492:LEU:CD2	2.37	0.43
1:A:156:ASP:OD2	1:A:182:TYR:HB2	2.18	0.43
1:A:455:PRO:HG3	1:A:883:VAL:CG2	2.47	0.43
1:A:459:PHE:C	1:A:872:GLN:HE22	2.21	0.43
1:A:890:ALA:O	1:A:891:LEU:HD13	2.18	0.43
1:A:420:MET:HB3	1:A:498:LYS:HZ1	1.83	0.43
1:A:84:SER:C	1:A:86:GLY:N	2.71	0.43
1:A:666:PHE:N	1:A:666:PHE:CD1	2.85	0.43
1:A:186:ILE:HG21	1:A:262:LEU:HD21	2.00	0.43
1:A:633:ASP:OD2	1:A:635:ALA:HB3	2.18	0.43
1:A:9:PRO:HB2	1:A:10:ILE:H	1.65	0.43
1:A:1011:MET:O	1:A:1014:ALA:HB3	2.18	0.43
1:A:607:GLU:HB3	1:A:630:SER:O	2.19	0.43
1:A:965:LEU:HD23	1:A:965:LEU:O	2.19	0.43
1:A:545:TYR:OH	1:A:903:LEU:HD22	2.18	0.43
1:A:685:ILE:HD11	1:A:819:TYR:CD2	2.53	0.43
1:A:987:MET:HB3	1:A:988:PRO:CD	2.41	0.43
1:A:613:ASN:HD22	1:A:613:ASN:C	2.18	0.43
1:A:712:MET:C	1:A:713:LEU:HD12	2.38	0.43
1:A:314:GLU:HB2	1:A:315:PRO:HD3	1.99	0.43
1:A:69:MET:CE	1:A:72:ILE:HD11	2.48	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:399:VAL:HG11	1:A:989:LEU:HD21	2.01	0.43
1:A:680:PHE:CZ	1:A:829:GLY:HA3	2.54	0.43
1:A:105:VAL:HG12	1:A:109:ASN:HD22	1.84	0.43
1:A:671:ILE:CG1	1:A:672:VAL:N	2.80	0.43
1:A:447:MET:HB3	1:A:887:CYS:CB	2.48	0.43
1:A:185:ARG:HG3	1:A:185:ARG:NH1	2.33	0.43
1:A:1022:VAL:O	1:A:1023:PRO:O	2.36	0.43
1:A:486:LEU:CA	1:A:490:PRO:HG2	2.49	0.43
1:A:1035:ARG:HE	1:A:1036:LYS:NZ	2.16	0.43
1:A:184:MET:CE	1:A:184:MET:HA	2.49	0.43
1:A:40:PRO:HD2	1:A:674:LEU:HD21	2.01	0.43
1:A:240:LEU:H	1:A:240:LEU:CD2	2.32	0.43
1:A:919:ARG:HD2	1:A:921:LEU:HD21	2.00	0.43
1:A:49:TYR:HE1	1:A:60:THR:HG21	1.84	0.43
1:A:166:ILE:C	1:A:168:ARG:N	2.71	0.43
1:A:872:GLN:O	1:A:876:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:713:LEU:N	1:A:832:ALA:HB1	2.33	0.43
1:A:429:GLU:O	1:A:432:ARG:HB3	2.19	0.43
1:A:635:ALA:O	1:A:637:ARG:N	2.51	0.43
1:A:340:VAL:HG11	1:A:395:MET:HB3	2.01	0.43
1:A:188:MET:HE2	1:A:774:MET:O	2.18	0.43
1:A:281:PHE:O	1:A:282:ASN:HB2	2.18	0.43
1:A:362:PHE:HA	1:A:365:THR:CG2	2.48	0.43
1:A:477:ALA:HA	1:A:480:LEU:HD12	2.01	0.42
1:A:722:GLU:O	1:A:723:ASP:HB3	2.19	0.42
1:A:556:PHE:HB2	1:A:913:LEU:HD11	2.01	0.42
1:A:684:LEU:HD11	1:A:855:VAL:HG12	2.01	0.42
1:A:1016:VAL:HG12	1:A:1016:VAL:O	2.19	0.42
1:A:842:GLU:C	1:A:844:MET:H	2.21	0.42
1:A:150:THR:OG1	1:A:153:ASP:HB2	2.19	0.42
1:A:149:MET:HG3	1:A:154:ILE:CG1	2.49	0.42
1:A:359:LEU:HD23	1:A:973:ARG:NH2	2.33	0.42
1:A:409:ALA:O	1:A:413:VAL:HG23	2.19	0.42
1:A:486:LEU:HA	1:A:490:PRO:HG2	2.01	0.42
1:A:878:ALA:HA	1:A:881:LEU:HD12	2.01	0.42
1:A:522:LYS:HA	1:A:526:HIS:HD2	1.85	0.42
1:A:169:THR:O	1:A:170:SER:C	2.56	0.42
1:A:735:LYS:O	1:A:739:LEU:HG	2.20	0.42
1:A:62:THR:O	1:A:65:ILE:N	2.53	0.42
1:A:907:LEU:HD23	1:A:1018:ALA:CB	2.44	0.42
1:A:971:ARG:HH11	1:A:971:ARG:CG	2.33	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:372:VAL:N	1:A:373:PRO:CD	2.83	0.42
1:A:922:THR:OG1	1:A:923:ASN:N	2.52	0.42
1:A:220:GLY:O	1:A:221:GLY:O	2.37	0.42
1:A:159:ALA:HB2	1:A:177:LEU:HG	2.00	0.42
1:A:615:PHE:C	1:A:615:PHE:CD2	2.93	0.42
1:A:760:ASN:CG	1:A:761:ASP:H	2.23	0.42
1:A:48:SER:HB3	1:A:125:GLN:HG2	2.00	0.42
1:A:327:TYR:C	1:A:327:TYR:HD2	2.23	0.42
1:A:72:ILE:HG23	1:A:106:GLN:HB3	2.01	0.42
1:A:92:LEU:HD22	1:A:107:VAL:CG2	2.49	0.42
1:A:572:PHE:CE1	1:A:629:VAL:HG21	2.55	0.42
1:A:133:SER:O	1:A:134:SER:C	2.58	0.42
1:A:534:ILE:HG22	1:A:541:TYR:OH	2.20	0.42
1:A:323:ILE:HG22	1:A:324:VAL:N	2.34	0.42
1:A:682:PHE:HB3	1:A:827:ILE:HB	2.02	0.42
1:A:17:ILE:O	1:A:20:MET:HB2	2.20	0.42
1:A:35:TYR:CD1	1:A:35:TYR:N	2.86	0.42
1:A:346:GLU:O	1:A:350:LEU:HG	2.19	0.42
1:A:32:VAL:HG23	1:A:300:LEU:CD2	2.50	0.41
1:A:457:ALA:HB2	1:A:471:SER:OG	2.20	0.41
1:A:1030:ARG:O	1:A:1031:ARG:HD3	2.20	0.41
1:A:394:THR:O	1:A:398:MET:HG2	2.20	0.41
1:A:457:ALA:O	1:A:459:PHE:N	2.53	0.41
1:A:253:VAL:HG12	1:A:259:ARG:HG2	2.01	0.41
1:A:133:SER:HB2	1:A:292:LYS:HG2	2.02	0.41
1:A:184:MET:HB2	1:A:762:PHE:CE2	2.55	0.41
1:A:54:ALA:N	1:A:84:SER:HA	2.34	0.41
1:A:527:TYR:HE2	1:A:968:VAL:HG22	1.84	0.41
1:A:950:LYS:O	1:A:954:ASP:OD2	2.38	0.41
1:A:460:GLY:N	1:A:872:GLN:HE22	2.18	0.41
1:A:329:THR:O	1:A:330:THR:C	2.58	0.41
1:A:240:LEU:H	1:A:240:LEU:HD22	1.84	0.41
1:A:1017:LEU:HD11	1:A:1022:VAL:HG21	2.01	0.41
1:A:355:MET:CE	1:A:355:MET:HA	2.50	0.41
1:A:49:TYR:CE1	1:A:60:THR:HG21	2.56	0.41
1:A:244:GLU:HG2	1:A:248:LYS:HE3	2.03	0.41
1:A:634:TRP:N	1:A:634:TRP:CD1	2.87	0.41
1:A:344:LEU:HD13	1:A:345:VAL:N	2.34	0.41
1:A:188:MET:HE1	1:A:200:PRO:HB3	2.02	0.41
1:A:445:ILE:HG22	1:A:943:ILE:HG21	2.02	0.41
1:A:712:MET:HA	1:A:835:LYS:HG3	2.02	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1027:VAL:O	1:A:1031:ARG:HG2	2.20	0.41
1:A:973:ARG:O	1:A:977:MET:HB2	2.20	0.41
1:A:445:ILE:HG22	1:A:943:ILE:HD12	2.03	0.41
1:A:277:ILE:HG22	1:A:614:GLY:C	2.40	0.41
1:A:252:LYS:HG2	1:A:253:VAL:N	2.36	0.41
1:A:251:LEU:CD1	1:A:265:VAL:HG21	2.51	0.41
1:A:406:VAL:O	1:A:409:ALA:HB3	2.20	0.41
1:A:986:VAL:O	1:A:989:LEU:HB2	2.21	0.41
1:A:568:ASP:HB2	1:A:643:LYS:HG3	2.03	0.41
1:A:173:GLY:HA3	1:A:293:LEU:C	2.41	0.41
1:A:429:GLU:O	1:A:433:LYS:HD3	2.21	0.41
1:A:972:LEU:O	1:A:972:LEU:HD13	2.20	0.41
1:A:118:LEU:O	1:A:119:PRO:C	2.59	0.41
1:A:407:ASP:CG	1:A:978:THR:HG21	2.41	0.41
1:A:211:ASN:ND2	1:A:760:ASN:HD22	2.19	0.41
1:A:30:LEU:HD23	1:A:390:ILE:HG13	2.02	0.41
1:A:391:ASN:N	1:A:394:THR:OG1	2.53	0.41
1:A:451:ALA:HB1	1:A:884:VAL:CA	2.51	0.41
1:A:282:ASN:C	1:A:284:GLN:H	2.24	0.41
1:A:10:ILE:HD13	1:A:11:PHE:CG	2.56	0.41
1:A:53:ASP:OD2	1:A:55:LYS:HB2	2.21	0.41
1:A:225:VAL:O	1:A:226:LYS:C	2.57	0.41
1:A:169:THR:O	1:A:172:VAL:HG23	2.20	0.41
1:A:451:ALA:HA	1:A:883:VAL:CG1	2.51	0.41
1:A:724:THR:H	1:A:814:PRO:HD3	1.85	0.41
1:A:332:PHE:CA	1:A:335:ILE:HG22	2.48	0.41
1:A:556:PHE:HB2	1:A:913:LEU:CD1	2.50	0.41
1:A:361:ASN:HB2	1:A:364:ALA:HB3	2.03	0.41
1:A:635:ALA:C	1:A:637:ARG:N	2.74	0.41
1:A:1026:PHE:N	1:A:1026:PHE:CD1	2.89	0.41
1:A:944:LEU:O	1:A:948:PHE:HB2	2.20	0.41
1:A:919:ARG:HB3	1:A:921:LEU:CD2	2.51	0.41
1:A:712:MET:CB	1:A:835:LYS:HE2	2.48	0.41
1:A:262:LEU:HD12	1:A:265:VAL:CG2	2.51	0.41
1:A:467:TYR:OH	1:A:869:SER:HA	2.21	0.41
1:A:43:VAL:HG11	1:A:107:VAL:CG1	2.51	0.41
1:A:95:GLU:OE1	1:A:95:GLU:HA	2.20	0.41
1:A:340:VAL:HG13	1:A:399:VAL:HG21	2.03	0.40
1:A:445:ILE:CG2	1:A:943:ILE:HG21	2.51	0.40
1:A:418:ARG:NH1	1:A:418:ARG:CB	2.84	0.40
1:A:149:MET:HG3	1:A:154:ILE:HG12	2.02	0.40

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:915:ALA:CB	1:A:1009:GLY:HA3	2.49	0.40
1:A:594:VAL:HG13	1:A:655:PHE:CZ	2.56	0.40
1:A:1025:PHE:C	1:A:1027:VAL:N	2.74	0.40
1:A:396:PHE:CE1	1:A:999:ALA:HB1	2.52	0.40
1:A:58:GLN:HE22	1:A:59:ASP:HB3	1.86	0.40
1:A:58:GLN:OE1	1:A:818:ARG:HD2	2.21	0.40
1:A:120:GLN:HG3	1:A:121:GLU:OE2	2.21	0.40
1:A:252:LYS:O	1:A:260:VAL:N	2.51	0.40
1:A:858:ASP:OD2	1:A:859:TRP:N	2.54	0.40
1:A:394:THR:HG22	1:A:469:GLN:HB3	2.03	0.40
1:A:453:PHE:HE2	1:A:474:ILE:CD1	2.34	0.40
1:A:484:VAL:C	1:A:486:LEU:H	2.25	0.40
1:A:484:VAL:HG13	1:A:488:LEU:HD23	2.04	0.40
1:A:583:THR:O	1:A:587:THR:HG22	2.22	0.40
1:A:90:ILE:CD1	1:A:90:ILE:H	2.28	0.40
1:A:518:ARG:O	1:A:522:LYS:HD3	2.22	0.40
1:A:225:VAL:O	1:A:225:VAL:HG23	2.21	0.40
1:A:414:GLU:O	1:A:417:GLU:HB2	2.22	0.40
1:A:367:ILE:HB	1:A:368:PRO:CD	2.43	0.40
1:A:733:GLN:O	1:A:737:GLN:HG3	2.20	0.40
1:A:169:THR:CG2	1:A:170:SER:N	2.84	0.40
1:A:254:ASN:HB2	1:A:258:SER:HG	1.86	0.40
1:A:577:GLN:NE2	1:A:623:ASN:HB3	2.36	0.40
1:A:953:MET:HG3	1:A:958:LYS:O	2.22	0.40
1:A:758:TYR:HE1	1:A:770:LYS:HG2	1.86	0.40

All (1) symmetry-related close contacts are listed below. The label for Atom-2 includes the symmetry operator and encoded unit-cell translations to be applied.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:525:HIS:NE2	1:A:525:HIS:NE2[4_556]	2.10	0.10

## 5.3 Torsion angles

### 5.3.1 Protein backbone

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	998/1053 (95%)	725 (73%)	198 (20%)	75 (8%)	1	15

All (75) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	9	PRO
1	A	10	ILE
1	A	29	LYS
1	A	134	SER
1	A	146	ASP
1	A	161	ASN
1	A	170	SER
1	A	217	GLY
1	A	221	GLY
1	A	327	TYR
1	A	523	SER
1	A	602	GLU
1	A	671	ILE
1	A	894	SER
1	A	1021	PHE
1	A	1022	VAL
1	A	1023	PRO
1	A	1034	SER
1	A	33	ALA
1	A	52	ALA
1	A	255	GLN
1	A	295	THR
1	A	299	ALA
1	A	459	PHE
1	A	464	GLY
1	A	638	PRO
1	A	715	SER
1	A	837	THR
1	A	900	SER
1	A	1017	LEU
1	A	34	GLN
1	A	62	THR
1	A	63	GLN
1	A	74	ASN
1	A	75	LEU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	137	LEU
1	A	150	THR
1	A	151	GLN
1	A	167	SER
1	A	466	ILE
1	A	468	ARG
1	A	526	HIS
1	A	563	PHE
1	A	579	PRO
1	A	636	ASP
1	A	775	SER
1	A	778	LYS
1	A	919	ARG
1	A	208	LYS
1	A	330	THR
1	A	527	TYR
1	A	644	VAL
1	A	714	THR
1	A	734	GLU
1	A	889	ALA
1	A	971	ARG
1	A	11	PHE
1	A	321	LEU
1	A	669	PRO
1	A	759	VAL
1	A	675	GLY
1	A	720	GLY
1	A	723	ASP
1	A	1025	PHE
1	A	50	PRO
1	A	1016	VAL
1	A	1024	VAL
1	A	171	GLY
1	A	991	ILE
1	A	796	GLY
1	A	975	ILE
1	A	1029	VAL
1	A	147	GLY
1	A	190	PRO
1	A	390	ILE

### 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	818/859 (95%)	781 (96%)	37 (4%)	34 73

All (37) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	10	ILE
1	A	58	GLN
1	A	68	ASN
1	A	77	TYR
1	A	108	GLN
1	A	131	LYS
1	A	137	LEU
1	A	138	MET
1	A	153	ASP
1	A	185	ARG
1	A	194	ASN
1	A	229	GLN
1	A	231	ASN
1	A	255	GLN
1	A	327	TYR
1	A	404	LEU
1	A	415	ASN
1	A	429	GLU
1	A	439	GLN
1	A	470	PHE
1	A	613	ASN
1	A	615	PHE
1	A	617	PHE
1	A	634	TRP
1	A	640	GLU
1	A	714	THR
1	A	798	MET
1	A	815	ARG
1	A	844	MET
1	A	846	GLN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	895	TRP
1	A	950	LYS
1	A	971	ARG
1	A	1020	PHE
1	A	1023	PRO
1	A	1025	PHE
1	A	1035	ARG

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (31) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	58	GLN
1	A	63	GLN
1	A	67	GLN
1	A	104	GLN
1	A	108	GLN
1	A	109	ASN
1	A	112	GLN
1	A	124	GLN
1	A	125	GLN
1	A	181	GLN
1	A	194	ASN
1	A	213	GLN
1	A	218	GLN
1	A	228	GLN
1	A	231	ASN
1	A	255	GLN
1	A	284	GLN
1	A	360	GLN
1	A	391	ASN
1	A	526	HIS
1	A	592	ASN
1	A	605	ASN
1	A	613	ASN
1	A	622	GLN
1	A	657	GLN
1	A	719	ASN
1	A	737	GLN
1	A	760	ASN
1	A	797	GLN
1	A	830	GLN
1	A	872	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](#)

There are no ligands in this entry.

### 5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

### 5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

## 6 Fit of model and data

### 6.1 Protein, DNA and RNA chains

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

### 6.2 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

### 6.3 Carbohydrates

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

### 6.4 Ligands

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

### 6.5 Other polymers

EDS was not executed - this section will therefore be empty.