



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Feb 1, 2016 – 09:52 AM GMT

PDB ID : 3K07
Title : Crystal structure of CusA
Authors : Su, C.-C.
Deposited on : 2009-09-24
Resolution : 3.52 Å(reported)

This is a Full wwPDB X-ray Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.
We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org
A user guide is available at
<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

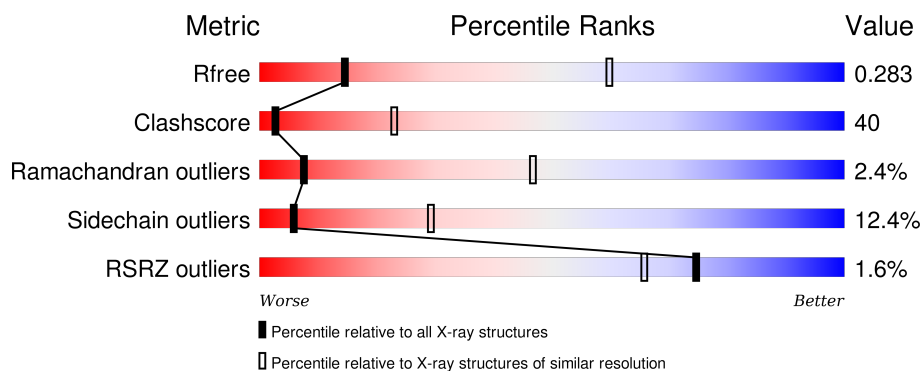
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

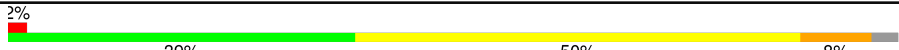
The reported resolution of this entry is 3.52 Å.

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	1089 (3.64-3.40)
Clashscore	102246	1197 (3.64-3.40)
Ramachandran outliers	100387	1159 (3.64-3.40)
Sidechain outliers	100360	1160 (3.64-3.40)
RSRZ outliers	91569	1096 (3.64-3.40)

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 ≥ 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	1055	

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 7885 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

In the tables below, the ZeroOcc column contains the number of atoms modelled with zero occupancy, the AltConf column contains the number of residues with at least one atom in alternate conformation and the Trace column contains the number of residues modelled with at most 2 atoms.

- Molecule 1 is a protein called Cation efflux system protein cusA.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	1025	Total	C	N	O	S	0	0	0
			7885	5100	1319	1430	36			

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

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

I1012	A1013	A1014	P1015	M1016	I1017	G1018	G1019	M1020	T1021	T1022	A1023	P1024	L1025	S1027	L1028	F1029	I1030	I1031	P1032	A1033	A1034	Y1035	K1036	L1037	M1038	W1039	L1040	HIS	ARG	ARG	HIS	ARG	VAL	ARG	LYS																									
I945	H946	Y947	L948	R949		I952	E953	A954	V955	P956	S957	L958	H959	H960	P961	Q962	T963	F964	S965	Q967	K968	L969		A972	L973	Y974	H975	G976	A977	V978	L979	R980	V981	R982	P983	K984	A985	H986	T987	V988	A989	V990	I991	I992	A993	G994	L995	L996	P997	I998	L999	W1000	G1001		V1008	M1009	S1010	R1011		
L874	M875	V876	P877	M878	T879	L880	V881	I882	I883		L886	L887		R892	R893	V894	G895	P896	A897		I900	I901	S902	S903	V904	P905	F906	A907	L908	V909		I912	W913	L914	L915	W916	W917	W918		H921	L922	S923	V924	A925		F930		I931	A932	L933		V936	A937	A938	E939	F940	G941	V942	V943	N944
Q794	Q795	L796	T797		D800		L804	R805	W806	S807		P810		L813	K814		T821	S822	W823	W824		A828		R831	D832	R833	W834	S835	W836	W837		L840	Q841	K842	L843	L844	L845	E846	K847	W848		L849	L850	K851	P852		F858		Q861		L864	L865	E866	R867	A868	I869	H870	R871	L872	K873

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	H 3 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	178.39 Å 178.39 Å 285.76 Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	37.28 – 3.52 37.28 – 3.52	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	92.8 (37.28-3.52) 98.1 (37.28-3.52)	Depositor EDS
R_{merge}	0.06	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	4.24 (at 3.56 Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX	Depositor
R, R_{free}	0.237 , 0.279 0.247 , 0.283	Depositor DCC
R_{free} test set	1098 reflections (5.11%)	DCC
Wilson B-factor (Å ²)	128.7	Xtriage
Anisotropy	0.154	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.29 , 131.3	EDS
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.51$, $\langle L^2 \rangle = 0.35$	Xtriage
Outliers	0 of 21499 reflections	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.92	EDS
Total number of atoms	7885	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	154.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 2.66% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

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	0.32	0/8048	0.52	4/10959 (0.0%)

There are no bond length outliers.

All (4) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	578	PRO	N-CA-C	6.72	129.58	112.10
1	A	517	LEU	N-CA-C	-6.14	94.41	111.00
1	A	26	TRP	CA-CB-CG	6.05	125.19	113.70
1	A	659	ALA	N-CA-C	-5.46	96.27	111.00

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	7885	0	8137	647	0
All	All	7885	0	8137	647	0

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 40.

All (647) 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:516:PRO:HG2	1:A:517:LEU:CD1	1.52	1.38
1:A:523:ARG:O	1:A:527:PRO:HD3	1.27	1.25
1:A:26:TRP:CZ3	1:A:30:THR:HG21	1.80	1.16
1:A:517:LEU:H	1:A:517:LEU:CD1	1.56	1.15
1:A:26:TRP:CZ3	1:A:30:THR:CG2	2.30	1.15
1:A:572:TYR:CE2	1:A:574:PRO:CG	2.30	1.13
1:A:152:ASP:HB3	1:A:155:ASP:HB2	1.29	1.12
1:A:516:PRO:CG	1:A:517:LEU:CD1	2.30	1.07
1:A:572:TYR:CZ	1:A:574:PRO:HG3	1.91	1.06
1:A:572:TYR:CE2	1:A:574:PRO:HG2	1.91	1.05
1:A:522:ILE:HG23	1:A:526:HIS:CD2	1.92	1.04
1:A:567:GLU:OE1	1:A:666:ILE:HG13	1.57	1.03
1:A:517:LEU:HD12	1:A:517:LEU:H	1.18	1.03
1:A:28:THR:O	1:A:31:ILE:HG22	1.59	1.03
1:A:522:ILE:CG2	1:A:526:HIS:HD2	1.72	1.02
1:A:522:ILE:CG2	1:A:526:HIS:CD2	2.44	1.00
1:A:517:LEU:O	1:A:521:LEU:HD23	1.59	1.00
1:A:516:PRO:HB2	1:A:517:LEU:HD12	1.43	1.00
1:A:636:TRP:HE3	1:A:637:ARG:H	1.09	0.99
1:A:517:LEU:N	1:A:517:LEU:HD12	1.71	0.99
1:A:520:PHE:O	1:A:524:VAL:HG23	1.63	0.99
1:A:572:TYR:CZ	1:A:574:PRO:CG	2.48	0.96
1:A:943:VAL:HG21	1:A:984:LYS:HE3	1.46	0.96
1:A:876:VAL:HG23	1:A:877:PRO:HD3	1.47	0.95
1:A:516:PRO:CG	1:A:517:LEU:HD13	1.92	0.95
1:A:25:ILE:HG23	1:A:26:TRP:N	1.82	0.95
1:A:516:PRO:HG2	1:A:517:LEU:HD13	0.96	0.94
1:A:984:LYS:HE2	1:A:984:LYS:HA	1.49	0.94
1:A:24:SER:O	1:A:28:THR:HG22	1.68	0.93
1:A:26:TRP:HZ3	1:A:30:THR:CG2	1.77	0.93
1:A:790:THR:HG22	1:A:792:MET:H	1.35	0.92
1:A:572:TYR:CE1	1:A:660:ASN:HB2	2.06	0.91
1:A:525:TYR:HE1	1:A:977:ALA:HB1	1.36	0.91
1:A:425:HIS:HB3	1:A:426:PRO:CD	2.01	0.91
1:A:980:ARG:HD2	1:A:980:ARG:H	1.35	0.91
1:A:573:MET:HE1	1:A:668:ASN:ND2	1.86	0.91
1:A:516:PRO:CB	1:A:517:LEU:HD12	2.00	0.90
1:A:493:ALA:HA	1:A:497:ILE:HG13	1.54	0.89
1:A:576:THR:HG23	1:A:658:LEU:CD1	2.03	0.88
1:A:522:ILE:HG22	1:A:526:HIS:HD2	1.38	0.88
1:A:953:GLU:O	1:A:957:SER:HB2	1.74	0.88
1:A:943:VAL:HA	1:A:946:MET:HG2	1.55	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:739:THR:HG22	1:A:741:ALA:H	1.39	0.87
1:A:614:THR:HG22	1:A:616:THR:H	1.37	0.87
1:A:517:LEU:C	1:A:521:LEU:HD23	1.95	0.86
1:A:573:MET:HE1	1:A:668:ASN:HD21	1.37	0.86
1:A:572:TYR:CD1	1:A:662:TRP:CH2	2.63	0.86
1:A:519:ARG:HH11	1:A:523:ARG:NH2	1.74	0.84
1:A:168:LEU:HB3	1:A:177:VAL:HG21	1.56	0.84
1:A:573:MET:CE	1:A:668:ASN:ND2	2.39	0.84
1:A:902:SER:O	1:A:905:PRO:HD2	1.78	0.83
1:A:523:ARG:O	1:A:527:PRO:CD	2.21	0.83
1:A:522:ILE:HD13	1:A:978:VAL:HG23	1.60	0.82
1:A:933:LEU:HD11	1:A:1019:GLY:HA3	1.61	0.82
1:A:572:TYR:CE2	1:A:574:PRO:HG3	2.06	0.82
1:A:572:TYR:HD1	1:A:662:TRP:CH2	1.96	0.82
1:A:661:LEU:CD2	1:A:663:VAL:HG13	2.09	0.81
1:A:160:GLN:HE22	1:A:287:GLY:HA3	1.44	0.81
1:A:953:GLU:O	1:A:957:SER:CB	2.28	0.81
1:A:16:VAL:HG21	1:A:499:ILE:HD12	1.62	0.81
1:A:520:PHE:O	1:A:524:VAL:CG2	2.29	0.80
1:A:831:ARG:HG3	1:A:832:ASP:H	1.46	0.80
1:A:960:ASN:N	1:A:961:PRO:HD2	1.96	0.80
1:A:517:LEU:O	1:A:521:LEU:CD2	2.30	0.79
1:A:976:GLY:HA2	1:A:980:ARG:NH1	1.98	0.79
1:A:519:ARG:NH1	1:A:523:ARG:NH2	2.30	0.79
1:A:26:TRP:CZ3	1:A:30:THR:HG23	2.18	0.79
1:A:160:GLN:HE22	1:A:287:GLY:CA	1.95	0.79
1:A:573:MET:CE	1:A:668:ASN:HD21	1.97	0.78
1:A:532:VAL:HG13	1:A:539:THR:HG21	1.65	0.78
1:A:72:THR:HG21	1:A:117:VAL:HG21	1.66	0.78
1:A:979:LEU:HD23	1:A:980:ARG:HH21	1.48	0.77
1:A:25:ILE:CG2	1:A:26:TRP:N	2.46	0.77
1:A:607:GLY:HA2	1:A:626:THR:HB	1.67	0.77
1:A:38:ALA:O	1:A:390:ILE:HG23	1.85	0.76
1:A:976:GLY:HA2	1:A:980:ARG:HH11	1.51	0.76
1:A:572:TYR:HE1	1:A:660:ASN:HB2	1.49	0.76
1:A:312:LYS:HA	1:A:315:LEU:HD12	1.68	0.76
1:A:982:ARG:HB3	1:A:983:PRO:HD3	1.69	0.75
1:A:333:ARG:HH22	1:A:568:GLY:H	1.31	0.75
1:A:333:ARG:NH2	1:A:568:GLY:H	1.85	0.75
1:A:946:MET:HG3	1:A:947:TYR:N	2.01	0.74
1:A:525:TYR:CE1	1:A:977:ALA:HB1	2.22	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:425:HIS:HB3	1:A:426:PRO:HD2	1.70	0.74
1:A:831:ARG:HG3	1:A:832:ASP:N	2.03	0.74
1:A:668:ASN:O	1:A:672:MET:HG3	1.88	0.73
1:A:955:VAL:HB	1:A:956:PRO:HD3	1.71	0.72
1:A:536:PRO:HB2	1:A:1037:LEU:HD12	1.72	0.72
1:A:572:TYR:CZ	1:A:574:PRO:HG2	2.21	0.71
1:A:572:TYR:HE2	1:A:574:PRO:HG2	1.52	0.71
1:A:661:LEU:HD11	1:A:679:SER:HB3	1.70	0.71
1:A:118:GLN:HE22	1:A:127:ALA:H	1.37	0.71
1:A:103:PRO:O	1:A:107:ARG:HG3	1.90	0.71
1:A:59:GLN:HG2	1:A:810:PRO:HG3	1.71	0.71
1:A:451:PHE:CD1	1:A:494:ILE:HD11	2.24	0.71
1:A:517:LEU:HD13	1:A:517:LEU:H	1.54	0.71
1:A:25:ILE:HG23	1:A:26:TRP:H	1.55	0.71
1:A:176:GLU:OE2	1:A:614:THR:HG23	1.90	0.71
1:A:901:ILE:HG22	1:A:902:SER:N	2.06	0.70
1:A:147:ARG:HE	1:A:320:GLU:HG3	1.55	0.70
1:A:25:ILE:CG2	1:A:26:TRP:H	2.03	0.70
1:A:389:ASN:HD22	1:A:389:ASN:N	1.89	0.70
1:A:576:THR:HG23	1:A:658:LEU:HD12	1.71	0.70
1:A:837:VAL:O	1:A:841:GLN:HB2	1.92	0.70
1:A:689:VAL:HG13	1:A:692:ASP:HB2	1.74	0.70
1:A:312:LYS:HA	1:A:315:LEU:CD1	2.22	0.69
1:A:984:LYS:CE	1:A:984:LYS:HA	2.21	0.69
1:A:546:SER:O	1:A:549:THR:HG22	1.92	0.69
1:A:183:VAL:HG22	1:A:272:ARG:HD2	1.74	0.69
1:A:980:ARG:HD2	1:A:980:ARG:N	2.07	0.69
1:A:572:TYR:HB2	1:A:662:TRP:CZ3	2.28	0.69
1:A:1031:ILE:HG22	1:A:1032:PRO:HD3	1.73	0.69
1:A:22:PHE:HA	1:A:25:ILE:HG22	1.74	0.69
1:A:574:PRO:HD2	1:A:624:VAL:HG13	1.75	0.69
1:A:454:LEU:O	1:A:458:THR:HG23	1.93	0.69
1:A:175:ALA:O	1:A:176:GLU:HB3	1.93	0.68
1:A:960:ASN:H	1:A:961:PRO:HD2	1.57	0.68
1:A:732:LYS:HD3	1:A:800:ASP:O	1.93	0.68
1:A:409:VAL:HG11	1:A:450:LEU:HD21	1.76	0.68
1:A:453:SER:HB3	1:A:939:GLU:HG3	1.75	0.68
1:A:522:ILE:HG22	1:A:526:HIS:CD2	2.20	0.68
1:A:40:PRO:O	1:A:42:LEU:HD12	1.94	0.68
1:A:1023:ALA:HB3	1:A:1024:PRO:HD3	1.76	0.68
1:A:121:LEU:HB2	1:A:122:PRO:HD2	1.76	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:696:MET:HE3	1:A:850:LEU:HA	1.76	0.68
1:A:354:ALA:HA	1:A:363:ALA:HB1	1.76	0.68
1:A:983:PRO:O	1:A:986:MET:HG2	1.93	0.67
1:A:36:VAL:HG23	1:A:335:ILE:HG12	1.77	0.67
1:A:405:ASP:O	1:A:409:VAL:HG23	1.94	0.67
1:A:160:GLN:NE2	1:A:287:GLY:HA3	2.09	0.67
1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD2	1.76	0.67
1:A:25:ILE:O	1:A:28:THR:CG2	2.43	0.67
1:A:563:PRO:HG3	1:A:1011:ARG:HG2	1.77	0.67
1:A:516:PRO:CB	1:A:517:LEU:CD1	2.67	0.67
1:A:864:LEU:HD23	1:A:867:ARG:HH22	1.59	0.67
1:A:524:VAL:O	1:A:527:PRO:HD2	1.95	0.66
1:A:755:MET:O	1:A:755:MET:HG3	1.95	0.66
1:A:577:LEU:HB3	1:A:578:PRO:HD2	1.77	0.66
1:A:207:LYS:HG3	1:A:756:VAL:CG2	2.25	0.66
1:A:516:PRO:HB2	1:A:517:LEU:CD1	2.24	0.66
1:A:597:MET:HA	1:A:602:VAL:HG21	1.77	0.66
1:A:999:LEU:HD22	1:A:1017:ILE:HD12	1.78	0.66
1:A:996:LEU:HD12	1:A:1017:ILE:HD13	1.77	0.66
1:A:390:ILE:HD11	1:A:391:MET:HE2	1.77	0.66
1:A:880:LEU:HA	1:A:883:ILE:HG22	1.78	0.66
1:A:518:ASN:O	1:A:521:LEU:HB2	1.95	0.65
1:A:636:TRP:HE3	1:A:637:ARG:N	1.89	0.65
1:A:361:ARG:O	1:A:364:LEU:HG	1.97	0.65
1:A:917:TRP:HD1	1:A:918:MET:HG3	1.61	0.65
1:A:317:GLU:CD	1:A:317:GLU:H	1.99	0.65
1:A:943:VAL:HG11	1:A:984:LYS:NZ	2.11	0.64
1:A:232:ARG:HG2	1:A:233:ALA:N	2.10	0.64
1:A:239:THR:HG22	1:A:241:ASP:H	1.63	0.64
1:A:420:GLU:HG3	1:A:421:TRP:N	2.12	0.64
1:A:592:THR:O	1:A:596:ILE:HG12	1.98	0.64
1:A:846:GLU:HG3	1:A:847:LYS:HG3	1.79	0.64
1:A:246:ILE:HB	1:A:259:LEU:HB2	1.77	0.64
1:A:580:ILE:HD11	1:A:585:ALA:HB2	1.79	0.64
1:A:573:MET:HE2	1:A:663:VAL:HG21	1.79	0.64
1:A:938:ALA:O	1:A:942:VAL:HG23	1.98	0.64
1:A:832:ASP:O	1:A:836:VAL:HG23	1.98	0.63
1:A:488:GLY:O	1:A:492:LEU:HD23	1.98	0.63
1:A:983:PRO:O	1:A:987:THR:HG23	1.98	0.63
1:A:105:TRP:O	1:A:109:ARG:HB2	1.98	0.63
1:A:790:THR:HG23	1:A:791:PRO:HD2	1.81	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:61:VAL:HB	1:A:86:SER:HB3	1.80	0.63
1:A:837:VAL:HA	1:A:840:LEU:HD12	1.79	0.63
1:A:979:LEU:HB3	1:A:980:ARG:HE	1.63	0.63
1:A:189:VAL:HB	1:A:770:LEU:HD12	1.80	0.62
1:A:572:TYR:HD1	1:A:662:TRP:CZ3	2.16	0.62
1:A:307:LYS:O	1:A:311:LEU:HG	1.98	0.62
1:A:411:ILE:HA	1:A:501:MET:HE3	1.81	0.62
1:A:958:LEU:H	1:A:958:LEU:HD23	1.62	0.62
1:A:872:LEU:O	1:A:875:MET:HB2	1.98	0.62
1:A:904:VAL:O	1:A:907:ALA:N	2.33	0.62
1:A:42:LEU:HB2	1:A:670:ILE:HD13	1.81	0.62
1:A:633:GLN:HE22	1:A:645:ILE:HG13	1.65	0.62
1:A:362:SER:OG	1:A:415:HIS:HE1	1.83	0.61
1:A:458:THR:HG22	1:A:486:MET:CB	2.31	0.61
1:A:904:VAL:O	1:A:906:PHE:N	2.33	0.61
1:A:29:TRP:HE3	1:A:32:ILE:HD11	1.63	0.61
1:A:26:TRP:CH2	1:A:30:THR:HG21	2.32	0.61
1:A:207:LYS:HG3	1:A:756:VAL:HG23	1.83	0.60
1:A:366:ALA:CB	1:A:408:ILE:HG22	2.31	0.60
1:A:981:VAL:HA	1:A:984:LYS:HB2	1.82	0.60
1:A:1014:ALA:HB3	1:A:1015:PRO:HD3	1.83	0.60
1:A:400:VAL:HG13	1:A:401:GLY:N	2.17	0.60
1:A:325:TYR:C	1:A:325:TYR:HD2	2.05	0.60
1:A:944:MET:O	1:A:948:LEU:HG	2.02	0.60
1:A:26:TRP:CE3	1:A:30:THR:HG23	2.37	0.60
1:A:417:ARG:HA	1:A:420:GLU:HG2	1.83	0.60
1:A:944:MET:HB3	1:A:1031:ILE:HG21	1.84	0.60
1:A:550:VAL:CG2	1:A:912:ILE:HG21	2.32	0.60
1:A:24:SER:O	1:A:28:THR:CG2	2.46	0.60
1:A:366:ALA:HB2	1:A:408:ILE:HG22	1.84	0.60
1:A:790:THR:HB	1:A:794:GLN:HB2	1.82	0.60
1:A:361:ARG:O	1:A:365:VAL:HG23	2.02	0.59
1:A:427:ASP:O	1:A:428:ALA:HB3	2.02	0.59
1:A:25:ILE:O	1:A:28:THR:HG23	2.02	0.59
1:A:1037:LEU:HD23	1:A:1037:LEU:O	2.02	0.59
1:A:325:TYR:CD2	1:A:325:TYR:C	2.76	0.59
1:A:526:HIS:O	1:A:530:LEU:HD11	2.02	0.59
1:A:22:PHE:HA	1:A:25:ILE:CG2	2.33	0.59
1:A:31:ILE:HG13	1:A:378:PHE:CD1	2.37	0.59
1:A:531:LYS:O	1:A:534:HIS:HB3	2.02	0.59
1:A:102:ASP:HB3	1:A:105:TRP:HB3	1.83	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:786:LEU:HD22	1:A:787:PRO:HD2	1.84	0.59
1:A:148:SER:C	1:A:150:LYS:H	2.04	0.59
1:A:739:THR:HG22	1:A:741:ALA:N	2.14	0.59
1:A:687:GLY:HA3	1:A:693:ILE:HG21	1.84	0.59
1:A:118:GLN:NE2	1:A:126:SER:HA	2.17	0.59
1:A:572:TYR:HD1	1:A:662:TRP:CZ2	2.21	0.59
1:A:953:GLU:O	1:A:957:SER:HB3	2.02	0.58
1:A:144:LEU:HD12	1:A:321:ILE:HD13	1.85	0.58
1:A:875:MET:HE3	1:A:931:ILE:HG13	1.86	0.58
1:A:873:LYS:O	1:A:876:VAL:HG22	2.02	0.58
1:A:390:ILE:HG13	1:A:391:MET:N	2.18	0.58
1:A:374:LEU:HD23	1:A:396:ILE:HD13	1.85	0.58
1:A:50:LYS:HE2	1:A:92:TYR:OH	2.03	0.58
1:A:572:TYR:CD1	1:A:662:TRP:CZ3	2.91	0.58
1:A:99:ASP:OD2	1:A:469:GLY:HA2	2.04	0.58
1:A:498:PRO:HA	1:A:501:MET:HG2	1.85	0.58
1:A:917:TRP:CD1	1:A:918:MET:HG3	2.39	0.58
1:A:930:PHE:CE1	1:A:1015:PRO:HB3	2.39	0.58
1:A:76:VAL:HG22	1:A:113:TYR:CD1	2.39	0.57
1:A:411:ILE:HA	1:A:501:MET:CE	2.35	0.57
1:A:29:TRP:CE3	1:A:32:ILE:HD11	2.39	0.57
1:A:608:LYS:HE2	1:A:625:GLU:HB3	1.86	0.57
1:A:556:LYS:HB3	1:A:916:TRP:CD1	2.40	0.57
1:A:135:GLY:O	1:A:669:ARG:HG2	2.04	0.57
1:A:963:THR:O	1:A:964:PHE:HB2	2.03	0.57
1:A:746:PHE:O	1:A:750:ALA:HB3	2.05	0.57
1:A:892:ARG:HG2	1:A:892:ARG:O	2.04	0.57
1:A:213:SER:O	1:A:237:LEU:HD13	2.04	0.57
1:A:370:LEU:HB2	1:A:371:PRO:HD3	1.86	0.57
1:A:831:ARG:HG2	1:A:836:VAL:HG22	1.86	0.57
1:A:345:GLU:OE1	1:A:400:VAL:HG11	2.05	0.57
1:A:402:ALA:HB3	1:A:486:MET:HE1	1.86	0.57
1:A:736:TYR:CE1	1:A:796:ILE:HG21	2.39	0.57
1:A:998:ILE:HD12	1:A:1009:MET:HE3	1.86	0.57
1:A:22:PHE:O	1:A:25:ILE:HG22	2.05	0.56
1:A:572:TYR:CD1	1:A:662:TRP:CZ2	2.92	0.56
1:A:493:ALA:HA	1:A:497:ILE:CG1	2.31	0.56
1:A:887:LEU:HD13	1:A:900:ILE:HG23	1.85	0.56
1:A:85:PHE:HB3	1:A:814:LYS:HG2	1.88	0.56
1:A:979:LEU:HD23	1:A:980:ARG:NH2	2.18	0.56
1:A:876:VAL:O	1:A:880:LEU:HG	2.05	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:552:TRP:N	1:A:553:PRO:HD2	2.20	0.56
1:A:893:ARG:HG3	1:A:895:GLY:H	1.69	0.56
1:A:599:VAL:O	1:A:602:VAL:HG22	2.05	0.56
1:A:651:ASN:O	1:A:654:ARG:HD3	2.06	0.56
1:A:1029:PHE:HD2	1:A:1029:PHE:N	2.04	0.56
1:A:522:ILE:HG23	1:A:526:HIS:NE2	2.20	0.56
1:A:354:ALA:HA	1:A:363:ALA:CB	2.35	0.56
1:A:245:HIS:CE1	1:A:260:ARG:HH11	2.23	0.56
1:A:880:LEU:O	1:A:883:ILE:HG22	2.05	0.56
1:A:519:ARG:NH1	1:A:523:ARG:HH21	2.04	0.56
1:A:391:MET:HG2	1:A:474:LEU:O	2.05	0.56
1:A:653:VAL:O	1:A:655:LEU:HG	2.06	0.56
1:A:641:THR:H	1:A:644:LYS:HD3	1.71	0.55
1:A:879:THR:O	1:A:882:ILE:HG23	2.06	0.55
1:A:25:ILE:O	1:A:28:THR:HG22	2.06	0.55
1:A:572:TYR:CE2	1:A:574:PRO:CD	2.90	0.55
1:A:121:LEU:HD13	1:A:125:VAL:HG23	1.88	0.55
1:A:984:LYS:HE2	1:A:984:LYS:CA	2.31	0.55
1:A:480:PHE:HB3	1:A:484:TYR:CE2	2.41	0.55
1:A:553:PRO:HD3	1:A:913:TRP:CZ2	2.41	0.55
1:A:959:ASN:HD22	1:A:968:LYS:NZ	2.04	0.55
1:A:573:MET:CE	1:A:663:VAL:HG21	2.36	0.55
1:A:614:THR:CG2	1:A:616:THR:HB	2.37	0.55
1:A:714:LEU:HD23	1:A:715:ALA:N	2.21	0.55
1:A:80:LYS:HG2	1:A:81:THR:HG23	1.89	0.55
1:A:201:ILE:HD11	1:A:249:LYS:HB2	1.88	0.55
1:A:519:ARG:HH11	1:A:523:ARG:HH22	1.52	0.54
1:A:1035:TYR:HD1	1:A:1038:MET:HE3	1.73	0.54
1:A:959:ASN:HB3	1:A:968:LYS:HD3	1.89	0.54
1:A:195:ARG:HB3	1:A:262:VAL:HA	1.90	0.54
1:A:948:LEU:HD12	1:A:949:ARG:N	2.23	0.54
1:A:696:MET:CE	1:A:850:LEU:HD23	2.37	0.54
1:A:282:GLY:O	1:A:284:VAL:HG23	2.07	0.54
1:A:976:GLY:C	1:A:980:ARG:HD3	2.28	0.54
1:A:637:ARG:O	1:A:639:GLY:N	2.41	0.54
1:A:750:ALA:HB1	1:A:772:TYR:CG	2.43	0.54
1:A:690:LEU:HD13	1:A:718:LEU:HD23	1.90	0.54
1:A:492:LEU:O	1:A:497:ILE:HG12	2.08	0.54
1:A:168:LEU:CB	1:A:177:VAL:HG21	2.33	0.53
1:A:864:LEU:CD2	1:A:867:ARG:HH22	2.21	0.53
1:A:595:LEU:HA	1:A:598:SER:HB3	1.89	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:841:GLN:HG3	1:A:858:PHE:CE1	2.42	0.53
1:A:756:VAL:HG22	1:A:756:VAL:O	2.06	0.53
1:A:577:LEU:HD23	1:A:577:LEU:N	2.22	0.53
1:A:464:ILE:HD11	1:A:479:ALA:HB2	1.90	0.53
1:A:980:ARG:CD	1:A:980:ARG:N	2.70	0.53
1:A:412:GLU:OE1	1:A:983:PRO:HG3	2.09	0.53
1:A:576:THR:HG23	1:A:658:LEU:CG	2.38	0.53
1:A:779:SER:H	1:A:782:ALA:HB3	1.74	0.53
1:A:364:LEU:HA	1:A:367:ILE:HD12	1.89	0.53
1:A:553:PRO:HG3	1:A:913:TRP:CE2	2.44	0.53
1:A:577:LEU:CB	1:A:578:PRO:HD2	2.39	0.53
1:A:212:ALA:HA	1:A:215:GLN:HE22	1.74	0.53
1:A:452:ILE:O	1:A:456:ILE:N	2.41	0.53
1:A:836:VAL:HG12	1:A:840:LEU:HD11	1.90	0.53
1:A:41:ASP:OD2	1:A:43:SER:OG	2.27	0.53
1:A:607:GLY:HA2	1:A:626:THR:CB	2.38	0.53
1:A:516:PRO:HG2	1:A:517:LEU:H	1.74	0.52
1:A:425:HIS:HB3	1:A:426:PRO:HD3	1.87	0.52
1:A:842:LYS:O	1:A:846:GLU:HG2	2.10	0.52
1:A:148:SER:C	1:A:150:LYS:N	2.63	0.52
1:A:576:THR:CG2	1:A:658:LEU:CD1	2.81	0.52
1:A:660:ASN:OD1	1:A:662:TRP:NE1	2.42	0.52
1:A:464:ILE:HD11	1:A:479:ALA:CB	2.40	0.52
1:A:67:TYR:CZ	1:A:71:THR:HG21	2.44	0.52
1:A:300:VAL:O	1:A:304:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:580:ILE:CD1	1:A:622:GLU:HB3	2.39	0.52
1:A:357:LEU:C	1:A:359:HIS:H	2.13	0.52
1:A:451:PHE:O	1:A:455:LEU:HB2	2.10	0.52
1:A:61:VAL:HG11	1:A:90:ASP:O	2.10	0.52
1:A:146:ASP:HA	1:A:318:GLY:O	2.09	0.52
1:A:145:VAL:HG12	1:A:284:VAL:HG21	1.92	0.52
1:A:596:ILE:O	1:A:602:VAL:HG21	2.10	0.52
1:A:779:SER:HB2	1:A:780:PRO:HD2	1.91	0.52
1:A:364:LEU:HD12	1:A:364:LEU:C	2.31	0.51
1:A:380:VAL:HG11	1:A:484:TYR:CE1	2.45	0.51
1:A:420:GLU:O	1:A:424:GLN:HG2	2.10	0.51
1:A:325:TYR:HD2	1:A:326:ASP:N	2.08	0.51
1:A:561:PHE:CD2	1:A:562:LEU:HG	2.44	0.51
1:A:637:ARG:HD2	1:A:638:PRO:HD2	1.91	0.51
1:A:406:ALA:HB3	1:A:454:LEU:HD11	1.92	0.51
1:A:62:GLU:HA	1:A:66:THR:HB	1.92	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:569:ASP:OD2	1:A:629:GLN:HA	2.11	0.51
1:A:36:VAL:HG22	1:A:37:ASP:N	2.25	0.51
1:A:427:ASP:O	1:A:428:ALA:CB	2.59	0.51
1:A:395:GLY:N	1:A:478:LEU:HD12	2.25	0.51
1:A:943:VAL:HG23	1:A:946:MET:HE2	1.92	0.51
1:A:1029:PHE:N	1:A:1029:PHE:CD2	2.75	0.51
1:A:65:VAL:O	1:A:69:LEU:HB2	2.10	0.51
1:A:907:ALA:HB1	1:A:933:LEU:HD22	1.92	0.51
1:A:458:THR:HG22	1:A:486:MET:HB2	1.92	0.51
1:A:748:THR:HG22	1:A:754:ALA:HB2	1.93	0.50
1:A:1022:THR:O	1:A:1026:LEU:HB2	2.10	0.50
1:A:346:PHE:CD2	1:A:370:LEU:HD12	2.46	0.50
1:A:400:VAL:HG13	1:A:401:GLY:H	1.76	0.50
1:A:904:VAL:O	1:A:905:PRO:C	2.47	0.50
1:A:724:ILE:HD12	1:A:780:PRO:HG3	1.94	0.50
1:A:904:VAL:C	1:A:906:PHE:N	2.64	0.50
1:A:10:VAL:HA	1:A:499:ILE:HD11	1.94	0.50
1:A:996:LEU:N	1:A:997:PRO:CD	2.74	0.50
1:A:846:GLU:HG3	1:A:847:LYS:N	2.26	0.50
1:A:190:VAL:HG12	1:A:264:LYS:O	2.10	0.50
1:A:59:GLN:CG	1:A:810:PRO:HG3	2.41	0.50
1:A:276:ALA:HB3	1:A:284:VAL:O	2.11	0.50
1:A:1031:ILE:O	1:A:1035:TYR:HB2	2.12	0.50
1:A:995:LEU:O	1:A:1017:ILE:HD11	2.12	0.50
1:A:67:TYR:N	1:A:68:PRO:HD2	2.27	0.50
1:A:596:ILE:O	1:A:602:VAL:HG11	2.12	0.49
1:A:458:THR:HG22	1:A:486:MET:HB3	1.94	0.49
1:A:878:MET:O	1:A:882:ILE:HG22	2.12	0.49
1:A:112:GLU:O	1:A:115:ASN:HB3	2.13	0.49
1:A:729:ASN:C	1:A:729:ASN:HD22	2.14	0.49
1:A:876:VAL:CG2	1:A:877:PRO:HD3	2.32	0.49
1:A:781:GLN:NE2	1:A:784:ARG:HD2	2.27	0.49
1:A:151:HIS:NE2	1:A:316:PRO:HB2	2.27	0.49
1:A:980:ARG:C	1:A:983:PRO:HD2	2.32	0.49
1:A:463:PRO:HB2	1:A:875:MET:HG2	1.93	0.49
1:A:966:GLU:O	1:A:969:LEU:HG	2.13	0.49
1:A:946:MET:HG3	1:A:947:TYR:H	1.78	0.49
1:A:612:ALA:O	1:A:614:THR:N	2.46	0.49
1:A:284:VAL:HG12	1:A:285:ALA:N	2.27	0.49
1:A:36:VAL:HG23	1:A:335:ILE:CG1	2.43	0.49
1:A:526:HIS:N	1:A:527:PRO:CD	2.76	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:983:PRO:HA	1:A:986:MET:HG2	1.93	0.49
1:A:904:VAL:HG22	1:A:905:PRO:HD3	1.94	0.48
1:A:685:VAL:HG13	1:A:822:SER:O	2.13	0.48
1:A:949:ARG:HG3	1:A:1035:TYR:OH	2.12	0.48
1:A:353:CYS:SG	1:A:408:ILE:HG21	2.53	0.48
1:A:435:ARG:O	1:A:439:ILE:HG12	2.13	0.48
1:A:167:GLU:HB3	1:A:311:LEU:HD11	1.94	0.48
1:A:594:LYS:HA	1:A:594:LYS:HD3	1.54	0.48
1:A:370:LEU:HD22	1:A:400:VAL:HG23	1.95	0.48
1:A:956:PRO:CG	1:A:972:ALA:HB2	2.43	0.48
1:A:572:TYR:OH	1:A:574:PRO:CG	2.61	0.48
1:A:364:LEU:HA	1:A:367:ILE:HB	1.94	0.48
1:A:244:ASN:O	1:A:258:TYR:HB3	2.14	0.48
1:A:977:ALA:O	1:A:981:VAL:HG23	2.14	0.48
1:A:707:VAL:HG13	1:A:708:PRO:HD2	1.95	0.48
1:A:440:THR:O	1:A:444:VAL:HG23	2.14	0.48
1:A:991:ILE:HG21	1:A:1020:MET:HG2	1.96	0.48
1:A:995:LEU:HD23	1:A:1017:ILE:HG13	1.96	0.48
1:A:896:GLU:O	1:A:900:ILE:HG22	2.14	0.48
1:A:140:TYR:HA	1:A:325:TYR:O	2.14	0.48
1:A:420:GLU:HG3	1:A:421:TRP:H	1.78	0.48
1:A:553:PRO:HG3	1:A:913:TRP:NE1	2.29	0.48
1:A:649:LEU:HB3	1:A:662:TRP:CZ2	2.48	0.48
1:A:446:VAL:O	1:A:446:VAL:HG13	2.14	0.48
1:A:207:LYS:HG3	1:A:756:VAL:HG21	1.96	0.48
1:A:563:PRO:HG2	1:A:1008:VAL:HA	1.95	0.48
1:A:909:VAL:O	1:A:912:ILE:HG22	2.14	0.48
1:A:274:GLY:HA2	1:A:609:THR:O	2.14	0.48
1:A:364:LEU:O	1:A:367:ILE:HB	2.14	0.47
1:A:497:ILE:N	1:A:498:PRO:CD	2.77	0.47
1:A:434:THR:O	1:A:438:VAL:HG12	2.14	0.47
1:A:189:VAL:HG22	1:A:265:VAL:HG22	1.96	0.47
1:A:22:PHE:CA	1:A:25:ILE:HG22	2.42	0.47
1:A:576:THR:HG23	1:A:658:LEU:HG	1.95	0.47
1:A:636:TRP:CE3	1:A:637:ARG:N	2.74	0.47
1:A:907:ALA:HB1	1:A:933:LEU:CD2	2.44	0.47
1:A:122:PRO:HB2	1:A:125:VAL:HG22	1.95	0.47
1:A:900:ILE:HD11	1:A:938:ALA:O	2.14	0.47
1:A:305:LYS:O	1:A:309:GLU:HG2	2.14	0.47
1:A:810:PRO:HB3	1:A:813:LEU:HD11	1.96	0.47
1:A:378:PHE:HA	1:A:381:MET:HE2	1.96	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:599:VAL:HG22	1:A:648:GLU:HG2	1.96	0.47
1:A:739:THR:CG2	1:A:741:ALA:H	2.19	0.47
1:A:1020:MET:O	1:A:1024:PRO:HG2	2.14	0.47
1:A:699:GLN:OE1	1:A:848:VAL:HG13	2.15	0.47
1:A:88:PHE:CD1	1:A:89:GLY:N	2.82	0.47
1:A:425:HIS:CB	1:A:426:PRO:CD	2.82	0.47
1:A:696:MET:HE2	1:A:848:VAL:HG12	1.94	0.47
1:A:105:TRP:CD1	1:A:105:TRP:C	2.87	0.47
1:A:430:LEU:O	1:A:430:LEU:HD12	2.15	0.47
1:A:558:GLY:HA3	1:A:921:HIS:HD2	1.80	0.47
1:A:725:ASN:HB2	1:A:805:LYS:O	2.15	0.47
1:A:614:THR:HG21	1:A:616:THR:HB	1.97	0.47
1:A:122:PRO:HB2	1:A:125:VAL:CG2	2.44	0.47
1:A:240:LEU:HD21	1:A:265:VAL:HG12	1.97	0.47
1:A:291:LEU:HD13	1:A:300:VAL:HG21	1.97	0.47
1:A:346:PHE:CZ	1:A:367:ILE:HG23	2.50	0.47
1:A:685:VAL:HG22	1:A:693:ILE:HB	1.97	0.47
1:A:573:MET:HE2	1:A:668:ASN:ND2	2.26	0.47
1:A:556:LYS:HG2	1:A:916:TRP:HE1	1.81	0.47
1:A:362:SER:OG	1:A:415:HIS:CE1	2.68	0.46
1:A:362:SER:HB3	1:A:411:ILE:CG2	2.44	0.46
1:A:446:VAL:O	1:A:446:VAL:CG1	2.62	0.46
1:A:461:PHE:O	1:A:464:ILE:HD12	2.15	0.46
1:A:554:LEU:HD22	1:A:554:LEU:O	2.15	0.46
1:A:947:TYR:CG	1:A:980:ARG:HG2	2.51	0.46
1:A:552:TRP:H	1:A:553:PRO:HD2	1.80	0.46
1:A:923:SER:C	1:A:925:ALA:N	2.68	0.46
1:A:571:LEU:CD2	1:A:665:PRO:HB3	2.46	0.46
1:A:637:ARG:HA	1:A:637:ARG:HD2	1.60	0.46
1:A:338:LEU:HG	1:A:390:ILE:HA	1.96	0.46
1:A:389:ASN:ND2	1:A:389:ASN:N	2.61	0.46
1:A:316:PRO:O	1:A:319:VAL:HG22	2.15	0.46
1:A:786:LEU:HA	1:A:787:PRO:HD2	1.75	0.46
1:A:998:ILE:HD11	1:A:1013:ALA:HB2	1.97	0.46
1:A:279:ASN:O	1:A:593:ASP:HB2	2.15	0.46
1:A:180:VAL:HG13	1:A:180:VAL:O	2.15	0.46
1:A:772:TYR:CD1	1:A:786:LEU:HD21	2.51	0.46
1:A:46:GLN:HB2	1:A:96:ILE:HD13	1.97	0.46
1:A:25:ILE:C	1:A:28:THR:HG22	2.36	0.46
1:A:1035:TYR:CD1	1:A:1038:MET:HE3	2.51	0.46
1:A:865:LEU:HD23	1:A:865:LEU:O	2.16	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:224:LEU:HD12	1:A:225:ALA:N	2.31	0.46
1:A:874:LEU:C	1:A:877:PRO:HD2	2.36	0.46
1:A:918:MET:CE	1:A:999:LEU:HD21	2.46	0.46
1:A:886:LEU:HA	1:A:886:LEU:HD23	1.73	0.46
1:A:522:ILE:O	1:A:526:HIS:CD2	2.69	0.46
1:A:365:VAL:HG12	1:A:411:ILE:HD11	1.98	0.46
1:A:954:ALA:O	1:A:958:LEU:HD21	2.16	0.46
1:A:570:LEU:CD2	1:A:630:LEU:HD11	2.46	0.45
1:A:88:PHE:HD1	1:A:89:GLY:N	2.14	0.45
1:A:960:ASN:N	1:A:961:PRO:CD	2.71	0.45
1:A:291:LEU:HD11	1:A:295:LYS:HB2	1.99	0.45
1:A:403:MET:HB2	1:A:489:ALA:CB	2.46	0.45
1:A:834:VAL:HG13	1:A:835:SER:N	2.32	0.45
1:A:143:ALA:HB3	1:A:322:VAL:CG2	2.46	0.45
1:A:872:LEU:HD22	1:A:875:MET:HE2	1.98	0.45
1:A:405:ASP:C	1:A:405:ASP:OD1	2.54	0.45
1:A:144:LEU:CD1	1:A:321:ILE:HD13	2.47	0.45
1:A:577:LEU:HA	1:A:577:LEU:HD22	1.61	0.45
1:A:887:LEU:HD13	1:A:900:ILE:CG2	2.47	0.45
1:A:349:VAL:HG11	1:A:404:VAL:HG11	1.99	0.45
1:A:947:TYR:CG	1:A:980:ARG:CG	3.00	0.45
1:A:6:ILE:HG12	1:A:494:ILE:O	2.17	0.45
1:A:959:ASN:HD22	1:A:968:LYS:HZ3	1.64	0.45
1:A:868:ALA:O	1:A:869:ASN:C	2.54	0.45
1:A:516:PRO:CG	1:A:517:LEU:H	2.30	0.45
1:A:516:PRO:O	1:A:517:LEU:C	2.54	0.45
1:A:790:THR:HB	1:A:794:GLN:H	1.81	0.45
1:A:690:LEU:CD1	1:A:718:LEU:HD23	2.46	0.45
1:A:576:THR:CG2	1:A:658:LEU:HD11	2.47	0.45
1:A:403:MET:HB2	1:A:489:ALA:HB2	1.98	0.45
1:A:6:ILE:HG21	1:A:444:VAL:HG22	1.99	0.45
1:A:35:PRO:O	1:A:387:ASN:HB2	2.16	0.45
1:A:216:GLU:HG3	1:A:236:TYR:CE1	2.52	0.45
1:A:171:ILE:CG2	1:A:172:PRO:HD2	2.46	0.45
1:A:62:GLU:O	1:A:67:TYR:HB3	2.17	0.45
1:A:351:VAL:O	1:A:355:LEU:HG	2.17	0.44
1:A:400:VAL:HA	1:A:403:MET:HG2	1.99	0.44
1:A:872:LEU:HD22	1:A:875:MET:CE	2.47	0.44
1:A:1034:ALA:O	1:A:1038:MET:HB2	2.17	0.44
1:A:948:LEU:C	1:A:948:LEU:HD12	2.37	0.44
1:A:787:PRO:C	1:A:788:ILE:HD12	2.38	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:966:GLU:HG3	1:A:967:GLN:N	2.33	0.44
1:A:284:VAL:CG1	1:A:285:ALA:N	2.81	0.44
1:A:797:THR:O	1:A:800:ASP:HB2	2.18	0.44
1:A:736:TYR:N	1:A:736:TYR:CD2	2.85	0.44
1:A:697:ALA:HA	1:A:824:ILE:HD11	2.00	0.44
1:A:715:ALA:CB	1:A:824:ILE:HG12	2.47	0.44
1:A:31:ILE:HG13	1:A:378:PHE:CE1	2.52	0.44
1:A:959:ASN:CB	1:A:968:LYS:HD3	2.46	0.44
1:A:595:LEU:N	1:A:595:LEU:HD23	2.33	0.44
1:A:541:LEU:HD13	1:A:545:LEU:HD23	2.00	0.44
1:A:577:LEU:CD2	1:A:577:LEU:N	2.79	0.44
1:A:435:ARG:HA	1:A:438:VAL:HG12	1.99	0.44
1:A:240:LEU:HG	1:A:267:ILE:CD1	2.48	0.44
1:A:772:TYR:HD1	1:A:786:LEU:HD21	1.83	0.44
1:A:958:LEU:H	1:A:958:LEU:CD2	2.26	0.44
1:A:403:MET:SD	1:A:485:ALA:HB1	2.58	0.44
1:A:543:ALA:HB1	1:A:906:PHE:CZ	2.52	0.44
1:A:991:ILE:CG2	1:A:1020:MET:HG2	2.48	0.44
1:A:187:TYR:CE1	1:A:267:ILE:HD11	2.53	0.44
1:A:341:LYS:NZ	1:A:1001:GLY:HA3	2.33	0.44
1:A:735:ARG:HD3	1:A:735:ARG:O	2.18	0.44
1:A:12:ASN:O	1:A:16:VAL:HG13	2.18	0.43
1:A:110:VAL:O	1:A:114:LEU:HB2	2.18	0.43
1:A:684:LYS:HE2	1:A:821:THR:OG1	2.18	0.43
1:A:543:ALA:HB2	1:A:1030:ILE:HD12	1.99	0.43
1:A:12:ASN:HB2	1:A:15:LEU:HG	2.00	0.43
1:A:159:LEU:HD21	1:A:315:LEU:HD23	1.99	0.43
1:A:589:LEU:HD11	1:A:608:LYS:N	2.33	0.43
1:A:873:LYS:C	1:A:875:MET:H	2.22	0.43
1:A:376:ILE:O	1:A:380:VAL:HG23	2.19	0.43
1:A:580:ILE:HG13	1:A:581:SER:N	2.31	0.43
1:A:284:VAL:HG12	1:A:285:ALA:O	2.19	0.43
1:A:182:GLY:CA	1:A:285:ALA:HB2	2.48	0.43
1:A:211:ASP:O	1:A:215:GLN:NE2	2.50	0.43
1:A:25:ILE:CA	1:A:28:THR:HG22	2.49	0.43
1:A:572:TYR:OH	1:A:574:PRO:HG2	2.17	0.43
1:A:186:GLU:HB3	1:A:268:GLY:O	2.18	0.43
1:A:237:LEU:HD23	1:A:243:PHE:CZ	2.53	0.43
1:A:188:GLN:HA	1:A:769:ASN:HB3	2.01	0.43
1:A:191:ILE:HA	1:A:263:ALA:HB2	2.00	0.43
1:A:69:LEU:HD13	1:A:117:VAL:HG11	2.01	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:69:LEU:HA	1:A:72:THR:HG22	2.00	0.43
1:A:147:ARG:NE	1:A:320:GLU:HG3	2.26	0.43
1:A:422:GLN:HG2	1:A:427:ASP:OD1	2.18	0.43
1:A:541:LEU:O	1:A:545:LEU:HD23	2.19	0.43
1:A:875:MET:CE	1:A:931:ILE:HG13	2.47	0.43
1:A:139:ILE:HG13	1:A:291:LEU:HB2	2.00	0.43
1:A:851:LYS:HE3	1:A:852:PRO:HD3	2.01	0.43
1:A:710:VAL:HA	1:A:828:ALA:HB2	2.01	0.43
1:A:69:LEU:CD1	1:A:117:VAL:HG11	2.49	0.43
1:A:322:VAL:O	1:A:322:VAL:HG23	2.19	0.43
1:A:467:LEU:HD23	1:A:467:LEU:HA	1.86	0.43
1:A:574:PRO:O	1:A:576:THR:N	2.52	0.43
1:A:21:LEU:O	1:A:21:LEU:HD13	2.19	0.43
1:A:5:ILE:N	1:A:5:ILE:HD12	2.34	0.43
1:A:978:VAL:HG13	1:A:979:LEU:H	1.84	0.42
1:A:497:ILE:H	1:A:497:ILE:HG12	1.58	0.42
1:A:918:MET:SD	1:A:999:LEU:HD11	2.59	0.42
1:A:22:PHE:O	1:A:26:TRP:HB3	2.18	0.42
1:A:13:ARG:O	1:A:16:VAL:HG22	2.20	0.42
1:A:696:MET:O	1:A:700:ILE:HG13	2.18	0.42
1:A:880:LEU:CA	1:A:883:ILE:HG22	2.48	0.42
1:A:417:ARG:CA	1:A:420:GLU:HG2	2.48	0.42
1:A:157:ARG:HB2	1:A:182:GLY:HA3	2.01	0.42
1:A:368:ILE:HG22	1:A:368:ILE:O	2.20	0.42
1:A:446:VAL:O	1:A:450:LEU:HG	2.19	0.42
1:A:914:LEU:HD23	1:A:1014:ALA:O	2.19	0.42
1:A:67:TYR:HA	1:A:70:THR:OG1	2.18	0.42
1:A:175:ALA:O	1:A:176:GLU:CB	2.66	0.42
1:A:451:PHE:CE1	1:A:494:ILE:HD11	2.53	0.42
1:A:577:LEU:HD13	1:A:578:PRO:HD2	2.01	0.42
1:A:543:ALA:HB1	1:A:906:PHE:HZ	1.84	0.42
1:A:390:ILE:CD1	1:A:391:MET:HE2	2.47	0.42
1:A:806:VAL:HG12	1:A:807:SER:N	2.34	0.42
1:A:975:HIS:C	1:A:977:ALA:H	2.22	0.42
1:A:570:LEU:HB2	1:A:663:VAL:O	2.18	0.42
1:A:614:THR:HG22	1:A:616:THR:N	2.20	0.42
1:A:708:PRO:HG2	1:A:831:ARG:NH2	2.34	0.42
1:A:840:LEU:O	1:A:844:ILE:HG13	2.20	0.42
1:A:771:ARG:NH2	1:A:772:TYR:O	2.53	0.42
1:A:215:GLN:O	1:A:235:GLY:HA3	2.19	0.42
1:A:574:PRO:HB3	1:A:660:ASN:HA	2.01	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:602:VAL:O	1:A:631:LYS:HE3	2.19	0.42
1:A:69:LEU:HA	1:A:69:LEU:HD12	1.82	0.42
1:A:703:VAL:HG21	1:A:848:VAL:CG2	2.50	0.42
1:A:224:LEU:HG	1:A:229:TYR:CE1	2.54	0.42
1:A:9:SER:HB2	1:A:495:VAL:HG13	2.02	0.42
1:A:526:HIS:N	1:A:527:PRO:HD3	2.35	0.42
1:A:570:LEU:HD21	1:A:630:LEU:HD11	2.01	0.42
1:A:489:ALA:HA	1:A:492:LEU:HB2	2.00	0.42
1:A:317:GLU:CD	1:A:317:GLU:N	2.69	0.42
1:A:417:ARG:O	1:A:438:VAL:HG21	2.20	0.42
1:A:31:ILE:HA	1:A:378:PHE:CD1	2.54	0.42
1:A:16:VAL:HG21	1:A:499:ILE:CD1	2.42	0.42
1:A:301:ILE:HD13	1:A:326:ASP:OD2	2.20	0.42
1:A:482:LYS:HE2	1:A:482:LYS:HB3	1.85	0.42
1:A:985:ALA:O	1:A:989:ALA:N	2.50	0.42
1:A:550:VAL:HG22	1:A:912:ILE:HG21	2.02	0.41
1:A:327:ARG:HG3	1:A:327:ARG:O	2.20	0.41
1:A:389:ASN:HD21	1:A:392:SER:HB3	1.85	0.41
1:A:405:ASP:OD1	1:A:406:ALA:N	2.53	0.41
1:A:466:THR:HG22	1:A:871:LYS:HG3	2.01	0.41
1:A:252:GLU:O	1:A:253:ASN:HB2	2.20	0.41
1:A:460:SER:O	1:A:463:PRO:HD2	2.19	0.41
1:A:85:PHE:HB3	1:A:814:LYS:HA	2.01	0.41
1:A:519:ARG:CZ	1:A:523:ARG:HH21	2.33	0.41
1:A:666:ILE:O	1:A:670:ILE:HG13	2.20	0.41
1:A:114:LEU:HD12	1:A:114:LEU:HA	1.80	0.41
1:A:414:ALA:O	1:A:418:LEU:HG	2.20	0.41
1:A:649:LEU:HA	1:A:649:LEU:HD13	1.92	0.41
1:A:614:THR:HG22	1:A:616:THR:HB	2.01	0.41
1:A:561:PHE:O	1:A:562:LEU:HD23	2.20	0.41
1:A:216:GLU:HG3	1:A:236:TYR:CD1	2.56	0.41
1:A:161:ASP:OD1	1:A:179:SER:OG	2.23	0.41
1:A:570:LEU:HD13	1:A:646:ILE:HD11	2.02	0.41
1:A:160:GLN:HE22	1:A:287:GLY:N	2.19	0.41
1:A:178:ALA:O	1:A:287:GLY:HA2	2.19	0.41
1:A:696:MET:HE1	1:A:850:LEU:HD23	2.01	0.41
1:A:780:PRO:O	1:A:804:ILE:HD11	2.20	0.41
1:A:980:ARG:O	1:A:983:PRO:HD2	2.21	0.41
1:A:484:TYR:O	1:A:488:GLY:N	2.54	0.41
1:A:436:TRP:HA	1:A:436:TRP:CE3	2.56	0.41
1:A:28:THR:C	1:A:31:ILE:HG22	2.34	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:121:LEU:HB2	1:A:122:PRO:CD	2.49	0.41
1:A:736:TYR:CD1	1:A:796:ILE:HG21	2.55	0.41
1:A:1028:LEU:C	1:A:1029:PHE:HD2	2.24	0.41
1:A:904:VAL:CG2	1:A:905:PRO:N	2.84	0.41
1:A:195:ARG:CB	1:A:262:VAL:HA	2.51	0.41
1:A:602:VAL:HA	1:A:630:LEU:HD23	2.03	0.41
1:A:350:ALA:HB1	1:A:367:ILE:HD11	2.03	0.41
1:A:406:ALA:HB2	1:A:454:LEU:HD21	2.03	0.41
1:A:36:VAL:CG2	1:A:37:ASP:N	2.84	0.41
1:A:1012:ILE:O	1:A:1012:ILE:CG1	2.69	0.41
1:A:990:VAL:HA	1:A:993:ALA:HB3	2.02	0.41
1:A:872:LEU:C	1:A:872:LEU:HD13	2.41	0.40
1:A:400:VAL:CG1	1:A:401:GLY:N	2.83	0.40
1:A:526:HIS:HB3	1:A:974:TYR:CZ	2.56	0.40
1:A:330:LEU:HD13	1:A:567:GLU:HB3	2.04	0.40
1:A:397:ALA:O	1:A:400:VAL:HG12	2.21	0.40
1:A:989:ALA:O	1:A:993:ALA:HB2	2.22	0.40
1:A:575:SER:N	1:A:659:ALA:O	2.54	0.40
1:A:1008:VAL:O	1:A:1012:ILE:HG22	2.22	0.40
1:A:897:ALA:HA	1:A:900:ILE:HG22	2.03	0.40
1:A:785:GLN:O	1:A:786:LEU:C	2.59	0.40
1:A:677:ILE:HG21	1:A:682:GLY:HA3	2.03	0.40
1:A:943:VAL:CA	1:A:946:MET:HG2	2.39	0.40
1:A:7:ARG:HA	1:A:10:VAL:HG22	2.04	0.40
1:A:814:LYS:HE3	1:A:823:TRP:CD2	2.56	0.40
1:A:701:GLU:HB2	1:A:715:ALA:HB3	2.04	0.40
1:A:725:ASN:HB3	1:A:727:GLU:OE1	2.21	0.40
1:A:436:TRP:HE3	1:A:436:TRP:HA	1.85	0.40
1:A:774:GLN:HA	1:A:777:ARG:HE	1.86	0.40
1:A:619:ALA:HA	1:A:620:PRO:HD3	1.93	0.40
1:A:940:PHE:CD2	1:A:1024:PRO:HA	2.57	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles

5.3.1 Protein backbone

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	1021/1055 (97%)	891 (87%)	105 (10%)	25 (2%)	7	47

All (25) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	122	PRO
1	A	148	SER
1	A	172	PRO
1	A	425	HIS
1	A	469	GLY
1	A	613	GLU
1	A	622	GLU
1	A	11	ALA
1	A	120	LYS
1	A	123	ALA
1	A	176	GLU
1	A	574	PRO
1	A	575	SER
1	A	579	GLY
1	A	753	GLY
1	A	235	GLY
1	A	428	ALA
1	A	54	PRO
1	A	655	LEU
1	A	708	PRO
1	A	89	GLY
1	A	526	HIS
1	A	638	PRO
1	A	527	PRO
1	A	149	GLY

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	844/872 (97%)	739 (88%)	105 (12%)	6 29

All (105) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	6	ILE
1	A	13	ARG
1	A	26	TRP
1	A	34	THR
1	A	73	MET
1	A	99	ASP
1	A	105	TRP
1	A	108	SER
1	A	109	ARG
1	A	115	ASN
1	A	146	ASP
1	A	155	ASP
1	A	165	LYS
1	A	168	LEU
1	A	210	LEU
1	A	211	ASP
1	A	224	LEU
1	A	237	LEU
1	A	240	LEU
1	A	242	ASP
1	A	260	ARG
1	A	272	ARG
1	A	273	ARG
1	A	278	LEU
1	A	288	VAL
1	A	296	ASN
1	A	320	GLU
1	A	323	THR
1	A	325	TYR
1	A	343	LEU
1	A	357	LEU
1	A	359	HIS
1	A	364	LEU
1	A	389	ASN
1	A	390	ILE
1	A	405	ASP
1	A	413	ASN
1	A	416	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	422	GLN
1	A	430	LEU
1	A	458	THR
1	A	464	ILE
1	A	468	GLU
1	A	497	ILE
1	A	503	TYR
1	A	517	LEU
1	A	520	PHE
1	A	530	LEU
1	A	531	LYS
1	A	556	LYS
1	A	570	LEU
1	A	571	LEU
1	A	572	TYR
1	A	576	THR
1	A	577	LEU
1	A	580	ILE
1	A	588	MET
1	A	594	LYS
1	A	595	LEU
1	A	601	GLU
1	A	624	VAL
1	A	634	GLU
1	A	636	TRP
1	A	637	ARG
1	A	649	LEU
1	A	656	PRO
1	A	671	ASP
1	A	673	LEU
1	A	685	VAL
1	A	688	THR
1	A	689	VAL
1	A	696	MET
1	A	698	GLU
1	A	705	ARG
1	A	717	ARG
1	A	729	ASN
1	A	740	VAL
1	A	749	SER
1	A	786	LEU
1	A	793	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	813	LEU
1	A	837	VAL
1	A	851	LYS
1	A	861	GLN
1	A	869	ASN
1	A	874	LEU
1	A	876	VAL
1	A	882	ILE
1	A	900	ILE
1	A	901	ILE
1	A	902	SER
1	A	904	VAL
1	A	936	VAL
1	A	947	TYR
1	A	948	LEU
1	A	952	ILE
1	A	958	LEU
1	A	962	GLN
1	A	967	GLN
1	A	968	LYS
1	A	980	ARG
1	A	984	LYS
1	A	998	ILE
1	A	1012	ILE
1	A	1029	PHE

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (25) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	46	GLN
1	A	115	ASN
1	A	118	GLN
1	A	160	GLN
1	A	188	GLN
1	A	215	GLN
1	A	245	HIS
1	A	253	ASN
1	A	279	ASN
1	A	296	ASN
1	A	389	ASN
1	A	413	ASN
1	A	415	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	470	GLN
1	A	526	HIS
1	A	635	GLN
1	A	668	ASN
1	A	729	ASN
1	A	781	GLN
1	A	785	GLN
1	A	838	HIS
1	A	869	ASN
1	A	921	HIS
1	A	959	ASN
1	A	967	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 [i](#)

6.1 Protein, DNA and RNA chains [i](#)

In the following table, the column labelled ‘#RSRZ> 2’ contains the number (and percentage) of RSRZ outliers, followed by percent RSRZ outliers for the chain as percentile scores relative to all X-ray entries and entries of similar resolution. The OWAB column contains the minimum, median, 95th percentile and maximum values of the occupancy-weighted average B-factor per residue. The column labelled ‘Q< 0.9’ lists the number of (and percentage) of residues with an average occupancy less than 0.9.

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	1025/1055 (97%)	-0.21	16 (1%) 74 66	63, 144, 233, 364	0

All (16) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	429	THR	5.6
1	A	428	ALA	5.3
1	A	427	ASP	5.1
1	A	526	HIS	3.8
1	A	405	ASP	3.7
1	A	434	THR	3.4
1	A	579	GLY	2.6
1	A	406	ALA	2.5
1	A	956	PRO	2.4
1	A	978	VAL	2.4
1	A	525	TYR	2.3
1	A	520	PHE	2.3
1	A	426	PRO	2.3
1	A	358	TRP	2.2
1	A	963	THR	2.0
1	A	892	ARG	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](#)

There are no ligands in this entry.

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.