



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Jan 31, 2016 – 07:52 PM GMT

PDB ID : 1HO8  
Title : CRYSTAL STRUCTURE OF THE REGULATORY SUBUNIT H OF THE  
V-TYPE ATPASE OF SACCHAROMYCES CEREVISIAE  
Authors : Sagermann, M.; Stevens, T.H.; Matthews, B.W.  
Deposited on : 2000-12-10  
Resolution : 2.95 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

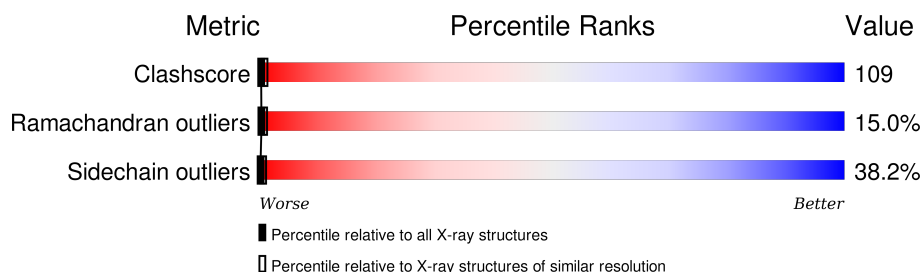
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

## *X-RAY DIFFRACTION*

The reported resolution of this entry is 2.95 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	2552 (3.00-2.92)
Ramachandran outliers	100387	2468 (3.00-2.92)
Sidechain outliers	100360	2471 (3.00-2.92)

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	480	

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

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
2	SO4	A	500	-	-	X	-

## 2 Entry composition [i](#)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3638 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 VACUOLAR ATP SYNTHASE SUBUNIT H.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	447	3608	2313	602	682	11	0	0	0

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-1	GLY	-	CLONING ARTIFACT	UNP P41807
A	0	SER	-	CLONING ARTIFACT	UNP P41807

- Molecule 2 is SULFATE ION (three-letter code: SO<sub>4</sub>) (formula: O<sub>4</sub>S).



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

- Molecule 3 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	A	25	Total	O	0	0
			25	25		

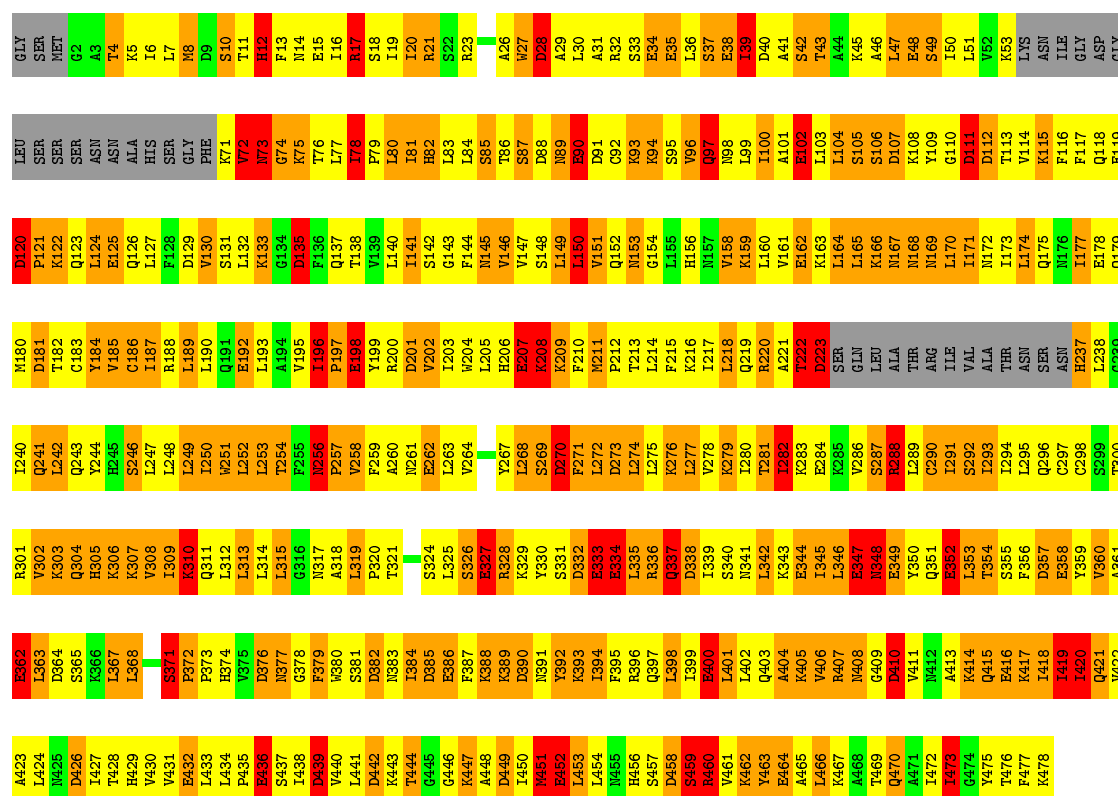
### 3 Residue-property plots

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: VACUOLAR ATP SYNTHASE SUBUNIT H

Chain A: 



## 4 Data and refinement statistics

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

Property	Value	Source
Space group	P 3 2 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	117.34Å 117.34Å 119.87Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	71.00 – 2.95	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	99.8 (71.00-2.95)	Depositor
$R_{merge}$	0.08	Depositor
$R_{sym}$	(Not available)	Depositor
Refinement program	TNT	Depositor
R, $R_{free}$	0.221 , 0.312	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	3638	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	72.0	wwPDB-VP

## 5 Model quality

### 5.1 Standard geometry

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z  > 5$	RMSZ	$\# Z  > 5$
1	A	1.09	32/3661 (0.9%)	1.31	56/4943 (1.1%)

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

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

All (32) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	73	ASN	C-N	-9.61	1.15	1.33
1	A	38	GLU	CD-OE2	9.41	1.36	1.25
1	A	358	GLU	CD-OE2	8.01	1.34	1.25
1	A	35	GLU	CD-OE2	7.58	1.33	1.25
1	A	327	GLU	CD-OE2	7.47	1.33	1.25
1	A	72	VAL	C-N	-6.69	1.18	1.34
1	A	207	GLU	CD-OE2	6.53	1.32	1.25
1	A	102	GLU	CD-OE2	6.36	1.32	1.25
1	A	15	GLU	CD-OE2	6.33	1.32	1.25
1	A	192	GLU	CD-OE2	6.25	1.32	1.25
1	A	436	GLU	CD-OE2	6.19	1.32	1.25
1	A	333	GLU	CD-OE2	6.19	1.32	1.25
1	A	344	GLU	CD-OE2	6.17	1.32	1.25
1	A	400	GLU	CD-OE2	6.13	1.32	1.25
1	A	90	GLU	CD-OE2	6.06	1.32	1.25
1	A	72	VAL	C-O	-6.04	1.11	1.23
1	A	262	GLU	CD-OE2	6.01	1.32	1.25
1	A	178	GLU	CD-OE2	6.00	1.32	1.25

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	416	GLU	CD-OE2	5.99	1.32	1.25
1	A	464	GLU	CD-OE2	5.90	1.32	1.25
1	A	198	GLU	CD-OE2	5.83	1.32	1.25
1	A	48	GLU	CD-OE2	5.82	1.32	1.25
1	A	432	GLU	CD-OE2	5.80	1.32	1.25
1	A	334	GLU	CD-OE2	5.74	1.31	1.25
1	A	386	GLU	CD-OE2	5.74	1.31	1.25
1	A	362	GLU	CD-OE2	5.71	1.31	1.25
1	A	34	GLU	CD-OE2	5.70	1.31	1.25
1	A	347	GLU	CD-OE2	5.59	1.31	1.25
1	A	162	GLU	CD-OE2	5.43	1.31	1.25
1	A	125	GLU	CD-OE2	5.42	1.31	1.25
1	A	352	GLU	CD-OE2	5.28	1.31	1.25
1	A	452	GLU	CD-OE2	5.18	1.31	1.25

All (56) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	17	ARG	NE-CZ-NH1	7.92	124.26	120.30
1	A	12	HIS	CA-CB-CG	-7.76	100.41	113.60
1	A	332	ASP	CB-CG-OD2	-7.11	111.90	118.30
1	A	135	ASP	CB-CG-OD2	-7.08	111.92	118.30
1	A	273	ASP	CB-CG-OD2	-7.08	111.92	118.30
1	A	270	ASP	CB-CG-OD2	-7.06	111.95	118.30
1	A	120	ASP	CB-CG-OD1	6.93	124.53	118.30
1	A	88	ASP	CB-CG-OD2	-6.69	112.28	118.30
1	A	135	ASP	CB-CG-OD1	6.60	124.24	118.30
1	A	439	ASP	CB-CG-OD2	-6.58	112.37	118.30
1	A	385	ASP	CB-CG-OD2	-6.49	112.46	118.30
1	A	120	ASP	CB-CG-OD2	-6.46	112.49	118.30
1	A	201	ASP	CB-CG-OD2	-6.35	112.58	118.30
1	A	449	ASP	CB-CG-OD2	-6.32	112.61	118.30
1	A	371	SER	C-N-CD	-6.24	106.88	120.60
1	A	223	ASP	CB-CG-OD2	-6.19	112.73	118.30
1	A	332	ASP	CB-CG-OD1	6.09	123.78	118.30
1	A	181	ASP	CB-CG-OD2	-6.08	112.82	118.30
1	A	17	ARG	NE-CZ-NH2	-6.02	117.29	120.30
1	A	426	ASP	CB-CG-OD2	-5.98	112.92	118.30
1	A	376	ASP	CB-CG-OD2	-5.96	112.93	118.30
1	A	364	ASP	CB-CG-OD2	-5.93	112.96	118.30
1	A	338	ASP	CB-CG-OD2	-5.92	112.97	118.30
1	A	382	ASP	CB-CG-OD2	-5.87	113.02	118.30

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	410	ASP	CB-CG-OD2	-5.87	113.02	118.30
1	A	270	ASP	CB-CG-OD1	5.84	123.56	118.30
1	A	28	ASP	CB-CG-OD1	5.82	123.54	118.30
1	A	107	ASP	CB-CG-OD2	-5.80	113.08	118.30
1	A	442	ASP	CB-CG-OD2	-5.76	113.12	118.30
1	A	111	ASP	CB-CG-OD2	-5.75	113.13	118.30
1	A	328	ARG	NE-CZ-NH2	-5.71	117.44	120.30
1	A	288	ARG	NE-CZ-NH1	5.66	123.13	120.30
1	A	91	ASP	CB-CG-OD2	-5.65	113.21	118.30
1	A	357	ASP	CB-CG-OD2	-5.64	113.22	118.30
1	A	112	ASP	CB-CG-OD2	-5.62	113.24	118.30
1	A	439	ASP	CB-CG-OD1	5.59	123.33	118.30
1	A	256	ASN	C-N-CD	-5.54	108.42	120.60
1	A	223	ASP	CB-CG-OD1	5.52	123.27	118.30
1	A	382	ASP	CB-CG-OD1	5.51	123.26	118.30
1	A	410	ASP	CB-CG-OD1	5.49	123.24	118.30
1	A	201	ASP	CB-CG-OD1	5.47	123.22	118.30
1	A	88	ASP	CB-CG-OD1	5.46	123.22	118.30
1	A	442	ASP	CB-CG-OD1	5.46	123.21	118.30
1	A	458	ASP	CB-CG-OD2	-5.41	113.43	118.30
1	A	28	ASP	N-CA-CB	-5.38	100.92	110.60
1	A	129	ASP	CB-CG-OD2	-5.35	113.49	118.30
1	A	338	ASP	CB-CG-OD1	5.33	123.10	118.30
1	A	281	THR	O-C-N	5.29	131.16	122.70
1	A	87	SER	N-CA-CB	5.28	118.41	110.50
1	A	458	ASP	CB-CG-OD1	5.26	123.03	118.30
1	A	460	ARG	NE-CZ-NH1	5.12	122.86	120.30
1	A	390	ASP	CB-CG-OD2	-5.11	113.70	118.30
1	A	357	ASP	CB-CG-OD1	5.08	122.87	118.30
1	A	426	ASP	CB-CG-OD1	5.06	122.86	118.30
1	A	449	ASP	CB-CG-OD1	5.06	122.86	118.30
1	A	111	ASP	CB-CG-OD1	5.03	122.82	118.30

There are no chirality outliers.

All (1) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	72	VAL	Mainchain

## 5.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	3608	0	3719	802	0
2	A	5	0	0	4	0
3	A	25	0	0	9	0
All	All	3638	0	3719	802	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 109.

All (802) 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:47:LEU:HA	1:A:50:ILE:HD12	1.18	1.18
1:A:75:LYS:HA	1:A:78:ILE:HD11	1.27	1.17
1:A:214:LEU:HD22	1:A:246:SER:HB3	1.20	1.11
1:A:78:ILE:HG12	1:A:79:PRO:HD3	1.21	1.09
1:A:389:LYS:HB2	1:A:394:ILE:HD11	1.21	1.09
1:A:424:LEU:HD22	1:A:465:ALA:HA	1.31	1.08
1:A:51:LEU:HD21	1:A:103:LEU:HD12	1.36	1.06
1:A:215:PHE:HA	1:A:218:LEU:HD12	1.08	1.06
1:A:177:ILE:HD13	1:A:217:ILE:HG13	1.38	1.05
1:A:279:LYS:HE2	1:A:321:THR:HG23	1.35	1.05
1:A:7:LEU:HD21	1:A:188:ARG:HD3	1.43	1.00
1:A:184:TYR:HD1	1:A:242:LEU:HD23	1.27	0.97
1:A:147:VAL:HG13	1:A:193:LEU:HD21	1.48	0.95
1:A:277:LEU:HD12	1:A:277:LEU:H	1.30	0.95
1:A:150:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD12	1.50	0.93
1:A:435:PRO:HB3	1:A:475:TYR:CD2	2.04	0.93
1:A:363:LEU:HD13	1:A:397:GLN:NE2	1.85	0.92
1:A:167:ASN:HD21	1:A:170:LEU:H	1.10	0.91
1:A:150:LEU:HD11	1:A:160:LEU:HB2	1.53	0.90
1:A:75:LYS:CA	1:A:78:ILE:HD11	2.02	0.89
1:A:424:LEU:HD22	1:A:465:ALA:CA	2.03	0.89
1:A:411:VAL:HG12	1:A:413:ALA:H	1.36	0.88
1:A:18:SER:HA	1:A:21:ARG:HD3	1.56	0.88
1:A:184:TYR:HA	1:A:242:LEU:HD21	1.56	0.87

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:184:TYR:CD1	1:A:242:LEU:HD23	2.09	0.87
1:A:405:LYS:HG3	1:A:416:GLU:HG3	1.55	0.87
1:A:279:LYS:CE	1:A:321:THR:HG23	2.05	0.86
1:A:170:LEU:HD23	1:A:171:ILE:N	1.91	0.85
1:A:213:THR:HG22	1:A:217:ILE:HD11	1.58	0.85
1:A:253:LEU:HD23	1:A:253:LEU:H	1.42	0.85
1:A:73:ASN:HD21	1:A:109:TYR:HB3	1.42	0.84
1:A:354:THR:HG23	1:A:356:PHE:H	1.42	0.83
1:A:47:LEU:CA	1:A:50:ILE:HD12	2.05	0.83
1:A:279:LYS:NZ	1:A:321:THR:HA	1.93	0.83
1:A:389:LYS:HB2	1:A:394:ILE:CD1	2.08	0.83
1:A:115:LYS:O	1:A:116:PHE:C	2.14	0.82
1:A:17:ARG:HG2	1:A:17:ARG:HH11	1.44	0.82
1:A:439:ASP:HB2	1:A:443:LYS:HE3	1.60	0.82
1:A:164:LEU:HD23	1:A:165:LEU:N	1.94	0.82
1:A:279:LYS:HZ3	1:A:321:THR:HA	1.43	0.81
1:A:289:LEU:O	1:A:293:ILE:HD12	1.80	0.81
1:A:213:THR:HG22	1:A:217:ILE:CD1	2.10	0.81
1:A:177:ILE:CD1	1:A:217:ILE:HG13	2.11	0.81
1:A:47:LEU:HD22	1:A:51:LEU:HD11	1.61	0.81
1:A:167:ASN:ND2	1:A:170:LEU:H	1.79	0.81
1:A:116:PHE:CE2	1:A:123:GLN:HG3	2.16	0.81
1:A:246:SER:O	1:A:250:ILE:HD12	1.82	0.80
1:A:394:ILE:HD12	1:A:394:ILE:H	1.46	0.79
1:A:397:GLN:HA	1:A:400:GLU:CD	2.02	0.79
1:A:120:ASP:HB3	1:A:122:LYS:CE	2.12	0.79
1:A:215:PHE:CA	1:A:218:LEU:HD12	2.03	0.79
1:A:388:LYS:HG2	1:A:392:TYR:CE1	2.18	0.79
1:A:462:LYS:HB3	1:A:462:LYS:NZ	1.98	0.78
1:A:206:HIS:O	1:A:209:LYS:HG3	1.83	0.78
1:A:115:LYS:N	1:A:118:GLN:NE2	2.32	0.78
1:A:274:LEU:O	1:A:278:VAL:HG23	1.84	0.78
1:A:47:LEU:HD22	1:A:51:LEU:CD1	2.14	0.77
1:A:238:LEU:HB3	3:A:2001:HOH:O	1.84	0.77
1:A:309:ILE:HA	1:A:312:LEU:HD12	1.67	0.77
1:A:438:ILE:HD13	1:A:472:ILE:HG23	1.66	0.77
1:A:453:LEU:HG	1:A:456:HIS:NE2	1.99	0.77
1:A:465:ALA:O	1:A:469:THR:HG23	1.84	0.77
1:A:177:ILE:HD13	1:A:217:ILE:CG1	2.14	0.77
1:A:411:VAL:CG1	1:A:413:ALA:H	1.97	0.76
1:A:151:VAL:HG13	1:A:193:LEU:HD23	1.67	0.76

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:89:ASN:HD22	1:A:92:CYS:H	1.31	0.76
1:A:50:ILE:HD13	1:A:71:LYS:HD2	1.68	0.76
1:A:251:TRP:NE1	1:A:296:GLN:NE2	2.34	0.75
1:A:115:LYS:N	1:A:118:GLN:HE21	1.85	0.75
1:A:413:ALA:O	1:A:414:LYS:C	2.24	0.75
1:A:398:LEU:HD13	1:A:427:ILE:HG13	1.68	0.75
1:A:50:ILE:HD13	1:A:71:LYS:CD	2.17	0.75
1:A:386:GLU:O	1:A:389:LYS:HG2	1.85	0.75
1:A:206:HIS:HB3	1:A:209:LYS:HD2	1.67	0.75
1:A:82:HIS:NE2	1:A:86:THR:HG21	2.01	0.74
1:A:274:LEU:C	1:A:278:VAL:HG23	2.07	0.74
1:A:131:SER:O	1:A:133:LYS:HD3	1.87	0.74
1:A:348:ASN:O	1:A:349:GLU:C	2.25	0.74
1:A:384:ILE:HD13	1:A:433:LEU:HD22	1.70	0.74
1:A:112:ASP:HA	1:A:115:LYS:HG3	1.68	0.74
1:A:184:TYR:HA	1:A:242:LEU:CD2	2.18	0.74
1:A:256:ASN:OD1	1:A:258:VAL:HG23	1.87	0.73
1:A:159:LYS:O	1:A:163:LYS:HG3	1.87	0.73
1:A:182:THR:O	1:A:183:CYS:C	2.23	0.73
1:A:199:TYR:O	1:A:202:VAL:HG23	1.87	0.73
1:A:150:LEU:HD11	1:A:160:LEU:CB	2.18	0.73
1:A:466:LEU:HD13	1:A:467:LYS:N	2.03	0.73
1:A:77:LEU:H	1:A:77:LEU:HD12	1.53	0.73
1:A:330:TYR:HB2	1:A:336:ARG:HD3	1.69	0.73
1:A:202:VAL:O	1:A:205:LEU:HB3	1.89	0.72
1:A:120:ASP:HB3	1:A:122:LYS:HE3	1.71	0.72
1:A:396:ARG:O	1:A:400:GLU:HG3	1.90	0.72
1:A:273:ASP:O	1:A:274:LEU:C	2.24	0.72
1:A:341:ASN:O	1:A:345:ILE:HD12	1.88	0.72
1:A:196:ILE:CG2	1:A:198:GLU:HG2	2.20	0.72
1:A:442:ASP:OD1	1:A:447:LYS:HG3	1.90	0.72
1:A:278:VAL:HG22	1:A:290:CYS:HB3	1.70	0.72
1:A:407:ARG:HG3	1:A:408:ASN:H	1.53	0.72
1:A:12:HIS:CE1	1:A:238:LEU:HD21	2.24	0.71
1:A:284:GLU:HB3	1:A:335:LEU:HD12	1.73	0.71
1:A:151:VAL:CG1	1:A:193:LEU:HD23	2.20	0.71
1:A:158:VAL:HG22	1:A:159:LYS:N	2.06	0.71
1:A:37:SER:O	1:A:38:GLU:C	2.30	0.70
1:A:253:LEU:HD23	1:A:253:LEU:N	2.07	0.70
1:A:436:GLU:OE1	1:A:436:GLU:HA	1.89	0.70
1:A:287:SER:O	1:A:288:ARG:C	2.29	0.70

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:307:LYS:O	1:A:311:GLN:HG3	1.91	0.70
1:A:120:ASP:HB2	1:A:123:GLN:HG2	1.72	0.70
1:A:38:GLU:O	1:A:39:ILE:C	2.30	0.70
1:A:7:LEU:HD21	1:A:188:ARG:CD	2.19	0.70
1:A:462:LYS:HG2	1:A:463:TYR:N	2.04	0.70
1:A:330:TYR:CE2	1:A:339:ILE:HD12	2.27	0.70
1:A:222:THR:O	1:A:280:ILE:HD13	1.91	0.70
1:A:467:LYS:HA	1:A:470:GLN:NE2	2.06	0.70
1:A:51:LEU:HD21	1:A:103:LEU:CD1	2.19	0.70
1:A:187:ILE:HD13	1:A:214:LEU:HD21	1.74	0.70
1:A:407:ARG:HG3	1:A:408:ASN:N	2.06	0.70
1:A:446:GLY:O	1:A:450:ILE:HG13	1.90	0.69
1:A:196:ILE:HB	1:A:199:TYR:CD2	2.28	0.69
1:A:97:GLN:NE2	1:A:97:GLN:HA	2.07	0.69
1:A:214:LEU:CD2	1:A:246:SER:HB3	2.13	0.69
1:A:92:CYS:O	1:A:96:VAL:HG23	1.92	0.69
1:A:170:LEU:CD2	1:A:171:ILE:HD13	2.23	0.69
1:A:17:ARG:HG2	1:A:17:ARG:NH1	2.06	0.69
1:A:372:PRO:HG2	1:A:373:PRO:HD3	1.73	0.69
1:A:153:ASN:OD1	1:A:154:GLY:N	2.26	0.69
1:A:148:SER:O	1:A:152:GLN:HG2	1.92	0.69
1:A:83:LEU:HD23	1:A:84:LEU:N	2.07	0.69
1:A:29:ALA:HA	1:A:32:ARG:HE	1.58	0.69
1:A:371:SER:CB	1:A:372:PRO:HD2	2.23	0.68
1:A:77:LEU:HD12	1:A:77:LEU:N	2.08	0.68
1:A:278:VAL:HG22	1:A:290:CYS:CB	2.24	0.68
1:A:124:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	1.75	0.68
1:A:206:HIS:HA	1:A:208:LYS:CD	2.24	0.68
1:A:78:ILE:H	1:A:78:ILE:HD13	1.56	0.68
1:A:330:TYR:HB2	1:A:336:ARG:CD	2.23	0.68
1:A:462:LYS:O	1:A:466:LEU:N	2.26	0.68
1:A:208:LYS:CD	1:A:208:LYS:H	2.05	0.68
1:A:78:ILE:HG12	1:A:79:PRO:CD	2.11	0.68
1:A:392:TYR:O	1:A:396:ARG:HG3	1.92	0.68
1:A:397:GLN:HA	1:A:400:GLU:OE2	1.93	0.68
1:A:89:ASN:HD22	1:A:92:CYS:N	1.91	0.68
1:A:292:SER:O	1:A:293:ILE:C	2.33	0.68
1:A:463:TYR:O	1:A:466:LEU:N	2.27	0.68
1:A:12:HIS:NE2	2:A:500:SO4:O3	2.26	0.68
1:A:195:VAL:O	1:A:197:PRO:HD3	1.94	0.67
1:A:311:GLN:HA	1:A:315:LEU:HD12	1.75	0.67

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:354:THR:HG23	1:A:356:PHE:N	2.08	0.67
1:A:462:LYS:HB3	1:A:462:LYS:HZ2	1.60	0.67
1:A:335:LEU:O	1:A:339:ILE:HG13	1.95	0.67
1:A:394:ILE:CD1	1:A:394:ILE:H	2.03	0.67
1:A:403:GLN:O	1:A:406:VAL:HG22	1.95	0.67
1:A:149:LEU:O	1:A:152:GLN:N	2.28	0.67
1:A:452:GLU:N	1:A:452:GLU:OE1	2.28	0.67
1:A:249:LEU:CD2	1:A:253:LEU:HD21	2.24	0.67
1:A:439:ASP:O	1:A:442:ASP:N	2.28	0.67
1:A:377:ASN:O	1:A:381:SER:N	2.27	0.67
1:A:98:ASN:O	1:A:101:ALA:N	2.28	0.66
1:A:415:GLN:O	1:A:416:GLU:C	2.32	0.66
1:A:438:ILE:HD11	1:A:475:TYR:HB2	1.77	0.66
1:A:122:LYS:O	1:A:125:GLU:N	2.28	0.66
1:A:158:VAL:O	1:A:159:LYS:C	2.33	0.66
1:A:109:TYR:O	1:A:111:ASP:N	2.29	0.66
1:A:89:ASN:HB3	1:A:92:CYS:HB2	1.78	0.66
1:A:216:LYS:O	1:A:220:ARG:HG3	1.95	0.66
1:A:256:ASN:O	1:A:259:PHE:N	2.29	0.66
1:A:413:ALA:O	1:A:415:GLN:N	2.28	0.66
1:A:141:ILE:H	1:A:141:ILE:HD13	1.61	0.66
1:A:305:HIS:O	1:A:308:VAL:N	2.29	0.66
1:A:389:LYS:CB	1:A:394:ILE:HD11	2.13	0.66
1:A:450:ILE:O	1:A:453:LEU:N	2.29	0.66
1:A:237:HIS:N	1:A:240:ILE:HD12	2.11	0.66
1:A:348:ASN:O	1:A:350:TYR:N	2.29	0.66
1:A:384:ILE:HD13	1:A:433:LEU:CD2	2.25	0.65
1:A:124:LEU:HG	1:A:124:LEU:O	1.96	0.65
1:A:163:LYS:HA	1:A:166:LYS:HE3	1.78	0.65
1:A:213:THR:O	1:A:217:ILE:HD12	1.95	0.65
1:A:84:LEU:HD13	1:A:130:VAL:CG2	2.27	0.65
1:A:124:LEU:HD21	1:A:150:LEU:CD2	2.26	0.65
1:A:161:VAL:HA	1:A:164:LEU:HD22	1.78	0.65
1:A:78:ILE:N	1:A:78:ILE:HD13	2.11	0.65
1:A:387:PHE:O	1:A:392:TYR:HA	1.97	0.65
1:A:446:GLY:HA2	1:A:449:ASP:HB2	1.79	0.65
1:A:168:ASN:O	1:A:171:ILE:N	2.30	0.65
1:A:28:ASP:OD1	1:A:28:ASP:N	2.30	0.65
1:A:198:GLU:H	1:A:198:GLU:CD	2.00	0.65
1:A:318:ALA:O	1:A:321:THR:HB	1.97	0.64
1:A:120:ASP:C	1:A:122:LYS:HD2	2.18	0.64

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:307:LYS:NZ	3:A:1024:HOH:O	2.30	0.64
1:A:421:GLN:HB2	1:A:464:GLU:HG3	1.80	0.64
1:A:418:ILE:HG22	1:A:419:ILE:N	2.11	0.64
1:A:431:VAL:HG12	1:A:432:GLU:N	2.12	0.64
1:A:277:LEU:H	1:A:277:LEU:CD1	2.08	0.64
1:A:215:PHE:O	1:A:218:LEU:N	2.27	0.64
1:A:248:LEU:O	1:A:249:LEU:C	2.36	0.64
1:A:115:LYS:O	1:A:118:GLN:N	2.31	0.64
1:A:114:VAL:HG12	1:A:118:GLN:HE21	1.62	0.64
1:A:84:LEU:HD13	1:A:130:VAL:HG21	1.79	0.63
1:A:287:SER:O	1:A:290:CYS:N	2.30	0.63
1:A:152:GLN:O	1:A:154:GLY:N	2.31	0.63
1:A:82:HIS:O	1:A:85:SER:N	2.31	0.63
1:A:433:LEU:O	1:A:435:PRO:HD3	1.97	0.63
1:A:294:ILE:HG21	1:A:342:LEU:HD11	1.80	0.63
1:A:147:VAL:O	1:A:148:SER:C	2.36	0.63
1:A:159:LYS:O	1:A:162:GLU:HB3	1.99	0.63
1:A:90:GLU:H	1:A:90:GLU:CD	2.02	0.63
1:A:148:SER:HB3	3:A:1028:HOH:O	1.99	0.63
1:A:264:VAL:HG11	1:A:308:VAL:HG13	1.80	0.63
1:A:27:TRP:O	1:A:30:LEU:N	2.31	0.63
1:A:207:GLU:HA	1:A:210:PHE:CZ	2.34	0.63
1:A:333:GLU:O	1:A:335:LEU:N	2.32	0.63
1:A:424:LEU:CD2	1:A:450:ILE:HG23	2.29	0.63
1:A:256:ASN:O	1:A:258:VAL:N	2.31	0.62
1:A:93:LYS:O	1:A:97:GLN:HB2	1.98	0.62
1:A:454:LEU:HA	1:A:462:LYS:HB2	1.81	0.62
1:A:109:TYR:C	1:A:111:ASP:H	2.02	0.62
1:A:75:LYS:HA	1:A:78:ILE:CD1	2.18	0.62
1:A:82:HIS:O	1:A:83:LEU:C	2.37	0.62
1:A:78:ILE:CG1	1:A:79:PRO:HD3	2.13	0.62
1:A:254:THR:HB	1:A:296:GLN:OE1	2.00	0.62
1:A:384:ILE:HG23	1:A:385:ASP:N	2.14	0.62
1:A:277:LEU:HD12	1:A:277:LEU:N	2.08	0.62
1:A:454:LEU:O	1:A:462:LYS:HB2	2.00	0.62
1:A:10:SER:HA	2:A:500:SO4:O4	1.98	0.62
1:A:350:TYR:HA	1:A:353:LEU:HG	1.81	0.62
1:A:376:ASP:O	1:A:379:PHE:N	2.33	0.62
1:A:4:THR:HG22	1:A:6:ILE:HG23	1.82	0.62
1:A:124:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD12	1.81	0.61
1:A:135:ASP:OD1	1:A:137:GLN:N	2.33	0.61

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:325:LEU:HB3	1:A:330:TYR:OH	1.99	0.61
1:A:333:GLU:O	1:A:336:ARG:N	2.32	0.61
1:A:402:LEU:HD22	1:A:402:LEU:O	1.99	0.61
1:A:286:VAL:O	1:A:287:SER:C	2.39	0.61
1:A:415:GLN:O	1:A:418:ILE:N	2.28	0.61
1:A:170:LEU:HD23	1:A:171:ILE:HD13	1.82	0.61
1:A:170:LEU:HD23	1:A:171:ILE:H	1.65	0.61
1:A:247:LEU:O	1:A:250:ILE:N	2.33	0.61
1:A:387:PHE:O	1:A:394:ILE:HD13	2.00	0.61
1:A:11:THR:N	2:A:500:SO4:O4	2.33	0.61
1:A:337:GLN:HA	1:A:337:GLN:OE1	1.99	0.61
1:A:14:ASN:HA	1:A:17:ARG:HD3	1.81	0.61
1:A:120:ASP:O	1:A:123:GLN:HB2	2.01	0.61
1:A:208:LYS:H	1:A:208:LYS:HD3	1.66	0.61
1:A:247:LEU:HB2	1:A:289:LEU:CD1	2.31	0.61
1:A:312:LEU:HB3	1:A:318:ALA:HB2	1.82	0.61
1:A:408:ASN:O	1:A:410:ASP:N	2.27	0.61
1:A:168:ASN:O	1:A:170:LEU:N	2.34	0.61
1:A:411:VAL:HG12	1:A:413:ALA:N	2.13	0.61
1:A:472:ILE:O	1:A:475:TYR:N	2.32	0.61
1:A:149:LEU:N	1:A:149:LEU:HD22	2.15	0.61
1:A:38:GLU:O	1:A:42:SER:N	2.29	0.60
1:A:106:SER:HG	1:A:109:TYR:H	1.47	0.60
1:A:360:VAL:O	1:A:361:ALA:C	2.39	0.60
1:A:123:GLN:HA	1:A:123:GLN:OE1	2.01	0.60
1:A:307:LYS:O	1:A:310:LYS:HB2	2.01	0.60
1:A:141:ILE:CD1	1:A:141:ILE:H	2.10	0.60
1:A:114:VAL:HG12	1:A:118:GLN:HG3	1.83	0.60
1:A:284:GLU:HB3	1:A:335:LEU:CD1	2.31	0.60
1:A:430:VAL:HG12	1:A:431:VAL:N	2.16	0.60
1:A:114:VAL:C	1:A:118:GLN:HE21	2.05	0.60
1:A:290:CYS:C	1:A:294:ILE:HD12	2.22	0.60
1:A:206:HIS:C	1:A:208:LYS:HD3	2.22	0.60
1:A:394:ILE:HD12	1:A:394:ILE:N	2.16	0.59
1:A:214:LEU:HD22	1:A:246:SER:CB	2.14	0.59
1:A:463:TYR:O	1:A:464:GLU:C	2.40	0.59
1:A:281:THR:HG22	1:A:282:ILE:N	2.16	0.59
1:A:282:ILE:HA	1:A:283:LYS:O	2.02	0.59
1:A:122:LYS:O	1:A:126:GLN:HG3	2.02	0.59
1:A:268:LEU:O	1:A:269:SER:C	2.41	0.59
1:A:384:ILE:O	1:A:385:ASP:C	2.40	0.59

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:49:SER:O	1:A:53:LYS:N	2.30	0.59
1:A:114:VAL:HG12	1:A:118:GLN:NE2	2.18	0.59
1:A:79:PRO:O	1:A:82:HIS:HB3	2.01	0.59
1:A:143:GLY:O	1:A:144:PHE:C	2.39	0.59
1:A:168:ASN:O	1:A:169:ASN:C	2.40	0.59
1:A:206:HIS:HA	1:A:208:LYS:HE3	1.85	0.59
1:A:421:GLN:CB	1:A:464:GLU:HG3	2.33	0.59
1:A:12:HIS:ND1	1:A:12:HIS:N	2.43	0.59
1:A:127:LEU:HD12	1:A:130:VAL:HG22	1.85	0.58
1:A:311:GLN:O	1:A:315:LEU:N	2.34	0.58
1:A:354:THR:HG22	1:A:357:ASP:H	1.68	0.58
1:A:237:HIS:HA	1:A:240:ILE:HD12	1.83	0.58
1:A:172:ASN:HA	1:A:175:GLN:OE1	2.02	0.58
1:A:448:ALA:O	1:A:451:MET:N	2.35	0.58
1:A:196:ILE:HD13	1:A:196:ILE:N	2.18	0.58
1:A:291:ILE:O	1:A:294:ILE:HB	2.04	0.58
1:A:392:TYR:O	1:A:393:LYS:C	2.38	0.58
1:A:219:GLN:O	1:A:220:ARG:C	2.42	0.58
1:A:438:ILE:CD1	1:A:475:TYR:HB2	2.33	0.58
1:A:213:THR:CG2	1:A:217:ILE:HD11	2.31	0.58
1:A:160:LEU:O	1:A:163:LYS:N	2.37	0.58
1:A:362:GLU:HB2	1:A:368:LEU:CD1	2.34	0.58
1:A:466:LEU:O	1:A:470:GLN:HG3	2.03	0.58
1:A:96:VAL:O	1:A:97:GLN:C	2.42	0.58
1:A:391:ASN:O	1:A:396:ARG:HD2	2.04	0.57
1:A:417:LYS:HE3	1:A:458:ASP:OD2	2.03	0.57
1:A:237:HIS:CA	1:A:240:ILE:HD12	2.34	0.57
1:A:163:LYS:HA	1:A:166:LYS:CE	2.34	0.57
1:A:185:VAL:HG12	1:A:186:CYS:N	2.18	0.57
1:A:184:TYR:CA	1:A:242:LEU:HD21	2.32	0.57
1:A:402:LEU:HD21	1:A:420:ILE:HG23	1.86	0.57
1:A:259:PHE:HA	1:A:262:GLU:OE1	2.04	0.57
1:A:290:CYS:O	1:A:294:ILE:HD12	2.04	0.57
1:A:309:ILE:HG21	1:A:345:ILE:HG22	1.86	0.57
1:A:351:GLN:C	1:A:353:LEU:H	2.08	0.57
1:A:448:ALA:HA	1:A:451:MET:HG3	1.87	0.57
1:A:448:ALA:O	1:A:449:ASP:C	2.40	0.57
1:A:363:LEU:HD13	1:A:397:GLN:CD	2.25	0.57
1:A:435:PRO:HB3	1:A:475:TYR:HD2	1.67	0.57
1:A:478:LYS:HG3	1:A:478:LYS:OXT	2.04	0.57
1:A:46:ALA:O	1:A:50:ILE:HG13	2.04	0.57

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:407:ARG:O	1:A:408:ASN:C	2.43	0.57
1:A:17:ARG:CG	1:A:17:ARG:HH11	2.16	0.57
1:A:159:LYS:HD3	1:A:163:LYS:HD2	1.86	0.57
1:A:182:THR:OG1	1:A:183:CYS:N	2.37	0.57
1:A:380:TRP:HH2	1:A:426:ASP:HB3	1.70	0.57
1:A:196:ILE:HG22	1:A:199:TYR:H	1.69	0.56
1:A:98:ASN:O	1:A:99:LEU:C	2.43	0.56
1:A:96:VAL:O	1:A:100:ILE:HD13	2.04	0.56
1:A:325:LEU:O	1:A:327:GLU:N	2.38	0.56
1:A:388:LYS:HB2	1:A:434:LEU:HD13	1.88	0.56
1:A:417:LYS:HE3	1:A:458:ASP:CG	2.26	0.56
1:A:347:GLU:O	1:A:350:TYR:HB3	2.05	0.56
1:A:20:ILE:HD12	1:A:141:ILE:HD12	1.86	0.56
1:A:250:ILE:O	1:A:251:TRP:C	2.44	0.56
1:A:402:LEU:C	1:A:402:LEU:HD13	2.26	0.56
1:A:170:LEU:HD21	1:A:171:ILE:HD13	1.88	0.56
1:A:100:ILE:HD13	1:A:100:ILE:H	1.70	0.56
1:A:400:GLU:O	1:A:401:LEU:C	2.44	0.56
1:A:362:GLU:HB2	1:A:368:LEU:HD12	1.88	0.56
1:A:281:THR:O	1:A:282:ILE:HG22	2.06	0.56
1:A:384:ILE:HG23	1:A:385:ASP:H	1.71	0.56
1:A:8:MET:HE1	1:A:105:SER:HB3	1.88	0.56
1:A:424:LEU:HD22	1:A:465:ALA:CB	2.36	0.56
1:A:460:ARG:CZ	1:A:460:ARG:HB2	2.35	0.56
1:A:464:GLU:OE1	1:A:464:GLU:HA	2.05	0.56
1:A:219:GLN:O	1:A:222:THR:N	2.38	0.55
1:A:278:VAL:HG11	1:A:291:ILE:HD11	1.88	0.55
1:A:418:ILE:O	1:A:421:GLN:HG2	2.07	0.55
1:A:305:HIS:O	1:A:306:LYS:C	2.44	0.55
1:A:308:VAL:HA	1:A:311:GLN:OE1	2.05	0.55
1:A:341:ASN:O	1:A:344:GLU:HG2	2.06	0.55
1:A:152:GLN:NE2	1:A:153:ASN:H	2.05	0.55
1:A:256:ASN:OD1	1:A:257:PRO:HD2	2.05	0.55
1:A:258:VAL:O	1:A:259:PHE:C	2.43	0.55
1:A:336:ARG:HB3	3:A:2015:HOH:O	2.06	0.55
1:A:27:TRP:O	1:A:28:ASP:C	2.45	0.55
1:A:405:LYS:HA	1:A:408:ASN:OD1	2.07	0.55
1:A:196:ILE:O	1:A:197:PRO:C	2.46	0.55
1:A:50:ILE:O	1:A:53:LYS:HE2	2.06	0.54
1:A:371:SER:C	1:A:373:PRO:HD2	2.27	0.54
1:A:309:ILE:HG22	1:A:346:LEU:HD23	1.88	0.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:131:SER:O	1:A:132:LEU:HB2	2.07	0.54
1:A:47:LEU:HG	1:A:71:LYS:NZ	2.22	0.54
1:A:5:LYS:NZ	1:A:106:SER:O	2.39	0.54
1:A:204:TRP:CD1	1:A:259:PHE:CD1	2.95	0.54
1:A:247:LEU:O	1:A:250:ILE:HB	2.07	0.54
1:A:168:ASN:HD22	1:A:168:ASN:H	1.54	0.54
1:A:346:LEU:O	1:A:347:GLU:C	2.43	0.54
1:A:454:LEU:C	1:A:462:LYS:HB2	2.28	0.54
1:A:463:TYR:O	1:A:466:LEU:HB3	2.08	0.54
1:A:116:PHE:CZ	1:A:123:GLN:HG3	2.43	0.54
1:A:81:ILE:O	1:A:84:LEU:HB2	2.07	0.54
1:A:306:LYS:O	1:A:307:LYS:C	2.45	0.54
1:A:360:VAL:O	1:A:363:LEU:N	2.40	0.54
1:A:50:ILE:HD13	1:A:71:LYS:HD3	1.88	0.54
1:A:81:ILE:O	1:A:82:HIS:C	2.45	0.54
1:A:279:LYS:NZ	1:A:321:THR:HG23	2.22	0.54
1:A:99:LEU:O	1:A:100:ILE:C	2.44	0.54
1:A:452:GLU:CD	1:A:452:GLU:H	2.12	0.54
1:A:211:MET:HE3	1:A:250:ILE:HG12	1.90	0.54
1:A:350:TYR:O	1:A:351:GLN:C	2.45	0.53
1:A:340:SER:O	1:A:343:LYS:HB3	2.08	0.53
1:A:429:HIS:O	1:A:430:VAL:C	2.46	0.53
1:A:439:ASP:O	1:A:440:VAL:C	2.47	0.53
1:A:439:ASP:CB	1:A:443:LYS:HE3	2.35	0.53
1:A:447:LYS:C	1:A:447:LYS:HD2	2.29	0.53
1:A:112:ASP:HA	1:A:115:LYS:CG	2.37	0.53
1:A:372:PRO:CG	1:A:373:PRO:HD3	2.38	0.53
1:A:137:GLN:O	1:A:138:THR:C	2.43	0.53
1:A:89:ASN:O	1:A:92:CYS:HB2	2.09	0.53
1:A:184:TYR:O	1:A:185:VAL:C	2.46	0.53
1:A:275:LEU:HA	1:A:278:VAL:CG2	2.39	0.53
1:A:420:ILE:HG22	1:A:424:LEU:HD11	1.90	0.53
1:A:421:GLN:HA	1:A:424:LEU:HD12	1.91	0.53
1:A:140:LEU:O	1:A:144:PHE:N	2.38	0.53
1:A:39:ILE:CG2	1:A:40:ASP:H	2.22	0.53
1:A:356:PHE:CD1	1:A:383:ASN:HB3	2.43	0.53
1:A:137:GLN:O	1:A:140:LEU:N	2.41	0.53
1:A:149:LEU:O	1:A:150:LEU:C	2.47	0.53
1:A:165:LEU:HD21	1:A:203:ILE:HA	1.91	0.53
1:A:39:ILE:HG23	1:A:40:ASP:N	2.23	0.53
1:A:86:THR:O	1:A:87:SER:HB2	2.09	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:247:LEU:HB2	1:A:289:LEU:HD12	1.90	0.53
1:A:168:ASN:ND2	1:A:168:ASN:H	2.06	0.53
1:A:83:LEU:C	1:A:83:LEU:HD23	2.29	0.53
1:A:270:ASP:O	1:A:273:ASP:HB2	2.08	0.53
1:A:281:THR:CG2	1:A:282:ILE:N	2.71	0.53
1:A:158:VAL:O	1:A:162:GLU:N	2.36	0.52
1:A:206:HIS:HA	1:A:208:LYS:CE	2.38	0.52
1:A:418:ILE:O	1:A:419:ILE:C	2.47	0.52
1:A:82:HIS:CD2	1:A:86:THR:HG21	2.44	0.52
1:A:244:TYR:O	1:A:247:LEU:N	2.43	0.52
1:A:213:THR:HG22	1:A:217:ILE:HD12	1.91	0.52
1:A:77:LEU:O	1:A:80:LEU:N	2.42	0.52
1:A:466:LEU:HD22	1:A:466:LEU:C	2.30	0.52
1:A:256:ASN:O	1:A:257:PRO:C	2.46	0.52
1:A:417:LYS:O	1:A:417:LYS:HG2	2.09	0.52
1:A:460:ARG:O	1:A:464:GLU:N	2.34	0.52
1:A:74:GLY:HA3	3:A:1003:HOH:O	2.08	0.52
1:A:196:ILE:HG22	1:A:198:GLU:HG2	1.90	0.52
1:A:208:LYS:HD3	1:A:208:LYS:N	2.25	0.52
1:A:80:LEU:O	1:A:83:LEU:HB3	2.10	0.52
1:A:402:LEU:O	1:A:406:VAL:HG13	2.10	0.52
1:A:205:LEU:O	1:A:205:LEU:HD12	2.10	0.52
1:A:392:TYR:N	1:A:392:TYR:CD1	2.77	0.52
1:A:249:LEU:O	1:A:252:LEU:HB2	2.09	0.52
1:A:250:ILE:O	1:A:252:LEU:N	2.43	0.52
1:A:333:GLU:O	1:A:334:GLU:C	2.49	0.52
1:A:171:ILE:HG22	1:A:172:ASN:N	2.25	0.52
1:A:270:ASP:O	1:A:271:PHE:C	2.48	0.51
1:A:405:LYS:O	1:A:416:GLU:OE2	2.28	0.51
1:A:477:PHE:O	1:A:478:LYS:O	2.29	0.51
1:A:94:LYS:HG3	1:A:138:THR:OG1	2.10	0.51
1:A:394:ILE:O	1:A:397:GLN:HB3	2.10	0.51
1:A:161:VAL:O	1:A:162:GLU:C	2.48	0.51
1:A:199:TYR:O	1:A:203:ILE:HG13	2.11	0.51
1:A:332:ASP:O	1:A:333:GLU:C	2.49	0.51
1:A:250:ILE:HG22	1:A:251:TRP:N	2.24	0.51
1:A:115:LYS:HA	1:A:118:GLN:HB2	1.92	0.51
1:A:330:TYR:CZ	1:A:339:ILE:HD12	2.45	0.51
1:A:122:LYS:HD2	1:A:122:LYS:H	1.76	0.51
1:A:196:ILE:O	1:A:196:ILE:HG22	2.10	0.51
1:A:89:ASN:O	1:A:92:CYS:N	2.37	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:330:TYR:O	1:A:336:ARG:NE	2.44	0.51
1:A:177:ILE:HG22	1:A:177:ILE:O	2.12	0.50
1:A:187:ILE:CD1	1:A:214:LEU:HD21	2.39	0.50
1:A:354:THR:CG2	1:A:356:PHE:HB3	2.41	0.50
1:A:114:VAL:O	1:A:115:LYS:C	2.48	0.50
1:A:158:VAL:O	1:A:161:VAL:N	2.44	0.50
1:A:319:LEU:N	3:A:1002:HOH:O	2.44	0.50
1:A:12:HIS:NE2	1:A:238:LEU:CD2	2.74	0.50
1:A:163:LYS:O	1:A:166:LYS:N	2.39	0.50
1:A:242:LEU:O	1:A:246:SER:OG	2.28	0.50
1:A:275:LEU:O	1:A:276:LYS:C	2.50	0.50
1:A:7:LEU:CD2	1:A:188:ARG:HD3	2.29	0.50
1:A:297:CYS:C	1:A:302:VAL:HG21	2.32	0.50
1:A:439:ASP:O	1:A:443:LYS:HG3	2.11	0.50
1:A:268:LEU:O	1:A:271:PHE:HB3	2.12	0.50
1:A:251:TRP:CE2	1:A:296:GLN:NE2	2.79	0.50
1:A:219:GLN:O	1:A:221:ALA:N	2.45	0.50
1:A:290:CYS:O	1:A:291:ILE:C	2.48	0.50
1:A:351:GLN:O	1:A:353:LEU:N	2.45	0.50
1:A:122:LYS:HA	1:A:125:GLU:HB2	1.93	0.50
1:A:39:ILE:CG2	1:A:40:ASP:N	2.75	0.50
1:A:250:ILE:O	1:A:254:THR:OG1	2.29	0.50
1:A:428:THR:O	1:A:431:VAL:HB	2.12	0.50
1:A:466:LEU:HD13	1:A:466:LEU:C	2.32	0.50
1:A:171:ILE:HG22	1:A:175:GLN:OE1	2.12	0.50
1:A:114:VAL:CG1	1:A:118:GLN:HE21	2.24	0.49
1:A:116:PHE:HE2	1:A:123:GLN:HG3	1.73	0.49
1:A:152:GLN:HE21	1:A:153:ASN:H	1.59	0.49
1:A:80:LEU:O	1:A:81:ILE:C	2.47	0.49
1:A:185:VAL:O	1:A:188:ARG:N	2.45	0.49
1:A:204:TRP:CD1	1:A:259:PHE:CE1	3.00	0.49
1:A:378:GLY:O	1:A:379:PHE:C	2.48	0.49
1:A:83:LEU:O	1:A:84:LEU:C	2.48	0.49
1:A:309:ILE:HG21	1:A:345:ILE:CG2	2.42	0.49
1:A:103:LEU:O	1:A:106:SER:N	2.45	0.49
1:A:152:GLN:HE21	1:A:153:ASN:N	2.10	0.49
1:A:81:ILE:HA	1:A:84:LEU:HB2	1.93	0.49
1:A:147:VAL:HG13	1:A:193:LEU:CD2	2.33	0.49
1:A:164:LEU:HD23	1:A:165:LEU:H	1.74	0.49
1:A:257:PRO:HD3	1:A:301:ARG:HH12	1.76	0.49
1:A:150:LEU:CD1	1:A:161:VAL:HG23	2.43	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:39:ILE:O	1:A:43:THR:HB	2.12	0.49
1:A:407:ARG:CG	1:A:408:ASN:H	2.22	0.49
1:A:453:LEU:HD23	1:A:461:VAL:HG12	1.94	0.49
1:A:185:VAL:O	1:A:186:CYS:C	2.51	0.49
1:A:319:LEU:O	1:A:320:PRO:C	2.51	0.49
1:A:434:LEU:O	1:A:437:SER:N	2.35	0.49
1:A:261:ASN:ND2	1:A:303:LYS:HG3	2.28	0.49
1:A:31:ALA:O	1:A:34:GLU:N	2.44	0.49
1:A:166:LYS:HA	1:A:209:LYS:NZ	2.27	0.49
1:A:407:ARG:CG	1:A:408:ASN:N	2.76	0.49
1:A:12:HIS:CE1	1:A:238:LEU:CD2	2.93	0.49
1:A:115:LYS:HE3	1:A:118:GLN:HE22	1.78	0.49
1:A:120:ASP:HB3	1:A:122:LYS:NZ	2.26	0.49
1:A:357:ASP:O	1:A:358:GLU:C	2.51	0.49
1:A:456:HIS:H	1:A:462:LYS:HZ2	1.61	0.49
1:A:313:LEU:HA	1:A:313:LEU:HD12	1.57	0.48
1:A:374:HIS:HD2	1:A:426:ASP:OD1	1.96	0.48
1:A:150:LEU:O	1:A:199:TYR:OH	2.28	0.48
1:A:270:ASP:O	1:A:273:ASP:N	2.46	0.48
1:A:100:ILE:N	1:A:100:ILE:CD1	2.76	0.48
1:A:251:TRP:CD1	1:A:296:GLN:NE2	2.82	0.48
1:A:309:ILE:O	1:A:310:LYS:C	2.50	0.48
1:A:419:ILE:HG12	1:A:419:ILE:H	1.28	0.48
1:A:460:ARG:O	1:A:464:GLU:HG2	2.14	0.48
1:A:199:TYR:O	1:A:200:ARG:C	2.51	0.48
1:A:313:LEU:HD12	3:A:1002:HOH:O	2.13	0.48
1:A:392:TYR:HD1	1:A:392:TYR:N	2.12	0.48
1:A:406:VAL:CG2	1:A:407:ARG:N	2.76	0.48
1:A:30:LEU:HB3	1:A:36:LEU:HG	1.95	0.48
1:A:6:ILE:O	1:A:6:ILE:HG13	2.10	0.48
1:A:96:VAL:O	1:A:98:ASN:N	2.46	0.48
1:A:221:ALA:HB1	1:A:243:GLN:NE2	2.28	0.48
1:A:308:VAL:O	1:A:309:ILE:C	2.51	0.48
1:A:279:LYS:HZ1	1:A:321:THR:HA	1.76	0.48
1:A:120:ASP:O	1:A:123:GLN:N	2.41	0.48
1:A:237:HIS:O	1:A:241:GLN:HB2	2.14	0.48
1:A:109:TYR:C	1:A:111:ASP:N	2.67	0.48
1:A:140:LEU:HA	1:A:140:LEU:HD12	1.54	0.48
1:A:456:HIS:C	1:A:462:LYS:HZ1	2.16	0.48
1:A:313:LEU:HD11	1:A:319:LEU:HG	1.96	0.48
1:A:12:HIS:NE2	2:A:500:SO4:S	2.87	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:38:GLU:O	1:A:41:ALA:N	2.47	0.48
1:A:392:TYR:HB3	1:A:395:PHE:HB3	1.95	0.48
1:A:149:LEU:HA	1:A:152:GLN:CG	2.44	0.47
1:A:353:LEU:HD23	1:A:353:LEU:N	2.29	0.47
1:A:362:GLU:OE1	1:A:374:HIS:HE1	1.97	0.47
1:A:384:ILE:HD13	1:A:433:LEU:CB	2.44	0.47
1:A:399:ILE:O	1:A:400:GLU:C	2.52	0.47
1:A:117:PHE:CD1	1:A:117:PHE:N	2.82	0.47
1:A:268:LEU:HD11	1:A:272:LEU:HD11	1.96	0.47
1:A:77:LEU:CD1	1:A:77:LEU:H	2.24	0.47
1:A:89:ASN:ND2	1:A:92:CYS:N	2.60	0.47
1:A:272:LEU:O	1:A:275:LEU:HD12	2.14	0.47
1:A:168:ASN:ND2	1:A:168:ASN:N	2.62	0.47
1:A:28:ASP:O	1:A:31:ALA:HB3	2.14	0.47
1:A:247:LEU:HB2	1:A:289:LEU:HD13	1.95	0.47
1:A:259:PHE:HD1	1:A:262:GLU:OE1	1.97	0.47
1:A:435:PRO:HB3	1:A:475:TYR:CE2	2.48	0.47
1:A:49:SER:O	1:A:53:LYS:HG3	2.15	0.47
1:A:50:ILE:H	1:A:50:ILE:HG13	1.51	0.47
1:A:114:VAL:CG1	1:A:118:GLN:NE2	2.78	0.47
1:A:142:SER:O	1:A:143:GLY:C	2.53	0.47
1:A:268:LEU:CD1	1:A:272:LEU:HD11	2.44	0.47
1:A:18:SER:CA	1:A:21:ARG:HD3	2.38	0.47
1:A:101:ALA:HB2	1:A:145:ASN:OD1	2.14	0.47
1:A:118:GLN:CD	1:A:153:ASN:HD21	2.17	0.47
1:A:278:VAL:HG11	1:A:291:ILE:CD1	2.45	0.47
1:A:384:ILE:HD11	1:A:434:LEU:HG	1.96	0.47
1:A:433:LEU:C	1:A:435:PRO:HD3	2.34	0.47
1:A:435:PRO:O	1:A:438:ILE:HG13	2.14	0.47
1:A:453:LEU:O	1:A:462:LYS:HA	2.15	0.47
1:A:161:VAL:O	1:A:164:LEU:HD23	2.14	0.47
1:A:215:PHE:O	1:A:216:LYS:C	2.49	0.47
1:A:244:TYR:CE1	1:A:289:LEU:HD11	2.50	0.47
1:A:276:LYS:O	1:A:280:ILE:HD12	2.15	0.47
1:A:282:ILE:HG13	1:A:283:LYS:HA	1.97	0.47
1:A:389:LYS:O	1:A:391:ASN:N	2.48	0.47
1:A:106:SER:OG	1:A:109:TYR:N	2.43	0.47
1:A:204:TRP:CE3	1:A:207:GLU:HB3	2.50	0.47
1:A:72:VAL:O	1:A:73:ASN:CG	2.53	0.47
1:A:114:VAL:O	1:A:117:PHE:N	2.47	0.47
1:A:37:SER:HB2	1:A:39:ILE:HG22	1.98	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:211:MET:O	1:A:212:PRO:C	2.53	0.47
1:A:211:MET:CE	1:A:250:ILE:HG12	2.45	0.47
1:A:277:LEU:O	1:A:278:VAL:C	2.53	0.47
1:A:387:PHE:C	1:A:394:ILE:HD13	2.36	0.47
1:A:182:THR:O	1:A:185:VAL:N	2.48	0.46
1:A:247:LEU:CB	1:A:289:LEU:HD13	2.45	0.46
1:A:355:SER:O	1:A:358:GLU:HB3	2.15	0.46
1:A:421:GLN:O	1:A:422:VAL:C	2.51	0.46
1:A:193:LEU:O	1:A:196:ILE:HB	2.14	0.46
1:A:263:LEU:HD23	1:A:267:TYR:HB2	1.96	0.46
1:A:12:HIS:CD2	1:A:238:LEU:CD2	2.98	0.46
1:A:122:LYS:CD	1:A:122:LYS:H	2.29	0.46
1:A:196:ILE:CD1	1:A:196:ILE:N	2.77	0.46
1:A:262:GLU:O	1:A:263:LEU:C	2.51	0.46
1:A:141:ILE:HD13	1:A:141:ILE:N	2.29	0.46
1:A:147:VAL:CG1	1:A:193:LEU:HD21	2.31	0.46
1:A:260:ALA:HB3	1:A:302:VAL:HG13	1.97	0.46
1:A:368:LEU:HB3	1:A:422:VAL:HG11	1.96	0.46
1:A:371:SER:O	1:A:372:PRO:C	2.53	0.46
1:A:475:TYR:N	1:A:475:TYR:CD1	2.83	0.46
1:A:398:LEU:CD1	1:A:427:ILE:HG13	2.43	0.46
1:A:313:LEU:HD11	1:A:346:LEU:HB3	1.98	0.46
1:A:213:THR:C	1:A:217:ILE:HD12	2.35	0.46
1:A:11:THR:HB	1:A:12:HIS:CE1	2.51	0.46
1:A:252:LEU:HD23	1:A:252:LEU:HA	1.61	0.46
1:A:363:LEU:HD13	1:A:397:GLN:HE21	1.76	0.46
1:A:389:LYS:H	1:A:392:TYR:HA	1.81	0.46
1:A:439:ASP:HB2	1:A:443:LYS:CE	2.40	0.46
1:A:454:LEU:CA	1:A:462:LYS:HB2	2.44	0.46
1:A:119:GLU:C	1:A:121:PRO:HD3	2.36	0.46
1:A:77:LEU:C	1:A:79:PRO:HD2	2.36	0.46
1:A:247:LEU:CD1	1:A:289:LEU:HB2	2.45	0.46
1:A:96:VAL:HG12	1:A:100:ILE:HD11	1.98	0.46
1:A:307:LYS:O	1:A:308:VAL:C	2.53	0.46
1:A:162:GLU:O	1:A:166:LYS:HG3	2.16	0.46
1:A:81:ILE:O	1:A:82:HIS:O	2.34	0.46
1:A:93:LYS:O	1:A:97:GLN:N	2.47	0.46
1:A:281:THR:HG21	1:A:286:VAL:HB	1.98	0.46
1:A:289:LEU:C	1:A:293:ILE:HD12	2.35	0.46
1:A:414:LYS:O	1:A:415:GLN:C	2.54	0.46
1:A:146:VAL:CG1	1:A:147:VAL:N	2.78	0.45

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:16:ILE:O	1:A:20:ILE:HG12	2.16	0.45
1:A:330:TYR:CD1	1:A:335:LEU:HD13	2.50	0.45
1:A:356:PHE:O	1:A:357:ASP:C	2.53	0.45
1:A:263:LEU:C	1:A:263:LEU:HD23	2.36	0.45
1:A:440:VAL:O	1:A:444:THR:OG1	2.31	0.45
1:A:466:LEU:O	1:A:466:LEU:HD22	2.16	0.45
1:A:20:ILE:CD1	1:A:141:ILE:HD12	2.46	0.45
1:A:196:ILE:CB	1:A:199:TYR:CD2	2.97	0.45
1:A:115:LYS:O	1:A:119:GLU:OE2	2.34	0.45
1:A:37:SER:O	1:A:40:ASP:HB2	2.17	0.45
1:A:310:LYS:O	1:A:311:GLN:C	2.55	0.45
1:A:424:LEU:HB2	1:A:464:GLU:HB3	1.98	0.45
1:A:30:LEU:O	1:A:35:GLU:N	2.45	0.45
1:A:115:LYS:CA	1:A:118:GLN:NE2	2.80	0.45
1:A:274:LEU:HD13	1:A:274:LEU:H	1.81	0.45
1:A:257:PRO:HD3	1:A:301:ARG:NH1	2.31	0.45
1:A:288:ARG:HG2	1:A:335:LEU:HG	1.98	0.45
1:A:397:GLN:HA	1:A:400:GLU:OE1	2.17	0.45
1:A:447:LYS:HD2	1:A:447:LYS:O	2.16	0.45
1:A:152:GLN:NE2	1:A:152:GLN:CA	2.80	0.45
1:A:330:TYR:O	1:A:331:SER:C	2.54	0.45
1:A:13:PHE:O	1:A:16:ILE:N	2.50	0.45
1:A:75:LYS:HE2	1:A:75:LYS:HB3	1.48	0.45
1:A:20:ILE:CG2	1:A:94:LYS:HD3	2.47	0.45
1:A:258:VAL:HA	1:A:261:ASN:HB2	1.98	0.45
1:A:274:LEU:CD1	1:A:274:LEU:N	2.79	0.45
1:A:303:LYS:C	1:A:304:GLN:HG3	2.35	0.45
1:A:385:ASP:O	1:A:389:LYS:HD3	2.17	0.45
1:A:12:HIS:CD2	1:A:238:LEU:HD22	2.51	0.45
1:A:145:ASN:O	1:A:146:VAL:C	2.56	0.45
1:A:82:HIS:CD2	1:A:86:THR:CG2	3.00	0.45
1:A:256:ASN:HA	1:A:257:PRO:HD3	1.66	0.45
1:A:273:ASP:O	1:A:276:LYS:N	2.50	0.45
1:A:384:ILE:O	1:A:387:PHE:N	2.41	0.45
1:A:237:HIS:N	1:A:240:ILE:CD1	2.79	0.45
1:A:115:LYS:O	1:A:117:PHE:N	2.49	0.45
1:A:141:ILE:HA	1:A:144:PHE:HB3	1.99	0.45
1:A:83:LEU:CD2	1:A:84:LEU:N	2.79	0.45
1:A:20:ILE:HG22	1:A:94:LYS:HD3	1.99	0.45
1:A:289:LEU:HA	1:A:289:LEU:HD23	1.72	0.45
1:A:38:GLU:O	1:A:40:ASP:N	2.50	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:207:GLU:O	1:A:211:MET:HB2	2.16	0.44
1:A:344:GLU:O	1:A:345:ILE:C	2.55	0.44
1:A:84:LEU:HD23	1:A:93:LYS:HB3	1.99	0.44
1:A:335:LEU:HD23	1:A:335:LEU:O	2.17	0.44
1:A:454:LEU:HD23	1:A:465:ALA:HB3	1.99	0.44
1:A:221:ALA:CB	1:A:243:GLN:NE2	2.81	0.44
1:A:112:ASP:O	1:A:113:THR:C	2.55	0.44
1:A:292:SER:O	1:A:295:LEU:N	2.50	0.44
1:A:310:LYS:NZ	1:A:349:GLU:OE2	2.28	0.44
1:A:368:LEU:HB3	1:A:422:VAL:CG1	2.48	0.44
1:A:114:VAL:CB	1:A:118:GLN:HE21	2.31	0.44
1:A:158:VAL:HA	1:A:161:VAL:HB	1.99	0.44
1:A:337:GLN:O	1:A:338:ASP:C	2.53	0.44
1:A:406:VAL:HG23	1:A:407:ARG:N	2.33	0.44
1:A:411:VAL:H	1:A:416:GLU:CD	2.21	0.44
1:A:103:LEU:O	1:A:106:SER:HB3	2.17	0.44
1:A:165:LEU:HD13	1:A:165:LEU:HA	1.82	0.44
1:A:83:LEU:HD22	1:A:96:VAL:HG21	2.00	0.44
1:A:309:ILE:CG2	1:A:345:ILE:HG22	2.47	0.44
1:A:368:LEU:HA	1:A:368:LEU:HD12	1.69	0.44
1:A:456:HIS:HB2	1:A:462:LYS:HB3	1.99	0.44
1:A:84:LEU:CD1	1:A:130:VAL:HG21	2.46	0.44
1:A:94:LYS:HE2	1:A:137:GLN:NE2	2.33	0.44
1:A:173:ILE:CG2	1:A:186:CYS:SG	3.06	0.44
1:A:253:LEU:CD2	1:A:253:LEU:H	2.15	0.44
1:A:347:GLU:O	1:A:348:ASN:C	2.54	0.44
1:A:350:TYR:O	1:A:353:LEU:HG	2.18	0.44
1:A:408:ASN:C	1:A:410:ASP:H	2.19	0.44
1:A:75:LYS:C	1:A:78:ILE:HD11	2.38	0.44
1:A:170:LEU:C	1:A:170:LEU:HD23	2.38	0.44
1:A:105:SER:O	1:A:106:SER:C	2.56	0.43
1:A:122:LYS:O	1:A:123:GLN:C	2.53	0.43
1:A:334:GLU:O	1:A:337:GLN:HB2	2.18	0.43
1:A:319:LEU:HA	1:A:319:LEU:HD23	1.55	0.43
1:A:401:LEU:O	1:A:404:ALA:HB3	2.18	0.43
1:A:38:GLU:HA	1:A:41:ALA:HB3	2.01	0.43
1:A:362:GLU:HB3	1:A:367:LEU:O	2.17	0.43
1:A:456:HIS:HB2	1:A:462:LYS:NZ	2.32	0.43
1:A:206:HIS:CB	1:A:209:LYS:HD2	2.43	0.43
1:A:207:GLU:HA	1:A:210:PHE:CE1	2.54	0.43
1:A:51:LEU:HD22	1:A:102:GLU:HB3	2.00	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:96:VAL:O	1:A:99:LEU:N	2.52	0.43
1:A:247:LEU:HD13	1:A:289:LEU:HB2	2.00	0.43
1:A:8:MET:CE	1:A:105:SER:HB3	2.47	0.43
1:A:144:PHE:CD2	1:A:145:ASN:N	2.87	0.43
1:A:189:LEU:O	1:A:192:GLU:N	2.49	0.43
1:A:356:PHE:O	1:A:359:TYR:N	2.52	0.43
1:A:404:ALA:O	1:A:406:VAL:N	2.52	0.43
1:A:100:ILE:HD13	1:A:100:ILE:N	2.32	0.43
1:A:117:PHE:O	1:A:118:GLN:C	2.53	0.43
1:A:309:ILE:HG12	1:A:309:ILE:H	1.37	0.43
1:A:152:GLN:NE2	1:A:152:GLN:HA	2.34	0.43
1:A:216:LYS:HA	1:A:219:GLN:OE1	2.19	0.43
1:A:415:GLN:O	1:A:417:LYS:N	2.52	0.43
1:A:32:ARG:C	1:A:34:GLU:H	2.22	0.43
1:A:149:LEU:N	1:A:149:LEU:CD2	2.80	0.43
1:A:278:VAL:HG22	1:A:290:CYS:SG	2.59	0.43
1:A:418:ILE:O	1:A:420:ILE:N	2.52	0.43
1:A:180:MET:O	1:A:181:ASP:C	2.56	0.42
1:A:184:TYR:HD1	1:A:242:LEU:CD2	2.14	0.42
1:A:7:LEU:HA	1:A:7:LEU:HD23	1.82	0.42
1:A:421:GLN:H	1:A:421:GLN:HG2	1.70	0.42
1:A:458:ASP:O	1:A:459:SER:C	2.57	0.42
1:A:5:LYS:HB3	1:A:8:MET:HE1	2.01	0.42
1:A:147:VAL:O	1:A:149:LEU:N	2.52	0.42
1:A:389:LYS:HA	1:A:389:LYS:HD2	1.50	0.42
1:A:446:GLY:O	1:A:447:LYS:C	2.57	0.42
1:A:326:SER:CB	1:A:343:LYS:HD3	2.49	0.42
1:A:19:ILE:HG22	1:A:19:ILE:O	2.19	0.42
1:A:286:VAL:O	1:A:289:LEU:N	2.52	0.42
1:A:448:ALA:O	1:A:450:ILE:N	2.52	0.42
1:A:97:GLN:O	1:A:100:ILE:HB	2.19	0.42
1:A:141:ILE:O	1:A:144:PHE:HB3	2.19	0.42
1:A:150:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HA	1.93	0.42
1:A:84:LEU:HD13	1:A:130:VAL:HG23	2.00	0.42
1:A:97:GLN:HE21	1:A:145:ASN:HD22	1.66	0.42
1:A:182:THR:O	1:A:184:TYR:N	2.51	0.42
1:A:181:ASP:O	1:A:184:TYR:HB3	2.20	0.42
1:A:253:LEU:CD2	1:A:253:LEU:N	2.77	0.42
1:A:268:LEU:C	1:A:268:LEU:HD12	2.40	0.42
1:A:356:PHE:O	1:A:359:TYR:HB3	2.19	0.42
1:A:174:LEU:HD23	1:A:175:GLN:HG3	1.99	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:73:ASN:N	3:A:1023:HOH:O	2.50	0.42
1:A:189:LEU:O	1:A:190:LEU:C	2.58	0.42
1:A:462:LYS:CB	1:A:462:LYS:NZ	2.78	0.42
1:A:30:LEU:HA	1:A:33:SER:OG	2.20	0.42
1:A:122:LYS:C	1:A:125:GLU:H	2.23	0.42
1:A:404:ALA:O	1:A:405:LYS:C	2.58	0.42
1:A:164:LEU:HD23	1:A:164:LEU:C	2.36	0.42
1:A:72:VAL:O	1:A:73:ASN:CB	2.66	0.42
1:A:93:LYS:H	1:A:93:LYS:HG3	1.62	0.42
1:A:428:THR:O	1:A:429:HIS:C	2.56	0.42
1:A:152:GLN:HE21	1:A:152:GLN:CA	2.31	0.42
1:A:16:ILE:HG22	1:A:20:ILE:HD11	2.01	0.42
1:A:77:LEU:O	1:A:78:ILE:C	2.58	0.42
1:A:221:ALA:O	1:A:223:ASP:N	2.52	0.42
1:A:434:LEU:O	1:A:436:GLU:N	2.53	0.42
1:A:260:ALA:O	1:A:261:ASN:C	2.57	0.41
1:A:424:LEU:HD23	1:A:450:ILE:HG23	2.01	0.41
1:A:106:SER:HG	1:A:109:TYR:HD2	1.67	0.41
1:A:206:HIS:CA	1:A:208:LYS:HD3	2.50	0.41
1:A:363:LEU:HA	1:A:363:LEU:HD23	1.64	0.41
1:A:395:PHE:CZ	1:A:430:VAL:HG11	2.54	0.41
1:A:420:ILE:O	1:A:423:ALA:N	2.53	0.41
1:A:26:ALA:O	1:A:27:TRP:C	2.57	0.41
1:A:76:THR:O	1:A:80:LEU:HG	2.20	0.41
1:A:84:LEU:HD23	1:A:84:LEU:HA	1.78	0.41
1:A:29:ALA:O	1:A:33:SER:N	2.29	0.41
1:A:187:ILE:CD1	1:A:214:LEU:CD2	2.99	0.41
1:A:271:PHE:O	1:A:273:ASP:N	2.54	0.41
1:A:311:GLN:HG3	1:A:311:GLN:H	1.66	0.41
1:A:103:LEU:O	1:A:104:LEU:C	2.59	0.41
1:A:354:THR:HG21	1:A:356:PHE:HB3	2.01	0.41
1:A:5:LYS:NZ	1:A:105:SER:O	2.51	0.41
1:A:77:LEU:CD1	1:A:77:LEU:N	2.79	0.41
1:A:368:LEU:HB3	1:A:422:VAL:HB	2.02	0.41
1:A:141:ILE:O	1:A:142:SER:C	2.59	0.41
1:A:389:LYS:HB3	1:A:390:ASP:H	1.50	0.41
1:A:403:GLN:O	1:A:404:ALA:C	2.58	0.41
1:A:477:PHE:HB3	1:A:478:LYS:H	1.57	0.41
1:A:135:ASP:OD1	1:A:138:THR:N	2.47	0.41
1:A:149:LEU:O	1:A:151:VAL:N	2.53	0.41
1:A:196:ILE:HG23	1:A:198:GLU:HG2	2.01	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:173:ILE:HG22	1:A:186:CYS:SG	2.61	0.41
1:A:248:LEU:HD12	1:A:248:LEU:O	2.21	0.41
1:A:298:CYS:HB3	1:A:309:ILE:HD13	2.02	0.41
1:A:392:TYR:HE2	1:A:437:SER:HA	1.85	0.41
1:A:473:ILE:HD12	1:A:473:ILE:HA	1.68	0.41
1:A:49:SER:O	1:A:50:ILE:C	2.58	0.41
1:A:77:LEU:O	1:A:79:PRO:N	2.54	0.41
1:A:187:ILE:O	1:A:188:ARG:C	2.56	0.41
1:A:271:PHE:O	1:A:274:LEU:N	2.49	0.41
1:A:350:TYR:O	1:A:353:LEU:N	2.53	0.41
1:A:388:LYS:CG	1:A:392:TYR:CE1	2.98	0.41
1:A:449:ASP:HA	1:A:452:GLU:OE2	2.21	0.41
1:A:119:GLU:OE2	1:A:119:GLU:N	2.54	0.41
1:A:441:LEU:HA	1:A:441:LEU:HD12	1.54	0.41
1:A:190:LEU:O	1:A:193:LEU:HB2	2.21	0.40
1:A:39:ILE:HG23	1:A:40:ASP:H	1.83	0.40
1:A:43:THR:HG21	1:A:79:PRO:HG2	2.02	0.40
1:A:372:PRO:CG	1:A:373:PRO:CD	2.99	0.40
1:A:288:ARG:O	1:A:289:LEU:C	2.59	0.40
1:A:334:GLU:HA	1:A:337:GLN:HB2	2.02	0.40
1:A:356:PHE:O	1:A:360:VAL:HG23	2.19	0.40
1:A:467:LYS:HA	1:A:470:GLN:CD	2.42	0.40
1:A:377:ASN:O	1:A:381:SER:OG	2.28	0.40
1:A:4:THR:HG22	1:A:6:ILE:CG2	2.48	0.40
1:A:302:VAL:O	1:A:305:HIS:ND1	2.36	0.40
1:A:303:LYS:H	1:A:303:LYS:HG2	1.49	0.40
1:A:167:ASN:ND2	1:A:167:ASN:C	2.75	0.40
1:A:47:LEU:HG	1:A:71:LYS:HZ3	1.87	0.40
1:A:120:ASP:CA	1:A:122:LYS:HD2	2.51	0.40
1:A:158:VAL:HG12	1:A:158:VAL:H	1.38	0.40
1:A:180:MET:HB3	1:A:180:MET:HE3	1.96	0.40
1:A:319:LEU:HB2	3:A:1002:HOH:O	2.21	0.40
1:A:380:TRP:CH2	1:A:426:ASP:HB3	2.52	0.40
1:A:428:THR:O	1:A:431:VAL:N	2.55	0.40
1:A:47:LEU:HD23	1:A:47:LEU:HA	1.72	0.40
1:A:13:PHE:HA	1:A:16:ILE:HD12	2.03	0.40
1:A:160:LEU:O	1:A:161:VAL:C	2.58	0.40
1:A:349:GLU:O	1:A:353:LEU:HD23	2.21	0.40
1:A:454:LEU:HD22	1:A:466:LEU:CA	2.52	0.40
1:A:171:ILE:HA	1:A:171:ILE:HD12	1.56	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	441/480 (92%)	231 (52%)	144 (33%)	66 (15%)	<b>0</b> <b>1</b>

All (66) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	27	TRP
1	A	28	ASP
1	A	39	ILE
1	A	73	ASN
1	A	153	ASN
1	A	169	ASN
1	A	185	VAL
1	A	319	LEU
1	A	333	GLU
1	A	334	GLU
1	A	372	PRO
1	A	414	LYS
1	A	415	GLN
1	A	74	GLY
1	A	82	HIS
1	A	222	THR
1	A	257	PRO
1	A	326	SER
1	A	348	ASN
1	A	352	GLU
1	A	404	ALA
1	A	405	LYS
1	A	409	GLY
1	A	463	TYR
1	A	72	VAL
1	A	78	ILE
1	A	97	GLN
1	A	104	LEU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	186	CYS
1	A	189	LEU
1	A	251	TRP
1	A	252	LEU
1	A	271	PHE
1	A	272	LEU
1	A	310	LYS
1	A	349	GLU
1	A	420	ILE
1	A	459	SER
1	A	110	GLY
1	A	150	LEU
1	A	208	LYS
1	A	220	ARG
1	A	250	ILE
1	A	268	LEU
1	A	287	SER
1	A	288	ARG
1	A	337	GLN
1	A	347	GLU
1	A	451	MET
1	A	80	LEU
1	A	145	ASN
1	A	290	CYS
1	A	346	LEU
1	A	4	THR
1	A	135	ASP
1	A	184	TYR
1	A	345	ILE
1	A	473	ILE
1	A	96	VAL
1	A	121	PRO
1	A	293	ILE
1	A	419	ILE
1	A	282	ILE
1	A	151	VAL
1	A	196	ILE
1	A	197	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	414/440 (94%)	256 (62%)	158 (38%)	<b>0</b> <b>0</b>

All (158) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	8	MET
1	A	10	SER
1	A	12	HIS
1	A	17	ARG
1	A	20	ILE
1	A	21	ARG
1	A	23	ARG
1	A	28	ASP
1	A	37	SER
1	A	39	ILE
1	A	42	SER
1	A	43	THR
1	A	45	LYS
1	A	47	LEU
1	A	48	GLU
1	A	49	SER
1	A	75	LYS
1	A	78	ILE
1	A	81	ILE
1	A	85	SER
1	A	89	ASN
1	A	90	GLU
1	A	93	LYS
1	A	94	LYS
1	A	95	SER
1	A	97	GLN
1	A	100	ILE
1	A	102	GLU
1	A	105	SER
1	A	106	SER

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	107	ASP
1	A	108	LYS
1	A	111	ASP
1	A	115	LYS
1	A	120	ASP
1	A	122	LYS
1	A	124	LEU
1	A	130	VAL
1	A	133	LYS
1	A	135	ASP
1	A	141	ILE
1	A	146	VAL
1	A	149	LEU
1	A	150	LEU
1	A	156	HIS
1	A	158	VAL
1	A	159	LYS
1	A	164	LEU
1	A	165	LEU
1	A	166	LYS
1	A	167	ASN
1	A	168	ASN
1	A	170	LEU
1	A	171	ILE
1	A	174	LEU
1	A	177	ILE
1	A	179	GLN
1	A	187	ILE
1	A	196	ILE
1	A	198	GLU
1	A	201	ASP
1	A	202	VAL
1	A	207	GLU
1	A	208	LYS
1	A	209	LYS
1	A	211	MET
1	A	218	LEU
1	A	222	THR
1	A	223	ASP
1	A	237	HIS
1	A	241	GLN
1	A	242	LEU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	246	SER
1	A	249	LEU
1	A	253	LEU
1	A	254	THR
1	A	256	ASN
1	A	258	VAL
1	A	269	SER
1	A	270	ASP
1	A	274	LEU
1	A	276	LYS
1	A	277	LEU
1	A	279	LYS
1	A	282	ILE
1	A	288	ARG
1	A	291	ILE
1	A	292	SER
1	A	300	THR
1	A	302	VAL
1	A	303	LYS
1	A	304	GLN
1	A	305	HIS
1	A	306	LYS
1	A	307	LYS
1	A	308	VAL
1	A	309	ILE
1	A	310	LYS
1	A	313	LEU
1	A	314	LEU
1	A	315	LEU
1	A	317	ASN
1	A	324	SER
1	A	327	GLU
1	A	328	ARG
1	A	329	LYS
1	A	333	GLU
1	A	335	LEU
1	A	336	ARG
1	A	337	GLN
1	A	342	LEU
1	A	348	ASN
1	A	352	GLU
1	A	353	LEU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	354	THR
1	A	360	VAL
1	A	362	GLU
1	A	363	LEU
1	A	365	SER
1	A	367	LEU
1	A	368	LEU
1	A	371	SER
1	A	377	ASN
1	A	379	PHE
1	A	382	ASP
1	A	384	ILE
1	A	388	LYS
1	A	389	LYS
1	A	392	TYR
1	A	393	LYS
1	A	394	ILE
1	A	398	LEU
1	A	400	GLU
1	A	401	LEU
1	A	406	VAL
1	A	407	ARG
1	A	408	ASN
1	A	410	ASP
1	A	417	LYS
1	A	418	ILE
1	A	419	ILE
1	A	420	ILE
1	A	421	GLN
1	A	436	GLU
1	A	439	ASP
1	A	444	THR
1	A	447	LYS
1	A	451	MET
1	A	452	GLU
1	A	453	LEU
1	A	457	SER
1	A	459	SER
1	A	460	ARG
1	A	462	LYS
1	A	466	LEU
1	A	470	GLN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	473	ILE
1	A	476	THR

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (17) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	14	ASN
1	A	73	ASN
1	A	89	ASN
1	A	97	GLN
1	A	118	GLN
1	A	137	GLN
1	A	152	GLN
1	A	167	ASN
1	A	168	ASN
1	A	169	ASN
1	A	172	ASN
1	A	179	GLN
1	A	206	HIS
1	A	243	GLN
1	A	341	ASN
1	A	374	HIS
1	A	397	GLN

### 5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

## 5.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

There are no non-standard protein/DNA/RNA residues in this entry.

## 5.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

## 5.6 Ligand geometry ⓘ

1 ligand is modelled in this entry.

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	$\# Z  > 2$	Counts	RMSZ	$\# Z  > 2$
2	SO4	A	500	-	4,4,4	0.47	0	6,6,6	0.18	0

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	SO4	A	500	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

1 monomer is involved in 4 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
2	A	500	SO4	4	0

## 5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

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

There are no chain breaks in this entry.

## 6 Fit of model and data ⓘ

### 6.1 Protein, DNA and RNA chains ⓘ

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.