



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Feb 1, 2016 – 04:57 AM GMT

PDB ID : 2OS8
Title : Rigor-like structures of muscle myosins reveal key mechanical elements in the transduction pathways of this allosteric motor
Authors : Yang, Y.; Gourinath, S.; Cohen, C.; Brown, J.H.
Deposited on : 2007-02-05
Resolution : 3.27 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

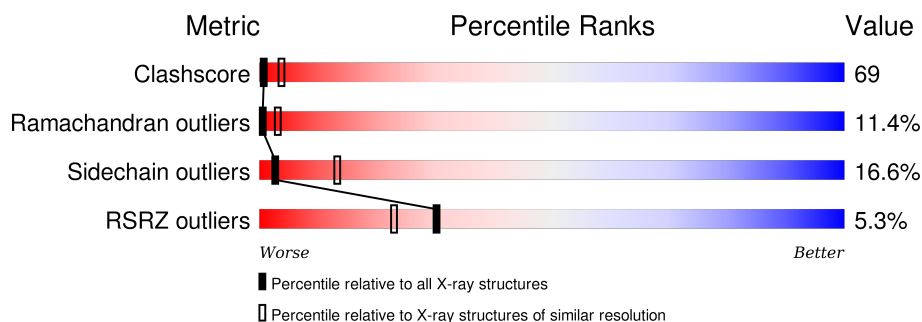
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.27 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	1941 (3.36-3.20)
Ramachandran outliers	100387	1905 (3.36-3.20)
Sidechain outliers	100360	1903 (3.36-3.20)
RSRZ outliers	91569	1764 (3.36-3.20)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments on the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 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	840	
2	B	157	
3	C	157	

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
5	CA	C	991	-	-	-	X

2 Entry composition

There are 5 unique types of molecules in this entry. The entry contains 8665 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 Myosin heavy chain.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	798	Total	C	N	O	S	0	0	0
			6362	4048	1101	1176	37			

- Molecule 2 is a protein called Myosin regulatory light chain.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
2	B	135	Total	C	N	O	S	0	0	0
			1072	680	170	212	10			

- Molecule 3 is a protein called Myosin essential light chain.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
3	C	155	Total	C	N	O	S	0	0	0
			1229	777	195	250	7			

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

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	B	1	Total	Mg	0	0
			1	1		

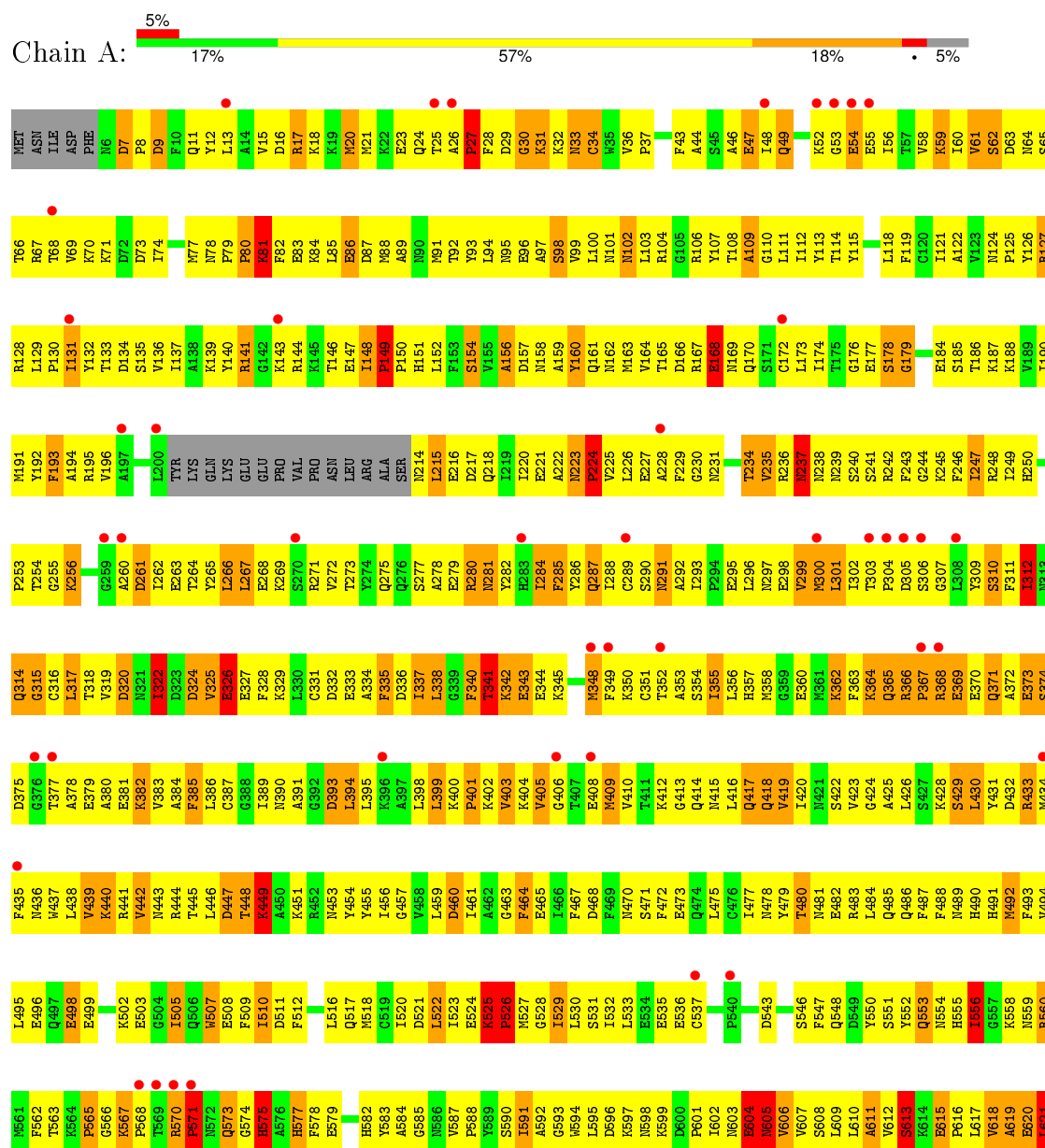
- Molecule 5 is CALCIUM ION (three-letter code: CA) (formula: Ca).

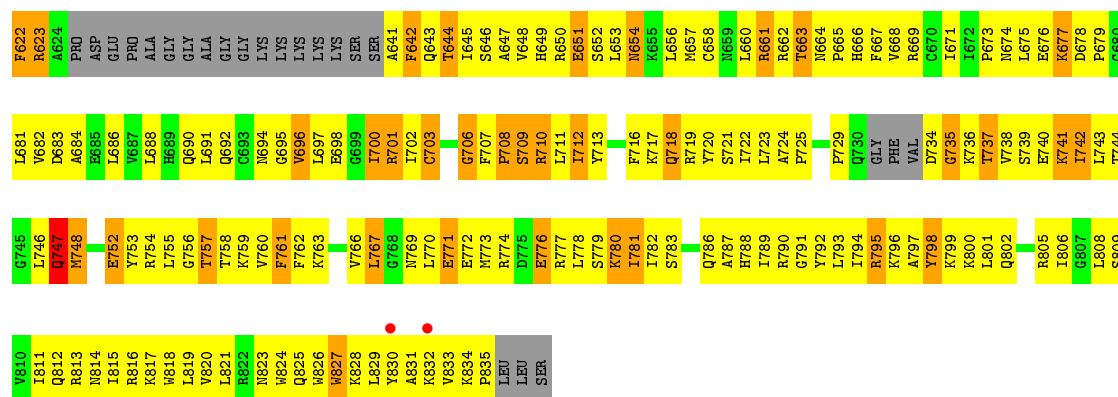
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
5	C	1	Total	Ca	0	0
			1	1		

3 Residue-property plots

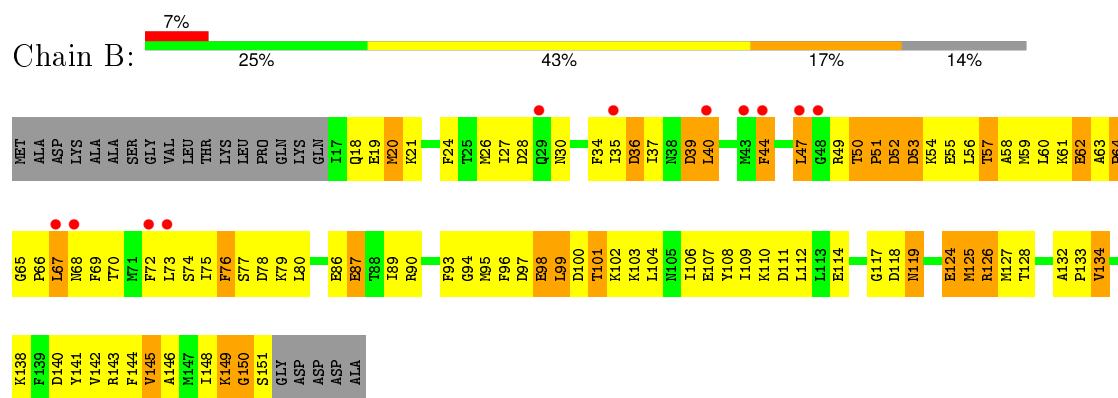
These plots are drawn for all protein, RNA and DNA chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of errors displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry and electron density. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. A red dot above a residue indicates a poor fit to the electron density ($RSRZ > 2$). Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

• Molecule 1: Myosin heavy chain

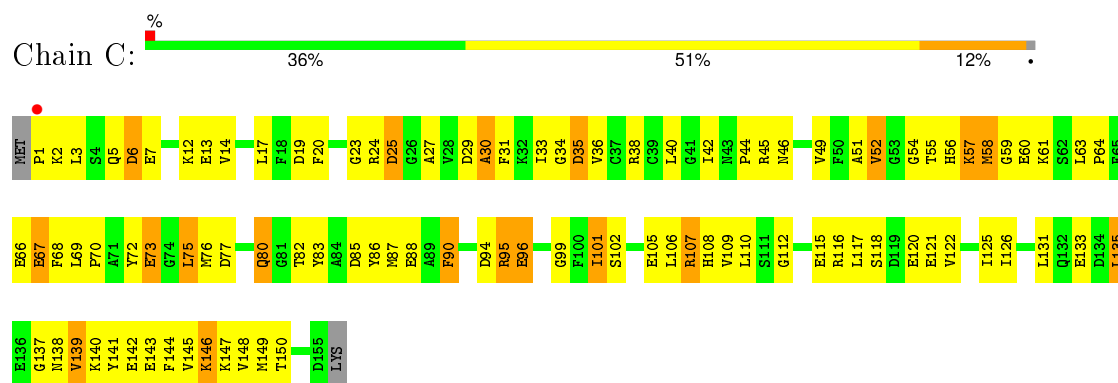




• Molecule 2: Myosin regulatory light chain



• Molecule 3: Myosin essential light chain



4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 1 21 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	85.57Å 50.36Å 161.62Å 90.00° 98.72° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	48.03 – 3.27 48.03 – 3.28	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	75.3 (48.03-3.27) 75.4 (48.03-3.28)	Depositor EDS
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	0.09	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	3.70 (at 3.25Å)	Xtriage
Refinement program	CNS 1.1	Depositor
R, R_{free}	0.281 , 0.314 0.274 , (Not available)	Depositor DCC
R_{free} test set	No test flags present.	DCC
Wilson B-factor (Å ²)	78.0	Xtriage
Anisotropy	0.254	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.27 , 92.5	EDS
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.45$, $\langle L^2 \rangle = 0.27$	Xtriage
Outliers	0 of 16888 reflections	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.89	EDS
Total number of atoms	8665	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	101.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 5.50% 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](#)

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# $ Z > 5$	RMSZ	# $ Z > 5$
1	A	0.48	0/6490	0.76	4/8756 (0.0%)
2	B	0.51	0/1089	0.78	0/1456
3	C	0.64	0/1254	0.79	0/1688
All	All	0.51	0/8833	0.77	4/11900 (0.0%)

There are no bond length outliers.

All (4) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed($^{\circ}$)	Ideal($^{\circ}$)
1	A	507	TRP	N-CA-C	-6.49	93.47	111.00
1	A	322	ILE	N-CA-C	-6.45	93.58	111.00
1	A	374	SER	N-CA-C	5.33	125.39	111.00
1	A	179	GLY	N-CA-C	-5.16	100.20	113.10

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	6362	0	6299	976	3
2	B	1072	0	1043	109	3
3	C	1229	0	1153	143	0
4	B	1	0	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
5	C	1	0	0	0	0
All	All	8665	0	8495	1180	3

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 69.

All (1180) 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:601:PRO:HA	1:A:642:PHE:HA	1.21	1.14
1:A:127:ARG:HE	1:A:679:PRO:HB3	1.11	1.14
1:A:366:ARG:HD3	1:A:369:GLU:HB2	1.23	1.13
1:A:611:ALA:O	1:A:619:ALA:HA	1.52	1.06
1:A:833:VAL:HG12	1:A:835:PRO:HD3	1.38	1.06
3:C:95:ARG:HD2	3:C:96:GLU:H	1.22	1.04
1:A:126:TYR:HB2	1:A:679:PRO:HG3	1.38	1.04
1:A:190:ILE:HA	1:A:193:PHE:HB2	1.39	1.04
1:A:112:ILE:HD13	1:A:125:PRO:HG3	1.40	1.03
1:A:225:VAL:O	1:A:229:PHE:CD1	2.12	1.03
1:A:118:LEU:HD21	1:A:495:LEU:HD12	1.40	1.03
1:A:405:VAL:HG12	1:A:406:GLY:H	1.20	1.01
1:A:338:LEU:HD22	1:A:445:THR:HG21	1.42	1.00
1:A:414:GLN:NE2	1:A:418:GLN:HB3	1.76	1.00
2:B:97:ASP:OD1	2:B:101:THR:HG23	1.63	0.99
1:A:414:GLN:HE22	1:A:418:GLN:HB3	1.27	0.98
1:A:459:LEU:HD12	1:A:460:ASP:N	1.79	0.97
1:A:716:PHE:HD2	1:A:739:SER:HG	0.99	0.97
1:A:734:ASP:HB3	1:A:737:THR:OG1	1.65	0.97
1:A:115:TYR:HE1	1:A:150:PRO:HA	1.25	0.96
1:A:492:MET:HE1	1:A:702:ILE:HG21	1.46	0.96
3:C:95:ARG:HD2	3:C:96:GLU:N	1.80	0.96
1:A:780:LYS:HE3	1:A:780:LYS:HA	1.47	0.96
1:A:492:MET:O	1:A:496:GLU:HG2	1.68	0.94
1:A:570:ARG:HB3	1:A:571:PRO:HD2	1.50	0.93
1:A:334:ALA:HA	1:A:337:ILE:HD12	1.48	0.93
1:A:812:GLN:HE22	2:B:118:ASP:H	1.08	0.93
1:A:694:ASN:HB2	1:A:696:VAL:HG22	1.48	0.93
1:A:610:LEU:O	1:A:618:VAL:HG12	1.69	0.93
1:A:126:TYR:CB	1:A:679:PRO:HG3	1.99	0.92
1:A:491:HIS:CE1	1:A:665:PRO:HD2	2.04	0.91
1:A:170:GLN:OE1	1:A:664:ASN:HB3	1.71	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:293:ILE:HG21	1:A:296:LEU:HD13	1.52	0.91
1:A:644:THR:HG23	1:A:647:ALA:HB2	1.52	0.90
1:A:667:PHE:HB3	1:A:669:ARG:HH12	1.37	0.90
1:A:292:ALA:HB3	1:A:328:PHE:HD2	1.36	0.89
1:A:725:PRO:HB3	3:C:88:GLU:HG3	1.53	0.89
2:B:21:LYS:HA	2:B:24:PHE:HB2	1.55	0.89
1:A:736:LYS:O	1:A:740:GLU:HG3	1.74	0.88
1:A:548:GLN:HG3	1:A:552:TYR:HE1	1.38	0.88
1:A:389:ILE:HG23	1:A:613:SER:OG	1.72	0.88
1:A:215:LEU:HD11	1:A:260:ALA:HB2	1.55	0.87
1:A:470:ASN:HB2	1:A:588:PRO:O	1.75	0.87
1:A:403:VAL:HG22	1:A:404:LYS:H	1.37	0.87
1:A:734:ASP:HB3	1:A:737:THR:HG1	1.38	0.86
3:C:42:ILE:HD13	3:C:76:MET:HA	1.58	0.86
1:A:681:LEU:HD12	1:A:682:VAL:H	1.40	0.86
1:A:522:LEU:HD22	1:A:522:LEU:O	1.75	0.86
1:A:13:LEU:O	1:A:111:LEU:HD11	1.74	0.86
1:A:814:ASN:HD22	2:B:89:ILE:HG12	1.40	0.86
1:A:620:GLU:OE2	1:A:621:LEU:HD23	1.76	0.85
1:A:565:PRO:HD3	1:A:578:PHE:HA	1.57	0.85
3:C:42:ILE:O	3:C:44:PRO:HD3	1.77	0.85
1:A:521:ASP:O	1:A:525:LYS:HG2	1.77	0.85
1:A:184:GLU:HA	1:A:187:LYS:HD3	1.59	0.85
3:C:64:PRO:HD2	3:C:67:GLU:HB2	1.58	0.84
1:A:174:ILE:HG12	1:A:668:VAL:HB	1.57	0.84
1:A:794:ILE:HD11	3:C:35:ASP:OD2	1.77	0.84
1:A:832:LYS:HE3	2:B:47:LEU:HD13	1.60	0.84
3:C:95:ARG:HH11	3:C:96:GLU:H	1.22	0.84
3:C:87:MET:HE1	3:C:142:GLU:HG3	1.59	0.84
1:A:570:ARG:HB3	1:A:571:PRO:CD	2.08	0.83
1:A:734:ASP:OD1	1:A:735:GLY:N	2.10	0.83
1:A:281:ASN:HB3	1:A:285:PHE:HE2	1.44	0.83
1:A:56:ILE:HG22	1:A:58:VAL:HG13	1.61	0.82
1:A:127:ARG:NE	1:A:679:PRO:HB3	1.94	0.82
1:A:620:GLU:HA	1:A:623:ARG:HB2	1.59	0.82
1:A:160:TYR:HE2	1:A:196:VAL:HG23	1.44	0.82
1:A:228:ALA:HB1	1:A:287:GLN:NE2	1.95	0.82
1:A:365:GLN:HA	1:A:372:ALA:HA	1.62	0.82
1:A:505:ILE:HB	1:A:756:GLY:HA2	1.61	0.82
1:A:129:LEU:HB3	1:A:130:PRO:HD2	1.61	0.82
1:A:266:LEU:HD11	1:A:649:HIS:HA	1.58	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:67:LEU:HD12	2:B:67:LEU:H	1.45	0.82
1:A:620:GLU:N	1:A:623:ARG:HD3	1.94	0.81
1:A:798:TYR:O	1:A:801:LEU:HB3	1.80	0.81
1:A:284:ILE:O	1:A:287:GLN:HG3	1.80	0.81
3:C:46:ASN:HB2	3:C:115:GLU:OE1	1.80	0.81
3:C:95:ARG:NH1	3:C:96:GLU:HB2	1.96	0.80
1:A:399:LEU:O	1:A:401:PRO:HD3	1.80	0.80
1:A:698:GLU:O	1:A:702:ILE:HG12	1.80	0.80
1:A:722:ILE:HD13	3:C:88:GLU:HB3	1.63	0.80
1:A:459:LEU:HD12	1:A:460:ASP:H	1.43	0.80
1:A:115:TYR:CE1	1:A:150:PRO:HA	2.14	0.80
1:A:28:PHE:CD1	1:A:80:PRO:HD3	2.17	0.80
1:A:225:VAL:O	1:A:229:PHE:HD1	1.61	0.80
1:A:88:MET:HE1	1:A:99:VAL:HA	1.63	0.80
1:A:118:LEU:HD21	1:A:495:LEU:CD1	2.11	0.80
1:A:112:ILE:HG13	1:A:113:TYR:CE1	2.16	0.79
1:A:355:ILE:HD13	1:A:430:LEU:HD21	1.64	0.79
3:C:131:LEU:HG	3:C:139:VAL:HG11	1.64	0.79
1:A:389:ILE:HD12	1:A:394:LEU:HD11	1.64	0.79
1:A:280:ARG:HG3	1:A:286:TYR:CZ	2.16	0.78
2:B:87:GLU:HG2	2:B:90:ARG:NH1	1.97	0.78
1:A:446:LEU:C	1:A:448:THR:H	1.87	0.78
1:A:620:GLU:CA	1:A:623:ARG:HB2	2.12	0.78
1:A:157:ASP:HB2	1:A:192:TYR:OH	1.83	0.78
1:A:358:MET:HE1	1:A:426:LEU:HG	1.66	0.78
1:A:381:GLU:HG2	1:A:391:ALA:CB	2.13	0.78
1:A:526:PRO:O	1:A:528:GLY:N	2.15	0.78
1:A:812:GLN:NE2	2:B:118:ASP:H	1.81	0.78
2:B:146:ALA:HB1	2:B:151:SER:HB3	1.65	0.78
1:A:126:TYR:CZ	1:A:677:LYS:HA	2.19	0.78
1:A:692:GLN:HA	1:A:697:LEU:HD12	1.66	0.77
1:A:459:LEU:HD11	1:A:461:ILE:HG13	1.66	0.77
1:A:747:GLN:HG2	1:A:747:GLN:O	1.84	0.77
1:A:505:ILE:HB	1:A:755:LEU:O	1.85	0.77
1:A:286:TYR:HE2	1:A:317:LEU:HA	1.49	0.77
1:A:119:PHE:HD1	1:A:696:VAL:CG1	1.98	0.77
1:A:743:LEU:HD22	1:A:748:MET:HG3	1.67	0.77
1:A:78:ASN:HD21	1:A:92:THR:H	1.33	0.76
1:A:106:ARG:NH2	1:A:150:PRO:HG2	2.00	0.76
1:A:292:ALA:HB3	1:A:328:PHE:CD2	2.19	0.76
1:A:422:SER:O	1:A:425:ALA:HB3	1.86	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:160:TYR:CE2	1:A:196:VAL:HG23	2.20	0.75
1:A:753:TYR:O	1:A:754:ARG:HG2	1.87	0.75
1:A:790:ARG:HH11	1:A:790:ARG:HG3	1.51	0.75
1:A:225:VAL:O	1:A:229:PHE:CE1	2.39	0.75
3:C:118:SER:OG	3:C:121:GLU:HB2	1.86	0.75
1:A:342:LYS:HA	1:A:345:LYS:HB3	1.69	0.75
2:B:97:ASP:OD2	2:B:102:LYS:N	2.19	0.75
1:A:492:MET:CE	1:A:702:ILE:HG21	2.17	0.75
1:A:660:LEU:O	1:A:663:THR:HG22	1.86	0.75
1:A:619:ALA:C	1:A:623:ARG:HD3	2.06	0.74
1:A:172:CYS:HA	1:A:666:HIS:HB2	1.67	0.74
1:A:667:PHE:HB3	1:A:669:ARG:NH1	2.02	0.74
1:A:36:VAL:HG12	1:A:44:ALA:O	1.87	0.74
1:A:748:MET:HB3	1:A:753:TYR:HE1	1.53	0.74
2:B:141:TYR:O	2:B:145:VAL:HG12	1.87	0.74
1:A:236:ARG:O	1:A:237:ASN:HB2	1.88	0.74
1:A:303:THR:HG23	1:A:304:PRO:HD2	1.70	0.74
1:A:95:ASN:O	1:A:99:VAL:HG23	1.88	0.74
1:A:288:ILE:HA	1:A:328:PHE:CE2	2.22	0.74
2:B:74:SER:O	2:B:78:ASP:HB2	1.87	0.74
1:A:786:GLN:HE22	3:C:115:GLU:N	1.86	0.74
1:A:547:PHE:HB2	1:A:595:LEU:HD11	1.69	0.74
1:A:493:PHE:HA	1:A:512:PHE:CE2	2.23	0.74
1:A:70:LYS:O	1:A:74:ILE:HG23	1.88	0.73
1:A:248:ARG:HB2	1:A:261:ASP:OD1	1.88	0.73
1:A:405:VAL:HG12	1:A:406:GLY:N	2.01	0.73
1:A:192:TYR:O	1:A:196:VAL:HG22	1.88	0.73
1:A:721:SER:HA	1:A:742:ILE:CD1	2.19	0.73
2:B:144:PHE:CE1	2:B:148:ILE:HD11	2.24	0.73
1:A:127:ARG:O	1:A:129:LEU:HG	1.89	0.72
1:A:578:PHE:HE2	1:A:591:ILE:HG23	1.54	0.72
1:A:61:VAL:HG12	1:A:62:SER:N	2.03	0.72
1:A:722:ILE:HD11	3:C:88:GLU:C	2.10	0.72
3:C:143:GLU:HA	3:C:146:LYS:CG	2.20	0.72
1:A:48:ILE:HG22	1:A:49:GLN:H	1.54	0.72
3:C:105:GLU:O	3:C:108:HIS:HB3	1.90	0.72
1:A:285:PHE:HB2	1:A:312:ILE:HD11	1.72	0.72
1:A:395:LEU:H	1:A:395:LEU:HD12	1.53	0.72
3:C:143:GLU:HA	3:C:146:LYS:HG3	1.72	0.72
1:A:790:ARG:NH1	1:A:790:ARG:HG3	2.04	0.72
2:B:24:PHE:O	2:B:27:ILE:HG12	1.90	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:137:GLY:O	3:C:138:ASN:ND2	2.23	0.72
1:A:603:ASN:O	1:A:606:VAL:HG23	1.89	0.71
1:A:333:GLU:O	1:A:337:ILE:HG13	1.90	0.71
1:A:193:PHE:CZ	1:A:456:ILE:HG21	2.25	0.71
2:B:40:LEU:HD13	2:B:56:LEU:HD23	1.73	0.71
1:A:505:ILE:HG23	1:A:505:ILE:O	1.89	0.71
1:A:814:ASN:HD22	2:B:89:ILE:CG1	2.02	0.71
1:A:493:PHE:HA	1:A:512:PHE:HE2	1.56	0.71
1:A:384:ALA:O	1:A:389:ILE:HG12	1.90	0.71
1:A:616:PRO:O	1:A:619:ALA:HB3	1.91	0.71
1:A:741:LYS:O	1:A:744:THR:N	2.23	0.71
2:B:87:GLU:HG2	2:B:90:ARG:HH11	1.55	0.71
1:A:805:ARG:HG3	3:C:20:PHE:CE2	2.25	0.71
3:C:122:VAL:O	3:C:126:ILE:HG13	1.91	0.71
2:B:106:ILE:HG23	2:B:107:GLU:N	2.06	0.70
2:B:132:ALA:O	2:B:134:VAL:HG23	1.90	0.70
3:C:150:THR:O	3:C:150:THR:HG22	1.91	0.70
1:A:343:GLU:HG2	1:A:344:GLU:N	2.04	0.70
3:C:72:TYR:O	3:C:76:MET:HG3	1.91	0.70
1:A:669:ARG:HB3	1:A:694:ASN:ND2	2.07	0.70
3:C:135:LEU:HD12	3:C:135:LEU:H	1.56	0.70
1:A:130:PRO:O	1:A:132:TYR:N	2.25	0.70
1:A:617:LEU:CG	1:A:618:VAL:H	2.04	0.70
1:A:700:ILE:HG22	1:A:701:ARG:N	2.06	0.70
1:A:617:LEU:HG	1:A:618:VAL:N	2.07	0.69
1:A:701:ARG:HH12	1:A:702:ILE:CD1	2.03	0.69
1:A:28:PHE:C	1:A:30:GLY:H	1.94	0.69
1:A:828:LYS:O	1:A:832:LYS:HB2	1.90	0.69
1:A:223:ASN:HB2	1:A:224:PRO:HD3	1.73	0.69
1:A:748:MET:HB3	1:A:753:TYR:CE1	2.26	0.69
1:A:505:ILE:HD11	1:A:754:ARG:HB3	1.74	0.69
1:A:722:ILE:CD1	3:C:88:GLU:HB3	2.22	0.69
2:B:21:LYS:CA	2:B:24:PHE:HB2	2.21	0.69
1:A:447:ASP:C	1:A:449:LYS:H	1.93	0.69
1:A:720:TYR:O	1:A:742:ILE:HD13	1.92	0.69
1:A:389:ILE:CG2	1:A:613:SER:OG	2.40	0.69
1:A:490:HIS:O	1:A:493:PHE:HB3	1.93	0.69
1:A:617:LEU:CD2	1:A:618:VAL:H	2.05	0.69
2:B:145:VAL:HG22	2:B:145:VAL:O	1.93	0.69
1:A:601:PRO:CA	1:A:642:PHE:HA	2.13	0.69
3:C:29:ASP:OD2	3:C:59:GLY:N	2.24	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:372:ALA:HB2	1:A:416:LEU:HD23	1.74	0.68
1:A:786:GLN:HE22	3:C:115:GLU:H	1.40	0.68
1:A:498:GLU:HG3	1:A:499:GLU:N	2.07	0.68
1:A:29:ASP:O	1:A:31:LYS:N	2.26	0.68
1:A:354:SER:O	1:A:358:MET:HG3	1.93	0.68
1:A:696:VAL:HG23	1:A:697:LEU:H	1.59	0.68
1:A:133:THR:O	1:A:137:ILE:HG13	1.94	0.68
1:A:433:ARG:C	1:A:435:PHE:H	1.96	0.68
1:A:281:ASN:CB	1:A:285:PHE:HE2	2.08	0.67
1:A:430:LEU:HA	1:A:433:ARG:HD2	1.76	0.67
1:A:748:MET:HE1	1:A:770:LEU:HD21	1.77	0.67
2:B:55:GLU:O	2:B:59:MET:HB2	1.94	0.67
3:C:61:LYS:HE2	3:C:63:LEU:HD21	1.75	0.67
1:A:505:ILE:CG1	1:A:754:ARG:HB3	2.24	0.67
1:A:228:ALA:HB1	1:A:287:GLN:HE22	1.59	0.67
1:A:91:MET:HB2	1:A:94:LEU:HD23	1.77	0.67
1:A:36:VAL:HG23	1:A:37:PRO:HD2	1.77	0.67
1:A:780:LYS:O	1:A:783:SER:N	2.28	0.67
1:A:248:ARG:HA	1:A:457:GLY:HA2	1.76	0.67
1:A:617:LEU:HD23	1:A:618:VAL:H	1.59	0.67
1:A:112:ILE:HD13	1:A:125:PRO:CG	2.21	0.66
1:A:363:PHE:HB3	1:A:373:GLU:O	1.95	0.66
1:A:403:VAL:HG12	1:A:410:VAL:H	1.60	0.66
1:A:262:ILE:HG22	1:A:263:GLU:N	2.11	0.66
1:A:620:GLU:C	1:A:623:ARG:HB2	2.16	0.66
1:A:119:PHE:HD1	1:A:696:VAL:HG12	1.61	0.66
1:A:280:ARG:HD2	1:A:280:ARG:H	1.59	0.66
1:A:403:VAL:HG12	1:A:410:VAL:N	2.10	0.66
1:A:60:ILE:HG22	1:A:61:VAL:N	2.10	0.66
1:A:467:PHE:H	1:A:470:ASN:HD21	1.42	0.66
1:A:644:THR:HG23	1:A:647:ALA:CB	2.25	0.66
1:A:607:VAL:O	1:A:611:ALA:N	2.27	0.66
1:A:414:GLN:HG3	1:A:419:VAL:HG22	1.77	0.66
1:A:293:ILE:CG2	1:A:296:LEU:HD13	2.25	0.66
1:A:293:ILE:HG22	1:A:296:LEU:H	1.61	0.66
1:A:608:SER:O	1:A:611:ALA:HB3	1.96	0.66
1:A:690:GLN:O	1:A:694:ASN:OD1	2.14	0.66
2:B:50:THR:OG1	2:B:51:PRO:CD	2.43	0.66
1:A:390:ASN:HB2	1:A:393:ASP:OD2	1.96	0.66
1:A:272:VAL:HA	1:A:281:ASN:OD1	1.95	0.65
1:A:429:SER:O	1:A:433:ARG:HD2	1.95	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:277:SER:O	1:A:315:GLY:HA3	1.96	0.65
1:A:8:PRO:O	1:A:11:GLN:HB2	1.96	0.65
1:A:223:ASN:HB3	1:A:227:GLU:OE2	1.96	0.65
1:A:681:LEU:HD12	1:A:682:VAL:N	2.09	0.65
3:C:67:GLU:O	3:C:70:PRO:HD2	1.95	0.65
1:A:826:TRP:HB3	2:B:76:PHE:CE2	2.31	0.65
1:A:805:ARG:HG3	3:C:20:PHE:CD2	2.32	0.65
1:A:579:GLU:HA	1:A:587:VAL:O	1.97	0.65
1:A:590:SER:O	1:A:592:ALA:N	2.26	0.65
1:A:835:PRO:HG3	2:B:26:MET:HE3	1.79	0.65
1:A:676:GLU:O	1:A:676:GLU:HG3	1.97	0.64
1:A:720:TYR:OH	1:A:771:GLU:OE2	2.11	0.64
1:A:654:ASN:H	1:A:654:ASN:HD22	1.45	0.64
1:A:234:THR:O	1:A:236:ARG:N	2.30	0.64
1:A:281:ASN:HB3	1:A:285:PHE:CE2	2.30	0.64
1:A:193:PHE:HZ	1:A:456:ILE:HG21	1.61	0.64
1:A:331:CYS:HG	1:A:335:PHE:HE1	1.46	0.64
1:A:355:ILE:CD1	1:A:430:LEU:HD21	2.27	0.64
1:A:570:ARG:CB	1:A:571:PRO:HD2	2.27	0.64
1:A:617:LEU:O	1:A:619:ALA:N	2.31	0.64
1:A:505:ILE:CB	1:A:756:GLY:HA2	2.28	0.64
1:A:721:SER:HA	1:A:742:ILE:HD11	1.80	0.64
1:A:331:CYS:SG	1:A:335:PHE:HE1	2.20	0.64
1:A:358:MET:CE	1:A:426:LEU:HG	2.26	0.64
1:A:190:ILE:CD1	1:A:249:ILE:HD11	2.26	0.64
3:C:70:PRO:O	3:C:73:GLU:HB2	1.97	0.64
1:A:718:GLN:HG3	1:A:719:ARG:N	2.13	0.64
1:A:223:ASN:CB	1:A:224:PRO:HD3	2.27	0.64
1:A:325:VAL:HG12	1:A:326:GLU:N	2.11	0.64
1:A:385:PHE:C	1:A:387:CYS:H	2.00	0.64
1:A:617:LEU:CG	1:A:618:VAL:N	2.60	0.64
1:A:288:ILE:HG12	1:A:328:PHE:CZ	2.33	0.64
1:A:36:VAL:O	1:A:43:PHE:HA	1.98	0.64
1:A:190:ILE:HD13	1:A:249:ILE:HD11	1.79	0.63
1:A:141:ARG:NE	1:A:196:VAL:HB	2.13	0.63
1:A:486:GLN:HA	1:A:516:LEU:HD12	1.78	0.63
3:C:133:GLU:HG2	3:C:137:GLY:HA2	1.80	0.63
1:A:223:ASN:O	1:A:225:VAL:N	2.32	0.63
1:A:781:ILE:HG21	3:C:85:ASP:O	1.98	0.63
1:A:493:PHE:CE2	1:A:511:ASP:HA	2.34	0.63
1:A:228:ALA:CB	1:A:287:GLN:HE22	2.11	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:617:LEU:CD2	1:A:618:VAL:HG23	2.28	0.63
1:A:716:PHE:HD2	1:A:739:SER:OG	1.75	0.63
1:A:505:ILE:CD1	1:A:754:ARG:HB3	2.28	0.63
3:C:86:TYR:O	3:C:87:MET:C	2.36	0.63
3:C:33:ILE:HG21	3:C:63:LEU:HD12	1.81	0.63
1:A:28:PHE:HA	1:A:33:ASN:HD21	1.64	0.63
1:A:674:ASN:OD1	1:A:681:LEU:HD23	1.99	0.63
1:A:243:PHE:HB3	1:A:267:LEU:HB2	1.80	0.63
2:B:98:GLU:C	2:B:100:ASP:H	2.01	0.63
1:A:302:ILE:HG23	1:A:309:TYR:OH	1.99	0.63
2:B:67:LEU:HD12	2:B:67:LEU:N	2.12	0.63
1:A:148:ILE:HG23	1:A:149:PRO:HD2	1.81	0.62
1:A:713:TYR:CD2	1:A:736:LYS:HA	2.33	0.62
1:A:560:ARG:HG2	1:A:560:ARG:O	1.98	0.62
1:A:676:GLU:O	1:A:678:ASP:N	2.32	0.62
1:A:493:PHE:CD2	1:A:511:ASP:HA	2.34	0.62
1:A:131:ILE:HG22	1:A:151:HIS:HE2	1.64	0.62
1:A:503:GLU:O	1:A:757:THR:HG23	1.98	0.62
1:A:246:PHE:CE1	1:A:457:GLY:HA3	2.35	0.62
1:A:617:LEU:HD21	1:A:618:VAL:HG23	1.81	0.62
1:A:467:PHE:HB2	1:A:470:ASN:ND2	2.15	0.62
1:A:119:PHE:CE2	1:A:488:PHE:CE2	2.87	0.62
1:A:363:PHE:CE2	1:A:399:LEU:HD21	2.34	0.62
1:A:373:GLU:HG2	1:A:374:SER:N	2.14	0.62
1:A:622:PHE:H	1:A:622:PHE:HD1	1.46	0.62
2:B:20:MET:HB2	2:B:69:PHE:HE1	1.65	0.62
1:A:350:LYS:HB3	1:A:386:LEU:HD22	1.81	0.62
1:A:741:LYS:O	1:A:742:ILE:C	2.37	0.62
1:A:485:GLN:NE2	1:A:695:GLY:HA3	2.13	0.62
1:A:620:GLU:O	1:A:623:ARG:HB2	1.99	0.62
1:A:748:MET:CE	1:A:770:LEU:HD21	2.28	0.62
1:A:582:HIS:O	1:A:585:GLY:N	2.33	0.62
1:A:660:LEU:C	1:A:662:ARG:H	2.01	0.62
1:A:700:ILE:O	1:A:703:CYS:N	2.33	0.62
2:B:117:GLY:HA2	3:C:20:PHE:CE1	2.35	0.62
3:C:29:ASP:O	3:C:31:PHE:N	2.33	0.62
2:B:63:ALA:O	2:B:65:GLY:N	2.30	0.62
1:A:366:ARG:HB3	1:A:367:PRO:HD2	1.80	0.62
1:A:389:ILE:CD1	1:A:394:LEU:HD11	2.28	0.62
1:A:783:SER:OG	3:C:115:GLU:HG3	2.00	0.62
1:A:552:TYR:O	1:A:555:HIS:N	2.33	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:492:MET:HE1	1:A:702:ILE:CG2	2.28	0.61
1:A:669:ARG:HB3	1:A:694:ASN:HD22	1.63	0.61
2:B:62:GLU:O	2:B:64:PRO:HD3	2.00	0.61
1:A:433:ARG:O	1:A:435:PHE:N	2.33	0.61
1:A:300:MET:O	1:A:301:LEU:HB2	1.98	0.61
1:A:362:LYS:HZ3	1:A:362:LYS:HB2	1.65	0.61
1:A:194:ALA:C	1:A:196:VAL:H	2.03	0.61
1:A:28:PHE:C	1:A:30:GLY:N	2.54	0.61
1:A:364:LYS:HG2	1:A:365:GLN:O	2.01	0.61
3:C:117:LEU:HD22	3:C:121:GLU:OE1	2.00	0.61
1:A:617:LEU:HG	1:A:618:VAL:H	1.63	0.61
1:A:737:THR:O	1:A:740:GLU:HB2	2.00	0.61
1:A:433:ARG:C	1:A:435:PHE:N	2.54	0.61
1:A:505:ILE:C	1:A:505:ILE:HD13	2.21	0.61
3:C:120:GLU:HG3	3:C:121:GLU:N	2.15	0.61
1:A:327:GLU:OE2	1:A:331:CYS:HB2	2.01	0.61
3:C:141:TYR:O	3:C:145:VAL:HG23	2.01	0.61
1:A:464:PHE:HD2	1:A:465:GLU:N	1.99	0.61
1:A:106:ARG:HB3	1:A:111:LEU:HB3	1.82	0.60
1:A:485:GLN:O	1:A:485:GLN:OE1	2.19	0.60
1:A:577:HIS:ND1	1:A:577:HIS:N	2.49	0.60
2:B:103:LYS:HD3	2:B:138:LYS:HB3	1.83	0.60
1:A:364:LYS:O	1:A:373:GLU:N	2.33	0.60
1:A:492:MET:O	1:A:492:MET:HG2	2.01	0.60
1:A:493:PHE:HB2	1:A:512:PHE:CD2	2.35	0.60
1:A:284:ILE:HA	1:A:287:GLN:CG	2.31	0.60
3:C:67:GLU:C	3:C:70:PRO:HD2	2.22	0.60
1:A:48:ILE:HG22	1:A:49:GLN:N	2.17	0.60
1:A:464:PHE:CD2	1:A:465:GLU:N	2.69	0.60
1:A:505:ILE:HG13	1:A:754:ARG:HB3	1.82	0.60
1:A:439:VAL:O	1:A:441:ARG:N	2.35	0.60
1:A:36:VAL:CG2	1:A:37:PRO:HD2	2.30	0.60
1:A:484:LEU:O	1:A:487:PHE:HB3	2.01	0.60
1:A:643:GLN:HA	1:A:643:GLN:OE1	2.00	0.60
1:A:402:LYS:HB3	1:A:605:ASN:HD21	1.67	0.60
1:A:367:PRO:HG2	1:A:368:ARG:H	1.66	0.60
2:B:20:MET:SD	2:B:73:LEU:HD11	2.42	0.60
1:A:33:ASN:N	1:A:33:ASN:OD1	2.34	0.60
3:C:101:ILE:HG22	3:C:141:TYR:HD1	1.67	0.60
1:A:467:PHE:N	1:A:470:ASN:HD21	2.00	0.60
1:A:824:TRP:CD2	1:A:826:TRP:HB2	2.37	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:522:LEU:O	1:A:529:ILE:HG13	2.02	0.60
1:A:827:TRP:O	1:A:827:TRP:HE3	1.84	0.60
1:A:33:ASN:HA	1:A:46:ALA:O	2.02	0.60
2:B:98:GLU:HA	2:B:98:GLU:OE1	2.02	0.60
1:A:763:LYS:O	1:A:766:VAL:HG23	2.01	0.60
3:C:131:LEU:HD11	3:C:144:PHE:HB2	1.83	0.59
1:A:795:ARG:HD3	3:C:38:ARG:O	2.02	0.59
1:A:119:PHE:HE1	1:A:696:VAL:N	2.00	0.59
1:A:403:VAL:CG1	1:A:410:VAL:H	2.15	0.59
1:A:821:LEU:HB3	1:A:827:TRP:CD1	2.37	0.59
1:A:70:LYS:HB2	1:A:73:ASP:OD2	2.01	0.59
1:A:390:ASN:O	1:A:393:ASP:HB2	2.01	0.59
1:A:478:ASN:O	1:A:479:TYR:C	2.41	0.59
1:A:826:TRP:C	1:A:828:LYS:H	2.05	0.59
1:A:78:ASN:ND2	1:A:92:THR:HG22	2.17	0.59
1:A:91:MET:HB2	1:A:94:LEU:CD2	2.31	0.59
1:A:483:ARG:C	1:A:657:MET:HE1	2.23	0.59
1:A:550:TYR:O	1:A:554:ASN:HB2	2.03	0.59
1:A:761:PHE:N	1:A:761:PHE:CD1	2.70	0.59
3:C:142:GLU:HG2	3:C:146:LYS:HD3	1.83	0.59
1:A:737:THR:O	1:A:740:GLU:N	2.36	0.59
3:C:36:VAL:HG11	3:C:68:PHE:CZ	2.37	0.59
1:A:335:PHE:O	1:A:336:ASP:C	2.41	0.59
1:A:548:GLN:O	1:A:552:TYR:HD1	1.86	0.59
1:A:528:GLY:O	1:A:530:LEU:N	2.36	0.59
1:A:309:TYR:O	1:A:312:ILE:N	2.36	0.58
1:A:162:ASN:HB3	1:A:170:GLN:OE1	2.03	0.58
1:A:814:ASN:ND2	2:B:89:ILE:HG12	2.16	0.58
1:A:286:TYR:CE2	1:A:317:LEU:HA	2.35	0.58
1:A:428:LYS:O	1:A:431:TYR:N	2.36	0.58
3:C:57:LYS:HG2	3:C:60:GLU:CG	2.33	0.58
1:A:577:HIS:CD2	1:A:591:ILE:HD11	2.38	0.58
1:A:28:PHE:HZ	1:A:77:MET:O	1.86	0.58
3:C:125:ILE:HD11	3:C:148:VAL:HG22	1.84	0.58
1:A:322:ILE:CG2	1:A:324:ASP:OD1	2.52	0.58
1:A:156:ALA:O	1:A:159:ALA:N	2.33	0.58
1:A:721:SER:HA	1:A:742:ILE:HD13	1.85	0.58
1:A:446:LEU:C	1:A:448:THR:N	2.57	0.58
1:A:340:PHE:N	1:A:340:PHE:HD2	2.02	0.58
1:A:309:TYR:O	1:A:311:PHE:N	2.37	0.58
1:A:288:ILE:HG12	1:A:328:PHE:CE1	2.39	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:162:ASN:HB3	1:A:170:GLN:CD	2.25	0.58
1:A:405:VAL:CG1	1:A:406:GLY:H	2.04	0.58
1:A:660:LEU:O	1:A:662:ARG:N	2.36	0.58
3:C:131:LEU:CD1	3:C:144:PHE:HB2	2.33	0.58
1:A:377:THR:O	1:A:381:GLU:HG3	2.04	0.58
3:C:95:ARG:HH11	3:C:96:GLU:HB2	1.67	0.58
1:A:548:GLN:CG	1:A:552:TYR:HE1	2.14	0.58
2:B:67:LEU:CD1	2:B:67:LEU:H	2.14	0.58
1:A:88:MET:CE	1:A:102:ASN:HB3	2.34	0.57
1:A:139:LYS:O	1:A:143:LYS:HE3	2.04	0.57
1:A:570:ARG:CB	1:A:571:PRO:CD	2.77	0.57
1:A:92:THR:HG23	1:A:93:TYR:N	2.19	0.57
1:A:112:ILE:HG13	1:A:113:TYR:CD1	2.39	0.57
1:A:84:LYS:CA	1:A:102:ASN:HD21	2.18	0.57
1:A:746:LEU:O	1:A:747:GLN:HB3	2.04	0.57
2:B:125:MET:O	2:B:128:THR:N	2.37	0.57
1:A:591:ILE:HG22	1:A:594:TRP:CE3	2.38	0.57
2:B:146:ALA:C	2:B:148:ILE:N	2.57	0.57
1:A:602:ILE:HB	1:A:641:ALA:CB	2.35	0.57
1:A:174:ILE:HG23	1:A:668:VAL:HG12	1.86	0.57
1:A:319:VAL:HG12	1:A:320:ASP:N	2.19	0.57
1:A:780:LYS:O	1:A:782:ILE:N	2.37	0.57
1:A:447:ASP:O	1:A:449:LYS:N	2.34	0.57
2:B:96:PHE:HB3	2:B:108:TYR:HE2	1.69	0.57
1:A:371:GLN:CD	1:A:400:LYS:HE3	2.24	0.57
1:A:664:ASN:ND2	1:A:666:HIS:NE2	2.52	0.57
1:A:737:THR:O	1:A:738:VAL:C	2.43	0.57
1:A:87:ASP:OD1	1:A:89:ALA:N	2.35	0.57
1:A:717:LYS:HG3	1:A:718:GLN:N	2.19	0.57
1:A:436:ASN:O	1:A:440:LYS:HG3	2.04	0.57
3:C:33:ILE:HG21	3:C:63:LEU:CD1	2.35	0.56
1:A:483:ARG:CZ	1:A:653:LEU:HD21	2.35	0.56
2:B:106:ILE:HD11	2:B:110:LYS:HE3	1.87	0.56
1:A:620:GLU:HA	1:A:623:ARG:CB	2.33	0.56
1:A:487:PHE:HD1	1:A:661:ARG:NH1	2.02	0.56
1:A:691:LEU:O	1:A:696:VAL:HG23	2.04	0.56
1:A:567:LYS:HD3	1:A:568:PRO:HD2	1.87	0.56
1:A:273:THR:HG21	1:A:424:GLY:CA	2.36	0.56
1:A:280:ARG:HG3	1:A:286:TYR:CE1	2.40	0.56
1:A:399:LEU:O	1:A:414:GLN:HG2	2.06	0.56
1:A:780:LYS:HA	1:A:780:LYS:CE	2.26	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:78:ASN:HD21	1:A:92:THR:N	2.03	0.56
1:A:340:PHE:N	1:A:340:PHE:CD2	2.74	0.56
2:B:24:PHE:O	2:B:27:ILE:HG23	2.06	0.56
1:A:591:ILE:HA	1:A:594:TRP:CE2	2.40	0.56
3:C:64:PRO:HD2	3:C:67:GLU:CB	2.32	0.56
1:A:594:TRP:C	1:A:596:ASP:H	2.09	0.56
1:A:177:GLU:C	1:A:179:GLY:H	2.08	0.56
3:C:95:ARG:HH11	3:C:96:GLU:N	1.97	0.56
1:A:692:GLN:CA	1:A:697:LEU:HD12	2.35	0.56
1:A:381:GLU:HA	1:A:391:ALA:CB	2.35	0.56
1:A:68:THR:HG23	1:A:68:THR:O	2.06	0.56
1:A:235:VAL:H	1:A:279:GLU:HG2	1.71	0.56
1:A:499:GLU:O	1:A:503:GLU:HG2	2.05	0.56
1:A:84:LYS:HA	1:A:102:ASN:HD21	1.71	0.56
3:C:87:MET:HE1	3:C:142:GLU:CG	2.34	0.56
3:C:14:VAL:HG12	3:C:36:VAL:HG13	1.88	0.56
1:A:235:VAL:HG23	1:A:279:GLU:CG	2.35	0.56
1:A:620:GLU:OE2	1:A:621:LEU:CD2	2.53	0.56
2:B:40:LEU:CD1	2:B:56:LEU:HD23	2.36	0.55
1:A:575:HIS:ND1	1:A:575:HIS:C	2.60	0.55
1:A:533:LEU:O	1:A:533:LEU:HD23	2.06	0.55
1:A:573:GLN:N	1:A:573:GLN:OE1	2.39	0.55
1:A:713:TYR:CE1	1:A:755:LEU:HD22	2.41	0.55
1:A:107:TYR:O	1:A:109:ALA:N	2.36	0.55
2:B:68:ASN:OD1	2:B:70:THR:N	2.38	0.55
1:A:157:ASP:O	1:A:161:GLN:HG3	2.06	0.55
1:A:734:ASP:CB	1:A:737:THR:OG1	2.48	0.55
1:A:794:ILE:HD13	3:C:35:ASP:HB3	1.88	0.55
3:C:106:LEU:CD1	3:C:110:LEU:HD11	2.37	0.55
3:C:19:ASP:OD1	3:C:27:ALA:O	2.25	0.55
1:A:124:ASN:OD1	1:A:126:TYR:CD2	2.58	0.55
1:A:159:ALA:HA	1:A:666:HIS:CE1	2.41	0.55
1:A:235:VAL:HG23	1:A:279:GLU:CD	2.27	0.55
1:A:302:ILE:HD12	1:A:356:LEU:CD1	2.37	0.55
1:A:424:GLY:O	1:A:428:LYS:HG3	2.06	0.55
1:A:505:ILE:CG2	1:A:756:GLY:HA2	2.36	0.55
1:A:756:GLY:O	1:A:757:THR:HG23	2.07	0.55
3:C:14:VAL:CG1	3:C:36:VAL:HG13	2.37	0.55
1:A:383:VAL:HG23	1:A:384:ALA:N	2.22	0.55
1:A:302:ILE:HD12	1:A:356:LEU:HD12	1.89	0.55
1:A:650:ARG:HH11	1:A:650:ARG:HG2	1.70	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:780:LYS:O	1:A:781:ILE:C	2.44	0.55
1:A:381:GLU:HA	1:A:391:ALA:HB2	1.88	0.55
1:A:306:SER:O	1:A:317:LEU:HB3	2.05	0.55
1:A:88:MET:HE2	1:A:102:ASN:HB3	1.87	0.55
1:A:723:LEU:HB3	1:A:746:LEU:HD21	1.89	0.55
1:A:485:GLN:HE21	1:A:695:GLY:HA3	1.70	0.55
2:B:62:GLU:O	2:B:64:PRO:CD	2.56	0.54
1:A:486:GLN:O	1:A:487:PHE:C	2.46	0.54
1:A:691:LEU:HD22	1:A:696:VAL:HG21	1.89	0.54
1:A:63:ASP:OD1	1:A:64:ASN:N	2.31	0.54
1:A:414:GLN:HE22	1:A:418:GLN:NE2	2.05	0.54
1:A:523:ILE:HG22	1:A:524:GLU:N	2.22	0.54
1:A:683:ASP:O	1:A:686:LEU:N	2.40	0.54
1:A:525:LYS:O	1:A:526:PRO:O	2.24	0.54
1:A:793:LEU:CD1	3:C:121:GLU:HG2	2.37	0.54
1:A:272:VAL:HB	1:A:428:LYS:HG2	1.89	0.54
1:A:611:ALA:O	1:A:619:ALA:CA	2.41	0.54
1:A:777:ARG:O	1:A:781:ILE:N	2.39	0.54
1:A:724:ALA:N	1:A:725:PRO:HD3	2.21	0.54
1:A:673:PRO:HG2	1:A:674:ASN:H	1.72	0.54
1:A:342:LYS:HA	1:A:345:LYS:HD3	1.88	0.54
1:A:101:ASN:O	1:A:103:LEU:N	2.40	0.54
1:A:96:GLU:O	1:A:99:VAL:N	2.40	0.54
1:A:32:LYS:HB3	1:A:48:ILE:H	1.72	0.54
2:B:28:ASP:HA	2:B:39:ASP:OD2	2.08	0.54
1:A:319:VAL:HG12	1:A:320:ASP:H	1.72	0.54
1:A:174:ILE:HG23	1:A:668:VAL:CG1	2.37	0.54
1:A:797:ALA:O	1:A:798:TYR:C	2.45	0.54
1:A:537:CYS:HA	1:A:599:LYS:HE2	1.88	0.54
1:A:615:GLU:HB3	1:A:617:LEU:CD2	2.38	0.54
1:A:190:ILE:O	1:A:193:PHE:N	2.41	0.54
1:A:87:ASP:OD1	1:A:87:ASP:C	2.45	0.54
1:A:119:PHE:HE2	1:A:488:PHE:CD2	2.26	0.54
1:A:222:ALA:O	1:A:225:VAL:HB	2.07	0.54
1:A:154:SER:O	1:A:158:ASN:ND2	2.35	0.54
1:A:292:ALA:CB	1:A:328:PHE:HB3	2.38	0.54
1:A:794:ILE:CD1	3:C:35:ASP:OD2	2.53	0.54
3:C:23:GLY:O	3:C:24:ARG:C	2.47	0.54
1:A:301:LEU:O	1:A:357:HIS:NE2	2.41	0.53
1:A:119:PHE:HD1	1:A:696:VAL:HG13	1.73	0.53
1:A:95:ASN:OD1	1:A:98: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:7:ASP:OD2	1:A:9:ASP:HB2	2.08	0.53
1:A:414:GLN:HG3	1:A:419:VAL:CG2	2.37	0.53
1:A:170:GLN:O	1:A:456:ILE:HA	2.08	0.53
1:A:753:TYR:HB2	1:A:761:PHE:O	2.09	0.53
1:A:357:HIS:O	1:A:360:GLU:N	2.42	0.53
1:A:713:TYR:HE1	1:A:760:VAL:HB	1.72	0.53
1:A:59:LYS:HB3	1:A:59:LYS:NZ	2.24	0.53
2:B:58:ALA:HA	2:B:61:LYS:CG	2.38	0.53
1:A:115:TYR:HE1	1:A:150:PRO:CA	2.11	0.53
1:A:562:PHE:CE1	1:A:578:PHE:CD1	2.96	0.53
1:A:403:VAL:HG22	1:A:404:LYS:N	2.16	0.53
1:A:547:PHE:CB	1:A:595:LEU:HD11	2.37	0.53
1:A:758:THR:OG1	1:A:759:LYS:HG2	2.09	0.53
1:A:676:GLU:O	1:A:676:GLU:CG	2.57	0.53
1:A:583:TYR:CD1	1:A:584:ALA:N	2.77	0.53
1:A:478:ASN:HD22	1:A:478:ASN:N	2.05	0.53
1:A:303:THR:HG23	1:A:304:PRO:CD	2.37	0.53
1:A:134:ASP:HA	1:A:137:ILE:HD12	1.91	0.53
1:A:570:ARG:O	1:A:571:PRO:O	2.25	0.53
1:A:326:GLU:O	1:A:329:LYS:HB3	2.09	0.53
1:A:20:MET:O	1:A:23:GLU:OE2	2.26	0.53
1:A:229:PHE:O	1:A:282:TYR:CD1	2.62	0.53
1:A:537:CYS:CA	1:A:599:LYS:HE2	2.39	0.53
1:A:676:GLU:O	1:A:677:LYS:C	2.47	0.53
1:A:617:LEU:O	1:A:618:VAL:C	2.47	0.53
1:A:683:ASP:O	1:A:684:ALA:C	2.48	0.53
1:A:395:LEU:HD23	1:A:399:LEU:HD11	1.90	0.53
3:C:20:PHE:CG	3:C:20:PHE:O	2.62	0.53
1:A:167:ARG:O	1:A:168:GLU:O	2.26	0.53
1:A:480:THR:HG22	1:A:481:ASN:N	2.23	0.52
3:C:106:LEU:HD11	3:C:110:LEU:HD11	1.90	0.52
1:A:8:PRO:O	1:A:11:GLN:CB	2.57	0.52
1:A:275:GLN:HB2	1:A:314:GLN:NE2	2.24	0.52
1:A:84:LYS:HA	1:A:102:ASN:ND2	2.24	0.52
1:A:125:PRO:O	1:A:126:TYR:HB2	2.09	0.52
1:A:416:LEU:O	1:A:420:ILE:HG13	2.09	0.52
1:A:141:ARG:HE	1:A:196:VAL:HB	1.73	0.52
1:A:743:LEU:O	1:A:748:MET:HB2	2.10	0.52
1:A:772:GLU:O	1:A:776:GLU:HG2	2.09	0.52
1:A:488:PHE:O	1:A:489:ASN:C	2.48	0.52
1:A:701:ARG:HH12	1:A:702:ILE:HD13	1.72	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:51:ALA:O	3:C:52:VAL:HG13	2.09	0.52
1:A:617:LEU:N	1:A:617:LEU:HD23	2.25	0.52
3:C:142:GLU:O	3:C:146:LYS:HG2	2.09	0.52
1:A:29:ASP:OD2	1:A:32:LYS:HB2	2.09	0.52
1:A:237:ASN:ND2	1:A:239:ASN:H	2.08	0.52
1:A:368:ARG:HA	1:A:368:ARG:HE	1.73	0.52
1:A:701:ARG:HH11	1:A:701:ARG:HB3	1.74	0.52
1:A:526:PRO:O	1:A:531:SER:CB	2.57	0.52
1:A:262:ILE:HG22	1:A:263:GLU:H	1.74	0.52
1:A:158:ASN:O	1:A:162:ASN:ND2	2.42	0.52
2:B:106:ILE:HG23	2:B:107:GLU:H	1.74	0.52
3:C:52:VAL:HG21	3:C:75:LEU:HD21	1.91	0.52
1:A:475:LEU:HD13	1:A:475:LEU:C	2.30	0.52
1:A:521:ASP:O	1:A:525:LYS:CG	2.54	0.52
3:C:90:PHE:HD2	3:C:145:VAL:HG21	1.74	0.52
1:A:606:VAL:HA	1:A:609:LEU:HB3	1.91	0.52
1:A:267:LEU:HD12	1:A:268:GLU:N	2.25	0.52
3:C:49:VAL:O	3:C:52:VAL:HG22	2.10	0.52
1:A:622:PHE:CD1	1:A:622:PHE:N	2.78	0.52
1:A:58:VAL:O	1:A:66:THR:HA	2.09	0.52
1:A:815:ILE:HD11	2:B:144:PHE:CE1	2.45	0.52
1:A:59:LYS:HA	1:A:65:SER:O	2.10	0.52
3:C:101:ILE:HG13	3:C:105:GLU:HG2	1.91	0.52
1:A:453:ASN:HB3	1:A:454:TYR:CD1	2.45	0.52
1:A:619:ALA:O	1:A:623:ARG:HG3	2.10	0.52
1:A:250:HIS:HA	1:A:455:TYR:HA	1.92	0.52
1:A:654:ASN:HD22	1:A:654:ASN:N	2.07	0.52
1:A:598:ASN:ND2	1:A:645:ILE:HB	2.25	0.52
1:A:430:LEU:HG	1:A:431:TYR:H	1.75	0.51
1:A:27:PRO:CD	1:A:28:PHE:H	2.21	0.51
1:A:60:ILE:CG2	1:A:61:VAL:N	2.72	0.51
1:A:316:CYS:C	1:A:317:LEU:HD23	2.30	0.51
1:A:507:TRP:O	1:A:508:GLU:HG2	2.09	0.51
1:A:169:ASN:O	1:A:663:THR:HA	2.10	0.51
1:A:348:MET:CE	1:A:437:TRP:HZ3	2.23	0.51
1:A:818:TRP:HB2	2:B:148:ILE:HG23	1.92	0.51
3:C:90:PHE:HE1	3:C:109:VAL:HG11	1.75	0.51
1:A:366:ARG:HD2	1:A:371:GLN:HB3	1.91	0.51
1:A:428:LYS:O	1:A:430:LEU:N	2.43	0.51
1:A:184:GLU:HG2	1:A:188:LYS:HZ3	1.75	0.51
2:B:35:ILE:HD12	2:B:35:ILE:O	2.10	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:288:ILE:HA	1:A:328:PHE:CZ	2.46	0.51
1:A:821:LEU:HD11	2:B:80:LEU:HG	1.92	0.51
1:A:78:ASN:ND2	1:A:92:THR:H	2.04	0.51
1:A:819:LEU:HD11	2:B:127:MET:HB3	1.93	0.51
1:A:548:GLN:O	1:A:552:TYR:CD1	2.64	0.51
1:A:28:PHE:CG	1:A:80:PRO:HD3	2.45	0.51
1:A:503:GLU:HG3	1:A:761:PHE:HZ	1.75	0.51
1:A:722:ILE:HD11	3:C:88:GLU:O	2.11	0.51
1:A:74:ILE:HG13	1:A:74:ILE:O	2.09	0.51
3:C:135:LEU:N	3:C:135:LEU:HD12	2.24	0.51
1:A:148:ILE:HG12	1:A:149:PRO:HD2	1.93	0.51
1:A:88:MET:CE	1:A:99:VAL:HA	2.39	0.51
1:A:447:ASP:C	1:A:449:LYS:N	2.64	0.51
1:A:100:LEU:HB2	1:A:688:LEU:HD21	1.93	0.51
1:A:92:THR:CG2	1:A:93:TYR:N	2.73	0.51
1:A:617:LEU:O	1:A:621:LEU:HG	2.11	0.51
1:A:34:CYS:HA	1:A:77:MET:HB2	1.92	0.51
1:A:278:ALA:O	1:A:316:CYS:SG	2.61	0.50
1:A:284:ILE:HG22	1:A:285:PHE:CD1	2.46	0.50
1:A:651:GLU:O	1:A:654:ASN:N	2.44	0.50
1:A:348:MET:O	1:A:349:PHE:C	2.49	0.50
1:A:505:ILE:HD11	1:A:754:ARG:CB	2.42	0.50
1:A:516:LEU:O	1:A:520:ILE:HG13	2.10	0.50
1:A:747:GLN:CG	1:A:747:GLN:O	2.57	0.50
2:B:75:ILE:O	2:B:79:LYS:HG2	2.12	0.50
1:A:301:LEU:O	1:A:357:HIS:CE1	2.64	0.50
1:A:833:VAL:HG12	1:A:835:PRO:CD	2.25	0.50
1:A:478:ASN:O	1:A:481:ASN:N	2.44	0.50
1:A:584:ALA:HA	1:A:692:GLN:HE21	1.76	0.50
2:B:50:THR:OG1	2:B:51:PRO:HD3	2.11	0.50
3:C:3:LEU:HD22	3:C:7:GLU:HG2	1.93	0.50
1:A:126:TYR:HB3	1:A:679:PRO:HG3	1.88	0.50
1:A:302:ILE:HG23	1:A:309:TYR:CZ	2.47	0.50
1:A:591:ILE:HG22	1:A:594:TRP:CZ3	2.46	0.50
1:A:253:PRO:HD2	1:A:256:LYS:HE3	1.93	0.50
1:A:271:ARG:HH12	1:A:279:GLU:HB3	1.76	0.50
1:A:280:ARG:O	1:A:281:ASN:O	2.29	0.50
1:A:486:GLN:CA	1:A:516:LEU:HD12	2.42	0.50
1:A:651:GLU:O	1:A:652:SER:C	2.48	0.50
1:A:184:GLU:HG2	1:A:188:LYS:NZ	2.26	0.50
3:C:69:LEU:HB3	3:C:70:PRO:HD3	1.92	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:17:LEU:O	3:C:17:LEU:HD12	2.11	0.50
1:A:441:ARG:O	1:A:444:ARG:HB2	2.11	0.50
2:B:36:ASP:N	2:B:39:ASP:OD1	2.44	0.50
1:A:491:HIS:NE2	1:A:665:PRO:HD2	2.26	0.50
3:C:33:ILE:CG2	3:C:63:LEU:HD12	2.42	0.50
2:B:126:ARG:HH11	2:B:126:ARG:CB	2.25	0.50
1:A:478:ASN:O	1:A:482:GLU:N	2.33	0.50
1:A:28:PHE:HB2	1:A:80:PRO:CD	2.42	0.50
1:A:762:PHE:HB3	1:A:766:VAL:HG11	1.94	0.50
1:A:598:ASN:HD21	1:A:646:SER:H	1.59	0.50
1:A:694:ASN:CB	1:A:696:VAL:HG22	2.33	0.50
1:A:264:THR:HG21	1:A:435:PHE:CE2	2.47	0.50
1:A:235:VAL:HG23	1:A:279:GLU:OE2	2.12	0.50
1:A:799:LYS:O	1:A:800:LYS:C	2.49	0.50
1:A:243:PHE:CB	1:A:267:LEU:HB2	2.40	0.50
1:A:253:PRO:CD	1:A:451:LYS:HG2	2.42	0.50
1:A:363:PHE:CD2	1:A:399:LEU:HD21	2.47	0.49
1:A:414:GLN:HG2	1:A:419:VAL:HG13	1.94	0.49
1:A:343:GLU:HG2	1:A:344:GLU:HG3	1.94	0.49
2:B:125:MET:O	2:B:126:ARG:C	2.50	0.49
1:A:403:VAL:HG12	1:A:410:VAL:O	2.12	0.49
2:B:143:ARG:O	2:B:146:ALA:HB3	2.11	0.49
2:B:63:ALA:HB2	2:B:75:ILE:HD11	1.93	0.49
1:A:112:ILE:CD1	1:A:125:PRO:HG3	2.27	0.49
1:A:159:ALA:O	1:A:162:ASN:HB2	2.13	0.49
1:A:485:GLN:OE1	1:A:489:ASN:ND2	2.45	0.49
1:A:700:ILE:CG2	1:A:701:ARG:N	2.75	0.49
2:B:52:ASP:N	2:B:52:ASP:OD1	2.45	0.49
1:A:642:PHE:N	1:A:642:PHE:CD1	2.80	0.49
1:A:114:THR:HG22	1:A:115:TYR:N	2.27	0.49
3:C:90:PHE:HD2	3:C:145:VAL:CG2	2.26	0.49
3:C:19:ASP:OD1	3:C:25:ASP:OD2	2.29	0.49
2:B:58:ALA:HA	2:B:61:LYS:HG2	1.94	0.49
1:A:250:HIS:HA	1:A:455:TYR:CB	2.42	0.49
3:C:131:LEU:HG	3:C:139:VAL:CG1	2.37	0.49
3:C:150:THR:O	3:C:150:THR:CG2	2.60	0.49
1:A:83:GLU:C	1:A:85:LEU:N	2.64	0.49
1:A:16:ASP:OD2	1:A:18:LYS:HB2	2.11	0.49
1:A:385:PHE:C	1:A:387:CYS:N	2.66	0.49
1:A:830:TYR:OH	2:B:20:MET:HB3	2.13	0.49
1:A:96:GLU:O	1:A:97:ALA:C	2.50	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:786:GLN:NE2	3:C:115:GLU:H	2.09	0.49
1:A:551:SER:O	1:A:555:HIS:N	2.45	0.49
1:A:148:ILE:HG23	1:A:149:PRO:CD	2.41	0.49
1:A:505:ILE:CG2	1:A:505:ILE:O	2.59	0.49
1:A:220:ILE:O	1:A:223:ASN:HB2	2.12	0.49
1:A:355:ILE:O	1:A:358:MET:HB2	2.12	0.49
2:B:21:LYS:C	2:B:24:PHE:HB2	2.32	0.49
1:A:548:GLN:HB2	1:A:591:ILE:HD11	1.95	0.49
1:A:593:GLY:O	1:A:597:LYS:HG3	2.13	0.49
1:A:298:GLU:O	1:A:301:LEU:N	2.31	0.49
1:A:650:ARG:O	1:A:654:ASN:ND2	2.45	0.49
2:B:44:PHE:O	2:B:47:LEU:HD12	2.13	0.49
1:A:53:GLY:C	1:A:55:GLU:H	2.16	0.49
1:A:813:ARG:O	1:A:816:ARG:HB2	2.13	0.49
1:A:816:ARG:HH11	1:A:816:ARG:HG3	1.76	0.49
1:A:126:TYR:CE1	1:A:677:LYS:HA	2.47	0.48
1:A:833:VAL:CG1	1:A:835:PRO:HD3	2.26	0.48
1:A:157:ASP:O	1:A:160:TYR:HB3	2.12	0.48
1:A:170:GLN:HB2	1:A:456:ILE:HG23	1.95	0.48
1:A:478:ASN:N	1:A:478:ASN:ND2	2.61	0.48
1:A:477:ILE:O	1:A:480:THR:HB	2.13	0.48
1:A:691:LEU:O	1:A:697:LEU:HG	2.13	0.48
1:A:438:LEU:O	1:A:442:VAL:HG22	2.12	0.48
1:A:590:SER:C	1:A:592:ALA:H	2.13	0.48
1:A:552:TYR:C	1:A:554:ASN:N	2.65	0.48
2:B:106:ILE:CG2	2:B:107:GLU:N	2.75	0.48
2:B:126:ARG:HH11	2:B:126:ARG:HB2	1.78	0.48
1:A:275:GLN:HB2	1:A:314:GLN:HB2	1.95	0.48
1:A:317:LEU:HB2	1:A:318:THR:H	1.50	0.48
1:A:371:GLN:OE1	1:A:400:LYS:HE3	2.12	0.48
1:A:606:VAL:O	1:A:610:LEU:HD23	2.13	0.48
1:A:265:TYR:O	1:A:266:LEU:C	2.51	0.48
1:A:567:LYS:HD2	1:A:567:LYS:C	2.34	0.48
1:A:223:ASN:C	1:A:225:VAL:H	2.17	0.48
1:A:480:THR:O	1:A:483:ARG:HB2	2.12	0.48
1:A:559:ASN:OD1	1:A:562:PHE:N	2.46	0.48
1:A:231:ASN:HA	1:A:240:SER:O	2.13	0.48
1:A:11:GLN:NE2	1:A:12:TYR:CE1	2.82	0.48
1:A:228:ALA:CB	1:A:287:GLN:NE2	2.69	0.48
1:A:350:LYS:HB3	1:A:386:LEU:CD2	2.42	0.48
1:A:650:ARG:O	1:A:653:LEU:HB3	2.13	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:483:ARG:HB3	1:A:657:MET:CE	2.44	0.48
1:A:266:LEU:HD13	1:A:649:HIS:CD2	2.49	0.48
2:B:149:LYS:O	2:B:151:SER:N	2.46	0.48
1:A:439:VAL:O	1:A:440:LYS:C	2.51	0.48
3:C:31:PHE:HE1	3:C:56:HIS:O	1.96	0.48
2:B:126:ARG:NH1	2:B:126:ARG:CB	2.76	0.48
1:A:286:TYR:CE1	1:A:312:ILE:HG12	2.49	0.48
1:A:577:HIS:HD2	1:A:591:ILE:HD11	1.76	0.48
1:A:402:LYS:HB3	1:A:605:ASN:ND2	2.26	0.48
1:A:275:GLN:HB3	1:A:279:GLU:O	2.14	0.48
1:A:423:VAL:C	1:A:425:ALA:N	2.63	0.48
3:C:57:LYS:O	3:C:60:GLU:HG3	2.14	0.48
1:A:430:LEU:HD12	1:A:431:TYR:N	2.28	0.48
1:A:780:LYS:HE2	3:C:45:ARG:NH1	2.29	0.48
1:A:552:TYR:O	1:A:554:ASN:N	2.47	0.48
1:A:826:TRP:C	1:A:828:LYS:N	2.67	0.48
1:A:825:GLN:O	1:A:828:LYS:CB	2.61	0.48
2:B:133:PRO:O	2:B:134:VAL:CG2	2.61	0.48
2:B:57:THR:HA	2:B:60:LEU:HD12	1.95	0.48
1:A:720:TYR:CE2	1:A:770:LEU:HB3	2.49	0.48
1:A:486:GLN:O	1:A:489:ASN:N	2.47	0.48
1:A:808:LEU:O	1:A:812:GLN:HB2	2.13	0.48
3:C:24:ARG:O	3:C:25:ASP:HB3	2.14	0.48
2:B:97:ASP:HB2	2:B:104:LEU:CD2	2.44	0.48
1:A:814:ASN:ND2	2:B:89:ILE:CG1	2.75	0.48
1:A:58:VAL:O	1:A:67:ARG:N	2.47	0.48
1:A:799:LYS:O	1:A:802:GLN:N	2.45	0.48
2:B:93:PHE:O	2:B:95:MET:N	2.47	0.48
1:A:224:PRO:HA	1:A:227:GLU:HB2	1.97	0.47
1:A:234:THR:O	1:A:235:VAL:C	2.52	0.47
1:A:389:ILE:CG1	1:A:394:LEU:HD11	2.44	0.47
1:A:761:PHE:N	1:A:761:PHE:HD1	2.11	0.47
1:A:653:LEU:HD23	1:A:653:LEU:C	2.34	0.47
1:A:656:LEU:C	1:A:656:LEU:HD12	2.35	0.47
1:A:409:MET:SD	1:A:409:MET:N	2.81	0.47
1:A:223:ASN:CB	1:A:224:PRO:CD	2.92	0.47
1:A:303:THR:HG22	1:A:305:ASP:H	1.78	0.47
1:A:430:LEU:CA	1:A:433:ARG:HD2	2.44	0.47
1:A:487:PHE:HZ	1:A:665:PRO:HG3	1.79	0.47
1:A:787:ALA:CB	3:C:45:ARG:HG2	2.44	0.47
3:C:20:PHE:O	3:C:20:PHE:CD2	2.67	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:708:PRO:O	1:A:709:SER:C	2.52	0.47
1:A:663:THR:O	1:A:665:PRO:HD3	2.14	0.47
1:A:60:ILE:HG22	1:A:61:VAL:H	1.78	0.47
1:A:509:PHE:CE2	1:A:510:ILE:HD12	2.49	0.47
1:A:284:ILE:CG2	1:A:285:PHE:N	2.76	0.47
1:A:365:GLN:HA	1:A:371:GLN:O	2.14	0.47
1:A:101:ASN:O	1:A:102:ASN:C	2.52	0.47
3:C:107:ARG:HE	3:C:107:ARG:HB3	1.28	0.47
1:A:463:GLY:O	1:A:464:PHE:O	2.31	0.47
1:A:273:THR:CG2	1:A:428:LYS:HE3	2.45	0.47
1:A:194:ALA:C	1:A:196:VAL:N	2.67	0.47
1:A:104:ARG:HH21	1:A:684:ALA:HB2	1.79	0.47
2:B:89:ILE:HG21	2:B:145:VAL:HG23	1.96	0.47
1:A:429:SER:O	1:A:433:ARG:CD	2.62	0.47
1:A:798:TYR:O	1:A:801:LEU:N	2.47	0.47
1:A:237:ASN:HD22	1:A:237:ASN:C	2.17	0.47
1:A:384:ALA:HA	1:A:389:ILE:HD11	1.95	0.47
1:A:617:LEU:C	1:A:619:ALA:N	2.64	0.47
1:A:739:SER:O	1:A:740:GLU:C	2.52	0.47
1:A:488:PHE:HD2	1:A:667:PHE:CZ	2.32	0.47
3:C:117:LEU:CD2	3:C:121:GLU:OE1	2.62	0.47
3:C:27:ALA:HA	3:C:63:LEU:O	2.14	0.47
1:A:788:HIS:CE1	3:C:80:GLN:NE2	2.83	0.47
1:A:517:GLN:HA	1:A:517:GLN:NE2	2.30	0.47
1:A:716:PHE:HD2	1:A:739:SER:CB	2.27	0.47
1:A:381:GLU:HG2	1:A:391:ALA:HB1	1.92	0.47
2:B:35:ILE:HD12	2:B:35:ILE:C	2.35	0.47
1:A:734:ASP:CB	1:A:737:THR:HG1	2.18	0.47
1:A:713:TYR:OH	1:A:755:LEU:HD22	2.15	0.47
1:A:713:TYR:CE1	1:A:760:VAL:HB	2.49	0.47
1:A:292:ALA:CB	1:A:328:PHE:HD2	2.19	0.47
1:A:577:HIS:CD2	1:A:591:ILE:CD1	2.97	0.47
1:A:403:VAL:HG13	1:A:404:LYS:N	2.30	0.47
1:A:799:LYS:C	1:A:801:LEU:N	2.64	0.47
1:A:792:TYR:O	1:A:793:LEU:C	2.54	0.47
3:C:30:ALA:O	3:C:33:ILE:HG12	2.15	0.47
1:A:788:HIS:ND1	3:C:80:GLN:NE2	2.63	0.47
1:A:602:ILE:HB	1:A:641:ALA:HB3	1.96	0.47
1:A:9:ASP:C	1:A:11:GLN:H	2.17	0.47
1:A:675:LEU:HD13	1:A:686:LEU:HD21	1.97	0.47
1:A:526:PRO:O	1:A:531:SER:HB3	2.14	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:184:GLU:O	1:A:187:LYS:HB2	2.15	0.47
3:C:83:TYR:HB2	3:C:149:MET:HE1	1.97	0.47
1:A:790:ARG:CG	1:A:790:ARG:HH11	2.22	0.47
1:A:177:GLU:O	1:A:179:GLY:N	2.39	0.47
3:C:3:LEU:HD23	3:C:7:GLU:OE1	2.15	0.47
1:A:394:LEU:N	1:A:394:LEU:HD12	2.30	0.46
1:A:137:ILE:O	1:A:141:ARG:HB2	2.15	0.46
1:A:28:PHE:CZ	1:A:77:MET:O	2.68	0.46
1:A:108:THR:O	1:A:109:ALA:HB2	2.15	0.46
1:A:231:ASN:ND2	1:A:241:SER:OG	2.48	0.46
1:A:619:ALA:O	1:A:623:ARG:CG	2.63	0.46
1:A:479:TYR:O	1:A:480:THR:C	2.52	0.46
3:C:82:THR:H	3:C:85:ASP:HB2	1.81	0.46
1:A:262:ILE:CG2	1:A:263:GLU:N	2.78	0.46
1:A:708:PRO:O	1:A:710:ARG:CD	2.63	0.46
1:A:365:GLN:HB2	1:A:366:ARG:H	1.52	0.46
1:A:430:LEU:CG	1:A:431:TYR:N	2.78	0.46
1:A:119:PHE:CD1	1:A:696:VAL:CG1	2.89	0.46
1:A:752:GLU:O	1:A:763:LYS:N	2.48	0.46
1:A:621:LEU:HD12	1:A:622:PHE:HE1	1.81	0.46
1:A:119:PHE:CD1	1:A:696:VAL:HG13	2.48	0.46
2:B:140:ASP:OD1	2:B:140:ASP:C	2.53	0.46
1:A:493:PHE:HD1	1:A:494:VAL:HG23	1.79	0.46
1:A:225:VAL:HG12	1:A:229:PHE:CE1	2.51	0.46
1:A:101:ASN:O	1:A:104:ARG:N	2.49	0.46
1:A:174:ILE:HG12	1:A:668:VAL:CB	2.39	0.46
1:A:552:TYR:O	1:A:553:GLN:C	2.54	0.46
1:A:444:ARG:O	1:A:447:ASP:HB3	2.15	0.46
1:A:131:ILE:CG2	1:A:151:HIS:HE2	2.26	0.46
1:A:414:GLN:OE1	1:A:418:GLN:NE2	2.49	0.46
1:A:808:LEU:HD21	2:B:112:LEU:O	2.16	0.46
1:A:186:THR:O	1:A:187:LYS:C	2.54	0.46
1:A:419:VAL:O	1:A:422:SER:N	2.49	0.46
1:A:798:TYR:O	1:A:801:LEU:CB	2.56	0.46
1:A:46:ALA:C	1:A:47:GLU:HG3	2.36	0.46
1:A:176:GLY:O	1:A:177:GLU:C	2.53	0.46
1:A:806:ILE:O	1:A:806:ILE:HG22	2.15	0.46
1:A:280:ARG:HG2	1:A:281:ASN:N	2.29	0.46
1:A:194:ALA:O	1:A:196:VAL:N	2.49	0.46
1:A:498:GLU:O	1:A:502:LYS:N	2.45	0.46
1:A:663:THR:O	1:A:665:PRO:CD	2.63	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:118:SER:HG	3:C:121:GLU:HB2	1.81	0.46
1:A:135:SER:O	1:A:139:LYS:HG3	2.16	0.46
1:A:414:GLN:HE22	1:A:418:GLN:HE21	1.63	0.45
1:A:300:MET:O	1:A:301:LEU:CB	2.64	0.45
1:A:620:GLU:HG3	1:A:621:LEU:H	1.81	0.45
1:A:136:VAL:HG13	1:A:140:TYR:CE1	2.51	0.45
3:C:106:LEU:HG	3:C:110:LEU:HD11	1.98	0.45
1:A:112:ILE:O	1:A:122:ALA:HA	2.15	0.45
1:A:298:GLU:O	1:A:300:MET:N	2.49	0.45
1:A:60:ILE:CG2	1:A:61:VAL:H	2.29	0.45
1:A:717:LYS:CG	1:A:718:GLN:N	2.79	0.45
1:A:284:ILE:HA	1:A:287:GLN:CD	2.37	0.45
1:A:285:PHE:O	1:A:289:CYS:SG	2.72	0.45
1:A:378:ALA:O	1:A:382:LYS:HG3	2.16	0.45
1:A:691:LEU:CD2	1:A:696:VAL:HG21	2.45	0.45
1:A:525:LYS:HG3	1:A:525:LYS:O	2.16	0.45
1:A:244:GLY:O	1:A:265:TYR:HB2	2.16	0.45
1:A:52:LYS:HD3	1:A:55:GLU:OE1	2.16	0.45
1:A:543:ASP:O	1:A:546:SER:N	2.49	0.45
1:A:430:LEU:HG	1:A:431:TYR:N	2.32	0.45
2:B:37:ILE:HG12	2:B:60:LEU:CD1	2.47	0.45
3:C:12:LYS:O	3:C:13:GLU:C	2.53	0.45
1:A:383:VAL:HG23	1:A:384:ALA:H	1.80	0.45
1:A:417:GLN:O	1:A:419:VAL:N	2.50	0.45
1:A:190:ILE:O	1:A:191:MET:C	2.52	0.45
1:A:106:ARG:HB3	1:A:111:LEU:CB	2.46	0.45
2:B:86:GLU:O	2:B:90:ARG:HB2	2.17	0.45
2:B:144:PHE:O	2:B:148:ILE:HG13	2.16	0.45
3:C:118:SER:O	3:C:121:GLU:N	2.50	0.45
1:A:819:LEU:HD12	1:A:819:LEU:HA	1.76	0.45
1:A:657:MET:O	1:A:658:CYS:C	2.55	0.45
3:C:29:ASP:C	3:C:31:PHE:N	2.70	0.45
1:A:250:HIS:HA	1:A:455:TYR:CA	2.47	0.45
1:A:250:HIS:HA	1:A:455:TYR:HB3	1.98	0.45
1:A:783:SER:HA	1:A:786:GLN:HE21	1.81	0.45
1:A:26:ALA:HA	1:A:27:PRO:HD3	1.80	0.45
3:C:90:PHE:CE1	3:C:109:VAL:HG11	2.51	0.45
1:A:598:ASN:HD22	1:A:645:ILE:HB	1.81	0.45
1:A:607:VAL:HG12	1:A:608:SER:N	2.32	0.45
1:A:215:LEU:HD11	1:A:260:ALA:CB	2.38	0.45
3:C:42:ILE:C	3:C:44:PRO:HD3	2.34	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:50:THR:OG1	2:B:51:PRO:HD2	2.16	0.45
1:A:769:ASN:O	1:A:770:LEU:C	2.55	0.45
1:A:467:PHE:HB2	1:A:470:ASN:HD21	1.82	0.45
1:A:686:LEU:O	1:A:690:GLN:HG3	2.17	0.45
3:C:31:PHE:CD2	3:C:58:MET:HG2	2.52	0.45
1:A:706:GLY:O	1:A:708:PRO:HD3	2.17	0.45
2:B:114:GLU:O	2:B:114:GLU:HG2	2.17	0.45
1:A:229:PHE:CE2	1:A:284:ILE:HD12	2.52	0.45
1:A:384:ALA:HB1	1:A:389:ILE:HG13	1.97	0.45
1:A:428:LYS:O	1:A:429:SER:C	2.55	0.45
1:A:667:PHE:O	1:A:668:VAL:HG23	2.17	0.45
1:A:334:ALA:CA	1:A:337:ILE:HD12	2.34	0.45
1:A:293:ILE:HG22	1:A:296:LEU:N	2.30	0.45
3:C:55:THR:HG21	3:C:60:GLU:HB2	1.98	0.45
3:C:80:GLN:OE1	3:C:80:GLN:HA	2.15	0.45
1:A:517:GLN:O	1:A:518:MET:C	2.54	0.45
1:A:99:VAL:HG21	1:A:700:ILE:CD1	2.47	0.44
1:A:780:LYS:HG3	3:C:45:ARG:NH1	2.32	0.44
3:C:106:LEU:HG	3:C:110:LEU:CD1	2.48	0.44
1:A:805:ARG:HH11	3:C:17:LEU:HA	1.82	0.44
1:A:604:GLU:H	1:A:604:GLU:CD	2.20	0.44
1:A:226:LEU:HA	1:A:229:PHE:HD1	1.82	0.44
1:A:771:GLU:O	1:A:774:ARG:N	2.50	0.44
1:A:520:ILE:O	1:A:524:GLU:HG2	2.17	0.44
1:A:582:HIS:O	1:A:583:TYR:C	2.55	0.44
1:A:660:LEU:C	1:A:662:ARG:N	2.70	0.44
2:B:149:LYS:O	2:B:150:GLY:C	2.54	0.44
3:C:90:PHE:CD2	3:C:145:VAL:CG2	3.01	0.44
2:B:28:ASP:HB2	2:B:39:ASP:OD2	2.17	0.44
1:A:310:SER:HB2	1:A:360:GLU:OE1	2.18	0.44
1:A:591:ILE:HA	1:A:594:TRP:NE1	2.32	0.44
1:A:319:VAL:HB	1:A:322:ILE:HB	1.98	0.44
1:A:423:VAL:O	1:A:426:LEU:N	2.51	0.44
1:A:793:LEU:O	1:A:796:LYS:HB3	2.17	0.44
1:A:49:GLN:NE2	1:A:59:LYS:HB2	2.33	0.44
1:A:805:ARG:NH1	3:C:17:LEU:HA	2.33	0.44
1:A:402:LYS:HG3	1:A:409:MET:HB2	1.98	0.44
1:A:271:ARG:NH1	1:A:280:ARG:O	2.51	0.44
1:A:621:LEU:HB2	1:A:622:PHE:H	1.65	0.44
2:B:18:GLN:C	2:B:20:MET:H	2.20	0.44
1:A:483:ARG:O	1:A:486:GLN:HB3	2.17	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:827:TRP:CZ3	1:A:831:ALA:HB2	2.53	0.44
1:A:716:PHE:CD2	1:A:739:SER:HB3	2.53	0.44
1:A:667:PHE:HD2	1:A:669:ARG:HH22	1.64	0.44
1:A:832:LYS:HG2	2:B:47:LEU:HD22	2.00	0.44
3:C:23:GLY:O	3:C:25:ASP:CG	2.56	0.44
1:A:811:ILE:HD11	2:B:93:PHE:HA	1.99	0.44
1:A:767:LEU:HD12	1:A:767:LEU:HA	1.64	0.44
2:B:109:ILE:O	2:B:109:ILE:HG13	2.17	0.44
1:A:696:VAL:HG23	1:A:697:LEU:N	2.29	0.44
1:A:71:LYS:C	1:A:74:ILE:HG12	2.38	0.44
3:C:108:HIS:O	3:C:112:GLY:N	2.51	0.44
1:A:85:LEU:HD12	1:A:86:GLU:H	1.83	0.44
1:A:509:PHE:CD2	1:A:510:ILE:HD12	2.52	0.44
1:A:389:ILE:HD12	1:A:394:LEU:CD1	2.42	0.44
1:A:617:LEU:HB2	1:A:621:LEU:HD21	2.00	0.44
1:A:833:VAL:O	1:A:834:LYS:HD2	2.17	0.44
1:A:133:THR:HG22	1:A:134:ASP:N	2.33	0.44
1:A:814:ASN:HD22	2:B:89:ILE:CD1	2.30	0.44
2:B:98:GLU:C	2:B:100:ASP:N	2.67	0.44
1:A:816:ARG:O	1:A:817:LYS:C	2.56	0.44
1:A:602:ILE:O	1:A:642:PHE:CE1	2.71	0.44
1:A:414:GLN:CG	1:A:419:VAL:HG13	2.47	0.44
1:A:606:VAL:CA	1:A:609:LEU:HB3	2.48	0.44
1:A:700:ILE:O	1:A:701:ARG:C	2.56	0.44
1:A:786:GLN:O	1:A:789:ILE:HB	2.18	0.44
1:A:793:LEU:HD11	3:C:121:GLU:HG2	1.99	0.44
1:A:148:ILE:O	1:A:149:PRO:O	2.35	0.44
1:A:752:GLU:O	1:A:763:LYS:HG2	2.18	0.44
1:A:237:ASN:HD22	1:A:238:ASN:N	2.16	0.43
2:B:69:PHE:O	2:B:72:PHE:HB3	2.17	0.43
1:A:87:ASP:HA	1:A:115:TYR:O	2.18	0.43
1:A:656:LEU:O	1:A:656:LEU:HD12	2.17	0.43
1:A:43:PHE:CG	1:A:97:ALA:HB2	2.52	0.43
1:A:329:LYS:O	1:A:332:ASP:HB3	2.17	0.43
1:A:281:ASN:CB	1:A:285:PHE:CE2	2.94	0.43
1:A:84:LYS:CA	1:A:102:ASN:ND2	2.80	0.43
1:A:653:LEU:O	1:A:654:ASN:C	2.57	0.43
1:A:824:TRP:HB3	1:A:827:TRP:HB2	1.99	0.43
1:A:446:LEU:O	1:A:448:THR:N	2.50	0.43
1:A:253:PRO:HD3	1:A:451:LYS:HG2	2.00	0.43
1:A:753:TYR:O	1:A:754:ARG:NH1	2.43	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:439:VAL:C	1:A:441:ARG:N	2.71	0.43
1:A:412:LYS:HB2	1:A:412:LYS:HE3	1.87	0.43
1:A:350:LYS:O	1:A:353:ALA:N	2.48	0.43
1:A:560:ARG:O	1:A:560:ARG:CG	2.64	0.43
1:A:471:SER:OG	1:A:472:PHE:N	2.50	0.43
1:A:290:SER:O	1:A:292:ALA:N	2.47	0.43
2:B:40:LEU:O	2:B:44:PHE:HB2	2.19	0.43
1:A:156:ALA:O	1:A:157:ASP:C	2.56	0.43
2:B:146:ALA:CB	2:B:151:SER:HB3	2.42	0.43
3:C:122:VAL:HG12	3:C:126:ILE:HD12	1.99	0.43
1:A:439:VAL:O	1:A:442:VAL:HG23	2.19	0.43
3:C:19:ASP:CG	3:C:19:ASP:O	2.56	0.43
1:A:717:LYS:HG3	1:A:718:GLN:H	1.82	0.43
1:A:642:PHE:HD1	1:A:642:PHE:N	2.17	0.43
1:A:225:VAL:HG12	1:A:229:PHE:HE1	1.82	0.43
1:A:368:ARG:HA	1:A:368:ARG:NE	2.34	0.43
1:A:379:GLU:O	1:A:383:VAL:HG22	2.19	0.43
1:A:350:LYS:O	1:A:351:CYS:C	2.57	0.43
1:A:799:LYS:O	1:A:801:LEU:N	2.52	0.43
1:A:230:GLY:HA3	1:A:243:PHE:CD1	2.53	0.43
2:B:99:LEU:O	2:B:100:ASP:C	2.57	0.43
1:A:621:LEU:C	1:A:623:ARG:N	2.70	0.43
1:A:106:ARG:O	1:A:111:LEU:HB2	2.19	0.43
1:A:119:PHE:HE1	1:A:695:GLY:C	2.21	0.43
1:A:119:PHE:CE2	1:A:488:PHE:CD2	3.06	0.43
1:A:555:HIS:O	1:A:556:ILE:C	2.57	0.43
1:A:341:THR:HG22	1:A:342:LYS:H	1.84	0.43
1:A:604:GLU:N	1:A:604:GLU:CD	2.72	0.43
3:C:99:GLY:O	3:C:140:LYS:HA	2.19	0.43
1:A:236:ARG:O	1:A:237:ASN:CB	2.62	0.43
1:A:707:PHE:HB3	1:A:761:PHE:HB3	2.00	0.43
1:A:671:ILE:HG23	1:A:690:GLN:OE1	2.19	0.43
3:C:143:GLU:HA	3:C:146:LYS:HG2	2.01	0.43
3:C:94:ASP:HB2	3:C:141:TYR:HE1	1.84	0.43
1:A:79:PRO:O	1:A:81:LYS:N	2.52	0.43
1:A:245:LYS:CE	1:A:247:ILE:HD11	2.49	0.43
1:A:223:ASN:HB2	1:A:224:PRO:CD	2.47	0.43
1:A:235:VAL:H	1:A:279:GLU:CG	2.31	0.43
1:A:354:SER:HA	1:A:383:VAL:HG12	2.01	0.43
1:A:169:ASN:OD1	1:A:455:TYR:N	2.52	0.43
1:A:384:ALA:HA	1:A:389:ILE:CG1	2.48	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:400:LYS:HA	1:A:414:GLN:HB2	2.01	0.42
1:A:615:GLU:HB3	1:A:617:LEU:HD21	2.01	0.42
1:A:481:ASN:HA	1:A:484:LEU:HB2	2.01	0.42
1:A:594:TRP:C	1:A:596:ASP:N	2.71	0.42
1:A:242:ARG:HB3	1:A:268:GLU:HG2	2.01	0.42
2:B:54:LYS:O	2:B:58:ALA:CB	2.66	0.42
1:A:254:THR:O	1:A:255:GLY:C	2.58	0.42
1:A:284:ILE:HA	1:A:287:GLN:HG3	2.01	0.42
1:A:384:ALA:CA	1:A:389:ILE:HG13	2.50	0.42
1:A:835:PRO:CG	2:B:26:MET:HE3	2.48	0.42
1:A:157:ASP:O	1:A:161:GLN:N	2.43	0.42
1:A:160:TYR:CE1	1:A:164:VAL:HG21	2.54	0.42
1:A:69:VAL:HG12	1:A:70:LYS:N	2.34	0.42
3:C:34:GLY:O	3:C:38:ARG:HG3	2.19	0.42
1:A:412:LYS:O	1:A:413:GLY:C	2.57	0.42
1:A:12:TYR:CE1	1:A:130:PRO:HG3	2.54	0.42
1:A:220:ILE:O	1:A:220:ILE:HG22	2.18	0.42
1:A:221:GLU:O	1:A:224:PRO:HD2	2.19	0.42
1:A:379:GLU:HA	1:A:382:LYS:CG	2.49	0.42
1:A:387:CYS:SG	1:A:610:LEU:HD13	2.59	0.42
1:A:793:LEU:CD1	3:C:121:GLU:CG	2.97	0.42
1:A:365:GLN:HG2	1:A:416:LEU:HD11	2.01	0.42
1:A:503:GLU:C	1:A:505:ILE:H	2.21	0.42
1:A:773:MET:O	1:A:774:ARG:C	2.58	0.42
1:A:591:ILE:HG22	1:A:594:TRP:CD2	2.54	0.42
3:C:1:PRO:HA	3:C:76:MET:HE1	2.02	0.42
3:C:106:LEU:O	3:C:109:VAL:N	2.53	0.42
1:A:52:LYS:NZ	1:A:52:LYS:HB3	2.35	0.42
1:A:817:LYS:O	1:A:820:VAL:HB	2.19	0.42
1:A:121:ILE:HG22	1:A:122:ALA:N	2.35	0.42
1:A:352:THR:O	1:A:355:ILE:HG12	2.20	0.42
1:A:370:GLU:CD	1:A:415:ASN:HB3	2.40	0.42
1:A:163:MET:HB2	1:A:170:GLN:HG2	2.01	0.42
1:A:808:LEU:HA	1:A:808:LEU:HD12	1.62	0.42
1:A:791:GLY:HA2	3:C:38:ARG:HD3	2.01	0.42
1:A:371:GLN:HA	1:A:414:GLN:O	2.19	0.42
1:A:522:LEU:HD13	1:A:529:ILE:HD11	2.01	0.42
1:A:28:PHE:HE1	1:A:77:MET:HG2	1.85	0.42
1:A:173:LEU:N	1:A:173:LEU:HD23	2.35	0.42
1:A:351:CYS:SG	1:A:617:LEU:HD11	2.59	0.42
1:A:140:TYR:O	1:A:141:ARG:C	2.57	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:96:GLU:O	1:A:100:LEU:N	2.43	0.42
2:B:24:PHE:HA	2:B:27:ILE:HG23	2.01	0.42
1:A:532:ILE:O	1:A:535:GLU:N	2.50	0.42
1:A:269:LYS:O	1:A:272:VAL:HG23	2.20	0.42
1:A:235:VAL:HG23	1:A:279:GLU:HG3	2.01	0.42
1:A:285:PHE:HB2	1:A:312:ILE:CD1	2.46	0.42
1:A:416:LEU:O	1:A:420:ILE:CG1	2.67	0.42
1:A:101:ASN:C	1:A:103:LEU:N	2.73	0.42
2:B:40:LEU:HD13	2:B:56:LEU:CD2	2.46	0.42
1:A:439:VAL:O	1:A:442:VAL:N	2.52	0.42
1:A:152:LEU:HD12	1:A:152:LEU:O	2.19	0.42
1:A:417:GLN:O	1:A:418:GLN:C	2.58	0.42
1:A:432:ASP:O	1:A:435:PHE:HB3	2.20	0.42
1:A:481:ASN:O	1:A:482:GLU:C	2.57	0.42
2:B:21:LYS:HG2	2:B:21:LYS:O	2.19	0.42
1:A:681:LEU:O	1:A:682:VAL:HG23	2.19	0.42
3:C:120:GLU:HG3	3:C:121:GLU:H	1.83	0.42
1:A:246:PHE:O	1:A:248:ARG:N	2.52	0.42
3:C:105:GLU:O	3:C:108:HIS:N	2.52	0.42
1:A:280:ARG:HH22	1:A:319:VAL:CG2	2.33	0.42
1:A:473:GLU:O	1:A:477:ILE:HG12	2.20	0.42
1:A:59:LYS:HE2	1:A:64:ASN:OD1	2.20	0.42
3:C:29:ASP:C	3:C:31:PHE:H	2.21	0.42
3:C:36:VAL:HG11	3:C:68:PHE:HZ	1.81	0.42
3:C:66:GLU:CD	3:C:66:GLU:H	2.23	0.42
2:B:142:VAL:HG22	2:B:142:VAL:O	2.19	0.42
1:A:354:SER:O	1:A:358:MET:CG	2.64	0.41
1:A:302:ILE:HD11	1:A:356:LEU:CB	2.50	0.41
1:A:370:GLU:CG	1:A:415:ASN:HB3	2.50	0.41
1:A:419:VAL:O	1:A:420:ILE:C	2.58	0.41
1:A:297:ASN:HD22	1:A:298:GLU:CD	2.22	0.41
1:A:716:PHE:CD2	1:A:739:SER:CB	3.03	0.41
1:A:587:VAL:HG13	1:A:588:PRO:HD2	2.02	0.41
1:A:295:GLU:C	1:A:296:LEU:HD12	2.40	0.41
3:C:1:PRO:HG3	3:C:77:ASP:OD1	2.19	0.41
1:A:124:ASN:OD1	1:A:126:TYR:N	2.52	0.41
1:A:394:LEU:CD1	1:A:394:LEU:H	2.33	0.41
1:A:300:MET:HB3	1:A:353:ALA:HB2	2.02	0.41
1:A:621:LEU:H	1:A:621:LEU:HD23	1.85	0.41
1:A:157:ASP:HB2	1:A:192:TYR:CZ	2.55	0.41
1:A:172:CYS:CA	1:A:666:HIS:HB2	2.43	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:485:GLN:O	1:A:486:GLN:C	2.59	0.41
1:A:563:THR:OG1	1:A:579:GLU:HB2	2.19	0.41
1:A:598:ASN:O	1:A:598:ASN:ND2	2.53	0.41
1:A:830:TYR:O	1:A:834:LYS:HD3	2.20	0.41
1:A:617:LEU:HD23	1:A:618:VAL:N	2.32	0.41
2:B:104:LEU:HD12	2:B:109:ILE:HD13	2.02	0.41
1:A:498:GLU:CG	1:A:499:GLU:N	2.80	0.41
1:A:653:LEU:O	1:A:656:LEU:N	2.52	0.41
1:A:688:LEU:O	1:A:692:GLN:HB2	2.21	0.41
1:A:669:ARG:CB	1:A:694:ASN:HD22	2.31	0.41
1:A:27:PRO:CD	1:A:28:PHE:N	2.83	0.41
1:A:616:PRO:O	1:A:619:ALA:CB	2.63	0.41
1:A:528:GLY:O	1:A:529:ILE:C	2.58	0.41
1:A:717:LYS:CG	1:A:718:GLN:H	2.33	0.41
3:C:83:TYR:O	3:C:87:MET:HG2	2.20	0.41
3:C:106:LEU:O	3:C:107:ARG:C	2.59	0.41
3:C:122:VAL:HG12	3:C:126:ILE:CD1	2.50	0.41
2:B:126:ARG:HB3	2:B:126:ARG:NH1	2.35	0.41
1:A:144:ARG:HG3	1:A:147:GLU:HG3	2.03	0.41
1:A:223:ASN:C	1:A:225:VAL:N	2.73	0.41
1:A:617:LEU:CD2	1:A:617:LEU:N	2.84	0.41
1:A:619:ALA:O	1:A:623:ARG:CB	2.68	0.41
2:B:34:PHE:HB3	2:B:35:ILE:H	1.50	0.41
3:C:6:ASP:C	3:C:6:ASP:OD2	2.58	0.41
1:A:430:LEU:C	1:A:430:LEU:HD12	2.40	0.41
2:B:20:MET:HB2	2:B:69:PHE:CE1	2.49	0.41
1:A:653:LEU:O	1:A:656:LEU:HB3	2.20	0.41
1:A:824:TRP:CE3	1:A:826:TRP:HB2	2.55	0.41
1:A:266:LEU:CD1	1:A:649:HIS:HA	2.41	0.41
3:C:145:VAL:O	3:C:145:VAL:HG12	2.19	0.41
1:A:598:ASN:ND2	1:A:645:ILE:H	2.19	0.41
1:A:712:ILE:H	1:A:712:ILE:HG13	1.59	0.41
1:A:676:GLU:C	1:A:678:ASP:N	2.74	0.41
1:A:9:ASP:C	1:A:11:GLN:N	2.74	0.41
1:A:582:HIS:HD2	1:A:587:VAL:CG2	2.34	0.41
1:A:296:LEU:HD23	1:A:349:PHE:CE2	2.56	0.41
1:A:440:LYS:O	1:A:443:ASN:HB3	2.21	0.41
1:A:711:LEU:O	1:A:759:LYS:CB	2.69	0.41
1:A:708:PRO:O	1:A:710:ARG:HD2	2.20	0.41
1:A:532:ILE:O	1:A:535:GLU:HB3	2.21	0.41
1:A:214:ASN:HB3	1:A:216:GLU:OE1	2.21	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:300:MET:HB3	1:A:353:ALA:CB	2.51	0.41
2:B:73:LEU:O	2:B:77:SER:HB3	2.20	0.41
3:C:95:ARG:HH11	3:C:96:GLU:CB	2.32	0.41
1:A:760:VAL:C	1:A:761:PHE:HD1	2.25	0.41
1:A:827:TRP:O	1:A:827:TRP:CE3	2.71	0.41
1:A:648:VAL:O	1:A:649:HIS:C	2.58	0.41
1:A:77:MET:HE2	1:A:77:MET:HB2	1.92	0.41
1:A:246:PHE:HE1	1:A:457:GLY:HA3	1.85	0.41
3:C:147:LYS:O	3:C:150:THR:N	2.51	0.41
3:C:40:LEU:HA	3:C:40:LEU:HD23	1.91	0.41
1:A:574:GLY:O	1:A:575:HIS:C	2.59	0.41
1:A:303:THR:CG2	1:A:304:PRO:HD2	2.46	0.40
1:A:753:TYR:C	1:A:754:ARG:HG2	2.40	0.40
1:A:701:ARG:HH12	1:A:702:ILE:HD11	1.85	0.40
1:A:475:LEU:HD22	1:A:475:LEU:O	2.20	0.40
1:A:125:PRO:O	1:A:127:ARG:HG2	2.22	0.40
1:A:815:ILE:CG2	1:A:815:ILE:O	2.69	0.40
2:B:146:ALA:C	2:B:148:ILE:H	2.22	0.40
1:A:325:VAL:O	1:A:327:GLU:N	2.55	0.40
1:A:415:ASN:C	1:A:417:GLN:N	2.73	0.40
1:A:417:GLN:HB2	1:A:418:GLN:H	1.71	0.40
1:A:377:THR:HA	1:A:380:ALA:HB3	2.01	0.40
2:B:146:ALA:O	2:B:148:ILE:N	2.54	0.40
1:A:92:THR:HG23	1:A:93:TYR:CD1	2.56	0.40
3:C:33:ILE:HG22	3:C:68:PHE:CE1	2.56	0.40
1:A:217:ASP:O	1:A:218:GLN:C	2.59	0.40
1:A:302:ILE:CG2	1:A:303:THR:N	2.84	0.40
1:A:664:ASN:O	1:A:666:HIS:HD2	2.04	0.40
1:A:771:GLU:O	1:A:772:GLU:C	2.60	0.40
1:A:488:PHE:O	1:A:491:HIS:N	2.53	0.40
1:A:99:VAL:O	1:A:100:LEU:C	2.59	0.40
1:A:777:ARG:O	1:A:778:LEU:C	2.60	0.40
1:A:148:ILE:HG23	1:A:149:PRO:N	2.35	0.40
1:A:177:GLU:C	1:A:179:GLY:N	2.74	0.40
2:B:58:ALA:O	2:B:61:LYS:HB2	2.21	0.40
1:A:281:ASN:ND2	1:A:311:PHE:O	2.54	0.40
1:A:302:ILE:CD1	1:A:356:LEU:CD1	2.99	0.40
1:A:620:GLU:O	1:A:623:ARG:CB	2.69	0.40
1:A:829:LEU:O	1:A:832:LYS:CB	2.70	0.40
3:C:14:VAL:HG21	3:C:40:LEU:CD2	2.51	0.40
1:A:816:ARG:HE	2:B:124:GLU:CD	2.25	0.40

All (3) symmetry-related close contacts are listed below. The label for Atom-2 includes the symmetry operator and encoded unit-cell translations to be applied.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:54:GLU:OE2	2:B:30:ASN:CB[2_736]	1.04	1.16
1:A:54:GLU:OE2	2:B:30:ASN:CA[2_736]	1.56	0.64
1:A:54:GLU:CD	2:B:30:ASN:CB[2_736]	2.09	0.11

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	790/840 (94%)	500 (63%)	189 (24%)	101 (13%)	0	2
2	B	133/157 (85%)	93 (70%)	24 (18%)	16 (12%)	0	3
3	C	153/157 (98%)	116 (76%)	31 (20%)	6 (4%)	4	27
All	All	1076/1154 (93%)	709 (66%)	244 (23%)	123 (11%)	0	3

All (123) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	27	PRO
1	A	30	GLY
1	A	86	GLU
1	A	109	ALA
1	A	131	ILE
1	A	149	PRO
1	A	168	GLU
1	A	235	VAL
1	A	237	ASN
1	A	247	ILE
1	A	281	ASN
1	A	299	VAL
1	A	310	SER
1	A	312	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	326	GLU
1	A	338	LEU
1	A	367	PRO
1	A	399	LEU
1	A	417	GLN
1	A	418	GLN
1	A	464	PHE
1	A	526	PRO
1	A	527	MET
1	A	529	ILE
1	A	565	PRO
1	A	571	PRO
1	A	575	HIS
1	A	591	ILE
1	A	604	GLU
1	A	613	SER
1	A	621	LEU
1	A	623	ARG
1	A	661	ARG
1	A	677	LYS
1	A	708	PRO
2	B	119	ASN
3	C	25	ASP
3	C	52	VAL
3	C	135	LEU
1	A	141	ARG
1	A	195	ARG
1	A	224	PRO
1	A	266	LEU
1	A	291	ASN
1	A	301	LEU
1	A	335	PHE
1	A	337	ILE
1	A	341	THR
1	A	364	LYS
1	A	405	VAL
1	A	429	SER
1	A	434	MET
1	A	440	LYS
1	A	448	THR
1	A	449	LYS
1	A	556	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	566	GLY
1	A	573	GLN
1	A	618	VAL
1	A	706	GLY
1	A	709	SER
1	A	742	ILE
1	A	781	ILE
2	B	19	GLU
2	B	62	GLU
2	B	64	PRO
2	B	94	GLY
2	B	125	MET
2	B	150	GLY
3	C	2	LYS
3	C	30	ALA
1	A	17	ARG
1	A	82	PHE
1	A	102	ASN
1	A	165	THR
1	A	178	SER
1	A	223	ASN
1	A	320	ASP
1	A	375	ASP
1	A	382	LYS
1	A	611	ALA
1	A	757	THR
1	A	798	TYR
2	B	50	THR
2	B	126	ARG
2	B	149	LYS
3	C	54	GLY
1	A	54	GLU
1	A	81	LYS
1	A	371	GLN
1	A	394	LEU
1	A	447	ASP
1	A	570	ARG
1	A	619	ALA
1	A	663	THR
1	A	747	GLN
1	A	771	GLU
2	B	53	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
2	B	134	VAL
1	A	25	THR
1	A	80	PRO
1	A	156	ALA
1	A	348	MET
1	A	366	ARG
1	A	480	THR
1	A	605	ASN
1	A	735	GLY
1	A	741	LYS
2	B	51	PRO
1	A	33	ASN
1	A	110	GLY
1	A	553	GLN
2	B	66	PRO
2	B	99	LEU
1	A	61	VAL
1	A	307	GLY
1	A	315	GLY
1	A	439	VAL
1	A	401	PRO
1	A	403	VAL
2	B	145	VAL
1	A	525	LYS
1	A	325	VAL

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	683/737 (93%)	564 (83%)	119 (17%)	2	12
2	B	117/136 (86%)	99 (85%)	18 (15%)	3	16
3	C	131/134 (98%)	113 (86%)	18 (14%)	4	21
All	All	931/1007 (92%)	776 (83%)	155 (17%)	3	13

All (155) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	7	ASP
1	A	9	ASP
1	A	15	VAL
1	A	17	ARG
1	A	20	MET
1	A	21	MET
1	A	24	GLN
1	A	27	PRO
1	A	31	LYS
1	A	34	CYS
1	A	47	GLU
1	A	49	GLN
1	A	59	LYS
1	A	62	SER
1	A	81	LYS
1	A	98	SER
1	A	127	ARG
1	A	128	ARG
1	A	146	THR
1	A	148	ILE
1	A	149	PRO
1	A	154	SER
1	A	160	TYR
1	A	166	ASP
1	A	168	GLU
1	A	178	SER
1	A	185	SER
1	A	193	PHE
1	A	215	LEU
1	A	224	PRO
1	A	234	THR
1	A	237	ASN
1	A	256	LYS
1	A	261	ASP
1	A	267	LEU
1	A	280	ARG
1	A	284	ILE
1	A	285	PHE
1	A	287	GLN
1	A	291	ASN
1	A	299	VAL
1	A	300	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	312	ILE
1	A	314	GLN
1	A	317	LEU
1	A	322	ILE
1	A	324	ASP
1	A	326	GLU
1	A	340	PHE
1	A	341	THR
1	A	342	LYS
1	A	343	GLU
1	A	355	ILE
1	A	362	LYS
1	A	365	GLN
1	A	368	ARG
1	A	369	GLU
1	A	373	GLU
1	A	385	PHE
1	A	393	ASP
1	A	398	LEU
1	A	408	GLU
1	A	409	MET
1	A	419	VAL
1	A	430	LEU
1	A	433	ARG
1	A	442	VAL
1	A	449	LYS
1	A	460	ASP
1	A	468	ASP
1	A	492	MET
1	A	498	GLU
1	A	505	ILE
1	A	510	ILE
1	A	522	LEU
1	A	525	LYS
1	A	526	PRO
1	A	536	GLU
1	A	556	ILE
1	A	558	LYS
1	A	560	ARG
1	A	567	LYS
1	A	571	PRO
1	A	575	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	577	HIS
1	A	604	GLU
1	A	605	ASN
1	A	606	VAL
1	A	612	VAL
1	A	613	SER
1	A	615	GLU
1	A	620	GLU
1	A	621	LEU
1	A	622	PHE
1	A	642	PHE
1	A	644	THR
1	A	651	GLU
1	A	654	ASN
1	A	696	VAL
1	A	700	ILE
1	A	701	ARG
1	A	703	CYS
1	A	710	ARG
1	A	712	ILE
1	A	718	GLN
1	A	729	PRO
1	A	737	THR
1	A	747	GLN
1	A	748	MET
1	A	752	GLU
1	A	761	PHE
1	A	767	LEU
1	A	776	GLU
1	A	779	SER
1	A	780	LYS
1	A	795	ARG
1	A	809	SER
1	A	823	ASN
1	A	827	TRP
2	B	20	MET
2	B	36	ASP
2	B	39	ASP
2	B	40	LEU
2	B	44	PHE
2	B	47	LEU
2	B	49	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
2	B	52	ASP
2	B	53	ASP
2	B	57	THR
2	B	67	LEU
2	B	76	PHE
2	B	87	GLU
2	B	98	GLU
2	B	101	THR
2	B	111	ASP
2	B	119	ASN
2	B	124	GLU
3	C	5	GLN
3	C	6	ASP
3	C	35	ASP
3	C	57	LYS
3	C	58	MET
3	C	67	GLU
3	C	73	GLU
3	C	75	LEU
3	C	80	GLN
3	C	90	PHE
3	C	95	ARG
3	C	96	GLU
3	C	101	ILE
3	C	102	SER
3	C	107	ARG
3	C	116	ARG
3	C	139	VAL
3	C	146	LYS

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (35) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	11	GLN
1	A	49	GLN
1	A	78	ASN
1	A	102	ASN
1	A	162	ASN
1	A	231	ASN
1	A	237	ASN
1	A	239	ASN
1	A	287	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	314	GLN
1	A	414	GLN
1	A	418	GLN
1	A	436	ASN
1	A	470	ASN
1	A	478	ASN
1	A	481	ASN
1	A	486	GLN
1	A	489	ASN
1	A	491	HIS
1	A	517	GLN
1	A	555	HIS
1	A	598	ASN
1	A	605	ASN
1	A	654	ASN
1	A	664	ASN
1	A	692	GLN
1	A	694	ASN
1	A	718	GLN
1	A	769	ASN
1	A	786	GLN
1	A	804	GLN
1	A	812	GLN
1	A	814	ASN
2	B	91	ASN
3	C	138	ASN

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

Of 2 ligands modelled in this entry, 2 are monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

5.7 Other polymers

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data

6.1 Protein, DNA and RNA chains

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	798/840 (95%)	0.08	46 (5%) 26 20	20, 106, 189, 202	0
2	B	135/157 (85%)	0.17	11 (8%) 15 10	26, 104, 229, 246	0
3	C	155/157 (98%)	-0.41	1 (0%) 90 87	24, 54, 92, 118	0
All	All	1088/1154 (94%)	0.02	58 (5%) 30 23	20, 94, 196, 246	0

All (58) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	260	ALA	11.6
1	A	569	THR	8.3
2	B	72	PHE	6.2
1	A	408	GLU	5.3
1	A	303	THR	5.1
1	A	306	SER	4.8
1	A	304	PRO	4.8
1	A	376	GLY	4.4
2	B	44	PHE	4.4
2	B	29	GLN	4.1
1	A	368	ARG	4.1
1	A	26	ALA	3.8
2	B	47	LEU	3.8
1	A	200	LEU	3.7
1	A	55	GLU	3.6
1	A	571	PRO	3.6
1	A	308	LEU	3.6
1	A	570	ARG	3.6
2	B	73	LEU	3.5
1	A	367	PRO	3.5
1	A	68	THR	3.3
1	A	25	THR	3.2
1	A	283	HIS	3.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	349	PHE	3.1
1	A	259	GLY	3.0
2	B	67	LEU	2.9
2	B	35	ILE	2.9
1	A	305	ASP	2.9
1	A	396	LYS	2.8
1	A	52	LYS	2.8
1	A	377	THR	2.8
1	A	53	GLY	2.8
1	A	540	PRO	2.6
2	B	43	MET	2.6
1	A	832	LYS	2.5
1	A	48	ILE	2.5
2	B	48	GLY	2.5
1	A	352	THR	2.4
1	A	568	PRO	2.3
2	B	40	LEU	2.3
1	A	406	GLY	2.3
1	A	289	CYS	2.2
1	A	300	MET	2.2
1	A	435	PHE	2.2
1	A	131	ILE	2.2
1	A	830	TYR	2.2
1	A	270	SER	2.2
2	B	68	ASN	2.1
1	A	348	MET	2.1
1	A	537	CYS	2.1
1	A	197	ALA	2.1
3	C	1	PRO	2.1
1	A	143	LYS	2.1
1	A	54	GLU	2.1
1	A	434	MET	2.0
1	A	228	ALA	2.0
1	A	13	LEU	2.0
1	A	172	CYS	2.0

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

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

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. LLDF column lists the quality of electron density of the group with respect to its neighbouring residues in protein, DNA or RNA chains. The B-factors column lists the minimum, median, 95th percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled 'Q< 0.9' lists the number of atoms with occupancy less than 0.9.

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	LLDF	B-factors(\AA^2)	Q<0.9
5	CA	C	991	1/1	0.75	0.96	51.70	259,259,259,259	0
4	MG	B	990	1/1	0.90	0.04	-1.68	25,25,25,25	0

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.