



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 08:09 PM UTC

PDB ID : 1IWG / pdb_00001iwg
Title : Crystal structure of Bacterial Multidrug Efflux transporter AcrB
Authors : Murakami, S.; Nakashima, R.; Yamashita, E.; Yamaguchi, A.
Deposited on : 2002-05-15
Resolution : 3.50 Å(reported)

This is a Full wwPDB X-ray Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/XrayValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

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

MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0
Xtriage (Phenix) : **NOT EXECUTED**
EDS : **NOT EXECUTED**
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.49

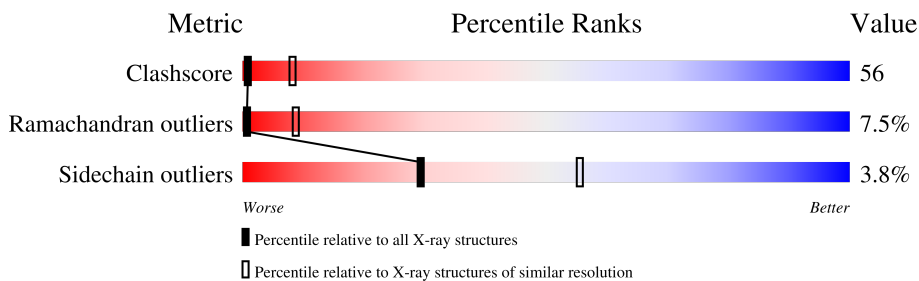
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.50 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	190562	1140 (3.54-3.46)
Ramachandran outliers	187476	1113 (3.54-3.46)
Sidechain outliers	187428	1114 (3.54-3.46)

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 of the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria respectively. 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 $\leq 5\%$.

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	1053	

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 7639 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

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

- Molecule 1 is a protein called AcrB.

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

There are 4 discrepancies between the modelled and reference sequences:

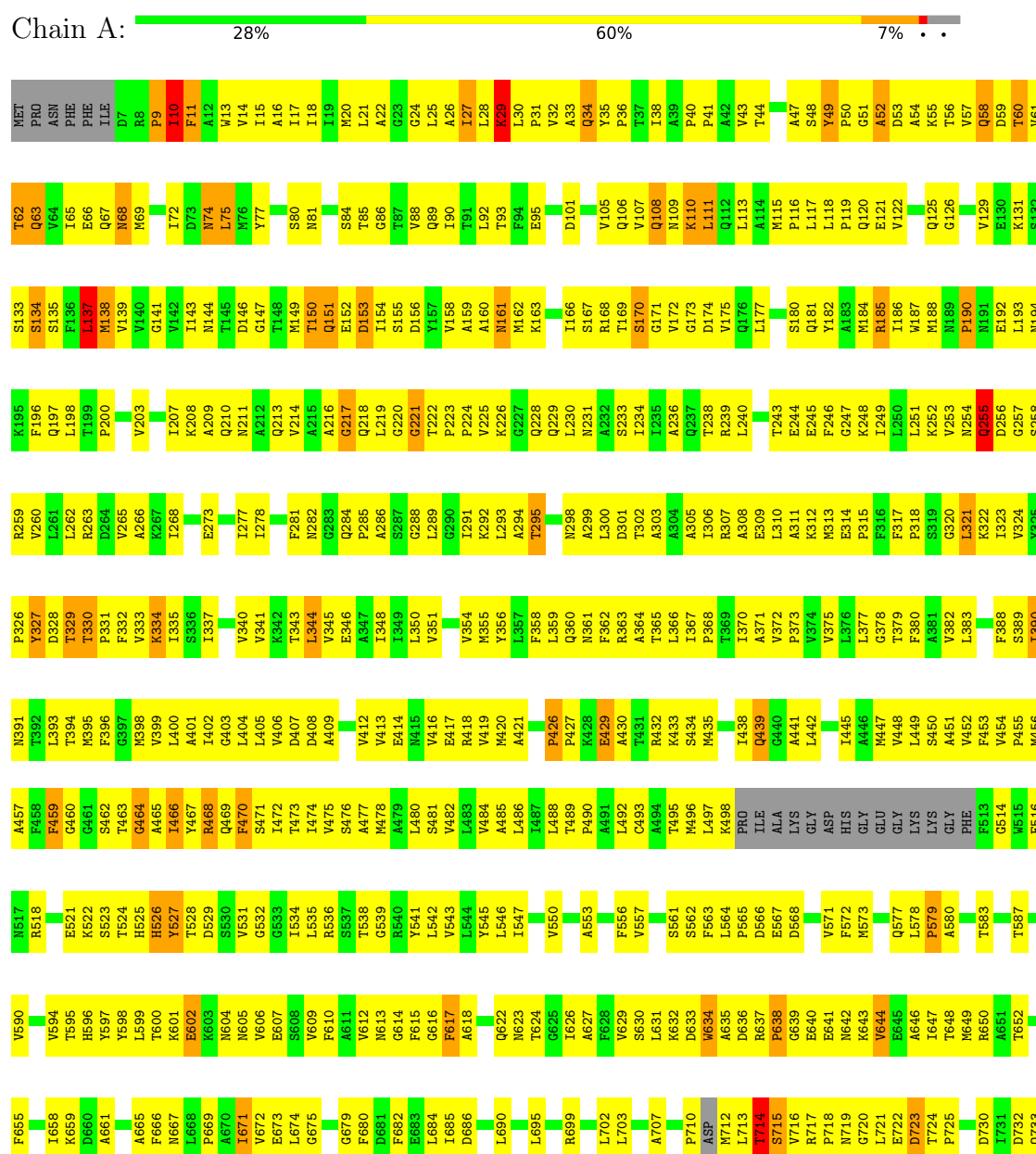
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1050	HIS	-	expression tag	UNP P31224
A	1051	HIS	-	expression tag	UNP P31224
A	1052	HIS	-	expression tag	UNP P31224
A	1053	HIS	-	expression tag	UNP P31224

3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry. 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. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

Note EDS was not executed.

• Molecule 1: AcrB





4 Data and refinement statistics

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

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

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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	0.31	1/7779 (0.0%)	0.84	16/10563 (0.2%)

All (1) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	949	ALA	N-CA	-6.35	1.37	1.46

All (16) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	949	ALA	CA-C-N	-15.75	93.58	121.14
1	A	949	ALA	C-N-CA	-15.75	93.58	121.14
1	A	110	LYS	N-CA-C	-8.57	102.95	113.41
1	A	844	MET	N-CA-C	-6.07	105.79	113.43
1	A	49	TYR	CA-C-N	6.01	127.35	119.84
1	A	49	TYR	C-N-CA	6.01	127.35	119.84
1	A	111	LEU	N-CA-C	-5.86	105.03	111.82
1	A	426	PRO	N-CA-C	5.70	117.65	110.70
1	A	897	ILE	CB-CA-C	-5.46	108.56	114.35
1	A	60	THR	N-CA-C	-5.45	108.40	114.62
1	A	1022	VAL	CA-C-N	5.28	126.43	119.84
1	A	1022	VAL	C-N-CA	5.28	126.43	119.84
1	A	618	ALA	N-CA-C	-5.26	105.54	111.28
1	A	950	LYS	CB-CA-C	5.24	120.95	109.99
1	A	1026	PHE	N-CA-C	-5.23	106.00	112.38
1	A	597	TYR	N-CA-C	-5.02	105.26	111.33

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

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	7639	0	7800	861	1
All	All	7639	0	7800	861	1

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 56.

All (861) close contacts within the same asymmetric unit are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:598:TYR:HB3	1:A:606:VAL:HG21	1.39	1.05
1:A:108:GLN:HB3	1:A:129:VAL:HG11	1.42	0.99
1:A:151:GLN:HB3	1:A:285:PRO:HB3	1.45	0.97
1:A:240:LEU:HD12	1:A:245:GLU:HB3	1.42	0.97
1:A:904:VAL:HG21	1:A:942:ALA:HB2	1.46	0.96
1:A:686:ASP:HB3	1:A:823:PRO:HG2	1.47	0.94
1:A:367:ILE:HG12	1:A:492:LEU:HD22	1.50	0.93
1:A:800:PRO:HG2	1:A:803:ALA:HB2	1.47	0.93
1:A:32:VAL:HG12	1:A:390:ILE:HD12	1.47	0.93
1:A:905:VAL:HB	1:A:906:PRO:HD3	1.49	0.92
1:A:743:ILE:HD12	1:A:743:ILE:H	1.32	0.92
1:A:1027:VAL:HG23	1:A:1028:VAL:H	1.34	0.92
1:A:991:ILE:HG22	1:A:992:SER:H	1.34	0.90
1:A:1018:ALA:HB1	1:A:1024:VAL:HG21	1.54	0.89
1:A:351:VAL:HG21	1:A:406:VAL:HG11	1.50	0.89
1:A:562:SER:O	1:A:924:ASP:HA	1.72	0.89
1:A:69:MET:HE2	1:A:72:ILE:HD11	1.51	0.89
1:A:946:VAL:O	1:A:950:LYS:N	2.07	0.87
1:A:561:SER:HA	1:A:923:ASN:HB3	1.57	0.87
1:A:60:THR:HG23	1:A:61:VAL:HG23	1.56	0.87
1:A:110:LYS:HD3	1:A:113:LEU:HD12	1.57	0.87
1:A:200:PRO:HD2	1:A:749:THR:HG22	1.57	0.87
1:A:1022:VAL:HG13	1:A:1023:PRO:HD2	1.55	0.85
1:A:137:LEU:HG	1:A:138:MET:H	1.42	0.85
1:A:949:ALA:O	1:A:950:LYS:HD3	1.76	0.85
1:A:844:MET:HE2	1:A:847:LEU:HD12	1.60	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:985:GLY:O	1:A:988:PRO:HD2	1.78	0.82
1:A:904:VAL:HG22	1:A:1024:VAL:HG22	1.61	0.81
1:A:181:GLN:HE22	1:A:767:ARG:HH21	1.29	0.81
1:A:945:ILE:HA	1:A:971:ARG:NH1	1.95	0.81
1:A:222:THR:HB	1:A:223:PRO:HD3	1.62	0.81
1:A:987:MET:HB3	1:A:988:PRO:HD3	1.63	0.80
1:A:141:GLY:HA2	1:A:288:GLY:HA3	1.64	0.80
1:A:568:ASP:OD1	1:A:644:VAL:HG23	1.80	0.79
1:A:158:VAL:HA	1:A:162:MET:HE3	1.64	0.79
1:A:1023:PRO:HB3	1:A:1027:VAL:HG13	1.63	0.79
1:A:459:PHE:HB2	1:A:464:GLY:HA2	1.63	0.79
1:A:950:LYS:NZ	1:A:1028:VAL:HG11	1.95	0.79
1:A:367:ILE:HB	1:A:368:PRO:HD3	1.64	0.79
1:A:330:THR:HB	1:A:331:PRO:HD3	1.65	0.78
1:A:125:GLN:HG3	1:A:126:GLY:H	1.49	0.77
1:A:790:TYR:CD1	1:A:800:PRO:HA	2.20	0.77
1:A:187:TRP:HZ3	1:A:774:MET:HE2	1.49	0.77
1:A:300:LEU:HD22	1:A:333:VAL:HG11	1.65	0.77
1:A:580:ALA:HB1	1:A:724:THR:HG22	1.66	0.77
1:A:919:ARG:HG2	1:A:920:GLY:H	1.50	0.76
1:A:489:THR:HB	1:A:490:PRO:HD3	1.66	0.76
1:A:247:GLY:HA2	1:A:268:ILE:HD12	1.68	0.76
1:A:721:LEU:HD22	1:A:825:MET:HE3	1.67	0.76
1:A:213:GLN:HG3	1:A:239:ARG:HG3	1.67	0.76
1:A:613:ASN:HD22	1:A:614:GLY:N	1.84	0.75
1:A:948:PHE:O	1:A:952:LEU:HG	1.85	0.75
1:A:57:VAL:HA	1:A:60:THR:HG22	1.68	0.75
1:A:253:VAL:HG12	1:A:259:ARG:HA	1.67	0.75
1:A:904:VAL:HA	1:A:907:LEU:HD22	1.67	0.74
1:A:897:ILE:HG23	1:A:946:VAL:HG11	1.69	0.74
1:A:456:MET:HA	1:A:876:LEU:HB3	1.68	0.74
1:A:484:VAL:HG13	1:A:488:LEU:HB3	1.70	0.74
1:A:465:ALA:HA	1:A:468:ARG:HB3	1.68	0.74
1:A:32:VAL:HA	1:A:390:ILE:HB	1.70	0.73
1:A:973:ARG:HB3	1:A:974:PRO:HD3	1.70	0.73
1:A:398:MET:O	1:A:402:ILE:HG13	1.89	0.73
1:A:903:LEU:O	1:A:907:LEU:HD13	1.88	0.73
1:A:790:TYR:HD1	1:A:800:PRO:HA	1.53	0.73
1:A:723:ASP:HA	1:A:813:SER:HA	1.70	0.72
1:A:596:HIS:HA	1:A:599:LEU:HB2	1.71	0.72
1:A:26:ALA:O	1:A:30:LEU:HB2	1.88	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:90:ILE:HD12	1:A:90:ILE:H	1.55	0.72
1:A:713:LEU:O	1:A:714:THR:HG23	1.89	0.72
1:A:903:LEU:O	1:A:906:PRO:HD2	1.90	0.72
1:A:291:ILE:HG21	1:A:306:ILE:HD11	1.72	0.72
1:A:730:ASP:HB2	1:A:806:SER:HB3	1.72	0.72
1:A:710:PRO:C	1:A:713:LEU:HA	2.15	0.71
1:A:184:MET:HE3	1:A:184:MET:HA	1.72	0.71
1:A:641:GLU:HB3	1:A:650:ARG:HH22	1.55	0.71
1:A:1035:ARG:H	1:A:1035:ARG:HD3	1.55	0.71
1:A:194:ASN:ND2	1:A:798:MET:HG2	2.05	0.71
1:A:162:MET:HG2	1:A:313:MET:SD	2.29	0.71
1:A:358:PHE:HB3	1:A:977:MET:HE2	1.72	0.71
1:A:596:HIS:O	1:A:600:THR:HG22	1.90	0.71
1:A:686:ASP:OD1	1:A:690:LEU:HB2	1.89	0.71
1:A:583:THR:HA	1:A:622:GLN:NE2	2.03	0.71
1:A:101:ASP:O	1:A:105:VAL:HG23	1.90	0.71
1:A:355:MET:HE3	1:A:355:MET:HA	1.73	0.71
1:A:475:VAL:O	1:A:478:MET:HB3	1.91	0.71
1:A:792:ARG:HA	1:A:798:MET:HE3	1.73	0.71
1:A:602:GLU:HG3	1:A:605:ASN:HB2	1.73	0.71
1:A:281:PHE:CZ	1:A:324:VAL:HG21	2.25	0.71
1:A:890:ALA:C	1:A:891:LEU:HD22	2.16	0.71
1:A:789:TRP:O	1:A:801:PHE:HB2	1.91	0.70
1:A:842:GLU:O	1:A:846:GLN:HG3	1.90	0.70
1:A:435:MET:HE1	1:A:490:PRO:HB3	1.71	0.70
1:A:470:PHE:CD1	1:A:929:VAL:HG21	2.26	0.70
1:A:888:LEU:O	1:A:898:PRO:HG3	1.92	0.70
1:A:405:LEU:HD22	1:A:481:SER:HB3	1.73	0.70
1:A:222:THR:HB	1:A:223:PRO:CD	2.21	0.70
1:A:1015:THR:O	1:A:1019:ILE:HG22	1.91	0.70
1:A:712:MET:HB3	1:A:835:LYS:HE2	1.72	0.69
1:A:143:ILE:HG22	1:A:286:ALA:HB2	1.75	0.69
1:A:682:PHE:HE2	1:A:702:LEU:HD11	1.56	0.69
1:A:802:SER:HA	1:A:805:SER:HB3	1.74	0.69
1:A:904:VAL:HG12	1:A:938:SER:HB3	1.73	0.69
1:A:573:MET:HE1	1:A:617:PHE:HE2	1.56	0.69
1:A:1027:VAL:HG23	1:A:1028:VAL:N	2.08	0.68
1:A:408:ASP:HA	1:A:940:LYS:HZ1	1.57	0.68
1:A:1035:ARG:HE	1:A:1036:LYS:HZ3	1.42	0.68
1:A:273:GLU:HG3	1:A:772:TYR:HE2	1.57	0.68
1:A:583:THR:HA	1:A:622:GLN:HE21	1.59	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:950:LYS:HZ2	1:A:1028:VAL:HG11	1.56	0.68
1:A:438:ILE:HG22	1:A:442:LEU:HG	1.75	0.68
1:A:10:ILE:HD13	1:A:11:PHE:CD2	2.29	0.67
1:A:534:ILE:HB	1:A:1026:PHE:HZ	1.58	0.67
1:A:314:GLU:HA	1:A:317:PHE:CD2	2.28	0.67
1:A:401:ALA:O	1:A:405:LEU:HG	1.95	0.67
1:A:671:ILE:HG13	1:A:672:VAL:H	1.58	0.67
1:A:452:VAL:HG23	1:A:453:PHE:HD1	1.58	0.67
1:A:907:LEU:HD23	1:A:1018:ALA:HB2	1.76	0.67
1:A:744:ASN:O	1:A:748:THR:HG22	1.93	0.67
1:A:115:MET:HB2	1:A:116:PRO:HD3	1.77	0.67
1:A:846:GLN:OE1	1:A:847:LEU:HG	1.95	0.66
1:A:979:SER:HB2	1:A:1015:THR:HG21	1.78	0.66
1:A:975:ILE:HG13	1:A:1019:ILE:HD13	1.78	0.66
1:A:695:LEU:HD22	1:A:825:MET:SD	2.36	0.66
1:A:9:PRO:HG3	1:A:495:THR:OG1	1.96	0.65
1:A:564:LEU:HG	1:A:565:PRO:HD2	1.78	0.65
1:A:36:PRO:O	1:A:38:ILE:HG13	1.96	0.65
1:A:310:LEU:HD23	1:A:310:LEU:O	1.95	0.65
1:A:632:LYS:HD2	1:A:633:ASP:OD1	1.97	0.65
1:A:186:ILE:HD13	1:A:262:LEU:HD21	1.77	0.65
1:A:532:GLY:HA2	1:A:535:LEU:HD12	1.78	0.65
1:A:564:LEU:HB3	1:A:671:ILE:HG22	1.79	0.65
1:A:792:ARG:HE	1:A:798:MET:HE1	1.61	0.65
1:A:173:GLY:HA2	1:A:294:ALA:HB2	1.78	0.65
1:A:904:VAL:HG21	1:A:942:ALA:CB	2.25	0.65
1:A:986:VAL:HG12	1:A:990:VAL:HG23	1.78	0.65
1:A:143:ILE:HG22	1:A:286:ALA:CB	2.26	0.64
1:A:228:GLN:HE21	1:A:230:LEU:H	1.45	0.64
1:A:900:SER:HA	1:A:1027:VAL:HB	1.79	0.64
1:A:945:ILE:HG23	1:A:971:ARG:NH2	2.13	0.64
1:A:911:GLY:HA3	1:A:1013:THR:HB	1.80	0.64
1:A:1022:VAL:CG1	1:A:1023:PRO:HD2	2.28	0.64
1:A:531:VAL:O	1:A:535:LEU:HG	1.96	0.64
1:A:960:LEU:HD22	1:A:961:ILE:HG23	1.78	0.64
1:A:432:ARG:HD2	1:A:433:LYS:NZ	2.13	0.64
1:A:210:GLN:O	1:A:240:LEU:HD21	1.98	0.64
1:A:356:TYR:HD1	1:A:365:THR:HG21	1.63	0.63
1:A:390:ILE:HG23	1:A:395:MET:SD	2.38	0.63
1:A:724:THR:HB	1:A:725:PRO:HD2	1.80	0.63
1:A:108:GLN:HB2	1:A:129:VAL:HG21	1.80	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:203:VAL:O	1:A:207:ILE:HG13	1.98	0.63
1:A:777:ALA:O	1:A:781:MET:HG2	1.99	0.63
1:A:986:VAL:O	1:A:990:VAL:HG23	1.98	0.63
1:A:991:ILE:HG22	1:A:992:SER:N	2.11	0.63
1:A:327:TYR:CD2	1:A:571:VAL:HG11	2.34	0.63
1:A:527:TYR:OH	1:A:1019:ILE:HG13	1.99	0.63
1:A:990:VAL:HG22	1:A:1004:GLY:C	2.23	0.63
1:A:403:GLY:HA3	1:A:982:PHE:CD1	2.33	0.63
1:A:150:THR:C	1:A:152:GLU:H	2.07	0.62
1:A:193:LEU:HD23	1:A:265:VAL:HB	1.80	0.62
1:A:354:VAL:CG2	1:A:984:LEU:HD12	2.29	0.62
1:A:778:LYS:HG3	1:A:779:TYR:CD1	2.33	0.62
1:A:532:GLY:O	1:A:536:ARG:HG3	1.99	0.62
1:A:721:LEU:H	1:A:721:LEU:HD12	1.64	0.62
1:A:166:ILE:C	1:A:168:ARG:H	2.07	0.62
1:A:538:THR:HG23	1:A:1030:ARG:HH21	1.65	0.62
1:A:969:ARG:HD2	1:A:969:ARG:O	1.99	0.62
1:A:56:THR:HG22	1:A:60:THR:HG21	1.81	0.62
1:A:493:CYS:SG	1:A:497:LEU:HD22	2.40	0.62
1:A:131:LYS:HB3	1:A:295:THR:H	1.65	0.62
1:A:399:VAL:HA	1:A:402:ILE:HD12	1.81	0.62
1:A:418:ARG:NH1	1:A:418:ARG:HB2	2.15	0.62
1:A:454:VAL:O	1:A:457:ALA:HB3	2.00	0.62
1:A:950:LYS:HZ2	1:A:1028:VAL:CG1	2.12	0.62
1:A:971:ARG:HG3	1:A:971:ARG:HH11	1.65	0.61
1:A:527:TYR:O	1:A:531:VAL:HG23	2.00	0.61
1:A:255:GLN:NE2	1:A:256:ASP:N	2.48	0.61
1:A:435:MET:HA	1:A:438:ILE:HB	1.80	0.61
1:A:719:ASN:HB2	1:A:826:GLU:HB3	1.83	0.61
1:A:553:ALA:O	1:A:557:VAL:HG23	2.00	0.61
1:A:29:LYS:NZ	1:A:29:LYS:HB3	2.15	0.61
1:A:149:MET:HB2	1:A:153:ASP:HB3	1.83	0.61
1:A:451:ALA:O	1:A:455:PRO:HG2	2.00	0.61
1:A:455:PRO:HG3	1:A:883:VAL:HG21	1.81	0.61
1:A:138:MET:HE2	1:A:328:ASP:OD1	2.00	0.61
1:A:546:LEU:O	1:A:550:VAL:HG23	2.01	0.60
1:A:682:PHE:CE2	1:A:702:LEU:HD11	2.36	0.60
1:A:298:ASN:HB2	1:A:301:ASP:HB2	1.83	0.60
1:A:671:ILE:HG13	1:A:672:VAL:N	2.16	0.60
1:A:733:GLN:OE1	1:A:743:ILE:HG12	2.01	0.60
1:A:447:MET:HB3	1:A:887:CYS:HB3	1.83	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:463:THR:O	1:A:466:ILE:HB	2.02	0.60
1:A:901:VAL:HG21	1:A:939:ALA:HA	1.82	0.60
1:A:478:MET:O	1:A:482:VAL:HG23	2.02	0.60
1:A:600:THR:HG23	1:A:601:LYS:H	1.67	0.60
1:A:172:VAL:HG13	1:A:291:ILE:HG23	1.83	0.60
1:A:455:PRO:HB2	1:A:880:SER:OG	2.01	0.60
1:A:638:PRO:HG2	1:A:639:GLY:H	1.65	0.60
1:A:774:MET:O	1:A:775:SER:HB3	2.01	0.60
1:A:877:TYR:O	1:A:881:LEU:HG	2.01	0.60
1:A:30:LEU:HD11	1:A:388:PHE:O	2.02	0.60
1:A:354:VAL:HG21	1:A:984:LEU:HD12	1.83	0.60
1:A:600:THR:HG23	1:A:601:LYS:N	2.17	0.60
1:A:207:ILE:C	1:A:209:ALA:H	2.10	0.59
1:A:31:PRO:O	1:A:389:SER:HB2	2.02	0.59
1:A:658:ILE:C	1:A:659:LYS:HD2	2.27	0.59
1:A:719:ASN:ND2	1:A:815:ARG:HH21	1.99	0.59
1:A:904:VAL:O	1:A:907:LEU:HB2	2.02	0.59
1:A:945:ILE:HG22	1:A:945:ILE:O	2.01	0.59
1:A:426:PRO:HB3	1:A:498:LYS:HZ2	1.66	0.59
1:A:493:CYS:O	1:A:497:LEU:HB2	2.03	0.59
1:A:378:GLY:O	1:A:382:VAL:HG23	2.03	0.59
1:A:655:PHE:HA	1:A:659:LYS:HD3	1.85	0.59
1:A:984:LEU:O	1:A:988:PRO:HD3	2.03	0.59
1:A:92:LEU:HD13	1:A:107:VAL:HG21	1.84	0.59
1:A:332:PHE:HA	1:A:335:ILE:HG22	1.83	0.59
1:A:945:ILE:HD12	1:A:1024:VAL:CG1	2.33	0.59
1:A:213:GLN:HG2	1:A:239:ARG:H	1.68	0.59
1:A:343:THR:HG21	1:A:989:LEU:HD21	1.83	0.59
1:A:1010:GLY:O	1:A:1014:ALA:HB2	2.02	0.59
1:A:447:MET:O	1:A:451:ALA:HB2	2.03	0.59
1:A:658:ILE:O	1:A:659:LYS:HD2	2.02	0.59
1:A:452:VAL:HG23	1:A:453:PHE:CD1	2.37	0.58
1:A:873:ALA:HB3	1:A:874:PRO:HD3	1.85	0.58
1:A:721:LEU:HD12	1:A:721:LEU:N	2.18	0.58
1:A:20:MET:HA	1:A:377:LEU:HD13	1.85	0.58
1:A:380:PHE:CE2	1:A:398:MET:HE2	2.38	0.58
1:A:832:ALA:HB3	1:A:835:LYS:HB2	1.86	0.58
1:A:414:GLU:CD	1:A:974:PRO:HG3	2.29	0.58
1:A:573:MET:HE1	1:A:617:PHE:CE2	2.37	0.58
1:A:166:ILE:HD12	1:A:166:ILE:H	1.69	0.58
1:A:396:PHE:HE1	1:A:999:ALA:HB1	1.69	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:573:MET:HE3	1:A:626:ILE:HD11	1.86	0.58
1:A:198:LEU:HA	1:A:792:ARG:HH21	1.68	0.58
1:A:230:LEU:HD23	1:A:230:LEU:C	2.29	0.58
1:A:707:ALA:O	1:A:710:PRO:HD3	2.03	0.58
1:A:375:VAL:HG11	1:A:405:LEU:HD22	1.85	0.58
1:A:634:TRP:H	1:A:634:TRP:CD1	2.22	0.58
1:A:990:VAL:HG22	1:A:1005:THR:N	2.19	0.58
1:A:43:VAL:HG11	1:A:107:VAL:HG11	1.85	0.58
1:A:90:ILE:HD12	1:A:90:ILE:N	2.18	0.57
1:A:420:MET:HG2	1:A:426:PRO:HA	1.85	0.57
1:A:185:ARG:HG3	1:A:185:ARG:HH11	1.68	0.57
1:A:291:ILE:HG21	1:A:306:ILE:CD1	2.34	0.57
1:A:426:PRO:N	1:A:427:PRO:CD	2.67	0.57
1:A:945:ILE:HG12	1:A:971:ARG:NE	2.19	0.57
1:A:166:ILE:HG22	1:A:175:VAL:HG21	1.86	0.57
1:A:192:GLU:HB3	1:A:265:VAL:HA	1.86	0.57
1:A:524:THR:O	1:A:528:THR:HB	2.04	0.57
1:A:358:PHE:HB3	1:A:977:MET:CE	2.33	0.57
1:A:680:PHE:HB2	1:A:859:TRP:HZ3	1.70	0.57
1:A:160:ALA:O	1:A:161:ASN:HB2	2.04	0.57
1:A:341:VAL:O	1:A:344:LEU:HB3	2.04	0.57
1:A:399:VAL:HA	1:A:402:ILE:CD1	2.34	0.57
1:A:983:ILE:HG22	1:A:983:ILE:O	2.04	0.57
1:A:10:ILE:HD13	1:A:11:PHE:H	1.70	0.57
1:A:882:ILE:O	1:A:886:LEU:HD23	2.05	0.57
1:A:915:ALA:HB2	1:A:1009:GLY:HA3	1.86	0.57
1:A:1030:ARG:O	1:A:1034:SER:HB3	2.05	0.57
1:A:16:ALA:O	1:A:20:MET:HG2	2.04	0.56
1:A:246:PHE:O	1:A:249:ILE:HG12	2.05	0.56
1:A:732:ASP:OD2	1:A:735:LYS:HG3	2.05	0.56
1:A:904:VAL:CG1	1:A:938:SER:HB3	2.35	0.56
1:A:14:VAL:O	1:A:18:ILE:HG13	2.06	0.56
1:A:27:ILE:CD1	1:A:390:ILE:HD11	2.35	0.56
1:A:188:MET:HA	1:A:266:ALA:HB2	1.88	0.56
1:A:194:ASN:C	1:A:196:PHE:H	2.13	0.56
1:A:629:VAL:HG12	1:A:630:SER:N	2.21	0.56
1:A:752:ALA:O	1:A:774:MET:HA	2.05	0.56
1:A:851:LEU:HB3	1:A:852:PRO:HD2	1.87	0.56
1:A:919:ARG:HG2	1:A:920:GLY:N	2.19	0.56
1:A:448:VAL:HG21	1:A:943:ILE:HD11	1.88	0.56
1:A:326:PRO:O	1:A:327:TYR:C	2.48	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:449:LEU:HB2	1:A:478:MET:HE2	1.86	0.56
1:A:467:TYR:CE2	1:A:925:VAL:HG13	2.41	0.56
1:A:606:VAL:HA	1:A:631:LEU:HD23	1.88	0.56
1:A:945:ILE:HD12	1:A:1024:VAL:HG12	1.88	0.56
1:A:166:ILE:HG22	1:A:175:VAL:CG2	2.36	0.56
1:A:402:ILE:O	1:A:406:VAL:HG23	2.05	0.56
1:A:641:GLU:HA	1:A:646:ALA:CB	2.36	0.56
1:A:1023:PRO:C	1:A:1025:PHE:N	2.63	0.56
1:A:190:PRO:HG3	1:A:789:TRP:CE2	2.41	0.56
1:A:312:LYS:O	1:A:315:PRO:HD2	2.05	0.56
1:A:169:THR:HG22	1:A:170:SER:N	2.21	0.56
1:A:255:GLN:NE2	1:A:256:ASP:H	2.04	0.55
1:A:1033:PHE:O	1:A:1034:SER:C	2.48	0.55
1:A:84:SER:C	1:A:86:GLY:H	2.13	0.55
1:A:456:MET:CE	1:A:932:LEU:HD11	2.35	0.55
1:A:777:ALA:C	1:A:779:TYR:H	2.15	0.55
1:A:905:VAL:HB	1:A:906:PRO:CD	2.29	0.55
1:A:41:PRO:HA	1:A:295:THR:HG21	1.88	0.55
1:A:58:GLN:O	1:A:62:THR:HB	2.07	0.55
1:A:80:SER:HB3	1:A:818:ARG:HB2	1.89	0.55
1:A:514:GLY:O	1:A:518:ARG:HG3	2.07	0.55
1:A:901:VAL:CG2	1:A:939:ALA:HA	2.35	0.55
1:A:151:GLN:HB3	1:A:285:PRO:CB	2.29	0.55
1:A:713:LEU:O	1:A:832:ALA:HB2	2.07	0.55
1:A:538:THR:HG23	1:A:1030:ARG:NH2	2.22	0.55
1:A:29:LYS:HB3	1:A:29:LYS:HZ3	1.72	0.55
1:A:778:LYS:HG3	1:A:779:TYR:CE1	2.41	0.55
1:A:792:ARG:NE	1:A:798:MET:HE1	2.22	0.55
1:A:188:MET:HE1	1:A:200:PRO:HB3	1.88	0.55
1:A:221:GLY:O	1:A:222:THR:C	2.50	0.55
1:A:451:ALA:HB1	1:A:884:VAL:HA	1.89	0.55
1:A:743:ILE:H	1:A:743:ILE:CD1	2.08	0.55
1:A:1026:PHE:O	1:A:1030:ARG:HG2	2.07	0.55
1:A:190:PRO:HG3	1:A:789:TRP:CZ2	2.42	0.55
1:A:450:SER:N	1:A:478:MET:HE1	2.22	0.55
1:A:773:VAL:HG13	1:A:773:VAL:O	2.06	0.55
1:A:1030:ARG:C	1:A:1034:SER:HB3	2.32	0.55
1:A:9:PRO:C	1:A:10:ILE:HD12	2.32	0.54
1:A:685:ILE:HD11	1:A:819:TYR:HD2	1.72	0.54
1:A:801:PHE:O	1:A:805:SER:HB2	2.07	0.54
1:A:75:LEU:HD11	1:A:92:LEU:HB3	1.89	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:254:ASN:HB2	1:A:258:SER:OG	2.07	0.54
1:A:291:ILE:HG12	1:A:306:ILE:HD13	1.89	0.54
1:A:432:ARG:HD2	1:A:433:LYS:HZ1	1.71	0.54
1:A:528:THR:O	1:A:531:VAL:HB	2.08	0.54
1:A:949:ALA:C	1:A:950:LYS:HD3	2.30	0.54
1:A:159:ALA:HA	1:A:163:LYS:HB3	1.89	0.54
1:A:277:ILE:HA	1:A:613:ASN:O	2.07	0.54
1:A:985:GLY:C	1:A:988:PRO:HD2	2.33	0.54
1:A:635:ALA:C	1:A:637:ARG:H	2.16	0.54
1:A:984:LEU:O	1:A:987:MET:HB3	2.07	0.54
1:A:1028:VAL:O	1:A:1032:ARG:HB3	2.07	0.54
1:A:897:ILE:N	1:A:898:PRO:CD	2.71	0.54
1:A:949:ALA:O	1:A:950:LYS:C	2.34	0.54
1:A:218:GLN:NE2	1:A:231:ASN:HD21	2.06	0.54
1:A:403:GLY:HA3	1:A:982:PHE:CE1	2.43	0.54
1:A:521:GLU:O	1:A:525:HIS:HB2	2.08	0.54
1:A:594:VAL:HA	1:A:655:PHE:HE1	1.73	0.54
1:A:721:LEU:HD22	1:A:825:MET:CE	2.38	0.54
1:A:133:SER:O	1:A:135:SER:N	2.41	0.54
1:A:426:PRO:CD	1:A:427:PRO:HD3	2.38	0.54
1:A:990:VAL:HG13	1:A:1005:THR:OG1	2.08	0.54
1:A:426:PRO:N	1:A:427:PRO:HD3	2.23	0.53
1:A:1025:PHE:N	1:A:1027:VAL:HG22	2.23	0.53
1:A:10:ILE:CD1	1:A:11:PHE:H	2.21	0.53
1:A:162:MET:HA	1:A:313:MET:SD	2.48	0.53
1:A:721:LEU:HD11	1:A:817:GLU:CD	2.32	0.53
1:A:216:ALA:O	1:A:217:GLY:O	2.26	0.53
1:A:441:ALA:O	1:A:445:ILE:HG12	2.09	0.53
1:A:334:LYS:NZ	1:A:334:LYS:HB3	2.24	0.53
1:A:903:LEU:HD12	1:A:1027:VAL:HG12	1.90	0.53
1:A:1025:PHE:O	1:A:1029:VAL:HG23	2.09	0.53
1:A:36:PRO:HG3	1:A:469:GLN:OE1	2.08	0.53
1:A:27:ILE:HD11	1:A:390:ILE:HD11	1.90	0.53
1:A:92:LEU:HD22	1:A:107:VAL:HG23	1.90	0.53
1:A:1027:VAL:CG2	1:A:1028:VAL:H	2.16	0.53
1:A:111:LEU:HD23	1:A:111:LEU:O	2.08	0.53
1:A:332:PHE:O	1:A:335:ILE:HG22	2.08	0.53
1:A:344:LEU:HD13	1:A:344:LEU:C	2.34	0.53
1:A:699:ARG:HE	1:A:718:PRO:HB3	1.72	0.53
1:A:197:GLN:HA	1:A:798:MET:SD	2.49	0.53
1:A:61:VAL:HG22	1:A:122:VAL:HG21	1.91	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:318:PRO:HG2	1:A:321:LEU:HB2	1.91	0.53
1:A:419:VAL:C	1:A:421:ALA:H	2.17	0.53
1:A:871:ASN:O	1:A:874:PRO:HD2	2.09	0.53
1:A:972:LEU:HD13	1:A:972:LEU:C	2.34	0.53
1:A:1035:ARG:HG2	1:A:1036:LYS:HG3	1.91	0.53
1:A:170:SER:OG	1:A:305:ALA:HB3	2.09	0.52
1:A:743:ILE:HD12	1:A:743:ILE:N	2.12	0.52
1:A:982:PHE:CD2	1:A:1011:MET:HG3	2.44	0.52
1:A:188:MET:HA	1:A:266:ALA:CB	2.39	0.52
1:A:371:ALA:O	1:A:375:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:485:ALA:HA	1:A:489:THR:HB	1.90	0.52
1:A:578:LEU:HB3	1:A:579:PRO:HD2	1.92	0.52
1:A:647:ILE:HA	1:A:650:ARG:NH1	2.25	0.52
1:A:648:THR:O	1:A:652:THR:HG23	2.10	0.52
1:A:716:VAL:O	1:A:717:ARG:HG2	2.08	0.52
1:A:875:SER:O	1:A:879:ILE:HG13	2.09	0.52
1:A:964:THR:HB	1:A:1025:PHE:CE2	2.44	0.52
1:A:200:PRO:HD2	1:A:749:THR:CG2	2.36	0.52
1:A:218:GLN:HA	1:A:234:ILE:HG13	1.91	0.52
1:A:327:TYR:CD2	1:A:327:TYR:C	2.87	0.52
1:A:370:ILE:O	1:A:370:ILE:HG22	2.09	0.52
1:A:476:SER:O	1:A:480:LEU:HG	2.09	0.52
1:A:616:GLY:HA3	1:A:624:THR:HB	1.92	0.52
1:A:21:LEU:O	1:A:22:ALA:C	2.52	0.52
1:A:372:VAL:CG2	1:A:373:PRO:HD3	2.40	0.52
1:A:792:ARG:HG3	1:A:793:ALA:N	2.25	0.52
1:A:10:ILE:O	1:A:11:PHE:C	2.53	0.52
1:A:34:GLN:CD	1:A:333:VAL:HG22	2.34	0.52
1:A:291:ILE:N	1:A:291:ILE:HD12	2.24	0.52
1:A:713:LEU:H	1:A:833:PRO:HD2	1.74	0.52
1:A:950:LYS:NZ	1:A:1028:VAL:CG1	2.70	0.52
1:A:1003:VAL:O	1:A:1007:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:471:SER:O	1:A:475:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:762:PHE:CE1	1:A:764:ASP:HB2	2.44	0.52
1:A:1023:PRO:C	1:A:1025:PHE:H	2.16	0.52
1:A:448:VAL:O	1:A:451:ALA:HB3	2.10	0.52
1:A:895:TRP:HA	1:A:895:TRP:CE3	2.44	0.52
1:A:979:SER:O	1:A:983:ILE:HG13	2.10	0.52
1:A:190:PRO:HD2	1:A:779:TYR:CD2	2.45	0.52
1:A:399:VAL:HG12	1:A:989:LEU:HD11	1.91	0.52
1:A:655:PHE:O	1:A:659:LYS:HB2	2.08	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:960:LEU:CD2	1:A:961:ILE:HG23	2.39	0.52
1:A:34:GLN:HG2	1:A:333:VAL:HG22	1.92	0.52
1:A:149:MET:HE2	1:A:154:ILE:HG12	1.91	0.52
1:A:169:THR:OG1	1:A:309:GLU:HG2	2.10	0.52
1:A:188:MET:HE2	1:A:773:VAL:HG22	1.91	0.52
1:A:310:LEU:HD21	1:A:323:ILE:HD13	1.91	0.52
1:A:343:THR:HG21	1:A:989:LEU:CD2	2.39	0.52
1:A:919:ARG:HH22	1:A:990:VAL:HG12	1.75	0.52
1:A:312:LYS:C	1:A:315:PRO:HD2	2.35	0.51
1:A:965:LEU:HD23	1:A:965:LEU:C	2.35	0.51
1:A:60:THR:CG2	1:A:61:VAL:HG23	2.34	0.51
1:A:214:VAL:O	1:A:236:ALA:HB3	2.11	0.51
1:A:542:LEU:O	1:A:546:LEU:HG	2.11	0.51
1:A:219:LEU:O	1:A:231:ASN:HA	2.09	0.51
1:A:247:GLY:HA2	1:A:268:ILE:CD1	2.39	0.51
1:A:594:VAL:HA	1:A:655:PHE:CE1	2.45	0.51
1:A:156:ASP:HA	1:A:181:GLN:HA	1.92	0.51
1:A:609:VAL:HG12	1:A:610:PHE:N	2.25	0.51
1:A:945:ILE:HA	1:A:971:ARG:CZ	2.40	0.51
1:A:75:LEU:CD1	1:A:92:LEU:HB3	2.41	0.51
1:A:680:PHE:HB2	1:A:859:TRP:CZ3	2.45	0.51
1:A:979:SER:CB	1:A:1015:THR:HG21	2.40	0.51
1:A:375:VAL:HG11	1:A:481:SER:HB3	1.91	0.51
1:A:926:TYR:CE1	1:A:999:ALA:HB1	2.46	0.51
1:A:32:VAL:HB	1:A:337:ILE:HD11	1.93	0.51
1:A:68:ASN:O	1:A:110:LYS:HD2	2.11	0.51
1:A:344:LEU:HD23	1:A:402:ILE:HD11	1.93	0.51
1:A:595:THR:O	1:A:599:LEU:HG	2.11	0.51
1:A:626:ILE:HG13	1:A:627:ALA:N	2.26	0.51
1:A:25:LEU:C	1:A:25:LEU:HD13	2.35	0.51
1:A:180:SER:OG	1:A:273:GLU:HB3	2.11	0.51
1:A:604:ASN:C	1:A:605:ASN:HD22	2.19	0.51
1:A:723:ASP:H	1:A:814:PRO:HD2	1.76	0.51
1:A:901:VAL:HG23	1:A:942:ALA:HB3	1.93	0.51
1:A:880:SER:C	1:A:882:ILE:H	2.19	0.50
1:A:945:ILE:HG12	1:A:971:ARG:CZ	2.41	0.50
1:A:13:TRP:O	1:A:17:ILE:HG13	2.11	0.50
1:A:27:ILE:C	1:A:29:LYS:H	2.19	0.50
1:A:950:LYS:HZ1	1:A:1028:VAL:HG11	1.71	0.50
1:A:580:ALA:HB1	1:A:724:THR:CG2	2.38	0.50
1:A:760:ASN:O	1:A:771:VAL:HB	2.12	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:173:GLY:HA3	1:A:293:LEU:O	2.11	0.50
1:A:281:PHE:CE2	1:A:324:VAL:HG21	2.46	0.50
1:A:463:THR:O	1:A:463:THR:HG22	2.11	0.50
1:A:892:TYR:CE2	1:A:943:ILE:HG23	2.47	0.50
1:A:240:LEU:N	1:A:240:LEU:HD22	2.27	0.50
1:A:472:ILE:HG23	1:A:473:THR:N	2.27	0.50
1:A:598:TYR:CB	1:A:606:VAL:HG21	2.27	0.50
1:A:174:ASP:O	1:A:292:LYS:HB3	2.12	0.50
1:A:372:VAL:HG11	1:A:406:VAL:HG22	1.93	0.50
1:A:741:VAL:HG12	1:A:792:ARG:O	2.12	0.50
1:A:351:VAL:HG23	1:A:981:ALA:HB1	1.92	0.50
1:A:1026:PHE:HB3	1:A:1030:ARG:NH2	2.27	0.50
1:A:154:ILE:O	1:A:155:SER:C	2.55	0.50
1:A:545:TYR:CE2	1:A:903:LEU:HB3	2.47	0.50
1:A:613:ASN:HD22	1:A:614:GLY:H	1.58	0.50
1:A:647:ILE:HA	1:A:650:ARG:HH11	1.77	0.50
1:A:925:VAL:O	1:A:929:VAL:HG23	2.12	0.50
1:A:69:MET:HA	1:A:69:MET:HE3	1.93	0.50
1:A:403:GLY:HA3	1:A:982:PHE:HD1	1.76	0.50
1:A:643:LYS:O	1:A:644:VAL:C	2.55	0.50
1:A:745:ASP:HA	1:A:748:THR:CG2	2.42	0.50
1:A:74:ASN:O	1:A:75:LEU:HB2	2.11	0.49
1:A:652:THR:CG2	1:A:665:ALA:HB3	2.42	0.49
1:A:1026:PHE:CB	1:A:1030:ARG:HH12	2.25	0.49
1:A:438:ILE:HG22	1:A:442:LEU:CG	2.41	0.49
1:A:710:PRO:O	1:A:713:LEU:HA	2.11	0.49
1:A:795:ASP:OD2	1:A:797:GLN:HG2	2.11	0.49
1:A:949:ALA:HB1	1:A:950:LYS:HZ3	1.77	0.49
1:A:314:GLU:HA	1:A:317:PHE:CE2	2.46	0.49
1:A:372:VAL:HG11	1:A:406:VAL:CG2	2.42	0.49
1:A:453:PHE:HE2	1:A:474:ILE:HD12	1.77	0.49
1:A:88:VAL:HG22	1:A:89:GLN:N	2.26	0.49
1:A:525:HIS:O	1:A:526:HIS:C	2.55	0.49
1:A:539:GLY:O	1:A:543:VAL:HG23	2.13	0.49
1:A:556:PHE:HD1	1:A:913:LEU:HD21	1.78	0.49
1:A:587:THR:HG21	1:A:613:ASN:HD21	1.78	0.49
1:A:914:LEU:C	1:A:914:LEU:HD23	2.37	0.49
1:A:9:PRO:O	1:A:10:ILE:C	2.55	0.49
1:A:61:VAL:CG2	1:A:122:VAL:HG21	2.42	0.49
1:A:400:LEU:HD21	1:A:933:THR:OG1	2.12	0.49
1:A:480:LEU:O	1:A:484:VAL:HG23	2.13	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:903:LEU:HD12	1:A:1027:VAL:CG1	2.43	0.49
1:A:47:ALA:HB3	1:A:88:VAL:CG1	2.43	0.49
1:A:72:ILE:HD13	1:A:107:VAL:HA	1.95	0.49
1:A:194:ASN:C	1:A:196:PHE:N	2.69	0.49
1:A:543:VAL:O	1:A:547:ILE:HG13	2.13	0.49
1:A:44:THR:O	1:A:129:VAL:HA	2.13	0.49
1:A:137:LEU:N	1:A:137:LEU:HD23	2.28	0.49
1:A:172:VAL:HG11	1:A:175:VAL:HG22	1.93	0.49
1:A:671:ILE:CG1	1:A:672:VAL:H	2.20	0.49
1:A:702:LEU:HD12	1:A:851:LEU:HD11	1.94	0.49
1:A:754:TRP:CZ2	1:A:786:ILE:HD13	2.48	0.49
1:A:1013:THR:HG22	1:A:1013:THR:O	2.13	0.49
1:A:54:ALA:O	1:A:816:LEU:HD12	2.13	0.49
1:A:379:THR:O	1:A:383:LEU:HG	2.13	0.49
1:A:826:GLU:OE1	1:A:828:LEU:HD21	2.13	0.49
1:A:1026:PHE:HD1	1:A:1026:PHE:H	1.60	0.49
1:A:450:SER:O	1:A:455:PRO:HD3	2.13	0.48
1:A:20:MET:HA	1:A:377:LEU:CD1	2.43	0.48
1:A:139:VAL:HA	1:A:289:LEU:O	2.13	0.48
1:A:836:SER:O	1:A:837:THR:C	2.57	0.48
1:A:211:ASN:CB	1:A:240:LEU:HD23	2.43	0.48
1:A:459:PHE:C	1:A:872:GLN:HE22	2.21	0.48
1:A:577:GLN:OE1	1:A:624:THR:HG22	2.13	0.48
1:A:944:LEU:C	1:A:946:VAL:H	2.21	0.48
1:A:433:LYS:N	1:A:433:LYS:HD2	2.28	0.48
1:A:899:PHE:O	1:A:902:MET:HB2	2.13	0.48
1:A:435:MET:HA	1:A:438:ILE:CG1	2.44	0.48
1:A:712:MET:C	1:A:713:LEU:HD12	2.38	0.48
1:A:713:LEU:HD12	1:A:713:LEU:N	2.29	0.48
1:A:322:LYS:NZ	1:A:322:LYS:HB3	2.29	0.48
1:A:450:SER:CA	1:A:478:MET:HE1	2.43	0.48
1:A:742:SER:HB3	1:A:745:ASP:OD2	2.13	0.48
1:A:138:MET:O	1:A:291:ILE:HD13	2.14	0.48
1:A:166:ILE:H	1:A:166:ILE:CD1	2.26	0.48
1:A:388:PHE:HE1	1:A:472:ILE:HG21	1.79	0.48
1:A:919:ARG:HB3	1:A:921:LEU:HD23	1.95	0.48
1:A:27:ILE:HD13	1:A:380:PHE:CD1	2.49	0.47
1:A:173:GLY:CA	1:A:294:ALA:HB2	2.42	0.47
1:A:613:ASN:HD22	1:A:613:ASN:C	2.18	0.47
1:A:632:LYS:HD3	1:A:633:ASP:H	1.79	0.47
1:A:41:PRO:HA	1:A:295:THR:CG2	2.43	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:62:THR:OG1	1:A:88:VAL:HG21	2.14	0.47
1:A:418:ARG:HE	1:A:970:MET:HB2	1.79	0.47
1:A:907:LEU:O	1:A:910:ILE:HG22	2.14	0.47
1:A:1019:ILE:HG23	1:A:1020:PHE:N	2.29	0.47
1:A:55:LYS:HD2	1:A:55:LYS:N	2.29	0.47
1:A:567:GLU:OE1	1:A:997:SER:HA	2.14	0.47
1:A:911:GLY:CA	1:A:1013:THR:HB	2.43	0.47
1:A:942:ALA:HA	1:A:1024:VAL:HG13	1.96	0.47
1:A:166:ILE:HD12	1:A:166:ILE:N	2.28	0.47
1:A:379:THR:HB	1:A:398:MET:HE1	1.97	0.47
1:A:893:GLU:O	1:A:894:SER:HB3	2.14	0.47
1:A:952:LEU:O	1:A:956:GLU:HB2	2.14	0.47
1:A:11:PHE:O	1:A:15:ILE:HG13	2.14	0.47
1:A:149:MET:HE2	1:A:154:ILE:HA	1.95	0.47
1:A:684:LEU:HD11	1:A:855:VAL:CG1	2.45	0.47
1:A:211:ASN:HB2	1:A:240:LEU:HD23	1.97	0.47
1:A:305:ALA:HA	1:A:308:ALA:HB3	1.96	0.47
1:A:470:PHE:CD2	1:A:929:VAL:HG11	2.49	0.47
1:A:482:VAL:O	1:A:486:LEU:HG	2.14	0.47
1:A:842:GLU:C	1:A:844:MET:H	2.21	0.47
1:A:986:VAL:HA	1:A:989:LEU:HD12	1.95	0.47
1:A:77:TYR:CE1	1:A:93:THR:HB	2.50	0.47
1:A:169:THR:O	1:A:170:SER:C	2.56	0.47
1:A:445:ILE:HG22	1:A:943:ILE:CD1	2.45	0.47
1:A:641:GLU:HB3	1:A:650:ARG:NH2	2.27	0.47
1:A:968:VAL:HB	1:A:1025:PHE:CZ	2.49	0.47
1:A:972:LEU:HD11	1:A:976:LEU:HD22	1.97	0.47
1:A:144:ASN:HA	1:A:320:GLY:O	2.15	0.47
1:A:137:LEU:HG	1:A:138:MET:N	2.22	0.47
1:A:172:VAL:HG11	1:A:175:VAL:CG2	2.45	0.47
1:A:303:ALA:HA	1:A:306:ILE:HD12	1.97	0.47
1:A:399:VAL:CG1	1:A:989:LEU:HD11	2.45	0.47
1:A:531:VAL:O	1:A:534:ILE:HG12	2.14	0.47
1:A:615:PHE:C	1:A:615:PHE:CD2	2.93	0.47
1:A:783:PRO:O	1:A:786:ILE:HG12	2.15	0.47
1:A:971:ARG:O	1:A:974:PRO:HD2	2.15	0.47
1:A:35:TYR:H	1:A:35:TYR:HD1	1.59	0.47
1:A:68:ASN:HD22	1:A:68:ASN:HA	1.52	0.47
1:A:133:SER:O	1:A:134:SER:C	2.58	0.47
1:A:327:TYR:C	1:A:327:TYR:HD2	2.23	0.47
1:A:637:ARG:HD2	1:A:642:ASN:O	2.15	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:760:ASN:CG	1:A:761:ASP:H	2.23	0.47
1:A:924:ASP:OD2	1:A:926:TYR:HB2	2.15	0.47
1:A:986:VAL:HG13	1:A:1004:GLY:HA2	1.96	0.47
1:A:1021:PHE:O	1:A:1022:VAL:O	2.32	0.47
1:A:57:VAL:CA	1:A:60:THR:HG22	2.43	0.46
1:A:713:LEU:H	1:A:832:ALA:HB1	1.80	0.46
1:A:897:ILE:HB	1:A:898:PRO:HD3	1.97	0.46
1:A:34:GLN:CG	1:A:333:VAL:HG22	2.46	0.46
1:A:710:PRO:HB2	1:A:713:LEU:HB3	1.97	0.46
1:A:966:ASP:O	1:A:969:ARG:HB3	2.16	0.46
1:A:24:GLY:O	1:A:27:ILE:HG22	2.15	0.46
1:A:449:LEU:CB	1:A:478:MET:HE2	2.45	0.46
1:A:686:ASP:CB	1:A:823:PRO:HG2	2.33	0.46
1:A:222:THR:O	1:A:224:PRO:HD3	2.15	0.46
1:A:263:ARG:HG2	1:A:263:ARG:O	2.14	0.46
1:A:329:THR:O	1:A:330:THR:C	2.58	0.46
1:A:170:SER:O	1:A:302:THR:HG23	2.14	0.46
1:A:372:VAL:HG23	1:A:373:PRO:HD3	1.95	0.46
1:A:391:ASN:O	1:A:395:MET:HG2	2.15	0.46
1:A:412:VAL:O	1:A:416:VAL:HG23	2.16	0.46
1:A:435:MET:HA	1:A:438:ILE:CB	2.44	0.46
1:A:456:MET:SD	1:A:932:LEU:HD11	2.55	0.46
1:A:774:MET:HE3	1:A:780:ARG:CZ	2.45	0.46
1:A:905:VAL:O	1:A:909:VAL:HG23	2.15	0.46
1:A:334:LYS:HB3	1:A:334:LYS:HZ3	1.81	0.46
1:A:449:LEU:O	1:A:452:VAL:HG22	2.16	0.46
1:A:577:GLN:HE22	1:A:623:ASN:HB3	1.80	0.46
1:A:84:SER:C	1:A:86:GLY:N	2.71	0.46
1:A:218:GLN:CB	1:A:233:SER:HA	2.46	0.46
1:A:277:ILE:HG22	1:A:614:GLY:C	2.40	0.46
1:A:919:ARG:HD2	1:A:921:LEU:CD2	2.46	0.46
1:A:685:ILE:HG22	1:A:686:ASP:N	2.31	0.46
1:A:921:LEU:HD12	1:A:1002:ALA:HA	1.98	0.46
1:A:118:LEU:O	1:A:119:PRO:C	2.59	0.46
1:A:225:VAL:O	1:A:226:LYS:C	2.57	0.46
1:A:324:VAL:HG13	1:A:326:PRO:HD3	1.98	0.46
1:A:407:ASP:CG	1:A:978:THR:HG21	2.41	0.46
1:A:721:LEU:HD11	1:A:817:GLU:OE1	2.16	0.46
1:A:173:GLY:HA3	1:A:293:LEU:C	2.41	0.46
1:A:282:ASN:C	1:A:284:GLN:H	2.24	0.46
1:A:348:ILE:O	1:A:351:VAL:HG12	2.16	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:358:PHE:CB	1:A:977:MET:HE2	2.44	0.46
1:A:416:VAL:O	1:A:420:MET:HG3	2.16	0.46
1:A:605:ASN:HB3	1:A:631:LEU:HD22	1.98	0.46
1:A:635:ALA:C	1:A:637:ARG:N	2.74	0.46
1:A:641:GLU:O	1:A:646:ALA:HB3	2.16	0.46
1:A:468:ARG:O	1:A:472:ILE:HG22	2.16	0.45
1:A:792:ARG:HH11	1:A:792:ARG:HG2	1.80	0.45
1:A:1032:ARG:HH11	1:A:1032:ARG:HG2	1.81	0.45
1:A:768:VAL:HG13	1:A:768:VAL:O	2.16	0.45
1:A:980:LEU:O	1:A:984:LEU:HG	2.16	0.45
1:A:27:ILE:CG2	1:A:28:LEU:N	2.80	0.45
1:A:240:LEU:HB2	1:A:246:PHE:CE1	2.51	0.45
1:A:463:THR:HA	1:A:466:ILE:HG13	1.97	0.45
1:A:605:ASN:HD21	1:A:642:ASN:ND2	2.13	0.45
1:A:846:GLN:OE1	1:A:847:LEU:N	2.49	0.45
1:A:192:GLU:O	1:A:196:PHE:HD1	2.00	0.45
1:A:1025:PHE:HD2	1:A:1025:PHE:HA	1.65	0.45
1:A:418:ARG:CB	1:A:418:ARG:HH11	2.30	0.45
1:A:185:ARG:HG2	1:A:187:TRP:CZ2	2.52	0.45
1:A:278:ILE:O	1:A:278:ILE:HG13	2.16	0.45
1:A:447:MET:HE2	1:A:447:MET:HA	1.99	0.45
1:A:1018:ALA:CB	1:A:1024:VAL:HG21	2.38	0.45
1:A:307:ARG:O	1:A:311:ALA:HB2	2.17	0.45
1:A:355:MET:SD	1:A:368:PRO:HG2	2.57	0.45
1:A:362:PHE:HA	1:A:365:THR:HG22	1.97	0.45
1:A:484:VAL:C	1:A:486:LEU:H	2.25	0.45
1:A:105:VAL:HG12	1:A:109:ASN:ND2	2.32	0.45
1:A:590:VAL:O	1:A:594:VAL:HG23	2.16	0.45
1:A:715:SER:O	1:A:829:GLY:HA2	2.17	0.45
1:A:971:ARG:C	1:A:974:PRO:HD2	2.42	0.45
1:A:1026:PHE:HB3	1:A:1030:ARG:HH22	1.82	0.45
1:A:58:GLN:O	1:A:63:GLN:HG3	2.17	0.45
1:A:527:TYR:OH	1:A:968:VAL:HG21	2.17	0.45
1:A:652:THR:HG23	1:A:665:ALA:HB3	1.98	0.45
1:A:679:GLY:HA2	1:A:830:GLN:HA	1.99	0.45
1:A:372:VAL:HG12	1:A:405:LEU:CB	2.47	0.45
1:A:379:THR:HG21	1:A:398:MET:SD	2.57	0.45
1:A:430:ALA:O	1:A:434:SER:HB3	2.17	0.45
1:A:880:SER:O	1:A:884:VAL:HG23	2.17	0.45
1:A:719:ASN:ND2	1:A:815:ARG:NH2	2.65	0.44
1:A:1025:PHE:C	1:A:1027:VAL:N	2.74	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1035:ARG:NE	1:A:1036:LYS:HZ3	2.11	0.44
1:A:213:GLN:HG2	1:A:238:THR:HA	1.98	0.44
1:A:429:GLU:OE1	1:A:429:GLU:N	2.51	0.44
1:A:439:GLN:C	1:A:439:GLN:OE1	2.60	0.44
1:A:703:LEU:HD21	1:A:827:ILE:HG23	1.99	0.44
1:A:792:ARG:HG3	1:A:793:ALA:H	1.82	0.44
1:A:896:SER:N	1:A:898:PRO:HD2	2.32	0.44
1:A:163:LYS:HD2	1:A:177:LEU:HB2	1.98	0.44
1:A:496:MET:C	1:A:496:MET:SD	3.00	0.44
1:A:522:LYS:HA	1:A:526:HIS:CD2	2.53	0.44
1:A:29:LYS:O	1:A:29:LYS:HG2	2.18	0.44
1:A:85:THR:O	1:A:85:THR:HG22	2.18	0.44
1:A:393:LEU:CD1	1:A:466:ILE:HA	2.47	0.44
1:A:447:MET:HB3	1:A:887:CYS:SG	2.57	0.44
1:A:566:ASP:HB3	1:A:667:ASN:ND2	2.32	0.44
1:A:612:VAL:CG1	1:A:615:PHE:HB3	2.48	0.44
1:A:177:LEU:HD13	1:A:177:LEU:C	2.42	0.44
1:A:366:LEU:O	1:A:370:ILE:HG13	2.17	0.44
1:A:525:HIS:HA	1:A:529:ASP:OD1	2.17	0.44
1:A:733:GLN:HB3	1:A:737:GLN:HE21	1.82	0.44
1:A:1026:PHE:HB3	1:A:1030:ARG:NH1	2.31	0.44
1:A:81:ASN:O	1:A:88:VAL:HA	2.18	0.44
1:A:133:SER:HB2	1:A:292:LYS:CG	2.47	0.44
1:A:243:THR:HG23	1:A:244:GLU:N	2.33	0.44
1:A:456:MET:HG2	1:A:876:LEU:HD13	2.00	0.44
1:A:516:PHE:HD1	1:A:516:PHE:H	1.66	0.44
1:A:27:ILE:HG22	1:A:28:LEU:N	2.32	0.44
1:A:445:ILE:O	1:A:449:LEU:HG	2.17	0.44
1:A:467:TYR:CZ	1:A:928:GLN:HG2	2.52	0.44
1:A:921:LEU:N	1:A:921:LEU:HD22	2.33	0.44
1:A:937:LEU:O	1:A:940:LYS:HB3	2.18	0.44
1:A:1024:VAL:HG12	1:A:1024:VAL:O	2.17	0.44
1:A:11:PHE:CD2	1:A:11:PHE:N	2.81	0.44
1:A:150:THR:C	1:A:152:GLU:N	2.74	0.44
1:A:367:ILE:HD11	1:A:497:LEU:HD13	2.00	0.44
1:A:646:ALA:O	1:A:649:MET:HB2	2.18	0.44
1:A:946:VAL:O	1:A:949:ALA:C	2.60	0.44
1:A:314:GLU:N	1:A:315:PRO:CD	2.80	0.44
1:A:578:LEU:HD13	1:A:661:ALA:HB2	1.99	0.44
1:A:680:PHE:HZ	1:A:716:VAL:HG12	1.83	0.44
1:A:714:THR:HB	1:A:715:SER:H	1.64	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:895:TRP:HA	1:A:895:TRP:HE3	1.82	0.44
1:A:156:ASP:OD2	1:A:182:TYR:HB2	2.18	0.43
1:A:359:LEU:O	1:A:360:GLN:C	2.61	0.43
1:A:367:ILE:HG12	1:A:492:LEU:CD2	2.37	0.43
1:A:455:PRO:HG3	1:A:883:VAL:CG2	2.47	0.43
1:A:666:PHE:CD1	1:A:666:PHE:N	2.85	0.43
1:A:890:ALA:O	1:A:891:LEU:HD13	2.18	0.43
1:A:971:ARG:O	1:A:971:ARG:HD2	2.18	0.43
1:A:186:ILE:HG21	1:A:262:LEU:HD21	2.00	0.43
1:A:207:ILE:C	1:A:209:ALA:N	2.76	0.43
1:A:1021:PHE:O	1:A:1022:VAL:C	2.60	0.43
1:A:9:PRO:HB2	1:A:10:ILE:H	1.65	0.43
1:A:419:VAL:C	1:A:421:ALA:N	2.76	0.43
1:A:607:GLU:HB3	1:A:630:SER:O	2.19	0.43
1:A:633:ASP:OD2	1:A:635:ALA:HB3	2.18	0.43
1:A:965:LEU:HD23	1:A:965:LEU:O	2.19	0.43
1:A:1011:MET:O	1:A:1014:ALA:HB3	2.18	0.43
1:A:314:GLU:HB2	1:A:315:PRO:HD3	1.99	0.43
1:A:545:TYR:OH	1:A:903:LEU:HD22	2.18	0.43
1:A:685:ILE:HD11	1:A:819:TYR:CD2	2.53	0.43
1:A:987:MET:HB3	1:A:988:PRO:CD	2.41	0.43
1:A:51:GLY:O	1:A:52:ALA:C	2.62	0.43
1:A:105:VAL:HG12	1:A:109:ASN:HD22	1.84	0.43
1:A:399:VAL:HG11	1:A:989:LEU:HD21	2.01	0.43
1:A:671:ILE:CG1	1:A:672:VAL:N	2.80	0.43
1:A:680:PHE:CZ	1:A:829:GLY:HA3	2.54	0.43
1:A:158:VAL:HG22	1:A:162:MET:CE	2.49	0.43
1:A:185:ARG:HG3	1:A:185:ARG:NH1	2.33	0.43
1:A:447:MET:HB3	1:A:887:CYS:CB	2.48	0.43
1:A:486:LEU:CA	1:A:490:PRO:HG2	2.49	0.43
1:A:1022:VAL:O	1:A:1023:PRO:O	2.36	0.43
1:A:40:PRO:HD2	1:A:674:LEU:HD21	2.01	0.43
1:A:49:TYR:HE1	1:A:60:THR:HG21	1.84	0.43
1:A:166:ILE:C	1:A:168:ARG:N	2.71	0.43
1:A:240:LEU:CD2	1:A:240:LEU:H	2.32	0.43
1:A:309:GLU:C	1:A:311:ALA:H	2.26	0.43
1:A:429:GLU:O	1:A:432:ARG:HB3	2.19	0.43
1:A:713:LEU:N	1:A:832:ALA:HB1	2.33	0.43
1:A:872:GLN:O	1:A:876:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:919:ARG:HD2	1:A:921:LEU:HD21	2.00	0.43
1:A:180:SER:HG	1:A:273:GLU:HB3	1.82	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:340:VAL:HG11	1:A:395:MET:HB3	2.01	0.43
1:A:362:PHE:HA	1:A:365:THR:CG2	2.48	0.43
1:A:363:ARG:HH11	1:A:498:LYS:C	2.27	0.43
1:A:635:ALA:O	1:A:637:ARG:N	2.51	0.43
1:A:309:GLU:O	1:A:313:MET:HE3	2.19	0.42
1:A:477:ALA:HA	1:A:480:LEU:HD12	2.01	0.42
1:A:556:PHE:HB2	1:A:913:LEU:HD11	2.01	0.42
1:A:684:LEU:HD11	1:A:855:VAL:HG12	2.01	0.42
1:A:722:GLU:O	1:A:723:ASP:HB3	2.19	0.42
1:A:1016:VAL:HG12	1:A:1016:VAL:O	2.19	0.42
1:A:149:MET:HG3	1:A:154:ILE:CG1	2.49	0.42
1:A:150:THR:OG1	1:A:153:ASP:HB2	2.19	0.42
1:A:359:LEU:HD23	1:A:973:ARG:NH2	2.33	0.42
1:A:409:ALA:O	1:A:413:VAL:HG23	2.19	0.42
1:A:486:LEU:HA	1:A:490:PRO:HG2	2.01	0.42
1:A:522:LYS:HA	1:A:526:HIS:HD2	1.85	0.42
1:A:878:ALA:HA	1:A:881:LEU:HD12	2.01	0.42
1:A:62:THR:O	1:A:65:ILE:N	2.53	0.42
1:A:735:LYS:O	1:A:739:LEU:HG	2.20	0.42
1:A:281:PHE:O	1:A:282:ASN:HB2	2.18	0.42
1:A:907:LEU:HD23	1:A:1018:ALA:CB	2.44	0.42
1:A:971:ARG:HH11	1:A:971:ARG:CG	2.33	0.42
1:A:159:ALA:HB2	1:A:177:LEU:HG	2.00	0.42
1:A:220:GLY:O	1:A:221:GLY:O	2.37	0.42
1:A:372:VAL:N	1:A:373:PRO:CD	2.83	0.42
1:A:922:THR:OG1	1:A:923:ASN:N	2.52	0.42
1:A:48:SER:HB3	1:A:125:GLN:HG2	2.00	0.42
1:A:72:ILE:HG23	1:A:106:GLN:HB3	2.01	0.42
1:A:92:LEU:HD22	1:A:107:VAL:CG2	2.49	0.42
1:A:572:PHE:CE1	1:A:629:VAL:HG21	2.55	0.42
1:A:323:ILE:HG22	1:A:324:VAL:N	2.34	0.42
1:A:456:MET:HE1	1:A:932:LEU:HD11	2.01	0.42
1:A:534:ILE:HG22	1:A:541:TYR:OH	2.20	0.42
1:A:1007:VAL:O	1:A:1008:MET:C	2.63	0.42
1:A:17:ILE:O	1:A:20:MET:HB2	2.20	0.42
1:A:35:TYR:CD1	1:A:35:TYR:N	2.86	0.42
1:A:67:GLN:C	1:A:69:MET:H	2.27	0.42
1:A:332:PHE:C	1:A:335:ILE:HG22	2.45	0.42
1:A:346:GLU:O	1:A:350:LEU:HG	2.19	0.42
1:A:682:PHE:HB3	1:A:827:ILE:HB	2.02	0.42
1:A:32:VAL:HG23	1:A:300:LEU:CD2	2.50	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:457:ALA:HB2	1:A:471:SER:OG	2.20	0.41
1:A:1027:VAL:O	1:A:1028:VAL:C	2.62	0.41
1:A:54:ALA:N	1:A:84:SER:HA	2.34	0.41
1:A:133:SER:HB2	1:A:292:LYS:HG2	2.02	0.41
1:A:184:MET:HB2	1:A:762:PHE:CE2	2.55	0.41
1:A:253:VAL:HG12	1:A:259:ARG:HG2	2.01	0.41
1:A:394:THR:O	1:A:398:MET:HG2	2.20	0.41
1:A:457:ALA:O	1:A:459:PHE:N	2.53	0.41
1:A:674:LEU:HD12	1:A:674:LEU:C	2.45	0.41
1:A:1030:ARG:O	1:A:1031:ARG:HD3	2.20	0.41
1:A:460:GLY:N	1:A:872:GLN:HE22	2.18	0.41
1:A:527:TYR:HE2	1:A:968:VAL:HG22	1.84	0.41
1:A:777:ALA:C	1:A:779:TYR:N	2.76	0.41
1:A:950:LYS:O	1:A:954:ASP:OD2	2.38	0.41
1:A:49:TYR:CE1	1:A:60:THR:HG21	2.56	0.41
1:A:240:LEU:HD22	1:A:240:LEU:H	1.84	0.41
1:A:244:GLU:HG2	1:A:248:LYS:HE3	2.03	0.41
1:A:634:TRP:CD1	1:A:634:TRP:N	2.87	0.41
1:A:969:ARG:HD2	1:A:969:ARG:C	2.45	0.41
1:A:1017:LEU:HD11	1:A:1022:VAL:HG21	2.01	0.41
1:A:344:LEU:HD13	1:A:345:VAL:N	2.34	0.41
1:A:445:ILE:HG22	1:A:943:ILE:HG21	2.02	0.41
1:A:712:MET:HA	1:A:835:LYS:HG3	2.02	0.41
1:A:251:LEU:CD1	1:A:265:VAL:HG21	2.51	0.41
1:A:252:LYS:HG2	1:A:253:VAL:N	2.36	0.41
1:A:445:ILE:HG22	1:A:943:ILE:HD12	2.03	0.41
1:A:973:ARG:O	1:A:977:MET:HB2	2.20	0.41
1:A:1027:VAL:O	1:A:1031:ARG:HG2	2.20	0.41
1:A:406:VAL:O	1:A:409:ALA:HB3	2.20	0.41
1:A:429:GLU:O	1:A:433:LYS:HD3	2.21	0.41
1:A:568:ASP:HB2	1:A:643:LYS:HG3	2.03	0.41
1:A:798:MET:HE3	1:A:798:MET:HA	2.02	0.41
1:A:972:LEU:HD13	1:A:972:LEU:O	2.20	0.41
1:A:986:VAL:O	1:A:989:LEU:HB2	2.21	0.41
1:A:10:ILE:HD13	1:A:11:PHE:CG	2.56	0.41
1:A:30:LEU:HD23	1:A:390:ILE:HG13	2.02	0.41
1:A:53:ASP:OD2	1:A:55:LYS:HB2	2.21	0.41
1:A:211:ASN:ND2	1:A:760:ASN:HD22	2.19	0.41
1:A:294:ALA:O	1:A:295:THR:C	2.63	0.41
1:A:391:ASN:N	1:A:394:THR:OG1	2.53	0.41
1:A:451:ALA:HB1	1:A:884:VAL:CA	2.51	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:527:TYR:O	1:A:528:THR:C	2.63	0.41
1:A:751:GLY:O	1:A:752:ALA:C	2.64	0.41
1:A:115:MET:C	1:A:117:LEU:H	2.29	0.41
1:A:169:THR:O	1:A:172:VAL:HG23	2.20	0.41
1:A:332:PHE:CA	1:A:335:ILE:HG22	2.48	0.41
1:A:361:ASN:HB2	1:A:364:ALA:HB3	2.03	0.41
1:A:401:ALA:O	1:A:402:ILE:C	2.63	0.41
1:A:451:ALA:HA	1:A:883:VAL:CG1	2.51	0.41
1:A:556:PHE:HB2	1:A:913:LEU:CD1	2.50	0.41
1:A:724:THR:H	1:A:814:PRO:HD3	1.85	0.41
1:A:43:VAL:HG11	1:A:107:VAL:CG1	2.51	0.41
1:A:95:GLU:OE1	1:A:95:GLU:HA	2.20	0.41
1:A:262:LEU:HD12	1:A:265:VAL:CG2	2.51	0.41
1:A:467:TYR:OH	1:A:869:SER:HA	2.21	0.41
1:A:712:MET:CB	1:A:835:LYS:HE2	2.48	0.41
1:A:894:SER:C	1:A:896:SER:H	2.29	0.41
1:A:919:ARG:HB3	1:A:921:LEU:CD2	2.51	0.41
1:A:944:LEU:O	1:A:948:PHE:HB2	2.20	0.41
1:A:1026:PHE:N	1:A:1026:PHE:CD1	2.89	0.41
1:A:65:ILE:O	1:A:66:GLU:C	2.64	0.40
1:A:149:MET:HG3	1:A:154:ILE:HG12	2.02	0.40
1:A:340:VAL:HG13	1:A:399:VAL:HG21	2.03	0.40
1:A:418:ARG:NH1	1:A:418:ARG:CB	2.84	0.40
1:A:445:ILE:CG2	1:A:943:ILE:HG21	2.51	0.40
1:A:702:LEU:C	1:A:702:LEU:HD23	2.47	0.40
1:A:915:ALA:CB	1:A:1009:GLY:HA3	2.49	0.40
1:A:960:LEU:C	1:A:960:LEU:HD23	2.46	0.40
1:A:58:GLN:HE22	1:A:59:ASP:HB3	1.86	0.40
1:A:58:GLN:OE1	1:A:818:ARG:HD2	2.21	0.40
1:A:62:THR:O	1:A:63:GLN:C	2.64	0.40
1:A:120:GLN:HG3	1:A:121:GLU:OE2	2.21	0.40
1:A:396:PHE:CE1	1:A:999:ALA:HB1	2.52	0.40
1:A:462:SER:C	1:A:464:GLY:H	2.28	0.40
1:A:545:TYR:CD1	1:A:545:TYR:C	2.99	0.40
1:A:594:VAL:HG13	1:A:655:PHE:CZ	2.56	0.40
1:A:672:VAL:O	1:A:673:GLU:C	2.64	0.40
1:A:252:LYS:O	1:A:260:VAL:N	2.51	0.40
1:A:255:GLN:C	1:A:257:GLY:H	2.30	0.40
1:A:464:GLY:C	1:A:466:ILE:N	2.79	0.40
1:A:486:LEU:C	1:A:490:PRO:HG2	2.47	0.40
1:A:764:ASP:O	1:A:765:ARG:C	2.64	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:858:ASP:OD2	1:A:859:TRP:N	2.54	0.40
1:A:90:ILE:H	1:A:90:ILE:CD1	2.28	0.40
1:A:225:VAL:O	1:A:225:VAL:HG23	2.21	0.40
1:A:394:THR:HG22	1:A:469:GLN:HB3	2.03	0.40
1:A:453:PHE:HE2	1:A:474:ILE:CD1	2.34	0.40
1:A:484:VAL:HG13	1:A:488:LEU:HD23	2.04	0.40
1:A:518:ARG:O	1:A:522:LYS:HD3	2.22	0.40
1:A:583:THR:O	1:A:587:THR:HG22	2.22	0.40
1:A:169:THR:CG2	1:A:170:SER:N	2.84	0.40
1:A:367:ILE:HB	1:A:368:PRO:CD	2.43	0.40
1:A:414:GLU:O	1:A:417:GLU:HB2	2.22	0.40
1:A:577:GLN:NE2	1:A:623:ASN:HB3	2.36	0.40
1:A:733:GLN:O	1:A:737:GLN:HG3	2.20	0.40
1:A:758:TYR:HE1	1:A:770:LYS:HG2	1.86	0.40
1:A:953:MET:HG3	1:A:958:LYS:O	2.22	0.40

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

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

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	998/1053 (95%)	725 (73%)	198 (20%)	75 (8%)	1 9

All (75) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	9	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	10	ILE
1	A	29	LYS
1	A	134	SER
1	A	146	ASP
1	A	161	ASN
1	A	170	SER
1	A	217	GLY
1	A	221	GLY
1	A	327	TYR
1	A	523	SER
1	A	602	GLU
1	A	671	ILE
1	A	894	SER
1	A	1021	PHE
1	A	1022	VAL
1	A	1023	PRO
1	A	1034	SER
1	A	33	ALA
1	A	52	ALA
1	A	255	GLN
1	A	295	THR
1	A	299	ALA
1	A	459	PHE
1	A	464	GLY
1	A	638	PRO
1	A	715	SER
1	A	837	THR
1	A	900	SER
1	A	1017	LEU
1	A	34	GLN
1	A	62	THR
1	A	63	GLN
1	A	74	ASN
1	A	75	LEU
1	A	137	LEU
1	A	150	THR
1	A	151	GLN
1	A	167	SER
1	A	466	ILE
1	A	468	ARG
1	A	526	HIS
1	A	563	PHE

Continued on next page...

Continued from previous page...

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

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	818/859 (95%)	787 (96%)	31 (4%)	29 55

All (31) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	10	ILE
1	A	27	ILE
1	A	29	LYS
1	A	58	GLN
1	A	68	ASN
1	A	108	GLN
1	A	137	LEU
1	A	138	MET
1	A	153	ASP
1	A	185	ARG
1	A	229	GLN
1	A	255	GLN
1	A	329	THR
1	A	334	LYS
1	A	344	LEU
1	A	404	LEU
1	A	429	GLU
1	A	439	GLN
1	A	470	PHE
1	A	617	PHE
1	A	634	TRP
1	A	640	GLU
1	A	714	THR
1	A	798	MET
1	A	815	ARG
1	A	844	MET
1	A	846	GLN
1	A	895	TRP
1	A	950	LYS
1	A	1023	PRO
1	A	1025	PHE

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (33) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	58	GLN
1	A	67	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	108	GLN
1	A	109	ASN
1	A	112	GLN
1	A	124	GLN
1	A	125	GLN
1	A	151	GLN
1	A	181	GLN
1	A	189	ASN
1	A	194	ASN
1	A	213	GLN
1	A	228	GLN
1	A	231	ASN
1	A	255	GLN
1	A	284	GLN
1	A	360	GLN
1	A	391	ASN
1	A	526	HIS
1	A	577	GLN
1	A	592	ASN
1	A	605	ASN
1	A	613	ASN
1	A	622	GLN
1	A	623	ASN
1	A	657	GLN
1	A	719	ASN
1	A	737	GLN
1	A	760	ASN
1	A	797	GLN
1	A	830	GLN
1	A	872	GLN
1	A	923	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 [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data

6.1 Protein, DNA and RNA chains

EDS was not executed - this section is therefore empty.

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

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.3 Carbohydrates

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.4 Ligands

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.5 Other polymers

EDS was not executed - this section is therefore empty.