



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 03:27 PM UTC

PDB ID : 2R7O / pdb_00002r7o
Title : Crystal Structure of VP1 apoenzyme of Rotavirus SA11 (N-terminal hexahistidine-tagged)
Authors : Lu, X.; Harrison, S.C.; Tao, Y.J.; Patton, J.T.; Nibert, M.L.
Deposited on : 2007-09-09
Resolution : 3.35 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)	:	2.0
EDS	:	3.0
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
CCP4	:	9.0.010 (Gargrove)
Density-Fitness	:	1.0.12
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

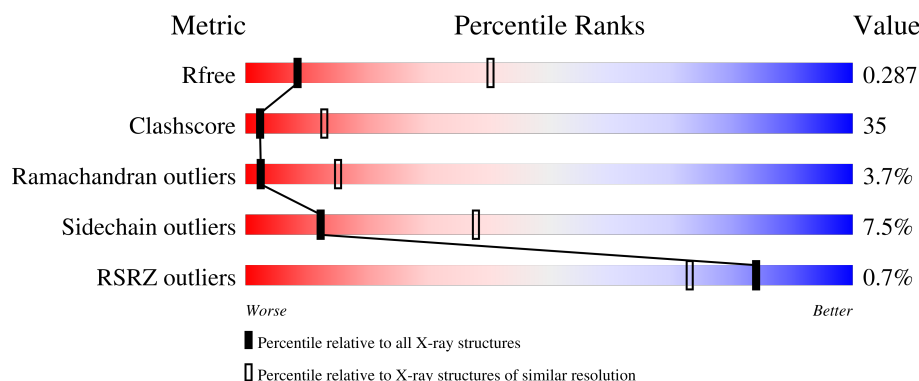
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

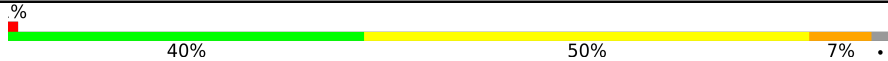
The reported resolution of this entry is 3.35 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
R_{free}	180053	1099 (3.40-3.32)
Clashscore	190562	1116 (3.40-3.32)
Ramachandran outliers	187476	1101 (3.40-3.32)
Sidechain outliers	187428	1101 (3.40-3.32)
RSRZ outliers	180081	1099 (3.40-3.32)

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 $\leq 5\%$. 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	1095	

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 8741 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.

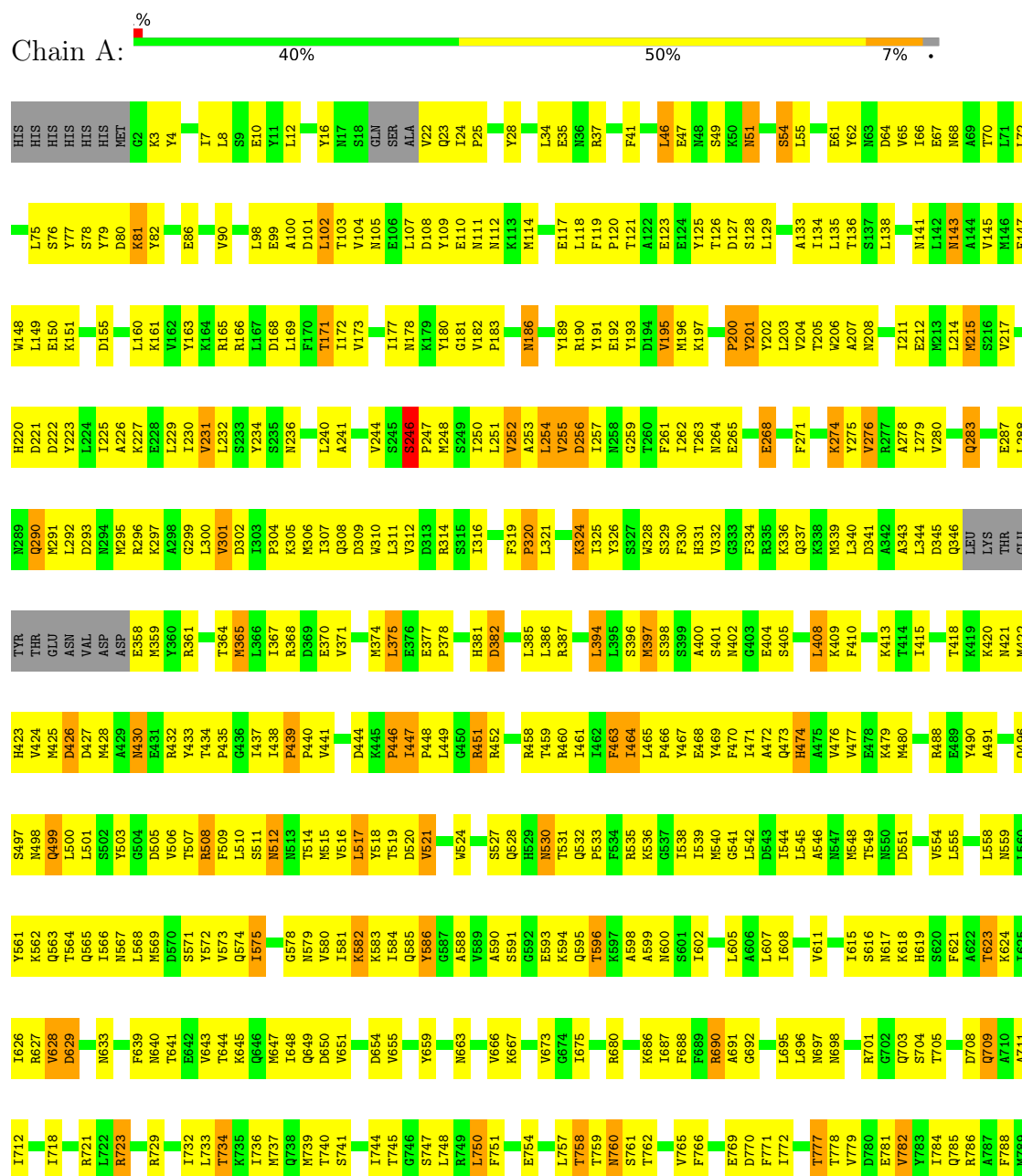
- Molecule 1 is a protein called RNA-dependent RNA polymerase.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	1071	Total	C	N	O	S	0	10	0
			8741	5604	1457	1642	38			

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 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: RNA-dependent RNA polymerase



31082	31085	31086	GLN	PRO
F1009	M1010	D1013	L1014	E1015
K1016	L1017	I1018	K1023	G1024
K1025	I1026	V1029	L1033	H1034
A1037	I1042	N1043	Y1044	A1045
I1046	K1047	N1048	G1049	S1050
W1051	I1052	S1053	L1054	Y1058
P1059	E1062	M1063	I1064	K1065
L1066	W1067	K1068	M1070	W1071
N1072	I1073	T1074	R1077	S1078
P1079	Y1080	T1081	N1082	A1083
S790	L791	K795	S796	G797
I798	E801	I802	A803	A804
T807	F808	K809	N810	Y811
V812	T813	R814	L815	S816
L819	L820	K823	N824	N825
I826	V827	S828	R829	G830
I831	A832	E835	K836	A837
K838	L839	N840	S841	Y842
A843	P844	I845	S846	L847
E848	Q853	I854	L857	L858
T859	M860	L861	Q862	K863
P864	V865	F867	K868	S869
S870	K871	I872	T873	I874
N875	R879	D880	T881	K882
P883	F884	F885	T886	V887
A890	H891	L892	P893	I894
Q897	K898	F899	M900	P901
N906	V907	Q908	Q912	R917
Y918	Y919	Q920	I921	E922
D923	D924	G925	S926	K927
S928	A929	I930	L933	Y981
S982	R983	D984	K985	L988
L989	E990	S991	Y992	L996
T999	N1000	Y1001	G1002	C1003
Y1004	Q1005	L1006		

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 21 21 21	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	76.90Å 112.08Å 142.81Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	50.00 – 3.35 50.00 – 3.35	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	84.1 (50.00-3.35) 84.0 (50.00-3.35)	Depositor EDS
R_{merge}	0.16	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	2.18 (at 3.32Å)	Xtriage
Refinement program	CNS	Depositor
R, R_{free}	0.235 , 0.318 0.222 , 0.287	Depositor DCC
R_{free} test set	1424 reflections (7.77%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	65.2	Xtriage
Anisotropy	0.385	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.29 , 47.4	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.47$, $\langle L^2 \rangle = 0.30$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.91	EDS
Total number of atoms	8741	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	43.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 4.49% 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, 0.333 respectively for untwinned datasets, and 0.375, 0.2 for perfectly twinned datasets.

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	0.50	0/8914	0.98	27/12052 (0.2%)

There are no bond length outliers.

All (27) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1078[A]	SER	CA-C-N	8.56	128.28	119.64
1	A	1078[A]	SER	C-N-CA	8.56	128.28	119.64
1	A	1078[B]	SER	CA-C-N	8.56	128.28	119.64
1	A	1078[B]	SER	C-N-CA	8.56	128.28	119.64
1	A	757	LEU	N-CA-C	8.09	120.17	111.36
1	A	824	ASN	N-CA-C	7.87	122.31	112.87
1	A	575	ILE	N-CA-C	7.44	115.27	107.76
1	A	254	LEU	N-CA-C	7.42	119.37	111.28
1	A	1077[A]	ARG	N-CA-C	7.27	126.28	110.80
1	A	1077[B]	ARG	N-CA-C	7.27	126.28	110.80
1	A	1085[A]	PHE	N-CA-C	6.62	124.90	110.80
1	A	231	VAL	N-CA-C	6.27	116.42	110.53
1	A	255	VAL	N-CA-C	6.05	118.06	108.87
1	A	182	VAL	CA-C-N	5.94	125.96	119.90
1	A	182	VAL	C-N-CA	5.94	125.96	119.90
1	A	739	MET	N-CA-C	5.82	118.57	111.82
1	A	826	ILE	N-CA-C	-5.54	104.97	110.62
1	A	344	LEU	N-CA-C	5.53	118.06	111.71
1	A	67	GLU	N-CA-C	5.50	117.36	111.36
1	A	579	ASN	N-CA-C	-5.46	106.65	113.15
1	A	530	ASN	N-CA-C	5.45	117.22	111.28
1	A	474	HIS	N-CA-C	5.29	116.85	111.14
1	A	246	SER	N-CA-C	5.22	121.35	109.81
1	A	68	ASN	N-CA-C	5.19	119.88	113.50
1	A	900	MET	CA-C-N	5.14	126.26	119.84
1	A	900	MET	C-N-CA	5.14	126.26	119.84
1	A	777	THR	N-CA-C	-5.04	107.69	113.88

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	8741	0	8825	620	0
All	All	8741	0	8825	620	0

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 35.

All (620) 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:441:VAL:HB	1:A:447:ILE:HD11	1.45	0.96
1:A:385:LEU:HD23	1:A:479:LYS:HE2	1.48	0.95
1:A:651:VAL:O	1:A:655:VAL:HG23	1.66	0.94
1:A:8:LEU:HD12	1:A:737:MET:HG2	1.49	0.91
1:A:960:LEU:HA	1:A:963:ILE:HD12	1.51	0.90
1:A:438:ILE:HG22	1:A:468:GLU:HB3	1.55	0.89
1:A:98:LEU:HD11	1:A:172:ILE:HG23	1.56	0.87
1:A:499:GLN:HG3	1:A:1086[A]:PHE:HB2	1.55	0.85
1:A:254:LEU:HB3	1:A:314:ARG:HD2	1.58	0.85
1:A:4:TYR:HD1	1:A:733:LEU:HD22	1.41	0.84
1:A:605:LEU:HB2	1:A:628:VAL:HG11	1.57	0.84
1:A:520:ASP:HB2	1:A:667:LYS:HE3	1.59	0.84
1:A:906:ASN:HD22	1:A:907:VAL:H	1.26	0.83
1:A:248:MET:HG2	1:A:326:TYR:CD2	2.13	0.83
1:A:296:ARG:NH2	1:A:308:GLN:HE21	1.75	0.83
1:A:750:LEU:HD21	1:A:861:LEU:HD22	1.60	0.82
1:A:367:ILE:O	1:A:371:VAL:HG23	1.80	0.82
1:A:539:ILE:HG23	1:A:562:LYS:HG3	1.61	0.82
1:A:257:ILE:HB	1:A:276:VAL:HG23	1.63	0.81
1:A:78:SER:O	1:A:747:SER:HB2	1.81	0.80
1:A:704:SER:HB2	1:A:709:GLN:HE22	1.47	0.80
1:A:836:LYS:HA	1:A:839:LEU:HD12	1.65	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:843:ALA:HB3	1:A:844:PRO:HD3	1.64	0.78
1:A:186:ASN:H	1:A:186:ASN:HD22	1.32	0.78
1:A:212:GLU:HB2	1:A:696:LEU:HD12	1.65	0.78
1:A:1018:ILE:HD12	1:A:1037:ALA:HB1	1.65	0.78
1:A:1001:TYR:HD1	1:A:1084[A]:ASN:HB3	1.50	0.77
1:A:968:PRO:HG2	1:A:971:ASP:HB2	1.67	0.77
1:A:296:ARG:HH22	1:A:308:GLN:HE21	1.29	0.76
1:A:217:VAL:HG13	1:A:222:ASP:HB2	1.66	0.76
1:A:276:VAL:HB	1:A:673:VAL:HG12	1.68	0.75
1:A:708:ASP:HB3	1:A:1080[A]:TYR:CE1	2.21	0.75
1:A:820:LEU:HB3	1:A:824:ASN:HD22	1.51	0.75
1:A:825:ASN:HA	1:A:828:SER:HB2	1.69	0.75
1:A:165:ARG:HD3	1:A:223:TYR:HB2	1.68	0.74
1:A:394:LEU:HD21	1:A:424:VAL:HG11	1.69	0.74
1:A:520:ASP:HB3	1:A:667:LYS:HB3	1.69	0.74
1:A:906:ASN:HD22	1:A:907:VAL:N	1.85	0.74
1:A:473:GLN:HG2	1:A:561:TYR:CE1	2.23	0.73
1:A:708:ASP:O	1:A:712:ILE:HG13	1.88	0.73
1:A:473:GLN:OE1	1:A:595:GLN:HG2	1.88	0.73
1:A:22:VAL:HG22	1:A:77:TYR:HB3	1.72	0.72
1:A:447:ILE:HD12	1:A:447:ILE:N	2.05	0.72
1:A:627:ARG:HH11	1:A:627:ARG:HG2	1.54	0.72
1:A:370:GLU:O	1:A:374:MET:HG3	1.88	0.72
1:A:368:ARG:HD2	1:A:544:ILE:HD11	1.72	0.72
1:A:430:ASN:HB3	1:A:432:ARG:HG3	1.71	0.71
1:A:101:ASP:O	1:A:104:VAL:HG23	1.90	0.71
1:A:215:MET:HE2	1:A:215:MET:HA	1.72	0.71
1:A:331:HIS:NE2	1:A:692:GLY:HA2	2.05	0.71
1:A:293:ASP:HA	1:A:296:ARG:HD2	1.72	0.70
1:A:340:LEU:O	1:A:340:LEU:HD12	1.90	0.70
1:A:248:MET:HA	1:A:251:LEU:HD12	1.73	0.70
1:A:999:ILE:HD11	1:A:1009:PHE:CD1	2.27	0.70
1:A:1023:LYS:HE3	1:A:1058:TYR:O	1.90	0.70
1:A:840:ASN:HA	1:A:845:ILE:CG2	2.23	0.69
1:A:434:THR:HG21	1:A:437:ILE:HD12	1.74	0.69
1:A:519:THR:HG22	1:A:520:ASP:N	2.08	0.69
1:A:535:ARG:NH2	1:A:568:LEU:HD13	2.07	0.69
1:A:278:ALA:HB2	1:A:673:VAL:HG21	1.74	0.68
1:A:147:PHE:HE1	1:A:151:LYS:HE3	1.58	0.68
1:A:324:LYS:HG2	1:A:328:TRP:CD1	2.29	0.68
1:A:535:ARG:CZ	1:A:568:LEU:HD13	2.22	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:778:THR:O	1:A:782:VAL:HG22	1.93	0.68
1:A:105:ASN:ND2	1:A:111:ASN:HA	2.08	0.68
1:A:368:ARG:HD2	1:A:544:ILE:CD1	2.23	0.68
1:A:644:THR:OG1	1:A:647:MET:HG3	1.94	0.68
1:A:186:ASN:HD21	1:A:190:ARG:H	1.39	0.68
1:A:686:LYS:HB2	1:A:688:PHE:HE2	1.58	0.68
1:A:691:ALA:HB2	1:A:723:ARG:HB3	1.75	0.68
1:A:477:VAL:HA	1:A:480:MET:HE3	1.76	0.67
1:A:296:ARG:NH2	1:A:308:GLN:NE2	2.43	0.67
1:A:394:LEU:HD22	1:A:815:LEU:HD21	1.77	0.67
1:A:438:ILE:HD11	1:A:563:GLN:HB3	1.75	0.67
1:A:967:ILE:HD12	1:A:967:ILE:H	1.59	0.67
1:A:217:VAL:HG13	1:A:222:ASP:CB	2.25	0.67
1:A:370:GLU:HG3	1:A:374:MET:HE3	1.76	0.67
1:A:365:MET:HG3	1:A:368:ARG:NH2	2.10	0.66
1:A:440:PRO:HA	1:A:567:ASN:HD22	1.61	0.66
1:A:382:ASP:OD1	1:A:551:ASP:HB2	1.95	0.66
1:A:1026:ILE:O	1:A:1026:ILE:HG23	1.95	0.66
1:A:248:MET:HE2	1:A:252:VAL:HG12	1.76	0.66
1:A:381:HIS:O	1:A:382:ASP:HB2	1.95	0.66
1:A:906:ASN:ND2	1:A:907:VAL:N	2.44	0.66
1:A:191:TYR:CE2	1:A:204:VAL:HG11	2.31	0.66
1:A:1006:LEU:HG	1:A:1086[A]:PHE:HE1	1.60	0.65
1:A:532:GLN:HB2	1:A:533:PRO:HD3	1.78	0.65
1:A:135:LEU:HD13	1:A:709:GLN:OE1	1.96	0.65
1:A:408:LEU:HD13	1:A:415:ILE:HG13	1.79	0.65
1:A:777:THR:HG21	1:A:882:LYS:NZ	2.11	0.65
1:A:890:ALA:HB2	1:A:1053:SER:HB2	1.79	0.65
1:A:207:ALA:O	1:A:211:ILE:HG13	1.96	0.65
1:A:906:ASN:ND2	1:A:907:VAL:H	1.95	0.65
1:A:1001:TYR:CD1	1:A:1084[A]:ASN:HB3	2.33	0.64
1:A:972:ALA:O	1:A:976:VAL:HG23	1.98	0.64
1:A:161:LYS:O	1:A:165:ARG:HG3	1.98	0.64
1:A:105:ASN:HB2	1:A:111:ASN:CG	2.23	0.64
1:A:741:SER:HB3	1:A:751:PHE:CD1	2.33	0.63
1:A:186:ASN:HD22	1:A:186:ASN:N	1.96	0.63
1:A:161:LYS:HB3	1:A:165:ARG:HH12	1.64	0.63
1:A:324:LYS:O	1:A:328:TRP:HD1	1.82	0.63
1:A:509:PHE:CD2	1:A:624:LYS:HB3	2.32	0.63
1:A:147:PHE:CE1	1:A:151:LYS:HE3	2.33	0.63
1:A:247:PRO:HG3	1:A:291:MET:HB3	1.81	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:704:SER:HB2	1:A:709:GLN:NE2	2.12	0.63
1:A:261:PHE:CE1	1:A:271:PHE:HB2	2.34	0.63
1:A:729:ARG:NH1	1:A:770:ASP:OD1	2.31	0.62
1:A:470:PHE:HE1	1:A:594:LYS:HD3	1.64	0.62
1:A:781:GLU:O	1:A:785:GLN:HB2	1.98	0.62
1:A:1029:VAL:HG13	1:A:1066:LEU:HD23	1.81	0.62
1:A:463:PHE:CD1	1:A:590:ALA:HB3	2.35	0.62
1:A:292:LEU:O	1:A:296:ARG:HG3	2.00	0.62
1:A:779:VAL:O	1:A:782:VAL:HG23	2.00	0.62
1:A:463:PHE:HD2	1:A:465:LEU:HD21	1.65	0.62
1:A:816:SER:HB3	1:A:820:LEU:HD11	1.82	0.62
1:A:758:THR:HG22	1:A:766:PHE:O	2.00	0.61
1:A:872:ILE:HD11	1:A:1072:ASN:HB2	1.80	0.61
1:A:928:SER:HB2	1:A:984:ASP:OD1	2.00	0.61
1:A:145:VAL:HG21	1:A:211:ILE:HG23	1.82	0.61
1:A:225:ILE:HD13	1:A:325:ILE:HD13	1.81	0.61
1:A:791:LEU:HD23	1:A:791:LEU:H	1.65	0.61
1:A:324:LYS:O	1:A:328:TRP:CD1	2.53	0.61
1:A:387:ARG:HB3	1:A:387:ARG:HH11	1.63	0.61
1:A:512:ASN:N	1:A:512:ASN:HD22	1.97	0.61
1:A:967:ILE:HD12	1:A:967:ILE:N	2.15	0.61
1:A:917:ARG:HD2	1:A:919:TYR:CE1	2.36	0.61
1:A:165:ARG:HE	1:A:220:HIS:HA	1.66	0.60
1:A:573:VAL:HG21	1:A:586:TYR:CD1	2.36	0.60
1:A:546:ALA:HA	1:A:558:LEU:HD13	1.84	0.60
1:A:301:VAL:C	1:A:304:PRO:HD2	2.26	0.60
1:A:687:ILE:CG2	1:A:900:MET:HG2	2.32	0.60
1:A:98:LEU:CD1	1:A:172:ILE:HG23	2.30	0.60
1:A:708:ASP:HB3	1:A:1080[A]:TYR:CZ	2.37	0.60
1:A:586:TYR:CE2	1:A:588:ALA:HB3	2.37	0.59
1:A:627:ARG:HG2	1:A:627:ARG:NH1	2.17	0.59
1:A:933:LEU:HD23	1:A:962:LEU:HD22	1.84	0.59
1:A:959:GLN:O	1:A:963:ILE:HG13	2.03	0.59
1:A:100:ALA:O	1:A:102:LEU:HD13	2.02	0.59
1:A:463:PHE:CE1	1:A:590:ALA:HB3	2.37	0.59
1:A:1009:PHE:C	1:A:1010:ASN:HD22	2.10	0.59
1:A:28:TYR:CD2	1:A:72:LEU:HD13	2.37	0.59
1:A:319:PHE:N	1:A:320:PRO:CD	2.66	0.59
1:A:208:ASN:HB2	1:A:697:ASN:HD21	1.68	0.59
1:A:105:ASN:HB3	1:A:110:GLU:HB2	1.85	0.59
1:A:343:ALA:O	1:A:346:GLN:HG3	2.03	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:126:THR:HG23	1:A:126:THR:O	2.03	0.58
1:A:460:ARG:HG3	1:A:460:ARG:HH11	1.67	0.58
1:A:611:VAL:O	1:A:615:ILE:HG23	2.02	0.58
1:A:295:MET:HE1	1:A:307:ILE:HD12	1.83	0.58
1:A:473:GLN:HE22	1:A:593:GLU:HB3	1.66	0.58
1:A:951:ILE:HG12	1:A:985:LYS:HA	1.85	0.58
1:A:623:THR:HG21	1:A:626:ILE:HD11	1.86	0.58
1:A:470:PHE:CE1	1:A:594:LYS:HD3	2.39	0.58
1:A:690:ARG:HH11	1:A:690:ARG:HB3	1.68	0.58
1:A:853:GLN:HE21	1:A:857:LEU:HB2	1.69	0.58
1:A:906:ASN:ND2	1:A:907:VAL:HG23	2.18	0.58
1:A:449:LEU:HD13	1:A:573:VAL:HG13	1.85	0.58
1:A:542:LEU:HD23	1:A:558:LEU:HD23	1.86	0.58
1:A:561:TYR:OH	1:A:595:GLN:HB3	2.04	0.58
1:A:22:VAL:CG2	1:A:77:TYR:HB3	2.34	0.58
1:A:225:ILE:CD1	1:A:325:ILE:HD13	2.33	0.57
1:A:134:ILE:HG23	1:A:136:THR:HG22	1.85	0.57
1:A:226:ALA:O	1:A:230:ILE:HG13	2.04	0.57
1:A:292:LEU:HD23	1:A:295:MET:CE	2.34	0.57
1:A:441:VAL:HG22	1:A:567:ASN:HB3	1.86	0.57
1:A:984:ASP:O	1:A:988:ILE:HG12	2.05	0.57
1:A:248:MET:HE3	1:A:248:MET:O	2.05	0.57
1:A:744:ILE:HG13	1:A:858:LEU:HD13	1.85	0.57
1:A:872:ILE:O	1:A:1073:ILE:HA	2.05	0.57
1:A:440:PRO:HA	1:A:567:ASN:ND2	2.19	0.57
1:A:262:ILE:HD12	1:A:263:THR:N	2.20	0.56
1:A:948:TYR:O	1:A:951:ILE:HG22	2.05	0.56
1:A:223:TYR:O	1:A:227:LYS:HB2	2.06	0.56
1:A:329:SER:O	1:A:332:VAL:HG22	2.05	0.56
1:A:334:PHE:HB2	1:A:336:LYS:HE3	1.87	0.56
1:A:477:VAL:HA	1:A:480:MET:CE	2.35	0.56
1:A:519:THR:CG2	1:A:520:ASP:N	2.67	0.56
1:A:524:TRP:NE1	1:A:607:LEU:HD13	2.21	0.56
1:A:8:LEU:HD12	1:A:737:MET:CG	2.31	0.56
1:A:208:ASN:HB2	1:A:697:ASN:ND2	2.20	0.56
1:A:499:GLN:NE2	1:A:680:ARG:HH11	2.02	0.56
1:A:930:ILE:O	1:A:934:ILE:HG13	2.06	0.56
1:A:572:TYR:CE1	1:A:585:GLN:HG3	2.40	0.56
1:A:781:GLU:O	1:A:784:ILE:HG22	2.05	0.56
1:A:119:PHE:CG	1:A:125:TYR:HA	2.40	0.56
1:A:221:ASP:OD1	1:A:306:MET:HE2	2.05	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1059:PRO:O	1:A:1063:MET:HG3	2.06	0.56
1:A:112:ASN:ND2	1:A:234:TYR:CE1	2.74	0.56
1:A:491:ALA:HB3	1:A:629:ASP:OD1	2.05	0.56
1:A:101:ASP:C	1:A:103:THR:H	2.13	0.56
1:A:473:GLN:O	1:A:477:VAL:HG23	2.06	0.56
1:A:582:LYS:HG2	1:A:583:LYS:H	1.71	0.56
1:A:385:LEU:CD2	1:A:479:LYS:HE2	2.31	0.55
1:A:750:LEU:HD21	1:A:861:LEU:CD2	2.34	0.55
1:A:255:VAL:O	1:A:673:VAL:HG21	2.06	0.55
1:A:364:THR:OG1	1:A:533:PRO:HB3	2.07	0.55
1:A:491:ALA:HB2	1:A:627:ARG:HD2	1.88	0.55
1:A:528:GLN:O	1:A:531:THR:HG22	2.06	0.55
1:A:563:GLN:OE1	1:A:566:ILE:HB	2.06	0.55
1:A:530:ASN:O	1:A:533:PRO:HD2	2.06	0.55
1:A:864:PRO:O	1:A:865:VAL:HG12	2.06	0.55
1:A:970:ILE:HG23	1:A:971:ASP:N	2.22	0.55
1:A:248:MET:HE1	1:A:319:PHE:HZ	1.72	0.55
1:A:361:ARG:O	1:A:365:MET:HB2	2.07	0.55
1:A:772:ILE:CD1	1:A:1047:LYS:HB2	2.37	0.55
1:A:109:TYR:HD1	1:A:129:LEU:HD13	1.70	0.55
1:A:511:SER:H	1:A:514:THR:CG2	2.20	0.55
1:A:536:LYS:O	1:A:540:MET:HG3	2.07	0.55
1:A:899:PHE:C	1:A:901:PRO:HD3	2.31	0.55
1:A:253:ALA:O	1:A:278:ALA:HB1	2.07	0.55
1:A:451:ARG:HH21	1:A:459:THR:HG21	1.72	0.55
1:A:573:VAL:HG23	1:A:586:TYR:HB2	1.88	0.55
1:A:584:ILE:HG13	1:A:585:GLN:O	2.06	0.55
1:A:647:MET:O	1:A:651:VAL:HG23	2.07	0.55
1:A:166:ARG:HG2	1:A:166:ARG:HH11	1.72	0.54
1:A:449:LEU:HD11	1:A:461:ILE:HD12	1.89	0.54
1:A:511:SER:H	1:A:514:THR:HG23	1.72	0.54
1:A:736:ILE:O	1:A:740:THR:HG23	2.07	0.54
1:A:816:SER:HB3	1:A:820:LEU:CD1	2.38	0.54
1:A:7:ILE:HA	1:A:10:GLU:OE1	2.07	0.54
1:A:186:ASN:HD21	1:A:190:ARG:N	2.05	0.54
1:A:4:TYR:C	1:A:4:TYR:CD2	2.84	0.54
1:A:309:ASP:O	1:A:312:VAL:HG22	2.06	0.54
1:A:346:GLN:HG2	1:A:586:TYR:CZ	2.42	0.54
1:A:262:ILE:HD12	1:A:263:THR:C	2.33	0.54
1:A:126:THR:C	1:A:128:SER:H	2.15	0.54
1:A:449:LEU:HD21	1:A:461:ILE:CD1	2.37	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:519:THR:CG2	1:A:520:ASP:H	2.21	0.54
1:A:761:SER:OG	1:A:762:THR:N	2.38	0.54
1:A:476:VAL:O	1:A:480:MET:HG3	2.07	0.54
1:A:573:VAL:CG1	1:A:575:ILE:HG13	2.38	0.54
1:A:544:ILE:O	1:A:548:MET:HG3	2.07	0.54
1:A:559:ASN:HA	1:A:562:LYS:NZ	2.22	0.54
1:A:873:THR:HA	1:A:1073:ILE:HG23	1.89	0.54
1:A:134:ILE:HG13	1:A:698:ASN:OD1	2.07	0.54
1:A:573:VAL:HG12	1:A:575:ILE:HG13	1.90	0.54
1:A:882:LYS:HB3	1:A:883:PRO:HD3	1.89	0.54
1:A:952:SER:OG	1:A:1071:TRP:HE3	1.90	0.54
1:A:1082[A]:ASN:O	1:A:1084[A]:ASN:N	2.40	0.54
1:A:473:GLN:HB3	1:A:594:LYS:HB3	1.90	0.53
1:A:186:ASN:ND2	1:A:190:ARG:H	2.06	0.53
1:A:195:VAL:HG23	1:A:196:MET:H	1.72	0.53
1:A:398:SER:HA	1:A:838:LYS:HE2	1.90	0.53
1:A:796:SER:OG	1:A:845:ILE:HG23	2.09	0.53
1:A:744:ILE:N	1:A:744:ILE:HD12	2.24	0.53
1:A:161:LYS:CB	1:A:165:ARG:HH12	2.20	0.53
1:A:387:ARG:HB3	1:A:387:ARG:NH1	2.22	0.53
1:A:505:ASP:O	1:A:508:ARG:HB3	2.09	0.53
1:A:221:ASP:O	1:A:225:ILE:HG13	2.09	0.53
1:A:426:ASP:HB3	1:A:432:ARG:NH2	2.24	0.53
1:A:820:LEU:HD13	1:A:824:ASN:HB2	1.91	0.53
1:A:864:PRO:HB3	1:A:867:PHE:HE2	1.73	0.53
1:A:109:TYR:HA	1:A:118:LEU:CD2	2.39	0.53
1:A:796:SER:C	1:A:798:ILE:H	2.16	0.53
1:A:1082[A]:ASN:O	1:A:1084[A]:ASN:CG	2.52	0.53
1:A:177:ILE:HD13	1:A:203:LEU:HD11	1.90	0.52
1:A:12:LEU:HD22	1:A:16:TYR:HE2	1.73	0.52
1:A:168:ASP:O	1:A:171:THR:HB	2.09	0.52
1:A:345:ASP:HB2	1:A:458:ARG:CZ	2.39	0.52
1:A:421:ASN:OD1	1:A:422:MET:N	2.42	0.52
1:A:564:THR:O	1:A:568:LEU:HG	2.09	0.52
1:A:823:LYS:HE2	1:A:825:ASN:OD1	2.09	0.52
1:A:985:LYS:NZ	1:A:985:LYS:HB3	2.24	0.52
1:A:420:LYS:HA	1:A:423:HIS:CD2	2.44	0.52
1:A:222:ASP:OD1	1:A:324:LYS:HD3	2.08	0.52
1:A:227:LYS:O	1:A:231:VAL:HG23	2.10	0.52
1:A:240:LEU:O	1:A:244:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:538:ILE:HD13	1:A:595:GLN:OE1	2.10	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:549:THR:HG21	1:A:554:VAL:CG1	2.40	0.52
1:A:880:ASP:O	1:A:883:PRO:HD2	2.10	0.52
1:A:408:LEU:HD12	1:A:408:LEU:N	2.24	0.52
1:A:410:PHE:HD1	1:A:807:THR:HG21	1.74	0.52
1:A:760:ASN:C	1:A:760:ASN:ND2	2.67	0.52
1:A:321:LEU:O	1:A:325:ILE:HG12	2.10	0.52
1:A:515:MET:HE3	1:A:639:PHE:CE2	2.44	0.52
1:A:607:LEU:HD21	1:A:659:TYR:HE1	1.75	0.52
1:A:293:ASP:O	1:A:297:LYS:HG2	2.08	0.52
1:A:808:PHE:O	1:A:812:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:114:MET:HB2	1:A:117:GLU:HG2	1.92	0.52
1:A:232:LEU:HD21	1:A:299:GLY:HA3	1.90	0.52
1:A:496:GLN:HB3	1:A:920:GLN:HB2	1.91	0.52
1:A:879:ARG:HG3	1:A:879:ARG:HH11	1.75	0.52
1:A:345:ASP:HB2	1:A:458:ARG:NH1	2.25	0.51
1:A:428:MET:SD	1:A:811:TYR:HD1	2.32	0.51
1:A:596:THR:O	1:A:600:ASN:HB2	2.10	0.51
1:A:820:LEU:HD13	1:A:824:ASN:CB	2.40	0.51
1:A:506:VAL:O	1:A:510:LEU:HG	2.10	0.51
1:A:803:ALA:HA	1:A:808:PHE:CD2	2.46	0.51
1:A:292:LEU:HD23	1:A:295:MET:HE3	1.93	0.51
1:A:330:PHE:CZ	1:A:690:ARG:CZ	2.94	0.51
1:A:519:THR:HG22	1:A:520:ASP:H	1.74	0.51
1:A:126:THR:OG1	1:A:128:SER:HB3	2.11	0.51
1:A:703:GLN:H	1:A:703:GLN:NE2	2.08	0.51
1:A:772:ILE:HG23	1:A:1043:ASN:HD22	1.75	0.51
1:A:410:PHE:HE2	1:A:415:ILE:HD11	1.76	0.51
1:A:466:PRO:HD2	1:A:469:TYR:CD2	2.46	0.51
1:A:582:LYS:CG	1:A:583:LYS:H	2.24	0.51
1:A:659:TYR:CG	1:A:666:VAL:HG21	2.46	0.51
1:A:924:ASP:C	1:A:944:ILE:HD13	2.35	0.51
1:A:330:PHE:CE1	1:A:690:ARG:NE	2.79	0.51
1:A:397:MET:HA	1:A:400:ALA:HB2	1.93	0.51
1:A:515:MET:HE2	1:A:643:VAL:HG13	1.92	0.51
1:A:8:LEU:HA	1:A:737:MET:SD	2.51	0.51
1:A:1005:GLN:CG	1:A:1006:LEU:HD12	2.41	0.51
1:A:962:LEU:O	1:A:967:ILE:HD13	2.11	0.51
1:A:41:PHE:HB2	1:A:62:TYR:CD1	2.45	0.50
1:A:1005:GLN:HG3	1:A:1006:LEU:HD12	1.92	0.50
1:A:618:LYS:HD3	1:A:654:ASP:OD2	2.12	0.50
1:A:358:GLU:HG3	1:A:359:MET:H	1.76	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:447:ILE:N	1:A:447:ILE:CD1	2.73	0.50
1:A:819:LEU:C	1:A:820:LEU:HD23	2.37	0.50
1:A:54:SER:OG	1:A:55:LEU:N	2.44	0.50
1:A:452:ARG:HG3	1:A:452:ARG:HH11	1.76	0.50
1:A:777:THR:HG21	1:A:882:LYS:HZ1	1.75	0.50
1:A:967:ILE:H	1:A:967:ILE:CD1	2.22	0.50
1:A:892:LEU:HB2	1:A:1051:TRP:CD1	2.47	0.50
1:A:758:THR:HG22	1:A:766:PHE:C	2.37	0.50
1:A:246:SER:OG	1:A:247:PRO:HD3	2.12	0.50
1:A:343:ALA:CB	1:A:575:ILE:HD13	2.41	0.50
1:A:385:LEU:HD13	1:A:939:VAL:CG2	2.42	0.50
1:A:687:ILE:HG23	1:A:687:ILE:O	2.11	0.50
1:A:76:SER:O	1:A:748:LEU:HA	2.12	0.49
1:A:255:VAL:HG12	1:A:256:ASP:O	2.12	0.49
1:A:1029:VAL:O	1:A:1033:LEU:HG	2.12	0.49
1:A:1080[A]:TYR:C	1:A:1082[A]:ASN:H	2.19	0.49
1:A:467:TYR:C	1:A:467:TYR:CD1	2.89	0.49
1:A:387:ARG:HH11	1:A:387:ARG:CB	2.25	0.49
1:A:803:ALA:HA	1:A:808:PHE:CG	2.47	0.49
1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CD	2.71	0.49
1:A:532:GLN:O	1:A:536:LYS:HG3	2.12	0.49
1:A:824:ASN:O	1:A:827:VAL:N	2.46	0.49
1:A:166:ARG:HG2	1:A:166:ARG:NH1	2.26	0.49
1:A:232:LEU:HD22	1:A:300:LEU:HD12	1.95	0.49
1:A:748:LEU:HD23	1:A:748:LEU:O	2.13	0.49
1:A:759:THR:O	1:A:759:THR:HG23	2.13	0.49
1:A:1009:PHE:HE2	1:A:1042:ILE:HG13	1.78	0.49
1:A:531:THR:HG23	1:A:532:GLN:N	2.27	0.49
1:A:23:GLN:O	1:A:25:PRO:HD3	2.13	0.49
1:A:255:VAL:HG22	1:A:314:ARG:O	2.13	0.49
1:A:433:TYR:CE1	1:A:435:PRO:HD3	2.49	0.48
1:A:772:ILE:HG23	1:A:1043:ASN:ND2	2.29	0.48
1:A:898:LYS:HE2	1:A:908:GLN:HG2	1.94	0.48
1:A:899:PHE:CZ	1:A:900:MET:HE2	2.48	0.48
1:A:1079[B]:PRO:O	1:A:1080[B]:TYR:CG	2.66	0.48
1:A:279:ILE:HG13	1:A:648:ILE:HD11	1.95	0.48
1:A:497:SER:HB2	1:A:501:LEU:HD23	1.95	0.48
1:A:515:MET:HG2	1:A:639:PHE:HE2	1.77	0.48
1:A:951:ILE:HG23	1:A:1071:TRP:HZ3	1.79	0.48
1:A:591:SER:HB2	1:A:596:THR:HG21	1.95	0.48
1:A:24:ILE:HG21	1:A:46:LEU:CD1	2.44	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:80:ASP:O	1:A:81:LYS:HG3	2.13	0.48
1:A:396:SER:O	1:A:398:SER:N	2.46	0.48
1:A:1058:TYR:HD2	1:A:1063:MET:HG2	1.79	0.48
1:A:488:ARG:NH2	1:A:501:LEU:HD11	2.28	0.48
1:A:509:PHE:O	1:A:514:THR:HG21	2.13	0.48
1:A:769:GLU:HG2	1:A:772:ILE:HD12	1.95	0.48
1:A:825:ASN:HA	1:A:828:SER:CB	2.41	0.48
1:A:441:VAL:O	1:A:571:SER:HA	2.14	0.48
1:A:595:GLN:O	1:A:599:ALA:N	2.38	0.47
1:A:1047:LYS:O	1:A:1048:ASN:ND2	2.47	0.47
1:A:105:ASN:HD22	1:A:111:ASN:HA	1.76	0.47
1:A:449:LEU:HD22	1:A:573:VAL:HG11	1.95	0.47
1:A:498:ASN:HB2	1:A:1086[A]:PHE:CE2	2.48	0.47
1:A:729:ARG:HH11	1:A:770:ASP:CG	2.22	0.47
1:A:195:VAL:HG23	1:A:196:MET:N	2.28	0.47
1:A:405:SER:HA	1:A:418:THR:HA	1.96	0.47
1:A:633:ASN:OD1	1:A:633:ASN:O	2.33	0.47
1:A:639:PHE:C	1:A:641:THR:H	2.23	0.47
1:A:280:VAL:O	1:A:645:LYS:HE3	2.14	0.47
1:A:906:ASN:HD21	1:A:907:VAL:HG23	1.79	0.47
1:A:385:LEU:HD13	1:A:939:VAL:HG22	1.96	0.47
1:A:145:VAL:CG2	1:A:211:ILE:HG23	2.42	0.47
1:A:466:PRO:HD2	1:A:469:TYR:HD2	1.79	0.47
1:A:827:VAL:HG13	1:A:940:TYR:CZ	2.50	0.47
1:A:276:VAL:HB	1:A:673:VAL:CG1	2.42	0.47
1:A:549:THR:HG21	1:A:554:VAL:HG11	1.97	0.47
1:A:621:PHE:CD1	1:A:621:PHE:C	2.93	0.47
1:A:1068:LYS:HE3	1:A:1068:LYS:HA	1.96	0.47
1:A:1077[A]:ARG:O	1:A:1078[A]:SER:C	2.56	0.47
1:A:125:TYR:HE1	1:A:201:TYR:HE1	1.63	0.47
1:A:248:MET:O	1:A:252:VAL:HG13	2.14	0.47
1:A:465:LEU:HB3	1:A:469:TYR:CD2	2.50	0.47
1:A:687:ILE:HG22	1:A:899:PHE:O	2.15	0.47
1:A:41:PHE:HD1	1:A:62:TYR:CD2	2.33	0.47
1:A:129:LEU:HB2	1:A:201:TYR:OH	2.15	0.47
1:A:400:ALA:HB2	1:A:470:PHE:CE2	2.50	0.47
1:A:472:ALA:O	1:A:561:TYR:HD1	1.96	0.47
1:A:473:GLN:NE2	1:A:593:GLU:HB3	2.29	0.47
1:A:214:LEU:C	1:A:214:LEU:HD12	2.40	0.47
1:A:402:ASN:N	1:A:420:LYS:HD2	2.30	0.47
1:A:447:ILE:HG22	1:A:448:PRO:O	2.14	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:426:ASP:O	1:A:430:ASN:HB2	2.15	0.46
1:A:535:ARG:HH11	1:A:565:GLN:NE2	2.12	0.46
1:A:616:SER:O	1:A:617:ASN:C	2.58	0.46
1:A:107:LEU:HB2	1:A:110:GLU:HG3	1.96	0.46
1:A:283:GLN:HG2	1:A:649:GLN:HG3	1.98	0.46
1:A:295:MET:O	1:A:300:LEU:HB2	2.15	0.46
1:A:464:ILE:O	1:A:464:ILE:HG22	2.14	0.46
1:A:545:LEU:O	1:A:548:MET:HB2	2.15	0.46
1:A:865:VAL:HG22	1:A:865:VAL:O	2.16	0.46
1:A:382:ASP:O	1:A:387:ARG:HD2	2.14	0.46
1:A:520:ASP:CB	1:A:667:LYS:HE3	2.39	0.46
1:A:212:GLU:CB	1:A:696:LEU:HD12	2.39	0.46
1:A:160:LEU:O	1:A:163:TYR:HB3	2.16	0.46
1:A:449:LEU:HD21	1:A:461:ILE:HD12	1.97	0.46
1:A:535:ARG:HH11	1:A:565:GLN:HE22	1.63	0.46
1:A:675:ILE:C	1:A:675:ILE:HD12	2.41	0.46
1:A:922:GLU:OE1	1:A:926:SER:N	2.49	0.46
1:A:1013:ASP:O	1:A:1016:LYS:HG2	2.15	0.46
1:A:4:TYR:CD1	1:A:733:LEU:HD22	2.33	0.46
1:A:262:ILE:HD12	1:A:262:ILE:C	2.40	0.46
1:A:300:LEU:HD12	1:A:300:LEU:N	2.30	0.46
1:A:396:SER:OG	1:A:474:HIS:NE2	2.49	0.46
1:A:538:ILE:HD12	1:A:565:GLN:NE2	2.31	0.46
1:A:101:ASP:O	1:A:103:THR:N	2.49	0.46
1:A:200:PRO:O	1:A:201:TYR:C	2.58	0.46
1:A:290:GLN:HE21	1:A:290:GLN:HB2	1.54	0.46
1:A:444:ASP:C	1:A:446:PRO:HD3	2.41	0.46
1:A:840:ASN:HA	1:A:845:ILE:HG21	1.97	0.46
1:A:161:LYS:HB3	1:A:165:ARG:NH1	2.28	0.46
1:A:186:ASN:H	1:A:186:ASN:ND2	2.07	0.46
1:A:310:TRP:CZ2	1:A:319:PHE:HD1	2.34	0.46
1:A:801:GLU:O	1:A:804:ALA:HB3	2.15	0.46
1:A:109:TYR:HA	1:A:118:LEU:HD21	1.98	0.45
1:A:186:ASN:O	1:A:189:TYR:N	2.48	0.45
1:A:840:ASN:OD1	1:A:846:SER:HA	2.16	0.45
1:A:874:ILE:CG2	1:A:875:ASN:N	2.80	0.45
1:A:247:PRO:O	1:A:251:LEU:HG	2.17	0.45
1:A:424:VAL:O	1:A:428:MET:HG3	2.17	0.45
1:A:598:ALA:O	1:A:602:ILE:HG13	2.16	0.45
1:A:695:LEU:HD21	1:A:732:ILE:CD1	2.47	0.45
1:A:786:ARG:HD3	1:A:869:SER:HB2	1.99	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:180:TYR:CE1	1:A:200:PRO:HD3	2.51	0.45
1:A:734:THR:HA	1:A:737:MET:HE3	1.97	0.45
1:A:112:ASN:OD1	1:A:202:TYR:HB2	2.16	0.45
1:A:126:THR:C	1:A:128:SER:N	2.75	0.45
1:A:180:TYR:CD1	1:A:200:PRO:HD3	2.51	0.45
1:A:264:ASN:OD1	1:A:268:GLU:HG3	2.16	0.45
1:A:410:PHE:CE2	1:A:415:ILE:HD11	2.52	0.45
1:A:944:ILE:HG23	1:A:945:GLU:N	2.30	0.45
1:A:257:ILE:O	1:A:275:TYR:HA	2.17	0.45
1:A:446:PRO:C	1:A:447:ILE:HD12	2.41	0.45
1:A:690:ARG:O	1:A:723:ARG:NH1	2.49	0.45
1:A:302:ASP:O	1:A:306:MET:HG3	2.16	0.45
1:A:441:VAL:HB	1:A:447:ILE:CD1	2.33	0.45
1:A:133:ALA:HB1	1:A:701:ARG:HG3	1.99	0.45
1:A:134:ILE:CG2	1:A:136:THR:HG22	2.45	0.45
1:A:264:ASN:HD21	1:A:268:GLU:HG3	1.81	0.45
1:A:301:VAL:O	1:A:304:PRO:HD2	2.17	0.45
1:A:448:PRO:HD2	1:A:464:ILE:O	2.17	0.45
1:A:580:VAL:HG12	1:A:581:ILE:N	2.32	0.45
1:A:951:ILE:CG1	1:A:985:LYS:HA	2.47	0.45
1:A:64:ASP:OD2	1:A:65:VAL:N	2.48	0.44
1:A:501:LEU:O	1:A:501:LEU:HD12	2.17	0.44
1:A:872:ILE:HG13	1:A:1072:ASN:O	2.17	0.44
1:A:105:ASN:HB2	1:A:111:ASN:OD1	2.17	0.44
1:A:250:ILE:HG13	1:A:291:MET:HE3	1.99	0.44
1:A:377:GLU:N	1:A:378:PRO:CD	2.81	0.44
1:A:437:ILE:O	1:A:439:PRO:HD3	2.17	0.44
1:A:626:ILE:O	1:A:627:ARG:NH1	2.43	0.44
1:A:705:THR:O	1:A:709:GLN:HB2	2.16	0.44
1:A:422:MET:HA	1:A:425:MET:HG3	1.98	0.44
1:A:832:ALA:O	1:A:836:LYS:HG3	2.17	0.44
1:A:954:HIS:HB2	1:A:957:GLU:HG3	1.98	0.44
1:A:248:MET:HE3	1:A:251:LEU:HB2	1.99	0.44
1:A:358:GLU:C	1:A:359:MET:HE2	2.43	0.44
1:A:415:ILE:CD1	1:A:422:MET:HE1	2.48	0.44
1:A:496:GLN:O	1:A:920:GLN:HG2	2.18	0.44
1:A:770:ASP:O	1:A:771:PHE:HB2	2.18	0.44
1:A:148:TRP:CE3	1:A:149:LEU:HD23	2.52	0.44
1:A:223:TYR:CZ	1:A:227:LYS:HD2	2.53	0.44
1:A:232:LEU:CD2	1:A:300:LEU:HD12	2.46	0.44
1:A:358:GLU:HG3	1:A:359:MET:N	2.33	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:127:ASP:OD1	1:A:127:ASP:C	2.60	0.44
1:A:447:ILE:CG2	1:A:464:ILE:H	2.31	0.44
1:A:626:ILE:C	1:A:627:ARG:HG2	2.43	0.44
1:A:820:LEU:HB3	1:A:824:ASN:ND2	2.27	0.44
1:A:500:LEU:HD22	1:A:899:PHE:HE1	1.83	0.44
1:A:650:ASP:O	1:A:654:ASP:OD1	2.36	0.44
1:A:820:LEU:HD22	1:A:824:ASN:CG	2.43	0.44
1:A:825:ASN:O	1:A:829:ARG:HG2	2.18	0.44
1:A:1077[B]:ARG:O	1:A:1078[B]:SER:C	2.60	0.44
1:A:500:LEU:HD12	1:A:917:ARG:O	2.18	0.44
1:A:595:GLN:O	1:A:599:ALA:HB3	2.18	0.44
1:A:854:ILE:O	1:A:858:LEU:HG	2.17	0.44
1:A:951:ILE:HG13	1:A:985:LYS:HG2	1.99	0.44
1:A:49:SER:C	1:A:51:ASN:H	2.25	0.43
1:A:241:ALA:HB2	1:A:332:VAL:HG21	2.00	0.43
1:A:977:GLY:O	1:A:978:SER:O	2.36	0.43
1:A:3:LYS:O	1:A:7:ILE:HG13	2.18	0.43
1:A:108:ASP:HA	1:A:111:ASN:HD22	1.83	0.43
1:A:181:GLY:O	1:A:183:PRO:HD3	2.19	0.43
1:A:279:ILE:HG13	1:A:648:ILE:CD1	2.47	0.43
1:A:777:THR:HG23	1:A:882:LYS:HD2	2.00	0.43
1:A:165:ARG:HG3	1:A:165:ARG:HH11	1.84	0.43
1:A:215:MET:HA	1:A:215:MET:CE	2.45	0.43
1:A:324:LYS:HG2	1:A:328:TRP:NE1	2.33	0.43
1:A:586:TYR:HE2	1:A:588:ALA:HB3	1.81	0.43
1:A:860:MET:O	1:A:860:MET:HE3	2.18	0.43
1:A:921:ILE:O	1:A:922:GLU:C	2.61	0.43
1:A:948:TYR:OH	1:A:1071:TRP:HA	2.18	0.43
1:A:101:ASP:C	1:A:103:THR:N	2.76	0.43
1:A:427:ASP:OD1	1:A:432:ARG:NH2	2.52	0.43
1:A:448:PRO:HB2	1:A:464:ILE:HB	1.99	0.43
1:A:578:GLY:C	1:A:580:VAL:H	2.27	0.43
1:A:894:ILE:O	1:A:894:ILE:HG13	2.18	0.43
1:A:109:TYR:OH	1:A:337:GLN:HB2	2.19	0.43
1:A:512:ASN:N	1:A:512:ASN:ND2	2.65	0.43
1:A:396:SER:O	1:A:397:MET:C	2.61	0.43
1:A:686:LYS:HD3	1:A:901:PRO:HG2	2.01	0.43
1:A:754:GLU:O	1:A:758:THR:OG1	2.35	0.43
1:A:840:ASN:O	1:A:841:SER:C	2.60	0.43
1:A:880:ASP:OD2	1:A:1069:LYS:HE3	2.19	0.43
1:A:169:LEU:HG	1:A:223:TYR:CE1	2.54	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1047:LYS:O	1:A:1048:ASN:CG	2.61	0.43
1:A:900:MET:N	1:A:901:PRO:HD3	2.34	0.43
1:A:981:TYR:CZ	1:A:985:LYS:HD2	2.53	0.43
1:A:708:ASP:CG	1:A:1080[A]:TYR:CZ	2.97	0.43
1:A:970:ILE:HG23	1:A:971:ASP:H	1.82	0.43
1:A:319:PHE:N	1:A:320:PRO:HD2	2.34	0.42
1:A:527:SER:O	1:A:530:ASN:N	2.48	0.42
1:A:897:GLN:OE1	1:A:897:GLN:N	2.49	0.42
1:A:745:THR:OG1	1:A:748:LEU:HB3	2.19	0.42
1:A:1024:GLY:O	1:A:1026:ILE:N	2.49	0.42
1:A:1034:HIS:O	1:A:1037:ALA:HB3	2.20	0.42
1:A:729:ARG:HD2	1:A:770:ASP:OD2	2.19	0.42
1:A:386:LEU:HB3	1:A:554:VAL:HG22	2.00	0.42
1:A:409:LYS:HA	1:A:413:LYS:O	2.19	0.42
1:A:428:MET:SD	1:A:811:TYR:CD1	3.11	0.42
1:A:138:LEU:HA	1:A:141:ASN:HD22	1.84	0.42
1:A:517:LEU:C	1:A:517:LEU:HD23	2.44	0.42
1:A:521:VAL:HG11	1:A:607:LEU:CD2	2.49	0.42
1:A:887:VAL:HG12	1:A:1054:LEU:HG	2.02	0.42
1:A:61:GLU:O	1:A:61:GLU:HG2	2.19	0.42
1:A:64:ASP:OD2	1:A:65:VAL:HG23	2.20	0.42
1:A:173:VAL:O	1:A:177:ILE:HG12	2.19	0.42
1:A:368:ARG:HG3	1:A:541:GLY:N	2.35	0.42
1:A:438:ILE:HD11	1:A:563:GLN:CG	2.50	0.42
1:A:441:VAL:HG11	1:A:465:LEU:HD22	2.02	0.42
1:A:503:TYR:HB2	1:A:687:ILE:HD13	2.02	0.42
1:A:922:GLU:HG3	1:A:991:SER:OG	2.20	0.42
1:A:72:LEU:HG	1:A:861:LEU:HG	2.01	0.42
1:A:114:MET:HB2	1:A:117:GLU:CG	2.50	0.42
1:A:438:ILE:HD11	1:A:563:GLN:CB	2.45	0.42
1:A:827:VAL:O	1:A:831:ILE:HG13	2.20	0.42
1:A:133:ALA:CB	1:A:701:ARG:HG3	2.50	0.42
1:A:229:LEU:HD21	1:A:244:VAL:HG21	2.01	0.42
1:A:873:THR:HA	1:A:1073:ILE:CG2	2.50	0.42
1:A:374:MET:HE1	1:A:602:ILE:HG12	2.01	0.42
1:A:381:HIS:O	1:A:382:ASP:CB	2.66	0.42
1:A:441:VAL:CB	1:A:447:ILE:HD11	2.34	0.42
1:A:542:LEU:HD11	1:A:561:TYR:HD2	1.85	0.42
1:A:574:GLN:HG2	1:A:581:ILE:CG2	2.50	0.42
1:A:802:ILE:HG13	1:A:808:PHE:HD2	1.85	0.42
1:A:186:ASN:N	1:A:186:ASN:ND2	2.67	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:865:VAL:HG13	1:A:866:THR:HG23	2.02	0.42
1:A:288:LEU:HD12	1:A:288:LEU:O	2.20	0.41
1:A:934:ILE:HG23	1:A:965:LEU:CD1	2.49	0.41
1:A:143:ASN:HD22	1:A:143:ASN:HA	1.54	0.41
1:A:248:MET:HE1	1:A:319:PHE:CZ	2.52	0.41
1:A:292:LEU:HD13	1:A:308:GLN:NE2	2.35	0.41
1:A:507:THR:HA	1:A:510:LEU:HD12	2.02	0.41
1:A:811:TYR:CZ	1:A:815:LEU:HD11	2.54	0.41
1:A:546:ALA:O	1:A:555:LEU:HD21	2.20	0.41
1:A:929:ALA:N	1:A:984:ASP:OD2	2.53	0.41
1:A:205:THR:HG23	1:A:206:TRP:N	2.36	0.41
1:A:718:ILE:HG23	1:A:771:PHE:CE1	2.55	0.41
1:A:54:SER:O	1:A:55:LEU:HD23	2.20	0.41
1:A:169:LEU:HG	1:A:223:TYR:HE1	1.85	0.41
1:A:766:PHE:N	1:A:766:PHE:CD2	2.89	0.41
1:A:798:ILE:HB	1:A:845:ILE:HG12	2.03	0.41
1:A:840:ASN:HA	1:A:845:ILE:HG22	1.99	0.41
1:A:899:PHE:CE1	1:A:900:MET:HE2	2.55	0.41
1:A:81:LYS:O	1:A:82:TYR:HB2	2.19	0.41
1:A:169:LEU:HD21	1:A:227:LYS:HG3	2.03	0.41
1:A:191:TYR:CZ	1:A:204:VAL:HG11	2.56	0.41
1:A:193:TYR:O	1:A:197:LYS:HB2	2.21	0.41
1:A:810:ASN:O	1:A:814:ARG:HB2	2.20	0.41
1:A:824:ASN:ND2	1:A:964:SER:HB2	2.35	0.41
1:A:871:LYS:HD3	1:A:1074:THR:HG21	2.01	0.41
1:A:490:TYR:HA	1:A:628:VAL:HG22	2.02	0.41
1:A:690:ARG:HH11	1:A:690:ARG:CB	2.34	0.41
1:A:711:ALA:HB2	1:A:765:VAL:HG22	2.03	0.41
1:A:844:PRO:O	1:A:848:GLU:HB2	2.21	0.41
1:A:992:TYR:CE2	1:A:996:LEU:HD11	2.56	0.41
1:A:86:GLU:O	1:A:90:VAL:HG23	2.21	0.41
1:A:236:ASN:OD1	1:A:236:ASN:C	2.64	0.41
1:A:426:ASP:HB3	1:A:432:ARG:HH21	1.84	0.41
1:A:568:LEU:O	1:A:569:MET:C	2.64	0.41
1:A:1042:ILE:O	1:A:1045:ALA:HB3	2.21	0.41
1:A:161:LYS:C	1:A:165:ARG:NH1	2.78	0.41
1:A:375:LEU:HB2	1:A:545:LEU:HD13	2.03	0.41
1:A:467:TYR:O	1:A:471:ILE:HD13	2.20	0.41
1:A:516:VAL:HG21	1:A:675:ILE:HG21	2.01	0.41
1:A:530:ASN:C	1:A:533:PRO:HD2	2.46	0.41
1:A:772:ILE:HD11	1:A:1047:LYS:HB2	2.02	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:784:ILE:HG13	1:A:788:PHE:CE2	2.56	0.41
1:A:917:ARG:HD2	1:A:919:TYR:CZ	2.56	0.41
1:A:687:ILE:CG2	1:A:687:ILE:O	2.69	0.41
1:A:255:VAL:HG23	1:A:310:TRP:HH2	1.86	0.40
1:A:524:TRP:CD1	1:A:607:LEU:HD22	2.56	0.40
1:A:539:ILE:HG23	1:A:562:LYS:CG	2.42	0.40
1:A:959:GLN:NE2	1:A:973:ASP:CG	2.79	0.40
1:A:119:PHE:HA	1:A:120:PRO:HD2	1.94	0.40
1:A:287:GLU:O	1:A:291:MET:HG3	2.22	0.40
1:A:615:ILE:HG13	1:A:616:SER:N	2.34	0.40
1:A:621:PHE:C	1:A:621:PHE:HD1	2.29	0.40
1:A:1079[A]:PRO:HD2	1:A:1080[A]:TYR:CE2	2.56	0.40
1:A:884:PHE:CG	1:A:1058:TYR:CD1	3.09	0.40
1:A:1062:GLU:HA	1:A:1065:LYS:HZ3	1.87	0.40
1:A:34:LEU:O	1:A:37:ARG:HB2	2.20	0.40
1:A:200:PRO:O	1:A:203:LEU:N	2.54	0.40
1:A:989:LEU:C	1:A:989:LEU:HD23	2.47	0.40
1:A:62:TYR:O	1:A:66:ILE:HG12	2.22	0.40
1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:HD12	2.36	0.40
1:A:255:VAL:HG11	1:A:316:ILE:HB	2.02	0.40
1:A:375:LEU:HB2	1:A:545:LEU:CD1	2.51	0.40
1:A:449:LEU:HD21	1:A:461:ILE:HD13	2.02	0.40
1:A:908:GLN:O	1:A:912:GLN:HG3	2.21	0.40
1:A:982:SER:O	1:A:985:LYS:HB2	2.21	0.40

There are no symmetry-related clashes.

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	1073/1095 (98%)	926 (86%)	105 (10%)	42 (4%)	2 14

All (42) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	54	SER
1	A	397	MET
1	A	401	SER
1	A	864	PRO
1	A	978	SER
1	A	1077[A]	ARG
1	A	1077[B]	ARG
1	A	1079[A]	PRO
1	A	1079[B]	PRO
1	A	1084[A]	ASN
1	A	1084[B]	ASN
1	A	102	LEU
1	A	201	TYR
1	A	382	ASP
1	A	521	VAL
1	A	825	ASN
1	A	862	GLN
1	A	865	VAL
1	A	1002	GLY
1	A	81	LYS
1	A	582	LYS
1	A	640	ASN
1	A	870	SER
1	A	256	ASP
1	A	463	PHE
1	A	464	ILE
1	A	596	THR
1	A	760	ASN
1	A	790	SER
1	A	795	LYS
1	A	1025	LYS
1	A	192	GLU
1	A	274	LYS
1	A	508	ARG
1	A	586	TYR
1	A	200	PRO
1	A	246	SER
1	A	301	VAL
1	A	901	PRO
1	A	259	GLY
1	A	798	ILE
1	A	446	PRO

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	979/996 (98%)	904 (92%)	75 (8%)	12	37

All (75) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	35	GLU
1	A	46	LEU
1	A	47	GLU
1	A	51	ASN
1	A	70	THR
1	A	79	TYR
1	A	99	GLU
1	A	121	THR
1	A	143	ASN
1	A	150	GLU
1	A	155	ASP
1	A	171	THR
1	A	178	ASN
1	A	186	ASN
1	A	195	VAL
1	A	215	MET
1	A	246	SER
1	A	252	VAL
1	A	265	GLU
1	A	268	GLU
1	A	274	LYS
1	A	276	VAL
1	A	283	GLN
1	A	290	GLN
1	A	305	LYS
1	A	311	LEU
1	A	320	PRO
1	A	324	LYS
1	A	339	MET
1	A	341	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	365	MET
1	A	375	LEU
1	A	394	LEU
1	A	404	GLU
1	A	408	LEU
1	A	426	ASP
1	A	430	ASN
1	A	439	PRO
1	A	447	ILE
1	A	451	ARG
1	A	499	GLN
1	A	512	ASN
1	A	517	LEU
1	A	518	TYR
1	A	608	ILE
1	A	619	HIS
1	A	623	THR
1	A	628	VAL
1	A	629	ASP
1	A	663	ASN
1	A	690	ARG
1	A	709	GLN
1	A	721	ARG
1	A	723	ARG
1	A	734	THR
1	A	750	LEU
1	A	758	THR
1	A	782	VAL
1	A	820	LEU
1	A	835	GLU
1	A	838	LYS
1	A	886	THR
1	A	892	LEU
1	A	906	ASN
1	A	939	VAL
1	A	967	ILE
1	A	971	ASP
1	A	1003	CYS
1	A	1015	GLU
1	A	1050	SER
1	A	1068	LYS
1	A	1078[A]	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1078[B]	SER
1	A	1084[A]	ASN
1	A	1084[B]	ASN

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (40) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	36	ASN
1	A	42	HIS
1	A	48	ASN
1	A	141	ASN
1	A	143	ASN
1	A	185	HIS
1	A	186	ASN
1	A	258	ASN
1	A	283	GLN
1	A	289	ASN
1	A	290	GLN
1	A	308	GLN
1	A	346	GLN
1	A	402	ASN
1	A	423	HIS
1	A	473	GLN
1	A	499	GLN
1	A	512	ASN
1	A	547	ASN
1	A	565	GLN
1	A	600	ASN
1	A	649	GLN
1	A	653	ASN
1	A	694	ASN
1	A	703	GLN
1	A	706	GLN
1	A	810	ASN
1	A	818	GLN
1	A	824	ASN
1	A	853	GLN
1	A	862	GLN
1	A	906	ASN
1	A	956	ASN
1	A	959	GLN
1	A	1005	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1010	ASN
1	A	1034	HIS
1	A	1043	ASN
1	A	1048	ASN
1	A	1072	ASN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

5.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no 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 [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2		OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	1071/1095 (97%)	-0.25	8 (0%)	84 73	4, 37, 95, 149	10 (0%)

All (8) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	1081[A]	THR	9.4
1	A	1085[A]	PHE	9.3
1	A	1083[A]	ALA	5.3
1	A	1086[A]	PHE	4.9
1	A	1082[A]	ASN	4.9
1	A	1084[A]	ASN	4.2
1	A	1080[A]	TYR	3.3
1	A	1078[A]	SER	3.3

6.2 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

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

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.