



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

May 14, 2020 – 05:06 pm BST

PDB ID : 1W93
Title : Crystal Structure of Biotin Carboxylase Domain of Acetyl-Coenzyme A Carboxylase from *Saccharomyces cerevisiae*
Authors : Shen, Y.; Volrath, S.L.; Weatherly, S.C.; Elich, T.D.; Tong, L.
Deposited on : 2004-10-05
Resolution : 2.50 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 following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

MolProbity : 4.02b-467
Xtriage (Phenix) : 1.13
EDS : 2.11
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Refmac : 5.8.0158
CCP4 : 7.0.044 (Gargrove)
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.11

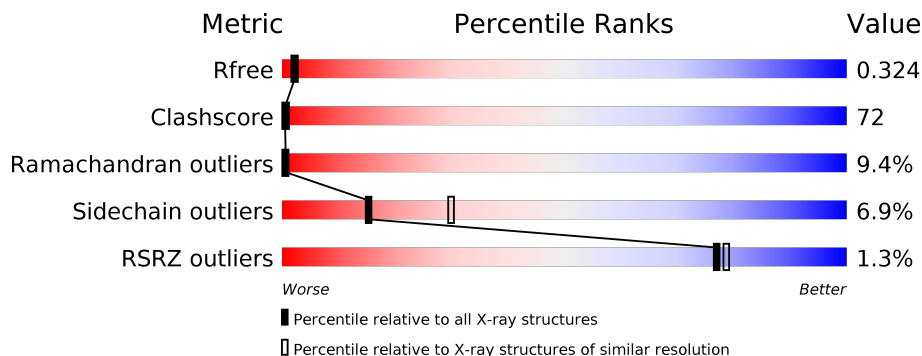
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

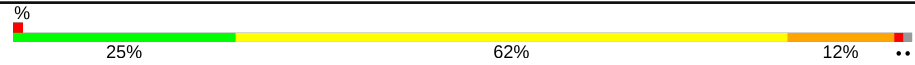
The reported resolution of this entry is 2.50 Å.

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))
R_{free}	130704	4661 (2.50-2.50)
Clashscore	141614	5346 (2.50-2.50)
Ramachandran outliers	138981	5231 (2.50-2.50)
Sidechain outliers	138945	5233 (2.50-2.50)
RSRZ outliers	127900	4559 (2.50-2.50)

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 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	553	

2 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 4438 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 ACETYL-COENZYME A CARBOXYLASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	549	4289	2697	751	823	18	0	0	0

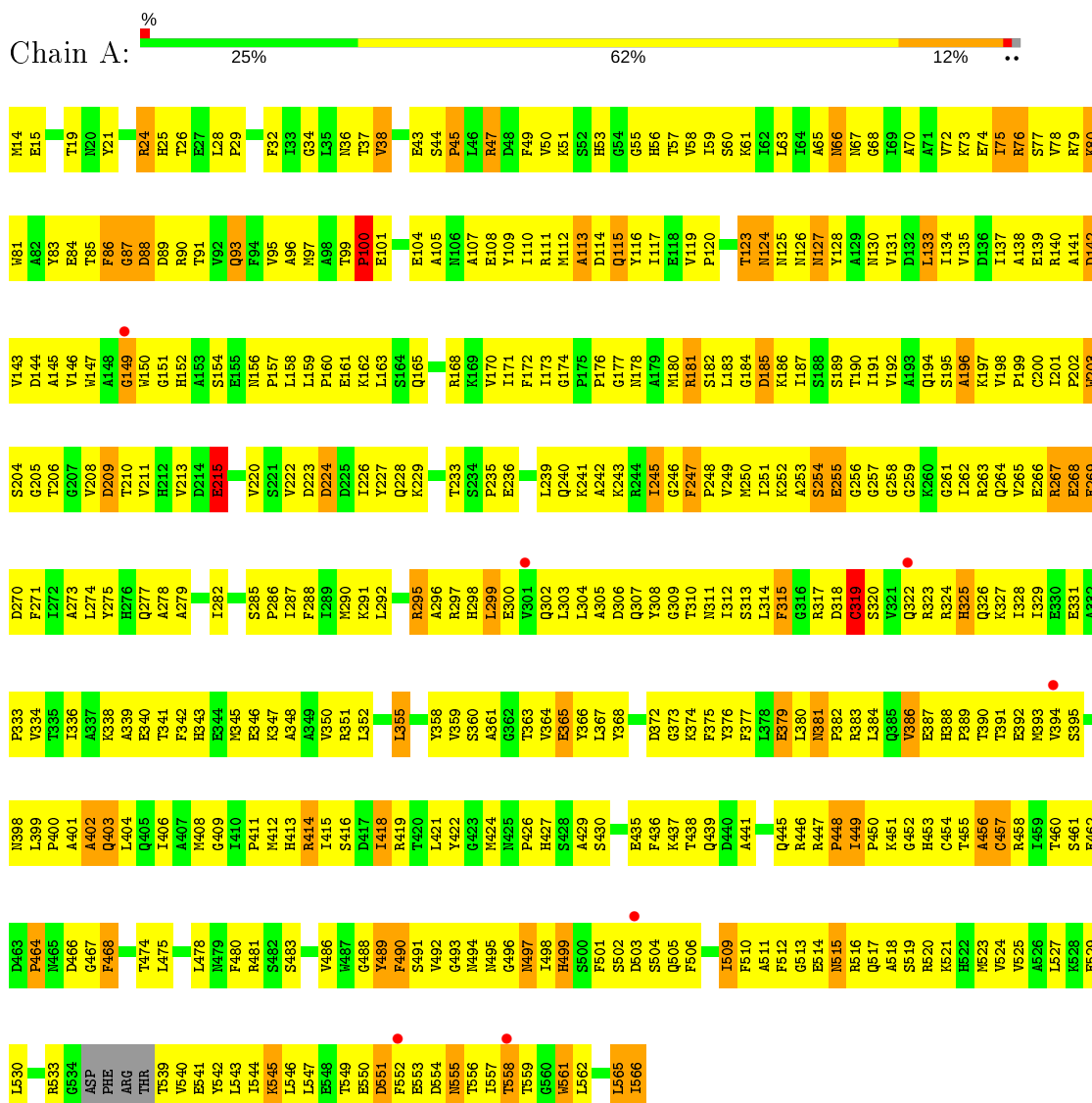
- Molecule 2 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
2	A	149	Total	O	0	0
			149	149		

3 Residue-property plots [i](#)

These plots are drawn for all protein, RNA and DNA 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: ACETYL-COENZYME A CARBOXYLASE



4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 62	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	101.74Å 101.74Å 145.83Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	29.63 – 2.50 29.63 – 2.50	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	84.3 (29.63-2.50) 86.2 (29.63-2.50)	Depositor EDS
R_{merge}	0.08	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	4.54 (at 2.51Å)	Xtrriage
Refinement program	CNS 1.1	Depositor
R, R_{free}	0.254 , 0.323 0.257 , 0.324	Depositor DCC
R_{free} test set	1747 reflections (6.85%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	32.7	Xtrriage
Anisotropy	0.012	Xtrriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.29 , 77.1	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.41$, $\langle L^2 \rangle = 0.24$	Xtrriage
Estimated twinning fraction	0.216 for h,-h-k,-l	Xtrriage
F_o, F_c correlation	0.83	EDS
Total number of atoms	4438	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	27.0	wwPDB-VP

Xtrriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 2.98% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹ Intensities estimated from amplitudes.

² Theoretical 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 [i](#)

5.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z >5	RMSZ	# Z >5
1	A	0.38	0/4380	0.64	0/5927

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

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	4289	0	4199	607	1
2	A	149	0	0	41	0
All	All	4438	0	4199	607	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 72.

All (607) 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:274:LEU:HA	1:A:277:GLN:HG3	1.29	1.11
1:A:566:ILE:HD12	1:A:566:ILE:H	1.25	1.02
1:A:326:GLN:HE21	1:A:327:LYS:N	1.61	0.98
1:A:326:GLN:HE21	1:A:327:LYS:H	1.02	0.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:517:GLN:HG2	1:A:520:ARG:HH12	1.26	0.96
1:A:390:THR:HG23	1:A:510:PHE:HE1	1.29	0.95
1:A:550:GLU:HA	1:A:553:GLU:HB2	1.50	0.94
1:A:265:VAL:HG22	1:A:274:LEU:HD12	1.49	0.94
1:A:57:THR:HG21	1:A:171:ILE:HD11	1.48	0.93
1:A:297:ARG:HB2	1:A:368:TYR:HB3	1.48	0.93
1:A:250:MET:SD	1:A:264:GLN:HG2	2.09	0.92
1:A:419:ARG:HB3	1:A:424:MET:HB2	1.52	0.90
1:A:302:GLN:HB2	1:A:317:ARG:HH12	1.34	0.89
1:A:191:ILE:HA	1:A:194:GLN:HG3	1.53	0.89
1:A:65:ALA:HA	1:A:97:MET:HE2	1.54	0.89
1:A:311:ASN:HB2	1:A:350:VAL:HG13	1.56	0.87
1:A:157:PRO:HB3	1:A:180:MET:HB2	1.57	0.86
1:A:248:PRO:HB3	1:A:266:GLU:HA	1.58	0.86
1:A:248:PRO:HB2	1:A:292:LEU:HD23	1.58	0.86
1:A:453:HIS:HB3	1:A:519:SER:OG	1.76	0.86
1:A:361:ALA:HB3	1:A:403:GLN:HE21	1.40	0.85
1:A:317:ARG:NH2	1:A:363:THR:HG21	1.91	0.84
1:A:435:GLU:HB2	1:A:437:LYS:HG3	1.59	0.84
1:A:185:ASP:HB2	1:A:254:SER:HB2	1.60	0.83
1:A:304:LEU:HB2	1:A:314:LEU:HD11	1.58	0.83
1:A:524:VAL:HG13	1:A:544:ILE:HG23	1.58	0.83
1:A:282:ILE:HG22	1:A:285:SER:HB2	1.60	0.83
1:A:38:VAL:HG12	1:A:58:VAL:HG23	1.60	0.82
1:A:251:ILE:O	1:A:262:ILE:HA	1.79	0.82
1:A:268:GLU:HA	2:A:2084:HOH:O	1.80	0.81
1:A:557:ILE:HD12	1:A:561:TRP:HB2	1.61	0.81
1:A:66:ASN:HD22	1:A:67:ASN:H	1.25	0.81
1:A:149:GLY:HA2	2:A:2043:HOH:O	1.79	0.81
1:A:390:THR:HG23	1:A:510:PHE:CE1	2.16	0.81
1:A:128:TYR:O	1:A:134:ILE:HD11	1.80	0.80
1:A:323:ARG:HB3	1:A:326:GLN:HB3	1.63	0.80
1:A:331:GLU:HB2	1:A:453:HIS:NE2	1.97	0.80
1:A:530:LEU:HD12	1:A:533:ARG:HD2	1.64	0.80
1:A:127:ASN:HA	1:A:133:LEU:HD22	1.63	0.79
1:A:90:ARG:HD2	1:A:114:ASP:OD1	1.82	0.79
1:A:331:GLU:HB2	1:A:453:HIS:HE2	1.47	0.79
1:A:352:LEU:HD12	1:A:355:LEU:HD23	1.63	0.79
1:A:201:ILE:HD11	1:A:367:LEU:HD22	1.64	0.79
1:A:387:GLU:HA	2:A:2108:HOH:O	1.82	0.78
1:A:66:ASN:ND2	1:A:67:ASN:H	1.81	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:329:ILE:HA	2:A:2119:HOH:O	1.82	0.78
1:A:413:HIS:CE1	1:A:414:ARG:HG2	2.19	0.77
1:A:483:SER:HA	2:A:2130:HOH:O	1.83	0.77
1:A:452:GLY:HA3	1:A:512:PHE:CZ	2.20	0.77
1:A:486:VAL:HG13	1:A:510:PHE:O	1.84	0.77
1:A:101:GLU:HA	1:A:104:GLU:OE1	1.85	0.76
1:A:49:PHE:O	1:A:53:HIS:ND1	2.18	0.76
1:A:461:SER:O	1:A:504:SER:HB2	1.86	0.76
1:A:464:PRO:HA	1:A:503:ASP:OD1	1.85	0.76
1:A:521:LYS:O	1:A:525:VAL:HG23	1.85	0.76
1:A:160:PRO:HB3	1:A:172:PHE:CD2	2.21	0.76
1:A:394:VAL:O	1:A:450:PRO:HA	1.86	0.75
1:A:326:GLN:NE2	1:A:327:LYS:H	1.81	0.75
1:A:413:HIS:ND1	1:A:414:ARG:HG2	2.01	0.74
1:A:333:PRO:HD3	1:A:394:VAL:HG11	1.68	0.74
1:A:183:LEU:HD11	1:A:382:PRO:HG3	1.68	0.74
1:A:381:ASN:N	1:A:381:ASN:HD22	1.86	0.73
1:A:517:GLN:HG3	1:A:520:ARG:HH22	1.53	0.73
1:A:524:VAL:CG1	1:A:544:ILE:HG23	2.17	0.73
1:A:108:GLU:O	1:A:112:MET:HG3	1.89	0.73
1:A:490:PHE:HB3	1:A:505:GLN:OE1	1.89	0.73
1:A:241:LYS:O	1:A:245:ILE:HG13	1.89	0.72
1:A:302:GLN:HG2	1:A:391:THR:HG21	1.72	0.71
1:A:47:ARG:HG2	1:A:47:ARG:HH11	1.54	0.71
1:A:566:ILE:HD12	1:A:566:ILE:N	2.03	0.71
1:A:240:GLN:HE22	1:A:243:LYS:NZ	1.88	0.71
1:A:311:ASN:CB	1:A:350:VAL:HG13	2.19	0.71
1:A:302:GLN:HB2	1:A:317:ARG:NH1	2.06	0.71
1:A:108:GLU:OE1	1:A:475:LEU:HB3	1.90	0.71
1:A:195:SER:C	1:A:197:LYS:H	1.92	0.71
1:A:328:ILE:HG22	1:A:329:ILE:HG13	1.71	0.71
1:A:196:ALA:O	1:A:351:ARG:HD2	1.91	0.71
1:A:336:ILE:HG12	2:A:2098:HOH:O	1.90	0.70
1:A:65:ALA:HA	1:A:97:MET:CE	2.21	0.70
1:A:215:GLU:HG3	2:A:2061:HOH:O	1.90	0.70
1:A:192:VAL:HG22	1:A:211:VAL:HG11	1.72	0.70
1:A:384:LEU:HD13	1:A:403:GLN:HE22	1.55	0.70
1:A:540:VAL:O	1:A:543:LEU:HB2	1.91	0.70
1:A:213:VAL:HG22	1:A:220:VAL:HG22	1.74	0.69
1:A:345:MET:O	1:A:348:ALA:HB3	1.92	0.69
1:A:331:GLU:HA	1:A:455:THR:HA	1.74	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:493:GLY:HA3	2:A:2138:HOH:O	1.92	0.69
1:A:131:VAL:O	1:A:135:VAL:HG23	1.91	0.69
1:A:557:ILE:HG13	1:A:561:TRP:CG	2.27	0.69
1:A:95:VAL:HG22	1:A:115:GLN:HE21	1.57	0.69
1:A:324:ARG:O	1:A:325:HIS:HB2	1.93	0.69
1:A:150:TRP:HB3	1:A:384:LEU:O	1.93	0.69
1:A:566:ILE:CD1	1:A:566:ILE:H	1.97	0.68
1:A:492:VAL:HG22	1:A:505:GLN:NE2	2.08	0.68
1:A:19:THR:OG1	1:A:414:ARG:HD2	1.94	0.67
1:A:295:ARG:HA	1:A:559:THR:OG1	1.93	0.67
1:A:390:THR:HG22	1:A:454:CYS:SG	2.35	0.67
1:A:252:LYS:HG2	1:A:262:ILE:HG12	1.75	0.67
1:A:203:TRP:HD1	1:A:206:THR:HG1	1.42	0.67
1:A:270:ASP:O	1:A:274:LEU:HG	1.94	0.67
1:A:498:ILE:N	1:A:498:ILE:HD12	2.10	0.67
1:A:174:GLY:HA3	2:A:2049:HOH:O	1.95	0.66
1:A:493:GLY:O	1:A:501:PHE:HA	1.95	0.66
1:A:550:GLU:C	1:A:552:PHE:H	1.97	0.66
1:A:474:THR:HB	1:A:492:VAL:HB	1.75	0.66
1:A:192:VAL:HA	1:A:211:VAL:HG11	1.76	0.66
1:A:247:PHE:H	1:A:247:PHE:HD2	1.41	0.66
1:A:498:ILE:HB	1:A:499:HIS:CE1	2.30	0.66
1:A:38:VAL:HG13	1:A:56:HIS:O	1.94	0.66
1:A:83:TYR:HA	1:A:88:ASP:H	1.61	0.66
1:A:359:VAL:HG12	1:A:360:SER:N	2.11	0.65
1:A:457:CYS:HB2	1:A:509:ILE:HG22	1.77	0.65
1:A:384:LEU:HD13	1:A:403:GLN:NE2	2.11	0.65
1:A:72:VAL:HG13	1:A:112:MET:SD	2.37	0.65
1:A:251:ILE:HD11	1:A:265:VAL:HG21	1.79	0.65
1:A:435:GLU:OE2	1:A:437:LYS:HD3	1.96	0.65
1:A:187:ILE:HG12	1:A:288:PHE:CD2	2.31	0.65
1:A:412:MET:HG3	1:A:418:ILE:HG13	1.78	0.65
1:A:295:ARG:HB2	2:A:2089:HOH:O	1.96	0.65
1:A:517:GLN:CG	1:A:520:ARG:HH12	2.07	0.65
1:A:398:ASN:HB3	1:A:401:ALA:HB3	1.78	0.64
1:A:388:HIS:N	1:A:389:PRO:CD	2.61	0.64
1:A:497:ASN:HB3	1:A:498:ILE:HD12	1.80	0.64
1:A:250:MET:HB3	1:A:252:LYS:HZ1	1.62	0.64
1:A:66:ASN:HD22	1:A:67:ASN:N	1.96	0.64
1:A:271:PHE:HB2	2:A:2084:HOH:O	1.97	0.64
1:A:481:ARG:H	1:A:529:GLU:CD	2.01	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:101:GLU:N	1:A:101:GLU:OE1	2.19	0.63
1:A:339:ALA:O	1:A:343:HIS:ND1	2.31	0.63
1:A:117:ILE:HD12	1:A:137:ILE:HG23	1.80	0.63
1:A:557:ILE:CD1	1:A:561:TRP:HB2	2.28	0.63
1:A:88:ASP:HB3	1:A:91:THR:OG1	1.98	0.63
1:A:413:HIS:HB2	1:A:419:ARG:HH12	1.62	0.63
1:A:329:ILE:HG12	2:A:2119:HOH:O	1.99	0.63
1:A:520:ARG:O	1:A:523:MET:HB3	1.98	0.63
1:A:77:SER:OG	1:A:400:PRO:HB2	1.99	0.63
1:A:83:TYR:O	1:A:87:GLY:HA2	1.98	0.63
1:A:343:HIS:HA	1:A:346:GLU:OE1	1.99	0.62
1:A:361:ALA:CB	1:A:403:GLN:HE21	2.12	0.62
1:A:474:THR:HG21	1:A:494:ASN:HD21	1.64	0.62
1:A:157:PRO:HB3	1:A:180:MET:CB	2.29	0.62
1:A:124:ASN:C	1:A:126:ASN:H	2.02	0.62
1:A:488:GLY:O	1:A:489:TYR:HB3	1.99	0.62
1:A:208:VAL:HG22	1:A:229:LYS:HE3	1.80	0.62
1:A:361:ALA:HB3	1:A:403:GLN:NE2	2.12	0.62
1:A:146:VAL:HG23	1:A:170:VAL:HG11	1.80	0.62
1:A:517:GLN:O	1:A:520:ARG:HB3	2.00	0.62
1:A:25:HIS:O	1:A:28:LEU:HB2	2.00	0.62
1:A:389:PRO:HB2	1:A:510:PHE:CZ	2.35	0.62
1:A:257:GLY:O	1:A:259:GLY:N	2.32	0.62
1:A:381:ASN:ND2	1:A:381:ASN:N	2.46	0.62
1:A:386:VAL:HG12	1:A:387:GLU:OE2	2.00	0.62
1:A:274:LEU:O	1:A:277:GLN:HB2	1.99	0.62
1:A:192:VAL:O	1:A:195:SER:HB3	1.99	0.61
1:A:100:PRO:HD3	1:A:119:VAL:O	2.00	0.61
1:A:336:ILE:HD11	1:A:555:ASN:OD1	1.99	0.61
1:A:543:LEU:O	1:A:544:ILE:C	2.37	0.61
1:A:28:LEU:HD21	1:A:307:GLN:O	2.00	0.61
1:A:542:TYR:O	1:A:545:LYS:HB2	2.01	0.60
1:A:452:GLY:N	2:A:2118:HOH:O	2.34	0.60
1:A:516:ARG:CZ	1:A:555:ASN:HB2	2.32	0.60
1:A:201:ILE:HG13	1:A:376:TYR:CB	2.31	0.60
1:A:72:VAL:HG21	1:A:475:LEU:HD22	1.83	0.60
1:A:14:MET:CG	1:A:15:GLU:H	2.14	0.60
1:A:47:ARG:HG2	1:A:47:ARG:NH1	2.17	0.60
1:A:411:PRO:HG2	1:A:414:ARG:HB2	1.83	0.60
1:A:211:VAL:HA	2:A:2062:HOH:O	2.00	0.60
1:A:352:LEU:CD1	1:A:355:LEU:HD23	2.32	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:80:LYS:HE2	1:A:84:GLU:HG3	1.84	0.60
1:A:156:ASN:OD1	1:A:158:LEU:HB2	2.01	0.60
1:A:383:ARG:HG3	1:A:383:ARG:HH11	1.65	0.60
1:A:115:GLN:HA	2:A:2032:HOH:O	2.00	0.59
1:A:303:LEU:HD11	1:A:350:VAL:HA	1.84	0.59
1:A:328:ILE:HD13	1:A:458:ARG:HB3	1.84	0.59
1:A:329:ILE:HG21	1:A:552:PHE:CE1	2.37	0.59
1:A:303:LEU:HA	1:A:313:SER:HA	1.85	0.59
1:A:456:ALA:O	1:A:457:CYS:SG	2.60	0.59
1:A:187:ILE:HB	1:A:227:TYR:CE2	2.38	0.59
1:A:380:LEU:HD23	1:A:381:ASN:N	2.17	0.59
1:A:448:PRO:O	1:A:449:ILE:HB	2.02	0.59
1:A:43:GLU:HA	1:A:47:ARG:CD	2.33	0.59
1:A:151:GLY:N	1:A:154:SER:OG	2.36	0.58
1:A:194:GLN:HE22	1:A:206:THR:HA	1.68	0.58
1:A:421:LEU:HD11	1:A:448:PRO:HB3	1.85	0.58
1:A:150:TRP:CZ2	1:A:386:VAL:HG23	2.38	0.58
1:A:211:VAL:HG12	1:A:222:VAL:HG22	1.85	0.58
1:A:422:TYR:O	1:A:446:ARG:N	2.37	0.58
1:A:557:ILE:CG2	1:A:561:TRP:HB3	2.33	0.58
1:A:21:TYR:CD2	1:A:24:ARG:HD3	2.39	0.58
1:A:261:GLY:HA2	1:A:278:ALA:HB1	1.85	0.58
1:A:317:ARG:NH2	1:A:363:THR:CG2	2.66	0.58
1:A:99:THR:OG1	1:A:495:ASN:ND2	2.37	0.58
1:A:454:CYS:HA	1:A:511:ALA:O	2.04	0.58
1:A:59:ILE:HG13	1:A:408:MET:HG2	1.86	0.58
1:A:274:LEU:HD22	1:A:277:GLN:HE21	1.69	0.57
1:A:299:LEU:O	1:A:300:GLU:HG3	2.03	0.57
1:A:77:SER:CB	1:A:400:PRO:HB2	2.34	0.57
1:A:342:PHE:HA	1:A:345:MET:HE3	1.86	0.57
1:A:380:LEU:C	1:A:381:ASN:HD22	2.07	0.57
1:A:157:PRO:HB2	1:A:161:GLU:OE2	2.04	0.57
1:A:66:ASN:ND2	1:A:67:ASN:N	2.51	0.57
1:A:80:LYS:HE2	1:A:84:GLU:CG	2.34	0.57
1:A:194:GLN:OE1	1:A:208:VAL:O	2.21	0.57
1:A:168:ARG:HG3	1:A:168:ARG:NH1	2.20	0.57
1:A:391:THR:HG22	2:A:2110:HOH:O	2.04	0.57
1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HE3	1.86	0.57
1:A:168:ARG:HH11	1:A:168:ARG:HG3	1.69	0.56
1:A:236:GLU:O	1:A:240:GLN:HG2	2.05	0.56
1:A:186:LYS:HD3	1:A:254:SER:O	2.05	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:298:HIS:N	1:A:320:SER:OG	2.36	0.56
1:A:146:VAL:HG12	1:A:147:TRP:N	2.19	0.56
1:A:202:PRO:O	1:A:291:LYS:N	2.38	0.56
1:A:141:ALA:O	1:A:142:ASP:HB3	2.06	0.56
1:A:57:THR:CG2	1:A:171:ILE:HD11	2.30	0.56
1:A:191:ILE:HG23	1:A:208:VAL:O	2.05	0.56
1:A:14:MET:HG2	1:A:15:GLU:H	1.70	0.56
1:A:345:MET:HG2	1:A:375:PHE:CE1	2.41	0.56
1:A:141:ALA:O	1:A:142:ASP:CB	2.53	0.56
1:A:250:MET:HG2	1:A:292:LEU:HD13	1.87	0.56
1:A:297:ARG:N	1:A:368:TYR:O	2.38	0.56
1:A:296:ALA:O	1:A:559:THR:HG23	2.06	0.56
1:A:185:ASP:CB	1:A:254:SER:HB2	2.33	0.56
1:A:296:ALA:O	1:A:558:THR:HB	2.06	0.56
1:A:351:ARG:HG3	1:A:351:ARG:HH11	1.70	0.56
1:A:97:MET:HE3	1:A:128:TYR:CD1	2.41	0.56
1:A:133:LEU:O	1:A:137:ILE:HG13	2.06	0.56
1:A:186:LYS:N	1:A:186:LYS:HD2	2.21	0.56
1:A:303:LEU:HG	1:A:312:ILE:O	2.05	0.56
1:A:47:ARG:HH12	1:A:51:LYS:HD2	1.71	0.56
1:A:72:VAL:HG21	1:A:475:LEU:CD2	2.36	0.56
1:A:278:ALA:HB2	2:A:2079:HOH:O	2.05	0.55
1:A:274:LEU:CA	1:A:277:GLN:HG3	2.20	0.55
1:A:202:PRO:HB2	1:A:291:LYS:HB2	1.89	0.55
1:A:135:VAL:HG13	1:A:163:LEU:HD23	1.88	0.55
1:A:186:LYS:H	1:A:186:LYS:CD	2.20	0.55
1:A:254:SER:C	1:A:256:GLY:H	2.10	0.55
1:A:317:ARG:HH22	1:A:363:THR:CG2	2.19	0.55
1:A:44:SER:O	1:A:47:ARG:HB3	2.07	0.55
1:A:49:PHE:HB3	1:A:86:PHE:HE1	1.71	0.55
1:A:317:ARG:HH11	1:A:317:ARG:HG3	1.70	0.55
1:A:315:PHE:CE2	1:A:395:SER:HB3	2.40	0.55
1:A:318:ASP:C	1:A:319:CYS:SG	2.85	0.55
1:A:502:SER:HB2	2:A:2138:HOH:O	2.07	0.55
1:A:162:LYS:HA	1:A:165:GLN:HB3	1.88	0.55
1:A:413:HIS:HB2	1:A:419:ARG:NH1	2.21	0.55
1:A:55:GLY:HA2	1:A:409:GLY:O	2.07	0.55
1:A:318:ASP:OD2	1:A:336:ILE:HG13	2.06	0.55
1:A:491:SER:O	1:A:505:GLN:HB3	2.06	0.55
1:A:516:ARG:NE	1:A:555:ASN:HD22	2.04	0.55
1:A:146:VAL:HG23	1:A:170:VAL:CG1	2.37	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:304:LEU:N	1:A:312:ILE:O	2.40	0.54
1:A:297:ARG:O	1:A:367:LEU:HA	2.07	0.54
1:A:527:LEU:HD13	1:A:543:LEU:HB3	1.89	0.54
1:A:263:ARG:HB3	1:A:274:LEU:HD13	1.89	0.54
1:A:345:MET:HG2	1:A:375:PHE:CZ	2.42	0.54
1:A:441:ALA:HA	2:A:2116:HOH:O	2.08	0.54
1:A:486:VAL:HG22	1:A:511:ALA:HA	1.89	0.54
1:A:195:SER:O	1:A:197:LYS:HG3	2.08	0.54
1:A:250:MET:HB3	1:A:252:LYS:NZ	2.22	0.54
1:A:191:ILE:O	1:A:194:GLN:HB2	2.07	0.54
1:A:481:ARG:N	1:A:529:GLU:OE2	2.37	0.54
1:A:185:ASP:O	1:A:189:SER:HB2	2.08	0.54
1:A:314:LEU:O	1:A:315:PHE:HB2	2.08	0.54
1:A:518:ALA:O	1:A:521:LYS:HB3	2.07	0.54
1:A:549:THR:O	1:A:553:GLU:HG3	2.07	0.54
1:A:63:LEU:HB2	1:A:143:VAL:HG11	1.90	0.54
1:A:252:LYS:NZ	1:A:262:ILE:HG21	2.21	0.54
1:A:147:TRP:CZ2	1:A:149:GLY:HA3	2.42	0.54
1:A:161:GLU:O	1:A:165:GLN:HB2	2.06	0.54
1:A:242:ALA:HA	1:A:245:ILE:HD12	1.90	0.54
1:A:516:ARG:HE	1:A:555:ASN:HD22	1.55	0.54
1:A:191:ILE:CA	1:A:194:GLN:HG3	2.31	0.54
1:A:331:GLU:HB2	1:A:453:HIS:CE1	2.42	0.54
1:A:360:SER:OG	1:A:403:GLN:HB3	2.07	0.54
1:A:72:VAL:HG22	1:A:109:TYR:HB3	1.89	0.54
1:A:142:ASP:HB2	2:A:2041:HOH:O	2.08	0.53
1:A:235:PRO:HA	1:A:275:TYR:CE2	2.42	0.53
1:A:550:GLU:O	1:A:552:PHE:N	2.41	0.53
1:A:109:TYR:C	1:A:111:ARG:N	2.62	0.53
1:A:131:VAL:HG13	1:A:159:LEU:HD12	1.90	0.53
1:A:100:PRO:HB2	1:A:101:GLU:OE1	2.07	0.53
1:A:312:ILE:HG12	1:A:412:MET:CE	2.38	0.53
1:A:187:ILE:HG13	1:A:254:SER:HB3	1.90	0.53
1:A:562:LEU:O	1:A:565:LEU:HB2	2.08	0.53
1:A:61:LYS:HG2	1:A:143:VAL:HG12	1.90	0.53
1:A:135:VAL:HA	1:A:138:ALA:HB3	1.90	0.53
1:A:250:MET:HE1	1:A:264:GLN:HE21	1.73	0.53
1:A:550:GLU:C	1:A:552:PHE:N	2.61	0.53
1:A:192:VAL:HG22	1:A:211:VAL:CG1	2.37	0.53
1:A:63:LEU:HD12	1:A:95:VAL:O	2.09	0.53
1:A:306:ASP:HA	1:A:406:ILE:HG21	1.89	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:462:GLU:HB2	2:A:2122:HOH:O	2.08	0.53
1:A:198:VAL:CG1	1:A:377:PHE:HB2	2.39	0.52
1:A:300:GLU:N	1:A:317:ARG:O	2.42	0.52
1:A:331:GLU:HB3	1:A:455:THR:HG23	1.90	0.52
1:A:411:PRO:O	1:A:415:ILE:HG13	2.10	0.52
1:A:227:TYR:CD1	1:A:227:TYR:O	2.62	0.52
1:A:414:ARG:NH1	1:A:429:ALA:HB2	2.24	0.52
1:A:44:SER:O	1:A:47:ARG:N	2.40	0.52
1:A:418:ILE:HG22	1:A:419:ARG:N	2.24	0.52
1:A:200:CYS:HA	2:A:2106:HOH:O	2.09	0.52
1:A:364:VAL:HG12	1:A:366:TYR:CE2	2.45	0.52
1:A:334:VAL:HG13	2:A:2098:HOH:O	2.09	0.52
1:A:445:GLN:O	1:A:446:ARG:HG2	2.09	0.52
1:A:499:HIS:C	1:A:501:PHE:H	2.13	0.52
1:A:380:LEU:HD22	1:A:382:PRO:HD3	1.92	0.52
1:A:95:VAL:CG2	1:A:115:GLN:HE21	2.23	0.52
1:A:399:LEU:O	1:A:403:GLN:HG3	2.10	0.52
1:A:204:SER:OG	1:A:288:PHE:HB2	2.10	0.51
1:A:523:MET:HG3	1:A:547:LEU:CD1	2.40	0.51
1:A:550:GLU:HA	1:A:553:GLU:CB	2.31	0.51
1:A:201:ILE:CD1	1:A:367:LEU:HD22	2.37	0.51
1:A:240:GLN:NE2	1:A:243:LYS:NZ	2.56	0.51
1:A:359:VAL:CG1	1:A:360:SER:N	2.72	0.51
1:A:383:ARG:NH1	1:A:383:ARG:HG3	2.24	0.51
1:A:499:HIS:C	1:A:501:PHE:N	2.61	0.51
1:A:49:PHE:CZ	1:A:81:TRP:HZ2	2.29	0.51
1:A:516:ARG:NH2	1:A:555:ASN:N	2.59	0.51
1:A:317:ARG:NH1	1:A:317:ARG:HG3	2.25	0.51
1:A:352:LEU:O	1:A:355:LEU:HB3	2.11	0.51
1:A:455:THR:O	1:A:523:MET:HE2	2.11	0.51
1:A:379:GLU:OE2	1:A:381:ASN:ND2	2.44	0.50
1:A:393:MET:HG2	1:A:512:PHE:CD2	2.46	0.50
1:A:312:ILE:HG12	1:A:412:MET:HE3	1.93	0.50
1:A:551:ASP:HB3	1:A:557:ILE:CG1	2.42	0.50
1:A:205:GLY:O	1:A:208:VAL:HG23	2.11	0.50
1:A:194:GLN:CB	1:A:209:ASP:HB3	2.41	0.50
1:A:304:LEU:HD12	1:A:360:SER:O	2.11	0.50
1:A:279:ALA:HB2	1:A:287:ILE:HD11	1.93	0.50
1:A:340:GLU:HA	1:A:343:HIS:HB2	1.92	0.50
1:A:516:ARG:NH2	1:A:555:ASN:CA	2.74	0.50
1:A:468:PHE:HD1	1:A:468:PHE:H	1.56	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:117:ILE:HD12	1:A:137:ILE:CG2	2.40	0.50
1:A:142:ASP:O	1:A:168:ARG:NH2	2.45	0.50
1:A:186:LYS:H	1:A:186:LYS:HD2	1.75	0.50
1:A:109:TYR:CZ	1:A:110:ILE:HG13	2.47	0.50
1:A:458:ARG:HG2	1:A:458:ARG:HH11	1.76	0.50
1:A:65:ALA:O	1:A:66:ASN:HB2	2.12	0.50
1:A:15:GLU:HA	2:A:2001:HOH:O	2.11	0.50
1:A:341:THR:HA	2:A:2100:HOH:O	2.11	0.50
1:A:63:LEU:HA	1:A:95:VAL:O	2.11	0.50
1:A:252:LYS:HA	1:A:262:ILE:HG12	1.93	0.49
1:A:451:LYS:O	1:A:512:PHE:CE2	2.65	0.49
1:A:77:SER:HB2	1:A:400:PRO:HB2	1.93	0.49
1:A:178:ASN:O	1:A:182:SER:OG	2.24	0.49
1:A:510:PHE:HZ	2:A:2108:HOH:O	1.95	0.49
1:A:72:VAL:HG22	1:A:109:TYR:CB	2.42	0.49
1:A:557:ILE:HG21	1:A:561:TRP:HB3	1.93	0.49
1:A:97:MET:HE3	1:A:128:TYR:HD1	1.76	0.49
1:A:203:TRP:HA	1:A:290:MET:HA	1.95	0.49
1:A:261:GLY:O	1:A:262:ILE:HG13	2.13	0.49
1:A:308:TYR:O	1:A:309:GLY:C	2.51	0.49
1:A:47:ARG:O	1:A:47:ARG:HG2	2.13	0.49
1:A:389:PRO:HB2	1:A:510:PHE:CE1	2.48	0.49
1:A:202:PRO:HG2	1:A:291:LYS:HD3	1.94	0.49
1:A:342:PHE:HD1	1:A:345:MET:HE3	1.77	0.49
1:A:79:ARG:NH1	1:A:90:ARG:NH2	2.61	0.49
1:A:146:VAL:HG21	1:A:163:LEU:HD22	1.94	0.49
1:A:261:GLY:C	1:A:278:ALA:HB1	2.33	0.49
1:A:298:HIS:CD2	1:A:367:LEU:HD12	2.48	0.49
1:A:478:LEU:HD13	1:A:530:LEU:HD22	1.93	0.49
1:A:545:LYS:O	1:A:549:THR:HG23	2.13	0.49
1:A:49:PHE:CB	1:A:86:PHE:HE1	2.25	0.48
1:A:516:ARG:HE	1:A:555:ASN:ND2	2.11	0.48
1:A:127:ASN:HA	1:A:133:LEU:CD2	2.39	0.48
1:A:137:ILE:HA	1:A:140:ARG:HD3	1.95	0.48
1:A:386:VAL:CG1	1:A:387:GLU:OE2	2.60	0.48
1:A:205:GLY:O	1:A:206:THR:C	2.51	0.48
1:A:298:HIS:O	1:A:299:LEU:O	2.32	0.48
1:A:333:PRO:CD	1:A:394:VAL:HG11	2.42	0.48
1:A:304:LEU:HB2	1:A:314:LEU:CD1	2.36	0.48
1:A:124:ASN:C	1:A:126:ASN:N	2.64	0.48
1:A:249:VAL:HB	1:A:290:MET:O	2.14	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:516:ARG:HH22	1:A:555:ASN:N	2.12	0.48
1:A:147:TRP:CZ2	1:A:149:GLY:CA	2.97	0.48
1:A:333:PRO:HG3	1:A:450:PRO:CB	2.43	0.48
1:A:195:SER:C	1:A:197:LYS:N	2.62	0.48
1:A:253:ALA:O	1:A:255:GLU:N	2.46	0.48
1:A:14:MET:CG	1:A:15:GLU:N	2.76	0.48
1:A:438:THR:O	1:A:441:ALA:CB	2.61	0.48
1:A:154:SER:HA	2:A:2044:HOH:O	2.14	0.48
1:A:402:ALA:O	1:A:404:LEU:N	2.47	0.48
1:A:195:SER:O	1:A:197:LYS:N	2.45	0.48
1:A:112:MET:O	1:A:113:ALA:O	2.32	0.47
1:A:236:GLU:OE2	1:A:240:GLN:NE2	2.47	0.47
1:A:247:PHE:N	1:A:247:PHE:HD2	2.10	0.47
1:A:263:ARG:HH11	1:A:263:ARG:HG2	1.79	0.47
1:A:475:LEU:HG	2:A:2128:HOH:O	2.13	0.47
1:A:336:ILE:CD1	1:A:555:ASN:O	2.62	0.47
1:A:124:ASN:HD22	1:A:124:ASN:N	2.12	0.47
1:A:198:VAL:HG12	1:A:377:PHE:HB2	1.96	0.47
1:A:247:PHE:N	1:A:247:PHE:CD2	2.77	0.47
1:A:300:GLU:HG3	1:A:365:GLU:HB3	1.96	0.47
1:A:236:GLU:OE2	1:A:240:GLN:HG2	2.14	0.47
1:A:387:GLU:HG3	2:A:2108:HOH:O	2.13	0.47
1:A:464:PRO:CA	1:A:503:ASP:OD1	2.60	0.47
1:A:242:ALA:HB1	1:A:247:PHE:CE2	2.49	0.47
1:A:404:LEU:HD12	1:A:404:LEU:O	2.14	0.47
1:A:87:GLY:O	1:A:88:ASP:HB2	2.13	0.47
1:A:186:LYS:N	1:A:186:LYS:CD	2.77	0.47
1:A:295:ARG:HB3	1:A:558:THR:OG1	2.15	0.47
1:A:79:ARG:NH1	1:A:90:ARG:HH21	2.13	0.47
1:A:297:ARG:HA	1:A:320:SER:HB3	1.97	0.47
1:A:351:ARG:CG	1:A:351:ARG:HH11	2.27	0.47
1:A:415:ILE:O	1:A:418:ILE:N	2.47	0.47
1:A:458:ARG:HH12	1:A:460:THR:CG2	2.28	0.47
1:A:358:TYR:OH	1:A:361:ALA:O	2.33	0.47
1:A:268:GLU:O	1:A:270:ASP:N	2.48	0.47
1:A:523:MET:HG3	1:A:547:LEU:HD11	1.97	0.47
1:A:59:ILE:HD13	1:A:145:ALA:CB	2.45	0.46
1:A:273:ALA:O	1:A:277:GLN:HG2	2.15	0.46
1:A:342:PHE:O	1:A:346:GLU:HG3	2.15	0.46
1:A:392:GLU:OE2	1:A:399:LEU:N	2.36	0.46
1:A:310:THR:O	1:A:412:MET:HE2	2.15	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:491:SER:C	1:A:505:GLN:HB3	2.35	0.46
1:A:298:HIS:ND1	1:A:322:GLN:NE2	2.63	0.46
1:A:413:HIS:CE1	1:A:414:ARG:CG	2.94	0.46
1:A:436:PHE:CZ	1:A:447:ARG:HA	2.50	0.46
1:A:557:ILE:HG23	1:A:561:TRP:HB3	1.96	0.46
1:A:394:VAL:HB	1:A:450:PRO:HB3	1.96	0.46
1:A:75:ILE:O	1:A:77:SER:N	2.49	0.46
1:A:303:LEU:HD11	1:A:350:VAL:CA	2.46	0.46
1:A:359:VAL:HG12	1:A:360:SER:H	1.79	0.46
1:A:37:THR:HB	2:A:2016:HOH:O	2.15	0.46
1:A:50:VAL:HG21	1:A:58:VAL:HG22	1.98	0.46
1:A:61:LYS:HD3	1:A:95:VAL:HG21	1.97	0.46
1:A:255:GLU:C	2:A:2074:HOH:O	2.53	0.46
1:A:438:THR:O	1:A:439:GLN:C	2.54	0.46
1:A:248:PRO:CB	1:A:292:LEU:HD23	2.39	0.46
1:A:34:GLY:HA3	1:A:57:THR:HG21	1.98	0.46
1:A:114:ASP:O	1:A:115:GLN:HB3	2.15	0.46
1:A:59:ILE:HG23	1:A:144:ASP:HB2	1.98	0.46
1:A:359:VAL:CG1	1:A:360:SER:H	2.29	0.46
1:A:388:HIS:N	1:A:389:PRO:HD2	2.30	0.46
1:A:453:HIS:O	1:A:512:PHE:HA	2.15	0.46
1:A:372:ASP:OD1	1:A:374:LYS:N	2.49	0.46
1:A:336:ILE:HD11	1:A:555:ASN:CG	2.36	0.46
1:A:388:HIS:O	1:A:389:PRO:C	2.54	0.46
1:A:426:PRO:HG2	1:A:427:HIS:CE1	2.51	0.46
1:A:297:ARG:HH22	1:A:556:THR:HA	1.81	0.46
1:A:458:ARG:HH12	1:A:460:THR:HG21	1.81	0.46
1:A:557:ILE:CG2	1:A:561:TRP:CB	2.94	0.46
1:A:303:LEU:HD11	1:A:350:VAL:HG22	1.98	0.45
1:A:542:TYR:O	1:A:546:LEU:HG	2.16	0.45
1:A:159:LEU:HB3	1:A:160:PRO:HD3	1.99	0.45
1:A:436:PHE:CD1	1:A:447:ARG:NH1	2.84	0.45
1:A:524:VAL:O	1:A:527:LEU:N	2.48	0.45
1:A:252:LYS:HZ3	1:A:262:ILE:CG2	2.28	0.45
1:A:492:VAL:HG22	1:A:505:GLN:HE21	1.79	0.45
1:A:90:ARG:HD3	1:A:90:ARG:HA	1.74	0.45
1:A:269:GLU:CD	1:A:269:GLU:N	2.70	0.45
1:A:250:MET:CG	1:A:292:LEU:HD13	2.47	0.45
1:A:314:LEU:O	1:A:315:PHE:CB	2.64	0.45
1:A:412:MET:O	1:A:415:ILE:HB	2.16	0.45
1:A:448:PRO:O	1:A:449:ILE:CB	2.64	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:512:PHE:CD1	1:A:513:GLY:N	2.85	0.45
1:A:75:ILE:O	1:A:76:ARG:C	2.54	0.45
1:A:109:TYR:C	1:A:111:ARG:H	2.18	0.45
1:A:298:HIS:C	1:A:299:LEU:O	2.55	0.45
1:A:456:ALA:HA	1:A:509:ILE:O	2.17	0.45
1:A:109:TYR:CG	1:A:110:ILE:N	2.85	0.45
1:A:126:ASN:O	1:A:127:ASN:HB3	2.16	0.45
1:A:315:PHE:CD2	1:A:394:VAL:HG23	2.51	0.45
1:A:73:LYS:HA	2:A:2020:HOH:O	2.16	0.45
1:A:224:ASP:O	1:A:227:TYR:N	2.50	0.45
1:A:261:GLY:CA	1:A:278:ALA:HB1	2.45	0.45
1:A:305:ALA:HB2	1:A:311:ASN:HA	1.98	0.45
1:A:412:MET:HA	1:A:415:ILE:HD12	1.98	0.45
1:A:180:MET:O	1:A:183:LEU:HG	2.17	0.45
1:A:187:ILE:O	1:A:190:THR:OG1	2.35	0.45
1:A:300:GLU:O	1:A:317:ARG:N	2.49	0.45
1:A:327:LYS:HE3	1:A:387:GLU:OE1	2.17	0.45
1:A:358:TYR:CE2	1:A:359:VAL:O	2.70	0.45
1:A:297:ARG:O	1:A:368:TYR:N	2.45	0.44
1:A:478:LEU:HB3	1:A:480:PHE:CE1	2.52	0.44
1:A:488:GLY:HA2	1:A:509:ILE:HA	1.99	0.44
1:A:516:ARG:NH2	1:A:555:ASN:CB	2.80	0.44
1:A:123:THR:HB	1:A:125:ASN:OD1	2.17	0.44
1:A:245:ILE:HG22	1:A:246:GLY:N	2.32	0.44
1:A:474:THR:CG2	1:A:494:ASN:HD21	2.29	0.44
1:A:21:TYR:CD2	1:A:24:ARG:CD	2.99	0.44
1:A:347:LYS:O	1:A:351:ARG:HB2	2.18	0.44
1:A:203:TRP:CD1	1:A:206:THR:N	2.85	0.44
1:A:348:ALA:HA	1:A:351:ARG:NH2	2.33	0.44
1:A:25:HIS:CE1	1:A:56:HIS:HB3	2.53	0.44
1:A:176:PRO:HD2	1:A:359:VAL:HB	2.00	0.44
1:A:388:HIS:HD2	1:A:392:GLU:HG3	1.81	0.44
1:A:551:ASP:HB3	1:A:557:ILE:HG12	1.99	0.44
1:A:28:LEU:O	1:A:29:PRO:C	2.54	0.44
1:A:203:TRP:NE1	1:A:206:THR:N	2.66	0.44
1:A:252:LYS:CG	1:A:262:ILE:HG12	2.45	0.44
1:A:381:ASN:HB3	1:A:383:ARG:NH1	2.33	0.44
1:A:498:ILE:HD12	1:A:498:ILE:H	1.81	0.44
1:A:524:VAL:HG22	1:A:547:LEU:HD12	2.00	0.44
1:A:201:ILE:HG13	1:A:376:TYR:HB3	2.00	0.44
1:A:222:VAL:HA	2:A:2062:HOH:O	2.18	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:254:SER:O	1:A:256:GLY:N	2.50	0.44
1:A:415:ILE:O	1:A:418:ILE:HB	2.17	0.44
1:A:539:THR:HG22	1:A:540:VAL:HG13	2.00	0.44
1:A:411:PRO:HG2	1:A:414:ARG:CB	2.48	0.43
1:A:419:ARG:NH2	1:A:430:SER:O	2.49	0.43
1:A:474:THR:HG21	1:A:494:ASN:ND2	2.32	0.43
1:A:453:HIS:CD2	1:A:516:ARG:HA	2.53	0.43
1:A:59:ILE:HD13	1:A:145:ALA:HB2	2.00	0.43
1:A:161:GLU:OE2	1:A:177:GLY:HA3	2.18	0.43
1:A:295:ARG:HG3	1:A:295:ARG:NH1	2.33	0.43
1:A:414:ARG:HA	1:A:414:ARG:HE	1.83	0.43
1:A:458:ARG:NH2	1:A:506:PHE:CD2	2.86	0.43
1:A:516:ARG:HH12	1:A:554:ASP:CA	2.30	0.43
1:A:329:ILE:HG21	1:A:552:PHE:CZ	2.52	0.43
1:A:235:PRO:HA	1:A:275:TYR:CD2	2.53	0.43
1:A:446:ARG:O	1:A:447:ARG:C	2.56	0.43
1:A:159:LEU:O	1:A:163:LEU:HG	2.19	0.43
1:A:158:LEU:CD2	1:A:181:ARG:HH21	2.31	0.43
1:A:314:LEU:O	1:A:391:THR:HG23	2.18	0.43
1:A:461:SER:O	1:A:504:SER:CB	2.60	0.43
1:A:96:ALA:O	1:A:116:TYR:HB2	2.18	0.43
1:A:333:PRO:HD3	1:A:394:VAL:CG1	2.43	0.43
1:A:130:ASN:OD1	1:A:131:VAL:N	2.52	0.43
1:A:557:ILE:HG13	1:A:561:TRP:CD1	2.53	0.43
1:A:161:GLU:HG3	1:A:177:GLY:HA3	2.01	0.43
1:A:70:ALA:HA	1:A:150:TRP:CH2	2.53	0.43
1:A:239:LEU:O	1:A:239:LEU:HD12	2.19	0.42
1:A:300:GLU:CG	1:A:365:GLU:HB3	2.49	0.42
1:A:43:GLU:HA	1:A:47:ARG:HD3	2.00	0.42
1:A:451:LYS:O	1:A:512:PHE:HE2	2.01	0.42
1:A:514:GLU:HG3	1:A:515:ASN:H	1.84	0.42
1:A:72:VAL:CG2	1:A:109:TYR:HB3	2.50	0.42
1:A:516:ARG:HH12	1:A:554:ASP:N	2.18	0.42
1:A:551:ASP:O	1:A:557:ILE:HB	2.20	0.42
1:A:551:ASP:O	1:A:557:ILE:HG12	2.19	0.42
1:A:14:MET:HG2	1:A:15:GLU:N	2.33	0.42
1:A:190:THR:N	2:A:2056:HOH:O	2.53	0.42
1:A:315:PHE:CE2	1:A:394:VAL:O	2.73	0.42
1:A:412:MET:HA	1:A:415:ILE:CD1	2.50	0.42
1:A:128:TYR:HE2	1:A:495:ASN:HD22	1.67	0.42
1:A:107:ALA:HB1	1:A:109:TYR:CD2	2.54	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:160:PRO:HB3	1:A:172:PHE:CG	2.54	0.42
1:A:368:TYR:HE1	1:A:373:GLY:O	2.03	0.42
1:A:411:PRO:HG2	1:A:414:ARG:CG	2.49	0.42
1:A:127:ASN:O	1:A:130:ASN:HB3	2.20	0.42
1:A:135:VAL:O	1:A:138:ALA:HB3	2.19	0.42
1:A:135:VAL:O	1:A:139:GLU:N	2.44	0.42
1:A:263:ARG:N	2:A:2079:HOH:O	2.53	0.42
1:A:297:ARG:HB3	1:A:320:SER:OG	2.19	0.42
1:A:447:ARG:O	1:A:448:PRO:O	2.38	0.42
1:A:541:GLU:O	1:A:545:LYS:HG3	2.19	0.42
1:A:551:ASP:HB3	1:A:557:ILE:HG13	2.02	0.42
1:A:198:VAL:O	1:A:199:PRO:C	2.58	0.42
1:A:345:MET:C	1:A:348:ALA:HB3	2.40	0.42
1:A:505:GLN:O	1:A:506:PHE:CD1	2.73	0.42
1:A:86:PHE:CD2	1:A:86:PHE:N	2.71	0.42
1:A:127:ASN:CG	1:A:128:TYR:H	2.12	0.42
1:A:228:GLN:NE2	2:A:2066:HOH:O	2.52	0.42
1:A:393:MET:HG3	1:A:393:MET:O	2.19	0.42
1:A:546:LEU:HD22	1:A:561:TRP:CH2	2.55	0.42
1:A:183:LEU:HB2	1:A:184:GLY:H	1.66	0.42
1:A:249:VAL:HA	1:A:292:LEU:H	1.85	0.42
1:A:158:LEU:CD2	1:A:181:ARG:NH2	2.83	0.41
1:A:172:PHE:HZ	2:A:2044:HOH:O	2.02	0.41
1:A:105:ALA:HB2	2:A:2136:HOH:O	2.20	0.41
1:A:151:GLY:O	1:A:152:HIS:C	2.59	0.41
1:A:160:PRO:HA	1:A:163:LEU:HD12	2.03	0.41
1:A:168:ARG:O	1:A:168:ARG:NH1	2.52	0.41
1:A:25:HIS:ND1	1:A:56:HIS:HB3	2.35	0.41
1:A:297:ARG:HD3	1:A:558:THR:HA	2.03	0.41
1:A:380:LEU:HD23	1:A:380:LEU:C	2.40	0.41
1:A:60:SER:O	1:A:93:GLN:N	2.54	0.41
1:A:199:PRO:O	1:A:376:TYR:HA	2.20	0.41
1:A:364:VAL:HG12	1:A:364:VAL:O	2.19	0.41
1:A:419:ARG:HH22	1:A:430:SER:C	2.21	0.41
1:A:159:LEU:O	1:A:163:LEU:HD12	2.20	0.41
1:A:203:TRP:HD1	1:A:206:THR:OG1	2.01	0.41
1:A:211:VAL:HG12	1:A:222:VAL:CG2	2.50	0.41
1:A:267:ARG:O	1:A:268:GLU:C	2.58	0.41
1:A:263:ARG:HB2	2:A:2079:HOH:O	2.19	0.41
1:A:285:SER:HA	1:A:286:PRO:HD3	1.93	0.41
1:A:338:LYS:HB3	1:A:341:THR:OG1	2.20	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:38:VAL:O	1:A:38:VAL:HG23	2.20	0.41
1:A:413:HIS:O	1:A:419:ARG:NH1	2.46	0.41
1:A:99:THR:CG2	1:A:119:VAL:HG23	2.51	0.41
1:A:546:LEU:HB3	1:A:561:TRP:HH2	1.86	0.41
1:A:210:THR:HB	1:A:226:ILE:HD12	2.03	0.41
1:A:256:GLY:C	2:A:2076:HOH:O	2.59	0.41
1:A:336:ILE:HD11	1:A:555:ASN:CB	2.51	0.41
1:A:381:ASN:O	1:A:383:ARG:N	2.54	0.41
1:A:418:ILE:O	1:A:419:ARG:C	2.59	0.41
1:A:557:ILE:HG21	1:A:561:TRP:CE3	2.56	0.41
1:A:74:GLU:O	1:A:78:VAL:HG23	2.21	0.41
1:A:83:TYR:HA	1:A:87:GLY:HA2	2.02	0.41
1:A:157:PRO:CB	1:A:180:MET:HB2	2.41	0.41
1:A:29:PRO:HD2	1:A:32:PHE:CD2	2.56	0.41
1:A:458:ARG:NH1	1:A:460:THR:CG2	2.84	0.41
1:A:88:ASP:C	1:A:90:ARG:H	2.23	0.41
1:A:119:VAL:HB	1:A:120:PRO:CD	2.50	0.41
1:A:441:ALA:O	1:A:445:GLN:HB2	2.20	0.41
1:A:89:ASP:O	1:A:90:ARG:HD3	2.21	0.41
1:A:126:ASN:O	1:A:127:ASN:CB	2.68	0.40
1:A:146:VAL:CG1	1:A:147:TRP:N	2.82	0.40
1:A:187:ILE:CG1	1:A:288:PHE:CD2	3.02	0.40
1:A:306:ASP:HA	1:A:406:ILE:CG2	2.50	0.40
1:A:96:ALA:HB1	2:A:2028:HOH:O	2.20	0.40
1:A:298:HIS:HA	1:A:366:TYR:O	2.21	0.40
1:A:90:ARG:CD	1:A:114:ASP:OD1	2.62	0.40
1:A:123:THR:CB	1:A:125:ASN:OD1	2.70	0.40
1:A:203:TRP:CB	1:A:290:MET:HA	2.52	0.40
1:A:252:LYS:NZ	1:A:262:ILE:HD13	2.35	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:26:THR:OG1	1:A:26:THR:OG1[4_765]	1.49	0.71

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	545/553 (99%)	381 (70%)	113 (21%)	51 (9%)	0 0

All (51) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	113	ALA
1	A	127	ASN
1	A	142	ASP
1	A	254	SER
1	A	268	GLU
1	A	269	GLU
1	A	295	ARG
1	A	299	LEU
1	A	449	ILE
1	A	464	PRO
1	A	68	GLY
1	A	87	GLY
1	A	88	ASP
1	A	100	PRO
1	A	149	GLY
1	A	224	ASP
1	A	255	GLU
1	A	258	GLY
1	A	315	PHE
1	A	403	GLN
1	A	448	PRO
1	A	456	ALA
1	A	489	TYR
1	A	497	ASN
1	A	551	ASP
1	A	561	TRP
1	A	565	LEU
1	A	45	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	85	THR
1	A	115	GLN
1	A	185	ASP
1	A	196	ALA
1	A	215	GLU
1	A	245	ILE
1	A	457	CYS
1	A	555	ASN
1	A	558	THR
1	A	75	ILE
1	A	76	ARG
1	A	325	HIS
1	A	355	LEU
1	A	467	GLY
1	A	93	GLN
1	A	181	ARG
1	A	319	CYS
1	A	402	ALA
1	A	545	LYS
1	A	416	SER
1	A	496	GLY
1	A	173	ILE
1	A	418	ILE

5.3.2 Protein sidechains [i](#)

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	462/466 (99%)	430 (93%)	32 (7%)	15 30

All (32) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	24	ARG
1	A	36	ASN
1	A	38	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	45	PRO
1	A	47	ARG
1	A	66	ASN
1	A	80	LYS
1	A	86	PHE
1	A	100	PRO
1	A	123	THR
1	A	124	ASN
1	A	133	LEU
1	A	203	TRP
1	A	209	ASP
1	A	215	GLU
1	A	223	ASP
1	A	233	THR
1	A	247	PHE
1	A	267	ARG
1	A	319	CYS
1	A	365	GLU
1	A	379	GLU
1	A	381	ASN
1	A	386	VAL
1	A	414	ARG
1	A	466	ASP
1	A	468	PHE
1	A	490	PHE
1	A	499	HIS
1	A	509	ILE
1	A	515	ASN
1	A	566	ILE

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (18) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	66	ASN
1	A	115	GLN
1	A	124	ASN
1	A	194	GLN
1	A	228	GLN
1	A	240	GLN
1	A	264	GLN
1	A	277	GLN
1	A	280	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	326	GLN
1	A	381	ASN
1	A	403	GLN
1	A	445	GLN
1	A	485	ASN
1	A	494	ASN
1	A	495	ASN
1	A	522	HIS
1	A	555	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 carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	549/553 (99%)	-0.24	7 (1%) 77 79	8, 27, 39, 57	0

All (7) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	301	VAL	2.8
1	A	149	GLY	2.6
1	A	503	ASP	2.6
1	A	394	VAL	2.3
1	A	552	PHE	2.2
1	A	322	GLN	2.2
1	A	558	THR	2.0

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

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

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.