



## wwPDB EM Map/Model Validation Report ⓘ

Jun 1, 2016 – 10:36 PM EDT

PDB ID : 3JD8  
EMDB ID: : EMD-6640  
Title : cryo-EM structure of the full-length human NPC1 at 4.4 angstrom  
Authors : Gong, X.; Qian, H.W.; Zhou, X.H.; Wu, J.P.; Zhou, Q.; Yan, N.  
Deposited on : 2016-05-01  
Resolution : 4.43 Å(reported)  
Based on PDB ID : 5F1B, 3GKI

This is a wwPDB EM Map/Model Validation Report for a publicly released PDB/EMDB entry.  
For rigid body fitted models, validation errors reported here could stem from errors in the original structure(s) used in the fitting.  
We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)  
A user guide is available at  
<http://wwpdb.org/validation/2016/EMValidationReportHelp>

---

MolProbity : 4.02b-467  
Mogul : 1.7.1 (RC1), CSD as537be (2016)  
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et. al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20027674

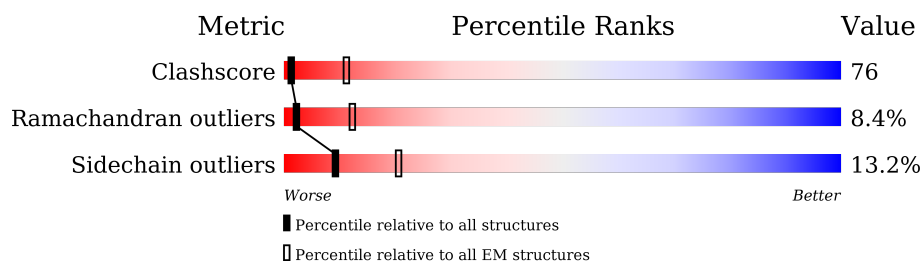
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*ELECTRON MICROSCOPY*

The reported resolution of this entry is 4.43 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)	EM structures (#Entries)
Clashscore	114402	924
Ramachandran outliers	111179	726
Sidechain outliers	111093	686

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains. The red, orange, yellow and green segments on the bar indicate the fraction of residues that contain outliers for  $\geq 3$ , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions  $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	1278	<div>48% 30% 10% • 11%</div>

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

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
4	NAG	A	1306	-	-	X	-
4	NAG	A	1307	-	-	X	-
5	NAG	A	1312	-	-	X	-

## 2 Entry composition [i](#)

There are 6 unique types of molecules in this entry. The entry contains 8050 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

In the tables below, 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.

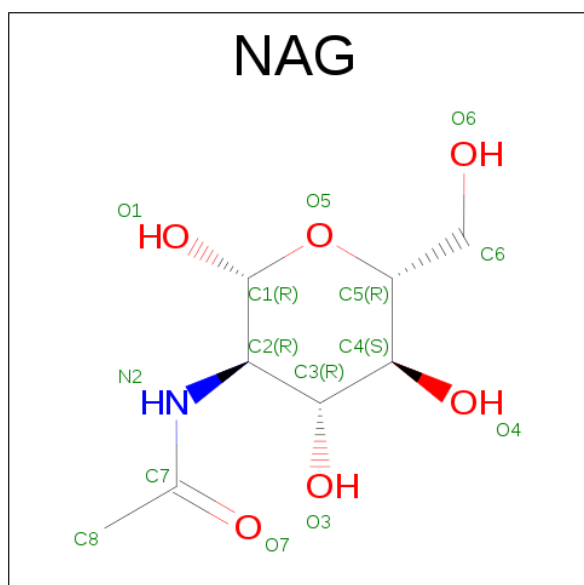
- Molecule 1 is a protein called Niemann-Pick C1 protein.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S		
1	A	1133	7695	4862	1315	1476	42	1	0

- Molecule 2 is a polymer of unknown type called SUGAR (2-MER).

Mol	Chain	Residues	Atoms				AltConf
			Total	C	N	O	
2	A	2	112	64	8	40	0
2	A	2	112	64	8	40	0
2	A	2	112	64	8	40	0
2	A	2	112	64	8	40	0

- Molecule 3 is SUGAR (N-ACETYL-D-GLUCOSAMINE) (three-letter code: NAG) (formula:  $C_8H_{15}NO_6$ ).



Mol	Chain	Residues	Atoms				AltConf
3	A	1	Total	C	N	O	0
			126	72	9	45	
3	A	1	Total	C	N	O	0
			126	72	9	45	
3	A	1	Total	C	N	O	0
			126	72	9	45	
3	A	1	Total	C	N	O	0
			126	72	9	45	
3	A	1	Total	C	N	O	0
			126	72	9	45	
3	A	1	Total	C	N	O	0
			126	72	9	45	
3	A	1	Total	C	N	O	0
			126	72	9	45	
3	A	1	Total	C	N	O	0
			126	72	9	45	

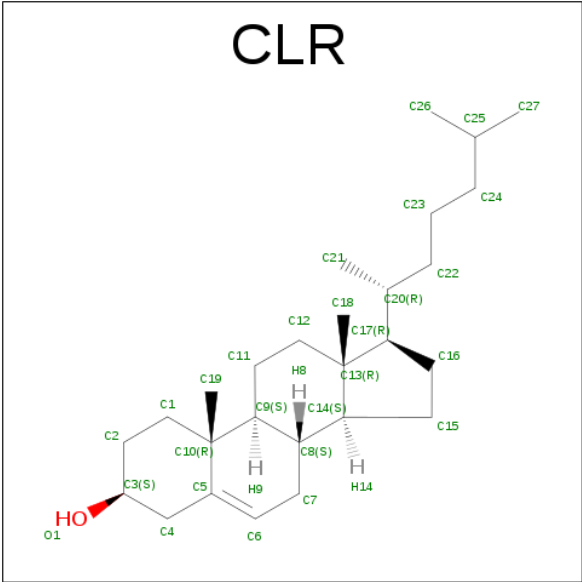
- Molecule 4 is a polymer of unknown type called SUGAR (3-MER).

Mol	Chain	Residues	Atoms				AltConf
4	A	3	Total	C	N	O	0
			39	22	2	15	

- Molecule 5 is a polymer of unknown type called SUGAR (4-MER).

Mol	Chain	Residues	Atoms				AltConf
5	A	4	Total	C	N	O	0
			50	28	2	20	

- Molecule 6 is CHOLESTEROL (three-letter code: CLR) (formula: C<sub>27</sub>H<sub>46</sub>O).

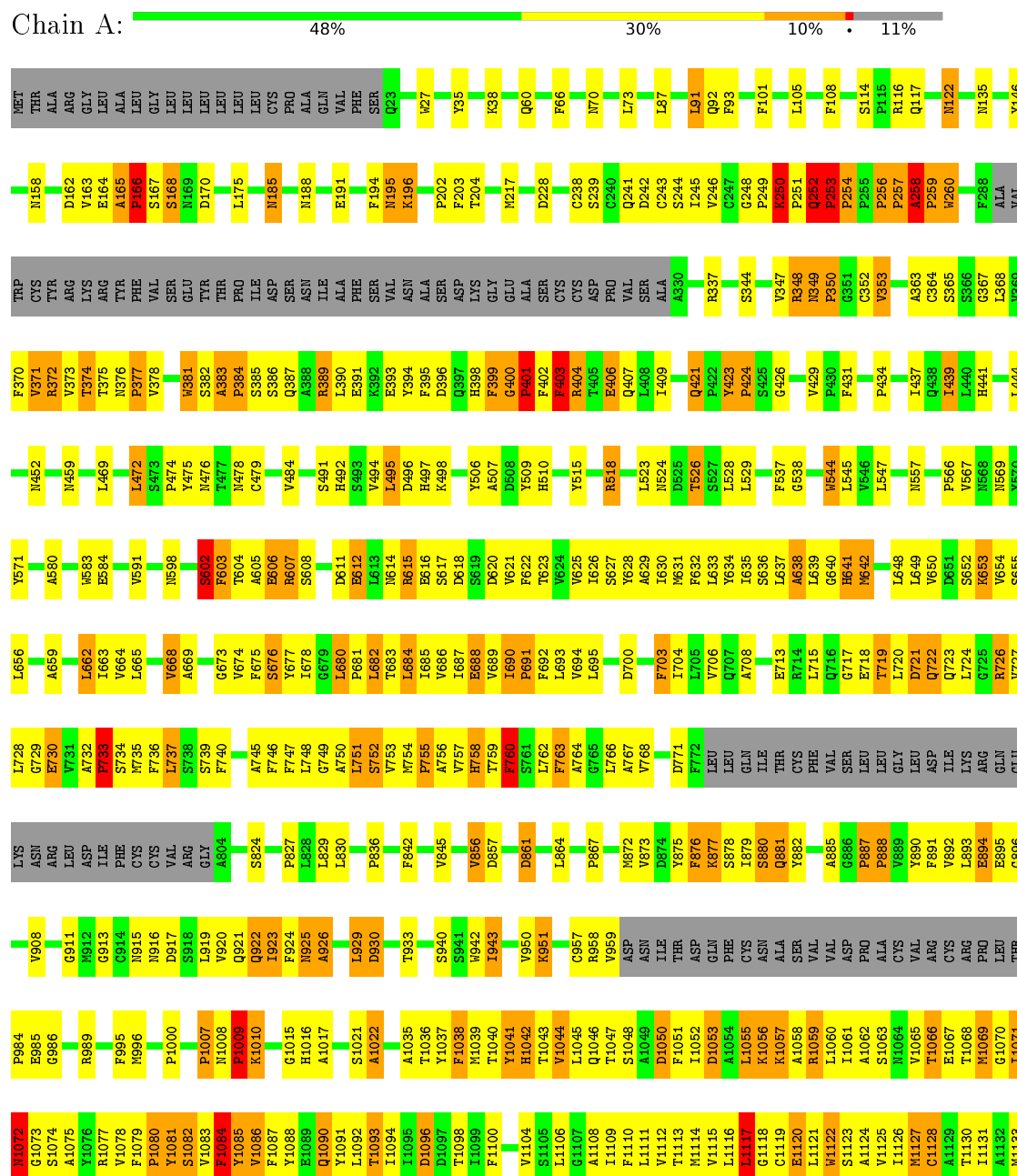


Mol	Chain	Residues	Atoms			AltConf
6	A	1	Total	C	O	0
			28	27	1	

### 3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA and DNA chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of errors displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry. 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.

#### • Molecule 1: Niemann-Pick C1 protein



GLU	G1201	V1134
ARG	I1202	L1135
GLU	T1203	V1136
ARG	L1204	N1137
LEU	T1205	M1138
LEU	K1206	F1139
ASN	F1207	G1140
PHE	G1208	V1141
	G1209	M1142
	I1210	M1143
	V1211	L1144
	V1212	M1145
	L1213	G1146
	A1214	I1147
	F1215	S1148
		L1149
	Q1219	N1150
	I1220	A1151
	F1221	V1152
	Q1222	S1153
	I1223	L1154
	F1224	V1155
	Y1225	N1156
	F1226	
	R1227	M1159
	M1228	S1160
	Y1229	C1161
	L1230	G1162
	A1231	I1163
	M1232	S1164
	V1233	V1165
	L1234	E1166
	L1235	F1167
	G1236	C1168
	A1237	S1169
	T1238	H1170
	H1239	I1171
		T1172
	F1243	R1173
	I1251	V1177
	GLY	S1178
	PRO	M1179
	SER	
	VAL	V1184
	ASN	E1185
	LYS	R1186
	ALA	A1187
	LYS	E1188
	SER	E1189
	CYS	A1190
	ALA	L1191
	THR	
	GLU	M1194
	GLU	G1195
	ARG	S1196
	TYR	S1197
	LYS	V1198
	GLY	F1199
	THR	S1200

## 4 Experimental information

Property	Value	Source
Reconstruction method	Not provided	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	Depositor
Number of images used	Not provided	Depositor
Resolution determination method	Not provided	Depositor
CTF correction method	Each micrograph	Depositor
Microscope	FEI TITAN KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ( $e^-/\text{\AA}^2$ )	50	Depositor
Minimum defocus (nm)	1500	Depositor
Maximum defocus (nm)	3000	Depositor
Magnification	22500	Depositor
Image detector	GATAN K2 SUMMIT (4k x 4k)	Depositor



## 5 Model quality

### 5.1 Standard geometry

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: BMA, NAG, CLR, MAN

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  > 2$	RMSZ	# $ Z  > 2$
1	A	0.52	8/7843 (0.1%)	0.67	31/10748 (0.3%)

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

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	2

All (8) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	940	SER	C-N	13.96	1.66	1.34
1	A	429	VAL	C-N	-5.49	1.23	1.34
1	A	166	PRO	N-CD	5.27	1.55	1.47
1	A	469	LEU	C-N	-5.22	1.22	1.34
1	A	424	PRO	N-CD	5.12	1.55	1.47
1	A	249	PRO	N-CD	5.11	1.55	1.47
1	A	881	GLN	C-N	-5.02	1.22	1.34
1	A	401	PRO	N-CD	5.01	1.54	1.47

All (31) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	602	SER	CB-CA-C	-9.99	91.11	110.10
1	A	755	PRO	CA-N-CD	-8.22	99.99	111.50
1	A	996	MET	C-N-CA	-6.63	105.11	121.70
1	A	887	PRO	N-CA-CB	6.57	111.18	103.30
1	A	836	PRO	N-CA-CB	6.43	111.02	103.30

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	256	PRO	C-N-CD	6.21	141.44	128.40
1	A	258	ALA	C-N-CD	6.14	141.30	128.40
1	A	254	PRO	C-N-CD	6.08	141.16	128.40
1	A	252	GLN	C-N-CD	6.08	141.16	128.40
1	A	253	PRO	C-N-CD	6.07	141.14	128.40
1	A	400	GLY	C-N-CD	6.06	141.12	128.40
1	A	383	ALA	C-N-CD	6.05	141.12	128.40
1	A	421	GLN	C-N-CD	6.04	141.08	128.40
1	A	690	ILE	C-N-CD	6.03	141.06	128.40
1	A	1009	PRO	N-CA-CB	6.03	110.53	103.30
1	A	377	PRO	N-CA-CB	5.96	110.45	103.30
1	A	1007	PRO	N-CA-CB	5.92	110.40	103.30
1	A	827	PRO	N-CA-CB	5.92	110.40	103.30
1	A	867	PRO	N-CA-CB	5.92	110.40	103.30
1	A	733	PRO	N-CA-CB	5.90	110.39	103.30
1	A	888	PRO	N-CA-CB	5.89	110.37	103.30
1	A	350	PRO	N-CA-CB	5.89	110.37	103.30
1	A	1000	PRO	N-CA-CB	5.89	110.37	103.30
1	A	940	SER	C-N-CA	-5.82	107.16	121.70
1	A	165	ALA	C-N-CD	5.62	140.21	128.40
1	A	940	SER	CA-C-N	-5.33	105.47	117.20
1	A	429	VAL	O-C-N	-5.32	110.99	121.10
1	A	1096	ASP	CB-CG-OD2	5.25	123.03	118.30
1	A	1053	ASP	CB-CG-OD2	5.21	122.99	118.30
1	A	248	GLY	C-N-CD	5.14	139.19	128.40
1	A	423	TYR	C-N-CD	5.11	139.13	128.40

There are no chirality outliers.

All (2) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	602	SER	Peptide
1	A	603	PHE	Peptide

## 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	7695	0	6476	1101	0
2	A	112	0	100	12	0
3	A	126	0	117	13	0
4	A	39	0	34	20	0
5	A	50	0	43	10	0
6	A	28	0	46	1	0
All	All	8050	0	6816	1126	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 76.

All (1126) 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:ASN:HD21	2:A:1310:NAG:C1	0.99	1.62
1:A:724:LEU:HD22	1:A:1170:HIS:CE1	1.29	1.62
1:A:656:LEU:CD1	1:A:685:ILE:HG13	1.17	1.56
1:A:524:ASN:ND2	2:A:1304:NAG:C1	1.68	1.54
1:A:693:LEU:HD11	1:A:763:PHE:CE2	1.41	1.52
1:A:656:LEU:HD11	1:A:685:ILE:CG1	1.31	1.52
1:A:158:ASN:ND2	3:A:1303:NAG:C1	1.69	1.50
1:A:70:ASN:HD21	3:A:1317:NAG:C1	1.26	1.49
1:A:185:ASN:HD21	2:A:1319:NAG:C1	1.24	1.48
1:A:403:PHE:CE2	1:A:566:PRO:HB3	1.46	1.46
1:A:684:LEU:CD2	1:A:728:LEU:HD13	1.45	1.44
1:A:1138:MET:HE1	1:A:1232:MET:CA	1.44	1.44
1:A:659:ALA:HA	1:A:662:LEU:CD2	1.46	1.44
1:A:693:LEU:CD1	1:A:763:PHE:HE2	1.30	1.43
1:A:631:MET:CE	1:A:1204:LEU:O	1.64	1.42
1:A:693:LEU:HD11	1:A:763:PHE:CD2	1.52	1.42
1:A:1133:MET:HG2	1:A:1239:HIS:NE2	1.12	1.42
1:A:1133:MET:HG2	1:A:1239:HIS:CD2	1.52	1.42
1:A:185:ASN:ND2	2:A:1319:NAG:C1	1.80	1.42
1:A:135:ASN:ND2	3:A:1322:NAG:C1	1.81	1.41
1:A:656:LEU:CD1	1:A:685:ILE:CG1	1.85	1.40
1:A:1178:SER:CB	1:A:1186:ARG:HH11	1.35	1.40
1:A:684:LEU:HD21	1:A:728:LEU:CD1	1.51	1.38
1:A:598:ASN:ND2	2:A:1310:NAG:C1	1.85	1.37
1:A:688:GLU:CG	1:A:724:LEU:HD23	1.52	1.35
1:A:688:GLU:O	1:A:691:PRO:HD2	1.20	1.35
1:A:684:LEU:HD21	1:A:728:LEU:CD2	1.55	1.34
1:A:1133:MET:HE2	1:A:1239:HIS:ND1	1.05	1.33

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:723:GLN:OE1	1:A:1169:SER:HB2	1.20	1.33
1:A:693:LEU:CD1	1:A:763:PHE:CE2	2.03	1.33
1:A:523:LEU:HD11	1:A:1016:HIS:CB	1.58	1.32
1:A:724:LEU:CD2	1:A:1170:HIS:CE1	2.13	1.31
1:A:401:PRO:HD3	1:A:571:TYR:CE1	1.65	1.31
1:A:1142:MET:HA	1:A:1147:ILE:CB	1.57	1.31
1:A:856:VAL:CB	1:A:1091:TYR:HE2	1.41	1.30
1:A:686:VAL:HG12	1:A:690:ILE:CD1	1.62	1.30
1:A:1133:MET:CE	1:A:1239:HIS:ND1	1.95	1.29
1:A:557:ASN:ND2	4:A:1306:NAG:C1	1.96	1.29
1:A:1084:PHE:CE1	1:A:1085:TYR:CD1	2.20	1.29
1:A:1138:MET:CE	1:A:1232:MET:HB2	1.63	1.28
1:A:923:ILE:O	1:A:1042:HIS:HB2	1.33	1.28
1:A:401:PRO:HG3	1:A:571:TYR:CD1	1.68	1.28
1:A:452:ASN:HD21	3:A:1323:NAG:C1	1.45	1.28
1:A:926:ALA:O	1:A:1040:THR:HG22	1.34	1.28
1:A:1142:MET:HE3	1:A:1148:SER:O	1.11	1.27
1:A:686:VAL:CG1	1:A:690:ILE:HD11	1.61	1.27
1:A:1070:GLY:O	1:A:1071:ILE:CG1	1.83	1.26
1:A:70:ASN:ND2	3:A:1317:NAG:C1	1.95	1.26
1:A:459:ASN:ND2	3:A:1324:NAG:C1	1.97	1.26
1:A:923:ILE:O	1:A:1042:HIS:CB	1.83	1.26
1:A:648:LEU:HB3	1:A:763:PHE:CE1	1.70	1.26
1:A:751:LEU:O	1:A:755:PRO:HG3	1.29	1.25
1:A:659:ALA:CA	1:A:662:LEU:HD23	1.66	1.24
1:A:162:ASP:OD2	1:A:244:SER:CB	1.86	1.24
1:A:406:GLU:OE1	1:A:583:TRP:HZ3	1.17	1.23
1:A:688:GLU:HG2	1:A:1170:HIS:NE2	1.54	1.23
1:A:724:LEU:HD22	1:A:1170:HIS:NE2	1.54	1.23
1:A:1055:LEU:HD23	1:A:1085:TYR:CZ	1.73	1.22
1:A:1138:MET:CE	1:A:1232:MET:CB	2.15	1.22
1:A:684:LEU:CD2	1:A:728:LEU:CD1	2.09	1.22
1:A:478:ASN:HD21	5:A:1312:NAG:C1	1.52	1.21
1:A:915:ASN:CB	1:A:920:VAL:HA	1.69	1.21
1:A:452:ASN:ND2	3:A:1323:NAG:C1	2.02	1.21
1:A:688:GLU:O	1:A:691:PRO:CD	1.86	1.21
1:A:676:SER:HB3	1:A:1225:TYR:OH	1.41	1.20
1:A:856:VAL:O	1:A:1048:SER:CB	1.89	1.20
1:A:162:ASP:OD2	1:A:244:SER:HB3	1.04	1.20
1:A:250:LYS:HB3	1:A:251:PRO:CD	1.70	1.20
1:A:882:TYR:CB	1:A:1082:SER:HB3	1.70	1.19

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:684:LEU:HD21	1:A:728:LEU:CG	1.70	1.19
1:A:1133:MET:HE2	1:A:1239:HIS:CG	1.76	1.19
1:A:924:PHE:H	1:A:925:ASN:CB	1.56	1.18
1:A:1127:MET:HA	1:A:1127:MET:HE3	1.19	1.18
1:A:1127:MET:CE	1:A:1168:CYS:HB3	1.74	1.18
1:A:1133:MET:CG	1:A:1239:HIS:CD2	2.26	1.17
1:A:755:PRO:HD2	1:A:756:ALA:H	1.06	1.16
1:A:1142:MET:CA	1:A:1147:ILE:CB	2.22	1.16
1:A:732:ALA:CB	1:A:749:GLY:HA3	1.75	1.16
1:A:1108:ALA:O	1:A:1112:VAL:HG23	1.43	1.16
1:A:767:ALA:O	1:A:771:ASP:CB	1.94	1.16
1:A:1133:MET:CG	1:A:1239:HIS:NE2	2.08	1.16
1:A:730:GLU:CG	1:A:1108:ALA:HB1	1.76	1.16
1:A:1133:MET:HG2	1:A:1239:HIS:CE1	1.81	1.15
1:A:1178:SER:CB	1:A:1186:ARG:HD2	1.76	1.15
1:A:656:LEU:HD11	1:A:685:ILE:CB	1.77	1.15
1:A:959:VAL:CB	1:A:984:PRO:N	2.10	1.15
1:A:1142:MET:CE	1:A:1148:SER:O	1.93	1.14
1:A:1138:MET:CE	1:A:1232:MET:HA	1.76	1.14
1:A:1071:ILE:O	1:A:1072:ASN:O	1.65	1.14
1:A:1071:ILE:HG22	1:A:1072:ASN:N	1.61	1.14
1:A:1084:PHE:CE1	1:A:1085:TYR:HD1	1.59	1.14
1:A:507:ALA:HB1	1:A:529:LEU:HG	1.28	1.14
1:A:724:LEU:CD1	1:A:1166:GLU:HG2	1.77	1.14
1:A:1009:PRO:HA	1:A:1016:HIS:O	1.44	1.13
1:A:1178:SER:CB	1:A:1186:ARG:CD	2.25	1.13
1:A:635:ILE:HG23	1:A:690:ILE:HD13	1.14	1.13
1:A:631:MET:SD	1:A:1208:GLY:CA	2.36	1.13
1:A:1070:GLY:O	1:A:1071:ILE:HG13	0.95	1.12
1:A:135:ASN:HD21	3:A:1322:NAG:C1	1.50	1.12
1:A:1140:GLY:O	1:A:1144:LEU:CB	1.96	1.12
1:A:1046:GLN:CB	1:A:1050:ASP:OD2	1.98	1.12
1:A:720:LEU:HD22	1:A:1170:HIS:HA	1.29	1.12
1:A:856:VAL:O	1:A:1048:SER:HB3	1.44	1.11
1:A:752:SER:O	1:A:755:PRO:HD2	1.46	1.11
1:A:684:LEU:CD2	1:A:728:LEU:HD22	1.79	1.11
1:A:879:ILE:CA	1:A:1043:THR:HG21	1.79	1.11
1:A:688:GLU:HG3	1:A:724:LEU:HD23	1.29	1.11
1:A:406:GLU:OE1	1:A:583:TRP:CZ3	2.03	1.10
1:A:724:LEU:HD11	1:A:1166:GLU:CG	1.81	1.10
1:A:1178:SER:CB	1:A:1186:ARG:NH1	2.14	1.10

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:752:SER:O	1:A:755:PRO:CD	1.99	1.10
1:A:656:LEU:CB	1:A:682:LEU:HD11	1.79	1.10
1:A:1098:THR:HG22	1:A:1154:LEU:HD21	1.22	1.09
1:A:856:VAL:CB	1:A:1091:TYR:CE2	2.34	1.09
1:A:915:ASN:CA	1:A:920:VAL:HA	1.81	1.09
1:A:688:GLU:HG2	1:A:724:LEU:HD23	1.32	1.09
1:A:1062:ALA:HB1	1:A:1078:VAL:HB	1.18	1.09
1:A:1156:ASN:HB3	1:A:1228:MET:HE3	1.34	1.08
4:A:1307:NAG:H62	4:A:1308:BMA:C2	1.82	1.08
1:A:403:PHE:CD2	1:A:566:PRO:HB3	1.87	1.08
1:A:687:ILE:O	1:A:691:PRO:HD3	1.53	1.08
1:A:365:SER:HA	1:A:662:LEU:HB3	1.30	1.08
1:A:684:LEU:HD23	1:A:728:LEU:HD13	1.14	1.08
1:A:730:GLU:HG3	1:A:1108:ALA:CB	1.82	1.08
1:A:929:LEU:CB	1:A:1038:PHE:CD2	2.37	1.08
1:A:1138:MET:HE2	1:A:1232:MET:CB	1.78	1.07
1:A:196:LYS:HG3	1:A:204:THR:OG1	1.54	1.07
1:A:680:LEU:HB3	1:A:1229:TYR:OH	1.50	1.07
1:A:1156:ASN:CB	1:A:1228:MET:HE3	1.83	1.07
1:A:1127:MET:HE1	1:A:1168:CYS:HB3	1.28	1.07
1:A:1138:MET:HE2	1:A:1232:MET:HB2	1.35	1.07
1:A:228:ASP:CB	1:A:246:VAL:HG13	1.84	1.07
1:A:656:LEU:HD13	1:A:685:ILE:HG13	1.26	1.07
1:A:1071:ILE:CG2	1:A:1072:ASN:H	1.62	1.06
1:A:403:PHE:HE2	1:A:566:PRO:CB	1.67	1.06
1:A:685:ILE:O	1:A:689:VAL:HG23	1.56	1.06
1:A:684:LEU:CD2	1:A:728:LEU:CD2	2.33	1.06
1:A:1142:MET:O	1:A:1147:ILE:CB	2.02	1.05
1:A:1062:ALA:HB1	1:A:1078:VAL:CB	1.86	1.05
1:A:659:ALA:C	1:A:662:LEU:HD23	1.76	1.05
1:A:478:ASN:ND2	5:A:1312:NAG:C1	2.17	1.05
1:A:688:GLU:C	1:A:691:PRO:CD	2.23	1.05
1:A:403:PHE:CE2	1:A:566:PRO:CB	2.40	1.04
1:A:1133:MET:CE	1:A:1239:HIS:CG	2.39	1.04
1:A:635:ILE:HG23	1:A:690:ILE:CD1	1.86	1.04
1:A:635:ILE:CG2	1:A:690:ILE:CD1	2.35	1.04
1:A:732:ALA:CB	1:A:749:GLY:CA	2.35	1.03
1:A:656:LEU:HD13	1:A:685:ILE:CG1	1.74	1.03
1:A:879:ILE:N	1:A:1043:THR:HG21	1.71	1.03
1:A:717:GLY:O	1:A:721:ASP:HB2	1.58	1.03
1:A:1065:VAL:O	1:A:1068:THR:HG22	1.56	1.03

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1156:ASN:HB3	1:A:1228:MET:CE	1.87	1.03
1:A:631:MET:SD	1:A:1208:GLY:N	2.32	1.03
1:A:659:ALA:HA	1:A:662:LEU:HD23	1.13	1.03
1:A:751:LEU:O	1:A:755:PRO:CG	2.05	1.02
1:A:688:GLU:HG2	1:A:724:LEU:CD2	1.87	1.02
1:A:686:VAL:CG1	1:A:690:ILE:CD1	2.27	1.02
1:A:879:ILE:C	1:A:1043:THR:CG2	2.28	1.02
1:A:915:ASN:HA	1:A:920:VAL:HA	1.38	1.02
1:A:924:PHE:N	1:A:925:ASN:CB	2.22	1.02
1:A:523:LEU:CD1	1:A:1016:HIS:CB	2.36	1.02
1:A:1138:MET:CE	1:A:1232:MET:CA	2.31	1.02
1:A:607:ARG:HG2	1:A:611:ASP:CG	1.79	1.02
1:A:1084:PHE:CE1	1:A:1085:TYR:CE1	2.47	1.02
1:A:656:LEU:HB2	1:A:682:LEU:CD1	1.88	1.02
1:A:648:LEU:HD12	1:A:763:PHE:CD1	1.95	1.02
1:A:688:GLU:CG	1:A:724:LEU:CD2	2.38	1.02
1:A:1046:GLN:HB3	1:A:1050:ASP:OD2	1.59	1.01
1:A:879:ILE:CA	1:A:1043:THR:CG2	2.38	1.01
1:A:923:ILE:C	1:A:1042:HIS:HB3	1.80	1.01
1:A:337:ARG:HA	1:A:718:GLU:HG3	1.41	1.01
1:A:1194:MET:HE2	1:A:1194:MET:HA	1.43	1.01
4:A:1307:NAG:C6	4:A:1308:BMA:H2	1.90	1.01
1:A:401:PRO:CD	1:A:571:TYR:CE1	2.44	1.00
1:A:635:ILE:HG21	1:A:690:ILE:HD11	1.40	1.00
1:A:688:GLU:C	1:A:691:PRO:HD3	1.82	1.00
1:A:693:LEU:HD12	1:A:763:PHE:HE2	1.18	1.00
1:A:879:ILE:C	1:A:1043:THR:HG22	1.81	1.00
1:A:929:LEU:CB	1:A:1038:PHE:CE2	2.45	1.00
1:A:723:GLN:OE1	1:A:1169:SER:CB	2.08	1.00
1:A:1209:GLY:HA3	1:A:1230:LEU:HD13	1.43	0.99
1:A:401:PRO:HB2	1:A:569:ASN:ND2	1.75	0.99
4:A:1307:NAG:H62	4:A:1308:BMA:H2	0.99	0.99
1:A:922:GLN:O	1:A:1042:HIS:ND1	1.93	0.99
1:A:402:PHE:O	1:A:403:PHE:HB3	1.63	0.99
1:A:1138:MET:HE1	1:A:1232:MET:CB	1.84	0.99
1:A:250:LYS:HB3	1:A:251:PRO:HD3	1.38	0.99
1:A:659:ALA:CA	1:A:662:LEU:CD2	2.28	0.99
1:A:686:VAL:HG12	1:A:690:ILE:HD12	1.42	0.99
1:A:732:ALA:HB3	1:A:749:GLY:HA3	1.40	0.98
1:A:1062:ALA:HA	1:A:1078:VAL:HG21	1.44	0.98
1:A:656:LEU:HB2	1:A:682:LEU:HD11	0.98	0.98

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:684:LEU:CD1	1:A:1166:GLU:HG3	1.93	0.98
1:A:1045:LEU:HA	1:A:1051:PHE:CZ	1.99	0.98
1:A:724:LEU:HD22	1:A:1170:HIS:HE1	1.21	0.98
1:A:1127:MET:HA	1:A:1127:MET:CE	1.94	0.98
1:A:459:ASN:HD21	3:A:1324:NAG:C1	1.66	0.98
1:A:677:TYR:O	1:A:681:PRO:CB	2.12	0.97
1:A:1071:ILE:HG22	1:A:1072:ASN:H	0.83	0.97
1:A:680:LEU:CB	1:A:1229:TYR:OH	2.13	0.97
1:A:676:SER:OG	1:A:1226:PHE:CE2	2.15	0.97
1:A:724:LEU:CD2	1:A:1170:HIS:NE2	2.22	0.97
1:A:557:ASN:HD21	4:A:1306:NAG:C1	1.72	0.97
1:A:1045:LEU:HA	1:A:1051:PHE:HZ	1.27	0.96
1:A:607:ARG:O	1:A:611:ASP:N	1.98	0.96
1:A:1085:TYR:O	1:A:1087:PHE:N	1.97	0.96
1:A:631:MET:HE1	1:A:1204:LEU:C	1.85	0.96
1:A:659:ALA:O	1:A:662:LEU:HD23	1.66	0.96
1:A:732:ALA:HB1	1:A:749:GLY:HA3	1.45	0.96
1:A:607:ARG:HG2	1:A:611:ASP:OD2	1.64	0.96
1:A:365:SER:HA	1:A:662:LEU:CB	1.95	0.96
1:A:752:SER:C	1:A:755:PRO:CD	2.33	0.96
1:A:241:GLN:NE2	1:A:518:ARG:HH22	1.64	0.96
1:A:1062:ALA:CB	1:A:1078:VAL:HB	1.95	0.96
1:A:591:VAL:CG1	1:A:603:PHE:CE1	2.49	0.96
1:A:653:LYS:O	1:A:682:LEU:HD21	1.65	0.96
1:A:923:ILE:O	1:A:1042:HIS:HB3	1.63	0.95
1:A:684:LEU:HD21	1:A:728:LEU:HD22	1.40	0.95
1:A:686:VAL:O	1:A:690:ILE:HG13	1.65	0.95
1:A:718:GLU:O	1:A:722:GLN:HB2	1.67	0.95
1:A:1062:ALA:CA	1:A:1078:VAL:HG21	1.95	0.95
1:A:879:ILE:O	1:A:1043:THR:CG2	2.14	0.95
1:A:1142:MET:C	1:A:1147:ILE:CB	2.35	0.95
1:A:1110:PHE:O	1:A:1114:MET:HG2	1.67	0.95
1:A:943:ILE:CB	1:A:1010:LYS:O	2.15	0.94
1:A:371:VAL:O	1:A:373:VAL:N	2.01	0.94
1:A:685:ILE:O	1:A:689:VAL:CG2	2.15	0.94
1:A:401:PRO:CG	1:A:571:TYR:CD1	2.49	0.94
1:A:720:LEU:O	1:A:723:GLN:NE2	1.98	0.94
1:A:680:LEU:CG	1:A:1229:TYR:OH	2.16	0.94
1:A:1055:LEU:HD23	1:A:1085:TYR:OH	1.66	0.94
1:A:656:LEU:CD1	1:A:685:ILE:HG12	1.93	0.94
1:A:1046:GLN:CG	1:A:1050:ASP:OD2	2.16	0.94

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:724:LEU:CD2	1:A:1170:HIS:HE1	1.74	0.94
1:A:631:MET:HE1	1:A:1204:LEU:O	0.76	0.94
1:A:398:HIS:HB3	1:A:399:PHE:CE1	2.02	0.94
1:A:591:VAL:HG11	1:A:603:PHE:CE1	2.02	0.93
1:A:692:PHE:CE1	1:A:713:GLU:HA	2.02	0.93
1:A:1135:LEU:HD21	1:A:1161:CYS:SG	2.08	0.93
1:A:635:ILE:CG2	1:A:690:ILE:HD11	1.98	0.93
1:A:635:ILE:CG2	1:A:690:ILE:HD13	1.94	0.93
1:A:688:GLU:HG2	1:A:1170:HIS:CE1	2.03	0.93
1:A:1084:PHE:CZ	1:A:1085:TYR:CE1	2.57	0.93
1:A:729:GLY:O	1:A:733:PRO:CB	2.17	0.93
1:A:228:ASP:HB3	1:A:246:VAL:HG13	1.48	0.92
1:A:724:LEU:O	1:A:728:LEU:HG	1.70	0.92
1:A:507:ALA:HB1	1:A:529:LEU:CG	2.00	0.92
1:A:732:ALA:HB3	1:A:749:GLY:CA	1.98	0.92
1:A:1229:TYR:O	1:A:1233:VAL:HG23	1.69	0.92
1:A:241:GLN:HE22	1:A:518:ARG:NH2	1.68	0.92
1:A:401:PRO:HB2	1:A:569:ASN:HD21	1.30	0.92
1:A:678:ILE:HG12	1:A:748:LEU:HD21	1.51	0.92
1:A:1130:THR:HG21	1:A:1168:CYS:SG	2.08	0.92
1:A:1171:ILE:HG23	1:A:1191:LEU:CD2	2.00	0.92
1:A:1084:PHE:CZ	1:A:1085:TYR:HE1	1.87	0.92
1:A:401:PRO:HG3	1:A:571:TYR:HD1	1.01	0.92
1:A:879:ILE:O	1:A:1043:THR:HG22	1.71	0.91
1:A:135:ASN:HD22	3:A:1322:NAG:C1	1.66	0.91
1:A:1046:GLN:HG2	1:A:1050:ASP:OD2	1.71	0.91
1:A:1156:ASN:CG	1:A:1228:MET:HE3	1.91	0.90
1:A:680:LEU:HG	1:A:1229:TYR:OH	1.69	0.90
1:A:494:VAL:HA	1:A:497:HIS:CE1	2.06	0.90
1:A:620:ASP:O	1:A:623:THR:OG1	1.88	0.90
1:A:924:PHE:CB	1:A:1041:TYR:O	2.20	0.90
1:A:1141:VAL:O	1:A:1147:ILE:CB	2.19	0.90
1:A:1082:SER:O	1:A:1084:PHE:N	2.05	0.90
1:A:755:PRO:HD2	1:A:756:ALA:N	1.84	0.89
1:A:915:ASN:CB	1:A:920:VAL:CA	2.51	0.89
1:A:1059:ARG:HG3	1:A:1059:ARG:HH11	1.36	0.89
1:A:929:LEU:CB	1:A:1038:PHE:HD2	1.81	0.89
1:A:396:ASP:O	1:A:400:GLY:N	2.04	0.89
1:A:228:ASP:HA	1:A:246:VAL:CG1	2.03	0.89
1:A:1098:THR:HG22	1:A:1154:LEU:CD2	2.03	0.89
1:A:1133:MET:CG	1:A:1239:HIS:CE1	2.53	0.89

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:659:ALA:HA	1:A:662:LEU:HD22	1.54	0.89
1:A:885:ALA:O	1:A:1079:PHE:O	1.89	0.89
1:A:1085:TYR:O	1:A:1088:TYR:N	2.06	0.89
1:A:752:SER:C	1:A:755:PRO:HD3	1.93	0.89
1:A:641:HIS:O	1:A:642:MET:O	1.90	0.88
1:A:557:ASN:HD22	4:A:1306:NAG:C1	1.79	0.88
1:A:1062:ALA:CB	1:A:1078:VAL:CB	2.52	0.88
1:A:1009:PRO:CA	1:A:1016:HIS:O	2.22	0.88
1:A:632:PHE:HZ	1:A:650:VAL:HG23	1.39	0.88
1:A:693:LEU:HD11	1:A:763:PHE:HD2	1.36	0.88
1:A:544:TRP:HD1	1:A:545:LEU:N	1.72	0.88
1:A:401:PRO:HD3	1:A:571:TYR:HE1	1.09	0.88
1:A:656:LEU:HB3	1:A:751:LEU:HD21	1.54	0.88
1:A:591:VAL:HG12	1:A:603:PHE:CZ	2.08	0.87
1:A:1082:SER:HB2	1:A:1084:PHE:CD1	2.08	0.87
1:A:1084:PHE:HE1	1:A:1085:TYR:CD1	1.88	0.87
1:A:1127:MET:CE	1:A:1168:CYS:CB	2.51	0.87
1:A:680:LEU:HB3	1:A:1229:TYR:HH	1.37	0.87
1:A:631:MET:HG3	1:A:1208:GLY:HA3	1.54	0.87
1:A:523:LEU:HD11	1:A:1016:HIS:CA	2.04	0.87
1:A:650:VAL:O	1:A:654:VAL:HG23	1.74	0.87
1:A:692:PHE:HZ	1:A:713:GLU:CB	1.86	0.87
1:A:692:PHE:CZ	1:A:713:GLU:HA	2.10	0.86
1:A:631:MET:CE	1:A:1204:LEU:C	2.44	0.86
1:A:755:PRO:CD	1:A:756:ALA:H	1.88	0.86
1:A:384:PRO:HA	1:A:389:ARG:HG3	1.58	0.86
1:A:1133:MET:HE2	1:A:1239:HIS:CE1	2.09	0.85
1:A:1138:MET:HE1	1:A:1232:MET:HA	0.86	0.85
1:A:459:ASN:HD22	3:A:1324:NAG:C1	1.87	0.85
1:A:507:ALA:CB	1:A:529:LEU:HG	2.05	0.85
1:A:856:VAL:O	1:A:1048:SER:HB2	1.75	0.85
1:A:631:MET:SD	1:A:1208:GLY:HA2	2.14	0.85
1:A:656:LEU:CB	1:A:682:LEU:CD1	2.53	0.85
1:A:684:LEU:HD11	1:A:728:LEU:CD2	2.06	0.85
1:A:879:ILE:HA	1:A:1043:THR:CG2	2.04	0.85
1:A:720:LEU:HD22	1:A:1170:HIS:CA	2.06	0.85
1:A:1178:SER:CB	1:A:1186:ARG:HD3	2.04	0.84
1:A:656:LEU:CD1	1:A:682:LEU:HD12	2.07	0.84
1:A:1070:GLY:C	1:A:1071:ILE:HG13	1.96	0.84
1:A:441:HIS:CE1	1:A:495:LEU:HD23	2.12	0.84
1:A:732:ALA:HB1	1:A:749:GLY:CA	2.02	0.84

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:926:ALA:O	1:A:1040:THR:CG2	2.23	0.84
1:A:894:GLU:CB	1:A:995:PHE:CB	2.55	0.84
1:A:402:PHE:O	1:A:403:PHE:CB	2.25	0.84
1:A:688:GLU:CG	1:A:1170:HIS:NE2	2.39	0.84
1:A:228:ASP:CB	1:A:246:VAL:CG1	2.56	0.83
1:A:648:LEU:CB	1:A:763:PHE:CE1	2.60	0.83
1:A:1133:MET:SD	1:A:1239:HIS:CE1	2.71	0.83
1:A:196:LYS:CG	1:A:204:THR:OG1	2.25	0.83
1:A:1167:PHE:CE2	1:A:1237:ALA:HA	2.12	0.83
1:A:167:SER:O	1:A:168:SER:OG	1.96	0.83
1:A:676:SER:OG	1:A:1226:PHE:HE2	1.60	0.82
1:A:687:ILE:O	1:A:691:PRO:CD	2.28	0.82
1:A:1082:SER:HB2	1:A:1084:PHE:CE1	2.14	0.82
1:A:1229:TYR:CE1	1:A:1233:VAL:HG21	2.15	0.82
1:A:591:VAL:CG1	1:A:603:PHE:CZ	2.63	0.82
1:A:1055:LEU:HD22	1:A:1055:LEU:O	1.78	0.82
1:A:1140:GLY:O	1:A:1144:LEU:N	2.13	0.82
1:A:1210:ILE:HG13	1:A:1214:ALA:HB3	1.61	0.82
1:A:631:MET:CG	1:A:1208:GLY:HA3	2.10	0.81
1:A:1209:GLY:HA3	1:A:1230:LEU:CD1	2.10	0.81
1:A:1209:GLY:O	1:A:1213:LEU:N	2.11	0.81
1:A:720:LEU:O	1:A:723:GLN:HG3	1.79	0.81
1:A:1127:MET:HE1	1:A:1168:CYS:CB	2.09	0.81
1:A:241:GLN:HE22	1:A:518:ARG:HH22	0.85	0.81
1:A:1135:LEU:O	1:A:1139:PHE:HD2	1.64	0.81
1:A:684:LEU:HG	1:A:1166:GLU:HG3	1.61	0.81
1:A:1171:ILE:CG2	1:A:1191:LEU:CD2	2.59	0.81
1:A:1068:THR:HG23	1:A:1069:MET:H	1.44	0.81
1:A:396:ASP:HA	1:A:400:GLY:CA	2.11	0.81
1:A:1229:TYR:CD1	1:A:1233:VAL:HG21	2.15	0.80
1:A:228:ASP:HA	1:A:246:VAL:HG11	1.61	0.80
1:A:678:ILE:CG1	1:A:748:LEU:HD21	2.11	0.80
1:A:686:VAL:HG13	1:A:690:ILE:HD11	1.62	0.80
1:A:985:GLU:CB	1:A:986:GLY:HA2	2.11	0.80
1:A:396:ASP:HA	1:A:400:GLY:HA2	1.64	0.80
1:A:404:ARG:HD2	1:A:567:VAL:CG2	2.12	0.80
1:A:633:LEU:O	1:A:636:SER:OG	1.99	0.80
1:A:684:LEU:CG	1:A:1166:GLU:HG3	2.10	0.80
1:A:656:LEU:HD13	1:A:685:ILE:HG12	1.56	0.80
1:A:628:TYR:OH	1:A:653:LYS:HD2	1.82	0.80
1:A:1142:MET:CE	1:A:1153:SER:OG	2.30	0.80

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
5:A:1312:NAG:H62	5:A:1313:NAG:HN2	1.47	0.80
4:A:1306:NAG:H62	4:A:1307:NAG:C8	2.12	0.79
1:A:381:TRP:HD1	1:A:382:SER:N	1.80	0.79
1:A:959:VAL:C	1:A:984:PRO:N	2.36	0.79
1:A:472:LEU:HD21	1:A:1017:ALA:CB	2.13	0.79
1:A:608:SER:O	1:A:612:GLU:HB2	1.82	0.79
1:A:730:GLU:HG2	1:A:1112:VAL:CG2	2.13	0.79
1:A:1142:MET:HE2	1:A:1153:SER:OG	1.83	0.79
1:A:337:ARG:HA	1:A:718:GLU:CG	2.12	0.79
1:A:659:ALA:O	1:A:662:LEU:CD2	2.31	0.79
1:A:584:GLU:OE2	1:A:606:GLU:HB2	1.82	0.79
1:A:648:LEU:HD11	1:A:763:PHE:HA	1.63	0.79
1:A:1051:PHE:HB3	1:A:1084:PHE:HD2	1.49	0.79
1:A:1108:ALA:O	1:A:1112:VAL:CG2	2.28	0.78
1:A:1156:ASN:ND2	1:A:1228:MET:HE3	1.97	0.78
1:A:1171:ILE:HG23	1:A:1191:LEU:HD23	1.63	0.78
1:A:1202:ILE:HG21	1:A:1237:ALA:HB1	1.62	0.78
1:A:185:ASN:HD22	2:A:1319:NAG:C1	1.93	0.78
1:A:401:PRO:HB2	1:A:569:ASN:CG	2.03	0.78
1:A:720:LEU:CD2	1:A:1170:HIS:HA	2.11	0.78
1:A:401:PRO:CB	1:A:569:ASN:HD21	1.96	0.78
1:A:693:LEU:CD1	1:A:763:PHE:CD2	2.47	0.78
1:A:580:ALA:O	1:A:584:GLU:HG3	1.83	0.78
1:A:629:ALA:O	1:A:633:LEU:HG	1.84	0.78
1:A:409:ILE:HG21	1:A:872:MET:CB	2.14	0.77
1:A:856:VAL:C	1:A:1048:SER:CB	2.53	0.77
1:A:228:ASP:CA	1:A:246:VAL:HG13	2.14	0.77
1:A:688:GLU:OE1	1:A:721:ASP:OD1	2.02	0.77
1:A:1021:SER:O	1:A:1022:ALA:CB	2.32	0.77
1:A:632:PHE:CZ	1:A:650:VAL:HG23	2.19	0.77
1:A:693:LEU:HD12	1:A:763:PHE:CE2	2.01	0.77
1:A:1201:GLY:O	1:A:1205:THR:HG23	1.84	0.77
1:A:730:GLU:HG3	1:A:1108:ALA:HB1	0.87	0.77
1:A:648:LEU:HB3	1:A:763:PHE:CZ	2.17	0.77
1:A:407:GLN:HB3	1:A:604:THR:HG21	1.67	0.76
1:A:656:LEU:HD11	1:A:685:ILE:HG13	0.78	0.76
1:A:1110:PHE:HE2	1:A:1124:ALA:HB1	1.49	0.76
1:A:1135:LEU:O	1:A:1139:PHE:CD2	2.38	0.76
1:A:544:TRP:CD1	1:A:545:LEU:N	2.53	0.76
1:A:684:LEU:CD1	1:A:728:LEU:HD22	2.15	0.76
1:A:631:MET:CG	1:A:1208:GLY:CA	2.64	0.76

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:752:SER:HA	1:A:755:PRO:CG	2.15	0.76
1:A:726:ARG:HB3	1:A:1112:VAL:CG1	2.16	0.76
1:A:1184:VAL:HG12	1:A:1184:VAL:O	1.84	0.76
1:A:1194:MET:CE	1:A:1194:MET:HA	2.15	0.76
1:A:959:VAL:C	1:A:984:PRO:CB	2.54	0.76
1:A:1199:PHE:O	1:A:1203:THR:CG2	2.34	0.75
1:A:381:TRP:O	1:A:740:PHE:CB	2.33	0.75
1:A:726:ARG:HB3	1:A:1112:VAL:HG11	1.68	0.75
1:A:607:ARG:CG	1:A:611:ASP:CG	2.53	0.75
1:A:630:ILE:O	1:A:634:TYR:CD2	2.39	0.75
1:A:494:VAL:HA	1:A:497:HIS:ND1	2.01	0.75
1:A:403:PHE:HE2	1:A:566:PRO:HB3	0.94	0.75
1:A:684:LEU:HD11	1:A:728:LEU:HD21	1.68	0.75
1:A:684:LEU:HD23	1:A:728:LEU:CD1	1.96	0.75
1:A:676:SER:CB	1:A:1225:TYR:OH	2.30	0.75
1:A:1138:MET:SD	1:A:1232:MET:HB2	2.26	0.74
1:A:720:LEU:HB3	1:A:1170:HIS:HD2	1.52	0.74
1:A:1127:MET:CE	1:A:1130:THR:HG21	2.16	0.74
1:A:621:VAL:O	1:A:625:VAL:HG23	1.87	0.74
1:A:873:VAL:CB	1:A:1045:LEU:HD13	2.17	0.74
1:A:1062:ALA:HB2	1:A:1078:VAL:HG11	1.70	0.74
1:A:1142:MET:HE3	1:A:1148:SER:C	2.07	0.74
1:A:185:ASN:ND2	2:A:1319:NAG:O5	2.20	0.74
1:A:656:LEU:HD11	1:A:685:ILE:CG2	2.18	0.74
1:A:881:GLN:CB	1:A:1041:TYR:HB2	2.17	0.74
1:A:1045:LEU:CA	1:A:1051:PHE:CZ	2.71	0.74
1:A:1127:MET:HE2	1:A:1168:CYS:CB	2.18	0.74
1:A:441:HIS:NE2	1:A:496:ASP:OD1	2.21	0.74
1:A:1055:LEU:HD23	1:A:1085:TYR:CE2	2.23	0.73
4:A:1306:NAG:H82	4:A:1306:NAG:C1	2.18	0.73
1:A:396:ASP:CA	1:A:400:GLY:HA2	2.17	0.73
1:A:250:LYS:HB3	1:A:251:PRO:HD2	1.68	0.73
1:A:1068:THR:HG23	1:A:1069:MET:N	2.03	0.73
1:A:515:TYR:CE1	1:A:526:THR:CG2	2.70	0.73
1:A:984:PRO:O	1:A:989:ARG:N	2.21	0.73
1:A:1046:GLN:O	1:A:1047:THR:OG1	2.06	0.73
1:A:1045:LEU:CA	1:A:1051:PHE:HZ	2.00	0.73
1:A:684:LEU:HD11	1:A:1166:GLU:HG3	1.71	0.73
1:A:1156:ASN:CB	1:A:1228:MET:CE	2.57	0.73
1:A:228:ASP:CA	1:A:246:VAL:CG1	2.67	0.73
1:A:1210:ILE:CD1	1:A:1214:ALA:HB2	2.19	0.73

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:401:PRO:CB	1:A:569:ASN:OD1	2.36	0.73
1:A:653:LYS:C	1:A:653:LYS:HE3	2.09	0.73
1:A:1127:MET:O	1:A:1130:THR:OG1	2.06	0.72
1:A:368:LEU:O	1:A:665:LEU:CB	2.36	0.72
1:A:632:PHE:CZ	1:A:650:VAL:CG2	2.72	0.72
1:A:1062:ALA:HB1	1:A:1078:VAL:CG2	2.20	0.72
1:A:1211:VAL:O	1:A:1215:PHE:CB	2.38	0.72
1:A:1138:MET:HE2	1:A:1232:MET:HB3	1.67	0.72
1:A:676:SER:HB3	1:A:1225:TYR:CZ	2.23	0.72
1:A:879:ILE:C	1:A:1043:THR:HG21	2.00	0.72
1:A:1062:ALA:O	1:A:1066:THR:OG1	2.06	0.72
1:A:108:PHE:HE1	1:A:194:PHE:HE1	1.37	0.72
1:A:1138:MET:O	1:A:1142:MET:HG2	1.89	0.72
1:A:1084:PHE:CD1	1:A:1085:TYR:HD1	2.06	0.72
1:A:1203:THR:HG23	1:A:1204:LEU:N	2.03	0.71
1:A:720:LEU:C	1:A:723:GLN:HE21	1.93	0.71
1:A:1122:TRP:O	1:A:1126:ILE:HG13	1.89	0.71
1:A:1161:CYS:O	1:A:1165:VAL:HG23	1.91	0.71
4:A:1306:NAG:C6	4:A:1307:NAG:C8	2.68	0.71
1:A:1131:ILE:O	1:A:1135:LEU:HG	1.90	0.71
1:A:259:PRO:O	1:A:260:TRP:CB	2.37	0.71
1:A:929:LEU:CB	1:A:1038:PHE:HE2	1.98	0.71
1:A:1228:MET:HG3	1:A:1229:TYR:N	2.04	0.71
1:A:404:ARG:HD2	1:A:567:VAL:HG23	1.72	0.71
1:A:591:VAL:HB	1:A:603:PHE:HE1	1.55	0.71
1:A:915:ASN:HA	1:A:920:VAL:CA	2.17	0.71
1:A:544:TRP:CZ2	1:A:1041:TYR:HE1	2.07	0.71
1:A:689:VAL:HG21	1:A:759:THR:HG21	1.72	0.71
1:A:1051:PHE:HB3	1:A:1084:PHE:CD2	2.25	0.71
1:A:1124:ALA:O	1:A:1128:CYS:HB2	1.91	0.71
1:A:631:MET:SD	1:A:1208:GLY:HA3	2.30	0.70
1:A:754:MET:N	1:A:755:PRO:HD3	2.05	0.70
1:A:856:VAL:C	1:A:1048:SER:HB3	2.11	0.70
1:A:1156:ASN:HB3	1:A:1228:MET:HE1	1.73	0.70
1:A:1130:THR:CG2	1:A:1168:CYS:SG	2.79	0.70
1:A:1106:LEU:CD2	1:A:1131:ILE:HD13	2.22	0.70
1:A:824:SER:CB	1:A:1188:GLU:OE1	2.40	0.70
1:A:1133:MET:HG2	1:A:1239:HIS:CG	2.24	0.70
1:A:386:SER:O	1:A:390:LEU:HD12	1.90	0.70
1:A:406:GLU:OE2	1:A:567:VAL:CG1	2.40	0.70
1:A:506:TYR:HB3	1:A:528:LEU:HD13	1.74	0.70

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:684:LEU:CD1	1:A:728:LEU:CD2	2.70	0.69
5:A:1312:NAG:H62	5:A:1313:NAG:N2	2.06	0.69
1:A:635:ILE:HG21	1:A:690:ILE:CD1	2.09	0.69
1:A:1138:MET:CE	1:A:1138:MET:HA	2.22	0.69
1:A:751:LEU:O	1:A:755:PRO:CD	2.41	0.69
1:A:730:GLU:HG2	1:A:1112:VAL:HG21	1.73	0.69
5:A:1313:NAG:H4	5:A:1314:BMA:O2	1.93	0.69
1:A:653:LYS:HB2	1:A:682:LEU:HD23	1.75	0.69
1:A:704:ILE:HA	1:A:708:ALA:HB3	1.75	0.69
1:A:1084:PHE:HZ	1:A:1085:TYR:HE1	1.38	0.68
1:A:524:ASN:HD22	2:A:1304:NAG:C1	2.02	0.68
1:A:591:VAL:HB	1:A:603:PHE:CE1	2.27	0.68
1:A:692:PHE:CZ	1:A:713:GLU:CA	2.76	0.68
1:A:1203:THR:CG2	1:A:1204:LEU:N	2.55	0.68
1:A:656:LEU:CG	1:A:685:ILE:HG13	2.18	0.68
1:A:1110:PHE:O	1:A:1114:MET:CG	2.39	0.68
1:A:752:SER:O	1:A:755:PRO:CG	2.41	0.68
1:A:924:PHE:CA	1:A:925:ASN:CB	2.71	0.68
1:A:1047:THR:HG22	1:A:1048:SER:N	2.09	0.68
1:A:1065:VAL:O	1:A:1068:THR:CG2	2.36	0.68
1:A:722:GLN:HE21	1:A:1116:LEU:HD11	1.57	0.68
1:A:656:LEU:HD13	1:A:682:LEU:HD12	1.75	0.68
1:A:1110:PHE:CE2	1:A:1124:ALA:HB1	2.29	0.68
1:A:158:ASN:CG	3:A:1303:NAG:C1	2.60	0.68
1:A:544:TRP:CZ2	1:A:1041:TYR:CE1	2.82	0.68
1:A:692:PHE:HE1	1:A:713:GLU:HA	1.53	0.68
1:A:1135:LEU:HB3	1:A:1139:PHE:HE2	1.59	0.67
1:A:662:LEU:HG	1:A:663:ILE:N	2.07	0.67
1:A:1160:SER:HB2	1:A:1232:MET:SD	2.34	0.67
1:A:228:ASP:HA	1:A:246:VAL:HG13	1.74	0.67
1:A:407:GLN:HB3	1:A:604:THR:CG2	2.24	0.67
1:A:607:ARG:HG2	1:A:611:ASP:OD1	1.93	0.67
1:A:648:LEU:CD1	1:A:763:PHE:CD1	2.74	0.67
1:A:692:PHE:HZ	1:A:713:GLU:CA	2.08	0.67
1:A:762:LEU:O	1:A:766:LEU:HG	1.95	0.67
1:A:878:SER:C	1:A:1043:THR:HG21	2.13	0.67
5:A:1312:NAG:C6	5:A:1313:NAG:C1	2.73	0.67
1:A:401:PRO:HB2	1:A:569:ASN:OD1	1.94	0.67
1:A:1009:PRO:O	1:A:1010:LYS:O	2.11	0.67
1:A:724:LEU:HD11	1:A:1166:GLU:HG2	0.84	0.67
1:A:1229:TYR:O	1:A:1233:VAL:CG2	2.43	0.67

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:704:ILE:HA	1:A:708:ALA:CB	2.24	0.67
1:A:755:PRO:CD	1:A:756:ALA:N	2.51	0.67
4:A:1306:NAG:C6	4:A:1307:NAG:H82	2.24	0.67
1:A:1098:THR:CG2	1:A:1154:LEU:HD21	2.13	0.67
1:A:1133:MET:CG	1:A:1239:HIS:CG	2.77	0.67
1:A:685:ILE:N	1:A:685:ILE:HD13	2.09	0.67
1:A:751:LEU:C	1:A:751:LEU:HD23	2.15	0.67
1:A:1080:PRO:HG2	1:A:1085:TYR:CE2	2.29	0.67
1:A:1062:ALA:HB2	1:A:1078:VAL:CG1	2.24	0.66
1:A:108:PHE:CE1	1:A:194:PHE:HE1	2.12	0.66
1:A:401:PRO:CD	1:A:571:TYR:HE1	1.96	0.66
1:A:950:VAL:O	1:A:951:LYS:CB	2.43	0.66
1:A:399:PHE:HE2	1:A:1022:ALA:HA	1.60	0.66
1:A:635:ILE:HG13	1:A:1204:LEU:HD13	1.77	0.66
1:A:691:PRO:HD2	1:A:692:PHE:H	1.60	0.66
1:A:337:ARG:CA	1:A:718:GLU:HG3	2.23	0.66
1:A:1133:MET:HG3	1:A:1239:HIS:CD2	2.22	0.66
1:A:630:ILE:HG22	1:A:634:TYR:HE2	1.59	0.66
1:A:688:GLU:C	1:A:691:PRO:HD2	1.97	0.66
1:A:1022:ALA:O	1:A:1035:ALA:N	2.27	0.66
2:A:1305:NAG:O7	2:A:1305:NAG:O3	2.11	0.66
1:A:703:PHE:C	1:A:708:ALA:HB2	2.15	0.66
1:A:627:SER:OG	1:A:1212:VAL:CG2	2.43	0.66
1:A:757:VAL:O	1:A:760:PHE:HB2	1.96	0.66
1:A:916:ASN:N	1:A:919:LEU:O	2.23	0.66
1:A:1207:PHE:O	1:A:1210:ILE:HG22	1.96	0.66
1:A:1210:ILE:HG23	1:A:1211:VAL:N	2.11	0.66
1:A:656:LEU:HD12	1:A:682:LEU:HD12	1.77	0.66
1:A:1080:PRO:HG2	1:A:1085:TYR:HE2	1.61	0.65
1:A:1114:MET:CE	1:A:1124:ALA:HB2	2.27	0.65
1:A:690:ILE:O	1:A:694:VAL:HG23	1.96	0.65
1:A:472:LEU:HD22	1:A:538:GLY:HA3	1.78	0.65
1:A:627:SER:OG	1:A:1212:VAL:HG22	1.96	0.65
1:A:1133:MET:HE3	1:A:1239:HIS:HB2	1.79	0.65
1:A:688:GLU:CB	1:A:724:LEU:HD23	2.25	0.65
1:A:618:ASP:O	1:A:621:VAL:HG23	1.96	0.65
1:A:723:GLN:NE2	1:A:724:LEU:HB2	2.12	0.65
4:A:1306:NAG:O6	4:A:1307:NAG:C8	2.45	0.65
1:A:674:VAL:O	1:A:678:ILE:HG13	1.97	0.65
1:A:678:ILE:HG12	1:A:748:LEU:CD2	2.27	0.65
1:A:384:PRO:O	1:A:385:SER:OG	2.14	0.65

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:474:PRO:O	1:A:476:ASN:N	2.30	0.65
1:A:723:GLN:HG2	1:A:1173:ARG:HG3	1.79	0.64
1:A:1127:MET:HE2	1:A:1168:CYS:HB3	1.72	0.64
1:A:395:PHE:CD2	1:A:1081:TYR:HD2	2.15	0.64
1:A:630:ILE:O	1:A:634:TYR:HD2	1.79	0.64
1:A:674:VAL:O	1:A:678:ILE:CD1	2.46	0.64
4:A:1306:NAG:H62	4:A:1307:NAG:H82	1.80	0.64
1:A:381:TRP:CD1	1:A:382:SER:N	2.64	0.64
1:A:591:VAL:CB	1:A:603:PHE:CE1	2.80	0.64
1:A:611:ASP:O	1:A:615:ARG:HB2	1.96	0.64
1:A:664:VAL:CG1	1:A:669:ALA:HB3	2.28	0.64
1:A:1082:SER:O	1:A:1084:PHE:HD1	1.79	0.64
1:A:686:VAL:HG11	1:A:690:ILE:HD11	1.74	0.64
1:A:1167:PHE:CE2	1:A:1237:ALA:CA	2.79	0.64
1:A:640:GLY:O	1:A:642:MET:N	2.30	0.64
1:A:653:LYS:HA	1:A:682:LEU:HG	1.80	0.64
1:A:684:LEU:HD21	1:A:728:LEU:HD11	1.69	0.64
1:A:684:LEU:HD22	1:A:728:LEU:HD22	1.75	0.64
1:A:407:GLN:O	1:A:604:THR:OG1	2.16	0.63
1:A:686:VAL:O	1:A:690:ILE:CG1	2.44	0.63
1:A:1046:GLN:HB3	1:A:1050:ASP:CG	2.18	0.63
1:A:1062:ALA:CB	1:A:1078:VAL:HG11	2.29	0.63
1:A:1045:LEU:N	1:A:1051:PHE:CZ	2.67	0.63
1:A:423:TYR:CE1	1:A:424:PRO:HB3	2.33	0.63
1:A:607:ARG:O	1:A:611:ASP:HB2	1.99	0.63
1:A:879:ILE:O	1:A:1043:THR:HG21	1.92	0.63
1:A:252:GLN:O	1:A:254:PRO:HD3	1.99	0.63
1:A:692:PHE:CZ	1:A:713:GLU:CB	2.75	0.63
1:A:885:ALA:O	1:A:1079:PHE:HB2	1.99	0.63
1:A:1145:TRP:O	1:A:1147:ILE:N	2.31	0.63
1:A:1062:ALA:CB	1:A:1078:VAL:CG1	2.77	0.63
1:A:1085:TYR:O	1:A:1086:VAL:C	2.37	0.63
1:A:1137:ASN:HB3	1:A:1235:LEU:HD13	1.80	0.63
1:A:403:PHE:HE2	1:A:566:PRO:CG	2.11	0.63
1:A:401:PRO:CG	1:A:571:TYR:CE1	2.79	0.63
1:A:686:VAL:O	1:A:690:ILE:N	2.30	0.63
1:A:724:LEU:CD1	1:A:1166:GLU:HA	2.29	0.62
1:A:630:ILE:HA	1:A:633:LEU:HD12	1.81	0.62
1:A:1171:ILE:HA	1:A:1194:MET:HG2	1.81	0.62
1:A:752:SER:CA	1:A:755:PRO:CG	2.78	0.62
1:A:166:PRO:O	1:A:167:SER:OG	2.17	0.62

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:754:MET:N	1:A:755:PRO:CD	2.62	0.62
1:A:630:ILE:CG2	1:A:634:TYR:HE2	2.12	0.62
1:A:732:ALA:HB3	1:A:749:GLY:HA2	1.82	0.62
1:A:1177:VAL:O	1:A:1186:ARG:NH1	2.32	0.62
1:A:1229:TYR:CD1	1:A:1233:VAL:CG2	2.82	0.62
1:A:875:TYR:O	1:A:876:PHE:O	2.18	0.62
1:A:401:PRO:HG3	1:A:571:TYR:CE1	2.29	0.61
1:A:1133:MET:CE	1:A:1239:HIS:CE1	2.74	0.61
1:A:228:ASP:HB2	1:A:246:VAL:CG1	2.29	0.61
1:A:622:PHE:O	1:A:626:ILE:HG13	2.01	0.61
1:A:591:VAL:CB	1:A:603:PHE:HE1	2.12	0.61
1:A:1213:LEU:C	1:A:1227:ARG:HH21	2.03	0.61
1:A:406:GLU:OE2	1:A:567:VAL:HG13	2.01	0.61
1:A:1199:PHE:O	1:A:1203:THR:HG22	2.00	0.61
1:A:1210:ILE:HG13	1:A:1214:ALA:CB	2.30	0.61
1:A:386:SER:O	1:A:390:LEU:HB2	2.01	0.61
1:A:680:LEU:O	1:A:683:THR:HG22	2.00	0.61
1:A:684:LEU:HD21	1:A:728:LEU:HD21	1.72	0.61
1:A:1194:MET:O	1:A:1198:VAL:HG23	2.00	0.61
1:A:431:PHE:CE2	1:A:510:HIS:HD2	2.19	0.61
1:A:635:ILE:CG1	1:A:1204:LEU:HD13	2.31	0.61
1:A:1021:SER:O	1:A:1022:ALA:HB3	2.01	0.61
1:A:1092:LEU:HD13	1:A:1093:THR:N	2.15	0.61
1:A:1186:ARG:HG3	1:A:1187:ALA:N	2.15	0.61
1:A:631:MET:CE	1:A:1208:GLY:N	2.63	0.61
1:A:723:GLN:O	1:A:727:VAL:HG23	2.01	0.60
1:A:752:SER:HA	1:A:755:PRO:HG3	1.82	0.60
1:A:1046:GLN:CG	1:A:1050:ASP:CG	2.70	0.60
4:A:1306:NAG:O6	4:A:1307:NAG:H82	2.02	0.60
1:A:724:LEU:HD13	1:A:1166:GLU:HA	1.82	0.60
1:A:1140:GLY:O	1:A:1144:LEU:CA	2.49	0.60
1:A:663:ILE:HD13	1:A:750:ALA:HB1	1.84	0.60
1:A:1114:MET:HE2	1:A:1124:ALA:HB2	1.83	0.60
1:A:1142:MET:HE1	1:A:1153:SER:OG	2.00	0.60
1:A:476:ASN:OD1	1:A:478:ASN:HB2	2.02	0.60
1:A:656:LEU:CD1	1:A:682:LEU:CD1	2.80	0.60
1:A:1055:LEU:HD13	1:A:1056:LYS:N	2.17	0.60
1:A:649:LEU:O	1:A:652:SER:N	2.35	0.60
1:A:882:TYR:CB	1:A:1082:SER:CB	2.64	0.60
1:A:764:ALA:O	1:A:768:VAL:HG23	2.02	0.60
1:A:1209:GLY:O	1:A:1212:VAL:N	2.35	0.59

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:373:VAL:O	1:A:375:THR:N	2.35	0.59
1:A:684:LEU:CD2	1:A:728:LEU:HD11	2.27	0.59
1:A:1046:GLN:HB3	1:A:1050:ASP:CB	2.32	0.59
1:A:691:PRO:O	1:A:695:LEU:HG	2.02	0.59
1:A:752:SER:HA	1:A:755:PRO:HG2	1.84	0.59
1:A:607:ARG:CG	1:A:611:ASP:OD1	2.50	0.59
1:A:924:PHE:CB	1:A:925:ASN:CA	2.80	0.59
1:A:1080:PRO:HB2	1:A:1085:TYR:CZ	2.37	0.59
1:A:1229:TYR:HD1	1:A:1233:VAL:CG2	2.16	0.59
1:A:122:ASN:ND2	1:A:217[B]:MET:CE	2.66	0.59
1:A:163:VAL:HA	1:A:242:ASP:O	2.01	0.59
1:A:676:SER:HB3	1:A:1225:TYR:HH	1.60	0.59
1:A:881:GLN:CB	1:A:1041:TYR:CB	2.79	0.59
1:A:1106:LEU:HD23	1:A:1131:ILE:HD13	1.84	0.59
1:A:656:LEU:HA	1:A:751:LEU:HG	1.84	0.59
1:A:1091:TYR:HA	1:A:1094:ILE:CG1	2.31	0.59
1:A:1191:LEU:O	1:A:1195:GLY:N	2.36	0.59
1:A:1239:HIS:CE1	1:A:1243:PHE:CB	2.86	0.59
1:A:382:SER:HB3	1:A:1086:VAL:O	2.03	0.59
1:A:732:ALA:CB	1:A:749:GLY:HA2	2.31	0.59
1:A:1149:LEU:HA	1:A:1153:SER:CB	2.33	0.59
1:A:985:GLU:HA	1:A:989:ARG:H	1.68	0.59
1:A:1133:MET:HE3	1:A:1239:HIS:CG	2.35	0.58
1:A:363:ALA:O	1:A:367:GLY:N	2.27	0.58
1:A:1070:GLY:O	1:A:1071:ILE:CB	2.50	0.58
1:A:1210:ILE:HD12	1:A:1214:ALA:HB2	1.84	0.58
1:A:395:PHE:CD2	1:A:1081:TYR:CD2	2.91	0.58
1:A:637:LEU:HA	1:A:641:HIS:HA	1.84	0.58
1:A:648:LEU:CD1	1:A:763:PHE:HA	2.33	0.58
1:A:1115:VAL:HG12	1:A:1115:VAL:O	2.02	0.58
1:A:648:LEU:HD12	1:A:763:PHE:HD1	1.65	0.58
1:A:1055:LEU:C	1:A:1055:LEU:HD22	2.24	0.58
1:A:1112:VAL:HA	1:A:1115:VAL:HG23	1.85	0.58
1:A:752:SER:O	1:A:755:PRO:HG2	2.03	0.58
1:A:1059:ARG:CG	1:A:1059:ARG:HH11	2.14	0.58
1:A:1084:PHE:CZ	1:A:1085:TYR:CD1	2.84	0.58
1:A:1159:MET:HE1	1:A:1163:ILE:HD11	1.85	0.58
5:A:1313:NAG:O3	5:A:1314:BMA:H2	2.03	0.58
1:A:241:GLN:NE2	1:A:518:ARG:NH2	2.38	0.58
1:A:659:ALA:HA	1:A:662:LEU:HD21	1.71	0.58
1:A:515:TYR:CE1	1:A:526:THR:HG23	2.38	0.58

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1085:TYR:C	1:A:1087:PHE:N	2.57	0.58
1:A:751:LEU:C	1:A:755:PRO:HG3	2.20	0.58
1:A:656:LEU:HB3	1:A:751:LEU:CD2	2.31	0.57
1:A:1082:SER:CB	1:A:1084:PHE:CE1	2.86	0.57
1:A:250:LYS:CB	1:A:251:PRO:HD3	2.24	0.57
1:A:402:PHE:O	1:A:403:PHE:CD1	2.57	0.57
1:A:664:VAL:HG13	1:A:669:ALA:HB3	1.85	0.57
1:A:723:GLN:CD	1:A:1169:SER:HB2	2.17	0.57
1:A:252:GLN:C	1:A:254:PRO:HD3	2.25	0.57
1:A:688:GLU:O	1:A:691:PRO:CG	2.51	0.57
1:A:1203:THR:CG2	1:A:1204:LEU:H	2.18	0.57
1:A:257:PRO:O	1:A:258:ALA:HB2	2.05	0.57
1:A:479:CYS:O	1:A:537:PHE:HB3	2.05	0.57
1:A:557:ASN:ND2	4:A:1306:NAG:O5	2.38	0.57
1:A:1055:LEU:C	1:A:1055:LEU:HD13	2.25	0.57
1:A:656:LEU:HD12	1:A:682:LEU:CD1	2.34	0.57
1:A:757:VAL:HA	1:A:760:PHE:HD2	1.70	0.57
1:A:720:LEU:O	1:A:723:GLN:CG	2.51	0.57
1:A:1062:ALA:CB	1:A:1078:VAL:CG2	2.82	0.56
1:A:393:GLU:O	1:A:396:ASP:HB2	2.06	0.56
1:A:1062:ALA:CB	1:A:1078:VAL:HG21	2.35	0.56
1:A:252:GLN:H	1:A:253:PRO:HD3	1.70	0.56
1:A:631:MET:SD	1:A:1207:PHE:C	2.83	0.56
1:A:857:ASP:HA	1:A:1048:SER:HB3	1.87	0.56
1:A:676:SER:CB	1:A:1225:TYR:CZ	2.87	0.56
1:A:1110:PHE:HD2	1:A:1128:CYS:HG	1.54	0.56
1:A:1156:ASN:ND2	1:A:1228:MET:CE	2.68	0.56
1:A:635:ILE:HG22	1:A:649:LEU:HD11	1.86	0.56
1:A:724:LEU:HD21	1:A:1170:HIS:HE1	1.66	0.56
4:A:1306:NAG:C6	4:A:1307:NAG:H83	2.36	0.56
1:A:924:PHE:CB	1:A:925:ASN:HA	2.36	0.56
1:A:1048:SER:HA	1:A:1088:TYR:CE2	2.41	0.56
1:A:396:ASP:HA	1:A:400:GLY:N	2.20	0.56
1:A:396:ASP:C	1:A:400:GLY:H	2.06	0.56
1:A:723:GLN:HE22	1:A:724:LEU:HB2	1.71	0.56
1:A:1059:ARG:HG3	1:A:1059:ARG:NH1	2.09	0.56
1:A:441:HIS:CE1	1:A:496:ASP:OD1	2.59	0.56
1:A:655:SER:HB2	1:A:758:HIS:CD2	2.40	0.56
1:A:879:ILE:HA	1:A:1043:THR:HG23	1.85	0.56
1:A:1048:SER:O	1:A:1052:ILE:HD12	2.06	0.56
1:A:191:GLU:OE2	1:A:195:ASN:ND2	2.39	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1046:GLN:HG2	1:A:1050:ASP:CG	2.25	0.55
1:A:1106:LEU:HD22	1:A:1131:ILE:HD13	1.87	0.55
1:A:1117:LEU:CD2	1:A:1123:SER:HB3	2.36	0.55
1:A:845:VAL:CB	1:A:1136:VAL:HG12	2.36	0.55
1:A:1228:MET:HG3	1:A:1229:TYR:H	1.71	0.55
1:A:724:LEU:HD21	1:A:1166:GLU:CD	2.26	0.55
1:A:754:MET:O	1:A:757:VAL:HG22	2.07	0.55
4:A:1306:NAG:H62	4:A:1307:NAG:N2	2.21	0.55
1:A:398:HIS:CB	1:A:399:PHE:CE1	2.86	0.55
1:A:431:PHE:CZ	1:A:510:HIS:HD2	2.25	0.55
1:A:627:SER:O	1:A:631:MET:HG2	2.07	0.55
1:A:664:VAL:CG2	1:A:747:PHE:CB	2.85	0.55
1:A:92:GLN:HE22	1:A:526:THR:HB	1.71	0.55
1:A:1224:PHE:HA	1:A:1227:ARG:HB2	1.88	0.55
1:A:1100:PHE:O	1:A:1104:VAL:HG23	2.07	0.55
1:A:196:LYS:HG3	1:A:204:THR:HG1	1.64	0.55
1:A:491:SER:OG	1:A:494:VAL:HG23	2.06	0.55
1:A:407:GLN:O	1:A:604:THR:N	2.40	0.55
1:A:381:TRP:HD1	1:A:382:SER:H	1.55	0.55
1:A:444:LEU:HD23	1:A:492:HIS:CG	2.42	0.55
1:A:185:ASN:ND2	1:A:188:ASN:ND2	2.55	0.55
1:A:674:VAL:O	1:A:678:ILE:HD12	2.06	0.55
1:A:1202:ILE:HG21	1:A:1237:ALA:CB	2.34	0.54
1:A:653:LYS:HG3	1:A:654:VAL:N	2.23	0.54
1:A:732:ALA:HB1	1:A:749:GLY:N	2.22	0.54
1:A:1055:LEU:CD2	1:A:1085:TYR:OH	2.47	0.54
1:A:1135:LEU:CD2	1:A:1161:CYS:SG	2.92	0.54
1:A:1239:HIS:O	1:A:1243:PHE:N	2.32	0.54
1:A:762:LEU:O	1:A:766:LEU:CG	2.55	0.54
1:A:1142:MET:CE	1:A:1148:SER:C	2.71	0.54
1:A:1229:TYR:HD1	1:A:1233:VAL:HG21	1.69	0.54
1:A:650:VAL:O	1:A:654:VAL:CG2	2.52	0.54
1:A:674:VAL:O	1:A:678:ILE:CG1	2.56	0.54
1:A:753:VAL:O	1:A:757:VAL:HG13	2.07	0.54
1:A:758:HIS:ND1	1:A:762:LEU:HD12	2.23	0.54
1:A:1167:PHE:CE2	1:A:1237:ALA:HB2	2.43	0.54
1:A:1137:ASN:HB3	1:A:1235:LEU:CD1	2.37	0.54
1:A:406:GLU:OE2	1:A:567:VAL:HG11	2.07	0.54
1:A:409:ILE:CG2	1:A:872:MET:CB	2.83	0.54
1:A:656:LEU:HD11	1:A:685:ILE:HG21	1.87	0.54
1:A:250:LYS:CB	1:A:251:PRO:CD	2.60	0.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1133:MET:HG2	1:A:1239:HIS:HE2	1.51	0.54
1:A:1200:SER:O	1:A:1203:THR:HG22	2.07	0.54
1:A:252:GLN:N	1:A:253:PRO:HD3	2.22	0.54
1:A:1109:ILE:O	1:A:1113:THR:HG23	2.07	0.54
1:A:1084:PHE:HE1	1:A:1085:TYR:CE1	2.08	0.54
1:A:1167:PHE:CE2	1:A:1237:ALA:CB	2.91	0.54
1:A:691:PRO:CD	1:A:692:PHE:H	2.21	0.54
1:A:704:ILE:CA	1:A:708:ALA:HB3	2.38	0.54
1:A:733:PRO:C	1:A:735:MET:H	2.11	0.54
1:A:1133:MET:CE	1:A:1239:HIS:CB	2.86	0.53
1:A:1167:PHE:HE2	1:A:1237:ALA:CA	2.19	0.53
1:A:396:ASP:CB	1:A:400:GLY:HA2	2.38	0.53
1:A:398:HIS:HB3	1:A:399:PHE:CD1	2.42	0.53
1:A:684:LEU:CG	1:A:728:LEU:HD22	2.38	0.53
1:A:523:LEU:CD1	1:A:1016:HIS:N	2.71	0.53
1:A:824:SER:CB	1:A:1188:GLU:CD	2.77	0.53
5:A:1312:NAG:H61	5:A:1313:NAG:C1	2.38	0.53
1:A:649:LEU:HD22	1:A:686:VAL:HG13	1.90	0.53
1:A:1184:VAL:CG1	1:A:1184:VAL:O	2.53	0.53
1:A:1171:ILE:HG23	1:A:1191:LEU:HD22	1.90	0.53
1:A:93:PHE:CE1	1:A:175:LEU:HD13	2.44	0.53
1:A:686:VAL:HG12	1:A:690:ILE:CG1	2.34	0.53
1:A:1021:SER:O	1:A:1022:ALA:HB2	2.08	0.53
1:A:632:PHE:HZ	1:A:650:VAL:CG2	2.11	0.53
1:A:915:ASN:CB	1:A:919:LEU:C	2.77	0.53
1:A:1234:LEU:O	1:A:1234:LEU:HD22	2.09	0.53
1:A:632:PHE:CZ	1:A:650:VAL:HG22	2.44	0.53
1:A:1127:MET:HE1	1:A:1130:THR:HG21	1.89	0.53
1:A:758:HIS:O	1:A:762:LEU:HB2	2.09	0.53
1:A:387:GLN:O	1:A:391:GLU:HB2	2.10	0.52
1:A:635:ILE:HG22	1:A:649:LEU:CD1	2.39	0.52
1:A:1234:LEU:O	1:A:1238:THR:HG23	2.09	0.52
1:A:861:ASP:CB	1:A:1219:GLN:CB	2.87	0.52
1:A:683:THR:HG23	1:A:684:LEU:N	2.25	0.52
1:A:478:ASN:CG	5:A:1312:NAG:C1	2.78	0.52
1:A:688:GLU:HA	1:A:691:PRO:HG3	1.91	0.52
1:A:924:PHE:CB	1:A:925:ASN:CB	2.87	0.52
1:A:164:GLU:OE1	1:A:241:GLN:O	2.26	0.52
1:A:1120:GLU:O	1:A:1124:ALA:HB3	2.10	0.52
1:A:1239:HIS:NE2	1:A:1243:PHE:CB	2.73	0.52
1:A:724:LEU:O	1:A:728:LEU:CG	2.53	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1047:THR:HG22	1:A:1048:SER:H	1.75	0.52
1:A:347:VAL:C	1:A:349:ASN:H	2.12	0.52
1:A:685:ILE:O	1:A:689:VAL:CB	2.57	0.52
1:A:915:ASN:CB	1:A:920:VAL:N	2.73	0.52
1:A:1068:THR:CG2	1:A:1069:MET:N	2.73	0.52
1:A:1210:ILE:CG2	1:A:1211:VAL:N	2.73	0.52
1:A:402:PHE:O	1:A:403:PHE:CG	2.63	0.52
1:A:631:MET:CG	1:A:1208:GLY:HA2	2.36	0.52
1:A:824:SER:HA	1:A:1188:GLU:CD	2.30	0.52
1:A:1063:SER:O	1:A:1067:GLU:HB2	2.10	0.52
1:A:1210:ILE:O	1:A:1214:ALA:N	2.43	0.52
1:A:690:ILE:N	1:A:691:PRO:CD	2.73	0.52
1:A:656:LEU:HB3	1:A:751:LEU:HD11	1.91	0.52
1:A:1091:TYR:HA	1:A:1094:ILE:HG13	1.90	0.51
1:A:1138:MET:SD	1:A:1138:MET:N	2.83	0.51
1:A:1167:PHE:HE2	1:A:1237:ALA:HB2	1.74	0.51
1:A:377:PRO:CB	1:A:378:VAL:HA	2.39	0.51
1:A:1138:MET:HE2	1:A:1138:MET:HA	1.92	0.51
1:A:627:SER:CB	1:A:1211:VAL:HB	2.40	0.51
1:A:1047:THR:CG2	1:A:1048:SER:N	2.73	0.51
1:A:856:VAL:C	1:A:1048:SER:OG	2.49	0.51
1:A:1068:THR:CG2	1:A:1069:MET:H	2.17	0.51
1:A:915:ASN:CB	1:A:919:LEU:O	2.59	0.51
1:A:1044:VAL:HB	1:A:1051:PHE:CE1	2.45	0.51
1:A:584:GLU:OE2	1:A:606:GLU:CB	2.56	0.51
1:A:1080:PRO:HB2	1:A:1085:TYR:OH	2.10	0.51
1:A:1119:CYS:CB	1:A:1122:TRP:CB	2.89	0.51
1:A:723:GLN:NE2	1:A:724:LEU:N	2.59	0.51
1:A:751:LEU:HD23	1:A:751:LEU:O	2.11	0.51
1:A:1084:PHE:CD1	1:A:1085:TYR:N	2.78	0.51
1:A:371:VAL:C	1:A:373:VAL:N	2.64	0.51
1:A:401:PRO:CB	1:A:569:ASN:ND2	2.58	0.51
1:A:1210:ILE:HG23	1:A:1211:VAL:H	1.76	0.51
1:A:724:LEU:HD23	1:A:1170:HIS:NE2	2.17	0.51
1:A:1209:GLY:CA	1:A:1230:LEU:HD13	2.30	0.51
1:A:752:SER:C	1:A:755:PRO:CG	2.78	0.51
1:A:544:TRP:HZ2	1:A:1041:TYR:CE1	2.26	0.51
1:A:923:ILE:CA	1:A:1042:HIS:HB3	2.41	0.51
1:A:474:PRO:C	1:A:476:ASN:N	2.62	0.50
1:A:523:LEU:HD11	1:A:1016:HIS:N	2.26	0.50
1:A:1121:LEU:O	1:A:1125:VAL:HB	2.11	0.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1133:MET:CE	1:A:1239:HIS:HB2	2.41	0.50
1:A:114:SER:O	1:A:117:GLN:HG3	2.11	0.50
1:A:1133:MET:HE3	1:A:1239:HIS:CB	2.41	0.50
1:A:676:SER:OG	1:A:1225:TYR:CE1	2.64	0.50
1:A:423:TYR:CZ	1:A:424:PRO:HB3	2.46	0.50
1:A:611:ASP:O	1:A:615:ARG:CB	2.60	0.50
1:A:959:VAL:CA	1:A:984:PRO:N	2.74	0.50
1:A:1153:SER:HA	1:A:1156:ASN:HB2	1.94	0.50
1:A:1229:TYR:HE1	1:A:1233:VAL:HG21	1.70	0.50
1:A:749:GLY:O	1:A:752:SER:CB	2.60	0.50
1:A:1111:LEU:O	1:A:1115:VAL:HG23	2.11	0.50
1:A:384:PRO:HA	1:A:389:ARG:CG	2.38	0.50
1:A:403:PHE:CD2	1:A:566:PRO:CB	2.77	0.50
1:A:515:TYR:CE1	1:A:526:THR:HG22	2.45	0.50
1:A:1202:ILE:O	1:A:1205:THR:OG1	2.21	0.50
1:A:1167:PHE:CD2	1:A:1237:ALA:HA	2.47	0.50
1:A:663:ILE:HD11	1:A:754:MET:HG3	1.93	0.50
1:A:656:LEU:CA	1:A:751:LEU:HG	2.41	0.50
1:A:659:ALA:O	1:A:663:ILE:HG13	2.12	0.50
1:A:719:THR:O	1:A:723:GLN:HG3	2.12	0.50
1:A:1115:VAL:O	1:A:1116:LEU:HG	2.12	0.49
1:A:726:ARG:HB3	1:A:1112:VAL:HG13	1.93	0.49
1:A:653:LYS:C	1:A:682:LEU:HD21	2.30	0.49
1:A:686:VAL:CG1	1:A:690:ILE:CG1	2.90	0.49
1:A:399:PHE:CE2	1:A:1022:ALA:HA	2.45	0.49
1:A:1152:VAL:HG11	1:A:1225:TYR:HD2	1.76	0.49
1:A:1223:ILE:O	1:A:1227:ARG:CG	2.61	0.49
1:A:398:HIS:C	1:A:399:PHE:CG	2.86	0.49
1:A:402:PHE:C	1:A:403:PHE:HD1	2.15	0.49
1:A:1117:LEU:HD13	1:A:1173:ARG:HD3	1.93	0.49
1:A:631:MET:CE	1:A:1208:GLY:H	2.26	0.49
1:A:423:TYR:CG	1:A:424:PRO:HA	2.47	0.49
1:A:627:SER:HB3	1:A:1211:VAL:HB	1.93	0.49
1:A:729:GLY:O	1:A:733:PRO:N	2.45	0.49
1:A:1223:ILE:O	1:A:1227:ARG:HG2	2.11	0.49
1:A:1092:LEU:C	1:A:1094:ILE:H	2.16	0.49
4:A:1306:NAG:O6	4:A:1307:NAG:H83	2.12	0.49
1:A:344:SER:O	1:A:348:ARG:N	2.41	0.49
1:A:381:TRP:CD1	1:A:381:TRP:C	2.85	0.49
1:A:35:TYR:CZ	1:A:38:LYS:HD2	2.48	0.49
1:A:337:ARG:HA	1:A:718:GLU:CD	2.32	0.49

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1091:TYR:HA	1:A:1094:ILE:HG12	1.94	0.48
1:A:1130:THR:HA	1:A:1133:MET:HB3	1.95	0.48
1:A:431:PHE:CZ	1:A:510:HIS:CD2	3.00	0.48
1:A:618:ASP:O	1:A:621:VAL:CG2	2.60	0.48
1:A:656:LEU:HB3	1:A:682:LEU:CD1	2.42	0.48
1:A:885:ALA:O	1:A:1079:PHE:CA	2.61	0.48
1:A:382:SER:HA	1:A:1090:GLN:HG3	1.93	0.48
1:A:985:GLU:CB	1:A:989:ARG:CB	2.91	0.48
1:A:1071:ILE:C	1:A:1072:ASN:O	2.43	0.48
1:A:402:PHE:C	1:A:403:PHE:CD1	2.87	0.48
1:A:720:LEU:HD21	1:A:1170:HIS:O	2.14	0.48
1:A:1062:ALA:C	1:A:1078:VAL:HG21	2.32	0.48
1:A:1093:THR:HG22	1:A:1093:THR:O	2.13	0.48
1:A:1138:MET:CE	1:A:1138:MET:CA	2.91	0.48
1:A:1178:SER:CB	1:A:1186:ARG:CZ	2.89	0.48
1:A:382:SER:O	1:A:383:ALA:HB3	2.12	0.48
1:A:421:GLN:HB3	1:A:426:GLY:HA2	1.96	0.48
1:A:444:LEU:HD23	1:A:492:HIS:CE1	2.49	0.48
1:A:544:TRP:O	1:A:879:ILE:CB	2.62	0.48
1:A:598:ASN:ND2	2:A:1310:NAG:C2	2.70	0.48
1:A:404:ARG:HG3	1:A:567:VAL:O	2.13	0.48
1:A:474:PRO:C	1:A:476:ASN:H	2.18	0.48
1:A:1060:LEU:O	1:A:1063:SER:OG	2.25	0.48
1:A:1081:TYR:CD1	1:A:1081:TYR:C	2.86	0.48
1:A:472:LEU:HB3	1:A:476:ASN:HB3	1.96	0.47
1:A:690:ILE:HG22	1:A:690:ILE:O	2.14	0.47
1:A:648:LEU:CB	1:A:763:PHE:CZ	2.93	0.47
1:A:1071:ILE:CG2	1:A:1072:ASN:N	2.34	0.47
1:A:1127:MET:HE3	1:A:1130:THR:CG2	2.44	0.47
1:A:108:PHE:HE1	1:A:194:PHE:CE1	2.26	0.47
1:A:684:LEU:HG	1:A:1166:GLU:CG	2.38	0.47
1:A:704:ILE:CA	1:A:708:ALA:CB	2.92	0.47
1:A:252:GLN:N	1:A:253:PRO:CD	2.78	0.47
1:A:616:GLU:O	1:A:618:ASP:N	2.48	0.47
1:A:880:SER:O	1:A:1043:THR:HG22	2.15	0.47
1:A:915:ASN:HA	1:A:921:GLN:N	2.29	0.47
1:A:653:LYS:O	1:A:653:LYS:HE3	2.13	0.47
1:A:656:LEU:CD2	1:A:685:ILE:HG13	2.45	0.47
1:A:1063:SER:O	1:A:1067:GLU:CB	2.62	0.47
1:A:1063:SER:O	1:A:1067:GLU:HG3	2.14	0.47
1:A:1149:LEU:HA	1:A:1153:SER:HB2	1.97	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1210:ILE:CD1	1:A:1214:ALA:CB	2.91	0.47
1:A:684:LEU:CD2	1:A:728:LEU:CG	2.57	0.47
1:A:1059:ARG:CG	1:A:1059:ARG:NH1	2.73	0.47
1:A:1062:ALA:O	1:A:1078:VAL:HG21	2.15	0.47
1:A:688:GLU:HB2	1:A:724:LEU:CD2	2.44	0.47
1:A:437:ILE:HD13	1:A:509:TYR:CD1	2.50	0.47
1:A:704:ILE:N	1:A:708:ALA:HB2	2.29	0.47
1:A:758:HIS:C	1:A:760:PHE:H	2.18	0.47
1:A:985:GLU:CB	1:A:986:GLY:CA	2.87	0.47
1:A:38:LYS:HB3	1:A:202:PRO:HB3	1.97	0.47
1:A:635:ILE:HG21	1:A:686:VAL:HG11	1.97	0.47
1:A:688:GLU:HA	1:A:691:PRO:CG	2.45	0.47
1:A:635:ILE:HG12	1:A:1204:LEU:CD1	2.44	0.46
1:A:1232:MET:HG3	1:A:1233:VAL:N	2.29	0.46
1:A:196:LYS:HE2	1:A:196:LYS:HB2	1.68	0.46
1:A:656:LEU:CB	1:A:751:LEU:HD11	2.45	0.46
4:A:1306:NAG:C8	4:A:1306:NAG:C1	2.86	0.46
1:A:648:LEU:CG	1:A:763:PHE:CD1	2.98	0.46
1:A:1045:LEU:HD23	1:A:1051:PHE:HZ	1.79	0.46
1:A:824:SER:HA	1:A:1188:GLU:OE2	2.16	0.46
1:A:736:PHE:O	1:A:737:LEU:O	2.33	0.46
1:A:396:ASP:HA	1:A:400:GLY:H	1.80	0.46
1:A:1167:PHE:HE2	1:A:1237:ALA:CB	2.27	0.46
1:A:476:ASN:HA	5:A:1312:NAG:H82	1.97	0.46
1:A:632:PHE:HE1	1:A:649:LEU:CB	2.28	0.46
1:A:1115:VAL:C	1:A:1116:LEU:HG	2.36	0.46
1:A:515:TYR:HE1	1:A:526:THR:CG2	2.28	0.46
1:A:656:LEU:HD22	1:A:751:LEU:CD2	2.46	0.46
1:A:401:PRO:CG	1:A:569:ASN:OD1	2.64	0.46
1:A:472:LEU:HD21	1:A:1017:ALA:HB1	1.96	0.46
1:A:885:ALA:O	1:A:1079:PHE:C	2.53	0.46
1:A:985:GLU:HA	1:A:989:ARG:CB	2.46	0.46
1:A:1048:SER:O	1:A:1052:ILE:CD1	2.63	0.46
1:A:523:LEU:CD1	1:A:1015:GLY:C	2.83	0.46
1:A:122:ASN:ND2	1:A:217[B]:MET:HE1	2.31	0.45
6:A:1325:CLR:H232	6:A:1325:CLR:H272	1.79	0.45
1:A:484:VAL:HG11	1:A:547:LEU:HD21	1.98	0.45
1:A:165:ALA:O	1:A:167:SER:N	2.50	0.45
1:A:627:SER:CB	1:A:1212:VAL:HG23	2.47	0.45
1:A:1210:ILE:CG2	1:A:1211:VAL:H	2.29	0.45
1:A:688:GLU:CB	1:A:724:LEU:CD2	2.89	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1090:GLN:C	1:A:1092:LEU:H	2.19	0.45
1:A:162:ASP:OD2	1:A:244:SER:OG	2.32	0.45
1:A:753:VAL:C	1:A:755:PRO:CD	2.85	0.45
1:A:91:LEU:HD13	1:A:101:PHE:CZ	2.52	0.45
1:A:1154:LEU:HD23	1:A:1154:LEU:HA	1.78	0.45
1:A:635:ILE:HG21	1:A:686:VAL:CG1	2.46	0.45
1:A:649:LEU:CD2	1:A:686:VAL:HG13	2.47	0.45
1:A:659:ALA:CA	1:A:662:LEU:HD21	2.36	0.45
1:A:676:SER:CB	1:A:1225:TYR:CE1	2.99	0.45
1:A:1225:TYR:HD1	1:A:1226:PHE:CG	2.35	0.45
1:A:122:ASN:CG	1:A:217[B]:MET:CE	2.85	0.45
1:A:381:TRP:C	1:A:383:ALA:H	2.19	0.45
1:A:688:GLU:CA	1:A:691:PRO:HD3	2.45	0.45
1:A:684:LEU:CG	1:A:728:LEU:CD2	2.95	0.45
1:A:1082:SER:HG	1:A:1084:PHE:HE1	1.64	0.45
1:A:1080:PRO:O	1:A:1085:TYR:CE2	2.70	0.44
1:A:135:ASN:ND2	3:A:1322:NAG:O5	2.21	0.44
1:A:404:ARG:HH11	1:A:404:ARG:CG	2.30	0.44
1:A:1053:ASP:O	1:A:1057:LYS:HD2	2.18	0.44
1:A:396:ASP:O	1:A:399:PHE:N	2.50	0.44
1:A:690:ILE:N	1:A:691:PRO:HD3	2.32	0.44
1:A:122:ASN:CG	1:A:217[B]:MET:HE3	2.38	0.44
1:A:238:CYS:O	1:A:246:VAL:HG21	2.17	0.44
1:A:382:SER:OG	1:A:1086:VAL:HG13	2.17	0.44
1:A:713:GLU:C	1:A:715:LEU:H	2.20	0.44
1:A:720:LEU:C	1:A:723:GLN:HG3	2.37	0.44
1:A:723:GLN:OE1	1:A:1169:SER:CA	2.63	0.44
1:A:396:ASP:CA	1:A:400:GLY:H	2.30	0.44
1:A:66:PHE:HB3	1:A:73:LEU:HD21	2.00	0.44
1:A:688:GLU:HB2	1:A:724:LEU:HD21	1.98	0.44
1:A:691:PRO:HB3	1:A:1197:SER:HB2	2.00	0.44
1:A:246:VAL:O	1:A:246:VAL:HG23	2.18	0.44
1:A:683:THR:CG2	1:A:684:LEU:N	2.80	0.44
1:A:1048:SER:O	1:A:1052:ILE:HG13	2.18	0.44
1:A:1117:LEU:HD23	1:A:1123:SER:HB3	2.00	0.44
1:A:885:ALA:O	1:A:1079:PHE:CB	2.65	0.44
1:A:1047:THR:CG2	1:A:1048:SER:H	2.30	0.43
1:A:1133:MET:SD	1:A:1239:HIS:ND1	2.78	0.43
1:A:444:LEU:HD23	1:A:492:HIS:CD2	2.53	0.43
1:A:653:LYS:HG3	1:A:654:VAL:H	1.82	0.43
1:A:1094:ILE:O	1:A:1098:THR:HG23	2.18	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:732:ALA:O	1:A:746:PHE:HA	2.17	0.43
1:A:1044:VAL:O	1:A:1045:LEU:C	2.56	0.43
1:A:1198:VAL:O	1:A:1202:ILE:HB	2.19	0.43
1:A:878:SER:C	1:A:1043:THR:CG2	2.86	0.43
1:A:1156:ASN:HD22	1:A:1228:MET:CE	2.30	0.43
1:A:122:ASN:ND2	1:A:217[B]:MET:HE3	2.34	0.43
1:A:168:SER:C	1:A:170:ASP:H	2.20	0.43
1:A:749:GLY:O	1:A:752:SER:HB2	2.18	0.43
1:A:1041:TYR:N	1:A:1041:TYR:CD1	2.86	0.43
1:A:1090:GLN:O	1:A:1094:ILE:HG12	2.19	0.43
1:A:632:PHE:HE1	1:A:649:LEU:HB3	1.83	0.43
1:A:364:CYS:O	1:A:662:LEU:HB2	2.18	0.43
1:A:637:LEU:O	1:A:638:ALA:C	2.57	0.43
1:A:228:ASP:CG	1:A:245:ILE:HG21	2.39	0.43
1:A:653:LYS:HA	1:A:682:LEU:CG	2.47	0.43
1:A:1100:PHE:CE1	1:A:1104:VAL:CG2	3.02	0.43
1:A:690:ILE:O	1:A:694:VAL:CG2	2.64	0.43
1:A:930:ASP:O	1:A:933:THR:N	2.50	0.43
1:A:627:SER:CB	1:A:1212:VAL:CG2	2.96	0.42
1:A:239:SER:O	1:A:243:CYS:HB3	2.19	0.42
1:A:352:CYS:O	1:A:353:VAL:C	2.56	0.42
1:A:1063:SER:O	1:A:1067:GLU:CG	2.67	0.42
1:A:1222:GLN:C	1:A:1224:PHE:N	2.72	0.42
1:A:386:SER:O	1:A:390:LEU:CD1	2.65	0.42
1:A:637:LEU:O	1:A:638:ALA:O	2.37	0.42
1:A:767:ALA:O	1:A:771:ASP:N	2.52	0.42
1:A:893:LEU:O	1:A:894:GLU:C	2.55	0.42
1:A:523:LEU:CG	1:A:1016:HIS:CB	2.96	0.42
1:A:1160:SER:HB2	1:A:1232:MET:CE	2.50	0.42
1:A:421:GLN:H	1:A:421:GLN:CD	2.20	0.42
1:A:911:GLY:C	1:A:913:GLY:H	2.22	0.42
1:A:1093:THR:HG22	1:A:1096:ASP:HB2	2.01	0.42
1:A:622:PHE:O	1:A:626:ILE:CG1	2.67	0.42
1:A:1085:TYR:C	1:A:1087:PHE:H	2.22	0.42
1:A:1117:LEU:HB3	1:A:1118:GLY:H	1.70	0.42
1:A:1199:PHE:O	1:A:1203:THR:HB	2.20	0.42
1:A:673:GLY:C	1:A:675:PHE:H	2.23	0.42
1:A:723:GLN:HG2	1:A:1173:ARG:CG	2.46	0.42
1:A:726:ARG:NE	1:A:726:ARG:HA	2.35	0.42
1:A:1127:MET:CE	1:A:1130:THR:CG2	2.92	0.42
1:A:1127:MET:HE3	1:A:1130:THR:HG21	1.97	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:598:ASN:CG	2:A:1310:NAG:C1	2.77	0.42
1:A:196:LYS:H	1:A:196:LYS:HG3	1.53	0.42
1:A:404:ARG:HH11	1:A:404:ARG:CB	2.32	0.42
1:A:509:TYR:CZ	1:A:510:HIS:CE1	3.08	0.42
1:A:507:ALA:CB	1:A:529:LEU:CG	2.80	0.42
1:A:668:VAL:O	1:A:669:ALA:HB2	2.20	0.42
1:A:685:ILE:O	1:A:689:VAL:HB	2.19	0.42
1:A:656:LEU:CD2	1:A:751:LEU:O	2.67	0.42
1:A:942:TRP:O	1:A:943:ILE:CB	2.68	0.42
1:A:1173:ARG:HA	1:A:1173:ARG:HD2	1.75	0.42
1:A:876:PHE:O	1:A:877:LYS:CB	2.67	0.42
1:A:1045:LEU:HD23	1:A:1051:PHE:CZ	2.54	0.42
1:A:1229:TYR:CD1	1:A:1229:TYR:C	2.93	0.42
1:A:733:PRO:C	1:A:735:MET:N	2.73	0.42
1:A:370:PHE:O	1:A:371:VAL:CB	2.67	0.42
1:A:544:TRP:CD1	1:A:544:TRP:C	2.92	0.42
1:A:686:VAL:HG13	1:A:690:ILE:CD1	2.34	0.42
1:A:691:PRO:CD	1:A:692:PHE:N	2.83	0.42
1:A:399:PHE:CD1	1:A:399:PHE:N	2.88	0.42
1:A:423:TYR:HA	1:A:424:PRO:HA	1.79	0.42
1:A:635:ILE:HG12	1:A:1204:LEU:HD12	2.02	0.42
1:A:653:LYS:HA	1:A:682:LEU:CD2	2.50	0.42
1:A:656:LEU:CD1	1:A:685:ILE:CB	2.62	0.42
1:A:1131:ILE:O	1:A:1135:LEU:CG	2.63	0.41
1:A:1202:ILE:CG2	1:A:1237:ALA:CB	2.98	0.41
1:A:1227:ARG:HD3	1:A:1227:ARG:HA	1.78	0.41
1:A:202:PRO:HG2	1:A:203:PHE:CE2	2.55	0.41
1:A:908:VAL:HG13	1:A:926:ALA:HA	2.02	0.41
1:A:726:ARG:CB	1:A:1112:VAL:CG1	2.95	0.41
1:A:1171:ILE:CG2	1:A:1191:LEU:HD21	2.47	0.41
1:A:635:ILE:CG1	1:A:1204:LEU:CD1	2.98	0.41
4:A:1307:NAG:H62	4:A:1308:BMA:C1	2.48	0.41
1:A:372:ARG:C	1:A:374:THR:H	2.23	0.41
1:A:649:LEU:O	1:A:650:VAL:C	2.57	0.41
1:A:893:LEU:O	1:A:895:GLU:N	2.53	0.41
1:A:1058:ALA:HA	1:A:1061:ILE:HD12	2.03	0.41
1:A:726:ARG:CB	1:A:1112:VAL:HG11	2.45	0.41
1:A:730:GLU:HG2	1:A:1112:VAL:HG23	1.99	0.41
1:A:758:HIS:C	1:A:760:PHE:N	2.74	0.41
1:A:1117:LEU:HD11	1:A:1173:ARG:HH11	1.84	0.41
1:A:1207:PHE:HD1	1:A:1207:PHE:HA	1.78	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:680:LEU:O	1:A:683:THR:CG2	2.68	0.41
1:A:1009:PRO:C	1:A:1010:LYS:O	2.59	0.41
1:A:631:MET:HE1	1:A:1208:GLY:H	1.85	0.41
1:A:1220:ILE:O	1:A:1221:PHE:C	2.59	0.41
1:A:1228:MET:O	1:A:1229:TYR:C	2.58	0.41
1:A:507:ALA:CB	1:A:529:LEU:CD2	2.98	0.41
1:A:1114:MET:HE1	1:A:1124:ALA:HB2	2.03	0.41
1:A:1152:VAL:O	1:A:1155:VAL:N	2.54	0.41
1:A:1225:TYR:HD1	1:A:1226:PHE:CD1	2.39	0.41
1:A:684:LEU:HD11	1:A:1166:GLU:CG	2.47	0.41
1:A:1199:PHE:O	1:A:1203:THR:HG21	2.19	0.41
1:A:1229:TYR:HD1	1:A:1229:TYR:C	2.24	0.41
1:A:885:ALA:O	1:A:1079:PHE:N	2.54	0.41
1:A:1222:GLN:O	1:A:1224:PHE:N	2.54	0.41
1:A:751:LEU:O	1:A:755:PRO:HD3	2.17	0.41
1:A:1210:ILE:HD11	1:A:1214:ALA:HB2	2.01	0.41
1:A:381:TRP:C	1:A:383:ALA:N	2.74	0.41
1:A:1224:PHE:CA	1:A:1227:ARG:HB2	2.51	0.41
1:A:656:LEU:HD22	1:A:751:LEU:O	2.19	0.40
1:A:648:LEU:CG	1:A:763:PHE:CE1	3.03	0.40
1:A:631:MET:HE3	1:A:1204:LEU:C	2.37	0.40
1:A:434:PRO:HA	1:A:439:ILE:HG12	2.03	0.40
1:A:842:PHE:O	1:A:1136:VAL:HG11	2.21	0.40
1:A:893:LEU:O	1:A:896:GLY:N	2.54	0.40
1:A:1112:VAL:HA	1:A:1115:VAL:CG2	2.49	0.40
1:A:1166:GLU:O	1:A:1169:SER:OG	2.29	0.40
2:A:1305:NAG:HO3	2:A:1305:NAG:C7	2.23	0.40
1:A:653:LYS:C	1:A:653:LYS:CE	2.86	0.40
4:A:1306:NAG:HO6	4:A:1307:NAG:H82	1.87	0.40
1:A:398:HIS:C	1:A:399:PHE:CD1	2.95	0.40
1:A:885:ALA:N	1:A:1079:PHE:O	2.51	0.40
1:A:1140:GLY:C	1:A:1144:LEU:CB	2.83	0.40

There are no symmetry-related clashes.

## 5.3 Torsion angles

### 5.3.1 Protein backbone

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all EM

entries.

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	1126/1278 (88%)	898 (80%)	134 (12%)	94 (8%)	1	18

All (94) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	250	LYS
1	A	256	PRO
1	A	350	PRO
1	A	372	ARG
1	A	374	THR
1	A	376	ASN
1	A	403	PHE
1	A	638	ALA
1	A	639	LEU
1	A	642	MET
1	A	700	ASP
1	A	706	VAL
1	A	737	LEU
1	A	739	SER
1	A	829	LEU
1	A	856	VAL
1	A	864	LEU
1	A	876	PHE
1	A	922	GLN
1	A	929	LEU
1	A	930	ASP
1	A	951	LYS
1	A	957	CYS
1	A	958	ARG
1	A	1007	PRO
1	A	1008	ASN
1	A	1009	PRO
1	A	1010	LYS
1	A	1044	VAL
1	A	1071	ILE
1	A	1072	ASN
1	A	1083	VAL
1	A	1085	TYR
1	A	1086	VAL

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1122	TRP
1	A	1146	GLY
1	A	260	TRP
1	A	475	TYR
1	A	605	ALA
1	A	606	GLU
1	A	617	SER
1	A	641	HIS
1	A	760	PHE
1	A	830	LEU
1	A	888	PRO
1	A	923	ILE
1	A	943	ILE
1	A	1022	ALA
1	A	1073	GLY
1	A	1075	ALA
1	A	1177	VAL
1	A	1179	MET
1	A	1215	PHE
1	A	168	SER
1	A	348	ARG
1	A	498	LYS
1	A	668	VAL
1	A	861	ASP
1	A	877	LYS
1	A	890	TYR
1	A	894	GLU
1	A	1178	SER
1	A	1221	PHE
1	A	252	GLN
1	A	691	PRO
1	A	745	ALA
1	A	891	PHE
1	A	917	ASP
1	A	926	ALA
1	A	1084	PHE
1	A	1093	THR
1	A	1120	GLU
1	A	1150	ASN
1	A	1167	PHE
1	A	258	ALA
1	A	353	VAL

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	371	VAL
1	A	384	PRO
1	A	703	PHE
1	A	733	PRO
1	A	734	SER
1	A	925	ASN
1	A	1117	LEU
1	A	253	PRO
1	A	259	PRO
1	A	401	PRO
1	A	880	SER
1	A	887	PRO
1	A	1080	PRO
1	A	166	PRO
1	A	892	VAL
1	A	1202	ILE
1	A	349	ASN
1	A	257	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 PDB entries followed by that with respect to all EM entries.

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	643/1109 (58%)	558 (87%)	85 (13%)	5	30

All (85) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	27	TRP
1	A	60	GLN
1	A	87	LEU
1	A	91	LEU
1	A	105	LEU
1	A	116	ARG
1	A	122	ASN
1	A	146	TYR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	185	ASN
1	A	195	ASN
1	A	196	LYS
1	A	250	LYS
1	A	252	GLN
1	A	381	TRP
1	A	389	ARG
1	A	394	TYR
1	A	399	PHE
1	A	403	PHE
1	A	404	ARG
1	A	406	GLU
1	A	439	ILE
1	A	472	LEU
1	A	495	LEU
1	A	518	ARG
1	A	526	THR
1	A	544	TRP
1	A	602	SER
1	A	607	ARG
1	A	612	GLU
1	A	614	ASN
1	A	615	ARG
1	A	653	LYS
1	A	662	LEU
1	A	676	SER
1	A	680	LEU
1	A	682	LEU
1	A	684	LEU
1	A	688	GLU
1	A	719	THR
1	A	721	ASP
1	A	722	GLN
1	A	726	ARG
1	A	730	GLU
1	A	751	LEU
1	A	752	SER
1	A	758	HIS
1	A	760	PHE
1	A	763	PHE
1	A	1036	THR
1	A	1037	TYR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1038	PHE
1	A	1039	MET
1	A	1041	TYR
1	A	1042	HIS
1	A	1050	ASP
1	A	1055	LEU
1	A	1056	LYS
1	A	1057	LYS
1	A	1059	ARG
1	A	1066	THR
1	A	1069	MET
1	A	1072	ASN
1	A	1074	SER
1	A	1077	ARG
1	A	1081	TYR
1	A	1082	SER
1	A	1084	PHE
1	A	1090	GLN
1	A	1117	LEU
1	A	1127	MET
1	A	1128	CYS
1	A	1138	MET
1	A	1153	SER
1	A	1154	LEU
1	A	1159	MET
1	A	1166	GLU
1	A	1172	THR
1	A	1173	ARG
1	A	1189	GLU
1	A	1194	MET
1	A	1199	PHE
1	A	1207	PHE
1	A	1227	ARG
1	A	1228	MET
1	A	1229	TYR

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (20) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	70	ASN
1	A	86	ASN
1	A	92	GLN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	135	ASN
1	A	154	ASN
1	A	185	ASN
1	A	200	GLN
1	A	241	GLN
1	A	447	GLN
1	A	452	ASN
1	A	459	ASN
1	A	478	ASN
1	A	490	ASN
1	A	510	HIS
1	A	554	ASN
1	A	598	ASN
1	A	722	GLN
1	A	1046	GLN
1	A	1072	ASN
1	A	1156	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 ⓘ

15 carbohydrates are modelled in this entry.

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	$\# Z  > 2$	Counts	RMSZ	$\# Z  > 2$
2	NAG	A	1301	1,2	14,14,15	0.62	0	15,19,21	0.87	0

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z  > 2	Counts	RMSZ	# Z  > 2
2	NAG	A	1302	2	14,14,15	0.56	0	15,19,21	0.73	1 (6%)
2	NAG	A	1304	2	14,14,15	0.46	0	15,19,21	0.98	2 (13%)
2	NAG	A	1305	2	14,14,15	0.28	0	15,19,21	0.54	0
4	NAG	A	1306	4	14,14,15	0.29	0	15,19,21	0.52	0
4	NAG	A	1307	4	14,14,15	0.29	0	15,19,21	0.53	0
4	BMA	A	1308	4	11,11,12	0.26	0	15,15,17	0.57	0
2	NAG	A	1310	2	14,14,15	0.33	0	15,19,21	1.47	2 (13%)
2	NAG	A	1311	2	14,14,15	0.64	0	15,19,21	1.11	2 (13%)
5	NAG	A	1312	5	14,14,15	0.27	0	15,19,21	0.53	0
5	NAG	A	1313	5	14,14,15	0.26	0	15,19,21	0.84	0
5	BMA	A	1314	5	11,11,12	0.28	0	15,15,17	0.63	0
5	MAN	A	1315	5	11,11,12	0.36	0	15,15,17	1.21	1 (6%)
2	NAG	A	1318	-	14,14,15	0.39	0	15,19,21	1.15	2 (13%)
2	NAG	A	1319	-	14,14,15	0.37	0	15,19,21	1.16	2 (13%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	NAG	A	1301	1,2	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	A	1302	2	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	A	1304	2	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	A	1305	2	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	1306	4	-	2/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	1307	4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	BMA	A	1308	4	-	0/2/19/22	0/1/1/1
2	NAG	A	1310	2	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	A	1311	2	-	0/6/23/26	0/1/1/1
5	NAG	A	1312	5	-	0/6/23/26	0/1/1/1
5	NAG	A	1313	5	-	0/6/23/26	0/1/1/1
5	BMA	A	1314	5	-	0/2/19/22	0/1/1/1
5	MAN	A	1315	5	-	0/2/19/22	0/1/1/1
2	NAG	A	1318	-	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	A	1319	-	-	0/6/23/26	0/1/1/1

There are no bond length outliers.

All (12) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	A	1310	NAG	O4-C4-C3	-3.38	102.75	110.36
2	A	1318	NAG	C2-N2-C7	-2.42	119.95	123.11
2	A	1319	NAG	C2-N2-C7	-2.41	119.97	123.11
2	A	1311	NAG	O5-C5-C4	-2.01	106.81	110.13
2	A	1318	NAG	C8-C7-N2	2.02	119.97	116.10
2	A	1319	NAG	C8-C7-N2	2.04	120.00	116.10
2	A	1302	NAG	C1-O5-C5	2.04	115.14	112.14
2	A	1304	NAG	C1-O5-C5	2.07	115.18	112.14
2	A	1304	NAG	C4-C3-C2	2.32	114.94	111.34
2	A	1311	NAG	C4-C3-C2	2.48	115.19	111.34
2	A	1310	NAG	C1-O5-C5	3.19	116.82	112.14
5	A	1315	MAN	C1-C2-C3	3.60	113.91	109.55

There are no chirality outliers.

All (2) torsion outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
4	A	1306	NAG	C8-C7-N2-C2
4	A	1306	NAG	O7-C7-N2-C2

There are no ring outliers.

10 monomers are involved in 42 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
2	A	1304	NAG	2	0
2	A	1305	NAG	2	0
4	A	1306	NAG	16	0
4	A	1307	NAG	14	0
4	A	1308	BMA	4	0
2	A	1310	NAG	4	0
5	A	1312	NAG	8	0
5	A	1313	NAG	6	0
5	A	1314	BMA	2	0
2	A	1319	NAG	4	0

## 5.6 Ligand geometry

10 ligands are modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the chemical component dictionary. The Link

column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with  $|Z| > 2$  is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	$\# Z  > 2$	Counts	RMSZ	$\# Z  > 2$
3	NAG	A	1303	-	14,14,15	0.30	0	15,19,21	0.53	0
3	NAG	A	1309	-	14,14,15	0.48	0	15,19,21	0.98	0
3	NAG	A	1316	1	14,14,15	0.40	0	15,19,21	1.16	2 (13%)
3	NAG	A	1317	-	14,14,15	0.28	0	15,19,21	0.54	0
3	NAG	A	1320	1	14,14,15	0.29	0	15,19,21	0.53	0
3	NAG	A	1321	-	14,14,15	0.28	0	15,19,21	0.54	0
3	NAG	A	1322	-	14,14,15	0.28	0	15,19,21	0.53	0
3	NAG	A	1323	-	14,14,15	0.28	0	15,19,21	0.54	0
3	NAG	A	1324	-	14,14,15	0.41	0	15,19,21	1.17	2 (13%)
6	CLR	A	1325	-	31,31,31	0.55	0	48,48,48	1.45	8 (16%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
3	NAG	A	1303	-	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NAG	A	1309	-	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NAG	A	1316	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NAG	A	1317	-	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NAG	A	1320	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NAG	A	1321	-	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NAG	A	1322	-	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NAG	A	1323	-	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NAG	A	1324	-	-	0/6/23/26	0/1/1/1
6	CLR	A	1325	-	-	0/10/68/68	0/4/4/4

There are no bond length outliers.

All (12) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
6	A	1325	CLR	C1-C2-C3	-3.46	105.81	110.41
6	A	1325	CLR	C8-C7-C6	-2.83	108.39	112.76
6	A	1325	CLR	C4-C5-C6	-2.52	116.44	120.60
3	A	1324	NAG	C2-N2-C7	-2.44	119.93	123.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
3	A	1316	NAG	C2-N2-C7	-2.41	119.97	123.11
6	A	1325	CLR	C3-C4-C5	-2.38	107.40	111.89
6	A	1325	CLR	C18-C13-C17	-2.21	107.55	111.76
3	A	1316	NAG	C8-C7-N2	2.01	119.94	116.10
3	A	1324	NAG	C8-C7-N2	2.02	119.97	116.10
6	A	1325	CLR	C4-C5-C10	2.21	119.62	116.41
6	A	1325	CLR	C14-C8-C9	3.14	113.55	109.09
6	A	1325	CLR	C1-C10-C9	3.19	113.65	108.67

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

6 monomers are involved in 14 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
3	A	1303	NAG	2	0
3	A	1317	NAG	2	0
3	A	1322	NAG	4	0
3	A	1323	NAG	2	0
3	A	1324	NAG	3	0
6	A	1325	CLR	1	0

## 5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

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

There are no chain breaks in this entry.