



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Feb 1, 2016 – 10:04 AM GMT

PDB ID : 3KSO
Title : Structure and Mechanism of the Heavy Metal Transporter CusA
Authors : Su, C.-C.
Deposited on : 2009-11-23
Resolution : 4.37 Å(reported)

This is a Full wwPDB X-ray Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.
We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org
A user guide is available at
<http://wwpdb.org/validation/2016/XrayValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

MolProbity : 4.02b-467
Mogul : 1.7 (RC4), CSD as536be (2015)
Xtriage (Phenix) : 1.9-1692
EDS : rb-20026688
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)
Refmac : 5.8.0135
CCP4 : 6.5.0
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : trunk26865

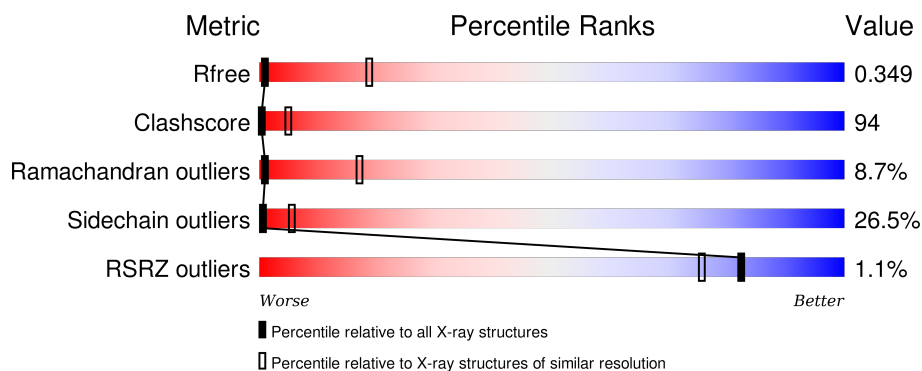
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

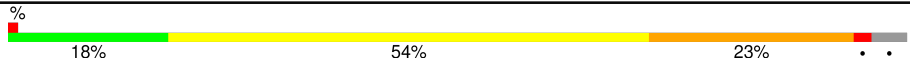
The reported resolution of this entry is 4.37 Å.

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}	91344	1063 (5.08-3.60)
Clashscore	102246	1171 (5.08-3.60)
Ramachandran outliers	100387	1110 (5.08-3.60)
Sidechain outliers	100360	1093 (5.08-3.60)
RSRZ outliers	91569	1067 (5.08-3.60)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments on the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$. The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the electron density. The numeric value is given above the bar.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	1055	

2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 7785 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 Cation efflux system protein cusA.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	1014	Total	C	N	O	S	0	0	0
			7784	5031	1304	1413	36			

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-7	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054
A	-6	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054
A	-5	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054
A	-4	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054
A	-3	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054
A	-2	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054
A	-1	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054
A	0	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054

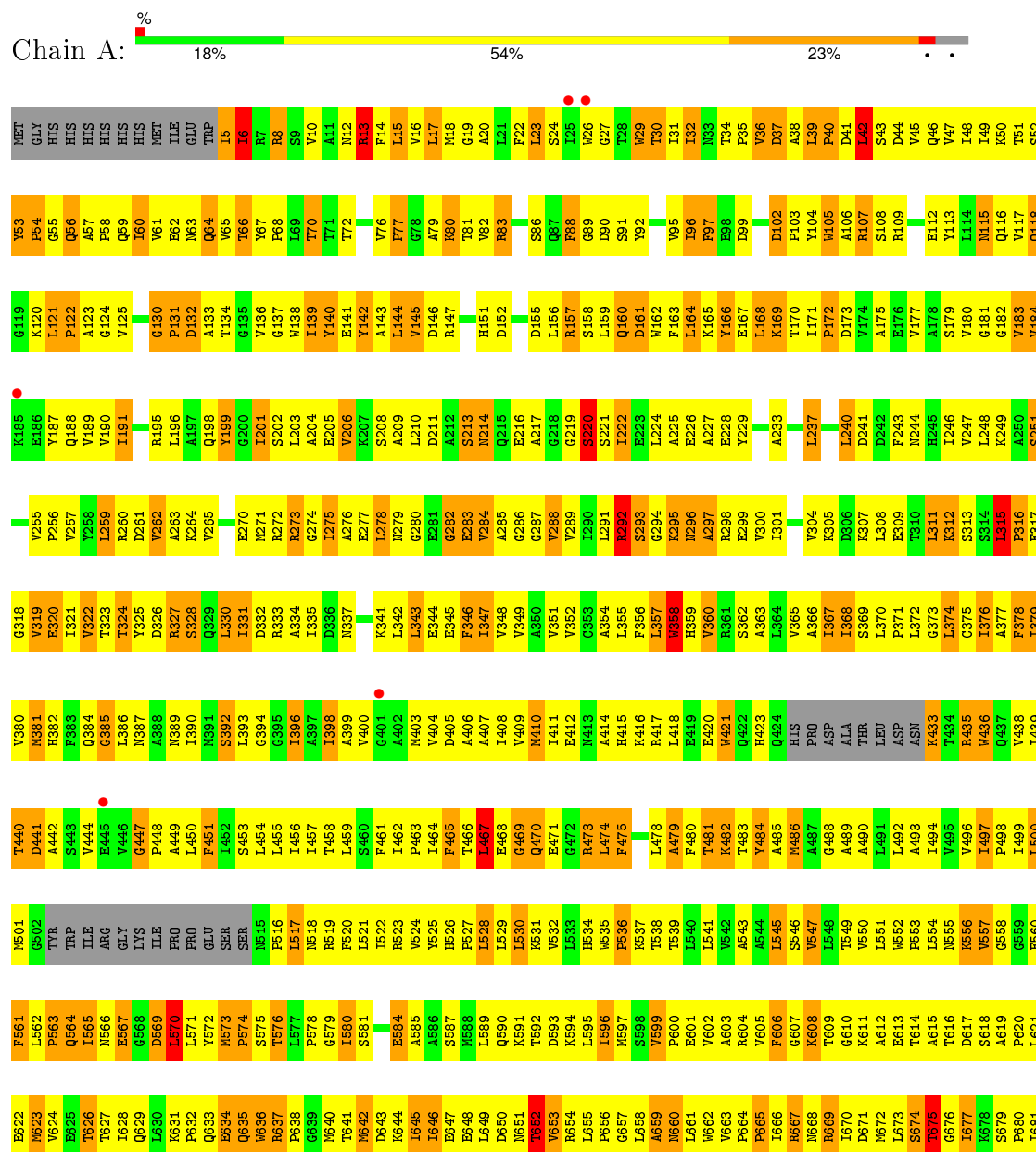
- Molecule 2 is SILVER ION (three-letter code: AG) (formula: Ag).

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
2	A	1	Total	Ag	0	0
			1	1		

3 Residue-property plots

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

• Molecule 1: Cation efflux system protein csaA



A993	G994	L995	L996	P997	I998	L999	W1000	G1001	T1002	G1003	A1004	A1005	G1006	E1007	V1008	M1009	S1010	R1011	I1012	A1013	A1014	P1015	M1016	I1017	G1018	G1019	M1020	I1021	T1022	A1023	P1024	L1025	L1026	S1027	L1028	F1029	I1030	I1031	P1032	A1033	A1034	Y1035	K1036	L1037	M1038	TRP	LEU	HIS	ARG	HIS	ARG	VAL	ARG	ARG	LYS				
L993	A994	G995	V996	A997	A998	E999	F990	G991	V992	V993	M994	L995	M996	Y997	L998	R999	H990	A991	I992	E993	A994	V995	P996	S997	L998	N999	N990	P991	Q992	T993	P994	S995	E996	Q997	K998	L999	D990	E991	A992	W993	Y994	H995	G996	A997	V998	L999	R990	V991	R992	P993	K994	A995	M996	T997	V998	A999	V990	I991	I992
K873	L874	M875	V876	P877	M878	T879	L880	M881	L882	L883	F884	V885	L886	L887	T888	L889	A890	F891	R892	R893	V894	G895	E896	A897	L898	L899	P900	I901	S902	S903	V904	P905	F906	A907	L908	V909	G910	G911	W912	W913	L914	L915	W916	W917	W918	G919	F920	H921	L922	S923	V924	A925	T926	T927	V928	G929	F930	I931	A932
V806	S807	T808	G809	P810	S811	M812	L813	R814	T815	E816	M817	A818	R819	P820	T821	S822	M823	I824	Y825	R826	D827	A828	R829	D830	R831	D832	M833	V837	M838	D839	L840	Q841	K842	A843	I844	A845	E846	K847	V848	Q849	L850	K851	P852	G853	T854	F858	S859	G860	Q861	F862	E863	L864	L865	L869	L872				
L745	F746	V747	V748	G749	A750	V751	G752	G753	A754	M755	V756	A757	E758	V759	V760	E761	G762	I763	A764	R765	F766	F767	I768	M769	L770	R771	Y772	P773	Q774	S775	A776	R777	D778	S779	F780	E781	G782	R784	Q785	L786	I787	L788	L789	T790	P791	M792	R793	K794	Q795	I796	T797	L798	A799	D800	V801	A802	D803	I804	K805
G682	L683	K684	V685	S686	G687	T688	V689	L690	I693	D694	A695	M696	A697	E698	Q699	I700	E701	A704	R705	T706	F707	V708	G709	V710	A711	S712	A713	L714	A715	E716	R717	L718	E719	G720	G721	R722	Y723	I724	N725	V726	E727	I728	N729	R730	E731	K732	A733	Y736	G737	M738	T739	V740	A741	D742	V743	Q744			

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	H 3 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	179.99Å 179.99Å 286.02Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	35.47 – 4.37 35.48 – 4.37	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	92.6 (35.47-4.37) 99.6 (35.48-4.37)	Depositor EDS
R_{merge}	0.06	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	3.31 (at 4.44Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX (phenix.refine)	Depositor
R, R_{free}	0.268 , 0.321 0.282 , 0.349	Depositor DCC
R_{free} test set	588 reflections (5.01%)	DCC
Wilson B-factor (Å ²)	187.4	Xtriage
Anisotropy	0.205	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.21 , 201.4	EDS
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.49$, $\langle L^2 \rangle = 0.32$	Xtriage
Outliers	0 of 11752 reflections	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.89	EDS
Total number of atoms	7785	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	254.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.57% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

²Theoretical values of $\langle |L| \rangle$, $\langle L^2 \rangle$ for acentric reflections are 0.5, 0.375 respectively for untwinned datasets, and 0.333, 0.2 for perfectly twinned datasets.

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

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	0/7939	0.72	7/10805 (0.1%)

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	1	1

There are no bond length outliers.

All (7) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	5	ILE	CB-CA-C	10.48	132.56	111.60
1	A	659	ALA	N-CA-C	-9.78	84.59	111.00
1	A	6	ILE	N-CA-CB	-6.77	95.23	110.80
1	A	1023	ALA	C-N-CD	-6.07	107.25	120.60
1	A	220	SER	N-CA-C	5.96	127.09	111.00
1	A	145	VAL	CB-CA-C	-5.21	101.51	111.40
1	A	570	LEU	CA-CB-CG	5.16	127.17	115.30

All (1) chirality outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atom
1	A	5	ILE	CA

All (1) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	282	GLY	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	7784	0	8050	1486	0
2	A	1	0	0	0	0
All	All	7785	0	8050	1486	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 94.

All (1486) 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:370:LEU:HD21	1:A:403:MET:SD	1.40	1.59
1:A:15:LEU:HD23	1:A:16:VAL:N	1.34	1.41
1:A:409:VAL:HB	1:A:450:LEU:CD1	1.57	1.32
1:A:821:THR:HG23	1:A:823:TRP:NE1	1.46	1.31
1:A:370:LEU:CD2	1:A:403:MET:SD	2.22	1.26
1:A:362:SER:HB3	1:A:411:ILE:CD1	1.66	1.25
1:A:17:LEU:HD12	1:A:17:LEU:O	1.36	1.22
1:A:26:TRP:NE1	1:A:379:ILE:HD12	1.56	1.19
1:A:145:VAL:HG22	1:A:320:GLU:O	1.43	1.18
1:A:608:LYS:O	1:A:608:LYS:HD3	1.38	1.17
1:A:26:TRP:HE1	1:A:379:ILE:CD1	1.58	1.16
1:A:543:ALA:HA	1:A:906:PHE:HZ	1.08	1.15
1:A:145:VAL:O	1:A:319:VAL:HA	1.46	1.14
1:A:407:ALA:O	1:A:411:ILE:HG12	1.48	1.12
1:A:27:GLY:CA	1:A:375:CYS:HB3	1.79	1.12
1:A:5:ILE:HG22	1:A:6:ILE:HD12	1.21	1.12
1:A:567:GLU:HB3	1:A:665:PRO:HD3	1.26	1.11
1:A:634:GLU:HG3	1:A:635:GLN:HG2	1.13	1.10
1:A:62:GLU:HA	1:A:66:THR:HG23	1.34	1.10
1:A:496:VAL:O	1:A:500:LEU:HD21	1.50	1.10
1:A:273:ARG:HG3	1:A:273:ARG:HH21	1.03	1.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:27:GLY:HA3	1:A:375:CYS:HB3	1.35	1.09
1:A:956:PRO:HA	1:A:959:ASN:HB2	1.11	1.07
1:A:572:TYR:HE1	1:A:574:PRO:HG3	1.19	1.07
1:A:17:LEU:HD12	1:A:17:LEU:C	1.76	1.06
1:A:796:ILE:HG22	1:A:797:THR:H	1.21	1.06
1:A:412:GLU:HG2	1:A:983:PRO:HG3	1.38	1.06
1:A:362:SER:CB	1:A:411:ILE:HD11	1.84	1.06
1:A:790:THR:CB	1:A:791:PRO:HD2	1.86	1.06
1:A:409:VAL:CB	1:A:450:LEU:HD11	1.84	1.05
1:A:62:GLU:HA	1:A:66:THR:CG2	1.86	1.05
1:A:821:THR:HG23	1:A:823:TRP:HE1	0.93	1.05
1:A:790:THR:OG1	1:A:791:PRO:HD2	1.57	1.05
1:A:140:TYR:OH	1:A:323:THR:HG22	1.56	1.04
1:A:575:SER:HB2	1:A:659:ALA:CB	1.87	1.04
1:A:42:LEU:HD12	1:A:473:ARG:HD2	1.36	1.03
1:A:27:GLY:HA3	1:A:375:CYS:CB	1.89	1.02
1:A:409:VAL:CB	1:A:450:LEU:CD1	2.37	1.02
1:A:36:VAL:O	1:A:36:VAL:HG23	1.56	1.02
1:A:410:MET:SD	1:A:500:LEU:CD1	2.48	1.02
1:A:575:SER:HB2	1:A:659:ALA:HB3	1.05	1.02
1:A:956:PRO:HA	1:A:959:ASN:CB	1.90	1.01
1:A:324:THR:HG21	1:A:606:PHE:CD2	1.95	1.01
1:A:357:LEU:HD23	1:A:415:HIS:CE1	1.96	1.01
1:A:166:TYR:N	1:A:166:TYR:HD1	1.56	1.01
1:A:725:ASN:HB3	1:A:727:GLU:OE2	1.60	1.01
1:A:543:ALA:HA	1:A:906:PHE:CZ	1.96	1.00
1:A:576:THR:HG21	1:A:622:GLU:O	1.62	0.99
1:A:992:ILE:HD11	1:A:1020:MET:CB	1.92	0.99
1:A:601:GLU:OE2	1:A:645:ILE:HD11	1.61	0.99
1:A:681:ILE:HG22	1:A:682:GLY:H	1.26	0.99
1:A:83:ARG:HD2	1:A:675:THR:OG1	1.59	0.98
1:A:15:LEU:O	1:A:18:MET:HG2	1.61	0.98
1:A:707:VAL:HG22	1:A:708:PRO:HD2	1.45	0.97
1:A:162:TRP:CG	1:A:764:ALA:HB2	2.00	0.97
1:A:145:VAL:HG21	1:A:320:GLU:CG	1.93	0.97
1:A:456:ILE:HG23	1:A:883:ILE:HD11	1.47	0.97
1:A:288:VAL:HG23	1:A:289:VAL:N	1.79	0.96
1:A:575:SER:CB	1:A:659:ALA:HB3	1.95	0.95
1:A:15:LEU:CD2	1:A:16:VAL:N	2.30	0.95
1:A:144:LEU:HD12	1:A:156:LEU:HD22	1.48	0.95
1:A:375:CYS:HA	1:A:378:PHE:HE1	1.32	0.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:13:ARG:HD2	1:A:14:PHE:CD2	2.01	0.95
1:A:26:TRP:CZ2	1:A:379:ILE:HD11	2.02	0.94
1:A:324:THR:HG21	1:A:606:PHE:HD2	1.26	0.94
1:A:109:ARG:HA	1:A:109:ARG:NE	1.83	0.94
1:A:784:ARG:O	1:A:799:ALA:HB2	1.68	0.94
1:A:166:TYR:N	1:A:166:TYR:CD1	2.32	0.93
1:A:324:THR:HG21	1:A:606:PHE:HB2	1.50	0.93
1:A:821:THR:CG2	1:A:823:TRP:HE1	1.81	0.93
1:A:160:GLN:NE2	1:A:179:SER:HB3	1.82	0.93
1:A:405:ASP:O	1:A:408:ILE:HB	1.70	0.92
1:A:288:VAL:CG2	1:A:289:VAL:N	2.31	0.92
1:A:237:LEU:HD13	1:A:243:PHE:CE1	2.05	0.92
1:A:273:ARG:NH2	1:A:273:ARG:HG3	1.81	0.91
1:A:146:ASP:HA	1:A:318:GLY:O	1.71	0.91
1:A:365:VAL:O	1:A:368:ILE:HG22	1.70	0.90
1:A:357:LEU:HD23	1:A:415:HIS:ND1	1.86	0.90
1:A:634:GLU:CG	1:A:635:GLN:HG2	2.02	0.90
1:A:42:LEU:HD23	1:A:43:SER:H	1.36	0.90
1:A:15:LEU:C	1:A:15:LEU:HD23	1.91	0.90
1:A:26:TRP:NE1	1:A:379:ILE:CD1	2.25	0.90
1:A:105:TRP:HD1	1:A:106:ALA:N	1.69	0.90
1:A:5:ILE:HG22	1:A:6:ILE:CD1	2.02	0.90
1:A:572:TYR:CE1	1:A:574:PRO:HG3	2.07	0.89
1:A:181:GLY:HA2	1:A:274:GLY:O	1.71	0.89
1:A:1014:ALA:HB3	1:A:1015:PRO:HD3	1.54	0.89
1:A:362:SER:HB3	1:A:411:ILE:HD11	0.90	0.89
1:A:139:ILE:HD11	1:A:291:LEU:HD13	1.52	0.89
1:A:63:ASN:HA	1:A:67:TYR:HD2	1.38	0.89
1:A:409:VAL:CG1	1:A:450:LEU:HD12	2.03	0.88
1:A:60:ILE:HD11	1:A:64:GLN:NE2	1.88	0.88
1:A:956:PRO:CA	1:A:959:ASN:HB2	2.02	0.88
1:A:790:THR:CB	1:A:791:PRO:CD	2.50	0.88
1:A:489:ALA:HA	1:A:492:LEU:HB3	1.55	0.88
1:A:201:ILE:HG22	1:A:249:LYS:HD3	1.55	0.88
1:A:461:PHE:CG	1:A:482:LYS:HD3	2.08	0.88
1:A:736:TYR:HD1	1:A:796:ILE:HD13	1.38	0.88
1:A:567:GLU:HG2	1:A:664:PRO:HA	1.53	0.88
1:A:144:LEU:HB2	1:A:285:ALA:O	1.73	0.88
1:A:899:LEU:HD12	1:A:945:LEU:HD23	1.55	0.87
1:A:906:PHE:HB2	1:A:1026:LEU:HD13	1.55	0.87
1:A:105:TRP:CD1	1:A:106:ALA:N	2.43	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:330:LEU:O	1:A:330:LEU:HD12	1.74	0.87
1:A:524:VAL:O	1:A:528:LEU:HD21	1.75	0.87
1:A:409:VAL:HB	1:A:450:LEU:HD11	0.88	0.87
1:A:1033:ALA:O	1:A:1036:LYS:HE3	1.73	0.87
1:A:741:ALA:HA	1:A:744:GLN:OE1	1.75	0.87
1:A:201:ILE:HD12	1:A:248:LEU:HD12	1.57	0.87
1:A:827:ASP:OD2	1:A:829:ARG:HD3	1.75	0.87
1:A:992:ILE:HD11	1:A:1020:MET:HB2	1.57	0.87
1:A:1036:LYS:HG3	1:A:1037:LEU:H	1.38	0.86
1:A:730:ARG:HH11	1:A:733:ALA:HB3	1.37	0.86
1:A:362:SER:CB	1:A:411:ILE:CD1	2.48	0.86
1:A:118:GLN:NE2	1:A:121:LEU:HD21	1.90	0.86
1:A:980:ARG:NH2	1:A:1027:SER:HB3	1.91	0.86
1:A:173:ASP:O	1:A:292:ARG:HB2	1.75	0.86
1:A:27:GLY:HA2	1:A:375:CYS:HB3	1.56	0.85
1:A:893:ARG:O	1:A:896:GLU:HG2	1.76	0.85
1:A:184:VAL:HG21	1:A:270:GLU:OE1	1.75	0.85
1:A:410:MET:SD	1:A:500:LEU:HD11	2.15	0.85
1:A:26:TRP:HE1	1:A:379:ILE:HD12	0.74	0.85
1:A:469:GLY:HA3	1:A:864:LEU:HD11	1.58	0.85
1:A:912:ILE:HA	1:A:915:LEU:HD12	1.54	0.85
1:A:13:ARG:CZ	1:A:14:PHE:CE2	2.60	0.85
1:A:334:ALA:HA	1:A:1004:ALA:HB1	1.56	0.85
1:A:409:VAL:HG21	1:A:450:LEU:HG	1.57	0.85
1:A:237:LEU:HD13	1:A:243:PHE:HE1	1.40	0.85
1:A:145:VAL:HG21	1:A:320:GLU:HG3	1.60	0.84
1:A:790:THR:HG22	1:A:796:ILE:HD12	1.60	0.84
1:A:160:GLN:O	1:A:164:LEU:HB2	1.77	0.84
1:A:105:TRP:HD1	1:A:106:ALA:CA	1.90	0.84
1:A:15:LEU:HD23	1:A:16:VAL:CA	2.08	0.84
1:A:60:ILE:HD11	1:A:64:GLN:HE21	1.40	0.84
1:A:525:TYR:CE1	1:A:977:ALA:HB1	2.12	0.83
1:A:614:THR:HG23	1:A:616:THR:H	1.42	0.83
1:A:66:THR:HB	1:A:91:SER:OG	1.78	0.83
1:A:1019:GLY:O	1:A:1023:ALA:CB	2.26	0.83
1:A:345:GLU:HG2	1:A:400:VAL:HG11	1.60	0.83
1:A:465:PHE:CG	1:A:479:ALA:HB1	2.12	0.83
1:A:24:SER:CA	1:A:372:LEU:HD13	2.09	0.83
1:A:969:LEU:HD12	1:A:970:ASP:N	1.94	0.83
1:A:980:ARG:CZ	1:A:1028:LEU:HD23	2.08	0.83
1:A:732:LYS:HD3	1:A:800:ASP:O	1.79	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:272:ARG:HH11	1:A:275:ILE:HG23	1.42	0.83
1:A:162:TRP:CD1	1:A:764:ALA:HB2	2.14	0.83
1:A:851:LYS:HB3	1:A:852:PRO:CD	2.09	0.83
1:A:324:THR:CG2	1:A:606:PHE:HD2	1.91	0.82
1:A:910:GLY:HA3	1:A:1022:THR:OG1	1.79	0.82
1:A:37:ASP:HA	1:A:331:ILE:HD11	1.61	0.82
1:A:599:VAL:HG21	1:A:649:LEU:HD21	1.62	0.82
1:A:823:TRP:N	1:A:823:TRP:CD1	2.40	0.82
1:A:465:PHE:CD1	1:A:479:ALA:HB1	2.15	0.82
1:A:932:ALA:HB3	1:A:1016:MET:HE1	1.60	0.82
1:A:814:LYS:HB3	1:A:823:TRP:CZ2	2.15	0.82
1:A:378:PHE:O	1:A:381:MET:HG3	1.79	0.82
1:A:379:ILE:O	1:A:382:HIS:HB3	1.79	0.82
1:A:24:SER:HA	1:A:372:LEU:HD13	1.61	0.82
1:A:455:LEU:O	1:A:458:THR:HG22	1.80	0.82
1:A:105:TRP:C	1:A:105:TRP:CD1	2.53	0.81
1:A:27:GLY:C	1:A:375:CYS:SG	2.59	0.81
1:A:697:ALA:HB1	1:A:715:ALA:HB1	1.62	0.81
1:A:211:ASP:OD1	1:A:756:VAL:CG2	2.28	0.81
1:A:35:PRO:O	1:A:36:VAL:HG12	1.81	0.81
1:A:179:SER:O	1:A:613:GLU:HB3	1.80	0.81
1:A:746:PHE:CG	1:A:788:ILE:HD11	2.15	0.80
1:A:550:VAL:CG2	1:A:912:ILE:HG21	2.11	0.80
1:A:653:VAL:O	1:A:653:VAL:HG12	1.80	0.80
1:A:788:ILE:HG22	1:A:796:ILE:HB	1.64	0.80
1:A:368:ILE:CD1	1:A:368:ILE:O	2.30	0.80
1:A:775:SER:O	1:A:778:ASP:HB2	1.81	0.80
1:A:385:GLY:O	1:A:386:LEU:HG	1.82	0.80
1:A:27:GLY:CA	1:A:375:CYS:CB	2.55	0.80
1:A:375:CYS:HA	1:A:378:PHE:CE1	2.17	0.80
1:A:366:ALA:HA	1:A:369:SER:OG	1.81	0.80
1:A:796:ILE:HG22	1:A:797:THR:N	1.97	0.80
1:A:326:ASP:OD1	1:A:328:SER:HB3	1.81	0.80
1:A:457:ILE:HG23	1:A:935:GLY:HA3	1.63	0.80
1:A:320:GLU:C	1:A:321:ILE:HD13	2.02	0.79
1:A:580:ILE:HD11	1:A:585:ALA:HB2	1.64	0.79
1:A:790:THR:CG2	1:A:794:GLN:HG3	2.13	0.79
1:A:61:VAL:HG21	1:A:89:GLY:H	1.45	0.79
1:A:719:GLU:HA	1:A:810:PRO:HA	1.63	0.79
1:A:10:VAL:O	1:A:13:ARG:HB2	1.83	0.79
1:A:992:ILE:HD12	1:A:1017:ILE:HG23	1.64	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:407:ALA:O	1:A:411:ILE:CG1	2.30	0.79
1:A:790:THR:OG1	1:A:791:PRO:CD	2.30	0.79
1:A:458:THR:HB	1:A:486:MET:SD	2.22	0.79
1:A:463:PRO:HG2	1:A:464:ILE:HD12	1.65	0.78
1:A:482:LYS:HE2	1:A:483:THR:N	1.97	0.78
1:A:48:ILE:H	1:A:48:ILE:HD12	1.48	0.78
1:A:998:ILE:HD11	1:A:1010:SER:N	1.99	0.78
1:A:34:THR:HG23	1:A:36:VAL:CG1	2.13	0.78
1:A:145:VAL:HG21	1:A:320:GLU:HG2	1.66	0.78
1:A:35:PRO:O	1:A:36:VAL:CG1	2.31	0.78
1:A:76:VAL:HB	1:A:113:TYR:CD1	2.19	0.78
1:A:932:ALA:HB3	1:A:1016:MET:CE	2.14	0.78
1:A:145:VAL:O	1:A:319:VAL:CA	2.28	0.78
1:A:105:TRP:HD1	1:A:106:ALA:HA	1.47	0.77
1:A:790:THR:HG23	1:A:794:GLN:HG3	1.66	0.77
1:A:677:ILE:HG22	1:A:679:SER:HB2	1.67	0.77
1:A:13:ARG:NH1	1:A:14:PHE:CE2	2.53	0.77
1:A:475:PHE:CE1	1:A:478:LEU:HD13	2.20	0.77
1:A:349:VAL:HG22	1:A:990:VAL:HG11	1.67	0.77
1:A:821:THR:CG2	1:A:823:TRP:NE1	2.39	0.77
1:A:539:THR:HG21	1:A:1033:ALA:CB	2.15	0.77
1:A:140:TYR:OH	1:A:323:THR:CG2	2.33	0.77
1:A:969:LEU:HD12	1:A:970:ASP:H	1.48	0.77
1:A:609:THR:HG23	1:A:624:VAL:HA	1.64	0.77
1:A:368:ILE:HD13	1:A:368:ILE:O	1.85	0.76
1:A:35:PRO:C	1:A:36:VAL:HG13	2.06	0.76
1:A:24:SER:CB	1:A:372:LEU:HD13	2.15	0.76
1:A:567:GLU:CB	1:A:665:PRO:HD3	2.12	0.76
1:A:31:ILE:HG13	1:A:378:PHE:CZ	2.20	0.76
1:A:118:GLN:HA	1:A:118:GLN:HE21	1.51	0.76
1:A:109:ARG:HA	1:A:109:ARG:HE	1.51	0.76
1:A:221:SER:HB3	1:A:228:GLU:CG	2.16	0.76
1:A:461:PHE:CD2	1:A:482:LYS:HD3	2.21	0.76
1:A:56:GLN:HB2	1:A:61:VAL:HG22	1.66	0.76
1:A:473:ARG:O	1:A:473:ARG:HD3	1.85	0.75
1:A:536:PRO:HB3	1:A:1036:LYS:HD2	1.67	0.75
1:A:567:GLU:OE2	1:A:570:LEU:HB2	1.86	0.75
1:A:998:ILE:CD1	1:A:1006:SER:HB3	2.16	0.75
1:A:400:VAL:O	1:A:404:VAL:HG23	1.85	0.75
1:A:546:SER:HB2	1:A:906:PHE:CE2	2.21	0.75
1:A:158:SER:HB3	1:A:766:TYR:OH	1.87	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:525:TYR:HA	1:A:528:LEU:CD2	2.16	0.75
1:A:459:LEU:O	1:A:463:PRO:HD3	1.87	0.75
1:A:944:MET:O	1:A:1031:ILE:HG21	1.86	0.75
1:A:412:GLU:HG2	1:A:983:PRO:CG	2.15	0.75
1:A:922:LEU:HD23	1:A:923:SER:N	2.02	0.75
1:A:790:THR:HB	1:A:791:PRO:HD2	1.68	0.75
1:A:536:PRO:O	1:A:1036:LYS:HE2	1.87	0.74
1:A:482:LYS:C	1:A:482:LYS:HE2	2.08	0.74
1:A:536:PRO:C	1:A:1036:LYS:HE2	2.07	0.74
1:A:759:THR:HG23	1:A:766:TYR:O	1.87	0.74
1:A:977:ALA:O	1:A:980:ARG:HG3	1.87	0.74
1:A:570:LEU:HD12	1:A:571:LEU:N	2.02	0.74
1:A:812:MET:O	1:A:813:LEU:HD13	1.86	0.74
1:A:633:GLN:OE1	1:A:633:GLN:HA	1.85	0.74
1:A:884:PHE:HA	1:A:887:LEU:HB2	1.69	0.74
1:A:915:LEU:HD21	1:A:1014:ALA:HB1	1.69	0.74
1:A:610:GLY:HA2	1:A:620:PRO:O	1.85	0.74
1:A:1008:VAL:O	1:A:1012:ILE:HG23	1.87	0.74
1:A:465:PHE:C	1:A:465:PHE:CD1	2.59	0.74
1:A:356:PHE:CD2	1:A:986:MET:HB3	2.23	0.74
1:A:62:GLU:CA	1:A:66:THR:HG23	2.14	0.74
1:A:324:THR:HG21	1:A:606:PHE:CB	2.17	0.74
1:A:553:PRO:HB2	1:A:912:ILE:CD1	2.18	0.74
1:A:951:ALA:HA	1:A:953:GLU:HG2	1.70	0.74
1:A:189:VAL:HG22	1:A:265:VAL:HG23	1.68	0.74
1:A:39:LEU:HG	1:A:666:ILE:HG21	1.68	0.74
1:A:574:PRO:CD	1:A:624:VAL:HG13	2.17	0.74
1:A:760:VAL:HG23	1:A:765:ARG:HB3	1.69	0.74
1:A:907:ALA:O	1:A:1019:GLY:HA2	1.86	0.74
1:A:980:ARG:HH21	1:A:1027:SER:HB3	1.53	0.74
1:A:26:TRP:CE2	1:A:379:ILE:HD11	2.23	0.74
1:A:63:ASN:HA	1:A:67:TYR:CD2	2.23	0.74
1:A:884:PHE:C	1:A:886:LEU:H	1.91	0.73
1:A:905:PRO:O	1:A:909:VAL:HG23	1.87	0.73
1:A:61:VAL:O	1:A:66:THR:HG22	1.88	0.73
1:A:574:PRO:HD3	1:A:624:VAL:HG13	1.68	0.73
1:A:221:SER:CB	1:A:228:GLU:OE2	2.36	0.73
1:A:571:LEU:HD23	1:A:665:PRO:HA	1.68	0.73
1:A:899:LEU:HD21	1:A:1030:ILE:HB	1.70	0.73
1:A:279:ASN:ND2	1:A:597:MET:HG2	2.04	0.73
1:A:160:GLN:HE21	1:A:179:SER:CB	2.01	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:160:GLN:NE2	1:A:179:SER:CB	2.50	0.73
1:A:790:THR:HG22	1:A:796:ILE:CD1	2.18	0.73
1:A:409:VAL:CG1	1:A:450:LEU:CD1	2.65	0.73
1:A:797:THR:O	1:A:800:ASP:HB2	1.89	0.73
1:A:27:GLY:C	1:A:375:CYS:HG	1.90	0.73
1:A:959:ASN:CG	1:A:961:PRO:HG3	2.08	0.73
1:A:145:VAL:CG2	1:A:320:GLU:HG2	2.19	0.73
1:A:567:GLU:HB3	1:A:665:PRO:CD	2.14	0.73
1:A:177:VAL:HG12	1:A:177:VAL:O	1.87	0.73
1:A:15:LEU:HD23	1:A:16:VAL:H	1.51	0.73
1:A:277:GLU:HG2	1:A:278:LEU:N	2.03	0.73
1:A:492:LEU:O	1:A:496:VAL:N	2.23	0.72
1:A:1019:GLY:O	1:A:1023:ALA:HB2	1.89	0.72
1:A:922:LEU:HA	1:A:926:THR:HG21	1.71	0.72
1:A:933:LEU:HD12	1:A:1016:MET:HA	1.71	0.72
1:A:590:GLN:HG3	1:A:594:LYS:HE2	1.71	0.72
1:A:187:TYR:CD2	1:A:759:THR:HG21	2.24	0.72
1:A:404:VAL:O	1:A:408:ILE:HG12	1.88	0.72
1:A:363:ALA:O	1:A:367:ILE:HG22	1.89	0.72
1:A:465:PHE:HD1	1:A:465:PHE:C	1.92	0.72
1:A:35:PRO:C	1:A:36:VAL:CG1	2.58	0.72
1:A:608:LYS:O	1:A:608:LYS:CD	2.30	0.72
1:A:65:VAL:O	1:A:68:PRO:HD2	1.89	0.72
1:A:435:ARG:O	1:A:439:ILE:HG12	1.89	0.72
1:A:1030:ILE:HG13	1:A:1031:ILE:N	2.03	0.72
1:A:283:GLU:O	1:A:283:GLU:HG3	1.89	0.72
1:A:552:TRP:HZ3	1:A:916:TRP:CG	2.07	0.72
1:A:984:LYS:HA	1:A:987:THR:HG22	1.71	0.72
1:A:468:GLU:O	1:A:469:GLY:O	2.06	0.72
1:A:42:LEU:CD2	1:A:43:SER:H	2.02	0.72
1:A:237:LEU:HD22	1:A:243:PHE:CD1	2.25	0.71
1:A:831:ARG:HD3	1:A:832:ASP:H	1.54	0.71
1:A:5:ILE:CG2	1:A:6:ILE:HD12	2.11	0.71
1:A:589:LEU:HD21	1:A:607:GLY:O	1.90	0.71
1:A:97:PHE:CE1	1:A:106:ALA:HB1	2.25	0.71
1:A:553:PRO:HB2	1:A:912:ILE:HD11	1.73	0.71
1:A:325:TYR:HE1	1:A:665:PRO:HB3	1.55	0.71
1:A:19:GLY:O	1:A:23:LEU:HD23	1.90	0.71
1:A:746:PHE:CB	1:A:788:ILE:HD11	2.20	0.71
1:A:354:ALA:HA	1:A:360:VAL:HG13	1.71	0.71
1:A:57:ALA:O	1:A:61:VAL:N	2.22	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:70:THR:OG1	1:A:818:ALA:HA	1.91	0.71
1:A:392:SER:HA	1:A:481:THR:OG1	1.90	0.71
1:A:968:LYS:HA	1:A:971:GLU:HG2	1.72	0.71
1:A:26:TRP:CE2	1:A:379:ILE:CD1	2.73	0.71
1:A:221:SER:HB2	1:A:228:GLU:OE2	1.91	0.71
1:A:484:TYR:HD1	1:A:484:TYR:N	1.89	0.71
1:A:414:ALA:O	1:A:418:LEU:HB2	1.91	0.71
1:A:162:TRP:CG	1:A:764:ALA:CB	2.74	0.71
1:A:390:ILE:HD13	1:A:1008:VAL:HG11	1.73	0.70
1:A:915:LEU:HD11	1:A:1015:PRO:HG3	1.71	0.70
1:A:27:GLY:HA3	1:A:375:CYS:SG	2.31	0.70
1:A:687:GLY:HA3	1:A:854:THR:HG22	1.73	0.70
1:A:143:ALA:HB2	1:A:606:PHE:CE2	2.25	0.70
1:A:469:GLY:CA	1:A:864:LEU:HD21	2.21	0.70
1:A:435:ARG:HD2	1:A:435:ARG:H	1.55	0.70
1:A:142:TYR:HE1	1:A:287:GLY:H	1.38	0.70
1:A:781:GLN:OE1	1:A:784:ARG:HD2	1.92	0.70
1:A:903:SER:HA	1:A:1026:LEU:HD11	1.74	0.70
1:A:1033:ALA:O	1:A:1036:LYS:CE	2.39	0.70
1:A:551:LEU:HA	1:A:554:LEU:HB2	1.72	0.70
1:A:145:VAL:CG2	1:A:320:GLU:O	2.33	0.70
1:A:876:VAL:O	1:A:879:THR:HG22	1.90	0.70
1:A:145:VAL:HG22	1:A:320:GLU:C	2.12	0.70
1:A:1026:LEU:O	1:A:1026:LEU:HG	1.91	0.70
1:A:992:ILE:HD11	1:A:1020:MET:HB3	1.72	0.70
1:A:105:TRP:CD1	1:A:106:ALA:HA	2.26	0.70
1:A:263:ALA:C	1:A:264:LYS:HD2	2.12	0.69
1:A:13:ARG:CZ	1:A:14:PHE:CZ	2.75	0.69
1:A:821:THR:HG23	1:A:823:TRP:CD1	2.27	0.69
1:A:26:TRP:CZ2	1:A:379:ILE:CD1	2.74	0.69
1:A:790:THR:HG21	1:A:796:ILE:HD11	1.75	0.69
1:A:96:ILE:HD13	1:A:96:ILE:H	1.57	0.69
1:A:392:SER:O	1:A:481:THR:HG21	1.91	0.69
1:A:1002:THR:HB	1:A:1006:SER:HB2	1.74	0.69
1:A:26:TRP:HZ2	1:A:379:ILE:HD11	1.55	0.69
1:A:140:TYR:HH	1:A:323:THR:HG22	1.54	0.69
1:A:38:ALA:HA	1:A:389:ASN:CB	2.23	0.69
1:A:462:ILE:HA	1:A:465:PHE:CD2	2.28	0.69
1:A:277:GLU:HG2	1:A:278:LEU:H	1.57	0.69
1:A:324:THR:CG2	1:A:606:PHE:HB2	2.22	0.69
1:A:710:VAL:HG22	1:A:828:ALA:HA	1.73	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:221:SER:HA	1:A:229:TYR:O	1.91	0.69
1:A:530:LEU:HD12	1:A:530:LEU:O	1.92	0.69
1:A:1036:LYS:HG3	1:A:1037:LEU:N	2.07	0.68
1:A:484:TYR:CD1	1:A:484:TYR:N	2.61	0.68
1:A:36:VAL:O	1:A:36:VAL:CG2	2.30	0.68
1:A:790:THR:CG2	1:A:796:ILE:HD11	2.23	0.68
1:A:410:MET:SD	1:A:500:LEU:HD12	2.32	0.68
1:A:945:LEU:HD13	1:A:945:LEU:O	1.94	0.68
1:A:580:ILE:HD13	1:A:584:GLU:HG2	1.74	0.68
1:A:903:SER:OG	1:A:1026:LEU:HD21	1.92	0.68
1:A:896:GLU:HG3	1:A:897:ALA:N	2.07	0.68
1:A:160:GLN:HE21	1:A:179:SER:HB3	1.57	0.68
1:A:138:TRP:CZ3	1:A:288:VAL:HG11	2.29	0.68
1:A:35:PRO:HA	1:A:296:ASN:HB3	1.75	0.68
1:A:668:ASN:O	1:A:672:MET:HB2	1.93	0.68
1:A:851:LYS:HB3	1:A:852:PRO:HD3	1.76	0.68
1:A:528:LEU:H	1:A:528:LEU:HD22	1.58	0.68
1:A:988:VAL:HG11	1:A:1024:PRO:HG2	1.76	0.68
1:A:589:LEU:HD22	1:A:609:THR:OG1	1.94	0.68
1:A:56:GLN:HB2	1:A:61:VAL:CG2	2.24	0.68
1:A:812:MET:HG3	1:A:813:LEU:N	2.08	0.68
1:A:276:ALA:HB3	1:A:284:VAL:O	1.94	0.68
1:A:1028:LEU:HB2	1:A:1029:PHE:CE2	2.29	0.68
1:A:386:LEU:HD21	1:A:480:PHE:CD2	2.29	0.68
1:A:518:ASN:O	1:A:522:ILE:HG13	1.94	0.68
1:A:288:VAL:HG23	1:A:289:VAL:H	1.57	0.68
1:A:500:LEU:HD23	1:A:500:LEU:N	2.09	0.67
1:A:334:ALA:HA	1:A:1004:ALA:CB	2.24	0.67
1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:PRO:HD2	1.76	0.67
1:A:965:SER:O	1:A:966:GLU:HB2	1.94	0.67
1:A:380:VAL:HG13	1:A:484:TYR:CD2	2.29	0.67
1:A:611:LYS:HG3	1:A:617:ASP:O	1.95	0.67
1:A:279:ASN:HD22	1:A:597:MET:HG2	1.59	0.67
1:A:1002:THR:CB	1:A:1006:SER:HB2	2.25	0.67
1:A:27:GLY:CA	1:A:375:CYS:SG	2.83	0.67
1:A:420:GLU:HB2	1:A:421:TRP:CE3	2.29	0.67
1:A:380:VAL:HG13	1:A:484:TYR:HD2	1.59	0.67
1:A:72:THR:HG22	1:A:113:TYR:HB3	1.76	0.67
1:A:681:ILE:HG22	1:A:682:GLY:N	2.07	0.67
1:A:606:PHE:O	1:A:626:THR:HA	1.95	0.67
1:A:790:THR:HG21	1:A:794:GLN:HE21	1.60	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:796:ILE:CG2	1:A:797:THR:H	2.03	0.67
1:A:341:LYS:HD3	1:A:342:LEU:HD23	1.77	0.66
1:A:969:LEU:O	1:A:973:LEU:HD13	1.96	0.66
1:A:370:LEU:HD22	1:A:403:MET:SD	2.34	0.66
1:A:157:ARG:HH12	1:A:273:ARG:HH12	1.44	0.66
1:A:790:THR:CG2	1:A:796:ILE:CD1	2.73	0.66
1:A:247:VAL:C	1:A:248:LEU:HD23	2.15	0.66
1:A:686:SER:HB3	1:A:819:ARG:HE	1.60	0.66
1:A:573:MET:O	1:A:661:LEU:HB2	1.95	0.66
1:A:386:LEU:HD11	1:A:480:PHE:HD2	1.59	0.66
1:A:265:VAL:O	1:A:265:VAL:HG12	1.95	0.66
1:A:346:PHE:C	1:A:346:PHE:CD1	2.68	0.66
1:A:575:SER:N	1:A:659:ALA:O	2.23	0.66
1:A:718:LEU:O	1:A:720:GLY:N	2.28	0.66
1:A:550:VAL:O	1:A:553:PRO:HD2	1.95	0.66
1:A:1036:LYS:HZ2	1:A:1037:LEU:HD23	1.59	0.66
1:A:80:LYS:HB3	1:A:96:ILE:O	1.96	0.66
1:A:357:LEU:CD2	1:A:415:HIS:ND1	2.60	0.65
1:A:291:LEU:CD1	1:A:300:VAL:HG21	2.26	0.65
1:A:368:ILE:CD1	1:A:368:ILE:C	2.65	0.65
1:A:221:SER:HB3	1:A:228:GLU:CD	2.17	0.65
1:A:356:PHE:CG	1:A:986:MET:HB3	2.31	0.65
1:A:76:VAL:HB	1:A:113:TYR:HD1	1.59	0.65
1:A:669:ARG:HA	1:A:669:ARG:HE	1.60	0.65
1:A:880:LEU:O	1:A:883:ILE:HG22	1.95	0.65
1:A:904:VAL:HG13	1:A:905:PRO:HD3	1.78	0.65
1:A:980:ARG:HH12	1:A:1028:LEU:HA	1.60	0.65
1:A:580:ILE:CD1	1:A:584:GLU:HG2	2.26	0.65
1:A:816:GLU:O	1:A:817:ASN:HB2	1.96	0.65
1:A:753:GLY:HA2	1:A:771:ARG:HB3	1.77	0.65
1:A:1030:ILE:HG13	1:A:1031:ILE:H	1.62	0.65
1:A:37:ASP:CA	1:A:331:ILE:HD11	2.26	0.65
1:A:325:TYR:HD2	1:A:325:TYR:O	1.78	0.65
1:A:741:ALA:O	1:A:744:GLN:HB2	1.97	0.65
1:A:911:GLY:HA2	1:A:1018:GLY:HA3	1.79	0.65
1:A:700:ILE:HD11	1:A:844:ILE:HD11	1.79	0.65
1:A:291:LEU:HD21	1:A:295:LYS:O	1.97	0.65
1:A:736:TYR:CD1	1:A:796:ILE:HD13	2.25	0.65
1:A:497:ILE:CG1	1:A:498:PRO:HD3	2.26	0.65
1:A:86:SER:O	1:A:813:LEU:HD23	1.97	0.65
1:A:416:LYS:O	1:A:420:GLU:HG3	1.97	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:50:LYS:HD2	1:A:92:TYR:CE2	2.32	0.64
1:A:53:TYR:HD2	1:A:65:VAL:HG11	1.62	0.64
1:A:348:VAL:HG11	1:A:993:ALA:HB1	1.79	0.64
1:A:899:LEU:O	1:A:899:LEU:HD22	1.97	0.64
1:A:345:GLU:OE1	1:A:345:GLU:HA	1.97	0.64
1:A:917:TRP:CE3	1:A:918:MET:HG2	2.32	0.64
1:A:13:ARG:NH1	1:A:14:PHE:HE2	1.92	0.64
1:A:526:HIS:N	1:A:527:PRO:HD2	2.13	0.64
1:A:930:PHE:HD1	1:A:1015:PRO:HB2	1.63	0.64
1:A:16:VAL:O	1:A:20:ALA:N	2.30	0.64
1:A:337:ASN:HD22	1:A:1004:ALA:HB3	1.63	0.64
1:A:550:VAL:HG23	1:A:912:ILE:HG21	1.78	0.64
1:A:102:ASP:O	1:A:105:TRP:HB3	1.96	0.64
1:A:188:GLN:HG2	1:A:769:ASN:HB3	1.79	0.64
1:A:998:ILE:HD13	1:A:1009:MET:HB2	1.80	0.64
1:A:1031:ILE:O	1:A:1035:TYR:HB2	1.98	0.64
1:A:57:ALA:HB3	1:A:60:ILE:HG22	1.80	0.64
1:A:88:PHE:CD2	1:A:88:PHE:C	2.71	0.64
1:A:921:HIS:NE2	1:A:1011:ARG:HD3	2.12	0.64
1:A:922:LEU:HG	1:A:926:THR:OG1	1.98	0.64
1:A:936:VAL:HG11	1:A:1020:MET:HE2	1.80	0.64
1:A:660:ASN:OD1	1:A:660:ASN:N	2.30	0.64
1:A:552:TRP:HZ3	1:A:916:TRP:CD2	2.16	0.64
1:A:190:VAL:HG12	1:A:264:LYS:O	1.98	0.64
1:A:48:ILE:HD13	1:A:131:PRO:HD3	1.79	0.64
1:A:142:TYR:C	1:A:142:TYR:CD1	2.71	0.64
1:A:13:ARG:HD2	1:A:14:PHE:CE2	2.33	0.63
1:A:333:ARG:O	1:A:1004:ALA:HB2	1.98	0.63
1:A:291:LEU:HD11	1:A:300:VAL:HG21	1.80	0.63
1:A:591:LYS:O	1:A:595:LEU:HD23	1.98	0.63
1:A:910:GLY:HA3	1:A:1022:THR:CB	2.27	0.63
1:A:354:ALA:HA	1:A:360:VAL:CG1	2.28	0.63
1:A:550:VAL:HB	1:A:909:VAL:HG22	1.80	0.63
1:A:939:GLU:O	1:A:943:VAL:HG12	1.97	0.63
1:A:599:VAL:HG21	1:A:649:LEU:CD2	2.27	0.63
1:A:469:GLY:HA3	1:A:864:LEU:HD21	1.80	0.63
1:A:1029:PHE:O	1:A:1033:ALA:HB3	1.98	0.63
1:A:96:ILE:HD13	1:A:96:ILE:N	2.13	0.63
1:A:12:ASN:O	1:A:15:LEU:HB3	1.99	0.63
1:A:933:LEU:HD23	1:A:934:ALA:N	2.14	0.63
1:A:398:ILE:HG13	1:A:399:ALA:N	2.14	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1020:MET:O	1:A:1024:PRO:HD2	1.99	0.63
1:A:39:LEU:CG	1:A:666:ILE:HG21	2.28	0.63
1:A:103:PRO:HA	1:A:106:ALA:HB3	1.81	0.63
1:A:804:ILE:HG13	1:A:804:ILE:O	1.97	0.63
1:A:539:THR:O	1:A:543:ALA:HB2	1.98	0.63
1:A:987:THR:O	1:A:991:ILE:HD13	1.99	0.63
1:A:784:ARG:O	1:A:799:ALA:CB	2.44	0.63
1:A:247:VAL:O	1:A:248:LEU:HD23	1.99	0.63
1:A:393:LEU:HA	1:A:396:ILE:HG23	1.79	0.63
1:A:217:ALA:H	1:A:233:ALA:HB3	1.63	0.63
1:A:903:SER:HB2	1:A:1030:ILE:HD13	1.80	0.63
1:A:38:ALA:HB2	1:A:390:ILE:HG23	1.80	0.63
1:A:83:ARG:NH1	1:A:816:GLU:OE1	2.31	0.62
1:A:623:MET:HE2	1:A:623:MET:HA	1.81	0.62
1:A:961:PRO:O	1:A:962:GLN:HB2	1.99	0.62
1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HD23	1.64	0.62
1:A:368:ILE:HD12	1:A:368:ILE:O	1.99	0.62
1:A:399:ALA:HB2	1:A:485:ALA:HB1	1.80	0.62
1:A:736:TYR:HE1	1:A:796:ILE:CG2	2.12	0.62
1:A:681:ILE:CG2	1:A:682:GLY:H	2.07	0.62
1:A:163:PHE:O	1:A:167:GLU:HG2	1.99	0.62
1:A:979:LEU:HD12	1:A:980:ARG:N	2.15	0.62
1:A:180:VAL:HG12	1:A:286:GLY:O	1.98	0.62
1:A:411:ILE:O	1:A:415:HIS:CE1	2.51	0.62
1:A:142:TYR:C	1:A:142:TYR:HD1	2.03	0.62
1:A:160:GLN:HE22	1:A:179:SER:HB3	1.59	0.62
1:A:159:LEU:HD12	1:A:163:PHE:HB3	1.81	0.62
1:A:411:ILE:O	1:A:415:HIS:NE2	2.33	0.62
1:A:887:LEU:HD21	1:A:900:ILE:HD12	1.82	0.62
1:A:66:THR:HG21	1:A:86:SER:HB2	1.82	0.62
1:A:201:ILE:HD11	1:A:262:VAL:HG21	1.82	0.62
1:A:224:LEU:HG	1:A:225:ALA:H	1.65	0.62
1:A:936:VAL:HG13	1:A:1020:MET:HE1	1.82	0.62
1:A:453:SER:HB2	1:A:939:GLU:HG2	1.82	0.62
1:A:975:HIS:CD2	1:A:976:GLY:H	2.18	0.62
1:A:980:ARG:O	1:A:984:LYS:HB2	2.00	0.62
1:A:221:SER:CB	1:A:228:GLU:CD	2.68	0.62
1:A:522:ILE:HG22	1:A:526:HIS:CE1	2.35	0.62
1:A:123:ALA:O	1:A:125:VAL:HG23	2.00	0.62
1:A:697:ALA:HB1	1:A:715:ALA:CB	2.29	0.62
1:A:225:ALA:O	1:A:227:ALA:N	2.33	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:561:PHE:O	1:A:563:PRO:HD3	2.00	0.62
1:A:324:THR:CB	1:A:606:PHE:HD2	2.13	0.62
1:A:682:GLY:HA2	1:A:824:ILE:O	2.00	0.62
1:A:211:ASP:OD1	1:A:756:VAL:HG21	1.99	0.62
1:A:565:ILE:HG22	1:A:566:ASN:N	2.13	0.62
1:A:635:GLN:HG3	1:A:636:TRP:CZ3	2.35	0.61
1:A:730:ARG:HA	1:A:730:ARG:HE	1.64	0.61
1:A:433:LYS:HD3	1:A:435:ARG:HD2	1.82	0.61
1:A:999:LEU:HD23	1:A:1010:SER:HB2	1.82	0.61
1:A:24:SER:CB	1:A:372:LEU:CD1	2.78	0.61
1:A:1019:GLY:O	1:A:1023:ALA:N	2.34	0.61
1:A:463:PRO:HG3	1:A:879:THR:CB	2.30	0.61
1:A:520:PHE:O	1:A:524:VAL:HG23	2.00	0.61
1:A:31:ILE:HG23	1:A:32:ILE:N	2.14	0.61
1:A:595:LEU:HD12	1:A:652:THR:O	2.01	0.61
1:A:910:GLY:CA	1:A:1022:THR:OG1	2.49	0.61
1:A:386:LEU:HD11	1:A:480:PHE:HB3	1.82	0.61
1:A:38:ALA:HA	1:A:389:ASN:HB2	1.83	0.61
1:A:984:LYS:HA	1:A:987:THR:CG2	2.30	0.61
1:A:790:THR:CG2	1:A:794:GLN:CG	2.77	0.61
1:A:550:VAL:HG23	1:A:912:ILE:CG2	2.30	0.61
1:A:827:ASP:OD1	1:A:828:ALA:N	2.34	0.61
1:A:332:ASP:HA	1:A:335:ILE:HG22	1.82	0.61
1:A:685:VAL:HG22	1:A:693:ILE:HG23	1.83	0.61
1:A:17:LEU:CD1	1:A:17:LEU:O	2.30	0.61
1:A:409:VAL:CG2	1:A:450:LEU:HG	2.28	0.61
1:A:643:ASP:HA	1:A:646:ILE:HG22	1.83	0.61
1:A:730:ARG:NH1	1:A:733:ALA:HB3	2.14	0.61
1:A:911:GLY:HA2	1:A:1018:GLY:CA	2.31	0.61
1:A:718:LEU:HD11	1:A:814:LYS:HE2	1.82	0.61
1:A:751:VAL:HG12	1:A:752:GLY:N	2.15	0.61
1:A:905:PRO:HA	1:A:908:LEU:HD12	1.81	0.61
1:A:159:LEU:HD12	1:A:159:LEU:O	2.01	0.61
1:A:784:ARG:HG3	1:A:804:ILE:HG12	1.83	0.61
1:A:680:PRO:HG2	1:A:827:ASP:CG	2.22	0.61
1:A:990:VAL:HA	1:A:993:ALA:HB3	1.83	0.61
1:A:13:ARG:CD	1:A:14:PHE:CD2	2.81	0.60
1:A:951:ALA:C	1:A:953:GLU:H	2.04	0.60
1:A:412:GLU:CG	1:A:983:PRO:HG3	2.24	0.60
1:A:613:GLU:O	1:A:613:GLU:HG3	2.01	0.60
1:A:591:LYS:HA	1:A:594:LYS:HE3	1.83	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:790:THR:HG23	1:A:794:GLN:CG	2.32	0.60
1:A:672:MET:O	1:A:673:LEU:HD23	2.01	0.60
1:A:83:ARG:HG3	1:A:83:ARG:O	1.99	0.60
1:A:922:LEU:HA	1:A:926:THR:CG2	2.31	0.60
1:A:53:TYR:O	1:A:54:PRO:C	2.40	0.60
1:A:384:GLN:O	1:A:385:GLY:O	2.20	0.60
1:A:70:THR:O	1:A:82:VAL:HG11	2.01	0.60
1:A:736:TYR:HD1	1:A:796:ILE:CD1	2.11	0.60
1:A:346:PHE:HD1	1:A:347:ILE:N	1.99	0.60
1:A:521:LEU:HD21	1:A:981:VAL:HG11	1.83	0.60
1:A:915:LEU:CD2	1:A:1014:ALA:HB1	2.31	0.60
1:A:552:TRP:CZ3	1:A:916:TRP:CD2	2.89	0.60
1:A:324:THR:HG21	1:A:606:PHE:CG	2.35	0.60
1:A:105:TRP:NE1	1:A:109:ARG:HG3	2.16	0.60
1:A:393:LEU:N	1:A:393:LEU:HD23	2.16	0.60
1:A:604:ARG:HD2	1:A:629:GLN:OE1	2.02	0.60
1:A:243:PHE:O	1:A:246:ILE:HG13	2.01	0.60
1:A:386:LEU:HD11	1:A:480:PHE:CD2	2.37	0.60
1:A:899:LEU:CD2	1:A:1030:ILE:HB	2.31	0.60
1:A:105:TRP:CD1	1:A:106:ALA:CA	2.80	0.60
1:A:761:GLU:O	1:A:762:GLY:O	2.18	0.60
1:A:561:PHE:CD2	1:A:561:PHE:N	2.67	0.60
1:A:903:SER:CB	1:A:1030:ILE:HD13	2.32	0.60
1:A:909:VAL:O	1:A:913:TRP:HD1	1.85	0.60
1:A:949:ARG:CZ	1:A:949:ARG:HA	2.32	0.60
1:A:17:LEU:CD1	1:A:17:LEU:C	2.49	0.60
1:A:168:LEU:O	1:A:170:THR:N	2.35	0.59
1:A:409:VAL:HG11	1:A:450:LEU:HD12	1.84	0.59
1:A:321:ILE:HD13	1:A:321:ILE:N	2.16	0.59
1:A:246:ILE:HD12	1:A:259:LEU:HD12	1.83	0.59
1:A:334:ALA:CA	1:A:1004:ALA:HB1	2.28	0.59
1:A:465:PHE:CD1	1:A:466:THR:N	2.70	0.59
1:A:812:MET:C	1:A:813:LEU:HD22	2.22	0.59
1:A:899:LEU:HG	1:A:1034:ALA:HB3	1.85	0.59
1:A:175:ALA:HB2	1:A:292:ARG:HG2	1.84	0.59
1:A:677:ILE:HG23	1:A:825:TYR:CD1	2.37	0.59
1:A:685:VAL:HG22	1:A:693:ILE:HD12	1.84	0.59
1:A:929:GLY:HA3	1:A:1012:ILE:O	2.02	0.59
1:A:462:ILE:HG23	1:A:465:PHE:CE2	2.38	0.59
1:A:410:MET:O	1:A:410:MET:CE	2.50	0.59
1:A:376:ILE:HG12	1:A:377:ALA:N	2.18	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:947:TYR:O	1:A:948:LEU:HD12	2.03	0.59
1:A:814:LYS:HB3	1:A:823:TRP:CH2	2.38	0.59
1:A:762:GLY:O	1:A:764:ALA:N	2.30	0.59
1:A:162:TRP:CD2	1:A:764:ALA:HB1	2.38	0.59
1:A:436:TRP:HE1	1:A:501:MET:CG	2.16	0.59
1:A:278:LEU:O	1:A:279:ASN:HB2	2.03	0.59
1:A:653:VAL:O	1:A:653:VAL:CG1	2.50	0.59
1:A:728:ILE:HA	1:A:802:ALA:HB2	1.84	0.59
1:A:724:ILE:HD11	1:A:780:PRO:HG3	1.84	0.59
1:A:906:PHE:CB	1:A:1026:LEU:HD13	2.31	0.58
1:A:373:GLY:O	1:A:376:ILE:HG23	2.03	0.58
1:A:545:LEU:HD23	1:A:546:SER:OG	2.02	0.58
1:A:571:LEU:CD2	1:A:665:PRO:HA	2.32	0.58
1:A:163:PHE:CD2	1:A:163:PHE:O	2.56	0.58
1:A:500:LEU:H	1:A:500:LEU:CD2	2.15	0.58
1:A:1023:ALA:HB3	1:A:1024:PRO:HD2	1.84	0.58
1:A:891:PHE:O	1:A:892:ARG:HB3	2.03	0.58
1:A:930:PHE:CD1	1:A:1015:PRO:HB2	2.38	0.58
1:A:523:ARG:C	1:A:523:ARG:HD2	2.23	0.58
1:A:897:ALA:O	1:A:900:ILE:HG23	2.03	0.58
1:A:109:ARG:CA	1:A:109:ARG:NE	2.63	0.58
1:A:59:GLN:O	1:A:63:ASN:OD1	2.20	0.58
1:A:214:ASN:CG	1:A:214:ASN:O	2.41	0.58
1:A:917:TRP:HE3	1:A:918:MET:CG	2.17	0.58
1:A:83:ARG:NH1	1:A:823:TRP:CH2	2.71	0.58
1:A:900:ILE:O	1:A:904:VAL:HG12	2.04	0.58
1:A:396:ILE:O	1:A:399:ALA:HB3	2.04	0.58
1:A:453:SER:CB	1:A:939:GLU:HG2	2.32	0.58
1:A:319:VAL:O	1:A:319:VAL:HG23	2.03	0.58
1:A:620:PRO:HD2	1:A:623:MET:HB2	1.84	0.58
1:A:162:TRP:CD1	1:A:764:ALA:CB	2.84	0.58
1:A:526:HIS:HD2	1:A:529:LEU:HD21	1.69	0.58
1:A:736:TYR:HE1	1:A:796:ILE:HG21	1.68	0.58
1:A:220:SER:OG	1:A:221:SER:N	2.37	0.58
1:A:806:VAL:HG12	1:A:807:SER:N	2.18	0.58
1:A:841:GLN:HG3	1:A:842:LYS:N	2.19	0.58
1:A:899:LEU:CD1	1:A:1031:ILE:HD13	2.33	0.58
1:A:707:VAL:CG2	1:A:708:PRO:HD2	2.28	0.58
1:A:436:TRP:HE1	1:A:501:MET:HG3	1.68	0.58
1:A:529:LEU:CD2	1:A:974:TYR:HB3	2.34	0.58
1:A:467:LEU:HD21	1:A:872:LEU:HD23	1.85	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:998:ILE:O	1:A:998:ILE:HD12	2.04	0.57
1:A:179:SER:O	1:A:613:GLU:CB	2.51	0.57
1:A:365:VAL:HG11	1:A:499:ILE:HG22	1.87	0.57
1:A:399:ALA:CB	1:A:485:ALA:HB1	2.34	0.57
1:A:464:ILE:O	1:A:467:LEU:HD11	2.03	0.57
1:A:550:VAL:HA	1:A:913:TRP:NE1	2.20	0.57
1:A:279:ASN:ND2	1:A:597:MET:CG	2.66	0.57
1:A:42:LEU:CD1	1:A:473:ARG:HD2	2.23	0.57
1:A:683:ILE:O	1:A:683:ILE:HG13	2.03	0.57
1:A:967:GLN:HG2	1:A:967:GLN:O	2.04	0.57
1:A:463:PRO:HG3	1:A:879:THR:OG1	2.04	0.57
1:A:145:VAL:HG23	1:A:320:GLU:N	2.19	0.57
1:A:631:LYS:HD2	1:A:636:TRP:CZ3	2.39	0.57
1:A:497:ILE:O	1:A:500:LEU:HG	2.05	0.57
1:A:273:ARG:NH2	1:A:273:ARG:CG	2.61	0.57
1:A:667:ARG:HB2	1:A:667:ARG:CZ	2.33	0.57
1:A:936:VAL:CG1	1:A:1020:MET:HE1	2.35	0.57
1:A:464:ILE:N	1:A:464:ILE:HD12	2.19	0.57
1:A:527:PRO:O	1:A:531:LYS:HE2	2.05	0.57
1:A:912:ILE:O	1:A:915:LEU:HB2	2.04	0.57
1:A:201:ILE:HD12	1:A:248:LEU:CD1	2.32	0.57
1:A:265:VAL:CG1	1:A:265:VAL:O	2.53	0.57
1:A:37:ASP:HA	1:A:331:ILE:CD1	2.32	0.57
1:A:730:ARG:HE	1:A:730:ARG:CA	2.17	0.57
1:A:669:ARG:HA	1:A:669:ARG:NE	2.19	0.57
1:A:409:VAL:HB	1:A:450:LEU:CG	2.32	0.57
1:A:536:PRO:CA	1:A:1036:LYS:HE2	2.35	0.57
1:A:992:ILE:HG22	1:A:992:ILE:O	2.03	0.57
1:A:56:GLN:HA	1:A:56:GLN:HE21	1.69	0.57
1:A:57:ALA:O	1:A:60:ILE:N	2.36	0.57
1:A:697:ALA:CB	1:A:715:ALA:HB1	2.33	0.57
1:A:569:ASP:OD2	1:A:629:GLN:HA	2.05	0.57
1:A:109:ARG:NE	1:A:112:GLU:OE2	2.35	0.57
1:A:622:GLU:CD	1:A:622:GLU:H	2.08	0.57
1:A:83:ARG:NH1	1:A:83:ARG:HB2	2.20	0.57
1:A:486:MET:HA	1:A:486:MET:HE3	1.86	0.57
1:A:521:LEU:C	1:A:521:LEU:HD23	2.25	0.57
1:A:922:LEU:HD23	1:A:923:SER:H	1.67	0.57
1:A:145:VAL:CG2	1:A:320:GLU:CG	2.73	0.57
1:A:145:VAL:HG11	1:A:322:VAL:CG1	2.35	0.57
1:A:132:ASP:OD1	1:A:132:ASP:O	2.23	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:189:VAL:HG22	1:A:265:VAL:CG2	2.35	0.57
1:A:325:TYR:CD2	1:A:325:TYR:C	2.78	0.56
1:A:103:PRO:O	1:A:106:ALA:N	2.38	0.56
1:A:365:VAL:CG1	1:A:499:ILE:HG22	2.35	0.56
1:A:516:PRO:HA	1:A:519:ARG:HD2	1.86	0.56
1:A:454:LEU:HD12	1:A:493:ALA:HB2	1.87	0.56
1:A:489:ALA:CA	1:A:492:LEU:HB3	2.29	0.56
1:A:929:GLY:O	1:A:1016:MET:HE2	2.05	0.56
1:A:933:LEU:HD11	1:A:1019:GLY:HA3	1.87	0.56
1:A:118:GLN:NE2	1:A:121:LEU:CD2	2.67	0.56
1:A:144:LEU:O	1:A:284:VAL:HG21	2.06	0.56
1:A:687:GLY:O	1:A:688:THR:HB	2.05	0.56
1:A:889:LEU:HD23	1:A:890:ALA:H	1.71	0.56
1:A:680:PRO:HD2	1:A:826:ILE:O	2.05	0.56
1:A:556:LYS:NZ	1:A:558:GLY:HA2	2.20	0.56
1:A:403:MET:CE	1:A:489:ALA:HB2	2.35	0.56
1:A:461:PHE:C	1:A:463:PRO:HD2	2.26	0.56
1:A:914:LEU:HD12	1:A:914:LEU:O	2.06	0.56
1:A:136:VAL:HG22	1:A:670:ILE:HD11	1.86	0.56
1:A:325:TYR:CD2	1:A:325:TYR:O	2.58	0.56
1:A:58:PRO:HD3	1:A:88:PHE:HB2	1.88	0.56
1:A:158:SER:CB	1:A:766:TYR:OH	2.53	0.56
1:A:138:TRP:HE1	1:A:616:THR:HG21	1.69	0.56
1:A:814:LYS:O	1:A:815:THR:HG23	2.06	0.56
1:A:936:VAL:HG11	1:A:1020:MET:CE	2.36	0.56
1:A:291:LEU:O	1:A:293:SER:N	2.39	0.56
1:A:57:ALA:H	1:A:61:VAL:HG23	1.70	0.56
1:A:518:ASN:ND2	1:A:982:ARG:HE	2.03	0.56
1:A:526:HIS:N	1:A:527:PRO:CD	2.69	0.56
1:A:157:ARG:O	1:A:161:ASP:HB2	2.06	0.56
1:A:158:SER:HB3	1:A:766:TYR:HH	1.69	0.56
1:A:138:TRP:HZ3	1:A:288:VAL:HG11	1.69	0.56
1:A:203:LEU:C	1:A:205:GLU:H	2.09	0.56
1:A:500:LEU:H	1:A:500:LEU:HD23	1.68	0.56
1:A:676:GLY:C	1:A:677:ILE:HG13	2.26	0.56
1:A:480:PHE:O	1:A:484:TYR:CD1	2.59	0.56
1:A:535:TRP:HB3	1:A:538:THR:CG2	2.35	0.56
1:A:984:LYS:O	1:A:988:VAL:HG23	2.06	0.56
1:A:88:PHE:O	1:A:88:PHE:HD2	1.89	0.56
1:A:410:MET:O	1:A:410:MET:HE2	2.06	0.56
1:A:701:GLU:HG2	1:A:713:ALA:HB3	1.88	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:998:ILE:HD13	1:A:1006:SER:HB3	1.86	0.55
1:A:899:LEU:CD2	1:A:1034:ALA:HB3	2.36	0.55
1:A:24:SER:HB2	1:A:372:LEU:HD13	1.87	0.55
1:A:40:PRO:HB2	1:A:42:LEU:CD1	2.36	0.55
1:A:237:LEU:HD22	1:A:243:PHE:CE1	2.41	0.55
1:A:884:PHE:C	1:A:886:LEU:N	2.60	0.55
1:A:72:THR:CG2	1:A:113:TYR:HB3	2.36	0.55
1:A:790:THR:HG21	1:A:794:GLN:HG3	1.85	0.55
1:A:43:SER:O	1:A:44:ASP:OD2	2.24	0.55
1:A:493:ALA:O	1:A:496:VAL:HG12	2.05	0.55
1:A:554:LEU:CD2	1:A:912:ILE:HG13	2.36	0.55
1:A:27:GLY:O	1:A:375:CYS:SG	2.58	0.55
1:A:643:ASP:HA	1:A:646:ILE:CG2	2.36	0.55
1:A:260:ARG:HG3	1:A:261:ASP:OD1	2.06	0.55
1:A:579:GLY:O	1:A:580:ILE:HG22	2.07	0.55
1:A:905:PRO:HA	1:A:908:LEU:CD1	2.37	0.55
1:A:66:THR:O	1:A:70:THR:HG23	2.06	0.55
1:A:80:LYS:HD2	1:A:96:ILE:O	2.06	0.55
1:A:760:VAL:HG23	1:A:765:ARG:HE	1.71	0.55
1:A:433:LYS:HD3	1:A:435:ARG:CD	2.37	0.55
1:A:724:ILE:CD1	1:A:780:PRO:HG3	2.36	0.55
1:A:409:VAL:HG12	1:A:450:LEU:HD12	1.88	0.55
1:A:411:ILE:O	1:A:415:HIS:CD2	2.59	0.55
1:A:134:THR:HG23	1:A:136:VAL:N	2.21	0.55
1:A:483:THR:HB	1:A:484:TYR:CD1	2.42	0.55
1:A:140:TYR:HE2	1:A:142:TYR:HB3	1.70	0.55
1:A:567:GLU:OE1	1:A:569:ASP:N	2.40	0.55
1:A:683:ILE:HD11	1:A:824:ILE:HD12	1.89	0.55
1:A:272:ARG:HH11	1:A:275:ILE:CG2	2.15	0.55
1:A:760:VAL:CG2	1:A:765:ARG:HE	2.20	0.55
1:A:655:LEU:HB3	1:A:656:PRO:CD	2.37	0.55
1:A:736:TYR:CE1	1:A:796:ILE:HG21	2.41	0.55
1:A:187:TYR:HB3	1:A:243:PHE:HE2	1.72	0.55
1:A:563:PRO:O	1:A:564:GLN:HB2	2.06	0.55
1:A:380:VAL:HG22	1:A:484:TYR:CE2	2.41	0.55
1:A:546:SER:O	1:A:549:THR:HG22	2.06	0.55
1:A:620:PRO:HD2	1:A:623:MET:CB	2.37	0.55
1:A:723:TYR:CE1	1:A:810:PRO:HD2	2.42	0.55
1:A:908:LEU:O	1:A:912:ILE:HG22	2.07	0.55
1:A:51:THR:HG21	1:A:65:VAL:CG2	2.37	0.55
1:A:590:GLN:OE1	1:A:590:GLN:HA	2.07	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:994:GLY:O	1:A:997:PRO:HD2	2.07	0.55
1:A:1028:LEU:HB2	1:A:1029:PHE:CD2	2.42	0.54
1:A:182:GLY:HA3	1:A:285:ALA:HB2	1.90	0.54
1:A:367:ILE:O	1:A:371:PRO:HD2	2.07	0.54
1:A:739:THR:O	1:A:742:ASP:N	2.40	0.54
1:A:564:GLN:O	1:A:565:ILE:HB	2.07	0.54
1:A:19:GLY:HA2	1:A:22:PHE:CD2	2.41	0.54
1:A:462:ILE:N	1:A:463:PRO:CD	2.70	0.54
1:A:301:ILE:CG2	1:A:305:LYS:HE3	2.37	0.54
1:A:792:MET:O	1:A:793:LYS:C	2.44	0.54
1:A:199:TYR:CD2	1:A:199:TYR:N	2.74	0.54
1:A:952:ILE:O	1:A:956:PRO:HD3	2.07	0.54
1:A:853:GLY:O	1:A:854:THR:HG23	2.06	0.54
1:A:330:LEU:O	1:A:330:LEU:CD1	2.52	0.54
1:A:38:ALA:HA	1:A:389:ASN:HA	1.90	0.54
1:A:529:LEU:HD22	1:A:974:TYR:HB3	1.87	0.54
1:A:960:ASN:N	1:A:961:PRO:HD3	2.22	0.54
1:A:567:GLU:HG2	1:A:664:PRO:CA	2.34	0.54
1:A:697:ALA:O	1:A:715:ALA:HB2	2.07	0.54
1:A:346:PHE:CD1	1:A:347:ILE:HD12	2.43	0.54
1:A:13:ARG:NE	1:A:14:PHE:CE2	2.76	0.54
1:A:38:ALA:HA	1:A:389:ASN:CA	2.38	0.54
1:A:297:ALA:O	1:A:301:ILE:HG13	2.08	0.54
1:A:1036:LYS:NZ	1:A:1037:LEU:HD23	2.22	0.54
1:A:80:LYS:HD3	1:A:81:THR:HG23	1.90	0.54
1:A:565:ILE:CG2	1:A:566:ASN:N	2.71	0.54
1:A:554:LEU:C	1:A:555:ASN:HD22	2.11	0.54
1:A:137:GLY:O	1:A:291:LEU:N	2.31	0.54
1:A:277:GLU:HG3	1:A:282:GLY:O	2.08	0.54
1:A:105:TRP:CE2	1:A:109:ARG:HG3	2.43	0.54
1:A:831:ARG:HD3	1:A:832:ASP:N	2.21	0.54
1:A:497:ILE:HG12	1:A:498:PRO:HD3	1.90	0.54
1:A:980:ARG:HH22	1:A:1027:SER:C	2.11	0.54
1:A:320:GLU:O	1:A:321:ILE:HD13	2.07	0.54
1:A:546:SER:HA	1:A:549:THR:HG22	1.90	0.53
1:A:372:LEU:N	1:A:372:LEU:HD23	2.22	0.53
1:A:173:ASP:CG	1:A:295:LYS:HD3	2.29	0.53
1:A:368:ILE:HG23	1:A:369:SER:N	2.22	0.53
1:A:917:TRP:CE3	1:A:918:MET:CG	2.91	0.53
1:A:949:ARG:HG2	1:A:1035:TYR:OH	2.07	0.53
1:A:51:THR:HG21	1:A:65:VAL:HG21	1.90	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:277:GLU:OE2	1:A:590:GLN:HA	2.08	0.53
1:A:728:ILE:CD1	1:A:728:ILE:N	2.71	0.53
1:A:38:ALA:O	1:A:39:LEU:HB2	2.09	0.53
1:A:461:PHE:HA	1:A:931:ILE:HG21	1.89	0.53
1:A:346:PHE:CE1	1:A:347:ILE:HD12	2.43	0.53
1:A:640:MET:CE	1:A:644:LYS:HG2	2.38	0.53
1:A:899:LEU:HD23	1:A:1034:ALA:CB	2.38	0.53
1:A:378:PHE:O	1:A:381:MET:HE3	2.08	0.53
1:A:55:GLY:O	1:A:56:GLN:HG2	2.07	0.53
1:A:58:PRO:O	1:A:62:GLU:HB2	2.07	0.53
1:A:237:LEU:CD2	1:A:243:PHE:CD1	2.92	0.53
1:A:524:VAL:O	1:A:528:LEU:CD2	2.54	0.53
1:A:157:ARG:NH1	1:A:273:ARG:HH12	2.04	0.53
1:A:277:GLU:CD	1:A:593:ASP:HB3	2.29	0.53
1:A:418:LEU:O	1:A:418:LEU:HD13	2.09	0.53
1:A:140:TYR:CD2	1:A:141:GLU:N	2.76	0.53
1:A:770:LEU:O	1:A:770:LEU:HG	2.08	0.53
1:A:528:LEU:O	1:A:532:VAL:HG22	2.09	0.53
1:A:368:ILE:CG2	1:A:369:SER:N	2.71	0.53
1:A:309:GLU:HA	1:A:312:LYS:HG2	1.89	0.53
1:A:748:THR:HG23	1:A:749:SER:N	2.24	0.53
1:A:823:TRP:N	1:A:823:TRP:HD1	2.05	0.53
1:A:988:VAL:HG21	1:A:1024:PRO:HG3	1.90	0.53
1:A:872:LEU:HD13	1:A:872:LEU:O	2.09	0.53
1:A:948:LEU:HD22	1:A:1031:ILE:HG22	1.91	0.53
1:A:24:SER:HB2	1:A:372:LEU:CD1	2.39	0.53
1:A:133:ALA:HA	1:A:293:SER:HB2	1.90	0.53
1:A:603:ALA:O	1:A:604:ARG:HG3	2.09	0.53
1:A:746:PHE:O	1:A:750:ALA:HB3	2.09	0.53
1:A:574:PRO:CD	1:A:624:VAL:CG1	2.86	0.53
1:A:728:ILE:HD12	1:A:728:ILE:N	2.22	0.53
1:A:240:LEU:O	1:A:244:ASN:ND2	2.42	0.53
1:A:944:MET:HG3	1:A:1031:ILE:HG13	1.90	0.52
1:A:325:TYR:HE2	1:A:327:ARG:HB2	1.74	0.52
1:A:501:MET:SD	1:A:501:MET:N	2.82	0.52
1:A:885:VAL:HG12	1:A:885:VAL:O	2.09	0.52
1:A:187:TYR:CE2	1:A:759:THR:HG21	2.45	0.52
1:A:83:ARG:CD	1:A:675:THR:OG1	2.47	0.52
1:A:57:ALA:O	1:A:60:ILE:HG22	2.10	0.52
1:A:403:MET:HE2	1:A:489:ALA:HB2	1.92	0.52
1:A:960:ASN:N	1:A:960:ASN:OD1	2.42	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:139:ILE:CG2	1:A:301:ILE:HD11	2.39	0.52
1:A:458:THR:CB	1:A:486:MET:HG2	2.39	0.52
1:A:531:LYS:HA	1:A:534:HIS:HB2	1.91	0.52
1:A:469:GLY:HA3	1:A:864:LEU:CD1	2.35	0.52
1:A:883:ILE:O	1:A:887:LEU:N	2.42	0.52
1:A:683:ILE:HG22	1:A:858:PHE:CE1	2.44	0.52
1:A:739:THR:O	1:A:740:VAL:C	2.47	0.52
1:A:976:GLY:HA2	1:A:979:LEU:HG	1.91	0.52
1:A:80:LYS:HE3	1:A:97:PHE:O	2.10	0.52
1:A:224:LEU:HB3	1:A:229:TYR:CE1	2.45	0.52
1:A:420:GLU:HB2	1:A:421:TRP:CZ3	2.45	0.52
1:A:346:PHE:CD1	1:A:347:ILE:N	2.77	0.52
1:A:145:VAL:CG2	1:A:320:GLU:C	2.78	0.52
1:A:624:VAL:O	1:A:624:VAL:HG13	2.09	0.52
1:A:652:THR:O	1:A:653:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:470:GLN:HG3	1:A:471:GLU:N	2.24	0.52
1:A:370:LEU:O	1:A:374:LEU:N	2.40	0.52
1:A:13:ARG:CD	1:A:14:PHE:CE2	2.93	0.52
1:A:980:ARG:NH1	1:A:1028:LEU:HA	2.25	0.52
1:A:277:GLU:CG	1:A:278:LEU:H	2.23	0.52
1:A:645:ILE:HG22	1:A:646:ILE:N	2.24	0.52
1:A:736:TYR:CD1	1:A:796:ILE:CD1	2.91	0.52
1:A:914:LEU:HD23	1:A:1018:GLY:H	1.75	0.52
1:A:953:GLU:C	1:A:956:PRO:HD2	2.31	0.52
1:A:140:TYR:HD2	1:A:141:GLU:N	2.08	0.52
1:A:37:ASP:OD1	1:A:297:ALA:HB2	2.10	0.52
1:A:462:ILE:N	1:A:463:PRO:HD2	2.25	0.51
1:A:917:TRP:CZ3	1:A:918:MET:HG2	2.45	0.51
1:A:217:ALA:O	1:A:233:ALA:HB3	2.09	0.51
1:A:15:LEU:CD2	1:A:16:VAL:HG13	2.40	0.51
1:A:899:LEU:HD11	1:A:1031:ILE:HA	1.91	0.51
1:A:279:ASN:CA	1:A:593:ASP:OD1	2.58	0.51
1:A:469:GLY:HA2	1:A:864:LEU:HD21	1.93	0.51
1:A:463:PRO:HG2	1:A:464:ILE:CD1	2.38	0.51
1:A:105:TRP:HD1	1:A:105:TRP:C	1.99	0.51
1:A:162:TRP:CD2	1:A:764:ALA:CB	2.93	0.51
1:A:311:LEU:O	1:A:313:SER:N	2.43	0.51
1:A:1019:GLY:O	1:A:1023:ALA:HB3	2.06	0.51
1:A:195:ARG:HB3	1:A:261:ASP:O	2.10	0.51
1:A:679:SER:OG	1:A:825:TYR:HB3	2.10	0.51
1:A:420:GLU:HB2	1:A:421:TRP:HE3	1.72	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:718:LEU:C	1:A:720:GLY:H	2.14	0.51
1:A:879:THR:O	1:A:883:ILE:HB	2.11	0.51
1:A:974:TYR:HA	1:A:977:ALA:HB3	1.92	0.51
1:A:688:THR:H	1:A:820:PRO:HD2	1.76	0.51
1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD2	1.93	0.51
1:A:710:VAL:HG13	1:A:828:ALA:HB1	1.92	0.51
1:A:458:THR:O	1:A:461:PHE:HB3	2.11	0.51
1:A:951:ALA:C	1:A:953:GLU:N	2.64	0.51
1:A:142:TYR:CE1	1:A:287:GLY:N	2.70	0.51
1:A:203:LEU:C	1:A:205:GLU:N	2.64	0.51
1:A:199:TYR:HD1	1:A:257:VAL:HG22	1.75	0.51
1:A:299:GLU:OE1	1:A:299:GLU:HA	2.11	0.51
1:A:936:VAL:CG1	1:A:1020:MET:CE	2.89	0.51
1:A:539:THR:O	1:A:543:ALA:CB	2.59	0.51
1:A:983:PRO:HB2	1:A:984:LYS:HD2	1.92	0.51
1:A:169:LYS:HG3	1:A:175:ALA:O	2.11	0.51
1:A:57:ALA:N	1:A:61:VAL:HG23	2.25	0.51
1:A:182:GLY:CA	1:A:285:ALA:HB2	2.40	0.51
1:A:748:THR:HG23	1:A:749:SER:H	1.76	0.51
1:A:304:VAL:HG12	1:A:305:LYS:N	2.24	0.51
1:A:569:ASP:OD1	1:A:569:ASP:N	2.44	0.51
1:A:790:THR:HB	1:A:791:PRO:CD	2.33	0.51
1:A:103:PRO:O	1:A:107:ARG:N	2.29	0.51
1:A:580:ILE:HD12	1:A:581:SER:N	2.26	0.51
1:A:716:GLU:HG3	1:A:719:GLU:HG2	1.93	0.51
1:A:29:TRP:CG	1:A:30:THR:N	2.79	0.51
1:A:92:TYR:CE1	1:A:618:SER:HA	2.46	0.51
1:A:572:TYR:HE2	1:A:653:VAL:HG11	1.76	0.51
1:A:706:THR:HG23	1:A:707:VAL:N	2.26	0.51
1:A:816:GLU:HB3	1:A:821:THR:HG21	1.93	0.50
1:A:1023:ALA:HB3	1:A:1024:PRO:CD	2.41	0.50
1:A:292:ARG:HH21	1:A:292:ARG:HG3	1.76	0.50
1:A:66:THR:O	1:A:70:THR:CG2	2.59	0.50
1:A:157:ARG:NH2	1:A:161:ASP:OD2	2.44	0.50
1:A:996:LEU:HD13	1:A:997:PRO:N	2.26	0.50
1:A:348:VAL:HG11	1:A:993:ALA:CB	2.41	0.50
1:A:492:LEU:HD23	1:A:493:ALA:N	2.26	0.50
1:A:42:LEU:C	1:A:44:ASP:N	2.59	0.50
1:A:118:GLN:HA	1:A:118:GLN:NE2	2.24	0.50
1:A:998:ILE:HD12	1:A:1006:SER:HB3	1.94	0.50
1:A:1033:ALA:HA	1:A:1036:LYS:HG2	1.92	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:518:ASN:HD21	1:A:982:ARG:NE	2.10	0.50
1:A:971:GLU:HA	1:A:974:TYR:CE1	2.47	0.50
1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:PRO:CD	2.41	0.50
1:A:52:SER:O	1:A:125:VAL:HG13	2.11	0.50
1:A:76:VAL:HG22	1:A:77:PRO:O	2.11	0.50
1:A:58:PRO:HG3	1:A:88:PHE:N	2.26	0.50
1:A:574:PRO:HG2	1:A:624:VAL:CG1	2.41	0.50
1:A:649:LEU:O	1:A:652:THR:N	2.45	0.50
1:A:688:THR:O	1:A:688:THR:CG2	2.60	0.50
1:A:686:SER:CB	1:A:819:ARG:HE	2.23	0.50
1:A:547:VAL:HA	1:A:909:VAL:HG21	1.92	0.50
1:A:959:ASN:C	1:A:961:PRO:HD3	2.32	0.50
1:A:790:THR:HG21	1:A:794:GLN:CG	2.41	0.50
1:A:81:THR:OG1	1:A:96:ILE:HD11	2.12	0.50
1:A:237:LEU:CD2	1:A:243:PHE:HD1	2.24	0.50
1:A:354:ALA:N	1:A:360:VAL:HG11	2.27	0.50
1:A:984:LYS:CA	1:A:987:THR:HG22	2.41	0.50
1:A:145:VAL:O	1:A:145:VAL:HG23	2.11	0.50
1:A:762:GLY:O	1:A:763:ILE:CG2	2.60	0.50
1:A:209:ALA:O	1:A:213:SER:OG	2.30	0.50
1:A:899:LEU:HD23	1:A:1034:ALA:HB3	1.93	0.50
1:A:651:ASN:C	1:A:653:VAL:H	2.14	0.50
1:A:177:VAL:HG22	1:A:289:VAL:HG22	1.94	0.50
1:A:580:ILE:HD11	1:A:585:ALA:CB	2.41	0.50
1:A:1023:ALA:CB	1:A:1024:PRO:CD	2.90	0.50
1:A:458:THR:HG23	1:A:459:LEU:HD23	1.93	0.50
1:A:168:LEU:C	1:A:170:THR:N	2.65	0.50
1:A:599:VAL:HG12	1:A:600:PRO:HD2	1.92	0.50
1:A:605:VAL:HG13	1:A:626:THR:HG22	1.93	0.50
1:A:561:PHE:C	1:A:563:PRO:HD3	2.31	0.50
1:A:517:LEU:O	1:A:517:LEU:HD12	2.12	0.50
1:A:684:LYS:HE3	1:A:859:SER:OG	2.12	0.50
1:A:550:VAL:HA	1:A:913:TRP:HE1	1.77	0.50
1:A:121:LEU:CD1	1:A:122:PRO:HD2	2.41	0.50
1:A:694:ASP:O	1:A:698:GLU:HG2	2.11	0.50
1:A:549:THR:O	1:A:913:TRP:HZ2	1.95	0.49
1:A:880:LEU:HA	1:A:883:ILE:HG22	1.94	0.49
1:A:959:ASN:HB3	1:A:961:PRO:HD3	1.94	0.49
1:A:608:LYS:C	1:A:608:LYS:HD3	2.22	0.49
1:A:146:ASP:O	1:A:146:ASP:OD1	2.30	0.49
1:A:728:ILE:CD1	1:A:728:ILE:H	2.25	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:988:VAL:HG11	1:A:1024:PRO:CG	2.42	0.49
1:A:605:VAL:CG1	1:A:606:PHE:N	2.75	0.49
1:A:46:GLN:HB3	1:A:96:ILE:HG22	1.94	0.49
1:A:470:GLN:O	1:A:474:LEU:HD13	2.12	0.49
1:A:201:ILE:CD1	1:A:248:LEU:HD12	2.34	0.49
1:A:272:ARG:NH1	1:A:275:ILE:HG23	2.19	0.49
1:A:217:ALA:O	1:A:233:ALA:CB	2.60	0.49
1:A:118:GLN:HE21	1:A:121:LEU:HD21	1.72	0.49
1:A:355:LEU:HG	1:A:355:LEU:O	2.12	0.49
1:A:488:GLY:O	1:A:492:LEU:CB	2.60	0.49
1:A:10:VAL:C	1:A:13:ARG:HB2	2.32	0.49
1:A:357:LEU:O	1:A:358:TRP:O	2.31	0.49
1:A:458:THR:HG23	1:A:459:LEU:N	2.28	0.49
1:A:145:VAL:CG2	1:A:320:GLU:N	2.76	0.49
1:A:603:ALA:HB2	1:A:631:LYS:HG3	1.95	0.49
1:A:118:GLN:HE22	1:A:121:LEU:HD21	1.76	0.49
1:A:574:PRO:CG	1:A:624:VAL:CG1	2.90	0.49
1:A:184:VAL:HG23	1:A:270:GLU:CB	2.43	0.49
1:A:219:GLY:O	1:A:220:SER:CB	2.60	0.49
1:A:50:LYS:HD2	1:A:92:TYR:CZ	2.48	0.49
1:A:53:TYR:CD2	1:A:65:VAL:HG11	2.45	0.49
1:A:277:GLU:CG	1:A:278:LEU:N	2.75	0.49
1:A:530:LEU:O	1:A:534:HIS:HB2	2.12	0.49
1:A:929:GLY:HA2	1:A:1016:MET:HE3	1.93	0.49
1:A:62:GLU:HG2	1:A:86:SER:OG	2.13	0.49
1:A:81:THR:O	1:A:95:VAL:HG13	2.12	0.49
1:A:955:VAL:HG13	1:A:968:LYS:NZ	2.27	0.49
1:A:345:GLU:OE2	1:A:994:GLY:HA3	2.12	0.49
1:A:551:LEU:O	1:A:551:LEU:HD23	2.12	0.49
1:A:968:LYS:HD3	1:A:968:LYS:C	2.33	0.49
1:A:26:TRP:HZ2	1:A:379:ILE:CD1	2.21	0.49
1:A:45:VAL:HG13	1:A:45:VAL:O	2.13	0.49
1:A:473:ARG:C	1:A:473:ARG:HD3	2.30	0.49
1:A:713:ALA:O	1:A:714:LEU:HD23	2.13	0.49
1:A:48:ILE:HG21	1:A:615:ALA:O	2.13	0.49
1:A:603:ALA:HB2	1:A:631:LYS:CG	2.42	0.49
1:A:366:ALA:O	1:A:369:SER:OG	2.30	0.49
1:A:687:GLY:HA3	1:A:854:THR:CG2	2.41	0.49
1:A:535:TRP:HB3	1:A:538:THR:HG23	1.94	0.48
1:A:463:PRO:HG3	1:A:879:THR:HB	1.94	0.48
1:A:959:ASN:ND2	1:A:961:PRO:HG3	2.27	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:786:LEU:HD23	1:A:787:PRO:CD	2.43	0.48
1:A:673:LEU:O	1:A:675:THR:HG22	2.13	0.48
1:A:816:GLU:H	1:A:821:THR:HG22	1.78	0.48
1:A:83:ARG:CZ	1:A:816:GLU:OE1	2.60	0.48
1:A:536:PRO:CB	1:A:1036:LYS:HD2	2.39	0.48
1:A:546:SER:O	1:A:909:VAL:HG11	2.12	0.48
1:A:142:TYR:OH	1:A:160:GLN:OE1	2.31	0.48
1:A:280:GLY:O	1:A:590:GLN:NE2	2.46	0.48
1:A:607:GLY:CA	1:A:626:THR:HG23	2.44	0.48
1:A:729:ASN:HD22	1:A:732:LYS:HB2	1.78	0.48
1:A:900:ILE:C	1:A:900:ILE:HD13	2.34	0.48
1:A:949:ARG:NE	1:A:949:ARG:HA	2.29	0.48
1:A:727:GLU:HG3	1:A:805:LYS:HE3	1.95	0.48
1:A:686:SER:O	1:A:854:THR:HG22	2.13	0.48
1:A:436:TRP:O	1:A:440:THR:HG23	2.13	0.48
1:A:357:LEU:HD21	1:A:412:GLU:OE1	2.13	0.48
1:A:465:PHE:CG	1:A:479:ALA:CB	2.91	0.48
1:A:554:LEU:HD21	1:A:912:ILE:HG13	1.95	0.48
1:A:740:VAL:HG13	1:A:741:ALA:H	1.77	0.48
1:A:752:GLY:O	1:A:777:ARG:NH1	2.46	0.48
1:A:640:MET:HE2	1:A:644:LYS:HG2	1.96	0.48
1:A:471:GLU:OE2	1:A:865:LEU:HD21	2.14	0.48
1:A:409:VAL:CB	1:A:450:LEU:CG	2.90	0.48
1:A:915:LEU:HD21	1:A:1014:ALA:CB	2.39	0.48
1:A:923:SER:OG	1:A:925:ALA:HB3	2.13	0.48
1:A:284:VAL:HG22	1:A:285:ALA:H	1.77	0.48
1:A:199:TYR:HD2	1:A:199:TYR:N	2.11	0.48
1:A:13:ARG:O	1:A:16:VAL:HG22	2.14	0.48
1:A:50:LYS:HG3	1:A:51:THR:N	2.29	0.48
1:A:771:ARG:NH2	1:A:777:ARG:NH1	2.60	0.48
1:A:887:LEU:CD2	1:A:900:ILE:HD12	2.44	0.48
1:A:649:LEU:HA	1:A:652:THR:OG1	2.13	0.48
1:A:152:ASP:HB3	1:A:155:ASP:HB2	1.94	0.48
1:A:536:PRO:HA	1:A:1036:LYS:CD	2.43	0.48
1:A:996:LEU:O	1:A:996:LEU:HD22	2.14	0.48
1:A:851:LYS:HB3	1:A:852:PRO:HD2	1.90	0.48
1:A:637:ARG:HG2	1:A:640:MET:SD	2.54	0.48
1:A:15:LEU:CD2	1:A:16:VAL:CG1	2.92	0.48
1:A:139:ILE:HG13	1:A:291:LEU:HB2	1.95	0.48
1:A:570:LEU:O	1:A:628:ILE:HG13	2.14	0.48
1:A:53:TYR:CD2	1:A:125:VAL:HG11	2.49	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:760:VAL:CG2	1:A:765:ARG:NE	2.76	0.48
1:A:49:ILE:HG22	1:A:49:ILE:O	2.14	0.48
1:A:899:LEU:CG	1:A:1034:ALA:HB3	2.43	0.48
1:A:913:TRP:C	1:A:915:LEU:N	2.67	0.48
1:A:325:TYR:HD2	1:A:325:TYR:C	2.17	0.48
1:A:72:THR:OG1	1:A:117:VAL:HG21	2.13	0.48
1:A:196:LEU:HD12	1:A:262:VAL:HG11	1.95	0.48
1:A:183:VAL:HG23	1:A:272:ARG:NH2	2.28	0.48
1:A:528:LEU:HD13	1:A:528:LEU:N	2.29	0.47
1:A:880:LEU:HA	1:A:883:ILE:CG2	2.43	0.47
1:A:550:VAL:CB	1:A:909:VAL:HG22	2.43	0.47
1:A:945:LEU:HA	1:A:1031:ILE:HG23	1.96	0.47
1:A:988:VAL:O	1:A:992:ILE:HG12	2.14	0.47
1:A:173:ASP:OD1	1:A:295:LYS:HD3	2.14	0.47
1:A:624:VAL:HG22	1:A:624:VAL:O	2.11	0.47
1:A:376:ILE:O	1:A:380:VAL:HG12	2.14	0.47
1:A:453:SER:HB2	1:A:939:GLU:CG	2.44	0.47
1:A:61:VAL:O	1:A:65:VAL:HG13	2.13	0.47
1:A:873:LYS:O	1:A:877:PRO:HG2	2.14	0.47
1:A:251:SER:HB3	1:A:255:VAL:O	2.14	0.47
1:A:12:ASN:O	1:A:13:ARG:C	2.53	0.47
1:A:522:ILE:CG2	1:A:526:HIS:CE1	2.97	0.47
1:A:635:GLN:O	1:A:636:TRP:HB2	2.15	0.47
1:A:117:VAL:HG22	1:A:120:LYS:HE3	1.96	0.47
1:A:147:ARG:HB2	1:A:318:GLY:HA2	1.96	0.47
1:A:221:SER:HB3	1:A:228:GLU:HG3	1.93	0.47
1:A:883:ILE:HD12	1:A:883:ILE:HA	1.79	0.47
1:A:688:THR:O	1:A:688:THR:HG22	2.13	0.47
1:A:943:VAL:HG21	1:A:984:LYS:NZ	2.28	0.47
1:A:140:TYR:CZ	1:A:323:THR:HG22	2.45	0.47
1:A:769:ASN:OD1	1:A:770:LEU:N	2.47	0.47
1:A:362:SER:CB	1:A:411:ILE:HD12	2.42	0.47
1:A:461:PHE:CD2	1:A:461:PHE:C	2.87	0.47
1:A:525:TYR:HA	1:A:528:LEU:HD23	1.94	0.47
1:A:956:PRO:HA	1:A:959:ASN:CG	2.33	0.47
1:A:196:LEU:HA	1:A:262:VAL:CG1	2.45	0.47
1:A:833:MET:H	1:A:862:PHE:HZ	1.63	0.47
1:A:995:LEU:HB2	1:A:1017:ILE:HD11	1.97	0.47
1:A:453:SER:O	1:A:457:ILE:HG13	2.14	0.47
1:A:62:GLU:O	1:A:66:THR:HG23	2.15	0.47
1:A:405:ASP:O	1:A:408:ILE:CB	2.53	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:HD22	2.29	0.47
1:A:550:VAL:HG22	1:A:554:LEU:HG	1.95	0.47
1:A:723:TYR:OH	1:A:810:PRO:HD2	2.15	0.47
1:A:673:LEU:O	1:A:675:THR:N	2.43	0.47
1:A:933:LEU:HB2	1:A:1016:MET:HA	1.96	0.47
1:A:480:PHE:O	1:A:483:THR:HB	2.15	0.47
1:A:933:LEU:C	1:A:933:LEU:HD23	2.35	0.47
1:A:145:VAL:HG23	1:A:320:GLU:HG2	1.96	0.47
1:A:441:ASP:OD2	1:A:442:ALA:N	2.47	0.47
1:A:553:PRO:HB2	1:A:912:ILE:HD13	1.95	0.47
1:A:31:ILE:HG23	1:A:32:ILE:H	1.80	0.47
1:A:237:LEU:CD1	1:A:243:PHE:CE1	2.91	0.47
1:A:806:VAL:HG12	1:A:807:SER:H	1.80	0.47
1:A:381:MET:HE3	1:A:382:HIS:HB2	1.96	0.46
1:A:749:SER:HA	1:A:754:ALA:HB3	1.96	0.46
1:A:1017:ILE:O	1:A:1020:MET:N	2.47	0.46
1:A:132:ASP:OD2	1:A:292:ARG:HD2	2.16	0.46
1:A:160:GLN:HE21	1:A:179:SER:HB2	1.77	0.46
1:A:612:ALA:O	1:A:613:GLU:HB3	2.16	0.46
1:A:367:ILE:HG12	1:A:368:ILE:N	2.20	0.46
1:A:677:ILE:CG2	1:A:679:SER:HB2	2.43	0.46
1:A:343:LEU:O	1:A:343:LEU:HD12	2.15	0.46
1:A:10:VAL:O	1:A:10:VAL:HG12	2.14	0.46
1:A:13:ARG:NE	1:A:14:PHE:CZ	2.83	0.46
1:A:899:LEU:HD13	1:A:1030:ILE:HD12	1.98	0.46
1:A:88:PHE:CD2	1:A:88:PHE:O	2.68	0.46
1:A:589:LEU:HD12	1:A:589:LEU:O	2.15	0.46
1:A:44:ASP:OD1	1:A:96:ILE:HB	2.16	0.46
1:A:12:ASN:HB3	1:A:15:LEU:HD13	1.96	0.46
1:A:458:THR:HB	1:A:486:MET:CG	2.44	0.46
1:A:31:ILE:CG2	1:A:32:ILE:N	2.78	0.46
1:A:134:THR:CG2	1:A:136:VAL:HB	2.45	0.46
1:A:571:LEU:HD23	1:A:665:PRO:CA	2.41	0.46
1:A:63:ASN:O	1:A:67:TYR:HB2	2.15	0.46
1:A:165:LYS:C	1:A:166:TYR:HD1	2.17	0.46
1:A:342:LEU:CD2	1:A:400:VAL:HG21	2.46	0.46
1:A:602:VAL:O	1:A:602:VAL:HG23	2.14	0.46
1:A:569:ASP:HB3	1:A:628:ILE:O	2.15	0.46
1:A:844:ILE:HG23	1:A:848:VAL:CG2	2.45	0.46
1:A:483:THR:HB	1:A:484:TYR:HD1	1.81	0.46
1:A:170:THR:O	1:A:170:THR:HG22	2.16	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:325:TYR:CE2	1:A:327:ARG:HB2	2.50	0.46
1:A:797:THR:O	1:A:800:ASP:N	2.37	0.46
1:A:640:MET:HA	1:A:644:LYS:HB3	1.98	0.46
1:A:608:LYS:NZ	1:A:617:ASP:OD2	2.45	0.46
1:A:279:ASN:HD21	1:A:597:MET:CE	2.29	0.46
1:A:203:LEU:HA	1:A:206:VAL:HG23	1.96	0.46
1:A:1031:ILE:N	1:A:1032:PRO:HD2	2.31	0.46
1:A:813:LEU:N	1:A:813:LEU:HD22	2.31	0.46
1:A:714:LEU:O	1:A:715:ALA:C	2.54	0.46
1:A:410:MET:O	1:A:410:MET:HE3	2.16	0.46
1:A:980:ARG:HH22	1:A:1027:SER:HB3	1.79	0.46
1:A:683:ILE:HD13	1:A:700:ILE:HG21	1.98	0.46
1:A:896:GLU:O	1:A:899:LEU:HB3	2.17	0.45
1:A:899:LEU:HD11	1:A:1031:ILE:HD13	1.98	0.45
1:A:580:ILE:CD1	1:A:585:ALA:HB2	2.41	0.45
1:A:467:LEU:CD2	1:A:872:LEU:HD23	2.46	0.45
1:A:951:ALA:HB1	1:A:954:ALA:CB	2.47	0.45
1:A:988:VAL:CG2	1:A:1024:PRO:HG3	2.46	0.45
1:A:145:VAL:HG11	1:A:322:VAL:HG13	1.99	0.45
1:A:273:ARG:HH21	1:A:273:ARG:CG	1.94	0.45
1:A:367:ILE:O	1:A:371:PRO:CD	2.64	0.45
1:A:723:TYR:CZ	1:A:810:PRO:HD2	2.50	0.45
1:A:380:VAL:HG22	1:A:484:TYR:CD2	2.51	0.45
1:A:900:ILE:HD13	1:A:901:ILE:N	2.31	0.45
1:A:37:ASP:C	1:A:331:ILE:HD11	2.37	0.45
1:A:48:ILE:HD12	1:A:48:ILE:N	2.24	0.45
1:A:83:ARG:NH2	1:A:816:GLU:OE1	2.49	0.45
1:A:331:ILE:HA	1:A:331:ILE:HD13	1.63	0.45
1:A:214:ASN:HB2	1:A:237:LEU:HD12	1.99	0.45
1:A:366:ALA:CA	1:A:369:SER:OG	2.61	0.45
1:A:356:PHE:HE2	1:A:985:ALA:HB3	1.82	0.45
1:A:965:SER:O	1:A:966:GLU:CB	2.63	0.45
1:A:561:PHE:N	1:A:561:PHE:HD2	2.11	0.45
1:A:1002:THR:C	1:A:1004:ALA:H	2.20	0.45
1:A:756:VAL:O	1:A:768:ILE:O	2.33	0.45
1:A:138:TRP:CE3	1:A:288:VAL:HG21	2.51	0.45
1:A:781:GLN:HA	1:A:781:GLN:OE1	2.17	0.45
1:A:221:SER:CA	1:A:229:TYR:O	2.60	0.45
1:A:496:VAL:C	1:A:500:LEU:HD21	2.30	0.45
1:A:18:MET:O	1:A:22:PHE:CG	2.70	0.45
1:A:891:PHE:O	1:A:892:ARG:CB	2.65	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:596:ILE:HD13	1:A:596:ILE:HA	1.69	0.45
1:A:743:VAL:O	1:A:744:GLN:C	2.55	0.45
1:A:8:ARG:O	1:A:8:ARG:HD3	2.17	0.45
1:A:685:VAL:O	1:A:821:THR:HA	2.17	0.45
1:A:926:THR:O	1:A:928:THR:N	2.50	0.45
1:A:946:MET:C	1:A:948:LEU:H	2.20	0.45
1:A:974:TYR:O	1:A:978:VAL:HG12	2.17	0.45
1:A:68:PRO:HB3	1:A:120:LYS:HB2	1.97	0.45
1:A:324:THR:HG1	1:A:606:PHE:HD2	1.62	0.45
1:A:105:TRP:NE1	1:A:109:ARG:CG	2.80	0.45
1:A:151:HIS:NE2	1:A:316:PRO:HB2	2.31	0.45
1:A:488:GLY:O	1:A:492:LEU:HB2	2.17	0.45
1:A:921:HIS:NE2	1:A:1011:ARG:CD	2.80	0.45
1:A:145:VAL:CG1	1:A:322:VAL:HG13	2.47	0.45
1:A:125:VAL:O	1:A:125:VAL:HG12	2.17	0.45
1:A:279:ASN:HA	1:A:593:ASP:OD1	2.16	0.45
1:A:732:LYS:CD	1:A:800:ASP:O	2.58	0.45
1:A:762:GLY:O	1:A:763:ILE:HG22	2.17	0.45
1:A:722:ARG:HG2	1:A:808:THR:HG22	1.99	0.45
1:A:521:LEU:O	1:A:521:LEU:HD23	2.17	0.45
1:A:642:MET:HG3	1:A:642:MET:O	2.16	0.45
1:A:704:ALA:O	1:A:711:ALA:HB2	2.17	0.45
1:A:15:LEU:C	1:A:15:LEU:CD2	2.60	0.44
1:A:535:TRP:HA	1:A:536:PRO:HD3	1.77	0.44
1:A:117:VAL:O	1:A:117:VAL:HG12	2.17	0.44
1:A:187:TYR:CD1	1:A:187:TYR:N	2.85	0.44
1:A:341:LYS:HD3	1:A:341:LYS:C	2.37	0.44
1:A:966:GLU:HA	1:A:966:GLU:OE1	2.16	0.44
1:A:889:LEU:HD23	1:A:890:ALA:N	2.32	0.44
1:A:903:SER:OG	1:A:1030:ILE:HD13	2.17	0.44
1:A:372:LEU:O	1:A:375:CYS:N	2.50	0.44
1:A:62:GLU:HG2	1:A:86:SER:CB	2.47	0.44
1:A:191:ILE:HA	1:A:263:ALA:HB2	2.00	0.44
1:A:83:ARG:HH11	1:A:83:ARG:HB2	1.82	0.44
1:A:486:MET:HG3	1:A:490:ALA:HB2	2.00	0.44
1:A:168:LEU:HD12	1:A:168:LEU:HA	1.79	0.44
1:A:631:LYS:HD2	1:A:636:TRP:CH2	2.52	0.44
1:A:605:VAL:HG13	1:A:606:PHE:H	1.83	0.44
1:A:184:VAL:HG23	1:A:270:GLU:HB3	2.00	0.44
1:A:773:PRO:O	1:A:775:SER:N	2.50	0.44
1:A:938:ALA:O	1:A:942:VAL:HG23	2.17	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:488:GLY:O	1:A:492:LEU:N	2.50	0.44
1:A:539:THR:HG21	1:A:1033:ALA:HB1	1.97	0.44
1:A:547:VAL:CG1	1:A:547:VAL:O	2.65	0.44
1:A:24:SER:OG	1:A:372:LEU:HD11	2.18	0.44
1:A:168:LEU:C	1:A:170:THR:H	2.21	0.44
1:A:710:VAL:CG2	1:A:828:ALA:HA	2.46	0.44
1:A:778:ASP:O	1:A:779:SER:CB	2.65	0.44
1:A:669:ARG:CA	1:A:669:ARG:HE	2.18	0.44
1:A:13:ARG:O	1:A:14:PHE:C	2.53	0.44
1:A:945:LEU:HB2	1:A:1031:ILE:HD12	2.00	0.44
1:A:949:ARG:CG	1:A:1035:TYR:OH	2.66	0.44
1:A:529:LEU:HA	1:A:532:VAL:HG22	1.98	0.44
1:A:988:VAL:O	1:A:988:VAL:HG12	2.17	0.44
1:A:122:PRO:HB2	1:A:123:ALA:H	1.51	0.44
1:A:538:THR:HA	1:A:541:LEU:HG	1.99	0.44
1:A:554:LEU:HD23	1:A:912:ILE:HG13	1.99	0.44
1:A:34:THR:HG23	1:A:36:VAL:HG12	1.95	0.44
1:A:62:GLU:OE1	1:A:67:TYR:CE2	2.71	0.44
1:A:368:ILE:HD12	1:A:368:ILE:C	2.36	0.44
1:A:719:GLU:O	1:A:809:GLY:O	2.35	0.44
1:A:20:ALA:O	1:A:23:LEU:HB2	2.18	0.44
1:A:660:ASN:HB2	1:A:662:TRP:HE1	1.82	0.44
1:A:798:LEU:C	1:A:800:ASP:N	2.70	0.44
1:A:144:LEU:O	1:A:284:VAL:HG11	2.17	0.44
1:A:910:GLY:HA3	1:A:1022:THR:HB	1.98	0.44
1:A:690:LEU:C	1:A:690:LEU:HD13	2.38	0.44
1:A:685:VAL:HG12	1:A:822:SER:O	2.17	0.44
1:A:978:VAL:HG22	1:A:982:ARG:HH12	1.82	0.44
1:A:984:LYS:N	1:A:984:LYS:HD2	2.33	0.44
1:A:53:TYR:HA	1:A:125:VAL:HG13	1.99	0.44
1:A:591:LYS:O	1:A:594:LYS:N	2.46	0.44
1:A:222:ILE:N	1:A:229:TYR:O	2.48	0.44
1:A:354:ALA:CA	1:A:360:VAL:CG1	2.95	0.44
1:A:690:LEU:HD22	1:A:690:LEU:O	2.18	0.44
1:A:909:VAL:O	1:A:913:TRP:CD1	2.69	0.44
1:A:553:PRO:HB3	1:A:916:TRP:HB2	1.98	0.44
1:A:593:ASP:O	1:A:593:ASP:OD1	2.35	0.44
1:A:158:SER:O	1:A:162:TRP:N	2.33	0.44
1:A:249:LYS:HA	1:A:249:LYS:HD2	1.83	0.44
1:A:964:PHE:CD2	1:A:965:SER:OG	2.65	0.44
1:A:995:LEU:CB	1:A:1017:ILE:HD11	2.48	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:940:PHE:HA	1:A:943:VAL:CG1	2.48	0.43
1:A:982:ARG:N	1:A:983:PRO:CD	2.81	0.43
1:A:521:LEU:HD22	1:A:981:VAL:HG21	1.99	0.43
1:A:656:PRO:O	1:A:658:LEU:N	2.51	0.43
1:A:497:ILE:HA	1:A:500:LEU:HD11	1.99	0.43
1:A:545:LEU:HD23	1:A:546:SER:N	2.33	0.43
1:A:876:VAL:HA	1:A:879:THR:HG22	1.99	0.43
1:A:899:LEU:C	1:A:899:LEU:HD22	2.39	0.43
1:A:944:MET:HB3	1:A:1031:ILE:HG13	2.00	0.43
1:A:955:VAL:N	1:A:956:PRO:CD	2.80	0.43
1:A:139:ILE:CG1	1:A:291:LEU:HB2	2.48	0.43
1:A:142:TYR:CD1	1:A:142:TYR:O	2.71	0.43
1:A:162:TRP:CE2	1:A:764:ALA:HB1	2.53	0.43
1:A:47:VAL:O	1:A:47:VAL:HG12	2.18	0.43
1:A:562:LEU:HG	1:A:562:LEU:O	2.18	0.43
1:A:409:VAL:CB	1:A:450:LEU:HG	2.48	0.43
1:A:390:ILE:C	1:A:390:ILE:HD12	2.38	0.43
1:A:372:LEU:O	1:A:375:CYS:HB2	2.18	0.43
1:A:365:VAL:HG12	1:A:499:ILE:CG2	2.48	0.43
1:A:861:GLN:HG2	1:A:861:GLN:O	2.18	0.43
1:A:922:LEU:HG	1:A:926:THR:HG1	1.82	0.43
1:A:34:THR:OG1	1:A:35:PRO:N	2.51	0.43
1:A:277:GLU:CD	1:A:590:GLN:OE1	2.56	0.43
1:A:996:LEU:H	1:A:997:PRO:HD2	1.83	0.43
1:A:565:ILE:CG2	1:A:566:ASN:H	2.31	0.43
1:A:142:TYR:HD1	1:A:142:TYR:O	2.01	0.43
1:A:623:MET:HA	1:A:623:MET:CE	2.46	0.43
1:A:345:GLU:HG2	1:A:400:VAL:CG1	2.40	0.43
1:A:895:GLY:HA2	1:A:1038:MET:HG2	1.99	0.43
1:A:454:LEU:CD1	1:A:493:ALA:HB2	2.47	0.43
1:A:342:LEU:HD21	1:A:400:VAL:HG21	2.00	0.43
1:A:435:ARG:CD	1:A:435:ARG:H	2.28	0.43
1:A:450:LEU:O	1:A:454:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:478:LEU:O	1:A:479:ALA:C	2.57	0.43
1:A:475:PHE:CZ	1:A:924:VAL:O	2.72	0.43
1:A:635:GLN:HG3	1:A:636:TRP:CE3	2.54	0.43
1:A:45:VAL:HG13	1:A:97:PHE:H	1.84	0.43
1:A:728:ILE:HA	1:A:802:ALA:CB	2.48	0.43
1:A:221:SER:HB3	1:A:228:GLU:OE2	2.16	0.43
1:A:556:LYS:O	1:A:557:VAL:HG22	2.18	0.43
1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD22	1.54	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:147:ARG:H	1:A:318:GLY:C	2.21	0.43
1:A:1004:ALA:O	1:A:1005:GLY:O	2.37	0.43
1:A:142:TYR:HE1	1:A:287:GLY:N	2.12	0.43
1:A:996:LEU:H	1:A:997:PRO:CD	2.32	0.43
1:A:421:TRP:N	1:A:421:TRP:HE3	2.15	0.43
1:A:204:ALA:O	1:A:208:SER:HB2	2.19	0.43
1:A:450:LEU:HA	1:A:450:LEU:HD23	1.86	0.43
1:A:140:TYR:C	1:A:140:TYR:CD2	2.91	0.43
1:A:632:PRO:C	1:A:634:GLU:H	2.22	0.43
1:A:118:GLN:HE21	1:A:121:LEU:CD2	2.32	0.43
1:A:864:LEU:HA	1:A:864:LEU:HD22	1.75	0.43
1:A:394:GLY:O	1:A:398:ILE:HG23	2.18	0.43
1:A:447:GLY:O	1:A:449:ALA:N	2.51	0.43
1:A:451:PHE:CD2	1:A:494:ILE:CG1	3.02	0.43
1:A:38:ALA:CB	1:A:390:ILE:HG23	2.46	0.42
1:A:550:VAL:HG13	1:A:554:LEU:HD12	2.01	0.42
1:A:926:THR:HA	1:A:1011:ARG:O	2.19	0.42
1:A:168:LEU:O	1:A:171:ILE:N	2.52	0.42
1:A:171:ILE:O	1:A:173:ASP:N	2.52	0.42
1:A:296:ASN:O	1:A:297:ALA:C	2.57	0.42
1:A:92:TYR:CD1	1:A:618:SER:HB2	2.53	0.42
1:A:645:ILE:O	1:A:649:LEU:HB2	2.18	0.42
1:A:760:VAL:HG23	1:A:765:ARG:NE	2.33	0.42
1:A:564:GLN:HB3	1:A:565:ILE:H	1.59	0.42
1:A:202:SER:HB3	1:A:205:GLU:HG3	2.00	0.42
1:A:357:LEU:HD23	1:A:415:HIS:HE1	1.72	0.42
1:A:552:TRP:CH2	1:A:916:TRP:CE2	3.06	0.42
1:A:975:HIS:CD2	1:A:976:GLY:N	2.86	0.42
1:A:738:MET:HG3	1:A:791:PRO:HD3	2.01	0.42
1:A:156:LEU:O	1:A:159:LEU:N	2.52	0.42
1:A:451:PHE:CG	1:A:494:ILE:HD11	2.54	0.42
1:A:537:LYS:O	1:A:541:LEU:HG	2.18	0.42
1:A:34:THR:HG23	1:A:36:VAL:HG11	1.97	0.42
1:A:325:TYR:CE1	1:A:665:PRO:HB3	2.44	0.42
1:A:61:VAL:HG21	1:A:89:GLY:N	2.25	0.42
1:A:483:THR:HB	1:A:484:TYR:CE1	2.55	0.42
1:A:326:ASP:O	1:A:328:SER:N	2.52	0.42
1:A:571:LEU:N	1:A:571:LEU:HD22	2.35	0.42
1:A:790:THR:OG1	1:A:791:PRO:N	2.48	0.42
1:A:683:ILE:CD1	1:A:700:ILE:HG21	2.49	0.42
1:A:167:GLU:O	1:A:307:LYS:HE2	2.19	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:963:THR:O	1:A:964:PHE:O	2.37	0.42
1:A:496:VAL:O	1:A:500:LEU:CD2	2.42	0.42
1:A:1020:MET:O	1:A:1024:PRO:CD	2.66	0.42
1:A:462:ILE:HG12	1:A:465:PHE:CE2	2.54	0.42
1:A:134:THR:HG21	1:A:136:VAL:HB	2.00	0.42
1:A:328:SER:O	1:A:331:ILE:HB	2.20	0.42
1:A:143:ALA:HA	1:A:286:GLY:HA3	2.01	0.42
1:A:210:LEU:HD12	1:A:210:LEU:HA	1.70	0.42
1:A:406:ALA:HA	1:A:450:LEU:CD2	2.50	0.42
1:A:1010:SER:OG	1:A:1011:ARG:N	2.53	0.42
1:A:933:LEU:CD1	1:A:1019:GLY:HA3	2.48	0.42
1:A:526:HIS:HA	1:A:529:LEU:CD2	2.49	0.42
1:A:887:LEU:HD22	1:A:900:ILE:HG21	2.02	0.42
1:A:619:ALA:HA	1:A:620:PRO:HD3	1.83	0.42
1:A:335:ILE:HD12	1:A:335:ILE:HA	1.88	0.42
1:A:696:MET:O	1:A:698:GLU:N	2.52	0.42
1:A:497:ILE:CB	1:A:498:PRO:HD3	2.49	0.42
1:A:911:GLY:CA	1:A:1019:GLY:N	2.83	0.42
1:A:666:ILE:N	1:A:666:ILE:HD12	2.34	0.42
1:A:979:LEU:HD12	1:A:979:LEU:C	2.39	0.42
1:A:277:GLU:OE2	1:A:593:ASP:HB3	2.19	0.42
1:A:41:ASP:C	1:A:42:LEU:HD13	2.40	0.42
1:A:199:TYR:HD1	1:A:257:VAL:CG2	2.32	0.42
1:A:464:ILE:HG22	1:A:464:ILE:O	2.20	0.42
1:A:535:TRP:HB3	1:A:538:THR:OG1	2.20	0.42
1:A:896:GLU:CB	1:A:945:LEU:HD11	2.49	0.42
1:A:195:ARG:HB2	1:A:262:VAL:HA	2.02	0.42
1:A:728:ILE:HG13	1:A:743:VAL:HG11	2.02	0.42
1:A:190:VAL:O	1:A:190:VAL:HG13	2.20	0.42
1:A:301:ILE:HD12	1:A:328:SER:CB	2.49	0.42
1:A:279:ASN:ND2	1:A:597:MET:SD	2.86	0.42
1:A:184:VAL:CG2	1:A:270:GLU:OE1	2.57	0.42
1:A:963:THR:O	1:A:964:PHE:CD1	2.72	0.42
1:A:1000:TRP:O	1:A:1000:TRP:CD1	2.72	0.42
1:A:104:TYR:CD1	1:A:104:TYR:N	2.88	0.42
1:A:526:HIS:CD2	1:A:529:LEU:HD21	2.52	0.42
1:A:438:VAL:HG23	1:A:439:ILE:HD13	2.01	0.42
1:A:786:LEU:CD2	1:A:787:PRO:HD2	2.50	0.42
1:A:786:LEU:HD23	1:A:787:PRO:HD2	2.02	0.42
1:A:647:GLU:O	1:A:648:GLU:C	2.58	0.42
1:A:380:VAL:O	1:A:484:TYR:HE2	2.03	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:39:LEU:HG	1:A:666:ILE:HG12	2.02	0.41
1:A:933:LEU:HD12	1:A:1015:PRO:O	2.20	0.41
1:A:635:GLN:CG	1:A:636:TRP:CZ3	3.02	0.41
1:A:123:ALA:O	1:A:124:GLY:C	2.59	0.41
1:A:518:ASN:HD21	1:A:982:ARG:HE	1.62	0.41
1:A:131:PRO:HB2	1:A:132:ASP:H	1.50	0.41
1:A:48:ILE:O	1:A:130:GLY:N	2.53	0.41
1:A:587:SER:C	1:A:589:LEU:N	2.72	0.41
1:A:1021:ILE:HG23	1:A:1022:THR:H	1.85	0.41
1:A:403:MET:HE3	1:A:489:ALA:HB2	2.01	0.41
1:A:1008:VAL:HG22	1:A:1009:MET:N	2.34	0.41
1:A:357:LEU:HD11	1:A:982:ARG:HG2	2.01	0.41
1:A:524:VAL:O	1:A:524:VAL:HG12	2.20	0.41
1:A:66:THR:HG21	1:A:86:SER:CB	2.49	0.41
1:A:729:ASN:HB3	1:A:732:LYS:HB3	2.02	0.41
1:A:620:PRO:HB2	1:A:622:GLU:OE1	2.20	0.41
1:A:713:ALA:C	1:A:714:LEU:HD23	2.40	0.41
1:A:440:THR:O	1:A:444:VAL:HG23	2.20	0.41
1:A:696:MET:C	1:A:698:GLU:N	2.74	0.41
1:A:621:LEU:HA	1:A:621:LEU:HD12	1.92	0.41
1:A:1002:THR:HG21	1:A:1006:SER:H	1.86	0.41
1:A:537:LYS:HD2	1:A:537:LYS:HA	1.81	0.41
1:A:278:LEU:HD23	1:A:605:VAL:O	2.20	0.41
1:A:278:LEU:N	1:A:282:GLY:O	2.53	0.41
1:A:40:PRO:O	1:A:42:LEU:HD13	2.21	0.41
1:A:202:SER:CA	1:A:205:GLU:HG3	2.50	0.41
1:A:1007:GLU:CD	1:A:1007:GLU:N	2.73	0.41
1:A:351:VAL:HG12	1:A:352:VAL:N	2.34	0.41
1:A:386:LEU:HB3	1:A:387:ASN:H	1.71	0.41
1:A:554:LEU:O	1:A:555:ASN:ND2	2.53	0.41
1:A:911:GLY:HA2	1:A:1019:GLY:N	2.35	0.41
1:A:792:MET:O	1:A:794:GLN:N	2.54	0.41
1:A:211:ASP:OD1	1:A:756:VAL:HG23	2.16	0.41
1:A:308:LEU:O	1:A:312:LYS:HG2	2.21	0.41
1:A:865:LEU:HD22	1:A:865:LEU:HA	1.70	0.41
1:A:311:LEU:C	1:A:313:SER:H	2.23	0.41
1:A:772:TYR:HE1	1:A:787:PRO:HD2	1.85	0.41
1:A:650:ASP:OD1	1:A:650:ASP:O	2.38	0.41
1:A:547:VAL:HG13	1:A:547:VAL:O	2.21	0.41
1:A:920:PHE:HB3	1:A:921:HIS:H	1.41	0.41
1:A:948:LEU:HD22	1:A:1031:ILE:CG2	2.50	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:156:LEU:O	1:A:159:LEU:HB3	2.20	0.41
1:A:342:LEU:HA	1:A:342:LEU:HD23	1.66	0.41
1:A:874:LEU:HA	1:A:874:LEU:HD22	1.84	0.41
1:A:385:GLY:O	1:A:386:LEU:CG	2.62	0.41
1:A:896:GLU:HB2	1:A:945:LEU:CD1	2.51	0.41
1:A:134:THR:HG23	1:A:137:GLY:H	1.86	0.41
1:A:139:ILE:HG22	1:A:301:ILE:HD11	2.02	0.41
1:A:812:MET:CG	1:A:813:LEU:N	2.82	0.41
1:A:80:LYS:HB2	1:A:97:PHE:HA	2.03	0.41
1:A:343:LEU:HD12	1:A:343:LEU:C	2.41	0.41
1:A:115:ASN:CG	1:A:116:GLN:N	2.74	0.41
1:A:412:GLU:HG2	1:A:983:PRO:CB	2.50	0.41
1:A:518:ASN:ND2	1:A:982:ARG:NE	2.68	0.41
1:A:139:ILE:HB	1:A:140:TYR:H	1.44	0.41
1:A:61:VAL:HG11	1:A:90:ASP:O	2.21	0.41
1:A:773:PRO:C	1:A:775:SER:H	2.24	0.41
1:A:417:ARG:CB	1:A:442:ALA:HB2	2.51	0.41
1:A:410:MET:HG3	1:A:497:ILE:HG23	2.03	0.41
1:A:492:LEU:C	1:A:492:LEU:HD23	2.41	0.41
1:A:1014:ALA:HB3	1:A:1015:PRO:CD	2.38	0.41
1:A:978:VAL:HG22	1:A:982:ARG:NH1	2.36	0.41
1:A:464:ILE:H	1:A:464:ILE:HD12	1.84	0.41
1:A:486:MET:CA	1:A:486:MET:HE3	2.51	0.41
1:A:525:TYR:O	1:A:525:TYR:CD2	2.74	0.41
1:A:891:PHE:HB2	1:A:896:GLU:OE1	2.21	0.41
1:A:612:ALA:H	1:A:617:ASP:HB3	1.86	0.41
1:A:136:VAL:HG22	1:A:670:ILE:CD1	2.51	0.41
1:A:171:ILE:HA	1:A:172:PRO:HD2	1.78	0.41
1:A:729:ASN:ND2	1:A:732:LYS:HB2	2.36	0.41
1:A:844:ILE:HG12	1:A:848:VAL:HG11	2.02	0.41
1:A:224:LEU:HB3	1:A:229:TYR:HE1	1.82	0.41
1:A:311:LEU:C	1:A:313:SER:N	2.74	0.41
1:A:313:SER:O	1:A:315:LEU:N	2.54	0.41
1:A:677:ILE:N	1:A:677:ILE:HD12	2.36	0.41
1:A:1012:ILE:HG13	1:A:1013:ALA:N	2.35	0.40
1:A:552:TRP:CZ3	1:A:916:TRP:CE2	3.09	0.40
1:A:930:PHE:CD1	1:A:1015:PRO:CB	3.04	0.40
1:A:296:ASN:N	1:A:296:ASN:OD1	2.53	0.40
1:A:571:LEU:HD13	1:A:571:LEU:HA	1.82	0.40
1:A:605:VAL:CG1	1:A:606:PHE:H	2.34	0.40
1:A:260:ARG:HG3	1:A:261:ASP:N	2.36	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:730:ARG:CA	1:A:730:ARG:NE	2.83	0.40
1:A:184:VAL:HG23	1:A:270:GLU:HB2	2.02	0.40
1:A:637:ARG:HA	1:A:638:PRO:HD3	1.96	0.40
1:A:492:LEU:O	1:A:493:ALA:C	2.58	0.40
1:A:720:GLY:O	1:A:811:SER:HB2	2.20	0.40
1:A:896:GLU:HB2	1:A:945:LEU:HD11	2.02	0.40
1:A:518:ASN:HD21	1:A:982:ARG:HG3	1.86	0.40
1:A:32:ILE:HD13	1:A:32:ILE:O	2.20	0.40
1:A:294:GLY:O	1:A:295:LYS:HD2	2.21	0.40
1:A:48:ILE:H	1:A:48:ILE:CD1	2.23	0.40
1:A:570:LEU:HD11	1:A:662:TRP:HB3	2.04	0.40
1:A:596:ILE:HG22	1:A:605:VAL:HG21	2.03	0.40
1:A:330:LEU:CD2	1:A:567:GLU:HA	2.50	0.40
1:A:567:GLU:HG3	1:A:567:GLU:H	1.67	0.40
1:A:567:GLU:OE2	1:A:570:LEU:CA	2.69	0.40
1:A:700:ILE:HD11	1:A:844:ILE:CD1	2.49	0.40
1:A:187:TYR:O	1:A:768:ILE:HA	2.21	0.40
1:A:8:ARG:NH1	1:A:12:ASN:OD1	2.55	0.40
1:A:461:PHE:CD1	1:A:482:LYS:HD3	2.53	0.40
1:A:790:THR:HG21	1:A:794:GLN:NE2	2.31	0.40
1:A:700:ILE:CD1	1:A:844:ILE:HD11	2.48	0.40
1:A:804:ILE:CG1	1:A:804:ILE:O	2.65	0.40
1:A:602:VAL:O	1:A:602:VAL:CG2	2.68	0.40
1:A:409:VAL:HG11	1:A:450:LEU:CD1	2.47	0.40
1:A:50:LYS:HB2	1:A:92:TYR:CE2	2.56	0.40
1:A:591:LYS:O	1:A:594:LYS:HB2	2.21	0.40
1:A:797:THR:O	1:A:798:LEU:C	2.59	0.40
1:A:224:LEU:HD23	1:A:229:TYR:CE1	2.57	0.40
1:A:354:ALA:N	1:A:360:VAL:CG1	2.85	0.40
1:A:198:GLN:HB2	1:A:199:TYR:HD2	1.86	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 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	1008/1055 (96%)	752 (75%)	168 (17%)	88 (9%)	1	17

All (88) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	13	ARG
1	A	36	VAL
1	A	54	PRO
1	A	131	PRO
1	A	139	ILE
1	A	172	PRO
1	A	220	SER
1	A	226	GLU
1	A	292	ARG
1	A	293	SER
1	A	358	TRP
1	A	385	GLY
1	A	469	GLY
1	A	564	GLN
1	A	565	ILE
1	A	578	PRO
1	A	719	GLU
1	A	757	GLY
1	A	762	GLY
1	A	774	GLN
1	A	920	PHE
1	A	962	GLN
1	A	964	PHE
1	A	107	ARG
1	A	122	PRO
1	A	169	LYS
1	A	214	ASN
1	A	296	ASN
1	A	360	VAL
1	A	447	GLY
1	A	479	ALA
1	A	536	PRO
1	A	563	PRO
1	A	653	VAL
1	A	817	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	853	GLY
1	A	885	VAL
1	A	892	ARG
1	A	914	LEU
1	A	923	SER
1	A	965	SER
1	A	966	GLU
1	A	1002	THR
1	A	1005	GLY
1	A	1037	LEU
1	A	42	LEU
1	A	80	LYS
1	A	251	SER
1	A	297	ALA
1	A	312	LYS
1	A	316	PRO
1	A	359	HIS
1	A	448	PRO
1	A	467	LEU
1	A	636	TRP
1	A	642	MET
1	A	665	PRO
1	A	675	THR
1	A	697	ALA
1	A	715	ALA
1	A	763	ILE
1	A	959	ASN
1	A	56	GLN
1	A	79	ALA
1	A	319	VAL
1	A	652	THR
1	A	674	SER
1	A	793	LYS
1	A	829	ARG
1	A	77	PRO
1	A	132	ASP
1	A	327	ARG
1	A	779	SER
1	A	889	LEU
1	A	927	GLY
1	A	102	ASP
1	A	130	GLY

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	687	GLY
1	A	847	LYS
1	A	912	ILE
1	A	996	LEU
1	A	39	LEU
1	A	557	VAL
1	A	256	PRO
1	A	657	GLY
1	A	911	GLY
1	A	315	LEU
1	A	574	PRO

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	834/872 (96%)	613 (74%)	221 (26%)	0 5

All (221) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	6	ILE
1	A	8	ARG
1	A	13	ARG
1	A	15	LEU
1	A	17	LEU
1	A	23	LEU
1	A	29	TRP
1	A	30	THR
1	A	32	ILE
1	A	37	ASP
1	A	40	PRO
1	A	42	LEU
1	A	53	TYR
1	A	60	ILE
1	A	64	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	66	THR
1	A	70	THR
1	A	83	ARG
1	A	88	PHE
1	A	96	ILE
1	A	97	PHE
1	A	99	ASP
1	A	105	TRP
1	A	108	SER
1	A	115	ASN
1	A	118	GLN
1	A	121	LEU
1	A	140	TYR
1	A	142	TYR
1	A	144	LEU
1	A	157	ARG
1	A	160	GLN
1	A	161	ASP
1	A	164	LEU
1	A	166	TYR
1	A	168	LEU
1	A	183	VAL
1	A	184	VAL
1	A	191	ILE
1	A	199	TYR
1	A	201	ILE
1	A	206	VAL
1	A	213	SER
1	A	216	GLU
1	A	222	ILE
1	A	237	LEU
1	A	240	LEU
1	A	241	ASP
1	A	259	LEU
1	A	262	VAL
1	A	271	MET
1	A	273	ARG
1	A	275	ILE
1	A	278	LEU
1	A	283	GLU
1	A	284	VAL
1	A	288	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	292	ARG
1	A	295	LYS
1	A	298	ARG
1	A	311	LEU
1	A	315	LEU
1	A	317	GLU
1	A	320	GLU
1	A	322	VAL
1	A	324	THR
1	A	328	SER
1	A	330	LEU
1	A	331	ILE
1	A	343	LEU
1	A	344	GLU
1	A	346	PHE
1	A	347	ILE
1	A	357	LEU
1	A	358	TRP
1	A	367	ILE
1	A	368	ILE
1	A	374	LEU
1	A	376	ILE
1	A	378	PHE
1	A	379	ILE
1	A	381	MET
1	A	392	SER
1	A	396	ILE
1	A	398	ILE
1	A	410	MET
1	A	421	TRP
1	A	423	HIS
1	A	433	LYS
1	A	435	ARG
1	A	436	TRP
1	A	440	THR
1	A	441	ASP
1	A	451	PHE
1	A	465	PHE
1	A	467	LEU
1	A	470	GLN
1	A	473	ARG
1	A	474	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	475	PHE
1	A	481	THR
1	A	482	LYS
1	A	484	TYR
1	A	486	MET
1	A	497	ILE
1	A	500	LEU
1	A	517	LEU
1	A	528	LEU
1	A	530	LEU
1	A	545	LEU
1	A	547	VAL
1	A	556	LYS
1	A	560	GLU
1	A	561	PHE
1	A	567	GLU
1	A	569	ASP
1	A	570	LEU
1	A	573	MET
1	A	576	THR
1	A	580	ILE
1	A	584	GLU
1	A	592	THR
1	A	596	ILE
1	A	599	VAL
1	A	606	PHE
1	A	608	LYS
1	A	623	MET
1	A	626	THR
1	A	627	THR
1	A	634	GLU
1	A	635	GLN
1	A	637	ARG
1	A	641	THR
1	A	645	ILE
1	A	646	ILE
1	A	652	THR
1	A	654	ARG
1	A	660	ASN
1	A	663	VAL
1	A	667	ARG
1	A	669	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	671	ASP
1	A	674	SER
1	A	675	THR
1	A	677	ILE
1	A	685	VAL
1	A	696	MET
1	A	700	ILE
1	A	705	ARG
1	A	707	VAL
1	A	710	VAL
1	A	728	ILE
1	A	730	ARG
1	A	740	VAL
1	A	745	LEU
1	A	755	MET
1	A	759	THR
1	A	760	VAL
1	A	765	ARG
1	A	770	LEU
1	A	771	ARG
1	A	774	GLN
1	A	775	SER
1	A	778	ASP
1	A	786	LEU
1	A	788	ILE
1	A	789	LEU
1	A	790	THR
1	A	792	MET
1	A	800	ASP
1	A	801	VAL
1	A	803	ASP
1	A	804	ILE
1	A	813	LEU
1	A	815	THR
1	A	823	TRP
1	A	826	ILE
1	A	829	ARG
1	A	831	ARG
1	A	833	MET
1	A	837	VAL
1	A	839	ASP
1	A	844	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	846	GLU
1	A	854	THR
1	A	862	PHE
1	A	865	LEU
1	A	869	ASN
1	A	872	LEU
1	A	874	LEU
1	A	878	MET
1	A	881	MET
1	A	886	LEU
1	A	888	TYR
1	A	889	LEU
1	A	899	LEU
1	A	900	ILE
1	A	904	VAL
1	A	912	ILE
1	A	914	LEU
1	A	920	PHE
1	A	930	PHE
1	A	939	GLU
1	A	943	VAL
1	A	946	MET
1	A	949	ARG
1	A	958	LEU
1	A	975	HIS
1	A	980	ARG
1	A	982	ARG
1	A	990	VAL
1	A	996	LEU
1	A	998	ILE
1	A	1008	VAL
1	A	1012	ILE
1	A	1020	MET
1	A	1021	ILE
1	A	1026	LEU
1	A	1027	SER
1	A	1035	TYR
1	A	1037	LEU

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (16) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	56	GLN
1	A	64	GLN
1	A	87	GLN
1	A	118	GLN
1	A	160	GLN
1	A	244	ASN
1	A	253	ASN
1	A	279	ASN
1	A	437	GLN
1	A	515	ASN
1	A	518	ASN
1	A	526	HIS
1	A	555	ASN
1	A	729	ASN
1	A	794	GLN
1	A	975	HIS

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry ⓘ

Of 1 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

5.7 Other polymers [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	1014/1055 (96%)	-0.31	11 (1%) 82 75	127, 246, 387, 517	0

All (11) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	1000	TRP	4.7
1	A	401	GLY	4.5
1	A	849	GLN	4.2
1	A	26	TRP	3.0
1	A	712	SER	2.9
1	A	949	ARG	2.7
1	A	827	ASP	2.4
1	A	445	GLU	2.4
1	A	25	ILE	2.3
1	A	860	GLY	2.1
1	A	185	LYS	2.1

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](#)

In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. LLDF column lists the quality of electron density of the group with respect to its neighbouring residues in protein, DNA or RNA chains.

The B-factors column lists the minimum, median, 95th percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled 'Q< 0.9' lists the number of atoms with occupancy less than 0.9.

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	LLDF	B-factors(\AA^2)	Q<0.9
2	AG	A	1048	1/1	0.95	0.19	-	271,271,271,271	0

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.