



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Feb 1, 2016 – 05:22 PM GMT

PDB ID : 4I2W
Title : Crystal structure of the myosin chaperone UNC-45 from C.elegans in complex with a Hsp70 peptide
Authors : Clausen, T.; Gazda, L.; Hellerschmied, D.
Deposited on : 2012-11-23
Resolution : 3.60 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

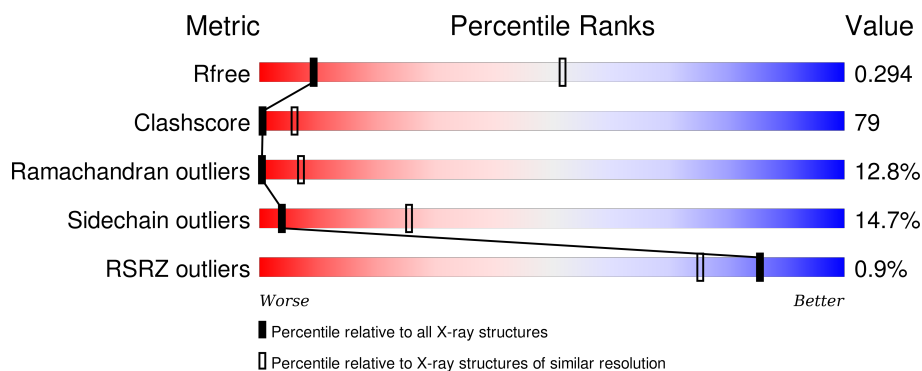
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.60 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	1408 (3.80-3.40)
Clashscore	102246	1010 (3.74-3.46)
Ramachandran outliers	100387	1007 (3.76-3.44)
Sidechain outliers	100360	1007 (3.76-3.44)
RSRZ outliers	91569	1003 (3.78-3.42)

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	961	
2	B	10	

2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 7052 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

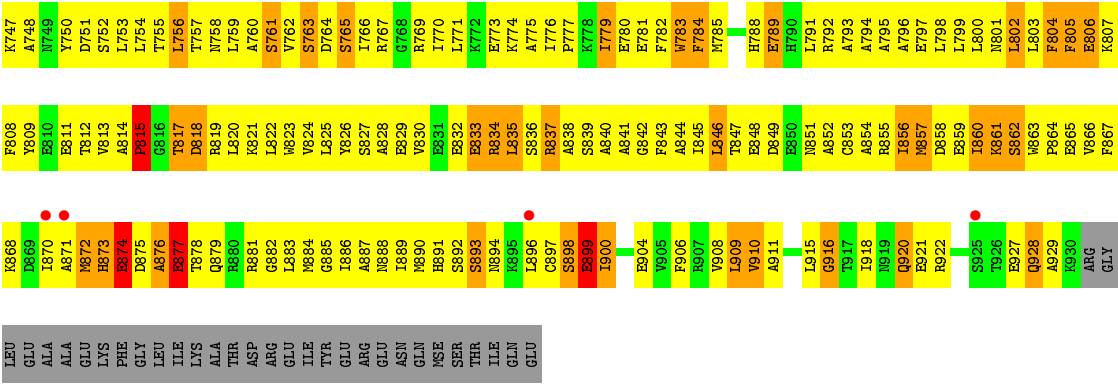
In the tables below, the ZeroOcc column contains the number of atoms modelled with zero occupancy, the AltConf column contains the number of residues with at least one atom in alternate conformation and the Trace column contains the number of residues modelled with at most 2 atoms.

- Molecule 1 is a protein called Protein UNC-45.

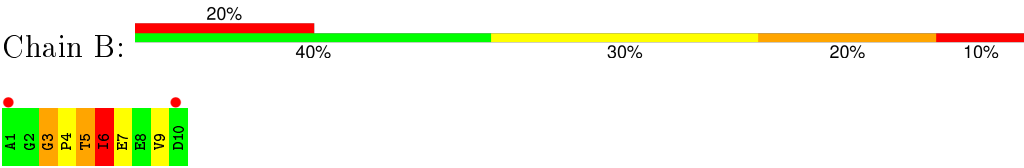
Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	904	Total	C	N	O	S	Se	0	0	0
			6983	4403	1209	1327	19	25			

- Molecule 2 is a protein called Heat shock 70 kDa protein A.

Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf	Trace
2	B	10	Total	C	N	O	0	0	0
			69	41	10	18			



● Molecule 2: Heat shock 70 kDa protein A



4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 61 2 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	86.28 Å 86.28 Å 808.98 Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	47.82 – 3.60 44.94 – 3.60	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.7 (47.82-3.60) 99.9 (44.94-3.60)	Depositor EDS
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	0.14	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	2.11 (at 3.57 Å)	Xtriage
Refinement program	CNS	Depositor
R, R_{free}	0.234 , 0.284 0.246 , 0.294	Depositor DCC
R_{free} test set	1114 reflections (4.99%)	DCC
Wilson B-factor (Å ²)	112.7	Xtriage
Anisotropy	0.261	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.30 , 89.3	EDS
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.41$, $\langle L^2 \rangle = 0.23$	Xtriage
Outliers	0 of 22313 reflections	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.92	EDS
Total number of atoms	7052	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	125.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 2.73% 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 [i](#)

5.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	0.39	0/7058	0.69	0/9490
2	B	0.49	0/69	0.95	1/92 (1.1%)
All	All	0.39	0/7127	0.69	1/9582 (0.0%)

There are no bond length outliers.

All (1) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	B	7	GLU	N-CA-C	-5.16	97.08	111.00

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts [i](#)

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in the chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes within the asymmetric unit, whereas Symm-Clashes lists symmetry related clashes.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	6983	0	7015	1109	0
2	B	69	0	63	17	0
All	All	7052	0	7078	1120	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 79.

All (1120) 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:329:ILE:HG13	1:A:330:PRO:HD2	1.23	1.19
1:A:448:MSE:HB3	1:A:456:MSE:HE2	1.32	1.10
1:A:269:LYS:HB2	1:A:282:VAL:HG11	1.31	1.10
1:A:25:ILE:H	1:A:25:ILE:HD12	1.15	1.08
1:A:498:VAL:HB	1:A:535:PHE:CZ	1.89	1.05
1:A:390:LYS:HG3	1:A:431:ILE:HD12	1.34	1.05
1:A:572:LEU:HD22	1:A:572:LEU:H	1.23	1.04
1:A:541:LYS:HD2	1:A:541:LYS:H	1.20	1.03
1:A:82:LYS:HA	2:B:6:ILE:HD12	1.43	1.00
1:A:353:ILE:HD11	1:A:356:LEU:HB3	1.40	1.00
1:A:157:THR:HG23	1:A:158:GLU:H	1.26	0.98
1:A:660:LYS:HG2	1:A:661:ASN:H	1.27	0.98
1:A:470:LYS:HG3	1:A:471:HIS:H	1.29	0.98
1:A:448:MSE:HB2	1:A:456:MSE:HB3	1.47	0.96
1:A:736:LEU:HA	1:A:739:LEU:HG	1.46	0.95
1:A:287:LYS:HG3	1:A:288:ILE:HD13	1.46	0.95
1:A:677:GLU:HA	1:A:680:ARG:NH1	1.82	0.94
1:A:11:ILE:HD12	1:A:34:ALA:HB2	1.49	0.94
1:A:448:MSE:HE2	1:A:460:ALA:HB2	1.50	0.93
1:A:857:MSE:HG3	1:A:896:LEU:HG	1.52	0.91
1:A:53:ARG:HD2	1:A:57:ARG:HD2	1.51	0.91
1:A:393:VAL:HG21	1:A:424:MSE:HE2	1.51	0.91
1:A:526:ILE:H	1:A:526:ILE:HD13	1.33	0.91
1:A:8:ALA:O	1:A:11:ILE:HG22	1.69	0.91
1:A:853:CYS:HA	1:A:856:ILE:HD11	1.52	0.90
1:A:188:VAL:HB	1:A:189:PRO:HD3	1.52	0.90
1:A:501:LEU:O	1:A:505:CYS:HB2	1.73	0.89
1:A:6:GLN:HE21	1:A:6:GLN:HA	1.38	0.89
1:A:792:ARG:NH2	1:A:835:LEU:HD21	1.86	0.89
1:A:479:LYS:HE2	1:A:479:LYS:HA	1.52	0.89
1:A:351:SER:HB3	1:A:420:PHE:HB2	1.55	0.88
1:A:660:LYS:H	1:A:663:LEU:HD23	1.38	0.88
1:A:7:THR:HG22	1:A:10:GLU:HG2	1.55	0.87
1:A:353:ILE:HG12	1:A:355:GLU:H	1.37	0.87
1:A:26:LYS:HE2	1:A:30:LEU:HD11	1.56	0.87
1:A:303:ASP:HB3	1:A:306:VAL:HG23	1.57	0.86
1:A:232:ASP:OD1	1:A:234:PRO:HG2	1.76	0.86
1:A:557:LEU:O	1:A:563:VAL:HG11	1.76	0.86
1:A:716:ALA:HB1	1:A:754:LEU:HD23	1.56	0.85
1:A:352:GLN:NE2	1:A:357:CYS:HA	1.91	0.84
1:A:344:LEU:H	1:A:344:LEU:HD12	1.43	0.84
1:A:626:THR:HG23	1:A:627:HIS:H	1.42	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:767:ARG:O	1:A:771:LEU:HG	1.78	0.83
1:A:39:THR:O	1:A:46:ARG:HD2	1.78	0.83
1:A:205:THR:O	1:A:209:ILE:HG12	1.78	0.83
1:A:860:ILE:HG23	1:A:863:TRP:HB3	1.61	0.83
1:A:677:GLU:HA	1:A:680:ARG:HH12	1.43	0.82
1:A:539:THR:HG23	1:A:540:GLU:H	1.43	0.82
1:A:543:SER:OG	1:A:546:ILE:HG12	1.80	0.82
1:A:744:VAL:O	1:A:745:GLU:HB2	1.77	0.82
1:A:865:GLU:HA	1:A:868:LYS:HD2	1.61	0.82
1:A:572:LEU:HA	1:A:575:LYS:HD3	1.61	0.82
1:A:263:VAL:HG12	1:A:267:MSE:HE2	1.62	0.81
1:A:864:PRO:O	1:A:868:LYS:HG3	1.81	0.81
1:A:439:ASP:O	1:A:442:THR:HG22	1.81	0.81
1:A:541:LYS:CD	1:A:541:LYS:H	1.94	0.81
1:A:724:PHE:HE2	1:A:732:VAL:HG11	1.46	0.81
1:A:382:PHE:O	1:A:386:ARG:HG3	1.81	0.81
1:A:541:LYS:HG2	1:A:542:TYR:H	1.45	0.80
1:A:329:ILE:HG13	1:A:330:PRO:CD	2.10	0.80
1:A:468:VAL:HG11	1:A:506:LYS:HG2	1.63	0.80
1:A:533:LYS:HG2	1:A:537:LEU:HD11	1.61	0.80
1:A:730:TYR:H	1:A:730:TYR:HD2	1.30	0.80
1:A:745:GLU:CD	1:A:746:GLY:H	1.85	0.80
1:A:148:LEU:HA	1:A:154:ALA:HB2	1.63	0.80
1:A:670:LEU:HD11	1:A:691:LEU:HD23	1.63	0.80
1:A:813:VAL:HG22	1:A:846:LEU:HD21	1.64	0.80
1:A:218:ASN:HB2	1:A:221:ARG:NH1	1.97	0.80
1:A:873:HIS:NE2	1:A:875:ASP:HB2	1.98	0.79
1:A:730:TYR:HB3	1:A:769:ARG:HE	1.48	0.79
1:A:464:ILE:HD11	1:A:485:LEU:HG	1.65	0.79
1:A:282:VAL:HG13	1:A:283:ALA:H	1.47	0.79
1:A:225:PHE:HA	1:A:228:MSE:HE3	1.62	0.79
1:A:595:ILE:O	1:A:599:LEU:HG	1.83	0.79
1:A:226:LEU:HD12	1:A:240:VAL:HG21	1.65	0.78
1:A:748:ALA:HB1	1:A:751:ASP:HB2	1.66	0.78
1:A:753:LEU:HD11	1:A:782:PHE:CD2	2.19	0.78
1:A:71:THR:O	1:A:75:GLU:HG2	1.84	0.78
1:A:415:ILE:HG23	1:A:459:ILE:HD13	1.66	0.78
1:A:415:ILE:HD13	1:A:455:LEU:HD23	1.66	0.78
1:A:323:MSE:HG2	1:A:375:ARG:HG3	1.64	0.77
1:A:282:VAL:HG13	1:A:283:ALA:N	1.99	0.77
1:A:741:HIS:HB3	1:A:742:PRO:HD3	1.67	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:39:THR:HG22	1:A:40:ASP:H	1.50	0.77
1:A:298:GLN:O	1:A:301:LEU:HB2	1.86	0.77
1:A:381:VAL:HG23	1:A:382:PHE:H	1.50	0.76
1:A:425:LEU:HD23	1:A:466:ALA:O	1.84	0.76
1:A:593:ALA:HB1	1:A:665:LEU:HB3	1.68	0.76
1:A:602:ALA:HB1	1:A:668:ARG:HB3	1.67	0.76
1:A:202:GLU:O	1:A:206:VAL:HG23	1.86	0.76
1:A:833:GLU:O	1:A:835:LEU:N	2.19	0.76
1:A:832:GLU:HG3	1:A:833:GLU:H	1.49	0.76
1:A:11:ILE:O	1:A:11:ILE:HD13	1.85	0.75
1:A:900:ILE:HD13	1:A:900:ILE:H	1.51	0.75
1:A:375:ARG:HH11	1:A:375:ARG:HG2	1.49	0.75
1:A:864:PRO:HB2	1:A:868:LYS:HE3	1.68	0.75
1:A:377:GLU:HG3	1:A:378:GLU:N	1.98	0.75
1:A:660:LYS:HG3	1:A:661:ASN:ND2	2.02	0.75
1:A:188:VAL:HG21	1:A:228:MSE:HE1	1.68	0.75
1:A:223:MSE:HE1	1:A:267:MSE:HG2	1.69	0.75
1:A:660:LYS:CG	1:A:661:ASN:H	2.00	0.74
1:A:860:ILE:HG23	1:A:860:ILE:O	1.87	0.74
1:A:660:LYS:HG2	1:A:661:ASN:N	2.02	0.74
1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:THR:N	2.01	0.74
1:A:249:THR:O	1:A:253:VAL:HG23	1.88	0.74
1:A:533:LYS:HD2	1:A:566:TRP:CZ2	2.22	0.74
1:A:792:ARG:HA	1:A:795:ALA:CB	2.17	0.74
1:A:680:ARG:HA	1:A:683:ILE:HG12	1.70	0.74
1:A:480:VAL:O	1:A:484:VAL:HG23	1.89	0.73
1:A:46:ARG:HB2	1:A:47:PRO:HD3	1.70	0.73
1:A:541:LYS:N	1:A:541:LYS:HD2	2.02	0.73
1:A:67:GLN:O	1:A:71:THR:HG22	1.87	0.73
1:A:371:ILE:HA	1:A:374:GLN:HE21	1.51	0.73
1:A:620:LYS:HG3	1:A:621:HIS:H	1.53	0.73
1:A:475:ILE:HG12	1:A:478:LEU:HD12	1.70	0.73
1:A:393:VAL:HG11	1:A:431:ILE:HG21	1.69	0.73
1:A:533:LYS:HG2	1:A:537:LEU:CD1	2.18	0.73
1:A:82:LYS:HZ3	2:B:6:ILE:HA	1.54	0.72
2:B:3:GLY:H	2:B:4:PRO:CD	2.02	0.72
1:A:660:LYS:H	1:A:663:LEU:CD2	2.03	0.72
1:A:580:LEU:HD11	1:A:588:CYS:SG	2.29	0.72
1:A:792:ARG:CZ	1:A:835:LEU:HD21	2.19	0.72
1:A:6:GLN:NE2	1:A:6:GLN:HA	2.04	0.72
1:A:170:LEU:O	1:A:170:LEU:HD23	1.90	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:822:LEU:HD23	1:A:825:LEU:HD12	1.69	0.72
1:A:867:PHE:CE1	1:A:886:ILE:HG13	2.25	0.72
1:A:25:ILE:H	1:A:25:ILE:CD1	1.91	0.71
1:A:847:THR:CG2	1:A:888:ASN:HB2	2.20	0.71
1:A:381:VAL:HG23	1:A:382:PHE:N	2.05	0.71
1:A:11:ILE:HG21	1:A:37:LEU:HD12	1.73	0.71
1:A:415:ILE:HG23	1:A:459:ILE:CD1	2.20	0.71
1:A:498:VAL:HG13	1:A:499:ARG:N	2.04	0.71
1:A:732:VAL:O	1:A:736:LEU:HD11	1.90	0.71
1:A:841:ALA:O	1:A:845:ILE:HD13	1.91	0.71
1:A:526:ILE:HB	1:A:530:LYS:HE3	1.73	0.71
1:A:393:VAL:HG21	1:A:424:MSE:CE	2.21	0.70
1:A:660:LYS:N	1:A:663:LEU:HD23	2.06	0.70
1:A:21:ASP:O	1:A:22:GLN:HB2	1.91	0.70
1:A:142:VAL:HA	1:A:145:MSE:HE2	1.74	0.70
1:A:581:ALA:HB2	1:A:592:LEU:HD23	1.73	0.70
1:A:898:SER:O	1:A:900:ILE:HG23	1.91	0.70
1:A:380:MSE:HG3	1:A:385:LYS:HB3	1.74	0.70
1:A:691:LEU:O	1:A:695:LEU:HD23	1.91	0.70
1:A:478:LEU:HB3	1:A:482:ILE:HD11	1.71	0.70
1:A:830:VAL:HG22	1:A:836:SER:HB3	1.73	0.70
1:A:779:ILE:HG12	1:A:798:LEU:HD23	1.73	0.69
1:A:589:VAL:HG11	1:A:657:THR:HG21	1.74	0.69
1:A:472:GLU:O	1:A:473:ARG:HB3	1.91	0.69
1:A:130:ASP:O	1:A:134:GLN:HB2	1.92	0.69
1:A:415:ILE:CD1	1:A:455:LEU:HD23	2.22	0.69
1:A:572:LEU:N	1:A:572:LEU:HD22	2.05	0.69
1:A:533:LYS:HD2	1:A:566:TRP:CH2	2.28	0.69
1:A:661:ASN:O	1:A:665:LEU:HD23	1.92	0.69
1:A:71:THR:HA	1:A:74:LEU:HD23	1.74	0.69
1:A:475:ILE:HA	1:A:478:LEU:HB2	1.74	0.69
1:A:353:ILE:CD1	1:A:356:LEU:HB3	2.19	0.69
1:A:352:GLN:HE22	1:A:357:CYS:HA	1.58	0.69
1:A:767:ARG:HA	1:A:770:ILE:HD12	1.75	0.68
1:A:833:GLU:HG2	1:A:834:ARG:H	1.59	0.68
1:A:7:THR:CG2	1:A:10:GLU:HG2	2.24	0.68
1:A:53:ARG:HH11	1:A:57:ARG:CZ	2.07	0.68
1:A:697:LYS:H	1:A:697:LYS:HD2	1.57	0.68
1:A:444:ILE:O	1:A:448:MSE:HG2	1.93	0.68
1:A:472:GLU:C	1:A:474:ALA:H	1.97	0.68
1:A:390:LYS:HA	1:A:393:VAL:HG12	1.75	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:6:ILE:O	2:B:6:ILE:HG12	1.93	0.68
1:A:47:PRO:HG3	1:A:76:PHE:CD1	2.28	0.68
1:A:324:HIS:CD2	1:A:331:ARG:HA	2.28	0.68
1:A:629:LYS:HA	1:A:634:TYR:CD2	2.28	0.68
1:A:625:GLU:O	1:A:625:GLU:HG2	1.94	0.68
1:A:375:ARG:HH21	1:A:660:LYS:HZ1	1.42	0.68
1:A:343:LEU:O	1:A:347:LEU:HD13	1.94	0.67
1:A:629:LYS:HA	1:A:634:TYR:HD2	1.59	0.67
1:A:866:VAL:O	1:A:870:ILE:HG22	1.93	0.67
1:A:443:PRO:HG2	1:A:444:ILE:H	1.57	0.67
1:A:808:PHE:HA	1:A:811:GLU:HB3	1.76	0.67
1:A:263:VAL:O	1:A:267:MSE:HG3	1.94	0.67
1:A:716:ALA:C	1:A:718:ALA:H	1.98	0.67
1:A:795:ALA:O	1:A:799:LEU:HD23	1.93	0.67
1:A:406:ASN:HB2	1:A:414:ARG:HH22	1.60	0.67
1:A:586:ALA:HA	1:A:589:VAL:HG22	1.77	0.67
1:A:601:ASN:HD21	1:A:638:ARG:NH2	1.93	0.67
1:A:344:LEU:H	1:A:344:LEU:CD1	2.07	0.67
1:A:82:LYS:HD2	2:B:6:ILE:HB	1.76	0.67
1:A:728:ARG:O	1:A:732:VAL:HG23	1.94	0.67
1:A:439:ASP:O	1:A:443:PRO:HD3	1.95	0.67
1:A:87:ARG:HE	1:A:91:ARG:CZ	2.08	0.67
1:A:872:MSE:HE2	1:A:873:HIS:N	2.10	0.67
1:A:425:LEU:O	1:A:429:VAL:HG23	1.96	0.66
1:A:737:CYS:HB3	1:A:773:GLU:HG2	1.78	0.66
1:A:538:GLU:HB3	1:A:541:LYS:HD3	1.78	0.66
1:A:889:ILE:HG22	1:A:896:LEU:HD23	1.77	0.66
1:A:468:VAL:HB	1:A:506:LYS:HE2	1.76	0.66
1:A:739:LEU:O	1:A:742:PRO:HD2	1.95	0.66
1:A:151:ARG:HB2	1:A:151:ARG:HH11	1.60	0.66
1:A:376:LEU:O	1:A:380:MSE:HE2	1.94	0.66
1:A:472:GLU:HG2	1:A:475:ILE:HD12	1.77	0.66
1:A:827:SER:O	1:A:878:THR:HG21	1.96	0.66
1:A:761:SER:HA	1:A:801:ASN:HB3	1.77	0.66
1:A:305:LYS:HE2	1:A:305:LYS:HA	1.78	0.66
1:A:323:MSE:HA	1:A:379:ASP:OD1	1.95	0.66
1:A:438:ASN:HD21	1:A:440:GLN:HE21	1.43	0.66
1:A:660:LYS:CG	1:A:661:ASN:N	2.57	0.65
1:A:188:VAL:HG21	1:A:228:MSE:CE	2.26	0.65
1:A:187:LEU:CD2	1:A:215:THR:HG21	2.26	0.65
1:A:432:GLY:O	1:A:435:LEU:HB2	1.97	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:560:ASP:O	1:A:564:LYS:HG3	1.96	0.65
1:A:552:GLU:HG2	1:A:556:TYR:HE1	1.61	0.65
1:A:589:VAL:HG13	1:A:654:VAL:O	1.96	0.65
1:A:503:GLY:HA2	1:A:506:LYS:HB3	1.78	0.65
1:A:623:VAL:N	1:A:624:PRO:HD2	2.12	0.65
1:A:311:ARG:NH1	1:A:311:ARG:HB2	2.10	0.65
1:A:26:LYS:HB3	1:A:30:LEU:HD11	1.78	0.65
1:A:883:LEU:HA	1:A:886:ILE:CG2	2.26	0.64
1:A:279:ASP:O	1:A:282:VAL:HG12	1.98	0.64
1:A:212:LEU:O	1:A:216:ILE:HG12	1.96	0.64
1:A:536:LEU:HD23	1:A:547:ARG:HB3	1.78	0.64
1:A:776:ILE:N	1:A:777:PRO:HD2	2.12	0.64
1:A:811:GLU:O	1:A:815:PRO:HG2	1.96	0.64
1:A:338:VAL:HA	1:A:343:LEU:HB2	1.80	0.64
2:B:6:ILE:O	2:B:6:ILE:CG1	2.45	0.64
1:A:35:LEU:O	1:A:38:THR:HG22	1.96	0.64
1:A:82:LYS:NZ	2:B:6:ILE:HA	2.13	0.64
1:A:826:TYR:CD2	1:A:835:LEU:HG	2.31	0.64
1:A:760:ALA:HB2	1:A:770:ILE:CD1	2.28	0.64
1:A:767:ARG:NH1	1:A:805:PHE:HB2	2.13	0.64
1:A:803:LEU:HD21	1:A:812:THR:HG21	1.79	0.64
1:A:820:LEU:O	1:A:824:VAL:HG22	1.98	0.64
1:A:529:ALA:HB1	1:A:566:TRP:CZ3	2.33	0.64
1:A:847:THR:HG22	1:A:888:ASN:HB2	1.80	0.64
1:A:300:MSE:HB2	1:A:306:VAL:HG21	1.79	0.63
1:A:475:ILE:HA	1:A:478:LEU:HD12	1.81	0.63
1:A:390:LYS:C	1:A:392:LYS:H	2.00	0.63
1:A:745:GLU:OE1	1:A:746:GLY:N	2.31	0.63
1:A:648:VAL:HB	1:A:649:PRO:HD3	1.80	0.63
1:A:734:LYS:N	1:A:735:PRO:HD2	2.13	0.63
1:A:53:ARG:CD	1:A:57:ARG:HD2	2.25	0.63
1:A:108:LEU:CA	1:A:117:ILE:HG21	2.29	0.63
1:A:475:ILE:HG22	1:A:475:ILE:O	1.99	0.63
1:A:900:ILE:HD13	1:A:900:ILE:N	2.13	0.63
1:A:756:LEU:HB3	1:A:798:LEU:HD11	1.80	0.63
1:A:677:GLU:CA	1:A:680:ARG:HH12	2.12	0.63
1:A:202:GLU:OE1	1:A:251:ASP:HB2	1.99	0.63
1:A:265:ASN:HD22	1:A:271:ASP:HA	1.62	0.63
1:A:792:ARG:HA	1:A:795:ALA:HB2	1.79	0.63
1:A:602:ALA:HB1	1:A:668:ARG:CB	2.27	0.63
1:A:697:LYS:HD2	1:A:697:LYS: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:55:MSE:HG2	1:A:86:ARG:CZ	2.29	0.63
1:A:240:VAL:O	1:A:243:LEU:HB2	1.99	0.63
1:A:863:TRP:N	1:A:864:PRO:HD2	2.14	0.62
1:A:483:PRO:HA	1:A:486:ARG:CD	2.28	0.62
1:A:639:VAL:O	1:A:643:VAL:HG23	1.99	0.62
1:A:539:THR:HA	1:A:547:ARG:NH1	2.14	0.62
1:A:684:ILE:HD11	1:A:723:SER:HA	1.81	0.62
1:A:833:GLU:CG	1:A:834:ARG:H	2.10	0.62
1:A:853:CYS:HB3	1:A:896:LEU:CD2	2.28	0.62
1:A:46:ARG:O	1:A:49:LEU:N	2.33	0.62
1:A:11:ILE:O	1:A:14:GLU:HB3	1.99	0.62
1:A:31:TYR:HD1	1:A:49:LEU:CD2	2.11	0.62
1:A:601:ASN:ND2	1:A:638:ARG:HH21	1.98	0.62
1:A:393:VAL:HG11	1:A:431:ILE:CG2	2.29	0.62
1:A:883:LEU:HA	1:A:886:ILE:HG22	1.81	0.62
1:A:142:VAL:HA	1:A:145:MSE:CE	2.29	0.62
1:A:387:THR:HG22	1:A:388:ILE:N	2.15	0.62
1:A:400:LEU:HD22	1:A:417:LEU:HB2	1.81	0.62
1:A:433:ILE:C	1:A:435:LEU:H	2.00	0.62
1:A:232:ASP:OD1	1:A:235:LYS:HG3	1.99	0.62
1:A:464:ILE:CD1	1:A:485:LEU:HG	2.30	0.62
1:A:375:ARG:HH21	1:A:660:LYS:NZ	1.96	0.62
1:A:433:ILE:HA	1:A:436:ILE:CD1	2.29	0.62
1:A:855:ARG:O	1:A:859:GLU:HB3	2.00	0.62
1:A:303:ASP:HB3	1:A:306:VAL:CG2	2.30	0.62
1:A:534:LYS:O	1:A:538:GLU:HG2	2.00	0.62
1:A:806:GLU:O	1:A:808:PHE:N	2.32	0.62
1:A:165:ASN:O	1:A:169:VAL:HG23	2.00	0.62
1:A:438:ASN:O	1:A:440:GLN:N	2.32	0.61
1:A:323:MSE:HE3	1:A:334:SER:HB3	1.80	0.61
1:A:684:ILE:HD13	1:A:684:ILE:O	2.00	0.61
1:A:287:LYS:CG	1:A:288:ILE:HD13	2.26	0.61
1:A:187:LEU:HD23	1:A:215:THR:HG21	1.80	0.61
1:A:502:VAL:HG12	1:A:503:GLY:N	2.15	0.61
1:A:505:CYS:HA	1:A:528:LEU:HD13	1.83	0.61
1:A:740:LEU:HD12	1:A:782:PHE:CZ	2.36	0.61
1:A:48:VAL:HG13	1:A:49:LEU:N	2.16	0.61
1:A:799:LEU:HA	1:A:802:LEU:HB2	1.82	0.61
1:A:93:GLN:C	1:A:95:GLY:H	2.03	0.61
1:A:381:VAL:HG23	1:A:382:PHE:CD1	2.35	0.61
1:A:691:LEU:C	1:A:695:LEU:HD23	2.20	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:792:ARG:HA	1:A:795:ALA:HB3	1.82	0.61
1:A:577:LEU:HD22	1:A:592:LEU:HD13	1.83	0.61
1:A:270:MSE:HB3	1:A:278:PRO:HB3	1.83	0.61
1:A:691:LEU:HG	1:A:695:LEU:HD21	1.83	0.60
1:A:407:ASP:O	1:A:409:GLU:N	2.34	0.60
1:A:262:ARG:HH11	1:A:262:ARG:HG3	1.66	0.60
1:A:817:THR:O	1:A:819:ARG:N	2.34	0.60
1:A:557:LEU:O	1:A:563:VAL:HG21	2.02	0.60
1:A:890:MSE:HB2	1:A:897:CYS:HA	1.82	0.60
1:A:643:VAL:HA	1:A:647:ALA:HB3	1.82	0.60
1:A:836:SER:OG	1:A:837:ARG:N	2.35	0.60
1:A:380:MSE:HE3	1:A:389:PHE:CD2	2.37	0.60
1:A:806:GLU:HA	1:A:809:TYR:HB3	1.83	0.60
1:A:552:GLU:HG2	1:A:556:TYR:CE1	2.35	0.60
1:A:762:VAL:O	1:A:763:SER:HB3	2.01	0.60
1:A:441:LEU:C	1:A:443:PRO:HD2	2.22	0.60
1:A:448:MSE:HE2	1:A:460:ALA:CB	2.29	0.60
1:A:375:ARG:NH2	1:A:660:LYS:NZ	2.50	0.60
1:A:308:ALA:O	1:A:311:ARG:HB3	2.02	0.60
1:A:506:LYS:HG2	1:A:506:LYS:O	2.02	0.60
1:A:690:VAL:O	1:A:693:LEU:HB3	2.02	0.60
1:A:867:PHE:CD1	1:A:886:ILE:HG13	2.36	0.60
1:A:371:ILE:HG13	1:A:372:CYS:N	2.16	0.60
1:A:422:ILE:O	1:A:426:GLN:HG3	2.01	0.59
1:A:70:CYS:SG	1:A:86:ARG:HB2	2.43	0.59
1:A:833:GLU:HG2	1:A:834:ARG:N	2.17	0.59
1:A:646:GLY:C	1:A:648:VAL:H	2.05	0.59
1:A:304:PRO:HA	1:A:360:PRO:HD2	1.84	0.59
1:A:697:LYS:H	1:A:697:LYS:CD	2.15	0.59
1:A:853:CYS:HA	1:A:856:ILE:CD1	2.29	0.59
1:A:256:THR:O	1:A:259:LEU:HB2	2.02	0.59
1:A:826:TYR:HD2	1:A:835:LEU:HG	1.66	0.59
1:A:830:VAL:HB	1:A:873:HIS:NE2	2.17	0.59
1:A:539:THR:HG23	1:A:540:GLU:N	2.15	0.59
1:A:828:ALA:O	1:A:830:VAL:HG23	2.01	0.59
1:A:48:VAL:O	1:A:52:ASN:ND2	2.36	0.59
1:A:225:PHE:HA	1:A:228:MSE:CE	2.30	0.59
1:A:182:TRP:CE3	1:A:184:GLN:HA	2.38	0.59
1:A:581:ALA:HB2	1:A:592:LEU:CD2	2.31	0.59
1:A:856:ILE:HG13	1:A:857:MSE:H	1.67	0.59
1:A:406:ASN:HB2	1:A:414:ARG:NH2	2.17	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:323:MSE:HG2	1:A:375:ARG:CG	2.30	0.59
1:A:403:ARG:HD2	1:A:413:TYR:CE1	2.38	0.59
1:A:792:ARG:HH22	1:A:835:LEU:HD21	1.68	0.59
1:A:847:THR:HG21	1:A:888:ASN:HB2	1.83	0.59
1:A:677:GLU:CA	1:A:680:ARG:NH1	2.62	0.59
1:A:375:ARG:HH11	1:A:375:ARG:CG	2.15	0.59
1:A:832:GLU:O	1:A:833:GLU:HB2	2.02	0.59
1:A:883:LEU:HD13	1:A:922:ARG:HA	1.85	0.59
1:A:226:LEU:HD22	1:A:263:VAL:HG13	1.85	0.59
1:A:726:GLY:O	1:A:727:GLN:HB3	2.02	0.59
1:A:192:LEU:HA	1:A:195:ILE:HD12	1.85	0.59
1:A:470:LYS:HG3	1:A:471:HIS:N	2.09	0.58
1:A:793:ALA:O	1:A:797:GLU:HG3	2.03	0.58
2:B:3:GLY:N	2:B:4:PRO:CD	2.66	0.58
1:A:875:ASP:O	1:A:877:GLU:N	2.36	0.58
1:A:657:THR:O	1:A:659:SER:N	2.35	0.58
1:A:56:ALA:O	1:A:59:LYS:HB2	2.03	0.58
1:A:359:TYR:O	1:A:359:TYR:HD1	1.86	0.58
1:A:262:ARG:HH11	1:A:262:ARG:CG	2.15	0.58
1:A:448:MSE:HE1	1:A:459:ILE:HG13	1.85	0.58
1:A:282:VAL:CG1	1:A:283:ALA:H	2.15	0.58
1:A:323:MSE:CG	1:A:375:ARG:HG3	2.31	0.58
1:A:662:ALA:O	1:A:665:LEU:HB2	2.03	0.58
1:A:879:GLN:HG3	1:A:918:ILE:CB	2.34	0.58
1:A:145:MSE:HE1	1:A:170:LEU:HD13	1.83	0.58
1:A:845:ILE:HD12	1:A:845:ILE:N	2.19	0.58
1:A:707:ALA:O	1:A:710:ALA:HB3	2.03	0.58
1:A:366:ARG:HH12	1:A:419:CYS:HB3	1.68	0.58
1:A:380:MSE:O	1:A:381:VAL:HG22	2.04	0.58
1:A:157:THR:HG23	1:A:158:GLU:N	2.09	0.58
1:A:739:LEU:C	1:A:742:PRO:HD2	2.24	0.58
1:A:48:VAL:O	1:A:51:ARG:HB3	2.04	0.58
1:A:791:LEU:O	1:A:795:ALA:HB2	2.04	0.58
1:A:873:HIS:O	1:A:875:ASP:N	2.36	0.58
1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:HE21	2.07	0.58
1:A:709:HIS:CE1	1:A:748:ALA:HB2	2.39	0.58
1:A:150:PHE:CD2	1:A:190:PHE:HD1	2.21	0.58
1:A:483:PRO:HA	1:A:486:ARG:HD2	1.85	0.58
1:A:651:CYS:O	1:A:655:SER:HB3	2.04	0.58
1:A:420:PHE:O	1:A:424:MSE:HG2	2.04	0.58
1:A:82:LYS:O	1:A:86:ARG:HG3	2.03	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:245:CYS:O	1:A:246:LYS:C	2.42	0.58
1:A:733:VAL:C	1:A:735:PRO:HD2	2.24	0.57
1:A:752:SER:O	1:A:756:LEU:HD22	2.03	0.57
1:A:498:VAL:HG13	1:A:499:ARG:H	1.68	0.57
1:A:401:ILE:HD12	1:A:417:LEU:HD21	1.86	0.57
1:A:573:LEU:O	1:A:577:LEU:HB2	2.03	0.57
1:A:730:TYR:HD2	1:A:730:TYR:N	2.02	0.57
1:A:158:GLU:O	1:A:162:THR:HG23	2.04	0.57
1:A:167:LEU:O	1:A:171:CYS:HB2	2.03	0.57
1:A:781:GLU:C	1:A:783:TRP:H	2.08	0.57
1:A:365:THR:O	1:A:369:VAL:HG23	2.03	0.57
1:A:183:ASN:HB3	1:A:186:ALA:HB3	1.85	0.57
1:A:637:LYS:C	1:A:637:LYS:HD3	2.25	0.57
1:A:699:ALA:O	1:A:704:LYS:HG2	2.05	0.57
1:A:53:ARG:HD2	1:A:57:ARG:CD	2.29	0.57
1:A:244:MSE:CA	1:A:256:THR:HG21	2.35	0.57
1:A:142:VAL:CG1	1:A:143:THR:N	2.68	0.57
1:A:324:HIS:ND1	1:A:325:MSE:N	2.53	0.57
1:A:480:VAL:O	1:A:483:PRO:HD2	2.05	0.57
1:A:428:PRO:O	1:A:430:ASP:N	2.37	0.57
1:A:733:VAL:N	1:A:735:PRO:HD2	2.19	0.57
1:A:774:LYS:HG2	1:A:774:LYS:O	2.05	0.57
1:A:691:LEU:O	1:A:694:ARG:N	2.37	0.57
1:A:626:THR:HG23	1:A:627:HIS:N	2.14	0.57
1:A:384:THR:O	1:A:388:ILE:HG13	2.05	0.57
1:A:364:GLU:O	1:A:366:ARG:N	2.36	0.57
1:A:870:ILE:HD11	1:A:882:GLY:HA2	1.87	0.57
1:A:574:LEU:O	1:A:578:VAL:HG23	2.04	0.57
1:A:114:ASP:O	1:A:116:GLY:N	2.38	0.57
1:A:258:ILE:HD13	1:A:258:ILE:N	2.20	0.57
1:A:442:THR:N	1:A:443:PRO:HD2	2.20	0.56
1:A:478:LEU:O	1:A:482:ILE:HG12	2.05	0.56
1:A:541:LYS:HG2	1:A:542:TYR:HD1	1.69	0.56
1:A:150:PHE:CG	1:A:190:PHE:HB3	2.40	0.56
1:A:723:SER:HG	1:A:724:PHE:HD1	1.51	0.56
1:A:479:LYS:HA	1:A:479:LYS:CE	2.30	0.56
1:A:709:HIS:HE1	1:A:713:LYS:HD3	1.69	0.56
1:A:536:LEU:HG	1:A:550:ALA:HB1	1.88	0.56
1:A:150:PHE:HD2	1:A:190:PHE:HD1	1.52	0.56
1:A:642:LEU:HD22	1:A:647:ALA:HB2	1.87	0.56
1:A:309:VAL:HA	1:A:312:GLU:OE1	2.06	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:659:SER:O	1:A:660:LYS:HB3	2.05	0.56
1:A:526:ILE:O	1:A:529:ALA:HB3	2.05	0.56
1:A:782:PHE:O	1:A:792:ARG:HG2	2.06	0.56
1:A:890:MSE:HE2	1:A:928:GLN:CB	2.36	0.56
1:A:538:GLU:CB	1:A:541:LYS:HD3	2.36	0.56
1:A:820:LEU:HD12	1:A:855:ARG:HB2	1.87	0.56
1:A:920:GLN:C	1:A:922:ARG:H	2.09	0.56
1:A:572:LEU:CA	1:A:575:LYS:HD3	2.32	0.56
1:A:602:ALA:O	1:A:668:ARG:HD3	2.06	0.56
1:A:498:VAL:CG1	1:A:499:ARG:N	2.69	0.56
1:A:548:ARG:HH12	1:A:587:LEU:HD22	1.70	0.56
1:A:58:LEU:O	1:A:58:LEU:HD13	2.06	0.56
1:A:400:LEU:HD13	1:A:417:LEU:HA	1.87	0.56
1:A:769:ARG:HH11	1:A:769:ARG:HG2	1.71	0.56
1:A:807:LYS:HD2	1:A:807:LYS:N	2.21	0.56
1:A:837:ARG:HB3	1:A:881:ARG:HH12	1.71	0.56
1:A:474:ALA:C	1:A:476:ASN:H	2.09	0.55
1:A:736:LEU:HA	1:A:739:LEU:CG	2.26	0.55
1:A:883:LEU:HD13	1:A:922:ARG:CA	2.35	0.55
1:A:552:GLU:O	1:A:555:SER:HB3	2.07	0.55
1:A:415:ILE:HD13	1:A:455:LEU:CD2	2.33	0.55
1:A:663:LEU:H	1:A:663:LEU:HD22	1.70	0.55
1:A:47:PRO:HG3	1:A:76:PHE:CG	2.42	0.55
1:A:801:ASN:HA	1:A:804:PHE:HB2	1.89	0.55
1:A:601:ASN:ND2	1:A:638:ARG:NH2	2.53	0.55
1:A:401:ILE:HG23	1:A:402:SER:N	2.21	0.55
1:A:570:ASP:OD2	1:A:572:LEU:HD23	2.06	0.55
1:A:493:ASP:OD2	1:A:495:THR:HG22	2.05	0.55
1:A:282:VAL:CG1	1:A:283:ALA:N	2.68	0.55
1:A:657:THR:C	1:A:659:SER:H	2.09	0.55
1:A:736:LEU:HD12	1:A:736:LEU:H	1.72	0.55
1:A:830:VAL:HB	1:A:873:HIS:CE1	2.41	0.55
1:A:883:LEU:CA	1:A:886:ILE:HG22	2.37	0.55
1:A:238:ARG:HH21	1:A:242:ARG:NH2	2.05	0.55
1:A:258:ILE:O	1:A:261:GLN:HB3	2.05	0.55
1:A:601:ASN:ND2	1:A:635:VAL:HG22	2.22	0.55
1:A:128:ASN:HA	1:A:131:LYS:HE3	1.87	0.55
1:A:601:ASN:HD22	1:A:635:VAL:HG22	1.72	0.55
1:A:244:MSE:HA	1:A:256:THR:HG21	1.89	0.55
1:A:390:LYS:CG	1:A:431:ILE:HD12	2.22	0.55
1:A:883:LEU:C	1:A:886:ILE:HG22	2.26	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:442:THR:O	1:A:445:MSE:HB3	2.07	0.55
1:A:433:ILE:O	1:A:436:ILE:HD13	2.07	0.55
2:B:4:PRO:C	2:B:6:ILE:H	2.08	0.55
1:A:172:ARG:HB3	1:A:214:GLU:CD	2.27	0.55
1:A:446:LEU:O	1:A:447:GLU:C	2.44	0.55
1:A:659:SER:O	1:A:660:LYS:HD2	2.06	0.55
1:A:195:ILE:O	1:A:247:LYS:HE3	2.07	0.55
1:A:650:ALA:O	1:A:653:ALA:HB3	2.07	0.55
1:A:660:LYS:CG	1:A:661:ASN:ND2	2.68	0.55
1:A:470:LYS:CG	1:A:471:HIS:H	2.09	0.55
1:A:779:ILE:O	1:A:779:ILE:HD12	2.06	0.55
1:A:90:ALA:O	1:A:93:GLN:HB2	2.06	0.55
1:A:274:LYS:O	1:A:275:GLU:HB2	2.06	0.54
1:A:830:VAL:HG13	1:A:833:GLU:HA	1.88	0.54
1:A:135:THR:C	1:A:137:SER:H	2.10	0.54
1:A:486:ARG:NH1	1:A:523:GLU:OE1	2.40	0.54
1:A:538:GLU:HB3	1:A:541:LYS:CG	2.37	0.54
1:A:113:ASN:O	1:A:114:ASP:HB2	2.07	0.54
1:A:503:GLY:O	1:A:507:ILE:HG13	2.06	0.54
1:A:870:ILE:HD11	1:A:882:GLY:CA	2.37	0.54
1:A:393:VAL:CG2	1:A:424:MSE:HE2	2.33	0.54
1:A:837:ARG:HB3	1:A:881:ARG:NH1	2.23	0.54
1:A:344:LEU:HD12	1:A:344:LEU:N	2.20	0.54
1:A:782:PHE:HB3	1:A:795:ALA:HB2	1.89	0.54
1:A:35:LEU:CD2	1:A:46:ARG:HH21	2.20	0.54
1:A:194:LEU:HD12	1:A:208:ALA:CB	2.37	0.54
1:A:194:LEU:HD22	1:A:200:GLU:OE1	2.07	0.54
1:A:88:SER:HB3	1:A:103:ASP:HB2	1.88	0.54
1:A:260:VAL:HG11	1:A:317:LEU:HD11	1.89	0.54
1:A:67:GLN:NE2	1:A:94:LEU:CD1	2.71	0.54
1:A:505:CYS:SG	1:A:557:LEU:HD13	2.48	0.54
1:A:390:LYS:HG3	1:A:431:ILE:CD1	2.22	0.54
1:A:11:ILE:HD13	1:A:11:ILE:C	2.28	0.54
1:A:39:THR:HB	1:A:41:GLU:OE1	2.08	0.54
1:A:7:THR:HG22	1:A:10:GLU:CG	2.32	0.54
1:A:461:ALA:HB2	1:A:488:LEU:HD13	1.89	0.54
1:A:278:PRO:HG3	1:A:328:GLY:O	2.08	0.53
1:A:381:VAL:HG23	1:A:382:PHE:HD1	1.73	0.53
2:B:3:GLY:N	2:B:4:PRO:HD3	2.23	0.53
1:A:684:ILE:HD13	1:A:684:ILE:C	2.29	0.53
1:A:719:ASP:OD1	1:A:721:MSE:HB2	2.08	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:462:GLU:OE2	1:A:549:TYR:CE1	2.61	0.53
1:A:531:THR:O	1:A:535:PHE:HB2	2.07	0.53
1:A:344:LEU:O	1:A:347:LEU:HB2	2.08	0.53
1:A:533:LYS:O	1:A:537:LEU:HG	2.07	0.53
1:A:381:VAL:CG2	1:A:382:PHE:H	2.20	0.53
1:A:773:GLU:O	1:A:774:LYS:HB3	2.09	0.53
1:A:818:ASP:HB3	1:A:821:LYS:HD3	1.90	0.53
1:A:65:GLY:O	1:A:66:ALA:C	2.47	0.53
1:A:423:THR:O	1:A:425:LEU:N	2.41	0.53
1:A:818:ASP:CB	1:A:821:LYS:HD3	2.39	0.53
1:A:187:LEU:O	1:A:191:VAL:HG23	2.08	0.53
1:A:489:TYR:O	1:A:489:TYR:HD1	1.92	0.53
1:A:671:LEU:HD13	1:A:706:LYS:HE2	1.88	0.53
1:A:361:VAL:CG1	1:A:362:SER:N	2.71	0.53
1:A:641:ALA:O	1:A:644:GLU:HB2	2.07	0.53
1:A:836:SER:O	1:A:838:ALA:N	2.41	0.53
1:A:168:LEU:HD13	1:A:211:ILE:HG13	1.91	0.53
1:A:752:SER:O	1:A:756:LEU:CD2	2.57	0.53
1:A:74:LEU:HD21	1:A:83:ALA:HB1	1.91	0.53
1:A:557:LEU:O	1:A:563:VAL:CG1	2.55	0.53
1:A:696:THR:HB	1:A:697:LYS:HD2	1.89	0.53
1:A:883:LEU:HB3	1:A:921:GLU:O	2.09	0.53
1:A:906:PHE:O	1:A:909:LEU:CB	2.57	0.53
1:A:415:ILE:HA	1:A:459:ILE:HD11	1.91	0.53
1:A:814:ALA:HB3	1:A:815:PRO:HD3	1.91	0.53
1:A:856:ILE:O	1:A:859:GLU:N	2.41	0.53
1:A:371:ILE:HA	1:A:374:GLN:NE2	2.23	0.53
1:A:639:VAL:HG13	1:A:673:PHE:CD2	2.44	0.53
1:A:736:LEU:HD12	1:A:736:LEU:N	2.24	0.53
1:A:879:GLN:O	1:A:883:LEU:HD12	2.09	0.53
1:A:886:ILE:CG2	1:A:887:ALA:N	2.72	0.53
1:A:526:ILE:N	1:A:526:ILE:HD13	2.14	0.52
1:A:124:LEU:O	1:A:127:ALA:HB3	2.09	0.52
1:A:534:LYS:HG2	1:A:538:GLU:HG2	1.90	0.52
1:A:538:GLU:OE2	1:A:541:LYS:HD3	2.09	0.52
1:A:56:ALA:O	1:A:59:LYS:N	2.42	0.52
1:A:734:LYS:N	1:A:735:PRO:CD	2.72	0.52
1:A:750:TYR:HB2	1:A:791:LEU:HD22	1.89	0.52
1:A:109:ARG:HG3	1:A:109:ARG:HH11	1.74	0.52
1:A:594:THR:O	1:A:598:ASN:HB2	2.09	0.52
1:A:265:ASN:ND2	1:A:271:ASP:HA	2.25	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:659:SER:O	1:A:660:LYS:CB	2.57	0.52
1:A:57:ARG:HB3	1:A:62:ASP:HB3	1.91	0.52
1:A:743:ASP:C	1:A:745:GLU:N	2.61	0.52
1:A:97:VAL:HG23	1:A:131:LYS:HE2	1.91	0.52
1:A:498:VAL:CG1	1:A:499:ARG:H	2.23	0.52
1:A:502:VAL:O	1:A:504:LEU:N	2.41	0.52
1:A:663:LEU:N	1:A:663:LEU:HD22	2.25	0.52
1:A:883:LEU:O	1:A:887:ALA:HB2	2.10	0.52
1:A:586:ALA:HA	1:A:589:VAL:CG2	2.40	0.52
1:A:776:ILE:HA	1:A:779:ILE:CG2	2.39	0.52
1:A:680:ARG:HA	1:A:683:ILE:CG1	2.39	0.52
1:A:671:LEU:HD12	1:A:706:LYS:O	2.09	0.52
1:A:238:ARG:HH21	1:A:242:ARG:HH21	1.56	0.52
1:A:538:GLU:HB3	1:A:541:LYS:CD	2.39	0.52
1:A:740:LEU:HD21	1:A:752:SER:OG	2.09	0.52
1:A:863:TRP:HE3	1:A:867:PHE:HD2	1.57	0.52
1:A:35:LEU:HD22	1:A:46:ARG:HH21	1.74	0.52
1:A:188:VAL:CB	1:A:189:PRO:HD3	2.35	0.52
1:A:724:PHE:CD2	1:A:732:VAL:HG21	2.45	0.52
1:A:853:CYS:HB3	1:A:896:LEU:HD21	1.91	0.52
1:A:108:LEU:HA	1:A:117:ILE:HG21	1.90	0.52
1:A:161:MSE:O	1:A:164:LEU:HB2	2.10	0.52
1:A:401:ILE:O	1:A:403:ARG:N	2.41	0.52
1:A:157:THR:CG2	1:A:158:GLU:H	2.05	0.52
1:A:108:LEU:HD13	1:A:108:LEU:C	2.29	0.52
1:A:465:VAL:HG22	1:A:503:GLY:N	2.24	0.52
1:A:840:ALA:O	1:A:843:PHE:HB3	2.09	0.52
1:A:748:ALA:HB1	1:A:751:ASP:OD2	2.10	0.52
1:A:571:SER:HB3	1:A:575:LYS:HD2	1.90	0.51
1:A:324:HIS:HE1	1:A:325:MSE:SE	2.43	0.51
1:A:544:VAL:HG23	1:A:545:ASP:N	2.25	0.51
1:A:646:GLY:O	1:A:648:VAL:N	2.39	0.51
1:A:565:GLU:O	1:A:569:ASP:HB2	2.10	0.51
1:A:330:PRO:HG2	1:A:333:TRP:CD1	2.46	0.51
1:A:663:LEU:H	1:A:663:LEU:CD2	2.22	0.51
1:A:812:THR:HG22	1:A:819:ARG:NE	2.24	0.51
1:A:177:GLY:O	1:A:181:VAL:HG23	2.10	0.51
1:A:378:GLU:O	1:A:380:MSE:N	2.39	0.51
1:A:398:ASN:O	1:A:401:ILE:HG22	2.10	0.51
1:A:892:SER:O	1:A:893:SER:HB3	2.11	0.51
1:A:692:CYS:O	1:A:695:LEU:HB2	2.10	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:677:GLU:N	1:A:680:ARG:HH12	2.09	0.51
1:A:237:VAL:HG22	1:A:289:TRP:CZ3	2.46	0.51
1:A:465:VAL:HG22	1:A:503:GLY:HA3	1.93	0.51
1:A:735:PRO:HG2	1:A:736:LEU:H	1.74	0.51
1:A:677:GLU:HA	1:A:680:ARG:HH11	1.73	0.51
1:A:677:GLU:H	1:A:680:ARG:HH12	1.58	0.51
1:A:564:LYS:HB2	1:A:638:ARG:NH1	2.26	0.51
1:A:530:LYS:H	1:A:530:LYS:HD2	1.76	0.51
1:A:46:ARG:HB2	1:A:47:PRO:CD	2.38	0.51
1:A:138:LEU:O	1:A:141:LYS:N	2.43	0.51
1:A:468:VAL:HG11	1:A:506:LYS:O	2.10	0.51
1:A:670:LEU:HD11	1:A:691:LEU:CD2	2.37	0.51
1:A:538:GLU:CA	1:A:541:LYS:HD3	2.40	0.51
1:A:544:VAL:HG12	1:A:547:ARG:HH21	1.76	0.51
1:A:877:GLU:OE1	1:A:877:GLU:HA	2.11	0.51
1:A:623:VAL:N	1:A:624:PRO:CD	2.73	0.51
1:A:21:ASP:O	1:A:22:GLN:CB	2.59	0.51
1:A:97:VAL:O	1:A:100:ALA:HB3	2.11	0.51
1:A:579:LEU:HD23	1:A:579:LEU:O	2.11	0.51
1:A:696:THR:O	1:A:704:LYS:HD3	2.11	0.50
1:A:734:LYS:O	1:A:738:ASP:OD2	2.28	0.50
1:A:785:MSE:HB2	1:A:792:ARG:HD2	1.91	0.50
1:A:745:GLU:CD	1:A:746:GLY:N	2.61	0.50
1:A:148:LEU:CD1	1:A:148:LEU:H	2.24	0.50
1:A:417:LEU:O	1:A:421:LEU:HG	2.11	0.50
1:A:863:TRP:N	1:A:864:PRO:CD	2.74	0.50
1:A:47:PRO:HG2	1:A:76:PHE:CD2	2.46	0.50
1:A:465:VAL:HG22	1:A:503:GLY:CA	2.42	0.50
1:A:692:CYS:HA	1:A:695:LEU:HG	1.93	0.50
1:A:216:ILE:HB	1:A:222:CYS:SG	2.52	0.50
1:A:414:ARG:HD2	1:A:456:MSE:HE1	1.93	0.50
1:A:501:LEU:HD11	1:A:531:THR:HG22	1.94	0.50
1:A:592:LEU:HG	1:A:596:TYR:CE2	2.46	0.50
1:A:26:LYS:O	1:A:30:LEU:HG	2.12	0.50
1:A:241:CYS:C	1:A:243:LEU:H	2.15	0.50
1:A:109:ARG:HG3	1:A:109:ARG:NH1	2.26	0.50
1:A:498:VAL:HB	1:A:535:PHE:HZ	1.66	0.50
1:A:501:LEU:HD11	1:A:531:THR:CG2	2.41	0.50
1:A:539:THR:HA	1:A:547:ARG:HH11	1.75	0.50
1:A:882:GLY:O	1:A:886:ILE:HB	2.12	0.50
1:A:23:ASP:OD1	1:A:26:LYS:HG3	2.12	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:315:ILE:HD13	1:A:369:VAL:HG22	1.92	0.50
1:A:323:MSE:HA	1:A:323:MSE:HE3	1.94	0.50
1:A:691:LEU:HG	1:A:695:LEU:CD2	2.41	0.50
1:A:822:LEU:HD22	1:A:826:TYR:HE1	1.76	0.50
1:A:743:ASP:C	1:A:745:GLU:H	2.15	0.50
1:A:423:THR:O	1:A:426:GLN:N	2.45	0.50
1:A:868:LYS:O	1:A:871:ALA:HB3	2.12	0.50
1:A:326:ASP:O	1:A:328:GLY:N	2.44	0.50
1:A:596:TYR:HE1	1:A:642:LEU:HD21	1.77	0.50
1:A:863:TRP:CH2	1:A:899:GLU:HB3	2.46	0.50
1:A:145:MSE:C	1:A:147:LYS:N	2.64	0.50
1:A:172:ARG:HB3	1:A:214:GLU:HG2	1.94	0.50
1:A:280:PRO:O	1:A:284:GLU:HB2	2.11	0.50
1:A:498:VAL:CB	1:A:535:PHE:CZ	2.80	0.50
1:A:340:GLU:O	1:A:344:LEU:HD13	2.12	0.50
1:A:27:ALA:HA	1:A:30:LEU:HD12	1.93	0.50
1:A:781:GLU:C	1:A:783:TRP:N	2.65	0.50
1:A:441:LEU:HD13	1:A:441:LEU:C	2.32	0.49
1:A:25:ILE:HD12	1:A:25:ILE:N	2.00	0.49
1:A:828:ALA:O	1:A:830:VAL:N	2.45	0.49
1:A:721:MSE:HE1	1:A:762:VAL:HG21	1.94	0.49
1:A:314:CYS:O	1:A:318:PHE:HB2	2.11	0.49
1:A:238:ARG:HD2	1:A:296:GLU:OE1	2.12	0.49
1:A:579:LEU:HD23	1:A:579:LEU:C	2.32	0.49
1:A:682:ARG:C	1:A:684:ILE:H	2.15	0.49
1:A:22:GLN:OE1	1:A:774:LYS:HE3	2.12	0.49
1:A:560:ASP:OD1	1:A:563:VAL:HG12	2.12	0.49
1:A:632:GLU:HG2	1:A:633:GLU:H	1.78	0.49
1:A:201:ASN:HB3	1:A:204:VAL:HG23	1.94	0.49
1:A:769:ARG:NH1	1:A:769:ARG:HG2	2.27	0.49
1:A:887:ALA:O	1:A:890:MSE:HG2	2.12	0.49
1:A:624:PRO:C	1:A:626:THR:H	2.15	0.49
1:A:226:LEU:HD22	1:A:263:VAL:CG1	2.43	0.49
1:A:148:LEU:N	1:A:148:LEU:HD12	2.28	0.49
1:A:149:ALA:HB1	1:A:164:LEU:CD2	2.43	0.49
1:A:201:ASN:O	1:A:204:VAL:HB	2.13	0.49
1:A:544:VAL:HG23	1:A:545:ASP:H	1.77	0.49
1:A:812:THR:HB	1:A:819:ARG:HD3	1.95	0.49
1:A:762:VAL:O	1:A:763:SER:CB	2.60	0.49
1:A:292:ARG:O	1:A:296:GLU:HG2	2.12	0.49
1:A:429:VAL:CG1	1:A:430:ASP:N	2.76	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:554:LEU:HD21	1:A:567:ILE:HD13	1.95	0.49
1:A:740:LEU:HD12	1:A:782:PHE:HZ	1.78	0.49
1:A:847:THR:HG23	1:A:889:ILE:HD13	1.95	0.49
1:A:170:LEU:HD22	1:A:181:VAL:CG2	2.42	0.49
1:A:353:ILE:HD13	1:A:356:LEU:O	2.13	0.49
1:A:863:TRP:CD2	1:A:864:PRO:HD3	2.47	0.49
1:A:264:PHE:HE2	1:A:317:LEU:HD22	1.76	0.49
1:A:131:LYS:O	1:A:134:GLN:N	2.45	0.49
1:A:173:GLU:O	1:A:173:GLU:HG2	2.10	0.49
1:A:323:MSE:HE3	1:A:379:ASP:OD1	2.13	0.49
1:A:596:TYR:CE1	1:A:642:LEU:HD21	2.47	0.49
1:A:143:THR:O	1:A:147:LYS:HG3	2.13	0.49
1:A:800:LEU:HD11	1:A:841:ALA:HB3	1.94	0.49
1:A:324:HIS:C	1:A:324:HIS:ND1	2.66	0.49
1:A:585:GLY:O	1:A:587:LEU:N	2.44	0.49
1:A:385:LYS:O	1:A:386:ARG:C	2.51	0.49
1:A:554:LEU:HD23	1:A:554:LEU:O	2.13	0.49
1:A:213:ASP:CG	1:A:262:ARG:HH12	2.16	0.49
1:A:462:GLU:HB2	1:A:499:ARG:HG2	1.95	0.48
1:A:883:LEU:HA	1:A:886:ILE:HG21	1.95	0.48
1:A:144:ASP:O	1:A:148:LEU:HD13	2.13	0.48
1:A:74:LEU:CD2	1:A:83:ALA:HB1	2.42	0.48
1:A:414:ARG:HH11	1:A:456:MSE:HE1	1.77	0.48
1:A:837:ARG:O	1:A:881:ARG:NH1	2.46	0.48
1:A:646:GLY:C	1:A:649:PRO:HD2	2.33	0.48
1:A:414:ARG:NH1	1:A:447:GLU:HG2	2.29	0.48
1:A:856:ILE:O	1:A:858:ASP:N	2.47	0.48
1:A:873:HIS:CD2	1:A:875:ASP:HB2	2.49	0.48
1:A:784:PHE:N	1:A:784:PHE:CD2	2.82	0.48
1:A:462:GLU:HA	1:A:465:VAL:HB	1.94	0.48
1:A:536:LEU:CD2	1:A:547:ARG:HB3	2.44	0.48
1:A:859:GLU:HG3	1:A:859:GLU:O	2.14	0.48
1:A:885:GLY:O	1:A:889:ILE:HG12	2.12	0.48
1:A:433:ILE:C	1:A:435:LEU:N	2.67	0.48
1:A:920:GLN:C	1:A:922:ARG:N	2.66	0.48
1:A:663:LEU:HB3	1:A:699:ALA:HB2	1.95	0.48
1:A:900:ILE:HB	1:A:904:GLU:CB	2.43	0.48
1:A:259:LEU:O	1:A:263:VAL:HG23	2.13	0.48
1:A:794:ALA:C	1:A:796:ALA:N	2.67	0.48
1:A:224:LYS:O	1:A:224:LYS:HD3	2.13	0.48
1:A:464:ILE:HG13	1:A:465:VAL:N	2.28	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:851:ASN:O	1:A:854:ALA:HB3	2.14	0.48
1:A:604:GLU:HG2	1:A:668:ARG:NH1	2.29	0.48
1:A:464:ILE:O	1:A:467:THR:N	2.45	0.48
1:A:390:LYS:C	1:A:392:LYS:N	2.67	0.48
1:A:367:GLN:NE2	1:A:586:ALA:O	2.47	0.48
1:A:834:ARG:C	1:A:836:SER:N	2.66	0.48
1:A:843:PHE:HZ	1:A:867:PHE:HE1	1.60	0.48
1:A:862:SER:C	1:A:864:PRO:HD2	2.34	0.48
1:A:148:LEU:N	1:A:148:LEU:CD1	2.77	0.48
1:A:375:ARG:NH1	1:A:375:ARG:CG	2.75	0.48
1:A:382:PHE:HB2	1:A:385:LYS:HB2	1.94	0.48
1:A:567:ILE:HG23	1:A:573:LEU:HD23	1.96	0.48
1:A:697:LYS:CD	1:A:697:LYS:N	2.75	0.48
1:A:860:ILE:CG2	1:A:860:ILE:O	2.60	0.48
1:A:626:THR:CG2	1:A:627:HIS:H	2.11	0.48
1:A:748:ALA:HB1	1:A:751:ASP:CB	2.42	0.48
1:A:262:ARG:NH1	1:A:262:ARG:CG	2.76	0.48
1:A:760:ALA:HB1	1:A:767:ARG:HG2	1.96	0.47
1:A:311:ARG:CZ	1:A:311:ARG:HB2	2.43	0.47
1:A:329:ILE:CG1	1:A:330:PRO:HD2	2.17	0.47
1:A:291:ILE:HD13	1:A:333:TRP:HZ3	1.79	0.47
1:A:414:ARG:HD2	1:A:456:MSE:CE	2.44	0.47
1:A:538:GLU:HB3	1:A:541:LYS:HG2	1.96	0.47
1:A:733:VAL:H	1:A:735:PRO:HD2	1.79	0.47
1:A:767:ARG:HA	1:A:770:ILE:CD1	2.43	0.47
1:A:779:ILE:CG1	1:A:798:LEU:HD23	2.43	0.47
1:A:886:ILE:HG23	1:A:887:ALA:N	2.28	0.47
1:A:19:VAL:HG21	1:A:31:TYR:OH	2.13	0.47
1:A:241:CYS:O	1:A:243:LEU:N	2.47	0.47
1:A:182:TRP:CD2	1:A:221:ARG:HD3	2.50	0.47
1:A:585:GLY:C	1:A:587:LEU:H	2.17	0.47
1:A:449:ALA:O	1:A:488:LEU:HD21	2.15	0.47
1:A:439:ASP:C	1:A:441:LEU:H	2.17	0.47
1:A:683:ILE:O	1:A:688:GLY:HA3	2.14	0.47
1:A:150:PHE:CD2	1:A:190:PHE:CD1	3.02	0.47
1:A:369:VAL:O	1:A:373:LEU:HD12	2.14	0.47
1:A:679:LEU:O	1:A:683:ILE:HG23	2.15	0.47
1:A:93:GLN:C	1:A:95:GLY:N	2.67	0.47
1:A:783:TRP:HE1	1:A:796:ALA:HB2	1.79	0.47
1:A:572:LEU:CD1	1:A:575:LYS:HE2	2.45	0.47
2:B:4:PRO:O	2:B:6:ILE:N	2.37	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:875:ASP:O	1:A:876:ALA:C	2.52	0.47
1:A:505:CYS:SG	1:A:557:LEU:CD1	3.02	0.47
1:A:852:ALA:O	1:A:856:ILE:HG12	2.15	0.47
1:A:875:ASP:O	1:A:877:GLU:HB2	2.14	0.47
1:A:45:LEU:O	1:A:48:VAL:CG1	2.63	0.47
1:A:710:ALA:O	1:A:714:LEU:HB2	2.15	0.47
1:A:346:LEU:HG	1:A:373:LEU:HD21	1.97	0.47
1:A:265:ASN:HA	1:A:270:MSE:O	2.14	0.47
1:A:482:ILE:O	1:A:485:LEU:HB2	2.15	0.47
1:A:498:VAL:C	1:A:500:ALA:H	2.18	0.47
1:A:764:ASP:OD2	1:A:805:PHE:CD2	2.68	0.47
1:A:883:LEU:HD13	1:A:922:ARG:CB	2.44	0.47
1:A:16:ASN:HA	1:A:31:TYR:OH	2.14	0.47
1:A:46:ARG:O	1:A:47:PRO:C	2.53	0.47
1:A:260:VAL:CG1	1:A:317:LEU:HD11	2.45	0.47
1:A:218:ASN:CB	1:A:221:ARG:NH1	2.75	0.47
1:A:165:ASN:O	1:A:168:LEU:HB3	2.15	0.47
1:A:210:ARG:HA	1:A:213:ASP:HB3	1.96	0.47
1:A:909:LEU:O	1:A:910:VAL:C	2.52	0.47
1:A:720:PRO:HG3	1:A:758:ASN:O	2.14	0.47
1:A:291:ILE:HG22	1:A:292:ARG:N	2.29	0.47
1:A:53:ARG:HH11	1:A:57:ARG:NH1	2.13	0.47
1:A:225:PHE:O	1:A:228:MSE:HG2	2.15	0.47
1:A:352:GLN:HG3	1:A:359:TYR:CE1	2.50	0.47
1:A:344:LEU:HD11	1:A:392:LYS:HE3	1.97	0.47
1:A:799:LEU:H	1:A:799:LEU:CD2	2.28	0.47
1:A:834:ARG:O	1:A:836:SER:N	2.48	0.47
1:A:898:SER:O	1:A:899:GLU:C	2.52	0.47
1:A:716:ALA:C	1:A:718:ALA:N	2.65	0.47
1:A:359:TYR:CD1	1:A:359:TYR:O	2.68	0.47
1:A:97:VAL:O	1:A:98:GLY:O	2.33	0.47
1:A:648:VAL:H	1:A:649:PRO:CD	2.28	0.47
1:A:150:PHE:CD2	1:A:190:PHE:HB3	2.50	0.47
1:A:724:PHE:N	1:A:725:PRO:CD	2.77	0.47
1:A:830:VAL:CB	1:A:873:HIS:NE2	2.78	0.47
1:A:282:VAL:O	1:A:283:ALA:C	2.53	0.46
1:A:806:GLU:HB2	1:A:807:LYS:HD2	1.96	0.46
1:A:664:GLU:OE1	1:A:668:ARG:NH2	2.48	0.46
1:A:335:TRP:CE3	1:A:385:LYS:HE2	2.50	0.46
1:A:581:ALA:C	1:A:583:LYS:H	2.18	0.46
1:A:736:LEU:O	1:A:740:LEU:HD23	2.15	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:813:VAL:HG11	1:A:849:ASP:OD2	2.15	0.46
1:A:438:ASN:C	1:A:440:GLN:H	2.18	0.46
1:A:503:GLY:CA	1:A:506:LYS:HB3	2.46	0.46
1:A:740:LEU:O	1:A:741:HIS:C	2.54	0.46
1:A:767:ARG:HH12	1:A:805:PHE:HB2	1.80	0.46
1:A:818:ASP:CA	1:A:821:LYS:HD3	2.46	0.46
1:A:267:MSE:HE1	1:A:293:VAL:HG21	1.96	0.46
1:A:308:ALA:O	1:A:311:ARG:N	2.48	0.46
1:A:270:MSE:HB3	1:A:278:PRO:CB	2.45	0.46
1:A:448:MSE:CE	1:A:460:ALA:HB2	2.35	0.46
1:A:771:LEU:HD21	1:A:802:LEU:HD22	1.96	0.46
1:A:209:ILE:HG22	1:A:259:LEU:HD21	1.98	0.46
1:A:632:GLU:C	1:A:634:TYR:H	2.18	0.46
1:A:915:LEU:O	1:A:916:GLY:C	2.53	0.46
1:A:468:VAL:HG21	1:A:506:LYS:HD3	1.96	0.46
1:A:560:ASP:O	1:A:563:VAL:HG13	2.16	0.46
2:B:3:GLY:C	2:B:5:THR:H	2.19	0.46
1:A:849:ASP:O	1:A:852:ALA:HB3	2.16	0.46
1:A:442:THR:N	1:A:443:PRO:CD	2.79	0.46
1:A:472:GLU:HA	1:A:475:ILE:HG13	1.97	0.46
2:B:3:GLY:H	2:B:4:PRO:HD3	1.76	0.46
1:A:188:VAL:HB	1:A:189:PRO:CD	2.35	0.46
1:A:313:THR:O	1:A:315:ILE:N	2.49	0.46
1:A:874:GLU:H	1:A:874:GLU:CD	2.17	0.46
1:A:818:ASP:HA	1:A:821:LYS:HD3	1.97	0.46
1:A:439:ASP:C	1:A:441:LEU:N	2.67	0.46
1:A:660:LYS:CA	1:A:663:LEU:HD23	2.46	0.46
1:A:730:TYR:CD2	1:A:730:TYR:N	2.71	0.46
1:A:779:ILE:HD11	1:A:799:LEU:HD21	1.98	0.46
1:A:12:ARG:O	1:A:15:GLY:N	2.49	0.46
1:A:264:PHE:HA	1:A:267:MSE:HE3	1.96	0.46
1:A:501:LEU:HD12	1:A:535:PHE:CD2	2.51	0.46
1:A:589:VAL:O	1:A:590:TYR:C	2.52	0.46
1:A:53:ARG:CD	1:A:57:ARG:NH1	2.79	0.46
1:A:145:MSE:C	1:A:147:LYS:H	2.18	0.46
1:A:489:TYR:CD1	1:A:489:TYR:C	2.88	0.46
1:A:238:ARG:NH2	1:A:242:ARG:NH2	2.64	0.46
1:A:577:LEU:HD22	1:A:592:LEU:CD1	2.46	0.46
1:A:691:LEU:O	1:A:693:LEU:N	2.49	0.46
1:A:799:LEU:N	1:A:799:LEU:HD22	2.31	0.46
1:A:833:GLU:CG	1:A:834:ARG:N	2.76	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:852:ALA:C	1:A:854:ALA:H	2.18	0.46
1:A:272:ARG:CZ	1:A:272:ARG:HB3	2.46	0.46
1:A:560:ASP:OD1	1:A:562:ASP:HB2	2.16	0.45
1:A:564:LYS:CB	1:A:638:ARG:NH1	2.79	0.45
1:A:769:ARG:O	1:A:770:ILE:C	2.54	0.45
1:A:498:VAL:C	1:A:500:ALA:N	2.69	0.45
1:A:666:ILE:O	1:A:670:LEU:HG	2.16	0.45
1:A:806:GLU:O	1:A:807:LYS:HB2	2.16	0.45
1:A:761:SER:OG	1:A:762:VAL:N	2.48	0.45
1:A:443:PRO:HG2	1:A:444:ILE:N	2.27	0.45
1:A:401:ILE:CG2	1:A:402:SER:N	2.78	0.45
1:A:894:ASN:HA	1:A:897:CYS:HB2	1.99	0.45
1:A:170:LEU:HD23	1:A:170:LEU:C	2.36	0.45
1:A:201:ASN:OD1	1:A:203:GLU:N	2.49	0.45
1:A:528:LEU:HB2	1:A:557:LEU:HD21	1.99	0.45
1:A:890:MSE:HG3	1:A:928:GLN:CB	2.47	0.45
1:A:324:HIS:CE1	1:A:325:MSE:SE	3.19	0.45
1:A:369:VAL:HG12	1:A:373:LEU:HD11	1.98	0.45
1:A:135:THR:OG1	1:A:136:THR:N	2.49	0.45
1:A:437:THR:O	1:A:439:ASP:N	2.50	0.45
1:A:560:ASP:O	1:A:563:VAL:CG1	2.64	0.45
1:A:396:PHE:CE1	1:A:400:LEU:HD12	2.51	0.45
1:A:397:PHE:CE1	1:A:417:LEU:HD11	2.51	0.45
1:A:539:THR:CG2	1:A:540:GLU:H	2.24	0.45
1:A:889:ILE:CG2	1:A:896:LEU:HD23	2.43	0.45
1:A:700:SER:O	1:A:703:GLY:N	2.49	0.45
1:A:729:ALA:O	1:A:732:VAL:N	2.50	0.45
1:A:739:LEU:HD11	1:A:752:SER:HB2	1.99	0.45
1:A:813:VAL:HG22	1:A:846:LEU:CD2	2.43	0.45
1:A:888:ASN:HA	1:A:891:HIS:HB2	1.99	0.45
1:A:210:ARG:O	1:A:213:ASP:HB3	2.17	0.45
1:A:29:GLU:CD	1:A:277:LYS:HD3	2.37	0.45
1:A:120:VAL:HG22	1:A:123:ARG:NH2	2.31	0.45
1:A:760:ALA:HB2	1:A:770:ILE:HD12	1.99	0.45
1:A:818:ASP:OD2	1:A:821:LYS:HE3	2.17	0.45
1:A:274:LYS:HD2	1:A:276:MSE:HE3	1.99	0.45
1:A:85:PHE:HE2	1:A:120:VAL:HG21	1.82	0.45
1:A:483:PRO:O	1:A:486:ARG:N	2.48	0.45
1:A:861:LYS:O	1:A:862:SER:C	2.55	0.45
1:A:15:GLY:HA2	1:A:30:LEU:HD13	1.98	0.45
1:A:279:ASP:HB3	1:A:282:VAL:HG12	1.99	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:385:LYS:N	1:A:385:LYS:HD2	2.32	0.45
1:A:660:LYS:CG	1:A:661:ASN:HD22	2.29	0.45
1:A:773:GLU:HG3	1:A:775:ALA:HB2	1.98	0.45
1:A:48:VAL:HG13	1:A:49:LEU:H	1.81	0.45
1:A:47:PRO:CG	1:A:76:PHE:CG	3.00	0.45
1:A:908:VAL:O	1:A:909:LEU:C	2.55	0.45
1:A:453:ASP:OD2	1:A:456:MSE:HG3	2.17	0.44
1:A:268:ALA:CB	1:A:283:ALA:HB2	2.47	0.44
1:A:472:GLU:C	1:A:474:ALA:N	2.66	0.44
2:B:4:PRO:C	2:B:6:ILE:N	2.70	0.44
1:A:591:THR:OG1	1:A:592:LEU:N	2.50	0.44
1:A:884:MSE:O	1:A:888:ASN:ND2	2.49	0.44
1:A:288:ILE:HD13	1:A:288:ILE:N	2.33	0.44
1:A:679:LEU:O	1:A:681:GLY:N	2.50	0.44
1:A:31:TYR:HD1	1:A:49:LEU:HD23	1.81	0.44
1:A:210:ARG:HA	1:A:213:ASP:CB	2.48	0.44
1:A:502:VAL:CG1	1:A:503:GLY:N	2.80	0.44
1:A:385:LYS:O	1:A:387:THR:N	2.51	0.44
1:A:433:ILE:O	1:A:435:LEU:N	2.51	0.44
1:A:864:PRO:HG2	1:A:865:GLU:H	1.81	0.44
1:A:794:ALA:HA	1:A:797:GLU:OE1	2.17	0.44
1:A:290:ILE:O	1:A:294:LEU:HD12	2.16	0.44
1:A:258:ILE:HD13	1:A:258:ILE:H	1.82	0.44
1:A:225:PHE:O	1:A:229:HIS:CE1	2.70	0.44
1:A:580:LEU:CD1	1:A:588:CYS:SG	3.04	0.44
1:A:313:THR:C	1:A:315:ILE:H	2.21	0.44
1:A:199:SER:O	1:A:200:GLU:C	2.55	0.44
1:A:530:LYS:N	1:A:530:LYS:HD2	2.33	0.44
1:A:729:ALA:HB1	1:A:766:ILE:HD12	2.00	0.44
1:A:832:GLU:CG	1:A:833:GLU:H	2.22	0.44
1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:THR:H	1.79	0.44
1:A:167:LEU:HD22	1:A:181:VAL:HG13	1.97	0.44
1:A:857:MSE:HE3	1:A:899:GLU:HG3	1.99	0.44
1:A:218:ASN:HB2	1:A:221:ARG:HH12	1.81	0.44
1:A:409:GLU:O	1:A:412:LYS:HG3	2.17	0.44
1:A:498:VAL:O	1:A:501:LEU:N	2.49	0.44
1:A:323:MSE:HE2	1:A:376:LEU:HA	1.99	0.44
1:A:375:ARG:NH2	1:A:660:LYS:HZ2	2.14	0.44
1:A:824:VAL:HG12	1:A:843:PHE:CE2	2.53	0.44
1:A:892:SER:O	1:A:893:SER:CB	2.66	0.44
1:A:716:ALA:O	1:A:718:ALA:N	2.47	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:121:LEU:O	1:A:125:VAL:HG23	2.18	0.44
1:A:407:ASP:O	1:A:408:ASP:C	2.56	0.44
1:A:463:LEU:HD12	1:A:463:LEU:O	2.17	0.44
1:A:572:LEU:HD12	1:A:575:LYS:HE2	1.99	0.44
1:A:821:LYS:CB	1:A:821:LYS:NZ	2.80	0.44
1:A:288:ILE:CD1	1:A:288:ILE:H	2.26	0.44
1:A:674:ALA:O	1:A:680:ARG:NH2	2.51	0.44
1:A:167:LEU:O	1:A:181:VAL:HG21	2.17	0.44
1:A:131:LYS:O	1:A:132:ILE:C	2.57	0.44
1:A:755:THR:O	1:A:759:LEU:HB2	2.18	0.43
1:A:779:ILE:CD1	1:A:798:LEU:HD23	2.47	0.43
1:A:568:VAL:HG23	1:A:599:LEU:HD13	1.99	0.43
1:A:439:ASP:O	1:A:443:PRO:CD	2.63	0.43
1:A:497:LYS:O	1:A:500:ALA:HB3	2.19	0.43
1:A:699:ALA:HB1	1:A:703:GLY:HA3	1.99	0.43
1:A:355:GLU:O	1:A:356:LEU:HB2	2.17	0.43
1:A:679:LEU:C	1:A:681:GLY:H	2.21	0.43
1:A:679:LEU:C	1:A:681:GLY:N	2.71	0.43
1:A:7:THR:HG22	1:A:10:GLU:OE2	2.19	0.43
1:A:74:LEU:H	1:A:74:LEU:HD22	1.83	0.43
1:A:646:GLY:C	1:A:648:VAL:N	2.72	0.43
1:A:451:SER:OG	1:A:452:GLN:N	2.50	0.43
1:A:423:THR:C	1:A:425:LEU:N	2.72	0.43
1:A:504:LEU:HD23	1:A:504:LEU:O	2.19	0.43
1:A:101:PHE:O	1:A:103:ASP:N	2.51	0.43
1:A:353:ILE:HG12	1:A:355:GLU:N	2.19	0.43
1:A:800:LEU:O	1:A:800:LEU:HD23	2.19	0.43
1:A:135:THR:C	1:A:137:SER:N	2.72	0.43
1:A:201:ASN:HB3	1:A:204:VAL:CG2	2.49	0.43
1:A:335:TRP:O	1:A:338:VAL:HG22	2.18	0.43
1:A:852:ALA:C	1:A:854:ALA:N	2.71	0.43
1:A:288:ILE:HD13	1:A:288:ILE:H	1.83	0.43
1:A:42:ASP:O	1:A:45:LEU:HB3	2.18	0.43
1:A:48:VAL:CG1	1:A:49:LEU:N	2.81	0.43
1:A:671:LEU:CD1	1:A:706:LYS:HE2	2.49	0.43
1:A:155:LYS:HD2	1:A:156:ASP:H	1.82	0.43
1:A:377:GLU:O	1:A:380:MSE:HB2	2.18	0.43
1:A:670:LEU:HA	1:A:673:PHE:HB2	2.01	0.43
1:A:12:ARG:O	1:A:16:ASN:OD1	2.37	0.43
1:A:369:VAL:HG12	1:A:373:LEU:CD1	2.48	0.43
1:A:138:LEU:O	1:A:139:ALA:C	2.57	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:182:TRP:CZ3	1:A:184:GLN:HA	2.53	0.43
1:A:375:ARG:NH2	1:A:660:LYS:HZ1	2.09	0.43
1:A:691:LEU:C	1:A:693:LEU:N	2.71	0.43
1:A:16:ASN:HA	2:B:9:VAL:HG21	2.01	0.43
1:A:313:THR:C	1:A:315:ILE:N	2.72	0.43
1:A:85:PHE:CE2	1:A:120:VAL:HG21	2.54	0.43
1:A:328:GLY:C	1:A:329:ILE:O	2.57	0.43
1:A:323:MSE:CE	1:A:334:SER:HB3	2.47	0.43
1:A:382:PHE:HB3	1:A:384:THR:HG23	2.00	0.43
1:A:385:LYS:C	1:A:387:THR:N	2.69	0.43
1:A:572:LEU:N	1:A:575:LYS:HD3	2.33	0.43
1:A:536:LEU:CD2	1:A:550:ALA:HB3	2.48	0.43
1:A:188:VAL:HG11	1:A:228:MSE:SE	2.69	0.43
1:A:409:GLU:C	1:A:409:GLU:OE1	2.56	0.43
1:A:85:PHE:CD2	1:A:85:PHE:C	2.92	0.43
1:A:336:LYS:O	1:A:340:GLU:HG3	2.19	0.43
1:A:375:ARG:CZ	1:A:375:ARG:HB2	2.48	0.43
1:A:770:ILE:O	1:A:773:GLU:HB3	2.18	0.43
1:A:812:THR:HA	1:A:819:ARG:HD2	1.99	0.43
1:A:45:LEU:O	1:A:48:VAL:HG12	2.19	0.43
1:A:164:LEU:O	1:A:165:ASN:C	2.57	0.43
1:A:646:GLY:CA	1:A:649:PRO:HD2	2.49	0.43
1:A:475:ILE:CG2	1:A:475:ILE:O	2.66	0.43
1:A:601:ASN:HD21	1:A:638:ARG:HH21	1.59	0.43
1:A:682:ARG:C	1:A:684:ILE:N	2.72	0.43
1:A:8:ALA:CB	1:A:45:LEU:HD21	2.48	0.43
1:A:261:GLN:HG3	1:A:265:ASN:OD1	2.19	0.42
1:A:448:MSE:CB	1:A:456:MSE:HB3	2.34	0.42
1:A:776:ILE:O	1:A:780:GLU:HB2	2.19	0.42
1:A:552:GLU:O	1:A:556:TYR:CD1	2.71	0.42
1:A:555:SER:HA	1:A:595:ILE:HG12	2.00	0.42
1:A:97:VAL:HG11	1:A:127:ALA:HB1	2.00	0.42
1:A:150:PHE:O	1:A:152:GLY:N	2.51	0.42
1:A:114:ASP:C	1:A:116:GLY:N	2.72	0.42
1:A:268:ALA:HB1	1:A:283:ALA:HB2	2.00	0.42
1:A:736:LEU:CD2	1:A:755:THR:HG21	2.49	0.42
1:A:808:PHE:O	1:A:812:THR:HG23	2.19	0.42
1:A:870:ILE:HG13	1:A:878:THR:HG22	2.00	0.42
1:A:626:THR:OG1	1:A:628:PRO:HD3	2.19	0.42
1:A:593:ALA:O	1:A:597:ALA:N	2.40	0.42
1:A:663:LEU:O	1:A:665:LEU:N	2.52	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:689:THR:O	1:A:693:LEU:HB2	2.18	0.42
1:A:724:PHE:O	1:A:725:PRO:O	2.37	0.42
1:A:872:MSE:HA	1:A:879:GLN:HB2	2.00	0.42
1:A:893:SER:OG	1:A:896:LEU:HD13	2.19	0.42
1:A:42:ASP:O	1:A:43:LYS:C	2.57	0.42
1:A:172:ARG:HB3	1:A:214:GLU:CG	2.49	0.42
1:A:429:VAL:HG13	1:A:430:ASP:N	2.33	0.42
1:A:397:PHE:CD1	1:A:417:LEU:HD11	2.54	0.42
1:A:764:ASP:O	1:A:765:SER:C	2.57	0.42
1:A:108:LEU:HB2	1:A:121:LEU:HD11	2.00	0.42
1:A:409:GLU:CD	1:A:409:GLU:C	2.78	0.42
1:A:548:ARG:NH1	1:A:587:LEU:HD22	2.33	0.42
1:A:366:ARG:O	1:A:367:GLN:C	2.57	0.42
1:A:572:LEU:CD2	1:A:572:LEU:H	1.99	0.42
1:A:642:LEU:C	1:A:644:GLU:N	2.72	0.42
1:A:536:LEU:O	1:A:538:GLU:N	2.53	0.42
2:B:3:GLY:C	2:B:5:THR:N	2.73	0.42
1:A:757:THR:HA	1:A:798:LEU:HD12	2.00	0.42
1:A:896:LEU:N	1:A:896:LEU:HD12	2.34	0.42
1:A:9:GLU:HB3	1:A:10:GLU:H	1.49	0.42
1:A:11:ILE:HG23	1:A:12:ARG:N	2.34	0.42
1:A:39:THR:HG22	1:A:40:ASP:N	2.27	0.42
1:A:352:GLN:HG3	1:A:359:TYR:HE1	1.84	0.42
1:A:381:VAL:CG2	1:A:382:PHE:N	2.74	0.42
1:A:782:PHE:HB3	1:A:795:ALA:CB	2.49	0.42
1:A:776:ILE:HD11	1:A:802:LEU:HD13	2.01	0.42
1:A:820:LEU:CD1	1:A:855:ARG:HB2	2.49	0.42
1:A:856:ILE:HG13	1:A:857:MSE:N	2.34	0.42
1:A:371:ILE:CG1	1:A:372:CYS:N	2.83	0.42
1:A:126:LYS:O	1:A:130:ASP:OD2	2.37	0.42
1:A:302:GLN:O	1:A:303:ASP:C	2.57	0.42
1:A:329:ILE:HG21	1:A:333:TRP:HB2	2.02	0.42
1:A:701:GLY:C	1:A:703:GLY:N	2.73	0.42
1:A:828:ALA:HB2	1:A:870:ILE:HB	2.00	0.42
1:A:143:THR:HA	1:A:146:GLU:HB3	2.01	0.42
1:A:108:LEU:HB2	1:A:117:ILE:CG2	2.49	0.42
1:A:126:LYS:HA	1:A:129:ASN:HD22	1.84	0.42
1:A:584:ALA:O	1:A:587:LEU:HD12	2.19	0.42
1:A:319:LEU:HG	1:A:320:LYS:N	2.34	0.42
1:A:446:LEU:HD21	1:A:480:VAL:HG21	2.01	0.42
1:A:663:LEU:C	1:A:665:LEU:N	2.72	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:785:MSE:HB3	1:A:788:HIS:CD2	2.55	0.42
1:A:844:ALA:HA	1:A:885:GLY:CA	2.49	0.42
1:A:12:ARG:CG	1:A:13:ASP:N	2.83	0.42
1:A:125:VAL:C	1:A:127:ALA:N	2.72	0.42
1:A:187:LEU:HD21	1:A:211:ILE:HG22	2.02	0.42
1:A:320:LYS:HZ1	1:A:658:GLU:HB3	1.85	0.42
1:A:431:ILE:O	1:A:435:LEU:HG	2.20	0.42
1:A:570:ASP:OD1	1:A:573:LEU:N	2.53	0.42
1:A:776:ILE:N	1:A:777:PRO:CD	2.81	0.42
1:A:676:TYR:O	1:A:677:GLU:HB2	2.19	0.42
1:A:53:ARG:CG	1:A:57:ARG:HD2	2.50	0.42
1:A:707:ALA:O	1:A:711:ILE:HG13	2.20	0.42
1:A:393:VAL:O	1:A:396:PHE:HB3	2.19	0.41
1:A:581:ALA:HB1	1:A:654:VAL:HG13	2.02	0.41
1:A:764:ASP:O	1:A:766:ILE:N	2.53	0.41
1:A:812:THR:CB	1:A:819:ARG:HD3	2.50	0.41
1:A:196:ASN:OD1	1:A:246:LYS:HD2	2.20	0.41
1:A:398:ASN:O	1:A:399:ALA:C	2.59	0.41
1:A:47:PRO:HG3	1:A:76:PHE:CE1	2.54	0.41
1:A:312:GLU:O	1:A:315:ILE:HB	2.20	0.41
1:A:245:CYS:HA	1:A:310:GLN:NE2	2.35	0.41
1:A:389:PHE:C	1:A:389:PHE:CD1	2.94	0.41
1:A:821:LYS:O	1:A:825:LEU:HG	2.20	0.41
1:A:830:VAL:CG1	1:A:833:GLU:HA	2.50	0.41
1:A:840:ALA:C	1:A:842:GLY:H	2.22	0.41
1:A:676:TYR:HB2	1:A:679:LEU:HD22	2.02	0.41
1:A:267:MSE:CE	1:A:293:VAL:HG21	2.50	0.41
1:A:303:ASP:OD2	1:A:305:LYS:HB2	2.19	0.41
1:A:349:VAL:O	1:A:351:SER:N	2.53	0.41
1:A:53:ARG:HD2	1:A:57:ARG:NH1	2.35	0.41
1:A:232:ASP:HB3	1:A:235:LYS:HD2	2.01	0.41
1:A:321:ASN:O	1:A:329:ILE:HB	2.21	0.41
1:A:464:ILE:C	1:A:466:ALA:N	2.72	0.41
1:A:501:LEU:CD1	1:A:531:THR:HG22	2.51	0.41
1:A:563:VAL:HG13	1:A:564:LYS:H	1.86	0.41
1:A:536:LEU:O	1:A:537:LEU:C	2.59	0.41
1:A:55:MSE:HE1	1:A:59:LYS:NZ	2.35	0.41
1:A:834:ARG:HD3	1:A:834:ARG:HA	1.88	0.41
1:A:52:ASN:OD1	2:B:9:VAL:HB	2.21	0.41
1:A:90:ALA:O	1:A:93:GLN:N	2.50	0.41
1:A:296:GLU:O	1:A:300:MSE:HG2	2.20	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:420:PHE:O	1:A:424:MSE:CG	2.69	0.41
1:A:567:ILE:HG23	1:A:573:LEU:CD2	2.51	0.41
1:A:87:ARG:HG2	1:A:103:ASP:OD1	2.21	0.41
1:A:70:CYS:SG	1:A:87:ARG:N	2.94	0.41
1:A:739:LEU:HD12	1:A:739:LEU:C	2.41	0.41
1:A:857:MSE:HE2	1:A:896:LEU:HB3	2.01	0.41
1:A:472:GLU:HG2	1:A:475:ILE:CD1	2.48	0.41
1:A:482:ILE:HD13	1:A:482:ILE:N	2.36	0.41
1:A:436:ILE:HD13	1:A:436:ILE:H	1.86	0.41
1:A:642:LEU:C	1:A:644:GLU:H	2.24	0.41
1:A:725:PRO:O	1:A:728:ARG:N	2.37	0.41
1:A:766:ILE:O	1:A:770:ILE:HG13	2.20	0.41
1:A:626:THR:OG1	1:A:627:HIS:N	2.53	0.41
1:A:632:GLU:O	1:A:634:TYR:N	2.48	0.41
1:A:364:GLU:HG2	1:A:368:HIS:HE1	1.85	0.41
1:A:397:PHE:CE1	1:A:421:LEU:HD21	2.55	0.41
1:A:663:LEU:HG	1:A:699:ALA:HA	2.03	0.41
1:A:87:ARG:HG2	1:A:91:ARG:HD2	2.02	0.41
1:A:822:LEU:HD22	1:A:826:TYR:CE1	2.55	0.41
1:A:839:SER:O	1:A:843:PHE:HB2	2.21	0.41
1:A:879:GLN:O	1:A:879:GLN:HG3	2.21	0.41
1:A:708:GLY:HA2	1:A:711:ILE:HD12	2.03	0.41
1:A:489:TYR:CD1	1:A:489:TYR:O	2.72	0.41
1:A:671:LEU:HD12	1:A:706:LYS:HB3	2.03	0.41
1:A:927:GLU:C	1:A:929:ALA:H	2.24	0.41
1:A:258:ILE:CD1	1:A:258:ILE:H	2.28	0.41
1:A:467:THR:O	1:A:467:THR:HG22	2.21	0.41
1:A:347:LEU:C	1:A:349:VAL:N	2.72	0.41
1:A:729:ALA:O	1:A:731:GLU:N	2.54	0.41
1:A:328:GLY:O	1:A:329:ILE:O	2.39	0.40
1:A:620:LYS:HG3	1:A:621:HIS:N	2.29	0.40
1:A:446:LEU:HD21	1:A:480:VAL:CG2	2.51	0.40
1:A:593:ALA:HB1	1:A:665:LEU:CB	2.46	0.40
1:A:736:LEU:O	1:A:756:LEU:HD21	2.20	0.40
1:A:247:LYS:HB2	1:A:252:PHE:CD2	2.56	0.40
1:A:554:LEU:HD23	1:A:554:LEU:C	2.42	0.40
1:A:723:SER:OG	1:A:724:PHE:HD1	2.04	0.40
1:A:788:HIS:O	1:A:789:GLU:C	2.59	0.40
1:A:803:LEU:O	1:A:805:PHE:N	2.54	0.40
1:A:803:LEU:CD2	1:A:812:THR:HG21	2.47	0.40
1:A:11:ILE:C	1:A:11:ILE:CD1	2.89	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:9:GLU:O	1:A:12:ARG:HG2	2.21	0.40
1:A:225:PHE:HA	1:A:228:MSE:HG2	2.04	0.40
1:A:251:ASP:OD2	1:A:251:ASP:N	2.54	0.40
1:A:448:MSE:CB	1:A:456:MSE:HE2	2.24	0.40
1:A:898:SER:HB2	1:A:899:GLU:OE1	2.21	0.40
1:A:53:ARG:HD3	1:A:57:ARG:NH1	2.35	0.40
1:A:223:MSE:CE	1:A:267:MSE:HG2	2.46	0.40
1:A:625:GLU:CG	1:A:625:GLU:O	2.66	0.40
1:A:493:ASP:HA	1:A:494:PRO:HD2	1.93	0.40
1:A:773:GLU:CG	1:A:775:ALA:HB2	2.52	0.40
1:A:664:GLU:O	1:A:667:ALA:HB3	2.22	0.40
1:A:197:ASP:OD1	1:A:199:SER:N	2.54	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	898/961 (93%)	558 (62%)	227 (25%)	113 (13%)	0	7
2	B	8/10 (80%)	3 (38%)	2 (25%)	3 (38%)	0	0
All	All	906/971 (93%)	561 (62%)	229 (25%)	116 (13%)	0	7

All (116) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	9	GLU
1	A	22	GLN
1	A	43	LYS
1	A	79	ALA
1	A	112	PRO
1	A	114	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	115	LYS
1	A	151	ARG
1	A	152	GLY
1	A	153	GLU
1	A	158	GLU
1	A	242	ARG
1	A	356	LEU
1	A	365	THR
1	A	403	ARG
1	A	408	ASP
1	A	429	VAL
1	A	439	ASP
1	A	451	SER
1	A	471	HIS
1	A	491	SER
1	A	567	ILE
1	A	586	ALA
1	A	660	LYS
1	A	716	ALA
1	A	745	GLU
1	A	747	LYS
1	A	761	SER
1	A	806	GLU
1	A	815	PRO
1	A	818	ASP
1	A	833	GLU
1	A	834	ARG
1	A	837	ARG
1	A	857	MSE
1	A	874	GLU
1	A	876	ALA
1	A	909	LEU
1	A	38	THR
1	A	98	GLY
1	A	102	GLN
1	A	156	ASP
1	A	157	THR
1	A	327	GLY
1	A	360	PRO
1	A	379	ASP
1	A	424	MSE
1	A	468	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	620	LYS
1	A	621	HIS
1	A	626	THR
1	A	658	GLU
1	A	659	SER
1	A	691	LEU
1	A	725	PRO
1	A	726	GLY
1	A	763	SER
1	A	804	PHE
1	A	829	GLU
1	A	856	ILE
1	A	862	SER
1	A	899	GLU
1	A	911	ALA
1	A	916	GLY
1	A	920	GLN
1	A	10	GLU
1	A	350	ALA
1	A	434	ASN
1	A	537	LEU
1	A	559	LEU
1	A	583	LYS
1	A	633	GLU
1	A	647	ALA
1	A	653	ALA
1	A	717	LYS
1	A	723	SER
1	A	730	TYR
1	A	735	PRO
1	A	765	SER
1	A	784	PHE
1	A	835	LEU
1	A	861	LYS
1	A	877	GLU
1	A	910	VAL
2	B	5	THR
1	A	44	ALA
1	A	136	THR
1	A	314	CYS
1	A	370	ALA
1	A	391	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	447	GLU
1	A	453	ASP
1	A	640	ARG
1	A	677	GLU
1	A	680	ARG
1	A	692	CYS
1	A	705	ILE
1	A	729	ALA
1	A	789	GLU
1	A	848	GLU
1	A	898	SER
1	A	928	GLN
1	A	329	ILE
1	A	381	VAL
1	A	541	LYS
1	A	664	GLU
1	A	893	SER
1	A	246	LYS
1	A	654	VAL
1	A	732	VAL
1	A	860	ILE
2	B	6	ILE
1	A	648	VAL
1	A	291	ILE
1	A	646	GLY
2	B	3	GLY

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	736/783 (94%)	628 (85%)	108 (15%)	4	25
2	B	7/7 (100%)	6 (86%)	1 (14%)	4	27
All	All	743/790 (94%)	634 (85%)	109 (15%)	4	25

All (109) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	6	GLN
1	A	9	GLU
1	A	11	ILE
1	A	25	ILE
1	A	33	GLU
1	A	35	LEU
1	A	41	GLU
1	A	55	MSE
1	A	60	ARG
1	A	61	ASP
1	A	70	CYS
1	A	71	THR
1	A	85	PHE
1	A	89	LEU
1	A	112	PRO
1	A	134	GLN
1	A	138	LEU
1	A	142	VAL
1	A	151	ARG
1	A	157	THR
1	A	161	MSE
1	A	173	GLU
1	A	212	LEU
1	A	213	ASP
1	A	220	VAL
1	A	236	SER
1	A	251	ASP
1	A	258	ILE
1	A	259	LEU
1	A	262	ARG
1	A	269	LYS
1	A	288	ILE
1	A	295	LEU
1	A	299	GLU
1	A	310	GLN
1	A	317	LEU
1	A	318	PHE
1	A	323	MSE
1	A	324	HIS
1	A	341	ARG
1	A	344	LEU
1	A	351	SER
1	A	353	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	357	CYS
1	A	359	TYR
1	A	375	ARG
1	A	376	LEU
1	A	377	GLU
1	A	384	THR
1	A	385	LYS
1	A	400	LEU
1	A	409	GLU
1	A	425	LEU
1	A	429	VAL
1	A	430	ASP
1	A	433	ILE
1	A	436	ILE
1	A	457	GLN
1	A	476	ASN
1	A	479	LYS
1	A	480	VAL
1	A	489	TYR
1	A	495	THR
1	A	505	CYS
1	A	526	ILE
1	A	530	LYS
1	A	535	PHE
1	A	541	LYS
1	A	560	ASP
1	A	565	GLU
1	A	572	LEU
1	A	580	LEU
1	A	589	VAL
1	A	591	THR
1	A	630	ASP
1	A	634	TYR
1	A	637	LYS
1	A	642	LEU
1	A	656	LYS
1	A	657	THR
1	A	658	GLU
1	A	666	ILE
1	A	673	PHE
1	A	683	ILE
1	A	684	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	692	CYS
1	A	695	LEU
1	A	697	LYS
1	A	717	LYS
1	A	730	TYR
1	A	736	LEU
1	A	739	LEU
1	A	745	GLU
1	A	756	LEU
1	A	779	ILE
1	A	783	TRP
1	A	802	LEU
1	A	805	PHE
1	A	815	PRO
1	A	817	THR
1	A	823	TRP
1	A	846	LEU
1	A	872	MSE
1	A	873	HIS
1	A	874	GLU
1	A	877	GLU
1	A	899	GLU
1	A	900	ILE
2	B	6	ILE

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (31) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	6	GLN
1	A	36	GLN
1	A	67	GLN
1	A	93	GLN
1	A	129	ASN
1	A	165	ASN
1	A	166	ASN
1	A	183	ASN
1	A	184	GLN
1	A	218	ASN
1	A	229	HIS
1	A	265	ASN
1	A	286	ASN
1	A	352	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	368	HIS
1	A	374	GLN
1	A	398	ASN
1	A	406	ASN
1	A	411	HIS
1	A	438	ASN
1	A	440	GLN
1	A	476	ASN
1	A	598	ASN
1	A	601	ASN
1	A	622	HIS
1	A	661	ASN
1	A	741	HIS
1	A	788	HIS
1	A	801	ASN
1	A	879	GLN
1	A	888	ASN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues ⓘ

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	879/961 (91%)	-0.29	6 (0%) 89 81	56, 122, 181, 200	0
2	B	10/10 (100%)	1.26	2 (20%) 1 1	173, 187, 200, 200	0
All	All	889/971 (91%)	-0.27	8 (0%) 85 75	56, 122, 182, 200	0

All (8) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	925	SER	3.0
1	A	622	HIS	2.6
2	B	1	ALA	2.5
1	A	896	LEU	2.5
1	A	522	GLU	2.3
1	A	871	ALA	2.3
2	B	10	ASP	2.1
1	A	870	ILE	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](#)

There are no ligands in this entry.

6.5 Other polymers ⓘ

There are no such residues in this entry.