



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Aug 8, 2016 – 04:12 PM EDT

PDB ID : 5L5K
Title : Plexin A4 full extracellular region, domains 1 to 10, data to 7.5 angstrom, spacegroup P4(1)
Authors : Janssen, B.J.C.; Kong, Y.; Malinauskas, T.; Vangoor, V.R.; Coles, C.H.; Kaufmann, R.; Ni, T.; Gilbert, R.J.C.; Padilla-Parra, S.; Pasterkamp, R.J.; Jones, E.Y.
Deposited on : 2016-05-28
Resolution : 7.50 Å(reported)

This is a Full wwPDB X-ray Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<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	:	unknown
Xtriage (Phenix)	:	1.9-1692
EDS	:	rb-20027939
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)	:	rb-20027939

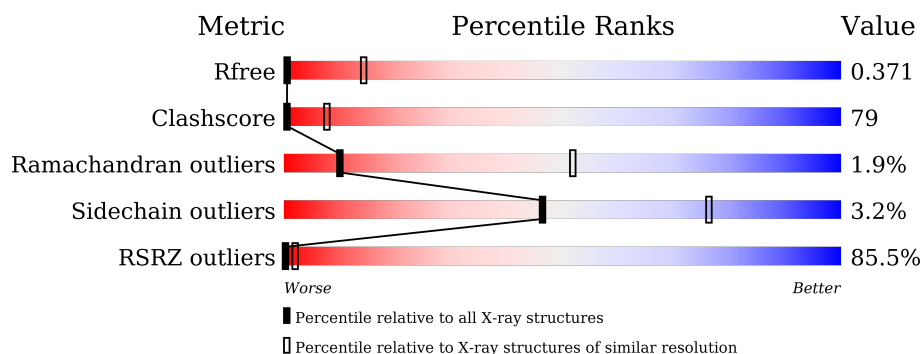
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 7.50 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
R_{free}	91344	1014 (9.50-3.66)
Clashscore	102246	1063 (10.00-3.70)
Ramachandran outliers	100387	1035 (9.50-3.66)
Sidechain outliers	100360	1005 (9.50-3.66)
RSRZ outliers	91569	1013 (9.50-3.66)

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	1207	<div> <div>83%</div> <div> <div>33%</div> <div>58%</div> <div>6%</div> </div> </div>

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 9134 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 Plexin-A4.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	1168	Total	C	N	O	S	0	0	0
			9134	5761	1572	1729	72			

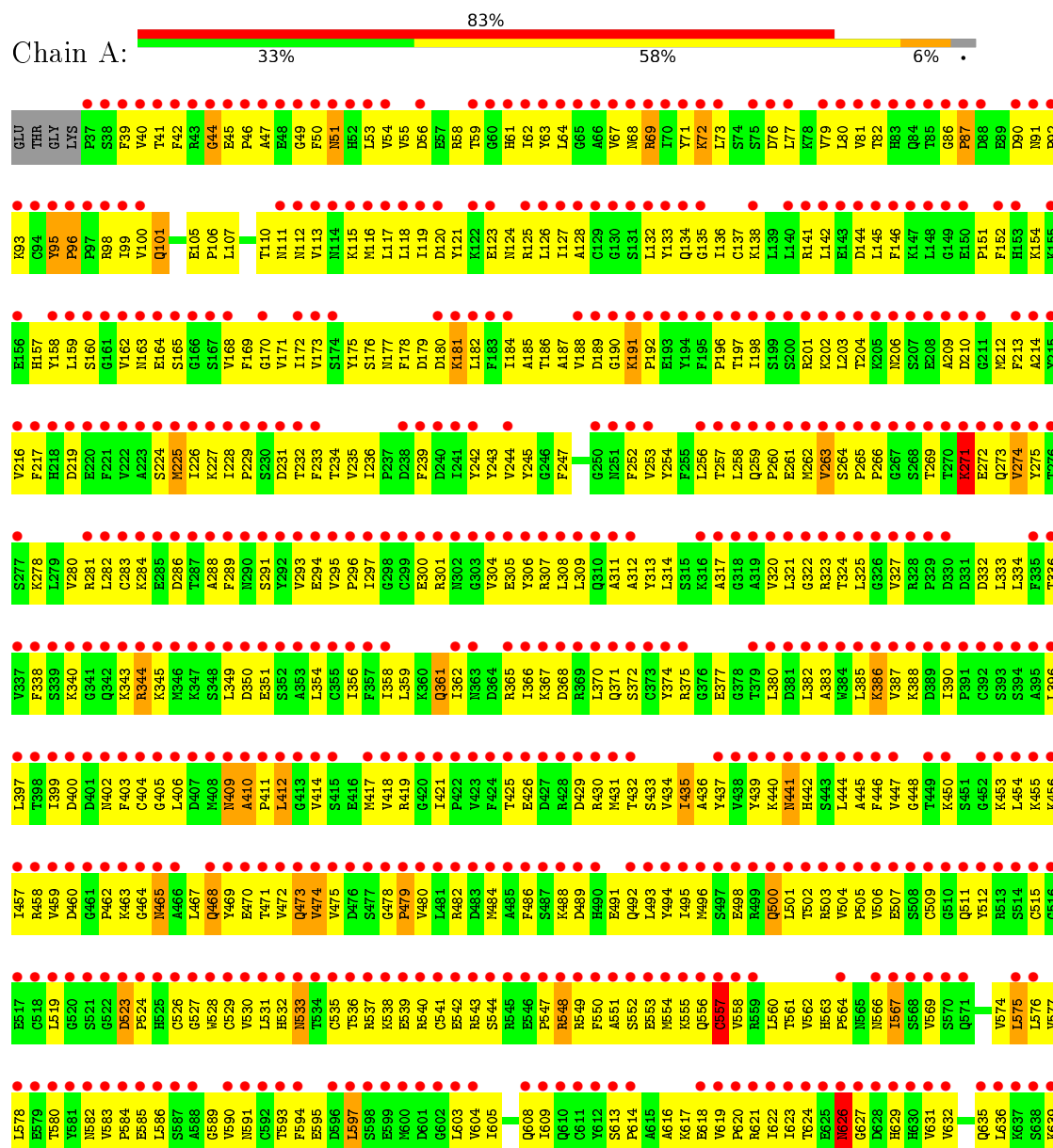
There are 13 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	33	GLU	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	34	THR	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	35	GLY	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1230	GLY	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1231	ARG	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1232	THR	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1233	LYS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1234	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1235	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1236	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1237	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1238	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1239	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2

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 ($\text{RSRZ} > 2$). 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: Plexin-A4



V1191	L1130	P1070	S1010	Y949	D888	P828	N763	G700	E840
T1192	N1131	Q1071	E1011	P950	I889	G829	T764	F701	T641
V1193	K1132	I1072	E1012	N951	A890	Q830	S765	Q702	G642
S1194	T1133	R1073	V1013	T952	S891	C831	Y766	L703	M643
D1195	N1134	A1074	L1014	L953	H892	T832	L704	L704	L644
V1196	F1135	K1075	D1015	T954	V893	L833	Y767	R705	F645
T1136	T1136	H1076	K1016	L955	K894	H834	T768	V706	A646
Y1137	Y1137	G1077	K1017	A956	V895	Q835	S647	D707	S647
L1198	Y1138	G1078	V1018	D957	A896	H836	T769	K708	T648
L1199	P1139	K1079	T1019	D958	A897	C837	T770	L709	S649
C1200	N1140	E1080	V1020	L959	V898	P838	L776	L710	F650
E1201	P1141	H1081	Q1021	P960	E899	A839	P777	V711	V651
S1202	V1142	I1082	Q1022	N961	C900	H840	V778	P712	F652
P1203	F1143	M1083	D1023	R862	S901	E841	E779	V713	Y653
N1204	A1144	C1084	A1024	G963	P902	S842	L780	E714	M654
LEU	E1145	C1085	A1025	P964	L903	R843	L781	V715	C655
ILE	PHE	E1086	I1026	N965	V904	W844	V782	I716	S656
GLY	SER	V1087	I1027	S966	D905	L845	V783	L717	V657
ARG	PRO	L1088	R1028	G967	G906	E846	W784		H658
HIS	SER	H1089	Q1029	G968	V907	L847	N785		H659
K1210	GLY	A1090	D1030	T969	I908	S848	L721		S660
V1211	ILE	T1091	L1031	Q970	P909	G849	K722		C661
M1212	LEU	E1092	V1032	V971	A910	A850	F787		L662
A1213	GLU	M1093	F1033	T972	E911	N851	F788		S663
R1214	LEU	T1094	Q1034	T973	Q912	S852	N789		L796
V1215	LYS	C1095	Y1035	T974	T913	K853	I790		C664
G1216	PRO	Q1096	V1036	G975	I913	C854	P727		V665
G1217	GLY	A1097	E1037	T976	C915	T855	N792		E666
M1218	GLY	P1098	D1038	N977	E916	N856	P729		S667
E1219	T1158	A1099	P1039	L978	N917	P857	Q730		P668
Y1220	P1159	L1100	T1040	N979	G918	R858	S731		Y669
S1221	I1160	A1101	I1041	A980	E919	I859	G732		R670
PRO	L1161	L1102	L1042	G981	A920	T860	Y798		C671
GLY	K1162	G1103	R1043	S982	Q921	E861	Y799		H672
MET	G1163	P1104	I1044	N983	P922	I862	R734		W673
VAL	K1164	D1105	E1045	V984	S923	I863	G735		C674
TYR	K1165	H1106	P1046	V985	Q924	P864	E737		K675
ILE	N1166	Q1107	E1047	V986	H925	V865	G738		Y676
ALA	L1167	S1108	W1048	V987	A926	T866	G804		R677
PRO	I1168	D1109	W1049	F988	G927	T867	L740		H678
GLY	P1169	L1110	I1050	G989	F928	P868	M806		V679
ARG	P1170	T1111	V1051	S990	V929	R869	R807		C680
THR	V1171	E1112	S1052	Q991	E930	E870	Q743		T681
LYS	A1172	R1113	G1053	P992	T931	G871	S809		H682
HIS		P1114	N1054	G993	C932	G872	G744		D683
HIS	N1175	E1115	T1055	L994	V933	T873	L745		P684
HIS	V1176	K1117	P1056	F995	A934	K874	E746		M685
HIS	L1178	F1117	I1057	H996	V935	V875	Q747		T686
HIS	N1179	G1118	A1058	R997	C936	T876	R748		C687
HIS	Y1180	F1119	V1059	R998	R937	I877	A751		S688
	T1181	L1120	W1060	S999	P938	R878	F689		Q690
	V1182	L1121	G1061	E939	F939	G879	L752		Q691
	L1183	D1122	T1062	F940	E980	E880	R753		E692
	V1184	N1123	H1063	N941	N881	N881	F754		G693
	G1185	V1124	L1064	A942	L882	G882	S755		V694
	E1186	Q1125	D1065	R943	G883	G883	S757		K695
	K1187	S1126	L1066	Q946	L884	L884	S758		L696
	P1188	L1127	L1067	I947	E885	E885	W759		P697
	C1189	L1128	Q1068	I947	F886	F886	Q760		E698
	T1190	I1129	N1069	Y948	R887	R887	G762		D699

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 41	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	220.59Å 220.59Å 65.94Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	55.15 – 7.50 61.18 – 7.50	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	98.5 (55.15-7.50) 98.5 (61.18-7.50)	Depositor EDS
R_{merge}	0.21	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	2.89 (at 7.40Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX (phenix.refine: 1.8.2_1309)	Depositor
R, R_{free}	0.353 , 0.371 0.350 , 0.371	Depositor DCC
R_{free} test set	196 reflections (4.61%)	DCC
Wilson B-factor (Å ²)	344.7	Xtriage
Anisotropy	0.661	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.41 , 399.1	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.44$, $\langle L^2 \rangle = 0.27$	Xtriage
Estimated twinning fraction	0.067 for h,-k,-l	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.71	EDS
Total number of atoms	9134	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	250.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 5.45% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	1.04	30/9324 (0.3%)	1.23	19/12638 (0.2%)

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

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	4

All (30) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	854	CYS	C-N	-21.05	0.85	1.34
1	A	700	CYS	C-N	20.20	1.72	1.34
1	A	557	CYS	C-N	-7.97	1.15	1.34
1	A	49	GLY	CA-C	6.34	1.62	1.51
1	A	626	ASN	CG-OD1	5.79	1.36	1.24
1	A	163	ASN	CG-OD1	5.77	1.36	1.24
1	A	500	GLN	CD-OE1	5.75	1.36	1.24
1	A	101	GLN	CD-OE1	5.74	1.36	1.24
1	A	473	GLN	CD-OE1	5.72	1.36	1.24
1	A	792	ASN	CG-OD1	5.70	1.36	1.24
1	A	51	ASN	CG-OD1	5.68	1.36	1.24
1	A	970	GLN	CD-OE1	5.68	1.36	1.24
1	A	273	GLN	CD-OE1	5.68	1.36	1.24
1	A	702	GLN	CD-OE1	5.67	1.36	1.24
1	A	826	GLN	CD-OE1	5.67	1.36	1.24
1	A	361	GLN	CD-OE1	5.67	1.36	1.24
1	A	533	ASN	CG-OD1	5.67	1.36	1.24
1	A	728	GLN	CD-OE1	5.67	1.36	1.24
1	A	1068	GLN	CD-OE1	5.66	1.36	1.24
1	A	983	ASN	CG-OD1	5.65	1.36	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	747	GLN	CD-OE1	5.65	1.36	1.24
1	A	1006	ASN	CG-OD1	5.65	1.36	1.24
1	A	409	ASN	CG-OD1	5.64	1.36	1.24
1	A	685	ASN	CG-OD1	5.63	1.36	1.24
1	A	441	ASN	CG-OD1	5.63	1.36	1.24
1	A	1175	ASN	CG-OD1	5.63	1.36	1.24
1	A	789	ASN	CG-OD1	5.62	1.36	1.24
1	A	690	GLN	CD-OE1	5.62	1.36	1.24
1	A	1179	ASN	CG-OD1	5.61	1.36	1.24
1	A	49	GLY	C-N	5.08	1.45	1.34

All (19) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	747	GLN	CG-CD-NE2	-30.31	43.95	116.70
1	A	557	CYS	CA-C-N	-25.68	60.70	117.20
1	A	557	CYS	C-N-CA	-18.83	74.63	121.70
1	A	747	GLN	CG-CD-OE1	-13.94	93.71	121.60
1	A	479	PRO	N-CA-C	8.16	133.31	112.10
1	A	843	ARG	C-N-CA	7.77	141.12	121.70
1	A	478	GLY	CA-C-O	-6.89	108.20	120.60
1	A	747	GLN	OE1-CD-NE2	6.86	137.67	121.90
1	A	473	GLN	C-N-CA	-6.69	104.98	121.70
1	A	892	HIS	CA-CB-CG	6.55	124.73	113.60
1	A	854	CYS	O-C-N	-6.03	113.05	122.70
1	A	225	MET	CG-SD-CE	-5.71	91.06	100.20
1	A	409	ASN	C-N-CA	5.69	135.92	121.70
1	A	49	GLY	C-N-CA	5.61	135.72	121.70
1	A	274	VAL	CG1-CB-CG2	5.44	119.61	110.90
1	A	1045	GLU	CA-C-N	5.22	131.73	117.10
1	A	919	GLU	C-N-CA	5.21	134.74	121.70
1	A	803	CYS	C-N-CA	5.11	133.03	122.30
1	A	676	TYR	CA-CB-CG	-5.10	103.71	113.40

There are no chirality outliers.

All (4) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	557	CYS	Mainchain
1	A	854	CYS	Mainchain
1	A	863	ILE	Peptide
1	A	95	TYR	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	9134	0	8998	1436	8
All	All	9134	0	8998	1436	8

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 (1436) 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:440:LYS:CD	1:A:538:LYS:HD2	1.28	1.55
1:A:700:CYS:C	1:A:701:PRO:N	1.72	1.43
1:A:440:LYS:HD3	1:A:538:LYS:CD	1.51	1.41
1:A:530:VAL:HG11	1:A:584:PRO:CD	1.50	1.38
1:A:854:CYS:C	1:A:855:THR:CA	1.93	1.37
1:A:458:ARG:CD	1:A:524:PRO:HG3	1.64	1.28
1:A:1109:ASP:OD1	1:A:1170:PRO:CG	1.81	1.27
1:A:1109:ASP:OD1	1:A:1170:PRO:HG2	1.22	1.27
1:A:440:LYS:CD	1:A:538:LYS:CD	2.08	1.26
1:A:854:CYS:CA	1:A:855:THR:N	1.96	1.25
1:A:458:ARG:CD	1:A:524:PRO:CG	2.15	1.24
1:A:1109:ASP:CG	1:A:1170:PRO:HG2	1.61	1.21
1:A:854:CYS:O	1:A:855:THR:N	1.75	1.18
1:A:295:VAL:HG12	1:A:414:VAL:HG11	1.27	1.17
1:A:967:GLY:O	1:A:1122:ASP:OD2	1.62	1.16
1:A:458:ARG:HD2	1:A:524:PRO:CG	1.73	1.16
1:A:530:VAL:CG1	1:A:584:PRO:CD	2.24	1.15
1:A:531:LEU:HD21	1:A:584:PRO:HB2	1.21	1.15
1:A:653:TYR:C	1:A:654:ASN:N	2.01	1.14
1:A:324:THR:HB	1:A:462:PRO:HB3	1.27	1.14
1:A:435:ILE:HG22	1:A:446:PHE:HB2	1.22	1.13
1:A:1036:VAL:C	1:A:1037:GLU:N	2.02	1.12
1:A:359:LEU:HD12	1:A:362:ILE:HD11	1.24	1.11
1:A:530:VAL:HG11	1:A:584:PRO:HD2	1.17	1.11
1:A:453:LYS:HG2	1:A:472:VAL:HG22	1.25	1.10
1:A:916:GLU:OE2	1:A:1024:ARG:NH2	1.82	1.10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:118:LEU:HD12	1:A:172:ILE:HD12	1.17	1.09
1:A:809:SER:HB2	1:A:881:ASN:HD21	1.09	1.09
1:A:474:VAL:HG12	1:A:475:VAL:HG23	1.33	1.08
1:A:531:LEU:HD23	1:A:584:PRO:HG2	1.14	1.08
1:A:653:TYR:O	1:A:654:ASN:N	1.85	1.08
1:A:1109:ASP:OD1	1:A:1170:PRO:CD	2.01	1.07
1:A:872:GLY:C	1:A:1023:ASP:HB3	1.75	1.07
1:A:1063:HIS:HB3	1:A:1066:LEU:HD12	1.37	1.07
1:A:531:LEU:CD2	1:A:584:PRO:HG2	1.84	1.07
1:A:806:MET:H	1:A:806:MET:HE3	1.15	1.07
1:A:301:ARG:HD2	1:A:425:THR:HG21	1.37	1.06
1:A:560:LEU:HD23	1:A:648:THR:HG23	1.37	1.06
1:A:1017:LYS:HE2	1:A:1017:LYS:H	1.19	1.06
1:A:458:ARG:HD3	1:A:524:PRO:HG3	1.19	1.06
1:A:530:VAL:HG11	1:A:584:PRO:HD3	1.37	1.06
1:A:595:GLU:HB2	1:A:597:LEU:HD23	1.32	1.05
1:A:1191:VAL:HG22	1:A:1200:CYS:HA	1.34	1.05
1:A:530:VAL:CG1	1:A:584:PRO:HD2	1.84	1.04
1:A:872:GLY:HA3	1:A:1024:ARG:HG2	1.38	1.04
1:A:458:ARG:HD3	1:A:524:PRO:CG	1.84	1.04
1:A:872:GLY:CA	1:A:1024:ARG:HG2	1.87	1.04
1:A:531:LEU:CD2	1:A:584:PRO:HB2	1.89	1.03
1:A:1111:THR:HG21	1:A:1136:THR:HG23	1.39	1.03
1:A:531:LEU:HD21	1:A:584:PRO:CB	1.88	1.03
1:A:46:PRO:HG2	1:A:69:ARG:HG3	1.41	1.03
1:A:440:LYS:HD2	1:A:538:LYS:HD2	1.06	1.01
1:A:494:TYR:HB3	1:A:501:LEU:HD21	1.40	1.00
1:A:872:GLY:O	1:A:1023:ASP:HB3	1.61	0.99
1:A:620:PRO:HA	1:A:623:ILE:HG13	1.41	0.99
1:A:444:LEU:HD12	1:A:446:PHE:CE1	1.98	0.99
1:A:117:LEU:HD11	1:A:126:LEU:HD21	1.45	0.98
1:A:531:LEU:CD2	1:A:584:PRO:CG	2.42	0.98
1:A:1109:ASP:OD1	1:A:1170:PRO:HD2	1.62	0.97
1:A:1072:ILE:HD11	1:A:1117:PHE:HZ	1.28	0.97
1:A:563:HIS:HB3	1:A:564:PRO:HD3	1.44	0.97
1:A:862:ILE:HG22	1:A:877:ILE:HA	1.46	0.97
1:A:1051:VAL:HB	1:A:1140:ASN:N	1.78	0.96
1:A:1036:VAL:O	1:A:1037:GLU:N	1.99	0.95
1:A:458:ARG:CD	1:A:524:PRO:CB	2.43	0.95
1:A:873:THR:HA	1:A:1023:ASP:OD2	1.66	0.95
1:A:531:LEU:HD23	1:A:584:PRO:CG	1.97	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:297:ILE:HG22	1:A:418:VAL:HG12	1.49	0.94
1:A:566:ASN:HA	1:A:651:VAL:HG23	1.49	0.94
1:A:809:SER:HB2	1:A:881:ASN:ND2	1.80	0.94
1:A:72:LYS:HE3	1:A:80:LEU:HD13	1.49	0.94
1:A:1067:ILE:HG21	1:A:1121:LEU:HD22	1.50	0.94
1:A:1118:GLY:HA2	1:A:1130:LEU:HD13	1.48	0.93
1:A:151:PRO:HB2	1:A:157:HIS:CD2	2.03	0.93
1:A:297:ILE:HG22	1:A:418:VAL:CG1	1.97	0.93
1:A:1067:ILE:HG23	1:A:1070:PRO:HG3	1.49	0.93
1:A:458:ARG:HD2	1:A:524:PRO:CB	1.99	0.93
1:A:863:ILE:HG22	1:A:876:THR:HB	1.48	0.93
1:A:62:ILE:CG1	1:A:73:LEU:HB2	1.98	0.93
1:A:527:GLY:HA3	1:A:550:PHE:CZ	2.04	0.92
1:A:1036:VAL:CG2	1:A:1066:LEU:HD13	1.99	0.92
1:A:435:ILE:HD13	1:A:436:ALA:H	1.34	0.92
1:A:804:GLY:HA2	1:A:806:MET:SD	2.09	0.92
1:A:39:PHE:CE2	1:A:473:GLN:HG3	2.05	0.92
1:A:239:PHE:HA	1:A:260:PRO:HG2	1.51	0.92
1:A:569:VAL:HB	1:A:654:ASN:HB2	1.50	0.92
1:A:865:VAL:HG13	1:A:866:THR:HG23	1.50	0.92
1:A:271:LYS:HG3	1:A:272:GLU:H	1.34	0.91
1:A:854:CYS:C	1:A:855:THR:N	0.85	0.90
1:A:42:PHE:HE1	1:A:79:VAL:HG22	1.31	0.90
1:A:802:LYS:C	1:A:803:CYS:N	2.24	0.90
1:A:676:TYR:CE1	1:A:728:GLN:O	2.25	0.90
1:A:933:VAL:HG23	1:A:934:ALA:H	1.36	0.90
1:A:1121:LEU:HD12	1:A:1127:LEU:CD2	2.02	0.90
1:A:532:HIS:O	1:A:641:THR:HG21	1.71	0.90
1:A:531:LEU:CD2	1:A:584:PRO:CB	2.48	0.90
1:A:447:VAL:HG22	1:A:455:LYS:HB2	1.53	0.89
1:A:806:MET:SD	1:A:807:ARG:HG3	2.11	0.89
1:A:809:SER:CB	1:A:881:ASN:HD21	1.86	0.89
1:A:446:PHE:HD2	1:A:454:LEU:HD21	1.38	0.89
1:A:951:MET:C	1:A:952:THR:N	2.26	0.89
1:A:359:LEU:CD1	1:A:362:ILE:HD11	2.02	0.89
1:A:447:VAL:CG2	1:A:455:LYS:HB2	2.03	0.89
1:A:95:TYR:CD2	1:A:96:PRO:HD3	2.08	0.89
1:A:854:CYS:O	1:A:855:THR:CA	2.13	0.88
1:A:486:PHE:CD1	1:A:493:LEU:HD13	2.09	0.88
1:A:181:LYS:CD	1:A:202:LYS:HA	2.04	0.88
1:A:951:MET:O	1:A:952:THR:N	2.07	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:972:THR:HG23	1:A:1002:TYR:CE1	2.07	0.88
1:A:453:LYS:CG	1:A:472:VAL:HG22	2.03	0.88
1:A:874:LYS:HB2	1:A:982:SER:CB	2.04	0.87
1:A:892:HIS:HB2	1:A:932:CYS:O	1.73	0.87
1:A:1067:ILE:HD13	1:A:1121:LEU:CD2	2.05	0.87
1:A:873:THR:HG23	1:A:981:GLY:HA2	1.54	0.87
1:A:110:THR:CG2	1:A:132:LEU:HD21	2.05	0.87
1:A:1111:THR:HG21	1:A:1136:THR:CG2	2.04	0.86
1:A:1057:ILE:CG2	1:A:1095:CYS:HB2	2.05	0.86
1:A:873:THR:HA	1:A:1023:ASP:CG	1.94	0.86
1:A:1076:HIS:HB2	1:A:1100:LEU:HD22	1.57	0.86
1:A:39:PHE:CE1	1:A:505:PRO:HD2	2.11	0.86
1:A:863:ILE:HG23	1:A:864:PRO:HD2	1.56	0.86
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:H	1.39	0.86
1:A:118:LEU:HD12	1:A:172:ILE:CD1	2.05	0.86
1:A:256:LEU:HB3	1:A:309:LEU:HD22	1.56	0.86
1:A:370:LEU:CD1	1:A:399:ILE:HD12	2.05	0.86
1:A:473:GLN:CG	1:A:504:VAL:HG22	2.06	0.86
1:A:874:LYS:HB2	1:A:982:SER:HB2	1.58	0.86
1:A:295:VAL:HA	1:A:414:VAL:CG2	2.06	0.86
1:A:471:THR:HG21	1:A:473:GLN:HE22	1.40	0.86
1:A:1193:VAL:HG12	1:A:1198:LEU:CD2	2.06	0.86
1:A:118:LEU:HD13	1:A:119:ILE:N	1.91	0.85
1:A:1072:ILE:HG23	1:A:1098:PRO:HG3	1.58	0.85
1:A:133:TYR:CG	1:A:136:ILE:HG12	2.12	0.85
1:A:603:LEU:HD23	1:A:604:VAL:N	1.90	0.85
1:A:295:VAL:CG1	1:A:414:VAL:HG11	2.07	0.85
1:A:435:ILE:CG2	1:A:446:PHE:HB2	2.06	0.85
1:A:989:GLY:HA2	1:A:1017:LYS:HE3	1.57	0.85
1:A:882:LEU:HB2	1:A:910:ALA:HA	1.58	0.85
1:A:959:LYS:HB2	1:A:972:THR:HB	1.57	0.85
1:A:440:LYS:HD3	1:A:538:LYS:HD3	1.56	0.85
1:A:676:TYR:HE1	1:A:728:GLN:O	1.57	0.85
1:A:706:VAL:HG22	1:A:707:ASP:H	1.42	0.84
1:A:830:GLN:HG2	1:A:831:CYS:H	1.43	0.84
1:A:863:ILE:CG2	1:A:876:THR:HB	2.07	0.84
1:A:971:VAL:HG22	1:A:1005:CYS:O	1.78	0.84
1:A:1067:ILE:HD13	1:A:1121:LEU:HD22	1.57	0.84
1:A:42:PHE:CZ	1:A:45:GLU:HB2	2.12	0.84
1:A:473:GLN:NE2	1:A:504:VAL:HG13	1.93	0.84
1:A:50:PHE:HB2	1:A:498:GLU:O	1.78	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:847:LEU:CD1	1:A:884:LEU:HD12	2.08	0.83
1:A:356:ILE:CG2	1:A:421:ILE:HB	2.07	0.83
1:A:854:CYS:O	1:A:855:THR:HA	1.76	0.83
1:A:100:VAL:HG12	1:A:101:GLN:HG3	1.58	0.83
1:A:1067:ILE:CG2	1:A:1070:PRO:HG3	2.08	0.83
1:A:1160:ILE:CG2	1:A:1200:CYS:HB3	2.09	0.83
1:A:996:HIS:HB3	1:A:1004:ILE:HG23	1.59	0.83
1:A:987:MET:HB2	1:A:1019:THR:CG2	2.09	0.83
1:A:358:ILE:HG23	1:A:361:GLN:H	1.44	0.83
1:A:847:LEU:HD11	1:A:850:ALA:HA	1.58	0.83
1:A:1057:ILE:HG22	1:A:1095:CYS:O	1.79	0.83
1:A:336:THR:O	1:A:354:LEU:HD12	1.78	0.82
1:A:356:ILE:HG22	1:A:421:ILE:HB	1.61	0.82
1:A:991:GLN:CG	1:A:1008:THR:HG21	2.10	0.82
1:A:133:TYR:CB	1:A:136:ILE:HG12	2.09	0.82
1:A:229:PRO:O	1:A:232:THR:HG22	1.79	0.82
1:A:847:LEU:HD12	1:A:852:SER:HB3	1.58	0.82
1:A:1124:VAL:CG1	1:A:1127:LEU:HD13	2.09	0.82
1:A:1193:VAL:HG12	1:A:1198:LEU:HD22	1.60	0.82
1:A:53:LEU:HD23	1:A:54:VAL:N	1.94	0.82
1:A:1130:LEU:HB3	1:A:1133:THR:HG23	1.59	0.82
1:A:506:VAL:O	1:A:507:GLU:N	2.12	0.82
1:A:1036:VAL:HG21	1:A:1066:LEU:HD13	1.60	0.82
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CE1	2.15	0.82
1:A:40:VAL:CG1	1:A:503:ARG:HB3	2.08	0.82
1:A:53:LEU:HB2	1:A:496:MET:HE1	1.62	0.82
1:A:1118:GLY:HA2	1:A:1130:LEU:CD1	2.10	0.82
1:A:785:ASN:HB3	1:A:788:PHE:CD2	2.14	0.82
1:A:873:THR:CG2	1:A:981:GLY:HA2	2.09	0.82
1:A:295:VAL:HA	1:A:414:VAL:HG22	1.60	0.81
1:A:1124:VAL:HG12	1:A:1127:LEU:HD13	1.62	0.81
1:A:42:PHE:CE1	1:A:79:VAL:HG22	2.14	0.81
1:A:397:LEU:HD23	1:A:399:ILE:CD1	2.10	0.81
1:A:440:LYS:NZ	1:A:538:LYS:CD	2.43	0.81
1:A:44:GLY:HA2	1:A:50:PHE:CE2	2.15	0.81
1:A:397:LEU:HD23	1:A:399:ILE:HD13	1.60	0.81
1:A:440:LYS:HZ3	1:A:538:LYS:HD3	1.44	0.81
1:A:569:VAL:CB	1:A:654:ASN:HB2	2.11	0.81
1:A:62:ILE:HG13	1:A:73:LEU:HB2	1.62	0.81
1:A:863:ILE:HG13	1:A:864:PRO:HD3	1.62	0.81
1:A:474:VAL:HG22	1:A:495:ILE:HG21	1.61	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:926:ALA:HB1	1:A:947:LEU:HD12	1.63	0.81
1:A:623:ILE:HD12	1:A:624:THR:N	1.96	0.80
1:A:994:LEU:CD1	1:A:1006:ASN:HB2	2.12	0.80
1:A:154:LYS:HD3	1:A:210:ASP:OD1	1.81	0.80
1:A:370:LEU:HD12	1:A:399:ILE:HD12	1.63	0.80
1:A:321:LEU:HD12	1:A:462:PRO:HG2	1.64	0.80
1:A:440:LYS:HD3	1:A:538:LYS:HZ2	1.44	0.80
1:A:486:PHE:CE1	1:A:493:LEU:HD13	2.16	0.80
1:A:872:GLY:N	1:A:1024:ARG:HG2	1.96	0.80
1:A:530:VAL:CG1	1:A:584:PRO:CG	2.59	0.80
1:A:444:LEU:HD13	1:A:445:ALA:N	1.97	0.80
1:A:889:ILE:HG23	1:A:892:HIS:CE1	2.16	0.80
1:A:872:GLY:HA3	1:A:1024:ARG:H	1.46	0.80
1:A:1067:ILE:CD1	1:A:1121:LEU:HA	2.12	0.79
1:A:439:TYR:OH	1:A:537:ARG:HB3	1.83	0.79
1:A:1167:LEU:HB2	1:A:1195:ASP:O	1.82	0.79
1:A:1180:TYR:HA	1:A:1215:VAL:HG12	1.62	0.79
1:A:239:PHE:CE1	1:A:260:PRO:HD2	2.17	0.79
1:A:192:PRO:HB3	1:A:233:PHE:CE1	2.17	0.79
1:A:380:LEU:HD12	1:A:386:LYS:HE3	1.64	0.79
1:A:972:THR:HA	1:A:1002:TYR:HE1	1.47	0.79
1:A:1070:PRO:HB3	1:A:1121:LEU:HD21	1.64	0.79
1:A:314:LEU:HD11	1:A:332:ASP:HB3	1.64	0.79
1:A:620:PRO:HA	1:A:623:ILE:CG1	2.12	0.79
1:A:847:LEU:CG	1:A:850:ALA:HA	2.13	0.79
1:A:994:LEU:HD11	1:A:1006:ASN:HB2	1.62	0.79
1:A:1121:LEU:HD12	1:A:1127:LEU:HD23	1.63	0.79
1:A:317:ALA:HB1	1:A:321:LEU:HB3	1.64	0.78
1:A:1191:VAL:HG13	1:A:1199:LEU:O	1.83	0.78
1:A:440:LYS:HD3	1:A:538:LYS:CE	2.13	0.78
1:A:591:ASN:OD1	1:A:639:LYS:HE2	1.83	0.78
1:A:56:ASP:OD2	1:A:142:LEU:HD11	1.83	0.78
1:A:629:HIS:CD2	1:A:669:TYR:HE1	2.00	0.78
1:A:854:CYS:C	1:A:855:THR:HA	2.01	0.78
1:A:847:LEU:CD2	1:A:884:LEU:HD13	2.14	0.78
1:A:1014:LEU:H	1:A:1014:LEU:HD22	1.48	0.78
1:A:168:VAL:HG23	1:A:185:ALA:O	1.84	0.78
1:A:295:VAL:HG12	1:A:414:VAL:CG1	2.09	0.78
1:A:44:GLY:HA2	1:A:50:PHE:HE2	1.44	0.78
1:A:324:THR:HB	1:A:462:PRO:CB	2.10	0.78
1:A:533:ASN:OD1	1:A:643:MET:O	2.02	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:453:LYS:HE3	1:A:472:VAL:CG2	2.13	0.78
1:A:699:ASP:O	1:A:725:ASN:OD1	2.01	0.78
1:A:715:VAL:HG21	1:A:717:LYS:HD2	1.65	0.78
1:A:231:ASP:O	1:A:234:THR:HG22	1.84	0.77
1:A:284:LYS:HD3	1:A:284:LYS:O	1.84	0.77
1:A:1109:ASP:OD2	1:A:1170:PRO:HG2	1.83	0.77
1:A:458:ARG:HD2	1:A:524:PRO:HG2	1.63	0.77
1:A:278:LYS:HE3	1:A:296:PRO:HG3	1.67	0.77
1:A:244:VAL:HG13	1:A:482:ARG:NH1	1.98	0.77
1:A:1016:MET:HG2	1:A:1035:TYR:CE2	2.19	0.77
1:A:994:LEU:O	1:A:994:LEU:HD12	1.84	0.77
1:A:1044:ILE:HG21	1:A:1057:ILE:HD11	1.66	0.77
1:A:1191:VAL:HG13	1:A:1199:LEU:C	2.05	0.77
1:A:359:LEU:HD12	1:A:362:ILE:CD1	2.09	0.77
1:A:710:LEU:HD12	1:A:710:LEU:O	1.84	0.77
1:A:742:ILE:HB	1:A:745:ILE:O	1.84	0.77
1:A:181:LYS:NZ	1:A:216:VAL:HG23	1.99	0.77
1:A:567:ILE:H	1:A:567:ILE:HD13	1.50	0.77
1:A:616:ALA:O	1:A:620:PRO:HD2	1.85	0.77
1:A:327:VAL:CG1	1:A:358:ILE:HD11	2.14	0.77
1:A:403:PHE:CE1	1:A:406:LEU:HD23	2.20	0.77
1:A:872:GLY:O	1:A:1023:ASP:CB	2.33	0.76
1:A:172:ILE:HG12	1:A:182:LEU:HD13	1.68	0.76
1:A:460:ASP:HB3	1:A:464:GLY:N	2.00	0.76
1:A:689:PHE:HE2	1:A:730:GLN:OE1	1.68	0.76
1:A:1021:GLN:HG2	1:A:1026:ARG:HG3	1.67	0.76
1:A:533:ASN:OD1	1:A:643:MET:C	2.24	0.76
1:A:1036:VAL:HG21	1:A:1066:LEU:HD22	1.68	0.76
1:A:1010:SER:HB2	1:A:1035:TYR:CE2	2.20	0.76
1:A:327:VAL:HG12	1:A:358:ILE:HD11	1.65	0.76
1:A:629:HIS:CG	1:A:669:TYR:OH	2.38	0.76
1:A:785:ASN:HB3	1:A:788:PHE:HD2	1.49	0.76
1:A:64:LEU:HD12	1:A:496:MET:CE	2.16	0.75
1:A:120:ASP:OD2	1:A:123:GLU:HG3	1.86	0.75
1:A:869:ARG:O	1:A:920:ALA:HB3	1.86	0.75
1:A:225:MET:HE1	1:A:227:LYS:HG3	1.69	0.75
1:A:547:PRO:O	1:A:548:ARG:HG2	1.84	0.75
1:A:595:GLU:CB	1:A:597:LEU:HD23	2.14	0.75
1:A:204:THR:HG21	1:A:209:ALA:HB3	1.66	0.75
1:A:780:LEU:O	1:A:780:LEU:HD12	1.85	0.75
1:A:202:LYS:HD3	1:A:214:ALA:HB3	1.69	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:323:ARG:HG3	1:A:324:THR:N	2.02	0.75
1:A:784:TRP:HD1	1:A:790:ILE:HD11	1.51	0.75
1:A:958:LEU:HD22	1:A:960:PRO:O	1.87	0.75
1:A:847:LEU:CD1	1:A:850:ALA:HA	2.16	0.74
1:A:683:ASP:O	1:A:686:THR:HG22	1.87	0.74
1:A:847:LEU:HD12	1:A:852:SER:CB	2.16	0.74
1:A:99:ILE:HD11	1:A:152:PHE:HB2	1.69	0.74
1:A:181:LYS:HZ3	1:A:216:VAL:HG23	1.52	0.74
1:A:256:LEU:CB	1:A:309:LEU:HD22	2.16	0.74
1:A:473:GLN:CB	1:A:504:VAL:HG22	2.17	0.74
1:A:1044:ILE:HG23	1:A:1057:ILE:HG12	1.69	0.74
1:A:562:VAL:HG22	1:A:578:LEU:CD2	2.18	0.74
1:A:1051:VAL:HG22	1:A:1107:GLN:OE1	1.88	0.74
1:A:278:LYS:HG2	1:A:296:PRO:HA	1.69	0.74
1:A:42:PHE:HZ	1:A:45:GLU:HB2	1.50	0.74
1:A:567:ILE:HD12	1:A:650:PHE:CZ	2.22	0.74
1:A:1072:ILE:HD11	1:A:1117:PHE:CZ	2.19	0.74
1:A:739:ILE:CD1	1:A:748:ARG:HG2	2.17	0.74
1:A:822:CYS:HA	1:A:833:LEU:HD23	1.70	0.74
1:A:533:ASN:ND2	1:A:645:PHE:HB3	2.03	0.74
1:A:873:THR:HB	1:A:917:MET:CE	2.17	0.74
1:A:448:GLY:HA3	1:A:480:VAL:HG21	1.68	0.74
1:A:532:HIS:O	1:A:641:THR:CG2	2.36	0.74
1:A:964:PRO:HG3	1:A:1066:LEU:HB3	1.69	0.74
1:A:1052:SER:HA	1:A:1140:ASN:HD21	1.52	0.74
1:A:321:LEU:CD1	1:A:462:PRO:HG2	2.17	0.74
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CZ	2.23	0.73
1:A:324:THR:HG21	1:A:462:PRO:HA	1.70	0.73
1:A:435:ILE:HD13	1:A:436:ALA:N	2.03	0.73
1:A:530:VAL:HG12	1:A:584:PRO:CG	2.18	0.73
1:A:46:PRO:HG2	1:A:69:ARG:CG	2.17	0.73
1:A:446:PHE:HB3	1:A:454:LEU:HD11	1.69	0.73
1:A:1082:ILE:H	1:A:1082:ILE:HD13	1.54	0.73
1:A:1070:PRO:HB3	1:A:1121:LEU:CD2	2.19	0.73
1:A:458:ARG:HD3	1:A:524:PRO:CB	2.12	0.73
1:A:225:MET:CE	1:A:227:LYS:HG3	2.19	0.73
1:A:440:LYS:NZ	1:A:538:LYS:HD3	2.03	0.73
1:A:446:PHE:CD2	1:A:454:LEU:HD21	2.24	0.73
1:A:704:LEU:HD11	1:A:724:LYS:HE3	1.69	0.73
1:A:1010:SER:HB2	1:A:1035:TYR:CZ	2.23	0.73
1:A:188:VAL:HG22	1:A:191:LYS:H	1.52	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:261:GLU:HA	1:A:264:SER:O	1.89	0.73
1:A:196:PRO:HB3	1:A:225:MET:HE1	1.69	0.73
1:A:440:LYS:HD3	1:A:538:LYS:HD2	1.12	0.73
1:A:1030:ASP:O	1:A:1032:VAL:HG23	1.89	0.73
1:A:440:LYS:HD3	1:A:538:LYS:NZ	2.04	0.72
1:A:531:LEU:CG	1:A:584:PRO:HB2	2.19	0.72
1:A:670:ARG:HA	1:A:670:ARG:HE	1.55	0.72
1:A:73:LEU:HD22	1:A:79:VAL:HA	1.71	0.72
1:A:184:ILE:HD12	1:A:184:ILE:O	1.89	0.72
1:A:321:LEU:HG	1:A:325:LEU:HD11	1.71	0.72
1:A:1036:VAL:HG23	1:A:1066:LEU:HD13	1.72	0.72
1:A:39:PHE:CD2	1:A:473:GLN:HG3	2.23	0.72
1:A:1016:MET:HE3	1:A:1017:LYS:C	2.10	0.72
1:A:370:LEU:HD21	1:A:374:TYR:HE1	1.55	0.72
1:A:937:ARG:CG	1:A:938:PRO:HD2	2.20	0.72
1:A:569:VAL:CG2	1:A:654:ASN:HB2	2.20	0.71
1:A:832:THR:CG2	1:A:836:HIS:HB2	2.20	0.71
1:A:989:GLY:HA2	1:A:1017:LYS:CE	2.20	0.71
1:A:181:LYS:HD2	1:A:202:LYS:HA	1.71	0.71
1:A:321:LEU:HG	1:A:325:LEU:CD1	2.20	0.71
1:A:872:GLY:C	1:A:1023:ASP:CB	2.58	0.71
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:OE1	1.90	0.71
1:A:814:LEU:HB3	1:A:847:LEU:HB2	1.70	0.71
1:A:871:GLY:C	1:A:1024:ARG:HG2	2.11	0.71
1:A:1165:LYS:HG3	1:A:1166:ASN:H	1.55	0.71
1:A:1045:GLU:CD	1:A:1058:ALA:HB3	2.11	0.71
1:A:480:VAL:HB	1:A:484:MET:CE	2.21	0.71
1:A:558:VAL:HG11	1:A:646:ALA:HB2	1.71	0.71
1:A:873:THR:HG23	1:A:981:GLY:CA	2.21	0.71
1:A:519:LEU:HD12	1:A:552:SER:O	1.90	0.71
1:A:563:HIS:HB2	1:A:577:VAL:CG1	2.21	0.71
1:A:619:VAL:HB	1:A:620:PRO:HD3	1.72	0.71
1:A:806:MET:HE3	1:A:806:MET:N	1.99	0.71
1:A:1004:ILE:HD13	1:A:1005:CYS:N	2.06	0.70
1:A:1051:VAL:HG23	1:A:1139:PRO:HA	1.72	0.70
1:A:115:LYS:HB3	1:A:168:VAL:HG11	1.71	0.70
1:A:188:VAL:HG13	1:A:190:GLY:H	1.56	0.70
1:A:595:GLU:HG2	1:A:632:VAL:HG13	1.72	0.70
1:A:453:LYS:HE3	1:A:472:VAL:HG21	1.73	0.70
1:A:704:LEU:HB2	1:A:722:LYS:HG3	1.71	0.70
1:A:847:LEU:HD21	1:A:850:ALA:HA	1.73	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1044:ILE:CG2	1:A:1057:ILE:HD11	2.21	0.70
1:A:1042:VAL:HG22	1:A:1060:TRP:O	1.92	0.70
1:A:450:LYS:HA	1:A:479:PRO:HB3	1.73	0.70
1:A:575:LEU:HD22	1:A:575:LEU:H	1.56	0.70
1:A:847:LEU:CD1	1:A:852:SER:HB3	2.20	0.70
1:A:872:GLY:HA3	1:A:1024:ARG:CG	2.18	0.70
1:A:1044:ILE:HG23	1:A:1057:ILE:CG1	2.22	0.70
1:A:1102:LEU:HG	1:A:1104:PRO:HD2	1.74	0.70
1:A:281:ARG:HB3	1:A:293:VAL:CG1	2.22	0.70
1:A:304:VAL:HG11	1:A:351:GLU:OE2	1.91	0.70
1:A:1016:MET:O	1:A:1032:VAL:HG13	1.91	0.70
1:A:216:VAL:HG12	1:A:224:SER:OG	1.92	0.70
1:A:367:LYS:HE2	1:A:399:ILE:O	1.91	0.70
1:A:380:LEU:HB2	1:A:386:LYS:HE3	1.74	0.70
1:A:474:VAL:CG1	1:A:475:VAL:HG23	2.18	0.70
1:A:962:ARG:HB3	1:A:1034:GLN:HG3	1.73	0.70
1:A:39:PHE:HE1	1:A:505:PRO:HD2	1.57	0.70
1:A:515:CYS:O	1:A:519:LEU:HD23	1.91	0.70
1:A:551:ALA:HA	1:A:556:GLN:OE1	1.92	0.70
1:A:63:TYR:C	1:A:64:LEU:HD22	2.12	0.70
1:A:380:LEU:HB2	1:A:386:LYS:CE	2.20	0.70
1:A:93:LYS:HD2	1:A:105:GLU:OE1	1.90	0.70
1:A:435:ILE:HD12	1:A:486:PHE:CD1	2.27	0.69
1:A:806:MET:H	1:A:806:MET:CE	1.97	0.69
1:A:446:PHE:HZ	1:A:506:VAL:HG23	1.55	0.69
1:A:959:LYS:CB	1:A:972:THR:HB	2.21	0.69
1:A:507:GLU:HG3	1:A:537:ARG:HG3	1.74	0.69
1:A:40:VAL:HG12	1:A:503:ARG:HB3	1.73	0.69
1:A:872:GLY:CA	1:A:1024:ARG:CG	2.69	0.69
1:A:560:LEU:CD2	1:A:648:THR:HG23	2.19	0.69
1:A:739:ILE:HB	1:A:781:THR:CG2	2.23	0.69
1:A:1063:HIS:HB3	1:A:1066:LEU:CD1	2.20	0.69
1:A:458:ARG:HD2	1:A:524:PRO:HB2	1.73	0.69
1:A:958:LEU:HD23	1:A:959:LYS:N	2.08	0.69
1:A:110:THR:HG22	1:A:132:LEU:HD21	1.73	0.69
1:A:689:PHE:CD1	1:A:691:GLU:HG2	2.28	0.69
1:A:1073:ARG:HD3	1:A:1128:LEU:HD11	1.75	0.69
1:A:474:VAL:HG21	1:A:495:ILE:HD13	1.72	0.69
1:A:595:GLU:CG	1:A:632:VAL:HG13	2.22	0.69
1:A:46:PRO:HG3	1:A:69:ARG:HD2	1.75	0.69
1:A:73:LEU:CD2	1:A:79:VAL:HA	2.23	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:863:ILE:HG23	1:A:864:PRO:CD	2.23	0.69
1:A:133:TYR:HB2	1:A:136:ILE:HG12	1.75	0.68
1:A:962:ARG:HB3	1:A:1034:GLN:CG	2.24	0.68
1:A:1111:THR:HG22	1:A:1112:GLU:H	1.59	0.68
1:A:42:PHE:HE1	1:A:79:VAL:CG2	2.05	0.68
1:A:555:LYS:HG3	1:A:556:GLN:N	2.09	0.68
1:A:594:PHE:O	1:A:595:GLU:HG2	1.94	0.68
1:A:72:LYS:HE3	1:A:80:LEU:CD1	2.21	0.68
1:A:412:LEU:H	1:A:412:LEU:HD13	1.59	0.68
1:A:867:GLY:HA3	1:A:948:TYR:OH	1.94	0.68
1:A:190:GLY:HA2	1:A:233:PHE:CE2	2.29	0.68
1:A:847:LEU:HD21	1:A:884:LEU:HD13	1.75	0.68
1:A:988:PHE:HB3	1:A:1016:MET:SD	2.33	0.68
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:NE	2.09	0.68
1:A:847:LEU:CD2	1:A:884:LEU:CD1	2.72	0.68
1:A:1052:SER:CA	1:A:1140:ASN:HD21	2.07	0.68
1:A:62:ILE:HD12	1:A:64:LEU:HD21	1.76	0.68
1:A:972:THR:HG23	1:A:1002:TYR:CD1	2.28	0.67
1:A:133:TYR:CD2	1:A:136:ILE:HG12	2.28	0.67
1:A:323:ARG:HG3	1:A:324:THR:H	1.58	0.67
1:A:533:ASN:OD1	1:A:643:MET:CB	2.42	0.67
1:A:703:LEU:HD13	1:A:723:ALA:HB2	1.76	0.67
1:A:847:LEU:HD11	1:A:884:LEU:HD12	1.75	0.67
1:A:964:PRO:HD3	1:A:1066:LEU:HB3	1.77	0.67
1:A:1016:MET:HG2	1:A:1035:TYR:HE2	1.57	0.67
1:A:98:ARG:HH21	1:A:107:LEU:HD12	1.59	0.67
1:A:440:LYS:CE	1:A:538:LYS:CD	2.72	0.67
1:A:653:TYR:HB3	1:A:669:TYR:CE2	2.30	0.67
1:A:773:ILE:HD13	1:A:773:ILE:H	1.59	0.67
1:A:239:PHE:CD1	1:A:260:PRO:HD2	2.30	0.67
1:A:1017:LYS:H	1:A:1017:LYS:CE	2.01	0.67
1:A:1036:VAL:HG21	1:A:1066:LEU:CD1	2.24	0.67
1:A:446:PHE:CZ	1:A:486:PHE:HZ	2.14	0.66
1:A:62:ILE:HD11	1:A:73:LEU:HD12	1.76	0.66
1:A:98:ARG:HE	1:A:107:LEU:HD11	1.60	0.66
1:A:321:LEU:O	1:A:325:LEU:HG	1.95	0.66
1:A:595:GLU:HG2	1:A:632:VAL:CG1	2.25	0.66
1:A:62:ILE:HG13	1:A:62:ILE:O	1.94	0.66
1:A:830:GLN:HG2	1:A:831:CYS:N	2.09	0.66
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:N	2.10	0.66
1:A:98:ARG:HE	1:A:107:LEU:CD1	2.07	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1100:LEU:HD11	1:A:1137:TYR:CD2	2.31	0.66
1:A:133:TYR:HB2	1:A:136:ILE:H	1.61	0.66
1:A:137:CYS:HB2	1:A:213:PHE:CZ	2.30	0.66
1:A:440:LYS:CE	1:A:538:LYS:HD2	2.21	0.66
1:A:863:ILE:HG13	1:A:864:PRO:CD	2.25	0.66
1:A:1016:MET:CE	1:A:1033:PHE:HB3	2.25	0.66
1:A:1163:LYS:HG2	1:A:1197:GLN:HG2	1.77	0.66
1:A:325:LEU:CD1	1:A:333:LEU:HD11	2.25	0.66
1:A:1013:VAL:HG22	1:A:1014:LEU:H	1.60	0.66
1:A:955:LEU:HG	1:A:973:ILE:CG2	2.25	0.66
1:A:460:ASP:HB3	1:A:463:LYS:HB3	1.77	0.66
1:A:706:VAL:HG13	1:A:707:ASP:O	1.96	0.66
1:A:1109:ASP:CG	1:A:1170:PRO:CG	2.46	0.66
1:A:216:VAL:HG12	1:A:224:SER:CB	2.26	0.66
1:A:110:THR:HB	1:A:132:LEU:CD2	2.26	0.65
1:A:892:HIS:NE2	1:A:931:ILE:HB	2.12	0.65
1:A:1111:THR:HG22	1:A:1112:GLU:N	2.12	0.65
1:A:782:VAL:HG23	1:A:790:ILE:HB	1.78	0.65
1:A:432:THR:OG1	1:A:480:VAL:HG23	1.96	0.65
1:A:739:ILE:HD12	1:A:748:ARG:HG2	1.76	0.65
1:A:296:PRO:HD2	1:A:414:VAL:CG2	2.26	0.65
1:A:567:ILE:HD13	1:A:651:VAL:O	1.96	0.65
1:A:700:CYS:C	1:A:701:PRO:CD	2.64	0.65
1:A:265:PRO:HD3	1:A:274:VAL:CG2	2.27	0.65
1:A:410:ALA:HB1	1:A:411:PRO:HD2	1.78	0.65
1:A:620:PRO:CA	1:A:623:ILE:HG13	2.23	0.65
1:A:847:LEU:HD22	1:A:884:LEU:CD1	2.27	0.65
1:A:53:LEU:HG	1:A:64:LEU:CD1	2.27	0.64
1:A:675:LYS:HE3	1:A:694:VAL:HG22	1.79	0.64
1:A:797:LYS:HD2	1:A:797:LYS:N	2.11	0.64
1:A:556:GLN:O	1:A:582:ASN:HB3	1.97	0.64
1:A:566:ASN:HB3	1:A:651:VAL:HG21	1.80	0.64
1:A:847:LEU:CD2	1:A:850:ALA:HA	2.27	0.64
1:A:105:GLU:HB3	1:A:106:PRO:HD2	1.80	0.64
1:A:181:LYS:HD3	1:A:202:LYS:HA	1.78	0.64
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CD1	2.33	0.64
1:A:261:GLU:HG2	1:A:264:SER:C	2.17	0.64
1:A:566:ASN:HA	1:A:651:VAL:CG2	2.25	0.64
1:A:1002:TYR:CZ	1:A:1004:ILE:HB	2.32	0.64
1:A:53:LEU:HB2	1:A:496:MET:CE	2.28	0.64
1:A:533:ASN:OD1	1:A:643:MET:HB2	1.98	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:854:CYS:CB	1:A:855:THR:N	2.60	0.64
1:A:1160:ILE:HG21	1:A:1200:CYS:HB3	1.79	0.64
1:A:847:LEU:HD13	1:A:884:LEU:HD12	1.77	0.64
1:A:926:ALA:HB1	1:A:947:LEU:CD1	2.27	0.64
1:A:1045:GLU:CG	1:A:1058:ALA:HB3	2.28	0.64
1:A:118:LEU:HG	1:A:172:ILE:HG13	1.80	0.64
1:A:186:THR:HG22	1:A:187:ALA:N	2.13	0.64
1:A:475:VAL:HG22	1:A:500:GLN:NE2	2.13	0.64
1:A:528:TRP:HZ2	1:A:533:ASN:HD22	1.44	0.64
1:A:175:TYR:HD2	1:A:179:ASP:HB3	1.63	0.64
1:A:309:LEU:HD11	1:A:311:ALA:O	1.98	0.64
1:A:713:VAL:HG12	1:A:714:GLU:HG3	1.79	0.63
1:A:806:MET:HG2	1:A:807:ARG:HG3	1.80	0.63
1:A:978:LEU:O	1:A:998:ARG:HD2	1.98	0.63
1:A:972:THR:HA	1:A:1002:TYR:CE1	2.32	0.63
1:A:453:LYS:HG2	1:A:472:VAL:CG2	2.16	0.63
1:A:439:TYR:HE2	1:A:538:LYS:HE3	1.62	0.63
1:A:440:LYS:HZ2	1:A:538:LYS:HG2	1.63	0.63
1:A:460:ASP:CB	1:A:463:LYS:HB3	2.28	0.63
1:A:706:VAL:HG22	1:A:707:ASP:N	2.12	0.63
1:A:569:VAL:HB	1:A:654:ASN:CB	2.27	0.63
1:A:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:C	2.18	0.63
1:A:1015:ASP:O	1:A:1016:MET:HB3	1.98	0.63
1:A:1084:ILE:HG13	1:A:1085:CYS:N	2.14	0.63
1:A:492:GLN:HG2	1:A:503:ARG:CG	2.29	0.63
1:A:56:ASP:OD1	1:A:119:ILE:HD12	1.98	0.63
1:A:320:VAL:O	1:A:323:ARG:HG2	1.98	0.63
1:A:368:ASP:O	1:A:371:GLN:HG2	1.97	0.63
1:A:629:HIS:CD2	1:A:669:TYR:CE1	2.85	0.63
1:A:432:THR:HG1	1:A:480:VAL:HG23	1.62	0.63
1:A:1165:LYS:HG3	1:A:1166:ASN:N	2.14	0.63
1:A:41:THR:HG22	1:A:502:THR:HA	1.81	0.63
1:A:440:LYS:CD	1:A:538:LYS:HD3	2.19	0.63
1:A:480:VAL:HG11	1:A:495:ILE:HD11	1.81	0.63
1:A:741:ASN:O	1:A:778:VAL:HG13	1.98	0.63
1:A:1045:GLU:HB2	1:A:1058:ALA:HB3	1.81	0.62
1:A:296:PRO:HB2	1:A:417:MET:SD	2.39	0.62
1:A:473:GLN:HG2	1:A:504:VAL:HG22	1.79	0.62
1:A:180:ASP:O	1:A:181:LYS:HG2	1.99	0.62
1:A:181:LYS:HE2	1:A:202:LYS:HG2	1.80	0.62
1:A:405:GLY:O	1:A:406:LEU:HD22	1.98	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:446:PHE:CE1	1:A:486:PHE:HZ	2.16	0.62
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:CZ	2.29	0.62
1:A:372:SER:O	1:A:375:ARG:HB2	1.99	0.62
1:A:847:LEU:HD22	1:A:884:LEU:HD13	1.81	0.62
1:A:1036:VAL:HG21	1:A:1066:LEU:CD2	2.29	0.62
1:A:410:ALA:HB1	1:A:411:PRO:CD	2.30	0.62
1:A:271:LYS:HG3	1:A:272:GLU:N	2.13	0.62
1:A:448:GLY:CA	1:A:480:VAL:HG21	2.28	0.62
1:A:488:LYS:HG3	1:A:489:ASP:N	2.14	0.62
1:A:968:GLY:HA3	1:A:1122:ASP:HB2	1.81	0.62
1:A:575:LEU:HD22	1:A:575:LEU:N	2.14	0.62
1:A:949:TYR:HE2	1:A:951:MET:CE	2.12	0.62
1:A:473:GLN:HB2	1:A:504:VAL:HG22	1.80	0.62
1:A:855:THR:HG23	1:A:856:ASN:OD1	2.00	0.62
1:A:894:LYS:HD3	1:A:899:GLU:HA	1.81	0.62
1:A:1014:LEU:HD22	1:A:1014:LEU:N	2.14	0.62
1:A:1067:ILE:HD13	1:A:1121:LEU:HD23	1.82	0.62
1:A:405:GLY:C	1:A:406:LEU:HD22	2.19	0.62
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:CD	2.20	0.62
1:A:469:TYR:HE2	1:A:471:THR:HB	1.65	0.62
1:A:530:VAL:HB	1:A:584:PRO:HG3	1.80	0.62
1:A:696:LEU:N	1:A:696:LEU:HD12	2.15	0.62
1:A:197:THR:HG21	1:A:228:ILE:HD11	1.82	0.61
1:A:382:LEU:HD23	1:A:385:LEU:HB3	1.81	0.61
1:A:1178:LEU:N	1:A:1178:LEU:HD12	2.14	0.61
1:A:182:LEU:HG	1:A:184:ILE:HG23	1.82	0.61
1:A:446:PHE:CZ	1:A:506:VAL:HG23	2.34	0.61
1:A:72:LYS:CD	1:A:80:LEU:HD12	2.31	0.61
1:A:1111:THR:HG23	1:A:1137:TYR:O	1.99	0.61
1:A:386:LYS:O	1:A:386:LYS:HG3	1.99	0.61
1:A:295:VAL:HA	1:A:414:VAL:HG21	1.81	0.61
1:A:994:LEU:CG	1:A:1006:ASN:HB2	2.30	0.61
1:A:204:THR:HG22	1:A:212:MET:SD	2.40	0.61
1:A:46:PRO:HD2	1:A:71:TYR:CE1	2.35	0.61
1:A:474:VAL:CG2	1:A:495:ILE:HD13	2.29	0.61
1:A:806:MET:CG	1:A:807:ARG:HG3	2.30	0.61
1:A:1042:VAL:HG23	1:A:1043:ARG:N	2.16	0.61
1:A:458:ARG:CG	1:A:524:PRO:HG3	2.28	0.61
1:A:387:VAL:HG13	1:A:388:LYS:HG3	1.83	0.61
1:A:333:LEU:CD2	1:A:358:ILE:HG13	2.31	0.61
1:A:963:GLY:O	1:A:1036:VAL:HG22	2.01	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:110:THR:HG22	1:A:111:ASN:N	2.14	0.61
1:A:715:VAL:CG2	1:A:717:LYS:HD2	2.30	0.61
1:A:815:LYS:HE3	1:A:911:GLU:HG3	1.83	0.61
1:A:119:ILE:HD13	1:A:121:TYR:CZ	2.36	0.60
1:A:257:THR:C	1:A:258:LEU:HD12	2.21	0.60
1:A:469:TYR:CE2	1:A:471:THR:HB	2.36	0.60
1:A:676:TYR:HE1	1:A:728:GLN:N	1.99	0.60
1:A:41:THR:HG22	1:A:502:THR:HG23	1.83	0.60
1:A:474:VAL:HG22	1:A:495:ILE:CG2	2.29	0.60
1:A:676:TYR:CE1	1:A:728:GLN:N	2.69	0.60
1:A:847:LEU:HD11	1:A:850:ALA:CA	2.29	0.60
1:A:1100:LEU:HD11	1:A:1137:TYR:CG	2.35	0.60
1:A:175:TYR:CD2	1:A:179:ASP:HB3	2.36	0.60
1:A:99:ILE:HG13	1:A:100:VAL:N	2.16	0.60
1:A:623:ILE:HA	1:A:626:ASN:OD1	2.01	0.60
1:A:964:PRO:HG3	1:A:1066:LEU:CB	2.31	0.60
1:A:46:PRO:HD2	1:A:71:TYR:CZ	2.36	0.60
1:A:440:LYS:HB3	1:A:538:LYS:NZ	2.17	0.60
1:A:323:ARG:HH21	1:A:463:LYS:HD2	1.67	0.60
1:A:1002:TYR:CE2	1:A:1004:ILE:HB	2.37	0.60
1:A:1029:GLN:HG2	1:A:1030:ASP:H	1.67	0.60
1:A:560:LEU:HD23	1:A:648:THR:CG2	2.25	0.60
1:A:62:ILE:HD13	1:A:77:LEU:CD2	2.32	0.60
1:A:95:TYR:CG	1:A:96:PRO:HD3	2.36	0.60
1:A:1088:LEU:N	1:A:1088:LEU:HD12	2.17	0.60
1:A:495:ILE:CG2	1:A:502:THR:HB	2.32	0.60
1:A:154:LYS:HB2	1:A:157:HIS:ND1	2.16	0.59
1:A:440:LYS:NZ	1:A:538:LYS:HG2	2.16	0.59
1:A:773:ILE:HD13	1:A:773:ILE:N	2.17	0.59
1:A:313:TYR:CE1	1:A:435:ILE:HG12	2.37	0.59
1:A:904:VAL:HG13	1:A:905:ASP:N	2.18	0.59
1:A:239:PHE:CA	1:A:260:PRO:HG2	2.30	0.59
1:A:314:LEU:HD12	1:A:333:LEU:O	2.01	0.59
1:A:1045:GLU:CB	1:A:1058:ALA:HB3	2.32	0.59
1:A:964:PRO:CG	1:A:1066:LEU:HB3	2.31	0.59
1:A:171:VAL:O	1:A:182:LEU:HD12	2.02	0.59
1:A:403:PHE:CZ	1:A:406:LEU:HD23	2.37	0.59
1:A:457:ILE:HG12	1:A:467:LEU:HD13	1.84	0.59
1:A:62:ILE:HD12	1:A:501:LEU:CD1	2.33	0.59
1:A:439:TYR:CE2	1:A:538:LYS:HE3	2.36	0.59
1:A:712:PRO:HG3	1:A:801:TYR:OH	2.01	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:665:VAL:HG11	1:A:697:PRO:HD3	1.84	0.59
1:A:1045:GLU:HG3	1:A:1058:ALA:O	2.03	0.59
1:A:1046:PRO:HD2	1:A:1057:ILE:HA	1.84	0.59
1:A:474:VAL:HG12	1:A:475:VAL:CG2	2.21	0.59
1:A:188:VAL:HG22	1:A:191:LYS:N	2.18	0.59
1:A:196:PRO:HB3	1:A:225:MET:CE	2.33	0.59
1:A:349:LEU:N	1:A:349:LEU:HD22	2.18	0.59
1:A:528:TRP:HZ2	1:A:533:ASN:ND2	2.01	0.59
1:A:665:VAL:HG12	1:A:697:PRO:HG3	1.83	0.59
1:A:40:VAL:HG13	1:A:503:ARG:HB3	1.85	0.58
1:A:578:LEU:HD13	1:A:636:LEU:HD21	1.85	0.58
1:A:832:THR:HG23	1:A:836:HIS:HB2	1.85	0.58
1:A:387:VAL:HG13	1:A:388:LYS:N	2.18	0.58
1:A:889:ILE:HD12	1:A:907:TYR:CZ	2.38	0.58
1:A:531:LEU:CG	1:A:584:PRO:CB	2.80	0.58
1:A:759:VAL:HG12	1:A:760:GLN:N	2.18	0.58
1:A:814:LEU:HD22	1:A:847:LEU:H	1.68	0.58
1:A:1040:THR:HB	1:A:1062:THR:HG22	1.83	0.58
1:A:320:VAL:HG21	1:A:442:HIS:ND1	2.19	0.58
1:A:566:ASN:CA	1:A:651:VAL:HG23	2.28	0.58
1:A:62:ILE:HG12	1:A:73:LEU:HB2	1.84	0.58
1:A:931:ILE:O	1:A:931:ILE:HG13	2.02	0.58
1:A:955:LEU:CD1	1:A:973:ILE:HG23	2.33	0.58
1:A:243:TYR:CD2	1:A:257:THR:HG22	2.37	0.58
1:A:1013:VAL:HG22	1:A:1014:LEU:N	2.19	0.58
1:A:1052:SER:CA	1:A:1140:ASN:ND2	2.64	0.58
1:A:814:LEU:HD22	1:A:847:LEU:N	2.18	0.58
1:A:959:LYS:CG	1:A:972:THR:HB	2.33	0.58
1:A:198:ILE:HB	1:A:226:ILE:CG2	2.34	0.58
1:A:1111:THR:HG23	1:A:1137:TYR:C	2.24	0.58
1:A:1057:ILE:HG21	1:A:1095:CYS:HB2	1.84	0.58
1:A:263:VAL:O	1:A:263:VAL:HG12	2.04	0.58
1:A:440:LYS:HZ2	1:A:538:LYS:CG	2.17	0.58
1:A:531:LEU:HG	1:A:584:PRO:CB	2.34	0.58
1:A:937:ARG:HG2	1:A:938:PRO:HD2	1.85	0.58
1:A:1215:VAL:HG23	1:A:1215:VAL:O	2.03	0.57
1:A:426:GLU:OE1	1:A:426:GLU:HA	2.04	0.57
1:A:569:VAL:HG21	1:A:654:ASN:HB2	1.86	0.57
1:A:991:GLN:HG3	1:A:1008:THR:HG21	1.84	0.57
1:A:987:MET:HB2	1:A:1019:THR:HG23	1.83	0.57
1:A:350:ASP:HA	1:A:430:ARG:HB2	1.86	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:324:THR:CG2	1:A:462:PRO:HA	2.34	0.57
1:A:873:THR:HB	1:A:917:MET:HE2	1.86	0.57
1:A:972:THR:CA	1:A:1002:TYR:HE1	2.15	0.57
1:A:110:THR:HB	1:A:132:LEU:HD23	1.85	0.57
1:A:1014:LEU:H	1:A:1014:LEU:CD2	2.17	0.57
1:A:1180:TYR:HA	1:A:1215:VAL:CG1	2.34	0.57
1:A:265:PRO:HD3	1:A:274:VAL:HG21	1.87	0.57
1:A:994:LEU:HD11	1:A:1006:ASN:OD1	2.05	0.57
1:A:430:ARG:HH21	1:A:432:THR:HG22	1.68	0.57
1:A:456:LYS:O	1:A:468:GLN:HG2	2.04	0.57
1:A:434:VAL:HG22	1:A:435:ILE:N	2.20	0.57
1:A:585:GLU:OE1	1:A:585:GLU:HA	2.04	0.57
1:A:1021:GLN:CG	1:A:1026:ARG:HG3	2.34	0.57
1:A:42:PHE:CE2	1:A:50:PHE:HZ	2.23	0.57
1:A:703:LEU:HD21	1:A:782:VAL:HG21	1.86	0.57
1:A:994:LEU:HG	1:A:1006:ASN:HB2	1.86	0.57
1:A:433:SER:HB3	1:A:484:MET:SD	2.45	0.57
1:A:885:GLU:HG3	1:A:887:ARG:H	1.70	0.57
1:A:1120:ILE:CD1	1:A:1128:LEU:HD13	2.35	0.56
1:A:116:MET:HG3	1:A:117:LEU:N	2.21	0.56
1:A:45:GLU:HB3	1:A:46:PRO:CD	2.35	0.56
1:A:435:ILE:CG2	1:A:486:PHE:HE1	2.19	0.56
1:A:474:VAL:CG2	1:A:495:ILE:HG21	2.35	0.56
1:A:785:ASN:ND2	1:A:788:PHE:HE2	2.03	0.56
1:A:882:LEU:HD12	1:A:882:LEU:N	2.21	0.56
1:A:1082:ILE:HD13	1:A:1082:ILE:N	2.19	0.56
1:A:321:LEU:HD12	1:A:462:PRO:CG	2.34	0.56
1:A:955:LEU:HG	1:A:973:ILE:HG23	1.86	0.56
1:A:1018:VAL:HG13	1:A:1018:VAL:O	2.05	0.56
1:A:459:VAL:O	1:A:459:VAL:HG23	2.05	0.56
1:A:446:PHE:CE1	1:A:486:PHE:CZ	2.93	0.56
1:A:501:LEU:HD23	1:A:502:THR:H	1.70	0.56
1:A:710:LEU:HB2	1:A:801:TYR:HE1	1.70	0.56
1:A:1177:LYS:HD3	1:A:1177:LYS:H	1.70	0.56
1:A:440:LYS:HZ3	1:A:538:LYS:CD	2.09	0.56
1:A:41:THR:CG2	1:A:502:THR:HG23	2.35	0.56
1:A:892:HIS:CE1	1:A:931:ILE:HB	2.40	0.56
1:A:118:LEU:HB3	1:A:127:ILE:CG2	2.36	0.56
1:A:254:TYR:CZ	1:A:281:ARG:HD2	2.39	0.56
1:A:262:MET:O	1:A:262:MET:HG3	2.05	0.56
1:A:528:TRP:CZ2	1:A:533:ASN:ND2	2.73	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:933:VAL:HG23	1:A:934:ALA:N	2.10	0.56
1:A:949:TYR:HE2	1:A:951:MET:HE2	1.69	0.56
1:A:926:ALA:CB	1:A:947:LEU:HD12	2.35	0.56
1:A:435:ILE:HD12	1:A:486:PHE:HD1	1.70	0.56
1:A:569:VAL:HG23	1:A:654:ASN:N	2.21	0.56
1:A:864:PRO:HG3	1:A:981:GLY:O	2.06	0.56
1:A:964:PRO:CD	1:A:1066:LEU:HB3	2.35	0.55
1:A:226:ILE:O	1:A:226:ILE:HG23	2.06	0.55
1:A:567:ILE:N	1:A:567:ILE:HD13	2.20	0.55
1:A:665:VAL:CG1	1:A:697:PRO:HD3	2.35	0.55
1:A:713:VAL:HG13	1:A:766:TYR:O	2.06	0.55
1:A:845:LEU:HD13	1:A:845:LEU:C	2.26	0.55
1:A:861:GLU:HG3	1:A:862:ILE:N	2.21	0.55
1:A:865:VAL:HG13	1:A:866:THR:N	2.21	0.55
1:A:1175:ASN:O	1:A:1177:LYS:HD2	2.06	0.55
1:A:1022:VAL:HG13	1:A:1022:VAL:O	2.06	0.55
1:A:380:LEU:HB2	1:A:386:LYS:HE2	1.87	0.55
1:A:439:TYR:HE2	1:A:538:LYS:CE	2.20	0.55
1:A:447:VAL:HG23	1:A:447:VAL:O	2.06	0.55
1:A:53:LEU:HG	1:A:64:LEU:HD13	1.87	0.55
1:A:72:LYS:HD2	1:A:80:LEU:HB2	1.87	0.55
1:A:236:ILE:O	1:A:236:ILE:HG23	2.07	0.55
1:A:370:LEU:HD13	1:A:370:LEU:C	2.27	0.55
1:A:474:VAL:HG12	1:A:475:VAL:N	2.21	0.55
1:A:46:PRO:CG	1:A:69:ARG:HD2	2.36	0.55
1:A:704:LEU:HD11	1:A:724:LYS:CE	2.35	0.55
1:A:937:ARG:HG3	1:A:938:PRO:HD2	1.89	0.55
1:A:983:ASN:O	1:A:1022:VAL:HG23	2.06	0.55
1:A:168:VAL:HG22	1:A:169:PHE:N	2.22	0.55
1:A:280:VAL:HG12	1:A:281:ARG:N	2.22	0.55
1:A:305:GLU:O	1:A:340:LYS:HG3	2.06	0.55
1:A:301:ARG:CD	1:A:425:THR:HG21	2.26	0.55
1:A:460:ASP:OD2	1:A:463:LYS:HB3	2.06	0.55
1:A:676:TYR:CD1	1:A:728:GLN:O	2.59	0.55
1:A:1073:ARG:CD	1:A:1128:LEU:HD11	2.37	0.55
1:A:1199:LEU:N	1:A:1199:LEU:HD12	2.21	0.55
1:A:382:LEU:HD23	1:A:385:LEU:CB	2.36	0.55
1:A:526:CYS:HB3	1:A:535:CYS:SG	2.46	0.55
1:A:440:LYS:NZ	1:A:538:LYS:CG	2.69	0.55
1:A:190:GLY:O	1:A:192:PRO:HD3	2.07	0.55
1:A:501:LEU:HD23	1:A:502:THR:N	2.22	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:509:CYS:HB3	1:A:535:CYS:SG	2.47	0.55
1:A:597:LEU:N	1:A:597:LEU:HD22	2.21	0.55
1:A:930:GLU:OE2	1:A:941:MET:HG3	2.07	0.55
1:A:1191:VAL:HG12	1:A:1192:THR:N	2.22	0.54
1:A:1072:ILE:CG2	1:A:1098:PRO:HG3	2.34	0.54
1:A:1176:VAL:HG23	1:A:1176:VAL:O	2.07	0.54
1:A:412:LEU:N	1:A:412:LEU:HD13	2.21	0.54
1:A:469:TYR:HB2	1:A:523:ASP:OD2	2.08	0.54
1:A:804:GLY:HA2	1:A:806:MET:CE	2.36	0.54
1:A:825:CYS:HB3	1:A:828:PRO:HG2	1.89	0.54
1:A:947:LEU:CD2	1:A:947:LEU:H	2.21	0.54
1:A:1192:THR:O	1:A:1199:LEU:HD13	2.07	0.54
1:A:370:LEU:HD11	1:A:399:ILE:HD12	1.88	0.54
1:A:412:LEU:C	1:A:412:LEU:HD22	2.28	0.54
1:A:785:ASN:HD22	1:A:788:PHE:HE2	1.54	0.54
1:A:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:O	2.06	0.54
1:A:1160:ILE:HG23	1:A:1200:CYS:HB3	1.89	0.54
1:A:63:TYR:CE2	1:A:72:LYS:HG2	2.43	0.54
1:A:988:PHE:HD2	1:A:1016:MET:SD	2.30	0.54
1:A:242:TYR:CD1	1:A:345:LYS:HE2	2.42	0.54
1:A:456:LYS:HZ3	1:A:507:GLU:N	2.04	0.54
1:A:709:ILE:O	1:A:799:TYR:HD1	1.90	0.54
1:A:91:ASN:CG	1:A:92:PRO:HD2	2.27	0.54
1:A:1016:MET:HE2	1:A:1033:PHE:HB3	1.90	0.54
1:A:563:HIS:HB3	1:A:564:PRO:CD	2.28	0.54
1:A:619:VAL:CB	1:A:620:PRO:HD3	2.37	0.54
1:A:1168:ILE:HG23	1:A:1168:ILE:O	2.07	0.54
1:A:710:LEU:HB2	1:A:801:TYR:CE1	2.42	0.54
1:A:780:LEU:HD12	1:A:780:LEU:C	2.27	0.54
1:A:359:LEU:HA	1:A:362:ILE:HG12	1.89	0.54
1:A:820:PHE:O	1:A:821:GLU:HB3	2.06	0.54
1:A:1004:ILE:HG23	1:A:1004:ILE:O	2.08	0.54
1:A:458:ARG:CD	1:A:524:PRO:HB2	2.31	0.54
1:A:689:PHE:HE2	1:A:730:GLN:CD	2.11	0.54
1:A:739:ILE:HB	1:A:781:THR:HG23	1.90	0.54
1:A:370:LEU:HD13	1:A:370:LEU:O	2.07	0.54
1:A:468:GLN:HB3	1:A:524:PRO:HD3	1.90	0.54
1:A:448:GLY:HA3	1:A:480:VAL:CG2	2.37	0.53
1:A:42:PHE:HE2	1:A:50:PHE:HZ	1.54	0.53
1:A:716:ILE:HG12	1:A:763:ASN:HB3	1.90	0.53
1:A:925:HIS:O	1:A:950:PHE:HD2	1.91	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:679:VAL:HG12	1:A:680:CYS:N	2.23	0.53
1:A:739:ILE:HB	1:A:781:THR:HG22	1.90	0.53
1:A:921:LYS:N	1:A:922:PRO:HD2	2.23	0.53
1:A:1130:LEU:CB	1:A:1133:THR:HG23	2.35	0.53
1:A:135:GLY:O	1:A:159:LEU:HD13	2.08	0.53
1:A:429:ASP:OD1	1:A:450:LYS:HB3	2.08	0.53
1:A:1109:ASP:OD2	1:A:1170:PRO:CG	2.54	0.53
1:A:151:PRO:O	1:A:157:HIS:HB3	2.07	0.53
1:A:963:GLY:C	1:A:1036:VAL:HG22	2.29	0.53
1:A:110:THR:HG22	1:A:111:ASN:H	1.72	0.53
1:A:175:TYR:HB3	1:A:179:ASP:HB3	1.89	0.53
1:A:181:LYS:CE	1:A:202:LYS:HG2	2.39	0.53
1:A:924:GLN:O	1:A:925:HIS:HB2	2.09	0.53
1:A:1072:ILE:HG21	1:A:1098:PRO:HD3	1.91	0.53
1:A:308:LEU:O	1:A:338:PHE:HA	2.09	0.53
1:A:426:GLU:HG2	1:A:429:ASP:O	2.08	0.53
1:A:578:LEU:HB2	1:A:609:ILE:HB	1.91	0.53
1:A:957:ASP:O	1:A:974:THR:HG22	2.09	0.53
1:A:1191:VAL:HG22	1:A:1200:CYS:CA	2.23	0.53
1:A:185:ALA:HB3	1:A:243:TYR:CG	2.44	0.53
1:A:321:LEU:CD2	1:A:325:LEU:HD11	2.39	0.53
1:A:472:VAL:O	1:A:472:VAL:HG12	2.09	0.53
1:A:575:LEU:H	1:A:575:LEU:CD2	2.22	0.53
1:A:444:LEU:HD12	1:A:446:PHE:CZ	2.44	0.53
1:A:509:CYS:HB2	1:A:536:THR:HA	1.91	0.53
1:A:530:VAL:CG1	1:A:584:PRO:HG3	2.38	0.53
1:A:811:GLY:N	1:A:881:ASN:OD1	2.39	0.53
1:A:495:ILE:O	1:A:495:ILE:HG23	2.08	0.53
1:A:530:VAL:HG12	1:A:584:PRO:CD	2.29	0.53
1:A:875:VAL:HG22	1:A:915:CYS:O	2.09	0.53
1:A:997:ARG:H	1:A:1004:ILE:CG2	2.22	0.53
1:A:1073:ARG:HD2	1:A:1120:ILE:HD11	1.91	0.52
1:A:553:GLU:HG3	1:A:554:MET:N	2.24	0.52
1:A:807:ARG:HD2	1:A:813:CYS:HA	1.90	0.52
1:A:933:VAL:HG22	1:A:940:PHE:HB3	1.91	0.52
1:A:1032:VAL:HG12	1:A:1033:PHE:N	2.23	0.52
1:A:1051:VAL:CG2	1:A:1139:PRO:HA	2.38	0.52
1:A:1124:VAL:HG11	1:A:1127:LEU:HD13	1.91	0.52
1:A:119:ILE:O	1:A:119:ILE:HG23	2.09	0.52
1:A:281:ARG:O	1:A:282:LEU:HD23	2.09	0.52
1:A:64:LEU:N	1:A:64:LEU:HD22	2.24	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:806:MET:HG2	1:A:807:ARG:CG	2.39	0.52
1:A:959:LYS:HG2	1:A:972:THR:CG2	2.39	0.52
1:A:1019:THR:HG23	1:A:1019:THR:O	2.09	0.52
1:A:956:ALA:O	1:A:1031:LEU:HD11	2.10	0.52
1:A:42:PHE:HZ	1:A:45:GLU:CB	2.22	0.52
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:NH2	2.24	0.52
1:A:623:ILE:HD12	1:A:623:ILE:C	2.28	0.52
1:A:712:PRO:O	1:A:715:VAL:HG22	2.09	0.52
1:A:797:LYS:HD2	1:A:797:LYS:H	1.72	0.52
1:A:955:LEU:CG	1:A:973:ILE:HG23	2.38	0.52
1:A:1064:LEU:HG	1:A:1090:ALA:O	2.09	0.52
1:A:396:LEU:C	1:A:396:LEU:HD13	2.30	0.52
1:A:947:LEU:O	1:A:947:LEU:HD23	2.09	0.52
1:A:39:PHE:CD1	1:A:505:PRO:HD2	2.44	0.52
1:A:589:GLY:HA3	1:A:639:LYS:HG3	1.90	0.52
1:A:827:SER:HB2	1:A:828:PRO:CD	2.40	0.52
1:A:994:LEU:HD11	1:A:1006:ASN:CB	2.37	0.52
1:A:370:LEU:HD21	1:A:374:TYR:CE1	2.39	0.52
1:A:532:HIS:HA	1:A:641:THR:OG1	2.09	0.52
1:A:952:THR:HG23	1:A:952:THR:O	2.08	0.52
1:A:984:VAL:HG11	1:A:998:ARG:HD3	1.91	0.52
1:A:385:LEU:HD13	1:A:385:LEU:C	2.29	0.52
1:A:805:ALA:H	1:A:806:MET:CE	2.22	0.52
1:A:296:PRO:HD2	1:A:414:VAL:HG22	1.92	0.52
1:A:958:LEU:HD23	1:A:959:LYS:H	1.74	0.52
1:A:371:GLN:O	1:A:375:ARG:HG3	2.09	0.52
1:A:473:GLN:HB2	1:A:504:VAL:CG2	2.40	0.52
1:A:689:PHE:CE2	1:A:730:GLN:CD	2.84	0.52
1:A:827:SER:HB2	1:A:828:PRO:HD3	1.91	0.52
1:A:228:ILE:HG22	1:A:233:PHE:CE1	2.45	0.52
1:A:541:CYS:SG	1:A:550:PHE:HD2	2.33	0.52
1:A:593:THR:HG23	1:A:593:THR:O	2.10	0.52
1:A:1029:GLN:HG2	1:A:1030:ASP:N	2.26	0.51
1:A:278:LYS:HG2	1:A:296:PRO:CA	2.38	0.51
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:HA	1.91	0.51
1:A:72:LYS:HD2	1:A:80:LEU:HD12	1.90	0.51
1:A:882:LEU:HD13	1:A:910:ALA:O	2.09	0.51
1:A:986:VAL:HG12	1:A:988:PHE:CE1	2.45	0.51
1:A:93:LYS:HD3	1:A:105:GLU:OE2	2.10	0.51
1:A:1064:LEU:HD22	1:A:1093:MET:HE3	1.93	0.51
1:A:689:PHE:CE1	1:A:691:GLU:CG	2.94	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:127:ILE:O	1:A:127:ILE:HG23	2.09	0.51
1:A:198:ILE:HB	1:A:226:ILE:HG22	1.91	0.51
1:A:997:ARG:H	1:A:1004:ILE:HG23	1.75	0.51
1:A:261:GLU:HG2	1:A:265:PRO:N	2.25	0.51
1:A:284:LYS:HD3	1:A:284:LYS:C	2.31	0.51
1:A:370:LEU:HD11	1:A:374:TYR:CE1	2.46	0.51
1:A:356:ILE:HG22	1:A:421:ILE:O	2.09	0.51
1:A:64:LEU:HD11	1:A:501:LEU:HD12	1.92	0.51
1:A:785:ASN:HB3	1:A:788:PHE:CE2	2.46	0.51
1:A:712:PRO:HG3	1:A:801:TYR:CZ	2.45	0.51
1:A:1067:ILE:HD12	1:A:1121:LEU:HA	1.93	0.51
1:A:580:THR:HG21	1:A:583:VAL:HG11	1.92	0.51
1:A:727:PRO:O	1:A:729:PRO:HD3	2.10	0.51
1:A:894:LYS:CD	1:A:899:GLU:HA	2.41	0.51
1:A:1040:THR:HG22	1:A:1041:ILE:N	2.26	0.51
1:A:133:TYR:O	1:A:134:GLN:HB2	2.11	0.51
1:A:265:PRO:HD3	1:A:274:VAL:HG22	1.92	0.51
1:A:519:LEU:N	1:A:519:LEU:HD22	2.26	0.51
1:A:716:ILE:O	1:A:716:ILE:HG23	2.09	0.51
1:A:370:LEU:HD13	1:A:374:TYR:CD1	2.46	0.51
1:A:531:LEU:HG	1:A:584:PRO:CG	2.41	0.51
1:A:567:ILE:CD1	1:A:650:PHE:CE2	2.94	0.51
1:A:716:ILE:CG1	1:A:763:ASN:HB3	2.40	0.51
1:A:823:GLY:HA3	1:A:844:TRP:CZ2	2.46	0.51
1:A:930:GLU:HG3	1:A:941:MET:SD	2.51	0.51
1:A:986:VAL:CG1	1:A:988:PHE:CE1	2.94	0.51
1:A:1016:MET:HE3	1:A:1017:LYS:CA	2.41	0.51
1:A:1180:TYR:CD2	1:A:1215:VAL:CG1	2.94	0.51
1:A:783:VAL:HG12	1:A:784:TRP:N	2.25	0.51
1:A:889:ILE:CD1	1:A:907:TYR:CE1	2.94	0.51
1:A:1002:TYR:OH	1:A:1004:ILE:HB	2.12	0.50
1:A:1072:ILE:HG23	1:A:1098:PRO:CG	2.34	0.50
1:A:1211:VAL:HG22	1:A:1212:MET:N	2.26	0.50
1:A:358:ILE:CG2	1:A:361:GLN:HB2	2.41	0.50
1:A:412:LEU:O	1:A:412:LEU:HD22	2.11	0.50
1:A:527:GLY:HA3	1:A:550:PHE:CE1	2.45	0.50
1:A:507:GLU:HG3	1:A:537:ARG:CG	2.41	0.50
1:A:695:LYS:CB	1:A:696:LEU:HD12	2.41	0.50
1:A:1029:GLN:CG	1:A:1030:ASP:H	2.24	0.50
1:A:1046:PRO:HD2	1:A:1057:ILE:HG13	1.91	0.50
1:A:322:GLY:CA	1:A:327:VAL:HG22	2.40	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:527:GLY:HA3	1:A:550:PHE:HZ	1.72	0.50
1:A:59:THR:HB	1:A:61:HIS:CE1	2.45	0.50
1:A:790:ILE:HD12	1:A:790:ILE:N	2.25	0.50
1:A:1180:TYR:CG	1:A:1215:VAL:CG1	2.95	0.50
1:A:184:ILE:HD12	1:A:184:ILE:C	2.31	0.50
1:A:234:THR:HG23	1:A:235:VAL:N	2.27	0.50
1:A:370:LEU:CD1	1:A:374:TYR:CD1	2.95	0.50
1:A:491:GLU:O	1:A:506:VAL:HG12	2.11	0.50
1:A:54:VAL:HG22	1:A:55:VAL:N	2.25	0.50
1:A:853:LYS:HD2	1:A:853:LYS:H	1.76	0.50
1:A:1160:ILE:HD11	1:A:1162:LEU:HD21	1.93	0.50
1:A:204:THR:HG23	1:A:206:ASN:O	2.11	0.50
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CD2	2.94	0.50
1:A:53:LEU:HD23	1:A:53:LEU:C	2.31	0.50
1:A:53:LEU:HG	1:A:64:LEU:HD11	1.92	0.50
1:A:119:ILE:CG2	1:A:121:TYR:CE1	2.95	0.50
1:A:228:ILE:CG2	1:A:233:PHE:CE1	2.94	0.50
1:A:468:GLN:HG3	1:A:524:PRO:HD2	1.94	0.50
1:A:64:LEU:HB2	1:A:71:TYR:HD2	1.77	0.50
1:A:798:VAL:O	1:A:798:VAL:HG13	2.10	0.50
1:A:895:VAL:O	1:A:896:ALA:HB3	2.11	0.50
1:A:171:VAL:HG12	1:A:172:ILE:N	2.26	0.50
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CG	2.94	0.50
1:A:216:VAL:HG13	1:A:217:PHE:N	2.26	0.50
1:A:380:LEU:CD1	1:A:386:LYS:HE3	2.37	0.50
1:A:473:GLN:CD	1:A:504:VAL:HG13	2.31	0.50
1:A:560:LEU:HG	1:A:648:THR:HG21	1.92	0.50
1:A:182:LEU:HD21	1:A:184:ILE:HG21	1.94	0.50
1:A:278:LYS:CE	1:A:296:PRO:HG3	2.41	0.50
1:A:566:ASN:HB3	1:A:651:VAL:CG2	2.40	0.50
1:A:1004:ILE:HD13	1:A:1004:ILE:C	2.31	0.50
1:A:1158:THR:HG22	1:A:1159:PRO:O	2.11	0.50
1:A:133:TYR:HB3	1:A:136:ILE:HG23	1.94	0.50
1:A:265:PRO:HB2	1:A:266:PRO:HD2	1.94	0.50
1:A:265:PRO:CD	1:A:274:VAL:HG22	2.42	0.50
1:A:295:VAL:O	1:A:295:VAL:HG23	2.12	0.50
1:A:418:VAL:O	1:A:418:VAL:HG13	2.10	0.50
1:A:59:THR:HB	1:A:61:HIS:ND1	2.27	0.50
1:A:703:LEU:HD22	1:A:703:LEU:N	2.26	0.50
1:A:1100:LEU:CD1	1:A:1137:TYR:CG	2.94	0.49
1:A:1184:VAL:HG23	1:A:1186:GLU:H	1.77	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:110:THR:CB	1:A:132:LEU:HD21	2.42	0.49
1:A:473:GLN:HB3	1:A:502:THR:HG21	1.94	0.49
1:A:76:ASP:O	1:A:77:LEU:HB2	2.11	0.49
1:A:782:VAL:CG2	1:A:790:ILE:HB	2.41	0.49
1:A:312:ALA:HB1	1:A:334:LEU:HD11	1.94	0.49
1:A:681:THR:HG21	1:A:686:THR:HG21	1.94	0.49
1:A:863:ILE:CG1	1:A:864:PRO:HD3	2.39	0.49
1:A:868:PRO:HD3	1:A:980:ALA:HB1	1.93	0.49
1:A:40:VAL:HG21	1:A:76:ASP:O	2.12	0.49
1:A:1072:ILE:CD1	1:A:1117:PHE:HZ	2.14	0.49
1:A:400:ASP:HB2	1:A:402:ASN:OD1	2.11	0.49
1:A:426:GLU:HG3	1:A:429:ASP:H	1.75	0.49
1:A:457:ILE:HG12	1:A:467:LEU:CD1	2.42	0.49
1:A:46:PRO:CG	1:A:69:ARG:HG3	2.27	0.49
1:A:300:GLU:HG2	1:A:305:GLU:HA	1.93	0.49
1:A:440:LYS:HB3	1:A:538:LYS:HZ2	1.78	0.49
1:A:453:LYS:HE3	1:A:472:VAL:HG22	1.94	0.49
1:A:841:GLU:HG3	1:A:842:SER:H	1.77	0.49
1:A:673:TRP:HB3	1:A:694:VAL:HB	1.94	0.49
1:A:790:ILE:H	1:A:790:ILE:HD12	1.77	0.49
1:A:81:VAL:HG12	1:A:82:THR:N	2.26	0.49
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:CA	2.42	0.49
1:A:1069:ASN:N	1:A:1070:PRO:HD3	2.27	0.49
1:A:531:LEU:CG	1:A:584:PRO:CG	2.90	0.49
1:A:653:TYR:HB3	1:A:669:TYR:CD2	2.48	0.49
1:A:736:TYR:CD2	1:A:784:TRP:HB3	2.47	0.49
1:A:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:HB3	1.93	0.49
1:A:987:MET:HB2	1:A:1019:THR:HG22	1.92	0.49
1:A:1020:VAL:HG13	1:A:1020:VAL:O	2.13	0.49
1:A:1057:ILE:HG22	1:A:1095:CYS:HB2	1.92	0.49
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CE2	2.47	0.49
1:A:320:VAL:HG23	1:A:441:ASN:HB3	1.94	0.49
1:A:321:LEU:CG	1:A:325:LEU:HD11	2.40	0.49
1:A:374:TYR:CE2	1:A:397:LEU:HD22	2.48	0.49
1:A:563:HIS:CB	1:A:564:PRO:HD3	2.31	0.49
1:A:530:VAL:CB	1:A:584:PRO:HG3	2.43	0.49
1:A:597:LEU:HD22	1:A:597:LEU:H	1.77	0.49
1:A:603:LEU:HD23	1:A:603:LEU:C	2.33	0.49
1:A:623:ILE:HD12	1:A:624:THR:CA	2.42	0.49
1:A:629:HIS:CG	1:A:669:TYR:CE1	3.00	0.49
1:A:781:THR:O	1:A:781:THR:HG23	2.12	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:892:HIS:HD2	1:A:893:VAL:N	2.10	0.49
1:A:185:ALA:HA	1:A:197:THR:O	2.13	0.49
1:A:190:GLY:HA2	1:A:233:PHE:HE2	1.73	0.49
1:A:882:LEU:HD23	1:A:913:ILE:HD11	1.94	0.49
1:A:144:ASP:O	1:A:145:LEU:HB2	2.13	0.48
1:A:190:GLY:C	1:A:192:PRO:HD3	2.33	0.48
1:A:435:ILE:HG21	1:A:486:PHE:CE1	2.48	0.48
1:A:590:VAL:HG12	1:A:591:ASN:N	2.27	0.48
1:A:782:VAL:HG23	1:A:782:VAL:O	2.12	0.48
1:A:907:TYR:CZ	1:A:909:PRO:HA	2.48	0.48
1:A:972:THR:HG23	1:A:1002:TYR:HE1	1.72	0.48
1:A:976:THR:HG22	1:A:977:ASN:N	2.27	0.48
1:A:541:CYS:SG	1:A:550:PHE:CD2	3.06	0.48
1:A:597:LEU:CD2	1:A:597:LEU:H	2.25	0.48
1:A:889:ILE:O	1:A:892:HIS:HB3	2.13	0.48
1:A:1067:ILE:HG23	1:A:1070:PRO:CG	2.32	0.48
1:A:1189:CYS:SG	1:A:1191:VAL:CG2	3.02	0.48
1:A:433:SER:HB3	1:A:484:MET:HE3	1.95	0.48
1:A:473:GLN:CD	1:A:504:VAL:HG22	2.34	0.48
1:A:561:THR:HG22	1:A:562:VAL:N	2.28	0.48
1:A:713:VAL:HG13	1:A:767:SER:HA	1.94	0.48
1:A:807:ARG:HB3	1:A:812:LEU:HB2	1.95	0.48
1:A:856:ASN:N	1:A:857:PRO:HD3	2.27	0.48
1:A:955:LEU:HD11	1:A:973:ILE:HG23	1.94	0.48
1:A:1184:VAL:CG2	1:A:1187:LYS:H	2.26	0.48
1:A:541:CYS:CB	1:A:544:SER:HB3	2.42	0.48
1:A:790:ILE:HG22	1:A:791:ASP:N	2.29	0.48
1:A:991:GLN:HA	1:A:991:GLN:OE1	2.13	0.48
1:A:1057:ILE:HG22	1:A:1095:CYS:C	2.32	0.48
1:A:175:TYR:CG	1:A:176:SER:N	2.82	0.48
1:A:468:GLN:CB	1:A:524:PRO:CD	2.92	0.48
1:A:774:ASN:ND2	1:A:820:PHE:CZ	2.81	0.48
1:A:991:GLN:CB	1:A:1008:THR:HG21	2.42	0.48
1:A:995:PHE:HZ	1:A:998:ARG:HB2	1.78	0.48
1:A:160:SER:OG	1:A:162:VAL:HG23	2.13	0.48
1:A:863:ILE:HG13	1:A:864:PRO:N	2.28	0.48
1:A:258:LEU:HD12	1:A:258:LEU:N	2.28	0.48
1:A:254:TYR:CE2	1:A:281:ARG:HD2	2.48	0.48
1:A:715:VAL:HG23	1:A:715:VAL:O	2.13	0.48
1:A:814:LEU:HD11	1:A:845:LEU:CD1	2.44	0.48
1:A:935:VAL:HG12	1:A:936:CYS: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:1163:LYS:CG	1:A:1197:GLN:HG2	2.41	0.48
1:A:239:PHE:CD1	1:A:260:PRO:HG2	2.48	0.48
1:A:710:LEU:HD13	1:A:801:TYR:OH	2.13	0.48
1:A:82:THR:O	1:A:82:THR:HG23	2.14	0.48
1:A:1041:ILE:CD1	1:A:1127:LEU:HG	2.44	0.48
1:A:543:ARG:HH11	1:A:549:ARG:HH22	1.62	0.48
1:A:740:LEU:HD12	1:A:740:LEU:N	2.29	0.48
1:A:872:GLY:O	1:A:1023:ASP:CG	2.51	0.48
1:A:68:ASN:ND2	1:A:87:PRO:HD3	2.29	0.47
1:A:783:VAL:HG13	1:A:788:PHE:O	2.13	0.47
1:A:833:LEU:HB2	1:A:836:HIS:ND1	2.29	0.47
1:A:333:LEU:HD21	1:A:358:ILE:HG13	1.94	0.47
1:A:872:GLY:HA3	1:A:1024:ARG:N	2.21	0.47
1:A:1218:MET:HG3	1:A:1219:GLU:N	2.29	0.47
1:A:113:VAL:HG11	1:A:165:SER:HB3	1.96	0.47
1:A:958:LEU:HD13	1:A:1033:PHE:HD1	1.79	0.47
1:A:1020:VAL:HG13	1:A:1027:ILE:HG12	1.96	0.47
1:A:39:PHE:CD2	1:A:473:GLN:CG	2.95	0.47
1:A:728:GLN:HA	1:A:753:ARG:NH2	2.30	0.47
1:A:949:TYR:CE2	1:A:951:MET:CE	2.95	0.47
1:A:105:GLU:CB	1:A:106:PRO:HD2	2.42	0.47
1:A:117:LEU:HD11	1:A:126:LEU:CD2	2.31	0.47
1:A:567:ILE:HD12	1:A:650:PHE:CE2	2.49	0.47
1:A:704:LEU:H	1:A:723:ALA:HA	1.79	0.47
1:A:847:LEU:CD1	1:A:884:LEU:CD1	2.88	0.47
1:A:997:ARG:HG2	1:A:998:ARG:N	2.30	0.47
1:A:1007:THR:HG22	1:A:1008:THR:O	2.15	0.47
1:A:1042:VAL:HG22	1:A:1060:TRP:C	2.35	0.47
1:A:1045:GLU:HB2	1:A:1058:ALA:H	1.79	0.47
1:A:380:LEU:HD12	1:A:390:ILE:CG2	2.45	0.47
1:A:480:VAL:HB	1:A:484:MET:HE1	1.95	0.47
1:A:716:ILE:HD11	1:A:763:ASN:HB3	1.95	0.47
1:A:843:ARG:HB2	1:A:843:ARG:NH1	2.30	0.47
1:A:118:LEU:C	1:A:118:LEU:HD13	2.34	0.47
1:A:262:MET:O	1:A:263:VAL:HB	2.14	0.47
1:A:45:GLU:HB3	1:A:46:PRO:HD3	1.97	0.47
1:A:77:LEU:HD22	1:A:501:LEU:HD13	1.96	0.47
1:A:984:VAL:HG23	1:A:984:VAL:O	2.14	0.47
1:A:1010:SER:HB2	1:A:1035:TYR:CD2	2.49	0.47
1:A:440:LYS:CD	1:A:538:LYS:HZ2	2.19	0.47
1:A:569:VAL:CG1	1:A:620:PRO:HG3	2.45	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:68:ASN:HB3	1:A:86:GLY:HA3	1.97	0.47
1:A:124:ASN:OD1	1:A:142:LEU:HB3	2.15	0.47
1:A:372:SER:HA	1:A:375:ARG:NE	2.29	0.47
1:A:471:THR:CG2	1:A:473:GLN:HE22	2.20	0.47
1:A:873:THR:HG21	1:A:981:GLY:HA2	1.91	0.47
1:A:1160:ILE:HG23	1:A:1160:ILE:O	2.14	0.47
1:A:253:VAL:HG23	1:A:253:VAL:O	2.15	0.47
1:A:440:LYS:HG2	1:A:440:LYS:O	2.14	0.47
1:A:947:LEU:H	1:A:947:LEU:HD23	1.79	0.47
1:A:1120:ILE:HD13	1:A:1128:LEU:HD13	1.96	0.46
1:A:430:ARG:HG2	1:A:431:MET:O	2.14	0.46
1:A:689:PHE:CE1	1:A:691:GLU:HG2	2.50	0.46
1:A:862:ILE:CG2	1:A:877:ILE:HG23	2.44	0.46
1:A:991:GLN:HB3	1:A:1008:THR:HG21	1.96	0.46
1:A:245:TYR:CE2	1:A:247:PHE:HD2	2.34	0.46
1:A:333:LEU:CD2	1:A:358:ILE:HA	2.45	0.46
1:A:702:GLN:O	1:A:723:ALA:HB1	2.14	0.46
1:A:1021:GLN:HG2	1:A:1026:ARG:CG	2.41	0.46
1:A:1015:ASP:H	1:A:1035:TYR:H	1.63	0.46
1:A:286:ASP:OD1	1:A:288:ALA:HB3	2.16	0.46
1:A:295:VAL:CA	1:A:414:VAL:HG21	2.45	0.46
1:A:783:VAL:HG11	1:A:786:GLY:O	2.16	0.46
1:A:953:LEU:HB3	1:A:977:ASN:O	2.14	0.46
1:A:181:LYS:HZ2	1:A:216:VAL:HG23	1.79	0.46
1:A:244:VAL:HB	1:A:309:LEU:HD23	1.97	0.46
1:A:987:MET:CE	1:A:990:SER:HA	2.44	0.46
1:A:475:VAL:HG22	1:A:500:GLN:HE21	1.81	0.46
1:A:1180:TYR:CD1	1:A:1215:VAL:HG11	2.51	0.46
1:A:296:PRO:CD	1:A:414:VAL:HG22	2.45	0.46
1:A:495:ILE:HG22	1:A:502:THR:HB	1.96	0.46
1:A:624:THR:HG23	1:A:624:THR:O	2.15	0.46
1:A:892:HIS:CD2	1:A:893:VAL:CG2	2.98	0.46
1:A:902:PRO:HA	1:A:915:CYS:HA	1.98	0.46
1:A:226:ILE:HD11	1:A:385:LEU:CD2	2.46	0.46
1:A:492:GLN:HG2	1:A:503:ARG:HD2	1.98	0.46
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:HE	1.80	0.46
1:A:629:HIS:CG	1:A:669:TYR:CZ	3.04	0.46
1:A:653:TYR:CB	1:A:669:TYR:CD2	2.98	0.46
1:A:539:GLU:HG3	1:A:540:ARG:N	2.31	0.46
1:A:745:ILE:O	1:A:745:ILE:HG23	2.15	0.46
1:A:955:LEU:CD1	1:A:973:ILE:CG2	2.94	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:98:ARG:NH2	1:A:107:LEU:HD12	2.29	0.46
1:A:265:PRO:CB	1:A:266:PRO:HD2	2.46	0.46
1:A:361:GLN:O	1:A:365:ARG:HG2	2.16	0.46
1:A:403:PHE:CE1	1:A:406:LEU:CD2	2.94	0.46
1:A:437:TYR:CE2	1:A:439:TYR:HB2	2.51	0.46
1:A:1171:VAL:HG12	1:A:1172:ALA:N	2.31	0.46
1:A:343:LYS:HG2	1:A:344:ARG:HG2	1.97	0.46
1:A:440:LYS:CE	1:A:538:LYS:HD3	2.39	0.46
1:A:72:LYS:O	1:A:80:LEU:HB2	2.15	0.46
1:A:873:THR:HG22	1:A:874:LYS:N	2.31	0.46
1:A:947:LEU:N	1:A:947:LEU:HD23	2.30	0.46
1:A:1016:MET:CE	1:A:1033:PHE:CB	2.94	0.45
1:A:1016:MET:O	1:A:1016:MET:HE2	2.16	0.45
1:A:239:PHE:HA	1:A:260:PRO:CG	2.33	0.45
1:A:503:ARG:O	1:A:505:PRO:HD3	2.15	0.45
1:A:511:GLN:HG3	1:A:512:TYR:CD2	2.51	0.45
1:A:1180:TYR:CD2	1:A:1215:VAL:HG13	2.51	0.45
1:A:468:GLN:CB	1:A:524:PRO:HD2	2.46	0.45
1:A:871:GLY:O	1:A:1024:ARG:HG2	2.16	0.45
1:A:1014:LEU:HD12	1:A:1035:TYR:O	2.16	0.45
1:A:118:LEU:HB3	1:A:127:ILE:HG22	1.98	0.45
1:A:327:VAL:HG11	1:A:358:ILE:HD11	1.97	0.45
1:A:469:TYR:CG	1:A:470:GLU:N	2.84	0.45
1:A:62:ILE:CD1	1:A:77:LEU:CD2	2.94	0.45
1:A:892:HIS:CD2	1:A:893:VAL:N	2.85	0.45
1:A:1020:VAL:CG1	1:A:1027:ILE:CG1	2.95	0.45
1:A:1057:ILE:HG23	1:A:1057:ILE:O	2.16	0.45
1:A:256:LEU:HD22	1:A:256:LEU:N	2.31	0.45
1:A:506:VAL:CG1	1:A:537:ARG:HH22	2.30	0.45
1:A:663:SER:O	1:A:667:SER:HB2	2.17	0.45
1:A:1041:ILE:N	1:A:1041:ILE:HD12	2.31	0.45
1:A:247:PHE:CD1	1:A:314:LEU:HD22	2.52	0.45
1:A:566:ASN:CB	1:A:651:VAL:CG2	2.95	0.45
1:A:62:ILE:CD1	1:A:73:LEU:HD12	2.45	0.45
1:A:743:GLN:HG2	1:A:744:GLY:N	2.31	0.45
1:A:863:ILE:HG22	1:A:876:THR:CB	2.35	0.45
1:A:99:ILE:HD11	1:A:152:PHE:CB	2.41	0.45
1:A:116:MET:SD	1:A:169:PHE:HA	2.57	0.45
1:A:192:PRO:HB3	1:A:233:PHE:CZ	2.51	0.45
1:A:252:PHE:CD1	1:A:283:CYS:HA	2.50	0.45
1:A:288:ALA:O	1:A:289:PHE:HB2	2.17	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:278:LYS:HD3	1:A:294:GLU:HG2	1.98	0.45
1:A:46:PRO:HD2	1:A:71:TYR:OH	2.16	0.45
1:A:671:CYS:HB3	1:A:680:CYS:SG	2.57	0.45
1:A:809:SER:HB2	1:A:881:ASN:CG	2.34	0.45
1:A:695:LYS:HB2	1:A:696:LEU:HD12	1.97	0.45
1:A:1102:LEU:HG	1:A:1104:PRO:CD	2.46	0.45
1:A:1067:ILE:HD13	1:A:1121:LEU:HA	1.95	0.45
1:A:594:PHE:CZ	1:A:614:PRO:HD3	2.51	0.45
1:A:162:VAL:HG21	1:A:187:ALA:HB3	1.99	0.45
1:A:225:MET:HE1	1:A:227:LYS:CG	2.43	0.45
1:A:245:TYR:CD2	1:A:312:ALA:HB3	2.51	0.45
1:A:492:GLN:HG2	1:A:503:ARG:HG2	1.98	0.45
1:A:1036:VAL:HG21	1:A:1066:LEU:CG	2.47	0.45
1:A:159:LEU:HG	1:A:201:ARG:HH12	1.81	0.45
1:A:264:SER:HA	1:A:265:PRO:HA	1.53	0.45
1:A:305:GLU:HG2	1:A:307:ARG:HG2	1.99	0.45
1:A:322:GLY:HA2	1:A:327:VAL:HG22	1.99	0.45
1:A:473:GLN:NE2	1:A:504:VAL:CG1	2.73	0.45
1:A:562:VAL:HG22	1:A:578:LEU:HD23	1.99	0.45
1:A:832:THR:HG21	1:A:836:HIS:CB	2.48	0.45
1:A:892:HIS:CD2	1:A:893:VAL:HG22	2.51	0.45
1:A:91:ASN:OD1	1:A:92:PRO:HD2	2.17	0.45
1:A:40:VAL:O	1:A:40:VAL:HG13	2.17	0.44
1:A:574:VAL:HG22	1:A:613:SER:OG	2.17	0.44
1:A:597:LEU:HG	1:A:622:ILE:HG12	1.99	0.44
1:A:695:LYS:C	1:A:696:LEU:HD12	2.37	0.44
1:A:828:PRO:HG3	1:A:837:CYS:SG	2.57	0.44
1:A:262:MET:SD	1:A:383:ALA:HB3	2.58	0.44
1:A:778:VAL:O	1:A:797:LYS:HB2	2.17	0.44
1:A:179:ASP:O	1:A:180:ASP:HB3	2.17	0.44
1:A:182:LEU:HB2	1:A:203:LEU:HD11	1.99	0.44
1:A:189:ASP:HB3	1:A:191:LYS:HD3	1.99	0.44
1:A:464:GLY:O	1:A:465:ASN:HB3	2.17	0.44
1:A:435:ILE:HG23	1:A:486:PHE:HE1	1.81	0.44
1:A:1036:VAL:CG2	1:A:1066:LEU:CD1	2.82	0.44
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:NE2	2.32	0.44
1:A:62:ILE:CD1	1:A:501:LEU:CD1	2.95	0.44
1:A:872:GLY:N	1:A:1024:ARG:CG	2.75	0.44
1:A:1120:ILE:CD1	1:A:1128:LEU:CD1	2.94	0.44
1:A:291:SER:HB3	1:A:404:CYS:O	2.18	0.44
1:A:841:GLU:HG3	1:A:842:SER:N	2.32	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:890:ALA:O	1:A:891:SER:HB2	2.17	0.44
1:A:1158:THR:HG22	1:A:1159:PRO:N	2.32	0.44
1:A:1200:CYS:SG	1:A:1201:GLU:N	2.90	0.44
1:A:252:PHE:HD1	1:A:283:CYS:HA	1.82	0.44
1:A:620:PRO:O	1:A:623:ILE:HG13	2.18	0.44
1:A:306:TYR:HE1	1:A:351:GLU:HG2	1.82	0.44
1:A:358:ILE:HG23	1:A:358:ILE:O	2.18	0.44
1:A:403:PHE:HE1	1:A:406:LEU:HD23	1.76	0.44
1:A:53:LEU:HD12	1:A:501:LEU:HG	1.99	0.44
1:A:58:ARG:NH1	1:A:58:ARG:HG2	2.31	0.44
1:A:689:PHE:CE2	1:A:730:GLN:OE1	2.59	0.44
1:A:1010:SER:HB2	1:A:1035:TYR:CE1	2.52	0.44
1:A:1073:ARG:HD3	1:A:1128:LEU:CD1	2.45	0.44
1:A:119:ILE:HG23	1:A:121:TYR:CE1	2.53	0.44
1:A:358:ILE:CG2	1:A:361:GLN:CB	2.95	0.44
1:A:541:CYS:HB3	1:A:544:SER:HB3	1.99	0.44
1:A:563:HIS:CB	1:A:577:VAL:HG12	2.46	0.44
1:A:629:HIS:HB3	1:A:669:TYR:CE1	2.53	0.44
1:A:62:ILE:CD1	1:A:73:LEU:HB2	2.47	0.44
1:A:118:LEU:O	1:A:127:ILE:HG22	2.17	0.44
1:A:133:TYR:CG	1:A:136:ILE:CG1	2.94	0.44
1:A:333:LEU:HD23	1:A:358:ILE:HG13	2.00	0.44
1:A:468:GLN:CG	1:A:524:PRO:HD2	2.48	0.44
1:A:53:LEU:HD11	1:A:501:LEU:HD11	2.00	0.44
1:A:586:LEU:HD13	1:A:590:VAL:HG21	1.99	0.44
1:A:978:LEU:HD13	1:A:1003:ILE:HG13	2.00	0.43
1:A:1127:LEU:HD12	1:A:1127:LEU:N	2.33	0.43
1:A:370:LEU:HD12	1:A:399:ILE:HG23	2.00	0.43
1:A:296:PRO:HB2	1:A:417:MET:CE	2.48	0.43
1:A:703:LEU:CD2	1:A:790:ILE:CG2	2.95	0.43
1:A:703:LEU:HD13	1:A:723:ALA:CB	2.47	0.43
1:A:1014:LEU:HA	1:A:1035:TYR:HB2	2.00	0.43
1:A:1044:ILE:HG23	1:A:1057:ILE:CD1	2.48	0.43
1:A:90:ASP:C	1:A:107:LEU:HD22	2.39	0.43
1:A:154:LYS:HB2	1:A:157:HIS:CE1	2.54	0.43
1:A:324:THR:HG22	1:A:324:THR:O	2.18	0.43
1:A:446:PHE:CB	1:A:454:LEU:HD11	2.43	0.43
1:A:501:LEU:CD2	1:A:502:THR:N	2.82	0.43
1:A:55:VAL:HG22	1:A:62:ILE:HG22	2.00	0.43
1:A:564:PRO:HB2	1:A:576:LEU:CD2	2.48	0.43
1:A:567:ILE:HD11	1:A:652:PHE:CD1	2.53	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:862:ILE:HG22	1:A:877:ILE:CA	2.32	0.43
1:A:1164:GLY:O	1:A:1167:LEU:HD13	2.17	0.43
1:A:1177:LYS:N	1:A:1177:LYS:HD3	2.31	0.43
1:A:370:LEU:CD2	1:A:374:TYR:HE1	2.28	0.43
1:A:380:LEU:CB	1:A:386:LYS:HE3	2.44	0.43
1:A:62:ILE:CD1	1:A:501:LEU:HD13	2.48	0.43
1:A:635:GLN:HB3	1:A:644:THR:HB	1.99	0.43
1:A:629:HIS:CB	1:A:669:TYR:OH	2.66	0.43
1:A:764:THR:CG2	1:A:766:TYR:CZ	3.01	0.43
1:A:995:PHE:CZ	1:A:998:ARG:HB2	2.53	0.43
1:A:958:LEU:HD13	1:A:1033:PHE:CD1	2.53	0.43
1:A:962:ARG:HD3	1:A:1034:GLN:NE2	2.34	0.43
1:A:1044:ILE:CG2	1:A:1057:ILE:CD1	2.93	0.43
1:A:123:GLU:HB2	1:A:125:ARG:HG2	2.01	0.43
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CD1	3.00	0.43
1:A:832:THR:CG2	1:A:836:HIS:CB	2.95	0.43
1:A:889:ILE:HA	1:A:892:HIS:ND1	2.33	0.43
1:A:1044:ILE:HG22	1:A:1046:PRO:O	2.18	0.43
1:A:1191:VAL:CG1	1:A:1192:THR:N	2.81	0.43
1:A:110:THR:HG21	1:A:132:LEU:HD21	1.97	0.43
1:A:173:VAL:O	1:A:173:VAL:HG23	2.18	0.43
1:A:217:PHE:CE2	1:A:219:ASP:HB2	2.53	0.43
1:A:274:VAL:HG23	1:A:275:TYR:N	2.30	0.43
1:A:295:VAL:CB	1:A:414:VAL:HG21	2.48	0.43
1:A:458:ARG:HB2	1:A:468:GLN:HE22	1.84	0.43
1:A:562:VAL:HG22	1:A:578:LEU:HD22	1.98	0.43
1:A:589:GLY:C	1:A:639:LYS:HG2	2.39	0.43
1:A:743:GLN:CD	1:A:743:GLN:H	2.21	0.43
1:A:839:ALA:HB1	1:A:841:GLU:O	2.18	0.43
1:A:847:LEU:CG	1:A:850:ALA:CA	2.92	0.43
1:A:958:LEU:CD2	1:A:959:LYS:N	2.81	0.43
1:A:1007:THR:HG22	1:A:1008:THR:N	2.33	0.43
1:A:1130:LEU:HD22	1:A:1133:THR:HG21	2.00	0.43
1:A:62:ILE:HD11	1:A:73:LEU:CD1	2.45	0.43
1:A:713:VAL:O	1:A:714:GLU:HB2	2.18	0.43
1:A:962:ARG:HD3	1:A:1034:GLN:HE21	1.83	0.43
1:A:864:PRO:CG	1:A:981:GLY:O	2.67	0.43
1:A:1031:LEU:HD22	1:A:1031:LEU:N	2.34	0.43
1:A:117:LEU:HG	1:A:126:LEU:HD11	2.01	0.43
1:A:119:ILE:HG21	1:A:121:TYR:CE1	2.54	0.43
1:A:281:ARG:HD3	1:A:281:ARG:HH11	1.71	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:460:ASP:CG	1:A:463:LYS:HB3	2.39	0.43
1:A:574:VAL:CG2	1:A:613:SER:HB3	2.48	0.43
1:A:889:ILE:CD1	1:A:907:TYR:CZ	3.01	0.43
1:A:965:MET:HG3	1:A:1010:SER:O	2.18	0.43
1:A:991:GLN:HG2	1:A:1008:THR:HG21	1.96	0.43
1:A:333:LEU:HD23	1:A:358:ILE:HA	2.01	0.43
1:A:542:GLU:HG2	1:A:543:ARG:HG3	2.01	0.43
1:A:563:HIS:HB2	1:A:577:VAL:HG12	2.01	0.43
1:A:815:LYS:HE3	1:A:911:GLU:CG	2.49	0.43
1:A:972:THR:CG2	1:A:1002:TYR:CE1	2.93	0.43
1:A:100:VAL:HG21	1:A:158:TYR:OH	2.19	0.43
1:A:917:MET:O	1:A:1024:ARG:NH1	2.52	0.43
1:A:1016:MET:HE2	1:A:1033:PHE:H	1.83	0.43
1:A:234:THR:CG2	1:A:235:VAL:N	2.82	0.43
1:A:711:VAL:HG21	1:A:798:VAL:CG2	2.48	0.43
1:A:216:VAL:CG1	1:A:217:PHE:N	2.82	0.43
1:A:458:ARG:HD3	1:A:524:PRO:HB3	1.94	0.43
1:A:470:GLU:HG2	1:A:471:THR:N	2.34	0.43
1:A:805:ALA:N	1:A:806:MET:HE3	2.34	0.43
1:A:98:ARG:HE	1:A:107:LEU:HD12	1.83	0.43
1:A:444:LEU:HD13	1:A:445:ALA:H	1.79	0.42
1:A:531:LEU:HD21	1:A:584:PRO:CG	2.29	0.42
1:A:617:LYS:HG3	1:A:618:GLU:N	2.34	0.42
1:A:728:GLN:HG3	1:A:753:ARG:NH2	2.34	0.42
1:A:224:SER:HA	1:A:289:PHE:CD1	2.54	0.42
1:A:764:THR:HG23	1:A:766:TYR:CZ	2.54	0.42
1:A:805:ALA:N	1:A:806:MET:CE	2.82	0.42
1:A:1032:VAL:CG1	1:A:1033:PHE:N	2.82	0.42
1:A:1130:LEU:CB	1:A:1133:THR:CG2	2.96	0.42
1:A:133:TYR:CB	1:A:136:ILE:HG23	2.49	0.42
1:A:128:ALA:O	1:A:138:LYS:HG2	2.19	0.42
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CE2	3.02	0.42
1:A:256:LEU:HD12	1:A:297:ILE:HD11	2.02	0.42
1:A:543:ARG:HB2	1:A:549:ARG:NH1	2.34	0.42
1:A:631:VAL:HG13	1:A:631:VAL:O	2.20	0.42
1:A:629:HIS:CB	1:A:669:TYR:CZ	3.02	0.42
1:A:863:ILE:HG21	1:A:876:THR:HB	1.97	0.42
1:A:1067:ILE:HD12	1:A:1121:LEU:CA	2.48	0.42
1:A:1041:ILE:HD13	1:A:1127:LEU:HG	2.00	0.42
1:A:115:LYS:HB3	1:A:168:VAL:CG1	2.47	0.42
1:A:281:ARG:NH1	1:A:366:ILE:HG21	2.33	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:412:LEU:CD1	1:A:412:LEU:N	2.83	0.42
1:A:555:LYS:NZ	1:A:556:GLN:HG2	2.34	0.42
1:A:590:VAL:CG1	1:A:591:ASN:N	2.82	0.42
1:A:53:LEU:CG	1:A:64:LEU:CD1	2.96	0.42
1:A:665:VAL:HG11	1:A:697:PRO:CD	2.48	0.42
1:A:629:HIS:ND1	1:A:669:TYR:OH	2.52	0.42
1:A:696:LEU:N	1:A:696:LEU:CD1	2.83	0.42
1:A:953:LEU:HA	1:A:977:ASN:HB2	2.02	0.42
1:A:1082:ILE:CD1	1:A:1082:ILE:N	2.83	0.42
1:A:1084:ILE:CG1	1:A:1085:CYS:N	2.82	0.42
1:A:112:ASN:ND2	1:A:133:TYR:HE2	2.17	0.42
1:A:1130:LEU:HB3	1:A:1133:THR:CG2	2.40	0.42
1:A:110:THR:CB	1:A:132:LEU:CD2	2.95	0.42
1:A:716:ILE:CD1	1:A:763:ASN:HB3	2.49	0.42
1:A:332:ASP:O	1:A:333:LEU:HD23	2.18	0.42
1:A:380:LEU:HD22	1:A:412:LEU:HB3	2.02	0.42
1:A:380:LEU:CB	1:A:386:LYS:CE	2.95	0.42
1:A:541:CYS:HB2	1:A:544:SER:HB3	2.01	0.42
1:A:759:VAL:CG1	1:A:760:GLN:N	2.81	0.42
1:A:1029:GLN:CG	1:A:1030:ASP:N	2.83	0.42
1:A:1064:LEU:HD13	1:A:1093:MET:HB2	2.01	0.42
1:A:1178:LEU:H	1:A:1178:LEU:HD12	1.81	0.42
1:A:435:ILE:CD1	1:A:486:PHE:HD1	2.30	0.42
1:A:597:LEU:CD2	1:A:597:LEU:N	2.82	0.42
1:A:567:ILE:HD11	1:A:650:PHE:CE2	2.53	0.42
1:A:281:ARG:HB3	1:A:293:VAL:HG11	1.97	0.42
1:A:321:LEU:HD23	1:A:333:LEU:CD1	2.50	0.42
1:A:626:ASN:HD22	1:A:627:GLY:N	2.18	0.42
1:A:68:ASN:CB	1:A:86:GLY:HA3	2.50	0.42
1:A:865:VAL:CG1	1:A:866:THR:N	2.82	0.42
1:A:916:GLU:OE2	1:A:1024:ARG:CZ	2.61	0.42
1:A:1180:TYR:CE1	1:A:1215:VAL:HG11	2.54	0.42
1:A:162:VAL:HG12	1:A:164:GLU:H	1.84	0.42
1:A:44:GLY:CA	1:A:50:PHE:HE2	2.23	0.42
1:A:567:ILE:CD1	1:A:567:ILE:N	2.82	0.42
1:A:988:PHE:CB	1:A:1016:MET:SD	3.06	0.42
1:A:239:PHE:CD1	1:A:260:PRO:CD	3.03	0.42
1:A:623:ILE:HD12	1:A:624:THR:HA	2.01	0.42
1:A:62:ILE:CD1	1:A:64:LEU:HD21	2.46	0.42
1:A:710:LEU:HD12	1:A:710:LEU:C	2.40	0.42
1:A:920:ALA:C	1:A:922:PRO:HD2	2.41	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:419:ARG:HH11	1:A:419:ARG:HD3	1.72	0.41
1:A:44:GLY:O	1:A:47:ALA:HA	2.20	0.41
1:A:435:ILE:HG21	1:A:486:PHE:HE1	1.81	0.41
1:A:662:LEU:O	1:A:666:GLU:HB3	2.20	0.41
1:A:679:VAL:CG1	1:A:680:CYS:N	2.82	0.41
1:A:715:VAL:HG21	1:A:717:LYS:CD	2.44	0.41
1:A:926:ALA:HB2	1:A:949:TYR:CD1	2.55	0.41
1:A:959:LYS:HG2	1:A:972:THR:HG21	2.01	0.41
1:A:177:ASN:O	1:A:178:PHE:CG	2.73	0.41
1:A:560:LEU:CG	1:A:648:THR:CG2	2.98	0.41
1:A:72:LYS:CE	1:A:80:LEU:CD1	2.95	0.41
1:A:817:ASP:OD1	1:A:820:PHE:CD2	2.74	0.41
1:A:803:CYS:SG	1:A:832:THR:HA	2.61	0.41
1:A:885:GLU:HG3	1:A:886:PHE:N	2.34	0.41
1:A:949:TYR:CE2	1:A:951:MET:HE2	2.51	0.41
1:A:95:TYR:CG	1:A:96:PRO:CD	3.03	0.41
1:A:987:MET:HE3	1:A:990:SER:HA	2.01	0.41
1:A:1180:TYR:CG	1:A:1215:VAL:HG11	2.56	0.41
1:A:178:PHE:O	1:A:178:PHE:HD1	2.02	0.41
1:A:226:ILE:HD11	1:A:385:LEU:HD23	2.03	0.41
1:A:471:THR:HG21	1:A:473:GLN:NE2	2.19	0.41
1:A:619:VAL:HB	1:A:620:PRO:CD	2.47	0.41
1:A:845:LEU:HD11	1:A:852:SER:OG	2.20	0.41
1:A:987:MET:HE3	1:A:990:SER:O	2.20	0.41
1:A:159:LEU:HG	1:A:201:ARG:NH1	2.36	0.41
1:A:403:PHE:CE2	1:A:405:GLY:HA2	2.55	0.41
1:A:847:LEU:HD12	1:A:852:SER:HB2	2.00	0.41
1:A:988:PHE:CD2	1:A:1016:MET:SD	3.12	0.41
1:A:962:ARG:CB	1:A:1034:GLN:HG3	2.45	0.41
1:A:440:LYS:HB3	1:A:538:LYS:HZ1	1.84	0.41
1:A:492:GLN:HB3	1:A:503:ARG:HG3	2.02	0.41
1:A:783:VAL:CG1	1:A:784:TRP:N	2.83	0.41
1:A:805:ALA:H	1:A:806:MET:HE3	1.85	0.41
1:A:958:LEU:HD22	1:A:960:PRO:N	2.35	0.41
1:A:256:LEU:CB	1:A:309:LEU:CD2	2.94	0.41
1:A:370:LEU:CD2	1:A:374:TYR:CE1	3.03	0.41
1:A:51:ASN:OD1	1:A:67:VAL:HG23	2.20	0.41
1:A:551:ALA:HB1	1:A:556:GLN:HB2	2.03	0.41
1:A:667:SER:HB3	1:A:668:PRO:CD	2.51	0.41
1:A:888:ASP:OD1	1:A:889:ILE:HG13	2.20	0.41
1:A:897:GLY:H	1:A:924:GLN:HE22	1.69	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:955:LEU:HD23	1:A:955:LEU:C	2.41	0.41
1:A:307:ARG:HD3	1:A:307:ARG:HA	1.88	0.41
1:A:446:PHE:CD1	1:A:446:PHE:N	2.88	0.41
1:A:453:LYS:CE	1:A:472:VAL:HG22	2.51	0.41
1:A:62:ILE:HD13	1:A:77:LEU:HD23	2.02	0.41
1:A:773:ILE:CD1	1:A:773:ILE:N	2.82	0.41
1:A:830:GLN:CG	1:A:831:CYS:H	2.24	0.41
1:A:862:ILE:HG21	1:A:877:ILE:HG12	2.03	0.41
1:A:889:ILE:HG23	1:A:892:HIS:NE2	2.33	0.41
1:A:904:VAL:CG1	1:A:905:ASP:N	2.82	0.41
1:A:889:ILE:HD12	1:A:907:TYR:CE1	2.56	0.41
1:A:1031:LEU:H	1:A:1031:LEU:HD22	1.84	0.41
1:A:1162:LEU:O	1:A:1197:GLN:HA	2.20	0.41
1:A:1178:LEU:N	1:A:1178:LEU:CD1	2.82	0.41
1:A:111:ASN:O	1:A:132:LEU:HD22	2.21	0.41
1:A:169:PHE:CD2	1:A:170:GLY:N	2.84	0.41
1:A:188:VAL:CG2	1:A:191:LYS:HB2	2.51	0.41
1:A:327:VAL:CG1	1:A:358:ILE:CD1	2.94	0.41
1:A:39:PHE:CZ	1:A:473:GLN:HG3	2.53	0.41
1:A:676:TYR:HE1	1:A:728:GLN:C	2.21	0.41
1:A:711:VAL:HB	1:A:800:LEU:HD23	2.02	0.41
1:A:959:LYS:HG2	1:A:972:THR:HB	2.02	0.41
1:A:242:TYR:CE1	1:A:345:LYS:HE2	2.56	0.41
1:A:280:VAL:CG1	1:A:281:ARG:N	2.83	0.41
1:A:953:LEU:HD12	1:A:978:LEU:HD23	2.01	0.41
1:A:1087:VAL:HG22	1:A:1093:MET:HE2	2.01	0.41
1:A:111:ASN:O	1:A:132:LEU:HD13	2.20	0.41
1:A:137:CYS:SG	1:A:159:LEU:CD1	3.09	0.41
1:A:469:TYR:CZ	1:A:470:GLU:O	2.74	0.41
1:A:506:VAL:HG13	1:A:537:ARG:NH2	2.36	0.41
1:A:959:LYS:CG	1:A:972:THR:HG21	2.51	0.41
1:A:468:GLN:HB3	1:A:468:GLN:HE21	1.47	0.41
1:A:492:GLN:CG	1:A:503:ARG:HD2	2.51	0.41
1:A:689:PHE:HD1	1:A:691:GLU:HG2	1.80	0.41
1:A:747:GLN:HG3	1:A:766:TYR:HD1	1.86	0.41
1:A:959:LYS:CG	1:A:972:THR:CB	2.97	0.41
1:A:188:VAL:HG13	1:A:189:ASP:N	2.36	0.40
1:A:387:VAL:CG1	1:A:388:LYS:N	2.82	0.40
1:A:435:ILE:HD12	1:A:486:PHE:CE1	2.56	0.40
1:A:67:VAL:CG1	1:A:111:ASN:HB3	2.50	0.40
1:A:72:LYS:CD	1:A:80:LEU:CD1	2.97	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:884:LEU:HA	1:A:884:LEU:HD23	1.75	0.40
1:A:1072:ILE:HG22	1:A:1083:ASN:O	2.21	0.40
1:A:259:GLN:HA	1:A:260:PRO:HD3	1.82	0.40
1:A:434:VAL:CG2	1:A:435:ILE:N	2.84	0.40
1:A:435:ILE:CD1	1:A:436:ALA:N	2.81	0.40
1:A:1044:ILE:CG2	1:A:1057:ILE:CG1	2.96	0.40
1:A:236:ILE:CG2	1:A:239:PHE:HB2	2.51	0.40
1:A:252:PHE:HE1	1:A:283:CYS:SG	2.45	0.40
1:A:605:ILE:O	1:A:608:GLN:HG2	2.20	0.40
1:A:567:ILE:CD1	1:A:650:PHE:CZ	3.01	0.40
1:A:805:ALA:H	1:A:806:MET:HE1	1.84	0.40
1:A:943:ARG:HB2	1:A:943:ARG:CZ	2.51	0.40
1:A:1069:ASN:OD1	1:A:1084:ILE:HD11	2.21	0.40
1:A:1183:LEU:HD12	1:A:1183:LEU:N	2.36	0.40
1:A:141:ARG:HB3	1:A:144:ASP:OD1	2.21	0.40
1:A:843:ARG:CZ	1:A:843:ARG:CB	2.99	0.40

All (8) symmetry-related close contacts are listed below. The label for Atom-2 includes the symmetry operator and encoded unit-cell translations to be applied.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:146:PHE:CE1	1:A:730:GLN:NE2[4_555]	0.96	1.24
1:A:146:PHE:CD1	1:A:730:GLN:OE1[4_555]	1.76	0.44
1:A:269:THR:CG2	1:A:377:GLU:CD[2_455]	1.90	0.30
1:A:146:PHE:CE1	1:A:730:GLN:CD[4_555]	1.91	0.29
1:A:146:PHE:CD1	1:A:730:GLN:NE2[4_555]	1.96	0.24
1:A:146:PHE:CD1	1:A:730:GLN:CD[4_555]	2.08	0.12
1:A:146:PHE:CZ	1:A:730:GLN:NE2[4_555]	2.09	0.11
1:A:269:THR:CG2	1:A:377:GLU:OE2[2_455]	2.14	0.06

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	1150/1207 (95%)	1071 (93%)	57 (5%)	22 (2%)	10	52

All (22) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	96	PRO
1	A	181	LYS
1	A	191	LYS
1	A	410	ALA
1	A	465	ASN
1	A	557	CYS
1	A	804	GLY
1	A	864	PRO
1	A	1111	THR
1	A	87	PRO
1	A	271	LYS
1	A	474	VAL
1	A	849	GLY
1	A	1015	ASP
1	A	1016	MET
1	A	263	VAL
1	A	1122	ASP
1	A	344	ARG
1	A	933	VAL
1	A	1013	VAL
1	A	44	GLY
1	A	921	LYS

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	1035/1067 (97%)	1002 (97%)	33 (3%)	46	76

All (33) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	69	ARG
1	A	72	LYS
1	A	271	LYS
1	A	386	LYS
1	A	409	ASN
1	A	412	LEU
1	A	435	ILE
1	A	468	GLN
1	A	523	ASP
1	A	529	CYS
1	A	548	ARG
1	A	567	ILE
1	A	575	LEU
1	A	597	LEU
1	A	621	ARG
1	A	626	ASN
1	A	670	ARG
1	A	743	GLN
1	A	773	ILE
1	A	792	ASN
1	A	797	LYS
1	A	806	MET
1	A	853	LYS
1	A	854	CYS
1	A	892	HIS
1	A	1004	ILE
1	A	1016	MET
1	A	1017	LYS
1	A	1024	ARG
1	A	1082	ILE
1	A	1107	GLN
1	A	1136	THR
1	A	1177	LYS

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. There are no such sidechains identified.

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	A	9

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	1139:PRO	C	1140:ASN	N	4.11
1	A	506:VAL	C	507:GLU	N	2.75
1	A	951:MET	C	952:THR	N	2.26
1	A	802:LYS	C	803:CYS	N	2.24
1	A	1036:VAL	C	1037:GLU	N	2.02
1	A	653:TYR	C	654:ASN	N	2.01
1	A	700:CYS	C	701:PRO	N	1.72
1	A	557:CYS	C	558:VAL	N	1.15
1	A	854:CYS	C	855:THR	N	0.85

6 Fit of model and data ⓘ

6.1 Protein, DNA and RNA chains ⓘ

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	1168/1207 (96%)	5.30	999 (85%) 0 2	185, 272, 310, 310	0

All (999) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	527	GLY	21.4
1	A	551	ALA	21.2
1	A	526	CYS	21.1
1	A	550	PHE	18.3
1	A	413	GLY	17.8
1	A	529	CYS	17.8
1	A	528	TRP	17.7
1	A	523	ASP	16.6
1	A	348	SER	16.5
1	A	584	PRO	16.0
1	A	473	GLN	15.9
1	A	729	PRO	15.5
1	A	866	THR	15.3
1	A	525	HIS	15.3
1	A	310	GLN	15.1
1	A	411	PRO	14.9
1	A	804	GLY	14.9
1	A	530	VAL	14.8
1	A	1166	ASN	14.8
1	A	541	CYS	14.6
1	A	409	ASN	14.4
1	A	345	LYS	14.3
1	A	307	ARG	13.9
1	A	353	ALA	13.7
1	A	298	GLY	13.7
1	A	398	THR	13.6
1	A	728	GLN	13.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	1141	PRO	13.3
1	A	49	GLY	13.3
1	A	868	PRO	12.9
1	A	671	CYS	12.9
1	A	727	PRO	12.9
1	A	536	THR	12.9
1	A	673	TRP	12.8
1	A	854	CYS	12.8
1	A	544	SER	12.7
1	A	680	CYS	12.6
1	A	164	GLU	12.6
1	A	867	GLY	12.6
1	A	807	ARG	12.5
1	A	918	GLY	12.5
1	A	694	VAL	12.4
1	A	582	ASN	12.4
1	A	474	VAL	12.4
1	A	160	SER	12.4
1	A	659	ASN	12.2
1	A	733	GLN	12.2
1	A	658	HIS	12.1
1	A	412	LEU	12.1
1	A	537	ARG	12.0
1	A	672	HIS	11.9
1	A	542	GLU	11.9
1	A	1076	HIS	11.8
1	A	583	VAL	11.8
1	A	864	PRO	11.7
1	A	165	SER	11.7
1	A	308	LEU	11.7
1	A	533	ASN	11.6
1	A	400	ASP	11.6
1	A	515	CYS	11.6
1	A	963	GLY	11.6
1	A	548	ARG	11.4
1	A	410	ALA	11.4
1	A	535	CYS	11.3
1	A	1105	ASP	11.3
1	A	1164	GLY	11.3
1	A	531	LEU	11.3
1	A	534	THR	11.1
1	A	549	ARG	11.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	723	ALA	11.1
1	A	507	GLU	11.0
1	A	730	GLN	11.0
1	A	1139	PRO	11.0
1	A	813	CYS	10.9
1	A	809	SER	10.9
1	A	405	GLY	10.8
1	A	399	ILE	10.8
1	A	681	THR	10.7
1	A	46	PRO	10.7
1	A	1009	SER	10.6
1	A	352	SER	10.6
1	A	189	ASP	10.6
1	A	767	SER	10.6
1	A	810	CYS	10.5
1	A	660	SER	10.5
1	A	784	TRP	10.5
1	A	839	ALA	10.4
1	A	1100	LEU	10.4
1	A	524	PRO	10.4
1	A	838	PRO	10.3
1	A	1010	SER	10.3
1	A	1165	LYS	10.2
1	A	163	ASN	10.2
1	A	981	GLY	10.2
1	A	843	ARG	10.2
1	A	669	TYR	10.2
1	A	1116	GLU	10.1
1	A	655	CYS	10.1
1	A	397	LEU	10.1
1	A	1167	LEU	10.1
1	A	1140	ASN	10.0
1	A	814	LEU	9.9
1	A	228	ILE	9.9
1	A	538	LYS	9.9
1	A	309	LEU	9.8
1	A	509	CYS	9.8
1	A	532	HIS	9.8
1	A	808	GLU	9.8
1	A	661	CYS	9.7
1	A	919	GLU	9.7
1	A	229	PRO	9.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	338	PHE	9.6
1	A	471	THR	9.6
1	A	223	ALA	9.6
1	A	676	TYR	9.6
1	A	964	PRO	9.6
1	A	402	ASN	9.6
1	A	344	ARG	9.6
1	A	678	HIS	9.6
1	A	51	ASN	9.5
1	A	644	THR	9.5
1	A	806	MET	9.5
1	A	506	VAL	9.4
1	A	1114	PRO	9.4
1	A	701	PRO	9.4
1	A	805	ALA	9.4
1	A	674	CYS	9.4
1	A	190	GLY	9.4
1	A	341	GLY	9.3
1	A	837	CYS	9.3
1	A	735	GLY	9.2
1	A	628	ASP	9.2
1	A	871	GLY	9.2
1	A	558	VAL	9.2
1	A	284	LYS	9.1
1	A	654	ASN	9.1
1	A	381	ASP	9.1
1	A	852	SER	9.0
1	A	704	LEU	9.0
1	A	948	TYR	9.0
1	A	682	HIS	9.0
1	A	679	VAL	9.0
1	A	343	LYS	8.9
1	A	384	TRP	8.9
1	A	675	LYS	8.9
1	A	641	THR	8.9
1	A	842	SER	8.8
1	A	726	LEU	8.8
1	A	803	CYS	8.8
1	A	306	TYR	8.8
1	A	161	GLY	8.8
1	A	113	VAL	8.8
1	A	949	TYR	8.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	224	SER	8.7
1	A	668	PRO	8.7
1	A	403	PHE	8.7
1	A	511	GLN	8.7
1	A	48	GLU	8.7
1	A	1055	THR	8.7
1	A	45	GLU	8.7
1	A	926	ALA	8.7
1	A	218	HIS	8.7
1	A	855	THR	8.7
1	A	865	VAL	8.7
1	A	272	GLU	8.7
1	A	791	ASP	8.7
1	A	552	SER	8.6
1	A	195	PHE	8.6
1	A	553	GLU	8.6
1	A	811	GLY	8.6
1	A	966	SER	8.6
1	A	950	PHE	8.6
1	A	521	SER	8.6
1	A	437	TYR	8.6
1	A	873	THR	8.6
1	A	472	VAL	8.5
1	A	408	MET	8.5
1	A	502	THR	8.5
1	A	557	CYS	8.5
1	A	522	GLY	8.5
1	A	508	SER	8.4
1	A	404	CYS	8.4
1	A	556	GLN	8.4
1	A	870	GLU	8.4
1	A	980	ALA	8.4
1	A	1169	PRO	8.4
1	A	431	MET	8.4
1	A	645	PHE	8.3
1	A	317	ALA	8.3
1	A	702	GLN	8.3
1	A	881	ASN	8.3
1	A	50	PHE	8.3
1	A	505	PRO	8.3
1	A	215	TYR	8.3
1	A	831	CYS	8.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	962	ARG	8.3
1	A	1102	LEU	8.3
1	A	217	PHE	8.3
1	A	844	TRP	8.3
1	A	869	ARG	8.3
1	A	1197	GLN	8.2
1	A	380	LEU	8.2
1	A	725	ASN	8.2
1	A	785	ASN	8.2
1	A	845	LEU	8.2
1	A	305	GLU	8.2
1	A	825	CYS	8.2
1	A	927	GLY	8.1
1	A	585	GLU	8.1
1	A	539	GLU	8.1
1	A	1049	SER	8.1
1	A	240	ASP	8.1
1	A	1038	ASP	8.1
1	A	115	LYS	8.1
1	A	827	SER	8.1
1	A	629	HIS	8.0
1	A	722	LYS	8.0
1	A	824	TRP	8.0
1	A	917	MET	8.0
1	A	1012	GLU	8.0
1	A	39	PHE	8.0
1	A	1101	ALA	8.0
1	A	311	ALA	8.0
1	A	1097	ALA	8.0
1	A	1180	TYR	8.0
1	A	342	GLN	8.0
1	A	1074	ALA	8.0
1	A	277	SER	8.0
1	A	898	VAL	8.0
1	A	114	ASN	7.9
1	A	275	TYR	7.9
1	A	657	VAL	7.9
1	A	337	VAL	7.9
1	A	695	LYS	7.9
1	A	401	ASP	7.9
1	A	1066	LEU	7.9
1	A	162	VAL	7.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	276	THR	7.8
1	A	897	GLY	7.8
1	A	602	GLY	7.8
1	A	499	ARG	7.8
1	A	1195	ASP	7.8
1	A	656	SER	7.8
1	A	495	ILE	7.8
1	A	498	GLU	7.8
1	A	44	GLY	7.7
1	A	219	ASP	7.7
1	A	483	ASP	7.7
1	A	652	PHE	7.7
1	A	734	ARG	7.7
1	A	339	SER	7.7
1	A	920	ALA	7.7
1	A	283	CYS	7.6
1	A	872	GLY	7.6
1	A	1122	ASP	7.6
1	A	497	SER	7.6
1	A	951	MET	7.6
1	A	519	LEU	7.6
1	A	285	GLU	7.6
1	A	512	TYR	7.6
1	A	439	TYR	7.5
1	A	667	SER	7.5
1	A	1196	VAL	7.5
1	A	159	LEU	7.5
1	A	640	GLU	7.5
1	A	802	LYS	7.5
1	A	166	GLY	7.5
1	A	347	LYS	7.5
1	A	965	MET	7.5
1	A	543	ARG	7.4
1	A	1098	PRO	7.4
1	A	40	VAL	7.4
1	A	630	HIS	7.4
1	A	969	THR	7.4
1	A	111	ASN	7.4
1	A	424	PHE	7.4
1	A	1068	GLN	7.4
1	A	38	SER	7.3
1	A	883	GLY	7.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	292	TYR	7.3
1	A	670	ARG	7.3
1	A	879	GLY	7.3
1	A	789	ASN	7.3
1	A	194	TYR	7.3
1	A	414	VAL	7.3
1	A	496	MET	7.3
1	A	846	GLU	7.2
1	A	477	SER	7.2
1	A	1013	VAL	7.2
1	A	486	PHE	7.2
1	A	188	VAL	7.1
1	A	540	ARG	7.1
1	A	952	THR	7.1
1	A	1008	THR	7.1
1	A	899	GLU	7.1
1	A	826	GLN	7.1
1	A	783	VAL	7.1
1	A	925	HIS	7.1
1	A	1107	GLN	7.1
1	A	273	GLN	7.0
1	A	880	GLU	7.0
1	A	1036	VAL	7.0
1	A	1123	ASN	7.0
1	A	95	TYR	7.0
1	A	180	ASP	7.0
1	A	216	VAL	7.0
1	A	677	ARG	7.0
1	A	736	TYR	7.0
1	A	1011	GLU	7.0
1	A	503	ARG	6.9
1	A	947	LEU	6.9
1	A	1106	HIS	6.9
1	A	52	HIS	6.9
1	A	386	LYS	6.9
1	A	425	THR	6.8
1	A	297	ILE	6.8
1	A	67	VAL	6.8
1	A	822	CYS	6.8
1	A	979	ASN	6.8
1	A	967	GLY	6.8
1	A	513	ARG	6.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	351	GLU	6.8
1	A	853	LYS	6.8
1	A	998	ARG	6.8
1	A	82	THR	6.7
1	A	222	VAL	6.7
1	A	1112	GLU	6.7
1	A	1163	LYS	6.7
1	A	650	PHE	6.7
1	A	43	ARG	6.7
1	A	406	LEU	6.7
1	A	1178	LEU	6.7
1	A	174	SER	6.7
1	A	510	GLY	6.7
1	A	346	MET	6.7
1	A	479	PRO	6.7
1	A	1162	LEU	6.7
1	A	731	SER	6.6
1	A	1198	LEU	6.6
1	A	938	PRO	6.6
1	A	287	THR	6.6
1	A	622	ILE	6.6
1	A	1144	GLU	6.6
1	A	700	CYS	6.6
1	A	83	HIS	6.6
1	A	208	GLU	6.6
1	A	1117	PHE	6.6
1	A	643	MET	6.5
1	A	703	LEU	6.5
1	A	786	GLY	6.5
1	A	1143	PHE	6.5
1	A	1056	PRO	6.5
1	A	482	ARG	6.5
1	A	1035	TYR	6.5
1	A	1145	ALA	6.4
1	A	85	THR	6.4
1	A	71	TYR	6.4
1	A	1138	TYR	6.4
1	A	912	GLN	6.4
1	A	1067	ILE	6.4
1	A	267	GLY	6.4
1	A	475	VAL	6.4
1	A	713	VAL	6.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	631	VAL	6.4
1	A	1142	VAL	6.4
1	A	354	LEU	6.4
1	A	271	LYS	6.4
1	A	766	TYR	6.4
1	A	191	LYS	6.4
1	A	924	GLN	6.3
1	A	547	PRO	6.3
1	A	464	GLY	6.3
1	A	705	ARG	6.3
1	A	293	VAL	6.3
1	A	653	TYR	6.3
1	A	322	GLY	6.3
1	A	443	SER	6.3
1	A	336	THR	6.3
1	A	834	ARG	6.3
1	A	684	PRO	6.2
1	A	518	CYS	6.2
1	A	812	LEU	6.2
1	A	693	ARG	6.2
1	A	1050	ILE	6.2
1	A	225	MET	6.2
1	A	732	GLY	6.2
1	A	913	ILE	6.2
1	A	790	ILE	6.2
1	A	545	ARG	6.2
1	A	847	LEU	6.2
1	A	227	LYS	6.2
1	A	816	ALA	6.2
1	A	841	GLU	6.1
1	A	1073	ARG	6.1
1	A	426	GLU	6.1
1	A	830	GLN	6.1
1	A	382	LEU	6.1
1	A	836	HIS	6.1
1	A	724	LYS	6.1
1	A	430	ARG	6.1
1	A	646	ALA	6.1
1	A	476	ASP	6.1
1	A	874	LYS	6.1
1	A	1077	GLY	6.1
1	A	664	CYS	6.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	878	ARG	6.1
1	A	1215	VAL	6.1
1	A	201	ARG	6.0
1	A	42	PHE	6.0
1	A	239	PHE	6.0
1	A	757	SER	6.0
1	A	340	LYS	6.0
1	A	580	THR	6.0
1	A	688	SER	6.0
1	A	902	PRO	6.0
1	A	1168	ILE	6.0
1	A	603	LEU	6.0
1	A	385	LEU	6.0
1	A	349	LEU	6.0
1	A	99	ILE	6.0
1	A	882	LEU	5.9
1	A	304	VAL	5.9
1	A	112	ASN	5.9
1	A	1131	ASN	5.9
1	A	1170	PRO	5.9
1	A	753	ARG	5.9
1	A	1081	HIS	5.9
1	A	422	PRO	5.9
1	A	66	ALA	5.9
1	A	264	SER	5.9
1	A	1065	ASP	5.9
1	A	914	VAL	5.9
1	A	41	THR	5.8
1	A	1137	TYR	5.8
1	A	815	LYS	5.8
1	A	1057	ILE	5.8
1	A	1161	ILE	5.8
1	A	982	SER	5.8
1	A	318	GLY	5.8
1	A	1075	LYS	5.8
1	A	936	CYS	5.8
1	A	504	VAL	5.8
1	A	1096	GLN	5.8
1	A	92	PRO	5.8
1	A	877	ILE	5.8
1	A	756	SER	5.8
1	A	1051	VAL	5.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	1111	THR	5.7
1	A	369	ARG	5.7
1	A	84	GLN	5.7
1	A	663	SER	5.7
1	A	47	ALA	5.7
1	A	395	ALA	5.7
1	A	968	GLY	5.7
1	A	1185	GLY	5.7
1	A	514	SER	5.7
1	A	875	VAL	5.7
1	A	683	ASP	5.7
1	A	1054	ASN	5.7
1	A	374	TYR	5.7
1	A	915	CYS	5.7
1	A	1095	CYS	5.7
1	A	835	GLN	5.7
1	A	266	PRO	5.6
1	A	632	VAL	5.6
1	A	859	ILE	5.6
1	A	858	ARG	5.6
1	A	876	THR	5.6
1	A	485	ALA	5.6
1	A	1115	GLU	5.6
1	A	72	LYS	5.6
1	A	291	SER	5.6
1	A	494	TYR	5.6
1	A	787	HIS	5.6
1	A	1024	ARG	5.6
1	A	68	ASN	5.6
1	A	423	VAL	5.6
1	A	265	PRO	5.6
1	A	1099	ALA	5.6
1	A	350	ASP	5.6
1	A	268	SER	5.5
1	A	586	LEU	5.5
1	A	788	PHE	5.5
1	A	1007	THR	5.5
1	A	1041	ILE	5.5
1	A	937	ARG	5.5
1	A	326	GLY	5.5
1	A	181	LYS	5.5
1	A	1204	ASN	5.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	383	ALA	5.5
1	A	1080	GLU	5.5
1	A	299	CYS	5.5
1	A	1039	PRO	5.5
1	A	832	THR	5.4
1	A	470	GLU	5.4
1	A	1133	THR	5.4
1	A	418	VAL	5.4
1	A	782	VAL	5.4
1	A	478	GLY	5.4
1	A	599	GLU	5.4
1	A	829	GLY	5.4
1	A	289	PHE	5.4
1	A	301	ARG	5.4
1	A	896	ALA	5.4
1	A	922	PRO	5.3
1	A	427	ASP	5.3
1	A	1203	PRO	5.3
1	A	516	GLY	5.3
1	A	300	GLU	5.3
1	A	432	THR	5.3
1	A	327	VAL	5.3
1	A	1202	SER	5.3
1	A	1171	VAL	5.3
1	A	884	LEU	5.3
1	A	192	PRO	5.2
1	A	321	LEU	5.2
1	A	1103	GLY	5.2
1	A	1124	VAL	5.2
1	A	155	LYS	5.2
1	A	840	HIS	5.2
1	A	939	GLU	5.2
1	A	1037	GLU	5.2
1	A	642	GLY	5.2
1	A	665	VAL	5.2
1	A	134	GLN	5.2
1	A	500	GLN	5.2
1	A	863	ILE	5.2
1	A	1048	TRP	5.2
1	A	601	ASP	5.2
1	A	1043	ARG	5.2
1	A	692	GLY	5.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	592	CYS	5.2
1	A	258	LEU	5.2
1	A	828	PRO	5.2
1	A	970	GLN	5.1
1	A	147	LYS	5.1
1	A	396	LEU	5.1
1	A	1083	ASN	5.1
1	A	70	ILE	5.1
1	A	712	PRO	5.1
1	A	1118	GLY	5.1
1	A	64	LEU	5.1
1	A	463	LYS	5.1
1	A	1160	ILE	5.0
1	A	63	TYR	5.0
1	A	69	ARG	5.0
1	A	604	VAL	5.0
1	A	1200	CYS	5.0
1	A	462	PRO	5.0
1	A	689	PHE	5.0
1	A	907	TYR	5.0
1	A	895	VAL	5.0
1	A	325	LEU	5.0
1	A	1113	ARG	5.0
1	A	691	GLU	5.0
1	A	737	GLU	5.0
1	A	638	SER	4.9
1	A	81	VAL	4.9
1	A	200	SER	4.9
1	A	220	GLU	4.9
1	A	1177	LYS	4.9
1	A	323	ARG	4.9
1	A	116	MET	4.9
1	A	1210	LYS	4.9
1	A	1061	GLY	4.9
1	A	1079	LYS	4.9
1	A	714	GLU	4.9
1	A	1040	THR	4.9
1	A	1060	TRP	4.8
1	A	916	GLU	4.8
1	A	407	ASP	4.8
1	A	1052	SER	4.8
1	A	1214	ARG	4.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	316	LYS	4.8
1	A	823	GLY	4.8
1	A	251	ASN	4.8
1	A	554	MET	4.8
1	A	774	ASN	4.8
1	A	999	SER	4.8
1	A	173	VAL	4.8
1	A	546	GLU	4.7
1	A	238	ASP	4.7
1	A	1130	LEU	4.7
1	A	755	ASN	4.7
1	A	598	SER	4.7
1	A	900	CYS	4.7
1	A	934	ALA	4.7
1	A	687	CYS	4.7
1	A	1044	ILE	4.7
1	A	261	GLU	4.7
1	A	53	LEU	4.6
1	A	833	LEU	4.6
1	A	481	LEU	4.6
1	A	501	LEU	4.6
1	A	76	ASP	4.6
1	A	226	ILE	4.6
1	A	75	SER	4.6
1	A	143	GLU	4.6
1	A	370	LEU	4.6
1	A	442	HIS	4.6
1	A	1181	THR	4.6
1	A	1085	CYS	4.6
1	A	1023	ASP	4.5
1	A	263	VAL	4.5
1	A	977	ASN	4.5
1	A	286	ASP	4.5
1	A	568	SER	4.5
1	A	768	TYR	4.5
1	A	1045	GLU	4.5
1	A	146	PHE	4.5
1	A	637	LYS	4.5
1	A	1069	ASN	4.5
1	A	429	ASP	4.5
1	A	609	ILE	4.5
1	A	610	GLN	4.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	567	ILE	4.5
1	A	1034	GLN	4.5
1	A	324	THR	4.5
1	A	440	LYS	4.5
1	A	213	PHE	4.5
1	A	142	LEU	4.5
1	A	203	LEU	4.5
1	A	953	LEU	4.5
1	A	1176	VAL	4.5
1	A	933	VAL	4.5
1	A	1121	LEU	4.4
1	A	460	ASP	4.4
1	A	894	LYS	4.4
1	A	1182	VAL	4.4
1	A	1063	HIS	4.4
1	A	1042	VAL	4.4
1	A	1087	VAL	4.4
1	A	1186	GLU	4.4
1	A	612	TYR	4.4
1	A	581	TYR	4.3
1	A	488	LYS	4.3
1	A	611	CYS	4.3
1	A	438	VAL	4.3
1	A	153	HIS	4.3
1	A	79	VAL	4.3
1	A	862	ILE	4.3
1	A	1119	PHE	4.3
1	A	888	ASP	4.3
1	A	1213	ALA	4.3
1	A	183	PHE	4.3
1	A	296	PRO	4.3
1	A	371	GLN	4.3
1	A	1059	VAL	4.3
1	A	209	ALA	4.3
1	A	520	GLY	4.3
1	A	613	SER	4.2
1	A	856	ASN	4.2
1	A	762	GLN	4.2
1	A	366	ILE	4.2
1	A	1132	LYS	4.2
1	A	419	ARG	4.2
1	A	1201	GLU	4.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	1070	PRO	4.2
1	A	1078	GLY	4.2
1	A	274	VAL	4.2
1	A	820	PHE	4.2
1	A	857	PRO	4.2
1	A	193	GLU	4.2
1	A	775	ASN	4.2
1	A	205	LYS	4.2
1	A	450	LYS	4.2
1	A	594	PHE	4.2
1	A	662	LEU	4.2
1	A	387	VAL	4.2
1	A	636	LEU	4.1
1	A	921	LYS	4.1
1	A	379	THR	4.1
1	A	778	VAL	4.1
1	A	893	VAL	4.1
1	A	461	GLY	4.1
1	A	1194	SER	4.1
1	A	131	SER	4.1
1	A	627	GLY	4.1
1	A	889	ILE	4.1
1	A	1184	VAL	4.1
1	A	210	ASP	4.1
1	A	1053	GLY	4.1
1	A	984	VAL	4.0
1	A	156	GLU	4.0
1	A	1179	ASN	4.0
1	A	65	GLY	4.0
1	A	290	ASN	4.0
1	A	144	ASP	4.0
1	A	281	ARG	4.0
1	A	624	THR	4.0
1	A	355	CYS	4.0
1	A	207	SER	4.0
1	A	214	ALA	4.0
1	A	715	VAL	4.0
1	A	1104	PRO	4.0
1	A	132	LEU	4.0
1	A	1218	MET	4.0
1	A	170	GLY	4.0
1	A	960	PRO	4.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	221	PHE	3.9
1	A	781	THR	3.9
1	A	415	SER	3.9
1	A	901	SER	3.9
1	A	930	GLU	3.9
1	A	555	LYS	3.9
1	A	886	PHE	3.9
1	A	100	VAL	3.9
1	A	758	SER	3.9
1	A	1072	ILE	3.9
1	A	821	GLU	3.9
1	A	133	TYR	3.9
1	A	117	LEU	3.9
1	A	590	VAL	3.9
1	A	752	LEU	3.9
1	A	232	THR	3.9
1	A	1082	ILE	3.9
1	A	850	ALA	3.9
1	A	1064	LEU	3.9
1	A	465	ASN	3.9
1	A	118	LEU	3.9
1	A	1033	PHE	3.9
1	A	259	GLN	3.8
1	A	458	ARG	3.8
1	A	619	VAL	3.8
1	A	96	PRO	3.8
1	A	182	LEU	3.8
1	A	56	ASP	3.8
1	A	890	ALA	3.8
1	A	591	ASN	3.8
1	A	860	THR	3.8
1	A	623	ILE	3.8
1	A	282	LEU	3.8
1	A	1109	ASP	3.8
1	A	600	MET	3.8
1	A	303	GLY	3.8
1	A	312	ALA	3.8
1	A	231	ASP	3.8
1	A	800	LEU	3.8
1	A	294	GLU	3.8
1	A	997	ARG	3.8
1	A	1014	LEU	3.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	150	GLU	3.7
1	A	206	ASN	3.7
1	A	446	PHE	3.7
1	A	1212	MET	3.7
1	A	614	PRO	3.7
1	A	651	VAL	3.7
1	A	686	THR	3.7
1	A	940	PHE	3.7
1	A	587	SER	3.7
1	A	569	VAL	3.7
1	A	241	ILE	3.7
1	A	961	ASN	3.7
1	A	690	GLN	3.7
1	A	295	VAL	3.7
1	A	666	GLU	3.7
1	A	1093	MET	3.7
1	A	270	THR	3.7
1	A	329	PRO	3.7
1	A	123	GLU	3.7
1	A	391	PRO	3.6
1	A	202	LYS	3.6
1	A	1046	PRO	3.6
1	A	892	HIS	3.6
1	A	1094	THR	3.6
1	A	93	LYS	3.6
1	A	490	HIS	3.6
1	A	484	MET	3.6
1	A	639	LYS	3.6
1	A	620	PRO	3.6
1	A	1092	GLU	3.6
1	A	909	PRO	3.6
1	A	1086	GLU	3.6
1	A	269	THR	3.6
1	A	1062	THR	3.6
1	A	776	LEU	3.6
1	A	260	PRO	3.6
1	A	469	TYR	3.6
1	A	801	TYR	3.5
1	A	571	GLN	3.5
1	A	576	LEU	3.5
1	A	257	THR	3.5
1	A	1110	LEU	3.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	1189	CYS	3.5
1	A	1125	GLN	3.5
1	A	367	LYS	3.5
1	A	242	TYR	3.5
1	A	946	GLN	3.5
1	A	152	PHE	3.5
1	A	903	LEU	3.5
1	A	1187	LYS	3.5
1	A	119	ILE	3.5
1	A	978	LEU	3.4
1	A	59	THR	3.4
1	A	911	GLU	3.4
1	A	73	LEU	3.4
1	A	77	LEU	3.4
1	A	796	ASN	3.4
1	A	388	LYS	3.4
1	A	851	ASN	3.4
1	A	302	ASN	3.4
1	A	373	CYS	3.4
1	A	910	ALA	3.4
1	A	1084	ILE	3.4
1	A	931	ILE	3.4
1	A	906	GLY	3.3
1	A	37	PRO	3.3
1	A	754	PHE	3.3
1	A	328	ARG	3.3
1	A	375	ARG	3.3
1	A	887	ARG	3.3
1	A	428	ARG	3.3
1	A	798	VAL	3.3
1	A	196	PRO	3.3
1	A	1129	ILE	3.3
1	A	61	HIS	3.3
1	A	578	LEU	3.3
1	A	1135	PHE	3.3
1	A	792	ASN	3.3
1	A	129	CYS	3.3
1	A	747	GLN	3.3
1	A	618	GLU	3.3
1	A	1071	GLN	3.3
1	A	685	ASN	3.3
1	A	493	LEU	3.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	62	ILE	3.2
1	A	1022	VAL	3.2
1	A	711	VAL	3.2
1	A	986	VAL	3.2
1	A	740	LEU	3.2
1	A	204	THR	3.2
1	A	1058	ALA	3.2
1	A	763	ASN	3.2
1	A	456	LYS	3.2
1	A	172	ILE	3.2
1	A	626	ASN	3.2
1	A	390	ILE	3.2
1	A	288	ALA	3.1
1	A	566	ASN	3.1
1	A	621	ARG	3.1
1	A	1127	LEU	3.1
1	A	564	PRO	3.1
1	A	127	ILE	3.1
1	A	1216	GLY	3.1
1	A	244	VAL	3.1
1	A	368	ASP	3.1
1	A	1211	VAL	3.1
1	A	97	PRO	3.1
1	A	158	TYR	3.1
1	A	148	LEU	3.1
1	A	696	LEU	3.1
1	A	1136	THR	3.1
1	A	441	ASN	3.1
1	A	742	ILE	3.0
1	A	130	GLY	3.0
1	A	86	GLY	3.0
1	A	932	CYS	3.0
1	A	98	ARG	3.0
1	A	1108	SER	3.0
1	A	87	PRO	3.0
1	A	335	PHE	3.0
1	A	492	GLN	3.0
1	A	1199	LEU	2.9
1	A	459	VAL	2.9
1	A	262	MET	2.9
1	A	362	ILE	2.9
1	A	167	SER	2.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	1175	ASN	2.9
1	A	777	PRO	2.9
1	A	480	VAL	2.9
1	A	517	GLU	2.9
1	A	885	GLU	2.9
1	A	468	GLN	2.9
1	A	649	SER	2.9
1	A	1091	THR	2.9
1	A	1172	ALA	2.9
1	A	765	SER	2.9
1	A	570	SER	2.8
1	A	455	LYS	2.8
1	A	140	LEU	2.8
1	A	1159	PRO	2.8
1	A	721	LEU	2.8
1	A	929	VAL	2.8
1	A	141	ARG	2.8
1	A	88	ASP	2.8
1	A	145	LEU	2.8
1	A	211	GLY	2.8
1	A	559	ARG	2.8
1	A	738	CYS	2.8
1	A	319	ALA	2.8
1	A	908	ILE	2.8
1	A	625	GLU	2.8
1	A	372	SER	2.8
1	A	487	SER	2.8
1	A	363	ASN	2.7
1	A	199	SER	2.7
1	A	444	LEU	2.7
1	A	709	ILE	2.7
1	A	198	ILE	2.7
1	A	421	ILE	2.7
1	A	597	LEU	2.7
1	A	1006	ASN	2.7
1	A	394	SER	2.7
1	A	593	THR	2.7
1	A	445	ALA	2.7
1	A	393	SER	2.7
1	A	452	GLY	2.7
1	A	706	VAL	2.7
1	A	817	ASP	2.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	764	THR	2.6
1	A	453	LYS	2.6
1	A	253	VAL	2.6
1	A	741	ASN	2.6
1	A	575	LEU	2.6
1	A	417	MET	2.6
1	A	135	GLY	2.6
1	A	1003	ILE	2.6
1	A	988	PHE	2.6
1	A	447	VAL	2.6
1	A	996	HIS	2.6
1	A	635	GLN	2.6
1	A	60	GLY	2.6
1	A	420	GLY	2.6
1	A	454	LEU	2.6
1	A	466	ALA	2.6
1	A	985	VAL	2.6
1	A	138	LYS	2.6
1	A	1025	ALA	2.6
1	A	1193	VAL	2.5
1	A	779	GLU	2.5
1	A	759	VAL	2.5
1	A	861	GLU	2.5
1	A	991	GLN	2.5
1	A	120	ASP	2.5
1	A	357	PHE	2.5
1	A	588	ALA	2.5
1	A	780	LEU	2.5
1	A	168	VAL	2.5
1	A	330	ASP	2.5
1	A	697	PRO	2.5
1	A	1188	PRO	2.5
1	A	90	ASP	2.5
1	A	365	ARG	2.4
1	A	128	ALA	2.4
1	A	1090	ALA	2.4
1	A	971	VAL	2.4
1	A	992	PRO	2.4
1	A	449	THR	2.4
1	A	125	ARG	2.4
1	A	973	ILE	2.4
1	A	983	ASN	2.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	233	PHE	2.4
1	A	596	ASP	2.4
1	A	748	ARG	2.4
1	A	1183	LEU	2.4
1	A	941	MET	2.4
1	A	457	ILE	2.4
1	A	54	VAL	2.4
1	A	149	GLY	2.4
1	A	904	VAL	2.4
1	A	320	VAL	2.4
1	A	699	ASP	2.4
1	A	717	LYS	2.3
1	A	392	CYS	2.3
1	A	905	ASP	2.3
1	A	184	ILE	2.3
1	A	710	LEU	2.3
1	A	1191	VAL	2.3
1	A	793	PRO	2.3
1	A	1020	VAL	2.3
1	A	1217	GLY	2.3
1	A	356	ILE	2.3
1	A	1219	GLU	2.3
1	A	579	GLU	2.3
1	A	1018	VAL	2.3
1	A	751	ALA	2.2
1	A	608	GLN	2.2
1	A	250	GLY	2.2
1	A	126	LEU	2.2
1	A	122	LYS	2.2
1	A	1128	LEU	2.2
1	A	197	THR	2.2
1	A	891	SER	2.2
1	A	358	ILE	2.1
1	A	489	ASP	2.1
1	A	80	LEU	2.1
1	A	935	VAL	2.1
1	A	91	ASN	2.1
1	A	389	ASP	2.1
1	A	230	SER	2.1
1	A	923	SER	2.1
1	A	94	CYS	2.0
1	A	797	LYS	2.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	1005	CYS	2.0
1	A	252	PHE	2.0
1	A	256	LEU	2.0
1	A	1120	ILE	2.0
1	A	849	GLY	2.0
1	A	1126	SER	2.0

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

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

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.