



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Aug 8, 2016 – 04:22 PM EDT

PDB ID : 5L5M
Title : Plexin A4 full extracellular region, domains 1 to 7 modeled, data to 8 angstrom, spacegroup P4(3)2(1)2
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 : 8.00 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

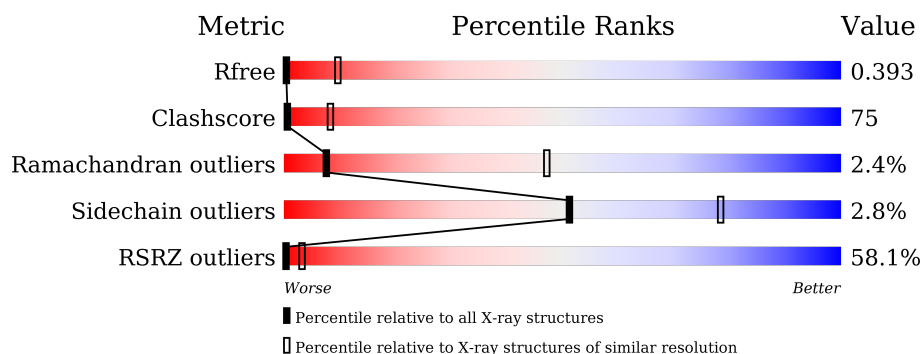
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 8.00 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	1015 (11.50-3.66)
Clashscore	102246	1064 (11.50-3.70)
Ramachandran outliers	100387	1036 (11.50-3.66)
Sidechain outliers	100360	1006 (11.50-3.66)
RSRZ outliers	91569	1014 (11.50-3.66)

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	

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 7189 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
			Total	C	N	O	S			
1	A	915	7189	4533	1239	1357	60	0	0	0

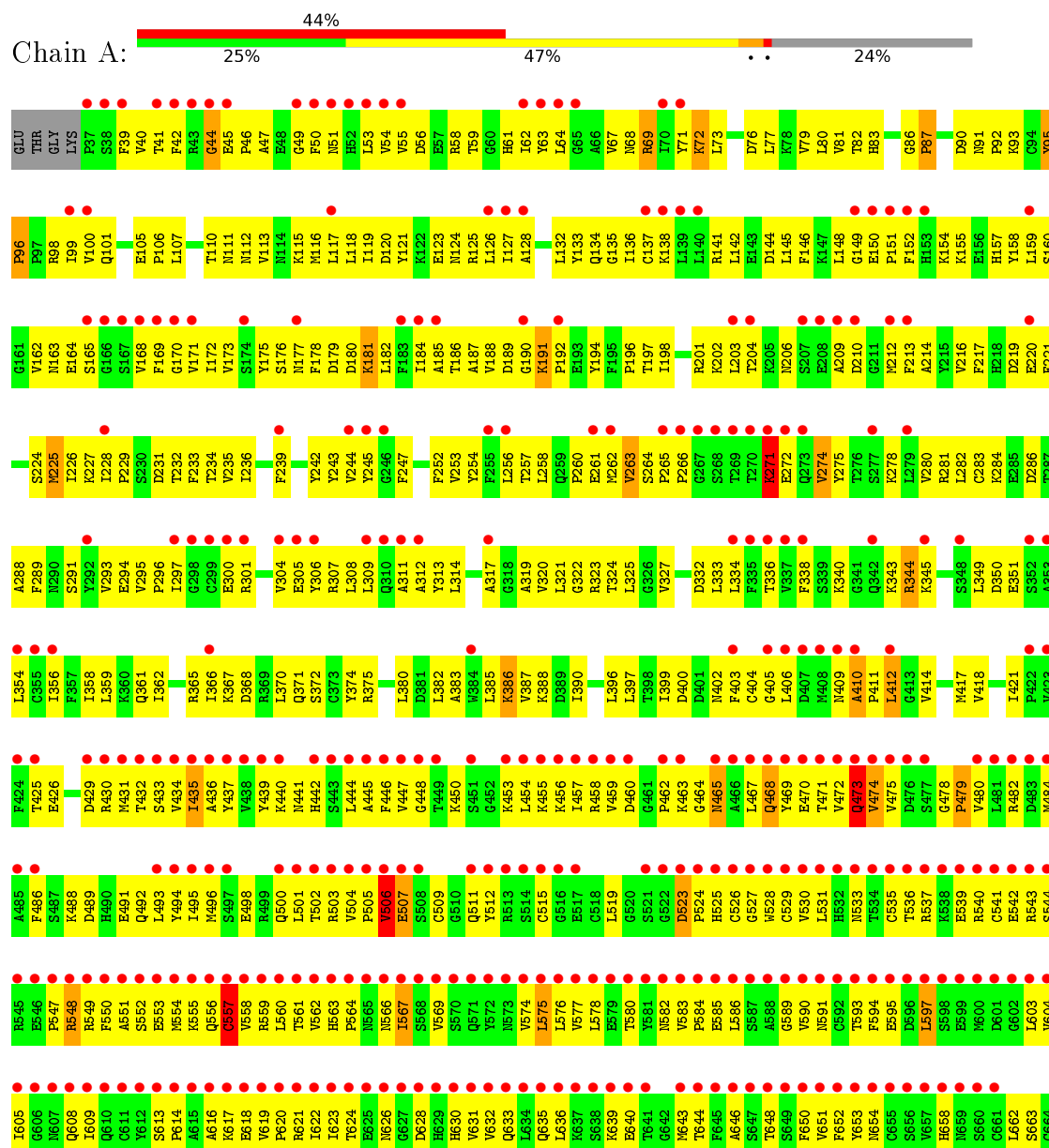
There are 13 discrepancies between the modelled and reference sequences:

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 ($RSRZ > 2$). 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





4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 43 21 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	271.48Å 271.48Å 251.25Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	72.13 – 8.00 72.13 – 8.00	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.4 (72.13-8.00) 99.3 (72.13-8.00)	Depositor EDS
R_{merge}	0.13	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	1.60 (at 8.39Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX (phenix.refine: 1.8.2_1309)	Depositor
R, R_{free}	0.373 , 0.395 0.371 , 0.393	Depositor DCC
R_{free} test set	495 reflections (4.81%)	DCC
Wilson B-factor (Å ²)	530.0	Xtriage
Anisotropy	0.475	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.41 , 484.2	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.39$, $\langle L^2 \rangle = 0.21$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.70	EDS
Total number of atoms	7189	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 6.43% 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	0.97	4/7346 (0.1%)	1.46	29/9949 (0.3%)

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

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	7

All (4) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	557	CYS	C-N	17.01	1.73	1.34
1	A	700	CYS	C-N	-13.28	1.09	1.34
1	A	49	GLY	CA-C	6.34	1.61	1.51
1	A	49	GLY	C-N	5.06	1.45	1.34

All (29) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	747	GLN	CG-CD-OE1	-38.83	43.94	121.60
1	A	506	VAL	O-C-N	-35.49	65.92	122.70
1	A	557	CYS	CA-C-N	-34.27	41.81	117.20
1	A	557	CYS	C-N-CA	-32.12	41.40	121.70
1	A	854	CYS	O-C-N	-27.52	78.66	122.70
1	A	700	CYS	C-N-CD	-24.09	67.61	120.60
1	A	854	CYS	C-N-CA	-20.05	71.57	121.70
1	A	700	CYS	O-C-N	-19.07	84.87	121.10
1	A	854	CYS	CA-C-N	-15.52	83.05	117.20
1	A	802	LYS	O-C-N	-15.25	98.31	122.70
1	A	557	CYS	O-C-N	-11.90	103.67	122.70
1	A	747	GLN	CG-CD-NE2	-9.55	93.78	116.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	506	VAL	CA-C-N	8.21	135.25	117.20
1	A	479	PRO	N-CA-C	8.15	133.30	112.10
1	A	802	LYS	CA-C-N	8.05	134.90	117.20
1	A	843	ARG	C-N-CA	7.74	141.05	121.70
1	A	478	GLY	CA-C-O	-6.91	108.17	120.60
1	A	747	GLN	OE1-CD-NE2	6.88	137.72	121.90
1	A	473	GLN	C-N-CA	-6.69	104.98	121.70
1	A	892	HIS	CA-CB-CG	6.59	124.80	113.60
1	A	506	VAL	C-N-CA	6.54	138.04	121.70
1	A	802	LYS	C-N-CA	5.82	136.25	121.70
1	A	225	MET	CG-SD-CE	-5.68	91.11	100.20
1	A	409	ASN	C-N-CA	5.67	135.88	121.70
1	A	49	GLY	C-N-CA	5.59	135.68	121.70
1	A	274	VAL	CG1-CB-CG2	5.46	119.64	110.90
1	A	919	GLU	C-N-CA	5.22	134.75	121.70
1	A	676	TYR	CA-CB-CG	-5.11	103.69	113.40
1	A	803	CYS	C-N-CA	5.09	132.99	122.30

There are no chirality outliers.

All (7) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	506	VAL	Mainchain
1	A	700	CYS	Mainchain
1	A	802	LYS	Mainchain,Peptide
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	7189	0	7045	1066	13
All	All	7189	0	7045	1066	13

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 75.

All (1066) 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:439:TYR:CD1	1:A:537:ARG:NH1	1.70	1.55
1:A:439:TYR:CE1	1:A:537:ARG:NH1	1.71	1.54
1:A:548:ARG:CG	1:A:584:PRO:HA	1.31	1.52
1:A:556:GLN:HA	1:A:582:ASN:CB	1.40	1.51
1:A:548:ARG:HG3	1:A:584:PRO:CA	1.45	1.40
1:A:555:LYS:NZ	1:A:582:ASN:HD21	0.93	1.40
1:A:555:LYS:HZ2	1:A:582:ASN:ND2	1.26	1.32
1:A:556:GLN:HA	1:A:582:ASN:CG	1.51	1.32
1:A:555:LYS:NZ	1:A:582:ASN:ND2	1.77	1.29
1:A:531:LEU:HD13	1:A:640:GLU:CD	1.53	1.26
1:A:556:GLN:CA	1:A:582:ASN:HB3	1.65	1.25
1:A:556:GLN:CA	1:A:582:ASN:CB	2.18	1.19
1:A:531:LEU:HD13	1:A:640:GLU:OE2	1.40	1.17
1:A:359:LEU:HD12	1:A:362:ILE:HD11	1.24	1.16
1:A:439:TYR:CE1	1:A:537:ARG:CZ	2.08	1.15
1:A:118:LEU:HD12	1:A:172:ILE:HD12	1.17	1.13
1:A:295:VAL:HG12	1:A:414:VAL:HG11	1.27	1.12
1:A:653:TYR:C	1:A:654:ASN:N	2.02	1.12
1:A:556:GLN:HA	1:A:582:ASN:HB3	1.20	1.11
1:A:556:GLN:HG2	1:A:582:ASN:ND2	1.63	1.10
1:A:474:VAL:HG12	1:A:475:VAL:HG23	1.33	1.10
1:A:435:ILE:HG22	1:A:446:PHE:HB2	1.22	1.09
1:A:595:GLU:HB2	1:A:597:LEU:HD23	1.32	1.09
1:A:324:THR:HB	1:A:462:PRO:HB3	1.27	1.09
1:A:806:MET:H	1:A:806:MET:HE3	1.14	1.09
1:A:453:LYS:HG2	1:A:472:VAL:HG22	1.25	1.08
1:A:569:VAL:HG21	1:A:654:ASN:HB2	1.26	1.08
1:A:301:ARG:HD2	1:A:425:THR:HG21	1.37	1.06
1:A:439:TYR:HE1	1:A:537:ARG:CZ	1.43	1.05
1:A:560:LEU:HD23	1:A:648:THR:HG23	1.37	1.05
1:A:46:PRO:HG2	1:A:69:ARG:HG3	1.41	1.03
1:A:494:TYR:HB3	1:A:501:LEU:HD21	1.40	1.01
1:A:620:PRO:HA	1:A:623:ILE:HG13	1.41	1.01
1:A:556:GLN:O	1:A:582:ASN:O	1.80	0.99
1:A:444:LEU:HD12	1:A:446:PHE:CE1	1.98	0.98
1:A:117:LEU:HD11	1:A:126:LEU:HD21	1.45	0.98
1:A:563:HIS:HB3	1:A:564:PRO:HD3	1.44	0.97
1:A:623:ILE:HA	1:A:626:ASN:HD21	1.28	0.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:439:TYR:HD1	1:A:537:ARG:NH1	1.60	0.96
1:A:556:GLN:C	1:A:582:ASN:HB3	1.87	0.96
1:A:297:ILE:HG22	1:A:418:VAL:HG12	1.49	0.95
1:A:566:ASN:HA	1:A:651:VAL:HG23	1.49	0.95
1:A:531:LEU:CD1	1:A:640:GLU:OE2	2.14	0.94
1:A:458:ARG:CZ	1:A:524:PRO:HB3	1.95	0.94
1:A:862:ILE:HG22	1:A:877:ILE:HA	1.46	0.94
1:A:810:CYS:SG	1:A:855:THR:HG22	2.06	0.94
1:A:72:LYS:HE3	1:A:80:LEU:HD13	1.49	0.93
1:A:297:ILE:HG22	1:A:418:VAL:CG1	1.97	0.93
1:A:804:GLY:HA2	1:A:806:MET:SD	2.09	0.92
1:A:527:GLY:HA3	1:A:550:PHE:CZ	2.05	0.92
1:A:62:ILE:CG1	1:A:73:LEU:HB2	1.98	0.92
1:A:435:ILE:HD13	1:A:436:ALA:H	1.34	0.92
1:A:271:LYS:HG3	1:A:272:GLU:H	1.34	0.92
1:A:863:ILE:HG22	1:A:876:THR:HB	1.48	0.92
1:A:239:PHE:HA	1:A:260:PRO:HG2	1.51	0.91
1:A:806:MET:SD	1:A:807:ARG:HG3	2.11	0.91
1:A:39:PHE:CE2	1:A:473:GLN:HG3	2.04	0.91
1:A:42:PHE:HE1	1:A:79:VAL:HG22	1.31	0.91
1:A:865:VAL:HG13	1:A:866:THR:HG23	1.50	0.91
1:A:933:VAL:HG23	1:A:934:ALA:H	1.36	0.91
1:A:447:VAL:HG22	1:A:455:LYS:HB2	1.53	0.91
1:A:447:VAL:CG2	1:A:455:LYS:HB2	2.03	0.89
1:A:446:PHE:HD2	1:A:454:LEU:HD21	1.38	0.89
1:A:653:TYR:HE2	1:A:682:HIS:HD1	1.18	0.89
1:A:95:TYR:CD2	1:A:96:PRO:HD3	2.08	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:359:LEU:CD1	1:A:362:ILE:HD11	2.02	0.88
1:A:863:ILE:HG23	1:A:864:PRO:HD2	1.55	0.88
1:A:555:LYS:HZ1	1:A:582:ASN:HD21	1.16	0.88
1:A:548:ARG:HG2	1:A:584:PRO:HA	1.53	0.88
1:A:453:LYS:CG	1:A:472:VAL:HG22	2.03	0.87
1:A:556:GLN:O	1:A:582:ASN:HB3	1.74	0.87
1:A:603:LEU:HD23	1:A:604:VAL:N	1.90	0.87
1:A:39:PHE:CE1	1:A:505:PRO:HD2	2.11	0.86
1:A:892:HIS:HB2	1:A:932:CYS:O	1.74	0.86
1:A:295:VAL:HA	1:A:414:VAL:CG2	2.05	0.86
1:A:833:LEU:HB2	1:A:836:HIS:HD2	1.39	0.86
1:A:435:ILE:CG2	1:A:446:PHE:HB2	2.06	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:847:LEU:HD12	1:A:852:SER:HB3	1.58	0.86
1:A:370:LEU:CD1	1:A:399:ILE:HD12	2.05	0.85
1:A:473:GLN:CG	1:A:504:VAL:HG22	2.06	0.85
1:A:133:TYR:CG	1:A:136:ILE:HG12	2.12	0.85
1:A:110:THR:CG2	1:A:132:LEU:HD21	2.05	0.85
1:A:295:VAL:CG1	1:A:414:VAL:HG11	2.07	0.85
1:A:100:VAL:HG12	1:A:101:GLN:HG3	1.58	0.85
1:A:569:VAL:CG2	1:A:654:ASN:HB2	2.06	0.85
1:A:882:LEU:HB2	1:A:910:ALA:HA	1.58	0.85
1:A:256:LEU:HB3	1:A:309:LEU:HD22	1.56	0.85
1:A:847:LEU:HD11	1:A:850:ALA:HA	1.58	0.85
1:A:863:ILE:CG2	1:A:876:THR:HB	2.07	0.85
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:H	1.39	0.84
1:A:556:GLN:HG2	1:A:582:ASN:HD22	1.42	0.84
1:A:118:LEU:HD13	1:A:119:ILE:N	1.91	0.84
1:A:356:ILE:CG2	1:A:421:ILE:HB	2.07	0.84
1:A:42:PHE:CZ	1:A:45:GLU:HB2	2.12	0.84
1:A:50:PHE:HB2	1:A:498:GLU:O	1.78	0.84
1:A:229:PRO:O	1:A:232:THR:HG22	1.79	0.83
1:A:706:VAL:HG22	1:A:707:ASP:H	1.42	0.83
1:A:40:VAL:CG1	1:A:503:ARG:HB3	2.08	0.83
1:A:830:GLN:HG2	1:A:831:CYS:H	1.43	0.83
1:A:118:LEU:HD12	1:A:172:ILE:CD1	2.05	0.83
1:A:555:LYS:HZ3	1:A:582:ASN:HD21	1.23	0.82
1:A:356:ILE:HG22	1:A:421:ILE:HB	1.61	0.82
1:A:295:VAL:HA	1:A:414:VAL:HG22	1.60	0.82
1:A:53:LEU:HD23	1:A:54:VAL:N	1.94	0.82
1:A:42:PHE:CE1	1:A:79:VAL:HG22	2.14	0.82
1:A:44:GLY:HA2	1:A:50:PHE:CE2	2.15	0.82
1:A:133:TYR:CB	1:A:136:ILE:HG12	2.09	0.82
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CE1	2.15	0.82
1:A:474:VAL:HG22	1:A:495:ILE:HG21	1.61	0.82
1:A:397:LEU:HD23	1:A:399:ILE:HD13	1.61	0.82
1:A:336:THR:O	1:A:354:LEU:HD12	1.78	0.81
1:A:44:GLY:HA2	1:A:50:PHE:HE2	1.44	0.81
1:A:785:ASN:HB3	1:A:788:PHE:CD2	2.14	0.81
1:A:397:LEU:HD23	1:A:399:ILE:CD1	2.10	0.81
1:A:533:ASN:HD22	1:A:643:MET:CB	1.94	0.81
1:A:154:LYS:HD3	1:A:210:ASP:OD1	1.81	0.81
1:A:889:ILE:HG23	1:A:892:HIS:CE1	2.16	0.81
1:A:926:ALA:HB1	1:A:947:LEU:HD12	1.63	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:370:LEU:HD12	1:A:399:ILE:HD12	1.63	0.80
1:A:548:ARG:CG	1:A:584:PRO:CA	2.27	0.80
1:A:358:ILE:HG23	1:A:361:GLN:H	1.44	0.80
1:A:324:THR:HB	1:A:462:PRO:CB	2.10	0.80
1:A:623:ILE:HD12	1:A:624:THR:N	1.97	0.80
1:A:154:LYS:HB2	1:A:157:HIS:CD2	2.16	0.80
1:A:444:LEU:HD13	1:A:445:ALA:N	1.97	0.80
1:A:314:LEU:HD11	1:A:332:ASP:HB3	1.64	0.80
1:A:192:PRO:HB3	1:A:233:PHE:CE1	2.17	0.80
1:A:486:PHE:CE1	1:A:493:LEU:HD13	2.16	0.79
1:A:239:PHE:CE1	1:A:260:PRO:HD2	2.18	0.79
1:A:556:GLN:C	1:A:582:ASN:CB	2.46	0.79
1:A:62:ILE:HG13	1:A:73:LEU:HB2	1.62	0.79
1:A:863:ILE:HG13	1:A:864:PRO:HD3	1.62	0.79
1:A:715:VAL:HG21	1:A:717:LYS:HD2	1.65	0.79
1:A:317:ALA:HB1	1:A:321:LEU:HB3	1.64	0.79
1:A:321:LEU:HD12	1:A:462:PRO:HG2	1.64	0.79
1:A:380:LEU:HD12	1:A:386:LYS:HE3	1.64	0.79
1:A:56:ASP:OD2	1:A:142:LEU:HD11	1.83	0.79
1:A:556:GLN:CA	1:A:582:ASN:CG	2.44	0.79
1:A:847:LEU:CG	1:A:850:ALA:HA	2.13	0.79
1:A:295:VAL:HG12	1:A:414:VAL:CG1	2.09	0.78
1:A:533:ASN:ND2	1:A:643:MET:HB3	1.97	0.78
1:A:244:VAL:HG13	1:A:482:ARG:NH1	1.98	0.78
1:A:785:ASN:HB3	1:A:788:PHE:HD2	1.48	0.78
1:A:231:ASP:O	1:A:234:THR:HG22	1.84	0.78
1:A:548:ARG:O	1:A:584:PRO:HD3	1.82	0.78
1:A:742:ILE:HB	1:A:745:ILE:O	1.84	0.78
1:A:359:LEU:HD12	1:A:362:ILE:CD1	2.10	0.78
1:A:181:LYS:NZ	1:A:216:VAL:HG23	1.98	0.78
1:A:168:VAL:HG23	1:A:185:ALA:O	1.84	0.78
1:A:319:ALA:H	1:A:441:ASN:HD22	1.31	0.78
1:A:327:VAL:CG1	1:A:358:ILE:HD11	2.14	0.78
1:A:620:PRO:HA	1:A:623:ILE:CG1	2.12	0.78
1:A:453:LYS:HE3	1:A:472:VAL:CG2	2.13	0.78
1:A:284:LYS:HD3	1:A:284:LYS:O	1.84	0.77
1:A:444:LEU:HD23	1:A:525:HIS:CE1	2.20	0.77
1:A:591:ASN:OD1	1:A:639:LYS:HE2	1.83	0.77
1:A:204:THR:HG21	1:A:209:ALA:HB3	1.66	0.77
1:A:278:LYS:HE3	1:A:296:PRO:HG3	1.67	0.77
1:A:320:VAL:HG21	1:A:442:HIS:CD2	2.19	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:547:PRO:O	1:A:548:ARG:HG2	1.84	0.77
1:A:51:ASN:HD21	1:A:67:VAL:HG23	1.49	0.76
1:A:780:LEU:HD12	1:A:780:LEU:O	1.86	0.76
1:A:460:ASP:HB3	1:A:464:GLY:N	2.00	0.76
1:A:533:ASN:ND2	1:A:643:MET:SD	2.58	0.76
1:A:196:PRO:HB3	1:A:225:MET:HE1	1.66	0.76
1:A:327:VAL:HG12	1:A:358:ILE:HD11	1.65	0.76
1:A:567:ILE:H	1:A:567:ILE:HD13	1.50	0.76
1:A:64:LEU:HD12	1:A:496:MET:CE	2.16	0.76
1:A:120:ASP:OD2	1:A:123:GLU:HG3	1.86	0.76
1:A:595:GLU:CB	1:A:597:LEU:HD23	2.14	0.76
1:A:623:ILE:HA	1:A:626:ASN:ND2	2.01	0.75
1:A:847:LEU:HD12	1:A:852:SER:CB	2.16	0.75
1:A:854:CYS:O	1:A:940:PHE:CE1	2.38	0.75
1:A:278:LYS:HG2	1:A:296:PRO:HA	1.69	0.75
1:A:616:ALA:O	1:A:620:PRO:HD2	1.85	0.75
1:A:403:PHE:CE1	1:A:406:LEU:HD23	2.20	0.75
1:A:873:THR:HB	1:A:917:MET:CE	2.17	0.75
1:A:448:GLY:HA3	1:A:480:VAL:HG21	1.68	0.75
1:A:710:LEU:HD12	1:A:710:LEU:O	1.84	0.75
1:A:202:LYS:HD3	1:A:214:ALA:HB3	1.69	0.75
1:A:739:ILE:CD1	1:A:748:ARG:HG2	2.17	0.74
1:A:847:LEU:CD1	1:A:850:ALA:HA	2.16	0.74
1:A:806:MET:HE3	1:A:806:MET:N	1.99	0.74
1:A:446:PHE:HB3	1:A:454:LEU:HD11	1.69	0.74
1:A:473:GLN:CB	1:A:504:VAL:HG22	2.17	0.74
1:A:151:PRO:HB2	1:A:157:HIS:ND1	2.02	0.74
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CZ	2.23	0.74
1:A:869:ARG:O	1:A:920:ALA:HB3	1.86	0.74
1:A:172:ILE:HG12	1:A:182:LEU:HD13	1.68	0.74
1:A:256:LEU:CB	1:A:309:LEU:HD22	2.17	0.74
1:A:323:ARG:HG3	1:A:324:THR:N	2.02	0.74
1:A:39:PHE:CD2	1:A:473:GLN:HG3	2.23	0.74
1:A:531:LEU:HD13	1:A:640:GLU:OE1	1.86	0.74
1:A:683:ASP:O	1:A:686:THR:HG22	1.87	0.74
1:A:704:LEU:HD11	1:A:724:LYS:HE3	1.69	0.74
1:A:784:TRP:HD1	1:A:790:ILE:HD11	1.51	0.74
1:A:42:PHE:HZ	1:A:45:GLU:HB2	1.50	0.73
1:A:806:MET:H	1:A:806:MET:CE	1.97	0.73
1:A:188:VAL:HG22	1:A:191:LYS:H	1.52	0.73
1:A:435:ILE:HD13	1:A:436:ALA:N	2.03	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:562:VAL:HG22	1:A:578:LEU:CD2	2.18	0.73
1:A:46:PRO:HG2	1:A:69:ARG:CG	2.17	0.73
1:A:822:CYS:HA	1:A:833:LEU:HD23	1.70	0.73
1:A:154:LYS:H	1:A:157:HIS:HD2	1.36	0.73
1:A:99:ILE:HD11	1:A:152:PHE:HB2	1.69	0.73
1:A:567:ILE:HD12	1:A:650:PHE:CZ	2.22	0.73
1:A:814:LEU:HB3	1:A:847:LEU:HB2	1.70	0.73
1:A:704:LEU:HB2	1:A:722:LYS:HG3	1.71	0.73
1:A:225:MET:CE	1:A:227:LYS:HG3	2.18	0.72
1:A:321:LEU:HG	1:A:325:LEU:HD11	1.71	0.72
1:A:321:LEU:CD1	1:A:462:PRO:HG2	2.17	0.72
1:A:556:GLN:O	1:A:582:ASN:CB	2.37	0.72
1:A:555:LYS:HZ2	1:A:582:ASN:HD21	0.76	0.72
1:A:261:GLU:HA	1:A:264:SER:O	1.89	0.72
1:A:324:THR:HG21	1:A:462:PRO:HA	1.70	0.72
1:A:832:THR:CG2	1:A:836:HIS:HB2	2.20	0.72
1:A:184:ILE:HD12	1:A:184:ILE:O	1.89	0.72
1:A:73:LEU:HD22	1:A:79:VAL:HA	1.72	0.72
1:A:115:LYS:HB3	1:A:168:VAL:HG11	1.71	0.72
1:A:847:LEU:CD1	1:A:852:SER:HB3	2.20	0.72
1:A:321:LEU:HG	1:A:325:LEU:CD1	2.20	0.72
1:A:304:VAL:HG11	1:A:351:GLU:OE2	1.91	0.71
1:A:380:LEU:HB2	1:A:386:LYS:CE	2.20	0.71
1:A:533:ASN:ND2	1:A:643:MET:CB	2.53	0.71
1:A:370:LEU:HD21	1:A:374:TYR:HE1	1.55	0.71
1:A:471:THR:HG23	1:A:473:GLN:HE22	1.55	0.71
1:A:515:CYS:O	1:A:519:LEU:HD23	1.91	0.71
1:A:558:VAL:HG11	1:A:646:ALA:HB2	1.71	0.71
1:A:188:VAL:HG13	1:A:190:GLY:H	1.56	0.71
1:A:181:LYS:HZ3	1:A:216:VAL:HG23	1.56	0.71
1:A:575:LEU:HD22	1:A:575:LEU:H	1.56	0.71
1:A:450:LYS:HA	1:A:479:PRO:HB3	1.73	0.71
1:A:519:LEU:HD12	1:A:552:SER:O	1.90	0.71
1:A:444:LEU:HD23	1:A:525:HIS:NE2	2.05	0.71
1:A:446:PHE:HZ	1:A:506:VAL:HG23	1.55	0.71
1:A:653:TYR:CE2	1:A:682:HIS:ND1	2.56	0.71
1:A:93:LYS:HD2	1:A:105:GLU:OE1	1.91	0.71
1:A:225:MET:HE1	1:A:227:LYS:HG3	1.73	0.70
1:A:367:LYS:HE2	1:A:399:ILE:O	1.91	0.70
1:A:551:ALA:HA	1:A:556:GLN:OE1	1.91	0.70
1:A:670:ARG:HA	1:A:670:ARG:HE	1.55	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:847:LEU:HD21	1:A:850:ALA:HA	1.72	0.70
1:A:854:CYS:O	1:A:940:PHE:HE1	1.72	0.70
1:A:548:ARG:O	1:A:584:PRO:CD	2.39	0.70
1:A:181:LYS:HD2	1:A:202:LYS:HA	1.71	0.70
1:A:595:GLU:HG2	1:A:632:VAL:HG13	1.72	0.70
1:A:563:HIS:HB2	1:A:577:VAL:CG1	2.21	0.70
1:A:72:LYS:HE3	1:A:80:LEU:CD1	2.21	0.70
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:OE1	1.90	0.70
1:A:480:VAL:HB	1:A:484:MET:CE	2.21	0.70
1:A:474:VAL:HG21	1:A:495:ILE:HD13	1.72	0.70
1:A:619:VAL:HB	1:A:620:PRO:HD3	1.72	0.70
1:A:453:LYS:HE3	1:A:472:VAL:HG21	1.73	0.70
1:A:937:ARG:CG	1:A:938:PRO:HD2	2.20	0.70
1:A:281:ARG:HB3	1:A:293:VAL:CG1	2.22	0.70
1:A:809:SER:CB	1:A:881:ASN:HD21	2.04	0.70
1:A:446:PHE:CD2	1:A:454:LEU:HD21	2.24	0.70
1:A:40:VAL:HG12	1:A:503:ARG:HB3	1.73	0.70
1:A:63:TYR:C	1:A:64:LEU:HD22	2.12	0.69
1:A:507:GLU:HG3	1:A:537:ARG:HG3	1.74	0.69
1:A:595:GLU:CG	1:A:632:VAL:HG13	2.22	0.69
1:A:380:LEU:HB2	1:A:386:LYS:HE3	1.74	0.69
1:A:435:ILE:HD12	1:A:486:PHE:CD1	2.27	0.69
1:A:133:TYR:HB2	1:A:136:ILE:HG12	1.75	0.69
1:A:569:VAL:HG21	1:A:654:ASN:CB	2.14	0.69
1:A:474:VAL:CG1	1:A:475:VAL:HG23	2.18	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	2.22	0.69
1:A:473:GLN:OE1	1:A:504:VAL:HG13	1.93	0.69
1:A:689:PHE:CD1	1:A:691:GLU:HG2	2.28	0.69
1:A:809:SER:HB2	1:A:881:ASN:HD21	1.57	0.69
1:A:216:VAL:HG12	1:A:224:SER:OG	1.92	0.69
1:A:73:LEU:CD2	1:A:79:VAL:HA	2.23	0.68
1:A:110:THR:HG22	1:A:132:LEU:HD21	1.74	0.68
1:A:39:PHE:HE1	1:A:505:PRO:HD2	1.56	0.68
1:A:412:LEU:H	1:A:412:LEU:HD13	1.59	0.68
1:A:53:LEU:HB2	1:A:496:MET:HE1	1.76	0.68
1:A:555:LYS:HG3	1:A:556:GLN:N	2.09	0.68
1:A:133:TYR:CD2	1:A:136:ILE:HG12	2.28	0.68
1:A:62:ILE:HD11	1:A:73:LEU:HD12	1.76	0.68
1:A:594:PHE:O	1:A:595:GLU:HG2	1.94	0.67
1:A:830:GLN:HG2	1:A:831:CYS:N	2.09	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:NE	2.09	0.67
1:A:98:ARG:HH21	1:A:107:LEU:HD12	1.59	0.67
1:A:863:ILE:HG23	1:A:864:PRO:CD	2.23	0.67
1:A:867:GLY:HA3	1:A:948:TYR:OH	1.94	0.67
1:A:98:ARG:HE	1:A:107:LEU:CD1	2.07	0.67
1:A:46:PRO:HG3	1:A:69:ARG:HD2	1.75	0.67
1:A:190:GLY:HA2	1:A:233:PHE:CE2	2.29	0.67
1:A:321:LEU:O	1:A:325:LEU:HG	1.95	0.67
1:A:548:ARG:C	1:A:584:PRO:HB3	2.15	0.67
1:A:239:PHE:CD1	1:A:260:PRO:HD2	2.30	0.67
1:A:474:VAL:HG12	1:A:475:VAL:CG2	2.21	0.67
1:A:137:CYS:HB2	1:A:213:PHE:CZ	2.30	0.67
1:A:62:ILE:HD12	1:A:64:LEU:HD21	1.76	0.67
1:A:703:LEU:HD13	1:A:723:ALA:HB2	1.76	0.67
1:A:548:ARG:HG3	1:A:584:PRO:C	2.14	0.67
1:A:133:TYR:HB2	1:A:136:ILE:H	1.61	0.66
1:A:460:ASP:HB3	1:A:463:LYS:HB3	1.77	0.66
1:A:531:LEU:CD1	1:A:640:GLU:CD	2.48	0.66
1:A:739:ILE:HD12	1:A:748:ARG:HG2	1.76	0.66
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:N	2.10	0.66
1:A:42:PHE:HE1	1:A:79:VAL:CG2	2.05	0.66
1:A:62:ILE:HG13	1:A:62:ILE:O	1.94	0.66
1:A:323:ARG:HG3	1:A:324:THR:H	1.58	0.66
1:A:110:THR:HB	1:A:132:LEU:CD2	2.26	0.66
1:A:556:GLN:CG	1:A:582:ASN:ND2	2.51	0.66
1:A:325:LEU:CD1	1:A:333:LEU:HD11	2.25	0.66
1:A:595:GLU:HG2	1:A:632:VAL:CG1	2.25	0.66
1:A:773:ILE:HD13	1:A:773:ILE:H	1.59	0.66
1:A:98:ARG:HE	1:A:107:LEU:HD11	1.60	0.66
1:A:432:THR:OG1	1:A:480:VAL:HG23	1.96	0.66
1:A:797:LYS:HD2	1:A:797:LYS:N	2.11	0.66
1:A:444:LEU:CD2	1:A:525:HIS:CE1	2.78	0.66
1:A:863:ILE:HG13	1:A:864:PRO:CD	2.25	0.66
1:A:181:LYS:HD3	1:A:202:LYS:HA	1.78	0.66
1:A:548:ARG:CB	1:A:584:PRO:HA	2.24	0.65
1:A:261:GLU:HG2	1:A:264:SER:C	2.17	0.65
1:A:555:LYS:HZ2	1:A:582:ASN:CG	1.99	0.65
1:A:296:PRO:HD2	1:A:414:VAL:CG2	2.27	0.65
1:A:446:PHE:CZ	1:A:486:PHE:HZ	2.14	0.65
1:A:567:ILE:HD13	1:A:651:VAL:O	1.96	0.65
1:A:706:VAL:HG13	1:A:707:ASP:O	1.96	0.65

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	0.65
1:A:713:VAL:HG12	1:A:714:GLU:HG3	1.79	0.65
1:A:216:VAL:HG12	1:A:224:SER:CB	2.26	0.65
1:A:675:LYS:HE3	1:A:694:VAL:HG22	1.79	0.65
1:A:926:ALA:HB1	1:A:947:LEU:CD1	2.27	0.65
1:A:265:PRO:HD3	1:A:274:VAL:CG2	2.27	0.64
1:A:782:VAL:HG23	1:A:790:ILE:HB	1.77	0.64
1:A:847:LEU:CD2	1:A:850:ALA:HA	2.27	0.64
1:A:309:LEU:HD11	1:A:311:ALA:O	1.98	0.64
1:A:410:ALA:HB1	1:A:411:PRO:HD2	1.78	0.64
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CD1	2.33	0.64
1:A:620:PRO:CA	1:A:623:ILE:HG13	2.23	0.64
1:A:154:LYS:H	1:A:157:HIS:CD2	2.15	0.64
1:A:368:ASP:O	1:A:371:GLN:HG2	1.97	0.64
1:A:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:C	2.17	0.64
1:A:892:HIS:NE2	1:A:931:ILE:HB	2.11	0.64
1:A:53:LEU:HB2	1:A:496:MET:CE	2.27	0.64
1:A:53:LEU:HG	1:A:64:LEU:CD1	2.27	0.64
1:A:175:TYR:HD2	1:A:179:ASP:HB3	1.63	0.64
1:A:446:PHE:CE1	1:A:486:PHE:HZ	2.16	0.64
1:A:181:LYS:HE2	1:A:202:LYS:HG2	1.80	0.64
1:A:105:GLU:HB3	1:A:106:PRO:HD2	1.80	0.63
1:A:320:VAL:O	1:A:323:ARG:HG2	1.98	0.63
1:A:446:PHE:CZ	1:A:506:VAL:HG23	2.33	0.63
1:A:405:GLY:O	1:A:406:LEU:HD22	1.98	0.63
1:A:806:MET:HG2	1:A:807:ARG:HG3	1.80	0.63
1:A:405:GLY:C	1:A:406:LEU:HD22	2.19	0.63
1:A:460:ASP:CB	1:A:463:LYS:HB3	2.28	0.63
1:A:566:ASN:HA	1:A:651:VAL:CG2	2.25	0.63
1:A:118:LEU:HG	1:A:172:ILE:HG13	1.80	0.63
1:A:186:THR:HG22	1:A:187:ALA:N	2.13	0.63
1:A:548:ARG:HG3	1:A:584:PRO:HA	0.65	0.63
1:A:833:LEU:HB2	1:A:836:HIS:CD2	2.29	0.63
1:A:41:THR:HG22	1:A:502:THR:HA	1.81	0.63
1:A:566:ASN:HB3	1:A:651:VAL:HG21	1.80	0.63
1:A:473:GLN:HB2	1:A:504:VAL:HG22	1.80	0.63
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:CZ	2.29	0.63
1:A:448:GLY:CA	1:A:480:VAL:HG21	2.28	0.63
1:A:575:LEU:HD22	1:A:575:LEU:N	2.14	0.63
1:A:453:LYS:HG2	1:A:472:VAL:CG2	2.16	0.63
1:A:847:LEU:HD11	1:A:850:ALA:CA	2.29	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:372:SER:O	1:A:375:ARG:HB2	1.99	0.62
1:A:56:ASP:OD1	1:A:119:ILE:HD12	1.98	0.62
1:A:110:THR:HG22	1:A:111:ASN:N	2.14	0.62
1:A:480:VAL:HG11	1:A:495:ILE:HD11	1.81	0.62
1:A:180:ASP:O	1:A:181:LYS:HG2	1.99	0.62
1:A:382:LEU:HD23	1:A:385:LEU:HB3	1.81	0.62
1:A:469:TYR:HE2	1:A:471:THR:HB	1.65	0.62
1:A:473:GLN:HG2	1:A:504:VAL:HG22	1.79	0.62
1:A:741:ASN:O	1:A:778:VAL:HG13	1.98	0.62
1:A:855:THR:HG23	1:A:856:ASN:OD1	1.99	0.62
1:A:296:PRO:HB2	1:A:417:MET:SD	2.39	0.62
1:A:410:ALA:HB1	1:A:411:PRO:CD	2.30	0.62
1:A:197:THR:HG21	1:A:228:ILE:HD11	1.82	0.62
1:A:204:THR:HG22	1:A:212:MET:SD	2.40	0.62
1:A:492:GLN:HG2	1:A:503:ARG:CG	2.29	0.62
1:A:949:TYR:HE2	1:A:951:MET:CE	2.12	0.62
1:A:696:LEU:N	1:A:696:LEU:HD12	2.15	0.61
1:A:894:LYS:HD3	1:A:899:GLU:HA	1.81	0.61
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:CD	2.20	0.61
1:A:806:MET:CG	1:A:807:ARG:HG3	2.29	0.61
1:A:257:THR:C	1:A:258:LEU:HD12	2.21	0.61
1:A:386:LYS:O	1:A:386:LYS:HG3	1.99	0.61
1:A:548:ARG:NE	1:A:583:VAL:O	2.34	0.61
1:A:41:THR:HG22	1:A:502:THR:HG23	1.83	0.61
1:A:469:TYR:CE2	1:A:471:THR:HB	2.36	0.61
1:A:474:VAL:CG2	1:A:495:ILE:HD13	2.29	0.61
1:A:809:SER:HB2	1:A:881:ASN:ND2	2.15	0.61
1:A:175:TYR:CD2	1:A:179:ASP:HB3	2.36	0.61
1:A:46:PRO:HD2	1:A:71:TYR:CE1	2.35	0.61
1:A:333:LEU:CD2	1:A:358:ILE:HG13	2.31	0.61
1:A:474:VAL:HG22	1:A:495:ILE:CG2	2.29	0.61
1:A:715:VAL:CG2	1:A:717:LYS:HD2	2.30	0.61
1:A:665:VAL:HG12	1:A:697:PRO:HG3	1.83	0.61
1:A:72:LYS:CD	1:A:80:LEU:HD12	2.30	0.61
1:A:182:LEU:HG	1:A:184:ILE:HG23	1.82	0.60
1:A:488:LYS:HG3	1:A:489:ASP:N	2.14	0.60
1:A:712:PRO:HG3	1:A:801:TYR:OH	2.01	0.60
1:A:46:PRO:HD2	1:A:71:TYR:CZ	2.36	0.60
1:A:313:TYR:CE1	1:A:435:ILE:HG12	2.37	0.60
1:A:295:VAL:HA	1:A:414:VAL:HG21	1.81	0.60
1:A:949:TYR:HE2	1:A:951:MET:HE2	1.65	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:403:PHE:CZ	1:A:406:LEU:HD23	2.37	0.60
1:A:530:VAL:HB	1:A:584:PRO:HG3	1.82	0.60
1:A:706:VAL:HG22	1:A:707:ASP:N	2.12	0.60
1:A:119:ILE:HD13	1:A:121:TYR:CZ	2.36	0.60
1:A:548:ARG:O	1:A:584:PRO:HB3	2.02	0.60
1:A:566:ASN:CA	1:A:651:VAL:HG23	2.28	0.60
1:A:95:TYR:CG	1:A:96:PRO:HD3	2.36	0.60
1:A:320:VAL:HG21	1:A:442:HIS:HD2	1.63	0.60
1:A:495:ILE:CG2	1:A:502:THR:HB	2.32	0.60
1:A:271:LYS:HG3	1:A:272:GLU:N	2.13	0.60
1:A:387:VAL:HG13	1:A:388:LYS:HG3	1.83	0.60
1:A:548:ARG:O	1:A:584:PRO:CB	2.50	0.60
1:A:51:ASN:HD21	1:A:67:VAL:CG2	2.15	0.59
1:A:904:VAL:HG13	1:A:905:ASP:N	2.18	0.59
1:A:154:LYS:N	1:A:157:HIS:HD2	2.00	0.59
1:A:773:ILE:HD13	1:A:773:ILE:N	2.17	0.59
1:A:832:THR:HG23	1:A:836:HIS:HB2	1.85	0.59
1:A:243:TYR:CD2	1:A:257:THR:HG22	2.37	0.59
1:A:665:VAL:HG11	1:A:697:PRO:HD3	1.84	0.59
1:A:314:LEU:HD12	1:A:333:LEU:O	2.01	0.59
1:A:62:ILE:HD13	1:A:77:LEU:CD2	2.32	0.59
1:A:323:ARG:HH21	1:A:463:LYS:HD2	1.67	0.59
1:A:99:ILE:HG13	1:A:100:VAL:N	2.16	0.59
1:A:349:LEU:N	1:A:349:LEU:HD22	2.18	0.59
1:A:548:ARG:O	1:A:584:PRO:CG	2.51	0.59
1:A:759:VAL:HG12	1:A:760:GLN:N	2.18	0.59
1:A:171:VAL:O	1:A:182:LEU:HD12	2.02	0.58
1:A:578:LEU:HD13	1:A:636:LEU:HD21	1.85	0.58
1:A:473:GLN:H	1:A:473:GLN:NE2	2.01	0.58
1:A:937:ARG:HG2	1:A:938:PRO:HD2	1.85	0.58
1:A:62:ILE:HD12	1:A:501:LEU:CD1	2.33	0.58
1:A:630:HIS:HD2	1:A:632:VAL:CG2	2.15	0.58
1:A:432:THR:HG1	1:A:480:VAL:HG23	1.67	0.58
1:A:931:ILE:O	1:A:931:ILE:HG13	2.02	0.58
1:A:853:LYS:HB2	1:A:940:PHE:CZ	2.38	0.58
1:A:585:GLU:OE1	1:A:585:GLU:HA	2.04	0.58
1:A:889:ILE:HD12	1:A:907:TYR:CZ	2.38	0.58
1:A:457:ILE:HG12	1:A:467:LEU:HD13	1.84	0.58
1:A:387:VAL:HG13	1:A:388:LYS:N	2.18	0.58
1:A:873:THR:HB	1:A:917:MET:HE2	1.85	0.58
1:A:110:THR:HB	1:A:132:LEU:HD23	1.85	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:814:LEU:HD22	1:A:847:LEU:N	2.18	0.57
1:A:198:ILE:HB	1:A:226:ILE:CG2	2.34	0.57
1:A:556:GLN:C	1:A:582:ASN:HB2	2.25	0.57
1:A:814:LEU:HD22	1:A:847:LEU:H	1.69	0.57
1:A:263:VAL:O	1:A:263:VAL:HG12	2.04	0.57
1:A:885:GLU:HG3	1:A:887:ARG:H	1.70	0.57
1:A:434:VAL:HG22	1:A:435:ILE:N	2.20	0.57
1:A:430:ARG:HH21	1:A:432:THR:HG22	1.68	0.57
1:A:324:THR:CG2	1:A:462:PRO:HA	2.34	0.57
1:A:433:SER:HB3	1:A:484:MET:SD	2.45	0.57
1:A:531:LEU:HB3	1:A:640:GLU:OE2	2.04	0.57
1:A:188:VAL:HG22	1:A:191:LYS:N	2.18	0.57
1:A:426:GLU:OE1	1:A:426:GLU:HA	2.04	0.57
1:A:40:VAL:HG13	1:A:503:ARG:HB3	1.85	0.57
1:A:321:LEU:HD12	1:A:462:PRO:CG	2.35	0.57
1:A:350:ASP:HA	1:A:430:ARG:HB2	1.86	0.57
1:A:501:LEU:HD23	1:A:502:THR:H	1.70	0.57
1:A:704:LEU:HD11	1:A:724:LYS:CE	2.35	0.57
1:A:703:LEU:HD21	1:A:782:VAL:HG21	1.86	0.57
1:A:196:PRO:HB3	1:A:225:MET:CE	2.33	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:262:MET:O	1:A:262:MET:HG3	2.05	0.56
1:A:468:GLN:HB2	1:A:523:ASP:CG	2.25	0.56
1:A:226:ILE:O	1:A:226:ILE:HG23	2.06	0.56
1:A:305:GLU:O	1:A:340:LYS:HG3	2.06	0.56
1:A:42:PHE:CE2	1:A:50:PHE:HZ	2.23	0.56
1:A:239:PHE:CA	1:A:260:PRO:HG2	2.30	0.56
1:A:474:VAL:CG2	1:A:495:ILE:HG21	2.35	0.56
1:A:710:LEU:HB2	1:A:801:TYR:HE1	1.70	0.56
1:A:45:GLU:HB3	1:A:46:PRO:CD	2.35	0.56
1:A:785:ASN:HD22	1:A:788:PHE:HE2	1.54	0.56
1:A:853:LYS:CG	1:A:940:PHE:HZ	2.19	0.56
1:A:533:ASN:HD22	1:A:643:MET:CG	2.18	0.56
1:A:116:MET:HG3	1:A:117:LEU:N	2.21	0.56
1:A:456:LYS:O	1:A:468:GLN:HG2	2.04	0.56
1:A:459:VAL:O	1:A:459:VAL:HG23	2.05	0.56
1:A:820:PHE:O	1:A:821:GLU:HB3	2.06	0.56
1:A:845:LEU:HD13	1:A:845:LEU:C	2.26	0.56
1:A:446:PHE:CE1	1:A:486:PHE:CZ	2.93	0.56
1:A:42:PHE:HE2	1:A:50:PHE:HZ	1.54	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:665:VAL:CG1	1:A:697:PRO:HD3	2.35	0.56
1:A:713:VAL:HG13	1:A:766:TYR:O	2.06	0.56
1:A:563:HIS:HB3	1:A:564:PRO:CD	2.28	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:926:ALA:CB	1:A:947:LEU:HD12	2.35	0.56
1:A:175:TYR:HB3	1:A:179:ASP:HB3	1.88	0.56
1:A:254:TYR:CZ	1:A:281:ARG:HD2	2.39	0.56
1:A:53:LEU:HG	1:A:64:LEU:HD13	1.87	0.56
1:A:597:LEU:N	1:A:597:LEU:HD22	2.21	0.56
1:A:46:PRO:CG	1:A:69:ARG:HD2	2.36	0.56
1:A:62:ILE:HG12	1:A:73:LEU:HB2	1.84	0.56
1:A:265:PRO:HD3	1:A:274:VAL:HG21	1.87	0.55
1:A:51:ASN:ND2	1:A:67:VAL:HG23	2.20	0.55
1:A:110:THR:HG22	1:A:111:ASN:H	1.72	0.55
1:A:380:LEU:HB2	1:A:386:LYS:HE2	1.87	0.55
1:A:710:LEU:HB2	1:A:801:TYR:CE1	2.42	0.55
1:A:370:LEU:HD13	1:A:370:LEU:C	2.27	0.55
1:A:619:VAL:CB	1:A:620:PRO:HD3	2.36	0.55
1:A:72:LYS:HD2	1:A:80:LEU:HB2	1.87	0.55
1:A:118:LEU:HB3	1:A:127:ILE:CG2	2.36	0.55
1:A:242:TYR:CD1	1:A:345:LYS:HE2	2.41	0.55
1:A:435:ILE:CG2	1:A:486:PHE:HE1	2.19	0.55
1:A:797:LYS:HD2	1:A:797:LYS:H	1.71	0.55
1:A:804:GLY:HA2	1:A:806:MET:CE	2.36	0.55
1:A:865:VAL:HG13	1:A:866:THR:N	2.21	0.55
1:A:435:ILE:HD12	1:A:486:PHE:HD1	1.71	0.55
1:A:91:ASN:CG	1:A:92:PRO:HD2	2.27	0.55
1:A:509:CYS:HB3	1:A:535:CYS:SG	2.47	0.55
1:A:556:GLN:HA	1:A:582:ASN:ND2	2.19	0.55
1:A:359:LEU:HA	1:A:362:ILE:HG12	1.89	0.55
1:A:412:LEU:N	1:A:412:LEU:HD13	2.22	0.55
1:A:460:ASP:OD2	1:A:463:LYS:HB3	2.06	0.55
1:A:825:CYS:HB3	1:A:828:PRO:HG2	1.89	0.55
1:A:190:GLY:O	1:A:192:PRO:HD3	2.07	0.54
1:A:382:LEU:HD23	1:A:385:LEU:CB	2.36	0.54
1:A:526:CYS:HB3	1:A:535:CYS:SG	2.46	0.54
1:A:709:ILE:O	1:A:799:TYR:HD1	1.90	0.54
1:A:780:LEU:HD12	1:A:780:LEU:C	2.27	0.54
1:A:628:ASP:OD2	1:A:669:TYR:HE1	1.90	0.54
1:A:947:LEU:CD2	1:A:947:LEU:H	2.21	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:474:VAL:HG12	1:A:475:VAL:N	2.21	0.54
1:A:168:VAL:HG22	1:A:169:PHE:N	2.22	0.54
1:A:280:VAL:HG12	1:A:281:ARG:N	2.22	0.54
1:A:412:LEU:C	1:A:412:LEU:HD22	2.28	0.54
1:A:370:LEU:HD13	1:A:370:LEU:O	2.07	0.54
1:A:921:LYS:N	1:A:922:PRO:HD2	2.23	0.54
1:A:548:ARG:HB2	1:A:583:VAL:C	2.27	0.54
1:A:370:LEU:HD21	1:A:374:TYR:CE1	2.39	0.54
1:A:63:TYR:CE2	1:A:72:LYS:HG2	2.43	0.54
1:A:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:O	2.07	0.54
1:A:861:GLU:HG3	1:A:862:ILE:N	2.21	0.54
1:A:937:ARG:HG3	1:A:938:PRO:HD2	1.89	0.54
1:A:151:PRO:O	1:A:157:HIS:HB3	2.07	0.54
1:A:72:LYS:HD2	1:A:80:LEU:HD12	1.90	0.54
1:A:472:VAL:O	1:A:472:VAL:HG12	2.09	0.53
1:A:925:HIS:O	1:A:950:PHE:HD2	1.91	0.53
1:A:236:ILE:O	1:A:236:ILE:HG23	2.07	0.53
1:A:429:ASP:OD1	1:A:450:LYS:HB3	2.08	0.53
1:A:501:LEU:HD23	1:A:502:THR:N	2.22	0.53
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:HA	1.91	0.53
1:A:447:VAL:HG23	1:A:447:VAL:O	2.06	0.53
1:A:623:ILE:HD12	1:A:623:ILE:C	2.28	0.53
1:A:64:LEU:N	1:A:64:LEU:HD22	2.24	0.53
1:A:567:ILE:N	1:A:567:ILE:HD13	2.20	0.53
1:A:739:ILE:HB	1:A:781:THR:HG23	1.90	0.53
1:A:154:LYS:HB2	1:A:157:HIS:HD2	1.70	0.53
1:A:448:GLY:HA3	1:A:480:VAL:CG2	2.37	0.53
1:A:471:THR:CG2	1:A:473:GLN:HE22	2.20	0.53
1:A:807:ARG:HD2	1:A:813:CYS:HA	1.90	0.53
1:A:385:LEU:HD13	1:A:385:LEU:C	2.29	0.53
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:NH2	2.24	0.53
1:A:553:GLU:HG3	1:A:554:MET:N	2.24	0.53
1:A:575:LEU:H	1:A:575:LEU:CD2	2.22	0.53
1:A:630:HIS:HD2	1:A:632:VAL:HG23	1.73	0.53
1:A:805:ALA:N	1:A:806:MET:HE3	2.24	0.53
1:A:924:GLN:O	1:A:925:HIS:HB2	2.09	0.53
1:A:239:PHE:HA	1:A:260:PRO:CG	2.32	0.53
1:A:495:ILE:O	1:A:495:ILE:HG23	2.08	0.53
1:A:712:PRO:O	1:A:715:VAL:HG22	2.09	0.53
1:A:806:MET:HG2	1:A:807:ARG:CG	2.39	0.53
1:A:135:GLY:O	1:A:159:LEU:HD13	2.08	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:370:LEU:HD11	1:A:399:ILE:HD12	1.89	0.53
1:A:578:LEU:HB2	1:A:609:ILE:HB	1.91	0.53
1:A:930:GLU:OE2	1:A:941:MET:HG3	2.07	0.53
1:A:281:ARG:O	1:A:282:LEU:HD23	2.09	0.53
1:A:426:GLU:HG2	1:A:429:ASP:O	2.08	0.53
1:A:39:PHE:CD1	1:A:505:PRO:HD2	2.44	0.53
1:A:580:THR:HG21	1:A:583:VAL:HG11	1.91	0.53
1:A:805:ALA:H	1:A:806:MET:CE	2.22	0.53
1:A:947:LEU:O	1:A:947:LEU:HD23	2.09	0.52
1:A:198:ILE:HB	1:A:226:ILE:HG22	1.91	0.52
1:A:321:LEU:CD2	1:A:325:LEU:HD11	2.39	0.52
1:A:827:SER:HB2	1:A:828:PRO:CD	2.39	0.52
1:A:827:SER:HB2	1:A:828:PRO:HD3	1.91	0.52
1:A:882:LEU:HD13	1:A:910:ALA:O	2.09	0.52
1:A:371:GLN:O	1:A:375:ARG:HG3	2.09	0.52
1:A:589:GLY:HA3	1:A:639:LYS:HG3	1.90	0.52
1:A:875:VAL:HG22	1:A:915:CYS:O	2.09	0.52
1:A:308:LEU:O	1:A:338:PHE:HA	2.09	0.52
1:A:42:PHE:HZ	1:A:45:GLU:CB	2.22	0.52
1:A:569:VAL:CG2	1:A:654:ASN:CB	2.81	0.52
1:A:679:VAL:HG12	1:A:680:CYS:N	2.24	0.52
1:A:181:LYS:CE	1:A:202:LYS:HG2	2.38	0.52
1:A:301:ARG:CD	1:A:425:THR:HG21	2.26	0.52
1:A:468:GLN:CB	1:A:523:ASP:HA	2.38	0.52
1:A:53:LEU:HG	1:A:64:LEU:HD11	1.92	0.52
1:A:783:VAL:HG12	1:A:784:TRP:N	2.25	0.52
1:A:396:LEU:C	1:A:396:LEU:HD13	2.30	0.52
1:A:509:CYS:HB2	1:A:536:THR:HA	1.91	0.52
1:A:853:LYS:CG	1:A:940:PHE:CZ	2.93	0.52
1:A:185:ALA:HB3	1:A:243:TYR:CG	2.44	0.52
1:A:356:ILE:HG22	1:A:421:ILE:O	2.09	0.52
1:A:560:LEU:HG	1:A:648:THR:HG21	1.92	0.52
1:A:653:TYR:O	1:A:654:ASN:N	2.43	0.52
1:A:228:ILE:HG22	1:A:233:PHE:CE1	2.45	0.52
1:A:716:ILE:O	1:A:716:ILE:HG23	2.09	0.52
1:A:119:ILE:O	1:A:119:ILE:HG23	2.09	0.52
1:A:716:ILE:HG12	1:A:763:ASN:HB3	1.90	0.52
1:A:261:GLU:HG2	1:A:265:PRO:N	2.25	0.52
1:A:296:PRO:HD2	1:A:414:VAL:HG22	1.92	0.52
1:A:439:TYR:HD1	1:A:537:ARG:HH12	1.38	0.52
1:A:739:ILE:HB	1:A:781:THR:HG22	1.90	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:933:VAL:HG22	1:A:940:PHE:HB3	1.91	0.51
1:A:556:GLN:CB	1:A:582:ASN:HB3	2.35	0.51
1:A:184:ILE:HD12	1:A:184:ILE:C	2.31	0.51
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CG	2.94	0.51
1:A:426:GLU:HG3	1:A:429:ASP:H	1.75	0.51
1:A:567:ILE:CD1	1:A:650:PHE:CE2	2.94	0.51
1:A:127:ILE:O	1:A:127:ILE:HG23	2.09	0.51
1:A:593:THR:HG23	1:A:593:THR:O	2.10	0.51
1:A:716:ILE:CG1	1:A:763:ASN:HB3	2.41	0.51
1:A:790:ILE:HD12	1:A:790:ILE:N	2.25	0.51
1:A:53:LEU:HD23	1:A:53:LEU:C	2.31	0.51
1:A:560:LEU:HD23	1:A:648:THR:CG2	2.25	0.51
1:A:727:PRO:O	1:A:729:PRO:HD3	2.10	0.51
1:A:216:VAL:HG13	1:A:217:PHE:N	2.26	0.51
1:A:930:GLU:HG3	1:A:941:MET:SD	2.51	0.51
1:A:93:LYS:HD3	1:A:105:GLU:OE2	2.10	0.51
1:A:181:LYS:HZ2	1:A:216:VAL:HG23	1.75	0.51
1:A:370:LEU:HD13	1:A:374:TYR:CD1	2.46	0.51
1:A:418:VAL:O	1:A:418:VAL:HG13	2.10	0.51
1:A:473:GLN:CD	1:A:504:VAL:HG13	2.31	0.51
1:A:473:GLN:HB2	1:A:504:VAL:CG2	2.40	0.51
1:A:64:LEU:HD11	1:A:501:LEU:HD12	1.92	0.51
1:A:853:LYS:HD2	1:A:853:LYS:H	1.76	0.51
1:A:171:VAL:HG12	1:A:172:ILE:N	2.26	0.51
1:A:265:PRO:HD3	1:A:274:VAL:HG22	1.92	0.51
1:A:322:GLY:CA	1:A:327:VAL:HG22	2.41	0.51
1:A:370:LEU:HD11	1:A:374:TYR:CE1	2.46	0.51
1:A:433:SER:HB3	1:A:484:MET:HE3	1.93	0.51
1:A:491:GLU:O	1:A:506:VAL:HG12	2.11	0.51
1:A:798:VAL:O	1:A:798:VAL:HG13	2.10	0.51
1:A:712:PRO:HG3	1:A:801:TYR:CZ	2.45	0.51
1:A:278:LYS:HG2	1:A:296:PRO:CA	2.39	0.51
1:A:566:ASN:HB3	1:A:651:VAL:CG2	2.40	0.51
1:A:810:CYS:SG	1:A:855:THR:CG2	2.92	0.51
1:A:823:GLY:HA3	1:A:844:TRP:CZ2	2.46	0.51
1:A:895:VAL:O	1:A:896:ALA:HB3	2.11	0.51
1:A:234:THR:HG23	1:A:235:VAL:N	2.26	0.51
1:A:519:LEU:N	1:A:519:LEU:HD22	2.26	0.51
1:A:541:CYS:SG	1:A:550:PHE:HD2	2.33	0.51
1:A:703:LEU:N	1:A:703:LEU:HD22	2.26	0.51
1:A:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:HB3	1.93	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:889:ILE:CD1	1:A:907:TYR:CE1	2.94	0.51
1:A:284:LYS:HD3	1:A:284:LYS:C	2.31	0.50
1:A:403:PHE:CE1	1:A:406:LEU:CD2	2.94	0.50
1:A:412:LEU:O	1:A:412:LEU:HD22	2.11	0.50
1:A:59:THR:HB	1:A:61:HIS:CE1	2.45	0.50
1:A:695:LYS:CB	1:A:696:LEU:HD12	2.41	0.50
1:A:119:ILE:CG2	1:A:121:TYR:CE1	2.95	0.50
1:A:400:ASP:HB2	1:A:402:ASN:OD1	2.11	0.50
1:A:805:ALA:H	1:A:806:MET:HE3	1.75	0.50
1:A:204:THR:HG23	1:A:206:ASN:O	2.11	0.50
1:A:358:ILE:CG2	1:A:361:GLN:HB2	2.41	0.50
1:A:689:PHE:CE1	1:A:691:GLU:CG	2.94	0.50
1:A:76:ASP:O	1:A:77:LEU:HB2	2.11	0.50
1:A:81:VAL:HG12	1:A:82:THR:N	2.26	0.50
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CD2	2.94	0.50
1:A:300:GLU:HG2	1:A:305:GLU:HA	1.93	0.50
1:A:54:VAL:HG22	1:A:55:VAL:N	2.25	0.50
1:A:628:ASP:OD2	1:A:669:TYR:CE1	2.64	0.50
1:A:713:VAL:HG13	1:A:767:SER:HA	1.94	0.50
1:A:133:TYR:O	1:A:134:GLN:HB2	2.11	0.50
1:A:228:ILE:CG2	1:A:233:PHE:CE1	2.94	0.50
1:A:673:TRP:HB3	1:A:694:VAL:HB	1.94	0.50
1:A:64:LEU:HB2	1:A:71:TYR:HD2	1.77	0.50
1:A:370:LEU:CD1	1:A:374:TYR:CD1	2.95	0.50
1:A:457:ILE:HG12	1:A:467:LEU:CD1	2.42	0.50
1:A:782:VAL:HG23	1:A:782:VAL:O	2.12	0.50
1:A:444:LEU:HD12	1:A:446:PHE:CZ	2.44	0.50
1:A:507:GLU:HG3	1:A:537:ARG:CG	2.41	0.50
1:A:132:LEU:HD11	1:A:163:ASN:HD22	1.77	0.50
1:A:182:LEU:HD21	1:A:184:ILE:HG21	1.94	0.50
1:A:597:LEU:CD2	1:A:597:LEU:H	2.25	0.49
1:A:676:TYR:CD1	1:A:730:GLN:HG3	2.47	0.49
1:A:185:ALA:HA	1:A:197:THR:O	2.13	0.49
1:A:321:LEU:CG	1:A:325:LEU:HD11	2.40	0.49
1:A:894:LYS:CD	1:A:899:GLU:HA	2.41	0.49
1:A:295:VAL:HG23	1:A:295:VAL:O	2.12	0.49
1:A:312:ALA:HB1	1:A:334:LEU:HD11	1.95	0.49
1:A:473:GLN:HB3	1:A:502:THR:HG21	1.94	0.49
1:A:506:VAL:HG13	1:A:507:GLU:N	2.27	0.49
1:A:892:HIS:HD2	1:A:893:VAL:N	2.10	0.49
1:A:190:GLY:HA2	1:A:233:PHE:HE2	1.73	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:541:CYS:CB	1:A:544:SER:HB3	2.42	0.49
1:A:792:ASN:HD21	1:A:796:ASN:N	2.10	0.49
1:A:133:TYR:HB3	1:A:136:ILE:HG23	1.94	0.49
1:A:380:LEU:CD1	1:A:386:LYS:HE3	2.37	0.49
1:A:623:ILE:HD12	1:A:624:THR:CA	2.42	0.49
1:A:105:GLU:CB	1:A:106:PRO:HD2	2.42	0.49
1:A:110:THR:CB	1:A:132:LEU:HD21	2.42	0.49
1:A:590:VAL:HG12	1:A:591:ASN:N	2.27	0.49
1:A:46:PRO:CG	1:A:69:ARG:HG3	2.27	0.49
1:A:781:THR:O	1:A:781:THR:HG23	2.12	0.49
1:A:841:GLU:HG3	1:A:842:SER:H	1.77	0.49
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:CA	2.42	0.49
1:A:190:GLY:C	1:A:192:PRO:HD3	2.33	0.49
1:A:475:VAL:HG22	1:A:500:GLN:OE1	2.13	0.49
1:A:863:ILE:HG13	1:A:864:PRO:N	2.28	0.49
1:A:856:ASN:N	1:A:857:PRO:HD3	2.27	0.49
1:A:403:PHE:HE1	1:A:406:LEU:HD23	1.76	0.49
1:A:453:LYS:HE3	1:A:472:VAL:HG22	1.94	0.49
1:A:557:CYS:HB3	1:A:558:VAL:HG23	1.95	0.49
1:A:935:VAL:HG12	1:A:936:CYS:N	2.28	0.49
1:A:603:LEU:HD23	1:A:603:LEU:C	2.33	0.49
1:A:40:VAL:HG21	1:A:76:ASP:O	2.12	0.49
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CE2	2.47	0.48
1:A:435:ILE:HG21	1:A:486:PHE:CE1	2.48	0.48
1:A:527:GLY:HA3	1:A:550:PHE:CE1	2.45	0.48
1:A:785:ASN:HB3	1:A:788:PHE:CE2	2.46	0.48
1:A:790:ILE:H	1:A:790:ILE:HD12	1.77	0.48
1:A:265:PRO:CD	1:A:274:VAL:HG22	2.42	0.48
1:A:39:PHE:CD2	1:A:473:GLN:CG	2.95	0.48
1:A:59:THR:HB	1:A:61:HIS:ND1	2.27	0.48
1:A:736:TYR:CD2	1:A:784:TRP:HB3	2.47	0.48
1:A:278:LYS:CE	1:A:296:PRO:HG3	2.41	0.48
1:A:320:VAL:HG23	1:A:441:ASN:HB3	1.94	0.48
1:A:258:LEU:HD12	1:A:258:LEU:N	2.29	0.48
1:A:473:GLN:CD	1:A:504:VAL:HG22	2.34	0.48
1:A:557:CYS:CB	1:A:558:VAL:HG23	2.29	0.48
1:A:175:TYR:CG	1:A:176:SER:N	2.82	0.48
1:A:254:TYR:CE2	1:A:281:ARG:HD2	2.48	0.48
1:A:782:VAL:CG2	1:A:790:ILE:HB	2.41	0.48
1:A:239:PHE:CD1	1:A:260:PRO:HG2	2.48	0.48
1:A:265:PRO:HB2	1:A:266:PRO:HD2	1.94	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:681:THR:HG21	1:A:686:THR:HG21	1.95	0.48
1:A:783:VAL:HG13	1:A:788:PHE:O	2.13	0.48
1:A:374:TYR:CE2	1:A:397:LEU:HD22	2.48	0.48
1:A:882:LEU:HD23	1:A:913:ILE:HD11	1.94	0.48
1:A:440:LYS:HG2	1:A:440:LYS:O	2.14	0.48
1:A:862:ILE:HG22	1:A:877:ILE:CA	2.32	0.48
1:A:144:ASP:O	1:A:145:LEU:HB2	2.13	0.48
1:A:430:ARG:HG2	1:A:431:MET:O	2.14	0.48
1:A:77:LEU:HD22	1:A:501:LEU:HD13	1.96	0.48
1:A:567:ILE:HD12	1:A:650:PHE:CE2	2.49	0.48
1:A:710:LEU:HD13	1:A:801:TYR:OH	2.14	0.48
1:A:160:SER:OG	1:A:162:VAL:HG23	2.14	0.48
1:A:541:CYS:SG	1:A:550:PHE:CD2	3.06	0.48
1:A:862:ILE:CG2	1:A:877:ILE:HG23	2.44	0.48
1:A:118:LEU:C	1:A:118:LEU:HD13	2.34	0.47
1:A:597:LEU:HD22	1:A:597:LEU:H	1.78	0.47
1:A:555:LYS:HZ2	1:A:556:GLN:HG2	1.79	0.47
1:A:555:LYS:HB2	1:A:559:ARG:NH2	2.28	0.47
1:A:561:THR:HG22	1:A:562:VAL:N	2.28	0.47
1:A:626:ASN:ND2	1:A:630:HIS:HB2	2.29	0.47
1:A:740:LEU:HD12	1:A:740:LEU:N	2.29	0.47
1:A:889:ILE:O	1:A:892:HIS:HB3	2.13	0.47
1:A:68:ASN:ND2	1:A:87:PRO:HD3	2.30	0.47
1:A:807:ARG:HB3	1:A:812:LEU:HB2	1.96	0.47
1:A:907:TYR:CZ	1:A:909:PRO:HA	2.48	0.47
1:A:262:MET:O	1:A:263:VAL:HB	2.14	0.47
1:A:281:ARG:HB3	1:A:293:VAL:HG11	1.97	0.47
1:A:495:ILE:HG22	1:A:502:THR:HB	1.96	0.47
1:A:702:GLN:O	1:A:723:ALA:HB1	2.14	0.47
1:A:947:LEU:H	1:A:947:LEU:HD23	1.79	0.47
1:A:333:LEU:HD21	1:A:358:ILE:HG13	1.94	0.47
1:A:380:LEU:CB	1:A:386:LYS:HE3	2.43	0.47
1:A:569:VAL:CG1	1:A:620:PRO:HG3	2.45	0.47
1:A:728:GLN:HA	1:A:753:ARG:NH2	2.30	0.47
1:A:82:THR:O	1:A:82:THR:HG23	2.14	0.47
1:A:863:ILE:CG1	1:A:864:PRO:HD3	2.39	0.47
1:A:361:GLN:HE21	1:A:365:ARG:HH21	1.61	0.47
1:A:372:SER:HA	1:A:375:ARG:NE	2.30	0.47
1:A:458:ARG:NH1	1:A:524:PRO:HB3	2.29	0.47
1:A:745:ILE:O	1:A:745:ILE:HG23	2.15	0.47
1:A:716:ILE:HD11	1:A:763:ASN:HB3	1.96	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:124:ASN:OD1	1:A:142:LEU:HB3	2.14	0.47
1:A:790:ILE:HG22	1:A:791:ASP:N	2.28	0.47
1:A:715:VAL:HG23	1:A:715:VAL:O	2.13	0.47
1:A:253:VAL:O	1:A:253:VAL:HG23	2.15	0.47
1:A:244:VAL:HB	1:A:309:LEU:HD23	1.97	0.47
1:A:295:VAL:CA	1:A:414:VAL:HG21	2.45	0.47
1:A:361:GLN:O	1:A:365:ARG:HG2	2.16	0.46
1:A:380:LEU:HD12	1:A:390:ILE:CG2	2.45	0.46
1:A:503:ARG:O	1:A:505:PRO:HD3	2.16	0.46
1:A:556:GLN:CA	1:A:582:ASN:HB2	2.35	0.46
1:A:689:PHE:CE1	1:A:691:GLU:HG2	2.50	0.46
1:A:814:LEU:HD11	1:A:845:LEU:CD1	2.44	0.46
1:A:333:LEU:CD2	1:A:358:ILE:HA	2.45	0.46
1:A:45:GLU:HB3	1:A:46:PRO:HD3	1.97	0.46
1:A:113:VAL:HG11	1:A:165:SER:HB3	1.96	0.46
1:A:265:PRO:CB	1:A:266:PRO:HD2	2.45	0.46
1:A:704:LEU:H	1:A:723:ALA:HA	1.79	0.46
1:A:68:ASN:HB3	1:A:86:GLY:HA3	1.97	0.46
1:A:947:LEU:N	1:A:947:LEU:HD23	2.30	0.46
1:A:264:SER:HA	1:A:265:PRO:HA	1.53	0.46
1:A:252:PHE:CD1	1:A:283:CYS:HA	2.51	0.46
1:A:435:ILE:HG21	1:A:486:PHE:HE1	1.81	0.46
1:A:159:LEU:HG	1:A:201:ARG:HH12	1.81	0.46
1:A:62:ILE:HD11	1:A:73:LEU:CD1	2.45	0.46
1:A:695:LYS:HB2	1:A:696:LEU:HD12	1.96	0.46
1:A:743:GLN:HG2	1:A:744:GLY:N	2.31	0.46
1:A:892:HIS:CD2	1:A:893:VAL:CG2	2.98	0.46
1:A:343:LYS:HG2	1:A:344:ARG:HG2	1.97	0.46
1:A:543:ARG:HH11	1:A:549:ARG:HH22	1.62	0.46
1:A:531:LEU:CB	1:A:640:GLU:OE2	2.64	0.46
1:A:72:LYS:O	1:A:80:LEU:HB2	2.15	0.46
1:A:286:ASP:OD1	1:A:288:ALA:HB3	2.16	0.46
1:A:468:GLN:HB3	1:A:468:GLN:HE21	1.47	0.46
1:A:511:GLN:HG3	1:A:512:TYR:CD2	2.51	0.46
1:A:843:ARG:HB2	1:A:843:ARG:NH1	2.30	0.46
1:A:892:HIS:CD2	1:A:893:VAL:HG22	2.51	0.46
1:A:117:LEU:HD11	1:A:126:LEU:CD2	2.31	0.46
1:A:118:LEU:HB3	1:A:127:ILE:HG22	1.98	0.46
1:A:245:TYR:CD2	1:A:312:ALA:HB3	2.51	0.46
1:A:902:PRO:HA	1:A:915:CYS:HA	1.97	0.46
1:A:226:ILE:HD11	1:A:385:LEU:CD2	2.46	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:44:GLY:CA	1:A:50:PHE:HE2	2.23	0.46
1:A:539:GLU:HG3	1:A:540:ARG:N	2.31	0.46
1:A:192:PRO:HB3	1:A:233:PHE:CZ	2.51	0.45
1:A:288:ALA:O	1:A:289:PHE:HB2	2.17	0.45
1:A:444:LEU:CD2	1:A:525:HIS:NE2	2.76	0.45
1:A:594:PHE:CZ	1:A:614:PRO:HD3	2.51	0.45
1:A:624:THR:O	1:A:624:THR:HG23	2.15	0.45
1:A:91:ASN:OD1	1:A:92:PRO:HD2	2.17	0.45
1:A:949:TYR:CE2	1:A:951:MET:HE2	2.47	0.45
1:A:296:PRO:CD	1:A:414:VAL:HG22	2.45	0.45
1:A:46:PRO:HD2	1:A:71:TYR:OH	2.16	0.45
1:A:492:GLN:HG2	1:A:503:ARG:HD2	1.98	0.45
1:A:830:GLN:CG	1:A:831:CYS:H	2.24	0.45
1:A:873:THR:HG22	1:A:874:LYS:N	2.31	0.45
1:A:110:THR:CB	1:A:132:LEU:CD2	2.94	0.45
1:A:256:LEU:HD22	1:A:256:LEU:N	2.31	0.45
1:A:695:LYS:C	1:A:696:LEU:HD12	2.37	0.45
1:A:358:ILE:CG2	1:A:361:GLN:CB	2.95	0.45
1:A:444:LEU:HD13	1:A:445:ALA:H	1.79	0.45
1:A:563:HIS:CB	1:A:577:VAL:HG12	2.46	0.45
1:A:949:TYR:CE2	1:A:951:MET:CE	2.95	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:446:PHE:CB	1:A:454:LEU:HD11	2.43	0.45
1:A:469:TYR:CG	1:A:470:GLU:N	2.84	0.45
1:A:783:VAL:HG11	1:A:786:GLY:O	2.15	0.45
1:A:98:ARG:NH2	1:A:107:LEU:HD12	2.29	0.45
1:A:62:ILE:CD1	1:A:501:LEU:CD1	2.95	0.45
1:A:62:ILE:CD1	1:A:77:LEU:CD2	2.94	0.45
1:A:778:VAL:O	1:A:797:LYS:HB2	2.17	0.45
1:A:828:PRO:HG3	1:A:837:CYS:SG	2.56	0.45
1:A:890:ALA:O	1:A:891:SER:HB2	2.17	0.45
1:A:442:HIS:CD2	1:A:458:ARG:HH21	2.35	0.45
1:A:492:GLN:HG2	1:A:503:ARG:HG2	1.98	0.45
1:A:58:ARG:HG2	1:A:58:ARG:NH1	2.31	0.45
1:A:833:LEU:CB	1:A:836:HIS:HD2	2.22	0.45
1:A:118:LEU:O	1:A:127:ILE:HG22	2.17	0.45
1:A:110:THR:HG21	1:A:132:LEU:HD21	1.97	0.45
1:A:179:ASP:O	1:A:180:ASP:HB3	2.17	0.45
1:A:305:GLU:HG2	1:A:307:ARG:HG2	1.99	0.45
1:A:370:LEU:CD2	1:A:374:TYR:HE1	2.27	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:435:ILE:HG23	1:A:486:PHE:HE1	1.81	0.45
1:A:72:LYS:CE	1:A:80:LEU:CD1	2.95	0.45
1:A:245:TYR:CE2	1:A:247:PHE:HD2	2.34	0.45
1:A:437:TYR:CE2	1:A:439:TYR:HB2	2.51	0.45
1:A:564:PRO:HB2	1:A:576:LEU:CD2	2.48	0.45
1:A:574:VAL:HG22	1:A:613:SER:OG	2.17	0.45
1:A:892:HIS:CD2	1:A:893:VAL:N	2.85	0.45
1:A:162:VAL:HG21	1:A:187:ALA:HB3	1.99	0.44
1:A:306:TYR:HE1	1:A:351:GLU:HG2	1.82	0.44
1:A:62:ILE:CD1	1:A:73:LEU:HD12	2.45	0.44
1:A:247:PHE:CD1	1:A:314:LEU:HD22	2.52	0.44
1:A:435:ILE:CD1	1:A:486:PHE:HD1	2.31	0.44
1:A:541:CYS:HB3	1:A:544:SER:HB3	1.99	0.44
1:A:566:ASN:CB	1:A:651:VAL:CG2	2.95	0.44
1:A:151:PRO:HB2	1:A:157:HIS:CE1	2.52	0.44
1:A:278:LYS:HD3	1:A:294:GLU:HG2	1.98	0.44
1:A:567:ILE:HD11	1:A:652:PHE:CD1	2.53	0.44
1:A:586:LEU:HD13	1:A:590:VAL:HG21	1.99	0.44
1:A:663:SER:O	1:A:667:SER:HB2	2.17	0.44
1:A:884:LEU:HA	1:A:884:LEU:HD23	1.76	0.44
1:A:620:PRO:O	1:A:623:ILE:HG13	2.18	0.44
1:A:671:CYS:HB3	1:A:680:CYS:SG	2.57	0.44
1:A:291:SER:HB3	1:A:404:CYS:O	2.18	0.44
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:NE2	2.32	0.44
1:A:703:LEU:CD2	1:A:790:ILE:CG2	2.95	0.44
1:A:252:PHE:HD1	1:A:283:CYS:HA	1.82	0.44
1:A:40:VAL:O	1:A:40:VAL:HG13	2.17	0.44
1:A:549:ARG:HA	1:A:584:PRO:HB3	2.00	0.44
1:A:597:LEU:HG	1:A:622:ILE:HG12	1.99	0.44
1:A:42:PHE:CZ	1:A:45:GLU:CB	2.95	0.44
1:A:713:VAL:O	1:A:714:GLU:HB2	2.18	0.44
1:A:889:ILE:HA	1:A:892:HIS:ND1	2.33	0.44
1:A:217:PHE:CE2	1:A:219:ASP:HB2	2.53	0.44
1:A:262:MET:SD	1:A:383:ALA:HB3	2.58	0.44
1:A:322:GLY:HA2	1:A:327:VAL:HG22	1.99	0.44
1:A:464:GLY:O	1:A:465:ASN:HB3	2.17	0.44
1:A:635:GLN:HB3	1:A:644:THR:HB	1.99	0.44
1:A:759:VAL:CG1	1:A:760:GLN:N	2.81	0.44
1:A:832:THR:HG21	1:A:836:HIS:CB	2.47	0.44
1:A:95:TYR:HD1	1:A:95:TYR:HA	1.70	0.44
1:A:324:THR:HG22	1:A:324:THR:O	2.18	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:501:LEU:CD2	1:A:502:THR:N	2.81	0.43
1:A:53:LEU:HD12	1:A:501:LEU:HG	1.99	0.43
1:A:711:VAL:HG21	1:A:798:VAL:CG2	2.48	0.43
1:A:853:LYS:HG3	1:A:940:PHE:CZ	2.53	0.43
1:A:189:ASP:HB3	1:A:191:LYS:HD3	1.99	0.43
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CD1	3.00	0.43
1:A:281:ARG:NH1	1:A:366:ILE:HG21	2.33	0.43
1:A:295:VAL:CB	1:A:414:VAL:HG21	2.47	0.43
1:A:841:GLU:HG3	1:A:842:SER:N	2.32	0.43
1:A:569:VAL:CG2	1:A:654:ASN:CA	2.95	0.43
1:A:743:GLN:CD	1:A:743:GLN:H	2.21	0.43
1:A:764:THR:CG2	1:A:766:TYR:CZ	3.01	0.43
1:A:119:ILE:HG23	1:A:121:TYR:CE1	2.53	0.43
1:A:296:PRO:HB2	1:A:417:MET:CE	2.48	0.43
1:A:528:TRP:HZ2	1:A:533:ASN:OD1	2.01	0.43
1:A:716:ILE:CD1	1:A:763:ASN:HB3	2.49	0.43
1:A:358:ILE:O	1:A:358:ILE:HG23	2.18	0.43
1:A:574:VAL:CG2	1:A:613:SER:HB3	2.48	0.43
1:A:764:THR:HG23	1:A:766:TYR:CZ	2.54	0.43
1:A:662:LEU:HD21	1:A:791:ASP:HB2	1.79	0.43
1:A:98:ARG:HE	1:A:107:LEU:HD12	1.83	0.43
1:A:133:TYR:CG	1:A:136:ILE:CG1	2.94	0.43
1:A:162:VAL:HG12	1:A:164:GLU:H	1.84	0.43
1:A:225:MET:CE	1:A:227:LYS:CG	2.94	0.43
1:A:458:ARG:HB2	1:A:468:GLN:HE22	1.83	0.43
1:A:53:LEU:HD11	1:A:501:LEU:HD11	2.00	0.43
1:A:567:ILE:HD11	1:A:650:PHE:CE2	2.53	0.43
1:A:863:ILE:HG22	1:A:876:THR:CB	2.35	0.43
1:A:333:LEU:HD23	1:A:358:ILE:HA	2.01	0.43
1:A:468:GLN:HB2	1:A:523:ASP:HA	2.00	0.43
1:A:542:GLU:HG2	1:A:543:ARG:HG3	2.01	0.43
1:A:562:VAL:HG22	1:A:578:LEU:HD22	1.98	0.43
1:A:555:LYS:HZ1	1:A:582:ASN:ND2	1.89	0.43
1:A:703:LEU:HD13	1:A:723:ALA:CB	2.47	0.43
1:A:460:ASP:CG	1:A:463:LYS:HB3	2.39	0.43
1:A:173:VAL:O	1:A:173:VAL:HG23	2.18	0.43
1:A:471:THR:HG23	1:A:473:GLN:NE2	2.27	0.43
1:A:617:LYS:HG3	1:A:618:GLU:N	2.34	0.43
1:A:676:TYR:HD1	1:A:730:GLN:HG3	1.84	0.43
1:A:90:ASP:C	1:A:107:LEU:HD22	2.39	0.43
1:A:470:GLU:HG2	1:A:471:THR:N	2.34	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:805:ALA:N	1:A:806:MET:CE	2.82	0.43
1:A:182:LEU:HB2	1:A:203:LEU:HD11	1.99	0.42
1:A:370:LEU:HD12	1:A:399:ILE:HG23	2.01	0.42
1:A:500:GLN:HB3	1:A:500:GLN:HE21	1.59	0.42
1:A:679:VAL:CG1	1:A:680:CYS:N	2.82	0.42
1:A:62:ILE:CD1	1:A:73:LEU:HB2	2.46	0.42
1:A:728:GLN:HG3	1:A:753:ARG:NH2	2.34	0.42
1:A:839:ALA:HB1	1:A:841:GLU:O	2.18	0.42
1:A:889:ILE:HG23	1:A:892:HIS:NE2	2.33	0.42
1:A:123:GLU:HB2	1:A:125:ARG:HG2	2.00	0.42
1:A:133:TYR:CB	1:A:136:ILE:HG23	2.49	0.42
1:A:234:THR:CG2	1:A:235:VAL:N	2.82	0.42
1:A:589:GLY:C	1:A:639:LYS:HG2	2.39	0.42
1:A:100:VAL:HG21	1:A:158:TYR:OH	2.19	0.42
1:A:178:PHE:O	1:A:178:PHE:HD1	2.02	0.42
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CE2	3.02	0.42
1:A:186:THR:CG2	1:A:187:ALA:N	2.81	0.42
1:A:224:SER:HA	1:A:289:PHE:CD1	2.54	0.42
1:A:590:VAL:CG1	1:A:591:ASN:N	2.82	0.42
1:A:64:LEU:HD12	1:A:496:MET:HE3	1.98	0.42
1:A:885:GLU:HG3	1:A:886:PHE:N	2.34	0.42
1:A:128:ALA:O	1:A:138:LYS:HG2	2.19	0.42
1:A:169:PHE:CD2	1:A:170:GLY:N	2.84	0.42
1:A:256:LEU:HD12	1:A:297:ILE:HD11	2.02	0.42
1:A:327:VAL:HG11	1:A:358:ILE:HD11	1.97	0.42
1:A:789:ASN:HD22	1:A:790:ILE:N	2.17	0.42
1:A:216:VAL:CG1	1:A:217:PHE:N	2.82	0.42
1:A:274:VAL:HG23	1:A:275:TYR:N	2.30	0.42
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:HE	1.79	0.42
1:A:62:ILE:CD1	1:A:501:LEU:HD13	2.49	0.42
1:A:563:HIS:HB2	1:A:577:VAL:HG13	2.01	0.42
1:A:117:LEU:HG	1:A:126:LEU:HD11	2.01	0.42
1:A:333:LEU:HD23	1:A:358:ILE:HG13	2.00	0.42
1:A:865:VAL:CG1	1:A:866:THR:N	2.82	0.42
1:A:387:VAL:CG1	1:A:388:LYS:N	2.82	0.42
1:A:55:VAL:HG22	1:A:62:ILE:HG22	2.00	0.42
1:A:562:VAL:HG22	1:A:578:LEU:HD23	1.99	0.42
1:A:605:ILE:O	1:A:608:GLN:HG2	2.20	0.42
1:A:711:VAL:HB	1:A:800:LEU:HD23	2.02	0.42
1:A:62:ILE:CD1	1:A:64:LEU:HD21	2.46	0.42
1:A:68:ASN:CB	1:A:86:GLY:HA3	2.50	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:706:VAL:CG2	1:A:707:ASP:N	2.83	0.42
1:A:332:ASP:O	1:A:333:LEU:HD23	2.18	0.42
1:A:543:ARG:HB2	1:A:549:ARG:NH1	2.34	0.42
1:A:555:LYS:O	1:A:582:ASN:OD1	2.38	0.42
1:A:631:VAL:HG13	1:A:631:VAL:O	2.19	0.42
1:A:783:VAL:CG1	1:A:784:TRP:N	2.83	0.42
1:A:321:LEU:HD23	1:A:333:LEU:CD1	2.50	0.42
1:A:480:VAL:HB	1:A:484:MET:HE2	2.02	0.42
1:A:567:ILE:CD1	1:A:567:ILE:N	2.82	0.42
1:A:597:LEU:CD2	1:A:597:LEU:N	2.83	0.42
1:A:111:ASN:O	1:A:132:LEU:HD13	2.20	0.41
1:A:471:THR:HG21	1:A:473:GLN:OE1	2.19	0.41
1:A:528:TRP:CZ2	1:A:533:ASN:OD1	2.73	0.41
1:A:67:VAL:CG1	1:A:111:ASN:HB3	2.50	0.41
1:A:778:VAL:HG12	1:A:779:GLU:O	2.20	0.41
1:A:889:ILE:CD1	1:A:907:TYR:CZ	3.01	0.41
1:A:119:ILE:HG21	1:A:121:TYR:CE1	2.54	0.41
1:A:403:PHE:CE2	1:A:405:GLY:HA2	2.55	0.41
1:A:527:GLY:HA3	1:A:550:PHE:HZ	1.72	0.41
1:A:53:LEU:CG	1:A:64:LEU:CD1	2.96	0.41
1:A:773:ILE:N	1:A:773:ILE:CD1	2.82	0.41
1:A:862:ILE:HG21	1:A:877:ILE:HG12	2.03	0.41
1:A:904:VAL:CG1	1:A:905:ASP:N	2.82	0.41
1:A:112:ASN:ND2	1:A:133:TYR:HE2	2.17	0.41
1:A:188:VAL:O	1:A:188:VAL:HG22	2.21	0.41
1:A:280:VAL:CG1	1:A:281:ARG:N	2.83	0.41
1:A:926:ALA:HB2	1:A:949:TYR:CD1	2.55	0.41
1:A:137:CYS:SG	1:A:159:LEU:CD1	3.09	0.41
1:A:159:LEU:HG	1:A:201:ARG:NH1	2.35	0.41
1:A:380:LEU:CB	1:A:386:LYS:CE	2.95	0.41
1:A:412:LEU:CD1	1:A:412:LEU:N	2.83	0.41
1:A:541:CYS:HB2	1:A:544:SER:HB3	2.01	0.41
1:A:555:LYS:NZ	1:A:556:GLN:HG2	2.34	0.41
1:A:920:ALA:C	1:A:922:PRO:HD2	2.40	0.41
1:A:177:ASN:O	1:A:178:PHE:CG	2.73	0.41
1:A:44:GLY:O	1:A:47:ALA:HA	2.20	0.41
1:A:72:LYS:CD	1:A:80:LEU:CD1	2.97	0.41
1:A:817:ASP:OD1	1:A:820:PHE:CD2	2.73	0.41
1:A:888:ASP:OD1	1:A:889:ILE:HG13	2.20	0.41
1:A:95:TYR:CG	1:A:96:PRO:CD	3.03	0.41
1:A:307:ARG:HA	1:A:307:ARG:HD3	1.88	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:843:ARG:CZ	1:A:843:ARG:CB	2.99	0.41
1:A:225:MET:HE1	1:A:227:LYS:CG	2.47	0.41
1:A:457:ILE:CG1	1:A:467:LEU:HD13	2.50	0.41
1:A:901:SER:HA	1:A:902:PRO:HD2	1.89	0.41
1:A:242:TYR:CE1	1:A:345:LYS:HE2	2.56	0.41
1:A:453:LYS:CE	1:A:472:VAL:HG22	2.51	0.41
1:A:662:LEU:O	1:A:666:GLU:HB3	2.20	0.41
1:A:747:GLN:HG3	1:A:766:TYR:HD1	1.86	0.41
1:A:943:ARG:CZ	1:A:943:ARG:HB2	2.51	0.41
1:A:137:CYS:O	1:A:150:GLU:HG3	2.20	0.41
1:A:239:PHE:CD1	1:A:260:PRO:CD	3.03	0.41
1:A:480:VAL:HB	1:A:484:MET:HE1	1.97	0.41
1:A:548:ARG:HG3	1:A:584:PRO:N	2.22	0.41
1:A:435:ILE:HD12	1:A:486:PHE:CE1	2.56	0.41
1:A:667:SER:HB3	1:A:668:PRO:CD	2.51	0.41
1:A:845:LEU:HD11	1:A:852:SER:OG	2.20	0.41
1:A:313:TYR:CZ	1:A:435:ILE:CD1	3.04	0.41
1:A:469:TYR:CZ	1:A:470:GLU:O	2.74	0.41
1:A:473:GLN:HE21	1:A:473:GLN:HB2	1.55	0.41
1:A:658:HIS:ND1	1:A:663:SER:HB3	2.36	0.41
1:A:681:THR:OG1	1:A:686:THR:HG21	2.21	0.41
1:A:710:LEU:HD12	1:A:710:LEU:C	2.40	0.41
1:A:236:ILE:CG2	1:A:239:PHE:HB2	2.51	0.40
1:A:256:LEU:CB	1:A:309:LEU:CD2	2.94	0.40
1:A:488:LYS:CG	1:A:489:ASP:N	2.84	0.40
1:A:62:ILE:HD13	1:A:77:LEU:HD23	2.02	0.40
1:A:630:HIS:CD2	1:A:632:VAL:CG2	3.00	0.40
1:A:560:LEU:CG	1:A:648:THR:CG2	2.98	0.40
1:A:560:LEU:HB3	1:A:648:THR:CG2	2.51	0.40
1:A:115:LYS:HB3	1:A:168:VAL:CG1	2.47	0.40
1:A:185:ALA:HB3	1:A:243:TYR:CD2	2.56	0.40
1:A:226:ILE:HD11	1:A:385:LEU:HD23	2.02	0.40
1:A:566:ASN:CA	1:A:651:VAL:CG2	2.95	0.40
1:A:563:HIS:CB	1:A:577:VAL:CG1	2.95	0.40
1:A:897:GLY:H	1:A:924:GLN:HE22	1.69	0.40
1:A:349:LEU:N	1:A:349:LEU:CD2	2.84	0.40
1:A:380:LEU:HD22	1:A:412:LEU:HB3	2.02	0.40
1:A:632:VAL:HG12	1:A:633:GLN:N	2.37	0.40
1:A:252:PHE:HE1	1:A:283:CYS:SG	2.45	0.40
1:A:45:GLU:CB	1:A:46:PRO:CD	3.00	0.40
1:A:492:GLN:CG	1:A:503:ARG:HD2	2.51	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:875:VAL:HG23	1:A:875:VAL:O	2.22	0.40
1:A:853:LYS:HG2	1:A:940:PHE:HZ	1.87	0.40
1:A:95:TYR:CE2	1:A:194:TYR:CD1	3.09	0.40

All (13) 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:233:PHE:O	1:A:234:THR:OG1[8_665]	1.24	0.96
1:A:83:HIS:CE1	1:A:731:SER:OG[4_455]	1.63	0.57
1:A:148:LEU:O	1:A:728:GLN:NE2[4_455]	1.65	0.55
1:A:146:PHE:CE1	1:A:730:GLN:OE1[4_455]	1.79	0.41
1:A:234:THR:CA	1:A:234:THR:CA[8_665]	1.89	0.31
1:A:149:GLY:CA	1:A:728:GLN:OE1[4_455]	1.91	0.29
1:A:155:LYS:NZ	1:A:220:GLU:CB[8_665]	1.94	0.26
1:A:96:PRO:CG	1:A:221:PHE:CE1[8_665]	2.03	0.17
1:A:155:LYS:NZ	1:A:220:GLU:C[8_665]	2.03	0.17
1:A:141:ARG:NH2	1:A:691:GLU:OE2[4_455]	2.05	0.15
1:A:146:PHE:CE1	1:A:730:GLN:NE2[4_455]	2.05	0.15
1:A:146:PHE:CD1	1:A:730:GLN:CD[4_455]	2.16	0.04
1:A:234:THR:O	1:A:234:THR:O[8_665]	2.17	0.03

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	911/1207 (76%)	843 (92%)	46 (5%)	22 (2%)	7 47

All (22) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	96	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	181	LYS
1	A	191	LYS
1	A	410	ALA
1	A	465	ASN
1	A	506	VAL
1	A	557	CYS
1	A	700	CYS
1	A	701	PRO
1	A	803	CYS
1	A	804	GLY
1	A	864	PRO
1	A	87	PRO
1	A	507	GLU
1	A	271	LYS
1	A	474	VAL
1	A	849	GLY
1	A	263	VAL
1	A	344	ARG
1	A	933	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	812/1067 (76%)	789 (97%)	23 (3%)	51 78

All (23) 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	412	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	435	ILE
1	A	468	GLN
1	A	473	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	670	ARG
1	A	743	GLN
1	A	773	ILE
1	A	797	LYS
1	A	806	MET
1	A	853	LYS
1	A	854	CYS
1	A	892	HIS

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (29) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	51	ASN
1	A	101	GLN
1	A	157	HIS
1	A	163	ASN
1	A	273	GLN
1	A	361	GLN
1	A	409	ASN
1	A	441	ASN
1	A	442	HIS
1	A	473	GLN
1	A	500	GLN
1	A	533	ASN
1	A	582	ASN
1	A	626	ASN
1	A	629	HIS
1	A	630	HIS
1	A	672	HIS
1	A	678	HIS
1	A	685	ASN
1	A	690	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	702	GLN
1	A	728	GLN
1	A	747	GLN
1	A	789	ASN
1	A	792	ASN
1	A	826	GLN
1	A	836	HIS
1	A	881	ASN
1	A	892	HIS

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	A	3

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	653:TYR	C	654:ASN	N	2.02
1	A	557:CYS	C	558:VAL	N	1.73
1	A	700:CYS	C	701:PRO	N	1.09

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	915/1207 (75%)	4.00	532 (58%) 0 3	145, 231, 394, 394	0

All (532) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	859	ILE	30.0
1	A	860	THR	27.5
1	A	861	GLU	27.2
1	A	862	ILE	25.4
1	A	919	GLU	21.9
1	A	922	PRO	20.0
1	A	923	SER	19.9
1	A	924	GLN	19.3
1	A	918	GLY	19.3
1	A	898	VAL	19.2
1	A	920	ALA	19.1
1	A	945	SER	19.0
1	A	946	GLN	18.7
1	A	864	PRO	17.9
1	A	944	SER	17.1
1	A	897	GLY	17.1
1	A	927	GLY	16.7
1	A	620	PRO	16.7
1	A	921	LYS	16.1
1	A	878	ARG	15.9
1	A	865	VAL	15.7
1	A	858	ARG	15.5
1	A	888	ASP	15.5
1	A	623	ILE	15.4
1	A	876	THR	15.4
1	A	926	ALA	15.2
1	A	870	GLU	15.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	947	LEU	14.8
1	A	879	GLY	14.7
1	A	863	ILE	14.7
1	A	899	GLU	14.7
1	A	885	GLU	14.6
1	A	948	TYR	14.5
1	A	619	VAL	14.3
1	A	622	ILE	14.3
1	A	925	HIS	14.2
1	A	871	GLY	14.1
1	A	877	ILE	14.0
1	A	872	GLY	13.9
1	A	585	GLU	13.8
1	A	866	THR	13.7
1	A	892	HIS	13.6
1	A	943	ARG	13.6
1	A	896	ALA	13.5
1	A	931	ILE	13.5
1	A	646	ALA	13.4
1	A	883	GLY	13.2
1	A	895	VAL	13.0
1	A	913	ILE	12.9
1	A	584	PRO	12.7
1	A	868	PRO	12.7
1	A	917	MET	12.6
1	A	869	ARG	12.5
1	A	621	ARG	12.3
1	A	886	PHE	12.1
1	A	873	THR	12.1
1	A	950	PHE	12.0
1	A	890	ALA	12.0
1	A	929	VAL	12.0
1	A	949	TYR	12.0
1	A	887	ARG	12.0
1	A	561	THR	11.9
1	A	942	ALA	11.9
1	A	891	SER	11.6
1	A	889	ILE	11.6
1	A	618	GLU	11.6
1	A	912	GLN	11.5
1	A	874	LYS	11.5
1	A	587	SER	11.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	867	GLY	11.4
1	A	894	LYS	11.4
1	A	901	SER	11.3
1	A	857	PRO	11.3
1	A	882	LEU	11.2
1	A	951	MET	11.2
1	A	933	VAL	11.2
1	A	930	GLU	11.1
1	A	560	LEU	11.1
1	A	902	PRO	11.0
1	A	893	VAL	10.9
1	A	916	GLU	10.8
1	A	875	VAL	10.7
1	A	598	SER	10.6
1	A	900	CYS	10.5
1	A	473	GLN	10.5
1	A	624	THR	10.2
1	A	645	PHE	10.2
1	A	628	ASP	10.1
1	A	884	LEU	10.1
1	A	904	VAL	9.9
1	A	652	PHE	9.9
1	A	915	CYS	9.6
1	A	578	LEU	9.5
1	A	932	CYS	9.5
1	A	586	LEU	9.5
1	A	909	PRO	9.3
1	A	577	VAL	9.3
1	A	576	LEU	9.2
1	A	853	LYS	9.2
1	A	597	LEU	9.2
1	A	589	GLY	9.1
1	A	636	LEU	9.1
1	A	928	PHE	9.1
1	A	594	PHE	9.0
1	A	592	CYS	9.0
1	A	767	SER	9.0
1	A	644	THR	8.9
1	A	635	GLN	8.9
1	A	579	GLU	8.9
1	A	914	VAL	8.9
1	A	647	SER	8.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	613	SER	8.7
1	A	907	TYR	8.6
1	A	934	ALA	8.6
1	A	569	VAL	8.6
1	A	588	ALA	8.6
1	A	903	LEU	8.6
1	A	609	ILE	8.5
1	A	607	ASN	8.5
1	A	626	ASN	8.5
1	A	815	LYS	8.5
1	A	604	VAL	8.5
1	A	614	PRO	8.4
1	A	562	VAL	8.4
1	A	524	PRO	8.3
1	A	880	GLU	8.2
1	A	446	PHE	8.2
1	A	567	ILE	8.2
1	A	595	GLU	8.1
1	A	590	VAL	8.1
1	A	64	LEU	8.1
1	A	558	VAL	8.0
1	A	548	ARG	8.0
1	A	634	LEU	8.0
1	A	627	GLY	8.0
1	A	563	HIS	7.9
1	A	608	GLN	7.9
1	A	269	THR	7.8
1	A	852	SER	7.8
1	A	270	THR	7.8
1	A	908	ILE	7.7
1	A	650	PHE	7.7
1	A	471	THR	7.7
1	A	596	ASP	7.7
1	A	629	HIS	7.6
1	A	648	THR	7.6
1	A	53	LEU	7.6
1	A	583	VAL	7.6
1	A	610	GLN	7.6
1	A	564	PRO	7.5
1	A	606	GLY	7.5
1	A	271	LYS	7.5
1	A	905	ASP	7.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	766	TYR	7.4
1	A	881	ASN	7.4
1	A	612	TYR	7.4
1	A	640	GLU	7.3
1	A	593	THR	7.3
1	A	580	THR	7.3
1	A	571	GLN	7.3
1	A	424	PHE	7.2
1	A	632	VAL	7.2
1	A	911	GLU	7.1
1	A	630	HIS	7.1
1	A	486	PHE	7.0
1	A	625	GLU	6.9
1	A	547	PRO	6.9
1	A	436	ALA	6.9
1	A	659	ASN	6.9
1	A	431	MET	6.9
1	A	474	VAL	6.9
1	A	611	CYS	6.8
1	A	672	HIS	6.7
1	A	506	VAL	6.6
1	A	437	TYR	6.6
1	A	637	LYS	6.5
1	A	150	GLU	6.5
1	A	311	ALA	6.5
1	A	631	VAL	6.5
1	A	170	GLY	6.4
1	A	435	ILE	6.4
1	A	525	HIS	6.4
1	A	507	GLU	6.4
1	A	910	ALA	6.4
1	A	546	GLU	6.4
1	A	505	PRO	6.3
1	A	354	LEU	6.3
1	A	568	SER	6.3
1	A	906	GLY	6.2
1	A	495	ILE	6.2
1	A	566	ASN	6.2
1	A	603	LEU	6.2
1	A	935	VAL	6.1
1	A	523	ASP	6.1
1	A	649	SER	6.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	423	VAL	6.1
1	A	591	ASN	6.0
1	A	485	ALA	6.0
1	A	941	MET	6.0
1	A	654	ASN	6.0
1	A	854	CYS	6.0
1	A	617	LYS	5.9
1	A	71	TYR	5.9
1	A	616	ALA	5.9
1	A	151	PRO	5.9
1	A	244	VAL	5.9
1	A	599	GLU	5.9
1	A	713	VAL	5.8
1	A	39	PHE	5.8
1	A	310	GLN	5.8
1	A	337	VAL	5.7
1	A	653	TYR	5.7
1	A	549	ARG	5.7
1	A	695	LYS	5.7
1	A	775	ASN	5.7
1	A	447	VAL	5.6
1	A	816	ALA	5.6
1	A	575	LEU	5.6
1	A	678	HIS	5.6
1	A	727	PRO	5.6
1	A	600	MET	5.6
1	A	433	SER	5.6
1	A	54	VAL	5.5
1	A	268	SER	5.5
1	A	605	ILE	5.5
1	A	445	ALA	5.5
1	A	476	ASP	5.4
1	A	300	GLU	5.4
1	A	444	LEU	5.4
1	A	239	PHE	5.3
1	A	836	HIS	5.3
1	A	42	PHE	5.3
1	A	454	LEU	5.3
1	A	712	PRO	5.2
1	A	790	ILE	5.2
1	A	615	ALA	5.2
1	A	522	GLY	5.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	508	SER	5.2
1	A	38	SER	5.2
1	A	299	CYS	5.2
1	A	552	SER	5.1
1	A	207	SER	5.1
1	A	425	THR	5.1
1	A	669	TYR	5.1
1	A	721	LEU	5.1
1	A	484	MET	5.1
1	A	738	CYS	5.1
1	A	565	ASN	5.1
1	A	336	THR	5.1
1	A	574	VAL	5.1
1	A	638	SER	5.0
1	A	781	THR	5.0
1	A	719	ILE	5.0
1	A	309	LEU	5.0
1	A	422	PRO	5.0
1	A	711	VAL	5.0
1	A	668	PRO	5.0
1	A	782	VAL	4.9
1	A	633	GLN	4.9
1	A	477	SER	4.9
1	A	651	VAL	4.8
1	A	439	TYR	4.8
1	A	472	VAL	4.8
1	A	458	ARG	4.8
1	A	811	GLY	4.8
1	A	759	VAL	4.8
1	A	149	GLY	4.8
1	A	301	ARG	4.8
1	A	353	ALA	4.8
1	A	670	ARG	4.8
1	A	582	ASN	4.8
1	A	442	HIS	4.7
1	A	448	GLY	4.7
1	A	531	LEU	4.7
1	A	45	GLU	4.7
1	A	312	ALA	4.7
1	A	545	ARG	4.7
1	A	355	CYS	4.7
1	A	63	TYR	4.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	570	SER	4.6
1	A	521	SER	4.6
1	A	812	LEU	4.6
1	A	747	GLN	4.6
1	A	789	ASN	4.6
1	A	538	LYS	4.5
1	A	537	ARG	4.5
1	A	153	HIS	4.5
1	A	559	ARG	4.5
1	A	715	VAL	4.5
1	A	434	VAL	4.5
1	A	455	LYS	4.5
1	A	456	LYS	4.4
1	A	504	VAL	4.4
1	A	936	CYS	4.4
1	A	138	LYS	4.4
1	A	266	PRO	4.4
1	A	501	LEU	4.3
1	A	496	MET	4.3
1	A	722	LYS	4.3
1	A	245	TYR	4.3
1	A	530	VAL	4.2
1	A	526	CYS	4.2
1	A	482	ARG	4.2
1	A	183	PHE	4.2
1	A	65	GLY	4.2
1	A	494	TYR	4.2
1	A	432	THR	4.1
1	A	37	PRO	4.1
1	A	602	GLY	4.1
1	A	753	ARG	4.1
1	A	682	HIS	4.1
1	A	267	GLY	4.1
1	A	440	LYS	4.1
1	A	513	ARG	4.0
1	A	556	GLN	4.0
1	A	660	SER	4.0
1	A	50	PHE	4.0
1	A	709	ILE	4.0
1	A	780	LEU	4.0
1	A	800	LEU	4.0
1	A	551	ALA	4.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	720	THR	4.0
1	A	557	CYS	4.0
1	A	550	PHE	3.9
1	A	475	VAL	3.9
1	A	533	ASN	3.9
1	A	453	LYS	3.9
1	A	807	ARG	3.9
1	A	776	LEU	3.8
1	A	493	LEU	3.8
1	A	166	GLY	3.8
1	A	806	MET	3.8
1	A	752	LEU	3.8
1	A	573	ASN	3.8
1	A	791	ASP	3.7
1	A	856	ASN	3.7
1	A	168	VAL	3.7
1	A	814	LEU	3.7
1	A	658	HIS	3.7
1	A	701	PRO	3.6
1	A	483	ASP	3.6
1	A	137	CYS	3.6
1	A	511	GLN	3.6
1	A	465	ASN	3.6
1	A	536	THR	3.6
1	A	139	LEU	3.6
1	A	764	THR	3.5
1	A	246	GLY	3.5
1	A	694	VAL	3.5
1	A	335	PHE	3.5
1	A	543	ARG	3.5
1	A	305	GLU	3.5
1	A	152	PHE	3.5
1	A	801	TYR	3.5
1	A	761	CYS	3.5
1	A	765	SER	3.5
1	A	405	GLY	3.5
1	A	803	CYS	3.5
1	A	449	THR	3.5
1	A	272	GLU	3.5
1	A	581	TYR	3.4
1	A	304	VAL	3.4
1	A	710	LEU	3.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	601	ASP	3.4
1	A	514	SER	3.4
1	A	544	SER	3.4
1	A	774	ASN	3.4
1	A	43	ARG	3.4
1	A	443	SER	3.4
1	A	384	TRP	3.4
1	A	723	ALA	3.4
1	A	70	ILE	3.4
1	A	532	HIS	3.4
1	A	540	ARG	3.4
1	A	52	HIS	3.3
1	A	714	GLU	3.3
1	A	748	ARG	3.3
1	A	728	GLN	3.3
1	A	298	GLY	3.3
1	A	539	GLU	3.3
1	A	468	GLN	3.3
1	A	768	TYR	3.3
1	A	228	ILE	3.3
1	A	737	GLU	3.3
1	A	855	THR	3.3
1	A	480	VAL	3.2
1	A	534	THR	3.2
1	A	729	PRO	3.2
1	A	739	ILE	3.2
1	A	51	ASN	3.2
1	A	409	ASN	3.2
1	A	184	ILE	3.1
1	A	683	ASP	3.1
1	A	352	SER	3.1
1	A	749	VAL	3.1
1	A	55	VAL	3.1
1	A	736	TYR	3.1
1	A	740	LEU	3.1
1	A	808	GLU	3.1
1	A	169	PHE	3.1
1	A	798	VAL	3.1
1	A	256	LEU	3.1
1	A	348	SER	3.1
1	A	469	TYR	3.0
1	A	572	TYR	3.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	345	LYS	3.0
1	A	671	CYS	3.0
1	A	460	ASP	3.0
1	A	190	GLY	3.0
1	A	656	SER	3.0
1	A	213	PHE	3.0
1	A	639	LYS	3.0
1	A	940	PHE	3.0
1	A	459	VAL	3.0
1	A	429	ASP	3.0
1	A	528	TRP	3.0
1	A	100	VAL	3.0
1	A	407	ASP	3.0
1	A	657	VAL	3.0
1	A	675	LYS	3.0
1	A	126	LEU	3.0
1	A	717	LYS	3.0
1	A	470	GLU	2.9
1	A	813	CYS	2.9
1	A	204	THR	2.9
1	A	527	GLY	2.9
1	A	515	CYS	2.9
1	A	751	ALA	2.9
1	A	41	THR	2.9
1	A	667	SER	2.9
1	A	673	TRP	2.9
1	A	679	VAL	2.9
1	A	338	PHE	2.9
1	A	210	ASP	2.8
1	A	502	THR	2.8
1	A	802	LYS	2.8
1	A	643	MET	2.8
1	A	412	LEU	2.8
1	A	306	TYR	2.8
1	A	553	GLU	2.8
1	A	481	LEU	2.7
1	A	317	ALA	2.7
1	A	209	ALA	2.7
1	A	512	TYR	2.7
1	A	127	ILE	2.7
1	A	171	VAL	2.7
1	A	457	ILE	2.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	117	LEU	2.6
1	A	804	GLY	2.6
1	A	847	LEU	2.6
1	A	463	LYS	2.6
1	A	542	GLU	2.6
1	A	708	LYS	2.6
1	A	403	PHE	2.6
1	A	529	CYS	2.6
1	A	661	CYS	2.6
1	A	681	THR	2.5
1	A	704	LEU	2.5
1	A	754	PHE	2.5
1	A	99	ILE	2.5
1	A	261	GLU	2.5
1	A	408	MET	2.5
1	A	140	LEU	2.5
1	A	406	LEU	2.5
1	A	497	SER	2.5
1	A	517	GLU	2.5
1	A	62	ILE	2.5
1	A	516	GLY	2.5
1	A	693	ARG	2.5
1	A	410	ALA	2.5
1	A	702	GLN	2.5
1	A	212	MET	2.4
1	A	451	SER	2.4
1	A	128	ALA	2.4
1	A	655	CYS	2.4
1	A	334	LEU	2.4
1	A	684	PRO	2.4
1	A	760	GLN	2.4
1	A	342	GLN	2.4
1	A	725	ASN	2.4
1	A	733	GLN	2.4
1	A	817	ASP	2.4
1	A	430	ARG	2.4
1	A	203	LEU	2.4
1	A	500	GLN	2.4
1	A	185	ALA	2.3
1	A	703	LEU	2.3
1	A	535	CYS	2.3
1	A	762	GLN	2.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	555	LYS	2.3
1	A	726	LEU	2.3
1	A	718	PRO	2.3
1	A	784	TRP	2.3
1	A	262	MET	2.3
1	A	773	ILE	2.3
1	A	779	GLU	2.3
1	A	676	TYR	2.2
1	A	255	PHE	2.2
1	A	777	PRO	2.2
1	A	758	SER	2.2
1	A	297	ILE	2.2
1	A	554	MET	2.2
1	A	805	ALA	2.2
1	A	503	ARG	2.2
1	A	174	SER	2.2
1	A	192	PRO	2.2
1	A	438	VAL	2.2
1	A	279	LEU	2.2
1	A	292	TYR	2.2
1	A	787	HIS	2.2
1	A	541	CYS	2.1
1	A	177	ASN	2.1
1	A	466	ALA	2.1
1	A	277	SER	2.1
1	A	159	LEU	2.1
1	A	165	SER	2.1
1	A	809	SER	2.1
1	A	680	CYS	2.1
1	A	273	GLN	2.1
1	A	641	THR	2.1
1	A	265	PRO	2.1
1	A	799	TYR	2.1
1	A	44	GLY	2.0
1	A	366	ILE	2.0
1	A	356	ILE	2.0
1	A	208	GLU	2.0
1	A	467	LEU	2.0
1	A	462	PRO	2.0
1	A	220	GLU	2.0
1	A	666	GLU	2.0
1	A	167	SER	2.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	49	GLY	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.