



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Feb 1, 2016 – 12:48 PM GMT

PDB ID : 3S5K
Title : Crystal structures of falcilysin, a M16 metalloprotease from the malaria parasite *Plasmodium falciparum*
Authors : Morgunova, E.; Ponpuak, M.; Istvan, E.; Popov, A.; Goldberg, D.; Eneqvist, T.
Deposited on : 2011-05-23
Resolution : 3.20 Å(reported)

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

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

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

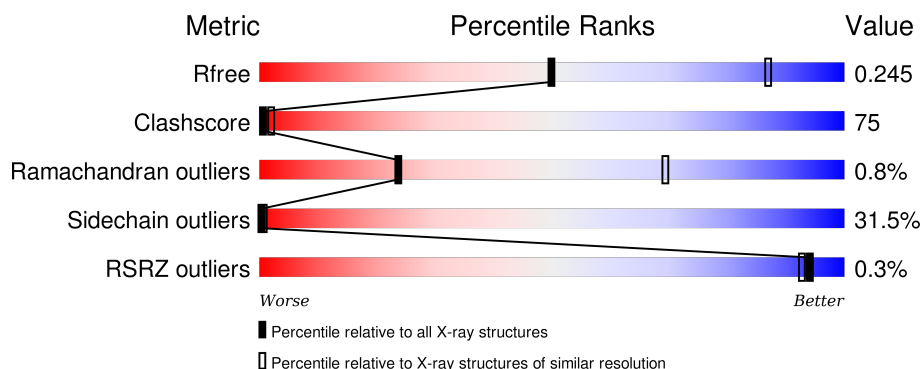
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.20 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	1124 (3.24-3.16)
Clashscore	102246	1024 (3.22-3.18)
Ramachandran outliers	100387	1004 (3.22-3.18)
Sidechain outliers	100360	1003 (3.22-3.18)
RSRZ outliers	91569	1129 (3.24-3.16)

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	1193	<div> <div></div> <div>20%</div> <div>44%</div> <div>23%</div> <div>•</div> <div>12%</div> </div>

2 Entry composition

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 8741 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 Falcilysin.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	1053	Total	C	N	O	S	0	0	0
			8674	5577	1418	1653	26			

- Molecule 2 is ZINC ION (three-letter code: ZN) (formula: Zn).

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

- Molecule 3 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	A	66	Total	O	0	0
			66	66		

K1151	L1085	G1019	S956	N894	C826	Y758
F1152	R1086	E1020	Y957	T895	N827	L759
A1153	K1087	Y1021	F958	L896	D828	N760
D1154	M1088	L1022	E959	K397		F761
L1155		D1023	E960	L898		F762
L1156	T1091	P1024	N961	L899	I832	K763
E1157	M1092	S1025	D962	E900	A833	T764
S1158	T1093	F1026	K963	Q901	L834	L765
K1159	E1094	T1027	Y964	L902	E835	L766
V1160	N1095	V1028	N965	E903	A836	L767
N1161	D1096	I1029	ASN	L904	V837	E768
E1162	L1097	V1030	ASP	L905	K838	N769
F1163	L1098	A1031	MET	E906	E839	K770
E1164	R1099	A1032	GLN	N907	S840	T771
K1165	Y1100	L1033	ASN	D908	D841	
	I1101	K1034	VAL	F909	F842	R774
	I1102	N1035	LVS	K910	S843	S775
I1168	N1103	S1036	ASN	T911		S776
I1169	T1104	Y1037	ASP	L912	K846	
T1170	F1105	L1038	PRQ	N915	K347	F779
T1171	G1106	W1039	THR	L916	V848	V780
K1172	T1107	D1040	VAL	N917	I849	I781
K1173	I1108	T1041	MET	G918	D850	L782
E1174	D1109	V1042	G979	R918	I851	R783
K1175	K1110	R1043	N980	L919	L852	
A1176	P1111	A1045	N981	R920	K853	N786
E1177	R1112	G1047		N921	R854	L787
Y1179	R1113	Y1048	Y984	K922	K855	G788
I1180	G1114	A1049	K985	L923	I856	S789
A1181	I1115	G1050	S986	F924	N857	N790
N1182	E1116	V1051	K987	N925	G858	S791
V1183	L1117	F1052	K988	K926	N859	A792
D1184	S1118	A1053	L989	K927	K860	
G1185	K1119	D1054	F990	N928	T861	Y797
E1186	L1120	I1055	D991	L929	T862	S798
F1187	S1121	E1056	E992	R930	F863	K799
K1188	F1122	Y1057	E993		S864	D800
K1189		D1058	K994	V933	E865	D801
V1190	I1126	G1059	Y995	T934	Y868	H802
L1191	S1127	S1060	K996	S935	L803	L803
I1192	M1128	Y1061	K997	D936	A869	N804
		V1062	E998	Y937	I870	V805
Q1132		F1063	F999	G938	L871	T806
D1133	R1134	L1064	A1066	L940	M872	D807
		S1065	V1001	L941	K873	K808
F1137		A1066	L1002	R942	Y874	Y809
R1138		R1067	P1003	L943	V875	N810
K1139		D1068	T1004	F944	K876	A811
R1140		P1069	F1005	N945		Q812
L1141		N1070	V1006	Y946		A813
M1142		L1071	M1007		K882	L814
N1143		E1072		S947	A895	F815
T1144		K1073		N948	H886	N816
K1145		T1077		E949	N887	L817
K1146		F1078		S950	I888	E818
E1147		R1079	I1014	L951	N889	N819
D1148			L1015	K952	Y890	H820
			F1016	N953	V876	V821
F1149			K1017	L954	G891	H821
Y1150			P1018	V955	Y892	S822

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 21 21 21	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	93.78Å 105.29Å 114.76Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	42.83 – 3.20 42.83 – 2.84	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.9 (42.83-3.20) 95.4 (42.83-2.84)	Depositor EDS
R_{merge}	0.26	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	1.24 (at 2.86Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX (PHENIX.REFINE: 1.6_289)	Depositor
R, R_{free}	0.210 , 0.316 0.220 , 0.245	Depositor DCC
R_{free} test set	800 reflections (4.32%)	DCC
Wilson B-factor (Å ²)	50.1	Xtriage
Anisotropy	0.258	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.36 , 78.6	EDS
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.42$, $\langle L^2 \rangle = 0.24$	Xtriage
Outliers	0 of 26160 reflections	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.89	EDS
Total number of atoms	8741	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	36.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.34% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

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	1.79	58/8849 (0.7%)	1.11	36/11918 (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	1

All (58) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	438	CYS	CB-SG	-10.15	1.65	1.82
1	A	826	CYS	CB-SG	-7.60	1.69	1.82
1	A	818	GLU	CG-CD	-7.31	1.41	1.51
1	A	188	TYR	CE1-CZ	-6.19	1.30	1.38
1	A	821	VAL	CA-CB	-6.18	1.41	1.54
1	A	188	TYR	CE2-CZ	-6.10	1.30	1.38
1	A	340	TYR	CE2-CZ	-6.06	1.30	1.38
1	A	502	ALA	CA-CB	-5.98	1.39	1.52
1	A	188	TYR	CD2-CE2	-5.97	1.30	1.39
1	A	564	TYR	CD2-CE2	-5.93	1.30	1.39
1	A	207	GLU	CD-OE1	-5.89	1.19	1.25
1	A	797	TYR	CD1-CE1	-5.89	1.30	1.39
1	A	1057	TYR	CD2-CE2	-5.88	1.30	1.39
1	A	71	TYR	CE2-CZ	-5.86	1.30	1.38
1	A	741	TYR	CD2-CE2	-5.80	1.30	1.39
1	A	241	TYR	CE2-CZ	-5.78	1.31	1.38
1	A	1057	TYR	CE2-CZ	-5.75	1.31	1.38
1	A	241	TYR	CD2-CE2	-5.74	1.30	1.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	809	TYR	CE1-CZ	-5.71	1.31	1.38
1	A	1021	TYR	CD1-CE1	-5.70	1.30	1.39
1	A	818	GLU	CB-CG	-5.62	1.41	1.52
1	A	71	TYR	CD2-CE2	-5.56	1.31	1.39
1	A	181	PHE	CD1-CE1	-5.54	1.28	1.39
1	A	343	TYR	CE2-CZ	-5.53	1.31	1.38
1	A	1026	PHE	CD2-CE2	-5.52	1.28	1.39
1	A	1057	TYR	CE1-CZ	-5.52	1.31	1.38
1	A	1153	ALA	CA-CB	-5.49	1.41	1.52
1	A	321	TYR	CE2-CZ	-5.48	1.31	1.38
1	A	182	PHE	CD1-CE1	-5.41	1.28	1.39
1	A	181	PHE	CD2-CE2	-5.35	1.28	1.39
1	A	262	TYR	CD2-CE2	-5.33	1.31	1.39
1	A	1163	PHE	CD1-CE1	-5.31	1.28	1.39
1	A	564	TYR	CE2-CZ	-5.30	1.31	1.38
1	A	1021	TYR	CE1-CZ	-5.26	1.31	1.38
1	A	1057	TYR	CD1-CE1	-5.26	1.31	1.39
1	A	1021	TYR	CD2-CE2	-5.25	1.31	1.39
1	A	171	TYR	CD1-CE1	-5.23	1.31	1.39
1	A	732	TYR	CD1-CE1	-5.23	1.31	1.39
1	A	321	TYR	CD1-CE1	-5.21	1.31	1.39
1	A	1037	TYR	CD1-CE1	-5.20	1.31	1.39
1	A	340	TYR	CD2-CE2	-5.19	1.31	1.39
1	A	944	PHE	CD1-CE1	-5.16	1.28	1.39
1	A	944	PHE	CD2-CE2	-5.15	1.28	1.39
1	A	661	PHE	CE2-CZ	-5.13	1.27	1.37
1	A	741	TYR	CE2-CZ	-5.12	1.31	1.38
1	A	144	TYR	CE1-CZ	-5.11	1.31	1.38
1	A	114	ALA	CA-CB	-5.11	1.41	1.52
1	A	182	PHE	CD2-CE2	-5.08	1.29	1.39
1	A	321	TYR	CD2-CE2	-5.08	1.31	1.39
1	A	1000	PHE	CD1-CE1	-5.07	1.29	1.39
1	A	1078	PHE	CD2-CE2	-5.06	1.29	1.39
1	A	1150	TYR	CE1-CZ	-5.05	1.31	1.38
1	A	321	TYR	CE1-CZ	-5.04	1.31	1.38
1	A	188	TYR	CD1-CE1	-5.04	1.31	1.39
1	A	241	TYR	CD1-CE1	-5.03	1.31	1.39
1	A	144	TYR	CE2-CZ	-5.03	1.32	1.38
1	A	354	TYR	CE1-CZ	-5.03	1.32	1.38
1	A	503	VAL	CB-CG1	-5.03	1.42	1.52

All (36) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	915	ILE	CB-CA-C	-7.40	96.80	111.60
1	A	365	VAL	CB-CA-C	-6.51	99.02	111.40
1	A	945	VAL	CB-CA-C	-6.49	99.07	111.40
1	A	837	VAL	CB-CA-C	-6.44	99.16	111.40
1	A	856	ILE	CB-CA-C	-6.38	98.83	111.60
1	A	821	VAL	CB-CA-C	-6.13	99.76	111.40
1	A	1002	LEU	CA-CB-CG	6.09	129.31	115.30
1	A	661	PHE	N-CA-C	-6.00	94.81	111.00
1	A	493	VAL	CB-CA-C	-5.99	100.03	111.40
1	A	440	LEU	CA-CB-CG	5.89	128.85	115.30
1	A	991	ASP	N-CA-C	-5.82	95.28	111.00
1	A	786	ASN	N-CA-C	5.79	126.63	111.00
1	A	904	LEU	CA-CB-CG	5.78	128.59	115.30
1	A	486	ILE	CB-CA-C	-5.78	100.04	111.60
1	A	242	ASN	N-CA-C	5.77	126.59	111.00
1	A	275	GLY	N-CA-C	-5.64	98.99	113.10
1	A	771	THR	CA-CB-CG2	-5.62	104.53	112.40
1	A	105	ASP	CB-CG-OD1	-5.55	113.30	118.30
1	A	301	VAL	CB-CA-C	-5.51	100.92	111.40
1	A	510	ILE	CB-CA-C	-5.51	100.58	111.60
1	A	528	VAL	CB-CA-C	-5.49	100.96	111.40
1	A	1108	ILE	CG1-CB-CG2	-5.45	99.42	111.40
1	A	848	VAL	CB-CA-C	-5.32	101.30	111.40
1	A	1134	ARG	NE-CZ-NH1	-5.28	117.66	120.30
1	A	181	PHE	N-CA-C	-5.23	96.89	111.00
1	A	1102	ILE	CB-CA-C	-5.22	101.16	111.60
1	A	499	ASN	N-CA-C	-5.21	96.94	111.00
1	A	597	LEU	CA-CB-CG	-5.16	103.42	115.30
1	A	325	LEU	CB-CG-CD2	-5.15	102.24	111.00
1	A	582	ILE	CB-CA-C	-5.13	101.33	111.60
1	A	770	LYS	CD-CE-NZ	5.12	123.49	111.70
1	A	105	ASP	C-N-CD	-5.11	109.36	120.60
1	A	292	TYR	N-CA-C	-5.09	97.24	111.00
1	A	1085	LEU	CA-CB-CG	5.05	126.91	115.30
1	A	485	VAL	CB-CA-C	-5.01	101.88	111.40
1	A	646	SER	N-CA-C	-5.00	97.50	111.00

There are no chirality outliers.

All (1) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	560	ASN	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	8674	0	8613	1304	2
2	A	1	0	0	0	0
3	A	66	0	0	6	0
All	All	8741	0	8613	1304	2

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 (1304) 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:263:MET:CE	1:A:457:ILE:HD12	1.14	1.54
1:A:610:ASN:C	1:A:613:GLU:CG	1.75	1.50
1:A:232:TYR:HB2	1:A:614:LYS:NZ	1.30	1.45
1:A:151:LEU:O	1:A:155:THR:CG2	1.67	1.42
1:A:612:GLN:CB	1:A:616:GLN:HB3	1.49	1.42
1:A:543:LEU:HD23	1:A:544:ILE:N	1.30	1.39
1:A:612:GLN:HG2	1:A:616:GLN:CB	1.52	1.39
1:A:263:MET:HE2	1:A:457:ILE:CD1	0.93	1.38
1:A:612:GLN:CG	1:A:616:GLN:CB	2.02	1.38
1:A:653:LEU:HD12	1:A:654:GLU:N	1.33	1.38
1:A:770:LYS:O	1:A:771:THR:CG2	1.70	1.37
1:A:350:ILE:HD13	1:A:581:VAL:O	1.20	1.36
1:A:611:GLU:HA	1:A:613:GLU:CB	1.56	1.34
1:A:1017:LYS:N	1:A:1020:GLU:OE2	1.61	1.34
1:A:266:ASP:OD2	1:A:341:GLN:NE2	1.56	1.33
1:A:263:MET:CE	1:A:457:ILE:CD1	1.80	1.32
1:A:612:GLN:CA	1:A:613:GLU:HB2	1.60	1.30
1:A:612:GLN:CG	1:A:616:GLN:HB3	1.56	1.29
1:A:348:PHE:O	1:A:350:ILE:HD11	1.11	1.29
1:A:770:LYS:O	1:A:771:THR:HG22	1.15	1.27
1:A:612:GLN:HB2	1:A:616:GLN:N	1.47	1.27
1:A:141:ASN:HB2	1:A:190:ASP:OD2	1.28	1.26
1:A:846:LYS:NZ	1:A:850:ASP:OD1	1.65	1.26
1:A:294:LYS:O	1:A:300:LYS:NZ	1.69	1.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1024:PRO:O	1:A:1141:ILE:CD1	1.86	1.23
1:A:522:SER:O	1:A:525:ILE:HD13	1.38	1.22
1:A:612:GLN:HB3	1:A:615:GLU:CB	1.68	1.22
1:A:942:HIS:O	1:A:947:SER:OG	1.54	1.22
1:A:119:THR:O	1:A:167:ASP:O	1.58	1.22
1:A:314:LEU:C	1:A:314:LEU:HD12	1.49	1.21
1:A:612:GLN:HA	1:A:613:GLU:CB	1.62	1.21
1:A:625:SER:O	1:A:629:ASN:ND2	1.72	1.20
1:A:925:ASN:CG	1:A:965:ILE:HD11	1.60	1.20
1:A:624:LEU:HD23	1:A:624:LEU:C	1.48	1.20
1:A:263:MET:CE	1:A:457:ILE:HG23	1.69	1.19
1:A:614:LYS:O	1:A:618:ILE:HD13	1.42	1.19
1:A:143:ASN:OD1	1:A:196:ASN:ND2	1.71	1.19
1:A:145:LYS:NZ	1:A:628:LYS:O	1.76	1.18
1:A:677:LEU:O	1:A:677:LEU:HD12	1.37	1.18
1:A:407:LEU:HD23	1:A:407:LEU:N	1.51	1.17
1:A:525:ILE:N	1:A:525:ILE:HD12	1.55	1.17
1:A:263:MET:HE2	1:A:457:ILE:HD13	1.25	1.17
1:A:834:LEU:O	1:A:834:LEU:HD12	1.42	1.17
1:A:556:ASN:O	1:A:560:ASN:ND2	1.77	1.16
1:A:314:LEU:O	1:A:314:LEU:HD12	1.43	1.16
1:A:202:TYR:CD1	1:A:624:LEU:HB2	1.81	1.16
1:A:231:ASP:O	1:A:233:LYS:HD2	1.43	1.15
1:A:957:TYR:O	1:A:960:GLU:HB2	1.47	1.15
1:A:348:PHE:O	1:A:350:ILE:CD1	1.94	1.15
1:A:1180:ILE:O	1:A:1184:ASP:O	1.64	1.15
1:A:599:LYS:O	1:A:603:LYS:HD3	1.46	1.14
1:A:65:SER:OG	1:A:87:THR:CG2	1.94	1.14
1:A:605:ARG:O	1:A:609:PHE:CE1	2.00	1.13
1:A:612:GLN:HG2	1:A:616:GLN:HB2	1.15	1.13
1:A:611:GLU:CA	1:A:613:GLU:CB	2.27	1.13
1:A:522:SER:O	1:A:525:ILE:CD1	1.95	1.13
1:A:65:SER:OG	1:A:87:THR:HG21	1.44	1.13
1:A:925:ASN:OD1	1:A:965:ILE:HD11	1.47	1.12
1:A:610:ASN:O	1:A:613:GLU:HG2	1.44	1.12
1:A:525:ILE:H	1:A:525:ILE:CD1	1.50	1.12
1:A:610:ASN:C	1:A:613:GLU:HG2	0.84	1.12
1:A:151:LEU:O	1:A:155:THR:HG21	1.41	1.12
1:A:237:ASN:HD22	1:A:237:ASN:C	1.54	1.11
1:A:1099:ARG:CG	1:A:1099:ARG:HH11	1.59	1.11
1:A:350:ILE:HD12	1:A:350:ILE:N	1.63	1.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:621:PHE:O	1:A:625:SER:OG	1.67	1.10
1:A:624:LEU:HD23	1:A:625:SER:N	1.64	1.10
1:A:610:ASN:CA	1:A:613:GLU:HG2	1.81	1.09
1:A:770:LYS:C	1:A:771:THR:HG23	1.68	1.09
1:A:349:TYR:CA	1:A:350:ILE:HD12	1.81	1.09
1:A:593:GLU:O	1:A:597:LEU:HD12	1.52	1.09
1:A:1189:LYS:HD2	1:A:1189:LYS:N	1.54	1.09
1:A:81:GLU:OE2	1:A:548:GLU:HB2	1.51	1.09
1:A:151:LEU:O	1:A:155:THR:HG23	1.37	1.09
1:A:667:ASN:O	1:A:952:LYS:NZ	1.85	1.09
1:A:407:LEU:N	1:A:408:GLU:OE2	1.85	1.08
1:A:419:ILE:HG22	1:A:420:ASN:N	1.65	1.08
1:A:858:GLY:HA2	1:A:861:THR:CG2	1.82	1.08
1:A:521:THR:O	1:A:522:SER:OG	1.68	1.08
1:A:600:GLN:HA	1:A:600:GLN:NE2	1.59	1.08
1:A:1189:LYS:CD	1:A:1189:LYS:H	1.63	1.07
1:A:332:ASP:OD1	1:A:334:ALA:CB	2.03	1.07
1:A:1103:ASN:O	1:A:1107:THR:HG23	1.54	1.07
1:A:139:SER:O	1:A:142:TYR:O	1.69	1.06
1:A:945:VAL:O	1:A:948:ASN:OD1	1.71	1.06
1:A:312:THR:O	1:A:316:ASN:ND2	1.89	1.06
1:A:406:SER:C	1:A:407:LEU:HD23	1.76	1.06
1:A:1145:LYS:HD2	1:A:1147:GLU:OE1	1.55	1.06
1:A:493:VAL:HG13	1:A:493:VAL:O	1.56	1.05
1:A:1145:LYS:CD	1:A:1147:GLU:OE1	2.03	1.05
1:A:349:TYR:C	1:A:350:ILE:HD12	1.76	1.05
1:A:742:LEU:HD21	1:A:943:LEU:HD13	1.35	1.05
1:A:611:GLU:HA	1:A:613:GLU:HB2	1.20	1.05
1:A:1099:ARG:NH1	1:A:1099:ARG:HG3	1.51	1.05
1:A:860:LYS:NZ	1:A:860:LYS:HB2	1.65	1.04
1:A:770:LYS:C	1:A:771:THR:CG2	2.18	1.04
1:A:745:VAL:CG1	1:A:814:LEU:CD2	2.35	1.04
1:A:837:VAL:HG12	1:A:838:LYS:N	1.65	1.04
1:A:301:VAL:O	1:A:301:VAL:HG12	1.54	1.04
1:A:996:LYS:O	1:A:996:LYS:HG2	1.55	1.04
1:A:600:GLN:HA	1:A:600:GLN:HE21	0.91	1.04
1:A:445:ILE:HG22	1:A:445:ILE:O	1.56	1.04
1:A:628:LYS:O	3:A:1200:HOH:O	1.76	1.03
1:A:263:MET:HE1	1:A:457:ILE:CG2	1.87	1.03
1:A:603:LYS:N	1:A:603:LYS:HD2	1.71	1.03
1:A:232:TYR:CD2	1:A:232:TYR:C	2.30	1.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:145:LYS:HD3	1:A:630:ALA:O	1.57	1.02
1:A:593:GLU:O	1:A:597:LEU:CD1	2.06	1.02
1:A:557:LYS:HB2	1:A:564:TYR:CE2	1.94	1.02
1:A:68:HIS:ND1	1:A:71:TYR:HD1	1.57	1.02
1:A:548:GLU:HA	1:A:548:GLU:OE1	1.60	1.01
1:A:697:LEU:O	1:A:698:LYS:HD3	1.60	1.01
1:A:745:VAL:HG11	1:A:814:LEU:HD22	1.43	1.01
1:A:1007:ASN:ND2	1:A:1070:ASN:O	1.94	1.01
1:A:610:ASN:O	1:A:613:GLU:HB3	1.59	1.00
1:A:612:GLN:HB2	1:A:616:GLN:HB3	1.43	1.00
1:A:542:LEU:HD23	1:A:542:LEU:N	1.73	1.00
1:A:624:LEU:O	1:A:627:TYR:N	1.93	1.00
1:A:745:VAL:HG12	1:A:814:LEU:HD23	1.41	1.00
1:A:1099:ARG:HG3	1:A:1099:ARG:HH11	0.86	0.99
1:A:544:ILE:O	1:A:544:ILE:HD12	1.60	0.99
1:A:806:THR:OG1	1:A:1057:TYR:O	1.80	0.99
1:A:612:GLN:CB	1:A:616:GLN:CB	2.36	0.99
1:A:624:LEU:C	1:A:624:LEU:CD2	2.29	0.99
1:A:424:ILE:O	1:A:424:ILE:HG23	1.61	0.99
1:A:660:TYR:OH	1:A:670:ILE:O	1.80	0.99
1:A:332:ASP:OD1	1:A:334:ALA:HB2	1.60	0.98
1:A:611:GLU:CA	1:A:613:GLU:HB2	1.91	0.98
1:A:145:LYS:CD	1:A:630:ALA:O	2.12	0.98
1:A:232:TYR:HD2	1:A:232:TYR:O	1.43	0.98
1:A:543:LEU:CD2	1:A:544:ILE:N	2.25	0.98
1:A:1024:PRO:O	1:A:1141:ILE:HD11	1.63	0.98
1:A:372:ASN:O	1:A:455:GLN:NE2	1.94	0.98
1:A:406:SER:C	1:A:408:GLU:OE2	2.02	0.97
1:A:612:GLN:CB	1:A:616:GLN:N	2.26	0.97
1:A:350:ILE:CD1	1:A:581:VAL:O	2.10	0.97
1:A:925:ASN:OD1	1:A:965:ILE:CD1	2.13	0.97
1:A:1026:PHE:O	1:A:1030:VAL:HG23	1.64	0.96
1:A:874:TYR:CD2	1:A:874:TYR:C	2.34	0.96
1:A:278:LYS:HB2	1:A:278:LYS:HZ2	1.29	0.96
1:A:745:VAL:CG1	1:A:814:LEU:HD22	1.93	0.96
1:A:263:MET:HE2	1:A:457:ILE:HD11	1.46	0.96
1:A:653:LEU:HD12	1:A:654:GLU:H	1.13	0.96
1:A:624:LEU:CD2	1:A:625:SER:N	2.27	0.96
1:A:232:TYR:CB	1:A:614:LYS:NZ	2.27	0.96
1:A:612:GLN:O	1:A:616:GLN:HG2	1.66	0.96
1:A:349:TYR:HA	1:A:350:ILE:HD12	1.47	0.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:543:LEU:CD2	1:A:544:ILE:H	1.78	0.95
1:A:1064:LEU:HD12	1:A:1065:SER:N	1.81	0.95
1:A:515:LYS:NZ	3:A:1224:HOH:O	1.98	0.95
1:A:120:LEU:N	1:A:120:LEU:HD12	1.77	0.95
1:A:611:GLU:HA	1:A:613:GLU:HB3	1.47	0.95
1:A:858:GLY:CA	1:A:861:THR:HG22	1.97	0.95
1:A:860:LYS:HB2	1:A:860:LYS:HZ3	1.17	0.95
1:A:612:GLN:HB3	1:A:615:GLU:HB3	1.45	0.94
1:A:263:MET:HE1	1:A:457:ILE:HG23	0.95	0.94
1:A:1109:ASP:OD2	1:A:1138:ARG:NH1	2.01	0.94
1:A:610:ASN:O	1:A:613:GLU:CB	2.15	0.93
1:A:202:TYR:HD1	1:A:624:LEU:HB2	1.19	0.93
1:A:542:LEU:CD2	1:A:542:LEU:N	2.29	0.93
1:A:1170:ILE:O	1:A:1170:ILE:HG22	1.68	0.93
1:A:373:PRO:HG2	1:A:373:PRO:O	1.69	0.92
1:A:1024:PRO:O	1:A:1141:ILE:HD13	1.69	0.92
1:A:874:TYR:HD2	1:A:874:TYR:C	1.73	0.92
1:A:612:GLN:C	1:A:616:GLN:HB3	1.90	0.92
1:A:614:LYS:C	1:A:616:GLN:H	1.72	0.92
1:A:1145:LYS:CE	1:A:1147:GLU:OE1	2.18	0.92
1:A:278:LYS:NZ	1:A:278:LYS:CB	2.30	0.92
1:A:908:ASP:HB3	1:A:911:THR:OG1	1.69	0.92
1:A:858:GLY:HA2	1:A:861:THR:HG21	1.51	0.92
1:A:645:ILE:HG12	1:A:648:LEU:HD12	1.49	0.91
1:A:614:LYS:HA	1:A:617:VAL:HB	1.51	0.91
1:A:605:ARG:O	1:A:609:PHE:HE1	1.50	0.91
1:A:1176:ALA:O	1:A:1180:ILE:HD12	1.69	0.91
1:A:653:LEU:CD1	1:A:654:GLU:N	2.30	0.91
1:A:821:VAL:O	1:A:821:VAL:HG23	1.70	0.91
1:A:812:GLN:N	1:A:812:GLN:HE21	1.67	0.91
1:A:263:MET:SD	1:A:457:ILE:HD12	2.09	0.91
1:A:407:LEU:CA	1:A:408:GLU:OE2	2.19	0.91
1:A:1104:THR:O	1:A:1107:THR:OG1	1.89	0.91
1:A:148:ILE:O	1:A:148:ILE:HG12	1.68	0.91
1:A:232:TYR:HB2	1:A:614:LYS:HZ3	1.09	0.90
1:A:611:GLU:CA	1:A:613:GLU:CG	2.38	0.90
1:A:653:LEU:C	1:A:653:LEU:HD12	1.87	0.90
1:A:1189:LYS:HD2	1:A:1189:LYS:H	0.76	0.90
1:A:350:ILE:CD1	1:A:350:ILE:N	2.30	0.90
1:A:237:ASN:HD22	1:A:238:GLY:N	1.68	0.89
1:A:232:TYR:HB2	1:A:614:LYS:HZ2	1.34	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:104:ASN:O	1:A:106:PRO:HD3	1.72	0.89
1:A:419:ILE:CG2	1:A:420:ASN:N	2.35	0.89
1:A:131:LEU:O	1:A:135:VAL:HG13	1.71	0.89
1:A:497:GLY:HA2	1:A:566:GLU:OE2	1.72	0.89
1:A:278:LYS:NZ	1:A:278:LYS:HB2	1.87	0.89
1:A:233:LYS:O	1:A:234:VAL:HG22	1.73	0.89
1:A:748:LEU:HD21	1:A:923:ILE:HG23	1.54	0.89
1:A:1029:ILE:O	1:A:1032:ALA:HB3	1.73	0.89
1:A:858:GLY:HA2	1:A:861:THR:HG22	1.55	0.89
1:A:1144:THR:HG22	1:A:1144:THR:O	1.73	0.88
1:A:314:LEU:C	1:A:314:LEU:CD1	2.29	0.88
1:A:145:LYS:NZ	3:A:1200:HOH:O	2.06	0.88
1:A:1017:LYS:CA	1:A:1020:GLU:OE2	2.22	0.88
1:A:521:THR:C	1:A:522:SER:HG	1.75	0.88
1:A:645:ILE:HD13	1:A:645:ILE:O	1.73	0.88
1:A:677:LEU:HD12	1:A:677:LEU:C	1.84	0.88
1:A:688:MET:O	1:A:692:LEU:HG	1.74	0.88
1:A:252:LEU:HD12	1:A:252:LEU:H	1.39	0.88
1:A:525:ILE:H	1:A:525:ILE:HD12	0.74	0.88
1:A:200:ASN:OD1	1:A:202:TYR:HD2	1.57	0.88
1:A:594:GLN:HA	1:A:594:GLN:OE1	1.74	0.87
1:A:672:GLU:HA	1:A:672:GLU:OE2	1.72	0.87
1:A:686:ASP:O	1:A:690:VAL:HG23	1.74	0.87
1:A:445:ILE:HB	1:A:461:GLY:HA3	1.54	0.87
1:A:682:HIS:O	1:A:685:LYS:CB	2.22	0.87
1:A:605:ARG:O	1:A:609:PHE:CD1	2.26	0.87
1:A:141:ASN:CB	1:A:190:ASP:OD2	2.21	0.87
1:A:283:LEU:HD11	1:A:287:GLU:HG2	1.57	0.87
1:A:682:HIS:O	1:A:685:LYS:HB3	1.75	0.87
1:A:307:SER:OG	1:A:309:ASN:N	2.08	0.86
1:A:1110:LYS:HG3	1:A:1110:LYS:O	1.75	0.86
1:A:188:TYR:O	1:A:192:VAL:HG23	1.76	0.86
1:A:1017:LYS:HB2	1:A:1020:GLU:OE2	1.75	0.86
1:A:670:ILE:HG21	1:A:944:PHE:CD1	2.11	0.86
1:A:981:ASN:ND2	3:A:1238:HOH:O	2.08	0.86
1:A:860:LYS:CB	1:A:860:LYS:HZ3	1.85	0.86
1:A:885:ALA:O	1:A:889:ILE:HG13	1.75	0.86
1:A:232:TYR:CD2	1:A:232:TYR:O	2.29	0.85
1:A:603:LYS:CD	1:A:603:LYS:N	2.39	0.85
1:A:237:ASN:ND2	1:A:237:ASN:C	2.30	0.85
1:A:612:GLN:CA	1:A:616:GLN:HB3	2.05	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:949:GLU:O	1:A:953:ASN:ND2	2.08	0.85
1:A:745:VAL:HG11	1:A:814:LEU:CD2	2.04	0.85
1:A:874:TYR:CD2	1:A:874:TYR:O	2.29	0.85
1:A:263:MET:CE	1:A:457:ILE:HD13	1.82	0.85
1:A:213:VAL:O	1:A:214:GLU:HB2	1.77	0.84
1:A:627:TYR:CD2	1:A:627:TYR:O	2.30	0.84
1:A:858:GLY:C	1:A:861:THR:HG22	1.97	0.84
1:A:984:ILE:HG23	1:A:989:LEU:HD12	1.57	0.84
1:A:206:THR:HG23	1:A:628:LYS:NZ	1.93	0.84
1:A:487:MET:O	1:A:491:LYS:CG	2.26	0.84
1:A:689:ASP:O	1:A:693:LYS:HG3	1.78	0.84
1:A:600:GLN:NE2	1:A:600:GLN:CA	2.41	0.84
1:A:68:HIS:HB3	1:A:71:TYR:HB2	1.58	0.84
1:A:138:GLY:HA2	1:A:147:SER:OG	1.78	0.84
1:A:612:GLN:HB3	1:A:615:GLU:HB2	1.55	0.84
1:A:485:VAL:HG12	1:A:486:ILE:N	1.90	0.83
1:A:1039:TRP:O	1:A:1039:TRP:CD1	2.30	0.83
1:A:407:LEU:C	1:A:408:GLU:OE2	2.16	0.83
1:A:1017:LYS:CB	1:A:1020:GLU:OE2	2.27	0.83
1:A:809:TYR:CZ	1:A:990:PHE:HD2	1.95	0.83
1:A:541:PRO:HB2	1:A:542:LEU:CD2	2.09	0.83
1:A:992:GLU:C	1:A:994:LYS:H	1.76	0.83
1:A:612:GLN:HB2	1:A:616:GLN:H	1.41	0.83
1:A:102:GLY:C	1:A:103:THR:HG22	1.99	0.83
1:A:543:LEU:HD21	1:A:544:ILE:HG22	1.59	0.83
1:A:857:ASN:O	1:A:861:THR:HB	1.79	0.83
1:A:561:GLU:HB3	1:A:564:TYR:HB2	1.60	0.83
1:A:283:LEU:HD12	1:A:284:THR:N	1.94	0.83
1:A:252:LEU:HD12	1:A:252:LEU:N	1.92	0.83
1:A:862:THR:HG22	1:A:862:THR:O	1.77	0.83
1:A:614:LYS:O	1:A:618:ILE:CD1	2.24	0.82
1:A:846:LYS:NZ	1:A:850:ASP:CG	2.32	0.82
1:A:645:ILE:CG1	1:A:648:LEU:HD12	2.08	0.82
1:A:102:GLY:O	1:A:103:THR:HG22	1.77	0.82
1:A:134:SER:O	1:A:137:SER:OG	1.97	0.82
1:A:809:TYR:OH	1:A:990:PHE:HD2	1.63	0.82
1:A:745:VAL:HG12	1:A:814:LEU:CD2	2.07	0.82
1:A:670:ILE:HG21	1:A:944:PHE:HD1	1.44	0.82
1:A:885:ALA:O	1:A:889:ILE:CG1	2.28	0.82
1:A:113:PHE:CE1	1:A:115:PHE:HE2	1.97	0.82
1:A:612:GLN:C	1:A:616:GLN:CG	2.48	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1174:GLU:H	1:A:1174:GLU:CD	1.83	0.82
1:A:902:LEU:HD12	1:A:902:LEU:O	1.80	0.82
1:A:543:LEU:CD2	1:A:544:ILE:HG22	2.09	0.81
1:A:557:LYS:HB2	1:A:564:TYR:HE2	1.44	0.81
1:A:161:ASN:HD22	1:A:162:ALA:H	1.28	0.81
1:A:612:GLN:HG3	1:A:616:GLN:CB	2.11	0.81
1:A:460:ILE:HD12	1:A:486:ILE:CD1	2.11	0.81
1:A:1160:VAL:CG2	1:A:1160:VAL:O	2.29	0.81
1:A:612:GLN:O	1:A:616:GLN:CG	2.29	0.81
1:A:68:HIS:ND1	1:A:71:TYR:CD1	2.40	0.81
1:A:1145:LYS:HE2	1:A:1147:GLU:OE1	1.81	0.81
1:A:348:PHE:C	1:A:350:ILE:HD11	1.98	0.80
1:A:193:PHE:O	1:A:194:GLN:CG	2.30	0.80
1:A:68:HIS:HD1	1:A:71:TYR:HD1	0.82	0.80
1:A:151:LEU:C	1:A:155:THR:HG21	2.02	0.80
1:A:237:ASN:ND2	1:A:238:GLY:N	2.30	0.80
1:A:424:ILE:O	1:A:424:ILE:CG2	2.30	0.80
1:A:812:GLN:N	1:A:812:GLN:NE2	2.29	0.80
1:A:603:LYS:CD	1:A:603:LYS:H	1.94	0.80
1:A:957:TYR:O	1:A:960:GLU:CB	2.28	0.80
1:A:821:VAL:CG2	1:A:821:VAL:O	2.30	0.80
1:A:148:ILE:O	1:A:148:ILE:CG1	2.30	0.80
1:A:992:GLU:O	1:A:994:LYS:N	2.13	0.80
1:A:544:ILE:O	1:A:544:ILE:CD1	2.29	0.80
1:A:569:VAL:O	1:A:573:PHE:HB2	1.81	0.80
1:A:1127:SER:O	1:A:1128:ASN:CB	2.27	0.80
1:A:139:SER:OG	1:A:190:ASP:C	2.21	0.80
1:A:645:ILE:CG1	1:A:645:ILE:O	2.30	0.80
1:A:531:MET:HG2	1:A:541:PRO:HB3	1.62	0.80
1:A:493:VAL:O	1:A:493:VAL:HG22	1.80	0.79
1:A:594:GLN:CA	1:A:594:GLN:OE1	2.29	0.79
1:A:765:LEU:O	1:A:765:LEU:HD12	1.83	0.79
1:A:612:GLN:O	1:A:616:GLN:CB	2.29	0.79
1:A:811:ALA:C	1:A:812:GLN:NE2	2.36	0.79
1:A:197:VAL:CG2	1:A:197:VAL:O	2.30	0.79
1:A:232:TYR:HD2	1:A:232:TYR:C	1.77	0.79
1:A:612:GLN:C	1:A:616:GLN:HG2	2.03	0.79
1:A:742:LEU:HD23	1:A:933:VAL:HG13	1.64	0.79
1:A:645:ILE:CD1	1:A:645:ILE:O	2.30	0.79
1:A:996:LYS:CG	1:A:996:LYS:O	2.29	0.79
1:A:612:GLN:CG	1:A:616:GLN:CA	2.61	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:697:LEU:O	1:A:698:LYS:CD	2.30	0.79
1:A:610:ASN:O	1:A:613:GLU:CG	2.07	0.79
1:A:487:MET:O	1:A:491:LYS:HG3	1.83	0.79
1:A:612:GLN:HG3	1:A:616:GLN:CA	2.13	0.78
1:A:513:ILE:HG22	1:A:514:LEU:N	1.95	0.78
1:A:1177:ASN:ND2	3:A:1259:HOH:O	2.15	0.78
1:A:672:GLU:OE2	1:A:672:GLU:CA	2.30	0.78
1:A:1039:TRP:C	1:A:1039:TRP:CD1	2.55	0.78
1:A:61:ILE:CG1	1:A:61:ILE:O	2.30	0.78
1:A:612:GLN:HA	1:A:613:GLU:HB2	0.80	0.78
1:A:680:ASN:ND2	1:A:683:MET:HB2	1.99	0.78
1:A:425:HIS:C	1:A:429:SER:OG	2.22	0.78
1:A:612:GLN:HG2	1:A:616:GLN:HB3	1.31	0.78
1:A:135:VAL:HG23	1:A:136:LEU:N	1.99	0.78
1:A:1145:LYS:O	1:A:1148:ASP:OD2	2.02	0.78
1:A:742:LEU:CD2	1:A:943:LEU:HD13	2.13	0.78
1:A:363:ASN:OD1	1:A:585:GLU:HA	1.83	0.78
1:A:745:VAL:CG1	1:A:814:LEU:HD23	2.04	0.77
1:A:682:HIS:O	1:A:685:LYS:N	2.18	0.77
1:A:425:HIS:O	1:A:429:SER:OG	2.00	0.77
1:A:721:THR:HG23	1:A:721:THR:O	1.83	0.77
1:A:232:TYR:CB	1:A:614:LYS:HZ3	1.90	0.77
1:A:332:ASP:OD1	1:A:334:ALA:N	2.17	0.77
1:A:612:GLN:HB3	1:A:615:GLU:CA	2.15	0.77
1:A:542:LEU:HD23	1:A:542:LEU:H	1.48	0.77
1:A:674:TYR:OH	1:A:733:GLU:OE2	2.03	0.77
1:A:616:GLN:HG3	1:A:617:VAL:H	1.50	0.77
1:A:312:THR:HG22	1:A:313:GLU:N	1.98	0.77
1:A:102:GLY:C	1:A:103:THR:CG2	2.52	0.77
1:A:135:VAL:CG2	1:A:136:LEU:N	2.45	0.76
1:A:570:GLU:HA	1:A:574:ILE:HD12	1.66	0.76
1:A:679:THR:OG1	1:A:680:ASN:N	2.17	0.76
1:A:612:GLN:C	1:A:616:GLN:CB	2.53	0.76
1:A:834:LEU:HD12	1:A:834:LEU:C	1.93	0.76
1:A:548:GLU:CA	1:A:548:GLU:OE1	2.30	0.76
1:A:373:PRO:O	1:A:373:PRO:CG	2.30	0.76
1:A:596:ASN:O	1:A:600:GLN:N	2.19	0.76
1:A:291:PHE:O	1:A:292:TYR:C	2.19	0.76
1:A:1028:VAL:O	1:A:1032:ALA:HB2	1.86	0.76
1:A:600:GLN:HE21	1:A:600:GLN:CA	1.85	0.76
1:A:510:ILE:HG22	1:A:511:GLU:N	1.99	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:278:LYS:HZ3	1:A:278:LYS:CB	1.97	0.76
1:A:610:ASN:C	1:A:613:GLU:CB	2.54	0.76
1:A:272:ASN:OD1	1:A:274:GLY:N	2.18	0.76
1:A:570:GLU:O	1:A:575:ASN:ND2	2.19	0.75
1:A:231:ASP:O	1:A:233:LYS:CD	2.30	0.75
1:A:616:GLN:HG3	1:A:617:VAL:N	2.02	0.75
1:A:265:PRO:HD2	1:A:341:GLN:OE1	1.86	0.75
1:A:653:LEU:HD11	1:A:654:GLU:O	1.86	0.75
1:A:105:ASP:OD1	1:A:107:LEU:HD12	1.86	0.75
1:A:1039:TRP:CZ2	1:A:1043:ARG:HD2	2.21	0.75
1:A:65:SER:N	1:A:66:PRO:HD3	2.01	0.75
1:A:606:ILE:HG23	1:A:606:ILE:O	1.84	0.75
1:A:1036:SER:O	1:A:1040:ASP:HB2	1.87	0.75
1:A:151:LEU:C	1:A:155:THR:CG2	2.55	0.75
1:A:543:LEU:HD23	1:A:544:ILE:H	0.93	0.75
1:A:65:SER:OG	1:A:87:THR:HG23	1.87	0.74
1:A:619:LYS:HE2	1:A:623:GLU:CG	2.16	0.74
1:A:653:LEU:CD1	1:A:654:GLU:O	2.35	0.74
1:A:528:VAL:O	1:A:532:THR:HG23	1.87	0.74
1:A:409:ASN:HB2	1:A:412:ASP:OD2	1.85	0.74
1:A:263:MET:CE	1:A:457:ILE:CG2	2.55	0.74
1:A:736:THR:O	1:A:737:THR:C	2.24	0.74
1:A:1095:ASN:O	1:A:1099:ARG:NH1	2.20	0.74
1:A:614:LYS:C	1:A:616:GLN:N	2.36	0.74
1:A:677:LEU:O	1:A:677:LEU:CD1	2.30	0.74
1:A:206:THR:HG23	1:A:628:LYS:HZ3	1.49	0.74
1:A:132:GLU:OE1	1:A:164:THR:OG1	2.06	0.74
1:A:1154:ASP:O	1:A:1158:SER:HB3	1.88	0.74
1:A:1014:ILE:O	1:A:1014:ILE:HG22	1.86	0.74
1:A:1179:TYR:CE1	1:A:1183:VAL:HB	2.23	0.73
1:A:742:LEU:HD21	1:A:943:LEU:CD1	2.15	0.73
1:A:232:TYR:HB2	1:A:614:LYS:HZ1	1.49	0.73
1:A:627:TYR:CG	1:A:627:TYR:O	2.40	0.73
1:A:856:ILE:O	1:A:856:ILE:CG2	2.34	0.73
1:A:612:GLN:HB2	1:A:616:GLN:CB	2.08	0.73
1:A:750:HIS:ND1	1:A:750:HIS:N	2.37	0.73
1:A:851:ILE:HG22	1:A:852:LEU:N	2.04	0.73
1:A:362:GLU:OE1	1:A:466:LYS:NZ	2.22	0.73
1:A:612:GLN:HB2	1:A:616:GLN:CA	2.19	0.73
1:A:243:GLU:HG3	1:A:1049:TYR:CE1	2.24	0.73
1:A:1127:SER:O	1:A:1128:ASN:HB3	1.88	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:487:MET:O	1:A:491:LYS:HG2	1.87	0.73
1:A:860:LYS:HB2	1:A:860:LYS:HZ2	1.54	0.72
1:A:595:GLU:O	1:A:598:GLU:HB3	1.88	0.72
1:A:278:LYS:HZ3	1:A:278:LYS:HB3	1.54	0.72
1:A:502:ALA:O	1:A:505:ALA:HB3	1.89	0.72
1:A:653:LEU:CD1	1:A:654:GLU:H	1.97	0.72
1:A:1103:ASN:C	1:A:1103:ASN:OD1	2.28	0.72
1:A:202:TYR:CE1	1:A:624:LEU:HB2	2.24	0.72
1:A:834:LEU:CD1	1:A:834:LEU:O	2.30	0.72
1:A:209:TRP:HE1	1:A:283:LEU:HB3	1.55	0.72
1:A:816:ASN:OD1	1:A:816:ASN:C	2.29	0.72
1:A:119:THR:O	1:A:167:ASP:C	2.27	0.71
1:A:769:ASN:ND2	1:A:841:ASP:O	2.20	0.71
1:A:1029:ILE:O	1:A:1032:ALA:N	2.23	0.71
1:A:193:PHE:O	1:A:194:GLN:HG2	1.90	0.71
1:A:887:ASN:O	1:A:891:GLY:N	2.23	0.71
1:A:139:SER:C	1:A:196:ASN:OD1	2.27	0.71
1:A:1139:LYS:O	1:A:1139:LYS:CG	2.38	0.71
1:A:1176:ALA:O	1:A:1180:ILE:CD1	2.38	0.71
1:A:860:LYS:CB	1:A:860:LYS:NZ	2.30	0.71
1:A:797:TYR:HE1	1:A:814:LEU:HD12	1.55	0.71
1:A:645:ILE:C	1:A:647:ASP:H	1.93	0.71
1:A:616:GLN:OE1	1:A:616:GLN:C	2.29	0.71
1:A:255:LEU:HD21	1:A:366:SER:HB3	1.71	0.71
1:A:460:ILE:HD12	1:A:486:ILE:HD13	1.73	0.71
1:A:233:LYS:O	1:A:234:VAL:CG2	2.39	0.71
1:A:560:ASN:H	1:A:560:ASN:ND2	1.89	0.71
1:A:606:ILE:CG2	1:A:606:ILE:O	2.35	0.71
1:A:807:ASP:OD2	1:A:809:TYR:N	2.23	0.70
1:A:145:LYS:HD2	1:A:630:ALA:O	1.89	0.70
1:A:587:ASP:OD1	1:A:587:ASP:C	2.29	0.70
1:A:299:LYS:O	1:A:302:LYS:HE3	1.91	0.70
1:A:79:ASN:C	1:A:79:ASN:OD1	2.30	0.70
1:A:856:ILE:O	1:A:856:ILE:HG22	1.85	0.70
1:A:612:GLN:CG	1:A:616:GLN:HB2	1.89	0.70
1:A:200:ASN:HB3	1:A:203:ILE:HG13	1.73	0.70
1:A:554:VAL:O	1:A:555:LYS:C	2.25	0.70
1:A:612:GLN:CB	1:A:615:GLU:C	2.59	0.70
1:A:91:HIS:HD2	1:A:322:LEU:HD13	1.55	0.70
1:A:645:ILE:O	1:A:645:ILE:HG12	1.90	0.70
1:A:937:TYR:O	1:A:937:TYR:HD2	1.75	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:233:LYS:C	1:A:234:VAL:CG2	2.60	0.70
1:A:213:VAL:HG23	1:A:214:GLU:N	2.06	0.70
1:A:598:GLU:HG2	1:A:599:LYS:HE3	1.74	0.70
1:A:509:ASN:OD1	1:A:509:ASN:C	2.30	0.70
1:A:1139:LYS:O	1:A:1139:LYS:HG3	1.92	0.70
1:A:1025:SER:O	1:A:1029:ILE:CD1	2.40	0.69
1:A:945:VAL:HG12	1:A:946:ASN:N	2.03	0.69
1:A:1064:LEU:HD12	1:A:1065:SER:H	1.56	0.69
1:A:145:LYS:N	1:A:632:GLU:OE1	2.24	0.69
1:A:254:ASP:OD1	1:A:254:ASP:C	2.29	0.69
1:A:450:ASN:OD1	1:A:450:ASN:C	2.29	0.69
1:A:609:PHE:C	1:A:610:ASN:O	2.29	0.69
1:A:723:TYR:C	1:A:726:ASN:HD22	1.94	0.69
1:A:284:THR:HB	1:A:287:GLU:H	1.57	0.69
1:A:360:GLU:OE1	1:A:468:ASN:ND2	2.26	0.69
1:A:1025:SER:O	1:A:1029:ILE:HD13	1.92	0.69
1:A:285:TYR:CE2	1:A:289:LYS:HE2	2.28	0.69
1:A:612:GLN:N	1:A:613:GLU:HB2	2.08	0.69
1:A:321:TYR:C	1:A:323:GLY:H	1.95	0.69
1:A:1101:ILE:CD1	1:A:1141:ILE:O	2.40	0.69
1:A:575:ASN:N	1:A:575:ASN:ND2	2.38	0.69
1:A:283:LEU:CD1	1:A:287:GLU:HG2	2.22	0.69
1:A:887:ASN:HA	1:A:891:GLY:HA3	1.73	0.69
1:A:94:ALA:O	1:A:95:LYS:HB2	1.90	0.69
1:A:645:ILE:HG12	1:A:648:LEU:CD1	2.23	0.69
1:A:810:ASN:OD1	1:A:810:ASN:C	2.31	0.69
1:A:407:LEU:CD2	1:A:407:LEU:N	2.30	0.68
1:A:1037:TYR:O	1:A:1038:LEU:C	2.22	0.68
1:A:1079:ARG:NE	1:A:1164:GLU:OE1	2.25	0.68
1:A:348:PHE:N	1:A:348:PHE:CD1	2.55	0.68
1:A:200:ASN:OD1	1:A:202:TYR:CD2	2.45	0.68
1:A:60:TRP:O	1:A:60:TRP:HE3	1.75	0.68
1:A:180:ASP:O	1:A:183:ASN:N	2.27	0.68
1:A:623:GLU:O	1:A:626:LYS:HG3	1.93	0.68
1:A:166:ASN:HD21	1:A:269:HIS:HA	1.59	0.68
1:A:612:GLN:CB	1:A:615:GLU:CB	2.61	0.68
1:A:612:GLN:CB	1:A:615:GLU:HB3	2.21	0.68
1:A:909:PHE:CE1	1:A:912:LEU:HD23	2.29	0.68
1:A:925:ASN:ND2	1:A:965:ILE:HD11	2.08	0.68
1:A:431:LEU:HD13	1:A:460:ILE:HD13	1.76	0.68
1:A:809:TYR:OH	1:A:990:PHE:CD2	2.43	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:116:TYR:OH	1:A:536:ASN:OD1	2.06	0.68
1:A:1103:ASN:O	1:A:1107:THR:CG2	2.39	0.68
1:A:139:SER:OG	1:A:190:ASP:O	2.10	0.68
1:A:575:ASN:N	1:A:575:ASN:HD22	1.92	0.68
1:A:1034:LYS:HD3	1:A:1053:ALA:H	1.59	0.67
1:A:105:ASP:C	1:A:105:ASP:OD1	2.30	0.67
1:A:1000:PHE:HD2	1:A:1192:ILE:HD11	1.59	0.67
1:A:560:ASN:H	1:A:560:ASN:HD22	1.39	0.67
1:A:892:TYR:O	1:A:893:GLU:C	2.27	0.67
1:A:85:THR:O	1:A:101:LEU:HA	1.93	0.67
1:A:846:LYS:HZ2	1:A:850:ASP:CG	1.96	0.67
1:A:624:LEU:O	1:A:627:TYR:HB3	1.95	0.67
1:A:66:PRO:O	1:A:73:ILE:HD11	1.94	0.67
1:A:299:LYS:HD2	1:A:299:LYS:H	1.59	0.67
1:A:551:LEU:O	1:A:555:LYS:HG3	1.95	0.67
1:A:1023:ASP:OD1	1:A:1024:PRO:N	2.28	0.67
1:A:663:ASN:C	1:A:663:ASN:OD1	2.30	0.67
1:A:838:LYS:HG2	1:A:839:GLU:HG2	1.77	0.67
1:A:79:ASN:OD1	1:A:81:GLU:N	2.28	0.67
1:A:61:ILE:HG12	1:A:61:ILE:O	1.93	0.67
1:A:1000:PHE:CD2	1:A:1192:ILE:HD11	2.29	0.67
1:A:312:THR:HG23	1:A:316:ASN:HD21	1.58	0.67
1:A:180:ASP:O	1:A:181:PHE:C	2.31	0.67
1:A:1179:TYR:HE2	1:A:1187:PHE:CE1	2.13	0.67
1:A:443:ASN:ND2	1:A:463:LYS:NZ	2.43	0.66
1:A:807:ASP:C	1:A:807:ASP:OD2	2.29	0.66
1:A:797:TYR:CE1	1:A:814:LEU:HD12	2.30	0.66
1:A:460:ILE:CD1	1:A:486:ILE:HD13	2.24	0.66
1:A:1112:ARG:HB3	1:A:1116:GLU:HB2	1.77	0.66
1:A:624:LEU:HD23	1:A:625:SER:CA	2.25	0.66
1:A:614:LYS:C	1:A:618:ILE:HD13	2.14	0.66
1:A:894:ASN:O	1:A:895:TYR:C	2.32	0.66
1:A:488:ASN:O	1:A:492:LYS:HB2	1.96	0.66
1:A:349:TYR:HA	1:A:350:ILE:CD1	2.24	0.66
1:A:1058:ASP:C	1:A:1058:ASP:OD1	2.30	0.66
1:A:616:GLN:C	1:A:616:GLN:CD	2.53	0.66
1:A:332:ASP:CG	1:A:334:ALA:HB3	2.16	0.66
1:A:408:GLU:N	1:A:408:GLU:OE2	2.29	0.66
1:A:557:LYS:O	1:A:561:GLU:N	2.29	0.66
1:A:1105:ILE:O	1:A:1109:ASP:HB2	1.96	0.66
1:A:240:VAL:O	1:A:241:TYR:C	2.32	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:369:TRP:CD1	1:A:576:ASN:HB3	2.30	0.66
1:A:1029:ILE:O	1:A:1033:LEU:N	2.28	0.66
1:A:291:PHE:O	1:A:292:TYR:O	2.13	0.66
1:A:242:ASN:ND2	1:A:1047:GLY:O	2.29	0.66
1:A:619:LYS:O	1:A:623:GLU:N	2.22	0.66
1:A:756:LEU:O	1:A:759:LEU:HB2	1.95	0.66
1:A:259:GLU:O	1:A:263:MET:HG3	1.95	0.65
1:A:594:GLN:OE1	1:A:594:GLN:N	2.29	0.65
1:A:442:ASN:CB	1:A:857:ASN:HD22	2.09	0.65
1:A:441:GLY:HA3	1:A:462:LEU:HG	1.78	0.65
1:A:926:LYS:HD2	1:A:959:GLU:HG2	1.78	0.65
1:A:616:GLN:CG	1:A:617:VAL:N	2.60	0.65
1:A:543:LEU:CD2	1:A:544:ILE:CG2	2.74	0.65
1:A:419:ILE:O	1:A:422:LEU:N	2.29	0.65
1:A:474:ASN:OD1	1:A:475:PHE:N	2.30	0.65
1:A:1178:GLU:OE2	1:A:1178:GLU:N	2.30	0.65
1:A:1182:ASN:N	1:A:1182:ASN:OD1	2.30	0.65
1:A:332:ASP:CG	1:A:334:ALA:CB	2.64	0.65
1:A:127:ILE:N	1:A:128:PRO:CD	2.59	0.65
1:A:91:HIS:CD2	1:A:322:LEU:HD13	2.32	0.65
1:A:614:LYS:HD2	1:A:618:ILE:HD11	1.78	0.65
1:A:614:LYS:O	1:A:616:GLN:N	2.30	0.65
1:A:809:TYR:CZ	1:A:990:PHE:CD2	2.84	0.65
1:A:283:LEU:C	1:A:283:LEU:HD12	2.17	0.65
1:A:670:ILE:CG2	1:A:944:PHE:CD1	2.79	0.65
1:A:1010:SER:OG	1:A:1168:VAL:O	2.14	0.65
1:A:151:LEU:CA	1:A:155:THR:HG21	2.27	0.65
1:A:557:LYS:O	1:A:561:GLU:HB2	1.96	0.65
1:A:105:ASP:OD1	1:A:106:PRO:N	2.30	0.65
1:A:124:GLY:O	1:A:275:GLY:HA2	1.96	0.65
1:A:498:PHE:O	1:A:499:ASN:C	2.33	0.65
1:A:857:ASN:O	1:A:861:THR:CB	2.44	0.65
1:A:1029:ILE:O	1:A:1032:ALA:CB	2.43	0.64
1:A:139:SER:OG	1:A:191:SER:HA	1.97	0.64
1:A:1101:ILE:HG22	1:A:1102:ILE:N	2.06	0.64
1:A:202:TYR:O	1:A:206:THR:OG1	2.15	0.64
1:A:682:HIS:O	1:A:685:LYS:CA	2.45	0.64
1:A:770:LYS:O	1:A:771:THR:HG23	1.66	0.64
1:A:312:THR:CG2	1:A:313:GLU:N	2.58	0.64
1:A:575:ASN:HD22	1:A:575:ASN:H	1.44	0.64
1:A:858:GLY:O	1:A:861:THR:HG22	1.96	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:564:TYR:C	1:A:564:TYR:CD1	2.66	0.64
1:A:372:ASN:OD1	1:A:372:ASN:N	2.30	0.64
1:A:742:LEU:CD2	1:A:943:LEU:CD1	2.73	0.64
1:A:957:TYR:O	1:A:960:GLU:N	2.28	0.64
1:A:141:ASN:HD21	1:A:324:GLN:HE22	1.46	0.64
1:A:942:HIS:HA	1:A:946:ASN:HB2	1.80	0.64
1:A:266:ASP:CG	1:A:341:GLN:NE2	2.48	0.64
1:A:332:ASP:OD1	1:A:334:ALA:HB3	1.94	0.64
1:A:862:THR:CG2	1:A:862:THR:O	2.46	0.64
1:A:894:ASN:O	1:A:894:ASN:ND2	2.30	0.64
1:A:509:ASN:OD1	1:A:510:ILE:N	2.30	0.64
1:A:550:TYR:HA	1:A:553:ILE:HG13	1.78	0.64
1:A:232:TYR:O	1:A:233:LYS:HD2	1.98	0.64
1:A:193:PHE:O	1:A:194:GLN:HG3	1.97	0.64
1:A:981:ASN:O	1:A:981:ASN:ND2	2.30	0.64
1:A:645:ILE:CG1	1:A:648:LEU:CD1	2.76	0.63
1:A:321:TYR:C	1:A:323:GLY:N	2.48	0.63
1:A:119:THR:C	1:A:120:LEU:HD12	2.19	0.63
1:A:567:LYS:O	1:A:571:LYS:HB3	1.98	0.63
1:A:347:PRO:HG3	1:A:579:ARG:NH2	2.13	0.63
1:A:1138:ARG:O	1:A:1142:MET:HG3	1.99	0.63
1:A:992:GLU:C	1:A:994:LYS:N	2.46	0.63
1:A:799:LYS:H	1:A:810:ASN:HD21	1.47	0.63
1:A:642:ILE:HG23	1:A:643:ILE:N	2.13	0.63
1:A:860:LYS:CG	1:A:861:THR:N	2.62	0.63
1:A:416:LEU:O	1:A:420:ASN:HB3	1.99	0.63
1:A:1145:LYS:HD2	1:A:1147:GLU:CD	2.18	0.63
1:A:166:ASN:OD1	1:A:166:ASN:C	2.33	0.63
1:A:858:GLY:O	1:A:862:THR:OG1	2.14	0.63
1:A:455:GLN:C	1:A:456:TYR:HD2	2.02	0.63
1:A:1110:LYS:CG	1:A:1110:LYS:O	2.43	0.62
1:A:902:LEU:O	1:A:906:GLU:OE1	2.17	0.62
1:A:349:TYR:CA	1:A:350:ILE:CD1	2.69	0.62
1:A:309:ASN:O	1:A:311:PRO:HD3	1.99	0.62
1:A:81:GLU:OE2	1:A:548:GLU:CB	2.40	0.62
1:A:1113:ARG:O	1:A:1116:GLU:CG	2.47	0.62
1:A:771:THR:HB	1:A:839:GLU:O	1.99	0.62
1:A:858:GLY:O	1:A:862:THR:CB	2.47	0.62
1:A:1160:VAL:HG22	1:A:1160:VAL:O	1.96	0.62
1:A:263:MET:HE1	1:A:457:ILE:CD1	2.06	0.62
1:A:316:ASN:O	1:A:320:GLN:HG2	2.00	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:276:ASP:HB3	1:A:278:LYS:HG3	1.81	0.62
1:A:888:ILE:O	1:A:894:ASN:HB2	1.99	0.62
1:A:185:MET:HG2	1:A:317:PHE:HE2	1.64	0.62
1:A:732:TYR:OH	1:A:1121:SER:HB3	1.99	0.62
1:A:512:PHE:C	1:A:512:PHE:CD2	2.71	0.62
1:A:543:LEU:C	1:A:543:LEU:HD23	2.07	0.62
1:A:350:ILE:HD12	1:A:350:ILE:H	1.63	0.62
1:A:460:ILE:HD12	1:A:486:ILE:HD11	1.80	0.62
1:A:263:MET:SD	1:A:457:ILE:HG23	2.40	0.62
1:A:369:TRP:NE1	1:A:579:ARG:HD3	2.14	0.62
1:A:571:LYS:HG2	1:A:572:HIS:CD2	2.34	0.62
1:A:1113:ARG:O	1:A:1116:GLU:HG2	1.99	0.62
1:A:358:SER:O	1:A:361:LYS:HE2	1.99	0.62
1:A:441:GLY:HA2	1:A:465:ILE:HG23	1.81	0.62
1:A:781:ILE:O	1:A:781:ILE:CG2	2.41	0.62
1:A:805:VAL:HG23	1:A:1020:GLU:O	2.00	0.62
1:A:868:TYR:O	1:A:869:ALA:C	2.38	0.62
1:A:193:PHE:C	1:A:194:GLN:HG3	2.20	0.62
1:A:876:LYS:NZ	1:A:1056:GLU:OE2	2.32	0.62
1:A:725:GLY:O	1:A:926:LYS:NZ	2.32	0.62
1:A:258:GLU:O	1:A:262:TYR:HD2	1.83	0.62
1:A:665:ASN:HD21	1:A:956:SER:HB2	1.63	0.62
1:A:197:VAL:O	1:A:197:VAL:HG23	2.00	0.61
1:A:612:GLN:CB	1:A:615:GLU:CA	2.77	0.61
1:A:624:LEU:HD22	1:A:625:SER:N	2.14	0.61
1:A:1180:ILE:C	1:A:1184:ASP:O	2.36	0.61
1:A:665:ASN:ND2	1:A:956:SER:HB2	2.16	0.61
1:A:321:TYR:O	1:A:323:GLY:N	2.33	0.61
1:A:571:LYS:HD3	1:A:572:HIS:NE2	2.16	0.61
1:A:442:ASN:HB3	1:A:857:ASN:HD22	1.64	0.61
1:A:445:ILE:CG2	1:A:445:ILE:O	2.30	0.61
1:A:728:PRO:O	1:A:728:PRO:HG2	2.00	0.61
1:A:612:GLN:O	1:A:616:GLN:HB3	1.98	0.61
1:A:767:LEU:O	1:A:783:ARG:NH1	2.34	0.61
1:A:1189:LYS:CD	1:A:1189:LYS:N	2.30	0.61
1:A:1070:ASN:OD1	1:A:1073:LYS:HE3	2.01	0.61
1:A:739:ILE:HG22	1:A:740:VAL:N	2.16	0.61
1:A:619:LYS:HG2	1:A:623:GLU:HG2	1.81	0.60
1:A:149:GLY:O	1:A:153:LYS:HG3	2.01	0.60
1:A:129:HIS:NE2	1:A:243:GLU:OE1	2.31	0.60
1:A:285:TYR:N	1:A:286:GLU:OE1	2.34	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:542:LEU:O	1:A:545:PHE:HB2	2.02	0.60
1:A:948:ASN:O	1:A:952:LYS:HG3	2.01	0.60
1:A:677:LEU:HD11	1:A:684:LEU:HG	1.84	0.60
1:A:541:PRO:HB2	1:A:542:LEU:HD23	1.84	0.60
1:A:645:ILE:HD13	1:A:645:ILE:C	2.21	0.60
1:A:1029:ILE:O	1:A:1032:ALA:CA	2.49	0.60
1:A:120:LEU:N	1:A:120:LEU:CD1	2.54	0.60
1:A:139:SER:OG	1:A:191:SER:N	2.35	0.60
1:A:419:ILE:O	1:A:422:LEU:HB2	2.01	0.60
1:A:645:ILE:C	1:A:647:ASP:N	2.42	0.60
1:A:619:LYS:HE2	1:A:623:GLU:HG3	1.84	0.60
1:A:857:ASN:O	1:A:861:THR:CG2	2.48	0.60
1:A:166:ASN:ND2	1:A:269:HIS:HA	2.15	0.60
1:A:1126:ILE:O	1:A:1126:ILE:HG13	2.00	0.59
1:A:743:GLN:HG2	1:A:818:GLU:HG3	1.84	0.59
1:A:797:TYR:HE1	1:A:814:LEU:CD1	2.14	0.59
1:A:562:PRO:C	1:A:564:TYR:N	2.54	0.59
1:A:356:ASP:OD2	1:A:358:SER:OG	2.19	0.59
1:A:1093:THR:OG1	1:A:1094:GLU:N	2.35	0.59
1:A:827:ASN:HB2	1:A:950:SER:OG	2.00	0.59
1:A:805:VAL:HG12	1:A:806:THR:H	1.67	0.59
1:A:876:LYS:NZ	1:A:1060:SER:OG	2.33	0.59
1:A:612:GLN:CA	1:A:613:GLU:CB	2.42	0.59
1:A:769:ASN:OD1	1:A:770:LYS:N	2.33	0.59
1:A:763:LYS:HG2	1:A:764:THR:N	2.15	0.59
1:A:612:GLN:O	1:A:612:GLN:HG2	2.03	0.59
1:A:346:GLY:N	1:A:577:ALA:O	2.34	0.59
1:A:490:LEU:HD22	1:A:569:VAL:CG1	2.32	0.59
1:A:560:ASN:ND2	1:A:560:ASN:N	2.42	0.59
1:A:542:LEU:HA	1:A:545:PHE:CD1	2.36	0.59
1:A:995:VAL:HG22	1:A:1165:LYS:HB3	1.85	0.59
1:A:680:ASN:HD21	1:A:683:MET:HB2	1.68	0.59
1:A:934:THR:CG2	1:A:1118:SER:OG	2.50	0.59
1:A:619:LYS:CG	1:A:623:GLU:HG2	2.33	0.59
1:A:612:GLN:CB	1:A:615:GLU:N	2.66	0.59
1:A:624:LEU:HD23	1:A:624:LEU:O	2.00	0.59
1:A:596:ASN:OD1	1:A:596:ASN:N	2.30	0.59
1:A:156:LEU:HD12	1:A:177:ASN:HB2	1.85	0.59
1:A:953:ASN:H	1:A:953:ASN:HD22	1.49	0.59
1:A:132:GLU:HG2	1:A:133:HIS:N	2.17	0.59
1:A:805:VAL:HG12	1:A:806:THR:N	2.18	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:955:VAL:CG1	1:A:955:VAL:O	2.47	0.59
1:A:746:PHE:CE1	1:A:924:PHE:CD1	2.90	0.59
1:A:543:LEU:HD23	1:A:544:ILE:CG2	2.32	0.58
1:A:445:ILE:HB	1:A:461:GLY:CA	2.31	0.58
1:A:105:ASP:CG	1:A:107:LEU:HD12	2.24	0.58
1:A:107:LEU:HD13	1:A:1113:ARG:CZ	2.32	0.58
1:A:1160:VAL:HG23	1:A:1160:VAL:O	2.02	0.58
1:A:197:VAL:HG22	1:A:197:VAL:O	1.98	0.58
1:A:657:VAL:CG2	1:A:658:ASN:N	2.66	0.58
1:A:191:SER:O	1:A:195:PRO:HG3	2.03	0.58
1:A:1086:ARG:NH2	1:A:1154:ASP:OD1	2.37	0.58
1:A:504:GLU:O	1:A:508:ASN:HB2	2.03	0.58
1:A:753:VAL:HG22	1:A:980:TRP:HB2	1.86	0.58
1:A:113:PHE:CD1	1:A:115:PHE:HE2	2.22	0.58
1:A:892:TYR:O	1:A:895:TYR:N	2.37	0.58
1:A:1003:PRO:HG2	1:A:1003:PRO:O	2.03	0.58
1:A:613:GLU:O	1:A:617:VAL:HG23	2.03	0.58
1:A:113:PHE:CE2	1:A:173:ALA:HB3	2.38	0.58
1:A:258:GLU:O	1:A:262:TYR:CD2	2.57	0.58
1:A:233:LYS:C	1:A:234:VAL:HG23	2.22	0.58
1:A:232:TYR:O	1:A:233:LYS:HG3	2.04	0.58
1:A:557:LYS:CB	1:A:564:TYR:CE2	2.79	0.58
1:A:759:LEU:O	1:A:763:LYS:HB3	2.04	0.58
1:A:746:PHE:CE2	1:A:929:LEU:HD13	2.38	0.58
1:A:1171:THR:OG1	1:A:1172:THR:N	2.36	0.57
1:A:316:ASN:O	1:A:320:GLN:CG	2.52	0.57
1:A:675:ASN:H	1:A:675:ASN:ND2	2.02	0.57
1:A:372:ASN:HB3	1:A:406:SER:HA	1.85	0.57
1:A:645:ILE:HA	1:A:648:LEU:HD12	1.86	0.57
1:A:619:LYS:HG2	1:A:623:GLU:CG	2.35	0.57
1:A:935:SER:OG	1:A:939:ALA:HB3	2.04	0.57
1:A:544:ILE:O	1:A:544:ILE:CG1	2.44	0.57
1:A:769:ASN:O	1:A:771:THR:HG23	2.03	0.57
1:A:283:LEU:HD12	1:A:284:THR:H	1.68	0.57
1:A:613:GLU:O	1:A:617:VAL:CG2	2.53	0.57
1:A:1029:ILE:HA	1:A:1032:ALA:HB3	1.86	0.57
1:A:113:PHE:CE1	1:A:115:PHE:CE2	2.87	0.56
1:A:522:SER:O	1:A:525:ILE:HD11	1.96	0.56
1:A:659:VAL:HB	1:A:687:ASN:HB3	1.86	0.56
1:A:597:LEU:HA	1:A:600:GLN:HB2	1.87	0.56
1:A:469:ASN:C	1:A:471:LYS:N	2.58	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1115:ILE:HG13	1:A:1119:LYS:HG3	1.87	0.56
1:A:334:ALA:O	1:A:335:VAL:HG22	2.05	0.56
1:A:113:PHE:CD1	1:A:115:PHE:CE2	2.94	0.56
1:A:1093:THR:O	1:A:1097:LEU:N	2.34	0.56
1:A:834:LEU:CD1	1:A:834:LEU:C	2.60	0.56
1:A:834:LEU:HB2	1:A:954:LEU:HD13	1.87	0.56
1:A:801:ASP:O	1:A:802:HIS:HB2	2.05	0.56
1:A:452:SER:C	1:A:453:LEU:HD23	2.26	0.56
1:A:618:ILE:HD12	1:A:618:ILE:N	2.20	0.56
1:A:1055:ILE:HG13	1:A:1056:GLU:N	2.19	0.56
1:A:91:HIS:HD2	1:A:322:LEU:CD1	2.19	0.56
1:A:858:GLY:CA	1:A:861:THR:CG2	2.58	0.56
1:A:797:TYR:CE1	1:A:814:LEU:CD1	2.88	0.56
1:A:1049:TYR:HB3	1:A:1067:ARG:HB2	1.88	0.56
1:A:582:ILE:HG22	1:A:582:ILE:O	1.99	0.56
1:A:348:PHE:C	1:A:350:ILE:CD1	2.68	0.56
1:A:948:ASN:OD1	1:A:948:ASN:N	2.30	0.56
1:A:681:GLU:HA	1:A:684:LEU:HD12	1.88	0.56
1:A:1180:ILE:HA	1:A:1184:ASP:O	2.05	0.56
1:A:542:LEU:HA	1:A:545:PHE:HD1	1.71	0.55
1:A:564:TYR:CD1	1:A:564:TYR:O	2.59	0.55
1:A:425:HIS:N	1:A:429:SER:OG	2.39	0.55
1:A:232:TYR:O	1:A:233:LYS:CG	2.54	0.55
1:A:612:GLN:HB2	1:A:615:GLU:N	2.21	0.55
1:A:624:LEU:O	1:A:627:TYR:CA	2.54	0.55
1:A:1113:ARG:H	1:A:1116:GLU:HG3	1.70	0.55
1:A:688:MET:C	1:A:690:VAL:N	2.59	0.55
1:A:151:LEU:HA	1:A:155:THR:CG2	2.37	0.55
1:A:407:LEU:HD21	1:A:572:HIS:CE1	2.41	0.55
1:A:875:VAL:HG12	1:A:876:LYS:N	2.22	0.55
1:A:645:ILE:CA	1:A:648:LEU:HD12	2.37	0.55
1:A:252:LEU:CD1	1:A:252:LEU:N	2.65	0.55
1:A:889:ILE:O	1:A:894:ASN:OD1	2.25	0.55
1:A:806:THR:C	1:A:807:ASP:O	2.42	0.55
1:A:1023:ASP:OD1	1:A:1024:PRO:HD2	2.07	0.55
1:A:267:ASN:O	1:A:270:SER:OG	2.22	0.55
1:A:604:LYS:O	1:A:607:GLU:HG2	2.06	0.55
1:A:573:PHE:N	1:A:573:PHE:CD1	2.72	0.55
1:A:542:LEU:HD22	1:A:542:LEU:N	2.20	0.55
1:A:334:ALA:C	1:A:335:VAL:CG2	2.75	0.55
1:A:1072:GLU:OE2	1:A:1179:TYR:CD1	2.60	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:876:LYS:CE	1:A:1060:SER:OG	2.54	0.54
1:A:151:LEU:HA	1:A:155:THR:HG21	1.89	0.54
1:A:790:MET:HG3	1:A:819:MET:HG2	1.88	0.54
1:A:348:PHE:HD1	1:A:348:PHE:N	2.01	0.54
1:A:193:PHE:C	1:A:194:GLN:CG	2.75	0.54
1:A:657:VAL:HG22	1:A:658:ASN:N	2.22	0.54
1:A:96:THR:O	1:A:96:THR:HG22	2.04	0.54
1:A:860:LYS:HG2	1:A:861:THR:N	2.22	0.54
1:A:71:TYR:HE1	1:A:319:ASP:HB2	1.73	0.54
1:A:428:GLU:C	1:A:429:SER:O	2.41	0.54
1:A:207:GLU:O	1:A:240:VAL:HG23	2.08	0.54
1:A:154:GLY:CA	1:A:1099:ARG:O	2.55	0.54
1:A:1028:VAL:O	1:A:1032:ALA:CB	2.55	0.54
1:A:1023:ASP:OD1	1:A:1024:PRO:CD	2.55	0.54
1:A:748:LEU:HD21	1:A:923:ILE:HD13	1.90	0.54
1:A:490:LEU:HD22	1:A:569:VAL:HG11	1.90	0.54
1:A:643:ILE:O	1:A:644:SER:C	2.45	0.54
1:A:1101:ILE:HD11	1:A:1141:ILE:O	2.06	0.54
1:A:645:ILE:CB	1:A:648:LEU:HD12	2.37	0.54
1:A:688:MET:HG3	1:A:688:MET:O	2.08	0.54
1:A:1174:GLU:N	1:A:1174:GLU:CD	2.57	0.54
1:A:139:SER:O	1:A:196:ASN:OD1	2.26	0.54
1:A:1038:LEU:HB3	1:A:1051:VAL:HG21	1.89	0.54
1:A:837:VAL:CG1	1:A:957:TYR:CE2	2.90	0.53
1:A:769:ASN:O	1:A:771:THR:CG2	2.55	0.53
1:A:114:ALA:HA	1:A:171:TYR:O	2.09	0.53
1:A:862:THR:HG23	1:A:865:GLU:HB2	1.89	0.53
1:A:61:ILE:O	1:A:61:ILE:HG13	2.08	0.53
1:A:1034:LYS:HD3	1:A:1053:ALA:N	2.22	0.53
1:A:60:TRP:CE3	1:A:61:ILE:HA	2.44	0.53
1:A:268:VAL:O	1:A:268:VAL:HG23	2.09	0.53
1:A:119:THR:C	1:A:167:ASP:O	2.39	0.53
1:A:624:LEU:CD2	1:A:625:SER:CA	2.86	0.53
1:A:1111:PRO:C	1:A:1112:ARG:HG3	2.29	0.53
1:A:107:LEU:HD13	1:A:1113:ARG:NH1	2.23	0.53
1:A:765:LEU:C	1:A:765:LEU:HD12	2.22	0.53
1:A:611:GLU:C	1:A:613:GLU:HB2	2.28	0.53
1:A:167:ASP:OD1	1:A:167:ASP:N	2.30	0.53
1:A:624:LEU:O	1:A:627:TYR:CB	2.56	0.53
1:A:1179:TYR:CD1	1:A:1183:VAL:HB	2.44	0.53
1:A:857:ASN:O	1:A:861:THR:HG22	2.08	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:885:ALA:O	1:A:889:ILE:HG12	2.08	0.53
1:A:549:LYS:O	1:A:553:ILE:HG13	2.08	0.53
1:A:682:HIS:O	1:A:686:ASP:N	2.39	0.53
1:A:887:ASN:O	1:A:891:GLY:CA	2.56	0.53
1:A:624:LEU:HD21	1:A:628:LYS:HD2	1.91	0.53
1:A:154:GLY:HA3	1:A:1099:ARG:O	2.09	0.53
1:A:255:LEU:HD13	1:A:584:LEU:HD12	1.91	0.53
1:A:871:LEU:O	1:A:874:TYR:N	2.38	0.53
1:A:82:PHE:CE1	1:A:545:PHE:CD2	2.97	0.52
1:A:407:LEU:HD12	1:A:416:LEU:HD11	1.91	0.52
1:A:750:HIS:O	1:A:922:LYS:NZ	2.41	0.52
1:A:746:PHE:CE1	1:A:924:PHE:HD1	2.27	0.52
1:A:183:ASN:HD21	1:A:643:ILE:HG22	1.74	0.52
1:A:443:ASN:ND2	1:A:463:LYS:HZ2	2.06	0.52
1:A:263:MET:HE2	1:A:457:ILE:HD12	0.57	0.52
1:A:264:PHE:HB3	1:A:267:ASN:OD1	2.09	0.52
1:A:612:GLN:CB	1:A:616:GLN:CA	2.81	0.52
1:A:807:ASP:OD2	1:A:808:LYS:N	2.43	0.52
1:A:739:ILE:CG2	1:A:740:VAL:N	2.73	0.52
1:A:1115:ILE:HA	1:A:1118:SER:HB2	1.91	0.52
1:A:525:ILE:N	1:A:525:ILE:CD1	2.30	0.52
1:A:748:LEU:CD2	1:A:923:ILE:HG23	2.36	0.52
1:A:827:ASN:OD1	1:A:828:ASP:N	2.42	0.52
1:A:653:LEU:HD12	1:A:654:GLU:O	2.06	0.52
1:A:610:ASN:C	1:A:611:GLU:HG2	2.24	0.52
1:A:561:GLU:O	1:A:564:TYR:CB	2.58	0.52
1:A:686:ASP:O	1:A:690:VAL:CG2	2.52	0.52
1:A:746:PHE:CE1	1:A:924:PHE:CE1	2.98	0.52
1:A:612:GLN:HB2	1:A:615:GLU:C	2.17	0.52
1:A:572:HIS:C	1:A:573:PHE:HD1	2.13	0.52
1:A:573:PHE:N	1:A:573:PHE:HD1	2.07	0.52
1:A:365:VAL:HG21	1:A:482:VAL:HG21	1.92	0.52
1:A:152:GLU:HG3	1:A:152:GLU:O	2.08	0.52
1:A:984:ILE:HG23	1:A:989:LEU:CD1	2.36	0.52
1:A:428:GLU:O	1:A:429:SER:O	2.28	0.52
1:A:1036:SER:O	1:A:1040:ASP:CB	2.56	0.52
1:A:282:ASN:N	1:A:282:ASN:HD22	2.08	0.52
1:A:419:ILE:HG22	1:A:420:ASN:CA	2.39	0.52
1:A:138:GLY:HA2	1:A:147:SER:HG	1.73	0.52
1:A:60:TRP:C	1:A:60:TRP:CE3	2.83	0.52
1:A:832:ILE:HG22	1:A:833:ALA:N	2.20	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:333:ASP:O	1:A:335:VAL:CG2	2.58	0.51
1:A:902:LEU:HD12	1:A:902:LEU:C	2.27	0.51
1:A:139:SER:OG	1:A:191:SER:CA	2.57	0.51
1:A:81:GLU:OE2	1:A:548:GLU:N	2.42	0.51
1:A:71:TYR:CE1	1:A:319:ASP:HB2	2.45	0.51
1:A:874:TYR:HD2	1:A:875:VAL:N	2.08	0.51
1:A:300:LYS:HE2	1:A:334:ALA:O	2.11	0.51
1:A:683:MET:O	1:A:687:ASN:HB2	2.10	0.51
1:A:255:LEU:O	1:A:256:TYR:C	2.48	0.51
1:A:872:MET:HE3	1:A:1064:LEU:HD23	1.91	0.51
1:A:897:LYS:HE2	1:A:900:GLU:OE1	2.11	0.51
1:A:232:TYR:O	1:A:233:LYS:CD	2.58	0.51
1:A:897:LYS:O	1:A:901:GLN:HG3	2.09	0.51
1:A:918:ARG:HG3	1:A:918:ARG:O	2.08	0.51
1:A:435:LEU:HD13	1:A:461:GLY:O	2.10	0.51
1:A:367:VAL:HA	1:A:580:SER:O	2.11	0.51
1:A:894:ASN:C	1:A:894:ASN:HD22	2.02	0.51
1:A:91:HIS:HB3	1:A:95:LYS:H	1.76	0.51
1:A:349:TYR:C	1:A:350:ILE:CD1	2.63	0.51
1:A:589:ASN:C	1:A:591:ALA:N	2.59	0.51
1:A:801:ASP:C	1:A:802:HIS:O	2.43	0.51
1:A:806:THR:OG1	1:A:1058:ASP:HA	2.11	0.51
1:A:847:LYS:O	1:A:850:ASP:HB2	2.10	0.51
1:A:688:MET:C	1:A:690:VAL:H	2.15	0.51
1:A:995:VAL:HG22	1:A:1165:LYS:HA	1.92	0.51
1:A:166:ASN:OD1	1:A:166:ASN:O	2.29	0.51
1:A:663:ASN:O	1:A:663:ASN:OD1	2.29	0.51
1:A:443:ASN:HD22	1:A:463:LYS:HZ2	1.58	0.51
1:A:1011:MET:HE2	1:A:1163:PHE:HB3	1.93	0.51
1:A:471:LYS:O	1:A:472:ILE:C	2.47	0.50
1:A:689:ASP:O	1:A:693:LYS:CG	2.57	0.50
1:A:286:GLU:H	1:A:286:GLU:CD	2.07	0.50
1:A:119:THR:H	1:A:168:ARG:HA	1.75	0.50
1:A:562:PRO:O	1:A:564:TYR:N	2.44	0.50
1:A:146:ASN:OD1	1:A:148:ILE:HG22	2.11	0.50
1:A:509:ASN:O	1:A:510:ILE:C	2.47	0.50
1:A:1036:SER:O	1:A:1040:ASP:N	2.33	0.50
1:A:616:GLN:OE1	1:A:616:GLN:CA	2.56	0.50
1:A:806:THR:O	1:A:807:ASP:O	2.29	0.50
1:A:190:ASP:O	1:A:190:ASP:OD1	2.29	0.50
1:A:1037:TYR:O	1:A:1038:LEU:O	2.29	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:760:ASN:OD1	1:A:760:ASN:O	2.30	0.50
1:A:589:ASN:O	1:A:590:TYR:C	2.47	0.50
1:A:1006:VAL:HG23	1:A:1006:VAL:O	2.10	0.50
1:A:601:GLU:O	1:A:602:LEU:C	2.46	0.50
1:A:810:ASN:OD1	1:A:810:ASN:O	2.29	0.50
1:A:372:ASN:CB	1:A:406:SER:HA	2.41	0.50
1:A:1180:ILE:CA	1:A:1184:ASP:O	2.60	0.50
1:A:1184:ASP:OD1	1:A:1186:GLU:N	2.41	0.50
1:A:857:ASN:OD1	1:A:857:ASN:O	2.29	0.50
1:A:564:TYR:HD1	1:A:564:TYR:O	1.95	0.50
1:A:503:VAL:HG12	1:A:504:GLU:N	2.23	0.50
1:A:80:GLU:O	1:A:80:GLU:OE2	2.30	0.50
1:A:860:LYS:HG2	1:A:861:THR:H	1.77	0.50
1:A:261:LYS:O	1:A:265:PRO:HB3	2.12	0.50
1:A:1098:LEU:O	1:A:1099:ARG:C	2.46	0.50
1:A:1029:ILE:CA	1:A:1032:ALA:HB3	2.41	0.50
1:A:85:THR:O	1:A:85:THR:OG1	2.29	0.50
1:A:612:GLN:CG	1:A:616:GLN:N	2.71	0.50
1:A:571:LYS:HG2	1:A:572:HIS:N	2.25	0.50
1:A:127:ILE:N	1:A:128:PRO:HD2	2.27	0.50
1:A:619:LYS:HE2	1:A:623:GLU:CD	2.32	0.50
1:A:240:VAL:O	1:A:243:GLU:N	2.45	0.50
1:A:332:ASP:OD1	1:A:334:ALA:CA	2.58	0.49
1:A:858:GLY:O	1:A:862:THR:HB	2.12	0.49
1:A:347:PRO:C	1:A:348:PHE:HD1	2.14	0.49
1:A:807:ASP:HA	1:A:1018:PRO:HG3	1.94	0.49
1:A:570:GLU:HA	1:A:574:ILE:CD1	2.41	0.49
1:A:645:ILE:O	1:A:646:SER:C	2.47	0.49
1:A:690:VAL:O	1:A:691:PHE:C	2.44	0.49
1:A:452:SER:O	1:A:453:LEU:HD23	2.11	0.49
1:A:347:PRO:CG	1:A:579:ARG:NH2	2.75	0.49
1:A:589:ASN:O	1:A:591:ALA:N	2.45	0.49
1:A:250:SER:OG	1:A:253:GLU:HB2	2.12	0.49
1:A:614:LYS:CD	1:A:618:ILE:HD11	2.41	0.49
1:A:498:PHE:C	1:A:499:ASN:O	2.39	0.49
1:A:572:HIS:C	1:A:573:PHE:CD1	2.86	0.49
1:A:446:ASP:OD1	1:A:446:ASP:O	2.30	0.49
1:A:437:ASP:N	1:A:437:ASP:OD1	2.39	0.49
1:A:284:THR:HB	1:A:287:GLU:HB3	1.94	0.49
1:A:1039:TRP:O	1:A:1039:TRP:CG	2.62	0.49
1:A:593:GLU:C	1:A:594:GLN:OE1	2.51	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:696:VAL:C	1:A:698:LYS:H	2.14	0.49
1:A:672:GLU:O	1:A:672:GLU:OE2	2.29	0.49
1:A:781:ILE:HG23	1:A:781:ILE:O	2.13	0.49
1:A:467:ARG:CG	1:A:467:ARG:O	2.60	0.49
1:A:319:ASP:OD1	1:A:319:ASP:O	2.29	0.49
1:A:816:ASN:OD1	1:A:816:ASN:O	2.30	0.49
1:A:723:TYR:C	1:A:726:ASN:ND2	2.65	0.49
1:A:446:ASP:CG	1:A:446:ASP:O	2.45	0.49
1:A:213:VAL:HG22	1:A:621:PHE:CD2	2.47	0.49
1:A:925:ASN:CG	1:A:965:ILE:CD1	2.53	0.49
1:A:373:PRO:CD	1:A:373:PRO:O	2.58	0.49
1:A:231:ASP:O	1:A:232:TYR:C	2.51	0.49
1:A:609:PHE:O	1:A:610:ASN:O	2.30	0.49
1:A:587:ASP:O	1:A:587:ASP:OD1	2.30	0.49
1:A:423:LEU:O	1:A:431:LEU:HB2	2.12	0.49
1:A:748:LEU:HD13	1:A:759:LEU:HD11	1.95	0.49
1:A:79:ASN:OD1	1:A:79:ASN:O	2.30	0.48
1:A:1138:ARG:HG3	1:A:1138:ARG:O	2.13	0.48
1:A:264:PHE:N	1:A:265:PRO:HD3	2.28	0.48
1:A:603:LYS:HD3	1:A:603:LYS:H	1.74	0.48
1:A:307:SER:CB	1:A:309:ASN:H	2.23	0.48
1:A:366:SER:O	1:A:366:SER:OG	2.30	0.48
1:A:330:TYR:CD2	1:A:330:TYR:N	2.80	0.48
1:A:612:GLN:HG3	1:A:616:GLN:HA	1.95	0.48
1:A:616:GLN:OE1	1:A:616:GLN:O	2.30	0.48
1:A:1184:ASP:OD1	1:A:1186:GLU:CG	2.61	0.48
1:A:156:LEU:N	1:A:180:ASP:OD2	2.44	0.48
1:A:940:LEU:O	1:A:941:LYS:C	2.52	0.48
1:A:927:LYS:HE2	1:A:927:LYS:HB2	1.63	0.48
1:A:254:ASP:OD1	1:A:254:ASP:O	2.30	0.48
1:A:503:VAL:O	1:A:507:ILE:HG13	2.13	0.48
1:A:1029:ILE:HD12	1:A:1029:ILE:N	2.28	0.48
1:A:370:LEU:HB2	1:A:578:HIS:CD2	2.48	0.48
1:A:1087:LYS:O	1:A:1091:THR:HG23	2.14	0.48
1:A:915:ILE:HG22	1:A:916:LEU:N	2.14	0.48
1:A:1029:ILE:C	1:A:1032:ALA:HB3	2.32	0.48
1:A:477:LYS:O	1:A:481:GLU:HG3	2.13	0.48
1:A:263:MET:SD	1:A:457:ILE:CG2	3.01	0.48
1:A:662:THR:OG1	1:A:667:ASN:ND2	2.46	0.48
1:A:408:GLU:N	1:A:408:GLU:CD	2.63	0.48
1:A:742:LEU:HD22	1:A:943:LEU:HD11	1.95	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:356:ASP:CG	1:A:358:SER:OG	2.52	0.48
1:A:612:GLN:OE1	1:A:612:GLN:N	2.46	0.48
1:A:82:PHE:HE1	1:A:545:PHE:CD2	2.32	0.48
1:A:925:ASN:OD1	1:A:965:ILE:HD13	2.11	0.48
1:A:847:LYS:O	1:A:848:VAL:C	2.50	0.48
1:A:1024:PRO:C	1:A:1141:ILE:HD13	2.33	0.48
1:A:1034:LYS:HB2	1:A:1053:ALA:HB3	1.95	0.48
1:A:183:ASN:ND2	1:A:643:ILE:HG22	2.29	0.48
1:A:612:GLN:HB3	1:A:615:GLU:N	2.27	0.48
1:A:1101:ILE:HD11	1:A:1144:THR:HB	1.96	0.48
1:A:1107:THR:OG1	1:A:1108:ILE:N	2.46	0.48
1:A:133:HIS:CE1	1:A:1043:ARG:HH22	2.32	0.48
1:A:562:PRO:O	1:A:563:MET:C	2.52	0.47
1:A:660:TYR:HB3	1:A:729:ILE:HB	1.96	0.47
1:A:560:ASN:N	1:A:560:ASN:HD22	2.01	0.47
1:A:521:THR:O	1:A:522:SER:CB	2.56	0.47
1:A:443:ASN:ND2	1:A:463:LYS:HZ1	2.11	0.47
1:A:1060:SER:O	1:A:1060:SER:OG	2.29	0.47
1:A:180:ASP:O	1:A:182:PHE:N	2.47	0.47
1:A:166:ASN:HA	1:A:273:SER:OG	2.13	0.47
1:A:934:THR:CB	1:A:1118:SER:OG	2.60	0.47
1:A:661:PHE:CD2	1:A:723:TYR:CE1	3.02	0.47
1:A:601:GLU:O	1:A:601:GLU:HG3	2.13	0.47
1:A:612:GLN:HG3	1:A:615:GLU:C	2.35	0.47
1:A:120:LEU:HD12	1:A:120:LEU:H	1.72	0.47
1:A:995:VAL:O	1:A:995:VAL:HG12	2.08	0.47
1:A:597:LEU:O	1:A:598:GLU:C	2.51	0.47
1:A:1007:ASN:HB3	1:A:1170:ILE:O	2.15	0.47
1:A:953:ASN:N	1:A:953:ASN:HD22	2.13	0.47
1:A:529:PHE:O	1:A:533:SER:HB3	2.14	0.47
1:A:285:TYR:CZ	1:A:289:LYS:HE2	2.49	0.47
1:A:801:ASP:O	1:A:802:HIS:C	2.52	0.47
1:A:1120:LEU:O	1:A:1120:LEU:HG	2.08	0.47
1:A:126:GLY:O	1:A:130:ILE:HG13	2.15	0.47
1:A:610:ASN:N	1:A:613:GLU:HG2	2.29	0.47
1:A:534:LYS:HG3	1:A:540:ASP:O	2.15	0.47
1:A:872:MET:HE1	1:A:1052:PHE:CD1	2.50	0.47
1:A:992:GLU:HG2	1:A:992:GLU:H	1.38	0.47
1:A:666:GLU:CG	1:A:666:GLU:O	2.62	0.47
1:A:82:PHE:CE1	1:A:545:PHE:HD2	2.33	0.47
1:A:318:VAL:HG12	1:A:319:ASP:N	2.29	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1051:VAL:CG1	1:A:1051:VAL:O	2.59	0.47
1:A:121:THR:CG2	1:A:128:PRO:HG2	2.45	0.47
1:A:178:ASN:O	1:A:179:LYS:C	2.51	0.47
1:A:613:GLU:N	1:A:616:GLN:HG2	2.30	0.47
1:A:805:VAL:HG21	1:A:1016:PHE:HB3	1.97	0.47
1:A:870:ILE:O	1:A:871:LEU:C	2.53	0.47
1:A:412:ASP:O	1:A:413:TYR:C	2.52	0.47
1:A:1011:MET:CE	1:A:1163:PHE:HB3	2.45	0.47
1:A:1063:PHE:HE2	1:A:1163:PHE:CE1	2.33	0.47
1:A:264:PHE:HA	1:A:341:GLN:OE1	2.14	0.46
1:A:618:ILE:CD1	1:A:618:ILE:N	2.77	0.46
1:A:1007:ASN:N	1:A:1007:ASN:OD1	2.48	0.46
1:A:619:LYS:CE	1:A:623:GLU:CG	2.92	0.46
1:A:612:GLN:CG	1:A:615:GLU:HB3	2.45	0.46
1:A:144:TYR:HB3	1:A:632:GLU:OE1	2.15	0.46
1:A:416:LEU:O	1:A:420:ASN:CB	2.64	0.46
1:A:783:ARG:O	1:A:783:ARG:CG	2.58	0.46
1:A:637:LEU:C	1:A:639:LYS:H	2.17	0.46
1:A:369:TRP:CE2	1:A:579:ARG:HD3	2.50	0.46
1:A:522:SER:C	1:A:525:ILE:CD1	2.76	0.46
1:A:644:SER:HB2	1:A:646:SER:OG	2.15	0.46
1:A:128:PRO:HG3	1:A:291:PHE:CZ	2.50	0.46
1:A:724:GLU:N	1:A:726:ASN:HD22	2.13	0.46
1:A:783:ARG:HG3	1:A:783:ARG:O	2.15	0.46
1:A:1093:THR:O	1:A:1094:GLU:C	2.52	0.46
1:A:154:GLY:HA3	1:A:1099:ARG:CA	2.45	0.46
1:A:635:GLU:H	1:A:635:GLU:HG2	1.41	0.46
1:A:350:ILE:CD1	1:A:350:ILE:H	2.24	0.46
1:A:805:VAL:HG22	1:A:1022:LEU:HD12	1.97	0.46
1:A:807:ASP:OD2	1:A:810:ASN:N	2.48	0.46
1:A:872:MET:HE2	1:A:872:MET:HB2	1.69	0.46
1:A:812:GLN:CA	1:A:812:GLN:NE2	2.74	0.46
1:A:428:GLU:HA	1:A:433:LYS:HB2	1.98	0.46
1:A:1137:PHE:CE2	1:A:1141:ILE:HG13	2.51	0.46
1:A:624:LEU:HD23	1:A:625:SER:HA	1.97	0.46
1:A:872:MET:HB3	1:A:1064:LEU:HD23	1.98	0.46
1:A:105:ASP:OD2	1:A:107:LEU:HD12	2.14	0.46
1:A:661:PHE:CE1	1:A:728:PRO:HB3	2.51	0.46
1:A:358:SER:HB2	1:A:360:GLU:O	2.15	0.46
1:A:801:ASP:OD2	1:A:804:ASN:HB2	2.16	0.46
1:A:741:TYR:HD2	1:A:820:HIS:CD2	2.33	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:495:LYS:O	1:A:495:LYS:HG3	2.08	0.46
1:A:264:PHE:CE2	1:A:457:ILE:HD11	2.51	0.46
1:A:82:PHE:CD1	1:A:545:PHE:HD2	2.33	0.46
1:A:1016:PHE:HZ	1:A:1026:PHE:CE2	2.33	0.46
1:A:1029:ILE:HG22	1:A:1030:VAL:N	2.25	0.46
1:A:135:VAL:HG22	1:A:136:LEU:N	2.30	0.46
1:A:1034:LYS:HA	1:A:1038:LEU:HB2	1.97	0.46
1:A:691:PHE:O	1:A:695:TYR:HB2	2.15	0.46
1:A:955:VAL:O	1:A:955:VAL:HG13	2.13	0.46
1:A:419:ILE:HG22	1:A:420:ASN:H	1.69	0.46
1:A:596:ASN:O	1:A:597:LEU:C	2.50	0.46
1:A:1051:VAL:HG22	1:A:1052:PHE:N	2.30	0.46
1:A:694:LYS:HB3	1:A:695:TYR:CD1	2.50	0.46
1:A:761:LEU:O	1:A:765:LEU:N	2.46	0.46
1:A:543:LEU:C	1:A:545:PHE:N	2.68	0.46
1:A:680:ASN:O	1:A:684:LEU:HD12	2.16	0.46
1:A:875:VAL:HG13	1:A:875:VAL:O	2.14	0.46
1:A:897:LYS:O	1:A:898:LEU:C	2.53	0.46
1:A:473:LYS:HB2	1:A:481:GLU:OE2	2.15	0.46
1:A:447:ARG:HD3	1:A:447:ARG:O	2.16	0.46
1:A:590:TYR:O	1:A:594:GLN:HB2	2.16	0.46
1:A:305:PHE:CZ	1:A:307:SER:HB3	2.50	0.46
1:A:1107:THR:HG1	1:A:1108:ILE:N	2.14	0.46
1:A:561:GLU:O	1:A:564:TYR:HB3	2.15	0.46
1:A:763:LYS:HE2	1:A:792:ALA:O	2.16	0.46
1:A:644:SER:O	1:A:647:ASP:HB2	2.17	0.45
1:A:135:VAL:HG22	1:A:136:LEU:H	1.81	0.45
1:A:1051:VAL:HG13	1:A:1051:VAL:O	2.10	0.45
1:A:156:LEU:HB2	1:A:180:ASP:OD2	2.16	0.45
1:A:115:PHE:HE1	1:A:189:MET:HG3	1.81	0.45
1:A:542:LEU:O	1:A:543:LEU:C	2.54	0.45
1:A:671:MET:HG3	1:A:675:ASN:ND2	2.31	0.45
1:A:161:ASN:HD22	1:A:162:ALA:N	2.05	0.45
1:A:66:PRO:HD2	1:A:311:PRO:HG2	1.98	0.45
1:A:622:GLU:O	1:A:626:LYS:HG2	2.17	0.45
1:A:607:GLU:HG3	1:A:608:ASN:N	2.32	0.45
1:A:613:GLU:N	1:A:616:GLN:CG	2.80	0.45
1:A:696:VAL:O	1:A:698:LYS:N	2.49	0.45
1:A:105:ASP:OD2	1:A:1113:ARG:NH1	2.38	0.45
1:A:454:VAL:HG22	1:A:454:VAL:O	2.15	0.45
1:A:909:PHE:CD1	1:A:912:LEU:HD23	2.51	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:542:LEU:O	1:A:545:PHE:N	2.49	0.45
1:A:418:ILE:HG22	1:A:419:ILE:N	2.21	0.45
1:A:858:GLY:O	1:A:861:THR:CG2	2.64	0.45
1:A:894:ASN:C	1:A:894:ASN:ND2	2.63	0.45
1:A:413:TYR:CE2	1:A:417:LEU:HD11	2.51	0.45
1:A:664:ILE:HG23	1:A:664:ILE:HD13	1.56	0.45
1:A:751:LEU:O	1:A:980:TRP:HB3	2.17	0.45
1:A:781:ILE:O	1:A:781:ILE:HG22	2.08	0.45
1:A:325:LEU:HD23	1:A:325:LEU:HA	1.48	0.45
1:A:1107:THR:HG1	1:A:1108:ILE:H	1.65	0.45
1:A:876:LYS:HZ1	1:A:1060:SER:HG	1.63	0.45
1:A:156:LEU:HD12	1:A:177:ASN:CB	2.45	0.45
1:A:189:MET:HE1	1:A:317:PHE:CZ	2.51	0.45
1:A:465:ILE:H	1:A:465:ILE:HG12	1.45	0.45
1:A:187:VAL:HG12	1:A:188:TYR:N	2.28	0.45
1:A:478:VAL:O	1:A:482:VAL:HG23	2.17	0.45
1:A:484:ASP:O	1:A:485:VAL:C	2.52	0.45
1:A:648:LEU:C	1:A:649:ASN:O	2.51	0.45
1:A:997:LYS:HB3	1:A:1187:PHE:CE2	2.52	0.44
1:A:472:ILE:HG22	1:A:474:ASN:O	2.17	0.44
1:A:732:TYR:OH	1:A:1121:SER:CB	2.63	0.44
1:A:535:LEU:HA	1:A:535:LEU:HD23	1.61	0.44
1:A:206:THR:HG23	1:A:628:LYS:HZ1	1.77	0.44
1:A:1179:TYR:HE2	1:A:1187:PHE:HE1	1.60	0.44
1:A:980:TRP:CE3	1:A:981:ASN:HA	2.53	0.44
1:A:1010:SER:O	1:A:1010:SER:OG	2.33	0.44
1:A:1162:GLU:O	1:A:1165:LYS:HG3	2.15	0.44
1:A:135:VAL:O	1:A:191:SER:OG	2.35	0.44
1:A:872:MET:HE3	1:A:872:MET:HB3	1.74	0.44
1:A:672:GLU:HA	1:A:675:ASN:ND2	2.32	0.44
1:A:528:VAL:O	1:A:529:PHE:C	2.55	0.44
1:A:417:LEU:N	1:A:417:LEU:HD23	2.32	0.44
1:A:369:TRP:HD1	1:A:576:ASN:HB3	1.79	0.44
1:A:284:THR:CB	1:A:287:GLU:HB3	2.48	0.44
1:A:892:TYR:O	1:A:894:ASN:N	2.50	0.44
1:A:736:THR:O	1:A:737:THR:O	2.34	0.44
1:A:285:TYR:O	1:A:288:PHE:HB3	2.17	0.44
1:A:314:LEU:CG	1:A:315:LEU:N	2.80	0.44
1:A:424:ILE:HD11	1:A:460:ILE:CG2	2.48	0.44
1:A:748:LEU:HD22	1:A:751:LEU:HD22	1.98	0.44
1:A:110:GLU:HG3	1:A:158:THR:HG21	1.99	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:368:ALA:HA	1:A:458:PHE:O	2.18	0.44
1:A:611:GLU:HA	1:A:612:GLN:HA	1.79	0.44
1:A:346:GLY:HA3	1:A:347:PRO:HA	1.79	0.44
1:A:955:VAL:O	1:A:958:PHE:HB2	2.18	0.44
1:A:1132:GLN:HG2	1:A:1132:GLN:H	1.39	0.44
1:A:757:ALA:C	1:A:759:LEU:H	2.21	0.44
1:A:133:HIS:HE1	1:A:1043:ARG:NH2	2.15	0.44
1:A:103:THR:O	1:A:308:LYS:HA	2.18	0.44
1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HG	1.51	0.44
1:A:411:THR:O	1:A:411:THR:HG22	2.17	0.44
1:A:264:PHE:N	1:A:265:PRO:CD	2.81	0.44
1:A:613:GLU:O	1:A:617:VAL:HB	2.18	0.44
1:A:612:GLN:HG3	1:A:616:GLN:N	2.32	0.44
1:A:478:VAL:CG1	1:A:479:HIS:N	2.77	0.44
1:A:269:HIS:NE2	1:A:454:VAL:HG12	2.33	0.44
1:A:446:ASP:OD1	1:A:446:ASP:C	2.55	0.43
1:A:234:VAL:HG12	1:A:235:SER:N	2.33	0.43
1:A:435:LEU:HD23	1:A:485:VAL:HG11	2.00	0.43
1:A:113:PHE:C	1:A:113:PHE:CD1	2.92	0.43
1:A:882:LYS:HG2	1:A:882:LYS:O	2.18	0.43
1:A:815:PHE:C	1:A:815:PHE:CD1	2.91	0.43
1:A:980:TRP:CD2	1:A:981:ASN:N	2.86	0.43
1:A:454:VAL:CG2	1:A:454:VAL:O	2.67	0.43
1:A:512:PHE:O	1:A:512:PHE:CD2	2.72	0.43
1:A:1042:VAL:O	1:A:1042:VAL:CG1	2.57	0.43
1:A:314:LEU:HD12	1:A:315:LEU:N	2.23	0.43
1:A:1179:TYR:CE2	1:A:1187:PHE:CE1	3.01	0.43
1:A:893:GLU:O	1:A:893:GLU:HG3	2.17	0.43
1:A:832:ILE:CG2	1:A:832:ILE:O	2.55	0.43
1:A:1083:LYS:HB3	1:A:1083:LYS:HE3	1.32	0.43
1:A:1179:TYR:CE1	1:A:1183:VAL:CB	2.97	0.43
1:A:133:HIS:HE1	1:A:1043:ARG:HH22	1.66	0.43
1:A:428:GLU:O	1:A:429:SER:C	2.51	0.43
1:A:956:SER:O	1:A:956:SER:OG	2.30	0.43
1:A:436:THR:HG22	1:A:437:ASP:N	2.28	0.43
1:A:1169:ILE:HG21	1:A:1169:ILE:HD13	1.73	0.43
1:A:624:LEU:CD2	1:A:625:SER:HA	2.48	0.43
1:A:472:ILE:CG2	1:A:478:VAL:HG23	2.49	0.43
1:A:923:ILE:HG23	1:A:923:ILE:HD13	1.71	0.43
1:A:622:GLU:HG2	1:A:623:GLU:N	2.34	0.43
1:A:801:ASP:O	1:A:802:HIS:O	2.37	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:249:SER:O	1:A:251:PRO:HD3	2.18	0.43
1:A:683:MET:O	1:A:687:ASN:CB	2.67	0.43
1:A:418:ILE:O	1:A:418:ILE:CG2	2.55	0.43
1:A:107:LEU:CD1	1:A:1113:ARG:NH1	2.82	0.43
1:A:1039:TRP:CE2	1:A:1043:ARG:HD2	2.52	0.43
1:A:995:VAL:CG2	1:A:1165:LYS:HB3	2.49	0.43
1:A:766:ILE:HD13	1:A:766:ILE:HG21	1.82	0.43
1:A:837:VAL:HG12	1:A:838:LYS:CA	2.43	0.43
1:A:809:TYR:CE1	1:A:990:PHE:CD2	3.07	0.43
1:A:332:ASP:CG	1:A:334:ALA:HB2	2.33	0.43
1:A:276:ASP:C	1:A:278:LYS:N	2.72	0.43
1:A:892:TYR:C	1:A:894:ASN:N	2.66	0.43
1:A:454:VAL:O	1:A:539:ARG:NH2	2.52	0.43
1:A:997:LYS:O	1:A:998:GLU:HG3	2.19	0.42
1:A:472:ILE:HG23	1:A:478:VAL:HG23	2.00	0.42
1:A:764:THR:HG23	1:A:764:THR:O	2.19	0.42
1:A:344:LYS:HD3	3:A:1213:HOH:O	2.18	0.42
1:A:652:THR:O	1:A:653:LEU:C	2.54	0.42
1:A:596:ASN:O	1:A:599:LYS:N	2.52	0.42
1:A:365:VAL:HG12	1:A:366:SER:N	2.32	0.42
1:A:148:ILE:HG23	1:A:149:GLY:N	2.34	0.42
1:A:1029:ILE:HG23	1:A:1085:LEU:HD11	2.00	0.42
1:A:333:ASP:O	1:A:335:VAL:HG23	2.19	0.42
1:A:1093:THR:HG23	1:A:1096:ASP:H	1.84	0.42
1:A:267:ASN:OD1	1:A:267:ASN:C	2.54	0.42
1:A:1138:ARG:O	1:A:1142:MET:CG	2.67	0.42
1:A:91:HIS:HB3	1:A:95:LYS:N	2.34	0.42
1:A:937:TYR:C	1:A:937:TYR:CD2	2.92	0.42
1:A:285:TYR:CE2	1:A:289:LYS:CE	3.01	0.42
1:A:154:GLY:C	1:A:155:THR:CG2	2.87	0.42
1:A:569:VAL:O	1:A:573:PHE:CB	2.63	0.42
1:A:469:ASN:C	1:A:471:LYS:H	2.21	0.42
1:A:82:PHE:O	1:A:83:LYS:C	2.58	0.42
1:A:1016:PHE:HZ	1:A:1026:PHE:HE2	1.67	0.42
1:A:321:TYR:O	1:A:324:GLN:HG2	2.19	0.42
1:A:115:PHE:CE1	1:A:189:MET:HG3	2.54	0.42
1:A:213:VAL:O	1:A:214:GLU:CB	2.52	0.42
1:A:1049:TYR:HB3	1:A:1067:ARG:CB	2.50	0.42
1:A:357:HIS:C	1:A:358:SER:O	2.52	0.42
1:A:936:ASP:OD1	1:A:936:ASP:N	2.30	0.42
1:A:1137:PHE:O	1:A:1141:ILE:HG12	2.20	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:365:VAL:O	1:A:461:GLY:HA2	2.19	0.42
1:A:875:VAL:HG23	1:A:1168:VAL:HB	2.01	0.42
1:A:910:LYS:O	1:A:911:THR:C	2.54	0.42
1:A:162:ALA:HB1	1:A:171:TYR:HD2	1.85	0.42
1:A:1146:LYS:O	1:A:1149:PHE:HB2	2.20	0.42
1:A:1026:PHE:HA	1:A:1029:ILE:HD13	2.02	0.42
1:A:1023:ASP:HA	1:A:1024:PRO:HD3	1.86	0.42
1:A:456:TYR:CD2	1:A:456:TYR:N	2.86	0.42
1:A:746:PHE:CZ	1:A:924:PHE:HD1	2.38	0.42
1:A:801:ASP:O	1:A:804:ASN:HB2	2.20	0.42
1:A:1011:MET:HB2	1:A:1011:MET:HE2	1.66	0.42
1:A:151:LEU:HD11	1:A:187:VAL:HG21	2.02	0.42
1:A:805:VAL:CG1	1:A:806:THR:N	2.83	0.42
1:A:1007:ASN:N	1:A:1068:ASP:O	2.53	0.42
1:A:889:ILE:HG23	1:A:889:ILE:HD13	1.58	0.42
1:A:851:ILE:O	1:A:854:ARG:HG2	2.19	0.42
1:A:741:TYR:CD2	1:A:820:HIS:CD2	3.08	0.42
1:A:1092:MET:HB3	1:A:1092:MET:HE3	1.53	0.42
1:A:895:TYR:CD1	1:A:895:TYR:C	2.89	0.41
1:A:469:ASN:O	1:A:471:LYS:N	2.53	0.41
1:A:648:LEU:HD22	1:A:1105:ILE:HD12	2.01	0.41
1:A:540:ASP:HA	1:A:541:PRO:HD2	1.81	0.41
1:A:346:GLY:CA	1:A:348:PHE:CE1	3.03	0.41
1:A:206:THR:HG1	1:A:206:THR:H	1.58	0.41
1:A:1184:ASP:HB3	1:A:1187:PHE:HD1	1.86	0.41
1:A:1068:ASP:OD1	1:A:1069:PRO:HD2	2.20	0.41
1:A:722:LYS:HE2	1:A:722:LYS:HB2	1.70	0.41
1:A:849:ILE:HG23	1:A:849:ILE:HD13	1.81	0.41
1:A:346:GLY:CA	1:A:348:PHE:HE1	2.32	0.41
1:A:1014:ILE:HG23	1:A:1016:PHE:H	1.86	0.41
1:A:190:ASP:O	1:A:194:GLN:N	2.51	0.41
1:A:561:GLU:O	1:A:564:TYR:HB2	2.19	0.41
1:A:619:LYS:O	1:A:623:GLU:HB2	2.20	0.41
1:A:116:TYR:N	1:A:302:LYS:O	2.42	0.41
1:A:937:TYR:O	1:A:937:TYR:CD2	2.65	0.41
1:A:723:TYR:HA	1:A:726:ASN:ND2	2.36	0.41
1:A:664:ILE:HG21	1:A:664:ILE:HD12	1.67	0.41
1:A:803:LEU:O	1:A:1021:TYR:HD1	2.03	0.41
1:A:332:ASP:C	1:A:334:ALA:H	2.23	0.41
1:A:925:ASN:ND2	1:A:965:ILE:CD1	2.82	0.41
1:A:370:LEU:HD11	1:A:455:GLN:HB3	2.02	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:995:VAL:HG22	1:A:1165:LYS:CB	2.50	0.41
1:A:437:ASP:O	1:A:439:GLY:N	2.54	0.41
1:A:151:LEU:CA	1:A:155:THR:CG2	2.94	0.41
1:A:131:LEU:O	1:A:131:LEU:HD23	2.21	0.41
1:A:203:ILE:HD12	1:A:203:ILE:HG21	1.87	0.41
1:A:573:PHE:O	1:A:574:ILE:C	2.55	0.41
1:A:887:ASN:CA	1:A:891:GLY:HA3	2.47	0.41
1:A:776:SER:O	1:A:780:VAL:HG23	2.21	0.41
1:A:873:LYS:HB3	1:A:873:LYS:HE2	1.67	0.41
1:A:119:THR:N	1:A:167:ASP:O	2.54	0.41
1:A:68:HIS:CB	1:A:71:TYR:HB2	2.38	0.41
1:A:180:ASP:C	1:A:182:PHE:N	2.66	0.41
1:A:1173:LYS:HE2	1:A:1173:LYS:HB2	1.76	0.41
1:A:589:ASN:O	1:A:592:GLN:N	2.53	0.41
1:A:423:LEU:HD23	1:A:430:VAL:HB	2.03	0.41
1:A:888:ILE:O	1:A:894:ASN:CB	2.69	0.41
1:A:650:LYS:O	1:A:651:LYS:HG2	2.21	0.41
1:A:1088:MET:HB2	1:A:1088:MET:HE2	1.58	0.41
1:A:542:LEU:HB3	1:A:545:PHE:HB2	2.03	0.41
1:A:422:LEU:HD13	1:A:498:PHE:CD1	2.56	0.41
1:A:72:ASP:O	1:A:89:TYR:HA	2.21	0.41
1:A:74:ILE:HD13	1:A:74:ILE:HG21	1.69	0.41
1:A:805:VAL:CG1	1:A:806:THR:H	2.31	0.40
1:A:1137:PHE:CE2	1:A:1141:ILE:CG1	3.05	0.40
1:A:597:LEU:H	1:A:597:LEU:HD12	1.86	0.40
1:A:519:LEU:HD12	1:A:739:ILE:HD13	2.04	0.40
1:A:280:ILE:CG2	1:A:280:ILE:O	2.62	0.40
1:A:1152:PHE:O	1:A:1156:LEU:HB2	2.21	0.40
1:A:607:GLU:C	1:A:609:PHE:H	2.23	0.40
1:A:213:VAL:HG23	1:A:214:GLU:H	1.82	0.40
1:A:498:PHE:O	1:A:499:ASN:O	2.37	0.40
1:A:657:VAL:CG2	1:A:658:ASN:H	2.32	0.40
1:A:657:VAL:HG23	1:A:658:ASN:H	1.86	0.40
1:A:437:ASP:C	1:A:439:GLY:N	2.75	0.40
1:A:190:ASP:C	1:A:190:ASP:OD1	2.59	0.40
1:A:670:ILE:CG2	1:A:670:ILE:O	2.60	0.40
1:A:1113:ARG:N	1:A:1116:GLU:HG3	2.36	0.40
1:A:409:ASN:O	1:A:410:PRO:C	2.55	0.40
1:A:1093:THR:H	1:A:1096:ASP:HB2	1.86	0.40
1:A:447:ARG:HD3	1:A:447:ARG:C	2.41	0.40
1:A:1027:THR:OG1	1:A:1028:VAL:N	2.54	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:524:SER:O	1:A:528:VAL:HG23	2.20	0.40
1:A:1063:PHE:CE2	1:A:1163:PHE:CE1	3.10	0.40
1:A:774:ARG:HG3	1:A:779:PHE:HB2	2.04	0.40
1:A:257:HIS:O	1:A:261:LYS:HB2	2.22	0.40
1:A:612:GLN:CG	1:A:615:GLU:C	2.90	0.40
1:A:1037:TYR:CE2	1:A:1077:THR:HG22	2.56	0.40
1:A:748:LEU:HD11	1:A:815:PHE:HB2	2.03	0.40
1:A:357:HIS:O	1:A:358:SER:C	2.59	0.40
1:A:655:VAL:HA	1:A:656:PRO:HD2	1.83	0.40

All (2) 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:608:ASN:ND2	1:A:988:LYS:CG[2_554]	1.98	0.22
1:A:538:ASN:O	1:A:679:THR:OG1[2_654]	2.10	0.10

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	1043/1193 (87%)	998 (96%)	37 (4%)	8 (1%)	24 69

All (8) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	213	VAL
1	A	610	ASN
1	A	613	GLU
1	A	1128	ASN
1	A	373	PRO
1	A	615	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	697	LEU
1	A	426	THR

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	972/1104 (88%)	666 (68%)	306 (32%)	0 1

All (306) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	60	TRP
1	A	61	ILE
1	A	62	HIS
1	A	65	SER
1	A	66	PRO
1	A	67	LYS
1	A	68	HIS
1	A	69	ASN
1	A	72	ASP
1	A	75	GLU
1	A	80	GLU
1	A	81	GLU
1	A	84	MET
1	A	87	THR
1	A	95	LYS
1	A	96	THR
1	A	100	SER
1	A	101	LEU
1	A	103	THR
1	A	107	LEU
1	A	110	GLU
1	A	111	GLN
1	A	120	LEU
1	A	125	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	132	GLU
1	A	137	SER
1	A	139	SER
1	A	145	LYS
1	A	147	SER
1	A	158	THR
1	A	161	ASN
1	A	163	TYR
1	A	167	ASP
1	A	168	ARG
1	A	172	MET
1	A	175	SER
1	A	176	MET
1	A	179	LYS
1	A	180	ASP
1	A	185	MET
1	A	191	SER
1	A	197	VAL
1	A	203	ILE
1	A	206	THR
1	A	212	GLU
1	A	214	GLU
1	A	232	TYR
1	A	233	LYS
1	A	235	SER
1	A	236	PHE
1	A	237	ASN
1	A	239	ILE
1	A	242	ASN
1	A	248	LEU
1	A	249	SER
1	A	252	LEU
1	A	254	ASP
1	A	260	MET
1	A	261	LYS
1	A	268	VAL
1	A	270	SER
1	A	273	SER
1	A	278	LYS
1	A	280	ILE
1	A	281	THR
1	A	282	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	284	THR
1	A	286	GLU
1	A	287	GLU
1	A	290	GLU
1	A	299	LYS
1	A	301	VAL
1	A	302	LYS
1	A	309	ASN
1	A	312	THR
1	A	314	LEU
1	A	329	LYS
1	A	331	ARG
1	A	335	VAL
1	A	338	VAL
1	A	341	GLN
1	A	348	PHE
1	A	350	ILE
1	A	358	SER
1	A	359	GLU
1	A	364	LEU
1	A	366	SER
1	A	373	PRO
1	A	374	LYS
1	A	407	LEU
1	A	408	GLU
1	A	418	ILE
1	A	419	ILE
1	A	421	ASN
1	A	424	ILE
1	A	426	THR
1	A	432	TYR
1	A	438	CYS
1	A	440	LEU
1	A	447	ARG
1	A	452	SER
1	A	453	LEU
1	A	455	GLN
1	A	459	SER
1	A	460	ILE
1	A	465	ILE
1	A	467	ARG
1	A	468	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	469	ASN
1	A	471	LYS
1	A	472	ILE
1	A	476	ASP
1	A	478	VAL
1	A	484	ASP
1	A	485	VAL
1	A	491	LYS
1	A	495	LYS
1	A	499	ASN
1	A	509	ASN
1	A	510	ILE
1	A	513	ILE
1	A	520	LYS
1	A	521	THR
1	A	523	LYS
1	A	524	SER
1	A	525	ILE
1	A	530	GLU
1	A	533	SER
1	A	534	LYS
1	A	542	LEU
1	A	543	LEU
1	A	544	ILE
1	A	548	GLU
1	A	552	ASN
1	A	553	ILE
1	A	557	LYS
1	A	560	ASN
1	A	563	MET
1	A	564	TYR
1	A	565	LEU
1	A	568	PHE
1	A	570	GLU
1	A	571	LYS
1	A	573	PHE
1	A	575	ASN
1	A	584	LEU
1	A	587	ASP
1	A	594	GLN
1	A	595	GLU
1	A	596	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	599	LYS
1	A	600	GLN
1	A	601	GLU
1	A	602	LEU
1	A	603	LYS
1	A	604	LYS
1	A	605	ARG
1	A	608	ASN
1	A	611	GLU
1	A	613	GLU
1	A	614	LYS
1	A	616	GLN
1	A	624	LEU
1	A	625	SER
1	A	626	LYS
1	A	628	LYS
1	A	629	ASN
1	A	634	PRO
1	A	635	GLU
1	A	642	ILE
1	A	644	SER
1	A	645	ILE
1	A	653	LEU
1	A	661	PHE
1	A	663	ASN
1	A	664	ILE
1	A	665	ASN
1	A	667	ASN
1	A	669	ASN
1	A	670	ILE
1	A	672	GLU
1	A	673	THR
1	A	675	ASN
1	A	677	LEU
1	A	678	LYS
1	A	681	GLU
1	A	685	LYS
1	A	720	GLU
1	A	721	THR
1	A	722	LYS
1	A	724	GLU
1	A	733	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	734	MET
1	A	737	THR
1	A	742	LEU
1	A	750	HIS
1	A	752	THR
1	A	759	LEU
1	A	761	LEU
1	A	763	LYS
1	A	764	THR
1	A	776	SER
1	A	782	LEU
1	A	783	ARG
1	A	787	ILE
1	A	789	SER
1	A	791	SER
1	A	798	SER
1	A	806	THR
1	A	808	LYS
1	A	810	ASN
1	A	812	GLN
1	A	814	LEU
1	A	816	ASN
1	A	822	LEU
1	A	823	SER
1	A	832	ILE
1	A	834	LEU
1	A	835	GLU
1	A	843	SER
1	A	846	LYS
1	A	860	LYS
1	A	863	PHE
1	A	868	TYR
1	A	873	LYS
1	A	874	TYR
1	A	875	VAL
1	A	887	ASN
1	A	889	ILE
1	A	894	ASN
1	A	895	TYR
1	A	902	LEU
1	A	903	GLU
1	A	904	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	906	GLU
1	A	911	THR
1	A	915	ILE
1	A	918	ARG
1	A	920	ARG
1	A	923	ILE
1	A	930	MET
1	A	935	SER
1	A	936	ASP
1	A	937	TYR
1	A	941	LYS
1	A	947	SER
1	A	948	ASN
1	A	951	LEU
1	A	959	GLU
1	A	962	ASP
1	A	963	LYS
1	A	964	TYR
1	A	986	SER
1	A	988	LYS
1	A	989	LEU
1	A	992	GLU
1	A	993	GLU
1	A	995	VAL
1	A	996	LYS
1	A	1004	THR
1	A	1007	ASN
1	A	1011	MET
1	A	1017	LYS
1	A	1025	SER
1	A	1036	SER
1	A	1055	ILE
1	A	1062	VAL
1	A	1064	LEU
1	A	1083	LYS
1	A	1087	LYS
1	A	1088	MET
1	A	1091	THR
1	A	1092	MET
1	A	1099	ARG
1	A	1101	ILE
1	A	1103	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1108	ILE
1	A	1112	ARG
1	A	1116	GLU
1	A	1118	SER
1	A	1120	LEU
1	A	1122	PHE
1	A	1127	SER
1	A	1132	GLN
1	A	1140	ARG
1	A	1142	MET
1	A	1143	ASN
1	A	1144	THR
1	A	1146	LYS
1	A	1147	GLU
1	A	1148	ASP
1	A	1156	LEU
1	A	1158	SER
1	A	1160	VAL
1	A	1162	GLU
1	A	1165	LYS
1	A	1170	ILE
1	A	1173	LYS
1	A	1178	GLU
1	A	1180	ILE
1	A	1182	ASN
1	A	1183	VAL
1	A	1186	GLU
1	A	1189	LYS
1	A	1191	LEU
1	A	1192	ILE

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (33) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	91	HIS
1	A	111	GLN
1	A	133	HIS
1	A	161	ASN
1	A	183	ASN
1	A	237	ASN
1	A	282	ASN
1	A	295	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	316	ASN
1	A	324	GLN
1	A	357	HIS
1	A	425	HIS
1	A	443	ASN
1	A	468	ASN
1	A	538	ASN
1	A	560	ASN
1	A	572	HIS
1	A	575	ASN
1	A	600	GLN
1	A	665	ASN
1	A	667	ASN
1	A	680	ASN
1	A	687	ASN
1	A	726	ASN
1	A	812	GLN
1	A	857	ASN
1	A	880	ASN
1	A	894	ASN
1	A	928	ASN
1	A	946	ASN
1	A	953	ASN
1	A	981	ASN
1	A	1177	ASN

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry

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

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

5.7 Other polymers

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data

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	1053/1193 (88%)	-0.50	3 (0%) 94 93	9, 32, 70, 128	0

All (3) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	610	ASN	4.0
1	A	612	GLN	2.8
1	A	263	MET	2.0

6.2 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains

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

6.3 Carbohydrates

There are no carbohydrates in this entry.

6.4 Ligands

In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. LLDF column lists the quality of electron density of the group with respect to its neighbouring residues in protein, DNA or RNA chains. The B-factors column lists the minimum, median, 95th percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled ‘Q< 0.9’ lists the number of atoms with occupancy less than 0.9.

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	LLDF	B-factors(Å ²)	Q<0.9
2	ZN	A	1194	1/1	0.35	0.20	-	38,38,38,38	0

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.