



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Feb 1, 2016 – 01:47 PM GMT

PDB ID : 3V0C
Title : 4.3 angstrom crystal structure of an inactive BoNT/A (E224Q/R363A/Y366F)
Authors : Gu, S.; Rumpel, S.; Zhou, J.; Strotmeier, J.; Bigalke, H.; Perry, K.; Shoemaker, C.B.; Rummel, A.; Jin, R.
Deposited on : 2011-12-07
Resolution : 4.30 Å(reported)

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

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

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

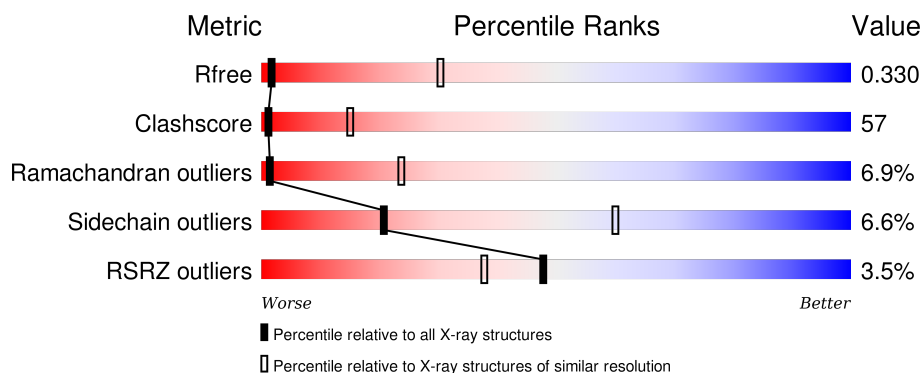
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 4.30 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	1059 (5.00-3.60)
Clashscore	102246	1166 (5.00-3.60)
Ramachandran outliers	100387	1106 (5.00-3.60)
Sidechain outliers	100360	1089 (5.00-3.60)
RSRZ outliers	91569	1062 (5.00-3.60)

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	1312	

2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 10390 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 BoNT/A.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	1277	Total	C	N	O	S	0	0	0
			10389	6664	1714	1979	32			

There are 20 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	224	GLN	GLU	ENGINEERED MUTATION	UNP Q7B8V4
A	363	ALA	ARG	ENGINEERED MUTATION	UNP Q7B8V4
A	366	PHE	TYR	ENGINEERED MUTATION	UNP Q7B8V4
A	1158	ALA	THR	CONFLICT	UNP Q7B8V4
A	1297	VAL	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1298	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1299	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1300	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1301	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1302	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1303	SER	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1304	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1305	TRP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1306	SER	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1307	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1308	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1309	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1310	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1311	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1312	LYS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4

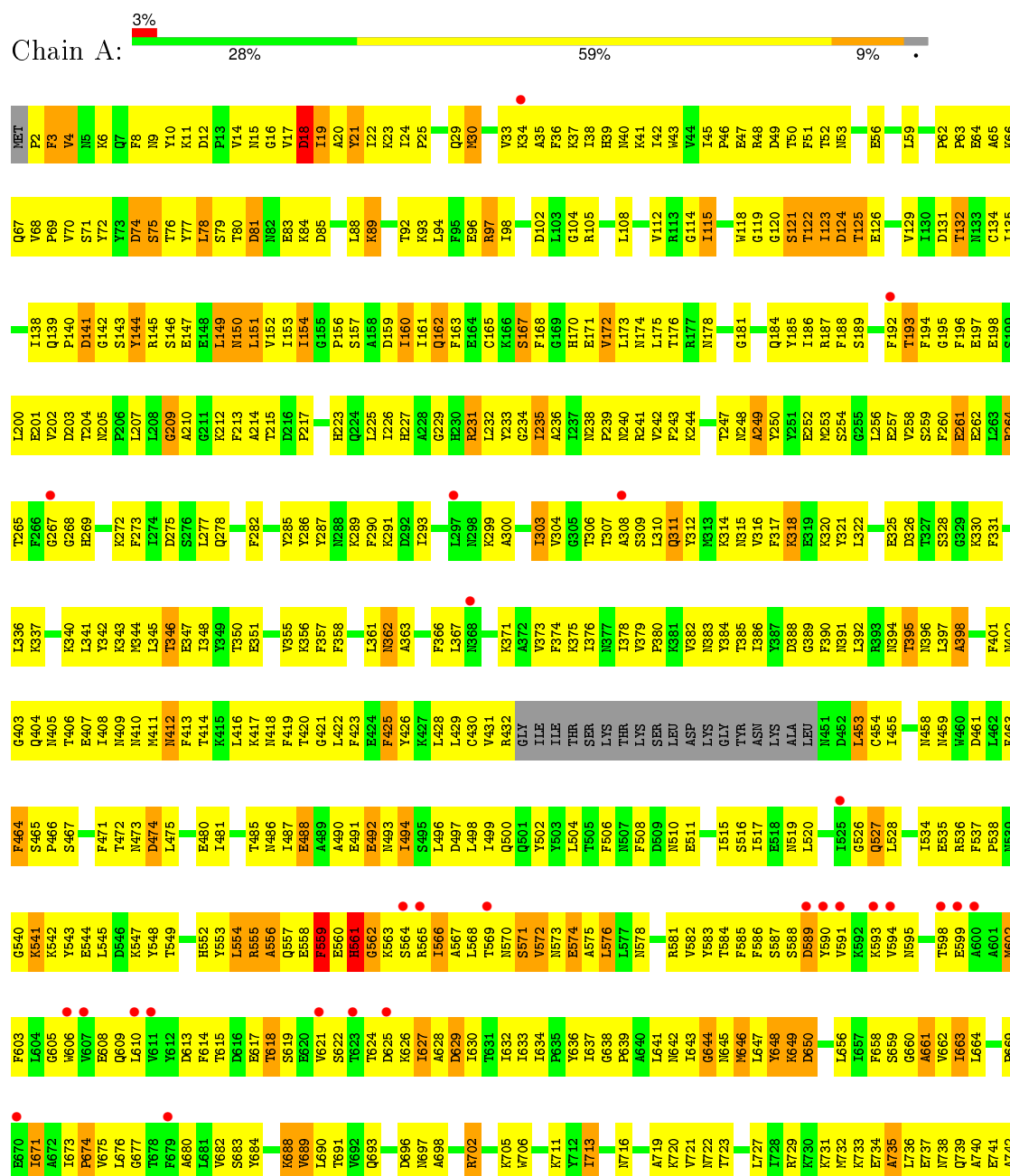
- Molecule 2 is ZINC ION (three-letter code: ZN) (formula: Zn).

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

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: BoNT/A





4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 31 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	167.52Å 167.52Å 158.73Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	45.11 – 4.30 45.11 – 4.30	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.9 (45.11-4.30) 99.9 (45.11-4.30)	Depositor EDS
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	2.96 (at 4.28Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX (phenix.refine: 1.7.2_869)	Depositor
R, R_{free}	0.322 , 0.349 0.312 , 0.330	Depositor DCC
R_{free} test set	912 reflections (5.11%)	DCC
Wilson B-factor (Å ²)	161.8	Xtriage
Anisotropy	0.203	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.32 , 242.5	EDS
Estimated twinning fraction	0.021 for -h,-k,l	Xtriage
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.48$, $\langle L^2 \rangle = 0.31$	Xtriage
Outliers	0 of 17872 reflections	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.83	EDS
Total number of atoms	10390	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	235.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 2.53% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality [i](#)

5.1 Standard geometry [i](#)

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	1.16	0/10610	0.66	1/14367 (0.0%)

There are no bond length outliers.

All (1) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed($^{\circ}$)	Ideal($^{\circ}$)
1	A	151	LEU	CA-CB-CG	6.20	129.55	115.30

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	10389	0	10255	1168	9
2	A	1	0	0	0	0
All	All	10390	0	10255	1168	9

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 57.

All (1168) 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:277:LEU:HD22	1:A:474:ASP:HB3	1.24	1.13
1:A:872:ASN:HD21	1:A:874:ILE:HB	1.12	1.11
1:A:948:ARG:HB3	1:A:1068:TRP:HB2	1.28	1.10
1:A:310:LEU:HD11	1:A:314:LYS:HE3	1.38	1.05
1:A:1027:SER:HB2	1:A:1041:ILE:HD11	1.37	1.02
1:A:969:GLU:H	1:A:972:SER:HB3	1.24	1.02
1:A:1248:GLY:HA2	1:A:1268:ASN:HD21	1.16	1.02
1:A:927:ILE:HG12	1:A:1052:ASN:HB3	1.36	1.01
1:A:346:THR:HG22	1:A:347:GLU:HG3	1.41	1.01
1:A:1010:TYR:HB3	1:A:1015:ILE:HD11	1.41	0.99
1:A:52:THR:HG22	1:A:528:LEU:HD11	1.47	0.96
1:A:806:LYS:HD2	1:A:934:TYR:HB3	1.48	0.95
1:A:910:ASP:HB3	1:A:913:GLN:HE21	1.30	0.95
1:A:566:ILE:HG12	1:A:749:TYR:CD1	2.02	0.95
1:A:576:LEU:HA	1:A:581:ARG:HB2	1.49	0.95
1:A:763:ASN:HB2	1:A:765:ASN:ND2	1.82	0.95
1:A:2:PRO:HG2	1:A:39:HIS:CD2	2.03	0.94
1:A:629:ASP:OD1	1:A:630:ILE:HG13	1.71	0.91
1:A:264:ARG:HH11	1:A:264:ARG:HG2	1.33	0.91
1:A:217:PRO:HG2	1:A:378:ILE:HD11	1.49	0.90
1:A:584:THR:HG22	1:A:586:PHE:H	1.38	0.89
1:A:242:VAL:HG11	1:A:257:GLU:HB2	1.53	0.89
1:A:1027:SER:HB2	1:A:1041:ILE:CD1	2.02	0.89
1:A:21:TYR:HE1	1:A:34:LYS:HB2	1.36	0.88
1:A:418:ASN:HD21	1:A:420:THR:HB	1.36	0.88
1:A:17:VAL:HG12	1:A:145:ARG:HH22	1.39	0.87
1:A:428:LEU:HB3	1:A:542:LYS:HA	1.57	0.87
1:A:559:PHE:HB3	1:A:582:VAL:HG22	1.57	0.86
1:A:49:ASP:HB3	1:A:187:ARG:HE	1.41	0.85
1:A:41:LYS:HB3	1:A:150:ASN:HB2	1.58	0.85
1:A:815:LEU:HD23	1:A:845:LEU:HD11	1.58	0.85
1:A:575:ALA:O	1:A:581:ARG:HB2	1.77	0.85
1:A:984:ILE:HG12	1:A:998:VAL:HG22	1.60	0.84
1:A:426:TYR:CE1	1:A:540:GLY:HA2	2.11	0.84
1:A:24:ILE:HD11	1:A:45:ILE:HD11	1.59	0.84
1:A:556:ALA:O	1:A:583:TYR:HB3	1.78	0.84
1:A:969:GLU:N	1:A:972:SER:HB3	1.93	0.84
1:A:969:GLU:H	1:A:972:SER:CB	1.90	0.84
1:A:968:MET:HG2	1:A:972:SER:O	1.78	0.84
1:A:755:THR:O	1:A:756:GLU:HB2	1.78	0.84
1:A:968:MET:HA	1:A:972:SER:HB3	1.59	0.83
1:A:1019:ILE:HG12	1:A:1029:ILE:HD12	1.59	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:952:TYR:HB2	1:A:1003:GLN:HE22	1.43	0.83
1:A:122:THR:O	1:A:126:GLU:HB3	1.79	0.83
1:A:605:GLY:HA2	1:A:608:GLU:OE1	1.77	0.83
1:A:22:ILE:HD13	1:A:35:ALA:HB3	1.61	0.83
1:A:35:ALA:HB2	1:A:45:ILE:HG12	1.61	0.83
1:A:43:TRP:HD1	1:A:149:LEU:HD21	1.44	0.83
1:A:306:THR:HG22	1:A:516:SER:O	1.78	0.82
1:A:872:ASN:ND2	1:A:874:ILE:HB	1.93	0.82
1:A:1163:LYS:HB2	1:A:1181:TYR:HB2	1.61	0.82
1:A:872:ASN:ND2	1:A:874:ILE:H	1.78	0.82
1:A:789:ASN:HD21	1:A:861:ARG:HE	1.26	0.82
1:A:713:ILE:HD11	1:A:796:LEU:HD21	1.61	0.82
1:A:594:VAL:HG12	1:A:746:ILE:HG21	1.59	0.82
1:A:573:ASN:O	1:A:576:LEU:HG	1.80	0.82
1:A:21:TYR:CE1	1:A:34:LYS:HB2	2.15	0.82
1:A:1248:GLY:HA2	1:A:1268:ASN:ND2	1.95	0.82
1:A:979:ASN:O	1:A:982:GLU:HG2	1.79	0.82
1:A:52:THR:CG2	1:A:528:LEU:HD11	2.09	0.81
1:A:70:VAL:HG12	1:A:161:ILE:HD11	1.62	0.81
1:A:927:ILE:HG12	1:A:1052:ASN:CB	2.10	0.81
1:A:624:THR:HB	1:A:627:ILE:HD13	1.62	0.81
1:A:487:ILE:HG23	1:A:488:GLU:OE1	1.81	0.81
1:A:397:LEU:HA	1:A:402:ASN:HB2	1.60	0.81
1:A:702:ARG:HG3	1:A:702:ARG:HH11	1.46	0.81
1:A:344:MET:HE3	1:A:502:TYR:HD2	1.43	0.81
1:A:473:ASN:OD1	1:A:475:LEU:HD12	1.79	0.81
1:A:610:LEU:HD12	1:A:747:ILE:HD11	1.63	0.80
1:A:1110:PRO:HB2	1:A:1159:LYS:HD3	1.63	0.80
1:A:872:ASN:HD21	1:A:874:ILE:CB	1.94	0.80
1:A:1013:ARG:HG2	1:A:1101:TRP:HA	1.64	0.80
1:A:391:ASN:HD21	1:A:404:GLN:HE21	1.25	0.80
1:A:464:PHE:CE2	1:A:466:PRO:HG3	2.17	0.80
1:A:277:LEU:HD23	1:A:472:THR:HG22	1.62	0.80
1:A:763:ASN:HD22	1:A:765:ASN:HD21	1.29	0.80
1:A:1203:GLU:O	1:A:1204:LYS:HD3	1.81	0.80
1:A:385:THR:HG23	1:A:388:ASP:H	1.47	0.79
1:A:986:THR:HG22	1:A:996:ARG:HB3	1.63	0.79
1:A:643:ILE:HG21	1:A:664:LEU:HD23	1.64	0.79
1:A:929:LYS:O	1:A:932:ILE:HG22	1.82	0.79
1:A:277:LEU:CD2	1:A:474:ASP:HB3	2.10	0.79
1:A:1099:ASP:HB2	1:A:1103:ASP:H	1.47	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:375:LYS:HB3	1:A:414:THR:HB	1.63	0.78
1:A:961:GLU:HB2	1:A:979:ASN:HD22	1.46	0.78
1:A:18:ASP:HA	1:A:37:LYS:HB2	1.65	0.78
1:A:122:THR:HB	1:A:126:GLU:OE1	1.84	0.78
1:A:344:MET:HE3	1:A:502:TYR:CD2	2.19	0.78
1:A:306:THR:HG21	1:A:515:ILE:HG22	1.66	0.78
1:A:798:ASN:ND2	1:A:893:ARG:HG3	1.99	0.77
1:A:962:TYR:H	1:A:962:TYR:HD1	1.32	0.77
1:A:1057:LEU:H	1:A:1057:LEU:HD12	1.48	0.77
1:A:590:TYR:O	1:A:594:VAL:HG23	1.84	0.77
1:A:1227:ASN:ND2	1:A:1229:GLN:HB3	2.00	0.77
1:A:1196:ASN:O	1:A:1199:GLN:HG3	1.85	0.76
1:A:170:HIS:CD2	1:A:172:VAL:H	2.02	0.76
1:A:1265:ASN:HA	1:A:1268:ASN:HD22	1.48	0.76
1:A:2:PRO:O	1:A:39:HIS:HD2	1.69	0.76
1:A:935:ASN:HA	1:A:1049:ALA:HB2	1.67	0.76
1:A:1233:ASN:ND2	1:A:1271:ILE:HG23	2.01	0.76
1:A:1211:ILE:H	1:A:1211:ILE:HD12	1.51	0.75
1:A:985:TRP:CD2	1:A:1019:ILE:HG21	2.22	0.75
1:A:547:LYS:NZ	1:A:646:MET:HB3	2.02	0.75
1:A:935:ASN:HA	1:A:1049:ALA:CB	2.16	0.75
1:A:11:LYS:NZ	1:A:81:ASP:HB3	2.01	0.75
1:A:42:ILE:HD12	1:A:151:LEU:HD12	1.68	0.75
1:A:1020:THR:HG23	1:A:1078:GLU:HG3	1.67	0.75
1:A:873:ILE:O	1:A:876:THR:HB	1.85	0.74
1:A:987:LEU:HD12	1:A:1041:ILE:HD13	1.68	0.74
1:A:154:ILE:H	1:A:154:ILE:HD12	1.51	0.74
1:A:1203:GLU:HB3	1:A:1262:VAL:HG11	1.70	0.74
1:A:14:VAL:HG13	1:A:20:ALA:HA	1.69	0.74
1:A:39:HIS:ND1	1:A:40:ASN:N	2.35	0.74
1:A:903:LYS:HB2	1:A:922:SER:HB3	1.69	0.74
1:A:264:ARG:NH1	1:A:264:ARG:HG2	1.98	0.74
1:A:634:ILE:HG22	1:A:637:ILE:HG13	1.68	0.74
1:A:952:TYR:CE2	1:A:980:TYR:HA	2.23	0.74
1:A:1248:GLY:CA	1:A:1268:ASN:HD21	1.98	0.74
1:A:765:ASN:HB3	1:A:768:ASP:HB2	1.69	0.73
1:A:713:ILE:HG12	1:A:801:ILE:HD13	1.69	0.73
1:A:417:LYS:HE3	1:A:419:PHE:CE1	2.23	0.73
1:A:418:ASN:ND2	1:A:420:THR:H	1.86	0.73
1:A:1100:PHE:HD1	1:A:1283:GLU:HG2	1.54	0.73
1:A:809:GLU:HG2	1:A:934:TYR:CE2	2.23	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:584:THR:HG22	1:A:586:PHE:N	2.02	0.73
1:A:641:LEU:HB2	1:A:643:ILE:HG12	1.68	0.73
1:A:984:ILE:HG23	1:A:998:VAL:HG22	1.69	0.73
1:A:584:THR:HG22	1:A:585:PHE:N	2.01	0.73
1:A:918:ASN:ND2	1:A:1065:ARG:HB3	2.03	0.73
1:A:622:SER:HB2	1:A:633:ILE:HB	1.70	0.73
1:A:882:ARG:HH22	1:A:1073:ASN:ND2	1.86	0.73
1:A:17:VAL:HG12	1:A:145:ARG:NH2	2.03	0.73
1:A:102:ASP:HB2	1:A:357:PHE:HE2	1.54	0.73
1:A:790:GLN:O	1:A:794:SER:HB3	1.89	0.72
1:A:420:THR:HG22	1:A:420:THR:O	1.90	0.72
1:A:1155:TYR:CE2	1:A:1287:VAL:HG13	2.23	0.72
1:A:395:THR:C	1:A:397:LEU:H	1.93	0.72
1:A:201:GLU:HG3	1:A:361:LEU:CD1	2.20	0.72
1:A:644:GLY:O	1:A:647:LEU:HG	1.90	0.72
1:A:167:SER:HB3	1:A:231:ARG:HH12	1.53	0.72
1:A:626:LYS:C	1:A:627:ILE:HD12	2.10	0.72
1:A:755:THR:OG1	1:A:757:GLU:HG2	1.89	0.72
1:A:210:ALA:H	1:A:405:ASN:ND2	1.88	0.72
1:A:429:LEU:HD23	1:A:543:TYR:HB2	1.72	0.71
1:A:702:ARG:O	1:A:705:LYS:HB3	1.89	0.71
1:A:153:ILE:HD13	1:A:186:ILE:HB	1.69	0.71
1:A:18:ASP:HA	1:A:37:LYS:CB	2.20	0.71
1:A:1011:ILE:HG21	1:A:1291:TRP:HZ3	1.54	0.71
1:A:306:THR:HG21	1:A:515:ILE:CG2	2.21	0.71
1:A:226:ILE:HD13	1:A:350:THR:HA	1.73	0.71
1:A:946:TRP:HB2	1:A:1070:LYS:HB3	1.73	0.70
1:A:249:ALA:HB3	1:A:252:GLU:HG3	1.72	0.70
1:A:481:ILE:HD13	1:A:698:ALA:HA	1.74	0.70
1:A:974:TRP:HB2	1:A:985:TRP:CH2	2.27	0.70
1:A:201:GLU:HG3	1:A:361:LEU:HD11	1.73	0.70
1:A:798:ASN:HD22	1:A:893:ARG:CG	2.05	0.70
1:A:264:ARG:HH11	1:A:264:ARG:CG	2.05	0.70
1:A:210:ALA:N	1:A:405:ASN:ND2	2.40	0.70
1:A:598:THR:HG22	1:A:602:MET:O	1.92	0.70
1:A:210:ALA:N	1:A:405:ASN:HD21	1.90	0.70
1:A:1249:PHE:CE2	1:A:1271:ILE:HD12	2.27	0.69
1:A:1044:LEU:HD23	1:A:1047:ILE:HD11	1.74	0.69
1:A:990:THR:C	1:A:992:GLU:H	1.95	0.69
1:A:1193:LEU:HD11	1:A:1206:LEU:HD13	1.73	0.69
1:A:549:THR:H	1:A:552:HIS:HD2	1.41	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:49:ASP:CB	1:A:187:ARG:HE	2.05	0.69
1:A:575:ALA:HB1	1:A:582:VAL:O	1.92	0.69
1:A:757:GLU:HB2	1:A:760:ASN:ND2	2.08	0.69
1:A:184:GLN:OE1	1:A:231:ARG:HD3	1.92	0.69
1:A:181:GLY:HA2	1:A:231:ARG:O	1.93	0.68
1:A:749:TYR:O	1:A:752:ASN:HB3	1.92	0.68
1:A:1096:ILE:O	1:A:1098:LYS:HE3	1.93	0.68
1:A:1041:ILE:O	1:A:1041:ILE:HG22	1.93	0.68
1:A:789:ASN:ND2	1:A:861:ARG:HE	1.92	0.68
1:A:745:ALA:O	1:A:748:ASN:HB3	1.94	0.68
1:A:202:VAL:HG11	1:A:778:ASN:O	1.93	0.68
1:A:967:CYS:SG	1:A:1050:SER:HB2	2.34	0.68
1:A:1210:GLU:HG3	1:A:1212:PRO:HD2	1.75	0.68
1:A:1168:GLY:C	1:A:1170:LYS:H	1.95	0.68
1:A:944:SER:HB3	1:A:1018:THR:HG23	1.75	0.68
1:A:193:THR:HG21	1:A:215:THR:O	1.93	0.68
1:A:1227:ASN:O	1:A:1230:GLY:N	2.27	0.68
1:A:310:LEU:CD1	1:A:314:LYS:HE3	2.20	0.68
1:A:1010:TYR:CB	1:A:1015:ILE:HD11	2.19	0.68
1:A:463:PHE:CE1	1:A:727:LEU:HD23	2.29	0.67
1:A:212:LYS:HE2	1:A:371:LYS:HB2	1.76	0.67
1:A:426:TYR:CZ	1:A:540:GLY:HA2	2.28	0.67
1:A:23:LYS:NZ	1:A:23:LYS:HB2	2.09	0.67
1:A:409:ASN:OD1	1:A:412:ASN:HB2	1.94	0.67
1:A:105:ARG:HG2	1:A:508:PHE:CE1	2.28	0.67
1:A:585:PHE:HB3	1:A:639:PRO:O	1.95	0.67
1:A:656:LEU:HA	1:A:663:ILE:HD12	1.76	0.67
1:A:1023:ARG:HD3	1:A:1023:ARG:O	1.95	0.67
1:A:1241:ASP:OD2	1:A:1245:ASN:HB2	1.95	0.67
1:A:984:ILE:HG23	1:A:998:VAL:CG2	2.24	0.67
1:A:43:TRP:CD1	1:A:149:LEU:HD21	2.29	0.67
1:A:1099:ASP:OD2	1:A:1103:ASP:HB2	1.96	0.66
1:A:820:LEU:HD21	1:A:842:ASN:OD1	1.94	0.66
1:A:30:MET:HE2	1:A:33:VAL:HG23	1.76	0.66
1:A:22:ILE:HD11	1:A:43:TRP:CZ3	2.30	0.66
1:A:713:ILE:HD11	1:A:796:LEU:CD2	2.25	0.66
1:A:646:MET:O	1:A:647:LEU:HD23	1.96	0.66
1:A:145:ARG:HA	1:A:519:ASN:OD1	1.96	0.66
1:A:455:ILE:CG2	1:A:555:ARG:HD2	2.26	0.66
1:A:176:THR:CG2	1:A:236:ALA:HB3	2.26	0.66
1:A:275:ASP:OD2	1:A:472:THR:HB	1.95	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:500:GLN:HE22	1:A:504:LEU:HD21	1.60	0.66
1:A:830:LEU:HB2	1:A:834:VAL:HG13	1.76	0.66
1:A:1193:LEU:C	1:A:1193:LEU:HD12	2.16	0.66
1:A:209:GLY:HA3	1:A:405:ASN:HD22	1.61	0.66
1:A:986:THR:HG22	1:A:996:ARG:CB	2.26	0.65
1:A:181:GLY:HA3	1:A:232:LEU:O	1.97	0.65
1:A:1155:TYR:CD2	1:A:1287:VAL:HG22	2.31	0.65
1:A:839:ASP:O	1:A:843:ASN:HB2	1.97	0.65
1:A:1101:TRP:CZ3	1:A:1286:PRO:O	2.49	0.65
1:A:643:ILE:O	1:A:645:ASN:N	2.28	0.65
1:A:671:ILE:N	1:A:671:ILE:HD12	2.12	0.65
1:A:985:TRP:HB2	1:A:1019:ILE:HD13	1.77	0.65
1:A:253:MET:HG3	1:A:463:PHE:O	1.97	0.65
1:A:485:THR:HB	1:A:697:ASN:HD22	1.60	0.65
1:A:576:LEU:HA	1:A:581:ARG:CB	2.27	0.65
1:A:754:TYR:OH	1:A:757:GLU:HG3	1.96	0.65
1:A:798:ASN:HD22	1:A:893:ARG:HG3	1.58	0.65
1:A:968:MET:CA	1:A:972:SER:HB3	2.27	0.65
1:A:115:ILE:HG22	1:A:317:PHE:HE1	1.62	0.64
1:A:526:GLY:O	1:A:527:GLN:HB2	1.95	0.64
1:A:557:GLN:O	1:A:738:ASN:HB3	1.95	0.64
1:A:22:ILE:CD1	1:A:35:ALA:HB3	2.26	0.64
1:A:22:ILE:HD12	1:A:22:ILE:N	2.12	0.64
1:A:1145:THR:HG22	1:A:1145:THR:O	1.96	0.64
1:A:356:LYS:HD2	1:A:496:LEU:HD21	1.79	0.64
1:A:1061:ARG:HG2	1:A:1061:ARG:HH11	1.61	0.64
1:A:948:ARG:HH11	1:A:948:ARG:HG2	1.62	0.64
1:A:1265:ASN:HA	1:A:1268:ASN:ND2	2.12	0.64
1:A:406:THR:HG22	1:A:413:PHE:CG	2.33	0.64
1:A:634:ILE:HD11	1:A:783:ASN:HB3	1.79	0.64
1:A:634:ILE:HG12	1:A:784:ILE:HG12	1.78	0.64
1:A:882:ARG:HA	1:A:912:ASN:HD21	1.61	0.64
1:A:11:LYS:HZ1	1:A:81:ASP:CB	2.11	0.64
1:A:463:PHE:CZ	1:A:727:LEU:HD23	2.33	0.64
1:A:628:ALA:O	1:A:629:ASP:HB2	1.97	0.64
1:A:464:PHE:O	1:A:465:SER:HB3	1.96	0.64
1:A:1296:LEU:HD23	1:A:1296:LEU:H	1.62	0.64
1:A:306:THR:HG23	1:A:517:ILE:HG22	1.80	0.64
1:A:1080:ASN:O	1:A:1084:ILE:HG12	1.97	0.64
1:A:1195:THR:HB	1:A:1206:LEU:HD23	1.80	0.63
1:A:733:LYS:HB2	1:A:781:MET:CE	2.28	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:24:ILE:CD1	1:A:45:ILE:HD11	2.28	0.63
1:A:167:SER:HB3	1:A:231:ARG:NH1	2.13	0.63
1:A:913:GLN:HG2	1:A:1070:LYS:HE2	1.79	0.63
1:A:1192:ARG:HD3	1:A:1219:GLN:OE1	1.98	0.63
1:A:987:LEU:HD12	1:A:1041:ILE:CD1	2.28	0.63
1:A:458:ASN:HB3	1:A:461:ASP:HB2	1.79	0.63
1:A:965:ILE:HD12	1:A:976:VAL:HG21	1.80	0.63
1:A:336:LEU:HD12	1:A:336:LEU:O	1.99	0.63
1:A:740:ALA:O	1:A:744:LYS:HG3	1.98	0.63
1:A:881:LEU:HD11	1:A:1072:PHE:HB3	1.79	0.63
1:A:819:LEU:HD23	1:A:841:VAL:HB	1.80	0.63
1:A:397:LEU:O	1:A:398:ALA:HB2	1.98	0.63
1:A:744:LYS:O	1:A:748:ASN:HB2	1.99	0.62
1:A:547:LYS:HE2	1:A:646:MET:SD	2.39	0.62
1:A:918:ASN:HD22	1:A:1065:ARG:HB3	1.61	0.62
1:A:572:VAL:HG12	1:A:574:GLU:H	1.64	0.62
1:A:122:THR:O	1:A:123:ILE:HB	1.99	0.62
1:A:1062:ASP:OD1	1:A:1064:HIS:N	2.32	0.62
1:A:1117:TYR:HD2	1:A:1252:PHE:HZ	1.47	0.62
1:A:161:ILE:HD12	1:A:194:PHE:CE2	2.34	0.62
1:A:320:LYS:HD3	1:A:321:TYR:CE2	2.35	0.62
1:A:549:THR:H	1:A:552:HIS:CD2	2.18	0.62
1:A:115:ILE:HA	1:A:150:ASN:HD21	1.64	0.62
1:A:53:ASN:HB3	1:A:56:GLU:HB2	1.80	0.62
1:A:98:ILE:O	1:A:104:GLY:HA3	1.98	0.62
1:A:951:LYS:HG3	1:A:952:TYR:N	2.14	0.62
1:A:940:ASN:HA	1:A:1021:ASN:O	1.99	0.62
1:A:1011:ILE:CG2	1:A:1291:TRP:HZ3	2.13	0.62
1:A:85:ASP:O	1:A:89:LYS:HD3	2.00	0.62
1:A:917:PHE:O	1:A:1057:LEU:HD13	2.00	0.61
1:A:223:HIS:ND1	1:A:351:GLU:OE1	2.32	0.61
1:A:1255:PHE:CD2	1:A:1260:LYS:HD2	2.35	0.61
1:A:764:PHE:CZ	1:A:769:LEU:HD22	2.34	0.61
1:A:500:GLN:NE2	1:A:504:LEU:HD21	2.14	0.61
1:A:637:ILE:HD11	1:A:784:ILE:HG23	1.82	0.61
1:A:1168:GLY:O	1:A:1170:LYS:HG2	1.99	0.61
1:A:556:ALA:HB2	1:A:576:LEU:HD23	1.81	0.61
1:A:747:ILE:HG21	1:A:764:PHE:CZ	2.36	0.61
1:A:361:LEU:H	1:A:404:GLN:HE22	1.48	0.61
1:A:962:TYR:CE2	1:A:1057:LEU:HD23	2.35	0.61
1:A:789:ASN:OD1	1:A:861:ARG:HG2	2.00	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:23:LYS:HB2	1:A:23:LYS:HZ2	1.64	0.61
1:A:731:LYS:O	1:A:734:GLU:HB3	2.01	0.61
1:A:682:VAL:HG12	1:A:684:TYR:CE1	2.35	0.61
1:A:1101:TRP:HZ3	1:A:1286:PRO:O	1.84	0.61
1:A:643:ILE:C	1:A:645:ASN:H	2.04	0.61
1:A:287:TYR:CE2	1:A:291:LYS:HD2	2.36	0.61
1:A:455:ILE:HG21	1:A:555:ARG:HD2	1.81	0.60
1:A:584:THR:HG22	1:A:585:PHE:H	1.64	0.60
1:A:325:GLU:HB3	1:A:331:PHE:CD1	2.36	0.60
1:A:250:TYR:HB2	1:A:429:LEU:CD2	2.31	0.60
1:A:15:ASN:OD1	1:A:17:VAL:O	2.19	0.60
1:A:306:THR:HG22	1:A:517:ILE:HA	1.82	0.60
1:A:618:THR:HG23	1:A:780:ALA:HB2	1.83	0.60
1:A:769:LEU:O	1:A:772:LYS:HB2	2.01	0.60
1:A:406:THR:O	1:A:410:ASN:HA	2.01	0.60
1:A:872:ASN:HD22	1:A:874:ILE:H	1.47	0.60
1:A:49:ASP:OD1	1:A:52:THR:HB	2.01	0.60
1:A:135:ILE:CG2	1:A:149:LEU:HD12	2.31	0.60
1:A:593:LYS:HD3	1:A:609:GLN:CD	2.21	0.60
1:A:325:GLU:HB3	1:A:331:PHE:CE1	2.36	0.60
1:A:1128:VAL:HG11	1:A:1191:TYR:CE2	2.37	0.60
1:A:348:ILE:HG23	1:A:499:ILE:HG12	1.83	0.60
1:A:903:LYS:HG3	1:A:921:SER:HB2	1.83	0.60
1:A:961:GLU:HA	1:A:978:LEU:O	2.02	0.59
1:A:702:ARG:NH1	1:A:702:ARG:HG3	2.17	0.59
1:A:1075:PHE:CD2	1:A:1079:LEU:HD11	2.36	0.59
1:A:163:PHE:HA	1:A:187:ARG:O	2.01	0.59
1:A:52:THR:HG23	1:A:528:LEU:HD21	1.82	0.59
1:A:250:TYR:HB2	1:A:429:LEU:HD22	1.84	0.59
1:A:1099:ASP:HB2	1:A:1103:ASP:N	2.15	0.59
1:A:974:TRP:HA	1:A:986:THR:O	2.01	0.59
1:A:852:GLN:OE1	1:A:855:LYS:HE3	2.01	0.59
1:A:591:VAL:HG12	1:A:595:ASN:HD22	1.66	0.59
1:A:872:ASN:ND2	1:A:874:ILE:N	2.50	0.59
1:A:170:HIS:HD2	1:A:172:VAL:H	1.45	0.59
1:A:634:ILE:CG2	1:A:637:ILE:HG13	2.31	0.59
1:A:249:ALA:HB3	1:A:252:GLU:CG	2.32	0.59
1:A:336:LEU:CD1	1:A:340:LYS:HE3	2.32	0.59
1:A:134:CYS:HB3	1:A:147:GLU:O	2.02	0.59
1:A:961:GLU:CB	1:A:979:ASN:HD22	2.13	0.59
1:A:535:GLU:HG3	1:A:537:PHE:CZ	2.37	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:8:PHE:HD1	1:A:19:ILE:HD11	1.67	0.59
1:A:923:LYS:HD3	1:A:1056:LYS:HD3	1.84	0.59
1:A:906:PHE:O	1:A:907:ASP:C	2.41	0.59
1:A:277:LEU:HD23	1:A:472:THR:CG2	2.30	0.59
1:A:949:ILE:O	1:A:1012:ASN:HA	2.03	0.59
1:A:802:PRO:HB3	1:A:932:ILE:HD11	1.84	0.59
1:A:428:LEU:O	1:A:543:TYR:N	2.35	0.59
1:A:706:TRP:CZ3	1:A:848:ASP:HB2	2.38	0.59
1:A:995:GLN:OE1	1:A:996:ARG:N	2.35	0.59
1:A:576:LEU:HA	1:A:581:ARG:HD2	1.85	0.59
1:A:636:TYR:C	1:A:639:PRO:HD2	2.23	0.59
1:A:1241:ASP:CG	1:A:1245:ASN:HB2	2.23	0.59
1:A:1016:PHE:CE2	1:A:1088:TYR:HB2	2.38	0.59
1:A:1101:TRP:CZ3	1:A:1288:ASP:HB2	2.38	0.58
1:A:498:LEU:O	1:A:502:TYR:HD1	1.85	0.58
1:A:97:ARG:HG2	1:A:386:ILE:O	2.03	0.58
1:A:952:TYR:CE1	1:A:1065:ARG:CZ	2.86	0.58
1:A:934:TYR:O	1:A:937:MET:HB2	2.03	0.58
1:A:1014:TRP:CH2	1:A:1070:LYS:HE3	2.38	0.58
1:A:566:ILE:HG12	1:A:749:TYR:CG	2.39	0.58
1:A:1193:LEU:CD1	1:A:1206:LEU:HD13	2.33	0.58
1:A:658:PHE:CD1	1:A:889:ILE:HG21	2.38	0.58
1:A:1255:PHE:O	1:A:1256:ASN:HB2	2.03	0.58
1:A:578:ASN:O	1:A:581:ARG:HB3	2.04	0.58
1:A:857:VAL:O	1:A:863:LEU:HD11	2.01	0.58
1:A:950:PRO:O	1:A:1065:ARG:NH2	2.36	0.58
1:A:1211:ILE:HD12	1:A:1211:ILE:N	2.18	0.58
1:A:1164:LYS:HD3	1:A:1168:GLY:HA2	1.86	0.58
1:A:584:THR:CG2	1:A:585:PHE:N	2.66	0.58
1:A:312:TYR:CE2	1:A:515:ILE:HG13	2.39	0.58
1:A:984:ILE:HG22	1:A:985:TRP:N	2.18	0.58
1:A:11:LYS:HZ1	1:A:81:ASP:HB3	1.69	0.58
1:A:425:PHE:CZ	1:A:537:PHE:HB2	2.39	0.58
1:A:455:ILE:HD12	1:A:552:HIS:ND1	2.19	0.58
1:A:566:ILE:HD13	1:A:749:TYR:HB3	1.86	0.58
1:A:764:PHE:HZ	1:A:769:LEU:HD22	1.68	0.58
1:A:226:ILE:CG2	1:A:265:THR:HG23	2.34	0.58
1:A:1234:LYS:O	1:A:1236:LYS:HG3	2.04	0.58
1:A:1239:LEU:HD13	1:A:1240:GLN:N	2.19	0.58
1:A:952:TYR:CD2	1:A:980:TYR:HA	2.39	0.57
1:A:242:VAL:HG13	1:A:258:VAL:O	2.03	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:258:VAL:HG21	1:A:367:LEU:HD21	1.87	0.57
1:A:1097:LEU:HD23	1:A:1236:LYS:HD2	1.87	0.57
1:A:624:THR:HG21	1:A:633:ILE:HD12	1.85	0.57
1:A:487:ILE:CG2	1:A:488:GLU:N	2.66	0.57
1:A:960:ASN:HD21	1:A:1061:ARG:H	1.52	0.57
1:A:542:LYS:HE2	1:A:544:GLU:HG3	1.87	0.57
1:A:229:GLY:O	1:A:233:TYR:HD1	1.88	0.57
1:A:2:PRO:O	1:A:4:VAL:N	2.37	0.57
1:A:193:THR:HG22	1:A:194:PHE:H	1.70	0.57
1:A:903:LYS:CB	1:A:922:SER:HB3	2.34	0.57
1:A:866:PHE:O	1:A:870:ILE:HG12	2.05	0.57
1:A:861:ARG:NH2	1:A:862:LEU:HD21	2.19	0.57
1:A:72:TYR:CE2	1:A:160:ILE:HD12	2.39	0.57
1:A:963:THR:O	1:A:1057:LEU:HA	2.04	0.57
1:A:574:GLU:C	1:A:576:LEU:H	2.07	0.57
1:A:1155:TYR:CE2	1:A:1287:VAL:HG22	2.40	0.57
1:A:1296:LEU:HD23	1:A:1296:LEU:N	2.20	0.57
1:A:30:MET:CE	1:A:33:VAL:HG23	2.35	0.56
1:A:473:ASN:ND2	1:A:475:LEU:H	2.03	0.56
1:A:1168:GLY:O	1:A:1170:LYS:N	2.37	0.56
1:A:669:PRO:HB3	1:A:720:LYS:HB3	1.87	0.56
1:A:948:ARG:HB3	1:A:1068:TRP:CB	2.19	0.56
1:A:395:THR:O	1:A:397:LEU:N	2.37	0.56
1:A:72:TYR:CZ	1:A:416:LEU:HD13	2.40	0.56
1:A:259:SER:OG	1:A:262:GLU:HB2	2.05	0.56
1:A:362:ASN:ND2	1:A:363:ALA:O	2.38	0.56
1:A:480:GLU:HA	1:A:680:ALA:HB3	1.86	0.56
1:A:80:THR:OG1	1:A:83:GLU:HG3	2.06	0.56
1:A:918:ASN:OD1	1:A:1060:CYS:HB3	2.04	0.56
1:A:395:THR:C	1:A:397:LEU:N	2.58	0.56
1:A:195:GLY:HA3	1:A:374:PHE:HE1	1.70	0.56
1:A:1210:GLU:HB3	1:A:1213:ASP:OD2	2.05	0.56
1:A:1096:ILE:HG21	1:A:1104:TYR:CD1	2.41	0.56
1:A:1080:ASN:HD21	1:A:1082:LYS:HB3	1.69	0.56
1:A:935:ASN:OD1	1:A:1049:ALA:HB3	2.06	0.56
1:A:1075:PHE:CE2	1:A:1079:LEU:HD11	2.41	0.56
1:A:1114:LEU:HD12	1:A:1115:ASN:N	2.20	0.56
1:A:963:THR:HA	1:A:977:SER:HA	1.88	0.56
1:A:8:PHE:CD1	1:A:19:ILE:HD11	2.41	0.56
1:A:594:VAL:CG1	1:A:746:ILE:HG21	2.32	0.56
1:A:1127:ASN:O	1:A:1132:GLY:HA3	2.06	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:628:ALA:O	1:A:629:ASP:CB	2.53	0.56
1:A:115:ILE:HD12	1:A:316:VAL:HG11	1.86	0.56
1:A:1155:TYR:OH	1:A:1291:TRP:HB3	2.06	0.56
1:A:1227:ASN:HB3	1:A:1231:ILE:O	2.06	0.56
1:A:733:LYS:O	1:A:737:GLU:HG3	2.06	0.56
1:A:660:GLY:O	1:A:662:VAL:N	2.39	0.56
1:A:269:HIS:O	1:A:272:LYS:N	2.35	0.56
1:A:879:LEU:HB3	1:A:1074:LEU:HB3	1.88	0.56
1:A:1029:ILE:O	1:A:1029:ILE:HG23	2.05	0.56
1:A:154:ILE:HD13	1:A:187:ARG:HG3	1.87	0.56
1:A:856:TYR:O	1:A:857:VAL:HG23	2.06	0.56
1:A:952:TYR:HB2	1:A:1003:GLN:NE2	2.18	0.55
1:A:573:ASN:C	1:A:575:ALA:H	2.10	0.55
1:A:575:ALA:O	1:A:581:ARG:CB	2.53	0.55
1:A:337:LYS:HA	1:A:340:LYS:HD2	1.88	0.55
1:A:1136:LEU:HD11	1:A:1252:PHE:CD2	2.41	0.55
1:A:1173:ILE:HB	1:A:1175:ARG:HH12	1.71	0.55
1:A:1085:LYS:HE3	1:A:1089:ASP:OD2	2.06	0.55
1:A:1137:LYS:HG3	1:A:1138:GLY:H	1.70	0.55
1:A:951:LYS:NZ	1:A:1151:ASN:OD1	2.40	0.55
1:A:176:THR:HG22	1:A:236:ALA:HB3	1.88	0.55
1:A:643:ILE:C	1:A:645:ASN:N	2.58	0.55
1:A:1167:SER:HB3	1:A:1170:LYS:NZ	2.21	0.55
1:A:559:PHE:C	1:A:559:PHE:CD1	2.79	0.55
1:A:1204:LYS:H	1:A:1262:VAL:HG13	1.71	0.55
1:A:972:SER:HB2	1:A:1048:HIS:HB2	1.88	0.55
1:A:542:LYS:HE2	1:A:544:GLU:CG	2.36	0.55
1:A:706:TRP:CD2	1:A:808:LEU:HD13	2.41	0.55
1:A:1130:ILE:HD12	1:A:1131:ARG:N	2.22	0.55
1:A:9:ASN:HB2	1:A:12:ASP:OD1	2.06	0.55
1:A:555:ARG:O	1:A:558:GLU:HG3	2.07	0.55
1:A:702:ARG:HE	1:A:812:ASP:CG	2.09	0.55
1:A:1211:ILE:H	1:A:1211:ILE:CD1	2.18	0.55
1:A:1155:TYR:CZ	1:A:1287:VAL:HA	2.41	0.55
1:A:22:ILE:CG2	1:A:24:ILE:HD12	2.37	0.55
1:A:888:LEU:HB3	1:A:900:ILE:HD11	1.89	0.55
1:A:429:LEU:O	1:A:454:CYS:HA	2.06	0.55
1:A:1276:ARG:O	1:A:1278:LEU:HG	2.07	0.55
1:A:243:PHE:CZ	1:A:273:PHE:HB3	2.41	0.55
1:A:1022:ASN:HB2	1:A:1078:GLU:OE2	2.07	0.55
1:A:1013:ARG:HG3	1:A:1101:TRP:HD1	1.72	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:754:TYR:OH	1:A:757:GLU:O	2.23	0.54
1:A:226:ILE:HD13	1:A:350:THR:CA	2.36	0.54
1:A:1277:THR:HG22	1:A:1277:THR:O	2.07	0.54
1:A:2:PRO:HG2	1:A:39:HIS:NE2	2.22	0.54
1:A:1020:THR:CG2	1:A:1078:GLU:HG3	2.36	0.54
1:A:212:LYS:CE	1:A:371:LYS:HB2	2.37	0.54
1:A:458:ASN:HD22	1:A:459:ASN:H	1.55	0.54
1:A:1034:ARG:CZ	1:A:1036:ILE:HD11	2.36	0.54
1:A:984:ILE:HG12	1:A:998:VAL:CG2	2.32	0.54
1:A:422:LEU:HD23	1:A:423:PHE:CE1	2.42	0.54
1:A:888:LEU:HD21	1:A:914:ILE:HD11	1.89	0.54
1:A:48:ARG:CZ	1:A:59:LEU:HD13	2.36	0.54
1:A:1112:TYR:CZ	1:A:1159:LYS:HE2	2.42	0.54
1:A:815:LEU:HD23	1:A:845:LEU:CD1	2.36	0.54
1:A:632:ILE:HD12	1:A:786:LYS:HB3	1.89	0.54
1:A:322:LEU:HD12	1:A:341:LEU:HB2	1.88	0.54
1:A:566:ILE:CD1	1:A:749:TYR:HB3	2.37	0.54
1:A:584:THR:CG2	1:A:585:PHE:H	2.21	0.54
1:A:115:ILE:CG2	1:A:317:PHE:HE1	2.21	0.54
1:A:72:TYR:CE1	1:A:416:LEU:HD13	2.43	0.54
1:A:669:PRO:HG3	1:A:721:VAL:HG22	1.89	0.54
1:A:1077:LYS:HE3	1:A:1083:GLU:OE1	2.08	0.54
1:A:625:ASP:C	1:A:627:ILE:H	2.10	0.54
1:A:11:LYS:HZ2	1:A:81:ASP:HB3	1.72	0.54
1:A:816:LYS:O	1:A:820:LEU:HD23	2.08	0.54
1:A:97:ARG:HD3	1:A:358:PHE:CE1	2.43	0.54
1:A:178:ASN:O	1:A:289:LYS:HB3	2.08	0.54
1:A:587:SER:H	1:A:617:GLU:CD	2.10	0.54
1:A:11:LYS:NZ	1:A:81:ASP:CB	2.70	0.54
1:A:663:ILE:O	1:A:663:ILE:HG22	2.08	0.54
1:A:903:LYS:CG	1:A:921:SER:HB2	2.38	0.53
1:A:754:TYR:CG	1:A:755:THR:N	2.76	0.53
1:A:309:SER:O	1:A:312:TYR:N	2.41	0.53
1:A:123:ILE:HD12	1:A:123:ILE:N	2.23	0.53
1:A:515:ILE:HG22	1:A:515:ILE:O	2.08	0.53
1:A:418:ASN:ND2	1:A:420:THR:N	2.56	0.53
1:A:423:PHE:O	1:A:426:TYR:HD2	1.90	0.53
1:A:1163:LYS:HD3	1:A:1183:ASN:ND2	2.24	0.53
1:A:909:ILE:HD11	1:A:1106:GLN:OE1	2.08	0.53
1:A:658:PHE:HD1	1:A:889:ILE:HG21	1.72	0.53
1:A:661:ALA:HB1	1:A:791:CYS:HB3	1.89	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:17:VAL:O	1:A:18:ASP:OD1	2.27	0.53
1:A:772:LYS:O	1:A:774:ASN:N	2.41	0.53
1:A:458:ASN:ND2	1:A:459:ASN:N	2.57	0.53
1:A:925:GLU:HB2	1:A:1054:MET:SD	2.49	0.53
1:A:1005:ILE:O	1:A:1151:ASN:HA	2.09	0.53
1:A:1164:LYS:HD3	1:A:1168:GLY:CA	2.39	0.53
1:A:797:MET:CE	1:A:866:PHE:HE1	2.22	0.53
1:A:432:ARG:N	1:A:545:LEU:O	2.42	0.53
1:A:52:THR:CG2	1:A:528:LEU:HD21	2.39	0.53
1:A:269:HIS:O	1:A:272:LYS:HB2	2.09	0.53
1:A:318:LYS:CG	1:A:331:PHE:CE1	2.92	0.53
1:A:535:GLU:HG3	1:A:535:GLU:O	2.09	0.53
1:A:824:TYR:O	1:A:827:ARG:HG2	2.09	0.53
1:A:549:THR:N	1:A:552:HIS:HD2	2.05	0.53
1:A:573:ASN:C	1:A:575:ALA:N	2.63	0.53
1:A:641:LEU:HD11	1:A:732:MET:SD	2.49	0.53
1:A:816:LYS:HE3	1:A:842:ASN:HA	1.89	0.53
1:A:1116:LEU:HB2	1:A:1281:SER:O	2.09	0.53
1:A:594:VAL:HG12	1:A:746:ILE:HD13	1.91	0.52
1:A:1241:ASP:HB3	1:A:1247:ILE:HD11	1.91	0.52
1:A:1146:THR:O	1:A:1147:ASN:HB2	2.09	0.52
1:A:405:ASN:CG	1:A:408:ILE:HD13	2.30	0.52
1:A:903:LYS:HA	1:A:903:LYS:HE2	1.89	0.52
1:A:1112:TYR:CE1	1:A:1159:LYS:HE2	2.44	0.52
1:A:552:HIS:O	1:A:555:ARG:HB3	2.09	0.52
1:A:22:ILE:HD12	1:A:22:ILE:H	1.72	0.52
1:A:1205:ILE:O	1:A:1206:LEU:HB2	2.08	0.52
1:A:407:GLU:O	1:A:410:ASN:HB2	2.08	0.52
1:A:226:ILE:HG21	1:A:265:THR:HG23	1.90	0.52
1:A:906:PHE:CE2	1:A:914:ILE:HG12	2.44	0.52
1:A:947:ILE:CG2	1:A:1015:ILE:HB	2.40	0.52
1:A:318:LYS:NZ	1:A:325:GLU:HG2	2.25	0.52
1:A:589:ASP:OD1	1:A:593:LYS:HE3	2.10	0.52
1:A:348:ILE:HD13	1:A:494:ILE:HG23	1.90	0.52
1:A:140:PRO:C	1:A:142:GLY:H	2.13	0.52
1:A:1163:LYS:HG3	1:A:1183:ASN:ND2	2.24	0.52
1:A:562:GLY:C	1:A:564:SER:H	2.13	0.52
1:A:1009:ASP:HA	1:A:1013:ARG:HH11	1.73	0.52
1:A:952:TYR:HE2	1:A:981:GLY:H	1.56	0.52
1:A:735:ALA:O	1:A:738:ASN:N	2.42	0.52
1:A:684:TYR:CD2	1:A:690:LEU:HD23	2.44	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:669:PRO:HG3	1:A:721:VAL:CG2	2.39	0.52
1:A:238:ASN:HD21	1:A:240:ASN:HD22	1.58	0.52
1:A:614:PHE:CD2	1:A:773:LEU:HD22	2.45	0.52
1:A:15:ASN:O	1:A:17:VAL:N	2.42	0.52
1:A:197:GLU:CG	1:A:212:LYS:HG2	2.39	0.52
1:A:989:ASP:HB2	1:A:1046:ASN:O	2.10	0.52
1:A:3:PHE:O	1:A:4:VAL:HB	2.10	0.52
1:A:872:ASN:HD22	1:A:874:ILE:N	2.05	0.51
1:A:267:GLY:O	1:A:268:GLY:C	2.48	0.51
1:A:872:ASN:HB3	1:A:875:ASN:ND2	2.26	0.51
1:A:1163:LYS:HD3	1:A:1183:ASN:HD22	1.75	0.51
1:A:1154:LEU:O	1:A:1156:ARG:N	2.40	0.51
1:A:554:LEU:HA	1:A:557:GLN:NE2	2.26	0.51
1:A:763:ASN:ND2	1:A:765:ASN:HD21	2.04	0.51
1:A:258:VAL:HG22	1:A:366:PHE:HE2	1.74	0.51
1:A:547:LYS:HZ3	1:A:646:MET:HB3	1.75	0.51
1:A:282:PHE:O	1:A:285:TYR:HB3	2.10	0.51
1:A:46:PRO:O	1:A:84:LYS:HD3	2.09	0.51
1:A:948:ARG:NH1	1:A:948:ARG:HG2	2.23	0.51
1:A:139:GLN:NE2	1:A:145:ARG:NH1	2.59	0.51
1:A:973:GLY:N	1:A:988:GLN:O	2.44	0.51
1:A:17:VAL:C	1:A:19:ILE:H	2.13	0.51
1:A:275:ASP:OD1	1:A:278:GLN:HG3	2.11	0.51
1:A:258:VAL:HG13	1:A:366:PHE:CE2	2.46	0.51
1:A:193:THR:OG1	1:A:376:ILE:HD13	2.11	0.51
1:A:649:LYS:O	1:A:650:ASP:O	2.28	0.51
1:A:336:LEU:HD12	1:A:340:LYS:HE3	1.93	0.51
1:A:114:GLY:O	1:A:320:LYS:HD2	2.11	0.51
1:A:146:SER:OG	1:A:520:LEU:N	2.42	0.51
1:A:1114:LEU:HD12	1:A:1114:LEU:C	2.30	0.51
1:A:755:THR:O	1:A:756:GLU:CB	2.55	0.51
1:A:310:LEU:O	1:A:314:LYS:HG3	2.11	0.51
1:A:614:PHE:O	1:A:618:THR:HB	2.10	0.51
1:A:547:LYS:HZ2	1:A:646:MET:HB3	1.74	0.51
1:A:9:ASN:HB2	1:A:12:ASP:CG	2.31	0.51
1:A:972:SER:O	1:A:973:GLY:O	2.30	0.50
1:A:429:LEU:CD2	1:A:543:TYR:HB2	2.39	0.50
1:A:35:ALA:CB	1:A:45:ILE:HG12	2.38	0.50
1:A:929:LYS:O	1:A:933:VAL:HG23	2.12	0.50
1:A:487:ILE:HG22	1:A:488:GLU:N	2.26	0.50
1:A:351:GLU:O	1:A:355:VAL:HG23	2.10	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:74:ASP:O	1:A:76:THR:N	2.44	0.50
1:A:1041:ILE:HG23	1:A:1044:LEU:HB2	1.92	0.50
1:A:1197:ALA:HB2	1:A:1247:ILE:CD1	2.42	0.50
1:A:962:TYR:CE1	1:A:978:LEU:HB2	2.46	0.50
1:A:763:ASN:HB2	1:A:765:ASN:HD21	1.73	0.50
1:A:167:SER:HB2	1:A:184:GLN:NE2	2.26	0.50
1:A:1130:ILE:HD12	1:A:1130:ILE:C	2.32	0.50
1:A:947:ILE:O	1:A:1014:TRP:HA	2.11	0.50
1:A:36:PHE:N	1:A:36:PHE:CD1	2.79	0.50
1:A:21:TYR:O	1:A:138:ILE:HB	2.12	0.50
1:A:1161:ILE:HG22	1:A:1163:LYS:HD3	1.93	0.50
1:A:1010:TYR:HB3	1:A:1015:ILE:CD1	2.29	0.50
1:A:428:LEU:HD23	1:A:542:LYS:HG3	1.92	0.50
1:A:431:VAL:HB	1:A:453:LEU:HD23	1.94	0.50
1:A:150:ASN:O	1:A:232:LEU:HD21	2.12	0.50
1:A:746:ILE:HG22	1:A:747:ILE:N	2.26	0.50
1:A:70:VAL:HG12	1:A:71:SER:N	2.27	0.50
1:A:1133:TYR:CD2	1:A:1260:LYS:NZ	2.80	0.50
1:A:827:ARG:C	1:A:829:THR:H	2.14	0.50
1:A:38:ILE:O	1:A:39:HIS:HB2	2.11	0.50
1:A:1026:ASN:HB3	1:A:1040:PRO:HA	1.94	0.50
1:A:355:VAL:O	1:A:355:VAL:HG12	2.12	0.50
1:A:1122:TYR:CE1	1:A:1137:LYS:HB3	2.47	0.50
1:A:247:THR:HG21	1:A:254:SER:O	2.12	0.50
1:A:1288:ASP:O	1:A:1290:GLY:N	2.45	0.50
1:A:422:LEU:HD23	1:A:423:PHE:HE1	1.77	0.50
1:A:624:THR:CG2	1:A:633:ILE:HD12	2.41	0.50
1:A:481:ILE:CD1	1:A:698:ALA:HA	2.40	0.50
1:A:1104:TYR:CD2	1:A:1173:ILE:HD13	2.47	0.50
1:A:458:ASN:ND2	1:A:459:ASN:H	2.10	0.50
1:A:673:ILE:O	1:A:807:ARG:NH1	2.45	0.49
1:A:201:GLU:HG3	1:A:361:LEU:HD13	1.92	0.49
1:A:537:PHE:HB3	1:A:538:PRO:HD2	1.94	0.49
1:A:920:GLU:HG3	1:A:920:GLU:O	2.12	0.49
1:A:641:LEU:HD11	1:A:732:MET:HG2	1.95	0.49
1:A:1236:LYS:NZ	1:A:1282:TRP:O	2.43	0.49
1:A:10:TYR:HA	1:A:36:PHE:HZ	1.76	0.49
1:A:379:VAL:N	1:A:380:PRO:HD2	2.28	0.49
1:A:638:GLY:N	1:A:639:PRO:HD2	2.27	0.49
1:A:746:ILE:O	1:A:747:ILE:C	2.49	0.49
1:A:965:ILE:O	1:A:976:VAL:N	2.45	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:247:THR:HG23	1:A:254:SER:HA	1.93	0.49
1:A:156:PRO:HD3	1:A:189:SER:HB2	1.93	0.49
1:A:1233:ASN:HD22	1:A:1271:ILE:HG23	1.75	0.49
1:A:571:SER:OG	1:A:572:VAL:N	2.44	0.49
1:A:394:ASN:O	1:A:395:THR:C	2.51	0.49
1:A:1291:TRP:O	1:A:1293:GLU:N	2.46	0.49
1:A:114:GLY:O	1:A:320:LYS:CE	2.60	0.49
1:A:235:ILE:O	1:A:235:ILE:HG23	2.12	0.49
1:A:743:THR:O	1:A:743:THR:CG2	2.61	0.49
1:A:647:LEU:O	1:A:648:TYR:C	2.51	0.49
1:A:1255:PHE:HD2	1:A:1260:LYS:HD2	1.76	0.49
1:A:318:LYS:HG3	1:A:331:PHE:HE1	1.77	0.49
1:A:79:SER:N	1:A:83:GLU:OE1	2.45	0.49
1:A:1209:LEU:CD1	1:A:1217:LEU:HD12	2.43	0.49
1:A:380:PRO:HG2	1:A:383:ASN:HB2	1.95	0.49
1:A:872:ASN:ND2	1:A:874:ILE:CB	2.64	0.49
1:A:986:THR:HG21	1:A:996:ARG:NH2	2.27	0.49
1:A:269:HIS:HE1	1:A:859:ASN:HD22	1.59	0.49
1:A:72:TYR:CD2	1:A:160:ILE:HD12	2.48	0.49
1:A:962:TYR:CD2	1:A:1057:LEU:HD23	2.48	0.49
1:A:961:GLU:CA	1:A:979:ASN:HD22	2.26	0.49
1:A:22:ILE:HD13	1:A:35:ALA:CB	2.37	0.49
1:A:1241:ASP:OD1	1:A:1241:ASP:C	2.51	0.49
1:A:583:TYR:CG	1:A:584:THR:N	2.80	0.49
1:A:378:ILE:HG23	1:A:384:TYR:CD1	2.48	0.49
1:A:209:GLY:HA3	1:A:213:PHE:CZ	2.48	0.49
1:A:172:VAL:HG12	1:A:172:VAL:O	2.12	0.49
1:A:243:PHE:HD1	1:A:260:PHE:HE1	1.59	0.49
1:A:540:GLY:O	1:A:541:LYS:C	2.50	0.49
1:A:733:LYS:HB2	1:A:781:MET:HE1	1.95	0.49
1:A:559:PHE:HB3	1:A:582:VAL:CG2	2.37	0.48
1:A:526:GLY:O	1:A:527:GLN:CB	2.61	0.48
1:A:966:ASN:HD22	1:A:975:LYS:HG3	1.78	0.48
1:A:1109:LYS:NZ	1:A:1286:PRO:CB	2.76	0.48
1:A:3:PHE:HA	1:A:96:GLU:OE1	2.12	0.48
1:A:702:ARG:NH1	1:A:702:ARG:CG	2.76	0.48
1:A:966:ASN:HA	1:A:975:LYS:HB2	1.95	0.48
1:A:1105:LEU:HD21	1:A:1162:ILE:CD1	2.43	0.48
1:A:954:ASN:O	1:A:1148:ILE:HD13	2.13	0.48
1:A:1111:TYR:CD1	1:A:1286:PRO:HB3	2.47	0.48
1:A:45:ILE:HG22	1:A:47:GLU:HG2	1.96	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:384:TYR:HA	1:A:389:GLY:O	2.12	0.48
1:A:135:ILE:HG21	1:A:149:LEU:HD12	1.94	0.48
1:A:306:THR:CG2	1:A:517:ILE:HG22	2.42	0.48
1:A:1171:ASP:OD2	1:A:1173:ILE:HB	2.13	0.48
1:A:1173:ILE:HB	1:A:1175:ARG:NH1	2.28	0.48
1:A:1027:SER:CB	1:A:1041:ILE:HD11	2.24	0.48
1:A:974:TRP:H	1:A:987:LEU:HA	1.77	0.48
1:A:555:ARG:HA	1:A:555:ARG:HE	1.78	0.48
1:A:647:LEU:O	1:A:649:LYS:N	2.46	0.48
1:A:17:VAL:O	1:A:19:ILE:N	2.46	0.48
1:A:609:GLN:HG2	1:A:613:ASP:OD2	2.14	0.48
1:A:621:VAL:CG1	1:A:632:ILE:HG23	2.44	0.48
1:A:641:LEU:HB2	1:A:643:ILE:CG1	2.39	0.48
1:A:214:ALA:CB	1:A:413:PHE:CE1	2.97	0.48
1:A:1117:TYR:C	1:A:1119:PRO:HD3	2.34	0.48
1:A:676:LEU:CD1	1:A:808:LEU:HD23	2.44	0.48
1:A:1137:LYS:HG3	1:A:1138:GLY:N	2.28	0.48
1:A:118:TRP:CD1	1:A:317:PHE:HZ	2.31	0.48
1:A:210:ALA:H	1:A:405:ASN:HD21	1.51	0.48
1:A:1253:HIS:O	1:A:1259:ALA:HA	2.14	0.48
1:A:559:PHE:O	1:A:559:PHE:CD1	2.67	0.48
1:A:311:GLN:NE2	1:A:312:TYR:N	2.61	0.48
1:A:171:GLU:HG2	1:A:172:VAL:CG2	2.43	0.48
1:A:903:LYS:HB2	1:A:922:SER:CB	2.41	0.48
1:A:760:ASN:O	1:A:761:ASN:CB	2.62	0.48
1:A:1135:TYR:N	1:A:1135:TYR:CD1	2.81	0.48
1:A:970:ASN:O	1:A:971:ASN:HB2	2.13	0.47
1:A:33:VAL:HG12	1:A:34:LYS:N	2.29	0.47
1:A:22:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HD12	1.96	0.47
1:A:144:TYR:C	1:A:144:TYR:CD1	2.87	0.47
1:A:796:LEU:CD2	1:A:801:ILE:HG12	2.44	0.47
1:A:1199:GLN:NE2	1:A:1204:LYS:HA	2.29	0.47
1:A:1104:TYR:HB3	1:A:1173:ILE:HG23	1.96	0.47
1:A:569:THR:O	1:A:595:ASN:ND2	2.45	0.47
1:A:1113:MET:CE	1:A:1160:PHE:HB2	2.44	0.47
1:A:838:LYS:HB3	1:A:838:LYS:NZ	2.29	0.47
1:A:874:ILE:C	1:A:876:THR:H	2.17	0.47
1:A:455:ILE:CD1	1:A:552:HIS:ND1	2.78	0.47
1:A:304:VAL:HG23	1:A:304:VAL:O	2.14	0.47
1:A:702:ARG:C	1:A:702:ARG:HD2	2.35	0.47
1:A:225:LEU:C	1:A:227:HIS:N	2.68	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:974:TRP:HB2	1:A:985:TRP:CZ2	2.50	0.47
1:A:420:THR:O	1:A:421:GLY:C	2.51	0.47
1:A:1100:PHE:CD1	1:A:1283:GLU:HG2	2.43	0.47
1:A:1296:LEU:H	1:A:1296:LEU:CD2	2.27	0.47
1:A:1009:ASP:HA	1:A:1013:ARG:NH1	2.29	0.47
1:A:997:VAL:HG11	1:A:1027:SER:O	2.14	0.47
1:A:757:GLU:HB2	1:A:760:ASN:HD22	1.76	0.47
1:A:135:ILE:HG23	1:A:149:LEU:HD12	1.96	0.47
1:A:1269:ARG:NH1	1:A:1273:ARG:HH11	2.11	0.47
1:A:93:LYS:NZ	1:A:378:ILE:O	2.34	0.47
1:A:705:LYS:HD3	1:A:705:LYS:O	2.15	0.47
1:A:671:ILE:HG22	1:A:673:ILE:HD11	1.97	0.47
1:A:1193:LEU:HD12	1:A:1194:ALA:N	2.28	0.47
1:A:974:TRP:CE3	1:A:985:TRP:CZ3	3.02	0.47
1:A:1010:TYR:HD2	1:A:1015:ILE:CD1	2.28	0.47
1:A:660:GLY:C	1:A:662:VAL:H	2.18	0.47
1:A:217:PRO:CG	1:A:378:ILE:HD11	2.33	0.47
1:A:149:LEU:HD13	1:A:152:VAL:CG2	2.45	0.47
1:A:248:ASN:O	1:A:249:ALA:HB2	2.14	0.47
1:A:944:SER:HA	1:A:1017:VAL:O	2.15	0.47
1:A:212:LYS:HE2	1:A:371:LYS:CB	2.43	0.47
1:A:299:LYS:HE3	1:A:299:LYS:HB2	1.74	0.47
1:A:968:MET:HA	1:A:972:SER:CB	2.39	0.47
1:A:554:LEU:HD11	1:A:734:GLU:HG2	1.97	0.47
1:A:802:PRO:CB	1:A:932:ILE:HD11	2.45	0.47
1:A:948:ARG:HA	1:A:1013:ARG:O	2.15	0.47
1:A:947:ILE:HG22	1:A:1015:ILE:HB	1.97	0.47
1:A:92:THR:HG22	1:A:93:LYS:N	2.29	0.47
1:A:145:ARG:HG3	1:A:145:ARG:O	2.15	0.47
1:A:627:ILE:HD12	1:A:627:ILE:N	2.30	0.47
1:A:197:GLU:HG2	1:A:212:LYS:HG2	1.96	0.47
1:A:1041:ILE:C	1:A:1043:ASN:H	2.18	0.47
1:A:168:PHE:HA	1:A:528:LEU:HA	1.96	0.47
1:A:574:GLU:CD	1:A:574:GLU:N	2.66	0.47
1:A:574:GLU:HA	1:A:574:GLU:OE1	2.15	0.47
1:A:576:LEU:CA	1:A:581:ARG:HB2	2.35	0.47
1:A:585:PHE:CE1	1:A:586:PHE:CE1	3.03	0.47
1:A:420:THR:CG2	1:A:420:THR:O	2.59	0.47
1:A:702:ARG:O	1:A:702:ARG:HD2	2.14	0.47
1:A:1205:ILE:O	1:A:1261:LEU:O	2.33	0.47
1:A:663:ILE:CG2	1:A:663:ILE:O	2.62	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:987:LEU:CD1	1:A:1041:ILE:HD13	2.43	0.46
1:A:1014:TRP:HD1	1:A:1102:GLY:HA3	1.80	0.46
1:A:742:ALA:C	1:A:744:LYS:H	2.18	0.46
1:A:757:GLU:CB	1:A:760:ASN:ND2	2.78	0.46
1:A:18:ASP:HA	1:A:37:LYS:HB3	1.97	0.46
1:A:105:ARG:NH1	1:A:508:PHE:CZ	2.83	0.46
1:A:171:GLU:HG2	1:A:172:VAL:HG23	1.97	0.46
1:A:1096:ILE:HD12	1:A:1104:TYR:CE1	2.50	0.46
1:A:1124:ASP:HB2	1:A:1137:LYS:HB2	1.97	0.46
1:A:1288:ASP:C	1:A:1290:GLY:H	2.18	0.46
1:A:1233:ASN:OD1	1:A:1235:CYS:N	2.43	0.46
1:A:761:ASN:C	1:A:763:ASN:H	2.16	0.46
1:A:674:PRO:C	1:A:807:ARG:NH1	2.69	0.46
1:A:195:GLY:HA3	1:A:374:PHE:CE1	2.49	0.46
1:A:954:ASN:HB3	1:A:956:ILE:HG13	1.97	0.46
1:A:915:GLN:HB2	1:A:1068:TRP:CZ3	2.50	0.46
1:A:346:THR:HG22	1:A:347:GLU:N	2.30	0.46
1:A:553:TYR:CD2	1:A:642:ASN:HB2	2.51	0.46
1:A:167:SER:HB2	1:A:184:GLN:HE22	1.81	0.46
1:A:227:HIS:CE1	1:A:261:GLU:OE1	2.68	0.46
1:A:757:GLU:CB	1:A:760:ASN:HD22	2.28	0.46
1:A:21:TYR:HA	1:A:21:TYR:HD1	1.68	0.46
1:A:729:ARG:HH22	1:A:789:ASN:ND2	2.12	0.46
1:A:1111:TYR:CE1	1:A:1286:PRO:HB3	2.50	0.46
1:A:943:THR:CG2	1:A:1019:ILE:HB	2.46	0.46
1:A:1041:ILE:O	1:A:1041:ILE:CG2	2.62	0.46
1:A:2:PRO:HA	1:A:108:LEU:HD13	1.98	0.46
1:A:6:LYS:HD2	1:A:18:ASP:OD2	2.16	0.46
1:A:1018:THR:HG21	1:A:1084:ILE:HD12	1.97	0.46
1:A:29:GLN:N	1:A:29:GLN:CD	2.68	0.46
1:A:161:ILE:HB	1:A:194:PHE:CZ	2.51	0.46
1:A:1028:LYS:HB3	1:A:1035:LEU:CD1	2.46	0.46
1:A:397:LEU:O	1:A:398:ALA:CB	2.62	0.46
1:A:671:ILE:HD13	1:A:803:TYR:CD2	2.50	0.46
1:A:719:ALA:HA	1:A:723:THR:HG23	1.98	0.46
1:A:119:GLY:O	1:A:121:SER:N	2.48	0.46
1:A:643:ILE:CG2	1:A:664:LEU:HD23	2.40	0.46
1:A:139:GLN:CD	1:A:145:ARG:NH1	2.69	0.46
1:A:24:ILE:CD1	1:A:45:ILE:CD1	2.94	0.46
1:A:1080:ASN:OD1	1:A:1083:GLU:HG3	2.16	0.46
1:A:535:GLU:O	1:A:536:ARG:C	2.54	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:65:ALA:O	1:A:536:ARG:NH2	2.48	0.46
1:A:984:ILE:CG2	1:A:998:VAL:HG22	2.44	0.46
1:A:586:PHE:HB3	1:A:617:GLU:OE2	2.15	0.46
1:A:757:GLU:O	1:A:757:GLU:HG3	2.16	0.46
1:A:1205:ILE:HA	1:A:1262:VAL:HG22	1.98	0.46
1:A:965:ILE:HB	1:A:976:VAL:HG23	1.97	0.46
1:A:318:LYS:HG3	1:A:331:PHE:CE1	2.51	0.46
1:A:534:ILE:HG22	1:A:534:ILE:O	2.15	0.46
1:A:696:ASP:OD1	1:A:840:LYS:NZ	2.41	0.46
1:A:105:ARG:HG2	1:A:508:PHE:HE1	1.78	0.46
1:A:1199:GLN:HE22	1:A:1204:LYS:HB3	1.80	0.46
1:A:964:ILE:HG13	1:A:965:ILE:N	2.31	0.46
1:A:1062:ASP:C	1:A:1062:ASP:OD1	2.54	0.46
1:A:706:TRP:CE3	1:A:808:LEU:HD13	2.51	0.46
1:A:207:LEU:HD21	1:A:775:GLU:OE2	2.16	0.46
1:A:1099:ASP:N	1:A:1103:ASP:O	2.47	0.45
1:A:566:ILE:HG23	1:A:749:TYR:CB	2.46	0.45
1:A:115:ILE:HG22	1:A:317:PHE:CE1	2.48	0.45
1:A:318:LYS:HG2	1:A:331:PHE:CE1	2.51	0.45
1:A:492:GLU:C	1:A:494:ILE:H	2.18	0.45
1:A:326:ASP:OD1	1:A:328:SER:N	2.49	0.45
1:A:1143:VAL:HG12	1:A:1149:TYR:HE1	1.81	0.45
1:A:39:HIS:HE1	1:A:511:GLU:OE2	1.97	0.45
1:A:3:PHE:O	1:A:96:GLU:OE2	2.35	0.45
1:A:48:ARG:NH1	1:A:77:TYR:HB3	2.32	0.45
1:A:1238:ASN:HA	1:A:1249:PHE:HA	1.97	0.45
1:A:1203:GLU:HB3	1:A:1262:VAL:CG1	2.44	0.45
1:A:798:ASN:HD22	1:A:893:ARG:HG2	1.81	0.45
1:A:1197:ALA:HB2	1:A:1247:ILE:HD13	1.98	0.45
1:A:62:PRO:HG2	1:A:64:GLU:O	2.16	0.45
1:A:390:PHE:O	1:A:392:LEU:N	2.48	0.45
1:A:674:PRO:C	1:A:807:ARG:HH11	2.19	0.45
1:A:315:ASN:O	1:A:318:LYS:HB3	2.16	0.45
1:A:1109:LYS:HA	1:A:1110:PRO:HD2	1.79	0.45
1:A:1268:ASN:O	1:A:1272:GLU:HG3	2.16	0.45
1:A:123:ILE:O	1:A:124:ASP:C	2.53	0.45
1:A:458:ASN:HD22	1:A:459:ASN:N	2.13	0.45
1:A:906:PHE:HD2	1:A:911:LYS:O	2.00	0.45
1:A:661:ALA:CB	1:A:791:CYS:HB3	2.46	0.45
1:A:566:ILE:HG23	1:A:749:TYR:CG	2.51	0.45
1:A:764:PHE:CD1	1:A:764:PHE:O	2.70	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:671:ILE:HD13	1:A:803:TYR:HD2	1.82	0.45
1:A:1100:PHE:CB	1:A:1285:ILE:HG12	2.47	0.45
1:A:102:ASP:HB2	1:A:357:PHE:CE2	2.44	0.45
1:A:683:SER:HA	1:A:822:TYR:OH	2.17	0.45
1:A:943:THR:HG22	1:A:1019:ILE:HB	1.99	0.45
1:A:14:VAL:HA	1:A:19:ILE:HG22	1.99	0.45
1:A:610:LEU:HD12	1:A:747:ILE:CD1	2.41	0.45
1:A:606:TRP:O	1:A:609:GLN:HB3	2.16	0.45
1:A:144:TYR:OH	1:A:520:LEU:O	2.27	0.45
1:A:74:ASP:O	1:A:75:SER:C	2.55	0.45
1:A:1186:VAL:N	1:A:1189:LYS:O	2.49	0.45
1:A:1012:ASN:CG	1:A:1012:ASN:O	2.53	0.45
1:A:998:VAL:CG1	1:A:999:PHE:N	2.80	0.45
1:A:1161:ILE:HG22	1:A:1163:LYS:CD	2.47	0.45
1:A:598:THR:HG23	1:A:602:MET:CE	2.46	0.45
1:A:1130:ILE:HG23	1:A:1209:LEU:HD22	1.99	0.45
1:A:289:LYS:HD3	1:A:289:LYS:HA	1.71	0.45
1:A:1008:SER:O	1:A:1013:ARG:NH1	2.50	0.45
1:A:999:PHE:CG	1:A:1031:ILE:HG13	2.52	0.45
1:A:574:GLU:C	1:A:576:LEU:N	2.70	0.45
1:A:567:ALA:O	1:A:746:ILE:HG12	2.17	0.45
1:A:70:VAL:CG1	1:A:71:SER:N	2.80	0.45
1:A:599:GLU:O	1:A:602:MET:O	2.35	0.45
1:A:593:LYS:NZ	1:A:613:ASP:OD2	2.40	0.45
1:A:143:SER:O	1:A:144:TYR:HB3	2.16	0.45
1:A:1109:LYS:NZ	1:A:1286:PRO:HB3	2.32	0.45
1:A:984:ILE:CG1	1:A:998:VAL:HG22	2.39	0.45
1:A:455:ILE:HD12	1:A:552:HIS:HA	1.99	0.45
1:A:487:ILE:HG23	1:A:488:GLU:CD	2.37	0.45
1:A:952:TYR:CD1	1:A:1065:ARG:CZ	3.00	0.44
1:A:979:ASN:O	1:A:980:TYR:C	2.55	0.44
1:A:985:TRP:CG	1:A:1019:ILE:HG21	2.51	0.44
1:A:935:ASN:C	1:A:937:MET:H	2.20	0.44
1:A:306:THR:CG2	1:A:517:ILE:HA	2.47	0.44
1:A:902:SER:O	1:A:903:LYS:HE2	2.17	0.44
1:A:737:GLU:O	1:A:741:GLU:HB2	2.16	0.44
1:A:869:TYR:CD1	1:A:869:TYR:C	2.91	0.44
1:A:883:TYR:H	1:A:912:ASN:CG	2.21	0.44
1:A:581:ARG:O	1:A:581:ARG:HG3	2.17	0.44
1:A:760:ASN:O	1:A:761:ASN:HB2	2.17	0.44
1:A:2:PRO:O	1:A:39:HIS:CD2	2.60	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1168:GLY:C	1:A:1170:LYS:N	2.64	0.44
1:A:1269:ARG:CZ	1:A:1270:GLN:NE2	2.80	0.44
1:A:1288:ASP:C	1:A:1290:GLY:N	2.68	0.44
1:A:1104:TYR:CD2	1:A:1173:ILE:CD1	3.00	0.44
1:A:425:PHE:HZ	1:A:537:PHE:HB2	1.80	0.44
1:A:36:PHE:CZ	1:A:88:LEU:HD22	2.52	0.44
1:A:719:ALA:HA	1:A:723:THR:CG2	2.46	0.44
1:A:955:SER:HA	1:A:958:LEU:HG	1.99	0.44
1:A:1029:ILE:HG23	1:A:1036:ILE:HB	1.98	0.44
1:A:431:VAL:HG11	1:A:548:TYR:CE1	2.53	0.44
1:A:122:THR:CB	1:A:126:GLU:OE1	2.61	0.44
1:A:318:LYS:CG	1:A:331:PHE:HE1	2.31	0.44
1:A:632:ILE:CD1	1:A:786:LYS:HD3	2.47	0.44
1:A:1146:THR:HG22	1:A:1147:ASN:ND2	2.33	0.44
1:A:227:HIS:ND1	1:A:261:GLU:OE1	2.50	0.44
1:A:153:ILE:CD1	1:A:186:ILE:HB	2.42	0.44
1:A:659:SER:HB2	1:A:663:ILE:HG13	1.98	0.44
1:A:964:ILE:HG13	1:A:965:ILE:HG13	2.00	0.44
1:A:238:ASN:OD1	1:A:239:PRO:HD2	2.16	0.44
1:A:688:LYS:O	1:A:689:VAL:C	2.55	0.44
1:A:1012:ASN:O	1:A:1101:TRP:CD1	2.70	0.44
1:A:455:ILE:HG23	1:A:555:ARG:HD2	1.98	0.44
1:A:2:PRO:HD3	1:A:108:LEU:HD22	2.00	0.44
1:A:1163:LYS:CD	1:A:1183:ASN:ND2	2.80	0.44
1:A:269:HIS:CE1	1:A:859:ASN:HD22	2.36	0.44
1:A:764:PHE:CE2	1:A:766:ILE:HG12	2.52	0.44
1:A:504:LEU:C	1:A:506:PHE:H	2.21	0.44
1:A:11:LYS:HZ1	1:A:81:ASP:CG	2.19	0.44
1:A:923:LYS:HB2	1:A:1056:LYS:HB2	1.99	0.44
1:A:742:ALA:C	1:A:744:LYS:N	2.71	0.44
1:A:1206:LEU:HD11	1:A:1250:ILE:HG12	2.00	0.44
1:A:42:ILE:CD1	1:A:151:LEU:HB3	2.48	0.44
1:A:603:PHE:O	1:A:606:TRP:HB3	2.17	0.44
1:A:1180:VAL:HG22	1:A:1221:VAL:O	2.18	0.44
1:A:621:VAL:HG11	1:A:632:ILE:HG23	1.98	0.44
1:A:1057:LEU:N	1:A:1057:LEU:HD12	2.23	0.44
1:A:948:ARG:CB	1:A:1068:TRP:HB2	2.20	0.44
1:A:430:CYS:HA	1:A:454:CYS:HA	2.00	0.44
1:A:754:TYR:CD1	1:A:755:THR:N	2.78	0.44
1:A:610:LEU:CD1	1:A:747:ILE:HD11	2.41	0.44
1:A:1211:ILE:HB	1:A:1212:PRO:HD3	1.99	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:843:ASN:O	1:A:846:SER:OG	2.34	0.44
1:A:485:THR:HG22	1:A:486:ASN:N	2.33	0.44
1:A:949:ILE:HG22	1:A:950:PRO:O	2.17	0.44
1:A:22:ILE:CD1	1:A:22:ILE:N	2.79	0.44
1:A:198:GLU:OE2	1:A:200:LEU:HB2	2.18	0.44
1:A:1199:GLN:NE2	1:A:1204:LYS:HB3	2.32	0.44
1:A:1194:ALA:O	1:A:1206:LEU:HA	2.18	0.44
1:A:417:LYS:HE3	1:A:419:PHE:CZ	2.53	0.44
1:A:990:THR:C	1:A:992:GLU:N	2.65	0.44
1:A:202:VAL:HA	1:A:205:ASN:O	2.18	0.44
1:A:403:GLY:HA2	1:A:409:ASN:HD22	1.83	0.44
1:A:844:THR:O	1:A:846:SER:N	2.40	0.44
1:A:458:ASN:HB3	1:A:461:ASP:CB	2.45	0.44
1:A:891:LEU:HD23	1:A:891:LEU:HA	1.81	0.44
1:A:549:THR:HG23	1:A:552:HIS:CD2	2.53	0.43
1:A:575:ALA:O	1:A:581:ARG:CA	2.66	0.43
1:A:763:ASN:HB2	1:A:765:ASN:HD22	1.75	0.43
1:A:167:SER:CB	1:A:184:GLN:HE22	2.31	0.43
1:A:515:ILE:HA	1:A:515:ILE:HD13	1.82	0.43
1:A:859:ASN:HD21	1:A:861:ARG:HH12	1.66	0.43
1:A:195:GLY:HA2	1:A:213:PHE:O	2.18	0.43
1:A:176:THR:CG2	1:A:176:THR:O	2.65	0.43
1:A:97:ARG:NH1	1:A:358:PHE:CD1	2.86	0.43
1:A:234:GLY:O	1:A:235:ILE:HD12	2.17	0.43
1:A:991:GLN:O	1:A:993:ILE:N	2.50	0.43
1:A:748:ASN:O	1:A:749:TYR:C	2.56	0.43
1:A:192:PHE:HA	1:A:374:PHE:O	2.18	0.43
1:A:1025:ASN:HB3	1:A:1026:ASN:H	1.50	0.43
1:A:591:VAL:HG12	1:A:595:ASN:ND2	2.32	0.43
1:A:1144:MET:HB3	1:A:1150:LEU:HD13	2.00	0.43
1:A:1233:ASN:OD1	1:A:1235:CYS:HB2	2.18	0.43
1:A:1267:TYR:O	1:A:1268:ASN:C	2.57	0.43
1:A:15:ASN:C	1:A:17:VAL:H	2.20	0.43
1:A:24:ILE:HG23	1:A:25:PRO:N	2.33	0.43
1:A:126:GLU:OE2	1:A:304:VAL:CG1	2.66	0.43
1:A:772:LYS:C	1:A:774:ASN:N	2.70	0.43
1:A:67:GLN:HB3	1:A:425:PHE:CD2	2.53	0.43
1:A:907:ASP:O	1:A:911:LYS:HG2	2.17	0.43
1:A:562:GLY:O	1:A:564:SER:N	2.51	0.43
1:A:1113:MET:HE3	1:A:1160:PHE:HB2	2.01	0.43
1:A:119:GLY:C	1:A:121:SER:N	2.70	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:159:ASP:C	1:A:159:ASP:OD1	2.57	0.43
1:A:408:ILE:C	1:A:410:ASN:H	2.22	0.43
1:A:243:PHE:HD1	1:A:260:PHE:CE1	2.36	0.43
1:A:309:SER:C	1:A:311:GLN:N	2.69	0.43
1:A:105:ARG:NH1	1:A:508:PHE:CE1	2.86	0.43
1:A:981:GLY:HA2	1:A:1001:TYR:CZ	2.54	0.43
1:A:1034:ARG:NH1	1:A:1036:ILE:CD1	2.81	0.43
1:A:346:THR:CG2	1:A:347:GLU:HG3	2.29	0.43
1:A:429:LEU:O	1:A:552:HIS:HE1	2.02	0.43
1:A:1199:GLN:HE22	1:A:1204:LYS:CA	2.31	0.43
1:A:203:ASP:OD1	1:A:204:THR:N	2.52	0.43
1:A:411:MET:HG3	1:A:411:MET:O	2.19	0.43
1:A:310:LEU:HD13	1:A:314:LYS:HG3	2.00	0.43
1:A:778:ASN:O	1:A:782:ILE:HG13	2.18	0.43
1:A:1087:LEU:O	1:A:1091:GLN:HG3	2.18	0.43
1:A:874:ILE:HD13	1:A:874:ILE:HA	1.73	0.43
1:A:809:GLU:HG2	1:A:934:TYR:CD2	2.53	0.43
1:A:566:ILE:HG12	1:A:749:TYR:HB3	2.00	0.43
1:A:540:GLY:O	1:A:541:LYS:O	2.37	0.43
1:A:648:TYR:O	1:A:649:LYS:O	2.36	0.43
1:A:320:LYS:HD3	1:A:321:TYR:CZ	2.53	0.43
1:A:722:ASN:ND2	1:A:792:SER:OG	2.52	0.43
1:A:162:GLN:HE21	1:A:162:GLN:HB3	1.56	0.43
1:A:1010:TYR:CD1	1:A:1010:TYR:N	2.86	0.43
1:A:585:PHE:HZ	1:A:736:LEU:HD23	1.84	0.43
1:A:473:ASN:OD1	1:A:475:LEU:CD1	2.60	0.43
1:A:388:ASP:HB3	1:A:391:ASN:O	2.18	0.43
1:A:1061:ARG:CG	1:A:1061:ARG:HH11	2.27	0.43
1:A:995:GLN:NE2	1:A:1039:LYS:HB3	2.34	0.43
1:A:1070:LYS:HG2	1:A:1071:TYR:CG	2.53	0.43
1:A:1125:VAL:HG22	1:A:1134:MET:SD	2.59	0.43
1:A:558:GLU:O	1:A:559:PHE:CG	2.72	0.42
1:A:491:GLU:OE2	1:A:711:LYS:HD2	2.19	0.42
1:A:716:ASN:OD1	1:A:720:LYS:HE3	2.19	0.42
1:A:1242:ASN:C	1:A:1244:GLY:H	2.22	0.42
1:A:1099:ASP:C	1:A:1101:TRP:N	2.71	0.42
1:A:973:GLY:HA2	1:A:988:GLN:H	1.83	0.42
1:A:571:SER:O	1:A:572:VAL:HB	2.19	0.42
1:A:343:LYS:HD3	1:A:502:TYR:OH	2.19	0.42
1:A:464:PHE:O	1:A:465:SER:CB	2.65	0.42
1:A:1026:ASN:ND2	1:A:1028:LYS:HE2	2.34	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:634:ILE:N	1:A:634:ILE:HD12	2.34	0.42
1:A:196:PHE:CZ	1:A:362:ASN:HA	2.54	0.42
1:A:132:THR:O	1:A:132:THR:HG23	2.17	0.42
1:A:885:SER:OG	1:A:886:ASN:N	2.52	0.42
1:A:913:GLN:OE1	1:A:1014:TRP:CZ2	2.72	0.42
1:A:584:THR:HG21	1:A:586:PHE:HB2	2.01	0.42
1:A:22:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HD12	2.00	0.42
1:A:459:ASN:C	1:A:461:ASP:H	2.21	0.42
1:A:879:LEU:HD23	1:A:1072:PHE:HE2	1.83	0.42
1:A:471:PHE:CE2	1:A:720:LYS:HE2	2.54	0.42
1:A:874:ILE:C	1:A:876:THR:N	2.73	0.42
1:A:917:PHE:O	1:A:1057:LEU:CD1	2.67	0.42
1:A:969:GLU:O	1:A:970:ASN:HB3	2.17	0.42
1:A:115:ILE:HD12	1:A:316:VAL:CG1	2.50	0.42
1:A:729:ARG:HH22	1:A:789:ASN:HD22	1.66	0.42
1:A:194:PHE:N	1:A:194:PHE:CD1	2.87	0.42
1:A:459:ASN:O	1:A:461:ASP:N	2.45	0.42
1:A:711:LYS:HB2	1:A:856:TYR:CE2	2.54	0.42
1:A:1221:VAL:CG2	1:A:1239:LEU:HD23	2.49	0.42
1:A:869:TYR:HD1	1:A:870:ILE:HD13	1.84	0.42
1:A:235:ILE:HD11	1:A:286:TYR:HB3	2.01	0.42
1:A:244:LYS:HB2	1:A:467:SER:OG	2.20	0.42
1:A:559:PHE:HE2	1:A:742:ALA:HA	1.84	0.42
1:A:662:VAL:C	1:A:664:LEU:H	2.22	0.42
1:A:325:GLU:HA	1:A:330:LYS:O	2.20	0.42
1:A:535:GLU:OE2	1:A:537:PHE:CE2	2.73	0.42
1:A:923:LYS:CD	1:A:1056:LYS:HD3	2.50	0.42
1:A:915:GLN:HB2	1:A:1068:TRP:CE3	2.54	0.42
1:A:882:ARG:HB3	1:A:912:ASN:OD1	2.19	0.42
1:A:758:GLU:C	1:A:760:ASN:H	2.22	0.42
1:A:761:ASN:C	1:A:763:ASN:N	2.73	0.42
1:A:374:PHE:CE2	1:A:406:THR:HG21	2.53	0.42
1:A:357:PHE:CD1	1:A:357:PHE:N	2.87	0.42
1:A:1023:ARG:HD3	1:A:1023:ARG:C	2.38	0.42
1:A:491:GLU:O	1:A:492:GLU:C	2.58	0.42
1:A:494:ILE:HD12	1:A:494:ILE:N	2.35	0.42
1:A:1221:VAL:HG23	1:A:1239:LEU:HD23	2.02	0.42
1:A:40:ASN:O	1:A:112:VAL:HG23	2.20	0.42
1:A:1163:LYS:CG	1:A:1183:ASN:ND2	2.83	0.42
1:A:170:HIS:HD2	1:A:173:LEU:N	2.18	0.42
1:A:68:VAL:CG1	1:A:69:PRO:HD2	2.50	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1235:CYS:HA	1:A:1280:CYS:O	2.19	0.42
1:A:430:CYS:HA	1:A:453:LEU:O	2.20	0.42
1:A:638:GLY:O	1:A:642:ASN:CA	2.68	0.42
1:A:487:ILE:O	1:A:488:GLU:O	2.37	0.42
1:A:498:LEU:HG	1:A:502:TYR:CE1	2.55	0.42
1:A:675:VAL:HA	1:A:807:ARG:HD2	2.02	0.42
1:A:1061:ARG:NH1	1:A:1061:ARG:HG2	2.32	0.42
1:A:1062:ASP:OD1	1:A:1063:THR:N	2.53	0.42
1:A:1115:ASN:HB2	1:A:1282:TRP:CZ3	2.55	0.42
1:A:1209:LEU:HD11	1:A:1217:LEU:HD12	2.01	0.42
1:A:125:THR:O	1:A:300:ALA:HA	2.20	0.42
1:A:154:ILE:HD12	1:A:186:ILE:O	2.19	0.42
1:A:638:GLY:N	1:A:639:PRO:CD	2.83	0.42
1:A:660:GLY:C	1:A:662:VAL:N	2.73	0.42
1:A:641:LEU:CD1	1:A:732:MET:SD	3.08	0.42
1:A:198:GLU:CD	1:A:201:GLU:HG2	2.40	0.42
1:A:405:ASN:OD1	1:A:407:GLU:N	2.51	0.42
1:A:1155:TYR:N	1:A:1155:TYR:CD1	2.87	0.42
1:A:779:LYS:HA	1:A:782:ILE:HD12	2.02	0.42
1:A:1166:ALA:O	1:A:1167:SER:HB2	2.20	0.42
1:A:659:SER:HB2	1:A:663:ILE:CD1	2.49	0.42
1:A:1252:PHE:O	1:A:1253:HIS:HB2	2.19	0.42
1:A:114:GLY:O	1:A:320:LYS:CD	2.68	0.42
1:A:1128:VAL:CG1	1:A:1129:GLY:N	2.83	0.42
1:A:961:GLU:HB2	1:A:979:ASN:ND2	2.23	0.42
1:A:927:ILE:HA	1:A:1052:ASN:HB3	2.02	0.42
1:A:910:ASP:C	1:A:912:ASN:H	2.24	0.42
1:A:373:VAL:HG12	1:A:374:PHE:N	2.35	0.42
1:A:170:HIS:CG	1:A:173:LEU:HB2	2.55	0.42
1:A:1061:ARG:NH1	1:A:1061:ARG:CG	2.82	0.42
1:A:568:LEU:HB3	1:A:595:ASN:OD1	2.19	0.42
1:A:907:ASP:O	1:A:911:LYS:HA	2.20	0.42
1:A:74:ASP:OD1	1:A:74:ASP:O	2.38	0.42
1:A:303:ILE:HG22	1:A:310:LEU:HB2	2.02	0.41
1:A:566:ILE:CG1	1:A:749:TYR:HB3	2.50	0.41
1:A:149:LEU:CD2	1:A:150:ASN:H	2.33	0.41
1:A:862:LEU:O	1:A:865:THR:HB	2.20	0.41
1:A:502:TYR:O	1:A:506:PHE:HB2	2.20	0.41
1:A:794:SER:O	1:A:798:ASN:OD1	2.38	0.41
1:A:684:TYR:CD1	1:A:684:TYR:N	2.87	0.41
1:A:588:SER:O	1:A:591:VAL:N	2.53	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1144:MET:HB3	1:A:1150:LEU:CD1	2.50	0.41
1:A:163:PHE:CD1	1:A:188:PHE:HA	2.55	0.41
1:A:565:ARG:O	1:A:566:ILE:C	2.58	0.41
1:A:585:PHE:CE1	1:A:586:PHE:HE1	2.37	0.41
1:A:217:PRO:HG2	1:A:378:ILE:CD1	2.35	0.41
1:A:309:SER:O	1:A:312:TYR:HB3	2.19	0.41
1:A:965:ILE:HD12	1:A:976:VAL:CG2	2.48	0.41
1:A:797:MET:CE	1:A:866:PHE:CE1	3.01	0.41
1:A:322:LEU:HD23	1:A:322:LEU:HA	1.83	0.41
1:A:290:PHE:O	1:A:293:ILE:N	2.53	0.41
1:A:385:THR:HG23	1:A:388:ASP:N	2.24	0.41
1:A:1227:ASN:HD21	1:A:1229:GLN:HB3	1.80	0.41
1:A:919:LEU:C	1:A:921:SER:H	2.21	0.41
1:A:265:THR:O	1:A:265:THR:HG22	2.20	0.41
1:A:66:LYS:HE2	1:A:68:VAL:HG21	2.02	0.41
1:A:560:GLU:O	1:A:561:HIS:C	2.59	0.41
1:A:927:ILE:HG23	1:A:1051:ASN:ND2	2.35	0.41
1:A:430:CYS:HB2	1:A:544:GLU:HA	2.02	0.41
1:A:742:ALA:O	1:A:745:ALA:N	2.48	0.41
1:A:22:ILE:CD1	1:A:22:ILE:H	2.32	0.41
1:A:801:ILE:HB	1:A:802:PRO:HD3	2.01	0.41
1:A:1026:ASN:N	1:A:1026:ASN:OD1	2.53	0.41
1:A:897:LYS:HG3	1:A:899:ASN:OD1	2.20	0.41
1:A:942:SER:HA	1:A:1019:ILE:O	2.20	0.41
1:A:638:GLY:HA2	1:A:643:ILE:HB	2.02	0.41
1:A:662:VAL:O	1:A:664:LEU:N	2.53	0.41
1:A:819:LEU:O	1:A:823:ILE:HG13	2.21	0.41
1:A:70:VAL:CG1	1:A:161:ILE:HD11	2.42	0.41
1:A:473:ASN:HD21	1:A:674:PRO:HG3	1.86	0.41
1:A:23:LYS:NZ	1:A:23:LYS:CB	2.81	0.41
1:A:1241:ASP:O	1:A:1241:ASP:OD1	2.39	0.41
1:A:174:ASN:C	1:A:176:THR:H	2.24	0.41
1:A:941:PHE:O	1:A:1021:ASN:HB2	2.20	0.41
1:A:684:TYR:HD2	1:A:690:LEU:HD23	1.85	0.41
1:A:884:GLU:HG3	1:A:891:LEU:HD11	2.02	0.41
1:A:342:TYR:O	1:A:346:THR:HB	2.19	0.41
1:A:763:ASN:C	1:A:765:ASN:N	2.72	0.41
1:A:93:LYS:NZ	1:A:384:TYR:O	2.53	0.41
1:A:93:LYS:HE2	1:A:384:TYR:HD1	1.86	0.41
1:A:119:GLY:C	1:A:121:SER:H	2.23	0.41
1:A:131:ASP:N	1:A:131:ASP:OD1	2.53	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:303:ILE:O	1:A:303:ILE:HG12	2.19	0.41
1:A:1267:TYR:CD2	1:A:1280:CYS:SG	3.14	0.41
1:A:757:GLU:CG	1:A:760:ASN:ND2	2.84	0.41
1:A:765:ASN:CB	1:A:768:ASP:HB2	2.45	0.41
1:A:772:LYS:O	1:A:773:LEU:C	2.59	0.41
1:A:919:LEU:HD23	1:A:919:LEU:N	2.36	0.41
1:A:903:LYS:HB2	1:A:922:SER:CA	2.51	0.41
1:A:205:ASN:ND2	1:A:401:PHE:HE2	2.18	0.41
1:A:588:SER:O	1:A:591:VAL:HG23	2.20	0.41
1:A:824:TYR:C	1:A:826:ASN:H	2.24	0.41
1:A:996:ARG:O	1:A:1039:LYS:HD2	2.20	0.41
1:A:250:TYR:HB2	1:A:429:LEU:HD21	2.01	0.41
1:A:566:ILE:HG12	1:A:749:TYR:HD1	1.74	0.41
1:A:758:GLU:O	1:A:759:LYS:HB2	2.21	0.41
1:A:3:PHE:O	1:A:96:GLU:CD	2.58	0.41
1:A:594:VAL:HG12	1:A:746:ILE:CD1	2.50	0.41
1:A:1018:THR:HG21	1:A:1084:ILE:CD1	2.51	0.41
1:A:1138:GLY:HA3	1:A:1139:PRO:HD2	1.73	0.41
1:A:88:LEU:HD12	1:A:88:LEU:HA	1.82	0.41
1:A:1065:ARG:HD2	1:A:1065:ARG:HA	1.85	0.41
1:A:1029:ILE:O	1:A:1029:ILE:CG2	2.67	0.41
1:A:554:LEU:HD23	1:A:641:LEU:CD2	2.51	0.41
1:A:25:PRO:HD2	1:A:185:TYR:OH	2.20	0.41
1:A:193:THR:CG2	1:A:215:THR:O	2.65	0.41
1:A:289:LYS:O	1:A:293:ILE:HG12	2.21	0.41
1:A:975:LYS:O	1:A:975:LYS:HD3	2.20	0.41
1:A:691:THR:C	1:A:693:GLN:N	2.75	0.41
1:A:950:PRO:CD	1:A:1066:TYR:O	2.69	0.41
1:A:754:TYR:OH	1:A:757:GLU:CG	2.65	0.41
1:A:747:ILE:CG2	1:A:764:PHE:CZ	3.02	0.41
1:A:1022:ASN:HD22	1:A:1025:ASN:N	2.19	0.41
1:A:494:ILE:HG22	1:A:494:ILE:O	2.21	0.41
1:A:553:TYR:CG	1:A:642:ASN:HB2	2.56	0.40
1:A:761:ASN:O	1:A:763:ASN:N	2.42	0.40
1:A:141:ASP:OD2	1:A:143:SER:OG	2.40	0.40
1:A:583:TYR:O	1:A:739:GLN:NE2	2.53	0.40
1:A:740:ALA:HB2	1:A:777:ILE:HD11	2.03	0.40
1:A:1077:LYS:HE2	1:A:1079:LEU:HD23	2.03	0.40
1:A:78:LEU:H	1:A:83:GLU:CD	2.24	0.40
1:A:1137:LYS:CG	1:A:1138:GLY:H	2.34	0.40
1:A:619:SER:O	1:A:621:VAL:HG23	2.20	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:426:TYR:C	1:A:426:TYR:CD1	2.94	0.40
1:A:392:LEU:HB2	1:A:395:THR:OG1	2.22	0.40
1:A:506:PHE:HB3	1:A:508:PHE:CE2	2.57	0.40
1:A:1193:LEU:CD1	1:A:1193:LEU:C	2.87	0.40
1:A:1198:SER:O	1:A:1199:GLN:O	2.38	0.40
1:A:192:PHE:CZ	1:A:375:LYS:NZ	2.78	0.40
1:A:226:ILE:O	1:A:226:ILE:HG22	2.20	0.40
1:A:336:LEU:HD11	1:A:340:LYS:HE3	2.03	0.40
1:A:94:LEU:O	1:A:98:ILE:HG13	2.20	0.40
1:A:690:LEU:HA	1:A:690:LEU:HD12	1.80	0.40
1:A:492:GLU:O	1:A:494:ILE:N	2.51	0.40
1:A:568:LEU:HA	1:A:595:ASN:OD1	2.21	0.40
1:A:497:ASP:O	1:A:500:GLN:HB3	2.22	0.40
1:A:471:PHE:CE2	1:A:720:LYS:CE	3.05	0.40
1:A:1269:ARG:CZ	1:A:1270:GLN:HE22	2.35	0.40
1:A:962:TYR:HE2	1:A:1057:LEU:HD23	1.81	0.40
1:A:815:LEU:O	1:A:819:LEU:HB2	2.21	0.40
1:A:1030:TYR:CE1	1:A:1035:LEU:HB2	2.57	0.40
1:A:880:ASN:ND2	1:A:880:ASN:C	2.74	0.40

All (9) 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:486:ASN:OD1	1:A:1273:ARG:NH2[6_555]	1.12	1.08
1:A:63:PRO:O	1:A:309:SER:N[3_564]	1.82	0.38
1:A:486:ASN:CG	1:A:1273:ARG:NH2[6_555]	1.90	0.30
1:A:693:GLN:NE2	1:A:1276:ARG:CB[6_555]	1.96	0.24
1:A:697:ASN:ND2	1:A:1276:ARG:NH2[6_555]	2.00	0.20
1:A:486:ASN:OD1	1:A:1273:ARG:CZ[6_555]	2.02	0.18
1:A:64:GLU:CG	1:A:307:THR:O[3_564]	2.07	0.13
1:A:693:GLN:NE2	1:A:1276:ARG:CG[6_555]	2.17	0.03
1:A:63:PRO:O	1:A:308:ALA:CA[3_564]	2.18	0.02

5.3 Torsion angles

5.3.1 Protein backbone

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

of similar resolution.

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	1273/1312 (97%)	1008 (79%)	177 (14%)	88 (7%)	1	24

All (88) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	121	SER
1	A	398	ALA
1	A	488	GLU
1	A	541	LYS
1	A	559	PHE
1	A	561	HIS
1	A	566	ILE
1	A	571	SER
1	A	629	ASP
1	A	649	LYS
1	A	650	ASP
1	A	831	ILE
1	A	973	GLY
1	A	974	TRP
1	A	992	GLU
1	A	1146	THR
1	A	1199	GLN
1	A	1245	ASN
1	A	1273	ARG
1	A	16	GLY
1	A	18	ASP
1	A	75	SER
1	A	123	ILE
1	A	160	ILE
1	A	209	GLY
1	A	256	LEU
1	A	396	ASN
1	A	464	PHE
1	A	490	ALA
1	A	492	GLU
1	A	493	ASN
1	A	510	ASN
1	A	527	GLN
1	A	556	ALA

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	563	LYS
1	A	572	VAL
1	A	644	GLY
1	A	648	TYR
1	A	661	ALA
1	A	763	ASN
1	A	773	LEU
1	A	980	TYR
1	A	1138	GLY
1	A	1176	ASN
1	A	1292	GLY
1	A	3	PHE
1	A	30	MET
1	A	115	ILE
1	A	124	ASP
1	A	157	SER
1	A	249	ALA
1	A	562	GLY
1	A	689	VAL
1	A	859	ASN
1	A	891	LEU
1	A	911	LYS
1	A	1155	TYR
1	A	1206	LEU
1	A	1216	ASN
1	A	1289	ASP
1	A	19	ILE
1	A	125	THR
1	A	453	LEU
1	A	646	MET
1	A	663	ILE
1	A	688	LYS
1	A	761	ASN
1	A	762	ILE
1	A	845	LEU
1	A	848	ASP
1	A	885	SER
1	A	1145	THR
1	A	4	VAL
1	A	74	ASP
1	A	141	ASP
1	A	175	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	395	THR
1	A	735	ALA
1	A	825	ASP
1	A	1165	TYR
1	A	1169	ASN
1	A	674	PRO
1	A	677	GLY
1	A	120	GLY
1	A	746	ILE
1	A	494	ILE
1	A	172	VAL
1	A	627	ILE

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	1158/1190 (97%)	1082 (93%)	76 (7%)	21 60

All (76) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	18	ASP
1	A	21	TYR
1	A	50	THR
1	A	51	PHE
1	A	78	LEU
1	A	81	ASP
1	A	89	LYS
1	A	97	ARG
1	A	122	THR
1	A	129	VAL
1	A	132	THR
1	A	144	TYR
1	A	149	LEU
1	A	150	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	154	ILE
1	A	162	GLN
1	A	165	CYS
1	A	167	SER
1	A	193	THR
1	A	231	ARG
1	A	235	ILE
1	A	241	ARG
1	A	261	GLU
1	A	264	ARG
1	A	303	ILE
1	A	311	GLN
1	A	318	LYS
1	A	345	LEU
1	A	346	THR
1	A	362	ASN
1	A	382	VAL
1	A	412	ASN
1	A	425	PHE
1	A	474	ASP
1	A	554	LEU
1	A	555	ARG
1	A	559	PHE
1	A	561	HIS
1	A	570	ASN
1	A	574	GLU
1	A	576	LEU
1	A	589	ASP
1	A	602	MET
1	A	615	THR
1	A	618	THR
1	A	671	ILE
1	A	702	ARG
1	A	713	ILE
1	A	743	THR
1	A	750	GLN
1	A	763	ASN
1	A	796	LEU
1	A	812	ASP
1	A	825	ASP
1	A	833	GLN
1	A	834	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	835	ASP
1	A	843	ASN
1	A	872	ASN
1	A	874	ILE
1	A	880	ASN
1	A	881	LEU
1	A	912	ASN
1	A	918	ASN
1	A	962	TYR
1	A	974	TRP
1	A	975	LYS
1	A	1018	THR
1	A	1022	ASN
1	A	1026	ASN
1	A	1057	LEU
1	A	1077	LYS
1	A	1114	LEU
1	A	1193	LEU
1	A	1243	ASN
1	A	1277	THR

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (47) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	39	HIS
1	A	150	ASN
1	A	162	GLN
1	A	170	HIS
1	A	205	ASN
1	A	227	HIS
1	A	240	ASN
1	A	269	HIS
1	A	311	GLN
1	A	315	ASN
1	A	362	ASN
1	A	377	ASN
1	A	402	ASN
1	A	404	GLN
1	A	418	ASN
1	A	458	ASN
1	A	500	GLN
1	A	552	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	557	GLN
1	A	645	ASN
1	A	697	ASN
1	A	722	ASN
1	A	760	ASN
1	A	765	ASN
1	A	789	ASN
1	A	872	ASN
1	A	880	ASN
1	A	913	GLN
1	A	915	GLN
1	A	960	ASN
1	A	966	ASN
1	A	971	ASN
1	A	979	ASN
1	A	988	GLN
1	A	1003	GLN
1	A	1012	ASN
1	A	1022	ASN
1	A	1026	ASN
1	A	1073	ASN
1	A	1120	ASN
1	A	1126	ASN
1	A	1147	ASN
1	A	1199	GLN
1	A	1243	ASN
1	A	1254	GLN
1	A	1268	ASN
1	A	1270	GLN

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	1277/1312 (97%)	0.19	45 (3%)	48 38	119, 222, 356, 750	0

All (45) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	590	TYR	6.0
1	A	569	THR	5.4
1	A	594	VAL	4.8
1	A	625	ASP	4.5
1	A	1044	LEU	4.4
1	A	610	LEU	3.8
1	A	600	ALA	3.7
1	A	564	SER	3.7
1	A	1219	GLN	3.6
1	A	1264	SER	3.4
1	A	611	VAL	3.3
1	A	1229	GLN	3.1
1	A	593	LYS	3.1
1	A	589	ASP	3.1
1	A	1249	PHE	3.0
1	A	591	VAL	3.0
1	A	679	PHE	3.0
1	A	607	VAL	2.9
1	A	623	THR	2.9
1	A	525	ILE	2.8
1	A	756	GLU	2.7
1	A	598	THR	2.7
1	A	1166	ALA	2.6
1	A	762	ILE	2.6
1	A	297	LEU	2.5
1	A	1167	SER	2.5
1	A	990	THR	2.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	670	GLU	2.4
1	A	1296	LEU	2.3
1	A	1214	VAL	2.3
1	A	1197	ALA	2.3
1	A	763	ASN	2.3
1	A	565	ARG	2.3
1	A	951	LYS	2.2
1	A	192	PHE	2.2
1	A	267	GLY	2.2
1	A	599	GLU	2.1
1	A	1218	SER	2.1
1	A	606	TRP	2.1
1	A	34	LYS	2.1
1	A	621	VAL	2.0
1	A	758	GLU	2.0
1	A	368	ASN	2.0
1	A	1176	ASN	2.0
1	A	308	ALA	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](#)

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

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	LLDF	B-factors(\AA^2)	Q<0.9
2	ZN	A	1313	1/1	0.92	0.47	-	147,147,147,147	0

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.