Full wwPDB X-ray Structure Validation Report (i)

Sep 3, 2023 – 04:58 AM EDT

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
https://www.wwpdb.org/validation/2017/XrayValidationReportHelp
with specific help available everywhere you see the (i) symbol.

The types of validation reports are described at
http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types.

The following versions of software and data (see references (1)) were used in the production of this report:

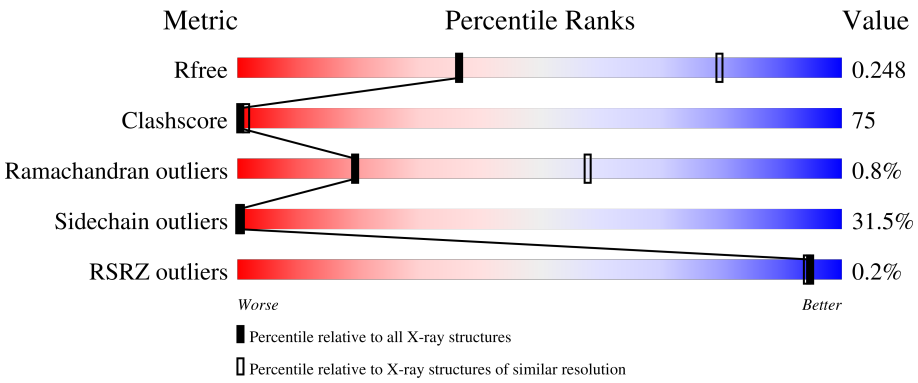
MolProbity	:	4.02b-467
Xtriage (Phenix)	:	1.13
EDS	:	2.35
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Refmac	:	5.8.0158
CCP4	:	7.0.044 (Gargrove)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.35

1 Overall quality at a glance (i)

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}	130704	1133 (3.20-3.20)
Clashscore	141614	1253 (3.20-3.20)
Ramachandran outliers	138981	1234 (3.20-3.20)
Sidechain outliers	138945	1233 (3.20-3.20)
RSRZ outliers	127900	1095 (3.20-3.20)

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 of the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for >=3, 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria respectively. 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 <=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	20% 44% 23% • 12%

2 Entry composition (i)

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
			Total	C	N	O	S			
1	A	1053	8674	5577	1418	1653	26	0	0	0

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

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

- Molecule 3 is water.

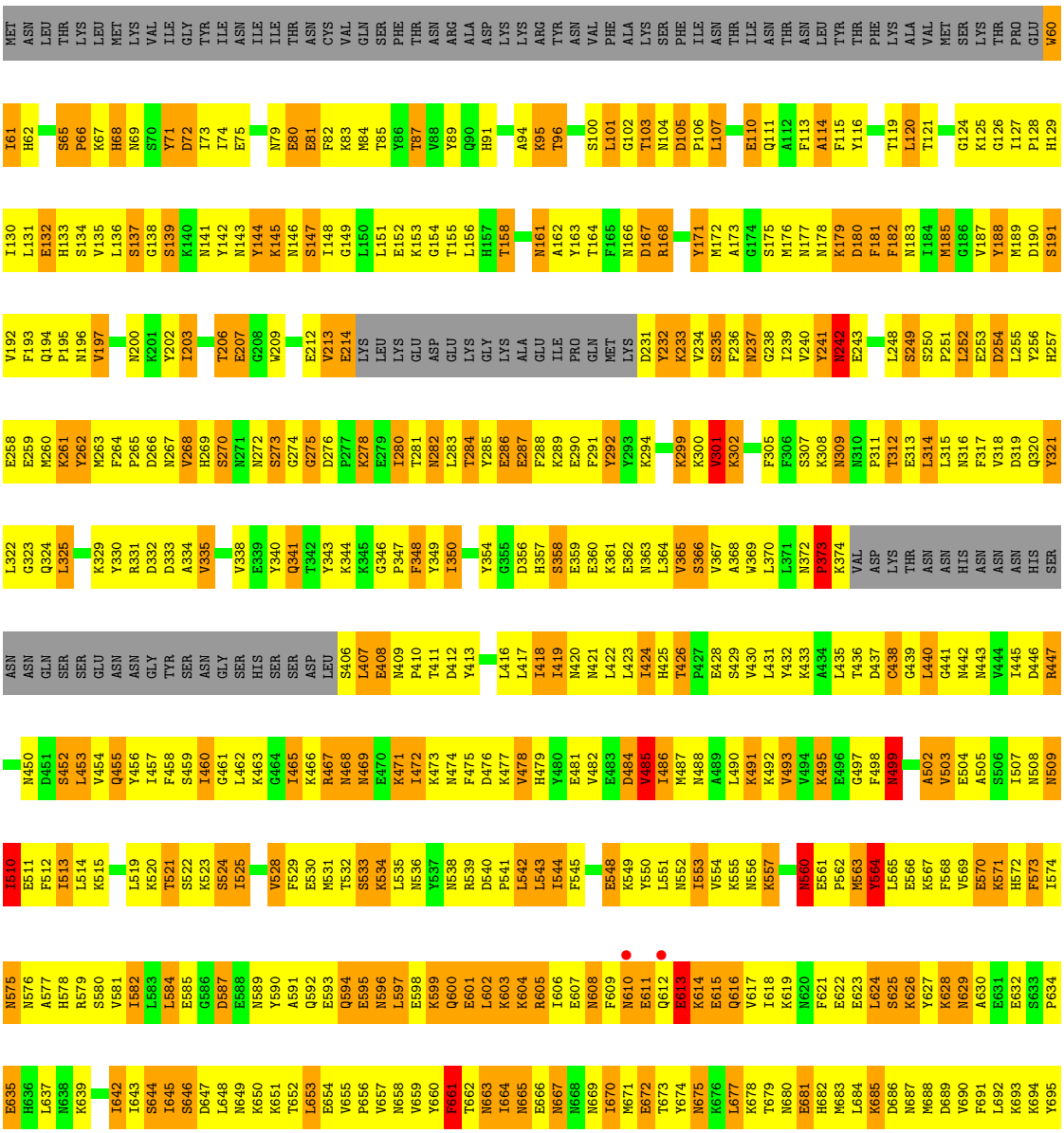
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
			Total	O		
3	A	66	66	66	0	0

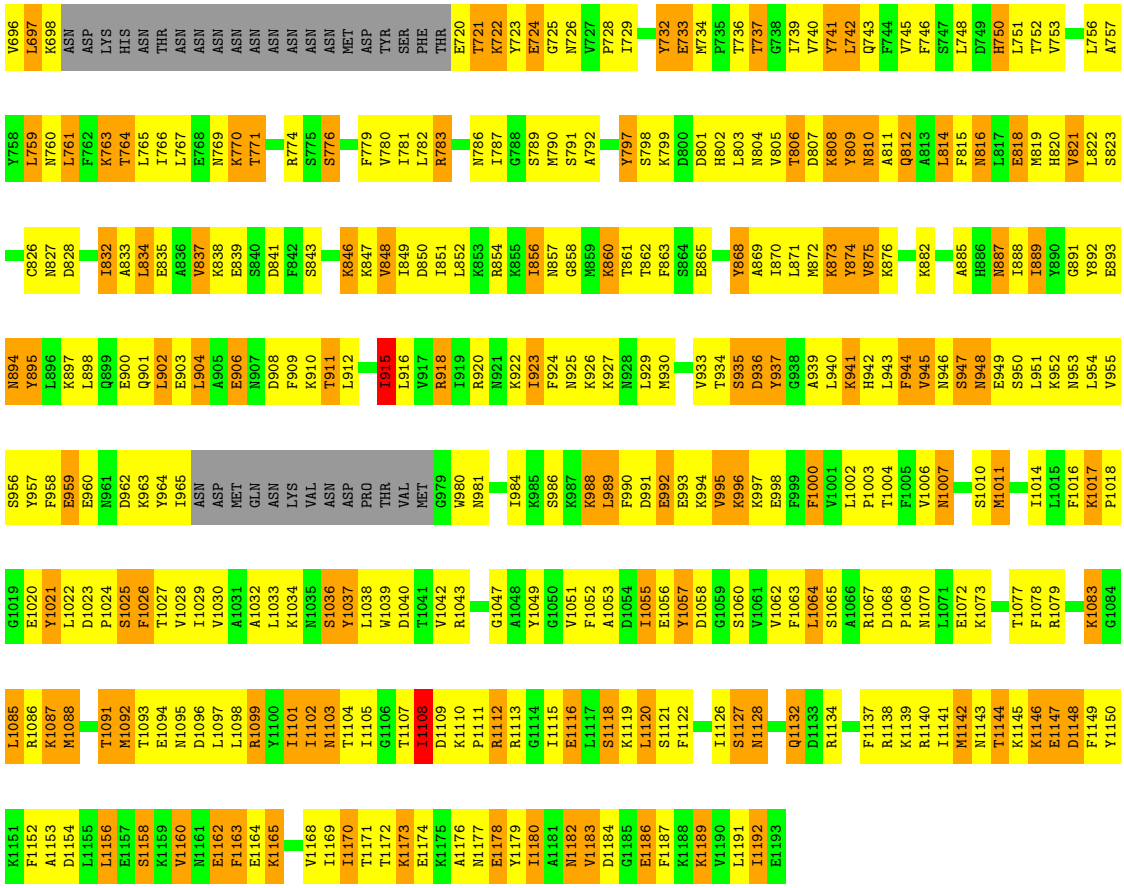
3 Residue-property plots (i)

These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes 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: Falcilysin

Chain A: 20% 44% 23% • 12%




V696 L697 K698 ASN ASP LYS HIS ASN THR ASN ASN ASN ASN ASN ASN ASN ASN MET ASP TYR SER PHE THR E720 T721 K722 Y723 E724 G725 N726 V727 P728 I729 Y732 E733 M734 P735 T736 T737 G738 I739 V740 Y741 L742 Q743 F744 V745 F746 S747 L748 D749 H750 L751 T752 V753 L756 A757
Y758 L759 N760 L761 F762 K763 T764 L765 I766 L767 E768 N769 K770 T771 R774 S775 S776 F779 V780 I781 L782 R783 N786 I787 G788 S789 M790 S791 A792 Y797 S798 K799 D800 D801 H802 L803 N804 V805 T806 D807 K808 Y809 N810 A811 Q812 A813 L814 F815 N816 L817 E818 M819 H820 V821 S822 S823
C826 N827 D828 I832 A833 L834 E835 A836 V837 K838 E839 S840 D841 F842 S843 K846 K847 V848 I849 D850 I851 L852 K853 R854 K855 I856 N857 G858 M859 K860 T861 T862 F863 S864 E865 Y868 A869 I870 L871 M872 K873 Y874 V875 K876 K882 A885 H886 N887 I888 I889 Y890 G891 Y892 E893
N894 Y895 L896 K897 L898 Q899 E900 Q901 L902 E903 L904 A905 E906 N907 D908 F909 K910 T911 L912 I915 L916 V917 R918 I919 R920 N921 K922 I923 F924 N925 K926 K927 N928 L929 M930 V933 T934 S935 D936 Y937 G938 A939 L940 K941 H942 L943 F944 V945 N946 S947 N948 E949 S950 L951 K952 N953 L954 V955
S956 Y957 F958 E959 E960 N961 D962 K963 Y964 I965 ASN ASP MET GLN ASN LYS VAL ASN ASP PRO THR VAL MET G979 W980 N981 I984 K985 S986 K987 K988 L989 F990 D991 E992 E993 K994 V995 K996 K997 E998 F999 F1000 V1001 L1002 P1003 T1004 F1005 V1006 N1007 S1010 M1011 I1014 L1015 F1016 K1017 P1018
G1019 E1020 Y1021 L1022 D1023 P1024 S1025 F1026 T1027 V1028 I1029 V1030 A1031 A1032 L1033 K1034 N1035 S1036 Y1037 L1038 W1039 D1040 T1041 V1042 R1043 G1047 A1048 Y1049 G1050 V1051 F1052 A1053 D1054 I1055 E1056 Y1057 D1058 G1059 S1060 V1061 V1062 F1063 L1064 S1065 A1066 R1067 D1068 P1069 N1070 L1071 E1072 K1073 T1077 F1078 R1079 K1083 G1084
L1085 R1086 K1087 M1088 T1091 M1092 T1093 E1094 N1095 D1096 L1097 L1098 R1099 Y1100 I1101 I1102 N1103 T1104 I1105 G1106 T1107 I1108 D1109 K1110 P1111 R1112 R1113 G1114 I1115 E1116 L1117 S1118 K1119 L1120 S1121 F1122 I1126 S1127 N1128 Q1132 D1133 R1134 F1137 R1138 K1139 R1140 I1141 M1142 N1143 T1144 K1145 K1146 E1147 D1148 F1149 Y1150
K1151 F1152 A1153 D1154 L1155 L1156 E1157 S1158 K1159 V1160 N1161 E1162 F1163 E1164 K1165 V1168 I1169 I1170 T1171 T1172 K1173 E1174 K1175 A1176 N1177 E1178 Y1179 I1180 A1181 N1182 V1183 D1184 G1185 E1186 F1187 K1188 K1189 V1190 L1191 I1192 E1193

4 Data and refinement statistics (i)

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
$< I/\sigma(I) >$ [1]	1.24 (at 2.86Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX (phenix.refine: 1.6_289)	Depositor
R, R_{free}	0.210 , 0.316 0.224 , 0.248	Depositor DCC
R_{free} test set	1075 reflections (4.11%)	wwPDB-VP
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 , 78.7	EDS
L-test for twinning[2]	$< \|L\| > = 0.42$, $< L^2 > = 0.24$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	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.*

[1] Intensities estimated from amplitudes.

[2] Theoretical values of $< |L| >$, $< L^2 >$ for acentric reflections are 0.5, 0.333 respectively for untwinned datasets, and 0.375, 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	1.79	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(^{o})	Ideal(^{o})
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 (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	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:294:LYS:O	1:A:300:LYS:NZ	1.69	1.26
1:A:846:LYS:NZ	1:A:850:ASP:OD1	1.65	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:HD12	1:A:314:LEU:C	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:143:ASN:OD1	1:A:196:ASN:ND2	1.71	1.19
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: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:N	1:A:407:LEU:HD23	1.51	1.17
1:A:525:ILE:HD12	1:A:525:ILE:N	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:202:TYR:CD1	1:A:624:LEU:HB2	1.81	1.16
1:A:314:LEU:HD12	1:A:314:LEU:O	1.43	1.16
1:A:231:ASP:O	1:A:233:LYS:HD2	1.43	1.15
1:A:348:PHE:O	1:A:350:ILE:CD1	1.94	1.15
1:A:957:TYR:O	1:A:960:GLU:HB2	1.47	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:65:SER:OG	1:A:87:THR:HG21	1.44	1.13
1:A:522:SER:O	1:A:525:ILE:CD1	1.95	1.13
1:A:925:ASN:OD1	1:A:965:ILE:HD11	1.47	1.12
1:A:525:ILE:CD1	1:A:525:ILE:H	1.50	1.12
1:A:610:ASN:O	1:A:613:GLU:HG2	1.44	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:C	1:A:237:ASN:HD22	1.54	1.11
1:A:1099:ARG:HH11	1:A:1099:ARG:CG	1.59	1.11
1:A:350:ILE:N	1:A:350:ILE:HD12	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: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: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: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:H	1:A:1189:LYS:CD	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:O	1:A:493:VAL:HG13	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:HB2	1:A:860:LYS:NZ	1.65	1.04
1:A:745:VAL:CG1	1:A:814:LEU:CD2	2.35	1.04
1:A:770:LYS:C	1:A:771:THR:CG2	2.18	1.04
1:A:301:VAL:HG12	1:A:301:VAL:O	1.54	1.04
1:A:837:VAL:HG12	1:A:838:LYS:N	1.65	1.04
1:A:996:LYS:O	1:A:996:LYS:HG2	1.55	1.04
1:A:445:ILE:HG22	1:A:445:ILE:O	1.56	1.04
1:A:600:GLN:HA	1:A:600:GLN:HE21	0.91	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:HD2	1:A:603:LYS:N	1.71	1.03
1:A:232:TYR:C	1:A:232:TYR:CD2	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:OE1	1:A:548:GLU:HA	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:HH11	1:A:1099:ARG:HG3	0.86	0.99
1:A:544:ILE:HD12	1:A:544:ILE:O	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:HG23	1:A:424:ILE:O	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:372:ASN:O	1:A:455:GLN:NE2	1.94	0.98
1:A:1024:PRO:O	1:A:1141:ILE:HD11	1.63	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:874:TYR:C	1:A:874:TYR:CD2	2.34	0.96
1:A:1026:PHE:O	1:A:1030:VAL:HG23	1.64	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:624:LEU:CD2	1:A:625:SER:N	2.27	0.96
1:A:653:LEU:HD12	1:A:654:GLU:H	1.13	0.96
1:A:232:TYR:CB	1:A:614:LYS:NZ	2.27	0.96
1:A:349:TYR:HA	1:A:350:ILE:HD12	1.47	0.96
1:A:612:GLN:O	1:A:616:GLN:HG2	1.66	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:N	1:A:542:LEU:CD2	2.29	0.93
1:A:1170:ILE:HG22	1:A:1170:ILE:O	1.68	0.93
1:A:373:PRO:O	1:A:373:PRO:HG2	1.69	0.92
1:A:1024:PRO:O	1:A:1141:ILE:HD13	1.69	0.92
1:A:874:TYR:C	1:A:874:TYR:HD2	1.73	0.92
1:A:612:GLN:C	1:A:616:GLN:HB3	1.90	0.92
1:A:278:LYS:CB	1:A:278:LYS:NZ	2.30	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: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:812:GLN:HE21	1:A:812:GLN:N	1.67	0.91
1:A:821:VAL:O	1:A:821:VAL:HG23	1.70	0.91
1:A:263:MET:SD	1:A:457:ILE:HD12	2.09	0.91
1:A:148:ILE:HG12	1:A:148:ILE:O	1.68	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: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:HD12	1:A:653:LEU:C	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:104:ASN:O	1:A:106:PRO:HD3	1.72	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:232:TYR:HB2	1:A:614:LYS:HZ2	1.34	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:HB2	1:A:278:LYS:NZ	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:314:LEU:C	1:A:314:LEU:CD1	2.29	0.88
1:A:1144:THR:HG22	1:A:1144:THR:O	1.73	0.88
1:A:145:LYS:NZ	3:A:1200:HOH:O	2.06	0.88
1:A:521:THR:C	1:A:522:SER:HG	1.75	0.88
1:A:1017:LYS:CA	1:A:1020:GLU:OE2	2.22	0.88
1:A:645:ILE:O	1:A:645:ILE:HD13	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:H	1:A:252:LEU:HD12	1.39	0.88
1:A:200:ASN:OD1	1:A:202:TYR:HD2	1.57	0.88
1:A:525:ILE:HD12	1:A:525:ILE:H	0.74	0.88
1:A:594:GLN:OE1	1:A:594:GLN:HA	1.74	0.87
1:A:672:GLU:OE2	1:A:672:GLU:HA	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: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:1017:LYS:HB2	1:A:1020:GLU:OE2	1.75	0.86
1:A:860:LYS:HZ3	1:A:860:LYS:CB	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:N	1:A:603:LYS:CD	2.39	0.85
1:A:237:ASN:C	1:A:237:ASN:ND2	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:O	1:A:627:TYR:CD2	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: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:600:GLN:NE2	1:A:600:GLN:CA	2.41	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:CD1	1:A:1039:TRP:O	2.30	0.83
1:A:407:LEU:C	1:A:408:GLU:OE2	2.16	0.83
1:A:809:TYR:CZ	1:A:990:PHE:HD2	1.95	0.83
1:A:1017:LYS:CB	1:A:1020:GLU:OE2	2.27	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:102:GLY:C	1:A:103:THR:HG22	1.99	0.83
1:A:612:GLN:HB2	1:A:616:GLN:H	1.41	0.83
1:A:283:LEU:HD12	1:A:284:THR:N	1.94	0.83
1:A:543:LEU:HD21	1:A:544:ILE:HG22	1.59	0.83
1:A:561:GLU:HB3	1:A:564:TYR:HB2	1.60	0.83
1:A:857:ASN:O	1:A:861:THR:HB	1.79	0.83
1:A:252:LEU:HD12	1:A:252:LEU:N	1.92	0.83
1:A:862:THR:O	1:A:862:THR:HG22	1.77	0.83
1:A:614:LYS:O	1:A:618:ILE:CD1	2.24	0.82
1:A:645:ILE:CG1	1:A:648:LEU:HD12	2.08	0.82
1:A:846:LYS:NZ	1:A:850:ASP:CG	2.32	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:113:PHE:CE1	1:A:115:PHE:HE2	1.97	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: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:902:LEU:HD12	1:A:902:LEU:O	1.80	0.82
1:A:1174:GLU:H	1:A:1174:GLU:CD	1.83	0.82
1:A:161:ASN:HD22	1:A:162:ALA:H	1.28	0.81
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: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:68:HIS:ND1	1:A:71:TYR:CD1	2.40	0.81
1:A:612:GLN:O	1:A:616:GLN:CG	2.29	0.81
1:A:1145:LYS:HE2	1:A:1147:GLU:OE1	1.81	0.81
1:A:193:PHE:O	1:A:194:GLN:CG	2.30	0.80
1:A:348:PHE:C	1:A:350:ILE:HD11	1.98	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:148:ILE:O	1:A:148:ILE:CG1	2.30	0.80
1:A:821:VAL:O	1:A:821:VAL:CG2	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:O	1:A:645:ILE:CG1	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:OE1	1:A:594:GLN:CA	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:C	1:A:232:TYR:HD2	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:O	1:A:645:ILE:CD1	2.30	0.79
1:A:996:LYS:O	1:A:996:LYS:CG	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:487:MET:O	1:A:491:LYS:HG3	1.83	0.79
1:A:610:ASN:O	1:A:613:GLU:CG	2.07	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:61:ILE:CG1	1:A:61:ILE:O	2.30	0.78
1:A:1039:TRP:CD1	1:A:1039:TRP:C	2.55	0.78
1:A:425:HIS:C	1:A:429:SER:OG	2.22	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:135:VAL:HG23	1:A:136:LEU:N	1.99	0.78
1:A:612:GLN:HG2	1:A:616:GLN:HB3	1.31	0.78
1:A:742:LEU:CD2	1:A:943:LEU:HD13	2.13	0.78
1:A:1145:LYS:O	1:A:1148:ASP:OD2	2.02	0.78
1:A:363:ASN:OD1	1:A:585:GLU:HA	1.83	0.78
1:A:425:HIS:O	1:A:429:SER:OG	2.00	0.77
1:A:682:HIS:O	1:A:685:LYS:N	2.18	0.77
1:A:721:THR:O	1:A:721:THR:HG23	1.83	0.77
1:A:745:VAL:CG1	1:A:814:LEU:HD23	2.04	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:542:LEU:HD23	1:A:542:LEU:H	1.48	0.77
1:A:612:GLN:HB3	1:A:615:GLU:CA	2.15	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:102:GLY:C	1:A:103:THR:CG2	2.52	0.77
1:A:312:THR:HG22	1:A:313:GLU:N	1.98	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:548:GLU:OE1	1:A:548:GLU:CA	2.30	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:373:PRO:O	1:A:373:PRO:CG	2.30	0.76
1:A:291:PHE:O	1:A:292:TYR:C	2.19	0.76
1:A:596:ASN:O	1:A:600:GLN:N	2.19	0.76
1:A:1028:VAL:O	1:A:1032:ALA:HB2	1.86	0.76
1:A:510:ILE:HG22	1:A:511:GLU:N	1.99	0.76
1:A:600:GLN:HE21	1:A:600:GLN:CA	1.85	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:278:LYS:CB	1:A:278:LYS:HZ3	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:105:ASP:OD1	1:A:107:LEU:HD12	1.86	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: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:O	1:A:606:ILE:HG23	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:528:VAL:O	1:A:532:THR:HG23	1.87	0.74
1:A:653:LEU:CD1	1:A:654:GLU:O	2.35	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:132:GLU:OE1	1:A:164:THR:OG1	2.06	0.74
1:A:206:THR:HG23	1:A:628:LYS:HZ3	1.49	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:742:LEU:HD21	1:A:943:LEU:CD1	2.15	0.73
1:A:1179:TYR:CE1	1:A:1183:VAL:HB	2.23	0.73
1:A:232:TYR:HB2	1:A:614:LYS:HZ1	1.49	0.73
1:A:627:TYR:O	1:A:627:TYR:CG	2.40	0.73
1:A:856:ILE:CG2	1:A:856:ILE:O	2.34	0.73
1:A:612:GLN:HB2	1:A:616:GLN:CB	2.08	0.73
1:A:362:GLU:OE1	1:A:466:LYS:NZ	2.22	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:243:GLU:HG3	1:A:1049:TYR:CE1	2.24	0.73
1:A:612:GLN:HB2	1:A:616:GLN:CA	2.19	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:OD1	1:A:1103:ASN:C	2.28	0.72
1:A:202:TYR:CE1	1:A:624:LEU:HB2	2.24	0.72
1:A:209:TRP:HE1	1:A:283:LEU:HB3	1.55	0.72
1:A:834:LEU:O	1:A:834:LEU:CD1	2.30	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:193:PHE:O	1:A:194:GLN:HG2	1.90	0.71
1:A:769:ASN:ND2	1:A:841:ASP:O	2.20	0.71
1:A:887:ASN:O	1:A:891:GLY:N	2.23	0.71
1:A:1029:ILE:O	1:A:1032:ALA: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:797:TYR:HE1	1:A:814:LEU:HD12	1.55	0.71
1:A:860:LYS:NZ	1:A:860:LYS:CB	2.30	0.71
1:A:645:ILE:C	1:A:647:ASP:H	1.93	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:616:GLN:C	1:A:616:GLN:OE1	2.29	0.71
1:A:233:LYS:O	1:A:234:VAL:CG2	2.39	0.71
1:A:560:ASN:ND2	1:A:560:ASN:H	1.89	0.71
1:A:606:ILE:O	1:A:606:ILE:CG2	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:299:LYS:O	1:A:302:LYS:HE3	1.91	0.70
1:A:587:ASP:OD1	1:A:587:ASP:C	2.29	0.70
1:A:79:ASN:OD1	1:A:79:ASN:C	2.30	0.70
1:A:856:ILE:O	1:A:856:ILE:HG22	1.85	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:CG	1:A:616:GLN:HB2	1.89	0.70
1:A:91:HIS:HD2	1:A:322:LEU:HD13	1.55	0.70
1:A:612:GLN:CB	1:A:615:GLU:C	2.59	0.70
1:A:645:ILE:HG12	1:A:645:ILE:O	1.90	0.70
1:A:937:TYR:HD2	1:A:937:TYR:O	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:509:ASN:C	1:A:509:ASN:OD1	2.30	0.70
1:A:598:GLU:HG2	1:A:599:LYS:HE3	1.74	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:C	1:A:450:ASN:OD1	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:285:TYR:CE2	1:A:289:LYS:HE2	2.28	0.69
1:A:1025:SER:O	1:A:1029:ILE:HD13	1.92	0.69
1:A:94:ALA:O	1:A:95:LYS:HB2	1.90	0.69
1:A:283:LEU:CD1	1:A:287:GLU:HG2	2.22	0.69
1:A:321:TYR:C	1:A:323:GLY:H	1.95	0.69
1:A:575:ASN:ND2	1:A:575:ASN:N	2.38	0.69
1:A:612:GLN:N	1:A:613:GLU:HB2	2.08	0.69
1:A:887:ASN:HA	1:A:891:GLY:HA3	1.73	0.69
1:A:1101:ILE:CD1	1:A:1141:ILE:O	2.40	0.69
1:A:645:ILE:HG12	1:A:648:LEU:CD1	2.23	0.69
1:A:810:ASN:C	1:A:810:ASN:OD1	2.31	0.69
1:A:407:LEU:N	1:A:407:LEU:CD2	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:60:TRP:HE3	1:A:60:TRP:O	1.75	0.68
1:A:200:ASN:OD1	1:A:202:TYR:CD2	2.45	0.68
1:A:348:PHE:N	1:A:348:PHE:CD1	2.55	0.68
1:A:166:ASN:HD21	1:A:269:HIS:HA	1.59	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: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:116:TYR:OH	1:A:536:ASN:OD1	2.06	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:809:TYR:OH	1:A:990:PHE:CD2	2.43	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:105:ASP:OD1	1:A:105:ASP:C	2.30	0.67
1:A:1000:PHE:HD2	1:A:1192:ILE:HD11	1.59	0.67
1:A:1034:LYS:HD3	1:A:1053:ALA:H	1.59	0.67
1:A:85:THR:O	1:A:101:LEU:HA	1.93	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:846:LYS:HZ2	1:A:850:ASP:CG	1.96	0.67
1:A:66:PRO:O	1:A:73:ILE:HD11	1.94	0.67
1:A:299:LYS:H	1:A:299:LYS:HD2	1.59	0.67
1:A:551:LEU:O	1:A:555:LYS:HG3	1.95	0.67
1:A:624:LEU:O	1:A:627:TYR:HB3	1.95	0.67
1:A:663:ASN:OD1	1:A:663:ASN:C	2.30	0.67
1:A:1023:ASP:OD1	1:A:1024:PRO:N	2.28	0.67
1:A:61:ILE:O	1:A:61:ILE:HG12	1.93	0.67
1:A:79:ASN:OD1	1:A:81:GLU:N	2.28	0.67
1:A:838:LYS:HG2	1:A:839:GLU:HG2	1.77	0.67
1:A:1000:PHE:CD2	1:A:1192:ILE:HD11	2.29	0.67
1:A:180:ASP:O	1:A:181:PHE:C	2.31	0.67
1:A:312:THR:HG23	1:A:316:ASN:HD21	1.58	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:460:ILE:CD1	1:A:486:ILE:HD13	2.24	0.66
1:A:797:TYR:CE1	1:A:814:LEU:HD12	2.30	0.66
1:A:807:ASP:OD2	1:A:807:ASP:C	2.29	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:488:ASN:O	1:A:492:LYS:HB2	1.96	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: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:332:ASP:CG	1:A:334:ALA:HB3	2.16	0.66
1:A:616:GLN:C	1:A:616:GLN:CD	2.53	0.66
1:A:240:VAL:O	1:A:241:TYR:C	2.32	0.66
1:A:408:GLU:OE2	1:A:408:GLU:N	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:242:ASN:ND2	1:A:1047:GLY:O	2.29	0.66
1:A:291:PHE:O	1:A:292:TYR:O	2.13	0.66
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: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:441:GLY:HA3	1:A:462:LEU:HG	1.78	0.65
1:A:442:ASN:CB	1:A:857:ASN:HD22	2.09	0.65
1:A:594:GLN:OE1	1:A:594:GLN:N	2.29	0.65
1:A:926:LYS:HD2	1:A:959:GLU:HG2	1.78	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:543:LEU:CD2	1:A:544:ILE:CG2	2.74	0.65
1:A:616:GLN:CG	1:A:617:VAL:N	2.60	0.65
1:A:1178:GLU:OE2	1:A:1178:GLU:N	2.30	0.65
1:A:1182:ASN:OD1	1:A:1182:ASN:N	2.30	0.65
1:A:91:HIS:CD2	1:A:322:LEU:HD13	2.32	0.65
1:A:127:ILE:N	1:A:128:PRO:CD	2.59	0.65
1:A:332:ASP:CG	1:A:334:ALA:CB	2.64	0.65
1:A:614:LYS:HD2	1:A:618:ILE:HD11	1.78	0.65
1:A:283:LEU:HD12	1:A:283:LEU:C	2.17	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: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: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: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: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:139:SER:OG	1:A:191:SER:HA	1.97	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:1029:ILE:O	1:A:1032:ALA:CB	2.43	0.64
1:A:1101:ILE:HG22	1:A:1102:ILE:N	2.06	0.64
1:A:312:THR:CG2	1:A:313:GLU:N	2.58	0.64
1:A:770:LYS:O	1:A:771:THR:HG23	1.66	0.64
1:A:564:TYR:CD1	1:A:564:TYR:C	2.66	0.64
1:A:575:ASN:HD22	1:A:575:ASN:H	1.44	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:858:GLY:O	1:A:861:THR:HG22	1.96	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: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:957:TYR:O	1:A:960:GLU:N	2.28	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: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:862:THR:O	1:A:862:THR:CG2	2.46	0.64
1:A:894:ASN:O	1:A:894:ASN:ND2	2.30	0.64
1:A:193:PHE:O	1:A:194:GLN:HG3	1.97	0.64
1:A:232:TYR:O	1:A:233:LYS:HD2	1.98	0.64
1:A:981:ASN:ND2	1:A:981:ASN:O	2.30	0.64
1:A:645:ILE:CG1	1:A:648:LEU:CD1	2.76	0.63
1:A:119:THR:C	1:A:120:LEU:HD12	2.19	0.63
1:A:321:TYR:C	1:A:323:GLY:N	2.48	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:992:GLU:C	1:A:994:LYS:N	2.46	0.63
1:A:1138:ARG:O	1:A:1142:MET:HG3	1.99	0.63
1:A:642:ILE:HG23	1:A:643:ILE:N	2.13	0.63
1:A:799:LYS:H	1:A:810:ASN:HD21	1.47	0.63
1:A:860:LYS:CG	1:A:861:THR:N	2.62	0.63
1:A:166:ASN:C	1:A:166:ASN:OD1	2.33	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: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:902:LEU:O	1:A:906:GLU:OE1	2.17	0.62
1:A:1110:LYS:O	1:A:1110:LYS:CG	2.43	0.62
1:A:81:GLU:OE2	1:A:548:GLU:CB	2.40	0.62
1:A:309:ASN:O	1:A:311:PRO:HD3	1.99	0.62
1:A:349:TYR:CA	1:A:350:ILE:CD1	2.69	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:O	1:A:1160:VAL:HG22	1.96	0.62
1:A:185:MET:HG2	1:A:317:PHE:HE2	1.64	0.62
1:A:263:MET:HE1	1:A:457:ILE:CD1	2.06	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:316:ASN:O	1:A:320:GLN:HG2	2.00	0.62
1:A:512:PHE:C	1:A:512:PHE:CD2	2.71	0.62
1:A:732:TYR:OH	1:A:1121:SER:HB3	1.99	0.62
1:A:888:ILE:O	1:A:894:ASN:HB2	1.99	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:543:LEU:HD23	1:A:543:LEU:C	2.07	0.62
1:A:263:MET:SD	1:A:457:ILE:HG23	2.40	0.62
1:A:358:SER:O	1:A:361:LYS:HE2	1.99	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: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: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:725:GLY:O	1:A:926:LYS:NZ	2.32	0.62
1:A:876:LYS:NZ	1:A:1056:GLU:OE2	2.32	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:665:ASN:ND2	1:A:956:SER:HB2	2.16	0.61
1:A:1180:ILE:C	1:A:1184:ASP:O	2.36	0.61
1:A:321:TYR:O	1:A:323:GLY:N	2.33	0.61
1:A:442:ASN:HB3	1:A:857:ASN:HD22	1.64	0.61
1:A:445:ILE:O	1:A:445:ILE:CG2	2.30	0.61
1:A:571:LYS:HD3	1:A:572:HIS:NE2	2.16	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:739:ILE:HG22	1:A:740:VAL:N	2.16	0.61
1:A:1070:ASN:OD1	1:A:1073:LYS:HE3	2.01	0.61
1:A:1189:LYS:N	1:A:1189:LYS:CD	2.30	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:677:LEU:HD11	1:A:684:LEU:HG	1.84	0.60
1:A:948:ASN:O	1:A:952:LYS:HG3	2.01	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:120:LEU:N	1:A:120:LEU:CD1	2.54	0.60
1:A:1029:ILE:O	1:A:1032:ALA:CA	2.49	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:619:LYS:HE2	1:A:623:GLU:HG3	1.84	0.60
1:A:645:ILE:C	1:A:647:ASP:N	2.42	0.60
1:A:166:ASN:ND2	1:A:269:HIS:HA	2.15	0.60
1:A:857:ASN:O	1:A:861:THR:CG2	2.48	0.60
1:A:743:GLN:HG2	1:A:818:GLU:HG3	1.84	0.59
1:A:1126:ILE:HG13	1:A:1126:ILE:O	2.00	0.59
1:A:356:ASP:OD2	1:A:358:SER:OG	2.19	0.59
1:A:562:PRO:C	1:A:564:TYR:N	2.54	0.59
1:A:797:TYR:HE1	1:A:814:LEU:CD1	2.14	0.59
1:A:827:ASN:HB2	1:A:950:SER:OG	2.00	0.59
1:A:1093:THR:OG1	1:A:1094:GLU:N	2.35	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:763:LYS:HG2	1:A:764:THR:N	2.15	0.59
1:A:769:ASN:OD1	1:A:770:LYS:N	2.33	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:612:GLN:HG2	1:A:612:GLN:O	2.03	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:132:GLU:HG2	1:A:133:HIS:N	2.17	0.59
1:A:156:LEU:HD12	1:A:177:ASN:HB2	1.85	0.59
1:A:596:ASN:OD1	1:A:596:ASN:N	2.30	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:953:ASN:HD22	1:A:953:ASN:H	1.49	0.59
1:A:746:PHE:CE1	1:A:924:PHE:CD1	2.90	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:805:VAL:HG12	1:A:806:THR:N	2.18	0.59
1:A:955:VAL:O	1:A:955:VAL:CG1	2.47	0.59
1:A:445:ILE:HB	1:A:461:GLY:CA	2.31	0.58
1:A:543:LEU:HD23	1:A:544:ILE:CG2	2.32	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:197:VAL:O	1:A:197:VAL:HG22	1.98	0.58
1:A:1160:VAL:O	1:A:1160:VAL:HG23	2.02	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:504:GLU:O	1:A:508:ASN:HB2	2.03	0.58
1:A:1086:ARG:NH2	1:A:1154:ASP:OD1	2.37	0.58
1:A:113:PHE:CD1	1:A:115:PHE:HE2	2.22	0.58
1:A:753:VAL:HG22	1:A:980:TRP:HB2	1.86	0.58
1:A:892:TYR:O	1:A:895:TYR:N	2.37	0.58
1:A:1003:PRO:O	1:A:1003:PRO:HG2	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:613:GLU:O	1:A:617:VAL:HG23	2.03	0.58
1:A:232:TYR:O	1:A:233:LYS:HG3	2.04	0.58
1:A:233:LYS:C	1:A:234:VAL:HG23	2.22	0.58
1:A:557:LYS:CB	1:A:564:TYR:CE2	2.79	0.58
1:A:746:PHE:CE2	1:A:929:LEU:HD13	2.38	0.58
1:A:759:LEU:O	1:A:763:LYS:HB3	2.04	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:619:LYS:HG2	1:A:623:GLU:CG	2.35	0.57
1:A:645:ILE:HA	1:A:648:LEU:HD12	1.86	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:283:LEU:HD12	1:A:284:THR:H	1.68	0.57
1:A:769:ASN:O	1:A:771:THR:HG23	2.03	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:469:ASN:C	1:A:471:LYS:N	2.58	0.56
1:A:522:SER:O	1:A:525:ILE:HD11	1.96	0.56
1:A:597:LEU:HA	1:A:600:GLN:HB2	1.87	0.56
1:A:659:VAL:HB	1:A:687:ASN:HB3	1.86	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:113:PHE:CD1	1:A:115:PHE:CE2	2.94	0.56
1:A:334:ALA:O	1:A:335:VAL:HG22	2.05	0.56
1:A:1093:THR:O	1:A:1097:LEU:N	2.34	0.56
1:A:452:SER:C	1:A:453:LEU:HD23	2.26	0.56
1:A:801:ASP:O	1:A:802:HIS:HB2	2.05	0.56
1:A:834:LEU:C	1:A:834:LEU:CD1	2.60	0.56
1:A:834:LEU:HB2	1:A:954:LEU:HD13	1.87	0.56
1:A:91:HIS:HD2	1:A:322:LEU:CD1	2.19	0.56
1:A:618:ILE:N	1:A:618:ILE:HD12	2.20	0.56
1:A:1055:ILE:HG13	1:A:1056:GLU:N	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:681:GLU:HA	1:A:684:LEU:HD12	1.88	0.56
1:A:948:ASN:OD1	1:A:948:ASN:N	2.30	0.56
1:A:1180:ILE:HA	1:A:1184:ASP:O	2.05	0.56
1:A:425:HIS:N	1:A:429:SER:OG	2.39	0.55
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: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:688:MET:C	1:A:690:VAL:N	2.59	0.55
1:A:1113:ARG:H	1:A:1116:GLU:HG3	1.70	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:252:LEU:N	1:A:252:LEU:CD1	2.65	0.55
1:A:645:ILE:CA	1:A:648:LEU:HD12	2.37	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:573:PHE:CD1	1:A:573:PHE:N	2.72	0.55
1:A:604:LYS:O	1:A:607:GLU:HG2	2.06	0.55
1:A:334:ALA:C	1:A:335:VAL:CG2	2.75	0.55
1:A:542:LEU:N	1:A:542:LEU:HD22	2.20	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:96:THR:O	1:A:96:THR:HG22	2.04	0.54
1:A:193:PHE:C	1:A:194:GLN:CG	2.75	0.54
1:A:348:PHE:N	1:A:348:PHE:HD1	2.01	0.54
1:A:657:VAL:HG22	1:A:658:ASN:N	2.22	0.54
1:A:71:TYR:HE1	1:A:319:ASP:HB2	1.73	0.54
1:A:207:GLU:O	1:A:240:VAL:HG23	2.08	0.54
1:A:428:GLU:C	1:A:429:SER:O	2.41	0.54
1:A:860:LYS:HG2	1:A:861:THR:N	2.22	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:748:LEU:HD21	1:A:923:ILE:HD13	1.90	0.54
1:A:1023:ASP:OD1	1:A:1024:PRO:CD	2.55	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:645:ILE:CB	1:A:648:LEU:HD12	2.37	0.54
1:A:688:MET:O	1:A:688:MET:HG3	2.08	0.54
1:A:1101:ILE:HD11	1:A:1141:ILE:O	2.06	0.54
1:A:1174:GLU:CD	1:A:1174:GLU:N	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:114:ALA:HA	1:A:171:TYR:O	2.09	0.53
1:A:769:ASN:O	1:A:771:THR:CG2	2.55	0.53
1:A:61:ILE:O	1:A:61:ILE:HG13	2.08	0.53
1:A:862:THR:HG23	1:A:865:GLU:HB2	1.89	0.53
1:A:60:TRP:CE3	1:A:61:ILE:HA	2.44	0.53
1:A:268:VAL:HG23	1:A:268:VAL:O	2.09	0.53
1:A:1034:LYS:HD3	1:A:1053:ALA:N	2.22	0.53
1:A:107:LEU:HD13	1:A:1113:ARG:NH1	2.23	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:765:LEU:HD12	1:A:765:LEU:C	2.22	0.53
1:A:1111:PRO:C	1:A:1112:ARG:HG3	2.29	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:549:LYS:O	1:A:553:ILE:HG13	2.08	0.53
1:A:624:LEU:O	1:A:627:TYR:CB	2.56	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:1179:TYR:CD1	1:A:1183:VAL:HB	2.44	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:746:PHE:CE1	1:A:924:PHE:HD1	2.27	0.52
1:A:750:HIS:O	1:A:922:LYS:NZ	2.41	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:739:ILE:CG2	1:A:740:VAL:N	2.73	0.52
1:A:807:ASP:OD2	1:A:808:LYS:N	2.43	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:561:GLU:O	1:A:564:TYR:CB	2.58	0.52
1:A:610:ASN:C	1:A:611:GLU:HG2	2.24	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:152:GLU:O	1:A:152:GLU:HG3	2.08	0.52
1:A:365:VAL:HG21	1:A:482:VAL:HG21	1.92	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:612:GLN:HB2	1:A:615:GLU:C	2.17	0.52
1:A:282:ASN:N	1:A:282:ASN:HD22	2.08	0.52
1:A:428:GLU:O	1:A:429:SER:O	2.28	0.52
1:A:984:ILE:HG23	1:A:989:LEU:CD1	2.36	0.52
1:A:1036:SER:O	1:A:1040:ASP:CB	2.56	0.52
1:A:60:TRP:CE3	1:A:60:TRP:C	2.83	0.52
1:A:138:GLY:HA2	1:A:147:SER:HG	1.73	0.52
1:A:419:ILE:HG22	1:A:420:ASN:CA	2.39	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:71:TYR:CE1	1:A:319:ASP:HB2	2.45	0.51
1:A:81:GLU:OE2	1:A:548:GLU:N	2.42	0.51
1:A:139:SER:OG	1:A:191:SER:CA	2.57	0.51
1:A:874:TYR:HD2	1:A:875:VAL:N	2.08	0.51
1:A:255:LEU:O	1:A:256:TYR:C	2.48	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: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:367:VAL:HA	1:A:580:SER:O	2.11	0.51
1:A:435:LEU:HD13	1:A:461:GLY:O	2.10	0.51
1:A:91:HIS:HB3	1:A:95:LYS:H	1.76	0.51
1:A:894:ASN:C	1:A:894:ASN:HD22	2.02	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:688:MET:C	1:A:690:VAL:H	2.15	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: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:443:ASN:HD22	1:A:463:LYS:HZ2	1.58	0.51
1:A:663:ASN:OD1	1:A:663:ASN:O	2.29	0.51
1:A:1011:MET:HE2	1:A:1163:PHE:HB3	1.93	0.51
1:A:286:GLU:H	1:A:286:GLU:CD	2.07	0.50
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:119:THR:H	1:A:168:ARG:HA	1.75	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:562:PRO:O	1:A:564:TYR:N	2.44	0.50
1:A:1036:SER:O	1:A:1040:ASP:N	2.33	0.50
1:A:190:ASP:O	1:A:190:ASP:OD1	2.29	0.50
1:A:616:GLN:CA	1:A:616:GLN:OE1	2.56	0.50
1:A:760:ASN:O	1:A:760:ASN:OD1	2.30	0.50
1:A:806:THR:O	1:A:807:ASP: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:1037:TYR:O	1:A:1038:LEU:O	2.29	0.50
1:A:589:ASN:O	1:A:590:TYR:C	2.47	0.50
1:A:601:GLU:O	1:A:602:LEU:C	2.46	0.50
1:A:1006:VAL:O	1:A:1006:VAL:HG23	2.10	0.50
1:A:80:GLU:OE2	1:A:80:GLU:O	2.30	0.50
1:A:372:ASN:CB	1:A:406:SER:HA	2.41	0.50
1:A:503:VAL:HG12	1:A:504:GLU:N	2.23	0.50
1:A:564:TYR:O	1:A:564:TYR:HD1	1.95	0.50
1:A:810:ASN:OD1	1:A:810:ASN:O	2.29	0.50
1:A:857:ASN:O	1:A:857:ASN:OD1	2.29	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:860:LYS:HG2	1:A:861:THR:H	1.77	0.50
1:A:85:THR:O	1:A:85:THR:OG1	2.29	0.50
1:A:261:LYS:O	1:A:265:PRO:HB3	2.12	0.50
1:A:1029:ILE:CA	1:A:1032:ALA:HB3	2.41	0.50
1:A:1098:LEU:O	1:A:1099:ARG:C	2.46	0.50
1:A:127:ILE:N	1:A:128:PRO:HD2	2.27	0.50
1:A:240:VAL:O	1:A:243:GLU:N	2.45	0.50
1:A:571:LYS:HG2	1:A:572:HIS:N	2.25	0.50
1:A:612:GLN:CG	1:A:616:GLN:N	2.71	0.50
1:A:619:LYS:HE2	1:A:623:GLU:CD	2.32	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:452:SER:O	1:A:453:LEU:HD23	2.11	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:807:ASP:HA	1:A:1018:PRO:HG3	1.94	0.49
1:A:250:SER:OG	1:A:253:GLU:HB2	2.12	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:437:ASP:N	1:A:437:ASP:OD1	2.39	0.49
1:A:446:ASP:O	1:A:446:ASP:OD1	2.30	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:614:LYS:CD	1:A:618:ILE:HD11	2.41	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:467:ARG:CG	1:A:467:ARG:O	2.60	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:593:GLU:C	1:A:594:GLN:OE1	2.51	0.49
1:A:672:GLU:OE2	1:A:672:GLU:O	2.29	0.49
1:A:696:VAL:C	1:A:698:LYS:H	2.14	0.49
1:A:781:ILE:O	1:A:781:ILE:HG23	2.13	0.49
1:A:319:ASP:OD1	1:A:319:ASP:O	2.29	0.49
1:A:446:ASP:O	1:A:446:ASP:CG	2.45	0.49
1:A:723:TYR:C	1:A:726:ASN:ND2	2.65	0.49
1:A:816:ASN:OD1	1:A:816:ASN:O	2.30	0.49
1:A:213:VAL:HG22	1:A:621:PHE:CD2	2.47	0.49
1:A:373:PRO:O	1:A:373:PRO:CD	2.58	0.49
1:A:925:ASN:CG	1:A:965:ILE:CD1	2.53	0.49
1:A:231:ASP:O	1:A:232:TYR:C	2.51	0.49
1:A:587:ASP:OD1	1:A:587:ASP:O	2.30	0.49
1:A:609:PHE:O	1:A:610:ASN:O	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:O	1:A:1138:ARG:HG3	2.13	0.48
1:A:264:PHE:N	1:A:265:PRO:HD3	2.28	0.48
1:A:307:SER:CB	1:A:309:ASN:H	2.23	0.48
1:A:330:TYR:CD2	1:A:330:TYR:N	2.80	0.48
1:A:366:SER:O	1:A:366:SER:OG	2.30	0.48
1:A:603:LYS:HD3	1:A:603:LYS:H	1.74	0.48
1:A:156:LEU:N	1:A:180:ASP:OD2	2.44	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:927:LYS:HE2	1:A:927:LYS:HB2	1.63	0.48
1:A:940:LEU:O	1:A:941:LYS:C	2.52	0.48
1:A:1184:ASP:OD1	1:A:1186:GLU:CG	2.61	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:370:LEU:HB2	1:A:578:HIS:CD2	2.48	0.48
1:A:915:ILE:HG22	1:A:916:LEU:N	2.14	0.48
1:A:1029:ILE:HD12	1:A:1029:ILE:N	2.28	0.48
1:A:1087:LYS:O	1:A:1091:THR:HG23	2.14	0.48
1:A:477:LYS:O	1:A:481:GLU:HG3	2.13	0.48
1:A:1029:ILE:C	1:A:1032:ALA:HB3	2.32	0.48
1:A:263:MET:SD	1:A:457:ILE:CG2	3.01	0.48
1:A:356:ASP:CG	1:A:358:SER:OG	2.52	0.48
1:A:408:GLU:N	1:A:408:GLU:CD	2.63	0.48
1:A:662:THR:OG1	1:A:667:ASN:ND2	2.46	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:742:LEU:HD22	1:A:943:LEU:HD11	1.95	0.48
1:A:82:PHE:HE1	1:A:545:PHE:CD2	2.32	0.48
1:A:612:GLN:N	1:A:612:GLN:OE1	2.46	0.48
1:A:925:ASN:OD1	1:A:965:ILE:HD13	2.11	0.48
1:A:183:ASN:ND2	1:A:643:ILE:HG22	2.29	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:133:HIS:CE1	1:A:1043:ARG:HH22	2.32	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: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:HD22	1:A:560:ASN:N	2.01	0.47
1:A:443:ASN:ND2	1:A:463:LYS:HZ1	2.11	0.47
1:A:521:THR:O	1:A:522:SER:CB	2.56	0.47
1:A:166:ASN:HA	1:A:273:SER:OG	2.13	0.47
1:A:180:ASP:O	1:A:182:PHE:N	2.47	0.47
1:A:934:THR:CB	1:A:1118:SER:OG	2.60	0.47
1:A:1060:SER:OG	1:A:1060:SER:O	2.29	0.47
1:A:601:GLU:O	1:A:601:GLU:HG3	2.13	0.47
1:A:661:PHE:CD2	1:A:723:TYR:CE1	3.02	0.47
1:A:120:LEU:HD12	1:A:120:LEU:H	1.72	0.47
1:A:612:GLN:HG3	1:A:615:GLU:C	2.35	0.47
1:A:995:VAL:O	1:A:995:VAL:HG12	2.08	0.47
1:A:126:GLY:O	1:A:130:ILE:HG13	2.15	0.47
1:A:285:TYR:CZ	1:A:289:LYS:HE2	2.49	0.47
1:A:529:PHE:O	1:A:533:SER:HB3	2.14	0.47
1:A:597:LEU:O	1:A:598:GLU:C	2.51	0.47
1:A:801:ASP:O	1:A:802:HIS:C	2.52	0.47
1:A:953:ASN:HD22	1:A:953:ASN:N	2.13	0.47
1:A:1007:ASN:HB3	1:A:1170:ILE:O	2.15	0.47
1:A:1120:LEU:O	1:A:1120:LEU:HG	2.08	0.47
1:A:534:LYS:HG3	1:A:540:ASP:O	2.15	0.47
1:A:610:ASN:N	1:A:613:GLU:HG2	2.29	0.47
1:A:666:GLU:CG	1:A:666:GLU:O	2.62	0.47
1:A:872:MET:HE1	1:A:1052:PHE:CD1	2.50	0.47
1:A:992:GLU:H	1:A:992:GLU:HG2	1.38	0.47
1:A:82:PHE:CE1	1:A:545:PHE:HD2	2.33	0.47
1:A:121:THR:CG2	1:A:128:PRO:HG2	2.45	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:178:ASN:O	1:A:179:LYS:C	2.51	0.47
1:A:318:VAL:HG12	1:A:319:ASP:N	2.29	0.47
1:A:1051:VAL:O	1:A:1051:VAL:CG1	2.59	0.47
1:A:412:ASP:O	1:A:413:TYR:C	2.52	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: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:619:LYS:CE	1:A:623:GLU:CG	2.92	0.46
1:A:1007:ASN:OD1	1:A:1007:ASN:N	2.48	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:612:GLN:CG	1:A:615:GLU:HB3	2.45	0.46
1:A:637:LEU:C	1:A:639:LYS:H	2.17	0.46
1:A:783:ARG:O	1:A:783:ARG:CG	2.58	0.46
1:A:128:PRO:HG3	1:A:291:PHE:CZ	2.50	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:724:GLU:N	1:A:726:ASN:HD22	2.13	0.46
1:A:783:ARG:O	1:A:783:ARG:HG3	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:428:GLU:HA	1:A:433:LYS:HB2	1.98	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:812:GLN:NE2	1:A:812:GLN:CA	2.74	0.46
1:A:872:MET:HE2	1:A:872:MET:HB2	1.69	0.46
1:A:105:ASP:OD2	1:A:107:LEU:HD12	2.14	0.46
1:A:358:SER:HB2	1:A:360:GLU:O	2.15	0.46
1:A:495:LYS:O	1:A:495:LYS:HG3	2.08	0.46
1:A:624:LEU:HD23	1:A:625:SER:HA	1.97	0.46
1:A:661:PHE:CE1	1:A:728:PRO:HB3	2.51	0.46
1:A:741:TYR:HD2	1:A:820:HIS:CD2	2.33	0.46
1:A:801:ASP:OD2	1:A:804:ASN:HB2	2.16	0.46
1:A:872:MET:HB3	1:A:1064:LEU:HD23	1.98	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1137:PHE:CE2	1:A:1141:ILE:HG13	2.51	0.46
1:A:82:PHE:CD1	1:A:545:PHE:HD2	2.33	0.46
1:A:135:VAL:HG22	1:A:136:LEU:N	2.30	0.46
1:A:264:PHE:CE2	1:A:457:ILE:HD11	2.51	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: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:1034:LYS:HA	1:A:1038:LEU:HB2	1.97	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: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:1051:VAL:HG22	1:A:1052:PHE:N	2.30	0.46
1:A:447:ARG:O	1:A:447:ARG:HD3	2.16	0.46
1:A:473:LYS:HB2	1:A:481:GLU:OE2	2.15	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:O	1:A:875:VAL:HG13	2.14	0.46
1:A:897:LYS:O	1:A:898:LEU:C	2.53	0.46
1:A:305:PHE:CZ	1:A:307:SER:HB3	2.50	0.46
1:A:561:GLU:O	1:A:564:TYR:HB3	2.15	0.46
1:A:590:TYR:O	1:A:594:GLN:HB2	2.16	0.46
1:A:763:LYS:HE2	1:A:792:ALA:O	2.16	0.46
1:A:1107:THR:HG1	1:A:1108:ILE:N	2.14	0.46
1:A:644:SER:O	1:A:647:ASP:HB2	2.17	0.45
1:A:115:PHE:HE1	1:A:189:MET:HG3	1.81	0.45
1:A:135:VAL:HG22	1:A:136:LEU:H	1.81	0.45
1:A:156:LEU:HB2	1:A:180:ASP:OD2	2.16	0.45
1:A:1051:VAL:O	1:A:1051:VAL:HG13	2.10	0.45
1:A:161:ASN:HD22	1:A:162:ALA:N	2.05	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: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:105:ASP:OD2	1:A:1113:ARG:NH1	2.38	0.45
1:A:454:VAL:O	1:A:454:VAL:HG22	2.15	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: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:413:TYR:CE2	1:A:417:LEU:HD11	2.51	0.45
1:A:418:ILE:HG22	1:A:419:ILE:N	2.21	0.45
1:A:542:LEU:O	1:A:545:PHE:N	2.49	0.45
1:A:664:ILE:HG23	1:A:664:ILE:HD13	1.56	0.45
1:A:858:GLY:O	1:A:861:THR:CG2	2.64	0.45
1:A:894:ASN:ND2	1:A:894:ASN:C	2.63	0.45
1:A:325:LEU:HD23	1:A:325:LEU:HA	1.48	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:876:LYS:HZ1	1:A:1060:SER:HG	1.63	0.45
1:A:1107:THR:HG1	1:A:1108:ILE:H	1.65	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:472:ILE:HG22	1:A:474:ASN:O	2.17	0.44
1:A:535:LEU:HA	1:A:535:LEU:HD23	1.61	0.44
1:A:732:TYR:OH	1:A:1121:SER:CB	2.63	0.44
1:A:997:LYS:HB3	1:A:1187:PHE:CE2	2.52	0.44
1:A:206:THR:HG23	1:A:628:LYS:HZ1	1.77	0.44
1:A:980:TRP:CE3	1:A:981:ASN:HA	2.53	0.44
1:A:1179:TYR:HE2	1:A:1187:PHE:HE1	1.60	0.44
1:A:1010:SER:OG	1:A:1010:SER:O	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:417:LEU:N	1:A:417:LEU:HD23	2.32	0.44
1:A:528:VAL:O	1:A:529:PHE:C	2.55	0.44
1:A:672:GLU:HA	1:A:675:ASN:ND2	2.32	0.44
1:A:872:MET:HE3	1:A:872:MET:HB3	1.74	0.44
1:A:284:THR:CB	1:A:287:GLU:HB3	2.48	0.44
1:A:285:TYR:O	1:A:288:PHE:HB3	2.17	0.44
1:A:369:TRP:HD1	1:A:576:ASN:HB3	1.79	0.44
1:A:736:THR:O	1:A:737:THR:O	2.34	0.44
1:A:892:TYR:O	1:A:894:ASN:N	2.50	0.44
1:A:110:GLU:HG3	1:A:158:THR:HG21	1.99	0.44
1:A:314:LEU:CG	1:A:315:LEU:N	2.80	0.44
1:A:368:ALA:HA	1:A:458:PHE:O	2.18	0.44
1:A:424:ILE:HD11	1:A:460:ILE:CG2	2.48	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:748:LEU:HD22	1:A:751:LEU:HD22	1.98	0.44
1:A:346:GLY:HA3	1:A:347:PRO:HA	1.79	0.44
1:A:611:GLU:HA	1:A:612:GLN:HA	1.79	0.44
1:A:955:VAL:O	1:A:958:PHE:HB2	2.18	0.44
1:A:1132:GLN:H	1:A:1132:GLN:HG2	1.39	0.44
1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HG	1.51	0.44
1:A:103:THR:O	1:A:308:LYS:HA	2.18	0.44
1:A:133:HIS:HE1	1:A:1043:ARG:NH2	2.15	0.44
1:A:411:THR:HG22	1:A:411:THR:O	2.17	0.44
1:A:757:ALA:C	1:A:759:LEU:H	2.21	0.44
1:A:264:PHE:N	1:A:265:PRO:CD	2.81	0.44
1:A:269:HIS:NE2	1:A:454:VAL:HG12	2.33	0.44
1:A:478:VAL:CG1	1:A:479:HIS:N	2.77	0.44
1:A:612:GLN:HG3	1:A:616:GLN:N	2.32	0.44
1:A:613:GLU:O	1:A:617:VAL:HB	2.18	0.44
1:A:446:ASP:OD1	1:A:446:ASP:C	2.55	0.43
1:A:113:PHE:CD1	1:A:113:PHE:C	2.92	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:882:LYS:O	1:A:882:LYS:HG2	2.18	0.43
1:A:454:VAL:O	1:A:454:VAL:CG2	2.67	0.43
1:A:815:PHE:CD1	1:A:815:PHE:C	2.91	0.43
1:A:980:TRP:CD2	1:A:981:ASN:N	2.86	0.43
1:A:512:PHE:CD2	1:A:512:PHE:O	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:832:ILE:O	1:A:832:ILE:CG2	2.55	0.43
1:A:893:GLU:O	1:A:893:GLU:HG3	2.17	0.43
1:A:1083:LYS:HB3	1:A:1083:LYS:HE3	1.32	0.43
1:A:1179:TYR:CE2	1:A:1187:PHE:CE1	3.01	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:436:THR:HG22	1:A:437:ASP:N	2.28	0.43
1:A:956:SER:O	1:A:956:SER:OG	2.30	0.43
1:A:1169:ILE:HG21	1:A:1169:ILE:HD13	1.73	0.43
1:A:1179:TYR:CE1	1:A:1183:VAL:CB	2.97	0.43
1:A:249:SER:O	1:A:251:PRO:HD3	2.18	0.43
1:A:472:ILE:CG2	1:A:478:VAL:HG23	2.49	0.43
1:A:622:GLU:HG2	1:A:623:GLU:N	2.34	0.43
1:A:624:LEU:CD2	1:A:625:SER:HA	2.48	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:923:ILE:HG23	1:A:923:ILE:HD13	1.71	0.43
1:A:107:LEU:CD1	1:A:1113:ARG:NH1	2.82	0.43
1:A:418:ILE:O	1:A:418:ILE:CG2	2.55	0.43
1:A:683:MET:O	1:A:687:ASN:CB	2.67	0.43
1:A:766:ILE:HD13	1:A:766:ILE:HG21	1.82	0.43
1:A:995:VAL:CG2	1:A:1165:LYS:HB3	2.49	0.43
1:A:1039:TRP:CE2	1:A:1043:ARG:HD2	2.52	0.43
1:A:276:ASP:C	1:A:278:LYS:N	2.72	0.43
1:A:332:ASP:CG	1:A:334:ALA:HB2	2.33	0.43
1:A:454:VAL:O	1:A:539:ARG:NH2	2.52	0.43
1:A:809:TYR:CE1	1:A:990:PHE:CD2	3.07	0.43
1:A:837:VAL:HG12	1:A:838:LYS:CA	2.43	0.43
1:A:892:TYR:C	1:A:894:ASN:N	2.66	0.43
1:A:344:LYS:HD3	3:A:1213:HOH:O	2.18	0.42
1:A:472:ILE:HG23	1:A:478:VAL:HG23	2.00	0.42
1:A:764:THR:O	1:A:764:THR:HG23	2.19	0.42
1:A:997:LYS:O	1:A:998:GLU:HG3	2.19	0.42
1:A:148:ILE:HG23	1:A:149:GLY:N	2.34	0.42
1:A:365:VAL:HG12	1:A:366:SER:N	2.32	0.42
1:A:596:ASN:O	1:A:599:LYS:N	2.52	0.42
1:A:652:THR:O	1:A:653:LEU:C	2.54	0.42
1:A:333:ASP:O	1:A:335:VAL:HG23	2.19	0.42
1:A:1029:ILE:HG23	1:A:1085:LEU:HD11	2.00	0.42
1:A:1093:THR:HG23	1:A:1096:ASP:H	1.84	0.42
1:A:91:HIS:HB3	1:A:95:LYS:N	2.34	0.42
1:A:267:ASN:OD1	1:A:267:ASN:C	2.54	0.42
1:A:285:TYR:CE2	1:A:289:LYS:CE	3.01	0.42
1:A:937:TYR:C	1:A:937:TYR:CD2	2.92	0.42
1:A:1138:ARG:O	1:A:1142:MET:CG	2.67	0.42
1:A:154:GLY:C	1:A:155:THR:CG2	2.87	0.42
1:A:469:ASN:C	1:A:471:LYS:H	2.21	0.42
1:A:569:VAL:O	1:A:573:PHE:CB	2.63	0.42
1:A:82:PHE:O	1:A:83:LYS:C	2.58	0.42
1:A:115:PHE:CE1	1:A:189:MET:HG3	2.54	0.42
1:A:321:TYR:O	1:A:324:GLN:HG2	2.19	0.42
1:A:1016:PHE:HZ	1:A:1026:PHE:HE2	1.67	0.42
1:A:213:VAL:O	1:A:214:GLU:CB	2.52	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:1049:TYR:HB3	1:A:1067:ARG:CB	2.50	0.42
1:A:162:ALA:HB1	1:A:171:TYR:HD2	1.85	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:1137:PHE:O	1:A:1141:ILE:HG12	2.20	0.42
1:A:1146:LYS:O	1:A:1149:PHE:HB2	2.20	0.42
1:A:456:TYR:N	1:A:456:TYR:CD2	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:HE2	1:A:1011:MET:HB2	1.66	0.42
1:A:1023:ASP:HA	1:A:1024:PRO:HD3	1.86	0.42
1:A:1026:PHE:HA	1:A:1029:ILE:HD13	2.02	0.42
1:A:151:LEU:HD11	1:A:187:VAL:HG21	2.02	0.42
1:A:741:TYR:CD2	1:A:820:HIS:CD2	3.08	0.42
1:A:805:VAL:CG1	1:A:806:THR:N	2.83	0.42
1:A:851:ILE:O	1:A:854:ARG:HG2	2.19	0.42
1:A:889:ILE:HG23	1:A:889:ILE:HD13	1.58	0.42
1:A:1007:ASN:N	1:A:1068:ASP:O	2.53	0.42
1:A:1092:MET:HB3	1:A:1092:MET:HE3	1.53	0.42
1:A:895:TYR:C	1:A:895:TYR:CD1	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:206:THR:H	1:A:206:THR:HG1	1.58	0.41
1:A:346:GLY:CA	1:A:348:PHE:CE1	3.03	0.41
1:A:540:ASP:HA	1:A:541:PRO:HD2	1.81	0.41
1:A:722:LYS:HB2	1:A:722:LYS:HE2	1.70	0.41
1:A:849:ILE:HD13	1:A:849:ILE:HG23	1.81	0.41
1:A:1068:ASP:OD1	1:A:1069:PRO:HD2	2.20	0.41
1:A:1184:ASP:HB3	1:A:1187:PHE:HD1	1.86	0.41
1:A:116:TYR:N	1:A:302:LYS:O	2.42	0.41
1:A:190:ASP:O	1:A:194:GLN:N	2.51	0.41
1:A:346:GLY:CA	1:A:348:PHE:HE1	2.32	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:664:ILE:HD12	1:A:664:ILE:HG21	1.67	0.41
1:A:723:TYR:HA	1:A:726:ASN:ND2	2.36	0.41
1:A:803:LEU:O	1:A:1021:TYR:HD1	2.03	0.41
1:A:937:TYR:O	1:A:937:TYR:CD2	2.65	0.41
1:A:1014:ILE:HG23	1:A:1016:PHE:H	1.86	0.41
1:A:332:ASP:C	1:A:334:ALA:H	2.23	0.41
1:A:370:LEU:HD11	1:A:455:GLN:HB3	2.02	0.41
1:A:437:ASP:O	1:A:439:GLY:N	2.54	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:925:ASN:ND2	1:A:965:ILE:CD1	2.82	0.41
1:A:995:VAL:HG22	1:A:1165:LYS:CB	2.50	0.41
1:A:131:LEU:O	1:A:131:LEU:HD23	2.21	0.41
1:A:151:LEU:CA	1:A:155:THR:CG2	2.94	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:776:SER:O	1:A:780:VAL:HG23	2.21	0.41
1:A:873:LYS:HE2	1:A:873:LYS:HB3	1.67	0.41
1:A:887:ASN:CA	1:A:891:GLY:HA3	2.47	0.41
1:A:68:HIS:CB	1:A:71:TYR:HB2	2.38	0.41
1:A:119:THR:N	1:A:167:ASP:O	2.54	0.41
1:A:180:ASP:C	1:A:182:PHE:N	2.66	0.41
1:A:1173:LYS:HB2	1:A:1173:LYS:HE2	1.76	0.41
1:A:423:LEU:HD23	1:A:430:VAL:HB	2.03	0.41
1:A:589:ASN:O	1:A:592:GLN:N	2.53	0.41
1:A:650:LYS:O	1:A:651:LYS:HG2	2.21	0.41
1:A:888:ILE:O	1:A:894:ASN:CB	2.69	0.41
1:A:1088:MET:HE2	1:A:1088:MET:HB2	1.58	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:422:LEU:HD13	1:A:498:PHE:CD1	2.56	0.41
1:A:542:LEU:HB3	1:A:545:PHE:HB2	2.03	0.41
1:A:280:ILE:O	1:A:280:ILE:CG2	2.62	0.40
1:A:519:LEU:HD12	1:A:739:ILE:HD13	2.04	0.40
1:A:597:LEU:HD12	1:A:597:LEU:H	1.86	0.40
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:1152:PHE:O	1:A:1156:LEU:HB2	2.21	0.40
1:A:213:VAL:HG23	1:A:214:GLU:H	1.82	0.40
1:A:437:ASP:C	1:A:439:GLY:N	2.75	0.40
1:A:498:PHE:O	1:A:499:ASN:O	2.37	0.40
1:A:607:GLU:C	1:A:609:PHE:H	2.23	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:190:ASP:C	1:A:190:ASP:OD1	2.59	0.40
1:A:409:ASN:O	1:A:410:PRO:C	2.55	0.40
1:A:447:ARG:HD3	1:A:447:ARG:C	2.41	0.40
1:A:670:ILE:O	1:A:670:ILE:CG2	2.60	0.40
1:A:1093:THR:H	1:A:1096:ASP:HB2	1.86	0.40
1:A:1113:ARG:N	1:A:1116:GLU:HG3	2.36	0.40
1:A:524:SER:O	1:A:528: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:774:ARG:HG3	1:A:779:PHE:HB2	2.04	0.40
1:A:1027:THR:OG1	1:A:1028:VAL:N	2.54	0.40
1:A:1063:PHE:CE2	1:A:1163:PHE:CE1	3.10	0.40
1:A:257:HIS:O	1:A:261:LYS:HB2	2.22	0.40
1:A:357:HIS:O	1:A:358:SER:C	2.59	0.40
1:A:612:GLN:CG	1:A:615:GLU:C	2.90	0.40
1:A:655:VAL:HA	1:A:656:PRO:HD2	1.83	0.40
1:A:748:LEU:HD11	1:A:815:PHE:HB2	2.03	0.40
1:A:1037:TYR:CE2	1:A:1077:THR:HG22	2.56	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%)	19 58

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 (i)

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 0

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

Sometimes 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 (i)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates (i)

There are no monosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry (i)

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 (i)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data (i)

6.1 Protein, DNA and RNA chains (i)

In the following table, the column labelled '#RSRZ> 2' contains the number (and percentage) of RSRZ outliers, followed by percent RSRZ outliers for the chain as percentile scores relative to all X-ray entries and entries of similar resolution. The OWAB column contains the minimum, median, 95th percentile and maximum values of the occupancy-weighted average B-factor per residue. The column labelled 'Q< 0.9' lists the number of (and percentage) of residues with an average occupancy less than 0.9.

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2			OWAB(Å^2)	Q<0.9
1	A	1053/1193 (88%)	-0.51	2 (0%)	95	94	9, 32, 70, 128	0

All (2) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	610	ASN	3.9
1	A	612	GLN	2.7

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 monosaccharides 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. 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	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.