



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report

Feb 26, 2014 – 04:40 PM GMT

PDB ID : 1JDE  
Title : K22A mutant of pyruvate, phosphate dikinase  
Authors : Ye, D.; Wei, M.; McGuire, M.; Huang, K.; Kapadia, G.; Herzberg, O.; Martin, B.M.; Dunaway-Mariano, D.  
Deposited on : 2001-06-13  
Resolution : 2.80 Å(reported)

This is a full wwPDB validation report for a publicly released PDB entry.  
We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)  
A user guide is available at <http://wwpdb.org/ValidationPDFNotes.html>

---

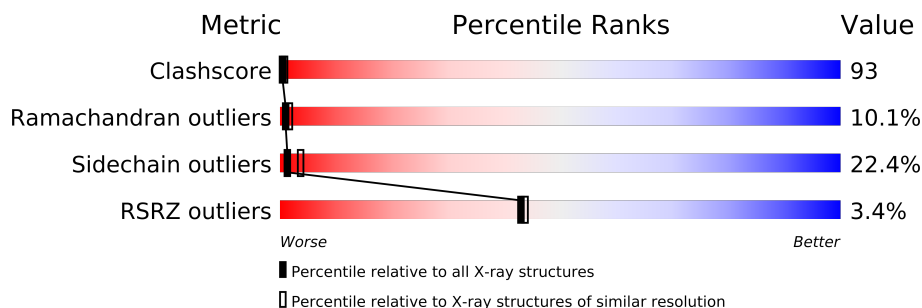
The following versions of software and data (see [references](#)) were used in the production of this report:

MolProbity : 4.02b-467  
Mogul : 1.15 2013  
Xtriage (Phenix) : dev-1323  
EDS : stable22639  
Percentile statistics : 21963  
Refmac : 5.8.0049  
CCP4 : 6.3.0 (Settle)  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et. al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : stable22683

# 1 Overall quality at a glance

The reported resolution of this entry is 2.80 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))
Clashscore	79885	2295 (2.80-2.80)
Ramachandran outliers	78287	2252 (2.80-2.80)
Sidechain outliers	78261	2254 (2.80-2.80)
RSRZ outliers	66119	1802 (2.80-2.80)

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  $\geq 3$ , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the electron density.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	873	

The following table lists non-polymeric compounds that are outliers for geometric or electron-density-fit criteria:

Mol	Type	Chain	Res	Geometry	Electron density
2	SO4	A	902	-	X

## 2 Entry composition i

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 6768 atoms, of which 0 are hydrogen and 0 are deuterium.

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 PYRUVATE, PHOSPHATE DIKINASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	868	6717	4226	1138	1302	51	0	0	0

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	22	ALA	LYS	ENGINEERED	UNP P22983

- Molecule 2 is SULFATE ION (three-letter code: SO<sub>4</sub>) (formula: O<sub>4</sub>S).



Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
			Total	O	S		
2	A	1	5	4	1	0	0
2	A	1	5	4	1	0	0

- Molecule 3 is water.

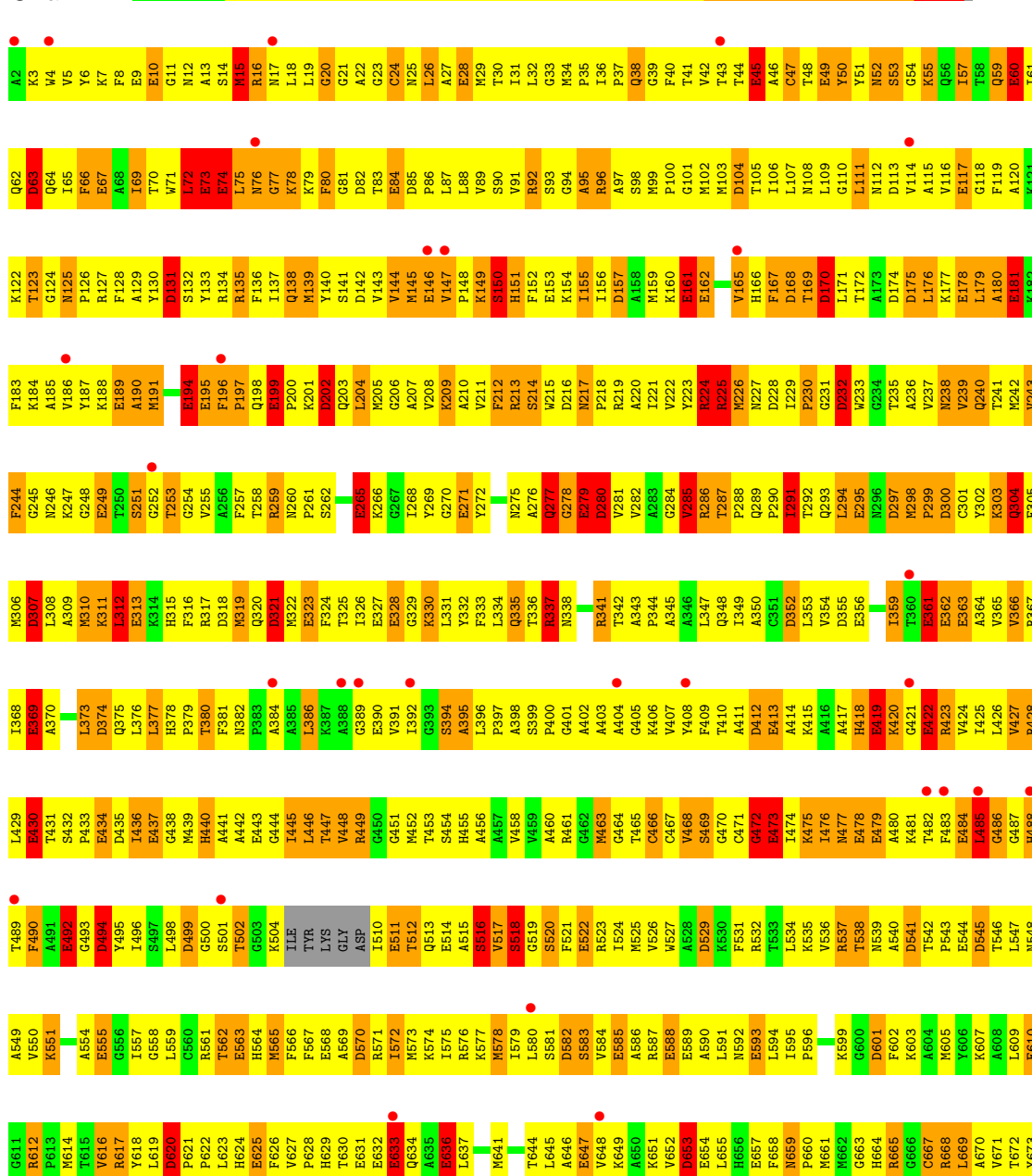
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	A	41	Total	O	0	0
			41	41		

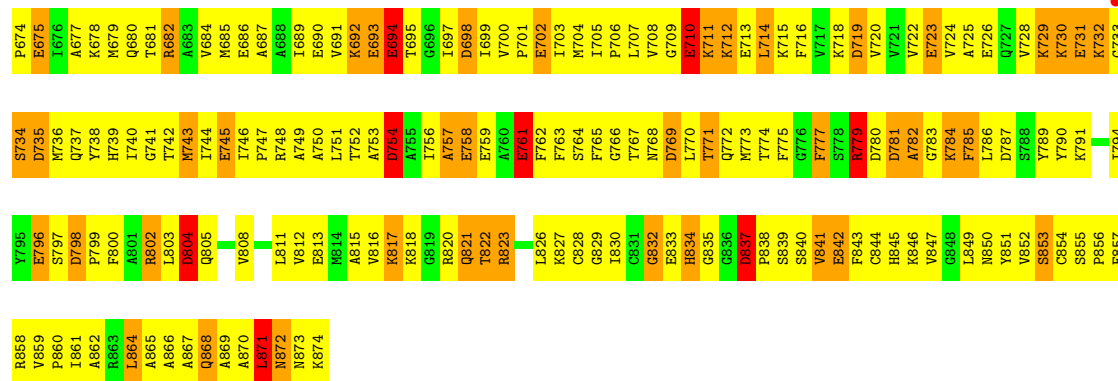
### 3 Residue-property plots

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: PYRUVATE, PHOSPHATE DIKINASE

Chain A:





## 4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 1 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	89.90Å 58.60Å 102.30Å 90.00° 95.10° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	10.00 – 2.80 49.03 – 2.75	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	(Not available) (10.00-2.80) 86.8 (49.03-2.75)	Depositor EDS
$R_{merge}$	0.07	Depositor
$R_{sym}$	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ <sup>1</sup>	2.18 (at 2.77Å)	Xtriage
Refinement program	X-PLOR	Depositor
R, $R_{free}$	0.193 , (Not available) 0.260 , (Not available)	Depositor DCC
$R_{free}$ test set	No test flags present.	DCC
Wilson B-factor (Å <sup>2</sup> )	32.9	Xtriage
Anisotropy	0.573	Xtriage
Bulk solvent $k_{sol}$ (e/Å <sup>3</sup> ), $B_{sol}$ (Å <sup>2</sup> )	0.39 , 103.1	EDS
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
L-test for twinning	$\langle  L  \rangle = 0.42$ , $\langle L^2 \rangle = 0.25$	Xtriage
Outliers	0 of 25068 reflections	Xtriage
$F_o, F_c$ correlation	0.79	EDS
Total number of atoms	6768	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	28.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 16.30% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

<sup>1</sup>Intensities estimated from amplitudes.

## 5 Model quality

### 5.1 Standard geometry

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: SO4

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	1.25	76/6839 (1.1%)	1.59	90/9217 (1.0%)

All (76) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	146	GLU	CD-OE2	9.95	1.36	1.25
1	A	694	GLU	CD-OE2	9.32	1.35	1.25
1	A	249	GLU	CD-OE2	8.99	1.35	1.25
1	A	153	GLU	CD-OE2	8.88	1.35	1.25
1	A	419	GLU	CD-OE2	8.71	1.35	1.25
1	A	710	GLU	CD-OE2	8.48	1.34	1.25
1	A	702	GLU	CD-OE2	8.36	1.34	1.25
1	A	194	GLU	CD-OE2	8.24	1.34	1.25
1	A	726	GLU	CD-OE2	8.22	1.34	1.25
1	A	796	GLU	CD-OE2	8.02	1.34	1.25
1	A	390	GLU	CD-OE2	8.00	1.34	1.25
1	A	723	GLU	CD-OE2	7.97	1.34	1.25
1	A	422	GLU	CD-OE2	7.86	1.34	1.25
1	A	759	GLU	CD-OE2	7.86	1.34	1.25
1	A	625	GLU	CD-OE2	7.74	1.34	1.25
1	A	522	GLU	CD-OE2	7.53	1.33	1.25
1	A	84	GLU	CD-OE2	7.48	1.33	1.25
1	A	195	GLU	CD-OE2	7.46	1.33	1.25
1	A	514	GLU	CD-OE2	7.37	1.33	1.25
1	A	633	GLU	CD-OE2	7.32	1.33	1.25
1	A	610	GLU	CD-OE2	7.25	1.33	1.25
1	A	162	GLU	CD-OE2	7.15	1.33	1.25
1	A	181	GLU	CD-OE2	7.15	1.33	1.25
1	A	271	GLU	CD-OE2	7.12	1.33	1.25
1	A	328	GLU	CD-OE2	7.06	1.33	1.25
1	A	758	GLU	CD-OE2	7.03	1.33	1.25

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	511	GLU	CD-OE2	6.91	1.33	1.25
1	A	74	GLU	CD-OE2	6.90	1.33	1.25
1	A	675	GLU	CD-OE2	6.83	1.33	1.25
1	A	60	GLU	CD-OE2	6.79	1.33	1.25
1	A	484	GLU	CD-OE2	6.79	1.33	1.25
1	A	279	GLU	CD-OE2	6.69	1.33	1.25
1	A	49	GLU	CD-OE2	6.60	1.32	1.25
1	A	265	GLU	CD-OE2	6.58	1.32	1.25
1	A	544	GLU	CD-OE2	6.48	1.32	1.25
1	A	761	GLU	CD-OE2	6.43	1.32	1.25
1	A	479	GLU	CD-OE2	6.42	1.32	1.25
1	A	323	GLU	CD-OE2	6.41	1.32	1.25
1	A	434	GLU	CD-OE2	6.40	1.32	1.25
1	A	362	GLU	CD-OE2	6.35	1.32	1.25
1	A	28	GLU	CD-OE2	6.29	1.32	1.25
1	A	437	GLU	CD-OE2	6.26	1.32	1.25
1	A	632	GLU	CD-OE2	6.23	1.32	1.25
1	A	117	GLU	CD-OE2	6.22	1.32	1.25
1	A	647	GLU	CD-OE2	6.18	1.32	1.25
1	A	813	GLU	CD-OE2	6.17	1.32	1.25
1	A	363	GLU	CD-OE2	6.07	1.32	1.25
1	A	833	GLU	CD-OE2	6.01	1.32	1.25
1	A	585	GLU	CD-OE2	6.00	1.32	1.25
1	A	654	GLU	CD-OE2	5.98	1.32	1.25
1	A	745	GLU	CD-OE2	5.97	1.32	1.25
1	A	369	GLU	CD-OE2	5.89	1.32	1.25
1	A	295	GLU	CD-OE2	5.81	1.32	1.25
1	A	178	GLU	CD-OE2	5.79	1.32	1.25
1	A	45	GLU	CD-OE2	5.67	1.31	1.25
1	A	161	GLU	CD-OE2	5.67	1.31	1.25
1	A	588	GLU	CD-OE2	5.67	1.31	1.25
1	A	413	GLU	CD-OE2	5.63	1.31	1.25
1	A	563	GLU	CD-OE2	5.59	1.31	1.25
1	A	361	GLU	CD-OE2	5.53	1.31	1.25
1	A	589	GLU	CD-OE2	5.52	1.31	1.25
1	A	568	GLU	CD-OE2	5.49	1.31	1.25
1	A	10	GLU	CD-OE2	5.46	1.31	1.25
1	A	73	GLU	CD-OE2	5.44	1.31	1.25
1	A	555	GLU	CD-OE2	5.42	1.31	1.25
1	A	631	GLU	CD-OE2	5.35	1.31	1.25
1	A	731	GLU	CD-OE2	5.33	1.31	1.25
1	A	67	GLU	CD-OE2	5.31	1.31	1.25

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	693	GLU	CD-OE2	5.31	1.31	1.25
1	A	430	GLU	CD-OE2	5.29	1.31	1.25
1	A	636	GLU	CD-OE2	5.23	1.31	1.25
1	A	593	GLU	CD-OE2	5.22	1.31	1.25
1	A	199	GLU	CD-OE2	5.22	1.31	1.25
1	A	473	GLU	CD-OE2	5.19	1.31	1.25
1	A	189	GLU	CD-OE2	5.17	1.31	1.25
1	A	492	GLU	CD-OE2	5.09	1.31	1.25

All (90) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	196	PHE	C-N-CD	-11.04	96.32	120.60
1	A	202	ASP	CB-CG-OD2	-9.67	109.60	118.30
1	A	601	ASP	CB-CG-OD2	-9.55	109.70	118.30
1	A	719	ASP	CB-CG-OD1	8.99	126.39	118.30
1	A	682	ARG	NE-CZ-NH1	8.73	124.66	120.30
1	A	620	ASP	CB-CG-OD2	-8.43	110.72	118.30
1	A	224	ARG	NE-CZ-NH1	8.36	124.48	120.30
1	A	63	ASP	CB-CG-OD2	-8.09	111.02	118.30
1	A	142	ASP	CB-CG-OD2	-8.08	111.02	118.30
1	A	321	ASP	CB-CG-OD1	8.08	125.57	118.30
1	A	541	ASP	CB-CG-OD2	-8.04	111.06	118.30
1	A	665	ARG	NE-CZ-NH1	7.88	124.24	120.30
1	A	617	ARG	NE-CZ-NH1	7.88	124.24	120.30
1	A	781	ASP	CB-CG-OD1	7.86	125.38	118.30
1	A	168	ASP	CB-CG-OD1	7.84	125.36	118.30
1	A	798	ASP	CB-CG-OD2	-7.83	111.25	118.30
1	A	617	ARG	NE-CZ-NH2	-7.81	116.39	120.30
1	A	529	ASP	CB-CG-OD1	7.80	125.32	118.30
1	A	798	ASP	CB-CG-OD1	7.68	125.22	118.30
1	A	665	ARG	NE-CZ-NH2	-7.58	116.51	120.30
1	A	719	ASP	CB-CG-OD2	-7.42	111.62	118.30
1	A	337	ARG	NE-CZ-NH2	-7.42	116.59	120.30
1	A	216	ASP	CB-CG-OD2	-7.33	111.71	118.30
1	A	280	ASP	CB-CG-OD2	-7.22	111.80	118.30
1	A	216	ASP	CB-CG-OD1	7.17	124.76	118.30
1	A	754	ASP	CB-CG-OD2	-7.17	111.85	118.30
1	A	570	ASP	CB-CG-OD2	-7.13	111.88	118.30
1	A	131	ASP	CB-CG-OD2	-7.12	111.89	118.30
1	A	653	ASP	CB-CG-OD2	-6.82	112.17	118.30
1	A	170	ASP	CB-CG-OD2	-6.80	112.18	118.30

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	837	ASP	CB-CG-OD2	-6.75	112.23	118.30
1	A	259	ARG	NE-CZ-NH2	-6.70	116.95	120.30
1	A	384	ALA	N-CA-CB	6.67	119.43	110.10
1	A	412	ASP	CB-CG-OD2	-6.62	112.34	118.30
1	A	259	ARG	NE-CZ-NH1	6.61	123.60	120.30
1	A	449	ARG	NE-CZ-NH1	6.58	123.59	120.30
1	A	355	ASP	CB-CG-OD1	6.57	124.21	118.30
1	A	601	ASP	CB-CG-OD1	6.56	124.20	118.30
1	A	668	ARG	NE-CZ-NH1	6.55	123.58	120.30
1	A	668	ARG	NE-CZ-NH2	-6.54	117.03	120.30
1	A	804	ASP	CB-CG-OD1	6.49	124.14	118.30
1	A	582	ASP	CB-CG-OD2	-6.24	112.68	118.30
1	A	280	ASP	CB-CG-OD1	6.20	123.88	118.30
1	A	537	ARG	NE-CZ-NH2	-6.18	117.21	120.30
1	A	243	VAL	CB-CA-C	6.07	122.92	111.40
1	A	168	ASP	CB-CG-OD2	-6.05	112.86	118.30
1	A	50	TYR	CB-CG-CD2	-5.99	117.41	121.00
1	A	113	ASP	CB-CG-OD2	-5.97	112.93	118.30
1	A	355	ASP	CB-CG-OD2	-5.95	112.94	118.30
1	A	769	ASP	CB-CG-OD1	5.95	123.66	118.30
1	A	541	ASP	CB-CG-OD1	5.90	123.61	118.30
1	A	104	ASP	CB-CG-OD2	-5.87	113.02	118.30
1	A	612	ARG	NE-CZ-NH2	-5.85	117.38	120.30
1	A	780	ASP	CB-CG-OD2	-5.81	113.07	118.30
1	A	780	ASP	CB-CG-OD1	5.74	123.47	118.30
1	A	157	ASP	CB-CG-OD1	5.72	123.45	118.30
1	A	232	ASP	CB-CG-OD1	5.71	123.44	118.30
1	A	570	ASP	CB-CG-OD1	5.69	123.42	118.30
1	A	307	ASP	CB-CG-OD2	-5.59	113.27	118.30
1	A	779	ARG	NE-CZ-NH1	5.55	123.08	120.30
1	A	672	THR	CA-CB-CG2	-5.55	104.63	112.40
1	A	529	ASP	CB-CG-OD2	-5.53	113.33	118.30
1	A	95	ALA	N-CA-CB	5.52	117.82	110.10
1	A	476	ILE	CB-CA-C	-5.50	100.60	111.60
1	A	537	ARG	NE-CZ-NH1	5.49	123.04	120.30
1	A	435	ASP	CB-CG-OD2	-5.45	113.40	118.30
1	A	698	ASP	CB-CG-OD2	-5.42	113.42	118.30
1	A	837	ASP	CB-CG-OD1	5.41	123.17	118.30
1	A	225	ARG	NE-CZ-NH1	-5.31	117.65	120.30
1	A	321	ASP	CB-CG-OD2	-5.30	113.53	118.30
1	A	582	ASP	CB-CG-OD1	5.26	123.04	118.30
1	A	300	ASP	CB-CG-OD2	-5.26	113.57	118.30

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	175	ASP	CB-CG-OD2	-5.22	113.60	118.30
1	A	157	ASP	CB-CG-OD2	-5.20	113.62	118.30
1	A	63	ASP	CB-CG-OD1	5.17	122.96	118.30
1	A	190	ALA	CB-CA-C	5.17	117.86	110.10
1	A	472	GLY	C-N-CA	5.17	134.63	121.70
1	A	224	ARG	NE-CZ-NH2	-5.17	117.72	120.30
1	A	494	ASP	CB-CG-OD1	5.16	122.95	118.30
1	A	781	ASP	CB-CG-OD2	-5.16	113.66	118.30
1	A	842	GLU	N-CA-CB	5.15	119.88	110.60
1	A	754	ASP	CB-CG-OD1	5.11	122.90	118.30
1	A	277	GLN	N-CA-CB	5.10	119.78	110.60
1	A	113	ASP	CB-CG-OD1	5.09	122.88	118.30
1	A	352	ASP	CB-CG-OD1	5.08	122.88	118.30
1	A	735	ASP	CB-CG-OD1	5.07	122.87	118.30
1	A	142	ASP	CB-CG-OD1	5.06	122.86	118.30
1	A	667	CYS	CA-CB-SG	-5.04	104.93	114.00
1	A	297	ASP	CB-CG-OD2	-5.02	113.79	118.30
1	A	312	LEU	N-CA-CB	5.01	120.43	110.40

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

## 5.2 Close contacts ⓘ

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in the chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogens added by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes within the asymmetric unit, and the number in parentheses is this value normalized per 1000 atoms of the molecule in the chain. The Symm-Clashes column gives symmetry related clashes, in the same way as for the Clashes column.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	6717	0	6632	1241	0
2	A	10	0	0	6	0
3	A	41	0	0	5	0
All	All	6768	0	6632	1241	0

Clashscore is defined as the number of clashes calculated for the entry per 1000 atoms (including hydrogens) of the entry. The overall clashscore for this entry is 93.

All (1241) close contacts within the same asymmetric unit are listed below.

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:219:ARG:NH2	1:A:437:GLU:H	1.41	1.18
1:A:276:ALA:HB1	1:A:281:VAL:HG21	1.27	1.14
1:A:219:ARG:HH21	1:A:437:GLU:N	1.46	1.13
1:A:574:LYS:HD3	1:A:593:GLU:HB2	1.20	1.13
1:A:5:VAL:HG22	1:A:42:VAL:HA	1.27	1.12
1:A:401:GLY:H	1:A:499:ASP:HB3	1.11	1.11
1:A:105:THR:HG21	1:A:279:GLU:HG2	1.25	1.10
1:A:429:LEU:HD23	1:A:430:GLU:HG2	1.35	1.07
1:A:285:VAL:HG23	1:A:449:ARG:HH12	1.16	1.07
1:A:244:PHE:H	1:A:327:GLU:HG3	1.12	1.07
1:A:419:GLU:HA	1:A:441:ALA:HB1	1.36	1.06
1:A:373:LEU:HD21	1:A:864:LEU:HD12	1.39	1.05
1:A:477:ASN:HD21	1:A:480:ALA:HB3	1.19	1.04
1:A:732:LYS:HG2	1:A:734:SER:H	1.22	1.04
1:A:137:ILE:HG21	1:A:183:PHE:HB3	1.40	1.03
1:A:580:LEU:HD13	1:A:648:VAL:HG22	1.36	1.02
1:A:754:ASP:HB3	1:A:818:LYS:HB3	1.40	1.00
1:A:682:ARG:HH12	1:A:730:LYS:HE3	1.23	0.99
1:A:147:VAL:HG12	1:A:151:HIS:HD2	1.27	0.99
1:A:406:LYS:HD2	1:A:493:GLY:HA2	1.43	0.97
1:A:342:THR:HG22	1:A:344:PRO:HD2	1.45	0.96
1:A:844:CYS:HB3	1:A:849:LEU:HD12	1.45	0.95
1:A:700:VAL:HG13	1:A:737:GLN:HB3	1.48	0.95
1:A:685:MET:HB3	1:A:728:VAL:HG11	1.45	0.94
1:A:308:LEU:HD13	1:A:333:PHE:HE1	1.27	0.93
1:A:477:ASN:ND2	1:A:480:ALA:HB3	1.83	0.93
1:A:88:LEU:HD11	1:A:111:LEU:HG	1.51	0.93
1:A:619:LEU:HB2	1:A:680:GLN:HE22	1.34	0.92
1:A:536:VAL:HG11	1:A:859:VAL:HG13	1.52	0.92
1:A:4:TRP:CE3	1:A:61:ILE:HD11	2.05	0.92
1:A:682:ARG:NH1	1:A:730:LYS:HE3	1.82	0.92
1:A:562:THR:HG1	1:A:566:PHE:HE1	1.06	0.92
1:A:48:THR:HG22	1:A:52:ASN:ND2	1.85	0.92
1:A:156:ILE:HG13	1:A:183:PHE:HZ	1.36	0.91
1:A:700:VAL:HG13	1:A:737:GLN:CB	2.01	0.91
1:A:6:TYR:HD1	1:A:43:THR:HG1	1.16	0.91
1:A:308:LEU:HD13	1:A:333:PHE:CE1	2.05	0.90
1:A:74:GLU:HG3	1:A:75:LEU:H	1.37	0.90
1:A:83:THR:HA	1:A:115:ALA:HB2	1.54	0.90
1:A:140:TYR:CE1	1:A:197:PRO:HG3	2.07	0.90
1:A:401:GLY:N	1:A:499:ASP:HB3	1.86	0.90
1:A:410:THR:HG22	1:A:412:ASP:H	1.37	0.89
1:A:572:ILE:HG23	1:A:573:MET:H	1.36	0.89

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:65:ILE:HG21	1:A:204:LEU:HD21	1.54	0.88
1:A:88:LEU:HD21	1:A:111:LEU:CD2	2.03	0.88
1:A:276:ALA:HB1	1:A:281:VAL:CG2	2.02	0.88
1:A:48:THR:HG22	1:A:52:ASN:HD21	1.38	0.88
1:A:105:THR:CG2	1:A:279:GLU:HG2	2.05	0.87
1:A:92:ARG:HB3	1:A:105:THR:HB	1.54	0.87
1:A:342:THR:HG21	1:A:400:PRO:HG2	1.56	0.87
1:A:224:ARG:HG2	1:A:229:ILE:HB	1.56	0.87
1:A:262:SER:HB3	1:A:400:PRO:HD3	1.57	0.86
1:A:134:ARG:HA	1:A:180:ALA:HB2	1.57	0.86
1:A:251:SER:HB3	1:A:328:GLU:H	1.39	0.86
1:A:381:PHE:CD2	1:A:402:ALA:HB1	2.10	0.86
1:A:137:ILE:HA	1:A:196:PHE:CZ	2.10	0.85
1:A:402:ALA:CB	1:A:498:LEU:HG	2.06	0.85
1:A:429:LEU:HD23	1:A:430:GLU:CG	2.06	0.85
1:A:580:LEU:HD13	1:A:648:VAL:CG2	2.06	0.85
1:A:243:VAL:HA	1:A:327:GLU:OE2	1.76	0.84
1:A:603:LYS:HG2	1:A:687:ALA:HB1	1.59	0.84
1:A:88:LEU:HD21	1:A:111:LEU:HD23	1.55	0.84
1:A:786:LEU:HG	1:A:790:TYR:CE2	2.13	0.84
1:A:268:ILE:HG13	1:A:306:MET:SD	2.19	0.83
1:A:837:ASP:H	1:A:841:VAL:HG23	1.44	0.82
1:A:191:MET:CE	1:A:191:MET:HA	2.10	0.82
1:A:574:LYS:CD	1:A:593:GLU:HB2	2.08	0.82
1:A:285:VAL:HB	1:A:449:ARG:HH22	1.43	0.82
1:A:272:TYR:CE2	1:A:289:GLN:HB2	2.15	0.82
1:A:402:ALA:HB2	1:A:498:LEU:HG	1.61	0.82
1:A:732:LYS:HG2	1:A:734:SER:N	1.93	0.82
1:A:575:ILE:O	1:A:579:ILE:HG13	1.79	0.82
1:A:352:ASP:O	1:A:356:GLU:HG3	1.80	0.81
1:A:426:LEU:O	1:A:445:ILE:HG22	1.79	0.81
1:A:270:GLY:O	1:A:291:ILE:HG22	1.80	0.81
1:A:258:THR:HG21	1:A:320:GLN:HB2	1.62	0.81
1:A:81:GLY:HA3	1:A:200:PRO:HG2	1.63	0.81
1:A:260:ASN:HB2	3:A:908:HOH:O	1.81	0.81
1:A:488:HIS:HB2	1:A:490:PHE:CZ	2.14	0.81
1:A:373:LEU:CD2	1:A:864:LEU:HD12	2.11	0.81
1:A:842:GLU:O	1:A:846:LYS:HG2	1.81	0.80
1:A:137:ILE:HD12	1:A:180:ALA:HB1	1.64	0.80
1:A:88:LEU:CD1	1:A:111:LEU:HG	2.11	0.80
1:A:845:HIS:CE1	1:A:870:ALA:HB2	2.16	0.80
1:A:392:ILE:HG22	1:A:488:HIS:CE1	2.16	0.80

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:460:ALA:HB1	1:A:465:THR:O	1.82	0.80
1:A:71:TRP:CZ2	1:A:75:LEU:HD22	2.17	0.80
1:A:136:PHE:HE2	1:A:196:PHE:HE1	1.30	0.80
1:A:28:GLU:O	1:A:32:LEU:HG	1.82	0.80
1:A:244:PHE:N	1:A:327:GLU:HG3	1.96	0.80
1:A:83:THR:HB	1:A:114:VAL:HG12	1.63	0.79
1:A:148:PRO:HB2	1:A:150:SER:OG	1.82	0.79
1:A:496:ILE:HB	1:A:504:LYS:HB2	1.64	0.79
1:A:107:LEU:HD13	1:A:277:GLN:CG	2.11	0.79
1:A:141:SER:OG	1:A:147:VAL:HG23	1.82	0.79
1:A:278:GLY:O	1:A:280:ASP:N	2.16	0.79
1:A:404:ALA:HB2	1:A:496:ILE:HG23	1.65	0.79
1:A:285:VAL:HG23	1:A:449:ARG:NH1	1.96	0.79
1:A:92:ARG:HB3	1:A:105:THR:CB	2.12	0.79
1:A:359:ILE:HG22	1:A:363:GLU:HB3	1.64	0.79
1:A:359:ILE:HG22	1:A:363:GLU:CB	2.12	0.78
1:A:765:PHE:CD1	1:A:812:VAL:HG22	2.19	0.78
1:A:301:CYS:SG	1:A:326:ILE:HD13	2.23	0.78
1:A:88:LEU:HD21	1:A:111:LEU:CG	2.14	0.78
1:A:754:ASP:CB	1:A:818:LYS:HB3	2.14	0.78
1:A:745:GLU:C	1:A:770:LEU:HD13	2.04	0.78
1:A:350:ALA:O	1:A:354:VAL:HG23	1.84	0.78
1:A:312:LEU:HB2	1:A:316:PHE:HE2	1.50	0.77
1:A:574:LYS:HB2	1:A:574:LYS:NZ	2.00	0.77
1:A:97:ALA:O	1:A:99:MET:HG3	1.85	0.77
1:A:480:ALA:O	1:A:482:THR:HG23	1.84	0.77
1:A:366:VAL:HG11	1:A:872:ASN:HB3	1.67	0.77
1:A:854:CYS:SG	1:A:859:VAL:HA	2.25	0.77
1:A:439:MET:HB3	1:A:463:MET:CE	2.15	0.77
1:A:107:LEU:HD11	1:A:279:GLU:HB2	1.66	0.76
1:A:73:GLU:HA	1:A:76:ASN:ND2	2.00	0.76
1:A:386:LEU:HD21	1:A:498:LEU:CD1	2.15	0.76
1:A:76:ASN:O	1:A:78:LYS:HG2	1.85	0.76
1:A:225:ARG:HD2	1:A:226:MET:N	2.01	0.76
1:A:131:ASP:O	1:A:134:ARG:HG3	1.85	0.76
1:A:255:VAL:HG21	1:A:453:THR:OG1	1.86	0.76
1:A:73:GLU:CD	1:A:79:LYS:HE2	2.06	0.76
1:A:269:TYR:HA	3:A:904:HOH:O	1.85	0.76
1:A:767:THR:OG1	1:A:832:GLY:HA3	1.85	0.76
1:A:584:VAL:O	1:A:588:GLU:HG3	1.84	0.76
1:A:214:SER:O	1:A:217:ASN:HB3	1.85	0.75
1:A:261:PRO:HD2	1:A:269:TYR:CD1	2.20	0.75

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:107:LEU:HD12	1:A:139:MET:CE	2.16	0.75
1:A:100:PRO:HA	2:A:902:SO4:O1	1.86	0.75
1:A:254:GLY:HA3	1:A:324:PHE:CZ	2.22	0.75
1:A:779:ARG:HG3	1:A:779:ARG:HH11	1.51	0.75
1:A:419:GLU:HA	1:A:441:ALA:CB	2.13	0.75
1:A:191:MET:HA	1:A:191:MET:HE3	1.69	0.75
1:A:88:LEU:HD21	1:A:111:LEU:HG	1.69	0.75
1:A:405:GLY:C	1:A:494:ASP:HA	2.06	0.75
1:A:767:THR:O	1:A:771:THR:HB	1.87	0.75
1:A:427:VAL:CG2	1:A:446:LEU:HD13	2.16	0.75
1:A:223:TYR:HD2	1:A:436:ILE:HG12	1.49	0.75
1:A:571:ARG:HB3	1:A:594:LEU:HD21	1.68	0.74
1:A:483:PHE:CE1	1:A:490:PHE:HB2	2.23	0.74
1:A:476:ILE:HG23	1:A:483:PHE:HB3	1.67	0.74
1:A:155:ILE:O	1:A:159:MET:HB2	1.88	0.74
1:A:312:LEU:HB2	1:A:316:PHE:CE2	2.22	0.74
1:A:386:LEU:CD1	1:A:510:ILE:HD12	2.18	0.74
1:A:83:THR:HB	1:A:114:VAL:CG1	2.18	0.74
1:A:255:VAL:HG11	1:A:453:THR:HB	1.70	0.74
1:A:406:LYS:HA	1:A:494:ASP:H	1.52	0.74
1:A:36:ILE:HG22	1:A:333:PHE:O	1.86	0.74
1:A:378:HIS:HB3	1:A:379:PRO:HD2	1.68	0.74
1:A:127:ARG:HD2	1:A:171:LEU:O	1.87	0.74
1:A:134:ARG:CA	1:A:180:ALA:HB2	2.17	0.74
1:A:439:MET:HB3	1:A:463:MET:HE2	1.69	0.74
1:A:692:LYS:HG2	1:A:697:ILE:O	1.88	0.74
1:A:147:VAL:HG12	1:A:151:HIS:CD2	2.19	0.74
1:A:134:ARG:HB3	1:A:180:ALA:HB2	1.69	0.73
1:A:183:PHE:O	1:A:186:VAL:HG12	1.88	0.73
1:A:670:ALA:HA	1:A:673:TYR:O	1.88	0.73
1:A:244:PHE:H	1:A:327:GLU:CG	1.99	0.73
1:A:658:PHE:C	1:A:659:ASN:HD22	1.90	0.73
1:A:698:ASP:O	1:A:699:ILE:HD13	1.87	0.73
1:A:181:GLU:HG2	1:A:184:LYS:NZ	2.02	0.73
1:A:571:ARG:HB3	1:A:594:LEU:CD2	2.17	0.73
1:A:230:PRO:HG2	1:A:233:TRP:NE1	2.04	0.73
1:A:200:PRO:HA	1:A:203:GLN:HG3	1.70	0.73
1:A:622:PRO:HB3	1:A:664:HIS:O	1.87	0.73
1:A:400:PRO:HA	1:A:499:ASP:CB	2.18	0.73
1:A:197:PRO:O	1:A:203:GLN:HG2	1.87	0.73
1:A:692:LYS:O	1:A:692:LYS:HD3	1.88	0.73
1:A:186:VAL:HA	1:A:189:GLU:CD	2.09	0.73

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:134:ARG:CB	1:A:180:ALA:HB2	2.19	0.72
1:A:207:ALA:O	1:A:211:VAL:HG23	1.89	0.72
1:A:213:ARG:HD3	1:A:213:ARG:O	1.88	0.72
1:A:779:ARG:HG2	1:A:800:PHE:CG	2.24	0.72
1:A:547:LEU:O	1:A:550:VAL:HG22	1.89	0.72
1:A:326:ILE:HG12	1:A:331:LEU:HD12	1.70	0.72
1:A:667:CYS:O	1:A:671:VAL:HG23	1.89	0.72
1:A:566:PHE:HZ	1:A:680:GLN:HE21	1.34	0.72
1:A:657:GLU:OE1	1:A:663:GLY:HA3	1.90	0.72
1:A:319:MET:HB3	1:A:341:ARG:NH1	2.04	0.72
1:A:92:ARG:CB	1:A:105:THR:HB	2.18	0.72
1:A:156:ILE:HG13	1:A:183:PHE:CZ	2.24	0.72
1:A:199:GLU:HB3	1:A:202:ASP:HB2	1.71	0.71
1:A:148:PRO:HD2	1:A:151:HIS:CD2	2.25	0.71
1:A:13:ALA:HA	1:A:24:CYS:SG	2.30	0.71
1:A:298:MET:HG2	1:A:301:CYS:SG	2.30	0.71
1:A:768:ASN:O	1:A:772:GLN:HG3	1.89	0.71
1:A:775:PHE:HD2	1:A:777:PHE:CZ	2.07	0.71
1:A:109:LEU:HB2	1:A:136:PHE:HE1	1.54	0.71
1:A:406:LYS:HA	1:A:494:ASP:N	2.06	0.71
1:A:157:ASP:O	1:A:161:GLU:HB2	1.89	0.71
1:A:259:ARG:NH2	1:A:353:LEU:HD21	2.05	0.71
1:A:652:VAL:HA	1:A:655:LEU:HD12	1.72	0.71
1:A:317:ARG:HH11	1:A:317:ARG:HB3	1.56	0.71
1:A:668:ARG:HD2	1:A:668:ARG:H	1.56	0.71
1:A:136:PHE:CE2	1:A:196:PHE:HE1	2.08	0.70
1:A:691:VAL:HA	1:A:694:GLU:OE1	1.91	0.70
1:A:519:GLY:O	1:A:523:ARG:HG3	1.91	0.70
1:A:100:PRO:HA	2:A:902:SO4:S	2.32	0.70
1:A:599:LYS:O	1:A:603:LYS:HG3	1.91	0.70
1:A:678:LYS:HG2	1:A:724:VAL:HG21	1.73	0.70
1:A:766:GLY:O	1:A:770:LEU:HB2	1.91	0.70
1:A:55:LYS:HD2	1:A:213:ARG:HH12	1.56	0.70
1:A:55:LYS:HD2	1:A:213:ARG:NH1	2.06	0.70
1:A:4:TRP:CZ3	1:A:49:GLU:HG2	2.26	0.70
1:A:291:ILE:O	1:A:291:ILE:HD12	1.90	0.70
1:A:546:THR:O	1:A:550:VAL:HG13	1.92	0.70
1:A:93:SER:OG	1:A:103:MET:HB3	1.92	0.70
1:A:107:LEU:HD12	1:A:139:MET:SD	2.30	0.70
1:A:772:GLN:NE2	1:A:779:ARG:HB2	2.06	0.70
1:A:823:ARG:O	1:A:826:LEU:HB2	1.91	0.69
1:A:334:LEU:HD23	1:A:334:LEU:N	2.07	0.69

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:7:LYS:HE3	1:A:10:GLU:OE1	1.92	0.69
1:A:258:THR:CG2	1:A:320:GLN:HB2	2.22	0.69
1:A:665:ARG:O	1:A:707:LEU:HD23	1.91	0.69
1:A:18:LEU:HA	1:A:44:THR:OG1	1.92	0.69
1:A:370:ALA:HB2	1:A:868:GLN:OE1	1.92	0.69
1:A:693:GLU:O	1:A:695:THR:N	2.26	0.69
1:A:621:PRO:HB3	1:A:625:GLU:CD	2.13	0.69
1:A:517:VAL:HG23	1:A:522:GLU:OE2	1.93	0.69
1:A:644:THR:HG22	1:A:646:ALA:H	1.57	0.69
1:A:25:ASN:O	1:A:29:MET:HG3	1.93	0.69
1:A:146:GLU:CB	1:A:187:TYR:HE2	2.06	0.69
1:A:81:GLY:HA2	1:A:110:GLY:O	1.93	0.69
1:A:728:VAL:O	1:A:730:LYS:HG2	1.93	0.68
1:A:176:LEU:O	1:A:179:LEU:N	2.26	0.68
1:A:472:GLY:O	1:A:474:ILE:HG13	1.93	0.68
1:A:728:VAL:O	1:A:730:LYS:N	2.27	0.68
1:A:595:ILE:N	1:A:596:PRO:HD2	2.09	0.68
1:A:572:ILE:HG23	1:A:573:MET:N	2.08	0.68
1:A:71:TRP:CE2	1:A:75:LEU:HD22	2.29	0.68
1:A:63:ASP:O	1:A:67:GLU:N	2.27	0.68
1:A:127:ARG:HG3	1:A:176:LEU:CD1	2.24	0.68
1:A:401:GLY:H	1:A:499:ASP:CB	1.98	0.68
1:A:753:ALA:CB	1:A:815:ALA:HA	2.24	0.68
1:A:37:PRO:O	1:A:240:GLN:NE2	2.26	0.68
1:A:382:ASN:ND2	1:A:511:GLU:OE2	2.27	0.68
1:A:580:LEU:HD11	1:A:637:LEU:HD21	1.74	0.68
1:A:386:LEU:HD12	1:A:510:ILE:HD12	1.76	0.67
1:A:16:ARG:HG3	1:A:20:GLY:O	1.93	0.67
1:A:803:LEU:O	1:A:803:LEU:HG	1.94	0.67
1:A:107:LEU:HB2	1:A:139:MET:HE1	1.76	0.67
1:A:487:GLY:H	1:A:488:HIS:HD2	1.41	0.67
1:A:35:PRO:O	1:A:332:TYR:HA	1.93	0.67
1:A:224:ARG:CG	1:A:229:ILE:HB	2.25	0.67
1:A:758:GLU:O	1:A:823:ARG:NH2	2.27	0.67
1:A:535:LYS:O	1:A:852:VAL:HG23	1.93	0.67
1:A:76:ASN:OD1	1:A:87:LEU:HD13	1.94	0.67
1:A:574:LYS:HD3	1:A:593:GLU:CB	2.11	0.67
1:A:644:THR:O	1:A:647:GLU:N	2.27	0.67
1:A:104:ASP:HB3	1:A:143:VAL:CG1	2.25	0.67
1:A:100:PRO:HB2	1:A:458:VAL:CG1	2.25	0.67
1:A:73:GLU:O	1:A:77:GLY:N	2.28	0.67
1:A:211:VAL:HG11	1:A:237:VAL:HB	1.76	0.67

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:18:LEU:HB3	1:A:43:THR:HG23	1.76	0.67
1:A:282:VAL:HG12	1:A:453:THR:HG21	1.75	0.67
1:A:317:ARG:O	1:A:367:ARG:NH1	2.27	0.67
1:A:419:GLU:CA	1:A:441:ALA:HB1	2.20	0.67
1:A:251:SER:HB3	1:A:328:GLU:N	2.09	0.67
1:A:532:ARG:NH1	1:A:534:LEU:O	2.28	0.67
1:A:37:PRO:HD2	1:A:240:GLN:HE22	1.60	0.67
1:A:429:LEU:HA	1:A:448:VAL:HG23	1.75	0.66
1:A:80:PHE:HA	1:A:87:LEU:HB3	1.78	0.66
1:A:400:PRO:HA	1:A:499:ASP:HB2	1.77	0.66
1:A:253:THR:HG21	1:A:278:GLY:N	2.10	0.66
1:A:272:TYR:HD1	1:A:291:ILE:HA	1.60	0.66
1:A:743:MET:HA	1:A:764:SER:O	1.96	0.66
1:A:396:LEU:H	1:A:468:VAL:HG12	1.61	0.66
1:A:408:TYR:O	1:A:426:LEU:HD12	1.96	0.66
1:A:260:ASN:HB3	1:A:265:GLU:HB2	1.77	0.66
1:A:537:ARG:NH2	1:A:557:ILE:O	2.27	0.66
1:A:109:LEU:HB2	1:A:136:PHE:CE1	2.29	0.66
1:A:66:PHE:HD2	1:A:201:LYS:HZ3	1.44	0.66
1:A:57:ILE:H	1:A:57:ILE:HD12	1.59	0.66
1:A:398:ALA:HB3	1:A:467:CYS:O	1.95	0.66
1:A:213:ARG:HH11	1:A:213:ARG:HG2	1.61	0.66
1:A:732:LYS:CG	1:A:734:SER:H	2.06	0.66
1:A:803:LEU:CD2	1:A:843:PHE:HD2	2.08	0.66
1:A:259:ARG:HG2	1:A:266:LYS:HA	1.77	0.66
1:A:137:ILE:HG22	1:A:152:PHE:HE1	1.61	0.65
1:A:674:PRO:O	1:A:677:ALA:HB3	1.97	0.65
1:A:219:ARG:HH21	1:A:437:GLU:H	0.70	0.65
1:A:386:LEU:HD13	1:A:510:ILE:HG21	1.78	0.65
1:A:596:PRO:O	1:A:599:LYS:HB3	1.96	0.65
1:A:543:PRO:HD3	1:A:605:MET:SD	2.36	0.65
1:A:718:LYS:HG3	1:A:740:ILE:HD13	1.78	0.65
1:A:366:VAL:CG1	1:A:872:ASN:HB3	2.26	0.65
1:A:126:PRO:O	1:A:130:TYR:HB2	1.97	0.65
1:A:211:VAL:O	1:A:213:ARG:N	2.29	0.65
1:A:213:ARG:CG	1:A:213:ARG:HH11	2.10	0.65
1:A:524:ILE:HD12	1:A:527:TRP:CE3	2.32	0.65
1:A:169:THR:OG1	1:A:275:ASN:ND2	2.29	0.65
1:A:301:CYS:O	1:A:304:GLN:HB2	1.96	0.65
1:A:837:ASP:H	1:A:841:VAL:CG2	2.09	0.65
1:A:603:LYS:HD3	1:A:691:VAL:HG23	1.78	0.65
1:A:131:ASP:O	1:A:135:ARG:HD3	1.97	0.65

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:40:PHE:CE1	1:A:69:ILE:HD13	2.32	0.65
1:A:735:ASP:OD1	1:A:735:ASP:N	2.26	0.65
1:A:253:THR:CG2	1:A:278:GLY:HA2	2.27	0.65
1:A:155:ILE:HB	1:A:183:PHE:HE1	1.62	0.65
1:A:516:SER:OG	1:A:517:VAL:N	2.28	0.65
1:A:270:GLY:C	1:A:291:ILE:HG22	2.16	0.64
1:A:117:GLU:O	1:A:120:ALA:HB3	1.97	0.64
1:A:223:TYR:HD2	1:A:436:ILE:CG1	2.09	0.64
1:A:341:ARG:NH1	3:A:922:HOH:O	2.29	0.64
1:A:27:ALA:O	1:A:30:THR:HB	1.96	0.64
1:A:80:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HD23	1.80	0.64
1:A:392:ILE:HD12	1:A:485:LEU:HB3	1.78	0.64
1:A:576:ARG:NH2	1:A:633:GLU:OE1	2.30	0.64
1:A:750:ALA:HB1	1:A:811:LEU:O	1.97	0.64
1:A:146:GLU:HB3	1:A:187:TYR:HE2	1.62	0.64
1:A:88:LEU:CD2	1:A:111:LEU:HG	2.27	0.64
1:A:689:ILE:O	1:A:693:GLU:HG3	1.97	0.64
1:A:251:SER:CB	1:A:328:GLU:H	2.07	0.64
1:A:537:ARG:HD3	1:A:851:TYR:CD1	2.32	0.64
1:A:771:THR:HA	1:A:808:VAL:HG21	1.80	0.64
1:A:337:ARG:NH1	2:A:902:SO4:O3	2.30	0.64
1:A:368:ILE:HB	1:A:864:LEU:HD11	1.78	0.64
1:A:386:LEU:HD21	1:A:498:LEU:HD11	1.80	0.64
1:A:70:THR:O	1:A:74:GLU:HG2	1.97	0.64
1:A:318:ASP:OD2	1:A:341:ARG:NH2	2.31	0.64
1:A:592:ASN:HA	1:A:595:ILE:HD12	1.79	0.63
1:A:485:LEU:HD23	1:A:486:GLY:H	1.64	0.63
1:A:316:PHE:HB2	1:A:320:GLN:NE2	2.14	0.63
1:A:433:PRO:HD3	1:A:455:HIS:NE2	2.13	0.63
1:A:7:LYS:HB2	1:A:10:GLU:HB2	1.80	0.63
1:A:474:ILE:HG22	1:A:476:ILE:HG13	1.81	0.63
1:A:12:ASN:O	1:A:24:CYS:HB2	1.99	0.63
1:A:708:VAL:HG21	1:A:714:LEU:HB2	1.81	0.63
1:A:39:GLY:HA2	1:A:72:LEU:HD21	1.78	0.63
1:A:386:LEU:HA	1:A:510:ILE:HD12	1.80	0.63
1:A:578:MET:CG	1:A:587:ARG:HB3	2.29	0.63
1:A:89:VAL:O	1:A:109:LEU:N	2.26	0.63
1:A:645:LEU:O	1:A:649:LYS:HG3	1.98	0.63
1:A:728:VAL:HA	1:A:730:LYS:HE2	1.81	0.63
1:A:609:LEU:O	1:A:612:ARG:HB2	1.98	0.63
1:A:411:ALA:O	1:A:414:ALA:HB3	1.99	0.62
1:A:272:TYR:HE2	1:A:289:GLN:NE2	1.97	0.62

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:107:LEU:HD13	1:A:277:GLN:OE1	1.99	0.62
1:A:392:ILE:CD1	1:A:485:LEU:HD13	2.29	0.62
1:A:395:ALA:O	1:A:396:LEU:HD12	1.99	0.62
1:A:828:CYS:N	1:A:850:ASN:OD1	2.28	0.62
1:A:74:GLU:HG3	1:A:75:LEU:N	2.10	0.62
1:A:404:ALA:O	1:A:423:ARG:HB3	2.00	0.62
1:A:104:ASP:HB3	1:A:143:VAL:HG11	1.81	0.62
1:A:324:PHE:HA	1:A:332:TYR:O	1.99	0.62
1:A:621:PRO:HB3	1:A:625:GLU:OE1	2.00	0.62
1:A:558:GLY:HA3	1:A:853:SER:OG	1.99	0.62
1:A:779:ARG:HG3	1:A:779:ARG:NH1	2.12	0.62
1:A:732:LYS:HG2	1:A:734:SER:CA	2.28	0.62
1:A:578:MET:HA	1:A:581:SER:OG	2.00	0.62
1:A:578:MET:HB2	1:A:590:ALA:CB	2.30	0.62
1:A:592:ASN:HA	1:A:595:ILE:CD1	2.29	0.62
1:A:431:THR:OG1	1:A:456:ALA:HB2	2.00	0.62
1:A:81:GLY:HA3	1:A:200:PRO:CG	2.29	0.62
1:A:88:LEU:HD11	1:A:111:LEU:CG	2.27	0.62
1:A:20:GLY:HA2	1:A:96:ARG:HA	1.81	0.62
1:A:685:MET:CE	1:A:736:MET:HG2	2.30	0.62
1:A:427:VAL:O	1:A:428:ARG:HG2	2.00	0.61
1:A:713:GLU:O	1:A:716:PHE:N	2.31	0.61
1:A:76:ASN:O	1:A:78:LYS:N	2.33	0.61
1:A:400:PRO:HA	1:A:499:ASP:HB3	1.81	0.61
1:A:427:VAL:HG22	1:A:446:LEU:HD13	1.80	0.61
1:A:550:VAL:HA	1:A:554:ALA:HB3	1.81	0.61
1:A:704:MET:SD	1:A:764:SER:HB3	2.40	0.61
1:A:548:ASN:O	1:A:551:LYS:HB3	2.00	0.61
1:A:344:PRO:O	1:A:347:LEU:HB2	2.01	0.61
1:A:476:ILE:HA	1:A:483:PHE:HA	1.82	0.61
1:A:185:ALA:HA	1:A:188:LYS:HB3	1.81	0.61
1:A:5:VAL:CG2	1:A:42:VAL:HA	2.18	0.61
1:A:331:LEU:HG	1:A:332:TYR:N	2.15	0.61
1:A:616:VAL:HG23	1:A:702:GLU:O	2.00	0.61
1:A:618:TYR:N	1:A:704:MET:O	2.29	0.61
1:A:180:ALA:HA	1:A:183:PHE:HB2	1.82	0.61
1:A:269:TYR:OH	1:A:452:MET:HB3	2.01	0.61
1:A:620:ASP:O	1:A:665:ARG:HB2	2.01	0.61
1:A:842:GLU:HG3	1:A:869:ALA:HA	1.82	0.61
1:A:155:ILE:HD11	1:A:186:VAL:HG21	1.82	0.61
1:A:65:ILE:HG21	1:A:204:LEU:CD2	2.30	0.61
1:A:472:GLY:O	1:A:474:ILE:N	2.27	0.61

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:34:MET:O	1:A:36:ILE:N	2.30	0.61
1:A:779:ARG:HG2	1:A:800:PHE:CD2	2.35	0.61
1:A:748:ARG:O	1:A:751:LEU:HB2	2.00	0.61
1:A:143:VAL:C	1:A:145:MET:H	2.04	0.61
1:A:803:LEU:HD23	1:A:843:PHE:HD2	1.64	0.61
1:A:123:THR:O	1:A:123:THR:HG23	2.01	0.61
1:A:271:GLU:HB3	1:A:288:PRO:HB2	1.83	0.60
1:A:603:LYS:O	1:A:607:LYS:HG3	2.01	0.60
1:A:786:LEU:HG	1:A:790:TYR:HE2	1.64	0.60
1:A:765:PHE:CE1	1:A:812:VAL:HG22	2.36	0.60
1:A:4:TRP:O	1:A:43:THR:HB	2.01	0.60
1:A:364:ALA:O	1:A:368:ILE:HD12	2.00	0.60
1:A:648:VAL:O	1:A:652:VAL:N	2.33	0.60
1:A:685:MET:HE3	1:A:736:MET:HG2	1.83	0.60
1:A:661:MET:CE	1:A:772:GLN:HB2	2.32	0.60
1:A:6:TYR:HD1	1:A:43:THR:OG1	1.83	0.60
1:A:401:GLY:O	1:A:499:ASP:N	2.27	0.60
1:A:775:PHE:CD2	1:A:777:PHE:CZ	2.88	0.60
1:A:305:PHE:O	1:A:309:ALA:N	2.31	0.60
1:A:181:GLU:HG2	1:A:184:LYS:HZ1	1.66	0.60
1:A:386:LEU:HD13	1:A:510:ILE:HD12	1.84	0.60
1:A:820:ARG:HG2	1:A:826:LEU:HB3	1.82	0.60
1:A:420:LYS:HG3	1:A:442:ALA:C	2.22	0.60
1:A:518:SER:O	1:A:522:GLU:HG2	2.02	0.60
1:A:732:LYS:O	1:A:734:SER:N	2.34	0.60
1:A:603:LYS:CG	1:A:687:ALA:HB1	2.31	0.60
1:A:392:ILE:HD11	1:A:485:LEU:HD13	1.83	0.60
1:A:294:LEU:HB3	1:A:302:TYR:HD1	1.67	0.60
1:A:434:GLU:O	1:A:434:GLU:HG3	2.01	0.60
1:A:138:GLN:HA	1:A:152:PHE:CE1	2.37	0.60
1:A:405:GLY:O	1:A:494:ASP:HA	2.02	0.59
1:A:563:GLU:OE1	1:A:617:ARG:NH1	2.35	0.59
1:A:83:THR:HA	1:A:115:ALA:CB	2.30	0.59
1:A:140:TYR:HE2	1:A:203:GLN:O	1.84	0.59
1:A:381:PHE:HB3	1:A:386:LEU:HD22	1.85	0.59
1:A:397:PRO:O	1:A:452:MET:HE1	2.02	0.59
1:A:700:VAL:HG13	1:A:737:GLN:HB2	1.83	0.59
1:A:537:ARG:HD3	1:A:851:TYR:CG	2.37	0.59
1:A:857:PHE:O	1:A:860:PRO:HD2	2.02	0.59
1:A:559:LEU:CD1	1:A:617:ARG:HB3	2.32	0.59
1:A:790:TYR:OH	1:A:798:ASP:HA	2.02	0.59
1:A:827:LYS:HA	1:A:850:ASN:OD1	2.03	0.59

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:689:ILE:HG21	1:A:731:GLU:HB2	1.83	0.59
1:A:187:TYR:CE1	1:A:196:PHE:HA	2.37	0.59
1:A:12:ASN:OD1	1:A:13:ALA:N	2.35	0.59
1:A:872:ASN:C	1:A:872:ASN:HD22	2.06	0.59
1:A:33:GLY:O	1:A:34:MET:HG2	2.03	0.59
1:A:603:LYS:CD	1:A:691:VAL:HG23	2.32	0.59
1:A:668:ARG:HD2	1:A:668:ARG:N	2.18	0.59
1:A:91:VAL:HG22	1:A:239:VAL:HG13	1.84	0.59
1:A:732:LYS:HG2	1:A:734:SER:HA	1.85	0.59
1:A:701:PRO:HD2	1:A:737:GLN:O	2.02	0.59
1:A:151:HIS:O	1:A:154:LYS:N	2.35	0.59
1:A:718:LYS:HG3	1:A:740:ILE:CD1	2.33	0.59
1:A:379:PRO:HB2	1:A:512:THR:HB	1.85	0.59
1:A:109:LEU:HD11	1:A:203:GLN:HB2	1.84	0.58
1:A:477:ASN:OD1	1:A:480:ALA:N	2.28	0.58
1:A:841:VAL:HB	1:A:865:ALA:HB1	1.85	0.58
1:A:225:ARG:HG3	1:A:225:ARG:NH1	2.18	0.58
1:A:563:GLU:HG3	1:A:621:PRO:CD	2.34	0.58
1:A:359:ILE:HG22	1:A:363:GLU:HB2	1.85	0.58
1:A:258:THR:HG23	1:A:320:GLN:O	2.01	0.58
1:A:291:ILE:O	1:A:302:TYR:HE1	1.86	0.58
1:A:445:ILE:O	1:A:467:CYS:HA	2.03	0.58
1:A:290:PRO:HD2	1:A:293:GLN:OE1	2.03	0.58
1:A:222:VAL:HG11	1:A:437:GLU:HG3	1.86	0.58
1:A:402:ALA:HA	1:A:498:LEU:HA	1.86	0.58
1:A:845:HIS:NE2	1:A:870:ALA:HB2	2.19	0.58
1:A:152:PHE:HD2	1:A:152:PHE:H	1.49	0.58
1:A:71:TRP:CZ3	1:A:72:LEU:HD23	2.39	0.58
1:A:294:LEU:CD2	1:A:298:MET:HB3	2.33	0.58
1:A:27:ALA:O	1:A:31:ILE:HG12	2.04	0.58
1:A:5:VAL:HG22	1:A:42:VAL:CA	2.18	0.58
1:A:867:ALA:O	1:A:871:LEU:HB2	2.04	0.58
1:A:127:ARG:HG3	1:A:176:LEU:HD11	1.84	0.58
1:A:614:MET:O	1:A:702:GLU:HB2	2.04	0.58
1:A:661:MET:HE1	1:A:772:GLN:HB2	1.86	0.58
1:A:130:TYR:O	1:A:133:TYR:N	2.36	0.57
1:A:261:PRO:HD2	1:A:269:TYR:CE1	2.38	0.57
1:A:627:VAL:HB	1:A:628:PRO:HD2	1.85	0.57
1:A:591:LEU:HD22	1:A:679:MET:HE3	1.86	0.57
1:A:326:ILE:HA	1:A:330:LYS:O	2.05	0.57
1:A:669:LEU:O	1:A:673:TYR:HD2	1.87	0.57
1:A:41:THR:OG1	1:A:238:ASN:HB3	2.04	0.57

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:617:ARG:HB2	1:A:704:MET:HE2	1.86	0.57
1:A:253:THR:HG21	1:A:278:GLY:CA	2.35	0.57
1:A:59:GLN:O	1:A:61:ILE:N	2.37	0.57
1:A:138:GLN:HA	1:A:152:PHE:CD1	2.40	0.57
1:A:665:ARG:HG3	1:A:707:LEU:CD2	2.34	0.57
1:A:409:PHE:O	1:A:428:ARG:HD3	2.05	0.57
1:A:718:LYS:O	1:A:722:VAL:HB	2.05	0.57
1:A:538:THR:CG2	1:A:540:ALA:HB2	2.34	0.57
1:A:128:PHE:CE2	1:A:247:LYS:HD3	2.39	0.57
1:A:187:TYR:HE1	1:A:196:PHE:HA	1.70	0.57
1:A:407:VAL:O	1:A:492:GLU:HB3	2.04	0.57
1:A:563:GLU:OE2	1:A:620:ASP:N	2.37	0.57
1:A:368:ILE:HG22	1:A:369:GLU:N	2.19	0.57
1:A:316:PHE:HD2	1:A:320:GLN:NE2	2.03	0.57
1:A:701:PRO:O	1:A:738:TYR:HA	2.05	0.57
1:A:359:ILE:CG2	1:A:363:GLU:HB3	2.32	0.57
1:A:564:HIS:C	1:A:566:PHE:H	2.08	0.57
1:A:534:LEU:HD11	1:A:845:HIS:HA	1.86	0.57
1:A:343:ALA:HB3	1:A:344:PRO:HD3	1.87	0.57
1:A:425:ILE:HG22	1:A:426:LEU:N	2.19	0.57
1:A:474:ILE:HG23	1:A:484:GLU:O	2.04	0.57
1:A:816:VAL:O	1:A:820:ARG:HG3	2.05	0.57
1:A:826:LEU:HD23	1:A:827:LYS:O	2.05	0.57
1:A:444:GLY:HA3	1:A:466:CYS:SG	2.45	0.56
1:A:488:HIS:HB2	1:A:490:PHE:CE1	2.40	0.56
1:A:224:ARG:HG3	1:A:229:ILE:CG2	2.35	0.56
1:A:518:SER:HG	1:A:520:SER:HG	1.51	0.56
1:A:869:ALA:O	1:A:873:ASN:HB2	2.04	0.56
1:A:155:ILE:HD11	1:A:186:VAL:CG2	2.35	0.56
1:A:66:PHE:HE2	1:A:201:LYS:HD3	1.70	0.56
1:A:578:MET:HG2	1:A:587:ARG:HB3	1.87	0.56
1:A:224:ARG:HG3	1:A:229:ILE:HG21	1.87	0.56
1:A:840:SER:O	1:A:842:GLU:N	2.38	0.56
1:A:379:PRO:HB2	1:A:512:THR:CG2	2.34	0.56
1:A:106:ILE:HG12	1:A:140:TYR:HA	1.87	0.56
1:A:458:VAL:HG22	1:A:461:ARG:NH2	2.20	0.56
1:A:386:LEU:O	1:A:389:GLY:N	2.37	0.56
1:A:602:PHE:CZ	1:A:684:VAL:HG22	2.40	0.56
1:A:680:GLN:O	1:A:684:VAL:HG23	2.05	0.56
1:A:122:LYS:O	1:A:122:LYS:HD3	2.04	0.56
1:A:178:GLU:O	1:A:181:GLU:HB3	2.05	0.56
1:A:864:LEU:HD22	1:A:868:GLN:NE2	2.20	0.56

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:272:TYR:CD2	1:A:289:GLN:HB2	2.40	0.56
1:A:439:MET:O	1:A:463:MET:HE1	2.06	0.56
1:A:109:LEU:CB	1:A:136:PHE:HE1	2.18	0.56
1:A:8:PHE:O	1:A:27:ALA:HB1	2.05	0.56
1:A:411:ALA:HB1	1:A:438:GLY:HA3	1.87	0.56
1:A:386:LEU:HA	1:A:510:ILE:CD1	2.35	0.56
1:A:754:ASP:O	1:A:822:THR:HG21	2.05	0.56
1:A:11:GLY:HA2	1:A:15:MET:CE	2.36	0.56
1:A:771:THR:HG22	1:A:772:GLN:N	2.21	0.56
1:A:107:LEU:HD12	1:A:139:MET:HE1	1.88	0.56
1:A:57:ILE:CG2	1:A:61:ILE:HG21	2.35	0.56
1:A:365:VAL:HG13	1:A:864:LEU:CD2	2.36	0.56
1:A:660:PRO:O	1:A:665:ARG:NH2	2.34	0.56
1:A:781:ASP:O	1:A:783:GLY:N	2.39	0.56
1:A:109:LEU:HG	1:A:110:GLY:H	1.70	0.55
1:A:71:TRP:O	1:A:74:GLU:HG3	2.07	0.55
1:A:498:LEU:C	1:A:500:GLY:H	2.07	0.55
1:A:134:ARG:HA	1:A:180:ALA:CB	2.33	0.55
1:A:584:VAL:HG13	1:A:675:GLU:CD	2.27	0.55
1:A:91:VAL:O	1:A:105:THR:HA	2.06	0.55
1:A:11:GLY:HA2	1:A:15:MET:SD	2.46	0.55
1:A:66:PHE:HD2	1:A:201:LYS:NZ	2.03	0.55
1:A:331:LEU:HD23	1:A:333:PHE:CE1	2.42	0.55
1:A:9:GLU:CD	1:A:38:GLN:HE22	2.09	0.55
1:A:574:LYS:HZ2	1:A:574:LYS:HB2	1.69	0.55
1:A:405:GLY:O	1:A:495:TYR:N	2.38	0.55
1:A:21:GLY:O	1:A:25:ASN:HB2	2.06	0.55
1:A:523:ARG:NH1	3:A:907:HOH:O	2.39	0.55
1:A:18:LEU:HB3	1:A:43:THR:CG2	2.36	0.55
1:A:84:GLU:O	1:A:118:GLY:O	2.24	0.55
1:A:272:TYR:CD1	1:A:291:ILE:HA	2.42	0.55
1:A:566:PHE:HE2	1:A:679:MET:CE	2.20	0.55
1:A:840:SER:O	1:A:843:PHE:N	2.39	0.55
1:A:379:PRO:HB2	1:A:512:THR:CB	2.36	0.55
1:A:51:TYR:O	1:A:53:SER:N	2.34	0.55
1:A:54:GLY:O	1:A:55:LYS:HB2	2.07	0.55
1:A:500:GLY:O	1:A:502:THR:OG1	2.24	0.55
1:A:311:LYS:HG2	1:A:312:LEU:N	2.21	0.55
1:A:649:LYS:O	1:A:653:ASP:N	2.40	0.55
1:A:106:ILE:HD13	1:A:207:ALA:HB1	1.88	0.55
1:A:386:LEU:HD12	1:A:510:ILE:CD1	2.35	0.55
1:A:536:VAL:CG1	1:A:859:VAL:HG13	2.33	0.55

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:310:MET:O	1:A:313:GLU:N	2.39	0.55
1:A:424:VAL:HG22	1:A:441:ALA:O	2.08	0.54
1:A:410:THR:HG22	1:A:412:ASP:N	2.14	0.54
1:A:812:VAL:O	1:A:816:VAL:HG23	2.07	0.54
1:A:37:PRO:HG2	1:A:240:GLN:CD	2.27	0.54
1:A:57:ILE:CD1	1:A:57:ILE:H	2.12	0.54
1:A:628:PRO:HB3	1:A:633:GLU:HB3	1.88	0.54
1:A:667:CYS:SG	1:A:668:ARG:HD2	2.47	0.54
1:A:132:SER:O	1:A:135:ARG:HB2	2.07	0.54
1:A:484:GLU:HG2	1:A:485:LEU:H	1.72	0.54
1:A:348:GLN:NE2	1:A:352:ASP:OD1	2.40	0.54
1:A:107:LEU:HB2	1:A:139:MET:CE	2.37	0.54
1:A:392:ILE:HD12	1:A:490:PHE:CZ	2.42	0.54
1:A:844:CYS:CB	1:A:849:LEU:HD12	2.28	0.54
1:A:852:VAL:HG12	1:A:853:SER:H	1.71	0.54
1:A:522:GLU:O	1:A:526:VAL:HG23	2.07	0.54
1:A:310:MET:O	1:A:313:GLU:HB3	2.08	0.54
1:A:40:PHE:O	1:A:239:VAL:N	2.37	0.54
1:A:829:GLY:HA3	1:A:851:TYR:CE2	2.41	0.54
1:A:379:PRO:HB2	1:A:512:THR:HG21	1.89	0.54
1:A:159:MET:HE2	1:A:175:ASP:O	2.07	0.54
1:A:196:PHE:CD1	1:A:197:PRO:HD2	2.43	0.54
1:A:852:VAL:HG12	1:A:853:SER:N	2.22	0.54
1:A:427:VAL:HG23	1:A:446:LEU:HD13	1.90	0.54
1:A:101:GLY:O	1:A:455:HIS:NE2	2.37	0.54
1:A:623:LEU:N	1:A:623:LEU:HD23	2.23	0.54
1:A:420:LYS:HG2	1:A:443:GLU:OE1	2.07	0.54
1:A:440:HIS:HA	1:A:463:MET:SD	2.48	0.54
1:A:378:HIS:HB3	1:A:379:PRO:CD	2.38	0.54
1:A:79:LYS:HG2	1:A:82:ASP:HB2	1.90	0.53
1:A:42:VAL:HG12	1:A:212:PHE:HZ	1.73	0.53
1:A:262:SER:HB3	1:A:400:PRO:CD	2.34	0.53
1:A:835:GLY:O	1:A:841:VAL:HG22	2.07	0.53
1:A:107:LEU:HD13	1:A:277:GLN:HG3	1.88	0.53
1:A:392:ILE:HG13	1:A:485:LEU:HD13	1.90	0.53
1:A:844:CYS:HB3	1:A:849:LEU:CD1	2.29	0.53
1:A:479:GLU:OE2	1:A:479:GLU:HA	2.09	0.53
1:A:140:TYR:OH	1:A:206:GLY:HA3	2.08	0.53
1:A:375:GLN:HA	1:A:378:HIS:CE1	2.43	0.53
1:A:837:ASP:HB3	1:A:840:SER:CB	2.39	0.53
1:A:119:PHE:CD2	1:A:129:ALA:HB2	2.44	0.53
1:A:469:SER:O	1:A:471:CYS:N	2.42	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:578:MET:HG3	1:A:587:ARG:HB3	1.90	0.53
1:A:272:TYR:CE2	1:A:289:GLN:NE2	2.76	0.53
1:A:797:SER:OG	1:A:802:ARG:HD3	2.09	0.53
1:A:478:GLU:OE2	1:A:481:LYS:HG2	2.09	0.53
1:A:106:ILE:CD1	1:A:207:ALA:HB1	2.39	0.53
1:A:489:THR:HG22	1:A:489:THR:O	2.08	0.53
1:A:253:THR:HG21	1:A:278:GLY:HA2	1.90	0.53
1:A:317:ARG:HH12	1:A:359:ILE:HG23	1.74	0.53
1:A:312:LEU:HD12	1:A:320:GLN:HG3	1.90	0.53
1:A:564:HIS:HA	1:A:567:PHE:HB2	1.90	0.53
1:A:609:LEU:O	1:A:612:ARG:HD2	2.08	0.53
1:A:805:GLN:HB3	1:A:843:PHE:CE2	2.43	0.53
1:A:257:PHE:CD1	1:A:321:ASP:HB2	2.43	0.53
1:A:66:PHE:CE2	1:A:201:LYS:HD3	2.44	0.53
1:A:66:PHE:CD2	1:A:201:LYS:NZ	2.78	0.53
1:A:66:PHE:HD1	1:A:66:PHE:N	2.07	0.53
1:A:30:THR:OG1	1:A:36:ILE:HD11	2.07	0.53
1:A:745:GLU:OE1	1:A:769:ASP:OD2	2.27	0.53
1:A:692:LYS:HD3	1:A:692:LYS:C	2.29	0.53
1:A:64:GLN:HA	1:A:67:GLU:HB2	1.90	0.53
1:A:235:THR:HG22	1:A:236:ALA:N	2.24	0.53
1:A:222:VAL:HG11	1:A:437:GLU:CG	2.39	0.52
1:A:74:GLU:O	1:A:77:GLY:N	2.26	0.52
1:A:564:HIS:CE1	1:A:565:MET:HG2	2.42	0.52
1:A:563:GLU:OE2	1:A:621:PRO:HD3	2.09	0.52
1:A:748:ARG:HA	1:A:751:LEU:HD12	1.90	0.52
1:A:107:LEU:HD13	1:A:277:GLN:CD	2.29	0.52
1:A:872:ASN:HD22	1:A:873:ASN:N	2.06	0.52
1:A:574:LYS:HB2	1:A:574:LYS:HZ3	1.72	0.52
1:A:347:LEU:HD12	1:A:376:LEU:HD21	1.91	0.52
1:A:541:ASP:OD2	1:A:561:ARG:HB2	2.08	0.52
1:A:335:GLN:HG2	1:A:336:THR:H	1.72	0.52
1:A:420:LYS:HG3	1:A:442:ALA:O	2.10	0.52
1:A:771:THR:HA	1:A:808:VAL:CG2	2.39	0.52
1:A:677:ALA:O	1:A:681:THR:OG1	2.27	0.52
1:A:104:ASP:HB3	1:A:143:VAL:HG13	1.92	0.52
1:A:16:ARG:NE	1:A:21:GLY:HA2	2.24	0.52
1:A:500:GLY:O	1:A:502:THR:N	2.43	0.52
1:A:591:LEU:HD22	1:A:679:MET:CE	2.40	0.52
1:A:86:PRO:HG3	1:A:115:ALA:HB1	1.91	0.52
1:A:119:PHE:O	1:A:123:THR:HB	2.10	0.52
1:A:451:GLY:H	1:A:454:SER:HB3	1.74	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:105:THR:HG21	1:A:279:GLU:CG	2.18	0.52
1:A:117:GLU:HG2	1:A:130:TYR:OH	2.10	0.52
1:A:179:LEU:HD11	1:A:183:PHE:CE1	2.45	0.52
1:A:336:THR:C	1:A:337:ARG:HG2	2.30	0.52
1:A:57:ILE:C	1:A:62:GLN:HE21	2.12	0.52
1:A:540:ALA:O	1:A:541:ASP:OD1	2.28	0.52
1:A:106:ILE:HD13	1:A:207:ALA:CB	2.39	0.52
1:A:330:LYS:HB3	1:A:332:TYR:CE2	2.45	0.52
1:A:668:ARG:NE	1:A:707:LEU:HG	2.25	0.52
1:A:837:ASP:HB3	1:A:840:SER:HB2	1.92	0.52
1:A:710:GLU:HA	1:A:756:ILE:HD11	1.92	0.52
1:A:396:LEU:O	1:A:468:VAL:HG13	2.10	0.52
1:A:272:TYR:OH	1:A:293:GLN:HB3	2.10	0.52
1:A:566:PHE:CE1	1:A:619:LEU:HD13	2.45	0.52
1:A:567:PHE:CE2	1:A:626:PHE:CE1	2.98	0.52
1:A:223:TYR:CD2	1:A:436:ILE:HG12	2.37	0.52
1:A:471:CYS:O	1:A:472:GLY:O	2.28	0.52
1:A:571:ARG:HB3	1:A:594:LEU:HD22	1.92	0.52
1:A:4:TRP:NE1	1:A:60:GLU:OE1	2.42	0.51
1:A:403:ALA:HB1	1:A:443:GLU:HB3	1.91	0.51
1:A:41:THR:HA	1:A:238:ASN:HA	1.92	0.51
1:A:732:LYS:C	1:A:734:SER:N	2.64	0.51
1:A:538:THR:O	1:A:557:ILE:HG23	2.10	0.51
1:A:712:LYS:HA	1:A:715:LYS:HE2	1.92	0.51
1:A:750:ALA:O	1:A:753:ALA:HB2	2.10	0.51
1:A:382:ASN:HD22	1:A:511:GLU:CD	2.14	0.51
1:A:315:HIS:ND1	1:A:315:HIS:O	2.44	0.51
1:A:194:GLU:OE1	1:A:195:GLU:O	2.28	0.51
1:A:124:GLY:O	1:A:125:ASN:HB2	2.09	0.51
1:A:789:TYR:CE2	1:A:794:ILE:HG21	2.45	0.51
1:A:111:LEU:HB3	1:A:133:TYR:HD1	1.75	0.51
1:A:189:GLU:HG3	1:A:190:ALA:N	2.24	0.51
1:A:16:ARG:HE	1:A:21:GLY:HA2	1.76	0.51
1:A:587:ARG:O	1:A:591:LEU:HG	2.10	0.51
1:A:708:VAL:O	1:A:749:ALA:HB2	2.11	0.51
1:A:574:LYS:HA	1:A:577:LYS:HE3	1.92	0.51
1:A:420:LYS:HG2	1:A:443:GLU:CD	2.31	0.51
1:A:485:LEU:HD23	1:A:486:GLY:N	2.26	0.51
1:A:27:ALA:O	1:A:31:ILE:N	2.42	0.51
1:A:859:VAL:O	1:A:862:ALA:N	2.42	0.51
1:A:840:SER:C	1:A:842:GLU:H	2.14	0.51
1:A:281:VAL:O	1:A:284:GLY:O	2.27	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:381:PHE:CZ	1:A:496:ILE:HG23	2.46	0.51
1:A:754:ASP:HB3	1:A:818:LYS:HE2	1.91	0.51
1:A:667:CYS:SG	1:A:668:ARG:N	2.84	0.51
1:A:859:VAL:N	1:A:860:PRO:CD	2.73	0.51
1:A:410:THR:HB	1:A:413:GLU:HB2	1.92	0.51
1:A:109:LEU:CB	1:A:136:PHE:CE1	2.92	0.51
1:A:521:PHE:O	1:A:525:MET:HG2	2.10	0.51
1:A:106:ILE:HG23	1:A:140:TYR:N	2.25	0.51
1:A:99:MET:O	2:A:902:SO4:O2	2.29	0.51
1:A:19:LEU:O	1:A:24:CYS:N	2.43	0.51
1:A:563:GLU:CG	1:A:621:PRO:HD3	2.41	0.51
1:A:705:ILE:HG22	1:A:708:VAL:HG23	1.93	0.51
1:A:71:TRP:CZ3	1:A:72:LEU:CD2	2.94	0.51
1:A:488:HIS:N	1:A:488:HIS:CD2	2.78	0.51
1:A:140:TYR:O	1:A:144:VAL:HG23	2.11	0.51
1:A:111:LEU:HB3	1:A:133:TYR:CD1	2.46	0.50
1:A:66:PHE:CD1	1:A:66:PHE:N	2.77	0.50
1:A:476:ILE:HG23	1:A:482:THR:O	2.11	0.50
1:A:851:TYR:HD1	1:A:852:VAL:O	1.92	0.50
1:A:708:VAL:HB	1:A:742:THR:OG1	2.11	0.50
1:A:106:ILE:HG21	1:A:140:TYR:HA	1.92	0.50
1:A:326:ILE:CG1	1:A:331:LEU:HD12	2.41	0.50
1:A:803:LEU:O	1:A:805:GLN:N	2.44	0.50
1:A:223:TYR:CD2	1:A:436:ILE:HD11	2.46	0.50
1:A:543:PRO:O	1:A:546:THR:N	2.44	0.50
1:A:159:MET:CE	1:A:179:LEU:HB2	2.41	0.50
1:A:316:PHE:HD2	1:A:320:GLN:CD	2.15	0.50
1:A:381:PHE:HD2	1:A:402:ALA:HB1	1.71	0.50
1:A:732:LYS:C	1:A:734:SER:H	2.15	0.50
1:A:439:MET:HE1	1:A:456:ALA:HA	1.93	0.50
1:A:222:VAL:HG11	1:A:437:GLU:CD	2.32	0.50
1:A:402:ALA:HB1	1:A:498:LEU:HG	1.93	0.50
1:A:112:ASN:O	1:A:116:VAL:N	2.42	0.50
1:A:493:GLY:O	1:A:494:ASP:O	2.29	0.50
1:A:439:MET:HB3	1:A:463:MET:HE1	1.91	0.50
1:A:223:TYR:CE2	1:A:436:ILE:HD11	2.47	0.50
1:A:109:LEU:HG	1:A:110:GLY:N	2.27	0.50
1:A:198:GLN:O	1:A:200:PRO:HD3	2.12	0.50
1:A:255:VAL:CG1	1:A:453:THR:HB	2.41	0.50
1:A:316:PHE:CD2	1:A:320:GLN:NE2	2.79	0.50
1:A:545:ASP:O	1:A:549:ALA:N	2.44	0.50
1:A:433:PRO:HD3	1:A:455:HIS:CE1	2.46	0.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:119:PHE:O	1:A:123:THR:N	2.34	0.50
1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:HD12	2.26	0.50
1:A:803:LEU:HD23	1:A:843:PHE:CD2	2.47	0.50
1:A:473:GLU:H	1:A:473:GLU:CD	2.15	0.50
1:A:429:LEU:HA	1:A:448:VAL:CG2	2.42	0.50
1:A:859:VAL:O	1:A:862:ALA:HB3	2.12	0.50
1:A:73:GLU:OE2	1:A:79:LYS:HE2	2.12	0.49
1:A:417:ALA:O	1:A:418:HIS:HB2	2.11	0.49
1:A:34:MET:CE	1:A:312:LEU:HD23	2.42	0.49
1:A:9:GLU:HA	1:A:31:ILE:HD11	1.94	0.49
1:A:221:ILE:CD1	1:A:224:ARG:NH2	2.75	0.49
1:A:834:HIS:N	1:A:834:HIS:CD2	2.79	0.49
1:A:619:LEU:HB2	1:A:680:GLN:NE2	2.16	0.49
1:A:181:GLU:HG2	1:A:184:LYS:HZ2	1.74	0.49
1:A:578:MET:HB2	1:A:590:ALA:HB3	1.93	0.49
1:A:323:GLU:O	1:A:334:LEU:N	2.44	0.49
1:A:368:ILE:CG2	1:A:369:GLU:N	2.76	0.49
1:A:408:TYR:HE1	1:A:424:VAL:HG12	1.77	0.49
1:A:588:GLU:O	1:A:592:ASN:N	2.35	0.49
1:A:571:ARG:CB	1:A:594:LEU:HD21	2.40	0.49
1:A:403:ALA:HB1	1:A:443:GLU:CB	2.41	0.49
1:A:245:GLY:O	1:A:275:ASN:HA	2.13	0.49
1:A:685:MET:HG3	1:A:725:ALA:CB	2.42	0.49
1:A:722:VAL:HG12	1:A:723:GLU:N	2.27	0.49
1:A:749:ALA:HA	1:A:756:ILE:HD12	1.95	0.49
1:A:380:THR:O	1:A:512:THR:HG22	2.12	0.49
1:A:106:ILE:HG21	1:A:140:TYR:CA	2.42	0.49
1:A:66:PHE:CD2	1:A:201:LYS:CE	2.95	0.49
1:A:135:ARG:CZ	1:A:277:GLN:HB3	2.42	0.49
1:A:424:VAL:HG23	1:A:424:VAL:O	2.12	0.49
1:A:623:LEU:HB2	1:A:655:LEU:HD22	1.93	0.49
1:A:774:THR:OG1	1:A:811:LEU:HD12	2.13	0.49
1:A:134:ARG:HD3	1:A:179:LEU:CD2	2.43	0.49
1:A:496:ILE:N	1:A:496:ILE:HD12	2.26	0.49
1:A:248:GLY:O	1:A:275:ASN:HB2	2.11	0.49
1:A:623:LEU:HD21	1:A:669:LEU:HD21	1.93	0.49
1:A:123:THR:HG23	1:A:125:ASN:HB3	1.94	0.49
1:A:189:GLU:HG3	1:A:190:ALA:H	1.78	0.49
1:A:51:TYR:C	1:A:53:SER:H	2.16	0.49
1:A:65:ILE:C	1:A:66:PHE:HD1	2.16	0.49
1:A:487:GLY:H	1:A:488:HIS:CD2	2.25	0.49
1:A:353:LEU:HB3	1:A:359:ILE:HG12	1.94	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:634:GLN:OE1	1:A:649:LYS:HG2	2.13	0.49
1:A:572:ILE:CG2	1:A:573:MET:H	2.19	0.49
1:A:771:THR:CG2	1:A:772:GLN:N	2.75	0.49
1:A:110:GLY:HA2	1:A:200:PRO:HB3	1.94	0.49
1:A:495:TYR:CD2	1:A:496:ILE:N	2.81	0.49
1:A:675:GLU:HA	1:A:678:LYS:HB2	1.94	0.49
1:A:230:PRO:HG2	1:A:233:TRP:CD1	2.48	0.49
1:A:255:VAL:HG11	1:A:453:THR:CB	2.40	0.48
1:A:51:TYR:CE1	1:A:55:LYS:HD3	2.47	0.48
1:A:394:SER:O	1:A:395:ALA:HB2	2.12	0.48
1:A:244:PHE:CD1	1:A:244:PHE:N	2.81	0.48
1:A:33:GLY:C	1:A:34:MET:HG2	2.33	0.48
1:A:221:ILE:HD13	1:A:224:ARG:NH2	2.28	0.48
1:A:523:ARG:NE	2:A:901:SO4:O3	2.47	0.48
1:A:91:VAL:HG22	1:A:239:VAL:CG1	2.43	0.48
1:A:43:THR:HG22	1:A:44:THR:N	2.28	0.48
1:A:40:PHE:CZ	1:A:69:ILE:CD1	2.96	0.48
1:A:290:PRO:O	1:A:292:THR:N	2.46	0.48
1:A:325:THR:O	1:A:332:TYR:N	2.46	0.48
1:A:536:VAL:O	1:A:555:GLU:HB2	2.13	0.48
1:A:232:ASP:OD1	1:A:232:ASP:N	2.46	0.48
1:A:739:HIS:HB3	1:A:761:GLU:HG3	1.95	0.48
1:A:211:VAL:C	1:A:213:ARG:H	2.17	0.48
1:A:485:LEU:CD2	1:A:486:GLY:H	2.25	0.48
1:A:316:PHE:HB2	1:A:320:GLN:HE22	1.78	0.48
1:A:704:MET:SD	1:A:764:SER:CB	3.02	0.48
1:A:65:ILE:O	1:A:69:ILE:HG12	2.14	0.48
1:A:392:ILE:CG1	1:A:485:LEU:HD13	2.43	0.48
1:A:584:VAL:HG12	1:A:588:GLU:HG3	1.94	0.48
1:A:110:GLY:N	1:A:203:GLN:OE1	2.41	0.48
1:A:5:VAL:CG2	1:A:42:VAL:HG13	2.44	0.48
1:A:403:ALA:O	1:A:404:ALA:HB2	2.12	0.48
1:A:724:VAL:O	1:A:728:VAL:N	2.41	0.48
1:A:826:LEU:HD23	1:A:826:LEU:C	2.33	0.48
1:A:73:GLU:HG2	1:A:79:LYS:HA	1.96	0.48
1:A:93:SER:HB2	1:A:103:MET:HE2	1.94	0.48
1:A:381:PHE:CD1	1:A:510:ILE:CG2	2.97	0.48
1:A:420:LYS:HG2	1:A:420:LYS:O	2.14	0.48
1:A:40:PHE:HE1	1:A:69:ILE:HD13	1.76	0.48
1:A:396:LEU:HD23	1:A:452:MET:SD	2.54	0.48
1:A:325:THR:N	1:A:332:TYR:O	2.45	0.48
1:A:521:PHE:CE1	1:A:525:MET:HG3	2.49	0.48

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:307:ASP:N	1:A:307:ASP:OD1	2.47	0.48
1:A:381:PHE:CD1	1:A:510:ILE:HG22	2.48	0.48
1:A:718:LYS:NZ	1:A:740:ILE:HB	2.28	0.48
1:A:48:THR:CG2	1:A:52:ASN:HD21	2.16	0.48
1:A:427:VAL:HG12	1:A:427:VAL:O	2.07	0.48
1:A:106:ILE:HG23	1:A:139:MET:HB3	1.96	0.48
1:A:179:LEU:CD1	1:A:183:PHE:CE1	2.97	0.48
1:A:756:ILE:O	1:A:758:GLU:N	2.46	0.48
1:A:295:GLU:O	1:A:299:PRO:HB3	2.13	0.48
1:A:13:ALA:HA	1:A:24:CYS:CB	2.43	0.48
1:A:225:ARG:O	1:A:228:ASP:N	2.46	0.48
1:A:747:PRO:O	1:A:751:LEU:HG	2.13	0.48
1:A:144:VAL:HG12	1:A:144:VAL:O	2.13	0.47
1:A:395:ALA:HB2	1:A:471:CYS:SG	2.54	0.47
1:A:285:VAL:HB	1:A:449:ARG:NH2	2.20	0.47
1:A:596:PRO:HA	1:A:599:LYS:HE3	1.96	0.47
1:A:90:SER:HB3	1:A:242:MET:SD	2.54	0.47
1:A:177:LYS:O	1:A:177:LYS:HG2	2.14	0.47
1:A:616:VAL:O	1:A:704:MET:N	2.35	0.47
1:A:427:VAL:HG23	1:A:446:LEU:CD1	2.44	0.47
1:A:381:PHE:CB	1:A:386:LEU:HD22	2.44	0.47
1:A:492:GLU:OE2	1:A:492:GLU:N	2.48	0.47
1:A:377:LEU:HD13	1:A:857:PHE:HD1	1.80	0.47
1:A:220:ALA:O	1:A:224:ARG:HB3	2.13	0.47
1:A:149:LYS:HE2	1:A:149:LYS:HB2	1.77	0.47
1:A:148:PRO:HD2	1:A:151:HIS:HD2	1.74	0.47
1:A:4:TRP:HZ3	1:A:49:GLU:HB3	1.79	0.47
1:A:566:PHE:HE2	1:A:679:MET:HE1	1.79	0.47
1:A:119:PHE:CZ	1:A:128:PHE:CE2	3.02	0.47
1:A:116:VAL:O	1:A:120:ALA:N	2.39	0.47
1:A:4:TRP:HZ3	1:A:49:GLU:HG2	1.74	0.47
1:A:471:CYS:SG	1:A:474:ILE:HD11	2.55	0.47
1:A:24:CYS:O	1:A:28:GLU:HB2	2.15	0.47
1:A:564:HIS:CG	1:A:565:MET:N	2.82	0.47
1:A:700:VAL:O	1:A:700:VAL:HG12	2.12	0.47
1:A:167:PHE:O	1:A:170:ASP:OD2	2.33	0.47
1:A:109:LEU:HD12	1:A:136:PHE:HE1	1.80	0.47
1:A:66:PHE:CE1	1:A:205:MET:SD	3.08	0.47
1:A:22:ALA:O	1:A:26:LEU:HD12	2.14	0.47
1:A:19:LEU:HD22	1:A:41:THR:CG2	2.44	0.47
1:A:583:SER:O	1:A:587:ARG:HG3	2.15	0.47
1:A:172:THR:OG1	1:A:175:ASP:OD1	2.32	0.47

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:189:GLU:CG	1:A:190:ALA:H	2.28	0.47
1:A:116:VAL:HG13	1:A:117:GLU:N	2.30	0.47
1:A:126:PRO:O	1:A:130:TYR:HD2	1.97	0.47
1:A:107:LEU:HD22	1:A:277:GLN:OE1	2.14	0.47
1:A:4:TRP:CD2	1:A:61:ILE:HD11	2.49	0.47
1:A:566:PHE:O	1:A:571:ARG:HB2	2.15	0.47
1:A:617:ARG:HB2	1:A:704:MET:CE	2.44	0.47
1:A:541:ASP:OD1	1:A:561:ARG:HG3	2.15	0.47
1:A:789:TYR:CD2	1:A:794:ILE:CG2	2.98	0.47
1:A:165:VAL:HG13	1:A:170:ASP:OD2	2.14	0.47
1:A:73:GLU:CA	1:A:76:ASN:ND2	2.75	0.47
1:A:5:VAL:HG23	1:A:42:VAL:HG13	1.97	0.47
1:A:728:VAL:CG1	1:A:729:LYS:N	2.78	0.47
1:A:707:LEU:CD1	1:A:746:ILE:HD11	2.45	0.47
1:A:189:GLU:CG	1:A:190:ALA:N	2.78	0.47
1:A:317:ARG:NH1	1:A:317:ARG:HB3	2.25	0.47
1:A:392:ILE:HD12	1:A:490:PHE:HZ	1.79	0.47
1:A:718:LYS:HZ2	1:A:740:ILE:HB	1.79	0.47
1:A:536:VAL:CG1	1:A:537:ARG:N	2.78	0.47
1:A:230:PRO:HG2	1:A:233:TRP:CE2	2.50	0.47
1:A:224:ARG:HH11	1:A:231:GLY:N	2.13	0.47
1:A:460:ALA:O	1:A:464:GLY:N	2.47	0.47
1:A:70:THR:HB	3:A:919:HOH:O	2.15	0.47
1:A:91:VAL:O	1:A:106:ILE:N	2.47	0.47
1:A:109:LEU:C	1:A:109:LEU:HD23	2.34	0.46
1:A:179:LEU:HD11	1:A:183:PHE:CZ	2.51	0.46
1:A:345:ALA:O	1:A:349:ILE:HG13	2.16	0.46
1:A:474:ILE:O	1:A:476:ILE:N	2.49	0.46
1:A:763:PHE:HB2	1:A:826:LEU:HD21	1.97	0.46
1:A:76:ASN:ND2	1:A:78:LYS:H	2.14	0.46
1:A:42:VAL:HG12	1:A:212:PHE:CZ	2.49	0.46
1:A:102:MET:CE	1:A:436:ILE:HD13	2.44	0.46
1:A:797:SER:CB	1:A:802:ARG:HD3	2.45	0.46
1:A:791:LYS:HD3	1:A:791:LYS:HA	1.76	0.46
1:A:43:THR:CG2	1:A:44:THR:N	2.78	0.46
1:A:246:ASN:OD1	1:A:246:ASN:N	2.47	0.46
1:A:304:GLN:HA	1:A:304:GLN:NE2	2.31	0.46
1:A:591:LEU:HD12	1:A:675:GLU:HB2	1.97	0.46
1:A:659:ASN:HD22	1:A:659:ASN:N	2.13	0.46
1:A:729:LYS:HE2	1:A:736:MET:HB3	1.96	0.46
1:A:230:PRO:HB2	1:A:232:ASP:OD1	2.15	0.46
1:A:774:THR:O	1:A:774:THR:HG22	2.16	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:147:VAL:CG1	1:A:151:HIS:HD2	2.13	0.46
1:A:341:ARG:HH11	1:A:349:ILE:HD13	1.78	0.46
1:A:485:LEU:CD2	1:A:486:GLY:N	2.78	0.46
1:A:34:MET:HE1	1:A:312:LEU:HD23	1.97	0.46
1:A:710:GLU:OE2	1:A:712:LYS:HB2	2.16	0.46
1:A:744:ILE:O	1:A:770:LEU:HD22	2.16	0.46
1:A:85:ASP:OD1	1:A:122:LYS:HG3	2.15	0.46
1:A:131:ASP:OD1	1:A:134:ARG:NH2	2.46	0.46
1:A:188:LYS:O	1:A:191:MET:O	2.34	0.46
1:A:66:PHE:CD2	1:A:201:LYS:HE2	2.51	0.46
1:A:392:ILE:CD1	1:A:490:PHE:CZ	2.98	0.46
1:A:690:GLU:O	1:A:694:GLU:HG3	2.15	0.46
1:A:744:ILE:HG21	1:A:765:PHE:CE1	2.51	0.46
1:A:109:LEU:CG	1:A:110:GLY:N	2.79	0.46
1:A:145:MET:SD	1:A:146:GLU:N	2.89	0.46
1:A:65:ILE:O	1:A:69:ILE:HB	2.16	0.46
1:A:787:ASP:O	1:A:790:TYR:HB2	2.15	0.46
1:A:146:GLU:O	1:A:147:VAL:HG22	2.16	0.46
1:A:422:GLU:O	1:A:423:ARG:HG3	2.15	0.46
1:A:285:VAL:CB	1:A:449:ARG:HH22	2.20	0.46
1:A:243:VAL:HG21	1:A:332:TYR:HB2	1.98	0.46
1:A:744:ILE:CG2	1:A:765:PHE:CE1	2.99	0.46
1:A:199:GLU:O	1:A:202:ASP:HB2	2.14	0.46
1:A:317:ARG:NH1	1:A:317:ARG:CB	2.79	0.46
1:A:406:LYS:O	1:A:425:ILE:N	2.27	0.46
1:A:116:VAL:CG1	1:A:117:GLU:N	2.79	0.46
1:A:17:ASN:O	1:A:44:THR:OG1	2.24	0.46
1:A:186:VAL:HG23	1:A:189:GLU:OE1	2.16	0.46
1:A:195:GLU:O	1:A:197:PRO:N	2.49	0.46
1:A:368:ILE:H	1:A:368:ILE:HD12	1.81	0.46
1:A:566:PHE:CZ	1:A:680:GLN:NE2	2.81	0.46
1:A:534:LEU:HD11	1:A:845:HIS:CA	2.45	0.46
1:A:37:PRO:HG2	1:A:240:GLN:NE2	2.31	0.46
1:A:277:GLN:HE21	1:A:277:GLN:HB2	1.56	0.46
1:A:66:PHE:O	1:A:70:THR:HG23	2.16	0.46
1:A:373:LEU:HB2	1:A:861:ILE:HG13	1.97	0.46
1:A:517:VAL:O	1:A:517:VAL:HG23	2.16	0.46
1:A:349:ILE:HG22	1:A:349:ILE:O	2.16	0.45
1:A:396:LEU:O	1:A:398:ALA:N	2.44	0.45
1:A:472:GLY:C	1:A:474:ILE:H	2.08	0.45
1:A:381:PHE:CZ	1:A:496:ILE:CG2	2.99	0.45
1:A:12:ASN:N	1:A:15:MET:SD	2.89	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:272:TYR:CZ	1:A:289:GLN:HB2	2.49	0.45
1:A:591:LEU:HD23	1:A:591:LEU:HA	1.63	0.45
1:A:843:PHE:O	1:A:847:VAL:N	2.48	0.45
1:A:331:LEU:CD2	1:A:333:PHE:CE1	2.99	0.45
1:A:854:CYS:HB2	1:A:858:ARG:HB2	1.97	0.45
1:A:805:GLN:HB3	1:A:843:PHE:CD2	2.51	0.45
1:A:409:PHE:HA	1:A:427:VAL:O	2.16	0.45
1:A:134:ARG:HD3	1:A:179:LEU:HD23	1.98	0.45
1:A:251:SER:HA	1:A:326:ILE:O	2.17	0.45
1:A:208:VAL:O	1:A:211:VAL:HB	2.16	0.45
1:A:79:LYS:C	1:A:87:LEU:HB3	2.37	0.45
1:A:418:HIS:HB2	1:A:422:GLU:HB2	1.97	0.45
1:A:298:MET:HG2	1:A:301:CYS:HB2	1.99	0.45
1:A:9:GLU:HA	1:A:31:ILE:CD1	2.46	0.45
1:A:591:LEU:O	1:A:679:MET:HG3	2.17	0.45
1:A:707:LEU:HD13	1:A:746:ILE:HD11	1.97	0.45
1:A:709:GLY:O	1:A:756:ILE:HD11	2.17	0.45
1:A:140:TYR:CE2	1:A:203:GLN:HA	2.51	0.45
1:A:93:SER:HB2	1:A:103:MET:CE	2.47	0.45
1:A:291:ILE:O	1:A:294:LEU:HB2	2.17	0.45
1:A:536:VAL:C	1:A:537:ARG:HG3	2.36	0.45
1:A:352:ASP:OD1	1:A:352:ASP:N	2.49	0.45
1:A:155:ILE:HB	1:A:183:PHE:CE1	2.49	0.45
1:A:191:MET:HE2	1:A:191:MET:HA	1.95	0.45
1:A:210:ALA:O	1:A:214:SER:OG	2.28	0.45
1:A:213:ARG:CG	1:A:213:ARG:NH1	2.76	0.45
1:A:311:LYS:CG	1:A:312:LEU:N	2.79	0.45
1:A:403:ALA:O	1:A:496:ILE:HG23	2.17	0.45
1:A:422:GLU:C	1:A:423:ARG:HG3	2.37	0.45
1:A:328:GLU:O	1:A:330:LYS:N	2.50	0.45
1:A:579:ILE:C	1:A:581:SER:H	2.20	0.45
1:A:557:ILE:HG13	1:A:609:LEU:HD21	1.98	0.45
1:A:226:MET:SD	1:A:440:HIS:CD2	3.10	0.45
1:A:223:TYR:HD2	1:A:436:ILE:CD1	2.29	0.45
1:A:185:ALA:O	1:A:189:GLU:HG2	2.17	0.45
1:A:61:ILE:O	1:A:65:ILE:HG13	2.17	0.45
1:A:349:ILE:HG22	1:A:353:LEU:HD12	1.99	0.45
1:A:270:GLY:CA	1:A:291:ILE:HG22	2.46	0.45
1:A:700:VAL:HG22	1:A:737:GLN:CD	2.37	0.45
1:A:361:GLU:HB3	1:A:531:PHE:HZ	1.82	0.45
1:A:741:GLY:HA3	1:A:762:PHE:CD2	2.52	0.45
1:A:271:GLU:OE1	1:A:453:THR:HG22	2.17	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:303:LYS:O	1:A:304:GLN:O	2.35	0.45
1:A:667:CYS:HB3	1:A:706:PRO:O	2.17	0.45
1:A:485:LEU:HA	1:A:485:LEU:HD23	1.59	0.45
1:A:59:GLN:O	1:A:62:GLN:N	2.50	0.44
1:A:319:MET:HB3	1:A:341:ARG:HH12	1.80	0.44
1:A:347:LEU:HD23	1:A:347:LEU:HA	1.71	0.44
1:A:398:ALA:HB2	1:A:469:SER:OG	2.16	0.44
1:A:487:GLY:N	1:A:488:HIS:HD2	2.11	0.44
1:A:25:ASN:O	1:A:28:GLU:HB3	2.16	0.44
1:A:301:CYS:O	1:A:304:GLN:N	2.51	0.44
1:A:47:CYS:O	1:A:50:TYR:HB3	2.17	0.44
1:A:57:ILE:HD11	1:A:209:LYS:HB3	1.99	0.44
1:A:319:MET:CE	1:A:341:ARG:HG3	2.47	0.44
1:A:722:VAL:HG22	1:A:738:TYR:OH	2.17	0.44
1:A:845:HIS:CB	1:A:869:ALA:HB1	2.47	0.44
1:A:106:ILE:CG2	1:A:140:TYR:N	2.80	0.44
1:A:159:MET:HE2	1:A:179:LEU:HB2	1.98	0.44
1:A:253:THR:HG23	1:A:278:GLY:HA2	2.00	0.44
1:A:99:MET:N	1:A:100:PRO:CD	2.80	0.44
1:A:319:MET:HE3	1:A:341:ARG:HG3	1.99	0.44
1:A:496:ILE:O	1:A:504:LYS:N	2.50	0.44
1:A:22:ALA:HB3	1:A:94:GLY:HA2	1.99	0.44
1:A:627:VAL:HG21	1:A:652:VAL:HG13	1.98	0.44
1:A:595:ILE:N	1:A:596:PRO:CD	2.79	0.44
1:A:579:ILE:HG22	1:A:651:LYS:NZ	2.32	0.44
1:A:229:ILE:HG22	1:A:230:PRO:N	2.33	0.44
1:A:223:TYR:CD2	1:A:436:ILE:CD1	3.01	0.44
1:A:280:ASP:OD2	1:A:281:VAL:HG13	2.17	0.44
1:A:563:GLU:CG	1:A:621:PRO:CD	2.95	0.44
1:A:854:CYS:SG	1:A:862:ALA:HB2	2.57	0.44
1:A:225:ARG:HG3	1:A:225:ARG:HH11	1.83	0.44
1:A:176:LEU:O	1:A:179:LEU:HB3	2.17	0.44
1:A:200:PRO:C	1:A:202:ASP:H	2.20	0.44
1:A:207:ALA:HA	1:A:210:ALA:HB3	1.99	0.44
1:A:447:THR:OG1	1:A:469:SER:HA	2.17	0.44
1:A:298:MET:HB3	1:A:301:CYS:HB2	1.98	0.44
1:A:837:ASP:HB3	1:A:840:SER:OG	2.17	0.44
1:A:119:PHE:CD2	1:A:129:ALA:CB	3.00	0.44
1:A:817:LYS:HD3	1:A:817:LYS:C	2.38	0.44
1:A:73:GLU:HA	1:A:76:ASN:HD21	1.80	0.44
1:A:818:LYS:O	1:A:821:GLN:HB2	2.17	0.44
1:A:837:ASP:O	1:A:839:SER:N	2.50	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:196:PHE:CG	1:A:197:PRO:HD2	2.53	0.44
1:A:204:LEU:HD22	1:A:205:MET:SD	2.58	0.44
1:A:365:VAL:HG11	1:A:867:ALA:HB1	1.99	0.44
1:A:536:VAL:HG12	1:A:537:ARG:N	2.32	0.44
1:A:225:ARG:CD	1:A:226:MET:N	2.78	0.44
1:A:122:LYS:C	1:A:122:LYS:HD3	2.38	0.44
1:A:138:GLN:HB2	1:A:152:PHE:CD1	2.52	0.44
1:A:156:ILE:CG1	1:A:183:PHE:CZ	2.98	0.44
1:A:298:MET:HG2	1:A:301:CYS:CB	2.48	0.44
1:A:128:PHE:CG	1:A:129:ALA:N	2.86	0.44
1:A:624:HIS:CE1	1:A:629:HIS:CD2	3.05	0.44
1:A:141:SER:O	1:A:145:MET:N	2.51	0.44
1:A:141:SER:HG	1:A:147:VAL:HG23	1.79	0.44
1:A:270:GLY:CA	1:A:291:ILE:CG2	2.96	0.44
1:A:741:GLY:HA3	1:A:762:PHE:CG	2.52	0.44
1:A:23:GLY:CA	1:A:238:ASN:ND2	2.81	0.43
1:A:517:VAL:HG21	1:A:521:PHE:CD2	2.53	0.43
1:A:866:ALA:HA	1:A:869:ALA:HB3	2.00	0.43
1:A:352:ASP:O	1:A:356:GLU:N	2.48	0.43
1:A:466:CYS:SG	1:A:467:CYS:N	2.88	0.43
1:A:224:ARG:NH1	1:A:231:GLY:N	2.66	0.43
1:A:362:GLU:O	1:A:366:VAL:HG23	2.18	0.43
1:A:386:LEU:HD21	1:A:498:LEU:HD12	1.99	0.43
1:A:420:LYS:O	1:A:443:GLU:OE1	2.37	0.43
1:A:298:MET:HG2	1:A:301:CYS:HG	1.82	0.43
1:A:119:PHE:CD1	1:A:123:THR:HB	2.53	0.43
1:A:741:GLY:N	1:A:762:PHE:CE2	2.86	0.43
1:A:109:LEU:HA	1:A:136:PHE:CD1	2.54	0.43
1:A:4:TRP:HZ3	1:A:49:GLU:CB	2.30	0.43
1:A:574:LYS:CB	1:A:574:LYS:NZ	2.77	0.43
1:A:243:VAL:HG21	1:A:332:TYR:CB	2.48	0.43
1:A:686:GLU:HG3	1:A:728:VAL:CG2	2.48	0.43
1:A:661:MET:SD	1:A:772:GLN:OE1	2.77	0.43
1:A:103:MET:HB2	2:A:902:SO4:O4	2.18	0.43
1:A:864:LEU:HD13	1:A:868:GLN:HE22	1.82	0.43
1:A:415:LYS:C	1:A:417:ALA:H	2.21	0.43
1:A:251:SER:CB	1:A:328:GLU:N	2.77	0.43
1:A:652:VAL:O	1:A:652:VAL:HG12	2.18	0.43
1:A:564:HIS:O	1:A:566:PHE:N	2.51	0.43
1:A:582:ASP:O	1:A:583:SER:HB3	2.18	0.43
1:A:707:LEU:HD12	1:A:746:ILE:CD1	2.48	0.43
1:A:782:ALA:HA	1:A:785:PHE:CE2	2.53	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:74:GLU:CG	1:A:75:LEU:H	2.17	0.43
1:A:477:ASN:CG	1:A:480:ALA:HB3	2.37	0.43
1:A:648:VAL:O	1:A:652:VAL:HG23	2.18	0.43
1:A:362:GLU:HG3	1:A:531:PHE:CE1	2.53	0.43
1:A:79:LYS:O	1:A:87:LEU:HB3	2.19	0.43
1:A:359:ILE:HD12	1:A:364:ALA:HB2	2.01	0.43
1:A:408:TYR:HD1	1:A:414:ALA:HA	1.84	0.43
1:A:628:PRO:CB	1:A:633:GLU:HB3	2.48	0.43
1:A:109:LEU:HD12	1:A:136:PHE:CE1	2.53	0.43
1:A:271:GLU:O	1:A:282:VAL:HG11	2.19	0.43
1:A:368:ILE:HD12	1:A:368:ILE:N	2.33	0.43
1:A:529:ASP:HA	1:A:532:ARG:HG2	2.00	0.43
1:A:549:ALA:O	1:A:554:ALA:HB2	2.19	0.43
1:A:141:SER:OG	1:A:146:GLU:HB2	2.18	0.43
1:A:490:PHE:N	1:A:490:PHE:CD1	2.86	0.43
1:A:327:GLU:HG2	1:A:327:GLU:O	2.19	0.43
1:A:694:GLU:HG3	1:A:694:GLU:H	1.41	0.43
1:A:618:TYR:CZ	1:A:703:ILE:HG23	2.54	0.43
1:A:830:ILE:HD13	1:A:844:CYS:SG	2.59	0.43
1:A:107:LEU:CD1	1:A:139:MET:HE1	2.49	0.43
1:A:177:LYS:O	1:A:181:GLU:HB2	2.19	0.43
1:A:102:MET:SD	1:A:223:TYR:CD2	3.11	0.43
1:A:156:ILE:HG12	1:A:179:LEU:HD21	2.01	0.42
1:A:72:LEU:O	1:A:75:LEU:N	2.52	0.42
1:A:317:ARG:HH22	1:A:363:GLU:CD	2.22	0.42
1:A:399:SER:OG	1:A:466:CYS:HA	2.19	0.42
1:A:27:ALA:HA	1:A:30:THR:HB	2.01	0.42
1:A:834:HIS:H	1:A:834:HIS:CD2	2.37	0.42
1:A:708:VAL:CG2	1:A:714:LEU:HB2	2.49	0.42
1:A:637:LEU:HD12	1:A:637:LEU:O	2.20	0.42
1:A:583:SER:OG	1:A:586:ALA:HB2	2.19	0.42
1:A:725:ALA:O	1:A:728:VAL:HG12	2.19	0.42
1:A:685:MET:CB	1:A:728:VAL:HG11	2.34	0.42
1:A:107:LEU:HB2	1:A:139:MET:SD	2.59	0.42
1:A:253:THR:CG2	1:A:282:VAL:HG23	2.49	0.42
1:A:466:CYS:O	1:A:467:CYS:HB2	2.19	0.42
1:A:484:GLU:CG	1:A:485:LEU:H	2.32	0.42
1:A:8:PHE:CZ	1:A:26:LEU:HD22	2.54	0.42
1:A:700:VAL:HG22	1:A:737:GLN:OE1	2.19	0.42
1:A:244:PHE:C	1:A:246:ASN:H	2.22	0.42
1:A:272:TYR:CD1	1:A:289:GLN:O	2.72	0.42
1:A:272:TYR:CE2	1:A:289:GLN:CB	2.96	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:602:PHE:CE1	1:A:616:VAL:HG11	2.55	0.42
1:A:659:ASN:HA	1:A:660:PRO:HD2	1.74	0.42
1:A:728:VAL:HG13	1:A:729:LYS:N	2.35	0.42
1:A:685:MET:HE1	1:A:736:MET:HG2	2.02	0.42
1:A:539:ASN:HD21	1:A:853:SER:C	2.21	0.42
1:A:515:ALA:O	1:A:516:SER:O	2.37	0.42
1:A:712:LYS:HG2	1:A:715:LYS:NZ	2.34	0.42
1:A:547:LEU:HD23	1:A:547:LEU:HA	1.57	0.42
1:A:4:TRP:CH2	1:A:49:GLU:HG2	2.54	0.42
1:A:630:THR:O	1:A:634:GLN:HB2	2.19	0.42
1:A:805:GLN:CB	1:A:843:PHE:CE2	3.03	0.42
1:A:143:VAL:C	1:A:145:MET:N	2.72	0.42
1:A:374:ASP:N	1:A:861:ILE:HD11	2.35	0.42
1:A:749:ALA:HA	1:A:756:ILE:CD1	2.50	0.42
1:A:543:PRO:HA	1:A:546:THR:OG1	2.19	0.42
1:A:3:LYS:HB3	1:A:6:TYR:CZ	2.55	0.42
1:A:57:ILE:CG2	1:A:61:ILE:CG2	2.98	0.42
1:A:259:ARG:NH2	1:A:353:LEU:CD2	2.80	0.42
1:A:34:MET:CE	1:A:312:LEU:CD2	2.98	0.42
1:A:603:LYS:CD	1:A:691:VAL:CG2	2.97	0.42
1:A:619:LEU:HD11	1:A:626:PHE:HZ	1.84	0.42
1:A:678:LYS:NZ	1:A:720:VAL:HG13	2.35	0.42
1:A:219:ARG:HG3	1:A:434:GLU:HA	2.00	0.42
1:A:74:GLU:O	1:A:76:ASN:N	2.53	0.42
1:A:675:GLU:H	1:A:675:GLU:HG3	1.61	0.42
1:A:361:GLU:HG3	1:A:527:TRP:CD2	2.54	0.42
1:A:775:PHE:HE1	1:A:804:ASP:OD2	2.02	0.42
1:A:319:MET:O	1:A:319:MET:SD	2.77	0.42
1:A:559:LEU:CD1	1:A:617:ARG:CB	2.98	0.42
1:A:591:LEU:CD1	1:A:675:GLU:HB2	2.50	0.42
1:A:700:VAL:CG1	1:A:737:GLN:HB3	2.35	0.42
1:A:224:ARG:CG	1:A:229:ILE:CB	2.97	0.42
1:A:186:VAL:HA	1:A:189:GLU:OE2	2.20	0.42
1:A:45:GLU:OE1	1:A:46:ALA:N	2.50	0.42
1:A:76:ASN:ND2	1:A:76:ASN:C	2.72	0.42
1:A:88:LEU:HA	1:A:109:LEU:O	2.20	0.42
1:A:251:SER:OG	1:A:328:GLU:HA	2.20	0.42
1:A:667:CYS:SG	1:A:668:ARG:CD	3.07	0.42
1:A:19:LEU:HD22	1:A:41:THR:HG21	2.02	0.41
1:A:100:PRO:HB2	1:A:458:VAL:HG11	1.99	0.41
1:A:144:VAL:O	1:A:145:MET:O	2.37	0.41
1:A:185:ALA:HA	1:A:188:LYS:CB	2.48	0.41

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:40:PHE:CE1	1:A:69:ILE:CD1	3.01	0.41
1:A:79:LYS:CG	1:A:82:ASP:HB2	2.50	0.41
1:A:95:ALA:O	1:A:96:ARG:O	2.38	0.41
1:A:523:ARG:O	1:A:527:TRP:CD2	2.74	0.41
1:A:812:VAL:O	1:A:812:VAL:CG1	2.68	0.41
1:A:693:GLU:C	1:A:695:THR:H	2.20	0.41
1:A:179:LEU:C	1:A:181:GLU:H	2.22	0.41
1:A:279:GLU:OE1	1:A:279:GLU:N	2.53	0.41
1:A:277:GLN:H	1:A:281:VAL:HG21	1.84	0.41
1:A:408:TYR:O	1:A:426:LEU:HA	2.20	0.41
1:A:248:GLY:HA2	1:A:275:ASN:OD1	2.20	0.41
1:A:707:LEU:CD1	1:A:746:ILE:CD1	2.98	0.41
1:A:539:ASN:ND2	1:A:853:SER:O	2.46	0.41
1:A:410:THR:HB	1:A:413:GLU:HG3	2.02	0.41
1:A:517:VAL:CG2	1:A:521:PHE:CD2	3.03	0.41
1:A:260:ASN:N	1:A:265:GLU:O	2.53	0.41
1:A:757:ALA:HB2	1:A:763:PHE:CZ	2.55	0.41
1:A:745:GLU:O	1:A:770:LEU:HD13	2.21	0.41
1:A:117:GLU:OE2	1:A:130:TYR:OH	2.36	0.41
1:A:82:ASP:OD2	1:A:84:GLU:N	2.46	0.41
1:A:448:VAL:HG22	1:A:476:ILE:HD11	2.02	0.41
1:A:498:LEU:C	1:A:500:GLY:N	2.73	0.41
1:A:538:THR:HG22	1:A:540:ALA:HB2	2.01	0.41
1:A:715:LYS:HE2	1:A:715:LYS:HB3	1.83	0.41
1:A:92:ARG:HA	1:A:104:ASP:O	2.20	0.41
1:A:137:ILE:O	1:A:196:PHE:CZ	2.74	0.41
1:A:392:ILE:HD11	1:A:485:LEU:CD1	2.48	0.41
1:A:407:VAL:O	1:A:408:TYR:CD2	2.74	0.41
1:A:471:CYS:O	1:A:474:ILE:HG13	2.19	0.41
1:A:137:ILE:HG22	1:A:152:PHE:CE1	2.49	0.41
1:A:335:GLN:HG2	1:A:336:THR:N	2.35	0.41
1:A:76:ASN:C	1:A:78:LYS:H	2.24	0.41
1:A:78:LYS:HB3	1:A:78:LYS:HE2	1.57	0.41
1:A:370:ALA:O	1:A:373:LEU:HD22	2.21	0.41
1:A:22:ALA:HB3	1:A:94:GLY:CA	2.50	0.41
1:A:653:ASP:C	1:A:655:LEU:H	2.23	0.41
1:A:584:VAL:O	1:A:588:GLU:N	2.51	0.41
1:A:592:ASN:CA	1:A:595:ILE:HD12	2.48	0.41
1:A:846:LYS:HD3	1:A:873:ASN:HD21	1.85	0.41
1:A:380:THR:O	1:A:512:THR:HA	2.20	0.41
1:A:235:THR:HG22	1:A:236:ALA:O	2.21	0.41
1:A:103:MET:N	1:A:103:MET:SD	2.89	0.41

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:107:LEU:CD1	1:A:139:MET:SD	3.05	0.41
1:A:373:LEU:HD12	1:A:376:LEU:HD11	2.02	0.41
1:A:147:VAL:HG12	1:A:148:PRO:HD2	2.02	0.41
1:A:4:TRP:HE3	1:A:46:ALA:CB	2.33	0.41
1:A:59:GLN:CD	1:A:59:GLN:H	2.24	0.41
1:A:285:VAL:O	1:A:286:ARG:HB2	2.21	0.41
1:A:668:ARG:CZ	1:A:707:LEU:HG	2.50	0.41
1:A:224:ARG:HH11	1:A:230:PRO:C	2.24	0.41
1:A:224:ARG:HG2	1:A:224:ARG:O	2.21	0.41
1:A:260:ASN:CB	1:A:265:GLU:HB2	2.49	0.41
1:A:855:SER:HB3	1:A:856:PRO:HD2	2.02	0.41
1:A:4:TRP:CZ3	1:A:61:ILE:HD11	2.51	0.41
1:A:93:SER:HG	1:A:104:ASP:H	1.67	0.41
1:A:353:LEU:HA	1:A:353:LEU:HD23	1.93	0.41
1:A:261:PRO:CD	1:A:269:TYR:CD1	2.97	0.41
1:A:298:MET:CG	1:A:301:CYS:HG	2.33	0.41
1:A:627:VAL:HB	1:A:628:PRO:CD	2.50	0.41
1:A:603:LYS:HG2	1:A:687:ALA:CB	2.40	0.41
1:A:224:ARG:CG	1:A:229:ILE:CG2	2.97	0.41
1:A:157:ASP:HA	1:A:160:LYS:HE3	2.02	0.41
1:A:748:ARG:HA	1:A:751:LEU:HB2	2.03	0.41
1:A:204:LEU:CD2	1:A:205:MET:SD	3.09	0.41
1:A:251:SER:O	1:A:275:ASN:N	2.51	0.41
1:A:377:LEU:HD13	1:A:857:PHE:CD1	2.56	0.41
1:A:439:MET:O	1:A:463:MET:SD	2.79	0.41
1:A:160:LYS:HG3	1:A:161:GLU:N	2.36	0.41
1:A:811:LEU:HA	1:A:811:LEU:HD23	1.64	0.41
1:A:432:SER:C	1:A:455:HIS:CE1	2.94	0.41
1:A:415:LYS:HB2	1:A:415:LYS:HE3	1.64	0.40
1:A:420:LYS:HG2	1:A:443:GLU:OE2	2.21	0.40
1:A:445:ILE:HG13	1:A:467:CYS:SG	2.60	0.40
1:A:584:VAL:HG12	1:A:588:GLU:CG	2.51	0.40
1:A:741:GLY:HA3	1:A:762:PHE:CE2	2.56	0.40
1:A:136:PHE:C	1:A:136:PHE:CD2	2.94	0.40
1:A:151:HIS:HB3	1:A:186:VAL:HG21	2.03	0.40
1:A:11:GLY:CA	1:A:15:MET:SD	3.09	0.40
1:A:252:GLY:N	1:A:326:ILE:O	2.54	0.40
1:A:571:ARG:NH2	1:A:601:ASP:OD1	2.52	0.40
1:A:790:TYR:OH	1:A:799:PRO:HD3	2.21	0.40
1:A:157:ASP:O	1:A:160:LYS:HG3	2.21	0.40
1:A:107:LEU:CG	1:A:139:MET:SD	3.09	0.40
1:A:143:VAL:O	1:A:145:MET:N	2.55	0.40

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Distance(Å)	Clash(Å)
1:A:137:ILE:CG2	1:A:183:PHE:HB3	2.29	0.40
1:A:199:GLU:O	1:A:202:ASP:N	2.54	0.40
1:A:140:TYR:CE2	1:A:203:GLN:O	2.71	0.40
1:A:303:LYS:HB2	1:A:303:LYS:HE3	1.77	0.40
1:A:829:GLY:HA3	1:A:851:TYR:CD2	2.56	0.40
1:A:843:PHE:O	1:A:847:VAL:HB	2.20	0.40
1:A:741:GLY:HA3	1:A:762:PHE:CD1	2.56	0.40
1:A:741:GLY:HA3	1:A:762:PHE:CE1	2.56	0.40
1:A:145:MET:C	1:A:146:GLU:HG2	2.41	0.40
1:A:287:THR:HA	1:A:288:PRO:HD2	1.96	0.40
1:A:72:LEU:HA	1:A:72:LEU:HD23	1.63	0.40
1:A:580:LEU:CD1	1:A:637:LEU:HD21	2.46	0.40
1:A:834:HIS:HB3	1:A:840:SER:HG	1.86	0.40
1:A:439:MET:C	1:A:463:MET:SD	3.00	0.40
1:A:183:PHE:HA	1:A:186:VAL:HG12	2.02	0.40
1:A:341:ARG:HB3	1:A:342:THR:H	1.65	0.40
1:A:373:LEU:HD21	1:A:864:LEU:CD1	2.28	0.40
1:A:20:GLY:HA3	1:A:94:GLY:O	2.21	0.40
1:A:564:HIS:CD2	1:A:564:HIS:H	2.39	0.40
1:A:224:ARG:O	1:A:229:ILE:HB	2.22	0.40
1:A:518:SER:OG	1:A:519:GLY:N	2.55	0.40
1:A:775:PHE:CE1	1:A:804:ASP:OD2	2.73	0.40

There are no symmetry-related clashes.

## 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	864/873 (99%)	628 (73%)	149 (17%)	87 (10%)	<b>1</b> <b>2</b>

All (87) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	38	GLN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	55	LYS
1	A	59	GLN
1	A	60	GLU
1	A	96	ARG
1	A	108	ASN
1	A	145	MET
1	A	197	PRO
1	A	212	PHE
1	A	278	GLY
1	A	279	GLU
1	A	291	ILE
1	A	337	ARG
1	A	395	ALA
1	A	419	GLU
1	A	423	ARG
1	A	472	GLY
1	A	473	GLU
1	A	494	ASP
1	A	501	SER
1	A	516	SER
1	A	518	SER
1	A	569	ALA
1	A	572	ILE
1	A	583	SER
1	A	694	GLU
1	A	732	LYS
1	A	734	SER
1	A	782	ALA
1	A	75	LEU
1	A	77	GLY
1	A	139	MET
1	A	151	HIS
1	A	162	GLU
1	A	165	VAL
1	A	180	ALA
1	A	225	ARG
1	A	226	MET
1	A	286	ARG
1	A	304	GLN
1	A	319	MET
1	A	329	GLY
1	A	470	GLY

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	486	GLY
1	A	492	GLU
1	A	499	ASP
1	A	565	MET
1	A	729	LYS
1	A	757	ALA
1	A	841	VAL
1	A	15	MET
1	A	72	LEU
1	A	73	GLU
1	A	80	PHE
1	A	475	LYS
1	A	485	LEU
1	A	502	THR
1	A	636	GLU
1	A	733	GLY
1	A	784	LYS
1	A	804	ASP
1	A	52	ASN
1	A	150	SER
1	A	204	LEU
1	A	421	GLY
1	A	711	LYS
1	A	712	LYS
1	A	871	LEU
1	A	53	SER
1	A	176	LEU
1	A	179	LEU
1	A	218	PRO
1	A	285	VAL
1	A	517	VAL
1	A	620	ASP
1	A	785	PHE
1	A	230	PRO
1	A	265	GLU
1	A	418	HIS
1	A	610	GLU
1	A	832	GLY
1	A	299	PRO
1	A	838	PRO
1	A	20	GLY
1	A	436	ILE

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	144	VAL
1	A	125	ASN

### 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	709/713 (99%)	550 (78%)	159 (22%)	<b>1</b> <b>4</b>

All (159) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	14	SER
1	A	15	MET
1	A	16	ARG
1	A	24	CYS
1	A	26	LEU
1	A	45	GLU
1	A	47	CYS
1	A	57	ILE
1	A	63	ASP
1	A	66	PHE
1	A	69	ILE
1	A	72	LEU
1	A	74	GLU
1	A	76	ASN
1	A	78	LYS
1	A	92	ARG
1	A	98	SER
1	A	111	LEU
1	A	123	THR
1	A	131	ASP
1	A	135	ARG
1	A	138	GLN
1	A	147	VAL
1	A	149	LYS
1	A	150	SER
1	A	155	ILE

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	161	GLU
1	A	166	HIS
1	A	167	PHE
1	A	168	ASP
1	A	169	THR
1	A	170	ASP
1	A	174	ASP
1	A	181	GLU
1	A	191	MET
1	A	194	GLU
1	A	199	GLU
1	A	202	ASP
1	A	209	LYS
1	A	213	ARG
1	A	214	SER
1	A	215	TRP
1	A	217	ASN
1	A	224	ARG
1	A	227	ASN
1	A	232	ASP
1	A	238	ASN
1	A	239	VAL
1	A	240	GLN
1	A	241	THR
1	A	244	PHE
1	A	249	GLU
1	A	251	SER
1	A	253	THR
1	A	277	GLN
1	A	280	ASP
1	A	285	VAL
1	A	287	THR
1	A	291	ILE
1	A	294	LEU
1	A	297	ASP
1	A	298	MET
1	A	300	ASP
1	A	303	LYS
1	A	304	GLN
1	A	307	ASP
1	A	310	MET
1	A	311	LYS

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	312	LEU
1	A	313	GLU
1	A	321	ASP
1	A	322	MET
1	A	330	LYS
1	A	335	GLN
1	A	338	ASN
1	A	341	ARG
1	A	359	ILE
1	A	361	GLU
1	A	366	VAL
1	A	369	GLU
1	A	373	LEU
1	A	374	ASP
1	A	377	LEU
1	A	380	THR
1	A	386	LEU
1	A	391	VAL
1	A	394	SER
1	A	420	LYS
1	A	422	GLU
1	A	427	VAL
1	A	428	ARG
1	A	430	GLU
1	A	440	HIS
1	A	445	ILE
1	A	446	LEU
1	A	447	THR
1	A	448	VAL
1	A	463	MET
1	A	466	CYS
1	A	468	VAL
1	A	469	SER
1	A	475	LYS
1	A	477	ASN
1	A	478	GLU
1	A	485	LEU
1	A	488	HIS
1	A	490	PHE
1	A	492	GLU
1	A	512	THR
1	A	513	GLN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	516	SER
1	A	518	SER
1	A	520	SER
1	A	538	THR
1	A	542	THR
1	A	545	ASP
1	A	551	LYS
1	A	562	THR
1	A	570	ASP
1	A	578	MET
1	A	585	GLU
1	A	616	VAL
1	A	633	GLU
1	A	636	GLU
1	A	641	MET
1	A	653	ASP
1	A	659	ASN
1	A	669	LEU
1	A	692	LYS
1	A	694	GLU
1	A	710	GLU
1	A	711	LYS
1	A	714	LEU
1	A	719	ASP
1	A	730	LYS
1	A	743	MET
1	A	752	THR
1	A	754	ASP
1	A	761	GLU
1	A	771	THR
1	A	773	MET
1	A	777	PHE
1	A	779	ARG
1	A	784	LYS
1	A	796	GLU
1	A	802	ARG
1	A	804	ASP
1	A	817	LYS
1	A	821	GLN
1	A	822	THR
1	A	823	ARG
1	A	834	HIS

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	837	ASP
1	A	853	SER
1	A	864	LEU
1	A	868	GLN
1	A	871	LEU
1	A	872	ASN
1	A	874	LYS

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (22) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	38	GLN
1	A	52	ASN
1	A	56	GLN
1	A	62	GLN
1	A	76	ASN
1	A	151	HIS
1	A	238	ASN
1	A	240	GLN
1	A	289	GLN
1	A	320	GLN
1	A	338	ASN
1	A	348	GLN
1	A	378	HIS
1	A	488	HIS
1	A	564	HIS
1	A	624	HIS
1	A	656	HIS
1	A	659	ASN
1	A	680	GLN
1	A	768	ASN
1	A	772	GLN
1	A	845	HIS

### 5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA chains 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 ⓘ

2 ligands are modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. 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  $|Z| > 2$  is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	$\# Z  > 2$	Counts	RMSZ	$\# Z  > 2$
2	SO4	A	901	-	4,4,4	1.73	1 (25%)	6,6,6	0.52	0
2	SO4	A	902	-	4,4,4	1.94	1 (25%)	6,6,6	0.33	0

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	SO4	A	901	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	A	902	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0

All (2) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	A	902	SO4	O2-S	3.30	1.57	1.47
2	A	901	SO4	O3-S	-2.85	1.37	1.47

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

## 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, 95<sup>th</sup> 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 <sup>2</sup> )	Q<0.9
1	A	868/873 (99%)	0.27	30 (3%) 42 42	8, 28, 41, 53	0

All (30) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	389	GLY	5.7
1	A	2	ALA	4.7
1	A	186	VAL	4.7
1	A	146	GLU	4.7
1	A	43	THR	4.5
1	A	147	VAL	3.6
1	A	196	PHE	3.4
1	A	421	GLY	3.4
1	A	388	ALA	3.1
1	A	76	ASN	3.1
1	A	404	ALA	3.0
1	A	501	SER	3.0
1	A	165	VAL	2.9
1	A	633	GLU	2.7
1	A	360	THR	2.7
1	A	482	THR	2.7
1	A	489	THR	2.6
1	A	17	ASN	2.6
1	A	114	VAL	2.5
1	A	580	LEU	2.5
1	A	408	TYR	2.4
1	A	4	TRP	2.4
1	A	733	GLY	2.4
1	A	485	LEU	2.3
1	A	488	HIS	2.3
1	A	252	GLY	2.2
1	A	483	PHE	2.1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	648	VAL	2.1
1	A	392	ILE	2.0
1	A	384	ALA	2.0

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

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

## 6.3 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

## 6.4 Ligands ⓘ

In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. LLDF column lists the quality of electron density of the group with respect to its neighbouring residues in protein, DNA or RNA chains. The B-factors column lists the minimum, median, 95<sup>th</sup> 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	RSR	LLDF	B-factors( $\text{\AA}^2$ )	Q < 0.9
2	SO4	A	902	5/5	0.29	3.88	59,61,63,64	0
2	SO4	A	901	5/5	0.14	-1.75	45,45,54,56	5

## 6.5 Other polymers ⓘ

There are no such residues in this entry.