



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Jan 31, 2016 – 09:02 PM GMT

PDB ID : 1N7D
Title : Extracellular domain of the LDL receptor
Authors : Rudenko, G.; Henry, L.; Henderson, K.; Ichtchenko, K.; Brown, M.S.; Goldstein, J.L.; Deisenhofer, J.
Deposited on : 2002-11-13
Resolution : 3.70 Å(reported)

This is a Full wwPDB X-ray Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<http://wwpdb.org/validation/2016/XrayValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

MolProbity : 4.02b-467
Mogul : 1.7 (RC4), CSD as536be (2015)
Xtriage (Phenix) : **NOT EXECUTED**
EDS : **NOT EXECUTED**
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : trunk26865

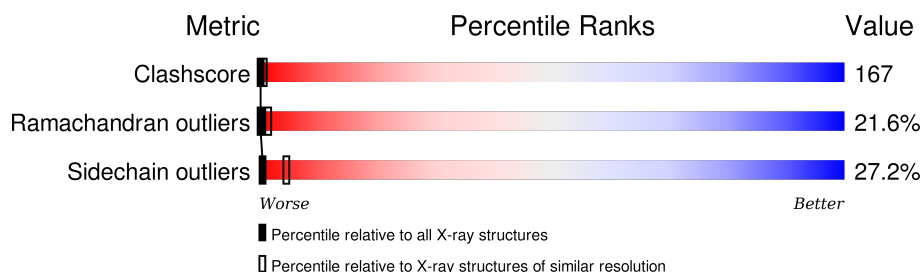
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.70 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	102246	1224 (3.90-3.50)
Ramachandran outliers	100387	1172 (3.90-3.50)
Sidechain outliers	100360	1170 (3.90-3.50)

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

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	699	

The following table lists non-polymeric compounds, carbohydrate monomers and non-standard residues in protein, DNA, RNA chains that are outliers for geometric or electron-density-fit criteria:

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
2	NAG	A	2030	X	-	X	-
3	NAG	A	3030	X	-	X	-
5	KEG	A	6003	-	-	X	-

2 Entry composition

There are 5 unique types of molecules in this entry. The entry contains 4956 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 Low-density lipoprotein receptor.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	639	Total	C	N	O	S	0	0	0
			4702	2874	800	966	62			

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	494	GLN	ASN	ENGINEERED	UNP P01130
A	636	GLN	ASN	ENGINEERED	UNP P01130

- Molecule 2 is a polymer of unknown type called SUGAR (N-ACETYL-D-GLUCOSAMINE).

Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
2	A	5	Total	C	N	O	0	0
			61	34	2	25		

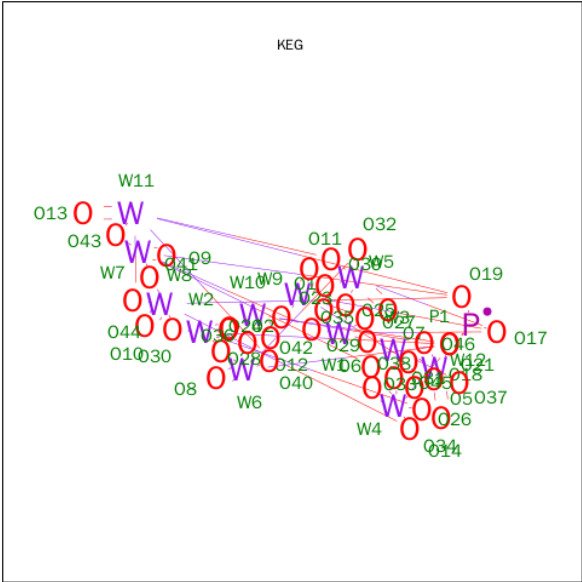
- Molecule 3 is a polymer of unknown type called SUGAR (4-MER).

Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
3	A	4	Total	C	N	O	0	0
			50	28	2	20		

- Molecule 4 is CALCIUM ION (three-letter code: CA) (formula: Ca).

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	A	8	Total	Ca	0	0
			8	8		

- Molecule 5 is 12-TUNGSTOPHOSPHATE (three-letter code: KEG) (formula: O₄₀PW₁₂).



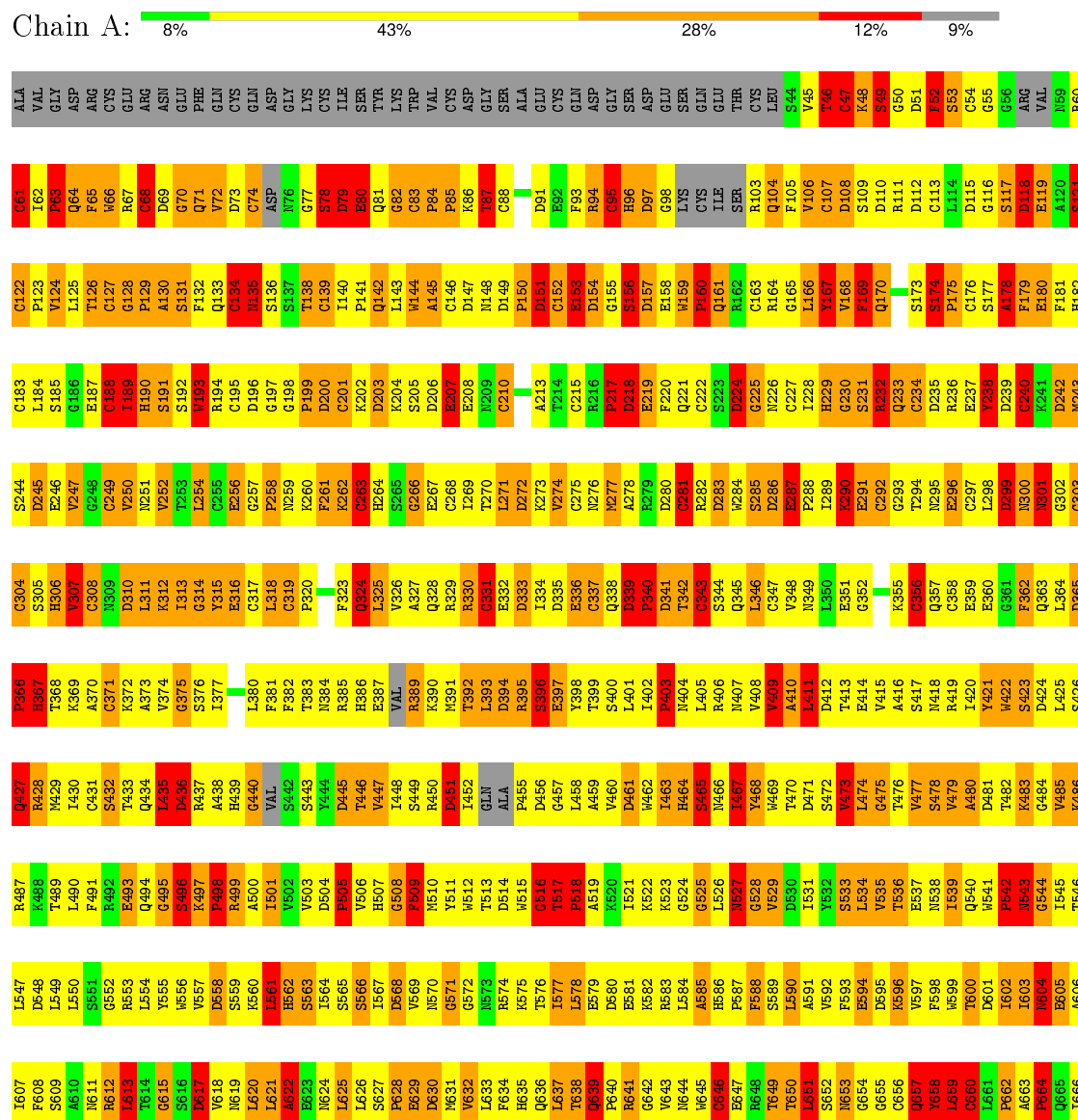
Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
5	A	1	Total	O	P	W	0	0
			53	40	1	12		
5	A	1	Total	O	P	W	0	0
			53	40	1	12		
5	A	1	Total	O	P	W	0	0
			29	21	1	7		

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.

Note EDS was not executed.

- Molecule 1: Low-density lipoprotein receptor



1667	P668	H669	5670	P671	K672	P673	T674	C677	P678	K681	L682	L683	A684	R685	D686	K687	R688	S689	C690	L691	T692	S693	ALA	GLU	ALA	ALA	VAL	ALA
------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	-----	-----	-----	-----	-----	-----

4 Data and refinement statistics

Xtriage (Phenix) and EDS were not executed - this section will therefore be incomplete.

Property	Value	Source
Space group	P 31 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	185.29 Å 185.29 Å 85.19 Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	45.30 – 3.70	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	87.8 (45.30-3.70)	Depositor
R_{merge}	0.09	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
Refinement program	CNS 1.1	Depositor
R, R_{free}	0.381 , 0.382	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	4956	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	124.0	wwPDB-VP

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: KEG, CA, BMA, NAG, MAN

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	0.90	5/4796 (0.1%)	1.77	160/6528 (2.5%)

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	2
2	A	1	0
3	A	1	0
All	All	2	2

All (5) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	343	CYS	CB-SG	-8.68	1.67	1.82
1	A	139	CYS	CB-SG	6.30	1.93	1.82
1	A	356	CYS	CB-SG	-6.30	1.71	1.82
1	A	134	CYS	CB-SG	5.64	1.91	1.82
1	A	190	HIS	N-CA	5.32	1.56	1.46

All (160) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	339	ASP	C-N-CD	-14.47	88.76	120.60
1	A	314	GLY	N-CA-C	-12.66	81.45	113.10
1	A	68	CYS	CA-CB-SG	-12.09	92.23	114.00
1	A	473	VAL	N-CA-C	-11.68	79.47	111.00
1	A	517	THR	C-N-CD	-11.25	95.86	120.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	134	CYS	N-CA-C	-10.87	81.66	111.00
1	A	179	PHE	N-CA-C	-10.50	82.65	111.00
1	A	649	THR	N-CA-C	-10.39	82.95	111.00
1	A	395	ARG	N-CA-C	-10.35	83.05	111.00
1	A	417	SER	N-CA-C	-10.16	83.57	111.00
1	A	445	ASP	N-CA-C	10.12	138.31	111.00
1	A	154	ASP	N-CA-C	9.94	137.83	111.00
1	A	604	ASN	N-CA-C	-9.82	84.49	111.00
1	A	341	ASP	N-CA-C	-9.73	84.72	111.00
1	A	339	ASP	C-N-CA	9.65	162.54	122.00
1	A	509	PHE	N-CA-C	9.61	136.94	111.00
1	A	495	GLY	N-CA-C	-9.54	89.25	113.10
1	A	299	ASP	N-CA-C	-9.52	85.31	111.00
1	A	95	CYS	CA-CB-SG	9.31	130.76	114.00
1	A	201	CYS	N-CA-C	-9.25	86.02	111.00
1	A	245	ASP	N-CA-C	-9.15	86.31	111.00
1	A	46	THR	N-CA-C	-8.85	87.10	111.00
1	A	306	HIS	C-N-CA	8.85	143.81	121.70
1	A	82	GLY	N-CA-C	-8.45	91.99	113.10
1	A	411	LEU	N-CA-C	8.40	133.67	111.00
1	A	375	GLY	N-CA-C	-8.34	92.25	113.10
1	A	118	ASP	N-CA-C	-8.27	88.67	111.00
1	A	230	GLY	N-CA-C	-8.25	92.47	113.10
1	A	660	CYS	N-CA-C	8.25	133.28	111.00
1	A	603	ILE	CA-C-N	-8.21	99.13	117.20
1	A	188	CYS	N-CA-C	7.99	132.57	111.00
1	A	153	GLU	C-N-CA	7.95	141.59	121.70
1	A	313	ILE	N-CA-C	7.92	132.38	111.00
1	A	561	LEU	N-CA-C	-7.90	89.66	111.00
1	A	339	ASP	N-CA-C	7.80	132.06	111.00
1	A	230	GLY	C-N-CA	-7.80	102.21	121.70
1	A	303	GLY	N-CA-C	-7.74	93.75	113.10
1	A	52	PHE	N-CA-C	7.74	131.89	111.00
1	A	638	THR	N-CA-C	-7.65	90.34	111.00
1	A	409	VAL	N-CA-C	7.62	131.56	111.00
1	A	94	ARG	N-CA-C	-7.60	90.47	111.00
1	A	324	GLN	N-CA-C	7.48	131.20	111.00
1	A	474	LEU	CA-CB-CG	-7.39	98.30	115.30
1	A	659	LEU	N-CA-C	7.38	130.93	111.00
1	A	340	PRO	CA-N-CD	-7.37	101.19	111.50
1	A	180	GLU	N-CA-C	7.35	130.84	111.00
1	A	131	SER	N-CA-C	7.34	130.82	111.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	603	ILE	C-N-CA	7.34	140.05	121.70
1	A	346	LEU	N-CA-C	7.34	130.81	111.00
1	A	168	VAL	N-CA-C	7.33	130.78	111.00
1	A	134	CYS	CA-CB-SG	7.31	127.16	114.00
1	A	233	GLN	N-CA-C	7.25	130.58	111.00
1	A	578	LEU	N-CA-C	7.22	130.51	111.00
1	A	229	HIS	N-CA-C	7.22	130.49	111.00
1	A	443	SER	N-CA-C	7.16	130.32	111.00
1	A	498	PRO	N-CA-C	7.13	130.63	112.10
1	A	615	GLY	N-CA-C	-7.08	95.39	113.10
1	A	629	GLU	N-CA-C	7.06	130.06	111.00
1	A	290	LYS	CA-C-N	-7.01	101.78	117.20
1	A	77	GLY	N-CA-C	-7.00	95.60	113.10
1	A	290	LYS	N-CA-C	-6.99	92.12	111.00
1	A	467	ILE	N-CA-C	6.95	129.75	111.00
1	A	170	GLN	N-CA-C	6.92	129.68	111.00
1	A	646	CYS	N-CA-C	-6.89	92.40	111.00
1	A	78	SER	N-CA-C	6.81	129.40	111.00
1	A	144	TRP	N-CA-C	-6.81	92.62	111.00
1	A	318	LEU	N-CA-C	6.77	129.27	111.00
1	A	166	LEU	N-CA-C	6.76	129.25	111.00
1	A	121	SER	N-CA-C	-6.74	92.81	111.00
1	A	518	PRO	N-CA-C	-6.73	94.59	112.10
1	A	653	ASN	N-CA-C	-6.68	92.97	111.00
1	A	189	ILE	N-CA-C	6.67	129.00	111.00
1	A	307	VAL	N-CA-C	6.67	129.00	111.00
1	A	367	HIS	N-CA-C	-6.63	93.10	111.00
1	A	330	ARG	N-CA-C	6.61	128.84	111.00
1	A	213	ALA	N-CA-C	6.59	128.80	111.00
1	A	529	VAL	N-CA-C	6.54	128.67	111.00
1	A	48	LYS	N-CA-C	-6.54	93.34	111.00
1	A	417	SER	C-N-CA	-6.49	105.47	121.70
1	A	464	HIS	N-CA-C	-6.48	93.50	111.00
1	A	628	PRO	N-CA-C	6.48	128.94	112.10
1	A	617	ASP	N-CA-C	-6.44	93.62	111.00
1	A	163	CYS	N-CA-C	-6.43	93.63	111.00
1	A	306	HIS	CA-C-N	-6.42	103.07	117.20
1	A	525	GLY	N-CA-C	-6.36	97.21	113.10
1	A	130	ALA	C-N-CA	-6.34	105.85	121.70
1	A	331	CYS	N-CA-C	6.33	128.09	111.00
1	A	80	GLU	N-CA-C	-6.32	93.94	111.00
1	A	83	CYS	N-CA-C	6.28	127.95	111.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	66	TRP	N-CA-C	-6.27	94.08	111.00
1	A	622	ALA	C-N-CA	-6.26	106.04	121.70
1	A	427	GLN	N-CA-C	-6.24	94.15	111.00
1	A	95	CYS	N-CA-C	-6.20	94.26	111.00
1	A	281	CYS	N-CA-C	-6.20	94.26	111.00
1	A	547	LEU	CA-CB-CG	6.19	129.54	115.30
1	A	217	PRO	N-CA-C	6.15	128.09	112.10
1	A	658	TYR	N-CA-C	-6.11	94.51	111.00
1	A	200	ASP	N-CA-C	6.07	127.40	111.00
1	A	446	THR	N-CA-C	6.02	127.25	111.00
1	A	366	PRO	N-CA-C	6.01	127.72	112.10
1	A	161	GLN	N-CA-C	-6.00	94.80	111.00
1	A	272	ASP	N-CA-C	-5.98	94.86	111.00
1	A	210	CYS	N-CA-C	-5.97	94.88	111.00
1	A	461	ASP	N-CA-C	-5.95	94.94	111.00
1	A	61	CYS	N-CA-C	5.95	127.05	111.00
1	A	637	LEU	CA-CB-CG	-5.94	101.64	115.30
1	A	544	GLY	N-CA-C	-5.93	98.27	113.10
1	A	477	VAL	N-CA-C	-5.89	95.09	111.00
1	A	516	GLY	N-CA-C	-5.87	98.42	113.10
1	A	79	ASP	N-CA-C	5.85	126.80	111.00
1	A	459	ALA	N-CA-C	-5.84	95.22	111.00
1	A	286	ASP	N-CA-C	-5.77	95.42	111.00
1	A	151	ASP	N-CA-C	-5.76	95.44	111.00
1	A	603	ILE	O-C-N	5.75	131.90	122.70
1	A	301	ASN	N-CA-C	-5.75	95.48	111.00
1	A	287	GLU	C-N-CD	5.75	140.47	128.40
1	A	435	LEU	N-CA-C	5.75	126.52	111.00
1	A	480	ALA	C-N-CA	-5.67	107.52	121.70
1	A	436	ASP	N-CA-C	-5.66	95.72	111.00
1	A	153	GLU	CB-CA-C	5.61	121.62	110.40
1	A	660	CYS	CA-CB-SG	5.60	124.08	114.00
1	A	263	CYS	N-CA-C	-5.58	95.92	111.00
1	A	262	LYS	N-CA-C	-5.58	95.94	111.00
1	A	300	ASN	N-CA-C	-5.56	95.98	111.00
1	A	518	PRO	CA-N-CD	-5.54	103.74	111.50
1	A	306	HIS	O-C-N	5.54	131.56	122.70
1	A	274	VAL	N-CA-C	5.53	125.93	111.00
1	A	691	LEU	CA-CB-CG	-5.52	102.60	115.30
1	A	440	GLY	N-CA-C	-5.52	99.30	113.10
1	A	87	THR	N-CA-C	5.50	125.84	111.00
1	A	174	SER	N-CA-C	5.42	125.64	111.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	190	HIS	CB-CA-C	-5.42	99.57	110.40
1	A	604	ASN	CB-CA-C	-5.41	99.57	110.40
1	A	263	CYS	CA-CB-SG	5.38	123.69	114.00
1	A	527	ASN	N-CA-C	-5.38	96.47	111.00
1	A	423	SER	C-N-CA	-5.35	108.33	121.70
1	A	169	PHE	N-CA-C	5.34	125.42	111.00
1	A	473	VAL	C-N-CA	-5.34	108.35	121.70
1	A	224	ASP	N-CA-C	-5.32	96.64	111.00
1	A	543	ASN	N-CA-C	5.31	125.33	111.00
1	A	199	PRO	C-N-CA	-5.30	108.45	121.70
1	A	396	SER	N-CA-C	5.29	125.28	111.00
1	A	613	LEU	CA-CB-CG	-5.28	103.15	115.30
1	A	156	SER	N-CA-C	5.28	125.24	111.00
1	A	145	ALA	CA-C-N	-5.27	105.61	117.20
1	A	657	GLN	N-CA-C	-5.26	96.80	111.00
1	A	175	PRO	N-CA-C	5.25	125.75	112.10
1	A	167	TYR	N-CA-C	5.20	125.03	111.00
1	A	639	GLN	N-CA-CB	-5.19	101.26	110.60
1	A	178	ALA	N-CA-C	5.18	124.99	111.00
1	A	331	CYS	CA-C-N	-5.15	105.87	117.20
1	A	496	SER	C-N-CA	-5.12	108.89	121.70
1	A	558	ASP	N-CA-C	-5.09	97.25	111.00
1	A	151	ASP	C-N-CA	-5.09	108.98	121.70
1	A	340	PRO	CA-CB-CG	-5.07	94.36	104.00
1	A	252	VAL	N-CA-C	-5.07	97.31	111.00
1	A	268	CYS	N-CA-C	-5.04	97.38	111.00
1	A	483	LYS	N-CA-C	-5.04	97.38	111.00
1	A	356	CYS	CA-CB-SG	5.04	123.07	114.00
1	A	232	ARG	N-CA-C	-5.04	97.41	111.00

All (2) chirality outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atom
2	A	2030	NAG	C1
3	A	3030	NAG	C1

All (2) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	167	TYR	Sidechain
1	A	468	TYR	Sidechain

5.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	4702	0	4113	1510	4
2	A	61	0	50	25	0
3	A	50	0	43	31	0
4	A	8	0	0	0	0
5	A	135	0	0	19	12
All	All	4956	0	4206	1527	16

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 167.

All (1527) 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:586:HIS:CB	1:A:602:ILE:HG21	1.37	1.55
1:A:251:ASN:CA	3:A:3030:NAG:H82	1.11	1.54
1:A:586:HIS:HB2	1:A:602:ILE:CG2	1.39	1.51
1:A:251:ASN:HB3	3:A:3030:NAG:C8	1.41	1.48
1:A:251:ASN:HB3	3:A:3030:NAG:C7	1.43	1.47
1:A:519:ALA:CB	1:A:539:ILE:HG23	1.46	1.45
1:A:251:ASN:CB	3:A:3030:NAG:N2	1.78	1.45
1:A:251:ASN:CG	3:A:3030:NAG:N2	1.75	1.40
1:A:251:ASN:CB	3:A:3030:NAG:C8	2.00	1.38
1:A:251:ASN:CB	3:A:3030:NAG:HN2	1.31	1.38
1:A:391:MET:CE	1:A:621:LEU:HD21	1.56	1.35
1:A:251:ASN:CB	3:A:3030:NAG:H82	1.56	1.33
1:A:593:PHE:CD1	1:A:633:LEU:HD21	1.63	1.32
1:A:185:SER:CB	1:A:203:ASP:HB2	1.57	1.32
1:A:660:CYS:HB2	1:A:673:PHE:CE2	1.65	1.31
1:A:251:ASN:CA	3:A:3030:NAG:C8	2.07	1.31
1:A:508:GLY:O	1:A:526:LEU:HB3	1.30	1.28
1:A:132:PHE:CD2	1:A:156:SER:HB2	1.70	1.26
1:A:251:ASN:HB3	3:A:3030:NAG:N2	1.37	1.25
1:A:611:ASN:HB3	1:A:615:GLY:O	1.14	1.25
1:A:519:ALA:HB3	1:A:539:ILE:CG2	1.67	1.24
1:A:135:ASN:CG	2:A:2030:NAG:C1	2.04	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:195:CYS:HA	1:A:207:GLU:CB	1.68	1.24
1:A:467:ILE:O	1:A:479:VAL:HA	1.39	1.23
1:A:389:ARG:HA	1:A:401:LEU:N	1.50	1.22
1:A:305:SER:HB3	1:A:330:ARG:CB	1.68	1.22
1:A:325:LEU:O	1:A:331:CYS:HB3	1.37	1.22
1:A:554:LEU:O	1:A:566:SER:HA	1.42	1.20
1:A:585:ALA:HB3	1:A:602:ILE:HD11	1.19	1.17
1:A:251:ASN:HD21	3:A:3030:NAG:C1	1.49	1.17
1:A:275:CYS:HA	1:A:287:GLU:HG2	1.22	1.17
1:A:507:HIS:HB3	1:A:509:PHE:CD1	1.80	1.16
1:A:585:ALA:CB	1:A:602:ILE:HD11	1.73	1.16
1:A:342:THR:HG23	1:A:347:CYS:CB	1.76	1.16
1:A:193:TRP:CE3	1:A:582:LYS:HE2	1.79	1.16
1:A:498:PRO:HG3	1:A:513:THR:O	1.46	1.16
1:A:622:ALA:HB1	1:A:625:LEU:CD2	1.75	1.16
1:A:251:ASN:C	3:A:3030:NAG:H82	1.67	1.16
1:A:339:ASP:OD1	1:A:342:THR:HG21	1.43	1.16
1:A:562:HIS:C	1:A:584:LEU:HD21	1.64	1.15
1:A:222:CYS:SG	1:A:244:SER:HB2	1.87	1.15
1:A:251:ASN:CB	3:A:3030:NAG:C7	2.11	1.15
1:A:185:SER:HB2	1:A:203:ASP:CB	1.74	1.15
1:A:317:CYS:O	1:A:318:LEU:HD23	1.47	1.14
1:A:152:CYS:SG	1:A:155:GLY:N	2.18	1.14
1:A:411:LEU:H	1:A:411:LEU:CD2	1.54	1.13
1:A:185:SER:HB2	1:A:203:ASP:HB2	1.15	1.13
1:A:409:VAL:O	1:A:409:VAL:HG12	1.48	1.13
1:A:500:ALA:HB3	1:A:513:THR:OG1	1.45	1.13
1:A:481:ASP:HB2	1:A:486:LYS:HB2	1.22	1.12
1:A:133:GLN:O	2:A:2030:NAG:C8	1.96	1.12
1:A:588:PHE:HB3	1:A:629:GLU:CG	1.78	1.12
1:A:132:PHE:CE2	2:A:2030:NAG:H81	1.84	1.11
1:A:234:CYS:HA	1:A:246:GLU:HG3	1.29	1.11
1:A:654:GLY:N	1:A:659:LEU:HD12	1.63	1.11
1:A:231:SER:C	1:A:233:GLN:H	1.38	1.11
1:A:65:PHE:O	1:A:69:ASP:HB3	1.50	1.10
1:A:468:TYR:CE2	1:A:526:LEU:HD13	1.84	1.10
1:A:150:PRO:HA	1:A:158:GLU:OE1	1.52	1.09
1:A:588:PHE:HB3	1:A:629:GLU:HG3	1.20	1.09
1:A:294:THR:OG1	1:A:312:LYS:HA	1.50	1.09
1:A:654:GLY:H	1:A:659:LEU:HD12	0.95	1.09
1:A:663:ALA:CB	1:A:672:LYS:HA	1.81	1.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:663:ALA:HB3	1:A:672:LYS:CA	1.82	1.08
1:A:468:TYR:OH	1:A:526:LEU:CD2	2.01	1.08
1:A:275:CYS:HA	1:A:287:GLU:CG	1.83	1.08
1:A:467:ILE:HG12	1:A:468:TYR:H	1.09	1.08
1:A:195:CYS:HA	1:A:207:GLU:HB2	1.15	1.07
1:A:339:ASP:HA	1:A:342:THR:HB	1.37	1.07
1:A:622:ALA:HB1	1:A:625:LEU:HD21	1.27	1.07
1:A:411:LEU:H	1:A:411:LEU:HD23	0.92	1.07
1:A:653:ASN:CB	1:A:659:LEU:HD13	1.84	1.07
1:A:468:TYR:OH	1:A:526:LEU:CD1	2.02	1.06
1:A:152:CYS:O	1:A:154:ASP:N	1.88	1.06
1:A:464:HIS:HB3	1:A:466:ASN:HD22	1.14	1.06
1:A:392:THR:HB	1:A:395:ARG:O	1.53	1.06
1:A:249:CYS:O	1:A:250:VAL:HG23	1.56	1.05
1:A:305:SER:HB3	1:A:330:ARG:HB3	1.29	1.05
1:A:166:LEU:O	1:A:167:TYR:HD1	1.39	1.05
1:A:653:ASN:HB2	1:A:659:LEU:HD13	1.11	1.05
1:A:391:MET:HE1	1:A:621:LEU:HD21	1.10	1.05
1:A:251:ASN:HA	3:A:3030:NAG:H82	1.06	1.05
1:A:134:CYS:O	1:A:136:SER:N	1.90	1.04
1:A:594:GLU:HA	1:A:594:GLU:OE1	1.55	1.04
1:A:183:CYS:HB2	1:A:205:SER:HB3	1.38	1.04
1:A:421:TYR:CD2	1:A:432:SER:HB2	1.92	1.04
1:A:342:THR:HG23	1:A:347:CYS:HB2	1.05	1.04
1:A:593:PHE:HD1	1:A:633:LEU:CD2	1.69	1.03
1:A:548:ASP:HB3	1:A:552:GLY:HA3	1.06	1.03
1:A:301:ASN:HD21	1:A:308:CYS:HB3	1.25	1.02
1:A:559:SER:HB3	1:A:586:HIS:HA	1.36	1.02
1:A:270:THR:CG2	1:A:272:ASP:H	1.72	1.02
1:A:411:LEU:N	1:A:411:LEU:HD23	1.71	1.02
1:A:585:ALA:HB3	1:A:602:ILE:CD1	1.90	1.02
1:A:74:CYS:HB3	1:A:78:SER:OG	1.59	1.02
1:A:236:ARG:H	1:A:246:GLU:HG2	1.20	1.02
1:A:300:ASN:C	1:A:302:GLY:H	1.44	1.01
1:A:519:ALA:O	1:A:539:ILE:HG21	1.58	1.01
1:A:242:ASP:OD1	1:A:243:MET:N	1.91	1.01
1:A:133:GLN:O	2:A:2030:NAG:H81	1.60	1.01
1:A:527:ASN:O	1:A:529:VAL:HG23	1.59	1.01
1:A:467:ILE:HG22	1:A:480:ALA:O	1.61	1.01
1:A:236:ARG:N	1:A:246:GLU:HG2	1.75	1.01
1:A:456:ASP:O	1:A:499:ARG:HA	1.62	1.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:251:ASN:CG	3:A:3030:NAG:C1	2.28	1.00
1:A:185:SER:OG	1:A:203:ASP:HB2	1.61	1.00
1:A:358:CYS:CB	1:A:362:PHE:HB3	1.92	1.00
1:A:270:THR:HG22	1:A:272:ASP:H	1.25	1.00
1:A:600:THR:HG21	1:A:628:PRO:O	1.61	1.00
1:A:134:CYS:C	1:A:136:SER:H	1.61	1.00
1:A:505:PRO:O	1:A:506:VAL:HG12	1.59	0.99
1:A:622:ALA:CB	1:A:625:LEU:HD21	1.91	0.99
1:A:325:LEU:O	1:A:331:CYS:CB	2.10	0.99
1:A:554:LEU:N	1:A:567:ILE:O	1.95	0.99
1:A:607:ILE:C	1:A:608:PHE:HD2	1.66	0.99
1:A:251:ASN:ND2	3:A:3030:NAG:C2	2.26	0.99
1:A:585:ALA:CB	1:A:602:ILE:CD1	2.40	0.99
1:A:146:CYS:HA	1:A:157:ASP:CA	1.92	0.98
1:A:586:HIS:HB3	1:A:588:PHE:CE1	1.98	0.98
1:A:358:CYS:HB3	1:A:362:PHE:HB3	0.99	0.98
1:A:195:CYS:CA	1:A:207:GLU:HB3	1.92	0.98
1:A:543:ASN:ND2	1:A:559:SER:OG	1.96	0.98
1:A:612:ARG:O	1:A:613:LEU:HD13	1.64	0.98
1:A:195:CYS:CA	1:A:207:GLU:CB	2.41	0.98
1:A:141:PRO:O	1:A:143:LEU:N	1.96	0.98
1:A:559:SER:HA	1:A:587:PRO:HD2	1.43	0.98
1:A:611:ASN:CB	1:A:615:GLY:O	2.10	0.98
1:A:240:CYS:SG	1:A:242:ASP:HB3	2.04	0.98
1:A:364:LEU:HD11	1:A:369:LYS:HA	1.44	0.97
1:A:654:GLY:H	1:A:659:LEU:CD1	1.77	0.97
1:A:507:HIS:HB3	1:A:509:PHE:CE1	1.99	0.97
1:A:660:CYS:HB2	1:A:673:PHE:HE2	1.17	0.97
1:A:264:HIS:HB3	1:A:285:SER:HB3	1.45	0.97
1:A:251:ASN:C	3:A:3030:NAG:C8	2.29	0.97
1:A:548:ASP:HB3	1:A:552:GLY:CA	1.94	0.97
1:A:391:MET:SD	1:A:621:LEU:HD21	2.04	0.97
1:A:510:MET:CG	1:A:524:GLY:HA3	1.94	0.96
1:A:418:ASN:O	1:A:434:GLN:HA	1.63	0.96
1:A:639:GLN:H	1:A:640:PRO:HD3	1.30	0.96
1:A:132:PHE:HD2	1:A:156:SER:HB2	1.26	0.96
1:A:339:ASP:CA	1:A:342:THR:HB	1.94	0.96
1:A:160:PRO:HB3	1:A:166:LEU:HD21	1.47	0.96
1:A:342:THR:CG2	1:A:343:CYS:N	2.28	0.96
1:A:195:CYS:N	1:A:207:GLU:HB3	1.78	0.96
1:A:578:LEU:O	1:A:578:LEU:HG	1.63	0.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:87:THR:HG22	1:A:88:CYS:H	1.30	0.96
1:A:295:ASN:HA	1:A:310:ASP:OD2	1.64	0.95
1:A:157:ASP:O	1:A:158:GLU:HG3	1.66	0.95
1:A:107:CYS:CB	1:A:119:GLU:HG3	1.97	0.95
1:A:391:MET:HE1	1:A:621:LEU:CD2	1.96	0.95
1:A:629:GLU:HG2	1:A:629:GLU:O	1.66	0.95
1:A:135:ASN:HD22	2:A:2030:NAG:C1	1.79	0.95
1:A:468:TYR:CZ	1:A:526:LEU:HD13	2.02	0.95
1:A:358:CYS:HB3	1:A:362:PHE:CB	1.95	0.95
1:A:286:ASP:C	1:A:287:GLU:HG3	1.85	0.94
1:A:133:GLN:O	2:A:2030:NAG:H82	1.67	0.94
1:A:593:PHE:HD1	1:A:633:LEU:HD21	0.97	0.94
1:A:663:ALA:HB3	1:A:672:LYS:HA	0.95	0.94
1:A:409:VAL:O	1:A:409:VAL:CG1	2.11	0.94
1:A:134:CYS:SG	1:A:154:ASP:C	2.46	0.94
1:A:421:TYR:HD2	1:A:432:SER:HB2	1.28	0.94
1:A:342:THR:HG22	1:A:343:CYS:N	1.81	0.94
1:A:135:ASN:ND2	2:A:2030:NAG:O5	1.98	0.94
1:A:340:PRO:HA	1:A:342:THR:O	1.66	0.94
1:A:548:ASP:CB	1:A:552:GLY:HA3	1.98	0.94
1:A:510:MET:HG2	1:A:524:GLY:HA3	1.50	0.93
1:A:231:SER:C	1:A:233:GLN:N	2.20	0.93
1:A:305:SER:CB	1:A:330:ARG:CB	2.46	0.93
1:A:339:ASP:N	1:A:342:THR:HB	1.83	0.93
1:A:469:TRP:CZ3	1:A:480:ALA:HB2	2.03	0.93
1:A:515:TRP:HB3	1:A:542:PRO:HD2	1.48	0.93
1:A:588:PHE:CE1	1:A:602:ILE:HG22	2.03	0.93
1:A:467:ILE:HG12	1:A:468:TYR:N	1.78	0.93
1:A:238:TYR:CE2	1:A:243:MET:HA	2.04	0.93
1:A:133:GLN:HG2	1:A:138:THR:H	1.33	0.93
1:A:185:SER:CB	1:A:203:ASP:CB	2.39	0.93
1:A:481:ASP:HB2	1:A:486:LYS:CB	1.99	0.93
1:A:110:ASP:H	1:A:119:GLU:CD	1.71	0.93
1:A:342:THR:CG2	1:A:347:CYS:HB2	1.98	0.92
1:A:605:GLU:HB2	1:A:624:ASN:HA	1.51	0.92
1:A:107:CYS:HB2	1:A:119:GLU:HG3	1.52	0.92
1:A:263:CYS:SG	1:A:266:GLY:HA3	2.09	0.92
1:A:467:ILE:O	1:A:479:VAL:CA	2.17	0.92
1:A:468:TYR:CZ	1:A:526:LEU:CD1	2.53	0.92
1:A:192:SER:O	1:A:194:ARG:N	2.02	0.92
1:A:468:TYR:CE2	1:A:526:LEU:CD1	2.51	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:107:CYS:HB2	1:A:119:GLU:CA	2.00	0.91
1:A:325:LEU:O	1:A:326:VAL:HG12	1.71	0.91
1:A:499:ARG:NH2	1:A:629:GLU:O	2.04	0.91
1:A:640:PRO:O	1:A:641:ARG:HB2	1.71	0.91
1:A:660:CYS:HB2	1:A:673:PHE:CZ	2.04	0.91
1:A:517:THR:N	1:A:518:PRO:HD2	1.85	0.91
1:A:132:PHE:CE2	1:A:156:SER:HB2	2.06	0.91
1:A:310:ASP:HB2	1:A:315:TYR:HA	1.54	0.90
1:A:338:GLN:O	1:A:341:ASP:HB2	1.72	0.90
1:A:474:LEU:O	1:A:494:GLN:HA	1.70	0.90
1:A:588:PHE:HD2	1:A:629:GLU:OE2	1.53	0.90
1:A:251:ASN:CG	3:A:3030:NAG:C2	2.40	0.90
1:A:613:LEU:O	1:A:615:GLY:N	2.04	0.90
1:A:95:CYS:C	1:A:97:ASP:H	1.73	0.90
1:A:485:VAL:O	1:A:486:LYS:HG2	1.71	0.90
1:A:275:CYS:CA	1:A:287:GLU:HG2	2.01	0.90
1:A:73:ASP:O	1:A:74:CYS:HB2	1.70	0.90
1:A:115:ASP:OD2	1:A:117:SER:HB2	1.72	0.90
1:A:519:ALA:CB	1:A:539:ILE:CG2	2.39	0.90
1:A:84:PRO:HB2	1:A:85:PRO:CD	2.02	0.90
1:A:190:HIS:O	1:A:193:TRP:CD1	2.25	0.90
1:A:384:ASN:HB2	1:A:626:LEU:O	1.72	0.90
1:A:595:ASP:HA	1:A:612:ARG:HD3	1.53	0.90
1:A:238:TYR:CZ	1:A:243:MET:HB3	2.07	0.90
1:A:464:HIS:HB3	1:A:466:ASN:ND2	1.86	0.89
1:A:66:TRP:O	1:A:79:ASP:HB2	1.71	0.89
1:A:515:TRP:O	1:A:516:GLY:O	1.90	0.89
1:A:554:LEU:O	1:A:566:SER:CA	2.19	0.89
1:A:201:CYS:SG	1:A:205:SER:HB2	2.11	0.89
1:A:251:ASN:CG	3:A:3030:NAG:C7	2.36	0.89
1:A:291:GLU:OE1	1:A:291:GLU:HA	1.71	0.89
1:A:451:ASP:OD2	1:A:487:ARG:NH1	2.04	0.89
1:A:134:CYS:SG	1:A:154:ASP:CA	2.61	0.89
1:A:496:SER:O	1:A:498:PRO:HD2	1.71	0.89
1:A:588:PHE:CB	1:A:629:GLU:HG3	2.00	0.89
1:A:251:ASN:HA	3:A:3030:NAG:C8	1.89	0.89
1:A:54:CYS:SG	1:A:55:GLY:N	2.46	0.89
1:A:427:GLN:HG3	1:A:429:MET:SD	2.13	0.89
1:A:107:CYS:HB2	1:A:119:GLU:HA	1.54	0.89
1:A:562:HIS:O	1:A:584:LEU:HD21	1.72	0.88
1:A:300:ASN:C	1:A:302:GLY:N	2.20	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:238:TYR:OH	1:A:243:MET:HB3	1.72	0.88
1:A:107:CYS:SG	1:A:107:CYS:O	2.31	0.88
1:A:333:ASP:HB3	1:A:351:GLU:HG2	1.54	0.88
1:A:514:ASP:O	1:A:542:PRO:HG2	1.71	0.88
1:A:507:HIS:HB3	1:A:509:PHE:HD1	1.36	0.88
1:A:118:ASP:O	1:A:119:GLU:HB2	1.71	0.88
1:A:48:LYS:O	1:A:50:GLY:N	2.05	0.88
1:A:586:HIS:O	1:A:602:ILE:CG2	2.21	0.88
1:A:553:ARG:HB2	1:A:567:ILE:C	1.94	0.88
1:A:105:PHE:O	1:A:107:CYS:N	2.06	0.88
1:A:150:PRO:CA	1:A:158:GLU:OE1	2.21	0.88
1:A:468:TYR:OH	1:A:526:LEU:HD11	1.72	0.88
1:A:326:VAL:HG23	1:A:328:GLN:H	1.38	0.88
1:A:183:CYS:HB2	1:A:205:SER:CB	2.04	0.88
1:A:641:ARG:HG3	1:A:642:GLY:H	1.37	0.88
1:A:166:LEU:O	1:A:167:TYR:CD1	2.26	0.88
1:A:557:VAL:HG13	1:A:590:LEU:HD13	1.54	0.87
1:A:613:LEU:C	1:A:615:GLY:H	1.77	0.87
1:A:259:ASN:O	1:A:270:THR:HB	1.73	0.87
1:A:289:ILE:HA	1:A:292:CYS:HB2	1.56	0.87
1:A:342:THR:CG2	1:A:343:CYS:H	1.87	0.87
1:A:410:ALA:HB1	1:A:457:GLY:HA2	1.54	0.87
1:A:73:ASP:O	1:A:79:ASP:OD1	1.93	0.87
1:A:291:GLU:C	1:A:293:GLY:H	1.78	0.87
1:A:333:ASP:OD1	1:A:351:GLU:HA	1.73	0.87
1:A:607:ILE:C	1:A:608:PHE:CD2	2.48	0.87
1:A:176:CYS:O	1:A:178:ALA:N	2.07	0.87
1:A:633:LEU:HG	1:A:634:PHE:H	1.38	0.87
1:A:269:ILE:HD13	1:A:280:ASP:O	1.75	0.86
1:A:526:LEU:HD23	1:A:662:PRO:HG2	1.57	0.86
1:A:261:PHE:HD2	1:A:262:LYS:N	1.72	0.86
1:A:658:TYR:CZ	1:A:678:PRO:HD3	2.11	0.86
1:A:677:CYS:HB3	1:A:678:PRO:HD2	1.55	0.86
1:A:497:LYS:O	1:A:515:TRP:CH2	2.29	0.86
1:A:499:ARG:HG2	1:A:499:ARG:O	1.72	0.86
1:A:462:TRP:CD2	1:A:639:GLN:HG3	2.11	0.86
1:A:468:TYR:OH	1:A:526:LEU:HD21	1.75	0.86
1:A:374:VAL:HG22	1:A:375:GLY:H	1.39	0.86
1:A:251:ASN:HB3	3:A:3030:NAG:H83	1.53	0.85
1:A:339:ASP:OD1	1:A:342:THR:CG2	2.24	0.85
1:A:263:CYS:HB3	1:A:267:GLU:H	1.40	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:559:SER:CB	1:A:586:HIS:HA	2.05	0.85
1:A:301:ASN:ND2	1:A:308:CYS:HB3	1.90	0.85
1:A:48:LYS:HG3	1:A:61:CYS:HB2	1.58	0.85
1:A:193:TRP:N	1:A:193:TRP:CD1	2.38	0.85
1:A:109:SER:HA	1:A:119:GLU:HG2	1.58	0.85
1:A:164:ARG:HG2	1:A:165:GLY:H	1.38	0.85
1:A:389:ARG:HA	1:A:401:LEU:H	1.40	0.85
1:A:427:GLN:O	1:A:429:MET:N	2.09	0.85
1:A:392:THR:CG2	1:A:395:ARG:HG3	2.07	0.85
1:A:465:SER:OG	1:A:482:THR:HG21	1.76	0.84
1:A:390:LYS:N	1:A:399:THR:O	2.09	0.84
1:A:589:SER:HB2	1:A:600:THR:H	1.42	0.84
1:A:600:THR:CG2	1:A:628:PRO:O	2.24	0.84
1:A:195:CYS:HA	1:A:207:GLU:HB3	1.55	0.84
1:A:65:PHE:C	1:A:67:ARG:N	2.25	0.84
1:A:411:LEU:N	1:A:411:LEU:CD2	2.34	0.84
1:A:427:GLN:HG3	1:A:429:MET:CG	2.07	0.84
1:A:527:ASN:OD1	1:A:674:THR:OG1	1.95	0.84
1:A:391:MET:CE	1:A:621:LEU:CD2	2.50	0.84
1:A:242:ASP:CG	1:A:243:MET:H	1.81	0.84
1:A:629:GLU:O	1:A:629:GLU:CG	2.25	0.83
1:A:588:PHE:HE1	1:A:602:ILE:HG22	1.39	0.83
1:A:343:CYS:H	1:A:347:CYS:HB2	1.43	0.83
1:A:464:HIS:O	1:A:466:ASN:N	2.12	0.83
1:A:317:CYS:C	1:A:318:LEU:HD23	1.99	0.83
1:A:627:SER:N	1:A:628:PRO:HD3	1.92	0.83
1:A:301:ASN:HD22	1:A:304:CYS:HB3	1.44	0.83
1:A:625:LEU:HB2	1:A:628:PRO:CG	2.09	0.82
1:A:133:GLN:C	2:A:2030:NAG:H82	2.00	0.82
1:A:462:TRP:CD1	1:A:463:ILE:HG23	2.14	0.82
1:A:536:THR:O	1:A:537:GLU:HB2	1.79	0.82
1:A:195:CYS:H	1:A:207:GLU:HB3	1.39	0.82
1:A:517:THR:H	1:A:518:PRO:HD2	1.44	0.82
1:A:588:PHE:O	1:A:629:GLU:HG3	1.79	0.82
1:A:599:TRP:CZ3	1:A:601:ASP:OD2	2.32	0.82
1:A:638:THR:O	1:A:639:GLN:HB2	1.80	0.82
1:A:263:CYS:CB	1:A:267:GLU:H	1.93	0.82
1:A:566:SER:O	1:A:575:LYS:N	2.13	0.82
1:A:362:PHE:CG	1:A:373:ALA:HB2	2.15	0.81
1:A:150:PRO:O	1:A:586:HIS:CE1	2.33	0.81
1:A:251:ASN:ND2	3:A:3030:NAG:N2	2.26	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:586:HIS:CB	1:A:602:ILE:CG2	2.20	0.81
1:A:362:PHE:HE1	1:A:637:LEU:HD22	1.44	0.81
1:A:681:MET:HA	1:A:691:LEU:O	1.80	0.81
1:A:261:PHE:HD2	1:A:262:LYS:H	1.29	0.81
1:A:298:LEU:HD23	1:A:301:ASN:CB	2.10	0.81
1:A:512:TRP:O	1:A:521:ILE:HG23	1.80	0.81
1:A:604:ASN:O	1:A:606:ALA:N	2.13	0.81
1:A:585:ALA:HB1	1:A:602:ILE:HD11	1.63	0.81
1:A:607:ILE:O	1:A:608:PHE:HD2	1.63	0.81
1:A:221:GLN:OE1	1:A:225:GLY:HA2	1.80	0.81
1:A:270:THR:HG22	1:A:271:LEU:N	1.96	0.81
1:A:180:GLU:CD	1:A:189:ILE:O	2.19	0.81
1:A:135:ASN:CB	2:A:2030:NAG:C1	2.59	0.81
1:A:337:CYS:C	1:A:342:THR:OG1	2.19	0.81
1:A:519:ALA:HB3	1:A:539:ILE:HG23	0.81	0.80
1:A:557:VAL:HG21	1:A:587:PRO:HB2	1.61	0.80
1:A:65:PHE:C	1:A:67:ARG:H	1.83	0.80
1:A:427:GLN:NE2	1:A:429:MET:SD	2.52	0.80
1:A:448:ILE:O	1:A:448:ILE:HG23	1.81	0.80
1:A:236:ARG:H	1:A:246:GLU:CG	1.92	0.80
1:A:310:ASP:CB	1:A:315:TYR:HA	2.11	0.80
1:A:152:CYS:SG	1:A:154:ASP:HA	2.22	0.80
1:A:576:THR:O	1:A:577:ILE:HG12	1.82	0.80
1:A:260:LYS:HA	1:A:270:THR:OG1	1.81	0.80
1:A:288:PRO:O	1:A:292:CYS:HB2	1.82	0.80
1:A:62:ILE:HG23	1:A:63:PRO:HD2	1.61	0.80
1:A:517:THR:N	1:A:518:PRO:CD	2.45	0.80
1:A:461:ASP:HB3	1:A:466:ASN:O	1.81	0.80
1:A:222:CYS:SG	1:A:244:SER:CB	2.68	0.80
1:A:496:SER:C	1:A:498:PRO:HD2	2.01	0.79
1:A:149:ASP:OD1	1:A:586:HIS:NE2	2.15	0.79
1:A:506:VAL:HG13	1:A:507:HIS:CD2	2.17	0.79
1:A:468:TYR:OH	1:A:526:LEU:CG	2.29	0.79
1:A:539:ILE:HD13	1:A:540:GLN:H	1.47	0.79
1:A:231:SER:OG	1:A:233:GLN:CB	2.31	0.79
1:A:151:ASP:HB2	1:A:541:TRP:CZ3	2.18	0.79
1:A:504:ASP:OD1	1:A:507:HIS:HD2	1.66	0.79
1:A:238:TYR:CE2	1:A:243:MET:CA	2.65	0.79
1:A:146:CYS:HA	1:A:157:ASP:O	1.82	0.79
1:A:401:LEU:O	1:A:403:PRO:HD3	1.82	0.79
1:A:193:TRP:N	1:A:193:TRP:HD1	1.81	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:60:ARG:C	1:A:61:CYS:SG	2.61	0.79
1:A:611:ASN:ND2	1:A:615:GLY:HA3	1.97	0.79
1:A:391:MET:SD	1:A:621:LEU:CD2	2.72	0.79
1:A:543:ASN:HB3	1:A:557:VAL:HG23	1.63	0.79
1:A:263:CYS:HB3	1:A:267:GLU:O	1.83	0.78
1:A:264:HIS:HB3	1:A:285:SER:CB	2.12	0.78
1:A:305:SER:CB	1:A:330:ARG:CA	2.61	0.78
1:A:146:CYS:HA	1:A:157:ASP:C	2.02	0.78
1:A:519:ALA:HB1	1:A:539:ILE:HG23	1.63	0.78
1:A:497:LYS:HB2	1:A:515:TRP:CE2	2.19	0.78
1:A:656:CYS:HB2	1:A:659:LEU:CA	2.13	0.78
1:A:633:LEU:HG	1:A:634:PHE:N	1.98	0.78
1:A:242:ASP:CG	1:A:243:MET:N	2.32	0.78
1:A:160:PRO:CB	1:A:166:LEU:HD21	2.14	0.78
1:A:625:LEU:HB2	1:A:628:PRO:HG2	1.64	0.78
1:A:468:TYR:HE2	1:A:526:LEU:HD13	1.47	0.78
1:A:342:THR:HG23	1:A:343:CYS:H	1.49	0.78
1:A:519:ALA:O	1:A:539:ILE:CG2	2.32	0.78
1:A:521:ILE:HG22	1:A:522:LYS:N	1.99	0.78
1:A:206:ASP:O	1:A:208:GLU:N	2.16	0.78
1:A:146:CYS:HA	1:A:157:ASP:HA	1.66	0.77
1:A:53:SER:CB	1:A:61:CYS:H	1.97	0.77
1:A:134:CYS:SG	1:A:154:ASP:N	2.57	0.77
1:A:74:CYS:CB	1:A:78:SER:OG	2.31	0.77
1:A:507:HIS:O	1:A:509:PHE:N	2.17	0.77
1:A:499:ARG:NH2	1:A:629:GLU:HG2	1.98	0.77
1:A:103:ARG:HB2	5:A:6002:KEG:O13	1.84	0.77
1:A:474:LEU:HD13	1:A:497:LYS:HD3	1.65	0.77
1:A:656:CYS:O	1:A:659:LEU:HB3	1.84	0.77
1:A:280:ASP:N	1:A:286:ASP:OD2	2.13	0.77
1:A:157:ASP:C	1:A:158:GLU:HG3	2.05	0.77
1:A:514:ASP:CG	1:A:515:TRP:N	2.36	0.77
1:A:507:HIS:CB	1:A:509:PHE:CD1	2.66	0.77
1:A:435:LEU:O	1:A:436:ASP:CG	2.24	0.77
1:A:94:ARG:C	1:A:95:CYS:O	2.19	0.77
1:A:251:ASN:HB3	3:A:3030:NAG:HN2	1.12	0.77
1:A:389:ARG:HA	1:A:401:LEU:CA	2.15	0.76
1:A:586:HIS:HB3	1:A:588:PHE:CZ	2.19	0.76
1:A:529:VAL:HG12	1:A:529:VAL:O	1.84	0.76
1:A:283:ASP:C	1:A:285:SER:H	1.86	0.76
1:A:51:ASP:O	1:A:52:PHE:HB2	1.84	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:392:THR:HG22	1:A:395:ARG:HE	1.51	0.76
1:A:510:MET:HG3	1:A:524:GLY:HA3	1.67	0.76
1:A:456:ASP:O	1:A:499:ARG:CA	2.32	0.76
1:A:132:PHE:CE2	1:A:133:GLN:O	2.38	0.76
1:A:421:TYR:HA	1:A:422:TRP:HE3	1.50	0.76
1:A:508:GLY:HA3	1:A:664:PRO:HA	1.65	0.76
1:A:435:LEU:O	1:A:436:ASP:OD2	2.03	0.76
1:A:586:HIS:CA	1:A:602:ILE:HG21	2.15	0.76
1:A:612:ARG:O	1:A:612:ARG:HG2	1.83	0.76
1:A:383:THR:O	1:A:628:PRO:HA	1.85	0.76
1:A:656:CYS:HB2	1:A:659:LEU:HB2	1.67	0.76
1:A:238:TYR:HE2	1:A:243:MET:CA	1.99	0.76
1:A:508:GLY:HA3	1:A:664:PRO:CA	2.16	0.75
1:A:262:LYS:O	1:A:264:HIS:N	2.19	0.75
1:A:305:SER:HB3	1:A:330:ARG:CA	2.16	0.75
1:A:537:GLU:HG2	1:A:538:ASN:N	2.00	0.75
1:A:462:TRP:HD1	1:A:463:ILE:HG23	1.49	0.75
1:A:526:LEU:O	1:A:526:LEU:HG	1.86	0.75
1:A:185:SER:HB2	1:A:203:ASP:HB3	1.66	0.75
1:A:592:VAL:O	1:A:592:VAL:HG23	1.87	0.75
1:A:159:TRP:HA	1:A:159:TRP:CE3	2.21	0.75
1:A:580:ASP:O	1:A:584:LEU:HD23	1.86	0.75
1:A:298:LEU:C	1:A:300:ASN:N	2.38	0.75
1:A:594:GLU:OE1	1:A:594:GLU:CA	2.35	0.75
1:A:298:LEU:HD23	1:A:301:ASN:HB2	1.67	0.75
1:A:169:PHE:HD2	1:A:170:GLN:H	1.35	0.75
1:A:236:ARG:CA	1:A:246:GLU:HG2	2.16	0.75
1:A:115:ASP:O	1:A:117:SER:N	2.19	0.75
1:A:500:ALA:HB3	1:A:513:THR:HG1	1.49	0.74
1:A:465:SER:CB	1:A:482:THR:HG21	2.17	0.74
1:A:330:ARG:HG3	1:A:330:ARG:O	1.85	0.74
1:A:427:GLN:HG3	1:A:429:MET:HG2	1.68	0.74
1:A:427:GLN:O	1:A:429:MET:HG2	1.88	0.74
1:A:658:TYR:CE2	1:A:678:PRO:HD3	2.21	0.74
1:A:620:LEU:HD23	1:A:620:LEU:N	2.02	0.74
1:A:296:GLU:O	1:A:299:ASP:HB2	1.87	0.74
1:A:629:GLU:O	1:A:630:ASP:HB2	1.84	0.74
1:A:506:VAL:O	1:A:506:VAL:HG13	1.87	0.74
1:A:656:CYS:HB2	1:A:659:LEU:CB	2.17	0.74
1:A:250:VAL:O	1:A:251:ASN:C	2.23	0.74
1:A:134:CYS:C	1:A:136:SER:N	2.32	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:78:SER:HA	1:A:82:GLY:CA	2.16	0.74
1:A:300:ASN:O	1:A:303:GLY:N	2.17	0.73
1:A:345:GLN:NE2	1:A:594:GLU:HG3	2.03	0.73
1:A:622:ALA:HB1	1:A:625:LEU:HD22	1.65	0.73
1:A:507:HIS:O	1:A:508:GLY:C	2.26	0.73
1:A:310:ASP:OD1	1:A:315:TYR:HA	1.88	0.73
1:A:337:CYS:SG	1:A:349:ASN:HB2	2.27	0.73
1:A:238:TYR:CE2	1:A:243:MET:HB3	2.23	0.73
1:A:132:PHE:CZ	2:A:2030:NAG:O7	2.41	0.73
1:A:256:GLU:O	1:A:258:PRO:N	2.22	0.73
1:A:570:ASN:O	1:A:571:GLY:C	2.26	0.73
1:A:653:ASN:CA	1:A:659:LEU:HD13	2.19	0.73
1:A:586:HIS:O	1:A:602:ILE:HG23	1.89	0.73
1:A:653:ASN:CA	1:A:659:LEU:CD1	2.67	0.73
1:A:301:ASN:HA	1:A:304:CYS:CB	2.19	0.73
1:A:310:ASP:OD1	1:A:311:LEU:N	2.22	0.73
1:A:319:CYS:HB2	1:A:331:CYS:H	1.53	0.73
1:A:316:GLU:HG2	1:A:318:LEU:HG	1.70	0.72
1:A:490:LEU:HD13	1:A:528:GLY:HA2	1.71	0.72
1:A:561:LEU:O	1:A:563:SER:N	2.21	0.72
1:A:568:ASP:C	1:A:570:ASN:H	1.93	0.72
1:A:537:GLU:HG2	1:A:538:ASN:H	1.55	0.72
1:A:296:GLU:OE1	1:A:315:TYR:HB2	1.89	0.72
1:A:131:SER:OG	1:A:132:PHE:N	2.19	0.72
1:A:687:MET:O	1:A:688:ARG:HG3	1.89	0.72
1:A:234:CYS:HA	1:A:246:GLU:CG	2.16	0.72
1:A:239:ASP:O	1:A:240:CYS:HB3	1.88	0.72
1:A:421:TYR:HA	1:A:422:TRP:CE3	2.25	0.72
1:A:639:GLN:N	1:A:640:PRO:HD3	1.95	0.72
1:A:71:GLN:H	1:A:80:GLU:CB	2.02	0.72
1:A:410:ALA:CB	1:A:457:GLY:HA2	2.20	0.71
1:A:151:ASP:HB2	1:A:541:TRP:HZ3	1.54	0.71
1:A:263:CYS:SG	1:A:267:GLU:N	2.63	0.71
1:A:328:GLN:C	1:A:329:ARG:HG2	2.11	0.71
1:A:179:PHE:O	1:A:180:GLU:CD	2.28	0.71
1:A:84:PRO:O	1:A:85:PRO:C	2.27	0.71
1:A:127:CYS:HB3	1:A:131:SER:OG	1.89	0.71
1:A:344:SER:O	1:A:345:GLN:OE1	2.06	0.71
1:A:468:TYR:HE2	1:A:526:LEU:CD1	1.99	0.71
1:A:301:ASN:HA	1:A:304:CYS:HB2	1.73	0.71
1:A:557:VAL:HB	1:A:587:PRO:HG2	1.72	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:251:ASN:HB2	3:A:3030:NAG:HN2	1.47	0.71
1:A:270:THR:CG2	1:A:271:LEU:H	2.03	0.71
1:A:234:CYS:SG	1:A:246:GLU:HA	2.29	0.71
1:A:526:LEU:CD2	1:A:662:PRO:HG2	2.19	0.71
1:A:245:ASP:C	1:A:246:GLU:OE1	2.29	0.71
1:A:115:ASP:C	1:A:117:SER:H	1.94	0.71
1:A:107:CYS:HB2	1:A:119:GLU:CG	2.21	0.71
1:A:421:TYR:HD2	1:A:432:SER:CB	2.01	0.71
1:A:308:CYS:SG	1:A:308:CYS:O	2.49	0.71
1:A:305:SER:CB	1:A:330:ARG:HB2	2.21	0.71
1:A:219:GLU:HB2	1:A:228:ILE:O	1.89	0.71
1:A:576:THR:C	1:A:577:ILE:HG12	2.11	0.71
1:A:603:ILE:HG22	1:A:605:GLU:OE2	1.91	0.71
1:A:135:ASN:HD22	2:A:2030:NAG:C5	2.03	0.71
1:A:296:GLU:H	1:A:296:GLU:CD	1.93	0.71
1:A:481:ASP:OD1	1:A:482:THR:N	2.15	0.70
1:A:438:ALA:O	1:A:440:GLY:N	2.24	0.70
1:A:588:PHE:CD2	1:A:629:GLU:OE2	2.42	0.70
1:A:362:PHE:HE1	1:A:637:LEU:CD2	2.03	0.70
1:A:95:CYS:C	1:A:97:ASP:N	2.42	0.70
1:A:557:VAL:CG2	1:A:587:PRO:HB2	2.22	0.70
1:A:270:THR:HG22	1:A:272:ASP:N	2.04	0.70
1:A:311:LEU:O	1:A:313:ILE:N	2.25	0.70
1:A:107:CYS:CA	1:A:119:GLU:HG3	2.21	0.70
1:A:519:ALA:C	1:A:539:ILE:HG21	2.10	0.70
1:A:507:HIS:CB	1:A:509:PHE:HD1	2.04	0.70
1:A:190:HIS:O	1:A:193:TRP:NE1	2.24	0.70
1:A:243:MET:O	1:A:247:VAL:HG13	1.92	0.70
1:A:252:VAL:N	3:A:3030:NAG:C8	2.54	0.70
1:A:286:ASP:OD1	1:A:287:GLU:HG3	1.91	0.70
1:A:235:ASP:OD1	1:A:237:GLU:HB2	1.92	0.70
1:A:647:GLU:O	1:A:651:LEU:HD11	1.92	0.70
1:A:47:CYS:O	1:A:48:LYS:C	2.29	0.69
1:A:164:ARG:HG2	1:A:165:GLY:N	2.07	0.69
1:A:682:LEU:N	1:A:690:CYS:HB3	2.07	0.69
1:A:505:PRO:O	1:A:506:VAL:CG1	2.38	0.69
1:A:291:GLU:C	1:A:293:GLY:N	2.46	0.69
1:A:392:THR:HG22	1:A:395:ARG:HG3	1.73	0.69
1:A:328:GLN:O	1:A:329:ARG:HG2	1.91	0.69
1:A:482:THR:HG22	1:A:483:LYS:HG2	1.73	0.69
1:A:337:CYS:HB2	1:A:349:ASN:HB3	1.74	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:599:TRP:HZ3	1:A:601:ASP:OD2	1.74	0.69
1:A:296:GLU:O	1:A:299:ASP:CB	2.40	0.69
1:A:521:ILE:O	1:A:533:SER:HA	1.91	0.69
1:A:206:ASP:OD1	1:A:207:GLU:HG2	1.92	0.69
1:A:383:THR:HG23	1:A:411:LEU:CD2	2.22	0.69
1:A:384:ASN:HA	1:A:627:SER:O	1.92	0.69
1:A:585:ALA:HB1	1:A:602:ILE:CD1	2.18	0.69
1:A:135:ASN:HB3	2:A:2030:NAG:C1	2.22	0.69
1:A:612:ARG:O	1:A:612:ARG:CG	2.40	0.69
1:A:84:PRO:HB2	1:A:85:PRO:HD2	1.74	0.69
1:A:108:ASP:OD1	1:A:108:ASP:N	2.25	0.69
1:A:660:CYS:CB	1:A:673:PHE:CE2	2.60	0.69
1:A:362:PHE:CE1	1:A:637:LEU:CD2	2.75	0.69
1:A:462:TRP:CZ2	1:A:505:PRO:HG2	2.27	0.68
1:A:281:CYS:C	1:A:283:ASP:H	1.96	0.68
1:A:594:GLU:OE1	1:A:612:ARG:NH1	2.26	0.68
1:A:95:CYS:O	1:A:97:ASP:N	2.27	0.68
1:A:660:CYS:CB	1:A:673:PHE:HE2	1.98	0.68
1:A:243:MET:O	1:A:247:VAL:CG1	2.41	0.68
1:A:132:PHE:CD2	1:A:133:GLN:N	2.62	0.68
1:A:337:CYS:SG	1:A:348:VAL:C	2.72	0.68
1:A:362:PHE:HA	1:A:373:ALA:CB	2.23	0.68
1:A:159:TRP:HA	1:A:159:TRP:HE3	1.57	0.68
1:A:208:GLU:HA	1:A:208:GLU:OE1	1.91	0.68
1:A:233:GLN:HA	1:A:245:ASP:OD1	1.93	0.68
1:A:510:MET:O	1:A:524:GLY:N	2.27	0.68
1:A:515:TRP:C	1:A:516:GLY:O	2.31	0.68
1:A:132:PHE:CE2	2:A:2030:NAG:C8	2.71	0.68
1:A:462:TRP:CE2	1:A:505:PRO:HG2	2.29	0.68
1:A:527:ASN:O	1:A:529:VAL:N	2.23	0.68
1:A:270:THR:CG2	1:A:271:LEU:N	2.56	0.68
1:A:326:VAL:HG23	1:A:328:GLN:N	2.09	0.68
1:A:348:VAL:HG22	1:A:355:LYS:O	1.94	0.68
1:A:71:GLN:O	1:A:80:GLU:OE1	2.12	0.68
1:A:144:TRP:CZ3	1:A:541:TRP:HE3	2.12	0.67
1:A:421:TYR:CE2	1:A:432:SER:HB2	2.29	0.67
1:A:469:TRP:HZ3	1:A:480:ALA:N	1.91	0.67
1:A:356:CYS:O	1:A:357:GLN:CG	2.42	0.67
1:A:611:ASN:HD22	1:A:615:GLY:HA3	1.57	0.67
1:A:362:PHE:CD1	1:A:373:ALA:CB	2.77	0.67
1:A:143:LEU:C	1:A:144:TRP:HD1	1.97	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:382:PHE:HB3	1:A:631:MET:HG2	1.75	0.67
1:A:307:VAL:HG12	1:A:307:VAL:O	1.92	0.67
1:A:219:GLU:HB2	1:A:229:HIS:HB2	1.75	0.67
1:A:475:GLY:HA3	1:A:493:GLU:O	1.94	0.67
1:A:147:ASP:OD1	1:A:157:ASP:OD2	2.13	0.67
1:A:589:SER:OG	1:A:630:ASP:HA	1.94	0.67
1:A:605:GLU:HB3	1:A:625:LEU:N	2.09	0.67
1:A:422:TRP:CE3	1:A:422:TRP:N	2.62	0.67
1:A:469:TRP:CH2	1:A:480:ALA:HB2	2.30	0.67
1:A:597:VAL:O	1:A:609:SER:HA	1.94	0.67
1:A:562:HIS:HB3	1:A:584:LEU:HD23	1.75	0.67
1:A:414:GLU:OE1	1:A:462:TRP:HB3	1.93	0.67
1:A:337:CYS:SG	1:A:349:ASN:CB	2.82	0.67
1:A:578:LEU:O	1:A:578:LEU:CG	2.35	0.67
1:A:133:GLN:HG2	1:A:138:THR:N	2.07	0.67
1:A:270:THR:HG23	1:A:272:ASP:H	1.59	0.67
1:A:147:ASP:N	1:A:147:ASP:OD1	2.28	0.67
1:A:383:THR:CG2	1:A:411:LEU:HD22	2.24	0.67
1:A:356:CYS:O	1:A:357:GLN:HG3	1.94	0.67
1:A:169:PHE:CD2	1:A:170:GLN:N	2.63	0.66
1:A:607:ILE:HG12	1:A:625:LEU:CD1	2.24	0.66
1:A:427:GLN:OE1	1:A:427:GLN:HA	1.95	0.66
1:A:641:ARG:HG3	1:A:642:GLY:N	2.10	0.66
1:A:298:LEU:HA	1:A:301:ASN:H	1.61	0.66
1:A:259:ASN:O	1:A:270:THR:CB	2.43	0.66
1:A:273:LYS:O	1:A:273:LYS:HG2	1.93	0.66
1:A:346:LEU:O	1:A:346:LEU:HG	1.93	0.66
1:A:585:ALA:C	1:A:602:ILE:HD13	2.16	0.66
1:A:304:CYS:HA	1:A:317:CYS:HB3	1.77	0.66
1:A:562:HIS:CA	1:A:584:LEU:HD21	2.25	0.66
1:A:133:GLN:C	2:A:2030:NAG:C8	2.62	0.66
1:A:334:ILE:HG23	1:A:336:GLU:OE2	1.96	0.66
1:A:588:PHE:HB3	1:A:629:GLU:CB	2.26	0.66
1:A:176:CYS:C	1:A:178:ALA:N	2.47	0.66
1:A:155:GLY:HA2	1:A:159:TRP:CB	2.25	0.66
1:A:559:SER:OG	1:A:587:PRO:N	2.29	0.66
1:A:656:CYS:HB2	1:A:659:LEU:HA	1.78	0.66
1:A:654:GLY:N	1:A:659:LEU:CD1	2.45	0.66
1:A:269:ILE:O	1:A:269:ILE:HG13	1.94	0.66
1:A:269:ILE:O	1:A:270:THR:OG1	2.10	0.66
1:A:294:THR:HA	1:A:296:GLU:OE2	1.96	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:503:VAL:HA	1:A:510:MET:HA	1.75	0.66
1:A:72:VAL:HA	1:A:80:GLU:OE2	1.95	0.66
1:A:169:PHE:HD2	1:A:170:GLN:N	1.93	0.66
1:A:250:VAL:O	1:A:252:VAL:HG23	1.96	0.66
1:A:588:PHE:CD2	1:A:629:GLU:CD	2.69	0.65
1:A:48:LYS:CG	1:A:61:CYS:HB2	2.26	0.65
1:A:261:PHE:CD2	1:A:262:LYS:N	2.60	0.65
1:A:190:HIS:O	1:A:192:SER:N	2.30	0.65
1:A:256:GLU:O	1:A:258:PRO:HD2	1.97	0.65
1:A:499:ARG:CG	1:A:499:ARG:O	2.45	0.65
1:A:430:ILE:HG12	1:A:448:ILE:HG22	1.78	0.65
1:A:193:TRP:HE3	1:A:582:LYS:HE2	1.49	0.65
1:A:411:LEU:HD23	1:A:630:ASP:HB3	1.78	0.65
1:A:600:THR:CG2	1:A:601:ASP:N	2.59	0.65
1:A:275:CYS:HA	1:A:287:GLU:CB	2.26	0.65
1:A:117:SER:O	1:A:118:ASP:HB3	1.94	0.65
1:A:139:CYS:C	1:A:140:ILE:HG13	2.16	0.65
1:A:562:HIS:O	1:A:584:LEU:CD2	2.45	0.65
1:A:634:PHE:CD2	1:A:635:HIS:N	2.64	0.65
1:A:270:THR:HG22	1:A:271:LEU:H	1.57	0.65
1:A:147:ASP:OD2	1:A:560:LYS:HE2	1.97	0.65
1:A:421:TYR:HB3	1:A:431:CYS:O	1.96	0.65
1:A:271:LEU:HB2	1:A:273:LYS:HB2	1.79	0.65
1:A:289:ILE:HG23	1:A:289:ILE:O	1.97	0.65
1:A:298:LEU:HD23	1:A:301:ASN:HB3	1.76	0.65
1:A:374:VAL:HG22	1:A:375:GLY:N	2.12	0.65
1:A:147:ASP:O	1:A:158:GLU:OE2	2.14	0.65
1:A:251:ASN:OD1	3:A:3030:NAG:C1	2.44	0.65
1:A:553:ARG:CB	1:A:567:ILE:C	2.65	0.65
1:A:190:HIS:HB2	1:A:193:TRP:HE1	1.62	0.65
1:A:684:ALA:O	1:A:686:ASP:N	2.27	0.65
1:A:132:PHE:CD2	2:A:2030:NAG:H81	2.30	0.64
1:A:481:ASP:HB2	1:A:486:LYS:CG	2.26	0.64
1:A:298:LEU:HA	1:A:301:ASN:HB2	1.77	0.64
1:A:508:GLY:O	1:A:526:LEU:CB	2.25	0.64
1:A:509:PHE:HA	1:A:524:GLY:O	1.97	0.64
1:A:496:SER:O	1:A:498:PRO:CD	2.43	0.64
1:A:496:SER:OG	1:A:496:SER:O	1.99	0.64
1:A:583:ARG:O	1:A:599:TRP:HH2	1.80	0.64
1:A:462:TRP:CE3	1:A:639:GLN:HG3	2.33	0.64
1:A:605:GLU:CB	1:A:624:ASN:HA	2.26	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:66:TRP:C	1:A:79:ASP:HB2	2.17	0.64
1:A:66:TRP:O	1:A:79:ASP:O	2.16	0.64
1:A:367:HIS:O	1:A:368:THR:HG23	1.96	0.64
1:A:539:ILE:HD13	1:A:540:GLN:N	2.11	0.64
1:A:392:THR:O	1:A:394:ASP:N	2.30	0.64
1:A:135:ASN:HB3	2:A:2030:NAG:N2	2.12	0.64
1:A:159:TRP:O	1:A:161:GLN:N	2.31	0.64
1:A:521:ILE:CG2	1:A:522:LYS:N	2.61	0.64
1:A:514:ASP:O	1:A:542:PRO:CG	2.44	0.64
1:A:261:PHE:O	1:A:263:CYS:N	2.28	0.64
1:A:206:ASP:CG	1:A:207:GLU:H	2.02	0.64
1:A:256:GLU:O	1:A:258:PRO:CD	2.46	0.64
1:A:256:GLU:C	1:A:258:PRO:HD2	2.18	0.64
1:A:607:ILE:HG12	1:A:625:LEU:HD11	1.80	0.63
1:A:298:LEU:C	1:A:300:ASN:H	1.99	0.63
1:A:557:VAL:CG1	1:A:590:LEU:HD13	2.25	0.63
1:A:482:THR:HG22	1:A:483:LYS:CG	2.28	0.63
1:A:74:CYS:HB3	1:A:78:SER:HG	1.61	0.63
1:A:362:PHE:HA	1:A:373:ALA:HB2	1.81	0.63
1:A:521:ILE:HG22	1:A:522:LYS:H	1.61	0.63
1:A:588:PHE:HD2	1:A:629:GLU:CD	2.02	0.63
1:A:134:CYS:SG	1:A:155:GLY:N	2.71	0.63
1:A:333:ASP:CB	1:A:351:GLU:HG2	2.27	0.63
1:A:68:CYS:SG	1:A:80:GLU:CA	2.87	0.63
1:A:103:ARG:HG3	1:A:104:GLN:N	2.13	0.63
1:A:625:LEU:HD23	1:A:625:LEU:N	2.12	0.63
1:A:310:ASP:CG	1:A:315:TYR:HA	2.19	0.63
1:A:345:GLN:NE2	1:A:612:ARG:NH2	2.46	0.63
1:A:622:ALA:O	1:A:625:LEU:HD21	1.98	0.63
1:A:135:ASN:OD1	1:A:135:ASN:N	2.29	0.63
1:A:391:MET:HE3	1:A:621:LEU:HD11	1.80	0.63
1:A:504:ASP:O	1:A:507:HIS:HB2	1.99	0.63
1:A:299:ASP:OD1	1:A:299:ASP:O	2.16	0.63
1:A:316:GLU:HG2	1:A:318:LEU:CG	2.29	0.63
1:A:324:GLN:H	1:A:334:ILE:HG22	1.63	0.63
1:A:182:HIS:ND1	1:A:187:GLU:OE1	2.32	0.63
1:A:658:TYR:CD2	1:A:677:CYS:HA	2.34	0.63
1:A:155:GLY:HA2	1:A:159:TRP:HB3	1.81	0.62
1:A:310:ASP:HB2	1:A:315:TYR:CA	2.27	0.62
1:A:345:GLN:CB	1:A:371:CYS:HB2	2.28	0.62
1:A:554:LEU:H	1:A:567:ILE:C	1.98	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:629:GLU:O	1:A:630:ASP:CB	2.47	0.62
1:A:651:LEU:HD13	1:A:653:ASN:O	1.99	0.62
1:A:261:PHE:O	1:A:267:GLU:O	2.16	0.62
1:A:314:GLY:O	1:A:316:GLU:N	2.20	0.62
1:A:224:ASP:O	1:A:226:ASN:N	2.33	0.62
1:A:153:GLU:HA	1:A:153:GLU:OE1	1.98	0.62
1:A:514:ASP:CG	1:A:515:TRP:H	2.03	0.62
1:A:534:LEU:HG	1:A:535:VAL:N	2.13	0.62
1:A:527:ASN:OD1	1:A:674:THR:CB	2.47	0.62
1:A:305:SER:CB	1:A:330:ARG:HA	2.29	0.62
1:A:493:GLU:HA	1:A:493:GLU:OE1	1.98	0.62
1:A:381:PHE:O	1:A:631:MET:HG2	2.00	0.62
1:A:525:GLY:HA2	1:A:664:PRO:HG3	1.82	0.62
1:A:314:GLY:C	1:A:316:GLU:H	2.01	0.62
1:A:340:PRO:HG2	1:A:613:LEU:CD2	2.29	0.62
1:A:392:THR:HG22	1:A:395:ARG:NE	2.14	0.62
1:A:411:LEU:HD21	1:A:630:ASP:O	2.00	0.62
1:A:613:LEU:C	1:A:615:GLY:N	2.39	0.62
1:A:499:ARG:O	1:A:500:ALA:HB2	1.98	0.62
1:A:501:ILE:HG22	1:A:512:TRP:HB2	1.82	0.62
1:A:586:HIS:O	1:A:588:PHE:CD1	2.53	0.62
1:A:447:VAL:O	1:A:448:ILE:HG22	1.99	0.62
1:A:684:ALA:HB3	1:A:686:ASP:OD1	2.00	0.62
1:A:249:CYS:O	1:A:250:VAL:CG2	2.42	0.62
1:A:298:LEU:CA	1:A:301:ASN:HB2	2.30	0.62
1:A:305:SER:HB3	1:A:330:ARG:HB2	1.71	0.62
1:A:83:CYS:SG	1:A:84:PRO:HD2	2.40	0.62
1:A:451:ASP:CG	1:A:487:ARG:HH12	2.02	0.62
1:A:53:SER:HB3	1:A:61:CYS:H	1.63	0.62
1:A:539:ILE:HD11	1:A:542:PRO:HG3	1.82	0.61
1:A:562:HIS:HB3	1:A:584:LEU:CD2	2.29	0.61
1:A:484:GLY:O	1:A:485:VAL:HG22	2.00	0.61
1:A:653:ASN:HA	1:A:659:LEU:CD1	2.29	0.61
1:A:231:SER:CB	1:A:233:GLN:CB	2.77	0.61
1:A:68:CYS:C	1:A:70:GLY:H	2.01	0.61
1:A:48:LYS:HD2	1:A:61:CYS:O	2.00	0.61
1:A:587:PRO:O	1:A:588:PHE:CG	2.54	0.61
1:A:135:ASN:HD22	2:A:2030:NAG:H5	1.63	0.61
1:A:686:ASP:O	1:A:688:ARG:N	2.32	0.61
1:A:599:TRP:HZ3	1:A:601:ASP:CG	2.04	0.61
1:A:135:ASN:HB3	2:A:2030:NAG:C2	2.30	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:469:TRP:CZ3	1:A:480:ALA:CB	2.81	0.61
1:A:654:GLY:HA3	1:A:673:PHE:CZ	2.36	0.61
1:A:193:TRP:HD1	1:A:193:TRP:H	1.29	0.61
1:A:517:THR:HG22	1:A:517:THR:O	2.00	0.61
1:A:53:SER:HB3	1:A:61:CYS:N	2.14	0.61
1:A:636:GLN:HA	1:A:636:GLN:OE1	2.01	0.61
1:A:130:ALA:O	1:A:131:SER:HB2	2.00	0.61
1:A:240:CYS:SG	1:A:242:ASP:CB	2.85	0.61
1:A:493:GLU:HG3	1:A:495:GLY:O	2.00	0.61
1:A:521:ILE:CG2	1:A:522:LYS:H	2.14	0.61
1:A:293:GLY:O	1:A:296:GLU:OE2	2.18	0.61
1:A:189:ILE:HG22	1:A:193:TRP:CE2	2.36	0.61
1:A:367:HIS:O	1:A:368:THR:CG2	2.49	0.61
1:A:422:TRP:N	1:A:422:TRP:HE3	1.98	0.61
1:A:427:GLN:CG	1:A:429:MET:SD	2.88	0.61
1:A:334:ILE:HG13	1:A:336:GLU:HG3	1.82	0.61
1:A:146:CYS:CA	1:A:157:ASP:O	2.48	0.61
1:A:620:LEU:O	1:A:621:LEU:HB2	2.00	0.61
1:A:152:CYS:C	1:A:154:ASP:N	2.53	0.61
1:A:586:HIS:HB2	1:A:602:ILE:CB	2.23	0.61
1:A:506:VAL:CG1	1:A:507:HIS:CD2	2.83	0.61
1:A:245:ASP:HB3	1:A:246:GLU:OE1	2.00	0.61
1:A:144:TRP:CZ3	1:A:541:TRP:CE3	2.88	0.60
1:A:403:PRO:O	1:A:404:ASN:OD1	2.18	0.60
1:A:139:CYS:O	1:A:140:ILE:HG13	2.01	0.60
1:A:606:ALA:HA	1:A:625:LEU:HD11	1.84	0.60
1:A:625:LEU:HB2	1:A:628:PRO:HG3	1.81	0.60
1:A:424:ASP:OD1	1:A:425:LEU:N	2.34	0.60
1:A:250:VAL:CG1	1:A:250:VAL:O	2.49	0.60
1:A:484:GLY:O	1:A:485:VAL:CG2	2.50	0.60
1:A:107:CYS:CB	1:A:119:GLU:HA	2.27	0.60
1:A:682:LEU:O	1:A:684:ALA:N	2.35	0.60
1:A:106:VAL:O	1:A:106:VAL:HG13	2.01	0.60
1:A:599:TRP:N	1:A:631:MET:HE1	2.16	0.60
1:A:485:VAL:O	1:A:486:LYS:CG	2.46	0.60
1:A:261:PHE:C	1:A:263:CYS:N	2.54	0.60
1:A:190:HIS:HB2	1:A:193:TRP:NE1	2.16	0.60
1:A:452:ILE:C	1:A:471:ASP:OD1	2.39	0.60
1:A:47:CYS:O	1:A:49:SER:N	2.35	0.60
1:A:591:ALA:HB3	1:A:598:PHE:HB2	1.84	0.60
1:A:286:ASP:O	1:A:287:GLU:HG3	2.02	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:313:ILE:O	1:A:313:ILE:HG22	2.01	0.60
1:A:585:ALA:CB	1:A:602:ILE:HD13	2.31	0.60
1:A:600:THR:HA	1:A:607:ILE:HD13	1.83	0.60
1:A:469:TRP:CE3	1:A:478:SER:OG	2.55	0.60
1:A:278:ALA:O	1:A:286:ASP:OD2	2.20	0.60
1:A:195:CYS:CA	1:A:207:GLU:HB2	2.08	0.60
1:A:684:ALA:N	1:A:689:SER:O	2.34	0.60
1:A:301:ASN:CA	1:A:304:CYS:HB2	2.31	0.60
1:A:345:GLN:O	1:A:357:GLN:O	2.20	0.60
1:A:48:LYS:CE	1:A:61:CYS:O	2.50	0.60
1:A:310:ASP:CG	1:A:311:LEU:N	2.55	0.59
1:A:333:ASP:CG	1:A:351:GLU:HA	2.22	0.59
1:A:170:GLN:O	1:A:170:GLN:HG2	2.00	0.59
1:A:605:GLU:O	1:A:624:ASN:N	2.35	0.59
1:A:327:ALA:O	1:A:328:GLN:HG2	2.02	0.59
1:A:677:CYS:HB3	1:A:678:PRO:CD	2.28	0.59
1:A:274:VAL:HG23	1:A:274:VAL:O	2.02	0.59
1:A:536:THR:HG23	1:A:536:THR:O	2.02	0.59
1:A:414:GLU:OE1	1:A:462:TRP:CB	2.50	0.59
1:A:107:CYS:HA	1:A:119:GLU:OE2	2.01	0.59
1:A:599:TRP:CZ3	1:A:601:ASP:CG	2.76	0.59
1:A:127:CYS:HB3	1:A:131:SER:CB	2.33	0.59
1:A:221:GLN:OE1	1:A:225:GLY:CA	2.51	0.59
1:A:71:GLN:H	1:A:80:GLU:HB3	1.67	0.59
1:A:133:GLN:HG3	1:A:138:THR:O	2.02	0.59
1:A:263:CYS:HB3	1:A:267:GLU:N	2.13	0.59
1:A:260:LYS:CA	1:A:270:THR:OG1	2.48	0.59
1:A:84:PRO:HB2	1:A:85:PRO:HD3	1.85	0.59
1:A:335:ASP:CA	1:A:349:ASN:HD21	2.15	0.59
1:A:455:PRO:HA	1:A:470:THR:O	2.01	0.59
1:A:608:PHE:N	1:A:608:PHE:CD2	2.67	0.59
1:A:363:GLN:HA	1:A:363:GLN:OE1	2.01	0.59
1:A:667:ASN:N	1:A:668:PRO:CD	2.64	0.59
1:A:510:MET:HG2	1:A:524:GLY:CA	2.28	0.59
1:A:296:GLU:N	1:A:296:GLU:CD	2.55	0.59
1:A:334:ILE:HG23	1:A:336:GLU:CG	2.32	0.59
1:A:490:LEU:HD13	1:A:528:GLY:CA	2.32	0.59
1:A:583:ARG:CB	1:A:608:PHE:HE1	2.15	0.59
1:A:472:SER:HA	1:A:474:LEU:HD21	1.83	0.58
1:A:473:VAL:O	1:A:474:LEU:HD23	2.03	0.58
1:A:564:ILE:O	1:A:564:ILE:HG23	2.03	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:456:ASP:OD2	1:A:472:SER:OG	2.21	0.58
1:A:421:TYR:CA	1:A:422:TRP:HE3	2.15	0.58
1:A:238:TYR:CE2	1:A:243:MET:CB	2.85	0.58
1:A:450:ARG:CB	5:A:6002:KEG:O26	2.51	0.58
1:A:513:THR:HG23	1:A:542:PRO:CB	2.33	0.58
1:A:325:LEU:O	1:A:326:VAL:CG1	2.48	0.58
1:A:553:ARG:HB2	1:A:567:ILE:CA	2.33	0.58
1:A:593:PHE:CD1	1:A:633:LEU:CD2	2.52	0.58
1:A:338:GLN:N	1:A:342:THR:OG1	2.36	0.58
1:A:68:CYS:HA	1:A:80:GLU:HA	1.84	0.58
1:A:87:THR:CG2	1:A:88:CYS:H	2.08	0.58
1:A:118:ASP:O	1:A:119:GLU:CB	2.50	0.58
1:A:605:GLU:C	1:A:625:LEU:HG	2.24	0.58
1:A:190:HIS:HB2	1:A:193:TRP:CZ2	2.38	0.58
1:A:462:TRP:CD2	1:A:639:GLN:CG	2.86	0.58
1:A:283:ASP:C	1:A:285:SER:N	2.55	0.58
1:A:87:THR:HG22	1:A:88:CYS:N	2.10	0.58
1:A:452:ILE:C	1:A:471:ASP:OD2	2.42	0.58
1:A:482:THR:HG22	1:A:483:LYS:N	2.18	0.58
1:A:654:GLY:CA	1:A:673:PHE:CZ	2.87	0.58
1:A:384:ASN:CG	1:A:387:GLU:HB3	2.24	0.58
1:A:127:CYS:O	1:A:128:GLY:O	2.21	0.58
1:A:594:GLU:O	1:A:595:ASP:OD2	2.22	0.58
1:A:498:PRO:HD3	1:A:514:ASP:HA	1.85	0.58
1:A:504:ASP:OD1	1:A:549:LEU:HD11	2.03	0.58
1:A:651:LEU:HB2	1:A:653:ASN:O	2.03	0.58
1:A:63:PRO:C	1:A:65:PHE:H	2.08	0.58
1:A:497:LYS:O	1:A:515:TRP:CZ2	2.56	0.58
1:A:543:ASN:O	1:A:557:VAL:CG2	2.52	0.58
1:A:468:TYR:OH	1:A:526:LEU:HD22	1.96	0.58
1:A:150:PRO:O	1:A:586:HIS:NE2	2.37	0.57
1:A:559:SER:CA	1:A:587:PRO:HD2	2.25	0.57
1:A:660:CYS:SG	1:A:660:CYS:O	2.62	0.57
1:A:70:GLY:HA2	1:A:80:GLU:HB2	1.85	0.57
1:A:475:GLY:N	1:A:496:SER:OG	2.37	0.57
1:A:392:THR:CB	1:A:395:ARG:HG3	2.34	0.57
1:A:146:CYS:CA	1:A:157:ASP:HB2	2.33	0.57
1:A:383:THR:HG23	1:A:411:LEU:HD21	1.85	0.57
1:A:462:TRP:CE2	1:A:639:GLN:HG3	2.38	0.57
1:A:539:ILE:CD1	1:A:542:PRO:HG3	2.35	0.57
1:A:606:ALA:C	1:A:625:LEU:HD11	2.25	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:447:VAL:HG22	1:A:484:GLY:HA3	1.85	0.57
1:A:481:ASP:CB	1:A:486:LYS:CG	2.82	0.57
1:A:126:THR:O	1:A:128:GLY:N	2.38	0.57
1:A:334:ILE:HD12	1:A:335:ASP:N	2.19	0.57
1:A:63:PRO:O	1:A:65:PHE:N	2.38	0.57
1:A:415:VAL:CG1	1:A:416:ALA:N	2.67	0.57
1:A:252:VAL:N	3:A:3030:NAG:H82	2.15	0.57
1:A:105:PHE:HB3	1:A:108:ASP:OD2	2.05	0.57
1:A:456:ASP:CG	1:A:472:SER:OG	2.43	0.57
1:A:513:THR:HG23	1:A:542:PRO:HB2	1.86	0.57
1:A:589:SER:HG	1:A:630:ASP:HA	1.67	0.57
1:A:588:PHE:O	1:A:629:GLU:O	2.22	0.57
1:A:653:ASN:OD1	1:A:655:GLY:N	2.38	0.57
1:A:656:CYS:CB	1:A:659:LEU:HA	2.35	0.57
1:A:93:PHE:O	1:A:98:GLY:HA2	2.03	0.57
1:A:465:SER:HB3	1:A:482:THR:HG21	1.87	0.57
1:A:68:CYS:SG	1:A:80:GLU:N	2.78	0.57
1:A:384:ASN:OD1	1:A:387:GLU:HB3	2.05	0.57
1:A:557:VAL:HB	1:A:587:PRO:CG	2.33	0.57
1:A:607:ILE:HG22	1:A:608:PHE:N	2.20	0.57
1:A:300:ASN:O	1:A:302:GLY:N	2.35	0.57
1:A:402:ILE:O	1:A:404:ASN:N	2.34	0.57
1:A:262:LYS:O	1:A:263:CYS:C	2.44	0.57
1:A:344:SER:HB2	1:A:612:ARG:HH21	1.70	0.57
1:A:501:ILE:HB	1:A:511:TYR:O	2.05	0.56
1:A:556:TRP:O	1:A:564:ILE:HG13	2.05	0.56
1:A:160:PRO:HB3	1:A:166:LEU:CD2	2.30	0.56
1:A:144:TRP:CD1	1:A:144:TRP:N	2.71	0.56
1:A:250:VAL:HG12	1:A:250:VAL:O	2.04	0.56
1:A:482:THR:CG2	1:A:483:LYS:N	2.68	0.56
1:A:301:ASN:CA	1:A:304:CYS:CB	2.83	0.56
1:A:190:HIS:CB	1:A:193:TRP:HE1	2.17	0.56
1:A:392:THR:HG22	1:A:395:ARG:CG	2.34	0.56
1:A:108:ASP:N	1:A:119:GLU:OE2	2.38	0.56
1:A:151:ASP:CB	1:A:541:TRP:CZ3	2.88	0.56
1:A:152:CYS:SG	1:A:154:ASP:C	2.83	0.56
1:A:149:ASP:C	1:A:158:GLU:OE2	2.43	0.56
1:A:641:ARG:CG	1:A:642:GLY:H	2.13	0.56
1:A:332:GLU:HA	1:A:351:GLU:OE2	2.06	0.56
1:A:160:PRO:HB3	1:A:166:LEU:HD11	1.87	0.56
1:A:383:THR:HG23	1:A:411:LEU:HD22	1.87	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:656:CYS:O	1:A:659:LEU:CB	2.53	0.56
1:A:281:CYS:O	1:A:283:ASP:N	2.35	0.56
1:A:384:ASN:OD1	1:A:387:GLU:CB	2.54	0.56
1:A:251:ASN:OD1	3:A:3030:NAG:C7	2.53	0.56
1:A:299:ASP:O	1:A:300:ASN:O	2.24	0.56
1:A:276:ASN:O	1:A:277:MET:C	2.42	0.56
1:A:179:PHE:O	1:A:180:GLU:CG	2.53	0.56
1:A:84:PRO:CB	1:A:85:PRO:CD	2.79	0.56
1:A:143:LEU:C	1:A:144:TRP:CD1	2.79	0.56
1:A:663:ALA:HB2	1:A:673:PHE:H	1.70	0.56
1:A:553:ARG:CB	1:A:568:ASP:N	2.69	0.56
1:A:554:LEU:O	1:A:567:ILE:N	2.39	0.56
1:A:362:PHE:CG	1:A:373:ALA:CB	2.88	0.56
1:A:431:CYS:SG	1:A:445:ASP:O	2.56	0.56
1:A:469:TRP:CD2	1:A:478:SER:OG	2.59	0.56
1:A:663:ALA:HB2	1:A:673:PHE:N	2.21	0.56
1:A:330:ARG:CG	1:A:330:ARG:O	2.53	0.56
1:A:78:SER:C	1:A:82:GLY:N	2.59	0.56
1:A:535:VAL:O	1:A:537:GLU:N	2.37	0.55
1:A:457:GLY:C	1:A:458:LEU:HG	2.26	0.55
1:A:477:VAL:O	1:A:478:SER:HB3	2.05	0.55
1:A:296:GLU:OE1	1:A:315:TYR:CB	2.53	0.55
1:A:323:PHE:HB3	1:A:333:ASP:HB2	1.88	0.55
1:A:231:SER:O	1:A:233:GLN:N	2.30	0.55
1:A:94:ARG:O	1:A:95:CYS:O	2.22	0.55
5:A:6002:KEG:O17	5:A:6002:KEG:O35	2.24	0.55
1:A:202:LYS:HG2	1:A:202:LYS:O	2.06	0.55
1:A:526:LEU:CG	1:A:526:LEU:O	2.54	0.55
1:A:549:LEU:HG	1:A:549:LEU:O	2.06	0.55
1:A:259:ASN:O	1:A:260:LYS:HG2	2.06	0.55
1:A:356:CYS:C	1:A:357:GLN:HG3	2.26	0.55
1:A:597:VAL:HG22	1:A:598:PHE:N	2.22	0.55
1:A:622:ALA:C	1:A:625:LEU:HD21	2.26	0.55
1:A:234:CYS:CA	1:A:246:GLU:HG3	2.19	0.55
1:A:250:VAL:O	1:A:252:VAL:N	2.38	0.55
1:A:392:THR:HB	1:A:395:ARG:HG3	1.88	0.55
1:A:446:THR:CG2	1:A:447:VAL:N	2.68	0.55
1:A:81:GLN:C	1:A:83:CYS:H	2.08	0.55
1:A:115:ASP:CG	1:A:117:SER:HB2	2.27	0.55
1:A:146:CYS:HA	1:A:157:ASP:CB	2.36	0.55
1:A:151:ASP:C	1:A:151:ASP:OD1	2.45	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:301:ASN:HD22	1:A:304:CYS:CB	2.18	0.55
1:A:68:CYS:H	1:A:79:ASP:C	2.09	0.55
1:A:132:PHE:HZ	2:A:2030:NAG:O7	1.87	0.55
1:A:469:TRP:O	1:A:477:VAL:HA	2.06	0.55
1:A:529:VAL:O	1:A:529:VAL:CG1	2.53	0.55
1:A:687:MET:O	1:A:688:ARG:CG	2.55	0.55
1:A:634:PHE:CD2	1:A:635:HIS:HB2	2.42	0.55
1:A:109:SER:CA	1:A:119:GLU:HG2	2.33	0.55
1:A:374:VAL:CG2	1:A:375:GLY:H	2.15	0.55
1:A:513:THR:CG2	1:A:542:PRO:HB2	2.36	0.54
1:A:325:LEU:C	1:A:326:VAL:CG1	2.76	0.54
1:A:190:HIS:C	1:A:193:TRP:HE1	2.11	0.54
1:A:254:LEU:CD1	1:A:256:GLU:HB3	2.36	0.54
1:A:537:GLU:CG	1:A:538:ASN:N	2.70	0.54
1:A:621:LEU:O	1:A:622:ALA:HB2	2.08	0.54
1:A:542:PRO:O	1:A:543:ASN:CB	2.53	0.54
1:A:468:TYR:HH	1:A:526:LEU:HD21	1.72	0.54
1:A:527:ASN:C	1:A:529:VAL:H	2.10	0.54
1:A:269:ILE:CD1	1:A:280:ASP:O	2.52	0.54
1:A:115:ASP:C	1:A:117:SER:N	2.58	0.54
1:A:602:ILE:HG13	1:A:603:ILE:N	2.23	0.54
1:A:506:VAL:O	1:A:507:HIS:CG	2.59	0.54
1:A:281:CYS:C	1:A:283:ASP:N	2.61	0.54
1:A:358:CYS:SG	1:A:363:GLN:C	2.86	0.54
1:A:448:ILE:O	1:A:448:ILE:CG2	2.54	0.54
1:A:496:SER:C	1:A:498:PRO:CD	2.73	0.54
1:A:588:PHE:CA	1:A:629:GLU:HG3	2.38	0.54
1:A:340:PRO:HG2	1:A:613:LEU:HD21	1.88	0.54
1:A:657:GLN:O	1:A:658:TYR:CB	2.56	0.54
1:A:504:ASP:OD1	1:A:507:HIS:CD2	2.54	0.54
1:A:298:LEU:HA	1:A:301:ASN:N	2.22	0.54
1:A:392:THR:CG2	1:A:395:ARG:NE	2.70	0.54
1:A:580:ASP:O	1:A:584:LEU:CD2	2.53	0.54
1:A:62:ILE:HG23	1:A:63:PRO:CD	2.36	0.54
1:A:68:CYS:SG	1:A:80:GLU:HA	2.48	0.54
1:A:107:CYS:HB2	1:A:119:GLU:N	2.23	0.54
1:A:391:MET:SD	1:A:621:LEU:CG	2.96	0.53
1:A:68:CYS:SG	1:A:84:PRO:HD2	2.48	0.53
1:A:169:PHE:HD2	1:A:170:GLN:HB2	1.73	0.53
1:A:499:ARG:HH21	1:A:629:GLU:HG2	1.70	0.53
1:A:422:TRP:O	1:A:430:ILE:HB	2.08	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:324:GLN:H	1:A:334:ILE:H	1.55	0.53
1:A:220:PHE:HZ	1:A:244:SER:O	1.91	0.53
1:A:563:SER:OG	1:A:564:ILE:N	2.39	0.53
1:A:467:ILE:O	1:A:479:VAL:CB	2.57	0.53
1:A:122:CYS:N	1:A:123:PRO:HD3	2.23	0.53
1:A:149:ASP:C	1:A:149:ASP:OD1	2.46	0.53
1:A:456:ASP:HB3	1:A:499:ARG:CB	2.38	0.53
1:A:130:ALA:O	1:A:131:SER:CB	2.49	0.53
1:A:139:CYS:O	1:A:140:ILE:CG1	2.56	0.53
1:A:527:ASN:ND2	1:A:527:ASN:C	2.59	0.53
1:A:468:TYR:CZ	1:A:526:LEU:HD11	2.32	0.53
1:A:220:PHE:CD1	1:A:221:GLN:N	2.76	0.53
1:A:169:PHE:CD2	1:A:170:GLN:HB2	2.43	0.53
1:A:537:GLU:O	1:A:539:ILE:HB	2.09	0.53
1:A:409:VAL:O	1:A:410:ALA:HB2	2.07	0.53
1:A:291:GLU:O	1:A:293:GLY:N	2.41	0.53
1:A:317:CYS:O	1:A:318:LEU:CD2	2.39	0.53
1:A:229:HIS:C	1:A:230:GLY:O	2.39	0.53
1:A:683:LEU:HA	1:A:690:CYS:SG	2.49	0.53
1:A:592:VAL:CG2	1:A:592:VAL:O	2.57	0.53
1:A:215:CYS:O	1:A:217:PRO:HD3	2.09	0.53
1:A:134:CYS:SG	1:A:153:GLU:C	2.87	0.53
1:A:539:ILE:HD12	1:A:542:PRO:HD3	1.91	0.53
1:A:362:PHE:CE1	1:A:373:ALA:HB3	2.44	0.53
1:A:185:SER:O	1:A:201:CYS:SG	2.67	0.53
1:A:276:ASN:OD1	1:A:276:ASN:O	2.27	0.53
1:A:362:PHE:CD2	1:A:373:ALA:HB2	2.43	0.53
5:A:6002:KEG:O21	5:A:6002:KEG:O38	2.27	0.53
1:A:584:LEU:O	1:A:585:ALA:HB2	2.08	0.53
1:A:647:GLU:O	1:A:651:LEU:CD1	2.56	0.53
1:A:226:ASN:O	1:A:228:ILE:N	2.42	0.53
1:A:254:LEU:HD12	1:A:256:GLU:HB3	1.91	0.53
1:A:152:CYS:SG	1:A:154:ASP:CA	2.95	0.53
1:A:428:ARG:CB	1:A:452:ILE:HG21	2.39	0.53
1:A:138:THR:HG22	1:A:139:CYS:N	2.24	0.53
1:A:467:ILE:O	1:A:479:VAL:HG23	2.08	0.53
1:A:68:CYS:C	1:A:70:GLY:N	2.61	0.53
1:A:446:THR:O	1:A:447:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:251:ASN:CG	3:A:3030:NAG:HN2	1.72	0.52
1:A:334:ILE:HD12	1:A:335:ASP:H	1.75	0.52
1:A:553:ARG:HA	1:A:568:ASP:HA	1.92	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:392:THR:OG1	1:A:397:GLU:HB3	2.09	0.52
1:A:135:ASN:ND2	2:A:2030:NAG:C5	2.69	0.52
1:A:242:ASP:OD2	1:A:244:SER:HB2	2.08	0.52
1:A:150:PRO:O	1:A:586:HIS:HE1	1.88	0.52
1:A:391:MET:SD	1:A:621:LEU:HG	2.49	0.52
1:A:392:THR:CG2	1:A:395:ARG:HE	2.21	0.52
1:A:683:LEU:O	1:A:684:ALA:O	2.26	0.52
1:A:617:ASP:OD2	1:A:617:ASP:O	2.27	0.52
1:A:335:ASP:C	1:A:349:ASN:HD21	2.13	0.52
1:A:345:GLN:CG	1:A:371:CYS:HB2	2.39	0.52
1:A:627:SER:N	1:A:628:PRO:CD	2.70	0.52
1:A:634:PHE:CG	1:A:635:HIS:N	2.75	0.52
1:A:222:CYS:HB3	1:A:242:ASP:OD2	2.09	0.52
1:A:539:ILE:CD1	1:A:540:GLN:N	2.72	0.52
1:A:314:GLY:C	1:A:316:GLU:N	2.62	0.52
1:A:229:HIS:CG	1:A:230:GLY:N	2.76	0.52
1:A:687:MET:C	1:A:688:ARG:HG3	2.30	0.52
1:A:151:ASP:HB2	1:A:541:TRP:CH2	2.45	0.52
1:A:546:THR:HG22	1:A:590:LEU:HD23	1.90	0.52
1:A:284:TRP:C	1:A:286:ASP:H	2.13	0.52
1:A:508:GLY:HA3	1:A:664:PRO:N	2.24	0.52
1:A:198:GLY:N	1:A:207:GLU:OE2	2.43	0.52
1:A:52:PHE:CD2	1:A:52:PHE:C	2.83	0.52
1:A:690:CYS:O	1:A:691:LEU:HG	2.10	0.52
1:A:585:ALA:O	1:A:602:ILE:HG23	2.10	0.52
1:A:362:PHE:O	1:A:363:GLN:CD	2.48	0.52
1:A:558:ASP:HB3	1:A:561:LEU:HB2	1.92	0.51
1:A:634:PHE:HD2	1:A:635:HIS:HB2	1.75	0.51
1:A:83:CYS:CB	1:A:84:PRO:HD2	2.34	0.51
1:A:146:CYS:N	1:A:157:ASP:HB2	2.26	0.51
1:A:456:ASP:HB3	1:A:499:ARG:HB2	1.92	0.51
1:A:107:CYS:HB2	1:A:119:GLU:CB	2.41	0.51
1:A:46:THR:O	1:A:47:CYS:O	2.28	0.51
1:A:386:HIS:CB	1:A:405:LEU:O	2.57	0.51
1:A:498:PRO:HD3	1:A:514:ASP:CB	2.40	0.51
1:A:499:ARG:NH1	1:A:544:GLY:HA2	2.25	0.51
1:A:53:SER:CB	1:A:61:CYS:N	2.71	0.51
1:A:66:TRP:O	1:A:79:ASP:CB	2.52	0.51
1:A:132:PHE:CE2	1:A:156:SER:CB	2.89	0.51
1:A:302:GLY:C	1:A:304:CYS:H	1.96	0.51
1:A:64:GLN:O	1:A:67:ARG:HB3	2.11	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:392:THR:CG2	1:A:395:ARG:CG	2.86	0.51
1:A:418:ASN:O	1:A:434:GLN:OE1	2.28	0.51
1:A:598:PHE:CE2	1:A:609:SER:HB2	2.45	0.51
1:A:537:GLU:C	1:A:539:ILE:N	2.59	0.51
1:A:337:CYS:SG	1:A:349:ASN:N	2.84	0.51
1:A:179:PHE:O	1:A:180:GLU:HG2	2.10	0.51
1:A:53:SER:CB	1:A:60:ARG:HA	2.40	0.51
1:A:419:ARG:HA	1:A:433:THR:O	2.11	0.51
1:A:474:LEU:O	1:A:493:GLU:O	2.29	0.51
1:A:534:LEU:HD23	1:A:535:VAL:HG23	1.93	0.51
1:A:537:GLU:O	1:A:538:ASN:C	2.49	0.51
1:A:690:CYS:C	1:A:691:LEU:HG	2.31	0.51
1:A:497:LYS:CB	1:A:515:TRP:CE2	2.92	0.51
1:A:537:GLU:CG	1:A:538:ASN:H	2.22	0.51
1:A:307:VAL:CG1	1:A:307:VAL:O	2.57	0.51
1:A:682:LEU:C	1:A:690:CYS:HB3	2.32	0.51
1:A:564:ILE:HG23	1:A:577:ILE:HB	1.93	0.50
1:A:688:ARG:O	1:A:689:SER:HB2	2.10	0.50
1:A:484:GLY:C	1:A:485:VAL:HG23	2.31	0.50
1:A:524:GLY:O	1:A:525:GLY:C	2.50	0.50
1:A:393:LEU:HD11	1:A:598:PHE:CE2	2.46	0.50
1:A:360:GLU:OE1	1:A:360:GLU:HA	2.11	0.50
1:A:588:PHE:C	1:A:629:GLU:HG3	2.32	0.50
1:A:422:TRP:CE3	1:A:431:CYS:O	2.65	0.50
1:A:468:TYR:CE2	1:A:526:LEU:HD11	2.42	0.50
1:A:107:CYS:HA	1:A:119:GLU:CD	2.31	0.50
1:A:370:ALA:O	1:A:372:LYS:N	2.40	0.50
1:A:384:ASN:C	1:A:384:ASN:OD1	2.49	0.50
1:A:413:THR:OG1	1:A:414:GLU:N	2.44	0.50
1:A:469:TRP:CZ3	1:A:478:SER:OG	2.64	0.50
1:A:195:CYS:H	1:A:207:GLU:CB	2.17	0.50
1:A:179:PHE:C	1:A:180:GLU:HG2	2.31	0.50
1:A:383:THR:CG2	1:A:411:LEU:CD2	2.85	0.50
1:A:525:GLY:CA	1:A:664:PRO:HG3	2.40	0.50
1:A:84:PRO:O	1:A:86:LYS:N	2.44	0.50
1:A:364:LEU:HG	1:A:365:ASP:N	2.27	0.50
1:A:643:VAL:HG12	1:A:644:ASN:N	2.26	0.50
1:A:481:ASP:CB	1:A:486:LYS:HG3	2.42	0.50
1:A:682:LEU:O	1:A:690:CYS:HA	2.12	0.50
1:A:543:ASN:O	1:A:557:VAL:HG23	2.12	0.50
1:A:259:ASN:C	1:A:260:LYS:HG2	2.33	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:74:CYS:HB3	1:A:78:SER:CB	2.40	0.50
1:A:169:PHE:HD2	1:A:170:GLN:CB	2.24	0.50
1:A:143:LEU:O	1:A:144:TRP:HD1	1.95	0.50
1:A:345:GLN:HE21	1:A:594:GLU:HG3	1.77	0.50
1:A:581:GLU:O	1:A:582:LYS:CG	2.60	0.50
1:A:159:TRP:CA	1:A:159:TRP:CE3	2.95	0.49
1:A:132:PHE:HD2	1:A:156:SER:CB	2.13	0.49
1:A:527:ASN:HD22	1:A:527:ASN:C	2.14	0.49
1:A:324:GLN:O	1:A:325:LEU:HB2	2.12	0.49
1:A:554:LEU:N	1:A:567:ILE:H	2.10	0.49
1:A:370:ALA:C	1:A:372:LYS:N	2.66	0.49
1:A:474:LEU:C	1:A:496:SER:OG	2.50	0.49
1:A:586:HIS:O	1:A:602:ILE:HG22	2.08	0.49
1:A:499:ARG:NH2	1:A:630:ASP:OD2	2.45	0.49
1:A:320:PRO:HD2	1:A:331:CYS:SG	2.52	0.49
1:A:600:THR:HG22	1:A:601:ASP:N	2.26	0.49
1:A:48:LYS:HE3	1:A:61:CYS:O	2.12	0.49
1:A:645:TRP:O	1:A:646:CYS:SG	2.70	0.49
1:A:381:PHE:O	1:A:631:MET:HA	2.12	0.49
1:A:472:SER:HA	1:A:474:LEU:CD2	2.42	0.49
1:A:499:ARG:CZ	1:A:629:GLU:HG2	2.42	0.49
1:A:484:GLY:C	1:A:485:VAL:CG2	2.80	0.49
1:A:190:HIS:HB2	1:A:193:TRP:CE2	2.47	0.49
1:A:221:GLN:O	1:A:221:GLN:HG3	2.12	0.49
1:A:618:VAL:HG12	1:A:619:ASN:N	2.28	0.49
1:A:514:ASP:OD1	1:A:515:TRP:N	2.45	0.49
1:A:469:TRP:HZ3	1:A:480:ALA:CB	2.23	0.49
1:A:284:TRP:O	1:A:288:PRO:HG3	2.12	0.49
1:A:63:PRO:C	1:A:65:PHE:N	2.66	0.49
1:A:96:HIS:ND1	1:A:115:ASP:OD2	2.46	0.49
1:A:48:LYS:N	1:A:61:CYS:SG	2.81	0.49
1:A:560:LYS:O	1:A:561:LEU:HD23	2.12	0.49
1:A:180:GLU:OE2	1:A:189:ILE:O	2.30	0.49
1:A:643:VAL:CG1	1:A:644:ASN:N	2.75	0.49
1:A:383:THR:HG21	1:A:411:LEU:HD22	1.95	0.49
1:A:411:LEU:CD2	1:A:630:ASP:O	2.61	0.49
1:A:132:PHE:HE2	1:A:133:GLN:O	1.91	0.49
1:A:485:VAL:C	1:A:486:LYS:HG2	2.33	0.49
1:A:298:LEU:N	1:A:301:ASN:HB2	2.27	0.49
1:A:333:ASP:C	1:A:333:ASP:OD1	2.51	0.49
1:A:555:TYR:C	1:A:590:LEU:HD21	2.32	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:263:CYS:HB3	1:A:267:GLU:C	2.33	0.49
1:A:302:GLY:C	1:A:304:CYS:N	2.57	0.49
1:A:389:ARG:CA	1:A:401:LEU:H	2.18	0.49
1:A:72:VAL:HA	1:A:80:GLU:CD	2.33	0.49
1:A:48:LYS:CD	1:A:61:CYS:O	2.60	0.49
1:A:519:ALA:HB1	1:A:539:ILE:HD12	1.94	0.48
1:A:543:ASN:HB2	1:A:557:VAL:O	2.13	0.48
1:A:447:VAL:O	1:A:447:VAL:HG12	2.13	0.48
1:A:477:VAL:HG23	1:A:491:PHE:HB3	1.94	0.48
1:A:639:GLN:HG2	1:A:639:GLN:O	2.13	0.48
1:A:288:PRO:O	1:A:292:CYS:CB	2.55	0.48
1:A:339:ASP:HA	1:A:342:THR:CB	2.26	0.48
1:A:554:LEU:CB	1:A:567:ILE:HG22	2.43	0.48
1:A:190:HIS:O	1:A:191:SER:C	2.51	0.48
1:A:193:TRP:HB3	1:A:196:ASP:OD2	2.13	0.48
1:A:238:TYR:HE2	1:A:243:MET:C	2.16	0.48
1:A:254:LEU:HD12	1:A:256:GLU:OE1	2.13	0.48
1:A:310:ASP:OD1	1:A:315:TYR:CA	2.60	0.48
1:A:340:PRO:CA	1:A:342:THR:O	2.51	0.48
1:A:553:ARG:HB2	1:A:568:ASP:N	2.25	0.48
1:A:180:GLU:CA	1:A:180:GLU:OE1	2.61	0.48
1:A:146:CYS:CA	1:A:157:ASP:HA	2.42	0.48
1:A:498:PRO:HD3	1:A:514:ASP:HB2	1.95	0.48
1:A:543:ASN:HD22	1:A:559:SER:HG	1.59	0.48
1:A:462:TRP:CE2	1:A:639:GLN:CG	2.96	0.48
1:A:342:THR:HG23	1:A:347:CYS:HB3	1.81	0.48
1:A:180:GLU:OE1	1:A:189:ILE:O	2.31	0.48
1:A:234:CYS:SG	1:A:246:GLU:CA	3.01	0.48
1:A:667:ASN:N	1:A:668:PRO:HD3	2.27	0.48
1:A:148:ASN:O	1:A:150:PRO:HD3	2.12	0.48
1:A:556:TRP:CZ2	1:A:565:SER:OG	2.66	0.48
1:A:408:VAL:CG2	1:A:422:TRP:HD1	2.27	0.48
1:A:461:ASP:OD1	1:A:462:TRP:N	2.46	0.48
1:A:477:VAL:HG12	1:A:478:SER:N	2.29	0.48
1:A:588:PHE:CD1	1:A:602:ILE:HG22	2.48	0.48
1:A:506:VAL:O	1:A:506:VAL:HG22	2.14	0.48
1:A:78:SER:HA	1:A:82:GLY:HA3	1.94	0.48
1:A:292:CYS:SG	1:A:313:ILE:HD11	2.54	0.48
1:A:206:ASP:CG	1:A:207:GLU:N	2.66	0.48
1:A:181:PHE:C	1:A:188:CYS:HB3	2.34	0.48
1:A:48:LYS:O	1:A:49:SER:C	2.47	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:555:TYR:O	1:A:590:LEU:CD2	2.61	0.48
1:A:606:ALA:CA	1:A:625:LEU:HD11	2.43	0.48
1:A:133:GLN:HA	1:A:138:THR:HB	1.96	0.48
1:A:325:LEU:C	1:A:326:VAL:HG12	2.32	0.48
1:A:683:LEU:N	1:A:690:CYS:SG	2.87	0.48
1:A:477:VAL:HG12	1:A:478:SER:H	1.79	0.48
1:A:654:GLY:CA	1:A:673:PHE:HZ	2.26	0.48
1:A:339:ASP:N	1:A:342:THR:CB	2.68	0.48
1:A:149:ASP:N	1:A:158:GLU:OE2	2.47	0.48
1:A:501:ILE:HG22	1:A:512:TRP:CB	2.43	0.48
1:A:539:ILE:O	1:A:540:GLN:NE2	2.45	0.48
1:A:251:ASN:C	3:A:3030:NAG:H83	2.27	0.48
1:A:295:ASN:ND2	1:A:310:ASP:OD2	2.46	0.48
5:A:6001:KEG:O41	5:A:6001:KEG:O19	2.32	0.48
1:A:149:ASP:HB3	1:A:560:LYS:NZ	2.29	0.47
1:A:586:HIS:C	1:A:602:ILE:CG2	2.82	0.47
1:A:298:LEU:H	1:A:301:ASN:HB2	1.79	0.47
1:A:362:PHE:HA	1:A:373:ALA:HB1	1.95	0.47
1:A:60:ARG:O	1:A:61:CYS:SG	2.72	0.47
1:A:380:LEU:HG	1:A:381:PHE:N	2.29	0.47
1:A:389:ARG:CA	1:A:401:LEU:N	2.46	0.47
1:A:408:VAL:HG22	1:A:409:VAL:N	2.29	0.47
5:A:6002:KEG:O21	5:A:6002:KEG:O37	2.32	0.47
1:A:543:ASN:CB	1:A:557:VAL:O	2.62	0.47
1:A:411:LEU:O	1:A:632:VAL:HG11	2.14	0.47
1:A:408:VAL:C	1:A:409:VAL:HG23	2.35	0.47
1:A:508:GLY:C	1:A:526:LEU:HB3	2.23	0.47
1:A:132:PHE:CD2	1:A:133:GLN:O	2.67	0.47
1:A:421:TYR:C	1:A:422:TRP:HE3	2.18	0.47
1:A:261:PHE:H	1:A:269:ILE:H	1.60	0.47
1:A:263:CYS:SG	1:A:266:GLY:CA	2.93	0.47
1:A:555:TYR:C	1:A:590:LEU:CD2	2.83	0.47
1:A:135:ASN:HB3	2:A:2030:NAG:HN2	1.77	0.47
1:A:503:VAL:HG23	1:A:505:PRO:HD3	1.97	0.47
1:A:204:LYS:C	1:A:206:ASP:H	2.16	0.47
1:A:345:GLN:HE21	1:A:594:GLU:CG	2.28	0.47
1:A:180:GLU:HA	1:A:180:GLU:OE1	2.13	0.47
1:A:222:CYS:SG	1:A:244:SER:O	2.73	0.47
1:A:499:ARG:HH12	1:A:544:GLY:HA2	1.79	0.47
1:A:559:SER:OG	1:A:587:PRO:CD	2.63	0.47
1:A:139:CYS:C	1:A:140:ILE:CG1	2.82	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:639:GLN:N	1:A:640:PRO:CD	2.75	0.47
1:A:335:ASP:HA	1:A:349:ASN:HD21	1.79	0.47
1:A:344:SER:C	1:A:345:GLN:OE1	2.53	0.47
1:A:305:SER:HB2	1:A:330:ARG:CA	2.44	0.47
1:A:548:ASP:C	1:A:550:LEU:H	2.18	0.47
1:A:93:PHE:C	1:A:95:CYS:N	2.68	0.47
1:A:377:ILE:O	1:A:377:ILE:HG13	2.14	0.47
1:A:150:PRO:CG	1:A:158:GLU:OE1	2.62	0.47
1:A:452:ILE:C	1:A:471:ASP:CG	2.72	0.47
1:A:64:GLN:C	1:A:67:ARG:HB3	2.35	0.47
1:A:666:ILE:HG23	1:A:667:ASN:ND2	2.30	0.47
1:A:663:ALA:O	1:A:664:PRO:C	2.54	0.47
1:A:663:ALA:C	1:A:664:PRO:O	2.51	0.47
1:A:206:ASP:C	1:A:208:GLU:N	2.67	0.47
1:A:568:ASP:C	1:A:570:ASN:N	2.63	0.47
1:A:118:ASP:CG	1:A:118:ASP:O	2.53	0.47
1:A:413:THR:OG1	1:A:420:ILE:HG22	2.14	0.46
1:A:464:HIS:O	1:A:465:SER:C	2.48	0.46
1:A:654:GLY:HA2	1:A:673:PHE:CZ	2.50	0.46
1:A:300:ASN:C	1:A:303:GLY:H	2.11	0.46
1:A:316:GLU:HG2	1:A:318:LEU:CD2	2.45	0.46
1:A:333:ASP:CG	1:A:352:GLY:H	2.18	0.46
1:A:117:SER:O	1:A:118:ASP:CB	2.61	0.46
1:A:658:TYR:OH	1:A:678:PRO:HB3	2.16	0.46
1:A:143:LEU:C	1:A:145:ALA:H	2.08	0.46
1:A:588:PHE:O	1:A:629:GLU:CG	2.58	0.46
1:A:607:ILE:CG2	1:A:608:PHE:N	2.78	0.46
1:A:298:LEU:HA	1:A:301:ASN:CB	2.46	0.46
1:A:206:ASP:CG	1:A:207:GLU:HG2	2.36	0.46
1:A:188:CYS:C	1:A:189:ILE:HG12	2.35	0.46
1:A:78:SER:OG	1:A:79:ASP:OD1	2.33	0.46
1:A:362:PHE:CE1	1:A:637:LEU:HD22	2.33	0.46
1:A:451:ASP:OD2	1:A:487:ARG:CZ	2.61	0.46
1:A:598:PHE:CD2	1:A:609:SER:HB2	2.50	0.46
1:A:283:ASP:HB3	1:A:285:SER:HB2	1.96	0.46
1:A:381:PHE:O	1:A:631:MET:CB	2.63	0.46
1:A:244:SER:HA	1:A:247:VAL:CG1	2.46	0.46
1:A:150:PRO:HG3	1:A:158:GLU:OE1	2.16	0.46
1:A:670:SER:N	1:A:671:PRO:HD3	2.30	0.46
1:A:52:PHE:HB3	1:A:62:ILE:O	2.15	0.46
1:A:415:VAL:HG11	1:A:636:GLN:OE1	2.15	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
5:A:6001:KEG:O21	5:A:6001:KEG:O38	2.34	0.46
1:A:456:ASP:HB2	1:A:498:PRO:O	2.16	0.46
1:A:456:ASP:HB3	1:A:499:ARG:HG3	1.97	0.46
1:A:543:ASN:ND2	1:A:587:PRO:O	2.49	0.46
1:A:491:PHE:O	1:A:491:PHE:CD2	2.69	0.46
1:A:220:PHE:C	1:A:220:PHE:CD1	2.86	0.46
1:A:235:ASP:H	1:A:246:GLU:CG	2.29	0.46
1:A:677:CYS:CB	1:A:678:PRO:HD2	2.38	0.46
1:A:367:HIS:C	1:A:368:THR:HG23	2.36	0.46
5:A:6001:KEG:O35	5:A:6001:KEG:O17	2.33	0.46
1:A:497:LYS:HB2	1:A:515:TRP:NE1	2.30	0.46
1:A:564:ILE:O	1:A:577:ILE:O	2.34	0.46
1:A:128:GLY:O	1:A:130:ALA:N	2.37	0.46
1:A:468:TYR:CD2	1:A:478:SER:O	2.69	0.46
1:A:182:HIS:CE1	1:A:187:GLU:OE1	2.69	0.46
1:A:337:CYS:C	1:A:342:THR:HG1	2.17	0.46
1:A:666:ILE:HG12	1:A:667:ASN:OD1	2.15	0.46
1:A:471:ASP:C	1:A:473:VAL:H	2.19	0.46
1:A:201:CYS:HB3	1:A:205:SER:H	1.81	0.46
1:A:446:THR:HG23	1:A:447:VAL:N	2.31	0.46
1:A:465:SER:O	1:A:482:THR:HB	2.16	0.46
1:A:297:CYS:C	1:A:299:ASP:N	2.68	0.46
5:A:6001:KEG:O43	5:A:6001:KEG:O19	2.34	0.46
1:A:337:CYS:HB2	1:A:349:ASN:CB	2.45	0.45
1:A:337:CYS:CB	1:A:349:ASN:HB3	2.43	0.45
1:A:611:ASN:OD1	1:A:612:ARG:N	2.49	0.45
1:A:568:ASP:N	1:A:568:ASP:OD1	2.49	0.45
1:A:499:ARG:NH1	1:A:544:GLY:CA	2.79	0.45
1:A:251:ASN:ND2	3:A:3030:NAG:C3	2.78	0.45
1:A:133:GLN:CB	2:A:2030:NAG:H82	2.45	0.45
1:A:593:PHE:O	1:A:596:LYS:O	2.35	0.45
1:A:300:ASN:O	1:A:304:CYS:HB2	2.15	0.45
1:A:319:CYS:HB2	1:A:331:CYS:N	2.26	0.45
1:A:641:ARG:CG	1:A:642:GLY:N	2.77	0.45
1:A:673:PHE:O	1:A:674:THR:HG23	2.17	0.45
1:A:236:ARG:HA	1:A:246:GLU:HG2	1.95	0.45
1:A:110:ASP:O	1:A:112:ASP:N	2.49	0.45
1:A:474:LEU:HA	1:A:474:LEU:HD23	1.62	0.45
1:A:381:PHE:O	1:A:631:MET:CG	2.64	0.45
1:A:525:GLY:CA	1:A:664:PRO:CG	2.94	0.45
1:A:105:PHE:HB3	1:A:108:ASP:OD1	2.16	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:301:ASN:CA	1:A:304:CYS:HB3	2.47	0.45
1:A:328:GLN:O	1:A:329:ARG:CG	2.64	0.45
1:A:489:THR:HG22	1:A:490:LEU:N	2.32	0.45
1:A:404:ASN:OD1	1:A:404:ASN:O	2.34	0.45
1:A:556:TRP:CH2	1:A:565:SER:OG	2.68	0.45
1:A:132:PHE:CE2	2:A:2030:NAG:O7	2.69	0.45
1:A:193:TRP:CZ3	1:A:582:LYS:HG2	2.51	0.45
1:A:663:ALA:CB	1:A:671:PRO:O	2.64	0.45
1:A:287:GLU:O	1:A:288:PRO:C	2.52	0.45
1:A:305:SER:HB2	1:A:330:ARG:HB2	1.96	0.45
1:A:338:GLN:C	1:A:342:THR:HB	2.36	0.45
1:A:124:VAL:O	1:A:125:LEU:C	2.55	0.45
1:A:472:SER:CA	1:A:474:LEU:HD21	2.45	0.45
1:A:519:ALA:C	1:A:539:ILE:CG2	2.79	0.45
1:A:147:ASP:OD2	1:A:560:LYS:CE	2.64	0.45
1:A:653:ASN:CG	1:A:655:GLY:H	2.20	0.45
1:A:286:ASP:OD1	1:A:287:GLU:CG	2.62	0.45
1:A:296:GLU:C	1:A:297:CYS:O	2.53	0.45
1:A:305:SER:O	1:A:307:VAL:N	2.50	0.45
1:A:550:LEU:HA	1:A:550:LEU:HD12	1.78	0.45
1:A:536:THR:O	1:A:537:GLU:CB	2.49	0.45
1:A:465:SER:C	1:A:482:THR:OG1	2.55	0.45
1:A:286:ASP:O	1:A:287:GLU:CG	2.64	0.45
1:A:288:PRO:O	1:A:292:CYS:SG	2.74	0.45
1:A:301:ASN:HA	1:A:304:CYS:HB3	1.97	0.45
1:A:60:ARG:HB3	1:A:61:CYS:SG	2.57	0.45
1:A:496:SER:HA	1:A:514:ASP:OD2	2.18	0.44
1:A:586:HIS:CB	1:A:602:ILE:HG22	2.36	0.44
1:A:626:LEU:O	1:A:627:SER:HB2	2.17	0.44
1:A:464:HIS:CB	1:A:466:ASN:HD22	2.05	0.44
1:A:481:ASP:OD2	1:A:486:LYS:HG3	2.17	0.44
1:A:289:ILE:HA	1:A:292:CYS:CB	2.39	0.44
1:A:178:ALA:C	1:A:180:GLU:H	2.20	0.44
1:A:657:GLN:NE2	1:A:657:GLN:HA	2.13	0.44
1:A:413:THR:O	1:A:414:GLU:HB3	2.16	0.44
1:A:673:PHE:HA	1:A:673:PHE:HD2	1.53	0.44
1:A:270:THR:CG2	1:A:272:ASP:N	2.57	0.44
1:A:334:ILE:O	1:A:336:GLU:HG3	2.17	0.44
1:A:613:LEU:HD12	1:A:613:LEU:HA	1.33	0.44
1:A:87:THR:CG2	1:A:88:CYS:N	2.77	0.44
1:A:256:GLU:C	1:A:258:PRO:CD	2.85	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:605:GLU:HB3	1:A:625:LEU:O	2.16	0.44
1:A:319:CYS:HA	1:A:320:PRO:HD3	1.85	0.44
1:A:286:ASP:O	1:A:287:GLU:CB	2.65	0.44
1:A:299:ASP:O	1:A:300:ASN:C	2.56	0.44
1:A:197:GLY:C	1:A:207:GLU:OE2	2.56	0.44
1:A:222:CYS:SG	1:A:242:ASP:OD2	2.75	0.44
1:A:470:THR:HG23	1:A:470:THR:O	2.17	0.44
1:A:595:ASP:HA	1:A:612:ARG:CD	2.34	0.44
5:A:6003:KEG:O24	5:A:6003:KEG:O18	2.36	0.44
1:A:519:ALA:O	1:A:539:ILE:HG13	2.18	0.44
1:A:586:HIS:C	1:A:587:PRO:O	2.54	0.44
1:A:149:ASP:OD1	1:A:150:PRO:O	2.35	0.44
1:A:132:PHE:CZ	2:A:2030:NAG:H81	2.47	0.44
1:A:504:ASP:O	1:A:505:PRO:O	2.36	0.44
1:A:333:ASP:CG	1:A:352:GLY:N	2.71	0.44
1:A:345:GLN:CB	1:A:371:CYS:CB	2.95	0.44
1:A:345:GLN:NE2	1:A:594:GLU:CG	2.79	0.44
1:A:51:ASP:O	1:A:52:PHE:CB	2.54	0.44
1:A:465:SER:O	1:A:466:ASN:OD1	2.36	0.44
1:A:467:ILE:CG1	1:A:468:TYR:N	2.61	0.44
1:A:527:ASN:ND2	1:A:527:ASN:O	2.51	0.44
1:A:654:GLY:HA3	1:A:660:CYS:HB3	1.99	0.44
1:A:670:SER:N	1:A:671:PRO:CD	2.81	0.44
1:A:185:SER:HB3	1:A:201:CYS:SG	2.58	0.43
1:A:305:SER:HB2	1:A:330:ARG:HA	1.99	0.43
1:A:567:ILE:HG12	1:A:568:ASP:N	2.33	0.43
5:A:6002:KEG:O43	5:A:6002:KEG:O19	2.36	0.43
1:A:511:TYR:HA	1:A:522:LYS:O	2.18	0.43
1:A:585:ALA:O	1:A:602:ILE:CG2	2.67	0.43
1:A:429:MET:CE	1:A:446:THR:OG1	2.66	0.43
1:A:461:ASP:CB	1:A:466:ASN:O	2.61	0.43
1:A:345:GLN:HE21	1:A:594:GLU:CD	2.22	0.43
1:A:451:ASP:OD2	1:A:487:ARG:NH2	2.51	0.43
1:A:384:ASN:CG	1:A:387:GLU:CB	2.87	0.43
1:A:337:CYS:CB	1:A:349:ASN:CB	2.97	0.43
1:A:188:CYS:C	1:A:189:ILE:CG1	2.85	0.43
1:A:146:CYS:HA	1:A:157:ASP:HB2	1.98	0.43
1:A:389:ARG:HB3	1:A:400:SER:CA	2.48	0.43
1:A:462:TRP:HD1	1:A:463:ILE:CG2	2.23	0.43
1:A:318:LEU:HB3	1:A:319:CYS:H	1.64	0.43
1:A:73:ASP:O	1:A:74:CYS:CB	2.51	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:586:HIS:HB3	1:A:602:ILE:CG2	2.37	0.43
1:A:221:GLN:HA	1:A:226:ASN:O	2.18	0.43
1:A:96:HIS:CE1	1:A:115:ASP:CG	2.92	0.43
1:A:384:ASN:OD1	1:A:387:GLU:HB2	2.17	0.43
1:A:515:TRP:O	1:A:515:TRP:CD1	2.71	0.43
1:A:558:ASP:CB	1:A:561:LEU:HB2	2.48	0.43
1:A:233:GLN:O	1:A:246:GLU:OE2	2.37	0.43
1:A:540:GLN:HB2	1:A:561:LEU:HD21	2.01	0.43
1:A:476:THR:C	1:A:477:VAL:HG23	2.39	0.43
1:A:273:LYS:CE	1:A:280:ASP:OD2	2.67	0.43
1:A:331:CYS:HB2	1:A:332:GLU:H	1.57	0.43
5:A:6003:KEG:O17	5:A:6003:KEG:O23	2.36	0.43
1:A:555:TYR:CB	1:A:590:LEU:HD21	2.49	0.43
1:A:586:HIS:O	1:A:588:PHE:CE1	2.72	0.43
1:A:599:TRP:N	1:A:599:TRP:CD1	2.87	0.43
1:A:469:TRP:CZ3	1:A:480:ALA:N	2.80	0.43
1:A:345:GLN:HB3	1:A:371:CYS:CB	2.48	0.43
1:A:71:GLN:H	1:A:80:GLU:CG	2.31	0.43
1:A:393:LEU:HD12	1:A:393:LEU:HA	1.77	0.43
1:A:393:LEU:HD11	1:A:598:PHE:CZ	2.54	0.43
1:A:585:ALA:O	1:A:586:HIS:C	2.57	0.43
1:A:138:THR:HG22	1:A:140:ILE:HG13	2.01	0.43
1:A:305:SER:HB2	1:A:330:ARG:CB	2.45	0.43
1:A:362:PHE:CE1	1:A:373:ALA:CB	3.02	0.43
1:A:365:ASP:HA	1:A:366:PRO:HD2	1.60	0.43
1:A:336:GLU:N	1:A:349:ASN:ND2	2.66	0.43
1:A:221:GLN:OE1	1:A:225:GLY:N	2.52	0.43
1:A:691:LEU:HD23	1:A:691:LEU:HA	1.77	0.43
5:A:6001:KEG:O21	5:A:6001:KEG:O37	2.36	0.43
1:A:564:ILE:HG22	1:A:577:ILE:O	2.19	0.42
1:A:499:ARG:HH21	1:A:630:ASP:HB2	1.84	0.42
1:A:638:THR:O	1:A:638:THR:HG22	2.18	0.42
1:A:332:GLU:CA	1:A:351:GLU:OE2	2.66	0.42
1:A:553:ARG:HB3	1:A:568:ASP:N	2.33	0.42
1:A:578:LEU:O	1:A:579:GLU:C	2.52	0.42
1:A:512:TRP:CZ2	1:A:522:LYS:CB	3.01	0.42
1:A:327:ALA:C	1:A:329:ARG:N	2.70	0.42
1:A:192:SER:OG	1:A:192:SER:O	2.32	0.42
5:A:6001:KEG:O44	5:A:6001:KEG:O19	2.37	0.42
1:A:290:LYS:HA	1:A:290:LYS:HD3	1.35	0.42
1:A:152:CYS:O	1:A:154:ASP:HA	2.18	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:381:PHE:O	1:A:382:PHE:HB3	2.19	0.42
1:A:586:HIS:CB	1:A:588:PHE:CE1	2.87	0.42
1:A:429:MET:CB	1:A:449:SER:HA	2.48	0.42
1:A:151:ASP:CB	1:A:541:TRP:HZ3	2.26	0.42
1:A:607:ILE:O	1:A:608:PHE:CD2	2.55	0.42
1:A:621:LEU:HG	1:A:621:LEU:O	2.19	0.42
5:A:6003:KEG:O17	5:A:6003:KEG:O27	2.38	0.42
1:A:512:TRP:C	1:A:512:TRP:CD1	2.92	0.42
1:A:507:HIS:HB3	1:A:509:PHE:HE1	1.75	0.42
1:A:195:CYS:N	1:A:207:GLU:CB	2.61	0.42
1:A:107:CYS:C	1:A:109:SER:H	2.22	0.42
1:A:498:PRO:HD3	1:A:514:ASP:CA	2.49	0.42
1:A:589:SER:O	1:A:590:LEU:HB2	2.18	0.42
1:A:605:GLU:HB3	1:A:624:ASN:C	2.40	0.42
1:A:656:CYS:HB2	1:A:660:CYS:H	1.84	0.42
1:A:235:ASP:OD1	1:A:246:GLU:OE2	2.38	0.42
1:A:415:VAL:CG1	1:A:636:GLN:OE1	2.67	0.42
1:A:543:ASN:ND2	1:A:559:SER:CB	2.82	0.42
1:A:586:HIS:O	1:A:587:PRO:C	2.56	0.42
1:A:289:ILE:CG2	1:A:289:ILE:O	2.67	0.42
1:A:325:LEU:O	1:A:331:CYS:HB2	2.10	0.42
1:A:105:PHE:HB3	1:A:108:ASP:CG	2.39	0.42
1:A:588:PHE:CE1	1:A:602:ILE:CG2	2.91	0.42
1:A:589:SER:HB2	1:A:600:THR:N	2.22	0.42
1:A:421:TYR:HD2	1:A:432:SER:CA	2.32	0.42
1:A:489:THR:O	1:A:490:LEU:HD23	2.19	0.42
1:A:513:THR:HG22	1:A:514:ASP:N	2.35	0.42
1:A:586:HIS:HD2	1:A:602:ILE:CD1	2.32	0.42
1:A:201:CYS:HB2	1:A:205:SER:O	2.18	0.42
1:A:476:THR:O	1:A:477:VAL:CG2	2.68	0.42
1:A:527:ASN:CG	1:A:527:ASN:O	2.56	0.42
1:A:235:ASP:N	1:A:246:GLU:HG3	2.34	0.42
1:A:564:ILE:CG2	1:A:577:ILE:O	2.68	0.42
1:A:277:MET:O	1:A:278:ALA:HB2	2.20	0.42
1:A:316:GLU:HG2	1:A:316:GLU:O	2.20	0.42
5:A:6003:KEG:O17	5:A:6003:KEG:O35	2.37	0.42
1:A:201:CYS:CB	1:A:205:SER:HB2	2.49	0.41
1:A:553:ARG:HB3	1:A:568:ASP:CA	2.50	0.41
1:A:70:GLY:O	1:A:71:GLN:CB	2.67	0.41
1:A:681:MET:HG2	1:A:692:THR:HG22	2.00	0.41
1:A:174:SER:O	1:A:174:SER:OG	2.38	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:158:GLU:O	1:A:159:TRP:HB2	2.20	0.41
1:A:606:ALA:HA	1:A:625:LEU:CD1	2.48	0.41
1:A:654:GLY:HA2	1:A:673:PHE:HZ	1.83	0.41
1:A:345:GLN:HG2	1:A:371:CYS:HB2	2.01	0.41
1:A:112:ASP:HB2	1:A:118:ASP:OD2	2.20	0.41
5:A:6003:KEG:O18	5:A:6003:KEG:O36	2.37	0.41
1:A:411:LEU:CD2	1:A:630:ASP:HB3	2.46	0.41
1:A:332:GLU:HB2	1:A:351:GLU:CD	2.41	0.41
1:A:591:ALA:O	1:A:598:PHE:N	2.50	0.41
1:A:408:VAL:HG23	1:A:422:TRP:HD1	1.85	0.41
1:A:190:HIS:O	1:A:193:TRP:HD1	1.95	0.41
1:A:425:LEU:HG	1:A:425:LEU:O	2.20	0.41
1:A:316:GLU:HG2	1:A:318:LEU:HD21	2.01	0.41
1:A:333:ASP:H	1:A:351:GLU:HG2	1.86	0.41
1:A:219:GLU:CB	1:A:229:HIS:HB2	2.46	0.41
1:A:233:GLN:O	1:A:235:ASP:N	2.53	0.41
1:A:142:GLN:O	1:A:143:LEU:HD23	2.20	0.41
1:A:500:ALA:C	1:A:501:ILE:CG2	2.89	0.41
1:A:604:ASN:O	1:A:605:GLU:C	2.56	0.41
1:A:606:ALA:HA	1:A:625:LEU:CG	2.51	0.41
1:A:356:CYS:C	1:A:357:GLN:CG	2.88	0.41
1:A:151:ASP:O	1:A:151:ASP:OD1	2.38	0.41
1:A:525:GLY:HA2	1:A:664:PRO:CG	2.50	0.41
1:A:567:ILE:HD11	1:A:571:GLY:HA2	2.02	0.41
1:A:412:ASP:HB3	1:A:460:VAL:CG2	2.51	0.41
1:A:603:ILE:CG2	1:A:605:GLU:OE2	2.65	0.41
1:A:467:ILE:O	1:A:479:VAL:CG2	2.69	0.41
1:A:653:ASN:HA	1:A:659:LEU:HD11	2.03	0.41
1:A:568:ASP:O	1:A:570:ASN:N	2.51	0.41
1:A:415:VAL:HG12	1:A:416:ALA:N	2.34	0.41
1:A:387:GLU:HG3	1:A:389:ARG:HG2	2.03	0.41
1:A:149:ASP:HB3	1:A:560:LYS:HZ3	1.86	0.41
1:A:556:TRP:HA	1:A:590:LEU:HD22	2.02	0.41
1:A:660:CYS:CB	1:A:673:PHE:CZ	2.92	0.41
1:A:553:ARG:HB3	1:A:568:ASP:HA	2.03	0.41
1:A:358:CYS:CB	1:A:362:PHE:C	2.89	0.41
5:A:6003:KEG:O28	5:A:6003:KEG:O18	2.38	0.41
1:A:475:GLY:HA2	1:A:496:SER:CB	2.51	0.41
1:A:511:TYR:CD1	1:A:523:LYS:HA	2.56	0.41
1:A:133:GLN:CG	1:A:138:THR:H	2.19	0.41
1:A:633:LEU:HA	1:A:633:LEU:HD12	1.92	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:409:VAL:H	1:A:423:SER:HG	1.68	0.41
1:A:462:TRP:C	1:A:462:TRP:CD1	2.95	0.41
1:A:568:ASP:HB2	1:A:570:ASN:O	2.21	0.41
1:A:617:ASP:C	1:A:617:ASP:OD2	2.59	0.41
1:A:121:SER:O	1:A:121:SER:OG	2.35	0.41
1:A:337:CYS:SG	1:A:348:VAL:N	2.94	0.40
1:A:198:GLY:HA2	1:A:199:PRO:HD3	1.68	0.40
1:A:52:PHE:CZ	1:A:67:ARG:HB2	2.56	0.40
1:A:65:PHE:O	1:A:67:ARG:N	2.52	0.40
1:A:468:TYR:O	1:A:469:TRP:HB3	2.20	0.40
1:A:329:ARG:O	1:A:330:ARG:HG2	2.20	0.40
1:A:553:ARG:HB3	1:A:568:ASP:OD1	2.21	0.40
1:A:235:ASP:H	1:A:246:GLU:HG3	1.86	0.40
1:A:45:VAL:HG12	1:A:45:VAL:O	2.21	0.40
1:A:499:ARG:HH12	1:A:544:GLY:CA	2.34	0.40
1:A:605:GLU:O	1:A:625:LEU:N	2.49	0.40
1:A:271:LEU:C	1:A:273:LYS:N	2.70	0.40
1:A:333:ASP:N	1:A:351:GLU:HG2	2.36	0.40
1:A:193:TRP:HE3	1:A:200:ASP:OD2	2.04	0.40
1:A:506:VAL:HG13	1:A:507:HIS:NE2	2.36	0.40
1:A:300:ASN:HA	1:A:300:ASN:HD22	1.74	0.40
1:A:83:CYS:CB	1:A:84:PRO:CD	2.95	0.40
1:A:658:TYR:CZ	1:A:678:PRO:CD	2.93	0.40
5:A:6002:KEG:O21	5:A:6002:KEG:O31	2.39	0.40
1:A:144:TRP:O	1:A:157:ASP:HB2	2.20	0.40
1:A:383:THR:HG22	1:A:411:LEU:HD13	2.03	0.40
1:A:133:GLN:CB	2:A:2030:NAG:C8	3.00	0.40
1:A:184:LEU:N	1:A:205:SER:OG	2.54	0.40
1:A:491:PHE:HD1	1:A:531:ILE:HD13	1.86	0.40

All (16) 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)
5:A:6003:KEG:P1	5:A:6003:KEG:O17[4_556]	1.52	0.68
5:A:6003:KEG:P1	5:A:6003:KEG:O18[4_556]	1.52	0.68
5:A:6003:KEG:W1	5:A:6003:KEG:O1[4_556]	1.62	0.58
5:A:6003:KEG:W2	5:A:6003:KEG:O2[4_556]	1.63	0.57
5:A:6003:KEG:O18	5:A:6003:KEG:O18[4_556]	1.70	0.50
5:A:6003:KEG:O17	5:A:6003:KEG:O17[4_556]	1.72	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
5:A:6003:KEG:W2	5:A:6003:KEG:O28[4_556]	1.83	0.37
5:A:6003:KEG:W1	5:A:6003:KEG:O27[4_556]	1.85	0.35
5:A:6003:KEG:W2	5:A:6003:KEG:O24[4_556]	1.85	0.35
5:A:6003:KEG:W6	5:A:6003:KEG:O38[4_556]	1.86	0.34
5:A:6003:KEG:W5	5:A:6003:KEG:O37[4_556]	1.86	0.34
5:A:6003:KEG:W1	5:A:6003:KEG:O23[4_556]	1.89	0.31
1:A:218:ASP:OD1	1:A:673:PHE:O[2_665]	1.95	0.25
1:A:251:ASN:O	1:A:570:ASN:ND2[2_665]	1.97	0.23
1:A:404:ASN:ND2	1:A:427:GLN:OE1[4_556]	2.14	0.06
1:A:267:GLU:CD	1:A:574:ARG:O[2_665]	2.17	0.03

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	625/699 (89%)	334 (53%)	156 (25%)	135 (22%)	0 1

All (135) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	46	THR
1	A	47	CYS
1	A	49	SER
1	A	63	PRO
1	A	64	GLN
1	A	71	GLN
1	A	72	VAL
1	A	79	ASP
1	A	80	GLU
1	A	84	PRO
1	A	91	ASP
1	A	106	VAL
1	A	111	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	113	CYS
1	A	119	GLU
1	A	135	ASN
1	A	142	GLN
1	A	157	ASP
1	A	160	PRO
1	A	178	ALA
1	A	188	CYS
1	A	191	SER
1	A	193	TRP
1	A	207	GLU
1	A	218	ASP
1	A	225	GLY
1	A	234	CYS
1	A	240	CYS
1	A	250	VAL
1	A	257	GLY
1	A	271	LEU
1	A	312	LYS
1	A	315	TYR
1	A	366	PRO
1	A	385	ARG
1	A	393	LEU
1	A	396	SER
1	A	410	ALA
1	A	428	ARG
1	A	436	ASP
1	A	437	ARG
1	A	439	HIS
1	A	485	VAL
1	A	497	LYS
1	A	508	GLY
1	A	509	PHE
1	A	527	ASN
1	A	543	ASN
1	A	562	HIS
1	A	605	GLU
1	A	621	LEU
1	A	668	PRO
1	A	683	LEU
1	A	684	ALA
1	A	68	CYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	70	GLY
1	A	95	CYS
1	A	96	HIS
1	A	116	GLY
1	A	128	GLY
1	A	153	GLU
1	A	177	SER
1	A	287	GLU
1	A	331	CYS
1	A	465	SER
1	A	496	SER
1	A	516	GLY
1	A	528	GLY
1	A	569	VAL
1	A	571	GLY
1	A	572	GLY
1	A	585	ALA
1	A	604	ASN
1	A	622	ALA
1	A	641	ARG
1	A	650	THR
1	A	651	LEU
1	A	652	SER
1	A	662	PRO
1	A	685	ARG
1	A	687	MET
1	A	97	ASP
1	A	121	SER
1	A	129	PRO
1	A	224	ASP
1	A	232	ARG
1	A	242	ASP
1	A	263	CYS
1	A	281	CYS
1	A	282	ARG
1	A	292	CYS
1	A	325	LEU
1	A	406	ARG
1	A	427	GLN
1	A	451	ASP
1	A	493	GLU
1	A	498	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	536	THR
1	A	52	PHE
1	A	85	PRO
1	A	127	CYS
1	A	169	PHE
1	A	227	CYS
1	A	238	TYR
1	A	258	PRO
1	A	277	MET
1	A	301	ASN
1	A	478	SER
1	A	486	LYS
1	A	505	PRO
1	A	617	ASP
1	A	639	GLN
1	A	151	ASP
1	A	307	VAL
1	A	426	SER
1	A	463	ILE
1	A	499	ARG
1	A	561	LEU
1	A	590	LEU
1	A	602	ILE
1	A	630	ASP
1	A	646	CYS
1	A	306	HIS
1	A	517	THR
1	A	588	PHE
1	A	671	PRO
1	A	403	PRO
1	A	266	GLY
1	A	475	GLY
1	A	409	VAL
1	A	542	PRO
1	A	518	PRO
1	A	664	PRO
1	A	175	PRO
1	A	447	VAL

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	508/614 (83%)	370 (73%)	138 (27%)	0 4

All (138) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	46	THR
1	A	47	CYS
1	A	49	SER
1	A	53	SER
1	A	61	CYS
1	A	63	PRO
1	A	65	PHE
1	A	74	CYS
1	A	78	SER
1	A	87	THR
1	A	104	GLN
1	A	107	CYS
1	A	108	ASP
1	A	117	SER
1	A	118	ASP
1	A	121	SER
1	A	122	CYS
1	A	124	VAL
1	A	126	THR
1	A	129	PRO
1	A	134	CYS
1	A	135	ASN
1	A	138	THR
1	A	150	PRO
1	A	152	CYS
1	A	156	SER
1	A	159	TRP
1	A	160	PRO
1	A	167	TYR
1	A	168	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	173	SER
1	A	174	SER
1	A	189	ILE
1	A	193	TRP
1	A	203	ASP
1	A	207	GLU
1	A	210	CYS
1	A	217	PRO
1	A	218	ASP
1	A	219	GLU
1	A	231	SER
1	A	232	ARG
1	A	238	TYR
1	A	240	CYS
1	A	243	MET
1	A	247	VAL
1	A	249	CYS
1	A	254	LEU
1	A	256	GLU
1	A	261	PHE
1	A	263	CYS
1	A	283	ASP
1	A	285	SER
1	A	290	LYS
1	A	291	GLU
1	A	296	GLU
1	A	299	ASP
1	A	301	ASN
1	A	304	CYS
1	A	308	CYS
1	A	310	ASP
1	A	311	LEU
1	A	316	GLU
1	A	319	CYS
1	A	324	GLN
1	A	333	ASP
1	A	336	GLU
1	A	337	CYS
1	A	339	ASP
1	A	340	PRO
1	A	342	THR
1	A	343	CYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	356	CYS
1	A	359	GLU
1	A	362	PHE
1	A	365	ASP
1	A	366	PRO
1	A	367	HIS
1	A	371	CYS
1	A	376	SER
1	A	389	ARG
1	A	392	THR
1	A	394	ASP
1	A	396	SER
1	A	397	GLU
1	A	398	TYR
1	A	403	PRO
1	A	407	ASN
1	A	411	LEU
1	A	421	TYR
1	A	422	TRP
1	A	432	SER
1	A	435	LEU
1	A	451	ASP
1	A	465	SER
1	A	467	ILE
1	A	473	VAL
1	A	479	VAL
1	A	498	PRO
1	A	501	ILE
1	A	505	PRO
1	A	509	PHE
1	A	518	PRO
1	A	527	ASN
1	A	533	SER
1	A	534	LEU
1	A	535	VAL
1	A	539	ILE
1	A	542	PRO
1	A	545	ILE
1	A	563	SER
1	A	566	SER
1	A	568	ASP
1	A	577	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	594	GLU
1	A	596	LYS
1	A	600	THR
1	A	612	ARG
1	A	613	LEU
1	A	617	ASP
1	A	620	LEU
1	A	625	LEU
1	A	632	VAL
1	A	649	THR
1	A	650	THR
1	A	651	LEU
1	A	657	GLN
1	A	658	TYR
1	A	659	LEU
1	A	660	CYS
1	A	664	PRO
1	A	668	PRO
1	A	671	PRO
1	A	673	PHE
1	A	678	PRO
1	A	687	MET
1	A	689	SER
1	A	692	THR

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (14) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	148	ASN
1	A	190	HIS
1	A	251	ASN
1	A	264	HIS
1	A	300	ASN
1	A	301	ASN
1	A	309	ASN
1	A	345	GLN
1	A	407	ASN
1	A	464	HIS
1	A	466	ASN
1	A	507	HIS
1	A	538	ASN
1	A	543	ASN

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates ⓘ

9 carbohydrates 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	NAG	A	2030	1,2	14,14,15	0.76	0	15,19,21	0.61	0
2	NAG	A	2031	2	14,14,15	0.84	1 (7%)	15,19,21	0.64	0
2	BMA	A	2032	2	11,11,12	0.76	0	14,15,17	0.40	0
2	MAN	A	2033	2	11,11,12	0.95	1 (9%)	14,15,17	0.77	1 (7%)
2	MAN	A	2035	2	11,11,12	13.83	1 (9%)	14,15,17	5.30	2 (14%)
3	NAG	A	3030	1,3	14,14,15	0.76	0	15,19,21	0.61	0
3	NAG	A	3031	3	14,14,15	0.83	1 (7%)	15,19,21	0.62	0
3	BMA	A	3032	3	11,11,12	0.77	0	14,15,17	0.40	0
3	MAN	A	3033	3	11,11,12	0.93	1 (9%)	14,15,17	0.77	1 (7%)

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	NAG	A	2030	1,2	1/1/5/7	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	A	2031	2	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	BMA	A	2032	2	-	0/2/19/22	0/1/1/1
2	MAN	A	2033	2	-	0/2/19/22	0/1/1/1
2	MAN	A	2035	2	-	0/2/19/22	0/1/1/1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
3	NAG	A	3030	1,3	1/1/5/7	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NAG	A	3031	3	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	BMA	A	3032	3	-	0/2/19/22	0/1/1/1
3	MAN	A	3033	3	-	0/2/19/22	0/1/1/1

All (5) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
3	A	3031	NAG	C1-C2	2.15	1.55	1.52
2	A	2031	NAG	C1-C2	2.18	1.55	1.52
3	A	3033	MAN	C2-C3	2.53	1.56	1.52
2	A	2033	MAN	C2-C3	2.57	1.56	1.52
2	A	2035	MAN	O6-C6	45.84	3.40	1.42

All (4) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	A	2033	MAN	C1-C2-C3	2.09	112.01	109.54
3	A	3033	MAN	C1-C2-C3	2.10	112.03	109.54
2	A	2035	MAN	C1-O5-C5	2.25	115.11	112.25
2	A	2035	MAN	O6-C6-C5	19.59	176.06	111.33

All (2) chirality outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atom
3	A	3030	NAG	C1
2	A	2030	NAG	C1

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

2 monomers are involved in 56 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
2	A	2030	NAG	25	0
3	A	3030	NAG	31	0

5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 11 ligands modelled in this entry, 8 are monoatomic - leaving 3 for Mogul analysis.

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$
5	KEG	A	6001	-	76,76,76	3.19	43 (56%)	6,234,234	2.18	2 (33%)
5	KEG	A	6002	-	76,76,76	2.63	34 (44%)	6,234,234	4.36	3 (50%)
5	KEG	A	6003	-	13,37,76	1.97	5 (38%)	0,95,234	0.00	-

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
5	KEG	A	6001	-	-	0/0/456/456	0/0/24/24
5	KEG	A	6002	-	-	0/0/456/456	0/0/24/24
5	KEG	A	6003	-	-	0/0/162/456	0/0/8/24

All (82) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
5	A	6001	KEG	W2-O28	-8.11	1.55	1.93
5	A	6001	KEG	P1-O18	-7.87	1.27	1.54
5	A	6001	KEG	W6-O36	-7.58	1.58	1.93
5	A	6001	KEG	W1-O29	-7.04	1.60	1.91
5	A	6001	KEG	W3-O33	-6.91	1.61	1.91
5	A	6002	KEG	P1-O18	-6.69	1.31	1.54
5	A	6001	KEG	W10-O28	-5.89	1.66	1.93
5	A	6002	KEG	W1-O23	-5.80	1.66	1.93
5	A	6002	KEG	W11-O13	-5.45	1.56	1.71
5	A	6001	KEG	W5-O23	-5.43	1.68	1.93
5	A	6002	KEG	W2-O18	-5.01	2.16	2.43
5	A	6002	KEG	W4-O26	-4.94	1.69	1.91
5	A	6001	KEG	P1-O19	-4.72	1.38	1.54
5	A	6001	KEG	W7-O29	-4.71	1.70	1.91
5	A	6002	KEG	W5-O23	-4.67	1.71	1.93
5	A	6001	KEG	W1-O23	-4.66	1.71	1.93
5	A	6001	KEG	W2-O2	-4.59	1.58	1.71
5	A	6002	KEG	W3-O33	-4.56	1.71	1.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
5	A	6002	KEG	P1-O17	-4.55	1.38	1.54
5	A	6002	KEG	W1-O25	-4.43	1.72	1.91
5	A	6001	KEG	W10-O18	-4.42	2.19	2.43
5	A	6001	KEG	W2-O18	-4.33	2.19	2.43
5	A	6002	KEG	W12-O14	-4.20	1.59	1.71
5	A	6001	KEG	W11-O13	-4.07	1.60	1.71
5	A	6002	KEG	W12-O37	-4.07	1.74	1.93
5	A	6001	KEG	W10-O36	-4.01	1.74	1.93
5	A	6002	KEG	W10-O42	-3.99	1.73	1.91
5	A	6001	KEG	W9-O42	-3.98	1.73	1.91
5	A	6002	KEG	W7-O33	-3.94	1.74	1.91
5	A	6001	KEG	W12-O14	-3.92	1.60	1.71
5	A	6001	KEG	W1-O17	-3.81	2.22	2.43
5	A	6002	KEG	W5-O39	-3.68	1.75	1.91
5	A	6003	KEG	W12-O14	-3.66	1.60	1.70
5	A	6002	KEG	W1-O17	-3.60	2.23	2.43
5	A	6001	KEG	W8-O10	-3.54	1.61	1.71
5	A	6001	KEG	W6-O24	-3.53	1.77	1.93
5	A	6002	KEG	W1-O27	-3.52	1.77	1.93
5	A	6002	KEG	W11-O39	-3.42	1.76	1.91
5	A	6002	KEG	W10-O12	-3.40	1.62	1.71
5	A	6001	KEG	W2-O24	-3.26	1.78	1.93
5	A	6002	KEG	W1-O1	-3.23	1.62	1.71
5	A	6002	KEG	W9-O42	-3.04	1.78	1.91
5	A	6001	KEG	W8-O44	-3.02	1.79	1.93
5	A	6001	KEG	W9-O11	-3.01	1.63	1.71
5	A	6001	KEG	W3-O25	-3.00	1.78	1.91
5	A	6001	KEG	W10-O12	-2.83	1.63	1.71
5	A	6001	KEG	W6-O8	-2.76	1.63	1.71
5	A	6002	KEG	W2-O26	-2.76	1.79	1.91
5	A	6001	KEG	W5-O7	-2.65	1.64	1.71
5	A	6002	KEG	W12-O45	-2.59	1.80	1.91
5	A	6002	KEG	W9-O45	-2.58	1.80	1.91
5	A	6002	KEG	W8-O44	-2.55	1.81	1.93
5	A	6002	KEG	W9-O27	-2.50	1.81	1.93
5	A	6001	KEG	W11-O40	-2.48	1.80	1.91
5	A	6001	KEG	W1-O1	-2.46	1.64	1.71
5	A	6002	KEG	W6-O32	-2.33	1.81	1.91
5	A	6001	KEG	W4-O6	-2.28	1.65	1.71
5	A	6003	KEG	W9-O11	-2.28	1.65	1.71
5	A	6003	KEG	W10-O12	-2.26	1.65	1.71
5	A	6001	KEG	W8-O41	-2.25	1.83	1.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
5	A	6001	KEG	W1-O25	-2.25	1.81	1.91
5	A	6001	KEG	W11-O44	-2.24	1.83	1.93
5	A	6001	KEG	W7-O33	-2.24	1.81	1.91
5	A	6001	KEG	W4-O26	-2.22	1.81	1.91
5	A	6002	KEG	W2-O2	-2.22	1.65	1.71
5	A	6001	KEG	W2-O26	-2.18	1.81	1.91
5	A	6002	KEG	W3-O25	-2.07	1.82	1.91
5	A	6002	KEG	W11-O44	-2.05	1.83	1.93
5	A	6002	KEG	W7-O9	-2.03	1.65	1.71
5	A	6002	KEG	W6-O18	2.09	2.54	2.43
5	A	6002	KEG	W9-O35	2.11	2.03	1.93
5	A	6001	KEG	W3-O31	2.12	2.03	1.93
5	A	6001	KEG	W6-O32	2.29	2.01	1.91
5	A	6001	KEG	W4-O21	2.33	2.55	2.43
5	A	6001	KEG	W5-O32	2.41	2.01	1.91
5	A	6001	KEG	P1-O21	2.57	1.63	1.54
5	A	6001	KEG	W3-O37	2.95	2.07	1.93
5	A	6002	KEG	W4-O21	3.14	2.60	2.43
5	A	6001	KEG	W3-O21	3.34	2.61	2.43
5	A	6002	KEG	W8-O34	3.37	2.05	1.91
5	A	6003	KEG	W10-O18	3.63	2.47	2.34
5	A	6003	KEG	W9-O17	3.65	2.47	2.34

All (5) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
5	A	6002	KEG	O18-P1-O17	-7.71	99.61	108.94
5	A	6001	KEG	O19-P1-O18	-3.48	104.72	108.94
5	A	6001	KEG	O21-P1-O18	3.29	112.92	108.94
5	A	6002	KEG	O19-P1-O17	3.68	113.38	108.94
5	A	6002	KEG	O19-P1-O18	6.15	116.37	108.94

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

3 monomers are involved in 31 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
5	A	6001	KEG	6	0
5	A	6002	KEG	7	0
5	A	6003	KEG	6	12

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 [i](#)

6.1 Protein, DNA and RNA chains [i](#)

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

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

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

6.3 Carbohydrates [i](#)

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

6.4 Ligands [i](#)

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

6.5 Other polymers [i](#)

EDS was not executed - this section will therefore be empty.