



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Sep 27, 2017 – 02:30 PM EDT

PDB ID : 1JDE
Title : K22A mutant of pyruvate, phosphate dikinase
Authors : Ye, D.; Wei, M.; McGuire, M.; Huang, K.; Kapadia, G.; Herzberg, O.; Martin, B.M.; Dunaway-Mariano, D.
Deposited on : unknown
Resolution : 2.80 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 : 1.7.2 (RC1), CSD as538be (2017)
Xtriage (Phenix) : 1.9-1692
EDS : rb-20030345
Percentile statistics : 20161228.v01 (using entries in the PDB archive December 28th 2016)
Refmac : 5.8.0135
CCP4 : 6.5.0
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20030345

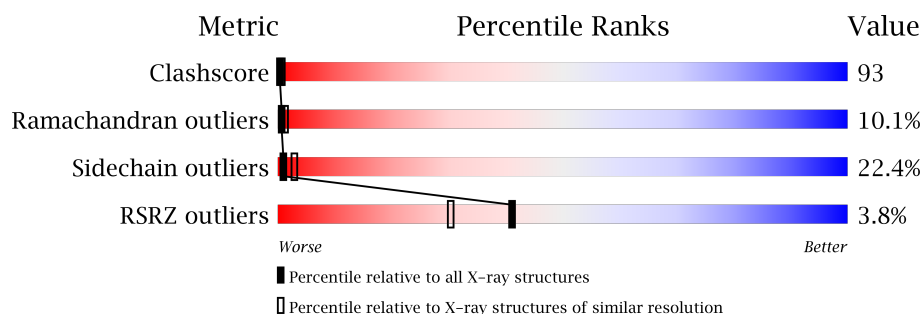
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 2.80 Å.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	112137	3033 (2.80-2.80)
Ramachandran outliers	110173	2983 (2.80-2.80)
Sidechain outliers	110143	2985 (2.80-2.80)
RSRZ outliers	101464	2610 (2.80-2.80)

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	873	

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	SO4	A	902	-	-	X	X

2 Entry composition [i](#)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 6768 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 PYRUVATE, PHOSPHATE DIKINASE.

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

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

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

- Molecule 2 is SULFATE ION (three-letter code: SO4) (formula: O₄S).



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

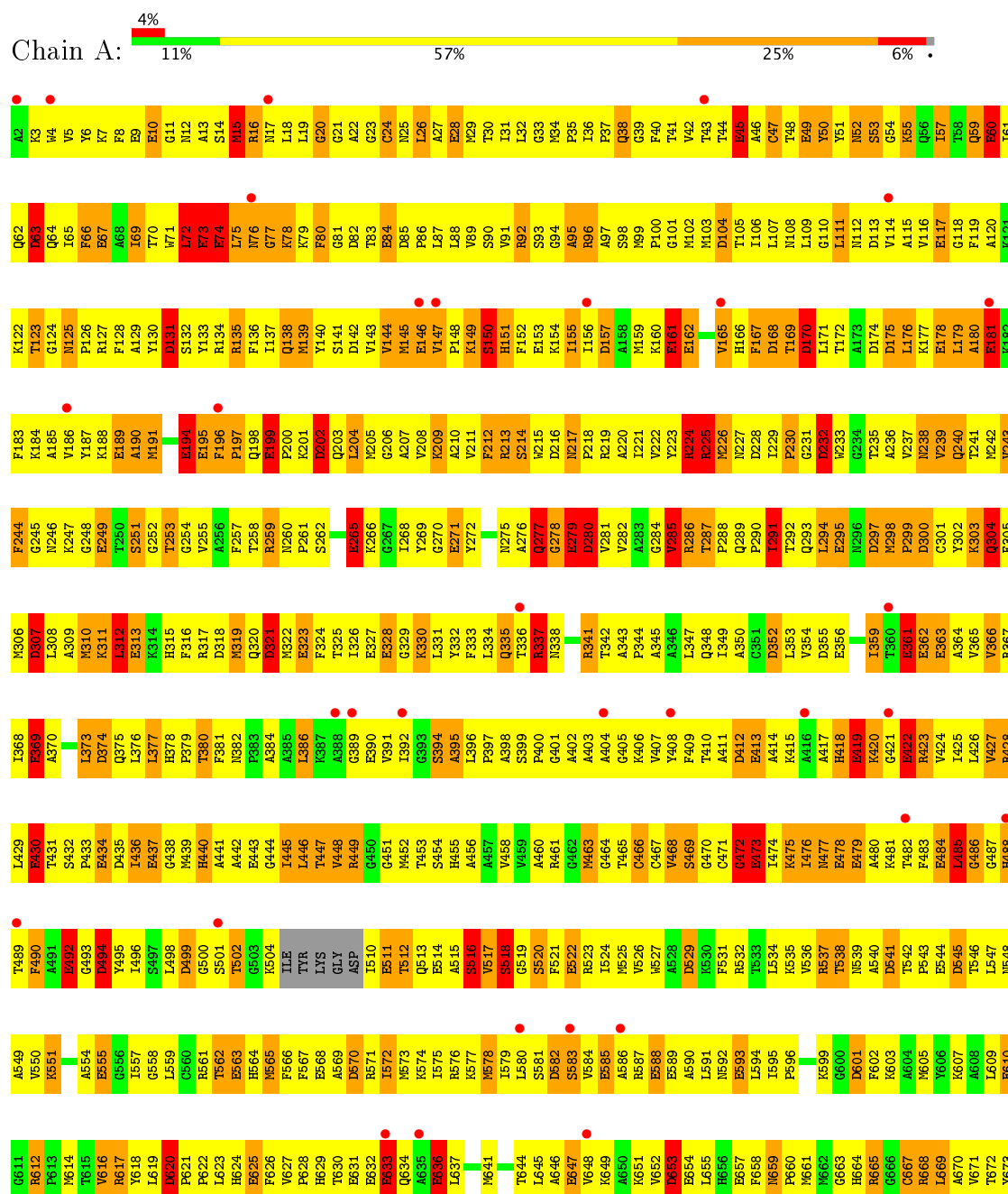
- Molecule 3 is water.

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

3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA and DNA chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry and electron density. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. A red dot above a residue indicates a poor fit to the electron density ($RSRZ > 2$). Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

• Molecule 1: PYRUVATE, PHOSPHATE DIKINASE



P674	S734	Y795	R858
E675	D735	E796	V859
I676	M736	S797	P860
A677	Q737	D798	I861
K678	Y738	F799	A862
M679	H739	F800	R863
Q680	I740	A801	I864
T681	G741	R802	A865
R682	T742	L803	A866
A683	M743	D804	A867
V684	I744	Q805	Q868
M685	E745	V808	A869
E686	I746		A870
A687	F747		L871
A688	R748	L811	M872
E689	I689	V812	M873
E690	A750	E813	K874
V691	L751	M814	
K692	T752	A815	
E693	A753	V816	
E694	D754	R817	
T695	A755	K818	
G696	I756	G819	
I697	A757	R820	
D698	E758	Q821	
I699	E759	T822	
V700	A760	R823	
P701	E761		
E702	F762	L826	
I703	F763	K827	
M704	S764	C828	
I705	F765	G829	
F706	G766	C830	
L707	T767	G831	
V708	M768	G832	
G709	D769	E833	
E710	L770	H834	
K711	T771	G835	
K712	Q772	G836	
E713	M773	D837	
L714	T774	P838	
K715	F775	S839	
F716	G776	S840	
V717	F777	V841	
K718	S778	E842	
D719	R779	F843	
V720	D780	C844	
V721	D781	H845	
V722	A782	K846	
E723	G783	V847	
V724	K784	G848	
A725	F785	L849	
E726	L786	M850	
Q727	D787	Y851	
V728	S788	V852	
K729	Y789	S853	
K730	Y790	C854	
E731	K791	S855	
K732		P856	
G733	I794	F857	

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 1 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	89.90 Å 58.60 Å 102.30 Å 90.00° 95.10° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	10.00 – 2.80 49.03 – 2.75	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	(Not available) (10.00-2.80) 86.8 (49.03-2.75)	Depositor EDS
R_{merge}	0.07	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	2.18 (at 2.77 Å)	Xtriage
Refinement program	X-PLOR	Depositor
R, R_{free}	0.193 , (Not available) 0.247 , (Not available)	Depositor DCC
R_{free} test set	No test flags present.	DCC
Wilson B-factor (Å ²)	32.9	Xtriage
Anisotropy	0.573	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.38 , 139.1	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.42$, $\langle L^2 \rangle = 0.25$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.79	EDS
Total number of atoms	6768	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	28.0	wwPDB-VP

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

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z >5	RMSZ	# Z >5
1	A	1.25	76/6839 (1.1%)	1.59	90/9217 (1.0%)

All (76) bond length outliers are listed below:

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

Continued on next page...

Continued from previous page...

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

Continued on next page...

Continued from previous page...

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

All (90) bond angle outliers are listed below:

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

Continued on next page...

Continued from previous page...

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

Continued on next page...

Continued from previous page...

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

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 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	6717	0	6632	1241	0
2	A	10	0	0	6	0
3	A	41	0	0	5	0
All	All	6768	0	6632	1241	0

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 93.

All (1241) 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:219:ARG:NH2	1:A:437:GLU:H	1.41	1.18
1:A:276:ALA:HB1	1:A:281:VAL:HG21	1.27	1.14
1:A:219:ARG:HH21	1:A:437:GLU:N	1.46	1.13
1:A:574:LYS:HD3	1:A:593:GLU:HB2	1.20	1.13
1:A:5:VAL:HG22	1:A:42:VAL:HA	1.27	1.12
1:A:401:GLY:H	1:A:499:ASP:HB3	1.11	1.11
1:A:105:THR:HG21	1:A:279:GLU:HG2	1.25	1.10
1:A:429:LEU:HD23	1:A:430:GLU:HG2	1.35	1.07
1:A:285:VAL:HG23	1:A:449:ARG:HH12	1.16	1.07
1:A:244:PHE:H	1:A:327:GLU:HG3	1.12	1.07
1:A:419:GLU:HA	1:A:441:ALA:HB1	1.36	1.06
1:A:373:LEU:HD21	1:A:864:LEU:HD12	1.39	1.05
1:A:477:ASN:HD21	1:A:480:ALA:HB3	1.19	1.04
1:A:732:LYS:HG2	1:A:734:SER:H	1.22	1.04
1:A:137:ILE:HG21	1:A:183:PHE:HB3	1.40	1.03
1:A:580:LEU:HD13	1:A:648:VAL:HG22	1.36	1.02
1:A:754:ASP:HB3	1:A:818:LYS:HB3	1.40	1.00
1:A:682:ARG:HH12	1:A:730:LYS:HE3	1.23	0.99
1:A:147:VAL:HG12	1:A:151:HIS:HD2	1.27	0.99
1:A:406:LYS:HD2	1:A:493:GLY:HA2	1.43	0.97
1:A:342:THR:HG22	1:A:344:PRO:HD2	1.45	0.96
1:A:844:CYS:HB3	1:A:849:LEU:HD12	1.45	0.95
1:A:700:VAL:HG13	1:A:737:GLN:HB3	1.48	0.95
1:A:685:MET:HB3	1:A:728:VAL:HG11	1.45	0.94
1:A:308:LEU:HD13	1:A:333:PHE:HE1	1.27	0.93
1:A:477:ASN:ND2	1:A:480:ALA:HB3	1.83	0.93
1:A:88:LEU:HD11	1:A:111:LEU:HG	1.51	0.93
1:A:619:LEU:HB2	1:A:680:GLN:HE22	1.34	0.92
1:A:536:VAL:HG11	1:A:859:VAL:HG13	1.52	0.92
1:A:4:TRP:CE3	1:A:61:ILE:HD11	2.05	0.92
1:A:682:ARG:NH1	1:A:730:LYS:HE3	1.82	0.92
1:A:562:THR:HG1	1:A:566:PHE:HE1	1.06	0.92
1:A:48:THR:HG22	1:A:52:ASN:ND2	1.85	0.92
1:A:156:ILE:HG13	1:A:183:PHE:HZ	1.36	0.91
1:A:700:VAL:HG13	1:A:737:GLN:CB	2.01	0.91
1:A:6:TYR:HD1	1:A:43:THR:HG1	1.16	0.91
1:A:308:LEU:HD13	1:A:333:PHE:CE1	2.05	0.90
1:A:74:GLU:HG3	1:A:75:LEU:H	1.37	0.90
1:A:83:THR:HA	1:A:115:ALA:HB2	1.54	0.90
1:A:140:TYR:CE1	1:A:197:PRO:HG3	2.07	0.90
1:A:401:GLY:N	1:A:499:ASP:HB3	1.86	0.90
1:A:410:THR:HG22	1:A:412:ASP:H	1.37	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:572:ILE:HG23	1:A:573:MET:H	1.36	0.89
1:A:65:ILE:HG21	1:A:204:LEU:HD21	1.54	0.88
1:A:88:LEU:HD21	1:A:111:LEU:CD2	2.03	0.88
1:A:276:ALA:HB1	1:A:281:VAL:CG2	2.02	0.88
1:A:48:THR:HG22	1:A:52:ASN:HD21	1.38	0.88
1:A:105:THR:CG2	1:A:279:GLU:HG2	2.05	0.87
1:A:92:ARG:HB3	1:A:105:THR:HB	1.54	0.87
1:A:224:ARG:HG2	1:A:229:ILE:HB	1.56	0.87
1:A:342:THR:HG21	1:A:400:PRO:HG2	1.56	0.87
1:A:262:SER:HB3	1:A:400:PRO:HD3	1.57	0.86
1:A:134:ARG:HA	1:A:180:ALA:HB2	1.57	0.86
1:A:251:SER:HB3	1:A:328:GLU:H	1.39	0.86
1:A:381:PHE:CD2	1:A:402:ALA:HB1	2.10	0.86
1:A:137:ILE:HA	1:A:196:PHE:CZ	2.10	0.85
1:A:402:ALA:CB	1:A:498:LEU:HG	2.06	0.85
1:A:429:LEU:HD23	1:A:430:GLU:CG	2.06	0.85
1:A:580:LEU:HD13	1:A:648:VAL:CG2	2.06	0.85
1:A:243:VAL:HA	1:A:327:GLU:OE2	1.76	0.84
1:A:603:LYS:HG2	1:A:687:ALA:HB1	1.59	0.84
1:A:88:LEU:HD21	1:A:111:LEU:HD23	1.55	0.84
1:A:786:LEU:HG	1:A:790:TYR:CE2	2.13	0.84
1:A:268:ILE:HG13	1:A:306:MET:SD	2.19	0.83
1:A:837:ASP:H	1:A:841:VAL:HG23	1.44	0.82
1:A:191:MET:CE	1:A:191:MET:HA	2.10	0.82
1:A:272:TYR:CE2	1:A:289:GLN:HB2	2.15	0.82
1:A:285:VAL:HB	1:A:449:ARG:HH22	1.43	0.82
1:A:574:LYS:CD	1:A:593:GLU:HB2	2.08	0.82
1:A:402:ALA:HB2	1:A:498:LEU:HG	1.61	0.82
1:A:732:LYS:HG2	1:A:734:SER:N	1.93	0.82
1:A:575:ILE:O	1:A:579:ILE:HG13	1.79	0.82
1:A:352:ASP:O	1:A:356:GLU:HG3	1.80	0.81
1:A:270:GLY:O	1:A:291:ILE:HG22	1.80	0.81
1:A:258:THR:HG21	1:A:320:GLN:HB2	1.62	0.81
1:A:426:LEU:O	1:A:445:ILE:HG22	1.79	0.81
1:A:81:GLY:HA3	1:A:200:PRO:HG2	1.63	0.81
1:A:260:ASN:HB2	3:A:908:HOH:O	1.81	0.81
1:A:488:HIS:HB2	1:A:490:PHE:CZ	2.14	0.81
1:A:373:LEU:CD2	1:A:864:LEU:HD12	2.11	0.81
1:A:842:GLU:O	1:A:846:LYS:HG2	1.81	0.80
1:A:137:ILE:HD12	1:A:180:ALA:HB1	1.64	0.80
1:A:845:HIS:CE1	1:A:870:ALA:HB2	2.16	0.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:88:LEU:CD1	1:A:111:LEU:HG	2.11	0.80
1:A:392:ILE:HG22	1:A:488:HIS:CE1	2.16	0.80
1:A:460:ALA:HB1	1:A:465:THR:O	1.82	0.80
1:A:71:TRP:CZ2	1:A:75:LEU:HD22	2.17	0.80
1:A:136:PHE:HE2	1:A:196:PHE:HE1	1.30	0.80
1:A:28:GLU:O	1:A:32:LEU:HG	1.82	0.80
1:A:244:PHE:N	1:A:327:GLU:HG3	1.96	0.80
1:A:83:THR:HB	1:A:114:VAL:HG12	1.63	0.79
1:A:148:PRO:HB2	1:A:150:SER:OG	1.82	0.79
1:A:496:ILE:HB	1:A:504:LYS:HB2	1.64	0.79
1:A:107:LEU:HD13	1:A:277:GLN:CG	2.11	0.79
1:A:141:SER:OG	1:A:147:VAL:HG23	1.82	0.79
1:A:278:GLY:O	1:A:280:ASP:N	2.16	0.79
1:A:285:VAL:HG23	1:A:449:ARG:NH1	1.96	0.79
1:A:404:ALA:HB2	1:A:496:ILE:HG23	1.65	0.79
1:A:359:ILE:HG22	1:A:363:GLU:HB3	1.64	0.79
1:A:92:ARG:HB3	1:A:105:THR:CB	2.12	0.79
1:A:359:ILE:HG22	1:A:363:GLU:CB	2.12	0.78
1:A:765:PHE:CD1	1:A:812:VAL:HG22	2.19	0.78
1:A:301:CYS:SG	1:A:326:ILE:HD13	2.23	0.78
1:A:88:LEU:HD21	1:A:111:LEU:CG	2.14	0.78
1:A:745:GLU:C	1:A:770:LEU:HD13	2.04	0.78
1:A:754:ASP:CB	1:A:818:LYS:HB3	2.14	0.78
1:A:350:ALA:O	1:A:354:VAL:HG23	1.84	0.78
1:A:312:LEU:HB2	1:A:316:PHE:HE2	1.50	0.77
1:A:574:LYS:HB2	1:A:574:LYS:NZ	2.00	0.77
1:A:480:ALA:O	1:A:482:THR:HG23	1.84	0.77
1:A:366:VAL:HG11	1:A:872:ASN:HB3	1.67	0.77
1:A:97:ALA:O	1:A:99:MET:HG3	1.85	0.77
1:A:439:MET:HB3	1:A:463:MET:CE	2.15	0.77
1:A:854:CYS:SG	1:A:859:VAL:HA	2.25	0.77
1:A:107:LEU:HD11	1:A:279:GLU:HB2	1.66	0.76
1:A:73:GLU:HA	1:A:76:ASN:ND2	2.00	0.76
1:A:386:LEU:HD21	1:A:498:LEU:CD1	2.15	0.76
1:A:225:ARG:HD2	1:A:226:MET:N	2.01	0.76
1:A:76:ASN:O	1:A:78:LYS:HG2	1.85	0.76
1:A:131:ASP:O	1:A:134:ARG:HG3	1.85	0.76
1:A:269:TYR:HA	3:A:904:HOH:O	1.85	0.76
1:A:255:VAL:HG21	1:A:453:THR:OG1	1.86	0.76
1:A:73:GLU:CD	1:A:79:LYS:HE2	2.06	0.76
1:A:767:THR:OG1	1:A:832:GLY:HA3	1.85	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:584:VAL:O	1:A:588:GLU:HG3	1.84	0.76
1:A:214:SER:O	1:A:217:ASN:HB3	1.85	0.75
1:A:261:PRO:HD2	1:A:269:TYR:CD1	2.20	0.75
1:A:107:LEU:HD12	1:A:139:MET:CE	2.16	0.75
1:A:254:GLY:HA3	1:A:324:PHE:CZ	2.22	0.75
1:A:779:ARG:HG3	1:A:779:ARG:HH11	1.51	0.75
1:A:100:PRO:HA	2:A:902:SO4:O1	1.86	0.75
1:A:419:GLU:HA	1:A:441:ALA:CB	2.13	0.75
1:A:191:MET:HA	1:A:191:MET:HE3	1.69	0.75
1:A:427:VAL:CG2	1:A:446:LEU:HD13	2.16	0.75
1:A:405:GLY:C	1:A:494:ASP:HA	2.06	0.75
1:A:767:THR:O	1:A:771:THR:HB	1.87	0.75
1:A:88:LEU:HD21	1:A:111:LEU:HG	1.69	0.75
1:A:223:TYR:HD2	1:A:436:ILE:HG12	1.49	0.75
1:A:571:ARG:HB3	1:A:594:LEU:HD21	1.68	0.74
1:A:483:PHE:CE1	1:A:490:PHE:HB2	2.23	0.74
1:A:476:ILE:HG23	1:A:483:PHE:HB3	1.67	0.74
1:A:155:ILE:O	1:A:159:MET:HB2	1.88	0.74
1:A:312:LEU:HB2	1:A:316:PHE:CE2	2.22	0.74
1:A:386:LEU:CD1	1:A:510:ILE:HD12	2.18	0.74
1:A:83:THR:HB	1:A:114:VAL:CG1	2.18	0.74
1:A:36:ILE:HG22	1:A:333:PHE:O	1.86	0.74
1:A:378:HIS:HB3	1:A:379:PRO:HD2	1.68	0.74
1:A:255:VAL:HG11	1:A:453:THR:HB	1.70	0.74
1:A:406:LYS:HA	1:A:494:ASP:H	1.52	0.74
1:A:127:ARG:HD2	1:A:171:LEU:O	1.87	0.74
1:A:134:ARG:CA	1:A:180:ALA:HB2	2.17	0.74
1:A:439:MET:HB3	1:A:463:MET:HE2	1.69	0.74
1:A:692:LYS:HG2	1:A:697:ILE:O	1.88	0.74
1:A:147:VAL:HG12	1:A:151:HIS:CD2	2.19	0.74
1:A:134:ARG:HB3	1:A:180:ALA:HB2	1.69	0.73
1:A:183:PHE:O	1:A:186:VAL:HG12	1.88	0.73
1:A:670:ALA:HA	1:A:673:TYR:O	1.88	0.73
1:A:244:PHE:H	1:A:327:GLU:CG	1.99	0.73
1:A:658:PHE:C	1:A:659:ASN:HD22	1.90	0.73
1:A:698:ASP:O	1:A:699:ILE:HD13	1.87	0.73
1:A:181:GLU:HG2	1:A:184:LYS:NZ	2.02	0.73
1:A:230:PRO:HG2	1:A:233:TRP:NE1	2.04	0.73
1:A:571:ARG:HB3	1:A:594:LEU:CD2	2.17	0.73
1:A:200:PRO:HA	1:A:203:GLN:HG3	1.70	0.73
1:A:622:PRO:HB3	1:A:664:HIS:O	1.87	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:400:PRO:HA	1:A:499:ASP:CB	2.18	0.73
1:A:197:PRO:O	1:A:203:GLN:HG2	1.87	0.73
1:A:692:LYS:O	1:A:692:LYS:HD3	1.88	0.73
1:A:186:VAL:HA	1:A:189:GLU:CD	2.09	0.73
1:A:134:ARG:CB	1:A:180:ALA:HB2	2.19	0.72
1:A:207:ALA:O	1:A:211:VAL:HG23	1.89	0.72
1:A:213:ARG:HD3	1:A:213:ARG:O	1.88	0.72
1:A:547:LEU:O	1:A:550:VAL:HG22	1.89	0.72
1:A:779:ARG:HG2	1:A:800:PHE:CG	2.24	0.72
1:A:326:ILE:HG12	1:A:331:LEU:HD12	1.70	0.72
1:A:657:GLU:OE1	1:A:663:GLY:HA3	1.90	0.72
1:A:667:CYS:O	1:A:671:VAL:HG23	1.89	0.72
1:A:566:PHE:HZ	1:A:680:GLN:HE21	1.34	0.72
1:A:319:MET:HB3	1:A:341:ARG:NH1	2.04	0.72
1:A:92:ARG:CB	1:A:105:THR:HB	2.18	0.72
1:A:156:ILE:HG13	1:A:183:PHE:CZ	2.24	0.72
1:A:199:GLU:HB3	1:A:202:ASP:HB2	1.71	0.71
1:A:148:PRO:HD2	1:A:151:HIS:CD2	2.25	0.71
1:A:13:ALA:HA	1:A:24:CYS:SG	2.30	0.71
1:A:298:MET:HG2	1:A:301:CYS:SG	2.30	0.71
1:A:768:ASN:O	1:A:772:GLN:HG3	1.89	0.71
1:A:775:PHE:HD2	1:A:777:PHE:CZ	2.07	0.71
1:A:109:LEU:HB2	1:A:136:PHE:HE1	1.54	0.71
1:A:157:ASP:O	1:A:161:GLU:HB2	1.89	0.71
1:A:406:LYS:HA	1:A:494:ASP:N	2.06	0.71
1:A:259:ARG:NH2	1:A:353:LEU:HD21	2.05	0.71
1:A:652:VAL:HA	1:A:655:LEU:HD12	1.72	0.71
1:A:317:ARG:HB3	1:A:317:ARG:HH11	1.56	0.71
1:A:668:ARG:HD2	1:A:668:ARG:H	1.56	0.71
1:A:136:PHE:CE2	1:A:196:PHE:HE1	2.08	0.70
1:A:691:VAL:HA	1:A:694:GLU:OE1	1.91	0.70
1:A:519:GLY:O	1:A:523:ARG:HG3	1.91	0.70
1:A:100:PRO:HA	2:A:902:SO4:S	2.32	0.70
1:A:599:LYS:O	1:A:603:LYS:HG3	1.91	0.70
1:A:678:LYS:HG2	1:A:724:VAL:HG21	1.73	0.70
1:A:766:GLY:O	1:A:770:LEU:HB2	1.91	0.70
1:A:55:LYS:HD2	1:A:213:ARG:HH12	1.56	0.70
1:A:55:LYS:HD2	1:A:213:ARG:NH1	2.06	0.70
1:A:4:TRP:CZ3	1:A:49:GLU:HG2	2.26	0.70
1:A:291:ILE:O	1:A:291:ILE:HD12	1.90	0.70
1:A:546:THR:O	1:A:550:VAL:HG13	1.92	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:93:SER:OG	1:A:103:MET:HB3	1.92	0.70
1:A:107:LEU:HD12	1:A:139:MET:SD	2.30	0.70
1:A:772:GLN:NE2	1:A:779:ARG:HB2	2.06	0.70
1:A:823:ARG:O	1:A:826:LEU:HB2	1.91	0.69
1:A:7:LYS:HE3	1:A:10:GLU:OE1	1.92	0.69
1:A:334:LEU:HD23	1:A:334:LEU:N	2.07	0.69
1:A:258:THR:CG2	1:A:320:GLN:HB2	2.22	0.69
1:A:665:ARG:O	1:A:707:LEU:HD23	1.91	0.69
1:A:18:LEU:HA	1:A:44:THR:OG1	1.92	0.69
1:A:693:GLU:O	1:A:695:THR:N	2.26	0.69
1:A:370:ALA:HB2	1:A:868:GLN:OE1	1.92	0.69
1:A:517:VAL:HG23	1:A:522:GLU:OE2	1.93	0.69
1:A:621:PRO:HB3	1:A:625:GLU:CD	2.13	0.69
1:A:644:THR:HG22	1:A:646:ALA:H	1.57	0.69
1:A:25:ASN:O	1:A:29:MET:HG3	1.93	0.69
1:A:146:GLU:CB	1:A:187:TYR:HE2	2.06	0.69
1:A:81:GLY:HA2	1:A:110:GLY:O	1.93	0.69
1:A:728:VAL:O	1:A:730:LYS:HG2	1.93	0.68
1:A:176:LEU:O	1:A:179:LEU:N	2.26	0.68
1:A:472:GLY:O	1:A:474:ILE:HG13	1.93	0.68
1:A:728:VAL:O	1:A:730:LYS:N	2.27	0.68
1:A:572:ILE:HG23	1:A:573:MET:N	2.08	0.68
1:A:595:ILE:N	1:A:596:PRO:HD2	2.09	0.68
1:A:63:ASP:O	1:A:67:GLU:N	2.27	0.68
1:A:71:TRP:CE2	1:A:75:LEU:HD22	2.29	0.68
1:A:127:ARG:HG3	1:A:176:LEU:CD1	2.24	0.68
1:A:401:GLY:H	1:A:499:ASP:CB	1.98	0.68
1:A:753:ALA:CB	1:A:815:ALA:HA	2.24	0.68
1:A:37:PRO:O	1:A:240:GLN:NE2	2.26	0.68
1:A:382:ASN:ND2	1:A:511:GLU:OE2	2.27	0.68
1:A:580:LEU:HD11	1:A:637:LEU:HD21	1.74	0.68
1:A:16:ARG:HG3	1:A:20:GLY:O	1.93	0.67
1:A:386:LEU:HD12	1:A:510:ILE:HD12	1.76	0.67
1:A:803:LEU:O	1:A:803:LEU:HG	1.94	0.67
1:A:107:LEU:HB2	1:A:139:MET:HE1	1.76	0.67
1:A:487:GLY:H	1:A:488:HIS:HD2	1.41	0.67
1:A:224:ARG:CG	1:A:229:ILE:HB	2.25	0.67
1:A:35:PRO:O	1:A:332:TYR:HA	1.93	0.67
1:A:758:GLU:O	1:A:823:ARG:NH2	2.27	0.67
1:A:535:LYS:O	1:A:852:VAL:HG23	1.93	0.67
1:A:76:ASN:OD1	1:A:87:LEU:HD13	1.94	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:574:LYS:HD3	1:A:593:GLU:CB	2.11	0.67
1:A:644:THR:O	1:A:647:GLU:N	2.27	0.67
1:A:104:ASP:HB3	1:A:143:VAL:CG1	2.25	0.67
1:A:100:PRO:HB2	1:A:458:VAL:CG1	2.25	0.67
1:A:73:GLU:O	1:A:77:GLY:N	2.28	0.67
1:A:211:VAL:HG11	1:A:237:VAL:HB	1.76	0.67
1:A:37:PRO:HD2	1:A:240:GLN:HE22	1.60	0.67
1:A:251:SER:HB3	1:A:328:GLU:N	2.09	0.67
1:A:317:ARG:O	1:A:367:ARG:NH1	2.27	0.67
1:A:18:LEU:HB3	1:A:43:THR:HG23	1.76	0.67
1:A:419:GLU:CA	1:A:441:ALA:HB1	2.20	0.67
1:A:282:VAL:HG12	1:A:453:THR:HG21	1.75	0.67
1:A:532:ARG:NH1	1:A:534:LEU:O	2.28	0.67
1:A:429:LEU:HA	1:A:448:VAL:HG23	1.75	0.66
1:A:400:PRO:HA	1:A:499:ASP:HB2	1.77	0.66
1:A:80:PHE:HA	1:A:87:LEU:HB3	1.78	0.66
1:A:253:THR:HG21	1:A:278:GLY:N	2.10	0.66
1:A:272:TYR:HD1	1:A:291:ILE:HA	1.60	0.66
1:A:743:MET:HA	1:A:764:SER:O	1.96	0.66
1:A:260:ASN:HB3	1:A:265:GLU:HB2	1.77	0.66
1:A:396:LEU:H	1:A:468:VAL:HG12	1.61	0.66
1:A:408:TYR:O	1:A:426:LEU:HD12	1.96	0.66
1:A:537:ARG:NH2	1:A:557:ILE:O	2.27	0.66
1:A:109:LEU:HB2	1:A:136:PHE:CE1	2.29	0.66
1:A:66:PHE:HD2	1:A:201:LYS:HZ3	1.44	0.66
1:A:398:ALA:HB3	1:A:467:CYS:O	1.95	0.66
1:A:57:ILE:H	1:A:57:ILE:HD12	1.59	0.66
1:A:213:ARG:HH11	1:A:213:ARG:HG2	1.61	0.66
1:A:732:LYS:CG	1:A:734:SER:H	2.06	0.66
1:A:803:LEU:CD2	1:A:843:PHE:HD2	2.08	0.66
1:A:259:ARG:HG2	1:A:266:LYS:HA	1.77	0.66
1:A:137:ILE:HG22	1:A:152:PHE:HE1	1.61	0.65
1:A:674:PRO:O	1:A:677:ALA:HB3	1.97	0.65
1:A:386:LEU:HD13	1:A:510:ILE:HG21	1.78	0.65
1:A:219:ARG:HH21	1:A:437:GLU:H	0.70	0.65
1:A:543:PRO:HD3	1:A:605:MET:SD	2.36	0.65
1:A:596:PRO:O	1:A:599:LYS:HB3	1.96	0.65
1:A:718:LYS:HG3	1:A:740:ILE:HD13	1.78	0.65
1:A:366:VAL:CG1	1:A:872:ASN:HB3	2.26	0.65
1:A:126:PRO:O	1:A:130:TYR:HB2	1.97	0.65
1:A:211:VAL:O	1:A:213:ARG:N	2.29	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:213:ARG:CG	1:A:213:ARG:HH11	2.10	0.65
1:A:524:ILE:HD12	1:A:527:TRP:CE3	2.32	0.65
1:A:169:THR:OG1	1:A:275:ASN:ND2	2.29	0.65
1:A:301:CYS:O	1:A:304:GLN:HB2	1.96	0.65
1:A:837:ASP:H	1:A:841:VAL:CG2	2.09	0.65
1:A:603:LYS:HD3	1:A:691:VAL:HG23	1.78	0.65
1:A:131:ASP:O	1:A:135:ARG:HD3	1.97	0.65
1:A:40:PHE:CE1	1:A:69:ILE:HD13	2.32	0.65
1:A:735:ASP:OD1	1:A:735:ASP:N	2.26	0.65
1:A:253:THR:CG2	1:A:278:GLY:HA2	2.27	0.65
1:A:155:ILE:HB	1:A:183:PHE:HE1	1.62	0.65
1:A:516:SER:OG	1:A:517:VAL:N	2.28	0.65
1:A:270:GLY:C	1:A:291:ILE:HG22	2.16	0.64
1:A:117:GLU:O	1:A:120:ALA:HB3	1.97	0.64
1:A:223:TYR:HD2	1:A:436:ILE:CG1	2.09	0.64
1:A:27:ALA:O	1:A:30:THR:HB	1.96	0.64
1:A:341:ARG:NH1	3:A:922:HOH:O	2.29	0.64
1:A:392:ILE:HD12	1:A:485:LEU:HB3	1.78	0.64
1:A:576:ARG:NH2	1:A:633:GLU:OE1	2.30	0.64
1:A:80:PHE:HB2	1:A:87:LEU:HD23	1.80	0.64
1:A:750:ALA:HB1	1:A:811:LEU:O	1.97	0.64
1:A:146:GLU:HB3	1:A:187:TYR:HE2	1.62	0.64
1:A:689:ILE:O	1:A:693:GLU:HG3	1.97	0.64
1:A:88:LEU:CD2	1:A:111:LEU:HG	2.27	0.64
1:A:251:SER:CB	1:A:328:GLU:H	2.07	0.64
1:A:537:ARG:HD3	1:A:851:TYR:CD1	2.32	0.64
1:A:771:THR:HA	1:A:808:VAL:HG21	1.80	0.64
1:A:337:ARG:NH1	2:A:902:SO4:O3	2.30	0.64
1:A:386:LEU:HD21	1:A:498:LEU:HD11	1.80	0.64
1:A:368:ILE:HB	1:A:864:LEU:HD11	1.78	0.64
1:A:318:ASP:OD2	1:A:341:ARG:NH2	2.31	0.64
1:A:70:THR:O	1:A:74:GLU:HG2	1.97	0.64
1:A:592:ASN:HA	1:A:595:ILE:HD12	1.79	0.63
1:A:316:PHE:HB2	1:A:320:GLN:NE2	2.14	0.63
1:A:485:LEU:HD23	1:A:486:GLY:H	1.64	0.63
1:A:433:PRO:HD3	1:A:455:HIS:NE2	2.13	0.63
1:A:7:LYS:HB2	1:A:10:GLU:HB2	1.80	0.63
1:A:12:ASN:O	1:A:24:CYS:HB2	1.99	0.63
1:A:474:ILE:HG22	1:A:476:ILE:HG13	1.81	0.63
1:A:708:VAL:HG21	1:A:714:LEU:HB2	1.81	0.63
1:A:39:GLY:HA2	1:A:72:LEU:HD21	1.78	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:386:LEU:HA	1:A:510:ILE:HD12	1.80	0.63
1:A:578:MET:CG	1:A:587:ARG:HB3	2.29	0.63
1:A:609:LEU:O	1:A:612:ARG:HB2	1.98	0.63
1:A:645:LEU:O	1:A:649:LYS:HG3	1.98	0.63
1:A:728:VAL:HA	1:A:730:LYS:HE2	1.81	0.63
1:A:89:VAL:O	1:A:109:LEU:N	2.26	0.63
1:A:411:ALA:O	1:A:414:ALA:HB3	1.99	0.62
1:A:272:TYR:HE2	1:A:289:GLN:NE2	1.97	0.62
1:A:107:LEU:HD13	1:A:277:GLN:OE1	1.99	0.62
1:A:392:ILE:CD1	1:A:485:LEU:HD13	2.29	0.62
1:A:395:ALA:O	1:A:396:LEU:HD12	1.99	0.62
1:A:828:CYS:N	1:A:850:ASN:OD1	2.28	0.62
1:A:404:ALA:O	1:A:423:ARG:HB3	2.00	0.62
1:A:74:GLU:HG3	1:A:75:LEU:N	2.10	0.62
1:A:104:ASP:HB3	1:A:143:VAL:HG11	1.81	0.62
1:A:324:PHE:HA	1:A:332:TYR:O	1.99	0.62
1:A:558:GLY:HA3	1:A:853:SER:OG	1.99	0.62
1:A:621:PRO:HB3	1:A:625:GLU:OE1	2.00	0.62
1:A:779:ARG:HG3	1:A:779:ARG:NH1	2.12	0.62
1:A:431:THR:OG1	1:A:456:ALA:HB2	2.00	0.62
1:A:578:MET:HA	1:A:581:SER:OG	2.00	0.62
1:A:578:MET:HB2	1:A:590:ALA:CB	2.30	0.62
1:A:592:ASN:HA	1:A:595:ILE:CD1	2.29	0.62
1:A:732:LYS:HG2	1:A:734:SER:CA	2.28	0.62
1:A:81:GLY:HA3	1:A:200:PRO:CG	2.29	0.62
1:A:88:LEU:HD11	1:A:111:LEU:CG	2.27	0.62
1:A:20:GLY:HA2	1:A:96:ARG:HA	1.81	0.62
1:A:685:MET:CE	1:A:736:MET:HG2	2.30	0.62
1:A:427:VAL:O	1:A:428:ARG:HG2	2.00	0.61
1:A:713:GLU:O	1:A:716:PHE:N	2.31	0.61
1:A:76:ASN:O	1:A:78:LYS:N	2.33	0.61
1:A:400:PRO:HA	1:A:499:ASP:HB3	1.81	0.61
1:A:427:VAL:HG22	1:A:446:LEU:HD13	1.80	0.61
1:A:550:VAL:HA	1:A:554:ALA:HB3	1.81	0.61
1:A:548:ASN:O	1:A:551:LYS:HB3	2.00	0.61
1:A:704:MET:SD	1:A:764:SER:HB3	2.40	0.61
1:A:344:PRO:O	1:A:347:LEU:HB2	2.01	0.61
1:A:476:ILE:HA	1:A:483:PHE:HA	1.82	0.61
1:A:185:ALA:HA	1:A:188:LYS:HB3	1.81	0.61
1:A:331:LEU:HG	1:A:332:TYR:N	2.15	0.61
1:A:5:VAL:CG2	1:A:42:VAL:HA	2.18	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:616:VAL:HG23	1:A:702:GLU:O	2.00	0.61
1:A:618:TYR:N	1:A:704:MET:O	2.29	0.61
1:A:180:ALA:HA	1:A:183:PHE:HB2	1.82	0.61
1:A:269:TYR:OH	1:A:452:MET:HB3	2.01	0.61
1:A:620:ASP:O	1:A:665:ARG:HB2	2.01	0.61
1:A:842:GLU:HG3	1:A:869:ALA:HA	1.82	0.61
1:A:155:ILE:HD11	1:A:186:VAL:HG21	1.82	0.61
1:A:65:ILE:HG21	1:A:204:LEU:CD2	2.30	0.61
1:A:472:GLY:O	1:A:474:ILE:N	2.27	0.61
1:A:34:MET:O	1:A:36:ILE:N	2.30	0.61
1:A:748:ARG:O	1:A:751:LEU:HB2	2.00	0.61
1:A:779:ARG:HG2	1:A:800:PHE:CD2	2.35	0.61
1:A:123:THR:O	1:A:123:THR:HG23	2.01	0.61
1:A:143:VAL:C	1:A:145:MET:H	2.04	0.61
1:A:803:LEU:HD23	1:A:843:PHE:HD2	1.64	0.61
1:A:271:GLU:HB3	1:A:288:PRO:HB2	1.83	0.60
1:A:603:LYS:O	1:A:607:LYS:HG3	2.01	0.60
1:A:765:PHE:CE1	1:A:812:VAL:HG22	2.36	0.60
1:A:786:LEU:HG	1:A:790:TYR:HE2	1.64	0.60
1:A:364:ALA:O	1:A:368:ILE:HD12	2.00	0.60
1:A:4:TRP:O	1:A:43:THR:HB	2.01	0.60
1:A:648:VAL:O	1:A:652:VAL:N	2.33	0.60
1:A:685:MET:HE3	1:A:736:MET:HG2	1.83	0.60
1:A:661:MET:CE	1:A:772:GLN:HB2	2.32	0.60
1:A:305:PHE:O	1:A:309:ALA:N	2.31	0.60
1:A:401:GLY:O	1:A:499:ASP:N	2.27	0.60
1:A:6:TYR:HD1	1:A:43:THR:OG1	1.83	0.60
1:A:775:PHE:CD2	1:A:777:PHE:CZ	2.88	0.60
1:A:181:GLU:HG2	1:A:184:LYS:HZ1	1.66	0.60
1:A:386:LEU:HD13	1:A:510:ILE:HD12	1.84	0.60
1:A:820:ARG:HG2	1:A:826:LEU:HB3	1.82	0.60
1:A:420:LYS:HG3	1:A:442:ALA:C	2.22	0.60
1:A:518:SER:O	1:A:522:GLU:HG2	2.02	0.60
1:A:603:LYS:CG	1:A:687:ALA:HB1	2.31	0.60
1:A:732:LYS:O	1:A:734:SER:N	2.34	0.60
1:A:294:LEU:HB3	1:A:302:TYR:HD1	1.67	0.60
1:A:392:ILE:HD11	1:A:485:LEU:HD13	1.83	0.60
1:A:138:GLN:HA	1:A:152:PHE:CE1	2.37	0.60
1:A:434:GLU:O	1:A:434:GLU:HG3	2.01	0.60
1:A:405:GLY:O	1:A:494:ASP:HA	2.02	0.59
1:A:563:GLU:OE1	1:A:617:ARG:NH1	2.35	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:83:THR:HA	1:A:115:ALA:CB	2.30	0.59
1:A:140:TYR:HE2	1:A:203:GLN:O	1.84	0.59
1:A:381:PHE:HB3	1:A:386:LEU:HD22	1.85	0.59
1:A:397:PRO:O	1:A:452:MET:HE1	2.02	0.59
1:A:700:VAL:HG13	1:A:737:GLN:HB2	1.83	0.59
1:A:537:ARG:HD3	1:A:851:TYR:CG	2.37	0.59
1:A:857:PHE:O	1:A:860:PRO:HD2	2.02	0.59
1:A:559:LEU:CD1	1:A:617:ARG:HB3	2.32	0.59
1:A:689:ILE:HG21	1:A:731:GLU:HB2	1.83	0.59
1:A:790:TYR:OH	1:A:798:ASP:HA	2.02	0.59
1:A:827:LYS:HA	1:A:850:ASN:OD1	2.03	0.59
1:A:12:ASN:OD1	1:A:13:ALA:N	2.35	0.59
1:A:187:TYR:CE1	1:A:196:PHE:HA	2.37	0.59
1:A:872:ASN:C	1:A:872:ASN:HD22	2.06	0.59
1:A:33:GLY:O	1:A:34:MET:HG2	2.03	0.59
1:A:603:LYS:CD	1:A:691:VAL:HG23	2.32	0.59
1:A:668:ARG:HD2	1:A:668:ARG:N	2.18	0.59
1:A:701:PRO:HD2	1:A:737:GLN:O	2.02	0.59
1:A:732:LYS:HG2	1:A:734:SER:HA	1.85	0.59
1:A:91:VAL:HG22	1:A:239:VAL:HG13	1.84	0.59
1:A:151:HIS:O	1:A:154:LYS:N	2.35	0.59
1:A:379:PRO:HB2	1:A:512:THR:HB	1.85	0.59
1:A:718:LYS:HG3	1:A:740:ILE:CD1	2.33	0.59
1:A:109:LEU:HD11	1:A:203:GLN:HB2	1.84	0.58
1:A:225:ARG:HG3	1:A:225:ARG:NH1	2.18	0.58
1:A:477:ASN:OD1	1:A:480:ALA:N	2.28	0.58
1:A:841:VAL:HB	1:A:865:ALA:HB1	1.85	0.58
1:A:563:GLU:HG3	1:A:621:PRO:CD	2.34	0.58
1:A:359:ILE:HG22	1:A:363:GLU:HB2	1.85	0.58
1:A:258:THR:HG23	1:A:320:GLN:O	2.01	0.58
1:A:291:ILE:O	1:A:302:TYR:HE1	1.86	0.58
1:A:290:PRO:HD2	1:A:293:GLN:OE1	2.03	0.58
1:A:445:ILE:O	1:A:467:CYS:HA	2.03	0.58
1:A:402:ALA:HA	1:A:498:LEU:HA	1.86	0.58
1:A:222:VAL:HG11	1:A:437:GLU:HG3	1.86	0.58
1:A:845:HIS:NE2	1:A:870:ALA:HB2	2.19	0.58
1:A:152:PHE:HD2	1:A:152:PHE:H	1.49	0.58
1:A:294:LEU:CD2	1:A:298:MET:HB3	2.33	0.58
1:A:27:ALA:O	1:A:31:ILE:HG12	2.04	0.58
1:A:71:TRP:CZ3	1:A:72:LEU:HD23	2.39	0.58
1:A:5:VAL:HG22	1:A:42:VAL:CA	2.18	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:867:ALA:O	1:A:871:LEU:HB2	2.04	0.58
1:A:127:ARG:HG3	1:A:176:LEU:HD11	1.84	0.58
1:A:614:MET:O	1:A:702:GLU:HB2	2.04	0.58
1:A:661:MET:HE1	1:A:772:GLN:HB2	1.86	0.58
1:A:130:TYR:O	1:A:133:TYR:N	2.36	0.57
1:A:261:PRO:HD2	1:A:269:TYR:CE1	2.38	0.57
1:A:591:LEU:HD22	1:A:679:MET:HE3	1.86	0.57
1:A:627:VAL:HB	1:A:628:PRO:HD2	1.85	0.57
1:A:326:ILE:HA	1:A:330:LYS:O	2.05	0.57
1:A:669:LEU:O	1:A:673:TYR:HD2	1.87	0.57
1:A:41:THR:OG1	1:A:238:ASN:HB3	2.04	0.57
1:A:617:ARG:HB2	1:A:704:MET:HE2	1.86	0.57
1:A:253:THR:HG21	1:A:278:GLY:CA	2.35	0.57
1:A:59:GLN:O	1:A:61:ILE:N	2.37	0.57
1:A:138:GLN:HA	1:A:152:PHE:CD1	2.40	0.57
1:A:409:PHE:O	1:A:428:ARG:HD3	2.05	0.57
1:A:665:ARG:HG3	1:A:707:LEU:CD2	2.34	0.57
1:A:128:PHE:CE2	1:A:247:LYS:HD3	2.39	0.57
1:A:538:THR:CG2	1:A:540:ALA:HB2	2.34	0.57
1:A:718:LYS:O	1:A:722:VAL:HB	2.05	0.57
1:A:187:TYR:HE1	1:A:196:PHE:HA	1.70	0.57
1:A:407:VAL:O	1:A:492:GLU:HB3	2.04	0.57
1:A:563:GLU:OE2	1:A:620:ASP:N	2.37	0.57
1:A:316:PHE:HD2	1:A:320:GLN:NE2	2.03	0.57
1:A:368:ILE:HG22	1:A:369:GLU:N	2.19	0.57
1:A:701:PRO:O	1:A:738:TYR:HA	2.05	0.57
1:A:359:ILE:CG2	1:A:363:GLU:HB3	2.32	0.57
1:A:564:HIS:C	1:A:566:PHE:H	2.08	0.57
1:A:534:LEU:HD11	1:A:845:HIS:HA	1.86	0.57
1:A:343:ALA:HB3	1:A:344:PRO:HD3	1.87	0.57
1:A:425:ILE:HG22	1:A:426:LEU:N	2.19	0.57
1:A:474:ILE:HG23	1:A:484:GLU:O	2.04	0.57
1:A:816:VAL:O	1:A:820:ARG:HG3	2.05	0.57
1:A:826:LEU:HD23	1:A:827:LYS:O	2.05	0.57
1:A:224:ARG:HG3	1:A:229:ILE:CG2	2.35	0.56
1:A:444:GLY:HA3	1:A:466:CYS:SG	2.45	0.56
1:A:488:HIS:HB2	1:A:490:PHE:CE1	2.40	0.56
1:A:518:SER:HG	1:A:520:SER:HG	1.51	0.56
1:A:869:ALA:O	1:A:873:ASN:HB2	2.04	0.56
1:A:155:ILE:HD11	1:A:186:VAL:CG2	2.35	0.56
1:A:224:ARG:HG3	1:A:229:ILE:HG21	1.87	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:379:PRO:HB2	1:A:512:THR:CG2	2.34	0.56
1:A:578:MET:HG2	1:A:587:ARG:HB3	1.87	0.56
1:A:66:PHE:HE2	1:A:201:LYS:HD3	1.70	0.56
1:A:840:SER:O	1:A:842:GLU:N	2.38	0.56
1:A:106:ILE:HG12	1:A:140:TYR:HA	1.87	0.56
1:A:386:LEU:O	1:A:389:GLY:N	2.37	0.56
1:A:122:LYS:O	1:A:122:LYS:HD3	2.04	0.56
1:A:458:VAL:HG22	1:A:461:ARG:NH2	2.20	0.56
1:A:602:PHE:CZ	1:A:684:VAL:HG22	2.40	0.56
1:A:680:GLN:O	1:A:684:VAL:HG23	2.05	0.56
1:A:178:GLU:O	1:A:181:GLU:HB3	2.05	0.56
1:A:272:TYR:CD2	1:A:289:GLN:HB2	2.40	0.56
1:A:439:MET:O	1:A:463:MET:HE1	2.06	0.56
1:A:864:LEU:HD22	1:A:868:GLN:NE2	2.20	0.56
1:A:109:LEU:CB	1:A:136:PHE:HE1	2.18	0.56
1:A:8:PHE:O	1:A:27:ALA:HB1	2.05	0.56
1:A:411:ALA:HB1	1:A:438:GLY:HA3	1.87	0.56
1:A:386:LEU:HA	1:A:510:ILE:CD1	2.35	0.56
1:A:754:ASP:O	1:A:822:THR:HG21	2.05	0.56
1:A:11:GLY:HA2	1:A:15:MET:CE	2.36	0.56
1:A:771:THR:HG22	1:A:772:GLN:N	2.21	0.56
1:A:107:LEU:HD12	1:A:139:MET:HE1	1.88	0.56
1:A:57:ILE:CG2	1:A:61:ILE:HG21	2.35	0.56
1:A:660:PRO:O	1:A:665:ARG:NH2	2.34	0.56
1:A:781:ASP:O	1:A:783:GLY:N	2.39	0.56
1:A:365:VAL:HG13	1:A:864:LEU:CD2	2.36	0.56
1:A:109:LEU:HG	1:A:110:GLY:H	1.70	0.55
1:A:498:LEU:C	1:A:500:GLY:H	2.07	0.55
1:A:71:TRP:O	1:A:74:GLU:HG3	2.07	0.55
1:A:134:ARG:HA	1:A:180:ALA:CB	2.33	0.55
1:A:584:VAL:HG13	1:A:675:GLU:CD	2.27	0.55
1:A:91:VAL:O	1:A:105:THR:HA	2.06	0.55
1:A:11:GLY:HA2	1:A:15:MET:SD	2.46	0.55
1:A:66:PHE:HD2	1:A:201:LYS:NZ	2.03	0.55
1:A:331:LEU:HD23	1:A:333:PHE:CE1	2.42	0.55
1:A:9:GLU:CD	1:A:38:GLN:HE22	2.09	0.55
1:A:21:GLY:O	1:A:25:ASN:HB2	2.06	0.55
1:A:405:GLY:O	1:A:495:TYR:N	2.38	0.55
1:A:523:ARG:NH1	3:A:907:HOH:O	2.39	0.55
1:A:574:LYS:HZ2	1:A:574:LYS:HB2	1.69	0.55
1:A:272:TYR:CD1	1:A:291:ILE:HA	2.42	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:18:LEU:HB3	1:A:43:THR:CG2	2.36	0.55
1:A:379:PRO:HB2	1:A:512:THR:CB	2.36	0.55
1:A:566:PHE:HE2	1:A:679:MET:CE	2.20	0.55
1:A:840:SER:O	1:A:843:PHE:N	2.39	0.55
1:A:84:GLU:O	1:A:118:GLY:O	2.24	0.55
1:A:51:TYR:O	1:A:53:SER:N	2.34	0.55
1:A:54:GLY:O	1:A:55:LYS:HB2	2.07	0.55
1:A:311:LYS:HG2	1:A:312:LEU:N	2.21	0.55
1:A:500:GLY:O	1:A:502:THR:OG1	2.24	0.55
1:A:649:LYS:O	1:A:653:ASP:N	2.40	0.55
1:A:106:ILE:HD13	1:A:207:ALA:HB1	1.88	0.55
1:A:310:MET:O	1:A:313:GLU:N	2.39	0.55
1:A:386:LEU:HD12	1:A:510:ILE:CD1	2.35	0.55
1:A:536:VAL:CG1	1:A:859:VAL:HG13	2.33	0.55
1:A:37:PRO:HG2	1:A:240:GLN:CD	2.27	0.54
1:A:410:THR:HG22	1:A:412:ASP:N	2.14	0.54
1:A:424:VAL:HG22	1:A:441:ALA:O	2.08	0.54
1:A:812:VAL:O	1:A:816:VAL:HG23	2.07	0.54
1:A:57:ILE:CD1	1:A:57:ILE:H	2.12	0.54
1:A:628:PRO:HB3	1:A:633:GLU:HB3	1.88	0.54
1:A:667:CYS:SG	1:A:668:ARG:HD2	2.47	0.54
1:A:132:SER:O	1:A:135:ARG:HB2	2.07	0.54
1:A:348:GLN:NE2	1:A:352:ASP:OD1	2.40	0.54
1:A:484:GLU:HG2	1:A:485:LEU:H	1.72	0.54
1:A:107:LEU:HB2	1:A:139:MET:CE	2.37	0.54
1:A:310:MET:O	1:A:313:GLU:HB3	2.08	0.54
1:A:392:ILE:HD12	1:A:490:PHE:CZ	2.42	0.54
1:A:522:GLU:O	1:A:526:VAL:HG23	2.07	0.54
1:A:844:CYS:CB	1:A:849:LEU:HD12	2.28	0.54
1:A:852:VAL:HG12	1:A:853:SER:H	1.71	0.54
1:A:379:PRO:HB2	1:A:512:THR:HG21	1.89	0.54
1:A:40:PHE:O	1:A:239:VAL:N	2.37	0.54
1:A:829:GLY:HA3	1:A:851:TYR:CE2	2.41	0.54
1:A:101:GLY:O	1:A:455:HIS:NE2	2.37	0.54
1:A:159:MET:HE2	1:A:175:ASP:O	2.07	0.54
1:A:196:PHE:CD1	1:A:197:PRO:HD2	2.43	0.54
1:A:427:VAL:HG23	1:A:446:LEU:HD13	1.90	0.54
1:A:852:VAL:HG12	1:A:853:SER:N	2.22	0.54
1:A:623:LEU:N	1:A:623:LEU:HD23	2.23	0.54
1:A:378:HIS:HB3	1:A:379:PRO:CD	2.38	0.54
1:A:420:LYS:HG2	1:A:443:GLU:OE1	2.07	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:440:HIS:HA	1:A:463:MET:SD	2.48	0.54
1:A:262:SER:HB3	1:A:400:PRO:CD	2.34	0.53
1:A:42:VAL:HG12	1:A:212:PHE:HZ	1.73	0.53
1:A:79:LYS:HG2	1:A:82:ASP:HB2	1.90	0.53
1:A:835:GLY:O	1:A:841:VAL:HG22	2.07	0.53
1:A:107:LEU:HD13	1:A:277:GLN:HG3	1.88	0.53
1:A:392:ILE:HG13	1:A:485:LEU:HD13	1.90	0.53
1:A:479:GLU:OE2	1:A:479:GLU:HA	2.09	0.53
1:A:844:CYS:HB3	1:A:849:LEU:CD1	2.29	0.53
1:A:140:TYR:OH	1:A:206:GLY:HA3	2.08	0.53
1:A:375:GLN:HA	1:A:378:HIS:CE1	2.43	0.53
1:A:119:PHE:CD2	1:A:129:ALA:HB2	2.44	0.53
1:A:837:ASP:HB3	1:A:840:SER:CB	2.39	0.53
1:A:469:SER:O	1:A:471:CYS:N	2.42	0.53
1:A:578:MET:HG3	1:A:587:ARG:HB3	1.90	0.53
1:A:272:TYR:CE2	1:A:289:GLN:NE2	2.76	0.53
1:A:478:GLU:OE2	1:A:481:LYS:HG2	2.09	0.53
1:A:797:SER:OG	1:A:802:ARG:HD3	2.09	0.53
1:A:106:ILE:CD1	1:A:207:ALA:HB1	2.39	0.53
1:A:489:THR:O	1:A:489:THR:HG22	2.08	0.53
1:A:253:THR:HG21	1:A:278:GLY:HA2	1.90	0.53
1:A:317:ARG:HH12	1:A:359:ILE:HG23	1.74	0.53
1:A:312:LEU:HD12	1:A:320:GLN:HG3	1.90	0.53
1:A:564:HIS:HA	1:A:567:PHE:HB2	1.90	0.53
1:A:257:PHE:CD1	1:A:321:ASP:HB2	2.43	0.53
1:A:609:LEU:O	1:A:612:ARG:HD2	2.08	0.53
1:A:805:GLN:HB3	1:A:843:PHE:CE2	2.43	0.53
1:A:66:PHE:CE2	1:A:201:LYS:HD3	2.44	0.53
1:A:235:THR:HG22	1:A:236:ALA:N	2.24	0.53
1:A:30:THR:OG1	1:A:36:ILE:HD11	2.07	0.53
1:A:66:PHE:CD2	1:A:201:LYS:NZ	2.78	0.53
1:A:66:PHE:HD1	1:A:66:PHE:N	2.07	0.53
1:A:64:GLN:HA	1:A:67:GLU:HB2	1.90	0.53
1:A:692:LYS:C	1:A:692:LYS:HD3	2.29	0.53
1:A:745:GLU:OE1	1:A:769:ASP:OD2	2.27	0.53
1:A:222:VAL:HG11	1:A:437:GLU:CG	2.39	0.52
1:A:564:HIS:CE1	1:A:565:MET:HG2	2.42	0.52
1:A:563:GLU:OE2	1:A:621:PRO:HD3	2.09	0.52
1:A:74:GLU:O	1:A:77:GLY:N	2.26	0.52
1:A:748:ARG:HA	1:A:751:LEU:HD12	1.90	0.52
1:A:107:LEU:HD13	1:A:277:GLN:CD	2.29	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:872:ASN:HD22	1:A:873:ASN:N	2.06	0.52
1:A:347:LEU:HD12	1:A:376:LEU:HD21	1.91	0.52
1:A:541:ASP:OD2	1:A:561:ARG:HB2	2.08	0.52
1:A:574:LYS:HB2	1:A:574:LYS:HZ3	1.72	0.52
1:A:335:GLN:HG2	1:A:336:THR:H	1.72	0.52
1:A:420:LYS:HG3	1:A:442:ALA:O	2.10	0.52
1:A:677:ALA:O	1:A:681:THR:OG1	2.27	0.52
1:A:771:THR:HA	1:A:808:VAL:CG2	2.39	0.52
1:A:104:ASP:HB3	1:A:143:VAL:HG13	1.92	0.52
1:A:16:ARG:NE	1:A:21:GLY:HA2	2.24	0.52
1:A:86:PRO:HG3	1:A:115:ALA:HB1	1.91	0.52
1:A:119:PHE:O	1:A:123:THR:HB	2.10	0.52
1:A:451:GLY:H	1:A:454:SER:HB3	1.74	0.52
1:A:500:GLY:O	1:A:502:THR:N	2.43	0.52
1:A:591:LEU:HD22	1:A:679:MET:CE	2.40	0.52
1:A:105:THR:HG21	1:A:279:GLU:CG	2.18	0.52
1:A:117:GLU:HG2	1:A:130:TYR:OH	2.10	0.52
1:A:179:LEU:HD11	1:A:183:PHE:CE1	2.45	0.52
1:A:336:THR:C	1:A:337:ARG:HG2	2.30	0.52
1:A:540:ALA:O	1:A:541:ASP:OD1	2.28	0.52
1:A:57:ILE:C	1:A:62:GLN:HE21	2.12	0.52
1:A:106:ILE:HD13	1:A:207:ALA:CB	2.39	0.52
1:A:330:LYS:HB3	1:A:332:TYR:CE2	2.45	0.52
1:A:668:ARG:NE	1:A:707:LEU:HG	2.25	0.52
1:A:710:GLU:HA	1:A:756:ILE:HD11	1.92	0.52
1:A:837:ASP:HB3	1:A:840:SER:HB2	1.92	0.52
1:A:272:TYR:OH	1:A:293:GLN:HB3	2.10	0.52
1:A:223:TYR:CD2	1:A:436:ILE:HG12	2.37	0.52
1:A:396:LEU:O	1:A:468:VAL:HG13	2.10	0.52
1:A:566:PHE:CE1	1:A:619:LEU:HD13	2.45	0.52
1:A:567:PHE:CE2	1:A:626:PHE:CE1	2.98	0.52
1:A:471:CYS:O	1:A:472:GLY:O	2.28	0.52
1:A:571:ARG:HB3	1:A:594:LEU:HD22	1.92	0.52
1:A:315:HIS:ND1	1:A:315:HIS:O	2.44	0.51
1:A:41:THR:HA	1:A:238:ASN:HA	1.92	0.51
1:A:403:ALA:HB1	1:A:443:GLU:HB3	1.91	0.51
1:A:4:TRP:NE1	1:A:60:GLU:OE1	2.42	0.51
1:A:382:ASN:HD22	1:A:511:GLU:CD	2.14	0.51
1:A:538:THR:O	1:A:557:ILE:HG23	2.10	0.51
1:A:712:LYS:HA	1:A:715:LYS:HE2	1.92	0.51
1:A:732:LYS:C	1:A:734:SER:N	2.64	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:750:ALA:O	1:A:753:ALA:HB2	2.10	0.51
1:A:124:GLY:O	1:A:125:ASN:HB2	2.09	0.51
1:A:194:GLU:OE1	1:A:195:GLU:O	2.28	0.51
1:A:789:TYR:CE2	1:A:794:ILE:HG21	2.45	0.51
1:A:111:LEU:HB3	1:A:133:TYR:HD1	1.75	0.51
1:A:189:GLU:HG3	1:A:190:ALA:N	2.24	0.51
1:A:16:ARG:HE	1:A:21:GLY:HA2	1.76	0.51
1:A:587:ARG:O	1:A:591:LEU:HG	2.10	0.51
1:A:708:VAL:O	1:A:749:ALA:HB2	2.11	0.51
1:A:27:ALA:O	1:A:31:ILE:N	2.42	0.51
1:A:420:LYS:HG2	1:A:443:GLU:CD	2.31	0.51
1:A:485:LEU:HD23	1:A:486:GLY:N	2.26	0.51
1:A:574:LYS:HA	1:A:577:LYS:HE3	1.92	0.51
1:A:840:SER:C	1:A:842:GLU:H	2.14	0.51
1:A:859:VAL:O	1:A:862:ALA:N	2.42	0.51
1:A:281:VAL:O	1:A:284:GLY:O	2.27	0.51
1:A:381:PHE:CZ	1:A:496:ILE:HG23	2.46	0.51
1:A:410:THR:HB	1:A:413:GLU:HB2	1.92	0.51
1:A:667:CYS:SG	1:A:668:ARG:N	2.84	0.51
1:A:754:ASP:HB3	1:A:818:LYS:HE2	1.91	0.51
1:A:859:VAL:N	1:A:860:PRO:CD	2.73	0.51
1:A:109:LEU:CB	1:A:136:PHE:CE1	2.92	0.51
1:A:521:PHE:O	1:A:525:MET:HG2	2.10	0.51
1:A:106:ILE:HG23	1:A:140:TYR:N	2.25	0.51
1:A:19:LEU:O	1:A:24:CYS:N	2.43	0.51
1:A:563:GLU:CG	1:A:621:PRO:HD3	2.41	0.51
1:A:705:ILE:HG22	1:A:708:VAL:HG23	1.93	0.51
1:A:99:MET:O	2:A:902:SO4:O2	2.29	0.51
1:A:488:HIS:N	1:A:488:HIS:CD2	2.78	0.51
1:A:71:TRP:CZ3	1:A:72:LEU:CD2	2.94	0.51
1:A:140:TYR:O	1:A:144:VAL:HG23	2.11	0.51
1:A:111:LEU:HB3	1:A:133:TYR:CD1	2.46	0.50
1:A:476:ILE:HG23	1:A:482:THR:O	2.11	0.50
1:A:66:PHE:CD1	1:A:66:PHE:N	2.77	0.50
1:A:708:VAL:HB	1:A:742:THR:OG1	2.11	0.50
1:A:851:TYR:HD1	1:A:852:VAL:O	1.92	0.50
1:A:106:ILE:HG21	1:A:140:TYR:HA	1.92	0.50
1:A:223:TYR:CD2	1:A:436:ILE:HD11	2.46	0.50
1:A:326:ILE:CG1	1:A:331:LEU:HD12	2.41	0.50
1:A:543:PRO:O	1:A:546:THR:N	2.44	0.50
1:A:803:LEU:O	1:A:805:GLN:N	2.44	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:159:MET:CE	1:A:179:LEU:HB2	2.41	0.50
1:A:316:PHE:HD2	1:A:320:GLN:CD	2.15	0.50
1:A:381:PHE:HD2	1:A:402:ALA:HB1	1.71	0.50
1:A:439:MET:HE1	1:A:456:ALA:HA	1.93	0.50
1:A:732:LYS:C	1:A:734:SER:H	2.15	0.50
1:A:222:VAL:HG11	1:A:437:GLU:CD	2.32	0.50
1:A:402:ALA:HB1	1:A:498:LEU:HG	1.93	0.50
1:A:112:ASN:O	1:A:116:VAL:N	2.42	0.50
1:A:223:TYR:CE2	1:A:436:ILE:HD11	2.47	0.50
1:A:439:MET:HB3	1:A:463:MET:HE1	1.91	0.50
1:A:493:GLY:O	1:A:494:ASP:O	2.29	0.50
1:A:109:LEU:HG	1:A:110:GLY:N	2.27	0.50
1:A:119:PHE:O	1:A:123:THR:N	2.34	0.50
1:A:198:GLN:O	1:A:200:PRO:HD3	2.12	0.50
1:A:316:PHE:CD2	1:A:320:GLN:NE2	2.79	0.50
1:A:255:VAL:CG1	1:A:453:THR:HB	2.41	0.50
1:A:433:PRO:HD3	1:A:455:HIS:CE1	2.46	0.50
1:A:545:ASP:O	1:A:549:ALA:N	2.44	0.50
1:A:473:GLU:H	1:A:473:GLU:CD	2.15	0.50
1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:HD12	2.26	0.50
1:A:803:LEU:HD23	1:A:843:PHE:CD2	2.47	0.50
1:A:429:LEU:HA	1:A:448:VAL:CG2	2.42	0.50
1:A:859:VAL:O	1:A:862:ALA:HB3	2.12	0.50
1:A:221:ILE:CD1	1:A:224:ARG:NH2	2.75	0.49
1:A:34:MET:CE	1:A:312:LEU:HD23	2.42	0.49
1:A:9:GLU:HA	1:A:31:ILE:HD11	1.94	0.49
1:A:417:ALA:O	1:A:418:HIS:HB2	2.11	0.49
1:A:73:GLU:OE2	1:A:79:LYS:HE2	2.12	0.49
1:A:834:HIS:N	1:A:834:HIS:CD2	2.79	0.49
1:A:619:LEU:HB2	1:A:680:GLN:NE2	2.16	0.49
1:A:181:GLU:HG2	1:A:184:LYS:HZ2	1.74	0.49
1:A:323:GLU:O	1:A:334:LEU:N	2.44	0.49
1:A:578:MET:HB2	1:A:590:ALA:HB3	1.93	0.49
1:A:368:ILE:CG2	1:A:369:GLU:N	2.76	0.49
1:A:408:TYR:HE1	1:A:424:VAL:HG12	1.77	0.49
1:A:588:GLU:O	1:A:592:ASN:N	2.35	0.49
1:A:571:ARG:CB	1:A:594:LEU:HD21	2.40	0.49
1:A:245:GLY:O	1:A:275:ASN:HA	2.13	0.49
1:A:380:THR:O	1:A:512:THR:HG22	2.12	0.49
1:A:403:ALA:HB1	1:A:443:GLU:CB	2.41	0.49
1:A:722:VAL:HG12	1:A:723:GLU:N	2.27	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:685:MET:HG3	1:A:725:ALA:CB	2.42	0.49
1:A:749:ALA:HA	1:A:756:ILE:HD12	1.95	0.49
1:A:106:ILE:HG21	1:A:140:TYR:CA	2.42	0.49
1:A:66:PHE:CD2	1:A:201:LYS:CE	2.95	0.49
1:A:135:ARG:CZ	1:A:277:GLN:HB3	2.42	0.49
1:A:424:VAL:HG23	1:A:424:VAL:O	2.12	0.49
1:A:623:LEU:HB2	1:A:655:LEU:HD22	1.93	0.49
1:A:774:THR:OG1	1:A:811:LEU:HD12	2.13	0.49
1:A:123:THR:HG23	1:A:125:ASN:HB3	1.94	0.49
1:A:134:ARG:HD3	1:A:179:LEU:CD2	2.43	0.49
1:A:248:GLY:O	1:A:275:ASN:HB2	2.11	0.49
1:A:496:ILE:N	1:A:496:ILE:HD12	2.26	0.49
1:A:623:LEU:HD21	1:A:669:LEU:HD21	1.93	0.49
1:A:189:GLU:HG3	1:A:190:ALA:H	1.78	0.49
1:A:487:GLY:H	1:A:488:HIS:CD2	2.25	0.49
1:A:51:TYR:C	1:A:53:SER:H	2.16	0.49
1:A:65:ILE:C	1:A:66:PHE:HD1	2.16	0.49
1:A:353:LEU:HB3	1:A:359:ILE:HG12	1.94	0.49
1:A:572:ILE:CG2	1:A:573:MET:H	2.19	0.49
1:A:634:GLN:OE1	1:A:649:LYS:HG2	2.13	0.49
1:A:771:THR:CG2	1:A:772:GLN:N	2.75	0.49
1:A:110:GLY:HA2	1:A:200:PRO:HB3	1.94	0.49
1:A:230:PRO:HG2	1:A:233:TRP:CD1	2.48	0.49
1:A:495:TYR:CD2	1:A:496:ILE:N	2.81	0.49
1:A:675:GLU:HA	1:A:678:LYS:HB2	1.94	0.49
1:A:221:ILE:HD13	1:A:224:ARG:NH2	2.28	0.48
1:A:244:PHE:CD1	1:A:244:PHE:N	2.81	0.48
1:A:255:VAL:HG11	1:A:453:THR:CB	2.40	0.48
1:A:33:GLY:C	1:A:34:MET:HG2	2.33	0.48
1:A:394:SER:O	1:A:395:ALA:HB2	2.12	0.48
1:A:51:TYR:CE1	1:A:55:LYS:HD3	2.47	0.48
1:A:523:ARG:NE	2:A:901:SO4:O3	2.47	0.48
1:A:232:ASP:N	1:A:232:ASP:OD1	2.46	0.48
1:A:91:VAL:HG22	1:A:239:VAL:CG1	2.43	0.48
1:A:290:PRO:O	1:A:292:THR:N	2.46	0.48
1:A:325:THR:O	1:A:332:TYR:N	2.46	0.48
1:A:43:THR:HG22	1:A:44:THR:N	2.28	0.48
1:A:536:VAL:O	1:A:555:GLU:HB2	2.13	0.48
1:A:40:PHE:CZ	1:A:69:ILE:CD1	2.96	0.48
1:A:739:HIS:HB3	1:A:761:GLU:HG3	1.95	0.48
1:A:211:VAL:C	1:A:213:ARG:H	2.17	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:316:PHE:HB2	1:A:320:GLN:HE22	1.78	0.48
1:A:485:LEU:CD2	1:A:486:GLY:H	2.25	0.48
1:A:704:MET:SD	1:A:764:SER:CB	3.02	0.48
1:A:392:ILE:CG1	1:A:485:LEU:HD13	2.43	0.48
1:A:584:VAL:HG12	1:A:588:GLU:HG3	1.94	0.48
1:A:65:ILE:O	1:A:69:ILE:HG12	2.14	0.48
1:A:110:GLY:N	1:A:203:GLN:OE1	2.41	0.48
1:A:403:ALA:O	1:A:404:ALA:HB2	2.12	0.48
1:A:5:VAL:CG2	1:A:42:VAL:HG13	2.44	0.48
1:A:724:VAL:O	1:A:728:VAL:N	2.41	0.48
1:A:826:LEU:HD23	1:A:826:LEU:C	2.33	0.48
1:A:381:PHE:CD1	1:A:510:ILE:CG2	2.97	0.48
1:A:420:LYS:HG2	1:A:420:LYS:O	2.14	0.48
1:A:73:GLU:HG2	1:A:79:LYS:HA	1.96	0.48
1:A:93:SER:HB2	1:A:103:MET:HE2	1.94	0.48
1:A:307:ASP:N	1:A:307:ASP:OD1	2.47	0.48
1:A:325:THR:N	1:A:332:TYR:O	2.45	0.48
1:A:40:PHE:HE1	1:A:69:ILE:HD13	1.76	0.48
1:A:396:LEU:HD23	1:A:452:MET:SD	2.54	0.48
1:A:521:PHE:CE1	1:A:525:MET:HG3	2.49	0.48
1:A:427:VAL:HG12	1:A:427:VAL:O	2.07	0.48
1:A:381:PHE:CD1	1:A:510:ILE:HG22	2.48	0.48
1:A:48:THR:CG2	1:A:52:ASN:HD21	2.16	0.48
1:A:718:LYS:NZ	1:A:740:ILE:HB	2.28	0.48
1:A:106:ILE:HG23	1:A:139:MET:HB3	1.96	0.48
1:A:179:LEU:CD1	1:A:183:PHE:CE1	2.97	0.48
1:A:295:GLU:O	1:A:299:PRO:HB3	2.13	0.48
1:A:756:ILE:O	1:A:758:GLU:N	2.46	0.48
1:A:225:ARG:O	1:A:228:ASP:N	2.46	0.48
1:A:13:ALA:HA	1:A:24:CYS:CB	2.43	0.48
1:A:747:PRO:O	1:A:751:LEU:HG	2.13	0.48
1:A:144:VAL:HG12	1:A:144:VAL:O	2.13	0.47
1:A:90:SER:HB3	1:A:242:MET:SD	2.54	0.47
1:A:285:VAL:HB	1:A:449:ARG:NH2	2.20	0.47
1:A:395:ALA:HB2	1:A:471:CYS:SG	2.54	0.47
1:A:596:PRO:HA	1:A:599:LYS:HE3	1.96	0.47
1:A:177:LYS:O	1:A:177:LYS:HG2	2.14	0.47
1:A:427:VAL:HG23	1:A:446:LEU:CD1	2.44	0.47
1:A:616:VAL:O	1:A:704:MET:N	2.35	0.47
1:A:149:LYS:HE2	1:A:149:LYS:HB2	1.77	0.47
1:A:220:ALA:O	1:A:224:ARG:HB3	2.13	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:377:LEU:HD13	1:A:857:PHE:HD1	1.80	0.47
1:A:381:PHE:CB	1:A:386:LEU:HD22	2.44	0.47
1:A:492:GLU:OE2	1:A:492:GLU:N	2.48	0.47
1:A:119:PHE:CZ	1:A:128:PHE:CE2	3.02	0.47
1:A:148:PRO:HD2	1:A:151:HIS:HD2	1.74	0.47
1:A:4:TRP:HZ3	1:A:49:GLU:HB3	1.79	0.47
1:A:566:PHE:HE2	1:A:679:MET:HE1	1.79	0.47
1:A:116:VAL:O	1:A:120:ALA:N	2.39	0.47
1:A:167:PHE:O	1:A:170:ASP:OD2	2.33	0.47
1:A:24:CYS:O	1:A:28:GLU:HB2	2.15	0.47
1:A:471:CYS:SG	1:A:474:ILE:HD11	2.55	0.47
1:A:4:TRP:HZ3	1:A:49:GLU:HG2	1.74	0.47
1:A:564:HIS:CG	1:A:565:MET:N	2.82	0.47
1:A:700:VAL:O	1:A:700:VAL:HG12	2.12	0.47
1:A:109:LEU:HD12	1:A:136:PHE:HE1	1.80	0.47
1:A:66:PHE:CE1	1:A:205:MET:SD	3.08	0.47
1:A:22:ALA:O	1:A:26:LEU:HD12	2.14	0.47
1:A:19:LEU:HD22	1:A:41:THR:CG2	2.44	0.47
1:A:583:SER:O	1:A:587:ARG:HG3	2.15	0.47
1:A:165:VAL:HG13	1:A:170:ASP:OD2	2.14	0.47
1:A:172:THR:OG1	1:A:175:ASP:OD1	2.32	0.47
1:A:189:GLU:CG	1:A:190:ALA:H	2.28	0.47
1:A:566:PHE:O	1:A:571:ARG:HB2	2.15	0.47
1:A:116:VAL:HG13	1:A:117:GLU:N	2.30	0.47
1:A:126:PRO:O	1:A:130:TYR:HD2	1.97	0.47
1:A:107:LEU:HD22	1:A:277:GLN:OE1	2.14	0.47
1:A:541:ASP:OD1	1:A:561:ARG:HG3	2.15	0.47
1:A:617:ARG:HB2	1:A:704:MET:CE	2.44	0.47
1:A:4:TRP:CD2	1:A:61:ILE:HD11	2.49	0.47
1:A:789:TYR:CD2	1:A:794:ILE:CG2	2.98	0.47
1:A:5:VAL:HG23	1:A:42:VAL:HG13	1.97	0.47
1:A:728:VAL:CG1	1:A:729:LYS:N	2.78	0.47
1:A:707:LEU:CD1	1:A:746:ILE:HD11	2.45	0.47
1:A:73:GLU:CA	1:A:76:ASN:ND2	2.75	0.47
1:A:189:GLU:CG	1:A:190:ALA:N	2.78	0.47
1:A:230:PRO:HG2	1:A:233:TRP:CE2	2.50	0.47
1:A:224:ARG:HH11	1:A:231:GLY:N	2.13	0.47
1:A:317:ARG:NH1	1:A:317:ARG:HB3	2.25	0.47
1:A:392:ILE:HD12	1:A:490:PHE:HZ	1.79	0.47
1:A:460:ALA:O	1:A:464:GLY:N	2.47	0.47
1:A:536:VAL:CG1	1:A:537:ARG:N	2.78	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:718:LYS:HZ2	1:A:740:ILE:HB	1.79	0.47
1:A:70:THR:HB	3:A:919:HOH:O	2.15	0.47
1:A:91:VAL:O	1:A:106:ILE:N	2.47	0.47
1:A:109:LEU:C	1:A:109:LEU:HD23	2.34	0.46
1:A:179:LEU:HD11	1:A:183:PHE:CZ	2.51	0.46
1:A:345:ALA:O	1:A:349:ILE:HG13	2.16	0.46
1:A:474:ILE:O	1:A:476:ILE:N	2.49	0.46
1:A:763:PHE:HB2	1:A:826:LEU:HD21	1.97	0.46
1:A:42:VAL:HG12	1:A:212:PHE:CZ	2.49	0.46
1:A:102:MET:CE	1:A:436:ILE:HD13	2.44	0.46
1:A:76:ASN:ND2	1:A:78:LYS:H	2.14	0.46
1:A:791:LYS:HD3	1:A:791:LYS:HA	1.76	0.46
1:A:797:SER:CB	1:A:802:ARG:HD3	2.45	0.46
1:A:230:PRO:HB2	1:A:232:ASP:OD1	2.15	0.46
1:A:246:ASN:OD1	1:A:246:ASN:N	2.47	0.46
1:A:304:GLN:HA	1:A:304:GLN:NE2	2.31	0.46
1:A:43:THR:CG2	1:A:44:THR:N	2.78	0.46
1:A:591:LEU:HD12	1:A:675:GLU:HB2	1.97	0.46
1:A:659:ASN:HD22	1:A:659:ASN:N	2.13	0.46
1:A:729:LYS:HE2	1:A:736:MET:HB3	1.96	0.46
1:A:774:THR:O	1:A:774:THR:HG22	2.16	0.46
1:A:147:VAL:CG1	1:A:151:HIS:HD2	2.13	0.46
1:A:341:ARG:HH11	1:A:349:ILE:HD13	1.78	0.46
1:A:34:MET:HE1	1:A:312:LEU:HD23	1.97	0.46
1:A:485:LEU:CD2	1:A:486:GLY:N	2.78	0.46
1:A:710:GLU:OE2	1:A:712:LYS:HB2	2.16	0.46
1:A:744:ILE:O	1:A:770:LEU:HD22	2.16	0.46
1:A:85:ASP:OD1	1:A:122:LYS:HG3	2.15	0.46
1:A:131:ASP:OD1	1:A:134:ARG:NH2	2.46	0.46
1:A:188:LYS:O	1:A:191:MET:O	2.34	0.46
1:A:66:PHE:CD2	1:A:201:LYS:HE2	2.51	0.46
1:A:392:ILE:CD1	1:A:490:PHE:CZ	2.98	0.46
1:A:690:GLU:O	1:A:694:GLU:HG3	2.15	0.46
1:A:744:ILE:HG21	1:A:765:PHE:CE1	2.51	0.46
1:A:109:LEU:CG	1:A:110:GLY:N	2.79	0.46
1:A:145:MET:SD	1:A:146:GLU:N	2.89	0.46
1:A:65:ILE:O	1:A:69:ILE:HB	2.16	0.46
1:A:787:ASP:O	1:A:790:TYR:HB2	2.15	0.46
1:A:146:GLU:O	1:A:147:VAL:HG22	2.16	0.46
1:A:243:VAL:HG21	1:A:332:TYR:HB2	1.98	0.46
1:A:422:GLU:O	1:A:423:ARG:HG3	2.15	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:285:VAL:CB	1:A:449:ARG:HH22	2.20	0.46
1:A:744:ILE:CG2	1:A:765:PHE:CE1	2.99	0.46
1:A:199:GLU:O	1:A:202:ASP:HB2	2.14	0.46
1:A:317:ARG:NH1	1:A:317:ARG:CB	2.79	0.46
1:A:406:LYS:O	1:A:425:ILE:N	2.27	0.46
1:A:116:VAL:CG1	1:A:117:GLU:N	2.79	0.46
1:A:17:ASN:O	1:A:44:THR:OG1	2.24	0.46
1:A:186:VAL:HG23	1:A:189:GLU:OE1	2.16	0.46
1:A:195:GLU:O	1:A:197:PRO:N	2.49	0.46
1:A:368:ILE:H	1:A:368:ILE:HD12	1.81	0.46
1:A:37:PRO:HG2	1:A:240:GLN:NE2	2.31	0.46
1:A:534:LEU:HD11	1:A:845:HIS:CA	2.45	0.46
1:A:566:PHE:CZ	1:A:680:GLN:NE2	2.81	0.46
1:A:277:GLN:HB2	1:A:277:GLN:HE21	1.56	0.46
1:A:517:VAL:O	1:A:517:VAL:HG23	2.16	0.46
1:A:66:PHE:O	1:A:70:THR:HG23	2.16	0.46
1:A:373:LEU:HB2	1:A:861:ILE:HG13	1.97	0.46
1:A:12:ASN:N	1:A:15:MET:SD	2.89	0.45
1:A:272:TYR:CZ	1:A:289:GLN:HB2	2.49	0.45
1:A:349:ILE:HG22	1:A:349:ILE:O	2.16	0.45
1:A:396:LEU:O	1:A:398:ALA:N	2.44	0.45
1:A:472:GLY:C	1:A:474:ILE:H	2.08	0.45
1:A:381:PHE:CZ	1:A:496:ILE:CG2	2.99	0.45
1:A:591:LEU:HD23	1:A:591:LEU:HA	1.63	0.45
1:A:843:PHE:O	1:A:847:VAL:N	2.48	0.45
1:A:331:LEU:CD2	1:A:333:PHE:CE1	2.99	0.45
1:A:409:PHE:HA	1:A:427:VAL:O	2.16	0.45
1:A:805:GLN:HB3	1:A:843:PHE:CD2	2.51	0.45
1:A:854:CYS:HB2	1:A:858:ARG:HB2	1.97	0.45
1:A:134:ARG:HD3	1:A:179:LEU:HD23	1.98	0.45
1:A:251:SER:HA	1:A:326:ILE:O	2.17	0.45
1:A:208:VAL:O	1:A:211:VAL:HB	2.16	0.45
1:A:298:MET:HG2	1:A:301:CYS:HB2	1.99	0.45
1:A:418:HIS:HB2	1:A:422:GLU:HB2	1.97	0.45
1:A:591:LEU:O	1:A:679:MET:HG3	2.17	0.45
1:A:707:LEU:HD13	1:A:746:ILE:HD11	1.97	0.45
1:A:709:GLY:O	1:A:756:ILE:HD11	2.17	0.45
1:A:79:LYS:C	1:A:87:LEU:HB3	2.37	0.45
1:A:9:GLU:HA	1:A:31:ILE:CD1	2.46	0.45
1:A:140:TYR:CE2	1:A:203:GLN:HA	2.51	0.45
1:A:291:ILE:O	1:A:294:LEU:HB2	2.17	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:352:ASP:OD1	1:A:352:ASP:N	2.49	0.45
1:A:536:VAL:C	1:A:537:ARG:HG3	2.36	0.45
1:A:93:SER:HB2	1:A:103:MET:CE	2.47	0.45
1:A:155:ILE:HB	1:A:183:PHE:CE1	2.49	0.45
1:A:191:MET:HE2	1:A:191:MET:HA	1.95	0.45
1:A:210:ALA:O	1:A:214:SER:OG	2.28	0.45
1:A:213:ARG:CG	1:A:213:ARG:NH1	2.76	0.45
1:A:311:LYS:CG	1:A:312:LEU:N	2.79	0.45
1:A:223:TYR:HD2	1:A:436:ILE:CD1	2.29	0.45
1:A:328:GLU:O	1:A:330:LYS:N	2.50	0.45
1:A:403:ALA:O	1:A:496:ILE:HG23	2.17	0.45
1:A:422:GLU:C	1:A:423:ARG:HG3	2.37	0.45
1:A:226:MET:SD	1:A:440:HIS:CD2	3.10	0.45
1:A:557:ILE:HG13	1:A:609:LEU:HD21	1.98	0.45
1:A:579:ILE:C	1:A:581:SER:H	2.20	0.45
1:A:185:ALA:O	1:A:189:GLU:HG2	2.17	0.45
1:A:270:GLY:CA	1:A:291:ILE:HG22	2.46	0.45
1:A:349:ILE:HG22	1:A:353:LEU:HD12	1.99	0.45
1:A:361:GLU:HB3	1:A:531:PHE:HZ	1.82	0.45
1:A:61:ILE:O	1:A:65:ILE:HG13	2.17	0.45
1:A:700:VAL:HG22	1:A:737:GLN:CD	2.37	0.45
1:A:741:GLY:HA3	1:A:762:PHE:CD2	2.52	0.45
1:A:303:LYS:O	1:A:304:GLN:O	2.35	0.45
1:A:271:GLU:OE1	1:A:453:THR:HG22	2.17	0.45
1:A:667:CYS:HB3	1:A:706:PRO:O	2.17	0.45
1:A:485:LEU:HA	1:A:485:LEU:HD23	1.59	0.45
1:A:25:ASN:O	1:A:28:GLU:HB3	2.16	0.44
1:A:301:CYS:O	1:A:304:GLN:N	2.51	0.44
1:A:319:MET:HB3	1:A:341:ARG:HH12	1.80	0.44
1:A:347:LEU:HA	1:A:347:LEU:HD23	1.71	0.44
1:A:398:ALA:HB2	1:A:469:SER:OG	2.16	0.44
1:A:47:CYS:O	1:A:50:TYR:HB3	2.17	0.44
1:A:487:GLY:N	1:A:488:HIS:HD2	2.11	0.44
1:A:59:GLN:O	1:A:62:GLN:N	2.50	0.44
1:A:319:MET:CE	1:A:341:ARG:HG3	2.47	0.44
1:A:57:ILE:HD11	1:A:209:LYS:HB3	1.99	0.44
1:A:722:VAL:HG22	1:A:738:TYR:OH	2.17	0.44
1:A:845:HIS:CB	1:A:869:ALA:HB1	2.47	0.44
1:A:106:ILE:CG2	1:A:140:TYR:N	2.80	0.44
1:A:159:MET:HE2	1:A:179:LEU:HB2	1.98	0.44
1:A:223:TYR:CD2	1:A:436:ILE:CD1	3.01	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:229:ILE:HG22	1:A:230:PRO:N	2.33	0.44
1:A:253:THR:HG23	1:A:278:GLY:HA2	2.00	0.44
1:A:319:MET:HE3	1:A:341:ARG:HG3	1.99	0.44
1:A:496:ILE:O	1:A:504:LYS:N	2.50	0.44
1:A:595:ILE:N	1:A:596:PRO:CD	2.79	0.44
1:A:627:VAL:HG21	1:A:652:VAL:HG13	1.98	0.44
1:A:579:ILE:HG22	1:A:651:LYS:NZ	2.32	0.44
1:A:22:ALA:HB3	1:A:94:GLY:HA2	1.99	0.44
1:A:99:MET:N	1:A:100:PRO:CD	2.80	0.44
1:A:225:ARG:HG3	1:A:225:ARG:HH11	1.83	0.44
1:A:280:ASP:OD2	1:A:281:VAL:HG13	2.17	0.44
1:A:563:GLU:CG	1:A:621:PRO:CD	2.95	0.44
1:A:854:CYS:SG	1:A:862:ALA:HB2	2.57	0.44
1:A:119:PHE:CD2	1:A:129:ALA:CB	3.00	0.44
1:A:176:LEU:O	1:A:179:LEU:HB3	2.17	0.44
1:A:200:PRO:C	1:A:202:ASP:H	2.20	0.44
1:A:207:ALA:HA	1:A:210:ALA:HB3	1.99	0.44
1:A:298:MET:HB3	1:A:301:CYS:HB2	1.98	0.44
1:A:447:THR:OG1	1:A:469:SER:HA	2.17	0.44
1:A:817:LYS:HD3	1:A:817:LYS:C	2.38	0.44
1:A:837:ASP:HB3	1:A:840:SER:OG	2.17	0.44
1:A:73:GLU:HA	1:A:76:ASN:HD21	1.80	0.44
1:A:818:LYS:O	1:A:821:GLN:HB2	2.17	0.44
1:A:837:ASP:O	1:A:839:SER:N	2.50	0.44
1:A:122:LYS:C	1:A:122:LYS:HD3	2.38	0.44
1:A:196:PHE:CG	1:A:197:PRO:HD2	2.53	0.44
1:A:204:LEU:HD22	1:A:205:MET:SD	2.58	0.44
1:A:225:ARG:CD	1:A:226:MET:N	2.78	0.44
1:A:536:VAL:HG12	1:A:537:ARG:N	2.32	0.44
1:A:365:VAL:HG11	1:A:867:ALA:HB1	1.99	0.44
1:A:128:PHE:CG	1:A:129:ALA:N	2.86	0.44
1:A:138:GLN:HB2	1:A:152:PHE:CD1	2.52	0.44
1:A:156:ILE:CG1	1:A:183:PHE:CZ	2.98	0.44
1:A:298:MET:HG2	1:A:301:CYS:CB	2.48	0.44
1:A:624:HIS:CE1	1:A:629:HIS:CD2	3.05	0.44
1:A:141:SER:O	1:A:145:MET:N	2.51	0.44
1:A:141:SER:HG	1:A:147:VAL:HG23	1.79	0.44
1:A:270:GLY:CA	1:A:291:ILE:CG2	2.96	0.44
1:A:741:GLY:HA3	1:A:762:PHE:CG	2.52	0.44
1:A:23:GLY:CA	1:A:238:ASN:ND2	2.81	0.43
1:A:352:ASP:O	1:A:356:GLU:N	2.48	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:517:VAL:HG21	1:A:521:PHE:CD2	2.53	0.43
1:A:866:ALA:HA	1:A:869:ALA:HB3	2.00	0.43
1:A:224:ARG:NH1	1:A:231:GLY:N	2.66	0.43
1:A:362:GLU:O	1:A:366:VAL:HG23	2.18	0.43
1:A:466:CYS:SG	1:A:467:CYS:N	2.88	0.43
1:A:119:PHE:CD1	1:A:123:THR:HB	2.53	0.43
1:A:298:MET:HG2	1:A:301:CYS:HG	1.82	0.43
1:A:386:LEU:HD21	1:A:498:LEU:HD12	1.99	0.43
1:A:420:LYS:O	1:A:443:GLU:OE1	2.37	0.43
1:A:741:GLY:N	1:A:762:PHE:CE2	2.86	0.43
1:A:109:LEU:HA	1:A:136:PHE:CD1	2.54	0.43
1:A:243:VAL:HG21	1:A:332:TYR:CB	2.48	0.43
1:A:4:TRP:HZ3	1:A:49:GLU:CB	2.30	0.43
1:A:574:LYS:CB	1:A:574:LYS:NZ	2.77	0.43
1:A:661:MET:SD	1:A:772:GLN:OE1	2.77	0.43
1:A:686:GLU:HG3	1:A:728:VAL:CG2	2.48	0.43
1:A:251:SER:CB	1:A:328:GLU:N	2.77	0.43
1:A:415:LYS:C	1:A:417:ALA:H	2.21	0.43
1:A:564:HIS:O	1:A:566:PHE:N	2.51	0.43
1:A:582:ASP:O	1:A:583:SER:HB3	2.18	0.43
1:A:652:VAL:O	1:A:652:VAL:HG12	2.18	0.43
1:A:707:LEU:HD12	1:A:746:ILE:CD1	2.48	0.43
1:A:782:ALA:HA	1:A:785:PHE:CE2	2.53	0.43
1:A:864:LEU:HD13	1:A:868:GLN:HE22	1.82	0.43
1:A:103:MET:HB2	2:A:902:SO4:O4	2.18	0.43
1:A:477:ASN:CG	1:A:480:ALA:HB3	2.37	0.43
1:A:362:GLU:HG3	1:A:531:PHE:CE1	2.53	0.43
1:A:648:VAL:O	1:A:652:VAL:HG23	2.18	0.43
1:A:74:GLU:CG	1:A:75:LEU:H	2.17	0.43
1:A:359:ILE:HD12	1:A:364:ALA:HB2	2.01	0.43
1:A:408:TYR:HD1	1:A:414:ALA:HA	1.84	0.43
1:A:628:PRO:CB	1:A:633:GLU:HB3	2.48	0.43
1:A:79:LYS:O	1:A:87:LEU:HB3	2.19	0.43
1:A:109:LEU:HD12	1:A:136:PHE:CE1	2.53	0.43
1:A:271:GLU:O	1:A:282:VAL:HG11	2.19	0.43
1:A:368:ILE:HD12	1:A:368:ILE:N	2.33	0.43
1:A:529:ASP:HA	1:A:532:ARG:HG2	2.00	0.43
1:A:549:ALA:O	1:A:554:ALA:HB2	2.19	0.43
1:A:141:SER:OG	1:A:146:GLU:HB2	2.18	0.43
1:A:327:GLU:O	1:A:327:GLU:HG2	2.19	0.43
1:A:490:PHE:N	1:A:490:PHE:CD1	2.86	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:694:GLU:HG3	1:A:694:GLU:H	1.41	0.43
1:A:618:TYR:CZ	1:A:703:ILE:HG23	2.54	0.43
1:A:830:ILE:HD13	1:A:844:CYS:SG	2.59	0.43
1:A:107:LEU:CD1	1:A:139:MET:HE1	2.49	0.43
1:A:177:LYS:O	1:A:181:GLU:HB2	2.19	0.43
1:A:102:MET:SD	1:A:223:TYR:CD2	3.11	0.43
1:A:156:ILE:HG12	1:A:179:LEU:HD21	2.01	0.42
1:A:27:ALA:HA	1:A:30:THR:HB	2.01	0.42
1:A:317:ARG:HH22	1:A:363:GLU:CD	2.22	0.42
1:A:399:SER:OG	1:A:466:CYS:HA	2.19	0.42
1:A:708:VAL:CG2	1:A:714:LEU:HB2	2.49	0.42
1:A:72:LEU:O	1:A:75:LEU:N	2.52	0.42
1:A:834:HIS:H	1:A:834:HIS:CD2	2.37	0.42
1:A:583:SER:OG	1:A:586:ALA:HB2	2.19	0.42
1:A:637:LEU:HD12	1:A:637:LEU:O	2.20	0.42
1:A:725:ALA:O	1:A:728:VAL:HG12	2.19	0.42
1:A:685:MET:CB	1:A:728:VAL:HG11	2.34	0.42
1:A:107:LEU:HB2	1:A:139:MET:SD	2.59	0.42
1:A:253:THR:CG2	1:A:282:VAL:HG23	2.49	0.42
1:A:8:PHE:CZ	1:A:26:LEU:HD22	2.54	0.42
1:A:466:CYS:O	1:A:467:CYS:HB2	2.19	0.42
1:A:484:GLU:CG	1:A:485:LEU:H	2.32	0.42
1:A:700:VAL:HG22	1:A:737:GLN:OE1	2.19	0.42
1:A:244:PHE:C	1:A:246:ASN:H	2.22	0.42
1:A:272:TYR:CD1	1:A:289:GLN:O	2.72	0.42
1:A:272:TYR:CE2	1:A:289:GLN:CB	2.96	0.42
1:A:515:ALA:O	1:A:516:SER:O	2.37	0.42
1:A:539:ASN:HD21	1:A:853:SER:C	2.21	0.42
1:A:547:LEU:HD23	1:A:547:LEU:HA	1.57	0.42
1:A:602:PHE:CE1	1:A:616:VAL:HG11	2.55	0.42
1:A:659:ASN:HA	1:A:660:PRO:HD2	1.74	0.42
1:A:712:LYS:HG2	1:A:715:LYS:NZ	2.34	0.42
1:A:728:VAL:HG13	1:A:729:LYS:N	2.35	0.42
1:A:685:MET:HE1	1:A:736:MET:HG2	2.02	0.42
1:A:4:TRP:CH2	1:A:49:GLU:HG2	2.54	0.42
1:A:630:THR:O	1:A:634:GLN:HB2	2.19	0.42
1:A:805:GLN:CB	1:A:843:PHE:CE2	3.03	0.42
1:A:143:VAL:C	1:A:145:MET:N	2.72	0.42
1:A:374:ASP:N	1:A:861:ILE:HD11	2.35	0.42
1:A:543:PRO:HA	1:A:546:THR:OG1	2.19	0.42
1:A:749:ALA:HA	1:A:756:ILE:CD1	2.50	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:259:ARG:NH2	1:A:353:LEU:CD2	2.80	0.42
1:A:34:MET:CE	1:A:312:LEU:CD2	2.98	0.42
1:A:3:LYS:HB3	1:A:6:TYR:CZ	2.55	0.42
1:A:57:ILE:CG2	1:A:61:ILE:CG2	2.98	0.42
1:A:603:LYS:CD	1:A:691:VAL:CG2	2.97	0.42
1:A:619:LEU:HD11	1:A:626:PHE:HZ	1.84	0.42
1:A:678:LYS:NZ	1:A:720:VAL:HG13	2.35	0.42
1:A:219:ARG:HG3	1:A:434:GLU:HA	2.00	0.42
1:A:361:GLU:HG3	1:A:527:TRP:CD2	2.54	0.42
1:A:675:GLU:H	1:A:675:GLU:HG3	1.61	0.42
1:A:74:GLU:O	1:A:76:ASN:N	2.53	0.42
1:A:775:PHE:HE1	1:A:804:ASP:OD2	2.02	0.42
1:A:224:ARG:CG	1:A:229:ILE:CB	2.97	0.42
1:A:319:MET:O	1:A:319:MET:SD	2.77	0.42
1:A:559:LEU:CD1	1:A:617:ARG:CB	2.98	0.42
1:A:591:LEU:CD1	1:A:675:GLU:HB2	2.50	0.42
1:A:700:VAL:CG1	1:A:737:GLN:HB3	2.35	0.42
1:A:186:VAL:HA	1:A:189:GLU:OE2	2.20	0.42
1:A:251:SER:OG	1:A:328:GLU:HA	2.20	0.42
1:A:45:GLU:OE1	1:A:46:ALA:N	2.50	0.42
1:A:667:CYS:SG	1:A:668:ARG:CD	3.07	0.42
1:A:76:ASN:ND2	1:A:76:ASN:C	2.72	0.42
1:A:88:LEU:HA	1:A:109:LEU:O	2.20	0.42
1:A:19:LEU:HD22	1:A:41:THR:HG21	2.02	0.41
1:A:100:PRO:HB2	1:A:458:VAL:HG11	1.99	0.41
1:A:144:VAL:O	1:A:145:MET:O	2.37	0.41
1:A:185:ALA:HA	1:A:188:LYS:CB	2.48	0.41
1:A:40:PHE:CE1	1:A:69:ILE:CD1	3.01	0.41
1:A:523:ARG:O	1:A:527:TRP:CD2	2.74	0.41
1:A:693:GLU:C	1:A:695:THR:H	2.20	0.41
1:A:812:VAL:O	1:A:812:VAL:CG1	2.68	0.41
1:A:79:LYS:CG	1:A:82:ASP:HB2	2.50	0.41
1:A:95:ALA:O	1:A:96:ARG:O	2.38	0.41
1:A:179:LEU:C	1:A:181:GLU:H	2.22	0.41
1:A:248:GLY:HA2	1:A:275:ASN:OD1	2.20	0.41
1:A:260:ASN:N	1:A:265:GLU:O	2.53	0.41
1:A:279:GLU:OE1	1:A:279:GLU:N	2.53	0.41
1:A:277:GLN:H	1:A:281:VAL:HG21	1.84	0.41
1:A:410:THR:HB	1:A:413:GLU:HG3	2.02	0.41
1:A:408:TYR:O	1:A:426:LEU:HA	2.20	0.41
1:A:517:VAL:CG2	1:A:521:PHE:CD2	3.03	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:707:LEU:CD1	1:A:746:ILE:CD1	2.98	0.41
1:A:757:ALA:HB2	1:A:763:PHE:CZ	2.55	0.41
1:A:745:GLU:O	1:A:770:LEU:HD13	2.21	0.41
1:A:539:ASN:ND2	1:A:853:SER:O	2.46	0.41
1:A:117:GLU:OE2	1:A:130:TYR:OH	2.36	0.41
1:A:448:VAL:HG22	1:A:476:ILE:HD11	2.02	0.41
1:A:498:LEU:C	1:A:500:GLY:N	2.73	0.41
1:A:538:THR:HG22	1:A:540:ALA:HB2	2.01	0.41
1:A:715:LYS:HE2	1:A:715:LYS:HB3	1.83	0.41
1:A:82:ASP:OD2	1:A:84:GLU:N	2.46	0.41
1:A:92:ARG:HA	1:A:104:ASP:O	2.20	0.41
1:A:137:ILE:O	1:A:196:PHE:CZ	2.74	0.41
1:A:392:ILE:HD11	1:A:485:LEU:CD1	2.48	0.41
1:A:407:VAL:O	1:A:408:TYR:CD2	2.74	0.41
1:A:471:CYS:O	1:A:474:ILE:HG13	2.19	0.41
1:A:137:ILE:HG22	1:A:152:PHE:CE1	2.49	0.41
1:A:22:ALA:HB3	1:A:94:GLY:CA	2.50	0.41
1:A:235:THR:HG22	1:A:236:ALA:O	2.21	0.41
1:A:335:GLN:HG2	1:A:336:THR:N	2.35	0.41
1:A:370:ALA:O	1:A:373:LEU:HD22	2.21	0.41
1:A:380:THR:O	1:A:512:THR:HA	2.20	0.41
1:A:584:VAL:O	1:A:588:GLU:N	2.51	0.41
1:A:592:ASN:CA	1:A:595:ILE:HD12	2.48	0.41
1:A:653:ASP:C	1:A:655:LEU:H	2.23	0.41
1:A:76:ASN:C	1:A:78:LYS:H	2.24	0.41
1:A:78:LYS:HE2	1:A:78:LYS:HB3	1.57	0.41
1:A:846:LYS:HD3	1:A:873:ASN:HD21	1.85	0.41
1:A:103:MET:N	1:A:103:MET:SD	2.89	0.41
1:A:107:LEU:CD1	1:A:139:MET:SD	3.05	0.41
1:A:373:LEU:HD12	1:A:376:LEU:HD11	2.02	0.41
1:A:147:VAL:HG12	1:A:148:PRO:HD2	2.02	0.41
1:A:224:ARG:HH11	1:A:230:PRO:C	2.24	0.41
1:A:224:ARG:HG2	1:A:224:ARG:O	2.21	0.41
1:A:260:ASN:CB	1:A:265:GLU:HB2	2.49	0.41
1:A:285:VAL:O	1:A:286:ARG:HB2	2.21	0.41
1:A:4:TRP:HE3	1:A:46:ALA:CB	2.33	0.41
1:A:59:GLN:CD	1:A:59:GLN:H	2.24	0.41
1:A:668:ARG:CZ	1:A:707:LEU:HG	2.50	0.41
1:A:855:SER:HB3	1:A:856:PRO:HD2	2.02	0.41
1:A:157:ASP:HA	1:A:160:LYS:HE3	2.02	0.41
1:A:224:ARG:CG	1:A:229:ILE:CG2	2.97	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:261:PRO:CD	1:A:269:TYR:CD1	2.97	0.41
1:A:298:MET:CG	1:A:301:CYS:HG	2.33	0.41
1:A:353:LEU:HA	1:A:353:LEU:HD23	1.93	0.41
1:A:603:LYS:HG2	1:A:687:ALA:CB	2.40	0.41
1:A:4:TRP:CZ3	1:A:61:ILE:HD11	2.51	0.41
1:A:93:SER:HG	1:A:104:ASP:H	1.67	0.41
1:A:627:VAL:HB	1:A:628:PRO:CD	2.50	0.41
1:A:748:ARG:HA	1:A:751:LEU:HB2	2.03	0.41
1:A:160:LYS:HG3	1:A:161:GLU:N	2.36	0.41
1:A:204:LEU:CD2	1:A:205:MET:SD	3.09	0.41
1:A:251:SER:O	1:A:275:ASN:N	2.51	0.41
1:A:377:LEU:HD13	1:A:857:PHE:CD1	2.56	0.41
1:A:432:SER:C	1:A:455:HIS:CE1	2.94	0.41
1:A:439:MET:O	1:A:463:MET:SD	2.79	0.41
1:A:811:LEU:HA	1:A:811:LEU:HD23	1.64	0.41
1:A:415:LYS:HB2	1:A:415:LYS:HE3	1.64	0.40
1:A:420:LYS:HG2	1:A:443:GLU:OE2	2.21	0.40
1:A:445:ILE:HG13	1:A:467:CYS:SG	2.60	0.40
1:A:584:VAL:HG12	1:A:588:GLU:CG	2.51	0.40
1:A:741:GLY:HA3	1:A:762:PHE:CE2	2.56	0.40
1:A:136:PHE:C	1:A:136:PHE:CD2	2.94	0.40
1:A:157:ASP:O	1:A:160:LYS:HG3	2.21	0.40
1:A:11:GLY:CA	1:A:15:MET:SD	3.09	0.40
1:A:151:HIS:HB3	1:A:186:VAL:HG21	2.03	0.40
1:A:252:GLY:N	1:A:326:ILE:O	2.54	0.40
1:A:571:ARG:NH2	1:A:601:ASP:OD1	2.52	0.40
1:A:790:TYR:OH	1:A:799:PRO:HD3	2.21	0.40
1:A:107:LEU:CG	1:A:139:MET:SD	3.09	0.40
1:A:143:VAL:O	1:A:145:MET:N	2.55	0.40
1:A:137:ILE:CG2	1:A:183:PHE:HB3	2.29	0.40
1:A:199:GLU:O	1:A:202:ASP:N	2.54	0.40
1:A:140:TYR:CE2	1:A:203:GLN:O	2.71	0.40
1:A:303:LYS:HB2	1:A:303:LYS:HE3	1.77	0.40
1:A:741:GLY:HA3	1:A:762:PHE:CD1	2.56	0.40
1:A:741:GLY:HA3	1:A:762:PHE:CE1	2.56	0.40
1:A:829:GLY:HA3	1:A:851:TYR:CD2	2.56	0.40
1:A:843:PHE:O	1:A:847:VAL:HB	2.20	0.40
1:A:145:MET:C	1:A:146:GLU:HG2	2.41	0.40
1:A:287:THR:HA	1:A:288:PRO:HD2	1.96	0.40
1:A:439:MET:C	1:A:463:MET:SD	3.00	0.40
1:A:580:LEU:CD1	1:A:637:LEU:HD21	2.46	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:72:LEU:HA	1:A:72:LEU:HD23	1.63	0.40
1:A:834:HIS:HB3	1:A:840:SER:HG	1.86	0.40
1:A:183:PHE:HA	1:A:186:VAL:HG12	2.02	0.40
1:A:20:GLY:HA3	1:A:94:GLY:O	2.21	0.40
1:A:224:ARG:O	1:A:229:ILE:HB	2.22	0.40
1:A:341:ARG:HB3	1:A:342:THR:H	1.65	0.40
1:A:373:LEU:HD21	1:A:864:LEU:CD1	2.28	0.40
1:A:518:SER:OG	1:A:519:GLY:N	2.55	0.40
1:A:564:HIS:CD2	1:A:564:HIS:H	2.39	0.40
1:A:775:PHE:CE1	1:A:804:ASP:OD2	2.73	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles [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	864/873 (99%)	628 (73%)	149 (17%)	87 (10%)	1 1

All (87) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	38	GLN
1	A	55	LYS
1	A	59	GLN
1	A	60	GLU
1	A	96	ARG
1	A	108	ASN
1	A	145	MET
1	A	197	PRO
1	A	212	PHE
1	A	278	GLY
1	A	279	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	291	ILE
1	A	337	ARG
1	A	395	ALA
1	A	419	GLU
1	A	423	ARG
1	A	472	GLY
1	A	473	GLU
1	A	494	ASP
1	A	501	SER
1	A	516	SER
1	A	518	SER
1	A	569	ALA
1	A	572	ILE
1	A	583	SER
1	A	694	GLU
1	A	732	LYS
1	A	734	SER
1	A	782	ALA
1	A	75	LEU
1	A	77	GLY
1	A	139	MET
1	A	151	HIS
1	A	162	GLU
1	A	165	VAL
1	A	180	ALA
1	A	225	ARG
1	A	226	MET
1	A	286	ARG
1	A	304	GLN
1	A	319	MET
1	A	329	GLY
1	A	470	GLY
1	A	486	GLY
1	A	492	GLU
1	A	499	ASP
1	A	565	MET
1	A	729	LYS
1	A	757	ALA
1	A	841	VAL
1	A	15	MET
1	A	72	LEU
1	A	73	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	80	PHE
1	A	475	LYS
1	A	485	LEU
1	A	502	THR
1	A	636	GLU
1	A	733	GLY
1	A	784	LYS
1	A	804	ASP
1	A	52	ASN
1	A	150	SER
1	A	204	LEU
1	A	421	GLY
1	A	711	LYS
1	A	712	LYS
1	A	871	LEU
1	A	53	SER
1	A	176	LEU
1	A	179	LEU
1	A	218	PRO
1	A	285	VAL
1	A	517	VAL
1	A	620	ASP
1	A	785	PHE
1	A	230	PRO
1	A	265	GLU
1	A	418	HIS
1	A	610	GLU
1	A	832	GLY
1	A	299	PRO
1	A	838	PRO
1	A	20	GLY
1	A	436	ILE
1	A	144	VAL
1	A	125	ASN

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	709/713 (99%)	550 (78%)	159 (22%)	1 3

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

Mol	Chain	Res	Type
1	A	14	SER
1	A	15	MET
1	A	16	ARG
1	A	24	CYS
1	A	26	LEU
1	A	45	GLU
1	A	47	CYS
1	A	57	ILE
1	A	63	ASP
1	A	66	PHE
1	A	69	ILE
1	A	72	LEU
1	A	74	GLU
1	A	76	ASN
1	A	78	LYS
1	A	92	ARG
1	A	98	SER
1	A	111	LEU
1	A	123	THR
1	A	131	ASP
1	A	135	ARG
1	A	138	GLN
1	A	147	VAL
1	A	149	LYS
1	A	150	SER
1	A	155	ILE
1	A	161	GLU
1	A	166	HIS
1	A	167	PHE
1	A	168	ASP
1	A	169	THR
1	A	170	ASP
1	A	174	ASP
1	A	181	GLU
1	A	191	MET
1	A	194	GLU
1	A	199	GLU
1	A	202	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	209	LYS
1	A	213	ARG
1	A	214	SER
1	A	215	TRP
1	A	217	ASN
1	A	224	ARG
1	A	227	ASN
1	A	232	ASP
1	A	238	ASN
1	A	239	VAL
1	A	240	GLN
1	A	241	THR
1	A	244	PHE
1	A	249	GLU
1	A	251	SER
1	A	253	THR
1	A	277	GLN
1	A	280	ASP
1	A	285	VAL
1	A	287	THR
1	A	291	ILE
1	A	294	LEU
1	A	297	ASP
1	A	298	MET
1	A	300	ASP
1	A	303	LYS
1	A	304	GLN
1	A	307	ASP
1	A	310	MET
1	A	311	LYS
1	A	312	LEU
1	A	313	GLU
1	A	321	ASP
1	A	322	MET
1	A	330	LYS
1	A	335	GLN
1	A	338	ASN
1	A	341	ARG
1	A	359	ILE
1	A	361	GLU
1	A	366	VAL
1	A	369	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	373	LEU
1	A	374	ASP
1	A	377	LEU
1	A	380	THR
1	A	386	LEU
1	A	391	VAL
1	A	394	SER
1	A	420	LYS
1	A	422	GLU
1	A	427	VAL
1	A	428	ARG
1	A	430	GLU
1	A	440	HIS
1	A	445	ILE
1	A	446	LEU
1	A	447	THR
1	A	448	VAL
1	A	463	MET
1	A	466	CYS
1	A	468	VAL
1	A	469	SER
1	A	475	LYS
1	A	477	ASN
1	A	478	GLU
1	A	485	LEU
1	A	488	HIS
1	A	490	PHE
1	A	492	GLU
1	A	512	THR
1	A	513	GLN
1	A	516	SER
1	A	518	SER
1	A	520	SER
1	A	538	THR
1	A	542	THR
1	A	545	ASP
1	A	551	LYS
1	A	562	THR
1	A	570	ASP
1	A	578	MET
1	A	585	GLU
1	A	616	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	633	GLU
1	A	636	GLU
1	A	641	MET
1	A	653	ASP
1	A	659	ASN
1	A	669	LEU
1	A	692	LYS
1	A	694	GLU
1	A	710	GLU
1	A	711	LYS
1	A	714	LEU
1	A	719	ASP
1	A	730	LYS
1	A	743	MET
1	A	752	THR
1	A	754	ASP
1	A	761	GLU
1	A	771	THR
1	A	773	MET
1	A	777	PHE
1	A	779	ARG
1	A	784	LYS
1	A	796	GLU
1	A	802	ARG
1	A	804	ASP
1	A	817	LYS
1	A	821	GLN
1	A	822	THR
1	A	823	ARG
1	A	834	HIS
1	A	837	ASP
1	A	853	SER
1	A	864	LEU
1	A	868	GLN
1	A	871	LEU
1	A	872	ASN
1	A	874	LYS

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

Mol	Chain	Res	Type
1	A	38	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

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

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

2 ligands are modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the Chemical Component Dictionary. The

Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	SO4	A	901	-	4,4,4	0.72	0	6,6,6	0.46	0
2	SO4	A	902	-	4,4,4	1.30	1 (25%)	6,6,6	0.25	0

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

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

All (1) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	A	902	SO4	O2-S	2.25	1.57	1.45

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

2 monomers are involved in 6 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
2	A	901	SO4	1	0
2	A	902	SO4	5	0

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data ⓘ

6.1 Protein, DNA and RNA chains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	868/873 (99%)	0.29	33 (3%) 41 30	8, 28, 41, 53	0

All (33) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	389	GLY	5.3
1	A	146	GLU	5.1
1	A	43	THR	4.9
1	A	186	VAL	4.7
1	A	2	ALA	4.2
1	A	421	GLY	3.4
1	A	633	GLU	3.3
1	A	501	SER	3.1
1	A	147	VAL	3.0
1	A	196	PHE	3.0
1	A	76	ASN	2.9
1	A	360	THR	2.8
1	A	388	ALA	2.7
1	A	482	THR	2.7
1	A	580	LEU	2.6
1	A	489	THR	2.5
1	A	17	ASN	2.5
1	A	408	TYR	2.5
1	A	165	VAL	2.5
1	A	4	TRP	2.4
1	A	404	ALA	2.4
1	A	488	HIS	2.4
1	A	336	THR	2.4
1	A	392	ILE	2.3
1	A	114	VAL	2.3
1	A	648	VAL	2.2
1	A	181	GLU	2.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	416	ALA	2.2
1	A	586	ALA	2.2
1	A	583	SER	2.2
1	A	635	ALA	2.1
1	A	156	ILE	2.1
1	A	733	GLY	2.0

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

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

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

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

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	LLDF	B-factors(\AA^2)	Q<0.9
2	SO4	A	902	5/5	0.86	0.28	3.10	59,61,63,64	0
2	SO4	A	901	5/5	0.98	0.15	-	45,45,54,56	5

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.