



Full wwPDB/EMDatabank EM Map/Model Validation Report ⓘ

Dec 6, 2017 – 11:39 AM EST

PDB ID : 5JNX
EMDB ID: : 8169
Title : The 6.6 Å cryo-EM structure of the full-length human NPC1 in complex with the cleaved glycoprotein of Ebola virus
Authors : Gong, X.; Qian, H.W.; Zhou, X.H.; Wu, J.P.; Wan, T.; Shi, Y.; Gao, F.; Zhou, Q.; Yan, N.
Deposited on : unknown
Resolution : 6.56 Å(reported)

This is a Full wwPDB/EMDatabank EM Map/Model Validation Report
for a publicly released PDB/EMDB entry.

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org
A user guide is available at
<http://wwpdb.org/validation/2016/EMValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

MolProbity : 4.02b-467
Mogul : 1.7.2 (RC1), CSD as538be (2017)
Percentile statistics : 20161228.v01 (using entries in the PDB archive December 28th 2016)
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et. al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20030345

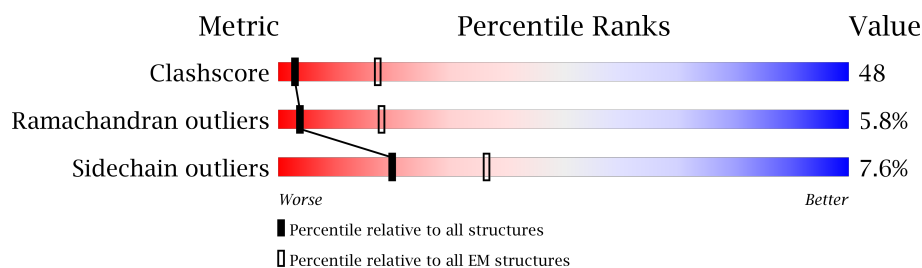
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 6.56 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)	EM structures (#Entries)
Clashscore	125131	1336
Ramachandran outliers	121729	1120
Sidechain outliers	121581	1026

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains. The red, orange, yellow and green segments on the 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 $\leq 5\%$.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	1278	
2	C	158	
2	E	158	
2	G	158	
3	D	130	
3	F	130	
3	H	130	

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
4	NAG	A	1306	-	-	X	-
4	NAG	A	1307	-	-	X	-
4	NAG	A	1309	X	-	-	-
4	NAG	A	1312	-	-	X	-

2 Entry composition

There are 6 unique types of molecules in this entry. The entry contains 13749 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

In the tables below, 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 Niemann-Pick C1 protein.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
1	A	1133	Total	C	N	O	S	1	0
			7695	4862	1315	1476	42		

- Molecule 2 is a protein called Envelope glycoprotein.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
2	C	158	Total	C	N	O	S	0	0
			1194	757	209	223	5		
2	E	158	Total	C	N	O	S	0	0
			1194	757	209	223	5		
2	G	158	Total	C	N	O	S	0	0
			1194	757	209	223	5		

There are 6 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
C	31	ARG	-	expression tag	UNP P87666
C	42	VAL	THR	engineered mutation	UNP P87666
E	31	ARG	-	expression tag	UNP P87666
E	42	VAL	THR	engineered mutation	UNP P87666
G	31	ARG	-	expression tag	UNP P87666
G	42	VAL	THR	engineered mutation	UNP P87666

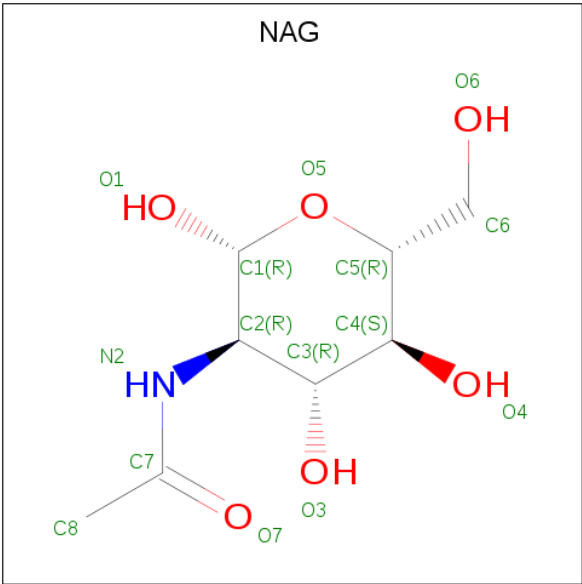
- Molecule 3 is a protein called Envelope glycoprotein.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
3	D	87	Total	C	N	O	S	0	0
			687	441	121	122	3		
3	F	87	Total	C	N	O	S	0	0
			687	441	121	122	3		
3	H	87	Total	C	N	O	S	0	0
			687	441	121	122	3		

There are 18 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
D	633	HIS	-	expression tag	UNP P87666
D	634	HIS	-	expression tag	UNP P87666
D	635	HIS	-	expression tag	UNP P87666
D	636	HIS	-	expression tag	UNP P87666
D	637	HIS	-	expression tag	UNP P87666
D	638	HIS	-	expression tag	UNP P87666
F	633	HIS	-	expression tag	UNP P87666
F	634	HIS	-	expression tag	UNP P87666
F	635	HIS	-	expression tag	UNP P87666
F	636	HIS	-	expression tag	UNP P87666
F	637	HIS	-	expression tag	UNP P87666
F	638	HIS	-	expression tag	UNP P87666
H	633	HIS	-	expression tag	UNP P87666
H	634	HIS	-	expression tag	UNP P87666
H	635	HIS	-	expression tag	UNP P87666
H	636	HIS	-	expression tag	UNP P87666
H	637	HIS	-	expression tag	UNP P87666
H	638	HIS	-	expression tag	UNP P87666

- Molecule 4 is N-ACETYL-D-GLUCOSAMINE (three-letter code: NAG) (formula: C₈H₁₅NO₆).



Mol	Chain	Residues	Atoms				AltConf
4	A	1	Total	C	N	O	0
			294	168	21	105	
4	A	1	Total	C	N	O	0
			294	168	21	105	

Continued on next page...

Continued from previous page...

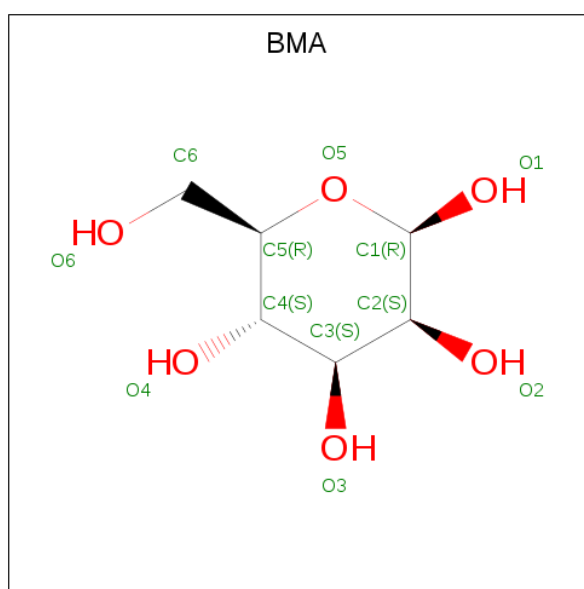
Mol	Chain	Residues	Atoms				AltConf
4	A	1	Total	C	N	O	0
			294	168	21	105	
4	A	1	Total	C	N	O	0
			294	168	21	105	
4	A	1	Total	C	N	O	0
			294	168	21	105	
4	A	1	Total	C	N	O	0
			294	168	21	105	
4	A	1	Total	C	N	O	0
			294	168	21	105	
4	A	1	Total	C	N	O	0
			294	168	21	105	
4	A	1	Total	C	N	O	0
			294	168	21	105	
4	A	1	Total	C	N	O	0
			294	168	21	105	
4	A	1	Total	C	N	O	0
			294	168	21	105	
4	A	1	Total	C	N	O	0
			294	168	21	105	
4	A	1	Total	C	N	O	0
			294	168	21	105	
4	A	1	Total	C	N	O	0
			294	168	21	105	
4	A	1	Total	C	N	O	0
			294	168	21	105	
4	A	1	Total	C	N	O	0
			294	168	21	105	
4	A	1	Total	C	N	O	0
			294	168	21	105	
4	A	1	Total	C	N	O	0
			294	168	21	105	
4	D	1	Total	C	N	O	0
			28	16	2	10	
4	D	1	Total	C	N	O	0
			28	16	2	10	

Continued on next page...

Continued from previous page...

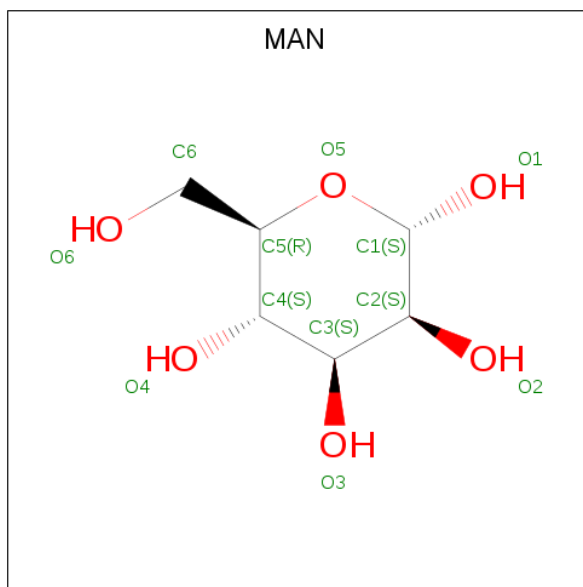
Mol	Chain	Residues	Atoms				AltConf
4	F	1	Total	C	N	O	0
			28	16	2	10	
4	F	1	Total	C	N	O	0
			28	16	2	10	
4	H	1	Total	C	N	O	0
			28	16	2	10	
4	H	1	Total	C	N	O	0
			28	16	2	10	

- Molecule 5 is BETA-D-MANNOSE (three-letter code: BMA) (formula: $C_6H_{12}O_6$).



Mol	Chain	Residues	Atoms			AltConf
5	A	1	Total	C	O	0
			22	12	10	
5	A	1	Total	C	O	0
			22	12	10	

- Molecule 6 is ALPHA-D-MANNOSE (three-letter code: MAN) (formula: $C_6H_{12}O_6$).

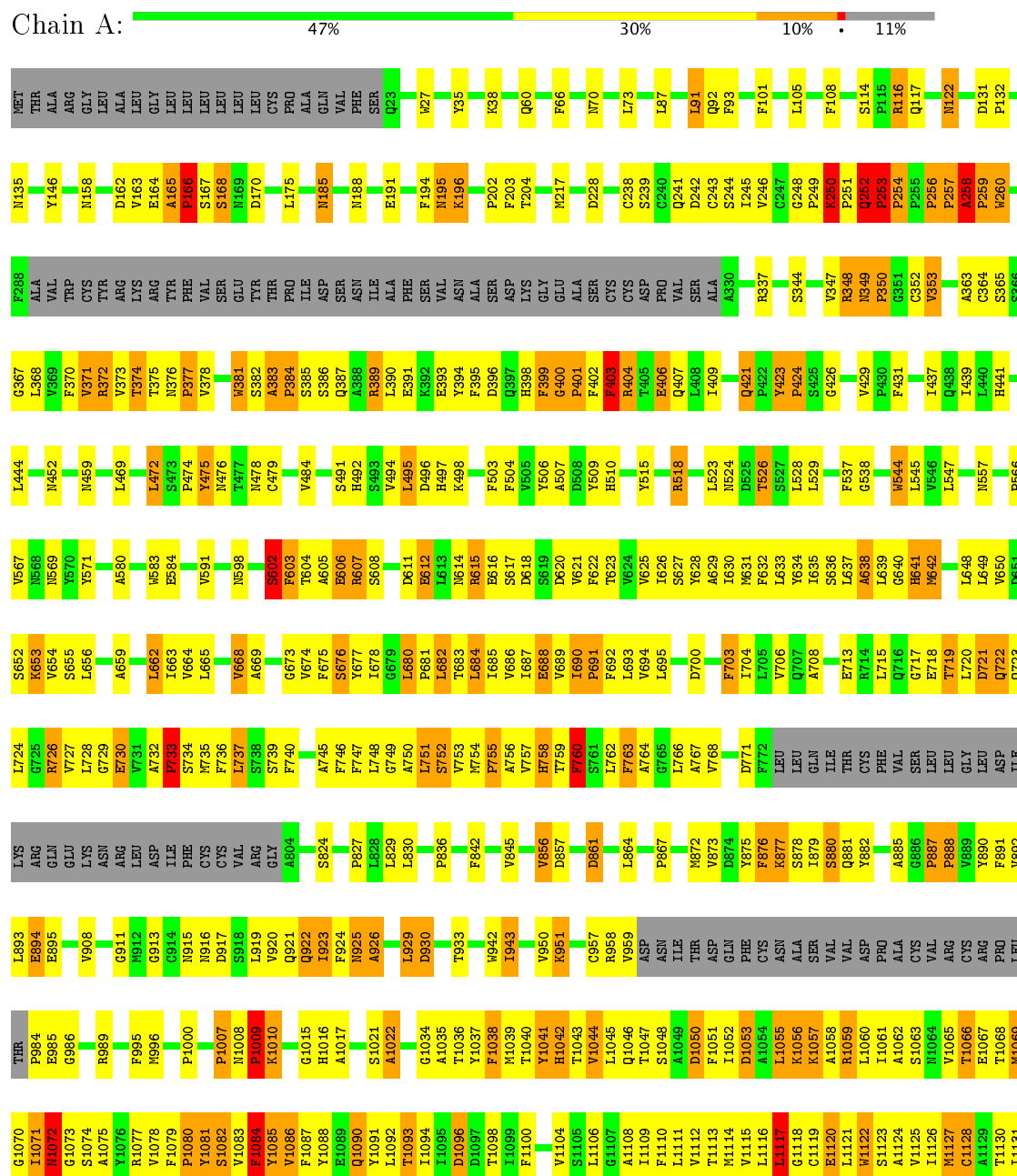


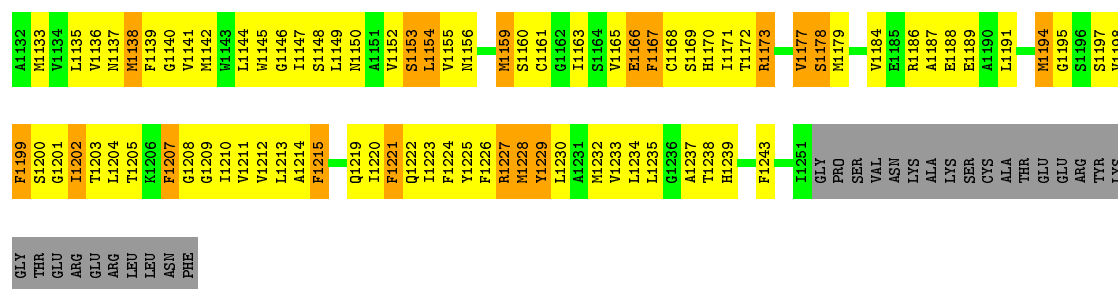
Mol	Chain	Residues	Atoms			AltConf
6	A	1	Total	C	O	0
			11	6	5	

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. 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. 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: Niemann-Pick C1 protein





- Molecule 2: Envelope glycoprotein

Chain C: 86% 12% .



- Molecule 2: Envelope glycoprotein

Chain E: 80% 18% .



- Molecule 2: Envelope glycoprotein

Chain G: 86% 12% .



- Molecule 3: Envelope glycoprotein

Chain D: 52% 14% 33% .

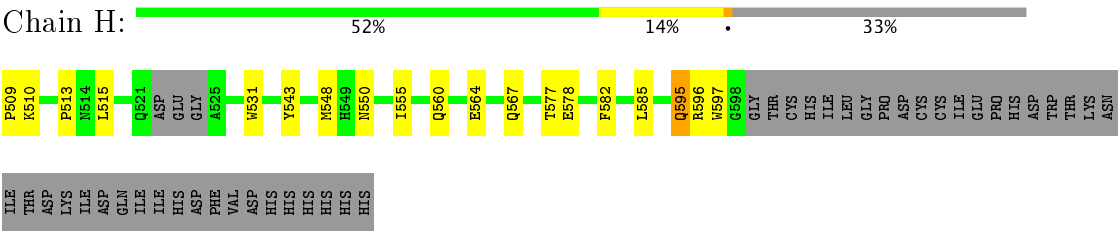


- Molecule 3: Envelope glycoprotein

Chain F: 52% 14% 33% .



- Molecule 3: Envelope glycoprotein



4 Experimental information

Property	Value	Source
Reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	Depositor
Number of particles used	50223	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	PHASE FLIPPING AND AMPLITUDE CORRECTION	Depositor
Microscope	FEI TITAN KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{\AA}^2$)	50	Depositor
Minimum defocus (nm)	1700	Depositor
Maximum defocus (nm)	2700	Depositor
Magnification	38270	Depositor
Image detector	GATAN K2 SUMMIT (4k x 4k)	Depositor

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: 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 > 2$	RMSZ	# $ Z > 2$
1	A	0.49	6/7843 (0.1%)	0.67	29/10748 (0.3%)
2	C	0.42	0/1223	0.59	1/1664 (0.1%)
2	E	0.44	0/1223	0.59	1/1664 (0.1%)
2	G	0.43	0/1223	0.59	1/1664 (0.1%)
3	D	0.42	0/702	0.62	0/952
3	F	0.42	0/702	0.62	0/952
3	H	0.42	0/702	0.62	0/952
All	All	0.47	6/13618 (0.0%)	0.64	32/18596 (0.2%)

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	C	0	1
2	E	0	1
2	G	0	1
All	All	0	5

All (6) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	429	VAL	C-N	-5.49	1.23	1.34
1	A	166	PRO	N-CD	5.22	1.55	1.47
1	A	469	LEU	C-N	-5.20	1.22	1.34
1	A	424	PRO	N-CD	5.08	1.54	1.47
1	A	249	PRO	N-CD	5.07	1.54	1.47
1	A	254	PRO	N-CD	5.01	1.54	1.47

All (32) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	602	SER	CB-CA-C	-9.99	91.12	110.10
1	A	755	PRO	CA-N-CD	-8.22	99.99	111.50
1	A	996	MET	C-N-CA	-6.63	105.12	121.70
1	A	887	PRO	N-CA-CB	6.58	111.20	103.30
1	A	836	PRO	N-CA-CB	6.46	111.06	103.30
1	A	256	PRO	C-N-CD	6.21	141.45	128.40
1	A	258	ALA	C-N-CD	6.12	141.26	128.40
1	A	252	GLN	C-N-CD	6.08	141.17	128.40
1	A	253	PRO	C-N-CD	6.07	141.15	128.40
1	A	254	PRO	C-N-CD	6.06	141.13	128.40
1	A	400	GLY	C-N-CD	6.06	141.13	128.40
1	A	383	ALA	C-N-CD	6.04	141.09	128.40
1	A	690	ILE	C-N-CD	6.04	141.09	128.40
1	A	421	GLN	C-N-CD	6.02	141.03	128.40
1	A	1009	PRO	N-CA-CB	6.00	110.50	103.30
1	A	377	PRO	N-CA-CB	5.95	110.44	103.30
1	A	827	PRO	N-CA-CB	5.95	110.44	103.30
1	A	1000	PRO	N-CA-CB	5.93	110.41	103.30
1	A	733	PRO	N-CA-CB	5.92	110.41	103.30
1	A	867	PRO	N-CA-CB	5.92	110.41	103.30
1	A	1007	PRO	N-CA-CB	5.92	110.41	103.30
1	A	888	PRO	N-CA-CB	5.90	110.38	103.30
1	A	350	PRO	N-CA-CB	5.88	110.35	103.30
1	A	165	ALA	C-N-CD	5.62	140.20	128.40
1	A	429	VAL	O-C-N	-5.32	111.00	121.10
2	C	42	VAL	CA-CB-CG2	5.25	118.78	110.90
1	A	1053	ASP	CB-CG-OD2	5.25	123.03	118.30
1	A	1096	ASP	CB-CG-OD2	5.23	123.01	118.30
2	G	42	VAL	CA-CB-CG2	5.23	118.74	110.90
2	E	42	VAL	CA-CB-CG2	5.20	118.70	110.90
1	A	248	GLY	C-N-CD	5.15	139.21	128.40
1	A	423	TYR	C-N-CD	5.10	139.11	128.40

There are no chirality outliers.

All (5) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	602	SER	Peptide
1	A	603	PHE	Peptide
2	C	69	ASN	Sidechain
2	E	69	ASN	Sidechain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
2	G	69	ASN	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	7695	0	6476	1133	0
2	C	1194	0	1153	17	0
2	E	1194	0	1153	69	0
2	G	1194	0	1153	17	0
3	D	687	0	679	19	0
3	F	687	0	679	20	0
3	H	687	0	679	18	0
4	A	294	0	265	42	0
4	D	28	0	25	1	0
4	F	28	0	25	2	0
4	H	28	0	25	1	0
5	A	22	0	19	5	0
6	A	11	0	10	0	0
All	All	13749	0	12341	1252	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 48.

All (1252) 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:724:LEU:HD22	1:A:1170:HIS:CE1	1.29	1.62
1:A:656:LEU:CD1	1:A:685:ILE:HG13	1.17	1.60
1:A:656:LEU:HD11	1:A:685:ILE:CG1	1.31	1.58
1:A:598:ASN:HD21	4:A:1310:NAG:C1	0.99	1.57
1:A:693:LEU:HD11	1:A:763:PHE:CE2	1.41	1.53
1:A:185:ASN:HD21	4:A:1319:NAG:C1	1.24	1.51
1:A:403:PHE:CE2	1:A:566:PRO:HB3	1.46	1.50
1:A:503:PHE:CZ	2:E:86:TRP:HE3	1.30	1.49
1:A:684:LEU:CD2	1:A:728:LEU:HD13	1.45	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:70:ASN:HD21	4:A:1317:NAG:C1	1.26	1.46
1:A:656:LEU:CD1	1:A:685:ILE:CG1	1.85	1.45
1:A:659:ALA:HA	1:A:662:LEU:CD2	1.46	1.44
1:A:693:LEU:CD1	1:A:763:PHE:HE2	1.30	1.44
1:A:503:PHE:CZ	2:E:86:TRP:CE3	2.05	1.44
1:A:631:MET:CE	1:A:1204:LEU:O	1.64	1.42
1:A:693:LEU:HD11	1:A:763:PHE:CD2	1.52	1.42
1:A:1133:MET:HG2	1:A:1239:HIS:NE2	1.12	1.41
1:A:1138:MET:HE1	1:A:1232:MET:CA	1.44	1.41
1:A:1133:MET:HG2	1:A:1239:HIS:CD2	1.52	1.40
1:A:693:LEU:CD1	1:A:763:PHE:CE2	2.03	1.39
1:A:688:GLU:CG	1:A:724:LEU:HD23	1.52	1.39
1:A:1178:SER:CB	1:A:1186:ARG:HH11	1.35	1.38
1:A:503:PHE:CE2	2:E:86:TRP:HE3	1.41	1.36
1:A:684:LEU:HD21	1:A:728:LEU:CD1	1.51	1.36
1:A:1142:MET:HA	1:A:1147:ILE:CB	1.57	1.35
1:A:684:LEU:HD21	1:A:728:LEU:CD2	1.55	1.34
1:A:1133:MET:HE2	1:A:1239:HIS:ND1	1.07	1.34
1:A:856:VAL:CB	1:A:1091:TYR:HE2	1.41	1.32
1:A:523:LEU:HD11	1:A:1016:HIS:CB	1.58	1.31
1:A:401:PRO:HD3	1:A:571:TYR:CE1	1.65	1.30
1:A:686:VAL:CG1	1:A:690:ILE:HD11	1.61	1.30
1:A:724:LEU:CD2	1:A:1170:HIS:CE1	2.13	1.30
1:A:1084:PHE:CE1	1:A:1085:TYR:CD1	2.20	1.29
1:A:723:GLN:OE1	1:A:1169:SER:HB2	1.20	1.28
1:A:751:LEU:O	1:A:755:PRO:HG3	1.29	1.28
1:A:1138:MET:CE	1:A:1232:MET:HB2	1.63	1.27
1:A:452:ASN:HD21	4:A:1323:NAG:C1	1.45	1.27
1:A:923:ILE:O	1:A:1042:HIS:CB	1.83	1.27
1:A:1133:MET:CE	1:A:1239:HIS:ND1	1.96	1.26
1:A:401:PRO:HG3	1:A:571:TYR:CD1	1.68	1.26
1:A:688:GLU:O	1:A:691:PRO:HD2	1.19	1.26
1:A:648:LEU:HB3	1:A:763:PHE:CE1	1.70	1.26
1:A:686:VAL:HG12	1:A:690:ILE:CD1	1.62	1.26
1:A:503:PHE:CE2	2:E:86:TRP:CE3	2.18	1.25
1:A:1070:GLY:O	1:A:1071:ILE:CG1	1.83	1.24
1:A:162:ASP:OD2	1:A:244:SER:CB	1.86	1.24
1:A:688:GLU:O	1:A:691:PRO:CD	1.86	1.23
1:A:1138:MET:CE	1:A:1232:MET:CB	2.15	1.23
1:A:688:GLU:HG2	1:A:1170:HIS:NE2	1.54	1.22
1:A:1055:LEU:HD23	1:A:1085:TYR:CZ	1.73	1.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:882:TYR:CB	1:A:1082:SER:HB3	1.70	1.22
1:A:1142:MET:HE3	1:A:1148:SER:O	1.11	1.22
1:A:162:ASP:OD2	1:A:244:SER:HB3	1.04	1.22
1:A:659:ALA:CA	1:A:662:LEU:HD23	1.66	1.22
1:A:915:ASN:CB	1:A:920:VAL:HA	1.68	1.21
1:A:478:ASN:HD21	4:A:1312:NAG:C1	1.52	1.21
1:A:856:VAL:O	1:A:1048:SER:CB	1.89	1.21
1:A:406:GLU:OE1	1:A:583:TRP:HZ3	1.17	1.20
1:A:684:LEU:HD21	1:A:728:LEU:CG	1.70	1.20
1:A:926:ALA:O	1:A:1040:THR:HG22	1.34	1.20
1:A:724:LEU:HD22	1:A:1170:HIS:NE2	1.54	1.20
1:A:684:LEU:CD2	1:A:728:LEU:CD1	2.09	1.19
1:A:1133:MET:CG	1:A:1239:HIS:CD2	2.26	1.19
1:A:503:PHE:CB	2:E:83:THR:HG21	1.48	1.19
1:A:1127:MET:CE	1:A:1168:CYS:HB3	1.74	1.18
1:A:1142:MET:CA	1:A:1147:ILE:CB	2.22	1.18
1:A:1108:ALA:O	1:A:1112:VAL:HG23	1.43	1.18
1:A:1084:PHE:CE1	1:A:1085:TYR:HD1	1.59	1.17
1:A:250:LYS:HB3	1:A:251:PRO:CD	1.70	1.17
1:A:732:ALA:CB	1:A:749:GLY:HA3	1.75	1.17
1:A:1009:PRO:HA	1:A:1016:HIS:O	1.44	1.17
1:A:421:GLN:OE1	2:E:144:THR:HG22	1.45	1.17
1:A:656:LEU:HD13	1:A:685:ILE:HG13	1.26	1.16
1:A:923:ILE:O	1:A:1042:HIS:HB2	1.33	1.16
1:A:1133:MET:CG	1:A:1239:HIS:NE2	2.08	1.16
1:A:924:PHE:H	1:A:925:ASN:CB	1.56	1.16
1:A:730:GLU:CG	1:A:1108:ALA:HB1	1.76	1.15
1:A:1138:MET:CE	1:A:1232:MET:HA	1.76	1.15
1:A:755:PRO:HD2	1:A:756:ALA:H	1.06	1.15
1:A:507:ALA:HB1	1:A:529:LEU:HG	1.28	1.15
1:A:1071:ILE:O	1:A:1072:ASN:O	1.65	1.15
1:A:1142:MET:CE	1:A:1148:SER:O	1.93	1.15
1:A:656:LEU:HD13	1:A:685:ILE:CG1	1.74	1.15
1:A:1156:ASN:CB	1:A:1228:MET:HE3	1.74	1.15
1:A:1178:SER:CB	1:A:1186:ARG:CD	2.25	1.15
1:A:724:LEU:CD1	1:A:1166:GLU:HG2	1.77	1.15
1:A:676:SER:HB3	1:A:1225:TYR:OH	1.41	1.15
1:A:1133:MET:HG2	1:A:1239:HIS:CE1	1.81	1.15
1:A:767:ALA:O	1:A:771:ASP:CB	1.94	1.15
1:A:1178:SER:CB	1:A:1186:ARG:HD2	1.76	1.14
1:A:959:VAL:CB	1:A:984:PRO:N	2.10	1.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:E:76:ALA:HB1	2:E:81:SER:CB	1.78	1.13
1:A:1071:ILE:CG2	1:A:1072:ASN:H	1.62	1.13
1:A:1127:MET:HE3	1:A:1127:MET:HA	1.18	1.13
1:A:688:GLU:HG3	1:A:724:LEU:HD23	1.29	1.13
1:A:631:MET:SD	1:A:1208:GLY:CA	2.36	1.13
1:A:856:VAL:O	1:A:1048:SER:HB3	1.44	1.13
1:A:684:LEU:CD2	1:A:728:LEU:HD22	1.79	1.12
1:A:1140:GLY:O	1:A:1144:LEU:CB	1.97	1.12
1:A:656:LEU:HD11	1:A:685:ILE:CB	1.77	1.12
1:A:879:ILE:CA	1:A:1043:THR:HG21	1.79	1.12
1:A:1070:GLY:O	1:A:1071:ILE:HG13	0.95	1.12
1:A:135:ASN:HD21	4:A:1322:NAG:C1	1.50	1.12
1:A:1062:ALA:HB1	1:A:1078:VAL:HB	1.18	1.12
1:A:684:LEU:HD23	1:A:728:LEU:HD13	1.14	1.12
1:A:1133:MET:HE2	1:A:1239:HIS:CG	1.84	1.12
1:A:752:SER:O	1:A:755:PRO:HD2	1.46	1.12
1:A:656:LEU:CB	1:A:682:LEU:HD11	1.79	1.11
1:A:1098:THR:HG22	1:A:1154:LEU:HD21	1.22	1.11
1:A:406:GLU:OE1	1:A:583:TRP:CZ3	2.03	1.11
1:A:915:ASN:CA	1:A:920:VAL:HA	1.81	1.10
1:A:1046:GLN:CB	1:A:1050:ASP:OD2	1.98	1.10
1:A:635:ILE:HG23	1:A:690:ILE:HD13	1.14	1.10
1:A:403:PHE:CD2	1:A:566:PRO:HB3	1.87	1.10
1:A:752:SER:O	1:A:755:PRO:CD	1.99	1.10
1:A:1178:SER:CB	1:A:1186:ARG:NH1	2.15	1.09
1:A:401:PRO:HG3	1:A:571:TYR:HD1	1.01	1.09
1:A:856:VAL:CB	1:A:1091:TYR:CE2	2.34	1.09
3:F:510:LYS:NZ	4:F:701:NAG:O6	1.86	1.09
1:A:680:LEU:HB3	1:A:1229:TYR:OH	1.51	1.09
1:A:504:PHE:HE2	2:E:79:VAL:CG1	1.63	1.09
1:A:720:LEU:HD22	1:A:1170:HIS:HA	1.28	1.09
3:D:510:LYS:NZ	4:D:701:NAG:O6	1.86	1.08
1:A:724:LEU:HD11	1:A:1166:GLU:CG	1.81	1.08
4:A:1307:NAG:H62	5:A:1308:BMA:C2	1.82	1.08
1:A:929:LEU:CB	1:A:1038:PHE:CD2	2.37	1.08
1:A:1138:MET:HE2	1:A:1232:MET:CB	1.78	1.07
1:A:1142:MET:O	1:A:1147:ILE:CB	2.02	1.07
1:A:228:ASP:CB	1:A:246:VAL:HG13	1.84	1.07
1:A:659:ALA:HA	1:A:662:LEU:HD23	1.13	1.07
1:A:365:SER:HA	1:A:662:LEU:HB3	1.30	1.07
3:H:510:LYS:NZ	4:H:701:NAG:O6	1.86	1.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1071:ILE:HG22	1:A:1072:ASN:N	1.61	1.07
1:A:730:GLU:HG3	1:A:1108:ALA:CB	1.82	1.07
1:A:687:ILE:O	1:A:691:PRO:HD3	1.53	1.06
1:A:693:LEU:HD12	1:A:763:PHE:HE2	1.18	1.06
1:A:1062:ALA:HB1	1:A:1078:VAL:CB	1.86	1.06
1:A:403:PHE:HE2	1:A:566:PRO:CB	1.67	1.06
1:A:915:ASN:HA	1:A:920:VAL:HA	1.38	1.06
1:A:503:PHE:HE1	2:E:83:THR:O	1.36	1.06
1:A:1156:ASN:HB3	1:A:1228:MET:HE3	1.09	1.06
1:A:688:GLU:HG2	1:A:724:LEU:HD23	1.32	1.05
1:A:879:ILE:N	1:A:1043:THR:HG21	1.71	1.05
1:A:688:GLU:C	1:A:691:PRO:CD	2.23	1.05
1:A:196:LYS:HG3	1:A:204:THR:OG1	1.54	1.05
1:A:685:ILE:O	1:A:689:VAL:HG23	1.56	1.05
1:A:635:ILE:CG2	1:A:690:ILE:CD1	2.35	1.04
1:A:1127:MET:HE1	1:A:1168:CYS:HB3	1.33	1.04
1:A:1133:MET:CE	1:A:1239:HIS:CG	2.39	1.04
1:A:635:ILE:HG23	1:A:690:ILE:CD1	1.86	1.04
1:A:503:PHE:CD2	2:E:83:THR:HG22	1.60	1.04
1:A:1138:MET:HE2	1:A:1232:MET:HB2	1.34	1.04
1:A:717:GLY:O	1:A:721:ASP:HB2	1.58	1.04
1:A:686:VAL:CG1	1:A:690:ILE:CD1	2.27	1.04
1:A:1065:VAL:O	1:A:1068:THR:HG22	1.56	1.04
1:A:1194:MET:HE2	1:A:1194:MET:HA	1.37	1.04
1:A:403:PHE:CE2	1:A:566:PRO:CB	2.40	1.03
1:A:1046:GLN:HB3	1:A:1050:ASP:OD2	1.59	1.03
1:A:1156:ASN:HB3	1:A:1228:MET:CE	1.87	1.03
1:A:688:GLU:HG2	1:A:724:LEU:CD2	1.87	1.03
1:A:656:LEU:HB2	1:A:682:LEU:CD1	1.88	1.03
1:A:732:ALA:CB	1:A:749:GLY:CA	2.35	1.03
1:A:751:LEU:O	1:A:755:PRO:CG	2.05	1.03
1:A:607:ARG:HG2	1:A:611:ASP:CG	1.79	1.03
1:A:659:ALA:C	1:A:662:LEU:HD23	1.77	1.03
1:A:732:ALA:HB3	1:A:749:GLY:HA3	1.40	1.03
1:A:635:ILE:HG21	1:A:690:ILE:HD11	1.40	1.02
1:A:684:LEU:CD2	1:A:728:LEU:CD2	2.33	1.02
1:A:250:LYS:HB3	1:A:251:PRO:HD3	1.38	1.02
1:A:523:LEU:CD1	1:A:1016:HIS:CB	2.36	1.02
4:A:1307:NAG:C6	5:A:1308:BMA:H2	1.90	1.02
1:A:879:ILE:CA	1:A:1043:THR:CG2	2.38	1.02
1:A:922:GLN:O	1:A:1042:HIS:ND1	1.93	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:924:PHE:N	1:A:925:ASN:CB	2.22	1.02
2:E:76:ALA:CB	2:E:81:SER:HB2	1.89	1.02
1:A:631:MET:SD	1:A:1208:GLY:N	2.32	1.02
1:A:1084:PHE:CE1	1:A:1085:TYR:CE1	2.47	1.01
1:A:879:ILE:C	1:A:1043:THR:CG2	2.28	1.01
1:A:659:ALA:CA	1:A:662:LEU:CD2	2.28	1.01
1:A:723:GLN:OE1	1:A:1169:SER:CB	2.08	1.01
1:A:401:PRO:HB2	1:A:569:ASN:ND2	1.75	1.01
1:A:923:ILE:C	1:A:1042:HIS:HB3	1.80	1.01
1:A:688:GLU:CG	1:A:724:LEU:CD2	2.38	1.01
1:A:879:ILE:C	1:A:1043:THR:HG22	1.81	1.00
3:D:595:GLN:HA	3:D:595:GLN:HE21	1.25	1.00
1:A:337:ARG:HA	1:A:718:GLU:HG3	1.41	1.00
1:A:1138:MET:HE1	1:A:1232:MET:CB	1.84	1.00
1:A:504:PHE:CE2	2:E:79:VAL:HG11	1.97	1.00
1:A:648:LEU:HD12	1:A:763:PHE:CD1	1.95	1.00
1:A:401:PRO:CD	1:A:571:TYR:CE1	2.44	0.99
1:A:929:LEU:CB	1:A:1038:PHE:CE2	2.45	0.99
1:A:688:GLU:C	1:A:691:PRO:HD3	1.82	0.99
1:A:503:PHE:HB2	2:E:83:THR:HG21	1.44	0.99
3:H:595:GLN:HE21	3:H:595:GLN:HA	1.25	0.99
1:A:1062:ALA:HA	1:A:1078:VAL:HG21	1.44	0.99
1:A:1045:LEU:HA	1:A:1051:PHE:HZ	1.27	0.99
1:A:676:SER:OG	1:A:1226:PHE:CE2	2.15	0.98
1:A:504:PHE:HE2	2:E:79:VAL:HG11	1.24	0.98
1:A:724:LEU:HD22	1:A:1170:HIS:HE1	1.21	0.98
1:A:1209:GLY:HA3	1:A:1230:LEU:HD13	1.43	0.98
3:F:595:GLN:HE21	3:F:595:GLN:HA	1.25	0.98
4:A:1307:NAG:H62	5:A:1308:BMA:H2	0.99	0.98
1:A:402:PHE:O	1:A:403:PHE:HB3	1.63	0.98
1:A:631:MET:HE1	1:A:1204:LEU:C	1.81	0.98
1:A:686:VAL:HG12	1:A:690:ILE:HD12	1.42	0.98
1:A:135:ASN:HD22	4:A:1322:NAG:C1	1.66	0.97
1:A:684:LEU:CD1	1:A:1166:GLU:HG3	1.93	0.97
2:E:76:ALA:HB1	2:E:81:SER:HB2	0.99	0.97
1:A:635:ILE:CG2	1:A:690:ILE:HD13	1.94	0.97
1:A:1071:ILE:HG22	1:A:1072:ASN:H	0.83	0.97
1:A:656:LEU:HB2	1:A:682:LEU:HD11	0.98	0.97
1:A:720:LEU:O	1:A:723:GLN:NE2	1.98	0.97
1:A:1062:ALA:CB	1:A:1078:VAL:HB	1.95	0.97
1:A:459:ASN:HD21	4:A:1324:NAG:C1	1.66	0.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:607:ARG:O	1:A:611:ASP:N	1.98	0.96
1:A:752:SER:C	1:A:755:PRO:CD	2.34	0.96
1:A:680:LEU:CB	1:A:1229:TYR:OH	2.13	0.96
1:A:724:LEU:CD2	1:A:1170:HIS:NE2	2.22	0.96
1:A:677:TYR:O	1:A:681:PRO:CB	2.12	0.96
1:A:1045:LEU:HA	1:A:1051:PHE:CZ	1.99	0.96
1:A:1062:ALA:CA	1:A:1078:VAL:HG21	1.95	0.96
1:A:1085:TYR:O	1:A:1087:PHE:N	1.97	0.96
1:A:1055:LEU:HD23	1:A:1085:TYR:OH	1.66	0.96
1:A:557:ASN:HD22	4:A:1306:NAG:C1	1.79	0.96
1:A:591:VAL:CG1	1:A:603:PHE:CE1	2.49	0.96
1:A:506:TYR:CE1	2:E:80:PRO:HG3	2.00	0.96
1:A:732:ALA:HB1	1:A:749:GLY:HA3	1.45	0.95
1:A:503:PHE:HB3	2:E:83:THR:HG21	1.48	0.95
1:A:503:PHE:CE1	2:E:83:THR:O	2.18	0.95
1:A:1127:MET:CE	1:A:1127:MET:HA	1.94	0.95
1:A:607:ARG:HG2	1:A:611:ASP:OD2	1.64	0.95
1:A:686:VAL:O	1:A:690:ILE:HG13	1.65	0.95
1:A:557:ASN:HD21	4:A:1306:NAG:C1	1.72	0.95
1:A:685:ILE:O	1:A:689:VAL:CG2	2.15	0.95
1:A:718:GLU:O	1:A:722:GLN:HB2	1.67	0.95
1:A:401:PRO:CG	1:A:571:TYR:CD1	2.49	0.95
1:A:659:ALA:O	1:A:662:LEU:HD23	1.66	0.95
1:A:365:SER:HA	1:A:662:LEU:CB	1.95	0.95
1:A:653:LYS:O	1:A:682:LEU:HD21	1.65	0.95
1:A:692:PHE:CE1	1:A:713:GLU:HA	2.02	0.95
1:A:241:GLN:NE2	1:A:518:ARG:HH22	1.64	0.94
1:A:656:LEU:CD1	1:A:685:ILE:HG12	1.93	0.94
1:A:943:ILE:CB	1:A:1010:LYS:O	2.15	0.94
1:A:635:ILE:CG2	1:A:690:ILE:HD11	1.98	0.94
1:A:879:ILE:O	1:A:1043:THR:CG2	2.14	0.94
1:A:1142:MET:C	1:A:1147:ILE:CB	2.35	0.94
1:A:1110:PHE:O	1:A:1114:MET:HG2	1.67	0.94
1:A:398:HIS:HB3	1:A:399:PHE:CE1	2.02	0.94
1:A:591:VAL:HG11	1:A:603:PHE:CE1	2.02	0.93
1:A:1046:GLN:CG	1:A:1050:ASP:OD2	2.16	0.93
1:A:688:GLU:HG2	1:A:1170:HIS:CE1	2.03	0.93
1:A:421:GLN:OE1	2:E:144:THR:CG2	2.15	0.93
1:A:503:PHE:HZ	2:E:86:TRP:CE3	1.72	0.93
1:A:1135:LEU:HD21	1:A:1161:CYS:SG	2.08	0.93
1:A:729:GLY:O	1:A:733:PRO:CB	2.17	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1229:TYR:O	1:A:1233:VAL:HG23	1.69	0.93
1:A:1084:PHE:CZ	1:A:1085:TYR:HE1	1.87	0.92
1:A:507:ALA:HB1	1:A:529:LEU:CG	1.99	0.92
1:A:923:ILE:O	1:A:1042:HIS:HB3	1.63	0.92
1:A:241:GLN:HE22	1:A:518:ARG:NH2	1.68	0.92
2:E:76:ALA:CB	2:E:81:SER:CB	2.46	0.92
1:A:631:MET:HE1	1:A:1204:LEU:O	0.75	0.92
1:A:1084:PHE:CZ	1:A:1085:TYR:CE1	2.57	0.92
1:A:1130:THR:HG21	1:A:1168:CYS:SG	2.08	0.92
1:A:371:VAL:O	1:A:373:VAL:N	2.01	0.92
1:A:494:VAL:HA	1:A:497:HIS:CE1	2.06	0.91
1:A:1046:GLN:HG2	1:A:1050:ASP:OD2	1.71	0.91
1:A:228:ASP:HB3	1:A:246:VAL:HG13	1.48	0.91
1:A:879:ILE:O	1:A:1043:THR:HG22	1.71	0.91
1:A:1171:ILE:HG23	1:A:1191:LEU:CD2	2.00	0.91
1:A:1059:ARG:HH11	1:A:1059:ARG:HG3	1.36	0.91
1:A:885:ALA:O	1:A:1079:PHE:O	1.89	0.91
1:A:724:LEU:O	1:A:728:LEU:HG	1.70	0.91
1:A:680:LEU:CG	1:A:1229:TYR:OH	2.16	0.91
1:A:724:LEU:CD2	1:A:1170:HIS:HE1	1.74	0.90
1:A:678:ILE:HG12	1:A:748:LEU:HD21	1.51	0.90
1:A:396:ASP:O	1:A:400:GLY:N	2.04	0.90
1:A:656:LEU:HB3	1:A:751:LEU:HD21	1.54	0.90
1:A:1141:VAL:O	1:A:1147:ILE:CB	2.19	0.90
1:A:684:LEU:HD21	1:A:728:LEU:HD22	1.40	0.90
1:A:924:PHE:CB	1:A:1041:TYR:O	2.20	0.89
1:A:620:ASP:O	1:A:623:THR:OG1	1.88	0.89
1:A:732:ALA:HB3	1:A:749:GLY:CA	1.98	0.89
1:A:631:MET:HG3	1:A:1208:GLY:HA3	1.54	0.89
1:A:915:ASN:CB	1:A:920:VAL:CA	2.51	0.89
1:A:1082:SER:HB2	1:A:1084:PHE:CD1	2.08	0.89
1:A:591:VAL:HG12	1:A:603:PHE:CZ	2.08	0.89
1:A:401:PRO:HB2	1:A:569:ASN:HD21	1.30	0.89
1:A:504:PHE:CE2	2:E:79:VAL:CG1	2.53	0.89
1:A:641:HIS:O	1:A:642:MET:O	1.89	0.89
1:A:1098:THR:HG22	1:A:1154:LEU:CD2	2.03	0.88
1:A:680:LEU:HG	1:A:1229:TYR:OH	1.70	0.88
1:A:506:TYR:OH	2:E:80:PRO:HA	1.73	0.88
1:A:755:PRO:HD2	1:A:756:ALA:N	1.84	0.88
1:A:1082:SER:O	1:A:1084:PHE:N	2.05	0.88
1:A:228:ASP:HA	1:A:246:VAL:CG1	2.03	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:659:ALA:HA	1:A:662:LEU:HD22	1.54	0.88
1:A:632:PHE:HZ	1:A:650:VAL:HG23	1.39	0.88
1:A:1178:SER:CB	1:A:1186:ARG:HD3	2.04	0.88
1:A:631:MET:SD	1:A:1208:GLY:HA2	2.14	0.88
1:A:752:SER:C	1:A:755:PRO:HD3	1.93	0.88
1:A:1009:PRO:CA	1:A:1016:HIS:O	2.22	0.87
1:A:504:PHE:HZ	2:E:141:VAL:HG21	1.39	0.87
1:A:544:TRP:HD1	1:A:545:LEU:N	1.72	0.87
1:A:1127:MET:CE	1:A:1168:CYS:CB	2.52	0.87
1:A:929:LEU:CB	1:A:1038:PHE:HD2	1.81	0.87
1:A:507:ALA:CB	1:A:529:LEU:HG	2.05	0.87
1:A:879:ILE:HA	1:A:1043:THR:CG2	2.04	0.87
1:A:459:ASN:HD22	4:A:1324:NAG:C1	1.87	0.87
1:A:755:PRO:CD	1:A:756:ALA:H	1.88	0.87
1:A:1085:TYR:O	1:A:1088:TYR:N	2.06	0.86
1:A:523:LEU:HD11	1:A:1016:HIS:CA	2.04	0.86
1:A:692:PHE:HZ	1:A:713:GLU:CB	1.86	0.86
1:A:684:LEU:HD11	1:A:728:LEU:CD2	2.05	0.86
1:A:692:PHE:CZ	1:A:713:GLU:HA	2.10	0.86
1:A:650:VAL:O	1:A:654:VAL:HG23	1.74	0.86
1:A:384:PRO:HA	1:A:389:ARG:HG3	1.58	0.85
1:A:1070:GLY:C	1:A:1071:ILE:HG13	1.97	0.85
1:A:401:PRO:HD3	1:A:571:TYR:HE1	1.08	0.85
3:D:595:GLN:HA	3:D:595:GLN:NE2	1.92	0.85
1:A:1138:MET:HE1	1:A:1232:MET:HA	0.86	0.85
3:F:595:GLN:NE2	3:F:595:GLN:HA	1.92	0.85
1:A:688:GLU:CG	1:A:1170:HIS:NE2	2.39	0.85
1:A:441:HIS:CE1	1:A:495:LEU:HD23	2.12	0.85
1:A:894:GLU:CB	1:A:995:PHE:CB	2.55	0.84
1:A:1138:MET:CE	1:A:1232:MET:CA	2.31	0.84
1:A:402:PHE:O	1:A:403:PHE:CB	2.25	0.84
1:A:1062:ALA:CB	1:A:1078:VAL:CB	2.52	0.84
1:A:720:LEU:HD22	1:A:1170:HIS:CA	2.06	0.84
1:A:656:LEU:CD1	1:A:682:LEU:HD12	2.07	0.84
1:A:1133:MET:CG	1:A:1239:HIS:CE1	2.53	0.84
1:A:1055:LEU:HD22	1:A:1055:LEU:O	1.78	0.84
1:A:196:LYS:CG	1:A:204:THR:OG1	2.25	0.84
1:A:1084:PHE:HE1	1:A:1085:TYR:CD1	1.88	0.84
2:C:39:HIS:HB2	2:C:42:VAL:HG22	1.60	0.84
1:A:167:SER:O	1:A:168:SER:OG	1.96	0.83
1:A:228:ASP:CB	1:A:246:VAL:CG1	2.56	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:684:LEU:HG	1:A:1166:GLU:HG3	1.61	0.83
1:A:1167:PHE:CE2	1:A:1237:ALA:HA	2.13	0.83
1:A:693:LEU:CD1	1:A:763:PHE:CD2	2.48	0.83
1:A:1082:SER:HB2	1:A:1084:PHE:CE1	2.14	0.83
1:A:1142:MET:HE2	1:A:1153:SER:OG	1.79	0.83
2:G:39:HIS:HB2	2:G:42:VAL:HG22	1.60	0.83
3:H:595:GLN:NE2	3:H:595:GLN:HA	1.92	0.83
1:A:1068:THR:HG23	1:A:1069:MET:H	1.44	0.83
1:A:732:ALA:HB1	1:A:749:GLY:CA	2.02	0.83
1:A:1133:MET:SD	1:A:1239:HIS:CE1	2.71	0.82
1:A:656:LEU:CB	1:A:682:LEU:CD1	2.53	0.82
1:A:1209:GLY:O	1:A:1213:LEU:N	2.11	0.82
1:A:926:ALA:O	1:A:1040:THR:CG2	2.23	0.82
1:A:241:GLN:HE22	1:A:518:ARG:HH22	0.85	0.82
1:A:631:MET:CG	1:A:1208:GLY:HA3	2.10	0.82
1:A:856:VAL:O	1:A:1048:SER:HB2	1.75	0.82
1:A:591:VAL:CG1	1:A:603:PHE:CZ	2.63	0.82
1:A:1210:ILE:HG13	1:A:1214:ALA:HB3	1.61	0.82
1:A:686:VAL:HG13	1:A:690:ILE:HD11	1.62	0.82
1:A:684:LEU:CG	1:A:1166:GLU:HG3	2.10	0.81
2:E:39:HIS:HB2	2:E:42:VAL:HG22	1.60	0.81
1:A:503:PHE:HE2	2:E:86:TRP:CE3	1.97	0.81
1:A:228:ASP:HA	1:A:246:VAL:HG11	1.61	0.81
1:A:656:LEU:HD13	1:A:685:ILE:HG12	1.56	0.81
1:A:396:ASP:HA	1:A:400:GLY:CA	2.11	0.81
1:A:1133:MET:HE2	1:A:1239:HIS:CE1	2.10	0.81
1:A:1202:ILE:HG21	1:A:1237:ALA:HB1	1.62	0.81
1:A:720:LEU:O	1:A:723:GLN:HG3	1.79	0.81
1:A:676:SER:OG	1:A:1226:PHE:HE2	1.60	0.81
1:A:1135:LEU:O	1:A:1139:PHE:HD2	1.64	0.81
1:A:693:LEU:HD11	1:A:763:PHE:HD2	1.36	0.81
1:A:421:GLN:HG2	2:E:143:GLY:HA2	1.60	0.81
1:A:1140:GLY:O	1:A:1144:LEU:N	2.13	0.80
1:A:396:ASP:HA	1:A:400:GLY:HA2	1.63	0.80
1:A:1108:ALA:O	1:A:1112:VAL:CG2	2.28	0.80
1:A:1229:TYR:CE1	1:A:1233:VAL:HG21	2.15	0.80
1:A:678:ILE:CG1	1:A:748:LEU:HD21	2.11	0.80
1:A:1142:MET:CE	1:A:1153:SER:OG	2.30	0.80
1:A:648:LEU:CB	1:A:763:PHE:CE1	2.60	0.80
1:A:985:GLU:CB	1:A:986:GLY:HA2	2.11	0.80
1:A:1171:ILE:CG2	1:A:1191:LEU:CD2	2.59	0.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1229:TYR:CD1	1:A:1233:VAL:HG21	2.15	0.80
1:A:628:TYR:OH	1:A:653:LYS:HD2	1.82	0.80
1:A:1209:GLY:HA3	1:A:1230:LEU:CD1	2.10	0.80
1:A:503:PHE:CE2	2:E:86:TRP:CZ3	2.69	0.80
1:A:608:SER:O	1:A:612:GLU:HB2	1.82	0.80
4:A:1306:NAG:H62	4:A:1307:NAG:C8	2.12	0.79
1:A:503:PHE:CZ	2:E:86:TRP:HB2	2.17	0.79
1:A:633:LEU:O	1:A:636:SER:OG	1.99	0.79
1:A:648:LEU:HB3	1:A:763:PHE:CZ	2.17	0.79
1:A:687:ILE:O	1:A:691:PRO:CD	2.28	0.79
1:A:503:PHE:CZ	2:E:83:THR:HA	2.15	0.79
1:A:504:PHE:HE2	2:E:79:VAL:HG12	1.46	0.79
1:A:404:ARG:HD2	1:A:567:VAL:CG2	2.12	0.79
1:A:648:LEU:HD11	1:A:763:PHE:HA	1.64	0.79
1:A:959:VAL:C	1:A:984:PRO:N	2.36	0.79
1:A:381:TRP:HD1	1:A:382:SER:N	1.80	0.79
1:A:584:GLU:OE2	1:A:606:GLU:HB2	1.82	0.79
1:A:580:ALA:O	1:A:584:GLU:HG3	1.83	0.79
1:A:631:MET:CE	1:A:1204:LEU:C	2.44	0.79
1:A:401:PRO:CB	1:A:569:ASN:HD21	1.96	0.79
1:A:472:LEU:HD21	1:A:1017:ALA:CB	2.13	0.78
1:A:730:GLU:HG2	1:A:1112:VAL:CG2	2.13	0.78
1:A:1171:ILE:HG23	1:A:1191:LEU:HD23	1.63	0.78
1:A:185:ASN:HD22	4:A:1319:NAG:C1	1.93	0.78
1:A:720:LEU:CD2	1:A:1170:HIS:HA	2.11	0.78
4:A:1312:NAG:H62	4:A:1313:NAG:HN2	1.47	0.78
1:A:659:ALA:O	1:A:662:LEU:CD2	2.31	0.78
1:A:337:ARG:HA	1:A:718:GLU:CG	2.12	0.78
1:A:635:ILE:HG21	1:A:690:ILE:CD1	2.09	0.78
1:A:1110:PHE:HE2	1:A:1124:ALA:HB1	1.48	0.78
1:A:409:ILE:HG21	1:A:872:MET:CB	2.14	0.78
1:A:1184:VAL:O	1:A:1184:VAL:HG12	1.84	0.78
1:A:228:ASP:CA	1:A:246:VAL:HG13	2.14	0.78
1:A:856:VAL:C	1:A:1048:SER:CB	2.53	0.78
1:A:632:PHE:CZ	1:A:650:VAL:HG23	2.19	0.78
1:A:1051:PHE:HB3	1:A:1084:PHE:HD2	1.49	0.77
1:A:1127:MET:HE2	1:A:1168:CYS:CB	2.13	0.77
1:A:401:PRO:HB2	1:A:569:ASN:CG	2.03	0.77
1:A:1021:SER:O	1:A:1022:ALA:CB	2.31	0.77
1:A:629:ALA:O	1:A:633:LEU:HG	1.84	0.77
1:A:1201:GLY:O	1:A:1205:THR:HG23	1.84	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:752:SER:HA	1:A:755:PRO:CG	2.15	0.77
1:A:1156:ASN:CG	1:A:1228:MET:HE3	2.06	0.76
1:A:544:TRP:CD1	1:A:545:LEU:N	2.53	0.76
1:A:879:ILE:C	1:A:1043:THR:HG21	2.00	0.76
1:A:688:GLU:OE1	1:A:721:ASP:OD1	2.02	0.76
1:A:381:TRP:O	1:A:740:PHE:CB	2.33	0.76
1:A:959:VAL:C	1:A:984:PRO:CB	2.54	0.76
1:A:1135:LEU:O	1:A:1139:PHE:CD2	2.38	0.76
1:A:1138:MET:HE2	1:A:1232:MET:HB3	1.67	0.76
1:A:684:LEU:CD1	1:A:728:LEU:HD22	2.15	0.76
1:A:1194:MET:CE	1:A:1194:MET:HA	2.15	0.76
1:A:631:MET:CG	1:A:1208:GLY:CA	2.64	0.76
1:A:494:VAL:HA	1:A:497:HIS:ND1	2.01	0.76
1:A:630:ILE:O	1:A:634:TYR:CD2	2.39	0.76
1:A:503:PHE:HZ	2:E:86:TRP:HB2	1.48	0.76
1:A:503:PHE:CD2	2:E:83:THR:CG2	2.28	0.75
1:A:1127:MET:CE	1:A:1130:THR:HG21	2.16	0.75
1:A:1127:MET:HE2	1:A:1168:CYS:HB3	1.67	0.75
1:A:506:TYR:OH	2:E:80:PRO:CA	2.34	0.75
1:A:607:ARG:CG	1:A:611:ASP:CG	2.53	0.75
1:A:1138:MET:SD	1:A:1232:MET:HB2	2.27	0.75
1:A:656:LEU:HD11	1:A:685:ILE:HG13	0.78	0.75
1:A:1199:PHE:O	1:A:1203:THR:CG2	2.34	0.75
1:A:726:ARG:HB3	1:A:1112:VAL:CG1	2.16	0.74
1:A:396:ASP:CA	1:A:400:GLY:HA2	2.17	0.74
1:A:441:HIS:NE2	1:A:496:ASP:OD1	2.21	0.74
1:A:250:LYS:HB3	1:A:251:PRO:HD2	1.68	0.74
1:A:407:GLN:HB3	1:A:604:THR:HG21	1.67	0.74
1:A:515:TYR:CE1	1:A:526:THR:CG2	2.70	0.74
1:A:684:LEU:HD11	1:A:728:LEU:HD21	1.68	0.74
1:A:1045:LEU:CA	1:A:1051:PHE:CZ	2.70	0.74
1:A:873:VAL:CB	1:A:1045:LEU:HD13	2.17	0.74
1:A:1084:PHE:CD1	1:A:1085:TYR:HD1	2.06	0.74
1:A:730:GLU:HG3	1:A:1108:ALA:HB1	0.87	0.74
1:A:185:ASN:ND2	4:A:1319:NAG:O5	2.20	0.74
1:A:1045:LEU:CA	1:A:1051:PHE:HZ	2.00	0.74
1:A:881:GLN:CB	1:A:1041:TYR:HB2	2.17	0.74
1:A:1055:LEU:HD23	1:A:1085:TYR:CE2	2.23	0.74
1:A:726:ARG:HB3	1:A:1112:VAL:HG11	1.68	0.74
4:A:1306:NAG:H82	4:A:1306:NAG:C1	2.18	0.74
2:E:70:LEU:HD13	2:E:179:GLY:HA2	1.70	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:503:PHE:CE2	2:E:83:THR:HG22	2.22	0.74
1:A:1127:MET:HE1	1:A:1168:CYS:CB	2.14	0.73
1:A:1127:MET:O	1:A:1130:THR:OG1	2.06	0.73
1:A:656:LEU:HD11	1:A:685:ILE:CG2	2.18	0.73
1:A:720:LEU:HB3	1:A:1170:HIS:HD2	1.52	0.73
1:A:621:VAL:O	1:A:625:VAL:HG23	1.87	0.73
1:A:368:LEU:O	1:A:665:LEU:CB	2.36	0.73
1:A:1065:VAL:O	1:A:1068:THR:CG2	2.36	0.73
1:A:676:SER:CB	1:A:1225:TYR:OH	2.30	0.73
1:A:1062:ALA:O	1:A:1066:THR:OG1	2.06	0.73
1:A:1203:THR:HG23	1:A:1204:LEU:N	2.03	0.73
1:A:228:ASP:CA	1:A:246:VAL:CG1	2.67	0.73
1:A:401:PRO:CB	1:A:569:ASN:OD1	2.36	0.73
1:A:1156:ASN:CB	1:A:1228:MET:CE	2.57	0.73
1:A:504:PHE:CZ	2:E:141:VAL:HG21	2.23	0.73
1:A:1210:ILE:CD1	1:A:1214:ALA:HB2	2.19	0.73
1:A:984:PRO:O	1:A:989:ARG:N	2.21	0.73
1:A:1068:THR:HG23	1:A:1069:MET:N	2.03	0.73
1:A:1122:TRP:O	1:A:1126:ILE:HG13	1.89	0.72
1:A:653:LYS:HE3	1:A:653:LYS:C	2.09	0.72
1:A:915:ASN:HA	1:A:920:VAL:CA	2.17	0.72
2:G:70:LEU:HD13	2:G:179:GLY:HA2	1.70	0.72
1:A:108:PHE:HE1	1:A:194:PHE:HE1	1.37	0.72
1:A:259:PRO:O	1:A:260:TRP:CB	2.37	0.72
1:A:684:LEU:HD23	1:A:728:LEU:CD1	1.96	0.72
2:C:70:LEU:HD13	2:C:179:GLY:HA2	1.70	0.72
1:A:1138:MET:O	1:A:1142:MET:HG2	1.89	0.72
4:A:1306:NAG:C6	4:A:1307:NAG:C8	2.68	0.72
1:A:676:SER:HB3	1:A:1225:TYR:CZ	2.23	0.72
1:A:544:TRP:CZ2	1:A:1041:TYR:HE1	2.07	0.72
1:A:1142:MET:HE3	1:A:1148:SER:C	2.09	0.72
1:A:684:LEU:HD11	1:A:1166:GLU:HG3	1.71	0.72
1:A:1062:ALA:HB2	1:A:1078:VAL:HG11	1.70	0.71
1:A:386:SER:O	1:A:390:LEU:HD12	1.90	0.71
1:A:1133:MET:HE3	1:A:1239:HIS:CG	2.26	0.71
1:A:1131:ILE:O	1:A:1135:LEU:HG	1.90	0.71
1:A:1211:VAL:O	1:A:1215:PHE:CB	2.38	0.71
1:A:632:PHE:CZ	1:A:650:VAL:CG2	2.72	0.71
1:A:1124:ALA:O	1:A:1128:CYS:HB2	1.91	0.71
1:A:693:LEU:HD12	1:A:763:PHE:CE2	2.01	0.71
1:A:929:LEU:CB	1:A:1038:PHE:HE2	1.98	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1161:CYS:O	1:A:1165:VAL:HG23	1.91	0.71
1:A:631:MET:SD	1:A:1208:GLY:HA3	2.30	0.71
1:A:1046:GLN:O	1:A:1047:THR:OG1	2.06	0.71
1:A:1228:MET:HG3	1:A:1229:TYR:N	2.04	0.71
1:A:1062:ALA:HB1	1:A:1078:VAL:CG2	2.20	0.71
1:A:1133:MET:HG3	1:A:1239:HIS:CD2	2.23	0.71
1:A:692:PHE:HE1	1:A:713:GLU:HA	1.53	0.71
1:A:754:MET:N	1:A:755:PRO:HD3	2.05	0.71
1:A:689:VAL:HG21	1:A:759:THR:HG21	1.72	0.71
1:A:403:PHE:HE2	1:A:566:PRO:HB3	0.94	0.70
1:A:1098:THR:CG2	1:A:1154:LEU:HD21	2.13	0.70
1:A:720:LEU:C	1:A:723:GLN:HE21	1.93	0.70
1:A:1051:PHE:HB3	1:A:1084:PHE:CD2	2.25	0.70
1:A:404:ARG:HD2	1:A:567:VAL:HG23	1.72	0.70
1:A:591:VAL:HB	1:A:603:PHE:HE1	1.55	0.70
1:A:856:VAL:C	1:A:1048:SER:HB3	2.11	0.70
1:A:503:PHE:HZ	2:E:86:TRP:CD2	2.10	0.70
4:A:1312:NAG:H62	4:A:1313:NAG:N2	2.06	0.70
1:A:684:LEU:CD1	1:A:728:LEU:CD2	2.70	0.70
1:A:824:SER:CB	1:A:1188:GLU:OE1	2.40	0.70
1:A:506:TYR:HB3	1:A:528:LEU:HD13	1.74	0.70
1:A:1138:MET:CE	1:A:1138:MET:HA	2.22	0.70
1:A:228:ASP:HA	1:A:246:VAL:HG13	1.74	0.70
1:A:406:GLU:OE2	1:A:567:VAL:CG1	2.40	0.70
1:A:688:GLU:C	1:A:691:PRO:HD2	1.97	0.70
1:A:591:VAL:HB	1:A:603:PHE:CE1	2.27	0.69
1:A:684:LEU:HD21	1:A:728:LEU:HD11	1.69	0.69
1:A:722:GLN:HE21	1:A:1116:LEU:HD11	1.57	0.69
2:E:76:ALA:CB	2:E:81:SER:HB3	2.22	0.69
1:A:506:TYR:CZ	2:E:80:PRO:HG3	2.26	0.69
2:E:39:HIS:HD2	2:E:42:VAL:HG21	1.58	0.69
1:A:730:GLU:HG2	1:A:1112:VAL:HG21	1.73	0.69
1:A:1106:LEU:CD2	1:A:1131:ILE:HD13	2.22	0.69
1:A:704:ILE:HA	1:A:708:ALA:HB3	1.75	0.69
1:A:1130:THR:CG2	1:A:1168:CYS:SG	2.79	0.69
1:A:751:LEU:O	1:A:755:PRO:CD	2.41	0.69
2:C:39:HIS:HD2	2:C:42:VAL:HG21	1.58	0.69
1:A:1203:THR:CG2	1:A:1204:LEU:N	2.55	0.69
1:A:607:ARG:HG2	1:A:611:ASP:OD1	1.93	0.69
1:A:755:PRO:CD	1:A:756:ALA:N	2.51	0.69
1:A:692:PHE:CZ	1:A:713:GLU:CA	2.76	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:752:SER:O	1:A:755:PRO:CG	2.41	0.68
4:A:1305:NAG:O7	4:A:1305:NAG:O3	2.11	0.68
4:A:1313:NAG:H4	5:A:1314:BMA:O2	1.93	0.68
1:A:924:PHE:CA	1:A:925:ASN:CB	2.71	0.68
1:A:1047:THR:HG22	1:A:1048:SER:N	2.09	0.68
1:A:1160:SER:HB2	1:A:1232:MET:SD	2.34	0.68
1:A:662:LEU:HG	1:A:663:ILE:N	2.07	0.68
1:A:108:PHE:CE1	1:A:194:PHE:HE1	2.12	0.68
1:A:1009:PRO:O	1:A:1010:LYS:O	2.11	0.68
1:A:1133:MET:HE3	1:A:1239:HIS:HB2	1.74	0.68
1:A:1133:MET:CG	1:A:1239:HIS:CG	2.77	0.68
4:A:1306:NAG:C6	4:A:1307:NAG:H82	2.24	0.68
1:A:630:ILE:HG22	1:A:634:TYR:HE2	1.59	0.68
1:A:704:ILE:HA	1:A:708:ALA:CB	2.24	0.68
1:A:1110:PHE:O	1:A:1114:MET:CG	2.39	0.68
1:A:1133:MET:HG2	1:A:1239:HIS:HE2	1.51	0.68
1:A:648:LEU:CD1	1:A:763:PHE:CD1	2.74	0.68
1:A:1110:PHE:CE2	1:A:1124:ALA:HB1	2.29	0.67
1:A:158:ASN:CG	4:A:1303:NAG:C1	2.60	0.67
4:A:1312:NAG:C6	4:A:1313:NAG:C1	2.73	0.67
1:A:544:TRP:CZ2	1:A:1041:TYR:CE1	2.82	0.67
1:A:762:LEU:O	1:A:766:LEU:HG	1.95	0.67
1:A:878:SER:C	1:A:1043:THR:HG21	2.13	0.67
1:A:653:LYS:HB2	1:A:682:LEU:HD23	1.75	0.67
2:G:39:HIS:HD2	2:G:42:VAL:HG21	1.57	0.67
3:H:509:PRO:HB2	3:H:510:LYS:HG3	1.77	0.67
1:A:1133:MET:HG2	1:A:1239:HIS:CG	2.24	0.67
1:A:656:LEU:CG	1:A:685:ILE:HG13	2.18	0.67
1:A:1062:ALA:HB2	1:A:1078:VAL:CG1	2.24	0.67
1:A:1059:ARG:NH1	1:A:1059:ARG:HG3	2.09	0.67
1:A:635:ILE:HG13	1:A:1204:LEU:HD13	1.77	0.67
1:A:751:LEU:C	1:A:751:LEU:HD23	2.15	0.67
1:A:401:PRO:HG3	1:A:571:TYR:CE1	2.29	0.67
1:A:656:LEU:HD13	1:A:682:LEU:HD12	1.75	0.67
1:A:1080:PRO:HG2	1:A:1085:TYR:CE2	2.30	0.67
1:A:401:PRO:HB2	1:A:569:ASN:OD1	1.94	0.67
1:A:950:VAL:O	1:A:951:LYS:CB	2.43	0.67
1:A:627:SER:OG	1:A:1212:VAL:CG2	2.43	0.67
1:A:399:PHE:HE2	1:A:1022:ALA:HA	1.60	0.66
1:A:703:PHE:C	1:A:708:ALA:HB2	2.15	0.66
1:A:1022:ALA:O	1:A:1035:ALA:N	2.27	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:407:GLN:HB3	1:A:604:THR:CG2	2.24	0.66
1:A:688:GLU:CB	1:A:724:LEU:HD23	2.25	0.66
3:D:509:PRO:HB2	3:D:510:LYS:HG3	1.77	0.66
1:A:503:PHE:CE1	2:E:83:THR:C	2.51	0.66
1:A:691:PRO:HD2	1:A:692:PHE:H	1.60	0.66
1:A:1135:LEU:HB3	1:A:1139:PHE:HE2	1.59	0.66
1:A:630:ILE:O	1:A:634:TYR:HD2	1.79	0.66
1:A:690:ILE:O	1:A:694:VAL:HG23	1.96	0.66
3:F:595:GLN:HE21	3:F:595:GLN:CA	2.05	0.66
3:H:595:GLN:HE21	3:H:595:GLN:CA	2.05	0.66
3:D:595:GLN:CA	3:D:595:GLN:HE21	2.05	0.66
1:A:506:TYR:OH	2:E:80:PRO:CB	2.44	0.66
1:A:250:LYS:CB	1:A:251:PRO:CD	2.60	0.66
1:A:611:ASP:O	1:A:615:ARG:HB2	1.96	0.66
1:A:1229:TYR:O	1:A:1233:VAL:CG2	2.43	0.65
1:A:685:ILE:HD13	1:A:685:ILE:N	2.09	0.65
3:F:509:PRO:HB2	3:F:510:LYS:HG3	1.77	0.65
1:A:1114:MET:CE	1:A:1124:ALA:HB2	2.27	0.65
1:A:1167:PHE:CE2	1:A:1237:ALA:CA	2.79	0.65
1:A:472:LEU:HD22	1:A:538:GLY:HA3	1.78	0.65
1:A:692:PHE:HZ	1:A:713:GLU:CA	2.08	0.65
1:A:723:GLN:NE2	1:A:724:LEU:HB2	2.12	0.65
1:A:1082:SER:O	1:A:1084:PHE:HD1	1.79	0.65
1:A:724:LEU:HD11	1:A:1166:GLU:HG2	0.84	0.65
4:A:1306:NAG:O6	4:A:1307:NAG:C8	2.45	0.65
1:A:656:LEU:HD12	1:A:682:LEU:HD12	1.77	0.65
1:A:879:ILE:O	1:A:1043:THR:HG21	1.92	0.65
1:A:591:VAL:CB	1:A:603:PHE:CE1	2.80	0.65
1:A:757:VAL:O	1:A:760:PHE:HB2	1.96	0.65
1:A:640:GLY:O	1:A:642:MET:N	2.30	0.65
1:A:423:TYR:CE1	1:A:424:PRO:HB3	2.32	0.64
1:A:1207:PHE:O	1:A:1210:ILE:HG22	1.97	0.64
1:A:1210:ILE:HG23	1:A:1211:VAL:N	2.11	0.64
1:A:1084:PHE:HZ	1:A:1085:TYR:HE1	1.38	0.64
1:A:627:SER:OG	1:A:1212:VAL:HG22	1.96	0.64
1:A:363:ALA:O	1:A:367:GLY:N	2.27	0.64
1:A:474:PRO:O	1:A:476:ASN:N	2.30	0.64
1:A:674:VAL:O	1:A:678:ILE:CD1	2.46	0.64
1:A:692:PHE:CZ	1:A:713:GLU:CB	2.76	0.64
1:A:1046:GLN:HB3	1:A:1050:ASP:CG	2.18	0.64
1:A:384:PRO:O	1:A:385:SER:OG	2.14	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:407:GLN:O	1:A:604:THR:OG1	2.16	0.64
1:A:1137:ASN:HB3	1:A:1235:LEU:HD13	1.80	0.64
1:A:1145:TRP:O	1:A:1147:ILE:N	2.31	0.64
1:A:686:VAL:O	1:A:690:ILE:N	2.30	0.64
1:A:653:LYS:HA	1:A:682:LEU:HG	1.80	0.64
2:E:76:ALA:HB2	2:E:81:SER:HB3	1.80	0.64
1:A:723:GLN:HG2	1:A:1173:ARG:HG3	1.79	0.64
1:A:401:PRO:CG	1:A:571:TYR:CE1	2.79	0.64
1:A:618:ASP:O	1:A:621:VAL:HG23	1.96	0.64
1:A:1080:PRO:HG2	1:A:1085:TYR:HE2	1.62	0.63
1:A:395:PHE:CD2	1:A:1081:TYR:HD2	2.15	0.63
1:A:664:VAL:CG1	1:A:669:ALA:HB3	2.28	0.63
1:A:674:VAL:O	1:A:678:ILE:HG13	1.97	0.63
1:A:403:PHE:HE2	1:A:566:PRO:CG	2.11	0.63
1:A:1062:ALA:CB	1:A:1078:VAL:HG11	2.29	0.63
1:A:401:PRO:CD	1:A:571:TYR:HE1	1.96	0.63
1:A:630:ILE:CG2	1:A:634:TYR:HE2	2.12	0.63
1:A:1229:TYR:CD1	1:A:1233:VAL:CG2	2.82	0.63
1:A:1062:ALA:CB	1:A:1078:VAL:CG1	2.77	0.62
1:A:1045:LEU:N	1:A:1051:PHE:CZ	2.67	0.62
1:A:252:GLN:O	1:A:254:PRO:HD3	1.99	0.62
1:A:1177:VAL:O	1:A:1186:ARG:NH1	2.32	0.62
1:A:166:PRO:O	1:A:167:SER:OG	2.17	0.62
1:A:228:ASP:HB2	1:A:246:VAL:CG1	2.29	0.62
1:A:250:LYS:CB	1:A:251:PRO:HD3	2.24	0.62
1:A:630:ILE:HA	1:A:633:LEU:HD12	1.81	0.62
1:A:684:LEU:HD22	1:A:728:LEU:HD22	1.75	0.62
1:A:754:MET:N	1:A:755:PRO:CD	2.62	0.62
1:A:1085:TYR:O	1:A:1086:VAL:C	2.37	0.62
1:A:607:ARG:O	1:A:611:ASP:HB2	1.99	0.62
1:A:885:ALA:O	1:A:1079:PHE:HB2	1.99	0.62
1:A:680:LEU:O	1:A:683:THR:HG22	2.00	0.62
1:A:1210:ILE:HG13	1:A:1214:ALA:CB	2.30	0.62
1:A:381:TRP:CD1	1:A:382:SER:N	2.64	0.62
1:A:591:VAL:CB	1:A:603:PHE:HE1	2.12	0.62
1:A:678:ILE:HG12	1:A:748:LEU:CD2	2.27	0.62
1:A:724:LEU:CD1	1:A:1166:GLU:HA	2.29	0.61
1:A:686:VAL:HG11	1:A:690:ILE:HD11	1.73	0.61
1:A:1171:ILE:HA	1:A:1194:MET:HG2	1.81	0.61
1:A:1199:PHE:O	1:A:1203:THR:HG22	2.00	0.61
1:A:684:LEU:HD21	1:A:728:LEU:HD21	1.72	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:631:MET:CE	1:A:1208:GLY:N	2.63	0.61
1:A:431:PHE:CE2	1:A:510:HIS:HD2	2.18	0.61
1:A:875:TYR:O	1:A:876:PHE:O	2.18	0.61
1:A:659:ALA:HA	1:A:662:LEU:HD21	1.71	0.61
1:A:1092:LEU:HD13	1:A:1093:THR:N	2.15	0.61
1:A:622:PHE:O	1:A:626:ILE:HG13	2.01	0.61
1:A:752:SER:CA	1:A:755:PRO:CG	2.78	0.61
1:A:752:SER:HA	1:A:755:PRO:HG3	1.82	0.61
4:A:1306:NAG:H62	4:A:1307:NAG:H82	1.80	0.61
1:A:1186:ARG:HG3	1:A:1187:ALA:N	2.15	0.60
1:A:1194:MET:O	1:A:1198:VAL:HG23	2.00	0.60
1:A:1213:LEU:C	1:A:1227:ARG:HH21	2.03	0.60
1:A:881:GLN:CB	1:A:1041:TYR:CB	2.79	0.60
1:A:337:ARG:CA	1:A:718:GLU:HG3	2.23	0.60
1:A:724:LEU:HD13	1:A:1166:GLU:HA	1.82	0.60
1:A:723:GLN:O	1:A:727:VAL:HG23	2.01	0.60
1:A:1140:GLY:O	1:A:1144:LEU:CA	2.49	0.60
1:A:663:ILE:HD13	1:A:750:ALA:HB1	1.84	0.60
4:A:1306:NAG:O6	4:A:1307:NAG:H82	2.02	0.60
1:A:732:ALA:HB3	1:A:749:GLY:HA2	1.81	0.60
1:A:607:ARG:CG	1:A:611:ASP:OD1	2.50	0.60
1:A:656:LEU:HA	1:A:751:LEU:HG	1.84	0.60
1:A:1046:GLN:HB3	1:A:1050:ASP:CB	2.32	0.60
1:A:1115:VAL:HG12	1:A:1115:VAL:O	2.02	0.60
1:A:163:VAL:HA	1:A:242:ASP:O	2.01	0.60
1:A:386:SER:O	1:A:390:LEU:HB2	2.01	0.60
1:A:764:ALA:O	1:A:768:VAL:HG23	2.02	0.60
1:A:635:ILE:CG1	1:A:1204:LEU:HD13	2.31	0.59
1:A:648:LEU:HD12	1:A:763:PHE:HD1	1.65	0.59
1:A:691:PRO:O	1:A:695:LEU:HG	2.02	0.59
1:A:1091:TYR:HA	1:A:1094:ILE:CG1	2.31	0.59
1:A:1110:PHE:HD2	1:A:1128:CYS:HG	1.50	0.59
1:A:373:VAL:O	1:A:375:THR:N	2.35	0.59
1:A:924:PHE:CB	1:A:925:ASN:CA	2.80	0.59
1:A:1046:GLN:CG	1:A:1050:ASP:CG	2.70	0.59
1:A:1021:SER:O	1:A:1022:ALA:HB3	2.01	0.59
1:A:1191:LEU:O	1:A:1195:GLY:N	2.36	0.59
1:A:1055:LEU:HD13	1:A:1056:LYS:N	2.17	0.59
1:A:406:GLU:OE2	1:A:567:VAL:HG13	2.01	0.59
1:A:1209:GLY:O	1:A:1212:VAL:N	2.35	0.59
1:A:1106:LEU:HD23	1:A:1131:ILE:HD13	1.84	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1112:VAL:HA	1:A:1115:VAL:HG23	1.85	0.59
1:A:1149:LEU:HA	1:A:1153:SER:CB	2.33	0.59
1:A:122:ASN:ND2	1:A:217[B]:MET:CE	2.66	0.59
1:A:395:PHE:CD2	1:A:1081:TYR:CD2	2.91	0.59
1:A:1229:TYR:HD1	1:A:1233:VAL:CG2	2.16	0.59
1:A:1239:HIS:CE1	1:A:1243:PHE:CB	2.86	0.59
1:A:1070:GLY:O	1:A:1071:ILE:CB	2.50	0.58
1:A:1082:SER:CB	1:A:1084:PHE:CE1	2.86	0.58
1:A:382:SER:HB3	1:A:1086:VAL:O	2.03	0.58
1:A:985:GLU:HA	1:A:989:ARG:H	1.68	0.58
2:E:39:HIS:CD2	2:E:42:VAL:HG21	2.38	0.58
1:A:476:ASN:OD1	1:A:478:ASN:HB2	2.02	0.58
1:A:504:PHE:CE2	2:E:79:VAL:HG12	2.29	0.58
1:A:942:TRP:O	1:A:943:ILE:CB	2.50	0.58
1:A:1080:PRO:HB2	1:A:1085:TYR:CZ	2.37	0.58
1:A:1142:MET:HE1	1:A:1153:SER:OG	2.04	0.58
1:A:649:LEU:O	1:A:652:SER:N	2.35	0.58
1:A:656:LEU:CD1	1:A:682:LEU:CD1	2.80	0.58
1:A:1055:LEU:C	1:A:1055:LEU:HD22	2.24	0.58
1:A:1142:MET:CE	1:A:1148:SER:C	2.71	0.58
1:A:515:TYR:CE1	1:A:526:THR:HG23	2.38	0.58
1:A:686:VAL:O	1:A:690:ILE:CG1	2.44	0.58
1:A:752:SER:HA	1:A:755:PRO:HG2	1.84	0.58
1:A:1133:MET:CE	1:A:1239:HIS:CE1	2.74	0.58
1:A:598:ASN:HD21	4:A:1310:NAG:C2	2.04	0.58
1:A:637:LEU:HA	1:A:641:HIS:HA	1.84	0.58
1:A:879:ILE:HA	1:A:1043:THR:HG23	1.85	0.58
1:A:1084:PHE:HE1	1:A:1085:TYR:CE1	2.08	0.58
1:A:1156:ASN:HD22	1:A:1228:MET:HE2	1.67	0.58
1:A:724:LEU:HD21	1:A:1170:HIS:HE1	1.66	0.58
1:A:1210:ILE:HD12	1:A:1214:ALA:HB2	1.84	0.58
1:A:1133:MET:HE3	1:A:1239:HIS:CB	2.34	0.58
1:A:720:LEU:O	1:A:723:GLN:CG	2.51	0.58
1:A:402:PHE:O	1:A:403:PHE:CD1	2.57	0.57
1:A:664:VAL:HG13	1:A:669:ALA:HB3	1.85	0.57
1:A:557:ASN:ND2	4:A:1306:NAG:O5	2.38	0.57
1:A:503:PHE:CZ	2:E:86:TRP:CD2	2.81	0.57
1:A:1046:GLN:HG2	1:A:1050:ASP:CG	2.25	0.57
1:A:1085:TYR:C	1:A:1087:PHE:N	2.57	0.57
1:A:1203:THR:CG2	1:A:1204:LEU:H	2.18	0.57
1:A:1202:ILE:HG21	1:A:1237:ALA:CB	2.34	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:252:GLN:H	1:A:253:PRO:HD3	1.69	0.57
1:A:656:LEU:HB3	1:A:751:LEU:CD2	2.31	0.57
1:A:421:GLN:CG	2:E:143:GLY:HA2	2.32	0.57
1:A:1068:THR:CG2	1:A:1069:MET:H	2.17	0.57
4:A:1313:NAG:O3	5:A:1314:BMA:H2	2.03	0.57
1:A:635:ILE:HG22	1:A:649:LEU:HD11	1.86	0.57
1:A:686:VAL:HG12	1:A:690:ILE:CG1	2.34	0.57
1:A:631:MET:SD	1:A:1207:PHE:C	2.83	0.57
1:A:1106:LEU:HD22	1:A:1131:ILE:HD13	1.87	0.57
1:A:396:ASP:HA	1:A:400:GLY:N	2.20	0.57
1:A:656:LEU:HD12	1:A:682:LEU:CD1	2.34	0.57
1:A:723:GLN:CD	1:A:1169:SER:HB2	2.17	0.57
1:A:257:PRO:O	1:A:258:ALA:HB2	2.05	0.57
1:A:241:GLN:NE2	1:A:518:ARG:NH2	2.38	0.57
1:A:857:ASP:HA	1:A:1048:SER:HB3	1.87	0.57
1:A:1062:ALA:CB	1:A:1078:VAL:HG21	2.35	0.57
1:A:655:SER:HB2	1:A:758:HIS:CD2	2.40	0.57
1:A:479:CYS:O	1:A:537:PHE:HB3	2.05	0.56
1:A:757:VAL:HA	1:A:760:PHE:HD2	1.70	0.56
2:C:39:HIS:CD2	2:C:42:VAL:HG21	2.38	0.56
1:A:1055:LEU:CD2	1:A:1085:TYR:OH	2.47	0.56
1:A:252:GLN:C	1:A:254:PRO:HD3	2.25	0.56
1:A:751:LEU:C	1:A:755:PRO:HG3	2.20	0.56
1:A:1059:ARG:HH11	1:A:1059:ARG:CG	2.14	0.56
1:A:1156:ASN:ND2	1:A:1228:MET:CE	2.68	0.56
1:A:1055:LEU:C	1:A:1055:LEU:HD13	2.25	0.56
1:A:676:SER:CB	1:A:1225:TYR:CZ	2.87	0.56
1:A:688:GLU:O	1:A:691:PRO:CG	2.51	0.56
1:A:396:ASP:C	1:A:400:GLY:H	2.06	0.56
1:A:403:PHE:CD2	1:A:566:PRO:CB	2.77	0.56
1:A:752:SER:O	1:A:755:PRO:HG2	2.03	0.56
1:A:916:ASN:N	1:A:919:LEU:O	2.23	0.56
2:G:39:HIS:CD2	2:G:42:VAL:HG21	2.38	0.56
1:A:648:LEU:CD1	1:A:763:PHE:HA	2.33	0.56
1:A:1062:ALA:CB	1:A:1078:VAL:CG2	2.82	0.56
1:A:845:VAL:CB	1:A:1136:VAL:HG12	2.36	0.56
1:A:393:GLU:O	1:A:396:ASP:HB2	2.06	0.56
1:A:724:LEU:HD21	1:A:1166:GLU:CD	2.26	0.56
4:A:1306:NAG:C6	4:A:1307:NAG:H83	2.36	0.56
1:A:724:LEU:HD23	1:A:1170:HIS:NE2	2.17	0.56
1:A:491:SER:OG	1:A:494:VAL:HG23	2.06	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:656:LEU:HD11	1:A:685:ILE:HG21	1.87	0.56
1:A:441:HIS:CE1	1:A:496:ASP:OD1	2.59	0.56
1:A:1048:SER:HA	1:A:1088:TYR:CE2	2.41	0.56
1:A:1117:LEU:CD2	1:A:1123:SER:HB3	2.36	0.56
1:A:1229:TYR:HE1	1:A:1233:VAL:HG21	1.70	0.56
4:A:1306:NAG:H62	4:A:1307:NAG:N2	2.21	0.56
1:A:650:VAL:O	1:A:654:VAL:CG2	2.52	0.56
1:A:409:ILE:CG2	1:A:872:MET:CB	2.83	0.55
2:G:69:ASN:HD21	2:G:105:ALA:HB2	1.72	0.55
1:A:1159:MET:HE1	1:A:1163:ILE:HD11	1.87	0.55
1:A:92:GLN:HE22	1:A:526:THR:HB	1.71	0.55
1:A:1200:SER:O	1:A:1203:THR:HG22	2.07	0.55
1:A:627:SER:O	1:A:631:MET:HG2	2.07	0.55
1:A:924:PHE:CB	1:A:925:ASN:HA	2.36	0.55
1:A:1184:VAL:O	1:A:1184:VAL:CG1	2.53	0.55
2:G:112:GLU:OE2	2:G:172:ARG:HG3	2.07	0.55
1:A:1048:SER:O	1:A:1052:ILE:HD12	2.06	0.55
1:A:504:PHE:HZ	2:E:141:VAL:CG2	2.16	0.55
1:A:674:VAL:O	1:A:678:ILE:HD12	2.06	0.55
1:A:252:GLN:N	1:A:253:PRO:HD3	2.22	0.55
1:A:753:VAL:O	1:A:757:VAL:HG13	2.07	0.55
1:A:754:MET:O	1:A:757:VAL:HG22	2.07	0.55
1:A:1167:PHE:HE2	1:A:1237:ALA:CA	2.19	0.55
1:A:1228:MET:HG3	1:A:1229:TYR:H	1.71	0.55
1:A:191:GLU:OE2	1:A:195:ASN:ND2	2.39	0.55
1:A:407:GLN:O	1:A:604:THR:N	2.40	0.55
1:A:398:HIS:HB3	1:A:399:PHE:CD1	2.42	0.55
2:E:112:GLU:OE2	2:E:172:ARG:HG3	2.07	0.55
1:A:185:ASN:ND2	1:A:188:ASN:ND2	2.55	0.54
1:A:431:PHE:CZ	1:A:510:HIS:HD2	2.25	0.54
1:A:444:LEU:HD23	1:A:492:HIS:CG	2.42	0.54
1:A:732:ALA:HB1	1:A:749:GLY:N	2.22	0.54
1:A:1167:PHE:CE2	1:A:1237:ALA:HB2	2.43	0.54
1:A:164:GLU:OE1	1:A:241:GLN:O	2.26	0.54
1:A:762:LEU:O	1:A:766:LEU:CG	2.55	0.54
2:C:69:ASN:HD21	2:C:105:ALA:HB2	1.71	0.54
1:A:1100:PHE:O	1:A:1104:VAL:HG23	2.07	0.54
2:E:163:ASP:OD1	3:F:543:TYR:OH	2.24	0.54
1:A:1135:LEU:CD2	1:A:1161:CYS:SG	2.92	0.54
1:A:1224:PHE:HA	1:A:1227:ARG:HB2	1.88	0.54
1:A:723:GLN:HE22	1:A:724:LEU:HB2	1.70	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1091:TYR:HA	1:A:1094:ILE:HG13	1.90	0.54
1:A:1109:ILE:O	1:A:1113:THR:HG23	2.07	0.54
1:A:1114:MET:HE1	1:A:1124:ALA:HB2	1.90	0.54
1:A:684:LEU:CD2	1:A:728:LEU:HD11	2.27	0.54
1:A:664:VAL:CG2	1:A:747:PHE:CB	2.85	0.54
2:C:112:GLU:OE2	2:C:172:ARG:HG3	2.07	0.54
1:A:653:LYS:HG3	1:A:654:VAL:N	2.23	0.54
1:A:704:ILE:CA	1:A:708:ALA:HB3	2.38	0.54
1:A:631:MET:CG	1:A:1208:GLY:HA2	2.37	0.54
1:A:1133:MET:CE	1:A:1239:HIS:CB	2.86	0.54
1:A:398:HIS:CB	1:A:399:PHE:CE1	2.86	0.54
1:A:649:LEU:HD22	1:A:686:VAL:HG13	1.90	0.53
1:A:674:VAL:O	1:A:678:ILE:CG1	2.56	0.53
1:A:733:PRO:C	1:A:735:MET:H	2.10	0.53
1:A:523:LEU:CD1	1:A:1016:HIS:N	2.70	0.53
1:A:882:TYR:CB	1:A:1082:SER:CB	2.64	0.53
1:A:347:VAL:C	1:A:349:ASN:H	2.12	0.53
1:A:758:HIS:ND1	1:A:762:LEU:HD12	2.23	0.53
2:E:69:ASN:HD21	2:E:105:ALA:HB2	1.72	0.53
1:A:1167:PHE:CE2	1:A:1237:ALA:CB	2.91	0.53
1:A:824:SER:CB	1:A:1188:GLU:CD	2.77	0.53
1:A:1137:ASN:HB3	1:A:1235:LEU:CD1	2.37	0.53
1:A:503:PHE:HZ	2:E:86:TRP:CB	2.19	0.53
1:A:632:PHE:CZ	1:A:650:VAL:HG22	2.44	0.53
1:A:915:ASN:CB	1:A:919:LEU:C	2.77	0.53
1:A:406:GLU:OE2	1:A:567:VAL:HG11	2.08	0.53
1:A:396:ASP:CB	1:A:400:GLY:HA2	2.38	0.53
2:C:39:HIS:CD2	2:C:42:VAL:CG2	2.92	0.53
1:A:544:TRP:HZ2	1:A:1041:TYR:CE1	2.26	0.53
1:A:1167:PHE:HE2	1:A:1237:ALA:HB2	1.74	0.53
1:A:861:ASP:CB	1:A:1219:GLN:CB	2.87	0.53
4:A:1312:NAG:H61	4:A:1313:NAG:C1	2.38	0.53
1:A:474:PRO:C	1:A:476:ASN:N	2.62	0.53
1:A:923:ILE:C	1:A:1042:HIS:CB	2.50	0.53
1:A:478:ASN:CG	4:A:1312:NAG:C1	2.78	0.53
1:A:635:ILE:HG22	1:A:649:LEU:CD1	2.39	0.53
1:A:1234:LEU:O	1:A:1238:THR:HG23	2.09	0.53
1:A:344:SER:O	1:A:348:ARG:N	2.41	0.53
1:A:684:LEU:CG	1:A:728:LEU:HD22	2.38	0.53
1:A:924:PHE:CB	1:A:925:ASN:CB	2.87	0.53
1:A:93:PHE:CE1	1:A:175:LEU:HD13	2.44	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1127:MET:HE1	1:A:1130:THR:HG21	1.88	0.52
1:A:688:GLU:HA	1:A:691:PRO:HG3	1.91	0.52
1:A:758:HIS:O	1:A:762:LEU:HB2	2.09	0.52
1:A:381:TRP:HD1	1:A:382:SER:H	1.55	0.52
1:A:1021:SER:O	1:A:1022:ALA:HB2	2.08	0.52
1:A:1171:ILE:HG23	1:A:1191:LEU:HD22	1.90	0.52
1:A:402:PHE:O	1:A:403:PHE:CG	2.63	0.52
1:A:824:SER:HA	1:A:1188:GLU:CD	2.30	0.52
1:A:752:SER:C	1:A:755:PRO:CG	2.78	0.52
1:A:1084:PHE:CD1	1:A:1085:TYR:N	2.78	0.52
1:A:1138:MET:N	1:A:1138:MET:SD	2.83	0.52
1:A:1210:ILE:CG2	1:A:1211:VAL:N	2.73	0.52
1:A:1210:ILE:O	1:A:1214:ALA:N	2.43	0.52
2:C:69:ASN:ND2	2:C:105:ALA:HB2	2.25	0.52
1:A:1068:THR:CG2	1:A:1069:MET:N	2.73	0.52
2:E:39:HIS:CD2	2:E:42:VAL:CG2	2.92	0.52
1:A:691:PRO:CD	1:A:692:PHE:H	2.21	0.52
3:F:595:GLN:HG3	3:F:596:ARG:NH1	2.25	0.52
1:A:1239:HIS:NE2	1:A:1243:PHE:CB	2.73	0.52
1:A:685:ILE:O	1:A:689:VAL:CB	2.58	0.52
1:A:690:ILE:N	1:A:691:PRO:CD	2.73	0.52
2:G:39:HIS:CD2	2:G:42:VAL:CG2	2.92	0.52
1:A:399:PHE:CE2	1:A:1022:ALA:HA	2.45	0.52
1:A:1047:THR:HG22	1:A:1048:SER:H	1.75	0.52
1:A:387:GLN:O	1:A:391:GLU:HB2	2.10	0.52
1:A:656:LEU:HB3	1:A:751:LEU:HD11	1.91	0.52
2:E:69:ASN:ND2	2:E:105:ALA:HB2	2.25	0.52
1:A:1239:HIS:O	1:A:1243:PHE:N	2.32	0.51
1:A:114:SER:O	1:A:117:GLN:HG3	2.11	0.51
1:A:1234:LEU:HD22	1:A:1234:LEU:O	2.09	0.51
1:A:915:ASN:CB	1:A:919:LEU:O	2.59	0.51
1:A:923:ILE:CA	1:A:1042:HIS:HB3	2.41	0.51
1:A:1047:THR:CG2	1:A:1048:SER:N	2.73	0.51
1:A:1080:PRO:HB2	1:A:1085:TYR:OH	2.10	0.51
1:A:627:SER:CB	1:A:1211:VAL:HB	2.40	0.51
1:A:751:LEU:HD23	1:A:751:LEU:O	2.11	0.51
3:F:515:LEU:HB3	3:F:548:MET:HB2	1.93	0.51
3:H:595:GLN:HG3	3:H:596:ARG:NH1	2.25	0.51
1:A:1133:MET:CE	1:A:1239:HIS:HB2	2.41	0.51
1:A:1121:LEU:O	1:A:1125:VAL:HB	2.11	0.51
1:A:515:TYR:CE1	1:A:526:THR:HG22	2.45	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1117:LEU:HD13	1:A:1173:ARG:HD3	1.93	0.51
1:A:1223:ILE:O	1:A:1227:ARG:HG2	2.11	0.51
1:A:915:ASN:CB	1:A:920:VAL:N	2.73	0.51
3:D:515:LEU:HB3	3:D:548:MET:HB2	1.93	0.51
1:A:856:VAL:C	1:A:1048:SER:OG	2.49	0.51
1:A:135:ASN:ND2	4:A:1322:NAG:O5	2.21	0.51
3:D:595:GLN:HG3	3:D:596:ARG:NH1	2.25	0.51
1:A:1044:VAL:HB	1:A:1051:PHE:CE1	2.45	0.51
1:A:1120:GLU:O	1:A:1124:ALA:HB3	2.10	0.51
1:A:377:PRO:CB	1:A:378:VAL:HA	2.39	0.51
2:G:69:ASN:ND2	2:G:105:ALA:HB2	2.25	0.51
1:A:1111:LEU:O	1:A:1115:VAL:HG23	2.11	0.51
1:A:1119:CYS:CB	1:A:1122:TRP:CB	2.89	0.51
1:A:371:VAL:C	1:A:373:VAL:N	2.64	0.51
1:A:723:GLN:NE2	1:A:724:LEU:N	2.59	0.51
3:H:515:LEU:HB3	3:H:548:MET:HB2	1.93	0.51
1:A:1138:MET:HA	1:A:1138:MET:HE2	1.92	0.50
1:A:1209:GLY:CA	1:A:1230:LEU:HD13	2.30	0.50
1:A:683:THR:HG23	1:A:684:LEU:N	2.25	0.50
1:A:648:LEU:CB	1:A:763:PHE:CZ	2.93	0.50
1:A:524:ASN:HD22	4:A:1304:NAG:C1	2.02	0.50
1:A:382:SER:O	1:A:383:ALA:HB3	2.12	0.50
1:A:423:TYR:CG	1:A:424:PRO:HA	2.47	0.50
1:A:584:GLU:OE2	1:A:606:GLU:CB	2.56	0.50
1:A:1178:SER:CB	1:A:1186:ARG:CZ	2.89	0.50
1:A:423:TYR:CZ	1:A:424:PRO:HB3	2.46	0.50
1:A:732:ALA:CB	1:A:749:GLY:HA2	2.31	0.50
1:A:382:SER:HA	1:A:1090:GLN:HG3	1.93	0.50
1:A:680:LEU:HB3	1:A:1229:TYR:HH	1.73	0.50
1:A:1229:TYR:HD1	1:A:1233:VAL:HG21	1.69	0.50
1:A:523:LEU:HD11	1:A:1016:HIS:N	2.25	0.50
1:A:1062:ALA:C	1:A:1078:VAL:HG21	2.32	0.49
1:A:1115:VAL:O	1:A:1116:LEU:HG	2.12	0.49
1:A:719:THR:O	1:A:723:GLN:HG3	2.12	0.49
1:A:688:GLU:CB	1:A:724:LEU:CD2	2.89	0.49
1:A:749:GLY:O	1:A:752:SER:CB	2.60	0.49
1:A:1063:SER:O	1:A:1067:GLU:HB2	2.10	0.49
1:A:676:SER:OG	1:A:1225:TYR:CE1	2.65	0.49
1:A:381:TRP:CD1	1:A:381:TRP:C	2.85	0.49
1:A:656:LEU:CA	1:A:751:LEU:HG	2.42	0.49
1:A:659:ALA:O	1:A:663:ILE:HG13	2.12	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1071:ILE:CG2	1:A:1072:ASN:N	2.34	0.49
1:A:108:PHE:HE1	1:A:194:PHE:CE1	2.26	0.49
1:A:686:VAL:CG1	1:A:690:ILE:CG1	2.90	0.49
1:A:729:GLY:O	1:A:733:PRO:N	2.45	0.49
1:A:1092:LEU:C	1:A:1094:ILE:H	2.16	0.49
1:A:1167:PHE:CD2	1:A:1237:ALA:HA	2.47	0.49
1:A:402:PHE:C	1:A:403:PHE:HD1	2.15	0.49
1:A:431:PHE:CZ	1:A:510:HIS:CD2	3.00	0.49
1:A:506:TYR:OH	2:E:80:PRO:HB3	2.12	0.49
1:A:337:ARG:HA	1:A:718:GLU:CD	2.32	0.49
1:A:663:ILE:HD11	1:A:754:MET:HG3	1.93	0.49
1:A:653:LYS:C	1:A:682:LEU:HD21	2.30	0.49
2:E:38:ILE:HG13	2:E:187:PRO:HD3	1.95	0.49
1:A:1152:VAL:HG11	1:A:1225:TYR:HD2	1.77	0.49
1:A:1091:TYR:HA	1:A:1094:ILE:HG12	1.94	0.49
1:A:1093:THR:HG22	1:A:1093:THR:O	2.13	0.49
1:A:1153:SER:HA	1:A:1156:ASN:HB2	1.94	0.49
1:A:631:MET:CE	1:A:1208:GLY:H	2.26	0.49
4:A:1306:NAG:O6	4:A:1307:NAG:H83	2.12	0.49
1:A:506:TYR:CZ	2:E:80:PRO:HB3	2.48	0.49
1:A:611:ASP:O	1:A:615:ARG:CB	2.60	0.49
3:F:510:LYS:NZ	4:F:701:NAG:HO6	2.08	0.49
1:A:1223:ILE:O	1:A:1227:ARG:CG	2.61	0.49
1:A:885:ALA:O	1:A:1079:PHE:CA	2.61	0.49
1:A:398:HIS:C	1:A:399:PHE:CG	2.86	0.49
1:A:726:ARG:HB3	1:A:1112:VAL:HG13	1.94	0.49
2:C:39:HIS:CB	2:C:42:VAL:HG22	2.40	0.49
1:A:627:SER:HB3	1:A:1211:VAL:HB	1.93	0.48
1:A:959:VAL:CA	1:A:984:PRO:N	2.74	0.48
2:C:51:LEU:HA	2:C:51:LEU:HD12	1.68	0.48
1:A:1210:ILE:HG23	1:A:1211:VAL:H	1.76	0.48
1:A:724:LEU:O	1:A:728:LEU:CG	2.53	0.48
1:A:404:ARG:HG3	1:A:567:VAL:O	2.13	0.48
1:A:1059:ARG:NH1	1:A:1059:ARG:CG	2.73	0.48
1:A:1156:ASN:ND2	1:A:1228:MET:HE2	2.27	0.48
1:A:618:ASP:O	1:A:621:VAL:CG2	2.60	0.48
1:A:1138:MET:CE	1:A:1138:MET:CA	2.91	0.48
1:A:1167:PHE:HE2	1:A:1237:ALA:CB	2.27	0.48
1:A:720:LEU:HD21	1:A:1170:HIS:O	2.13	0.48
1:A:985:GLU:CB	1:A:989:ARG:CB	2.91	0.48
2:C:163:ASP:OD1	3:D:543:TYR:OH	2.24	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1156:ASN:ND2	1:A:1228:MET:HE3	2.28	0.48
1:A:35:TYR:CZ	1:A:38:LYS:HD2	2.48	0.48
1:A:402:PHE:C	1:A:403:PHE:CD1	2.87	0.48
1:A:684:LEU:HG	1:A:1166:GLU:CG	2.38	0.48
1:A:1063:SER:O	1:A:1067:GLU:CB	2.62	0.48
1:A:544:TRP:O	1:A:879:ILE:CB	2.62	0.48
1:A:472:LEU:HB3	1:A:476:ASN:HB3	1.96	0.48
1:A:1063:SER:O	1:A:1067:GLU:HG3	2.14	0.48
1:A:444:LEU:HD23	1:A:492:HIS:CE1	2.49	0.48
1:A:653:LYS:HE3	1:A:653:LYS:O	2.13	0.48
2:G:163:ASP:OD1	3:H:543:TYR:OH	2.24	0.48
1:A:1045:LEU:HD23	1:A:1051:PHE:HZ	1.79	0.47
1:A:656:LEU:CB	1:A:751:LEU:HD11	2.44	0.47
1:A:1114:MET:HE2	1:A:1124:ALA:HB2	1.95	0.47
1:A:915:ASN:HA	1:A:921:GLN:N	2.29	0.47
2:G:38:ILE:HG13	2:G:187:PRO:HD3	1.95	0.47
1:A:704:ILE:CA	1:A:708:ALA:CB	2.92	0.47
1:A:688:GLU:HB2	1:A:724:LEU:CD2	2.44	0.47
1:A:1081:TYR:C	1:A:1081:TYR:CD1	2.86	0.47
1:A:1130:THR:HA	1:A:1133:MET:HB3	1.95	0.47
1:A:1210:ILE:CD1	1:A:1214:ALA:CB	2.91	0.47
1:A:690:ILE:HG22	1:A:690:ILE:O	2.14	0.47
1:A:704:ILE:N	1:A:708:ALA:HB2	2.29	0.47
1:A:252:GLN:N	1:A:253:PRO:CD	2.78	0.47
2:E:104:TRP:CZ2	2:E:134:ARG:HD2	2.50	0.47
1:A:1127:MET:CE	1:A:1130:THR:CG2	2.92	0.47
1:A:523:LEU:CD1	1:A:1015:GLY:C	2.83	0.47
1:A:684:LEU:CD2	1:A:728:LEU:CG	2.57	0.47
2:C:104:TRP:CZ2	2:C:134:ARG:HD2	2.50	0.47
1:A:437:ILE:HD13	1:A:509:TYR:CD1	2.50	0.47
2:G:104:TRP:CZ2	2:G:134:ARG:HD2	2.50	0.47
1:A:1232:MET:HG3	1:A:1233:VAL:N	2.29	0.47
2:C:38:ILE:HG13	2:C:187:PRO:HD3	1.95	0.47
3:F:595:GLN:NE2	3:F:595:GLN:CA	2.72	0.47
1:A:421:GLN:HB3	1:A:426:GLY:HA2	1.96	0.47
1:A:758:HIS:C	1:A:760:PHE:H	2.18	0.47
1:A:1048:SER:O	1:A:1052:ILE:CD1	2.63	0.46
1:A:474:PRO:C	1:A:476:ASN:H	2.18	0.46
1:A:656:LEU:CD1	1:A:685:ILE:CB	2.62	0.46
1:A:616:GLU:O	1:A:618:ASP:N	2.48	0.46
1:A:688:GLU:HA	1:A:691:PRO:CG	2.45	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:E:37:VAL:HG21	2:E:51:LEU:HD11	1.97	0.46
1:A:648:LEU:CG	1:A:763:PHE:CD1	2.98	0.46
2:G:37:VAL:HG21	2:G:51:LEU:HD11	1.97	0.46
1:A:635:ILE:HG12	1:A:1204:LEU:CD1	2.45	0.46
1:A:507:ALA:CB	1:A:529:LEU:CG	2.80	0.46
1:A:632:PHE:HE1	1:A:649:LEU:CB	2.28	0.46
1:A:880:SER:O	1:A:1043:THR:HG22	2.15	0.46
1:A:1210:ILE:CG2	1:A:1211:VAL:H	2.29	0.46
1:A:503:PHE:HZ	2:E:86:TRP:CG	2.33	0.46
1:A:1127:MET:HE3	1:A:1130:THR:CG2	2.45	0.46
1:A:824:SER:HA	1:A:1188:GLU:OE2	2.16	0.46
1:A:381:TRP:C	1:A:383:ALA:H	2.19	0.46
1:A:656:LEU:CD2	1:A:685:ILE:HG13	2.45	0.46
1:A:736:PHE:O	1:A:737:LEU:O	2.34	0.46
1:A:1084:PHE:CZ	1:A:1085:TYR:CD1	2.84	0.46
1:A:1090:GLN:C	1:A:1092:LEU:H	2.19	0.46
1:A:162:ASP:OD2	1:A:244:SER:OG	2.33	0.46
1:A:598:ASN:ND2	4:A:1310:NAG:C2	2.70	0.46
1:A:1131:ILE:O	1:A:1135:LEU:CG	2.63	0.46
1:A:656:LEU:HD22	1:A:751:LEU:CD2	2.46	0.46
1:A:656:LEU:HB3	1:A:682:LEU:CD1	2.42	0.46
1:A:688:GLU:CA	1:A:691:PRO:HD3	2.45	0.46
2:C:37:VAL:HG21	2:C:51:LEU:HD11	1.97	0.46
3:H:560:GLN:O	3:H:564:GLU:HG3	2.16	0.46
1:A:1062:ALA:O	1:A:1078:VAL:HG21	2.15	0.45
1:A:168:SER:C	1:A:170:ASP:H	2.20	0.45
1:A:476:ASN:HA	4:A:1312:NAG:H82	1.98	0.45
1:A:985:GLU:HA	1:A:989:ARG:CB	2.46	0.45
1:A:1115:VAL:C	1:A:1116:LEU:HG	2.36	0.45
1:A:635:ILE:HG21	1:A:686:VAL:CG1	2.46	0.45
1:A:676:SER:CB	1:A:1225:TYR:CE1	2.99	0.45
1:A:484:VAL:HG11	1:A:547:LEU:HD21	1.98	0.45
1:A:635:ILE:HG21	1:A:686:VAL:HG11	1.97	0.45
1:A:1202:ILE:O	1:A:1205:THR:OG1	2.21	0.45
1:A:122:ASN:ND2	1:A:217[B]:MET:HE1	2.31	0.45
1:A:165:ALA:O	1:A:167:SER:N	2.50	0.45
1:A:38:LYS:HB3	1:A:202:PRO:HB3	1.97	0.45
1:A:122:ASN:CG	1:A:217[B]:MET:CE	2.85	0.45
1:A:401:PRO:CG	1:A:569:ASN:OD1	2.64	0.45
1:A:1149:LEU:HA	1:A:1153:SER:HB2	1.97	0.45
1:A:506:TYR:CZ	2:E:80:PRO:CG	2.99	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:753:VAL:C	1:A:755:PRO:CD	2.85	0.45
1:A:885:ALA:O	1:A:1079:PHE:C	2.53	0.45
3:D:560:GLN:O	3:D:564:GLU:HG3	2.16	0.45
1:A:1034:GLY:HA2	1:A:1035:ALA:HA	1.69	0.45
1:A:396:ASP:CA	1:A:400:GLY:H	2.30	0.45
1:A:401:PRO:CB	1:A:569:ASN:ND2	2.58	0.45
1:A:1044:VAL:O	1:A:1045:LEU:C	2.56	0.45
1:A:1047:THR:CG2	1:A:1048:SER:H	2.30	0.45
1:A:1127:MET:HE3	1:A:1130:THR:HG21	1.99	0.45
1:A:723:GLN:HG2	1:A:1173:ARG:CG	2.46	0.45
3:F:560:GLN:O	3:F:564:GLU:HG3	2.16	0.45
1:A:732:ALA:O	1:A:746:PHE:HA	2.17	0.45
1:A:238:CYS:O	1:A:246:VAL:HG21	2.17	0.44
1:A:713:GLU:C	1:A:715:LEU:H	2.21	0.44
1:A:1053:ASP:O	1:A:1057:LYS:HD2	2.18	0.44
1:A:1225:TYR:HD1	1:A:1226:PHE:CG	2.35	0.44
1:A:627:SER:CB	1:A:1212:VAL:HG23	2.47	0.44
1:A:653:LYS:HG3	1:A:654:VAL:H	1.82	0.44
1:A:751:LEU:O	1:A:755:PRO:HD3	2.17	0.44
2:G:39:HIS:CB	2:G:42:VAL:HG22	2.39	0.44
1:A:91:LEU:HD13	1:A:101:PHE:CZ	2.52	0.44
1:A:382:SER:OG	1:A:1086:VAL:HG13	2.17	0.44
1:A:246:VAL:O	1:A:246:VAL:HG23	2.18	0.44
1:A:472:LEU:HD21	1:A:1017:ALA:HB1	1.96	0.44
2:E:51:LEU:HA	2:E:51:LEU:HD12	1.68	0.44
1:A:1080:PRO:O	1:A:1085:TYR:CE2	2.71	0.44
1:A:384:PRO:HA	1:A:389:ARG:CG	2.38	0.44
1:A:688:GLU:HB2	1:A:724:LEU:HD21	1.98	0.44
2:C:79:VAL:O	2:C:83:THR:HG23	2.17	0.44
1:A:682:LEU:HA	1:A:682:LEU:HD12	1.77	0.44
1:A:683:THR:CG2	1:A:684:LEU:N	2.80	0.44
1:A:930:ASP:O	1:A:933:THR:N	2.50	0.44
1:A:649:LEU:CD2	1:A:686:VAL:HG13	2.47	0.44
1:A:653:LYS:HA	1:A:682:LEU:CG	2.47	0.44
1:A:122:ASN:CG	1:A:217[B]:MET:HE3	2.38	0.44
1:A:396:ASP:HA	1:A:400:GLY:H	1.80	0.44
1:A:404:ARG:HH11	1:A:404:ARG:CG	2.30	0.44
1:A:632:PHE:HE1	1:A:649:LEU:HB3	1.83	0.44
1:A:690:ILE:N	1:A:691:PRO:HD3	2.32	0.43
1:A:893:LEU:O	1:A:894:GLU:C	2.55	0.43
1:A:1090:GLN:O	1:A:1094:ILE:HG12	2.19	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:352:CYS:O	1:A:353:VAL:C	2.56	0.43
1:A:421:GLN:OE1	1:A:421:GLN:N	2.39	0.43
1:A:444:LEU:HD23	1:A:492:HIS:CD2	2.53	0.43
1:A:690:ILE:O	1:A:694:VAL:CG2	2.64	0.43
1:A:691:PRO:HB3	1:A:1197:SER:HB2	2.00	0.43
1:A:228:ASP:CG	1:A:245:ILE:HG21	2.39	0.43
1:A:723:GLN:OE1	1:A:1169:SER:CA	2.63	0.43
2:E:79:VAL:O	2:E:83:THR:HG23	2.17	0.43
2:G:70:LEU:HD11	2:G:180:VAL:HG22	2.00	0.43
1:A:1117:LEU:HD23	1:A:1123:SER:HB3	2.00	0.43
1:A:627:SER:CB	1:A:1212:VAL:CG2	2.96	0.43
1:A:66:PHE:HB3	1:A:73:LEU:HD21	2.00	0.43
1:A:676:SER:HB3	1:A:1225:TYR:HH	1.71	0.43
1:A:876:PHE:O	1:A:877:LYS:CB	2.67	0.43
2:G:79:VAL:O	2:G:83:THR:HG23	2.17	0.43
1:A:885:ALA:O	1:A:1079:PHE:CB	2.65	0.43
1:A:1045:LEU:HD23	1:A:1051:PHE:CZ	2.54	0.43
1:A:1117:LEU:HD11	1:A:1173:ARG:HH11	1.84	0.43
1:A:684:LEU:HD12	1:A:1166:GLU:HG3	1.94	0.43
1:A:1213:LEU:O	1:A:1227:ARG:NH2	2.41	0.43
1:A:1094:ILE:O	1:A:1098:THR:HG23	2.18	0.43
1:A:122:ASN:ND2	1:A:217[B]:MET:HE3	2.34	0.43
1:A:911:GLY:C	1:A:913:GLY:H	2.22	0.43
1:A:1048:SER:O	1:A:1052:ILE:HG13	2.18	0.43
1:A:1059:ARG:HD3	1:A:1059:ARG:HA	1.75	0.43
1:A:364:CYS:O	1:A:662:LEU:HB2	2.18	0.43
1:A:404:ARG:HH11	1:A:404:ARG:CB	2.32	0.43
2:C:70:LEU:HD11	2:C:180:VAL:HG22	2.00	0.43
2:E:70:LEU:HD11	2:E:180:VAL:HG22	2.00	0.43
1:A:1159:MET:HB3	1:A:1159:MET:HE2	1.91	0.42
1:A:116:ARG:HB3	1:A:116:ARG:HE	1.32	0.42
1:A:196:LYS:HG3	1:A:196:LYS:H	1.53	0.42
2:G:63:LEU:HB3	3:H:585:LEU:HD22	2.01	0.42
1:A:523:LEU:CG	1:A:1016:HIS:CB	2.96	0.42
1:A:726:ARG:CB	1:A:1112:VAL:HG11	2.45	0.42
1:A:1117:LEU:HB3	1:A:1118:GLY:H	1.70	0.42
1:A:1198:VAL:O	1:A:1202:ILE:HB	2.18	0.42
1:A:239:SER:O	1:A:243:CYS:HB3	2.20	0.42
1:A:622:PHE:O	1:A:626:ILE:CG1	2.67	0.42
1:A:635:ILE:CG1	1:A:1204:LEU:CD1	2.98	0.42
1:A:653:LYS:C	1:A:653:LYS:CE	2.86	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:F:582:PHE:HE2	3:H:577:THR:HG23	1.85	0.42
1:A:1046:GLN:CB	1:A:1050:ASP:CG	2.80	0.42
1:A:1222:GLN:C	1:A:1224:PHE:N	2.72	0.42
1:A:726:ARG:NE	1:A:726:ARG:HA	2.35	0.42
1:A:684:LEU:CG	1:A:728:LEU:CD2	2.95	0.42
1:A:656:LEU:HD22	1:A:751:LEU:O	2.19	0.42
1:A:1100:PHE:CE1	1:A:1104:VAL:CG2	3.02	0.42
1:A:637:LEU:O	1:A:638:ALA:C	2.57	0.42
1:A:730:GLU:HG2	1:A:1112:VAL:HG23	1.99	0.42
3:D:577:THR:HG23	3:H:582:PHE:HE2	1.85	0.42
1:A:1199:PHE:O	1:A:1203:THR:HB	2.20	0.42
1:A:1160:SER:HB2	1:A:1232:MET:CE	2.50	0.42
4:A:1306:NAG:C1	4:A:1306:NAG:C8	2.86	0.42
1:A:370:PHE:O	1:A:371:VAL:CB	2.67	0.42
3:D:582:PHE:HE2	3:F:577:THR:HG23	1.85	0.42
2:E:63:LEU:HB3	3:F:585:LEU:HD22	2.01	0.42
1:A:1093:THR:HG22	1:A:1096:ASP:HB2	2.01	0.42
1:A:507:ALA:CB	1:A:529:LEU:CD2	2.98	0.42
1:A:1229:TYR:C	1:A:1229:TYR:CD1	2.93	0.42
1:A:659:ALA:CA	1:A:662:LEU:HD21	2.36	0.42
1:A:685:ILE:O	1:A:689:VAL:HB	2.19	0.42
1:A:749:GLY:O	1:A:752:SER:HB2	2.18	0.42
1:A:656:LEU:CD2	1:A:751:LEU:O	2.67	0.42
1:A:1063:SER:O	1:A:1067:GLU:CG	2.67	0.42
1:A:1085:TYR:C	1:A:1087:PHE:H	2.22	0.42
1:A:1202:ILE:CG2	1:A:1237:ALA:CB	2.98	0.42
1:A:637:LEU:O	1:A:638:ALA:O	2.37	0.42
1:A:668:VAL:O	1:A:669:ALA:HB2	2.20	0.42
1:A:1058:ALA:HA	1:A:1061:ILE:HD12	2.02	0.41
1:A:1227:ARG:HD3	1:A:1227:ARG:HA	1.78	0.41
1:A:396:ASP:O	1:A:399:PHE:N	2.50	0.41
1:A:733:PRO:C	1:A:735:MET:N	2.73	0.41
1:A:908:VAL:HG13	1:A:926:ALA:HA	2.02	0.41
2:E:39:HIS:CB	2:E:42:VAL:HG22	2.40	0.41
1:A:1060:LEU:O	1:A:1063:SER:OG	2.25	0.41
1:A:1210:ILE:HD11	1:A:1214:ALA:HB2	2.01	0.41
1:A:506:TYR:CZ	2:E:80:PRO:CB	3.03	0.41
1:A:649:LEU:O	1:A:650:VAL:C	2.57	0.41
1:A:653:LYS:HA	1:A:682:LEU:CD2	2.50	0.41
1:A:691:PRO:CD	1:A:692:PHE:N	2.83	0.41
2:G:51:LEU:HD12	2:G:51:LEU:HA	1.68	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:372:ARG:C	1:A:374:THR:H	2.23	0.41
1:A:544:TRP:C	1:A:544:TRP:CD1	2.92	0.41
1:A:842:PHE:O	1:A:1136:VAL:HG11	2.21	0.41
1:A:381:TRP:C	1:A:383:ALA:N	2.74	0.41
1:A:509:TYR:CZ	1:A:510:HIS:CE1	3.08	0.41
1:A:878:SER:C	1:A:1043:THR:CG2	2.86	0.41
1:A:1141:VAL:C	1:A:1147:ILE:CB	2.89	0.41
1:A:399:PHE:CD1	1:A:399:PHE:N	2.88	0.41
1:A:758:HIS:C	1:A:760:PHE:N	2.74	0.41
3:D:582:PHE:CE2	3:F:578:GLU:HB3	2.56	0.41
1:A:1220:ILE:O	1:A:1221:PHE:C	2.59	0.41
1:A:1225:TYR:HD1	1:A:1226:PHE:CD1	2.39	0.41
1:A:1229:TYR:C	1:A:1229:TYR:HD1	2.24	0.41
3:D:567:GLN:HG3	3:H:531:TRP:CG	2.56	0.41
1:A:885:ALA:O	1:A:1079:PHE:N	2.54	0.41
1:A:1112:VAL:HA	1:A:1115:VAL:CG2	2.49	0.41
1:A:131:ASP:HA	1:A:132:PRO:HD2	1.93	0.41
1:A:673:GLY:C	1:A:675:PHE:H	2.23	0.41
3:D:513:PRO:O	3:D:555:ILE:HD13	2.21	0.41
3:D:578:GLU:HB3	3:H:582:PHE:CZ	2.56	0.41
2:C:63:LEU:HB3	3:D:585:LEU:HD22	2.01	0.41
1:A:1048:SER:O	1:A:1052:ILE:CG1	2.69	0.41
1:A:635:ILE:HG12	1:A:1204:LEU:HD12	2.02	0.41
1:A:648:LEU:CG	1:A:763:PHE:CE1	3.03	0.41
1:A:767:ALA:O	1:A:771:ASP:N	2.52	0.41
3:D:578:GLU:HB3	3:H:582:PHE:CE2	2.56	0.41
1:A:1152:VAL:O	1:A:1155:VAL:N	2.54	0.41
3:D:582:PHE:CZ	3:F:578:GLU:HB3	2.56	0.41
3:F:582:PHE:CE2	3:H:578:GLU:HB3	2.56	0.41
1:A:1228:MET:O	1:A:1229:TYR:C	2.58	0.41
1:A:398:HIS:C	1:A:399:PHE:CD1	2.95	0.41
1:A:684:LEU:HD11	1:A:1166:GLU:CG	2.47	0.41
3:F:531:TRP:CG	3:H:567:GLN:HG3	2.56	0.41
3:H:513:PRO:O	3:H:555:ILE:HD13	2.21	0.41
1:A:1154:LEU:HA	1:A:1154:LEU:HD23	1.78	0.40
1:A:1220:ILE:HA	1:A:1223:ILE:CB	2.51	0.40
1:A:202:PRO:HG2	1:A:203:PHE:CE2	2.55	0.40
1:A:515:TYR:HE1	1:A:526:THR:CG2	2.28	0.40
1:A:893:LEU:O	1:A:895:GLU:N	2.54	0.40
2:E:92:VAL:HA	2:E:93:PRO:HD3	1.92	0.40
1:A:1127:MET:HE2	1:A:1168:CYS:HB2	2.01	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:885:ALA:N	1:A:1079:PHE:O	2.51	0.40
1:A:1222:GLN:O	1:A:1224:PHE:N	2.54	0.40
1:A:474:PRO:O	1:A:475:TYR:C	2.60	0.40
3:F:513:PRO:O	3:F:555:ILE:HD13	2.21	0.40
3:D:531:TRP:CG	3:F:567:GLN:HG3	2.56	0.40
1:A:1199:PHE:O	1:A:1203:THR:HG21	2.19	0.40
1:A:689:VAL:N	1:A:691:PRO:HD3	2.35	0.40
1:A:720:LEU:C	1:A:723:GLN:HG3	2.38	0.40
1:A:915:ASN:HA	1:A:921:GLN:H	1.87	0.40
1:A:923:ILE:CB	1:A:925:ASN:CB	2.99	0.40
1:A:1009:PRO:C	1:A:1010:LYS:O	2.59	0.40
1:A:1043:THR:C	1:A:1044:VAL:HG23	2.42	0.40
1:A:421:GLN:CD	1:A:421:GLN:H	2.20	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 PDB entries followed by that with respect to all EM entries.

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	1126/1278 (88%)	897 (80%)	135 (12%)	94 (8%)	1	16
2	C	156/158 (99%)	142 (91%)	12 (8%)	2 (1%)	14	56
2	E	156/158 (99%)	141 (90%)	13 (8%)	2 (1%)	14	56
2	G	156/158 (99%)	142 (91%)	12 (8%)	2 (1%)	14	56
3	D	83/130 (64%)	77 (93%)	4 (5%)	2 (2%)	7	42
3	F	83/130 (64%)	77 (93%)	4 (5%)	2 (2%)	7	42
3	H	83/130 (64%)	77 (93%)	4 (5%)	2 (2%)	7	42
All	All	1843/2142 (86%)	1553 (84%)	184 (10%)	106 (6%)	4	24

All (106) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	250	LYS
1	A	256	PRO
1	A	350	PRO
1	A	372	ARG
1	A	374	THR
1	A	376	ASN
1	A	403	PHE
1	A	638	ALA
1	A	639	LEU
1	A	642	MET
1	A	700	ASP
1	A	706	VAL
1	A	737	LEU
1	A	739	SER
1	A	829	LEU
1	A	856	VAL
1	A	864	LEU
1	A	876	PHE
1	A	922	GLN
1	A	929	LEU
1	A	930	ASP
1	A	943	ILE
1	A	951	LYS
1	A	957	CYS
1	A	958	ARG
1	A	1007	PRO
1	A	1008	ASN
1	A	1009	PRO
1	A	1010	LYS
1	A	1044	VAL
1	A	1071	ILE
1	A	1072	ASN
1	A	1083	VAL
1	A	1085	TYR
1	A	1086	VAL
1	A	1122	TRP
1	A	1146	GLY
1	A	260	TRP
1	A	475	TYR
1	A	605	ALA
1	A	606	GLU
1	A	617	SER
1	A	641	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	760	PHE
1	A	830	LEU
1	A	888	PRO
1	A	923	ILE
1	A	1022	ALA
1	A	1073	GLY
1	A	1075	ALA
1	A	1177	VAL
1	A	1179	MET
1	A	1215	PHE
2	C	50	LYS
2	C	51	LEU
3	D	597	TRP
2	E	50	LYS
2	E	51	LEU
3	F	597	TRP
2	G	50	LYS
2	G	51	LEU
3	H	597	TRP
1	A	168	SER
1	A	498	LYS
1	A	668	VAL
1	A	861	ASP
1	A	877	LYS
1	A	890	TYR
1	A	894	GLU
1	A	1178	SER
1	A	1221	PHE
1	A	252	GLN
1	A	348	ARG
1	A	691	PRO
1	A	734	SER
1	A	745	ALA
1	A	891	PHE
1	A	917	ASP
1	A	926	ALA
1	A	1084	PHE
1	A	1093	THR
1	A	1120	GLU
1	A	1150	ASN
1	A	1167	PHE
3	D	550	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
3	F	550	ASN
3	H	550	ASN
1	A	258	ALA
1	A	353	VAL
1	A	371	VAL
1	A	384	PRO
1	A	703	PHE
1	A	733	PRO
1	A	925	ASN
1	A	1117	LEU
1	A	253	PRO
1	A	259	PRO
1	A	401	PRO
1	A	880	SER
1	A	887	PRO
1	A	1080	PRO
1	A	166	PRO
1	A	892	VAL
1	A	1202	ILE
1	A	349	ASN
1	A	257	PRO

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 PDB entries followed by that with respect to all EM entries.

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	643/1109 (58%)	558 (87%)	85 (13%)	5	24
2	C	126/130 (97%)	124 (98%)	2 (2%)	68	85
2	E	126/130 (97%)	124 (98%)	2 (2%)	68	85
2	G	126/130 (97%)	124 (98%)	2 (2%)	68	85
3	D	70/111 (63%)	69 (99%)	1 (1%)	71	86
3	F	70/111 (63%)	69 (99%)	1 (1%)	71	86
3	H	70/111 (63%)	69 (99%)	1 (1%)	71	86
All	All	1231/1832 (67%)	1137 (92%)	94 (8%)	20	47

All (94) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	27	TRP
1	A	60	GLN
1	A	87	LEU
1	A	91	LEU
1	A	105	LEU
1	A	116	ARG
1	A	122	ASN
1	A	146	TYR
1	A	185	ASN
1	A	195	ASN
1	A	196	LYS
1	A	250	LYS
1	A	252	GLN
1	A	381	TRP
1	A	389	ARG
1	A	394	TYR
1	A	399	PHE
1	A	403	PHE
1	A	404	ARG
1	A	406	GLU
1	A	439	ILE
1	A	472	LEU
1	A	495	LEU
1	A	518	ARG
1	A	526	THR
1	A	544	TRP
1	A	602	SER
1	A	607	ARG
1	A	612	GLU
1	A	614	ASN
1	A	615	ARG
1	A	653	LYS
1	A	662	LEU
1	A	676	SER
1	A	680	LEU
1	A	682	LEU
1	A	684	LEU
1	A	688	GLU
1	A	719	THR
1	A	721	ASP
1	A	722	GLN
1	A	726	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	730	GLU
1	A	751	LEU
1	A	752	SER
1	A	758	HIS
1	A	760	PHE
1	A	763	PHE
1	A	1036	THR
1	A	1037	TYR
1	A	1038	PHE
1	A	1039	MET
1	A	1041	TYR
1	A	1042	HIS
1	A	1050	ASP
1	A	1055	LEU
1	A	1056	LYS
1	A	1057	LYS
1	A	1059	ARG
1	A	1066	THR
1	A	1069	MET
1	A	1072	ASN
1	A	1074	SER
1	A	1077	ARG
1	A	1081	TYR
1	A	1082	SER
1	A	1084	PHE
1	A	1090	GLN
1	A	1117	LEU
1	A	1127	MET
1	A	1128	CYS
1	A	1138	MET
1	A	1153	SER
1	A	1154	LEU
1	A	1159	MET
1	A	1166	GLU
1	A	1172	THR
1	A	1173	ARG
1	A	1189	GLU
1	A	1194	MET
1	A	1199	PHE
1	A	1207	PHE
1	A	1227	ARG
1	A	1228	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1229	TYR
2	C	53	CYS
2	C	169	VAL
3	D	595	GLN
2	E	53	CYS
2	E	169	VAL
3	F	595	GLN
2	G	53	CYS
2	G	169	VAL
3	H	595	GLN

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (29) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	70	ASN
1	A	86	ASN
1	A	92	GLN
1	A	135	ASN
1	A	154	ASN
1	A	185	ASN
1	A	200	GLN
1	A	241	GLN
1	A	447	GLN
1	A	452	ASN
1	A	459	ASN
1	A	478	ASN
1	A	490	ASN
1	A	510	HIS
1	A	554	ASN
1	A	598	ASN
1	A	722	GLN
1	A	1046	GLN
1	A	1072	ASN
1	A	1156	ASN
2	C	39	HIS
2	C	69	ASN
3	D	595	GLN
2	E	39	HIS
2	E	69	ASN
3	F	595	GLN
2	G	39	HIS
2	G	69	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
3	H	595	GLN

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry ⓘ

30 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	$\# Z > 2$
4	NAG	A	1301	1,4	14,14,15	0.64	0	15,19,21	1.20	1 (6%)
4	NAG	A	1302	4	14,14,15	0.55	0	15,19,21	0.77	1 (6%)
4	NAG	A	1303	1	14,14,15	0.30	0	15,19,21	0.56	0
4	NAG	A	1304	1,4	14,14,15	0.47	0	15,19,21	1.66	3 (20%)
4	NAG	A	1305	4	14,14,15	0.28	0	15,19,21	0.58	0
4	NAG	A	1306	1,4	14,14,15	0.30	0	15,19,21	0.37	0
4	NAG	A	1307	5,4	14,14,15	0.29	0	15,19,21	0.55	0
5	BMA	A	1308	4	11,11,12	0.27	0	13,15,17	0.53	0
4	NAG	A	1309	1	14,14,15	0.48	0	15,19,21	1.17	1 (6%)
4	NAG	A	1310	1,4	14,14,15	0.35	0	15,19,21	1.68	3 (20%)
4	NAG	A	1311	4	14,14,15	0.66	0	15,19,21	1.01	1 (6%)

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
4	NAG	A	1312	1,4	14,14,15	0.28	0	15,19,21	0.57	0
4	NAG	A	1313	5,4	14,14,15	0.27	0	15,19,21	0.78	0
5	BMA	A	1314	4,6	11,11,12	0.29	0	13,15,17	0.61	0
6	MAN	A	1315	5	11,11,12	0.36	0	13,15,17	1.17	1 (7%)
4	NAG	A	1316	1	14,14,15	0.41	0	15,19,21	1.17	2 (13%)
4	NAG	A	1317	1	14,14,15	0.29	0	15,19,21	0.57	0
4	NAG	A	1318	4	14,14,15	0.39	0	15,19,21	1.16	2 (13%)
4	NAG	A	1319	1,4	14,14,15	0.39	0	15,19,21	1.17	2 (13%)
4	NAG	A	1320	1	14,14,15	0.29	0	15,19,21	0.57	0
4	NAG	A	1321	-	14,14,15	0.29	0	15,19,21	0.57	0
4	NAG	A	1322	1	14,14,15	0.29	0	15,19,21	0.57	0
4	NAG	A	1323	1	14,14,15	0.28	0	15,19,21	0.56	0
4	NAG	A	1324	1	14,14,15	0.42	0	15,19,21	1.18	2 (13%)
4	NAG	D	701	3,4	14,14,15	0.69	0	15,19,21	1.16	1 (6%)
4	NAG	D	702	4	14,14,15	0.29	0	15,19,21	0.63	0
4	NAG	F	701	3,4	14,14,15	0.70	0	15,19,21	1.16	1 (6%)
4	NAG	F	702	4	14,14,15	0.30	0	15,19,21	0.64	0
4	NAG	H	701	3,4	14,14,15	0.68	0	15,19,21	1.15	1 (6%)
4	NAG	H	702	4	14,14,15	0.29	0	15,19,21	0.64	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
4	NAG	A	1301	1,4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	1302	4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	1303	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	1304	1,4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	1305	4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	1306	1,4	-	2/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	1307	5,4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
5	BMA	A	1308	4	-	0/2/19/22	0/1/1/1
4	NAG	A	1309	1	1/1/5/7	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	1310	1,4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	1311	4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	1312	1,4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	1313	5,4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
5	BMA	A	1314	4,6	-	0/2/19/22	0/1/1/1
6	MAN	A	1315	5	-	0/2/19/22	0/1/1/1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
4	NAG	A	1316	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	1317	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	1318	4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	1319	1,4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	1320	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	1321	-	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	1322	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	1323	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	1324	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	D	701	3,4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	D	702	4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	F	701	3,4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	F	702	4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	H	701	3,4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	H	702	4	-	0/6/23/26	0/1/1/1

There are no bond length outliers.

All (22) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
4	A	1304	NAG	O5-C1-C2	-4.99	104.53	111.47
4	D	701	NAG	O5-C1-C2	-3.57	106.50	111.47
4	H	701	NAG	O5-C1-C2	-3.57	106.50	111.47
4	F	701	NAG	O5-C1-C2	-3.56	106.52	111.47
4	A	1310	NAG	O4-C4-C3	-3.50	102.75	110.36
4	A	1301	NAG	O5-C1-C2	-2.99	107.31	111.47
4	A	1310	NAG	O5-C1-C2	-2.95	107.37	111.47
4	A	1309	NAG	O5-C1-C2	-2.06	108.60	111.47
4	A	1324	NAG	C2-N2-C7	-2.06	119.94	122.94
4	A	1318	NAG	C2-N2-C7	-2.02	119.99	122.94
4	A	1316	NAG	C2-N2-C7	-2.02	120.00	122.94
4	A	1319	NAG	C2-N2-C7	-2.01	120.00	122.94
4	A	1316	NAG	C8-C7-N2	2.12	119.94	116.11
4	A	1324	NAG	C8-C7-N2	2.14	119.97	116.11
4	A	1318	NAG	C8-C7-N2	2.15	119.99	116.11
4	A	1302	NAG	C1-O5-C5	2.16	115.14	112.17
4	A	1319	NAG	C8-C7-N2	2.16	120.02	116.11
4	A	1304	NAG	C1-O5-C5	2.19	115.19	112.17
4	A	1304	NAG	C4-C3-C2	2.70	114.98	111.02
4	A	1311	NAG	C4-C3-C2	2.84	115.18	111.02
6	A	1315	MAN	C1-C2-C3	3.37	113.93	109.65
4	A	1310	NAG	C1-O5-C5	3.39	116.83	112.17

All (1) chirality outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atom
4	A	1309	NAG	C1

All (2) torsion outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
4	A	1306	NAG	C8-C7-N2-C2
4	A	1306	NAG	O7-C7-N2-C2

There are no ring outliers.

18 monomers are involved in 46 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
4	A	1303	NAG	1	0
4	A	1304	NAG	1	0
4	A	1305	NAG	1	0
4	A	1306	NAG	14	0
4	A	1307	NAG	12	0
5	A	1308	BMA	3	0
4	A	1310	NAG	3	0
4	A	1312	NAG	7	0
4	A	1313	NAG	6	0
5	A	1314	BMA	2	0
4	A	1317	NAG	1	0
4	A	1319	NAG	3	0
4	A	1322	NAG	3	0
4	A	1323	NAG	1	0
4	A	1324	NAG	2	0
4	D	701	NAG	1	0
4	F	701	NAG	2	0
4	H	701	NAG	1	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.