



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Feb 14, 2017 – 07:21 pm GMT

PDB ID : 3S5K  
Title : Crystal structures of falcilysin, a M16 metalloprotease from the malaria parasite *Plasmodium falciparum*  
Authors : Morgunova, E.; Ponpuak, M.; Istvan, E.; Popov, A.; Goldberg, D.; Eneqvist, T.  
Deposited on : 2011-05-23  
Resolution : 3.20 Å(reported)

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

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto: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
Xtriage (Phenix)	:	1.9-1692
EDS	:	trunk28620
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)	:	recalc28949

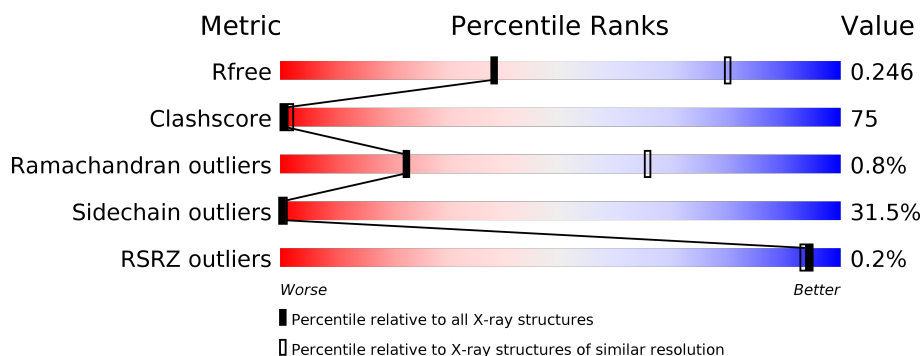
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*X-RAY DIFFRACTION*

The reported resolution of this entry is 3.20 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
$R_{free}$	100719	1015 (3.22-3.18)
Clashscore	112137	1009 (3.20-3.20)
Ramachandran outliers	110173	1118 (3.22-3.18)
Sidechain outliers	110143	1117 (3.22-3.18)
RSRZ outliers	101464	1020 (3.22-3.18)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments on the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for  $\geq 3$ , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. 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	1193	

## 2 Entry composition

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 8741 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

In the tables below, the ZeroOcc column contains the number of atoms modelled with zero occupancy, the AltConf column contains the number of residues with at least one atom in alternate conformation and the Trace column contains the number of residues modelled with at most 2 atoms.

- Molecule 1 is a protein called Falcilysin.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	1053	Total	C	N	O	S	0	0	0
			8674	5577	1418	1653	26			

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

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

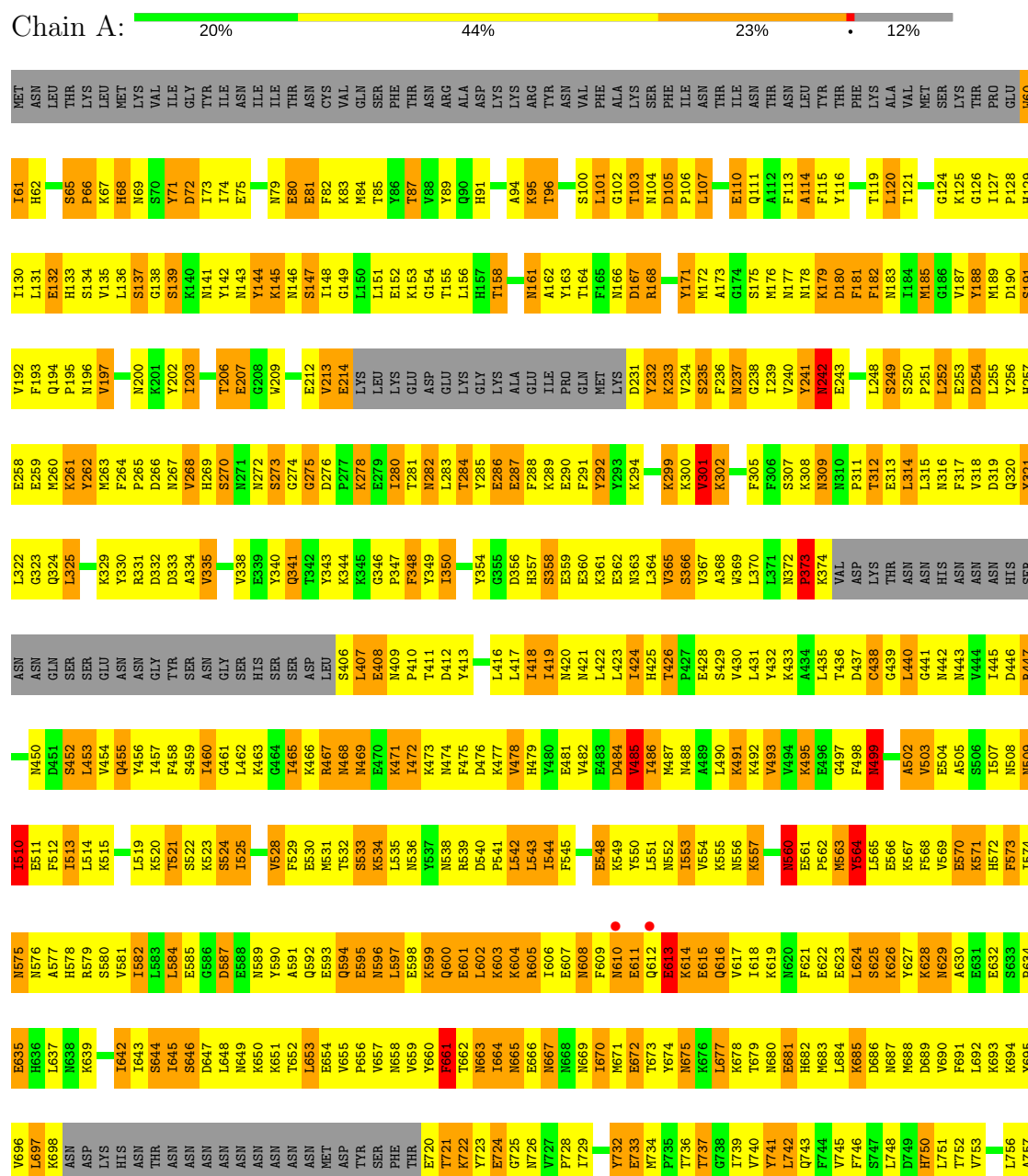
- Molecule 3 is water.

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

### 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: Falcilysin



K1151	F1152	A1153	D1154	L1155	L1156	E1157	S1158	K1159	V1160	N1161	E1162	F1163	E1164	K1165	V1168	I1169	I1170	T1171	T1172	K1173	E1174	K1175	A1176	N1177	E1178	Y1179	I1180	A1181	N1182	V1183	D1184	G1185	E1186	F1187	K1188	K1189	V1190	L1191	I1192	E1193															
L1085	R1086	K1087	M1088	T1091	M1092	T1093	E1094	N1095	D1096	L1097	L1098	R1099	Y1100	I1101	I1102	N1103	T1104	I1105	G1106	T1107	T1108	D1109	K1110	P1111	R1112	R1113	G1114	I1115	E1116	L1117	S1118	K1119	L1120	S1121	F1122	I1126	S1127	N1128	Q1132	D1133	R1134	F1137	R1138	K1139	R1140	I1141	M1142	N1143	T1144	K1145	F1146	E1147	D1148	F1149	Y1150
G1019	E1020	Y1021	L1022	P1023	P1024	S1025	F1026	T1027	V1028	I1029	V1030	A1031	A1032	L1033	K1034	N1035	Y1037	L1038	W1039	D1040	T1041	V1042	R1043	G1047	A1048	Y1049	G1050	V1051	F1052	A1053	D1054	E1055	Y1056	D1057	D1058	G1059	S1060	V1061	V1062	F1063	L1064	S1065	A1066	R1067	D1068	P1069	N1070	L1071	E1072	K1073	T1077	F1078	R1079	K1083	G1084
S956	Y957	F958	E959	E960	N961	D962	K963	Y964	Y965	ASN	ASP	MET	GLN	ASN	D908	F909	K910	T911	L912	R915	L916	Y917	R918	T919	R920	N921	R922	Y923	F924	N925	K926	N928	L929	N930	Y933	T934	S935	D936	Y937	G938	L940	K941	H942	T1004	F1005	Y945	V1006	N1007	S1010	M1011	I1014	L1015	F1016	K1017	P1018
R894	Y895	L896	K897	L898	Q899	E900	Q901	L902	E903	L904	A905	E906	GLN	ASN	D908	F909	K910	T911	L912	R915	L916	Y917	R918	T919	R920	N921	R922	Y923	F924	N925	K926	N928	L929	N930	Y933	T934	S935	D936	Y937	G938	L940	K941	H942	T1004	F1005	Y945	V1006	N1007	S1010	M1011	I1014	L1015	F1016	K1017	P1018
C826	N827	D828	I832	A833	L834	E835	A836	L837	K838	E839	S840	D841	S843	K846	K847	V848	I849	D850	I851	L852	K853	R854	I856	N857	G858	K859	K860	T861	T862	F863	S864	E865	Y868	A869	I870	L871	M872	K873	Y874	V875	K876	K882	A885	H886	N887	I888	I889	Y890	G891	L892	S893				
Y758	L759	N760	L761	F762	K763	T764	L765	L766	L767	E768	N769	K770	T771	R774	F775	S776	F779	V780	L781	L782	R783	N786	L787	G788	S789	M790	S791	A792	Y797	S798	K799	D800	D801	H802	L803	N804	V805	T806	D807	K808	Y809	N810	A811	Q812	A813	L814	F815	N816	L817	E818	M819	H820	Y821	L822	S823

## 4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 21 21 21	Depositor
Cell constants a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	93.78Å 105.29Å 114.76Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	42.83 – 3.20 42.83 – 2.84	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.9 (42.83-3.20) 95.4 (42.83-2.84)	Depositor EDS
$R_{merge}$	0.26	Depositor
$R_{sym}$	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ <sup>1</sup>	1.24 (at 2.86Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX (PHENIX.REFINE: 1.6_289)	Depositor
R, $R_{free}$	0.210 , 0.316 0.219 , 0.246	Depositor DCC
$R_{free}$ test set	799 reflections (4.14%)	DCC
Wilson B-factor (Å <sup>2</sup> )	50.1	Xtriage
Anisotropy	0.258	Xtriage
Bulk solvent $k_{sol}$ (e/Å <sup>3</sup> ), $B_{sol}$ (Å <sup>2</sup> )	0.36 , 78.7	EDS
L-test for twinning <sup>2</sup>	$\langle  L  \rangle = 0.42$ , $\langle L^2 \rangle = 0.24$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
$F_o, F_c$ correlation	0.89	EDS
Total number of atoms	8741	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	36.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.34% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

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

<sup>2</sup>Theoretical 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: ZN

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z  >5	RMSZ	# Z  >5
1	A	1.79	58/8849 (0.7%)	1.11	36/11918 (0.3%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	1

All (58) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	438	CYS	CB-SG	-10.15	1.65	1.82
1	A	826	CYS	CB-SG	-7.60	1.69	1.82
1	A	818	GLU	CG-CD	-7.31	1.41	1.51
1	A	188	TYR	CE1-CZ	-6.19	1.30	1.38
1	A	821	VAL	CA-CB	-6.18	1.41	1.54
1	A	188	TYR	CE2-CZ	-6.10	1.30	1.38
1	A	340	TYR	CE2-CZ	-6.06	1.30	1.38
1	A	502	ALA	CA-CB	-5.98	1.39	1.52
1	A	188	TYR	CD2-CE2	-5.97	1.30	1.39
1	A	564	TYR	CD2-CE2	-5.93	1.30	1.39
1	A	207	GLU	CD-OE1	-5.89	1.19	1.25
1	A	797	TYR	CD1-CE1	-5.89	1.30	1.39
1	A	1057	TYR	CD2-CE2	-5.88	1.30	1.39
1	A	71	TYR	CE2-CZ	-5.86	1.30	1.38
1	A	741	TYR	CD2-CE2	-5.80	1.30	1.39
1	A	241	TYR	CE2-CZ	-5.78	1.31	1.38
1	A	1057	TYR	CE2-CZ	-5.75	1.31	1.38
1	A	241	TYR	CD2-CE2	-5.74	1.30	1.39

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	809	TYR	CE1-CZ	-5.71	1.31	1.38
1	A	1021	TYR	CD1-CE1	-5.70	1.30	1.39
1	A	818	GLU	CB-CG	-5.62	1.41	1.52
1	A	71	TYR	CD2-CE2	-5.56	1.31	1.39
1	A	181	PHE	CD1-CE1	-5.54	1.28	1.39
1	A	343	TYR	CE2-CZ	-5.53	1.31	1.38
1	A	1026	PHE	CD2-CE2	-5.52	1.28	1.39
1	A	1057	TYR	CE1-CZ	-5.52	1.31	1.38
1	A	1153	ALA	CA-CB	-5.49	1.41	1.52
1	A	321	TYR	CE2-CZ	-5.48	1.31	1.38
1	A	182	PHE	CD1-CE1	-5.41	1.28	1.39
1	A	181	PHE	CD2-CE2	-5.35	1.28	1.39
1	A	262	TYR	CD2-CE2	-5.33	1.31	1.39
1	A	1163	PHE	CD1-CE1	-5.31	1.28	1.39
1	A	564	TYR	CE2-CZ	-5.30	1.31	1.38
1	A	1021	TYR	CE1-CZ	-5.26	1.31	1.38
1	A	1057	TYR	CD1-CE1	-5.26	1.31	1.39
1	A	1021	TYR	CD2-CE2	-5.25	1.31	1.39
1	A	171	TYR	CD1-CE1	-5.23	1.31	1.39
1	A	732	TYR	CD1-CE1	-5.23	1.31	1.39
1	A	321	TYR	CD1-CE1	-5.21	1.31	1.39
1	A	1037	TYR	CD1-CE1	-5.20	1.31	1.39
1	A	340	TYR	CD2-CE2	-5.19	1.31	1.39
1	A	944	PHE	CD1-CE1	-5.16	1.28	1.39
1	A	944	PHE	CD2-CE2	-5.15	1.28	1.39
1	A	661	PHE	CE2-CZ	-5.13	1.27	1.37
1	A	741	TYR	CE2-CZ	-5.12	1.31	1.38
1	A	144	TYR	CE1-CZ	-5.11	1.31	1.38
1	A	114	ALA	CA-CB	-5.11	1.41	1.52
1	A	182	PHE	CD2-CE2	-5.08	1.29	1.39
1	A	321	TYR	CD2-CE2	-5.08	1.31	1.39
1	A	1000	PHE	CD1-CE1	-5.07	1.29	1.39
1	A	1078	PHE	CD2-CE2	-5.06	1.29	1.39
1	A	1150	TYR	CE1-CZ	-5.05	1.31	1.38
1	A	321	TYR	CE1-CZ	-5.04	1.31	1.38
1	A	188	TYR	CD1-CE1	-5.04	1.31	1.39
1	A	241	TYR	CD1-CE1	-5.03	1.31	1.39
1	A	144	TYR	CE2-CZ	-5.03	1.32	1.38
1	A	354	TYR	CE1-CZ	-5.03	1.32	1.38
1	A	503	VAL	CB-CG1	-5.03	1.42	1.52

All (36) bond angle outliers are listed below:



Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	915	ILE	CB-CA-C	-7.40	96.80	111.60
1	A	365	VAL	CB-CA-C	-6.51	99.02	111.40
1	A	945	VAL	CB-CA-C	-6.49	99.07	111.40
1	A	837	VAL	CB-CA-C	-6.44	99.16	111.40
1	A	856	ILE	CB-CA-C	-6.38	98.83	111.60
1	A	821	VAL	CB-CA-C	-6.13	99.76	111.40
1	A	1002	LEU	CA-CB-CG	6.09	129.31	115.30
1	A	661	PHE	N-CA-C	-6.00	94.81	111.00
1	A	493	VAL	CB-CA-C	-5.99	100.03	111.40
1	A	440	LEU	CA-CB-CG	5.89	128.85	115.30
1	A	991	ASP	N-CA-C	-5.82	95.28	111.00
1	A	786	ASN	N-CA-C	5.79	126.63	111.00
1	A	904	LEU	CA-CB-CG	5.78	128.59	115.30
1	A	486	ILE	CB-CA-C	-5.78	100.04	111.60
1	A	242	ASN	N-CA-C	5.77	126.59	111.00
1	A	275	GLY	N-CA-C	-5.64	98.99	113.10
1	A	771	THR	CA-CB-CG2	-5.62	104.53	112.40
1	A	105	ASP	CB-CG-OD1	-5.55	113.30	118.30
1	A	301	VAL	CB-CA-C	-5.51	100.92	111.40
1	A	510	ILE	CB-CA-C	-5.51	100.58	111.60
1	A	528	VAL	CB-CA-C	-5.49	100.96	111.40
1	A	1108	ILE	CG1-CB-CG2	-5.45	99.42	111.40
1	A	848	VAL	CB-CA-C	-5.32	101.30	111.40
1	A	1134	ARG	NE-CZ-NH1	-5.28	117.66	120.30
1	A	181	PHE	N-CA-C	-5.23	96.89	111.00
1	A	1102	ILE	CB-CA-C	-5.22	101.16	111.60
1	A	499	ASN	N-CA-C	-5.21	96.94	111.00
1	A	597	LEU	CA-CB-CG	-5.16	103.42	115.30
1	A	325	LEU	CB-CG-CD2	-5.15	102.24	111.00
1	A	582	ILE	CB-CA-C	-5.13	101.33	111.60
1	A	770	LYS	CD-CE-NZ	5.12	123.49	111.70
1	A	105	ASP	C-N-CD	-5.11	109.36	120.60
1	A	292	TYR	N-CA-C	-5.09	97.24	111.00
1	A	1085	LEU	CA-CB-CG	5.05	126.91	115.30
1	A	485	VAL	CB-CA-C	-5.01	101.88	111.40
1	A	646	SER	N-CA-C	-5.00	97.50	111.00

There are no chirality outliers.

All (1) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	560	ASN	Peptide

## 5.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	8674	0	8613	1304	2
2	A	1	0	0	0	0
3	A	66	0	0	6	0
All	All	8741	0	8613	1304	2

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 75.

All (1304) close contacts within the same asymmetric unit are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:263:MET:CE	1:A:457:ILE:HD12	1.14	1.54
1:A:610:ASN:C	1:A:613:GLU:CG	1.75	1.50
1:A:232:TYR:HB2	1:A:614:LYS:NZ	1.30	1.45
1:A:151:LEU:O	1:A:155:THR:CG2	1.67	1.42
1:A:612:GLN:CB	1:A:616:GLN:HB3	1.49	1.42
1:A:543:LEU:HD23	1:A:544:ILE:N	1.30	1.39
1:A:612:GLN:HG2	1:A:616:GLN:CB	1.52	1.39
1:A:263:MET:HE2	1:A:457:ILE:CD1	0.93	1.38
1:A:612:GLN:CG	1:A:616:GLN:CB	2.02	1.38
1:A:653:LEU:HD12	1:A:654:GLU:N	1.33	1.38
1:A:770:LYS:O	1:A:771:THR:CG2	1.70	1.37
1:A:350:ILE:HD13	1:A:581:VAL:O	1.20	1.36
1:A:611:GLU:HA	1:A:613:GLU:CB	1.56	1.34
1:A:1017:LYS:N	1:A:1020:GLU:OE2	1.61	1.34
1:A:266:ASP:OD2	1:A:341:GLN:NE2	1.56	1.33
1:A:263:MET:CE	1:A:457:ILE:CD1	1.80	1.32
1:A:612:GLN:CA	1:A:613:GLU:HB2	1.60	1.30
1:A:612:GLN:CG	1:A:616:GLN:HB3	1.56	1.29
1:A:348:PHE:O	1:A:350:ILE:HD11	1.11	1.29
1:A:770:LYS:O	1:A:771:THR:HG22	1.15	1.27
1:A:612:GLN:HB2	1:A:616:GLN:N	1.47	1.27
1:A:141:ASN:HB2	1:A:190:ASP:OD2	1.28	1.26
1:A:294:LYS:O	1:A:300:LYS:NZ	1.69	1.26
1:A:846:LYS:NZ	1:A:850:ASP:OD1	1.65	1.26

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1024:PRO:O	1:A:1141:ILE:CD1	1.86	1.23
1:A:522:SER:O	1:A:525:ILE:HD13	1.38	1.22
1:A:612:GLN:HB3	1:A:615:GLU:CB	1.68	1.22
1:A:942:HIS:O	1:A:947:SER:OG	1.54	1.22
1:A:119:THR:O	1:A:167:ASP:O	1.58	1.22
1:A:314:LEU:C	1:A:314:LEU:HD12	1.49	1.21
1:A:612:GLN:HA	1:A:613:GLU:CB	1.62	1.21
1:A:625:SER:O	1:A:629:ASN:ND2	1.72	1.20
1:A:925:ASN:CG	1:A:965:ILE:HD11	1.60	1.20
1:A:624:LEU:HD23	1:A:624:LEU:C	1.48	1.20
1:A:143:ASN:OD1	1:A:196:ASN:ND2	1.71	1.19
1:A:263:MET:CE	1:A:457:ILE:HG23	1.69	1.19
1:A:614:LYS:O	1:A:618:ILE:HD13	1.42	1.19
1:A:145:LYS:NZ	1:A:628:LYS:O	1.76	1.18
1:A:677:LEU:O	1:A:677:LEU:HD12	1.37	1.18
1:A:407:LEU:HD23	1:A:407:LEU:N	1.51	1.17
1:A:525:ILE:N	1:A:525:ILE:HD12	1.55	1.17
1:A:834:LEU:O	1:A:834:LEU:HD12	1.42	1.17
1:A:263:MET:HE2	1:A:457:ILE:HD13	1.25	1.17
1:A:556:ASN:O	1:A:560:ASN:ND2	1.77	1.16
1:A:202:TYR:CD1	1:A:624:LEU:HB2	1.81	1.16
1:A:314:LEU:O	1:A:314:LEU:HD12	1.43	1.16
1:A:231:ASP:O	1:A:233:LYS:HD2	1.43	1.15
1:A:348:PHE:O	1:A:350:ILE:CD1	1.94	1.15
1:A:1180:ILE:O	1:A:1184:ASP:O	1.64	1.15
1:A:957:TYR:O	1:A:960:GLU:HB2	1.47	1.15
1:A:599:LYS:O	1:A:603:LYS:HD3	1.46	1.14
1:A:65:SER:OG	1:A:87:THR:CG2	1.94	1.14
1:A:605:ARG:O	1:A:609:PHE:CE1	2.00	1.13
1:A:612:GLN:HG2	1:A:616:GLN:HB2	1.15	1.13
1:A:611:GLU:CA	1:A:613:GLU:CB	2.27	1.13
1:A:522:SER:O	1:A:525:ILE:CD1	1.95	1.13
1:A:65:SER:OG	1:A:87:THR:HG21	1.44	1.13
1:A:925:ASN:OD1	1:A:965:ILE:HD11	1.47	1.12
1:A:525:ILE:H	1:A:525:ILE:CD1	1.50	1.12
1:A:610:ASN:O	1:A:613:GLU:HG2	1.44	1.12
1:A:610:ASN:C	1:A:613:GLU:HG2	0.84	1.12
1:A:151:LEU:O	1:A:155:THR:HG21	1.41	1.12
1:A:237:ASN:HD22	1:A:237:ASN:C	1.54	1.11
1:A:1099:ARG:CG	1:A:1099:ARG:HH11	1.59	1.11
1:A:350:ILE:HD12	1:A:350:ILE:N	1.63	1.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:621:PHE:O	1:A:625:SER:OG	1.67	1.10
1:A:624:LEU:HD23	1:A:625:SER:N	1.64	1.10
1:A:349:TYR:CA	1:A:350:ILE:HD12	1.81	1.09
1:A:770:LYS:C	1:A:771:THR:HG23	1.68	1.09
1:A:1189:LYS:HD2	1:A:1189:LYS:N	1.54	1.09
1:A:593:GLU:O	1:A:597:LEU:HD12	1.52	1.09
1:A:610:ASN:CA	1:A:613:GLU:HG2	1.81	1.09
1:A:81:GLU:OE2	1:A:548:GLU:HB2	1.51	1.09
1:A:151:LEU:O	1:A:155:THR:HG23	1.37	1.09
1:A:667:ASN:O	1:A:952:LYS:NZ	1.85	1.09
1:A:407:LEU:N	1:A:408:GLU:OE2	1.85	1.08
1:A:419:ILE:HG22	1:A:420:ASN:N	1.65	1.08
1:A:858:GLY:HA2	1:A:861:THR:CG2	1.82	1.08
1:A:521:THR:O	1:A:522:SER:OG	1.68	1.08
1:A:600:GLN:HA	1:A:600:GLN:NE2	1.59	1.08
1:A:1189:LYS:CD	1:A:1189:LYS:H	1.63	1.07
1:A:332:ASP:OD1	1:A:334:ALA:CB	2.03	1.07
1:A:1103:ASN:O	1:A:1107:THR:HG23	1.54	1.07
1:A:139:SER:O	1:A:142:TYR:O	1.69	1.06
1:A:945:VAL:O	1:A:948:ASN:OD1	1.71	1.06
1:A:312:THR:O	1:A:316:ASN:ND2	1.89	1.06
1:A:1145:LYS:HD2	1:A:1147:GLU:OE1	1.55	1.06
1:A:406:SER:C	1:A:407:LEU:HD23	1.76	1.06
1:A:493:VAL:HG13	1:A:493:VAL:O	1.56	1.05
1:A:1145:LYS:CD	1:A:1147:GLU:OE1	2.03	1.05
1:A:349:TYR:C	1:A:350:ILE:HD12	1.76	1.05
1:A:742:LEU:HD21	1:A:943:LEU:HD13	1.35	1.05
1:A:611:GLU:HA	1:A:613:GLU:HB2	1.20	1.05
1:A:1099:ARG:HG3	1:A:1099:ARG:NH1	1.51	1.05
1:A:860:LYS:NZ	1:A:860:LYS:HB2	1.65	1.04
1:A:770:LYS:C	1:A:771:THR:CG2	2.18	1.04
1:A:745:VAL:CG1	1:A:814:LEU:CD2	2.35	1.04
1:A:301:VAL:O	1:A:301:VAL:HG12	1.54	1.04
1:A:837:VAL:HG12	1:A:838:LYS:N	1.65	1.04
1:A:996:LYS:O	1:A:996:LYS:HG2	1.55	1.04
1:A:445:ILE:HG22	1:A:445:ILE:O	1.56	1.04
1:A:600:GLN:HA	1:A:600:GLN:HE21	0.91	1.04
1:A:628:LYS:O	3:A:1200:HOH:O	1.76	1.03
1:A:263:MET:HE1	1:A:457:ILE:CG2	1.87	1.03
1:A:603:LYS:N	1:A:603:LYS:HD2	1.71	1.03
1:A:232:TYR:CD2	1:A:232:TYR:C	2.30	1.03

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:145:LYS:HD3	1:A:630:ALA:O	1.57	1.02
1:A:593:GLU:O	1:A:597:LEU:CD1	2.06	1.02
1:A:557:LYS:HB2	1:A:564:TYR:CE2	1.94	1.02
1:A:68:HIS:ND1	1:A:71:TYR:HD1	1.57	1.02
1:A:548:GLU:HA	1:A:548:GLU:OE1	1.60	1.01
1:A:697:LEU:O	1:A:698:LYS:HD3	1.60	1.01
1:A:1007:ASN:ND2	1:A:1070:ASN:O	1.94	1.01
1:A:745:VAL:HG11	1:A:814:LEU:HD22	1.43	1.01
1:A:610:ASN:O	1:A:613:GLU:HB3	1.59	1.00
1:A:612:GLN:HB2	1:A:616:GLN:HB3	1.43	1.00
1:A:542:LEU:HD23	1:A:542:LEU:N	1.73	1.00
1:A:624:LEU:O	1:A:627:TYR:N	1.93	1.00
1:A:745:VAL:HG12	1:A:814:LEU:HD23	1.41	1.00
1:A:1099:ARG:HG3	1:A:1099:ARG:HH11	0.86	0.99
1:A:806:THR:OG1	1:A:1057:TYR:O	1.80	0.99
1:A:544:ILE:O	1:A:544:ILE:HD12	1.60	0.99
1:A:612:GLN:CB	1:A:616:GLN:CB	2.36	0.99
1:A:624:LEU:C	1:A:624:LEU:CD2	2.29	0.99
1:A:424:ILE:O	1:A:424:ILE:HG23	1.61	0.99
1:A:660:TYR:OH	1:A:670:ILE:O	1.80	0.99
1:A:332:ASP:OD1	1:A:334:ALA:HB2	1.60	0.98
1:A:611:GLU:CA	1:A:613:GLU:HB2	1.91	0.98
1:A:145:LYS:CD	1:A:630:ALA:O	2.12	0.98
1:A:232:TYR:HD2	1:A:232:TYR:O	1.43	0.98
1:A:543:LEU:CD2	1:A:544:ILE:N	2.25	0.98
1:A:1024:PRO:O	1:A:1141:ILE:HD11	1.63	0.98
1:A:372:ASN:O	1:A:455:GLN:NE2	1.94	0.98
1:A:406:SER:C	1:A:408:GLU:OE2	2.02	0.97
1:A:612:GLN:CB	1:A:616:GLN:N	2.26	0.97
1:A:350:ILE:CD1	1:A:581:VAL:O	2.10	0.97
1:A:925:ASN:OD1	1:A:965:ILE:CD1	2.13	0.97
1:A:1026:PHE:O	1:A:1030:VAL:HG23	1.64	0.96
1:A:874:TYR:CD2	1:A:874:TYR:C	2.34	0.96
1:A:278:LYS:HB2	1:A:278:LYS:HZ2	1.29	0.96
1:A:745:VAL:CG1	1:A:814:LEU:HD22	1.93	0.96
1:A:263:MET:HE2	1:A:457:ILE:HD11	1.46	0.96
1:A:624:LEU:CD2	1:A:625:SER:N	2.27	0.96
1:A:653:LEU:HD12	1:A:654:GLU:H	1.13	0.96
1:A:232:TYR:CB	1:A:614:LYS:NZ	2.27	0.96
1:A:349:TYR:HA	1:A:350:ILE:HD12	1.47	0.96
1:A:612:GLN:O	1:A:616:GLN:HG2	1.66	0.96

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:543:LEU:CD2	1:A:544:ILE:H	1.78	0.95
1:A:1064:LEU:HD12	1:A:1065:SER:N	1.81	0.95
1:A:515:LYS:NZ	3:A:1224:HOH:O	1.98	0.95
1:A:120:LEU:N	1:A:120:LEU:HD12	1.77	0.95
1:A:611:GLU:HA	1:A:613:GLU:HB3	1.47	0.95
1:A:858:GLY:CA	1:A:861:THR:HG22	1.97	0.95
1:A:860:LYS:HB2	1:A:860:LYS:HZ3	1.17	0.95
1:A:612:GLN:HB3	1:A:615:GLU:HB3	1.45	0.94
1:A:263:MET:HE1	1:A:457:ILE:HG23	0.95	0.94
1:A:1109:ASP:OD2	1:A:1138:ARG:NH1	2.01	0.94
1:A:610:ASN:O	1:A:613:GLU:CB	2.15	0.93
1:A:202:TYR:HD1	1:A:624:LEU:HB2	1.19	0.93
1:A:542:LEU:CD2	1:A:542:LEU:N	2.29	0.93
1:A:1170:ILE:O	1:A:1170:ILE:HG22	1.68	0.93
1:A:373:PRO:HG2	1:A:373:PRO:O	1.69	0.92
1:A:1024:PRO:O	1:A:1141:ILE:HD13	1.69	0.92
1:A:874:TYR:C	1:A:874:TYR:HD2	1.73	0.92
1:A:612:GLN:C	1:A:616:GLN:HB3	1.90	0.92
1:A:1145:LYS:CE	1:A:1147:GLU:OE1	2.18	0.92
1:A:278:LYS:NZ	1:A:278:LYS:CB	2.30	0.92
1:A:614:LYS:C	1:A:616:GLN:H	1.72	0.92
1:A:908:ASP:HB3	1:A:911:THR:OG1	1.69	0.92
1:A:858:GLY:HA2	1:A:861:THR:HG21	1.51	0.92
1:A:645:ILE:HG12	1:A:648:LEU:HD12	1.49	0.91
1:A:614:LYS:HA	1:A:617:VAL:HB	1.51	0.91
1:A:1176:ALA:O	1:A:1180:ILE:HD12	1.69	0.91
1:A:605:ARG:O	1:A:609:PHE:HE1	1.50	0.91
1:A:653:LEU:CD1	1:A:654:GLU:N	2.30	0.91
1:A:812:GLN:N	1:A:812:GLN:HE21	1.67	0.91
1:A:821:VAL:O	1:A:821:VAL:HG23	1.70	0.91
1:A:263:MET:SD	1:A:457:ILE:HD12	2.09	0.91
1:A:1104:THR:O	1:A:1107:THR:OG1	1.89	0.91
1:A:148:ILE:O	1:A:148:ILE:HG12	1.68	0.91
1:A:407:LEU:CA	1:A:408:GLU:OE2	2.19	0.91
1:A:232:TYR:HB2	1:A:614:LYS:HZ3	1.09	0.90
1:A:611:GLU:CA	1:A:613:GLU:CG	2.38	0.90
1:A:1189:LYS:HD2	1:A:1189:LYS:H	0.76	0.90
1:A:653:LEU:C	1:A:653:LEU:HD12	1.87	0.90
1:A:350:ILE:CD1	1:A:350:ILE:N	2.30	0.90
1:A:237:ASN:HD22	1:A:238:GLY:N	1.68	0.89
1:A:104:ASN:O	1:A:106:PRO:HD3	1.72	0.89

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:232:TYR:HB2	1:A:614:LYS:HZ2	1.34	0.89
1:A:419:ILE:CG2	1:A:420:ASN:N	2.35	0.89
1:A:131:LEU:O	1:A:135:VAL:HG13	1.71	0.89
1:A:497:GLY:HA2	1:A:566:GLU:OE2	1.72	0.89
1:A:278:LYS:NZ	1:A:278:LYS:HB2	1.87	0.89
1:A:233:LYS:O	1:A:234:VAL:HG22	1.73	0.89
1:A:748:LEU:HD21	1:A:923:ILE:HG23	1.54	0.89
1:A:1029:ILE:O	1:A:1032:ALA:HB3	1.73	0.89
1:A:858:GLY:HA2	1:A:861:THR:HG22	1.55	0.89
1:A:1144:THR:HG22	1:A:1144:THR:O	1.73	0.88
1:A:314:LEU:C	1:A:314:LEU:CD1	2.29	0.88
1:A:145:LYS:NZ	3:A:1200:HOH:O	2.06	0.88
1:A:1017:LYS:CA	1:A:1020:GLU:OE2	2.22	0.88
1:A:521:THR:C	1:A:522:SER:HG	1.75	0.88
1:A:645:ILE:HD13	1:A:645:ILE:O	1.73	0.88
1:A:677:LEU:HD12	1:A:677:LEU:C	1.84	0.88
1:A:688:MET:O	1:A:692:LEU:HG	1.74	0.88
1:A:252:LEU:H	1:A:252:LEU:HD12	1.39	0.88
1:A:200:ASN:OD1	1:A:202:TYR:HD2	1.57	0.88
1:A:525:ILE:H	1:A:525:ILE:HD12	0.74	0.88
1:A:594:GLN:HA	1:A:594:GLN:OE1	1.74	0.87
1:A:672:GLU:HA	1:A:672:GLU:OE2	1.72	0.87
1:A:686:ASP:O	1:A:690:VAL:HG23	1.74	0.87
1:A:445:ILE:HB	1:A:461:GLY:HA3	1.54	0.87
1:A:682:HIS:O	1:A:685:LYS:CB	2.22	0.87
1:A:605:ARG:O	1:A:609:PHE:CD1	2.26	0.87
1:A:141:ASN:CB	1:A:190:ASP:OD2	2.21	0.87
1:A:283:LEU:HD11	1:A:287:GLU:HG2	1.57	0.87
1:A:682:HIS:O	1:A:685:LYS:HB3	1.75	0.87
1:A:307:SER:OG	1:A:309:ASN:N	2.08	0.86
1:A:1110:LYS:HG3	1:A:1110:LYS:O	1.75	0.86
1:A:188:TYR:O	1:A:192:VAL:HG23	1.76	0.86
1:A:1017:LYS:HB2	1:A:1020:GLU:OE2	1.75	0.86
1:A:670:ILE:HG21	1:A:944:PHE:CD1	2.11	0.86
1:A:981:ASN:ND2	3:A:1238:HOH:O	2.08	0.86
1:A:860:LYS:CB	1:A:860:LYS:HZ3	1.85	0.86
1:A:885:ALA:O	1:A:889:ILE:HG13	1.75	0.86
1:A:232:TYR:CD2	1:A:232:TYR:O	2.29	0.85
1:A:603:LYS:CD	1:A:603:LYS:N	2.39	0.85
1:A:237:ASN:ND2	1:A:237:ASN:C	2.30	0.85
1:A:612:GLN:CA	1:A:616:GLN:HB3	2.05	0.85

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:949:GLU:O	1:A:953:ASN:ND2	2.08	0.85
1:A:745:VAL:HG11	1:A:814:LEU:CD2	2.04	0.85
1:A:874:TYR:CD2	1:A:874:TYR:O	2.29	0.85
1:A:263:MET:CE	1:A:457:ILE:HD13	1.82	0.85
1:A:213:VAL:O	1:A:214:GLU:HB2	1.77	0.84
1:A:627:TYR:CD2	1:A:627:TYR:O	2.30	0.84
1:A:858:GLY:C	1:A:861:THR:HG22	1.97	0.84
1:A:984:ILE:HG23	1:A:989:LEU:HD12	1.57	0.84
1:A:487:MET:O	1:A:491:LYS:CG	2.26	0.84
1:A:206:THR:HG23	1:A:628:LYS:NZ	1.93	0.84
1:A:689:ASP:O	1:A:693:LYS:HG3	1.78	0.84
1:A:138:GLY:HA2	1:A:147:SER:OG	1.78	0.84
1:A:600:GLN:NE2	1:A:600:GLN:CA	2.41	0.84
1:A:68:HIS:HB3	1:A:71:TYR:HB2	1.58	0.84
1:A:612:GLN:HB3	1:A:615:GLU:HB2	1.55	0.84
1:A:1039:TRP:O	1:A:1039:TRP:CD1	2.30	0.83
1:A:485:VAL:HG12	1:A:486:ILE:N	1.90	0.83
1:A:407:LEU:C	1:A:408:GLU:OE2	2.16	0.83
1:A:1017:LYS:CB	1:A:1020:GLU:OE2	2.27	0.83
1:A:809:TYR:CZ	1:A:990:PHE:HD2	1.95	0.83
1:A:541:PRO:HB2	1:A:542:LEU:CD2	2.09	0.83
1:A:992:GLU:C	1:A:994:LYS:H	1.76	0.83
1:A:102:GLY:C	1:A:103:THR:HG22	1.99	0.83
1:A:612:GLN:HB2	1:A:616:GLN:H	1.41	0.83
1:A:283:LEU:HD12	1:A:284:THR:N	1.94	0.83
1:A:543:LEU:HD21	1:A:544:ILE:HG22	1.59	0.83
1:A:561:GLU:HB3	1:A:564:TYR:HB2	1.60	0.83
1:A:857:ASN:O	1:A:861:THR:HB	1.79	0.83
1:A:252:LEU:HD12	1:A:252:LEU:N	1.92	0.83
1:A:862:THR:HG22	1:A:862:THR:O	1.77	0.83
1:A:614:LYS:O	1:A:618:ILE:CD1	2.24	0.82
1:A:645:ILE:CG1	1:A:648:LEU:HD12	2.08	0.82
1:A:846:LYS:NZ	1:A:850:ASP:CG	2.32	0.82
1:A:102:GLY:O	1:A:103:THR:HG22	1.77	0.82
1:A:134:SER:O	1:A:137:SER:OG	1.97	0.82
1:A:809:TYR:OH	1:A:990:PHE:HD2	1.63	0.82
1:A:745:VAL:HG12	1:A:814:LEU:CD2	2.07	0.82
1:A:113:PHE:CE1	1:A:115:PHE:HE2	1.97	0.82
1:A:885:ALA:O	1:A:889:ILE:CG1	2.28	0.82
1:A:670:ILE:HG21	1:A:944:PHE:HD1	1.44	0.82
1:A:1174:GLU:H	1:A:1174:GLU:CD	1.83	0.82

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:612:GLN:C	1:A:616:GLN:CG	2.48	0.82
1:A:902:LEU:HD12	1:A:902:LEU:O	1.80	0.82
1:A:161:ASN:HD22	1:A:162:ALA:H	1.28	0.81
1:A:543:LEU:CD2	1:A:544:ILE:HG22	2.09	0.81
1:A:557:LYS:HB2	1:A:564:TYR:HE2	1.44	0.81
1:A:612:GLN:HG3	1:A:616:GLN:CB	2.11	0.81
1:A:460:ILE:HD12	1:A:486:ILE:CD1	2.11	0.81
1:A:1160:VAL:CG2	1:A:1160:VAL:O	2.29	0.81
1:A:612:GLN:O	1:A:616:GLN:CG	2.29	0.81
1:A:68:HIS:ND1	1:A:71:TYR:CD1	2.40	0.81
1:A:1145:LYS:HE2	1:A:1147:GLU:OE1	1.81	0.81
1:A:193:PHE:O	1:A:194:GLN:CG	2.30	0.80
1:A:348:PHE:C	1:A:350:ILE:HD11	1.98	0.80
1:A:68:HIS:HD1	1:A:71:TYR:HD1	0.82	0.80
1:A:151:LEU:C	1:A:155:THR:HG21	2.02	0.80
1:A:237:ASN:ND2	1:A:238:GLY:N	2.30	0.80
1:A:424:ILE:O	1:A:424:ILE:CG2	2.30	0.80
1:A:812:GLN:N	1:A:812:GLN:NE2	2.29	0.80
1:A:603:LYS:CD	1:A:603:LYS:H	1.94	0.80
1:A:957:TYR:O	1:A:960:GLU:CB	2.28	0.80
1:A:148:ILE:O	1:A:148:ILE:CG1	2.30	0.80
1:A:821:VAL:CG2	1:A:821:VAL:O	2.30	0.80
1:A:992:GLU:O	1:A:994:LYS:N	2.13	0.80
1:A:1127:SER:O	1:A:1128:ASN:CB	2.27	0.80
1:A:544:ILE:O	1:A:544:ILE:CD1	2.29	0.80
1:A:569:VAL:O	1:A:573:PHE:HB2	1.81	0.80
1:A:139:SER:OG	1:A:190:ASP:C	2.21	0.80
1:A:645:ILE:CG1	1:A:645:ILE:O	2.30	0.80
1:A:531:MET:HG2	1:A:541:PRO:HB3	1.62	0.80
1:A:493:VAL:O	1:A:493:VAL:HG22	1.80	0.79
1:A:594:GLN:CA	1:A:594:GLN:OE1	2.29	0.79
1:A:765:LEU:O	1:A:765:LEU:HD12	1.83	0.79
1:A:612:GLN:O	1:A:616:GLN:CB	2.29	0.79
1:A:811:ALA:C	1:A:812:GLN:NE2	2.36	0.79
1:A:197:VAL:CG2	1:A:197:VAL:O	2.30	0.79
1:A:232:TYR:HD2	1:A:232:TYR:C	1.77	0.79
1:A:612:GLN:C	1:A:616:GLN:HG2	2.03	0.79
1:A:742:LEU:HD23	1:A:933:VAL:HG13	1.64	0.79
1:A:645:ILE:CD1	1:A:645:ILE:O	2.30	0.79
1:A:996:LYS:CG	1:A:996:LYS:O	2.29	0.79
1:A:612:GLN:CG	1:A:616:GLN:CA	2.61	0.79

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:697:LEU:O	1:A:698:LYS:CD	2.30	0.79
1:A:487:MET:O	1:A:491:LYS:HG3	1.83	0.79
1:A:610:ASN:O	1:A:613:GLU:CG	2.07	0.79
1:A:612:GLN:HG3	1:A:616:GLN:CA	2.13	0.78
1:A:1177:ASN:ND2	3:A:1259:HOH:O	2.15	0.78
1:A:513:ILE:HG22	1:A:514:LEU:N	1.95	0.78
1:A:672:GLU:OE2	1:A:672:GLU:CA	2.30	0.78
1:A:1039:TRP:C	1:A:1039:TRP:CD1	2.55	0.78
1:A:61:ILE:CG1	1:A:61:ILE:O	2.30	0.78
1:A:425:HIS:C	1:A:429:SER:OG	2.22	0.78
1:A:612:GLN:HA	1:A:613:GLU:HB2	0.80	0.78
1:A:680:ASN:ND2	1:A:683:MET:HB2	1.99	0.78
1:A:1145:LYS:O	1:A:1148:ASP:OD2	2.02	0.78
1:A:135:VAL:HG23	1:A:136:LEU:N	1.99	0.78
1:A:612:GLN:HG2	1:A:616:GLN:HB3	1.31	0.78
1:A:742:LEU:CD2	1:A:943:LEU:HD13	2.13	0.78
1:A:363:ASN:OD1	1:A:585:GLU:HA	1.83	0.78
1:A:425:HIS:O	1:A:429:SER:OG	2.00	0.77
1:A:682:HIS:O	1:A:685:LYS:N	2.18	0.77
1:A:721:THR:HG23	1:A:721:THR:O	1.83	0.77
1:A:745:VAL:CG1	1:A:814:LEU:HD23	2.04	0.77
1:A:332:ASP:OD1	1:A:334:ALA:N	2.17	0.77
1:A:232:TYR:CB	1:A:614:LYS:HZ3	1.90	0.77
1:A:542:LEU:H	1:A:542:LEU:HD23	1.48	0.77
1:A:612:GLN:HB3	1:A:615:GLU:CA	2.15	0.77
1:A:674:TYR:OH	1:A:733:GLU:OE2	2.03	0.77
1:A:616:GLN:HG3	1:A:617:VAL:H	1.50	0.77
1:A:102:GLY:C	1:A:103:THR:CG2	2.52	0.77
1:A:312:THR:HG22	1:A:313:GLU:N	1.98	0.77
1:A:135:VAL:CG2	1:A:136:LEU:N	2.45	0.76
1:A:570:GLU:HA	1:A:574:ILE:HD12	1.66	0.76
1:A:679:THR:OG1	1:A:680:ASN:N	2.17	0.76
1:A:548:GLU:CA	1:A:548:GLU:OE1	2.30	0.76
1:A:612:GLN:C	1:A:616:GLN:CB	2.53	0.76
1:A:834:LEU:HD12	1:A:834:LEU:C	1.93	0.76
1:A:373:PRO:O	1:A:373:PRO:CG	2.30	0.76
1:A:291:PHE:O	1:A:292:TYR:C	2.19	0.76
1:A:596:ASN:O	1:A:600:GLN:N	2.19	0.76
1:A:1028:VAL:O	1:A:1032:ALA:HB2	1.86	0.76
1:A:510:ILE:HG22	1:A:511:GLU:N	1.99	0.76
1:A:600:GLN:HE21	1:A:600:GLN:CA	1.85	0.76

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:278:LYS:HZ3	1:A:278:LYS:CB	1.97	0.76
1:A:610:ASN:C	1:A:613:GLU:CB	2.54	0.76
1:A:272:ASN:OD1	1:A:274:GLY:N	2.18	0.76
1:A:570:GLU:O	1:A:575:ASN:ND2	2.19	0.75
1:A:231:ASP:O	1:A:233:LYS:CD	2.30	0.75
1:A:616:GLN:HG3	1:A:617:VAL:N	2.02	0.75
1:A:1039:TRP:CZ2	1:A:1043:ARG:HD2	2.21	0.75
1:A:105:ASP:OD1	1:A:107:LEU:HD12	1.86	0.75
1:A:265:PRO:HD2	1:A:341:GLN:OE1	1.86	0.75
1:A:653:LEU:HD11	1:A:654:GLU:O	1.86	0.75
1:A:65:SER:N	1:A:66:PRO:HD3	2.01	0.75
1:A:1036:SER:O	1:A:1040:ASP:HB2	1.87	0.75
1:A:606:ILE:HG23	1:A:606:ILE:O	1.84	0.75
1:A:151:LEU:C	1:A:155:THR:CG2	2.55	0.75
1:A:543:LEU:HD23	1:A:544:ILE:H	0.93	0.75
1:A:619:LYS:HE2	1:A:623:GLU:CG	2.16	0.74
1:A:65:SER:OG	1:A:87:THR:HG23	1.87	0.74
1:A:528:VAL:O	1:A:532:THR:HG23	1.87	0.74
1:A:653:LEU:CD1	1:A:654:GLU:O	2.35	0.74
1:A:409:ASN:HB2	1:A:412:ASP:OD2	1.85	0.74
1:A:263:MET:CE	1:A:457:ILE:CG2	2.55	0.74
1:A:736:THR:O	1:A:737:THR:C	2.24	0.74
1:A:1095:ASN:O	1:A:1099:ARG:NH1	2.20	0.74
1:A:614:LYS:C	1:A:616:GLN:N	2.36	0.74
1:A:677:LEU:O	1:A:677:LEU:CD1	2.30	0.74
1:A:1154:ASP:O	1:A:1158:SER:HB3	1.88	0.74
1:A:132:GLU:OE1	1:A:164:THR:OG1	2.06	0.74
1:A:206:THR:HG23	1:A:628:LYS:HZ3	1.49	0.74
1:A:1014:ILE:HG22	1:A:1014:ILE:O	1.86	0.74
1:A:1179:TYR:CE1	1:A:1183:VAL:HB	2.23	0.73
1:A:742:LEU:HD21	1:A:943:LEU:CD1	2.15	0.73
1:A:232:TYR:HB2	1:A:614:LYS:HZ1	1.49	0.73
1:A:627:TYR:CG	1:A:627:TYR:O	2.40	0.73
1:A:856:ILE:O	1:A:856:ILE:CG2	2.34	0.73
1:A:612:GLN:HB2	1:A:616:GLN:CB	2.08	0.73
1:A:362:GLU:OE1	1:A:466:LYS:NZ	2.22	0.73
1:A:750:HIS:ND1	1:A:750:HIS:N	2.37	0.73
1:A:851:ILE:HG22	1:A:852:LEU:N	2.04	0.73
1:A:243:GLU:HG3	1:A:1049:TYR:CE1	2.24	0.73
1:A:612:GLN:HB2	1:A:616:GLN:CA	2.19	0.73
1:A:1127:SER:O	1:A:1128:ASN:HB3	1.88	0.73

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:487:MET:O	1:A:491:LYS:HG2	1.87	0.73
1:A:860:LYS:HB2	1:A:860:LYS:HZ2	1.54	0.72
1:A:595:GLU:O	1:A:598:GLU:HB3	1.88	0.72
1:A:278:LYS:HZ3	1:A:278:LYS:HB3	1.54	0.72
1:A:502:ALA:O	1:A:505:ALA:HB3	1.89	0.72
1:A:1103:ASN:C	1:A:1103:ASN:OD1	2.28	0.72
1:A:653:LEU:CD1	1:A:654:GLU:H	1.97	0.72
1:A:202:TYR:CE1	1:A:624:LEU:HB2	2.24	0.72
1:A:209:TRP:HE1	1:A:283:LEU:HB3	1.55	0.72
1:A:834:LEU:CD1	1:A:834:LEU:O	2.30	0.72
1:A:816:ASN:OD1	1:A:816:ASN:C	2.29	0.72
1:A:119:THR:O	1:A:167:ASP:C	2.27	0.71
1:A:1029:ILE:O	1:A:1032:ALA:N	2.23	0.71
1:A:193:PHE:O	1:A:194:GLN:HG2	1.90	0.71
1:A:769:ASN:ND2	1:A:841:ASP:O	2.20	0.71
1:A:887:ASN:O	1:A:891:GLY:N	2.23	0.71
1:A:1139:LYS:O	1:A:1139:LYS:CG	2.38	0.71
1:A:139:SER:C	1:A:196:ASN:OD1	2.27	0.71
1:A:1176:ALA:O	1:A:1180:ILE:CD1	2.38	0.71
1:A:797:TYR:HE1	1:A:814:LEU:HD12	1.55	0.71
1:A:860:LYS:CB	1:A:860:LYS:NZ	2.30	0.71
1:A:645:ILE:C	1:A:647:ASP:H	1.93	0.71
1:A:255:LEU:HD21	1:A:366:SER:HB3	1.71	0.71
1:A:460:ILE:HD12	1:A:486:ILE:HD13	1.73	0.71
1:A:616:GLN:OE1	1:A:616:GLN:C	2.29	0.71
1:A:233:LYS:O	1:A:234:VAL:CG2	2.39	0.71
1:A:560:ASN:H	1:A:560:ASN:ND2	1.89	0.71
1:A:606:ILE:CG2	1:A:606:ILE:O	2.35	0.71
1:A:807:ASP:OD2	1:A:809:TYR:N	2.23	0.70
1:A:145:LYS:HD2	1:A:630:ALA:O	1.89	0.70
1:A:299:LYS:O	1:A:302:LYS:HE3	1.91	0.70
1:A:587:ASP:OD1	1:A:587:ASP:C	2.29	0.70
1:A:79:ASN:C	1:A:79:ASN:OD1	2.30	0.70
1:A:856:ILE:O	1:A:856:ILE:HG22	1.85	0.70
1:A:200:ASN:HB3	1:A:203:ILE:HG13	1.73	0.70
1:A:554:VAL:O	1:A:555:LYS:C	2.25	0.70
1:A:612:GLN:CG	1:A:616:GLN:HB2	1.89	0.70
1:A:612:GLN:CB	1:A:615:GLU:C	2.59	0.70
1:A:91:HIS:HD2	1:A:322:LEU:HD13	1.55	0.70
1:A:645:ILE:O	1:A:645:ILE:HG12	1.90	0.70
1:A:937:TYR:O	1:A:937:TYR:HD2	1.75	0.70

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:233:LYS:C	1:A:234:VAL:CG2	2.60	0.70
1:A:1139:LYS:O	1:A:1139:LYS:HG3	1.92	0.70
1:A:213:VAL:HG23	1:A:214:GLU:N	2.06	0.70
1:A:509:ASN:OD1	1:A:509:ASN:C	2.30	0.70
1:A:598:GLU:HG2	1:A:599:LYS:HE3	1.74	0.70
1:A:1025:SER:O	1:A:1029:ILE:CD1	2.40	0.69
1:A:1064:LEU:HD12	1:A:1065:SER:H	1.56	0.69
1:A:945:VAL:HG12	1:A:946:ASN:N	2.03	0.69
1:A:254:ASP:C	1:A:254:ASP:OD1	2.29	0.69
1:A:450:ASN:OD1	1:A:450:ASN:C	2.29	0.69
1:A:145:LYS:N	1:A:632:GLU:OE1	2.24	0.69
1:A:609:PHE:C	1:A:610:ASN:O	2.29	0.69
1:A:723:TYR:C	1:A:726:ASN:HD22	1.94	0.69
1:A:284:THR:HB	1:A:287:GLU:H	1.57	0.69
1:A:360:GLU:OE1	1:A:468:ASN:ND2	2.26	0.69
1:A:1025:SER:O	1:A:1029:ILE:HD13	1.92	0.69
1:A:285:TYR:CE2	1:A:289:LYS:HE2	2.28	0.69
1:A:1101:ILE:CD1	1:A:1141:ILE:O	2.40	0.69
1:A:283:LEU:CD1	1:A:287:GLU:HG2	2.22	0.69
1:A:321:TYR:C	1:A:323:GLY:H	1.95	0.69
1:A:575:ASN:N	1:A:575:ASN:ND2	2.38	0.69
1:A:612:GLN:N	1:A:613:GLU:HB2	2.08	0.69
1:A:887:ASN:HA	1:A:891:GLY:HA3	1.73	0.69
1:A:94:ALA:O	1:A:95:LYS:HB2	1.90	0.69
1:A:645:ILE:HG12	1:A:648:LEU:CD1	2.23	0.69
1:A:810:ASN:OD1	1:A:810:ASN:C	2.31	0.69
1:A:1037:TYR:O	1:A:1038:LEU:C	2.22	0.68
1:A:1079:ARG:NE	1:A:1164:GLU:OE1	2.25	0.68
1:A:407:LEU:CD2	1:A:407:LEU:N	2.30	0.68
1:A:200:ASN:OD1	1:A:202:TYR:CD2	2.45	0.68
1:A:348:PHE:N	1:A:348:PHE:CD1	2.55	0.68
1:A:60:TRP:O	1:A:60:TRP:HE3	1.75	0.68
1:A:166:ASN:HD21	1:A:269:HIS:HA	1.59	0.68
1:A:180:ASP:O	1:A:183:ASN:N	2.27	0.68
1:A:623:GLU:O	1:A:626:LYS:HG3	1.93	0.68
1:A:612:GLN:CB	1:A:615:GLU:CB	2.61	0.68
1:A:612:GLN:CB	1:A:615:GLU:HB3	2.21	0.68
1:A:909:PHE:CE1	1:A:912:LEU:HD23	2.29	0.68
1:A:925:ASN:ND2	1:A:965:ILE:HD11	2.08	0.68
1:A:431:LEU:HD13	1:A:460:ILE:HD13	1.76	0.68
1:A:116:TYR:OH	1:A:536:ASN:OD1	2.06	0.68

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:809:TYR:OH	1:A:990:PHE:CD2	2.43	0.68
1:A:1103:ASN:O	1:A:1107:THR:CG2	2.39	0.68
1:A:139:SER:OG	1:A:190:ASP:O	2.10	0.68
1:A:575:ASN:N	1:A:575:ASN:HD22	1.92	0.68
1:A:1034:LYS:HD3	1:A:1053:ALA:H	1.59	0.67
1:A:105:ASP:C	1:A:105:ASP:OD1	2.30	0.67
1:A:1000:PHE:HD2	1:A:1192:ILE:HD11	1.59	0.67
1:A:85:THR:O	1:A:101:LEU:HA	1.93	0.67
1:A:560:ASN:H	1:A:560:ASN:HD22	1.39	0.67
1:A:892:TYR:O	1:A:893:GLU:C	2.27	0.67
1:A:846:LYS:HZ2	1:A:850:ASP:CG	1.96	0.67
1:A:299:LYS:HD2	1:A:299:LYS:H	1.59	0.67
1:A:551:LEU:O	1:A:555:LYS:HG3	1.95	0.67
1:A:624:LEU:O	1:A:627:TYR:HB3	1.95	0.67
1:A:66:PRO:O	1:A:73:ILE:HD11	1.94	0.67
1:A:1023:ASP:OD1	1:A:1024:PRO:N	2.28	0.67
1:A:663:ASN:C	1:A:663:ASN:OD1	2.30	0.67
1:A:1000:PHE:CD2	1:A:1192:ILE:HD11	2.29	0.67
1:A:61:ILE:HG12	1:A:61:ILE:O	1.93	0.67
1:A:79:ASN:OD1	1:A:81:GLU:N	2.28	0.67
1:A:838:LYS:HG2	1:A:839:GLU:HG2	1.77	0.67
1:A:180:ASP:O	1:A:181:PHE:C	2.31	0.67
1:A:312:THR:HG23	1:A:316:ASN:HD21	1.58	0.67
1:A:1179:TYR:HE2	1:A:1187:PHE:CE1	2.13	0.67
1:A:443:ASN:ND2	1:A:463:LYS:NZ	2.43	0.66
1:A:1112:ARG:HB3	1:A:1116:GLU:HB2	1.77	0.66
1:A:460:ILE:CD1	1:A:486:ILE:HD13	2.24	0.66
1:A:797:TYR:CE1	1:A:814:LEU:HD12	2.30	0.66
1:A:807:ASP:C	1:A:807:ASP:OD2	2.29	0.66
1:A:624:LEU:HD23	1:A:625:SER:CA	2.25	0.66
1:A:488:ASN:O	1:A:492:LYS:HB2	1.96	0.66
1:A:614:LYS:C	1:A:618:ILE:HD13	2.14	0.66
1:A:894:ASN:O	1:A:895:TYR:C	2.32	0.66
1:A:1058:ASP:C	1:A:1058:ASP:OD1	2.30	0.66
1:A:349:TYR:HA	1:A:350:ILE:CD1	2.24	0.66
1:A:332:ASP:CG	1:A:334:ALA:HB3	2.16	0.66
1:A:616:GLN:C	1:A:616:GLN:CD	2.53	0.66
1:A:1105:ILE:O	1:A:1109:ASP:HB2	1.96	0.66
1:A:240:VAL:O	1:A:241:TYR:C	2.32	0.66
1:A:408:GLU:N	1:A:408:GLU:OE2	2.29	0.66
1:A:557:LYS:O	1:A:561:GLU:N	2.29	0.66

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1029:ILE:O	1:A:1033:LEU:N	2.28	0.66
1:A:242:ASN:ND2	1:A:1047:GLY:O	2.29	0.66
1:A:291:PHE:O	1:A:292:TYR:O	2.13	0.66
1:A:369:TRP:CD1	1:A:576:ASN:HB3	2.30	0.66
1:A:619:LYS:O	1:A:623:GLU:N	2.22	0.66
1:A:756:LEU:O	1:A:759:LEU:HB2	1.95	0.66
1:A:259:GLU:O	1:A:263:MET:HG3	1.95	0.65
1:A:442:ASN:CB	1:A:857:ASN:HD22	2.09	0.65
1:A:441:GLY:HA3	1:A:462:LEU:HG	1.78	0.65
1:A:594:GLN:OE1	1:A:594:GLN:N	2.29	0.65
1:A:926:LYS:HD2	1:A:959:GLU:HG2	1.78	0.65
1:A:1178:GLU:OE2	1:A:1178:GLU:N	2.30	0.65
1:A:419:ILE:O	1:A:422:LEU:N	2.29	0.65
1:A:474:ASN:OD1	1:A:475:PHE:N	2.30	0.65
1:A:543:LEU:CD2	1:A:544:ILE:CG2	2.74	0.65
1:A:616:GLN:CG	1:A:617:VAL:N	2.60	0.65
1:A:1182:ASN:N	1:A:1182:ASN:OD1	2.30	0.65
1:A:127:ILE:N	1:A:128:PRO:CD	2.59	0.65
1:A:91:HIS:CD2	1:A:322:LEU:HD13	2.32	0.65
1:A:332:ASP:CG	1:A:334:ALA:CB	2.64	0.65
1:A:614:LYS:HD2	1:A:618:ILE:HD11	1.78	0.65
1:A:283:LEU:C	1:A:283:LEU:HD12	2.17	0.65
1:A:614:LYS:O	1:A:616:GLN:N	2.30	0.65
1:A:809:TYR:CZ	1:A:990:PHE:CD2	2.84	0.65
1:A:1010:SER:OG	1:A:1168:VAL:O	2.14	0.65
1:A:670:ILE:CG2	1:A:944:PHE:CD1	2.79	0.65
1:A:105:ASP:OD1	1:A:106:PRO:N	2.30	0.65
1:A:124:GLY:O	1:A:275:GLY:HA2	1.96	0.65
1:A:151:LEU:CA	1:A:155:THR:HG21	2.27	0.65
1:A:557:LYS:O	1:A:561:GLU:HB2	1.96	0.65
1:A:498:PHE:O	1:A:499:ASN:C	2.33	0.65
1:A:857:ASN:O	1:A:861:THR:CB	2.44	0.65
1:A:1029:ILE:O	1:A:1032:ALA:CB	2.43	0.64
1:A:1101:ILE:HG22	1:A:1102:ILE:N	2.06	0.64
1:A:139:SER:OG	1:A:191:SER:HA	1.97	0.64
1:A:202:TYR:O	1:A:206:THR:OG1	2.15	0.64
1:A:682:HIS:O	1:A:685:LYS:CA	2.45	0.64
1:A:312:THR:CG2	1:A:313:GLU:N	2.58	0.64
1:A:770:LYS:O	1:A:771:THR:HG23	1.66	0.64
1:A:564:TYR:C	1:A:564:TYR:CD1	2.66	0.64
1:A:575:ASN:HD22	1:A:575:ASN:H	1.44	0.64

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:858:GLY:O	1:A:861:THR:HG22	1.96	0.64
1:A:372:ASN:OD1	1:A:372:ASN:N	2.30	0.64
1:A:742:LEU:CD2	1:A:943:LEU:CD1	2.73	0.64
1:A:141:ASN:HD21	1:A:324:GLN:HE22	1.46	0.64
1:A:942:HIS:HA	1:A:946:ASN:HB2	1.80	0.64
1:A:957:TYR:O	1:A:960:GLU:N	2.28	0.64
1:A:332:ASP:OD1	1:A:334:ALA:HB3	1.94	0.64
1:A:266:ASP:CG	1:A:341:GLN:NE2	2.48	0.64
1:A:509:ASN:OD1	1:A:510:ILE:N	2.30	0.64
1:A:550:TYR:HA	1:A:553:ILE:HG13	1.78	0.64
1:A:862:THR:CG2	1:A:862:THR:O	2.46	0.64
1:A:894:ASN:O	1:A:894:ASN:ND2	2.30	0.64
1:A:193:PHE:O	1:A:194:GLN:HG3	1.97	0.64
1:A:232:TYR:O	1:A:233:LYS:HD2	1.98	0.64
1:A:981:ASN:O	1:A:981:ASN:ND2	2.30	0.64
1:A:645:ILE:CG1	1:A:648:LEU:CD1	2.76	0.63
1:A:119:THR:C	1:A:120:LEU:HD12	2.19	0.63
1:A:321:TYR:C	1:A:323:GLY:N	2.48	0.63
1:A:567:LYS:O	1:A:571:LYS:HB3	1.98	0.63
1:A:1138:ARG:O	1:A:1142:MET:HG3	1.99	0.63
1:A:347:PRO:HG3	1:A:579:ARG:NH2	2.13	0.63
1:A:992:GLU:C	1:A:994:LYS:N	2.46	0.63
1:A:642:ILE:HG23	1:A:643:ILE:N	2.13	0.63
1:A:799:LYS:H	1:A:810:ASN:HD21	1.47	0.63
1:A:860:LYS:CG	1:A:861:THR:N	2.62	0.63
1:A:1145:LYS:HD2	1:A:1147:GLU:CD	2.18	0.63
1:A:166:ASN:OD1	1:A:166:ASN:C	2.33	0.63
1:A:416:LEU:O	1:A:420:ASN:HB3	1.99	0.63
1:A:858:GLY:O	1:A:862:THR:OG1	2.14	0.63
1:A:455:GLN:C	1:A:456:TYR:HD2	2.02	0.63
1:A:1110:LYS:CG	1:A:1110:LYS:O	2.43	0.62
1:A:902:LEU:O	1:A:906:GLU:OE1	2.17	0.62
1:A:309:ASN:O	1:A:311:PRO:HD3	1.99	0.62
1:A:349:TYR:CA	1:A:350:ILE:CD1	2.69	0.62
1:A:81:GLU:OE2	1:A:548:GLU:CB	2.40	0.62
1:A:1113:ARG:O	1:A:1116:GLU:CG	2.47	0.62
1:A:1160:VAL:HG22	1:A:1160:VAL:O	1.96	0.62
1:A:771:THR:HB	1:A:839:GLU:O	1.99	0.62
1:A:858:GLY:O	1:A:862:THR:CB	2.47	0.62
1:A:276:ASP:HB3	1:A:278:LYS:HG3	1.81	0.62
1:A:185:MET:HG2	1:A:317:PHE:HE2	1.64	0.62

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:316:ASN:O	1:A:320:GLN:HG2	2.00	0.62
1:A:263:MET:HE1	1:A:457:ILE:CD1	2.06	0.62
1:A:512:PHE:C	1:A:512:PHE:CD2	2.71	0.62
1:A:732:TYR:OH	1:A:1121:SER:HB3	1.99	0.62
1:A:888:ILE:O	1:A:894:ASN:HB2	1.99	0.62
1:A:350:ILE:HD12	1:A:350:ILE:H	1.63	0.62
1:A:460:ILE:HD12	1:A:486:ILE:HD11	1.80	0.62
1:A:543:LEU:C	1:A:543:LEU:HD23	2.07	0.62
1:A:1113:ARG:O	1:A:1116:GLU:HG2	1.99	0.62
1:A:358:SER:O	1:A:361:LYS:HE2	1.99	0.62
1:A:263:MET:SD	1:A:457:ILE:HG23	2.40	0.62
1:A:571:LYS:HG2	1:A:572:HIS:CD2	2.34	0.62
1:A:369:TRP:NE1	1:A:579:ARG:HD3	2.14	0.62
1:A:441:GLY:HA2	1:A:465:ILE:HG23	1.81	0.62
1:A:781:ILE:O	1:A:781:ILE:CG2	2.41	0.62
1:A:805:VAL:HG23	1:A:1020:GLU:O	2.00	0.62
1:A:868:TYR:O	1:A:869:ALA:C	2.38	0.62
1:A:193:PHE:C	1:A:194:GLN:HG3	2.20	0.62
1:A:258:GLU:O	1:A:262:TYR:HD2	1.83	0.62
1:A:725:GLY:O	1:A:926:LYS:NZ	2.32	0.62
1:A:876:LYS:NZ	1:A:1056:GLU:OE2	2.32	0.62
1:A:665:ASN:HD21	1:A:956:SER:HB2	1.63	0.62
1:A:197:VAL:O	1:A:197:VAL:HG23	2.00	0.61
1:A:1180:ILE:C	1:A:1184:ASP:O	2.36	0.61
1:A:612:GLN:CB	1:A:615:GLU:CA	2.77	0.61
1:A:624:LEU:HD22	1:A:625:SER:N	2.14	0.61
1:A:665:ASN:ND2	1:A:956:SER:HB2	2.16	0.61
1:A:321:TYR:O	1:A:323:GLY:N	2.33	0.61
1:A:445:ILE:CG2	1:A:445:ILE:O	2.30	0.61
1:A:571:LYS:HD3	1:A:572:HIS:NE2	2.16	0.61
1:A:728:PRO:O	1:A:728:PRO:HG2	2.00	0.61
1:A:442:ASN:HB3	1:A:857:ASN:HD22	1.64	0.61
1:A:612:GLN:O	1:A:616:GLN:HB3	1.98	0.61
1:A:767:LEU:O	1:A:783:ARG:NH1	2.34	0.61
1:A:1070:ASN:OD1	1:A:1073:LYS:HE3	2.01	0.61
1:A:1189:LYS:CD	1:A:1189:LYS:N	2.30	0.61
1:A:739:ILE:HG22	1:A:740:VAL:N	2.16	0.61
1:A:619:LYS:HG2	1:A:623:GLU:HG2	1.81	0.60
1:A:149:GLY:O	1:A:153:LYS:HG3	2.01	0.60
1:A:129:HIS:NE2	1:A:243:GLU:OE1	2.31	0.60
1:A:285:TYR:N	1:A:286:GLU:OE1	2.34	0.60

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:542:LEU:O	1:A:545:PHE:HB2	2.02	0.60
1:A:677:LEU:HD11	1:A:684:LEU:HG	1.84	0.60
1:A:948:ASN:O	1:A:952:LYS:HG3	2.01	0.60
1:A:541:PRO:HB2	1:A:542:LEU:HD23	1.84	0.60
1:A:645:ILE:HD13	1:A:645:ILE:C	2.21	0.60
1:A:1029:ILE:O	1:A:1032:ALA:CA	2.49	0.60
1:A:120:LEU:N	1:A:120:LEU:CD1	2.54	0.60
1:A:139:SER:OG	1:A:191:SER:N	2.35	0.60
1:A:419:ILE:O	1:A:422:LEU:HB2	2.01	0.60
1:A:619:LYS:HE2	1:A:623:GLU:HG3	1.84	0.60
1:A:645:ILE:C	1:A:647:ASP:N	2.42	0.60
1:A:166:ASN:ND2	1:A:269:HIS:HA	2.15	0.60
1:A:857:ASN:O	1:A:861:THR:CG2	2.48	0.60
1:A:1126:ILE:O	1:A:1126:ILE:HG13	2.00	0.59
1:A:743:GLN:HG2	1:A:818:GLU:HG3	1.84	0.59
1:A:1093:THR:OG1	1:A:1094:GLU:N	2.35	0.59
1:A:356:ASP:OD2	1:A:358:SER:OG	2.19	0.59
1:A:562:PRO:C	1:A:564:TYR:N	2.54	0.59
1:A:797:TYR:HE1	1:A:814:LEU:CD1	2.14	0.59
1:A:827:ASN:HB2	1:A:950:SER:OG	2.00	0.59
1:A:876:LYS:NZ	1:A:1060:SER:OG	2.33	0.59
1:A:805:VAL:HG12	1:A:806:THR:H	1.67	0.59
1:A:612:GLN:CA	1:A:613:GLU:CB	2.42	0.59
1:A:763:LYS:HG2	1:A:764:THR:N	2.15	0.59
1:A:769:ASN:OD1	1:A:770:LYS:N	2.33	0.59
1:A:346:GLY:N	1:A:577:ALA:O	2.34	0.59
1:A:490:LEU:HD22	1:A:569:VAL:CG1	2.32	0.59
1:A:560:ASN:ND2	1:A:560:ASN:N	2.42	0.59
1:A:612:GLN:O	1:A:612:GLN:HG2	2.03	0.59
1:A:995:VAL:HG22	1:A:1165:LYS:HB3	1.85	0.59
1:A:542:LEU:HA	1:A:545:PHE:CD1	2.36	0.59
1:A:680:ASN:HD21	1:A:683:MET:HB2	1.68	0.59
1:A:934:THR:CG2	1:A:1118:SER:OG	2.50	0.59
1:A:619:LYS:CG	1:A:623:GLU:HG2	2.33	0.59
1:A:132:GLU:HG2	1:A:133:HIS:N	2.17	0.59
1:A:156:LEU:HD12	1:A:177:ASN:HB2	1.85	0.59
1:A:596:ASN:OD1	1:A:596:ASN:N	2.30	0.59
1:A:612:GLN:CB	1:A:615:GLU:N	2.66	0.59
1:A:624:LEU:HD23	1:A:624:LEU:O	2.00	0.59
1:A:953:ASN:H	1:A:953:ASN:HD22	1.49	0.59
1:A:746:PHE:CE1	1:A:924:PHE:CD1	2.90	0.59

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:805:VAL:HG12	1:A:806:THR:N	2.18	0.59
1:A:955:VAL:CG1	1:A:955:VAL:O	2.47	0.59
1:A:445:ILE:HB	1:A:461:GLY:CA	2.31	0.58
1:A:543:LEU:HD23	1:A:544:ILE:CG2	2.32	0.58
1:A:105:ASP:CG	1:A:107:LEU:HD12	2.24	0.58
1:A:107:LEU:HD13	1:A:1113:ARG:CZ	2.32	0.58
1:A:1160:VAL:HG23	1:A:1160:VAL:O	2.02	0.58
1:A:197:VAL:HG22	1:A:197:VAL:O	1.98	0.58
1:A:657:VAL:CG2	1:A:658:ASN:N	2.66	0.58
1:A:1086:ARG:NH2	1:A:1154:ASP:OD1	2.37	0.58
1:A:191:SER:O	1:A:195:PRO:HG3	2.03	0.58
1:A:504:GLU:O	1:A:508:ASN:HB2	2.03	0.58
1:A:113:PHE:CD1	1:A:115:PHE:HE2	2.22	0.58
1:A:753:VAL:HG22	1:A:980:TRP:HB2	1.86	0.58
1:A:1003:PRO:HG2	1:A:1003:PRO:O	2.03	0.58
1:A:892:TYR:O	1:A:895:TYR:N	2.37	0.58
1:A:113:PHE:CE2	1:A:173:ALA:HB3	2.38	0.58
1:A:258:GLU:O	1:A:262:TYR:CD2	2.57	0.58
1:A:613:GLU:O	1:A:617:VAL:HG23	2.03	0.58
1:A:232:TYR:O	1:A:233:LYS:HG3	2.04	0.58
1:A:233:LYS:C	1:A:234:VAL:HG23	2.22	0.58
1:A:557:LYS:CB	1:A:564:TYR:CE2	2.79	0.58
1:A:746:PHE:CE2	1:A:929:LEU:HD13	2.38	0.58
1:A:759:LEU:O	1:A:763:LYS:HB3	2.04	0.58
1:A:1171:THR:OG1	1:A:1172:THR:N	2.36	0.57
1:A:316:ASN:O	1:A:320:GLN:CG	2.52	0.57
1:A:675:ASN:H	1:A:675:ASN:ND2	2.02	0.57
1:A:372:ASN:HB3	1:A:406:SER:HA	1.85	0.57
1:A:619:LYS:HG2	1:A:623:GLU:CG	2.35	0.57
1:A:645:ILE:HA	1:A:648:LEU:HD12	1.86	0.57
1:A:935:SER:OG	1:A:939:ALA:HB3	2.04	0.57
1:A:544:ILE:O	1:A:544:ILE:CG1	2.44	0.57
1:A:283:LEU:HD12	1:A:284:THR:H	1.68	0.57
1:A:769:ASN:O	1:A:771:THR:HG23	2.03	0.57
1:A:613:GLU:O	1:A:617:VAL:CG2	2.53	0.57
1:A:1029:ILE:HA	1:A:1032:ALA:HB3	1.86	0.57
1:A:113:PHE:CE1	1:A:115:PHE:CE2	2.87	0.56
1:A:1115:ILE:HG13	1:A:1119:LYS:HG3	1.87	0.56
1:A:469:ASN:C	1:A:471:LYS:N	2.58	0.56
1:A:522:SER:O	1:A:525:ILE:HD11	1.96	0.56
1:A:597:LEU:HA	1:A:600:GLN:HB2	1.87	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:659:VAL:HB	1:A:687:ASN:HB3	1.86	0.56
1:A:1093:THR:O	1:A:1097:LEU:N	2.34	0.56
1:A:113:PHE:CD1	1:A:115:PHE:CE2	2.94	0.56
1:A:334:ALA:O	1:A:335:VAL:HG22	2.05	0.56
1:A:452:SER:C	1:A:453:LEU:HD23	2.26	0.56
1:A:801:ASP:O	1:A:802:HIS:HB2	2.05	0.56
1:A:834:LEU:CD1	1:A:834:LEU:C	2.60	0.56
1:A:834:LEU:HB2	1:A:954:LEU:HD13	1.87	0.56
1:A:1055:ILE:HG13	1:A:1056:GLU:N	2.19	0.56
1:A:618:ILE:HD12	1:A:618:ILE:N	2.20	0.56
1:A:91:HIS:HD2	1:A:322:LEU:CD1	2.19	0.56
1:A:858:GLY:CA	1:A:861:THR:CG2	2.58	0.56
1:A:1049:TYR:HB3	1:A:1067:ARG:HB2	1.88	0.56
1:A:797:TYR:CE1	1:A:814:LEU:CD1	2.88	0.56
1:A:582:ILE:HG22	1:A:582:ILE:O	1.99	0.56
1:A:1180:ILE:HA	1:A:1184:ASP:O	2.05	0.56
1:A:348:PHE:C	1:A:350:ILE:CD1	2.68	0.56
1:A:681:GLU:HA	1:A:684:LEU:HD12	1.88	0.56
1:A:948:ASN:OD1	1:A:948:ASN:N	2.30	0.56
1:A:425:HIS:N	1:A:429:SER:OG	2.39	0.55
1:A:542:LEU:HA	1:A:545:PHE:HD1	1.71	0.55
1:A:564:TYR:CD1	1:A:564:TYR:O	2.59	0.55
1:A:232:TYR:O	1:A:233:LYS:CG	2.54	0.55
1:A:612:GLN:HB2	1:A:615:GLU:N	2.21	0.55
1:A:1113:ARG:H	1:A:1116:GLU:HG3	1.70	0.55
1:A:624:LEU:O	1:A:627:TYR:CA	2.54	0.55
1:A:688:MET:C	1:A:690:VAL:N	2.59	0.55
1:A:151:LEU:HA	1:A:155:THR:CG2	2.37	0.55
1:A:407:LEU:HD21	1:A:572:HIS:CE1	2.41	0.55
1:A:875:VAL:HG12	1:A:876:LYS:N	2.22	0.55
1:A:252:LEU:CD1	1:A:252:LEU:N	2.65	0.55
1:A:645:ILE:CA	1:A:648:LEU:HD12	2.37	0.55
1:A:889:ILE:O	1:A:894:ASN:OD1	2.25	0.55
1:A:1023:ASP:OD1	1:A:1024:PRO:HD2	2.07	0.55
1:A:806:THR:C	1:A:807:ASP:O	2.42	0.55
1:A:267:ASN:O	1:A:270:SER:OG	2.22	0.55
1:A:573:PHE:N	1:A:573:PHE:CD1	2.72	0.55
1:A:604:LYS:O	1:A:607:GLU:HG2	2.06	0.55
1:A:1072:GLU:OE2	1:A:1179:TYR:CD1	2.60	0.55
1:A:334:ALA:C	1:A:335:VAL:CG2	2.75	0.55
1:A:542:LEU:HD22	1:A:542:LEU:N	2.20	0.55

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:876:LYS:CE	1:A:1060:SER:OG	2.54	0.54
1:A:151:LEU:HA	1:A:155:THR:HG21	1.89	0.54
1:A:790:MET:HG3	1:A:819:MET:HG2	1.88	0.54
1:A:193:PHE:C	1:A:194:GLN:CG	2.75	0.54
1:A:348:PHE:HD1	1:A:348:PHE:N	2.01	0.54
1:A:657:VAL:HG22	1:A:658:ASN:N	2.22	0.54
1:A:96:THR:O	1:A:96:THR:HG22	2.04	0.54
1:A:207:GLU:O	1:A:240:VAL:HG23	2.08	0.54
1:A:428:GLU:C	1:A:429:SER:O	2.41	0.54
1:A:71:TYR:HE1	1:A:319:ASP:HB2	1.73	0.54
1:A:860:LYS:HG2	1:A:861:THR:N	2.22	0.54
1:A:1028:VAL:O	1:A:1032:ALA:CB	2.55	0.54
1:A:154:GLY:CA	1:A:1099:ARG:O	2.55	0.54
1:A:1023:ASP:OD1	1:A:1024:PRO:CD	2.55	0.54
1:A:748:LEU:HD21	1:A:923:ILE:HD13	1.90	0.54
1:A:490:LEU:HD22	1:A:569:VAL:HG11	1.90	0.54
1:A:643:ILE:O	1:A:644:SER:C	2.45	0.54
1:A:1101:ILE:HD11	1:A:1141:ILE:O	2.06	0.54
1:A:1174:GLU:N	1:A:1174:GLU:CD	2.57	0.54
1:A:645:ILE:CB	1:A:648:LEU:HD12	2.37	0.54
1:A:688:MET:HG3	1:A:688:MET:O	2.08	0.54
1:A:1038:LEU:HB3	1:A:1051:VAL:HG21	1.89	0.54
1:A:139:SER:O	1:A:196:ASN:OD1	2.26	0.54
1:A:837:VAL:CG1	1:A:957:TYR:CE2	2.90	0.53
1:A:114:ALA:HA	1:A:171:TYR:O	2.09	0.53
1:A:769:ASN:O	1:A:771:THR:CG2	2.55	0.53
1:A:61:ILE:O	1:A:61:ILE:HG13	2.08	0.53
1:A:862:THR:HG23	1:A:865:GLU:HB2	1.89	0.53
1:A:1034:LYS:HD3	1:A:1053:ALA:N	2.22	0.53
1:A:268:VAL:O	1:A:268:VAL:HG23	2.09	0.53
1:A:60:TRP:CE3	1:A:61:ILE:HA	2.44	0.53
1:A:1111:PRO:C	1:A:1112:ARG:HG3	2.29	0.53
1:A:107:LEU:HD13	1:A:1113:ARG:NH1	2.23	0.53
1:A:119:THR:C	1:A:167:ASP:O	2.39	0.53
1:A:624:LEU:CD2	1:A:625:SER:CA	2.86	0.53
1:A:765:LEU:C	1:A:765:LEU:HD12	2.22	0.53
1:A:611:GLU:C	1:A:613:GLU:HB2	2.28	0.53
1:A:1179:TYR:CD1	1:A:1183:VAL:HB	2.44	0.53
1:A:167:ASP:OD1	1:A:167:ASP:N	2.30	0.53
1:A:549:LYS:O	1:A:553:ILE:HG13	2.08	0.53
1:A:624:LEU:O	1:A:627:TYR:CB	2.56	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:857:ASN:O	1:A:861:THR:HG22	2.08	0.53
1:A:885:ALA:O	1:A:889:ILE:HG12	2.08	0.53
1:A:682:HIS:O	1:A:686:ASP:N	2.39	0.53
1:A:887:ASN:O	1:A:891:GLY:CA	2.56	0.53
1:A:624:LEU:HD21	1:A:628:LYS:HD2	1.91	0.53
1:A:154:GLY:HA3	1:A:1099:ARG:O	2.09	0.53
1:A:255:LEU:HD13	1:A:584:LEU:HD12	1.91	0.53
1:A:871:LEU:O	1:A:874:TYR:N	2.38	0.53
1:A:407:LEU:HD12	1:A:416:LEU:HD11	1.91	0.52
1:A:82:PHE:CE1	1:A:545:PHE:CD2	2.97	0.52
1:A:746:PHE:CE1	1:A:924:PHE:HD1	2.27	0.52
1:A:750:HIS:O	1:A:922:LYS:NZ	2.41	0.52
1:A:443:ASN:ND2	1:A:463:LYS:HZ2	2.06	0.52
1:A:183:ASN:HD21	1:A:643:ILE:HG22	1.74	0.52
1:A:1115:ILE:HA	1:A:1118:SER:HB2	1.91	0.52
1:A:263:MET:HE2	1:A:457:ILE:HD12	0.57	0.52
1:A:264:PHE:HB3	1:A:267:ASN:OD1	2.09	0.52
1:A:612:GLN:CB	1:A:616:GLN:CA	2.81	0.52
1:A:739:ILE:CG2	1:A:740:VAL:N	2.73	0.52
1:A:807:ASP:OD2	1:A:808:LYS:N	2.43	0.52
1:A:525:ILE:N	1:A:525:ILE:CD1	2.30	0.52
1:A:827:ASN:OD1	1:A:828:ASP:N	2.42	0.52
1:A:748:LEU:CD2	1:A:923:ILE:HG23	2.36	0.52
1:A:653:LEU:HD12	1:A:654:GLU:O	2.06	0.52
1:A:561:GLU:O	1:A:564:TYR:CB	2.58	0.52
1:A:610:ASN:C	1:A:611:GLU:HG2	2.24	0.52
1:A:686:ASP:O	1:A:690:VAL:CG2	2.52	0.52
1:A:746:PHE:CE1	1:A:924:PHE:CE1	2.98	0.52
1:A:152:GLU:HG3	1:A:152:GLU:O	2.08	0.52
1:A:365:VAL:HG21	1:A:482:VAL:HG21	1.92	0.52
1:A:572:HIS:C	1:A:573:PHE:HD1	2.13	0.52
1:A:573:PHE:HD1	1:A:573:PHE:N	2.07	0.52
1:A:612:GLN:HB2	1:A:615:GLU:C	2.17	0.52
1:A:1036:SER:O	1:A:1040:ASP:CB	2.56	0.52
1:A:282:ASN:N	1:A:282:ASN:HD22	2.08	0.52
1:A:428:GLU:O	1:A:429:SER:O	2.28	0.52
1:A:984:ILE:HG23	1:A:989:LEU:CD1	2.36	0.52
1:A:138:GLY:HA2	1:A:147:SER:HG	1.73	0.52
1:A:419:ILE:HG22	1:A:420:ASN:CA	2.39	0.52
1:A:60:TRP:C	1:A:60:TRP:CE3	2.83	0.52
1:A:832:ILE:HG22	1:A:833:ALA:N	2.20	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:333:ASP:O	1:A:335:VAL:CG2	2.58	0.51
1:A:902:LEU:HD12	1:A:902:LEU:C	2.27	0.51
1:A:139:SER:OG	1:A:191:SER:CA	2.57	0.51
1:A:71:TYR:CE1	1:A:319:ASP:HB2	2.45	0.51
1:A:81:GLU:OE2	1:A:548:GLU:N	2.42	0.51
1:A:874:TYR:HD2	1:A:875:VAL:N	2.08	0.51
1:A:255:LEU:O	1:A:256:TYR:C	2.48	0.51
1:A:300:LYS:HE2	1:A:334:ALA:O	2.11	0.51
1:A:683:MET:O	1:A:687:ASN:HB2	2.10	0.51
1:A:872:MET:HE3	1:A:1064:LEU:HD23	1.91	0.51
1:A:897:LYS:HE2	1:A:900:GLU:OE1	2.11	0.51
1:A:232:TYR:O	1:A:233:LYS:CD	2.58	0.51
1:A:897:LYS:O	1:A:901:GLN:HG3	2.09	0.51
1:A:918:ARG:HG3	1:A:918:ARG:O	2.08	0.51
1:A:435:LEU:HD13	1:A:461:GLY:O	2.10	0.51
1:A:367:VAL:HA	1:A:580:SER:O	2.11	0.51
1:A:894:ASN:C	1:A:894:ASN:HD22	2.02	0.51
1:A:91:HIS:HB3	1:A:95:LYS:H	1.76	0.51
1:A:349:TYR:C	1:A:350:ILE:CD1	2.63	0.51
1:A:589:ASN:C	1:A:591:ALA:N	2.59	0.51
1:A:801:ASP:C	1:A:802:HIS:O	2.43	0.51
1:A:806:THR:OG1	1:A:1058:ASP:HA	2.11	0.51
1:A:688:MET:C	1:A:690:VAL:H	2.15	0.51
1:A:847:LYS:O	1:A:850:ASP:HB2	2.10	0.51
1:A:995:VAL:HG22	1:A:1165:LYS:HA	1.92	0.51
1:A:1011:MET:HE2	1:A:1163:PHE:HB3	1.93	0.51
1:A:166:ASN:O	1:A:166:ASN:OD1	2.29	0.51
1:A:443:ASN:HD22	1:A:463:LYS:HZ2	1.58	0.51
1:A:663:ASN:OD1	1:A:663:ASN:O	2.29	0.51
1:A:286:GLU:H	1:A:286:GLU:CD	2.07	0.50
1:A:471:LYS:O	1:A:472:ILE:C	2.47	0.50
1:A:689:ASP:O	1:A:693:LYS:CG	2.57	0.50
1:A:1036:SER:O	1:A:1040:ASP:N	2.33	0.50
1:A:119:THR:H	1:A:168:ARG:HA	1.75	0.50
1:A:146:ASN:OD1	1:A:148:ILE:HG22	2.11	0.50
1:A:509:ASN:O	1:A:510:ILE:C	2.47	0.50
1:A:562:PRO:O	1:A:564:TYR:N	2.44	0.50
1:A:1037:TYR:O	1:A:1038:LEU:O	2.29	0.50
1:A:190:ASP:O	1:A:190:ASP:OD1	2.29	0.50
1:A:616:GLN:OE1	1:A:616:GLN:CA	2.56	0.50
1:A:760:ASN:O	1:A:760:ASN:OD1	2.30	0.50

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:806:THR:O	1:A:807:ASP:O	2.29	0.50
1:A:1006:VAL:HG23	1:A:1006:VAL:O	2.10	0.50
1:A:589:ASN:O	1:A:590:TYR:C	2.47	0.50
1:A:601:GLU:O	1:A:602:LEU:C	2.46	0.50
1:A:1180:ILE:CA	1:A:1184:ASP:O	2.60	0.50
1:A:1184:ASP:OD1	1:A:1186:GLU:N	2.41	0.50
1:A:372:ASN:CB	1:A:406:SER:HA	2.41	0.50
1:A:503:VAL:HG12	1:A:504:GLU:N	2.23	0.50
1:A:564:TYR:HD1	1:A:564:TYR:O	1.95	0.50
1:A:80:GLU:O	1:A:80:GLU:OE2	2.30	0.50
1:A:810:ASN:OD1	1:A:810:ASN:O	2.29	0.50
1:A:857:ASN:OD1	1:A:857:ASN:O	2.29	0.50
1:A:860:LYS:HG2	1:A:861:THR:H	1.77	0.50
1:A:1029:ILE:CA	1:A:1032:ALA:HB3	2.41	0.50
1:A:1098:LEU:O	1:A:1099:ARG:C	2.46	0.50
1:A:261:LYS:O	1:A:265:PRO:HB3	2.12	0.50
1:A:85:THR:O	1:A:85:THR:OG1	2.29	0.50
1:A:127:ILE:N	1:A:128:PRO:HD2	2.27	0.50
1:A:240:VAL:O	1:A:243:GLU:N	2.45	0.50
1:A:571:LYS:HG2	1:A:572:HIS:N	2.25	0.50
1:A:612:GLN:CG	1:A:616:GLN:N	2.71	0.50
1:A:619:LYS:HE2	1:A:623:GLU:CD	2.32	0.50
1:A:332:ASP:OD1	1:A:334:ALA:CA	2.58	0.49
1:A:858:GLY:O	1:A:862:THR:HB	2.12	0.49
1:A:347:PRO:C	1:A:348:PHE:HD1	2.14	0.49
1:A:452:SER:O	1:A:453:LEU:HD23	2.11	0.49
1:A:570:GLU:HA	1:A:574:ILE:CD1	2.41	0.49
1:A:645:ILE:O	1:A:646:SER:C	2.47	0.49
1:A:690:VAL:O	1:A:691:PHE:C	2.44	0.49
1:A:807:ASP:HA	1:A:1018:PRO:HG3	1.94	0.49
1:A:250:SER:OG	1:A:253:GLU:HB2	2.12	0.49
1:A:347:PRO:CG	1:A:579:ARG:NH2	2.75	0.49
1:A:589:ASN:O	1:A:591:ALA:N	2.45	0.49
1:A:437:ASP:N	1:A:437:ASP:OD1	2.39	0.49
1:A:446:ASP:OD1	1:A:446:ASP:O	2.30	0.49
1:A:498:PHE:C	1:A:499:ASN:O	2.39	0.49
1:A:572:HIS:C	1:A:573:PHE:CD1	2.86	0.49
1:A:614:LYS:CD	1:A:618:ILE:HD11	2.41	0.49
1:A:1039:TRP:O	1:A:1039:TRP:CG	2.62	0.49
1:A:284:THR:HB	1:A:287:GLU:HB3	1.94	0.49
1:A:467:ARG:CG	1:A:467:ARG:O	2.60	0.49

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:593:GLU:C	1:A:594:GLN:OE1	2.51	0.49
1:A:672:GLU:O	1:A:672:GLU:OE2	2.29	0.49
1:A:696:VAL:C	1:A:698:LYS:H	2.14	0.49
1:A:781:ILE:HG23	1:A:781:ILE:O	2.13	0.49
1:A:319:ASP:OD1	1:A:319:ASP:O	2.29	0.49
1:A:446:ASP:CG	1:A:446:ASP:O	2.45	0.49
1:A:723:TYR:C	1:A:726:ASN:ND2	2.65	0.49
1:A:816:ASN:OD1	1:A:816:ASN:O	2.30	0.49
1:A:373:PRO:CD	1:A:373:PRO:O	2.58	0.49
1:A:213:VAL:HG22	1:A:621:PHE:CD2	2.47	0.49
1:A:925:ASN:CG	1:A:965:ILE:CD1	2.53	0.49
1:A:231:ASP:O	1:A:232:TYR:C	2.51	0.49
1:A:587:ASP:O	1:A:587:ASP:OD1	2.30	0.49
1:A:609:PHE:O	1:A:610:ASN:O	2.30	0.49
1:A:423:LEU:O	1:A:431:LEU:HB2	2.12	0.49
1:A:748:LEU:HD13	1:A:759:LEU:HD11	1.95	0.49
1:A:1138:ARG:O	1:A:1138:ARG:HG3	2.13	0.48
1:A:79:ASN:OD1	1:A:79:ASN:O	2.30	0.48
1:A:264:PHE:N	1:A:265:PRO:HD3	2.28	0.48
1:A:307:SER:CB	1:A:309:ASN:H	2.23	0.48
1:A:330:TYR:CD2	1:A:330:TYR:N	2.80	0.48
1:A:366:SER:O	1:A:366:SER:OG	2.30	0.48
1:A:603:LYS:HD3	1:A:603:LYS:H	1.74	0.48
1:A:1184:ASP:OD1	1:A:1186:GLU:CG	2.61	0.48
1:A:156:LEU:N	1:A:180:ASP:OD2	2.44	0.48
1:A:612:GLN:HG3	1:A:616:GLN:HA	1.95	0.48
1:A:616:GLN:OE1	1:A:616:GLN:O	2.30	0.48
1:A:927:LYS:HE2	1:A:927:LYS:HB2	1.63	0.48
1:A:940:LEU:O	1:A:941:LYS:C	2.52	0.48
1:A:254:ASP:OD1	1:A:254:ASP:O	2.30	0.48
1:A:503:VAL:O	1:A:507:ILE:HG13	2.13	0.48
1:A:1029:ILE:HD12	1:A:1029:ILE:N	2.28	0.48
1:A:1087:LYS:O	1:A:1091:THR:HG23	2.14	0.48
1:A:370:LEU:HB2	1:A:578:HIS:CD2	2.48	0.48
1:A:915:ILE:HG22	1:A:916:LEU:N	2.14	0.48
1:A:1029:ILE:C	1:A:1032:ALA:HB3	2.32	0.48
1:A:477:LYS:O	1:A:481:GLU:HG3	2.13	0.48
1:A:356:ASP:CG	1:A:358:SER:OG	2.52	0.48
1:A:408:GLU:N	1:A:408:GLU:CD	2.63	0.48
1:A:263:MET:SD	1:A:457:ILE:CG2	3.01	0.48
1:A:662:THR:OG1	1:A:667:ASN:ND2	2.46	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:742:LEU:HD22	1:A:943:LEU:HD11	1.95	0.48
1:A:82:PHE:HE1	1:A:545:PHE:CD2	2.32	0.48
1:A:612:GLN:N	1:A:612:GLN:OE1	2.46	0.48
1:A:925:ASN:OD1	1:A:965:ILE:HD13	2.11	0.48
1:A:1034:LYS:HB2	1:A:1053:ALA:HB3	1.95	0.48
1:A:1024:PRO:C	1:A:1141:ILE:HD13	2.33	0.48
1:A:183:ASN:ND2	1:A:643:ILE:HG22	2.29	0.48
1:A:847:LYS:O	1:A:848:VAL:C	2.50	0.48
1:A:133:HIS:CE1	1:A:1043:ARG:HH22	2.32	0.48
1:A:1101:ILE:HD11	1:A:1144:THR:HB	1.96	0.48
1:A:1107:THR:OG1	1:A:1108:ILE:N	2.46	0.48
1:A:612:GLN:HB3	1:A:615:GLU:N	2.27	0.48
1:A:562:PRO:O	1:A:563:MET:C	2.52	0.47
1:A:660:TYR:HB3	1:A:729:ILE:HB	1.96	0.47
1:A:560:ASN:N	1:A:560:ASN:HD22	2.01	0.47
1:A:443:ASN:ND2	1:A:463:LYS:HZ1	2.11	0.47
1:A:521:THR:O	1:A:522:SER:CB	2.56	0.47
1:A:1060:SER:O	1:A:1060:SER:OG	2.29	0.47
1:A:934:THR:CB	1:A:1118:SER:OG	2.60	0.47
1:A:180:ASP:O	1:A:182:PHE:N	2.47	0.47
1:A:166:ASN:HA	1:A:273:SER:OG	2.13	0.47
1:A:601:GLU:O	1:A:601:GLU:HG3	2.13	0.47
1:A:661:PHE:CD2	1:A:723:TYR:CE1	3.02	0.47
1:A:120:LEU:HD12	1:A:120:LEU:H	1.72	0.47
1:A:612:GLN:HG3	1:A:615:GLU:C	2.35	0.47
1:A:995:VAL:O	1:A:995:VAL:HG12	2.08	0.47
1:A:285:TYR:CZ	1:A:289:LYS:HE2	2.49	0.47
1:A:597:LEU:O	1:A:598:GLU:C	2.51	0.47
1:A:1120:LEU:O	1:A:1120:LEU:HG	2.08	0.47
1:A:1007:ASN:HB3	1:A:1170:ILE:O	2.15	0.47
1:A:126:GLY:O	1:A:130:ILE:HG13	2.15	0.47
1:A:529:PHE:O	1:A:533:SER:HB3	2.14	0.47
1:A:801:ASP:O	1:A:802:HIS:C	2.52	0.47
1:A:953:ASN:N	1:A:953:ASN:HD22	2.13	0.47
1:A:534:LYS:HG3	1:A:540:ASP:O	2.15	0.47
1:A:610:ASN:N	1:A:613:GLU:HG2	2.29	0.47
1:A:666:GLU:CG	1:A:666:GLU:O	2.62	0.47
1:A:872:MET:HE1	1:A:1052:PHE:CD1	2.50	0.47
1:A:992:GLU:HG2	1:A:992:GLU:H	1.38	0.47
1:A:1051:VAL:O	1:A:1051:VAL:CG1	2.59	0.47
1:A:121:THR:CG2	1:A:128:PRO:HG2	2.45	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:178:ASN:O	1:A:179:LYS:C	2.51	0.47
1:A:318:VAL:HG12	1:A:319:ASP:N	2.29	0.47
1:A:82:PHE:CE1	1:A:545:PHE:HD2	2.33	0.47
1:A:1063:PHE:HE2	1:A:1163:PHE:CE1	2.33	0.47
1:A:1011:MET:CE	1:A:1163:PHE:HB3	2.45	0.47
1:A:412:ASP:O	1:A:413:TYR:C	2.52	0.47
1:A:613:GLU:N	1:A:616:GLN:HG2	2.30	0.47
1:A:805:VAL:HG21	1:A:1016:PHE:HB3	1.97	0.47
1:A:870:ILE:O	1:A:871:LEU:C	2.53	0.47
1:A:1007:ASN:N	1:A:1007:ASN:OD1	2.48	0.46
1:A:264:PHE:HA	1:A:341:GLN:OE1	2.14	0.46
1:A:618:ILE:CD1	1:A:618:ILE:N	2.77	0.46
1:A:619:LYS:CE	1:A:623:GLU:CG	2.92	0.46
1:A:416:LEU:O	1:A:420:ASN:CB	2.64	0.46
1:A:612:GLN:CG	1:A:615:GLU:HB3	2.45	0.46
1:A:144:TYR:HB3	1:A:632:GLU:OE1	2.15	0.46
1:A:637:LEU:C	1:A:639:LYS:H	2.17	0.46
1:A:783:ARG:O	1:A:783:ARG:CG	2.58	0.46
1:A:1093:THR:O	1:A:1094:GLU:C	2.52	0.46
1:A:128:PRO:HG3	1:A:291:PHE:CZ	2.50	0.46
1:A:369:TRP:CE2	1:A:579:ARG:HD3	2.50	0.46
1:A:522:SER:C	1:A:525:ILE:CD1	2.76	0.46
1:A:644:SER:HB2	1:A:646:SER:OG	2.15	0.46
1:A:724:GLU:N	1:A:726:ASN:HD22	2.13	0.46
1:A:783:ARG:HG3	1:A:783:ARG:O	2.15	0.46
1:A:154:GLY:HA3	1:A:1099:ARG:CA	2.45	0.46
1:A:635:GLU:H	1:A:635:GLU:HG2	1.41	0.46
1:A:350:ILE:CD1	1:A:350:ILE:H	2.24	0.46
1:A:428:GLU:HA	1:A:433:LYS:HB2	1.98	0.46
1:A:805:VAL:HG22	1:A:1022:LEU:HD12	1.97	0.46
1:A:807:ASP:OD2	1:A:810:ASN:N	2.48	0.46
1:A:812:GLN:CA	1:A:812:GLN:NE2	2.74	0.46
1:A:872:MET:HE2	1:A:872:MET:HB2	1.69	0.46
1:A:105:ASP:OD2	1:A:107:LEU:HD12	2.14	0.46
1:A:1137:PHE:CE2	1:A:1141:ILE:HG13	2.51	0.46
1:A:358:SER:HB2	1:A:360:GLU:O	2.15	0.46
1:A:495:LYS:O	1:A:495:LYS:HG3	2.08	0.46
1:A:624:LEU:HD23	1:A:625:SER:HA	1.97	0.46
1:A:661:PHE:CE1	1:A:728:PRO:HB3	2.51	0.46
1:A:801:ASP:OD2	1:A:804:ASN:HB2	2.16	0.46
1:A:741:TYR:HD2	1:A:820:HIS:CD2	2.33	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:872:MET:HB3	1:A:1064:LEU:HD23	1.98	0.46
1:A:1016:PHE:HZ	1:A:1026:PHE:CE2	2.33	0.46
1:A:1029:ILE:HG22	1:A:1030:VAL:N	2.25	0.46
1:A:1034:LYS:HA	1:A:1038:LEU:HB2	1.97	0.46
1:A:135:VAL:HG22	1:A:136:LEU:N	2.30	0.46
1:A:264:PHE:CE2	1:A:457:ILE:HD11	2.51	0.46
1:A:82:PHE:CD1	1:A:545:PHE:HD2	2.33	0.46
1:A:691:PHE:O	1:A:695:TYR:HB2	2.15	0.46
1:A:955:VAL:O	1:A:955:VAL:HG13	2.13	0.46
1:A:1051:VAL:HG22	1:A:1052:PHE:N	2.30	0.46
1:A:419:ILE:HG22	1:A:420:ASN:H	1.69	0.46
1:A:596:ASN:O	1:A:597:LEU:C	2.50	0.46
1:A:694:LYS:HB3	1:A:695:TYR:CD1	2.50	0.46
1:A:761:LEU:O	1:A:765:LEU:N	2.46	0.46
1:A:447:ARG:HD3	1:A:447:ARG:O	2.16	0.46
1:A:473:LYS:HB2	1:A:481:GLU:OE2	2.15	0.46
1:A:543:LEU:C	1:A:545:PHE:N	2.68	0.46
1:A:680:ASN:O	1:A:684:LEU:HD12	2.16	0.46
1:A:875:VAL:HG13	1:A:875:VAL:O	2.14	0.46
1:A:897:LYS:O	1:A:898:LEU:C	2.53	0.46
1:A:1107:THR:HG1	1:A:1108:ILE:N	2.14	0.46
1:A:305:PHE:CZ	1:A:307:SER:HB3	2.50	0.46
1:A:561:GLU:O	1:A:564:TYR:HB3	2.15	0.46
1:A:590:TYR:O	1:A:594:GLN:HB2	2.16	0.46
1:A:763:LYS:HE2	1:A:792:ALA:O	2.16	0.46
1:A:644:SER:O	1:A:647:ASP:HB2	2.17	0.45
1:A:1051:VAL:O	1:A:1051:VAL:HG13	2.10	0.45
1:A:135:VAL:HG22	1:A:136:LEU:H	1.81	0.45
1:A:156:LEU:HB2	1:A:180:ASP:OD2	2.16	0.45
1:A:115:PHE:HE1	1:A:189:MET:HG3	1.81	0.45
1:A:161:ASN:HD22	1:A:162:ALA:N	2.05	0.45
1:A:542:LEU:O	1:A:543:LEU:C	2.54	0.45
1:A:671:MET:HG3	1:A:675:ASN:ND2	2.31	0.45
1:A:622:GLU:O	1:A:626:LYS:HG2	2.17	0.45
1:A:66:PRO:HD2	1:A:311:PRO:HG2	1.98	0.45
1:A:105:ASP:OD2	1:A:1113:ARG:NH1	2.38	0.45
1:A:454:VAL:HG22	1:A:454:VAL:O	2.15	0.45
1:A:607:GLU:HG3	1:A:608:ASN:N	2.32	0.45
1:A:613:GLU:N	1:A:616:GLN:CG	2.80	0.45
1:A:696:VAL:O	1:A:698:LYS:N	2.49	0.45
1:A:909:PHE:CD1	1:A:912:LEU:HD23	2.51	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:413:TYR:CE2	1:A:417:LEU:HD11	2.51	0.45
1:A:418:ILE:HG22	1:A:419:ILE:N	2.21	0.45
1:A:542:LEU:O	1:A:545:PHE:N	2.49	0.45
1:A:664:ILE:HG23	1:A:664:ILE:HD13	1.56	0.45
1:A:858:GLY:O	1:A:861:THR:CG2	2.64	0.45
1:A:894:ASN:C	1:A:894:ASN:ND2	2.63	0.45
1:A:325:LEU:HD23	1:A:325:LEU:HA	1.48	0.45
1:A:751:LEU:O	1:A:980:TRP:HB3	2.17	0.45
1:A:781:ILE:O	1:A:781:ILE:HG22	2.08	0.45
1:A:1107:THR:HG1	1:A:1108:ILE:H	1.65	0.45
1:A:876:LYS:HZ1	1:A:1060:SER:HG	1.63	0.45
1:A:156:LEU:HD12	1:A:177:ASN:CB	2.45	0.45
1:A:189:MET:HE1	1:A:317:PHE:CZ	2.51	0.45
1:A:465:ILE:H	1:A:465:ILE:HG12	1.45	0.45
1:A:187:VAL:HG12	1:A:188:TYR:N	2.28	0.45
1:A:478:VAL:O	1:A:482:VAL:HG23	2.17	0.45
1:A:484:ASP:O	1:A:485:VAL:C	2.52	0.45
1:A:648:LEU:C	1:A:649:ASN:O	2.51	0.45
1:A:472:ILE:HG22	1:A:474:ASN:O	2.17	0.44
1:A:535:LEU:HA	1:A:535:LEU:HD23	1.61	0.44
1:A:732:TYR:OH	1:A:1121:SER:CB	2.63	0.44
1:A:997:LYS:HB3	1:A:1187:PHE:CE2	2.52	0.44
1:A:1179:TYR:HE2	1:A:1187:PHE:HE1	1.60	0.44
1:A:206:THR:HG23	1:A:628:LYS:HZ1	1.77	0.44
1:A:980:TRP:CE3	1:A:981:ASN:HA	2.53	0.44
1:A:1010:SER:O	1:A:1010:SER:OG	2.33	0.44
1:A:1162:GLU:O	1:A:1165:LYS:HG3	2.15	0.44
1:A:135:VAL:O	1:A:191:SER:OG	2.35	0.44
1:A:417:LEU:N	1:A:417:LEU:HD23	2.32	0.44
1:A:528:VAL:O	1:A:529:PHE:C	2.55	0.44
1:A:672:GLU:HA	1:A:675:ASN:ND2	2.32	0.44
1:A:872:MET:HE3	1:A:872:MET:HB3	1.74	0.44
1:A:284:THR:CB	1:A:287:GLU:HB3	2.48	0.44
1:A:285:TYR:O	1:A:288:PHE:HB3	2.17	0.44
1:A:369:TRP:HD1	1:A:576:ASN:HB3	1.79	0.44
1:A:736:THR:O	1:A:737:THR:O	2.34	0.44
1:A:892:TYR:O	1:A:894:ASN:N	2.50	0.44
1:A:110:GLU:HG3	1:A:158:THR:HG21	1.99	0.44
1:A:314:LEU:CG	1:A:315:LEU:N	2.80	0.44
1:A:368:ALA:HA	1:A:458:PHE:O	2.18	0.44
1:A:424:ILE:HD11	1:A:460:ILE:CG2	2.48	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:748:LEU:HD22	1:A:751:LEU:HD22	1.98	0.44
1:A:1132:GLN:HG2	1:A:1132:GLN:H	1.39	0.44
1:A:346:GLY:HA3	1:A:347:PRO:HA	1.79	0.44
1:A:611:GLU:HA	1:A:612:GLN:HA	1.79	0.44
1:A:955:VAL:O	1:A:958:PHE:HB2	2.18	0.44
1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HG	1.51	0.44
1:A:133:HIS:HE1	1:A:1043:ARG:NH2	2.15	0.44
1:A:103:THR:O	1:A:308:LYS:HA	2.18	0.44
1:A:411:THR:HG22	1:A:411:THR:O	2.17	0.44
1:A:757:ALA:C	1:A:759:LEU:H	2.21	0.44
1:A:264:PHE:N	1:A:265:PRO:CD	2.81	0.44
1:A:269:HIS:NE2	1:A:454:VAL:HG12	2.33	0.44
1:A:478:VAL:CG1	1:A:479:HIS:N	2.77	0.44
1:A:613:GLU:O	1:A:617:VAL:HB	2.18	0.44
1:A:612:GLN:HG3	1:A:616:GLN:N	2.32	0.44
1:A:446:ASP:OD1	1:A:446:ASP:C	2.55	0.43
1:A:113:PHE:CD1	1:A:113:PHE:C	2.92	0.43
1:A:234:VAL:HG12	1:A:235:SER:N	2.33	0.43
1:A:435:LEU:HD23	1:A:485:VAL:HG11	2.00	0.43
1:A:882:LYS:HG2	1:A:882:LYS:O	2.18	0.43
1:A:454:VAL:CG2	1:A:454:VAL:O	2.67	0.43
1:A:815:PHE:CD1	1:A:815:PHE:C	2.91	0.43
1:A:980:TRP:CD2	1:A:981:ASN:N	2.86	0.43
1:A:1042:VAL:O	1:A:1042:VAL:CG1	2.57	0.43
1:A:512:PHE:O	1:A:512:PHE:CD2	2.72	0.43
1:A:1083:LYS:HB3	1:A:1083:LYS:HE3	1.32	0.43
1:A:1179:TYR:CE2	1:A:1187:PHE:CE1	3.01	0.43
1:A:314:LEU:HD12	1:A:315:LEU:N	2.23	0.43
1:A:832:ILE:CG2	1:A:832:ILE:O	2.55	0.43
1:A:893:GLU:O	1:A:893:GLU:HG3	2.17	0.43
1:A:133:HIS:HE1	1:A:1043:ARG:HH22	1.66	0.43
1:A:1169:ILE:HG21	1:A:1169:ILE:HD13	1.73	0.43
1:A:1179:TYR:CE1	1:A:1183:VAL:CB	2.97	0.43
1:A:428:GLU:O	1:A:429:SER:C	2.51	0.43
1:A:436:THR:HG22	1:A:437:ASP:N	2.28	0.43
1:A:956:SER:O	1:A:956:SER:OG	2.30	0.43
1:A:249:SER:O	1:A:251:PRO:HD3	2.18	0.43
1:A:472:ILE:CG2	1:A:478:VAL:HG23	2.49	0.43
1:A:622:GLU:HG2	1:A:623:GLU:N	2.34	0.43
1:A:624:LEU:CD2	1:A:625:SER:HA	2.48	0.43
1:A:801:ASP:O	1:A:802:HIS:O	2.37	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:923:ILE:HG23	1:A:923:ILE:HD13	1.71	0.43
1:A:1039:TRP:CE2	1:A:1043:ARG:HD2	2.52	0.43
1:A:107:LEU:CD1	1:A:1113:ARG:NH1	2.82	0.43
1:A:995:VAL:CG2	1:A:1165:LYS:HB3	2.49	0.43
1:A:418:ILE:O	1:A:418:ILE:CG2	2.55	0.43
1:A:683:MET:O	1:A:687:ASN:CB	2.67	0.43
1:A:766:ILE:HD13	1:A:766:ILE:HG21	1.82	0.43
1:A:276:ASP:C	1:A:278:LYS:N	2.72	0.43
1:A:332:ASP:CG	1:A:334:ALA:HB2	2.33	0.43
1:A:454:VAL:O	1:A:539:ARG:NH2	2.52	0.43
1:A:809:TYR:CE1	1:A:990:PHE:CD2	3.07	0.43
1:A:837:VAL:HG12	1:A:838:LYS:CA	2.43	0.43
1:A:892:TYR:C	1:A:894:ASN:N	2.66	0.43
1:A:344:LYS:HD3	3:A:1213:HOH:O	2.18	0.42
1:A:472:ILE:HG23	1:A:478:VAL:HG23	2.00	0.42
1:A:764:THR:HG23	1:A:764:THR:O	2.19	0.42
1:A:997:LYS:O	1:A:998:GLU:HG3	2.19	0.42
1:A:148:ILE:HG23	1:A:149:GLY:N	2.34	0.42
1:A:365:VAL:HG12	1:A:366:SER:N	2.32	0.42
1:A:596:ASN:O	1:A:599:LYS:N	2.52	0.42
1:A:652:THR:O	1:A:653:LEU:C	2.54	0.42
1:A:1029:ILE:HG23	1:A:1085:LEU:HD11	2.00	0.42
1:A:1093:THR:HG23	1:A:1096:ASP:H	1.84	0.42
1:A:333:ASP:O	1:A:335:VAL:HG23	2.19	0.42
1:A:1138:ARG:O	1:A:1142:MET:CG	2.67	0.42
1:A:267:ASN:OD1	1:A:267:ASN:C	2.54	0.42
1:A:285:TYR:CE2	1:A:289:LYS:CE	3.01	0.42
1:A:91:HIS:HB3	1:A:95:LYS:N	2.34	0.42
1:A:937:TYR:C	1:A:937:TYR:CD2	2.92	0.42
1:A:154:GLY:C	1:A:155:THR:CG2	2.87	0.42
1:A:469:ASN:C	1:A:471:LYS:H	2.21	0.42
1:A:569:VAL:O	1:A:573:PHE:CB	2.63	0.42
1:A:1016:PHE:HZ	1:A:1026:PHE:HE2	1.67	0.42
1:A:115:PHE:CE1	1:A:189:MET:HG3	2.54	0.42
1:A:321:TYR:O	1:A:324:GLN:HG2	2.19	0.42
1:A:82:PHE:O	1:A:83:LYS:C	2.58	0.42
1:A:1049:TYR:HB3	1:A:1067:ARG:CB	2.50	0.42
1:A:213:VAL:O	1:A:214:GLU:CB	2.52	0.42
1:A:357:HIS:C	1:A:358:SER:O	2.52	0.42
1:A:936:ASP:OD1	1:A:936:ASP:N	2.30	0.42
1:A:1137:PHE:O	1:A:1141:ILE:HG12	2.20	0.42

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1146:LYS:O	1:A:1149:PHE:HB2	2.20	0.42
1:A:162:ALA:HB1	1:A:171:TYR:HD2	1.85	0.42
1:A:365:VAL:O	1:A:461:GLY:HA2	2.19	0.42
1:A:875:VAL:HG23	1:A:1168:VAL:HB	2.01	0.42
1:A:910:LYS:O	1:A:911:THR:C	2.54	0.42
1:A:1011:MET:HB2	1:A:1011:MET:HE2	1.66	0.42
1:A:1023:ASP:HA	1:A:1024:PRO:HD3	1.86	0.42
1:A:1026:PHE:HA	1:A:1029:ILE:HD13	2.02	0.42
1:A:456:TYR:N	1:A:456:TYR:CD2	2.86	0.42
1:A:801:ASP:O	1:A:804:ASN:HB2	2.20	0.42
1:A:746:PHE:CZ	1:A:924:PHE:HD1	2.38	0.42
1:A:1007:ASN:N	1:A:1068:ASP:O	2.53	0.42
1:A:1092:MET:HB3	1:A:1092:MET:HE3	1.53	0.42
1:A:151:LEU:HD11	1:A:187:VAL:HG21	2.02	0.42
1:A:741:TYR:CD2	1:A:820:HIS:CD2	3.08	0.42
1:A:805:VAL:CG1	1:A:806:THR:N	2.83	0.42
1:A:851:ILE:O	1:A:854:ARG:HG2	2.19	0.42
1:A:889:ILE:HG23	1:A:889:ILE:HD13	1.58	0.42
1:A:895:TYR:C	1:A:895:TYR:CD1	2.89	0.41
1:A:648:LEU:HD22	1:A:1105:ILE:HD12	2.01	0.41
1:A:469:ASN:O	1:A:471:LYS:N	2.53	0.41
1:A:1068:ASP:OD1	1:A:1069:PRO:HD2	2.20	0.41
1:A:1184:ASP:HB3	1:A:1187:PHE:HD1	1.86	0.41
1:A:206:THR:HG1	1:A:206:THR:H	1.58	0.41
1:A:346:GLY:CA	1:A:348:PHE:CE1	3.03	0.41
1:A:540:ASP:HA	1:A:541:PRO:HD2	1.81	0.41
1:A:722:LYS:HE2	1:A:722:LYS:HB2	1.70	0.41
1:A:849:ILE:HG23	1:A:849:ILE:HD13	1.81	0.41
1:A:1014:ILE:HG23	1:A:1016:PHE:H	1.86	0.41
1:A:190:ASP:O	1:A:194:GLN:N	2.51	0.41
1:A:116:TYR:N	1:A:302:LYS:O	2.42	0.41
1:A:346:GLY:CA	1:A:348:PHE:HE1	2.32	0.41
1:A:561:GLU:O	1:A:564:TYR:HB2	2.19	0.41
1:A:619:LYS:O	1:A:623:GLU:HB2	2.20	0.41
1:A:664:ILE:HG21	1:A:664:ILE:HD12	1.67	0.41
1:A:723:TYR:HA	1:A:726:ASN:ND2	2.36	0.41
1:A:803:LEU:O	1:A:1021:TYR:HD1	2.03	0.41
1:A:937:TYR:O	1:A:937:TYR:CD2	2.65	0.41
1:A:332:ASP:C	1:A:334:ALA:H	2.23	0.41
1:A:370:LEU:HD11	1:A:455:GLN:HB3	2.02	0.41
1:A:437:ASP:O	1:A:439:GLY:N	2.54	0.41

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:925:ASN:ND2	1:A:965:ILE:CD1	2.82	0.41
1:A:995:VAL:HG22	1:A:1165:LYS:CB	2.50	0.41
1:A:131:LEU:O	1:A:131:LEU:HD23	2.21	0.41
1:A:151:LEU:CA	1:A:155:THR:CG2	2.94	0.41
1:A:203:ILE:HG21	1:A:203:ILE:HD12	1.87	0.41
1:A:573:PHE:O	1:A:574:ILE:C	2.55	0.41
1:A:776:SER:O	1:A:780:VAL:HG23	2.21	0.41
1:A:873:LYS:HB3	1:A:873:LYS:HE2	1.67	0.41
1:A:887:ASN:CA	1:A:891:GLY:HA3	2.47	0.41
1:A:1173:LYS:HE2	1:A:1173:LYS:HB2	1.76	0.41
1:A:119:THR:N	1:A:167:ASP:O	2.54	0.41
1:A:180:ASP:C	1:A:182:PHE:N	2.66	0.41
1:A:68:HIS:CB	1:A:71:TYR:HB2	2.38	0.41
1:A:1088:MET:HB2	1:A:1088:MET:HE2	1.58	0.41
1:A:423:LEU:HD23	1:A:430:VAL:HB	2.03	0.41
1:A:589:ASN:O	1:A:592:GLN:N	2.53	0.41
1:A:650:LYS:O	1:A:651:LYS:HG2	2.21	0.41
1:A:888:ILE:O	1:A:894:ASN:CB	2.69	0.41
1:A:422:LEU:HD13	1:A:498:PHE:CD1	2.56	0.41
1:A:542:LEU:HB3	1:A:545:PHE:HB2	2.03	0.41
1:A:72:ASP:O	1:A:89:TYR:HA	2.21	0.41
1:A:74:ILE:HD13	1:A:74:ILE:HG21	1.69	0.41
1:A:1137:PHE:CE2	1:A:1141:ILE:CG1	3.05	0.40
1:A:1152:PHE:O	1:A:1156:LEU:HB2	2.21	0.40
1:A:280:ILE:CG2	1:A:280:ILE:O	2.62	0.40
1:A:519:LEU:HD12	1:A:739:ILE:HD13	2.04	0.40
1:A:597:LEU:H	1:A:597:LEU:HD12	1.86	0.40
1:A:805:VAL:CG1	1:A:806:THR:H	2.31	0.40
1:A:213:VAL:HG23	1:A:214:GLU:H	1.82	0.40
1:A:437:ASP:C	1:A:439:GLY:N	2.75	0.40
1:A:498:PHE:O	1:A:499:ASN:O	2.37	0.40
1:A:607:GLU:C	1:A:609:PHE:H	2.23	0.40
1:A:657:VAL:CG2	1:A:658:ASN:H	2.32	0.40
1:A:657:VAL:HG23	1:A:658:ASN:H	1.86	0.40
1:A:1093:THR:H	1:A:1096:ASP:HB2	1.86	0.40
1:A:1113:ARG:N	1:A:1116:GLU:HG3	2.36	0.40
1:A:190:ASP:C	1:A:190:ASP:OD1	2.59	0.40
1:A:409:ASN:O	1:A:410:PRO:C	2.55	0.40
1:A:447:ARG:HD3	1:A:447:ARG:C	2.41	0.40
1:A:670:ILE:O	1:A:670:ILE:CG2	2.60	0.40
1:A:1027:THR:OG1	1:A:1028:VAL:N	2.54	0.40

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1063:PHE:CE2	1:A:1163:PHE:CE1	3.10	0.40
1:A:524:SER:O	1:A:528:VAL:HG23	2.20	0.40
1:A:774:ARG:HG3	1:A:779:PHE:HB2	2.04	0.40
1:A:1037:TYR:CE2	1:A:1077:THR:HG22	2.56	0.40
1:A:257:HIS:O	1:A:261:LYS:HB2	2.22	0.40
1:A:357:HIS:O	1:A:358:SER:C	2.59	0.40
1:A:612:GLN:CG	1:A:615:GLU:C	2.90	0.40
1:A:655:VAL:HA	1:A:656:PRO:HD2	1.83	0.40
1:A:748:LEU:HD11	1:A:815:PHE:HB2	2.03	0.40

All (2) symmetry-related close contacts are listed below. The label for Atom-2 includes the symmetry operator and encoded unit-cell translations to be applied.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:608:ASN:ND2	1:A:988:LYS:CG[2_554]	1.98	0.22
1:A:538:ASN:O	1:A:679:THR:OG1[2_654]	2.10	0.10

## 5.3 Torsion angles

### 5.3.1 Protein backbone

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	1043/1193 (87%)	998 (96%)	37 (4%)	8 (1%)	<div>22</div> <div>65</div>

All (8) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	213	VAL
1	A	610	ASN
1	A	613	GLU
1	A	1128	ASN
1	A	373	PRO
1	A	615	GLU

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	697	LEU
1	A	426	THR

### 5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	972/1104 (88%)	666 (68%)	306 (32%)	<b>0</b> <b>1</b>

All (306) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	60	TRP
1	A	61	ILE
1	A	62	HIS
1	A	65	SER
1	A	66	PRO
1	A	67	LYS
1	A	68	HIS
1	A	69	ASN
1	A	72	ASP
1	A	75	GLU
1	A	80	GLU
1	A	81	GLU
1	A	84	MET
1	A	87	THR
1	A	95	LYS
1	A	96	THR
1	A	100	SER
1	A	101	LEU
1	A	103	THR
1	A	107	LEU
1	A	110	GLU
1	A	111	GLN
1	A	120	LEU
1	A	125	LYS

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	132	GLU
1	A	137	SER
1	A	139	SER
1	A	145	LYS
1	A	147	SER
1	A	158	THR
1	A	161	ASN
1	A	163	TYR
1	A	167	ASP
1	A	168	ARG
1	A	172	MET
1	A	175	SER
1	A	176	MET
1	A	179	LYS
1	A	180	ASP
1	A	185	MET
1	A	191	SER
1	A	197	VAL
1	A	203	ILE
1	A	206	THR
1	A	212	GLU
1	A	214	GLU
1	A	232	TYR
1	A	233	LYS
1	A	235	SER
1	A	236	PHE
1	A	237	ASN
1	A	239	ILE
1	A	242	ASN
1	A	248	LEU
1	A	249	SER
1	A	252	LEU
1	A	254	ASP
1	A	260	MET
1	A	261	LYS
1	A	268	VAL
1	A	270	SER
1	A	273	SER
1	A	278	LYS
1	A	280	ILE
1	A	281	THR
1	A	282	ASN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	284	THR
1	A	286	GLU
1	A	287	GLU
1	A	290	GLU
1	A	299	LYS
1	A	301	VAL
1	A	302	LYS
1	A	309	ASN
1	A	312	THR
1	A	314	LEU
1	A	329	LYS
1	A	331	ARG
1	A	335	VAL
1	A	338	VAL
1	A	341	GLN
1	A	348	PHE
1	A	350	ILE
1	A	358	SER
1	A	359	GLU
1	A	364	LEU
1	A	366	SER
1	A	373	PRO
1	A	374	LYS
1	A	407	LEU
1	A	408	GLU
1	A	418	ILE
1	A	419	ILE
1	A	421	ASN
1	A	424	ILE
1	A	426	THR
1	A	432	TYR
1	A	438	CYS
1	A	440	LEU
1	A	447	ARG
1	A	452	SER
1	A	453	LEU
1	A	455	GLN
1	A	459	SER
1	A	460	ILE
1	A	465	ILE
1	A	467	ARG
1	A	468	ASN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	469	ASN
1	A	471	LYS
1	A	472	ILE
1	A	476	ASP
1	A	478	VAL
1	A	484	ASP
1	A	485	VAL
1	A	491	LYS
1	A	495	LYS
1	A	499	ASN
1	A	509	ASN
1	A	510	ILE
1	A	513	ILE
1	A	520	LYS
1	A	521	THR
1	A	523	LYS
1	A	524	SER
1	A	525	ILE
1	A	530	GLU
1	A	533	SER
1	A	534	LYS
1	A	542	LEU
1	A	543	LEU
1	A	544	ILE
1	A	548	GLU
1	A	552	ASN
1	A	553	ILE
1	A	557	LYS
1	A	560	ASN
1	A	563	MET
1	A	564	TYR
1	A	565	LEU
1	A	568	PHE
1	A	570	GLU
1	A	571	LYS
1	A	573	PHE
1	A	575	ASN
1	A	584	LEU
1	A	587	ASP
1	A	594	GLN
1	A	595	GLU
1	A	596	ASN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	599	LYS
1	A	600	GLN
1	A	601	GLU
1	A	602	LEU
1	A	603	LYS
1	A	604	LYS
1	A	605	ARG
1	A	608	ASN
1	A	611	GLU
1	A	613	GLU
1	A	614	LYS
1	A	616	GLN
1	A	624	LEU
1	A	625	SER
1	A	626	LYS
1	A	628	LYS
1	A	629	ASN
1	A	634	PRO
1	A	635	GLU
1	A	642	ILE
1	A	644	SER
1	A	645	ILE
1	A	653	LEU
1	A	661	PHE
1	A	663	ASN
1	A	664	ILE
1	A	665	ASN
1	A	667	ASN
1	A	669	ASN
1	A	670	ILE
1	A	672	GLU
1	A	673	THR
1	A	675	ASN
1	A	677	LEU
1	A	678	LYS
1	A	681	GLU
1	A	685	LYS
1	A	720	GLU
1	A	721	THR
1	A	722	LYS
1	A	724	GLU
1	A	733	GLU

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	734	MET
1	A	737	THR
1	A	742	LEU
1	A	750	HIS
1	A	752	THR
1	A	759	LEU
1	A	761	LEU
1	A	763	LYS
1	A	764	THR
1	A	776	SER
1	A	782	LEU
1	A	783	ARG
1	A	787	ILE
1	A	789	SER
1	A	791	SER
1	A	798	SER
1	A	806	THR
1	A	808	LYS
1	A	810	ASN
1	A	812	GLN
1	A	814	LEU
1	A	816	ASN
1	A	822	LEU
1	A	823	SER
1	A	832	ILE
1	A	834	LEU
1	A	835	GLU
1	A	843	SER
1	A	846	LYS
1	A	860	LYS
1	A	863	PHE
1	A	868	TYR
1	A	873	LYS
1	A	874	TYR
1	A	875	VAL
1	A	887	ASN
1	A	889	ILE
1	A	894	ASN
1	A	895	TYR
1	A	902	LEU
1	A	903	GLU
1	A	904	LEU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	906	GLU
1	A	911	THR
1	A	915	ILE
1	A	918	ARG
1	A	920	ARG
1	A	923	ILE
1	A	930	MET
1	A	935	SER
1	A	936	ASP
1	A	937	TYR
1	A	941	LYS
1	A	947	SER
1	A	948	ASN
1	A	951	LEU
1	A	959	GLU
1	A	962	ASP
1	A	963	LYS
1	A	964	TYR
1	A	986	SER
1	A	988	LYS
1	A	989	LEU
1	A	992	GLU
1	A	993	GLU
1	A	995	VAL
1	A	996	LYS
1	A	1004	THR
1	A	1007	ASN
1	A	1011	MET
1	A	1017	LYS
1	A	1025	SER
1	A	1036	SER
1	A	1055	ILE
1	A	1062	VAL
1	A	1064	LEU
1	A	1083	LYS
1	A	1087	LYS
1	A	1088	MET
1	A	1091	THR
1	A	1092	MET
1	A	1099	ARG
1	A	1101	ILE
1	A	1103	ASN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1108	ILE
1	A	1112	ARG
1	A	1116	GLU
1	A	1118	SER
1	A	1120	LEU
1	A	1122	PHE
1	A	1127	SER
1	A	1132	GLN
1	A	1140	ARG
1	A	1142	MET
1	A	1143	ASN
1	A	1144	THR
1	A	1146	LYS
1	A	1147	GLU
1	A	1148	ASP
1	A	1156	LEU
1	A	1158	SER
1	A	1160	VAL
1	A	1162	GLU
1	A	1165	LYS
1	A	1170	ILE
1	A	1173	LYS
1	A	1178	GLU
1	A	1180	ILE
1	A	1182	ASN
1	A	1183	VAL
1	A	1186	GLU
1	A	1189	LYS
1	A	1191	LEU
1	A	1192	ILE

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (33) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	91	HIS
1	A	111	GLN
1	A	133	HIS
1	A	161	ASN
1	A	183	ASN
1	A	237	ASN
1	A	282	ASN
1	A	295	ASN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	316	ASN
1	A	324	GLN
1	A	357	HIS
1	A	425	HIS
1	A	443	ASN
1	A	468	ASN
1	A	538	ASN
1	A	560	ASN
1	A	572	HIS
1	A	575	ASN
1	A	600	GLN
1	A	665	ASN
1	A	667	ASN
1	A	680	ASN
1	A	687	ASN
1	A	726	ASN
1	A	812	GLN
1	A	857	ASN
1	A	880	ASN
1	A	894	ASN
1	A	928	ASN
1	A	946	ASN
1	A	953	ASN
1	A	981	ASN
1	A	1177	ASN

### 5.3.3 RNA ⓘ

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

Of 1 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

## 5.7 Other polymers

There are no such residues in this entry.

## 5.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.

## 6 Fit of model and data [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å <sup>2</sup> )	Q<0.9
1	A	1053/1193 (88%)	-0.51	2 (0%) 94 93	9, 32, 70, 128	0

All (2) RSRZ outliers are listed below:

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

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

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

### 6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no 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, 95<sup>th</sup> percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled ‘Q< 0.9’ lists the number of atoms with occupancy less than 0.9.

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	LLDF	B-factors(Å <sup>2</sup> )	Q<0.9
2	ZN	A	1194	1/1	0.35	0.20	-	38,38,38,38	0

## 6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.