



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2018 – 09:25 pm GMT

PDB ID : 3V0C  
Title : 4.3 angstrom crystal structure of an inactive BoNT/A (E224Q/R363A/Y366F)  
Authors : Gu, S.; Rumpel, S.; Zhou, J.; Strotmeier, J.; Bigalke, H.; Perry, K.; Shoemaker, C.B.; Rummel, A.; Jin, R.  
Deposited on : 2011-12-07  
Resolution : 4.30 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

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/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) : 1.13  
EDS : trunk30967  
Percentile statistics : 20171227.v01 (using entries in the PDB archive December 27th 2017)  
Refmac : 5.8.0158  
CCP4 : 7.0 (Gargrove)  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : trunk30967

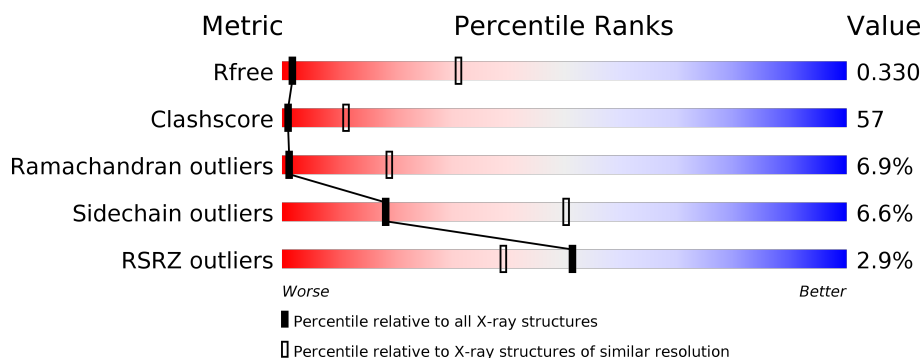
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*X-RAY DIFFRACTION*

The reported resolution of this entry is 4.30 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))
$R_{free}$	111664	1031 (4.90-3.70)
Clashscore	122126	1101 (4.90-3.70)
Ramachandran outliers	120053	1051 (4.90-3.70)
Sidechain outliers	120020	1035 (4.90-3.70)
RSRZ outliers	108989	1194 (5.00-3.60)

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	1312	

## 2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 10390 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 BoNT/A.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	1277	Total	C	N	O	S	0	0	0
			10389	6664	1714	1979	32			

There are 20 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	224	GLN	GLU	ENGINEERED MUTATION	UNP Q7B8V4
A	363	ALA	ARG	ENGINEERED MUTATION	UNP Q7B8V4
A	366	PHE	TYR	ENGINEERED MUTATION	UNP Q7B8V4
A	1158	ALA	THR	CONFLICT	UNP Q7B8V4
A	1297	VAL	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1298	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1299	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1300	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1301	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1302	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1303	SER	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1304	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1305	TRP	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1306	SER	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1307	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1308	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1309	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1310	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1311	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4
A	1312	LYS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q7B8V4

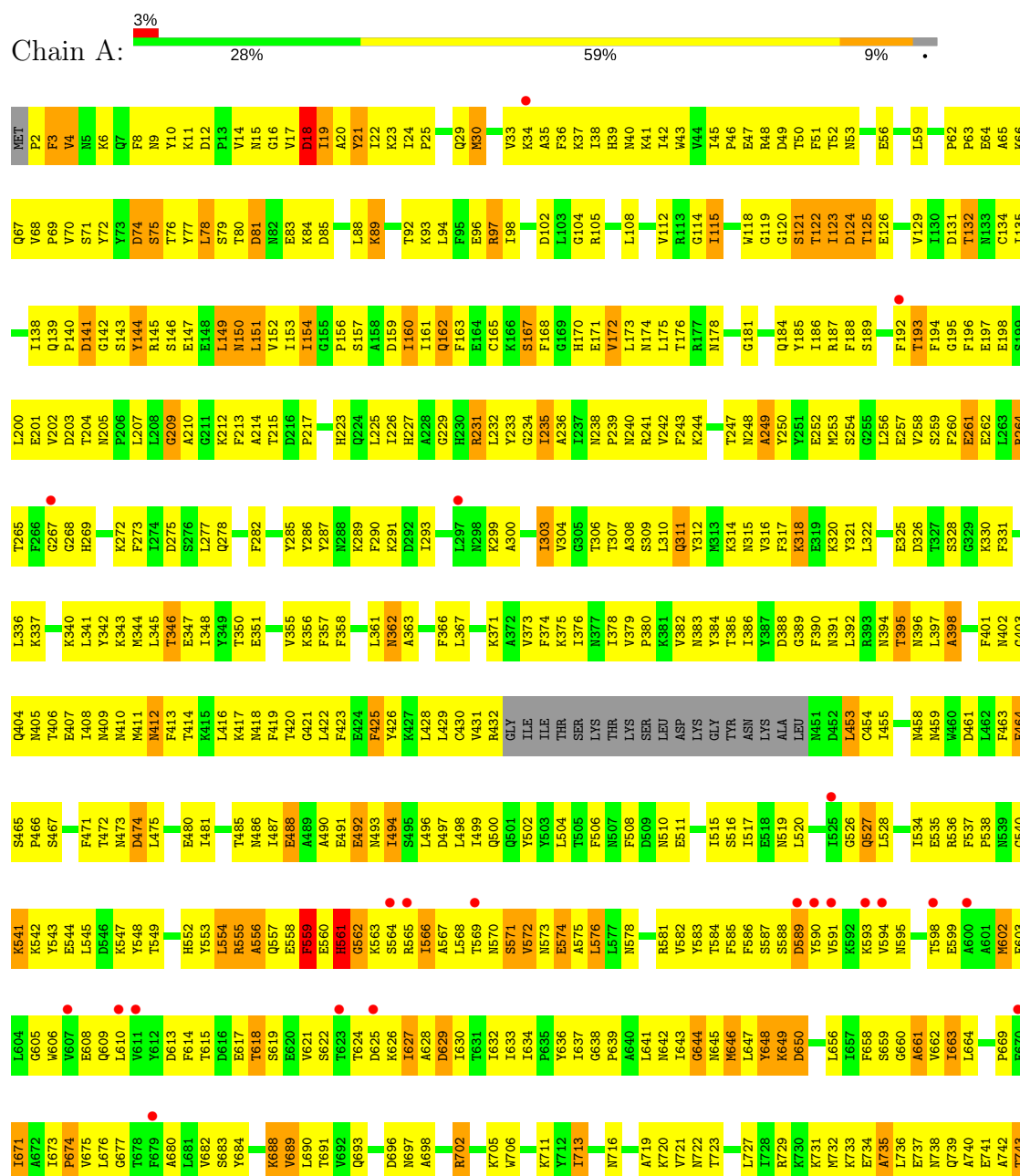
- Molecule 2 is ZINC ION (three-letter code: ZN) (formula: Zn).

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

### 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: BoNT/A



Y1267	R1268	L1269	Q1270	I1271	E1272	R1273	L1276	T1277	L1278	G1279	C1280	S1281	W1282	E1283	F1284	I1285	P1286	V1287	D1288	D1289	G1290	W1291	G1292	E1293	L1296	VAL	PRO	PRO	THR	PRO	GLY	SER	ALA	TRP	SER	HIS	PRO	GLN	GLU	LYS																		
Q1199	E1203	K1204	I1205	L1206	L1209	E1210	T1211	P1212	D1213	L1214	T1215	L1216	L1217	L1218	S1219	Q1219	V1220	V1221	M1227	D1228	Q1229	G1230	I1231	T1232	N1233	K1234	C1235	K1236	M1237	N1238	L1239	Q1240	D1241	N1242	N1243	G1244	N1245	D1246	L1247	G1248	F1249	I1250	G1251	F1252	H1253	Q1254	F1255	N1256	A1259	K1260	L1261	V1262	A1263	S1264	N1265	F1266		
R1131	G1132	Y1133	M1134	Y1135	L1136	K1137	G1138	P1139	V1143	M1144	T1145	T1146	M1147	T1148	Y1149	L1150	M1151	L1154	Y1155	R1156	K1159	F1160	I1161	I1162	K1163	K1164	Y1165	A1166	S1167	G1168	K1169	K1170	D1171	N1172	I1173	V1174	R1175	N1176	V1180	Y1181	N1182	N1183	V1186	K1189	E1190	Y1191	R1192	L1193	A1194	T1195	M1196	A1197	S1198					
Y1066	I1067	W1068	I1069	K1070	Y1071	F1072	M1073	L1074	F1075	D1076	K1077	E1078	L1079	M1080	E1081	K1082	E1083	I1084	K1085	D1086	L1087	Y1088	D1089	N1090	Q1091	I1096	L1097	K1098	D1099	F1100	W1101	G1102	D1103	Y1104	L1105	Q1106	K1109	P1110	Y1111	Y1112	M1113	L1114	N1115	L1116	Y1117	D1118	P1119	Y1122	V1123	D1124	V1125	W1126	N1127	T1063	H1064	R1065		
S1002	Q1003	M1004	I1005	S1008	D1009	Y1010	E084	I1011	N1012	R1013	W1014	I1015	F1016	Y1017	T1018	I1019	T1020	N1021	N1022	R1023	L1024	N1025	N1026	S1027	K1028	I1029	Y1030	I1031	R1034	L1035	W1036	K1039	P1040	I1041	S1042	N1043	L1044	G1045	N1046	I1047	H1048	A1049	S1050	N1051	N1052	I1053	M1054	F1055	K1056	L1057	C1060	R1061	D1062	N1127	T1063	H1064	R1065	
S942	T943	S944	W945	I946	R947	R948	I949	P950	K951	Y952	F953	N954	S955	I956	S957	L958	N959	N960	E961	Y962	T963	I964	I965	N966	C967	M968	E969	N970	N971	S972	G973	K975	V976	S977	L978	N979	Y980	G981	E982	I983	W984	T985	L986	N987	Q988	D989	T990	Q991	E992	I993	K994	Q995	R996	V997	V998	F999	K1000	Y1001
L808	E809	D812	L815	K816	L819	L820	K821	Y822	I823	Y824	D825	N826	R827	G828	T829	L830	I831	Q832	I833	W834	D835	K838	D839	K840	V841	N842	T843	N844	L845	S846	T847	D848	Q852	K855	Y856	V857	D858	M859	Q860	R861	L862	L863	S864	T865	F866	Y869	I870	K871	N872	I873	K874	R875						
K744	A745	I746	N748	Y749	Q750	Y751	N752	Q753	T754	E755	E756	E757	K758	N759	N760	N761	I762	R763	F764	I765	D766	D767	D768	L769	K772	L773	N774	E775	S776	I777	L778	K779	A780	W781	I782	N783	I784	N785	K786	N789	Q790	C791	S792	V793	S794	Y795	L796	M797	N798	I801	P802	Y803	K806	R807				
T876	L879	N880	L881	Y882	Y883	E884	S885	N886	K887	L888	I889	D890	L891	S892	R893	G897	I898	N899	I900	Q901	I902	K903	F906	D907	P908	I909	D910	N911	Q912	Q913	T914	Q915	L916	F917	N918	L919	E920	S921	S922	K923	I924	E925	V926	I927	L928	K929	I932	V933	Y934	N935	I870	K871	N872	I873	K874	R875		

## 4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 31 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	167.52Å 167.52Å 158.73Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	45.11 – 4.30 45.11 – 4.30	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.9 (45.11-4.30) 99.9 (45.11-4.30)	Depositor EDS
$R_{merge}$	(Not available)	Depositor
$R_{sym}$	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ <sup>1</sup>	2.96 (at 4.28Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX (phenix.refine: 1.7.2_869)	Depositor
R, $R_{free}$	0.322 , 0.349 0.312 , 0.330	Depositor DCC
$R_{free}$ test set	913 reflections (5.11%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å <sup>2</sup> )	161.8	Xtriage
Anisotropy	0.203	Xtriage
Bulk solvent $k_{sol}$ (e/Å <sup>3</sup> ), $B_{sol}$ (Å <sup>2</sup> )	0.32 , 241.0	EDS
L-test for twinning <sup>2</sup>	$\langle  L  \rangle = 0.48$ , $\langle L^2 \rangle = 0.31$	Xtriage
Estimated twinning fraction	0.021 for -h,-k,l	Xtriage
$F_o, F_c$ correlation	0.83	EDS
Total number of atoms	10390	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	235.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 2.53% 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 [i](#)

### 5.1 Standard geometry [i](#)

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	1.16	0/10610	0.66	1/14367 (0.0%)

There are no bond length outliers.

All (1) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed( $^{\circ}$ )	Ideal( $^{\circ}$ )
1	A	151	LEU	CA-CB-CG	6.20	129.55	115.30

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

### 5.2 Too-close contacts [i](#)

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	10389	0	10255	1168	9
2	A	1	0	0	0	0
All	All	10390	0	10255	1168	9

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 57.

All (1168) 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:277:LEU:HD22	1:A:474:ASP:HB3	1.24	1.13
1:A:872:ASN:HD21	1:A:874:ILE:HB	1.12	1.11
1:A:948:ARG:HB3	1:A:1068:TRP:HB2	1.28	1.10
1:A:310:LEU:HD11	1:A:314:LYS:HE3	1.38	1.05
1:A:1027:SER:HB2	1:A:1041:ILE:HD11	1.37	1.02
1:A:969:GLU:H	1:A:972:SER:HB3	1.24	1.02
1:A:1248:GLY:HA2	1:A:1268:ASN:HD21	1.16	1.02
1:A:927:ILE:HG12	1:A:1052:ASN:HB3	1.36	1.01
1:A:346:THR:HG22	1:A:347:GLU:HG3	1.41	1.01
1:A:1010:TYR:HB3	1:A:1015:ILE:HD11	1.41	0.99
1:A:52:THR:HG22	1:A:528:LEU:HD11	1.47	0.96
1:A:806:LYS:HD2	1:A:934:TYR:HB3	1.48	0.95
1:A:910:ASP:HB3	1:A:913:GLN:HE21	1.30	0.95
1:A:576:LEU:HA	1:A:581:ARG:HB2	1.49	0.95
1:A:566:ILE:HG12	1:A:749:TYR:CD1	2.02	0.95
1:A:763:ASN:HB2	1:A:765:ASN:ND2	1.82	0.95
1:A:2:PRO:HG2	1:A:39:HIS:CD2	2.03	0.94
1:A:629:ASP:OD1	1:A:630:ILE:HG13	1.71	0.91
1:A:264:ARG:HH11	1:A:264:ARG:HG2	1.33	0.91
1:A:217:PRO:HG2	1:A:378:ILE:HD11	1.49	0.90
1:A:584:THR:HG22	1:A:586:PHE:H	1.38	0.89
1:A:242:VAL:HG11	1:A:257:GLU:HB2	1.53	0.89
1:A:1027:SER:HB2	1:A:1041:ILE:CD1	2.02	0.89
1:A:21:TYR:HE1	1:A:34:LYS:HB2	1.36	0.88
1:A:418:ASN:HD21	1:A:420:THR:HB	1.36	0.88
1:A:17:VAL:HG12	1:A:145:ARG:HH22	1.39	0.87
1:A:428:LEU:HB3	1:A:542:LYS:HA	1.57	0.87
1:A:559:PHE:HB3	1:A:582:VAL:HG22	1.57	0.86
1:A:41:LYS:HB3	1:A:150:ASN:HB2	1.58	0.85
1:A:49:ASP:HB3	1:A:187:ARG:HE	1.41	0.85
1:A:815:LEU:HD23	1:A:845:LEU:HD11	1.58	0.85
1:A:575:ALA:O	1:A:581:ARG:HB2	1.77	0.85
1:A:426:TYR:CE1	1:A:540:GLY:HA2	2.11	0.84
1:A:984:ILE:HG12	1:A:998:VAL:HG22	1.60	0.84
1:A:24:ILE:HD11	1:A:45:ILE:HD11	1.59	0.84
1:A:556:ALA:O	1:A:583:TYR:HB3	1.78	0.84
1:A:969:GLU:N	1:A:972:SER:HB3	1.93	0.84
1:A:755:THR:O	1:A:756:GLU:HB2	1.78	0.84
1:A:969:GLU:H	1:A:972:SER:CB	1.90	0.84
1:A:968:MET:HG2	1:A:972:SER:O	1.78	0.84
1:A:968:MET:HA	1:A:972:SER:HB3	1.59	0.83
1:A:1019:ILE:HG12	1:A:1029:ILE:HD12	1.59	0.83

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:952:TYR:HB2	1:A:1003:GLN:HE22	1.43	0.83
1:A:122:THR:O	1:A:126:GLU:HB3	1.79	0.83
1:A:605:GLY:HA2	1:A:608:GLU:OE1	1.77	0.83
1:A:22:ILE:HD13	1:A:35:ALA:HB3	1.61	0.83
1:A:35:ALA:HB2	1:A:45:ILE:HG12	1.61	0.83
1:A:43:TRP:HD1	1:A:149:LEU:HD21	1.44	0.83
1:A:306:THR:HG22	1:A:516:SER:O	1.78	0.82
1:A:1163:LYS:HB2	1:A:1181:TYR:HB2	1.61	0.82
1:A:872:ASN:ND2	1:A:874:ILE:HB	1.93	0.82
1:A:789:ASN:HD21	1:A:861:ARG:HE	1.26	0.82
1:A:872:ASN:ND2	1:A:874:ILE:H	1.78	0.82
1:A:713:ILE:HD11	1:A:796:LEU:HD21	1.61	0.82
1:A:594:VAL:HG12	1:A:746:ILE:HG21	1.59	0.82
1:A:21:TYR:CE1	1:A:34:LYS:HB2	2.15	0.82
1:A:573:ASN:O	1:A:576:LEU:HG	1.80	0.82
1:A:1248:GLY:HA2	1:A:1268:ASN:ND2	1.95	0.82
1:A:979:ASN:O	1:A:982:GLU:HG2	1.79	0.82
1:A:70:VAL:HG12	1:A:161:ILE:HD11	1.62	0.81
1:A:52:THR:CG2	1:A:528:LEU:HD11	2.09	0.81
1:A:927:ILE:HG12	1:A:1052:ASN:CB	2.10	0.81
1:A:624:THR:HB	1:A:627:ILE:HD13	1.62	0.81
1:A:397:LEU:HA	1:A:402:ASN:HB2	1.60	0.81
1:A:487:ILE:HG23	1:A:488:GLU:OE1	1.81	0.81
1:A:344:MET:HE3	1:A:502:TYR:HD2	1.43	0.81
1:A:702:ARG:HG3	1:A:702:ARG:HH11	1.46	0.81
1:A:473:ASN:OD1	1:A:475:LEU:HD12	1.79	0.81
1:A:610:LEU:HD12	1:A:747:ILE:HD11	1.63	0.80
1:A:1110:PRO:HB2	1:A:1159:LYS:HD3	1.63	0.80
1:A:1013:ARG:HG2	1:A:1101:TRP:HA	1.64	0.80
1:A:872:ASN:HD21	1:A:874:ILE:CB	1.94	0.80
1:A:391:ASN:HD21	1:A:404:GLN:HE21	1.25	0.80
1:A:464:PHE:CE2	1:A:466:PRO:HG3	2.17	0.80
1:A:277:LEU:HD23	1:A:472:THR:HG22	1.62	0.80
1:A:763:ASN:HD22	1:A:765:ASN:HD21	1.29	0.80
1:A:1203:GLU:O	1:A:1204:LYS:HD3	1.81	0.80
1:A:385:THR:HG23	1:A:388:ASP:H	1.47	0.79
1:A:643:ILE:HG21	1:A:664:LEU:HD23	1.64	0.79
1:A:986:THR:HG22	1:A:996:ARG:HB3	1.63	0.79
1:A:929:LYS:O	1:A:932:ILE:HG22	1.82	0.79
1:A:277:LEU:CD2	1:A:474:ASP:HB3	2.10	0.79
1:A:1099:ASP:HB2	1:A:1103:ASP:H	1.47	0.78

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:375:LYS:HB3	1:A:414:THR:HB	1.63	0.78
1:A:122:THR:HB	1:A:126:GLU:OE1	1.84	0.78
1:A:18:ASP:HA	1:A:37:LYS:HB2	1.65	0.78
1:A:344:MET:HE3	1:A:502:TYR:CD2	2.19	0.78
1:A:961:GLU:HB2	1:A:979:ASN:HD22	1.46	0.78
1:A:306:THR:HG21	1:A:515:ILE:HG22	1.66	0.78
1:A:798:ASN:ND2	1:A:893:ARG:HG3	1.99	0.77
1:A:962:TYR:H	1:A:962:TYR:HD1	1.32	0.77
1:A:1057:LEU:H	1:A:1057:LEU:HD12	1.48	0.77
1:A:1227:ASN:ND2	1:A:1229:GLN:HB3	2.00	0.77
1:A:590:TYR:O	1:A:594:VAL:HG23	1.84	0.77
1:A:1196:ASN:O	1:A:1199:GLN:HG3	1.85	0.76
1:A:170:HIS:CD2	1:A:172:VAL:H	2.02	0.76
1:A:1265:ASN:HA	1:A:1268:ASN:HD22	1.48	0.76
1:A:2:PRO:O	1:A:39:HIS:HD2	1.69	0.76
1:A:935:ASN:HA	1:A:1049:ALA:HB2	1.67	0.76
1:A:1233:ASN:ND2	1:A:1271:ILE:HG23	2.01	0.76
1:A:1211:ILE:H	1:A:1211:ILE:HD12	1.51	0.75
1:A:985:TRP:CD2	1:A:1019:ILE:HG21	2.22	0.75
1:A:547:LYS:NZ	1:A:646:MET:HB3	2.02	0.75
1:A:11:LYS:NZ	1:A:81:ASP:HB3	2.01	0.75
1:A:935:ASN:HA	1:A:1049:ALA:CB	2.16	0.75
1:A:1020:THR:HG23	1:A:1078:GLU:HG3	1.67	0.75
1:A:42:ILE:HD12	1:A:151:LEU:HD12	1.68	0.75
1:A:873:ILE:O	1:A:876:THR:HB	1.85	0.74
1:A:987:LEU:HD12	1:A:1041:ILE:HD13	1.68	0.74
1:A:154:ILE:H	1:A:154:ILE:HD12	1.51	0.74
1:A:1203:GLU:HB3	1:A:1262:VAL:HG11	1.70	0.74
1:A:14:VAL:HG13	1:A:20:ALA:HA	1.69	0.74
1:A:39:HIS:ND1	1:A:40:ASN:N	2.35	0.74
1:A:903:LYS:HB2	1:A:922:SER:HB3	1.69	0.74
1:A:264:ARG:NH1	1:A:264:ARG:HG2	1.98	0.74
1:A:634:ILE:HG22	1:A:637:ILE:HG13	1.68	0.74
1:A:1248:GLY:CA	1:A:1268:ASN:HD21	1.98	0.74
1:A:952:TYR:CE2	1:A:980:TYR:HA	2.23	0.74
1:A:713:ILE:HG12	1:A:801:ILE:HD13	1.69	0.73
1:A:765:ASN:HB3	1:A:768:ASP:HB2	1.69	0.73
1:A:417:LYS:HE3	1:A:419:PHE:CE1	2.23	0.73
1:A:1100:PHE:HD1	1:A:1283:GLU:HG2	1.54	0.73
1:A:418:ASN:ND2	1:A:420:THR:H	1.86	0.73
1:A:584:THR:HG22	1:A:586:PHE:N	2.02	0.73

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:809:GLU:HG2	1:A:934:TYR:CE2	2.23	0.73
1:A:641:LEU:HB2	1:A:643:ILE:HG12	1.68	0.73
1:A:584:THR:HG22	1:A:585:PHE:N	2.01	0.73
1:A:984:ILE:HG23	1:A:998:VAL:HG22	1.69	0.73
1:A:622:SER:HB2	1:A:633:ILE:HB	1.70	0.73
1:A:918:ASN:ND2	1:A:1065:ARG:HB3	2.03	0.73
1:A:102:ASP:HB2	1:A:357:PHE:HE2	1.54	0.73
1:A:882:ARG:HH22	1:A:1073:ASN:ND2	1.86	0.73
1:A:17:VAL:HG12	1:A:145:ARG:NH2	2.03	0.73
1:A:790:GLN:O	1:A:794:SER:HB3	1.89	0.72
1:A:1155:TYR:CE2	1:A:1287:VAL:HG13	2.23	0.72
1:A:420:THR:HG22	1:A:420:THR:O	1.90	0.72
1:A:395:THR:C	1:A:397:LEU:H	1.93	0.72
1:A:201:GLU:HG3	1:A:361:LEU:CD1	2.20	0.72
1:A:644:GLY:O	1:A:647:LEU:HG	1.90	0.72
1:A:167:SER:HB3	1:A:231:ARG:HH12	1.53	0.72
1:A:626:LYS:C	1:A:627:ILE:HD12	2.10	0.72
1:A:210:ALA:H	1:A:405:ASN:ND2	1.88	0.72
1:A:755:THR:OG1	1:A:757:GLU:HG2	1.89	0.72
1:A:429:LEU:HD23	1:A:543:TYR:HB2	1.72	0.71
1:A:702:ARG:O	1:A:705:LYS:HB3	1.89	0.71
1:A:153:ILE:HD13	1:A:186:ILE:HB	1.69	0.71
1:A:18:ASP:HA	1:A:37:LYS:CB	2.20	0.71
1:A:1011:ILE:HG21	1:A:1291:TRP:HZ3	1.54	0.71
1:A:306:THR:HG21	1:A:515:ILE:CG2	2.21	0.71
1:A:226:ILE:HD13	1:A:350:THR:HA	1.73	0.71
1:A:946:TRP:HB2	1:A:1070:LYS:HB3	1.73	0.70
1:A:249:ALA:HB3	1:A:252:GLU:HG3	1.72	0.70
1:A:481:ILE:HD13	1:A:698:ALA:HA	1.74	0.70
1:A:201:GLU:HG3	1:A:361:LEU:HD11	1.73	0.70
1:A:974:TRP:HB2	1:A:985:TRP:CH2	2.27	0.70
1:A:798:ASN:HD22	1:A:893:ARG:CG	2.05	0.70
1:A:264:ARG:HH11	1:A:264:ARG:CG	2.05	0.70
1:A:210:ALA:N	1:A:405:ASN:ND2	2.40	0.70
1:A:598:THR:HG22	1:A:602:MET:O	1.92	0.70
1:A:210:ALA:N	1:A:405:ASN:HD21	1.90	0.70
1:A:1249:PHE:CE2	1:A:1271:ILE:HD12	2.27	0.69
1:A:1044:LEU:HD23	1:A:1047:ILE:HD11	1.74	0.69
1:A:990:THR:C	1:A:992:GLU:H	1.95	0.69
1:A:1193:LEU:HD11	1:A:1206:LEU:HD13	1.73	0.69
1:A:549:THR:H	1:A:552:HIS:HD2	1.41	0.69

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:575:ALA:HB1	1:A:582:VAL:O	1.92	0.69
1:A:184:GLN:OE1	1:A:231:ARG:HD3	1.92	0.69
1:A:49:ASP:CB	1:A:187:ARG:HE	2.05	0.69
1:A:757:GLU:HB2	1:A:760:ASN:ND2	2.08	0.69
1:A:181:GLY:HA2	1:A:231:ARG:O	1.93	0.68
1:A:749:TYR:O	1:A:752:ASN:HB3	1.92	0.68
1:A:1096:ILE:O	1:A:1098:LYS:HE3	1.93	0.68
1:A:1041:ILE:O	1:A:1041:ILE:HG22	1.93	0.68
1:A:789:ASN:ND2	1:A:861:ARG:HE	1.92	0.68
1:A:967:CYS:SG	1:A:1050:SER:HB2	2.34	0.68
1:A:745:ALA:O	1:A:748:ASN:HB3	1.94	0.68
1:A:202:VAL:HG11	1:A:778:ASN:O	1.93	0.68
1:A:1168:GLY:C	1:A:1170:LYS:H	1.95	0.68
1:A:1210:GLU:HG3	1:A:1212:PRO:HD2	1.75	0.68
1:A:944:SER:HB3	1:A:1018:THR:HG23	1.75	0.68
1:A:1227:ASN:O	1:A:1230:GLY:N	2.27	0.68
1:A:193:THR:HG21	1:A:215:THR:O	1.93	0.68
1:A:1010:TYR:CB	1:A:1015:ILE:HD11	2.19	0.68
1:A:310:LEU:CD1	1:A:314:LYS:HE3	2.20	0.68
1:A:212:LYS:HE2	1:A:371:LYS:HB2	1.76	0.67
1:A:463:PHE:CE1	1:A:727:LEU:HD23	2.29	0.67
1:A:23:LYS:NZ	1:A:23:LYS:HB2	2.09	0.67
1:A:409:ASN:OD1	1:A:412:ASN:HB2	1.94	0.67
1:A:426:TYR:CZ	1:A:540:GLY:HA2	2.28	0.67
1:A:105:ARG:HG2	1:A:508:PHE:CE1	2.28	0.67
1:A:1023:ARG:HD3	1:A:1023:ARG:O	1.95	0.67
1:A:585:PHE:HB3	1:A:639:PRO:O	1.95	0.67
1:A:656:LEU:HA	1:A:663:ILE:HD12	1.76	0.67
1:A:1241:ASP:OD2	1:A:1245:ASN:HB2	1.95	0.67
1:A:984:ILE:HG23	1:A:998:VAL:CG2	2.24	0.67
1:A:43:TRP:CD1	1:A:149:LEU:HD21	2.29	0.67
1:A:1099:ASP:OD2	1:A:1103:ASP:HB2	1.96	0.66
1:A:820:LEU:HD21	1:A:842:ASN:OD1	1.94	0.66
1:A:30:MET:HE2	1:A:33:VAL:HG23	1.76	0.66
1:A:22:ILE:HD11	1:A:43:TRP:CZ3	2.30	0.66
1:A:646:MET:O	1:A:647:LEU:HD23	1.96	0.66
1:A:713:ILE:HD11	1:A:796:LEU:CD2	2.25	0.66
1:A:145:ARG:HA	1:A:519:ASN:OD1	1.96	0.66
1:A:176:THR:CG2	1:A:236:ALA:HB3	2.26	0.66
1:A:455:ILE:CG2	1:A:555:ARG:HD2	2.26	0.66
1:A:275:ASP:OD2	1:A:472:THR:HB	1.95	0.66

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:500:GLN:HE22	1:A:504:LEU:HD21	1.60	0.66
1:A:830:LEU:HB2	1:A:834:VAL:HG13	1.76	0.66
1:A:1193:LEU:C	1:A:1193:LEU:HD12	2.16	0.66
1:A:209:GLY:HA3	1:A:405:ASN:HD22	1.61	0.66
1:A:1155:TYR:CD2	1:A:1287:VAL:HG22	2.31	0.65
1:A:181:GLY:HA3	1:A:232:LEU:O	1.97	0.65
1:A:839:ASP:O	1:A:843:ASN:HB2	1.97	0.65
1:A:986:THR:HG22	1:A:996:ARG:CB	2.26	0.65
1:A:1101:TRP:CZ3	1:A:1286:PRO:O	2.49	0.65
1:A:643:ILE:O	1:A:645:ASN:N	2.28	0.65
1:A:671:ILE:N	1:A:671:ILE:HD12	2.12	0.65
1:A:985:TRP:HB2	1:A:1019:ILE:HD13	1.77	0.65
1:A:253:MET:HG3	1:A:463:PHE:O	1.97	0.65
1:A:485:THR:HB	1:A:697:ASN:HD22	1.60	0.65
1:A:576:LEU:HA	1:A:581:ARG:CB	2.27	0.65
1:A:754:TYR:OH	1:A:757:GLU:HG3	1.96	0.65
1:A:798:ASN:HD22	1:A:893:ARG:HG3	1.58	0.65
1:A:968:MET:CA	1:A:972:SER:HB3	2.27	0.65
1:A:115:ILE:HG22	1:A:317:PHE:HE1	1.62	0.64
1:A:526:GLY:O	1:A:527:GLN:HB2	1.95	0.64
1:A:557:GLN:O	1:A:738:ASN:HB3	1.95	0.64
1:A:1145:THR:HG22	1:A:1145:THR:O	1.96	0.64
1:A:22:ILE:CD1	1:A:35:ALA:HB3	2.26	0.64
1:A:22:ILE:HD12	1:A:22:ILE:N	2.12	0.64
1:A:1061:ARG:HG2	1:A:1061:ARG:HH11	1.61	0.64
1:A:356:LYS:HD2	1:A:496:LEU:HD21	1.79	0.64
1:A:948:ARG:HH11	1:A:948:ARG:HG2	1.62	0.64
1:A:1265:ASN:HA	1:A:1268:ASN:ND2	2.12	0.64
1:A:406:THR:HG22	1:A:413:PHE:CG	2.33	0.64
1:A:634:ILE:HD11	1:A:783:ASN:HB3	1.79	0.64
1:A:634:ILE:HG12	1:A:784:ILE:HG12	1.78	0.64
1:A:463:PHE:CZ	1:A:727:LEU:HD23	2.33	0.64
1:A:11:LYS:HZ1	1:A:81:ASP:CB	2.11	0.64
1:A:882:ARG:HA	1:A:912:ASN:HD21	1.61	0.64
1:A:1296:LEU:HD23	1:A:1296:LEU:H	1.62	0.64
1:A:464:PHE:O	1:A:465:SER:HB3	1.96	0.64
1:A:628:ALA:O	1:A:629:ASP:HB2	1.97	0.64
1:A:1080:ASN:O	1:A:1084:ILE:HG12	1.97	0.64
1:A:306:THR:HG23	1:A:517:ILE:HG22	1.80	0.64
1:A:1195:THR:HB	1:A:1206:LEU:HD23	1.80	0.63
1:A:733:LYS:HB2	1:A:781:MET:CE	2.28	0.63

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:24:ILE:CD1	1:A:45:ILE:HD11	2.28	0.63
1:A:167:SER:HB3	1:A:231:ARG:NH1	2.13	0.63
1:A:1192:ARG:HD3	1:A:1219:GLN:OE1	1.98	0.63
1:A:913:GLN:HG2	1:A:1070:LYS:HE2	1.79	0.63
1:A:987:LEU:HD12	1:A:1041:ILE:CD1	2.28	0.63
1:A:336:LEU:HD12	1:A:336:LEU:O	1.99	0.63
1:A:458:ASN:HB3	1:A:461:ASP:HB2	1.79	0.63
1:A:965:ILE:HD12	1:A:976:VAL:HG21	1.80	0.63
1:A:881:LEU:HD11	1:A:1072:PHE:HB3	1.79	0.63
1:A:740:ALA:O	1:A:744:LYS:HG3	1.98	0.63
1:A:819:LEU:HD23	1:A:841:VAL:HB	1.80	0.63
1:A:397:LEU:O	1:A:398:ALA:HB2	1.98	0.63
1:A:744:LYS:O	1:A:748:ASN:HB2	1.99	0.62
1:A:547:LYS:HE2	1:A:646:MET:SD	2.39	0.62
1:A:1062:ASP:OD1	1:A:1064:HIS:N	2.32	0.62
1:A:918:ASN:HD22	1:A:1065:ARG:HB3	1.61	0.62
1:A:122:THR:O	1:A:123:ILE:HB	1.99	0.62
1:A:1117:TYR:HD2	1:A:1252:PHE:HZ	1.47	0.62
1:A:572:VAL:HG12	1:A:574:GLU:H	1.64	0.62
1:A:161:ILE:HD12	1:A:194:PHE:CE2	2.34	0.62
1:A:320:LYS:HD3	1:A:321:TYR:CE2	2.35	0.62
1:A:115:ILE:HA	1:A:150:ASN:HD21	1.64	0.62
1:A:53:ASN:HB3	1:A:56:GLU:HB2	1.80	0.62
1:A:549:THR:H	1:A:552:HIS:CD2	2.18	0.62
1:A:98:ILE:O	1:A:104:GLY:HA3	1.98	0.62
1:A:940:ASN:HA	1:A:1021:ASN:O	1.99	0.62
1:A:951:LYS:HG3	1:A:952:TYR:N	2.14	0.62
1:A:1011:ILE:CG2	1:A:1291:TRP:HZ3	2.13	0.62
1:A:85:ASP:O	1:A:89:LYS:HD3	2.00	0.62
1:A:1255:PHE:CD2	1:A:1260:LYS:HD2	2.35	0.61
1:A:223:HIS:ND1	1:A:351:GLU:OE1	2.32	0.61
1:A:917:PHE:O	1:A:1057:LEU:HD13	2.00	0.61
1:A:1168:GLY:O	1:A:1170:LYS:HG2	1.99	0.61
1:A:500:GLN:NE2	1:A:504:LEU:HD21	2.14	0.61
1:A:637:ILE:HD11	1:A:784:ILE:HG23	1.82	0.61
1:A:764:PHE:CZ	1:A:769:LEU:HD22	2.34	0.61
1:A:556:ALA:HB2	1:A:576:LEU:HD23	1.81	0.61
1:A:747:ILE:HG21	1:A:764:PHE:CZ	2.36	0.61
1:A:361:LEU:H	1:A:404:GLN:HE22	1.48	0.61
1:A:962:TYR:CE2	1:A:1057:LEU:HD23	2.35	0.61
1:A:23:LYS:HB2	1:A:23:LYS:HZ2	1.64	0.61

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:789:ASN:OD1	1:A:861:ARG:HG2	2.00	0.61
1:A:682:VAL:HG12	1:A:684:TYR:CE1	2.35	0.61
1:A:731:LYS:O	1:A:734:GLU:HB3	2.01	0.61
1:A:1101:TRP:HZ3	1:A:1286:PRO:O	1.84	0.61
1:A:287:TYR:CE2	1:A:291:LYS:HD2	2.36	0.61
1:A:643:ILE:C	1:A:645:ASN:H	2.04	0.61
1:A:325:GLU:HB3	1:A:331:PHE:CD1	2.36	0.60
1:A:455:ILE:HG21	1:A:555:ARG:HD2	1.81	0.60
1:A:584:THR:HG22	1:A:585:PHE:H	1.64	0.60
1:A:15:ASN:OD1	1:A:17:VAL:O	2.19	0.60
1:A:306:THR:HG22	1:A:517:ILE:HA	1.82	0.60
1:A:406:THR:O	1:A:410:ASN:HA	2.01	0.60
1:A:250:TYR:HB2	1:A:429:LEU:CD2	2.31	0.60
1:A:769:LEU:O	1:A:772:LYS:HB2	2.01	0.60
1:A:618:THR:HG23	1:A:780:ALA:HB2	1.83	0.60
1:A:872:ASN:HD22	1:A:874:ILE:H	1.47	0.60
1:A:135:ILE:CG2	1:A:149:LEU:HD12	2.31	0.60
1:A:49:ASP:OD1	1:A:52:THR:HB	2.01	0.60
1:A:593:LYS:HD3	1:A:609:GLN:CD	2.21	0.60
1:A:325:GLU:HB3	1:A:331:PHE:CE1	2.36	0.60
1:A:1128:VAL:HG11	1:A:1191:TYR:CE2	2.37	0.60
1:A:348:ILE:HG23	1:A:499:ILE:HG12	1.83	0.60
1:A:903:LYS:HG3	1:A:921:SER:HB2	1.83	0.60
1:A:1075:PHE:CD2	1:A:1079:LEU:HD11	2.36	0.59
1:A:702:ARG:NH1	1:A:702:ARG:HG3	2.17	0.59
1:A:961:GLU:HA	1:A:978:LEU:O	2.02	0.59
1:A:163:PHE:HA	1:A:187:ARG:O	2.01	0.59
1:A:250:TYR:HB2	1:A:429:LEU:HD22	1.84	0.59
1:A:52:THR:HG23	1:A:528:LEU:HD21	1.82	0.59
1:A:1099:ASP:HB2	1:A:1103:ASP:N	2.15	0.59
1:A:591:VAL:HG12	1:A:595:ASN:HD22	1.66	0.59
1:A:852:GLN:OE1	1:A:855:LYS:HE3	2.01	0.59
1:A:974:TRP:HA	1:A:986:THR:O	2.01	0.59
1:A:134:CYS:HB3	1:A:147:GLU:O	2.02	0.59
1:A:170:HIS:HD2	1:A:172:VAL:H	1.45	0.59
1:A:249:ALA:HB3	1:A:252:GLU:CG	2.32	0.59
1:A:336:LEU:CD1	1:A:340:LYS:HE3	2.32	0.59
1:A:634:ILE:CG2	1:A:637:ILE:HG13	2.31	0.59
1:A:872:ASN:ND2	1:A:874:ILE:N	2.50	0.59
1:A:535:GLU:HG3	1:A:537:PHE:CZ	2.37	0.59
1:A:961:GLU:CB	1:A:979:ASN:HD22	2.13	0.59

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:923:LYS:HD3	1:A:1056:LYS:HD3	1.84	0.59
1:A:8:PHE:HD1	1:A:19:ILE:HD11	1.67	0.59
1:A:906:PHE:O	1:A:907:ASP:C	2.41	0.59
1:A:949:ILE:O	1:A:1012:ASN:HA	2.03	0.59
1:A:277:LEU:HD23	1:A:472:THR:CG2	2.30	0.59
1:A:802:PRO:HB3	1:A:932:ILE:HD11	1.84	0.59
1:A:428:LEU:O	1:A:543:TYR:N	2.35	0.59
1:A:706:TRP:CZ3	1:A:848:ASP:HB2	2.38	0.59
1:A:1016:PHE:CE2	1:A:1088:TYR:HB2	2.38	0.59
1:A:1241:ASP:CG	1:A:1245:ASN:HB2	2.23	0.59
1:A:576:LEU:HA	1:A:581:ARG:HD2	1.85	0.59
1:A:636:TYR:C	1:A:639:PRO:HD2	2.23	0.59
1:A:995:GLN:OE1	1:A:996:ARG:N	2.35	0.59
1:A:1101:TRP:CZ3	1:A:1288:ASP:HB2	2.38	0.58
1:A:498:LEU:O	1:A:502:TYR:HD1	1.85	0.58
1:A:97:ARG:HG2	1:A:386:ILE:O	2.03	0.58
1:A:934:TYR:O	1:A:937:MET:HB2	2.03	0.58
1:A:952:TYR:CE1	1:A:1065:ARG:CZ	2.86	0.58
1:A:1014:TRP:CH2	1:A:1070:LYS:HE3	2.38	0.58
1:A:1193:LEU:CD1	1:A:1206:LEU:HD13	2.33	0.58
1:A:566:ILE:HG12	1:A:749:TYR:CG	2.39	0.58
1:A:658:PHE:CD1	1:A:889:ILE:HG21	2.38	0.58
1:A:1255:PHE:O	1:A:1256:ASN:HB2	2.03	0.58
1:A:578:ASN:O	1:A:581:ARG:HB3	2.04	0.58
1:A:857:VAL:O	1:A:863:LEU:HD11	2.01	0.58
1:A:1164:LYS:HD3	1:A:1168:GLY:HA2	1.86	0.58
1:A:1211:ILE:HD12	1:A:1211:ILE:N	2.18	0.58
1:A:950:PRO:O	1:A:1065:ARG:NH2	2.36	0.58
1:A:312:TYR:CE2	1:A:515:ILE:HG13	2.39	0.58
1:A:584:THR:CG2	1:A:585:PHE:N	2.66	0.58
1:A:984:ILE:HG22	1:A:985:TRP:N	2.18	0.58
1:A:425:PHE:CZ	1:A:537:PHE:HB2	2.39	0.58
1:A:11:LYS:HZ1	1:A:81:ASP:HB3	1.69	0.58
1:A:1234:LYS:O	1:A:1236:LYS:HG3	2.04	0.58
1:A:1239:LEU:HD13	1:A:1240:GLN:N	2.19	0.58
1:A:226:ILE:CG2	1:A:265:THR:HG23	2.34	0.58
1:A:455:ILE:HD12	1:A:552:HIS:ND1	2.19	0.58
1:A:566:ILE:HD13	1:A:749:TYR:HB3	1.86	0.58
1:A:764:PHE:HZ	1:A:769:LEU:HD22	1.68	0.58
1:A:952:TYR:CD2	1:A:980:TYR:HA	2.39	0.57
1:A:1097:LEU:HD23	1:A:1236:LYS:HD2	1.87	0.57

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:242:VAL:HG13	1:A:258:VAL:O	2.03	0.57
1:A:258:VAL:HG21	1:A:367:LEU:HD21	1.87	0.57
1:A:624:THR:HG21	1:A:633:ILE:HD12	1.85	0.57
1:A:487:ILE:CG2	1:A:488:GLU:N	2.66	0.57
1:A:960:ASN:HD21	1:A:1061:ARG:H	1.52	0.57
1:A:229:GLY:O	1:A:233:TYR:HD1	1.88	0.57
1:A:542:LYS:HE2	1:A:544:GLU:HG3	1.87	0.57
1:A:193:THR:HG22	1:A:194:PHE:H	1.70	0.57
1:A:2:PRO:O	1:A:4:VAL:N	2.37	0.57
1:A:866:PHE:O	1:A:870:ILE:HG12	2.05	0.57
1:A:903:LYS:CB	1:A:922:SER:HB3	2.34	0.57
1:A:72:TYR:CE2	1:A:160:ILE:HD12	2.39	0.57
1:A:861:ARG:NH2	1:A:862:LEU:HD21	2.19	0.57
1:A:1155:TYR:CE2	1:A:1287:VAL:HG22	2.40	0.57
1:A:1296:LEU:HD23	1:A:1296:LEU:N	2.20	0.57
1:A:574:GLU:C	1:A:576:LEU:H	2.07	0.57
1:A:963:THR:O	1:A:1057:LEU:HA	2.04	0.57
1:A:1168:GLY:O	1:A:1170:LYS:N	2.37	0.56
1:A:30:MET:CE	1:A:33:VAL:HG23	2.35	0.56
1:A:473:ASN:ND2	1:A:475:LEU:H	2.03	0.56
1:A:669:PRO:HB3	1:A:720:LYS:HB3	1.87	0.56
1:A:259:SER:OG	1:A:262:GLU:HB2	2.05	0.56
1:A:362:ASN:ND2	1:A:363:ALA:O	2.38	0.56
1:A:395:THR:O	1:A:397:LEU:N	2.37	0.56
1:A:72:TYR:CZ	1:A:416:LEU:HD13	2.40	0.56
1:A:480:GLU:HA	1:A:680:ALA:HB3	1.86	0.56
1:A:80:THR:OG1	1:A:83:GLU:HG3	2.06	0.56
1:A:948:ARG:HB3	1:A:1068:TRP:CB	2.19	0.56
1:A:918:ASN:OD1	1:A:1060:CYS:HB3	2.04	0.56
1:A:1096:ILE:HG21	1:A:1104:TYR:CD1	2.41	0.56
1:A:395:THR:C	1:A:397:LEU:N	2.58	0.56
1:A:1080:ASN:HD21	1:A:1082:LYS:HB3	1.69	0.56
1:A:1210:GLU:HB3	1:A:1213:ASP:OD2	2.05	0.56
1:A:195:GLY:HA3	1:A:374:PHE:HE1	1.70	0.56
1:A:935:ASN:OD1	1:A:1049:ALA:HB3	2.06	0.56
1:A:1075:PHE:CE2	1:A:1079:LEU:HD11	2.41	0.56
1:A:1114:LEU:HD12	1:A:1115:ASN:N	2.20	0.56
1:A:1127:ASN:O	1:A:1132:GLY:HA3	2.06	0.56
1:A:8:PHE:CD1	1:A:19:ILE:HD11	2.41	0.56
1:A:594:VAL:CG1	1:A:746:ILE:HG21	2.32	0.56
1:A:963:THR:HA	1:A:977:SER:HA	1.88	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:115:ILE:HD12	1:A:316:VAL:HG11	1.86	0.56
1:A:1155:TYR:OH	1:A:1291:TRP:HB3	2.06	0.56
1:A:628:ALA:O	1:A:629:ASP:CB	2.53	0.56
1:A:1227:ASN:HB3	1:A:1231:ILE:O	2.06	0.56
1:A:733:LYS:O	1:A:737:GLU:HG3	2.06	0.56
1:A:660:GLY:O	1:A:662:VAL:N	2.39	0.56
1:A:879:LEU:HB3	1:A:1074:LEU:HB3	1.88	0.56
1:A:269:HIS:O	1:A:272:LYS:N	2.35	0.56
1:A:1029:ILE:O	1:A:1029:ILE:HG23	2.05	0.56
1:A:154:ILE:HD13	1:A:187:ARG:HG3	1.87	0.56
1:A:856:TYR:O	1:A:857:VAL:HG23	2.06	0.56
1:A:1136:LEU:HD11	1:A:1252:PHE:CD2	2.41	0.55
1:A:337:LYS:HA	1:A:340:LYS:HD2	1.88	0.55
1:A:573:ASN:C	1:A:575:ALA:H	2.10	0.55
1:A:575:ALA:O	1:A:581:ARG:CB	2.53	0.55
1:A:952:TYR:HB2	1:A:1003:GLN:NE2	2.18	0.55
1:A:1085:LYS:HE3	1:A:1089:ASP:OD2	2.06	0.55
1:A:1137:LYS:HG3	1:A:1138:GLY:H	1.70	0.55
1:A:1173:ILE:HB	1:A:1175:ARG:HH12	1.71	0.55
1:A:176:THR:HG22	1:A:236:ALA:HB3	1.88	0.55
1:A:951:LYS:NZ	1:A:1151:ASN:OD1	2.40	0.55
1:A:1167:SER:HB3	1:A:1170:LYS:NZ	2.21	0.55
1:A:643:ILE:C	1:A:645:ASN:N	2.58	0.55
1:A:1204:LYS:H	1:A:1262:VAL:HG13	1.71	0.55
1:A:559:PHE:C	1:A:559:PHE:CD1	2.79	0.55
1:A:972:SER:HB2	1:A:1048:HIS:HB2	1.88	0.55
1:A:1130:ILE:HD12	1:A:1131:ARG:N	2.22	0.55
1:A:542:LYS:HE2	1:A:544:GLU:CG	2.36	0.55
1:A:706:TRP:CD2	1:A:808:LEU:HD13	2.41	0.55
1:A:9:ASN:HB2	1:A:12:ASP:OD1	2.06	0.55
1:A:1211:ILE:H	1:A:1211:ILE:CD1	2.18	0.55
1:A:1155:TYR:CZ	1:A:1287:VAL:HA	2.41	0.55
1:A:555:ARG:O	1:A:558:GLU:HG3	2.07	0.55
1:A:702:ARG:HE	1:A:812:ASP:CG	2.09	0.55
1:A:22:ILE:CG2	1:A:24:ILE:HD12	2.37	0.55
1:A:888:LEU:HB3	1:A:900:ILE:HD11	1.89	0.55
1:A:1276:ARG:O	1:A:1278:LEU:HG	2.07	0.55
1:A:243:PHE:CZ	1:A:273:PHE:HB3	2.41	0.55
1:A:429:LEU:O	1:A:454:CYS:HA	2.06	0.55
1:A:1022:ASN:HB2	1:A:1078:GLU:OE2	2.07	0.55
1:A:1013:ARG:HG3	1:A:1101:TRP:HD1	1.72	0.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1277:THR:HG22	1:A:1277:THR:O	2.07	0.54
1:A:226:ILE:HD13	1:A:350:THR:CA	2.36	0.54
1:A:754:TYR:OH	1:A:757:GLU:O	2.23	0.54
1:A:1020:THR:CG2	1:A:1078:GLU:HG3	2.36	0.54
1:A:212:LYS:CE	1:A:371:LYS:HB2	2.37	0.54
1:A:2:PRO:HG2	1:A:39:HIS:NE2	2.22	0.54
1:A:458:ASN:HD22	1:A:459:ASN:H	1.55	0.54
1:A:1034:ARG:CZ	1:A:1036:ILE:HD11	2.36	0.54
1:A:422:LEU:HD23	1:A:423:PHE:CE1	2.42	0.54
1:A:48:ARG:CZ	1:A:59:LEU:HD13	2.36	0.54
1:A:888:LEU:HD21	1:A:914:ILE:HD11	1.89	0.54
1:A:984:ILE:HG12	1:A:998:VAL:CG2	2.32	0.54
1:A:1112:TYR:CZ	1:A:1159:LYS:HE2	2.42	0.54
1:A:322:LEU:HD12	1:A:341:LEU:HB2	1.88	0.54
1:A:632:ILE:HD12	1:A:786:LYS:HB3	1.89	0.54
1:A:815:LEU:HD23	1:A:845:LEU:CD1	2.36	0.54
1:A:566:ILE:CD1	1:A:749:TYR:HB3	2.37	0.54
1:A:115:ILE:CG2	1:A:317:PHE:HE1	2.21	0.54
1:A:584:THR:CG2	1:A:585:PHE:H	2.21	0.54
1:A:669:PRO:HG3	1:A:721:VAL:HG22	1.89	0.54
1:A:72:TYR:CE1	1:A:416:LEU:HD13	2.43	0.54
1:A:1077:LYS:HE3	1:A:1083:GLU:OE1	2.08	0.54
1:A:178:ASN:O	1:A:289:LYS:HB3	2.08	0.54
1:A:625:ASP:C	1:A:627:ILE:H	2.10	0.54
1:A:11:LYS:HZ2	1:A:81:ASP:HB3	1.72	0.54
1:A:816:LYS:O	1:A:820:LEU:HD23	2.08	0.54
1:A:97:ARG:HD3	1:A:358:PHE:CE1	2.43	0.54
1:A:11:LYS:NZ	1:A:81:ASP:CB	2.70	0.54
1:A:587:SER:H	1:A:617:GLU:CD	2.10	0.54
1:A:663:ILE:O	1:A:663:ILE:HG22	2.08	0.54
1:A:903:LYS:CG	1:A:921:SER:HB2	2.38	0.53
1:A:309:SER:O	1:A:312:TYR:N	2.41	0.53
1:A:754:TYR:CG	1:A:755:THR:N	2.76	0.53
1:A:123:ILE:HD12	1:A:123:ILE:N	2.23	0.53
1:A:515:ILE:HG22	1:A:515:ILE:O	2.08	0.53
1:A:1163:LYS:HD3	1:A:1183:ASN:ND2	2.24	0.53
1:A:418:ASN:ND2	1:A:420:THR:N	2.56	0.53
1:A:423:PHE:O	1:A:426:TYR:HD2	1.90	0.53
1:A:909:ILE:HD11	1:A:1106:GLN:OE1	2.08	0.53
1:A:658:PHE:HD1	1:A:889:ILE:HG21	1.72	0.53
1:A:661:ALA:HB1	1:A:791:CYS:HB3	1.89	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:925:GLU:HB2	1:A:1054:MET:SD	2.49	0.53
1:A:17:VAL:O	1:A:18:ASP:OD1	2.27	0.53
1:A:458:ASN:ND2	1:A:459:ASN:N	2.57	0.53
1:A:772:LYS:O	1:A:774:ASN:N	2.41	0.53
1:A:1005:ILE:O	1:A:1151:ASN:HA	2.09	0.53
1:A:1164:LYS:HD3	1:A:1168:GLY:CA	2.39	0.53
1:A:432:ARG:N	1:A:545:LEU:O	2.42	0.53
1:A:797:MET:CE	1:A:866:PHE:HE1	2.22	0.53
1:A:269:HIS:O	1:A:272:LYS:HB2	2.09	0.53
1:A:318:LYS:CG	1:A:331:PHE:CE1	2.92	0.53
1:A:52:THR:CG2	1:A:528:LEU:HD21	2.39	0.53
1:A:535:GLU:HG3	1:A:535:GLU:O	2.09	0.53
1:A:824:TYR:O	1:A:827:ARG:HG2	2.09	0.53
1:A:1116:LEU:HB2	1:A:1281:SER:O	2.09	0.53
1:A:549:THR:N	1:A:552:HIS:HD2	2.05	0.53
1:A:573:ASN:C	1:A:575:ALA:N	2.63	0.53
1:A:641:LEU:HD11	1:A:732:MET:SD	2.49	0.53
1:A:816:LYS:HE3	1:A:842:ASN:HA	1.89	0.53
1:A:1146:THR:O	1:A:1147:ASN:HB2	2.09	0.52
1:A:1241:ASP:HB3	1:A:1247:ILE:HD11	1.91	0.52
1:A:594:VAL:HG12	1:A:746:ILE:HD13	1.91	0.52
1:A:405:ASN:CG	1:A:408:ILE:HD13	2.30	0.52
1:A:903:LYS:HA	1:A:903:LYS:HE2	1.89	0.52
1:A:1112:TYR:CE1	1:A:1159:LYS:HE2	2.44	0.52
1:A:1205:ILE:O	1:A:1206:LEU:HB2	2.08	0.52
1:A:22:ILE:HD12	1:A:22:ILE:H	1.72	0.52
1:A:226:ILE:HG21	1:A:265:THR:HG23	1.90	0.52
1:A:407:GLU:O	1:A:410:ASN:HB2	2.08	0.52
1:A:552:HIS:O	1:A:555:ARG:HB3	2.09	0.52
1:A:906:PHE:CE2	1:A:914:ILE:HG12	2.44	0.52
1:A:140:PRO:C	1:A:142:GLY:H	2.13	0.52
1:A:318:LYS:NZ	1:A:325:GLU:HG2	2.25	0.52
1:A:348:ILE:HD13	1:A:494:ILE:HG23	1.90	0.52
1:A:589:ASP:OD1	1:A:593:LYS:HE3	2.10	0.52
1:A:947:ILE:CG2	1:A:1015:ILE:HB	2.40	0.52
1:A:1163:LYS:HG3	1:A:1183:ASN:ND2	2.24	0.52
1:A:562:GLY:C	1:A:564:SER:H	2.13	0.52
1:A:1009:ASP:HA	1:A:1013:ARG:HH11	1.73	0.52
1:A:238:ASN:HD21	1:A:240:ASN:HD22	1.58	0.52
1:A:684:TYR:CD2	1:A:690:LEU:HD23	2.44	0.52
1:A:669:PRO:HG3	1:A:721:VAL:CG2	2.39	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:735:ALA:O	1:A:738:ASN:N	2.42	0.52
1:A:952:TYR:HE2	1:A:981:GLY:H	1.56	0.52
1:A:614:PHE:CD2	1:A:773:LEU:HD22	2.45	0.52
1:A:15:ASN:O	1:A:17:VAL:N	2.42	0.52
1:A:197:GLU:CG	1:A:212:LYS:HG2	2.39	0.52
1:A:989:ASP:HB2	1:A:1046:ASN:O	2.10	0.52
1:A:3:PHE:O	1:A:4:VAL:HB	2.10	0.52
1:A:267:GLY:O	1:A:268:GLY:C	2.48	0.51
1:A:872:ASN:HD22	1:A:874:ILE:N	2.05	0.51
1:A:872:ASN:HB3	1:A:875:ASN:ND2	2.26	0.51
1:A:1154:LEU:O	1:A:1156:ARG:N	2.40	0.51
1:A:1163:LYS:HD3	1:A:1183:ASN:HD22	1.75	0.51
1:A:282:PHE:O	1:A:285:TYR:HB3	2.10	0.51
1:A:258:VAL:HG22	1:A:366:PHE:HE2	1.74	0.51
1:A:46:PRO:O	1:A:84:LYS:HD3	2.09	0.51
1:A:547:LYS:HZ3	1:A:646:MET:HB3	1.75	0.51
1:A:554:LEU:HA	1:A:557:GLN:NE2	2.26	0.51
1:A:763:ASN:ND2	1:A:765:ASN:HD21	2.04	0.51
1:A:139:GLN:NE2	1:A:145:ARG:NH1	2.59	0.51
1:A:948:ARG:NH1	1:A:948:ARG:HG2	2.23	0.51
1:A:17:VAL:C	1:A:19:ILE:H	2.13	0.51
1:A:973:GLY:N	1:A:988:GLN:O	2.44	0.51
1:A:114:GLY:O	1:A:320:LYS:HD2	2.11	0.51
1:A:146:SER:OG	1:A:520:LEU:N	2.42	0.51
1:A:275:ASP:OD1	1:A:278:GLN:HG3	2.11	0.51
1:A:336:LEU:HD12	1:A:340:LYS:HE3	1.93	0.51
1:A:258:VAL:HG13	1:A:366:PHE:CE2	2.46	0.51
1:A:193:THR:OG1	1:A:376:ILE:HD13	2.11	0.51
1:A:649:LYS:O	1:A:650:ASP:O	2.28	0.51
1:A:1114:LEU:HD12	1:A:1114:LEU:C	2.30	0.51
1:A:755:THR:O	1:A:756:GLU:CB	2.55	0.51
1:A:9:ASN:HB2	1:A:12:ASP:CG	2.31	0.51
1:A:310:LEU:O	1:A:314:LYS:HG3	2.11	0.51
1:A:614:PHE:O	1:A:618:THR:HB	2.10	0.51
1:A:547:LYS:HZ2	1:A:646:MET:HB3	1.74	0.51
1:A:35:ALA:CB	1:A:45:ILE:HG12	2.38	0.50
1:A:429:LEU:CD2	1:A:543:TYR:HB2	2.39	0.50
1:A:972:SER:O	1:A:973:GLY:O	2.30	0.50
1:A:351:GLU:O	1:A:355:VAL:HG23	2.10	0.50
1:A:487:ILE:HG22	1:A:488:GLU:N	2.26	0.50
1:A:74:ASP:O	1:A:76:THR:N	2.44	0.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:929:LYS:O	1:A:933:VAL:HG23	2.12	0.50
1:A:1041:ILE:HG23	1:A:1044:LEU:HB2	1.92	0.50
1:A:1197:ALA:HB2	1:A:1247:ILE:CD1	2.42	0.50
1:A:1130:ILE:HD12	1:A:1130:ILE:C	2.32	0.50
1:A:167:SER:HB2	1:A:184:GLN:NE2	2.26	0.50
1:A:763:ASN:HB2	1:A:765:ASN:HD21	1.73	0.50
1:A:962:TYR:CE1	1:A:978:LEU:HB2	2.46	0.50
1:A:947:ILE:O	1:A:1014:TRP:HA	2.11	0.50
1:A:36:PHE:N	1:A:36:PHE:CD1	2.79	0.50
1:A:1161:ILE:HG22	1:A:1163:LYS:HD3	1.93	0.50
1:A:21:TYR:O	1:A:138:ILE:HB	2.12	0.50
1:A:1010:TYR:HB3	1:A:1015:ILE:CD1	2.29	0.50
1:A:1133:TYR:CD2	1:A:1260:LYS:NZ	2.80	0.50
1:A:150:ASN:O	1:A:232:LEU:HD21	2.12	0.50
1:A:431:VAL:HB	1:A:453:LEU:HD23	1.94	0.50
1:A:428:LEU:HD23	1:A:542:LYS:HG3	1.92	0.50
1:A:70:VAL:HG12	1:A:71:SER:N	2.27	0.50
1:A:746:ILE:HG22	1:A:747:ILE:N	2.26	0.50
1:A:827:ARG:C	1:A:829:THR:H	2.14	0.50
1:A:1026:ASN:HB3	1:A:1040:PRO:HA	1.94	0.50
1:A:1122:TYR:CE1	1:A:1137:LYS:HB3	2.47	0.50
1:A:247:THR:HG21	1:A:254:SER:O	2.12	0.50
1:A:355:VAL:O	1:A:355:VAL:HG12	2.12	0.50
1:A:38:ILE:O	1:A:39:HIS:HB2	2.11	0.50
1:A:1104:TYR:CD2	1:A:1173:ILE:HD13	2.47	0.50
1:A:1288:ASP:O	1:A:1290:GLY:N	2.45	0.50
1:A:422:LEU:HD23	1:A:423:PHE:HE1	1.77	0.50
1:A:458:ASN:ND2	1:A:459:ASN:H	2.10	0.50
1:A:481:ILE:CD1	1:A:698:ALA:HA	2.40	0.50
1:A:624:THR:CG2	1:A:633:ILE:HD12	2.41	0.50
1:A:201:GLU:HG3	1:A:361:LEU:HD13	1.92	0.49
1:A:537:PHE:HB3	1:A:538:PRO:HD2	1.94	0.49
1:A:673:ILE:O	1:A:807:ARG:NH1	2.45	0.49
1:A:920:GLU:HG3	1:A:920:GLU:O	2.12	0.49
1:A:1236:LYS:NZ	1:A:1282:TRP:O	2.43	0.49
1:A:10:TYR:HA	1:A:36:PHE:HZ	1.76	0.49
1:A:379:VAL:N	1:A:380:PRO:HD2	2.28	0.49
1:A:641:LEU:HD11	1:A:732:MET:HG2	1.95	0.49
1:A:156:PRO:HD3	1:A:189:SER:HB2	1.93	0.49
1:A:247:THR:HG23	1:A:254:SER:HA	1.93	0.49
1:A:638:GLY:N	1:A:639:PRO:HD2	2.27	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:746:ILE:O	1:A:747:ILE:C	2.49	0.49
1:A:965:ILE:O	1:A:976:VAL:N	2.45	0.49
1:A:1233:ASN:HD22	1:A:1271:ILE:HG23	1.75	0.49
1:A:1291:TRP:O	1:A:1293:GLU:N	2.46	0.49
1:A:235:ILE:O	1:A:235:ILE:HG23	2.12	0.49
1:A:114:GLY:O	1:A:320:LYS:CE	2.60	0.49
1:A:394:ASN:O	1:A:395:THR:C	2.51	0.49
1:A:571:SER:OG	1:A:572:VAL:N	2.44	0.49
1:A:743:THR:O	1:A:743:THR:CG2	2.61	0.49
1:A:1209:LEU:CD1	1:A:1217:LEU:HD12	2.43	0.49
1:A:1255:PHE:HD2	1:A:1260:LYS:HD2	1.76	0.49
1:A:318:LYS:HG3	1:A:331:PHE:HE1	1.77	0.49
1:A:380:PRO:HG2	1:A:383:ASN:HB2	1.95	0.49
1:A:647:LEU:O	1:A:648:TYR:C	2.51	0.49
1:A:79:SER:N	1:A:83:GLU:OE1	2.45	0.49
1:A:269:HIS:HE1	1:A:859:ASN:HD22	1.59	0.49
1:A:72:TYR:CD2	1:A:160:ILE:HD12	2.48	0.49
1:A:872:ASN:ND2	1:A:874:ILE:CB	2.64	0.49
1:A:986:THR:HG21	1:A:996:ARG:NH2	2.27	0.49
1:A:1241:ASP:OD1	1:A:1241:ASP:C	2.51	0.49
1:A:22:ILE:HD13	1:A:35:ALA:CB	2.37	0.49
1:A:961:GLU:CA	1:A:979:ASN:HD22	2.26	0.49
1:A:962:TYR:CD2	1:A:1057:LEU:HD23	2.48	0.49
1:A:172:VAL:HG12	1:A:172:VAL:O	2.12	0.49
1:A:209:GLY:HA3	1:A:213:PHE:CZ	2.48	0.49
1:A:243:PHE:HD1	1:A:260:PHE:HE1	1.59	0.49
1:A:378:ILE:HG23	1:A:384:TYR:CD1	2.48	0.49
1:A:583:TYR:CG	1:A:584:THR:N	2.80	0.49
1:A:540:GLY:O	1:A:541:LYS:C	2.50	0.49
1:A:733:LYS:HB2	1:A:781:MET:HE1	1.95	0.49
1:A:526:GLY:O	1:A:527:GLN:CB	2.61	0.48
1:A:559:PHE:HB3	1:A:582:VAL:CG2	2.37	0.48
1:A:966:ASN:HD22	1:A:975:LYS:HG3	1.78	0.48
1:A:954:ASN:O	1:A:1148:ILE:HD13	2.13	0.48
1:A:1105:LEU:HD21	1:A:1162:ILE:CD1	2.43	0.48
1:A:1109:LYS:NZ	1:A:1286:PRO:CB	2.76	0.48
1:A:3:PHE:HA	1:A:96:GLU:OE1	2.12	0.48
1:A:702:ARG:NH1	1:A:702:ARG:CG	2.76	0.48
1:A:966:ASN:HA	1:A:975:LYS:HB2	1.95	0.48
1:A:1111:TYR:CD1	1:A:1286:PRO:HB3	2.47	0.48
1:A:45:ILE:HG22	1:A:47:GLU:HG2	1.96	0.48

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1171:ASP:OD2	1:A:1173:ILE:HB	2.13	0.48
1:A:1173:ILE:HB	1:A:1175:ARG:NH1	2.28	0.48
1:A:135:ILE:HG21	1:A:149:LEU:HD12	1.94	0.48
1:A:384:TYR:HA	1:A:389:GLY:O	2.12	0.48
1:A:306:THR:CG2	1:A:517:ILE:HG22	2.42	0.48
1:A:1027:SER:CB	1:A:1041:ILE:HD11	2.24	0.48
1:A:555:ARG:HA	1:A:555:ARG:HE	1.78	0.48
1:A:647:LEU:O	1:A:649:LYS:N	2.46	0.48
1:A:974:TRP:H	1:A:987:LEU:HA	1.77	0.48
1:A:17:VAL:O	1:A:19:ILE:N	2.46	0.48
1:A:609:GLN:HG2	1:A:613:ASP:OD2	2.14	0.48
1:A:621:VAL:CG1	1:A:632:ILE:HG23	2.44	0.48
1:A:1117:TYR:C	1:A:1119:PRO:HD3	2.34	0.48
1:A:1137:LYS:HG3	1:A:1138:GLY:N	2.28	0.48
1:A:214:ALA:CB	1:A:413:PHE:CE1	2.97	0.48
1:A:641:LEU:HB2	1:A:643:ILE:CG1	2.39	0.48
1:A:676:LEU:CD1	1:A:808:LEU:HD23	2.44	0.48
1:A:118:TRP:CD1	1:A:317:PHE:HZ	2.31	0.48
1:A:1253:HIS:O	1:A:1259:ALA:HA	2.14	0.48
1:A:210:ALA:H	1:A:405:ASN:HD21	1.51	0.48
1:A:171:GLU:HG2	1:A:172:VAL:CG2	2.43	0.48
1:A:311:GLN:NE2	1:A:312:TYR:N	2.61	0.48
1:A:559:PHE:O	1:A:559:PHE:CD1	2.67	0.48
1:A:903:LYS:HB2	1:A:922:SER:CB	2.41	0.48
1:A:1135:TYR:N	1:A:1135:TYR:CD1	2.81	0.48
1:A:760:ASN:O	1:A:761:ASN:CB	2.62	0.48
1:A:144:TYR:C	1:A:144:TYR:CD1	2.87	0.47
1:A:22:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HD12	1.96	0.47
1:A:33:VAL:HG12	1:A:34:LYS:N	2.29	0.47
1:A:970:ASN:O	1:A:971:ASN:HB2	2.13	0.47
1:A:1113:MET:CE	1:A:1160:PHE:HB2	2.44	0.47
1:A:1104:TYR:HB3	1:A:1173:ILE:HG23	1.96	0.47
1:A:1199:GLN:NE2	1:A:1204:LYS:HA	2.29	0.47
1:A:569:THR:O	1:A:595:ASN:ND2	2.45	0.47
1:A:796:LEU:CD2	1:A:801:ILE:HG12	2.44	0.47
1:A:838:LYS:NZ	1:A:838:LYS:HB3	2.29	0.47
1:A:225:LEU:C	1:A:227:HIS:N	2.68	0.47
1:A:304:VAL:HG23	1:A:304:VAL:O	2.14	0.47
1:A:455:ILE:CD1	1:A:552:HIS:ND1	2.78	0.47
1:A:702:ARG:C	1:A:702:ARG:HD2	2.35	0.47
1:A:874:ILE:C	1:A:876:THR:H	2.17	0.47

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1100:PHE:CD1	1:A:1283:GLU:HG2	2.43	0.47
1:A:1296:LEU:CD2	1:A:1296:LEU:H	2.27	0.47
1:A:420:THR:O	1:A:421:GLY:C	2.51	0.47
1:A:974:TRP:HB2	1:A:985:TRP:CZ2	2.50	0.47
1:A:1009:ASP:HA	1:A:1013:ARG:NH1	2.29	0.47
1:A:1269:ARG:NH1	1:A:1273:ARG:HH11	2.11	0.47
1:A:135:ILE:HG23	1:A:149:LEU:HD12	1.96	0.47
1:A:757:GLU:HB2	1:A:760:ASN:HD22	1.76	0.47
1:A:997:VAL:HG11	1:A:1027:SER:O	2.14	0.47
1:A:1193:LEU:HD12	1:A:1194:ALA:N	2.28	0.47
1:A:93:LYS:NZ	1:A:378:ILE:O	2.34	0.47
1:A:671:ILE:HG22	1:A:673:ILE:HD11	1.97	0.47
1:A:705:LYS:HD3	1:A:705:LYS:O	2.15	0.47
1:A:944:SER:HA	1:A:1017:VAL:O	2.15	0.47
1:A:149:LEU:HD13	1:A:152:VAL:CG2	2.45	0.47
1:A:248:ASN:O	1:A:249:ALA:HB2	2.14	0.47
1:A:974:TRP:CE3	1:A:985:TRP:CZ3	3.02	0.47
1:A:1010:TYR:HD2	1:A:1015:ILE:CD1	2.28	0.47
1:A:212:LYS:HE2	1:A:371:LYS:CB	2.43	0.47
1:A:299:LYS:HB2	1:A:299:LYS:HE3	1.74	0.47
1:A:217:PRO:CG	1:A:378:ILE:HD11	2.33	0.47
1:A:660:GLY:C	1:A:662:VAL:H	2.18	0.47
1:A:554:LEU:HD11	1:A:734:GLU:HG2	1.97	0.47
1:A:802:PRO:CB	1:A:932:ILE:HD11	2.45	0.47
1:A:968:MET:HA	1:A:972:SER:CB	2.39	0.47
1:A:145:ARG:O	1:A:145:ARG:HG3	2.15	0.47
1:A:197:GLU:HG2	1:A:212:LYS:HG2	1.96	0.47
1:A:627:ILE:HD12	1:A:627:ILE:N	2.30	0.47
1:A:92:THR:HG22	1:A:93:LYS:N	2.29	0.47
1:A:947:ILE:HG22	1:A:1015:ILE:HB	1.97	0.47
1:A:948:ARG:HA	1:A:1013:ARG:O	2.15	0.47
1:A:1041:ILE:C	1:A:1043:ASN:H	2.18	0.47
1:A:1205:ILE:O	1:A:1261:LEU:O	2.33	0.47
1:A:420:THR:CG2	1:A:420:THR:O	2.59	0.47
1:A:168:PHE:HA	1:A:528:LEU:HA	1.96	0.47
1:A:574:GLU:HA	1:A:574:GLU:OE1	2.15	0.47
1:A:574:GLU:CD	1:A:574:GLU:N	2.66	0.47
1:A:576:LEU:CA	1:A:581:ARG:HB2	2.35	0.47
1:A:585:PHE:CE1	1:A:586:PHE:CE1	3.03	0.47
1:A:663:ILE:CG2	1:A:663:ILE:O	2.62	0.47
1:A:702:ARG:O	1:A:702:ARG:HD2	2.14	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:987:LEU:CD1	1:A:1041:ILE:HD13	2.43	0.46
1:A:1014:TRP:HD1	1:A:1102:GLY:HA3	1.80	0.46
1:A:1096:ILE:HD12	1:A:1104:TYR:CE1	2.50	0.46
1:A:1124:ASP:HB2	1:A:1137:LYS:HB2	1.97	0.46
1:A:171:GLU:HG2	1:A:172:VAL:HG23	1.97	0.46
1:A:18:ASP:HA	1:A:37:LYS:HB3	1.97	0.46
1:A:105:ARG:NH1	1:A:508:PHE:CZ	2.83	0.46
1:A:742:ALA:C	1:A:744:LYS:H	2.18	0.46
1:A:757:GLU:CB	1:A:760:ASN:ND2	2.78	0.46
1:A:1233:ASN:OD1	1:A:1235:CYS:N	2.43	0.46
1:A:1288:ASP:C	1:A:1290:GLY:H	2.18	0.46
1:A:195:GLY:HA3	1:A:374:PHE:CE1	2.49	0.46
1:A:761:ASN:C	1:A:763:ASN:H	2.16	0.46
1:A:674:PRO:C	1:A:807:ARG:NH1	2.69	0.46
1:A:954:ASN:HB3	1:A:956:ILE:HG13	1.97	0.46
1:A:167:SER:HB2	1:A:184:GLN:HE22	1.81	0.46
1:A:227:HIS:CE1	1:A:261:GLU:OE1	2.68	0.46
1:A:346:THR:HG22	1:A:347:GLU:N	2.30	0.46
1:A:553:TYR:CD2	1:A:642:ASN:HB2	2.51	0.46
1:A:915:GLN:HB2	1:A:1068:TRP:CZ3	2.50	0.46
1:A:21:TYR:HA	1:A:21:TYR:HD1	1.68	0.46
1:A:729:ARG:HH22	1:A:789:ASN:ND2	2.12	0.46
1:A:757:GLU:CB	1:A:760:ASN:HD22	2.28	0.46
1:A:943:THR:CG2	1:A:1019:ILE:HB	2.46	0.46
1:A:1041:ILE:O	1:A:1041:ILE:CG2	2.62	0.46
1:A:1018:THR:HG21	1:A:1084:ILE:HD12	1.97	0.46
1:A:1111:TYR:CE1	1:A:1286:PRO:HB3	2.50	0.46
1:A:29:GLN:N	1:A:29:GLN:CD	2.68	0.46
1:A:2:PRO:HA	1:A:108:LEU:HD13	1.98	0.46
1:A:6:LYS:HD2	1:A:18:ASP:OD2	2.16	0.46
1:A:1028:LYS:HB3	1:A:1035:LEU:CD1	2.46	0.46
1:A:161:ILE:HB	1:A:194:PHE:CZ	2.51	0.46
1:A:119:GLY:O	1:A:121:SER:N	2.48	0.46
1:A:397:LEU:O	1:A:398:ALA:CB	2.62	0.46
1:A:671:ILE:HD13	1:A:803:TYR:CD2	2.50	0.46
1:A:719:ALA:HA	1:A:723:THR:HG23	1.98	0.46
1:A:1080:ASN:OD1	1:A:1083:GLU:HG3	2.16	0.46
1:A:139:GLN:CD	1:A:145:ARG:NH1	2.69	0.46
1:A:24:ILE:CD1	1:A:45:ILE:CD1	2.94	0.46
1:A:535:GLU:O	1:A:536:ARG:C	2.54	0.46
1:A:65:ALA:O	1:A:536:ARG:NH2	2.48	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:643:ILE:CG2	1:A:664:LEU:HD23	2.40	0.46
1:A:1205:ILE:HA	1:A:1262:VAL:HG22	1.98	0.46
1:A:318:LYS:HG3	1:A:331:PHE:CE1	2.51	0.46
1:A:534:ILE:HG22	1:A:534:ILE:O	2.15	0.46
1:A:586:PHE:HB3	1:A:617:GLU:OE2	2.15	0.46
1:A:696:ASP:OD1	1:A:840:LYS:NZ	2.41	0.46
1:A:757:GLU:O	1:A:757:GLU:HG3	2.16	0.46
1:A:965:ILE:HB	1:A:976:VAL:HG23	1.97	0.46
1:A:984:ILE:CG2	1:A:998:VAL:HG22	2.44	0.46
1:A:105:ARG:HG2	1:A:508:PHE:HE1	1.78	0.46
1:A:1062:ASP:C	1:A:1062:ASP:OD1	2.54	0.46
1:A:1199:GLN:HE22	1:A:1204:LYS:HB3	1.80	0.46
1:A:207:LEU:HD21	1:A:775:GLU:OE2	2.16	0.46
1:A:706:TRP:CE3	1:A:808:LEU:HD13	2.51	0.46
1:A:964:ILE:HG13	1:A:965:ILE:N	2.31	0.46
1:A:1099:ASP:N	1:A:1103:ASP:O	2.47	0.45
1:A:1143:VAL:HG12	1:A:1149:TYR:HE1	1.81	0.45
1:A:115:ILE:HG22	1:A:317:PHE:CE1	2.48	0.45
1:A:318:LYS:HG2	1:A:331:PHE:CE1	2.51	0.45
1:A:326:ASP:OD1	1:A:328:SER:N	2.49	0.45
1:A:492:GLU:C	1:A:494:ILE:H	2.18	0.45
1:A:566:ILE:HG23	1:A:749:TYR:CB	2.46	0.45
1:A:39:HIS:HE1	1:A:511:GLU:OE2	1.97	0.45
1:A:3:PHE:O	1:A:96:GLU:OE2	2.35	0.45
1:A:48:ARG:NH1	1:A:77:TYR:HB3	2.32	0.45
1:A:1197:ALA:HB2	1:A:1247:ILE:HD13	1.98	0.45
1:A:1203:GLU:HB3	1:A:1262:VAL:CG1	2.44	0.45
1:A:1238:ASN:HA	1:A:1249:PHE:HA	1.97	0.45
1:A:62:PRO:HG2	1:A:64:GLU:O	2.16	0.45
1:A:798:ASN:HD22	1:A:893:ARG:HG2	1.81	0.45
1:A:315:ASN:O	1:A:318:LYS:HB3	2.16	0.45
1:A:390:PHE:O	1:A:392:LEU:N	2.48	0.45
1:A:674:PRO:C	1:A:807:ARG:HH11	2.19	0.45
1:A:1109:LYS:HA	1:A:1110:PRO:HD2	1.79	0.45
1:A:123:ILE:O	1:A:124:ASP:C	2.53	0.45
1:A:1268:ASN:O	1:A:1272:GLU:HG3	2.16	0.45
1:A:458:ASN:HD22	1:A:459:ASN:N	2.13	0.45
1:A:661:ALA:CB	1:A:791:CYS:HB3	2.46	0.45
1:A:906:PHE:HD2	1:A:911:LYS:O	2.00	0.45
1:A:102:ASP:HB2	1:A:357:PHE:CE2	2.44	0.45
1:A:1100:PHE:CB	1:A:1285:ILE:HG12	2.47	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:671:ILE:HD13	1:A:803:TYR:HD2	1.82	0.45
1:A:683:SER:HA	1:A:822:TYR:OH	2.17	0.45
1:A:566:ILE:HG23	1:A:749:TYR:CG	2.51	0.45
1:A:764:PHE:CD1	1:A:764:PHE:O	2.70	0.45
1:A:943:THR:HG22	1:A:1019:ILE:HB	1.99	0.45
1:A:1186:VAL:N	1:A:1189:LYS:O	2.49	0.45
1:A:14:VAL:HA	1:A:19:ILE:HG22	1.99	0.45
1:A:144:TYR:OH	1:A:520:LEU:O	2.27	0.45
1:A:606:TRP:O	1:A:609:GLN:HB3	2.16	0.45
1:A:610:LEU:HD12	1:A:747:ILE:CD1	2.41	0.45
1:A:74:ASP:O	1:A:75:SER:C	2.55	0.45
1:A:1012:ASN:CG	1:A:1012:ASN:O	2.53	0.45
1:A:1130:ILE:HG23	1:A:1209:LEU:HD22	1.99	0.45
1:A:1161:ILE:HG22	1:A:1163:LYS:CD	2.47	0.45
1:A:289:LYS:HD3	1:A:289:LYS:HA	1.71	0.45
1:A:598:THR:HG23	1:A:602:MET:CE	2.46	0.45
1:A:998:VAL:CG1	1:A:999:PHE:N	2.80	0.45
1:A:1008:SER:O	1:A:1013:ARG:NH1	2.50	0.45
1:A:143:SER:O	1:A:144:TYR:HB3	2.16	0.45
1:A:567:ALA:O	1:A:746:ILE:HG12	2.17	0.45
1:A:574:GLU:C	1:A:576:LEU:N	2.70	0.45
1:A:599:GLU:O	1:A:602:MET:O	2.35	0.45
1:A:593:LYS:NZ	1:A:613:ASP:OD2	2.40	0.45
1:A:70:VAL:CG1	1:A:71:SER:N	2.80	0.45
1:A:999:PHE:CG	1:A:1031:ILE:HG13	2.52	0.45
1:A:1109:LYS:NZ	1:A:1286:PRO:HB3	2.32	0.45
1:A:455:ILE:HD12	1:A:552:HIS:HA	1.99	0.45
1:A:487:ILE:HG23	1:A:488:GLU:CD	2.37	0.45
1:A:984:ILE:CG1	1:A:998:VAL:HG22	2.39	0.45
1:A:985:TRP:CG	1:A:1019:ILE:HG21	2.51	0.44
1:A:952:TYR:CD1	1:A:1065:ARG:CZ	3.00	0.44
1:A:306:THR:CG2	1:A:517:ILE:HA	2.47	0.44
1:A:737:GLU:O	1:A:741:GLU:HB2	2.16	0.44
1:A:869:TYR:CD1	1:A:869:TYR:C	2.91	0.44
1:A:902:SER:O	1:A:903:LYS:HE2	2.17	0.44
1:A:935:ASN:C	1:A:937:MET:H	2.20	0.44
1:A:979:ASN:O	1:A:980:TYR:C	2.55	0.44
1:A:1168:GLY:C	1:A:1170:LYS:N	2.64	0.44
1:A:1269:ARG:CZ	1:A:1270:GLN:NE2	2.80	0.44
1:A:2:PRO:O	1:A:39:HIS:CD2	2.60	0.44
1:A:581:ARG:O	1:A:581:ARG:HG3	2.17	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:760:ASN:O	1:A:761:ASN:HB2	2.17	0.44
1:A:883:TYR:H	1:A:912:ASN:CG	2.21	0.44
1:A:1104:TYR:CD2	1:A:1173:ILE:CD1	3.00	0.44
1:A:1288:ASP:C	1:A:1290:GLY:N	2.68	0.44
1:A:425:PHE:HZ	1:A:537:PHE:HB2	1.80	0.44
1:A:719:ALA:HA	1:A:723:THR:CG2	2.46	0.44
1:A:36:PHE:CZ	1:A:88:LEU:HD22	2.52	0.44
1:A:955:SER:HA	1:A:958:LEU:HG	1.99	0.44
1:A:1029:ILE:HG23	1:A:1036:ILE:HB	1.98	0.44
1:A:1146:THR:HG22	1:A:1147:ASN:ND2	2.33	0.44
1:A:122:THR:CB	1:A:126:GLU:OE1	2.61	0.44
1:A:227:HIS:ND1	1:A:261:GLU:OE1	2.50	0.44
1:A:318:LYS:CG	1:A:331:PHE:HE1	2.31	0.44
1:A:431:VAL:HG11	1:A:548:TYR:CE1	2.53	0.44
1:A:632:ILE:CD1	1:A:786:LYS:HD3	2.47	0.44
1:A:153:ILE:CD1	1:A:186:ILE:HB	2.42	0.44
1:A:238:ASN:OD1	1:A:239:PRO:HD2	2.16	0.44
1:A:659:SER:HB2	1:A:663:ILE:HG13	1.98	0.44
1:A:688:LYS:O	1:A:689:VAL:C	2.55	0.44
1:A:964:ILE:HG13	1:A:965:ILE:HG13	2.00	0.44
1:A:1012:ASN:O	1:A:1101:TRP:CD1	2.70	0.44
1:A:923:LYS:HB2	1:A:1056:LYS:HB2	1.99	0.44
1:A:2:PRO:HD3	1:A:108:LEU:HD22	2.00	0.44
1:A:1163:LYS:CD	1:A:1183:ASN:ND2	2.80	0.44
1:A:11:LYS:HZ1	1:A:81:ASP:CG	2.19	0.44
1:A:504:LEU:C	1:A:506:PHE:H	2.21	0.44
1:A:455:ILE:HG23	1:A:555:ARG:HD2	1.98	0.44
1:A:764:PHE:CE2	1:A:766:ILE:HG12	2.52	0.44
1:A:269:HIS:CE1	1:A:859:ASN:HD22	2.36	0.44
1:A:1180:VAL:HG22	1:A:1221:VAL:O	2.18	0.44
1:A:1206:LEU:HD11	1:A:1250:ILE:HG12	2.00	0.44
1:A:42:ILE:CD1	1:A:151:LEU:HB3	2.48	0.44
1:A:603:PHE:O	1:A:606:TRP:HB3	2.17	0.44
1:A:621:VAL:HG11	1:A:632:ILE:HG23	1.98	0.44
1:A:742:ALA:C	1:A:744:LYS:N	2.71	0.44
1:A:1057:LEU:N	1:A:1057:LEU:HD12	2.23	0.44
1:A:948:ARG:CB	1:A:1068:TRP:HB2	2.20	0.44
1:A:1211:ILE:HB	1:A:1212:PRO:HD3	1.99	0.44
1:A:430:CYS:HA	1:A:454:CYS:HA	2.00	0.44
1:A:485:THR:HG22	1:A:486:ASN:N	2.33	0.44
1:A:610:LEU:CD1	1:A:747:ILE:HD11	2.41	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:754:TYR:CD1	1:A:755:THR:N	2.78	0.44
1:A:843:ASN:O	1:A:846:SER:OG	2.34	0.44
1:A:1194:ALA:O	1:A:1206:LEU:HA	2.18	0.44
1:A:1199:GLN:NE2	1:A:1204:LYS:HB3	2.32	0.44
1:A:198:GLU:OE2	1:A:200:LEU:HB2	2.18	0.44
1:A:202:VAL:HA	1:A:205:ASN:O	2.18	0.44
1:A:22:ILE:CD1	1:A:22:ILE:N	2.79	0.44
1:A:403:GLY:HA2	1:A:409:ASN:HD22	1.83	0.44
1:A:417:LYS:HE3	1:A:419:PHE:CZ	2.53	0.44
1:A:458:ASN:HB3	1:A:461:ASP:CB	2.45	0.44
1:A:844:THR:O	1:A:846:SER:N	2.40	0.44
1:A:891:LEU:HD23	1:A:891:LEU:HA	1.81	0.44
1:A:949:ILE:HG22	1:A:950:PRO:O	2.17	0.44
1:A:990:THR:C	1:A:992:GLU:N	2.65	0.44
1:A:176:THR:CG2	1:A:176:THR:O	2.65	0.43
1:A:167:SER:CB	1:A:184:GLN:HE22	2.31	0.43
1:A:195:GLY:HA2	1:A:213:PHE:O	2.18	0.43
1:A:234:GLY:O	1:A:235:ILE:HD12	2.17	0.43
1:A:97:ARG:NH1	1:A:358:PHE:CD1	2.86	0.43
1:A:515:ILE:HA	1:A:515:ILE:HD13	1.82	0.43
1:A:549:THR:HG23	1:A:552:HIS:CD2	2.53	0.43
1:A:575:ALA:O	1:A:581:ARG:CA	2.66	0.43
1:A:763:ASN:HB2	1:A:765:ASN:HD22	1.75	0.43
1:A:859:ASN:HD21	1:A:861:ARG:HH12	1.66	0.43
1:A:991:GLN:O	1:A:993:ILE:N	2.50	0.43
1:A:1025:ASN:HB3	1:A:1026:ASN:H	1.50	0.43
1:A:1144:MET:HB3	1:A:1150:LEU:HD13	2.00	0.43
1:A:192:PHE:HA	1:A:374:PHE:O	2.18	0.43
1:A:591:VAL:HG12	1:A:595:ASN:ND2	2.32	0.43
1:A:748:ASN:O	1:A:749:TYR:C	2.56	0.43
1:A:1113:MET:HE3	1:A:1160:PHE:HB2	2.01	0.43
1:A:119:GLY:C	1:A:121:SER:N	2.70	0.43
1:A:1233:ASN:OD1	1:A:1235:CYS:HB2	2.18	0.43
1:A:1267:TYR:O	1:A:1268:ASN:C	2.57	0.43
1:A:126:GLU:OE2	1:A:304:VAL:CG1	2.66	0.43
1:A:159:ASP:C	1:A:159:ASP:OD1	2.57	0.43
1:A:15:ASN:C	1:A:17:VAL:H	2.20	0.43
1:A:24:ILE:HG23	1:A:25:PRO:N	2.33	0.43
1:A:67:GLN:HB3	1:A:425:PHE:CD2	2.53	0.43
1:A:562:GLY:O	1:A:564:SER:N	2.51	0.43
1:A:772:LYS:C	1:A:774:ASN:N	2.70	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:907:ASP:O	1:A:911:LYS:HG2	2.17	0.43
1:A:243:PHE:HD1	1:A:260:PHE:CE1	2.36	0.43
1:A:408:ILE:C	1:A:410:ASN:H	2.22	0.43
1:A:309:SER:C	1:A:311:GLN:N	2.69	0.43
1:A:105:ARG:NH1	1:A:508:PHE:CE1	2.86	0.43
1:A:981:GLY:HA2	1:A:1001:TYR:CZ	2.54	0.43
1:A:1034:ARG:NH1	1:A:1036:ILE:CD1	2.81	0.43
1:A:1199:GLN:HE22	1:A:1204:LYS:CA	2.31	0.43
1:A:203:ASP:OD1	1:A:204:THR:N	2.52	0.43
1:A:346:THR:CG2	1:A:347:GLU:HG3	2.29	0.43
1:A:411:MET:HG3	1:A:411:MET:O	2.19	0.43
1:A:429:LEU:O	1:A:552:HIS:HE1	2.02	0.43
1:A:1087:LEU:O	1:A:1091:GLN:HG3	2.18	0.43
1:A:310:LEU:HD13	1:A:314:LYS:HG3	2.00	0.43
1:A:778:ASN:O	1:A:782:ILE:HG13	2.18	0.43
1:A:162:GLN:HE21	1:A:162:GLN:HB3	1.56	0.43
1:A:320:LYS:HD3	1:A:321:TYR:CZ	2.53	0.43
1:A:540:GLY:O	1:A:541:LYS:O	2.37	0.43
1:A:648:TYR:O	1:A:649:LYS:O	2.36	0.43
1:A:566:ILE:HG12	1:A:749:TYR:HB3	2.00	0.43
1:A:722:ASN:ND2	1:A:792:SER:OG	2.52	0.43
1:A:809:GLU:HG2	1:A:934:TYR:CD2	2.53	0.43
1:A:874:ILE:HD13	1:A:874:ILE:HA	1.73	0.43
1:A:1010:TYR:CD1	1:A:1010:TYR:N	2.86	0.43
1:A:1061:ARG:CG	1:A:1061:ARG:HH11	2.27	0.43
1:A:388:ASP:HB3	1:A:391:ASN:O	2.18	0.43
1:A:473:ASN:OD1	1:A:475:LEU:CD1	2.60	0.43
1:A:585:PHE:HZ	1:A:736:LEU:HD23	1.84	0.43
1:A:1070:LYS:HG2	1:A:1071:TYR:CG	2.53	0.43
1:A:1125:VAL:HG22	1:A:1134:MET:SD	2.59	0.43
1:A:995:GLN:NE2	1:A:1039:LYS:HB3	2.34	0.43
1:A:1242:ASN:C	1:A:1244:GLY:H	2.22	0.42
1:A:491:GLU:OE2	1:A:711:LYS:HD2	2.19	0.42
1:A:558:GLU:O	1:A:559:PHE:CG	2.72	0.42
1:A:716:ASN:OD1	1:A:720:LYS:HE3	2.19	0.42
1:A:1026:ASN:ND2	1:A:1028:LYS:HE2	2.34	0.42
1:A:1099:ASP:C	1:A:1101:TRP:N	2.71	0.42
1:A:132:THR:O	1:A:132:THR:HG23	2.17	0.42
1:A:196:PHE:CZ	1:A:362:ASN:HA	2.54	0.42
1:A:464:PHE:O	1:A:465:SER:CB	2.65	0.42
1:A:343:LYS:HD3	1:A:502:TYR:OH	2.19	0.42

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:571:SER:O	1:A:572:VAL:HB	2.19	0.42
1:A:634:ILE:N	1:A:634:ILE:HD12	2.34	0.42
1:A:885:SER:OG	1:A:886:ASN:N	2.52	0.42
1:A:973:GLY:HA2	1:A:988:GLN:H	1.83	0.42
1:A:22:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HD12	2.00	0.42
1:A:459:ASN:C	1:A:461:ASP:H	2.21	0.42
1:A:584:THR:HG21	1:A:586:PHE:HB2	2.01	0.42
1:A:471:PHE:CE2	1:A:720:LYS:HE2	2.54	0.42
1:A:879:LEU:HD23	1:A:1072:PHE:HE2	1.83	0.42
1:A:913:GLN:OE1	1:A:1014:TRP:CZ2	2.72	0.42
1:A:115:ILE:HD12	1:A:316:VAL:CG1	2.50	0.42
1:A:1221:VAL:CG2	1:A:1239:LEU:HD23	2.49	0.42
1:A:194:PHE:N	1:A:194:PHE:CD1	2.87	0.42
1:A:244:LYS:HB2	1:A:467:SER:OG	2.20	0.42
1:A:235:ILE:HD11	1:A:286:TYR:HB3	2.01	0.42
1:A:459:ASN:O	1:A:461:ASP:N	2.45	0.42
1:A:711:LYS:HB2	1:A:856:TYR:CE2	2.54	0.42
1:A:729:ARG:HH22	1:A:789:ASN:HD22	1.66	0.42
1:A:869:TYR:HD1	1:A:870:ILE:HD13	1.84	0.42
1:A:874:ILE:C	1:A:876:THR:N	2.73	0.42
1:A:917:PHE:O	1:A:1057:LEU:CD1	2.67	0.42
1:A:969:GLU:O	1:A:970:ASN:HB3	2.17	0.42
1:A:923:LYS:CD	1:A:1056:LYS:HD3	2.50	0.42
1:A:325:GLU:HA	1:A:330:LYS:O	2.20	0.42
1:A:535:GLU:OE2	1:A:537:PHE:CE2	2.73	0.42
1:A:559:PHE:HE2	1:A:742:ALA:HA	1.84	0.42
1:A:662:VAL:C	1:A:664:LEU:H	2.22	0.42
1:A:1023:ARG:HD3	1:A:1023:ARG:C	2.38	0.42
1:A:915:GLN:HB2	1:A:1068:TRP:CE3	2.54	0.42
1:A:1221:VAL:HG23	1:A:1239:LEU:HD23	2.02	0.42
1:A:357:PHE:N	1:A:357:PHE:CD1	2.87	0.42
1:A:374:PHE:CE2	1:A:406:THR:HG21	2.53	0.42
1:A:491:GLU:O	1:A:492:GLU:C	2.58	0.42
1:A:494:ILE:HD12	1:A:494:ILE:N	2.35	0.42
1:A:758:GLU:C	1:A:760:ASN:H	2.22	0.42
1:A:761:ASN:C	1:A:763:ASN:N	2.73	0.42
1:A:882:ARG:HB3	1:A:912:ASN:OD1	2.19	0.42
1:A:1163:LYS:CG	1:A:1183:ASN:ND2	2.83	0.42
1:A:170:HIS:HD2	1:A:173:LEU:N	2.18	0.42
1:A:40:ASN:O	1:A:112:VAL:HG23	2.20	0.42
1:A:68:VAL:CG1	1:A:69:PRO:HD2	2.50	0.42

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1061:ARG:NH1	1:A:1061:ARG:HG2	2.32	0.42
1:A:1062:ASP:OD1	1:A:1063:THR:N	2.53	0.42
1:A:1115:ASN:HB2	1:A:1282:TRP:CZ3	2.55	0.42
1:A:1209:LEU:HD11	1:A:1217:LEU:HD12	2.01	0.42
1:A:1235:CYS:HA	1:A:1280:CYS:O	2.19	0.42
1:A:125:THR:O	1:A:300:ALA:HA	2.20	0.42
1:A:430:CYS:HA	1:A:453:LEU:O	2.20	0.42
1:A:487:ILE:O	1:A:488:GLU:O	2.37	0.42
1:A:498:LEU:HG	1:A:502:TYR:CE1	2.55	0.42
1:A:638:GLY:O	1:A:642:ASN:CA	2.68	0.42
1:A:675:VAL:HA	1:A:807:ARG:HD2	2.02	0.42
1:A:1128:VAL:CG1	1:A:1129:GLY:N	2.83	0.42
1:A:1155:TYR:N	1:A:1155:TYR:CD1	2.87	0.42
1:A:1166:ALA:O	1:A:1167:SER:HB2	2.20	0.42
1:A:1252:PHE:O	1:A:1253:HIS:HB2	2.19	0.42
1:A:154:ILE:HD12	1:A:186:ILE:O	2.19	0.42
1:A:198:GLU:CD	1:A:201:GLU:HG2	2.40	0.42
1:A:114:GLY:O	1:A:320:LYS:CD	2.68	0.42
1:A:405:ASN:OD1	1:A:407:GLU:N	2.51	0.42
1:A:638:GLY:N	1:A:639:PRO:CD	2.83	0.42
1:A:659:SER:HB2	1:A:663:ILE:CD1	2.49	0.42
1:A:660:GLY:C	1:A:662:VAL:N	2.73	0.42
1:A:641:LEU:CD1	1:A:732:MET:SD	3.08	0.42
1:A:779:LYS:HA	1:A:782:ILE:HD12	2.02	0.42
1:A:927:ILE:HA	1:A:1052:ASN:HB3	2.02	0.42
1:A:1061:ARG:NH1	1:A:1061:ARG:CG	2.82	0.42
1:A:170:HIS:CG	1:A:173:LEU:HB2	2.55	0.42
1:A:373:VAL:HG12	1:A:374:PHE:N	2.35	0.42
1:A:568:LEU:HB3	1:A:595:ASN:OD1	2.19	0.42
1:A:74:ASP:OD1	1:A:74:ASP:O	2.38	0.42
1:A:907:ASP:O	1:A:911:LYS:HA	2.20	0.42
1:A:910:ASP:C	1:A:912:ASN:H	2.24	0.42
1:A:961:GLU:HB2	1:A:979:ASN:ND2	2.23	0.42
1:A:1144:MET:HB3	1:A:1150:LEU:CD1	2.50	0.41
1:A:149:LEU:CD2	1:A:150:ASN:H	2.33	0.41
1:A:303:ILE:HG22	1:A:310:LEU:HB2	2.02	0.41
1:A:502:TYR:O	1:A:506:PHE:HB2	2.20	0.41
1:A:566:ILE:CG1	1:A:749:TYR:HB3	2.50	0.41
1:A:588:SER:O	1:A:591:VAL:N	2.53	0.41
1:A:684:TYR:CD1	1:A:684:TYR:N	2.87	0.41
1:A:794:SER:O	1:A:798:ASN:OD1	2.38	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:862:LEU:O	1:A:865:THR:HB	2.20	0.41
1:A:163:PHE:CD1	1:A:188:PHE:HA	2.55	0.41
1:A:217:PRO:HG2	1:A:378:ILE:CD1	2.35	0.41
1:A:290:PHE:O	1:A:293:ILE:N	2.53	0.41
1:A:309:SER:O	1:A:312:TYR:HB3	2.19	0.41
1:A:322:LEU:HD23	1:A:322:LEU:HA	1.83	0.41
1:A:565:ARG:O	1:A:566:ILE:C	2.58	0.41
1:A:585:PHE:CE1	1:A:586:PHE:HE1	2.37	0.41
1:A:797:MET:CE	1:A:866:PHE:CE1	3.01	0.41
1:A:965:ILE:HD12	1:A:976:VAL:CG2	2.48	0.41
1:A:1227:ASN:HD21	1:A:1229:GLN:HB3	1.80	0.41
1:A:265:THR:O	1:A:265:THR:HG22	2.20	0.41
1:A:385:THR:HG23	1:A:388:ASP:N	2.24	0.41
1:A:560:GLU:O	1:A:561:HIS:C	2.59	0.41
1:A:66:LYS:HE2	1:A:68:VAL:HG21	2.02	0.41
1:A:919:LEU:C	1:A:921:SER:H	2.21	0.41
1:A:1026:ASN:N	1:A:1026:ASN:OD1	2.53	0.41
1:A:927:ILE:HG23	1:A:1051:ASN:ND2	2.35	0.41
1:A:22:ILE:CD1	1:A:22:ILE:H	2.32	0.41
1:A:430:CYS:HB2	1:A:544:GLU:HA	2.02	0.41
1:A:742:ALA:O	1:A:745:ALA:N	2.48	0.41
1:A:801:ILE:HB	1:A:802:PRO:HD3	2.01	0.41
1:A:897:LYS:HG3	1:A:899:ASN:OD1	2.20	0.41
1:A:1241:ASP:O	1:A:1241:ASP:OD1	2.39	0.41
1:A:70:VAL:CG1	1:A:161:ILE:HD11	2.42	0.41
1:A:174:ASN:C	1:A:176:THR:H	2.24	0.41
1:A:23:LYS:NZ	1:A:23:LYS:CB	2.81	0.41
1:A:638:GLY:HA2	1:A:643:ILE:HB	2.02	0.41
1:A:662:VAL:O	1:A:664:LEU:N	2.53	0.41
1:A:473:ASN:HD21	1:A:674:PRO:HG3	1.86	0.41
1:A:684:TYR:HD2	1:A:690:LEU:HD23	1.85	0.41
1:A:819:LEU:O	1:A:823:ILE:HG13	2.21	0.41
1:A:884:GLU:HG3	1:A:891:LEU:HD11	2.02	0.41
1:A:941:PHE:O	1:A:1021:ASN:HB2	2.20	0.41
1:A:942:SER:HA	1:A:1019:ILE:O	2.20	0.41
1:A:119:GLY:C	1:A:121:SER:H	2.23	0.41
1:A:131:ASP:N	1:A:131:ASP:OD1	2.53	0.41
1:A:342:TYR:O	1:A:346:THR:HB	2.19	0.41
1:A:93:LYS:NZ	1:A:384:TYR:O	2.53	0.41
1:A:763:ASN:C	1:A:765:ASN:N	2.72	0.41
1:A:93:LYS:HE2	1:A:384:TYR:HD1	1.86	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1267:TYR:CD2	1:A:1280:CYS:SG	3.14	0.41
1:A:205:ASN:ND2	1:A:401:PHE:HE2	2.18	0.41
1:A:303:ILE:O	1:A:303:ILE:HG12	2.19	0.41
1:A:588:SER:O	1:A:591:VAL:HG23	2.20	0.41
1:A:757:GLU:CG	1:A:760:ASN:ND2	2.84	0.41
1:A:765:ASN:CB	1:A:768:ASP:HB2	2.45	0.41
1:A:772:LYS:O	1:A:773:LEU:C	2.59	0.41
1:A:824:TYR:C	1:A:826:ASN:H	2.24	0.41
1:A:919:LEU:HD23	1:A:919:LEU:N	2.36	0.41
1:A:903:LYS:HB2	1:A:922:SER:CA	2.51	0.41
1:A:996:ARG:O	1:A:1039:LYS:HD2	2.20	0.41
1:A:1018:THR:HG21	1:A:1084:ILE:CD1	2.51	0.41
1:A:1138:GLY:HA3	1:A:1139:PRO:HD2	1.73	0.41
1:A:250:TYR:HB2	1:A:429:LEU:HD21	2.01	0.41
1:A:3:PHE:O	1:A:96:GLU:CD	2.58	0.41
1:A:566:ILE:HG12	1:A:749:TYR:HD1	1.74	0.41
1:A:594:VAL:HG12	1:A:746:ILE:CD1	2.50	0.41
1:A:758:GLU:O	1:A:759:LYS:HB2	2.21	0.41
1:A:88:LEU:HD12	1:A:88:LEU:HA	1.82	0.41
1:A:1029:ILE:O	1:A:1029:ILE:CG2	2.67	0.41
1:A:1065:ARG:HD2	1:A:1065:ARG:HA	1.85	0.41
1:A:25:PRO:HD2	1:A:185:TYR:OH	2.20	0.41
1:A:193:THR:CG2	1:A:215:THR:O	2.65	0.41
1:A:554:LEU:HD23	1:A:641:LEU:CD2	2.51	0.41
1:A:289:LYS:O	1:A:293:ILE:HG12	2.21	0.41
1:A:691:THR:C	1:A:693:GLN:N	2.75	0.41
1:A:975:LYS:O	1:A:975:LYS:HD3	2.20	0.41
1:A:1022:ASN:HD22	1:A:1025:ASN:N	2.19	0.41
1:A:494:ILE:HG22	1:A:494:ILE:O	2.21	0.41
1:A:754:TYR:OH	1:A:757:GLU:CG	2.65	0.41
1:A:747:ILE:CG2	1:A:764:PHE:CZ	3.02	0.41
1:A:950:PRO:CD	1:A:1066:TYR:O	2.69	0.41
1:A:141:ASP:OD2	1:A:143:SER:OG	2.40	0.40
1:A:553:TYR:CG	1:A:642:ASN:HB2	2.56	0.40
1:A:761:ASN:O	1:A:763:ASN:N	2.42	0.40
1:A:1077:LYS:HE2	1:A:1079:LEU:HD23	2.03	0.40
1:A:1137:LYS:CG	1:A:1138:GLY:H	2.34	0.40
1:A:583:TYR:O	1:A:739:GLN:NE2	2.53	0.40
1:A:619:SER:O	1:A:621:VAL:HG23	2.20	0.40
1:A:740:ALA:HB2	1:A:777:ILE:HD11	2.03	0.40
1:A:78:LEU:H	1:A:83:GLU:CD	2.24	0.40

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1193:LEU:CD1	1:A:1193:LEU:C	2.87	0.40
1:A:1198:SER:O	1:A:1199:GLN:O	2.38	0.40
1:A:192:PHE:CZ	1:A:375:LYS:NZ	2.78	0.40
1:A:226:ILE:O	1:A:226:ILE:HG22	2.20	0.40
1:A:336:LEU:HD11	1:A:340:LYS:HE3	2.03	0.40
1:A:392:LEU:HB2	1:A:395:THR:OG1	2.22	0.40
1:A:426:TYR:C	1:A:426:TYR:CD1	2.94	0.40
1:A:492:GLU:O	1:A:494:ILE:N	2.51	0.40
1:A:506:PHE:HB3	1:A:508:PHE:CE2	2.57	0.40
1:A:568:LEU:HA	1:A:595:ASN:OD1	2.21	0.40
1:A:690:LEU:HA	1:A:690:LEU:HD12	1.80	0.40
1:A:94:LEU:O	1:A:98:ILE:HG13	2.20	0.40
1:A:1269:ARG:CZ	1:A:1270:GLN:HE22	2.35	0.40
1:A:497:ASP:O	1:A:500:GLN:HB3	2.22	0.40
1:A:471:PHE:CE2	1:A:720:LYS:CE	3.05	0.40
1:A:1030:TYR:CE1	1:A:1035:LEU:HB2	2.57	0.40
1:A:962:TYR:HE2	1:A:1057:LEU:HD23	1.81	0.40
1:A:815:LEU:O	1:A:819:LEU:HB2	2.21	0.40
1:A:880:ASN:ND2	1:A:880:ASN:C	2.74	0.40

All (9) 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:486:ASN:OD1	1:A:1273:ARG:NH2[6_555]	1.12	1.08
1:A:63:PRO:O	1:A:309:SER:N[3_564]	1.82	0.38
1:A:486:ASN:CG	1:A:1273:ARG:NH2[6_555]	1.90	0.30
1:A:693:GLN:NE2	1:A:1276:ARG:CB[6_555]	1.96	0.24
1:A:697:ASN:ND2	1:A:1276:ARG:NH2[6_555]	2.00	0.20
1:A:486:ASN:OD1	1:A:1273:ARG:CZ[6_555]	2.02	0.18
1:A:64:GLU:CG	1:A:307:THR:O[3_564]	2.07	0.13
1:A:693:GLN:NE2	1:A:1276:ARG:CG[6_555]	2.17	0.03
1:A:63:PRO:O	1:A:308:ALA:CA[3_564]	2.18	0.02

## 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	1273/1312 (97%)	1008 (79%)	177 (14%)	88 (7%)	1	19

All (88) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	121	SER
1	A	398	ALA
1	A	488	GLU
1	A	541	LYS
1	A	559	PHE
1	A	561	HIS
1	A	566	ILE
1	A	571	SER
1	A	629	ASP
1	A	649	LYS
1	A	650	ASP
1	A	831	ILE
1	A	973	GLY
1	A	974	TRP
1	A	992	GLU
1	A	1146	THR
1	A	1199	GLN
1	A	1245	ASN
1	A	1273	ARG
1	A	16	GLY
1	A	18	ASP
1	A	75	SER
1	A	123	ILE
1	A	160	ILE
1	A	209	GLY
1	A	256	LEU
1	A	396	ASN
1	A	464	PHE
1	A	490	ALA
1	A	492	GLU
1	A	493	ASN
1	A	510	ASN
1	A	527	GLN
1	A	556	ALA

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	563	LYS
1	A	572	VAL
1	A	644	GLY
1	A	648	TYR
1	A	661	ALA
1	A	763	ASN
1	A	773	LEU
1	A	980	TYR
1	A	1138	GLY
1	A	1176	ASN
1	A	1292	GLY
1	A	3	PHE
1	A	30	MET
1	A	115	ILE
1	A	124	ASP
1	A	157	SER
1	A	249	ALA
1	A	562	GLY
1	A	689	VAL
1	A	859	ASN
1	A	891	LEU
1	A	911	LYS
1	A	1155	TYR
1	A	1206	LEU
1	A	1216	ASN
1	A	1289	ASP
1	A	19	ILE
1	A	125	THR
1	A	453	LEU
1	A	646	MET
1	A	663	ILE
1	A	688	LYS
1	A	761	ASN
1	A	762	ILE
1	A	845	LEU
1	A	848	ASP
1	A	885	SER
1	A	1145	THR
1	A	4	VAL
1	A	74	ASP
1	A	141	ASP
1	A	175	LEU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	395	THR
1	A	735	ALA
1	A	825	ASP
1	A	1165	TYR
1	A	1169	ASN
1	A	674	PRO
1	A	677	GLY
1	A	120	GLY
1	A	746	ILE
1	A	494	ILE
1	A	172	VAL
1	A	627	ILE

### 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	1158/1190 (97%)	1082 (93%)	76 (7%)	18 50

All (76) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	18	ASP
1	A	21	TYR
1	A	50	THR
1	A	51	PHE
1	A	78	LEU
1	A	81	ASP
1	A	89	LYS
1	A	97	ARG
1	A	122	THR
1	A	129	VAL
1	A	132	THR
1	A	144	TYR
1	A	149	LEU
1	A	150	ASN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	154	ILE
1	A	162	GLN
1	A	165	CYS
1	A	167	SER
1	A	193	THR
1	A	231	ARG
1	A	235	ILE
1	A	241	ARG
1	A	261	GLU
1	A	264	ARG
1	A	303	ILE
1	A	311	GLN
1	A	318	LYS
1	A	345	LEU
1	A	346	THR
1	A	362	ASN
1	A	382	VAL
1	A	412	ASN
1	A	425	PHE
1	A	474	ASP
1	A	554	LEU
1	A	555	ARG
1	A	559	PHE
1	A	561	HIS
1	A	570	ASN
1	A	574	GLU
1	A	576	LEU
1	A	589	ASP
1	A	602	MET
1	A	615	THR
1	A	618	THR
1	A	671	ILE
1	A	702	ARG
1	A	713	ILE
1	A	743	THR
1	A	750	GLN
1	A	763	ASN
1	A	796	LEU
1	A	812	ASP
1	A	825	ASP
1	A	833	GLN
1	A	834	VAL

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	835	ASP
1	A	843	ASN
1	A	872	ASN
1	A	874	ILE
1	A	880	ASN
1	A	881	LEU
1	A	912	ASN
1	A	918	ASN
1	A	962	TYR
1	A	974	TRP
1	A	975	LYS
1	A	1018	THR
1	A	1022	ASN
1	A	1026	ASN
1	A	1057	LEU
1	A	1077	LYS
1	A	1114	LEU
1	A	1193	LEU
1	A	1243	ASN
1	A	1277	THR

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (47) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	39	HIS
1	A	150	ASN
1	A	162	GLN
1	A	170	HIS
1	A	205	ASN
1	A	227	HIS
1	A	240	ASN
1	A	269	HIS
1	A	311	GLN
1	A	315	ASN
1	A	362	ASN
1	A	377	ASN
1	A	402	ASN
1	A	404	GLN
1	A	418	ASN
1	A	458	ASN
1	A	500	GLN
1	A	552	HIS

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	557	GLN
1	A	645	ASN
1	A	697	ASN
1	A	722	ASN
1	A	760	ASN
1	A	765	ASN
1	A	789	ASN
1	A	872	ASN
1	A	880	ASN
1	A	913	GLN
1	A	915	GLN
1	A	960	ASN
1	A	966	ASN
1	A	971	ASN
1	A	979	ASN
1	A	988	GLN
1	A	1003	GLN
1	A	1012	ASN
1	A	1022	ASN
1	A	1026	ASN
1	A	1073	ASN
1	A	1120	ASN
1	A	1126	ASN
1	A	1147	ASN
1	A	1199	GLN
1	A	1243	ASN
1	A	1254	GLN
1	A	1268	ASN
1	A	1270	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

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

### 6.1 Protein, DNA and RNA chains

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å <sup>2</sup> )	Q<0.9
1	A	1277/1312 (97%)	0.14	37 (2%) 51 39	119, 222, 356, 750	0

All (37) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	590	TYR	5.5
1	A	569	THR	5.1
1	A	594	VAL	4.7
1	A	1044	LEU	4.1
1	A	625	ASP	4.1
1	A	564	SER	3.6
1	A	610	LEU	3.5
1	A	1219	GLN	3.5
1	A	600	ALA	3.3
1	A	1264	SER	3.3
1	A	593	LYS	3.1
1	A	611	VAL	3.0
1	A	1229	GLN	3.0
1	A	589	ASP	3.0
1	A	591	VAL	2.9
1	A	1249	PHE	2.9
1	A	679	PHE	2.8
1	A	607	VAL	2.7
1	A	623	THR	2.6
1	A	756	GLU	2.6
1	A	598	THR	2.6
1	A	525	ILE	2.5
1	A	762	ILE	2.5
1	A	1167	SER	2.5
1	A	1166	ALA	2.5
1	A	990	THR	2.3
1	A	297	LEU	2.3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	763	ASN	2.3
1	A	670	GLU	2.2
1	A	951	LYS	2.2
1	A	1214	VAL	2.1
1	A	34	LYS	2.1
1	A	565	ARG	2.1
1	A	1197	ALA	2.1
1	A	267	GLY	2.1
1	A	1296	LEU	2.0
1	A	192	PHE	2.0

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

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

## 6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

## 6.4 Ligands [i](#)

In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. 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	B-factors( $\text{\AA}^2$ )	Q<0.9
2	ZN	A	1313	1/1	0.93	0.47	147,147,147,147	0

## 6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.