



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

May 29, 2020 – 03:02 am BST

PDB ID : 3KSO
Title : Structure and Mechanism of the Heavy Metal Transporter CusA
Authors : Su, C.-C.
Deposited on : 2009-11-23
Resolution : 4.37 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

<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	:	2.11
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Refmac	:	5.8.0158
CCP4	:	7.0.044 (Gargrove)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.11

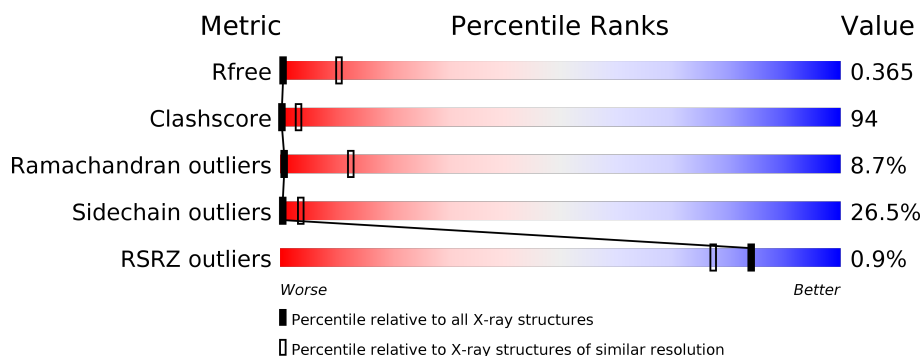
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 4.37 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}	130704	1022 (4.92-3.80)
Clashscore	141614	1085 (4.92-3.80)
Ramachandran outliers	138981	1036 (4.92-3.80)
Sidechain outliers	138945	1019 (4.92-3.80)
RSRZ outliers	127900	1091 (5.02-3.70)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments on the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria respectively. 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	1055	

2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 7785 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 Cation efflux system protein cusA.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	1014	Total	C	N	O	S	0	0	0
			7784	5031	1304	1413	36			

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-7	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054
A	-6	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054
A	-5	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054
A	-4	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054
A	-3	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054
A	-2	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054
A	-1	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054
A	0	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P38054

- Molecule 2 is SILVER ION (three-letter code: AG) (formula: Ag).

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

G994	I683	F746	S807	L874	A934	I684	F747	S808	L875	G935	I685	F748	S809	L876	G936	I686	F749	S810	L877	A937	I687	F750	S811	L878	A938	I688	F751	S812	L879	A939	I689	F752	S813	L880	A940	I690	F753	S814	G941	I693	F754	S815	G942	I694	F755	S816	G943	I695	F756	S817	G944	I696	F757	S818	G945	I697	F758	S819	G946	I698	F759	S820	G947	I699	F760	S821	G948	I700	F761	S822	G949	I701	F762	S823	G950	I702	F763	S824	G951	I703	F764	S825	G952	I704	F765	S826	G953	I705	F766	S827	G954	I706	F767	S828	G955	I707	F768	S829	G956	I708	F769	S830	G957	I709	F770	S831	G958	I710	F771	S832	G959	I711	F772	S833	G960	I712	F773	S834	G961	I713	F774	S835	G962	I714	F775	S836	G963	I715	F776	S837	G964	I716	F777	S838	G965	I717	F778	S839	G966	I718	F779	S840	G967	I719	F780	S841	G968	I720	F781	S842	G969	I721	F782	S843	G970	I722	F783	S844	G971	I723	F784	S845	G972	I724	F785	S846	G973	I725	F786	S847	G974	I726	F787	S848	G975	I727	F788	S849	G976	I728	F789	S850	G977	I729	F790	S851	G978	I730	F791	S852	G979	I731	F792	S853	G980	I732	F793	S854	G981	I733	F794	S855	G982	I734	F795	S856	G983	I735	F796	S857	G984	I736	F797	S858	G985	I737	F798	S859	G986	I738	F799	S860	G987	I739	F800	S861	G988	I740	F801	S862	G989	I741	F802	S863	G990	I742	F803	S864	G991	I743	F804	S865	G992	I744	F805	S866	G993	I745	F806	S867	G994	I746	F807	S868	G995	I747	F808	S869	G996	I748	F809	S870	G997	I749	F810	S871	G998	I750	F811	S872	G999	I751	F812	S873	G1000	I752	F813	S874	G1001	I753	F814	S875	G1002	I754	F815	S876	G1003	I755	F816	S877	G1004	I756	F817	S878	G1005	I757	F818	S879	G1006	I758	F820	S880	G1007	I759	F821	S881	G1008	I760	F822	S882	G1009	I761	F823	S883	G1010	I762	F824	S884	G1011	I763	F825	S885	G1012	I764	F826	S886	G1013	I765	F827	S887	G1014	I766	F828	S888	G1015	I767	F829	S889	G1016	I768	F830	S890	G1017	I769	F831	S891	G1018	I770	F832	S892	G1019	I771	F833	S893	G1020	I772	F834	S894	G1021	I773	F835	S895	G1022	I774	F836	S896	G1023	I775	F837	S897	G1024	I776	F838	S898	G1025	I777	F839	S899	G1026	I778	F840	S900	G1027	I779	F841	S901	G1028	I780	F842	S902	G1029	I781	F843	S903	G1030	I782	F844	S904	G1031	I783	F845	S905	G1032	I784	F846	S906	G1033	I785	F847	S907	G1034	I786	F848	S908	G1035	I787	F849	S909	G1036	I788	F850	S910	G1037	I789	F851	S911	G1038	I790	F852	S912	G1039	I791	F853	S913	G1040	I792	F854	S914	G1041	I793	F855	S915	G1042	I794	F856	S916	G1043	I795	F857	S917	G1044	I796	F858	S918	G1045	I797	F859	S919	G1046	I798	F860	S920	G1047	I799	F861	S921	G1048	I800	F862	S922	G1049	I801	F863	S923	G1050	I802	F864	S924	G1051	I803	F865	S925	G1052	I804	F866	S926	G1053	I805	F867	S927	G1054	I806	F868	S928	G1055	I807	F869	S929	G1056	I808	F870	S930	G1057	I809	F871	S931	G1058	I810	F872	S932	G1059	I811	F873	S933	G1060	I812	F874	S934	G1061	I813	F875	S935	G1062	I814	F876	S936	G1063	I815	F877	S937	G1064	I816	F878	S938	G1065	I817	F879	S939	G1066	I818	F880	S940	G1067	I819	F881	S941	G1068	I820	F882	S942	G1069	I821	F883	S943	G1070	I822	F884	S944	G1071	I823	F885	S945	G1072	I824	F886	S946	G1073	I825	F887	S947	G1074	I826	F888	S948	G1075	I827	F889	S949	G1076	I828	F890	S950	G1077	I829	F891	S951	G1078	I830	F892	S952	G1079	I831	F893	S953	G1080	I832	F894	S954	G1081	I833	F895	S955	G1082	I834	F896	S956	G1083	I835	F897	S957	G1084	I836	F898	S958	G1085	I837	F899	S959	G1086	I838	F900	S960	G1087	I839	F901	S961	G1088	I840	F902	S962	G1089	I841	F903	S963	G1090	I842	F904	S964	G1091	I843	F905	S965	G1092	I844	F906	S966	G1093	I845	F907	S967	G1094	I846	F908	S968	G1095	I847	F909	S969	G1096	I848	F910	S970	G1097	I849	F911	S971	G1098	I850	F912	S972	G1099	I851	F913	S973	G1100	I852	F914	S974	G1101	I853	F915	S975	G1102	I854	F916	S976	G1103	I855	F917	S977	G1104	I856	F918	S978	G1105	I857	F919	S979	G1106	I858	F920	S980	G1107	I859	F921	S981	G1108	I860	F922	S982	G1109	I861	F923	S983	G1110	I862	F924	S984	G1111	I863	F925	S985	G1112	I864	F926	S986	G1113	I865	F927	S987	G1114	I866	F928	S988	G1115	I867	F929	S989	G1116	I868	F930	S990	G1117	I869	F931	S991	G1118	I870	F932	S992	G1119	I871	F933	S993	G1120	I872	F934	S994	G1121	I873	F935	S995	G1122	I874	F936	S996	G1123	I875	F937	S997	G1124	I876	F938	S998	G1125	I877	F939	S999	G1126	I878	F940	S1000	G1127	I879	F941	S1001	G1128	I880	F942	S1002	G1129	I881	F943	S1003	G1130	I882	F944	S1004	G1131	I883	F945	S1005	G1132	I884	F946	S1006	G1133	I885	F947	S1007	G1134	I886	F948	S1008	G1135	I887	F949	S1009	G1136	I888	F950	S1010	G1137	I889	F951	S1011	G1138	I890	F952	S1012	G1139	I891	F953	S1013	G1140	I892	F954	S1014	G1141	I893	F955	S1015	G1142	I894	F956	S1016	G1143	I895	F957	S1017	G1144	I896	F958	S1018	G1145	I897	F959	S1019	G1146	I898	F960	S1020	G1147	I899	F961	S1021	G1148	I900	F962	S1022	G1149	I901	F963	S1023	G1150	I902	F964	S1024	G1151	I903	F965	S1025	G1152	I904	F966	S1026	G1153	I905	F967	S1027	G1154	I906	F968	S1028	G1155	I907	F969	S1029	G1156	I908	F970	S1030	G1157	I909	F971	S1031	G1158	I910	F972	S1032	G1159	I911	F973	S1033	G1160	I912	F974	S1034	G1161	I913	F975	S1035	G1162	I914	F976	S1036	G1163	I915	F977	S1037	G1164	I916	F978	S1038	G1165	I917	F979	S1039	G1166	I918	F980	S1040	G1167	I919	F981	S1041	G1168	I920	F982	S1042	G1169	I921	F983	S1043	G1170	I922	F984	S1044	G1171	I923	F985	S1045	G1172	I924	F986	S1046	G1173	I925	F987	S1047	G1174	I926	F988	S1048	G1175	I927	F989	S1049	G1176	I928	F990	S1050	G1177	I929	F991	S1051	G1178	I930	F992	S1052	G1179	I931	F993	S1053	G1180	I932	F994	S1054	G1181	I933	F995	S1055	G1182	I934	F996	S1056	G1183	I935	F997	S1057	G1184	I936	F998	S1058	G1185	I937	F999	S1059	G1186	I938	F1000	S1060	G1187	I939	F1001	S1061	G1188	I940	F1002	S1062	G1189	I941	F1003	S1063	G1190	I942	F1004	S1064	G1191	I943	F1005	S1065	G1192	I944	F1006	S1066	G1193	I945	F1007	S1067	G1194	I946	F1008	S1068	G1195	I947	F1009	S1069	G1196	I948	F1010	S1070	G1197	I949	F1011	S1071	G1198	I950	F1012	S1072	G1199	I951	F1013	S1073	G1200	I952	F1014	S1074	G1201	I953	F1015	S1075	G1202	I954	F1016	S1076	G1203	I955	F1017	S1077	G1204	I956	F1018	S1078	G1205	I957	F1019	S1079	G1206	I958	F1020	S1080	G1207	I959	F1021	S1081	G1208	I960	F1022	S1082	G1209	I961	F1023	S1083	G1210	I962	F1024	S1084	G1211	I963	F1025	S1085	G1212	I964	F1026	S1086	G1213	I965	F1027	S1087	G1214	I966	F1028	S1088	G1215	I967	F1029	S1089	G1216	I968	F1030	S1090	G1217	I969	F1031	S1091	G1218	I970	F1032	S1092	G1219	I971	F1033	S1093	G1220	I972	F1034	S1094	G1221	I973	F1035	S1095	G1222	I974	F1036	S1096	G1223	I975	F1037	S1097	G1224	I976	F1038	S1098	G1225	I977	F1039	S1099	G1226	I978	F1040	S1100	G1227	I979	F1041	S1101	G1228	I980	F1042	S1102	G1229	I981	F1043	S1103	G1230	I982	F1044	S1104	G1231	I983	F1045	S1105	G1232	I984	F1046	S1106	G1233	I985	F1047	S1107	G1234	I986	F1048	S1108	G1235	I987	F1049	S1109	G1236	I988	F1050	S1110	G1237	I989	F1051	S1111	G1238	I990	F1052	S1112	G1239	I991	F1053	S1113	G1240	I992	F1054	S1114	G1241	I993	F1055	S1115	G1242	I994	F1056	S1116	G1243	I995	F1057	S1117	G1244	I996	F1058	S1118	G1245	I997	F1059	S1119	G1246	I998	F1060	S1120	G1247	I999	F1061	S1121	G1248	I1000	F1062	S1122	G1249	I1001	F1063	S1123	G1250	I1002	F1064	S1124	G1251	I1003	F1065	S1125	G1252	I1004	F1066	S1126	G1253	I1005	F1067	S1127	G1254	I1006	F1068	S1128	G1255	I1007	F1069	S1129	G1256	I1008	F1070	S1130	G1257	I1009	F1071	S1131	G1258	I1010	F1072	S1132	G1259	I1011	F1073	S1133	G1260	I1012	F1074	S1134	G1261	I1013	F1075	S1135	G1262	I1014	F1076	S1136	G1263	I1015	F1077	S1137	G1264	I1016	F1078	S1138	G1265	I1017	F1079	S1139	G1266	I1018	F1080	S1140	G1267	I1019	F1081	S1141	G1268	I1020	F1082	S1142	G1269	I1021	F1083	S1143	G1270	I1022	F1084	S1144	G1271	I1023	F1085	S1145	G1272	I1024	F1086	S1146	G1273	I1025	F1087	S1147	G1274	I1026	F1088	S1148	G1275	I1027	F1089	S1149	G1276	I1028	F1090	S1150	G1277	I1029	F1091	S1151	G1278	I1030	F1092	S1152	G1279	I1031	F1093	S1153	G1280	I1032	F1094	S1154	G1281	I1033	F1095	S1155	G1282	I1034	F1096	S1156	G1283	I1035	F1097	S1157	G1284	I1036	F1098	S1158	G1285	I1037	F1099	S1159	G1286	I1038	F1100	S1160	G1287	I1039	F1101	S1161	G1288	I1040	F1102	S1162	G1289	I1041	F1103	S1163	G1290	I1042	F1104	S1164	G1291	I1043	F1105	S1165	G1292	I1044	F1106	S1166	G1293	I1045	F1107	S1167	G1294	I1046	F1108	S1168	G1295	I1047	F1109	S1169	G1
------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	----

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	H 3 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	179.99Å 179.99Å 286.02Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	35.47 – 4.37 35.48 – 4.37	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	92.6 (35.47-4.37) 99.6 (35.48-4.37)	Depositor EDS
R_{merge}	0.06	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	3.31 (at 4.44Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX	Depositor
R, R_{free}	0.268 , 0.321 0.300 , 0.365	Depositor DCC
R_{free} test set	588 reflections (5.00%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	187.4	Xtriage
Anisotropy	0.205	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.21 , 201.4	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.49$, $\langle L^2 \rangle = 0.32$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.89	EDS
Total number of atoms	7785	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	254.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.57% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	0.38	0/7939	0.72	7/10805 (0.1%)

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	1	1

There are no bond length outliers.

All (7) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed($^{\circ}$)	Ideal($^{\circ}$)
1	A	5	ILE	CB-CA-C	10.48	132.56	111.60
1	A	659	ALA	N-CA-C	-9.78	84.59	111.00
1	A	6	ILE	N-CA-CB	-6.77	95.23	110.80
1	A	1023	ALA	C-N-CD	-6.07	107.25	120.60
1	A	220	SER	N-CA-C	5.96	127.09	111.00
1	A	145	VAL	CB-CA-C	-5.21	101.51	111.40
1	A	570	LEU	CA-CB-CG	5.16	127.17	115.30

All (1) chirality outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atom
1	A	5	ILE	CA

All (1) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	282	GLY	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	7784	0	8050	1486	0
2	A	1	0	0	0	0
All	All	7785	0	8050	1486	0

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 94.

All (1486) 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:370:LEU:HD21	1:A:403:MET:SD	1.40	1.59
1:A:15:LEU:HD23	1:A:16:VAL:N	1.34	1.41
1:A:409:VAL:HB	1:A:450:LEU:CD1	1.57	1.32
1:A:821:THR:HG23	1:A:823:TRP:NE1	1.46	1.31
1:A:370:LEU:CD2	1:A:403:MET:SD	2.22	1.26
1:A:362:SER:HB3	1:A:411:ILE:CD1	1.66	1.25
1:A:17:LEU:HD12	1:A:17:LEU:O	1.36	1.22
1:A:26:TRP:NE1	1:A:379:ILE:HD12	1.56	1.19
1:A:145:VAL:HG22	1:A:320:GLU:O	1.43	1.18
1:A:608:LYS:O	1:A:608:LYS:HD3	1.38	1.17
1:A:26:TRP:HE1	1:A:379:ILE:CD1	1.58	1.16
1:A:543:ALA:HA	1:A:906:PHE:HZ	1.08	1.15
1:A:145:VAL:O	1:A:319:VAL:HA	1.46	1.14
1:A:407:ALA:O	1:A:411:ILE:HG12	1.48	1.12
1:A:27:GLY:CA	1:A:375:CYS:HB3	1.79	1.12
1:A:5:ILE:HG22	1:A:6:ILE:HD12	1.21	1.12
1:A:567:GLU:HB3	1:A:665:PRO:HD3	1.26	1.11
1:A:634:GLU:HG3	1:A:635:GLN:HG2	1.13	1.10
1:A:62:GLU:HA	1:A:66:THR:HG23	1.34	1.10
1:A:496:VAL:O	1:A:500:LEU:HD21	1.50	1.10
1:A:273:ARG:HG3	1:A:273:ARG:HH21	1.03	1.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:27:GLY:HA3	1:A:375:CYS:HB3	1.35	1.09
1:A:956:PRO:HA	1:A:959:ASN:HB2	1.11	1.07
1:A:572:TYR:HE1	1:A:574:PRO:HG3	1.19	1.07
1:A:17:LEU:HD12	1:A:17:LEU:C	1.76	1.06
1:A:796:ILE:HG22	1:A:797:THR:H	1.21	1.06
1:A:412:GLU:HG2	1:A:983:PRO:HG3	1.38	1.06
1:A:362:SER:CB	1:A:411:ILE:HD11	1.84	1.06
1:A:790:THR:CB	1:A:791:PRO:HD2	1.86	1.06
1:A:409:VAL:CB	1:A:450:LEU:HD11	1.84	1.05
1:A:62:GLU:HA	1:A:66:THR:CG2	1.86	1.05
1:A:790:THR:OG1	1:A:791:PRO:HD2	1.57	1.05
1:A:821:THR:HG23	1:A:823:TRP:HE1	0.93	1.05
1:A:140:TYR:OH	1:A:323:THR:HG22	1.56	1.04
1:A:575:SER:HB2	1:A:659:ALA:CB	1.87	1.04
1:A:42:LEU:HD12	1:A:473:ARG:HD2	1.36	1.03
1:A:27:GLY:HA3	1:A:375:CYS:CB	1.89	1.02
1:A:36:VAL:O	1:A:36:VAL:HG23	1.56	1.02
1:A:409:VAL:CB	1:A:450:LEU:CD1	2.37	1.02
1:A:410:MET:SD	1:A:500:LEU:CD1	2.48	1.02
1:A:575:SER:HB2	1:A:659:ALA:HB3	1.05	1.02
1:A:956:PRO:HA	1:A:959:ASN:CB	1.90	1.01
1:A:324:THR:HG21	1:A:606:PHE:CD2	1.95	1.01
1:A:166:TYR:HD1	1:A:166:TYR:N	1.56	1.01
1:A:357:LEU:HD23	1:A:415:HIS:CE1	1.96	1.01
1:A:725:ASN:HB3	1:A:727:GLU:OE2	1.60	1.01
1:A:543:ALA:HA	1:A:906:PHE:CZ	1.96	1.00
1:A:576:THR:HG21	1:A:622:GLU:O	1.62	0.99
1:A:992:ILE:HD11	1:A:1020:MET:CB	1.92	0.99
1:A:601:GLU:OE2	1:A:645:ILE:HD11	1.61	0.99
1:A:681:ILE:HG22	1:A:682:GLY:H	1.26	0.99
1:A:83:ARG:HD2	1:A:675:THR:OG1	1.59	0.98
1:A:15:LEU:O	1:A:18:MET:HG2	1.61	0.98
1:A:707:VAL:HG22	1:A:708:PRO:HD2	1.45	0.97
1:A:162:TRP:CG	1:A:764:ALA:HB2	2.00	0.97
1:A:145:VAL:HG21	1:A:320:GLU:CG	1.93	0.97
1:A:456:ILE:HG23	1:A:883:ILE:HD11	1.47	0.97
1:A:288:VAL:HG23	1:A:289:VAL:N	1.79	0.96
1:A:575:SER:CB	1:A:659:ALA:HB3	1.95	0.95
1:A:15:LEU:CD2	1:A:16:VAL:N	2.30	0.95
1:A:144:LEU:HD12	1:A:156:LEU:HD22	1.48	0.95
1:A:375:CYS:HA	1:A:378:PHE:HE1	1.32	0.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:13:ARG:HD2	1:A:14:PHE:CD2	2.01	0.95
1:A:26:TRP:CZ2	1:A:379:ILE:HD11	2.02	0.94
1:A:109:ARG:HA	1:A:109:ARG:NE	1.83	0.94
1:A:324:THR:HG21	1:A:606:PHE:HD2	1.26	0.94
1:A:784:ARG:O	1:A:799:ALA:HB2	1.68	0.94
1:A:166:TYR:CD1	1:A:166:TYR:N	2.32	0.93
1:A:324:THR:HG21	1:A:606:PHE:HB2	1.50	0.93
1:A:821:THR:CG2	1:A:823:TRP:HE1	1.81	0.93
1:A:160:GLN:NE2	1:A:179:SER:HB3	1.82	0.93
1:A:405:ASP:O	1:A:408:ILE:HB	1.70	0.92
1:A:288:VAL:CG2	1:A:289:VAL:N	2.31	0.92
1:A:237:LEU:HD13	1:A:243:PHE:CE1	2.05	0.92
1:A:273:ARG:NH2	1:A:273:ARG:HG3	1.81	0.91
1:A:146:ASP:HA	1:A:318:GLY:O	1.71	0.91
1:A:365:VAL:O	1:A:368:ILE:HG22	1.70	0.90
1:A:357:LEU:HD23	1:A:415:HIS:ND1	1.86	0.90
1:A:42:LEU:HD23	1:A:43:SER:H	1.36	0.90
1:A:634:GLU:CG	1:A:635:GLN:HG2	2.02	0.90
1:A:15:LEU:C	1:A:15:LEU:HD23	1.91	0.90
1:A:105:TRP:HD1	1:A:106:ALA:N	1.69	0.90
1:A:26:TRP:NE1	1:A:379:ILE:CD1	2.25	0.90
1:A:5:ILE:HG22	1:A:6:ILE:CD1	2.02	0.90
1:A:572:TYR:CE1	1:A:574:PRO:HG3	2.07	0.89
1:A:181:GLY:HA2	1:A:274:GLY:O	1.71	0.89
1:A:1014:ALA:HB3	1:A:1015:PRO:HD3	1.54	0.89
1:A:139:ILE:HD11	1:A:291:LEU:HD13	1.52	0.89
1:A:362:SER:HB3	1:A:411:ILE:HD11	0.90	0.89
1:A:63:ASN:HA	1:A:67:TYR:HD2	1.38	0.89
1:A:409:VAL:CG1	1:A:450:LEU:HD12	2.03	0.88
1:A:60:ILE:HD11	1:A:64:GLN:NE2	1.88	0.88
1:A:956:PRO:CA	1:A:959:ASN:HB2	2.02	0.88
1:A:790:THR:CB	1:A:791:PRO:CD	2.50	0.88
1:A:489:ALA:HA	1:A:492:LEU:HB3	1.55	0.88
1:A:201:ILE:HG22	1:A:249:LYS:HD3	1.55	0.88
1:A:461:PHE:CG	1:A:482:LYS:HD3	2.08	0.88
1:A:736:TYR:HD1	1:A:796:ILE:HD13	1.38	0.88
1:A:567:GLU:HG2	1:A:664:PRO:HA	1.53	0.88
1:A:144:LEU:HB2	1:A:285:ALA:O	1.73	0.88
1:A:906:PHE:HB2	1:A:1026:LEU:HD13	1.55	0.87
1:A:899:LEU:HD12	1:A:945:LEU:HD23	1.55	0.87
1:A:105:TRP:CD1	1:A:106:ALA:N	2.43	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:330:LEU:HD12	1:A:330:LEU:O	1.74	0.87
1:A:524:VAL:O	1:A:528:LEU:HD21	1.75	0.87
1:A:409:VAL:HB	1:A:450:LEU:HD11	0.88	0.87
1:A:1033:ALA:O	1:A:1036:LYS:HE3	1.73	0.87
1:A:741:ALA:HA	1:A:744:GLN:OE1	1.75	0.87
1:A:201:ILE:HD12	1:A:248:LEU:HD12	1.57	0.87
1:A:827:ASP:OD2	1:A:829:ARG:HD3	1.75	0.87
1:A:992:ILE:HD11	1:A:1020:MET:HB2	1.57	0.87
1:A:1036:LYS:HG3	1:A:1037:LEU:H	1.38	0.86
1:A:730:ARG:HH11	1:A:733:ALA:HB3	1.37	0.86
1:A:118:GLN:NE2	1:A:121:LEU:HD21	1.90	0.86
1:A:362:SER:CB	1:A:411:ILE:CD1	2.48	0.86
1:A:980:ARG:NH2	1:A:1027:SER:HB3	1.91	0.86
1:A:173:ASP:O	1:A:292:ARG:HB2	1.75	0.86
1:A:27:GLY:HA2	1:A:375:CYS:HB3	1.56	0.85
1:A:184:VAL:HG21	1:A:270:GLU:OE1	1.75	0.85
1:A:893:ARG:O	1:A:896:GLU:HG2	1.76	0.85
1:A:26:TRP:HE1	1:A:379:ILE:HD12	0.74	0.85
1:A:469:GLY:HA3	1:A:864:LEU:HD11	1.58	0.85
1:A:410:MET:SD	1:A:500:LEU:HD11	2.15	0.85
1:A:912:ILE:HA	1:A:915:LEU:HD12	1.54	0.85
1:A:334:ALA:HA	1:A:1004:ALA:HB1	1.56	0.85
1:A:13:ARG:CZ	1:A:14:PHE:CE2	2.60	0.85
1:A:237:LEU:HD13	1:A:243:PHE:HE1	1.40	0.85
1:A:409:VAL:HG21	1:A:450:LEU:HG	1.57	0.85
1:A:145:VAL:HG21	1:A:320:GLU:HG3	1.60	0.84
1:A:790:THR:HG22	1:A:796:ILE:HD12	1.60	0.84
1:A:105:TRP:HD1	1:A:106:ALA:CA	1.90	0.84
1:A:160:GLN:O	1:A:164:LEU:HB2	1.77	0.84
1:A:15:LEU:HD23	1:A:16:VAL:CA	2.08	0.84
1:A:60:ILE:HD11	1:A:64:GLN:HE21	1.40	0.84
1:A:614:THR:HG23	1:A:616:THR:H	1.42	0.83
1:A:525:TYR:CE1	1:A:977:ALA:HB1	2.12	0.83
1:A:66:THR:HB	1:A:91:SER:OG	1.78	0.83
1:A:1019:GLY:O	1:A:1023:ALA:CB	2.26	0.83
1:A:345:GLU:HG2	1:A:400:VAL:HG11	1.60	0.83
1:A:24:SER:CA	1:A:372:LEU:HD13	2.09	0.83
1:A:465:PHE:CG	1:A:479:ALA:HB1	2.12	0.83
1:A:969:LEU:HD12	1:A:970:ASP:N	1.94	0.83
1:A:980:ARG:CZ	1:A:1028:LEU:HD23	2.08	0.83
1:A:272:ARG:HH11	1:A:275:ILE:HG23	1.42	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:732:LYS:HD3	1:A:800:ASP:O	1.79	0.83
1:A:162:TRP:CD1	1:A:764:ALA:HB2	2.14	0.83
1:A:851:LYS:HB3	1:A:852:PRO:CD	2.09	0.83
1:A:910:GLY:HA3	1:A:1022:THR:OG1	1.79	0.82
1:A:324:THR:CG2	1:A:606:PHE:HD2	1.91	0.82
1:A:37:ASP:HA	1:A:331:ILE:HD11	1.61	0.82
1:A:599:VAL:HG21	1:A:649:LEU:HD21	1.62	0.82
1:A:932:ALA:HB3	1:A:1016:MET:HE1	1.60	0.82
1:A:465:PHE:CD1	1:A:479:ALA:HB1	2.15	0.82
1:A:823:TRP:N	1:A:823:TRP:CD1	2.40	0.82
1:A:378:PHE:O	1:A:381:MET:HG3	1.79	0.82
1:A:814:LYS:HB3	1:A:823:TRP:CZ2	2.15	0.82
1:A:379:ILE:O	1:A:382:HIS:HB3	1.79	0.82
1:A:24:SER:HA	1:A:372:LEU:HD13	1.61	0.82
1:A:455:LEU:O	1:A:458:THR:HG22	1.80	0.82
1:A:105:TRP:C	1:A:105:TRP:CD1	2.53	0.81
1:A:27:GLY:C	1:A:375:CYS:SG	2.59	0.81
1:A:697:ALA:HB1	1:A:715:ALA:HB1	1.62	0.81
1:A:211:ASP:OD1	1:A:756:VAL:CG2	2.28	0.81
1:A:179:SER:O	1:A:613:GLU:HB3	1.80	0.81
1:A:35:PRO:O	1:A:36:VAL:HG12	1.81	0.81
1:A:746:PHE:CG	1:A:788:ILE:HD11	2.15	0.80
1:A:550:VAL:CG2	1:A:912:ILE:HG21	2.11	0.80
1:A:368:ILE:CD1	1:A:368:ILE:O	2.30	0.80
1:A:653:VAL:O	1:A:653:VAL:HG12	1.80	0.80
1:A:775:SER:O	1:A:778:ASP:HB2	1.81	0.80
1:A:788:ILE:HG22	1:A:796:ILE:HB	1.64	0.80
1:A:385:GLY:O	1:A:386:LEU:HG	1.82	0.80
1:A:27:GLY:CA	1:A:375:CYS:CB	2.55	0.80
1:A:366:ALA:HA	1:A:369:SER:OG	1.81	0.80
1:A:375:CYS:HA	1:A:378:PHE:CE1	2.17	0.80
1:A:796:ILE:HG22	1:A:797:THR:N	1.97	0.80
1:A:326:ASP:OD1	1:A:328:SER:HB3	1.81	0.80
1:A:457:ILE:HG23	1:A:935:GLY:HA3	1.63	0.80
1:A:320:GLU:C	1:A:321:ILE:HD13	2.02	0.79
1:A:580:ILE:HD11	1:A:585:ALA:HB2	1.64	0.79
1:A:790:THR:CG2	1:A:794:GLN:HG3	2.13	0.79
1:A:61:VAL:HG21	1:A:89:GLY:H	1.45	0.79
1:A:719:GLU:HA	1:A:810:PRO:HA	1.63	0.79
1:A:10:VAL:O	1:A:13:ARG:HB2	1.83	0.79
1:A:992:ILE:HD12	1:A:1017:ILE:HG23	1.64	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:407:ALA:O	1:A:411:ILE:CG1	2.30	0.79
1:A:790:THR:OG1	1:A:791:PRO:CD	2.30	0.79
1:A:458:THR:HB	1:A:486:MET:SD	2.22	0.79
1:A:463:PRO:HG2	1:A:464:ILE:HD12	1.65	0.78
1:A:482:LYS:HE2	1:A:483:THR:N	1.97	0.78
1:A:48:ILE:H	1:A:48:ILE:HD12	1.48	0.78
1:A:998:ILE:HD11	1:A:1010:SER:N	1.99	0.78
1:A:34:THR:HG23	1:A:36:VAL:CG1	2.13	0.78
1:A:145:VAL:HG21	1:A:320:GLU:HG2	1.66	0.78
1:A:35:PRO:O	1:A:36:VAL:CG1	2.31	0.78
1:A:76:VAL:HB	1:A:113:TYR:CD1	2.19	0.78
1:A:145:VAL:O	1:A:319:VAL:CA	2.28	0.78
1:A:932:ALA:HB3	1:A:1016:MET:CE	2.14	0.78
1:A:105:TRP:HD1	1:A:106:ALA:HA	1.47	0.77
1:A:790:THR:HG23	1:A:794:GLN:HG3	1.66	0.77
1:A:677:ILE:HG22	1:A:679:SER:HB2	1.67	0.77
1:A:13:ARG:NH1	1:A:14:PHE:CE2	2.53	0.77
1:A:349:VAL:HG22	1:A:990:VAL:HG11	1.67	0.77
1:A:475:PHE:CE1	1:A:478:LEU:HD13	2.20	0.77
1:A:140:TYR:OH	1:A:323:THR:CG2	2.33	0.77
1:A:539:THR:HG21	1:A:1033:ALA:CB	2.15	0.77
1:A:821:THR:CG2	1:A:823:TRP:NE1	2.39	0.77
1:A:969:LEU:HD12	1:A:970:ASP:H	1.48	0.77
1:A:609:THR:HG23	1:A:624:VAL:HA	1.64	0.77
1:A:368:ILE:O	1:A:368:ILE:HD13	1.85	0.76
1:A:35:PRO:C	1:A:36:VAL:HG13	2.06	0.76
1:A:24:SER:CB	1:A:372:LEU:HD13	2.15	0.76
1:A:567:GLU:CB	1:A:665:PRO:HD3	2.12	0.76
1:A:118:GLN:HA	1:A:118:GLN:HE21	1.51	0.76
1:A:31:ILE:HG13	1:A:378:PHE:CZ	2.20	0.76
1:A:109:ARG:HA	1:A:109:ARG:HE	1.51	0.76
1:A:221:SER:HB3	1:A:228:GLU:CG	2.16	0.76
1:A:461:PHE:CD2	1:A:482:LYS:HD3	2.21	0.76
1:A:56:GLN:HB2	1:A:61:VAL:HG22	1.66	0.76
1:A:473:ARG:O	1:A:473:ARG:HD3	1.85	0.75
1:A:536:PRO:HB3	1:A:1036:LYS:HD2	1.67	0.75
1:A:567:GLU:OE2	1:A:570:LEU:HB2	1.86	0.75
1:A:400:VAL:O	1:A:404:VAL:HG23	1.85	0.75
1:A:998:ILE:CD1	1:A:1006:SER:HB3	2.16	0.75
1:A:158:SER:HB3	1:A:766:TYR:OH	1.87	0.75
1:A:546:SER:HB2	1:A:906:PHE:CE2	2.21	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:525:TYR:HA	1:A:528:LEU:CD2	2.16	0.75
1:A:459:LEU:O	1:A:463:PRO:HD3	1.87	0.75
1:A:412:GLU:HG2	1:A:983:PRO:CG	2.15	0.75
1:A:944:MET:O	1:A:1031:ILE:HG21	1.86	0.75
1:A:790:THR:HB	1:A:791:PRO:HD2	1.68	0.75
1:A:922:LEU:HD23	1:A:923:SER:N	2.02	0.75
1:A:482:LYS:C	1:A:482:LYS:HE2	2.08	0.74
1:A:536:PRO:O	1:A:1036:LYS:HE2	1.87	0.74
1:A:536:PRO:C	1:A:1036:LYS:HE2	2.07	0.74
1:A:759:THR:HG23	1:A:766:TYR:O	1.87	0.74
1:A:570:LEU:HD12	1:A:571:LEU:N	2.02	0.74
1:A:633:GLN:OE1	1:A:633:GLN:HA	1.85	0.74
1:A:812:MET:O	1:A:813:LEU:HD13	1.86	0.74
1:A:977:ALA:O	1:A:980:ARG:HG3	1.87	0.74
1:A:915:LEU:HD21	1:A:1014:ALA:HB1	1.69	0.74
1:A:610:GLY:HA2	1:A:620:PRO:O	1.85	0.74
1:A:884:PHE:HA	1:A:887:LEU:HB2	1.69	0.74
1:A:1008:VAL:O	1:A:1012:ILE:HG23	1.87	0.74
1:A:465:PHE:C	1:A:465:PHE:CD1	2.59	0.74
1:A:356:PHE:CD2	1:A:986:MET:HB3	2.23	0.74
1:A:324:THR:HG21	1:A:606:PHE:CB	2.17	0.74
1:A:62:GLU:CA	1:A:66:THR:HG23	2.14	0.74
1:A:553:PRO:HB2	1:A:912:ILE:CD1	2.18	0.74
1:A:189:VAL:HG22	1:A:265:VAL:HG23	1.68	0.74
1:A:951:ALA:HA	1:A:953:GLU:HG2	1.70	0.74
1:A:39:LEU:HG	1:A:666:ILE:HG21	1.68	0.74
1:A:574:PRO:CD	1:A:624:VAL:HG13	2.17	0.74
1:A:760:VAL:HG23	1:A:765:ARG:HB3	1.69	0.74
1:A:907:ALA:O	1:A:1019:GLY:HA2	1.86	0.74
1:A:26:TRP:CE2	1:A:379:ILE:HD11	2.23	0.74
1:A:63:ASN:HA	1:A:67:TYR:CD2	2.23	0.74
1:A:980:ARG:HH21	1:A:1027:SER:HB3	1.53	0.74
1:A:221:SER:CB	1:A:228:GLU:OE2	2.36	0.73
1:A:574:PRO:HD3	1:A:624:VAL:HG13	1.68	0.73
1:A:61:VAL:O	1:A:66:THR:HG22	1.88	0.73
1:A:884:PHE:C	1:A:886:LEU:H	1.91	0.73
1:A:905:PRO:O	1:A:909:VAL:HG23	1.87	0.73
1:A:571:LEU:HD23	1:A:665:PRO:HA	1.68	0.73
1:A:899:LEU:HD21	1:A:1030:ILE:HB	1.70	0.73
1:A:279:ASN:ND2	1:A:597:MET:HG2	2.04	0.73
1:A:160:GLN:HE21	1:A:179:SER:CB	2.01	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:160:GLN:NE2	1:A:179:SER:CB	2.50	0.73
1:A:790:THR:HG22	1:A:796:ILE:CD1	2.18	0.73
1:A:409:VAL:CG1	1:A:450:LEU:CD1	2.65	0.73
1:A:797:THR:O	1:A:800:ASP:HB2	1.89	0.73
1:A:27:GLY:C	1:A:375:CYS:HG	1.90	0.73
1:A:145:VAL:CG2	1:A:320:GLU:HG2	2.19	0.73
1:A:177:VAL:HG12	1:A:177:VAL:O	1.87	0.73
1:A:567:GLU:HB3	1:A:665:PRO:CD	2.14	0.73
1:A:959:ASN:CG	1:A:961:PRO:HG3	2.08	0.73
1:A:15:LEU:HD23	1:A:16:VAL:H	1.51	0.73
1:A:277:GLU:HG2	1:A:278:LEU:N	2.03	0.73
1:A:1019:GLY:O	1:A:1023:ALA:HB2	1.89	0.72
1:A:363:ALA:O	1:A:367:ILE:HG22	1.89	0.72
1:A:404:VAL:O	1:A:408:ILE:HG12	1.88	0.72
1:A:492:LEU:O	1:A:496:VAL:N	2.23	0.72
1:A:590:GLN:HG3	1:A:594:LYS:HE2	1.71	0.72
1:A:187:TYR:CD2	1:A:759:THR:HG21	2.24	0.72
1:A:922:LEU:HA	1:A:926:THR:HG21	1.71	0.72
1:A:933:LEU:HD12	1:A:1016:MET:HA	1.71	0.72
1:A:35:PRO:C	1:A:36:VAL:CG1	2.58	0.72
1:A:465:PHE:C	1:A:465:PHE:HD1	1.92	0.72
1:A:435:ARG:O	1:A:439:ILE:HG12	1.89	0.72
1:A:608:LYS:O	1:A:608:LYS:CD	2.30	0.72
1:A:65:VAL:O	1:A:68:PRO:HD2	1.89	0.72
1:A:1030:ILE:HG13	1:A:1031:ILE:N	2.03	0.72
1:A:283:GLU:O	1:A:283:GLU:HG3	1.89	0.72
1:A:468:GLU:O	1:A:469:GLY:O	2.06	0.72
1:A:552:TRP:HZ3	1:A:916:TRP:CG	2.07	0.72
1:A:984:LYS:HA	1:A:987:THR:HG22	1.71	0.72
1:A:42:LEU:CD2	1:A:43:SER:H	2.02	0.72
1:A:237:LEU:HD22	1:A:243:PHE:CD1	2.25	0.71
1:A:831:ARG:HD3	1:A:832:ASP:H	1.54	0.71
1:A:97:PHE:CE1	1:A:106:ALA:HB1	2.25	0.71
1:A:589:LEU:HD21	1:A:607:GLY:O	1.90	0.71
1:A:5:ILE:CG2	1:A:6:ILE:HD12	2.11	0.71
1:A:325:TYR:HE1	1:A:665:PRO:HB3	1.55	0.71
1:A:553:PRO:HB2	1:A:912:ILE:HD11	1.73	0.71
1:A:19:GLY:O	1:A:23:LEU:HD23	1.90	0.71
1:A:746:PHE:CB	1:A:788:ILE:HD11	2.20	0.71
1:A:354:ALA:HA	1:A:360:VAL:HG13	1.71	0.71
1:A:392:SER:HA	1:A:481:THR:OG1	1.90	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:57:ALA:O	1:A:61:VAL:N	2.22	0.71
1:A:70:THR:OG1	1:A:818:ALA:HA	1.91	0.71
1:A:221:SER:HB2	1:A:228:GLU:OE2	1.91	0.71
1:A:26:TRP:CE2	1:A:379:ILE:CD1	2.73	0.71
1:A:968:LYS:HA	1:A:971:GLU:HG2	1.72	0.71
1:A:414:ALA:O	1:A:418:LEU:HB2	1.91	0.71
1:A:484:TYR:HD1	1:A:484:TYR:N	1.89	0.71
1:A:162:TRP:CG	1:A:764:ALA:CB	2.74	0.71
1:A:390:ILE:HD13	1:A:1008:VAL:HG11	1.73	0.70
1:A:915:LEU:HD11	1:A:1015:PRO:HG3	1.71	0.70
1:A:27:GLY:HA3	1:A:375:CYS:SG	2.31	0.70
1:A:687:GLY:HA3	1:A:854:THR:HG22	1.73	0.70
1:A:435:ARG:HD2	1:A:435:ARG:H	1.55	0.70
1:A:143:ALA:HB2	1:A:606:PHE:CE2	2.25	0.70
1:A:469:GLY:CA	1:A:864:LEU:HD21	2.21	0.70
1:A:142:TYR:HE1	1:A:287:GLY:H	1.38	0.70
1:A:781:GLN:OE1	1:A:784:ARG:HD2	1.92	0.70
1:A:903:SER:HA	1:A:1026:LEU:HD11	1.74	0.70
1:A:1033:ALA:O	1:A:1036:LYS:CE	2.39	0.70
1:A:145:VAL:CG2	1:A:320:GLU:O	2.33	0.70
1:A:551:LEU:HA	1:A:554:LEU:HB2	1.72	0.70
1:A:145:VAL:HG22	1:A:320:GLU:C	2.12	0.70
1:A:876:VAL:O	1:A:879:THR:HG22	1.90	0.70
1:A:992:ILE:HD11	1:A:1020:MET:HB3	1.72	0.70
1:A:1026:LEU:O	1:A:1026:LEU:HG	1.91	0.70
1:A:105:TRP:CD1	1:A:106:ALA:HA	2.26	0.70
1:A:263:ALA:C	1:A:264:LYS:HD2	2.12	0.69
1:A:13:ARG:CZ	1:A:14:PHE:CZ	2.75	0.69
1:A:26:TRP:CZ2	1:A:379:ILE:CD1	2.74	0.69
1:A:790:THR:HG21	1:A:796:ILE:HD11	1.75	0.69
1:A:821:THR:HG23	1:A:823:TRP:CD1	2.27	0.69
1:A:96:ILE:HD13	1:A:96:ILE:H	1.57	0.69
1:A:392:SER:O	1:A:481:THR:HG21	1.91	0.69
1:A:1002:THR:HB	1:A:1006:SER:HB2	1.74	0.69
1:A:140:TYR:HH	1:A:323:THR:HG22	1.54	0.69
1:A:26:TRP:HZ2	1:A:379:ILE:HD11	1.55	0.69
1:A:277:GLU:HG2	1:A:278:LEU:H	1.57	0.69
1:A:38:ALA:HA	1:A:389:ASN:CB	2.23	0.69
1:A:462:ILE:HA	1:A:465:PHE:CD2	2.28	0.69
1:A:221:SER:HA	1:A:229:TYR:O	1.91	0.69
1:A:324:THR:CG2	1:A:606:PHE:HB2	2.22	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:710:VAL:HG22	1:A:828:ALA:HA	1.73	0.69
1:A:530:LEU:HD12	1:A:530:LEU:O	1.92	0.69
1:A:1036:LYS:HG3	1:A:1037:LEU:N	2.07	0.68
1:A:36:VAL:O	1:A:36:VAL:CG2	2.30	0.68
1:A:484:TYR:CD1	1:A:484:TYR:N	2.61	0.68
1:A:790:THR:CG2	1:A:796:ILE:HD11	2.23	0.68
1:A:410:MET:SD	1:A:500:LEU:HD12	2.32	0.68
1:A:580:ILE:HD13	1:A:584:GLU:HG2	1.74	0.68
1:A:945:LEU:O	1:A:945:LEU:HD13	1.94	0.68
1:A:903:SER:OG	1:A:1026:LEU:HD21	1.92	0.68
1:A:160:GLN:HE21	1:A:179:SER:HB3	1.57	0.68
1:A:138:TRP:CZ3	1:A:288:VAL:HG11	2.29	0.68
1:A:896:GLU:HG3	1:A:897:ALA:N	2.07	0.68
1:A:35:PRO:HA	1:A:296:ASN:HB3	1.75	0.68
1:A:668:ASN:O	1:A:672:MET:HB2	1.93	0.68
1:A:851:LYS:HB3	1:A:852:PRO:HD3	1.76	0.68
1:A:528:LEU:HD22	1:A:528:LEU:H	1.58	0.68
1:A:589:LEU:HD22	1:A:609:THR:OG1	1.94	0.68
1:A:988:VAL:HG11	1:A:1024:PRO:HG2	1.76	0.68
1:A:276:ALA:HB3	1:A:284:VAL:O	1.94	0.68
1:A:56:GLN:HB2	1:A:61:VAL:CG2	2.24	0.68
1:A:812:MET:HG3	1:A:813:LEU:N	2.08	0.68
1:A:1028:LEU:HB2	1:A:1029:PHE:CE2	2.29	0.68
1:A:288:VAL:HG23	1:A:289:VAL:H	1.57	0.68
1:A:386:LEU:HD21	1:A:480:PHE:CD2	2.29	0.68
1:A:518:ASN:O	1:A:522:ILE:HG13	1.94	0.68
1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:PRO:HD2	1.76	0.67
1:A:334:ALA:HA	1:A:1004:ALA:CB	2.24	0.67
1:A:500:LEU:HD23	1:A:500:LEU:N	2.09	0.67
1:A:965:SER:O	1:A:966:GLU:HB2	1.94	0.67
1:A:279:ASN:HD22	1:A:597:MET:HG2	1.59	0.67
1:A:380:VAL:HG13	1:A:484:TYR:CD2	2.29	0.67
1:A:611:LYS:HG3	1:A:617:ASP:O	1.95	0.67
1:A:1002:THR:CB	1:A:1006:SER:HB2	2.25	0.67
1:A:27:GLY:CA	1:A:375:CYS:SG	2.83	0.67
1:A:420:GLU:HB2	1:A:421:TRP:CE3	2.29	0.67
1:A:72:THR:HG22	1:A:113:TYR:HB3	1.76	0.67
1:A:380:VAL:HG13	1:A:484:TYR:HD2	1.59	0.67
1:A:681:ILE:HG22	1:A:682:GLY:N	2.07	0.67
1:A:606:PHE:O	1:A:626:THR:HA	1.95	0.67
1:A:790:THR:HG21	1:A:794:GLN:HE21	1.60	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:796:ILE:CG2	1:A:797:THR:H	2.03	0.67
1:A:341:LYS:HD3	1:A:342:LEU:HD23	1.77	0.66
1:A:969:LEU:O	1:A:973:LEU:HD13	1.96	0.66
1:A:157:ARG:HH12	1:A:273:ARG:HH12	1.44	0.66
1:A:370:LEU:HD22	1:A:403:MET:SD	2.34	0.66
1:A:790:THR:CG2	1:A:796:ILE:CD1	2.73	0.66
1:A:247:VAL:C	1:A:248:LEU:HD23	2.15	0.66
1:A:573:MET:O	1:A:661:LEU:HB2	1.95	0.66
1:A:686:SER:HB3	1:A:819:ARG:HE	1.60	0.66
1:A:265:VAL:HG12	1:A:265:VAL:O	1.95	0.66
1:A:346:PHE:C	1:A:346:PHE:CD1	2.68	0.66
1:A:386:LEU:HD11	1:A:480:PHE:HD2	1.59	0.66
1:A:575:SER:N	1:A:659:ALA:O	2.23	0.66
1:A:718:LEU:O	1:A:720:GLY:N	2.28	0.66
1:A:550:VAL:O	1:A:553:PRO:HD2	1.95	0.66
1:A:1036:LYS:HZ2	1:A:1037:LEU:HD23	1.59	0.66
1:A:80:LYS:HB3	1:A:96:ILE:O	1.96	0.66
1:A:291:LEU:CD1	1:A:300:VAL:HG21	2.26	0.65
1:A:357:LEU:CD2	1:A:415:HIS:ND1	2.60	0.65
1:A:221:SER:HB3	1:A:228:GLU:CD	2.17	0.65
1:A:356:PHE:CG	1:A:986:MET:HB3	2.31	0.65
1:A:368:ILE:CD1	1:A:368:ILE:C	2.65	0.65
1:A:669:ARG:HA	1:A:669:ARG:HE	1.60	0.65
1:A:76:VAL:HB	1:A:113:TYR:HD1	1.59	0.65
1:A:580:ILE:CD1	1:A:584:GLU:HG2	2.26	0.65
1:A:880:LEU:O	1:A:883:ILE:HG22	1.95	0.65
1:A:904:VAL:HG13	1:A:905:PRO:HD3	1.78	0.65
1:A:980:ARG:HH12	1:A:1028:LEU:HA	1.60	0.65
1:A:753:GLY:HA2	1:A:771:ARG:HB3	1.77	0.65
1:A:816:GLU:O	1:A:817:ASN:HB2	1.96	0.65
1:A:1030:ILE:HG13	1:A:1031:ILE:H	1.62	0.65
1:A:325:TYR:HD2	1:A:325:TYR:O	1.78	0.65
1:A:37:ASP:CA	1:A:331:ILE:HD11	2.26	0.65
1:A:741:ALA:O	1:A:744:GLN:HB2	1.97	0.65
1:A:911:GLY:HA2	1:A:1018:GLY:HA3	1.79	0.65
1:A:700:ILE:HD11	1:A:844:ILE:HD11	1.79	0.65
1:A:291:LEU:HD21	1:A:295:LYS:O	1.97	0.65
1:A:736:TYR:CD1	1:A:796:ILE:HD13	2.25	0.65
1:A:416:LYS:O	1:A:420:GLU:HG3	1.97	0.65
1:A:497:ILE:CG1	1:A:498:PRO:HD3	2.26	0.65
1:A:86:SER:O	1:A:813:LEU:HD23	1.97	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:348:VAL:HG11	1:A:993:ALA:HB1	1.79	0.64
1:A:53:TYR:HD2	1:A:65:VAL:HG11	1.62	0.64
1:A:50:LYS:HD2	1:A:92:TYR:CE2	2.32	0.64
1:A:345:GLU:OE1	1:A:345:GLU:HA	1.97	0.64
1:A:899:LEU:O	1:A:899:LEU:HD22	1.97	0.64
1:A:917:TRP:CE3	1:A:918:MET:HG2	2.32	0.64
1:A:13:ARG:NH1	1:A:14:PHE:HE2	1.92	0.64
1:A:930:PHE:HD1	1:A:1015:PRO:HB2	1.63	0.64
1:A:526:HIS:N	1:A:527:PRO:HD2	2.13	0.64
1:A:337:ASN:HD22	1:A:1004:ALA:HB3	1.63	0.64
1:A:102:ASP:O	1:A:105:TRP:HB3	1.96	0.64
1:A:16:VAL:O	1:A:20:ALA:N	2.30	0.64
1:A:188:GLN:HG2	1:A:769:ASN:HB3	1.79	0.64
1:A:550:VAL:HG23	1:A:912:ILE:HG21	1.78	0.64
1:A:1031:ILE:O	1:A:1035:TYR:HB2	1.98	0.64
1:A:57:ALA:HB3	1:A:60:ILE:HG22	1.80	0.64
1:A:88:PHE:CD2	1:A:88:PHE:C	2.71	0.64
1:A:998:ILE:HD13	1:A:1009:MET:HB2	1.80	0.64
1:A:660:ASN:OD1	1:A:660:ASN:N	2.30	0.64
1:A:921:HIS:NE2	1:A:1011:ARG:HD3	2.12	0.64
1:A:922:LEU:HG	1:A:926:THR:OG1	1.98	0.64
1:A:936:VAL:HG11	1:A:1020:MET:HE2	1.80	0.64
1:A:190:VAL:HG12	1:A:264:LYS:O	1.98	0.64
1:A:552:TRP:HZ3	1:A:916:TRP:CD2	2.16	0.64
1:A:48:ILE:HD13	1:A:131:PRO:HD3	1.79	0.64
1:A:142:TYR:C	1:A:142:TYR:CD1	2.71	0.64
1:A:13:ARG:HD2	1:A:14:PHE:CE2	2.33	0.63
1:A:291:LEU:HD11	1:A:300:VAL:HG21	1.80	0.63
1:A:333:ARG:O	1:A:1004:ALA:HB2	1.98	0.63
1:A:354:ALA:HA	1:A:360:VAL:CG1	2.28	0.63
1:A:591:LYS:O	1:A:595:LEU:HD23	1.98	0.63
1:A:910:GLY:HA3	1:A:1022:THR:CB	2.27	0.63
1:A:599:VAL:HG21	1:A:649:LEU:CD2	2.27	0.63
1:A:469:GLY:HA3	1:A:864:LEU:HD21	1.80	0.63
1:A:550:VAL:HB	1:A:909:VAL:HG22	1.80	0.63
1:A:939:GLU:O	1:A:943:VAL:HG12	1.97	0.63
1:A:1029:PHE:O	1:A:1033:ALA:HB3	1.98	0.63
1:A:96:ILE:HD13	1:A:96:ILE:N	2.13	0.63
1:A:12:ASN:O	1:A:15:LEU:HB3	1.99	0.63
1:A:398:ILE:HG13	1:A:399:ALA:N	2.14	0.63
1:A:933:LEU:HD23	1:A:934:ALA:N	2.14	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1020:MET:O	1:A:1024:PRO:HD2	1.99	0.63
1:A:103:PRO:HA	1:A:106:ALA:HB3	1.81	0.63
1:A:39:LEU:CG	1:A:666:ILE:HG21	2.28	0.63
1:A:804:ILE:HG13	1:A:804:ILE:O	1.97	0.63
1:A:217:ALA:H	1:A:233:ALA:HB3	1.63	0.63
1:A:247:VAL:O	1:A:248:LEU:HD23	1.99	0.63
1:A:393:LEU:HA	1:A:396:ILE:HG23	1.79	0.63
1:A:539:THR:O	1:A:543:ALA:HB2	1.98	0.63
1:A:784:ARG:O	1:A:799:ALA:CB	2.44	0.63
1:A:987:THR:O	1:A:991:ILE:HD13	1.99	0.63
1:A:38:ALA:HB2	1:A:390:ILE:HG23	1.80	0.63
1:A:903:SER:HB2	1:A:1030:ILE:HD13	1.80	0.63
1:A:623:MET:HE2	1:A:623:MET:HA	1.81	0.62
1:A:83:ARG:NH1	1:A:816:GLU:OE1	2.31	0.62
1:A:595:LEU:H	1:A:595:LEU:HD23	1.64	0.62
1:A:961:PRO:O	1:A:962:GLN:HB2	1.99	0.62
1:A:368:ILE:HD12	1:A:368:ILE:O	1.99	0.62
1:A:399:ALA:HB2	1:A:485:ALA:HB1	1.80	0.62
1:A:163:PHE:O	1:A:167:GLU:HG2	1.99	0.62
1:A:681:ILE:CG2	1:A:682:GLY:H	2.07	0.62
1:A:736:TYR:HE1	1:A:796:ILE:CG2	2.12	0.62
1:A:180:VAL:HG12	1:A:286:GLY:O	1.98	0.62
1:A:979:LEU:HD12	1:A:980:ARG:N	2.15	0.62
1:A:142:TYR:HD1	1:A:142:TYR:C	2.03	0.62
1:A:159:LEU:HD12	1:A:163:PHE:HB3	1.81	0.62
1:A:160:GLN:HE22	1:A:179:SER:HB3	1.59	0.62
1:A:411:ILE:O	1:A:415:HIS:CE1	2.51	0.62
1:A:224:LEU:HG	1:A:225:ALA:H	1.65	0.62
1:A:201:ILE:HD11	1:A:262:VAL:HG21	1.82	0.62
1:A:411:ILE:O	1:A:415:HIS:NE2	2.33	0.62
1:A:66:THR:HG21	1:A:86:SER:HB2	1.82	0.62
1:A:887:LEU:HD21	1:A:900:ILE:HD12	1.82	0.62
1:A:221:SER:CB	1:A:228:GLU:CD	2.68	0.62
1:A:453:SER:HB2	1:A:939:GLU:HG2	1.82	0.62
1:A:936:VAL:HG13	1:A:1020:MET:HE1	1.82	0.62
1:A:975:HIS:CD2	1:A:976:GLY:H	2.18	0.62
1:A:980:ARG:O	1:A:984:LYS:HB2	2.00	0.62
1:A:123:ALA:O	1:A:125:VAL:HG23	2.00	0.62
1:A:225:ALA:O	1:A:227:ALA:N	2.33	0.62
1:A:522:ILE:HG22	1:A:526:HIS:CE1	2.35	0.62
1:A:561:PHE:O	1:A:563:PRO:HD3	2.00	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:697:ALA:HB1	1:A:715:ALA:CB	2.29	0.62
1:A:324:THR:CB	1:A:606:PHE:HD2	2.13	0.62
1:A:565:ILE:HG22	1:A:566:ASN:N	2.13	0.62
1:A:682:GLY:HA2	1:A:824:ILE:O	2.00	0.62
1:A:211:ASP:OD1	1:A:756:VAL:HG21	1.99	0.62
1:A:433:LYS:HD3	1:A:435:ARG:HD2	1.82	0.61
1:A:635:GLN:HG3	1:A:636:TRP:CZ3	2.35	0.61
1:A:730:ARG:HA	1:A:730:ARG:HE	1.64	0.61
1:A:24:SER:CB	1:A:372:LEU:CD1	2.78	0.61
1:A:999:LEU:HD23	1:A:1010:SER:HB2	1.82	0.61
1:A:1019:GLY:O	1:A:1023:ALA:N	2.34	0.61
1:A:31:ILE:HG23	1:A:32:ILE:N	2.14	0.61
1:A:520:PHE:O	1:A:524:VAL:HG23	2.00	0.61
1:A:595:LEU:HD12	1:A:652:THR:O	2.01	0.61
1:A:463:PRO:HG3	1:A:879:THR:CB	2.30	0.61
1:A:910:GLY:CA	1:A:1022:THR:OG1	2.49	0.61
1:A:386:LEU:HD11	1:A:480:PHE:HB3	1.82	0.61
1:A:38:ALA:HA	1:A:389:ASN:HB2	1.83	0.61
1:A:790:THR:CG2	1:A:794:GLN:CG	2.77	0.61
1:A:984:LYS:HA	1:A:987:THR:CG2	2.30	0.61
1:A:332:ASP:HA	1:A:335:ILE:HG22	1.82	0.61
1:A:550:VAL:HG23	1:A:912:ILE:CG2	2.30	0.61
1:A:827:ASP:OD1	1:A:828:ALA:N	2.34	0.61
1:A:17:LEU:CD1	1:A:17:LEU:O	2.30	0.61
1:A:685:VAL:HG22	1:A:693:ILE:HG23	1.83	0.61
1:A:409:VAL:CG2	1:A:450:LEU:HG	2.28	0.61
1:A:643:ASP:HA	1:A:646:ILE:HG22	1.83	0.61
1:A:730:ARG:NH1	1:A:733:ALA:HB3	2.14	0.61
1:A:911:GLY:HA2	1:A:1018:GLY:CA	2.31	0.61
1:A:751:VAL:HG12	1:A:752:GLY:N	2.15	0.61
1:A:718:LEU:HD11	1:A:814:LYS:HE2	1.82	0.61
1:A:159:LEU:HD12	1:A:159:LEU:O	2.01	0.61
1:A:784:ARG:HG3	1:A:804:ILE:HG12	1.83	0.61
1:A:680:PRO:HG2	1:A:827:ASP:CG	2.22	0.61
1:A:905:PRO:HA	1:A:908:LEU:HD12	1.81	0.61
1:A:990:VAL:HA	1:A:993:ALA:HB3	1.83	0.61
1:A:13:ARG:CD	1:A:14:PHE:CD2	2.81	0.60
1:A:613:GLU:O	1:A:613:GLU:HG3	2.01	0.60
1:A:951:ALA:C	1:A:953:GLU:H	2.04	0.60
1:A:412:GLU:CG	1:A:983:PRO:HG3	2.24	0.60
1:A:591:LYS:HA	1:A:594:LYS:HE3	1.83	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:790:THR:HG23	1:A:794:GLN:CG	2.32	0.60
1:A:53:TYR:O	1:A:54:PRO:C	2.40	0.60
1:A:672:MET:O	1:A:673:LEU:HD23	2.01	0.60
1:A:83:ARG:HG3	1:A:83:ARG:O	1.99	0.60
1:A:922:LEU:HA	1:A:926:THR:CG2	2.31	0.60
1:A:346:PHE:HD1	1:A:347:ILE:N	1.99	0.60
1:A:384:GLN:O	1:A:385:GLY:O	2.20	0.60
1:A:70:THR:O	1:A:82:VAL:HG11	2.01	0.60
1:A:736:TYR:HD1	1:A:796:ILE:CD1	2.11	0.60
1:A:521:LEU:HD21	1:A:981:VAL:HG11	1.83	0.60
1:A:105:TRP:NE1	1:A:109:ARG:HG3	2.16	0.60
1:A:324:THR:HG21	1:A:606:PHE:CG	2.35	0.60
1:A:393:LEU:N	1:A:393:LEU:HD23	2.16	0.60
1:A:552:TRP:CZ3	1:A:916:TRP:CD2	2.89	0.60
1:A:915:LEU:CD2	1:A:1014:ALA:HB1	2.31	0.60
1:A:604:ARG:HD2	1:A:629:GLN:OE1	2.02	0.60
1:A:243:PHE:O	1:A:246:ILE:HG13	2.01	0.60
1:A:899:LEU:CD2	1:A:1030:ILE:HB	2.31	0.60
1:A:105:TRP:CD1	1:A:106:ALA:CA	2.80	0.60
1:A:386:LEU:HD11	1:A:480:PHE:CD2	2.37	0.60
1:A:561:PHE:CD2	1:A:561:PHE:N	2.67	0.60
1:A:761:GLU:O	1:A:762:GLY:O	2.18	0.60
1:A:903:SER:CB	1:A:1030:ILE:HD13	2.32	0.60
1:A:17:LEU:CD1	1:A:17:LEU:C	2.49	0.60
1:A:909:VAL:O	1:A:913:TRP:HD1	1.85	0.60
1:A:949:ARG:CZ	1:A:949:ARG:HA	2.32	0.60
1:A:168:LEU:O	1:A:170:THR:N	2.35	0.59
1:A:246:ILE:HD12	1:A:259:LEU:HD12	1.83	0.59
1:A:321:ILE:HD13	1:A:321:ILE:N	2.16	0.59
1:A:409:VAL:HG11	1:A:450:LEU:HD12	1.84	0.59
1:A:334:ALA:CA	1:A:1004:ALA:HB1	2.28	0.59
1:A:465:PHE:CD1	1:A:466:THR:N	2.70	0.59
1:A:812:MET:C	1:A:813:LEU:HD22	2.22	0.59
1:A:899:LEU:HG	1:A:1034:ALA:HB3	1.85	0.59
1:A:175:ALA:HB2	1:A:292:ARG:HG2	1.84	0.59
1:A:677:ILE:HG23	1:A:825:TYR:CD1	2.37	0.59
1:A:929:GLY:HA3	1:A:1012:ILE:O	2.02	0.59
1:A:462:ILE:HG23	1:A:465:PHE:CE2	2.38	0.59
1:A:685:VAL:HG22	1:A:693:ILE:HD12	1.84	0.59
1:A:376:ILE:HG12	1:A:377:ALA:N	2.18	0.59
1:A:410:MET:O	1:A:410:MET:CE	2.50	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:947:TYR:O	1:A:948:LEU:HD12	2.03	0.59
1:A:162:TRP:CD2	1:A:764:ALA:HB1	2.38	0.59
1:A:436:TRP:HE1	1:A:501:MET:CG	2.16	0.59
1:A:762:GLY:O	1:A:764:ALA:N	2.30	0.59
1:A:814:LYS:HB3	1:A:823:TRP:CH2	2.38	0.59
1:A:278:LEU:O	1:A:279:ASN:HB2	2.03	0.59
1:A:653:VAL:O	1:A:653:VAL:CG1	2.50	0.59
1:A:724:ILE:HD11	1:A:780:PRO:HG3	1.84	0.59
1:A:728:ILE:HA	1:A:802:ALA:HB2	1.84	0.59
1:A:906:PHE:CB	1:A:1026:LEU:HD13	2.31	0.58
1:A:163:PHE:CD2	1:A:163:PHE:O	2.56	0.58
1:A:373:GLY:O	1:A:376:ILE:HG23	2.03	0.58
1:A:545:LEU:HD23	1:A:546:SER:OG	2.02	0.58
1:A:571:LEU:CD2	1:A:665:PRO:HA	2.32	0.58
1:A:930:PHE:CD1	1:A:1015:PRO:HB2	2.38	0.58
1:A:1023:ALA:HB3	1:A:1024:PRO:HD2	1.84	0.58
1:A:500:LEU:H	1:A:500:LEU:CD2	2.15	0.58
1:A:523:ARG:C	1:A:523:ARG:HD2	2.23	0.58
1:A:891:PHE:O	1:A:892:ARG:HB3	2.03	0.58
1:A:109:ARG:CA	1:A:109:ARG:NE	2.63	0.58
1:A:897:ALA:O	1:A:900:ILE:HG23	2.03	0.58
1:A:214:ASN:CG	1:A:214:ASN:O	2.41	0.58
1:A:59:GLN:O	1:A:63:ASN:OD1	2.20	0.58
1:A:917:TRP:HE3	1:A:918:MET:CG	2.17	0.58
1:A:396:ILE:O	1:A:399:ALA:HB3	2.04	0.58
1:A:83:ARG:NH1	1:A:823:TRP:CH2	2.71	0.58
1:A:900:ILE:O	1:A:904:VAL:HG12	2.04	0.58
1:A:162:TRP:CD1	1:A:764:ALA:CB	2.84	0.58
1:A:319:VAL:O	1:A:319:VAL:HG23	2.03	0.58
1:A:620:PRO:HD2	1:A:623:MET:HB2	1.84	0.58
1:A:453:SER:CB	1:A:939:GLU:HG2	2.32	0.58
1:A:220:SER:OG	1:A:221:SER:N	2.37	0.58
1:A:526:HIS:HD2	1:A:529:LEU:HD21	1.69	0.58
1:A:736:TYR:HE1	1:A:796:ILE:HG21	1.68	0.58
1:A:806:VAL:HG12	1:A:807:SER:N	2.18	0.58
1:A:841:GLN:HG3	1:A:842:LYS:N	2.19	0.58
1:A:899:LEU:CD1	1:A:1031:ILE:HD13	2.33	0.58
1:A:436:TRP:HE1	1:A:501:MET:HG3	1.68	0.58
1:A:707:VAL:CG2	1:A:708:PRO:HD2	2.28	0.58
1:A:529:LEU:CD2	1:A:974:TYR:HB3	2.34	0.58
1:A:399:ALA:CB	1:A:485:ALA:HB1	2.34	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:467:LEU:HD21	1:A:872:LEU:HD23	1.85	0.57
1:A:365:VAL:HG11	1:A:499:ILE:HG22	1.87	0.57
1:A:179:SER:O	1:A:613:GLU:CB	2.51	0.57
1:A:998:ILE:O	1:A:998:ILE:HD12	2.04	0.57
1:A:464:ILE:O	1:A:467:LEU:HD11	2.03	0.57
1:A:42:LEU:CD1	1:A:473:ARG:HD2	2.23	0.57
1:A:550:VAL:HA	1:A:913:TRP:NE1	2.20	0.57
1:A:279:ASN:ND2	1:A:597:MET:CG	2.66	0.57
1:A:683:ILE:O	1:A:683:ILE:HG13	2.03	0.57
1:A:967:GLN:HG2	1:A:967:GLN:O	2.04	0.57
1:A:145:VAL:HG23	1:A:320:GLU:N	2.19	0.57
1:A:631:LYS:HD2	1:A:636:TRP:CZ3	2.39	0.57
1:A:463:PRO:HG3	1:A:879:THR:OG1	2.04	0.57
1:A:273:ARG:NH2	1:A:273:ARG:CG	2.61	0.57
1:A:497:ILE:O	1:A:500:LEU:HG	2.05	0.57
1:A:667:ARG:HB2	1:A:667:ARG:CZ	2.33	0.57
1:A:936:VAL:CG1	1:A:1020:MET:HE1	2.35	0.57
1:A:201:ILE:HD12	1:A:248:LEU:CD1	2.32	0.57
1:A:265:VAL:CG1	1:A:265:VAL:O	2.53	0.57
1:A:464:ILE:N	1:A:464:ILE:HD12	2.19	0.57
1:A:527:PRO:O	1:A:531:LYS:HE2	2.05	0.57
1:A:912:ILE:O	1:A:915:LEU:HB2	2.04	0.57
1:A:37:ASP:HA	1:A:331:ILE:CD1	2.32	0.57
1:A:669:ARG:HA	1:A:669:ARG:NE	2.19	0.57
1:A:730:ARG:HE	1:A:730:ARG:CA	2.17	0.57
1:A:409:VAL:HB	1:A:450:LEU:CG	2.32	0.57
1:A:536:PRO:CA	1:A:1036:LYS:HE2	2.35	0.57
1:A:56:GLN:HE21	1:A:56:GLN:HA	1.69	0.57
1:A:57:ALA:O	1:A:60:ILE:N	2.36	0.57
1:A:697:ALA:CB	1:A:715:ALA:HB1	2.33	0.57
1:A:992:ILE:HG22	1:A:992:ILE:O	2.03	0.57
1:A:109:ARG:NE	1:A:112:GLU:OE2	2.35	0.57
1:A:622:GLU:CD	1:A:622:GLU:H	2.08	0.57
1:A:569:ASP:OD2	1:A:629:GLN:HA	2.05	0.57
1:A:486:MET:HA	1:A:486:MET:HE3	1.86	0.57
1:A:521:LEU:C	1:A:521:LEU:HD23	2.25	0.57
1:A:83:ARG:NH1	1:A:83:ARG:HB2	2.20	0.57
1:A:132:ASP:OD1	1:A:132:ASP:O	2.23	0.57
1:A:189:VAL:HG22	1:A:265:VAL:CG2	2.35	0.57
1:A:145:VAL:CG2	1:A:320:GLU:CG	2.73	0.57
1:A:145:VAL:HG11	1:A:322:VAL:CG1	2.35	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:922:LEU:HD23	1:A:923:SER:H	1.67	0.57
1:A:103:PRO:O	1:A:106:ALA:N	2.38	0.56
1:A:325:TYR:CD2	1:A:325:TYR:C	2.78	0.56
1:A:365:VAL:CG1	1:A:499:ILE:HG22	2.35	0.56
1:A:516:PRO:HA	1:A:519:ARG:HD2	1.86	0.56
1:A:489:ALA:CA	1:A:492:LEU:HB3	2.29	0.56
1:A:454:LEU:HD12	1:A:493:ALA:HB2	1.87	0.56
1:A:144:LEU:O	1:A:284:VAL:HG21	2.06	0.56
1:A:687:GLY:O	1:A:688:THR:HB	2.05	0.56
1:A:889:LEU:HD23	1:A:890:ALA:H	1.71	0.56
1:A:929:GLY:O	1:A:1016:MET:HE2	2.05	0.56
1:A:933:LEU:HD11	1:A:1019:GLY:HA3	1.87	0.56
1:A:118:GLN:NE2	1:A:121:LEU:CD2	2.67	0.56
1:A:556:LYS:NZ	1:A:558:GLY:HA2	2.20	0.56
1:A:680:PRO:HD2	1:A:826:ILE:O	2.05	0.56
1:A:138:TRP:HE1	1:A:616:THR:HG21	1.69	0.56
1:A:158:SER:CB	1:A:766:TYR:OH	2.53	0.56
1:A:325:TYR:CD2	1:A:325:TYR:O	2.58	0.56
1:A:403:MET:CE	1:A:489:ALA:HB2	2.35	0.56
1:A:461:PHE:C	1:A:463:PRO:HD2	2.26	0.56
1:A:136:VAL:HG22	1:A:670:ILE:HD11	1.86	0.56
1:A:58:PRO:HD3	1:A:88:PHE:HB2	1.88	0.56
1:A:914:LEU:HD12	1:A:914:LEU:O	2.06	0.56
1:A:291:LEU:O	1:A:293:SER:N	2.39	0.56
1:A:57:ALA:H	1:A:61:VAL:HG23	1.70	0.56
1:A:814:LYS:O	1:A:815:THR:HG23	2.06	0.56
1:A:936:VAL:HG11	1:A:1020:MET:CE	2.36	0.56
1:A:157:ARG:O	1:A:161:ASP:HB2	2.06	0.56
1:A:203:LEU:C	1:A:205:GLU:H	2.09	0.56
1:A:138:TRP:HZ3	1:A:288:VAL:HG11	1.69	0.56
1:A:526:HIS:N	1:A:527:PRO:CD	2.69	0.56
1:A:158:SER:HB3	1:A:766:TYR:HH	1.69	0.56
1:A:518:ASN:ND2	1:A:982:ARG:HE	2.03	0.56
1:A:500:LEU:H	1:A:500:LEU:HD23	1.68	0.56
1:A:676:GLY:C	1:A:677:ILE:HG13	2.26	0.56
1:A:480:PHE:O	1:A:484:TYR:CD1	2.59	0.56
1:A:535:TRP:HB3	1:A:538:THR:CG2	2.35	0.56
1:A:88:PHE:O	1:A:88:PHE:HD2	1.89	0.56
1:A:984:LYS:O	1:A:988:VAL:HG23	2.06	0.56
1:A:410:MET:O	1:A:410:MET:HE2	2.06	0.56
1:A:701:GLU:HG2	1:A:713:ALA:HB3	1.88	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:998:ILE:HD13	1:A:1006:SER:HB3	1.86	0.55
1:A:237:LEU:HD22	1:A:243:PHE:CE1	2.41	0.55
1:A:24:SER:HB2	1:A:372:LEU:HD13	1.87	0.55
1:A:40:PRO:HB2	1:A:42:LEU:CD1	2.36	0.55
1:A:899:LEU:CD2	1:A:1034:ALA:HB3	2.36	0.55
1:A:43:SER:O	1:A:44:ASP:OD2	2.24	0.55
1:A:72:THR:CG2	1:A:113:TYR:HB3	2.36	0.55
1:A:790:THR:HG21	1:A:794:GLN:HG3	1.85	0.55
1:A:884:PHE:C	1:A:886:LEU:N	2.60	0.55
1:A:260:ARG:HG3	1:A:261:ASP:OD1	2.06	0.55
1:A:27:GLY:O	1:A:375:CYS:SG	2.58	0.55
1:A:493:ALA:O	1:A:496:VAL:HG12	2.05	0.55
1:A:579:GLY:O	1:A:580:ILE:HG22	2.07	0.55
1:A:643:ASP:HA	1:A:646:ILE:CG2	2.36	0.55
1:A:554:LEU:CD2	1:A:912:ILE:HG13	2.36	0.55
1:A:433:LYS:HD3	1:A:435:ARG:CD	2.37	0.55
1:A:66:THR:O	1:A:70:THR:HG23	2.06	0.55
1:A:724:ILE:CD1	1:A:780:PRO:HG3	2.36	0.55
1:A:760:VAL:HG23	1:A:765:ARG:HE	1.71	0.55
1:A:905:PRO:HA	1:A:908:LEU:CD1	2.37	0.55
1:A:80:LYS:HD2	1:A:96:ILE:O	2.06	0.55
1:A:411:ILE:O	1:A:415:HIS:CD2	2.59	0.55
1:A:409:VAL:HG12	1:A:450:LEU:HD12	1.88	0.55
1:A:134:THR:HG23	1:A:136:VAL:N	2.21	0.55
1:A:140:TYR:HE2	1:A:142:TYR:HB3	1.70	0.55
1:A:272:ARG:HH11	1:A:275:ILE:CG2	2.15	0.55
1:A:483:THR:HB	1:A:484:TYR:CD1	2.42	0.55
1:A:567:GLU:OE1	1:A:569:ASP:N	2.40	0.55
1:A:655:LEU:HB3	1:A:656:PRO:CD	2.37	0.55
1:A:760:VAL:CG2	1:A:765:ARG:HE	2.20	0.55
1:A:683:ILE:HD11	1:A:824:ILE:HD12	1.89	0.55
1:A:187:TYR:HB3	1:A:243:PHE:HE2	1.72	0.55
1:A:563:PRO:O	1:A:564:GLN:HB2	2.06	0.55
1:A:736:TYR:CE1	1:A:796:ILE:HG21	2.41	0.55
1:A:380:VAL:HG22	1:A:484:TYR:CE2	2.41	0.55
1:A:546:SER:O	1:A:549:THR:HG22	2.06	0.55
1:A:620:PRO:HD2	1:A:623:MET:CB	2.37	0.55
1:A:723:TYR:CE1	1:A:810:PRO:HD2	2.42	0.55
1:A:51:THR:HG21	1:A:65:VAL:CG2	2.37	0.55
1:A:590:GLN:OE1	1:A:590:GLN:HA	2.07	0.55
1:A:908:LEU:O	1:A:912:ILE:HG22	2.07	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:994:GLY:O	1:A:997:PRO:HD2	2.07	0.55
1:A:1028:LEU:HB2	1:A:1029:PHE:CD2	2.42	0.54
1:A:182:GLY:HA3	1:A:285:ALA:HB2	1.90	0.54
1:A:367:ILE:O	1:A:371:PRO:HD2	2.07	0.54
1:A:564:GLN:O	1:A:565:ILE:HB	2.07	0.54
1:A:739:THR:O	1:A:742:ASP:N	2.40	0.54
1:A:19:GLY:HA2	1:A:22:PHE:CD2	2.41	0.54
1:A:301:ILE:CG2	1:A:305:LYS:HE3	2.37	0.54
1:A:462:ILE:N	1:A:463:PRO:CD	2.70	0.54
1:A:792:MET:O	1:A:793:LYS:C	2.44	0.54
1:A:199:TYR:CD2	1:A:199:TYR:N	2.74	0.54
1:A:853:GLY:O	1:A:854:THR:HG23	2.06	0.54
1:A:952:ILE:O	1:A:956:PRO:HD3	2.07	0.54
1:A:330:LEU:O	1:A:330:LEU:CD1	2.52	0.54
1:A:346:PHE:CD1	1:A:347:ILE:HD12	2.43	0.54
1:A:38:ALA:HA	1:A:389:ASN:HA	1.90	0.54
1:A:529:LEU:HD22	1:A:974:TYR:HB3	1.87	0.54
1:A:567:GLU:HG2	1:A:664:PRO:CA	2.34	0.54
1:A:697:ALA:O	1:A:715:ALA:HB2	2.07	0.54
1:A:960:ASN:N	1:A:961:PRO:HD3	2.22	0.54
1:A:13:ARG:NE	1:A:14:PHE:CE2	2.76	0.54
1:A:297:ALA:O	1:A:301:ILE:HG13	2.08	0.54
1:A:38:ALA:HA	1:A:389:ASN:CA	2.38	0.54
1:A:1036:LYS:NZ	1:A:1037:LEU:HD23	2.22	0.54
1:A:565:ILE:CG2	1:A:566:ASN:N	2.71	0.54
1:A:80:LYS:HD3	1:A:81:THR:HG23	1.90	0.54
1:A:105:TRP:CE2	1:A:109:ARG:HG3	2.43	0.54
1:A:137:GLY:O	1:A:291:LEU:N	2.31	0.54
1:A:277:GLU:HG3	1:A:282:GLY:O	2.08	0.54
1:A:554:LEU:C	1:A:555:ASN:HD22	2.11	0.54
1:A:831:ARG:HD3	1:A:832:ASP:N	2.21	0.54
1:A:980:ARG:HH22	1:A:1027:SER:C	2.11	0.54
1:A:320:GLU:O	1:A:321:ILE:HD13	2.07	0.54
1:A:497:ILE:HG12	1:A:498:PRO:HD3	1.90	0.54
1:A:173:ASP:CG	1:A:295:LYS:HD3	2.29	0.53
1:A:368:ILE:HG23	1:A:369:SER:N	2.22	0.53
1:A:372:LEU:HD23	1:A:372:LEU:N	2.22	0.53
1:A:546:SER:HA	1:A:549:THR:HG22	1.90	0.53
1:A:917:TRP:CE3	1:A:918:MET:CG	2.91	0.53
1:A:277:GLU:OE2	1:A:590:GLN:HA	2.08	0.53
1:A:51:THR:HG21	1:A:65:VAL:HG21	1.90	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:728:ILE:CD1	1:A:728:ILE:N	2.71	0.53
1:A:949:ARG:HG2	1:A:1035:TYR:OH	2.07	0.53
1:A:346:PHE:CE1	1:A:347:ILE:HD12	2.43	0.53
1:A:38:ALA:O	1:A:39:LEU:HB2	2.09	0.53
1:A:640:MET:CE	1:A:644:LYS:HG2	2.38	0.53
1:A:461:PHE:HA	1:A:931:ILE:HG21	1.89	0.53
1:A:899:LEU:HD23	1:A:1034:ALA:CB	2.38	0.53
1:A:378:PHE:O	1:A:381:MET:HE3	2.08	0.53
1:A:237:LEU:CD2	1:A:243:PHE:CD1	2.92	0.53
1:A:55:GLY:O	1:A:56:GLN:HG2	2.07	0.53
1:A:58:PRO:O	1:A:62:GLU:HB2	2.07	0.53
1:A:157:ARG:NH1	1:A:273:ARG:HH12	2.04	0.53
1:A:418:LEU:O	1:A:418:LEU:HD13	2.09	0.53
1:A:524:VAL:O	1:A:528:LEU:CD2	2.54	0.53
1:A:277:GLU:CD	1:A:593:ASP:HB3	2.29	0.53
1:A:140:TYR:CD2	1:A:141:GLU:N	2.76	0.53
1:A:770:LEU:O	1:A:770:LEU:HG	2.08	0.53
1:A:309:GLU:HA	1:A:312:LYS:HG2	1.89	0.53
1:A:368:ILE:CG2	1:A:369:SER:N	2.71	0.53
1:A:528:LEU:O	1:A:532:VAL:HG22	2.09	0.53
1:A:748:THR:HG23	1:A:749:SER:N	2.24	0.53
1:A:948:LEU:HD22	1:A:1031:ILE:HG22	1.91	0.53
1:A:133:ALA:HA	1:A:293:SER:HB2	1.90	0.53
1:A:24:SER:HB2	1:A:372:LEU:CD1	2.39	0.53
1:A:603:ALA:O	1:A:604:ARG:HG3	2.09	0.53
1:A:746:PHE:O	1:A:750:ALA:HB3	2.09	0.53
1:A:823:TRP:HD1	1:A:823:TRP:N	2.05	0.53
1:A:872:LEU:HD13	1:A:872:LEU:O	2.09	0.53
1:A:988:VAL:HG21	1:A:1024:PRO:HG3	1.90	0.53
1:A:240:LEU:O	1:A:244:ASN:ND2	2.42	0.53
1:A:574:PRO:CD	1:A:624:VAL:CG1	2.86	0.53
1:A:728:ILE:HD12	1:A:728:ILE:N	2.22	0.53
1:A:944:MET:HG3	1:A:1031:ILE:HG13	1.90	0.52
1:A:325:TYR:HE2	1:A:327:ARG:HB2	1.74	0.52
1:A:501:MET:SD	1:A:501:MET:N	2.82	0.52
1:A:885:VAL:HG12	1:A:885:VAL:O	2.09	0.52
1:A:187:TYR:CE2	1:A:759:THR:HG21	2.45	0.52
1:A:57:ALA:O	1:A:60:ILE:HG22	2.10	0.52
1:A:83:ARG:CD	1:A:675:THR:OG1	2.47	0.52
1:A:139:ILE:CG2	1:A:301:ILE:HD11	2.39	0.52
1:A:403:MET:HE2	1:A:489:ALA:HB2	1.92	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:960:ASN:N	1:A:960:ASN:OD1	2.42	0.52
1:A:458:THR:CB	1:A:486:MET:HG2	2.39	0.52
1:A:469:GLY:HA3	1:A:864:LEU:CD1	2.35	0.52
1:A:531:LYS:HA	1:A:534:HIS:HB2	1.91	0.52
1:A:683:ILE:HG22	1:A:858:PHE:CE1	2.44	0.52
1:A:739:THR:O	1:A:740:VAL:C	2.47	0.52
1:A:883:ILE:O	1:A:887:LEU:N	2.42	0.52
1:A:224:LEU:HB3	1:A:229:TYR:CE1	2.45	0.52
1:A:346:PHE:CD1	1:A:347:ILE:N	2.77	0.52
1:A:420:GLU:HB2	1:A:421:TRP:CZ3	2.45	0.52
1:A:80:LYS:HE3	1:A:97:PHE:O	2.10	0.52
1:A:976:GLY:HA2	1:A:979:LEU:HG	1.91	0.52
1:A:145:VAL:CG2	1:A:320:GLU:C	2.78	0.52
1:A:470:GLN:HG3	1:A:471:GLU:N	2.24	0.52
1:A:624:VAL:O	1:A:624:VAL:HG13	2.09	0.52
1:A:652:THR:O	1:A:653:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:13:ARG:CD	1:A:14:PHE:CE2	2.93	0.52
1:A:277:GLU:CG	1:A:278:LEU:H	2.23	0.52
1:A:370:LEU:O	1:A:374:LEU:N	2.40	0.52
1:A:645:ILE:HG22	1:A:646:ILE:N	2.24	0.52
1:A:736:TYR:CD1	1:A:796:ILE:CD1	2.91	0.52
1:A:980:ARG:NH1	1:A:1028:LEU:HA	2.25	0.52
1:A:914:LEU:HD23	1:A:1018:GLY:H	1.75	0.52
1:A:140:TYR:HD2	1:A:141:GLU:N	2.08	0.52
1:A:37:ASP:OD1	1:A:297:ALA:HB2	2.10	0.52
1:A:953:GLU:C	1:A:956:PRO:HD2	2.31	0.52
1:A:217:ALA:O	1:A:233:ALA:HB3	2.09	0.51
1:A:462:ILE:N	1:A:463:PRO:HD2	2.25	0.51
1:A:917:TRP:CZ3	1:A:918:MET:HG2	2.45	0.51
1:A:15:LEU:CD2	1:A:16:VAL:HG13	2.40	0.51
1:A:469:GLY:HA2	1:A:864:LEU:HD21	1.93	0.51
1:A:279:ASN:CA	1:A:593:ASP:OD1	2.58	0.51
1:A:899:LEU:HD11	1:A:1031:ILE:HA	1.91	0.51
1:A:105:TRP:HD1	1:A:105:TRP:C	1.99	0.51
1:A:311:LEU:O	1:A:313:SER:N	2.43	0.51
1:A:463:PRO:HG2	1:A:464:ILE:CD1	2.38	0.51
1:A:162:TRP:CD2	1:A:764:ALA:CB	2.93	0.51
1:A:1019:GLY:O	1:A:1023:ALA:HB3	2.06	0.51
1:A:195:ARG:HB3	1:A:261:ASP:O	2.10	0.51
1:A:420:GLU:HB2	1:A:421:TRP:HE3	1.72	0.51
1:A:679:SER:OG	1:A:825:TYR:HB3	2.10	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:688:THR:H	1:A:820:PRO:HD2	1.76	0.51
1:A:718:LEU:C	1:A:720:GLY:H	2.14	0.51
1:A:879:THR:O	1:A:883:ILE:HB	2.11	0.51
1:A:974:TYR:HA	1:A:977:ALA:HB3	1.92	0.51
1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD2	1.93	0.51
1:A:710:VAL:HG13	1:A:828:ALA:HB1	1.92	0.51
1:A:142:TYR:CE1	1:A:287:GLY:N	2.70	0.51
1:A:199:TYR:HD1	1:A:257:VAL:HG22	1.75	0.51
1:A:203:LEU:C	1:A:205:GLU:N	2.64	0.51
1:A:299:GLU:OE1	1:A:299:GLU:HA	2.11	0.51
1:A:458:THR:O	1:A:461:PHE:HB3	2.11	0.51
1:A:951:ALA:C	1:A:953:GLU:N	2.64	0.51
1:A:169:LYS:HG3	1:A:175:ALA:O	2.11	0.51
1:A:182:GLY:CA	1:A:285:ALA:HB2	2.40	0.51
1:A:539:THR:O	1:A:543:ALA:CB	2.59	0.51
1:A:57:ALA:N	1:A:61:VAL:HG23	2.25	0.51
1:A:748:THR:HG23	1:A:749:SER:H	1.76	0.51
1:A:936:VAL:CG1	1:A:1020:MET:CE	2.89	0.51
1:A:983:PRO:HB2	1:A:984:LYS:HD2	1.92	0.51
1:A:103:PRO:O	1:A:107:ARG:N	2.29	0.51
1:A:29:TRP:CG	1:A:30:THR:N	2.79	0.51
1:A:304:VAL:HG12	1:A:305:LYS:N	2.24	0.51
1:A:569:ASP:N	1:A:569:ASP:OD1	2.44	0.51
1:A:580:ILE:HD12	1:A:581:SER:N	2.26	0.51
1:A:716:GLU:HG3	1:A:719:GLU:HG2	1.93	0.51
1:A:790:THR:HB	1:A:791:PRO:CD	2.33	0.51
1:A:572:TYR:HE2	1:A:653:VAL:HG11	1.76	0.51
1:A:92:TYR:CE1	1:A:618:SER:HA	2.46	0.51
1:A:706:THR:HG23	1:A:707:VAL:N	2.26	0.51
1:A:1023:ALA:HB3	1:A:1024:PRO:CD	2.41	0.50
1:A:157:ARG:NH2	1:A:161:ASP:OD2	2.44	0.50
1:A:292:ARG:HH21	1:A:292:ARG:HG3	1.76	0.50
1:A:348:VAL:HG11	1:A:993:ALA:CB	2.41	0.50
1:A:66:THR:O	1:A:70:THR:CG2	2.59	0.50
1:A:816:GLU:HB3	1:A:821:THR:HG21	1.93	0.50
1:A:996:LEU:HD13	1:A:997:PRO:N	2.26	0.50
1:A:42:LEU:C	1:A:44:ASP:N	2.59	0.50
1:A:492:LEU:HD23	1:A:493:ALA:N	2.26	0.50
1:A:118:GLN:HA	1:A:118:GLN:NE2	2.24	0.50
1:A:998:ILE:HD12	1:A:1006:SER:HB3	1.94	0.50
1:A:1033:ALA:HA	1:A:1036:LYS:HG2	1.92	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:PRO:CD	2.41	0.50
1:A:52:SER:O	1:A:125:VAL:HG13	2.11	0.50
1:A:518:ASN:HD21	1:A:982:ARG:NE	2.10	0.50
1:A:58:PRO:HG3	1:A:88:PHE:N	2.26	0.50
1:A:574:PRO:HG2	1:A:624:VAL:CG1	2.41	0.50
1:A:649:LEU:O	1:A:652:THR:N	2.45	0.50
1:A:686:SER:CB	1:A:819:ARG:HE	2.23	0.50
1:A:688:THR:O	1:A:688:THR:CG2	2.60	0.50
1:A:76:VAL:HG22	1:A:77:PRO:O	2.11	0.50
1:A:971:GLU:HA	1:A:974:TYR:CE1	2.47	0.50
1:A:237:LEU:CD2	1:A:243:PHE:HD1	2.24	0.50
1:A:354:ALA:N	1:A:360:VAL:HG11	2.27	0.50
1:A:790:THR:HG21	1:A:794:GLN:CG	2.41	0.50
1:A:81:THR:OG1	1:A:96:ILE:HD11	2.12	0.50
1:A:547:VAL:HA	1:A:909:VAL:HG21	1.92	0.50
1:A:959:ASN:C	1:A:961:PRO:HD3	2.32	0.50
1:A:145:VAL:O	1:A:145:VAL:HG23	2.11	0.50
1:A:209:ALA:O	1:A:213:SER:OG	2.30	0.50
1:A:762:GLY:O	1:A:763:ILE:CG2	2.60	0.50
1:A:984:LYS:CA	1:A:987:THR:HG22	2.41	0.50
1:A:899:LEU:HD23	1:A:1034:ALA:HB3	1.93	0.50
1:A:177:VAL:HG22	1:A:289:VAL:HG22	1.94	0.50
1:A:580:ILE:HD11	1:A:585:ALA:CB	2.41	0.50
1:A:651:ASN:C	1:A:653:VAL:H	2.14	0.50
1:A:1023:ALA:CB	1:A:1024:PRO:CD	2.90	0.50
1:A:168:LEU:C	1:A:170:THR:N	2.65	0.50
1:A:458:THR:HG23	1:A:459:LEU:HD23	1.93	0.50
1:A:517:LEU:O	1:A:517:LEU:HD12	2.12	0.50
1:A:561:PHE:C	1:A:563:PRO:HD3	2.31	0.50
1:A:599:VAL:HG12	1:A:600:PRO:HD2	1.92	0.50
1:A:605:VAL:HG13	1:A:626:THR:HG22	1.93	0.50
1:A:684:LYS:HE3	1:A:859:SER:OG	2.12	0.50
1:A:121:LEU:CD1	1:A:122:PRO:HD2	2.41	0.50
1:A:694:ASP:O	1:A:698:GLU:HG2	2.11	0.50
1:A:550:VAL:HA	1:A:913:TRP:HE1	1.77	0.50
1:A:146:ASP:O	1:A:146:ASP:OD1	2.30	0.49
1:A:549:THR:O	1:A:913:TRP:HZ2	1.95	0.49
1:A:608:LYS:C	1:A:608:LYS:HD3	2.22	0.49
1:A:728:ILE:CD1	1:A:728:ILE:H	2.25	0.49
1:A:880:LEU:HA	1:A:883:ILE:HG22	1.94	0.49
1:A:959:ASN:HB3	1:A:961:PRO:HD3	1.94	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:46:GLN:HB3	1:A:96:ILE:HG22	1.94	0.49
1:A:470:GLN:O	1:A:474:LEU:HD13	2.12	0.49
1:A:605:VAL:CG1	1:A:606:PHE:N	2.75	0.49
1:A:988:VAL:HG11	1:A:1024:PRO:CG	2.42	0.49
1:A:217:ALA:O	1:A:233:ALA:CB	2.60	0.49
1:A:201:ILE:CD1	1:A:248:LEU:HD12	2.34	0.49
1:A:272:ARG:NH1	1:A:275:ILE:HG23	2.19	0.49
1:A:118:GLN:HE21	1:A:121:LEU:HD21	1.72	0.49
1:A:355:LEU:HG	1:A:355:LEU:O	2.12	0.49
1:A:118:GLN:HE22	1:A:121:LEU:HD21	1.76	0.49
1:A:10:VAL:C	1:A:13:ARG:HB2	2.32	0.49
1:A:145:VAL:CG2	1:A:320:GLU:N	2.76	0.49
1:A:184:VAL:HG23	1:A:270:GLU:CB	2.43	0.49
1:A:219:GLY:O	1:A:220:SER:CB	2.60	0.49
1:A:357:LEU:O	1:A:358:TRP:O	2.31	0.49
1:A:458:THR:HG23	1:A:459:LEU:N	2.28	0.49
1:A:488:GLY:O	1:A:492:LEU:CB	2.60	0.49
1:A:574:PRO:CG	1:A:624:VAL:CG1	2.90	0.49
1:A:603:ALA:HB2	1:A:631:LYS:HG3	1.95	0.49
1:A:277:GLU:CG	1:A:278:LEU:N	2.75	0.49
1:A:53:TYR:CD2	1:A:65:VAL:HG11	2.45	0.49
1:A:50:LYS:HD2	1:A:92:TYR:CZ	2.48	0.49
1:A:929:GLY:HA2	1:A:1016:MET:HE3	1.93	0.49
1:A:530:LEU:O	1:A:534:HIS:HB2	2.12	0.49
1:A:62:GLU:HG2	1:A:86:SER:OG	2.13	0.49
1:A:81:THR:O	1:A:95:VAL:HG13	2.12	0.49
1:A:345:GLU:OE2	1:A:994:GLY:HA3	2.12	0.49
1:A:955:VAL:HG13	1:A:968:LYS:NZ	2.27	0.49
1:A:26:TRP:HZ2	1:A:379:ILE:CD1	2.21	0.49
1:A:45:VAL:HG13	1:A:45:VAL:O	2.13	0.49
1:A:473:ARG:C	1:A:473:ARG:HD3	2.30	0.49
1:A:551:LEU:HD23	1:A:551:LEU:O	2.12	0.49
1:A:713:ALA:O	1:A:714:LEU:HD23	2.13	0.49
1:A:968:LYS:HD3	1:A:968:LYS:C	2.33	0.49
1:A:366:ALA:O	1:A:369:SER:OG	2.30	0.49
1:A:48:ILE:HG21	1:A:615:ALA:O	2.13	0.49
1:A:603:ALA:HB2	1:A:631:LYS:CG	2.42	0.49
1:A:687:GLY:HA3	1:A:854:THR:CG2	2.41	0.49
1:A:535:TRP:HB3	1:A:538:THR:HG23	1.94	0.48
1:A:786:LEU:HD23	1:A:787:PRO:CD	2.43	0.48
1:A:463:PRO:HG3	1:A:879:THR:HB	1.94	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:959:ASN:ND2	1:A:961:PRO:HG3	2.27	0.48
1:A:536:PRO:CB	1:A:1036:LYS:HD2	2.39	0.48
1:A:142:TYR:OH	1:A:160:GLN:OE1	2.31	0.48
1:A:280:GLY:O	1:A:590:GLN:NE2	2.46	0.48
1:A:607:GLY:CA	1:A:626:THR:HG23	2.44	0.48
1:A:673:LEU:O	1:A:675:THR:HG22	2.13	0.48
1:A:729:ASN:HD22	1:A:732:LYS:HB2	1.78	0.48
1:A:816:GLU:H	1:A:821:THR:HG22	1.78	0.48
1:A:83:ARG:CZ	1:A:816:GLU:OE1	2.60	0.48
1:A:546:SER:O	1:A:909:VAL:HG11	2.12	0.48
1:A:436:TRP:O	1:A:440:THR:HG23	2.13	0.48
1:A:727:GLU:HG3	1:A:805:LYS:HE3	1.95	0.48
1:A:686:SER:O	1:A:854:THR:HG22	2.13	0.48
1:A:900:ILE:C	1:A:900:ILE:HD13	2.34	0.48
1:A:949:ARG:NE	1:A:949:ARG:HA	2.29	0.48
1:A:357:LEU:HD21	1:A:412:GLU:OE1	2.13	0.48
1:A:465:PHE:CG	1:A:479:ALA:CB	2.91	0.48
1:A:471:GLU:OE2	1:A:865:LEU:HD21	2.14	0.48
1:A:640:MET:HE2	1:A:644:LYS:HG2	1.96	0.48
1:A:740:VAL:HG13	1:A:741:ALA:H	1.77	0.48
1:A:752:GLY:O	1:A:777:ARG:NH1	2.46	0.48
1:A:554:LEU:HD21	1:A:912:ILE:HG13	1.95	0.48
1:A:199:TYR:N	1:A:199:TYR:HD2	2.11	0.48
1:A:284:VAL:HG22	1:A:285:ALA:H	1.77	0.48
1:A:409:VAL:CB	1:A:450:LEU:CG	2.90	0.48
1:A:915:LEU:HD21	1:A:1014:ALA:CB	2.39	0.48
1:A:923:SER:OG	1:A:925:ALA:HB3	2.13	0.48
1:A:13:ARG:O	1:A:16:VAL:HG22	2.14	0.48
1:A:50:LYS:HG3	1:A:51:THR:N	2.29	0.48
1:A:771:ARG:NH2	1:A:777:ARG:NH1	2.60	0.48
1:A:152:ASP:HB3	1:A:155:ASP:HB2	1.94	0.48
1:A:649:LEU:HA	1:A:652:THR:OG1	2.13	0.48
1:A:887:LEU:CD2	1:A:900:ILE:HD12	2.44	0.48
1:A:536:PRO:HA	1:A:1036:LYS:CD	2.43	0.48
1:A:637:ARG:HG2	1:A:640:MET:SD	2.54	0.48
1:A:851:LYS:HB3	1:A:852:PRO:HD2	1.90	0.48
1:A:996:LEU:HD22	1:A:996:LEU:O	2.14	0.48
1:A:139:ILE:HG13	1:A:291:LEU:HB2	1.95	0.48
1:A:15:LEU:CD2	1:A:16:VAL:CG1	2.92	0.48
1:A:49:ILE:HG22	1:A:49:ILE:O	2.14	0.48
1:A:53:TYR:CD2	1:A:125:VAL:HG11	2.49	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:570:LEU:O	1:A:628:ILE:HG13	2.14	0.48
1:A:760:VAL:CG2	1:A:765:ARG:NE	2.76	0.48
1:A:196:LEU:HD12	1:A:262:VAL:HG11	1.95	0.48
1:A:183:VAL:HG23	1:A:272:ARG:NH2	2.28	0.48
1:A:325:TYR:HD2	1:A:325:TYR:C	2.17	0.48
1:A:72:THR:OG1	1:A:117:VAL:HG21	2.13	0.48
1:A:899:LEU:CG	1:A:1034:ALA:HB3	2.43	0.48
1:A:913:TRP:C	1:A:915:LEU:N	2.67	0.48
1:A:945:LEU:HA	1:A:1031:ILE:HG23	1.96	0.47
1:A:173:ASP:OD1	1:A:295:LYS:HD3	2.14	0.47
1:A:528:LEU:HD13	1:A:528:LEU:N	2.29	0.47
1:A:624:VAL:HG22	1:A:624:VAL:O	2.11	0.47
1:A:880:LEU:HA	1:A:883:ILE:CG2	2.43	0.47
1:A:550:VAL:CB	1:A:909:VAL:HG22	2.43	0.47
1:A:988:VAL:O	1:A:992:ILE:HG12	2.14	0.47
1:A:251:SER:HB3	1:A:255:VAL:O	2.14	0.47
1:A:376:ILE:O	1:A:380:VAL:HG12	2.14	0.47
1:A:61:VAL:O	1:A:65:VAL:HG13	2.13	0.47
1:A:873:LYS:O	1:A:877:PRO:HG2	2.14	0.47
1:A:453:SER:HB2	1:A:939:GLU:CG	2.44	0.47
1:A:117:VAL:HG22	1:A:120:LYS:HE3	1.96	0.47
1:A:12:ASN:O	1:A:13:ARG:C	2.53	0.47
1:A:221:SER:HB3	1:A:228:GLU:HG3	1.93	0.47
1:A:147:ARG:HB2	1:A:318:GLY:HA2	1.96	0.47
1:A:522:ILE:CG2	1:A:526:HIS:CE1	2.97	0.47
1:A:635:GLN:O	1:A:636:TRP:HB2	2.15	0.47
1:A:688:THR:O	1:A:688:THR:HG22	2.13	0.47
1:A:883:ILE:HD12	1:A:883:ILE:HA	1.79	0.47
1:A:140:TYR:CZ	1:A:323:THR:HG22	2.45	0.47
1:A:769:ASN:OD1	1:A:770:LEU:N	2.47	0.47
1:A:943:VAL:HG21	1:A:984:LYS:NZ	2.28	0.47
1:A:196:LEU:HA	1:A:262:VAL:CG1	2.45	0.47
1:A:362:SER:CB	1:A:411:ILE:HD12	2.42	0.47
1:A:461:PHE:CD2	1:A:461:PHE:C	2.87	0.47
1:A:525:TYR:HA	1:A:528:LEU:HD23	1.94	0.47
1:A:833:MET:H	1:A:862:PHE:HZ	1.63	0.47
1:A:956:PRO:HA	1:A:959:ASN:CG	2.33	0.47
1:A:405:ASP:O	1:A:408:ILE:CB	2.53	0.47
1:A:62:GLU:O	1:A:66:THR:HG23	2.15	0.47
1:A:995:LEU:HB2	1:A:1017:ILE:HD11	1.97	0.47
1:A:453:SER:O	1:A:457:ILE:HG13	2.14	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:HD22	2.29	0.47
1:A:550:VAL:HG22	1:A:554:LEU:HG	1.95	0.47
1:A:723:TYR:OH	1:A:810:PRO:HD2	2.15	0.47
1:A:145:VAL:HG23	1:A:320:GLU:HG2	1.96	0.47
1:A:441:ASP:OD2	1:A:442:ALA:N	2.47	0.47
1:A:480:PHE:O	1:A:483:THR:HB	2.15	0.47
1:A:673:LEU:O	1:A:675:THR:N	2.43	0.47
1:A:933:LEU:HD23	1:A:933:LEU:C	2.35	0.47
1:A:933:LEU:HB2	1:A:1016:MET:HA	1.96	0.47
1:A:237:LEU:CD1	1:A:243:PHE:CE1	2.91	0.47
1:A:31:ILE:HG23	1:A:32:ILE:H	1.80	0.47
1:A:553:PRO:HB2	1:A:912:ILE:HD13	1.95	0.47
1:A:806:VAL:HG12	1:A:807:SER:H	1.80	0.47
1:A:381:MET:HE3	1:A:382:HIS:HB2	1.96	0.46
1:A:749:SER:HA	1:A:754:ALA:HB3	1.96	0.46
1:A:1017:ILE:O	1:A:1020:MET:N	2.47	0.46
1:A:160:GLN:HE21	1:A:179:SER:HB2	1.77	0.46
1:A:132:ASP:OD2	1:A:292:ARG:HD2	2.16	0.46
1:A:343:LEU:O	1:A:343:LEU:HD12	2.15	0.46
1:A:367:ILE:HG12	1:A:368:ILE:N	2.20	0.46
1:A:612:ALA:O	1:A:613:GLU:HB3	2.16	0.46
1:A:677:ILE:CG2	1:A:679:SER:HB2	2.43	0.46
1:A:899:LEU:HD13	1:A:1030:ILE:HD12	1.98	0.46
1:A:10:VAL:O	1:A:10:VAL:HG12	2.14	0.46
1:A:13:ARG:NE	1:A:14:PHE:CZ	2.83	0.46
1:A:589:LEU:HD12	1:A:589:LEU:O	2.15	0.46
1:A:88:PHE:CD2	1:A:88:PHE:O	2.68	0.46
1:A:44:ASP:OD1	1:A:96:ILE:HB	2.16	0.46
1:A:12:ASN:HB3	1:A:15:LEU:HD13	1.96	0.46
1:A:134:THR:CG2	1:A:136:VAL:HB	2.45	0.46
1:A:165:LYS:C	1:A:166:TYR:HD1	2.17	0.46
1:A:31:ILE:CG2	1:A:32:ILE:N	2.78	0.46
1:A:342:LEU:CD2	1:A:400:VAL:HG21	2.46	0.46
1:A:458:THR:HB	1:A:486:MET:CG	2.44	0.46
1:A:571:LEU:HD23	1:A:665:PRO:CA	2.41	0.46
1:A:602:VAL:O	1:A:602:VAL:HG23	2.14	0.46
1:A:63:ASN:O	1:A:67:TYR:HB2	2.15	0.46
1:A:569:ASP:HB3	1:A:628:ILE:O	2.15	0.46
1:A:844:ILE:HG23	1:A:848:VAL:CG2	2.45	0.46
1:A:170:THR:O	1:A:170:THR:HG22	2.16	0.46
1:A:325:TYR:CE2	1:A:327:ARG:HB2	2.50	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:483:THR:HB	1:A:484:TYR:HD1	1.81	0.46
1:A:640:MET:HA	1:A:644:LYS:HB3	1.98	0.46
1:A:797:THR:O	1:A:800:ASP:N	2.37	0.46
1:A:203:LEU:HA	1:A:206:VAL:HG23	1.96	0.46
1:A:279:ASN:HD21	1:A:597:MET:CE	2.29	0.46
1:A:608:LYS:NZ	1:A:617:ASP:OD2	2.45	0.46
1:A:1031:ILE:N	1:A:1032:PRO:HD2	2.31	0.46
1:A:714:LEU:O	1:A:715:ALA:C	2.54	0.46
1:A:813:LEU:N	1:A:813:LEU:HD22	2.31	0.46
1:A:980:ARG:HH22	1:A:1027:SER:HB3	1.79	0.46
1:A:410:MET:O	1:A:410:MET:HE3	2.16	0.46
1:A:683:ILE:HD13	1:A:700:ILE:HG21	1.98	0.46
1:A:899:LEU:HD11	1:A:1031:ILE:HD13	1.98	0.45
1:A:580:ILE:CD1	1:A:585:ALA:HB2	2.41	0.45
1:A:896:GLU:O	1:A:899:LEU:HB3	2.17	0.45
1:A:988:VAL:CG2	1:A:1024:PRO:HG3	2.46	0.45
1:A:145:VAL:HG11	1:A:322:VAL:HG13	1.99	0.45
1:A:273:ARG:HH21	1:A:273:ARG:CG	1.94	0.45
1:A:367:ILE:O	1:A:371:PRO:CD	2.64	0.45
1:A:723:TYR:CZ	1:A:810:PRO:HD2	2.50	0.45
1:A:467:LEU:CD2	1:A:872:LEU:HD23	2.46	0.45
1:A:951:ALA:HB1	1:A:954:ALA:CB	2.47	0.45
1:A:37:ASP:C	1:A:331:ILE:HD11	2.37	0.45
1:A:380:VAL:HG22	1:A:484:TYR:CD2	2.51	0.45
1:A:48:ILE:HD12	1:A:48:ILE:N	2.24	0.45
1:A:900:ILE:HD13	1:A:901:ILE:N	2.31	0.45
1:A:214:ASN:HB2	1:A:237:LEU:HD12	1.99	0.45
1:A:331:ILE:HA	1:A:331:ILE:HD13	1.63	0.45
1:A:366:ALA:CA	1:A:369:SER:OG	2.61	0.45
1:A:561:PHE:N	1:A:561:PHE:HD2	2.11	0.45
1:A:83:ARG:NH2	1:A:816:GLU:OE1	2.49	0.45
1:A:965:SER:O	1:A:966:GLU:CB	2.63	0.45
1:A:356:PHE:HE2	1:A:985:ALA:HB3	1.82	0.45
1:A:1002:THR:C	1:A:1004:ALA:H	2.20	0.45
1:A:221:SER:CA	1:A:229:TYR:O	2.60	0.45
1:A:138:TRP:CE3	1:A:288:VAL:HG21	2.51	0.45
1:A:756:VAL:O	1:A:768:ILE:O	2.33	0.45
1:A:781:GLN:HA	1:A:781:GLN:OE1	2.17	0.45
1:A:18:MET:O	1:A:22:PHE:CG	2.70	0.45
1:A:496:VAL:C	1:A:500:LEU:HD21	2.30	0.45
1:A:596:ILE:HD13	1:A:596:ILE:HA	1.69	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:743:VAL:O	1:A:744:GLN:C	2.55	0.45
1:A:891:PHE:O	1:A:892:ARG:CB	2.65	0.45
1:A:685:VAL:O	1:A:821:THR:HA	2.17	0.45
1:A:8:ARG:O	1:A:8:ARG:HD3	2.17	0.45
1:A:926:THR:O	1:A:928:THR:N	2.50	0.45
1:A:105:TRP:NE1	1:A:109:ARG:CG	2.80	0.45
1:A:151:HIS:NE2	1:A:316:PRO:HB2	2.31	0.45
1:A:324:THR:HG1	1:A:606:PHE:HD2	1.62	0.45
1:A:68:PRO:HB3	1:A:120:LYS:HB2	1.97	0.45
1:A:946:MET:C	1:A:948:LEU:H	2.20	0.45
1:A:974:TYR:O	1:A:978:VAL:HG12	2.17	0.45
1:A:125:VAL:HG12	1:A:125:VAL:O	2.17	0.45
1:A:145:VAL:CG1	1:A:322:VAL:HG13	2.47	0.45
1:A:279:ASN:HA	1:A:593:ASP:OD1	2.16	0.45
1:A:488:GLY:O	1:A:492:LEU:HB2	2.17	0.45
1:A:762:GLY:O	1:A:763:ILE:HG22	2.17	0.45
1:A:732:LYS:CD	1:A:800:ASP:O	2.58	0.45
1:A:722:ARG:HG2	1:A:808:THR:HG22	1.99	0.45
1:A:921:HIS:NE2	1:A:1011:ARG:CD	2.80	0.45
1:A:521:LEU:O	1:A:521:LEU:HD23	2.17	0.45
1:A:642:MET:HG3	1:A:642:MET:O	2.16	0.45
1:A:704:ALA:O	1:A:711:ALA:HB2	2.17	0.45
1:A:117:VAL:HG12	1:A:117:VAL:O	2.17	0.44
1:A:15:LEU:C	1:A:15:LEU:CD2	2.60	0.44
1:A:187:TYR:N	1:A:187:TYR:CD1	2.85	0.44
1:A:341:LYS:HD3	1:A:341:LYS:C	2.37	0.44
1:A:535:TRP:HA	1:A:536:PRO:HD3	1.77	0.44
1:A:889:LEU:HD23	1:A:890:ALA:N	2.32	0.44
1:A:966:GLU:HA	1:A:966:GLU:OE1	2.16	0.44
1:A:191:ILE:HA	1:A:263:ALA:HB2	2.00	0.44
1:A:372:LEU:O	1:A:375:CYS:N	2.50	0.44
1:A:62:GLU:HG2	1:A:86:SER:CB	2.47	0.44
1:A:903:SER:OG	1:A:1030:ILE:HD13	2.17	0.44
1:A:168:LEU:HD12	1:A:168:LEU:HA	1.79	0.44
1:A:184:VAL:HG23	1:A:270:GLU:HB3	2.00	0.44
1:A:486:MET:HG3	1:A:490:ALA:HB2	2.00	0.44
1:A:605:VAL:HG13	1:A:606:PHE:H	1.83	0.44
1:A:631:LYS:HD2	1:A:636:TRP:CH2	2.52	0.44
1:A:773:PRO:O	1:A:775:SER:N	2.50	0.44
1:A:83:ARG:HH11	1:A:83:ARG:HB2	1.82	0.44
1:A:938:ALA:O	1:A:942:VAL:HG23	2.17	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:168:LEU:C	1:A:170:THR:H	2.21	0.44
1:A:24:SER:OG	1:A:372:LEU:HD11	2.18	0.44
1:A:488:GLY:O	1:A:492:LEU:N	2.50	0.44
1:A:539:THR:HG21	1:A:1033:ALA:HB1	1.97	0.44
1:A:547:VAL:CG1	1:A:547:VAL:O	2.65	0.44
1:A:669:ARG:CA	1:A:669:ARG:HE	2.18	0.44
1:A:778:ASP:O	1:A:779:SER:CB	2.65	0.44
1:A:710:VAL:CG2	1:A:828:ALA:HA	2.46	0.44
1:A:945:LEU:HB2	1:A:1031:ILE:HD12	2.00	0.44
1:A:949:ARG:CG	1:A:1035:TYR:OH	2.66	0.44
1:A:122:PRO:HB2	1:A:123:ALA:H	1.51	0.44
1:A:13:ARG:O	1:A:14:PHE:C	2.53	0.44
1:A:529:LEU:HA	1:A:532:VAL:HG22	1.98	0.44
1:A:988:VAL:O	1:A:988:VAL:HG12	2.17	0.44
1:A:34:THR:HG23	1:A:36:VAL:HG12	1.95	0.44
1:A:368:ILE:HD12	1:A:368:ILE:C	2.36	0.44
1:A:538:THR:HA	1:A:541:LEU:HG	1.99	0.44
1:A:62:GLU:OE1	1:A:67:TYR:CE2	2.71	0.44
1:A:719:GLU:O	1:A:809:GLY:O	2.35	0.44
1:A:554:LEU:HD23	1:A:912:ILE:HG13	1.99	0.44
1:A:910:GLY:HA3	1:A:1022:THR:HB	1.98	0.44
1:A:20:ALA:O	1:A:23:LEU:HB2	2.18	0.44
1:A:144:LEU:O	1:A:284:VAL:HG11	2.17	0.44
1:A:660:ASN:HB2	1:A:662:TRP:HE1	1.82	0.44
1:A:690:LEU:C	1:A:690:LEU:HD13	2.38	0.44
1:A:798:LEU:C	1:A:800:ASP:N	2.70	0.44
1:A:222:ILE:N	1:A:229:TYR:O	2.48	0.44
1:A:354:ALA:CA	1:A:360:VAL:CG1	2.95	0.44
1:A:53:TYR:HA	1:A:125:VAL:HG13	1.99	0.44
1:A:591:LYS:O	1:A:594:LYS:N	2.46	0.44
1:A:685:VAL:HG12	1:A:822:SER:O	2.17	0.44
1:A:690:LEU:HD22	1:A:690:LEU:O	2.18	0.44
1:A:978:VAL:HG22	1:A:982:ARG:HH12	1.82	0.44
1:A:984:LYS:N	1:A:984:LYS:HD2	2.33	0.44
1:A:158:SER:O	1:A:162:TRP:N	2.33	0.44
1:A:249:LYS:HA	1:A:249:LYS:HD2	1.83	0.44
1:A:593:ASP:O	1:A:593:ASP:OD1	2.35	0.44
1:A:909:VAL:O	1:A:913:TRP:CD1	2.69	0.44
1:A:553:PRO:HB3	1:A:916:TRP:HB2	1.98	0.44
1:A:964:PHE:CD2	1:A:965:SER:OG	2.65	0.44
1:A:656:PRO:O	1:A:658:LEU:N	2.51	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:940:PHE:HA	1:A:943:VAL:CG1	2.48	0.43
1:A:521:LEU:HD22	1:A:981:VAL:HG21	1.99	0.43
1:A:982:ARG:N	1:A:983:PRO:CD	2.81	0.43
1:A:995:LEU:CB	1:A:1017:ILE:HD11	2.48	0.43
1:A:142:TYR:CD1	1:A:142:TYR:O	2.71	0.43
1:A:139:ILE:CG1	1:A:291:LEU:HB2	2.48	0.43
1:A:47:VAL:O	1:A:47:VAL:HG12	2.18	0.43
1:A:497:ILE:HA	1:A:500:LEU:HD11	1.99	0.43
1:A:545:LEU:HD23	1:A:546:SER:N	2.33	0.43
1:A:562:LEU:HG	1:A:562:LEU:O	2.18	0.43
1:A:162:TRP:CE2	1:A:764:ALA:HB1	2.53	0.43
1:A:876:VAL:HA	1:A:879:THR:HG22	1.99	0.43
1:A:899:LEU:C	1:A:899:LEU:HD22	2.39	0.43
1:A:944:MET:HB3	1:A:1031:ILE:HG13	2.00	0.43
1:A:955:VAL:N	1:A:956:PRO:CD	2.80	0.43
1:A:365:VAL:HG12	1:A:499:ILE:CG2	2.48	0.43
1:A:372:LEU:O	1:A:375:CYS:HB2	2.18	0.43
1:A:390:ILE:C	1:A:390:ILE:HD12	2.38	0.43
1:A:409:VAL:CB	1:A:450:LEU:HG	2.48	0.43
1:A:861:GLN:HG2	1:A:861:GLN:O	2.18	0.43
1:A:277:GLU:CD	1:A:590:GLN:OE1	2.56	0.43
1:A:34:THR:OG1	1:A:35:PRO:N	2.51	0.43
1:A:565:ILE:CG2	1:A:566:ASN:H	2.31	0.43
1:A:922:LEU:HG	1:A:926:THR:HG1	1.82	0.43
1:A:996:LEU:H	1:A:997:PRO:HD2	1.83	0.43
1:A:142:TYR:HD1	1:A:142:TYR:O	2.01	0.43
1:A:345:GLU:HG2	1:A:400:VAL:CG1	2.40	0.43
1:A:623:MET:HA	1:A:623:MET:CE	2.46	0.43
1:A:895:GLY:HA2	1:A:1038:MET:HG2	1.99	0.43
1:A:342:LEU:HD21	1:A:400:VAL:HG21	2.00	0.43
1:A:435:ARG:CD	1:A:435:ARG:H	2.28	0.43
1:A:454:LEU:CD1	1:A:493:ALA:HB2	2.47	0.43
1:A:221:SER:HB3	1:A:228:GLU:OE2	2.16	0.43
1:A:450:LEU:O	1:A:454:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:45:VAL:HG13	1:A:97:PHE:H	1.84	0.43
1:A:475:PHE:CZ	1:A:924:VAL:O	2.72	0.43
1:A:478:LEU:O	1:A:479:ALA:C	2.57	0.43
1:A:556:LYS:O	1:A:557:VAL:HG22	2.18	0.43
1:A:635:GLN:HG3	1:A:636:TRP:CE3	2.54	0.43
1:A:728:ILE:HA	1:A:802:ALA:CB	2.48	0.43
1:A:144:LEU:HA	1:A:144:LEU:HD22	1.54	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:147:ARG:H	1:A:318:GLY:C	2.21	0.43
1:A:1004:ALA:O	1:A:1005:GLY:O	2.37	0.43
1:A:142:TYR:HE1	1:A:287:GLY:N	2.12	0.43
1:A:204:ALA:O	1:A:208:SER:HB2	2.19	0.43
1:A:421:TRP:N	1:A:421:TRP:HE3	2.15	0.43
1:A:996:LEU:H	1:A:997:PRO:CD	2.32	0.43
1:A:118:GLN:HE21	1:A:121:LEU:CD2	2.32	0.43
1:A:140:TYR:C	1:A:140:TYR:CD2	2.91	0.43
1:A:394:GLY:O	1:A:398:ILE:HG23	2.18	0.43
1:A:447:GLY:O	1:A:449:ALA:N	2.51	0.43
1:A:450:LEU:HA	1:A:450:LEU:HD23	1.86	0.43
1:A:451:PHE:CD2	1:A:494:ILE:CG1	3.02	0.43
1:A:632:PRO:C	1:A:634:GLU:H	2.22	0.43
1:A:864:LEU:HA	1:A:864:LEU:HD22	1.75	0.43
1:A:168:LEU:O	1:A:171:ILE:N	2.52	0.42
1:A:171:ILE:O	1:A:173:ASP:N	2.52	0.42
1:A:202:SER:HB3	1:A:205:GLU:HG3	2.00	0.42
1:A:296:ASN:O	1:A:297:ALA:C	2.57	0.42
1:A:38:ALA:CB	1:A:390:ILE:HG23	2.46	0.42
1:A:550:VAL:HG13	1:A:554:LEU:HD12	2.01	0.42
1:A:564:GLN:HB3	1:A:565:ILE:H	1.59	0.42
1:A:92:TYR:CD1	1:A:618:SER:HB2	2.53	0.42
1:A:645:ILE:O	1:A:649:LEU:HB2	2.18	0.42
1:A:760:VAL:HG23	1:A:765:ARG:NE	2.33	0.42
1:A:926:THR:HA	1:A:1011:ARG:O	2.19	0.42
1:A:156:LEU:O	1:A:159:LEU:N	2.52	0.42
1:A:357:LEU:HD23	1:A:415:HIS:HE1	1.72	0.42
1:A:451:PHE:CG	1:A:494:ILE:HD11	2.54	0.42
1:A:738:MET:HG3	1:A:791:PRO:HD3	2.01	0.42
1:A:552:TRP:CH2	1:A:916:TRP:CE2	3.06	0.42
1:A:975:HIS:CD2	1:A:976:GLY:N	2.86	0.42
1:A:34:THR:HG23	1:A:36:VAL:HG11	1.97	0.42
1:A:537:LYS:O	1:A:541:LEU:HG	2.18	0.42
1:A:61:VAL:HG21	1:A:89:GLY:N	2.25	0.42
1:A:325:TYR:CE1	1:A:665:PRO:HB3	2.44	0.42
1:A:167:GLU:O	1:A:307:LYS:HE2	2.19	0.42
1:A:326:ASP:O	1:A:328:SER:N	2.52	0.42
1:A:483:THR:HB	1:A:484:TYR:CE1	2.55	0.42
1:A:571:LEU:N	1:A:571:LEU:HD22	2.35	0.42
1:A:683:ILE:CD1	1:A:700:ILE:HG21	2.49	0.42
1:A:790:THR:OG1	1:A:791:PRO:N	2.48	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:963:THR:O	1:A:964:PHE:O	2.37	0.42
1:A:1020:MET:O	1:A:1024:PRO:CD	2.66	0.42
1:A:134:THR:HG21	1:A:136:VAL:HB	2.00	0.42
1:A:143:ALA:HA	1:A:286:GLY:HA3	2.01	0.42
1:A:210:LEU:HD12	1:A:210:LEU:HA	1.70	0.42
1:A:328:SER:O	1:A:331:ILE:HB	2.20	0.42
1:A:462:ILE:HG12	1:A:465:PHE:CE2	2.54	0.42
1:A:496:VAL:O	1:A:500:LEU:CD2	2.42	0.42
1:A:1010:SER:OG	1:A:1011:ARG:N	2.53	0.42
1:A:933:LEU:CD1	1:A:1019:GLY:HA3	2.48	0.42
1:A:335:ILE:HD12	1:A:335:ILE:HA	1.88	0.42
1:A:406:ALA:HA	1:A:450:LEU:CD2	2.50	0.42
1:A:526:HIS:HA	1:A:529:LEU:CD2	2.49	0.42
1:A:619:ALA:HA	1:A:620:PRO:HD3	1.83	0.42
1:A:696:MET:O	1:A:698:GLU:N	2.52	0.42
1:A:887:LEU:HD22	1:A:900:ILE:HG21	2.02	0.42
1:A:911:GLY:CA	1:A:1019:GLY:N	2.83	0.42
1:A:199:TYR:HD1	1:A:257:VAL:CG2	2.32	0.42
1:A:41:ASP:C	1:A:42:LEU:HD13	2.40	0.42
1:A:497:ILE:CB	1:A:498:PRO:HD3	2.49	0.42
1:A:277:GLU:OE2	1:A:593:ASP:HB3	2.19	0.42
1:A:666:ILE:N	1:A:666:ILE:HD12	2.34	0.42
1:A:979:LEU:HD12	1:A:979:LEU:C	2.39	0.42
1:A:190:VAL:HG13	1:A:190:VAL:O	2.20	0.42
1:A:195:ARG:HB2	1:A:262:VAL:HA	2.02	0.42
1:A:464:ILE:HG22	1:A:464:ILE:O	2.20	0.42
1:A:535:TRP:HB3	1:A:538:THR:OG1	2.20	0.42
1:A:728:ILE:HG13	1:A:743:VAL:HG11	2.02	0.42
1:A:896:GLU:CB	1:A:945:LEU:HD11	2.49	0.42
1:A:1000:TRP:O	1:A:1000:TRP:CD1	2.72	0.42
1:A:104:TYR:CD1	1:A:104:TYR:N	2.88	0.42
1:A:184:VAL:CG2	1:A:270:GLU:OE1	2.57	0.42
1:A:301:ILE:HD12	1:A:328:SER:CB	2.49	0.42
1:A:279:ASN:ND2	1:A:597:MET:SD	2.86	0.42
1:A:963:THR:O	1:A:964:PHE:CD1	2.72	0.42
1:A:438:VAL:HG23	1:A:439:ILE:HD13	2.01	0.42
1:A:526:HIS:CD2	1:A:529:LEU:HD21	2.52	0.42
1:A:647:GLU:O	1:A:648:GLU:C	2.58	0.42
1:A:786:LEU:CD2	1:A:787:PRO:HD2	2.50	0.42
1:A:786:LEU:HD23	1:A:787:PRO:HD2	2.02	0.42
1:A:123:ALA:O	1:A:124:GLY:C	2.59	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:39:LEU:HG	1:A:666:ILE:HG12	2.02	0.41
1:A:380:VAL:O	1:A:484:TYR:HE2	2.03	0.41
1:A:635:GLN:CG	1:A:636:TRP:CZ3	3.02	0.41
1:A:933:LEU:HD12	1:A:1015:PRO:O	2.20	0.41
1:A:1021:ILE:HG23	1:A:1022:THR:H	1.85	0.41
1:A:48:ILE:O	1:A:130:GLY:N	2.53	0.41
1:A:131:PRO:HB2	1:A:132:ASP:H	1.50	0.41
1:A:587:SER:C	1:A:589:LEU:N	2.72	0.41
1:A:518:ASN:HD21	1:A:982:ARG:HE	1.62	0.41
1:A:1008:VAL:HG22	1:A:1009:MET:N	2.34	0.41
1:A:357:LEU:HD11	1:A:982:ARG:HG2	2.01	0.41
1:A:440:THR:O	1:A:444:VAL:HG23	2.20	0.41
1:A:403:MET:HE3	1:A:489:ALA:HB2	2.01	0.41
1:A:524:VAL:O	1:A:524:VAL:HG12	2.20	0.41
1:A:620:PRO:HB2	1:A:622:GLU:OE1	2.20	0.41
1:A:621:LEU:HA	1:A:621:LEU:HD12	1.92	0.41
1:A:66:THR:HG21	1:A:86:SER:CB	2.49	0.41
1:A:696:MET:C	1:A:698:GLU:N	2.74	0.41
1:A:713:ALA:C	1:A:714:LEU:HD23	2.40	0.41
1:A:729:ASN:HB3	1:A:732:LYS:HB3	2.02	0.41
1:A:1002:THR:HG21	1:A:1006:SER:H	1.86	0.41
1:A:1007:GLU:CD	1:A:1007:GLU:N	2.73	0.41
1:A:202:SER:CA	1:A:205:GLU:HG3	2.50	0.41
1:A:278:LEU:HD23	1:A:605:VAL:O	2.20	0.41
1:A:278:LEU:N	1:A:282:GLY:O	2.53	0.41
1:A:351:VAL:HG12	1:A:352:VAL:N	2.34	0.41
1:A:40:PRO:O	1:A:42:LEU:HD13	2.21	0.41
1:A:537:LYS:HD2	1:A:537:LYS:HA	1.81	0.41
1:A:911:GLY:HA2	1:A:1019:GLY:N	2.35	0.41
1:A:211:ASP:OD1	1:A:756:VAL:HG23	2.16	0.41
1:A:311:LEU:C	1:A:313:SER:H	2.23	0.41
1:A:308:LEU:O	1:A:312:LYS:HG2	2.21	0.41
1:A:386:LEU:HB3	1:A:387:ASN:H	1.71	0.41
1:A:554:LEU:O	1:A:555:ASN:ND2	2.53	0.41
1:A:650:ASP:OD1	1:A:650:ASP:O	2.38	0.41
1:A:772:TYR:HE1	1:A:787:PRO:HD2	1.85	0.41
1:A:792:MET:O	1:A:794:GLN:N	2.54	0.41
1:A:865:LEU:HD22	1:A:865:LEU:HA	1.70	0.41
1:A:156:LEU:O	1:A:159:LEU:HB3	2.20	0.41
1:A:342:LEU:HA	1:A:342:LEU:HD23	1.66	0.41
1:A:547:VAL:HG13	1:A:547:VAL:O	2.21	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:874:LEU:HA	1:A:874:LEU:HD22	1.84	0.41
1:A:920:PHE:HB3	1:A:921:HIS:H	1.41	0.41
1:A:948:LEU:HD22	1:A:1031:ILE:CG2	2.50	0.41
1:A:115:ASN:CG	1:A:116:GLN:N	2.74	0.41
1:A:134:THR:HG23	1:A:137:GLY:H	1.86	0.41
1:A:139:ILE:HG22	1:A:301:ILE:HD11	2.02	0.41
1:A:343:LEU:HD12	1:A:343:LEU:C	2.41	0.41
1:A:385:GLY:O	1:A:386:LEU:CG	2.62	0.41
1:A:80:LYS:HB2	1:A:97:PHE:HA	2.03	0.41
1:A:812:MET:CG	1:A:813:LEU:N	2.82	0.41
1:A:896:GLU:HB2	1:A:945:LEU:CD1	2.51	0.41
1:A:139:ILE:HB	1:A:140:TYR:H	1.44	0.41
1:A:412:GLU:HG2	1:A:983:PRO:CB	2.50	0.41
1:A:417:ARG:CB	1:A:442:ALA:HB2	2.51	0.41
1:A:518:ASN:ND2	1:A:982:ARG:NE	2.68	0.41
1:A:773:PRO:C	1:A:775:SER:H	2.24	0.41
1:A:61:VAL:HG11	1:A:90:ASP:O	2.21	0.41
1:A:1014:ALA:HB3	1:A:1015:PRO:CD	2.38	0.41
1:A:224:LEU:HB3	1:A:229:TYR:HE1	1.82	0.41
1:A:410:MET:HG3	1:A:497:ILE:HG23	2.03	0.41
1:A:612:ALA:H	1:A:617:ASP:HB3	1.86	0.41
1:A:729:ASN:ND2	1:A:732:LYS:HB2	2.36	0.41
1:A:844:ILE:HG12	1:A:848:VAL:HG11	2.02	0.41
1:A:978:VAL:HG22	1:A:982:ARG:NH1	2.36	0.41
1:A:136:VAL:HG22	1:A:670:ILE:CD1	2.51	0.41
1:A:171:ILE:HA	1:A:172:PRO:HD2	1.78	0.41
1:A:311:LEU:C	1:A:313:SER:N	2.74	0.41
1:A:313:SER:O	1:A:315:LEU:N	2.54	0.41
1:A:464:ILE:H	1:A:464:ILE:HD12	1.84	0.41
1:A:486:MET:CA	1:A:486:MET:HE3	2.51	0.41
1:A:492:LEU:HD23	1:A:492:LEU:C	2.41	0.41
1:A:525:TYR:O	1:A:525:TYR:CD2	2.74	0.41
1:A:891:PHE:HB2	1:A:896:GLU:OE1	2.21	0.41
1:A:677:ILE:N	1:A:677:ILE:HD12	2.36	0.41
1:A:1012:ILE:HG13	1:A:1013:ALA:N	2.35	0.40
1:A:184:VAL:HG23	1:A:270:GLU:HB2	2.02	0.40
1:A:260:ARG:HG3	1:A:261:ASP:N	2.36	0.40
1:A:296:ASN:N	1:A:296:ASN:OD1	2.53	0.40
1:A:571:LEU:HA	1:A:571:LEU:HD13	1.82	0.40
1:A:605:VAL:CG1	1:A:606:PHE:H	2.34	0.40
1:A:637:ARG:HA	1:A:638:PRO:HD3	1.96	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:730:ARG:NE	1:A:730:ARG:CA	2.83	0.40
1:A:552:TRP:CZ3	1:A:916:TRP:CE2	3.09	0.40
1:A:930:PHE:CD1	1:A:1015:PRO:CB	3.04	0.40
1:A:294:GLY:O	1:A:295:LYS:HD2	2.21	0.40
1:A:32:ILE:O	1:A:32:ILE:HD13	2.20	0.40
1:A:48:ILE:H	1:A:48:ILE:CD1	2.23	0.40
1:A:492:LEU:O	1:A:493:ALA:C	2.58	0.40
1:A:570:LEU:HD11	1:A:662:TRP:HB3	2.04	0.40
1:A:596:ILE:HG22	1:A:605:VAL:HG21	2.03	0.40
1:A:720:GLY:O	1:A:811:SER:HB2	2.20	0.40
1:A:896:GLU:HB2	1:A:945:LEU:HD11	2.02	0.40
1:A:518:ASN:HD21	1:A:982:ARG:HG3	1.86	0.40
1:A:330:LEU:CD2	1:A:567:GLU:HA	2.50	0.40
1:A:567:GLU:HG3	1:A:567:GLU:H	1.67	0.40
1:A:567:GLU:OE2	1:A:570:LEU:CA	2.69	0.40
1:A:700:ILE:HD11	1:A:844:ILE:CD1	2.49	0.40
1:A:187:TYR:O	1:A:768:ILE:HA	2.21	0.40
1:A:461:PHE:CD1	1:A:482:LYS:HD3	2.53	0.40
1:A:602:VAL:O	1:A:602:VAL:CG2	2.68	0.40
1:A:790:THR:HG21	1:A:794:GLN:NE2	2.31	0.40
1:A:804:ILE:O	1:A:804:ILE:CG1	2.65	0.40
1:A:700:ILE:CD1	1:A:844:ILE:HD11	2.48	0.40
1:A:8:ARG:NH1	1:A:12:ASN:OD1	2.55	0.40
1:A:198:GLN:HB2	1:A:199:TYR:HD2	1.86	0.40
1:A:224:LEU:HD23	1:A:229:TYR:CE1	2.57	0.40
1:A:354:ALA:N	1:A:360:VAL:CG1	2.85	0.40
1:A:409:VAL:HG11	1:A:450:LEU:CD1	2.47	0.40
1:A:50:LYS:HB2	1:A:92:TYR:CE2	2.56	0.40
1:A:591:LYS:O	1:A:594:LYS:HB2	2.21	0.40
1:A:797:THR:O	1:A:798:LEU:C	2.59	0.40

There are no symmetry-related clashes.

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	1008/1055 (96%)	752 (75%)	168 (17%)	88 (9%)	1	12

All (88) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	13	ARG
1	A	36	VAL
1	A	54	PRO
1	A	131	PRO
1	A	139	ILE
1	A	172	PRO
1	A	220	SER
1	A	226	GLU
1	A	292	ARG
1	A	293	SER
1	A	358	TRP
1	A	385	GLY
1	A	469	GLY
1	A	564	GLN
1	A	565	ILE
1	A	578	PRO
1	A	719	GLU
1	A	757	GLY
1	A	762	GLY
1	A	774	GLN
1	A	920	PHE
1	A	962	GLN
1	A	964	PHE
1	A	107	ARG
1	A	122	PRO
1	A	169	LYS
1	A	214	ASN
1	A	296	ASN
1	A	360	VAL
1	A	447	GLY
1	A	479	ALA
1	A	536	PRO
1	A	563	PRO
1	A	653	VAL
1	A	817	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	853	GLY
1	A	885	VAL
1	A	892	ARG
1	A	914	LEU
1	A	923	SER
1	A	965	SER
1	A	966	GLU
1	A	1002	THR
1	A	1005	GLY
1	A	1037	LEU
1	A	42	LEU
1	A	80	LYS
1	A	251	SER
1	A	297	ALA
1	A	312	LYS
1	A	316	PRO
1	A	359	HIS
1	A	448	PRO
1	A	467	LEU
1	A	636	TRP
1	A	642	MET
1	A	665	PRO
1	A	675	THR
1	A	697	ALA
1	A	715	ALA
1	A	763	ILE
1	A	959	ASN
1	A	56	GLN
1	A	79	ALA
1	A	319	VAL
1	A	652	THR
1	A	674	SER
1	A	793	LYS
1	A	829	ARG
1	A	77	PRO
1	A	132	ASP
1	A	327	ARG
1	A	779	SER
1	A	889	LEU
1	A	927	GLY
1	A	102	ASP
1	A	130	GLY

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	687	GLY
1	A	847	LYS
1	A	912	ILE
1	A	996	LEU
1	A	39	LEU
1	A	557	VAL
1	A	256	PRO
1	A	657	GLY
1	A	911	GLY
1	A	315	LEU
1	A	574	PRO

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all 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	834/872 (96%)	613 (74%)	221 (26%)	0 4

All (221) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	6	ILE
1	A	8	ARG
1	A	13	ARG
1	A	15	LEU
1	A	17	LEU
1	A	23	LEU
1	A	29	TRP
1	A	30	THR
1	A	32	ILE
1	A	37	ASP
1	A	40	PRO
1	A	42	LEU
1	A	53	TYR
1	A	60	ILE
1	A	64	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	66	THR
1	A	70	THR
1	A	83	ARG
1	A	88	PHE
1	A	96	ILE
1	A	97	PHE
1	A	99	ASP
1	A	105	TRP
1	A	108	SER
1	A	115	ASN
1	A	118	GLN
1	A	121	LEU
1	A	140	TYR
1	A	142	TYR
1	A	144	LEU
1	A	157	ARG
1	A	160	GLN
1	A	161	ASP
1	A	164	LEU
1	A	166	TYR
1	A	168	LEU
1	A	183	VAL
1	A	184	VAL
1	A	191	ILE
1	A	199	TYR
1	A	201	ILE
1	A	206	VAL
1	A	213	SER
1	A	216	GLU
1	A	222	ILE
1	A	237	LEU
1	A	240	LEU
1	A	241	ASP
1	A	259	LEU
1	A	262	VAL
1	A	271	MET
1	A	273	ARG
1	A	275	ILE
1	A	278	LEU
1	A	283	GLU
1	A	284	VAL
1	A	288	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	292	ARG
1	A	295	LYS
1	A	298	ARG
1	A	311	LEU
1	A	315	LEU
1	A	317	GLU
1	A	320	GLU
1	A	322	VAL
1	A	324	THR
1	A	328	SER
1	A	330	LEU
1	A	331	ILE
1	A	343	LEU
1	A	344	GLU
1	A	346	PHE
1	A	347	ILE
1	A	357	LEU
1	A	358	TRP
1	A	367	ILE
1	A	368	ILE
1	A	374	LEU
1	A	376	ILE
1	A	378	PHE
1	A	379	ILE
1	A	381	MET
1	A	392	SER
1	A	396	ILE
1	A	398	ILE
1	A	410	MET
1	A	421	TRP
1	A	423	HIS
1	A	433	LYS
1	A	435	ARG
1	A	436	TRP
1	A	440	THR
1	A	441	ASP
1	A	451	PHE
1	A	465	PHE
1	A	467	LEU
1	A	470	GLN
1	A	473	ARG
1	A	474	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	475	PHE
1	A	481	THR
1	A	482	LYS
1	A	484	TYR
1	A	486	MET
1	A	497	ILE
1	A	500	LEU
1	A	517	LEU
1	A	528	LEU
1	A	530	LEU
1	A	545	LEU
1	A	547	VAL
1	A	556	LYS
1	A	560	GLU
1	A	561	PHE
1	A	567	GLU
1	A	569	ASP
1	A	570	LEU
1	A	573	MET
1	A	576	THR
1	A	580	ILE
1	A	584	GLU
1	A	592	THR
1	A	596	ILE
1	A	599	VAL
1	A	606	PHE
1	A	608	LYS
1	A	623	MET
1	A	626	THR
1	A	627	THR
1	A	634	GLU
1	A	635	GLN
1	A	637	ARG
1	A	641	THR
1	A	645	ILE
1	A	646	ILE
1	A	652	THR
1	A	654	ARG
1	A	660	ASN
1	A	663	VAL
1	A	667	ARG
1	A	669	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	671	ASP
1	A	674	SER
1	A	675	THR
1	A	677	ILE
1	A	685	VAL
1	A	696	MET
1	A	700	ILE
1	A	705	ARG
1	A	707	VAL
1	A	710	VAL
1	A	728	ILE
1	A	730	ARG
1	A	740	VAL
1	A	745	LEU
1	A	755	MET
1	A	759	THR
1	A	760	VAL
1	A	765	ARG
1	A	770	LEU
1	A	771	ARG
1	A	774	GLN
1	A	775	SER
1	A	778	ASP
1	A	786	LEU
1	A	788	ILE
1	A	789	LEU
1	A	790	THR
1	A	792	MET
1	A	800	ASP
1	A	801	VAL
1	A	803	ASP
1	A	804	ILE
1	A	813	LEU
1	A	815	THR
1	A	823	TRP
1	A	826	ILE
1	A	829	ARG
1	A	831	ARG
1	A	833	MET
1	A	837	VAL
1	A	839	ASP
1	A	844	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	846	GLU
1	A	854	THR
1	A	862	PHE
1	A	865	LEU
1	A	869	ASN
1	A	872	LEU
1	A	874	LEU
1	A	878	MET
1	A	881	MET
1	A	886	LEU
1	A	888	TYR
1	A	889	LEU
1	A	899	LEU
1	A	900	ILE
1	A	904	VAL
1	A	912	ILE
1	A	914	LEU
1	A	920	PHE
1	A	930	PHE
1	A	939	GLU
1	A	943	VAL
1	A	946	MET
1	A	949	ARG
1	A	958	LEU
1	A	975	HIS
1	A	980	ARG
1	A	982	ARG
1	A	990	VAL
1	A	996	LEU
1	A	998	ILE
1	A	1008	VAL
1	A	1012	ILE
1	A	1020	MET
1	A	1021	ILE
1	A	1026	LEU
1	A	1027	SER
1	A	1035	TYR
1	A	1037	LEU

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (16) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	56	GLN
1	A	64	GLN
1	A	87	GLN
1	A	118	GLN
1	A	160	GLN
1	A	244	ASN
1	A	253	ASN
1	A	279	ASN
1	A	437	GLN
1	A	515	ASN
1	A	518	ASN
1	A	526	HIS
1	A	555	ASN
1	A	729	ASN
1	A	794	GLN
1	A	975	HIS

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 [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data [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, 95th percentile and maximum values of the occupancy-weighted average B-factor per residue. The column labelled ‘Q< 0.9’ lists the number of (and percentage) of residues with an average occupancy less than 0.9.

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	1014/1055 (96%)	-0.35	9 (0%) 84 77	127, 246, 387, 517	0

All (9) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	1000	TRP	4.2
1	A	401	GLY	4.2
1	A	849	GLN	4.1
1	A	712	SER	2.8
1	A	26	TRP	2.7
1	A	949	ARG	2.6
1	A	445	GLU	2.3
1	A	827	ASP	2.3
1	A	25	ILE	2.1

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, 95th percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled ‘Q< 0.9’ lists the number of atoms with occupancy less than 0.9.

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors(\AA^2)	Q<0.9
2	AG	A	1048	1/1	0.95	0.19	271,271,271,271	0

6.5 Other polymers ⓘ

There are no such residues in this entry.