



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 6, 2026 – 04:38 AM UTC

PDB ID : 5L5K / pdb_00005l5k
Title : Plexin A4 full extracellular region, domains 1 to 10, data to 7.5 angstrom, spacegroup P4(1)
Authors : Janssen, B.J.C.; Kong, Y.; Malinauskas, T.; Vangoor, V.R.; Coles, C.H.; Kaufmann, R.; Ni, T.; Gilbert, R.J.C.; Padilla-Parra, S.; Pasterkamp, R.J.; Jones, E.Y.
Deposited on : 2016-05-28
Resolution : 7.50 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 types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

The following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0
Xtriage (Phenix) : 2.0
EDS : 3.0
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
CCP4 : 9.0.010 (Gargrove)
Density-Fitness : 1.0.12
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.49

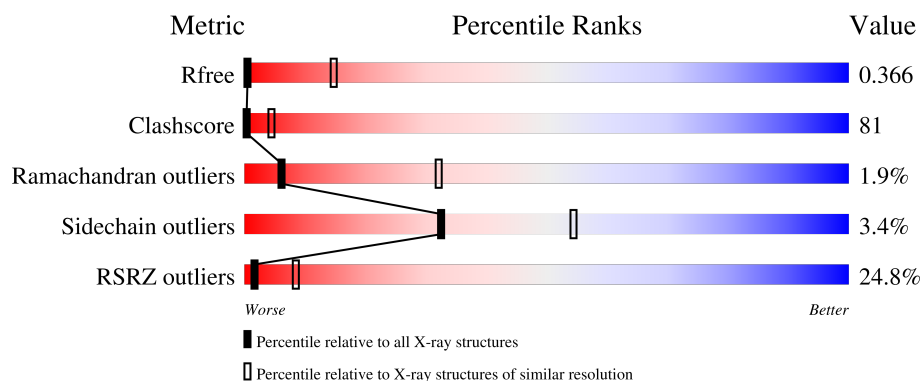
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 7.50 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}	180053	1167 (10.00-4.00)
Clashscore	190562	1000 (10.00-4.06)
Ramachandran outliers	187476	1054 (10.00-4.00)
Sidechain outliers	187428	1017 (10.00-4.00)
RSRZ outliers	180081	1161 (10.00-4.00)

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 of 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	1207	24% 30% 56% 10% ..

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 9134 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 Plexin-A4.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	1168	Total	C	N	O	S	0	0	0
			9134	5761	1572	1729	72			

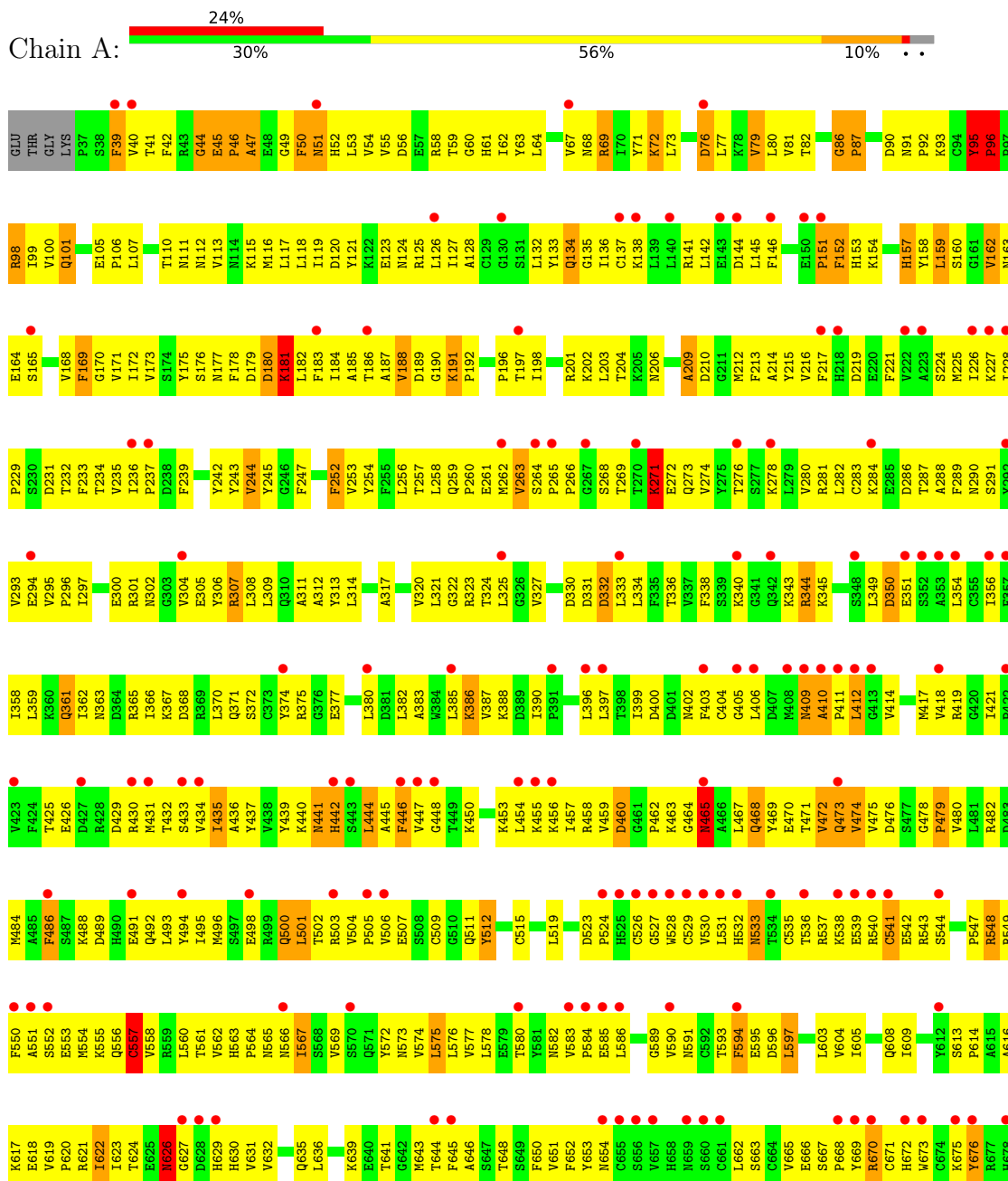
There are 13 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	33	GLU	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	34	THR	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	35	GLY	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1230	GLY	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1231	ARG	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1232	THR	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1233	LYS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1234	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1235	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1236	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1237	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1238	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1239	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2

3 Residue-property plots

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

• Molecule 1: Plexin-A4



S1194	V679	Q743	K815	N881	N941	I1003	H1063	M1131	S1194
D1195	C680	G744	A616	N882	A942	I1004	L1064	K1132	D1195
V1196	T681	T745	D817	L882	R943	C1005	D1065	M1133	V1196
Q1197	H682	E746	F820	G883	S944	N1006	L1066	T1134	Q1197
L1198	D683	Q747	F821	E884	S945	T1007	Q1067	T1135	L1198
L1199	P684	R748	C822	E885	Q946	T1008	Q1068	T1136	L1199
C1200	N685	R753	Q823	F886	L947	S1009	N1069	Y1137	C1200
E1201	T686	F754	W824	R887	T948	S1010	N1070	P1070	E1201
S1202	G687	F754	Q823	R888	Y949	E1011	Q1071	Q1071	S1202
F1203	S688	W759	C825	I889	F950	E1012	I1072	R1073	F1203
N1204	F689	Q760	Q826	A890	T952	V1013	L1073	R1073	N1204
LEU	Q690	C761	S827	S891	L953	L1014	D1015	H1076	LEU
ILE	E691	Q762	P828	H892	T954	D1016	K1016	H1076	ILE
GLY	V694	Q763	Q829	V893	L955	K1017	K1017	H1081	GLY
ARG	K695	N763	Q830	K894	A956	V1018	V1018	I1082	ARG
HIS	L696	T764	C931	V895	A956	A1018	A956	I1082	HIS
K1210	P697	S765	T832	A896	D957	T1019	N1083	N1083	K1210
V1211	P697	W766	L833	G897	L958	V1020	I1084	GLY	V1211
M1212	E698	S767	R834	V898	K959	Q1021	C1085	ILE	M1212
A1213	D699	T773	Q835	E899	P960	V1022	E1086	LEU	A1213
R1214	C700	W774	Q836	P902	R961	D1023	V1087	GLU	R1214
V1215	Q701	T774	C937	L903	R962	R1024	L1088	LYS	V1215
G1216	L702	T774	P838	V904	P964	A1025	N1089	PRO	G1216
G1217	L703	E779	A839	D905	R965	R1026	A1090	GLY	G1217
M1218	L704	W779	H840	G906	S866	I1027	A1090	GLY	M1218
E1219	R705	L780	E841	G907	S867	R1028	M1093	T1158	E1219
Y1220	V706	T781	S842	Y907	G967	Q1029	T1094	P1159	Y1220
S1221	D707	W782	R843	L908	G968	D1030	C1095	I1160	S1221
PRO	K708	W783	W844	P909	T969	L1031	Q1096	L1161	PRO
GLY	L709	W784	L845	A910	Q970	V1032	A1097	L1162	GLY
NET	L710	W785	E846	E911	V971	F1033	P1098	K1163	NET
VAL	W711	L847	L847	Q912	T972	Q1034	A1099	G1164	VAL
TYR	F712	H787	S848	I913	T973	Y1035	L1100	K1165	TYR
ILE	V713	F788	G849	V914	T974	E1037	A1101	M1166	ILE
ALA	E714	W789	A850	C915	G975	V1038	L1102	L1167	ALA
PRO	V715	D790	N851	E916	T976	D1038	G1103	I1168	PRO
GLY	L716	D791	S852	M917	N977	P1039	P1104	P1169	GLY
ARG	K717	W792	K853	G918	L978	T1040	D1105	P1170	ARG
THR	F718	F793	C884	E919	R979	I1041	H1106	V1171	THR
LYS	I719	A794	T855	A920	A980	V1042	Q1107	A1172	LYS
HIS	K722	W795	P857	K921	G981	R1043	S1108	N1175	HIS
HIS	A723	W796	P857	P922	S982	I1044	D1109	V1176	HIS
HIS	K724	W798	Q923	S923	N983	E1045	L1110	K1177	HIS
HIS	N725	W798	H824	Q924	V984	P1046	E1112	L1178	HIS
L726	L726	L800	T862	H925	V985	E1047	E1116	N1179	L726
P727	P727	Y801	P864	A926	V986	W1048	F1117	V1180	P727
Q728	Q728	X802	V865	G927	N987	S1049	G1118	T1181	Q728
P729	P729	C803	T866	F928	F988	I1050	F1119	V1182	P729
Q730	Q730	G804	G867	V929	S990	S1052	I1120	L1183	Q730
Q733	Q733	A805	P868	I931	Q991	G1053	L1121	G1185	Q733
R734	R734	R806	R869	C932	P992	N1054	D1122	E1186	R734
G735	G735	R807	E870	V933	L994	P1056	N1123	K1187	G735
Y736	Y736	S809	G871	V935	H995	I1057	V1124	P1188	Y736
I739	I739	C810	T873	C936	H996	A1058	L1127	C1189	I739
L740	L740	G811	K874	R937	R997	V1059	L1128	T1190	L740
N741	N741	L812	V875	P938	R998	W1060	I1129	V1191	N741
I742	I742	L814	T876	F940	Y1002	T1062	L1130	T1192	I742

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 41	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	220.59Å 220.59Å 65.94Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	55.15 – 7.50 55.15 – 7.50	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	98.5 (55.15-7.50) 98.4 (55.15-7.50)	Depositor EDS
R_{merge}	0.21	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	2.89 (at 7.40Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX 1.8.2_1309	Depositor
R, R_{free}	0.353 , 0.371 0.352 , 0.366	Depositor DCC
R_{free} test set	197 reflections (4.55%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	344.7	Xtriage
Anisotropy	0.661	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.40 , 616.6	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.44$, $\langle L^2 \rangle = 0.27$	Xtriage
Estimated twinning fraction	0.067 for h,-k,-l	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.70	EDS
Total number of atoms	9134	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	250.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 5.45% 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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	1.51	42/9324 (0.5%)	1.77	156/12638 (1.2%)

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

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	4

All (42) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	700	CYS	C-N	44.45	1.72	1.33
1	A	854	CYS	C-N	-34.83	0.85	1.33
1	A	557	CYS	C-N	-14.01	1.15	1.33
1	A	49	GLY	C-N	9.89	1.45	1.33
1	A	180	ASP	C-N	7.55	1.44	1.33
1	A	49	GLY	CA-C	7.18	1.62	1.51
1	A	626	ASN	CG-OD1	6.91	1.36	1.23
1	A	163	ASN	CG-OD1	6.89	1.36	1.23
1	A	500	GLN	CD-OE1	6.87	1.36	1.23
1	A	101	GLN	CD-OE1	6.86	1.36	1.23
1	A	50	PHE	N-CA	6.84	1.53	1.46
1	A	473	GLN	CD-OE1	6.83	1.36	1.23
1	A	792	ASN	CG-OD1	6.81	1.36	1.23
1	A	51	ASN	CG-OD1	6.79	1.36	1.23
1	A	970	GLN	CD-OE1	6.79	1.36	1.23
1	A	273	GLN	CD-OE1	6.79	1.36	1.23
1	A	702	GLN	CD-OE1	6.78	1.36	1.23
1	A	826	GLN	CD-OE1	6.78	1.36	1.23
1	A	361	GLN	CD-OE1	6.78	1.36	1.23
1	A	533	ASN	CG-OD1	6.78	1.36	1.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	728	GLN	CD-OE1	6.78	1.36	1.23
1	A	1068	GLN	CD-OE1	6.76	1.36	1.23
1	A	747	GLN	CD-OE1	6.76	1.36	1.23
1	A	983	ASN	CG-OD1	6.76	1.36	1.23
1	A	1006	ASN	CG-OD1	6.75	1.36	1.23
1	A	409	ASN	CG-OD1	6.74	1.36	1.23
1	A	441	ASN	CG-OD1	6.73	1.36	1.23
1	A	685	ASN	CG-OD1	6.73	1.36	1.23
1	A	1175	ASN	CG-OD1	6.73	1.36	1.23
1	A	789	ASN	CG-OD1	6.71	1.36	1.23
1	A	690	GLN	CD-OE1	6.71	1.36	1.23
1	A	1179	ASN	CG-OD1	6.71	1.36	1.23
1	A	157	HIS	ND1-CE1	6.47	1.39	1.32
1	A	836	HIS	ND1-CE1	6.38	1.39	1.32
1	A	1063	HIS	ND1-CE1	6.34	1.38	1.32
1	A	1081	HIS	ND1-CE1	6.31	1.38	1.32
1	A	46	PRO	N-CA	-6.30	1.41	1.47
1	A	630	HIS	ND1-CE1	6.23	1.38	1.32
1	A	442	HIS	ND1-CE1	6.22	1.38	1.32
1	A	672	HIS	ND1-CE1	6.11	1.38	1.32
1	A	711	VAL	CA-CB	-5.19	1.50	1.54
1	A	465	ASN	C-N	5.16	1.41	1.33

All (156) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	747	GLN	CG-CD-NE2	-48.30	43.95	116.40
1	A	557	CYS	CA-C-N	-37.03	74.63	123.14
1	A	557	CYS	C-N-CA	-37.03	74.63	123.14
1	A	747	GLN	OE1-CD-NE2	15.07	137.67	122.60
1	A	747	GLN	CG-CD-OE1	-13.54	93.71	120.80
1	A	843	ARG	CA-C-N	11.66	141.12	122.81
1	A	843	ARG	C-N-CA	11.66	141.12	122.81
1	A	892	HIS	CA-CB-CG	10.93	124.73	113.80
1	A	478	GLY	CA-C-N	10.15	132.53	119.84
1	A	478	GLY	C-N-CA	10.15	132.53	119.84
1	A	479	PRO	N-CA-C	10.12	133.31	112.47
1	A	473	GLN	CA-C-N	-9.44	104.98	121.97
1	A	473	GLN	C-N-CA	-9.44	104.98	121.97
1	A	478	GLY	CA-C-O	-9.31	108.20	121.52
1	A	940	PHE	CA-CB-CG	-9.14	104.66	113.80
1	A	221	PHE	CA-CB-CG	-9.10	104.70	113.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	594	PHE	CA-CB-CG	-8.85	104.95	113.80
1	A	446	PHE	CA-CB-CG	-8.37	105.43	113.80
1	A	45	GLU	N-CA-C	-8.01	101.85	112.75
1	A	754	PHE	CA-CB-CG	-7.97	105.83	113.80
1	A	46	PRO	N-CA-CB	7.87	107.33	102.92
1	A	1045	GLU	CA-C-N	-7.72	110.18	119.84
1	A	1045	GLU	C-N-CA	-7.72	110.18	119.84
1	A	330	ASP	CA-CB-CG	-7.68	104.92	112.60
1	A	473	GLN	N-CA-C	-7.51	103.38	112.54
1	A	844	TRP	N-CA-C	-7.42	97.84	109.72
1	A	45	GLU	CA-C-N	-7.35	111.23	120.79
1	A	45	GLU	C-N-CA	-7.35	111.23	120.79
1	A	188	VAL	N-CA-C	7.25	118.04	111.81
1	A	1204	ASN	CA-CB-CG	-7.12	105.48	112.60
1	A	152	PHE	CA-CB-CG	-7.10	106.70	113.80
1	A	169	PHE	CA-CB-CG	-6.90	106.90	113.80
1	A	854	CYS	O-C-N	-6.87	113.05	122.81
1	A	46	PRO	CB-CA-C	6.83	117.61	111.87
1	A	46	PRO	N-CA-C	-6.78	99.49	110.74
1	A	988	PHE	CA-CB-CG	-6.74	107.06	113.80
1	A	47	ALA	N-CA-C	-6.64	104.28	112.38
1	A	486	PHE	CA-CB-CG	-6.63	107.17	113.80
1	A	1023	ASP	CA-CB-CG	-6.61	105.99	112.60
1	A	363	ASN	CA-CB-CG	-6.61	105.99	112.60
1	A	1011	GLU	N-CA-C	-6.60	104.12	111.71
1	A	596	ASP	CA-CB-CG	-6.55	106.05	112.60
1	A	49	GLY	CA-C-N	6.44	135.72	121.81
1	A	49	GLY	C-N-CA	6.44	135.72	121.81
1	A	95	TYR	N-CA-C	-6.43	102.59	110.31
1	A	919	GLU	CA-C-N	6.40	134.74	121.94
1	A	919	GLU	C-N-CA	6.40	134.74	121.94
1	A	134	GLN	N-CA-C	-6.38	104.02	113.40
1	A	476	ASP	CA-C-N	-6.36	113.73	123.14
1	A	476	ASP	C-N-CA	-6.36	113.73	123.14
1	A	39	PHE	CA-CB-CG	-6.34	107.46	113.80
1	A	973	ILE	CB-CA-C	-6.34	103.29	110.96
1	A	741	ASN	CA-CB-CG	-6.32	106.28	112.60
1	A	1046	PRO	N-CA-C	-6.31	99.48	112.47
1	A	79	VAL	CB-CA-C	-6.29	104.44	111.23
1	A	183	PHE	CA-CB-CG	-6.20	107.60	113.80
1	A	1117	PHE	CA-CB-CG	-6.19	107.61	113.80
1	A	441	ASN	CA-CB-CG	-6.17	106.43	112.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	928	PHE	CA-CB-CG	-6.17	107.63	113.80
1	A	622	ILE	CB-CA-C	-6.14	103.97	112.02
1	A	307	ARG	N-CA-C	6.08	120.69	113.28
1	A	51	ASN	CA-CB-CG	-6.03	106.57	112.60
1	A	512	TYR	CA-C-N	6.03	128.85	120.29
1	A	512	TYR	C-N-CA	6.03	128.85	120.29
1	A	209	ALA	CA-C-N	6.01	129.45	120.31
1	A	209	ALA	C-N-CA	6.01	129.45	120.31
1	A	573	ASN	CA-CB-CG	-6.01	106.58	112.60
1	A	803	CYS	CA-C-N	5.93	133.03	121.41
1	A	803	CYS	C-N-CA	5.93	133.03	121.41
1	A	854	CYS	CA-C-N	-5.92	112.42	123.03
1	A	854	CYS	C-N-CA	-5.92	112.42	123.03
1	A	86	GLY	O-C-N	5.91	127.68	121.77
1	A	924	GLN	N-CA-C	5.89	117.70	111.28
1	A	1053	GLY	CA-C-N	5.87	131.19	122.74
1	A	1053	GLY	C-N-CA	5.87	131.19	122.74
1	A	1045	GLU	CA-C-O	-5.86	112.14	120.16
1	A	805	ALA	CA-C-N	5.84	130.60	120.68
1	A	805	ALA	C-N-CA	5.84	130.60	120.68
1	A	290	ASN	CA-CB-CG	-5.81	106.79	112.60
1	A	409	ASN	CA-C-N	5.79	135.92	121.80
1	A	409	ASN	C-N-CA	5.79	135.92	121.80
1	A	805	ALA	N-CA-C	-5.78	104.58	111.69
1	A	630	HIS	CB-CG-CD2	-5.77	123.70	131.20
1	A	244	VAL	N-CA-C	5.75	115.98	110.74
1	A	60	GLY	N-CA-C	-5.75	107.38	115.32
1	A	331	ASP	CA-CB-CG	-5.75	106.85	112.60
1	A	157	HIS	CB-CG-CD2	-5.68	123.81	131.20
1	A	829	GLY	N-CA-C	-5.67	106.34	115.08
1	A	1057	ILE	CA-C-N	-5.67	115.47	122.84
1	A	1057	ILE	C-N-CA	-5.67	115.47	122.84
1	A	676	TYR	CA-CB-CG	-5.66	103.71	113.90
1	A	153	HIS	N-CA-C	5.64	117.11	111.07
1	A	1175	ASN	N-CA-C	-5.63	103.84	111.55
1	A	621	ARG	N-CA-C	-5.63	105.15	111.28
1	A	476	ASP	CA-CB-CG	-5.61	106.99	112.60
1	A	699	ASP	CA-CB-CG	-5.60	107.00	112.60
1	A	460	ASP	CA-CB-CG	-5.58	107.02	112.60
1	A	332	ASP	CA-CB-CG	-5.56	107.04	112.60
1	A	541	CYS	CB-CA-C	-5.56	101.17	110.29
1	A	840	HIS	N-CA-C	-5.54	105.32	111.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	683	ASP	CA-CB-CG	-5.54	107.06	112.60
1	A	1063	HIS	CB-CG-CD2	-5.53	124.02	131.20
1	A	1199	LEU	CB-CA-C	-5.48	103.72	112.05
1	A	1123	ASN	CA-CB-CG	-5.48	107.12	112.60
1	A	252	PHE	CA-CB-CG	-5.45	108.36	113.80
1	A	76	ASP	CA-CB-CG	-5.43	107.17	112.60
1	A	1175	ASN	CA-CB-CG	-5.43	107.17	112.60
1	A	977	ASN	CA-CB-CG	-5.42	107.18	112.60
1	A	95	TYR	N-CA-CB	5.38	115.86	109.72
1	A	96	PRO	N-CA-CB	5.36	108.28	103.08
1	A	1081	HIS	CB-CG-CD2	-5.35	124.24	131.20
1	A	956	ALA	N-CA-C	5.34	118.26	111.69
1	A	237	PRO	CA-C-N	5.33	131.97	121.58
1	A	237	PRO	C-N-CA	5.33	131.97	121.58
1	A	881	ASN	CB-CA-C	-5.32	103.94	111.76
1	A	302	ASN	CA-CB-CG	-5.31	107.29	112.60
1	A	350	ASP	CA-CB-CG	-5.30	107.30	112.60
1	A	672	HIS	CB-CG-CD2	-5.30	124.31	131.20
1	A	1006	ASN	CA-CB-CG	-5.30	107.30	112.60
1	A	152	PHE	N-CA-C	5.26	119.83	113.41
1	A	691	GLU	CA-C-N	5.25	130.13	120.79
1	A	691	GLU	C-N-CA	5.25	130.13	120.79
1	A	159	LEU	N-CA-C	5.23	117.78	111.40
1	A	565	ASN	CA-CB-CG	-5.21	107.39	112.60
1	A	1029	GLN	CA-C-N	5.21	127.78	120.28
1	A	1029	GLN	C-N-CA	5.21	127.78	120.28
1	A	1119	PHE	CA-CB-CG	-5.19	108.61	113.80
1	A	151	PRO	CA-C-N	5.17	131.34	122.09
1	A	151	PRO	C-N-CA	5.17	131.34	122.09
1	A	287	THR	CA-C-N	5.14	128.12	120.31
1	A	287	THR	C-N-CA	5.14	128.12	120.31
1	A	630	HIS	CB-CG-ND1	5.12	130.37	122.70
1	A	774	ASN	CB-CA-C	-5.11	102.86	110.88
1	A	886	PHE	CA-CB-CG	-5.11	108.69	113.80
1	A	157	HIS	CB-CG-ND1	5.10	130.35	122.70
1	A	1131	ASN	CA-CB-CG	-5.10	107.50	112.60
1	A	163	ASN	CA-CB-CG	-5.10	107.50	112.60
1	A	472	VAL	CA-C-N	-5.08	112.23	120.72
1	A	472	VAL	C-N-CA	-5.08	112.23	120.72
1	A	855	THR	CA-C-N	5.08	128.31	122.83
1	A	855	THR	C-N-CA	5.08	128.31	122.83
1	A	442	HIS	CB-CG-CD2	-5.07	124.61	131.20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	215	TYR	CA-CB-CG	-5.07	104.78	113.90
1	A	512	TYR	CA-CB-CG	-5.07	104.78	113.90
1	A	844	TRP	CA-C-N	-5.07	116.01	123.00
1	A	844	TRP	C-N-CA	-5.07	116.01	123.00
1	A	181	LYS	N-CA-C	5.05	121.56	110.80
1	A	1063	HIS	CB-CG-ND1	5.04	130.27	122.70
1	A	162	VAL	CA-C-N	5.04	129.96	121.14
1	A	162	VAL	C-N-CA	5.04	129.96	121.14
1	A	1099	ALA	CA-C-N	5.04	131.44	122.06
1	A	1099	ALA	C-N-CA	5.04	131.44	122.06
1	A	788	PHE	CA-CB-CG	-5.02	108.78	113.80
1	A	50	PHE	N-CA-C	5.01	116.03	108.46
1	A	1038	ASP	CA-C-N	5.00	124.98	120.03
1	A	1038	ASP	C-N-CA	5.00	124.98	120.03

There are no chirality outliers.

All (4) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	557	CYS	Mainchain
1	A	854	CYS	Mainchain
1	A	863	ILE	Peptide
1	A	95	TYR	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	9134	0	8998	1462	10
All	All	9134	0	8998	1462	10

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 81.

All (1462) 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:440:LYS:CD	1:A:538:LYS:HD2	1.28	1.55
1:A:700:CYS:C	1:A:701:PRO:N	1.72	1.47
1:A:854:CYS:C	1:A:855:THR:CA	1.93	1.42
1:A:440:LYS:HD3	1:A:538:LYS:CD	1.51	1.41
1:A:530:VAL:HG11	1:A:584:PRO:CD	1.50	1.38
1:A:458:ARG:CD	1:A:524:PRO:HG3	1.64	1.28
1:A:1109:ASP:OD1	1:A:1170:PRO:CG	1.81	1.27
1:A:1109:ASP:OD1	1:A:1170:PRO:HG2	1.22	1.27
1:A:440:LYS:CD	1:A:538:LYS:CD	2.08	1.26
1:A:1109:ASP:CG	1:A:1170:PRO:HG2	1.61	1.25
1:A:854:CYS:CA	1:A:855:THR:N	1.96	1.25
1:A:458:ARG:CD	1:A:524:PRO:CG	2.15	1.24
1:A:653:TYR:C	1:A:654:ASN:N	2.01	1.19
1:A:854:CYS:O	1:A:855:THR:N	1.75	1.18
1:A:295:VAL:HG12	1:A:414:VAL:HG11	1.27	1.17
1:A:1036:VAL:C	1:A:1037:GLU:N	2.02	1.17
1:A:967:GLY:O	1:A:1122:ASP:OD2	1.62	1.16
1:A:458:ARG:HD2	1:A:524:PRO:CG	1.73	1.16
1:A:530:VAL:CG1	1:A:584:PRO:CD	2.24	1.15
1:A:531:LEU:HD21	1:A:584:PRO:HB2	1.21	1.15
1:A:324:THR:HB	1:A:462:PRO:HB3	1.27	1.14
1:A:435:ILE:HG22	1:A:446:PHE:HB2	1.22	1.13
1:A:872:GLY:C	1:A:1023:ASP:HB3	1.75	1.12
1:A:359:LEU:HD12	1:A:362:ILE:HD11	1.24	1.11
1:A:530:VAL:HG11	1:A:584:PRO:HD2	1.17	1.11
1:A:453:LYS:HG2	1:A:472:VAL:HG22	1.25	1.10
1:A:916:GLU:OE2	1:A:1024:ARG:NH2	1.82	1.10
1:A:118:LEU:HD12	1:A:172:ILE:HD12	1.17	1.09
1:A:809:SER:HB2	1:A:881:ASN:HD21	1.09	1.09
1:A:474:VAL:HG12	1:A:475:VAL:HG23	1.33	1.08
1:A:225:MET:HE1	1:A:227:LYS:HG3	1.31	1.08
1:A:531:LEU:HD23	1:A:584:PRO:HG2	1.14	1.08
1:A:653:TYR:O	1:A:654:ASN:N	1.85	1.08
1:A:1109:ASP:OD1	1:A:1170:PRO:CD	2.01	1.07
1:A:531:LEU:CD2	1:A:584:PRO:HG2	1.84	1.07
1:A:1063:HIS:HB3	1:A:1066:LEU:HD12	1.37	1.07
1:A:301:ARG:HD2	1:A:425:THR:HG21	1.37	1.06
1:A:806:MET:H	1:A:806:MET:HE3	1.16	1.06
1:A:560:LEU:HD23	1:A:648:THR:HG23	1.37	1.06
1:A:458:ARG:HD3	1:A:524:PRO:HG3	1.19	1.06
1:A:530:VAL:HG11	1:A:584:PRO:HD3	1.37	1.06
1:A:1017:LYS:HE2	1:A:1017:LYS:H	1.19	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:595:GLU:HB2	1:A:597:LEU:HD23	1.32	1.05
1:A:1191:VAL:HG22	1:A:1200:CYS:HA	1.34	1.05
1:A:530:VAL:CG1	1:A:584:PRO:HD2	1.84	1.04
1:A:1016:MET:HE2	1:A:1033:PHE:HB3	1.35	1.04
1:A:872:GLY:HA3	1:A:1024:ARG:HG2	1.38	1.04
1:A:458:ARG:HD3	1:A:524:PRO:CG	1.84	1.04
1:A:872:GLY:CA	1:A:1024:ARG:HG2	1.87	1.04
1:A:531:LEU:CD2	1:A:584:PRO:HB2	1.89	1.03
1:A:531:LEU:HD21	1:A:584:PRO:CB	1.88	1.03
1:A:1111:THR:HG21	1:A:1136:THR:HG23	1.39	1.03
1:A:46:PRO:HG2	1:A:69:ARG:HG3	1.41	1.03
1:A:440:LYS:HD2	1:A:538:LYS:HD2	1.06	1.01
1:A:494:TYR:HB3	1:A:501:LEU:HD21	1.40	1.00
1:A:872:GLY:O	1:A:1023:ASP:HB3	1.61	0.99
1:A:620:PRO:HA	1:A:623:ILE:HG13	1.41	0.99
1:A:444:LEU:HD12	1:A:446:PHE:CE1	1.98	0.99
1:A:117:LEU:HD11	1:A:126:LEU:HD21	1.45	0.98
1:A:531:LEU:CD2	1:A:584:PRO:CG	2.42	0.98
1:A:1109:ASP:OD1	1:A:1170:PRO:HD2	1.62	0.97
1:A:1072:ILE:HD11	1:A:1117:PHE:HZ	1.28	0.97
1:A:563:HIS:HB3	1:A:564:PRO:HD3	1.44	0.97
1:A:862:ILE:HG22	1:A:877:ILE:HA	1.46	0.97
1:A:1051:VAL:HB	1:A:1140:ASN:N	1.78	0.96
1:A:1036:VAL:O	1:A:1037:GLU:N	1.99	0.95
1:A:458:ARG:CD	1:A:524:PRO:CB	2.43	0.95
1:A:873:THR:HA	1:A:1023:ASP:OD2	1.66	0.95
1:A:854:CYS:C	1:A:855:THR:N	0.85	0.95
1:A:949:TYR:HE2	1:A:951:MET:HE2	1.31	0.95
1:A:802:LYS:C	1:A:803:CYS:N	2.24	0.95
1:A:531:LEU:HD23	1:A:584:PRO:CG	1.97	0.94
1:A:297:ILE:HG22	1:A:418:VAL:HG12	1.49	0.94
1:A:566:ASN:HA	1:A:651:VAL:HG23	1.49	0.94
1:A:1016:MET:HE2	1:A:1033:PHE:CB	1.97	0.94
1:A:809:SER:HB2	1:A:881:ASN:ND2	1.80	0.94
1:A:72:LYS:HE3	1:A:80:LEU:HD13	1.49	0.94
1:A:951:MET:C	1:A:952:THR:N	2.26	0.94
1:A:1067:ILE:HG21	1:A:1121:LEU:HD22	1.50	0.94
1:A:151:PRO:HB2	1:A:157:HIS:CD2	2.03	0.93
1:A:1118:GLY:HA2	1:A:1130:LEU:HD13	1.48	0.93
1:A:297:ILE:HG22	1:A:418:VAL:CG1	1.97	0.93
1:A:1067:ILE:HG23	1:A:1070:PRO:HG3	1.49	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:458:ARG:HD2	1:A:524:PRO:CB	1.99	0.93
1:A:863:ILE:HG22	1:A:876:THR:HB	1.48	0.93
1:A:62:ILE:CG1	1:A:73:LEU:HB2	1.98	0.93
1:A:527:GLY:HA3	1:A:550:PHE:CZ	2.04	0.92
1:A:435:ILE:HD13	1:A:436:ALA:H	1.34	0.92
1:A:804:GLY:HA2	1:A:806:MET:SD	2.09	0.92
1:A:1036:VAL:CG2	1:A:1066:LEU:HD13	1.99	0.92
1:A:39:PHE:CE2	1:A:473:GLN:HG3	2.05	0.92
1:A:225:MET:HE1	1:A:227:LYS:CG	1.99	0.92
1:A:239:PHE:HA	1:A:260:PRO:HG2	1.51	0.92
1:A:569:VAL:HB	1:A:654:ASN:HB2	1.50	0.92
1:A:865:VAL:HG13	1:A:866:THR:HG23	1.50	0.92
1:A:271:LYS:HG3	1:A:272:GLU:H	1.34	0.91
1:A:873:THR:HA	1:A:1023:ASP:CG	1.94	0.91
1:A:42:PHE:HE1	1:A:79:VAL:HG22	1.31	0.90
1:A:676:TYR:CE1	1:A:728:GLN:O	2.25	0.90
1:A:933:VAL:HG23	1:A:934:ALA:H	1.36	0.90
1:A:531:LEU:CD2	1:A:584:PRO:CB	2.48	0.90
1:A:532:HIS:O	1:A:641:THR:HG21	1.71	0.90
1:A:1121:LEU:HD12	1:A:1127:LEU:CD2	2.02	0.90
1:A:447:VAL:HG22	1:A:455:LYS:HB2	1.53	0.89
1:A:806:MET:SD	1:A:807:ARG:HG3	2.11	0.89
1:A:809:SER:CB	1:A:881:ASN:HD21	1.86	0.89
1:A:446:PHE:HD2	1:A:454:LEU:HD21	1.38	0.89
1:A:359:LEU:CD1	1:A:362:ILE:HD11	2.02	0.89
1:A:447:VAL:CG2	1:A:455:LYS:HB2	2.03	0.89
1:A:95:TYR:CD2	1:A:96:PRO:HD3	2.08	0.89
1:A:854:CYS:O	1:A:855:THR:CA	2.13	0.88
1:A:486:PHE:CD1	1:A:493:LEU:HD13	2.09	0.88
1:A:196:PRO:HB3	1:A:225:MET:HE2	1.53	0.88
1:A:181:LYS:CD	1:A:202:LYS:HA	2.04	0.88
1:A:951:MET:O	1:A:952:THR:N	2.07	0.88
1:A:972:THR:HG23	1:A:1002:TYR:CE1	2.07	0.88
1:A:453:LYS:CG	1:A:472:VAL:HG22	2.03	0.88
1:A:874:LYS:HB2	1:A:982:SER:CB	2.04	0.87
1:A:892:HIS:HB2	1:A:932:CYS:O	1.73	0.87
1:A:1067:ILE:HD13	1:A:1121:LEU:CD2	2.05	0.87
1:A:873:THR:HG23	1:A:981:GLY:HA2	1.54	0.87
1:A:110:THR:CG2	1:A:132:LEU:HD21	2.05	0.87
1:A:1111:THR:HG21	1:A:1136:THR:CG2	2.04	0.86
1:A:1057:ILE:CG2	1:A:1095:CYS:HB2	2.05	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:39:PHE:CE1	1:A:505:PRO:HD2	2.11	0.86
1:A:863:ILE:HG23	1:A:864:PRO:HD2	1.56	0.86
1:A:1076:HIS:HB2	1:A:1100:LEU:HD22	1.57	0.86
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:H	1.39	0.86
1:A:118:LEU:HD12	1:A:172:ILE:CD1	2.05	0.86
1:A:256:LEU:HB3	1:A:309:LEU:HD22	1.56	0.86
1:A:370:LEU:CD1	1:A:399:ILE:HD12	2.05	0.86
1:A:473:GLN:CG	1:A:504:VAL:HG22	2.06	0.86
1:A:874:LYS:HB2	1:A:982:SER:HB2	1.58	0.86
1:A:295:VAL:HA	1:A:414:VAL:CG2	2.06	0.86
1:A:471:THR:HG21	1:A:473:GLN:HE22	1.40	0.86
1:A:1193:VAL:HG12	1:A:1198:LEU:CD2	2.06	0.86
1:A:118:LEU:HD13	1:A:119:ILE:N	1.91	0.85
1:A:1072:ILE:HG23	1:A:1098:PRO:HG3	1.58	0.85
1:A:133:TYR:CG	1:A:136:ILE:HG12	2.12	0.85
1:A:603:LEU:HD23	1:A:604:VAL:N	1.90	0.85
1:A:295:VAL:CG1	1:A:414:VAL:HG11	2.07	0.85
1:A:435:ILE:CG2	1:A:446:PHE:HB2	2.06	0.85
1:A:989:GLY:HA2	1:A:1017:LYS:HE3	1.57	0.85
1:A:882:LEU:HB2	1:A:910:ALA:HA	1.58	0.85
1:A:959:LYS:HB2	1:A:972:THR:HB	1.57	0.85
1:A:440:LYS:HD3	1:A:538:LYS:HD3	1.56	0.85
1:A:676:TYR:HE1	1:A:728:GLN:O	1.57	0.85
1:A:706:VAL:HG22	1:A:707:ASP:H	1.42	0.84
1:A:830:GLN:HG2	1:A:831:CYS:H	1.43	0.84
1:A:863:ILE:CG2	1:A:876:THR:HB	2.07	0.84
1:A:971:VAL:HG22	1:A:1005:CYS:O	1.78	0.84
1:A:42:PHE:CZ	1:A:45:GLU:HB2	2.12	0.84
1:A:1067:ILE:HD13	1:A:1121:LEU:HD22	1.57	0.84
1:A:473:GLN:NE2	1:A:504:VAL:HG13	1.93	0.84
1:A:50:PHE:HB2	1:A:498:GLU:O	1.78	0.84
1:A:847:LEU:CD1	1:A:884:LEU:HD12	2.08	0.83
1:A:356:ILE:CG2	1:A:421:ILE:HB	2.07	0.83
1:A:854:CYS:O	1:A:855:THR:HA	1.76	0.83
1:A:100:VAL:HG12	1:A:101:GLN:HG3	1.58	0.83
1:A:1067:ILE:CG2	1:A:1070:PRO:HG3	2.08	0.83
1:A:996:HIS:HB3	1:A:1004:ILE:HG23	1.59	0.83
1:A:1160:ILE:CG2	1:A:1200:CYS:HB3	2.09	0.83
1:A:358:ILE:HG23	1:A:361:GLN:H	1.44	0.83
1:A:847:LEU:HD11	1:A:850:ALA:HA	1.58	0.83
1:A:987:MET:HB2	1:A:1019:THR:CG2	2.09	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1057:ILE:HG22	1:A:1095:CYS:O	1.79	0.83
1:A:336:THR:O	1:A:354:LEU:HD12	1.78	0.82
1:A:356:ILE:HG22	1:A:421:ILE:HB	1.61	0.82
1:A:991:GLN:CG	1:A:1008:THR:HG21	2.10	0.82
1:A:133:TYR:CB	1:A:136:ILE:HG12	2.09	0.82
1:A:229:PRO:O	1:A:232:THR:HG22	1.79	0.82
1:A:847:LEU:HD12	1:A:852:SER:HB3	1.58	0.82
1:A:53:LEU:HD23	1:A:54:VAL:N	1.94	0.82
1:A:854:CYS:C	1:A:855:THR:HA	2.01	0.82
1:A:1124:VAL:CG1	1:A:1127:LEU:HD13	2.09	0.82
1:A:1193:VAL:HG12	1:A:1198:LEU:HD22	1.60	0.82
1:A:506:VAL:O	1:A:507:GLU:N	2.12	0.82
1:A:1130:LEU:HB3	1:A:1133:THR:HG23	1.59	0.82
1:A:40:VAL:CG1	1:A:503:ARG:HB3	2.08	0.82
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CE1	2.15	0.82
1:A:1036:VAL:HG21	1:A:1066:LEU:HD13	1.60	0.82
1:A:1016:MET:HE3	1:A:1016:MET:O	1.79	0.82
1:A:1191:VAL:HG13	1:A:1199:LEU:C	2.05	0.82
1:A:785:ASN:HB3	1:A:788:PHE:CD2	2.14	0.82
1:A:873:THR:CG2	1:A:981:GLY:HA2	2.09	0.82
1:A:1118:GLY:HA2	1:A:1130:LEU:CD1	2.10	0.82
1:A:295:VAL:HA	1:A:414:VAL:HG22	1.60	0.81
1:A:42:PHE:CE1	1:A:79:VAL:HG22	2.14	0.81
1:A:1124:VAL:HG12	1:A:1127:LEU:HD13	1.62	0.81
1:A:44:GLY:HA2	1:A:50:PHE:CE2	2.15	0.81
1:A:397:LEU:HD23	1:A:399:ILE:CD1	2.10	0.81
1:A:440:LYS:NZ	1:A:538:LYS:CD	2.43	0.81
1:A:397:LEU:HD23	1:A:399:ILE:HD13	1.60	0.81
1:A:53:LEU:HB2	1:A:496:MET:HE3	1.62	0.81
1:A:62:ILE:HG13	1:A:73:LEU:HB2	1.62	0.81
1:A:440:LYS:HZ3	1:A:538:LYS:HD3	1.44	0.81
1:A:569:VAL:CB	1:A:654:ASN:HB2	2.11	0.81
1:A:863:ILE:HG13	1:A:864:PRO:HD3	1.62	0.81
1:A:474:VAL:HG22	1:A:495:ILE:HG21	1.61	0.81
1:A:926:ALA:HB1	1:A:947:LEU:HD12	1.63	0.81
1:A:533:ASN:OD1	1:A:643:MET:C	2.24	0.80
1:A:623:ILE:HD12	1:A:624:THR:N	1.96	0.80
1:A:994:LEU:CD1	1:A:1006:ASN:HB2	2.12	0.80
1:A:154:LYS:HD3	1:A:210:ASP:OD1	1.81	0.80
1:A:370:LEU:HD12	1:A:399:ILE:HD12	1.63	0.80
1:A:321:LEU:HD12	1:A:462:PRO:HG2	1.64	0.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:440:LYS:HD3	1:A:538:LYS:HZ2	1.44	0.80
1:A:486:PHE:CE1	1:A:493:LEU:HD13	2.16	0.80
1:A:949:TYR:CE2	1:A:951:MET:HE2	2.15	0.80
1:A:530:VAL:CG1	1:A:584:PRO:CG	2.59	0.80
1:A:872:GLY:N	1:A:1024:ARG:HG2	1.96	0.80
1:A:444:LEU:HD13	1:A:445:ALA:N	1.97	0.80
1:A:889:ILE:HG23	1:A:892:HIS:CE1	2.16	0.80
1:A:872:GLY:HA3	1:A:1024:ARG:H	1.46	0.80
1:A:439:TYR:OH	1:A:537:ARG:HB3	1.83	0.79
1:A:1067:ILE:CD1	1:A:1121:LEU:HA	2.12	0.79
1:A:1167:LEU:HB2	1:A:1195:ASP:O	1.82	0.79
1:A:1180:TYR:HA	1:A:1215:VAL:HG12	1.62	0.79
1:A:239:PHE:CE1	1:A:260:PRO:HD2	2.17	0.79
1:A:192:PRO:HB3	1:A:233:PHE:CE1	2.17	0.79
1:A:380:LEU:HD12	1:A:386:LYS:HE3	1.64	0.79
1:A:972:THR:HA	1:A:1002:TYR:HE1	1.47	0.79
1:A:1070:PRO:HB3	1:A:1121:LEU:HD21	1.64	0.79
1:A:314:LEU:HD11	1:A:332:ASP:HB3	1.64	0.79
1:A:620:PRO:HA	1:A:623:ILE:CG1	2.12	0.79
1:A:847:LEU:CG	1:A:850:ALA:HA	2.13	0.79
1:A:994:LEU:HD11	1:A:1006:ASN:HB2	1.62	0.79
1:A:1121:LEU:HD12	1:A:1127:LEU:HD23	1.63	0.79
1:A:317:ALA:HB1	1:A:321:LEU:HB3	1.64	0.78
1:A:1191:VAL:HG13	1:A:1199:LEU:O	1.83	0.78
1:A:440:LYS:HD3	1:A:538:LYS:CE	2.13	0.78
1:A:591:ASN:OD1	1:A:639:LYS:HE2	1.83	0.78
1:A:56:ASP:OD2	1:A:142:LEU:HD11	1.83	0.78
1:A:629:HIS:CD2	1:A:669:TYR:HE1	2.00	0.78
1:A:847:LEU:CD2	1:A:884:LEU:HD13	2.14	0.78
1:A:1014:LEU:H	1:A:1014:LEU:HD22	1.48	0.78
1:A:44:GLY:HA2	1:A:50:PHE:HE2	1.44	0.78
1:A:168:VAL:HG23	1:A:185:ALA:O	1.84	0.78
1:A:295:VAL:HG12	1:A:414:VAL:CG1	2.09	0.78
1:A:324:THR:HB	1:A:462:PRO:CB	2.10	0.78
1:A:533:ASN:OD1	1:A:643:MET:O	2.02	0.78
1:A:917:MET:HE1	1:A:948:TYR:OH	1.84	0.78
1:A:453:LYS:HE3	1:A:472:VAL:CG2	2.13	0.78
1:A:699:ASP:O	1:A:725:ASN:OD1	2.01	0.78
1:A:715:VAL:HG21	1:A:717:LYS:HD2	1.65	0.78
1:A:806:MET:H	1:A:806:MET:CE	1.97	0.78
1:A:231:ASP:O	1:A:234:THR:HG22	1.84	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:284:LYS:O	1:A:284:LYS:HD3	1.84	0.77
1:A:458:ARG:HD2	1:A:524:PRO:HG2	1.63	0.77
1:A:987:MET:HE2	1:A:990:SER:HA	1.65	0.77
1:A:1109:ASP:OD2	1:A:1170:PRO:HG2	1.83	0.77
1:A:244:VAL:HG13	1:A:482:ARG:NH1	1.98	0.77
1:A:278:LYS:HE3	1:A:296:PRO:HG3	1.67	0.77
1:A:994:LEU:HD12	1:A:994:LEU:O	1.84	0.77
1:A:1016:MET:HG2	1:A:1035:TYR:CE2	2.19	0.77
1:A:359:LEU:HD12	1:A:362:ILE:CD1	2.09	0.77
1:A:710:LEU:HD12	1:A:710:LEU:O	1.84	0.77
1:A:742:ILE:HB	1:A:745:ILE:O	1.84	0.77
1:A:1044:ILE:HG21	1:A:1057:ILE:HD11	1.66	0.77
1:A:181:LYS:NZ	1:A:216:VAL:HG23	1.99	0.77
1:A:567:ILE:HD13	1:A:567:ILE:H	1.50	0.77
1:A:616:ALA:O	1:A:620:PRO:HD2	1.85	0.77
1:A:327:VAL:CG1	1:A:358:ILE:HD11	2.14	0.77
1:A:403:PHE:CE1	1:A:406:LEU:HD23	2.20	0.77
1:A:872:GLY:O	1:A:1023:ASP:CB	2.33	0.76
1:A:871:GLY:C	1:A:1024:ARG:HG2	2.11	0.76
1:A:172:ILE:HG12	1:A:182:LEU:HD13	1.68	0.76
1:A:460:ASP:HB3	1:A:464:GLY:N	2.00	0.76
1:A:689:PHE:HE2	1:A:730:GLN:OE1	1.68	0.76
1:A:1021:GLN:HG2	1:A:1026:ARG:HG3	1.67	0.76
1:A:1036:VAL:HG21	1:A:1066:LEU:HD22	1.68	0.76
1:A:1045:GLU:CD	1:A:1058:ALA:HB3	2.11	0.76
1:A:327:VAL:HG12	1:A:358:ILE:HD11	1.65	0.76
1:A:629:HIS:CG	1:A:669:TYR:OH	2.38	0.76
1:A:785:ASN:HB3	1:A:788:PHE:HD2	1.49	0.76
1:A:1010:SER:HB2	1:A:1035:TYR:CE2	2.20	0.76
1:A:64:LEU:HD12	1:A:496:MET:CE	2.16	0.75
1:A:120:ASP:OD2	1:A:123:GLU:HG3	1.86	0.75
1:A:869:ARG:O	1:A:920:ALA:HB3	1.86	0.75
1:A:547:PRO:O	1:A:548:ARG:HG2	1.84	0.75
1:A:595:GLU:CB	1:A:597:LEU:HD23	2.14	0.75
1:A:204:THR:HG21	1:A:209:ALA:HB3	1.66	0.75
1:A:780:LEU:HD12	1:A:780:LEU:O	1.85	0.75
1:A:1016:MET:HE3	1:A:1016:MET:C	2.12	0.75
1:A:202:LYS:HD3	1:A:214:ALA:HB3	1.69	0.75
1:A:323:ARG:HG3	1:A:324:THR:N	2.02	0.75
1:A:784:TRP:HD1	1:A:790:ILE:HD11	1.51	0.75
1:A:958:LEU:HD22	1:A:960:PRO:O	1.87	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:847:LEU:CD1	1:A:850:ALA:HA	2.16	0.74
1:A:872:GLY:C	1:A:1023:ASP:CB	2.58	0.74
1:A:99:ILE:HD11	1:A:152:PHE:HB2	1.69	0.74
1:A:683:ASP:O	1:A:686:THR:HG22	1.87	0.74
1:A:847:LEU:HD12	1:A:852:SER:CB	2.16	0.74
1:A:181:LYS:HZ3	1:A:216:VAL:HG23	1.52	0.74
1:A:256:LEU:CB	1:A:309:LEU:HD22	2.16	0.74
1:A:473:GLN:CB	1:A:504:VAL:HG22	2.17	0.74
1:A:562:VAL:HG22	1:A:578:LEU:CD2	2.18	0.74
1:A:1044:ILE:HG23	1:A:1057:ILE:HG12	1.69	0.74
1:A:42:PHE:HZ	1:A:45:GLU:HB2	1.50	0.74
1:A:278:LYS:HG2	1:A:296:PRO:HA	1.69	0.74
1:A:567:ILE:HD12	1:A:650:PHE:CZ	2.22	0.74
1:A:1051:VAL:HG22	1:A:1107:GLN:OE1	1.88	0.74
1:A:63:TYR:C	1:A:64:LEU:HD22	2.12	0.74
1:A:739:ILE:CD1	1:A:748:ARG:HG2	2.17	0.74
1:A:822:CYS:HA	1:A:833:LEU:HD23	1.70	0.74
1:A:1072:ILE:HD11	1:A:1117:PHE:CZ	2.19	0.74
1:A:533:ASN:ND2	1:A:645:PHE:HB3	2.03	0.74
1:A:873:THR:HB	1:A:917:MET:CE	2.17	0.74
1:A:448:GLY:HA3	1:A:480:VAL:HG21	1.68	0.74
1:A:532:HIS:O	1:A:641:THR:CG2	2.36	0.74
1:A:964:PRO:HG3	1:A:1066:LEU:HB3	1.69	0.74
1:A:321:LEU:CD1	1:A:462:PRO:HG2	2.17	0.74
1:A:1052:SER:HA	1:A:1140:ASN:HD21	1.52	0.74
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CZ	2.23	0.73
1:A:324:THR:HG21	1:A:462:PRO:HA	1.70	0.73
1:A:435:ILE:HD13	1:A:436:ALA:N	2.03	0.73
1:A:46:PRO:HG2	1:A:69:ARG:CG	2.17	0.73
1:A:530:VAL:HG12	1:A:584:PRO:CG	2.18	0.73
1:A:446:PHE:HB3	1:A:454:LEU:HD11	1.69	0.73
1:A:1082:ILE:HD13	1:A:1082:ILE:H	1.54	0.73
1:A:458:ARG:HD3	1:A:524:PRO:CB	2.12	0.73
1:A:1070:PRO:HB3	1:A:1121:LEU:CD2	2.19	0.73
1:A:440:LYS:NZ	1:A:538:LYS:HD3	2.03	0.73
1:A:446:PHE:CD2	1:A:454:LEU:HD21	2.24	0.73
1:A:704:LEU:HD11	1:A:724:LYS:HE3	1.69	0.73
1:A:188:VAL:HG22	1:A:191:LYS:H	1.52	0.73
1:A:1010:SER:HB2	1:A:1035:TYR:CZ	2.23	0.73
1:A:261:GLU:HA	1:A:264:SER:O	1.89	0.73
1:A:440:LYS:HD3	1:A:538:LYS:HD2	1.12	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1030:ASP:O	1:A:1032:VAL:HG23	1.89	0.73
1:A:73:LEU:HD22	1:A:79:VAL:HA	1.71	0.72
1:A:440:LYS:HD3	1:A:538:LYS:NZ	2.04	0.72
1:A:531:LEU:CG	1:A:584:PRO:HB2	2.19	0.72
1:A:670:ARG:HE	1:A:670:ARG:HA	1.55	0.72
1:A:1087:VAL:HG22	1:A:1093:MET:HE2	1.72	0.72
1:A:184:ILE:HD12	1:A:184:ILE:O	1.89	0.72
1:A:321:LEU:HG	1:A:325:LEU:HD11	1.71	0.72
1:A:39:PHE:CD2	1:A:473:GLN:HG3	2.23	0.72
1:A:1036:VAL:HG23	1:A:1066:LEU:HD13	1.72	0.72
1:A:370:LEU:HD21	1:A:374:TYR:HE1	1.55	0.72
1:A:937:ARG:CG	1:A:938:PRO:HD2	2.20	0.72
1:A:569:VAL:CG2	1:A:654:ASN:HB2	2.20	0.71
1:A:832:THR:CG2	1:A:836:HIS:HB2	2.20	0.71
1:A:181:LYS:HD2	1:A:202:LYS:HA	1.71	0.71
1:A:321:LEU:HG	1:A:325:LEU:CD1	2.20	0.71
1:A:989:GLY:HA2	1:A:1017:LYS:CE	2.20	0.71
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:OE1	1.90	0.71
1:A:814:LEU:HB3	1:A:847:LEU:HB2	1.70	0.71
1:A:1165:LYS:HG3	1:A:1166:ASN:H	1.55	0.71
1:A:480:VAL:HB	1:A:484:MET:CE	2.21	0.71
1:A:558:VAL:HG11	1:A:646:ALA:HB2	1.71	0.71
1:A:873:THR:HG23	1:A:981:GLY:CA	2.21	0.71
1:A:519:LEU:HD12	1:A:552:SER:O	1.90	0.71
1:A:563:HIS:HB2	1:A:577:VAL:CG1	2.21	0.71
1:A:619:VAL:HB	1:A:620:PRO:HD3	1.72	0.71
1:A:115:LYS:HB3	1:A:168:VAL:HG11	1.71	0.70
1:A:188:VAL:HG13	1:A:190:GLY:H	1.56	0.70
1:A:595:GLU:HG2	1:A:632:VAL:HG13	1.72	0.70
1:A:1004:ILE:HD13	1:A:1005:CYS:N	2.06	0.70
1:A:1051:VAL:HG23	1:A:1139:PRO:HA	1.72	0.70
1:A:453:LYS:HE3	1:A:472:VAL:HG21	1.73	0.70
1:A:704:LEU:HB2	1:A:722:LYS:HG3	1.71	0.70
1:A:847:LEU:HD21	1:A:850:ALA:HA	1.73	0.70
1:A:450:LYS:HA	1:A:479:PRO:HB3	1.73	0.70
1:A:575:LEU:HD22	1:A:575:LEU:H	1.56	0.70
1:A:847:LEU:CD1	1:A:852:SER:HB3	2.20	0.70
1:A:872:GLY:HA3	1:A:1024:ARG:CG	2.18	0.70
1:A:1042:VAL:HG22	1:A:1060:TRP:O	1.92	0.70
1:A:1044:ILE:CG2	1:A:1057:ILE:HD11	2.21	0.70
1:A:281:ARG:HB3	1:A:293:VAL:CG1	2.22	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:304:VAL:HG11	1:A:351:GLU:OE2	1.91	0.70
1:A:1044:ILE:HG23	1:A:1057:ILE:CG1	2.22	0.70
1:A:1102:LEU:HG	1:A:1104:PRO:HD2	1.74	0.70
1:A:216:VAL:HG12	1:A:224:SER:OG	1.92	0.70
1:A:367:LYS:HE2	1:A:399:ILE:O	1.91	0.70
1:A:380:LEU:HB2	1:A:386:LYS:HE3	1.74	0.70
1:A:474:VAL:CG1	1:A:475:VAL:HG23	2.18	0.70
1:A:962:ARG:HB3	1:A:1034:GLN:HG3	1.73	0.70
1:A:1016:MET:O	1:A:1032:VAL:HG13	1.91	0.70
1:A:39:PHE:HE1	1:A:505:PRO:HD2	1.57	0.70
1:A:515:CYS:O	1:A:519:LEU:HD23	1.91	0.70
1:A:551:ALA:HA	1:A:556:GLN:OE1	1.92	0.70
1:A:380:LEU:HB2	1:A:386:LYS:CE	2.20	0.70
1:A:93:LYS:HD2	1:A:105:GLU:OE1	1.90	0.70
1:A:435:ILE:HD12	1:A:486:PHE:CD1	2.27	0.69
1:A:700:CYS:C	1:A:701:PRO:CD	2.64	0.69
1:A:446:PHE:HZ	1:A:506:VAL:HG23	1.55	0.69
1:A:959:LYS:CB	1:A:972:THR:HB	2.21	0.69
1:A:507:GLU:HG3	1:A:537:ARG:HG3	1.74	0.69
1:A:40:VAL:HG12	1:A:503:ARG:HB3	1.73	0.69
1:A:872:GLY:CA	1:A:1024:ARG:CG	2.69	0.69
1:A:560:LEU:CD2	1:A:648:THR:HG23	2.19	0.69
1:A:739:ILE:HB	1:A:781:THR:CG2	2.23	0.69
1:A:110:THR:HG22	1:A:132:LEU:HD21	1.73	0.69
1:A:261:GLU:HG2	1:A:264:SER:C	2.17	0.69
1:A:458:ARG:HD2	1:A:524:PRO:HB2	1.73	0.69
1:A:958:LEU:HD23	1:A:959:LYS:N	2.08	0.69
1:A:1063:HIS:HB3	1:A:1066:LEU:CD1	2.20	0.69
1:A:1109:ASP:CG	1:A:1170:PRO:CG	2.46	0.69
1:A:689:PHE:CD1	1:A:691:GLU:HG2	2.28	0.69
1:A:806:MET:HE3	1:A:806:MET:N	1.99	0.69
1:A:46:PRO:HG3	1:A:69:ARG:HD2	1.75	0.69
1:A:73:LEU:CD2	1:A:79:VAL:HA	2.23	0.69
1:A:474:VAL:HG21	1:A:495:ILE:HD13	1.72	0.69
1:A:595:GLU:CG	1:A:632:VAL:HG13	2.22	0.69
1:A:863:ILE:HG23	1:A:864:PRO:CD	2.23	0.69
1:A:1073:ARG:HD3	1:A:1128:LEU:HD11	1.75	0.69
1:A:133:TYR:HB2	1:A:136:ILE:HG12	1.75	0.68
1:A:962:ARG:HB3	1:A:1034:GLN:CG	2.24	0.68
1:A:1111:THR:HG22	1:A:1112:GLU:H	1.59	0.68
1:A:42:PHE:HE1	1:A:79:VAL:CG2	2.05	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:555:LYS:HG3	1:A:556:GLN:N	2.09	0.68
1:A:594:PHE:O	1:A:595:GLU:HG2	1.94	0.68
1:A:72:LYS:HE3	1:A:80:LEU:CD1	2.21	0.68
1:A:412:LEU:HD13	1:A:412:LEU:H	1.59	0.68
1:A:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:C	2.18	0.68
1:A:867:GLY:HA3	1:A:948:TYR:OH	1.94	0.68
1:A:190:GLY:HA2	1:A:233:PHE:CE2	2.29	0.68
1:A:847:LEU:HD21	1:A:884:LEU:HD13	1.75	0.68
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:NE	2.09	0.68
1:A:847:LEU:CD2	1:A:884:LEU:CD1	2.72	0.68
1:A:988:PHE:HB3	1:A:1016:MET:SD	2.33	0.68
1:A:62:ILE:HD12	1:A:64:LEU:HD21	1.76	0.68
1:A:1052:SER:CA	1:A:1140:ASN:HD21	2.07	0.68
1:A:133:TYR:CD2	1:A:136:ILE:HG12	2.28	0.67
1:A:972:THR:HG23	1:A:1002:TYR:CD1	2.28	0.67
1:A:323:ARG:HG3	1:A:324:THR:H	1.58	0.67
1:A:533:ASN:OD1	1:A:643:MET:CB	2.42	0.67
1:A:703:LEU:HD13	1:A:723:ALA:HB2	1.76	0.67
1:A:847:LEU:HD11	1:A:884:LEU:HD12	1.75	0.67
1:A:964:PRO:HD3	1:A:1066:LEU:HB3	1.77	0.67
1:A:98:ARG:HH21	1:A:107:LEU:HD12	1.59	0.67
1:A:440:LYS:CE	1:A:538:LYS:CD	2.72	0.67
1:A:653:TYR:HB3	1:A:669:TYR:CE2	2.30	0.67
1:A:773:ILE:HD13	1:A:773:ILE:H	1.59	0.67
1:A:1016:MET:HG2	1:A:1035:TYR:HE2	1.57	0.67
1:A:239:PHE:CD1	1:A:260:PRO:HD2	2.30	0.67
1:A:1017:LYS:H	1:A:1017:LYS:CE	2.01	0.67
1:A:1036:VAL:HG21	1:A:1066:LEU:CD1	2.24	0.67
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:CD	2.20	0.67
1:A:62:ILE:HD11	1:A:73:LEU:HD12	1.76	0.66
1:A:446:PHE:CZ	1:A:486:PHE:HZ	2.14	0.66
1:A:98:ARG:HE	1:A:107:LEU:HD11	1.60	0.66
1:A:321:LEU:O	1:A:325:LEU:HG	1.95	0.66
1:A:405:GLY:C	1:A:406:LEU:HD22	2.19	0.66
1:A:62:ILE:HG13	1:A:62:ILE:O	1.94	0.66
1:A:98:ARG:HE	1:A:107:LEU:CD1	2.07	0.66
1:A:595:GLU:HG2	1:A:632:VAL:CG1	2.25	0.66
1:A:830:GLN:HG2	1:A:831:CYS:N	2.09	0.66
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:N	2.10	0.66
1:A:133:TYR:HB2	1:A:136:ILE:H	1.61	0.66
1:A:137:CYS:HB2	1:A:213:PHE:CZ	2.30	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1100:LEU:HD11	1:A:1137:TYR:CD2	2.31	0.66
1:A:440:LYS:CE	1:A:538:LYS:HD2	2.21	0.66
1:A:863:ILE:HG13	1:A:864:PRO:CD	2.25	0.66
1:A:325:LEU:CD1	1:A:333:LEU:HD11	2.25	0.66
1:A:1163:LYS:HG2	1:A:1197:GLN:HG2	1.77	0.66
1:A:955:LEU:HG	1:A:973:ILE:CG2	2.25	0.66
1:A:1013:VAL:HG22	1:A:1014:LEU:H	1.60	0.66
1:A:460:ASP:HB3	1:A:463:LYS:HB3	1.77	0.66
1:A:706:VAL:HG13	1:A:707:ASP:O	1.96	0.66
1:A:216:VAL:HG12	1:A:224:SER:CB	2.26	0.66
1:A:110:THR:HB	1:A:132:LEU:CD2	2.26	0.65
1:A:892:HIS:NE2	1:A:931:ILE:HB	2.12	0.65
1:A:782:VAL:HG23	1:A:790:ILE:HB	1.78	0.65
1:A:1111:THR:HG22	1:A:1112:GLU:N	2.12	0.65
1:A:257:THR:C	1:A:258:LEU:HD12	2.21	0.65
1:A:432:THR:OG1	1:A:480:VAL:HG23	1.96	0.65
1:A:739:ILE:HD12	1:A:748:ARG:HG2	1.76	0.65
1:A:296:PRO:HD2	1:A:414:VAL:CG2	2.26	0.65
1:A:567:ILE:HD13	1:A:651:VAL:O	1.96	0.65
1:A:265:PRO:HD3	1:A:274:VAL:CG2	2.27	0.65
1:A:410:ALA:HB1	1:A:411:PRO:HD2	1.78	0.65
1:A:620:PRO:CA	1:A:623:ILE:HG13	2.23	0.65
1:A:847:LEU:HD22	1:A:884:LEU:CD1	2.27	0.65
1:A:53:LEU:HG	1:A:64:LEU:CD1	2.27	0.64
1:A:675:LYS:HE3	1:A:694:VAL:HG22	1.79	0.64
1:A:797:LYS:N	1:A:797:LYS:HD2	2.11	0.64
1:A:225:MET:CE	1:A:227:LYS:HG3	2.19	0.64
1:A:556:GLN:O	1:A:582:ASN:HB3	1.97	0.64
1:A:566:ASN:HB3	1:A:651:VAL:HG21	1.80	0.64
1:A:847:LEU:CD2	1:A:850:ALA:HA	2.27	0.64
1:A:105:GLU:HB3	1:A:106:PRO:HD2	1.80	0.64
1:A:181:LYS:HD3	1:A:202:LYS:HA	1.78	0.64
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CD1	2.33	0.64
1:A:566:ASN:HA	1:A:651:VAL:CG2	2.25	0.64
1:A:53:LEU:HB2	1:A:496:MET:CE	2.28	0.64
1:A:533:ASN:OD1	1:A:643:MET:HB2	1.98	0.64
1:A:854:CYS:CB	1:A:855:THR:N	2.60	0.64
1:A:1002:TYR:CZ	1:A:1004:ILE:HB	2.32	0.64
1:A:847:LEU:HD13	1:A:884:LEU:HD12	1.77	0.64
1:A:926:ALA:HB1	1:A:947:LEU:CD1	2.27	0.64
1:A:1160:ILE:HG21	1:A:1200:CYS:HB3	1.79	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:118:LEU:HG	1:A:172:ILE:HG13	1.80	0.64
1:A:1045:GLU:CG	1:A:1058:ALA:HB3	2.28	0.64
1:A:475:VAL:HG22	1:A:500:GLN:NE2	2.13	0.64
1:A:528:TRP:HZ2	1:A:533:ASN:HD22	1.44	0.64
1:A:175:TYR:HD2	1:A:179:ASP:HB3	1.63	0.64
1:A:309:LEU:HD11	1:A:311:ALA:O	1.98	0.64
1:A:713:VAL:HG12	1:A:714:GLU:HG3	1.79	0.63
1:A:806:MET:HG2	1:A:807:ARG:HG3	1.80	0.63
1:A:978:LEU:O	1:A:998:ARG:HD2	1.98	0.63
1:A:439:TYR:HE2	1:A:538:LYS:HE3	1.62	0.63
1:A:453:LYS:HG2	1:A:472:VAL:CG2	2.16	0.63
1:A:972:THR:HA	1:A:1002:TYR:CE1	2.32	0.63
1:A:440:LYS:HZ2	1:A:538:LYS:HG2	1.63	0.63
1:A:460:ASP:CB	1:A:463:LYS:HB3	2.28	0.63
1:A:706:VAL:HG22	1:A:707:ASP:N	2.12	0.63
1:A:569:VAL:HB	1:A:654:ASN:CB	2.27	0.63
1:A:56:ASP:OD1	1:A:119:ILE:HD12	1.98	0.63
1:A:492:GLN:HG2	1:A:503:ARG:CG	2.29	0.63
1:A:1015:ASP:O	1:A:1016:MET:HB3	1.98	0.63
1:A:320:VAL:O	1:A:323:ARG:HG2	1.98	0.63
1:A:368:ASP:O	1:A:371:GLN:HG2	1.97	0.63
1:A:629:HIS:CD2	1:A:669:TYR:CE1	2.85	0.63
1:A:41:THR:HG22	1:A:502:THR:HA	1.81	0.63
1:A:440:LYS:CD	1:A:538:LYS:HD3	2.19	0.63
1:A:480:VAL:HG11	1:A:495:ILE:HD11	1.81	0.63
1:A:741:ASN:O	1:A:778:VAL:HG13	1.98	0.63
1:A:1165:LYS:HG3	1:A:1166:ASN:N	2.14	0.63
1:A:296:PRO:HB2	1:A:417:MET:SD	2.39	0.62
1:A:473:GLN:HG2	1:A:504:VAL:HG22	1.79	0.62
1:A:1045:GLU:HB2	1:A:1058:ALA:HB3	1.81	0.62
1:A:1111:THR:HG23	1:A:1137:TYR:C	2.24	0.62
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:CZ	2.29	0.62
1:A:180:ASP:O	1:A:181:LYS:HG2	1.99	0.62
1:A:181:LYS:HE2	1:A:202:LYS:HG2	1.80	0.62
1:A:405:GLY:O	1:A:406:LEU:HD22	1.98	0.62
1:A:446:PHE:CE1	1:A:486:PHE:HZ	2.16	0.62
1:A:372:SER:O	1:A:375:ARG:HB2	1.99	0.62
1:A:847:LEU:HD22	1:A:884:LEU:HD13	1.81	0.62
1:A:186:THR:HG22	1:A:187:ALA:N	2.13	0.62
1:A:410:ALA:HB1	1:A:411:PRO:CD	2.30	0.62
1:A:1036:VAL:HG21	1:A:1066:LEU:CD2	2.29	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:271:LYS:HG3	1:A:272:GLU:N	2.13	0.62
1:A:448:GLY:CA	1:A:480:VAL:HG21	2.28	0.62
1:A:488:LYS:HG3	1:A:489:ASP:N	2.14	0.62
1:A:968:GLY:HA3	1:A:1122:ASP:HB2	1.81	0.62
1:A:575:LEU:HD22	1:A:575:LEU:N	2.14	0.62
1:A:473:GLN:HB2	1:A:504:VAL:HG22	1.80	0.62
1:A:855:THR:HG23	1:A:856:ASN:OD1	2.00	0.62
1:A:894:LYS:HD3	1:A:899:GLU:HA	1.81	0.62
1:A:469:TYR:HE2	1:A:471:THR:HB	1.65	0.62
1:A:530:VAL:HB	1:A:584:PRO:HG3	1.80	0.62
1:A:696:LEU:N	1:A:696:LEU:HD12	2.15	0.62
1:A:1014:LEU:HD22	1:A:1014:LEU:N	2.14	0.62
1:A:1067:ILE:HD13	1:A:1121:LEU:HD23	1.82	0.62
1:A:197:THR:HG21	1:A:228:ILE:HD11	1.82	0.61
1:A:382:LEU:HD23	1:A:385:LEU:HB3	1.81	0.61
1:A:873:THR:HB	1:A:917:MET:HE2	1.82	0.61
1:A:72:LYS:CD	1:A:80:LEU:HD12	2.31	0.61
1:A:182:LEU:HG	1:A:184:ILE:HG23	1.82	0.61
1:A:446:PHE:CZ	1:A:506:VAL:HG23	2.34	0.61
1:A:480:VAL:CG2	1:A:484:MET:HE1	2.29	0.61
1:A:1178:LEU:N	1:A:1178:LEU:HD12	2.14	0.61
1:A:295:VAL:HA	1:A:414:VAL:HG21	1.81	0.61
1:A:386:LYS:O	1:A:386:LYS:HG3	1.99	0.61
1:A:1111:THR:HG23	1:A:1137:TYR:O	1.99	0.61
1:A:46:PRO:HD2	1:A:71:TYR:CE1	2.35	0.61
1:A:204:THR:HG22	1:A:212:MET:SD	2.40	0.61
1:A:994:LEU:CG	1:A:1006:ASN:HB2	2.30	0.61
1:A:474:VAL:CG2	1:A:495:ILE:HD13	2.29	0.61
1:A:806:MET:CG	1:A:807:ARG:HG3	2.30	0.61
1:A:458:ARG:CG	1:A:524:PRO:HG3	2.28	0.61
1:A:1042:VAL:HG23	1:A:1043:ARG:N	2.16	0.61
1:A:387:VAL:HG13	1:A:388:LYS:HG3	1.83	0.61
1:A:1084:ILE:HG13	1:A:1085:CYS:N	2.14	0.61
1:A:333:LEU:CD2	1:A:358:ILE:HG13	2.31	0.61
1:A:845:LEU:HD13	1:A:845:LEU:C	2.26	0.61
1:A:110:THR:HG22	1:A:111:ASN:N	2.14	0.61
1:A:715:VAL:CG2	1:A:717:LYS:HD2	2.30	0.61
1:A:815:LYS:HE3	1:A:911:GLU:HG3	1.83	0.61
1:A:963:GLY:O	1:A:1036:VAL:HG22	2.01	0.61
1:A:119:ILE:HD13	1:A:121:TYR:CZ	2.36	0.60
1:A:469:TYR:CE2	1:A:471:THR:HB	2.36	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:676:TYR:HE1	1:A:728:GLN:N	1.99	0.60
1:A:41:THR:HG22	1:A:502:THR:HG23	1.83	0.60
1:A:474:VAL:HG22	1:A:495:ILE:CG2	2.29	0.60
1:A:676:TYR:CE1	1:A:728:GLN:N	2.69	0.60
1:A:847:LEU:HD11	1:A:850:ALA:CA	2.29	0.60
1:A:175:TYR:CD2	1:A:179:ASP:HB3	2.36	0.60
1:A:1100:LEU:HD11	1:A:1137:TYR:CG	2.35	0.60
1:A:99:ILE:HG13	1:A:100:VAL:N	2.16	0.60
1:A:623:ILE:HA	1:A:626:ASN:OD1	2.01	0.60
1:A:964:PRO:HG3	1:A:1066:LEU:CB	2.31	0.60
1:A:46:PRO:HD2	1:A:71:TYR:CZ	2.36	0.60
1:A:440:LYS:HB3	1:A:538:LYS:NZ	2.17	0.60
1:A:323:ARG:HH21	1:A:463:LYS:HD2	1.67	0.60
1:A:62:ILE:HD13	1:A:77:LEU:CD2	2.32	0.60
1:A:95:TYR:CG	1:A:96:PRO:HD3	2.36	0.60
1:A:560:LEU:HD23	1:A:648:THR:CG2	2.25	0.60
1:A:1002:TYR:CE2	1:A:1004:ILE:HB	2.37	0.60
1:A:1029:GLN:HG2	1:A:1030:ASP:H	1.67	0.60
1:A:495:ILE:CG2	1:A:502:THR:HB	2.32	0.60
1:A:1088:LEU:N	1:A:1088:LEU:HD12	2.17	0.60
1:A:154:LYS:HB2	1:A:157:HIS:ND1	2.16	0.59
1:A:440:LYS:NZ	1:A:538:LYS:HG2	2.16	0.59
1:A:773:ILE:HD13	1:A:773:ILE:N	2.17	0.59
1:A:313:TYR:CE1	1:A:435:ILE:HG12	2.37	0.59
1:A:904:VAL:HG13	1:A:905:ASP:N	2.18	0.59
1:A:239:PHE:CA	1:A:260:PRO:HG2	2.30	0.59
1:A:314:LEU:HD12	1:A:333:LEU:O	2.01	0.59
1:A:320:VAL:HG21	1:A:442:HIS:HD1	1.67	0.59
1:A:62:ILE:HD12	1:A:501:LEU:CD1	2.33	0.59
1:A:171:VAL:O	1:A:182:LEU:HD12	2.02	0.59
1:A:403:PHE:CZ	1:A:406:LEU:HD23	2.37	0.59
1:A:457:ILE:HG12	1:A:467:LEU:HD13	1.84	0.59
1:A:964:PRO:CG	1:A:1066:LEU:HB3	2.31	0.59
1:A:1045:GLU:CB	1:A:1058:ALA:HB3	2.32	0.59
1:A:370:LEU:C	1:A:370:LEU:HD13	2.27	0.59
1:A:439:TYR:CE2	1:A:538:LYS:HE3	2.36	0.59
1:A:712:PRO:HG3	1:A:801:TYR:OH	2.01	0.59
1:A:412:LEU:C	1:A:412:LEU:HD22	2.28	0.59
1:A:665:VAL:HG11	1:A:697:PRO:HD3	1.84	0.59
1:A:474:VAL:HG12	1:A:475:VAL:CG2	2.21	0.59
1:A:1045:GLU:HG3	1:A:1058:ALA:O	2.03	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1046:PRO:HD2	1:A:1057:ILE:HA	1.84	0.59
1:A:188:VAL:HG22	1:A:191:LYS:N	2.18	0.59
1:A:91:ASN:CG	1:A:92:PRO:HD2	2.27	0.59
1:A:349:LEU:N	1:A:349:LEU:HD22	2.18	0.59
1:A:528:TRP:HZ2	1:A:533:ASN:ND2	2.01	0.59
1:A:665:VAL:HG12	1:A:697:PRO:HG3	1.83	0.59
1:A:40:VAL:HG13	1:A:503:ARG:HB3	1.85	0.58
1:A:578:LEU:HD13	1:A:636:LEU:HD21	1.85	0.58
1:A:780:LEU:HD12	1:A:780:LEU:C	2.27	0.58
1:A:832:THR:HG23	1:A:836:HIS:HB2	1.85	0.58
1:A:387:VAL:HG13	1:A:388:LYS:N	2.18	0.58
1:A:889:ILE:HD12	1:A:907:TYR:CZ	2.38	0.58
1:A:531:LEU:CG	1:A:584:PRO:CB	2.80	0.58
1:A:689:PHE:HE2	1:A:730:GLN:CD	2.11	0.58
1:A:759:VAL:HG12	1:A:760:GLN:N	2.18	0.58
1:A:814:LEU:HD22	1:A:847:LEU:H	1.68	0.58
1:A:62:ILE:HG12	1:A:73:LEU:HB2	1.84	0.58
1:A:320:VAL:HG21	1:A:442:HIS:ND1	2.19	0.58
1:A:566:ASN:CA	1:A:651:VAL:HG23	2.28	0.58
1:A:1040:THR:HB	1:A:1062:THR:HG22	1.83	0.58
1:A:931:ILE:HG13	1:A:931:ILE:O	2.02	0.58
1:A:955:LEU:CD1	1:A:973:ILE:HG23	2.33	0.58
1:A:243:TYR:CD2	1:A:257:THR:HG22	2.37	0.58
1:A:814:LEU:HD22	1:A:847:LEU:N	2.18	0.58
1:A:959:LYS:CG	1:A:972:THR:HB	2.33	0.58
1:A:1013:VAL:HG22	1:A:1014:LEU:N	2.19	0.58
1:A:1052:SER:CA	1:A:1140:ASN:ND2	2.64	0.58
1:A:198:ILE:HB	1:A:226:ILE:CG2	2.34	0.58
1:A:263:VAL:HG12	1:A:263:VAL:O	2.04	0.58
1:A:440:LYS:HZ2	1:A:538:LYS:CG	2.17	0.58
1:A:531:LEU:HG	1:A:584:PRO:CB	2.34	0.58
1:A:937:ARG:HG2	1:A:938:PRO:HD2	1.85	0.58
1:A:963:GLY:C	1:A:1036:VAL:HG22	2.29	0.58
1:A:1057:ILE:HG21	1:A:1095:CYS:HB2	1.84	0.58
1:A:426:GLU:OE1	1:A:426:GLU:HA	2.04	0.57
1:A:569:VAL:HG21	1:A:654:ASN:HB2	1.86	0.57
1:A:991:GLN:HG3	1:A:1008:THR:HG21	1.84	0.57
1:A:1215:VAL:HG23	1:A:1215:VAL:O	2.03	0.57
1:A:949:TYR:HE2	1:A:951:MET:CE	2.12	0.57
1:A:987:MET:HB2	1:A:1019:THR:HG23	1.83	0.57
1:A:324:THR:CG2	1:A:462:PRO:HA	2.34	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:350:ASP:HA	1:A:430:ARG:HB2	1.86	0.57
1:A:110:THR:HB	1:A:132:LEU:HD23	1.85	0.57
1:A:972:THR:CA	1:A:1002:TYR:HE1	2.15	0.57
1:A:265:PRO:HD3	1:A:274:VAL:HG21	1.87	0.57
1:A:1014:LEU:H	1:A:1014:LEU:CD2	2.17	0.57
1:A:1180:TYR:HA	1:A:1215:VAL:CG1	2.34	0.57
1:A:430:ARG:HH21	1:A:432:THR:HG22	1.68	0.57
1:A:456:LYS:O	1:A:468:GLN:HG2	2.04	0.57
1:A:994:LEU:HD11	1:A:1006:ASN:OD1	2.05	0.57
1:A:585:GLU:OE1	1:A:585:GLU:HA	2.04	0.57
1:A:623:ILE:HD12	1:A:623:ILE:C	2.28	0.57
1:A:42:PHE:CE2	1:A:50:PHE:HZ	2.23	0.57
1:A:396:LEU:HD13	1:A:396:LEU:C	2.30	0.57
1:A:703:LEU:HD21	1:A:782:VAL:HG21	1.86	0.57
1:A:1021:GLN:CG	1:A:1026:ARG:HG3	2.34	0.57
1:A:433:SER:HB3	1:A:484:MET:SD	2.45	0.57
1:A:885:GLU:HG3	1:A:887:ARG:H	1.70	0.57
1:A:994:LEU:HG	1:A:1006:ASN:HB2	1.86	0.57
1:A:385:LEU:C	1:A:385:LEU:HD13	2.29	0.56
1:A:480:VAL:HG21	1:A:484:MET:HE1	1.87	0.56
1:A:45:GLU:HB3	1:A:46:PRO:CD	2.35	0.56
1:A:116:MET:HG3	1:A:117:LEU:N	2.21	0.56
1:A:321:LEU:HD12	1:A:462:PRO:CG	2.34	0.56
1:A:434:VAL:HG22	1:A:435:ILE:N	2.20	0.56
1:A:435:ILE:CG2	1:A:486:PHE:HE1	2.19	0.56
1:A:474:VAL:CG2	1:A:495:ILE:HG21	2.35	0.56
1:A:689:PHE:CE2	1:A:730:GLN:CD	2.84	0.56
1:A:785:ASN:ND2	1:A:788:PHE:HE2	2.03	0.56
1:A:882:LEU:N	1:A:882:LEU:HD12	2.21	0.56
1:A:955:LEU:HG	1:A:973:ILE:HG23	1.86	0.56
1:A:1082:ILE:HD13	1:A:1082:ILE:N	2.19	0.56
1:A:1120:ILE:CD1	1:A:1128:LEU:HD13	2.35	0.56
1:A:446:PHE:CE1	1:A:486:PHE:CZ	2.93	0.56
1:A:459:VAL:HG23	1:A:459:VAL:O	2.05	0.56
1:A:501:LEU:HD23	1:A:502:THR:H	1.70	0.56
1:A:710:LEU:HB2	1:A:801:TYR:HE1	1.70	0.56
1:A:1018:VAL:HG13	1:A:1018:VAL:O	2.05	0.56
1:A:41:THR:CG2	1:A:502:THR:HG23	2.35	0.56
1:A:440:LYS:HZ3	1:A:538:LYS:CD	2.09	0.56
1:A:892:HIS:CE1	1:A:931:ILE:HB	2.40	0.56
1:A:1177:LYS:HD3	1:A:1177:LYS:H	1.70	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:118:LEU:HB3	1:A:127:ILE:CG2	2.36	0.56
1:A:254:TYR:CZ	1:A:281:ARG:HD2	2.39	0.56
1:A:262:MET:O	1:A:262:MET:HG3	2.05	0.56
1:A:528:TRP:CZ2	1:A:533:ASN:ND2	2.73	0.56
1:A:933:VAL:HG23	1:A:934:ALA:N	2.10	0.56
1:A:926:ALA:CB	1:A:947:LEU:HD12	2.35	0.56
1:A:284:LYS:HD3	1:A:284:LYS:C	2.31	0.56
1:A:435:ILE:HD12	1:A:486:PHE:HD1	1.70	0.56
1:A:569:VAL:HG23	1:A:654:ASN:N	2.21	0.56
1:A:864:PRO:HG3	1:A:981:GLY:O	2.06	0.56
1:A:567:ILE:HD13	1:A:567:ILE:N	2.20	0.55
1:A:665:VAL:CG1	1:A:697:PRO:HD3	2.35	0.55
1:A:713:VAL:HG13	1:A:766:TYR:O	2.06	0.55
1:A:861:GLU:HG3	1:A:862:ILE:N	2.21	0.55
1:A:865:VAL:HG13	1:A:866:THR:N	2.21	0.55
1:A:964:PRO:CD	1:A:1066:LEU:HB3	2.35	0.55
1:A:1175:ASN:O	1:A:1177:LYS:HD2	2.06	0.55
1:A:53:LEU:HG	1:A:64:LEU:HD13	1.87	0.55
1:A:72:LYS:HD2	1:A:80:LEU:HB2	1.87	0.55
1:A:380:LEU:HB2	1:A:386:LYS:HE2	1.87	0.55
1:A:439:TYR:HE2	1:A:538:LYS:CE	2.20	0.55
1:A:447:VAL:HG23	1:A:447:VAL:O	2.06	0.55
1:A:1022:VAL:HG13	1:A:1022:VAL:O	2.06	0.55
1:A:46:PRO:CG	1:A:69:ARG:HD2	2.36	0.55
1:A:236:ILE:HG23	1:A:236:ILE:O	2.07	0.55
1:A:474:VAL:HG12	1:A:475:VAL:N	2.21	0.55
1:A:704:LEU:HD11	1:A:724:LYS:CE	2.35	0.55
1:A:937:ARG:HG3	1:A:938:PRO:HD2	1.89	0.55
1:A:983:ASN:O	1:A:1022:VAL:HG23	2.06	0.55
1:A:184:ILE:HD12	1:A:184:ILE:C	2.31	0.55
1:A:280:VAL:HG12	1:A:281:ARG:N	2.22	0.55
1:A:301:ARG:CD	1:A:425:THR:HG21	2.26	0.55
1:A:305:GLU:O	1:A:340:LYS:HG3	2.06	0.55
1:A:460:ASP:OD2	1:A:463:LYS:HB3	2.06	0.55
1:A:53:LEU:HD23	1:A:53:LEU:C	2.31	0.55
1:A:676:TYR:CD1	1:A:728:GLN:O	2.59	0.55
1:A:382:LEU:HD23	1:A:385:LEU:CB	2.36	0.55
1:A:440:LYS:NZ	1:A:538:LYS:CG	2.69	0.55
1:A:526:CYS:HB3	1:A:535:CYS:SG	2.46	0.55
1:A:1073:ARG:CD	1:A:1128:LEU:HD11	2.37	0.55
1:A:1199:LEU:N	1:A:1199:LEU:HD12	2.21	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:190:GLY:O	1:A:192:PRO:HD3	2.07	0.55
1:A:501:LEU:HD23	1:A:502:THR:N	2.22	0.55
1:A:509:CYS:HB3	1:A:535:CYS:SG	2.47	0.55
1:A:597:LEU:N	1:A:597:LEU:HD22	2.21	0.55
1:A:930:GLU:OE2	1:A:941:MET:HG3	2.07	0.55
1:A:473:GLN:CD	1:A:504:VAL:HG13	2.31	0.55
1:A:1004:ILE:HD13	1:A:1004:ILE:C	2.31	0.54
1:A:1191:VAL:HG12	1:A:1192:THR:N	2.22	0.54
1:A:168:VAL:HG22	1:A:169:PHE:N	2.22	0.54
1:A:412:LEU:HD13	1:A:412:LEU:N	2.21	0.54
1:A:469:TYR:HB2	1:A:523:ASP:OD2	2.08	0.54
1:A:804:GLY:HA2	1:A:806:MET:CE	2.36	0.54
1:A:825:CYS:HB3	1:A:828:PRO:HG2	1.89	0.54
1:A:947:LEU:H	1:A:947:LEU:CD2	2.21	0.54
1:A:1072:ILE:CG2	1:A:1098:PRO:HG3	2.34	0.54
1:A:1176:VAL:O	1:A:1176:VAL:HG23	2.07	0.54
1:A:226:ILE:HG23	1:A:226:ILE:O	2.06	0.54
1:A:370:LEU:HD11	1:A:399:ILE:HD12	1.88	0.54
1:A:785:ASN:HD22	1:A:788:PHE:HE2	1.54	0.54
1:A:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:O	2.06	0.54
1:A:1192:THR:O	1:A:1199:LEU:HD13	2.07	0.54
1:A:63:TYR:CE2	1:A:72:LYS:HG2	2.43	0.54
1:A:480:VAL:HB	1:A:484:MET:HE2	1.89	0.54
1:A:988:PHE:HD2	1:A:1016:MET:SD	2.30	0.54
1:A:1160:ILE:HG23	1:A:1200:CYS:HB3	1.89	0.54
1:A:242:TYR:CD1	1:A:345:LYS:HE2	2.42	0.54
1:A:709:ILE:O	1:A:799:TYR:HD1	1.90	0.54
1:A:563:HIS:HB3	1:A:564:PRO:CD	2.28	0.54
1:A:619:VAL:CB	1:A:620:PRO:HD3	2.37	0.54
1:A:710:LEU:HB2	1:A:801:TYR:CE1	2.42	0.54
1:A:1168:ILE:O	1:A:1168:ILE:HG23	2.07	0.54
1:A:190:GLY:C	1:A:192:PRO:HD3	2.33	0.54
1:A:196:PRO:CB	1:A:225:MET:HE2	2.34	0.54
1:A:359:LEU:HA	1:A:362:ILE:HG12	1.89	0.54
1:A:820:PHE:O	1:A:821:GLU:HB3	2.06	0.54
1:A:458:ARG:CD	1:A:524:PRO:HB2	2.31	0.54
1:A:739:ILE:HB	1:A:781:THR:HG23	1.90	0.54
1:A:1004:ILE:HG23	1:A:1004:ILE:O	2.08	0.54
1:A:370:LEU:HD13	1:A:370:LEU:O	2.07	0.54
1:A:468:GLN:HB3	1:A:524:PRO:HD3	1.90	0.54
1:A:42:PHE:HE2	1:A:50:PHE:HZ	1.54	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:448:GLY:HA3	1:A:480:VAL:CG2	2.37	0.53
1:A:603:LEU:HD23	1:A:603:LEU:C	2.33	0.53
1:A:716:ILE:HG12	1:A:763:ASN:HB3	1.90	0.53
1:A:925:HIS:O	1:A:950:PHE:HD2	1.91	0.53
1:A:679:VAL:HG12	1:A:680:CYS:N	2.23	0.53
1:A:739:ILE:HB	1:A:781:THR:HG22	1.90	0.53
1:A:921:LYS:N	1:A:922:PRO:HD2	2.23	0.53
1:A:135:GLY:O	1:A:159:LEU:HD13	2.08	0.53
1:A:429:ASP:OD1	1:A:450:LYS:HB3	2.08	0.53
1:A:456:LYS:HZ3	1:A:507:GLU:N	2.06	0.53
1:A:1130:LEU:CB	1:A:1133:THR:HG23	2.35	0.53
1:A:151:PRO:O	1:A:157:HIS:HB3	2.07	0.53
1:A:473:GLN:CD	1:A:504:VAL:HG22	2.34	0.53
1:A:110:THR:HG22	1:A:111:ASN:H	1.72	0.53
1:A:175:TYR:HB3	1:A:179:ASP:HB3	1.89	0.53
1:A:181:LYS:CE	1:A:202:LYS:HG2	2.39	0.53
1:A:1109:ASP:OD2	1:A:1170:PRO:CG	2.54	0.53
1:A:308:LEU:O	1:A:338:PHE:HA	2.09	0.53
1:A:426:GLU:HG2	1:A:429:ASP:O	2.08	0.53
1:A:578:LEU:HB2	1:A:609:ILE:HB	1.91	0.53
1:A:957:ASP:O	1:A:974:THR:HG22	2.09	0.53
1:A:1057:ILE:HG22	1:A:1095:CYS:C	2.32	0.53
1:A:1072:ILE:HG21	1:A:1098:PRO:HD3	1.91	0.53
1:A:185:ALA:HB3	1:A:243:TYR:CG	2.44	0.53
1:A:321:LEU:CD2	1:A:325:LEU:HD11	2.39	0.53
1:A:472:VAL:HG12	1:A:472:VAL:O	2.09	0.53
1:A:575:LEU:H	1:A:575:LEU:CD2	2.22	0.53
1:A:1191:VAL:HG22	1:A:1200:CYS:CA	2.23	0.53
1:A:444:LEU:HD12	1:A:446:PHE:CZ	2.44	0.53
1:A:509:CYS:HB2	1:A:536:THR:HA	1.91	0.53
1:A:530:VAL:CG1	1:A:584:PRO:HG3	2.38	0.53
1:A:811:GLY:N	1:A:881:ASN:OD1	2.39	0.53
1:A:495:ILE:O	1:A:495:ILE:HG23	2.08	0.53
1:A:530:VAL:HG12	1:A:584:PRO:CD	2.29	0.53
1:A:875:VAL:HG22	1:A:915:CYS:O	2.09	0.53
1:A:997:ARG:H	1:A:1004:ILE:CG2	2.22	0.53
1:A:553:GLU:HG3	1:A:554:MET:N	2.24	0.52
1:A:807:ARG:HD2	1:A:813:CYS:HA	1.90	0.52
1:A:933:VAL:HG22	1:A:940:PHE:HB3	1.91	0.52
1:A:1073:ARG:HD2	1:A:1120:ILE:HD11	1.91	0.52
1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:N	2.24	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:119:ILE:HG23	1:A:119:ILE:O	2.09	0.52
1:A:281:ARG:O	1:A:282:LEU:HD23	2.09	0.52
1:A:806:MET:HG2	1:A:807:ARG:CG	2.39	0.52
1:A:872:GLY:O	1:A:1023:ASP:CG	2.51	0.52
1:A:959:LYS:HG2	1:A:972:THR:CG2	2.39	0.52
1:A:1032:VAL:HG12	1:A:1033:PHE:N	2.23	0.52
1:A:1051:VAL:CG2	1:A:1139:PRO:HA	2.38	0.52
1:A:1124:VAL:HG11	1:A:1127:LEU:HD13	1.91	0.52
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:NH2	2.24	0.52
1:A:42:PHE:HZ	1:A:45:GLU:CB	2.22	0.52
1:A:196:PRO:HB3	1:A:225:MET:CE	2.33	0.52
1:A:712:PRO:O	1:A:715:VAL:HG22	2.09	0.52
1:A:797:LYS:HD2	1:A:797:LYS:H	1.72	0.52
1:A:955:LEU:CG	1:A:973:ILE:HG23	2.38	0.52
1:A:956:ALA:O	1:A:1031:LEU:HD11	2.10	0.52
1:A:1019:THR:HG23	1:A:1019:THR:O	2.09	0.52
1:A:947:LEU:HD23	1:A:947:LEU:O	2.09	0.52
1:A:1064:LEU:HG	1:A:1090:ALA:O	2.09	0.52
1:A:39:PHE:CD1	1:A:505:PRO:HD2	2.44	0.52
1:A:589:GLY:HA3	1:A:639:LYS:HG3	1.90	0.52
1:A:827:SER:HB2	1:A:828:PRO:CD	2.40	0.52
1:A:994:LEU:HD11	1:A:1006:ASN:CB	2.37	0.52
1:A:370:LEU:HD21	1:A:374:TYR:CE1	2.39	0.52
1:A:532:HIS:HA	1:A:641:THR:OG1	2.09	0.52
1:A:952:THR:HG23	1:A:952:THR:O	2.08	0.52
1:A:984:VAL:HG11	1:A:998:ARG:HD3	1.91	0.52
1:A:805:ALA:H	1:A:806:MET:CE	2.22	0.52
1:A:1042:VAL:HG22	1:A:1060:TRP:C	2.35	0.52
1:A:296:PRO:HD2	1:A:414:VAL:HG22	1.92	0.52
1:A:958:LEU:HD23	1:A:959:LYS:H	1.74	0.52
1:A:118:LEU:HD13	1:A:118:LEU:C	2.34	0.52
1:A:371:GLN:O	1:A:375:ARG:HG3	2.09	0.52
1:A:473:GLN:HB2	1:A:504:VAL:CG2	2.40	0.52
1:A:827:SER:HB2	1:A:828:PRO:HD3	1.91	0.52
1:A:228:ILE:HG22	1:A:233:PHE:CE1	2.45	0.52
1:A:541:CYS:SG	1:A:550:PHE:HD2	2.33	0.52
1:A:278:LYS:HG2	1:A:296:PRO:CA	2.38	0.51
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:HA	1.91	0.51
1:A:1029:GLN:HG2	1:A:1030:ASP:N	2.26	0.51
1:A:72:LYS:HD2	1:A:80:LEU:HD12	1.90	0.51
1:A:882:LEU:HD13	1:A:910:ALA:O	2.09	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:986:VAL:HG12	1:A:988:PHE:CE1	2.45	0.51
1:A:93:LYS:HD3	1:A:105:GLU:OE2	2.10	0.51
1:A:689:PHE:CE1	1:A:691:GLU:CG	2.94	0.51
1:A:924:GLN:O	1:A:925:HIS:HB2	2.09	0.51
1:A:127:ILE:HG23	1:A:127:ILE:O	2.09	0.51
1:A:198:ILE:HB	1:A:226:ILE:HG22	1.91	0.51
1:A:439:TYR:HH	1:A:537:ARG:HB3	1.75	0.51
1:A:997:ARG:H	1:A:1004:ILE:HG23	1.75	0.51
1:A:64:LEU:HD11	1:A:501:LEU:HD12	1.92	0.51
1:A:261:GLU:HG2	1:A:265:PRO:N	2.25	0.51
1:A:356:ILE:HG22	1:A:421:ILE:O	2.09	0.51
1:A:370:LEU:HD11	1:A:374:TYR:CE1	2.46	0.51
1:A:712:PRO:HG3	1:A:801:TYR:CZ	2.45	0.51
1:A:785:ASN:HB3	1:A:788:PHE:CE2	2.46	0.51
1:A:580:THR:HG21	1:A:583:VAL:HG11	1.92	0.51
1:A:727:PRO:O	1:A:729:PRO:HD3	2.10	0.51
1:A:894:LYS:CD	1:A:899:GLU:HA	2.41	0.51
1:A:1067:ILE:HD12	1:A:1121:LEU:HA	1.93	0.51
1:A:133:TYR:O	1:A:134:GLN:HB2	2.11	0.51
1:A:265:PRO:HD3	1:A:274:VAL:HG22	1.92	0.51
1:A:519:LEU:N	1:A:519:LEU:HD22	2.26	0.51
1:A:370:LEU:HD13	1:A:374:TYR:CD1	2.46	0.51
1:A:531:LEU:HG	1:A:584:PRO:CG	2.41	0.51
1:A:567:ILE:CD1	1:A:650:PHE:CE2	2.94	0.51
1:A:716:ILE:CG1	1:A:763:ASN:HB3	2.40	0.51
1:A:716:ILE:HG23	1:A:716:ILE:O	2.09	0.51
1:A:823:GLY:HA3	1:A:844:TRP:CZ2	2.46	0.51
1:A:930:GLU:HG3	1:A:941:MET:SD	2.51	0.51
1:A:986:VAL:CG1	1:A:988:PHE:CE1	2.94	0.51
1:A:783:VAL:HG12	1:A:784:TRP:N	2.25	0.51
1:A:889:ILE:CD1	1:A:907:TYR:CE1	2.94	0.51
1:A:1180:TYR:CD2	1:A:1215:VAL:CG1	2.94	0.51
1:A:358:ILE:CG2	1:A:361:GLN:HB2	2.41	0.50
1:A:412:LEU:HD22	1:A:412:LEU:O	2.11	0.50
1:A:507:GLU:HG3	1:A:537:ARG:CG	2.41	0.50
1:A:527:GLY:HA3	1:A:550:PHE:CE1	2.45	0.50
1:A:695:LYS:CB	1:A:696:LEU:HD12	2.41	0.50
1:A:1002:TYR:OH	1:A:1004:ILE:HB	2.12	0.50
1:A:1072:ILE:HG23	1:A:1098:PRO:CG	2.34	0.50
1:A:1211:VAL:HG22	1:A:1212:MET:N	2.26	0.50
1:A:59:THR:HB	1:A:61:HIS:CE1	2.45	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:322:GLY:CA	1:A:327:VAL:HG22	2.40	0.50
1:A:527:GLY:HA3	1:A:550:PHE:HZ	1.72	0.50
1:A:790:ILE:HD12	1:A:790:ILE:N	2.25	0.50
1:A:1029:GLN:CG	1:A:1030:ASP:H	2.24	0.50
1:A:1046:PRO:HD2	1:A:1057:ILE:HG13	1.91	0.50
1:A:54:VAL:HG22	1:A:55:VAL:N	2.25	0.50
1:A:234:THR:HG23	1:A:235:VAL:N	2.27	0.50
1:A:370:LEU:CD1	1:A:374:TYR:CD1	2.95	0.50
1:A:491:GLU:O	1:A:506:VAL:HG12	2.11	0.50
1:A:593:THR:HG23	1:A:593:THR:O	2.10	0.50
1:A:853:LYS:H	1:A:853:LYS:HD2	1.76	0.50
1:A:1180:TYR:CG	1:A:1215:VAL:CG1	2.95	0.50
1:A:53:LEU:HG	1:A:64:LEU:HD11	1.92	0.50
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CD2	2.94	0.50
1:A:204:THR:HG23	1:A:206:ASN:O	2.11	0.50
1:A:1160:ILE:HD11	1:A:1162:LEU:HD21	1.93	0.50
1:A:64:LEU:HB2	1:A:71:TYR:HD2	1.77	0.50
1:A:119:ILE:CG2	1:A:121:TYR:CE1	2.95	0.50
1:A:228:ILE:CG2	1:A:233:PHE:CE1	2.94	0.50
1:A:468:GLN:HG3	1:A:524:PRO:HD2	1.94	0.50
1:A:798:VAL:O	1:A:798:VAL:HG13	2.10	0.50
1:A:895:VAL:O	1:A:896:ALA:HB3	2.11	0.50
1:A:171:VAL:HG12	1:A:172:ILE:N	2.26	0.50
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CG	2.94	0.50
1:A:216:VAL:HG13	1:A:217:PHE:N	2.26	0.50
1:A:380:LEU:CD1	1:A:386:LYS:HE3	2.37	0.50
1:A:560:LEU:HG	1:A:648:THR:HG21	1.92	0.50
1:A:182:LEU:HD21	1:A:184:ILE:HG21	1.94	0.50
1:A:278:LYS:CE	1:A:296:PRO:HG3	2.41	0.50
1:A:566:ASN:HB3	1:A:651:VAL:CG2	2.40	0.50
1:A:59:THR:HB	1:A:61:HIS:ND1	2.27	0.50
1:A:133:TYR:HB3	1:A:136:ILE:HG23	1.94	0.50
1:A:265:PRO:CD	1:A:274:VAL:HG22	2.42	0.50
1:A:265:PRO:HB2	1:A:266:PRO:HD2	1.94	0.50
1:A:295:VAL:HG23	1:A:295:VAL:O	2.12	0.50
1:A:418:VAL:O	1:A:418:VAL:HG13	2.10	0.50
1:A:703:LEU:N	1:A:703:LEU:HD22	2.26	0.50
1:A:809:SER:HB2	1:A:881:ASN:CG	2.34	0.50
1:A:1040:THR:HG22	1:A:1041:ILE:N	2.26	0.50
1:A:1158:THR:HG22	1:A:1159:PRO:O	2.11	0.50
1:A:76:ASP:O	1:A:77:LEU:HB2	2.11	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:110:THR:CB	1:A:132:LEU:HD21	2.42	0.49
1:A:473:GLN:HB3	1:A:502:THR:HG21	1.94	0.49
1:A:782:VAL:CG2	1:A:790:ILE:HB	2.41	0.49
1:A:1100:LEU:CD1	1:A:1137:TYR:CG	2.94	0.49
1:A:1184:VAL:HG23	1:A:1186:GLU:H	1.77	0.49
1:A:312:ALA:HB1	1:A:334:LEU:HD11	1.94	0.49
1:A:681:THR:HG21	1:A:686:THR:HG21	1.94	0.49
1:A:863:ILE:CG1	1:A:864:PRO:HD3	2.39	0.49
1:A:868:PRO:HD3	1:A:980:ALA:HB1	1.93	0.49
1:A:40:VAL:HG21	1:A:76:ASP:O	2.12	0.49
1:A:46:PRO:CG	1:A:69:ARG:HG3	2.27	0.49
1:A:400:ASP:HB2	1:A:402:ASN:OD1	2.11	0.49
1:A:426:GLU:HG3	1:A:429:ASP:H	1.75	0.49
1:A:457:ILE:HG12	1:A:467:LEU:CD1	2.42	0.49
1:A:1072:ILE:CD1	1:A:1117:PHE:HZ	2.14	0.49
1:A:300:GLU:HG2	1:A:305:GLU:HA	1.93	0.49
1:A:440:LYS:HB3	1:A:538:LYS:HZ2	1.78	0.49
1:A:453:LYS:HE3	1:A:472:VAL:HG22	1.94	0.49
1:A:841:GLU:HG3	1:A:842:SER:H	1.77	0.49
1:A:81:VAL:HG12	1:A:82:THR:N	2.26	0.49
1:A:673:TRP:HB3	1:A:694:VAL:HB	1.94	0.49
1:A:695:LYS:C	1:A:696:LEU:HD12	2.37	0.49
1:A:790:ILE:HD12	1:A:790:ILE:H	1.77	0.49
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:CA	2.42	0.49
1:A:531:LEU:CG	1:A:584:PRO:CG	2.90	0.49
1:A:653:TYR:HB3	1:A:669:TYR:CD2	2.48	0.49
1:A:736:TYR:CD2	1:A:784:TRP:HB3	2.47	0.49
1:A:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:HB3	1.93	0.49
1:A:987:MET:HB2	1:A:1019:THR:HG22	1.92	0.49
1:A:1069:ASN:N	1:A:1070:PRO:HD3	2.27	0.49
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CE2	2.47	0.49
1:A:320:VAL:HG23	1:A:441:ASN:HB3	1.94	0.49
1:A:321:LEU:CG	1:A:325:LEU:HD11	2.40	0.49
1:A:1020:VAL:O	1:A:1020:VAL:HG13	2.13	0.49
1:A:1057:ILE:HG22	1:A:1095:CYS:HB2	1.92	0.49
1:A:374:TYR:CE2	1:A:397:LEU:HD22	2.48	0.49
1:A:530:VAL:CB	1:A:584:PRO:HG3	2.43	0.49
1:A:563:HIS:CB	1:A:564:PRO:HD3	2.31	0.49
1:A:597:LEU:HD22	1:A:597:LEU:H	1.77	0.49
1:A:623:ILE:HD12	1:A:624:THR:CA	2.42	0.49
1:A:629:HIS:CG	1:A:669:TYR:CE1	3.00	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:781:THR:HG23	1:A:781:THR:O	2.12	0.49
1:A:892:HIS:HD2	1:A:893:VAL:N	2.10	0.49
1:A:185:ALA:HA	1:A:197:THR:O	2.13	0.49
1:A:190:GLY:HA2	1:A:233:PHE:HE2	1.73	0.49
1:A:882:LEU:HD23	1:A:913:ILE:HD11	1.94	0.49
1:A:144:ASP:O	1:A:145:LEU:HB2	2.13	0.48
1:A:435:ILE:HG21	1:A:486:PHE:CE1	2.48	0.48
1:A:590:VAL:HG12	1:A:591:ASN:N	2.27	0.48
1:A:782:VAL:HG23	1:A:782:VAL:O	2.12	0.48
1:A:907:TYR:CZ	1:A:909:PRO:HA	2.48	0.48
1:A:972:THR:HG23	1:A:1002:TYR:HE1	1.72	0.48
1:A:976:THR:HG22	1:A:977:ASN:N	2.27	0.48
1:A:541:CYS:SG	1:A:550:PHE:CD2	3.06	0.48
1:A:597:LEU:H	1:A:597:LEU:CD2	2.25	0.48
1:A:889:ILE:O	1:A:892:HIS:HB3	2.13	0.48
1:A:561:THR:HG22	1:A:562:VAL:N	2.28	0.48
1:A:713:VAL:HG13	1:A:767:SER:HA	1.94	0.48
1:A:807:ARG:HB3	1:A:812:LEU:HB2	1.95	0.48
1:A:856:ASN:N	1:A:857:PRO:HD3	2.27	0.48
1:A:955:LEU:HD11	1:A:973:ILE:HG23	1.94	0.48
1:A:1067:ILE:HG23	1:A:1070:PRO:CG	2.32	0.48
1:A:1189:CYS:SG	1:A:1191:VAL:CG2	3.02	0.48
1:A:90:ASP:C	1:A:107:LEU:HD22	2.39	0.48
1:A:541:CYS:CB	1:A:544:SER:HB3	2.42	0.48
1:A:790:ILE:HG22	1:A:791:ASP:N	2.29	0.48
1:A:991:GLN:HA	1:A:991:GLN:OE1	2.13	0.48
1:A:1184:VAL:CG2	1:A:1187:LYS:H	2.26	0.48
1:A:468:GLN:CB	1:A:524:PRO:CD	2.92	0.48
1:A:774:ASN:ND2	1:A:820:PHE:CZ	2.81	0.48
1:A:991:GLN:CB	1:A:1008:THR:HG21	2.42	0.48
1:A:995:PHE:HZ	1:A:998:ARG:HB2	1.78	0.48
1:A:160:SER:OG	1:A:162:VAL:HG23	2.13	0.48
1:A:863:ILE:HG13	1:A:864:PRO:N	2.28	0.48
1:A:254:TYR:CE2	1:A:281:ARG:HD2	2.48	0.48
1:A:715:VAL:O	1:A:715:VAL:HG23	2.13	0.48
1:A:814:LEU:HD11	1:A:845:LEU:CD1	2.44	0.48
1:A:935:VAL:HG12	1:A:936:CYS:N	2.28	0.48
1:A:589:GLY:C	1:A:639:LYS:HG2	2.39	0.48
1:A:676:TYR:HE1	1:A:728:GLN:C	2.21	0.48
1:A:743:GLN:CD	1:A:743:GLN:H	2.21	0.48
1:A:82:THR:HG23	1:A:82:THR:O	2.14	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:239:PHE:CD1	1:A:260:PRO:HG2	2.48	0.48
1:A:710:LEU:HD13	1:A:801:TYR:OH	2.13	0.48
1:A:1163:LYS:CG	1:A:1197:GLN:HG2	2.41	0.48
1:A:460:ASP:CG	1:A:463:LYS:HB3	2.39	0.48
1:A:543:ARG:HH11	1:A:549:ARG:HH22	1.62	0.48
1:A:740:LEU:HD12	1:A:740:LEU:N	2.29	0.48
1:A:1041:ILE:CD1	1:A:1127:LEU:HG	2.44	0.48
1:A:68:ASN:ND2	1:A:87:PRO:HD3	2.29	0.47
1:A:783:VAL:HG13	1:A:788:PHE:O	2.13	0.47
1:A:833:LEU:HB2	1:A:836:HIS:ND1	2.29	0.47
1:A:175:TYR:CG	1:A:176:SER:N	2.82	0.47
1:A:333:LEU:HD21	1:A:358:ILE:HG13	1.94	0.47
1:A:871:GLY:C	1:A:1024:ARG:CG	2.85	0.47
1:A:872:GLY:HA3	1:A:1024:ARG:N	2.21	0.47
1:A:113:VAL:HG11	1:A:165:SER:HB3	1.96	0.47
1:A:958:LEU:HD13	1:A:1033:PHE:HD1	1.79	0.47
1:A:1218:MET:HG3	1:A:1219:GLU:N	2.29	0.47
1:A:39:PHE:CD2	1:A:473:GLN:CG	2.95	0.47
1:A:728:GLN:HA	1:A:753:ARG:NH2	2.30	0.47
1:A:1020:VAL:HG13	1:A:1027:ILE:HG12	1.96	0.47
1:A:105:GLU:CB	1:A:106:PRO:HD2	2.42	0.47
1:A:117:LEU:HD11	1:A:126:LEU:CD2	2.31	0.47
1:A:567:ILE:HD12	1:A:650:PHE:CE2	2.49	0.47
1:A:704:LEU:H	1:A:723:ALA:HA	1.79	0.47
1:A:847:LEU:CD1	1:A:884:LEU:CD1	2.88	0.47
1:A:997:ARG:HG2	1:A:998:ARG:N	2.30	0.47
1:A:380:LEU:HD12	1:A:390:ILE:CG2	2.45	0.47
1:A:716:ILE:HD11	1:A:763:ASN:HB3	1.95	0.47
1:A:843:ARG:HB2	1:A:843:ARG:NH1	2.30	0.47
1:A:1007:THR:HG22	1:A:1008:THR:O	2.15	0.47
1:A:1045:GLU:HB2	1:A:1058:ALA:H	1.79	0.47
1:A:45:GLU:HB3	1:A:46:PRO:HD3	1.97	0.47
1:A:52:HIS:O	1:A:496:MET:HE1	2.15	0.47
1:A:68:ASN:HB3	1:A:86:GLY:HA3	1.97	0.47
1:A:77:LEU:HD22	1:A:501:LEU:HD13	1.96	0.47
1:A:262:MET:O	1:A:263:VAL:HB	2.14	0.47
1:A:440:LYS:CD	1:A:538:LYS:HZ2	2.19	0.47
1:A:448:GLY:HA3	1:A:484:MET:HE1	1.97	0.47
1:A:569:VAL:CG1	1:A:620:PRO:HG3	2.45	0.47
1:A:984:VAL:O	1:A:984:VAL:HG23	2.14	0.47
1:A:1010:SER:HB2	1:A:1035:TYR:CD2	2.49	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:124:ASN:OD1	1:A:142:LEU:HB3	2.15	0.47
1:A:372:SER:HA	1:A:375:ARG:NE	2.29	0.47
1:A:471:THR:CG2	1:A:473:GLN:HE22	2.20	0.47
1:A:805:ALA:H	1:A:806:MET:HE1	1.79	0.47
1:A:873:THR:HG21	1:A:981:GLY:HA2	1.91	0.47
1:A:1016:MET:CE	1:A:1033:PHE:HB3	2.25	0.47
1:A:253:VAL:HG23	1:A:253:VAL:O	2.15	0.47
1:A:440:LYS:O	1:A:440:LYS:HG2	2.14	0.47
1:A:947:LEU:H	1:A:947:LEU:HD23	1.79	0.47
1:A:1160:ILE:HG23	1:A:1160:ILE:O	2.14	0.47
1:A:430:ARG:HG2	1:A:431:MET:O	2.14	0.46
1:A:689:PHE:CE1	1:A:691:GLU:HG2	2.50	0.46
1:A:862:ILE:CG2	1:A:877:ILE:HG23	2.44	0.46
1:A:1120:ILE:HD13	1:A:1128:LEU:HD13	1.96	0.46
1:A:203:LEU:HD22	1:A:212:MET:HE1	1.98	0.46
1:A:245:TYR:CE2	1:A:247:PHE:HD2	2.34	0.46
1:A:333:LEU:CD2	1:A:358:ILE:HA	2.45	0.46
1:A:702:GLN:O	1:A:723:ALA:HB1	2.14	0.46
1:A:710:LEU:HD12	1:A:710:LEU:C	2.40	0.46
1:A:920:ALA:C	1:A:922:PRO:HD2	2.41	0.46
1:A:991:GLN:HB3	1:A:1008:THR:HG21	1.96	0.46
1:A:286:ASP:OD1	1:A:288:ALA:HB3	2.16	0.46
1:A:295:VAL:CA	1:A:414:VAL:HG21	2.45	0.46
1:A:783:VAL:HG11	1:A:786:GLY:O	2.16	0.46
1:A:953:LEU:HB3	1:A:977:ASN:O	2.14	0.46
1:A:1015:ASP:H	1:A:1035:TYR:H	1.63	0.46
1:A:1021:GLN:HG2	1:A:1026:ARG:CG	2.41	0.46
1:A:181:LYS:HZ2	1:A:216:VAL:HG23	1.79	0.46
1:A:244:VAL:HB	1:A:309:LEU:HD23	1.97	0.46
1:A:258:LEU:HD12	1:A:258:LEU:N	2.28	0.46
1:A:475:VAL:HG22	1:A:500:GLN:HE21	1.81	0.46
1:A:296:PRO:CD	1:A:414:VAL:HG22	2.45	0.46
1:A:495:ILE:HG22	1:A:502:THR:HB	1.96	0.46
1:A:624:THR:O	1:A:624:THR:HG23	2.15	0.46
1:A:892:HIS:CD2	1:A:893:VAL:CG2	2.98	0.46
1:A:902:PRO:HA	1:A:915:CYS:HA	1.98	0.46
1:A:1180:TYR:CD1	1:A:1215:VAL:HG11	2.51	0.46
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:HE	1.80	0.46
1:A:226:ILE:HD11	1:A:385:LEU:CD2	2.46	0.46
1:A:492:GLN:HG2	1:A:503:ARG:HD2	1.98	0.46
1:A:629:HIS:CG	1:A:669:TYR:CZ	3.04	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:653:TYR:CB	1:A:669:TYR:CD2	2.98	0.46
1:A:539:GLU:HG3	1:A:540:ARG:N	2.31	0.46
1:A:745:ILE:O	1:A:745:ILE:HG23	2.15	0.46
1:A:955:LEU:CD1	1:A:973:ILE:CG2	2.94	0.46
1:A:98:ARG:NH2	1:A:107:LEU:HD12	2.29	0.46
1:A:265:PRO:CB	1:A:266:PRO:HD2	2.46	0.46
1:A:361:GLN:O	1:A:365:ARG:HG2	2.16	0.46
1:A:403:PHE:CE1	1:A:406:LEU:CD2	2.94	0.46
1:A:437:TYR:CE2	1:A:439:TYR:HB2	2.51	0.46
1:A:72:LYS:O	1:A:80:LEU:HB2	2.15	0.46
1:A:343:LYS:HG2	1:A:344:ARG:HG2	1.97	0.46
1:A:440:LYS:CE	1:A:538:LYS:HD3	2.39	0.46
1:A:873:THR:HG22	1:A:874:LYS:N	2.31	0.46
1:A:947:LEU:HD23	1:A:947:LEU:N	2.30	0.46
1:A:1171:VAL:HG12	1:A:1172:ALA:N	2.31	0.46
1:A:239:PHE:HA	1:A:260:PRO:CG	2.33	0.45
1:A:503:ARG:O	1:A:505:PRO:HD3	2.15	0.45
1:A:511:GLN:HG3	1:A:512:TYR:CD2	2.51	0.45
1:A:468:GLN:CB	1:A:524:PRO:HD2	2.46	0.45
1:A:871:GLY:O	1:A:1024:ARG:HG2	2.16	0.45
1:A:955:LEU:HD23	1:A:955:LEU:C	2.41	0.45
1:A:1180:TYR:CD2	1:A:1215:VAL:HG13	2.51	0.45
1:A:62:ILE:CD1	1:A:77:LEU:CD2	2.94	0.45
1:A:118:LEU:HB3	1:A:127:ILE:HG22	1.98	0.45
1:A:327:VAL:HG11	1:A:358:ILE:HD11	1.97	0.45
1:A:469:TYR:CG	1:A:470:GLU:N	2.84	0.45
1:A:892:HIS:CD2	1:A:893:VAL:N	2.85	0.45
1:A:1014:LEU:HD12	1:A:1035:TYR:O	2.16	0.45
1:A:256:LEU:HD22	1:A:256:LEU:N	2.31	0.45
1:A:506:VAL:CG1	1:A:537:ARG:HH22	2.30	0.45
1:A:663:SER:O	1:A:667:SER:HB2	2.17	0.45
1:A:1020:VAL:CG1	1:A:1027:ILE:CG1	2.95	0.45
1:A:1057:ILE:O	1:A:1057:ILE:HG23	2.16	0.45
1:A:62:ILE:CD1	1:A:73:LEU:HD12	2.45	0.45
1:A:99:ILE:HD11	1:A:152:PHE:CB	2.41	0.45
1:A:247:PHE:CD1	1:A:314:LEU:HD22	2.52	0.45
1:A:566:ASN:CB	1:A:651:VAL:CG2	2.95	0.45
1:A:743:GLN:HG2	1:A:744:GLY:N	2.31	0.45
1:A:863:ILE:HG22	1:A:876:THR:CB	2.35	0.45
1:A:1041:ILE:N	1:A:1041:ILE:HD12	2.31	0.45
1:A:46:PRO:HD2	1:A:71:TYR:OH	2.16	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:116:MET:SD	1:A:169:PHE:HA	2.57	0.45
1:A:192:PRO:HB3	1:A:233:PHE:CZ	2.51	0.45
1:A:252:PHE:CD1	1:A:283:CYS:HA	2.50	0.45
1:A:278:LYS:HD3	1:A:294:GLU:HG2	1.98	0.45
1:A:288:ALA:O	1:A:289:PHE:HB2	2.17	0.45
1:A:671:CYS:HB3	1:A:680:CYS:SG	2.57	0.45
1:A:695:LYS:HB2	1:A:696:LEU:HD12	1.97	0.45
1:A:594:PHE:CZ	1:A:614:PRO:HD3	2.51	0.45
1:A:1067:ILE:HD13	1:A:1121:LEU:HA	1.95	0.45
1:A:1102:LEU:HG	1:A:1104:PRO:CD	2.46	0.45
1:A:162:VAL:HG21	1:A:187:ALA:HB3	1.99	0.45
1:A:245:TYR:CD2	1:A:312:ALA:HB3	2.51	0.45
1:A:492:GLN:HG2	1:A:503:ARG:HG2	1.98	0.45
1:A:532:HIS:C	1:A:641:THR:OG1	2.60	0.45
1:A:847:LEU:HD11	1:A:850:ALA:C	2.42	0.45
1:A:991:GLN:CD	1:A:992:PRO:HD2	2.42	0.45
1:A:91:ASN:OD1	1:A:92:PRO:HD2	2.17	0.45
1:A:159:LEU:HG	1:A:201:ARG:HH12	1.81	0.45
1:A:264:SER:HA	1:A:265:PRO:HA	1.53	0.45
1:A:305:GLU:HG2	1:A:307:ARG:HG2	1.99	0.45
1:A:322:GLY:HA2	1:A:327:VAL:HG22	1.99	0.45
1:A:473:GLN:NE2	1:A:504:VAL:CG1	2.73	0.45
1:A:506:VAL:C	1:A:507:GLU:N	2.75	0.45
1:A:562:VAL:HG22	1:A:578:LEU:HD23	1.99	0.45
1:A:832:THR:HG21	1:A:836:HIS:CB	2.48	0.45
1:A:892:HIS:CD2	1:A:893:VAL:HG22	2.51	0.45
1:A:967:GLY:O	1:A:1122:ASP:CG	2.51	0.45
1:A:1036:VAL:HG21	1:A:1066:LEU:CG	2.47	0.45
1:A:40:VAL:HG13	1:A:40:VAL:O	2.17	0.44
1:A:574:VAL:HG22	1:A:613:SER:OG	2.17	0.44
1:A:597:LEU:HG	1:A:622:ILE:HG12	1.99	0.44
1:A:828:PRO:HG3	1:A:837:CYS:SG	2.57	0.44
1:A:262:MET:SD	1:A:383:ALA:HB3	2.58	0.44
1:A:778:VAL:O	1:A:797:LYS:HB2	2.17	0.44
1:A:68:ASN:CG	1:A:87:PRO:HD3	2.43	0.44
1:A:179:ASP:O	1:A:180:ASP:HB3	2.17	0.44
1:A:182:LEU:HB2	1:A:203:LEU:HD11	1.99	0.44
1:A:189:ASP:HB3	1:A:191:LYS:HD3	1.99	0.44
1:A:435:ILE:HG23	1:A:486:PHE:HE1	1.81	0.44
1:A:464:GLY:O	1:A:465:ASN:HB3	2.17	0.44
1:A:62:ILE:CD1	1:A:501:LEU:CD1	2.95	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:NE2	2.32	0.44
1:A:547:PRO:C	1:A:548:ARG:HG2	2.43	0.44
1:A:872:GLY:N	1:A:1024:ARG:CG	2.75	0.44
1:A:1036:VAL:CG2	1:A:1066:LEU:CD1	2.82	0.44
1:A:291:SER:HB3	1:A:404:CYS:O	2.18	0.44
1:A:841:GLU:HG3	1:A:842:SER:N	2.32	0.44
1:A:890:ALA:O	1:A:891:SER:HB2	2.17	0.44
1:A:1120:ILE:CD1	1:A:1128:LEU:CD1	2.94	0.44
1:A:252:PHE:HD1	1:A:283:CYS:HA	1.82	0.44
1:A:620:PRO:O	1:A:623:ILE:HG13	2.18	0.44
1:A:1158:THR:HG22	1:A:1159:PRO:N	2.32	0.44
1:A:1200:CYS:SG	1:A:1201:GLU:N	2.90	0.44
1:A:53:LEU:HD12	1:A:501:LEU:HG	1.99	0.44
1:A:58:ARG:NH1	1:A:58:ARG:HG2	2.31	0.44
1:A:306:TYR:HE1	1:A:351:GLU:HG2	1.82	0.44
1:A:358:ILE:HG23	1:A:358:ILE:O	2.18	0.44
1:A:403:PHE:HE1	1:A:406:LEU:HD23	1.76	0.44
1:A:62:ILE:CD1	1:A:73:LEU:HB2	2.47	0.44
1:A:119:ILE:HG23	1:A:121:TYR:CE1	2.53	0.44
1:A:276:THR:HB	1:A:278:LYS:HZ2	1.82	0.44
1:A:358:ILE:CG2	1:A:361:GLN:CB	2.95	0.44
1:A:541:CYS:HB3	1:A:544:SER:HB3	1.99	0.44
1:A:563:HIS:CB	1:A:577:VAL:HG12	2.46	0.44
1:A:629:HIS:HB3	1:A:669:TYR:CE1	2.53	0.44
1:A:1010:SER:HB2	1:A:1035:TYR:CE1	2.52	0.44
1:A:1068:GLN:C	1:A:1070:PRO:HD3	2.42	0.44
1:A:1073:ARG:HD3	1:A:1128:LEU:CD1	2.45	0.44
1:A:53:LEU:HD11	1:A:501:LEU:HD11	2.00	0.44
1:A:118:LEU:O	1:A:127:ILE:HG22	2.17	0.44
1:A:133:TYR:CG	1:A:136:ILE:CG1	2.94	0.44
1:A:333:LEU:HD23	1:A:358:ILE:HG13	2.00	0.44
1:A:468:GLN:CG	1:A:524:PRO:HD2	2.48	0.44
1:A:586:LEU:HD13	1:A:590:VAL:HG21	1.99	0.44
1:A:296:PRO:HB2	1:A:417:MET:CE	2.48	0.43
1:A:370:LEU:HD12	1:A:399:ILE:HG23	2.00	0.43
1:A:703:LEU:HD13	1:A:723:ALA:CB	2.47	0.43
1:A:703:LEU:CD2	1:A:790:ILE:CG2	2.95	0.43
1:A:978:LEU:HD13	1:A:1003:ILE:HG13	2.00	0.43
1:A:1127:LEU:HD12	1:A:1127:LEU:N	2.33	0.43
1:A:55:VAL:HG22	1:A:62:ILE:HG22	2.00	0.43
1:A:154:LYS:HB2	1:A:157:HIS:CE1	2.54	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:324:THR:O	1:A:324:THR:HG22	2.18	0.43
1:A:446:PHE:CB	1:A:454:LEU:HD11	2.43	0.43
1:A:501:LEU:CD2	1:A:502:THR:N	2.82	0.43
1:A:564:PRO:HB2	1:A:576:LEU:CD2	2.48	0.43
1:A:567:ILE:HD11	1:A:652:PHE:CD1	2.53	0.43
1:A:862:ILE:HG22	1:A:877:ILE:CA	2.32	0.43
1:A:1014:LEU:HA	1:A:1035:TYR:HB2	2.00	0.43
1:A:1044:ILE:HG23	1:A:1057:ILE:CD1	2.48	0.43
1:A:62:ILE:CD1	1:A:501:LEU:HD13	2.48	0.43
1:A:370:LEU:CD2	1:A:374:TYR:HE1	2.28	0.43
1:A:380:LEU:CB	1:A:386:LYS:HE3	2.44	0.43
1:A:629:HIS:CB	1:A:669:TYR:OH	2.66	0.43
1:A:635:GLN:HB3	1:A:644:THR:HB	1.99	0.43
1:A:764:THR:CG2	1:A:766:TYR:CZ	3.01	0.43
1:A:995:PHE:CZ	1:A:998:ARG:HB2	2.53	0.43
1:A:1164:GLY:O	1:A:1167:LEU:HD13	2.17	0.43
1:A:1177:LYS:HD3	1:A:1177:LYS:N	2.31	0.43
1:A:123:GLU:HB2	1:A:125:ARG:HG2	2.01	0.43
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CD1	3.00	0.43
1:A:832:THR:CG2	1:A:836:HIS:CB	2.95	0.43
1:A:889:ILE:HA	1:A:892:HIS:ND1	2.33	0.43
1:A:958:LEU:HD13	1:A:1033:PHE:CD1	2.53	0.43
1:A:962:ARG:HD3	1:A:1034:GLN:NE2	2.34	0.43
1:A:1044:ILE:CG2	1:A:1057:ILE:CD1	2.93	0.43
1:A:110:THR:HG21	1:A:132:LEU:HD21	1.97	0.43
1:A:173:VAL:O	1:A:173:VAL:HG23	2.18	0.43
1:A:217:PHE:CE2	1:A:219:ASP:HB2	2.53	0.43
1:A:295:VAL:CB	1:A:414:VAL:HG21	2.48	0.43
1:A:458:ARG:HB2	1:A:468:GLN:HE22	1.84	0.43
1:A:562:VAL:HG22	1:A:578:LEU:HD22	1.98	0.43
1:A:839:ALA:HB1	1:A:841:GLU:O	2.18	0.43
1:A:847:LEU:CG	1:A:850:ALA:CA	2.92	0.43
1:A:958:LEU:CD2	1:A:959:LYS:N	2.81	0.43
1:A:1044:ILE:HG22	1:A:1046:PRO:O	2.18	0.43
1:A:1191:VAL:CG1	1:A:1192:THR:N	2.81	0.43
1:A:62:ILE:HD11	1:A:73:LEU:CD1	2.45	0.43
1:A:572:TYR:CD2	1:A:572:TYR:C	2.96	0.43
1:A:713:VAL:O	1:A:714:GLU:HB2	2.18	0.43
1:A:864:PRO:CG	1:A:981:GLY:O	2.67	0.43
1:A:962:ARG:HD3	1:A:1034:GLN:HE21	1.83	0.43
1:A:1007:THR:HG22	1:A:1008:THR:N	2.33	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1130:LEU:HD22	1:A:1133:THR:HG21	2.00	0.43
1:A:117:LEU:HG	1:A:126:LEU:HD11	2.01	0.43
1:A:119:ILE:HG21	1:A:121:TYR:CE1	2.54	0.43
1:A:281:ARG:HH11	1:A:281:ARG:HD3	1.71	0.43
1:A:574:VAL:CG2	1:A:613:SER:HB3	2.48	0.43
1:A:889:ILE:CD1	1:A:907:TYR:CZ	3.01	0.43
1:A:965:MET:HG3	1:A:1010:SER:O	2.18	0.43
1:A:1031:LEU:N	1:A:1031:LEU:HD22	2.34	0.43
1:A:333:LEU:HD23	1:A:358:ILE:HA	2.01	0.43
1:A:484:MET:HE2	1:A:495:ILE:HG13	2.01	0.43
1:A:542:GLU:HG2	1:A:543:ARG:HG3	2.01	0.43
1:A:563:HIS:HB2	1:A:577:VAL:HG12	2.01	0.43
1:A:815:LYS:HE3	1:A:911:GLU:CG	2.49	0.43
1:A:991:GLN:HG2	1:A:1008:THR:HG21	1.96	0.43
1:A:100:VAL:HG21	1:A:158:TYR:OH	2.19	0.43
1:A:234:THR:CG2	1:A:235:VAL:N	2.82	0.43
1:A:711:VAL:HG21	1:A:798:VAL:CG2	2.48	0.43
1:A:917:MET:O	1:A:1024:ARG:NH1	2.52	0.43
1:A:972:THR:CG2	1:A:1002:TYR:CE1	2.93	0.43
1:A:98:ARG:HE	1:A:107:LEU:HD12	1.83	0.43
1:A:216:VAL:CG1	1:A:217:PHE:N	2.82	0.43
1:A:458:ARG:HD3	1:A:524:PRO:HB3	1.94	0.43
1:A:470:GLU:HG2	1:A:471:THR:N	2.34	0.43
1:A:444:LEU:HD13	1:A:445:ALA:H	1.79	0.42
1:A:531:LEU:HD21	1:A:584:PRO:CG	2.29	0.42
1:A:617:LYS:HG3	1:A:618:GLU:N	2.34	0.42
1:A:728:GLN:HG3	1:A:753:ARG:NH2	2.34	0.42
1:A:1064:LEU:HD13	1:A:1093:MET:HE3	2.01	0.42
1:A:224:SER:HA	1:A:289:PHE:CD1	2.54	0.42
1:A:764:THR:HG23	1:A:766:TYR:CZ	2.54	0.42
1:A:805:ALA:N	1:A:806:MET:CE	2.82	0.42
1:A:128:ALA:O	1:A:138:LYS:HG2	2.19	0.42
1:A:133:TYR:CB	1:A:136:ILE:HG23	2.49	0.42
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CE2	3.02	0.42
1:A:256:LEU:HD12	1:A:297:ILE:HD11	2.02	0.42
1:A:543:ARG:HB2	1:A:549:ARG:NH1	2.34	0.42
1:A:629:HIS:CB	1:A:669:TYR:CZ	3.02	0.42
1:A:631:VAL:O	1:A:631:VAL:HG13	2.20	0.42
1:A:863:ILE:HG21	1:A:876:THR:HB	1.97	0.42
1:A:1032:VAL:CG1	1:A:1033:PHE:N	2.82	0.42
1:A:1130:LEU:CB	1:A:1133:THR:CG2	2.96	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:53:LEU:CG	1:A:64:LEU:CD1	2.96	0.42
1:A:115:LYS:HB3	1:A:168:VAL:CG1	2.47	0.42
1:A:281:ARG:NH1	1:A:366:ILE:HG21	2.33	0.42
1:A:412:LEU:N	1:A:412:LEU:CD1	2.83	0.42
1:A:555:LYS:NZ	1:A:556:GLN:HG2	2.34	0.42
1:A:590:VAL:CG1	1:A:591:ASN:N	2.82	0.42
1:A:629:HIS:ND1	1:A:669:TYR:OH	2.52	0.42
1:A:665:VAL:HG11	1:A:697:PRO:CD	2.48	0.42
1:A:696:LEU:N	1:A:696:LEU:CD1	2.83	0.42
1:A:953:LEU:HA	1:A:977:ASN:HB2	2.02	0.42
1:A:1041:ILE:HD13	1:A:1127:LEU:HG	2.00	0.42
1:A:1067:ILE:HD12	1:A:1121:LEU:CA	2.48	0.42
1:A:110:THR:CB	1:A:132:LEU:CD2	2.95	0.42
1:A:112:ASN:ND2	1:A:133:TYR:HE2	2.17	0.42
1:A:716:ILE:CD1	1:A:763:ASN:HB3	2.49	0.42
1:A:917:MET:HE1	1:A:948:TYR:CZ	2.54	0.42
1:A:1082:ILE:N	1:A:1082:ILE:CD1	2.83	0.42
1:A:1084:ILE:CG1	1:A:1085:CYS:N	2.82	0.42
1:A:1130:LEU:HB3	1:A:1133:THR:CG2	2.40	0.42
1:A:332:ASP:O	1:A:333:LEU:HD23	2.18	0.42
1:A:380:LEU:CB	1:A:386:LYS:CE	2.95	0.42
1:A:380:LEU:HD22	1:A:412:LEU:HB3	2.02	0.42
1:A:541:CYS:HB2	1:A:544:SER:HB3	2.01	0.42
1:A:759:VAL:CG1	1:A:760:GLN:N	2.81	0.42
1:A:93:LYS:HD2	1:A:105:GLU:CD	2.45	0.42
1:A:435:ILE:CD1	1:A:486:PHE:HD1	2.30	0.42
1:A:567:ILE:HD11	1:A:650:PHE:CE2	2.53	0.42
1:A:597:LEU:N	1:A:597:LEU:CD2	2.82	0.42
1:A:955:LEU:C	1:A:955:LEU:CD2	2.93	0.42
1:A:1029:GLN:CG	1:A:1030:ASP:N	2.83	0.42
1:A:1064:LEU:HD13	1:A:1093:MET:HB2	2.01	0.42
1:A:1178:LEU:HD12	1:A:1178:LEU:H	1.81	0.42
1:A:68:ASN:CB	1:A:86:GLY:HA3	2.50	0.42
1:A:281:ARG:HB3	1:A:293:VAL:HG11	1.97	0.42
1:A:321:LEU:HD23	1:A:333:LEU:CD1	2.50	0.42
1:A:626:ASN:HD22	1:A:627:GLY:N	2.18	0.42
1:A:865:VAL:CG1	1:A:866:THR:N	2.82	0.42
1:A:916:GLU:OE2	1:A:1024:ARG:CZ	2.61	0.42
1:A:44:GLY:CA	1:A:50:PHE:HE2	2.23	0.42
1:A:162:VAL:HG12	1:A:164:GLU:H	1.84	0.42
1:A:567:ILE:N	1:A:567:ILE:CD1	2.82	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1180:TYR:CE1	1:A:1215:VAL:HG11	2.54	0.42
1:A:62:ILE:CD1	1:A:64:LEU:HD21	2.46	0.42
1:A:239:PHE:CD1	1:A:260:PRO:CD	3.03	0.42
1:A:623:ILE:HD12	1:A:624:THR:HA	2.01	0.42
1:A:988:PHE:CB	1:A:1016:MET:SD	3.06	0.42
1:A:1004:ILE:C	1:A:1004:ILE:CD1	2.93	0.42
1:A:44:GLY:O	1:A:47:ALA:HA	2.20	0.41
1:A:80:LEU:C	1:A:81:VAL:HG23	2.45	0.41
1:A:419:ARG:HH11	1:A:419:ARG:HD3	1.72	0.41
1:A:435:ILE:HG21	1:A:486:PHE:HE1	1.81	0.41
1:A:626:ASN:HD22	1:A:626:ASN:C	2.28	0.41
1:A:662:LEU:O	1:A:666:GLU:HB3	2.20	0.41
1:A:679:VAL:CG1	1:A:680:CYS:N	2.82	0.41
1:A:715:VAL:HG21	1:A:717:LYS:CD	2.44	0.41
1:A:926:ALA:HB2	1:A:949:TYR:CD1	2.55	0.41
1:A:959:LYS:HG2	1:A:972:THR:HG21	2.01	0.41
1:A:72:LYS:CE	1:A:80:LEU:CD1	2.95	0.41
1:A:95:TYR:CG	1:A:96:PRO:CD	3.03	0.41
1:A:177:ASN:O	1:A:178:PHE:CG	2.73	0.41
1:A:560:LEU:CG	1:A:648:THR:CG2	2.98	0.41
1:A:803:CYS:SG	1:A:832:THR:HA	2.61	0.41
1:A:817:ASP:OD1	1:A:820:PHE:CD2	2.74	0.41
1:A:885:GLU:HG3	1:A:886:PHE:N	2.34	0.41
1:A:178:PHE:HD1	1:A:178:PHE:O	2.02	0.41
1:A:226:ILE:HD11	1:A:385:LEU:HD23	2.03	0.41
1:A:471:THR:HG21	1:A:473:GLN:NE2	2.19	0.41
1:A:619:VAL:HB	1:A:620:PRO:CD	2.47	0.41
1:A:845:LEU:HD11	1:A:852:SER:OG	2.20	0.41
1:A:949:TYR:CE2	1:A:951:MET:CE	2.95	0.41
1:A:1180:TYR:CG	1:A:1215:VAL:HG11	2.56	0.41
1:A:159:LEU:HG	1:A:201:ARG:NH1	2.36	0.41
1:A:385:LEU:C	1:A:385:LEU:CD1	2.93	0.41
1:A:403:PHE:CE2	1:A:405:GLY:HA2	2.55	0.41
1:A:847:LEU:HD12	1:A:852:SER:HB2	2.00	0.41
1:A:988:PHE:CD2	1:A:1016:MET:SD	3.12	0.41
1:A:440:LYS:HB3	1:A:538:LYS:HZ1	1.84	0.41
1:A:492:GLN:HB3	1:A:503:ARG:HG3	2.02	0.41
1:A:783:VAL:CG1	1:A:784:TRP:N	2.83	0.41
1:A:958:LEU:HD22	1:A:960:PRO:N	2.35	0.41
1:A:962:ARG:CB	1:A:1034:GLN:HG3	2.45	0.41
1:A:51:ASN:OD1	1:A:67:VAL:HG23	2.20	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:256:LEU:CB	1:A:309:LEU:CD2	2.94	0.41
1:A:370:LEU:CD2	1:A:374:TYR:CE1	3.03	0.41
1:A:551:ALA:HB1	1:A:556:GLN:HB2	2.03	0.41
1:A:667:SER:HB3	1:A:668:PRO:CD	2.51	0.41
1:A:888:ASP:OD1	1:A:889:ILE:HG13	2.20	0.41
1:A:897:GLY:H	1:A:924:GLN:HE22	1.69	0.41
1:A:62:ILE:HD13	1:A:77:LEU:HD23	2.02	0.41
1:A:307:ARG:HD3	1:A:307:ARG:HA	1.88	0.41
1:A:446:PHE:CD1	1:A:446:PHE:N	2.88	0.41
1:A:453:LYS:CE	1:A:472:VAL:HG22	2.51	0.41
1:A:773:ILE:N	1:A:773:ILE:CD1	2.82	0.41
1:A:830:GLN:CG	1:A:831:CYS:H	2.24	0.41
1:A:862:ILE:HG21	1:A:877:ILE:HG12	2.03	0.41
1:A:889:ILE:HG23	1:A:892:HIS:NE2	2.33	0.41
1:A:889:ILE:HD12	1:A:907:TYR:CE1	2.56	0.41
1:A:892:HIS:CD2	1:A:892:HIS:C	2.98	0.41
1:A:904:VAL:CG1	1:A:905:ASP:N	2.82	0.41
1:A:39:PHE:CZ	1:A:473:GLN:HG3	2.53	0.41
1:A:53:LEU:C	1:A:53:LEU:CD2	2.94	0.41
1:A:111:ASN:O	1:A:132:LEU:HD22	2.21	0.41
1:A:169:PHE:CD2	1:A:170:GLY:N	2.84	0.41
1:A:188:VAL:CG2	1:A:191:LYS:HB2	2.51	0.41
1:A:327:VAL:CG1	1:A:358:ILE:CD1	2.94	0.41
1:A:711:VAL:HB	1:A:800:LEU:HD23	2.02	0.41
1:A:959:LYS:HG2	1:A:972:THR:HB	2.02	0.41
1:A:1031:LEU:HD22	1:A:1031:LEU:H	1.84	0.41
1:A:1162:LEU:O	1:A:1197:GLN:HA	2.20	0.41
1:A:1178:LEU:N	1:A:1178:LEU:CD1	2.82	0.41
1:A:111:ASN:O	1:A:132:LEU:HD13	2.20	0.41
1:A:137:CYS:SG	1:A:159:LEU:CD1	3.09	0.41
1:A:180:ASP:C	1:A:181:LYS:HG2	2.46	0.41
1:A:242:TYR:CE1	1:A:345:LYS:HE2	2.56	0.41
1:A:280:VAL:CG1	1:A:281:ARG:N	2.83	0.41
1:A:469:TYR:CZ	1:A:470:GLU:O	2.74	0.41
1:A:506:VAL:HG13	1:A:537:ARG:NH2	2.36	0.41
1:A:845:LEU:C	1:A:845:LEU:CD1	2.94	0.41
1:A:909:PRO:C	1:A:911:GLU:H	2.29	0.41
1:A:953:LEU:HD12	1:A:978:LEU:HD23	2.01	0.41
1:A:959:LYS:CG	1:A:972:THR:HG21	2.51	0.41
1:A:468:GLN:HB3	1:A:468:GLN:HE21	1.47	0.41
1:A:492:GLN:CG	1:A:503:ARG:HD2	2.51	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:689:PHE:HD1	1:A:691:GLU:HG2	1.80	0.41
1:A:747:GLN:HG3	1:A:766:TYR:HD1	1.86	0.41
1:A:959:LYS:CG	1:A:972:THR:CB	2.97	0.41
1:A:67:VAL:CG1	1:A:111:ASN:HB3	2.50	0.40
1:A:72:LYS:CD	1:A:80:LEU:CD1	2.97	0.40
1:A:188:VAL:HG13	1:A:189:ASP:N	2.36	0.40
1:A:284:LYS:C	1:A:284:LYS:CD	2.95	0.40
1:A:387:VAL:CG1	1:A:388:LYS:N	2.82	0.40
1:A:435:ILE:HD12	1:A:486:PHE:CE1	2.56	0.40
1:A:884:LEU:HA	1:A:884:LEU:HD23	1.75	0.40
1:A:259:GLN:HA	1:A:260:PRO:HD3	1.82	0.40
1:A:434:VAL:CG2	1:A:435:ILE:N	2.84	0.40
1:A:435:ILE:CD1	1:A:436:ALA:N	2.81	0.40
1:A:1072:ILE:HG22	1:A:1083:ASN:O	2.21	0.40
1:A:236:ILE:CG2	1:A:239:PHE:HB2	2.51	0.40
1:A:252:PHE:HE1	1:A:283:CYS:SG	2.45	0.40
1:A:567:ILE:CD1	1:A:650:PHE:CZ	3.01	0.40
1:A:605:ILE:O	1:A:608:GLN:HG2	2.20	0.40
1:A:1044:ILE:CG2	1:A:1057:ILE:CG1	2.96	0.40
1:A:444:LEU:HD13	1:A:444:LEU:C	2.44	0.40
1:A:943:ARG:HB2	1:A:943:ARG:CZ	2.51	0.40
1:A:141:ARG:HB3	1:A:144:ASP:OD1	2.21	0.40
1:A:843:ARG:CZ	1:A:843:ARG:CB	2.99	0.40
1:A:1069:ASN:OD1	1:A:1084:ILE:HD11	2.21	0.40
1:A:1093:MET:HE3	1:A:1093:MET:HB2	1.91	0.40
1:A:1183:LEU:HD12	1:A:1183:LEU:N	2.36	0.40

All (10) symmetry-related close contacts are listed below. The label for Atom-2 includes the symmetry operator and encoded unit-cell translations to be applied.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:146:PHE:CE1	1:A:730:GLN:NE2[4_555]	0.96	1.24
1:A:269:THR:CG2	1:A:377:GLU:OE1[2_455]	1.33	0.87
1:A:268:SER:OG	1:A:375:ARG:NH1[2_455]	1.48	0.72
1:A:146:PHE:CD1	1:A:730:GLN:OE1[4_555]	1.76	0.44
1:A:269:THR:CG2	1:A:377:GLU:CD[2_455]	1.90	0.30
1:A:146:PHE:CE1	1:A:730:GLN:CD[4_555]	1.91	0.29
1:A:146:PHE:CD1	1:A:730:GLN:NE2[4_555]	1.96	0.24
1:A:146:PHE:CD1	1:A:730:GLN:CD[4_555]	2.08	0.12
1:A:146:PHE:CZ	1:A:730:GLN:NE2[4_555]	2.09	0.11
1:A:269:THR:CG2	1:A:377:GLU:OE2[2_455]	2.14	0.06

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	1150/1207 (95%)	1071 (93%)	57 (5%)	22 (2%)	6	32

All (22) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	96	PRO
1	A	181	LYS
1	A	191	LYS
1	A	410	ALA
1	A	465	ASN
1	A	557	CYS
1	A	804	GLY
1	A	864	PRO
1	A	1111	THR
1	A	87	PRO
1	A	271	LYS
1	A	474	VAL
1	A	849	GLY
1	A	1015	ASP
1	A	1016	MET
1	A	263	VAL
1	A	1122	ASP
1	A	344	ARG
1	A	933	VAL
1	A	1013	VAL
1	A	44	GLY
1	A	921	LYS

5.3.2 Protein sidechains [i](#)

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	1035/1067 (97%)	1000 (97%)	35 (3%)	32 54

All (35) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	69	ARG
1	A	72	LYS
1	A	98	ARG
1	A	271	LYS
1	A	386	LYS
1	A	409	ASN
1	A	412	LEU
1	A	435	ILE
1	A	444	LEU
1	A	468	GLN
1	A	501	LEU
1	A	529	CYS
1	A	548	ARG
1	A	567	ILE
1	A	575	LEU
1	A	597	LEU
1	A	626	ASN
1	A	670	ARG
1	A	722	LYS
1	A	743	GLN
1	A	773	ILE
1	A	797	LYS
1	A	853	LYS
1	A	854	CYS
1	A	892	HIS
1	A	955	LEU
1	A	1004	ILE
1	A	1014	LEU
1	A	1016	MET
1	A	1017	LYS
1	A	1024	ARG
1	A	1082	ILE
1	A	1107	GLN
1	A	1136	THR
1	A	1177	LYS

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (4) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	114	ASN
1	A	134	GLN
1	A	490	HIS
1	A	1125	GLN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	A	9

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	1139:PRO	C	1140:ASN	N	4.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	506:VAL	C	507:GLU	N	2.75
1	A	951:MET	C	952:THR	N	2.26
1	A	802:LYS	C	803:CYS	N	2.24
1	A	1036:VAL	C	1037:GLU	N	2.02
1	A	653:TYR	C	654:ASN	N	2.01
1	A	700:CYS	C	701:PRO	N	1.72
1	A	557:CYS	C	558:VAL	N	1.15
1	A	854:CYS	C	855:THR	N	0.85

6 Fit of model and data ⓘ

6.1 Protein, DNA and RNA chains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	1168/1207 (96%)	1.44	290 (24%) 2 8	185, 272, 310, 310	0

All (290) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	584	PRO	18.0
1	A	531	LEU	12.9
1	A	676	TYR	11.0
1	A	678	HIS	10.3
1	A	727	PRO	10.2
1	A	814	LEU	10.1
1	A	673	TRP	9.8
1	A	679	VAL	9.6
1	A	704	LEU	9.3
1	A	810	CYS	8.7
1	A	726	LEU	8.6
1	A	412	LEU	8.6
1	A	836	HIS	8.5
1	A	1138	TYR	8.3
1	A	668	PRO	8.2
1	A	675	LYS	7.5
1	A	789	ASN	7.4
1	A	791	ASP	7.4
1	A	672	HIS	7.4
1	A	409	ASN	7.4
1	A	804	GLY	7.3
1	A	845	LEU	7.3
1	A	529	CYS	7.2
1	A	403	PHE	7.2
1	A	541	CYS	7.1
1	A	854	CYS	6.8
1	A	544	SER	6.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	351	GLU	6.7
1	A	847	LEU	6.5
1	A	1056	PRO	6.5
1	A	644	THR	6.4
1	A	411	PRO	6.3
1	A	222	VAL	6.3
1	A	406	LEU	6.3
1	A	723	ALA	6.2
1	A	583	VAL	6.1
1	A	527	GLY	6.1
1	A	948	TYR	6.1
1	A	837	CYS	6.1
1	A	530	VAL	6.1
1	A	629	HIS	6.0
1	A	628	ASP	6.0
1	A	40	VAL	5.9
1	A	669	TYR	5.8
1	A	532	HIS	5.7
1	A	950	PHE	5.6
1	A	918	GLY	5.6
1	A	694	VAL	5.6
1	A	552	SER	5.5
1	A	724	LYS	5.5
1	A	660	SER	5.5
1	A	67	VAL	5.5
1	A	413	GLY	5.5
1	A	695	LYS	5.4
1	A	661	CYS	5.4
1	A	284	LYS	5.4
1	A	342	GLN	5.3
1	A	526	CYS	5.3
1	A	1111	THR	5.3
1	A	722	LYS	5.2
1	A	1044	ILE	5.2
1	A	839	ALA	5.2
1	A	701	PRO	5.1
1	A	550	PHE	5.0
1	A	267	GLY	4.9
1	A	265	PRO	4.7
1	A	846	GLU	4.7
1	A	826	GLN	4.7
1	A	682	HIS	4.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	807	ARG	4.7
1	A	304	VAL	4.6
1	A	803	CYS	4.6
1	A	1107	GLN	4.6
1	A	783	VAL	4.6
1	A	735	GLY	4.5
1	A	688	SER	4.5
1	A	218	HIS	4.5
1	A	875	VAL	4.4
1	A	1101	ALA	4.4
1	A	498	GLU	4.3
1	A	431	MET	4.3
1	A	1096	GLN	4.3
1	A	832	THR	4.3
1	A	430	ARG	4.3
1	A	1043	ARG	4.3
1	A	540	ARG	4.3
1	A	784	TRP	4.3
1	A	524	PRO	4.1
1	A	354	LEU	4.1
1	A	1181	THR	4.1
1	A	681	THR	4.1
1	A	1097	ALA	4.0
1	A	473	GLN	4.0
1	A	264	SER	4.0
1	A	1139	PRO	4.0
1	A	223	ALA	4.0
1	A	824	TRP	4.0
1	A	811	GLY	3.9
1	A	276	THR	3.9
1	A	348	SER	3.8
1	A	325	LEU	3.7
1	A	838	PRO	3.7
1	A	702	GLN	3.7
1	A	656	SER	3.7
1	A	949	TYR	3.7
1	A	627	GLY	3.6
1	A	655	CYS	3.6
1	A	505	PRO	3.6
1	A	657	VAL	3.5
1	A	809	SER	3.5
1	A	844	TRP	3.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	506	VAL	3.5
1	A	1117	PHE	3.5
1	A	292	TYR	3.5
1	A	889	ILE	3.5
1	A	1193	VAL	3.4
1	A	39	PHE	3.4
1	A	1168	ILE	3.4
1	A	186	THR	3.4
1	A	670	ARG	3.4
1	A	1071	GLN	3.4
1	A	843	ARG	3.4
1	A	1057	ILE	3.4
1	A	884	LEU	3.4
1	A	830	GLN	3.4
1	A	447	VAL	3.4
1	A	197	THR	3.3
1	A	353	ALA	3.3
1	A	1135	PHE	3.3
1	A	868	PRO	3.3
1	A	228	ILE	3.3
1	A	1180	TYR	3.3
1	A	340	LYS	3.2
1	A	1102	LEU	3.2
1	A	423	VAL	3.2
1	A	294	GLU	3.2
1	A	396	LEU	3.2
1	A	551	ALA	3.2
1	A	886	PHE	3.2
1	A	585	GLU	3.1
1	A	262	MET	3.1
1	A	1029	GLN	3.1
1	A	566	ASN	3.1
1	A	454	LEU	3.1
1	A	217	PHE	3.1
1	A	834	ARG	3.1
1	A	1144	GLU	3.1
1	A	538	LYS	3.1
1	A	165	SER	3.1
1	A	953	LEU	3.1
1	A	787	HIS	3.1
1	A	534	THR	3.0
1	A	536	THR	3.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	525	HIS	3.0
1	A	1106	HIS	3.0
1	A	391	PRO	3.0
1	A	883	GLY	3.0
1	A	796	ASN	3.0
1	A	825	CYS	3.0
1	A	612	TYR	3.0
1	A	227	LYS	3.0
1	A	1084	ILE	3.0
1	A	539	GLU	3.0
1	A	443	SER	3.0
1	A	802	LYS	3.0
1	A	850	ALA	3.0
1	A	434	VAL	2.9
1	A	494	TYR	2.9
1	A	1169	PRO	2.9
1	A	1211	VAL	2.9
1	A	964	PRO	2.9
1	A	917	MET	2.9
1	A	528	TRP	2.9
1	A	963	GLY	2.9
1	A	761	CYS	2.9
1	A	455	LYS	2.8
1	A	1049	SER	2.8
1	A	1017	LYS	2.8
1	A	422	PRO	2.8
1	A	659	ASN	2.8
1	A	725	ASN	2.8
1	A	590	VAL	2.8
1	A	1120	ILE	2.8
1	A	1019	THR	2.8
1	A	586	LEU	2.8
1	A	729	PRO	2.7
1	A	1024	ARG	2.7
1	A	805	ALA	2.7
1	A	380	LEU	2.7
1	A	710	LEU	2.7
1	A	491	GLU	2.7
1	A	1217	GLY	2.7
1	A	788	PHE	2.7
1	A	920	ALA	2.7
1	A	448	GLY	2.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	144	ASP	2.7
1	A	137	CYS	2.7
1	A	1202	SER	2.7
1	A	734	ARG	2.6
1	A	1116	GLU	2.6
1	A	580	THR	2.6
1	A	1204	ASN	2.6
1	A	820	PHE	2.6
1	A	790	ILE	2.6
1	A	236	ILE	2.6
1	A	410	ALA	2.6
1	A	969	THR	2.6
1	A	828	PRO	2.6
1	A	183	PHE	2.5
1	A	794	ALA	2.5
1	A	934	ALA	2.5
1	A	446	PHE	2.5
1	A	1221	SER	2.5
1	A	486	PHE	2.5
1	A	333	LEU	2.5
1	A	882	LEU	2.5
1	A	51	ASN	2.5
1	A	827	SER	2.5
1	A	408	MET	2.5
1	A	385	LEU	2.5
1	A	151	PRO	2.5
1	A	1054	ASN	2.4
1	A	1134	ASN	2.4
1	A	352	SER	2.4
1	A	1186	GLU	2.4
1	A	503	ARG	2.4
1	A	903	LEU	2.4
1	A	736	TYR	2.4
1	A	797	LYS	2.4
1	A	1166	ASN	2.4
1	A	146	PHE	2.4
1	A	831	CYS	2.4
1	A	418	VAL	2.4
1	A	278	LYS	2.4
1	A	806	MET	2.4
1	A	887	ARG	2.3
1	A	374	TYR	2.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	1123	ASN	2.3
1	A	733	GLN	2.3
1	A	774	ASN	2.3
1	A	951	MET	2.3
1	A	357	PHE	2.3
1	A	405	GLY	2.3
1	A	1184	VAL	2.3
1	A	143	GLU	2.3
1	A	570	SER	2.3
1	A	237	PRO	2.3
1	A	957	ASP	2.3
1	A	954	THR	2.2
1	A	126	LEU	2.2
1	A	1010	SER	2.2
1	A	427	ASP	2.2
1	A	654	ASN	2.2
1	A	1110	LEU	2.2
1	A	1009	SER	2.2
1	A	138	LYS	2.2
1	A	1187	LYS	2.2
1	A	980	ALA	2.2
1	A	594	PHE	2.2
1	A	913	ILE	2.2
1	A	730	GLN	2.2
1	A	691	GLU	2.2
1	A	1047	GLU	2.2
1	A	356	ILE	2.2
1	A	397	LEU	2.2
1	A	1108	SER	2.1
1	A	442	HIS	2.1
1	A	925	HIS	2.1
1	A	150	GLU	2.1
1	A	867	GLY	2.1
1	A	433	SER	2.1
1	A	719	ILE	2.1
1	A	852	SER	2.1
1	A	945	SER	2.1
1	A	76	ASP	2.1
1	A	130	GLY	2.1
1	A	270	THR	2.1
1	A	1213	ALA	2.1
1	A	1100	LEU	2.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	1200	CYS	2.0
1	A	465	ASN	2.0
1	A	1136	THR	2.0
1	A	874	LYS	2.0
1	A	226	ILE	2.0
1	A	645	PHE	2.0
1	A	140	LEU	2.0
1	A	456	LYS	2.0
1	A	779	GLU	2.0
1	A	781	THR	2.0
1	A	944	SER	2.0

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

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

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.