



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 10:39 AM UTC

PDB ID : 5L5N / pdb_00005l5n
Title : Plexin A4 full extracellular region, domains 1 to 7 modeled, data to 8.5 angstrom, spacegroup P4(3)22
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 : 8.50 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

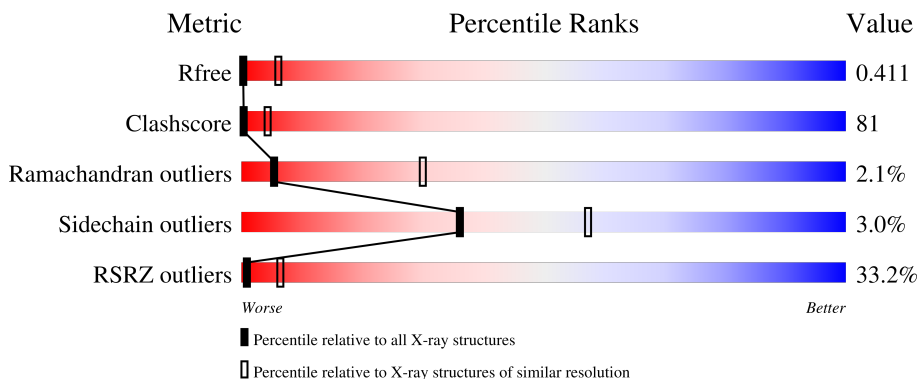
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 8.50 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	1168 (11.50-4.00)
Clashscore	190562	1001 (11.50-4.06)
Ramachandran outliers	187476	1055 (11.50-4.00)
Sidechain outliers	187428	1018 (11.50-4.00)
RSRZ outliers	180081	1162 (11.50-4.00)

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	25% 22% 46% 7% 24%

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 7189 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	915	Total	C	N	O	S	0	0	0
			7189	4533	1239	1357	60			

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

GLY	GLY	GLY	ARG	ASN	K921	I859	Y799	G732	Y689
MET	VAL	ASP	ILE	VAL	P922	T860	L800	Q733	R670
TYR	ASN	ASP	PRO	VAL	S923	I861	Y801	R734	C671
ILE	LEU	ILE	PRO	VAL	Q924	I862	K802	H735	H672
ALA	LEU	GLN	GLU	MET	H925	I863	C803	W673	W673
PRO	PRO	SER	TRP	PHE	A926	P864	G804	G674	G674
GLY	PRO	ASP	SER	GLY	G927	V865	A805	K675	K675
ARG	PRO	LEU	ILE	SER	F928	T866	M806	Y676	Y676
VAL	VAL	THR	VAL	GLN	V929	G867	R807	A677	A677
ALA	ALA	GLY	SER	PRO	E930	H678	E808	H678	H678
LYS	LYS	GLY	GLY	CYS	I931	R869	S809	V679	V679
HIS	HIS	GLY	ASN	LEU	C932	T873	C810	C680	C680
HIS	HIS	ASN	THR	PHE	V933	K874	G811	T681	T681
HIS	HIS	LYS	PRO	HIS	A934	V875	L812	H682	H682
HIS	HIS	LEU	ILE	ARG	C935	T876	C813	D683	D683
HIS	HIS	ASN	ALA	ARG	C936	R877	Q747	T686	T686
HIS	HIS	ASN	VAL	ARG	R937	I877	L814	F689	F689
HIS	HIS	THR	TRP	SER	P938	R878	K815	E691	E691
THR	THR	GLY	GLY	SER	F939	G879	V749	V694	V694
VAL	VAL	ASP	THR	TYR	P940	E880	A751	L696	L696
LEU	LEU	ASN	HIS	TYR	M941	N881	L752	P697	P697
LEU	LEU	ILE	ASN	ILE	A942	L882	R753	E698	E698
GLY	GLY	GLN	ASP	ILE	R943	G883	F754	C700	C700
GLY	GLY	SER	LEU	ASN	L947	L884	W755	P701	P701
LYS	LYS	LEU	ILE	THR	Y948	E885	C822	Q702	Q702
PRO	PRO	LEU	GLN	THR	Y949	F886	G823	L703	L703
CYS	CYS	ILE	ASN	THR	Y949	R887	W824	L704	L704
THR	THR	LEU	PRO	SER	F950	D888	C825	V706	V706
VAL	VAL	ASN	GLN	SER	M951	I889	Q826	D707	D707
VAL	VAL	LYS	ILE	GLU	THR	S891	S827	K708	K708
VAL	VAL	THR	ARG	VAL	LEU	H882	Q828	I709	I709
SER	SER	ASN	ALA	LEU	LEU	V893	Q830	V711	V711
ASP	ASP	PHE	LYS	ASP	LEU	C900	C831	P712	P712
VAL	VAL	THR	HIS	MET	LEU	E899	T832	V713	V713
GLN	GLN	TYR	GLY	GLY	ASP	V895	L833	E714	E714
LEU	LEU	LEU	GLY	VAL	LEU	A896	L834	V715	V715
LEU	LEU	TYR	THR	THR	LYS	G897	Q835	I716	I716
CYS	CYS	ASN	GLY	VAL	PRO	V898	H836	K717	K717
GLY	GLY	PRO	ILE	VAL	ASN	E899	C837	I718	I718
ARG	ARG	VAL	ILE	GLN	ARG	C900	P838	I719	I719
LYS	LYS	ASN	ASN	VAL	GLY	S901	A839	L721	L721
VAL	VAL	LEU	ALA	ARG	MET	P902	H840	K722	K722
GLY	GLY	PHE	GLY	ARG	SER	L903	E841	A723	A723
ARG	ARG	SER	VAL	ILE	GLY	D905	S842	K724	K724
VAL	VAL	THR	THR	THR	THR	G906	W844	W725	W725
MET	MET	LEU	GLY	LEU	GLY	I908	E846	L726	L726
ALA	ALA	LEU	ALA	VAL	VAL	P909	L847	P727	P727
ALA	ALA	GLU	GLY	VAL	THR	A910	S848	Q728	Q728
ARG	ARG	LEU	THR	PHE	ILE	E911	G849	P729	P729
LYS	LYS	LEU	THR	GLN	THR	Q912	A850	Q730	Q730
PRO	PRO	LYS	CYS	TYR	GLY	I913	N851	K731	K731
GLY	GLY	PRO	GLN	VAL	THR	V914	S852		
GLY	GLY	GLY	ALA	GLU	ASN	C915	K853		
MET	MET	THR	ASP	LEU	LEU	F916	C854		
GLU	GLU	PRO	PRO	ASN	ASN	M917	T855		
TYR	TYR	ILE	ALA	ALA	ALA	G918	N856		
SER	SER	ILE	ALA	ILE	ILE	E919	K797		
PRO	PRO	LEU	LEU	VAL	SER	A920	R858		

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 43 2 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	189.48Å 189.48Å 252.59Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	70.37 – 8.50 70.37 – 8.50	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.5 (70.37-8.50) 99.3 (70.37-8.50)	Depositor EDS
R_{merge}	0.33	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	1.94 (at 8.39Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX 1.8.2_1309	Depositor
R, R_{free}	0.401 , 0.412 0.405 , 0.411	Depositor DCC
R_{free} test set	203 reflections (4.61%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	502.9	Xtriage
Anisotropy	0.294	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.37 , 289.2	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.34$, $\langle L^2 \rangle = 0.17$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.54	EDS
Total number of atoms	7189	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	162.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 8.07% 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	1.52	10/7343 (0.1%)	1.76	121/9940 (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 (10) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	653	TYR	C-N	-59.48	0.50	1.33
1	A	700	CYS	C-N	-27.17	0.70	1.33
1	A	49	GLY	C-N	9.92	1.45	1.33
1	A	180	ASP	C-N	7.50	1.44	1.33
1	A	49	GLY	CA-C	7.27	1.62	1.51
1	A	50	PHE	N-CA	6.84	1.53	1.46
1	A	46	PRO	N-CA	-6.38	1.41	1.47
1	A	653	TYR	CA-C	-6.04	1.50	1.53
1	A	465	ASN	C-N	5.22	1.41	1.33
1	A	711	VAL	CA-CB	-5.18	1.50	1.54

All (121) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	653	TYR	O-C-N	-38.56	89.64	121.65
1	A	747	GLN	CG-CD-OE1	-38.43	43.94	120.80
1	A	700	CYS	O-C-N	-17.09	101.67	121.32
1	A	747	GLN	CG-CD-NE2	-15.10	93.74	116.40
1	A	747	GLN	OE1-CD-NE2	15.09	137.69	122.60
1	A	843	ARG	CA-C-N	11.63	141.07	122.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	843	ARG	C-N-CA	11.63	141.07	122.81
1	A	700	CYS	C-N-CD	-11.36	78.41	125.00
1	A	892	HIS	CA-CB-CG	10.95	124.75	113.80
1	A	478	GLY	CA-C-N	10.14	132.52	119.84
1	A	478	GLY	C-N-CA	10.14	132.52	119.84
1	A	479	PRO	N-CA-C	10.14	133.35	112.47
1	A	700	CYS	CA-C-N	-9.81	107.57	119.84
1	A	700	CYS	C-N-CA	-9.81	107.57	119.84
1	A	473	GLN	CA-C-N	-9.43	105.00	121.97
1	A	473	GLN	C-N-CA	-9.43	105.00	121.97
1	A	478	GLY	CA-C-O	-9.32	108.19	121.52
1	A	221	PHE	CA-CB-CG	-9.16	104.64	113.80
1	A	940	PHE	CA-CB-CG	-9.13	104.67	113.80
1	A	653	TYR	CA-C-N	-9.03	104.30	121.54
1	A	653	TYR	C-N-CA	-9.03	104.30	121.54
1	A	594	PHE	CA-CB-CG	-8.83	104.97	113.80
1	A	446	PHE	CA-CB-CG	-8.36	105.44	113.80
1	A	45	GLU	N-CA-C	-8.05	101.80	112.75
1	A	754	PHE	CA-CB-CG	-7.91	105.89	113.80
1	A	46	PRO	N-CA-CB	7.82	107.30	102.92
1	A	330	ASP	CA-CB-CG	-7.64	104.95	112.60
1	A	473	GLN	N-CA-C	-7.49	103.40	112.54
1	A	844	TRP	N-CA-C	-7.46	97.78	109.72
1	A	45	GLU	CA-C-N	-7.33	111.26	120.79
1	A	45	GLU	C-N-CA	-7.33	111.26	120.79
1	A	188	VAL	N-CA-C	7.17	117.98	111.81
1	A	152	PHE	CA-CB-CG	-7.03	106.77	113.80
1	A	169	PHE	CA-CB-CG	-6.86	106.94	113.80
1	A	46	PRO	CB-CA-C	6.78	117.57	111.87
1	A	46	PRO	N-CA-C	-6.76	99.52	110.74
1	A	486	PHE	CA-CB-CG	-6.69	107.11	113.80
1	A	47	ALA	N-CA-C	-6.68	104.23	112.38
1	A	363	ASN	CA-CB-CG	-6.62	105.98	112.60
1	A	596	ASP	CA-CB-CG	-6.59	106.01	112.60
1	A	95	TYR	N-CA-C	-6.48	102.53	110.31
1	A	919	GLU	CA-C-N	6.47	134.88	121.94
1	A	919	GLU	C-N-CA	6.47	134.88	121.94
1	A	49	GLY	CA-C-N	6.41	135.66	121.81
1	A	49	GLY	C-N-CA	6.41	135.66	121.81
1	A	741	ASN	CA-CB-CG	-6.38	106.22	112.60
1	A	134	GLN	N-CA-C	-6.37	104.04	113.40
1	A	39	PHE	CA-CB-CG	-6.35	107.45	113.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	476	ASP	CA-C-N	-6.34	113.75	123.14
1	A	476	ASP	C-N-CA	-6.34	113.75	123.14
1	A	79	VAL	CB-CA-C	-6.27	104.46	111.23
1	A	928	PHE	CA-CB-CG	-6.20	107.60	113.80
1	A	441	ASN	CA-CB-CG	-6.17	106.43	112.60
1	A	183	PHE	CA-CB-CG	-6.15	107.65	113.80
1	A	622	ILE	CB-CA-C	-6.12	104.00	112.02
1	A	51	ASN	CA-CB-CG	-6.09	106.51	112.60
1	A	512	TYR	CA-C-N	6.04	128.87	120.29
1	A	512	TYR	C-N-CA	6.04	128.87	120.29
1	A	307	ARG	N-CA-C	6.04	120.65	113.28
1	A	209	ALA	CA-C-N	6.00	129.42	120.31
1	A	209	ALA	C-N-CA	6.00	129.42	120.31
1	A	573	ASN	CA-CB-CG	-5.96	106.64	112.60
1	A	803	CYS	CA-C-N	5.91	132.99	121.41
1	A	803	CYS	C-N-CA	5.91	132.99	121.41
1	A	86	GLY	O-C-N	5.88	127.64	121.77
1	A	924	GLN	N-CA-C	5.88	117.68	111.28
1	A	653	TYR	CA-C-O	5.86	122.02	118.33
1	A	244	VAL	N-CA-C	5.84	116.05	110.74
1	A	805	ALA	CA-C-N	5.82	130.57	120.68
1	A	805	ALA	C-N-CA	5.82	130.57	120.68
1	A	290	ASN	CA-CB-CG	-5.77	106.83	112.60
1	A	409	ASN	CA-C-N	5.77	135.88	121.80
1	A	409	ASN	C-N-CA	5.77	135.88	121.80
1	A	60	GLY	N-CA-C	-5.73	107.41	115.32
1	A	805	ALA	N-CA-C	-5.68	104.70	111.69
1	A	331	ASP	CA-CB-CG	-5.68	106.92	112.60
1	A	460	ASP	CA-CB-CG	-5.65	106.95	112.60
1	A	676	TYR	CA-CB-CG	-5.64	103.75	113.90
1	A	829	GLY	N-CA-C	-5.63	106.41	115.08
1	A	153	HIS	N-CA-C	5.62	117.09	111.07
1	A	699	ASP	CA-CB-CG	-5.59	107.01	112.60
1	A	332	ASP	CA-CB-CG	-5.59	107.01	112.60
1	A	621	ARG	N-CA-C	-5.59	105.19	111.28
1	A	840	HIS	N-CA-C	-5.57	105.29	111.36
1	A	476	ASP	CA-CB-CG	-5.56	107.04	112.60
1	A	541	CYS	CB-CA-C	-5.56	101.18	110.29
1	A	683	ASP	CA-CB-CG	-5.54	107.06	112.60
1	A	252	PHE	CA-CB-CG	-5.45	108.35	113.80
1	A	76	ASP	CA-CB-CG	-5.44	107.16	112.60
1	A	95	TYR	N-CA-CB	5.39	115.87	109.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	96	PRO	N-CA-CB	5.33	108.25	103.08
1	A	881	ASN	CB-CA-C	-5.32	103.94	111.76
1	A	237	PRO	CA-C-N	5.31	131.94	121.58
1	A	237	PRO	C-N-CA	5.31	131.94	121.58
1	A	565	ASN	CA-CB-CG	-5.27	107.33	112.60
1	A	691	GLU	CA-C-N	5.27	130.16	120.79
1	A	691	GLU	C-N-CA	5.27	130.16	120.79
1	A	350	ASP	CA-CB-CG	-5.26	107.34	112.60
1	A	152	PHE	N-CA-C	5.24	119.81	113.41
1	A	302	ASN	CA-CB-CG	-5.24	107.36	112.60
1	A	159	LEU	N-CA-C	5.20	117.75	111.40
1	A	886	PHE	CA-CB-CG	-5.19	108.61	113.80
1	A	287	THR	CA-C-N	5.16	128.15	120.31
1	A	287	THR	C-N-CA	5.16	128.15	120.31
1	A	151	PRO	CA-C-N	5.14	131.28	122.09
1	A	151	PRO	C-N-CA	5.14	131.28	122.09
1	A	774	ASN	CB-CA-C	-5.13	102.82	110.88
1	A	855	THR	CA-C-N	5.11	128.34	122.83
1	A	855	THR	C-N-CA	5.11	128.34	122.83
1	A	472	VAL	CA-C-N	-5.10	112.21	120.72
1	A	472	VAL	C-N-CA	-5.10	112.21	120.72
1	A	215	TYR	CA-CB-CG	-5.09	104.74	113.90
1	A	512	TYR	CA-CB-CG	-5.09	104.74	113.90
1	A	163	ASN	CA-CB-CG	-5.07	107.53	112.60
1	A	181	LYS	N-CA-C	5.07	121.59	110.80
1	A	162	VAL	CA-C-N	5.05	129.98	121.14
1	A	162	VAL	C-N-CA	5.05	129.98	121.14
1	A	374	TYR	CA-CB-CG	-5.04	104.82	113.90
1	A	844	TRP	CA-C-N	-5.04	116.05	123.00
1	A	844	TRP	C-N-CA	-5.04	116.05	123.00
1	A	523	ASP	CB-CA-C	-5.02	102.02	109.60

There are no chirality outliers.

All (4) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	653	TYR	Mainchain
1	A	700	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	7189	0	7049	1151	32
All	All	7189	0	7049	1151	32

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 (1151) 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:468:GLN:HG3	1:A:524:PRO:CD	1.18	1.58
1:A:530:VAL:HG11	1:A:584:PRO:CD	1.11	1.56
1:A:439:TYR:CE2	1:A:538:LYS:NZ	1.78	1.51
1:A:468:GLN:CG	1:A:524:PRO:HD3	1.39	1.51
1:A:439:TYR:HE2	1:A:538:LYS:NZ	1.11	1.44
1:A:530:VAL:CG1	1:A:584:PRO:HD2	1.48	1.42
1:A:556:GLN:HA	1:A:582:ASN:ND2	1.33	1.36
1:A:530:VAL:CG1	1:A:584:PRO:CD	2.00	1.35
1:A:815:LYS:CE	1:A:910:ALA:HB3	1.55	1.34
1:A:662:LEU:HD23	1:A:791:ASP:OD2	1.27	1.32
1:A:557:CYS:O	1:A:582:ASN:CB	1.74	1.32
1:A:812:LEU:HD21	1:A:880:GLU:O	1.23	1.31
1:A:557:CYS:C	1:A:582:ASN:HB2	1.58	1.28
1:A:699:ASP:HA	1:A:725:ASN:OD1	1.11	1.28
1:A:810:CYS:SG	1:A:855:THR:HG22	1.76	1.24
1:A:569:VAL:CG2	1:A:654:ASN:HB2	1.66	1.23
1:A:555:LYS:O	1:A:582:ASN:OD1	1.57	1.20
1:A:569:VAL:HB	1:A:654:ASN:ND2	1.56	1.20
1:A:662:LEU:CD2	1:A:791:ASP:OD2	1.91	1.17
1:A:469:TYR:CG	1:A:523:ASP:OD2	1.98	1.17
1:A:533:ASN:HD21	1:A:644:THR:C	1.51	1.17
1:A:533:ASN:ND2	1:A:644:THR:C	2.03	1.17
1:A:439:TYR:HE2	1:A:538:LYS:CE	1.59	1.16
1:A:468:GLN:CG	1:A:524:PRO:CD	2.08	1.15
1:A:453:LYS:HG2	1:A:472:VAL:HG22	1.25	1.14
1:A:435:ILE:HG22	1:A:446:PHE:HB2	1.22	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:295:VAL:HG12	1:A:414:VAL:HG11	1.27	1.13
1:A:468:GLN:HG3	1:A:524:PRO:HD2	1.27	1.13
1:A:533:ASN:ND2	1:A:644:THR:O	1.82	1.13
1:A:324:THR:HB	1:A:462:PRO:HB3	1.27	1.13
1:A:469:TYR:CB	1:A:523:ASP:OD2	1.98	1.12
1:A:468:GLN:CB	1:A:524:PRO:HD3	1.79	1.11
1:A:699:ASP:CA	1:A:725:ASN:OD1	1.98	1.11
1:A:595:GLU:HB2	1:A:597:LEU:HD23	1.32	1.11
1:A:225:MET:HE1	1:A:227:LYS:HG3	1.32	1.11
1:A:359:LEU:HD12	1:A:362:ILE:HD11	1.24	1.11
1:A:662:LEU:HD23	1:A:791:ASP:CG	1.76	1.10
1:A:530:VAL:HB	1:A:584:PRO:HG3	1.21	1.09
1:A:469:TYR:HB2	1:A:523:ASP:CG	1.76	1.09
1:A:118:LEU:HD12	1:A:172:ILE:HD12	1.17	1.09
1:A:806:MET:H	1:A:806:MET:HE3	1.16	1.08
1:A:556:GLN:CA	1:A:582:ASN:ND2	2.16	1.07
1:A:474:VAL:HG12	1:A:475:VAL:HG23	1.33	1.06
1:A:530:VAL:CG1	1:A:584:PRO:CG	2.33	1.05
1:A:469:TYR:HB2	1:A:523:ASP:OD2	1.55	1.04
1:A:815:LYS:CD	1:A:910:ALA:HB3	1.87	1.04
1:A:815:LYS:HE3	1:A:910:ALA:HB3	1.31	1.04
1:A:569:VAL:HG23	1:A:654:ASN:CB	1.87	1.04
1:A:812:LEU:CD2	1:A:880:GLU:O	2.05	1.03
1:A:560:LEU:HD23	1:A:648:THR:HG23	1.37	1.03
1:A:533:ASN:CG	1:A:645:PHE:HB3	1.83	1.03
1:A:812:LEU:HG	1:A:881:ASN:OD1	1.59	1.02
1:A:620:PRO:HA	1:A:623:ILE:HG13	1.41	1.02
1:A:557:CYS:C	1:A:558:VAL:HA	1.85	1.02
1:A:494:TYR:HB3	1:A:501:LEU:HD21	1.40	1.01
1:A:458:ARG:HD2	1:A:524:PRO:CB	1.89	1.01
1:A:301:ARG:HD2	1:A:425:THR:HG21	1.37	1.01
1:A:854:CYS:HB3	1:A:855:THR:N	1.75	0.99
1:A:623:ILE:HA	1:A:626:ASN:HD21	1.28	0.99
1:A:444:LEU:HD12	1:A:446:PHE:CE1	1.98	0.98
1:A:117:LEU:HD11	1:A:126:LEU:HD21	1.45	0.98
1:A:46:PRO:HG2	1:A:69:ARG:HG3	1.41	0.97
1:A:530:VAL:HG11	1:A:584:PRO:HD3	1.47	0.97
1:A:563:HIS:HB3	1:A:564:PRO:HD3	1.44	0.95
1:A:42:PHE:HE1	1:A:79:VAL:HG22	1.31	0.95
1:A:439:TYR:CE2	1:A:538:LYS:CE	2.40	0.95
1:A:557:CYS:O	1:A:582:ASN:HB2	0.77	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:72:LYS:HE3	1:A:80:LEU:HD13	1.49	0.94
1:A:808:GLU:OE2	1:A:880:GLU:OE1	1.83	0.94
1:A:297:ILE:HG22	1:A:418:VAL:CG1	1.97	0.94
1:A:530:VAL:HG11	1:A:584:PRO:CG	1.96	0.94
1:A:862:ILE:HG22	1:A:877:ILE:HA	1.46	0.93
1:A:863:ILE:HG22	1:A:876:THR:HB	1.48	0.93
1:A:865:VAL:HG13	1:A:866:THR:HG23	1.50	0.93
1:A:804:GLY:HA2	1:A:806:MET:SD	2.09	0.92
1:A:39:PHE:CE2	1:A:473:GLN:HG3	2.04	0.92
1:A:62:ILE:CG1	1:A:73:LEU:HB2	1.98	0.92
1:A:949:TYR:HE2	1:A:951:MET:HE2	1.31	0.92
1:A:297:ILE:HG22	1:A:418:VAL:HG12	1.49	0.92
1:A:458:ARG:HD2	1:A:524:PRO:HB3	1.48	0.92
1:A:530:VAL:CB	1:A:584:PRO:HG3	1.99	0.91
1:A:239:PHE:HA	1:A:260:PRO:HG2	1.51	0.91
1:A:566:ASN:HA	1:A:651:VAL:HG23	1.49	0.91
1:A:225:MET:HE1	1:A:227:LYS:CG	1.99	0.91
1:A:435:ILE:HD13	1:A:436:ALA:H	1.34	0.91
1:A:933:VAL:HG23	1:A:934:ALA:H	1.36	0.91
1:A:527:GLY:HA3	1:A:550:PHE:CZ	2.04	0.91
1:A:806:MET:SD	1:A:807:ARG:HG3	2.11	0.91
1:A:815:LYS:CE	1:A:909:PRO:O	2.19	0.91
1:A:815:LYS:HD2	1:A:910:ALA:CB	2.00	0.90
1:A:569:VAL:HG23	1:A:654:ASN:HB2	0.91	0.90
1:A:359:LEU:CD1	1:A:362:ILE:HD11	2.02	0.90
1:A:271:LYS:HG3	1:A:272:GLU:H	1.34	0.89
1:A:447:VAL:HG22	1:A:455:LYS:HB2	1.53	0.89
1:A:533:ASN:OD1	1:A:645:PHE:CB	2.20	0.89
1:A:446:PHE:HD2	1:A:454:LEU:HD21	1.38	0.88
1:A:453:LYS:CG	1:A:472:VAL:HG22	2.03	0.88
1:A:95:TYR:CD2	1:A:96:PRO:HD3	2.08	0.88
1:A:486:PHE:CD1	1:A:493:LEU:HD13	2.09	0.88
1:A:833:LEU:HB2	1:A:836:HIS:HD2	1.39	0.88
1:A:532:HIS:HA	1:A:641:THR:OG1	1.72	0.88
1:A:447:VAL:CG2	1:A:455:LYS:HB2	2.03	0.88
1:A:256:LEU:HB3	1:A:309:LEU:HD22	1.56	0.87
1:A:892:HIS:HB2	1:A:932:CYS:O	1.74	0.87
1:A:557:CYS:C	1:A:582:ASN:CB	2.36	0.87
1:A:181:LYS:CD	1:A:202:LYS:HA	2.04	0.87
1:A:295:VAL:HA	1:A:414:VAL:CG2	2.05	0.87
1:A:196:PRO:HB3	1:A:225:MET:HE2	1.53	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:468:GLN:HG3	1:A:524:PRO:CG	2.05	0.86
1:A:39:PHE:CE1	1:A:505:PRO:HD2	2.11	0.86
1:A:439:TYR:CD2	1:A:538:LYS:NZ	2.42	0.86
1:A:110:THR:CG2	1:A:132:LEU:HD21	2.05	0.86
1:A:473:GLN:CG	1:A:504:VAL:HG22	2.06	0.86
1:A:603:LEU:HD23	1:A:604:VAL:N	1.90	0.86
1:A:863:ILE:HG23	1:A:864:PRO:HD2	1.56	0.86
1:A:533:ASN:CG	1:A:645:PHE:CB	2.48	0.86
1:A:133:TYR:CG	1:A:136:ILE:HG12	2.11	0.85
1:A:847:LEU:HD11	1:A:850:ALA:HA	1.58	0.85
1:A:118:LEU:HD13	1:A:119:ILE:N	1.91	0.85
1:A:370:LEU:CD1	1:A:399:ILE:HD12	2.05	0.85
1:A:882:LEU:HB2	1:A:910:ALA:HA	1.58	0.85
1:A:854:CYS:O	1:A:940:PHE:CZ	2.28	0.85
1:A:118:LEU:HD12	1:A:172:ILE:CD1	2.05	0.85
1:A:847:LEU:HD12	1:A:852:SER:HB3	1.58	0.85
1:A:815:LYS:HD2	1:A:910:ALA:HB3	1.55	0.85
1:A:863:ILE:CG2	1:A:876:THR:HB	2.07	0.85
1:A:706:VAL:HG22	1:A:707:ASP:H	1.42	0.84
1:A:42:PHE:CZ	1:A:45:GLU:HB2	2.12	0.84
1:A:468:GLN:CD	1:A:524:PRO:HG3	2.03	0.84
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:H	1.39	0.84
1:A:295:VAL:CG1	1:A:414:VAL:HG11	2.07	0.84
1:A:458:ARG:CD	1:A:524:PRO:HB3	2.07	0.84
1:A:50:PHE:HB2	1:A:498:GLU:O	1.78	0.83
1:A:229:PRO:O	1:A:232:THR:HG22	1.79	0.83
1:A:569:VAL:CG2	1:A:654:ASN:CB	2.52	0.83
1:A:358:ILE:HG23	1:A:361:GLN:H	1.44	0.83
1:A:295:VAL:HA	1:A:414:VAL:HG22	1.60	0.83
1:A:812:LEU:HD11	1:A:880:GLU:HB3	1.60	0.83
1:A:100:VAL:HG12	1:A:101:GLN:HG3	1.58	0.82
1:A:133:TYR:CB	1:A:136:ILE:HG12	2.09	0.82
1:A:356:ILE:CG2	1:A:421:ILE:HB	2.07	0.82
1:A:830:GLN:HG2	1:A:831:CYS:H	1.43	0.82
1:A:785:ASN:HB3	1:A:788:PHE:CD2	2.14	0.82
1:A:809:SER:HB3	1:A:856:ASN:HD21	1.44	0.82
1:A:53:LEU:HD23	1:A:54:VAL:N	1.94	0.82
1:A:42:PHE:CE1	1:A:79:VAL:HG22	2.14	0.82
1:A:435:ILE:CG2	1:A:446:PHE:HB2	2.06	0.82
1:A:40:VAL:CG1	1:A:503:ARG:HB3	2.08	0.82
1:A:468:GLN:HG3	1:A:524:PRO:HD3	0.88	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:533:ASN:OD1	1:A:645:PHE:HA	1.78	0.82
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CE1	2.15	0.82
1:A:44:GLY:HA2	1:A:50:PHE:CE2	2.15	0.82
1:A:336:THR:O	1:A:354:LEU:HD12	1.78	0.82
1:A:474:VAL:HG22	1:A:495:ILE:HG21	1.61	0.82
1:A:949:TYR:CE2	1:A:951:MET:HE2	2.15	0.81
1:A:530:VAL:HB	1:A:584:PRO:CG	2.05	0.81
1:A:863:ILE:HG13	1:A:864:PRO:HD3	1.62	0.81
1:A:397:LEU:HD23	1:A:399:ILE:HD13	1.61	0.81
1:A:926:ALA:HB1	1:A:947:LEU:HD12	1.63	0.81
1:A:486:PHE:CE1	1:A:493:LEU:HD13	2.16	0.81
1:A:889:ILE:HG23	1:A:892:HIS:CE1	2.16	0.81
1:A:359:LEU:HD12	1:A:362:ILE:CD1	2.09	0.81
1:A:397:LEU:HD23	1:A:399:ILE:CD1	2.11	0.81
1:A:154:LYS:HD3	1:A:210:ASP:OD1	1.81	0.81
1:A:533:ASN:ND2	1:A:645:PHE:N	2.28	0.80
1:A:295:VAL:HG12	1:A:414:VAL:CG1	2.09	0.80
1:A:62:ILE:HG13	1:A:73:LEU:HB2	1.62	0.80
1:A:370:LEU:HD12	1:A:399:ILE:HD12	1.63	0.80
1:A:154:LYS:HB2	1:A:157:HIS:CD2	2.16	0.80
1:A:53:LEU:HB2	1:A:496:MET:HE3	1.61	0.80
1:A:356:ILE:HG22	1:A:421:ILE:HB	1.61	0.80
1:A:380:LEU:HD12	1:A:386:LYS:HE3	1.64	0.80
1:A:468:GLN:HB2	1:A:523:ASP:HA	1.64	0.80
1:A:556:GLN:CA	1:A:582:ASN:CG	2.52	0.80
1:A:314:LEU:HD11	1:A:332:ASP:HB3	1.64	0.79
1:A:239:PHE:CE1	1:A:260:PRO:HD2	2.17	0.79
1:A:321:LEU:HD12	1:A:462:PRO:HG2	1.64	0.79
1:A:244:VAL:HG13	1:A:482:ARG:NH1	1.98	0.79
1:A:556:GLN:HA	1:A:582:ASN:HD21	1.43	0.79
1:A:192:PRO:HB3	1:A:233:PHE:CE1	2.17	0.79
1:A:569:VAL:HB	1:A:654:ASN:CG	2.08	0.79
1:A:444:LEU:HD13	1:A:445:ALA:N	1.97	0.79
1:A:715:VAL:HG21	1:A:717:LYS:HD2	1.65	0.78
1:A:56:ASP:OD2	1:A:142:LEU:HD11	1.83	0.78
1:A:569:VAL:CB	1:A:654:ASN:ND2	2.42	0.78
1:A:317:ALA:HB1	1:A:321:LEU:HB3	1.64	0.78
1:A:319:ALA:H	1:A:441:ASN:HD22	1.31	0.78
1:A:533:ASN:CG	1:A:645:PHE:CA	2.56	0.78
1:A:623:ILE:HD12	1:A:624:THR:N	1.96	0.78
1:A:327:VAL:HG12	1:A:358:ILE:HD11	1.65	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:700:CYS:CB	1:A:701:PRO:N	2.25	0.78
1:A:815:LYS:HE3	1:A:910:ALA:CB	2.13	0.78
1:A:181:LYS:NZ	1:A:216:VAL:HG23	1.99	0.78
1:A:320:VAL:HG21	1:A:442:HIS:CD2	2.19	0.78
1:A:44:GLY:HA2	1:A:50:PHE:HE2	1.44	0.78
1:A:742:ILE:HB	1:A:745:ILE:O	1.84	0.78
1:A:917:MET:HE1	1:A:948:TYR:OH	1.84	0.78
1:A:556:GLN:HA	1:A:582:ASN:CG	2.08	0.78
1:A:168:VAL:HG23	1:A:185:ALA:O	1.84	0.77
1:A:324:THR:HB	1:A:462:PRO:CB	2.10	0.77
1:A:620:PRO:HA	1:A:623:ILE:CG1	2.12	0.77
1:A:51:ASN:HD21	1:A:67:VAL:HG23	1.50	0.77
1:A:181:LYS:HZ3	1:A:216:VAL:HG23	1.49	0.77
1:A:785:ASN:HB3	1:A:788:PHE:HD2	1.48	0.77
1:A:806:MET:H	1:A:806:MET:CE	1.97	0.77
1:A:284:LYS:O	1:A:284:LYS:HD3	1.85	0.77
1:A:439:TYR:CE2	1:A:538:LYS:HE3	2.19	0.77
1:A:616:ALA:O	1:A:620:PRO:HD2	1.85	0.77
1:A:854:CYS:O	1:A:940:PHE:HZ	1.66	0.77
1:A:847:LEU:CG	1:A:850:ALA:HA	2.13	0.77
1:A:403:PHE:CE1	1:A:406:LEU:HD23	2.20	0.77
1:A:453:LYS:HE3	1:A:472:VAL:CG2	2.13	0.77
1:A:327:VAL:CG1	1:A:358:ILE:HD11	2.14	0.77
1:A:710:LEU:HD12	1:A:710:LEU:O	1.84	0.77
1:A:231:ASP:O	1:A:234:THR:HG22	1.84	0.77
1:A:591:ASN:OD1	1:A:639:LYS:HE2	1.83	0.76
1:A:533:ASN:OD1	1:A:645:PHE:CA	2.33	0.76
1:A:595:GLU:CB	1:A:597:LEU:HD23	2.14	0.76
1:A:204:THR:HG21	1:A:209:ALA:HB3	1.66	0.76
1:A:812:LEU:HD21	1:A:880:GLU:C	2.09	0.76
1:A:64:LEU:HD12	1:A:496:MET:CE	2.16	0.76
1:A:547:PRO:O	1:A:548:ARG:HG2	1.84	0.76
1:A:780:LEU:HD12	1:A:780:LEU:O	1.86	0.76
1:A:456:LYS:HD3	1:A:525:HIS:CE1	2.20	0.76
1:A:847:LEU:CD1	1:A:850:ALA:HA	2.16	0.76
1:A:120:ASP:OD2	1:A:123:GLU:HG3	1.86	0.76
1:A:869:ARG:O	1:A:920:ALA:HB3	1.86	0.76
1:A:278:LYS:HE3	1:A:296:PRO:HG3	1.67	0.75
1:A:172:ILE:HG12	1:A:182:LEU:HD13	1.68	0.75
1:A:847:LEU:HD12	1:A:852:SER:CB	2.16	0.75
1:A:448:GLY:HA3	1:A:480:VAL:HG21	1.68	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:473:GLN:CB	1:A:504:VAL:HG22	2.17	0.75
1:A:42:PHE:HZ	1:A:45:GLU:HB2	1.50	0.75
1:A:533:ASN:CG	1:A:645:PHE:HA	2.11	0.75
1:A:323:ARG:HG3	1:A:324:THR:N	2.02	0.75
1:A:676:TYR:HE1	1:A:730:GLN:HG2	1.52	0.75
1:A:256:LEU:CB	1:A:309:LEU:HD22	2.16	0.75
1:A:63:TYR:C	1:A:64:LEU:HD22	2.12	0.74
1:A:188:VAL:HG22	1:A:191:LYS:H	1.52	0.74
1:A:739:ILE:CD1	1:A:748:ARG:HG2	2.17	0.74
1:A:151:PRO:HB2	1:A:157:HIS:ND1	2.02	0.74
1:A:321:LEU:CD1	1:A:462:PRO:HG2	2.17	0.74
1:A:460:ASP:HB3	1:A:464:GLY:N	2.00	0.74
1:A:567:ILE:HD12	1:A:650:PHE:CZ	2.22	0.74
1:A:439:TYR:OH	1:A:538:LYS:HE3	1.88	0.74
1:A:567:ILE:HD13	1:A:567:ILE:H	1.50	0.74
1:A:815:LYS:HE2	1:A:910:ALA:HB3	1.67	0.74
1:A:822:CYS:HA	1:A:833:LEU:HD23	1.70	0.74
1:A:873:THR:HB	1:A:917:MET:CE	2.17	0.74
1:A:202:LYS:HD3	1:A:214:ALA:HB3	1.69	0.74
1:A:683:ASP:O	1:A:686:THR:HG22	1.87	0.74
1:A:704:LEU:HD11	1:A:724:LYS:HE3	1.70	0.74
1:A:784:TRP:HD1	1:A:790:ILE:HD11	1.51	0.74
1:A:530:VAL:CB	1:A:584:PRO:CG	2.61	0.74
1:A:154:LYS:H	1:A:157:HIS:HD2	1.36	0.74
1:A:456:LYS:HD3	1:A:525:HIS:HE1	1.53	0.74
1:A:562:VAL:HG22	1:A:578:LEU:CD2	2.18	0.74
1:A:99:ILE:HD11	1:A:152:PHE:HB2	1.69	0.73
1:A:278:LYS:HG2	1:A:296:PRO:HA	1.68	0.73
1:A:468:GLN:HB2	1:A:524:PRO:HD3	1.71	0.73
1:A:806:MET:HE3	1:A:806:MET:N	1.99	0.73
1:A:812:LEU:HG	1:A:881:ASN:CG	2.13	0.73
1:A:435:ILE:HD13	1:A:436:ALA:N	2.03	0.73
1:A:446:PHE:HB3	1:A:454:LEU:HD11	1.69	0.73
1:A:469:TYR:CD1	1:A:523:ASP:OD2	2.42	0.73
1:A:676:TYR:CE1	1:A:730:GLN:CG	2.72	0.73
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:458:ARG:HD2	1:A:524:PRO:HB2	1.71	0.73
1:A:321:LEU:HG	1:A:325:LEU:HD11	1.71	0.72
1:A:623:ILE:HA	1:A:626:ASN:ND2	2.01	0.72
1:A:184:ILE:HD12	1:A:184:ILE:O	1.89	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:704:LEU:HB2	1:A:722:LYS:HG3	1.71	0.72
1:A:115:LYS:HB3	1:A:168:VAL:HG11	1.71	0.72
1:A:670:ARG:HE	1:A:670:ARG:HA	1.54	0.72
1:A:321:LEU:HG	1:A:325:LEU:CD1	2.20	0.72
1:A:619:VAL:HB	1:A:620:PRO:HD3	1.72	0.72
1:A:814:LEU:HB3	1:A:847:LEU:HB2	1.70	0.72
1:A:261:GLU:HA	1:A:264:SER:O	1.89	0.72
1:A:832:THR:CG2	1:A:836:HIS:HB2	2.20	0.72
1:A:39:PHE:CD2	1:A:473:GLN:HG3	2.23	0.72
1:A:380:LEU:HB2	1:A:386:LYS:CE	2.20	0.72
1:A:847:LEU:CD1	1:A:852:SER:HB3	2.20	0.71
1:A:662:LEU:CD2	1:A:791:ASP:CG	2.54	0.71
1:A:676:TYR:CE1	1:A:730:GLN:HG2	2.25	0.71
1:A:700:CYS:HB3	1:A:701:PRO:N	2.04	0.71
1:A:446:PHE:CD2	1:A:454:LEU:HD21	2.24	0.71
1:A:46:PRO:HG2	1:A:69:ARG:CG	2.17	0.71
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:OE1	1.90	0.71
1:A:446:PHE:HZ	1:A:506:VAL:HG23	1.55	0.71
1:A:662:LEU:CD2	1:A:791:ASP:CB	2.69	0.71
1:A:304:VAL:HG11	1:A:351:GLU:OE2	1.91	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:73:LEU:HD22	1:A:79:VAL:HA	1.72	0.71
1:A:533:ASN:ND2	1:A:645:PHE:CA	2.54	0.71
1:A:847:LEU:HD21	1:A:850:ALA:HA	1.73	0.71
1:A:519:LEU:HD12	1:A:552:SER:O	1.90	0.70
1:A:595:GLU:HG2	1:A:632:VAL:HG13	1.72	0.70
1:A:937:ARG:CG	1:A:938:PRO:HD2	2.20	0.70
1:A:40:VAL:HG12	1:A:503:ARG:HB3	1.73	0.70
1:A:530:VAL:CB	1:A:584:PRO:CD	2.69	0.70
1:A:188:VAL:HG13	1:A:190:GLY:H	1.56	0.70
1:A:575:LEU:HD22	1:A:575:LEU:H	1.56	0.70
1:A:380:LEU:HB2	1:A:386:LYS:HE3	1.74	0.70
1:A:471:THR:HG23	1:A:473:GLN:HE22	1.55	0.70
1:A:181:LYS:HD2	1:A:202:LYS:HA	1.71	0.70
1:A:93:LYS:HD2	1:A:105:GLU:OE1	1.91	0.70
1:A:281:ARG:HB3	1:A:293:VAL:CG1	2.22	0.70
1:A:551:ALA:HA	1:A:556:GLN:OE1	1.92	0.70
1:A:563:HIS:HB2	1:A:577:VAL:CG1	2.21	0.70
1:A:450:LYS:HA	1:A:479:PRO:HB3	1.73	0.70
1:A:216:VAL:HG12	1:A:224:SER:OG	1.92	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:367:LYS:HE2	1:A:399:ILE:O	1.91	0.69
1:A:370:LEU:HD21	1:A:374:TYR:HE1	1.55	0.69
1:A:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:C	2.17	0.69
1:A:809:SER:CB	1:A:856:ASN:HD21	2.04	0.69
1:A:225:MET:CE	1:A:227:LYS:HG3	2.19	0.69
1:A:261:GLU:HG2	1:A:264:SER:C	2.17	0.69
1:A:533:ASN:ND2	1:A:645:PHE:HA	2.07	0.69
1:A:110:THR:HG22	1:A:132:LEU:HD21	1.73	0.69
1:A:815:LYS:HE3	1:A:909:PRO:O	1.93	0.69
1:A:39:PHE:HE1	1:A:505:PRO:HD2	1.56	0.69
1:A:474:VAL:HG21	1:A:495:ILE:HD13	1.72	0.69
1:A:507:GLU:HG3	1:A:537:ARG:HG3	1.73	0.69
1:A:689:PHE:CD1	1:A:691:GLU:HG2	2.28	0.69
1:A:863:ILE:HG23	1:A:864:PRO:CD	2.23	0.69
1:A:435:ILE:HD12	1:A:486:PHE:CD1	2.27	0.69
1:A:473:GLN:OE1	1:A:504:VAL:HG13	1.93	0.69
1:A:815:LYS:HE2	1:A:909:PRO:O	1.92	0.69
1:A:474:VAL:CG1	1:A:475:VAL:HG23	2.18	0.68
1:A:515:CYS:O	1:A:519:LEU:HD23	1.91	0.68
1:A:595:GLU:CG	1:A:632:VAL:HG13	2.22	0.68
1:A:453:LYS:HE3	1:A:472:VAL:HG21	1.73	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:62:ILE:HD12	1:A:64:LEU:HD21	1.76	0.68
1:A:73:LEU:CD2	1:A:79:VAL:HA	2.24	0.68
1:A:323:ARG:HG3	1:A:324:THR:H	1.58	0.68
1:A:506:VAL:HG13	1:A:537:ARG:NH1	2.08	0.68
1:A:773:ILE:HD13	1:A:773:ILE:H	1.59	0.68
1:A:533:ASN:OD1	1:A:645:PHE:HB3	1.89	0.68
1:A:739:ILE:HD12	1:A:748:ARG:HG2	1.76	0.68
1:A:739:ILE:HB	1:A:781:THR:CG2	2.22	0.68
1:A:62:ILE:HD11	1:A:73:LEU:HD12	1.76	0.68
1:A:98:ARG:HE	1:A:107:LEU:CD1	2.07	0.68
1:A:133:TYR:HB2	1:A:136:ILE:HG12	1.75	0.68
1:A:532:HIS:O	1:A:641:THR:HG21	1.94	0.68
1:A:46:PRO:HG3	1:A:69:ARG:HD2	1.75	0.67
1:A:190:GLY:HA2	1:A:233:PHE:CE2	2.29	0.67
1:A:98:ARG:HH21	1:A:107:LEU:HD12	1.60	0.67
1:A:133:TYR:CD2	1:A:136:ILE:HG12	2.28	0.67
1:A:405:GLY:C	1:A:406:LEU:HD22	2.19	0.67
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:N	2.10	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:412:LEU:HD13	1:A:412:LEU:H	1.59	0.67
1:A:62:ILE:HG13	1:A:62:ILE:O	1.94	0.67
1:A:555:LYS:O	1:A:582:ASN:CG	2.36	0.67
1:A:555:LYS:HG3	1:A:556:GLN:N	2.09	0.67
1:A:239:PHE:CD1	1:A:260:PRO:HD2	2.30	0.67
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:NE	2.09	0.67
1:A:137:CYS:HB2	1:A:213:PHE:CZ	2.30	0.67
1:A:98:ARG:HE	1:A:107:LEU:HD11	1.60	0.67
1:A:620:PRO:CA	1:A:623:ILE:HG13	2.23	0.67
1:A:703:LEU:HD13	1:A:723:ALA:HB2	1.76	0.67
1:A:446:PHE:CZ	1:A:486:PHE:HZ	2.13	0.66
1:A:515:CYS:HB2	1:A:558:VAL:HG23	1.76	0.66
1:A:560:LEU:CD2	1:A:648:THR:HG23	2.20	0.66
1:A:595:GLU:HG2	1:A:632:VAL:CG1	2.25	0.66
1:A:863:ILE:HG13	1:A:864:PRO:CD	2.25	0.66
1:A:42:PHE:HE1	1:A:79:VAL:CG2	2.05	0.66
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:CD	2.20	0.66
1:A:662:LEU:HD21	1:A:791:ASP:CB	2.25	0.66
1:A:867:GLY:HA3	1:A:948:TYR:OH	1.94	0.66
1:A:410:ALA:HB1	1:A:411:PRO:HD2	1.78	0.66
1:A:216:VAL:HG12	1:A:224:SER:CB	2.26	0.66
1:A:321:LEU:O	1:A:325:LEU:HG	1.95	0.66
1:A:474:VAL:HG12	1:A:475:VAL:CG2	2.21	0.66
1:A:257:THR:C	1:A:258:LEU:HD12	2.21	0.66
1:A:439:TYR:CZ	1:A:538:LYS:HE3	2.31	0.66
1:A:706:VAL:HG13	1:A:707:ASP:O	1.96	0.66
1:A:797:LYS:N	1:A:797:LYS:HD2	2.11	0.65
1:A:460:ASP:HB3	1:A:463:LYS:HB3	1.77	0.65
1:A:830:GLN:HG2	1:A:831:CYS:N	2.09	0.65
1:A:325:LEU:CD1	1:A:333:LEU:HD11	2.26	0.65
1:A:892:HIS:NE2	1:A:931:ILE:HB	2.11	0.65
1:A:133:TYR:HB2	1:A:136:ILE:H	1.61	0.65
1:A:296:PRO:HD2	1:A:414:VAL:CG2	2.27	0.65
1:A:432:THR:OG1	1:A:480:VAL:HG23	1.96	0.65
1:A:713:VAL:HG12	1:A:714:GLU:HG3	1.79	0.65
1:A:847:LEU:CD2	1:A:850:ALA:HA	2.27	0.65
1:A:812:LEU:N	1:A:881:ASN:OD1	2.29	0.65
1:A:110:THR:HB	1:A:132:LEU:CD2	2.26	0.65
1:A:368:ASP:O	1:A:371:GLN:HG2	1.97	0.64
1:A:567:ILE:HD13	1:A:651:VAL:O	1.96	0.64
1:A:53:LEU:HG	1:A:64:LEU:CD1	2.28	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:56:ASP:OD1	1:A:119:ILE:HD12	1.98	0.64
1:A:154:LYS:H	1:A:157:HIS:CD2	2.15	0.64
1:A:181:LYS:HD3	1:A:202:LYS:HA	1.78	0.64
1:A:105:GLU:HB3	1:A:106:PRO:HD2	1.80	0.64
1:A:566:ASN:HA	1:A:651:VAL:CG2	2.25	0.64
1:A:118:LEU:HG	1:A:172:ILE:HG13	1.80	0.64
1:A:309:LEU:HD11	1:A:311:ALA:O	1.98	0.64
1:A:926:ALA:HB1	1:A:947:LEU:CD1	2.27	0.64
1:A:295:VAL:HA	1:A:414:VAL:HG21	1.80	0.64
1:A:933:VAL:HG23	1:A:934:ALA:N	2.10	0.64
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CD1	2.33	0.64
1:A:782:VAL:HG23	1:A:790:ILE:HB	1.78	0.64
1:A:815:LYS:CE	1:A:910:ALA:CB	2.52	0.64
1:A:265:PRO:HD3	1:A:274:VAL:CG2	2.27	0.64
1:A:405:GLY:O	1:A:406:LEU:HD22	1.98	0.64
1:A:440:LYS:HD2	1:A:538:LYS:HD2	1.79	0.63
1:A:806:MET:HG2	1:A:807:ARG:HG3	1.80	0.63
1:A:320:VAL:O	1:A:323:ARG:HG2	1.98	0.63
1:A:675:LYS:HE3	1:A:694:VAL:HG22	1.79	0.63
1:A:706:VAL:HG22	1:A:707:ASP:N	2.12	0.63
1:A:854:CYS:O	1:A:940:PHE:CE1	2.51	0.63
1:A:386:LYS:O	1:A:386:LYS:HG3	1.99	0.63
1:A:474:VAL:CG2	1:A:495:ILE:HD13	2.29	0.63
1:A:372:SER:O	1:A:375:ARG:HB2	1.99	0.63
1:A:446:PHE:CE1	1:A:486:PHE:HZ	2.16	0.63
1:A:460:ASP:CB	1:A:463:LYS:HB3	2.28	0.63
1:A:186:THR:HG22	1:A:187:ALA:N	2.12	0.63
1:A:480:VAL:HG11	1:A:495:ILE:HD11	1.81	0.63
1:A:530:VAL:HG12	1:A:584:PRO:CG	2.27	0.63
1:A:855:THR:HG23	1:A:856:ASN:OD1	1.99	0.62
1:A:533:ASN:CB	1:A:645:PHE:HB3	2.29	0.62
1:A:180:ASP:O	1:A:181:LYS:HG2	1.99	0.62
1:A:410:ALA:HB1	1:A:411:PRO:CD	2.30	0.62
1:A:448:GLY:CA	1:A:480:VAL:HG21	2.28	0.62
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:CZ	2.29	0.62
1:A:473:GLN:HG2	1:A:504:VAL:HG22	1.79	0.62
1:A:741:ASN:O	1:A:778:VAL:HG13	1.98	0.62
1:A:204:THR:HG22	1:A:212:MET:SD	2.40	0.62
1:A:473:GLN:HB2	1:A:504:VAL:HG22	1.80	0.62
1:A:492:GLN:HG2	1:A:503:ARG:CG	2.29	0.62
1:A:320:VAL:HG21	1:A:442:HIS:HD2	1.64	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:446:PHE:CZ	1:A:506:VAL:HG23	2.33	0.62
1:A:873:THR:HB	1:A:917:MET:HE2	1.81	0.62
1:A:894:LYS:HD3	1:A:899:GLU:HA	1.80	0.62
1:A:53:LEU:HB2	1:A:496:MET:CE	2.27	0.62
1:A:530:VAL:HG21	1:A:584:PRO:HD3	1.82	0.62
1:A:175:TYR:HD2	1:A:179:ASP:HB3	1.63	0.62
1:A:181:LYS:HE2	1:A:202:LYS:HG2	1.80	0.61
1:A:296:PRO:HB2	1:A:417:MET:SD	2.39	0.61
1:A:506:VAL:C	1:A:507:GLU:N	2.58	0.61
1:A:333:LEU:CD2	1:A:358:ILE:HG13	2.31	0.61
1:A:480:VAL:CG2	1:A:484:MET:HE1	2.30	0.61
1:A:506:VAL:CG1	1:A:537:ARG:HH12	2.14	0.61
1:A:41:THR:HG22	1:A:502:THR:HA	1.81	0.61
1:A:110:THR:HG22	1:A:111:ASN:N	2.14	0.61
1:A:575:LEU:HD22	1:A:575:LEU:N	2.14	0.61
1:A:175:TYR:CD2	1:A:179:ASP:HB3	2.36	0.61
1:A:676:TYR:CD1	1:A:730:GLN:HG3	2.36	0.61
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:488:LYS:HG3	1:A:489:ASP:N	2.14	0.61
1:A:566:ASN:HB3	1:A:651:VAL:HG21	1.80	0.61
1:A:119:ILE:HD13	1:A:121:TYR:CZ	2.36	0.61
1:A:182:LEU:HG	1:A:184:ILE:HG23	1.82	0.61
1:A:474:VAL:HG22	1:A:495:ILE:CG2	2.29	0.61
1:A:468:GLN:OE1	1:A:524:PRO:HG3	2.00	0.60
1:A:469:TYR:CE2	1:A:471:THR:HB	2.36	0.60
1:A:557:CYS:C	1:A:558:VAL:CA	2.65	0.60
1:A:712:PRO:HG3	1:A:801:TYR:OH	2.01	0.60
1:A:458:ARG:CD	1:A:524:PRO:CB	2.71	0.60
1:A:662:LEU:HD23	1:A:791:ASP:CB	2.29	0.60
1:A:696:LEU:N	1:A:696:LEU:HD12	2.15	0.60
1:A:46:PRO:HD2	1:A:71:TYR:CZ	2.37	0.60
1:A:469:TYR:HE2	1:A:471:THR:HB	1.65	0.60
1:A:806:MET:CG	1:A:807:ARG:HG3	2.30	0.60
1:A:440:LYS:CD	1:A:538:LYS:HD2	2.31	0.60
1:A:630:HIS:HD2	1:A:632:VAL:CG2	2.15	0.60
1:A:46:PRO:HD2	1:A:71:TYR:CE1	2.35	0.60
1:A:403:PHE:CZ	1:A:406:LEU:HD23	2.37	0.60
1:A:845:LEU:HD13	1:A:845:LEU:C	2.26	0.60
1:A:323:ARG:HH21	1:A:463:LYS:HD2	1.67	0.60
1:A:715:VAL:CG2	1:A:717:LYS:HD2	2.30	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:62:ILE:HD13	1:A:77:LEU:CD2	2.32	0.59
1:A:95:TYR:CG	1:A:96:PRO:HD3	2.36	0.59
1:A:313:TYR:CE1	1:A:435:ILE:HG12	2.37	0.59
1:A:314:LEU:HD12	1:A:333:LEU:O	2.01	0.59
1:A:370:LEU:C	1:A:370:LEU:HD13	2.27	0.59
1:A:457:ILE:HG12	1:A:467:LEU:HD13	1.84	0.59
1:A:41:THR:HG22	1:A:502:THR:HG23	1.83	0.59
1:A:72:LYS:CD	1:A:80:LEU:HD12	2.30	0.59
1:A:665:VAL:HG12	1:A:697:PRO:HG3	1.83	0.59
1:A:773:ILE:HD13	1:A:773:ILE:N	2.17	0.59
1:A:453:LYS:HG2	1:A:472:VAL:CG2	2.16	0.59
1:A:566:ASN:CA	1:A:651:VAL:HG23	2.28	0.59
1:A:780:LEU:HD12	1:A:780:LEU:C	2.27	0.59
1:A:515:CYS:CB	1:A:558:VAL:HG23	2.31	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:847:LEU:HD11	1:A:850:ALA:CA	2.29	0.59
1:A:91:ASN:CG	1:A:92:PRO:HD2	2.27	0.59
1:A:188:VAL:HG22	1:A:191:LYS:N	2.18	0.59
1:A:387:VAL:HG13	1:A:388:LYS:HG3	1.83	0.59
1:A:387:VAL:HG13	1:A:388:LYS:N	2.18	0.59
1:A:473:GLN:NE2	1:A:473:GLN:H	2.01	0.59
1:A:759:VAL:HG12	1:A:760:GLN:N	2.18	0.59
1:A:51:ASN:HD21	1:A:67:VAL:CG2	2.15	0.59
1:A:99:ILE:HG13	1:A:100:VAL:N	2.16	0.59
1:A:495:ILE:CG2	1:A:502:THR:HB	2.32	0.59
1:A:560:LEU:HD23	1:A:648:THR:CG2	2.25	0.59
1:A:62:ILE:HD12	1:A:501:LEU:CD1	2.33	0.58
1:A:243:TYR:CD2	1:A:257:THR:HG22	2.37	0.58
1:A:350:ASP:HA	1:A:430:ARG:HB2	1.86	0.58
1:A:931:ILE:HG13	1:A:931:ILE:O	2.02	0.58
1:A:585:GLU:OE1	1:A:585:GLU:HA	2.03	0.58
1:A:110:THR:HB	1:A:132:LEU:HD23	1.85	0.58
1:A:171:VAL:O	1:A:182:LEU:HD12	2.02	0.58
1:A:904:VAL:HG13	1:A:905:ASP:N	2.18	0.58
1:A:814:LEU:HD22	1:A:847:LEU:N	2.18	0.58
1:A:889:ILE:HD12	1:A:907:TYR:CZ	2.38	0.58
1:A:530:VAL:HG11	1:A:584:PRO:HD2	0.59	0.58
1:A:263:VAL:HG12	1:A:263:VAL:O	2.04	0.58
1:A:699:ASP:O	1:A:725:ASN:CB	2.51	0.58
1:A:40:VAL:HG13	1:A:503:ARG:HB3	1.85	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:578:LEU:HD13	1:A:636:LEU:HD21	1.85	0.58
1:A:569:VAL:HB	1:A:654:ASN:HD22	1.63	0.57
1:A:349:LEU:N	1:A:349:LEU:HD22	2.18	0.57
1:A:506:VAL:CG1	1:A:537:ARG:NH1	2.67	0.57
1:A:832:THR:HG23	1:A:836:HIS:HB2	1.85	0.57
1:A:892:HIS:CE1	1:A:931:ILE:HB	2.40	0.57
1:A:154:LYS:N	1:A:157:HIS:HD2	2.00	0.57
1:A:198:ILE:HB	1:A:226:ILE:CG2	2.34	0.57
1:A:430:ARG:HH21	1:A:432:THR:HG22	1.68	0.57
1:A:254:TYR:CZ	1:A:281:ARG:HD2	2.39	0.57
1:A:321:LEU:HD12	1:A:462:PRO:CG	2.34	0.57
1:A:426:GLU:OE1	1:A:426:GLU:HA	2.04	0.57
1:A:434:VAL:HG22	1:A:435:ILE:N	2.20	0.57
1:A:459:VAL:HG23	1:A:459:VAL:O	2.05	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:623:ILE:HD12	1:A:623:ILE:C	2.29	0.57
1:A:833:LEU:HB2	1:A:836:HIS:CD2	2.29	0.57
1:A:446:PHE:CE1	1:A:486:PHE:CZ	2.93	0.56
1:A:468:GLN:CG	1:A:524:PRO:CG	2.75	0.56
1:A:380:LEU:HB2	1:A:386:LYS:HE2	1.87	0.56
1:A:703:LEU:HD21	1:A:782:VAL:HG21	1.87	0.56
1:A:45:GLU:HB3	1:A:46:PRO:CD	2.35	0.56
1:A:72:LYS:HD2	1:A:80:LEU:HB2	1.87	0.56
1:A:239:PHE:CA	1:A:260:PRO:HG2	2.30	0.56
1:A:265:PRO:HD3	1:A:274:VAL:HG21	1.87	0.56
1:A:324:THR:CG2	1:A:462:PRO:HA	2.34	0.56
1:A:385:LEU:C	1:A:385:LEU:HD13	2.29	0.56
1:A:456:LYS:O	1:A:468:GLN:HG2	2.04	0.56
1:A:474:VAL:CG2	1:A:495:ILE:HG21	2.35	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:885:GLU:HG3	1:A:887:ARG:H	1.70	0.56
1:A:41:THR:CG2	1:A:502:THR:HG23	2.36	0.56
1:A:433:SER:HB3	1:A:484:MET:SD	2.45	0.56
1:A:814:LEU:HD22	1:A:847:LEU:H	1.68	0.56
1:A:865:VAL:HG13	1:A:866:THR:N	2.21	0.56
1:A:370:LEU:HD21	1:A:374:TYR:CE1	2.39	0.56
1:A:435:ILE:CG2	1:A:486:PHE:HE1	2.19	0.56
1:A:53:LEU:HD23	1:A:53:LEU:C	2.31	0.56
1:A:435:ILE:HD12	1:A:486:PHE:HD1	1.70	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:785:ASN:ND2	1:A:788:PHE:HE2	2.03	0.56
1:A:926:ALA:CB	1:A:947:LEU:HD12	2.35	0.56
1:A:271:LYS:HG3	1:A:272:GLU:N	2.13	0.56
1:A:882:LEU:N	1:A:882:LEU:HD12	2.21	0.56
1:A:665:VAL:CG1	1:A:697:PRO:HD3	2.35	0.56
1:A:262:MET:O	1:A:262:MET:HG3	2.05	0.56
1:A:305:GLU:O	1:A:340:LYS:HG3	2.06	0.56
1:A:937:ARG:HG2	1:A:938:PRO:HD2	1.85	0.56
1:A:597:LEU:N	1:A:597:LEU:HD22	2.21	0.56
1:A:785:ASN:HD22	1:A:788:PHE:HE2	1.54	0.56
1:A:46:PRO:CG	1:A:69:ARG:HD2	2.36	0.55
1:A:118:LEU:HB3	1:A:127:ILE:CG2	2.36	0.55
1:A:382:LEU:HD23	1:A:385:LEU:CB	2.36	0.55
1:A:473:GLN:CD	1:A:504:VAL:HG13	2.31	0.55
1:A:53:LEU:HG	1:A:64:LEU:HD13	1.87	0.55
1:A:526:CYS:HB3	1:A:535:CYS:SG	2.46	0.55
1:A:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:O	2.07	0.55
1:A:820:PHE:O	1:A:821:GLU:HB3	2.06	0.55
1:A:116:MET:HG3	1:A:117:LEU:N	2.21	0.55
1:A:190:GLY:O	1:A:192:PRO:HD3	2.07	0.55
1:A:861:GLU:HG3	1:A:862:ILE:N	2.21	0.55
1:A:184:ILE:HD12	1:A:184:ILE:C	2.31	0.55
1:A:448:GLY:HA3	1:A:480:VAL:CG2	2.37	0.55
1:A:710:LEU:HB2	1:A:801:TYR:CE1	2.41	0.55
1:A:676:TYR:CE1	1:A:730:GLN:HG3	2.42	0.55
1:A:412:LEU:HD13	1:A:412:LEU:N	2.21	0.55
1:A:480:VAL:HG21	1:A:484:MET:HE1	1.87	0.55
1:A:804:GLY:HA2	1:A:806:MET:CE	2.36	0.55
1:A:474:VAL:HG12	1:A:475:VAL:N	2.21	0.55
1:A:937:ARG:HG3	1:A:938:PRO:HD2	1.89	0.55
1:A:236:ILE:HG23	1:A:236:ILE:O	2.07	0.55
1:A:563:HIS:HB3	1:A:564:PRO:CD	2.28	0.55
1:A:62:ILE:HG12	1:A:73:LEU:HB2	1.84	0.55
1:A:284:LYS:HD3	1:A:284:LYS:C	2.31	0.55
1:A:447:VAL:HG23	1:A:447:VAL:O	2.06	0.55
1:A:699:ASP:C	1:A:725:ASN:OD1	2.50	0.55
1:A:168:VAL:HG22	1:A:169:PHE:N	2.22	0.55
1:A:175:TYR:HB3	1:A:179:ASP:HB3	1.89	0.55
1:A:370:LEU:HD13	1:A:370:LEU:O	2.07	0.55
1:A:509:CYS:HB3	1:A:535:CYS:SG	2.47	0.55
1:A:460:ASP:OD2	1:A:463:LYS:HB3	2.06	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:619:VAL:CB	1:A:620:PRO:HD3	2.36	0.54
1:A:709:ILE:O	1:A:799:TYR:HD1	1.90	0.54
1:A:226:ILE:HG23	1:A:226:ILE:O	2.06	0.54
1:A:242:TYR:CD1	1:A:345:LYS:HE2	2.41	0.54
1:A:110:THR:HG22	1:A:111:ASN:H	1.72	0.54
1:A:151:PRO:O	1:A:157:HIS:HB3	2.07	0.54
1:A:280:VAL:HG12	1:A:281:ARG:N	2.22	0.54
1:A:495:ILE:O	1:A:495:ILE:HG23	2.08	0.54
1:A:704:LEU:HD11	1:A:724:LYS:CE	2.36	0.54
1:A:713:VAL:HG13	1:A:766:TYR:O	2.06	0.54
1:A:51:ASN:ND2	1:A:67:VAL:HG23	2.20	0.54
1:A:63:TYR:CE2	1:A:72:LYS:HG2	2.43	0.54
1:A:930:GLU:OE2	1:A:941:MET:HG3	2.07	0.54
1:A:480:VAL:HB	1:A:484:MET:HE2	1.89	0.54
1:A:921:LYS:N	1:A:922:PRO:HD2	2.23	0.54
1:A:947:LEU:H	1:A:947:LEU:CD2	2.21	0.54
1:A:190:GLY:C	1:A:192:PRO:HD3	2.33	0.53
1:A:370:LEU:HD11	1:A:399:ILE:HD12	1.88	0.53
1:A:630:HIS:HD2	1:A:632:VAL:HG23	1.73	0.53
1:A:135:GLY:O	1:A:159:LEU:HD13	2.08	0.53
1:A:359:LEU:HA	1:A:362:ILE:HG12	1.89	0.53
1:A:501:LEU:HD23	1:A:502:THR:N	2.22	0.53
1:A:662:LEU:HD21	1:A:791:ASP:HB2	1.88	0.53
1:A:429:ASP:OD1	1:A:450:LYS:HB3	2.08	0.53
1:A:468:GLN:CD	1:A:524:PRO:CG	2.78	0.53
1:A:42:PHE:HE2	1:A:50:PHE:HZ	1.54	0.53
1:A:46:PRO:CG	1:A:69:ARG:HG3	2.27	0.53
1:A:72:LYS:HD2	1:A:80:LEU:HD12	1.90	0.53
1:A:426:GLU:HG2	1:A:429:ASP:O	2.08	0.53
1:A:603:LEU:HD23	1:A:603:LEU:C	2.33	0.53
1:A:797:LYS:HD2	1:A:797:LYS:H	1.72	0.53
1:A:679:VAL:HG12	1:A:680:CYS:N	2.23	0.53
1:A:807:ARG:HD2	1:A:813:CYS:HA	1.90	0.53
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:NH2	2.24	0.53
1:A:321:LEU:CD2	1:A:325:LEU:HD11	2.39	0.53
1:A:875:VAL:HG22	1:A:915:CYS:O	2.09	0.53
1:A:882:LEU:HD13	1:A:910:ALA:O	2.09	0.53
1:A:119:ILE:HG23	1:A:119:ILE:O	2.08	0.53
1:A:185:ALA:HB3	1:A:243:TYR:CG	2.44	0.53
1:A:947:LEU:HD23	1:A:947:LEU:O	2.09	0.53
1:A:39:PHE:CD1	1:A:505:PRO:HD2	2.44	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:371:GLN:O	1:A:375:ARG:HG3	2.09	0.53
1:A:716:ILE:HG12	1:A:763:ASN:HB3	1.90	0.53
1:A:473:GLN:CD	1:A:504:VAL:HG22	2.34	0.53
1:A:806:MET:HG2	1:A:807:ARG:CG	2.39	0.53
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:HA	1.91	0.53
1:A:42:PHE:HZ	1:A:45:GLU:CB	2.22	0.53
1:A:716:ILE:HG23	1:A:716:ILE:O	2.09	0.53
1:A:739:ILE:HB	1:A:781:THR:HG23	1.90	0.53
1:A:783:VAL:HG12	1:A:784:TRP:N	2.24	0.53
1:A:825:CYS:HB3	1:A:828:PRO:HG2	1.89	0.53
1:A:553:GLU:HG3	1:A:554:MET:N	2.24	0.52
1:A:739:ILE:HB	1:A:781:THR:HG22	1.90	0.52
1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:N	2.24	0.52
1:A:578:LEU:HB2	1:A:609:ILE:HB	1.91	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:HD3	1.91	0.52
1:A:925:HIS:O	1:A:950:PHE:HD2	1.91	0.52
1:A:471:THR:CG2	1:A:473:GLN:HE22	2.20	0.52
1:A:308:LEU:O	1:A:338:PHE:HA	2.09	0.52
1:A:458:ARG:HG3	1:A:524:PRO:HG3	1.90	0.52
1:A:118:LEU:HD13	1:A:118:LEU:C	2.34	0.52
1:A:472:VAL:HG12	1:A:472:VAL:O	2.09	0.52
1:A:712:PRO:O	1:A:715:VAL:HG22	2.09	0.52
1:A:181:LYS:CE	1:A:202:LYS:HG2	2.39	0.52
1:A:356:ILE:HG22	1:A:421:ILE:O	2.09	0.52
1:A:580:THR:HG21	1:A:583:VAL:HG11	1.91	0.52
1:A:458:ARG:HD3	1:A:524:PRO:HB3	1.90	0.52
1:A:933:VAL:HG22	1:A:940:PHE:HB3	1.91	0.52
1:A:949:TYR:HE2	1:A:951:MET:CE	2.12	0.52
1:A:93:LYS:HD3	1:A:105:GLU:OE2	2.10	0.52
1:A:127:ILE:HG23	1:A:127:ILE:O	2.09	0.52
1:A:228:ILE:HG22	1:A:233:PHE:CE1	2.45	0.52
1:A:281:ARG:O	1:A:282:LEU:HD23	2.09	0.52
1:A:380:LEU:CD1	1:A:386:LYS:HE3	2.37	0.52
1:A:716:ILE:CG1	1:A:763:ASN:HB3	2.40	0.52
1:A:805:ALA:H	1:A:806:MET:CE	2.22	0.52
1:A:198:ILE:HB	1:A:226:ILE:HG22	1.91	0.52
1:A:712:PRO:HG3	1:A:801:TYR:CZ	2.45	0.52
1:A:64:LEU:HD11	1:A:501:LEU:HD12	1.92	0.51
1:A:473:GLN:HB2	1:A:504:VAL:CG2	2.40	0.51
1:A:790:ILE:HD12	1:A:790:ILE:N	2.25	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CG	2.94	0.51
1:A:509:CYS:HB2	1:A:536:THR:HA	1.91	0.51
1:A:321:LEU:CG	1:A:325:LEU:HD11	2.40	0.51
1:A:560:LEU:HG	1:A:648:THR:HG21	1.92	0.51
1:A:924:GLN:O	1:A:925:HIS:HB2	2.09	0.51
1:A:575:LEU:H	1:A:575:LEU:CD2	2.22	0.51
1:A:930:GLU:HG3	1:A:941:MET:SD	2.51	0.51
1:A:59:THR:HB	1:A:61:HIS:CE1	2.45	0.51
1:A:827:SER:HB2	1:A:828:PRO:CD	2.40	0.51
1:A:895:VAL:O	1:A:896:ALA:HB3	2.11	0.51
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CD2	2.94	0.51
1:A:567:ILE:CD1	1:A:650:PHE:CE2	2.94	0.51
1:A:798:VAL:O	1:A:798:VAL:HG13	2.10	0.51
1:A:823:GLY:HA3	1:A:844:TRP:CZ2	2.46	0.51
1:A:53:LEU:HG	1:A:64:LEU:HD11	1.92	0.51
1:A:204:THR:HG23	1:A:206:ASN:O	2.11	0.51
1:A:216:VAL:HG13	1:A:217:PHE:N	2.26	0.51
1:A:278:LYS:HG2	1:A:296:PRO:CA	2.38	0.51
1:A:519:LEU:N	1:A:519:LEU:HD22	2.26	0.51
1:A:530:VAL:HG12	1:A:584:PRO:HG2	1.93	0.51
1:A:541:CYS:SG	1:A:550:PHE:HD2	2.33	0.51
1:A:889:ILE:CD1	1:A:907:TYR:CE1	2.94	0.51
1:A:133:TYR:O	1:A:134:GLN:HB2	2.11	0.51
1:A:261:GLU:HG2	1:A:265:PRO:N	2.25	0.51
1:A:593:THR:HG23	1:A:593:THR:O	2.10	0.51
1:A:76:ASP:O	1:A:77:LEU:HB2	2.11	0.51
1:A:322:GLY:CA	1:A:327:VAL:HG22	2.40	0.51
1:A:370:LEU:HD13	1:A:374:TYR:CD1	2.46	0.51
1:A:426:GLU:HG3	1:A:429:ASP:H	1.76	0.51
1:A:444:LEU:HD12	1:A:446:PHE:CZ	2.44	0.51
1:A:853:LYS:H	1:A:853:LYS:HD2	1.76	0.51
1:A:171:VAL:HG12	1:A:172:ILE:N	2.26	0.51
1:A:358:ILE:CG2	1:A:361:GLN:HB2	2.41	0.51
1:A:531:LEU:HD23	1:A:584:PRO:HG2	1.93	0.51
1:A:695:LYS:CB	1:A:696:LEU:HD12	2.41	0.51
1:A:785:ASN:HB3	1:A:788:PHE:CE2	2.46	0.51
1:A:81:VAL:HG12	1:A:82:THR:N	2.26	0.50
1:A:703:LEU:N	1:A:703:LEU:HD22	2.26	0.50
1:A:892:HIS:HD2	1:A:893:VAL:N	2.10	0.50
1:A:228:ILE:CG2	1:A:233:PHE:CE1	2.94	0.50
1:A:491:GLU:O	1:A:506:VAL:HG12	2.11	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:566:ASN:HB3	1:A:651:VAL:CG2	2.40	0.50
1:A:567:ILE:HD13	1:A:567:ILE:N	2.20	0.50
1:A:689:PHE:CE1	1:A:691:GLU:CG	2.94	0.50
1:A:507:GLU:HG3	1:A:537:ARG:CG	2.40	0.50
1:A:533:ASN:HD21	1:A:645:PHE:HA	1.68	0.50
1:A:863:ILE:CG1	1:A:864:PRO:HD3	2.39	0.50
1:A:727:PRO:O	1:A:729:PRO:HD3	2.11	0.50
1:A:370:LEU:HD11	1:A:374:TYR:CE1	2.46	0.50
1:A:569:VAL:CB	1:A:654:ASN:HD22	2.21	0.50
1:A:54:VAL:HG22	1:A:55:VAL:N	2.25	0.50
1:A:119:ILE:CG2	1:A:121:TYR:CE1	2.95	0.50
1:A:296:PRO:HD2	1:A:414:VAL:HG22	1.92	0.50
1:A:473:GLN:HB3	1:A:502:THR:HG21	1.94	0.50
1:A:412:LEU:HD22	1:A:412:LEU:O	2.11	0.50
1:A:673:TRP:HB3	1:A:694:VAL:HB	1.94	0.50
1:A:506:VAL:HG11	1:A:537:ARG:HH12	1.77	0.50
1:A:541:CYS:CB	1:A:544:SER:HB3	2.42	0.50
1:A:713:VAL:HG13	1:A:767:SER:HA	1.94	0.50
1:A:782:VAL:CG2	1:A:790:ILE:HB	2.41	0.50
1:A:792:ASN:HD21	1:A:796:ASN:N	2.10	0.50
1:A:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:HB3	1.93	0.50
1:A:278:LYS:CE	1:A:296:PRO:HG3	2.41	0.50
1:A:295:VAL:HG23	1:A:295:VAL:O	2.12	0.50
1:A:370:LEU:CD1	1:A:374:TYR:CD1	2.95	0.50
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:CA	2.42	0.50
1:A:320:VAL:HG23	1:A:441:ASN:HB3	1.94	0.49
1:A:333:LEU:HD21	1:A:358:ILE:HG13	1.94	0.49
1:A:882:LEU:HD23	1:A:913:ILE:HD11	1.94	0.49
1:A:39:PHE:CD2	1:A:473:GLN:CG	2.95	0.49
1:A:110:THR:CB	1:A:132:LEU:HD21	2.42	0.49
1:A:400:ASP:HB2	1:A:402:ASN:OD1	2.11	0.49
1:A:841:GLU:HG3	1:A:842:SER:H	1.77	0.49
1:A:653:TYR:HE2	1:A:655:CYS:SG	2.35	0.49
1:A:59:THR:HB	1:A:61:HIS:ND1	2.27	0.49
1:A:265:PRO:CD	1:A:274:VAL:HG22	2.42	0.49
1:A:312:ALA:HB1	1:A:334:LEU:HD11	1.94	0.49
1:A:557:CYS:O	1:A:581:TYR:O	2.30	0.49
1:A:695:LYS:C	1:A:696:LEU:HD12	2.37	0.49
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CE2	2.47	0.49
1:A:457:ILE:HG12	1:A:467:LEU:CD1	2.42	0.49
1:A:623:ILE:HD12	1:A:624:THR:CA	2.42	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:40:VAL:HG21	1:A:76:ASP:O	2.12	0.49
1:A:254:TYR:CE2	1:A:281:ARG:HD2	2.48	0.49
1:A:265:PRO:HD3	1:A:274:VAL:HG22	1.92	0.49
1:A:418:VAL:O	1:A:418:VAL:HG13	2.11	0.49
1:A:681:THR:HG21	1:A:686:THR:HG21	1.94	0.49
1:A:790:ILE:HD12	1:A:790:ILE:H	1.77	0.49
1:A:856:ASN:N	1:A:857:PRO:HD3	2.27	0.49
1:A:863:ILE:HG13	1:A:864:PRO:N	2.28	0.49
1:A:182:LEU:HD21	1:A:184:ILE:HG21	1.94	0.49
1:A:234:THR:HG23	1:A:235:VAL:N	2.26	0.49
1:A:300:GLU:HG2	1:A:305:GLU:HA	1.93	0.49
1:A:736:TYR:CD2	1:A:784:TRP:HB3	2.47	0.49
1:A:894:LYS:CD	1:A:899:GLU:HA	2.41	0.49
1:A:133:TYR:HB3	1:A:136:ILE:HG23	1.94	0.49
1:A:475:VAL:HG22	1:A:500:GLN:OE1	2.13	0.49
1:A:590:VAL:HG12	1:A:591:ASN:N	2.27	0.49
1:A:781:THR:HG23	1:A:781:THR:O	2.12	0.49
1:A:810:CYS:SG	1:A:855:THR:CG2	2.72	0.49
1:A:132:LEU:HD11	1:A:163:ASN:HD22	1.77	0.49
1:A:196:PRO:HB3	1:A:225:MET:CE	2.33	0.49
1:A:361:GLN:HE21	1:A:365:ARG:HH21	1.61	0.49
1:A:597:LEU:CD2	1:A:597:LEU:H	2.25	0.49
1:A:809:SER:HB3	1:A:856:ASN:ND2	2.19	0.49
1:A:190:GLY:HA2	1:A:233:PHE:HE2	1.73	0.48
1:A:783:VAL:HG13	1:A:788:PHE:O	2.13	0.48
1:A:64:LEU:HB2	1:A:71:TYR:HD2	1.77	0.48
1:A:541:CYS:SG	1:A:550:PHE:CD2	3.06	0.48
1:A:716:ILE:HD11	1:A:763:ASN:HB3	1.95	0.48
1:A:782:VAL:HG23	1:A:782:VAL:O	2.12	0.48
1:A:807:ARG:HB3	1:A:812:LEU:HB2	1.95	0.48
1:A:99:ILE:HD11	1:A:152:PHE:CB	2.41	0.48
1:A:185:ALA:HA	1:A:197:THR:O	2.12	0.48
1:A:790:ILE:HG22	1:A:791:ASP:N	2.28	0.48
1:A:144:ASP:O	1:A:145:LEU:HB2	2.13	0.48
1:A:258:LEU:HD12	1:A:258:LEU:N	2.28	0.48
1:A:597:LEU:HD22	1:A:597:LEU:H	1.77	0.48
1:A:710:LEU:HD13	1:A:801:TYR:OH	2.13	0.48
1:A:715:VAL:O	1:A:715:VAL:HG23	2.13	0.48
1:A:935:VAL:HG12	1:A:936:CYS:N	2.28	0.48
1:A:435:ILE:HG21	1:A:486:PHE:CE1	2.48	0.48
1:A:626:ASN:ND2	1:A:630:HIS:HB2	2.29	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:662:LEU:HD22	1:A:791:ASP:OD2	2.00	0.48
1:A:743:GLN:CD	1:A:743:GLN:H	2.22	0.48
1:A:265:PRO:HB2	1:A:266:PRO:HD2	1.94	0.48
1:A:907:TYR:CZ	1:A:909:PRO:HA	2.48	0.48
1:A:82:THR:HG23	1:A:82:THR:O	2.14	0.48
1:A:90:ASP:C	1:A:107:LEU:HD22	2.39	0.48
1:A:453:LYS:HE3	1:A:472:VAL:HG22	1.94	0.48
1:A:527:GLY:HA3	1:A:550:PHE:CE1	2.45	0.48
1:A:239:PHE:CD1	1:A:260:PRO:HG2	2.48	0.48
1:A:374:TYR:CE2	1:A:397:LEU:HD22	2.48	0.48
1:A:557:CYS:C	1:A:582:ASN:HB3	2.35	0.48
1:A:862:ILE:CG2	1:A:877:ILE:HG23	2.44	0.48
1:A:175:TYR:CG	1:A:176:SER:N	2.82	0.47
1:A:372:SER:HA	1:A:375:ARG:NE	2.30	0.47
1:A:403:PHE:CE1	1:A:406:LEU:CD2	2.94	0.47
1:A:556:GLN:HA	1:A:582:ASN:HD22	1.59	0.47
1:A:702:GLN:O	1:A:723:ALA:HB1	2.14	0.47
1:A:745:ILE:O	1:A:745:ILE:HG23	2.14	0.47
1:A:52:HIS:O	1:A:496:MET:HE1	2.15	0.47
1:A:77:LEU:HD22	1:A:501:LEU:HD13	1.96	0.47
1:A:154:LYS:HB2	1:A:157:HIS:HD2	1.70	0.47
1:A:460:ASP:CG	1:A:463:LYS:HB3	2.39	0.47
1:A:740:LEU:HD12	1:A:740:LEU:N	2.29	0.47
1:A:814:LEU:HD11	1:A:845:LEU:CD1	2.44	0.47
1:A:68:ASN:ND2	1:A:87:PRO:HD3	2.29	0.47
1:A:160:SER:OG	1:A:162:VAL:HG23	2.14	0.47
1:A:440:LYS:HD3	1:A:538:LYS:CD	2.44	0.47
1:A:567:ILE:HD12	1:A:650:PHE:CE2	2.49	0.47
1:A:589:GLY:C	1:A:639:LYS:HG2	2.39	0.47
1:A:728:GLN:HA	1:A:753:ARG:NH2	2.30	0.47
1:A:196:PRO:CB	1:A:225:MET:HE2	2.34	0.47
1:A:892:HIS:CD2	1:A:893:VAL:CG2	2.98	0.47
1:A:430:ARG:HG2	1:A:431:MET:O	2.14	0.47
1:A:439:TYR:HE2	1:A:538:LYS:HZ1	0.83	0.47
1:A:843:ARG:HB2	1:A:843:ARG:NH1	2.30	0.47
1:A:68:ASN:HB3	1:A:86:GLY:HA3	1.97	0.47
1:A:72:LYS:O	1:A:80:LEU:HB2	2.15	0.47
1:A:133:TYR:CG	1:A:136:ILE:CG1	2.94	0.47
1:A:239:PHE:HA	1:A:260:PRO:CG	2.32	0.47
1:A:253:VAL:HG23	1:A:253:VAL:O	2.15	0.47
1:A:448:GLY:HA3	1:A:484:MET:HE1	1.97	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:530:VAL:CB	1:A:584:PRO:HD3	2.45	0.47
1:A:262:MET:O	1:A:263:VAL:HB	2.15	0.47
1:A:889:ILE:O	1:A:892:HIS:HB3	2.13	0.47
1:A:244:VAL:HB	1:A:309:LEU:HD23	1.97	0.47
1:A:440:LYS:O	1:A:440:LYS:HG2	2.14	0.47
1:A:561:THR:HG22	1:A:562:VAL:N	2.29	0.47
1:A:124:ASN:OD1	1:A:142:LEU:HB3	2.14	0.47
1:A:252:PHE:CD1	1:A:283:CYS:HA	2.50	0.47
1:A:296:PRO:CD	1:A:414:VAL:HG22	2.45	0.47
1:A:704:LEU:H	1:A:723:ALA:HA	1.79	0.47
1:A:947:LEU:H	1:A:947:LEU:HD23	1.79	0.47
1:A:527:GLY:HA3	1:A:550:PHE:HZ	1.72	0.46
1:A:805:ALA:H	1:A:806:MET:HE1	1.79	0.46
1:A:256:LEU:HD22	1:A:256:LEU:N	2.31	0.46
1:A:333:LEU:CD2	1:A:358:ILE:HA	2.45	0.46
1:A:343:LYS:HG2	1:A:344:ARG:HG2	1.97	0.46
1:A:495:ILE:HG22	1:A:502:THR:HB	1.96	0.46
1:A:783:VAL:HG11	1:A:786:GLY:O	2.15	0.46
1:A:812:LEU:CG	1:A:881:ASN:OD1	2.47	0.46
1:A:902:PRO:HA	1:A:915:CYS:HA	1.97	0.46
1:A:380:LEU:HD12	1:A:390:ILE:CG2	2.45	0.46
1:A:873:THR:HG22	1:A:874:LYS:N	2.31	0.46
1:A:920:ALA:C	1:A:922:PRO:HD2	2.41	0.46
1:A:62:ILE:HD11	1:A:73:LEU:CD1	2.45	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:710:LEU:HD12	1:A:710:LEU:C	2.40	0.46
1:A:46:PRO:HD2	1:A:71:TYR:OH	2.16	0.46
1:A:695:LYS:HB2	1:A:696:LEU:HD12	1.97	0.46
1:A:265:PRO:CB	1:A:266:PRO:HD2	2.45	0.46
1:A:492:GLN:HG2	1:A:503:ARG:HG2	1.98	0.46
1:A:676:TYR:CD1	1:A:730:GLN:CG	2.98	0.46
1:A:45:GLU:HB3	1:A:46:PRO:HD3	1.97	0.46
1:A:113:VAL:HG11	1:A:165:SER:HB3	1.96	0.46
1:A:226:ILE:HD11	1:A:385:LEU:CD2	2.46	0.46
1:A:515:CYS:HB3	1:A:558:VAL:N	2.31	0.46
1:A:530:VAL:CG1	1:A:584:PRO:HG2	2.38	0.46
1:A:543:ARG:HH11	1:A:549:ARG:HH22	1.62	0.46
1:A:566:ASN:CB	1:A:651:VAL:CG2	2.95	0.46
1:A:569:VAL:CG1	1:A:620:PRO:HG3	2.45	0.46
1:A:264:SER:HA	1:A:265:PRO:HA	1.53	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:286:ASP:OD1	1:A:288:ALA:HB3	2.16	0.45
1:A:503:ARG:O	1:A:505:PRO:HD3	2.15	0.45
1:A:62:ILE:CD1	1:A:77:LEU:CD2	2.94	0.45
1:A:361:GLN:O	1:A:365:ARG:HG2	2.15	0.45
1:A:563:HIS:CB	1:A:577:VAL:HG12	2.46	0.45
1:A:358:ILE:CG2	1:A:361:GLN:CB	2.95	0.45
1:A:624:THR:HG23	1:A:624:THR:O	2.15	0.45
1:A:863:ILE:HG21	1:A:876:THR:HB	1.97	0.45
1:A:98:ARG:NH2	1:A:107:LEU:HD12	2.29	0.45
1:A:435:ILE:HG23	1:A:486:PHE:HE1	1.81	0.45
1:A:586:LEU:HD13	1:A:590:VAL:HG21	1.99	0.45
1:A:663:SER:O	1:A:667:SER:HB2	2.17	0.45
1:A:828:PRO:HG3	1:A:837:CYS:SG	2.57	0.45
1:A:110:THR:CB	1:A:132:LEU:CD2	2.95	0.45
1:A:159:LEU:HG	1:A:201:ARG:HH12	1.81	0.45
1:A:947:LEU:HD23	1:A:947:LEU:N	2.30	0.45
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:HE	1.80	0.45
1:A:40:VAL:HG13	1:A:40:VAL:O	2.17	0.45
1:A:182:LEU:HB2	1:A:203:LEU:HD11	1.99	0.45
1:A:192:PRO:HB3	1:A:233:PHE:CZ	2.51	0.45
1:A:247:PHE:CD1	1:A:314:LEU:HD22	2.52	0.45
1:A:305:GLU:HG2	1:A:307:ARG:HG2	1.99	0.45
1:A:442:HIS:CD2	1:A:458:ARG:HH21	2.35	0.45
1:A:671:CYS:HB3	1:A:680:CYS:SG	2.57	0.45
1:A:892:HIS:CD2	1:A:893:VAL:HG22	2.51	0.45
1:A:91:ASN:OD1	1:A:92:PRO:HD2	2.16	0.45
1:A:118:LEU:HB3	1:A:127:ILE:HG22	1.98	0.45
1:A:151:PRO:HB2	1:A:157:HIS:CE1	2.52	0.45
1:A:541:CYS:HB3	1:A:544:SER:HB3	1.99	0.45
1:A:743:GLN:HG2	1:A:744:GLY:N	2.31	0.45
1:A:815:LYS:CD	1:A:910:ALA:CB	2.63	0.45
1:A:437:TYR:CE2	1:A:439:TYR:HB2	2.51	0.45
1:A:511:GLN:HG3	1:A:512:TYR:CD2	2.51	0.45
1:A:653:TYR:CE2	1:A:655:CYS:SG	3.10	0.45
1:A:58:ARG:NH1	1:A:58:ARG:HG2	2.31	0.45
1:A:116:MET:SD	1:A:169:PHE:HA	2.57	0.45
1:A:245:TYR:CD2	1:A:312:ALA:HB3	2.51	0.45
1:A:306:TYR:HE1	1:A:351:GLU:HG2	1.82	0.45
1:A:533:ASN:HD22	1:A:643:MET:C	2.24	0.45
1:A:892:HIS:CD2	1:A:893:VAL:N	2.85	0.45
1:A:118:LEU:O	1:A:127:ILE:HG22	2.17	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:370:LEU:CD2	1:A:374:TYR:HE1	2.28	0.45
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:NE2	2.32	0.45
1:A:469:TYR:CG	1:A:470:GLU:N	2.84	0.45
1:A:574:VAL:HG22	1:A:613:SER:OG	2.17	0.45
1:A:594:PHE:CZ	1:A:614:PRO:HD3	2.51	0.45
1:A:295:VAL:CA	1:A:414:VAL:HG21	2.45	0.44
1:A:435:ILE:HG21	1:A:486:PHE:HE1	1.81	0.44
1:A:564:PRO:HB2	1:A:576:LEU:CD2	2.47	0.44
1:A:42:PHE:CZ	1:A:45:GLU:CB	2.95	0.44
1:A:62:ILE:CD1	1:A:73:LEU:HB2	2.47	0.44
1:A:322:GLY:HA2	1:A:327:VAL:HG22	1.99	0.44
1:A:119:ILE:HG23	1:A:121:TYR:CE1	2.53	0.44
1:A:162:VAL:HG21	1:A:187:ALA:HB3	1.99	0.44
1:A:189:ASP:HB3	1:A:191:LYS:HD3	1.99	0.44
1:A:327:VAL:HG11	1:A:358:ILE:HD11	1.97	0.44
1:A:567:ILE:HD11	1:A:652:PHE:CD1	2.53	0.44
1:A:689:PHE:CE1	1:A:691:GLU:HG2	2.50	0.44
1:A:847:LEU:HD11	1:A:850:ALA:C	2.42	0.44
1:A:278:LYS:HD3	1:A:294:GLU:HG2	1.98	0.44
1:A:301:ARG:CD	1:A:425:THR:HG21	2.26	0.44
1:A:492:GLN:HG2	1:A:503:ARG:HD2	1.98	0.44
1:A:531:LEU:CD2	1:A:584:PRO:HG2	2.47	0.44
1:A:53:LEU:HD12	1:A:501:LEU:HG	1.99	0.44
1:A:274:VAL:HG23	1:A:275:TYR:N	2.30	0.44
1:A:281:ARG:NH1	1:A:366:ILE:HG21	2.33	0.44
1:A:296:PRO:HB2	1:A:417:MET:CE	2.48	0.44
1:A:446:PHE:CB	1:A:454:LEU:HD11	2.43	0.44
1:A:530:VAL:CG2	1:A:584:PRO:HD3	2.46	0.44
1:A:539:GLU:HG3	1:A:540:ARG:N	2.31	0.44
1:A:217:PHE:CE2	1:A:219:ASP:HB2	2.53	0.44
1:A:635:GLN:HB3	1:A:644:THR:HB	1.99	0.44
1:A:179:ASP:O	1:A:180:ASP:HB3	2.17	0.44
1:A:288:ALA:O	1:A:289:PHE:HB2	2.17	0.44
1:A:471:THR:HG23	1:A:473:GLN:NE2	2.28	0.44
1:A:703:LEU:CD2	1:A:790:ILE:CG2	2.95	0.44
1:A:778:VAL:O	1:A:797:LYS:HB2	2.17	0.44
1:A:889:ILE:HA	1:A:892:HIS:ND1	2.33	0.44
1:A:890:ALA:O	1:A:891:SER:HB2	2.17	0.44
1:A:53:LEU:HD11	1:A:501:LEU:HD11	2.00	0.44
1:A:173:VAL:O	1:A:173:VAL:HG23	2.18	0.44
1:A:252:PHE:HD1	1:A:283:CYS:HA	1.82	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:262:MET:SD	1:A:383:ALA:HB3	2.58	0.44
1:A:863:ILE:HG22	1:A:876:THR:CB	2.35	0.44
1:A:62:ILE:CD1	1:A:73:LEU:HD12	2.45	0.43
1:A:256:LEU:CB	1:A:309:LEU:CD2	2.94	0.43
1:A:291:SER:HB3	1:A:404:CYS:O	2.18	0.43
1:A:358:ILE:HG23	1:A:358:ILE:O	2.18	0.43
1:A:370:LEU:HD12	1:A:399:ILE:HG23	2.00	0.43
1:A:458:ARG:HB2	1:A:468:GLN:HE22	1.83	0.43
1:A:567:ILE:HD11	1:A:650:PHE:CE2	2.53	0.43
1:A:759:VAL:CG1	1:A:760:GLN:N	2.81	0.43
1:A:889:ILE:CD1	1:A:907:TYR:CZ	3.01	0.43
1:A:123:GLU:HB2	1:A:125:ARG:HG2	2.00	0.43
1:A:542:GLU:HG2	1:A:543:ARG:HG3	2.00	0.43
1:A:620:PRO:O	1:A:623:ILE:HG13	2.18	0.43
1:A:711:VAL:HG21	1:A:798:VAL:CG2	2.48	0.43
1:A:295:VAL:CB	1:A:414:VAL:HG21	2.48	0.43
1:A:528:TRP:HZ2	1:A:533:ASN:OD1	2.01	0.43
1:A:547:PRO:C	1:A:548:ARG:HG2	2.43	0.43
1:A:839:ALA:HB1	1:A:841:GLU:O	2.18	0.43
1:A:841:GLU:HG3	1:A:842:SER:N	2.32	0.43
1:A:862:ILE:HG22	1:A:877:ILE:CA	2.32	0.43
1:A:68:ASN:CG	1:A:87:PRO:HD3	2.43	0.43
1:A:324:THR:O	1:A:324:THR:HG22	2.18	0.43
1:A:444:LEU:HD12	1:A:446:PHE:CD1	2.51	0.43
1:A:555:LYS:NZ	1:A:556:GLN:HG2	2.34	0.43
1:A:53:LEU:CG	1:A:64:LEU:CD1	2.96	0.43
1:A:464:GLY:O	1:A:465:ASN:HB3	2.17	0.43
1:A:531:LEU:O	1:A:641:THR:OG1	2.16	0.43
1:A:597:LEU:HG	1:A:622:ILE:HG12	1.99	0.43
1:A:764:THR:HG23	1:A:766:TYR:CZ	2.54	0.43
1:A:832:THR:CG2	1:A:836:HIS:CB	2.95	0.43
1:A:832:THR:HG21	1:A:836:HIS:CB	2.48	0.43
1:A:98:ARG:HE	1:A:107:LEU:HD12	1.83	0.43
1:A:117:LEU:HG	1:A:126:LEU:HD11	2.01	0.43
1:A:572:TYR:CD2	1:A:572:TYR:C	2.96	0.43
1:A:574:VAL:CG2	1:A:613:SER:HB3	2.48	0.43
1:A:590:VAL:CG1	1:A:591:ASN:N	2.82	0.43
1:A:699:ASP:O	1:A:725:ASN:HB3	2.18	0.43
1:A:865:VAL:CG1	1:A:866:THR:N	2.82	0.43
1:A:55:VAL:HG22	1:A:62:ILE:HG22	2.00	0.43
1:A:713:VAL:O	1:A:714:GLU:HB2	2.18	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:117:LEU:HD11	1:A:126:LEU:CD2	2.31	0.43
1:A:332:ASP:O	1:A:333:LEU:HD23	2.18	0.43
1:A:62:ILE:CD1	1:A:501:LEU:CD1	2.95	0.43
1:A:679:VAL:CG1	1:A:680:CYS:N	2.82	0.43
1:A:764:THR:CG2	1:A:766:TYR:CZ	3.01	0.43
1:A:224:SER:HA	1:A:289:PHE:CD1	2.54	0.43
1:A:567:ILE:CD1	1:A:567:ILE:N	2.82	0.43
1:A:716:ILE:CD1	1:A:763:ASN:HB3	2.48	0.43
1:A:119:ILE:HG21	1:A:121:TYR:CE1	2.54	0.42
1:A:128:ALA:O	1:A:138:LYS:HG2	2.19	0.42
1:A:178:PHE:HD1	1:A:178:PHE:O	2.02	0.42
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CD1	3.00	0.42
1:A:380:LEU:CB	1:A:386:LYS:HE3	2.43	0.42
1:A:162:VAL:HG12	1:A:164:GLU:H	1.84	0.42
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CE2	3.02	0.42
1:A:412:LEU:N	1:A:412:LEU:CD1	2.82	0.42
1:A:435:ILE:CD1	1:A:486:PHE:HD1	2.31	0.42
1:A:484:MET:HE2	1:A:495:ILE:HG13	2.01	0.42
1:A:917:MET:HE1	1:A:948:TYR:CZ	2.55	0.42
1:A:501:LEU:CD2	1:A:502:THR:N	2.82	0.42
1:A:333:LEU:HD23	1:A:358:ILE:HA	2.01	0.42
1:A:471:THR:HG21	1:A:473:GLN:OE1	2.19	0.42
1:A:617:LYS:HG3	1:A:618:GLU:N	2.34	0.42
1:A:68:ASN:CB	1:A:86:GLY:HA3	2.50	0.42
1:A:133:TYR:CB	1:A:136:ILE:HG23	2.49	0.42
1:A:541:CYS:HB2	1:A:544:SER:HB3	2.01	0.42
1:A:562:VAL:HG22	1:A:578:LEU:HD22	1.98	0.42
1:A:789:ASN:HD22	1:A:790:ILE:N	2.17	0.42
1:A:805:ALA:N	1:A:806:MET:CE	2.82	0.42
1:A:885:GLU:HG3	1:A:886:PHE:N	2.34	0.42
1:A:62:ILE:CD1	1:A:501:LEU:HD13	2.49	0.42
1:A:380:LEU:CB	1:A:386:LYS:CE	2.95	0.42
1:A:543:ARG:HB2	1:A:549:ARG:NH1	2.34	0.42
1:A:563:HIS:HB2	1:A:577:VAL:HG13	2.01	0.42
1:A:72:LYS:CD	1:A:80:LEU:CD1	2.97	0.42
1:A:100:VAL:HG21	1:A:158:TYR:OH	2.19	0.42
1:A:112:ASN:ND2	1:A:133:TYR:HE2	2.17	0.42
1:A:169:PHE:CD2	1:A:170:GLY:N	2.84	0.42
1:A:728:GLN:HG3	1:A:753:ARG:NH2	2.34	0.42
1:A:889:ILE:HG23	1:A:892:HIS:NE2	2.33	0.42
1:A:234:THR:CG2	1:A:235:VAL:N	2.82	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:281:ARG:HB3	1:A:293:VAL:HG11	1.97	0.42
1:A:403:PHE:CE2	1:A:405:GLY:HA2	2.55	0.42
1:A:444:LEU:HD13	1:A:444:LEU:C	2.44	0.42
1:A:470:GLU:HG2	1:A:471:THR:N	2.34	0.42
1:A:926:ALA:HB2	1:A:949:TYR:CD1	2.55	0.42
1:A:44:GLY:O	1:A:47:ALA:HA	2.20	0.42
1:A:93:LYS:HD2	1:A:105:GLU:CD	2.45	0.42
1:A:216:VAL:CG1	1:A:217:PHE:N	2.82	0.42
1:A:888:ASP:OD1	1:A:889:ILE:HG13	2.20	0.42
1:A:947:LEU:CD2	1:A:947:LEU:N	2.83	0.42
1:A:67:VAL:CG1	1:A:111:ASN:HB3	2.50	0.42
1:A:111:ASN:O	1:A:132:LEU:HD13	2.20	0.42
1:A:380:LEU:HD22	1:A:412:LEU:HB3	2.02	0.42
1:A:387:VAL:CG1	1:A:388:LYS:N	2.82	0.42
1:A:562:VAL:HG22	1:A:578:LEU:HD23	1.99	0.42
1:A:662:LEU:O	1:A:666:GLU:HB3	2.20	0.42
1:A:711:VAL:HB	1:A:800:LEU:HD23	2.02	0.42
1:A:773:ILE:N	1:A:773:ILE:CD1	2.82	0.42
1:A:845:LEU:HD11	1:A:852:SER:OG	2.20	0.42
1:A:321:LEU:HD23	1:A:333:LEU:CD1	2.50	0.41
1:A:528:TRP:CZ2	1:A:533:ASN:OD1	2.73	0.41
1:A:623:ILE:HD12	1:A:624:THR:HA	2.01	0.41
1:A:563:HIS:CB	1:A:577:VAL:CG1	2.95	0.41
1:A:597:LEU:N	1:A:597:LEU:CD2	2.83	0.41
1:A:630:HIS:CD2	1:A:632:VAL:CG2	3.00	0.41
1:A:665:VAL:HG11	1:A:697:PRO:CD	2.48	0.41
1:A:44:GLY:CA	1:A:50:PHE:HE2	2.23	0.41
1:A:53:LEU:C	1:A:53:LEU:CD2	2.94	0.41
1:A:256:LEU:HD12	1:A:297:ILE:HD11	2.02	0.41
1:A:333:LEU:HD23	1:A:358:ILE:HG13	2.00	0.41
1:A:555:LYS:CG	1:A:556:GLN:N	2.83	0.41
1:A:137:CYS:SG	1:A:159:LEU:CD1	3.09	0.41
1:A:181:LYS:HZ2	1:A:216:VAL:HG23	1.82	0.41
1:A:605:ILE:O	1:A:608:GLN:HG2	2.19	0.41
1:A:696:LEU:N	1:A:696:LEU:CD1	2.83	0.41
1:A:909:PRO:C	1:A:911:GLU:H	2.29	0.41
1:A:435:ILE:CD1	1:A:436:ALA:N	2.81	0.41
1:A:494:TYR:CB	1:A:501:LEU:HD21	2.30	0.41
1:A:658:HIS:ND1	1:A:663:SER:HB3	2.36	0.41
1:A:783:VAL:CG1	1:A:784:TRP:N	2.83	0.41
1:A:817:ASP:OD1	1:A:820:PHE:CD2	2.73	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:847:LEU:HD12	1:A:852:SER:HB2	2.00	0.41
1:A:904:VAL:CG1	1:A:905:ASP:N	2.82	0.41
1:A:131:SER:O	1:A:133:TYR:CD2	2.74	0.41
1:A:177:ASN:O	1:A:178:PHE:CG	2.73	0.41
1:A:226:ILE:HD11	1:A:385:LEU:HD23	2.03	0.41
1:A:259:GLN:HA	1:A:260:PRO:HD3	1.82	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:560:LEU:CG	1:A:648:THR:CG2	2.98	0.41
1:A:892:HIS:CD2	1:A:892:HIS:C	2.98	0.41
1:A:80:LEU:C	1:A:81:VAL:HG23	2.45	0.41
1:A:282:LEU:HD23	1:A:292:TYR:HA	2.03	0.41
1:A:396:LEU:C	1:A:396:LEU:CD1	2.94	0.41
1:A:435:ILE:HD12	1:A:486:PHE:CE1	2.56	0.41
1:A:843:ARG:CZ	1:A:843:ARG:CB	2.99	0.41
1:A:39:PHE:CZ	1:A:473:GLN:HG3	2.53	0.41
1:A:188:VAL:HG22	1:A:188:VAL:O	2.21	0.41
1:A:403:PHE:HE1	1:A:406:LEU:HD23	1.75	0.41
1:A:492:GLN:HB3	1:A:503:ARG:HG3	2.02	0.41
1:A:884:LEU:HD23	1:A:884:LEU:HA	1.75	0.41
1:A:62:ILE:CD1	1:A:64:LEU:HD21	2.46	0.41
1:A:72:LYS:CE	1:A:80:LEU:CD1	2.95	0.41
1:A:111:ASN:O	1:A:132:LEU:HD22	2.21	0.41
1:A:159:LEU:HG	1:A:201:ARG:NH1	2.36	0.41
1:A:236:ILE:CG2	1:A:239:PHE:HB2	2.51	0.41
1:A:307:ARG:HD3	1:A:307:ARG:HA	1.88	0.41
1:A:385:LEU:C	1:A:385:LEU:CD1	2.93	0.41
1:A:631:VAL:O	1:A:631:VAL:HG13	2.19	0.41
1:A:833:LEU:CB	1:A:836:HIS:HD2	2.22	0.41
1:A:845:LEU:C	1:A:845:LEU:CD1	2.94	0.41
1:A:862:ILE:HG21	1:A:877:ILE:HG12	2.03	0.41
1:A:188:VAL:CG2	1:A:191:LYS:HB2	2.51	0.41
1:A:370:LEU:CD1	1:A:370:LEU:C	2.94	0.41
1:A:566:ASN:CA	1:A:651:VAL:CG2	2.95	0.41
1:A:703:LEU:HD13	1:A:723:ALA:CB	2.47	0.41
1:A:803:CYS:SG	1:A:832:THR:HA	2.61	0.41
1:A:943:ARG:CZ	1:A:943:ARG:HB2	2.51	0.41
1:A:280:VAL:CG1	1:A:281:ARG:N	2.83	0.40
1:A:419:ARG:HH11	1:A:419:ARG:HD3	1.72	0.40
1:A:681:THR:OG1	1:A:686:THR:HG21	2.21	0.40
1:A:867:GLY:HA2	1:A:868:PRO:HD3	1.91	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:889:ILE:HD12	1:A:907:TYR:CE1	2.56	0.40
1:A:137:CYS:O	1:A:150:GLU:HG3	2.20	0.40
1:A:689:PHE:HD1	1:A:691:GLU:HG2	1.80	0.40
1:A:897:GLY:H	1:A:924:GLN:HE22	1.69	0.40
1:A:105:GLU:CB	1:A:106:PRO:HD2	2.42	0.40
1:A:219:ASP:HB3	1:A:222:VAL:H	1.86	0.40
1:A:327:VAL:CG1	1:A:358:ILE:CD1	2.94	0.40
1:A:667:SER:HB3	1:A:668:PRO:CD	2.51	0.40
1:A:778:VAL:HG12	1:A:779:GLU:O	2.20	0.40
1:A:901:SER:HA	1:A:902:PRO:HD2	1.89	0.40
1:A:64:LEU:HD12	1:A:496:MET:HE3	2.00	0.40
1:A:252:PHE:HE1	1:A:283:CYS:SG	2.44	0.40
1:A:349:LEU:N	1:A:349:LEU:CD2	2.84	0.40
1:A:469:TYR:CZ	1:A:470:GLU:O	2.74	0.40
1:A:492:GLN:CG	1:A:503:ARG:HD2	2.51	0.40
1:A:284:LYS:C	1:A:284:LYS:CD	2.95	0.40
1:A:460:ASP:HB2	1:A:465:ASN:N	2.37	0.40
1:A:473:GLN:CD	1:A:504:VAL:CG1	2.95	0.40

All (32) 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:234:THR:CA	1:A:234:THR:CA[5_455]	0.86	1.34
1:A:233:PHE:O	1:A:234:THR:OG1[5_455]	0.87	1.33
1:A:146:PHE:CE1	1:A:730:GLN:OE1[4_555]	1.03	1.17
1:A:146:PHE:CE1	1:A:730:GLN:CD[4_555]	1.26	0.94
1:A:146:PHE:CD1	1:A:730:GLN:OE1[4_555]	1.26	0.94
1:A:155:LYS:NZ	1:A:221:PHE:N[5_455]	1.34	0.86
1:A:234:THR:O	1:A:234:THR:O[5_455]	1.40	0.80
1:A:233:PHE:O	1:A:234:THR:CB[5_455]	1.48	0.72
1:A:83:HIS:CE1	1:A:731:SER:OG[4_555]	1.57	0.63
1:A:175:TYR:CE1	1:A:842:SER:CB[8_454]	1.57	0.63
1:A:233:PHE:C	1:A:234:THR:CB[5_455]	1.63	0.57
1:A:208:GLU:OE2	1:A:728:GLN:NE2[4_555]	1.77	0.43
1:A:234:THR:N	1:A:234:THR:CB[5_455]	1.78	0.42
1:A:233:PHE:C	1:A:234:THR:OG1[5_455]	1.80	0.40
1:A:234:THR:CA	1:A:234:THR:CB[5_455]	1.82	0.38
1:A:146:PHE:CZ	1:A:730:GLN:NE2[4_555]	1.84	0.36
1:A:155:LYS:NZ	1:A:221:PHE:CA[5_455]	1.84	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:234:THR:N	1:A:234:THR:CA[5_455]	1.89	0.31
1:A:155:LYS:NZ	1:A:221:PHE:CG[5_455]	1.99	0.21
1:A:175:TYR:CD1	1:A:842:SER:CB[8_454]	2.01	0.19
1:A:230:SER:CA	1:A:230:SER:OG[5_455]	2.01	0.19
1:A:146:PHE:CZ	1:A:730:GLN:CD[4_555]	2.04	0.16
1:A:146:PHE:CE1	1:A:730:GLN:NE2[4_555]	2.04	0.16
1:A:155:LYS:NZ	1:A:221:PHE:CD2[5_455]	2.04	0.16
1:A:156:GLU:OE1	1:A:220:GLU:OE2[5_455]	2.05	0.15
1:A:234:THR:CA	1:A:234:THR:C[5_455]	2.07	0.13
1:A:175:TYR:OH	1:A:843:ARG:CG[8_454]	2.10	0.10
1:A:175:TYR:CD1	1:A:842:SER:OG[8_454]	2.12	0.08
1:A:148:LEU:O	1:A:728:GLN:NE2[4_555]	2.16	0.04
1:A:148:LEU:O	1:A:728:GLN:OE1[4_555]	2.19	0.01
1:A:155:LYS:NZ	1:A:220:GLU:C[5_455]	2.19	0.01
1:A:234:THR:C	1:A:234:THR:O[5_455]	2.19	0.01

5.3 Torsion angles

5.3.1 Protein backbone

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	905/1207 (75%)	842 (93%)	44 (5%)	19 (2%)	5 30

All (19) 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	654	ASN
1	A	700	CYS
1	A	701	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	804	GLY
1	A	864	PRO
1	A	87	PRO
1	A	271	LYS
1	A	474	VAL
1	A	849	GLY
1	A	263	VAL
1	A	344	ARG
1	A	933	VAL
1	A	44	GLY
1	A	921	LYS

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	812/1067 (76%)	788 (97%)	24 (3%)	36 57

All (24) 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	412	LEU
1	A	435	ILE
1	A	444	LEU
1	A	468	GLN
1	A	473	GLN
1	A	501	LEU
1	A	529	CYS
1	A	548	ARG
1	A	567	ILE
1	A	575	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	597	LEU
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

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (31) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	51	ASN
1	A	52	HIS
1	A	101	GLN
1	A	114	ASN
1	A	134	GLN
1	A	157	HIS
1	A	163	ASN
1	A	273	GLN
1	A	361	GLN
1	A	441	ASN
1	A	442	HIS
1	A	473	GLN
1	A	500	GLN
1	A	566	ASN
1	A	582	ASN
1	A	629	HIS
1	A	630	HIS
1	A	654	ASN
1	A	672	HIS
1	A	685	ASN
1	A	690	GLN
1	A	702	GLN
1	A	728	GLN
1	A	747	GLN
1	A	787	HIS
1	A	789	ASN
1	A	792	ASN
1	A	826	GLN
1	A	836	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	856	ASN
1	A	892	HIS

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	6

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	802:LYS	C	803:CYS	N	4.06
1	A	854:CYS	C	855:THR	N	3.30
1	A	557:CYS	C	558:VAL	N	2.81
1	A	506:VAL	C	507:GLU	N	2.58
1	A	700:CYS	C	701:PRO	N	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	653:TYR	C	654:ASN	N	0.50

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	915/1207 (75%)	1.74	304 (33%) 1 6	100, 150, 216, 216	0

All (304) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	815	LYS	11.7
1	A	633	GLN	11.2
1	A	649	SER	10.0
1	A	923	SER	9.9
1	A	621	ARG	9.6
1	A	747	GLN	9.6
1	A	624	THR	9.5
1	A	619	VAL	9.2
1	A	716	ILE	8.8
1	A	835	GLN	8.7
1	A	720	THR	8.7
1	A	714	GLU	8.6
1	A	669	TYR	8.4
1	A	588	ALA	8.1
1	A	760	GLN	7.9
1	A	542	GLU	7.8
1	A	715	VAL	7.7
1	A	552	SER	7.7
1	A	901	SER	7.6
1	A	566	ASN	7.1
1	A	622	ILE	7.1
1	A	623	ILE	6.9
1	A	585	GLU	6.9
1	A	620	PRO	6.7
1	A	543	ARG	6.6
1	A	925	HIS	6.6
1	A	628	ASP	6.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	640	GLU	6.5
1	A	897	GLY	6.4
1	A	722	LYS	6.4
1	A	854	CYS	6.4
1	A	569	VAL	6.3
1	A	407	ASP	6.3
1	A	717	LYS	6.2
1	A	657	VAL	6.2
1	A	629	HIS	6.2
1	A	406	LEU	6.0
1	A	547	PRO	5.9
1	A	423	VAL	5.9
1	A	874	LYS	5.9
1	A	752	LEU	5.7
1	A	736	TYR	5.6
1	A	735	GLY	5.5
1	A	926	ALA	5.5
1	A	631	VAL	5.3
1	A	477	SER	5.3
1	A	470	GLU	5.2
1	A	745	ILE	5.2
1	A	482	ARG	5.1
1	A	838	PRO	5.1
1	A	330	ASP	5.1
1	A	539	GLU	5.0
1	A	575	LEU	4.9
1	A	354	LEU	4.9
1	A	859	ILE	4.9
1	A	486	PHE	4.8
1	A	772	GLU	4.8
1	A	744	GLY	4.8
1	A	473	GLN	4.7
1	A	508	SER	4.7
1	A	718	PRO	4.7
1	A	99	ILE	4.7
1	A	403	PHE	4.7
1	A	387	VAL	4.6
1	A	150	GLU	4.6
1	A	409	ASN	4.5
1	A	270	THR	4.5
1	A	381	ASP	4.5
1	A	711	VAL	4.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	276	THR	4.5
1	A	587	SER	4.5
1	A	84	GLN	4.4
1	A	269	THR	4.3
1	A	37	PRO	4.3
1	A	422	PRO	4.3
1	A	424	PHE	4.3
1	A	235	VAL	4.3
1	A	388	LYS	4.3
1	A	721	LEU	4.3
1	A	803	CYS	4.2
1	A	766	TYR	4.2
1	A	643	MET	4.1
1	A	469	TYR	4.1
1	A	949	TYR	4.1
1	A	174	SER	4.1
1	A	100	VAL	4.1
1	A	912	GLN	4.1
1	A	891	SER	4.1
1	A	153	HIS	4.1
1	A	48	GLU	4.0
1	A	818	PRO	4.0
1	A	548	ARG	4.0
1	A	309	LEU	4.0
1	A	902	PRO	4.0
1	A	316	LYS	4.0
1	A	679	VAL	4.0
1	A	561	THR	4.0
1	A	231	ASP	3.9
1	A	710	LEU	3.9
1	A	924	GLN	3.8
1	A	197	THR	3.8
1	A	540	ARG	3.8
1	A	98	ARG	3.7
1	A	345	LYS	3.7
1	A	586	LEU	3.7
1	A	659	ASN	3.7
1	A	801	TYR	3.7
1	A	349	LEU	3.7
1	A	221	PHE	3.6
1	A	886	PHE	3.6
1	A	660	SER	3.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	401	ASP	3.6
1	A	483	ASP	3.6
1	A	467	LEU	3.6
1	A	531	LEU	3.6
1	A	900	CYS	3.6
1	A	133	TYR	3.6
1	A	506	VAL	3.5
1	A	856	ASN	3.5
1	A	152	PHE	3.5
1	A	300	GLU	3.5
1	A	553	GLU	3.5
1	A	754	PHE	3.5
1	A	405	GLY	3.5
1	A	190	GLY	3.5
1	A	767	SER	3.5
1	A	727	PRO	3.5
1	A	537	ARG	3.4
1	A	732	GLY	3.4
1	A	607	ASN	3.4
1	A	893	VAL	3.4
1	A	189	ASP	3.4
1	A	759	VAL	3.4
1	A	878	ARG	3.4
1	A	265	PRO	3.4
1	A	230	SER	3.4
1	A	806	MET	3.4
1	A	927	GLY	3.4
1	A	889	ILE	3.4
1	A	592	CYS	3.3
1	A	196	PRO	3.3
1	A	911	GLU	3.3
1	A	263	VAL	3.3
1	A	102	THR	3.3
1	A	410	ALA	3.3
1	A	580	THR	3.3
1	A	630	HIS	3.2
1	A	439	TYR	3.2
1	A	675	LYS	3.2
1	A	500	GLN	3.2
1	A	570	SER	3.2
1	A	228	ILE	3.2
1	A	668	PRO	3.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	122	LYS	3.2
1	A	142	LEU	3.2
1	A	793	PRO	3.2
1	A	210	ASP	3.2
1	A	597	LEU	3.1
1	A	639	LYS	3.1
1	A	64	LEU	3.1
1	A	239	PHE	3.1
1	A	571	GLN	3.1
1	A	843	ARG	3.1
1	A	756	SER	3.1
1	A	791	ASP	3.1
1	A	775	ASN	3.1
1	A	421	ILE	3.0
1	A	626	ASN	3.0
1	A	734	ARG	3.0
1	A	495	ILE	3.0
1	A	762	GLN	3.0
1	A	408	MET	3.0
1	A	504	VAL	3.0
1	A	866	THR	3.0
1	A	595	GLU	3.0
1	A	455	LYS	3.0
1	A	287	THR	3.0
1	A	704	LEU	3.0
1	A	216	VAL	3.0
1	A	290	ASN	3.0
1	A	493	LEU	2.9
1	A	203	LEU	2.9
1	A	213	PHE	2.9
1	A	257	THR	2.9
1	A	765	SER	2.9
1	A	947	LEU	2.9
1	A	310	GLN	2.9
1	A	288	ALA	2.9
1	A	534	THR	2.9
1	A	584	PRO	2.9
1	A	663	SER	2.9
1	A	440	LYS	2.9
1	A	903	LEU	2.8
1	A	786	GLY	2.8
1	A	205	LYS	2.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	612	TYR	2.8
1	A	143	GLU	2.8
1	A	546	GLU	2.8
1	A	565	ASN	2.8
1	A	853	LYS	2.8
1	A	232	THR	2.8
1	A	307	ARG	2.8
1	A	601	ASP	2.8
1	A	437	TYR	2.7
1	A	635	GLN	2.7
1	A	229	PRO	2.7
1	A	731	SER	2.7
1	A	884	LEU	2.7
1	A	876	THR	2.7
1	A	258	LEU	2.7
1	A	647	SER	2.7
1	A	774	ASN	2.7
1	A	193	GLU	2.7
1	A	41	THR	2.7
1	A	712	PRO	2.7
1	A	750	PRO	2.6
1	A	939	GLU	2.6
1	A	289	PHE	2.6
1	A	441	ASN	2.6
1	A	602	GLY	2.6
1	A	268	SER	2.6
1	A	890	ALA	2.6
1	A	54	VAL	2.6
1	A	411	PRO	2.6
1	A	578	LEU	2.6
1	A	915	CYS	2.6
1	A	779	GLU	2.6
1	A	75	SER	2.6
1	A	709	ILE	2.6
1	A	909	PRO	2.6
1	A	312	ALA	2.5
1	A	237	PRO	2.5
1	A	499	ARG	2.5
1	A	928	PHE	2.5
1	A	950	PHE	2.5
1	A	267	GLY	2.5
1	A	544	SER	2.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	858	ARG	2.5
1	A	236	ILE	2.5
1	A	180	ASP	2.5
1	A	479	PRO	2.5
1	A	402	ASN	2.5
1	A	627	GLY	2.5
1	A	678	HIS	2.5
1	A	443	SER	2.5
1	A	695	LYS	2.5
1	A	610	GLN	2.4
1	A	916	GLU	2.4
1	A	278	LYS	2.4
1	A	360	LYS	2.4
1	A	478	GLY	2.4
1	A	285	GLU	2.4
1	A	101	GLN	2.4
1	A	308	LEU	2.4
1	A	71	TYR	2.4
1	A	363	ASN	2.4
1	A	476	ASP	2.4
1	A	719	ILE	2.3
1	A	505	PRO	2.3
1	A	206	ASN	2.3
1	A	948	TYR	2.3
1	A	93	LYS	2.3
1	A	43	ARG	2.3
1	A	474	VAL	2.3
1	A	740	LEU	2.3
1	A	781	THR	2.3
1	A	78	LYS	2.3
1	A	343	LYS	2.3
1	A	887	ARG	2.2
1	A	522	GLY	2.2
1	A	524	PRO	2.2
1	A	350	ASP	2.2
1	A	374	TYR	2.2
1	A	625	GLU	2.2
1	A	821	GLU	2.2
1	A	130	GLY	2.2
1	A	256	LEU	2.1
1	A	82	THR	2.1
1	A	808	GLU	2.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	802	LYS	2.1
1	A	264	SER	2.1
1	A	419	ARG	2.1
1	A	266	PRO	2.1
1	A	163	ASN	2.1
1	A	465	ASN	2.1
1	A	261	GLU	2.1
1	A	129	CYS	2.1
1	A	796	ASN	2.1
1	A	545	ARG	2.1
1	A	507	GLU	2.1
1	A	748	ARG	2.1
1	A	676	TYR	2.1
1	A	799	TYR	2.1
1	A	697	PRO	2.1
1	A	563	HIS	2.0
1	A	642	GLY	2.0
1	A	431	MET	2.0
1	A	218	HIS	2.0
1	A	705	ARG	2.0
1	A	242	TYR	2.0
1	A	466	ALA	2.0
1	A	485	ALA	2.0
1	A	208	GLU	2.0
1	A	726	LEU	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.