



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Jun 22, 2024 – 05:53 PM EDT

PDB ID : 5L5K
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	:	4.02b-467
Xtriage (Phenix)	:	1.13
EDS	:	2.37.1
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Refmac	:	5.8.0158
CCP4	:	7.0.044 (Gargrove)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.37.1

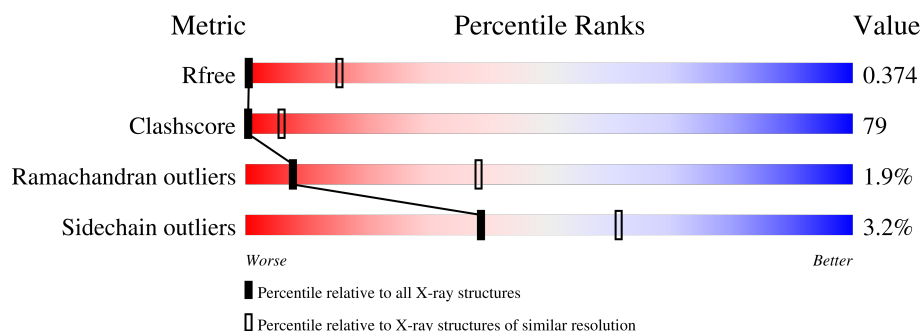
1 Overall quality at a glance

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}	130704	1004 (10.00-3.90)
Clashscore	141614	1069 (10.00-3.90)
Ramachandran outliers	138981	1002 (10.00-3.90)
Sidechain outliers	138945	1002 (10.00-3.86)

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 $\leq 5\%$.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	1207	<div> <div></div> <div>32%</div> <div>58%</div> <div>6%</div> <div></div> </div>

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			

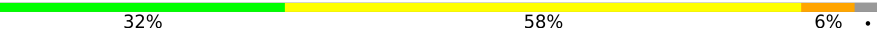
There are 13 discrepancies between the modelled and reference sequences:

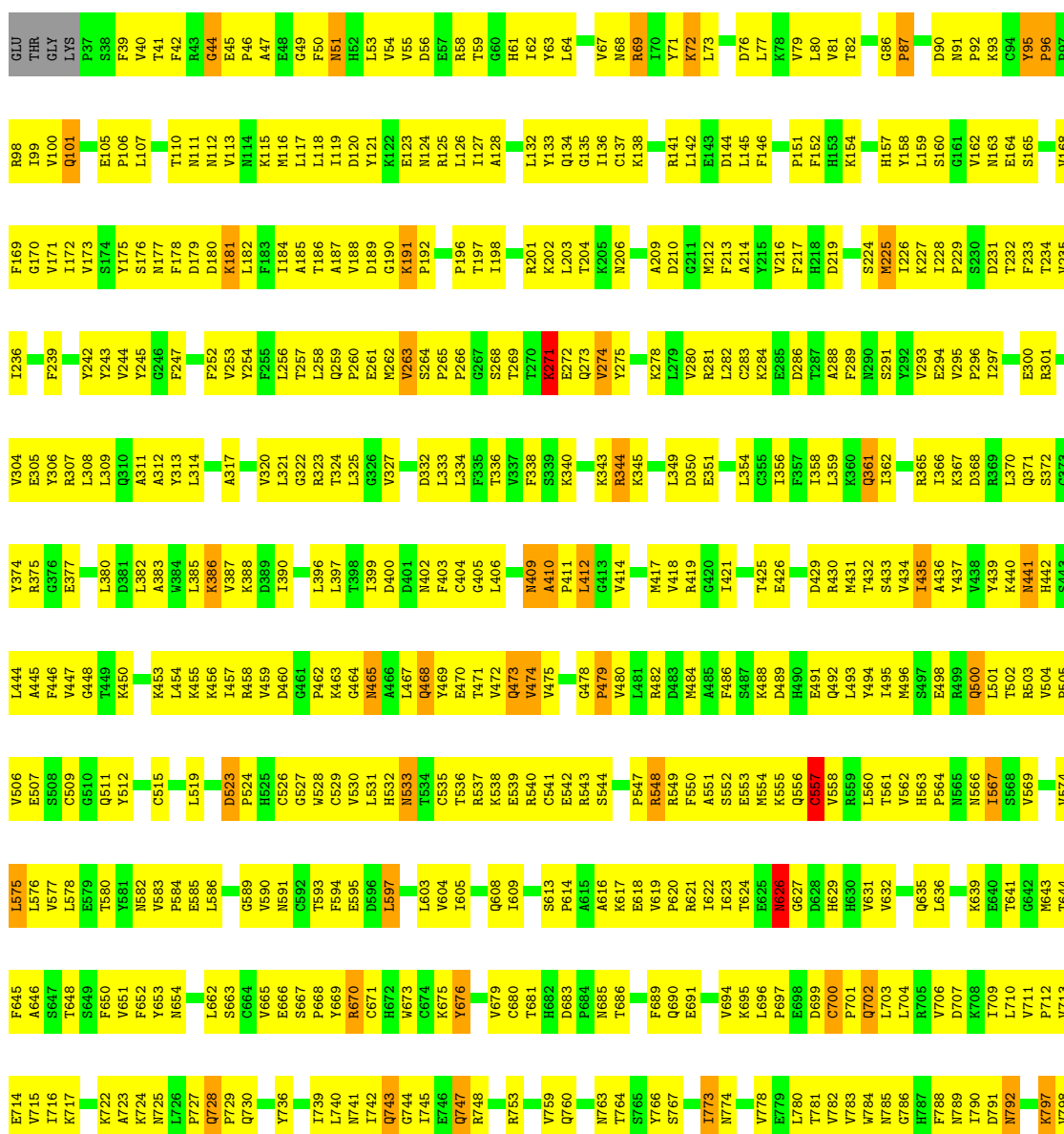
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	33	GLU	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	34	THR	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	35	GLY	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1230	GLY	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1231	ARG	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1232	THR	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1233	LYS	-	expression tag	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. 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. 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

Chain A: 





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 61.18 – 7.50	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	98.5 (55.15-7.50) 98.5 (61.18-7.50)	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 , 0.374	Depositor DCC
R_{free} test set	197 reflections (4.62%)	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)	0.41 , 399.1	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	0.71	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	1.04	30/9324 (0.3%)	1.23	19/12638 (0.2%)

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 (30) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	854	CYS	C-N	-21.05	0.85	1.34
1	A	700	CYS	C-N	20.20	1.72	1.34
1	A	557	CYS	C-N	-7.97	1.15	1.34
1	A	49	GLY	CA-C	6.34	1.62	1.51
1	A	626	ASN	CG-OD1	5.79	1.36	1.24
1	A	163	ASN	CG-OD1	5.77	1.36	1.24
1	A	500	GLN	CD-OE1	5.75	1.36	1.24
1	A	101	GLN	CD-OE1	5.74	1.36	1.24
1	A	473	GLN	CD-OE1	5.72	1.36	1.24
1	A	792	ASN	CG-OD1	5.70	1.36	1.24
1	A	51	ASN	CG-OD1	5.68	1.36	1.24
1	A	970	GLN	CD-OE1	5.68	1.36	1.24
1	A	273	GLN	CD-OE1	5.68	1.36	1.24
1	A	702	GLN	CD-OE1	5.67	1.36	1.24
1	A	826	GLN	CD-OE1	5.67	1.36	1.24
1	A	361	GLN	CD-OE1	5.67	1.36	1.24
1	A	533	ASN	CG-OD1	5.67	1.36	1.24
1	A	728	GLN	CD-OE1	5.67	1.36	1.24
1	A	1068	GLN	CD-OE1	5.66	1.36	1.24
1	A	983	ASN	CG-OD1	5.65	1.36	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	747	GLN	CD-OE1	5.65	1.36	1.24
1	A	1006	ASN	CG-OD1	5.65	1.36	1.24
1	A	409	ASN	CG-OD1	5.64	1.36	1.24
1	A	685	ASN	CG-OD1	5.63	1.36	1.24
1	A	441	ASN	CG-OD1	5.63	1.36	1.24
1	A	1175	ASN	CG-OD1	5.63	1.36	1.24
1	A	789	ASN	CG-OD1	5.62	1.36	1.24
1	A	690	GLN	CD-OE1	5.62	1.36	1.24
1	A	1179	ASN	CG-OD1	5.61	1.36	1.24
1	A	49	GLY	C-N	5.08	1.45	1.34

All (19) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	747	GLN	CG-CD-NE2	-30.31	43.95	116.70
1	A	557	CYS	CA-C-N	-25.68	60.70	117.20
1	A	557	CYS	C-N-CA	-18.83	74.63	121.70
1	A	747	GLN	CG-CD-OE1	-13.94	93.71	121.60
1	A	479	PRO	N-CA-C	8.16	133.31	112.10
1	A	843	ARG	C-N-CA	7.77	141.12	121.70
1	A	478	GLY	CA-C-O	-6.89	108.20	120.60
1	A	747	GLN	OE1-CD-NE2	6.86	137.67	121.90
1	A	473	GLN	C-N-CA	-6.69	104.98	121.70
1	A	892	HIS	CA-CB-CG	6.55	124.73	113.60
1	A	854	CYS	O-C-N	-6.03	113.05	122.70
1	A	225	MET	CG-SD-CE	-5.71	91.06	100.20
1	A	409	ASN	C-N-CA	5.69	135.92	121.70
1	A	49	GLY	C-N-CA	5.61	135.72	121.70
1	A	274	VAL	CG1-CB-CG2	5.44	119.61	110.90
1	A	1045	GLU	CA-C-N	5.22	131.73	117.10
1	A	919	GLU	C-N-CA	5.21	134.74	121.70
1	A	803	CYS	C-N-CA	5.11	133.03	122.30
1	A	676	TYR	CA-CB-CG	-5.10	103.71	113.40

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	1436	10
All	All	9134	0	8998	1436	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 79.

All (1436) 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	1.43
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:854:CYS:C	1:A:855:THR:CA	1.93	1.37
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: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:1109:ASP:CG	1:A:1170:PRO:HG2	1.61	1.21
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: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:653:TYR:C	1:A:654:ASN:N	2.01	1.14
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:1036:VAL:C	1:A:1037:GLU:N	2.02	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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: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:872:GLY:C	1:A:1023:ASP:HB3	1.75	1.07
1:A:531:LEU:CD2	1:A:584:PRO:HG2	1.84	1.07
1:A:806:MET:H	1:A:806:MET:HE3	1.15	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: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
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: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:531:LEU:HD23	1:A:584:PRO:CG	1.97	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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: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: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
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: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:854:CYS:C	1:A:855:THR:N	0.85	0.90
1:A:42:PHE:HE1	1:A:79:VAL:HG22	1.31	0.90
1:A:802:LYS:C	1:A:803:CYS:N	2.24	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:951:MET:C	1:A:952:THR:N	2.26	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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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:873:THR:HA	1:A:1023:ASP:CG	1.94	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

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: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
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: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:53:LEU:HB2	1:A:496:MET:HE1	1.62	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: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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:926:ALA:HB1	1:A:947:LEU:HD12	1.63	0.81
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
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: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:854:CYS:C	1:A:855:THR:HA	2.01	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:231:ASP:O	1:A:234:THR:HG22	1.84	0.77
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: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:1191:VAL:HG13	1:A:1199:LEU:C	2.05	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: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:533:ASN:OD1	1:A:643:MET:C	2.24	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: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:225:MET:HE1	1:A:227:LYS:HG3	1.69	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:202:LYS:HD3	1:A:214:ALA:HB3	1.69	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
1:A:847:LEU:CD1	1:A:850:ALA:HA	2.16	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: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:225:MET:CE	1:A:227:LYS:HG3	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:261:GLU:HA	1:A:264:SER:O	1.89	0.73
1:A:196:PRO:HB3	1:A:225:MET:HE1	1.69	0.73
1:A:440:LYS:HD3	1:A:538:LYS:HD2	1.12	0.73
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: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:1016:MET:HE3	1:A:1017:LYS:C	2.10	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:872:GLY:C	1:A:1023:ASP:CB	2.58	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:871:GLY:C	1:A:1024:ARG:HG2	2.11	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:1045:GLU:CD	1:A:1058:ALA:HB3	2.11	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:806:MET:HE3	1:A:806:MET:N	1.99	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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:63:TYR:C	1:A:64:LEU:HD22	2.12	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:806:MET:H	1:A:806:MET:CE	1.97	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: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:689:PHE:CD1	1:A:691:GLU:HG2	2.28	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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: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: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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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:1016:MET:CE	1:A:1033:PHE:HB3	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:1109:ASP:CG	1:A:1170:PRO:CG	2.46	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: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:700:CYS:C	1:A:701:PRO:CD	2.64	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: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:261:GLU:HG2	1:A:264:SER:C	2.17	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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:186:THR:HG22	1:A:187:ALA:N	2.13	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:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:C	2.18	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:1084:ILE:HG13	1:A:1085:CYS:N	2.14	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:432:THR:HG1	1:A:480:VAL:HG23	1.62	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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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: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
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:949:TYR:HE2	1:A:951:MET:CE	2.12	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:405:GLY:C	1:A:406:LEU:HD22	2.19	0.62
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:CD	2.20	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: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: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:333:LEU:CD2	1:A:358:ILE:HG13	2.31	0.61
1:A:110:THR:HG22	1:A:111:ASN:N	2.14	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:257:THR:C	1:A:258:LEU:HD12	2.21	0.60
1:A:469:TYR:CE2	1:A:471:THR:HB	2.36	0.60
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: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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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:196:PRO:HB3	1:A:225:MET:CE	2.33	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: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: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:1111:THR:HG23	1:A:1137:TYR:C	2.24	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: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: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:873:THR:HB	1:A:917:MET:HE2	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:434:VAL:HG22	1:A:435:ILE:N	2.20	0.57
1:A:585:GLU:OE1	1:A:585:GLU:HA	2.04	0.57
1:A:42:PHE:CE2	1:A:50:PHE:HZ	2.23	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: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: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: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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:933:VAL:HG23	1:A:934:ALA:N	2.10	0.56
1:A:949:TYR:HE2	1:A:951:MET:HE2	1.69	0.56
1:A:926:ALA:CB	1:A:947:LEU:HD12	2.35	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:226:ILE:HG23	1:A:226:ILE:O	2.06	0.55
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:845:LEU:HD13	1:A:845:LEU:C	2.26	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:370:LEU:C	1:A:370:LEU:HD13	2.27	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:168:VAL:HG22	1:A:169:PHE:N	2.22	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: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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:1191:VAL:HG12	1:A:1192:THR: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:370:LEU:HD11	1:A:399:ILE:HD12	1.88	0.54
1:A:412:LEU:C	1:A:412:LEU:HD22	2.28	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: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:91:ASN:CG	1:A:92:PRO:HD2	2.27	0.54
1:A:242:TYR:CD1	1:A:345:LYS:HE2	2.42	0.54
1:A:456:LYS:HZ3	1:A:507:GLU:N	2.04	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:1016:MET:HE2	1:A:1033:PHE:HB3	1.90	0.54
1:A:710:LEU:HB2	1:A:801:TYR:CE1	2.42	0.54
1:A:780:LEU:HD12	1:A:780:LEU:C	2.27	0.54
1:A:1168:ILE:O	1:A:1168:ILE:HG23	2.07	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:689:PHE:HE2	1:A:730:GLN:CD	2.11	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
1:A:448:GLY:HA3	1:A:480:VAL:CG2	2.37	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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: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:1109:ASP:OD2	1:A:1170:PRO:CG	2.54	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:924:GLN:O	1:A:925:HIS:HB2	2.09	0.53
1:A:963:GLY:C	1:A:1036:VAL:HG22	2.29	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: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
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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:623:ILE:HD12	1:A:623:ILE:C	2.28	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:396:LEU:HD13	1:A:396:LEU:C	2.30	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:385:LEU:C	1:A:385:LEU:HD13	2.29	0.52
1:A:805:ALA:H	1:A:806:MET:CE	2.22	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: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:689:PHE:CE2	1:A:730:GLN:CD	2.84	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:593:THR:HG23	1:A:593:THR:O	2.10	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
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:1064:LEU:HD22	1:A:1093:MET:HE3	1.93	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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: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:284:LYS:HD3	1:A:284:LYS:C	2.31	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:716:ILE:HG23	1:A:716:ILE:O	2.09	0.51
1:A:1040:THR:HG22	1:A:1041:ILE:N	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: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:1016:MET:HE3	1:A:1017:LYS:CA	2.41	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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:184:ILE:HD12	1:A:184:ILE:C	2.31	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: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:HD23	1:A:53:LEU:C	2.31	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:473:GLN:CD	1:A:504:VAL:HG13	2.31	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:1004:ILE:HD13	1:A:1004:ILE:C	2.31	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
1:A:110:THR:CB	1:A:132:LEU:HD21	2.42	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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: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:603:LEU:HD23	1:A:603:LEU:C	2.33	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
1:A:781:THR:HG23	1:A:781:THR:O	2.12	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:190:GLY:C	1:A:192:PRO:HD3	2.33	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:433:SER:HB3	1:A:484:MET:HE3	1.95	0.48
1:A:473:GLN:CD	1:A:504:VAL:HG22	2.34	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: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:175:TYR:CG	1:A:176:SER:N	2.82	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:1057:ILE:HG22	1:A:1095:CYS:C	2.32	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:258:LEU:HD12	1:A:258:LEU:N	2.28	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:82:THR:HG23	1:A:82:THR:O	2.14	0.48
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: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:872:GLY:O	1:A:1023:ASP:CG	2.51	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:333:LEU:HD21	1:A:358:ILE:HG13	1.94	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:949:TYR:CE2	1:A:951:MET:CE	2.95	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:480:VAL:HB	1:A:484:MET:HE1	1.95	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:1042:VAL:HG22	1:A:1060:TRP:C	2.35	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: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:118:LEU:HD13	1:A:118:LEU:C	2.34	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:569:VAL:CG1	1:A:620:PRO:HG3	2.45	0.47
1:A:984:VAL:HG23	1:A:984:VAL:O	2.14	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1010:SER:HB2	1:A:1035:TYR:CD2	2.49	0.47
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:873:THR:HG21	1:A:981:GLY:HA2	1.91	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: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: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:987:MET:CE	1:A:990:SER:HA	2.44	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:HG23	1:A:624:THR:O	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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:1016:MET:O	1:A:1016:MET:HE2	2.16	0.45
1:A:1016:MET:CE	1:A:1033:PHE:CB	2.94	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: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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:809:SER:HB2	1:A:881:ASN:CG	2.34	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:225:MET:HE1	1:A:227:LYS:CG	2.43	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: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: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: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:695:LYS:C	1:A:696:LEU:HD12	2.37	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: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
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:NE2	2.32	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:689:PHE:CE2	1:A:730:GLN:OE1	2.59	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: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: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:90:ASP:C	1:A:107:LEU:HD22	2.39	0.43
1:A:154:LYS:HB2	1:A:157:HIS:CE1	2.54	0.43
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:HG23	1:A:173:VAL:O	2.18	0.43
1:A:217:PHE:CE2	1:A:219:ASP:HB2	2.53	0.43
1:A:274:VAL:HG23	1:A:275:TYR:N	2.30	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:589:GLY:C	1:A:639:LYS:HG2	2.39	0.43
1:A:743:GLN:CD	1:A:743:GLN:H	2.21	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: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
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:460:ASP:CG	1:A:463:LYS:HB3	2.39	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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: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:1016:MET:HE2	1:A:1033:PHE:H	1.83	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:805:ALA:N	1:A:806:MET:HE3	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: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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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: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: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: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
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:710:LEU:HD12	1:A:710:LEU:C	2.40	0.42
1:A:920:ALA:C	1:A:922:PRO:HD2	2.41	0.42
1:A:988:PHE:CB	1:A:1016:MET:SD	3.06	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:44:GLY:O	1:A:47:ALA:HA	2.20	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: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:949:TYR:CE2	1:A:951:MET:HE2	2.51	0.41
1:A:987:MET:HE3	1:A:990:SER:HA	2.01	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:987:MET:HE3	1:A:990:SER:O	2.20	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: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:805:ALA:H	1:A:806:MET:HE3	1.85	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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:955:LEU:HD23	1:A:955:LEU:C	2.41	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: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: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:676:TYR:HE1	1:A:728:GLN:C	2.21	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: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: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:1087:VAL:HG22	1:A:1093:MET:HE2	2.01	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
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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:805:ALA:H	1:A:806:MET:HE1	1.84	0.40
1:A:1044:ILE:CG2	1:A:1057:ILE:CG1	2.96	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: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 ⓘ

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	1150/1207 (95%)	1071 (93%)	57 (5%)	22 (2%)	8	38

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 ⓘ

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%)	1002 (97%)	33 (3%)	39	61

All (33) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	69	ARG
1	A	72	LYS
1	A	271	LYS
1	A	386	LYS
1	A	409	ASN
1	A	412	LEU
1	A	435	ILE
1	A	468	GLN
1	A	523	ASP
1	A	529	CYS
1	A	548	ARG
1	A	567	ILE
1	A	575	LEU
1	A	597	LEU
1	A	621	ARG
1	A	626	ASN
1	A	670	ARG
1	A	743	GLN
1	A	773	ILE
1	A	792	ASN
1	A	797	LYS
1	A	806	MET
1	A	853	LYS
1	A	854	CYS
1	A	892	HIS
1	A	1004	ILE
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. There are no such sidechains identified.

5.3.3 RNA ⓘ

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 monosaccharides 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
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 [i](#)

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

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.

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

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.

6.3 Carbohydrates [i](#)

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.

6.4 Ligands [i](#)

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.

6.5 Other polymers [i](#)

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.