



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 02:05 AM UTC

PDB ID : 7ADH / pdb_00007adh
Title : THREE-DIMENSIONAL STRUCTURE OF ISONICOTINIMIDYLATED
LIVER ALCOHOL DEHYDROGENASE
Authors : Plapp, B.; Eklund, H.
Deposited on : 1984-01-16
Resolution : 3.20 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
Mogul	:	2022.3.0, CSD as543be (2022)
Xtriage (Phenix)	:	NOT EXECUTED
EDS	:	NOT EXECUTED
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

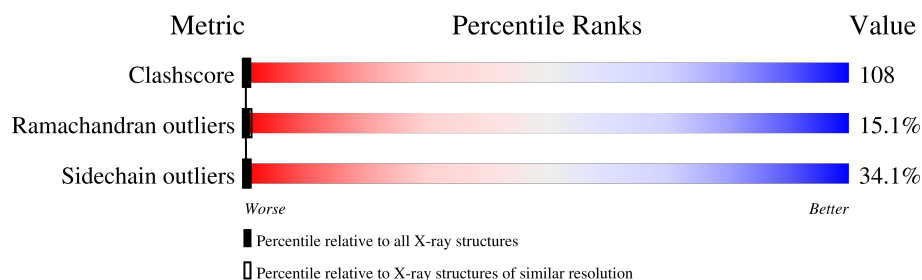
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.20 Å.

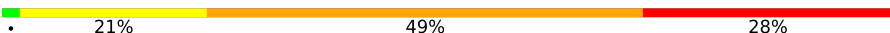
Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	190562	1573 (3.20-3.20)
Ramachandran outliers	187476	1548 (3.20-3.20)
Sidechain outliers	187428	1547 (3.20-3.20)

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 $\leq 5\%$.

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	374	

The following table lists non-polymeric compounds, carbohydrate monomers and non-standard residues in protein, DNA, RNA chains that are outliers for geometric or electron-density-fit criteria:

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
3	NTN	A	377	-	-	X	-
3	NTN	A	378	-	-	X	-
3	NTN	A	379	-	-	X	-
3	NTN	A	382	-	-	X	-
3	NTN	A	383	-	-	X	-

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
3	NTN	A	385	-	-	X	-
3	NTN	A	386	-	-	X	-
3	NTN	A	390	-	-	X	-
3	NTN	A	391	-	-	X	-
3	NTN	A	397	-	-	X	-

2 Entry composition [i](#)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2970 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.

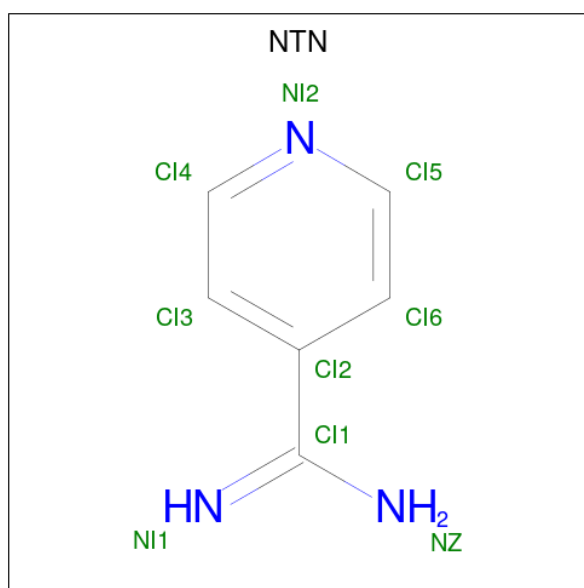
- Molecule 1 is a protein called ISONICOTINIMIDYLATED LIVER ALCOHOL DEHYDROGENASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	374	Total	C	N	O	S	32	0	0
			2784	1769	472	520	23			

- Molecule 2 is ZINC ION (CCD ID: ZN) (formula: Zn).

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

- Molecule 3 is ISONICOTINAMIDINE (CCD ID: NTN) (formula: C₆H₇N₃).



Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		

Continued on next page...

Continued from previous page...

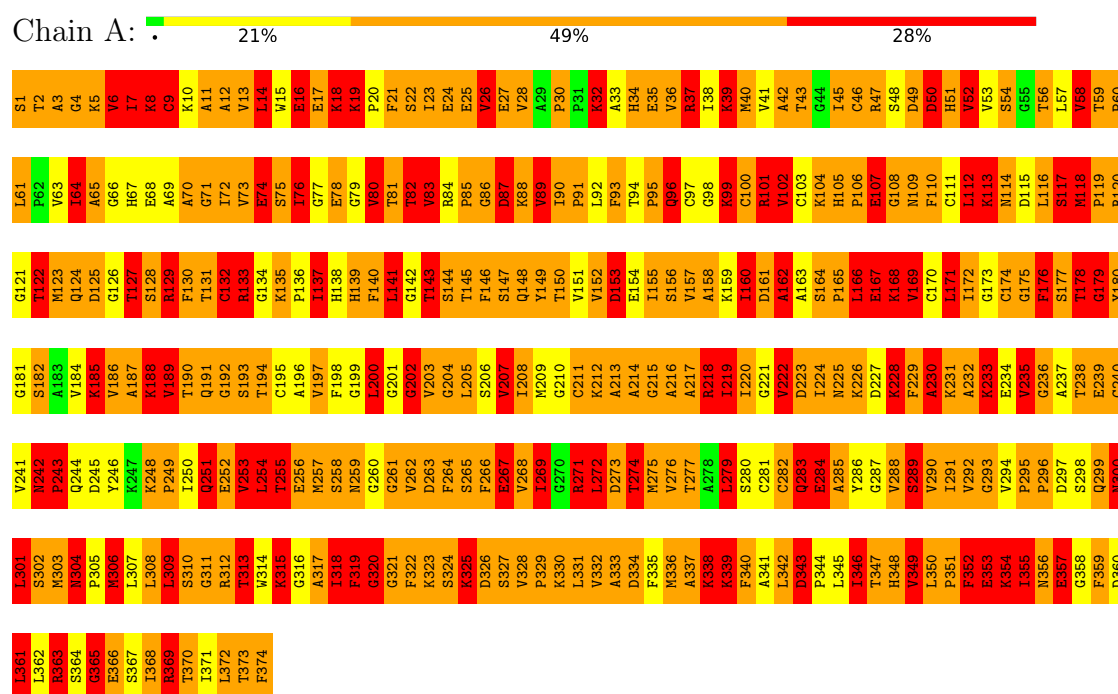
Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		

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.

Note EDS was not executed.

• Molecule 1: ISONICOTINIMIDYLATED LIVER ALCOHOL DEHYDROGENASE



4 Data and refinement statistics

Xtriage (Phenix) and EDS were not executed - this section is therefore incomplete.

Property	Value	Source
Space group	C 1 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	177.80Å 61.20Å 56.50Å 90.00° 104.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	(Not available) – 3.20	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	(Not available) ((Not available)-3.20)	Depositor
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
Refinement program	CORELS	Depositor
R, R_{free}	0.290 , (Not available)	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	2970	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	20.0	wwPDB-VP

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

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	2.22	82/2836 (2.9%)	3.62	559/3834 (14.6%)

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 (82) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	96	GLN	CA-CB	-30.78	1.01	1.53
1	A	96	GLN	N-CA	18.54	1.70	1.46
1	A	184	VAL	C-O	9.02	1.33	1.24
1	A	30	PRO	CA-C	8.90	1.60	1.52
1	A	366	GLU	C-O	8.31	1.34	1.24
1	A	52	VAL	N-CA	8.29	1.55	1.45
1	A	354	LYS	N-CA	7.92	1.56	1.46
1	A	161	ASP	CA-CB	7.60	1.62	1.52
1	A	28	VAL	CA-CB	7.46	1.62	1.53
1	A	99	LYS	CA-C	7.21	1.62	1.52
1	A	75	SER	N-CA	7.10	1.55	1.46
1	A	144	SER	CA-CB	-7.02	1.44	1.53
1	A	192	GLY	N-CA	6.97	1.55	1.45
1	A	89	VAL	N-CA	6.94	1.53	1.46
1	A	315	LYS	N-CA	6.88	1.55	1.46
1	A	107	GLU	CA-C	6.81	1.60	1.53
1	A	343	ASP	N-CA	6.75	1.51	1.46
1	A	113	LYS	CA-CB	6.72	1.62	1.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	141	LEU	N-CA	6.51	1.54	1.46
1	A	28	VAL	C-O	6.50	1.31	1.23
1	A	343	ASP	C-O	6.39	1.30	1.24
1	A	306	MET	C-O	6.37	1.32	1.24
1	A	236	GLY	N-CA	6.25	1.54	1.45
1	A	215	GLY	C-O	6.24	1.32	1.23
1	A	352	PHE	C-N	-6.23	1.25	1.33
1	A	246	TYR	N-CA	-6.21	1.37	1.46
1	A	143	THR	N-CA	6.16	1.52	1.46
1	A	263	ASP	N-CA	-6.14	1.38	1.46
1	A	8	LYS	N-CA	6.10	1.54	1.46
1	A	176	PHE	C-N	-6.08	1.25	1.33
1	A	7	ILE	CA-C	6.05	1.59	1.52
1	A	332	VAL	C-O	-5.96	1.18	1.24
1	A	246	TYR	CA-CB	5.95	1.62	1.53
1	A	286	TYR	N-CA	-5.95	1.41	1.46
1	A	145	THR	CB-OG1	5.92	1.53	1.43
1	A	16	GLU	N-CA	5.91	1.53	1.46
1	A	348	HIS	N-CA	5.89	1.53	1.46
1	A	347	THR	C-O	5.89	1.31	1.24
1	A	215	GLY	N-CA	5.88	1.53	1.45
1	A	219	ILE	CA-C	5.87	1.58	1.52
1	A	302	SER	C-O	5.86	1.31	1.24
1	A	17	GLU	CA-C	5.76	1.60	1.52
1	A	364	SER	CB-OG	5.76	1.53	1.42
1	A	300	ASN	CA-CB	5.75	1.63	1.53
1	A	132	CYS	CA-C	-5.74	1.46	1.53
1	A	143	THR	CA-C	-5.73	1.48	1.52
1	A	342	LEU	CA-CB	5.73	1.62	1.53
1	A	301	LEU	CA-C	5.69	1.60	1.52
1	A	50	ASP	C-O	-5.68	1.17	1.24
1	A	178	THR	N-CA	5.58	1.53	1.46
1	A	191	GLN	N-CA	5.58	1.52	1.46
1	A	324	SER	C-O	5.53	1.30	1.24
1	A	281	CYS	C-N	-5.53	1.26	1.33
1	A	293	GLY	C-N	5.50	1.39	1.33
1	A	7	ILE	N-CA	5.50	1.52	1.46
1	A	341	ALA	C-N	5.48	1.41	1.33
1	A	235	VAL	C-O	5.46	1.32	1.24
1	A	299	GLN	N-CA	5.40	1.52	1.45
1	A	79	GLY	N-CA	5.36	1.52	1.45
1	A	255	THR	N-CA	5.35	1.53	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	277	THR	CA-CB	5.34	1.62	1.53
1	A	286	TYR	C-O	5.33	1.30	1.24
1	A	48	SER	C-N	-5.29	1.26	1.33
1	A	293	GLY	CA-C	5.29	1.56	1.52
1	A	319	PHE	N-CA	5.29	1.53	1.46
1	A	271	ARG	CD-NE	5.25	1.53	1.46
1	A	190	THR	CA-CB	5.25	1.61	1.53
1	A	366	GLU	N-CA	-5.21	1.39	1.46
1	A	328	VAL	CA-C	5.19	1.58	1.52
1	A	369	ARG	C-O	5.16	1.30	1.23
1	A	349	VAL	N-CA	5.15	1.53	1.46
1	A	33	ALA	C-O	5.15	1.30	1.24
1	A	54	SER	CA-C	-5.12	1.46	1.52
1	A	142	GLY	N-CA	5.10	1.52	1.45
1	A	340	PHE	N-CA	5.09	1.52	1.46
1	A	83	VAL	C-O	5.05	1.29	1.23
1	A	230	ALA	N-CA	5.05	1.52	1.46
1	A	269	ILE	CA-CB	5.04	1.60	1.55
1	A	329	PRO	C-O	5.03	1.30	1.24
1	A	313	THR	CA-CB	5.02	1.61	1.53
1	A	161	ASP	C-O	5.01	1.30	1.23
1	A	83	VAL	CA-C	5.00	1.58	1.52

All (559) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	3	ALA	O-C-N	17.71	136.39	123.11
1	A	324	SER	N-CA-C	17.61	130.55	111.36
1	A	262	VAL	CA-C-N	15.77	142.99	120.28
1	A	262	VAL	C-N-CA	15.77	142.99	120.28
1	A	35	GLU	CB-CG-CD	15.71	139.31	112.60
1	A	52	VAL	N-CA-C	-15.57	99.29	111.90
1	A	216	ALA	O-C-N	15.08	142.65	122.59
1	A	311	GLY	CA-C-N	14.94	143.31	120.75
1	A	311	GLY	C-N-CA	14.94	143.31	120.75
1	A	279	LEU	N-CA-C	-14.86	91.80	112.45
1	A	285	ALA	CA-C-N	14.66	142.75	120.17
1	A	285	ALA	C-N-CA	14.66	142.75	120.17
1	A	304	ASN	CA-CB-CG	-14.60	98.00	112.60
1	A	52	VAL	CB-CA-C	14.55	125.27	111.30
1	A	245	ASP	CA-C-N	13.81	142.52	122.09
1	A	245	ASP	C-N-CA	13.81	142.52	122.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	50	ASP	O-C-N	13.53	136.46	122.12
1	A	304	ASN	OD1-CG-ND2	13.43	136.03	122.60
1	A	51	HIS	CA-C-N	-13.36	109.70	122.66
1	A	51	HIS	C-N-CA	-13.36	109.70	122.66
1	A	3	ALA	N-CA-C	13.33	123.82	108.49
1	A	107	GLU	N-CA-CB	13.09	132.12	110.79
1	A	263	ASP	CA-C-N	13.06	144.61	121.89
1	A	263	ASP	C-N-CA	13.06	144.61	121.89
1	A	211	CYS	CA-C-O	12.91	134.20	120.90
1	A	132	CYS	O-C-N	12.79	137.01	122.55
1	A	300	ASN	CA-CB-CG	-12.72	99.88	112.60
1	A	16	GLU	CA-C-N	12.52	145.45	121.54
1	A	16	GLU	C-N-CA	12.52	145.45	121.54
1	A	152	VAL	CA-C-O	-12.47	106.08	120.67
1	A	140	PHE	CA-CB-CG	12.44	126.24	113.80
1	A	144	SER	N-CA-C	-12.27	96.55	110.91
1	A	220	ILE	N-CA-C	-12.14	96.81	110.05
1	A	82	THR	N-CA-C	12.12	127.26	111.75
1	A	350	LEU	N-CA-C	12.06	128.34	110.14
1	A	78	GLU	CB-CG-CD	11.97	132.95	112.60
1	A	357	GLU	N-CA-C	-11.92	98.74	113.28
1	A	117	SER	N-CA-CB	11.79	130.41	110.49
1	A	252	GLU	CA-CB-CG	11.77	137.63	114.10
1	A	340	PHE	CA-C-O	-11.61	107.82	120.36
1	A	266	PHE	CA-CB-CG	11.40	125.20	113.80
1	A	75	SER	CA-C-O	-11.33	108.63	121.10
1	A	130	PHE	CA-CB-CG	11.24	125.04	113.80
1	A	189	VAL	CA-C-N	11.24	139.40	122.65
1	A	189	VAL	C-N-CA	11.24	139.40	122.65
1	A	207	VAL	CA-C-N	11.12	138.53	120.30
1	A	207	VAL	C-N-CA	11.12	138.53	120.30
1	A	322	PHE	CA-CB-CG	11.12	124.92	113.80
1	A	267	GLU	CA-CB-CG	10.99	136.07	114.10
1	A	48	SER	CA-C-N	10.82	138.78	120.71
1	A	48	SER	C-N-CA	10.82	138.78	120.71
1	A	219	ILE	N-CA-CB	10.78	125.01	112.40
1	A	129	ARG	CB-CG-CD	10.64	135.76	111.30
1	A	37	ARG	NE-CZ-NH2	-10.59	109.67	119.20
1	A	54	SER	CA-C-O	-10.58	107.15	119.95
1	A	124	GLN	OE1-CD-NE2	-10.50	112.10	122.60
1	A	234	GLU	O-C-N	10.25	134.21	122.22
1	A	245	ASP	N-CA-C	10.17	121.95	111.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	27	GLU	CA-CB-CG	10.11	134.32	114.10
1	A	248	LYS	N-CA-CB	10.08	121.68	111.10
1	A	249	PRO	CA-C-O	-10.05	110.00	121.36
1	A	109	ASN	CB-CG-ND2	9.99	131.39	116.40
1	A	104	LYS	CA-C-O	-9.94	107.25	119.28
1	A	167	GLU	CB-CG-CD	9.91	129.44	112.60
1	A	54	SER	N-CA-C	9.84	125.20	112.41
1	A	28	VAL	CA-C-O	-9.81	108.78	120.75
1	A	80	VAL	N-CA-C	9.79	122.13	107.15
1	A	308	LEU	CA-C-O	-9.71	108.17	120.31
1	A	234	GLU	CA-C-O	-9.71	109.13	120.10
1	A	71	GLY	CA-C-N	9.69	136.47	123.11
1	A	71	GLY	C-N-CA	9.69	136.47	123.11
1	A	122	THR	CA-C-N	9.64	137.73	122.59
1	A	122	THR	C-N-CA	9.64	137.73	122.59
1	A	309	LEU	N-CA-C	9.61	122.95	111.33
1	A	143	THR	CB-CA-C	9.59	125.46	111.65
1	A	184	VAL	N-CA-C	9.59	127.49	113.39
1	A	28	VAL	N-CA-CB	-9.55	99.56	111.31
1	A	12	ALA	CA-C-O	-9.53	110.27	120.46
1	A	76	ILE	CB-CG1-CD1	9.48	133.71	113.80
1	A	141	LEU	N-CA-C	-9.40	90.78	110.80
1	A	116	LEU	O-C-N	9.39	131.75	122.07
1	A	263	ASP	N-CA-C	9.37	122.48	111.71
1	A	110	PHE	O-C-N	9.34	135.01	122.59
1	A	155	ILE	N-CA-C	-9.29	100.60	110.36
1	A	315	LYS	CA-C-N	9.26	139.97	122.56
1	A	315	LYS	C-N-CA	9.26	139.97	122.56
1	A	3	ALA	CB-CA-C	-9.26	100.90	114.87
1	A	372	LEU	CA-C-O	-9.21	111.26	121.58
1	A	89	VAL	N-CA-CB	-9.20	93.13	112.00
1	A	338	LYS	N-CA-CB	9.14	125.93	110.49
1	A	176	PHE	CA-C-O	-9.09	108.03	119.31
1	A	363	ARG	N-CA-C	9.09	120.79	111.07
1	A	81	THR	CA-C-N	9.03	133.57	120.38
1	A	81	THR	C-N-CA	9.03	133.57	120.38
1	A	78	GLU	N-CA-C	-8.98	96.04	110.32
1	A	142	GLY	CA-C-N	-8.95	111.79	122.44
1	A	142	GLY	C-N-CA	-8.95	111.79	122.44
1	A	282	CYS	CA-C-O	-8.94	111.29	121.40
1	A	311	GLY	N-CA-C	8.94	128.95	115.63
1	A	59	THR	CA-CB-OG1	-8.90	96.24	109.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	142	GLY	O-C-N	8.85	134.21	122.70
1	A	332	VAL	CA-C-O	8.83	132.81	121.15
1	A	208	ILE	N-CA-C	-8.77	100.12	111.09
1	A	96	GLN	N-CA-CB	8.74	125.26	110.49
1	A	145	THR	CB-CA-C	8.73	127.32	109.95
1	A	374	PHE	CA-CB-CG	8.73	122.53	113.80
1	A	120	ARG	NE-CZ-NH2	-8.71	111.36	119.20
1	A	302	SER	CA-C-N	-8.71	104.91	121.63
1	A	302	SER	C-N-CA	-8.71	104.91	121.63
1	A	19	LYS	CA-C-O	-8.69	111.52	119.86
1	A	355	ILE	N-CA-C	-8.68	101.77	110.62
1	A	239	GLU	N-CA-CB	-8.65	98.41	111.56
1	A	91	PRO	CB-CA-C	8.64	122.28	111.23
1	A	282	CYS	N-CA-CB	-8.63	96.68	111.69
1	A	59	THR	N-CA-CB	8.61	125.69	110.37
1	A	117	SER	CA-C-O	-8.58	108.24	120.51
1	A	295	PRO	O-C-N	8.56	131.57	121.46
1	A	16	GLU	CA-C-O	8.54	132.72	120.51
1	A	284	GLU	CB-CG-CD	8.52	127.08	112.60
1	A	141	LEU	CB-CA-C	8.48	127.30	110.42
1	A	161	ASP	N-CA-C	8.47	123.30	108.56
1	A	155	ILE	CB-CA-C	8.47	122.72	111.88
1	A	11	ALA	CA-C-O	-8.41	112.41	121.99
1	A	261	GLY	CA-C-N	8.39	132.94	120.69
1	A	261	GLY	C-N-CA	8.39	132.94	120.69
1	A	167	GLU	CA-C-N	8.35	139.43	121.64
1	A	167	GLU	C-N-CA	8.35	139.43	121.64
1	A	332	VAL	CA-C-N	8.34	134.46	121.19
1	A	332	VAL	C-N-CA	8.34	134.46	121.19
1	A	34	HIS	CA-C-O	-8.34	110.56	120.57
1	A	109	ASN	CA-CB-CG	-8.34	104.26	112.60
1	A	292	VAL	CA-C-O	8.32	131.18	120.78
1	A	89	VAL	CB-CA-C	8.31	125.44	110.48
1	A	194	THR	O-C-N	8.31	133.91	123.28
1	A	215	GLY	CA-C-N	-8.30	105.69	121.54
1	A	215	GLY	C-N-CA	-8.30	105.69	121.54
1	A	275	MET	CA-CB-CG	8.29	130.67	114.10
1	A	298	SER	N-CA-C	8.28	121.65	109.07
1	A	49	ASP	CA-C-N	8.25	131.69	120.38
1	A	49	ASP	C-N-CA	8.25	131.69	120.38
1	A	215	GLY	CA-C-O	-8.23	106.24	120.57
1	A	158	ALA	N-CA-C	8.22	121.81	108.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	138	HIS	CA-C-O	-8.21	112.29	121.89
1	A	182	SER	O-C-N	8.20	130.94	122.09
1	A	342	LEU	N-CA-C	8.19	124.28	113.30
1	A	325	LYS	N-CA-CB	8.17	121.92	110.07
1	A	330	LYS	CA-C-O	8.17	129.46	120.63
1	A	343	ASP	N-CA-CB	-8.14	102.66	110.39
1	A	124	GLN	CG-CD-NE2	8.14	128.61	116.40
1	A	323	LYS	CA-C-N	8.14	131.85	120.29
1	A	323	LYS	C-N-CA	8.14	131.85	120.29
1	A	18	LYS	O-C-N	8.12	132.61	122.86
1	A	239	GLU	CA-C-O	-8.11	112.18	121.10
1	A	194	THR	N-CA-C	-8.09	94.82	108.26
1	A	118	MET	O-C-N	8.09	128.97	121.04
1	A	269	ILE	O-C-N	8.06	129.15	121.98
1	A	139	HIS	N-CA-CB	8.05	122.93	110.46
1	A	152	VAL	N-CA-CB	-8.02	97.44	111.39
1	A	114	ASN	CA-CB-CG	-8.01	104.59	112.60
1	A	327	SER	N-CA-C	7.99	123.50	113.43
1	A	212	LYS	N-CA-C	-7.98	101.54	111.75
1	A	65	ALA	CA-C-N	7.97	137.04	121.41
1	A	65	ALA	C-N-CA	7.97	137.04	121.41
1	A	204	GLY	CA-C-O	-7.94	112.87	121.05
1	A	145	THR	CA-CB-CG2	7.94	124.00	110.50
1	A	290	VAL	O-C-N	7.94	131.24	123.14
1	A	125	ASP	CA-CB-CG	7.93	120.53	112.60
1	A	91	PRO	CA-C-O	-7.90	112.39	121.56
1	A	193	SER	CA-C-O	7.90	131.81	120.51
1	A	369	ARG	CA-C-O	7.89	129.83	120.99
1	A	166	LEU	CA-C-N	7.85	131.12	120.44
1	A	166	LEU	C-N-CA	7.85	131.12	120.44
1	A	6	VAL	N-CA-CB	-7.77	98.41	111.23
1	A	150	THR	CA-C-O	-7.75	112.83	121.51
1	A	128	SER	N-CA-C	7.74	121.57	108.02
1	A	354	LYS	CB-CA-C	7.74	125.82	110.42
1	A	80	VAL	CA-C-N	7.72	130.48	120.44
1	A	80	VAL	C-N-CA	7.72	130.48	120.44
1	A	164	SER	CA-C-O	-7.69	111.78	119.24
1	A	155	ILE	CA-CB-CG1	7.69	123.47	110.40
1	A	370	THR	CA-CB-OG1	-7.68	98.07	109.60
1	A	35	GLU	CA-CB-CG	7.63	129.36	114.10
1	A	208	ILE	CA-C-O	7.62	128.70	120.47
1	A	326	ASP	CA-C-O	-7.62	109.14	119.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	59	THR	O-C-N	7.59	130.05	121.32
1	A	106	PRO	CB-CA-C	7.59	122.70	111.62
1	A	107	GLU	CB-CA-C	-7.57	101.51	111.42
1	A	116	LEU	CA-C-O	-7.47	112.97	120.82
1	A	132	CYS	N-CA-CB	7.47	121.47	110.49
1	A	212	LYS	CA-C-N	-7.46	110.48	120.63
1	A	212	LYS	C-N-CA	-7.46	110.48	120.63
1	A	35	GLU	CA-C-O	-7.46	109.84	120.51
1	A	353	GLU	N-CA-CB	-7.46	98.01	110.39
1	A	16	GLU	CB-CA-C	7.45	125.25	110.42
1	A	160	ILE	CA-C-N	7.45	133.33	122.16
1	A	160	ILE	C-N-CA	7.45	133.33	122.16
1	A	301	LEU	N-CA-CB	7.45	123.08	110.49
1	A	368	ILE	O-C-N	7.44	129.60	121.94
1	A	30	PRO	N-CA-C	-7.42	101.64	110.70
1	A	168	LYS	CB-CA-C	-7.40	96.12	110.11
1	A	88	LYS	CA-C-N	-7.39	112.83	122.51
1	A	88	LYS	C-N-CA	-7.39	112.83	122.51
1	A	75	SER	CB-CA-C	7.39	122.84	110.43
1	A	343	ASP	CB-CA-C	7.36	125.13	113.57
1	A	240	CYS	N-CA-C	7.33	120.43	108.26
1	A	109	ASN	CB-CG-OD1	-7.33	106.15	120.80
1	A	113	LYS	CB-CA-C	-7.32	99.35	111.13
1	A	233	LYS	CB-CA-C	7.31	125.59	110.31
1	A	28	VAL	CB-CA-C	-7.31	101.97	111.25
1	A	179	GLY	N-CA-C	-7.30	95.87	113.18
1	A	222	VAL	CA-C-O	-7.30	112.46	120.71
1	A	65	ALA	CA-C-O	-7.28	113.65	121.88
1	A	149	TYR	CA-C-O	-7.28	111.59	120.54
1	A	337	ALA	CA-C-N	7.27	135.42	121.54
1	A	337	ALA	C-N-CA	7.27	135.42	121.54
1	A	259	ASN	O-C-N	7.25	132.24	122.59
1	A	269	ILE	N-CA-CB	-7.24	103.44	111.41
1	A	105	HIS	CA-CB-CG	7.23	121.03	113.80
1	A	39	LYS	CA-C-O	-7.20	113.06	120.54
1	A	279	LEU	CA-C-N	7.18	130.78	120.79
1	A	279	LEU	C-N-CA	7.18	130.78	120.79
1	A	63	VAL	CA-C-O	-7.18	113.79	121.19
1	A	194	THR	N-CA-CB	7.14	122.41	110.77
1	A	325	LYS	N-CA-C	-7.14	103.43	111.14
1	A	220	ILE	CA-C-O	-7.12	113.36	121.98
1	A	284	GLU	N-CA-C	7.12	123.19	113.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	279	LEU	N-CA-CB	7.10	120.84	110.26
1	A	300	ASN	CA-C-N	7.09	135.08	121.54
1	A	300	ASN	C-N-CA	7.09	135.08	121.54
1	A	238	THR	O-C-N	7.06	132.14	122.46
1	A	27	GLU	N-CA-CB	-7.06	99.04	110.69
1	A	87	ASP	CA-C-O	-7.06	112.87	120.92
1	A	108	GLY	O-C-N	7.05	131.86	122.70
1	A	216	ALA	CA-C-N	7.04	134.99	121.54
1	A	216	ALA	C-N-CA	7.04	134.99	121.54
1	A	107	GLU	O-C-N	7.03	131.35	123.40
1	A	348	HIS	N-CA-C	6.96	121.00	108.69
1	A	248	LYS	O-C-N	6.94	128.03	121.71
1	A	1	SER	O-C-N	6.94	134.10	123.00
1	A	267	GLU	CA-C-O	-6.94	113.32	120.54
1	A	342	LEU	N-CA-CB	-6.93	100.15	110.61
1	A	213	ALA	N-CA-C	-6.91	103.36	111.03
1	A	285	ALA	O-C-N	6.91	132.28	122.20
1	A	43	THR	CB-CA-C	-6.89	95.63	110.45
1	A	49	ASP	CA-CB-CG	6.89	119.49	112.60
1	A	45	ILE	O-C-N	6.84	130.63	122.62
1	A	26	VAL	N-CA-C	6.82	118.54	108.65
1	A	178	THR	N-CA-C	-6.82	103.86	112.93
1	A	43	THR	CA-CB-OG1	-6.81	99.39	109.60
1	A	304	ASN	O-C-N	6.80	129.15	121.32
1	A	72	ILE	CA-C-O	-6.80	113.65	120.31
1	A	110	PHE	CA-C-O	-6.79	110.80	120.51
1	A	308	LEU	CA-C-N	6.78	129.67	120.38
1	A	308	LEU	C-N-CA	6.78	129.67	120.38
1	A	363	ARG	NE-CZ-NH2	-6.78	113.10	119.20
1	A	161	ASP	CB-CA-C	-6.77	101.46	112.03
1	A	239	GLU	OE1-CD-OE2	6.77	139.14	122.90
1	A	162	ALA	CA-C-O	-6.76	110.84	120.51
1	A	299	GLN	N-CA-C	-6.75	100.53	110.52
1	A	364	SER	CA-C-O	-6.75	113.92	122.63
1	A	249	PRO	O-C-N	6.72	131.43	122.89
1	A	52	VAL	O-C-N	6.72	129.06	122.07
1	A	352	PHE	CA-CB-CG	6.70	120.50	113.80
1	A	284	GLU	CB-CA-C	-6.68	97.67	110.57
1	A	86	GLY	CA-C-N	6.66	130.21	120.82
1	A	86	GLY	C-N-CA	6.66	130.21	120.82
1	A	323	LYS	N-CA-C	-6.65	98.36	108.67
1	A	251	GLN	CB-CG-CD	-6.64	101.32	112.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	370	THR	O-C-N	6.64	131.60	123.44
1	A	63	VAL	CA-C-N	-6.63	114.08	122.37
1	A	63	VAL	C-N-CA	-6.63	114.08	122.37
1	A	187	ALA	N-CA-C	-6.62	103.72	112.72
1	A	317	ALA	N-CA-C	6.60	119.24	108.55
1	A	21	PHE	CA-C-N	-6.59	113.66	122.42
1	A	21	PHE	C-N-CA	-6.59	113.66	122.42
1	A	214	ALA	CA-C-N	-6.58	108.51	121.41
1	A	214	ALA	C-N-CA	-6.58	108.51	121.41
1	A	157	VAL	N-CA-C	6.57	117.27	108.27
1	A	286	TYR	O-C-N	-6.54	114.12	121.84
1	A	79	GLY	N-CA-C	-6.54	106.13	114.37
1	A	26	VAL	CA-C-O	6.54	128.04	121.64
1	A	37	ARG	CB-CA-C	6.54	120.83	109.65
1	A	246	TYR	CB-CA-C	-6.54	98.75	109.53
1	A	345	LEU	N-CA-C	-6.53	103.66	111.69
1	A	110	PHE	CA-CB-CG	6.51	120.31	113.80
1	A	113	LYS	N-CA-C	6.50	120.84	112.26
1	A	122	THR	CA-CB-OG1	-6.50	99.85	109.60
1	A	356	ASN	CA-C-O	-6.48	111.27	119.31
1	A	16	GLU	CA-CB-CG	-6.48	101.14	114.10
1	A	161	ASP	CA-C-O	-6.47	114.92	122.37
1	A	211	CYS	N-CA-C	-6.46	103.86	111.03
1	A	365	GLY	N-CA-C	6.42	128.41	113.18
1	A	182	SER	N-CA-C	-6.42	104.21	111.14
1	A	203	VAL	CA-C-O	-6.41	113.93	121.05
1	A	104	LYS	N-CA-C	-6.41	105.21	113.16
1	A	255	THR	CB-CA-C	6.41	122.48	110.63
1	A	48	SER	CA-C-O	6.38	127.14	119.61
1	A	293	GLY	O-C-N	6.38	130.11	123.48
1	A	23	ILE	CA-C-N	6.37	131.81	121.74
1	A	23	ILE	C-N-CA	6.37	131.81	121.74
1	A	50	ASP	CA-C-O	-6.35	113.77	120.63
1	A	119	PRO	CB-CA-C	6.34	122.01	111.56
1	A	158	ALA	CB-CA-C	-6.33	99.65	110.16
1	A	325	LYS	O-C-N	6.33	128.92	122.09
1	A	50	ASP	CB-CA-C	-6.32	99.94	110.68
1	A	336	MET	CA-C-O	6.31	127.11	120.42
1	A	264	PHE	CA-CB-CG	-6.31	107.49	113.80
1	A	184	VAL	N-CA-CB	-6.31	101.07	111.98
1	A	302	SER	CA-C-O	-6.30	113.18	120.49
1	A	140	PHE	O-C-N	6.30	131.44	123.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	321	GLY	CA-C-N	6.29	130.42	121.42
1	A	321	GLY	C-N-CA	6.29	130.42	121.42
1	A	229	PHE	N-CA-CB	6.29	119.57	110.20
1	A	296	PRO	O-C-N	6.29	131.12	122.38
1	A	164	SER	O-C-N	6.29	126.86	121.20
1	A	226	LYS	CA-C-O	-6.29	111.52	120.51
1	A	286	TYR	N-CA-C	6.28	123.86	113.50
1	A	197	VAL	N-CA-CB	6.27	120.34	111.82
1	A	60	PRO	N-CA-C	6.26	120.90	111.14
1	A	315	LYS	CB-CA-C	6.26	122.87	110.42
1	A	296	PRO	CB-CA-C	6.26	121.38	111.31
1	A	3	ALA	CA-C-N	6.25	133.66	121.41
1	A	3	ALA	C-N-CA	6.25	133.66	121.41
1	A	47	ARG	CA-C-O	6.24	127.04	119.31
1	A	357	GLU	CA-C-O	6.24	126.60	119.18
1	A	11	ALA	N-CA-C	-6.23	102.75	110.41
1	A	76	ILE	N-CA-CB	6.23	121.51	111.23
1	A	239	GLU	CB-CA-C	-6.22	99.97	110.43
1	A	194	THR	CB-CA-C	6.21	119.71	110.14
1	A	78	GLU	O-C-N	6.20	130.01	123.06
1	A	215	GLY	O-C-N	6.18	130.74	122.70
1	A	336	MET	CA-C-N	6.18	131.03	120.72
1	A	336	MET	C-N-CA	6.18	131.03	120.72
1	A	74	GLU	CB-CG-CD	6.17	123.09	112.60
1	A	363	ARG	CB-CG-CD	6.17	125.49	111.30
1	A	99	LYS	N-CA-CB	6.17	120.91	110.49
1	A	143	THR	CA-C-N	6.16	132.24	122.93
1	A	143	THR	C-N-CA	6.16	132.24	122.93
1	A	366	GLU	N-CA-C	6.15	123.91	110.80
1	A	82	THR	CA-C-O	-6.15	113.31	120.20
1	A	267	GLU	CB-CG-CD	6.15	123.06	112.60
1	A	318	ILE	CB-CG1-CD1	-6.14	100.91	113.80
1	A	283	GLN	CA-C-O	-6.12	113.48	120.58
1	A	318	ILE	CA-CB-CG2	6.12	120.90	110.50
1	A	269	ILE	N-CA-C	-6.12	106.30	111.56
1	A	78	GLU	CA-CB-CG	6.10	126.30	114.10
1	A	372	LEU	N-CA-CB	-6.10	101.47	110.49
1	A	254	LEU	CA-CB-CG	6.09	137.62	116.30
1	A	280	SER	CA-C-O	-6.07	114.39	121.07
1	A	45	ILE	CB-CA-C	-6.07	104.05	111.88
1	A	159	LYS	N-CA-C	6.04	118.30	108.63
1	A	246	TYR	N-CA-C	6.04	120.11	109.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	100	CYS	O-C-N	-6.04	114.56	122.59
1	A	138	HIS	CB-CA-C	-6.03	99.11	110.51
1	A	79	GLY	CA-C-N	-6.03	114.94	122.48
1	A	79	GLY	C-N-CA	-6.03	114.94	122.48
1	A	176	PHE	N-CA-C	6.03	120.36	112.89
1	A	216	ALA	N-CA-CB	-6.02	100.31	110.49
1	A	108	GLY	N-CA-C	-6.02	98.91	113.18
1	A	309	LEU	CA-C-O	-6.02	114.13	120.63
1	A	315	LYS	N-CA-CB	-6.01	100.34	110.49
1	A	263	ASP	O-C-N	6.00	129.24	122.22
1	A	301	LEU	O-C-N	5.99	130.56	122.59
1	A	296	PRO	N-CA-C	-5.99	105.86	114.18
1	A	259	ASN	N-CA-C	-5.99	98.05	110.80
1	A	127	THR	N-CA-CB	-5.98	100.31	111.13
1	A	81	THR	CA-CB-OG1	-5.96	100.66	109.60
1	A	117	SER	O-C-N	5.96	130.52	122.59
1	A	215	GLY	N-CA-C	-5.95	99.08	113.18
1	A	264	PHE	CB-CA-C	-5.95	99.68	109.80
1	A	72	ILE	CB-CG1-CD1	5.95	126.29	113.80
1	A	290	VAL	CA-C-O	-5.95	113.94	120.72
1	A	262	VAL	N-CA-C	-5.94	101.52	109.30
1	A	42	ALA	N-CA-C	5.94	118.14	108.76
1	A	239	GLU	N-CA-C	5.93	117.55	108.42
1	A	324	SER	CA-CB-OG	-5.93	99.25	111.10
1	A	153	ASP	N-CA-CB	5.91	120.48	110.49
1	A	170	CYS	CA-C-N	5.90	128.50	120.54
1	A	170	CYS	C-N-CA	5.90	128.50	120.54
1	A	101	ARG	CA-C-O	-5.89	112.08	120.51
1	A	326	ASP	CA-CB-CG	5.89	118.49	112.60
1	A	150	THR	CA-CB-OG1	-5.86	100.81	109.60
1	A	148	GLN	CB-CG-CD	-5.86	102.64	112.60
1	A	107	GLU	N-CA-C	-5.85	97.46	107.23
1	A	102	VAL	N-CA-C	5.85	121.50	109.34
1	A	212	LYS	CB-CG-CD	-5.84	97.87	111.30
1	A	332	VAL	CB-CA-C	-5.83	104.24	111.94
1	A	212	LYS	CA-CB-CG	5.83	125.76	114.10
1	A	16	GLU	O-C-N	-5.82	114.84	122.59
1	A	306	MET	CA-CB-CG	-5.82	102.46	114.10
1	A	42	ALA	CB-CA-C	-5.79	99.56	110.16
1	A	141	LEU	CA-C-O	-5.78	112.24	120.51
1	A	9	CYS	N-CA-C	5.78	123.11	110.80
1	A	221	GLY	CA-C-N	-5.78	114.91	122.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	221	GLY	C-N-CA	-5.78	114.91	122.37
1	A	8	LYS	O-C-N	5.77	130.26	122.59
1	A	291	ILE	CB-CG1-CD1	5.75	125.88	113.80
1	A	14	LEU	N-CA-CB	5.75	122.65	110.29
1	A	223	ASP	CB-CA-C	5.74	119.56	109.80
1	A	289	SER	N-CA-CB	5.74	120.73	110.80
1	A	193	SER	N-CA-C	5.73	123.00	110.80
1	A	120	ARG	N-CA-CB	-5.73	102.98	110.88
1	A	185	LYS	N-CA-C	-5.72	106.17	114.12
1	A	190	THR	N-CA-C	5.72	119.14	109.76
1	A	43	THR	OG1-CB-CG2	5.70	120.69	109.30
1	A	48	SER	CA-CB-OG	-5.69	99.72	111.10
1	A	2	THR	O-C-N	-5.69	116.26	122.92
1	A	9	CYS	O-C-N	5.69	130.16	122.59
1	A	365	GLY	CA-C-N	5.69	132.40	121.54
1	A	365	GLY	C-N-CA	5.69	132.40	121.54
1	A	150	THR	CA-CB-CG2	5.68	120.16	110.50
1	A	340	PHE	CA-CB-CG	5.68	119.48	113.80
1	A	169	VAL	CA-C-O	-5.67	113.69	120.78
1	A	323	LYS	CG-CD-CE	5.67	124.34	111.30
1	A	373	THR	O-C-N	5.66	129.69	123.01
1	A	157	VAL	CA-C-N	5.66	130.97	123.00
1	A	157	VAL	C-N-CA	5.66	130.97	123.00
1	A	124	GLN	CA-CB-CG	5.64	125.38	114.10
1	A	144	SER	CB-CA-C	5.64	122.14	112.27
1	A	234	GLU	CG-CD-OE2	-5.63	105.45	118.40
1	A	271	ARG	CD-NE-CZ	-5.63	116.52	124.40
1	A	303	MET	O-C-N	5.62	129.78	123.48
1	A	169	VAL	CA-CB-CG1	5.59	119.91	110.40
1	A	271	ARG	CG-CD-NE	-5.59	99.70	112.00
1	A	110	PHE	N-CA-C	-5.59	98.89	110.80
1	A	279	LEU	O-C-N	5.59	130.50	122.28
1	A	28	VAL	N-CA-C	5.58	116.44	107.73
1	A	171	LEU	CA-C-O	-5.58	114.93	120.90
1	A	21	PHE	N-CA-C	5.58	118.62	109.76
1	A	90	ILE	CA-CB-CG1	5.57	119.87	110.40
1	A	59	THR	CA-C-O	-5.56	112.54	120.16
1	A	340	PHE	N-CA-C	5.56	117.96	108.90
1	A	302	SER	O-C-N	5.56	129.86	123.02
1	A	30	PRO	CB-CA-C	-5.56	104.14	110.92
1	A	368	ILE	CB-CG1-CD1	-5.54	102.16	113.80
1	A	194	THR	CA-CB-CG2	5.54	119.92	110.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	349	VAL	CA-C-O	5.54	126.57	120.48
1	A	22	SER	CA-C-O	-5.53	114.66	120.58
1	A	63	VAL	N-CA-CB	-5.53	101.12	111.62
1	A	30	PRO	CA-C-N	5.52	126.75	119.84
1	A	30	PRO	C-N-CA	5.52	126.75	119.84
1	A	339	LYS	CA-C-N	-5.52	115.20	122.99
1	A	339	LYS	C-N-CA	-5.52	115.20	122.99
1	A	57	LEU	CA-C-O	-5.51	114.69	120.58
1	A	281	CYS	CA-CB-SG	5.51	127.06	114.40
1	A	351	PRO	CA-C-N	5.48	132.01	121.54
1	A	351	PRO	C-N-CA	5.48	132.01	121.54
1	A	114	ASN	OD1-CG-ND2	5.47	128.07	122.60
1	A	232	ALA	O-C-N	5.47	127.72	122.03
1	A	295	PRO	CA-CB-CG	-5.46	94.12	104.50
1	A	27	GLU	CA-C-O	5.46	127.44	120.57
1	A	142	GLY	N-CA-C	-5.45	100.26	113.18
1	A	58	VAL	CA-C-O	-5.45	115.40	121.23
1	A	234	GLU	N-CA-CB	5.45	118.61	110.22
1	A	122	THR	OG1-CB-CG2	5.44	120.19	109.30
1	A	202	GLY	CA-C-O	-5.43	111.12	120.57
1	A	149	TYR	CA-C-N	-5.42	113.69	122.36
1	A	149	TYR	C-N-CA	-5.42	113.69	122.36
1	A	193	SER	N-CA-CB	-5.42	101.33	110.49
1	A	124	GLN	CB-CG-CD	5.41	121.80	112.60
1	A	177	SER	N-CA-C	-5.41	105.99	112.59
1	A	123	MET	CA-C-O	-5.41	115.12	121.44
1	A	146	PHE	CA-CB-CG	5.41	119.21	113.80
1	A	120	ARG	CB-CG-CD	-5.40	98.87	111.30
1	A	235	VAL	O-C-N	5.40	127.72	122.05
1	A	47	ARG	NE-CZ-NH2	5.40	124.06	119.20
1	A	218	ARG	NE-CZ-NH2	5.38	124.04	119.20
1	A	361	LEU	CB-CA-C	5.38	121.12	110.42
1	A	252	GLU	CA-C-O	-5.36	112.17	120.16
1	A	191	GLN	OE1-CD-NE2	5.35	127.95	122.60
1	A	266	PHE	CA-C-O	5.35	126.67	120.14
1	A	74	GLU	N-CA-CB	5.33	119.49	110.49
1	A	112	LEU	CA-CB-CG	5.33	134.94	116.30
1	A	283	GLN	N-CA-CB	-5.31	101.53	109.71
1	A	64	ILE	N-CA-CB	5.31	117.05	111.00
1	A	156	SER	N-CA-C	5.30	120.42	113.20
1	A	294	VAL	CA-C-N	5.30	125.84	120.38
1	A	294	VAL	C-N-CA	5.30	125.84	120.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	99	LYS	CB-CA-C	-5.30	99.87	110.42
1	A	365	GLY	O-C-N	-5.28	115.84	122.70
1	A	333	ALA	O-C-N	5.27	128.58	122.20
1	A	320	GLY	N-CA-C	5.27	125.67	113.18
1	A	271	ARG	NE-CZ-NH1	-5.26	116.24	121.50
1	A	346	ILE	CA-C-N	-5.26	111.94	121.14
1	A	346	ILE	C-N-CA	-5.26	111.94	121.14
1	A	228	LYS	CA-C-O	-5.25	113.00	120.51
1	A	373	THR	N-CA-CB	5.25	117.99	110.06
1	A	348	HIS	CA-CB-CG	-5.25	108.55	113.80
1	A	26	VAL	O-C-N	5.23	128.75	122.95
1	A	115	ASP	CA-CB-CG	-5.22	107.38	112.60
1	A	137	ILE	CA-C-O	-5.22	115.17	121.54
1	A	114	ASN	CB-CG-ND2	-5.22	108.57	116.40
1	A	14	LEU	CA-C-O	5.22	128.05	121.58
1	A	304	ASN	N-CA-C	5.22	121.34	109.81
1	A	275	MET	CB-CA-C	5.21	119.96	110.11
1	A	341	ALA	N-CA-C	5.21	118.23	110.52
1	A	261	GLY	N-CA-C	5.21	125.52	113.18
1	A	276	VAL	N-CA-C	-5.21	105.33	111.00
1	A	25	GLU	O-C-N	5.20	129.71	123.36
1	A	8	LYS	CA-C-N	5.20	131.47	121.54
1	A	8	LYS	C-N-CA	5.20	131.47	121.54
1	A	78	GLU	CA-C-N	-5.19	116.08	123.08
1	A	78	GLU	C-N-CA	-5.19	116.08	123.08
1	A	268	VAL	N-CA-CB	5.19	119.79	111.23
1	A	128	SER	CA-C-O	5.18	125.84	120.40
1	A	252	GLU	CB-CG-CD	5.17	121.40	112.60
1	A	312	ARG	CD-NE-CZ	-5.17	117.16	124.40
1	A	328	VAL	CA-CB-CG2	5.17	119.20	110.40
1	A	272	LEU	CB-CA-C	5.17	121.23	110.32
1	A	345	LEU	N-CA-CB	5.17	117.91	110.20
1	A	300	ASN	CA-C-O	5.17	127.90	120.51
1	A	32	LYS	CA-CB-CG	-5.16	103.77	114.10
1	A	242	ASN	CA-CB-CG	5.16	117.75	112.60
1	A	355	ILE	O-C-N	5.15	126.86	121.87
1	A	366	GLU	CA-C-O	-5.14	113.16	120.51
1	A	277	THR	CA-CB-OG1	-5.13	101.91	109.60
1	A	271	ARG	CA-C-O	-5.13	115.02	120.92
1	A	43	THR	O-C-N	5.13	129.09	123.25
1	A	202	GLY	O-C-N	5.13	129.37	122.70
1	A	334	ASP	CB-CG-OD1	5.12	130.18	118.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	122	THR	N-CA-CB	5.12	119.14	110.49
1	A	265	SER	CA-C-O	-5.12	115.72	121.40
1	A	101	ARG	NE-CZ-NH2	5.11	123.80	119.20
1	A	233	LYS	N-CA-C	-5.11	106.30	112.54
1	A	43	THR	CA-CB-CG2	5.10	119.17	110.50
1	A	238	THR	N-CA-CB	5.10	118.40	110.44
1	A	350	LEU	CA-C-O	5.10	126.16	120.04
1	A	13	VAL	CA-C-N	5.09	130.86	123.12
1	A	13	VAL	C-N-CA	5.09	130.86	123.12
1	A	354	LYS	N-CA-CB	-5.09	101.89	110.49
1	A	324	SER	CA-C-O	-5.09	115.03	120.42
1	A	167	GLU	CB-CA-C	-5.09	102.86	110.90
1	A	117	SER	CA-C-N	-5.08	115.98	123.30
1	A	117	SER	C-N-CA	-5.08	115.98	123.30
1	A	274	THR	CA-CB-OG1	-5.08	101.97	109.60
1	A	88	LYS	N-CA-CB	5.08	118.00	110.29
1	A	312	ARG	N-CA-CB	-5.08	102.58	110.04
1	A	271	ARG	NE-CZ-NH2	5.07	123.76	119.20
1	A	106	PRO	CA-C-N	5.06	129.51	121.72
1	A	106	PRO	C-N-CA	5.06	129.51	121.72
1	A	280	SER	CA-CB-OG	5.06	121.22	111.10
1	A	243	PRO	CA-C-N	5.05	129.27	120.68
1	A	243	PRO	C-N-CA	5.05	129.27	120.68
1	A	117	SER	N-CA-C	-5.05	100.05	110.80
1	A	70	ALA	CA-C-N	5.04	127.50	122.30
1	A	70	ALA	C-N-CA	5.04	127.50	122.30
1	A	107	GLU	CA-CB-CG	5.04	124.18	114.10
1	A	318	ILE	O-C-N	5.04	128.62	123.03
1	A	89	VAL	CA-CB-CG1	5.04	118.96	110.40
1	A	80	VAL	CA-CB-CG2	5.03	118.95	110.40
1	A	346	ILE	N-CA-CB	5.03	119.53	111.23
1	A	353	GLU	CB-CG-CD	-5.02	104.06	112.60
1	A	127	THR	CA-CB-OG1	-5.02	102.06	109.60
1	A	46	CYS	N-CA-C	-5.02	102.34	110.32
1	A	13	VAL	CA-C-O	5.01	127.39	121.02
1	A	267	GLU	CG-CD-OE2	-5.01	106.88	118.40
1	A	354	LYS	N-CA-C	-5.01	100.13	110.80
1	A	200	LEU	CB-CA-C	5.01	120.02	111.46
1	A	294	VAL	O-C-N	5.01	126.81	121.10

There are no chirality outliers.

All (4) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	129	ARG	Sidechain
1	A	271	ARG	Sidechain
1	A	363	ARG	Sidechain
1	A	37	ARG	Sidechain

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	2784	0	2799	627	730
2	A	2	0	0	0	1
3	A	184	0	92	9	145
All	All	2970	0	2891	628	734

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 108.

All (628) 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:96:GLN:N	1:A:96:GLN:CA	1.70	1.55
1:A:45:ILE:HD12	1:A:359:PHE:CE1	1.69	1.27
1:A:15:TRP:C	1:A:16:GLU:HG3	1.66	1.18
1:A:15:TRP:O	1:A:16:GLU:HG3	1.45	1.16
1:A:5:LYS:O	1:A:6:VAL:O	1.62	1.14
1:A:14:LEU:HB2	1:A:21:PHE:HE2	1.08	1.13
1:A:347:THR:HG21	1:A:368:ILE:H	1.11	1.12
1:A:110:PHE:HE1	1:A:116:LEU:HD13	1.06	1.12
1:A:76:ILE:HG13	1:A:80:VAL:HG22	1.27	1.12
1:A:19:LYS:HD3	3:A:381:NTN:NI1	1.51	1.11
1:A:194:THR:HG22	1:A:262:VAL:HG12	1.23	1.11
1:A:125:ASP:OD1	1:A:127:THR:HB	1.49	1.11
1:A:101:ARG:HG2	1:A:101:ARG:HH11	1.08	1.10
1:A:218:ARG:HG3	1:A:218:ARG:HH11	0.97	1.10
1:A:272:LEU:HD22	1:A:301:LEU:HB3	1.15	1.10
1:A:11:ALA:HB2	1:A:147:SER:HB2	1.35	1.08
1:A:224:ILE:HA	1:A:242:ASN:ND2	1.70	1.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:229:PHE:O	1:A:232:ALA:HB3	1.54	1.07
1:A:113:LYS:O	1:A:113:LYS:HG3	1.52	1.05
1:A:194:THR:CG2	1:A:262:VAL:HG12	1.87	1.03
1:A:194:THR:O	1:A:263:ASP:HB2	1.56	1.03
1:A:110:PHE:CE1	1:A:116:LEU:HD13	1.93	1.02
1:A:11:ALA:CB	1:A:147:SER:HB2	1.89	1.02
1:A:60:PRO:C	1:A:61:LEU:HD23	1.85	1.01
1:A:121:GLY:O	1:A:139:HIS:N	1.93	1.01
1:A:90:ILE:HG12	1:A:160:ILE:HG21	1.41	1.01
1:A:304:ASN:O	1:A:307:LEU:HD12	1.61	1.01
1:A:45:ILE:HD12	1:A:359:PHE:HE1	1.09	1.00
1:A:26:VAL:HG12	1:A:131:THR:O	1.61	1.00
1:A:200:LEU:HD11	1:A:208:ILE:HD11	1.44	0.99
1:A:224:ILE:HA	1:A:242:ASN:HD22	1.20	0.99
1:A:272:LEU:HD11	1:A:299:GLN:O	1.63	0.99
1:A:334:ASP:HB3	1:A:339:LYS:HD2	1.45	0.99
1:A:233:LYS:HA	1:A:237:ALA:HB3	1.43	0.98
1:A:205:LEU:O	1:A:209:MET:HB2	1.63	0.98
1:A:132:CYS:C	1:A:134:GLY:H	1.69	0.98
1:A:15:TRP:C	1:A:16:GLU:CG	2.37	0.98
1:A:14:LEU:HB2	1:A:21:PHE:CE2	1.98	0.98
1:A:30:PRO:HA	1:A:37:ARG:NH1	1.78	0.98
1:A:269:ILE:HG23	1:A:271:ARG:HG3	1.46	0.97
1:A:269:ILE:CG2	1:A:271:ARG:HG3	1.94	0.97
1:A:272:LEU:CD2	1:A:301:LEU:HB3	1.95	0.97
1:A:110:PHE:HE1	1:A:116:LEU:CD1	1.77	0.97
1:A:15:TRP:O	1:A:16:GLU:CG	2.13	0.96
1:A:187:ALA:O	1:A:189:VAL:N	1.97	0.96
1:A:269:ILE:HG22	1:A:271:ARG:H	1.28	0.96
1:A:69:ALA:HB3	1:A:145:THR:CG2	1.95	0.96
1:A:129:ARG:HG3	1:A:129:ARG:HH11	1.25	0.96
1:A:64:ILE:HD12	1:A:130:PHE:CE1	2.00	0.96
1:A:346:ILE:HD12	1:A:371:ILE:HD13	1.47	0.95
1:A:218:ARG:NH2	1:A:239:GLU:OE2	1.99	0.95
1:A:355:ILE:HG12	1:A:372:LEU:HD21	1.43	0.95
1:A:288:VAL:HG23	1:A:313:THR:HB	1.49	0.95
1:A:218:ARG:HH11	1:A:218:ARG:CG	1.80	0.94
1:A:218:ARG:HG3	1:A:218:ARG:NH1	1.68	0.94
1:A:346:ILE:HD12	1:A:371:ILE:CD1	1.97	0.94
1:A:200:LEU:HB2	1:A:223:ASP:HB2	1.51	0.93
1:A:73:VAL:HG23	1:A:87:ASP:O	1.67	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3:ALA:HB1	1:A:5:LYS:H	1.33	0.92
1:A:45:ILE:HD12	1:A:359:PHE:CD1	2.06	0.91
1:A:101:ARG:HG2	1:A:101:ARG:NH1	1.82	0.91
1:A:90:ILE:CG1	1:A:160:ILE:HG21	2.00	0.91
1:A:272:LEU:HD21	1:A:300:ASN:O	1.71	0.91
1:A:52:VAL:CG1	1:A:59:THR:HG22	2.01	0.90
1:A:101:ARG:HH11	1:A:101:ARG:CG	1.83	0.90
1:A:82:THR:HG22	1:A:83:VAL:HG22	1.51	0.89
1:A:271:ARG:O	1:A:275:MET:HE3	1.72	0.89
1:A:200:LEU:O	1:A:228:LYS:CG	2.21	0.89
1:A:347:THR:HG21	1:A:368:ILE:N	1.85	0.88
1:A:358:GLY:O	1:A:361:LEU:HD12	1.72	0.88
1:A:200:LEU:O	1:A:228:LYS:HG2	1.73	0.88
1:A:265:SER:OG	1:A:289:SER:OG	1.69	0.88
1:A:95:PRO:HB3	1:A:155:ILE:HD13	1.54	0.88
1:A:346:ILE:HG23	1:A:371:ILE:HD13	1.54	0.87
1:A:88:LYS:O	1:A:89:VAL:HG23	1.72	0.87
1:A:51:HIS:CE1	1:A:296:PRO:HD3	2.09	0.87
1:A:69:ALA:HB3	1:A:145:THR:HG22	1.57	0.87
1:A:231:LYS:O	1:A:235:VAL:HG13	1.76	0.86
1:A:100:CYS:O	1:A:101:ARG:C	2.14	0.86
1:A:198:PHE:CE1	1:A:222:VAL:HG21	2.10	0.86
1:A:334:ASP:CB	1:A:339:LYS:HD2	2.04	0.86
1:A:74:GLU:OE2	1:A:75:SER:HB2	1.76	0.85
1:A:110:PHE:CE1	1:A:116:LEU:CD1	2.57	0.85
1:A:38:ILE:HD11	1:A:152:VAL:HG21	1.58	0.85
1:A:42:ALA:O	1:A:69:ALA:HB1	1.77	0.85
1:A:284:GLU:O	1:A:310:SER:HB2	1.75	0.85
1:A:194:THR:HG22	1:A:262:VAL:CG1	2.06	0.85
1:A:43:THR:CG2	1:A:69:ALA:HB2	2.06	0.85
1:A:132:CYS:O	1:A:134:GLY:N	2.10	0.85
1:A:137:ILE:HD13	1:A:137:ILE:N	1.91	0.85
1:A:113:LYS:O	1:A:113:LYS:CG	2.20	0.84
1:A:196:ALA:HB2	1:A:262:VAL:HG21	1.60	0.83
1:A:129:ARG:CD	1:A:151:VAL:HG11	2.09	0.83
1:A:283:GLN:HE22	1:A:285:ALA:CB	1.91	0.83
1:A:348:HIS:ND1	1:A:361:LEU:HD22	1.94	0.83
1:A:99:LYS:HG3	1:A:104:LYS:HE3	1.61	0.83
1:A:217:ALA:O	1:A:238:THR:HG21	1.80	0.82
1:A:49:ASP:O	1:A:52:VAL:HG23	1.78	0.82
1:A:90:ILE:HG12	1:A:160:ILE:CG2	2.10	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:21:PHE:HB2	1:A:356:ASN:HD21	1.44	0.81
1:A:333:ALA:O	1:A:337:ALA:N	2.13	0.81
1:A:35:GLU:O	1:A:36:VAL:HG23	1.80	0.81
1:A:348:HIS:O	1:A:370:THR:OG1	1.98	0.81
1:A:45:ILE:CD1	1:A:359:PHE:HE1	1.93	0.81
1:A:197:VAL:HG21	1:A:208:ILE:HG12	1.62	0.81
1:A:332:VAL:O	1:A:335:PHE:HB3	1.80	0.81
1:A:283:GLN:NE2	1:A:285:ALA:HB3	1.96	0.81
1:A:204:GLY:O	1:A:207:VAL:HG12	1.81	0.80
1:A:84:ARG:O	1:A:87:ASP:HB2	1.80	0.80
1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLN:CA	2.54	0.80
1:A:35:GLU:OE1	1:A:129:ARG:NE	2.14	0.80
1:A:71:GLY:O	1:A:166:LEU:HD11	1.81	0.80
1:A:283:GLN:HE22	1:A:285:ALA:HB3	1.46	0.80
1:A:76:ILE:HG13	1:A:80:VAL:CG2	2.09	0.80
1:A:129:ARG:HD3	1:A:151:VAL:HG11	1.64	0.80
1:A:194:THR:OG1	1:A:218:ARG:HB3	1.82	0.80
1:A:176:PHE:CD1	1:A:176:PHE:C	2.59	0.80
1:A:176:PHE:CD1	1:A:176:PHE:O	2.36	0.79
1:A:51:HIS:ND1	1:A:296:PRO:CD	2.46	0.79
1:A:269:ILE:HG22	1:A:271:ARG:N	1.97	0.79
1:A:256:GLU:O	1:A:259:ASN:N	2.16	0.79
1:A:340:PHE:O	1:A:340:PHE:CD2	2.36	0.79
1:A:171:LEU:HD22	1:A:346:ILE:HD11	1.65	0.78
1:A:233:LYS:CA	1:A:237:ALA:HB3	2.13	0.78
1:A:69:ALA:CB	1:A:145:THR:HG22	2.11	0.78
1:A:369:ARG:HB2	1:A:369:ARG:HH11	1.46	0.78
1:A:161:ASP:O	1:A:163:ALA:N	2.17	0.77
1:A:11:ALA:HA	1:A:147:SER:HA	1.65	0.77
1:A:64:ILE:HD11	1:A:130:PHE:CD1	2.20	0.77
1:A:111:CYS:C	1:A:113:LYS:H	1.93	0.77
1:A:171:LEU:HD11	1:A:369:ARG:HG2	1.65	0.77
1:A:229:PHE:HD1	1:A:240:CYS:HG	1.31	0.77
1:A:85:PRO:C	1:A:87:ASP:H	1.94	0.76
1:A:132:CYS:C	1:A:134:GLY:N	2.38	0.76
1:A:348:HIS:CE1	1:A:367:SER:HB3	2.20	0.76
1:A:129:ARG:HG3	1:A:129:ARG:NH1	1.95	0.76
1:A:304:ASN:ND2	1:A:305:PRO:HD2	1.99	0.76
1:A:355:ILE:CG1	1:A:372:LEU:HD21	2.16	0.75
1:A:279:LEU:HD11	1:A:308:LEU:HD23	1.68	0.75
1:A:51:HIS:ND1	1:A:296:PRO:HD3	2.00	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:218:ARG:CZ	1:A:239:GLU:OE2	2.34	0.75
1:A:64:ILE:CD1	1:A:130:PHE:CE1	2.70	0.74
1:A:43:THR:HG22	1:A:69:ALA:HB2	1.68	0.74
1:A:74:GLU:HG2	1:A:149:TYR:HE1	1.52	0.74
1:A:349:VAL:HG13	1:A:371:ILE:HG22	1.69	0.74
1:A:64:ILE:CD1	1:A:130:PHE:CD1	2.71	0.73
1:A:122:THR:HG21	1:A:126:GLY:HA2	1.69	0.73
1:A:274:THR:HA	1:A:277:THR:HB	1.68	0.73
1:A:224:ILE:CA	1:A:242:ASN:ND2	2.50	0.73
1:A:229:PHE:O	1:A:232:ALA:CB	2.36	0.73
1:A:95:PRO:HB3	1:A:155:ILE:CD1	2.17	0.72
1:A:304:ASN:HD22	1:A:305:PRO:HD2	1.53	0.72
1:A:212:LYS:HE3	1:A:236:GLY:HA2	1.70	0.72
1:A:16:GLU:O	1:A:19:LYS:HG3	1.89	0.72
1:A:61:LEU:HD23	1:A:61:LEU:N	1.98	0.72
1:A:110:PHE:CD1	1:A:318:ILE:HG21	2.24	0.72
1:A:349:VAL:HG13	1:A:371:ILE:CG2	2.20	0.72
1:A:19:LYS:CD	3:A:381:NTN:NI1	2.37	0.72
1:A:204:GLY:CA	1:A:268:VAL:HG21	2.19	0.72
1:A:267:GLU:OE2	1:A:275:MET:HG3	1.90	0.72
1:A:369:ARG:HB2	1:A:369:ARG:NH1	2.04	0.72
1:A:96:GLN:N	1:A:96:GLN:C	2.47	0.71
1:A:21:PHE:HB2	1:A:356:ASN:ND2	2.04	0.71
1:A:369:ARG:HH11	1:A:369:ARG:CB	2.03	0.71
1:A:52:VAL:HG11	1:A:59:THR:HG22	1.73	0.71
1:A:15:TRP:O	1:A:16:GLU:CB	2.37	0.71
1:A:171:LEU:CD2	1:A:346:ILE:HD11	2.21	0.71
1:A:140:PHE:CE2	1:A:141:LEU:HD22	2.26	0.70
1:A:272:LEU:CD1	1:A:299:GLN:O	2.39	0.70
1:A:45:ILE:HG23	1:A:359:PHE:CE1	2.26	0.70
1:A:229:PHE:CD1	1:A:240:CYS:SG	2.85	0.70
1:A:248:LYS:HB3	1:A:249:PRO:HD2	1.73	0.70
1:A:154:GLU:HA	1:A:157:VAL:HG12	1.74	0.69
1:A:132:CYS:N	1:A:135:LYS:O	2.24	0.69
1:A:225:ASN:O	1:A:227:ASP:N	2.25	0.69
1:A:264:PHE:HD2	1:A:288:VAL:HG12	1.57	0.69
1:A:3:ALA:CB	1:A:5:LYS:HD2	2.22	0.69
1:A:30:PRO:CA	1:A:37:ARG:NH1	2.55	0.69
1:A:52:VAL:HG11	1:A:59:THR:CG2	2.22	0.69
1:A:182:SER:HA	1:A:186:VAL:CG2	2.23	0.69
1:A:82:THR:HG23	1:A:82:THR:O	1.93	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:365:GLY:O	1:A:367:SER:N	2.26	0.69
1:A:347:THR:HG22	1:A:369:ARG:H	1.55	0.69
1:A:67:HIS:HA	1:A:143:THR:OG1	1.93	0.69
1:A:243:PRO:HG3	1:A:250:ILE:HD13	1.75	0.69
1:A:273:ASP:OD1	1:A:273:ASP:N	2.26	0.69
1:A:319:PHE:O	1:A:321:GLY:N	2.25	0.68
1:A:56:THR:HB	1:A:297:ASP:HB3	1.75	0.68
1:A:13:VAL:N	1:A:22:SER:O	2.27	0.68
1:A:264:PHE:CD2	1:A:288:VAL:HG12	2.29	0.68
1:A:347:THR:CG2	1:A:368:ILE:H	1.99	0.68
1:A:171:LEU:C	1:A:173:GLY:H	2.00	0.68
1:A:255:THR:O	1:A:260:GLY:N	2.25	0.68
1:A:272:LEU:HD22	1:A:301:LEU:CB	2.09	0.68
1:A:176:PHE:O	1:A:176:PHE:CG	2.47	0.67
1:A:129:ARG:HD2	1:A:151:VAL:HG11	1.77	0.67
1:A:328:VAL:N	1:A:329:PRO:CD	2.58	0.67
1:A:218:ARG:NH2	1:A:239:GLU:CD	2.53	0.66
1:A:105:HIS:HD2	1:A:107:GLU:H	1.44	0.66
1:A:304:ASN:HD22	1:A:305:PRO:CD	2.07	0.66
1:A:83:VAL:HG12	1:A:87:ASP:OD2	1.94	0.66
1:A:346:ILE:HD12	1:A:371:ILE:HD11	1.77	0.66
1:A:30:PRO:O	1:A:30:PRO:HG2	1.93	0.66
1:A:252:GLU:C	1:A:254:LEU:H	2.02	0.66
1:A:279:LEU:HD11	1:A:308:LEU:CD2	2.24	0.66
1:A:347:THR:CG2	1:A:368:ILE:N	2.57	0.66
1:A:113:LYS:HG2	1:A:155:ILE:CD1	2.26	0.66
1:A:204:GLY:HA3	1:A:268:VAL:HG21	1.78	0.65
1:A:330:LYS:O	1:A:333:ALA:HB3	1.95	0.65
1:A:69:ALA:O	1:A:91:PRO:HD2	1.96	0.65
1:A:204:GLY:HA2	1:A:207:VAL:HG12	1.77	0.65
1:A:277:THR:O	1:A:277:THR:CG2	2.43	0.65
1:A:174:CYS:O	1:A:178:THR:HB	1.95	0.65
1:A:243:PRO:HG3	1:A:250:ILE:CD1	2.26	0.65
1:A:82:THR:O	1:A:82:THR:CG2	2.40	0.65
1:A:182:SER:HA	1:A:186:VAL:HG23	1.79	0.65
1:A:219:ILE:HD13	1:A:236:GLY:O	1.97	0.65
1:A:179:GLY:CA	1:A:203:VAL:HG13	2.26	0.65
1:A:288:VAL:HG23	1:A:313:THR:CB	2.27	0.64
1:A:323:LYS:O	1:A:327:SER:OG	2.09	0.64
1:A:41:VAL:HG21	1:A:166:LEU:HD12	1.78	0.64
1:A:41:VAL:CG2	1:A:166:LEU:HD12	2.27	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:147:SER:OG	1:A:149:TYR:O	2.15	0.64
1:A:284:GLU:HB2	1:A:310:SER:CB	2.27	0.64
1:A:336:MET:HE2	1:A:336:MET:HA	1.79	0.64
1:A:307:LEU:O	1:A:312:ARG:HD2	1.97	0.64
1:A:329:PRO:HA	1:A:332:VAL:HG23	1.80	0.64
1:A:24:GLU:OE2	1:A:132:CYS:SG	2.55	0.64
1:A:262:VAL:O	1:A:282:CYS:HA	1.98	0.64
1:A:172:ILE:HG22	1:A:328:VAL:HG13	1.81	0.63
1:A:332:VAL:O	1:A:335:PHE:N	2.31	0.63
1:A:65:ALA:O	1:A:146:PHE:HB2	1.98	0.63
1:A:150:THR:OG1	1:A:151:VAL:N	2.31	0.63
1:A:211:CYS:O	1:A:214:ALA:N	2.32	0.63
1:A:347:THR:O	1:A:348:HIS:CD2	2.52	0.63
1:A:40:MET:HE2	1:A:69:ALA:HB3	1.80	0.63
1:A:50:ASP:OD1	1:A:363:ARG:NH1	2.32	0.62
1:A:331:LEU:HD12	1:A:340:PHE:HZ	1.63	0.62
1:A:43:THR:HG23	1:A:69:ALA:HB2	1.80	0.62
1:A:102:VAL:CG1	1:A:112:LEU:HD23	2.29	0.62
1:A:219:ILE:HD12	1:A:238:THR:HG23	1.82	0.62
1:A:81:THR:OG1	1:A:82:THR:N	2.33	0.62
1:A:348:HIS:HB2	1:A:370:THR:CB	2.30	0.62
1:A:258:SER:OG	1:A:261:GLY:CA	2.48	0.62
1:A:333:ALA:HA	1:A:336:MET:HB2	1.81	0.62
1:A:65:ALA:C	1:A:146:PHE:HD1	2.08	0.62
1:A:250:ILE:HG12	1:A:254:LEU:HD23	1.82	0.62
1:A:200:LEU:O	1:A:228:LYS:HG3	1.99	0.61
1:A:327:SER:C	1:A:329:PRO:HD2	2.24	0.61
1:A:343:ASP:O	1:A:346:ILE:N	2.33	0.61
1:A:96:GLN:C	1:A:98:GLY:H	2.07	0.61
1:A:200:LEU:HB2	1:A:223:ASP:CB	2.29	0.61
1:A:92:LEU:HD21	1:A:328:VAL:HG21	1.82	0.61
1:A:219:ILE:N	1:A:238:THR:OG1	2.32	0.61
1:A:268:VAL:HG12	1:A:292:VAL:HG21	1.83	0.61
1:A:83:VAL:O	1:A:84:ARG:HG2	2.01	0.60
1:A:327:SER:O	1:A:328:VAL:C	2.44	0.60
1:A:192:GLY:O	1:A:217:ALA:HB3	2.01	0.60
1:A:194:THR:HG23	1:A:220:ILE:CD1	2.31	0.60
1:A:95:PRO:HB2	1:A:111:CYS:HB3	1.81	0.60
1:A:258:SER:OG	1:A:261:GLY:HA2	2.00	0.60
3:A:381:NTN:H5	3:A:387:NTN:H4	1.82	0.60
1:A:211:CYS:C	1:A:213:ALA:N	2.54	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:284:GLU:HB2	1:A:310:SER:HB2	1.84	0.60
1:A:110:PHE:HD1	1:A:318:ILE:HG21	1.64	0.60
1:A:90:ILE:CG1	1:A:160:ILE:CG2	2.77	0.60
1:A:111:CYS:O	1:A:113:LYS:N	2.34	0.60
1:A:223:ASP:C	1:A:225:ASN:H	2.10	0.60
1:A:288:VAL:HG22	1:A:313:THR:HG22	1.83	0.60
1:A:102:VAL:HG21	1:A:110:PHE:O	2.02	0.59
1:A:198:PHE:HB2	1:A:266:PHE:O	2.03	0.59
1:A:5:LYS:O	1:A:6:VAL:C	2.44	0.59
1:A:219:ILE:CD1	1:A:238:THR:HG23	2.33	0.59
1:A:348:HIS:HB2	1:A:370:THR:HB	1.83	0.59
1:A:288:VAL:CG2	1:A:313:THR:CG2	2.81	0.59
1:A:343:ASP:OD2	1:A:343:ASP:N	2.35	0.59
1:A:52:VAL:C	1:A:54:SER:N	2.59	0.59
1:A:225:ASN:C	1:A:227:ASP:H	2.11	0.59
1:A:65:ALA:C	1:A:146:PHE:CD1	2.81	0.59
1:A:249:PRO:CB	1:A:251:GLN:HG3	2.32	0.59
1:A:3:ALA:HB1	1:A:5:LYS:N	2.13	0.58
1:A:123:MET:HE1	1:A:151:VAL:C	2.28	0.58
1:A:129:ARG:HD2	1:A:151:VAL:CG1	2.32	0.58
1:A:100:CYS:SG	1:A:103:CYS:HB2	2.44	0.58
1:A:209:MET:HE2	1:A:235:VAL:HB	1.85	0.58
1:A:252:GLU:O	1:A:254:LEU:N	2.36	0.58
1:A:74:GLU:OE2	1:A:75:SER:CB	2.49	0.58
1:A:271:ARG:C	1:A:275:MET:HE3	2.27	0.58
1:A:277:THR:O	1:A:277:THR:HG22	2.02	0.58
1:A:105:HIS:CD2	1:A:107:GLU:H	2.21	0.58
1:A:283:GLN:HE22	1:A:285:ALA:HB2	1.68	0.58
1:A:229:PHE:HZ	1:A:242:ASN:HB2	1.68	0.58
1:A:283:GLN:NE2	1:A:285:ALA:CB	2.61	0.58
1:A:352:PHE:CD2	1:A:374:PHE:CZ	2.92	0.58
1:A:64:ILE:HB	1:A:144:SER:HB3	1.85	0.58
1:A:292:VAL:HG12	1:A:293:GLY:N	2.18	0.58
1:A:35:GLU:HG2	1:A:123:MET:HE2	1.85	0.57
1:A:69:ALA:CB	1:A:145:THR:CG2	2.72	0.57
1:A:267:GLU:HG3	1:A:275:MET:HA	1.86	0.57
1:A:60:PRO:O	1:A:61:LEU:HD23	2.04	0.57
1:A:74:GLU:HG2	1:A:149:TYR:CE1	2.38	0.57
1:A:66:GLY:N	1:A:146:PHE:CD1	2.72	0.57
1:A:122:THR:OG1	1:A:123:MET:N	2.28	0.57
1:A:161:ASP:O	1:A:164:SER:OG	2.16	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:347:THR:HG23	1:A:367:SER:HB2	1.87	0.57
1:A:85:PRO:O	1:A:87:ASP:N	2.38	0.57
1:A:90:ILE:CD1	1:A:169:VAL:O	2.53	0.57
1:A:92:LEU:HD21	1:A:328:VAL:CG2	2.34	0.57
1:A:40:MET:HE2	1:A:145:THR:HG23	1.86	0.57
1:A:113:LYS:HG2	1:A:155:ILE:HD11	1.85	0.57
1:A:273:ASP:C	1:A:275:MET:H	2.13	0.56
1:A:96:GLN:N	1:A:96:GLN:CB	2.42	0.56
1:A:273:ASP:O	1:A:276:VAL:HG12	2.05	0.56
1:A:14:LEU:HD13	1:A:16:GLU:H	1.70	0.56
1:A:35:GLU:O	1:A:36:VAL:CG2	2.51	0.56
1:A:70:ALA:HB1	1:A:166:LEU:HD22	1.86	0.56
1:A:250:ILE:HA	1:A:253:VAL:HG13	1.87	0.56
1:A:332:VAL:O	1:A:335:PHE:CB	2.53	0.56
1:A:21:PHE:CB	1:A:356:ASN:HD21	2.17	0.56
1:A:42:ALA:O	1:A:69:ALA:CB	2.52	0.56
1:A:59:THR:HA	1:A:119:PRO:HB2	1.87	0.56
1:A:113:LYS:HE2	1:A:124:GLN:HG2	1.86	0.56
1:A:154:GLU:HA	1:A:157:VAL:CG1	2.36	0.56
1:A:334:ASP:HB3	1:A:339:LYS:CD	2.28	0.56
1:A:10:LYS:HG2	1:A:24:GLU:O	2.05	0.56
1:A:14:LEU:CD1	1:A:61:LEU:HD13	2.35	0.56
1:A:333:ALA:O	1:A:336:MET:N	2.39	0.56
1:A:132:CYS:HB2	1:A:137:ILE:HD11	1.86	0.56
1:A:99:LYS:HG2	1:A:100:CYS:N	2.16	0.56
1:A:200:LEU:C	1:A:228:LYS:HG2	2.31	0.56
1:A:59:THR:OG1	1:A:60:PRO:CD	2.54	0.55
1:A:93:PHE:HE1	1:A:174:CYS:SG	2.29	0.55
1:A:194:THR:HG23	1:A:220:ILE:HD12	1.87	0.55
1:A:7:ILE:HG22	1:A:8:LYS:N	2.21	0.55
1:A:102:VAL:HG23	1:A:108:GLY:C	2.31	0.55
1:A:267:GLU:HG2	1:A:274:THR:O	2.05	0.55
1:A:272:LEU:HD11	1:A:299:GLN:C	2.32	0.55
1:A:350:LEU:O	1:A:373:THR:N	2.39	0.55
1:A:99:LYS:HG3	1:A:104:LYS:CE	2.34	0.55
1:A:204:GLY:O	1:A:207:VAL:N	2.40	0.55
1:A:228:LYS:O	1:A:232:ALA:HB2	2.06	0.55
1:A:360:ASP:O	1:A:363:ARG:N	2.39	0.55
1:A:11:ALA:HB1	1:A:147:SER:HB2	1.84	0.55
1:A:16:GLU:HA	1:A:61:LEU:HD12	1.88	0.55
1:A:41:VAL:HG13	3:A:383:NTN:H5	1.87	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:99:LYS:CG	1:A:104:LYS:HD2	2.37	0.55
1:A:229:PHE:O	1:A:230:ALA:C	2.49	0.55
1:A:225:ASN:C	1:A:227:ASP:N	2.64	0.55
1:A:14:LEU:HD12	1:A:61:LEU:HD13	1.87	0.54
1:A:26:VAL:CG1	1:A:131:THR:O	2.47	0.54
1:A:180:TYR:CA	1:A:206:SER:O	2.56	0.54
1:A:74:GLU:O	1:A:75:SER:HB2	2.07	0.54
1:A:171:LEU:CD2	1:A:346:ILE:CD1	2.84	0.54
1:A:124:GLN:NE2	1:A:155:ILE:HD11	2.22	0.54
1:A:109:ASN:N	1:A:109:ASN:OD1	2.39	0.54
1:A:218:ARG:HD3	1:A:220:ILE:HD11	1.89	0.54
1:A:288:VAL:CG2	1:A:313:THR:HG22	2.38	0.54
1:A:73:VAL:CG2	1:A:87:ASP:HB3	2.38	0.54
1:A:93:PHE:CE1	1:A:174:CYS:SG	3.01	0.54
1:A:272:LEU:HD23	1:A:275:MET:SD	2.48	0.54
1:A:276:VAL:HB	1:A:301:LEU:HD22	1.90	0.54
1:A:334:ASP:O	1:A:339:LYS:HB2	2.07	0.54
1:A:52:VAL:C	1:A:54:SER:H	2.16	0.54
1:A:105:HIS:CD2	1:A:106:PRO:HD2	2.43	0.54
1:A:327:SER:C	1:A:329:PRO:CD	2.80	0.54
1:A:11:ALA:HB3	1:A:26:VAL:HG21	1.90	0.53
1:A:215:GLY:O	1:A:216:ALA:HB2	2.07	0.53
1:A:46:CYS:O	1:A:49:ASP:HB2	2.08	0.53
1:A:96:GLN:HE21	1:A:325:LYS:HB2	1.73	0.53
1:A:291:ILE:HD11	1:A:314:TRP:CE2	2.43	0.53
1:A:59:THR:OG1	1:A:60:PRO:HD2	2.08	0.53
1:A:90:ILE:HG13	1:A:328:VAL:HG11	1.90	0.53
1:A:182:SER:HA	1:A:186:VAL:HG21	1.91	0.53
1:A:99:LYS:HG3	1:A:104:LYS:HD2	1.89	0.53
1:A:360:ASP:C	1:A:362:LEU:N	2.66	0.53
1:A:5:LYS:C	1:A:6:VAL:O	2.43	0.53
1:A:11:ALA:HB3	1:A:26:VAL:CG2	2.38	0.53
1:A:171:LEU:C	1:A:173:GLY:N	2.67	0.53
1:A:178:THR:HA	1:A:320:GLY:H	1.73	0.53
1:A:250:ILE:CG1	1:A:254:LEU:HD23	2.39	0.53
1:A:201:GLY:O	1:A:205:LEU:HD13	2.09	0.53
1:A:88:LYS:C	1:A:89:VAL:HG23	2.33	0.52
1:A:195:CYS:HA	1:A:264:PHE:O	2.09	0.52
1:A:198:PHE:HE1	1:A:222:VAL:HG21	1.71	0.52
1:A:250:ILE:C	1:A:252:GLU:H	2.16	0.52
1:A:23:ILE:HD11	1:A:353:GLU:O	2.10	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:146:PHE:CE2	1:A:355:ILE:HD11	2.44	0.52
1:A:64:ILE:HD12	1:A:130:PHE:CZ	2.44	0.52
1:A:180:TYR:HA	1:A:206:SER:O	2.10	0.52
1:A:358:GLY:C	1:A:360:ASP:H	2.16	0.52
1:A:198:PHE:CE1	1:A:222:VAL:CG2	2.88	0.52
1:A:9:CYS:SG	1:A:28:VAL:CG2	2.98	0.52
1:A:131:THR:HG22	1:A:133:ARG:C	2.35	0.52
1:A:70:ALA:O	1:A:166:LEU:HD13	2.10	0.52
1:A:252:GLU:HA	1:A:255:THR:OG1	2.10	0.52
1:A:349:VAL:HG12	1:A:373:THR:HG23	1.92	0.52
1:A:288:VAL:HG23	1:A:313:THR:CG2	2.40	0.51
1:A:360:ASP:O	1:A:362:LEU:N	2.42	0.51
1:A:180:TYR:CD1	1:A:180:TYR:C	2.88	0.51
1:A:284:GLU:O	1:A:310:SER:CB	2.51	0.51
1:A:229:PHE:CD1	1:A:240:CYS:HB3	2.45	0.51
1:A:21:PHE:HD1	1:A:355:ILE:HG23	1.76	0.51
1:A:111:CYS:C	1:A:113:LYS:N	2.65	0.51
1:A:309:LEU:C	1:A:311:GLY:H	2.16	0.51
1:A:352:PHE:CE2	1:A:374:PHE:CZ	2.98	0.51
1:A:351:PRO:O	1:A:354:LYS:HG3	2.10	0.51
1:A:15:TRP:O	1:A:16:GLU:HB2	2.08	0.51
1:A:211:CYS:O	1:A:212:LYS:C	2.53	0.51
1:A:333:ALA:O	1:A:336:MET:HB2	2.10	0.51
1:A:328:VAL:HB	1:A:329:PRO:HD3	1.91	0.51
1:A:346:ILE:CG2	1:A:371:ILE:HD13	2.34	0.51
1:A:186:VAL:C	1:A:188:LYS:H	2.19	0.51
1:A:64:ILE:HD12	1:A:130:PHE:CD1	2.41	0.51
1:A:100:CYS:HB2	1:A:112:LEU:HG	1.93	0.51
1:A:331:LEU:HD12	1:A:340:PHE:CZ	2.43	0.50
1:A:335:PHE:CD2	1:A:342:LEU:HD12	2.46	0.50
1:A:349:VAL:CG2	3:A:389:NTN:CI5	2.89	0.50
1:A:165:PRO:O	1:A:169:VAL:HG22	2.11	0.50
1:A:73:VAL:HG21	1:A:87:ASP:HB3	1.93	0.50
1:A:100:CYS:O	1:A:101:ARG:O	2.29	0.50
1:A:185:LYS:O	1:A:185:LYS:CD	2.60	0.50
1:A:224:ILE:HD12	1:A:244:GLN:NE2	2.27	0.50
1:A:300:ASN:OD1	1:A:300:ASN:N	2.24	0.50
1:A:229:PHE:HD1	1:A:240:CYS:SG	2.28	0.50
1:A:309:LEU:C	1:A:311:GLY:N	2.70	0.50
1:A:110:PHE:CE1	1:A:116:LEU:HD12	2.43	0.50
1:A:113:LYS:HD3	1:A:155:ILE:HD11	1.93	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:187:ALA:O	1:A:189:VAL:HG23	2.11	0.50
1:A:161:ASP:HB3	1:A:164:SER:OG	2.10	0.50
1:A:171:LEU:O	1:A:173:GLY:N	2.45	0.50
1:A:200:LEU:HB3	1:A:228:LYS:HG2	1.93	0.50
1:A:69:ALA:HB2	1:A:145:THR:HG22	1.93	0.50
1:A:88:LYS:O	1:A:89:VAL:CG2	2.53	0.50
1:A:113:LYS:HG2	1:A:155:ILE:HD13	1.93	0.50
1:A:340:PHE:O	1:A:340:PHE:CG	2.59	0.50
1:A:249:PRO:HB3	1:A:251:GLN:HG3	1.95	0.49
1:A:23:ILE:CD1	1:A:353:GLU:O	2.61	0.49
1:A:82:THR:HG22	1:A:83:VAL:CG2	2.34	0.49
1:A:113:LYS:HD3	1:A:155:ILE:CD1	2.42	0.49
1:A:121:GLY:HA2	1:A:139:HIS:O	2.12	0.49
1:A:229:PHE:HB3	1:A:240:CYS:SG	2.52	0.49
1:A:188:LYS:O	1:A:189:VAL:C	2.54	0.49
1:A:205:LEU:HD12	1:A:205:LEU:H	1.77	0.49
1:A:338:LYS:O	1:A:339:LYS:C	2.56	0.49
1:A:205:LEU:O	1:A:209:MET:CB	2.51	0.49
1:A:332:VAL:O	1:A:336:MET:N	2.46	0.49
1:A:355:ILE:HA	1:A:372:LEU:HD11	1.93	0.49
1:A:8:LYS:HG2	1:A:9:CYS:N	2.28	0.49
1:A:267:GLU:OE1	1:A:269:ILE:HB	2.13	0.49
1:A:171:LEU:HD22	1:A:346:ILE:CD1	2.37	0.49
1:A:229:PHE:C	1:A:232:ALA:HB3	2.36	0.49
1:A:303:MET:O	1:A:305:PRO:HD3	2.13	0.49
1:A:90:ILE:HD11	1:A:169:VAL:O	2.13	0.49
1:A:13:VAL:O	1:A:22:SER:N	2.37	0.48
1:A:113:LYS:CG	1:A:155:ILE:HD11	2.43	0.48
1:A:302:SER:O	1:A:303:MET:HB2	2.12	0.48
1:A:30:PRO:HA	1:A:37:ARG:CZ	2.41	0.48
1:A:229:PHE:HA	1:A:232:ALA:CB	2.43	0.48
1:A:75:SER:O	1:A:76:ILE:HG22	2.14	0.48
1:A:250:ILE:C	1:A:252:GLU:N	2.68	0.48
1:A:88:LYS:HD3	1:A:166:LEU:HG	1.96	0.48
1:A:116:LEU:O	1:A:117:SER:O	2.32	0.48
1:A:49:ASP:OD2	1:A:140:PHE:HE1	1.97	0.48
1:A:56:THR:OG1	1:A:296:PRO:HD2	2.14	0.48
1:A:146:PHE:HE2	1:A:372:LEU:CD2	2.27	0.48
1:A:169:VAL:CG1	1:A:332:VAL:HG13	2.45	0.47
1:A:219:ILE:HD12	1:A:219:ILE:N	2.29	0.47
1:A:90:ILE:HG13	1:A:160:ILE:HG21	1.90	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:123:MET:HB3	1:A:127:THR:O	2.15	0.47
1:A:249:PRO:O	1:A:252:GLU:HB3	2.13	0.47
1:A:52:VAL:CG1	1:A:59:THR:CG2	2.77	0.47
1:A:96:GLN:N	1:A:97:CYS:N	2.62	0.47
1:A:123:MET:HE1	1:A:151:VAL:O	2.14	0.47
1:A:182:SER:CA	1:A:186:VAL:HG23	2.42	0.47
1:A:332:VAL:O	1:A:335:PHE:CA	2.63	0.47
1:A:346:ILE:HG21	3:A:389:NTN:H6	1.96	0.47
1:A:192:GLY:O	1:A:217:ALA:CB	2.62	0.47
1:A:205:LEU:H	1:A:205:LEU:CD1	2.27	0.47
1:A:123:MET:CE	1:A:151:VAL:HG12	2.45	0.47
1:A:164:SER:O	1:A:166:LEU:N	2.47	0.47
1:A:3:ALA:HB2	1:A:5:LYS:HD2	1.96	0.47
1:A:26:VAL:CG1	1:A:132:CYS:HA	2.45	0.47
1:A:258:SER:OG	1:A:261:GLY:N	2.48	0.47
1:A:357:GLU:OE2	3:A:399:NTN:H6	2.15	0.47
1:A:273:ASP:C	1:A:275:MET:N	2.73	0.47
1:A:95:PRO:HB2	1:A:111:CYS:CB	2.44	0.46
1:A:252:GLU:C	1:A:254:LEU:N	2.67	0.46
1:A:96:GLN:C	1:A:98:GLY:N	2.73	0.46
1:A:290:VAL:HG22	1:A:315:LYS:HB3	1.97	0.46
1:A:279:LEU:HD22	1:A:312:ARG:HD3	1.97	0.46
1:A:272:LEU:HD23	1:A:272:LEU:HA	1.83	0.46
1:A:35:GLU:C	1:A:36:VAL:HG23	2.39	0.46
1:A:46:CYS:HB3	1:A:67:HIS:HE1	1.81	0.46
1:A:69:ALA:HB3	1:A:145:THR:HG23	1.92	0.46
1:A:165:PRO:O	1:A:167:GLU:N	2.49	0.46
1:A:333:ALA:CA	1:A:336:MET:HB2	2.45	0.46
1:A:220:ILE:CG2	1:A:241:VAL:CG2	2.94	0.46
1:A:224:ILE:HD12	1:A:244:GLN:HE21	1.81	0.46
1:A:118:MET:HA	1:A:119:PRO:HD2	1.79	0.46
1:A:160:ILE:HG13	1:A:161:ASP:H	1.80	0.46
1:A:187:ALA:O	1:A:188:LYS:C	2.58	0.46
1:A:195:CYS:SG	1:A:264:PHE:HB2	2.56	0.46
1:A:198:PHE:CD1	1:A:222:VAL:CG2	2.99	0.46
1:A:209:MET:CE	1:A:235:VAL:HB	2.46	0.46
1:A:272:LEU:HD11	1:A:300:ASN:C	2.41	0.46
1:A:153:ASP:HB3	1:A:154:GLU:H	1.45	0.45
1:A:210:GLY:O	1:A:213:ALA:HB3	2.16	0.45
1:A:224:ILE:HG22	1:A:243:PRO:HD2	1.97	0.45
1:A:136:PRO:C	1:A:137:ILE:HD13	2.39	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:148:GLN:HB3	1:A:374:PHE:CE2	2.52	0.45
1:A:369:ARG:HH11	1:A:369:ARG:HA	1.80	0.45
1:A:7:ILE:CG2	1:A:8:LYS:N	2.79	0.45
1:A:11:ALA:CB	1:A:147:SER:CB	2.80	0.45
1:A:161:ASP:C	1:A:164:SER:HG	2.18	0.45
1:A:220:ILE:CG2	1:A:241:VAL:HG23	2.47	0.45
1:A:249:PRO:HB2	1:A:251:GLN:HG3	1.97	0.45
1:A:304:ASN:O	1:A:305:PRO:C	2.58	0.45
1:A:3:ALA:CA	1:A:5:LYS:HD2	2.46	0.45
1:A:224:ILE:CA	1:A:242:ASN:HD22	2.09	0.45
1:A:268:VAL:HG23	1:A:268:VAL:O	2.15	0.45
1:A:160:ILE:HG13	1:A:164:SER:OG	2.15	0.45
1:A:284:GLU:HB2	1:A:310:SER:HB3	1.99	0.45
1:A:329:PRO:O	1:A:332:VAL:HG23	2.16	0.45
1:A:357:GLU:HA	1:A:360:ASP:OD1	2.16	0.45
1:A:137:ILE:HD12	1:A:137:ILE:HA	1.71	0.45
1:A:171:LEU:HD12	1:A:171:LEU:HA	1.75	0.45
1:A:190:THR:OG1	1:A:264:PHE:HE1	1.99	0.45
1:A:204:GLY:HA2	1:A:207:VAL:CG1	2.44	0.45
1:A:94:THR:O	1:A:95:PRO:O	2.35	0.45
1:A:358:GLY:O	1:A:360:ASP:N	2.50	0.44
1:A:51:HIS:ND1	1:A:296:PRO:CG	2.81	0.44
1:A:194:THR:OG1	1:A:218:ARG:CB	2.59	0.44
1:A:253:VAL:O	1:A:257:MET:HG3	2.18	0.44
1:A:328:VAL:O	1:A:331:LEU:HB3	2.17	0.44
1:A:349:VAL:CG1	1:A:371:ILE:HG22	2.41	0.44
1:A:99:LYS:HG3	1:A:104:LYS:CD	2.47	0.44
1:A:267:GLU:OE2	1:A:275:MET:CG	2.63	0.44
1:A:332:VAL:C	1:A:335:PHE:H	2.23	0.44
1:A:105:HIS:CD2	1:A:106:PRO:N	2.86	0.44
1:A:194:THR:HG22	1:A:262:VAL:CB	2.47	0.44
1:A:204:GLY:CA	1:A:207:VAL:HG12	2.44	0.44
1:A:187:ALA:HB2	1:A:290:VAL:HG21	1.99	0.44
1:A:315:LYS:HE3	3:A:391:NTN:H5	1.98	0.44
1:A:82:THR:HB	1:A:154:GLU:OE2	2.18	0.44
1:A:169:VAL:HG12	1:A:332:VAL:HG13	2.00	0.44
1:A:258:SER:HB2	1:A:261:GLY:C	2.43	0.44
1:A:348:HIS:CE1	1:A:367:SER:CB	2.97	0.44
1:A:95:PRO:HB3	1:A:113:LYS:HG2	2.00	0.43
1:A:243:PRO:HG3	1:A:250:ILE:HD12	2.00	0.43
1:A:358:GLY:C	1:A:360:ASP:N	2.75	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:68:GLU:OE1	1:A:369:ARG:NE	2.45	0.43
1:A:166:LEU:HA	1:A:169:VAL:HG23	1.99	0.43
1:A:257:MET:HE2	1:A:257:MET:HB3	1.90	0.43
1:A:279:LEU:CD1	1:A:308:LEU:HD23	2.43	0.43
1:A:76:ILE:HG12	1:A:77:GLY:O	2.19	0.43
1:A:200:LEU:O	1:A:205:LEU:HD11	2.18	0.43
1:A:205:LEU:HD12	1:A:205:LEU:N	2.33	0.43
1:A:129:ARG:NH1	1:A:129:ARG:CG	2.76	0.43
1:A:220:ILE:HD13	1:A:262:VAL:CG1	2.49	0.43
1:A:232:ALA:O	1:A:237:ALA:HB2	2.18	0.43
1:A:39:LYS:O	1:A:39:LYS:CG	2.67	0.43
1:A:109:ASN:O	1:A:111:CYS:N	2.52	0.43
1:A:161:ASP:O	1:A:162:ALA:C	2.60	0.43
1:A:230:ALA:C	1:A:232:ALA:N	2.76	0.43
1:A:356:ASN:C	1:A:358:GLY:N	2.70	0.43
1:A:67:HIS:HD1	1:A:67:HIS:N	2.16	0.43
1:A:64:ILE:HG12	1:A:137:ILE:HG21	2.01	0.43
1:A:351:PRO:O	1:A:354:LYS:CG	2.66	0.42
1:A:118:MET:O	1:A:119:PRO:C	2.62	0.42
1:A:140:PHE:O	1:A:141:LEU:HB2	2.19	0.42
1:A:154:GLU:O	1:A:157:VAL:HG12	2.19	0.42
1:A:166:LEU:HD22	1:A:166:LEU:HA	1.39	0.42
1:A:334:ASP:CG	1:A:339:LYS:HD2	2.43	0.42
1:A:74:GLU:O	1:A:74:GLU:CD	2.62	0.42
1:A:10:LYS:HA	1:A:25:GLU:HA	2.01	0.42
1:A:39:LYS:HG3	1:A:40:MET:O	2.19	0.42
1:A:74:GLU:OE2	1:A:74:GLU:O	2.37	0.42
1:A:209:MET:HE3	1:A:235:VAL:HG21	2.01	0.42
1:A:18:LYS:N	1:A:53:VAL:O	2.51	0.42
1:A:269:ILE:CG2	1:A:271:ARG:CG	2.81	0.42
1:A:348:HIS:ND1	1:A:367:SER:CB	2.81	0.42
1:A:368:ILE:HD13	1:A:368:ILE:HG21	1.67	0.42
1:A:307:LEU:O	1:A:312:ARG:CD	2.66	0.42
1:A:58:VAL:O	1:A:58:VAL:HG12	2.19	0.42
1:A:174:CYS:O	1:A:175:GLY:C	2.62	0.42
1:A:248:LYS:O	1:A:249:PRO:C	2.62	0.42
1:A:279:LEU:HD23	1:A:279:LEU:HA	1.71	0.42
1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLN:HB2	2.44	0.42
1:A:38:ILE:HD11	1:A:152:VAL:CG2	2.39	0.42
1:A:312:ARG:HD2	1:A:312:ARG:HH11	1.60	0.42
1:A:357:GLU:OE2	3:A:399:NTN:CI6	2.68	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:21:PHE:CD1	1:A:355:ILE:HG23	2.55	0.41
1:A:26:VAL:HG12	1:A:132:CYS:HA	2.02	0.41
1:A:160:ILE:HG13	1:A:161:ASP:N	2.34	0.41
1:A:340:PHE:O	1:A:340:PHE:HD2	2.00	0.41
1:A:348:HIS:HB2	1:A:370:THR:OG1	2.20	0.41
1:A:71:GLY:C	1:A:166:LEU:HD11	2.44	0.41
1:A:220:ILE:HG23	1:A:241:VAL:HG23	2.01	0.41
1:A:102:VAL:HG23	1:A:102:VAL:O	2.19	0.41
1:A:123:MET:HE1	1:A:151:VAL:HG12	2.02	0.41
1:A:201:GLY:O	1:A:202:GLY:C	2.63	0.41
1:A:198:PHE:CD1	1:A:222:VAL:HG22	2.54	0.41
1:A:211:CYS:O	1:A:215:GLY:N	2.45	0.41
1:A:334:ASP:HA	1:A:337:ALA:HB3	2.01	0.41
1:A:346:ILE:HD12	1:A:346:ILE:HG23	1.83	0.41
1:A:309:LEU:HA	1:A:309:LEU:HD12	1.29	0.41
1:A:35:GLU:OE1	1:A:129:ARG:NH2	2.52	0.41
1:A:51:HIS:CE1	1:A:296:PRO:CD	2.91	0.41
1:A:140:PHE:CD2	1:A:141:LEU:HD22	2.56	0.41
1:A:178:THR:O	1:A:179:GLY:O	2.39	0.41
1:A:268:VAL:HG12	1:A:292:VAL:HG11	2.03	0.41
1:A:93:PHE:CD2	1:A:93:PHE:C	2.99	0.41
1:A:176:PHE:CZ	1:A:340:PHE:CE2	3.09	0.41
1:A:168:LYS:HG2	1:A:342:LEU:HB2	2.03	0.41
1:A:258:SER:CB	1:A:261:GLY:C	2.94	0.41
1:A:338:LYS:O	1:A:340:PHE:N	2.54	0.41
1:A:121:GLY:O	1:A:139:HIS:CA	2.65	0.40
1:A:165:PRO:C	1:A:167:GLU:H	2.29	0.40
1:A:179:GLY:HA3	1:A:206:SER:HB2	2.03	0.40
1:A:273:ASP:O	1:A:275:MET:N	2.54	0.40
1:A:56:THR:HG1	1:A:296:PRO:HD2	1.86	0.40
1:A:152:VAL:CG2	1:A:152:VAL:O	2.69	0.40
1:A:179:GLY:O	1:A:181:GLY:N	2.54	0.40
1:A:200:LEU:HA	1:A:200:LEU:HD12	1.71	0.40
1:A:187:ALA:C	1:A:189:VAL:H	2.25	0.40
1:A:250:ILE:HG12	1:A:254:LEU:CD2	2.49	0.40
1:A:146:PHE:CE2	1:A:372:LEU:CD2	3.04	0.40
1:A:199:GLY:HA3	1:A:268:VAL:HG23	2.03	0.40

All (734) 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:103:CYS:C	1:A:325:LYS:N[2_556]	0.24	1.96
1:A:9:CYS:C	1:A:10:LYS:N[2_555]	0.30	1.90
1:A:34:HIS:CB	1:A:188:LYS:NZ[2_556]	0.31	1.89
1:A:24:GLU:CG	3:A:379:NTN:CI5[2_555]	0.38	1.82
1:A:123:MET:O	1:A:316:GLY:N[2_556]	0.38	1.82
1:A:24:GLU:O	1:A:25:GLU:CA[2_555]	0.40	1.80
1:A:34:HIS:C	3:A:391:NTN:CI2[2_556]	0.41	1.79
1:A:94:THR:O	1:A:102:VAL:CG2[2_556]	0.45	1.75
1:A:94:THR:CA	1:A:110:PHE:O[2_556]	0.46	1.74
1:A:120:ARG:CZ	1:A:291:ILE:O[2_556]	0.47	1.73
1:A:7:ILE:O	1:A:148:GLN:NE2[2_555]	0.50	1.70
1:A:1:SER:OG	1:A:40:MET:CA[2_555]	0.53	1.67
1:A:105:HIS:NE2	1:A:157:VAL:CB[2_556]	0.57	1.63
1:A:125:ASP:O	1:A:290:VAL:N[2_556]	0.57	1.63
1:A:1:SER:CB	1:A:40:MET:N[2_555]	0.58	1.62
1:A:5:LYS:N	3:A:383:NTN:NI2[2_555]	0.58	1.62
1:A:114:ASN:N	1:A:318:ILE:CG2[2_556]	0.59	1.61
1:A:34:HIS:CG	1:A:188:LYS:CE[2_556]	0.60	1.60
1:A:107:GLU:N	1:A:154:GLU:O[2_556]	0.61	1.59
1:A:166:LEU:O	3:A:377:NTN:CI4[2_555]	0.64	1.56
1:A:34:HIS:CA	3:A:391:NTN:CI1[2_556]	0.65	1.55
1:A:105:HIS:CG	1:A:157:VAL:C[2_556]	0.67	1.53
1:A:110:PHE:CE1	1:A:114:ASN:ND2[2_556]	0.67	1.53
1:A:11:ALA:C	1:A:25:GLU:CD[2_555]	0.69	1.51
1:A:27:GLU:CD	1:A:353:GLU:CG[2_555]	0.69	1.51
1:A:35:GLU:N	3:A:391:NTN:CI3[2_556]	0.69	1.51
1:A:100:CYS:CB	1:A:319:PHE:CE2[2_556]	0.71	1.49
1:A:113:LYS:CA	1:A:318:ILE:O[2_556]	0.72	1.48
1:A:97:CYS:SG	1:A:322:PHE:C[2_556]	0.73	1.47
1:A:107:GLU:C	1:A:155:ILE:C[2_556]	0.73	1.47
1:A:127:THR:CG2	1:A:314:TRP:N[2_556]	0.73	1.47
1:A:3:ALA:CB	3:A:383:NTN:CI6[2_555]	0.74	1.46
1:A:8:LYS:N	1:A:148:GLN:CB[2_555]	0.74	1.46
1:A:24:GLU:CD	3:A:379:NTN:NI2[2_555]	0.74	1.46
1:A:35:GLU:CB	3:A:391:NTN:NI2[2_556]	0.75	1.45
1:A:34:HIS:CD2	1:A:188:LYS:CD[2_556]	0.77	1.43
1:A:99:LYS:CB	1:A:327:SER:CB[2_556]	0.77	1.43
1:A:103:CYS:CB	1:A:324:SER:N[2_556]	0.77	1.43
1:A:116:LEU:CD2	1:A:117:SER:OG[2_556]	0.78	1.42
1:A:151:VAL:CG2	3:A:378:NTN:CI4[2_555]	0.78	1.42
1:A:10:LYS:CD	1:A:26:VAL:CB[2_555]	0.80	1.40
1:A:99:LYS:CA	1:A:327:SER:CB[2_556]	0.80	1.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:11:ALA:O	1:A:25:GLU:CD[2_555]	0.81	1.39
1:A:11:ALA:C	1:A:25:GLU:OE2[2_555]	0.81	1.39
1:A:110:PHE:CD1	1:A:114:ASN:CB[2_556]	0.81	1.39
1:A:108:GLY:N	1:A:155:ILE:C[2_556]	0.83	1.37
1:A:8:LYS:CA	1:A:148:GLN:CB[2_555]	0.84	1.36
1:A:10:LYS:CE	1:A:26:VAL:CG2[2_555]	0.84	1.36
1:A:24:GLU:OE2	3:A:379:NTN:CI4[2_555]	0.84	1.36
1:A:9:CYS:O	1:A:10:LYS:CA[2_555]	0.85	1.35
1:A:1:SER:O	1:A:39:LYS:CA[2_555]	0.86	1.34
1:A:108:GLY:N	1:A:155:ILE:O[2_556]	0.87	1.33
1:A:1:SER:CA	1:A:39:LYS:C[2_555]	0.88	1.32
1:A:134:GLY:O	1:A:305:PRO:CB[2_556]	0.88	1.32
1:A:23:ILE:CG2	1:A:133:ARG:CG[2_555]	0.89	1.31
1:A:105:HIS:CE1	1:A:157:VAL:CB[2_556]	0.89	1.31
1:A:92:LEU:CD2	1:A:101:ARG:C[2_556]	0.90	1.30
1:A:151:VAL:CB	3:A:378:NTN:CI4[2_555]	0.90	1.30
1:A:5:LYS:CE	1:A:41:VAL:CG1[2_555]	0.91	1.29
1:A:313:THR:N	3:A:382:NTN:NI1[2_556]	0.91	1.29
1:A:96:GLN:O	1:A:323:LYS:CG[2_556]	0.92	1.28
1:A:103:CYS:CB	1:A:324:SER:CA[2_556]	0.92	1.28
1:A:328:VAL:CG1	3:A:385:NTN:CI5[2_556]	0.93	1.27
1:A:8:LYS:C	1:A:148:GLN:CG[2_555]	0.94	1.26
1:A:11:ALA:CA	1:A:25:GLU:OE2[2_555]	0.94	1.26
1:A:94:THR:CG2	1:A:111:CYS:N[2_556]	0.94	1.26
1:A:1:SER:CB	1:A:39:LYS:C[2_555]	0.95	1.25
1:A:10:LYS:CG	1:A:26:VAL:N[2_555]	0.95	1.25
1:A:35:GLU:CA	3:A:391:NTN:CI4[2_556]	0.95	1.25
1:A:127:THR:CG2	1:A:313:THR:C[2_556]	0.95	1.25
3:A:390:NTN:NI1	3:A:397:NTN:NI2[2_556]	0.95	1.25
1:A:9:CYS:O	1:A:10:LYS:N[2_555]	0.96	1.24
1:A:150:THR:N	3:A:378:NTN:NI1[2_555]	0.96	1.24
1:A:99:LYS:N	1:A:323:LYS:O[2_556]	0.97	1.23
1:A:107:GLU:C	1:A:156:SER:N[2_556]	0.97	1.23
1:A:120:ARG:NH1	1:A:291:ILE:O[2_556]	0.97	1.23
1:A:24:GLU:CB	3:A:379:NTN:CI6[2_555]	0.98	1.22
1:A:123:MET:O	1:A:315:LYS:C[2_556]	0.98	1.22
1:A:125:ASP:O	1:A:290:VAL:CA[2_556]	0.98	1.22
1:A:149:TYR:OH	1:A:149:TYR:OH[2_555]	0.98	1.22
1:A:172:ILE:CG2	3:A:385:NTN:CI3[2_556]	0.99	1.21
1:A:5:LYS:NZ	1:A:41:VAL:CG1[2_555]	1.00	1.20
1:A:95:PRO:CA	1:A:109:ASN:N[2_556]	1.00	1.20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:107:GLU:CA	1:A:155:ILE:N[2_556]	1.00	1.20
1:A:120:ARG:NH2	1:A:292:VAL:N[2_556]	1.00	1.20
1:A:8:LYS:CB	1:A:148:GLN:CA[2_555]	1.01	1.19
1:A:96:GLN:C	1:A:323:LYS:CG[2_556]	1.01	1.19
1:A:8:LYS:CE	1:A:149:TYR:C[2_555]	1.02	1.18
1:A:125:ASP:C	1:A:290:VAL:CA[2_556]	1.02	1.18
1:A:1:SER:O	1:A:39:LYS:CB[2_555]	1.03	1.17
1:A:150:THR:CA	3:A:378:NTN:NI1[2_555]	1.03	1.17
1:A:105:HIS:O	1:A:325:LYS:CD[2_556]	1.04	1.16
1:A:24:GLU:C	1:A:25:GLU:N[2_555]	1.05	1.15
1:A:35:GLU:CA	3:A:391:NTN:NI2[2_556]	1.05	1.15
1:A:127:THR:O	1:A:314:TRP:O[2_556]	1.05	1.15
1:A:34:HIS:CB	3:A:391:NTN:CI1[2_556]	1.06	1.14
1:A:104:LYS:NZ	1:A:329:PRO:C[2_556]	1.07	1.13
1:A:105:HIS:CG	1:A:157:VAL:CA[2_556]	1.07	1.13
1:A:107:GLU:O	1:A:156:SER:CA[2_556]	1.07	1.13
1:A:129:ARG:NH2	1:A:313:THR:CG2[2_556]	1.08	1.12
1:A:35:GLU:N	3:A:391:NTN:CI4[2_556]	1.09	1.11
1:A:95:PRO:CB	1:A:109:ASN:OD1[2_556]	1.09	1.11
1:A:127:THR:O	1:A:314:TRP:C[2_556]	1.10	1.10
1:A:178:THR:O	3:A:386:NTN:NI2[2_556]	1.10	1.10
1:A:1:SER:C	1:A:39:LYS:CA[2_555]	1.12	1.08
1:A:101:ARG:CZ	1:A:173:GLY:CA[2_556]	1.12	1.08
1:A:27:GLU:OE1	1:A:353:GLU:CG[2_555]	1.14	1.06
1:A:104:LYS:CA	1:A:325:LYS:C[2_556]	1.14	1.06
1:A:1:SER:CA	1:A:39:LYS:O[2_555]	1.15	1.05
1:A:5:LYS:CE	1:A:41:VAL:CB[2_555]	1.15	1.05
1:A:97:CYS:SG	1:A:322:PHE:O[2_556]	1.15	1.05
1:A:331:LEU:CG	3:A:385:NTN:NI1[2_556]	1.15	1.05
1:A:5:LYS:NZ	1:A:41:VAL:CB[2_555]	1.16	1.04
1:A:10:LYS:CB	1:A:26:VAL:N[2_555]	1.16	1.04
1:A:34:HIS:CD2	1:A:188:LYS:CG[2_556]	1.16	1.04
1:A:8:LYS:CB	1:A:148:GLN:C[2_555]	1.17	1.03
1:A:95:PRO:C	1:A:109:ASN:N[2_556]	1.17	1.03
1:A:166:LEU:O	3:A:377:NTN:CI3[2_555]	1.17	1.03
1:A:22:SER:C	1:A:133:ARG:NH2[2_555]	1.18	1.02
1:A:34:HIS:ND1	1:A:188:LYS:CE[2_556]	1.18	1.02
1:A:98:GLY:N	1:A:323:LYS:CB[2_556]	1.18	1.02
1:A:101:ARG:NH2	1:A:173:GLY:C[2_556]	1.18	1.02
1:A:104:LYS:N	1:A:324:SER:C[2_556]	1.18	1.02
1:A:104:LYS:N	1:A:324:SER:O[2_556]	1.18	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:105:HIS:ND1	1:A:157:VAL:CA[2_556]	1.18	1.02
1:A:8:LYS:CE	1:A:149:TYR:O[2_555]	1.19	1.01
1:A:104:LYS:CA	1:A:325:LYS:O[2_556]	1.19	1.01
1:A:127:THR:C	1:A:314:TRP:CB[2_556]	1.19	1.01
1:A:9:CYS:C	1:A:9:CYS:C[2_555]	1.20	1.00
1:A:10:LYS:CD	1:A:26:VAL:CG2[2_555]	1.20	1.00
1:A:24:GLU:CB	3:A:379:NTN:CI5[2_555]	1.20	1.00
1:A:105:HIS:NE2	1:A:157:VAL:CG1[2_556]	1.20	1.00
1:A:127:THR:CA	1:A:314:TRP:CA[2_556]	1.20	1.00
1:A:127:THR:CB	1:A:314:TRP:CA[2_556]	1.20	1.00
1:A:34:HIS:C	3:A:391:NTN:CI3[2_556]	1.21	0.99
1:A:107:GLU:O	1:A:156:SER:N[2_556]	1.21	0.99
1:A:112:LEU:O	1:A:319:PHE:N[2_556]	1.21	0.99
1:A:24:GLU:CG	3:A:379:NTN:NI2[2_555]	1.22	0.98
1:A:34:HIS:CG	1:A:188:LYS:NZ[2_556]	1.22	0.98
1:A:107:GLU:CB	1:A:155:ILE:N[2_556]	1.22	0.98
1:A:96:GLN:N	1:A:109:ASN:CA[2_556]	1.23	0.97
1:A:99:LYS:N	1:A:327:SER:OG[2_556]	1.23	0.97
1:A:11:ALA:O	1:A:25:GLU:CG[2_555]	1.24	0.96
1:A:103:CYS:C	1:A:324:SER:C[2_556]	1.24	0.96
1:A:127:THR:CA	1:A:314:TRP:CB[2_556]	1.24	0.96
1:A:34:HIS:NE2	1:A:188:LYS:CD[2_556]	1.25	0.95
1:A:99:LYS:CA	1:A:327:SER:OG[2_556]	1.25	0.95
1:A:99:LYS:CE	1:A:331:LEU:CD2[2_556]	1.25	0.95
1:A:23:ILE:CG1	1:A:133:ARG:NE[2_555]	1.26	0.94
1:A:95:PRO:CD	1:A:110:PHE:N[2_556]	1.26	0.94
1:A:97:CYS:CB	1:A:322:PHE:C[2_556]	1.26	0.94
1:A:107:GLU:CA	1:A:154:GLU:C[2_556]	1.26	0.94
1:A:109:ASN:ND2	1:A:113:LYS:CB[2_556]	1.26	0.94
1:A:114:ASN:O	1:A:318:ILE:CD1[2_556]	1.26	0.94
1:A:101:ARG:NH1	1:A:173:GLY:CA[2_556]	1.27	0.93
1:A:105:HIS:CE1	1:A:157:VAL:CG2[2_556]	1.27	0.93
1:A:110:PHE:CE1	1:A:114:ASN:CG[2_556]	1.27	0.93
1:A:34:HIS:NE2	1:A:188:LYS:CG[2_556]	1.28	0.92
1:A:105:HIS:CD2	1:A:157:VAL:CA[2_556]	1.28	0.92
1:A:120:ARG:NH2	1:A:292:VAL:CA[2_556]	1.28	0.92
1:A:123:MET:C	1:A:316:GLY:N[2_556]	1.28	0.92
1:A:8:LYS:CA	1:A:148:GLN:CA[2_555]	1.29	0.91
1:A:103:CYS:O	1:A:325:LYS:N[2_556]	1.29	0.91
1:A:112:LEU:CB	1:A:319:PHE:CG[2_556]	1.29	0.91
1:A:120:ARG:NH2	1:A:291:ILE:C[2_556]	1.29	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:151:VAL:CG2	3:A:378:NTN:NI2[2_555]	1.29	0.91
1:A:8:LYS:CE	1:A:149:TYR:CA[2_555]	1.31	0.89
1:A:97:CYS:C	1:A:323:LYS:N[2_556]	1.31	0.89
1:A:24:GLU:O	1:A:25:GLU:N[2_555]	1.32	0.88
1:A:120:ARG:CZ	1:A:291:ILE:C[2_556]	1.32	0.88
1:A:288:VAL:CA	3:A:382:NTN:CI6[2_556]	1.32	0.88
1:A:1:SER:C	1:A:39:LYS:CB[2_555]	1.33	0.87
1:A:9:CYS:N	1:A:148:GLN:CG[2_555]	1.33	0.87
1:A:103:CYS:SG	1:A:324:SER:N[2_556]	1.33	0.87
1:A:113:LYS:NZ	1:A:321:GLY:N[2_556]	1.33	0.87
1:A:104:LYS:CD	1:A:329:PRO:CD[2_556]	1.34	0.86
1:A:24:GLU:OE2	3:A:379:NTN:CI3[2_555]	1.36	0.84
1:A:34:HIS:CA	3:A:391:NTN:CI2[2_556]	1.36	0.84
1:A:104:LYS:N	1:A:325:LYS:N[2_556]	1.36	0.84
1:A:122:THR:CG2	1:A:291:ILE:CD1[2_556]	1.36	0.84
1:A:23:ILE:N	1:A:133:ARG:NH2[2_555]	1.37	0.83
1:A:95:PRO:C	1:A:109:ASN:CA[2_556]	1.37	0.83
1:A:320:GLY:CA	3:A:386:NTN:CI6[2_556]	1.37	0.83
1:A:24:GLU:O	1:A:25:GLU:CB[2_555]	1.38	0.82
1:A:27:GLU:OE2	1:A:353:GLU:CG[2_555]	1.38	0.82
1:A:34:HIS:CA	3:A:391:NTN:NI1[2_556]	1.38	0.82
1:A:104:LYS:NZ	1:A:329:PRO:CA[2_556]	1.38	0.82
1:A:35:GLU:N	3:A:391:NTN:CI2[2_556]	1.39	0.81
1:A:94:THR:CG2	1:A:110:PHE:C[2_556]	1.39	0.81
1:A:112:LEU:CG	1:A:319:PHE:CD1[2_556]	1.39	0.81
1:A:103:CYS:CA	1:A:325:LYS:N[2_556]	1.40	0.80
1:A:107:GLU:C	1:A:155:ILE:O[2_556]	1.40	0.80
1:A:110:PHE:CD1	1:A:114:ASN:CG[2_556]	1.40	0.80
1:A:113:LYS:CA	1:A:318:ILE:C[2_556]	1.40	0.80
1:A:10:LYS:CD	1:A:26:VAL:CA[2_555]	1.41	0.79
1:A:95:PRO:CD	1:A:110:PHE:CA[2_556]	1.41	0.79
1:A:103:CYS:N	1:A:324:SER:CB[2_556]	1.41	0.79
1:A:105:HIS:CE1	1:A:157:VAL:CA[2_556]	1.41	0.79
1:A:107:GLU:CA	1:A:155:ILE:CA[2_556]	1.41	0.79
1:A:128:SER:N	1:A:314:TRP:CB[2_556]	1.41	0.79
1:A:92:LEU:CD2	1:A:102:VAL:N[2_556]	1.42	0.78
1:A:22:SER:O	1:A:133:ARG:NH2[2_555]	1.43	0.77
1:A:94:THR:CB	1:A:110:PHE:O[2_556]	1.43	0.77
1:A:105:HIS:NE2	1:A:157:VAL:CA[2_556]	1.43	0.77
1:A:112:LEU:CB	1:A:319:PHE:CB[2_556]	1.43	0.77
1:A:125:ASP:CA	1:A:290:VAL:CG2[2_556]	1.43	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:103:CYS:CA	1:A:324:SER:C[2_556]	1.44	0.76
1:A:113:LYS:CB	1:A:318:ILE:O[2_556]	1.44	0.76
1:A:127:THR:C	1:A:314:TRP:CA[2_556]	1.44	0.76
1:A:34:HIS:O	3:A:391:NTN:CI2[2_556]	1.45	0.75
1:A:106:PRO:C	1:A:154:GLU:O[2_556]	1.45	0.75
1:A:8:LYS:CA	1:A:148:GLN:CG[2_555]	1.46	0.74
1:A:95:PRO:N	1:A:110:PHE:N[2_556]	1.46	0.74
1:A:97:CYS:CB	1:A:322:PHE:CA[2_556]	1.46	0.74
1:A:10:LYS:CE	1:A:26:VAL:CB[2_555]	1.47	0.73
1:A:11:ALA:C	1:A:25:GLU:OE1[2_555]	1.47	0.73
1:A:37:ARG:NH2	3:A:383:NTN:NI1[2_555]	1.47	0.73
1:A:101:ARG:CZ	1:A:173:GLY:C[2_556]	1.47	0.73
1:A:104:LYS:NZ	1:A:330:LYS:N[2_556]	1.47	0.73
1:A:105:HIS:CD2	1:A:157:VAL:C[2_556]	1.47	0.73
1:A:116:LEU:CD2	1:A:117:SER:CB[2_556]	1.47	0.73
1:A:1:SER:CB	1:A:40:MET:CA[2_555]	1.48	0.72
1:A:23:ILE:CA	1:A:133:ARG:CZ[2_555]	1.48	0.72
1:A:104:LYS:CD	1:A:327:SER:C[2_556]	1.48	0.72
1:A:107:GLU:O	1:A:156:SER:C[2_556]	1.48	0.72
1:A:149:TYR:CZ	1:A:149:TYR:OH[2_555]	1.48	0.72
1:A:3:ALA:CB	3:A:383:NTN:CI2[2_555]	1.49	0.71
1:A:98:GLY:C	1:A:323:LYS:O[2_556]	1.49	0.71
1:A:107:GLU:N	1:A:154:GLU:C[2_556]	1.49	0.71
1:A:114:ASN:N	1:A:318:ILE:CB[2_556]	1.49	0.71
1:A:166:LEU:CD1	3:A:377:NTN:NI1[2_555]	1.49	0.71
1:A:320:GLY:N	3:A:386:NTN:CI6[2_556]	1.49	0.71
1:A:1:SER:C	1:A:39:LYS:C[2_555]	1.50	0.70
1:A:24:GLU:OE2	3:A:379:NTN:NI2[2_555]	1.50	0.70
1:A:82:THR:CG2	1:A:106:PRO:CG[2_556]	1.50	0.70
1:A:103:CYS:C	1:A:325:LYS:CA[2_556]	1.50	0.70
1:A:131:THR:CG2	1:A:353:GLU:OE1[2_555]	1.50	0.70
1:A:24:GLU:C	1:A:25:GLU:CA[2_555]	1.51	0.69
1:A:34:HIS:CD2	1:A:188:LYS:CE[2_556]	1.51	0.69
1:A:96:GLN:N	1:A:109:ASN:N[2_556]	1.51	0.69
1:A:98:GLY:C	1:A:327:SER:OG[2_556]	1.51	0.69
1:A:172:ILE:CG2	3:A:385:NTN:CI2[2_556]	1.51	0.69
1:A:282:CYS:SG	3:A:382:NTN:NI2[2_556]	1.51	0.69
1:A:10:LYS:N	1:A:10:LYS:N[2_555]	1.52	0.68
1:A:24:GLU:CD	3:A:379:NTN:CI4[2_555]	1.52	0.68
1:A:94:THR:C	1:A:110:PHE:O[2_556]	1.52	0.68
1:A:95:PRO:C	1:A:108:GLY:C[2_556]	1.52	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:97:CYS:CA	1:A:323:LYS:N[2_556]	1.52	0.68
1:A:126:GLY:O	1:A:314:TRP:CD1[2_556]	1.52	0.68
1:A:5:LYS:N	3:A:383:NTN:CI4[2_555]	1.53	0.67
1:A:95:PRO:CD	1:A:110:PHE:CB[2_556]	1.53	0.67
1:A:96:GLN:O	1:A:323:LYS:CD[2_556]	1.53	0.67
1:A:113:LYS:CD	1:A:321:GLY:CA[2_556]	1.53	0.67
1:A:123:MET:C	1:A:315:LYS:C[2_556]	1.53	0.67
1:A:135:LYS:CA	1:A:305:PRO:CG[2_556]	1.53	0.67
1:A:1:SER:OG	1:A:40:MET:C[2_555]	1.55	0.65
1:A:24:GLU:O	1:A:25:GLU:C[2_555]	1.55	0.65
1:A:28:VAL:CG1	3:A:378:NTN:CI6[2_555]	1.55	0.65
1:A:35:GLU:C	3:A:391:NTN:CI4[2_556]	1.55	0.65
1:A:105:HIS:CB	1:A:158:ALA:N[2_556]	1.55	0.65
1:A:113:LYS:C	1:A:318:ILE:CG2[2_556]	1.55	0.65
1:A:134:GLY:C	1:A:305:PRO:CB[2_556]	1.55	0.65
1:A:172:ILE:CG2	3:A:385:NTN:CI4[2_556]	1.55	0.65
1:A:7:ILE:O	1:A:148:GLN:CD[2_555]	1.56	0.64
1:A:97:CYS:SG	1:A:322:PHE:CA[2_556]	1.56	0.64
1:A:133:ARG:CA	1:A:353:GLU:OE2[2_555]	1.56	0.64
1:A:312:ARG:C	3:A:382:NTN:NI1[2_556]	1.56	0.64
1:A:1:SER:OG	1:A:40:MET:N[2_555]	1.57	0.63
1:A:2:THR:N	1:A:39:LYS:O[2_555]	1.57	0.63
1:A:101:ARG:NH2	1:A:173:GLY:CA[2_556]	1.57	0.63
1:A:104:LYS:N	1:A:325:LYS:CA[2_556]	1.57	0.63
1:A:104:LYS:CG	1:A:329:PRO:CD[2_556]	1.57	0.63
1:A:105:HIS:CB	1:A:157:VAL:C[2_556]	1.57	0.63
1:A:107:GLU:OE1	1:A:155:ILE:CG1[2_556]	1.57	0.63
1:A:127:THR:CG2	1:A:313:THR:O[2_556]	1.57	0.63
1:A:107:GLU:CA	1:A:155:ILE:C[2_556]	1.58	0.62
1:A:127:THR:CG2	1:A:314:TRP:CA[2_556]	1.58	0.62
1:A:127:THR:CA	1:A:314:TRP:CG[2_556]	1.58	0.62
1:A:132:CYS:SG	3:A:379:NTN:CI3[2_555]	1.58	0.62
1:A:1:SER:N	1:A:39:LYS:N[2_555]	1.59	0.61
1:A:11:ALA:O	1:A:25:GLU:OE1[2_555]	1.59	0.61
1:A:23:ILE:CB	1:A:133:ARG:NE[2_555]	1.59	0.61
1:A:99:LYS:CB	1:A:327:SER:OG[2_556]	1.59	0.61
1:A:105:HIS:CG	1:A:158:ALA:N[2_556]	1.59	0.61
1:A:106:PRO:CD	1:A:157:VAL:O[2_556]	1.59	0.61
1:A:107:GLU:OE2	1:A:153:ASP:CG[2_556]	1.59	0.61
1:A:125:ASP:O	1:A:289:SER:C[2_556]	1.59	0.61
1:A:7:ILE:C	1:A:148:GLN:NE2[2_555]	1.60	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:8:LYS:CG	1:A:149:TYR:N[2_555]	1.60	0.60
1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:N[2_555]	1.60	0.60
1:A:103:CYS:CA	1:A:324:SER:CA[2_556]	1.60	0.60
1:A:103:CYS:O	1:A:325:LYS:CA[2_556]	1.60	0.60
1:A:104:LYS:CD	1:A:328:VAL:N[2_556]	1.60	0.60
1:A:107:GLU:CB	1:A:154:GLU:C[2_556]	1.60	0.60
1:A:123:MET:O	1:A:316:GLY:CA[2_556]	1.60	0.60
1:A:288:VAL:N	3:A:382:NTN:CI6[2_556]	1.60	0.60
1:A:1:SER:C	1:A:39:LYS:O[2_555]	1.61	0.59
1:A:3:ALA:CB	3:A:383:NTN:CI5[2_555]	1.61	0.59
1:A:35:GLU:CG	3:A:391:NTN:CI5[2_556]	1.61	0.59
1:A:94:THR:O	1:A:102:VAL:CB[2_556]	1.61	0.59
1:A:101:ARG:NH2	1:A:174:CYS:N[2_556]	1.61	0.59
1:A:101:ARG:NH1	1:A:173:GLY:C[2_556]	1.61	0.59
1:A:107:GLU:OE2	1:A:153:ASP:CB[2_556]	1.61	0.59
1:A:120:ARG:NH2	1:A:291:ILE:O[2_556]	1.61	0.59
1:A:12:ALA:N	1:A:25:GLU:OE1[2_555]	1.62	0.58
1:A:41:VAL:CB	3:A:377:NTN:CI1[2_555]	1.62	0.58
1:A:92:LEU:CD2	1:A:101:ARG:O[2_556]	1.62	0.58
1:A:101:ARG:CA	1:A:328:VAL:CG2[2_556]	1.62	0.58
1:A:104:LYS:CE	1:A:327:SER:O[2_556]	1.62	0.58
1:A:110:PHE:CZ	1:A:114:ASN:ND2[2_556]	1.62	0.58
1:A:320:GLY:CA	3:A:386:NTN:CI2[2_556]	1.62	0.58
1:A:9:CYS:O	1:A:10:LYS:CB[2_555]	1.63	0.57
1:A:98:GLY:O	1:A:327:SER:OG[2_556]	1.63	0.57
1:A:104:LYS:CD	1:A:329:PRO:N[2_556]	1.63	0.57
3:A:390:NTN:CI1	3:A:397:NTN:NI2[2_556]	1.63	0.57
1:A:1:SER:O	1:A:39:LYS:N[2_555]	1.64	0.56
1:A:34:HIS:C	3:A:391:NTN:CI1[2_556]	1.64	0.56
1:A:99:LYS:CB	1:A:327:SER:CA[2_556]	1.64	0.56
1:A:105:HIS:CD2	1:A:157:VAL:O[2_556]	1.64	0.56
1:A:151:VAL:CG2	3:A:378:NTN:CI3[2_555]	1.64	0.56
1:A:24:GLU:CD	3:A:379:NTN:CI5[2_555]	1.65	0.55
1:A:34:HIS:C	3:A:391:NTN:CI6[2_556]	1.65	0.55
1:A:94:THR:OG1	1:A:112:LEU:N[2_556]	1.65	0.55
1:A:94:THR:C	1:A:102:VAL:CG2[2_556]	1.65	0.55
1:A:104:LYS:CA	1:A:325:LYS:CA[2_556]	1.65	0.55
1:A:104:LYS:NZ	1:A:329:PRO:N[2_556]	1.65	0.55
1:A:136:PRO:CG	1:A:303:MET:CE[2_556]	1.65	0.55
1:A:182:SER:N	3:A:386:NTN:CI4[2_556]	1.65	0.55
1:A:4:GLY:C	3:A:383:NTN:NI2[2_555]	1.66	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:94:THR:CB	1:A:110:PHE:C[2_556]	1.66	0.54
1:A:100:CYS:CB	1:A:319:PHE:CD2[2_556]	1.66	0.54
1:A:105:HIS:O	1:A:325:LYS:CG[2_556]	1.66	0.54
1:A:125:ASP:N	1:A:315:LYS:CB[2_556]	1.66	0.54
1:A:151:VAL:N	3:A:378:NTN:CI3[2_555]	1.66	0.54
1:A:287:GLY:O	3:A:382:NTN:CI1[2_556]	1.66	0.54
1:A:8:LYS:CD	1:A:149:TYR:N[2_555]	1.67	0.53
1:A:27:GLU:OE2	1:A:353:GLU:CB[2_555]	1.67	0.53
1:A:109:ASN:O	1:A:111:CYS:CB[2_556]	1.67	0.53
1:A:110:PHE:CG	1:A:114:ASN:CB[2_556]	1.67	0.53
1:A:306:MET:CE	1:A:354:LYS:CD[1_556]	1.67	0.53
1:A:322:PHE:O	2:A:376:ZN:ZN[2_556]	1.67	0.53
3:A:390:NTN:NI1	3:A:397:NTN:CI4[2_556]	1.67	0.53
1:A:23:ILE:CG1	1:A:133:ARG:CD[2_555]	1.68	0.52
1:A:99:LYS:CG	1:A:327:SER:C[2_556]	1.68	0.52
1:A:127:THR:C	1:A:314:TRP:C[2_556]	1.68	0.52
1:A:288:VAL:C	3:A:382:NTN:CI6[2_556]	1.68	0.52
1:A:34:HIS:CG	1:A:188:LYS:CD[2_556]	1.69	0.51
1:A:8:LYS:CB	1:A:148:GLN:N[2_555]	1.70	0.50
1:A:12:ALA:N	1:A:25:GLU:OE2[2_555]	1.70	0.50
1:A:94:THR:CA	1:A:110:PHE:C[2_556]	1.70	0.50
1:A:95:PRO:CB	1:A:109:ASN:N[2_556]	1.70	0.50
1:A:105:HIS:ND1	1:A:157:VAL:C[2_556]	1.70	0.50
1:A:112:LEU:C	1:A:319:PHE:CB[2_556]	1.70	0.50
1:A:120:ARG:NE	1:A:291:ILE:O[2_556]	1.70	0.50
1:A:150:THR:C	3:A:378:NTN:NI1[2_555]	1.70	0.50
1:A:5:LYS:CD	1:A:41:VAL:CG1[2_555]	1.71	0.49
1:A:24:GLU:OE1	3:A:379:NTN:NI2[2_555]	1.71	0.49
1:A:103:CYS:N	1:A:324:SER:OG[2_556]	1.71	0.49
1:A:105:HIS:C	1:A:325:LYS:CG[2_556]	1.71	0.49
1:A:134:GLY:O	1:A:305:PRO:CG[2_556]	1.71	0.49
1:A:8:LYS:CA	1:A:148:GLN:N[2_555]	1.72	0.48
1:A:94:THR:CG2	1:A:111:CYS:CA[2_556]	1.72	0.48
1:A:104:LYS:CB	1:A:325:LYS:O[2_556]	1.72	0.48
1:A:107:GLU:CA	1:A:154:GLU:O[2_556]	1.72	0.48
1:A:107:GLU:OE2	1:A:153:ASP:OD1[2_556]	1.72	0.48
1:A:112:LEU:CD1	1:A:319:PHE:CD1[2_556]	1.72	0.48
1:A:178:THR:C	3:A:386:NTN:NI2[2_556]	1.72	0.48
1:A:331:LEU:CG	3:A:385:NTN:CI1[2_556]	1.72	0.48
1:A:5:LYS:CE	1:A:41:VAL:CG2[2_555]	1.73	0.47
1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CA[2_555]	1.73	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:24:GLU:C	1:A:25:GLU:CB[2_555]	1.73	0.47
1:A:105:HIS:C	1:A:325:LYS:CD[2_556]	1.73	0.47
1:A:108:GLY:CA	1:A:155:ILE:O[2_556]	1.73	0.47
1:A:109:ASN:CB	1:A:111:CYS:SG[2_556]	1.73	0.47
1:A:113:LYS:N	1:A:318:ILE:O[2_556]	1.73	0.47
1:A:1:SER:N	1:A:38:ILE:C[2_555]	1.74	0.46
1:A:23:ILE:CG2	1:A:133:ARG:CD[2_555]	1.74	0.46
1:A:42:ALA:CB	3:A:377:NTN:CI5[2_555]	1.74	0.46
1:A:105:HIS:CD2	1:A:157:VAL:N[2_556]	1.74	0.46
1:A:126:GLY:CA	1:A:291:ILE:N[2_556]	1.74	0.46
1:A:34:HIS:CB	1:A:188:LYS:CE[2_556]	1.75	0.45
1:A:96:GLN:N	1:A:108:GLY:C[2_556]	1.75	0.45
1:A:98:GLY:N	1:A:323:LYS:CA[2_556]	1.75	0.45
1:A:1:SER:CB	1:A:39:LYS:O[2_555]	1.76	0.44
1:A:1:SER:CA	1:A:39:LYS:CA[2_555]	1.76	0.44
1:A:2:THR:CG2	1:A:72:ILE:CG2[2_555]	1.76	0.44
1:A:104:LYS:CE	1:A:330:LYS:N[2_556]	1.76	0.44
1:A:106:PRO:N	1:A:157:VAL:O[2_556]	1.76	0.44
1:A:123:MET:N	1:A:315:LYS:O[2_556]	1.76	0.44
1:A:126:GLY:N	1:A:290:VAL:CA[2_556]	1.76	0.44
1:A:11:ALA:CA	1:A:25:GLU:CD[2_555]	1.77	0.43
1:A:35:GLU:CB	3:A:391:NTN:CI5[2_556]	1.77	0.43
1:A:92:LEU:CB	1:A:102:VAL:CA[2_556]	1.77	0.43
1:A:96:GLN:CB	1:A:108:GLY:O[2_556]	1.77	0.43
1:A:105:HIS:CG	1:A:157:VAL:O[2_556]	1.77	0.43
1:A:24:GLU:CG	3:A:379:NTN:CI6[2_555]	1.78	0.42
1:A:24:GLU:C	1:A:24:GLU:C[2_555]	1.78	0.42
1:A:95:PRO:CG	1:A:110:PHE:N[2_556]	1.78	0.42
1:A:9:CYS:CA	1:A:10:LYS:N[2_555]	1.79	0.41
1:A:34:HIS:CA	1:A:188:LYS:NZ[2_556]	1.79	0.41
1:A:35:GLU:N	3:A:391:NTN:NI2[2_556]	1.79	0.41
1:A:125:ASP:C	1:A:290:VAL:N[2_556]	1.79	0.41
1:A:2:THR:CA	1:A:39:LYS:CG[2_555]	1.80	0.40
1:A:8:LYS:CD	1:A:149:TYR:CB[2_555]	1.80	0.40
1:A:9:CYS:C	1:A:10:LYS:CA[2_555]	1.80	0.40
1:A:23:ILE:CB	1:A:133:ARG:CG[2_555]	1.80	0.40
1:A:112:LEU:CB	1:A:319:PHE:CD1[2_556]	1.80	0.40
1:A:166:LEU:C	3:A:377:NTN:CI4[2_555]	1.80	0.40
1:A:1:SER:C	1:A:39:LYS:N[2_555]	1.81	0.39
1:A:2:THR:N	1:A:39:LYS:CG[2_555]	1.81	0.39
1:A:8:LYS:NZ	1:A:149:TYR:O[2_555]	1.81	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:94:THR:OG1	1:A:111:CYS:C[2_556]	1.81	0.39
1:A:108:GLY:N	1:A:156:SER:N[2_556]	1.81	0.39
1:A:110:PHE:CE1	1:A:114:ASN:CB[2_556]	1.81	0.39
1:A:166:LEU:O	3:A:377:NTN:NI2[2_555]	1.81	0.39
1:A:178:THR:CA	3:A:386:NTN:CI5[2_556]	1.81	0.39
1:A:26:VAL:CG1	3:A:379:NTN:NI1[2_555]	1.82	0.38
1:A:35:GLU:CG	3:A:391:NTN:NI2[2_556]	1.82	0.38
1:A:92:LEU:CD1	1:A:102:VAL:CA[2_556]	1.82	0.38
1:A:92:LEU:CD1	1:A:102:VAL:C[2_556]	1.82	0.38
1:A:95:PRO:CB	1:A:109:ASN:CA[2_556]	1.82	0.38
1:A:99:LYS:CG	1:A:327:SER:CB[2_556]	1.82	0.38
1:A:99:LYS:CD	1:A:331:LEU:CD2[2_556]	1.82	0.38
1:A:123:MET:O	1:A:315:LYS:O[2_556]	1.82	0.38
1:A:126:GLY:O	1:A:314:TRP:NE1[2_556]	1.82	0.38
1:A:4:GLY:C	3:A:383:NTN:CI4[2_555]	1.83	0.37
1:A:8:LYS:CE	1:A:149:TYR:CB[2_555]	1.83	0.37
1:A:8:LYS:CB	1:A:149:TYR:N[2_555]	1.83	0.37
1:A:10:LYS:CG	1:A:25:GLU:C[2_555]	1.83	0.37
1:A:37:ARG:CZ	3:A:383:NTN:NI1[2_555]	1.83	0.37
1:A:92:LEU:CG	1:A:102:VAL:CA[2_556]	1.83	0.37
1:A:95:PRO:CB	1:A:110:PHE:N[2_556]	1.83	0.37
1:A:105:HIS:CD2	1:A:157:VAL:CB[2_556]	1.83	0.37
1:A:112:LEU:CA	1:A:319:PHE:CB[2_556]	1.83	0.37
1:A:113:LYS:CE	1:A:321:GLY:CA[2_556]	1.83	0.37
1:A:178:THR:O	3:A:386:NTN:CI5[2_556]	1.83	0.37
1:A:8:LYS:CD	1:A:149:TYR:CA[2_555]	1.84	0.36
1:A:10:LYS:CG	1:A:26:VAL:CA[2_555]	1.84	0.36
1:A:11:ALA:O	1:A:25:GLU:OE2[2_555]	1.84	0.36
1:A:11:ALA:O	1:A:25:GLU:CB[2_555]	1.84	0.36
1:A:12:ALA:N	1:A:25:GLU:CD[2_555]	1.84	0.36
1:A:23:ILE:CA	1:A:133:ARG:NH2[2_555]	1.84	0.36
1:A:27:GLU:CD	1:A:353:GLU:CB[2_555]	1.84	0.36
1:A:96:GLN:CB	1:A:323:LYS:NZ[2_556]	1.84	0.36
1:A:99:LYS:CG	1:A:327:SER:O[2_556]	1.84	0.36
1:A:101:ARG:NH1	1:A:173:GLY:O[2_556]	1.84	0.36
1:A:104:LYS:C	1:A:325:LYS:CA[2_556]	1.84	0.36
1:A:112:LEU:O	1:A:319:PHE:CA[2_556]	1.84	0.36
1:A:122:THR:CB	1:A:315:LYS:O[2_556]	1.84	0.36
1:A:8:LYS:CB	1:A:148:GLN:CB[2_555]	1.85	0.35
1:A:35:GLU:O	3:A:391:NTN:CI4[2_556]	1.85	0.35
1:A:135:LYS:N	1:A:305:PRO:CG[2_556]	1.85	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:288:VAL:C	3:A:382:NTN:CI5[2_556]	1.85	0.35
1:A:1:SER:CA	1:A:40:MET:N[2_555]	1.86	0.34
1:A:5:LYS:CA	3:A:383:NTN:NI2[2_555]	1.86	0.34
1:A:97:CYS:CB	1:A:323:LYS:N[2_556]	1.86	0.34
1:A:97:CYS:SG	1:A:323:LYS:N[2_556]	1.86	0.34
1:A:99:LYS:C	1:A:327:SER:CB[2_556]	1.86	0.34
1:A:313:THR:N	3:A:382:NTN:CI1[2_556]	1.86	0.34
1:A:96:GLN:N	1:A:108:GLY:O[2_556]	1.87	0.33
1:A:100:CYS:SG	1:A:319:PHE:CD2[2_556]	1.87	0.33
1:A:113:LYS:CE	1:A:321:GLY:N[2_556]	1.87	0.33
1:A:5:LYS:N	3:A:383:NTN:CI5[2_555]	1.88	0.32
1:A:7:ILE:C	1:A:148:GLN:CD[2_555]	1.88	0.32
1:A:8:LYS:NZ	1:A:149:TYR:C[2_555]	1.88	0.32
1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB[2_555]	1.88	0.32
1:A:11:ALA:N	1:A:25:GLU:CG[2_555]	1.88	0.32
1:A:27:GLU:OE1	1:A:353:GLU:CB[2_555]	1.88	0.32
1:A:100:CYS:CA	1:A:319:PHE:CE2[2_556]	1.88	0.32
1:A:100:CYS:CB	1:A:319:PHE:CZ[2_556]	1.88	0.32
1:A:103:CYS:O	1:A:326:ASP:N[2_556]	1.88	0.32
1:A:103:CYS:CB	1:A:323:LYS:C[2_556]	1.88	0.32
1:A:104:LYS:CE	1:A:329:PRO:N[2_556]	1.88	0.32
1:A:112:LEU:CG	1:A:319:PHE:CG[2_556]	1.88	0.32
1:A:124:GLN:CG	1:A:317:ALA:CB[2_556]	1.88	0.32
1:A:166:LEU:C	3:A:377:NTN:CI3[2_555]	1.88	0.32
1:A:321:GLY:N	3:A:386:NTN:CI1[2_556]	1.88	0.32
1:A:32:LYS:CE	1:A:313:THR:CB[2_556]	1.89	0.31
1:A:94:THR:CB	1:A:111:CYS:C[2_556]	1.89	0.31
1:A:99:LYS:O	1:A:322:PHE:CB[2_556]	1.89	0.31
1:A:101:ARG:CZ	1:A:173:GLY:O[2_556]	1.89	0.31
1:A:105:HIS:CD2	1:A:157:VAL:CG1[2_556]	1.89	0.31
1:A:149:TYR:C	3:A:378:NTN:NI1[2_555]	1.89	0.31
1:A:150:THR:C	3:A:378:NTN:CI3[2_555]	1.89	0.31
1:A:35:GLU:OE2	1:A:315:LYS:NZ[2_556]	1.90	0.30
1:A:95:PRO:CA	1:A:110:PHE:N[2_556]	1.90	0.30
1:A:320:GLY:C	3:A:386:NTN:CI1[2_556]	1.90	0.30
1:A:2:THR:N	1:A:39:LYS:CB[2_555]	1.91	0.29
1:A:8:LYS:N	1:A:148:GLN:CG[2_555]	1.91	0.29
1:A:10:LYS:CE	1:A:26:VAL:CG1[2_555]	1.91	0.29
1:A:95:PRO:CG	1:A:109:ASN:OD1[2_556]	1.91	0.29
1:A:96:GLN:CA	1:A:108:GLY:O[2_556]	1.91	0.29
1:A:178:THR:C	3:A:386:NTN:CI5[2_556]	1.91	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:282:CYS:SG	3:A:382:NTN:CI5[2_556]	1.91	0.29
1:A:95:PRO:CA	1:A:109:ASN:CA[2_556]	1.92	0.28
1:A:103:CYS:N	1:A:324:SER:C[2_556]	1.92	0.28
1:A:103:CYS:SG	1:A:323:LYS:C[2_556]	1.92	0.28
1:A:107:GLU:O	1:A:157:VAL:N[2_556]	1.92	0.28
1:A:107:GLU:C	1:A:156:SER:CA[2_556]	1.92	0.28
1:A:178:THR:O	3:A:386:NTN:CI4[2_556]	1.92	0.28
1:A:331:LEU:CD1	3:A:385:NTN:NI1[2_556]	1.92	0.28
1:A:10:LYS:CD	1:A:26:VAL:N[2_555]	1.93	0.27
1:A:34:HIS:O	3:A:391:NTN:CI6[2_556]	1.93	0.27
1:A:35:GLU:CA	3:A:391:NTN:CI3[2_556]	1.93	0.27
1:A:92:LEU:CD2	1:A:101:ARG:CA[2_556]	1.93	0.27
1:A:95:PRO:CB	1:A:109:ASN:CG[2_556]	1.93	0.27
1:A:96:GLN:OE1	1:A:96:GLN:OE1[2_556]	1.93	0.27
1:A:103:CYS:CB	1:A:324:SER:C[2_556]	1.93	0.27
1:A:104:LYS:N	1:A:325:LYS:C[2_556]	1.93	0.27
1:A:105:HIS:ND1	1:A:158:ALA:N[2_556]	1.93	0.27
1:A:106:PRO:CA	3:A:397:NTN:NI1[2_556]	1.93	0.27
1:A:114:ASN:ND2	1:A:116:LEU:CD1[2_556]	1.93	0.27
1:A:23:ILE:CB	1:A:133:ARG:CD[2_555]	1.94	0.26
1:A:98:GLY:N	1:A:323:LYS:N[2_556]	1.94	0.26
1:A:100:CYS:SG	1:A:319:PHE:CE2[2_556]	1.94	0.26
1:A:110:PHE:CD1	1:A:114:ASN:ND2[2_556]	1.94	0.26
1:A:113:LYS:C	1:A:318:ILE:CB[2_556]	1.94	0.26
1:A:114:ASN:CA	1:A:318:ILE:CG2[2_556]	1.94	0.26
1:A:125:ASP:C	1:A:290:VAL:CB[2_556]	1.94	0.26
1:A:127:THR:N	1:A:315:LYS:N[2_556]	1.94	0.26
1:A:1:SER:CA	1:A:39:LYS:N[2_555]	1.95	0.25
1:A:10:LYS:NZ	1:A:26:VAL:CG2[2_555]	1.95	0.25
1:A:92:LEU:CG	1:A:102:VAL:N[2_556]	1.95	0.25
1:A:94:THR:N	1:A:110:PHE:O[2_556]	1.95	0.25
1:A:96:GLN:N	1:A:109:ASN:CB[2_556]	1.95	0.25
1:A:97:CYS:CB	1:A:322:PHE:N[2_556]	1.95	0.25
1:A:103:CYS:CA	1:A:324:SER:OG[2_556]	1.95	0.25
1:A:104:LYS:CB	1:A:329:PRO:CD[2_556]	1.95	0.25
1:A:107:GLU:O	1:A:155:ILE:C[2_556]	1.95	0.25
1:A:122:THR:OG1	1:A:315:LYS:O[2_556]	1.95	0.25
1:A:127:THR:CB	1:A:314:TRP:N[2_556]	1.95	0.25
1:A:41:VAL:CB	3:A:377:NTN:NI1[2_555]	1.96	0.24
1:A:95:PRO:CA	1:A:108:GLY:C[2_556]	1.96	0.24
1:A:114:ASN:O	1:A:318:ILE:CB[2_556]	1.96	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:134:GLY:C	1:A:305:PRO:CG[2_556]	1.96	0.24
1:A:94:THR:CB	1:A:111:CYS:N[2_556]	1.97	0.23
1:A:126:GLY:C	1:A:314:TRP:CD1[2_556]	1.97	0.23
1:A:129:ARG:CZ	1:A:313:THR:OG1[2_556]	1.97	0.23
1:A:150:THR:N	3:A:378:NTN:CI1[2_555]	1.97	0.23
1:A:8:LYS:O	1:A:148:GLN:CG[2_555]	1.98	0.22
1:A:35:GLU:N	3:A:391:NTN:CI6[2_556]	1.98	0.22
1:A:95:PRO:CB	1:A:109:ASN:C[2_556]	1.98	0.22
1:A:97:CYS:SG	1:A:322:PHE:CB[2_556]	1.98	0.22
1:A:105:HIS:ND1	1:A:157:VAL:CB[2_556]	1.98	0.22
1:A:113:LYS:N	1:A:318:ILE:C[2_556]	1.98	0.22
1:A:150:THR:O	3:A:378:NTN:NI1[2_555]	1.98	0.22
1:A:150:THR:CA	3:A:378:NTN:CI1[2_555]	1.98	0.22
1:A:23:ILE:O	1:A:25:GLU:O[2_555]	1.99	0.21
1:A:35:GLU:CB	3:A:391:NTN:CI4[2_556]	1.99	0.21
1:A:94:THR:CB	1:A:111:CYS:CA[2_556]	1.99	0.21
1:A:104:LYS:CD	1:A:327:SER:O[2_556]	1.99	0.21
1:A:105:HIS:NE2	1:A:157:VAL:CG2[2_556]	1.99	0.21
1:A:127:THR:CA	1:A:314:TRP:CD1[2_556]	1.99	0.21
1:A:151:VAL:CB	3:A:378:NTN:CI3[2_555]	1.99	0.21
1:A:7:ILE:C	1:A:148:GLN:CB[2_555]	2.00	0.20
1:A:12:ALA:CA	1:A:25:GLU:OE1[2_555]	2.00	0.20
1:A:34:HIS:O	3:A:391:NTN:CI1[2_556]	2.00	0.20
1:A:37:ARG:NH2	3:A:383:NTN:CI1[2_555]	2.00	0.20
1:A:94:THR:CG2	1:A:111:CYS:C[2_556]	2.00	0.20
1:A:114:ASN:O	1:A:318:ILE:CG1[2_556]	2.00	0.20
1:A:124:GLN:CB	1:A:186:VAL:CG1[2_556]	2.00	0.20
1:A:328:VAL:CG1	3:A:385:NTN:NI2[2_556]	2.00	0.20
1:A:34:HIS:CD2	1:A:188:LYS:CB[2_556]	2.01	0.19
1:A:34:HIS:CE1	1:A:188:LYS:CE[2_556]	2.01	0.19
1:A:97:CYS:N	1:A:323:LYS:CG[2_556]	2.01	0.19
1:A:99:LYS:CG	1:A:327:SER:CA[2_556]	2.01	0.19
1:A:103:CYS:N	1:A:324:SER:CA[2_556]	2.01	0.19
1:A:108:GLY:N	1:A:155:ILE:CA[2_556]	2.01	0.19
1:A:129:ARG:NH2	1:A:313:THR:CB[2_556]	2.01	0.19
1:A:151:VAL:CA	3:A:378:NTN:CI4[2_555]	2.01	0.19
1:A:151:VAL:CA	3:A:378:NTN:CI3[2_555]	2.01	0.19
1:A:8:LYS:N	1:A:148:GLN:CA[2_555]	2.02	0.18
1:A:23:ILE:CA	1:A:133:ARG:NE[2_555]	2.02	0.18
1:A:27:GLU:OE1	1:A:353:GLU:CA[2_555]	2.02	0.18
1:A:95:PRO:C	1:A:108:GLY:O[2_556]	2.02	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:97:CYS:O	1:A:323:LYS:N[2_556]	2.02	0.18
1:A:104:LYS:O	1:A:325:LYS:O[2_556]	2.02	0.18
1:A:105:HIS:N	1:A:325:LYS:CG[2_556]	2.02	0.18
1:A:112:LEU:CG	1:A:319:PHE:CE1[2_556]	2.02	0.18
1:A:172:ILE:CB	3:A:385:NTN:CI3[2_556]	2.02	0.18
1:A:1:SER:OG	1:A:40:MET:CB[2_555]	2.03	0.17
1:A:1:SER:N	1:A:39:LYS:C[2_555]	2.03	0.17
1:A:4:GLY:CA	3:A:383:NTN:CI4[2_555]	2.03	0.17
1:A:35:GLU:CA	3:A:391:NTN:CI5[2_556]	2.03	0.17
1:A:97:CYS:N	1:A:323:LYS:CA[2_556]	2.03	0.17
1:A:104:LYS:C	1:A:325:LYS:O[2_556]	2.03	0.17
1:A:112:LEU:C	1:A:319:PHE:N[2_556]	2.03	0.17
1:A:124:GLN:O	1:A:290:VAL:CG1[2_556]	2.03	0.17
1:A:136:PRO:CG	1:A:303:MET:SD[2_556]	2.03	0.17
1:A:328:VAL:CG1	3:A:385:NTN:CI6[2_556]	2.03	0.17
1:A:5:LYS:NZ	1:A:41:VAL:CA[2_555]	2.04	0.16
1:A:8:LYS:C	1:A:148:GLN:CB[2_555]	2.04	0.16
1:A:8:LYS:CG	1:A:148:GLN:N[2_555]	2.04	0.16
1:A:8:LYS:CE	1:A:149:TYR:N[2_555]	2.04	0.16
1:A:8:LYS:O	1:A:10:LYS:O[2_555]	2.04	0.16
1:A:10:LYS:CB	1:A:26:VAL:CA[2_555]	2.04	0.16
1:A:11:ALA:N	1:A:25:GLU:OE2[2_555]	2.04	0.16
1:A:27:GLU:CG	1:A:353:GLU:CG[2_555]	2.04	0.16
1:A:32:LYS:NZ	1:A:287:GLY:O[2_556]	2.04	0.16
1:A:96:GLN:CA	1:A:323:LYS:CG[2_556]	2.04	0.16
1:A:101:ARG:N	1:A:328:VAL:CG2[2_556]	2.04	0.16
1:A:112:LEU:O	1:A:318:ILE:C[2_556]	2.04	0.16
1:A:172:ILE:CB	3:A:385:NTN:CI4[2_556]	2.04	0.16
1:A:8:LYS:C	1:A:148:GLN:CD[2_555]	2.05	0.15
1:A:34:HIS:N	3:A:391:NTN:CI1[2_556]	2.05	0.15
1:A:104:LYS:CE	1:A:327:SER:C[2_556]	2.05	0.15
1:A:112:LEU:CD1	1:A:319:PHE:CE1[2_556]	2.05	0.15
1:A:120:ARG:NH1	1:A:291:ILE:C[2_556]	2.05	0.15
1:A:122:THR:CG2	1:A:291:ILE:CG1[2_556]	2.05	0.15
1:A:127:THR:O	1:A:314:TRP:CA[2_556]	2.05	0.15
1:A:151:VAL:CB	3:A:378:NTN:NI2[2_555]	2.05	0.15
1:A:23:ILE:CA	1:A:133:ARG:NH1[2_555]	2.06	0.14
1:A:92:LEU:CD1	1:A:102:VAL:O[2_556]	2.06	0.14
1:A:99:LYS:N	1:A:323:LYS:C[2_556]	2.06	0.14
1:A:99:LYS:CA	1:A:327:SER:CA[2_556]	2.06	0.14
1:A:105:HIS:CG	1:A:157:VAL:N[2_556]	2.06	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:124:GLN:OE1	1:A:316:GLY:O[2_556]	2.06	0.14
1:A:124:GLN:N	1:A:316:GLY:N[2_556]	2.06	0.14
1:A:125:ASP:CB	1:A:290:VAL:CG2[2_556]	2.06	0.14
1:A:287:GLY:O	3:A:382:NTN:CI2[2_556]	2.06	0.14
1:A:34:HIS:CE1	1:A:188:LYS:CD[2_556]	2.07	0.13
1:A:94:THR:C	1:A:110:PHE:C[2_556]	2.07	0.13
1:A:113:LYS:NZ	1:A:320:GLY:C[2_556]	2.07	0.13
1:A:114:ASN:C	1:A:318:ILE:CD1[2_556]	2.07	0.13
1:A:127:THR:CA	1:A:314:TRP:C[2_556]	2.07	0.13
1:A:10:LYS:CG	1:A:26:VAL:CG2[2_555]	2.08	0.12
1:A:23:ILE:N	1:A:133:ARG:CZ[2_555]	2.08	0.12
1:A:96:GLN:C	1:A:323:LYS:CB[2_556]	2.08	0.12
1:A:97:CYS:CA	1:A:322:PHE:C[2_556]	2.08	0.12
1:A:99:LYS:N	1:A:327:SER:CB[2_556]	2.08	0.12
1:A:107:GLU:C	1:A:155:ILE:CA[2_556]	2.08	0.12
1:A:107:GLU:CB	1:A:154:GLU:N[2_556]	2.08	0.12
1:A:113:LYS:C	1:A:318:ILE:O[2_556]	2.08	0.12
1:A:1:SER:C	1:A:39:LYS:CG[2_555]	2.09	0.11
1:A:41:VAL:CG1	3:A:377:NTN:CI1[2_555]	2.09	0.11
1:A:97:CYS:CB	1:A:322:PHE:O[2_556]	2.09	0.11
1:A:103:CYS:O	1:A:325:LYS:CB[2_556]	2.09	0.11
1:A:103:CYS:O	1:A:325:LYS:C[2_556]	2.09	0.11
1:A:104:LYS:CG	1:A:327:SER:N[2_556]	2.09	0.11
1:A:125:ASP:OD1	1:A:315:LYS:N[2_556]	2.09	0.11
1:A:125:ASP:O	1:A:290:VAL:CB[2_556]	2.09	0.11
1:A:125:ASP:CA	1:A:290:VAL:CB[2_556]	2.09	0.11
1:A:4:GLY:N	3:A:383:NTN:NI2[2_555]	2.10	0.10
1:A:37:ARG:NE	3:A:383:NTN:NI1[2_555]	2.10	0.10
1:A:95:PRO:CA	1:A:109:ASN:C[2_556]	2.10	0.10
1:A:97:CYS:N	1:A:323:LYS:N[2_556]	2.10	0.10
1:A:98:GLY:CA	1:A:323:LYS:CB[2_556]	2.10	0.10
1:A:101:ARG:NH2	1:A:173:GLY:O[2_556]	2.10	0.10
1:A:103:CYS:CA	1:A:324:SER:CB[2_556]	2.10	0.10
1:A:106:PRO:CB	3:A:397:NTN:NI1[2_556]	2.10	0.10
1:A:107:GLU:CA	1:A:156:SER:N[2_556]	2.10	0.10
1:A:124:GLN:CA	1:A:316:GLY:O[2_556]	2.10	0.10
1:A:135:LYS:N	1:A:305:PRO:CB[2_556]	2.10	0.10
1:A:185:LYS:NZ	3:A:397:NTN:NI2[2_556]	2.10	0.10
1:A:331:LEU:CB	3:A:385:NTN:CI1[2_556]	2.10	0.10
1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:C[2_555]	2.11	0.09
1:A:34:HIS:CB	3:A:391:NTN:NI1[2_556]	2.11	0.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:92:LEU:CB	1:A:102:VAL:CB[2_556]	2.11	0.09
1:A:95:PRO:C	1:A:109:ASN:C[2_556]	2.11	0.09
1:A:100:CYS:SG	1:A:324:SER:CB[2_556]	2.11	0.09
1:A:103:CYS:CB	1:A:324:SER:CB[2_556]	2.11	0.09
1:A:104:LYS:CA	1:A:324:SER:O[2_556]	2.11	0.09
1:A:105:HIS:C	1:A:157:VAL:O[2_556]	2.11	0.09
1:A:110:PHE:CE2	1:A:116:LEU:CG[2_556]	2.11	0.09
1:A:127:THR:OG1	1:A:289:SER:O[2_556]	2.11	0.09
1:A:312:ARG:CA	3:A:382:NTN:NI1[2_556]	2.11	0.09
1:A:4:GLY:N	3:A:383:NTN:CI4[2_555]	2.12	0.08
1:A:12:ALA:CA	1:A:133:ARG:NH1[2_555]	2.12	0.08
1:A:104:LYS:CD	1:A:328:VAL:C[2_556]	2.12	0.08
1:A:112:LEU:CD1	1:A:173:GLY:O[2_556]	2.12	0.08
1:A:120:ARG:CZ	1:A:292:VAL:N[2_556]	2.12	0.08
1:A:179:GLY:O	3:A:386:NTN:NI2[2_556]	2.12	0.08
1:A:5:LYS:CD	3:A:383:NTN:CI5[2_555]	2.13	0.07
1:A:7:ILE:CD1	1:A:39:LYS:CE[2_555]	2.13	0.07
1:A:8:LYS:CG	1:A:148:GLN:C[2_555]	2.13	0.07
1:A:24:GLU:OE2	3:A:379:NTN:CI2[2_555]	2.13	0.07
1:A:27:GLU:OE2	1:A:309:LEU:CD2[2_556]	2.13	0.07
1:A:34:HIS:CG	3:A:391:NTN:CI1[2_556]	2.13	0.07
1:A:35:GLU:N	3:A:391:NTN:CI5[2_556]	2.13	0.07
1:A:105:HIS:CA	1:A:325:LYS:CG[2_556]	2.13	0.07
1:A:109:ASN:ND2	1:A:113:LYS:CG[2_556]	2.13	0.07
1:A:127:THR:C	1:A:314:TRP:O[2_556]	2.13	0.07
1:A:127:THR:O	1:A:315:LYS:N[2_556]	2.13	0.07
1:A:172:ILE:CD1	3:A:385:NTN:CI3[2_556]	2.13	0.07
1:A:11:ALA:C	1:A:25:GLU:CG[2_555]	2.14	0.06
1:A:23:ILE:CD1	1:A:133:ARG:CB[2_555]	2.14	0.06
1:A:39:LYS:CE	1:A:74:GLU:OE1[2_555]	2.14	0.06
1:A:105:HIS:N	1:A:325:LYS:CA[2_556]	2.14	0.06
1:A:123:MET:CA	1:A:315:LYS:C[2_556]	2.14	0.06
1:A:127:THR:CB	1:A:289:SER:O[2_556]	2.14	0.06
1:A:136:PRO:CB	1:A:303:MET:CE[2_556]	2.14	0.06
1:A:5:LYS:CG	1:A:41:VAL:CG1[2_555]	2.15	0.05
1:A:35:GLU:CD	3:A:391:NTN:CI5[2_556]	2.15	0.05
1:A:94:THR:OG1	1:A:112:LEU:CA[2_556]	2.15	0.05
1:A:104:LYS:NZ	1:A:328:VAL:C[2_556]	2.15	0.05
1:A:105:HIS:NE2	1:A:157:VAL:N[2_556]	2.15	0.05
1:A:109:ASN:C	1:A:111:CYS:CB[2_556]	2.15	0.05
1:A:127:THR:CB	1:A:313:THR:O[2_556]	2.15	0.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:132:CYS:SG	3:A:379:NTN:NI1[2_555]	2.15	0.05
1:A:149:TYR:C	3:A:378:NTN:CI1[2_555]	2.15	0.05
1:A:185:LYS:CE	3:A:397:NTN:NI2[2_556]	2.15	0.05
1:A:288:VAL:O	3:A:382:NTN:CI5[2_556]	2.15	0.05
3:A:390:NTN:NI1	3:A:397:NTN:CI5[2_556]	2.15	0.05
1:A:9:CYS:SG	1:A:148:GLN:OE1[2_555]	2.16	0.04
1:A:23:ILE:CB	1:A:133:ARG:CB[2_555]	2.16	0.04
1:A:27:GLU:OE1	1:A:353:GLU:CD[2_555]	2.16	0.04
1:A:34:HIS:NE2	1:A:188:LYS:CE[2_556]	2.16	0.04
1:A:34:HIS:N	3:A:391:NTN:CI2[2_556]	2.16	0.04
1:A:97:CYS:C	1:A:323:LYS:CA[2_556]	2.16	0.04
1:A:112:LEU:O	1:A:319:PHE:CB[2_556]	2.16	0.04
1:A:10:LYS:CD	1:A:26:VAL:CG1[2_555]	2.17	0.03
1:A:23:ILE:CB	1:A:133:ARG:CZ[2_555]	2.17	0.03
1:A:82:THR:CG2	1:A:106:PRO:CB[2_556]	2.17	0.03
1:A:92:LEU:CG	1:A:101:ARG:C[2_556]	2.17	0.03
1:A:99:LYS:CA	1:A:323:LYS:O[2_556]	2.17	0.03
1:A:99:LYS:NZ	1:A:331:LEU:CD2[2_556]	2.17	0.03
1:A:105:HIS:ND1	1:A:157:VAL:CG2[2_556]	2.17	0.03
1:A:120:ARG:NE	1:A:291:ILE:C[2_556]	2.17	0.03
1:A:123:MET:C	1:A:315:LYS:CA[2_556]	2.17	0.03
1:A:320:GLY:CA	3:A:386:NTN:CI1[2_556]	2.17	0.03
1:A:94:THR:CB	1:A:112:LEU:N[2_556]	2.18	0.02
1:A:94:THR:CG2	1:A:111:CYS:O[2_556]	2.18	0.02
1:A:105:HIS:CA	1:A:157:VAL:O[2_556]	2.18	0.02
1:A:106:PRO:C	1:A:154:GLU:C[2_556]	2.18	0.02
1:A:120:ARG:NH2	1:A:292:VAL:C[2_556]	2.18	0.02
1:A:124:GLN:N	1:A:316:GLY:O[2_556]	2.18	0.02
1:A:127:THR:N	1:A:314:TRP:CD1[2_556]	2.18	0.02
1:A:151:VAL:CG2	3:A:378:NTN:CI5[2_555]	2.18	0.02
1:A:10:LYS:C	1:A:25:GLU:CG[2_555]	2.19	0.01
1:A:74:GLU:OE2	3:A:383:NTN:NI1[2_555]	2.19	0.01
1:A:98:GLY:CA	1:A:323:LYS:O[2_556]	2.19	0.01
1:A:104:LYS:NZ	1:A:329:PRO:O[2_556]	2.19	0.01
1:A:125:ASP:O	1:A:290:VAL:C[2_556]	2.19	0.01
1:A:133:ARG:N	1:A:353:GLU:OE2[2_555]	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	372/374 (100%)	247 (66%)	69 (18%)	56 (15%)	0 1

All (56) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	6	VAL
1	A	8	LYS
1	A	9	CYS
1	A	16	GLU
1	A	32	LYS
1	A	85	PRO
1	A	95	PRO
1	A	96	GLN
1	A	112	LEU
1	A	129	ARG
1	A	133	ARG
1	A	162	ALA
1	A	166	LEU
1	A	180	TYR
1	A	188	LYS
1	A	193	SER
1	A	226	LYS
1	A	301	LEU
1	A	320	GLY
1	A	338	LYS
1	A	339	LYS
1	A	365	GLY
1	A	366	GLU
1	A	17	GLU
1	A	20	PRO
1	A	86	GLY
1	A	99	LYS
1	A	117	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	153	ASP
1	A	172	ILE
1	A	253	VAL
1	A	256	GLU
1	A	257	MET
1	A	352	PHE
1	A	359	PHE
1	A	361	LEU
1	A	4	GLY
1	A	122	THR
1	A	165	PRO
1	A	217	ALA
1	A	230	ALA
1	A	274	THR
1	A	300	ASN
1	A	306	MET
1	A	36	VAL
1	A	179	GLY
1	A	189	VAL
1	A	243	PRO
1	A	160	ILE
1	A	224	ILE
1	A	346	ILE
1	A	73	VAL
1	A	202	GLY
1	A	319	PHE
1	A	175	GLY
1	A	344	PRO

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	308/308 (100%)	203 (66%)	105 (34%)	0 0

All (105) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	5	LYS
1	A	7	ILE
1	A	14	LEU
1	A	18	LYS
1	A	19	LYS
1	A	24	GLU
1	A	26	VAL
1	A	39	LYS
1	A	40	MET
1	A	47	ARG
1	A	50	ASP
1	A	52	VAL
1	A	56	THR
1	A	58	VAL
1	A	61	LEU
1	A	64	ILE
1	A	74	GLU
1	A	76	ILE
1	A	78	GLU
1	A	80	VAL
1	A	82	THR
1	A	83	VAL
1	A	87	ASP
1	A	89	VAL
1	A	93	PHE
1	A	96	GLN
1	A	99	LYS
1	A	101	ARG
1	A	102	VAL
1	A	107	GLU
1	A	112	LEU
1	A	113	LYS
1	A	118	MET
1	A	127	THR
1	A	129	ARG
1	A	131	THR
1	A	132	CYS
1	A	133	ARG
1	A	135	LYS
1	A	137	ILE
1	A	141	LEU
1	A	143	THR
1	A	147	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	160	ILE
1	A	166	LEU
1	A	167	GLU
1	A	168	LYS
1	A	169	VAL
1	A	171	LEU
1	A	174	CYS
1	A	176	PHE
1	A	177	SER
1	A	178	THR
1	A	185	LYS
1	A	186	VAL
1	A	188	LYS
1	A	191	GLN
1	A	200	LEU
1	A	205	LEU
1	A	207	VAL
1	A	218	ARG
1	A	219	ILE
1	A	222	VAL
1	A	225	ASN
1	A	228	LYS
1	A	231	LYS
1	A	233	LYS
1	A	235	VAL
1	A	242	ASN
1	A	251	GLN
1	A	253	VAL
1	A	254	LEU
1	A	255	THR
1	A	258	SER
1	A	267	GLU
1	A	269	ILE
1	A	272	LEU
1	A	273	ASP
1	A	274	THR
1	A	279	LEU
1	A	283	GLN
1	A	284	GLU
1	A	288	VAL
1	A	289	SER
1	A	295	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	301	LEU
1	A	304	ASN
1	A	306	MET
1	A	309	LEU
1	A	310	SER
1	A	313	THR
1	A	315	LYS
1	A	318	ILE
1	A	325	LYS
1	A	331	LEU
1	A	338	LYS
1	A	343	ASP
1	A	349	VAL
1	A	352	PHE
1	A	353	GLU
1	A	354	LYS
1	A	355	ILE
1	A	357	GLU
1	A	361	LEU
1	A	369	ARG

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (9) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	96	GLN
1	A	105	HIS
1	A	124	GLN
1	A	148	GLN
1	A	191	GLN
1	A	242	ASN
1	A	251	GLN
1	A	283	GLN
1	A	304	ASN

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 oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 25 ligands modelled in this entry, 2 are monoatomic - leaving 23 for Mogul analysis.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the Chemical Component Dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. 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 $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	$\# Z > 2$	Counts	RMSZ	$\# Z > 2$
3	NTN	A	390	1	7,8,9	1.39	2 (28%)	7,9,11	1.88	2 (28%)
3	NTN	A	395	1	7,8,9	2.25	4 (57%)	7,9,11	1.41	1 (14%)
3	NTN	A	398	1	7,8,9	1.43	2 (28%)	7,9,11	1.97	3 (42%)
3	NTN	A	399	1	7,8,9	1.27	2 (28%)	7,9,11	1.64	2 (28%)
3	NTN	A	394	1	7,8,9	1.36	2 (28%)	7,9,11	1.74	2 (28%)
3	NTN	A	381	1	7,8,9	1.64	3 (42%)	7,9,11	1.89	3 (42%)
3	NTN	A	386	1	7,8,9	1.40	2 (28%)	7,9,11	2.01	4 (57%)
3	NTN	A	387	1	7,8,9	1.46	2 (28%)	7,9,11	1.87	3 (42%)
3	NTN	A	380	1	7,8,9	1.37	2 (28%)	7,9,11	1.46	1 (14%)
3	NTN	A	384	1	7,8,9	1.43	2 (28%)	7,9,11	1.41	2 (28%)
3	NTN	A	396	1	7,8,9	1.28	2 (28%)	7,9,11	1.78	3 (42%)
3	NTN	A	377	1	7,8,9	1.48	2 (28%)	7,9,11	1.39	2 (28%)
3	NTN	A	382	1	7,8,9	1.33	2 (28%)	7,9,11	1.47	2 (28%)
3	NTN	A	388	1	7,8,9	1.57	2 (28%)	7,9,11	1.49	2 (28%)
3	NTN	A	392	1	7,8,9	1.45	2 (28%)	7,9,11	3.25	4 (57%)
3	NTN	A	378	1	7,8,9	2.52	5 (71%)	7,9,11	1.73	2 (28%)
3	NTN	A	379	1	7,8,9	1.50	2 (28%)	7,9,11	1.40	2 (28%)
3	NTN	A	389	1	7,8,9	2.04	4 (57%)	7,9,11	1.37	1 (14%)

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
3	NTN	A	397	1	7,8,9	1.32	2 (28%)	7,9,11	1.64	2 (28%)
3	NTN	A	385	1	7,8,9	1.46	3 (42%)	7,9,11	2.25	2 (28%)
3	NTN	A	383	1	7,8,9	1.48	2 (28%)	7,9,11	2.63	3 (42%)
3	NTN	A	393	1	7,8,9	1.56	2 (28%)	7,9,11	1.41	2 (28%)
3	NTN	A	391	1	7,8,9	2.07	3 (42%)	7,9,11	1.67	2 (28%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the Chemical Component Dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
3	NTN	A	390	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	395	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	398	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	399	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	394	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	381	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	386	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	387	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	380	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	384	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	396	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	377	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	382	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	388	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	392	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	378	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	379	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	389	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	397	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	385	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	383	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	393	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	391	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1

All (56) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
3	A	378	NTN	CI2-CI1	4.26	1.56	1.47
3	A	395	NTN	CI2-CI1	3.40	1.54	1.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
3	A	391	NTN	CI2-CI1	3.28	1.54	1.47
3	A	389	NTN	CI2-CI1	3.01	1.53	1.47
3	A	395	NTN	CI3-CI4	2.85	1.44	1.38
3	A	378	NTN	CI3-CI4	2.63	1.43	1.38
3	A	378	NTN	CI5-NI2	2.46	1.40	1.33
3	A	387	NTN	CI5-NI2	2.46	1.40	1.33
3	A	381	NTN	CI3-CI4	2.45	1.43	1.38
3	A	386	NTN	CI5-NI2	2.45	1.40	1.33
3	A	391	NTN	CI5-NI2	2.44	1.40	1.33
3	A	397	NTN	CI4-NI2	2.40	1.40	1.33
3	A	398	NTN	CI4-NI2	2.40	1.40	1.33
3	A	394	NTN	CI5-NI2	2.40	1.40	1.33
3	A	394	NTN	CI4-NI2	2.40	1.40	1.33
3	A	384	NTN	CI4-NI2	2.39	1.40	1.33
3	A	388	NTN	CI5-NI2	2.39	1.40	1.33
3	A	386	NTN	CI4-NI2	2.38	1.40	1.33
3	A	379	NTN	CI4-NI2	2.38	1.40	1.33
3	A	381	NTN	CI4-NI2	2.37	1.40	1.33
3	A	383	NTN	CI4-NI2	2.37	1.40	1.33
3	A	387	NTN	CI4-NI2	2.37	1.40	1.33
3	A	377	NTN	CI4-NI2	2.37	1.40	1.33
3	A	395	NTN	CI5-NI2	2.36	1.40	1.33
3	A	380	NTN	CI4-NI2	2.36	1.40	1.33
3	A	399	NTN	CI4-NI2	2.36	1.40	1.33
3	A	382	NTN	CI4-NI2	2.35	1.40	1.33
3	A	393	NTN	CI4-NI2	2.35	1.40	1.33
3	A	388	NTN	CI4-NI2	2.35	1.40	1.33
3	A	391	NTN	CI4-NI2	2.35	1.40	1.33
3	A	389	NTN	CI5-NI2	2.34	1.40	1.33
3	A	382	NTN	CI5-NI2	2.34	1.40	1.33
3	A	378	NTN	CI4-NI2	2.34	1.40	1.33
3	A	389	NTN	CI4-NI2	2.34	1.40	1.33
3	A	392	NTN	CI4-NI2	2.34	1.40	1.33
3	A	396	NTN	CI4-NI2	2.33	1.40	1.33
3	A	390	NTN	CI4-NI2	2.33	1.40	1.33
3	A	385	NTN	CI4-NI2	2.33	1.40	1.33
3	A	379	NTN	CI5-NI2	2.33	1.40	1.33
3	A	377	NTN	CI5-NI2	2.32	1.40	1.33
3	A	395	NTN	CI4-NI2	2.30	1.40	1.33
3	A	384	NTN	CI5-NI2	2.30	1.40	1.33
3	A	393	NTN	CI5-NI2	2.29	1.40	1.33
3	A	380	NTN	CI5-NI2	2.29	1.40	1.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
3	A	389	NTN	CI3-CI4	2.28	1.43	1.38
3	A	397	NTN	CI5-NI2	2.27	1.40	1.33
3	A	399	NTN	CI5-NI2	2.22	1.40	1.33
3	A	396	NTN	CI5-NI2	2.22	1.40	1.33
3	A	385	NTN	CI3-CI4	2.21	1.42	1.38
3	A	381	NTN	CI5-NI2	2.19	1.40	1.33
3	A	398	NTN	CI5-NI2	2.19	1.40	1.33
3	A	390	NTN	CI5-NI2	2.14	1.39	1.33
3	A	385	NTN	CI5-NI2	2.11	1.39	1.33
3	A	378	NTN	CI3-CI2	2.07	1.43	1.39
3	A	383	NTN	CI5-NI2	2.05	1.39	1.33
3	A	392	NTN	CI5-NI2	2.01	1.39	1.33

All (52) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
3	A	392	NTN	CI2-CI1-NI1	7.01	138.53	121.48
3	A	383	NTN	CI2-CI1-NI1	4.97	133.57	121.48
3	A	385	NTN	CI2-CI1-NI1	4.17	131.63	121.48
3	A	386	NTN	CI2-CI1-NI1	-3.25	113.59	121.48
3	A	381	NTN	CI2-CI1-NI1	3.20	129.25	121.48
3	A	398	NTN	CI6-CI2-CI3	3.10	122.25	117.65
3	A	390	NTN	CI2-CI1-NI1	3.03	128.85	121.48
3	A	383	NTN	CI6-CI2-CI3	2.99	122.09	117.65
3	A	387	NTN	CI2-CI1-NI1	-2.95	114.32	121.48
3	A	392	NTN	CI6-CI2-CI3	2.82	121.84	117.65
3	A	392	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.74	118.93	123.60
3	A	397	NTN	CI6-CI2-CI3	2.71	121.67	117.65
3	A	383	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.69	119.02	123.60
3	A	398	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.67	119.05	123.60
3	A	378	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.66	119.06	123.60
3	A	394	NTN	CI6-CI2-CI3	2.64	121.57	117.65
3	A	397	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.50	119.34	123.60
3	A	395	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.48	119.36	123.60
3	A	391	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.48	119.38	123.60
3	A	396	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.43	119.45	123.60
3	A	399	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.41	119.49	123.60
3	A	391	NTN	CI2-CI1-NI1	-2.40	115.65	121.48
3	A	396	NTN	CI6-CI2-CI3	2.38	121.18	117.65
3	A	386	NTN	CI6-CI2-CI3	2.37	121.17	117.65
3	A	394	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.35	119.58	123.60
3	A	389	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.35	119.59	123.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
3	A	399	NTN	CI6-CI2-CI3	2.34	121.12	117.65
3	A	378	NTN	CI2-CI1-NI1	-2.34	115.80	121.48
3	A	382	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.28	119.70	123.60
3	A	392	NTN	CI4-CI3-CI2	-2.26	117.24	119.63
3	A	398	NTN	CI2-CI1-NI1	2.25	126.95	121.48
3	A	386	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.24	119.78	123.60
3	A	390	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.23	119.80	123.60
3	A	385	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.21	119.83	123.60
3	A	380	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.20	119.84	123.60
3	A	387	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.17	119.90	123.60
3	A	393	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.15	119.92	123.60
3	A	388	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.14	119.94	123.60
3	A	387	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.14	119.95	123.60
3	A	384	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.13	119.97	123.60
3	A	377	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.13	119.97	123.60
3	A	396	NTN	CI2-CI1-NI1	2.12	126.63	121.48
3	A	379	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.11	120.00	123.60
3	A	393	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.09	120.03	123.60
3	A	379	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.09	120.04	123.60
3	A	384	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.09	120.04	123.60
3	A	388	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.08	120.05	123.60
3	A	381	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.08	120.05	123.60
3	A	382	NTN	CI6-CI2-CI3	2.06	120.71	117.65
3	A	386	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.05	120.10	123.60
3	A	381	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.04	120.11	123.60
3	A	377	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.04	120.11	123.60

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

14 monomers are involved in 154 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
3	A	390	NTN	0	4
3	A	399	NTN	2	0
3	A	381	NTN	3	0
3	A	386	NTN	0	14
3	A	387	NTN	1	0
3	A	377	NTN	0	10
3	A	382	NTN	0	13
3	A	378	NTN	0	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
3	A	379	NTN	0	16
3	A	389	NTN	2	0
3	A	397	NTN	0	8
3	A	385	NTN	0	13
3	A	383	NTN	1	18
3	A	391	NTN	1	33

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data

6.1 Protein, DNA and RNA chains

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.2 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.3 Carbohydrates

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.4 Ligands

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.5 Other polymers

EDS was not executed - this section is therefore empty.