



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 20, 2026 – 01:14 PM UTC

PDB ID : 4AQQ / pdb_00004aqq
Title : Dodecahedron formed of penton base protein from adenovirus Ad3
Authors : Burmeister, W.P.; Szolajska, E.; Zochowska, M.; Nerlo, B.; Andreev, I.; Schoehn, G.; Andrieu, J.-P.; Fender, P.; Naskalska, A.; Zubieta, C.; Cusack, S.; Chroboczek, J.
Deposited on : 2012-04-19
Resolution : 4.75 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/XrayValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

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

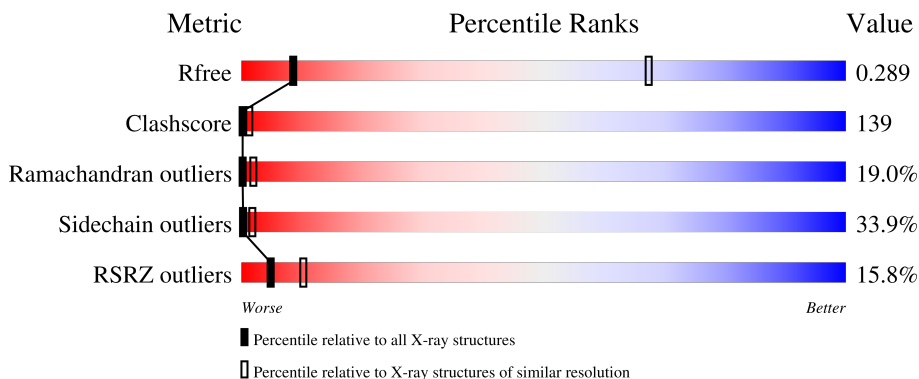
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 4.75 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
R_{free}	180053	1016 (5.58-3.94)
Clashscore	190562	1039 (5.56-3.96)
Ramachandran outliers	187476	1100 (5.58-3.90)
Sidechain outliers	187428	1081 (5.58-3.90)
RSRZ outliers	180081	1011 (5.58-3.94)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments of the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria respectively. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$. The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the electron density. The numeric value is given above the bar.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	509	

2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3725 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 L2 PROTEIN III (PENTON BASE).

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	462	Total	C	N	O	S	0	0	0
			3724	2353	636	721	14			

- Molecule 2 is CALCIUM ION (CCD ID: CA) (formula: Ca).

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

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 21 3	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	342.70Å 342.70Å 342.70Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	242.33 – 4.75 242.33 – 4.75	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.9 (242.33-4.75) 99.9 (242.33-4.75)	Depositor EDS
R_{merge}	0.21	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	2.30 (at 4.65Å)	Xtriage
Refinement program	REFMAC 5.6.0116	Depositor
R, R_{free}	0.291 , 0.290 0.291 , 0.289	Depositor DCC
R_{free} test set	3418 reflections (5.06%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	127.0	Xtriage
Anisotropy	0.000	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.32 , 11.4	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.44$, $\langle L^2 \rangle = 0.27$	Xtriage
Estimated twinning fraction	0.026 for l,-k,h	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.39	EDS
Total number of atoms	3725	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	56.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 1.28% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	0.94	3/3809 (0.1%)	1.69	108/5175 (2.1%)

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

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

All (3) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	115	GLU	CA-C	-6.04	1.44	1.52
1	A	441	MET	SD-CE	-5.98	1.64	1.79
1	A	115	GLU	N-CA	-5.60	1.39	1.46

All (108) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	84	TYR	N-CA-C	-22.49	86.84	111.36
1	A	157	VAL	N-CA-C	20.52	134.01	110.62
1	A	158	THR	N-CA-C	17.12	130.84	108.24
1	A	414	LEU	CA-C-N	-16.32	99.44	119.84
1	A	414	LEU	C-N-CA	-16.32	99.44	119.84
1	A	140	SER	N-CA-C	-15.00	92.44	110.44
1	A	414	LEU	N-CA-C	-13.31	92.96	110.40
1	A	116	ARG	N-CA-C	-12.37	95.04	111.74
1	A	520	ARG	N-CA-C	-11.14	99.98	112.57
1	A	308	THR	N-CA-C	-10.85	99.85	112.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	252	LEU	CA-C-N	-10.77	108.73	120.14
1	A	252	LEU	C-N-CA	-10.77	108.73	120.14
1	A	229	ASP	N-CA-C	-10.44	98.82	108.22
1	A	404	THR	N-CA-C	-10.16	100.03	111.71
1	A	63	LEU	N-CA-C	10.06	125.37	110.48
1	A	111	ILE	N-CA-C	-9.91	95.81	108.89
1	A	115	GLU	N-CA-C	9.57	131.18	110.80
1	A	50	GLU	N-CA-C	-9.17	95.39	109.24
1	A	387	ASN	N-CA-C	9.15	130.04	109.81
1	A	386	GLY	N-CA-C	9.01	134.53	113.18
1	A	114	ASP	N-CA-C	8.87	123.87	109.94
1	A	385	TYR	N-CA-C	8.86	122.21	111.40
1	A	215	ILE	N-CA-C	-8.36	102.19	110.30
1	A	83	ASN	N-CA-C	8.19	128.25	110.80
1	A	155	GLU	N-CA-C	8.19	128.25	110.80
1	A	197	ILE	N-CA-C	-8.19	102.07	111.00
1	A	416	ASP	N-CA-C	-8.06	103.53	112.72
1	A	313	THR	N-CA-C	-8.04	102.37	112.90
1	A	52	ARG	N-CA-C	-7.98	100.63	110.61
1	A	281	LYS	N-CA-C	-7.98	96.13	108.42
1	A	310	THR	N-CA-C	-7.96	101.75	114.09
1	A	51	GLY	N-CA-C	7.89	125.79	111.03
1	A	161	ASP	N-CA-C	-7.88	102.98	112.59
1	A	91	PHE	N-CA-C	-7.84	94.10	110.80
1	A	231	GLU	N-CA-C	7.74	120.39	111.11
1	A	159	VAL	N-CA-C	7.73	125.42	109.34
1	A	94	THR	N-CA-C	-7.60	99.78	110.50
1	A	279	GLY	N-CA-C	-7.52	95.36	113.18
1	A	124	LYS	N-CA-C	-7.51	99.34	110.46
1	A	200	ASN	N-CA-C	-7.40	102.20	112.12
1	A	84	TYR	CB-CA-C	-7.37	98.33	110.85
1	A	233	LYS	N-CA-C	-7.31	103.66	112.58
1	A	76	SER	N-CA-C	7.19	126.11	110.80
1	A	393	ARG	N-CA-C	-6.99	103.85	112.38
1	A	195	ASN	N-CA-C	-6.97	100.95	111.34
1	A	75	LYS	N-CA-C	-6.96	99.98	110.28
1	A	483	ALA	CA-C-N	-6.88	113.16	120.66
1	A	483	ALA	C-N-CA	-6.88	113.16	120.66
1	A	479	ILE	N-CA-C	6.85	118.71	108.23
1	A	95	VAL	N-CA-C	-6.82	105.44	113.42
1	A	274	HIS	CA-C-N	6.76	128.29	119.84
1	A	274	HIS	C-N-CA	6.76	128.29	119.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	89	SER	N-CA-C	-6.71	103.78	112.23
1	A	203	GLU	N-CA-C	6.58	119.30	111.33
1	A	182	GLY	N-CA-C	-6.56	101.92	110.45
1	A	280	PHE	N-CA-C	6.45	119.33	108.23
1	A	536	PRO	N-CA-C	-6.43	102.22	111.22
1	A	489	VAL	N-CA-C	6.39	117.30	107.78
1	A	472	PHE	CA-C-N	6.38	127.81	119.84
1	A	472	PHE	C-N-CA	6.38	127.81	119.84
1	A	111	ILE	CA-C-N	-6.38	113.50	123.13
1	A	111	ILE	C-N-CA	-6.38	113.50	123.13
1	A	62	PRO	N-CA-C	-6.35	99.39	112.47
1	A	101	PHE	N-CA-C	6.27	119.79	108.69
1	A	240	TYR	N-CA-C	-6.21	97.57	110.80
1	A	407	ALA	N-CA-C	-6.21	100.47	109.59
1	A	157	VAL	CB-CA-C	-6.18	103.95	112.04
1	A	90	ASN	N-CA-C	-6.16	99.71	109.07
1	A	234	LEU	N-CA-C	6.12	116.35	108.34
1	A	439	GLU	N-CA-C	-6.08	99.89	108.96
1	A	158	THR	CA-C-N	6.08	132.91	121.97
1	A	158	THR	C-N-CA	6.08	132.91	121.97
1	A	87	ASP	N-CA-C	6.07	123.74	110.80
1	A	113	PHE	CA-C-N	-6.07	111.08	122.73
1	A	113	PHE	C-N-CA	-6.07	111.08	122.73
1	A	168	ASP	N-CA-C	6.00	122.46	114.12
1	A	193	MET	N-CA-C	-5.97	104.69	111.14
1	A	526	TYR	N-CA-C	-5.95	106.07	113.15
1	A	184	PHE	N-CA-C	5.91	118.68	109.52
1	A	110	THR	N-CA-C	5.90	119.09	109.24
1	A	435	VAL	N-CA-C	5.87	116.64	108.89
1	A	433	TYR	N-CA-C	5.82	122.68	109.81
1	A	460	ARG	N-CA-C	-5.79	105.98	113.16
1	A	65	ASP	N-CA-C	5.77	122.28	113.51
1	A	351	LEU	N-CA-C	5.71	122.97	110.80
1	A	81	SER	N-CA-C	5.69	119.95	112.89
1	A	65	ASP	N-CA-CB	-5.60	108.50	114.10
1	A	236	MET	CA-C-N	-5.57	112.88	119.84
1	A	236	MET	C-N-CA	-5.57	112.88	119.84
1	A	483	ALA	N-CA-C	-5.53	102.65	110.29
1	A	494	PRO	N-CA-C	-5.52	101.11	112.47
1	A	378	SER	N-CA-C	5.49	118.05	108.76
1	A	212	GLU	N-CA-C	-5.48	104.73	111.75
1	A	60	LEU	N-CA-C	5.47	118.41	110.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	224	PHE	N-CA-C	-5.42	102.51	110.42
1	A	262	SER	N-CA-C	5.41	116.50	108.60
1	A	82	LEU	CA-C-N	-5.38	111.26	121.54
1	A	82	LEU	C-N-CA	-5.38	111.26	121.54
1	A	96	VAL	N-CA-C	-5.33	101.80	108.84
1	A	278	GLU	N-CA-C	5.28	122.04	110.80
1	A	232	THR	N-CA-C	-5.21	105.72	111.71
1	A	423	THR	N-CA-C	5.21	121.89	110.80
1	A	401	SER	N-CA-C	5.17	116.68	108.67
1	A	216	GLY	N-CA-C	5.10	122.36	115.32
1	A	112	ASN	N-CA-C	5.10	117.93	107.69
1	A	163	TYR	N-CA-C	-5.07	107.22	113.41
1	A	288	GLU	N-CA-C	-5.04	103.74	110.55
1	A	219	PHE	N-CA-C	-5.00	103.93	110.53

There are no chirality outliers.

All (1) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	528	TYR	Sidechain

5.2 Too-close contacts [i](#)

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	3724	0	3648	1025	0
2	A	1	0	0	0	0
All	All	3725	0	3648	1025	0

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 139.

All (1025) 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:129:THR:OG1	1:A:442:PRO:HG2	1.38	1.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:114:ASP:CG	1:A:115:GLU:H	1.34	1.23
1:A:105:GLU:O	1:A:108:THR:HG22	1.44	1.18
1:A:313:THR:HG23	1:A:348:LYS:HZ3	1.09	1.16
1:A:206:ARG:HB2	1:A:207:GLN:NE2	1.61	1.15
1:A:309:THR:CG2	1:A:351:LEU:HD22	1.79	1.12
1:A:202:LEU:HD12	1:A:203:GLU:H	1.09	1.12
1:A:235:ILE:HG12	1:A:295:LEU:HA	1.27	1.10
1:A:312:THR:OG1	1:A:348:LYS:HD3	1.48	1.10
1:A:381:LEU:HD12	1:A:381:LEU:H	0.98	1.10
1:A:206:ARG:HB2	1:A:207:GLN:HE21	1.08	1.08
1:A:199:ASP:HA	1:A:202:LEU:HD21	1.09	1.08
1:A:259:PHE:HB2	1:A:280:PHE:HE1	1.07	1.05
1:A:159:VAL:HA	1:A:162:THR:HB	1.37	1.05
1:A:226:LEU:HD23	1:A:227:GLY:H	1.22	1.05
1:A:501:THR:HG21	1:A:537:ARG:HH21	1.20	1.04
1:A:295:LEU:HD23	1:A:296:LEU:H	1.23	1.03
1:A:370:ASP:HB2	1:A:372:ILE:HD11	1.39	1.03
1:A:98:ASN:HD22	1:A:99:ASN:N	1.55	1.03
1:A:178:ILE:HD13	1:A:178:ILE:H	1.19	1.03
1:A:517:THR:HG21	1:A:521:ARG:HG2	1.38	1.02
1:A:309:THR:HG21	1:A:351:LEU:CD2	1.88	1.02
1:A:235:ILE:CG1	1:A:295:LEU:HA	1.88	1.02
1:A:429:GLN:HA	1:A:429:GLN:HE21	1.22	1.02
1:A:349:LYS:HA	1:A:351:LEU:HD21	1.41	1.01
1:A:348:LYS:HG3	1:A:350:GLU:OE1	1.59	1.01
1:A:71:LEU:HB3	1:A:532:GLY:O	1.61	1.00
1:A:424:PHE:CD2	1:A:434:PRO:HA	1.97	1.00
1:A:381:LEU:HD12	1:A:381:LEU:N	1.76	1.00
1:A:440:LEU:HD12	1:A:440:LEU:H	1.25	0.99
1:A:381:LEU:H	1:A:381:LEU:CD1	1.72	0.99
1:A:221:THR:O	1:A:222:ARG:HB2	1.59	0.98
1:A:309:THR:HG21	1:A:351:LEU:HD22	0.99	0.98
1:A:313:THR:HG23	1:A:348:LYS:NZ	1.76	0.98
1:A:101:PHE:HA	1:A:105:GLU:OE2	1.64	0.98
1:A:309:THR:O	1:A:348:LYS:N	1.97	0.98
1:A:259:PHE:HB2	1:A:280:PHE:CE1	1.97	0.97
1:A:98:ASN:ND2	1:A:100:ASP:H	1.61	0.97
1:A:239:VAL:HG13	1:A:476:GLN:HE22	1.28	0.97
1:A:413:SER:HA	1:A:436:VAL:HG23	1.47	0.96
1:A:131:MET:H	1:A:492:ASN:ND2	1.61	0.96
1:A:475:ASN:HB3	1:A:478:LEU:HD23	1.44	0.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:397:LEU:HD22	1:A:398:LEU:H	1.30	0.95
1:A:351:LEU:O	1:A:352:LYS:HB3	1.64	0.95
1:A:114:ASP:CG	1:A:115:GLU:N	2.14	0.95
1:A:199:ASP:CA	1:A:202:LEU:HD21	1.97	0.95
1:A:79:ILE:HD12	1:A:79:ILE:H	1.27	0.94
1:A:129:THR:HG22	1:A:527:VAL:HA	1.48	0.94
1:A:119:TRP:HA	1:A:539:LEU:HD12	1.49	0.93
1:A:422:VAL:HG22	1:A:423:THR:HG23	1.51	0.93
1:A:131:MET:HE1	1:A:138:MET:CG	1.99	0.92
1:A:517:THR:HG23	1:A:521:ARG:HA	1.52	0.92
1:A:397:LEU:HD22	1:A:398:LEU:N	1.85	0.91
1:A:171:LYS:HZ2	1:A:171:LYS:HA	1.35	0.91
1:A:273:ARG:C	1:A:275:PRO:HD2	1.97	0.90
1:A:501:THR:HG21	1:A:537:ARG:NH2	1.86	0.90
1:A:383:TYR:CE1	1:A:393:ARG:HG3	2.06	0.90
1:A:93:THR:HG22	1:A:94:THR:O	1.72	0.90
1:A:99:ASN:HD22	1:A:99:ASN:H	0.94	0.90
1:A:355:PRO:HG3	1:A:371:LYS:HB3	1.54	0.89
1:A:263:ARG:HD2	1:A:406:GLY:HA3	1.52	0.89
1:A:356:LEU:HD12	1:A:357:GLU:N	1.88	0.89
1:A:309:THR:CB	1:A:348:LYS:HG2	2.03	0.88
1:A:161:ASP:OD1	1:A:164:ASP:HB3	1.73	0.88
1:A:278:GLU:OE1	1:A:280:PHE:HB3	1.74	0.88
1:A:134:VAL:HG22	1:A:182:GLY:O	1.74	0.88
1:A:403:VAL:CG2	1:A:488:THR:HB	2.04	0.87
1:A:376:TYR:CE2	1:A:477:ILE:HG21	2.08	0.87
1:A:99:ASN:H	1:A:99:ASN:ND2	1.72	0.87
1:A:67:THR:O	1:A:536:PRO:HD2	1.74	0.87
1:A:517:THR:CG2	1:A:521:ARG:HA	2.04	0.87
1:A:199:ASP:HA	1:A:202:LEU:CD2	2.02	0.87
1:A:177:PHE:N	1:A:177:PHE:HD1	1.71	0.86
1:A:233:LYS:O	1:A:372:ILE:HG22	1.75	0.86
1:A:196:ALA:HA	1:A:199:ASP:HB2	1.58	0.86
1:A:518:ASP:O	1:A:521:ARG:N	2.09	0.86
1:A:102:THR:HG23	1:A:105:GLU:CD	2.00	0.85
1:A:161:ASP:O	1:A:165:HIS:N	2.07	0.85
1:A:307:ASP:C	1:A:309:THR:N	2.32	0.85
1:A:307:ASP:C	1:A:309:THR:H	1.80	0.85
1:A:135:ASN:ND2	1:A:138:MET:H	1.75	0.85
1:A:418:MET:HE3	1:A:502:LEU:HB2	1.59	0.85
1:A:131:MET:H	1:A:492:ASN:HD21	1.20	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:304:SER:OG	1:A:351:LEU:HB3	1.77	0.85
1:A:410:VAL:HG23	1:A:517:THR:O	1.77	0.85
1:A:159:VAL:CA	1:A:162:THR:HB	2.06	0.84
1:A:188:MET:O	1:A:192:LEU:HD23	1.76	0.84
1:A:235:ILE:HD13	1:A:235:ILE:N	1.92	0.84
1:A:295:LEU:HD23	1:A:296:LEU:N	1.92	0.84
1:A:63:LEU:HD22	1:A:64:TYR:H	1.43	0.84
1:A:313:THR:N	1:A:348:LYS:HZ1	1.75	0.84
1:A:171:LYS:HA	1:A:171:LYS:NZ	1.93	0.84
1:A:218:LYS:O	1:A:250:VAL:HG23	1.78	0.83
1:A:131:MET:HE1	1:A:138:MET:HG3	1.57	0.83
1:A:187:THR:CG2	1:A:484:PRO:HD3	2.07	0.83
1:A:403:VAL:HG21	1:A:488:THR:HB	1.59	0.83
1:A:187:THR:HA	1:A:190:ILE:HD13	1.60	0.83
1:A:190:ILE:HD12	1:A:190:ILE:H	1.43	0.83
1:A:72:VAL:HA	1:A:531:LEU:HD22	1.61	0.83
1:A:123:LEU:HD12	1:A:123:LEU:C	2.04	0.83
1:A:240:TYR:CE2	1:A:295:LEU:HD12	2.14	0.83
1:A:292:ILE:HB	1:A:374:THR:HG23	1.60	0.83
1:A:309:THR:HA	1:A:348:LYS:HD2	1.61	0.83
1:A:270:ILE:HD11	1:A:379:TRP:CD1	2.14	0.82
1:A:232:THR:HG21	1:A:236:MET:SD	2.19	0.82
1:A:139:PHE:HD1	1:A:139:PHE:N	1.77	0.82
1:A:202:LEU:HD12	1:A:203:GLU:N	1.94	0.82
1:A:235:ILE:HD11	1:A:295:LEU:N	1.95	0.82
1:A:293:PRO:O	1:A:373:ASN:HA	1.80	0.82
1:A:309:THR:CA	1:A:348:LYS:HG2	2.10	0.81
1:A:147:VAL:HG22	1:A:148:MET:N	1.94	0.81
1:A:232:THR:OG1	1:A:234:LEU:HB2	1.80	0.81
1:A:291:ASN:HD21	1:A:377:ARG:HE	1.28	0.81
1:A:504:LEU:HD12	1:A:504:LEU:H	1.45	0.81
1:A:533:ILE:HD13	1:A:533:ILE:O	1.80	0.81
1:A:89:SER:HB3	1:A:523:THR:HG22	1.62	0.81
1:A:363:ARG:HB2	1:A:475:ASN:HD21	1.46	0.81
1:A:518:ASP:OD1	1:A:520:ARG:HG3	1.81	0.81
1:A:230:PRO:HG2	1:A:231:GLU:H	1.46	0.81
1:A:236:MET:HA	1:A:296:LEU:HD23	1.63	0.80
1:A:287:LEU:H	1:A:287:LEU:HD22	1.45	0.80
1:A:72:VAL:HA	1:A:531:LEU:CD2	2.12	0.80
1:A:177:PHE:N	1:A:177:PHE:CD1	2.45	0.80
1:A:417:MET:HB2	1:A:512:GLN:NE2	1.96	0.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:98:ASN:HD22	1:A:98:ASN:C	1.90	0.79
1:A:235:ILE:HD11	1:A:295:LEU:H	1.45	0.79
1:A:215:ILE:HG22	1:A:216:GLY:N	1.97	0.79
1:A:133:ASN:HB2	1:A:490:SER:CB	2.12	0.79
1:A:291:ASN:ND2	1:A:377:ARG:HE	1.81	0.79
1:A:294:ALA:HA	1:A:374:THR:HG22	1.65	0.79
1:A:63:LEU:HD13	1:A:64:TYR:O	1.83	0.79
1:A:478:LEU:N	1:A:478:LEU:HD22	1.98	0.79
1:A:313:THR:CA	1:A:348:LYS:HZ1	1.95	0.79
1:A:198:ILE:O	1:A:202:LEU:HG	1.83	0.78
1:A:246:HIS:NE2	1:A:398:LEU:HD11	1.98	0.78
1:A:74:ASN:CG	1:A:529:LYS:HZ3	1.91	0.78
1:A:356:LEU:HD12	1:A:357:GLU:H	1.46	0.78
1:A:376:TYR:CD2	1:A:477:ILE:HG13	2.18	0.78
1:A:309:THR:HB	1:A:348:LYS:HG2	1.63	0.78
1:A:493:VAL:HG22	1:A:494:PRO:HD2	1.65	0.78
1:A:130:ASN:HA	1:A:492:ASN:HD21	1.49	0.78
1:A:133:ASN:HB2	1:A:490:SER:HB3	1.66	0.78
1:A:177:PHE:HD1	1:A:177:PHE:H	1.26	0.78
1:A:267:LEU:HD12	1:A:267:LEU:O	1.84	0.78
1:A:274:HIS:O	1:A:276:PHE:N	2.17	0.78
1:A:313:THR:H	1:A:348:LYS:HE3	1.48	0.78
1:A:496:LEU:HD23	1:A:496:LEU:N	2.00	0.78
1:A:246:HIS:ND1	1:A:247:PRO:O	2.17	0.77
1:A:133:ASN:HB3	1:A:183:ASN:HB2	1.64	0.77
1:A:238:GLY:HA2	1:A:295:LEU:HD21	1.65	0.77
1:A:159:VAL:H	1:A:162:THR:HB	1.50	0.77
1:A:199:ASP:C	1:A:202:LEU:HD11	2.09	0.77
1:A:369:GLU:O	1:A:371:LYS:N	2.15	0.77
1:A:250:VAL:HG13	1:A:378:SER:HB2	1.65	0.77
1:A:370:ASP:HB2	1:A:372:ILE:CD1	2.14	0.76
1:A:136:GLU:HA	1:A:141:ASN:CB	2.15	0.76
1:A:264:LEU:O	1:A:267:LEU:HB3	1.84	0.76
1:A:178:ILE:HD13	1:A:178:ILE:N	2.00	0.76
1:A:193:MET:C	1:A:195:ASN:H	1.92	0.76
1:A:137:TYR:HE1	1:A:522:ARG:CZ	1.98	0.76
1:A:451:GLU:C	1:A:453:ALA:H	1.92	0.76
1:A:136:GLU:HB2	1:A:141:ASN:ND2	2.00	0.76
1:A:224:PHE:O	1:A:225:ARG:HB3	1.83	0.76
1:A:171:LYS:HZ1	1:A:172:TYR:H	1.32	0.76
1:A:309:THR:C	1:A:348:LYS:HD2	2.10	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:88:HIS:CD2	1:A:528:TYR:O	2.39	0.76
1:A:348:LYS:NZ	1:A:348:LYS:HB3	1.97	0.76
1:A:270:ILE:HD11	1:A:379:TRP:CG	2.20	0.76
1:A:248:ASP:OD2	1:A:380:TYR:HB2	1.85	0.76
1:A:363:ARG:CB	1:A:475:ASN:HD21	1.98	0.75
1:A:99:ASN:N	1:A:99:ASN:HD22	1.76	0.75
1:A:274:HIS:N	1:A:275:PRO:CD	2.50	0.75
1:A:414:LEU:HD12	1:A:414:LEU:C	2.12	0.75
1:A:392:ILE:N	1:A:392:ILE:HD12	2.01	0.74
1:A:267:LEU:HD12	1:A:267:LEU:C	2.12	0.74
1:A:88:HIS:HD2	1:A:528:TYR:O	1.69	0.74
1:A:409:GLN:HA	1:A:440:LEU:HA	1.69	0.74
1:A:159:VAL:N	1:A:162:THR:HB	2.02	0.74
1:A:61:SER:O	1:A:63:LEU:N	2.21	0.74
1:A:356:LEU:HD11	1:A:358:LYS:O	1.87	0.74
1:A:102:THR:O	1:A:103:PRO:C	2.30	0.74
1:A:125:THR:HG21	1:A:499:HIS:CE1	2.22	0.74
1:A:131:MET:N	1:A:492:ASN:HD21	1.85	0.74
1:A:202:LEU:CD1	1:A:203:GLU:H	1.96	0.74
1:A:203:GLU:C	1:A:204:ILE:HD12	2.13	0.74
1:A:108:THR:HG23	1:A:109:GLN:N	2.03	0.74
1:A:79:ILE:HD12	1:A:79:ILE:N	2.03	0.73
1:A:440:LEU:HD12	1:A:440:LEU:N	2.02	0.73
1:A:198:ILE:C	1:A:200:ASN:H	1.97	0.73
1:A:246:HIS:CD2	1:A:398:LEU:HD11	2.22	0.73
1:A:448:PHE:CD1	1:A:448:PHE:N	2.54	0.73
1:A:119:TRP:CA	1:A:539:LEU:HD12	2.18	0.73
1:A:119:TRP:HA	1:A:539:LEU:CD1	2.16	0.73
1:A:293:PRO:O	1:A:294:ALA:HB2	1.89	0.73
1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:CD1	2.57	0.73
1:A:187:THR:HG21	1:A:484:PRO:HD3	1.69	0.73
1:A:135:ASN:HD21	1:A:138:MET:N	1.86	0.73
1:A:263:ARG:O	1:A:265:SER:N	2.21	0.73
1:A:517:THR:HG21	1:A:521:ARG:CG	2.16	0.73
1:A:201:TYR:CD2	1:A:202:LEU:N	2.56	0.73
1:A:294:ALA:O	1:A:295:LEU:HB2	1.88	0.73
1:A:147:VAL:HG22	1:A:148:MET:H	1.53	0.72
1:A:449:TYR:HA	1:A:486:ILE:HD12	1.70	0.72
1:A:91:PHE:CE1	1:A:514:VAL:HG13	2.23	0.72
1:A:190:ILE:H	1:A:190:ILE:CD1	2.03	0.72
1:A:274:HIS:N	1:A:275:PRO:HD2	2.01	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:287:LEU:HD22	1:A:287:LEU:N	2.04	0.72
1:A:119:TRP:HB2	1:A:537:ARG:O	1.90	0.72
1:A:164:ASP:O	1:A:167:GLU:HG2	1.89	0.72
1:A:226:LEU:HD23	1:A:227:GLY:N	2.01	0.72
1:A:252:LEU:HD21	1:A:376:TYR:CD1	2.24	0.72
1:A:493:VAL:CG2	1:A:494:PRO:HD2	2.19	0.72
1:A:104:THR:O	1:A:107:SER:HB3	1.90	0.72
1:A:235:ILE:HD12	1:A:293:PRO:HB2	1.72	0.72
1:A:397:LEU:HD13	1:A:397:LEU:C	2.13	0.72
1:A:135:ASN:ND2	1:A:138:MET:N	2.37	0.72
1:A:367:VAL:O	1:A:368:LEU:HB2	1.90	0.72
1:A:58:SER:O	1:A:59:GLU:C	2.32	0.72
1:A:179:LEU:HD22	1:A:192:LEU:HB3	1.70	0.72
1:A:223:ASN:O	1:A:226:LEU:HD22	1.89	0.72
1:A:477:ILE:HG22	1:A:478:LEU:HD22	1.71	0.72
1:A:108:THR:HG23	1:A:109:GLN:H	1.54	0.71
1:A:223:ASN:C	1:A:223:ASN:HD22	1.97	0.71
1:A:104:THR:OG1	1:A:105:GLU:N	2.24	0.71
1:A:78:ASP:OD2	1:A:93:THR:HG23	1.89	0.71
1:A:187:THR:O	1:A:190:ILE:N	2.23	0.71
1:A:416:ASP:C	1:A:512:GLN:HE22	1.98	0.71
1:A:142:LYS:O	1:A:143:PHE:HB3	1.89	0.71
1:A:348:LYS:HZ3	1:A:348:LYS:HB3	1.55	0.71
1:A:119:TRP:CE3	1:A:538:VAL:HG13	2.26	0.71
1:A:232:THR:HG23	1:A:234:LEU:H	1.55	0.71
1:A:125:THR:HG21	1:A:412:TRP:CZ3	2.26	0.70
1:A:145:ALA:HA	1:A:174:TRP:HZ3	1.53	0.70
1:A:178:ILE:H	1:A:178:ILE:CD1	1.97	0.70
1:A:493:VAL:HG22	1:A:494:PRO:CD	2.21	0.70
1:A:233:LYS:HB2	1:A:372:ILE:HG21	1.72	0.70
1:A:235:ILE:CD1	1:A:293:PRO:HB2	2.21	0.70
1:A:236:MET:HA	1:A:296:LEU:CD2	2.20	0.70
1:A:357:GLU:O	1:A:365:TYR:HB2	1.91	0.70
1:A:422:VAL:HG22	1:A:423:THR:N	2.05	0.70
1:A:189:THR:O	1:A:192:LEU:HB2	1.91	0.70
1:A:280:PHE:C	1:A:281:LYS:HG2	2.16	0.70
1:A:223:ASN:HB3	1:A:226:LEU:HD13	1.72	0.70
1:A:83:ASN:OD1	1:A:85:GLN:HG3	1.92	0.70
1:A:139:PHE:N	1:A:139:PHE:CD1	2.51	0.70
1:A:197:ILE:HD12	1:A:217:VAL:O	1.92	0.70
1:A:287:LEU:H	1:A:287:LEU:CD2	2.04	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:349:LYS:CA	1:A:351:LEU:HD21	2.19	0.70
1:A:474:GLU:CD	1:A:474:GLU:N	2.50	0.69
1:A:83:ASN:OD1	1:A:86:ASN:O	2.10	0.69
1:A:91:PHE:C	1:A:92:LEU:HG	2.16	0.69
1:A:131:MET:N	1:A:492:ASN:ND2	2.40	0.69
1:A:475:ASN:CB	1:A:478:LEU:HD23	2.20	0.69
1:A:146:ARG:HB3	1:A:174:TRP:CE3	2.28	0.69
1:A:197:ILE:CD1	1:A:217:VAL:O	2.40	0.69
1:A:130:ASN:CA	1:A:492:ASN:HD21	2.05	0.69
1:A:220:ASP:HB2	1:A:481:PRO:HG3	1.73	0.69
1:A:225:ARG:O	1:A:228:TRP:HB2	1.92	0.69
1:A:292:ILE:HG12	1:A:376:TYR:O	1.91	0.69
1:A:122:GLN:C	1:A:534:VAL:HG23	2.17	0.69
1:A:147:VAL:HG11	1:A:200:ASN:HD21	1.58	0.69
1:A:422:VAL:HG22	1:A:423:THR:CG2	2.21	0.69
1:A:177:PHE:HE2	1:A:197:ILE:HA	1.58	0.69
1:A:238:GLY:HA2	1:A:295:LEU:CD2	2.22	0.69
1:A:259:PHE:O	1:A:261:GLU:N	2.26	0.69
1:A:360:SER:C	1:A:362:SER:H	1.99	0.69
1:A:197:ILE:HG23	1:A:198:ILE:N	2.08	0.69
1:A:351:LEU:O	1:A:352:LYS:CB	2.39	0.69
1:A:56:ARG:O	1:A:57:TYR:HB3	1.92	0.69
1:A:383:TYR:HA	1:A:392:ILE:HD13	1.74	0.68
1:A:234:LEU:HD21	1:A:294:ALA:HB3	1.76	0.68
1:A:417:MET:CA	1:A:512:GLN:HE22	2.06	0.68
1:A:230:PRO:O	1:A:233:LYS:HG2	1.94	0.68
1:A:293:PRO:O	1:A:294:ALA:CB	2.41	0.68
1:A:160:ASN:ND2	1:A:160:ASN:H	1.90	0.68
1:A:119:TRP:HB3	1:A:538:VAL:HA	1.76	0.68
1:A:376:TYR:HE2	1:A:477:ILE:HG21	1.58	0.68
1:A:472:PHE:O	1:A:479:ILE:HG12	1.93	0.68
1:A:238:GLY:C	1:A:295:LEU:HD21	2.19	0.68
1:A:471:ARG:C	1:A:473:PRO:HD3	2.19	0.68
1:A:174:TRP:C	1:A:175:PHE:HD1	2.02	0.67
1:A:187:THR:O	1:A:188:MET:C	2.38	0.67
1:A:478:LEU:HD22	1:A:478:LEU:H	1.58	0.67
1:A:478:LEU:H	1:A:478:LEU:CD2	2.08	0.67
1:A:383:TYR:HE2	1:A:398:LEU:N	1.91	0.67
1:A:440:LEU:H	1:A:440:LEU:CD1	2.05	0.67
1:A:352:LYS:C	1:A:354:GLN:N	2.49	0.67
1:A:76:SER:O	1:A:79:ILE:HD13	1.93	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:106:ALA:O	1:A:107:SER:C	2.36	0.67
1:A:132:PRO:HD3	1:A:526:TYR:CD2	2.30	0.67
1:A:177:PHE:CE2	1:A:197:ILE:HA	2.30	0.67
1:A:238:GLY:CA	1:A:295:LEU:HD21	2.24	0.67
1:A:259:PHE:O	1:A:262:SER:N	2.27	0.67
1:A:157:VAL:C	1:A:158:THR:HG22	2.20	0.67
1:A:304:SER:CB	1:A:351:LEU:HB3	2.24	0.67
1:A:313:THR:N	1:A:348:LYS:HE3	2.09	0.67
1:A:395:TRP:HD1	1:A:396:THR:HG22	1.60	0.67
1:A:296:LEU:HD12	1:A:297:ASP:N	2.09	0.66
1:A:367:VAL:O	1:A:374:THR:HA	1.95	0.66
1:A:263:ARG:HD2	1:A:406:GLY:CA	2.25	0.66
1:A:117:SER:HA	1:A:541:SER:HA	1.78	0.66
1:A:518:ASP:O	1:A:520:ARG:N	2.29	0.66
1:A:75:LYS:O	1:A:79:ILE:CD1	2.42	0.66
1:A:252:LEU:HD21	1:A:376:TYR:CE1	2.31	0.66
1:A:267:LEU:C	1:A:269:GLY:H	2.03	0.66
1:A:309:THR:CA	1:A:348:LYS:HD2	2.24	0.66
1:A:89:SER:CB	1:A:523:THR:HG22	2.26	0.66
1:A:263:ARG:O	1:A:264:LEU:C	2.38	0.66
1:A:416:ASP:HB2	1:A:512:GLN:OE1	1.95	0.66
1:A:143:PHE:CD1	1:A:143:PHE:C	2.73	0.66
1:A:195:ASN:O	1:A:198:ILE:N	2.29	0.66
1:A:272:LYS:HD2	1:A:280:PHE:HB2	1.78	0.66
1:A:302:GLU:O	1:A:305:LYS:HB2	1.96	0.66
1:A:424:PHE:HD2	1:A:434:PRO:HA	1.57	0.66
1:A:433:TYR:O	1:A:434:PRO:O	2.13	0.66
1:A:495:ALA:C	1:A:496:LEU:HD23	2.21	0.66
1:A:85:GLN:CD	1:A:86:ASN:H	2.03	0.65
1:A:187:THR:HG23	1:A:484:PRO:HD3	1.77	0.65
1:A:304:SER:O	1:A:351:LEU:HD13	1.96	0.65
1:A:224:PHE:O	1:A:225:ARG:CB	2.43	0.65
1:A:376:TYR:HD2	1:A:477:ILE:HG13	1.62	0.65
1:A:51:GLY:O	1:A:52:ARG:HD3	1.96	0.65
1:A:147:VAL:HG11	1:A:200:ASN:ND2	2.12	0.65
1:A:246:HIS:C	1:A:246:HIS:HD1	2.05	0.65
1:A:418:MET:CE	1:A:502:LEU:HB2	2.25	0.65
1:A:283:MET:O	1:A:284:TYR:C	2.39	0.65
1:A:75:LYS:O	1:A:79:ILE:HD11	1.96	0.65
1:A:187:THR:O	1:A:189:THR:N	2.30	0.65
1:A:417:MET:HE3	1:A:534:VAL:HG11	1.78	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:452:GLN:HG3	1:A:455:TYR:CD2	2.31	0.65
1:A:263:ARG:NH1	1:A:405:CYS:O	2.26	0.65
1:A:194:ASN:ND2	1:A:219:PHE:O	2.29	0.65
1:A:309:THR:HA	1:A:348:LYS:CD	2.27	0.65
1:A:212:GLU:HA	1:A:215:ILE:CD1	2.27	0.65
1:A:226:LEU:CD2	1:A:226:LEU:H	2.09	0.65
1:A:475:ASN:O	1:A:477:ILE:N	2.30	0.65
1:A:170:LEU:HD22	1:A:170:LEU:H	1.62	0.64
1:A:294:ALA:O	1:A:295:LEU:CB	2.44	0.64
1:A:102:THR:O	1:A:105:GLU:HG2	1.97	0.64
1:A:136:GLU:HA	1:A:141:ASN:HB2	1.79	0.64
1:A:226:LEU:HD21	1:A:241:THR:HG23	1.78	0.64
1:A:246:HIS:ND1	1:A:246:HIS:C	2.54	0.64
1:A:313:THR:CG2	1:A:348:LYS:NZ	2.58	0.64
1:A:379:TRP:HH2	1:A:396:THR:HG1	1.45	0.64
1:A:85:GLN:CG	1:A:86:ASN:H	2.09	0.64
1:A:248:ASP:OD1	1:A:249:ILE:N	2.30	0.64
1:A:293:PRO:O	1:A:372:ILE:O	2.16	0.64
1:A:201:TYR:O	1:A:202:LEU:C	2.41	0.64
1:A:126:ILE:HG22	1:A:531:LEU:H	1.63	0.64
1:A:226:LEU:CD2	1:A:226:LEU:N	2.60	0.64
1:A:288:GLU:O	1:A:290:GLY:N	2.26	0.64
1:A:132:PRO:HD3	1:A:526:TYR:HD2	1.63	0.64
1:A:479:ILE:O	1:A:480:ARG:C	2.41	0.64
1:A:226:LEU:HD22	1:A:226:LEU:H	1.62	0.64
1:A:272:LYS:O	1:A:275:PRO:HD3	1.97	0.64
1:A:472:PHE:N	1:A:473:PRO:HD3	2.13	0.64
1:A:96:VAL:HG11	1:A:109:GLN:OE1	1.98	0.64
1:A:147:VAL:CG2	1:A:148:MET:H	2.10	0.63
1:A:185:SER:O	1:A:186:ALA:C	2.41	0.63
1:A:534:VAL:O	1:A:534:VAL:HG13	1.99	0.63
1:A:143:PHE:HD1	1:A:143:PHE:O	1.80	0.63
1:A:363:ARG:HD3	1:A:475:ASN:CG	2.24	0.63
1:A:198:ILE:HG22	1:A:202:LEU:HD23	1.81	0.63
1:A:229:ASP:CG	1:A:232:THR:HG22	2.23	0.63
1:A:138:MET:HB3	1:A:263:ARG:NH2	2.13	0.63
1:A:194:ASN:HD21	1:A:219:PHE:N	1.97	0.63
1:A:252:LEU:HD22	1:A:253:PRO:HD3	1.81	0.63
1:A:157:VAL:HB	1:A:158:THR:HG22	1.79	0.63
1:A:259:PHE:O	1:A:260:THR:C	2.42	0.63
1:A:89:SER:O	1:A:516:VAL:HG12	1.97	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:106:ALA:O	1:A:109:GLN:HG2	1.99	0.63
1:A:147:VAL:CG2	1:A:148:MET:N	2.60	0.63
1:A:111:ILE:CG2	1:A:111:ILE:O	2.46	0.63
1:A:391:GLY:O	1:A:392:ILE:HG23	1.99	0.63
1:A:429:GLN:HA	1:A:429:GLN:NE2	2.02	0.63
1:A:167:GLU:O	1:A:167:GLU:HG3	1.99	0.63
1:A:158:THR:OG1	1:A:159:VAL:N	2.31	0.62
1:A:179:LEU:CD2	1:A:192:LEU:HB3	2.29	0.62
1:A:143:PHE:HE2	1:A:219:PHE:CZ	2.17	0.62
1:A:478:LEU:N	1:A:478:LEU:CD2	2.63	0.62
1:A:98:ASN:ND2	1:A:98:ASN:C	2.57	0.62
1:A:216:GLY:HA2	1:A:252:LEU:HB2	1.81	0.62
1:A:125:THR:CG2	1:A:499:HIS:CE1	2.82	0.62
1:A:161:ASP:O	1:A:165:HIS:HB2	1.99	0.62
1:A:226:LEU:HG	1:A:241:THR:CG2	2.30	0.62
1:A:379:TRP:CZ2	1:A:383:TYR:HD2	2.17	0.62
1:A:501:THR:O	1:A:502:LEU:HD23	1.98	0.62
1:A:61:SER:O	1:A:62:PRO:C	2.43	0.62
1:A:270:ILE:HD11	1:A:379:TRP:CD2	2.34	0.62
1:A:313:THR:N	1:A:348:LYS:NZ	2.46	0.62
1:A:223:ASN:O	1:A:224:PHE:C	2.43	0.62
1:A:352:LYS:O	1:A:353:ILE:C	2.41	0.62
1:A:355:PRO:O	1:A:356:LEU:C	2.42	0.62
1:A:195:ASN:O	1:A:198:ILE:HB	1.99	0.62
1:A:226:LEU:CD2	1:A:241:THR:HG23	2.29	0.62
1:A:349:LYS:C	1:A:351:LEU:CD2	2.73	0.62
1:A:92:LEU:HD12	1:A:92:LEU:H	1.65	0.62
1:A:100:ASP:O	1:A:101:PHE:CD1	2.52	0.62
1:A:135:ASN:OD1	1:A:137:TYR:N	2.30	0.62
1:A:136:GLU:HA	1:A:141:ASN:HB3	1.82	0.62
1:A:212:GLU:O	1:A:215:ILE:HD13	1.99	0.62
1:A:263:ARG:HD2	1:A:405:CYS:O	1.99	0.62
1:A:387:ASN:O	1:A:388:PRO:C	2.43	0.62
1:A:92:LEU:HD12	1:A:92:LEU:N	2.14	0.61
1:A:309:THR:C	1:A:348:LYS:CD	2.72	0.61
1:A:370:ASP:OD1	1:A:372:ILE:HD12	1.99	0.61
1:A:383:TYR:CD1	1:A:393:ARG:HG3	2.36	0.61
1:A:206:ARG:CB	1:A:207:GLN:HE21	2.00	0.61
1:A:125:THR:CG2	1:A:499:HIS:HE1	2.13	0.61
1:A:222:ARG:HD3	1:A:482:PRO:HD3	1.82	0.61
1:A:119:TRP:N	1:A:119:TRP:HD1	1.98	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:273:ARG:C	1:A:275:PRO:CD	2.73	0.61
1:A:376:TYR:CE2	1:A:477:ILE:HG13	2.35	0.61
1:A:137:TYR:CE1	1:A:522:ARG:NH2	2.69	0.61
1:A:193:MET:C	1:A:195:ASN:N	2.59	0.61
1:A:508:ILE:HG23	1:A:512:GLN:NE2	2.16	0.61
1:A:226:LEU:HG	1:A:241:THR:HG23	1.81	0.61
1:A:270:ILE:HG22	1:A:270:ILE:O	1.99	0.61
1:A:143:PHE:CD1	1:A:143:PHE:O	2.53	0.60
1:A:152:LYS:C	1:A:169:ILE:HG22	2.26	0.60
1:A:239:VAL:CG1	1:A:476:GLN:HE22	2.09	0.60
1:A:226:LEU:CG	1:A:241:THR:HG23	2.31	0.60
1:A:386:GLY:O	1:A:388:PRO:HD2	2.01	0.60
1:A:65:ASP:O	1:A:66:THR:CB	2.49	0.60
1:A:134:VAL:HG22	1:A:182:GLY:C	2.26	0.60
1:A:194:ASN:OD1	1:A:218:LYS:HG2	2.01	0.60
1:A:414:LEU:HD11	1:A:418:MET:HG2	1.82	0.60
1:A:269:GLY:C	1:A:399:THR:HG23	2.27	0.60
1:A:84:TYR:O	1:A:85:GLN:C	2.42	0.60
1:A:352:LYS:O	1:A:354:GLN:N	2.34	0.60
1:A:533:ILE:HD13	1:A:533:ILE:C	2.26	0.60
1:A:380:TYR:CE1	1:A:384:ASN:ND2	2.69	0.60
1:A:524:CYS:SG	1:A:527:VAL:HG23	2.41	0.60
1:A:65:ASP:O	1:A:66:THR:HB	2.01	0.60
1:A:369:GLU:C	1:A:371:LYS:H	2.07	0.60
1:A:493:VAL:HG22	1:A:494:PRO:N	2.17	0.60
1:A:98:ASN:ND2	1:A:100:ASP:N	2.43	0.59
1:A:307:ASP:O	1:A:311:GLU:HG3	2.02	0.59
1:A:313:THR:N	1:A:348:LYS:CE	2.66	0.59
1:A:365:TYR:C	1:A:366:ASN:HD22	2.09	0.59
1:A:475:ASN:O	1:A:476:GLN:C	2.45	0.59
1:A:507:SER:C	1:A:508:ILE:HD13	2.27	0.59
1:A:76:SER:HA	1:A:79:ILE:CD1	2.32	0.59
1:A:215:ILE:CG2	1:A:216:GLY:N	2.66	0.59
1:A:117:SER:CB	1:A:541:SER:HA	2.33	0.59
1:A:131:MET:HE1	1:A:138:MET:HG2	1.84	0.59
1:A:145:ALA:CA	1:A:174:TRP:HZ3	2.15	0.59
1:A:151:ARG:C	1:A:152:LYS:HG3	2.28	0.59
1:A:263:ARG:CD	1:A:406:GLY:HA3	2.31	0.59
1:A:427:THR:OG1	1:A:428:ARG:N	2.34	0.59
1:A:102:THR:H	1:A:105:GLU:CD	2.09	0.59
1:A:170:LEU:HD13	1:A:170:LEU:N	2.18	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:90:ASN:CB	1:A:515:THR:OG1	2.51	0.59
1:A:125:THR:CG2	1:A:412:TRP:CZ3	2.86	0.59
1:A:287:LEU:HD12	1:A:379:TRP:HA	1.83	0.59
1:A:367:VAL:O	1:A:373:ASN:O	2.20	0.59
1:A:252:LEU:O	1:A:284:TYR:CD1	2.56	0.58
1:A:366:ASN:N	1:A:366:ASN:ND2	2.50	0.58
1:A:378:SER:HB3	1:A:381:LEU:HD13	1.85	0.58
1:A:248:ASP:OD2	1:A:378:SER:OG	2.21	0.58
1:A:270:ILE:HD11	1:A:379:TRP:CE2	2.38	0.58
1:A:502:LEU:HB3	1:A:503:PRO:HD2	1.84	0.58
1:A:526:TYR:N	1:A:526:TYR:CD1	2.70	0.58
1:A:120:GLY:HA3	1:A:502:LEU:O	2.03	0.58
1:A:383:TYR:CD1	1:A:383:TYR:C	2.81	0.58
1:A:405:CYS:O	1:A:405:CYS:SG	2.60	0.58
1:A:63:LEU:HD13	1:A:64:TYR:N	2.19	0.58
1:A:198:ILE:O	1:A:200:ASN:N	2.35	0.58
1:A:225:ARG:HD3	1:A:385:TYR:CD2	2.38	0.58
1:A:436:VAL:HG12	1:A:502:LEU:HD12	1.84	0.58
1:A:234:LEU:CD2	1:A:294:ALA:HB3	2.33	0.58
1:A:143:PHE:HE2	1:A:219:PHE:HZ	1.50	0.58
1:A:199:ASP:O	1:A:202:LEU:HD11	2.03	0.58
1:A:221:THR:O	1:A:222:ARG:CB	2.42	0.58
1:A:131:MET:HA	1:A:526:TYR:HD2	1.66	0.58
1:A:171:LYS:HZ1	1:A:172:TYR:N	2.00	0.58
1:A:371:LYS:C	1:A:372:ILE:HG13	2.28	0.58
1:A:114:ASP:H	1:A:119:TRP:HZ2	1.50	0.57
1:A:132:PRO:HD2	1:A:526:TYR:HE2	1.69	0.57
1:A:235:ILE:HD13	1:A:235:ILE:H	1.67	0.57
1:A:263:ARG:C	1:A:265:SER:N	2.59	0.57
1:A:193:MET:O	1:A:195:ASN:N	2.37	0.57
1:A:365:TYR:O	1:A:366:ASN:C	2.48	0.57
1:A:399:THR:OG1	1:A:400:THR:N	2.37	0.57
1:A:101:PHE:CA	1:A:105:GLU:OE2	2.46	0.57
1:A:309:THR:HA	1:A:348:LYS:HG2	1.86	0.57
1:A:381:LEU:O	1:A:385:TYR:N	2.37	0.57
1:A:383:TYR:C	1:A:383:TYR:HD1	2.12	0.57
1:A:396:THR:OG1	1:A:397:LEU:N	2.35	0.57
1:A:258:ASP:OD1	1:A:258:ASP:C	2.48	0.57
1:A:292:ILE:HB	1:A:374:THR:CG2	2.33	0.57
1:A:128:HIS:ND1	1:A:129:THR:N	2.52	0.57
1:A:220:ASP:O	1:A:248:ASP:HB3	2.05	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:296:LEU:HD12	1:A:297:ASP:H	1.69	0.57
1:A:348:LYS:HB2	1:A:350:GLU:OE2	2.04	0.57
1:A:379:TRP:HH2	1:A:396:THR:OG1	1.85	0.57
1:A:218:LYS:HD3	1:A:219:PHE:O	2.04	0.57
1:A:190:ILE:HD12	1:A:190:ILE:N	2.12	0.57
1:A:441:MET:C	1:A:443:VAL:H	2.13	0.57
1:A:474:GLU:N	1:A:474:GLU:OE1	2.37	0.57
1:A:509:ARG:O	1:A:511:VAL:N	2.38	0.57
1:A:132:PRO:HA	1:A:183:ASN:HB3	1.87	0.57
1:A:121:GLY:O	1:A:501:THR:HA	2.05	0.57
1:A:288:GLU:C	1:A:290:GLY:H	2.13	0.57
1:A:363:ARG:HD3	1:A:475:ASN:ND2	2.19	0.57
1:A:367:VAL:O	1:A:368:LEU:CB	2.52	0.57
1:A:196:ALA:HA	1:A:199:ASP:CB	2.33	0.56
1:A:417:MET:CB	1:A:512:GLN:NE2	2.68	0.56
1:A:78:ASP:O	1:A:79:ILE:C	2.48	0.56
1:A:161:ASP:CG	1:A:164:ASP:HB3	2.31	0.56
1:A:395:TRP:CD1	1:A:396:THR:HG22	2.40	0.56
1:A:433:TYR:O	1:A:434:PRO:C	2.47	0.56
1:A:105:GLU:O	1:A:106:ALA:C	2.48	0.56
1:A:132:PRO:HD2	1:A:526:TYR:CE2	2.40	0.56
1:A:138:MET:HB3	1:A:263:ARG:HH22	1.70	0.56
1:A:417:MET:HG2	1:A:418:MET:SD	2.45	0.56
1:A:418:MET:C	1:A:420:ASP:H	2.13	0.56
1:A:475:ASN:O	1:A:478:LEU:N	2.39	0.56
1:A:161:ASP:HB3	1:A:165:HIS:CG	2.41	0.56
1:A:359:ASP:CG	1:A:360:SER:N	2.62	0.56
1:A:87:ASP:OD1	1:A:88:HIS:N	2.39	0.56
1:A:146:ARG:O	1:A:255:CYS:HB3	2.05	0.56
1:A:298:VAL:O	1:A:301:TYR:HB3	2.05	0.56
1:A:414:LEU:CD1	1:A:417:MET:HB3	2.36	0.56
1:A:467:HIS:C	1:A:469:PHE:N	2.62	0.56
1:A:122:GLN:O	1:A:534:VAL:HG23	2.05	0.56
1:A:171:LYS:NZ	1:A:172:TYR:H	2.04	0.56
1:A:262:SER:OG	1:A:263:ARG:N	2.39	0.56
1:A:387:ASN:CB	1:A:391:GLY:HA3	2.36	0.56
1:A:467:HIS:C	1:A:469:PHE:H	2.12	0.56
1:A:111:ILE:CG2	1:A:508:ILE:HG12	2.36	0.56
1:A:125:THR:HG21	1:A:499:HIS:HE1	1.68	0.56
1:A:174:TRP:C	1:A:175:PHE:CD1	2.84	0.56
1:A:381:LEU:O	1:A:382:SER:C	2.48	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:477:ILE:CG2	1:A:478:LEU:HD22	2.36	0.56
1:A:252:LEU:HD11	1:A:376:TYR:HE1	1.72	0.55
1:A:303:GLU:HG2	1:A:304:SER:N	2.20	0.55
1:A:307:ASP:O	1:A:309:THR:N	2.39	0.55
1:A:309:THR:HA	1:A:348:LYS:CG	2.36	0.55
1:A:383:TYR:HA	1:A:392:ILE:CD1	2.35	0.55
1:A:429:GLN:HE21	1:A:429:GLN:CA	2.08	0.55
1:A:226:LEU:CD2	1:A:227:GLY:H	2.09	0.55
1:A:380:TYR:HE1	1:A:384:ASN:ND2	2.03	0.55
1:A:517:THR:HG23	1:A:521:ARG:CA	2.30	0.55
1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CD1	2.69	0.55
1:A:115:GLU:O	1:A:116:ARG:HG2	2.07	0.55
1:A:158:THR:OG1	1:A:159:VAL:HG23	2.06	0.55
1:A:102:THR:N	1:A:105:GLU:OE2	2.38	0.55
1:A:104:THR:O	1:A:105:GLU:C	2.48	0.55
1:A:391:GLY:O	1:A:392:ILE:HG13	2.06	0.55
1:A:471:ARG:HB2	1:A:472:PHE:CE1	2.42	0.55
1:A:143:PHE:CE2	1:A:219:PHE:HZ	2.24	0.55
1:A:286:ASP:O	1:A:288:GLU:N	2.40	0.55
1:A:302:GLU:O	1:A:305:LYS:CB	2.55	0.55
1:A:383:TYR:CE2	1:A:398:LEU:N	2.74	0.55
1:A:90:ASN:HB3	1:A:515:THR:OG1	2.07	0.55
1:A:304:SER:OG	1:A:309:THR:HG23	2.07	0.55
1:A:309:THR:CG2	1:A:351:LEU:CD2	2.64	0.55
1:A:351:LEU:N	1:A:351:LEU:HD23	2.22	0.55
1:A:198:ILE:C	1:A:200:ASN:N	2.61	0.55
1:A:277:GLN:O	1:A:278:GLU:HG2	2.06	0.55
1:A:360:SER:C	1:A:362:SER:N	2.59	0.55
1:A:187:THR:CA	1:A:190:ILE:HD13	2.32	0.55
1:A:203:GLU:O	1:A:204:ILE:HD12	2.07	0.55
1:A:447:SER:C	1:A:448:PHE:CD1	2.85	0.54
1:A:220:ASP:O	1:A:248:ASP:N	2.40	0.54
1:A:233:LYS:CB	1:A:372:ILE:HG21	2.36	0.54
1:A:239:VAL:HG13	1:A:476:GLN:NE2	2.11	0.54
1:A:276:PHE:C	1:A:277:GLN:HG3	2.31	0.54
1:A:378:SER:CB	1:A:381:LEU:HD13	2.38	0.54
1:A:437:GLY:HA3	1:A:499:HIS:HD2	1.72	0.54
1:A:294:ALA:HA	1:A:374:THR:CG2	2.37	0.54
1:A:246:HIS:NE2	1:A:398:LEU:CD1	2.69	0.54
1:A:301:TYR:CD1	1:A:352:LYS:HD2	2.42	0.54
1:A:374:THR:O	1:A:376:TYR:N	2.38	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:120:GLY:N	1:A:539:LEU:HD11	2.22	0.54
1:A:107:SER:HA	1:A:511:VAL:HG13	1.89	0.54
1:A:152:LYS:HB2	1:A:169:ILE:HG21	1.90	0.54
1:A:422:VAL:CG2	1:A:423:THR:N	2.71	0.54
1:A:123:LEU:C	1:A:123:LEU:CD1	2.76	0.54
1:A:301:TYR:HA	1:A:351:LEU:O	2.07	0.54
1:A:103:PRO:O	1:A:106:ALA:HB3	2.07	0.54
1:A:250:VAL:O	1:A:251:LEU:HD23	2.07	0.54
1:A:526:TYR:N	1:A:526:TYR:HD1	2.05	0.54
1:A:94:THR:CG2	1:A:103:PRO:HB3	2.38	0.53
1:A:122:GLN:HA	1:A:501:THR:HG22	1.90	0.53
1:A:349:LYS:C	1:A:351:LEU:HD23	2.33	0.53
1:A:178:ILE:N	1:A:178:ILE:CD1	2.62	0.53
1:A:249:ILE:HD12	1:A:257:VAL:HG11	1.90	0.53
1:A:122:GLN:CA	1:A:501:THR:HG22	2.37	0.53
1:A:150:SER:HB3	1:A:171:LYS:CB	2.38	0.53
1:A:69:LEU:HB2	1:A:534:VAL:O	2.09	0.53
1:A:197:ILE:CG2	1:A:198:ILE:N	2.71	0.53
1:A:246:HIS:O	1:A:247:PRO:C	2.50	0.53
1:A:440:LEU:N	1:A:440:LEU:CD1	2.70	0.53
1:A:455:TYR:CE1	1:A:459:LEU:HG	2.43	0.53
1:A:294:ALA:CA	1:A:374:THR:HG22	2.36	0.53
1:A:190:ILE:O	1:A:193:MET:N	2.42	0.53
1:A:303:GLU:C	1:A:305:LYS:H	2.17	0.53
1:A:267:LEU:C	1:A:269:GLY:N	2.67	0.53
1:A:508:ILE:HG23	1:A:512:GLN:HE21	1.74	0.53
1:A:129:THR:O	1:A:492:ASN:CG	2.51	0.52
1:A:133:ASN:CB	1:A:490:SER:OG	2.57	0.52
1:A:232:THR:O	1:A:233:LYS:HB2	2.09	0.52
1:A:350:GLU:H	1:A:350:GLU:CD	2.17	0.52
1:A:98:ASN:ND2	1:A:99:ASN:N	2.40	0.52
1:A:126:ILE:HD11	1:A:496:LEU:HD13	1.90	0.52
1:A:129:THR:O	1:A:492:ASN:ND2	2.41	0.52
1:A:134:VAL:HA	1:A:140:SER:OG	2.09	0.52
1:A:383:TYR:CA	1:A:392:ILE:HD13	2.38	0.52
1:A:473:PRO:HD2	1:A:474:GLU:OE2	2.10	0.52
1:A:239:VAL:HA	1:A:476:GLN:NE2	2.24	0.52
1:A:267:LEU:C	1:A:267:LEU:CD1	2.82	0.52
1:A:508:ILE:CG2	1:A:512:GLN:HE21	2.22	0.52
1:A:72:VAL:HG12	1:A:73:ASP:H	1.75	0.52
1:A:197:ILE:HD11	1:A:217:VAL:HB	1.89	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:76:SER:HA	1:A:79:ILE:HD13	1.90	0.52
1:A:132:PRO:CD	1:A:526:TYR:CE2	2.92	0.52
1:A:179:LEU:HD11	1:A:193:MET:HG3	1.90	0.52
1:A:220:ASP:OD1	1:A:220:ASP:C	2.52	0.52
1:A:361:LYS:HB2	1:A:363:ARG:HD2	1.91	0.52
1:A:387:ASN:HB2	1:A:391:GLY:HA3	1.91	0.52
1:A:90:ASN:HA	1:A:514:VAL:O	2.10	0.52
1:A:190:ILE:HG22	1:A:191:ASP:N	2.24	0.52
1:A:239:VAL:HG22	1:A:476:GLN:NE2	2.25	0.52
1:A:404:THR:O	1:A:405:CYS:SG	2.68	0.52
1:A:429:GLN:O	1:A:431:ASN:N	2.43	0.52
1:A:57:TYR:O	1:A:58:SER:C	2.52	0.52
1:A:194:ASN:HD22	1:A:219:PHE:HB2	1.75	0.52
1:A:246:HIS:CE1	1:A:247:PRO:O	2.63	0.52
1:A:75:LYS:O	1:A:79:ILE:HD12	2.10	0.52
1:A:76:SER:C	1:A:79:ILE:HD13	2.35	0.52
1:A:392:ILE:HA	1:A:395:TRP:HB3	1.92	0.52
1:A:108:THR:CG2	1:A:109:GLN:H	2.23	0.51
1:A:292:ILE:HG22	1:A:293:PRO:N	2.24	0.51
1:A:417:MET:N	1:A:512:GLN:HE22	2.08	0.51
1:A:116:ARG:O	1:A:117:SER:HB3	2.10	0.51
1:A:145:ALA:HA	1:A:257:VAL:HA	1.93	0.51
1:A:248:ASP:OD2	1:A:380:TYR:CB	2.57	0.51
1:A:270:ILE:HD11	1:A:379:TRP:NE1	2.26	0.51
1:A:304:SER:HB3	1:A:351:LEU:HB3	1.91	0.51
1:A:403:VAL:HG22	1:A:488:THR:HB	1.89	0.51
1:A:90:ASN:HB2	1:A:515:THR:OG1	2.10	0.51
1:A:114:ASP:N	1:A:119:TRP:HZ2	2.09	0.51
1:A:130:ASN:HA	1:A:492:ASN:ND2	2.22	0.51
1:A:223:ASN:O	1:A:223:ASN:ND2	2.44	0.51
1:A:92:LEU:HA	1:A:513:ARG:HA	1.93	0.51
1:A:98:ASN:HD22	1:A:99:ASN:H	1.50	0.51
1:A:193:MET:O	1:A:197:ILE:N	2.43	0.51
1:A:380:TYR:O	1:A:381:LEU:C	2.54	0.51
1:A:380:TYR:HB3	1:A:381:LEU:HD12	1.92	0.51
1:A:452:GLN:HG3	1:A:455:TYR:HD2	1.76	0.51
1:A:132:PRO:O	1:A:133:ASN:C	2.53	0.51
1:A:160:ASN:H	1:A:160:ASN:HD22	1.56	0.51
1:A:189:THR:O	1:A:190:ILE:C	2.54	0.51
1:A:366:ASN:HD22	1:A:366:ASN:N	2.08	0.51
1:A:408:GLU:OE1	1:A:408:GLU:HA	2.10	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:192:LEU:O	1:A:195:ASN:HB3	2.11	0.50
1:A:216:GLY:CA	1:A:252:LEU:HB2	2.41	0.50
1:A:246:HIS:CE1	1:A:247:PRO:HG2	2.46	0.50
1:A:430:VAL:CG1	1:A:431:ASN:N	2.75	0.50
1:A:113:PHE:CE1	1:A:536:PRO:CB	2.94	0.50
1:A:202:LEU:O	1:A:206:ARG:HG3	2.11	0.50
1:A:352:LYS:C	1:A:354:GLN:H	2.19	0.50
1:A:157:VAL:C	1:A:158:THR:CG2	2.84	0.50
1:A:304:SER:HB3	1:A:351:LEU:CB	2.40	0.50
1:A:363:ARG:HB2	1:A:475:ASN:ND2	2.21	0.50
1:A:58:SER:O	1:A:60:LEU:N	2.44	0.50
1:A:111:ILE:HG22	1:A:508:ILE:H	1.77	0.50
1:A:114:ASP:OD1	1:A:115:GLU:N	2.37	0.50
1:A:125:THR:HG22	1:A:497:THR:O	2.11	0.50
1:A:135:ASN:CG	1:A:136:GLU:N	2.70	0.50
1:A:226:LEU:HD23	1:A:226:LEU:N	2.26	0.50
1:A:258:ASP:OD1	1:A:259:PHE:N	2.45	0.50
1:A:288:GLU:C	1:A:387:ASN:HD21	2.20	0.50
1:A:119:TRP:CB	1:A:538:VAL:HA	2.41	0.50
1:A:135:ASN:OD1	1:A:136:GLU:N	2.45	0.50
1:A:185:SER:O	1:A:186:ALA:O	2.30	0.50
1:A:235:ILE:CD1	1:A:295:LEU:HA	2.41	0.50
1:A:369:GLU:H	1:A:369:GLU:CD	2.19	0.50
1:A:504:LEU:HD12	1:A:504:LEU:N	2.17	0.50
1:A:540:SER:O	1:A:541:SER:CB	2.60	0.50
1:A:511:VAL:HG23	1:A:511:VAL:O	2.10	0.50
1:A:533:ILE:C	1:A:533:ILE:CD1	2.85	0.50
1:A:191:ASP:N	1:A:191:ASP:OD1	2.45	0.50
1:A:194:ASN:ND2	1:A:219:PHE:HB2	2.27	0.50
1:A:518:ASP:OD1	1:A:518:ASP:C	2.54	0.50
1:A:117:SER:CA	1:A:541:SER:HA	2.41	0.49
1:A:120:GLY:CA	1:A:502:LEU:O	2.60	0.49
1:A:418:MET:HG3	1:A:436:VAL:CG1	2.42	0.49
1:A:89:SER:HA	1:A:516:VAL:CG1	2.41	0.49
1:A:96:VAL:HG21	1:A:106:ALA:HB1	1.93	0.49
1:A:173:GLU:HB3	1:A:175:PHE:HE1	1.77	0.49
1:A:191:ASP:O	1:A:195:ASN:N	2.45	0.49
1:A:252:LEU:C	1:A:284:TYR:CD1	2.90	0.49
1:A:280:PHE:O	1:A:281:LYS:HG2	2.11	0.49
1:A:106:ALA:O	1:A:109:GLN:CG	2.60	0.49
1:A:278:GLU:CD	1:A:280:PHE:HB3	2.35	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:111:ILE:O	1:A:111:ILE:HG23	2.12	0.49
1:A:115:GLU:C	1:A:116:ARG:HG2	2.36	0.49
1:A:126:ILE:CD1	1:A:496:LEU:HD22	2.42	0.49
1:A:509:ARG:C	1:A:511:VAL:N	2.70	0.49
1:A:132:PRO:O	1:A:134:VAL:N	2.46	0.49
1:A:146:ARG:HB2	1:A:173:GLU:O	2.12	0.49
1:A:161:ASP:O	1:A:165:HIS:CB	2.61	0.49
1:A:355:PRO:CG	1:A:371:LYS:HB3	2.35	0.49
1:A:82:LEU:HB2	1:A:92:LEU:HD13	1.93	0.49
1:A:108:THR:CG2	1:A:109:GLN:N	2.72	0.49
1:A:416:ASP:O	1:A:512:GLN:NE2	2.46	0.49
1:A:122:GLN:HB2	1:A:501:THR:HG22	1.95	0.49
1:A:200:ASN:O	1:A:201:TYR:C	2.55	0.49
1:A:452:GLN:O	1:A:452:GLN:HG2	2.13	0.49
1:A:107:SER:HB2	1:A:511:VAL:CG2	2.43	0.49
1:A:114:ASP:O	1:A:119:TRP:NE1	2.45	0.49
1:A:133:ASN:HB2	1:A:490:SER:OG	2.11	0.49
1:A:509:ARG:C	1:A:511:VAL:H	2.21	0.49
1:A:187:THR:HG23	1:A:484:PRO:CD	2.43	0.49
1:A:205:GLY:O	1:A:206:ARG:C	2.56	0.49
1:A:244:ALA:CB	1:A:484:PRO:HA	2.42	0.49
1:A:293:PRO:O	1:A:372:ILE:C	2.56	0.49
1:A:392:ILE:C	1:A:394:SER:N	2.68	0.49
1:A:144:LYS:HB2	1:A:258:ASP:HB3	1.94	0.48
1:A:150:SER:HB3	1:A:171:LYS:HB3	1.94	0.48
1:A:302:GLU:O	1:A:303:GLU:C	2.56	0.48
1:A:422:VAL:CG2	1:A:423:THR:HG23	2.33	0.48
1:A:74:ASN:CB	1:A:529:LYS:HZ3	2.26	0.48
1:A:125:THR:OG1	1:A:412:TRP:CH2	2.64	0.48
1:A:215:ILE:HG22	1:A:216:GLY:H	1.76	0.48
1:A:370:ASP:CB	1:A:372:ILE:HD11	2.28	0.48
1:A:414:LEU:HG	1:A:436:VAL:HG21	1.94	0.48
1:A:63:LEU:HD22	1:A:64:TYR:N	2.19	0.48
1:A:515:THR:O	1:A:515:THR:HG22	2.13	0.48
1:A:79:ILE:O	1:A:80:ALA:C	2.56	0.48
1:A:134:VAL:HG23	1:A:181:GLU:HA	1.95	0.48
1:A:417:MET:CA	1:A:512:GLN:NE2	2.74	0.48
1:A:451:GLU:O	1:A:453:ALA:N	2.46	0.48
1:A:418:MET:C	1:A:420:ASP:N	2.72	0.48
1:A:475:ASN:C	1:A:477:ILE:N	2.71	0.48
1:A:111:ILE:CG2	1:A:508:ILE:HB	2.43	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:229:ASP:OD1	1:A:231:GLU:N	2.47	0.48
1:A:263:ARG:HD2	1:A:405:CYS:C	2.37	0.48
1:A:540:SER:O	1:A:541:SER:HB2	2.13	0.48
1:A:133:ASN:HB3	1:A:183:ASN:CB	2.37	0.48
1:A:159:VAL:O	1:A:162:THR:HG22	2.13	0.48
1:A:179:LEU:CD2	1:A:180:PRO:HD2	2.43	0.48
1:A:201:TYR:O	1:A:204:ILE:N	2.44	0.48
1:A:251:LEU:CD1	1:A:256:GLY:HA2	2.43	0.48
1:A:309:THR:CA	1:A:348:LYS:CG	2.85	0.48
1:A:519:ALA:C	1:A:521:ARG:H	2.20	0.48
1:A:78:ASP:O	1:A:79:ILE:O	2.30	0.48
1:A:91:PHE:CD1	1:A:92:LEU:N	2.82	0.48
1:A:113:PHE:CE1	1:A:536:PRO:HG3	2.49	0.48
1:A:132:PRO:CD	1:A:526:TYR:CD2	2.97	0.48
1:A:193:MET:O	1:A:197:ILE:HG22	2.14	0.48
1:A:239:VAL:O	1:A:241:THR:N	2.47	0.48
1:A:291:ASN:HA	1:A:377:ARG:HA	1.96	0.48
1:A:437:GLY:HA3	1:A:499:HIS:CD2	2.49	0.48
1:A:92:LEU:HD12	1:A:92:LEU:O	2.14	0.48
1:A:118:ARG:C	1:A:119:TRP:CD1	2.92	0.48
1:A:190:ILE:O	1:A:191:ASP:C	2.57	0.48
1:A:417:MET:HA	1:A:512:GLN:HE22	1.75	0.48
1:A:421:PRO:HG2	1:A:424:PHE:CD1	2.49	0.48
1:A:479:ILE:O	1:A:481:PRO:N	2.47	0.48
1:A:378:SER:O	1:A:379:TRP:C	2.56	0.47
1:A:412:TRP:HE3	1:A:499:HIS:NE2	2.11	0.47
1:A:63:LEU:CD1	1:A:64:TYR:O	2.60	0.47
1:A:64:TYR:O	1:A:65:ASP:CB	2.62	0.47
1:A:133:ASN:N	1:A:183:ASN:HB3	2.29	0.47
1:A:418:MET:HE3	1:A:502:LEU:CB	2.40	0.47
1:A:472:PHE:C	1:A:474:GLU:OE1	2.57	0.47
1:A:395:TRP:C	1:A:396:THR:CG2	2.87	0.47
1:A:411:TYR:CD1	1:A:411:TYR:N	2.82	0.47
1:A:85:GLN:CD	1:A:86:ASN:N	2.71	0.47
1:A:102:THR:OG1	1:A:104:THR:HG23	2.15	0.47
1:A:246:HIS:O	1:A:247:PRO:O	2.32	0.47
1:A:413:SER:HB3	1:A:435:VAL:HA	1.96	0.47
1:A:107:SER:HB2	1:A:511:VAL:HG21	1.95	0.47
1:A:169:ILE:HG23	1:A:169:ILE:O	2.14	0.47
1:A:263:ARG:O	1:A:266:ASN:N	2.48	0.47
1:A:360:SER:O	1:A:362:SER:N	2.48	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:417:MET:CE	1:A:534:VAL:HG11	2.44	0.47
1:A:516:VAL:O	1:A:516:VAL:HG13	2.14	0.47
1:A:518:ASP:OD1	1:A:520:ARG:CG	2.60	0.47
1:A:67:THR:OG1	1:A:68:LYS:N	2.48	0.47
1:A:69:LEU:HD23	1:A:69:LEU:HA	1.56	0.47
1:A:485:THR:C	1:A:486:ILE:HD13	2.40	0.47
1:A:171:LYS:HA	1:A:171:LYS:CE	2.36	0.47
1:A:234:LEU:HD22	1:A:295:LEU:O	2.14	0.47
1:A:397:LEU:HD13	1:A:398:LEU:N	2.30	0.47
1:A:56:ARG:O	1:A:57:TYR:CB	2.62	0.46
1:A:379:TRP:O	1:A:380:TYR:C	2.56	0.46
1:A:180:PRO:O	1:A:181:GLU:C	2.58	0.46
1:A:279:GLY:O	1:A:395:TRP:HZ2	1.98	0.46
1:A:351:LEU:HD23	1:A:351:LEU:H	1.80	0.46
1:A:381:LEU:N	1:A:381:LEU:CD1	2.48	0.46
1:A:194:ASN:HD21	1:A:219:PHE:C	2.23	0.46
1:A:514:VAL:HG23	1:A:515:THR:N	2.30	0.46
1:A:91:PHE:HD1	1:A:92:LEU:N	2.13	0.46
1:A:134:VAL:HG23	1:A:134:VAL:O	2.16	0.46
1:A:151:ARG:HA	1:A:169:ILE:O	2.15	0.46
1:A:187:THR:O	1:A:190:ILE:HD13	2.15	0.46
1:A:64:TYR:O	1:A:65:ASP:HB2	2.16	0.46
1:A:107:SER:OG	1:A:108:THR:N	2.47	0.46
1:A:251:LEU:HD13	1:A:256:GLY:HA2	1.97	0.46
1:A:85:GLN:CG	1:A:86:ASN:N	2.76	0.46
1:A:164:ASP:O	1:A:167:GLU:CG	2.61	0.46
1:A:218:LYS:NZ	1:A:478:LEU:HA	2.31	0.46
1:A:391:GLY:C	1:A:392:ILE:CG1	2.87	0.46
1:A:422:VAL:O	1:A:424:PHE:N	2.46	0.46
1:A:78:ASP:OD1	1:A:94:THR:HG23	2.16	0.46
1:A:304:SER:O	1:A:309:THR:CG2	2.64	0.46
1:A:383:TYR:OH	1:A:397:LEU:HD22	2.16	0.46
1:A:508:ILE:CG2	1:A:512:GLN:NE2	2.79	0.46
1:A:123:LEU:HD12	1:A:123:LEU:O	2.16	0.46
1:A:220:ASP:N	1:A:248:ASP:O	2.45	0.46
1:A:230:PRO:CG	1:A:231:GLU:H	2.20	0.46
1:A:429:GLN:O	1:A:430:VAL:C	2.59	0.46
1:A:183:ASN:C	1:A:184:PHE:CD1	2.94	0.45
1:A:302:GLU:O	1:A:305:LYS:N	2.48	0.45
1:A:391:GLY:C	1:A:392:ILE:HG13	2.40	0.45
1:A:412:TRP:O	1:A:435:VAL:HG13	2.16	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:493:VAL:CG2	1:A:494:PRO:CD	2.87	0.45
1:A:496:LEU:N	1:A:496:LEU:CD2	2.72	0.45
1:A:79:ILE:HB	1:A:80:ALA:H	1.42	0.45
1:A:82:LEU:HB2	1:A:92:LEU:CD1	2.46	0.45
1:A:159:VAL:HA	1:A:162:THR:CB	2.25	0.45
1:A:197:ILE:HG23	1:A:198:ILE:H	1.78	0.45
1:A:253:PRO:HA	1:A:284:TYR:CG	2.50	0.45
1:A:258:ASP:HA	1:A:281:LYS:HA	1.97	0.45
1:A:119:TRP:O	1:A:504:LEU:HD12	2.16	0.45
1:A:240:TYR:HE1	1:A:293:PRO:HD2	1.81	0.45
1:A:403:VAL:C	1:A:405:CYS:N	2.70	0.45
1:A:534:VAL:O	1:A:534:VAL:CG1	2.64	0.45
1:A:540:SER:OG	1:A:541:SER:N	2.49	0.45
1:A:161:ASP:HA	1:A:164:ASP:HB3	1.98	0.45
1:A:304:SER:O	1:A:309:THR:HG21	2.17	0.45
1:A:60:LEU:O	1:A:61:SER:C	2.58	0.45
1:A:198:ILE:HG22	1:A:202:LEU:CD2	2.46	0.45
1:A:418:MET:HG3	1:A:436:VAL:HG13	1.98	0.45
1:A:470:ASN:O	1:A:473:PRO:HG3	2.16	0.45
1:A:264:LEU:O	1:A:267:LEU:N	2.44	0.45
1:A:395:TRP:C	1:A:396:THR:HG22	2.42	0.45
1:A:126:ILE:HD11	1:A:496:LEU:HD22	1.99	0.45
1:A:133:ASN:OD1	1:A:134:VAL:HG13	2.17	0.45
1:A:137:TYR:CE1	1:A:522:ARG:CZ	2.88	0.45
1:A:151:ARG:O	1:A:152:LYS:HG3	2.17	0.45
1:A:179:LEU:HB3	1:A:180:PRO:HD2	1.99	0.45
1:A:404:THR:O	1:A:405:CYS:C	2.60	0.45
1:A:81:SER:O	1:A:82:LEU:HD23	2.17	0.45
1:A:113:PHE:CZ	1:A:536:PRO:HB3	2.52	0.45
1:A:135:ASN:HD21	1:A:137:TYR:C	2.25	0.45
1:A:216:GLY:HA2	1:A:252:LEU:CB	2.47	0.45
1:A:263:ARG:HH11	1:A:406:GLY:HA3	1.81	0.45
1:A:212:GLU:O	1:A:213:SER:C	2.60	0.45
1:A:224:PHE:HB2	1:A:381:LEU:HD21	1.98	0.45
1:A:230:PRO:HG2	1:A:231:GLU:N	2.23	0.45
1:A:359:ASP:O	1:A:362:SER:N	2.47	0.45
1:A:397:LEU:HD13	1:A:398:LEU:C	2.42	0.45
1:A:85:GLN:HG3	1:A:86:ASN:H	1.81	0.44
1:A:252:LEU:HD21	1:A:376:TYR:HD1	1.78	0.44
1:A:299:THR:O	1:A:302:GLU:N	2.50	0.44
1:A:348:LYS:HG3	1:A:350:GLU:CD	2.35	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:379:TRP:O	1:A:382:SER:OG	2.31	0.44
1:A:454:VAL:O	1:A:457:GLN:HB3	2.17	0.44
1:A:498:ASP:C	1:A:498:ASP:OD1	2.59	0.44
1:A:518:ASP:O	1:A:521:ARG:CA	2.64	0.44
1:A:138:MET:HE3	1:A:263:ARG:NH2	2.32	0.44
1:A:287:LEU:O	1:A:377:ARG:HD3	2.16	0.44
1:A:410:VAL:HG21	1:A:516:VAL:CG2	2.48	0.44
1:A:73:ASP:HB3	1:A:91:PHE:CE1	2.52	0.44
1:A:442:PRO:HD2	1:A:443:VAL:HG23	1.99	0.44
1:A:448:PHE:N	1:A:448:PHE:HD1	2.11	0.44
1:A:228:TRP:HA	1:A:234:LEU:O	2.17	0.44
1:A:309:THR:CA	1:A:348:LYS:CD	2.93	0.44
1:A:349:LYS:C	1:A:351:LEU:HD21	2.39	0.44
1:A:135:ASN:ND2	1:A:137:TYR:HB3	2.33	0.44
1:A:252:LEU:CD2	1:A:376:TYR:CD1	2.97	0.44
1:A:119:TRP:CA	1:A:539:LEU:CD1	2.88	0.44
1:A:138:MET:CE	1:A:263:ARG:NH2	2.81	0.44
1:A:145:ALA:CA	1:A:174:TRP:CZ3	2.99	0.44
1:A:242:TYR:CZ	1:A:482:PRO:HA	2.53	0.44
1:A:264:LEU:O	1:A:265:SER:C	2.60	0.44
1:A:365:TYR:O	1:A:367:VAL:N	2.51	0.44
1:A:525:PRO:C	1:A:527:VAL:H	2.24	0.44
1:A:277:GLN:O	1:A:278:GLU:CB	2.65	0.44
1:A:127:MET:HE3	1:A:127:MET:HB2	1.79	0.44
1:A:138:MET:CE	1:A:263:ARG:HH22	2.31	0.44
1:A:148:MET:HA	1:A:172:TYR:HD1	1.83	0.44
1:A:197:ILE:CG2	1:A:198:ILE:H	2.30	0.44
1:A:388:PRO:HB2	1:A:389:GLU:HG3	1.98	0.44
1:A:188:MET:O	1:A:189:THR:C	2.61	0.43
1:A:312:THR:CB	1:A:348:LYS:HD3	2.45	0.43
1:A:127:MET:O	1:A:127:MET:HG3	2.15	0.43
1:A:158:THR:HA	1:A:165:HIS:HD2	1.83	0.43
1:A:103:PRO:O	1:A:104:THR:C	2.61	0.43
1:A:138:MET:C	1:A:139:PHE:CD1	2.96	0.43
1:A:197:ILE:O	1:A:200:ASN:HB3	2.18	0.43
1:A:227:GLY:C	1:A:235:ILE:HG22	2.43	0.43
1:A:51:GLY:HA3	1:A:53:ASN:HD22	1.83	0.43
1:A:115:GLU:C	1:A:117:SER:N	2.71	0.43
1:A:358:LYS:HB3	1:A:363:ARG:O	2.18	0.43
1:A:378:SER:OG	1:A:381:LEU:CD1	2.66	0.43
1:A:389:GLU:HG3	1:A:389:GLU:H	1.69	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:480:ARG:O	1:A:481:PRO:O	2.36	0.43
1:A:115:GLU:O	1:A:116:ARG:CG	2.67	0.43
1:A:135:ASN:OD1	1:A:137:TYR:HB3	2.18	0.43
1:A:450:ASN:HD21	1:A:452:GLN:HB3	1.84	0.43
1:A:135:ASN:HD21	1:A:137:TYR:HB3	1.83	0.43
1:A:172:TYR:CE2	1:A:254:GLY:HA3	2.54	0.43
1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	1.29	0.43
1:A:387:ASN:HA	1:A:388:PRO:HD2	1.67	0.43
1:A:77:ALA:O	1:A:80:ALA:HB3	2.18	0.43
1:A:161:ASP:OD1	1:A:164:ASP:CB	2.57	0.43
1:A:174:TRP:O	1:A:175:PHE:CD1	2.71	0.43
1:A:229:ASP:OD1	1:A:229:ASP:C	2.61	0.43
1:A:299:THR:O	1:A:302:GLU:HB2	2.18	0.43
1:A:306:LYS:O	1:A:310:THR:HG23	2.19	0.43
1:A:348:LYS:NZ	1:A:348:LYS:CB	2.72	0.43
1:A:419:GLN:O	1:A:420:ASP:HB2	2.19	0.43
1:A:195:ASN:O	1:A:199:ASP:N	2.38	0.43
1:A:397:LEU:C	1:A:397:LEU:CD1	2.85	0.43
1:A:424:PHE:CE2	1:A:434:PRO:HA	2.50	0.43
1:A:524:CYS:O	1:A:527:VAL:HG23	2.18	0.43
1:A:135:ASN:HD21	1:A:137:TYR:CA	2.32	0.43
1:A:235:ILE:N	1:A:235:ILE:CD1	2.61	0.43
1:A:383:TYR:CE2	1:A:398:LEU:HB2	2.54	0.43
1:A:507:SER:O	1:A:508:ILE:HD13	2.19	0.43
1:A:135:ASN:HD21	1:A:137:TYR:CB	2.32	0.42
1:A:159:VAL:H	1:A:162:THR:CB	2.26	0.42
1:A:229:ASP:OD1	1:A:232:THR:HG22	2.19	0.42
1:A:383:TYR:N	1:A:392:ILE:HD11	2.34	0.42
1:A:412:TRP:CE3	1:A:499:HIS:NE2	2.87	0.42
1:A:493:VAL:HG23	1:A:494:PRO:HD2	1.99	0.42
1:A:538:VAL:O	1:A:539:LEU:HG	2.19	0.42
1:A:128:HIS:HB3	1:A:528:TYR:HD2	1.84	0.42
1:A:200:ASN:ND2	1:A:201:TYR:N	2.67	0.42
1:A:211:LEU:HB3	1:A:213:SER:HB3	2.01	0.42
1:A:228:TRP:CG	1:A:229:ASP:H	2.37	0.42
1:A:354:GLN:HE21	1:A:354:GLN:HB3	1.64	0.42
1:A:414:LEU:HD13	1:A:417:MET:HB3	2.01	0.42
1:A:76:SER:HA	1:A:79:ILE:HD11	2.00	0.42
1:A:76:SER:C	1:A:79:ILE:CD1	2.92	0.42
1:A:480:ARG:O	1:A:481:PRO:C	2.62	0.42
1:A:95:VAL:HG22	1:A:95:VAL:O	2.20	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:111:ILE:HG22	1:A:508:ILE:HB	2.01	0.42
1:A:120:GLY:HA2	1:A:504:LEU:HG	2.01	0.42
1:A:150:SER:HB3	1:A:171:LYS:HB2	2.01	0.42
1:A:204:ILE:N	1:A:204:ILE:CD1	2.82	0.42
1:A:277:GLN:HB2	1:A:278:GLU:H	1.44	0.42
1:A:284:TYR:CZ	1:A:377:ARG:HD2	2.55	0.42
1:A:451:GLU:C	1:A:453:ALA:N	2.62	0.42
1:A:73:ASP:OD1	1:A:529:LYS:NZ	2.49	0.42
1:A:111:ILE:HD12	1:A:111:ILE:HA	1.92	0.42
1:A:149:VAL:O	1:A:149:VAL:HG23	2.19	0.42
1:A:273:ARG:HH21	1:A:397:LEU:HD23	1.84	0.42
1:A:145:ALA:C	1:A:174:TRP:CZ3	2.97	0.42
1:A:130:ASN:CA	1:A:492:ASN:ND2	2.80	0.42
1:A:309:THR:C	1:A:348:LYS:HG2	2.43	0.42
1:A:218:LYS:NZ	1:A:477:ILE:O	2.47	0.42
1:A:264:LEU:H	1:A:264:LEU:HG	1.43	0.42
1:A:307:ASP:O	1:A:308:THR:C	2.63	0.42
1:A:232:THR:HG23	1:A:233:LYS:N	2.35	0.42
1:A:450:ASN:ND2	1:A:452:GLN:HB3	2.35	0.42
1:A:220:ASP:HB2	1:A:481:PRO:CG	2.48	0.41
1:A:235:ILE:HD11	1:A:295:LEU:CA	2.49	0.41
1:A:267:LEU:O	1:A:269:GLY:N	2.53	0.41
1:A:93:THR:HG22	1:A:94:THR:N	2.35	0.41
1:A:131:MET:HA	1:A:132:PRO:HD3	1.73	0.41
1:A:152:LYS:HB2	1:A:169:ILE:CG2	2.50	0.41
1:A:220:ASP:CB	1:A:481:PRO:HG3	2.48	0.41
1:A:416:ASP:C	1:A:512:GLN:NE2	2.74	0.41
1:A:422:VAL:HG22	1:A:423:THR:H	1.80	0.41
1:A:191:ASP:O	1:A:192:LEU:C	2.63	0.41
1:A:424:PHE:HE2	1:A:435:VAL:HG23	1.85	0.41
1:A:91:PHE:CE1	1:A:514:VAL:CG1	2.98	0.41
1:A:116:ARG:HG2	1:A:116:ARG:HH11	1.85	0.41
1:A:124:LYS:HB2	1:A:533:ILE:CD1	2.50	0.41
1:A:369:GLU:C	1:A:371:LYS:N	2.71	0.41
1:A:388:PRO:HB2	1:A:389:GLU:H	1.53	0.41
1:A:87:ASP:CG	1:A:88:HIS:H	2.25	0.41
1:A:102:THR:HG23	1:A:105:GLU:OE1	2.19	0.41
1:A:116:ARG:O	1:A:117:SER:CB	2.68	0.41
1:A:195:ASN:C	1:A:197:ILE:N	2.78	0.41
1:A:369:GLU:O	1:A:370:ASP:CG	2.64	0.41
1:A:414:LEU:HA	1:A:514:VAL:HA	2.02	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:137:TYR:O	1:A:139:PHE:CE1	2.74	0.41
1:A:219:PHE:CD2	1:A:249:ILE:HG22	2.55	0.41
1:A:226:LEU:C	1:A:228:TRP:H	2.26	0.41
1:A:87:ASP:OD1	1:A:89:SER:N	2.38	0.41
1:A:252:LEU:HA	1:A:252:LEU:HD23	1.35	0.41
1:A:269:GLY:O	1:A:399:THR:HG23	2.20	0.41
1:A:366:ASN:O	1:A:367:VAL:C	2.60	0.41
1:A:380:TYR:C	1:A:380:TYR:CD1	2.98	0.41
1:A:379:TRP:CH2	1:A:396:THR:OG1	2.64	0.41
1:A:57:TYR:CE1	1:A:58:SER:HB3	2.56	0.41
1:A:89:SER:O	1:A:515:THR:HA	2.21	0.41
1:A:106:ALA:O	1:A:108:THR:N	2.54	0.41
1:A:111:ILE:O	1:A:111:ILE:HG22	2.20	0.41
1:A:203:GLU:HB3	1:A:204:ILE:CD1	2.50	0.41
1:A:218:LYS:HE2	1:A:220:ASP:HB2	2.02	0.41
1:A:226:LEU:HG	1:A:241:THR:HG21	2.01	0.41
1:A:387:ASN:O	1:A:389:GLU:N	2.54	0.41
1:A:273:ARG:NH2	1:A:397:LEU:HD23	2.36	0.41
1:A:372:ILE:O	1:A:373:ASN:OD1	2.39	0.41
1:A:151:ARG:HB3	1:A:209:GLY:O	2.21	0.40
1:A:245:PHE:O	1:A:246:HIS:CB	2.68	0.40
1:A:365:TYR:C	1:A:367:VAL:N	2.79	0.40
1:A:472:PHE:N	1:A:472:PHE:CD1	2.89	0.40
1:A:98:ASN:HD21	1:A:100:ASP:H	1.59	0.40
1:A:111:ILE:HG21	1:A:508:ILE:CG1	2.50	0.40
1:A:113:PHE:HE1	1:A:536:PRO:HG3	1.85	0.40
1:A:149:VAL:O	1:A:149:VAL:CG2	2.68	0.40
1:A:214:ASP:O	1:A:215:ILE:C	2.64	0.40
1:A:305:LYS:HA	1:A:351:LEU:HD13	2.03	0.40
1:A:63:LEU:CD2	1:A:64:TYR:H	2.23	0.40
1:A:82:LEU:CB	1:A:92:LEU:HD13	2.50	0.40
1:A:133:ASN:H	1:A:183:ASN:CB	2.34	0.40
1:A:273:ARG:O	1:A:275:PRO:HD2	2.18	0.40
1:A:436:VAL:CG1	1:A:502:LEU:HD12	2.49	0.40
1:A:94:THR:HA	1:A:510:GLY:O	2.22	0.40
1:A:136:GLU:N	1:A:181:GLU:OE2	2.43	0.40
1:A:239:VAL:HG12	1:A:240:TYR:C	2.47	0.40
1:A:248:ASP:OD1	1:A:379:TRP:HB3	2.22	0.40
1:A:369:GLU:C	1:A:370:ASP:CG	2.89	0.40
1:A:383:TYR:CA	1:A:392:ILE:CD1	2.99	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles

5.3.1 Protein backbone

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	458/509 (90%)	274 (60%)	97 (21%)	87 (19%)	0 2

All (87) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	57	TYR
1	A	59	GLU
1	A	66	THR
1	A	79	ILE
1	A	85	GLN
1	A	87	ASP
1	A	117	SER
1	A	188	MET
1	A	190	ILE
1	A	199	ASP
1	A	222	ARG
1	A	242	TYR
1	A	260	THR
1	A	275	PRO
1	A	278	GLU
1	A	351	LEU
1	A	352	LYS
1	A	368	LEU
1	A	370	ASP
1	A	388	PRO
1	A	392	ILE
1	A	415	PRO
1	A	423	THR
1	A	430	VAL
1	A	434	PRO
1	A	476	GLN
1	A	519	ALA
1	A	541	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	49	THR
1	A	58	SER
1	A	80	ALA
1	A	133	ASN
1	A	143	PHE
1	A	186	ALA
1	A	194	ASN
1	A	225	ARG
1	A	241	THR
1	A	264	LEU
1	A	289	GLY
1	A	294	ALA
1	A	295	LEU
1	A	372	ILE
1	A	380	TYR
1	A	383	TYR
1	A	452	GLN
1	A	481	PRO
1	A	510	GLY
1	A	521	ARG
1	A	107	SER
1	A	109	GLN
1	A	152	LYS
1	A	202	LEU
1	A	247	PRO
1	A	268	LEU
1	A	366	ASN
1	A	432	ASN
1	A	433	TYR
1	A	465	LEU
1	A	154	PRO
1	A	201	TYR
1	A	207	GLN
1	A	228	TRP
1	A	230	PRO
1	A	304	SER
1	A	367	VAL
1	A	381	LEU
1	A	382	SER
1	A	405	CYS
1	A	420	ASP
1	A	62	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	91	PHE
1	A	104	THR
1	A	187	THR
1	A	246	HIS
1	A	277	GLN
1	A	298	VAL
1	A	353	ILE
1	A	453	ALA
1	A	455	TYR
1	A	463	THR
1	A	356	LEU
1	A	361	LYS
1	A	387	ASN
1	A	473	PRO
1	A	480	ARG
1	A	236	MET
1	A	217	VAL

5.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	419/457 (92%)	277 (66%)	142 (34%)	0 2

All (142) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	52	ARG
1	A	54	SER
1	A	57	TYR
1	A	59	GLU
1	A	63	LEU
1	A	67	THR
1	A	71	LEU
1	A	72	VAL
1	A	85	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	92	LEU
1	A	96	VAL
1	A	98	ASN
1	A	99	ASN
1	A	102	THR
1	A	104	THR
1	A	107	SER
1	A	110	THR
1	A	116	ARG
1	A	119	TRP
1	A	123	LEU
1	A	126	ILE
1	A	130	ASN
1	A	131	MET
1	A	133	ASN
1	A	135	ASN
1	A	139	PHE
1	A	143	PHE
1	A	144	LYS
1	A	149	VAL
1	A	150	SER
1	A	157	VAL
1	A	158	THR
1	A	160	ASN
1	A	161	ASP
1	A	163	TYR
1	A	170	LEU
1	A	171	LYS
1	A	177	PHE
1	A	178	ILE
1	A	189	THR
1	A	191	ASP
1	A	193	MET
1	A	194	ASN
1	A	197	ILE
1	A	199	ASP
1	A	200	ASN
1	A	202	LEU
1	A	206	ARG
1	A	207	GLN
1	A	211	LEU
1	A	212	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	213	SER
1	A	214	ASP
1	A	215	ILE
1	A	220	ASP
1	A	221	THR
1	A	222	ARG
1	A	224	PHE
1	A	225	ARG
1	A	226	LEU
1	A	228	TRP
1	A	229	ASP
1	A	231	GLU
1	A	232	THR
1	A	235	ILE
1	A	241	THR
1	A	243	GLU
1	A	246	HIS
1	A	250	VAL
1	A	255	CYS
1	A	261	GLU
1	A	262	SER
1	A	265	SER
1	A	267	LEU
1	A	270	ILE
1	A	273	ARG
1	A	281	LYS
1	A	287	LEU
1	A	288	GLU
1	A	295	LEU
1	A	296	LEU
1	A	298	VAL
1	A	308	THR
1	A	313	THR
1	A	348	LYS
1	A	349	LYS
1	A	351	LEU
1	A	354	GLN
1	A	363	ARG
1	A	366	ASN
1	A	372	ILE
1	A	374	THR
1	A	376	TYR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	381	LEU
1	A	382	SER
1	A	383	TYR
1	A	389	GLU
1	A	390	LYS
1	A	392	ILE
1	A	396	THR
1	A	397	LEU
1	A	399	THR
1	A	400	THR
1	A	401	SER
1	A	402	ASP
1	A	403	VAL
1	A	408	GLU
1	A	410	VAL
1	A	412	TRP
1	A	415	PRO
1	A	417	MET
1	A	429	GLN
1	A	430	VAL
1	A	432	ASN
1	A	436	VAL
1	A	439	GLU
1	A	440	LEU
1	A	448	PHE
1	A	455	TYR
1	A	459	LEU
1	A	474	GLU
1	A	477	ILE
1	A	478	LEU
1	A	485	THR
1	A	486	ILE
1	A	487	THR
1	A	488	THR
1	A	496	LEU
1	A	497	THR
1	A	504	LEU
1	A	506	SER
1	A	513	ARG
1	A	514	VAL
1	A	515	THR
1	A	518	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	520	ARG
1	A	522	ARG
1	A	523	THR
1	A	524	CYS
1	A	533	ILE
1	A	538	VAL
1	A	539	LEU

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (26) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	53	ASN
1	A	85	GLN
1	A	88	HIS
1	A	98	ASN
1	A	99	ASN
1	A	112	ASN
1	A	130	ASN
1	A	141	ASN
1	A	160	ASN
1	A	165	HIS
1	A	194	ASN
1	A	195	ASN
1	A	200	ASN
1	A	207	GLN
1	A	223	ASN
1	A	291	ASN
1	A	354	GLN
1	A	366	ASN
1	A	387	ASN
1	A	429	GLN
1	A	450	ASN
1	A	461	GLN
1	A	476	GLN
1	A	492	ASN
1	A	499	HIS
1	A	512	GLN

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 1 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	A	1

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	314:THR	C	348:LYS	N	10.17

6 Fit of model and data ⓘ

6.1 Protein, DNA and RNA chains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	462/509 (90%)	0.87	73 (15%) 5 10	40, 44, 102, 154	0

All (73) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	463	THR	11.0
1	A	461	GLN	8.1
1	A	464	SER	7.7
1	A	155	GLU	6.4
1	A	297	ASP	6.3
1	A	459	LEU	5.5
1	A	314	THR	5.1
1	A	160	ASN	4.9
1	A	389	GLU	4.6
1	A	466	THR	4.5
1	A	480	ARG	4.3
1	A	429	GLN	4.3
1	A	51	GLY	4.2
1	A	49	THR	3.7
1	A	350	GLU	3.6
1	A	401	SER	3.6
1	A	168	ASP	3.5
1	A	50	GLU	3.4
1	A	64	TYR	3.4
1	A	357	GLU	3.4
1	A	152	LYS	3.3
1	A	438	ALA	3.3
1	A	428	ARG	3.2
1	A	173	GLU	3.2
1	A	288	GLU	3.1
1	A	446	LYS	3.1
1	A	209	GLY	3.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	542	ARG	3.0
1	A	108	THR	2.9
1	A	166	LYS	2.9
1	A	308	THR	2.8
1	A	212	GLU	2.8
1	A	208	ASN	2.8
1	A	154	PRO	2.8
1	A	289	GLY	2.7
1	A	159	VAL	2.7
1	A	306	LYS	2.7
1	A	505	ARG	2.7
1	A	163	TYR	2.6
1	A	455	TYR	2.6
1	A	48	PRO	2.6
1	A	469	PHE	2.6
1	A	408	GLU	2.6
1	A	453	ALA	2.6
1	A	305	LYS	2.5
1	A	203	GLU	2.4
1	A	236	MET	2.4
1	A	507	SER	2.4
1	A	231	GLU	2.4
1	A	285	GLU	2.4
1	A	402	ASP	2.3
1	A	393	ARG	2.3
1	A	74	ASN	2.3
1	A	52	ARG	2.3
1	A	506	SER	2.2
1	A	94	THR	2.2
1	A	278	GLU	2.2
1	A	296	LEU	2.2
1	A	78	ASP	2.2
1	A	277	GLN	2.2
1	A	63	LEU	2.1
1	A	359	ASP	2.1
1	A	411	TYR	2.1
1	A	65	ASP	2.1
1	A	56	ARG	2.1
1	A	298	VAL	2.1
1	A	167	GLU	2.1
1	A	509	ARG	2.1
1	A	259	PHE	2.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	396	THR	2.0
1	A	511	VAL	2.0
1	A	156	GLY	2.0
1	A	362	SER	2.0

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

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

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. The B-factors column lists the minimum, median, 95th percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled 'Q< 0.9' lists the number of atoms with occupancy less than 0.9.

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
2	CA	A	1001	1/1	0.94	0.06	54,54,54,54	1

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.