



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 6, 2026 – 02:35 PM UTC

PDB ID : 1B7U / pdb_00001b7u
Title : Structure of Mare Apolactoferrin: the N and C Lobes are in the Closed Form
Authors : Sharma, A.K.; Singh, T.P.
Deposited on : 1999-01-01
Resolution : 3.80 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) : **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

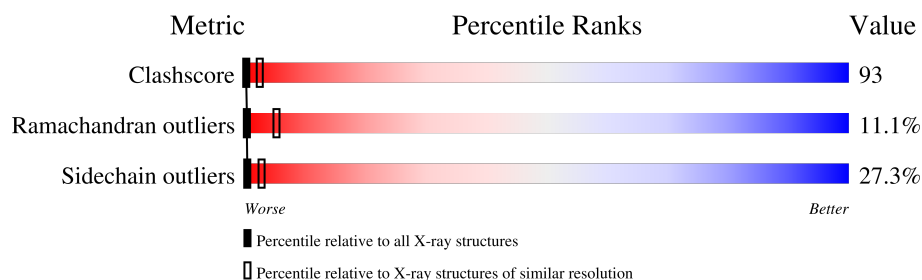
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.80 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	1012 (3.94-3.66)
Ramachandran outliers	187476	1048 (3.96-3.64)
Sidechain outliers	187428	1043 (3.96-3.64)

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	689	

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 5281 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 Lactotransferrin.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	689	5281	3299	937	1008	37	0	0	0

There are 6 discrepancies between the modelled and reference sequences:

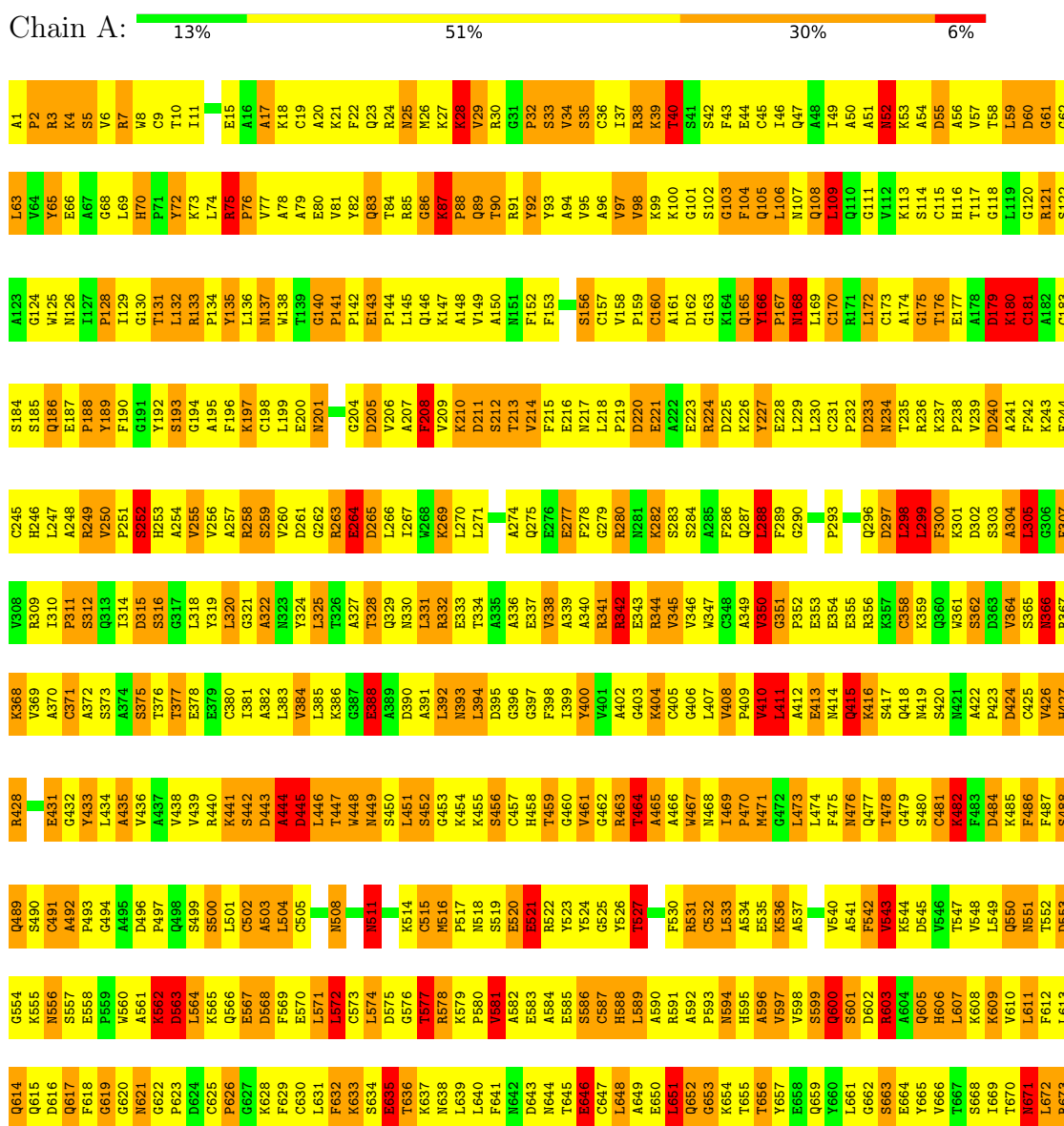
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	223	GLU	ASP	conflict	UNP O77811
A	269	LYS	ARG	conflict	UNP O77811
A	290	GLY	LYS	conflict	UNP O77811
A	294	GLY	GLU	conflict	UNP O77811
A	295	GLU	ASN	conflict	UNP O77811
A	296	GLN	LYS	conflict	UNP O77811

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: Lactotransferrin



R674	C675	S676	S677	S678	L681	F686	L687	R688	A689
------	------	------	------	------	------	------	------	------	------

4 Data and refinement statistics

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

Property	Value	Source
Space group	P 21 21 21	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	100.40 Å 77.40 Å 102.60 Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	32.00 – 3.80	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	99.2 (32.00-3.80)	Depositor
R_{merge}	0.15	Depositor
R_{sym}	0.15	Depositor
Refinement program	X-PLOR 3.851	Depositor
R, R_{free}	0.200 , 0.300	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	5281	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	44.0	wwPDB-VP

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	0.90	5/5392 (0.1%)	1.55	129/7298 (1.8%)

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 (5) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	299	LEU	N-CA	7.70	1.56	1.46
1	A	689	ALA	C-OXT	6.94	1.37	1.23
1	A	298	LEU	CA-C	6.67	1.60	1.52
1	A	312	SER	N-CA	6.23	1.54	1.46
1	A	180	LYS	C-N	-5.54	1.26	1.33

All (129) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	180	LYS	CB-CA-C	17.89	146.03	110.42
1	A	410	VAL	CB-CA-C	15.63	136.92	111.29
1	A	312	SER	N-CA-C	12.54	128.78	113.23
1	A	53	LYS	N-CA-C	-11.28	99.54	113.18
1	A	181	CYS	CB-CA-C	-10.65	98.12	111.22
1	A	85	ARG	N-CA-C	-10.01	100.65	112.86
1	A	5	SER	N-CA-C	-9.81	97.59	110.53
1	A	587	CYS	N-CA-C	9.47	122.81	111.82
1	A	140	GLY	CA-C-N	9.39	130.05	120.38
1	A	140	GLY	C-N-CA	9.39	130.05	120.38
1	A	51	ALA	N-CA-C	-9.31	103.10	112.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	29	VAL	N-CA-C	-9.20	102.66	113.42
1	A	671	ASN	N-CA-C	-9.04	100.26	111.11
1	A	143	GLU	N-CA-C	-9.00	95.36	109.04
1	A	87	LYS	CA-C-N	8.67	130.68	119.84
1	A	87	LYS	C-N-CA	8.67	130.68	119.84
1	A	163	GLY	N-CA-C	8.33	122.17	112.50
1	A	486	PHE	N-CA-C	-8.18	101.81	112.68
1	A	351	GLY	CA-C-N	8.08	128.84	119.47
1	A	351	GLY	C-N-CA	8.08	128.84	119.47
1	A	175	GLY	N-CA-C	8.02	120.50	110.96
1	A	521	GLU	N-CA-C	-7.98	93.81	110.80
1	A	391	ALA	N-CA-C	7.92	120.16	108.60
1	A	635	GLU	N-CA-C	-7.75	94.30	110.80
1	A	410	VAL	N-CA-C	-7.73	93.26	109.34
1	A	628	LYS	N-CA-C	7.70	122.70	113.16
1	A	678	SER	CA-C-N	7.66	127.71	119.28
1	A	678	SER	C-N-CA	7.66	127.71	119.28
1	A	233	ASP	N-CA-C	-7.65	104.41	113.21
1	A	633	LYS	N-CA-C	-7.64	94.52	110.80
1	A	227	TYR	N-CA-C	7.62	121.33	109.52
1	A	648	LEU	N-CA-C	-7.59	97.69	109.76
1	A	515	CYS	N-CA-C	7.58	121.94	112.24
1	A	102	SER	N-CA-C	-7.47	103.16	111.82
1	A	416	LYS	N-CA-C	-7.46	103.20	113.56
1	A	366	ASN	N-CA-C	-7.44	100.93	111.56
1	A	589	LEU	N-CA-C	-7.41	102.81	111.03
1	A	563	ASP	N-CA-C	7.38	119.40	111.36
1	A	372	ALA	N-CA-C	-7.19	96.33	108.26
1	A	371	CYS	N-CA-C	7.08	119.94	109.24
1	A	450	SER	N-CA-C	6.94	121.36	112.34
1	A	388	GLU	N-CA-C	-6.90	103.84	111.36
1	A	299	LEU	O-C-N	6.82	131.66	122.59
1	A	224	ARG	N-CA-C	-6.76	103.53	111.03
1	A	186	GLN	N-CA-C	-6.75	104.05	113.37
1	A	208	PHE	N-CA-C	-6.68	97.39	108.34
1	A	494	GLY	N-CA-C	6.61	122.35	114.48
1	A	304	ALA	N-CA-C	-6.56	98.13	108.63
1	A	435	ALA	N-CA-C	-6.54	100.81	110.48
1	A	492	ALA	CA-C-N	6.53	128.00	119.84
1	A	492	ALA	C-N-CA	6.53	128.00	119.84
1	A	653	GLY	N-CA-C	-6.44	107.41	115.08
1	A	40	THR	N-CA-C	6.43	124.49	110.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	180	LYS	N-CA-C	-6.35	97.28	110.80
1	A	17	ALA	N-CA-C	-6.33	104.38	111.28
1	A	315	ASP	N-CA-C	-6.32	99.80	109.41
1	A	312	SER	CB-CA-C	-6.31	96.74	109.55
1	A	445	ASP	N-CA-C	6.23	118.87	111.33
1	A	562	LYS	CA-C-N	6.23	129.14	120.29
1	A	562	LYS	C-N-CA	6.23	129.14	120.29
1	A	282	LYS	N-CA-C	-6.15	105.81	113.55
1	A	141	PRO	N-CA-C	6.12	118.16	110.70
1	A	288	LEU	N-CA-C	6.09	121.00	113.50
1	A	52	ASN	N-CA-C	6.09	123.77	110.80
1	A	290	GLY	N-CA-C	-6.08	98.78	113.18
1	A	482	LYS	N-CA-C	-6.07	97.88	110.80
1	A	320	LEU	N-CA-C	6.01	120.30	113.15
1	A	393	ASN	N-CA-C	-6.00	100.08	109.25
1	A	600	GLN	N-CA-C	-5.97	98.07	110.80
1	A	284	SER	N-CA-C	-5.96	105.27	112.54
1	A	38	ARG	N-CA-C	5.95	119.96	109.96
1	A	170	CYS	N-CA-C	-5.95	106.06	113.38
1	A	583	GLU	N-CA-C	5.94	123.46	110.80
1	A	411	LEU	CB-CA-C	-5.91	98.75	109.38
1	A	617	GLN	N-CA-C	-5.90	106.04	113.18
1	A	86	GLY	N-CA-C	-5.89	99.22	113.18
1	A	532	CYS	N-CA-C	5.86	117.67	111.28
1	A	109	LEU	N-CA-C	5.84	120.47	113.23
1	A	101	GLY	N-CA-C	-5.77	107.41	113.58
1	A	491	CYS	CA-CB-SG	-5.75	101.18	114.40
1	A	415	GLN	N-CA-C	5.74	119.80	112.34
1	A	420	SER	N-CA-C	-5.72	98.62	110.80
1	A	277	GLU	N-CA-C	5.69	119.41	111.56
1	A	531	ARG	N-CA-C	-5.69	105.08	111.28
1	A	263	ARG	N-CA-C	-5.69	104.35	113.28
1	A	259	SER	N-CA-C	-5.65	105.49	112.38
1	A	255	VAL	N-CA-C	-5.63	100.24	108.97
1	A	476	ASN	N-CA-C	-5.62	104.53	111.33
1	A	500	SER	N-CA-C	-5.62	103.16	111.81
1	A	408	VAL	CA-C-N	5.59	125.52	119.76
1	A	408	VAL	C-N-CA	5.59	125.52	119.76
1	A	177	GLU	N-CA-C	-5.57	98.94	110.80
1	A	298	LEU	CA-C-N	5.55	132.14	121.54
1	A	298	LEU	C-N-CA	5.55	132.14	121.54
1	A	481	CYS	N-CA-C	-5.53	106.37	113.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	456	SER	N-CA-C	5.51	118.21	109.50
1	A	577	THR	N-CA-C	5.51	122.54	110.80
1	A	530	PHE	N-CA-C	-5.49	104.82	112.45
1	A	572	LEU	N-CA-C	5.45	117.00	109.15
1	A	557	SER	N-CA-C	5.40	121.72	113.61
1	A	3	ARG	N-CA-C	-5.40	102.40	110.23
1	A	7	ARG	NE-CZ-NH2	5.35	124.02	119.20
1	A	166	TYR	CA-C-N	5.33	126.51	119.84
1	A	166	TYR	C-N-CA	5.33	126.51	119.84
1	A	672	LEU	N-CA-C	5.33	117.84	111.71
1	A	673	ARG	N-CA-C	-5.33	104.93	111.75
1	A	444	ALA	N-CA-C	5.32	122.12	110.80
1	A	614	GLN	N-CA-C	5.29	117.73	111.33
1	A	551	ASN	N-CA-C	5.28	119.48	112.30
1	A	511	ASN	N-CA-C	5.27	122.03	110.80
1	A	168	ASN	N-CA-C	5.27	122.02	110.80
1	A	651	LEU	N-CA-C	-5.26	103.94	110.41
1	A	599	SER	N-CA-C	5.25	116.26	108.60
1	A	665	TYR	N-CA-C	-5.25	105.25	110.97
1	A	83	GLN	N-CA-C	-5.23	103.23	110.35
1	A	622	GLY	CA-C-N	5.23	126.38	119.84
1	A	622	GLY	C-N-CA	5.23	126.38	119.84
1	A	75	ARG	N-CA-C	5.21	117.18	109.62
1	A	179	ASP	N-CA-C	5.17	119.08	112.87
1	A	345	VAL	N-CA-C	5.12	119.99	109.34
1	A	459	THR	N-CA-C	-5.11	106.30	112.54
1	A	111	GLY	N-CA-C	5.11	125.29	113.18
1	A	269	LYS	N-CA-C	-5.08	104.82	111.02
1	A	656	THR	N-CA-C	-5.08	103.00	110.52
1	A	181	CYS	N-CA-CB	-5.06	101.98	110.22
1	A	263	ARG	NE-CZ-NH2	5.05	123.75	119.20
1	A	103	GLY	N-CA-C	5.04	125.12	113.18
1	A	333	GLU	N-CA-C	5.03	116.31	109.18
1	A	214	VAL	N-CA-C	-5.00	105.45	110.30

There are no chirality outliers.

All (1) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	28	LYS	Mainchain

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	5281	0	5149	974	0
All	All	5281	0	5149	974	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 93.

All (974) 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:258:ARG:NH2	1:A:261:ASP:O	1.64	1.30
1:A:179:ASP:O	1:A:180:LYS:O	1.56	1.21
1:A:299:LEU:HB2	1:A:300:PHE:CE1	1.79	1.18
1:A:75:ARG:HH12	1:A:312:SER:HA	1.03	1.16
1:A:579:LYS:HD2	1:A:587:CYS:HB2	1.27	1.16
1:A:15:GLU:HA	1:A:298:LEU:HD11	1.36	1.07
1:A:75:ARG:NH1	1:A:312:SER:HA	1.72	1.05
1:A:354:GLU:HG2	1:A:639:LEU:HG	1.37	1.05
1:A:18:LYS:HG2	1:A:299:LEU:HD11	1.32	1.05
1:A:383:LEU:HD11	1:A:388:GLU:HB2	1.35	1.04
1:A:299:LEU:HB2	1:A:300:PHE:CD1	1.94	1.03
1:A:469:ILE:HB	1:A:470:PRO:HD3	1.42	1.01
1:A:349:ALA:O	1:A:373:SER:HB2	1.61	1.01
1:A:630:CYS:HB3	1:A:633:LYS:HB2	1.42	1.01
1:A:436:VAL:HG12	1:A:588:HIS:HA	1.42	1.00
1:A:96:ALA:HA	1:A:208:PHE:HA	1.44	0.99
1:A:469:ILE:HD12	1:A:469:ILE:H	1.27	0.99
1:A:651:LEU:HD12	1:A:651:LEU:H	1.29	0.98
1:A:470:PRO:HA	1:A:473:LEU:HD22	1.43	0.98
1:A:100:LYS:HG2	1:A:228:GLU:HB2	1.43	0.98
1:A:258:ARG:H	1:A:258:ARG:HD3	1.26	0.97
1:A:68:GLY:HA3	1:A:316:SER:HB2	1.47	0.96
1:A:392:LEU:HD11	1:A:394:LEU:HG	1.48	0.95
1:A:75:ARG:HB2	1:A:259:SER:HA	1.49	0.95
1:A:573:CYS:HB2	1:A:577:THR:HB	1.48	0.94
1:A:465:ALA:HB2	1:A:526:TYR:CZ	2.02	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:641:PHE:CE2	1:A:648:LEU:HD11	2.03	0.94
1:A:262:GLY:O	1:A:263:ARG:HB2	1.66	0.93
1:A:7:ARG:HA	1:A:35:SER:O	1.67	0.93
1:A:265:ASP:HA	1:A:309:ARG:HH12	1.34	0.92
1:A:9:CYS:HB3	1:A:57:VAL:HG11	1.52	0.92
1:A:133:ARG:HA	1:A:136:LEU:HD12	1.50	0.92
1:A:404:LYS:HE3	1:A:657:TYR:OH	1.71	0.91
1:A:179:ASP:O	1:A:180:LYS:C	2.12	0.90
1:A:79:ALA:HA	1:A:254:ALA:HA	1.55	0.89
1:A:413:GLU:HG3	1:A:595:HIS:HB2	1.54	0.89
1:A:385:LEU:HD21	1:A:407:LEU:HD11	1.55	0.89
1:A:289:PHE:HB3	1:A:303:SER:H	1.39	0.88
1:A:416:LYS:HA	1:A:646:GLU:HG2	1.53	0.88
1:A:25:ASN:HA	1:A:28:LYS:HB2	1.57	0.87
1:A:280:ARG:NH1	1:A:305:LEU:HA	1.90	0.86
1:A:408:VAL:HG23	1:A:655:THR:O	1.76	0.86
1:A:456:SER:HB2	1:A:487:PHE:CE1	2.11	0.86
1:A:258:ARG:CZ	1:A:261:ASP:O	2.24	0.86
1:A:439:VAL:HG11	1:A:572:LEU:HD23	1.57	0.86
1:A:76:PRO:HA	1:A:256:VAL:HG12	1.59	0.85
1:A:460:GLY:O	1:A:467:TRP:HB2	1.76	0.85
1:A:625:CYS:HA	1:A:629:PHE:O	1.75	0.85
1:A:457:CYS:HB2	1:A:541:ALA:HB2	1.58	0.85
1:A:189:TYR:HA	1:A:194:GLY:C	2.02	0.85
1:A:402:ALA:HB1	1:A:407:LEU:HB2	1.60	0.84
1:A:28:LYS:NZ	1:A:28:LYS:HB3	1.93	0.83
1:A:482:LYS:H	1:A:482:LYS:HD3	1.42	0.83
1:A:300:PHE:CD1	1:A:300:PHE:N	2.45	0.83
1:A:82:TYR:CE2	1:A:252:SER:HB3	2.14	0.83
1:A:106:LEU:O	1:A:109:LEU:HB2	1.78	0.83
1:A:448:TRP:O	1:A:451:LEU:HG	1.78	0.83
1:A:117:THR:OG1	1:A:124:GLY:HA3	1.79	0.82
1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:SER:H	1.45	0.81
1:A:298:LEU:HD13	1:A:299:LEU:HG	1.60	0.81
1:A:523:TYR:CZ	1:A:532:CYS:HA	2.15	0.81
1:A:460:GLY:HA2	1:A:493:PRO:HD2	1.61	0.81
1:A:674:ARG:HG2	1:A:674:ARG:HH11	1.44	0.81
1:A:6:VAL:HG13	1:A:55:ASP:OD1	1.80	0.81
1:A:409:PRO:HD2	1:A:655:THR:O	1.81	0.81
1:A:456:SER:O	1:A:490:SER:HB3	1.81	0.81
1:A:80:GLU:OE1	1:A:300:PHE:HB3	1.81	0.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:288:LEU:HD22	1:A:288:LEU:H	1.46	0.80
1:A:74:LEU:HD22	1:A:258:ARG:HA	1.63	0.80
1:A:381:ILE:O	1:A:384:VAL:HG22	1.83	0.79
1:A:491:CYS:HB2	1:A:504:LEU:HB2	1.63	0.79
1:A:328:THR:HA	1:A:331:LEU:HD23	1.63	0.79
1:A:671:ASN:O	1:A:674:ARG:HB2	1.82	0.79
1:A:397:GLY:O	1:A:400:TYR:HB3	1.81	0.79
1:A:116:HIS:CD2	1:A:158:VAL:HG22	2.18	0.78
1:A:65:TYR:CE2	1:A:328:THR:HB	2.18	0.78
1:A:277:GLU:O	1:A:283:SER:HB2	1.82	0.78
1:A:3:ARG:HA	1:A:3:ARG:NE	1.98	0.78
1:A:196:PHE:HE2	1:A:214:VAL:HG22	1.49	0.78
1:A:176:THR:O	1:A:180:LYS:HB2	1.83	0.77
1:A:347:TRP:HE1	1:A:640:LEU:HD22	1.50	0.77
1:A:399:ILE:HG23	1:A:598:VAL:HG21	1.66	0.77
1:A:77:VAL:HG23	1:A:256:VAL:HA	1.65	0.76
1:A:28:LYS:HB3	1:A:28:LYS:HZ2	1.50	0.76
1:A:499:SER:HB2	1:A:501:LEU:HD23	1.68	0.76
1:A:565:LYS:HB2	1:A:567:GLU:HG2	1.67	0.76
1:A:425:CYS:HA	1:A:428:ARG:HD3	1.68	0.76
1:A:423:PRO:O	1:A:426:VAL:HG23	1.86	0.76
1:A:98:VAL:HG13	1:A:206:VAL:HG23	1.67	0.76
1:A:579:LYS:CD	1:A:587:CYS:HB2	2.13	0.76
1:A:98:VAL:HG11	1:A:230:LEU:HD21	1.69	0.75
1:A:60:ASP:CG	1:A:121:ARG:HG3	2.11	0.75
1:A:436:VAL:HA	1:A:589:LEU:HG	1.68	0.75
1:A:113:LYS:HB2	1:A:205:ASP:HB2	1.69	0.75
1:A:59:LEU:HD13	1:A:63:LEU:HD23	1.68	0.74
1:A:223:GLU:O	1:A:226:LYS:HB2	1.86	0.74
1:A:91:ARG:HE	1:A:251:PRO:HG3	1.52	0.74
1:A:280:ARG:HB2	1:A:282:LYS:HD3	1.68	0.74
1:A:606:HIS:O	1:A:609:LYS:HG2	1.88	0.74
1:A:631:LEU:HD22	1:A:641:PHE:HE1	1.52	0.74
1:A:77:VAL:O	1:A:310:ILE:HG12	1.88	0.74
1:A:263:ARG:HD3	1:A:266:LEU:HD22	1.69	0.74
1:A:436:VAL:HG12	1:A:588:HIS:CA	2.17	0.74
1:A:551:ASN:HA	1:A:556:ASN:HB3	1.68	0.74
1:A:45:CYS:O	1:A:49:ILE:HD13	1.88	0.73
1:A:403:GLY:HA3	1:A:657:TYR:CD1	2.23	0.73
1:A:10:THR:HB	1:A:15:GLU:HB3	1.68	0.73
1:A:503:ALA:O	1:A:514:LYS:HE2	1.89	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:299:LEU:CB	1:A:300:PHE:CE1	2.68	0.73
1:A:651:LEU:H	1:A:651:LEU:CD1	2.01	0.73
1:A:113:LYS:HB3	1:A:172:LEU:HD21	1.70	0.73
1:A:283:SER:HB3	1:A:286:PHE:O	1.88	0.73
1:A:411:LEU:HB3	1:A:648:LEU:HB3	1.70	0.73
1:A:475:PHE:CE1	1:A:479:GLY:HA2	2.24	0.73
1:A:573:CYS:CB	1:A:577:THR:HB	2.18	0.73
1:A:400:TYR:OH	1:A:673:ARG:HD2	1.88	0.72
1:A:531:ARG:HA	1:A:560:TRP:CZ3	2.24	0.72
1:A:629:PHE:HE2	1:A:631:LEU:HG	1.55	0.72
1:A:354:GLU:HA	1:A:639:LEU:HD23	1.71	0.72
1:A:451:LEU:O	1:A:454:LYS:HG2	1.90	0.72
1:A:166:TYR:CD1	1:A:166:TYR:N	2.57	0.72
1:A:448:TRP:CE3	1:A:451:LEU:HD21	2.24	0.71
1:A:490:SER:C	1:A:504:LEU:HG	2.15	0.71
1:A:395:ASP:O	1:A:399:ILE:HG13	1.90	0.71
1:A:50:ALA:C	1:A:52:ASN:H	1.98	0.71
1:A:3:ARG:HH22	1:A:4:LYS:HG2	1.56	0.71
1:A:280:ARG:NH2	1:A:289:PHE:HD2	1.89	0.71
1:A:91:ARG:HA	1:A:251:PRO:HA	1.72	0.70
1:A:192:TYR:CE2	1:A:210:LYS:HG3	2.26	0.70
1:A:605:GLN:OE1	1:A:608:LYS:HD3	1.91	0.70
1:A:271:LEU:HD12	1:A:307:PHE:CE2	2.26	0.70
1:A:633:LYS:HA	1:A:643:ASP:HA	1.73	0.70
1:A:60:ASP:HB2	1:A:253:HIS:CE1	2.26	0.70
1:A:573:CYS:SG	1:A:579:LYS:HG3	2.31	0.70
1:A:118:GLY:HA2	1:A:159:PRO:HB2	1.74	0.70
1:A:9:CYS:HB3	1:A:57:VAL:CG1	2.22	0.70
1:A:192:TYR:HB3	1:A:213:THR:OG1	1.92	0.70
1:A:463:ARG:HG2	1:A:464:THR:N	2.06	0.70
1:A:571:LEU:HD13	1:A:579:LYS:HB2	1.74	0.69
1:A:558:GLU:HB3	1:A:560:TRP:CD1	2.27	0.69
1:A:499:SER:HB2	1:A:501:LEU:CD2	2.21	0.69
1:A:458:HIS:HB2	1:A:492:ALA:HA	1.75	0.69
1:A:467:TRP:HD1	1:A:468:ASN:OD1	1.74	0.69
1:A:129:ILE:H	1:A:129:ILE:HD12	1.57	0.69
1:A:394:LEU:HD13	1:A:398:PHE:C	2.18	0.69
1:A:91:ARG:NE	1:A:251:PRO:HG3	2.06	0.69
1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:CD1	2.60	0.69
1:A:461:VAL:HG12	1:A:467:TRP:CZ3	2.28	0.69
1:A:440:ARG:HH22	1:A:536:LYS:HA	1.58	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:455:LYS:HA	1:A:489:GLN:O	1.93	0.68
1:A:466:ALA:O	1:A:470:PRO:HD2	1.93	0.68
1:A:531:ARG:HA	1:A:560:TRP:CH2	2.28	0.68
1:A:523:TYR:OH	1:A:532:CYS:HA	1.92	0.68
1:A:416:LYS:HA	1:A:646:GLU:CG	2.23	0.68
1:A:289:PHE:HB3	1:A:303:SER:N	2.07	0.68
1:A:462:GLY:H	1:A:467:TRP:CD1	2.12	0.68
1:A:469:ILE:O	1:A:473:LEU:HD13	1.93	0.68
1:A:579:LYS:HB3	1:A:580:PRO:HD2	1.75	0.68
1:A:73:LYS:C	1:A:74:LEU:HD23	2.19	0.68
1:A:534:ALA:HB3	1:A:560:TRP:HZ3	1.57	0.68
1:A:619:GLY:C	1:A:621:ASN:H	2.02	0.68
1:A:490:SER:HA	1:A:504:LEU:HD11	1.75	0.68
1:A:322:ALA:HB2	1:A:385:LEU:O	1.93	0.67
1:A:279:GLY:O	1:A:282:LYS:HB2	1.94	0.67
1:A:632:PHE:CD1	1:A:632:PHE:N	2.61	0.67
1:A:511:ASN:ND2	1:A:522:ARG:HH22	1.92	0.67
1:A:632:PHE:O	1:A:633:LYS:HG2	1.94	0.67
1:A:579:LYS:HB2	1:A:587:CYS:SG	2.35	0.67
1:A:189:TYR:HA	1:A:194:GLY:O	1.94	0.67
1:A:298:LEU:HD13	1:A:299:LEU:CG	2.24	0.67
1:A:504:LEU:H	1:A:504:LEU:HD23	1.59	0.67
1:A:334:THR:O	1:A:338:VAL:HG23	1.95	0.67
1:A:463:ARG:NE	1:A:526:TYR:HE1	1.91	0.67
1:A:581:VAL:HG23	1:A:582:ALA:H	1.59	0.67
1:A:199:LEU:HA	1:A:204:GLY:HA3	1.77	0.67
1:A:280:ARG:CZ	1:A:289:PHE:HD2	2.08	0.67
1:A:411:LEU:HD23	1:A:611:LEU:HD22	1.76	0.67
1:A:356:ARG:HG2	1:A:359:LYS:NZ	2.10	0.66
1:A:469:ILE:HB	1:A:470:PRO:CD	2.22	0.66
1:A:471:MET:SD	1:A:471:MET:N	2.68	0.66
1:A:470:PRO:CA	1:A:473:LEU:HD22	2.23	0.66
1:A:592:ALA:HB1	1:A:593:PRO:HD2	1.78	0.66
1:A:355:GLU:O	1:A:359:LYS:HG3	1.95	0.66
1:A:432:GLY:HA2	1:A:594:ASN:OD1	1.96	0.66
1:A:105:GLN:OE1	1:A:235:THR:HA	1.96	0.66
1:A:237:LYS:HB2	1:A:245:CYS:SG	2.36	0.66
1:A:114:SER:O	1:A:156:SER:HA	1.96	0.66
1:A:193:SER:HB2	1:A:296:GLN:HB3	1.78	0.66
1:A:265:ASP:O	1:A:269:LYS:HG2	1.96	0.66
1:A:631:LEU:HD22	1:A:641:PHE:CE1	2.31	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:75:ARG:HG2	1:A:76:PRO:HD2	1.77	0.66
1:A:105:GLN:HB3	1:A:234:ASN:O	1.95	0.66
1:A:280:ARG:HH12	1:A:305:LEU:HA	1.59	0.66
1:A:361:TRP:CZ3	1:A:631:LEU:HD21	2.31	0.66
1:A:407:LEU:HB3	1:A:598:VAL:HG12	1.78	0.65
1:A:527:THR:HG21	1:A:636:THR:O	1.97	0.65
1:A:3:ARG:HG3	1:A:266:LEU:HD21	1.77	0.65
1:A:93:TYR:HD2	1:A:246:HIS:CE1	2.15	0.65
1:A:38:ARG:HH12	1:A:39:LYS:C	2.04	0.65
1:A:232:PRO:C	1:A:234:ASN:H	2.04	0.65
1:A:617:GLN:HB3	1:A:618:PHE:CE2	2.31	0.65
1:A:193:SER:CB	1:A:296:GLN:HB3	2.27	0.65
1:A:365:SER:O	1:A:368:LYS:HB2	1.96	0.65
1:A:15:GLU:HA	1:A:298:LEU:CD1	2.22	0.65
1:A:470:PRO:HA	1:A:473:LEU:CD2	2.22	0.65
1:A:496:ASP:O	1:A:499:SER:HB3	1.97	0.65
1:A:461:VAL:HA	1:A:467:TRP:CD2	2.32	0.64
1:A:74:LEU:HA	1:A:259:SER:H	1.62	0.64
1:A:293:PRO:HA	1:A:296:GLN:HE21	1.62	0.64
1:A:114:SER:HB3	1:A:153:PHE:CD2	2.32	0.64
1:A:416:LYS:HB3	1:A:644:ASN:O	1.97	0.64
1:A:453:GLY:HA2	1:A:486:PHE:O	1.97	0.64
1:A:607:LEU:O	1:A:610:VAL:HG22	1.97	0.64
1:A:674:ARG:HG2	1:A:674:ARG:NH1	2.12	0.64
1:A:49:ILE:HG23	1:A:55:ASP:O	1.98	0.64
1:A:100:LYS:CG	1:A:228:GLU:HB2	2.22	0.64
1:A:189:TYR:CZ	1:A:198:CYS:HA	2.32	0.64
1:A:189:TYR:CG	1:A:198:CYS:HB2	2.32	0.64
1:A:9:CYS:SG	1:A:39:LYS:HB2	2.38	0.64
1:A:278:PHE:HB2	1:A:288:LEU:HD11	1.79	0.64
1:A:630:CYS:HB3	1:A:633:LYS:CB	2.22	0.64
1:A:11:ILE:HG12	1:A:15:GLU:OE1	1.98	0.63
1:A:165:GLN:NE2	1:A:166:TYR:CD2	2.66	0.63
1:A:392:LEU:O	1:A:392:LEU:HD12	1.98	0.63
1:A:352:PRO:HA	1:A:355:GLU:HB3	1.80	0.63
1:A:482:LYS:HD3	1:A:482:LYS:N	2.13	0.63
1:A:400:TYR:HE1	1:A:681:LEU:HD21	1.63	0.63
1:A:463:ARG:CZ	1:A:526:TYR:HE1	2.11	0.63
1:A:561:ALA:O	1:A:564:LEU:HG	1.97	0.63
1:A:561:ALA:HB1	1:A:564:LEU:CD2	2.29	0.63
1:A:192:TYR:HB2	1:A:301:LYS:NZ	2.14	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:558:GLU:OE1	1:A:560:TRP:HD1	1.82	0.63
1:A:653:GLY:O	1:A:655:THR:HG23	1.99	0.63
1:A:334:THR:OG1	1:A:336:ALA:HB3	1.99	0.63
1:A:438:VAL:HA	1:A:571:LEU:HA	1.79	0.63
1:A:579:LYS:HE3	1:A:586:SER:HB2	1.80	0.63
1:A:463:ARG:NE	1:A:526:TYR:CE1	2.67	0.63
1:A:463:ARG:O	1:A:467:TRP:HB3	1.98	0.63
1:A:571:LEU:O	1:A:578:ARG:HA	1.99	0.62
1:A:548:VAL:HG12	1:A:549:LEU:HD23	1.81	0.62
1:A:49:ILE:HD11	1:A:57:VAL:HG13	1.81	0.62
1:A:392:LEU:HD12	1:A:392:LEU:C	2.24	0.62
1:A:433:TYR:O	1:A:591:ARG:HA	1.99	0.62
1:A:547:THR:O	1:A:550:GLN:HB2	1.99	0.62
1:A:611:LEU:O	1:A:615:GLN:HG2	1.98	0.62
1:A:11:ILE:HB	1:A:40:THR:O	2.00	0.62
1:A:135:TYR:N	1:A:135:TYR:HD1	1.97	0.62
1:A:59:LEU:O	1:A:253:HIS:HB3	1.99	0.62
1:A:9:CYS:HA	1:A:37:ILE:O	2.00	0.62
1:A:188:PRO:O	1:A:190:PHE:N	2.33	0.62
1:A:435:ALA:HB1	1:A:589:LEU:HD12	1.80	0.62
1:A:460:GLY:CA	1:A:493:PRO:HD2	2.28	0.62
1:A:250:VAL:HB	1:A:324:TYR:CD2	2.34	0.61
1:A:571:LEU:HD22	1:A:587:CYS:SG	2.40	0.61
1:A:93:TYR:HA	1:A:249:ARG:HA	1.81	0.61
1:A:521:GLU:HG3	1:A:523:TYR:H	1.65	0.61
1:A:631:LEU:HB3	1:A:632:PHE:CD1	2.35	0.61
1:A:237:LYS:HD2	1:A:245:CYS:HB2	1.82	0.61
1:A:157:CYS:HB2	1:A:172:LEU:HB3	1.83	0.61
1:A:347:TRP:NE1	1:A:640:LEU:HD22	2.15	0.61
1:A:490:SER:H	1:A:501:LEU:HA	1.66	0.61
1:A:463:ARG:NH2	1:A:526:TYR:CE1	2.69	0.61
1:A:297:ASP:CG	1:A:301:LYS:HD2	2.26	0.61
1:A:334:THR:HG23	1:A:337:GLU:OE2	2.00	0.61
1:A:5:SER:HB3	1:A:33:SER:O	2.01	0.61
1:A:461:VAL:HG12	1:A:467:TRP:CH2	2.36	0.60
1:A:150:ALA:HB2	1:A:169:LEU:HD11	1.83	0.60
1:A:52:ASN:HA	1:A:54:ALA:O	2.00	0.60
1:A:293:PRO:HA	1:A:296:GLN:HG2	1.82	0.60
1:A:385:LEU:HD11	1:A:405:CYS:HB3	1.82	0.60
1:A:95:VAL:CG1	1:A:246:HIS:HB2	2.31	0.60
1:A:505:CYS:HB2	1:A:514:LYS:HG3	1.83	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:550:GLN:HE22	1:A:638:ASN:HD21	1.49	0.60
1:A:356:ARG:HA	1:A:359:LYS:HE2	1.84	0.60
1:A:185:SER:C	1:A:187:GLU:H	2.08	0.60
1:A:346:VAL:O	1:A:390:ASP:HB2	2.01	0.60
1:A:407:LEU:N	1:A:407:LEU:HD12	2.16	0.60
1:A:410:VAL:O	1:A:651:LEU:HG	2.02	0.60
1:A:516:MET:HG2	1:A:517:PRO:N	2.17	0.60
1:A:608:LYS:HE2	1:A:650:GLU:OE2	2.01	0.60
1:A:334:THR:OG1	1:A:337:GLU:HG3	2.02	0.60
1:A:434:LEU:HD22	1:A:588:HIS:ND1	2.16	0.60
1:A:174:ALA:C	1:A:180:LYS:HG3	2.27	0.60
1:A:298:LEU:C	1:A:299:LEU:HD12	2.27	0.60
1:A:328:THR:O	1:A:331:LEU:HB2	2.01	0.60
1:A:149:VAL:O	1:A:153:PHE:HD1	1.84	0.59
1:A:212:SER:O	1:A:215:PHE:N	2.36	0.59
1:A:298:LEU:O	1:A:299:LEU:HD12	2.01	0.59
1:A:75:ARG:NH1	1:A:312:SER:CA	2.57	0.59
1:A:288:LEU:HD22	1:A:288:LEU:N	2.17	0.59
1:A:508:ASN:O	1:A:511:ASN:N	2.34	0.59
1:A:75:ARG:NH2	1:A:311:PRO:O	2.33	0.59
1:A:656:THR:N	1:A:659:GLN:HG3	2.18	0.59
1:A:632:PHE:CE2	1:A:647:CYS:HA	2.38	0.59
1:A:663:SER:O	1:A:666:VAL:HB	2.03	0.59
1:A:347:TRP:O	1:A:371:CYS:HB2	2.03	0.59
1:A:473:LEU:HD13	1:A:473:LEU:H	1.67	0.59
1:A:395:ASP:HB3	1:A:398:PHE:HD2	1.67	0.59
1:A:436:VAL:CA	1:A:589:LEU:HG	2.33	0.58
1:A:571:LEU:HD11	1:A:587:CYS:HB3	1.85	0.58
1:A:597:VAL:CG2	1:A:648:LEU:HD13	2.33	0.58
1:A:394:LEU:O	1:A:595:HIS:HB3	2.03	0.58
1:A:415:GLN:NE2	1:A:431:GLU:HB2	2.17	0.58
1:A:459:THR:OG1	1:A:463:ARG:HD3	2.03	0.58
1:A:464:THR:HG22	1:A:469:ILE:HD11	1.85	0.58
1:A:79:ALA:HA	1:A:254:ALA:CA	2.29	0.58
1:A:97:VAL:N	1:A:207:ALA:O	2.36	0.58
1:A:106:LEU:HA	1:A:109:LEU:HD13	1.85	0.58
1:A:356:ARG:HG2	1:A:359:LYS:HZ3	1.66	0.58
1:A:490:SER:O	1:A:504:LEU:HG	2.03	0.58
1:A:632:PHE:HB3	1:A:645:THR:HB	1.85	0.58
1:A:393:ASN:HB3	1:A:640:LEU:O	2.03	0.58
1:A:238:PRO:O	1:A:241:ALA:HB3	2.04	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:351:GLY:HA3	1:A:518:ASN:ND2	2.19	0.58
1:A:392:LEU:CD1	1:A:394:LEU:HG	2.30	0.58
1:A:166:TYR:N	1:A:166:TYR:HD1	2.01	0.58
1:A:298:LEU:HD22	1:A:299:LEU:H	1.68	0.57
1:A:115:CYS:SG	1:A:204:GLY:HA2	2.45	0.57
1:A:365:SER:O	1:A:366:ASN:HB3	2.04	0.57
1:A:404:LYS:HA	1:A:404:LYS:CE	2.34	0.57
1:A:633:LYS:CA	1:A:643:ASP:HA	2.35	0.57
1:A:3:ARG:CZ	1:A:4:LYS:H	2.17	0.57
1:A:394:LEU:HB3	1:A:399:ILE:HG12	1.86	0.57
1:A:380:CYS:HB3	1:A:392:LEU:HD23	1.86	0.57
1:A:396:GLY:HA2	1:A:399:ILE:HD12	1.86	0.57
1:A:10:THR:O	1:A:38:ARG:HD2	2.05	0.57
1:A:133:ARG:HB3	1:A:134:PRO:HD3	1.85	0.57
1:A:250:VAL:HG23	1:A:251:PRO:HD2	1.85	0.57
1:A:499:SER:OG	1:A:502:CYS:HB2	2.04	0.57
1:A:561:ALA:HB1	1:A:564:LEU:HG	1.85	0.57
1:A:395:ASP:HB3	1:A:398:PHE:CD2	2.40	0.57
1:A:635:GLU:O	1:A:636:THR:HG22	2.05	0.57
1:A:189:TYR:HB3	1:A:195:ALA:HA	1.87	0.57
1:A:278:PHE:HB2	1:A:288:LEU:CD1	2.34	0.57
1:A:409:PRO:O	1:A:651:LEU:HD21	2.04	0.57
1:A:448:TRP:CE3	1:A:448:TRP:HA	2.39	0.57
1:A:49:ILE:HG12	1:A:57:VAL:HG22	1.86	0.56
1:A:162:ASP:O	1:A:166:TYR:HE1	1.87	0.56
1:A:39:LYS:HD2	1:A:44:GLU:HG2	1.86	0.56
1:A:73:LYS:O	1:A:74:LEU:HD23	2.06	0.56
1:A:120:GLY:O	1:A:126:ASN:ND2	2.38	0.56
1:A:141:PRO:N	1:A:142:PRO:HD2	2.20	0.56
1:A:189:TYR:HB3	1:A:198:CYS:HB2	1.86	0.56
1:A:258:ARG:HB2	1:A:260:VAL:O	2.04	0.56
1:A:264:GLU:O	1:A:267:ILE:HB	2.06	0.56
1:A:456:SER:HB2	1:A:487:PHE:CD1	2.40	0.56
1:A:534:ALA:CB	1:A:560:TRP:HZ3	2.18	0.56
1:A:560:TRP:CE3	1:A:561:ALA:HB2	2.40	0.56
1:A:77:VAL:HG11	1:A:267:ILE:HG21	1.87	0.56
1:A:79:ALA:H	1:A:310:ILE:HD11	1.70	0.56
1:A:342:ARG:HA	1:A:603:ARG:HH21	1.70	0.56
1:A:383:LEU:HD11	1:A:388:GLU:CB	2.22	0.56
1:A:95:VAL:HG12	1:A:246:HIS:CB	2.36	0.56
1:A:299:LEU:HB2	1:A:300:PHE:HE1	1.55	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:671:ASN:ND2	1:A:674:ARG:NH2	2.52	0.56
1:A:199:LEU:HD12	1:A:204:GLY:O	2.06	0.56
1:A:206:VAL:HG21	1:A:230:LEU:HD11	1.86	0.56
1:A:415:GLN:O	1:A:416:LYS:HB3	2.06	0.56
1:A:473:LEU:O	1:A:476:ASN:HB3	2.05	0.56
1:A:8:TRP:HH2	1:A:58:THR:HG1	1.51	0.56
1:A:656:THR:H	1:A:659:GLN:HG3	1.70	0.56
1:A:189:TYR:CD1	1:A:198:CYS:N	2.74	0.56
1:A:344:ARG:HG3	1:A:344:ARG:O	2.06	0.56
1:A:7:ARG:CA	1:A:35:SER:O	2.50	0.56
1:A:8:TRP:HH2	1:A:58:THR:OG1	1.88	0.55
1:A:62:GLY:O	1:A:65:TYR:HB3	2.06	0.55
1:A:132:LEU:HD12	1:A:152:PHE:HE2	1.70	0.55
1:A:467:TRP:O	1:A:471:MET:HG2	2.06	0.55
1:A:518:ASN:OD1	1:A:520:GLU:HB2	2.06	0.55
1:A:380:CYS:O	1:A:383:LEU:HB3	2.06	0.55
1:A:615:GLN:NE2	1:A:647:CYS:HB2	2.21	0.55
1:A:278:PHE:CD1	1:A:286:PHE:HD2	2.24	0.55
1:A:130:GLY:O	1:A:133:ARG:HB3	2.07	0.55
1:A:448:TRP:N	1:A:572:LEU:HD11	2.22	0.55
1:A:504:LEU:HD23	1:A:504:LEU:N	2.22	0.55
1:A:94:ALA:O	1:A:247:LEU:N	2.37	0.55
1:A:349:ALA:HB1	1:A:354:GLU:HB2	1.88	0.55
1:A:175:GLY:HA3	1:A:180:LYS:HA	1.88	0.55
1:A:201:ASN:HD22	1:A:201:ASN:N	2.04	0.55
1:A:345:VAL:HG21	1:A:610:VAL:HG21	1.88	0.55
1:A:349:ALA:HB1	1:A:354:GLU:CB	2.37	0.55
1:A:250:VAL:HB	1:A:324:TYR:HD2	1.71	0.55
1:A:434:LEU:O	1:A:544:LYS:HA	2.07	0.55
1:A:319:TYR:CD1	1:A:687:LEU:HD21	2.42	0.55
1:A:411:LEU:HD11	1:A:612:PHE:CE2	2.42	0.55
1:A:441:LYS:HG3	1:A:442:SER:N	2.21	0.55
1:A:116:HIS:HB2	1:A:158:VAL:HA	1.88	0.54
1:A:343:GLU:HA	1:A:606:HIS:CE1	2.42	0.54
1:A:561:ALA:HB1	1:A:564:LEU:HD21	1.88	0.54
1:A:526:TYR:C	1:A:547:THR:HG21	2.32	0.54
1:A:625:CYS:SG	1:A:633:LYS:HG3	2.47	0.54
1:A:98:VAL:HB	1:A:236:ARG:NH2	2.22	0.54
1:A:201:ASN:N	1:A:201:ASN:ND2	2.51	0.54
1:A:280:ARG:HH11	1:A:305:LEU:HA	1.71	0.54
1:A:356:ARG:HA	1:A:359:LYS:HG3	1.89	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:297:ASP:OD1	1:A:301:LYS:HA	2.07	0.54
1:A:196:PHE:CE2	1:A:214:VAL:HG22	2.37	0.54
1:A:298:LEU:C	1:A:300:PHE:H	2.16	0.54
1:A:552:THR:O	1:A:554:GLY:N	2.41	0.54
1:A:10:THR:HG22	1:A:15:GLU:HG2	1.90	0.54
1:A:219:PRO:HA	1:A:224:ARG:NH2	2.22	0.54
1:A:641:PHE:HE2	1:A:648:LEU:HD11	1.61	0.54
1:A:670:THR:HG23	1:A:673:ARG:HD3	1.90	0.54
1:A:3:ARG:NH2	1:A:4:LYS:HG2	2.22	0.54
1:A:75:ARG:NH2	1:A:310:ILE:HB	2.23	0.54
1:A:95:VAL:HG13	1:A:246:HIS:HB2	1.90	0.54
1:A:439:VAL:HG13	1:A:572:LEU:HB2	1.90	0.54
1:A:299:LEU:C	1:A:300:PHE:CD1	2.86	0.54
1:A:324:TYR:CD1	1:A:324:TYR:C	2.85	0.54
1:A:465:ALA:HB2	1:A:526:TYR:CE1	2.42	0.54
1:A:52:ASN:ND2	1:A:54:ALA:O	2.41	0.53
1:A:394:LEU:HD13	1:A:399:ILE:N	2.23	0.53
1:A:435:ALA:CB	1:A:589:LEU:HD12	2.38	0.53
1:A:609:LYS:O	1:A:613:LEU:HG	2.08	0.53
1:A:94:ALA:N	1:A:248:ALA:O	2.41	0.53
1:A:193:SER:OG	1:A:297:ASP:HB2	2.08	0.53
1:A:458:HIS:CD2	1:A:492:ALA:HB2	2.43	0.53
1:A:344:ARG:HA	1:A:368:LYS:O	2.08	0.53
1:A:448:TRP:O	1:A:449:ASN:C	2.51	0.53
1:A:545:ASP:O	1:A:548:VAL:HB	2.09	0.53
1:A:77:VAL:HB	1:A:255:VAL:O	2.09	0.53
1:A:237:LYS:CD	1:A:245:CYS:HB2	2.38	0.53
1:A:425:CYS:O	1:A:427:HIS:N	2.42	0.53
1:A:459:THR:HG22	1:A:525:GLY:O	2.09	0.53
1:A:629:PHE:CE2	1:A:631:LEU:HG	2.42	0.53
1:A:116:HIS:CG	1:A:158:VAL:HG22	2.44	0.53
1:A:609:LYS:HG3	1:A:610:VAL:N	2.23	0.53
1:A:315:ASP:H	1:A:318:LEU:HB2	1.74	0.53
1:A:561:ALA:HB1	1:A:564:LEU:CG	2.39	0.53
1:A:22:PHE:CD1	1:A:286:PHE:CE2	2.96	0.53
1:A:138:TRP:CD2	1:A:145:LEU:HD13	2.43	0.53
1:A:407:LEU:HB3	1:A:598:VAL:CG1	2.39	0.53
1:A:410:VAL:O	1:A:651:LEU:CD1	2.57	0.53
1:A:502:CYS:O	1:A:504:LEU:N	2.41	0.53
1:A:58:THR:O	1:A:59:LEU:HD23	2.09	0.53
1:A:457:CYS:SG	1:A:533:LEU:CD1	2.97	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:475:PHE:CE2	1:A:675:CYS:SG	3.02	0.53
1:A:113:LYS:HD3	1:A:205:ASP:CG	2.34	0.53
1:A:210:LYS:O	1:A:212:SER:N	2.40	0.53
1:A:265:ASP:HA	1:A:309:ARG:NH1	2.14	0.53
1:A:399:ILE:O	1:A:402:ALA:HB3	2.09	0.53
1:A:439:VAL:N	1:A:570:GLU:O	2.39	0.53
1:A:17:ALA:O	1:A:20:ALA:HB3	2.09	0.52
1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:SER:N	2.22	0.52
1:A:138:TRP:CZ2	1:A:145:LEU:HB2	2.43	0.52
1:A:347:TRP:CH2	1:A:641:PHE:HZ	2.27	0.52
1:A:657:TYR:C	1:A:659:GLN:N	2.65	0.52
1:A:377:THR:O	1:A:380:CYS:HB2	2.10	0.52
1:A:65:TYR:CD1	1:A:66:GLU:OE2	2.63	0.52
1:A:99:LYS:HE3	1:A:200:GLU:HA	1.91	0.52
1:A:436:VAL:O	1:A:542:PHE:HA	2.09	0.52
1:A:133:ARG:CG	1:A:133:ARG:HH11	2.22	0.52
1:A:133:ARG:HE	1:A:138:TRP:HE3	1.54	0.52
1:A:258:ARG:NH1	1:A:262:GLY:O	2.43	0.52
1:A:266:LEU:O	1:A:269:LYS:HB2	2.09	0.52
1:A:314:ILE:HA	1:A:318:LEU:HD13	1.92	0.52
1:A:315:ASP:O	1:A:316:SER:C	2.53	0.52
1:A:416:LYS:HB2	1:A:646:GLU:N	2.25	0.52
1:A:422:ALA:HB1	1:A:423:PRO:HD2	1.91	0.52
1:A:118:GLY:HA2	1:A:159:PRO:CB	2.39	0.52
1:A:250:VAL:HG22	1:A:251:PRO:O	2.10	0.52
1:A:258:ARG:C	1:A:260:VAL:H	2.17	0.52
1:A:400:TYR:CD1	1:A:400:TYR:C	2.86	0.52
1:A:444:ALA:O	1:A:578:ARG:HD3	2.10	0.52
1:A:467:TRP:C	1:A:471:MET:HG2	2.35	0.52
1:A:634:SER:OG	1:A:643:ASP:HB2	2.10	0.52
1:A:385:LEU:CD2	1:A:407:LEU:HD11	2.36	0.52
1:A:400:TYR:CE1	1:A:681:LEU:HD21	2.44	0.52
1:A:475:PHE:HE2	1:A:481:CYS:CA	2.22	0.52
1:A:606:HIS:ND1	1:A:607:LEU:HD23	2.25	0.52
1:A:107:ASN:C	1:A:109:LEU:H	2.17	0.52
1:A:279:GLY:C	1:A:280:ARG:HG2	2.34	0.52
1:A:415:GLN:CD	1:A:415:GLN:H	2.18	0.52
1:A:415:GLN:C	1:A:417:SER:N	2.67	0.52
1:A:192:TYR:HB2	1:A:301:LYS:HZ2	1.73	0.52
1:A:457:CYS:HB2	1:A:541:ALA:CB	2.33	0.52
1:A:457:CYS:SG	1:A:533:LEU:HD12	2.50	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:561:ALA:O	1:A:563:ASP:N	2.43	0.52
1:A:342:ARG:HA	1:A:603:ARG:NH2	2.26	0.52
1:A:350:VAL:HG12	1:A:350:VAL:O	2.10	0.52
1:A:426:VAL:HA	1:A:647:CYS:SG	2.49	0.52
1:A:615:GLN:HE22	1:A:647:CYS:HB2	1.75	0.52
1:A:325:LEU:HD21	1:A:386:LYS:O	2.10	0.51
1:A:475:PHE:CZ	1:A:479:GLY:HA2	2.45	0.51
1:A:133:ARG:O	1:A:134:PRO:C	2.52	0.51
1:A:463:ARG:NH2	1:A:526:TYR:HE1	2.05	0.51
1:A:629:PHE:CG	1:A:630:CYS:N	2.78	0.51
1:A:8:TRP:CH2	1:A:58:THR:OG1	2.62	0.51
1:A:25:ASN:CA	1:A:28:LYS:HB2	2.35	0.51
1:A:38:ARG:HH22	1:A:40:THR:HA	1.74	0.51
1:A:74:LEU:HB3	1:A:257:ALA:O	2.10	0.51
1:A:611:LEU:HD21	1:A:648:LEU:CD1	2.40	0.51
1:A:70:HIS:HA	1:A:73:LYS:HE3	1.91	0.51
1:A:440:ARG:NH2	1:A:536:LYS:HA	2.25	0.51
1:A:571:LEU:O	1:A:579:LYS:N	2.43	0.51
1:A:617:GLN:O	1:A:618:PHE:CD1	2.64	0.51
1:A:18:LYS:CG	1:A:299:LEU:HD11	2.22	0.51
1:A:140:GLY:C	1:A:142:PRO:HD2	2.36	0.51
1:A:572:LEU:CD2	1:A:578:ARG:HD2	2.41	0.51
1:A:77:VAL:N	1:A:255:VAL:O	2.44	0.51
1:A:565:LYS:O	1:A:568:ASP:HB2	2.11	0.51
1:A:93:TYR:CD2	1:A:246:HIS:CE1	2.97	0.51
1:A:221:GLU:N	1:A:224:ARG:HH11	2.08	0.51
1:A:394:LEU:HD22	1:A:398:PHE:HB3	1.91	0.51
1:A:621:ASN:ND2	1:A:646:GLU:O	2.44	0.51
1:A:533:LEU:HD13	1:A:541:ALA:HB2	1.92	0.51
1:A:632:PHE:HE2	1:A:647:CYS:HA	1.76	0.51
1:A:635:GLU:C	1:A:637:LYS:H	2.19	0.51
1:A:258:ARG:C	1:A:260:VAL:N	2.64	0.51
1:A:381:ILE:O	1:A:382:ALA:C	2.53	0.51
1:A:477:GLN:O	1:A:478:THR:HG23	2.11	0.51
1:A:491:CYS:CB	1:A:504:LEU:HB2	2.38	0.51
1:A:656:THR:O	1:A:659:GLN:HB2	2.11	0.51
1:A:314:ILE:CG2	1:A:319:TYR:HB2	2.41	0.50
1:A:347:TRP:CE2	1:A:392:LEU:HA	2.46	0.50
1:A:453:GLY:N	1:A:486:PHE:O	2.44	0.50
1:A:623:PRO:O	1:A:626:PRO:HD2	2.11	0.50
1:A:448:TRP:CZ3	1:A:451:LEU:HD21	2.46	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:84:THR:C	1:A:86:GLY:N	2.67	0.50
1:A:358:CYS:O	1:A:362:SER:N	2.39	0.50
1:A:662:GLY:O	1:A:663:SER:C	2.55	0.50
1:A:162:ASP:O	1:A:166:TYR:CE1	2.64	0.50
1:A:8:TRP:O	1:A:36:CYS:CB	2.60	0.50
1:A:116:HIS:ND1	1:A:208:PHE:HE2	2.08	0.50
1:A:131:THR:O	1:A:134:PRO:HD2	2.11	0.50
1:A:133:ARG:O	1:A:135:TYR:N	2.45	0.50
1:A:223:GLU:CD	1:A:226:LYS:HD2	2.36	0.50
1:A:327:ALA:O	1:A:331:LEU:HD22	2.12	0.50
1:A:215:PHE:HZ	1:A:240:ASP:HA	1.76	0.50
1:A:345:VAL:HG22	1:A:607:LEU:HD22	1.94	0.50
1:A:347:TRP:CH2	1:A:641:PHE:CZ	3.00	0.50
1:A:402:ALA:HB1	1:A:407:LEU:CB	2.36	0.50
1:A:34:VAL:CG1	1:A:35:SER:H	2.22	0.49
1:A:473:LEU:HD13	1:A:473:LEU:N	2.27	0.49
1:A:597:VAL:HG21	1:A:648:LEU:HD13	1.92	0.49
1:A:60:ASP:O	1:A:63:LEU:N	2.45	0.49
1:A:189:TYR:CE2	1:A:198:CYS:HA	2.47	0.49
1:A:458:HIS:HB2	1:A:492:ALA:CB	2.41	0.49
1:A:672:LEU:N	1:A:672:LEU:CD2	2.75	0.49
1:A:28:LYS:NZ	1:A:28:LYS:CB	2.72	0.49
1:A:95:VAL:HG12	1:A:246:HIS:HB2	1.94	0.49
1:A:185:SER:C	1:A:187:GLU:N	2.69	0.49
1:A:193:SER:HB2	1:A:296:GLN:CB	2.41	0.49
1:A:441:LYS:HB3	1:A:568:ASP:O	2.13	0.49
1:A:534:ALA:C	1:A:536:LYS:H	2.20	0.49
1:A:27:LYS:O	1:A:27:LYS:HG2	2.12	0.49
1:A:199:LEU:HA	1:A:204:GLY:CA	2.42	0.49
1:A:232:PRO:C	1:A:234:ASN:N	2.70	0.49
1:A:92:TYR:HE1	1:A:250:VAL:HG22	1.77	0.49
1:A:411:LEU:HD12	1:A:649:ALA:O	2.12	0.49
1:A:439:VAL:CG1	1:A:572:LEU:HD23	2.35	0.49
1:A:475:PHE:HE2	1:A:481:CYS:N	2.11	0.49
1:A:99:LYS:HG3	1:A:199:LEU:HD11	1.94	0.49
1:A:170:CYS:SG	1:A:181:CYS:CB	3.01	0.49
1:A:491:CYS:HB2	1:A:504:LEU:CB	2.39	0.49
1:A:543:VAL:HG13	1:A:544:LYS:N	2.28	0.49
1:A:631:LEU:HD13	1:A:632:PHE:HE1	1.78	0.49
1:A:1:ALA:N	1:A:2:PRO:CD	2.75	0.49
1:A:212:SER:O	1:A:214:VAL:N	2.46	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:298:LEU:HD13	1:A:299:LEU:CD1	2.43	0.49
1:A:339:ALA:O	1:A:343:GLU:OE1	2.30	0.49
1:A:415:GLN:C	1:A:417:SER:H	2.20	0.49
1:A:49:ILE:HD12	1:A:54:ALA:HB3	1.95	0.49
1:A:118:GLY:N	1:A:159:PRO:HD2	2.28	0.49
1:A:410:VAL:O	1:A:651:LEU:HD11	2.12	0.49
1:A:425:CYS:HA	1:A:428:ARG:CD	2.41	0.49
1:A:469:ILE:H	1:A:469:ILE:CD1	2.05	0.49
1:A:606:HIS:HA	1:A:609:LYS:HE3	1.93	0.49
1:A:394:LEU:HD22	1:A:398:PHE:CB	2.42	0.48
1:A:415:GLN:CD	1:A:431:GLU:HB2	2.38	0.48
1:A:38:ARG:NH1	1:A:39:LYS:N	2.61	0.48
1:A:58:THR:HA	1:A:254:ALA:O	2.13	0.48
1:A:92:TYR:CE1	1:A:250:VAL:HG13	2.48	0.48
1:A:94:ALA:O	1:A:246:HIS:HB2	2.13	0.48
1:A:320:LEU:HB2	1:A:325:LEU:HD12	1.95	0.48
1:A:403:GLY:HA3	1:A:657:TYR:CE1	2.48	0.48
1:A:497:PRO:HA	1:A:515:CYS:SG	2.53	0.48
1:A:175:GLY:HA3	1:A:180:LYS:CA	2.43	0.48
1:A:280:ARG:NH2	1:A:289:PHE:CD2	2.77	0.48
1:A:82:TYR:HE2	1:A:252:SER:HB3	1.70	0.48
1:A:105:GLN:OE1	1:A:236:ARG:N	2.46	0.48
1:A:221:GLU:HA	1:A:224:ARG:HB2	1.95	0.48
1:A:618:PHE:CD1	1:A:629:PHE:HD2	2.32	0.48
1:A:193:SER:OG	1:A:296:GLN:HB3	2.13	0.48
1:A:607:LEU:O	1:A:608:LYS:C	2.56	0.48
1:A:34:VAL:HG22	1:A:270:LEU:HD21	1.96	0.48
1:A:91:ARG:HG2	1:A:251:PRO:HA	1.96	0.48
1:A:213:THR:HA	1:A:216:GLU:HB2	1.96	0.48
1:A:262:GLY:C	1:A:264:GLU:H	2.19	0.48
1:A:361:TRP:CZ2	1:A:631:LEU:HD11	2.49	0.48
1:A:384:VAL:HG21	1:A:407:LEU:HD21	1.96	0.48
1:A:394:LEU:HD22	1:A:395:ASP:H	1.79	0.48
1:A:411:LEU:HA	1:A:649:ALA:O	2.13	0.48
1:A:233:ASP:C	1:A:235:THR:H	2.22	0.48
1:A:573:CYS:N	1:A:577:THR:O	2.45	0.48
1:A:6:VAL:CG1	1:A:7:ARG:N	2.76	0.48
1:A:447:THR:HA	1:A:572:LEU:HD21	1.95	0.48
1:A:534:ALA:HB3	1:A:560:TRP:CZ3	2.44	0.48
1:A:577:THR:HG22	1:A:578:ARG:N	2.29	0.48
1:A:211:ASP:HB2	1:A:242:PHE:CG	2.48	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:619:GLY:C	1:A:621:ASN:N	2.71	0.48
1:A:148:ALA:O	1:A:152:PHE:HB2	2.14	0.47
1:A:265:ASP:OD2	1:A:266:LEU:HD12	2.14	0.47
1:A:382:ALA:O	1:A:385:LEU:HB2	2.14	0.47
1:A:411:LEU:HD11	1:A:612:PHE:CZ	2.49	0.47
1:A:516:MET:HG2	1:A:517:PRO:CD	2.44	0.47
1:A:22:PHE:HZ	1:A:274:ALA:CB	2.26	0.47
1:A:50:ALA:HA	1:A:258:ARG:HG3	1.96	0.47
1:A:288:LEU:HD23	1:A:289:PHE:CG	2.49	0.47
1:A:423:PRO:O	1:A:425:CYS:N	2.47	0.47
1:A:467:TRP:CD1	1:A:468:ASN:N	2.82	0.47
1:A:608:LYS:O	1:A:612:PHE:CD2	2.68	0.47
1:A:3:ARG:CG	1:A:266:LEU:HD21	2.44	0.47
1:A:588:HIS:CE1	1:A:590:ALA:HA	2.49	0.47
1:A:595:HIS:O	1:A:596:ALA:HB2	2.14	0.47
1:A:686:PHE:CD1	1:A:687:LEU:HD23	2.50	0.47
1:A:52:ASN:C	1:A:54:ALA:N	2.71	0.47
1:A:91:ARG:HB3	1:A:249:ARG:HD3	1.96	0.47
1:A:653:GLY:O	1:A:655:THR:N	2.47	0.47
1:A:20:ALA:O	1:A:23:GLN:HB3	2.14	0.47
1:A:25:ASN:O	1:A:29:VAL:HG23	2.14	0.47
1:A:189:TYR:CE1	1:A:198:CYS:N	2.82	0.47
1:A:250:VAL:HG23	1:A:251:PRO:CD	2.44	0.47
1:A:263:ARG:O	1:A:265:ASP:N	2.47	0.47
1:A:411:LEU:HD12	1:A:649:ALA:C	2.39	0.47
1:A:436:VAL:HG11	1:A:584:ALA:HB1	1.95	0.47
1:A:384:VAL:CG2	1:A:385:LEU:N	2.78	0.47
1:A:423:PRO:C	1:A:425:CYS:N	2.72	0.47
1:A:425:CYS:C	1:A:427:HIS:N	2.72	0.47
1:A:433:TYR:HE1	1:A:592:ALA:HB3	1.80	0.47
1:A:466:ALA:O	1:A:470:PRO:CD	2.61	0.47
1:A:44:GLU:HA	1:A:47:GLN:OE1	2.14	0.47
1:A:60:ASP:O	1:A:61:GLY:C	2.57	0.47
1:A:138:TRP:CH2	1:A:145:LEU:HD22	2.50	0.47
1:A:264:GLU:CG	1:A:309:ARG:NH2	2.78	0.47
1:A:315:ASP:OD1	1:A:318:LEU:HD12	2.14	0.47
1:A:395:ASP:HA	1:A:595:HIS:CG	2.50	0.47
1:A:453:GLY:CA	1:A:486:PHE:O	2.60	0.47
1:A:458:HIS:O	1:A:493:PRO:HD3	2.15	0.47
1:A:470:PRO:O	1:A:474:LEU:HG	2.14	0.47
1:A:487:PHE:O	1:A:488:SER:C	2.58	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:561:ALA:C	1:A:563:ASP:N	2.70	0.47
1:A:70:HIS:HA	1:A:73:LYS:HG3	1.97	0.47
1:A:265:ASP:CA	1:A:309:ARG:HH12	2.18	0.47
1:A:425:CYS:CA	1:A:428:ARG:HD3	2.41	0.47
1:A:476:ASN:HB3	1:A:477:GLN:OE1	2.15	0.47
1:A:60:ASP:O	1:A:62:GLY:N	2.48	0.47
1:A:214:VAL:O	1:A:217:ASN:N	2.48	0.47
1:A:95:VAL:CG1	1:A:246:HIS:CB	2.92	0.47
1:A:175:GLY:C	1:A:176:THR:O	2.57	0.47
1:A:195:ALA:O	1:A:198:CYS:CB	2.63	0.47
1:A:523:TYR:CZ	1:A:532:CYS:CA	2.95	0.47
1:A:599:SER:OG	1:A:600:GLN:N	2.48	0.47
1:A:614:GLN:OE1	1:A:618:PHE:HE2	1.98	0.47
1:A:446:LEU:HD22	1:A:454:LYS:NZ	2.30	0.46
1:A:221:GLU:O	1:A:225:ASP:HB2	2.15	0.46
1:A:297:ASP:OD1	1:A:301:LYS:HD2	2.15	0.46
1:A:43:PHE:O	1:A:47:GLN:NE2	2.48	0.46
1:A:98:VAL:CG1	1:A:206:VAL:HG23	2.41	0.46
1:A:251:PRO:O	1:A:252:SER:O	2.34	0.46
1:A:411:LEU:CB	1:A:648:LEU:HB3	2.44	0.46
1:A:128:PRO:O	1:A:129:ILE:C	2.58	0.46
1:A:138:TRP:NE1	1:A:143:GLU:O	2.48	0.46
1:A:176:THR:OG1	1:A:179:ASP:HB2	2.16	0.46
1:A:243:LYS:HB2	1:A:244:GLU:OE1	2.16	0.46
1:A:403:GLY:O	1:A:406:GLY:N	2.45	0.46
1:A:625:CYS:HB3	1:A:626:PRO:HD3	1.98	0.46
1:A:121:ARG:HE	1:A:121:ARG:HB2	1.48	0.46
1:A:329:GLN:O	1:A:332:ARG:HG2	2.15	0.46
1:A:413:GLU:CG	1:A:595:HIS:HB2	2.36	0.46
1:A:65:TYR:CD2	1:A:328:THR:HB	2.51	0.46
1:A:220:ASP:HB2	1:A:223:GLU:HB2	1.98	0.46
1:A:263:ARG:O	1:A:266:LEU:N	2.49	0.46
1:A:369:VAL:HG12	1:A:370:ALA:N	2.31	0.46
1:A:579:LYS:HB3	1:A:580:PRO:CD	2.42	0.46
1:A:550:GLN:NE2	1:A:638:ASN:HD21	2.12	0.46
1:A:565:LYS:C	1:A:567:GLU:N	2.74	0.46
1:A:133:ARG:O	1:A:136:LEU:N	2.49	0.46
1:A:199:LEU:HA	1:A:204:GLY:C	2.41	0.46
1:A:482:LYS:H	1:A:482:LYS:CD	2.20	0.46
1:A:565:LYS:C	1:A:567:GLU:H	2.24	0.46
1:A:670:THR:O	1:A:671:ASN:C	2.59	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:49:ILE:HD12	1:A:54:ALA:CB	2.45	0.46
1:A:394:LEU:CD2	1:A:398:PHE:HB3	2.45	0.46
1:A:657:TYR:O	1:A:659:GLN:N	2.49	0.46
1:A:668:SER:O	1:A:671:ASN:HB2	2.16	0.46
1:A:137:ASN:HD22	1:A:137:ASN:HA	1.63	0.45
1:A:377:THR:O	1:A:381:ILE:CD1	2.64	0.45
1:A:526:TYR:CD2	1:A:544:LYS:HG2	2.51	0.45
1:A:8:TRP:CZ2	1:A:58:THR:N	2.85	0.45
1:A:206:VAL:HG21	1:A:230:LEU:CD1	2.47	0.45
1:A:278:PHE:HA	1:A:283:SER:HB2	1.98	0.45
1:A:288:LEU:N	1:A:288:LEU:HD13	2.31	0.45
1:A:404:LYS:HA	1:A:404:LYS:HE2	1.98	0.45
1:A:440:ARG:HH22	1:A:536:LYS:CA	2.27	0.45
1:A:458:HIS:HB2	1:A:492:ALA:CA	2.44	0.45
1:A:460:GLY:N	1:A:493:PRO:HD2	2.31	0.45
1:A:568:ASP:HB3	1:A:569:PHE:CE1	2.52	0.45
1:A:606:HIS:HD2	1:A:609:LYS:NZ	2.15	0.45
1:A:607:LEU:O	1:A:610:VAL:N	2.48	0.45
1:A:189:TYR:CE1	1:A:198:CYS:HA	2.50	0.45
1:A:213:THR:O	1:A:216:GLU:HB2	2.16	0.45
1:A:263:ARG:N	1:A:264:GLU:OE2	2.50	0.45
1:A:353:GLU:HG3	1:A:519:SER:OG	2.16	0.45
1:A:426:VAL:N	1:A:647:CYS:SG	2.89	0.45
1:A:459:THR:CG2	1:A:526:TYR:HA	2.46	0.45
1:A:463:ARG:NH1	1:A:463:ARG:HG3	2.30	0.45
1:A:169:LEU:HD12	1:A:169:LEU:H	1.82	0.45
1:A:218:LEU:HD11	1:A:227:TYR:HE2	1.82	0.45
1:A:526:TYR:CD2	1:A:543:VAL:HG22	2.52	0.45
1:A:133:ARG:NE	1:A:138:TRP:HE3	2.14	0.45
1:A:224:ARG:C	1:A:226:LYS:N	2.74	0.45
1:A:366:ASN:C	1:A:366:ASN:HD22	2.25	0.45
1:A:526:TYR:HB3	1:A:547:THR:HG21	1.98	0.45
1:A:184:SER:OG	1:A:186:GLN:HB2	2.16	0.45
1:A:475:PHE:CE2	1:A:481:CYS:N	2.85	0.45
1:A:490:SER:O	1:A:501:LEU:C	2.59	0.45
1:A:496:ASP:O	1:A:497:PRO:C	2.58	0.45
1:A:99:LYS:CE	1:A:200:GLU:HA	2.47	0.45
1:A:262:GLY:O	1:A:263:ARG:CB	2.47	0.45
1:A:436:VAL:N	1:A:543:VAL:O	2.47	0.45
1:A:8:TRP:O	1:A:36:CYS:HA	2.17	0.45
1:A:195:ALA:O	1:A:198:CYS:HB3	2.16	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:395:ASP:O	1:A:398:PHE:HB2	2.17	0.45
1:A:469:ILE:CB	1:A:470:PRO:HD3	2.29	0.45
1:A:49:ILE:HG13	1:A:56:ALA:N	2.32	0.45
1:A:94:ALA:HB3	1:A:248:ALA:H	1.82	0.45
1:A:392:LEU:C	1:A:392:LEU:CD1	2.90	0.45
1:A:393:ASN:HD22	1:A:641:PHE:HA	1.82	0.45
1:A:607:LEU:HA	1:A:610:VAL:HG22	1.99	0.45
1:A:21:LYS:HA	1:A:24:ARG:HD2	1.98	0.44
1:A:133:ARG:CG	1:A:133:ARG:NH1	2.78	0.44
1:A:508:ASN:O	1:A:522:ARG:NH2	2.36	0.44
1:A:611:LEU:HD21	1:A:648:LEU:HD12	1.98	0.44
1:A:615:GLN:HG3	1:A:616:ASP:N	2.30	0.44
1:A:69:LEU:O	1:A:72:TYR:O	2.35	0.44
1:A:319:TYR:CE1	1:A:687:LEU:HD21	2.52	0.44
1:A:395:ASP:C	1:A:399:ILE:HG13	2.41	0.44
1:A:464:THR:O	1:A:465:ALA:C	2.61	0.44
1:A:574:LEU:O	1:A:576:GLY:N	2.50	0.44
1:A:60:ASP:HA	1:A:253:HIS:CG	2.52	0.44
1:A:105:GLN:O	1:A:106:LEU:C	2.60	0.44
1:A:105:GLN:O	1:A:108:GLN:N	2.50	0.44
1:A:197:LYS:O	1:A:198:CYS:C	2.60	0.44
1:A:214:VAL:O	1:A:218:LEU:N	2.50	0.44
1:A:229:LEU:O	1:A:236:ARG:HA	2.18	0.44
1:A:349:ALA:O	1:A:351:GLY:N	2.50	0.44
1:A:439:VAL:HG12	1:A:540:VAL:HG23	2.00	0.44
1:A:488:SER:C	1:A:489:GLN:HG3	2.41	0.44
1:A:144:PRO:C	1:A:146:GLN:N	2.73	0.44
1:A:189:TYR:CB	1:A:198:CYS:HB2	2.46	0.44
1:A:280:ARG:HE	1:A:280:ARG:N	2.14	0.44
1:A:400:TYR:CE2	1:A:669:ILE:HG23	2.52	0.44
1:A:549:LEU:O	1:A:555:LYS:HG2	2.18	0.44
1:A:686:PHE:HD1	1:A:687:LEU:HD23	1.81	0.44
1:A:81:VAL:HG23	1:A:307:PHE:HA	2.00	0.44
1:A:218:LEU:HD11	1:A:227:TYR:CE2	2.52	0.44
1:A:239:VAL:C	1:A:241:ALA:N	2.74	0.44
1:A:352:PRO:HA	1:A:355:GLU:CB	2.48	0.44
1:A:415:GLN:NE2	1:A:415:GLN:H	2.15	0.44
1:A:220:ASP:O	1:A:223:GLU:N	2.51	0.44
1:A:439:VAL:HG23	1:A:570:GLU:HB2	1.99	0.44
1:A:466:ALA:O	1:A:470:PRO:CG	2.65	0.44
1:A:656:THR:O	1:A:659:GLN:HG3	2.18	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:10:THR:O	1:A:38:ARG:NH1	2.49	0.44
1:A:80:GLU:HB2	1:A:82:TYR:CE1	2.53	0.44
1:A:199:LEU:CA	1:A:204:GLY:HA3	2.47	0.44
1:A:394:LEU:HD13	1:A:398:PHE:HB3	1.98	0.44
1:A:542:PHE:CD1	1:A:542:PHE:N	2.83	0.44
1:A:657:TYR:C	1:A:659:GLN:H	2.26	0.44
1:A:6:VAL:HA	1:A:263:ARG:NH1	2.33	0.44
1:A:38:ARG:HH12	1:A:40:THR:N	2.16	0.44
1:A:113:LYS:HB3	1:A:172:LEU:CD2	2.43	0.44
1:A:425:CYS:O	1:A:426:VAL:C	2.61	0.44
1:A:462:GLY:N	1:A:467:TRP:CD1	2.82	0.44
1:A:463:ARG:HG3	1:A:463:ARG:HH11	1.83	0.44
1:A:471:MET:HA	1:A:474:LEU:HD12	2.00	0.44
1:A:490:SER:C	1:A:501:LEU:O	2.60	0.44
1:A:600:GLN:O	1:A:601:SER:C	2.60	0.44
1:A:608:LYS:HE2	1:A:650:GLU:CD	2.42	0.44
1:A:159:PRO:C	1:A:160:CYS:SG	3.01	0.44
1:A:549:LEU:HD23	1:A:549:LEU:N	2.32	0.44
1:A:25:ASN:ND2	1:A:25:ASN:H	2.16	0.43
1:A:475:PHE:CE2	1:A:481:CYS:SG	3.11	0.43
1:A:603:ARG:NH1	1:A:607:LEU:HD21	2.33	0.43
1:A:410:VAL:O	1:A:651:LEU:CG	2.66	0.43
1:A:524:TYR:CD1	1:A:524:TYR:C	2.96	0.43
1:A:225:ASP:C	1:A:227:TYR:H	2.26	0.43
1:A:445:ASP:O	1:A:447:THR:N	2.51	0.43
1:A:553:ASP:OD1	1:A:566:GLN:HB3	2.18	0.43
1:A:8:TRP:O	1:A:36:CYS:CA	2.66	0.43
1:A:46:ILE:HD11	1:A:63:LEU:HD23	2.01	0.43
1:A:74:LEU:HA	1:A:259:SER:N	2.30	0.43
1:A:94:ALA:HB3	1:A:248:ALA:O	2.18	0.43
1:A:189:TYR:CG	1:A:198:CYS:CB	2.99	0.43
1:A:233:ASP:O	1:A:235:THR:HG23	2.19	0.43
1:A:393:ASN:HD21	1:A:413:GLU:HG3	1.82	0.43
1:A:423:PRO:C	1:A:425:CYS:H	2.26	0.43
1:A:448:TRP:O	1:A:451:LEU:CG	2.58	0.43
1:A:554:GLY:C	1:A:556:ASN:N	2.76	0.43
1:A:15:GLU:HG3	1:A:299:LEU:HG	2.01	0.43
1:A:25:ASN:C	1:A:28:LYS:HB2	2.44	0.43
1:A:32:PRO:HG2	1:A:269:LYS:HB3	2.00	0.43
1:A:77:VAL:H	1:A:256:VAL:HA	1.83	0.43
1:A:97:VAL:HG22	1:A:209:VAL:HG22	2.00	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:138:TRP:CE3	1:A:145:LEU:HD13	2.53	0.43
1:A:350:VAL:HG21	1:A:377:THR:HG22	2.00	0.43
1:A:288:LEU:HD23	1:A:289:PHE:CD1	2.54	0.43
1:A:339:ALA:O	1:A:340:ALA:C	2.61	0.43
1:A:416:LYS:NZ	1:A:620:GLY:HA3	2.34	0.43
1:A:533:LEU:HD11	1:A:540:VAL:C	2.43	0.43
1:A:550:GLN:HE22	1:A:638:ASN:ND2	2.16	0.43
1:A:77:VAL:HG23	1:A:257:ALA:H	1.84	0.43
1:A:212:SER:O	1:A:213:THR:C	2.61	0.43
1:A:223:GLU:OE1	1:A:226:LYS:HD2	2.19	0.43
1:A:358:CYS:O	1:A:359:LYS:C	2.61	0.43
1:A:395:ASP:O	1:A:396:GLY:C	2.61	0.43
1:A:608:LYS:HG3	1:A:612:PHE:HE2	1.83	0.43
1:A:610:VAL:O	1:A:614:GLN:HB2	2.19	0.43
1:A:38:ARG:NH1	1:A:38:ARG:HB3	2.34	0.43
1:A:265:ASP:C	1:A:269:LYS:HG2	2.43	0.43
1:A:343:GLU:HA	1:A:606:HIS:NE2	2.34	0.43
1:A:412:ALA:O	1:A:648:LEU:HA	2.19	0.43
1:A:566:GLN:HG2	1:A:567:GLU:OE2	2.18	0.43
1:A:623:PRO:C	1:A:626:PRO:HD2	2.44	0.43
1:A:666:VAL:O	1:A:669:ILE:HG22	2.18	0.43
1:A:57:VAL:HG23	1:A:59:LEU:HD21	2.01	0.43
1:A:65:TYR:CD1	1:A:65:TYR:C	2.97	0.43
1:A:87:LYS:HA	1:A:88:PRO:HD2	1.58	0.43
1:A:166:TYR:O	1:A:168:ASN:N	2.51	0.43
1:A:1:ALA:O	1:A:2:PRO:C	2.62	0.43
1:A:278:PHE:HA	1:A:283:SER:CB	2.48	0.43
1:A:458:HIS:CG	1:A:492:ALA:HB2	2.54	0.43
1:A:571:LEU:HD12	1:A:580:PRO:O	2.19	0.43
1:A:573:CYS:HB2	1:A:577:THR:CB	2.35	0.43
1:A:656:THR:CA	1:A:659:GLN:HG3	2.48	0.43
1:A:43:PHE:CD1	1:A:44:GLU:N	2.86	0.42
1:A:87:LYS:HD2	1:A:87:LYS:N	2.34	0.42
1:A:307:PHE:CD1	1:A:307:PHE:N	2.86	0.42
1:A:497:PRO:C	1:A:499:SER:H	2.26	0.42
1:A:39:LYS:HD3	1:A:39:LYS:HA	1.65	0.42
1:A:58:THR:HB	1:A:299:LEU:O	2.19	0.42
1:A:98:VAL:HG11	1:A:230:LEU:CD2	2.44	0.42
1:A:118:GLY:HA2	1:A:159:PRO:CD	2.48	0.42
1:A:416:LYS:O	1:A:416:LYS:HG2	2.19	0.42
1:A:422:ALA:C	1:A:424:ASP:H	2.28	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:490:SER:O	1:A:501:LEU:O	2.37	0.42
1:A:634:SER:CB	1:A:638:ASN:H	2.32	0.42
1:A:656:THR:OG1	1:A:659:GLN:HG3	2.19	0.42
1:A:4:LYS:NZ	1:A:4:LYS:HA	2.35	0.42
1:A:26:MET:O	1:A:30:ARG:N	2.52	0.42
1:A:297:ASP:HA	1:A:302:ASP:OD1	2.19	0.42
1:A:408:VAL:C	1:A:598:VAL:HG13	2.45	0.42
1:A:433:TYR:CE1	1:A:592:ALA:HB3	2.55	0.42
1:A:564:LEU:O	1:A:564:LEU:HD12	2.20	0.42
1:A:656:THR:OG1	1:A:659:GLN:CG	2.67	0.42
1:A:92:TYR:N	1:A:250:VAL:O	2.53	0.42
1:A:275:GLN:HB3	1:A:307:PHE:CZ	2.53	0.42
1:A:416:LYS:CA	1:A:646:GLU:HG2	2.38	0.42
1:A:475:PHE:CD1	1:A:475:PHE:C	2.96	0.42
1:A:480:SER:C	1:A:482:LYS:N	2.76	0.42
1:A:571:LEU:O	1:A:578:ARG:CA	2.66	0.42
1:A:633:LYS:HA	1:A:643:ASP:CG	2.43	0.42
1:A:82:TYR:N	1:A:89:GLN:O	2.45	0.42
1:A:150:ALA:O	1:A:153:PHE:O	2.38	0.42
1:A:377:THR:O	1:A:381:ILE:HD13	2.19	0.42
1:A:571:LEU:HD11	1:A:584:ALA:HA	2.01	0.42
1:A:598:VAL:HG12	1:A:599:SER:N	2.35	0.42
1:A:600:GLN:HG3	1:A:602:ASP:OD1	2.18	0.42
1:A:94:ALA:CB	1:A:248:ALA:O	2.68	0.42
1:A:94:ALA:H	1:A:246:HIS:HD2	1.68	0.42
1:A:264:GLU:HB2	1:A:309:ARG:NH2	2.34	0.42
1:A:301:LYS:HB3	1:A:304:ALA:HB2	2.01	0.42
1:A:376:THR:O	1:A:377:THR:C	2.63	0.42
1:A:393:ASN:HD21	1:A:413:GLU:CG	2.33	0.42
1:A:526:TYR:HB3	1:A:547:THR:CG2	2.50	0.42
1:A:593:PRO:HG3	1:A:661:LEU:CD2	2.49	0.42
1:A:10:THR:CB	1:A:15:GLU:HB3	2.46	0.42
1:A:289:PHE:HE2	1:A:305:LEU:O	2.02	0.42
1:A:394:LEU:HD23	1:A:394:LEU:HA	1.54	0.42
1:A:469:ILE:HD12	1:A:469:ILE:N	2.11	0.42
1:A:116:HIS:HB2	1:A:157:CYS:O	2.19	0.42
1:A:289:PHE:CE2	1:A:304:ALA:O	2.73	0.42
1:A:334:THR:C	1:A:336:ALA:N	2.75	0.42
1:A:77:VAL:HB	1:A:255:VAL:C	2.45	0.42
1:A:212:SER:HA	1:A:215:PHE:CD1	2.54	0.42
1:A:368:LYS:HD2	1:A:368:LYS:HA	1.80	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:422:ALA:C	1:A:424:ASP:N	2.76	0.42
1:A:475:PHE:O	1:A:476:ASN:C	2.63	0.42
1:A:561:ALA:O	1:A:562:LYS:C	2.63	0.42
1:A:573:CYS:SG	1:A:577:THR:HB	2.59	0.42
1:A:580:PRO:O	1:A:581:VAL:C	2.62	0.42
1:A:631:LEU:HD23	1:A:631:LEU:HA	1.90	0.42
1:A:25:ASN:HB2	1:A:278:PHE:CE1	2.55	0.42
1:A:129:ILE:H	1:A:129:ILE:CD1	2.28	0.42
1:A:338:VAL:O	1:A:339:ALA:C	2.61	0.42
1:A:414:ASN:ND2	1:A:428:ARG:HE	2.17	0.42
1:A:473:LEU:N	1:A:473:LEU:CD1	2.82	0.42
1:A:55:ASP:O	1:A:257:ALA:HA	2.20	0.41
1:A:364:VAL:C	1:A:366:ASN:N	2.75	0.41
1:A:92:TYR:CE1	1:A:250:VAL:HG22	2.54	0.41
1:A:147:LYS:HE2	1:A:147:LYS:HB3	1.76	0.41
1:A:150:ALA:HB1	1:A:168:ASN:HB3	2.03	0.41
1:A:461:VAL:HA	1:A:467:TRP:CE3	2.55	0.41
1:A:687:LEU:HD22	1:A:687:LEU:HA	1.81	0.41
1:A:129:ILE:HD12	1:A:129:ILE:N	2.30	0.41
1:A:153:PHE:CD1	1:A:153:PHE:N	2.88	0.41
1:A:197:LYS:HA	1:A:197:LYS:HD2	1.88	0.41
1:A:492:ALA:HA	1:A:493:PRO:HD3	1.71	0.41
1:A:552:THR:OG1	1:A:555:LYS:HD3	2.20	0.41
1:A:158:VAL:O	1:A:161:ALA:HB2	2.21	0.41
1:A:407:LEU:N	1:A:407:LEU:CD1	2.84	0.41
1:A:408:VAL:HG23	1:A:409:PRO:HD2	2.03	0.41
1:A:15:GLU:CA	1:A:298:LEU:HD11	2.26	0.41
1:A:192:TYR:CD2	1:A:301:LYS:HD3	2.55	0.41
1:A:266:LEU:CA	1:A:269:LYS:HG2	2.49	0.41
1:A:542:PHE:HB3	1:A:589:LEU:HD11	2.02	0.41
1:A:78:ALA:O	1:A:255:VAL:N	2.53	0.41
1:A:188:PRO:HB2	1:A:189:TYR:H	1.61	0.41
1:A:258:ARG:HD3	1:A:258:ARG:N	2.09	0.41
1:A:310:ILE:HG22	1:A:314:ILE:HG13	2.02	0.41
1:A:364:VAL:C	1:A:366:ASN:H	2.27	0.41
1:A:394:LEU:CD1	1:A:398:PHE:HB3	2.51	0.41
1:A:464:THR:HB	1:A:465:ALA:H	1.57	0.41
1:A:22:PHE:HD1	1:A:286:PHE:CE2	2.37	0.41
1:A:396:GLY:O	1:A:397:GLY:C	2.64	0.41
1:A:90:THR:HB	1:A:252:SER:OG	2.20	0.41
1:A:131:THR:C	1:A:133:ARG:H	2.28	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:280:ARG:CZ	1:A:289:PHE:CD2	2.96	0.41
1:A:353:GLU:HG2	1:A:520:GLU:CG	2.51	0.41
1:A:560:TRP:CE3	1:A:561:ALA:CB	3.03	0.41
1:A:565:LYS:CB	1:A:567:GLU:HG2	2.43	0.41
1:A:671:ASN:ND2	1:A:674:ARG:HH22	2.17	0.41
1:A:18:LYS:HG2	1:A:298:LEU:HD12	2.03	0.41
1:A:97:VAL:O	1:A:206:VAL:HG23	2.21	0.41
1:A:104:PHE:HD1	1:A:104:PHE:O	2.03	0.41
1:A:118:GLY:CA	1:A:159:PRO:HD2	2.51	0.41
1:A:194:GLY:O	1:A:195:ALA:C	2.61	0.41
1:A:252:SER:HB2	1:A:253:HIS:H	1.69	0.41
1:A:403:GLY:C	1:A:405:CYS:N	2.77	0.41
1:A:443:ASP:N	1:A:443:ASP:OD1	2.54	0.41
1:A:463:ARG:CG	1:A:464:THR:N	2.82	0.41
1:A:474:LEU:HG	1:A:474:LEU:H	1.54	0.41
1:A:555:LYS:H	1:A:555:LYS:HD2	1.85	0.41
1:A:561:ALA:C	1:A:563:ASP:H	2.27	0.41
1:A:651:LEU:C	1:A:652:GLN:NE2	2.79	0.41
1:A:118:GLY:HA2	1:A:159:PRO:HD2	2.01	0.41
1:A:152:PHE:HD2	1:A:153:PHE:CE1	2.39	0.41
1:A:400:TYR:HE1	1:A:681:LEU:CD2	2.32	0.41
1:A:571:LEU:HD11	1:A:584:ALA:HB2	2.03	0.41
1:A:43:PHE:HD1	1:A:47:GLN:HE22	1.69	0.40
1:A:84:THR:C	1:A:86:GLY:H	2.28	0.40
1:A:107:ASN:O	1:A:109:LEU:N	2.50	0.40
1:A:116:HIS:N	1:A:157:CYS:O	2.52	0.40
1:A:224:ARG:O	1:A:226:LYS:N	2.54	0.40
1:A:358:CYS:O	1:A:361:TRP:HB3	2.22	0.40
1:A:484:ASP:O	1:A:486:PHE:N	2.54	0.40
1:A:125:TRP:O	1:A:128:PRO:HG2	2.21	0.40
1:A:150:ALA:C	1:A:152:PHE:N	2.80	0.40
1:A:190:PHE:O	1:A:194:GLY:HA3	2.21	0.40
1:A:196:PHE:CE2	1:A:214:VAL:HA	2.56	0.40
1:A:341:ARG:O	1:A:343:GLU:N	2.55	0.40
1:A:448:TRP:HA	1:A:448:TRP:HE3	1.83	0.40
1:A:584:ALA:C	1:A:586:SER:H	2.29	0.40
1:A:635:GLU:O	1:A:637:LYS:N	2.52	0.40
1:A:115:CYS:HB2	1:A:207:ALA:HB2	2.03	0.40
1:A:105:GLN:HA	1:A:105:GLN:NE2	2.36	0.40
1:A:150:ALA:HB1	1:A:168:ASN:ND2	2.36	0.40
1:A:319:TYR:HD1	1:A:687:LEU:HD21	1.84	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:535:GLU:O	1:A:537:ALA:N	2.55	0.40
1:A:43:PHE:CD1	1:A:43:PHE:C	3.00	0.40
1:A:156:SER:O	1:A:169:LEU:O	2.39	0.40
1:A:173:CYS:HB3	1:A:187:GLU:OE1	2.22	0.40
1:A:221:GLU:HA	1:A:224:ARG:HD2	2.02	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	687/689 (100%)	468 (68%)	143 (21%)	76 (11%)	0 5

All (76) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	52	ASN
1	A	122	SER
1	A	167	PRO
1	A	168	ASN
1	A	180	LYS
1	A	183	CYS
1	A	188	PRO
1	A	189	TYR
1	A	213	THR
1	A	252	SER
1	A	264	GLU
1	A	305	LEU
1	A	316	SER
1	A	322	ALA
1	A	350	VAL
1	A	375	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	444	ALA
1	A	448	TRP
1	A	452	SER
1	A	464	THR
1	A	465	ALA
1	A	467	TRP
1	A	484	ASP
1	A	503	ALA
1	A	511	ASN
1	A	543	VAL
1	A	553	ASP
1	A	577	THR
1	A	603	ARG
1	A	635	GLU
1	A	663	SER
1	A	40	THR
1	A	88	PRO
1	A	103	GLY
1	A	108	GLN
1	A	176	THR
1	A	212	SER
1	A	419	ASN
1	A	426	VAL
1	A	443	ASP
1	A	446	LEU
1	A	485	LYS
1	A	654	LYS
1	A	297	ASP
1	A	342	ARG
1	A	488	SER
1	A	536	LYS
1	A	562	LYS
1	A	575	ASP
1	A	586	SER
1	A	594	ASN
1	A	636	THR
1	A	61	GLY
1	A	70	HIS
1	A	106	LEU
1	A	234	ASN
1	A	424	ASP
1	A	441	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	508	ASN
1	A	527	THR
1	A	588	HIS
1	A	601	SER
1	A	646	GLU
1	A	32	PRO
1	A	128	PRO
1	A	211	ASP
1	A	581	VAL
1	A	478	THR
1	A	596	ALA
1	A	311	PRO
1	A	338	VAL
1	A	619	GLY
1	A	76	PRO
1	A	410	VAL
1	A	2	PRO
1	A	321	GLY

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	565/565 (100%)	411 (73%)	154 (27%)	0 3

All (154) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	4	LYS
1	A	19	CYS
1	A	25	ASN
1	A	28	LYS
1	A	33	SER
1	A	34	VAL
1	A	35	SER
1	A	39	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	42	SER
1	A	52	ASN
1	A	55	ASP
1	A	59	LEU
1	A	60	ASP
1	A	63	LEU
1	A	65	TYR
1	A	72	TYR
1	A	75	ARG
1	A	83	GLN
1	A	87	LYS
1	A	89	GLN
1	A	90	THR
1	A	92	TYR
1	A	97	VAL
1	A	98	VAL
1	A	104	PHE
1	A	105	GLN
1	A	109	LEU
1	A	121	ARG
1	A	131	THR
1	A	132	LEU
1	A	133	ARG
1	A	135	TYR
1	A	137	ASN
1	A	156	SER
1	A	160	CYS
1	A	165	GLN
1	A	166	TYR
1	A	167	PRO
1	A	172	LEU
1	A	179	ASP
1	A	181	CYS
1	A	193	SER
1	A	197	LYS
1	A	201	ASN
1	A	205	ASP
1	A	208	PHE
1	A	210	LYS
1	A	220	ASP
1	A	221	GLU
1	A	231	CYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	240	ASP
1	A	249	ARG
1	A	250	VAL
1	A	252	SER
1	A	258	ARG
1	A	264	GLU
1	A	265	ASP
1	A	280	ARG
1	A	287	GLN
1	A	288	LEU
1	A	298	LEU
1	A	299	LEU
1	A	300	PHE
1	A	305	LEU
1	A	307	PHE
1	A	325	LEU
1	A	328	THR
1	A	330	ASN
1	A	331	LEU
1	A	332	ARG
1	A	341	ARG
1	A	342	ARG
1	A	344	ARG
1	A	350	VAL
1	A	358	CYS
1	A	362	SER
1	A	364	VAL
1	A	366	ASN
1	A	367	ARG
1	A	368	LYS
1	A	375	SER
1	A	377	THR
1	A	378	GLU
1	A	384	VAL
1	A	388	GLU
1	A	392	LEU
1	A	394	LEU
1	A	400	TYR
1	A	404	LYS
1	A	410	VAL
1	A	411	LEU
1	A	413	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	415	GLN
1	A	418	GLN
1	A	427	HIS
1	A	428	ARG
1	A	431	GLU
1	A	433	TYR
1	A	442	SER
1	A	445	ASP
1	A	447	THR
1	A	449	ASN
1	A	451	LEU
1	A	452	SER
1	A	461	VAL
1	A	463	ARG
1	A	464	THR
1	A	469	ILE
1	A	470	PRO
1	A	471	MET
1	A	473	LEU
1	A	482	LYS
1	A	489	GLN
1	A	500	SER
1	A	502	CYS
1	A	504	LEU
1	A	516	MET
1	A	520	GLU
1	A	521	GLU
1	A	527	THR
1	A	533	LEU
1	A	542	PHE
1	A	543	VAL
1	A	550	GLN
1	A	556	ASN
1	A	563	ASP
1	A	564	LEU
1	A	567	GLU
1	A	568	ASP
1	A	571	LEU
1	A	572	LEU
1	A	574	LEU
1	A	578	ARG
1	A	581	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	585	GLU
1	A	597	VAL
1	A	600	GLN
1	A	603	ARG
1	A	605	GLN
1	A	606	HIS
1	A	607	LEU
1	A	609	LYS
1	A	611	LEU
1	A	621	ASN
1	A	626	PRO
1	A	632	PHE
1	A	646	GLU
1	A	651	LEU
1	A	652	GLN
1	A	664	GLU
1	A	671	ASN
1	A	674	ARG
1	A	676	SER
1	A	687	LEU

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (23) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	47	GLN
1	A	52	ASN
1	A	83	GLN
1	A	89	GLN
1	A	108	GLN
1	A	137	ASN
1	A	146	GLN
1	A	165	GLN
1	A	201	ASN
1	A	217	ASN
1	A	246	HIS
1	A	275	GLN
1	A	287	GLN
1	A	323	ASN
1	A	330	ASN
1	A	366	ASN
1	A	511	ASN
1	A	550	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	595	HIS
1	A	606	HIS
1	A	615	GLN
1	A	652	GLN
1	A	671	ASN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

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.