



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 04:13 PM UTC

PDB ID : 2BY4 / pdb_00002by4
Title : SR Ca(2+)-ATPase in the HnE2 state complexed with the thapsigargin derivative Boc-12ADT.
Authors : Jensen, A.L.; Moller, J.V.; Soehoel, H.; Denmeade, S.R.; Isaacs, J.T.; Olsen, C.E.; Christensen, S.B.; Nissen, P.
Deposited on : 2005-07-28
Resolution : 3.30 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.0
Mogul	:	2022.3.0, CSD as543be (2022)
Xtriage (Phenix)	:	2.0
EDS	:	3.0
Buster-report	:	wwPDB partial adaption of 1.1.7 (2018)
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

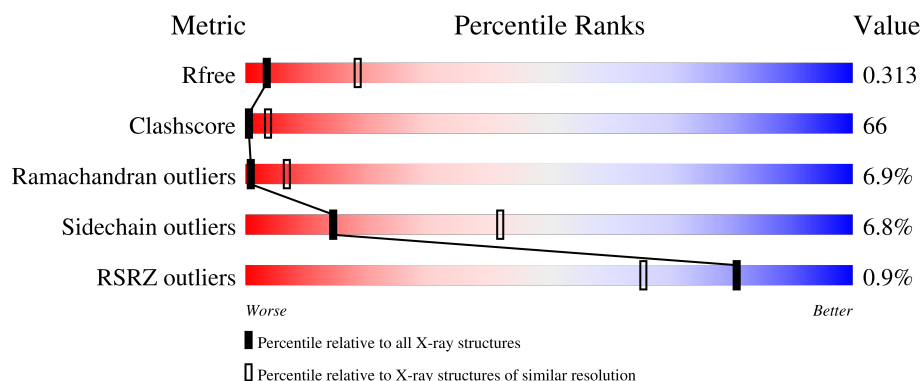
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.30 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	1169 (3.32-3.28)
Clashscore	190562	1209 (3.32-3.28)
Ramachandran outliers	187476	1188 (3.32-3.28)
Sidechain outliers	187428	1187 (3.32-3.28)
RSRZ outliers	180081	1169 (3.32-3.28)

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	994	23%63%13%

2 Entry composition [i](#)

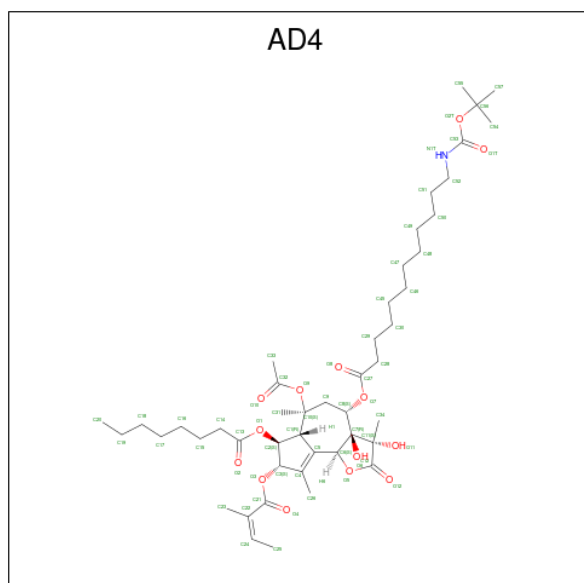
There are 5 unique types of molecules in this entry. The entry contains 7767 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

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 SARCOPLASMIC/ENDOPLASMIC RETICULUM CALCIUM ATPASE 1.

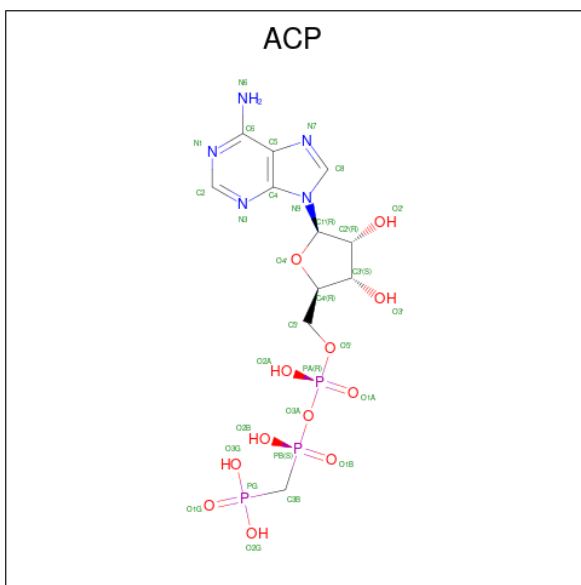
Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	994	7671	4876	1287	1451	57	0	0	0

- Molecule 2 is (3S,3AR,4S,6S,6AR,7S,8S,9BS)-6-(ACETYLOXY)-3,3A-DIHYDROXY-3,6,9-TRIMETHYL-8-[[[(2Z)-2-METHYLBUT-2-ENOYL]OXY}-7-(OCTANOYLOXY)-2-OXO-2,3,3A,4,5,6,6A,7,8,9B-DECAHYDROAZULENO[4,5-B]FURAN-4-YL 12-[(TERT-BUTOXYCARBONYL)AMINO]DODECANOATE (CCD ID: AD4) (formula: C₄₇H₇₅NO₁₄).



Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
			Total	C	N	O		
2	A	1	62	47	1	14	0	0

- Molecule 3 is PHOSPHOMETHYLPHOSPHONIC ACID ADENYLATE ESTER (CCD ID: ACP) (formula: C₁₁H₁₈N₅O₁₂P₃).



Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
3	A	1	Total 31	C 11	N 5	O 12	P 3	0	0

- Molecule 4 is MAGNESIUM ION (CCD ID: MG) (formula: Mg).

Mol	Chain	Residues	Atoms	ZeroOcc	AltConf
4	A	2	Total Mg 2 2	0	0

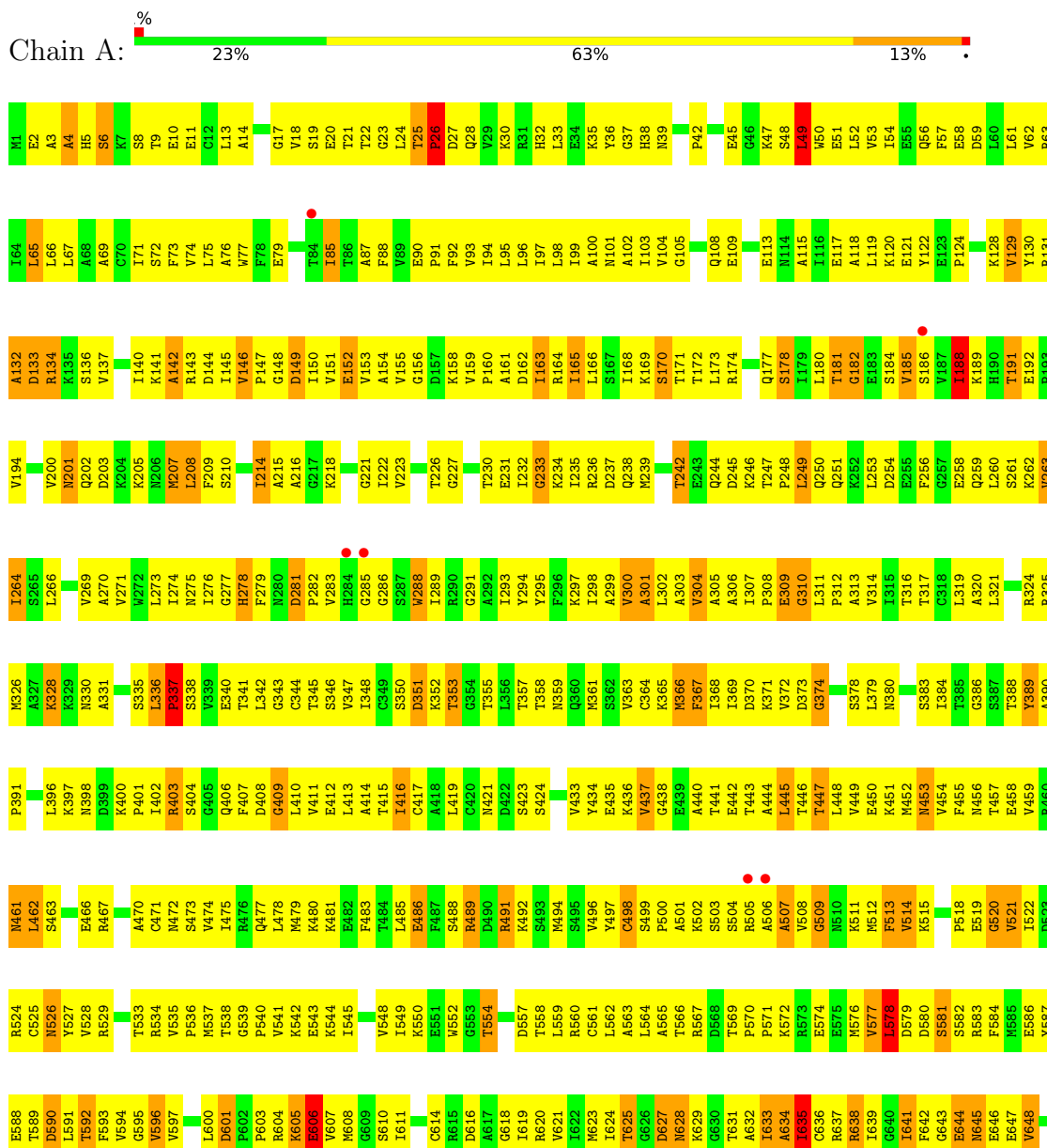
- Molecule 5 is SODIUM ION (CCD ID: NA) (formula: Na).

Mol	Chain	Residues	Atoms	ZeroOcc	AltConf
5	A	1	Total Na 1 1	0	0

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 and electron density. 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. A red dot above a residue indicates a poor fit to the electron density ($RSRZ > 2$). Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

• Molecule 1: SARCOPLASMIC/ENDOPLASMIC RETICULUM CALCIUM ATPASE 1



A	W667	V903	A839	L777	A714	R651
	L968	L904	I840	L778	E715	A652
	M969	V905		L779	I716	A653
	V970	T906	Y843	A779	G717	T654
	L971	I907	B844	A780	I718	G655
	K972	E908	G845	L781	A719	R656
	V973			G782	M720	E857
	S974	C910	T848	L783	G721	F658
	L975	H849	V850	F784	S722	
	V976	A912	G850	E785	G723	P662
V977	L913	A851	A786	T724	L663	
I978	S914	A852	L787	A725	A664	
G979	N915	A853	I788	V726	E665	
L980	L916	B854	F789	A727	Q666	
D981	S917	W855	V790	K728	R667	
B			F856	Q791	T729	E668
				L792	A730	A669
	I983	Q920	M857	L793	S731	C670
	L984		Y858		E732	R671
	K985			F794	M733	R672
	F986	M925	D861	V795	V734	A673
	I987	P926	G862	N796	L735	C674
	A988	P927	F863	L797	A736	C675
	R989	Q928	G864	V798	D737	F676
	N990	V929	V865	T799	D738	A677
V991		T866	D800	F739	R678	
L992	W932	H867	G801	N740	V679	
E993	L933	R868	L802	S741	E680	
G994	L934	Q869	P803	A804	P681	
C		G935	L870	R805	T742	S682
		S936	T871	A806	I743	H683
			H872	L807	A746	K684
		C938	F873	G808	V747	S685
		L939	M874	F809	E748	K686
		S940	Q875	M810	E749	I687
		M941	C876	P811	G750	V688
	S942	S942	T677	P812		E689
	L943	L943	E878		A752	Y690
	F944	H945	D879	T816	I753	L691
D		L946	H880	M817	G754	Q692
		I947	P881	M818	N755	S693
		L948	H882	R819	N756	Y694
		V949	F883	P820	M757	D695
		S950	E884	E821	K758	E696
		D951	G885	R822	Q759	I697
		P952	L886	S823	F760	T698
	L953	L953	D887	P824	I761	A699
	P954	P954	C888	K825	R762	M700
	M955	M955	E889		V763	T701
E	V956			L828	L764	G702
	F957			I765		
	K958	A893	I829	S766	V706	T706
	L959	E895	G891	G831	N768	D707
	Q960	P896	W832	V769	G770	A708
	A961	M897	L833	E771	V772	F709
	L962	T898	F834	R836		L710
	D963	N899	S835	Y837		A711
	L964	A900	R836			K712
	T965	L901	W837			S713
Q966	Q966	E892				

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 41 21 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	71.74Å 71.74Å 593.66Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	15.00 – 3.30 15.00 – 3.30	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	81.9 (15.00-3.30) 80.8 (15.00-3.30)	Depositor EDS
R_{merge}	0.16	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	1.51 (at 3.31Å)	Xtriage
Refinement program	CNS 1.1	Depositor
R, R_{free}	0.254 , 0.314 0.252 , 0.313	Depositor DCC
R_{free} test set	782 reflections (3.15%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	93.2	Xtriage
Anisotropy	0.171	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.27 , 55.9	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.40$, $\langle L^2 \rangle = 0.23$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.91	EDS
Total number of atoms	7767	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	80.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.02% 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: MG, AD4, NA, ACP

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	0.60	3/7812 (0.0%)	1.21	79/10592 (0.7%)

All (3) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	648	VAL	CA-CB	6.56	1.62	1.54
1	A	4	ALA	CA-CB	-5.89	1.45	1.53
1	A	185	VAL	CA-CB	5.41	1.61	1.54

All (79) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	336	LEU	CA-C-N	24.82	150.86	119.84
1	A	336	LEU	C-N-CA	24.82	150.86	119.84
1	A	5	HIS	N-CA-C	-11.12	97.74	114.64
1	A	870	LEU	N-CA-C	-10.99	99.91	113.97
1	A	336	LEU	C-N-CD	-10.64	81.36	125.00
1	A	914	ASN	N-CA-C	-10.63	100.99	113.21
1	A	625	THR	N-CA-C	9.38	122.08	108.86
1	A	389	TYR	N-CA-C	-8.18	102.56	112.54
1	A	670	CYS	N-CA-C	8.07	120.99	111.71
1	A	3	ALA	N-CA-C	-8.06	103.94	113.21
1	A	35	LYS	N-CA-C	-8.03	103.69	113.97
1	A	4	ALA	N-CA-C	7.48	121.00	108.20
1	A	504	SER	N-CA-C	7.48	119.12	110.97
1	A	514	VAL	N-CA-C	6.94	119.44	108.89
1	A	185	VAL	N-CA-C	-6.94	94.91	109.34
1	A	648	VAL	N-CA-C	6.93	119.55	112.90
1	A	806	ALA	N-CA-C	-6.91	103.85	112.90
1	A	756	ASN	N-CA-C	-6.89	103.38	111.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	191	THR	N-CA-C	6.87	120.89	112.23
1	A	503	SER	N-CA-C	6.82	122.00	112.93
1	A	251	GLN	N-CA-C	-6.77	103.59	110.97
1	A	301	ALA	N-CA-C	-6.67	103.49	111.69
1	A	181	THR	N-CA-C	6.57	119.31	108.99
1	A	164	ARG	N-CA-C	-6.57	99.20	109.25
1	A	403	ARG	N-CA-C	-6.54	101.28	110.50
1	A	857	MET	N-CA-C	6.51	122.12	112.94
1	A	561	CYS	N-CA-C	6.47	119.94	109.40
1	A	810	ASN	CA-C-N	6.38	126.95	120.38
1	A	810	ASN	C-N-CA	6.38	126.95	120.38
1	A	310	GLY	N-CA-C	6.35	121.56	113.24
1	A	163	ILE	N-CA-C	6.32	117.22	107.99
1	A	491	ARG	N-CA-C	-6.29	105.24	113.17
1	A	366	MET	N-CA-C	-6.26	100.03	108.86
1	A	798	VAL	N-CA-C	6.26	117.36	111.48
1	A	929	VAL	N-CA-C	-6.18	104.66	113.07
1	A	601	ASP	CA-C-N	6.14	126.70	120.38
1	A	601	ASP	C-N-CA	6.14	126.70	120.38
1	A	49	LEU	N-CA-C	-6.08	104.65	111.28
1	A	207	MET	N-CA-C	6.06	119.58	109.95
1	A	898	THR	N-CA-C	-6.03	105.18	112.54
1	A	924	ARG	N-CA-C	-5.99	106.13	113.50
1	A	641	ILE	N-CA-C	-5.94	104.56	110.62
1	A	949	TYR	N-CA-C	5.88	118.92	111.69
1	A	435	GLU	N-CA-C	5.87	119.66	110.32
1	A	498	CYS	N-CA-C	5.83	118.56	109.52
1	A	171	THR	N-CA-C	-5.77	105.73	112.89
1	A	973	ILE	CB-CA-C	-5.71	106.86	111.71
1	A	909	MET	N-CA-C	-5.70	106.17	113.01
1	A	885	GLY	N-CA-C	-5.69	99.69	113.18
1	A	461	ASN	N-CA-C	-5.60	106.30	113.02
1	A	526	ASN	N-CA-C	-5.58	106.47	113.72
1	A	129	VAL	N-CA-C	5.56	116.92	108.80
1	A	942	SER	N-CA-C	-5.56	105.32	111.71
1	A	991	TYR	N-CA-C	-5.56	100.86	109.14
1	A	328	LYS	N-CA-C	-5.53	105.33	111.36
1	A	165	ILE	N-CA-C	5.47	116.64	108.54
1	A	188	ILE	CB-CA-C	-5.47	105.57	111.59
1	A	984	LEU	N-CA-C	-5.44	105.43	111.36
1	A	285	GLY	N-CA-C	5.43	121.39	114.66
1	A	6	SER	N-CA-C	-5.39	106.74	113.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	628	ASN	N-CA-C	-5.38	103.42	110.53
1	A	953	LEU	N-CA-C	5.38	119.49	112.17
1	A	724	THR	N-CA-C	5.36	118.36	109.46
1	A	168	ILE	N-CA-C	5.34	115.00	106.88
1	A	647	GLU	CA-C-N	-5.33	114.74	122.69
1	A	647	GLU	C-N-CA	-5.33	114.74	122.69
1	A	132	ALA	N-CA-C	5.27	119.19	112.87
1	A	445	LEU	N-CA-C	-5.24	105.26	110.97
1	A	337	PRO	CA-N-CD	-5.21	104.71	112.00
1	A	513	PHE	N-CA-C	5.15	117.10	107.99
1	A	249	LEU	N-CA-C	-5.14	105.84	112.68
1	A	715	GLU	N-CA-C	-5.11	104.98	111.11
1	A	533	THR	N-CA-C	5.09	117.63	110.14
1	A	590	ASP	N-CA-C	-5.07	104.24	111.24
1	A	270	ALA	N-CA-C	-5.03	105.71	111.14
1	A	133	ASP	N-CA-C	5.02	118.25	112.57
1	A	351	ASP	N-CA-C	-5.02	104.24	110.41
1	A	233	GLY	N-CA-C	-5.01	106.58	112.64
1	A	245	ASP	N-CA-C	5.00	116.99	110.53

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

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	7671	0	7764	1026	0
2	A	62	0	75	13	0
3	A	31	0	14	8	0
4	A	2	0	0	0	0
5	A	1	0	0	0	0
All	All	7767	0	7853	1028	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 66.

All (1028) 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:331:ALA:HB1	1:A:733:MET:HE2	1.28	1.16
1:A:247:THR:HG22	1:A:250:GLN:HG3	1.20	1.13
1:A:865:VAL:HG21	1:A:869:GLN:HB2	1.22	1.13
1:A:894:PRO:HA	1:A:958:LYS:HE3	1.26	1.11
1:A:453:ASN:HB3	1:A:471:CYS:SG	1.91	1.10
1:A:865:VAL:HG11	1:A:869:GLN:C	1.79	1.08
1:A:273:LEU:HD12	1:A:276:ILE:HD11	1.34	1.04
1:A:347:VAL:HG22	1:A:620:ARG:HB3	1.39	1.03
1:A:100:ALA:HA	1:A:103:ILE:HD12	1.40	1.00
1:A:963:ASP:HA	1:A:967:TRP:CD1	1.95	1.00
1:A:909:MET:HE3	1:A:937:ILE:HG23	1.43	1.00
1:A:963:ASP:HA	1:A:967:TRP:HD1	1.22	0.99
1:A:791:GLN:HE22	1:A:897:MET:HE3	1.26	0.98
1:A:680:GLU:H	1:A:683:HIS:HD2	1.11	0.98
1:A:314:VAL:HG13	1:A:805:THR:HG22	1.43	0.98
1:A:281:ASP:H	1:A:282:PRO:HD2	1.28	0.98
1:A:155:VAL:HA	1:A:214:ILE:HD11	1.43	0.98
1:A:227:GLY:O	1:A:230:THR:HG22	1.66	0.95
1:A:350:SER:HA	1:A:701:THR:CG2	1.96	0.94
1:A:964:LEU:O	1:A:965:THR:HG23	1.67	0.94
1:A:153:VAL:HG11	1:A:214:ILE:HG21	1.50	0.94
1:A:894:PRO:HA	1:A:958:LYS:CE	1.98	0.94
1:A:500:PRO:HB2	1:A:505:ARG:HB2	1.48	0.94
1:A:527:TYR:HB2	1:A:592:THR:HG23	1.51	0.93
1:A:281:ASP:H	1:A:282:PRO:CD	1.81	0.93
1:A:301:ALA:HA	1:A:789:PRO:HG3	1.49	0.93
1:A:350:SER:HA	1:A:701:THR:HG22	1.51	0.92
1:A:783:LEU:HD12	1:A:784:PRO:HD2	1.49	0.92
1:A:129:VAL:HG12	1:A:151:VAL:HG22	1.52	0.92
1:A:326:MET:HE3	1:A:749:GLU:HB2	1.52	0.91
1:A:898:THR:HG22	1:A:958:LYS:CB	1.99	0.91
1:A:23:GLY:HA2	1:A:150:ILE:HD13	1.52	0.91
1:A:130:TYR:CE1	1:A:137:VAL:HG22	2.05	0.90
1:A:526:ASN:HD22	1:A:590:ASP:HA	1.37	0.90
1:A:964:LEU:HA	1:A:968:LEU:HG	1.53	0.89
1:A:549:ILE:HD11	1:A:596:VAL:HG11	1.54	0.89
1:A:581:SER:HA	1:A:584:PHE:CD2	2.08	0.88
1:A:311:LEU:HD23	2:A:1995:AD4:H491	1.53	0.88
1:A:239:MET:HE3	1:A:708:ALA:HB1	1.52	0.88
1:A:337:PRO:HD2	1:A:338:SER:N	1.87	0.87
1:A:331:ALA:HB1	1:A:733:MET:CE	2.04	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:535:VAL:HG13	1:A:536:PRO:HD2	1.56	0.86
1:A:337:PRO:HD2	1:A:338:SER:H	1.40	0.86
1:A:397:LYS:O	1:A:400:LYS:HG2	1.76	0.85
1:A:39:ASN:HB2	1:A:226:THR:OG1	1.76	0.85
1:A:408:ASP:O	1:A:411:VAL:HG22	1.76	0.85
1:A:363:VAL:HG11	1:A:448:LEU:HD22	1.57	0.84
1:A:155:VAL:CA	1:A:214:ILE:HD11	2.07	0.84
1:A:480:LYS:N	1:A:499:SER:O	2.11	0.83
1:A:133:ASP:O	1:A:134:ARG:HG3	1.80	0.82
1:A:478:LEU:O	1:A:479:MET:HG2	1.79	0.82
1:A:189:LYS:HD2	1:A:205:LYS:O	1.80	0.82
1:A:342:LEU:O	1:A:345:THR:HG23	1.80	0.82
1:A:57:PHE:HE1	1:A:102:ALA:HB2	1.43	0.81
1:A:898:THR:HG22	1:A:958:LYS:HB3	1.62	0.81
1:A:791:GLN:NE2	1:A:897:MET:HE3	1.94	0.81
1:A:386:GLY:HA3	1:A:451:LYS:NZ	1.96	0.81
1:A:128:LYS:O	1:A:151:VAL:HG13	1.81	0.80
1:A:413:LEU:HD12	1:A:564:LEU:HD12	1.64	0.80
1:A:140:ILE:HD11	1:A:145:ILE:HG12	1.64	0.80
1:A:926:PRO:O	1:A:929:VAL:HG23	1.80	0.80
1:A:898:THR:HG22	1:A:958:LYS:HB2	1.62	0.79
1:A:304:VAL:HB	1:A:793:LEU:HD21	1.65	0.79
1:A:424:SER:OG	1:A:437:VAL:HG11	1.81	0.79
1:A:963:ASP:CA	1:A:967:TRP:HD1	1.96	0.79
1:A:560:ARG:CZ	3:A:1996:ACP:H8	2.13	0.79
1:A:337:PRO:CD	1:A:338:SER:H	1.94	0.79
1:A:607:VAL:O	1:A:611:ILE:HG12	1.83	0.79
1:A:872:HIS:HB3	1:A:875:GLN:HE21	1.47	0.78
1:A:337:PRO:CD	1:A:338:SER:N	2.43	0.78
1:A:680:GLU:H	1:A:683:HIS:CD2	2.01	0.78
1:A:840:ILE:O	1:A:844:VAL:HG13	1.84	0.78
1:A:501:ALA:H	1:A:505:ARG:NH2	1.81	0.77
1:A:836:ARG:HG2	1:A:984:LEU:HD13	1.66	0.77
1:A:319:LEU:HG	1:A:757:MET:HE1	1.66	0.77
1:A:851:ALA:HB1	1:A:899:MET:HE3	1.66	0.77
1:A:925:MET:HE3	1:A:929:VAL:HG11	1.67	0.77
1:A:263:VAL:HA	1:A:266:LEU:HD12	1.66	0.77
1:A:402:ILE:HG22	1:A:403:ARG:O	1.84	0.77
1:A:638:ARG:HG3	1:A:638:ARG:HH11	1.50	0.77
1:A:913:LEU:C	1:A:915:SER:H	1.92	0.77
1:A:366:MET:HE2	1:A:384:ILE:HD11	1.67	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:369:ILE:HD11	1:A:545:ILE:HD11	1.68	0.76
1:A:155:VAL:HA	1:A:214:ILE:CD1	2.15	0.76
1:A:336:LEU:N	1:A:337:PRO:HD3	1.99	0.76
1:A:538:THR:OG1	1:A:541:VAL:HG23	1.85	0.76
1:A:565:ALA:HA	1:A:594:VAL:HG23	1.67	0.75
1:A:389:TYR:HE2	1:A:436:LYS:HB2	1.51	0.75
1:A:900:ALA:O	1:A:903:VAL:HG12	1.86	0.75
1:A:397:LYS:HB3	1:A:402:ILE:CD1	2.17	0.75
1:A:725:ALA:O	1:A:729:THR:HG23	1.87	0.75
1:A:671:ARG:HB3	1:A:694:TYR:CE2	2.21	0.74
1:A:383:SER:C	1:A:384:ILE:HD12	2.12	0.74
1:A:404:SER:OG	1:A:452:MET:HB2	1.87	0.74
1:A:757:MET:HA	1:A:760:PHE:CE2	2.21	0.74
1:A:19:SER:OG	1:A:22:THR:HB	1.87	0.74
1:A:49:LEU:O	1:A:53:VAL:HG23	1.87	0.74
1:A:254:ASP:O	1:A:258:GLU:HG2	1.88	0.74
1:A:397:LYS:HB3	1:A:402:ILE:HD11	1.69	0.74
1:A:388:THR:HG22	1:A:390:ALA:H	1.52	0.74
1:A:500:PRO:CB	1:A:505:ARG:HB2	2.17	0.74
1:A:56:GLN:OE1	1:A:105:GLY:HA3	1.88	0.74
1:A:654:THR:HG22	1:A:657:GLU:CG	2.18	0.74
1:A:69:ALA:HB2	1:A:94:ILE:CG2	2.18	0.73
1:A:560:ARG:NH2	3:A:1996:ACP:H8	2.03	0.73
1:A:950:VAL:O	1:A:954:PRO:HD2	1.88	0.73
1:A:623:MET:HE1	1:A:635:ILE:HG22	1.68	0.73
1:A:367:PHE:HZ	1:A:545:ILE:HG23	1.54	0.73
1:A:298:ILE:CD1	1:A:779:ALA:HB2	2.19	0.73
1:A:317:THR:O	1:A:321:LEU:HG	1.89	0.73
1:A:759:GLN:HE22	1:A:762:ARG:HH11	1.33	0.73
1:A:367:PHE:CD2	1:A:596:VAL:HG22	2.23	0.73
1:A:446:THR:O	1:A:449:VAL:HG22	1.87	0.73
1:A:897:MET:SD	1:A:958:LYS:HE2	2.27	0.73
1:A:470:ALA:O	1:A:474:VAL:HG13	1.89	0.73
1:A:25:THR:HA	1:A:132:ALA:HB3	1.71	0.72
1:A:281:ASP:N	1:A:282:PRO:HD2	2.04	0.72
1:A:471:CYS:O	1:A:474:VAL:HG22	1.88	0.72
1:A:563:ALA:C	1:A:564:LEU:HD23	2.14	0.72
1:A:130:TYR:HE1	1:A:137:VAL:HG22	1.55	0.72
1:A:909:MET:HE3	1:A:937:ILE:CG2	2.19	0.72
1:A:298:ILE:HD11	1:A:779:ALA:HB2	1.73	0.71
1:A:518:PRO:O	1:A:522:ILE:HB	1.90	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:286:GLY:C	1:A:288:TRP:H	1.96	0.71
1:A:170:SER:OG	1:A:218:LYS:N	2.23	0.71
1:A:411:VAL:HA	1:A:454:VAL:HG11	1.72	0.71
1:A:336:LEU:O	1:A:336:LEU:HD12	1.91	0.71
1:A:763:TYR:CZ	1:A:912:ALA:HB2	2.25	0.71
1:A:783:LEU:HD12	1:A:784:PRO:CD	2.20	0.71
1:A:24:LEU:HD13	1:A:149:ASP:HA	1.73	0.71
1:A:368:ILE:HD13	1:A:410:LEU:HD23	1.71	0.71
1:A:508:VAL:O	1:A:509:GLY:O	2.08	0.71
1:A:69:ALA:HB2	1:A:94:ILE:HG21	1.71	0.70
1:A:249:LEU:O	1:A:253:LEU:HD23	1.90	0.70
1:A:680:GLU:CB	1:A:681:PRO:HD2	2.22	0.70
1:A:608:MET:SD	1:A:639:ILE:HA	2.32	0.70
1:A:99:ILE:O	1:A:103:ILE:HG13	1.92	0.69
1:A:897:MET:HB2	1:A:958:LYS:HE2	1.74	0.69
1:A:733:MET:HE1	1:A:746:ALA:HB1	1.74	0.69
1:A:759:GLN:HE22	1:A:762:ARG:NH1	1.90	0.69
1:A:764:LEU:HD21	1:A:804:ALA:HB2	1.74	0.69
1:A:947:ILE:HG22	1:A:947:ILE:O	1.92	0.69
1:A:99:ILE:HG22	1:A:103:ILE:HD11	1.73	0.69
1:A:386:GLY:HA3	1:A:451:LYS:HZ1	1.57	0.69
1:A:39:ASN:O	1:A:143:ARG:HA	1.92	0.69
1:A:32:HIS:HB3	1:A:146:VAL:HG11	1.73	0.69
1:A:155:VAL:N	1:A:214:ILE:HD11	2.07	0.69
1:A:389:TYR:CE2	1:A:436:LYS:HB2	2.27	0.69
1:A:743:ILE:O	1:A:747:VAL:HG23	1.92	0.69
1:A:966:GLN:O	1:A:970:VAL:HG23	1.93	0.69
1:A:897:MET:HE2	1:A:958:LYS:HE2	1.75	0.69
1:A:855:TRP:CZ2	1:A:895:GLU:HG3	2.27	0.68
1:A:473:SER:O	1:A:477:GLN:HG3	1.93	0.68
1:A:833:LEU:HD11	1:A:837:TYR:CE2	2.28	0.68
1:A:185:VAL:HG12	1:A:186:SER:N	2.09	0.68
1:A:24:LEU:HA	1:A:28:GLN:OE1	1.93	0.68
1:A:312:PRO:HD3	2:A:1995:AD4:H512	1.75	0.68
1:A:909:MET:CE	1:A:940:SER:HB2	2.23	0.68
1:A:643:GLY:O	1:A:644:GLU:C	2.35	0.68
1:A:940:SER:O	1:A:943:LEU:HB2	1.93	0.68
1:A:979:GLY:O	1:A:983:ILE:HG13	1.93	0.68
1:A:150:ILE:HD12	1:A:150:ILE:N	2.08	0.68
1:A:174:ARG:HD2	1:A:186:SER:HB2	1.74	0.68
1:A:925:MET:CE	1:A:929:VAL:HG11	2.24	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:474:VAL:O	1:A:478:LEU:HG	1.93	0.68
1:A:56:GLN:C	1:A:57:PHE:HD1	2.02	0.68
1:A:901:LEU:O	1:A:905:VAL:HG23	1.93	0.68
1:A:147:PRO:HA	1:A:223:VAL:HG12	1.76	0.67
1:A:522:ILE:CG2	1:A:542:LYS:HE3	2.23	0.67
1:A:680:GLU:HB3	1:A:681:PRO:HD2	1.76	0.67
1:A:188:ILE:HG22	1:A:189:LYS:N	2.10	0.67
1:A:309:GLU:O	1:A:312:PRO:HD2	1.95	0.67
1:A:623:MET:HE1	1:A:635:ILE:CG2	2.25	0.67
1:A:355:THR:HG22	1:A:738:ASP:O	1.94	0.67
1:A:834:PHE:CE2	1:A:838:MET:HE2	2.30	0.67
1:A:521:VAL:HG21	1:A:563:ALA:HB3	1.75	0.67
1:A:214:ILE:HG13	1:A:214:ILE:O	1.95	0.67
1:A:898:THR:HG21	1:A:959:LEU:O	1.95	0.67
1:A:247:THR:C	1:A:249:LEU:H	2.02	0.66
1:A:513:PHE:HD1	1:A:566:THR:HG22	1.61	0.66
1:A:526:ASN:ND2	1:A:590:ASP:HA	2.10	0.66
1:A:788:ILE:HG23	1:A:789:PRO:HD2	1.77	0.66
1:A:901:LEU:O	1:A:901:LEU:HD23	1.95	0.66
1:A:801:GLY:O	1:A:805:THR:HG23	1.94	0.66
1:A:894:PRO:CA	1:A:958:LYS:HE3	2.17	0.66
1:A:326:MET:HE3	1:A:749:GLU:CB	2.25	0.66
1:A:927:PRO:HB2	1:A:934:LEU:HD21	1.78	0.66
1:A:475:ILE:HA	1:A:478:LEU:HD12	1.77	0.66
1:A:896:PRO:O	1:A:899:MET:HB2	1.96	0.66
1:A:911:ASN:HA	1:A:914:ASN:HD22	1.60	0.66
1:A:638:ARG:HG3	1:A:638:ARG:NH1	2.10	0.66
1:A:737:ASP:OD2	1:A:739:ASN:HB2	1.96	0.66
1:A:273:LEU:HD12	1:A:276:ILE:CD1	2.20	0.65
1:A:879:ASP:CB	1:A:882:HIS:HB2	2.25	0.65
1:A:247:THR:HG23	1:A:249:LEU:H	1.61	0.65
1:A:879:ASP:HB3	1:A:882:HIS:HB2	1.78	0.65
1:A:914:ASN:HB3	1:A:981:ASP:OD2	1.95	0.65
1:A:32:HIS:CB	1:A:146:VAL:HG11	2.27	0.65
1:A:749:GLU:O	1:A:753:ILE:HG12	1.97	0.65
1:A:781:LEU:O	1:A:871:THR:HG23	1.97	0.65
1:A:49:LEU:N	1:A:49:LEU:HD23	2.12	0.65
1:A:900:ALA:HA	1:A:903:VAL:HG12	1.79	0.65
1:A:748:GLU:HA	1:A:817:MET:HE3	1.79	0.65
1:A:314:VAL:CG1	1:A:805:THR:HG22	2.23	0.64
1:A:865:VAL:HG11	1:A:869:GLN:O	1.96	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:986:PHE:C	1:A:988:ALA:H	2.04	0.64
1:A:188:ILE:HD12	1:A:188:ILE:N	2.13	0.64
1:A:788:ILE:HB	1:A:791:GLN:NE2	2.13	0.64
1:A:8:SER:OG	1:A:11:GLU:HG3	1.97	0.64
1:A:247:THR:HG22	1:A:250:GLN:CG	2.14	0.64
1:A:515:LYS:O	1:A:515:LYS:HG3	1.97	0.64
1:A:943:LEU:O	1:A:946:LEU:N	2.31	0.63
1:A:986:PHE:CE1	1:A:989:ARG:HD2	2.32	0.63
1:A:247:THR:O	1:A:249:LEU:N	2.32	0.63
1:A:335:SER:O	1:A:338:SER:HB3	1.98	0.63
1:A:90:GLU:HB3	1:A:91:PRO:CD	2.29	0.63
1:A:909:MET:HE2	1:A:940:SER:HB2	1.81	0.63
1:A:478:LEU:HA	1:A:505:ARG:NH1	2.13	0.63
1:A:910:CYS:HA	1:A:913:LEU:HD12	1.80	0.63
1:A:203:ASP:OD1	1:A:489:ARG:HD3	1.98	0.63
1:A:288:TRP:O	1:A:291:GLY:N	2.31	0.63
1:A:963:ASP:CA	1:A:967:TRP:CD1	2.77	0.63
1:A:415:THR:HA	1:A:475:ILE:HG21	1.79	0.63
1:A:416:ILE:HD11	1:A:566:THR:HG23	1.79	0.63
1:A:946:LEU:O	1:A:953:LEU:HD12	1.99	0.63
1:A:325:ARG:NH1	1:A:753:ILE:HD11	2.14	0.62
1:A:250:GLN:O	1:A:253:LEU:HB2	1.99	0.62
1:A:708:ALA:N	1:A:709:PRO:HD2	2.14	0.62
1:A:629:LYS:HE3	1:A:652:ALA:O	1.99	0.62
1:A:488:SER:OG	1:A:491:ARG:HG2	2.00	0.62
1:A:249:LEU:HB2	1:A:340:GLU:OE1	1.99	0.62
1:A:370:ASP:HB2	1:A:380:ASN:OD1	1.99	0.62
1:A:853:ALA:O	1:A:856:PHE:HB2	1.99	0.62
1:A:897:MET:CE	1:A:958:LYS:HE2	2.29	0.62
1:A:879:ASP:O	1:A:882:HIS:N	2.30	0.62
1:A:909:MET:CE	1:A:937:ILE:HA	2.30	0.62
1:A:72:SER:OG	1:A:91:PRO:HD3	1.99	0.62
1:A:728:LYS:C	1:A:730:ALA:H	2.07	0.62
1:A:756:ASN:O	1:A:757:MET:C	2.42	0.62
1:A:178:SER:HA	1:A:184:SER:HB3	1.82	0.62
1:A:643:GLY:H	1:A:646:GLU:HG3	1.64	0.62
1:A:717:GLY:O	1:A:731:SER:HB2	2.00	0.62
1:A:748:GLU:HG3	1:A:817:MET:HE3	1.81	0.62
1:A:231:GLU:HA	1:A:234:LYS:HD3	1.82	0.62
1:A:247:THR:CG2	1:A:250:GLN:HG3	2.14	0.62
1:A:515:LYS:HE3	3:A:1996:ACP:N1	2.14	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:512:MET:HE2	1:A:576:MET:HE1	1.82	0.61
1:A:130:TYR:CZ	1:A:137:VAL:HG22	2.34	0.61
1:A:457:THR:O	1:A:459:VAL:HG13	1.99	0.61
1:A:867:TYR:O	1:A:868:HIS:HB2	1.99	0.61
1:A:501:ALA:N	1:A:505:ARG:NH2	2.48	0.61
1:A:536:PRO:O	1:A:538:THR:HG23	2.00	0.61
1:A:485:LEU:HD22	1:A:584:PHE:CE1	2.36	0.61
1:A:424:SER:HA	1:A:446:THR:HG21	1.82	0.61
1:A:174:ARG:NH1	1:A:186:SER:OG	2.34	0.61
1:A:658:PHE:CZ	1:A:666:GLN:HG3	2.36	0.61
1:A:848:THR:HA	1:A:903:VAL:HG11	1.83	0.61
1:A:185:VAL:HG12	1:A:186:SER:H	1.65	0.60
1:A:795:VAL:HA	1:A:799:THR:OG1	2.00	0.60
1:A:178:SER:HB3	1:A:184:SER:CB	2.31	0.60
1:A:654:THR:HG22	1:A:657:GLU:HG3	1.83	0.60
1:A:984:LEU:HA	1:A:987:ILE:HG12	1.81	0.60
1:A:18:VAL:CG2	1:A:24:LEU:HD12	2.31	0.60
1:A:119:LEU:C	1:A:121:GLU:H	2.08	0.60
1:A:203:ASP:HA	1:A:205:LYS:HE3	1.84	0.60
1:A:350:SER:HA	1:A:701:THR:HG21	1.82	0.60
1:A:760:PHE:CD1	1:A:760:PHE:C	2.79	0.60
1:A:494:MET:O	1:A:514:VAL:HG23	2.01	0.60
1:A:772:VAL:HG21	2:A:1995:AD4:H231	1.84	0.60
1:A:855:TRP:CE2	1:A:895:GLU:HB2	2.36	0.60
1:A:32:HIS:HB3	1:A:146:VAL:CG1	2.30	0.60
1:A:800:ASP:C	1:A:803:PRO:HD2	2.27	0.60
1:A:458:GLU:CD	1:A:458:GLU:H	2.10	0.60
1:A:13:LEU:HD11	1:A:166:LEU:HD22	1.84	0.60
1:A:122:TYR:HE2	1:A:726:VAL:HG21	1.67	0.60
1:A:830:SER:O	1:A:833:LEU:HB3	2.01	0.59
1:A:263:VAL:HG12	1:A:264:ILE:N	2.16	0.59
1:A:897:MET:HE2	1:A:958:LYS:CD	2.32	0.59
1:A:311:LEU:HB3	1:A:312:PRO:HD3	1.84	0.59
1:A:75:LEU:C	1:A:77:TRP:H	2.11	0.59
1:A:283:VAL:HG12	1:A:283:VAL:O	2.02	0.59
1:A:2:GLU:C	1:A:4:ALA:H	2.09	0.59
1:A:57:PHE:CE1	1:A:102:ALA:HB2	2.33	0.59
1:A:355:THR:HG21	1:A:720:MET:HE1	1.84	0.59
1:A:403:ARG:HB3	1:A:406:GLN:HG3	1.84	0.59
1:A:748:GLU:HG3	1:A:817:MET:CG	2.33	0.59
1:A:147:PRO:HA	1:A:223:VAL:CG1	2.33	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:373:ASP:O	1:A:374:GLY:C	2.45	0.59
1:A:178:SER:CA	1:A:184:SER:HB3	2.33	0.59
1:A:483:PHE:HE1	1:A:485:LEU:HD21	1.68	0.59
1:A:560:ARG:HH21	3:A:1996:ACP:H3'	1.67	0.59
1:A:834:PHE:HE2	1:A:838:MET:HE2	1.67	0.59
1:A:915:SER:C	1:A:917:SER:N	2.59	0.59
1:A:483:PHE:CE1	1:A:578:LEU:HD22	2.38	0.59
1:A:623:MET:SD	1:A:625:THR:HG21	2.43	0.59
1:A:784:PRO:CD	1:A:870:LEU:HD11	2.33	0.59
1:A:113:GLU:HB2	1:A:117:GLU:OE1	2.03	0.58
1:A:244:GLN:CD	1:A:244:GLN:H	2.10	0.58
1:A:180:LEU:C	1:A:180:LEU:HD12	2.28	0.58
1:A:667:ARG:HA	1:A:690:TYR:CD1	2.39	0.58
1:A:757:MET:O	1:A:761:ILE:HG13	2.03	0.58
1:A:475:ILE:HA	1:A:478:LEU:CD1	2.34	0.58
1:A:525:CYS:HA	1:A:591:LEU:O	2.03	0.58
1:A:527:TYR:HB3	1:A:534:ARG:HG2	1.85	0.58
1:A:648:VAL:HG12	1:A:648:VAL:O	2.02	0.58
1:A:386:GLY:HA3	1:A:451:LYS:HZ3	1.68	0.58
1:A:39:ASN:HB2	1:A:226:THR:HG1	1.65	0.58
1:A:153:VAL:CG1	1:A:214:ILE:HG21	2.30	0.58
1:A:436:LYS:HG3	1:A:443:THR:HG21	1.86	0.58
1:A:363:VAL:HG21	1:A:448:LEU:HB2	1.86	0.58
1:A:6:SER:HA	1:A:194:VAL:O	2.04	0.58
1:A:522:ILE:HG22	1:A:542:LYS:HE3	1.85	0.58
1:A:939:LEU:O	1:A:943:LEU:HD12	2.03	0.58
1:A:319:LEU:CG	1:A:757:MET:HE1	2.32	0.58
1:A:901:LEU:HD23	1:A:901:LEU:C	2.29	0.58
1:A:232:ILE:O	1:A:235:ILE:N	2.35	0.58
1:A:368:ILE:HG22	1:A:594:VAL:O	2.04	0.58
1:A:155:VAL:HG23	1:A:216:ALA:HA	1.86	0.57
1:A:478:LEU:O	1:A:479:MET:CG	2.51	0.57
1:A:524:ARG:HD2	1:A:588:GLU:O	2.04	0.57
1:A:72:SER:HB3	1:A:91:PRO:HB3	1.87	0.57
1:A:85:ILE:C	1:A:87:ALA:H	2.11	0.57
1:A:188:ILE:HD12	1:A:188:ILE:H	1.68	0.57
1:A:348:ILE:HD13	1:A:743:ILE:CG2	2.34	0.57
1:A:200:VAL:O	1:A:201:ASN:C	2.48	0.57
1:A:586:GLU:O	1:A:589:THR:HG23	2.04	0.57
1:A:642:PHE:CZ	1:A:648:VAL:HG13	2.39	0.57
1:A:822:ARG:HG2	1:A:823:SER:O	2.05	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:271:VAL:O	1:A:274:ILE:HG13	2.04	0.57
1:A:433:VAL:HG12	1:A:434:TYR:N	2.18	0.57
1:A:733:MET:HE1	1:A:746:ALA:CB	2.34	0.57
1:A:920:GLN:HB3	1:A:924:ARG:HD3	1.86	0.57
1:A:943:LEU:O	1:A:946:LEU:HB3	2.03	0.57
1:A:314:VAL:HG13	1:A:805:THR:CG2	2.28	0.57
1:A:367:PHE:CE2	1:A:596:VAL:HG22	2.40	0.57
1:A:59:ASP:OD2	1:A:61:LEU:HB2	2.04	0.57
1:A:230:THR:HG23	1:A:233:GLY:H	1.69	0.57
1:A:242:THR:HG23	1:A:712:LYS:HD3	1.87	0.57
1:A:359:ASN:HA	1:A:601:ASP:OD1	2.05	0.57
1:A:501:ALA:N	1:A:505:ARG:HH21	2.03	0.57
1:A:521:VAL:CG2	1:A:563:ALA:HB3	2.35	0.57
1:A:558:THR:HG22	1:A:634:ALA:HB1	1.87	0.57
1:A:788:ILE:H	1:A:791:GLN:CD	2.12	0.57
1:A:933:LEU:O	1:A:937:ILE:HG13	2.05	0.57
1:A:974:SER:C	1:A:976:PRO:HD2	2.29	0.57
1:A:897:MET:HB2	1:A:958:LYS:HG3	1.87	0.56
1:A:913:LEU:C	1:A:915:SER:N	2.63	0.56
1:A:192:GLU:OE1	1:A:580:ASP:HB3	2.05	0.56
1:A:512:MET:HB3	1:A:567:ARG:HB3	1.87	0.56
1:A:666:GLN:HG2	1:A:690:TYR:OH	2.05	0.56
1:A:61:LEU:HD12	2:A:1995:AD4:H522	1.87	0.56
1:A:286:GLY:C	1:A:288:TRP:N	2.62	0.56
1:A:308:PRO:HG2	2:A:1995:AD4:H511	1.87	0.56
1:A:388:THR:HG22	1:A:389:TYR:N	2.20	0.56
1:A:783:LEU:CD2	1:A:849:VAL:HG13	2.35	0.56
1:A:809:PHE:HD2	1:A:932:TRP:CD1	2.24	0.56
1:A:462:LEU:HB3	1:A:466:GLU:OE1	2.05	0.56
1:A:680:GLU:N	1:A:683:HIS:HD2	1.93	0.56
1:A:964:LEU:O	1:A:965:THR:CG2	2.50	0.56
1:A:357:THR:HA	1:A:603:PRO:HA	1.87	0.56
1:A:453:ASN:CB	1:A:471:CYS:SG	2.81	0.56
1:A:564:LEU:HD23	1:A:564:LEU:N	2.21	0.56
1:A:38:HIS:CD2	1:A:143:ARG:HH21	2.23	0.56
1:A:581:SER:HA	1:A:584:PHE:CE2	2.41	0.56
1:A:624:ILE:HG23	1:A:679:VAL:HG21	1.88	0.56
1:A:854:TRP:C	1:A:856:PHE:N	2.61	0.56
1:A:894:PRO:HG2	1:A:895:GLU:OE2	2.05	0.56
1:A:101:ASN:O	1:A:102:ALA:C	2.49	0.56
1:A:534:ARG:O	1:A:535:VAL:HG23	2.06	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:691:LEU:O	1:A:696:GLU:HB2	2.06	0.56
1:A:897:MET:HE2	1:A:958:LYS:CE	2.36	0.56
1:A:303:ALA:C	1:A:305:ALA:H	2.14	0.55
1:A:311:LEU:HD13	1:A:764:LEU:HD12	1.86	0.55
1:A:540:PRO:HG2	1:A:541:VAL:H	1.72	0.55
1:A:727:ALA:O	1:A:730:ALA:HB3	2.06	0.55
1:A:986:PHE:C	1:A:988:ALA:N	2.63	0.55
1:A:259:GLN:C	1:A:261:SER:N	2.64	0.55
1:A:483:PHE:CZ	1:A:578:LEU:HD22	2.41	0.55
1:A:856:PHE:O	1:A:864:GLY:HA3	2.06	0.55
1:A:95:LEU:O	1:A:99:ILE:HG13	2.06	0.55
1:A:440:ALA:HA	1:A:443:THR:HG22	1.89	0.55
1:A:235:ILE:O	1:A:236:ARG:C	2.48	0.55
1:A:911:ASN:HA	1:A:914:ASN:ND2	2.21	0.55
1:A:47:LYS:HB3	1:A:51:GLU:HB2	1.87	0.55
1:A:413:LEU:CD1	1:A:564:LEU:HD12	2.36	0.55
1:A:763:TYR:CE1	1:A:912:ALA:HB2	2.42	0.55
1:A:905:VAL:HG21	1:A:944:HIS:CD2	2.42	0.55
1:A:242:THR:CG2	1:A:712:LYS:HD3	2.36	0.55
1:A:483:PHE:CE1	1:A:485:LEU:HD21	2.42	0.55
1:A:856:PHE:HB3	1:A:870:LEU:HD22	1.89	0.55
1:A:909:MET:HE1	1:A:940:SER:HB2	1.89	0.55
1:A:160:PRO:O	1:A:160:PRO:HG2	2.07	0.55
1:A:277:GLY:C	1:A:279:PHE:H	2.14	0.55
1:A:950:VAL:O	1:A:954:PRO:CD	2.55	0.55
1:A:247:THR:C	1:A:249:LEU:N	2.63	0.55
1:A:305:ALA:O	1:A:772:VAL:HG23	2.07	0.55
1:A:154:ALA:C	1:A:214:ILE:HD11	2.32	0.54
1:A:718:ILE:HD12	1:A:743:ILE:HD13	1.89	0.54
1:A:535:VAL:HG13	1:A:536:PRO:CD	2.33	0.54
1:A:636:CYS:HB3	1:A:641:ILE:HB	1.88	0.54
1:A:644:GLU:O	1:A:645:ASN:HB2	2.07	0.54
1:A:795:VAL:HA	1:A:799:THR:HG1	1.71	0.54
1:A:165:ILE:HD11	1:A:208:LEU:CD2	2.37	0.54
1:A:260:LEU:HD11	1:A:306:ALA:HB1	1.89	0.54
1:A:854:TRP:C	1:A:856:PHE:H	2.16	0.54
1:A:249:LEU:HB2	1:A:340:GLU:CD	2.32	0.54
1:A:266:LEU:O	1:A:269:VAL:HB	2.07	0.54
1:A:643:GLY:O	1:A:646:GLU:HG2	2.06	0.54
1:A:355:THR:O	1:A:604:ARG:NH2	2.40	0.54
1:A:654:THR:HG22	1:A:657:GLU:OE1	2.08	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:122:TYR:O	1:A:158:LYS:HD3	2.08	0.54
1:A:163:ILE:HB	1:A:208:LEU:HB2	1.90	0.54
1:A:273:LEU:O	1:A:276:ILE:HG13	2.07	0.54
1:A:237:ASP:O	1:A:238:GLN:C	2.48	0.54
1:A:783:LEU:HD23	1:A:849:VAL:HG13	1.90	0.54
1:A:101:ASN:O	1:A:104:VAL:N	2.41	0.54
1:A:455:PHE:O	1:A:456:ASN:C	2.51	0.54
1:A:577:VAL:CG2	1:A:583:ARG:HD3	2.38	0.54
1:A:584:PHE:O	1:A:588:GLU:HG3	2.07	0.54
1:A:788:ILE:HG22	1:A:790:VAL:H	1.73	0.54
1:A:174:ARG:HH11	1:A:186:SER:CB	2.21	0.53
1:A:512:MET:CE	1:A:576:MET:HE1	2.38	0.53
1:A:654:THR:HG22	1:A:657:GLU:CD	2.34	0.53
1:A:865:VAL:O	1:A:865:VAL:HG13	2.07	0.53
1:A:634:ALA:O	1:A:635:ILE:C	2.51	0.53
1:A:644:GLU:O	1:A:645:ASN:CB	2.55	0.53
1:A:788:ILE:HG22	1:A:790:VAL:N	2.23	0.53
1:A:804:ALA:O	1:A:807:LEU:HB2	2.08	0.53
1:A:915:SER:O	1:A:917:SER:N	2.41	0.53
1:A:33:LEU:HD12	1:A:37:GLY:O	2.08	0.53
1:A:461:ASN:C	1:A:462:LEU:HD23	2.34	0.53
1:A:758:LYS:HG2	1:A:759:GLN:N	2.23	0.53
1:A:162:ASP:OD1	1:A:209:PHE:HA	2.08	0.53
1:A:166:LEU:HD11	1:A:222:ILE:HB	1.89	0.53
1:A:508:VAL:O	1:A:509:GLY:C	2.51	0.53
1:A:529:ARG:HG3	1:A:529:ARG:HH11	1.73	0.53
1:A:534:ARG:HG3	1:A:592:THR:CG2	2.38	0.53
1:A:748:GLU:HG3	1:A:817:MET:SD	2.48	0.53
1:A:909:MET:HE1	1:A:937:ILE:HA	1.90	0.53
1:A:968:LEU:O	1:A:972:LYS:HG2	2.07	0.53
1:A:311:LEU:O	1:A:312:PRO:C	2.51	0.53
1:A:774:CYS:SG	1:A:787:LEU:HD12	2.47	0.53
1:A:348:ILE:HA	1:A:699:ALA:HB3	1.90	0.53
1:A:11:GLU:O	1:A:14:ALA:HB3	2.09	0.53
1:A:442:GLU:CG	3:A:1996:ACP:HN62	2.22	0.53
1:A:791:GLN:HB3	1:A:901:LEU:HD12	1.91	0.53
1:A:67:LEU:O	1:A:71:ILE:HG13	2.09	0.53
1:A:452:MET:O	1:A:453:ASN:C	2.50	0.53
1:A:572:LYS:HB3	1:A:574:GLU:OE2	2.07	0.53
1:A:444:ALA:O	1:A:447:THR:HB	2.09	0.53
1:A:848:THR:HG22	1:A:903:VAL:HG13	1.89	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:90:GLU:HB3	1:A:91:PRO:HD3	1.91	0.53
1:A:150:ILE:HD12	1:A:150:ILE:H	1.74	0.53
1:A:325:ARG:HH12	1:A:753:ILE:CD1	2.21	0.53
1:A:478:LEU:O	1:A:505:ARG:CD	2.56	0.53
1:A:894:PRO:O	1:A:898:THR:HG23	2.09	0.53
1:A:119:LEU:C	1:A:121:GLU:N	2.65	0.52
1:A:528:VAL:HG23	1:A:528:VAL:O	2.07	0.52
1:A:889:GLU:O	1:A:889:GLU:HG2	2.09	0.52
1:A:71:ILE:O	1:A:75:LEU:HG	2.09	0.52
1:A:320:ALA:O	1:A:324:ARG:HG3	2.09	0.52
1:A:391:PRO:HD2	1:A:434:TYR:CD2	2.44	0.52
1:A:24:LEU:HD13	1:A:149:ASP:CA	2.40	0.52
1:A:352:LYS:NZ	1:A:627:ASP:OD2	2.36	0.52
1:A:449:VAL:HG23	1:A:450:GLU:N	2.24	0.52
1:A:947:ILE:O	1:A:947:ILE:CG2	2.58	0.52
1:A:75:LEU:HD13	1:A:297:LYS:HB3	1.91	0.52
1:A:421:ASN:ND2	1:A:446:THR:HG23	2.25	0.52
1:A:754:TYR:HA	1:A:757:MET:HB3	1.90	0.52
1:A:442:GLU:HG2	1:A:515:LYS:NZ	2.24	0.52
1:A:141:LYS:O	1:A:144:ASP:N	2.41	0.52
1:A:950:VAL:HG12	1:A:952:PRO:HD2	1.90	0.52
1:A:119:LEU:O	1:A:121:GLU:N	2.43	0.52
1:A:915:SER:C	1:A:917:SER:H	2.18	0.52
1:A:9:THR:HG22	1:A:10:GLU:OE1	2.09	0.52
1:A:56:GLN:C	1:A:57:PHE:CD1	2.86	0.52
1:A:536:PRO:O	1:A:537:MET:C	2.53	0.52
1:A:560:ARG:NH2	3:A:1996:ACP:H3'	2.24	0.52
1:A:662:PRO:O	1:A:664:ALA:N	2.43	0.52
1:A:794:TRP:HZ2	1:A:943:LEU:HD22	1.73	0.52
1:A:400:LYS:O	1:A:402:ILE:HG13	2.10	0.52
1:A:717:GLY:C	1:A:731:SER:HB2	2.35	0.52
1:A:676:PHE:CE2	1:A:687:ILE:HD13	2.45	0.51
1:A:689:GLU:CG	1:A:713:LYS:HZ3	2.23	0.51
1:A:539:GLY:N	1:A:540:PRO:HD2	2.25	0.51
1:A:654:THR:O	1:A:655:GLY:C	2.53	0.51
1:A:662:PRO:O	1:A:663:LEU:C	2.52	0.51
1:A:876:CYS:SG	1:A:884:GLU:HG3	2.51	0.51
1:A:65:LEU:HD12	1:A:98:LEU:HD21	1.93	0.51
1:A:643:GLY:H	1:A:646:GLU:CG	2.24	0.51
1:A:687:ILE:C	1:A:689:GLU:N	2.67	0.51
1:A:710:ALA:O	1:A:712:LYS:N	2.44	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:836:ARG:NH2	1:A:981:ASP:OD2	2.43	0.51
1:A:20:GLU:HG3	1:A:166:LEU:HD13	1.92	0.51
1:A:155:VAL:HG23	1:A:215:ALA:O	2.09	0.51
1:A:298:ILE:HD13	1:A:779:ALA:HB2	1.92	0.51
1:A:481:LYS:HE2	1:A:496:VAL:HG11	1.92	0.51
1:A:737:ASP:OD2	1:A:739:ASN:CB	2.58	0.51
1:A:791:GLN:NE2	1:A:897:MET:CE	2.69	0.51
1:A:974:SER:O	1:A:976:PRO:N	2.44	0.51
1:A:528:VAL:HG12	1:A:593:PHE:HB3	1.93	0.51
1:A:73:PHE:N	1:A:91:PRO:HB3	2.26	0.51
1:A:593:PHE:CE2	1:A:595:GLY:HA2	2.46	0.51
1:A:607:VAL:O	1:A:608:MET:C	2.52	0.51
1:A:832:TRP:CZ2	1:A:987:ILE:HG13	2.46	0.51
1:A:689:GLU:HG2	1:A:713:LYS:NZ	2.26	0.51
1:A:710:ALA:O	1:A:711:LEU:C	2.54	0.51
1:A:909:MET:HE3	1:A:937:ILE:HA	1.93	0.51
1:A:304:VAL:HA	1:A:309:GLU:OE2	2.11	0.51
1:A:724:THR:O	1:A:725:ALA:C	2.53	0.51
1:A:680:GLU:HG2	1:A:681:PRO:HD2	1.93	0.50
1:A:947:ILE:HG12	1:A:953:LEU:HD13	1.92	0.50
1:A:698:THR:HG23	1:A:715:GLU:OE1	2.11	0.50
1:A:364:CYS:O	1:A:383:SER:HA	2.12	0.50
1:A:491:ARG:HE	1:A:588:GLU:CD	2.18	0.50
1:A:766:SER:O	1:A:769:VAL:HB	2.10	0.50
1:A:795:VAL:O	1:A:800:ASP:HB2	2.11	0.50
1:A:894:PRO:HB2	1:A:959:LEU:H	1.75	0.50
1:A:236:ARG:NH1	1:A:236:ARG:HG2	2.25	0.50
1:A:419:LEU:HD13	1:A:513:PHE:CE2	2.47	0.50
1:A:608:MET:HE1	1:A:638:ARG:O	2.12	0.50
1:A:623:MET:SD	1:A:625:THR:CG2	2.99	0.50
1:A:689:GLU:CG	1:A:713:LYS:NZ	2.73	0.50
1:A:870:LEU:O	1:A:873:PHE:HB3	2.10	0.50
1:A:897:MET:HB2	1:A:958:LYS:CE	2.41	0.50
1:A:263:VAL:HG11	2:A:1995:AD4:O4	2.12	0.50
1:A:412:GLU:CD	1:A:529:ARG:HE	2.19	0.50
1:A:485:LEU:N	1:A:485:LEU:HD23	2.25	0.50
1:A:872:HIS:C	1:A:874:MET:N	2.67	0.50
1:A:914:ASN:HA	1:A:985:LYS:NZ	2.26	0.50
2:A:1995:AD4:H541	2:A:1995:AD4:O1T	2.11	0.50
1:A:178:SER:HB3	1:A:184:SER:HB3	1.92	0.50
1:A:185:VAL:CG1	1:A:186:SER:N	2.74	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:304:VAL:HG11	1:A:789:PRO:HB3	1.94	0.50
1:A:642:PHE:CE2	1:A:648:VAL:HG11	2.47	0.50
1:A:728:LYS:C	1:A:730:ALA:N	2.70	0.50
1:A:748:GLU:CG	1:A:817:MET:HE3	2.42	0.50
1:A:971:LEU:HB3	1:A:975:LEU:HD12	1.94	0.50
1:A:33:LEU:HG	1:A:33:LEU:O	2.11	0.50
1:A:415:THR:HA	1:A:475:ILE:HD13	1.94	0.50
1:A:895:GLU:N	1:A:896:PRO:HD2	2.27	0.50
1:A:115:ALA:O	1:A:118:ALA:HB3	2.12	0.50
1:A:721:GLY:N	1:A:735:LEU:O	2.45	0.50
1:A:962:LEU:O	1:A:965:THR:OG1	2.30	0.50
1:A:702:GLY:H	1:A:711:LEU:HD21	1.77	0.49
1:A:23:GLY:HA2	1:A:150:ILE:CD1	2.34	0.49
1:A:259:GLN:C	1:A:261:SER:H	2.19	0.49
1:A:342:LEU:O	1:A:342:LEU:HD12	2.12	0.49
1:A:348:ILE:HD13	1:A:743:ILE:HG21	1.93	0.49
1:A:415:THR:O	1:A:416:ILE:C	2.54	0.49
1:A:459:VAL:HA	1:A:462:LEU:CD1	2.41	0.49
1:A:513:PHE:CD1	1:A:566:THR:HG22	2.46	0.49
1:A:662:PRO:C	1:A:664:ALA:N	2.69	0.49
1:A:836:ARG:O	1:A:840:ILE:HG12	2.12	0.49
1:A:920:GLN:OE1	1:A:924:ARG:CZ	2.59	0.49
1:A:122:TYR:HE2	1:A:726:VAL:CG2	2.24	0.49
1:A:407:PHE:O	1:A:411:VAL:HG13	2.13	0.49
1:A:848:THR:HA	1:A:903:VAL:CG1	2.42	0.49
1:A:977:VAL:O	1:A:980:LEU:HB3	2.12	0.49
1:A:71:ILE:HB	1:A:300:VAL:CG1	2.42	0.49
1:A:92:PHE:CZ	1:A:96:LEU:HD11	2.48	0.49
1:A:274:ILE:HD12	1:A:275:ASN:OD1	2.11	0.49
1:A:748:GLU:O	1:A:749:GLU:C	2.55	0.49
1:A:829:ILE:HG23	1:A:833:LEU:HG	1.94	0.49
1:A:185:VAL:CG1	1:A:186:SER:H	2.25	0.49
1:A:274:ILE:HD12	1:A:275:ASN:CG	2.38	0.49
1:A:346:SER:N	1:A:697:ILE:O	2.45	0.49
1:A:472:ASN:O	1:A:475:ILE:N	2.45	0.49
1:A:969:MET:O	1:A:972:LYS:HG3	2.13	0.49
1:A:222:ILE:HG23	1:A:222:ILE:O	2.12	0.49
1:A:408:ASP:O	1:A:409:GLY:C	2.55	0.49
1:A:412:GLU:O	1:A:413:LEU:C	2.56	0.49
1:A:449:VAL:CG2	1:A:450:GLU:N	2.76	0.49
1:A:567:ARG:NE	1:A:571:PRO:HD3	2.27	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:701:THR:HG23	1:A:701:THR:O	2.12	0.49
1:A:155:VAL:HG13	1:A:156:GLY:N	2.28	0.49
1:A:263:VAL:O	1:A:264:ILE:C	2.56	0.49
1:A:600:LEU:HG	1:A:601:ASP:N	2.26	0.49
1:A:319:LEU:HG	1:A:757:MET:CE	2.39	0.49
1:A:358:THR:O	1:A:359:ASN:HB3	2.12	0.49
1:A:384:ILE:HD12	1:A:384:ILE:N	2.27	0.49
1:A:442:GLU:HG3	3:A:1996:ACP:HN62	1.78	0.49
1:A:527:TYR:CB	1:A:592:THR:HG23	2.35	0.49
1:A:633:ILE:O	1:A:634:ALA:C	2.55	0.49
1:A:654:THR:HG23	1:A:657:GLU:H	1.78	0.49
1:A:324:ARG:O	1:A:328:LYS:HG3	2.12	0.48
1:A:614:CYS:O	1:A:618:GLY:N	2.46	0.48
1:A:718:ILE:CD1	1:A:743:ILE:HD13	2.43	0.48
1:A:880:HIS:HB3	1:A:881:PRO:HD3	1.95	0.48
1:A:914:ASN:HA	1:A:985:LYS:HZ2	1.78	0.48
1:A:656:ARG:O	1:A:657:GLU:C	2.56	0.48
1:A:784:PRO:O	1:A:785:GLU:C	2.56	0.48
1:A:948:LEU:HB3	1:A:960:LYS:HG2	1.95	0.48
1:A:18:VAL:HG23	1:A:24:LEU:HD12	1.95	0.48
1:A:177:GLN:O	1:A:178:SER:C	2.56	0.48
1:A:371:LYS:HE3	1:A:373:ASP:HB2	1.95	0.48
1:A:792:LEU:O	1:A:796:ASN:ND2	2.47	0.48
1:A:141:LYS:O	1:A:142:ALA:C	2.56	0.48
1:A:299:ALA:O	1:A:302:LEU:HB3	2.14	0.48
1:A:448:LEU:HD12	1:A:448:LEU:C	2.39	0.48
1:A:497:TYR:HD1	1:A:512:MET:HE3	1.78	0.48
1:A:19:SER:C	1:A:21:THR:H	2.20	0.48
1:A:146:VAL:HG13	1:A:147:PRO:HD2	1.94	0.48
1:A:335:SER:C	1:A:337:PRO:HD3	2.39	0.48
1:A:352:LYS:HB2	1:A:625:THR:HG22	1.95	0.48
1:A:397:LYS:O	1:A:398:ASN:HB2	2.14	0.48
1:A:687:ILE:C	1:A:689:GLU:H	2.20	0.48
1:A:836:ARG:HH21	1:A:981:ASP:CG	2.21	0.48
1:A:97:ILE:HD11	1:A:797:LEU:HD11	1.95	0.48
1:A:440:ALA:O	1:A:443:THR:HG22	2.13	0.48
1:A:445:LEU:O	1:A:446:THR:C	2.56	0.48
1:A:529:ARG:HB2	1:A:529:ARG:CZ	2.44	0.48
1:A:63:ARG:O	1:A:66:LEU:N	2.45	0.48
1:A:604:ARG:O	1:A:607:VAL:HG23	2.14	0.48
1:A:688:VAL:HG12	1:A:688:VAL:O	2.13	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:879:ASP:HB2	1:A:882:HIS:HB2	1.93	0.48
1:A:14:ALA:O	1:A:17:GLY:N	2.46	0.48
1:A:48:SER:OG	1:A:50:TRP:HB3	2.13	0.48
1:A:178:SER:CB	1:A:184:SER:HB3	2.43	0.48
1:A:491:ARG:NH2	1:A:494:MET:HA	2.29	0.48
1:A:497:TYR:CD1	1:A:512:MET:HE3	2.49	0.48
1:A:605:LYS:O	1:A:607:VAL:N	2.47	0.48
1:A:619:ILE:CD1	1:A:747:VAL:HG11	2.44	0.48
1:A:668:GLU:O	1:A:669:ALA:C	2.57	0.48
1:A:740:PHE:O	1:A:743:ILE:HB	2.13	0.48
1:A:783:LEU:CD1	1:A:784:PRO:HD2	2.34	0.48
1:A:848:THR:O	1:A:851:ALA:HB3	2.14	0.48
1:A:181:THR:O	1:A:182:GLY:C	2.57	0.48
1:A:188:ILE:CG2	1:A:189:LYS:N	2.76	0.48
1:A:424:SER:H	1:A:437:VAL:HG12	1.77	0.48
1:A:606:GLU:H	1:A:606:GLU:CD	2.20	0.48
1:A:666:GLN:HG2	1:A:690:TYR:CZ	2.49	0.48
1:A:790:VAL:O	1:A:957:PHE:HE1	1.96	0.48
1:A:239:MET:O	1:A:242:THR:HG23	2.13	0.48
1:A:244:GLN:CD	1:A:244:GLN:N	2.72	0.48
1:A:295:TYR:HA	1:A:298:ILE:HG22	1.95	0.48
1:A:654:THR:CG2	1:A:657:GLU:HG3	2.44	0.48
1:A:680:GLU:CG	1:A:681:PRO:HD2	2.44	0.48
1:A:911:ASN:C	1:A:913:LEU:H	2.22	0.48
1:A:916:LEU:CD1	1:A:927:PRO:HA	2.43	0.48
1:A:943:LEU:O	1:A:944:HIS:C	2.57	0.48
1:A:388:THR:CG2	1:A:390:ALA:H	2.23	0.47
1:A:545:ILE:O	1:A:549:ILE:HG12	2.14	0.47
1:A:977:VAL:O	1:A:980:LEU:N	2.47	0.47
1:A:153:VAL:O	1:A:218:LYS:HA	2.14	0.47
1:A:637:ARG:HH21	1:A:645:ASN:H	1.61	0.47
1:A:748:GLU:HG3	1:A:817:MET:CE	2.44	0.47
1:A:801:GLY:C	1:A:803:PRO:HD2	2.40	0.47
1:A:946:LEU:HG	1:A:953:LEU:CD1	2.44	0.47
1:A:133:ASP:O	1:A:134:ARG:CG	2.58	0.47
1:A:411:VAL:O	1:A:415:THR:HG23	2.14	0.47
1:A:940:SER:HA	1:A:943:LEU:HD12	1.95	0.47
1:A:945:PHE:CE2	1:A:967:TRP:CH2	3.03	0.47
1:A:93:VAL:O	1:A:94:ILE:C	2.58	0.47
1:A:230:THR:O	1:A:233:GLY:N	2.47	0.47
1:A:717:GLY:N	1:A:732:GLU:OE1	2.30	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:371:LYS:HG2	1:A:372:VAL:N	2.28	0.47
1:A:852:ALA:HA	1:A:896:PRO:O	2.14	0.47
1:A:71:ILE:HB	1:A:300:VAL:HG11	1.96	0.47
1:A:437:VAL:CG1	1:A:438:GLY:N	2.77	0.47
1:A:442:GLU:HG3	3:A:1996:ACP:N6	2.30	0.47
1:A:934:LEU:O	1:A:935:GLY:C	2.57	0.47
1:A:109:GLU:C	1:A:109:GLU:CD	2.83	0.47
1:A:148:GLY:O	1:A:222:ILE:HG13	2.15	0.47
1:A:311:LEU:HD21	1:A:761:ILE:HG23	1.97	0.47
1:A:343:GLY:O	1:A:751:ARG:HG2	2.14	0.47
1:A:452:MET:O	1:A:454:VAL:N	2.48	0.47
1:A:471:CYS:C	1:A:474:VAL:HG22	2.39	0.47
1:A:642:PHE:CZ	1:A:648:VAL:CG1	2.98	0.47
1:A:843:TYR:CE2	1:A:977:VAL:HG22	2.50	0.47
1:A:879:ASP:O	1:A:880:HIS:C	2.56	0.47
1:A:436:LYS:HD2	1:A:440:ALA:HB2	1.97	0.47
1:A:445:LEU:C	1:A:447:THR:N	2.72	0.47
1:A:534:ARG:HG3	1:A:592:THR:HG21	1.97	0.47
1:A:633:ILE:O	1:A:636:CYS:HB2	2.14	0.47
1:A:173:LEU:O	1:A:188:ILE:HA	2.15	0.47
1:A:277:GLY:O	1:A:279:PHE:N	2.47	0.47
1:A:544:LYS:O	1:A:548:VAL:HG23	2.15	0.47
1:A:576:MET:HE3	1:A:587:TYR:HB3	1.97	0.47
1:A:303:ALA:C	1:A:305:ALA:N	2.71	0.47
1:A:366:MET:O	1:A:552:TRP:HH2	1.98	0.47
1:A:542:LYS:O	1:A:543:GLU:C	2.57	0.47
1:A:577:VAL:HG23	1:A:587:TYR:OH	2.15	0.47
1:A:854:TRP:CE3	1:A:899:MET:HE2	2.49	0.47
1:A:927:PRO:C	1:A:929:VAL:H	2.23	0.47
1:A:52:LEU:O	1:A:56:GLN:HG2	2.15	0.46
1:A:75:LEU:HD22	1:A:293:ILE:HG13	1.96	0.46
1:A:648:VAL:O	1:A:648:VAL:CG1	2.63	0.46
1:A:679:VAL:HG12	1:A:680:GLU:N	2.31	0.46
1:A:790:VAL:C	1:A:957:PHE:HE1	2.23	0.46
1:A:869:GLN:OE1	1:A:872:HIS:CD2	2.68	0.46
1:A:953:LEU:N	1:A:954:PRO:HD2	2.30	0.46
1:A:718:ILE:HD13	1:A:743:ILE:HG12	1.96	0.46
1:A:88:PHE:O	1:A:92:PHE:HB2	2.16	0.46
1:A:576:MET:HE3	1:A:587:TYR:CG	2.50	0.46
1:A:686:LYS:O	1:A:689:GLU:HB2	2.14	0.46
1:A:917:SER:OG	1:A:920:GLN:HB2	2.15	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:39:ASN:CB	1:A:226:THR:HG1	2.29	0.46
1:A:253:LEU:O	1:A:254:ASP:C	2.59	0.46
1:A:593:PHE:HZ	1:A:596:VAL:HG13	1.80	0.46
1:A:758:LYS:O	1:A:761:ILE:HB	2.16	0.46
1:A:788:ILE:O	1:A:791:GLN:HB2	2.16	0.46
1:A:975:LEU:HB2	1:A:976:PRO:HD3	1.98	0.46
1:A:52:LEU:O	1:A:53:VAL:C	2.59	0.46
1:A:415:THR:HG22	1:A:475:ILE:HG23	1.96	0.46
1:A:698:THR:CG2	1:A:715:GLU:OE1	2.63	0.46
1:A:62:VAL:HG23	1:A:98:LEU:HD22	1.98	0.46
1:A:214:ILE:O	1:A:214:ILE:CG1	2.62	0.46
1:A:308:PRO:O	1:A:309:GLU:C	2.58	0.46
1:A:348:ILE:HD13	1:A:743:ILE:HG22	1.98	0.46
1:A:352:LYS:HG2	1:A:353:THR:N	2.29	0.46
1:A:480:LYS:HB3	1:A:499:SER:HB3	1.98	0.46
1:A:26:PRO:O	1:A:30:LYS:HG3	2.15	0.46
1:A:577:VAL:HG21	1:A:583:ARG:HD3	1.98	0.46
1:A:8:SER:OG	1:A:11:GLU:CG	2.64	0.46
1:A:202:GLN:HG3	1:A:489:ARG:HH11	1.81	0.46
1:A:313:ALA:O	1:A:317:THR:HG23	2.16	0.46
1:A:352:LYS:CB	1:A:625:THR:HG22	2.45	0.46
1:A:200:VAL:O	1:A:203:ASP:N	2.49	0.46
1:A:388:THR:HB	1:A:390:ALA:HB3	1.98	0.46
1:A:653:TYR:CE2	1:A:669:ALA:HB1	2.50	0.46
1:A:728:LYS:O	1:A:730:ALA:N	2.49	0.46
1:A:752:ALA:O	1:A:753:ILE:C	2.58	0.46
1:A:759:GLN:NE2	1:A:762:ARG:HH11	2.07	0.46
1:A:25:THR:O	1:A:27:ASP:N	2.49	0.46
1:A:404:SER:HG	1:A:452:MET:HB2	1.79	0.46
1:A:697:ILE:HA	1:A:715:GLU:HG2	1.98	0.46
1:A:748:GLU:HG3	1:A:817:MET:HG2	1.98	0.46
1:A:865:VAL:HG11	1:A:870:LEU:N	2.29	0.46
1:A:908:GLU:C	1:A:910:CYS:N	2.74	0.46
1:A:19:SER:C	1:A:21:THR:N	2.72	0.45
1:A:259:GLN:HB3	2:A:1995:AD4:H262	1.97	0.45
1:A:632:ALA:HB1	1:A:675:CYS:SG	2.55	0.45
1:A:687:ILE:O	1:A:689:GLU:N	2.49	0.45
1:A:319:LEU:HB3	1:A:336:LEU:HD13	1.99	0.45
1:A:18:VAL:HG22	1:A:150:ILE:HD11	1.99	0.45
1:A:259:GLN:O	1:A:262:LYS:N	2.49	0.45
1:A:260:LEU:O	1:A:264:ILE:HG13	2.15	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:277:GLY:C	1:A:279:PHE:N	2.73	0.45
1:A:809:PHE:N	1:A:809:PHE:CD1	2.81	0.45
1:A:916:LEU:HD12	1:A:927:PRO:HA	1.98	0.45
1:A:59:ASP:O	1:A:62:VAL:HG12	2.16	0.45
1:A:75:LEU:O	1:A:77:TRP:N	2.48	0.45
1:A:124:PRO:O	1:A:142:ALA:HB2	2.17	0.45
1:A:397:LYS:HB3	1:A:402:ILE:HD12	1.97	0.45
1:A:424:SER:O	1:A:437:VAL:HG12	2.17	0.45
1:A:771:GLU:O	1:A:774:CYS:HB3	2.17	0.45
1:A:803:PRO:O	1:A:807:LEU:HG	2.17	0.45
1:A:342:LEU:HD12	1:A:345:THR:CG2	2.47	0.45
1:A:549:ILE:HD13	1:A:596:VAL:HG21	1.99	0.45
1:A:563:ALA:O	1:A:564:LEU:HD23	2.17	0.45
1:A:687:ILE:HG22	1:A:691:LEU:CD1	2.47	0.45
1:A:790:VAL:O	1:A:957:PHE:CE1	2.70	0.45
1:A:79:GLU:CD	1:A:79:GLU:N	2.75	0.45
1:A:325:ARG:NH1	1:A:753:ILE:CD1	2.78	0.45
1:A:351:ASP:OD2	1:A:701:THR:O	2.35	0.45
1:A:352:LYS:NZ	1:A:627:ASP:HB2	2.31	0.45
1:A:400:LYS:O	1:A:400:LYS:HG3	2.16	0.45
1:A:747:VAL:HG12	1:A:747:VAL:O	2.17	0.45
1:A:751:ARG:NH1	1:A:819:ARG:O	2.45	0.45
1:A:174:ARG:HA	1:A:174:ARG:HD3	1.65	0.45
1:A:235:ILE:C	1:A:237:ASP:N	2.75	0.45
1:A:760:PHE:C	1:A:760:PHE:HD1	2.24	0.45
1:A:872:HIS:C	1:A:874:MET:H	2.23	0.45
1:A:915:SER:O	1:A:916:LEU:C	2.60	0.45
1:A:36:TYR:CG	1:A:147:PRO:HG2	2.52	0.45
1:A:85:ILE:HD12	1:A:85:ILE:O	2.16	0.45
1:A:153:VAL:HG12	1:A:214:ILE:HG12	1.99	0.45
1:A:50:TRP:HA	1:A:50:TRP:CE3	2.52	0.45
1:A:153:VAL:HG11	1:A:214:ILE:CG2	2.33	0.45
1:A:235:ILE:O	1:A:237:ASP:N	2.49	0.45
1:A:459:VAL:HA	1:A:462:LEU:HG	1.98	0.45
1:A:638:ARG:O	1:A:638:ARG:HD3	2.16	0.45
1:A:791:GLN:O	1:A:794:TRP:N	2.49	0.45
1:A:969:MET:O	1:A:973:ILE:HG13	2.17	0.45
1:A:259:GLN:O	1:A:261:SER:N	2.50	0.45
1:A:274:ILE:HD13	1:A:780:ALA:O	2.17	0.45
1:A:445:LEU:O	1:A:448:LEU:N	2.50	0.45
1:A:506:ALA:O	1:A:507:ALA:C	2.59	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:832:TRP:CH2	1:A:987:ILE:HG21	2.52	0.45
1:A:188:ILE:O	1:A:189:LYS:HD3	2.16	0.44
1:A:307:ILE:O	1:A:768:ASN:ND2	2.51	0.44
1:A:549:ILE:CD1	1:A:596:VAL:HG21	2.48	0.44
1:A:683:HIS:O	1:A:684:LYS:C	2.61	0.44
1:A:687:ILE:O	1:A:690:TYR:N	2.49	0.44
1:A:722:SER:OG	1:A:738:ASP:OD2	2.31	0.44
1:A:754:TYR:O	1:A:758:LYS:HB3	2.17	0.44
1:A:69:ALA:HB2	1:A:94:ILE:HG22	1.96	0.44
1:A:170:SER:HG	1:A:218:LYS:H	1.59	0.44
1:A:202:GLN:O	1:A:205:LYS:CE	2.66	0.44
1:A:202:GLN:O	1:A:205:LYS:HE2	2.17	0.44
1:A:450:GLU:CD	1:A:471:CYS:HB2	2.41	0.44
1:A:782:GLY:O	1:A:783:LEU:C	2.60	0.44
1:A:90:GLU:HG3	1:A:790:VAL:HG22	1.99	0.44
1:A:230:THR:O	1:A:231:GLU:C	2.60	0.44
1:A:421:ASN:OD1	1:A:423:SER:N	2.47	0.44
1:A:449:VAL:CG2	1:A:472:ASN:ND2	2.80	0.44
1:A:529:ARG:HH11	1:A:529:ARG:CG	2.30	0.44
1:A:926:PRO:HB2	1:A:928:TRP:CE3	2.52	0.44
1:A:174:ARG:NE	1:A:188:ILE:HG13	2.32	0.44
1:A:275:ASN:HB3	1:A:278:HIS:HD2	1.82	0.44
1:A:408:ASP:O	1:A:411:VAL:N	2.50	0.44
1:A:676:PHE:HB3	1:A:679:VAL:HG22	1.99	0.44
1:A:767:SER:O	1:A:771:GLU:HG3	2.17	0.44
1:A:459:VAL:HG21	1:A:467:ARG:NH2	2.33	0.44
1:A:485:LEU:HD13	1:A:584:PHE:CD1	2.53	0.44
1:A:767:SER:HB2	1:A:908:GLU:CD	2.42	0.44
1:A:900:ALA:CA	1:A:903:VAL:HG12	2.47	0.44
1:A:2:GLU:C	1:A:4:ALA:N	2.73	0.44
1:A:844:VAL:HG12	1:A:907:ILE:HG21	1.99	0.44
1:A:101:ASN:ND2	2:A:1995:AD4:H572	2.33	0.44
1:A:235:ILE:O	1:A:238:GLN:N	2.51	0.44
1:A:256:PHE:CE2	1:A:260:LEU:HD22	2.52	0.44
1:A:442:GLU:HG2	1:A:515:LYS:HZ1	1.82	0.44
1:A:611:ILE:HD13	1:A:740:PHE:CE2	2.53	0.44
1:A:48:SER:O	1:A:52:LEU:HG	2.18	0.44
1:A:577:VAL:C	1:A:579:ASP:H	2.25	0.44
1:A:174:ARG:HB2	1:A:216:ALA:N	2.33	0.44
1:A:307:ILE:O	1:A:309:GLU:OE1	2.36	0.44
1:A:368:ILE:HD13	1:A:410:LEU:CD2	2.43	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:759:GLN:C	1:A:761:ILE:N	2.74	0.44
1:A:802:LEU:N	1:A:803:PRO:HD2	2.33	0.44
1:A:810:ASN:HA	1:A:811:PRO:HD2	1.86	0.44
1:A:878:GLU:C	1:A:880:HIS:H	2.25	0.44
1:A:897:MET:CB	1:A:958:LYS:HE2	2.47	0.44
1:A:148:GLY:O	1:A:149:ASP:C	2.61	0.43
1:A:130:TYR:OH	1:A:137:VAL:HG22	2.18	0.43
1:A:151:VAL:HG12	1:A:152:GLU:N	2.33	0.43
1:A:188:ILE:N	1:A:188:ILE:CD1	2.81	0.43
1:A:433:VAL:HG12	1:A:434:TYR:H	1.83	0.43
1:A:903:VAL:O	1:A:907:ILE:HG13	2.18	0.43
1:A:304:VAL:O	1:A:304:VAL:HG23	2.16	0.43
1:A:352:LYS:HB3	1:A:352:LYS:HE2	1.86	0.43
1:A:417:CYS:O	1:A:421:ASN:HB2	2.18	0.43
1:A:606:GLU:CD	1:A:606:GLU:N	2.76	0.43
1:A:748:GLU:HA	1:A:817:MET:CE	2.48	0.43
1:A:870:LEU:O	1:A:870:LEU:HD12	2.18	0.43
1:A:276:ILE:O	1:A:277:GLY:C	2.62	0.43
1:A:903:VAL:HG21	1:A:973:ILE:HG21	2.00	0.43
1:A:367:PHE:CZ	1:A:545:ILE:HG23	2.44	0.43
1:A:447:THR:O	1:A:448:LEU:C	2.61	0.43
1:A:819:ARG:O	1:A:820:PRO:C	2.61	0.43
1:A:836:ARG:HG2	1:A:984:LEU:HB3	2.01	0.43
1:A:974:SER:O	1:A:975:LEU:C	2.61	0.43
1:A:977:VAL:O	1:A:978:ILE:C	2.60	0.43
1:A:58:GLU:HA	1:A:63:ARG:NH1	2.33	0.43
1:A:165:ILE:HD11	1:A:208:LEU:HD23	2.00	0.43
1:A:751:ARG:O	1:A:752:ALA:C	2.59	0.43
1:A:259:GLN:HE22	1:A:262:LYS:CE	2.31	0.43
1:A:294:TYR:HD2	1:A:295:TYR:CD1	2.36	0.43
1:A:455:PHE:HE2	1:A:475:ILE:HG12	1.83	0.43
1:A:521:VAL:HG23	1:A:522:ILE:N	2.33	0.43
1:A:557:ASP:HB3	1:A:559:LEU:HG	2.01	0.43
1:A:759:GLN:O	1:A:760:PHE:C	2.59	0.43
1:A:893:ALA:O	1:A:896:PRO:HG2	2.19	0.43
1:A:23:GLY:HA3	1:A:131:ARG:HA	2.00	0.43
1:A:147:PRO:HG3	1:A:226:THR:HB	2.01	0.43
1:A:319:LEU:CD2	1:A:757:MET:HE1	2.49	0.43
1:A:908:GLU:C	1:A:910:CYS:H	2.27	0.43
1:A:96:LEU:HA	1:A:99:ILE:HD12	2.01	0.43
1:A:347:VAL:HG22	1:A:620:ARG:CB	2.28	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:538:THR:OG1	1:A:541:VAL:CG2	2.62	0.43
1:A:654:THR:HG22	1:A:657:GLU:CB	2.48	0.43
1:A:677:ALA:O	1:A:678:ARG:HB2	2.18	0.43
1:A:751:ARG:HD2	1:A:817:MET:CE	2.49	0.43
1:A:967:TRP:HA	1:A:970:VAL:HG23	1.99	0.43
1:A:981:ASP:C	1:A:983:ILE:N	2.75	0.43
1:A:610:SER:OG	1:A:741:SER:HB2	2.19	0.43
1:A:974:SER:C	1:A:976:PRO:CD	2.92	0.43
1:A:133:ASP:OD1	1:A:133:ASP:N	2.52	0.42
1:A:143:ARG:HE	1:A:143:ARG:HB2	1.53	0.42
1:A:324:ARG:HG3	1:A:324:ARG:H	1.57	0.42
1:A:437:VAL:HG13	1:A:438:GLY:N	2.34	0.42
1:A:474:VAL:HG23	1:A:475:ILE:N	2.34	0.42
1:A:713:LYS:HB2	1:A:713:LYS:HE3	1.84	0.42
1:A:844:VAL:CG2	1:A:845:GLY:N	2.81	0.42
1:A:363:VAL:CG1	1:A:448:LEU:HD22	2.40	0.42
1:A:520:GLY:O	1:A:521:VAL:C	2.61	0.42
1:A:627:ASP:OD1	1:A:631:THR:HG21	2.19	0.42
1:A:683:HIS:C	1:A:685:SER:N	2.76	0.42
1:A:878:GLU:C	1:A:880:HIS:N	2.78	0.42
1:A:913:LEU:HD21	1:A:937:ILE:HD11	2.01	0.42
1:A:45:GLU:O	1:A:45:GLU:HG2	2.19	0.42
1:A:128:LYS:HB2	1:A:128:LYS:HE3	1.91	0.42
1:A:365:LYS:HB2	1:A:552:TRP:CZ3	2.55	0.42
1:A:449:VAL:HG21	1:A:472:ASN:ND2	2.34	0.42
1:A:577:VAL:HG23	1:A:583:ARG:HD3	2.01	0.42
1:A:637:ARG:HA	1:A:642:PHE:O	2.20	0.42
1:A:777:LEU:O	1:A:778:THR:C	2.62	0.42
1:A:900:ALA:C	1:A:903:VAL:HG12	2.44	0.42
1:A:984:LEU:CA	1:A:987:ILE:HG12	2.46	0.42
1:A:236:ARG:HG2	1:A:236:ARG:HH11	1.83	0.42
1:A:514:VAL:CG2	1:A:515:LYS:N	2.82	0.42
1:A:680:GLU:CB	1:A:681:PRO:CD	2.96	0.42
1:A:832:TRP:O	1:A:835:PHE:HB3	2.20	0.42
1:A:855:TRP:CZ3	1:A:896:PRO:HD3	2.54	0.42
1:A:967:TRP:O	1:A:970:VAL:HB	2.19	0.42
1:A:631:THR:O	1:A:632:ALA:C	2.61	0.42
1:A:50:TRP:HA	1:A:50:TRP:HE3	1.85	0.42
1:A:347:VAL:HG12	1:A:348:ILE:N	2.34	0.42
1:A:388:THR:C	1:A:390:ALA:N	2.75	0.42
1:A:558:THR:HG22	1:A:634:ALA:CB	2.48	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:737:ASP:C	1:A:739:ASN:H	2.27	0.42
1:A:50:TRP:O	1:A:54:ILE:HG13	2.20	0.42
1:A:56:GLN:HB3	1:A:102:ALA:HA	2.01	0.42
1:A:739:ASN:O	1:A:740:PHE:C	2.62	0.42
1:A:854:TRP:HE3	1:A:899:MET:HE2	1.84	0.42
1:A:893:ALA:C	1:A:896:PRO:HD2	2.45	0.42
1:A:901:LEU:O	1:A:901:LEU:CD2	2.67	0.42
1:A:951:ASP:HB2	1:A:952:PRO:HD3	2.02	0.42
1:A:379:LEU:N	1:A:379:LEU:CD1	2.83	0.42
1:A:400:LYS:O	1:A:401:PRO:C	2.60	0.42
1:A:550:LYS:O	1:A:554:THR:HB	2.19	0.42
1:A:959:LEU:HG	1:A:960:LYS:N	2.35	0.42
1:A:188:ILE:HG22	1:A:189:LYS:H	1.84	0.42
1:A:367:PHE:CD1	1:A:367:PHE:C	2.97	0.42
1:A:419:LEU:HD13	1:A:513:PHE:HE2	1.83	0.42
1:A:521:VAL:HG21	1:A:563:ALA:CB	2.46	0.42
1:A:802:LEU:O	1:A:936:SER:HB2	2.19	0.42
1:A:816:ILE:C	1:A:818:ASP:H	2.27	0.42
1:A:854:TRP:CH2	1:A:969:MET:HG2	2.54	0.42
1:A:857:MET:O	1:A:858:TYR:CG	2.73	0.42
1:A:170:SER:HB2	1:A:172:THR:O	2.20	0.42
1:A:188:ILE:H	1:A:188:ILE:CD1	2.32	0.42
1:A:679:VAL:HG13	1:A:683:HIS:HB2	2.01	0.42
1:A:699:ALA:HA	1:A:716:ILE:O	2.19	0.42
1:A:771:GLU:O	1:A:772:VAL:C	2.63	0.42
1:A:840:ILE:O	1:A:843:TYR:HB3	2.20	0.42
1:A:909:MET:HE3	1:A:937:ILE:CA	2.49	0.42
1:A:953:LEU:O	1:A:956:ILE:HB	2.20	0.42
1:A:353:THR:O	1:A:357:THR:O	2.38	0.41
1:A:521:VAL:CG2	1:A:522:ILE:N	2.83	0.41
1:A:577:VAL:O	1:A:579:ASP:N	2.53	0.41
1:A:865:VAL:HG21	1:A:869:GLN:CB	2.16	0.41
1:A:865:VAL:HG11	1:A:869:GLN:CA	2.47	0.41
1:A:872:HIS:O	1:A:874:MET:N	2.52	0.41
1:A:886:LEU:HG	1:A:887:ASP:N	2.35	0.41
1:A:104:VAL:O	1:A:108:GLN:HB2	2.19	0.41
1:A:174:ARG:HB2	1:A:216:ALA:H	1.84	0.41
1:A:511:LYS:HA	1:A:570:PRO:HG3	2.03	0.41
1:A:683:HIS:O	1:A:685:SER:N	2.53	0.41
1:A:759:GLN:O	1:A:762:ARG:N	2.54	0.41
1:A:9:THR:CG2	1:A:10:GLU:OE1	2.68	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:174:ARG:HH11	1:A:186:SER:HB2	1.84	0.41
1:A:307:ILE:CG2	2:A:1995:AD4:O1T	2.68	0.41
1:A:478:LEU:C	1:A:505:ARG:NE	2.79	0.41
1:A:479:MET:HE3	1:A:498:CYS:HB2	2.02	0.41
1:A:491:ARG:O	1:A:492:LYS:C	2.63	0.41
1:A:689:GLU:HG2	1:A:713:LYS:HZ1	1.85	0.41
1:A:848:THR:HB	1:A:900:ALA:HB1	2.02	0.41
1:A:128:LYS:HE3	1:A:152:GLU:O	2.20	0.41
1:A:359:ASN:CA	1:A:601:ASP:OD1	2.67	0.41
1:A:519:GLU:OE1	1:A:519:GLU:N	2.37	0.41
1:A:802:LEU:N	1:A:803:PRO:CD	2.83	0.41
1:A:880:HIS:O	1:A:884:GLU:O	2.38	0.41
1:A:969:MET:SD	1:A:972:LYS:HD2	2.59	0.41
2:A:1995:AD4:O1T	2:A:1995:AD4:H551	2.20	0.41
1:A:702:GLY:N	1:A:711:LEU:HD21	2.36	0.41
1:A:912:ALA:O	1:A:933:LEU:HD21	2.21	0.41
1:A:38:HIS:CD2	1:A:143:ARG:NH2	2.87	0.41
1:A:72:SER:CB	1:A:91:PRO:HB3	2.49	0.41
1:A:163:ILE:CG2	1:A:221:GLY:HA3	2.50	0.41
1:A:262:LYS:O	1:A:263:VAL:C	2.62	0.41
1:A:403:ARG:HB3	1:A:406:GLN:CG	2.50	0.41
1:A:416:ILE:HG21	1:A:564:LEU:HB3	2.03	0.41
1:A:810:ASN:ND2	1:A:916:LEU:HD23	2.36	0.41
1:A:889:GLU:O	1:A:889:GLU:CG	2.67	0.41
1:A:159:VAL:O	1:A:210:SER:HA	2.20	0.41
1:A:174:ARG:HB3	1:A:215:ALA:HB3	2.02	0.41
1:A:471:CYS:O	1:A:474:VAL:CG2	2.64	0.41
1:A:710:ALA:C	1:A:712:LYS:N	2.76	0.41
1:A:785:GLU:OE1	1:A:788:ILE:HD11	2.21	0.41
1:A:38:HIS:CG	1:A:143:ARG:HH21	2.39	0.41
1:A:253:LEU:HD13	2:A:1995:AD4:C47	2.50	0.41
1:A:577:VAL:C	1:A:579:ASP:N	2.79	0.41
1:A:580:ASP:O	1:A:582:SER:N	2.54	0.41
1:A:707:ASP:C	1:A:709:PRO:HD2	2.45	0.41
1:A:828:LEU:HD23	1:A:828:LEU:HA	1.83	0.41
1:A:65:LEU:HB3	1:A:98:LEU:HD11	2.03	0.41
1:A:149:ASP:N	1:A:149:ASP:OD1	2.52	0.41
1:A:169:LYS:HB2	1:A:218:LYS:O	2.20	0.41
1:A:310:GLY:O	1:A:311:LEU:C	2.63	0.41
1:A:361:MET:CB	1:A:444:ALA:HB2	2.51	0.41
1:A:370:ASP:HB3	1:A:378:SER:O	2.21	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:414:ALA:O	1:A:417:CYS:HB2	2.21	0.41
1:A:811:PRO:HA	1:A:812:PRO:HD3	1.90	0.41
1:A:872:HIS:HB3	1:A:875:GLN:NE2	2.26	0.41
1:A:770:GLY:O	1:A:771:GLU:C	2.62	0.41
1:A:894:PRO:O	1:A:898:THR:CG2	2.69	0.41
1:A:986:PHE:O	1:A:988:ALA:N	2.54	0.41
1:A:24:LEU:O	1:A:131:ARG:HB3	2.22	0.40
1:A:146:VAL:HG13	1:A:147:PRO:CD	2.51	0.40
1:A:524:ARG:HH11	1:A:588:GLU:HB2	1.86	0.40
1:A:788:ILE:HA	1:A:788:ILE:HD13	1.84	0.40
1:A:890:ILE:O	1:A:893:ALA:HB2	2.21	0.40
1:A:160:PRO:O	1:A:160:PRO:CG	2.69	0.40
1:A:239:MET:O	1:A:242:THR:CG2	2.69	0.40
1:A:300:VAL:O	1:A:304:VAL:HG13	2.21	0.40
1:A:340:GLU:O	1:A:343:GLY:N	2.54	0.40
1:A:408:ASP:O	1:A:410:LEU:N	2.54	0.40
1:A:692:GLN:HG2	1:A:715:GLU:OE2	2.21	0.40
1:A:797:LEU:HD23	1:A:797:LEU:HA	1.87	0.40
1:A:857:MET:HE3	1:A:866:THR:HA	2.02	0.40
1:A:884:GLU:N	1:A:884:GLU:CD	2.80	0.40
1:A:232:ILE:O	1:A:233:GLY:C	2.61	0.40
1:A:365:LYS:HB3	1:A:552:TRP:CH2	2.57	0.40
1:A:501:ALA:CB	1:A:505:ARG:NH2	2.84	0.40
1:A:651:ARG:O	1:A:673:ALA:HA	2.21	0.40
1:A:854:TRP:O	1:A:857:MET:N	2.52	0.40
1:A:951:ASP:O	1:A:952:PRO:C	2.60	0.40
1:A:180:LEU:C	1:A:180:LEU:CD1	2.94	0.40
1:A:295:TYR:O	1:A:298:ILE:HG22	2.21	0.40
1:A:788:ILE:HG23	1:A:789:PRO:CD	2.47	0.40
1:A:838:MET:HE1	2:A:1995:AD4:H141	2.04	0.40
1:A:959:LEU:HG	1:A:960:LYS:H	1.87	0.40
1:A:57:PHE:CD1	1:A:57:PHE:N	2.89	0.40
1:A:150:ILE:N	1:A:150:ILE:CD1	2.76	0.40
1:A:189:LYS:HE3	1:A:207:MET:O	2.22	0.40
1:A:388:THR:HG22	1:A:389:TYR:H	1.87	0.40
1:A:467:ARG:O	1:A:467:ARG:NH1	2.55	0.40
1:A:535:VAL:CG1	1:A:536:PRO:N	2.85	0.40
1:A:562:LEU:O	1:A:596:VAL:HA	2.21	0.40
1:A:628:ASN:HB3	1:A:678:ARG:HH21	1.85	0.40
1:A:636:CYS:O	1:A:639:ILE:HG12	2.22	0.40
1:A:735:LEU:HD22	1:A:742:THR:CG2	2.51	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:822:ARG:HG2	1:A:823:SER:N	2.36	0.40
1:A:824:PRO:HD2	1:A:825:LYS:H	1.86	0.40
1:A:968:LEU:HA	1:A:968:LEU:HD23	1.82	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	992/994 (100%)	760 (77%)	164 (16%)	68 (7%)	1 7

All (68) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	182	GLY
1	A	281	ASP
1	A	337	PRO
1	A	374	GLY
1	A	502	LYS
1	A	509	GLY
1	A	581	SER
1	A	605	LYS
1	A	878	GLU
1	A	882	HIS
1	A	76	ALA
1	A	178	SER
1	A	278	HIS
1	A	289	ILE
1	A	453	ASN
1	A	463	SER
1	A	507	ALA
1	A	606	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	633	ILE
1	A	645	ASN
1	A	965	THR
1	A	993	GLU
1	A	120	LYS
1	A	134	ARG
1	A	142	ALA
1	A	161	ALA
1	A	248	PRO
1	A	288	TRP
1	A	353	THR
1	A	578	LEU
1	A	635	ILE
1	A	663	LEU
1	A	711	LEU
1	A	729	THR
1	A	916	LEU
1	A	309	GLU
1	A	330	ASN
1	A	489	ARG
1	A	520	GLY
1	A	634	ALA
1	A	725	ALA
1	A	738	ASP
1	A	811	PRO
1	A	822	ARG
1	A	862	GLY
1	A	905	VAL
1	A	975	LEU
1	A	149	ASP
1	A	486	GLU
1	A	705	VAL
1	A	861	ASP
1	A	201	ASN
1	A	644	GLU
1	A	664	ALA
1	A	684	LYS
1	A	803	PRO
1	A	816	ILE
1	A	26	PRO
1	A	263	VAL
1	A	416	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	865	VAL
1	A	264	ILE
1	A	824	PRO
1	A	409	GLY
1	A	978	ILE
1	A	42	PRO
1	A	521	VAL
1	A	681	PRO

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	840/840 (100%)	783 (93%)	57 (7%)	14	42

All (57) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	25	THR
1	A	26	PRO
1	A	49	LEU
1	A	65	LEU
1	A	74	VAL
1	A	85	ILE
1	A	136	SER
1	A	146	VAL
1	A	152	GLU
1	A	170	SER
1	A	188	ILE
1	A	191	THR
1	A	208	LEU
1	A	214	ILE
1	A	242	THR
1	A	246	LYS
1	A	300	VAL
1	A	304	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	316	THR
1	A	341	THR
1	A	344	CYS
1	A	367	PHE
1	A	396	LEU
1	A	437	VAL
1	A	441	THR
1	A	447	THR
1	A	462	LEU
1	A	486	GLU
1	A	554	THR
1	A	569	THR
1	A	577	VAL
1	A	578	LEU
1	A	592	THR
1	A	596	VAL
1	A	597	VAL
1	A	606	GLU
1	A	616	ASP
1	A	621	VAL
1	A	627	ASP
1	A	635	ILE
1	A	638	ARG
1	A	666	GLN
1	A	698	THR
1	A	760	PHE
1	A	767	SER
1	A	778	THR
1	A	805	THR
1	A	816	ILE
1	A	844	VAL
1	A	870	LEU
1	A	875	GLN
1	A	895	GLU
1	A	898	THR
1	A	943	LEU
1	A	964	LEU
1	A	981	ASP
1	A	990	ASN

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (20) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	5	HIS
1	A	38	HIS
1	A	111	ASN
1	A	177	GLN
1	A	244	GLN
1	A	251	GLN
1	A	259	GLN
1	A	278	HIS
1	A	398	ASN
1	A	461	ASN
1	A	526	ASN
1	A	628	ASN
1	A	683	HIS
1	A	692	GLN
1	A	759	GLN
1	A	791	GLN
1	A	796	ASN
1	A	868	HIS
1	A	875	GLN
1	A	919	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](#)

Of 5 ligands modelled in this entry, 3 are monoatomic - leaving 2 for Mogul analysis.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the Chemical Component Dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond

length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
3	ACP	A	1996	4	31,33,33	2.05	8 (25%)	47,52,52	1.90	13 (27%)
2	AD4	A	1995	-	60,64,64	1.71	14 (23%)	67,92,92	2.01	15 (22%)

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
3	ACP	A	1996	4	-	7/19/38/38	0/3/3/3
2	AD4	A	1995	-	-	24/50/116/116	0/3/3/3

All (22) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
3	A	1996	ACP	PB-O3A	6.78	1.65	1.58
2	A	1995	AD4	O4-C21	5.46	1.32	1.21
2	A	1995	AD4	O3-C3	4.28	1.52	1.44
3	A	1996	ACP	PB-O2B	-3.83	1.47	1.56
2	A	1995	AD4	O6-C7	3.54	1.48	1.43
3	A	1996	ACP	C5-N7	-3.28	1.33	1.39
2	A	1995	AD4	O1-C13	3.13	1.43	1.34
3	A	1996	ACP	C1'-N9	3.12	1.55	1.46
2	A	1995	AD4	C34-C11	3.09	1.57	1.53
2	A	1995	AD4	O7-C27	3.05	1.42	1.34
2	A	1995	AD4	C31-C10	2.87	1.58	1.52
2	A	1995	AD4	C11-C7	2.72	1.59	1.55
2	A	1995	AD4	C9-C10	2.72	1.58	1.54
2	A	1995	AD4	O11-C11	2.71	1.47	1.42
2	A	1995	AD4	C21-C22	2.70	1.58	1.50
3	A	1996	ACP	PG-O2G	-2.66	1.49	1.55
2	A	1995	AD4	O2T-C53	2.31	1.39	1.34
2	A	1995	AD4	C9-C8	2.25	1.55	1.52
3	A	1996	ACP	C3'-C4'	-2.22	1.47	1.53
3	A	1996	ACP	C4-N3	2.17	1.38	1.34
3	A	1996	ACP	C2-N1	2.09	1.37	1.33
2	A	1995	AD4	C1-C2	2.00	1.57	1.54

All (28) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	A	1995	AD4	O2T-C53-N1T	7.11	120.09	110.00
2	A	1995	AD4	C10-O9-C32	6.01	135.44	121.36
2	A	1995	AD4	C56-O2T-C53	-5.06	113.29	120.97
3	A	1996	ACP	O5'-C5'-C4'	5.01	126.05	108.99
3	A	1996	ACP	O3G-PG-C3B	-4.22	96.16	106.40
3	A	1996	ACP	C5'-C4'-C3'	-4.21	100.04	115.21
2	A	1995	AD4	O2T-C53-O1T	-4.04	118.47	125.64
3	A	1996	ACP	N3-C2-N1	-3.81	122.82	128.58
2	A	1995	AD4	C7-C6-C5	3.43	124.43	115.41
2	A	1995	AD4	C24-C22-C21	3.39	133.50	120.79
2	A	1995	AD4	O12-C12-C11	-3.34	124.90	128.28
2	A	1995	AD4	C6-O5-C12	-3.31	106.21	110.80
3	A	1996	ACP	PB-O3A-PA	3.09	142.47	132.37
2	A	1995	AD4	O5-C12-O12	3.03	125.52	121.60
2	A	1995	AD4	C2-O1-C13	-3.00	112.71	117.59
3	A	1996	ACP	O2A-PA-O5'	2.99	121.12	107.57
3	A	1996	ACP	C6-C5-C4	-2.83	113.31	117.18
2	A	1995	AD4	C23-C22-C21	-2.80	108.93	116.12
2	A	1995	AD4	O1-C2-C3	-2.79	104.92	110.18
3	A	1996	ACP	O2B-PB-C3B	2.68	117.82	106.73
2	A	1995	AD4	C26-C4-C3	-2.35	117.32	121.24
2	A	1995	AD4	O1T-C53-N1T	-2.32	121.44	124.93
3	A	1996	ACP	O1B-PB-C3B	-2.19	103.28	109.05
3	A	1996	ACP	N9-C8-N7	2.18	117.03	113.94
3	A	1996	ACP	O2G-PG-C3B	2.13	111.57	106.40
3	A	1996	ACP	C4-C5-N7	2.05	112.93	110.58
3	A	1996	ACP	C1'-N9-C8	2.04	131.63	127.09
2	A	1995	AD4	O7-C27-O8	2.01	128.40	123.70

There are no chirality outliers.

All (31) torsion outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
3	A	1996	ACP	C5'-O5'-PA-O1A
3	A	1996	ACP	C5'-O5'-PA-O2A
3	A	1996	ACP	C5'-O5'-PA-O3A
2	A	1995	AD4	C33-C32-O9-C10
2	A	1995	AD4	O10-C32-O9-C10
2	A	1995	AD4	C27-C28-C29-C30
2	A	1995	AD4	C30-C45-C46-C47
2	A	1995	AD4	C14-C13-O1-C2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
2	A	1995	AD4	C47-C48-C49-C50
2	A	1995	AD4	C16-C17-C18-C19
2	A	1995	AD4	O2-C13-O1-C2
2	A	1995	AD4	C15-C16-C17-C18
2	A	1995	AD4	C13-C14-C15-C16
2	A	1995	AD4	C46-C47-C48-C49
2	A	1995	AD4	C14-C15-C16-C17
2	A	1995	AD4	C17-C18-C19-C20
2	A	1995	AD4	O2T-C53-N1T-C52
3	A	1996	ACP	O4'-C4'-C5'-O5'
2	A	1995	AD4	C45-C46-C47-C48
2	A	1995	AD4	O4-C21-C22-C23
2	A	1995	AD4	O1T-C53-N1T-C52
3	A	1996	ACP	C2'-C1'-N9-C8
2	A	1995	AD4	C28-C29-C30-C45
2	A	1995	AD4	C49-C50-C51-C52
2	A	1995	AD4	O3-C21-C22-C23
2	A	1995	AD4	C48-C49-C50-C51
3	A	1996	ACP	C2'-C1'-N9-C4
2	A	1995	AD4	O4-C21-C22-C24
2	A	1995	AD4	O3-C21-C22-C24
2	A	1995	AD4	C29-C30-C45-C46
3	A	1996	ACP	O4'-C1'-N9-C8

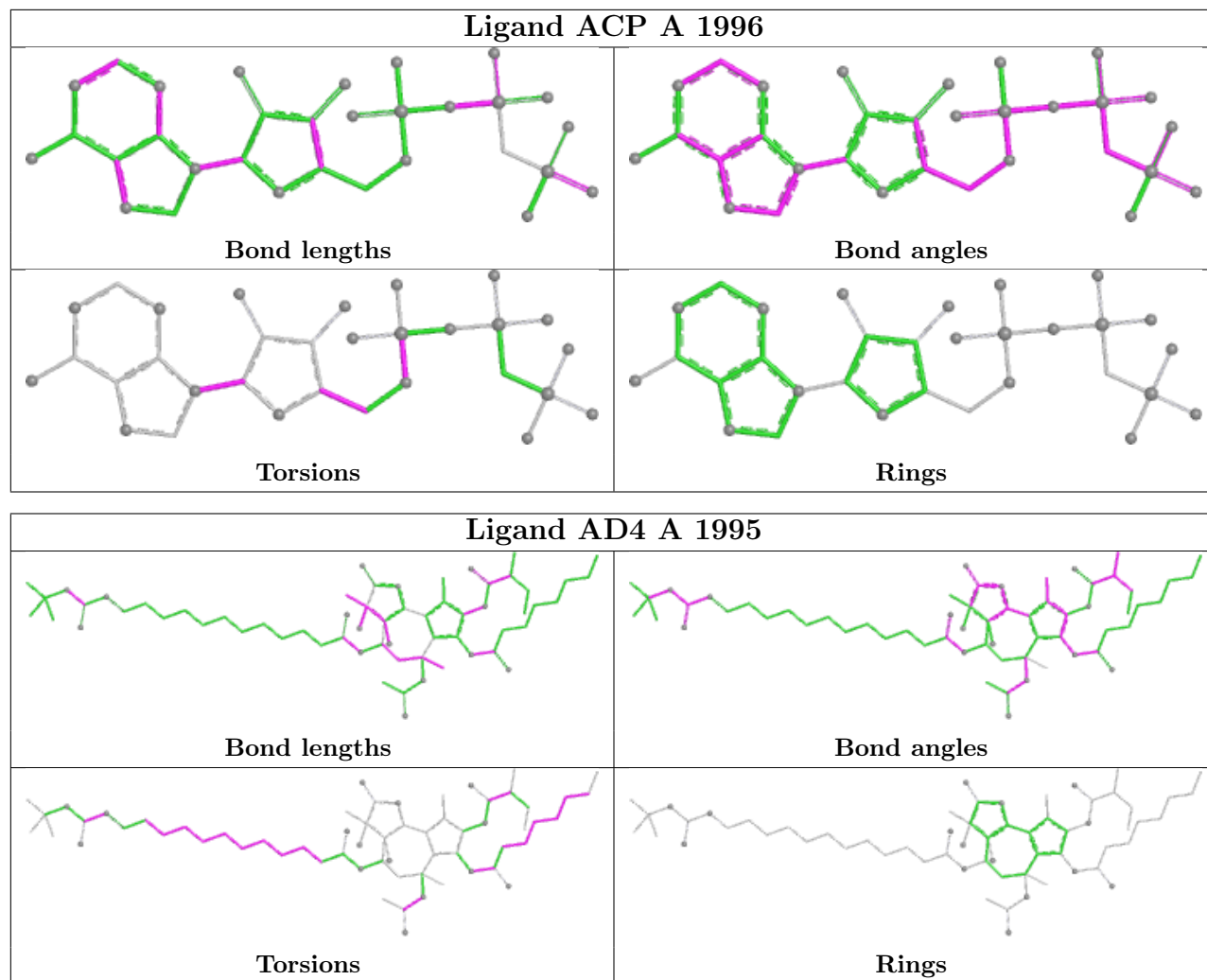
There are no ring outliers.

2 monomers are involved in 21 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
3	A	1996	ACP	8	0
2	A	1995	AD4	13	0

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less than 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient

equivalents in the CSD to analyse the geometry.



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 [i](#)

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

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	994/994 (100%)	-0.37	9 (0%) 81 65	32, 71, 140, 188	0

All (9) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	186	SER	2.5
1	A	959	LEU	2.4
1	A	506	ALA	2.4
1	A	284	HIS	2.3
1	A	84	THR	2.3
1	A	992	LEU	2.2
1	A	964	LEU	2.1
1	A	505	ARG	2.1
1	A	285	GLY	2.1

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](#)

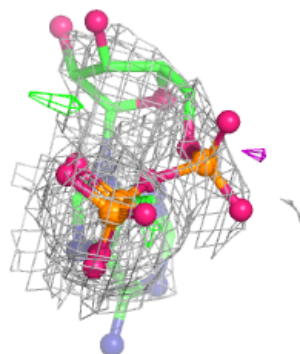
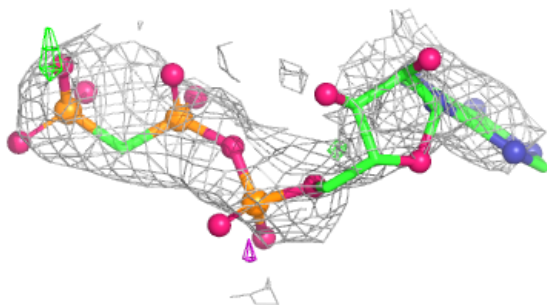
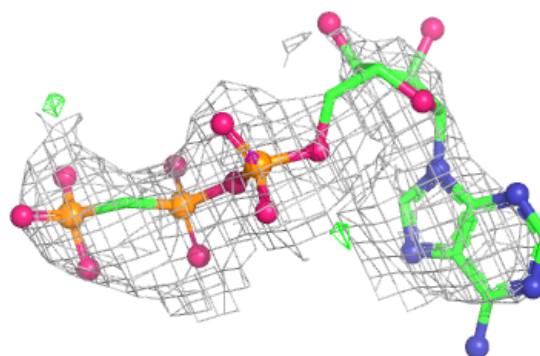
In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. The B-factors column lists the minimum, median, 95th percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled ‘Q< 0.9’ lists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

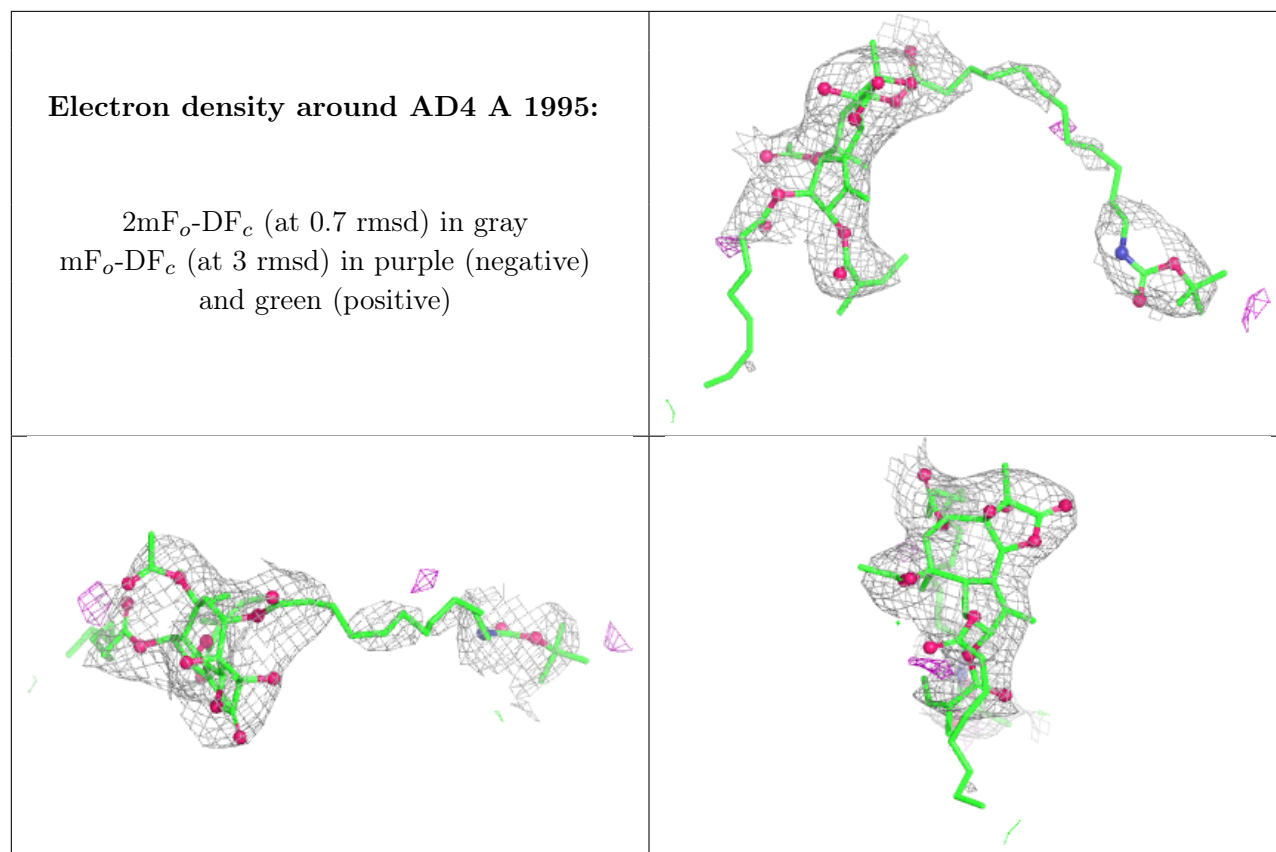
Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
4	MG	A	1997	1/1	0.71	0.12	69,69,69,69	1
5	NA	A	1999	1/1	0.74	0.18	49,49,49,49	0
3	ACP	A	1996	31/31	0.84	0.13	68,69,75,76	31
4	MG	A	1998	1/1	0.87	0.30	67,67,67,67	0
2	AD4	A	1995	62/62	0.92	0.11	68,71,73,76	0

The following is a graphical depiction of the model fit to experimental electron density of all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the geometry validation Tables will also be included. Each fit is shown from different orientation to approximate a three-dimensional view.

Electron density around ACP A 1996:

2mF_o-DF_c (at 0.7 rmsd) in gray
mF_o-DF_c (at 3 rmsd) in purple (negative)
and green (positive)





6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.