



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 20, 2026 – 11:11 AM UTC

PDB ID : 7D8C / pdb_00007d8c
Title : Crystal structure of the Cas12i1-crRNA binary complex
Authors : Zhang, B.; Luo, D.Y.; Li, Y.; OuYang, S.Y.
Deposited on : 2020-10-07
Resolution : 3.60 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
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

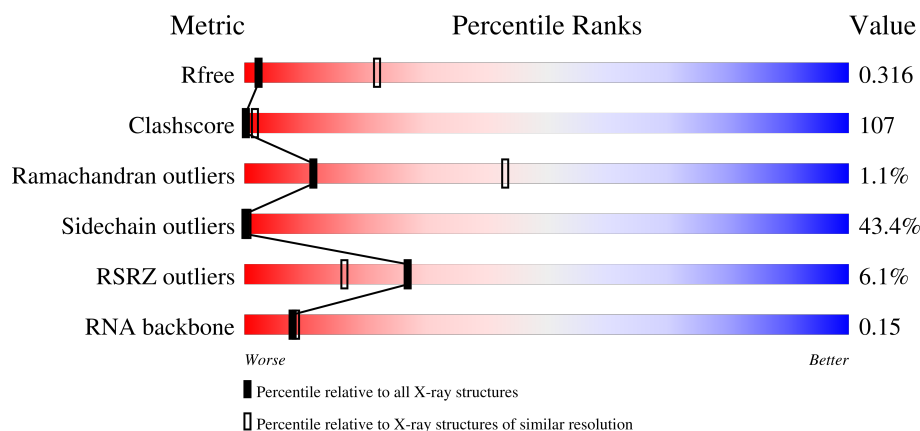
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.60 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	1747 (3.70-3.50)
Clashscore	190562	1827 (3.70-3.50)
Ramachandran outliers	187476	1773 (3.70-3.50)
Sidechain outliers	187428	1772 (3.70-3.50)
RSRZ outliers	180081	1745 (3.70-3.50)
RNA backbone	3983	1014 (4.14-3.06)

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	1101	
2	B	44	
3	C	3	

The following table lists non-polymeric compounds, carbohydrate monomers and non-standard

residues in protein, DNA, RNA chains that are outliers for geometric or electron-density-fit criteria:

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
4	CIT	A	1201	-	-	X	-

2 Entry composition [i](#)

There are 4 unique types of molecules in this entry. The entry contains 9441 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 12i1.

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S	Se			
1	A	1057	8557	5453	1473	1593	12	26	0	0	0

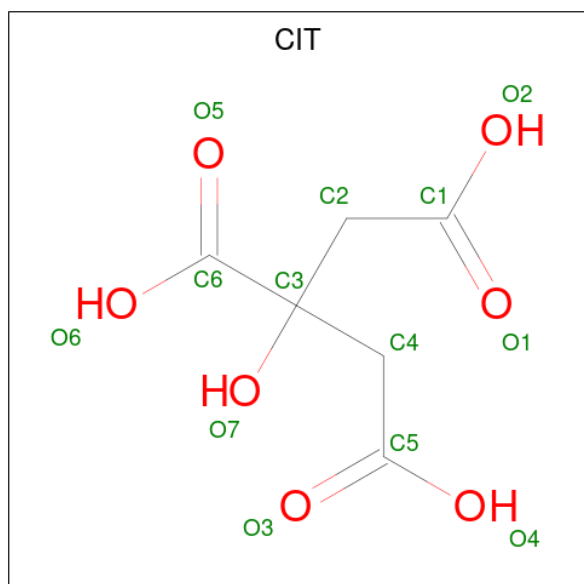
- Molecule 2 is a RNA chain called RNA (38-MER).

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	P			
2	B	38	807	361	139	269	38	0	0	0

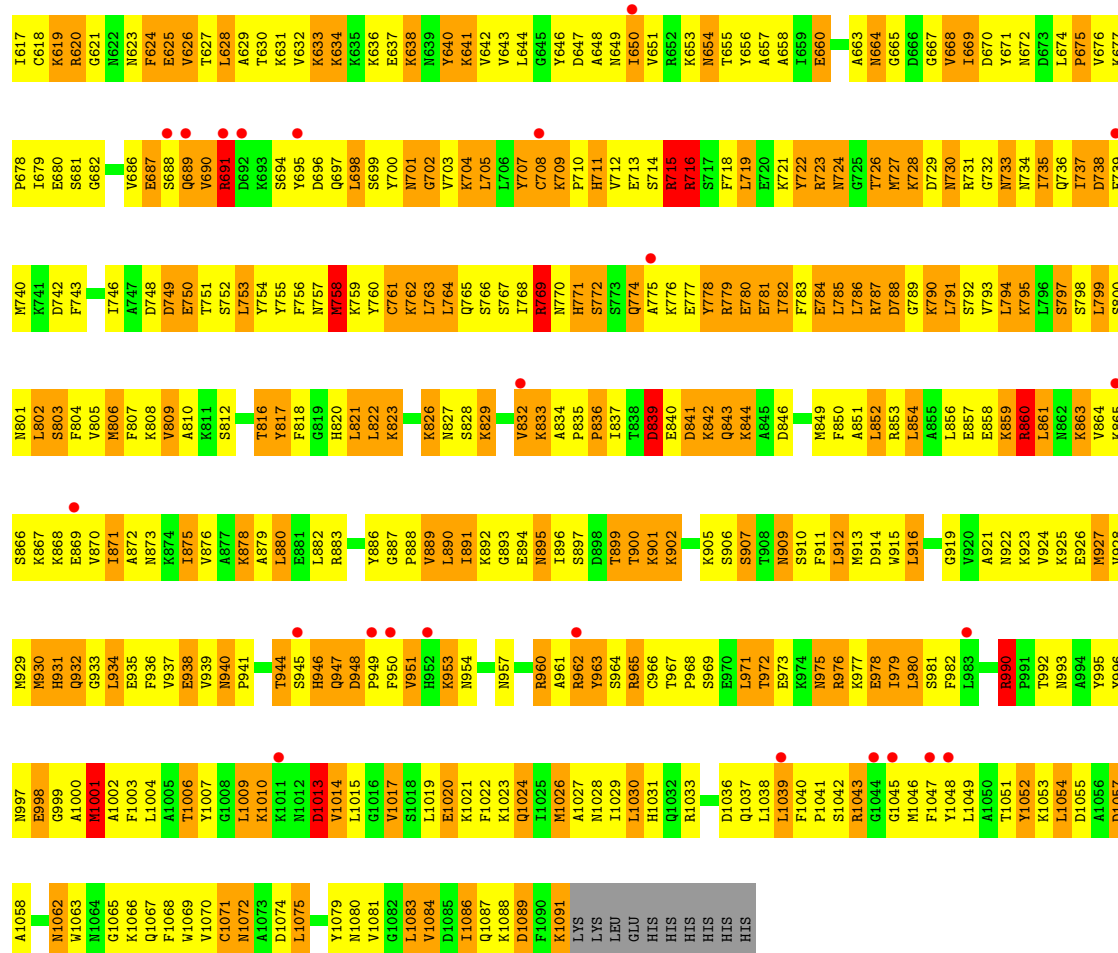
- Molecule 3 is a RNA chain called RNA (3-MER).

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	P			
3	C	3	64	29	12	20	3	0	0	0

- Molecule 4 is CITRIC ACID (CCD ID: CIT) (formula: C₆H₈O₇).



Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
4	A	1	Total	C	O	0	0
			13	6	7		



• Molecule 2: RNA (38-MER)



• Molecule 3: RNA (3-MER)



4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 63 2 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	211.93Å 211.93Å 164.76Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	57.42 – 3.60 57.42 – 3.60	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.8 (57.42-3.60) 99.9 (57.42-3.60)	Depositor EDS
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	3.21 (at 3.57Å)	Xtriage
Refinement program	REFMAC 5.8.0222	Depositor
R, R_{free}	0.280 , 0.308 0.285 , 0.316	Depositor DCC
R_{free} test set	1290 reflections (5.00%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	129.3	Xtriage
Anisotropy	0.045	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.36 , 216.2	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.44$, $\langle L^2 \rangle = 0.26$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.88	EDS
Total number of atoms	9441	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	144.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 4.06% 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: CIT

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	0.91	0/8706	1.28	18/11669 (0.2%)
2	B	0.63	0/901	1.05	8/1401 (0.6%)
3	C	0.59	0/71	1.19	2/108 (1.9%)
All	All	0.89	0/9678	1.26	28/13178 (0.2%)

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

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	30

There are no bond length outliers.

All (28) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	B	3	U	C2'-C3'-O3'	-7.21	102.88	113.70
1	A	464	GLN	N-CA-C	-6.97	99.34	109.59
1	A	803	SER	CA-C-N	-6.67	110.65	120.38
1	A	803	SER	C-N-CA	-6.67	110.65	120.38
1	A	839	ASP	N-CA-C	-6.49	104.55	113.18
3	C	3	U	C1'-C2'-O2'	6.20	117.70	108.40
1	A	1028	ASN	N-CA-C	-6.12	104.61	111.28
1	A	136	GLU	N-CA-C	-5.95	104.79	111.28
1	A	930	MSE	N-CA-C	5.88	118.64	111.82
1	A	123	THR	N-CA-C	-5.86	105.39	112.54
1	A	1001	MSE	N-CA-C	-5.80	104.87	111.07
2	B	21	C	C4'-C3'-O3'	-5.78	104.33	113.00
2	B	19	G	C4'-C3'-O3'	-5.78	104.34	113.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	B	2	U	C4'-C3'-O3'	5.73	118.00	109.40
1	A	758	MSE	N-CA-C	-5.71	104.69	111.03
1	A	702	GLY	CA-C-O	-5.60	118.28	122.37
1	A	1013	ASP	CA-C-N	-5.56	114.50	122.84
1	A	1013	ASP	C-N-CA	-5.56	114.50	122.84
1	A	1013	ASP	N-CA-C	-5.38	105.81	112.38
1	A	809	VAL	N-CA-C	-5.37	105.14	110.62
1	A	968	PRO	N-CA-C	-5.19	107.38	113.86
2	B	28	A	C1'-C2'-O2'	5.14	116.11	108.40
3	C	3	U	C2'-C3'-O3'	-5.09	106.07	113.70
2	B	33	A	C3'-C2'-O2'	5.08	118.32	110.70
1	A	49	ASN	N-CA-C	-5.06	104.84	111.02
2	B	15	C	O4'-C4'-C3'	-5.05	101.05	106.10
2	B	14	U	C3'-C2'-O2'	-5.04	107.04	114.60
1	A	1001	MSE	N-CA-CB	-5.03	102.72	110.01

There are no chirality outliers.

All (30) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	12	ARG	Sidechain
1	A	137	ARG	Sidechain
1	A	185	ARG	Sidechain
1	A	22	ARG	Sidechain
1	A	26	ARG	Sidechain
1	A	272	ARG	Sidechain
1	A	402	ARG	Sidechain
1	A	434	ARG	Sidechain
1	A	439	ARG	Sidechain
1	A	503	ARG	Sidechain
1	A	523	ARG	Sidechain
1	A	535	ARG	Sidechain
1	A	558	ARG	Sidechain
1	A	57	ARG	Sidechain
1	A	586	ARG	Sidechain
1	A	591	ARG	Sidechain
1	A	594	ARG	Sidechain
1	A	599	ARG	Sidechain
1	A	691	ARG	Sidechain
1	A	715	ARG	Sidechain
1	A	716	ARG	Sidechain
1	A	723	ARG	Sidechain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	769	ARG	Sidechain
1	A	787	ARG	Sidechain
1	A	860	ARG	Sidechain
1	A	960	ARG	Sidechain
1	A	962	ARG	Sidechain
1	A	965	ARG	Sidechain
1	A	976	ARG	Sidechain
1	A	990	ARG	Sidechain

5.2 Too-close contacts

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in the chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes within the asymmetric unit, whereas Symm-Clashes lists symmetry-related clashes.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	8557	0	8630	1937	0
2	B	807	0	406	116	0
3	C	64	0	33	9	0
4	A	13	0	5	7	0
All	All	9441	0	9074	1977	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 107.

All (1977) 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:352:TYR:CE1	1:A:434:ARG:HB3	1.33	1.58
1:A:347:PHE:HB3	1:A:435:TYR:CD1	1.43	1.51
1:A:719:LEU:HD12	1:A:740:MSE:CE	1.43	1.45
1:A:711:HIS:CG	1:A:791:LEU:HD21	1.54	1.42
1:A:116:TYR:CE1	1:A:128:TRP:HZ3	1.42	1.37
1:A:418:CYS:SG	1:A:430:VAL:HG23	1.66	1.35
1:A:296:TYR:HB2	1:A:301:TYR:CE2	1.62	1.35
1:A:906:SER:HB2	1:A:909:ASN:ND2	1.39	1.34
1:A:510:ILE:HG23	1:A:541:TYR:CE2	1.67	1.28
1:A:895:ASN:HA	1:A:913:MSE:CE	1.60	1.28
1:A:895:ASN:CB	1:A:913:MSE:HE1	1.63	1.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:895:ASN:HA	1:A:913:MSE:SE	1.83	1.27
1:A:895:ASN:CA	1:A:913:MSE:HE1	1.65	1.25
1:A:350:SER:OG	1:A:351:PRO:HD2	1.15	1.25
1:A:54:GLY:HA3	1:A:135:TYR:CE2	1.71	1.24
1:A:64:ALA:HA	1:A:66:LYS:CE	1.67	1.24
1:A:719:LEU:CD1	1:A:740:MSE:HE1	1.68	1.24
1:A:739:PHE:CE2	1:A:767:SER:HA	1.71	1.23
1:A:357:THR:HG23	1:A:359:VAL:CG2	1.68	1.23
1:A:1054:LEU:HD12	1:A:1079:TYR:CD2	1.74	1.23
1:A:329:ALA:O	1:A:333:ILE:HB	1.37	1.23
1:A:711:HIS:CD2	1:A:791:LEU:CD2	2.23	1.22
1:A:511:TRP:CE3	1:A:530:ALA:HB2	1.75	1.21
1:A:539:GLU:O	1:A:558:ARG:HG2	1.36	1.21
1:A:711:HIS:CD2	1:A:791:LEU:HD21	1.76	1.21
1:A:739:PHE:HE2	1:A:767:SER:CA	1.53	1.20
1:A:1083:LEU:O	1:A:1086:ILE:HG22	1.37	1.20
1:A:116:TYR:HE1	1:A:128:TRP:CZ3	1.58	1.20
1:A:348:PHE:CE1	1:A:360:LYS:HA	1.76	1.19
1:A:873:ASN:ND2	2:B:22:A:H5''	1.55	1.19
1:A:41:THR:HB	1:A:304:MSE:O	1.39	1.18
1:A:56:ASP:N	1:A:59:ILE:HD12	1.56	1.18
1:A:367:HIS:O	1:A:368:ILE:HG12	1.02	1.18
1:A:352:TYR:CD1	1:A:434:ARG:HB3	1.80	1.17
1:A:347:PHE:CB	1:A:435:TYR:CD1	2.26	1.17
1:A:352:TYR:CE1	1:A:434:ARG:CB	2.27	1.16
1:A:486:GLY:CA	1:A:514:ILE:HG22	1.76	1.15
1:A:14:ALA:HA	1:A:629:ALA:HB2	1.19	1.15
1:A:282:MSE:HA	1:A:282:MSE:HE3	1.26	1.15
1:A:510:ILE:O	1:A:530:ALA:HB1	1.45	1.15
1:A:965:ARG:HA	1:A:1039:LEU:HB3	1.22	1.15
1:A:352:TYR:CD2	1:A:435:TYR:HB2	1.82	1.14
1:A:357:THR:CG2	1:A:359:VAL:HG23	1.77	1.14
1:A:486:GLY:HA2	1:A:514:ILE:HG22	1.27	1.14
1:A:535:ARG:HB2	2:B:7:G:C6	1.82	1.14
1:A:64:ALA:CA	1:A:66:LYS:HE2	1.76	1.13
1:A:570:LEU:CD1	1:A:574:GLN:HB2	1.76	1.13
1:A:906:SER:CB	1:A:909:ASN:HD21	1.59	1.13
1:A:17:THR:HG22	1:A:533:SER:CB	1.79	1.12
1:A:418:CYS:SG	1:A:430:VAL:CG2	2.36	1.12
1:A:367:HIS:O	1:A:368:ILE:CG1	1.97	1.12
1:A:574:GLN:NE2	1:A:593:MSE:HE3	1.64	1.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:667:GLY:O	1:A:677:LYS:HE3	1.48	1.11
1:A:758:MSE:HG3	1:A:759:LYS:N	1.44	1.11
1:A:34:MSE:HE2	1:A:617:ILE:HG22	1.31	1.11
1:A:797:SER:O	2:B:11:C:H5''	1.47	1.11
1:A:689:GLN:CB	2:B:20:G:H4'	1.79	1.10
1:A:350:SER:OG	1:A:351:PRO:CD	2.00	1.10
1:A:895:ASN:HB2	1:A:913:MSE:HE1	1.20	1.10
1:A:11:THR:HG21	1:A:929:MSE:HB3	1.11	1.10
1:A:56:ASP:CB	1:A:59:ILE:HD12	1.81	1.10
1:A:674:LEU:HD12	1:A:675:PRO:HD2	1.34	1.09
1:A:719:LEU:CD1	1:A:740:MSE:CE	2.24	1.09
1:A:843:GLN:HB2	1:A:850:PHE:CD2	1.87	1.09
1:A:1030:LEU:HD21	1:A:1038:LEU:HG	1.24	1.09
1:A:41:THR:CG2	1:A:304:MSE:HA	1.81	1.09
1:A:689:GLN:HB3	2:B:20:G:H4'	1.29	1.09
1:A:41:THR:HG22	1:A:304:MSE:CA	1.82	1.09
1:A:527:HIS:HD2	4:A:1201:CIT:O7	1.33	1.09
1:A:116:TYR:CE1	1:A:128:TRP:CZ3	2.34	1.09
1:A:1091:LYS:HE2	1:A:1091:LYS:HA	1.35	1.09
1:A:821:LEU:HD13	1:A:822:LEU:HD23	1.14	1.08
1:A:377:TRP:CD1	1:A:445:VAL:CG1	2.35	1.08
1:A:570:LEU:HB2	2:B:18:U:C4	1.89	1.08
1:A:637:GLU:HG3	1:A:933:GLY:CA	1.81	1.08
1:A:67:ASP:C	1:A:69:ILE:HD12	1.79	1.08
1:A:54:GLY:HA3	1:A:135:TYR:CD2	1.89	1.07
1:A:12:ARG:HB3	1:A:631:LYS:HA	1.37	1.07
1:A:485:LEU:CG	1:A:515:LYS:HD2	1.85	1.07
1:A:41:THR:HG22	1:A:304:MSE:HA	1.34	1.06
1:A:758:MSE:HG3	1:A:759:LYS:H	0.89	1.06
1:A:20:ILE:HG12	1:A:531:LEU:HA	1.30	1.06
1:A:637:GLU:HG3	1:A:933:GLY:HA2	1.32	1.06
1:A:1055:ASP:HB3	1:A:1058:ALA:HB2	1.36	1.06
1:A:41:THR:HG22	1:A:304:MSE:CB	1.86	1.05
1:A:177:PHE:CD1	1:A:286:LYS:HG3	1.91	1.05
1:A:790:LYS:H	1:A:790:LYS:HD2	1.21	1.05
1:A:367:HIS:C	1:A:368:ILE:HG12	1.76	1.05
1:A:510:ILE:HD13	1:A:536:PHE:CD2	1.91	1.05
1:A:177:PHE:HD1	1:A:286:LYS:HG3	1.13	1.05
1:A:895:ASN:HA	1:A:913:MSE:HE1	1.22	1.05
1:A:51:PHE:CE2	1:A:156:MSE:SE	2.60	1.04
1:A:440:LYS:HG3	1:A:441:ASP:N	1.70	1.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:718:PHE:CD1	1:A:781:GLU:HG3	1.92	1.04
1:A:63:THR:HG21	1:A:157:TYR:OH	1.55	1.04
1:A:11:THR:HG21	1:A:929:MSE:CB	1.88	1.04
1:A:11:THR:CG2	1:A:929:MSE:HB3	1.88	1.04
1:A:485:LEU:HG	1:A:515:LYS:HD2	1.39	1.04
1:A:965:ARG:CA	1:A:1039:LEU:HB3	1.88	1.03
1:A:51:PHE:HE2	1:A:156:MSE:SE	1.91	1.03
1:A:671:TYR:CZ	1:A:1083:LEU:CD1	2.40	1.03
1:A:19:MSE:HE2	1:A:27:MSE:HE1	1.38	1.03
1:A:83:MSE:HB2	1:A:84:PRO:HD2	1.36	1.03
1:A:513:GLU:HB2	1:A:528:HIS:CD2	1.93	1.03
1:A:553:LEU:H	1:A:553:LEU:HD12	1.20	1.03
2:B:9:G:C2	2:B:22:A:C2	2.47	1.03
1:A:873:ASN:HD22	2:B:22:A:H5"	1.04	1.03
1:A:125:LYS:O	1:A:126:HIS:HD2	1.39	1.03
1:A:156:MSE:HE1	1:A:162:ILE:HD11	1.37	1.03
2:B:9:G:N2	2:B:22:A:C4	2.27	1.03
1:A:67:ASP:N	1:A:69:ILE:CD1	2.22	1.02
1:A:347:PHE:CB	1:A:435:TYR:CG	2.42	1.02
1:A:739:PHE:CD2	1:A:767:SER:HB2	1.93	1.02
1:A:634:LYS:HE3	1:A:931:HIS:O	1.59	1.02
1:A:802:LEU:O	1:A:805:VAL:HB	1.59	1.02
1:A:711:HIS:CG	1:A:791:LEU:CD2	2.42	1.02
1:A:348:PHE:HE2	1:A:363:LEU:HD21	1.25	1.02
1:A:56:ASP:CB	1:A:59:ILE:CD1	2.37	1.02
1:A:960:ARG:NH2	1:A:1068:PHE:HE2	1.56	1.02
1:A:420:GLU:HA	1:A:423:LYS:CD	1.88	1.01
1:A:17:THR:HG22	1:A:533:SER:HB2	1.42	1.01
1:A:56:ASP:HB3	1:A:59:ILE:HG13	1.40	1.01
1:A:348:PHE:HE1	1:A:360:LYS:HA	1.06	1.01
1:A:719:LEU:HB3	1:A:740:MSE:CE	1.89	1.01
1:A:511:TRP:CE3	1:A:530:ALA:CB	2.44	1.01
1:A:41:THR:HG22	1:A:304:MSE:HG2	1.43	1.00
1:A:575:ILE:CG2	1:A:579:ARG:NH2	2.24	1.00
1:A:791:LEU:H	1:A:791:LEU:HD22	1.26	1.00
1:A:322:PHE:HE2	1:A:466:ILE:HD13	1.23	1.00
1:A:54:GLY:CA	1:A:135:TYR:CD2	2.45	1.00
1:A:41:THR:HG22	1:A:304:MSE:CG	1.92	1.00
1:A:83:MSE:CB	1:A:84:PRO:CD	2.40	1.00
1:A:420:GLU:CA	1:A:423:LYS:HD2	1.91	1.00
1:A:431:GLN:HE22	1:A:434:ARG:NH2	1.59	1.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:913:MSE:SE	1:A:941:PRO:HG3	2.11	0.99
1:A:589:LYS:HA	1:A:592:GLN:HE21	1.28	0.99
1:A:739:PHE:CE2	1:A:767:SER:CA	2.37	0.99
1:A:637:GLU:CG	1:A:933:GLY:HA2	1.90	0.99
1:A:546:SER:HB3	1:A:602:ASN:HD22	1.28	0.99
1:A:17:THR:CG2	1:A:533:SER:HB2	1.92	0.99
1:A:368:ILE:O	1:A:373:ILE:HB	1.63	0.99
1:A:740:MSE:HE2	1:A:740:MSE:HA	1.45	0.98
1:A:346:GLY:HA3	1:A:435:TYR:OH	1.61	0.98
1:A:719:LEU:HD12	1:A:740:MSE:HE1	1.01	0.98
1:A:56:ASP:HB3	1:A:59:ILE:CG1	1.92	0.98
1:A:778:TYR:O	1:A:782:ILE:HG13	1.62	0.98
1:A:85:ILE:HA	1:A:127:GLN:NE2	1.79	0.98
1:A:23:SER:HB2	1:A:26:ARG:HG3	1.44	0.98
1:A:347:PHE:HA	1:A:350:SER:HB3	1.45	0.97
1:A:1039:LEU:HD12	1:A:1039:LEU:H	1.27	0.97
2:B:9:G:N1	2:B:22:A:C6	2.32	0.97
1:A:420:GLU:HA	1:A:423:LYS:HD2	0.97	0.97
1:A:377:TRP:CD1	1:A:445:VAL:HG13	1.99	0.97
1:A:348:PHE:HZ	1:A:361:TRP:HD1	1.13	0.97
1:A:473:TYR:HE2	1:A:620:ARG:HG2	1.27	0.97
1:A:716:ARG:HB2	1:A:743:PHE:CZ	1.99	0.97
1:A:701:ASN:O	1:A:754:TYR:HB2	1.66	0.96
1:A:296:TYR:HA	1:A:301:TYR:CE1	1.99	0.96
1:A:945:SER:HB3	1:A:962:ARG:CZ	1.96	0.96
1:A:909:ASN:HB3	1:A:941:PRO:O	1.65	0.96
1:A:245:GLN:NE2	1:A:249:LEU:HD23	1.80	0.96
1:A:758:MSE:CG	1:A:759:LYS:N	2.27	0.96
1:A:83:MSE:CB	1:A:84:PRO:HD2	1.94	0.96
1:A:198:LEU:HD11	1:A:205:ILE:HB	1.48	0.96
1:A:343:ILE:CD1	1:A:443:ILE:HG13	1.96	0.96
1:A:821:LEU:CD1	1:A:822:LEU:HD23	1.95	0.95
1:A:296:TYR:HD2	1:A:301:TYR:CD2	1.83	0.95
1:A:696:ASP:HB3	1:A:699:SER:HB2	1.47	0.95
1:A:808:LYS:HE3	2:B:33:A:H5'	1.46	0.95
1:A:1030:LEU:HD11	1:A:1038:LEU:CD1	1.96	0.95
1:A:700:TYR:OH	1:A:703:VAL:HG12	1.65	0.95
1:A:739:PHE:HE2	1:A:767:SER:HA	0.80	0.95
1:A:925:LYS:HB2	1:A:936:PHE:CD2	2.02	0.94
1:A:511:TRP:CD2	1:A:530:ALA:HB2	2.01	0.94
1:A:979:ILE:HG13	1:A:980:LEU:HD13	1.49	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:156:MSE:HE2	1:A:162:ILE:CG1	1.97	0.94
1:A:478:PHE:HD2	1:A:485:LEU:O	1.49	0.94
1:A:689:GLN:HB2	2:B:20:G:O2'	1.67	0.94
1:A:14:ALA:HA	1:A:629:ALA:CB	1.97	0.94
1:A:455:LEU:HD11	1:A:459:HIS:HD2	1.31	0.94
1:A:774:GLN:HB3	1:A:777:GLU:HG3	1.47	0.94
1:A:1054:LEU:CD1	1:A:1079:TYR:CD2	2.50	0.94
1:A:79:TRP:O	1:A:131:MSE:HB2	1.66	0.93
1:A:834:ALA:HB1	1:A:835:PRO:HD2	1.49	0.93
1:A:439:ARG:HH21	1:A:439:ARG:HG2	1.31	0.93
1:A:1030:LEU:HD11	1:A:1038:LEU:HD12	1.47	0.93
1:A:326:GLN:HE21	1:A:326:GLN:HA	1.34	0.93
1:A:322:PHE:CE2	1:A:466:ILE:HD13	2.03	0.93
1:A:322:PHE:HE2	1:A:466:ILE:CD1	1.81	0.93
1:A:56:ASP:CA	1:A:59:ILE:HD12	1.98	0.92
1:A:67:ASP:C	1:A:69:ILE:CD1	2.42	0.92
1:A:156:MSE:HE2	1:A:162:ILE:HG13	1.51	0.92
1:A:895:ASN:HB2	1:A:913:MSE:CE	1.99	0.92
1:A:674:LEU:HD12	1:A:675:PRO:CD	1.98	0.92
1:A:352:TYR:CD1	1:A:434:ARG:CB	2.46	0.92
1:A:296:TYR:HB2	1:A:301:TYR:CZ	2.04	0.92
1:A:711:HIS:O	1:A:715:ARG:HD2	1.68	0.92
1:A:759:LYS:NZ	1:A:763:LEU:HD21	1.85	0.92
1:A:1026:MSE:HE3	1:A:1026:MSE:HA	1.51	0.92
1:A:348:PHE:CE2	1:A:363:LEU:HD21	2.04	0.92
1:A:411:CYS:HB2	1:A:731:ARG:O	1.70	0.91
1:A:817:TYR:CE1	1:A:849:MSE:HE2	2.04	0.91
1:A:473:TYR:CE2	1:A:620:ARG:CG	2.52	0.91
1:A:719:LEU:HB3	1:A:740:MSE:SE	2.21	0.91
1:A:728:LYS:HA	1:A:734:ASN:HA	1.50	0.91
1:A:872:ALA:O	1:A:876:VAL:HG23	1.69	0.91
1:A:387:TYR:CE1	1:A:391:ILE:HG13	2.06	0.91
1:A:762:LYS:NZ	2:B:34:U:H1'	1.86	0.91
1:A:1007:TYR:OH	1:A:1038:LEU:HD22	1.71	0.91
1:A:85:ILE:HA	1:A:127:GLN:HE21	1.32	0.91
1:A:347:PHE:HA	1:A:350:SER:CB	2.01	0.91
1:A:391:ILE:O	1:A:395:SER:HB3	1.69	0.91
1:A:510:ILE:HG23	1:A:541:TYR:CD2	2.06	0.91
1:A:722:TYR:HE2	1:A:778:TYR:CE1	1.87	0.91
1:A:473:TYR:CE2	1:A:620:ARG:HG2	2.05	0.90
1:A:357:THR:CG2	1:A:359:VAL:CG2	2.45	0.90

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:12:ARG:CB	1:A:631:LYS:HA	2.02	0.90
1:A:719:LEU:CG	1:A:740:MSE:HE1	2.01	0.90
1:A:996:TYR:HE2	1:A:1043:ARG:NH1	1.69	0.90
1:A:198:LEU:CD1	1:A:205:ILE:HB	2.01	0.90
1:A:527:HIS:CD2	4:A:1201:CIT:O7	2.23	0.90
1:A:718:PHE:CE1	1:A:781:GLU:HG3	2.06	0.90
1:A:17:THR:CG2	1:A:533:SER:CB	2.47	0.89
1:A:54:GLY:HA3	1:A:135:TYR:HE2	1.35	0.89
1:A:1004:LEU:HA	1:A:1009:LEU:HD12	1.53	0.89
1:A:911:PHE:CE2	2:B:32:A:N6	2.40	0.89
1:A:539:GLU:O	1:A:558:ARG:CG	2.20	0.89
1:A:633:LYS:H	1:A:633:LYS:HD2	1.36	0.89
1:A:315:MSE:HG2	1:A:469:VAL:HG13	1.52	0.89
1:A:48:TRP:HH2	1:A:176:MSE:SE	2.05	0.89
1:A:322:PHE:CE2	1:A:466:ILE:CD1	2.56	0.89
1:A:760:TYR:HD2	1:A:785:LEU:HD21	1.34	0.89
1:A:350:SER:HG	1:A:351:PRO:HD2	1.30	0.89
1:A:931:HIS:HB2	1:A:934:LEU:HD22	1.55	0.89
1:A:1091:LYS:HA	1:A:1091:LYS:CE	1.99	0.89
1:A:440:LYS:HZ2	1:A:441:ASP:HB3	1.37	0.89
1:A:56:ASP:HB3	1:A:59:ILE:CD1	2.03	0.88
1:A:535:ARG:HB2	2:B:7:G:O6	1.72	0.88
1:A:656:TYR:CD2	1:A:682:GLY:O	2.26	0.88
1:A:660:GLU:O	1:A:676:VAL:HB	1.73	0.88
1:A:404:LYS:O	1:A:407:GLN:HB3	1.73	0.88
1:A:347:PHE:HB3	1:A:435:TYR:CG	2.08	0.88
1:A:911:PHE:HE2	2:B:32:A:N6	1.70	0.88
1:A:928:VAL:HG13	1:A:934:LEU:HB3	1.56	0.88
1:A:449:ILE:O	1:A:452:ILE:HG12	1.74	0.88
1:A:555:ALA:CB	1:A:562:ASN:OD1	2.21	0.88
1:A:636:LYS:HE3	1:A:935:GLU:OE1	1.71	0.88
1:A:296:TYR:HB2	1:A:301:TYR:CD2	2.09	0.88
1:A:570:LEU:CB	2:B:18:U:C4	2.56	0.88
1:A:574:GLN:NE2	1:A:593:MSE:CE	2.35	0.88
1:A:1053:LYS:HD2	1:A:1069:TRP:CZ3	2.09	0.88
1:A:70:SER:CB	1:A:112:GLN:HG3	2.04	0.88
1:A:296:TYR:C	1:A:297:TYR:HD1	1.82	0.88
1:A:671:TYR:OH	1:A:1083:LEU:HD12	1.74	0.88
1:A:348:PHE:CE1	1:A:360:LYS:CA	2.55	0.88
1:A:708:CYS:O	1:A:708:CYS:SG	2.32	0.87
1:A:83:MSE:HB2	1:A:84:PRO:CD	2.00	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:298:LEU:O	1:A:302:SER:HB3	1.72	0.87
1:A:510:ILE:CD1	1:A:536:PHE:HD2	1.86	0.87
1:A:188:LYS:O	1:A:192:TYR:HB2	1.74	0.87
1:A:370:GLU:O	1:A:373:ILE:HG22	1.74	0.87
1:A:715:ARG:HD2	1:A:715:ARG:H	1.39	0.87
1:A:369:GLY:O	1:A:370:GLU:HG3	1.74	0.87
1:A:13:LYS:O	1:A:629:ALA:HB1	1.74	0.87
1:A:374:LYS:HZ2	1:A:990:ARG:HH21	1.22	0.87
1:A:431:GLN:HE22	1:A:434:ARG:HH21	1.18	0.87
1:A:347:PHE:HB2	1:A:435:TYR:CG	2.10	0.86
1:A:542:TYR:CD2	1:A:595:LEU:HG	2.09	0.86
1:A:762:LYS:HZ1	2:B:34:U:H1'	1.37	0.86
1:A:125:LYS:O	1:A:126:HIS:CD2	2.28	0.86
1:A:44:PHE:CE1	1:A:304:MSE:HE3	2.10	0.86
1:A:721:LYS:C	1:A:722:TYR:HD1	1.82	0.86
1:A:156:MSE:CE	1:A:162:ILE:HD11	2.04	0.86
1:A:296:TYR:O	1:A:297:TYR:CD1	2.28	0.86
1:A:570:LEU:HB2	2:B:18:U:N3	1.89	0.86
1:A:575:ILE:HG21	1:A:579:ARG:NH2	1.89	0.86
1:A:490:SER:HB3	1:A:493:ASP:OD2	1.76	0.86
1:A:736:GLN:OE1	1:A:736:GLN:N	2.07	0.86
1:A:960:ARG:CZ	1:A:1068:PHE:HE2	1.88	0.86
1:A:1000:ALA:O	1:A:1003:PHE:HB3	1.75	0.86
1:A:54:GLY:CA	1:A:135:TYR:HD2	1.87	0.85
1:A:208:VAL:CG1	1:A:211:LEU:HG	2.06	0.85
1:A:164:LEU:HD13	1:A:164:LEU:O	1.76	0.85
1:A:160:LYS:O	1:A:166:LEU:HA	1.75	0.85
1:A:977:LYS:HA	1:A:980:LEU:HD22	1.56	0.85
1:A:63:THR:HG21	1:A:157:TYR:CZ	2.12	0.85
1:A:73:LEU:HD22	1:A:73:LEU:O	1.76	0.85
1:A:722:TYR:HD2	1:A:778:TYR:OH	1.59	0.85
1:A:417:TYR:HE2	1:A:433:LEU:HD13	1.40	0.85
1:A:348:PHE:CZ	1:A:361:TRP:HD1	1.95	0.85
1:A:754:TYR:HE2	1:A:798:SER:H	1.23	0.85
1:A:960:ARG:CZ	1:A:1068:PHE:CE2	2.60	0.85
1:A:719:LEU:HD12	1:A:740:MSE:HE3	1.56	0.85
1:A:461:VAL:O	1:A:464:GLN:HG3	1.77	0.85
1:A:1030:LEU:HD21	1:A:1038:LEU:CG	2.07	0.85
1:A:575:ILE:HG22	1:A:579:ARG:NH2	1.90	0.84
1:A:895:ASN:CA	1:A:913:MSE:SE	2.74	0.84
1:A:963:TYR:HA	1:A:1041:PRO:HA	1.58	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1003:PHE:O	1:A:1006:THR:HG22	1.78	0.84
1:A:208:VAL:HG12	1:A:211:LEU:HG	1.59	0.84
1:A:722:TYR:CE2	1:A:778:TYR:CE1	2.64	0.84
1:A:758:MSE:CE	1:A:805:VAL:HG12	2.06	0.84
1:A:893:GLY:O	1:A:939:VAL:HG22	1.77	0.84
1:A:737:ILE:O	1:A:737:ILE:HD13	1.78	0.84
1:A:1030:LEU:CD2	1:A:1038:LEU:HG	2.05	0.84
1:A:352:TYR:CE2	1:A:435:TYR:HA	2.12	0.84
1:A:707:TYR:CD2	2:B:13:A:C6	2.66	0.84
1:A:207:SER:OG	1:A:247:TYR:CE2	2.31	0.84
1:A:478:PHE:CE2	1:A:514:ILE:HD12	2.13	0.84
1:A:56:ASP:HB2	1:A:59:ILE:CD1	2.06	0.84
1:A:88:LYS:HB2	1:A:89:PRO:HD3	1.60	0.83
1:A:361:TRP:CE3	2:B:32:A:O2'	2.29	0.83
1:A:1009:LEU:CD2	1:A:1029:ILE:HD13	2.08	0.83
1:A:739:PHE:CE2	1:A:767:SER:HB2	2.13	0.83
1:A:489:ILE:HD11	2:B:1:A:H62	1.43	0.83
1:A:315:MSE:CG	1:A:469:VAL:HG13	2.08	0.83
1:A:379:ASP:N	1:A:379:ASP:OD1	2.07	0.83
1:A:760:TYR:CD2	1:A:785:LEU:HD21	2.13	0.83
1:A:924:VAL:O	1:A:928:VAL:HG23	1.78	0.83
1:A:282:MSE:HA	1:A:282:MSE:CE	2.07	0.83
1:A:510:ILE:HD13	1:A:536:PHE:CE2	2.13	0.83
1:A:906:SER:CB	1:A:909:ASN:ND2	2.30	0.83
1:A:808:LYS:HE3	2:B:33:A:C5'	2.09	0.83
1:A:965:ARG:HA	1:A:1039:LEU:CB	2.05	0.83
1:A:80:PHE:HB3	1:A:130:ASP:HA	1.60	0.82
1:A:156:MSE:CE	1:A:162:ILE:CG1	2.57	0.82
1:A:130:ASP:HB3	1:A:133:VAL:HG23	1.60	0.82
1:A:637:GLU:CB	1:A:933:GLY:HA2	2.09	0.82
1:A:1024:GLN:C	1:A:1024:GLN:HE21	1.87	0.82
1:A:56:ASP:H	1:A:59:ILE:HD12	1.44	0.82
1:A:347:PHE:HB2	1:A:435:TYR:CB	2.09	0.82
1:A:41:THR:CG2	1:A:304:MSE:HG2	2.09	0.82
1:A:681:SER:OG	1:A:1075:LEU:HD22	1.79	0.82
1:A:161:CYS:O	1:A:162:ILE:HD13	1.80	0.82
1:A:329:ALA:O	1:A:333:ILE:CB	2.26	0.82
1:A:486:GLY:HA2	1:A:514:ILE:CG2	2.09	0.82
1:A:669:ILE:CG2	1:A:1052:TYR:CE2	2.62	0.82
1:A:707:TYR:HD2	2:B:13:A:N1	1.77	0.82
1:A:1007:TYR:CD1	1:A:1033:ARG:NH2	2.47	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:296:TYR:CD2	1:A:301:TYR:CD2	2.67	0.82
1:A:689:GLN:HB3	2:B:20:G:C4'	2.07	0.82
1:A:785:LEU:HD12	1:A:785:LEU:O	1.80	0.82
1:A:1002:ALA:O	1:A:1006:THR:HB	1.79	0.82
1:A:19:MSE:CE	1:A:27:MSE:HE1	2.10	0.82
1:A:373:ILE:O	1:A:376:LEU:HD23	1.79	0.82
1:A:573:GLU:O	1:A:577:GLN:HG2	1.79	0.82
1:A:91:GLY:HA2	1:A:129:LYS:HD3	1.59	0.81
1:A:196:ILE:O	1:A:199:LEU:HG	1.80	0.81
1:A:324:LEU:HD22	1:A:324:LEU:O	1.79	0.81
1:A:716:ARG:HB2	1:A:743:PHE:HZ	1.45	0.81
1:A:17:THR:OG1	1:A:531:LEU:HD12	1.79	0.81
1:A:206:ASN:O	1:A:206:ASN:ND2	2.13	0.81
1:A:826:LYS:HB3	1:A:829:LYS:HG2	1.62	0.81
1:A:439:ARG:HG2	1:A:439:ARG:NH2	1.92	0.81
1:A:207:SER:OG	1:A:247:TYR:HE2	1.63	0.81
1:A:478:PHE:CZ	1:A:514:ILE:HD12	2.16	0.81
1:A:711:HIS:CB	1:A:791:LEU:HD21	2.10	0.81
1:A:149:MSE:O	1:A:149:MSE:HE3	1.81	0.81
1:A:418:CYS:CB	1:A:430:VAL:HG23	2.10	0.81
1:A:54:GLY:CA	1:A:135:TYR:CE2	2.57	0.81
1:A:1001:MSE:HA	1:A:1001:MSE:HE3	1.61	0.81
1:A:396:GLU:HG3	1:A:398:LYS:HD2	1.61	0.81
1:A:975:ASN:OD1	1:A:975:ASN:N	2.13	0.81
1:A:318:LYS:HG2	1:A:467:ASN:ND2	1.95	0.81
1:A:352:TYR:HE1	1:A:434:ARG:HB3	1.03	0.81
1:A:637:GLU:CG	1:A:933:GLY:CA	2.54	0.81
1:A:169:ALA:HB1	1:A:305:LEU:HD23	1.62	0.80
1:A:440:LYS:HG3	1:A:441:ASP:H	1.43	0.80
1:A:973:GLU:N	1:A:1019:LEU:HD11	1.96	0.80
1:A:551:ASP:N	1:A:551:ASP:OD1	2.10	0.80
1:A:711:HIS:O	1:A:715:ARG:CD	2.29	0.80
1:A:473:TYR:CE2	1:A:620:ARG:HG3	2.16	0.80
1:A:9:SER:O	1:A:633:LYS:HA	1.80	0.80
1:A:546:SER:HB3	1:A:602:ASN:ND2	1.95	0.80
1:A:718:PHE:CD1	1:A:781:GLU:CG	2.65	0.80
1:A:1030:LEU:CD1	1:A:1038:LEU:CD1	2.60	0.80
1:A:51:PHE:CD2	1:A:156:MSE:SE	2.84	0.80
1:A:70:SER:HB2	1:A:112:GLN:HE21	1.47	0.80
1:A:478:PHE:CD2	1:A:485:LEU:O	2.34	0.80
1:A:38:MSE:O	1:A:42:PRO:HD3	1.82	0.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:510:ILE:HG23	1:A:541:TYR:HE2	1.46	0.80
1:A:574:GLN:HE22	1:A:593:MSE:HE3	1.42	0.80
1:A:637:GLU:HG2	1:A:933:GLY:H	1.46	0.80
1:A:764:LEU:HD12	1:A:764:LEU:O	1.81	0.80
1:A:1055:ASP:HB3	1:A:1071:CYS:HB3	1.64	0.80
1:A:44:PHE:CZ	1:A:304:MSE:HE3	2.18	0.79
1:A:1053:LYS:HD2	1:A:1069:TRP:CH2	2.16	0.79
1:A:310:SER:OG	3:C:2:A:H4'	1.82	0.79
1:A:398:LYS:HG2	1:A:399:LYS:N	1.95	0.79
1:A:12:ARG:HB3	1:A:631:LYS:CA	2.11	0.79
1:A:145:SER:HB2	1:A:148:ASP:HB2	1.61	0.79
1:A:296:TYR:C	1:A:297:TYR:CD1	2.59	0.79
1:A:802:LEU:O	1:A:802:LEU:HD12	1.82	0.79
1:A:518:ASN:HD21	1:A:525:GLU:CD	1.91	0.79
1:A:620:ARG:HG2	1:A:620:ARG:HH11	1.45	0.79
1:A:70:SER:HB3	1:A:112:GLN:HG3	1.65	0.79
1:A:79:TRP:CD1	1:A:132:ARG:HD3	2.18	0.79
1:A:506:VAL:HG11	1:A:599:ARG:HH11	1.47	0.79
1:A:199:LEU:HD12	1:A:200:GLU:N	1.97	0.79
1:A:444:ALA:HB3	1:A:447:LYS:HG2	1.65	0.79
1:A:634:LYS:HG3	1:A:932:GLN:HG2	1.63	0.79
1:A:1058:ALA:HB1	1:A:1070:VAL:O	1.83	0.79
1:A:214:ILE:O	1:A:218:ALA:HB3	1.82	0.79
1:A:377:TRP:CD1	1:A:445:VAL:HG11	2.17	0.79
1:A:619:LYS:HE2	1:A:621:GLY:O	1.82	0.79
1:A:697:GLN:O	1:A:799:LEU:HB2	1.83	0.79
1:A:678:PRO:HG3	1:A:950:PHE:CE1	2.18	0.79
1:A:930:MSE:HB2	1:A:931:HIS:CE1	2.18	0.79
1:A:190:GLN:NE2	1:A:190:GLN:HA	1.96	0.78
1:A:570:LEU:CD1	1:A:574:GLN:CB	2.59	0.78
1:A:1007:TYR:HB2	1:A:1009:LEU:HD11	1.64	0.78
1:A:1007:TYR:HD1	1:A:1033:ARG:NH2	1.81	0.78
1:A:510:ILE:CD1	1:A:536:PHE:CD2	2.60	0.78
1:A:539:GLU:C	1:A:558:ARG:HG2	2.09	0.78
1:A:348:PHE:HZ	1:A:361:TRP:CD1	2.01	0.78
1:A:439:ARG:HB3	1:A:442:ASP:HB3	1.65	0.78
1:A:711:HIS:CD2	1:A:791:LEU:HD23	2.19	0.78
1:A:198:LEU:HD22	1:A:205:ILE:HD12	1.63	0.78
1:A:739:PHE:CE2	1:A:767:SER:CB	2.65	0.78
1:A:1030:LEU:HG	1:A:1038:LEU:HD11	1.66	0.78
1:A:414:ILE:HG22	1:A:430:VAL:HG22	1.66	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:511:TRP:CD2	1:A:530:ALA:CB	2.66	0.78
1:A:570:LEU:HD12	1:A:574:GLN:HB2	1.65	0.78
1:A:671:TYR:CZ	1:A:1083:LEU:HD13	2.19	0.78
1:A:40:GLY:HA3	1:A:304:MSE:SE	2.34	0.78
1:A:63:THR:HG21	1:A:157:TYR:CE1	2.18	0.78
1:A:758:MSE:HE3	1:A:805:VAL:HG12	1.66	0.78
1:A:347:PHE:CZ	1:A:432:LEU:HD12	2.19	0.78
1:A:357:THR:HG23	1:A:359:VAL:HG23	0.85	0.78
1:A:198:LEU:HD22	1:A:205:ILE:CD1	2.14	0.77
1:A:15:TYR:HB2	1:A:628:LEU:O	1.84	0.77
1:A:47:LEU:O	1:A:50:GLN:HG3	1.84	0.77
1:A:719:LEU:CD1	1:A:740:MSE:HE3	2.10	0.77
1:A:906:SER:HB2	1:A:909:ASN:HD21	0.71	0.77
1:A:473:TYR:HD2	1:A:620:ARG:CZ	1.97	0.77
2:B:9:G:C2	2:B:22:A:N1	2.52	0.77
1:A:144:LEU:HD22	1:A:281:CYS:SG	2.25	0.77
1:A:524:TRP:CE3	1:A:524:TRP:HA	2.18	0.77
1:A:458:LYS:HD2	1:A:458:LYS:O	1.85	0.77
1:A:489:ILE:HD11	2:B:1:A:N6	1.99	0.77
1:A:585:LEU:HD21	1:A:589:LYS:HD2	1.67	0.77
1:A:722:TYR:CD2	1:A:778:TYR:OH	2.34	0.77
1:A:1040:PHE:HB2	1:A:1041:PRO:HD2	1.66	0.77
1:A:979:ILE:HG13	1:A:980:LEU:N	2.00	0.77
1:A:548:ASN:N	1:A:549:PRO:CD	2.48	0.77
1:A:663:ALA:C	1:A:664:ASN:HD22	1.93	0.77
1:A:749:ASP:OD1	1:A:749:ASP:N	2.14	0.77
1:A:960:ARG:NH2	1:A:1068:PHE:CE2	2.49	0.77
1:A:125:LYS:C	1:A:126:HIS:HD2	1.91	0.77
1:A:346:GLY:CA	1:A:435:TYR:OH	2.32	0.77
1:A:740:MSE:HE2	1:A:740:MSE:CA	2.15	0.77
1:A:965:ARG:HG3	1:A:1039:LEU:HG	1.66	0.77
1:A:347:PHE:HE2	1:A:363:LEU:HD11	1.50	0.77
1:A:347:PHE:HB3	1:A:435:TYR:CE1	2.17	0.76
1:A:1030:LEU:CD1	1:A:1038:LEU:HD12	2.15	0.76
1:A:352:TYR:CD2	1:A:435:TYR:CB	2.68	0.76
1:A:20:ILE:CG1	1:A:531:LEU:HA	2.14	0.76
1:A:343:ILE:HD11	1:A:443:ILE:HG13	1.67	0.76
1:A:347:PHE:HB2	1:A:435:TYR:HB3	1.68	0.76
1:A:449:ILE:O	1:A:452:ILE:CG1	2.33	0.76
1:A:689:GLN:HB2	2:B:20:G:H4'	1.68	0.76
1:A:896:ILE:HG13	1:A:941:PRO:HD3	1.68	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:907:SER:O	1:A:910:SER:HB3	1.86	0.76
1:A:34:MSE:HE2	1:A:617:ILE:CG2	2.15	0.76
1:A:48:TRP:CH2	1:A:176:MSE:SE	2.88	0.76
1:A:880:LEU:HD12	1:A:880:LEU:O	1.85	0.76
1:A:834:ALA:HB1	1:A:835:PRO:CD	2.15	0.76
1:A:883:ARG:HA	1:A:887:GLY:O	1.85	0.76
1:A:873:ASN:HD22	2:B:22:A:C5'	1.93	0.76
1:A:559:THR:OG1	1:A:562:ASN:HB2	1.84	0.75
1:A:861:LEU:N	1:A:861:LEU:HD23	2.01	0.75
1:A:41:THR:HG21	1:A:304:MSE:HA	1.68	0.75
1:A:709:LYS:O	1:A:712:VAL:HG12	1.87	0.75
1:A:20:ILE:HB	1:A:530:ALA:O	1.86	0.75
1:A:369:GLY:O	1:A:372:ASN:HB2	1.85	0.75
1:A:716:ARG:HE	1:A:743:PHE:HE1	1.33	0.75
1:A:83:MSE:HG3	1:A:129:LYS:HG3	1.67	0.75
1:A:768:ILE:HB	1:A:778:TYR:CE2	2.21	0.75
1:A:30:LEU:HD12	1:A:30:LEU:O	1.86	0.75
1:A:67:ASP:N	1:A:69:ILE:HD13	2.00	0.75
1:A:169:ALA:HB1	1:A:305:LEU:CD2	2.16	0.75
1:A:116:TYR:CD1	1:A:128:TRP:HZ3	2.02	0.75
1:A:669:ILE:HG21	1:A:1052:TYR:CE2	2.21	0.75
1:A:979:ILE:HG13	1:A:980:LEU:CD1	2.15	0.75
1:A:74:LEU:HD12	1:A:74:LEU:O	1.85	0.75
1:A:348:PHE:HZ	1:A:361:TRP:H	1.35	0.75
1:A:707:TYR:HD2	2:B:13:A:C6	2.02	0.75
1:A:944:THR:HG22	1:A:947:GLN:OE1	1.86	0.75
1:A:181:ALA:HB1	1:A:184:ASN:HB2	1.69	0.74
1:A:740:MSE:CE	1:A:740:MSE:HA	2.16	0.74
1:A:73:LEU:HD22	1:A:73:LEU:C	2.12	0.74
1:A:669:ILE:HG23	1:A:1052:TYR:HE2	1.50	0.74
1:A:50:GLN:HB2	1:A:138:LEU:CD1	2.17	0.74
1:A:750:GLU:HA	1:A:750:GLU:OE2	1.85	0.74
1:A:897:SER:HB3	1:A:899:THR:CG2	2.17	0.74
1:A:996:TYR:CE2	1:A:1043:ARG:NH1	2.55	0.74
1:A:72:ASP:HB3	1:A:101:PHE:HZ	1.52	0.74
1:A:186:GLN:OE1	1:A:186:GLN:HA	1.86	0.74
1:A:348:PHE:HE2	1:A:363:LEU:CD2	1.99	0.74
1:A:524:TRP:HA	1:A:524:TRP:HE3	1.52	0.74
1:A:637:GLU:CG	1:A:933:GLY:N	2.50	0.74
1:A:759:LYS:HZ3	1:A:763:LEU:HD21	1.53	0.74
1:A:97:LEU:HD23	1:A:117:PHE:HB3	1.69	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:691:ARG:CZ	1:A:691:ARG:HB3	2.17	0.74
1:A:171:TYR:O	1:A:175:VAL:HG22	1.88	0.74
1:A:535:ARG:HG2	1:A:535:ARG:HH21	1.51	0.74
1:A:719:LEU:CB	1:A:740:MSE:CE	2.65	0.74
1:A:852:LEU:HD12	1:A:852:LEU:O	1.87	0.74
1:A:784:GLU:O	1:A:789:GLY:HA3	1.87	0.74
1:A:495:LEU:C	1:A:495:LEU:HD22	2.13	0.74
1:A:17:THR:HG22	1:A:533:SER:HB3	1.70	0.73
1:A:535:ARG:CB	2:B:7:G:C6	2.69	0.73
1:A:585:LEU:C	1:A:585:LEU:HD23	2.13	0.73
1:A:897:SER:HB3	1:A:899:THR:HG22	1.70	0.73
1:A:944:THR:HB	1:A:947:GLN:HG3	1.69	0.73
1:A:770:ASN:C	1:A:771:HIS:ND1	2.46	0.73
2:B:34:U:O2'	2:B:35:G:N2	2.21	0.73
1:A:648:ALA:O	1:A:916:LEU:HD23	1.88	0.73
1:A:663:ALA:C	1:A:664:ASN:ND2	2.45	0.73
1:A:387:TYR:O	1:A:391:ILE:HB	1.88	0.73
1:A:1049:LEU:HD22	1:A:1049:LEU:N	2.03	0.73
1:A:67:ASP:O	1:A:69:ILE:CD1	2.37	0.73
1:A:240:ILE:HD12	1:A:240:ILE:O	1.88	0.73
1:A:414:ILE:CG2	1:A:430:VAL:HG22	2.19	0.73
1:A:738:ASP:OD1	1:A:740:MSE:HB2	1.88	0.73
1:A:1026:MSE:HE3	1:A:1026:MSE:CA	2.14	0.73
1:A:1083:LEU:O	1:A:1086:ILE:CG2	2.28	0.73
2:B:9:G:N3	2:B:22:A:C2	2.56	0.73
1:A:34:MSE:CE	1:A:617:ILE:HG22	2.15	0.73
1:A:346:GLY:C	1:A:435:TYR:CZ	2.66	0.73
1:A:440:LYS:NZ	1:A:441:ASP:HB3	2.04	0.73
1:A:23:SER:HB2	1:A:26:ARG:CG	2.19	0.73
1:A:324:LEU:HD22	1:A:324:LEU:C	2.13	0.73
1:A:347:PHE:N	1:A:435:TYR:CZ	2.57	0.73
1:A:387:TYR:HE1	1:A:391:ILE:HG13	1.49	0.73
1:A:535:ARG:HB2	2:B:7:G:C5	2.23	0.73
1:A:719:LEU:CB	1:A:740:MSE:HE1	2.17	0.73
1:A:518:ASN:OD1	1:A:518:ASN:N	2.19	0.72
1:A:948:ASP:HB3	1:A:951:VAL:HB	1.71	0.72
1:A:142:LEU:HD12	1:A:285:ILE:HD13	1.70	0.72
1:A:309:LEU:C	1:A:309:LEU:HD12	2.13	0.72
1:A:435:TYR:HA	1:A:438:SER:OG	1.89	0.72
1:A:455:LEU:HD11	1:A:459:HIS:CD2	2.21	0.72
1:A:485:LEU:HB2	1:A:515:LYS:HB2	1.70	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:56:ASP:N	1:A:59:ILE:CD1	2.45	0.72
1:A:156:MSE:CE	1:A:162:ILE:CD1	2.68	0.72
1:A:343:ILE:HD13	1:A:443:ILE:HG13	1.71	0.72
1:A:50:GLN:CD	1:A:138:LEU:HD12	2.15	0.72
1:A:779:ARG:O	1:A:783:PHE:HD1	1.72	0.72
1:A:897:SER:CB	1:A:938:GLU:CD	2.63	0.72
1:A:440:LYS:HZ2	1:A:441:ASP:CB	2.03	0.72
1:A:66:LYS:C	1:A:69:ILE:CD1	2.62	0.72
1:A:531:LEU:N	1:A:531:LEU:HD23	2.04	0.72
1:A:312:ILE:H	1:A:312:ILE:HD12	1.55	0.72
1:A:700:TYR:OH	1:A:703:VAL:CG1	2.38	0.72
1:A:733:ASN:OD1	1:A:733:ASN:N	2.22	0.72
1:A:779:ARG:O	1:A:783:PHE:CD1	2.42	0.72
1:A:296:TYR:HA	1:A:301:TYR:CD1	2.25	0.72
1:A:680:GLU:OE1	1:A:878:LYS:HE2	1.90	0.72
1:A:790:LYS:H	1:A:790:LYS:CD	1.96	0.72
1:A:70:SER:HB2	1:A:112:GLN:NE2	2.04	0.71
1:A:757:ASN:O	1:A:761:CYS:SG	2.48	0.71
1:A:890:LEU:HD13	1:A:935:GLU:HB3	1.72	0.71
1:A:41:THR:N	1:A:42:PRO:CD	2.53	0.71
1:A:72:ASP:HB3	1:A:101:PHE:CZ	2.24	0.71
1:A:374:LYS:NZ	1:A:990:ARG:HH21	1.87	0.71
1:A:775:ALA:CB	1:A:821:LEU:HA	2.19	0.71
1:A:791:LEU:HD22	1:A:791:LEU:N	2.03	0.71
1:A:326:GLN:HE21	1:A:326:GLN:CA	2.00	0.71
1:A:841:ASP:OD1	1:A:841:ASP:N	2.21	0.71
1:A:74:LEU:HD12	1:A:74:LEU:C	2.15	0.71
1:A:177:PHE:CD1	1:A:286:LYS:CG	2.73	0.71
2:B:9:G:N2	2:B:22:A:N3	2.37	0.71
1:A:66:LYS:H	1:A:66:LYS:HD2	1.55	0.71
1:A:473:TYR:CD2	1:A:620:ARG:CZ	2.74	0.71
1:A:79:TRP:HZ3	1:A:101:PHE:CD2	2.09	0.71
1:A:477:ASN:HA	1:A:615:ILE:O	1.90	0.71
1:A:808:LYS:CE	2:B:33:A:H5'	2.20	0.71
1:A:64:ALA:C	1:A:66:LYS:HD2	2.15	0.71
1:A:83:MSE:HB3	1:A:84:PRO:CD	2.18	0.71
1:A:347:PHE:CE2	1:A:432:LEU:HD12	2.26	0.71
2:B:14:U:H2'	2:B:14:U:O2	1.90	0.71
1:A:38:MSE:O	1:A:42:PRO:CD	2.39	0.71
1:A:458:LYS:HD2	1:A:458:LYS:C	2.16	0.71
1:A:530:ALA:C	1:A:531:LEU:HD23	2.15	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:29:LEU:C	1:A:29:LEU:HD12	2.14	0.70
1:A:86:ASN:OD1	1:A:86:ASN:N	2.21	0.70
1:A:368:ILE:H	1:A:428:PRO:HB3	1.54	0.70
1:A:166:LEU:H	1:A:166:LEU:HD12	1.56	0.70
1:A:347:PHE:HB3	1:A:435:TYR:HD1	1.47	0.70
1:A:637:GLU:HG3	1:A:933:GLY:N	2.06	0.70
1:A:709:LYS:C	1:A:712:VAL:HG12	2.15	0.70
1:A:711:HIS:HB2	1:A:790:LYS:HG3	1.72	0.70
1:A:852:LEU:HD12	1:A:852:LEU:C	2.16	0.70
2:B:9:G:C2	2:B:22:A:C6	2.79	0.70
1:A:41:THR:CG2	1:A:304:MSE:CA	2.52	0.70
1:A:327:ILE:HA	1:A:330:LYS:HB2	1.74	0.70
1:A:372:ASN:O	1:A:375:THR:HG23	1.90	0.70
1:A:678:PRO:HG3	1:A:950:PHE:CZ	2.25	0.70
1:A:97:LEU:CD2	1:A:117:PHE:HB3	2.21	0.70
1:A:345:GLU:O	1:A:347:PHE:N	2.24	0.70
1:A:400:GLU:O	1:A:403:ILE:HG12	1.90	0.70
1:A:527:HIS:CD2	4:A:1201:CIT:H42	2.25	0.70
1:A:642:VAL:O	1:A:889:VAL:HA	1.91	0.70
1:A:318:LYS:HG2	1:A:467:ASN:HD21	1.57	0.70
1:A:50:GLN:HB2	1:A:138:LEU:HD13	1.73	0.70
1:A:510:ILE:CG2	1:A:541:TYR:CE2	2.62	0.70
1:A:674:LEU:CD2	1:A:1086:ILE:HD11	2.22	0.70
1:A:746:ILE:HG22	1:A:756:PHE:HD2	1.57	0.70
1:A:30:LEU:HD12	1:A:30:LEU:C	2.17	0.70
1:A:316:THR:O	1:A:320:CYS:HB3	1.92	0.70
1:A:570:LEU:HD11	1:A:574:GLN:HB2	1.70	0.70
1:A:634:LYS:CE	1:A:931:HIS:O	2.39	0.70
1:A:778:TYR:O	1:A:782:ILE:CG1	2.39	0.70
1:A:802:LEU:O	1:A:805:VAL:CB	2.39	0.70
1:A:880:LEU:HD12	1:A:880:LEU:C	2.17	0.70
1:A:374:LYS:HZ2	1:A:990:ARG:NH2	1.89	0.70
1:A:510:ILE:O	1:A:530:ALA:CB	2.34	0.70
1:A:802:LEU:HD12	1:A:802:LEU:C	2.17	0.70
1:A:982:PHE:CD1	1:A:996:TYR:HB3	2.27	0.70
1:A:12:ARG:NH2	3:C:3:U:C6	2.59	0.69
1:A:337:ASN:HB3	1:A:340:PHE:CD2	2.27	0.69
1:A:603:LEU:N	1:A:603:LEU:HD23	2.06	0.69
1:A:996:TYR:HE2	1:A:1043:ARG:HH11	1.40	0.69
1:A:50:GLN:OE1	1:A:138:LEU:HD12	1.92	0.69
1:A:644:LEU:O	1:A:891:ILE:HA	1.92	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1067:GLN:OE1	1:A:1067:GLN:HA	1.92	0.69
1:A:67:ASP:CA	1:A:69:ILE:CD1	2.70	0.69
1:A:347:PHE:N	1:A:435:TYR:CE1	2.61	0.69
1:A:393:SER:C	1:A:394:LEU:HD22	2.17	0.69
1:A:485:LEU:CD2	1:A:515:LYS:HD2	2.23	0.69
1:A:499:LEU:O	1:A:499:LEU:HD22	1.92	0.69
1:A:352:TYR:HD2	1:A:435:TYR:HB2	1.55	0.69
1:A:478:PHE:HB3	1:A:486:GLY:HA3	1.73	0.69
1:A:585:LEU:HD21	1:A:589:LYS:CD	2.23	0.69
1:A:47:LEU:HA	1:A:50:GLN:HG3	1.73	0.69
1:A:125:LYS:C	1:A:126:HIS:CD2	2.68	0.69
1:A:417:TYR:HE2	1:A:433:LEU:CD1	2.04	0.69
1:A:619:LYS:CE	1:A:621:GLY:O	2.40	0.69
1:A:709:LYS:HA	1:A:712:VAL:CG1	2.22	0.69
1:A:66:LYS:C	1:A:69:ILE:HD13	2.17	0.69
1:A:205:ILE:HG12	1:A:262:LEU:HD23	1.73	0.69
1:A:432:LEU:HD23	1:A:432:LEU:C	2.18	0.69
1:A:636:LYS:CE	1:A:935:GLU:OE1	2.41	0.69
1:A:63:THR:CG2	1:A:157:TYR:HE1	2.06	0.69
1:A:739:PHE:HD2	1:A:767:SER:HB2	1.50	0.69
1:A:368:ILE:HG22	1:A:433:LEU:CD2	2.23	0.69
1:A:374:LYS:NZ	1:A:990:ARG:NH2	2.41	0.69
1:A:527:HIS:CD2	4:A:1201:CIT:C4	2.76	0.69
1:A:547:GLU:C	1:A:549:PRO:HD3	2.18	0.69
1:A:925:LYS:HB2	1:A:936:PHE:CE2	2.27	0.69
1:A:63:THR:CG2	1:A:157:TYR:CE1	2.76	0.68
1:A:912:LEU:O	1:A:912:LEU:HD22	1.93	0.68
1:A:64:ALA:HA	1:A:66:LYS:HE2	0.79	0.68
1:A:418:CYS:SG	1:A:430:VAL:HG22	2.30	0.68
1:A:760:TYR:CD2	1:A:785:LEU:CD2	2.75	0.68
1:A:309:LEU:HD12	1:A:309:LEU:O	1.92	0.68
1:A:373:ILE:HG13	1:A:376:LEU:HD22	1.75	0.68
1:A:671:TYR:O	1:A:674:LEU:HB3	1.92	0.68
1:A:1001:MSE:HE3	1:A:1001:MSE:CA	2.21	0.68
1:A:1030:LEU:HD11	1:A:1038:LEU:CG	2.22	0.68
1:A:371:SER:O	1:A:374:LYS:HG3	1.93	0.68
1:A:477:ASN:CA	1:A:615:ILE:O	2.42	0.68
1:A:488:ILE:HG13	1:A:512:ILE:HB	1.76	0.68
1:A:669:ILE:HG23	1:A:1052:TYR:CE2	2.27	0.68
1:A:681:SER:OG	1:A:1075:LEU:CD2	2.41	0.68
1:A:187:THR:HB	1:A:191:PHE:HB3	1.76	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:371:SER:O	1:A:374:LYS:CD	2.42	0.68
1:A:486:GLY:CA	1:A:514:ILE:CG2	2.66	0.68
1:A:585:LEU:HD23	1:A:585:LEU:O	1.93	0.68
1:A:305:LEU:HG	1:A:309:LEU:HD23	1.76	0.68
1:A:758:MSE:HE1	1:A:809:VAL:HG21	1.76	0.68
1:A:30:LEU:HD12	1:A:34:MSE:HG2	1.75	0.68
1:A:538:GLU:OE2	1:A:591:ARG:HD2	1.94	0.68
1:A:721:LYS:C	1:A:722:TYR:CD1	2.70	0.68
1:A:697:GLN:HE21	2:B:11:C:H1'	1.60	0.67
1:A:876:VAL:O	1:A:880:LEU:N	2.24	0.67
1:A:73:LEU:HA	1:A:113:ALA:HB2	1.76	0.67
1:A:367:HIS:CD2	1:A:429:LEU:HD23	2.29	0.67
1:A:485:LEU:CB	1:A:515:LYS:HD2	2.24	0.67
1:A:647:ASP:OD1	1:A:649:ASN:HB2	1.94	0.67
1:A:779:ARG:CZ	1:A:846:ASP:OD2	2.42	0.67
1:A:803:SER:O	1:A:804:PHE:C	2.34	0.67
1:A:806:MSE:O	1:A:810:ALA:N	2.27	0.67
1:A:293:VAL:HG21	1:A:301:TYR:CE1	2.30	0.67
2:B:27:U:O2	3:C:1:A:H2	1.77	0.67
1:A:371:SER:O	1:A:374:LYS:CG	2.42	0.67
1:A:373:ILE:O	1:A:376:LEU:CD2	2.42	0.67
1:A:895:ASN:CA	1:A:913:MSE:CE	2.38	0.67
1:A:15:TYR:OH	1:A:539:GLU:HG2	1.94	0.67
1:A:574:GLN:HB3	1:A:593:MSE:HG3	1.75	0.67
1:A:633:LYS:HD2	1:A:633:LYS:N	2.09	0.67
1:A:698:LEU:N	1:A:698:LEU:HD23	2.07	0.67
1:A:159:GLU:HA	1:A:159:GLU:OE2	1.95	0.67
1:A:574:GLN:HE21	1:A:593:MSE:HE3	1.59	0.67
1:A:690:VAL:HG23	2:B:19:G:H21	1.59	0.67
1:A:722:TYR:HE2	1:A:778:TYR:HE1	1.40	0.67
1:A:821:LEU:HD13	1:A:822:LEU:CD2	2.08	0.67
1:A:347:PHE:CE2	1:A:363:LEU:HD11	2.29	0.67
1:A:660:GLU:HG2	1:A:663:ALA:HB2	1.75	0.67
1:A:835:PRO:HB2	1:A:836:PRO:HD2	1.76	0.67
1:A:615:ILE:N	1:A:615:ILE:HD12	2.10	0.67
1:A:722:TYR:HD2	1:A:778:TYR:CZ	2.13	0.67
1:A:1027:ALA:HA	1:A:1030:LEU:HB2	1.77	0.67
2:B:27:U:O2	3:C:1:A:C2	2.48	0.67
1:A:705:LEU:HB2	1:A:748:ASP:O	1.95	0.67
1:A:821:LEU:O	1:A:821:LEU:HD22	1.95	0.67
1:A:17:THR:CG2	1:A:533:SER:HB3	2.23	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:969:SER:HA	1:A:1023:LYS:NZ	2.10	0.66
1:A:369:GLY:C	1:A:370:GLU:HG3	2.19	0.66
1:A:775:ALA:HB3	1:A:821:LEU:HA	1.77	0.66
1:A:44:PHE:CZ	1:A:304:MSE:CE	2.78	0.66
1:A:67:ASP:N	1:A:69:ILE:HD11	2.10	0.66
1:A:422:GLY:CA	1:A:426:LYS:O	2.42	0.66
1:A:667:GLY:O	1:A:677:LYS:CE	2.35	0.66
1:A:1039:LEU:HD12	1:A:1039:LEU:N	2.01	0.66
1:A:1054:LEU:CD1	1:A:1079:TYR:CE2	2.78	0.66
1:A:153:LEU:HD23	1:A:153:LEU:C	2.20	0.66
1:A:1055:ASP:CB	1:A:1071:CYS:HB3	2.25	0.66
1:A:17:THR:CB	1:A:531:LEU:HD12	2.24	0.66
1:A:577:GLN:HG3	1:A:593:MSE:HE2	1.78	0.66
1:A:765:GLN:O	1:A:768:ILE:HG22	1.96	0.66
1:A:876:VAL:O	1:A:879:ALA:HB3	1.95	0.66
1:A:23:SER:CB	1:A:26:ARG:HG3	2.23	0.66
1:A:53:GLY:O	1:A:132:ARG:HD2	1.95	0.66
1:A:417:TYR:CE2	1:A:433:LEU:HD13	2.27	0.66
1:A:895:ASN:OD1	1:A:938:GLU:HB2	1.96	0.66
1:A:310:SER:N	1:A:311:PRO:HD2	2.11	0.66
1:A:517:LEU:HD11	1:A:522:MSE:HA	1.77	0.66
1:A:674:LEU:HD23	1:A:1086:ILE:HD11	1.78	0.65
1:A:769:ARG:HG3	1:A:769:ARG:HH11	1.61	0.65
1:A:761:CYS:O	1:A:765:GLN:N	2.26	0.65
1:A:945:SER:HB3	1:A:962:ARG:NH2	2.11	0.65
1:A:1022:PHE:HD1	1:A:1022:PHE:O	1.79	0.65
1:A:44:PHE:CE1	1:A:304:MSE:CE	2.79	0.65
1:A:352:TYR:CD1	1:A:434:ARG:HB2	2.31	0.65
1:A:511:TRP:HA	1:A:530:ALA:HB2	1.77	0.65
1:A:890:LEU:HD11	1:A:937:VAL:HG13	1.76	0.65
1:A:164:LEU:HD13	1:A:164:LEU:C	2.21	0.65
1:A:590:LYS:HG2	1:A:591:ARG:N	2.11	0.65
1:A:17:THR:HG23	1:A:533:SER:HB2	1.76	0.65
1:A:429:LEU:O	1:A:433:LEU:HG	1.97	0.65
1:A:689:GLN:CB	2:B:20:G:C4'	2.65	0.65
1:A:832:VAL:HG22	1:A:833:LYS:HE2	1.78	0.65
1:A:1048:TYR:CD1	1:A:1049:LEU:N	2.65	0.65
1:A:352:TYR:CE1	1:A:434:ARG:C	2.75	0.65
1:A:352:TYR:CE2	1:A:435:TYR:CA	2.80	0.65
1:A:546:SER:CB	1:A:602:ASN:HD22	2.06	0.65
1:A:854:LEU:HD13	1:A:854:LEU:N	2.11	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:268:GLU:OE2	1:A:268:GLU:HA	1.96	0.65
1:A:415:ASN:ND2	1:A:730:ASN:O	2.30	0.65
1:A:1058:ALA:CB	1:A:1070:VAL:O	2.45	0.65
1:A:201:GLU:HB3	1:A:203:THR:HG23	1.79	0.64
1:A:311:PRO:HG2	1:A:312:ILE:HD12	1.80	0.64
1:A:431:GLN:NE2	1:A:434:ARG:HH21	1.93	0.64
1:A:690:VAL:HG23	2:B:19:G:N2	2.13	0.64
1:A:722:TYR:CD2	1:A:778:TYR:CZ	2.84	0.64
1:A:11:THR:O	1:A:632:VAL:N	2.31	0.64
1:A:550:PRO:HB2	1:A:605:PRO:HA	1.77	0.64
1:A:91:GLY:CA	1:A:129:LYS:HD3	2.27	0.64
1:A:140:ALA:O	1:A:143:GLN:HG2	1.98	0.64
1:A:436:LEU:HD23	1:A:436:LEU:O	1.97	0.64
1:A:760:TYR:CE2	1:A:785:LEU:CD2	2.80	0.64
1:A:23:SER:CB	1:A:26:ARG:CG	2.76	0.64
1:A:33:PHE:CE2	1:A:37:LEU:HD11	2.33	0.64
1:A:13:LYS:O	1:A:629:ALA:CB	2.45	0.64
1:A:171:TYR:O	1:A:175:VAL:CG2	2.46	0.64
1:A:465:LYS:NZ	2:B:30:G:OP1	2.28	0.64
1:A:583:VAL:O	1:A:586:ARG:HB2	1.97	0.64
1:A:585:LEU:HD21	1:A:589:LYS:HB2	1.80	0.64
1:A:637:GLU:CG	1:A:933:GLY:H	2.11	0.64
1:A:913:MSE:SE	1:A:941:PRO:CG	2.91	0.64
1:A:637:GLU:HG2	1:A:933:GLY:N	2.12	0.64
1:A:637:GLU:HA	1:A:637:GLU:OE1	1.97	0.64
1:A:729:ASP:HB3	1:A:733:ASN:OD1	1.97	0.64
1:A:463:LYS:O	1:A:463:LYS:HG3	1.97	0.64
1:A:660:GLU:HB2	1:A:679:ILE:HD11	1.79	0.64
1:A:364:HIS:HB2	1:A:366:HIS:CE1	2.33	0.64
1:A:486:GLY:HA3	1:A:514:ILE:HG22	1.74	0.64
1:A:671:TYR:N	1:A:674:LEU:O	2.26	0.64
1:A:817:TYR:CD1	1:A:849:MSE:CE	2.81	0.64
1:A:951:VAL:HG21	1:A:1051:THR:OG1	1.97	0.64
1:A:340:PHE:CZ	1:A:447:LYS:HB3	2.32	0.63
1:A:127:GLN:HG2	1:A:129:LYS:HZ2	1.63	0.63
1:A:485:LEU:HG	1:A:515:LYS:CD	2.24	0.63
1:A:1009:LEU:HD21	1:A:1029:ILE:HD13	1.80	0.63
2:B:10:C:H2'	2:B:11:C:H6	1.62	0.63
1:A:377:TRP:CH2	1:A:436:LEU:HD22	2.34	0.63
1:A:546:SER:O	1:A:549:PRO:HD3	1.98	0.63
1:A:364:HIS:CD2	2:B:32:A:N7	2.67	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:640:TYR:CZ	1:A:890:LEU:CD2	2.82	0.63
1:A:12:ARG:HD2	1:A:631:LYS:HG2	1.79	0.63
1:A:83:MSE:HE3	1:A:469:VAL:O	1.99	0.63
1:A:589:LYS:HA	1:A:592:GLN:HB2	1.80	0.63
1:A:1026:MSE:HE2	1:A:1038:LEU:HD12	1.81	0.63
1:A:40:GLY:C	1:A:42:PRO:HD2	2.24	0.63
1:A:67:ASP:CA	1:A:69:ILE:HD11	2.28	0.63
1:A:296:TYR:CB	1:A:301:TYR:CZ	2.80	0.63
1:A:826:LYS:HE2	1:A:826:LYS:HA	1.80	0.63
1:A:41:THR:N	1:A:42:PRO:HD3	2.13	0.63
1:A:368:ILE:HG22	1:A:373:ILE:CD1	2.28	0.63
1:A:638:LYS:HD2	1:A:638:LYS:O	1.99	0.63
1:A:671:TYR:CE1	1:A:1083:LEU:HD11	2.34	0.63
1:A:56:ASP:HB2	1:A:59:ILE:HD11	1.79	0.62
1:A:419:GLU:O	1:A:423:LYS:HG3	1.99	0.62
1:A:534:THR:HG22	1:A:591:ARG:NH2	2.13	0.62
1:A:640:TYR:CE2	1:A:890:LEU:HD22	2.33	0.62
1:A:866:SER:O	1:A:870:VAL:HG23	1.99	0.62
1:A:965:ARG:CB	1:A:1039:LEU:HB3	2.28	0.62
1:A:689:GLN:N	2:B:20:G:O2'	2.30	0.62
1:A:930:MSE:HB2	1:A:931:HIS:ND1	2.14	0.62
1:A:11:THR:O	1:A:632:VAL:HB	1.99	0.62
1:A:697:GLN:C	1:A:799:LEU:HB2	2.24	0.62
1:A:12:ARG:CA	1:A:631:LYS:HA	2.29	0.62
1:A:135:TYR:HE1	1:A:139:LEU:CD1	2.13	0.62
1:A:352:TYR:HE1	1:A:434:ARG:HD2	1.65	0.62
1:A:792:SER:OG	1:A:795:LYS:HB2	1.99	0.62
1:A:976:ARG:HG3	1:A:1022:PHE:CD2	2.34	0.62
1:A:29:LEU:HD12	1:A:29:LEU:O	1.99	0.62
1:A:92:VAL:HG12	1:A:93:SER:N	2.14	0.62
1:A:671:TYR:CE2	1:A:1083:LEU:HD13	2.35	0.62
1:A:763:LEU:N	1:A:763:LEU:HD23	2.14	0.62
1:A:1009:LEU:CD2	1:A:1029:ILE:CD1	2.77	0.62
1:A:387:TYR:CD1	1:A:391:ILE:HG13	2.35	0.62
1:A:818:PHE:O	1:A:822:LEU:N	2.29	0.62
1:A:552:ALA:HB2	1:A:606:ARG:O	2.00	0.62
1:A:555:ALA:HB3	1:A:562:ASN:OD1	1.99	0.62
1:A:642:VAL:HG21	1:A:886:TYR:CB	2.30	0.62
1:A:791:LEU:N	1:A:791:LEU:HD13	2.14	0.62
1:A:581:ALA:HB1	1:A:582:PRO:HD2	1.80	0.62
1:A:801:ASN:O	1:A:805:VAL:HG23	1.99	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:85:ILE:CG2	1:A:125:LYS:CD	2.78	0.62
1:A:559:THR:OG1	1:A:562:ASN:CB	2.47	0.62
1:A:971:LEU:HD21	1:A:1040:PHE:HE2	1.65	0.62
1:A:345:GLU:O	1:A:348:PHE:N	2.25	0.62
1:A:510:ILE:HA	1:A:541:TYR:HE2	1.64	0.62
1:A:576:GLU:OE1	1:A:576:GLU:HA	2.00	0.62
1:A:634:LYS:CG	1:A:932:GLN:HG2	2.30	0.62
1:A:80:PHE:HD1	1:A:80:PHE:O	1.81	0.61
1:A:709:LYS:HA	1:A:712:VAL:HG12	1.82	0.61
1:A:54:GLY:HA2	1:A:135:TYR:CD2	2.33	0.61
1:A:166:LEU:HD12	1:A:166:LEU:N	2.14	0.61
1:A:371:SER:O	1:A:374:LYS:HD2	1.99	0.61
1:A:575:ILE:HG21	1:A:579:ARG:HH22	1.61	0.61
1:A:187:THR:HB	1:A:191:PHE:CB	2.30	0.61
1:A:350:SER:HB2	1:A:435:TYR:CD2	2.35	0.61
1:A:364:HIS:HB3	1:A:365:PRO:HD2	1.83	0.61
1:A:570:LEU:HD13	1:A:574:GLN:HB2	1.75	0.61
1:A:575:ILE:HG22	1:A:579:ARG:CZ	2.30	0.61
1:A:687:GLU:HB3	1:A:694:SER:HB3	1.81	0.61
1:A:718:PHE:CE1	1:A:781:GLU:CG	2.81	0.61
1:A:897:SER:O	1:A:899:THR:N	2.30	0.61
1:A:976:ARG:HG3	1:A:1022:PHE:HD2	1.64	0.61
1:A:1054:LEU:HD13	1:A:1079:TYR:CE2	2.35	0.61
1:A:91:GLY:HA3	1:A:127:GLN:OE1	2.00	0.61
1:A:116:TYR:CD1	1:A:128:TRP:CZ3	2.84	0.61
1:A:488:ILE:HG12	1:A:512:ILE:HG22	1.82	0.61
1:A:817:TYR:CE1	1:A:849:MSE:CE	2.81	0.61
1:A:637:GLU:HB2	1:A:933:GLY:HA2	1.83	0.61
1:A:697:GLN:HE21	2:B:11:C:C1'	2.13	0.61
1:A:837:ILE:O	1:A:837:ILE:HG23	2.00	0.61
1:A:948:ASP:OD2	1:A:960:ARG:NH2	2.33	0.61
2:B:15:C:H4'	2:B:16:G:H5'	1.83	0.61
1:A:352:TYR:CZ	1:A:434:ARG:C	2.78	0.61
1:A:585:LEU:CD2	1:A:589:LYS:HB2	2.30	0.61
1:A:762:LYS:HE3	2:B:34:U:O4'	2.00	0.61
1:A:23:SER:HB3	1:A:26:ARG:HG2	1.82	0.61
1:A:208:VAL:HG11	1:A:211:LEU:HG	1.82	0.61
1:A:449:ILE:C	1:A:452:ILE:HG12	2.26	0.61
1:A:570:LEU:HD23	2:B:18:U:C2	2.35	0.61
1:A:737:ILE:HD13	1:A:737:ILE:C	2.24	0.61
1:A:860:ARG:O	1:A:864:VAL:HG23	2.01	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:368:ILE:O	1:A:373:ILE:CB	2.46	0.61
1:A:477:ASN:CB	1:A:615:ILE:O	2.49	0.61
1:A:478:PHE:CD1	1:A:514:ILE:HD13	2.35	0.61
1:A:1030:LEU:HD11	1:A:1038:LEU:HG	1.82	0.61
1:A:574:GLN:HE22	1:A:593:MSE:CE	2.03	0.60
1:A:897:SER:O	1:A:899:THR:HG23	2.01	0.60
1:A:897:SER:C	1:A:899:THR:H	2.08	0.60
2:B:9:G:C6	2:B:22:A:C6	2.89	0.60
1:A:356:ASP:O	1:A:358:ASN:ND2	2.34	0.60
1:A:758:MSE:CE	1:A:809:VAL:HG21	2.30	0.60
2:B:18:U:O2'	2:B:19:G:H5'	2.01	0.60
1:A:495:LEU:CD1	1:A:495:LEU:H	2.14	0.60
1:A:66:LYS:H	1:A:66:LYS:CD	2.15	0.60
1:A:142:LEU:HB3	1:A:144:LEU:HG	1.83	0.60
1:A:164:LEU:CD1	1:A:164:LEU:H	2.14	0.60
1:A:208:VAL:HG12	1:A:211:LEU:H	1.65	0.60
1:A:333:ILE:HD11	1:A:457:LYS:NZ	2.15	0.60
1:A:350:SER:CB	1:A:435:TYR:CD2	2.84	0.60
1:A:743:PHE:HA	1:A:746:ILE:HD12	1.82	0.60
1:A:758:MSE:HE1	1:A:805:VAL:HG12	1.81	0.60
1:A:794:LEU:O	1:A:794:LEU:HD13	2.02	0.60
1:A:923:LYS:HD2	1:A:927:MSE:CG	2.31	0.60
1:A:315:MSE:CB	1:A:469:VAL:HG13	2.32	0.60
1:A:381:ASN:HA	1:A:384:HIS:HB3	1.84	0.60
1:A:420:GLU:O	1:A:423:LYS:HB2	2.02	0.60
1:A:779:ARG:HG3	1:A:780:GLU:N	2.14	0.60
1:A:832:VAL:O	1:A:832:VAL:HG13	2.01	0.60
1:A:912:LEU:O	1:A:912:LEU:HD13	2.00	0.60
1:A:214:ILE:O	1:A:218:ALA:CB	2.48	0.60
1:A:892:LYS:NZ	1:A:1086:ILE:HA	2.16	0.60
1:A:208:VAL:HG12	1:A:211:LEU:CG	2.29	0.60
1:A:348:PHE:CZ	1:A:361:TRP:CD1	2.81	0.60
1:A:371:SER:CA	1:A:374:LYS:HD2	2.31	0.60
1:A:722:TYR:CE2	1:A:778:TYR:HE1	2.15	0.60
1:A:415:ASN:OD1	1:A:430:VAL:HG11	2.02	0.60
1:A:436:LEU:HD23	1:A:436:LEU:C	2.27	0.60
1:A:556:ARG:HB3	1:A:607:TYR:HE1	1.65	0.60
1:A:648:ALA:O	1:A:916:LEU:CD2	2.50	0.60
1:A:478:PHE:CZ	1:A:514:ILE:CD1	2.85	0.60
1:A:758:MSE:HE3	1:A:805:VAL:CG1	2.32	0.60
1:A:391:ILE:O	1:A:395:SER:CB	2.47	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:817:TYR:CD1	1:A:849:MSE:HE3	2.37	0.59
1:A:56:ASP:H	1:A:59:ILE:CD1	2.13	0.59
1:A:135:TYR:O	1:A:135:TYR:HD1	1.85	0.59
1:A:518:ASN:ND2	1:A:525:GLU:OE1	2.36	0.59
1:A:88:LYS:CB	1:A:89:PRO:HD3	2.27	0.59
1:A:348:PHE:CE1	1:A:360:LYS:CB	2.85	0.59
1:A:553:LEU:HD12	1:A:553:LEU:N	2.04	0.59
1:A:574:GLN:HE21	1:A:593:MSE:CE	2.13	0.59
1:A:671:TYR:CE1	1:A:1083:LEU:CD1	2.85	0.59
1:A:979:ILE:CG1	1:A:980:LEU:HD13	2.30	0.59
2:B:25:A:C8	2:B:26:U:C5	2.90	0.59
1:A:60:ILE:O	1:A:60:ILE:HG22	2.01	0.59
1:A:347:PHE:HA	1:A:350:SER:HB2	1.82	0.59
1:A:190:GLN:HA	1:A:190:GLN:HE21	1.68	0.59
1:A:768:ILE:HB	1:A:778:TYR:CD2	2.38	0.59
1:A:130:ASP:CB	1:A:133:VAL:HG23	2.29	0.59
1:A:377:TRP:CH2	1:A:437:TYR:HD1	2.21	0.59
1:A:540:VAL:HA	1:A:558:ARG:HH11	1.68	0.59
1:A:686:VAL:O	1:A:686:VAL:HG12	2.01	0.59
1:A:690:VAL:CG2	2:B:19:G:H21	2.15	0.59
1:A:348:PHE:CZ	1:A:361:TRP:N	2.71	0.59
1:A:369:GLY:C	1:A:370:GLU:CG	2.75	0.59
1:A:488:ILE:HA	1:A:512:ILE:HB	1.85	0.59
1:A:690:VAL:O	1:A:690:VAL:HG12	2.02	0.59
1:A:797:SER:HB3	1:A:863:LYS:NZ	2.18	0.59
1:A:851:ALA:HA	1:A:854:LEU:HD22	1.85	0.59
1:A:298:LEU:O	1:A:298:LEU:HD12	2.02	0.59
1:A:414:ILE:CG2	1:A:430:VAL:HG13	2.33	0.59
1:A:347:PHE:CA	1:A:350:SER:HB3	2.27	0.59
1:A:488:ILE:HG12	1:A:512:ILE:CG2	2.33	0.59
1:A:535:ARG:CD	2:B:23:C:N4	2.65	0.59
1:A:868:LYS:HE2	1:A:919:GLY:HA3	1.84	0.59
1:A:890:LEU:CD1	1:A:935:GLU:HB3	2.33	0.59
1:A:1017:VAL:HG23	1:A:1017:VAL:O	2.02	0.59
1:A:1052:TYR:O	1:A:1054:LEU:HD23	2.03	0.59
1:A:1089:ASP:N	1:A:1089:ASP:OD1	2.35	0.59
2:B:9:G:N1	2:B:22:A:N1	2.50	0.59
1:A:30:LEU:CD1	1:A:34:MSE:HG2	2.32	0.59
1:A:348:PHE:CE1	1:A:360:LYS:HB3	2.38	0.59
1:A:681:SER:HB3	1:A:1079:TYR:CE2	2.38	0.59
1:A:709:LYS:CA	1:A:712:VAL:HG12	2.33	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:764:LEU:HD12	1:A:764:LEU:C	2.27	0.59
1:A:783:PHE:O	1:A:787:ARG:N	2.35	0.59
1:A:96:ASN:ND2	1:A:96:ASN:H	2.01	0.58
1:A:153:LEU:HA	1:A:156:MSE:HG3	1.85	0.58
1:A:671:TYR:HA	1:A:954:ASN:ND2	2.17	0.58
1:A:709:LYS:O	1:A:712:VAL:CG1	2.51	0.58
1:A:778:TYR:N	1:A:778:TYR:HD1	2.01	0.58
1:A:962:ARG:O	1:A:1042:SER:O	2.20	0.58
1:A:182:LYS:HE3	1:A:183:ASN:HB2	1.85	0.58
1:A:245:GLN:NE2	1:A:249:LEU:CD2	2.62	0.58
1:A:540:VAL:HB	1:A:607:TYR:CE2	2.38	0.58
1:A:760:TYR:O	1:A:764:LEU:N	2.25	0.58
2:B:14:U:O2	2:B:14:U:C2'	2.50	0.58
1:A:135:TYR:CE1	1:A:139:LEU:HD13	2.39	0.58
1:A:418:CYS:CB	1:A:430:VAL:CG2	2.78	0.58
1:A:538:GLU:O	1:A:558:ARG:CG	2.52	0.58
1:A:658:ALA:CB	1:A:882:LEU:HD11	2.33	0.58
1:A:895:ASN:OD1	1:A:938:GLU:CB	2.50	0.58
1:A:134:GLU:CD	1:A:137:ARG:HE	2.12	0.58
1:A:161:CYS:O	1:A:162:ILE:CD1	2.52	0.58
1:A:532:SER:O	2:B:7:G:OP2	2.20	0.58
1:A:758:MSE:CE	1:A:805:VAL:CG1	2.80	0.58
1:A:799:LEU:O	1:A:867:LYS:HE3	2.02	0.58
1:A:894:GLU:CG	1:A:941:PRO:HA	2.34	0.58
1:A:896:ILE:HD11	1:A:909:ASN:O	2.03	0.58
1:A:1007:TYR:CE1	1:A:1033:ARG:NH2	2.69	0.58
1:A:368:ILE:N	1:A:428:PRO:HB3	2.18	0.58
1:A:440:LYS:NZ	1:A:441:ASP:CA	2.66	0.58
1:A:760:TYR:CE2	1:A:785:LEU:HD22	2.39	0.58
1:A:620:ARG:HG2	1:A:620:ARG:NH1	2.15	0.58
1:A:678:PRO:HB3	1:A:1079:TYR:CE1	2.39	0.58
1:A:696:ASP:CB	1:A:699:SER:HB2	2.29	0.58
1:A:923:LYS:O	1:A:923:LYS:HD3	2.04	0.58
1:A:575:ILE:CG2	1:A:579:ARG:HH22	2.15	0.58
1:A:971:LEU:HD21	1:A:1040:PHE:CE2	2.39	0.58
1:A:416:THR:O	1:A:420:GLU:CG	2.51	0.58
1:A:509:TYR:HE2	2:B:4:U:H1'	1.69	0.58
1:A:658:ALA:CB	1:A:882:LEU:CD1	2.82	0.58
1:A:145:SER:CB	1:A:148:ASP:HB2	2.34	0.58
1:A:182:LYS:HD2	1:A:182:LYS:C	2.29	0.58
1:A:933:GLY:O	1:A:934:LEU:HD12	2.03	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:388:GLU:O	1:A:391:ILE:HG22	2.04	0.58
1:A:654:ASN:OD1	1:A:654:ASN:N	2.36	0.58
1:A:724:ASN:OD1	1:A:724:ASN:N	2.21	0.58
1:A:790:LYS:HD2	1:A:790:LYS:N	2.06	0.58
1:A:156:MSE:CE	1:A:162:ILE:HG12	2.32	0.57
1:A:633:LYS:O	1:A:633:LYS:HD3	2.04	0.57
1:A:715:ARG:HD2	1:A:715:ARG:N	2.11	0.57
1:A:689:GLN:HB2	2:B:20:G:HO2'	1.66	0.57
1:A:797:SER:HB3	1:A:863:LYS:HZ2	1.68	0.57
1:A:857:GLU:HA	1:A:857:GLU:OE2	2.03	0.57
1:A:1027:ALA:O	1:A:1031:HIS:N	2.30	0.57
1:A:32:ASN:O	1:A:35:ASP:N	2.37	0.57
1:A:142:LEU:HD12	1:A:144:LEU:HD21	1.86	0.57
1:A:350:SER:HB2	1:A:435:TYR:CE2	2.39	0.57
1:A:579:ARG:HD3	2:B:18:U:OP2	2.03	0.57
1:A:705:LEU:CB	1:A:748:ASP:O	2.52	0.57
1:A:921:ALA:HB1	1:A:936:PHE:HZ	1.69	0.57
1:A:343:ILE:HG12	1:A:443:ILE:CD1	2.34	0.57
1:A:368:ILE:HG22	1:A:433:LEU:HD21	1.87	0.57
1:A:640:TYR:CE2	1:A:890:LEU:CD2	2.87	0.57
1:A:663:ALA:O	1:A:664:ASN:ND2	2.35	0.57
2:B:9:G:C2	2:B:22:A:C4	2.93	0.57
1:A:141:GLU:OE1	1:A:141:GLU:HA	2.02	0.57
1:A:478:PHE:CE2	1:A:484:LEU:HG	2.39	0.57
1:A:907:SER:HA	1:A:910:SER:HB2	1.87	0.57
1:A:205:ILE:HG23	1:A:205:ILE:O	2.03	0.57
1:A:478:PHE:CE1	1:A:514:ILE:CD1	2.88	0.57
1:A:762:LYS:NZ	2:B:34:U:C1'	2.66	0.57
1:A:137:ARG:O	1:A:140:ALA:HB3	2.05	0.57
1:A:319:ASN:N	1:A:467:ASN:HD22	2.03	0.57
1:A:297:TYR:O	1:A:301:TYR:HB2	2.05	0.57
1:A:535:ARG:CB	2:B:7:G:C5	2.88	0.57
1:A:681:SER:HB3	1:A:1079:TYR:HE2	1.69	0.57
1:A:748:ASP:O	1:A:751:THR:OG1	2.22	0.57
1:A:833:LYS:HD3	1:A:833:LYS:N	2.20	0.57
2:B:9:G:N2	2:B:22:A:C5	2.72	0.57
1:A:54:GLY:HA2	1:A:135:TYR:HD2	1.62	0.57
1:A:361:TRP:CZ2	1:A:429:LEU:HD11	2.40	0.57
1:A:542:TYR:CD2	1:A:595:LEU:CG	2.86	0.57
1:A:729:ASP:HB2	1:A:733:ASN:O	2.05	0.57
1:A:785:LEU:HD12	1:A:785:LEU:C	2.29	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:807:PHE:O	1:A:810:ALA:HB3	2.05	0.57
1:A:17:THR:HG22	1:A:533:SER:CA	2.34	0.57
1:A:56:ASP:OD1	1:A:57:ARG:N	2.38	0.57
1:A:166:LEU:H	1:A:166:LEU:CD1	2.17	0.57
1:A:198:LEU:HD21	1:A:205:ILE:CG2	2.34	0.57
1:A:963:TYR:O	1:A:1047:PHE:O	2.22	0.56
1:A:1062:ASN:OD1	1:A:1065:GLY:CA	2.53	0.56
1:A:92:VAL:HG21	1:A:130:ASP:OD1	2.05	0.56
1:A:298:LEU:HD12	1:A:298:LEU:C	2.30	0.56
1:A:414:ILE:HG21	1:A:430:VAL:HG13	1.87	0.56
1:A:832:VAL:C	1:A:833:LYS:HD3	2.30	0.56
1:A:85:ILE:CG2	1:A:125:LYS:HD3	2.35	0.56
1:A:266:LEU:HD13	1:A:266:LEU:C	2.30	0.56
1:A:439:ARG:NH2	1:A:442:ASP:OD2	2.38	0.56
1:A:496:LYS:NZ	1:A:496:LYS:HB3	2.19	0.56
1:A:558:ARG:NH2	1:A:604:LEU:HD11	2.20	0.56
1:A:567:LYS:HE2	1:A:567:LYS:O	2.04	0.56
1:A:690:VAL:CG2	2:B:19:G:N2	2.68	0.56
1:A:949:PRO:CG	1:A:1054:LEU:HG	2.36	0.56
1:A:963:TYR:N	1:A:963:TYR:CD1	2.73	0.56
1:A:12:ARG:CZ	3:C:3:U:C5	2.88	0.56
1:A:417:TYR:CE2	1:A:433:LEU:CD1	2.86	0.56
1:A:446:ASP:OD1	1:A:446:ASP:N	2.38	0.56
1:A:511:TRP:HA	1:A:530:ALA:CB	2.36	0.56
1:A:624:PHE:N	1:A:624:PHE:CD1	2.73	0.56
1:A:944:THR:HG22	1:A:947:GLN:CD	2.30	0.56
1:A:1055:ASP:OD1	1:A:1057:ASP:N	2.39	0.56
1:A:823:LYS:HB2	1:A:823:LYS:NZ	2.20	0.56
1:A:1030:LEU:CG	1:A:1038:LEU:HD11	2.35	0.56
2:B:32:A:H2'	2:B:33:A:C2	2.40	0.56
1:A:168:THR:HG23	1:A:171:TYR:HB2	1.88	0.56
1:A:293:VAL:CG2	1:A:301:TYR:CE1	2.87	0.56
1:A:971:LEU:HD22	1:A:975:ASN:HD22	1.71	0.56
1:A:778:TYR:N	1:A:778:TYR:CD1	2.73	0.56
1:A:380:LEU:HD13	1:A:380:LEU:N	2.21	0.56
1:A:380:LEU:HB3	1:A:437:TYR:CZ	2.41	0.56
1:A:325:LYS:HA	1:A:328:ASP:HB2	1.87	0.56
1:A:408:GLY:CA	1:A:731:ARG:HB3	2.36	0.56
1:A:490:SER:CB	1:A:493:ASP:OD2	2.51	0.56
1:A:540:VAL:HB	1:A:607:TYR:CD2	2.41	0.56
1:A:1062:ASN:OD1	1:A:1065:GLY:N	2.39	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:67:ASP:O	1:A:69:ILE:HD11	2.06	0.55
1:A:857:GLU:O	1:A:860:ARG:HB3	2.06	0.55
1:A:897:SER:HB3	1:A:938:GLU:CD	2.29	0.55
1:A:1007:TYR:CZ	1:A:1038:LEU:HD13	2.41	0.55
1:A:477:ASN:HB2	1:A:615:ILE:O	2.06	0.55
1:A:707:TYR:N	1:A:707:TYR:CD1	2.74	0.55
1:A:722:TYR:CD1	1:A:722:TYR:N	2.71	0.55
1:A:32:ASN:O	1:A:33:PHE:C	2.49	0.55
1:A:414:ILE:HG22	1:A:430:VAL:CG2	2.36	0.55
1:A:527:HIS:HD2	4:A:1201:CIT:HO7	1.49	0.55
1:A:790:LYS:HB2	1:A:791:LEU:HD13	1.87	0.55
1:A:797:SER:OG	1:A:863:LYS:HE2	2.06	0.55
1:A:803:SER:O	1:A:805:VAL:N	2.40	0.55
1:A:164:LEU:HD22	1:A:165:SER:HB3	1.87	0.55
1:A:724:ASN:O	1:A:771:HIS:CE1	2.60	0.55
1:A:860:ARG:HG2	1:A:861:LEU:HD23	1.88	0.55
1:A:933:GLY:C	1:A:934:LEU:CD1	2.80	0.55
2:B:9:G:H5''	2:B:9:G:H8	1.72	0.55
1:A:50:GLN:CB	1:A:138:LEU:HD12	2.36	0.55
1:A:387:TYR:CD1	1:A:387:TYR:C	2.85	0.55
1:A:558:ARG:HG3	1:A:558:ARG:NH1	2.22	0.55
1:A:965:ARG:CZ	1:A:1047:PHE:CZ	2.90	0.55
1:A:117:PHE:CD1	1:A:117:PHE:N	2.74	0.55
1:A:164:LEU:H	1:A:164:LEU:HD12	1.72	0.55
1:A:242:LYS:HG2	1:A:243:ILE:HD13	1.88	0.55
1:A:374:LYS:HG2	1:A:449:ILE:HD11	1.87	0.55
1:A:570:LEU:HB3	2:B:18:U:C4	2.39	0.55
1:A:759:LYS:HE2	2:B:35:G:H22	1.70	0.55
1:A:784:GLU:O	1:A:789:GLY:CA	2.54	0.55
1:A:716:ARG:CB	1:A:743:PHE:CZ	2.85	0.55
1:A:50:GLN:HE22	1:A:137:ARG:HH21	1.55	0.55
1:A:169:ALA:HB2	1:A:306:GLU:HB2	1.88	0.55
1:A:322:PHE:C	1:A:322:PHE:CD1	2.84	0.55
1:A:345:GLU:O	1:A:345:GLU:HG2	2.03	0.55
1:A:416:THR:O	1:A:420:GLU:HG3	2.07	0.55
1:A:707:TYR:HB3	2:B:13:A:C2	2.42	0.55
1:A:40:GLY:C	1:A:42:PRO:CD	2.80	0.55
1:A:67:ASP:C	1:A:69:ILE:HD11	2.27	0.55
1:A:83:MSE:CE	1:A:469:VAL:O	2.54	0.55
1:A:116:TYR:CD1	1:A:116:TYR:C	2.85	0.55
1:A:315:MSE:N	1:A:315:MSE:SE	2.89	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:475:SER:HB3	1:A:618:CYS:HB2	1.89	0.55
1:A:671:TYR:HA	1:A:954:ASN:HD21	1.71	0.55
1:A:798:SER:O	1:A:863:LYS:NZ	2.40	0.55
1:A:803:SER:C	1:A:805:VAL:N	2.61	0.55
1:A:859:LYS:O	1:A:863:LYS:HB2	2.06	0.55
1:A:711:HIS:HB2	1:A:790:LYS:CG	2.37	0.54
1:A:1026:MSE:HA	1:A:1026:MSE:CE	2.32	0.54
1:A:296:TYR:CA	1:A:301:TYR:CE1	2.83	0.54
1:A:418:CYS:HB2	1:A:430:VAL:CG2	2.37	0.54
1:A:511:TRP:CZ2	2:B:3:U:N3	2.74	0.54
1:A:540:VAL:HA	1:A:558:ARG:NH1	2.22	0.54
1:A:839:ASP:HA	1:A:842:LYS:HG2	1.87	0.54
1:A:142:LEU:HB3	1:A:144:LEU:CG	2.38	0.54
1:A:159:GLU:HB2	1:A:161:CYS:SG	2.48	0.54
1:A:353:PHE:O	1:A:354:GLU:OE2	2.25	0.54
1:A:515:LYS:HG2	1:A:526:LYS:HG2	1.89	0.54
1:A:589:LYS:O	1:A:592:GLN:HB2	2.07	0.54
1:A:636:LYS:HD2	1:A:935:GLU:OE2	2.07	0.54
1:A:1001:MSE:CA	1:A:1001:MSE:CE	2.86	0.54
1:A:38:MSE:O	1:A:42:PRO:CG	2.55	0.54
1:A:309:LEU:HA	1:A:312:ILE:HD13	1.90	0.54
1:A:485:LEU:HD23	1:A:515:LYS:HD2	1.88	0.54
1:A:490:SER:HB3	1:A:493:ASP:CG	2.32	0.54
1:A:545:THR:HG21	1:A:599:ARG:HH12	1.71	0.54
1:A:999:GLY:O	1:A:1003:PHE:N	2.38	0.54
2:B:9:G:C2	2:B:22:A:N3	2.75	0.54
1:A:41:THR:HB	1:A:304:MSE:C	2.26	0.54
1:A:361:TRP:CD1	1:A:361:TRP:H	2.26	0.54
1:A:511:TRP:CE3	1:A:530:ALA:HB3	2.38	0.54
1:A:537:LEU:HA	1:A:541:TYR:HB3	1.88	0.54
1:A:634:LYS:O	1:A:634:LYS:HD3	2.08	0.54
1:A:689:GLN:CB	2:B:20:G:O2'	2.49	0.54
1:A:689:GLN:HA	1:A:689:GLN:NE2	2.22	0.54
1:A:72:ASP:HA	1:A:75:LEU:HD12	1.90	0.54
1:A:185:ARG:H	1:A:188:LYS:HB2	1.72	0.54
1:A:200:GLU:OE1	1:A:200:GLU:HA	2.08	0.54
1:A:548:ASN:N	1:A:549:PRO:HD2	2.22	0.54
1:A:590:LYS:HG2	1:A:591:ARG:H	1.72	0.54
1:A:134:GLU:O	1:A:138:LEU:N	2.41	0.54
1:A:135:TYR:CD1	1:A:135:TYR:C	2.84	0.54
1:A:422:GLY:HA3	1:A:426:LYS:O	2.08	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:897:SER:HB2	1:A:938:GLU:CD	2.32	0.54
1:A:199:LEU:HD12	1:A:199:LEU:C	2.32	0.54
1:A:637:GLU:HB3	1:A:888:PRO:HB3	1.89	0.54
1:A:788:ASP:N	1:A:788:ASP:OD1	2.41	0.54
1:A:817:TYR:CZ	1:A:849:MSE:HE2	2.43	0.54
1:A:927:MSE:O	1:A:930:MSE:HG2	2.07	0.54
1:A:616:ASN:HB3	1:A:627:THR:O	2.07	0.54
1:A:843:GLN:OE1	1:A:844:LYS:N	2.41	0.54
1:A:1048:TYR:HD1	1:A:1049:LEU:N	2.05	0.54
1:A:50:GLN:HB2	1:A:138:LEU:HD12	1.90	0.53
1:A:139:LEU:O	1:A:143:GLN:HA	2.08	0.53
1:A:307:ASN:HD21	1:A:474:PRO:HA	1.72	0.53
1:A:1026:MSE:O	1:A:1030:LEU:N	2.40	0.53
1:A:83:MSE:SE	1:A:131:MSE:HE1	2.59	0.53
1:A:319:ASN:OD1	1:A:466:ILE:CD1	2.57	0.53
1:A:646:TYR:CB	1:A:875:ILE:CD1	2.86	0.53
1:A:726:THR:H	1:A:770:ASN:CG	2.14	0.53
1:A:79:TRP:O	1:A:131:MSE:CB	2.50	0.53
1:A:633:LYS:H	1:A:633:LYS:CD	2.17	0.53
1:A:646:TYR:HB2	1:A:875:ILE:HD11	1.91	0.53
1:A:727:MSE:N	1:A:735:ILE:O	2.36	0.53
1:A:743:PHE:CD1	1:A:743:PHE:C	2.85	0.53
1:A:368:ILE:HB	1:A:373:ILE:HG21	1.89	0.53
1:A:760:TYR:HE2	1:A:785:LEU:HD22	1.72	0.53
1:A:397:ASP:N	1:A:397:ASP:OD1	2.40	0.53
1:A:719:LEU:CB	1:A:740:MSE:SE	3.02	0.53
1:A:980:LEU:HD13	1:A:980:LEU:N	2.23	0.53
1:A:245:GLN:HE21	1:A:249:LEU:HD23	1.68	0.53
1:A:352:TYR:HE1	1:A:434:ARG:CB	1.93	0.53
1:A:495:LEU:H	1:A:495:LEU:HD13	1.74	0.53
1:A:660:GLU:HG2	1:A:663:ALA:CB	2.38	0.53
1:A:967:THR:HA	1:A:1037:GLN:HA	1.89	0.53
1:A:85:ILE:HG22	1:A:125:LYS:CD	2.38	0.53
1:A:156:MSE:SE	1:A:176:MSE:CE	3.07	0.53
1:A:602:ASN:C	1:A:603:LEU:HD23	2.33	0.53
1:A:835:PRO:HB2	1:A:836:PRO:CD	2.38	0.53
1:A:978:GLU:OE2	1:A:1042:SER:HA	2.08	0.53
1:A:66:LYS:HD2	1:A:66:LYS:N	2.21	0.53
1:A:66:LYS:HZ1	1:A:71:ASP:CG	2.16	0.53
1:A:729:ASP:O	1:A:732:GLY:N	2.42	0.53
1:A:896:ILE:CG1	1:A:941:PRO:HD3	2.37	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:948:ASP:HB3	1:A:951:VAL:CB	2.39	0.53
1:A:962:ARG:O	1:A:1042:SER:N	2.42	0.53
1:A:201:GLU:HB3	1:A:203:THR:CG2	2.38	0.53
1:A:377:TRP:CH2	1:A:436:LEU:CD2	2.92	0.53
1:A:1051:THR:HB	1:A:1052:TYR:CD1	2.43	0.53
1:A:135:TYR:HE1	1:A:139:LEU:HD11	1.74	0.53
1:A:347:PHE:CE2	1:A:432:LEU:CD1	2.92	0.53
1:A:646:TYR:CD1	1:A:646:TYR:C	2.86	0.53
1:A:743:PHE:O	1:A:746:ILE:HB	2.09	0.53
1:A:828:SER:O	1:A:828:SER:OG	2.20	0.53
1:A:949:PRO:HG2	1:A:1054:LEU:HG	1.90	0.53
1:A:319:ASN:ND2	1:A:467:ASN:HB2	2.24	0.52
1:A:570:LEU:HD11	1:A:574:GLN:CB	2.34	0.52
1:A:1054:LEU:N	1:A:1054:LEU:CD2	2.72	0.52
1:A:164:LEU:CD1	1:A:164:LEU:N	2.72	0.52
1:A:210:GLN:NE2	1:A:214:ILE:HD11	2.24	0.52
1:A:341:GLY:HA3	1:A:455:LEU:HD22	1.91	0.52
1:A:452:ILE:HG13	1:A:453:THR:N	2.24	0.52
1:A:455:LEU:HD12	1:A:459:HIS:HB2	1.91	0.52
1:A:1009:LEU:HD23	1:A:1029:ILE:HD13	1.89	0.52
1:A:116:TYR:C	1:A:116:TYR:HD1	2.18	0.52
1:A:141:GLU:O	1:A:143:GLN:HG3	2.09	0.52
1:A:357:THR:HG23	1:A:359:VAL:CB	2.34	0.52
1:A:367:HIS:C	1:A:368:ILE:CG1	2.63	0.52
1:A:674:LEU:CD1	1:A:675:PRO:HD2	2.24	0.52
1:A:817:TYR:CD1	1:A:849:MSE:HE2	2.43	0.52
1:A:515:LYS:NZ	1:A:526:LYS:HE3	2.24	0.52
1:A:535:ARG:HD2	2:B:23:C:N4	2.24	0.52
1:A:669:ILE:HG21	1:A:1052:TYR:CZ	2.43	0.52
1:A:671:TYR:CZ	1:A:1083:LEU:HD11	2.39	0.52
1:A:854:LEU:N	1:A:854:LEU:CD1	2.73	0.52
1:A:169:ALA:CB	1:A:305:LEU:CD2	2.88	0.52
1:A:345:GLU:C	1:A:347:PHE:N	2.66	0.52
1:A:380:LEU:N	1:A:380:LEU:CD1	2.72	0.52
1:A:558:ARG:CG	1:A:558:ARG:NH1	2.73	0.52
1:A:669:ILE:CG2	1:A:1052:TYR:CZ	2.92	0.52
1:A:821:LEU:CD1	1:A:822:LEU:CD2	2.79	0.52
1:A:1030:LEU:CG	1:A:1038:LEU:CD1	2.88	0.52
1:A:1058:ALA:HB2	1:A:1071:CYS:HB3	1.91	0.52
1:A:47:LEU:HA	1:A:50:GLN:CG	2.40	0.52
1:A:66:LYS:CD	1:A:66:LYS:N	2.73	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:70:SER:HB2	1:A:112:GLN:HG3	1.90	0.52
1:A:356:ASP:OD1	1:A:356:ASP:N	2.42	0.52
1:A:357:THR:CG2	1:A:359:VAL:CB	2.88	0.52
1:A:399:LYS:NZ	1:A:399:LYS:CB	2.73	0.52
1:A:650:ILE:O	1:A:801:ASN:CG	2.52	0.52
1:A:797:SER:HB3	2:B:11:C:OP1	2.08	0.52
1:A:33:PHE:CE2	1:A:516:VAL:HG12	2.45	0.52
1:A:45:PHE:CE1	1:A:471:GLN:OE1	2.63	0.52
1:A:293:VAL:CG2	1:A:294:GLY:N	2.73	0.52
1:A:709:LYS:HA	1:A:712:VAL:HG11	1.91	0.52
1:A:755:TYR:O	1:A:758:MSE:HG3	2.10	0.52
1:A:772:SER:OG	1:A:820:HIS:HB3	2.10	0.52
1:A:937:VAL:O	1:A:937:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:900:THR:O	1:A:900:THR:HG23	2.10	0.52
1:A:1006:THR:CG2	1:A:1007:TYR:N	2.72	0.52
1:A:53:GLY:O	1:A:132:ARG:HA	2.09	0.52
1:A:67:ASP:O	1:A:69:ILE:HD12	2.04	0.52
1:A:655:THR:HG21	1:A:1074:ASP:C	2.34	0.52
1:A:672:ASN:N	1:A:954:ASN:OD1	2.43	0.52
1:A:715:ARG:NH2	1:A:784:GLU:HB3	2.25	0.52
1:A:963:TYR:N	1:A:963:TYR:HD1	2.07	0.52
1:A:965:ARG:CZ	1:A:1047:PHE:CE2	2.93	0.52
1:A:972:THR:HG23	1:A:975:ASN:HD21	1.74	0.52
1:A:156:MSE:SE	1:A:176:MSE:HE1	2.61	0.51
1:A:327:ILE:HG12	1:A:331:ASN:HB2	1.92	0.51
1:A:347:PHE:HA	1:A:435:TYR:CD2	2.45	0.51
1:A:364:HIS:CD2	2:B:32:A:C8	2.98	0.51
1:A:674:LEU:HD21	1:A:1086:ILE:HD11	1.92	0.51
1:A:700:TYR:HH	1:A:703:VAL:HG12	1.72	0.51
1:A:759:LYS:HZ2	1:A:763:LEU:HD21	1.73	0.51
1:A:763:LEU:N	1:A:763:LEU:CD2	2.72	0.51
1:A:823:LYS:NZ	1:A:823:LYS:CB	2.73	0.51
1:A:1004:LEU:HD13	1:A:1009:LEU:HD12	1.92	0.51
1:A:215:ILE:HG23	1:A:240:ILE:CD1	2.40	0.51
1:A:363:LEU:CD2	1:A:363:LEU:N	2.73	0.51
1:A:439:ARG:HG2	1:A:442:ASP:OD2	2.10	0.51
1:A:449:ILE:HA	1:A:452:ILE:CD1	2.41	0.51
1:A:1051:THR:HB	1:A:1052:TYR:HD1	1.75	0.51
2:B:9:G:C6	2:B:22:A:N6	2.78	0.51
1:A:296:TYR:C	1:A:296:TYR:CD1	2.86	0.51
1:A:394:LEU:N	1:A:394:LEU:CD2	2.73	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:740:MSE:HE2	1:A:740:MSE:N	2.25	0.51
1:A:753:LEU:HD21	1:A:791:LEU:HB2	1.91	0.51
1:A:794:LEU:HD13	1:A:794:LEU:C	2.36	0.51
1:A:85:ILE:HG22	1:A:125:LYS:HD3	1.92	0.51
1:A:245:GLN:CD	1:A:249:LEU:HB2	2.36	0.51
1:A:440:LYS:NZ	1:A:441:ASP:HA	2.25	0.51
1:A:615:ILE:N	1:A:615:ILE:CD1	2.73	0.51
1:A:617:ILE:HG12	1:A:626:VAL:HG13	1.91	0.51
1:A:715:ARG:HH22	1:A:784:GLU:HB3	1.76	0.51
1:A:746:ILE:HD11	1:A:763:LEU:HD11	1.92	0.51
1:A:791:LEU:CD2	1:A:791:LEU:H	2.07	0.51
1:A:33:PHE:O	1:A:37:LEU:HG	2.11	0.51
1:A:58:ASP:O	1:A:61:SER:OG	2.23	0.51
1:A:307:ASN:ND2	1:A:474:PRO:CB	2.73	0.51
1:A:387:TYR:HE1	1:A:391:ILE:CG1	2.20	0.51
1:A:678:PRO:HB3	1:A:1079:TYR:CZ	2.45	0.51
1:A:897:SER:HB2	1:A:938:GLU:OE2	2.11	0.51
1:A:960:ARG:CZ	1:A:1068:PHE:CZ	2.93	0.51
1:A:980:LEU:N	1:A:980:LEU:CD1	2.73	0.51
1:A:164:LEU:HD22	1:A:165:SER:CB	2.41	0.51
1:A:208:VAL:CG1	1:A:211:LEU:H	2.24	0.51
1:A:538:GLU:O	1:A:558:ARG:HG3	2.10	0.51
1:A:547:GLU:C	1:A:549:PRO:CD	2.84	0.51
1:A:738:ASP:OD1	1:A:740:MSE:N	2.43	0.51
1:A:762:LYS:HG2	1:A:809:VAL:HG11	1.91	0.51
1:A:933:GLY:C	1:A:934:LEU:HD12	2.36	0.51
1:A:1057:ASP:N	1:A:1057:ASP:OD1	2.41	0.51
1:A:80:PHE:N	1:A:80:PHE:CD1	2.73	0.51
1:A:198:LEU:HD21	1:A:205:ILE:HG21	1.93	0.51
1:A:373:ILE:HG13	1:A:376:LEU:CD2	2.40	0.51
1:A:558:ARG:NH2	1:A:604:LEU:CD1	2.73	0.51
1:A:671:TYR:CZ	1:A:1083:LEU:HD12	2.23	0.51
1:A:856:LEU:HD23	1:A:856:LEU:C	2.36	0.51
1:A:969:SER:HA	1:A:1023:LYS:HZ2	1.75	0.51
1:A:387:TYR:CD2	1:A:406:TYR:CD2	2.99	0.51
1:A:644:LEU:HD23	1:A:879:ALA:HB2	1.93	0.51
1:A:774:GLN:CB	1:A:777:GLU:HG3	2.30	0.51
1:A:156:MSE:HE2	1:A:162:ILE:HG12	1.88	0.51
1:A:174:SER:HA	1:A:178:GLY:HA3	1.92	0.51
1:A:335:TYR:O	1:A:335:TYR:HD1	1.94	0.51
1:A:380:LEU:HB3	1:A:437:TYR:CE1	2.46	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:553:LEU:H	1:A:553:LEU:CD1	1.98	0.51
1:A:712:VAL:HG13	1:A:713:GLU:N	2.26	0.51
1:A:771:HIS:ND1	1:A:771:HIS:N	2.59	0.51
1:A:603:LEU:O	1:A:605:PRO:HD3	2.11	0.51
1:A:843:GLN:HB2	1:A:850:PHE:CE2	2.43	0.51
1:A:12:ARG:HB2	1:A:630:THR:O	2.10	0.50
1:A:534:THR:HG22	1:A:591:ARG:HH22	1.75	0.50
1:A:768:ILE:HD12	1:A:778:TYR:CD2	2.46	0.50
1:A:47:LEU:HD23	1:A:48:TRP:N	2.25	0.50
1:A:169:ALA:CB	1:A:306:GLU:HB2	2.41	0.50
1:A:374:LYS:HE2	1:A:449:ILE:HD13	1.93	0.50
1:A:411:CYS:CB	1:A:731:ARG:O	2.52	0.50
1:A:419:GLU:O	1:A:423:LYS:N	2.43	0.50
1:A:689:GLN:HB2	2:B:20:G:C4'	2.39	0.50
1:A:719:LEU:HB3	1:A:740:MSE:HE3	1.90	0.50
1:A:56:ASP:HB2	1:A:59:ILE:HD12	1.68	0.50
1:A:333:ILE:HD11	1:A:457:LYS:HZ2	1.75	0.50
1:A:511:TRP:HZ2	2:B:3:U:N3	2.08	0.50
1:A:558:ARG:CD	1:A:558:ARG:N	2.73	0.50
1:A:587:LYS:O	1:A:590:LYS:HD2	2.11	0.50
1:A:1014:VAL:O	1:A:1014:VAL:HG22	2.12	0.50
1:A:566:GLY:C	1:A:568:PRO:HD3	2.36	0.50
1:A:1091:LYS:O	1:A:1091:LYS:HD3	2.12	0.50
1:A:50:GLN:CG	1:A:138:LEU:HD12	2.41	0.50
1:A:170:HIS:HD2	1:A:298:LEU:HD21	1.76	0.50
1:A:542:TYR:CE2	1:A:595:LEU:HG	2.47	0.50
1:A:971:LEU:HD11	1:A:975:ASN:HB2	1.93	0.50
1:A:13:LYS:C	1:A:629:ALA:HB1	2.37	0.50
1:A:162:ILE:HG22	1:A:163:GLY:N	2.25	0.50
1:A:213:SER:O	1:A:217:LYS:HB3	2.12	0.50
1:A:455:LEU:CD1	1:A:459:HIS:HD2	2.15	0.50
1:A:570:LEU:HB3	2:B:18:U:C5	2.46	0.50
1:A:642:VAL:HG21	1:A:886:TYR:HB2	1.93	0.50
1:A:854:LEU:HD13	1:A:854:LEU:H	1.75	0.50
1:A:30:LEU:C	1:A:30:LEU:CD1	2.85	0.50
1:A:145:SER:HB2	1:A:148:ASP:CB	2.35	0.50
1:A:511:TRP:NE1	2:B:2:U:C5	2.80	0.50
1:A:746:ILE:HG22	1:A:756:PHE:CD2	2.44	0.50
1:A:759:LYS:HZ3	1:A:763:LEU:CD2	2.22	0.50
1:A:779:ARG:NH1	1:A:846:ASP:OD2	2.45	0.50
1:A:83:MSE:HB3	1:A:84:PRO:HD3	1.89	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:320:CYS:SG	1:A:321:LYS:N	2.85	0.50
1:A:722:TYR:HD1	1:A:722:TYR:N	2.09	0.50
1:A:944:THR:CB	1:A:947:GLN:HG3	2.39	0.50
1:A:964:SER:N	1:A:1040:PHE:O	2.40	0.50
1:A:37:LEU:HB3	1:A:476:PHE:CZ	2.47	0.50
1:A:41:THR:CB	1:A:304:MSE:O	2.33	0.50
1:A:63:THR:HG23	1:A:157:TYR:HE1	1.76	0.50
1:A:353:PHE:CD1	1:A:353:PHE:C	2.90	0.50
1:A:45:PHE:HD2	1:A:312:ILE:HD11	1.77	0.49
1:A:574:GLN:HE21	1:A:574:GLN:HA	1.77	0.49
1:A:928:VAL:HG21	1:A:936:PHE:HB2	1.94	0.49
1:A:960:ARG:HB3	1:A:1048:TYR:OH	2.12	0.49
1:A:960:ARG:NE	1:A:1068:PHE:CE2	2.80	0.49
1:A:973:GLU:OE2	1:A:976:ARG:HD2	2.12	0.49
1:A:980:LEU:HD13	1:A:980:LEU:H	1.77	0.49
1:A:296:TYR:CB	1:A:301:TYR:CD2	2.90	0.49
1:A:371:SER:HB2	1:A:374:LYS:HD2	1.95	0.49
1:A:387:TYR:CE1	1:A:391:ILE:CG1	2.89	0.49
1:A:510:ILE:HG21	1:A:536:PHE:HE2	1.76	0.49
1:A:288:PHE:C	1:A:288:PHE:CD1	2.85	0.49
1:A:504:ASN:O	1:A:505:GLN:C	2.56	0.49
1:A:539:GLU:O	1:A:558:ARG:CD	2.60	0.49
1:A:656:TYR:CE2	1:A:682:GLY:HA3	2.47	0.49
1:A:794:LEU:C	1:A:794:LEU:CD1	2.85	0.49
1:A:907:SER:HA	1:A:910:SER:CB	2.42	0.49
1:A:348:PHE:HB3	1:A:360:LYS:NZ	2.27	0.49
1:A:648:ALA:C	1:A:916:LEU:HD21	2.38	0.49
1:A:979:ILE:CG1	1:A:980:LEU:CD1	2.89	0.49
1:A:1047:PHE:CE2	1:A:1070:VAL:CG1	2.95	0.49
1:A:132:ARG:HG3	1:A:132:ARG:HH11	1.77	0.49
1:A:243:ILE:HD13	1:A:243:ILE:N	2.26	0.49
1:A:665:GLY:O	1:A:668:VAL:CG2	2.61	0.49
1:A:711:HIS:NE2	1:A:791:LEU:HD23	2.27	0.49
1:A:721:LYS:HB2	1:A:722:TYR:CD1	2.46	0.49
1:A:1037:GLN:HG3	1:A:1037:GLN:O	2.12	0.49
1:A:12:ARG:HA	1:A:630:THR:O	2.12	0.49
1:A:47:LEU:HD23	1:A:47:LEU:C	2.37	0.49
1:A:671:TYR:OH	1:A:1083:LEU:CD1	2.41	0.49
1:A:818:PHE:CZ	1:A:849:MSE:HG2	2.47	0.49
1:A:1022:PHE:C	1:A:1022:PHE:CD1	2.91	0.49
1:A:1054:LEU:HD12	1:A:1079:TYR:CG	2.39	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:66:LYS:C	1:A:69:ILE:HD12	2.38	0.49
1:A:92:VAL:CG1	1:A:93:SER:N	2.75	0.49
1:A:570:LEU:HD13	1:A:574:GLN:CB	2.39	0.49
1:A:759:LYS:O	1:A:763:LEU:HD23	2.12	0.49
1:A:1020:GLU:HA	1:A:1020:GLU:OE2	2.12	0.49
1:A:1024:GLN:O	1:A:1024:GLN:NE2	2.41	0.49
1:A:307:ASN:CG	1:A:474:PRO:HB2	2.37	0.49
1:A:493:ASP:O	1:A:497:HIS:HB3	2.13	0.49
1:A:506:VAL:CG1	1:A:599:ARG:HH11	2.20	0.49
1:A:807:PHE:CE1	1:A:863:LYS:HE2	2.48	0.49
1:A:923:LYS:HD3	1:A:923:LYS:C	2.35	0.49
1:A:1000:ALA:O	1:A:1003:PHE:CB	2.56	0.49
1:A:387:TYR:O	1:A:391:ILE:N	2.45	0.49
1:A:488:ILE:CG1	1:A:512:ILE:HB	2.41	0.49
1:A:495:LEU:HD13	1:A:495:LEU:N	2.28	0.49
1:A:775:ALA:HB1	1:A:821:LEU:CA	2.43	0.49
1:A:895:ASN:CB	1:A:913:MSE:CE	2.57	0.49
1:A:931:HIS:ND1	1:A:931:HIS:N	2.60	0.49
2:B:9:G:C2	2:B:22:A:C5	3.00	0.49
1:A:12:ARG:HB2	1:A:630:THR:C	2.38	0.49
1:A:489:ILE:HB	1:A:511:TRP:O	2.13	0.49
1:A:546:SER:CB	1:A:602:ASN:ND2	2.68	0.49
1:A:574:GLN:NE2	1:A:574:GLN:CA	2.73	0.49
1:A:755:TYR:O	1:A:758:MSE:CG	2.61	0.49
1:A:923:LYS:O	1:A:926:GLU:HB3	2.13	0.49
1:A:925:LYS:CB	1:A:936:PHE:CD2	2.88	0.49
1:A:998:GLU:O	1:A:1001:MSE:HB2	2.13	0.49
1:A:1022:PHE:HD1	1:A:1022:PHE:C	2.21	0.49
1:A:168:THR:HG23	1:A:171:TYR:CB	2.43	0.48
1:A:373:ILE:HD11	1:A:433:LEU:HD22	1.94	0.48
1:A:527:HIS:HD2	4:A:1201:CIT:C3	2.21	0.48
1:A:634:LYS:HE2	1:A:932:GLN:HA	1.94	0.48
1:A:740:MSE:CE	1:A:740:MSE:CA	2.86	0.48
1:A:78:ASN:N	1:A:78:ASN:ND2	2.60	0.48
1:A:326:GLN:CA	1:A:326:GLN:NE2	2.73	0.48
1:A:377:TRP:CZ3	1:A:437:TYR:HD1	2.31	0.48
1:A:50:GLN:HE22	1:A:137:ARG:NH2	2.11	0.48
1:A:279:TRP:HB3	1:A:282:MSE:HB2	1.96	0.48
1:A:319:ASN:OD1	1:A:466:ILE:HD12	2.12	0.48
1:A:449:ILE:HA	1:A:452:ILE:HG12	1.96	0.48
1:A:634:LYS:HG3	1:A:932:GLN:CG	2.40	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:664:ASN:ND2	1:A:664:ASN:N	2.59	0.48
1:A:859:LYS:HD2	1:A:863:LYS:HD2	1.95	0.48
1:A:1013:ASP:OD1	1:A:1014:VAL:HG12	2.13	0.48
1:A:1039:LEU:N	1:A:1039:LEU:CD1	2.73	0.48
2:B:17:U:O2	2:B:17:U:O2'	2.27	0.48
1:A:177:PHE:HB2	1:A:296:TYR:CE2	2.48	0.48
1:A:371:SER:HA	1:A:374:LYS:HD2	1.96	0.48
1:A:377:TRP:NE1	1:A:445:VAL:HG13	2.27	0.48
1:A:485:LEU:HD13	1:A:485:LEU:N	2.28	0.48
1:A:503:ARG:HD2	2:B:2:U:O2'	2.14	0.48
1:A:640:TYR:CE1	1:A:890:LEU:HD23	2.49	0.48
1:A:698:LEU:O	1:A:800:SER:HA	2.13	0.48
1:A:1055:ASP:CB	1:A:1071:CYS:CB	2.92	0.48
1:A:517:LEU:CD1	1:A:517:LEU:C	2.86	0.48
1:A:644:LEU:HD12	1:A:657:ALA:O	2.13	0.48
1:A:737:ILE:N	1:A:737:ILE:CD1	2.76	0.48
1:A:15:TYR:N	1:A:628:LEU:O	2.46	0.48
1:A:64:ALA:C	1:A:66:LYS:CD	2.86	0.48
1:A:182:LYS:CE	1:A:183:ASN:HB2	2.44	0.48
1:A:361:TRP:HZ2	1:A:429:LEU:HD11	1.76	0.48
1:A:368:ILE:HG22	1:A:373:ILE:HD12	1.95	0.48
1:A:934:LEU:CD1	1:A:934:LEU:N	2.76	0.48
1:A:352:TYR:CZ	1:A:434:ARG:O	2.66	0.48
1:A:380:LEU:HD13	1:A:380:LEU:H	1.78	0.48
1:A:399:LYS:NZ	1:A:399:LYS:HB3	2.25	0.48
1:A:940:ASN:OD1	1:A:940:ASN:N	2.47	0.48
1:A:997:ASN:O	1:A:1001:MSE:HG2	2.14	0.48
1:A:12:ARG:CZ	3:C:3:U:C6	2.97	0.48
1:A:12:ARG:HA	1:A:631:LYS:HA	1.96	0.48
1:A:55:ILE:HD11	1:A:162:ILE:HG21	1.95	0.48
1:A:79:TRP:CZ3	1:A:101:PHE:CD2	2.98	0.48
1:A:82:VAL:HG11	1:A:466:ILE:CG2	2.44	0.48
1:A:198:LEU:HD22	1:A:205:ILE:HD13	1.95	0.48
1:A:559:THR:OG1	1:A:562:ASN:N	2.40	0.48
1:A:1055:ASP:HB2	1:A:1071:CYS:CB	2.44	0.48
1:A:1072:ASN:OD1	1:A:1075:LEU:N	2.35	0.48
2:B:29:A:H5'	2:B:30:G:OP2	2.14	0.48
1:A:90:GLN:C	1:A:129:LYS:HD3	2.38	0.48
1:A:293:VAL:HG21	1:A:301:TYR:CZ	2.49	0.48
1:A:329:ALA:C	1:A:333:ILE:HB	2.28	0.48
1:A:345:GLU:C	1:A:347:PHE:H	2.22	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:487:LYS:O	1:A:513:GLU:O	2.32	0.48
1:A:675:PRO:C	1:A:676:VAL:HG13	2.38	0.48
1:A:953:LYS:O	1:A:953:LYS:HG3	2.13	0.48
1:A:41:THR:HA	1:A:304:MSE:HB3	1.96	0.48
1:A:47:LEU:CA	1:A:50:GLN:HG3	2.41	0.48
1:A:111:ILE:H	1:A:111:ILE:HG13	1.48	0.48
1:A:343:ILE:C	1:A:343:ILE:HD12	2.38	0.48
1:A:357:THR:O	1:A:358:ASN:C	2.55	0.48
1:A:440:LYS:NZ	1:A:441:ASP:CB	2.72	0.48
1:A:449:ILE:O	1:A:452:ILE:HG13	2.14	0.48
1:A:42:PRO:HA	1:A:471:GLN:HE22	1.78	0.47
1:A:347:PHE:CA	1:A:435:TYR:CG	2.97	0.47
1:A:394:LEU:HD22	1:A:394:LEU:N	2.28	0.47
1:A:758:MSE:HE1	1:A:805:VAL:CG1	2.44	0.47
1:A:779:ARG:HD3	1:A:783:PHE:CE1	2.48	0.47
1:A:156:MSE:O	1:A:161:CYS:SG	2.67	0.47
1:A:348:PHE:CD1	1:A:360:LYS:HB3	2.49	0.47
1:A:460:LYS:O	1:A:461:VAL:C	2.57	0.47
1:A:681:SER:CB	1:A:1075:LEU:CD2	2.91	0.47
1:A:790:LYS:HG2	1:A:791:LEU:HD22	1.96	0.47
1:A:890:LEU:HD13	1:A:935:GLU:O	2.14	0.47
2:B:27:U:O2	3:C:2:A:H2	1.97	0.47
1:A:17:THR:HG22	1:A:533:SER:N	2.30	0.47
1:A:39:ASP:C	1:A:42:PRO:HD2	2.39	0.47
1:A:177:PHE:HB3	1:A:286:LYS:HE2	1.97	0.47
1:A:293:VAL:HG22	1:A:294:GLY:N	2.29	0.47
1:A:642:VAL:O	1:A:889:VAL:HB	2.14	0.47
1:A:1049:LEU:N	1:A:1049:LEU:CD2	2.74	0.47
1:A:183:ASN:O	1:A:188:LYS:HG3	2.15	0.47
1:A:347:PHE:CD1	1:A:347:PHE:C	2.92	0.47
1:A:812:SER:O	1:A:816:THR:HB	2.14	0.47
1:A:12:ARG:NH2	3:C:3:U:N1	2.62	0.47
1:A:119:SER:OG	1:A:466:ILE:HD13	2.15	0.47
1:A:713:GLU:OE2	1:A:713:GLU:HA	2.14	0.47
1:A:729:ASP:CB	1:A:733:ASN:O	2.63	0.47
1:A:1091:LYS:HE2	1:A:1091:LYS:CA	2.23	0.47
1:A:46:GLU:O	1:A:49:ASN:HB2	2.15	0.47
1:A:296:TYR:CA	1:A:301:TYR:CZ	2.97	0.47
1:A:487:LYS:HB3	1:A:487:LYS:HE3	1.58	0.47
1:A:52:GLY:O	1:A:78:ASN:HB3	2.14	0.47
1:A:79:TRP:HZ3	1:A:101:PHE:CE2	2.32	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:135:TYR:HD1	1:A:135:TYR:C	2.22	0.47
1:A:158:LYS:HD2	1:A:158:LYS:O	2.15	0.47
1:A:206:ASN:ND2	1:A:206:ASN:C	2.73	0.47
1:A:297:TYR:O	1:A:301:TYR:N	2.41	0.47
1:A:377:TRP:CH2	1:A:437:TYR:CD1	3.03	0.47
1:A:402:ARG:HA	1:A:402:ARG:HD2	1.59	0.47
1:A:478:PHE:N	1:A:615:ILE:O	2.45	0.47
1:A:489:ILE:H	1:A:512:ILE:HA	1.78	0.47
1:A:679:ILE:HG23	1:A:886:TYR:OH	2.15	0.47
1:A:802:LEU:HA	1:A:805:VAL:CG2	2.45	0.47
1:A:890:LEU:CD1	1:A:937:VAL:HG13	2.45	0.47
1:A:296:TYR:HD2	1:A:301:TYR:CG	2.32	0.47
1:A:619:LYS:NZ	1:A:621:GLY:O	2.48	0.47
1:A:681:SER:C	1:A:1075:LEU:HD21	2.40	0.47
1:A:64:ALA:HA	1:A:66:LYS:CD	2.38	0.47
1:A:96:ASN:HA	1:A:99:ASN:HD22	1.79	0.47
1:A:211:LEU:CD1	1:A:262:LEU:HD22	2.45	0.47
1:A:298:LEU:HD12	1:A:302:SER:HB3	1.97	0.47
1:A:528:HIS:HB2	2:B:1:A:H5'	1.96	0.47
1:A:590:LYS:CG	1:A:591:ARG:N	2.78	0.47
1:A:734:ASN:N	1:A:734:ASN:OD1	2.47	0.47
1:A:1030:LEU:CD1	1:A:1038:LEU:HG	2.45	0.47
1:A:78:ASN:H	1:A:78:ASN:HD22	1.64	0.46
1:A:213:SER:O	1:A:217:LYS:N	2.33	0.46
1:A:414:ILE:HD13	1:A:433:LEU:CB	2.45	0.46
1:A:452:ILE:HG13	1:A:453:THR:H	1.79	0.46
1:A:455:LEU:CD1	1:A:459:HIS:CD2	2.95	0.46
1:A:698:LEU:O	1:A:800:SER:HB2	2.14	0.46
1:A:1030:LEU:HG	1:A:1038:LEU:CD1	2.42	0.46
1:A:39:ASP:O	1:A:42:PRO:HD2	2.16	0.46
1:A:165:SER:O	1:A:165:SER:OG	2.23	0.46
1:A:361:TRP:CZ3	2:B:32:A:O2'	2.57	0.46
1:A:461:VAL:O	1:A:464:GLN:CG	2.58	0.46
1:A:640:TYR:CZ	1:A:890:LEU:HD23	2.50	0.46
1:A:892:LYS:HZ1	1:A:1086:ILE:HA	1.77	0.46
1:A:135:TYR:CE1	1:A:139:LEU:CD1	2.94	0.46
1:A:205:ILE:HG12	1:A:262:LEU:CD2	2.44	0.46
1:A:247:TYR:N	1:A:247:TYR:CD1	2.82	0.46
1:A:440:LYS:HZ2	1:A:441:ASP:CA	2.26	0.46
1:A:638:LYS:HD2	1:A:638:LYS:HA	1.77	0.46
1:A:641:LYS:HB3	1:A:641:LYS:HE3	1.47	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:642:VAL:O	1:A:889:VAL:CA	2.62	0.46
1:A:897:SER:C	1:A:899:THR:N	2.68	0.46
2:B:10:C:N3	2:B:21:C:O2	2.48	0.46
2:B:23:C:O5'	2:B:23:C:H6	1.98	0.46
2:B:26:U:O5'	2:B:26:U:H6	1.98	0.46
1:A:17:THR:OG1	1:A:531:LEU:CD1	2.57	0.46
1:A:97:LEU:HD21	1:A:117:PHE:HB3	1.97	0.46
1:A:125:LYS:HD3	1:A:125:LYS:HA	1.52	0.46
1:A:142:LEU:CD2	1:A:142:LEU:N	2.77	0.46
1:A:574:GLN:CD	1:A:574:GLN:N	2.73	0.46
1:A:341:GLY:CA	1:A:455:LEU:CD2	2.94	0.46
1:A:535:ARG:CD	2:B:23:C:C4	2.98	0.46
1:A:663:ALA:HB3	1:A:676:VAL:HA	1.97	0.46
1:A:947:GLN:HB2	1:A:1080:ASN:CG	2.41	0.46
1:A:976:ARG:HB2	1:A:1019:LEU:HD21	1.97	0.46
1:A:83:MSE:SE	1:A:131:MSE:CE	3.14	0.46
1:A:663:ALA:CB	1:A:676:VAL:HA	2.45	0.46
1:A:691:ARG:HB3	1:A:691:ARG:NH1	2.30	0.46
1:A:742:ASP:O	1:A:746:ILE:HG13	2.15	0.46
1:A:799:LEU:HD22	1:A:799:LEU:HA	1.73	0.46
1:A:864:VAL:HG13	1:A:915:TRP:CZ3	2.51	0.46
1:A:1007:TYR:HB3	1:A:1009:LEU:HD21	1.97	0.46
1:A:1040:PHE:HB2	1:A:1041:PRO:CD	2.40	0.46
1:A:82:VAL:HA	1:A:128:TRP:HA	1.98	0.46
1:A:270:LEU:N	1:A:270:LEU:HD23	2.31	0.46
1:A:333:ILE:HG22	1:A:333:ILE:O	2.16	0.46
1:A:352:TYR:CD2	1:A:435:TYR:CA	2.99	0.46
1:A:574:GLN:CD	1:A:574:GLN:H	2.24	0.46
1:A:821:LEU:HD13	1:A:821:LEU:C	2.40	0.46
1:A:1006:THR:HG21	1:A:1063:TRP:CZ3	2.50	0.46
1:A:60:ILE:O	1:A:60:ILE:CG2	2.63	0.46
1:A:93:SER:HB2	1:A:96:ASN:OD1	2.16	0.46
1:A:393:SER:HB3	1:A:394:LEU:HD23	1.97	0.46
1:A:658:ALA:HB2	1:A:882:LEU:HD11	1.96	0.46
1:A:758:MSE:HB2	1:A:758:MSE:HE2	1.36	0.46
1:A:965:ARG:HG3	1:A:1039:LEU:CG	2.42	0.46
1:A:296:TYR:O	1:A:296:TYR:CD1	2.69	0.46
1:A:350:SER:HG	1:A:351:PRO:CD	2.10	0.46
1:A:354:GLU:OE2	1:A:354:GLU:HA	2.14	0.46
1:A:656:TYR:CE2	1:A:682:GLY:CA	2.99	0.46
2:B:7:G:H2'	2:B:7:G:N3	2.30	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:511:TRP:CZ3	1:A:530:ALA:HB3	2.51	0.46
1:A:1030:LEU:CG	1:A:1038:LEU:HG	2.45	0.46
1:A:79:TRP:HD1	1:A:132:ARG:HD3	1.75	0.45
2:B:1:A:O5'	2:B:1:A:N3	2.49	0.45
1:A:83:MSE:HB3	1:A:84:PRO:HD2	1.82	0.45
1:A:211:LEU:CD1	1:A:262:LEU:CD2	2.94	0.45
1:A:345:GLU:O	1:A:346:GLY:C	2.58	0.45
1:A:758:MSE:O	1:A:761:CYS:N	2.50	0.45
1:A:923:LYS:CD	1:A:927:MSE:CG	2.93	0.45
1:A:933:GLY:C	1:A:934:LEU:HD13	2.40	0.45
1:A:24:HIS:ND1	1:A:24:HIS:C	2.72	0.45
1:A:51:PHE:HD2	1:A:156:MSE:SE	2.43	0.45
1:A:128:TRP:H	1:A:128:TRP:CD1	2.34	0.45
1:A:132:ARG:HH11	1:A:132:ARG:CG	2.29	0.45
1:A:297:TYR:CD1	1:A:297:TYR:N	2.82	0.45
1:A:50:GLN:NE2	1:A:137:ARG:HH21	2.14	0.45
1:A:78:ASN:N	1:A:78:ASN:HD22	2.15	0.45
1:A:189:HIS:O	1:A:189:HIS:CG	2.70	0.45
1:A:357:THR:CG2	1:A:359:VAL:HB	2.45	0.45
1:A:364:HIS:HD2	2:B:32:A:C8	2.34	0.45
1:A:458:LYS:C	1:A:458:LYS:CD	2.85	0.45
1:A:596:GLU:O	1:A:599:ARG:HD3	2.16	0.45
1:A:775:ALA:CB	1:A:821:LEU:CA	2.92	0.45
1:A:896:ILE:HG13	1:A:941:PRO:CD	2.41	0.45
1:A:965:ARG:NE	1:A:1047:PHE:CE2	2.85	0.45
1:A:12:ARG:CA	1:A:630:THR:O	2.65	0.45
1:A:112:GLN:H	1:A:112:GLN:HG2	1.45	0.45
1:A:449:ILE:CA	1:A:452:ILE:HG12	2.47	0.45
1:A:656:TYR:CD2	1:A:682:GLY:C	2.93	0.45
1:A:804:PHE:HE2	1:A:867:LYS:HD2	1.80	0.45
1:A:927:MSE:HB3	1:A:927:MSE:HE2	1.35	0.45
1:A:353:PHE:O	1:A:353:PHE:HD1	1.99	0.45
1:A:488:ILE:HG22	1:A:609:TRP:HH2	1.81	0.45
1:A:1083:LEU:HD22	1:A:1083:LEU:HA	1.70	0.45
1:A:66:LYS:NZ	1:A:71:ASP:OD2	2.48	0.45
1:A:211:LEU:HD13	1:A:262:LEU:CD1	2.47	0.45
1:A:215:ILE:HG23	1:A:240:ILE:HD13	1.99	0.45
1:A:296:TYR:HA	1:A:301:TYR:CZ	2.49	0.45
1:A:338:GLU:N	1:A:339:PRO:CD	2.79	0.45
1:A:504:ASN:O	1:A:506:VAL:N	2.48	0.45
1:A:535:ARG:NE	2:B:23:C:C4	2.85	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:704:LYS:N	1:A:704:LYS:HD2	2.31	0.45
1:A:1026:MSE:O	1:A:1029:ILE:N	2.50	0.45
1:A:1084:VAL:O	1:A:1084:VAL:HG12	2.16	0.45
1:A:17:THR:HG23	1:A:533:SER:CB	2.38	0.45
1:A:396:GLU:OE1	1:A:398:LYS:HE3	2.17	0.45
1:A:400:GLU:O	1:A:400:GLU:HG3	2.12	0.45
1:A:488:ILE:HD11	1:A:628:LEU:HD13	1.99	0.45
1:A:513:GLU:HB2	1:A:528:HIS:NE2	2.29	0.45
1:A:655:THR:HG21	1:A:1074:ASP:HB3	1.99	0.45
1:A:675:PRO:C	1:A:676:VAL:CG1	2.89	0.45
1:A:839:ASP:HA	1:A:842:LYS:CG	2.46	0.45
1:A:1047:PHE:CD2	1:A:1070:VAL:CG1	3.00	0.45
1:A:33:PHE:CD2	1:A:516:VAL:HG12	2.52	0.45
1:A:77:VAL:HG22	1:A:78:ASN:ND2	2.32	0.45
1:A:536:PHE:O	1:A:536:PHE:CD1	2.70	0.45
1:A:1055:ASP:HB2	1:A:1071:CYS:HB2	1.98	0.45
1:A:150:HIS:C	1:A:150:HIS:CD2	2.95	0.45
1:A:198:LEU:CD2	1:A:205:ILE:HB	2.47	0.45
1:A:646:TYR:OH	1:A:921:ALA:HB2	2.17	0.45
1:A:760:TYR:HE2	1:A:785:LEU:CD2	2.27	0.45
1:A:45:PHE:CD2	1:A:312:ILE:HD11	2.52	0.44
1:A:346:GLY:CA	1:A:435:TYR:CZ	3.00	0.44
1:A:385:SER:O	1:A:389:GLU:N	2.45	0.44
1:A:431:GLN:O	1:A:434:ARG:HB2	2.16	0.44
1:A:539:GLU:C	1:A:540:VAL:HG13	2.42	0.44
1:A:542:TYR:CG	1:A:595:LEU:HD21	2.52	0.44
1:A:711:HIS:CD2	1:A:715:ARG:HD3	2.52	0.44
1:A:54:GLY:CA	1:A:135:TYR:HE2	2.14	0.44
1:A:153:LEU:O	1:A:156:MSE:N	2.50	0.44
1:A:307:ASN:HD21	1:A:474:PRO:CA	2.30	0.44
1:A:340:PHE:CE1	1:A:447:LYS:HB3	2.52	0.44
1:A:568:PRO:HG3	1:A:594:ARG:O	2.17	0.44
1:A:911:PHE:CD2	2:B:32:A:N6	2.85	0.44
1:A:1052:TYR:CD1	1:A:1052:TYR:N	2.85	0.44
1:A:16:THR:O	1:A:533:SER:HB2	2.17	0.44
1:A:48:TRP:HA	1:A:51:PHE:HB2	1.99	0.44
1:A:460:LYS:O	1:A:463:LYS:N	2.47	0.44
1:A:803:SER:O	1:A:806:MSE:N	2.49	0.44
1:A:969:SER:HA	1:A:1023:LYS:HZ3	1.82	0.44
1:A:96:ASN:ND2	1:A:96:ASN:N	2.60	0.44
1:A:272:ARG:HA	1:A:272:ARG:HD3	1.30	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:353:PHE:O	1:A:353:PHE:CD1	2.70	0.44
1:A:541:TYR:O	1:A:541:TYR:CD1	2.70	0.44
1:A:711:HIS:O	1:A:715:ARG:HD3	2.16	0.44
1:A:719:LEU:HD22	1:A:719:LEU:HA	1.64	0.44
1:A:722:TYR:CD2	1:A:778:TYR:CE1	3.05	0.44
1:A:1030:LEU:HD21	1:A:1038:LEU:CD2	2.47	0.44
1:A:213:SER:O	1:A:217:LYS:CB	2.65	0.44
1:A:564:TYR:HE1	1:A:603:LEU:O	1.99	0.44
1:A:909:ASN:CB	1:A:941:PRO:O	2.52	0.44
1:A:245:GLN:OE1	1:A:249:LEU:HB2	2.17	0.44
1:A:369:GLY:O	1:A:372:ASN:CB	2.61	0.44
1:A:477:ASN:HB3	1:A:616:ASN:HA	1.99	0.44
1:A:511:TRP:CZ3	1:A:530:ALA:CB	2.99	0.44
1:A:715:ARG:CD	1:A:715:ARG:N	2.81	0.44
1:A:890:LEU:HD13	1:A:890:LEU:HA	1.79	0.44
1:A:47:LEU:C	1:A:50:GLN:HG3	2.40	0.44
1:A:335:TYR:O	1:A:335:TYR:CD1	2.70	0.44
1:A:340:PHE:CE2	1:A:447:LYS:HB3	2.53	0.44
1:A:488:ILE:CG2	1:A:609:TRP:HH2	2.31	0.44
1:A:758:MSE:O	1:A:759:LYS:C	2.60	0.44
1:A:769:ARG:HH11	1:A:769:ARG:CG	2.30	0.44
1:A:857:GLU:HG3	1:A:861:LEU:HD21	1.99	0.44
1:A:11:THR:CB	1:A:929:MSE:HB3	2.45	0.44
1:A:128:TRP:CD1	1:A:128:TRP:N	2.85	0.44
1:A:312:ILE:HD12	1:A:312:ILE:N	2.29	0.44
1:A:373:ILE:CD1	1:A:433:LEU:HD22	2.47	0.44
1:A:476:PHE:CD1	1:A:476:PHE:N	2.86	0.44
1:A:674:LEU:HD23	1:A:1086:ILE:CD1	2.46	0.44
1:A:758:MSE:O	1:A:760:TYR:N	2.51	0.44
1:A:40:GLY:CA	1:A:304:MSE:SE	3.11	0.44
1:A:66:LYS:CA	1:A:69:ILE:HD13	2.48	0.44
1:A:408:GLY:HA3	1:A:731:ARG:HB3	1.99	0.44
1:A:535:ARG:N	2:B:7:G:N7	2.53	0.44
1:A:539:GLU:O	1:A:558:ARG:HD3	2.18	0.44
1:A:44:PHE:HD2	1:A:305:LEU:HB2	1.83	0.43
1:A:115:GLU:HG3	1:A:327:ILE:HB	1.98	0.43
1:A:132:ARG:O	1:A:135:TYR:HB3	2.17	0.43
1:A:282:MSE:O	1:A:285:ILE:HB	2.18	0.43
1:A:646:TYR:CG	1:A:875:ILE:CD1	3.01	0.43
1:A:312:ILE:H	1:A:312:ILE:CD1	2.27	0.43
1:A:484:LEU:HD12	1:A:485:LEU:N	2.33	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:633:LYS:N	1:A:633:LYS:CD	2.74	0.43
1:A:400:GLU:O	1:A:403:ILE:CG1	2.64	0.43
1:A:555:ALA:O	1:A:556:ARG:HB2	2.17	0.43
1:A:636:LYS:HE3	1:A:935:GLU:CD	2.42	0.43
1:A:700:TYR:CE2	1:A:702:GLY:CA	3.01	0.43
1:A:912:LEU:HB3	1:A:941:PRO:HB2	2.00	0.43
2:B:9:G:C6	2:B:22:A:N1	2.86	0.43
1:A:153:LEU:C	1:A:153:LEU:CD2	2.90	0.43
1:A:352:TYR:CE1	1:A:434:ARG:CA	3.00	0.43
1:A:495:LEU:CD1	1:A:495:LEU:N	2.79	0.43
1:A:582:PRO:O	1:A:586:ARG:HB2	2.17	0.43
1:A:754:TYR:OH	2:B:12:C:OP1	2.28	0.43
1:A:29:LEU:C	1:A:29:LEU:CD1	2.85	0.43
1:A:241:LEU:HD12	1:A:241:LEU:O	2.18	0.43
1:A:347:PHE:CA	1:A:435:TYR:CD1	3.01	0.43
1:A:368:ILE:C	1:A:370:GLU:N	2.76	0.43
1:A:380:LEU:HA	1:A:383:ILE:HD13	2.01	0.43
1:A:486:GLY:HA3	1:A:514:ILE:CG2	2.44	0.43
1:A:654:ASN:ND2	1:A:871:ILE:CD1	2.82	0.43
1:A:658:ALA:HB1	1:A:882:LEU:CD1	2.46	0.43
1:A:697:GLN:O	1:A:799:LEU:CB	2.61	0.43
1:A:797:SER:OG	1:A:807:PHE:HE1	2.00	0.43
1:A:834:ALA:CB	1:A:835:PRO:CD	2.88	0.43
1:A:852:LEU:C	1:A:852:LEU:CD1	2.85	0.43
1:A:45:PHE:CB	1:A:308:ALA:HB1	2.48	0.43
1:A:45:PHE:HB2	1:A:308:ALA:HB1	2.01	0.43
1:A:156:MSE:HE3	1:A:156:MSE:HB3	1.66	0.43
1:A:299:GLY:O	1:A:303:ALA:HB2	2.18	0.43
1:A:797:SER:CB	1:A:863:LYS:NZ	2.81	0.43
1:A:865:LYS:HE2	1:A:869:GLU:OE2	2.18	0.43
1:A:64:ALA:O	1:A:66:LYS:HG3	2.19	0.43
1:A:77:VAL:HG21	1:A:316:THR:HG23	2.00	0.43
1:A:92:VAL:CG1	1:A:93:SER:H	2.30	0.43
1:A:169:ALA:HA	1:A:305:LEU:HD21	2.01	0.43
1:A:190:GLN:NE2	1:A:190:GLN:CA	2.73	0.43
1:A:386:LYS:HD2	1:A:386:LYS:HA	1.74	0.43
1:A:506:VAL:HG11	1:A:599:ARG:NH1	2.24	0.43
1:A:553:LEU:HD22	1:A:562:ASN:HB3	2.01	0.43
1:A:589:LYS:CA	1:A:592:GLN:HB2	2.48	0.43
1:A:718:PHE:CG	1:A:781:GLU:HG3	2.46	0.43
1:A:729:ASP:N	1:A:733:ASN:O	2.39	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:790:LYS:O	1:A:795:LYS:HD3	2.18	0.43
1:A:1031:HIS:CD2	1:A:1031:HIS:O	2.72	0.43
2:B:25:A:N1	3:C:3:U:C4	2.86	0.43
1:A:105:SER:O	1:A:105:SER:OG	2.34	0.43
1:A:164:LEU:C	1:A:164:LEU:HD22	2.43	0.43
1:A:215:ILE:HG13	1:A:243:ILE:HG21	2.00	0.43
1:A:341:GLY:HA2	1:A:455:LEU:HD23	2.01	0.43
1:A:403:ILE:HG13	1:A:404:LYS:N	2.34	0.43
1:A:431:GLN:HE22	1:A:434:ARG:HH22	1.58	0.43
1:A:901:LYS:HD2	1:A:901:LYS:HA	1.60	0.43
1:A:371:SER:CB	1:A:374:LYS:HD2	2.48	0.43
1:A:440:LYS:HZ3	1:A:441:ASP:HA	1.83	0.43
1:A:515:LYS:HZ1	1:A:526:LYS:HE3	1.84	0.43
1:A:559:THR:CB	1:A:561:THR:HG22	2.48	0.43
1:A:559:THR:HB	1:A:561:THR:HG22	1.99	0.43
1:A:656:TYR:CE2	1:A:682:GLY:C	2.97	0.43
1:A:832:VAL:CG2	1:A:833:LYS:HE2	2.48	0.43
2:B:9:G:N1	2:B:22:A:C5	2.85	0.43
1:A:177:PHE:O	1:A:296:TYR:OH	2.23	0.43
1:A:414:ILE:HG22	1:A:430:VAL:HG13	2.00	0.43
1:A:609:TRP:CD1	1:A:609:TRP:C	2.97	0.43
1:A:650:ILE:N	1:A:916:LEU:HD22	2.33	0.43
1:A:1058:ALA:CA	1:A:1070:VAL:O	2.67	0.43
1:A:329:ALA:O	1:A:333:ILE:N	2.49	0.42
1:A:374:LYS:HG2	1:A:449:ILE:CD1	2.49	0.42
1:A:973:GLU:CA	1:A:1019:LEU:HD11	2.48	0.42
1:A:1004:LEU:CD1	1:A:1009:LEU:HB2	2.49	0.42
1:A:290:ALA:O	1:A:294:GLY:N	2.52	0.42
1:A:555:ALA:O	1:A:557:PHE:CE2	2.72	0.42
1:A:574:GLN:NE2	1:A:574:GLN:HA	2.34	0.42
1:A:703:VAL:CG1	2:B:13:A:OP2	2.68	0.42
1:A:762:LYS:HZ2	2:B:34:U:H1'	1.78	0.42
1:A:768:ILE:CB	1:A:778:TYR:CE2	2.96	0.42
1:A:802:LEU:HA	1:A:805:VAL:HG21	2.00	0.42
1:A:80:PHE:HD2	1:A:130:ASP:OD1	2.02	0.42
1:A:101:PHE:CE1	1:A:109:PRO:HA	2.54	0.42
1:A:131:MSE:N	1:A:131:MSE:SE	3.00	0.42
1:A:542:TYR:OH	1:A:596:GLU:OE1	2.37	0.42
1:A:646:TYR:CB	1:A:875:ILE:HD11	2.49	0.42
1:A:721:LYS:CB	1:A:722:TYR:CD1	3.02	0.42
1:A:739:PHE:CD2	1:A:767:SER:CB	2.82	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:990:ARG:HA	1:A:990:ARG:HD2	1.45	0.42
1:A:12:ARG:CB	1:A:630:THR:O	2.67	0.42
1:A:527:HIS:CD2	4:A:1201:CIT:C3	3.00	0.42
1:A:574:GLN:HE21	1:A:574:GLN:CA	2.32	0.42
1:A:1063:TRP:N	1:A:1066:LYS:O	2.48	0.42
1:A:42:PRO:HA	1:A:471:GLN:NE2	2.34	0.42
1:A:91:GLY:N	1:A:129:LYS:HD3	2.33	0.42
1:A:215:ILE:O	1:A:218:ALA:O	2.38	0.42
1:A:322:PHE:CE2	1:A:466:ILE:HD12	2.49	0.42
1:A:538:GLU:O	1:A:558:ARG:HG2	2.18	0.42
1:A:680:GLU:OE1	1:A:878:LYS:CE	2.64	0.42
1:A:719:LEU:HD13	1:A:740:MSE:HE3	1.98	0.42
1:A:803:SER:C	1:A:805:VAL:H	2.27	0.42
1:A:41:THR:O	1:A:308:ALA:HB2	2.18	0.42
1:A:142:LEU:CD1	1:A:285:ILE:HD13	2.44	0.42
1:A:480:ASN:OD1	1:A:611:LYS:HB3	2.20	0.42
1:A:496:LYS:HB3	1:A:496:LYS:HZ2	1.85	0.42
1:A:699:SER:O	1:A:700:TYR:C	2.63	0.42
1:A:715:ARG:O	1:A:718:PHE:HB3	2.19	0.42
1:A:867:LYS:O	1:A:871:ILE:HG13	2.20	0.42
1:A:900:THR:OG1	1:A:902:LYS:CG	2.68	0.42
1:A:130:ASP:CB	1:A:133:VAL:CG2	2.96	0.42
1:A:135:TYR:O	1:A:135:TYR:CD1	2.70	0.42
1:A:566:GLY:O	1:A:568:PRO:HD3	2.19	0.42
1:A:310:SER:N	1:A:311:PRO:CD	2.80	0.42
1:A:323:VAL:HA	1:A:326:GLN:HB3	2.02	0.42
1:A:337:ASN:HB3	1:A:340:PHE:HD2	1.83	0.42
1:A:486:GLY:HA2	1:A:514:ILE:CB	2.50	0.42
1:A:823:LYS:HB2	1:A:823:LYS:HZ2	1.84	0.42
1:A:946:HIS:HA	1:A:1048:TYR:HE2	1.84	0.42
1:A:1001:MSE:HE2	1:A:1001:MSE:HB3	1.62	0.42
1:A:92:VAL:HG12	1:A:93:SER:H	1.80	0.42
1:A:466:ILE:HD12	1:A:466:ILE:HA	1.81	0.42
1:A:715:ARG:HH11	1:A:715:ARG:HA	1.85	0.42
1:A:718:PHE:HD2	1:A:719:LEU:HD23	1.85	0.42
1:A:837:ILE:CD1	1:A:841:ASP:HB2	2.50	0.42
1:A:152:ASP:CG	1:A:281:CYS:H	2.28	0.42
1:A:446:ASP:HA	1:A:449:ILE:HD12	2.01	0.42
1:A:489:ILE:HD13	1:A:489:ILE:HA	1.71	0.42
1:A:504:ASN:C	1:A:506:VAL:N	2.78	0.42
1:A:656:TYR:CE1	1:A:680:GLU:OE1	2.73	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:65:ASN:N	1:A:66:LYS:HD2	2.35	0.41
1:A:198:LEU:HD13	1:A:205:ILE:HB	1.97	0.41
1:A:288:PHE:CD1	1:A:288:PHE:O	2.73	0.41
1:A:319:ASN:ND2	1:A:467:ASN:O	2.53	0.41
1:A:590:LYS:NZ	2:B:19:G:OP1	2.48	0.41
1:A:716:ARG:NE	1:A:743:PHE:HE1	2.10	0.41
1:A:842:LYS:O	1:A:842:LYS:HG3	2.19	0.41
2:B:2:U:C2	2:B:3:U:O4	2.73	0.41
1:A:60:ILE:HD12	1:A:75:LEU:HD21	2.03	0.41
1:A:414:ILE:HD13	1:A:433:LEU:HB3	2.02	0.41
1:A:739:PHE:CE2	1:A:767:SER:N	2.86	0.41
1:A:843:GLN:CB	1:A:850:PHE:CD2	2.79	0.41
1:A:961:ALA:HB3	1:A:963:TYR:CE1	2.55	0.41
1:A:971:LEU:CD1	1:A:975:ASN:HB2	2.50	0.41
2:B:2:U:C1'	2:B:3:U:C5	3.03	0.41
2:B:22:A:H2'	2:B:23:C:C6	2.55	0.41
1:A:489:ILE:HG22	1:A:541:TYR:OH	2.20	0.41
1:A:705:LEU:HB3	1:A:749:ASP:HA	2.02	0.41
1:A:965:ARG:CD	1:A:1037:GLN:HG3	2.50	0.41
1:A:978:GLU:HG3	1:A:982:PHE:CE2	2.55	0.41
1:A:473:TYR:HD1	1:A:474:PRO:HD2	1.85	0.41
1:A:561:THR:HG23	1:A:562:ASN:N	2.35	0.41
1:A:798:SER:HB3	1:A:803:SER:OG	2.19	0.41
1:A:1054:LEU:CD1	1:A:1079:TYR:CG	3.02	0.41
1:A:37:LEU:O	1:A:40:GLY:N	2.52	0.41
1:A:393:SER:HB3	1:A:394:LEU:CD2	2.50	0.41
1:A:487:LYS:N	1:A:514:ILE:HG22	2.34	0.41
1:A:570:LEU:CB	2:B:18:U:C5	3.01	0.41
1:A:707:TYR:H	1:A:707:TYR:HD1	1.68	0.41
1:A:754:TYR:CE2	1:A:798:SER:N	2.82	0.41
1:A:1006:THR:HG22	1:A:1007:TYR:N	2.34	0.41
1:A:1046:MSE:O	1:A:1072:ASN:HA	2.21	0.41
1:A:79:TRP:O	1:A:131:MSE:N	2.52	0.41
1:A:336:GLU:HG3	1:A:337:ASN:OD1	2.19	0.41
1:A:495:LEU:C	1:A:495:LEU:CD2	2.86	0.41
1:A:843:GLN:O	1:A:844:LYS:C	2.63	0.41
1:A:860:ARG:O	1:A:864:VAL:N	2.48	0.41
1:A:964:SER:OG	1:A:1045:GLY:HA3	2.21	0.41
1:A:173:THR:CB	1:A:302:SER:HB2	2.51	0.41
1:A:363:LEU:N	1:A:363:LEU:HD23	2.35	0.41
1:A:380:LEU:CB	1:A:437:TYR:CE1	3.04	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:644:LEU:HD23	1:A:879:ALA:CB	2.50	0.41
1:A:648:ALA:C	1:A:916:LEU:CD2	2.93	0.41
1:A:333:ILE:HD11	1:A:457:LYS:HZ1	1.84	0.41
1:A:360:LYS:HB3	1:A:360:LYS:HE3	1.72	0.41
1:A:485:LEU:HD23	1:A:515:LYS:CD	2.50	0.41
1:A:765:GLN:HG3	1:A:816:THR:HG21	2.02	0.41
1:A:84:PRO:O	1:A:129:LYS:NZ	2.53	0.41
1:A:158:LYS:O	1:A:158:LYS:NZ	2.51	0.41
1:A:177:PHE:O	1:A:296:TYR:CZ	2.73	0.41
1:A:308:ALA:O	1:A:311:PRO:HD2	2.21	0.41
1:A:315:MSE:HB2	1:A:469:VAL:HG13	2.03	0.41
1:A:368:ILE:HG22	1:A:373:ILE:HD13	2.03	0.41
1:A:377:TRP:CG	1:A:445:VAL:HG11	2.54	0.41
1:A:387:TYR:HE1	1:A:391:ILE:CD1	2.34	0.41
1:A:422:GLY:HA2	1:A:426:LYS:O	2.20	0.41
1:A:426:LYS:HB3	1:A:427:THR:H	1.54	0.41
1:A:535:ARG:HD3	2:B:7:G:C6	2.56	0.41
1:A:554:ALA:O	1:A:556:ARG:HG3	2.21	0.41
1:A:646:TYR:HB3	1:A:875:ILE:HD13	2.03	0.41
1:A:655:THR:CG2	1:A:1074:ASP:HB3	2.51	0.41
1:A:660:GLU:HB2	1:A:679:ILE:CD1	2.48	0.41
1:A:705:LEU:HD22	1:A:708:CYS:SG	2.61	0.41
1:A:709:LYS:N	1:A:710:PRO:CD	2.84	0.41
1:A:766:SER:O	1:A:769:ARG:HB2	2.21	0.41
1:A:786:LEU:C	1:A:792:SER:HB2	2.46	0.41
1:A:1004:LEU:HD12	1:A:1009:LEU:C	2.46	0.41
2:B:15:C:C6	2:B:15:C:H5"	2.56	0.41
1:A:49:ASN:HD22	1:A:49:ASN:HA	1.54	0.41
1:A:82:VAL:HG11	1:A:466:ILE:HG21	2.03	0.41
1:A:364:HIS:CB	1:A:365:PRO:HD2	2.49	0.41
1:A:439:ARG:NH2	1:A:439:ARG:CG	2.73	0.41
1:A:455:LEU:HA	1:A:455:LEU:HD13	1.82	0.41
1:A:719:LEU:HD12	1:A:740:MSE:HE2	1.74	0.41
1:A:768:ILE:HD12	1:A:778:TYR:CG	2.56	0.41
1:A:948:ASP:CG	1:A:960:ARG:NH2	2.79	0.41
1:A:1055:ASP:O	1:A:1058:ALA:HB3	2.21	0.41
1:A:45:PHE:CD1	1:A:46:GLU:N	2.88	0.40
1:A:134:GLU:HA	1:A:137:ARG:HB3	2.02	0.40
1:A:135:TYR:O	1:A:138:LEU:HB3	2.20	0.40
1:A:338:GLU:N	1:A:339:PRO:HD2	2.36	0.40
1:A:487:LYS:H	1:A:514:ILE:HG22	1.86	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:517:LEU:C	1:A:517:LEU:HD13	2.46	0.40
1:A:517:LEU:HB2	1:A:524:TRP:CZ3	2.56	0.40
1:A:583:VAL:C	1:A:586:ARG:HB2	2.46	0.40
1:A:623:ASN:OD1	1:A:624:PHE:N	2.54	0.40
1:A:679:ILE:HG21	1:A:886:TYR:CE1	2.55	0.40
1:A:762:LYS:HB3	1:A:762:LYS:HE2	1.46	0.40
1:A:67:ASP:CB	1:A:69:ILE:HD11	2.51	0.40
1:A:296:TYR:CD2	1:A:301:TYR:CG	3.08	0.40
1:A:821:LEU:HD22	1:A:821:LEU:C	2.46	0.40
1:A:1026:MSE:HB3	1:A:1030:LEU:HD12	2.03	0.40
1:A:341:GLY:CA	1:A:455:LEU:HD22	2.51	0.40
1:A:346:GLY:C	1:A:435:TYR:CE2	2.99	0.40
1:A:370:GLU:HB2	1:A:371:SER:H	1.65	0.40
1:A:488:ILE:HG22	1:A:609:TRP:CH2	2.56	0.40
1:A:511:TRP:C	1:A:512:ILE:CG2	2.94	0.40
1:A:557:PHE:HB2	1:A:562:ASN:ND2	2.36	0.40
1:A:691:ARG:CZ	1:A:691:ARG:CB	2.91	0.40
1:A:53:GLY:O	1:A:132:ARG:CD	2.66	0.40
1:A:211:LEU:HD13	1:A:262:LEU:HD13	2.03	0.40
1:A:403:ILE:O	1:A:407:GLN:HB2	2.22	0.40
1:A:422:GLY:HA2	1:A:425:ALA:O	2.22	0.40
1:A:561:THR:CG2	1:A:562:ASN:N	2.84	0.40
1:A:618:CYS:O	1:A:625:GLU:N	2.49	0.40
1:A:650:ILE:CA	1:A:916:LEU:HD22	2.52	0.40
1:A:669:ILE:CG2	1:A:1052:TYR:OH	2.70	0.40
1:A:705:LEU:HA	1:A:708:CYS:HB3	2.04	0.40
1:A:724:ASN:O	1:A:771:HIS:HE1	2.03	0.40
1:A:1054:LEU:N	1:A:1054:LEU:HD22	2.35	0.40
1:A:1062:ASN:HB2	1:A:1067:GLN:CD	2.45	0.40
1:A:33:PHE:CE1	1:A:517:LEU:N	2.89	0.40
1:A:371:SER:C	1:A:374:LYS:HD2	2.45	0.40
1:A:378:GLU:HA	1:A:381:ASN:HD21	1.86	0.40
1:A:489:ILE:CD1	2:B:1:A:H62	2.25	0.40
1:A:548:ASN:N	1:A:549:PRO:HD3	2.26	0.40
1:A:707:TYR:CE2	2:B:13:A:N6	2.90	0.40
1:A:818:PHE:CZ	1:A:849:MSE:CG	3.04	0.40
1:A:843:GLN:HB2	1:A:850:PHE:CG	2.49	0.40
1:A:999:GLY:O	1:A:1002:ALA:HB3	2.21	0.40
1:A:1010:LYS:HD2	1:A:1013:ASP:HB2	2.03	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles

5.3.1 Protein backbone

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	1051/1101 (96%)	920 (88%)	119 (11%)	12 (1%)	11	43

All (12) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	67	ASP
1	A	110	ASP
1	A	944	THR
1	A	83	MSE
1	A	346	GLY
1	A	505	GLN
1	A	540	VAL
1	A	318	LYS
1	A	368	ILE
1	A	407	GLN
1	A	675	PRO
1	A	832	VAL

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	943/957 (98%)	534 (57%)	409 (43%)	0	0

All (409) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	12	ARG
1	A	16	THR
1	A	22	ARG
1	A	23	SER
1	A	24	HIS
1	A	25	ASP
1	A	26	ARG
1	A	28	LYS
1	A	29	LEU
1	A	30	LEU
1	A	39	ASP
1	A	41	THR
1	A	43	ILE
1	A	45	PHE
1	A	49	ASN
1	A	50	GLN
1	A	57	ARG
1	A	58	ASP
1	A	66	LYS
1	A	67	ASP
1	A	73	LEU
1	A	74	LEU
1	A	77	VAL
1	A	78	ASN
1	A	80	PHE
1	A	81	LYS
1	A	82	VAL
1	A	83	MSE
1	A	85	ILE
1	A	86	ASN
1	A	87	SER
1	A	88	LYS
1	A	90	GLN
1	A	95	SER
1	A	96	ASN
1	A	99	ASN
1	A	100	LEU
1	A	103	GLN
1	A	107	SER
1	A	108	GLU
1	A	111	ILE
1	A	112	GLN
1	A	116	TYR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	117	PHE
1	A	125	LYS
1	A	127	GLN
1	A	131	MSE
1	A	132	ARG
1	A	135	TYR
1	A	137	ARG
1	A	141	GLU
1	A	142	LEU
1	A	144	LEU
1	A	145	SER
1	A	146	ARG
1	A	154	LYS
1	A	155	LEU
1	A	156	MSE
1	A	158	LYS
1	A	160	LYS
1	A	161	CYS
1	A	164	LEU
1	A	168	THR
1	A	170	HIS
1	A	175	VAL
1	A	182	LYS
1	A	186	GLN
1	A	188	LYS
1	A	190	GLN
1	A	194	LYS
1	A	200	GLU
1	A	201	GLU
1	A	203	THR
1	A	206	ASN
1	A	208	VAL
1	A	217	LYS
1	A	240	ILE
1	A	241	LEU
1	A	242	LYS
1	A	243	ILE
1	A	244	VAL
1	A	247	TYR
1	A	249	LEU
1	A	263	ILE
1	A	265	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	268	GLU
1	A	269	LYS
1	A	270	LEU
1	A	272	ARG
1	A	273	PHE
1	A	275	TYR
1	A	276	GLU
1	A	280	LYS
1	A	286	LYS
1	A	293	VAL
1	A	296	TYR
1	A	298	LEU
1	A	305	LEU
1	A	306	GLU
1	A	307	ASN
1	A	315	MSE
1	A	317	THR
1	A	320	CYS
1	A	321	LYS
1	A	322	PHE
1	A	324	LEU
1	A	326	GLN
1	A	330	LYS
1	A	331	ASN
1	A	333	ILE
1	A	338	GLU
1	A	344	VAL
1	A	345	GLU
1	A	347	PHE
1	A	348	PHE
1	A	354	GLU
1	A	355	SER
1	A	356	ASP
1	A	357	THR
1	A	360	LYS
1	A	361	TRP
1	A	363	LEU
1	A	368	ILE
1	A	370	GLU
1	A	374	LYS
1	A	375	THR
1	A	376	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	377	TRP
1	A	379	ASP
1	A	380	LEU
1	A	381	ASN
1	A	383	ILE
1	A	384	HIS
1	A	387	TYR
1	A	388	GLU
1	A	391	ILE
1	A	393	SER
1	A	396	GLU
1	A	397	ASP
1	A	398	LYS
1	A	399	LYS
1	A	400	GLU
1	A	401	LYS
1	A	402	ARG
1	A	411	CYS
1	A	413	THR
1	A	414	ILE
1	A	416	THR
1	A	420	GLU
1	A	421	VAL
1	A	424	GLU
1	A	426	LYS
1	A	427	THR
1	A	430	VAL
1	A	431	GLN
1	A	432	LEU
1	A	434	ARG
1	A	438	SER
1	A	439	ARG
1	A	440	LYS
1	A	443	ILE
1	A	445	VAL
1	A	446	ASP
1	A	455	LEU
1	A	457	LYS
1	A	458	LYS
1	A	460	LYS
1	A	466	ILE
1	A	469	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	470	ILE
1	A	472	LYS
1	A	473	TYR
1	A	476	PHE
1	A	483	LYS
1	A	484	LEU
1	A	485	LEU
1	A	487	LYS
1	A	488	ILE
1	A	489	ILE
1	A	493	ASP
1	A	495	LEU
1	A	496	LYS
1	A	497	HIS
1	A	499	LEU
1	A	512	ILE
1	A	513	GLU
1	A	516	VAL
1	A	517	LEU
1	A	518	ASN
1	A	519	THR
1	A	520	LYS
1	A	521	THR
1	A	523	ARG
1	A	524	TRP
1	A	527	HIS
1	A	531	LEU
1	A	535	ARG
1	A	537	LEU
1	A	538	GLU
1	A	539	GLU
1	A	542	TYR
1	A	543	PRO
1	A	545	THR
1	A	547	GLU
1	A	551	ASP
1	A	553	LEU
1	A	556	ARG
1	A	558	ARG
1	A	560	LYS
1	A	565	GLU
1	A	567	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	570	LEU
1	A	571	SER
1	A	573	GLU
1	A	574	GLN
1	A	579	ARG
1	A	583	VAL
1	A	585	LEU
1	A	587	LYS
1	A	590	LYS
1	A	591	ARG
1	A	593	MSE
1	A	599	ARG
1	A	603	LEU
1	A	604	LEU
1	A	612	ASP
1	A	615	ILE
1	A	619	LYS
1	A	620	ARG
1	A	624	PHE
1	A	625	GLU
1	A	626	VAL
1	A	628	LEU
1	A	633	LYS
1	A	634	LYS
1	A	638	LYS
1	A	640	TYR
1	A	641	LYS
1	A	643	VAL
1	A	650	ILE
1	A	651	VAL
1	A	653	LYS
1	A	654	ASN
1	A	660	GLU
1	A	664	ASN
1	A	668	VAL
1	A	669	ILE
1	A	670	ASP
1	A	687	GLU
1	A	688	SER
1	A	689	GLN
1	A	690	VAL
1	A	691	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	695	TYR
1	A	698	LEU
1	A	701	ASN
1	A	704	LYS
1	A	705	LEU
1	A	707	TYR
1	A	708	CYS
1	A	709	LYS
1	A	711	HIS
1	A	714	SER
1	A	715	ARG
1	A	716	ARG
1	A	719	LEU
1	A	722	TYR
1	A	723	ARG
1	A	724	ASN
1	A	726	THR
1	A	727	MSE
1	A	728	LYS
1	A	730	ASN
1	A	733	ASN
1	A	735	ILE
1	A	737	ILE
1	A	738	ASP
1	A	749	ASP
1	A	750	GLU
1	A	752	SER
1	A	753	LEU
1	A	758	MSE
1	A	761	CYS
1	A	762	LYS
1	A	763	LEU
1	A	764	LEU
1	A	769	ARG
1	A	771	HIS
1	A	772	SER
1	A	774	GLN
1	A	776	LYS
1	A	778	TYR
1	A	779	ARG
1	A	780	GLU
1	A	781	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	782	ILE
1	A	784	GLU
1	A	785	LEU
1	A	786	LEU
1	A	788	ASP
1	A	790	LYS
1	A	791	LEU
1	A	793	VAL
1	A	794	LEU
1	A	795	LYS
1	A	797	SER
1	A	799	LEU
1	A	802	LEU
1	A	806	MSE
1	A	816	THR
1	A	817	TYR
1	A	821	LEU
1	A	822	LEU
1	A	823	LYS
1	A	826	LYS
1	A	827	ASN
1	A	829	LYS
1	A	833	LYS
1	A	836	PRO
1	A	839	ASP
1	A	840	GLU
1	A	841	ASP
1	A	842	LYS
1	A	843	GLN
1	A	844	LYS
1	A	852	LEU
1	A	853	ARG
1	A	854	LEU
1	A	858	GLU
1	A	859	LYS
1	A	860	ARG
1	A	861	LEU
1	A	863	LYS
1	A	871	ILE
1	A	875	ILE
1	A	878	LYS
1	A	880	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	889	VAL
1	A	890	LEU
1	A	891	ILE
1	A	895	ASN
1	A	899	THR
1	A	900	THR
1	A	901	LYS
1	A	902	LYS
1	A	905	LYS
1	A	907	SER
1	A	909	ASN
1	A	912	LEU
1	A	914	ASP
1	A	916	LEU
1	A	922	ASN
1	A	927	MSE
1	A	931	HIS
1	A	932	GLN
1	A	934	LEU
1	A	938	GLU
1	A	940	ASN
1	A	946	HIS
1	A	947	GLN
1	A	948	ASP
1	A	951	VAL
1	A	953	LYS
1	A	957	ASN
1	A	963	TYR
1	A	966	CYS
1	A	971	LEU
1	A	972	THR
1	A	975	ASN
1	A	978	GLU
1	A	979	ILE
1	A	980	LEU
1	A	981	SER
1	A	990	ARG
1	A	992	THR
1	A	993	ASN
1	A	995	TYR
1	A	998	GLU
1	A	1001	MSE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1006	THR
1	A	1009	LEU
1	A	1010	LYS
1	A	1013	ASP
1	A	1014	VAL
1	A	1015	LEU
1	A	1017	VAL
1	A	1020	GLU
1	A	1021	LYS
1	A	1024	GLN
1	A	1026	MSE
1	A	1030	LEU
1	A	1036	ASP
1	A	1039	LEU
1	A	1043	ARG
1	A	1052	TYR
1	A	1054	LEU
1	A	1057	ASP
1	A	1062	ASN
1	A	1071	CYS
1	A	1072	ASN
1	A	1075	LEU
1	A	1081	VAL
1	A	1083	LEU
1	A	1084	VAL
1	A	1086	ILE
1	A	1087	GLN
1	A	1088	LYS
1	A	1089	ASP
1	A	1091	LYS

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (42) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	49	ASN
1	A	50	GLN
1	A	65	ASN
1	A	78	ASN
1	A	90	GLN
1	A	103	GLN
1	A	112	GLN
1	A	120	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	126	HIS
1	A	127	GLN
1	A	150	HIS
1	A	170	HIS
1	A	189	HIS
1	A	190	GLN
1	A	204	GLN
1	A	245	GLN
1	A	326	GLN
1	A	331	ASN
1	A	358	ASN
1	A	364	HIS
1	A	381	ASN
1	A	431	GLN
1	A	459	HIS
1	A	497	HIS
1	A	505	GLN
1	A	508	ASN
1	A	527	HIS
1	A	574	GLN
1	A	592	GLN
1	A	602	ASN
1	A	622	ASN
1	A	664	ASN
1	A	689	GLN
1	A	697	GLN
1	A	774	GLN
1	A	909	ASN
1	A	932	GLN
1	A	942	ASN
1	A	947	GLN
1	A	952	HIS
1	A	1024	GLN
1	A	1031	HIS

5.3.3 RNA ⓘ

Mol	Chain	Analysed	Backbone Outliers	Pucker Outliers
2	B	37/44 (84%)	24 (64%)	8 (21%)
3	C	2/3 (66%)	1 (50%)	0
All	All	39/47 (82%)	25 (64%)	8 (20%)

All (25) RNA backbone outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
2	B	2	U
2	B	3	U
2	B	4	U
2	B	5	U
2	B	6	U
2	B	7	G
2	B	9	G
2	B	14	U
2	B	15	C
2	B	16	G
2	B	17	U
2	B	18	U
2	B	24	U
2	B	25	A
2	B	26	U
2	B	27	U
2	B	29	A
2	B	30	G
2	B	32	A
2	B	33	A
2	B	34	U
2	B	35	G
2	B	36	G
2	B	38	A
3	C	2	A

All (8) RNA pucker outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
2	B	2	U
2	B	4	U
2	B	14	U
2	B	15	C
2	B	17	U
2	B	24	U
2	B	33	A
2	B	35	G

5.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

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](#)

1 ligand is modelled in this entry.

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$
4	CIT	A	1201	-	12,12,12	1.28	1 (8%)	17,17,17	1.31	2 (11%)

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
4	CIT	A	1201	-	-	12/16/16/16	-

All (1) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
4	A	1201	CIT	C3-C6	-2.77	1.50	1.53

All (2) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
4	A	1201	CIT	O6-C6-C3	2.73	118.37	113.14
4	A	1201	CIT	O1-C1-C2	-2.05	117.16	122.95

There are no chirality outliers.

All (12) torsion outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
4	A	1201	CIT	C1-C2-C3-C4
4	A	1201	CIT	O7-C3-C6-O5
4	A	1201	CIT	O7-C3-C6-O6
4	A	1201	CIT	C1-C2-C3-C6
4	A	1201	CIT	C2-C3-C6-O5
4	A	1201	CIT	C1-C2-C3-O7
4	A	1201	CIT	C2-C3-C6-O6
4	A	1201	CIT	C4-C3-C6-O6
4	A	1201	CIT	C4-C3-C6-O5
4	A	1201	CIT	O7-C3-C4-C5
4	A	1201	CIT	O1-C1-C2-C3
4	A	1201	CIT	O2-C1-C2-C3

There are no ring outliers.

1 monomer is involved in 7 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
4	A	1201	CIT	7	0

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

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	1031/1101 (93%)	0.57	62 (6%) 27 17	63, 141, 199, 200	0
2	B	38/44 (86%)	0.50	3 (7%) 18 13	99, 121, 200, 200	0
3	C	3/3 (100%)	0.31	0 100 100	155, 155, 158, 171	0
All	All	1072/1148 (93%)	0.57	65 (6%) 27 16	63, 141, 199, 200	0

All (65) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	691	ARG	6.1
1	A	949	PRO	6.0
1	A	587	LYS	5.8
1	A	591	ARG	5.5
1	A	590	LYS	4.8
1	A	262	LEU	4.4
1	A	708	CYS	4.4
1	A	459	HIS	4.1
1	A	263	ILE	3.9
1	A	103	GLN	3.9
1	A	579	ARG	3.8
1	A	417	TYR	3.7
1	A	739	PHE	3.7
1	A	695	TYR	3.7
1	A	650	ILE	3.6
1	A	692	ASP	3.6
1	A	865	LYS	3.4
1	A	832	VAL	3.4
1	A	15	TYR	3.4
1	A	130	ASP	3.3
1	A	1045	GLY	3.3
1	A	474	PRO	3.3
1	A	688	SER	3.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	962	ARG	3.2
1	A	508	ASN	3.2
1	A	307	ASN	3.2
1	A	952	HIS	3.1
1	A	511	TRP	3.0
1	A	592	GLN	3.0
1	A	775	ALA	2.7
1	A	588	VAL	2.7
1	A	1048	TYR	2.7
1	A	14	ALA	2.7
1	A	213	SER	2.7
1	A	436	LEU	2.7
1	A	1047	PHE	2.6
1	A	172	ILE	2.6
1	A	472	LYS	2.6
1	A	506	VAL	2.5
1	A	1039	LEU	2.5
1	A	595	LEU	2.5
1	A	689	GLN	2.4
1	A	475	SER	2.4
1	A	344	VAL	2.3
1	A	945	SER	2.3
1	A	1011	LYS	2.3
1	A	596	GLU	2.3
1	A	1044	GLY	2.3
1	A	534	THR	2.3
2	B	35	G	2.3
1	A	279	TRP	2.3
1	A	538	GLU	2.3
1	A	264	ALA	2.2
2	B	20	G	2.2
1	A	869	GLU	2.2
1	A	260	PRO	2.1
1	A	265	ASN	2.1
1	A	983	LEU	2.1
1	A	196	ILE	2.1
1	A	495	LEU	2.1
1	A	215	ILE	2.0
2	B	31	G	2.0
1	A	13	LYS	2.0
1	A	392	ALA	2.0
1	A	950	PHE	2.0

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

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

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

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

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
4	CIT	A	1201	13/13	0.79	0.10	128,134,185,197	0

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.