



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 01:27 AM UTC

PDB ID : 2EC6 / pdb_00002ec6
Title : Placopecten Striated Muscle Myosin II
Authors : Yang, Y.; Brown, J.; Samudrala, G.; Reutzler, R.; Szent-Gyorgyi, A.
Deposited on : 2007-02-10
Resolution : 3.25 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
Xtrriage (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

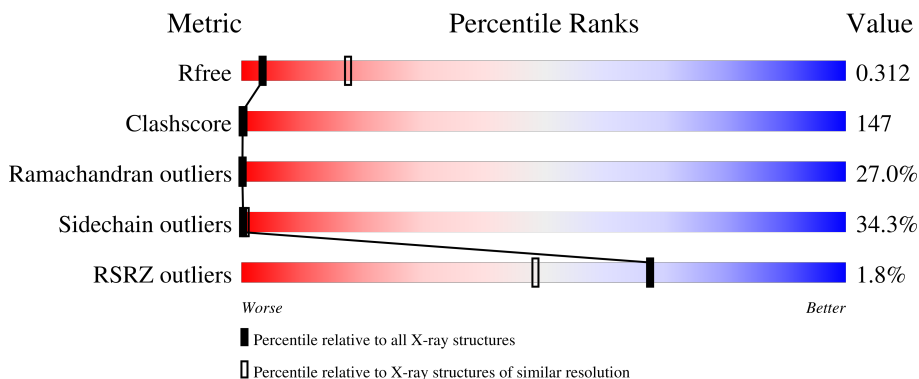
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.25 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	1605 (3.30-3.22)
Clashscore	190562	1660 (3.30-3.22)
Ramachandran outliers	187476	1630 (3.30-3.22)
Sidechain outliers	187428	1629 (3.30-3.22)
RSRZ outliers	180081	1605 (3.30-3.22)

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	838	 5% 36% 40% 15% 5%
2	B	133	 5% 9% 50% 23% 13% 5%
3	C	156	 12% 42% 38% 8% 5%

2 Entry composition

There are 5 unique types of molecules in this entry. The entry contains 8577 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 Myosin heavy chain.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	802	6338	4031	1084	1186	37	0	0	0

- Molecule 2 is a protein called Myosin regulatory light chain.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
2	B	126	979	624	154	191	10	0	0	0

There are 3 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
B	49	GLU	MET	conflict	UNP Q26069
B	105	ASP	LEU	conflict	UNP Q26069
B	106	ALA	ASP	conflict	UNP Q26069

- Molecule 3 is a protein called Myosin essential light chain.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
3	C	155	1228	776	195	250	7	0	0	0

There are 4 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
C	14	ASP	GLU	conflict	UNP Q26066
C	34	LEU	ILE	conflict	UNP Q26066
C	84	PHE	TYR	engineered mutation	UNP Q26066
C	151	ALA	THR	engineered mutation	UNP Q26066

- Molecule 4 is CALCIUM ION (CCD ID: CA) (formula: Ca).

Mol	Chain	Residues	Atoms	ZeroOcc	AltConf
4	C	1	Total Ca 1 1	0	0

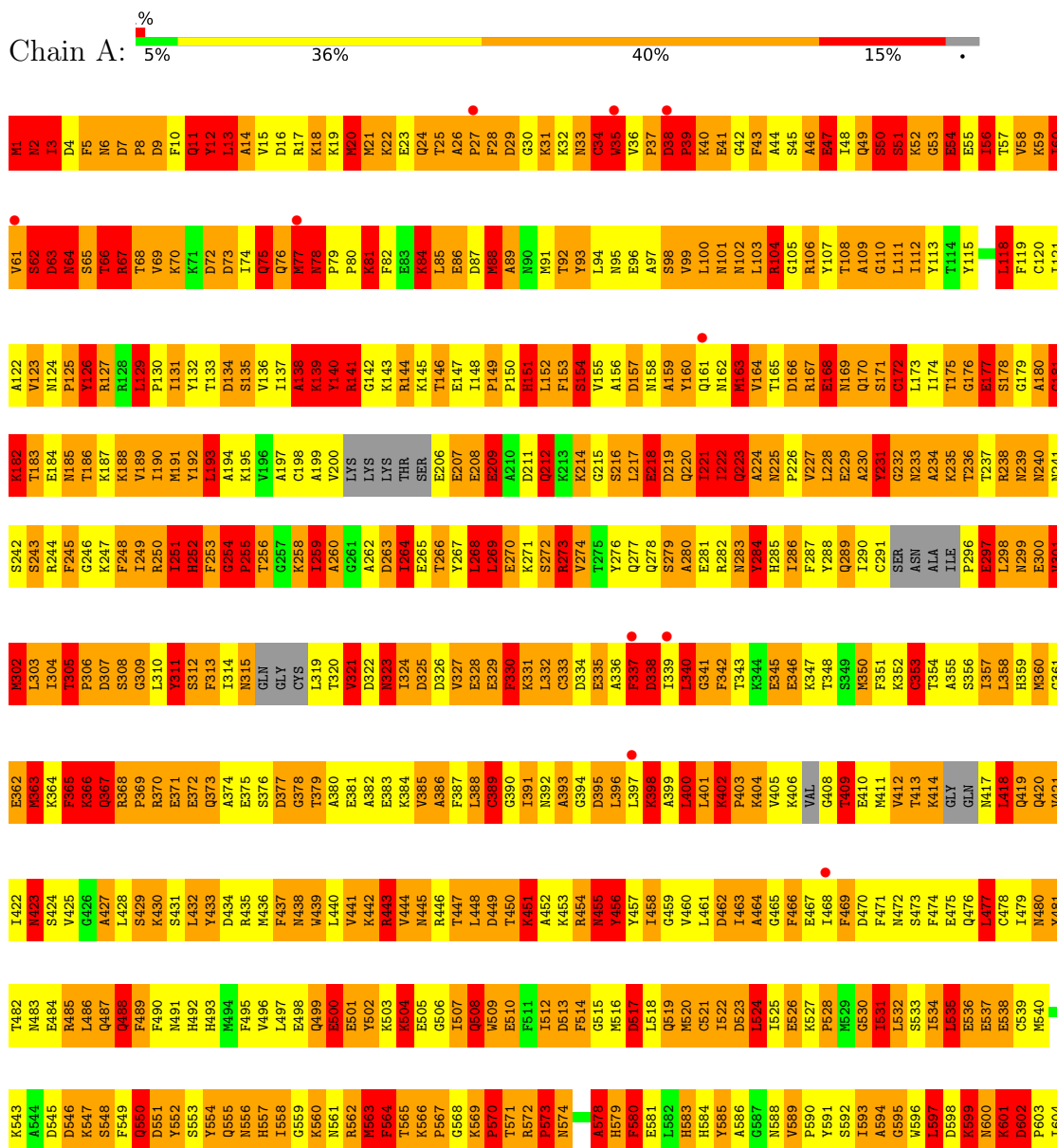
- Molecule 5 is water.

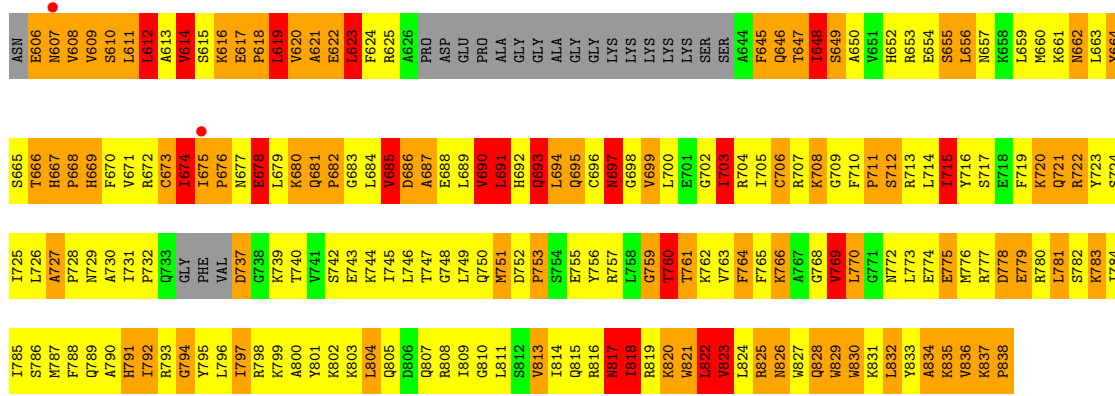
Mol	Chain	Residues	Atoms	ZeroOcc	AltConf
5	A	16	Total O 16 16	0	0
5	B	3	Total O 3 3	0	0
5	C	12	Total O 12 12	0	0

3 Residue-property plots

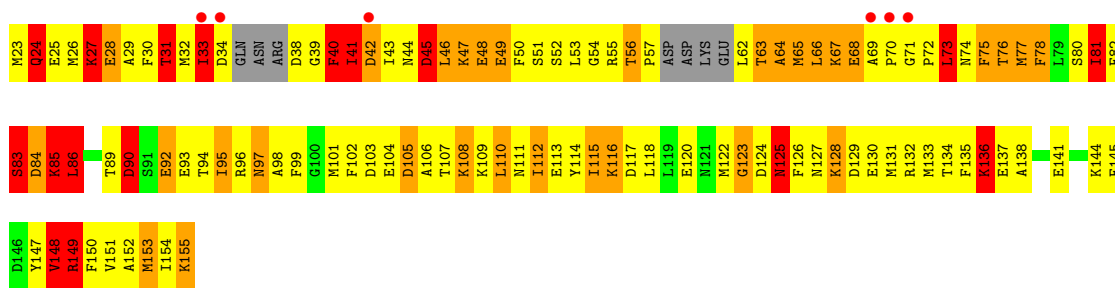
These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry and electron density. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. A red dot above a residue indicates a poor fit to the electron density ($RSRZ > 2$). Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

- Molecule 1: Myosin heavy chain

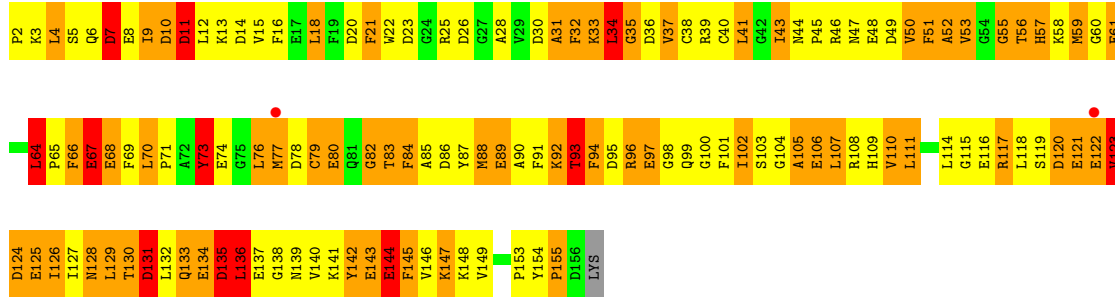




• Molecule 2: Myosin regulatory light chain



• Molecule 3: Myosin essential light chain



4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 1 21 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	85.27Å 50.37Å 156.77Å 90.00° 101.04° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	20.00 – 3.25 20.00 – 3.25	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	89.4 (20.00-3.25) 88.9 (20.00-3.25)	Depositor EDS
R_{merge}	0.07	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	1.47 (at 3.22Å)	Xtrriage
Refinement program	CNS 1.1	Depositor
R, R_{free}	0.279 , 0.300 0.294 , 0.312	Depositor DCC
R_{free} test set	1966 reflections (9.86%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	72.6	Xtrriage
Anisotropy	0.085	Xtrriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.24 , 51.6	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.47$, $\langle L^2 \rangle = 0.30$	Xtrriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtrriage
F_o, F_c correlation	0.87	EDS
Total number of atoms	8577	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	38.0	wwPDB-VP

Xtrriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 4.91% 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 i

5.1 Standard geometry i

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z >5	RMSZ	# Z >5
1	A	0.78	15/6463 (0.2%)	1.63	181/8722 (2.1%)
2	B	1.26	8/993 (0.8%)	1.67	24/1326 (1.8%)
3	C	0.60	0/1253	1.21	16/1686 (0.9%)
All	All	0.82	23/8709 (0.3%)	1.58	221/11734 (1.9%)

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	24
2	B	0	1
3	C	0	1
All	All	0	26

All (23) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	B	105	ASP	C-N	19.06	1.60	1.33
1	A	67	ARG	C-N	18.77	1.57	1.33
2	B	105	ASP	C-O	-14.92	1.04	1.24
1	A	612	LEU	C-O	-10.54	1.10	1.24
1	A	63	ASP	CA-C	-10.14	1.39	1.52
1	A	63	ASP	CB-CG	-9.77	1.27	1.52
1	A	612	LEU	C-N	9.73	1.46	1.33
1	A	68	THR	C-N	-8.96	1.21	1.33
2	B	71	GLY	C-O	-8.92	1.11	1.24
2	B	148	VAL	C-N	-8.85	1.21	1.33
1	A	611	LEU	C-N	-8.42	1.22	1.33
1	A	456	TYR	CE1-CZ	-8.39	1.18	1.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	63	ASP	C-O	-7.55	1.14	1.24
1	A	64	ASN	CB-CG	-7.16	1.34	1.52
2	B	51	SER	C-O	-6.84	1.15	1.24
1	A	64	ASN	C-N	6.40	1.42	1.33
1	A	51	SER	C-O	-6.09	1.16	1.24
2	B	49	GLU	C-O	5.92	1.31	1.24
1	A	64	ASN	CA-C	5.85	1.60	1.52
2	B	50	PHE	C-N	-5.72	1.23	1.33
1	A	456	TYR	CD1-CE1	-5.40	1.22	1.38
1	A	64	ASN	CA-CB	-5.33	1.44	1.53
2	B	149	ARG	C-N	5.07	1.40	1.33

All (221) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	564	PHE	N-CA-C	20.04	141.79	109.72
1	A	823	VAL	N-CA-C	-18.79	95.66	111.81
1	A	159	ALA	N-CA-C	-18.12	89.17	112.90
1	A	127	ARG	N-CA-C	-17.98	81.22	110.17
1	A	135	SER	N-CA-C	-16.72	93.66	112.72
2	B	25	GLU	N-CA-C	-15.75	93.63	113.16
2	B	85	LYS	N-CA-C	-14.30	95.14	112.59
1	A	228	LEU	N-CA-C	-14.29	87.72	109.86
1	A	31	LYS	N-CA-C	-13.85	94.88	114.12
2	B	105	ASP	CA-C-O	13.74	136.49	119.59
1	A	182	LYS	N-CA-C	-13.35	97.45	113.88
1	A	821	TRP	N-CA-C	-13.29	93.72	110.19
2	B	67	LYS	N-CA-C	-13.17	96.95	113.55
1	A	227	VAL	N-CA-C	-12.96	97.85	111.58
1	A	104	ARG	N-CA-C	-12.59	97.59	111.07
1	A	68	THR	CA-C-N	-12.42	105.01	123.27
1	A	68	THR	C-N-CA	-12.42	105.01	123.27
1	A	600	ASN	N-CA-C	-12.31	97.36	112.38
1	A	66	THR	N-CA-C	-12.23	84.75	110.80
1	A	222	ILE	N-CA-C	-12.19	99.09	111.77
1	A	585	TYR	N-CA-C	-12.02	91.23	109.86
1	A	835	LYS	N-CA-C	-11.41	97.50	112.34
1	A	305	THR	CA-C-N	11.33	134.01	119.84
1	A	305	THR	C-N-CA	11.33	134.01	119.84
1	A	68	THR	O-C-N	11.19	136.37	123.27
1	A	183	THR	N-CA-C	-11.04	97.99	112.34
1	A	77	MET	N-CA-C	10.84	125.34	107.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	186	THR	N-CA-C	-10.81	99.19	112.38
1	A	565	THR	N-CA-C	10.54	133.25	110.80
1	A	35	TRP	N-CA-C	10.54	133.24	110.80
3	C	35	GLY	N-CA-C	-10.43	101.55	114.16
1	A	33	ASN	N-CA-C	10.32	132.78	110.80
3	C	93	THR	N-CA-C	-10.29	100.95	113.19
1	A	313	PHE	N-CA-C	-10.08	99.55	113.56
1	A	530	GLY	N-CA-C	-9.77	95.77	112.77
1	A	540	MET	N-CA-C	-9.62	100.77	111.07
1	A	791	HIS	N-CA-C	-9.51	101.68	113.18
1	A	437	PHE	N-CA-C	-9.48	100.33	112.93
1	A	566	LYS	N-CA-C	-9.46	96.88	110.40
1	A	829	TRP	N-CA-C	-9.45	100.33	113.37
1	A	302	MET	N-CA-C	9.41	130.85	110.80
1	A	794	GLY	N-CA-C	-9.28	91.19	113.18
1	A	602	ASP	CA-C-N	9.21	131.36	119.84
1	A	602	ASP	C-N-CA	9.21	131.36	119.84
2	B	78	PHE	N-CA-C	-9.19	100.83	111.03
1	A	566	LYS	CA-C-N	9.16	131.29	119.84
1	A	566	LYS	C-N-CA	9.16	131.29	119.84
1	A	280	ALA	N-CA-C	-9.13	101.92	112.87
2	B	40	PHE	N-CA-C	-9.12	100.08	112.03
1	A	610	SER	N-CA-C	-9.09	100.61	112.24
2	B	48	GLU	N-CA-C	-9.02	101.53	111.36
2	B	75	PHE	N-CA-C	-9.01	100.13	114.09
1	A	208	GLU	N-CA-C	-8.97	95.04	109.76
1	A	752	ASP	CA-C-N	8.97	131.05	119.84
1	A	752	ASP	C-N-CA	8.97	131.05	119.84
1	A	601	LYS	N-CA-C	8.80	129.55	110.80
1	A	89	ALA	N-CA-C	-8.79	101.78	111.36
1	A	502	TYR	N-CA-C	-8.71	100.79	111.33
1	A	685	VAL	N-CA-C	8.62	127.27	109.34
1	A	33	ASN	CA-C-N	-8.61	111.11	123.00
1	A	33	ASN	C-N-CA	-8.61	111.11	123.00
1	A	498	GLU	N-CA-C	-8.59	101.50	112.93
1	A	209	GLU	N-CA-C	-8.57	92.55	110.80
2	B	138	ALA	CA-C-N	8.52	129.87	119.98
2	B	138	ALA	C-N-CA	8.52	129.87	119.98
1	A	438	ASN	N-CA-C	-8.51	100.86	111.75
3	C	154	TYR	CA-C-N	8.48	130.44	119.84
3	C	154	TYR	C-N-CA	8.48	130.44	119.84
3	C	146	VAL	N-CA-C	-8.39	102.25	110.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	64	ASN	CA-C-O	-8.38	108.52	120.51
1	A	619	LEU	N-CA-C	-8.35	102.20	112.38
1	A	489	PHE	N-CA-C	-8.30	102.18	111.14
2	B	31	THR	N-CA-C	-8.23	96.50	109.50
1	A	775	GLU	N-CA-C	-8.17	101.64	111.69
1	A	185	ASN	N-CA-C	-8.16	93.42	110.80
1	A	51	SER	CA-C-N	7.94	136.71	121.54
1	A	51	SER	C-N-CA	7.94	136.71	121.54
2	B	45	ASP	N-CA-C	-7.85	94.07	110.80
1	A	34	CYS	N-CA-C	7.76	121.57	109.07
1	A	455	ASN	N-CA-C	7.73	127.27	110.80
2	B	148	VAL	CA-C-N	7.67	136.20	121.54
2	B	148	VAL	C-N-CA	7.67	136.20	121.54
1	A	623	LEU	N-CA-C	-7.67	101.44	111.71
1	A	602	ASP	N-CA-C	7.63	122.13	108.47
1	A	612	LEU	CA-C-O	7.58	131.35	120.51
1	A	181	GLY	N-CA-C	-7.55	95.29	113.18
1	A	769	VAL	N-CA-C	-7.54	101.72	112.35
1	A	199	ALA	N-CA-C	-7.53	102.07	112.30
1	A	20	MET	N-CA-C	7.51	126.81	110.80
1	A	60	ILE	N-CA-C	7.47	124.88	109.34
1	A	118	LEU	N-CA-C	-7.46	104.03	113.43
1	A	455	ASN	O-C-N	-7.46	112.67	122.59
2	B	64	ALA	N-CA-C	-7.43	104.06	113.43
1	A	568	GLY	N-CA-C	-7.43	104.83	111.67
1	A	648	ILE	N-CA-C	7.41	118.18	110.62
1	A	366	LYS	N-CA-C	7.33	126.42	110.80
2	B	90	ASP	N-CA-C	7.32	119.97	110.53
1	A	564	PHE	CA-C-N	7.31	135.50	121.54
1	A	564	PHE	C-N-CA	7.31	135.50	121.54
1	A	456	TYR	N-CA-CB	-7.25	98.23	110.49
1	A	517	ASP	N-CA-C	-7.25	104.58	113.50
2	B	51	SER	CA-C-O	7.22	126.95	118.79
1	A	62	SER	CA-C-N	7.19	135.26	121.54
1	A	62	SER	C-N-CA	7.19	135.26	121.54
1	A	595	GLY	N-CA-C	-7.18	105.30	115.43
1	A	563	MET	CA-C-N	-7.13	111.62	122.81
1	A	563	MET	C-N-CA	-7.13	111.62	122.81
1	A	818	ILE	N-CA-C	-7.13	103.35	110.62
2	B	107	THR	N-CA-C	-7.10	104.43	113.23
3	C	59	MET	N-CA-C	-7.08	99.02	110.20
1	A	782	SER	N-CA-C	-6.99	103.66	111.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	B	65	MET	N-CA-C	-6.95	99.92	110.70
1	A	817	ASN	N-CA-C	6.92	118.90	111.36
1	A	67	ARG	O-C-N	-6.87	115.42	123.25
1	A	616	LYS	N-CA-C	-6.85	105.36	113.38
1	A	30	GLY	N-CA-C	6.82	123.76	115.31
1	A	402	LYS	CA-C-N	6.81	128.36	119.84
1	A	402	LYS	C-N-CA	6.81	128.36	119.84
1	A	223	GLN	N-CA-C	-6.79	97.39	110.56
1	A	456	TYR	CA-C-N	-6.75	110.43	122.45
1	A	456	TYR	C-N-CA	-6.75	110.43	122.45
1	A	524	LEU	N-CA-C	-6.73	104.95	113.43
1	A	157	ASP	N-CA-C	6.67	120.52	112.38
1	A	574	ASN	N-CA-C	-6.66	96.62	110.80
1	A	662	ASN	N-CA-C	-6.65	104.53	114.64
3	C	120	ASP	N-CA-C	-6.64	104.90	112.87
1	A	63	ASP	CB-CA-C	-6.63	97.23	110.42
1	A	564	PHE	CA-C-O	6.62	128.59	121.11
1	A	395	ASP	N-CA-C	-6.53	103.40	111.75
1	A	169	ASN	N-CA-C	6.51	120.01	109.40
1	A	178	SER	N-CA-C	6.51	119.74	109.39
3	C	57	HIS	N-CA-C	-6.50	105.36	113.55
1	A	367	GLN	CA-C-O	6.48	122.41	118.33
1	A	72	ASP	N-CA-C	-6.45	105.44	113.38
1	A	163	MET	N-CA-C	-6.37	102.58	110.41
1	A	92	THR	N-CA-C	-6.35	102.14	110.33
1	A	151	HIS	N-CA-C	-6.34	97.30	110.80
1	A	367	GLN	CB-CA-C	-6.31	107.26	116.53
1	A	75	GLN	N-CA-C	6.30	124.23	110.80
1	A	64	ASN	N-CA-CB	-6.30	99.85	110.49
1	A	522	ILE	N-CA-C	-6.29	103.23	111.09
1	A	480	ASN	N-CA-C	-6.22	104.80	112.38
1	A	340	LEU	CA-CB-CG	6.20	138.01	116.30
2	B	86	LEU	N-CA-C	-6.17	104.12	112.26
1	A	380	ALA	N-CA-C	-6.16	105.25	112.89
1	A	618	PRO	N-CA-C	-6.16	105.96	114.27
1	A	504	LYS	N-CA-C	-6.10	106.09	112.93
1	A	373	GLN	N-CA-C	6.09	118.57	110.53
1	A	599	LYS	N-CA-C	6.08	120.86	113.38
1	A	649	SER	N-CA-C	-6.07	104.58	111.07
1	A	583	HIS	N-CA-C	6.05	119.35	109.24
1	A	283	ASN	N-CA-C	6.04	118.13	108.41
1	A	63	ASP	CA-C-O	-6.01	111.91	120.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	531	ILE	N-CA-C	-6.00	106.65	111.81
1	A	123	VAL	N-CA-C	5.98	117.79	109.29
3	C	7	ASP	N-CA-C	-5.98	98.06	110.80
1	A	547	LYS	N-CA-C	-5.97	104.68	111.07
1	A	240	ASN	N-CA-C	5.96	123.33	114.09
2	B	93	GLU	N-CA-C	-5.95	106.36	113.97
2	B	68	GLU	N-CA-C	-5.93	106.68	112.97
3	C	64	LEU	N-CA-C	5.93	117.29	109.93
1	A	59	LYS	N-CA-C	5.93	123.43	110.80
1	A	622	GLU	N-CA-C	-5.89	104.70	112.72
1	A	535	LEU	N-CA-C	-5.87	104.88	112.68
1	A	673	CYS	N-CA-C	5.84	123.24	110.80
1	A	647	THR	N-CA-C	5.83	117.46	109.18
1	A	667	HIS	CA-C-N	5.81	127.11	119.84
1	A	667	HIS	C-N-CA	5.81	127.11	119.84
1	A	269	LEU	N-CA-C	-5.80	99.07	108.52
1	A	423	ASN	N-CA-C	-5.78	104.90	111.14
1	A	78	ASN	N-CA-C	5.76	122.54	109.81
3	C	121	GLU	N-CA-C	-5.75	104.93	111.14
1	A	669	HIS	N-CA-C	-5.69	99.87	108.52
1	A	102	ASN	N-CA-C	-5.68	106.39	113.15
1	A	412	VAL	N-CA-C	5.68	117.02	108.96
1	A	284	TYR	N-CA-C	5.66	122.86	110.80
1	A	129	LEU	CA-C-N	5.66	126.91	119.84
1	A	129	LEU	C-N-CA	5.66	126.91	119.84
1	A	301	VAL	N-CA-C	-5.57	97.75	109.34
1	A	109	ALA	N-CA-C	-5.53	103.80	110.44
1	A	254	GLY	CA-C-N	5.50	126.72	119.84
1	A	254	GLY	C-N-CA	5.50	126.72	119.84
1	A	578	ALA	N-CA-C	5.49	122.49	110.80
1	A	481	TYR	N-CA-C	-5.47	105.73	112.90
1	A	168	GLU	N-CA-C	5.46	122.42	110.80
3	C	94	PHE	N-CA-C	-5.46	106.54	114.12
1	A	567	PRO	N-CA-C	5.45	123.70	112.47
1	A	456	TYR	CE1-CZ-OH	-5.44	103.59	119.90
1	A	655	SER	N-CA-C	-5.41	102.65	111.04
1	A	125	PRO	N-CA-C	-5.40	101.35	112.47
1	A	691	LEU	N-CA-C	-5.40	104.80	111.33
1	A	154	SER	N-CA-C	-5.39	99.33	110.80
3	C	23	ASP	N-CA-C	-5.35	104.37	112.99
1	A	750	GLN	N-CA-C	-5.34	106.06	112.58
1	A	70	LYS	N-CA-C	5.34	116.19	108.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	B	136	LYS	N-CA-C	-5.32	105.86	112.93
1	A	47	GLU	N-CA-C	-5.29	101.71	109.81
1	A	252	HIS	N-CA-C	5.28	118.33	110.52
1	A	300	GLU	N-CA-C	-5.28	99.56	110.80
1	A	690	VAL	N-CA-C	-5.23	106.03	111.58
1	A	106	ARG	N-CA-C	-5.23	107.45	113.88
1	A	674	ILE	N-CA-C	5.23	120.21	109.34
3	C	73	TYR	N-CA-C	-5.22	105.19	112.45
1	A	703	ILE	N-CA-C	-5.20	105.02	112.35
1	A	443	ARG	N-CA-C	5.19	117.93	111.24
3	C	115	GLY	N-CA-C	5.17	120.76	111.34
2	B	96	ARG	N-CA-C	-5.16	105.65	111.28
1	A	376	SER	N-CA-C	-5.16	106.94	113.18
1	A	338	ASP	N-CA-C	5.15	121.78	110.80
1	A	141	ARG	N-CA-C	-5.15	105.36	111.69
1	A	548	SER	N-CA-C	-5.14	104.94	111.11
1	A	138	ALA	N-CA-C	5.11	121.69	110.80
1	A	597	LEU	N-CA-C	-5.11	105.83	111.71
1	A	749	LEU	N-CA-C	5.11	119.49	113.16
3	C	98	GLY	N-CA-C	-5.10	108.67	115.40
1	A	46	ALA	N-CA-C	5.09	114.55	107.73
1	A	715	ILE	N-CA-C	-5.08	101.75	109.78
1	A	212	GLN	N-CA-C	-5.07	106.88	113.16
1	A	146	THR	N-CA-C	5.05	119.60	113.38
1	A	221	ILE	N-CA-C	5.02	119.78	109.34
1	A	259	ILE	N-CA-C	-5.00	98.94	109.34

There are no chirality outliers.

All (26) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	1	MET	Peptide
1	A	11	GLN	Peptide
1	A	12	TYR	Peptide
1	A	13	LEU	Peptide
1	A	2	ASN	Peptide
1	A	230	ALA	Peptide
1	A	231	TYR	Peptide
1	A	232	GLY	Peptide
1	A	24	GLN	Peptide
1	A	38	ASP	Peptide
1	A	388	LEU	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	389	CYS	Peptide
1	A	39	PRO	Peptide
1	A	40	LYS	Peptide
1	A	455	ASN	Mainchain
1	A	50	SER	Peptide
1	A	51	SER	Peptide
1	A	53	GLY	Peptide
1	A	56	ILE	Peptide
1	A	564	PHE	Sidechain
1	A	63	ASP	Peptide
1	A	64	ASN	Peptide
1	A	67	ARG	Mainchain
1	A	8	PRO	Peptide
2	B	149	ARG	Mainchain
3	C	144	GLU	Mainchain

5.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	6338	0	6174	2055	0
2	B	979	0	936	202	0
3	C	1228	0	1149	268	0
4	C	1	0	0	0	0
5	A	16	0	0	0	0
5	B	3	0	0	0	0
5	C	12	0	0	1	0
All	All	8577	0	8259	2468	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 147.

All (2468) 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:53:GLY:CA	1:A:54:GLU:HB2	1.39	1.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:231:TYR:HB2	1:A:437:PHE:CE1	1.56	1.40
1:A:56:ILE:HD12	1:A:57:THR:CA	1.53	1.36
1:A:230:ALA:N	1:A:232:GLY:HA3	1.35	1.35
1:A:103:LEU:HD23	1:A:104:ARG:N	1.43	1.31
1:A:56:ILE:HD11	1:A:67:ARG:O	1.26	1.30
1:A:226:PRO:O	1:A:230:ALA:HB2	1.30	1.28
1:A:55:GLU:HA	1:A:69:VAL:O	1.35	1.21
1:A:229:GLU:C	1:A:232:GLY:HA3	1.69	1.18
1:A:60:ILE:HG13	1:A:61:VAL:N	1.55	1.16
1:A:289:GLN:CA	1:A:326:ASP:HB3	1.76	1.16
1:A:191:MET:O	1:A:195:LYS:HG2	1.45	1.14
1:A:223:GLN:O	1:A:226:PRO:HD2	1.44	1.14
1:A:200:VAL:HG21	1:A:258:LYS:HE2	1.26	1.14
1:A:193:LEU:H	1:A:193:LEU:HD12	1.14	1.13
1:A:289:GLN:HA	1:A:326:ASP:CB	1.79	1.13
1:A:391:ILE:HD12	1:A:611:LEU:HD23	1.18	1.13
2:B:34:ASP:HA	2:B:45:ASP:O	1.46	1.13
1:A:300:GLU:C	1:A:302:MET:H	1.49	1.12
1:A:134:ASP:HA	1:A:137:ILE:HG22	1.18	1.12
1:A:328:GLU:HA	1:A:332:LEU:HD23	1.24	1.12
1:A:8:PRO:HB2	1:A:10:PHE:HB2	1.19	1.11
2:B:64:ALA:HA	2:B:67:LYS:HB3	1.20	1.11
1:A:572:ARG:HG2	1:A:573:PRO:HD2	1.26	1.11
1:A:290:ILE:HB	1:A:330:PHE:CZ	1.86	1.11
1:A:298:LEU:HD23	1:A:301:VAL:HG21	1.28	1.10
1:A:232:GLY:O	1:A:245:PHE:CE1	2.03	1.10
1:A:3:ILE:HG22	1:A:4:ASP:N	1.55	1.10
1:A:53:GLY:CA	1:A:54:GLU:CB	2.30	1.10
1:A:178:SER:HB2	1:A:239:ASN:HD21	1.10	1.10
1:A:607:ASN:O	1:A:608:VAL:HG12	1.52	1.09
1:A:77:MET:HG3	1:A:98:SER:HB2	1.34	1.09
1:A:100:LEU:HD12	1:A:103:LEU:HD21	1.28	1.09
1:A:297:GLU:HG2	1:A:298:LEU:HD12	1.30	1.08
1:A:188:LYS:HB2	1:A:188:LYS:HZ2	1.05	1.08
1:A:229:GLU:N	1:A:232:GLY:HA2	1.67	1.07
1:A:231:TYR:CB	1:A:437:PHE:HE1	1.67	1.07
1:A:286:ILE:O	1:A:290:ILE:HG23	1.53	1.07
1:A:253:PHE:HB2	1:A:457:TYR:HA	1.33	1.07
1:A:3:ILE:HG22	1:A:4:ASP:H	1.06	1.07
1:A:100:LEU:C	1:A:103:LEU:HD22	1.80	1.06
1:A:186:THR:HG23	1:A:460:VAL:HG11	1.11	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:398:LYS:HD3	1:A:399:ALA:H	1.21	1.05
1:A:56:ILE:CD1	1:A:57:THR:HA	1.85	1.04
1:A:56:ILE:HD12	1:A:57:THR:N	1.72	1.04
1:A:287:PHE:O	1:A:290:ILE:HG12	1.56	1.04
3:C:58:LYS:HB2	3:C:61:GLU:HG2	1.38	1.04
1:A:391:ILE:CD1	1:A:611:LEU:HD23	1.88	1.04
1:A:56:ILE:HD12	1:A:57:THR:HA	1.06	1.03
1:A:367:GLN:HG2	1:A:418:LEU:HD13	1.40	1.03
1:A:601:LYS:O	1:A:603:PRO:HD3	1.56	1.03
1:A:803:LYS:O	1:A:807:GLN:HG2	1.59	1.03
1:A:124:ASN:HB2	1:A:674:ILE:HG21	1.38	1.03
1:A:368:ARG:HG3	1:A:371:GLU:O	1.58	1.03
1:A:38:ASP:CB	1:A:39:PRO:HD3	1.87	1.03
1:A:455:ASN:O	1:A:456:TYR:HB2	1.58	1.03
1:A:606:GLU:HA	1:A:610:SER:HB3	1.40	1.03
1:A:53:GLY:N	1:A:54:GLU:HB2	1.72	1.03
1:A:310:LEU:HG	1:A:311:TYR:H	1.17	1.02
1:A:365:PHE:HB2	1:A:377:ASP:HB3	1.38	1.02
1:A:304:ILE:HD12	1:A:305:THR:N	1.73	1.02
1:A:484:GLU:OE1	1:A:584:HIS:HB3	1.60	1.02
1:A:26:ALA:HB3	1:A:27:PRO:HD3	1.41	1.02
3:C:118:LEU:HD22	3:C:122:GLU:OE1	1.60	1.01
1:A:184:GLU:HA	1:A:187:LYS:HB3	1.43	1.01
1:A:348:THR:HA	1:A:351:PHE:HE1	1.24	1.01
1:A:618:PRO:HA	1:A:621:ALA:HB3	1.38	1.01
1:A:348:THR:HA	1:A:351:PHE:CE1	1.95	1.00
1:A:86:GLU:OE1	1:A:150:PRO:HD3	1.61	1.00
1:A:185:ASN:O	1:A:189:VAL:HG22	1.62	1.00
1:A:32:LYS:HA	1:A:48:ILE:HG22	1.44	1.00
1:A:232:GLY:O	1:A:245:PHE:HE1	1.42	1.00
3:C:107:LEU:CD1	3:C:111:LEU:HD11	1.93	0.99
1:A:53:GLY:HA3	1:A:54:GLU:HB2	1.00	0.99
1:A:37:PRO:HB3	1:A:43:PHE:CD2	1.98	0.99
1:A:55:GLU:CA	1:A:69:VAL:O	2.11	0.98
1:A:229:GLU:CA	1:A:232:GLY:CA	2.41	0.98
1:A:152:LEU:N	1:A:152:LEU:HD23	1.78	0.98
1:A:184:GLU:HA	1:A:187:LYS:CB	1.94	0.98
1:A:41:GLU:OE1	1:A:41:GLU:HA	1.59	0.98
1:A:401:LEU:HD12	1:A:402:LYS:HD2	1.44	0.98
1:A:493:HIS:O	1:A:496:VAL:HG12	1.64	0.97
1:A:153:PHE:HA	1:A:156:ALA:HB3	1.44	0.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:472:ASN:HB2	1:A:591:TYR:HA	1.45	0.97
1:A:301:VAL:O	1:A:302:MET:HB3	1.63	0.97
1:A:103:LEU:HD23	1:A:104:ARG:H	1.05	0.97
1:A:4:ASP:C	1:A:5:PHE:CD2	2.42	0.97
1:A:85:LEU:H	1:A:102:ASN:HD21	1.11	0.97
3:C:110:VAL:HG13	3:C:114:LEU:HD12	1.43	0.97
1:A:383:GLU:HA	1:A:393:ALA:HB2	1.47	0.96
1:A:472:ASN:ND2	1:A:589:VAL:HG12	1.81	0.96
1:A:53:GLY:HA3	1:A:54:GLU:CB	1.92	0.96
1:A:231:TYR:CB	1:A:437:PHE:CE1	2.43	0.96
1:A:100:LEU:O	1:A:103:LEU:HD22	1.65	0.95
1:A:56:ILE:HD13	1:A:58:VAL:H	1.30	0.95
1:A:375:GLU:HG2	1:A:377:ASP:H	1.32	0.95
1:A:305:THR:OG1	1:A:306:PRO:HD2	1.67	0.95
1:A:305:THR:CB	1:A:306:PRO:HD2	1.95	0.95
1:A:685:VAL:HG22	1:A:686:ASP:H	1.31	0.95
1:A:56:ILE:CD1	1:A:67:ARG:O	2.13	0.95
3:C:96:ARG:O	3:C:97:GLU:HG2	1.67	0.94
1:A:38:ASP:CG	1:A:39:PRO:HD3	1.92	0.94
1:A:53:GLY:N	1:A:54:GLU:CB	2.31	0.94
1:A:214:LYS:H	1:A:214:LYS:HD2	1.32	0.94
1:A:230:ALA:N	1:A:232:GLY:CA	2.30	0.94
1:A:78:ASN:HB3	1:A:82:PHE:CB	1.98	0.94
1:A:451:LYS:HB2	1:A:451:LYS:NZ	1.80	0.94
1:A:230:ALA:H	1:A:232:GLY:HA3	1.28	0.94
1:A:304:ILE:HD12	1:A:305:THR:H	1.31	0.94
2:B:47:LYS:HG3	2:B:48:GLU:N	1.84	0.93
2:B:118:LEU:HA	2:B:122:MET:HG3	1.49	0.93
1:A:161:GLN:O	1:A:165:THR:HB	1.68	0.93
1:A:190:ILE:H	1:A:193:LEU:HD13	1.33	0.93
1:A:233:ASN:CB	1:A:243:SER:HA	1.98	0.93
1:A:273:ARG:HG3	1:A:284:TYR:CE1	2.03	0.93
1:A:392:ASN:O	1:A:394:GLY:N	2.01	0.93
1:A:3:ILE:CG2	1:A:4:ASP:N	2.30	0.93
1:A:189:VAL:HB	1:A:193:LEU:HD11	1.50	0.93
1:A:507:ILE:HG12	1:A:508:GLN:N	1.82	0.93
1:A:229:GLU:HA	1:A:233:ASN:N	1.83	0.93
2:B:112:ILE:HG22	2:B:116:LYS:HG3	1.48	0.93
1:A:404:LYS:HA	1:A:412:VAL:O	1.67	0.93
1:A:77:MET:CG	1:A:98:SER:HB2	1.99	0.93
1:A:188:LYS:HB2	1:A:188:LYS:NZ	1.82	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:311:TYR:HA	1:A:362:GLU:OE2	1.67	0.93
1:A:672:ARG:HD2	1:A:697:ASN:HB3	1.51	0.92
1:A:789:GLN:HE22	3:C:111:LEU:HA	1.33	0.92
1:A:300:GLU:C	1:A:302:MET:N	2.19	0.92
1:A:569:LYS:HB3	1:A:569:LYS:NZ	1.83	0.92
1:A:727:ALA:HB1	1:A:730:ALA:HB3	1.52	0.92
1:A:297:GLU:CG	1:A:298:LEU:HD12	1.99	0.92
1:A:229:GLU:HA	1:A:232:GLY:C	1.95	0.92
1:A:787:MET:SD	3:C:80:GLU:HG2	2.10	0.92
1:A:350:MET:HA	1:A:353:CYS:SG	2.10	0.91
1:A:417:ASN:O	1:A:419:GLN:N	2.04	0.91
1:A:443:ARG:HA	1:A:446:ARG:CG	1.99	0.91
1:A:133:THR:HG22	1:A:134:ASP:H	1.36	0.91
1:A:185:ASN:H	1:A:188:LYS:H	1.18	0.91
1:A:182:LYS:NZ	1:A:182:LYS:HB3	1.85	0.91
1:A:618:PRO:O	1:A:623:LEU:HD11	1.70	0.91
1:A:212:GLN:HG3	1:A:214:LYS:HZ1	1.33	0.91
1:A:674:ILE:HB	1:A:676:PRO:HD3	1.52	0.91
2:B:41:ILE:HG12	2:B:45:ASP:HA	1.50	0.91
1:A:77:MET:HG3	1:A:98:SER:CB	2.00	0.90
1:A:112:ILE:HB	1:A:123:VAL:HB	1.51	0.90
1:A:324:ILE:HD13	1:A:325:ASP:H	1.36	0.90
1:A:24:GLN:O	1:A:25:THR:HG22	1.72	0.90
1:A:26:ALA:HB3	1:A:27:PRO:CD	2.01	0.90
1:A:355:ALA:HA	1:A:358:LEU:CD1	2.01	0.90
1:A:233:ASN:HB2	1:A:243:SER:HA	1.54	0.90
1:A:697:ASN:HD22	1:A:697:ASN:N	1.65	0.90
1:A:697:ASN:HD22	1:A:697:ASN:H	1.16	0.90
1:A:532:LEU:HD23	1:A:533:SER:N	1.87	0.90
2:B:34:ASP:HB2	2:B:45:ASP:HA	1.54	0.90
2:B:83:SER:C	2:B:85:LYS:H	1.78	0.90
1:A:328:GLU:CA	1:A:332:LEU:HD23	2.02	0.89
1:A:788:PHE:O	1:A:792:ILE:HG22	1.72	0.89
1:A:675:ILE:H	1:A:676:PRO:HD3	1.35	0.89
1:A:141:ARG:HD2	1:A:142:GLY:H	1.37	0.89
1:A:175:THR:HB	1:A:672:ARG:NE	1.87	0.89
1:A:308:SER:HA	1:A:311:TYR:CE1	2.07	0.89
1:A:421:VAL:HG23	1:A:422:ILE:H	1.38	0.89
1:A:4:ASP:C	1:A:5:PHE:HD2	1.79	0.89
1:A:189:VAL:O	1:A:191:MET:N	2.05	0.89
1:A:815:GLN:HE22	2:B:124:ASP:H	1.19	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:10:ASP:HA	3:C:13:LYS:HE3	1.55	0.89
1:A:226:PRO:O	1:A:230:ALA:CB	2.21	0.88
1:A:180:ALA:H	1:A:674:ILE:HG12	1.38	0.88
1:A:461:LEU:HD13	1:A:462:ASP:N	1.88	0.88
1:A:123:VAL:HA	1:A:674:ILE:HG22	1.55	0.88
1:A:231:TYR:HB2	1:A:437:PHE:HE1	0.77	0.88
1:A:332:LEU:H	1:A:332:LEU:HD22	1.37	0.88
1:A:466:PHE:N	1:A:483:ASN:ND2	2.22	0.88
1:A:472:ASN:HB3	1:A:591:TYR:HD1	1.38	0.88
1:A:48:ILE:HG12	1:A:49:GLN:H	1.35	0.88
1:A:190:ILE:HD12	1:A:218:GLU:HB3	1.53	0.88
1:A:237:THR:HG23	1:A:238:ARG:N	1.89	0.88
3:C:107:LEU:HD12	3:C:111:LEU:HD11	1.54	0.88
1:A:439:TRP:NE1	1:A:623:LEU:HG	1.89	0.88
1:A:229:GLU:N	1:A:232:GLY:CA	2.36	0.87
1:A:308:SER:HA	1:A:311:TYR:HE1	1.35	0.87
1:A:696:CYS:O	1:A:698:GLY:N	2.07	0.87
1:A:55:GLU:HG2	1:A:68:THR:HG22	1.54	0.87
1:A:322:ASP:O	1:A:324:ILE:HG23	1.74	0.87
1:A:310:LEU:HG	1:A:311:TYR:N	1.90	0.87
1:A:327:VAL:HG23	1:A:328:GLU:N	1.89	0.87
2:B:56:THR:HG23	2:B:57:PRO:HD2	1.53	0.87
1:A:532:LEU:HD11	1:A:653:ARG:CZ	2.03	0.87
1:A:614:VAL:HG22	1:A:615:SER:N	1.87	0.87
1:A:234:ALA:O	1:A:285:HIS:HB2	1.74	0.87
1:A:421:VAL:HA	1:A:424:SER:HB2	1.55	0.87
1:A:178:SER:CB	1:A:239:ASN:HD21	1.88	0.87
1:A:477:LEU:O	1:A:477:LEU:HD22	1.74	0.87
1:A:37:PRO:HB3	1:A:43:PHE:HD2	1.31	0.87
1:A:63:ASP:C	1:A:64:ASN:CG	2.39	0.87
1:A:291:CYS:O	1:A:306:PRO:HD3	1.72	0.87
3:C:117:ARG:HE	3:C:117:ARG:H	1.19	0.87
1:A:95:ASN:OD1	1:A:98:SER:HB3	1.75	0.86
1:A:551:ASP:O	1:A:554:TYR:HB2	1.75	0.86
1:A:29:ASP:HB2	1:A:33:ASN:HD22	1.38	0.86
1:A:75:GLN:HG2	1:A:95:ASN:HD22	1.40	0.86
1:A:176:GLY:CA	1:A:673:CYS:HB2	2.05	0.86
3:C:106:GLU:O	3:C:109:HIS:HB3	1.75	0.86
1:A:332:LEU:HD22	1:A:332:LEU:N	1.90	0.86
1:A:100:LEU:CD1	1:A:103:LEU:HD21	2.05	0.86
1:A:157:ASP:HB2	1:A:192:TYR:OH	1.75	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:229:GLU:C	1:A:232:GLY:CA	2.47	0.86
1:A:320:THR:HG23	1:A:324:ILE:CG1	2.05	0.86
1:A:695:GLN:HA	1:A:700:LEU:HD12	1.55	0.86
3:C:31:ALA:HB3	3:C:56:THR:HG22	1.58	0.86
1:A:56:ILE:CD1	1:A:57:THR:CA	2.46	0.86
1:A:186:THR:CG2	1:A:460:VAL:HG11	2.02	0.86
1:A:303:LEU:HG	1:A:359:HIS:CE1	2.10	0.86
1:A:169:ASN:O	1:A:666:THR:HG22	1.76	0.85
1:A:621:ALA:H	1:A:623:LEU:CD1	1.89	0.85
1:A:53:GLY:H	1:A:54:GLU:CB	1.88	0.85
1:A:320:THR:HG23	1:A:324:ILE:HG13	1.58	0.85
1:A:617:GLU:OE1	1:A:619:LEU:HD23	1.77	0.85
1:A:100:LEU:O	1:A:102:ASN:N	2.09	0.85
1:A:152:LEU:O	1:A:155:VAL:HG22	1.75	0.85
1:A:253:PHE:N	1:A:456:TYR:O	2.09	0.85
1:A:74:ILE:HG23	1:A:75:GLN:H	1.40	0.85
1:A:108:THR:HG23	1:A:684:LEU:HD22	1.59	0.85
1:A:298:LEU:C	1:A:300:GLU:H	1.82	0.85
1:A:176:GLY:HA3	1:A:673:CYS:HB2	1.57	0.85
1:A:189:VAL:HB	1:A:193:LEU:CD1	2.06	0.85
1:A:386:ALA:CB	1:A:393:ALA:N	2.40	0.85
1:A:214:LYS:H	1:A:214:LYS:CD	1.88	0.85
1:A:304:ILE:O	1:A:305:THR:HB	1.73	0.85
1:A:374:ALA:HB2	1:A:418:LEU:HB2	1.58	0.85
1:A:569:LYS:HG2	1:A:570:PRO:HD2	1.58	0.85
1:A:674:ILE:HG13	1:A:675:ILE:N	1.91	0.85
1:A:103:LEU:CD2	1:A:104:ARG:N	2.37	0.85
1:A:399:ALA:HA	1:A:403:PRO:CB	2.06	0.85
1:A:126:TYR:HE2	1:A:680:LYS:HB3	1.42	0.84
1:A:479:ILE:HG23	1:A:483:ASN:ND2	1.92	0.84
1:A:340:LEU:HD21	1:A:444:VAL:HA	1.60	0.84
1:A:761:THR:HG23	1:A:762:LYS:HG2	1.58	0.84
1:A:796:LEU:HD21	3:C:126:ILE:HG12	1.58	0.84
1:A:100:LEU:HD12	1:A:103:LEU:CD2	2.06	0.84
1:A:55:GLU:HB3	1:A:68:THR:CG2	2.08	0.84
1:A:466:PHE:H	1:A:483:ASN:HD21	1.26	0.84
1:A:834:ALA:HB2	1:A:837:LYS:HD2	1.58	0.83
1:A:55:GLU:HB3	1:A:68:THR:HG23	1.61	0.83
1:A:55:GLU:CB	1:A:68:THR:HG23	2.08	0.83
1:A:397:LEU:HA	1:A:400:LEU:HD12	1.58	0.83
1:A:578:ALA:O	1:A:579:HIS:HB2	1.75	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:12:LEU:HA	3:C:41:LEU:HD11	1.59	0.83
1:A:184:GLU:CA	1:A:187:LYS:HB3	2.09	0.83
1:A:19:LYS:HG3	1:A:20:MET:H	1.43	0.83
1:A:11:GLN:CB	1:A:12:TYR:C	2.52	0.83
1:A:112:ILE:HG13	1:A:113:TYR:CE1	2.14	0.83
1:A:567:PRO:HG3	1:A:580:PHE:N	1.94	0.83
1:A:572:ARG:HG2	1:A:573:PRO:CD	2.08	0.83
1:A:303:LEU:HD23	1:A:388:LEU:HD11	1.61	0.83
1:A:43:PHE:CE2	1:A:97:ALA:HB2	2.13	0.83
1:A:308:SER:O	1:A:310:LEU:N	2.12	0.83
1:A:513:ASP:O	1:A:516:MET:HG2	1.78	0.83
1:A:60:ILE:HG13	1:A:61:VAL:H	1.41	0.83
1:A:824:LEU:O	1:A:826:ASN:N	2.12	0.83
1:A:828:GLN:C	1:A:830:TRP:H	1.86	0.83
1:A:103:LEU:CD2	1:A:104:ARG:H	1.90	0.83
1:A:228:LEU:O	1:A:230:ALA:N	2.12	0.83
1:A:229:GLU:C	1:A:233:ASN:H	1.87	0.82
1:A:479:ILE:CG2	1:A:483:ASN:ND2	2.41	0.82
1:A:276:TYR:CD2	1:A:277:GLN:N	2.48	0.82
1:A:389:CYS:SG	1:A:390:GLY:N	2.51	0.82
3:C:58:LYS:HB2	3:C:61:GLU:CG	2.09	0.82
1:A:725:ILE:HD13	1:A:780:ARG:O	1.79	0.82
1:A:298:LEU:HD23	1:A:301:VAL:CG2	2.07	0.82
1:A:328:GLU:HA	1:A:332:LEU:CD2	2.08	0.82
1:A:37:PRO:CD	1:A:73:ASP:O	2.27	0.82
1:A:180:ALA:HB2	1:A:674:ILE:HG23	1.61	0.82
1:A:500:GLU:CD	1:A:501:GLU:H	1.86	0.82
1:A:134:ASP:CA	1:A:137:ILE:HG22	2.07	0.82
1:A:390:GLY:HA3	1:A:615:SER:HB2	1.59	0.82
1:A:716:TYR:HE1	1:A:763:VAL:HB	1.44	0.82
1:A:60:ILE:CG1	1:A:61:VAL:N	2.39	0.82
2:B:110:LEU:HB2	2:B:115:ILE:HD11	1.62	0.82
1:A:185:ASN:N	1:A:188:LYS:H	1.77	0.82
1:A:55:GLU:CB	1:A:68:THR:CG2	2.58	0.81
1:A:175:THR:HB	1:A:672:ARG:HE	1.42	0.81
1:A:327:VAL:HG23	1:A:328:GLU:H	1.43	0.81
1:A:55:GLU:HG2	1:A:68:THR:CG2	2.09	0.81
1:A:229:GLU:CA	1:A:233:ASN:H	1.93	0.81
1:A:466:PHE:HE2	1:A:468:ILE:HG23	1.44	0.81
1:A:87:ASP:C	1:A:89:ALA:H	1.89	0.81
1:A:715:ILE:HA	1:A:762:LYS:HB3	1.61	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:48:ILE:HA	1:A:58:VAL:HG21	1.61	0.81
1:A:439:TRP:HE1	1:A:623:LEU:HG	1.42	0.81
1:A:572:ARG:CG	1:A:573:PRO:HD2	2.11	0.81
2:B:40:PHE:O	2:B:73:LEU:HG	1.81	0.81
2:B:54:GLY:O	2:B:55:ARG:HG3	1.81	0.81
1:A:32:LYS:HE3	1:A:47:GLU:HG3	1.61	0.80
1:A:92:THR:OG1	1:A:768:GLY:HA2	1.81	0.80
1:A:302:MET:CG	1:A:303:LEU:HD22	2.11	0.80
1:A:435:ARG:CZ	1:A:624:PHE:HA	2.11	0.80
1:A:252:HIS:HA	1:A:457:TYR:HB3	1.63	0.80
2:B:56:THR:HG23	2:B:57:PRO:CD	2.09	0.80
1:A:126:TYR:CE2	1:A:680:LYS:HB3	2.17	0.80
3:C:107:LEU:HD11	3:C:111:LEU:HD11	1.63	0.80
1:A:55:GLU:C	1:A:56:ILE:HG23	2.07	0.80
1:A:140:TYR:HA	1:A:143:LYS:HG3	1.63	0.80
1:A:554:TYR:C	1:A:556:ASN:N	2.35	0.80
1:A:77:MET:HG3	1:A:98:SER:HA	1.63	0.80
1:A:458:ILE:HG13	1:A:459:GLY:N	1.95	0.80
1:A:785:ILE:O	1:A:789:GLN:HG2	1.80	0.80
3:C:124:ASP:O	3:C:128:ASN:HB2	1.81	0.80
1:A:137:ILE:HG23	1:A:138:ALA:H	1.47	0.80
1:A:359:HIS:O	1:A:362:GLU:HG2	1.82	0.80
1:A:365:PHE:CB	1:A:377:ASP:HB3	2.12	0.80
1:A:367:GLN:HG2	1:A:418:LEU:CD1	2.11	0.80
1:A:443:ARG:HA	1:A:446:ARG:HG2	1.63	0.80
1:A:753:PRO:HA	1:A:756:TYR:CE1	2.17	0.80
1:A:552:TYR:HD1	1:A:552:TYR:C	1.90	0.80
3:C:5:SER:O	3:C:9:ILE:HG22	1.82	0.80
1:A:435:ARG:NH1	1:A:624:PHE:HA	1.97	0.79
1:A:723:TYR:HB3	1:A:726:LEU:HD12	1.64	0.79
1:A:147:GLU:O	1:A:148:ILE:HG12	1.81	0.79
1:A:346:GLU:CD	1:A:346:GLU:N	2.37	0.79
1:A:472:ASN:CB	1:A:591:TYR:HA	2.12	0.79
1:A:354:THR:O	1:A:357:ILE:HG23	1.82	0.79
1:A:22:LYS:HD3	1:A:22:LYS:N	1.98	0.79
1:A:386:ALA:HB1	1:A:393:ALA:N	1.97	0.79
3:C:125:GLU:O	3:C:129:LEU:HD12	1.81	0.79
1:A:157:ASP:C	1:A:160:TYR:HB3	2.08	0.79
1:A:443:ARG:HA	1:A:446:ARG:HG3	1.61	0.79
1:A:549:PHE:HD2	1:A:593:ILE:HG13	1.48	0.79
1:A:57:THR:HG22	1:A:57:THR:O	1.82	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:600:ASN:O	1:A:648:ILE:HG23	1.83	0.79
1:A:56:ILE:CD1	1:A:58:VAL:H	1.94	0.79
1:A:222:ILE:HA	1:A:225:ASN:OD1	1.83	0.79
1:A:303:LEU:HG	1:A:359:HIS:HE1	1.47	0.79
1:A:399:ALA:HA	1:A:403:PRO:HB3	1.62	0.79
1:A:451:LYS:HB2	1:A:451:LYS:HZ3	1.47	0.79
1:A:569:LYS:CG	1:A:570:PRO:HD2	2.12	0.79
1:A:401:LEU:C	1:A:402:LYS:HG3	2.08	0.78
1:A:481:TYR:CE1	1:A:525:ILE:HD11	2.18	0.78
1:A:427:ALA:CB	1:A:603:PRO:HD2	2.13	0.78
1:A:346:GLU:CD	1:A:346:GLU:H	1.90	0.78
3:C:67:GLU:O	3:C:69:PHE:N	2.15	0.78
1:A:401:LEU:CD1	1:A:402:LYS:HD2	2.13	0.78
1:A:675:ILE:N	1:A:676:PRO:HD3	1.98	0.78
1:A:32:LYS:CE	1:A:47:GLU:HG3	2.13	0.78
1:A:63:ASP:O	1:A:64:ASN:CG	2.27	0.78
1:A:303:LEU:O	1:A:304:ILE:HG13	1.83	0.78
1:A:48:ILE:HG12	1:A:49:GLN:N	1.99	0.78
1:A:160:TYR:O	1:A:163:MET:HB2	1.84	0.78
1:A:495:PHE:CD2	1:A:513:ASP:HA	2.19	0.78
1:A:807:GLN:HB2	3:C:22:TRP:HZ2	1.49	0.78
1:A:112:ILE:HD12	1:A:123:VAL:O	1.84	0.78
1:A:567:PRO:HD3	1:A:580:PHE:HA	1.64	0.78
1:A:78:ASN:HB3	1:A:82:PHE:HB2	1.64	0.78
1:A:609:VAL:HG11	1:A:624:PHE:HD2	1.47	0.78
2:B:118:LEU:O	2:B:122:MET:HB2	1.84	0.78
1:A:106:ARG:NE	1:A:111:LEU:HD12	1.98	0.77
1:A:189:VAL:O	1:A:190:ILE:HG13	1.83	0.77
1:A:190:ILE:N	1:A:193:LEU:HD13	1.98	0.77
1:A:794:GLY:HA2	3:C:39:ARG:HG2	1.66	0.77
2:B:24:GLN:C	2:B:26:MET:H	1.87	0.77
1:A:487:GLN:O	1:A:490:PHE:N	2.16	0.77
1:A:225:ASN:O	1:A:228:LEU:C	2.27	0.77
1:A:242:SER:O	1:A:244:ARG:N	2.18	0.77
2:B:64:ALA:CA	2:B:67:LYS:HB3	2.08	0.77
1:A:253:PHE:O	1:A:455:ASN:O	2.03	0.77
1:A:337:PHE:CD1	1:A:347:LYS:HE2	2.20	0.77
1:A:472:ASN:HD21	1:A:589:VAL:HG12	1.47	0.77
1:A:182:LYS:HB3	1:A:182:LYS:HZ2	1.50	0.77
1:A:368:ARG:CG	1:A:371:GLU:O	2.33	0.77
1:A:398:LYS:CD	1:A:399:ALA:H	1.96	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:150:PRO:O	1:A:151:HIS:HB2	1.83	0.77
1:A:251:ILE:O	1:A:457:TYR:HB2	1.85	0.77
1:A:684:LEU:HD12	1:A:685:VAL:HB	1.64	0.77
1:A:181:GLY:O	1:A:185:ASN:OD1	2.03	0.77
1:A:229:GLU:C	1:A:233:ASN:N	2.43	0.77
1:A:237:THR:CG2	1:A:238:ARG:H	1.97	0.77
1:A:427:ALA:HB2	1:A:603:PRO:HD2	1.66	0.77
1:A:674:ILE:CG1	1:A:675:ILE:H	1.98	0.77
2:B:23:MET:O	2:B:24:GLN:HB3	1.84	0.77
1:A:532:LEU:HD11	1:A:653:ARG:NE	2.00	0.76
1:A:552:TYR:C	1:A:552:TYR:CD1	2.63	0.76
1:A:725:ILE:O	1:A:728:PRO:HD3	1.84	0.76
1:A:235:LYS:HA	1:A:240:ASN:O	1.84	0.76
1:A:597:LEU:CD1	1:A:597:LEU:H	1.98	0.76
1:A:619:LEU:HD22	1:A:619:LEU:H	1.49	0.76
1:A:85:LEU:HD23	1:A:102:ASN:ND2	1.99	0.76
1:A:505:GLU:OE2	1:A:761:THR:HG22	1.86	0.76
1:A:120:CYS:HB3	1:A:671:VAL:HG22	1.64	0.76
1:A:288:TYR:C	1:A:290:ILE:H	1.90	0.76
1:A:298:LEU:CD2	1:A:301:VAL:HG21	2.13	0.76
1:A:606:GLU:HB2	1:A:610:SER:N	2.00	0.76
1:A:75:GLN:HG2	1:A:95:ASN:ND2	2.00	0.76
1:A:77:MET:HG3	1:A:98:SER:CA	2.16	0.76
1:A:237:THR:CG2	1:A:238:ARG:N	2.49	0.76
1:A:695:GLN:CA	1:A:700:LEU:HD12	2.16	0.76
1:A:764:PHE:N	1:A:764:PHE:HD1	1.83	0.76
3:C:91:PHE:O	3:C:92:LYS:HG3	1.85	0.76
1:A:404:LYS:HB2	1:A:411:MET:HB3	1.65	0.76
1:A:597:LEU:H	1:A:597:LEU:HD13	1.51	0.76
2:B:120:GLU:OE2	2:B:131:MET:HG3	1.86	0.76
3:C:38:CYS:HB3	3:C:43:ILE:HD11	1.68	0.76
3:C:127:ILE:O	3:C:127:ILE:HG13	1.86	0.76
1:A:525:ILE:HG22	1:A:531:ILE:HG23	1.68	0.75
1:A:803:LYS:O	1:A:807:GLN:CG	2.34	0.75
2:B:63:THR:O	2:B:67:LYS:HB2	1.86	0.75
1:A:421:VAL:HG23	1:A:422:ILE:N	1.98	0.75
1:A:569:LYS:HB3	1:A:569:LYS:HZ3	1.51	0.75
1:A:697:ASN:N	1:A:697:ASN:ND2	2.31	0.75
1:A:466:PHE:CE2	1:A:468:ILE:HG23	2.22	0.75
1:A:180:ALA:H	1:A:674:ILE:CG1	1.99	0.75
1:A:253:PHE:CB	1:A:456:TYR:O	2.34	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:325:ASP:O	1:A:327:VAL:HG22	1.87	0.75
1:A:455:ASN:HB3	1:A:456:TYR:CD2	2.21	0.75
1:A:104:ARG:HA	1:A:107:TYR:CD2	2.21	0.75
1:A:302:MET:HG2	1:A:303:LEU:N	1.99	0.75
1:A:226:PRO:C	1:A:230:ALA:HB2	2.11	0.75
1:A:386:ALA:CB	1:A:393:ALA:H	1.99	0.75
1:A:569:LYS:HE2	1:A:570:PRO:HD2	1.68	0.75
1:A:614:VAL:C	1:A:616:LYS:H	1.92	0.75
3:C:70:LEU:HD23	3:C:71:PRO:CD	2.16	0.75
1:A:111:LEU:HD13	1:A:112:ILE:N	2.03	0.74
1:A:229:GLU:HA	1:A:233:ASN:H	1.48	0.74
1:A:229:GLU:CA	1:A:232:GLY:HA3	2.14	0.74
1:A:233:ASN:HB3	1:A:243:SER:HA	1.68	0.74
1:A:32:LYS:HA	1:A:48:ILE:CG2	2.16	0.74
1:A:720:LYS:HG3	1:A:721:GLN:N	2.02	0.74
1:A:660:MET:C	1:A:662:ASN:H	1.93	0.74
1:A:56:ILE:HG21	1:A:69:VAL:HG22	1.69	0.74
1:A:332:LEU:H	1:A:332:LEU:CD2	1.99	0.74
1:A:608:VAL:HG13	1:A:611:LEU:HA	1.68	0.74
1:A:55:GLU:C	1:A:56:ILE:CG2	2.61	0.74
1:A:105:GLY:O	1:A:109:ALA:HB3	1.87	0.74
3:C:32:PHE:H	3:C:56:THR:HG22	1.51	0.74
1:A:229:GLU:CA	1:A:233:ASN:N	2.49	0.74
1:A:327:VAL:CG2	1:A:328:GLU:H	1.93	0.74
1:A:467:GLU:OE2	1:A:479:ILE:HD12	1.88	0.74
1:A:567:PRO:CD	1:A:580:PHE:HA	2.17	0.74
1:A:743:GLU:O	1:A:747:THR:HG23	1.87	0.74
1:A:38:ASP:CB	1:A:39:PRO:CD	2.66	0.74
3:C:18:LEU:HD12	3:C:18:LEU:O	1.87	0.74
1:A:7:ASP:N	1:A:9:ASP:H	1.86	0.74
1:A:723:TYR:O	1:A:745:ILE:HD13	1.88	0.74
1:A:458:ILE:CG1	1:A:459:GLY:H	1.99	0.73
1:A:720:LYS:CG	1:A:721:GLN:N	2.51	0.73
1:A:87:ASP:O	1:A:89:ALA:N	2.20	0.73
1:A:341:GLY:O	1:A:443:ARG:NE	2.21	0.73
1:A:674:ILE:CG1	1:A:675:ILE:N	2.48	0.73
1:A:396:LEU:H	1:A:396:LEU:CD2	2.01	0.73
1:A:466:PHE:H	1:A:483:ASN:ND2	1.85	0.73
1:A:703:ILE:HA	1:A:706:CYS:HB2	1.71	0.73
2:B:82:PHE:HD1	2:B:83:SER:HG	1.36	0.73
3:C:49:ASP:CG	3:C:79:CYS:SG	2.72	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:125:GLU:O	3:C:129:LEU:CD1	2.36	0.73
1:A:722:ARG:HD3	1:A:777:ARG:NE	2.03	0.73
1:A:792:ILE:O	1:A:792:ILE:HG12	1.88	0.73
1:A:178:SER:HB2	1:A:239:ASN:ND2	1.96	0.73
1:A:180:ALA:N	1:A:674:ILE:HG12	2.04	0.73
1:A:273:ARG:HA	1:A:273:ARG:NE	2.04	0.73
1:A:304:ILE:HD13	1:A:311:TYR:CD2	2.24	0.73
1:A:78:ASN:HB3	1:A:82:PHE:HB3	1.69	0.73
1:A:525:ILE:HG22	1:A:531:ILE:CG2	2.19	0.73
1:A:55:GLU:O	1:A:56:ILE:CG2	2.37	0.73
1:A:182:LYS:C	1:A:184:GLU:N	2.40	0.73
1:A:807:GLN:CB	3:C:22:TRP:HZ2	2.02	0.73
1:A:158:ASN:HA	1:A:161:GLN:HB3	1.71	0.72
1:A:237:THR:HG21	1:A:281:GLU:OE1	1.89	0.72
1:A:449:ASP:O	1:A:451:LYS:N	2.16	0.72
1:A:255:PRO:HD3	1:A:454:ARG:CB	2.19	0.72
2:B:68:GLU:C	2:B:70:PRO:HD3	2.14	0.72
1:A:535:LEU:HD21	1:A:600:ASN:ND2	2.03	0.72
1:A:231:TYR:OH	1:A:350:MET:HE1	1.90	0.72
1:A:310:LEU:CG	1:A:311:TYR:H	1.93	0.72
1:A:554:TYR:O	1:A:556:ASN:N	2.21	0.72
1:A:137:ILE:HG23	1:A:138:ALA:N	2.03	0.72
1:A:525:ILE:O	1:A:532:LEU:HB3	1.89	0.72
1:A:545:ASP:O	1:A:546:ASP:HB2	1.90	0.72
1:A:73:ASP:OD2	1:A:73:ASP:N	2.22	0.72
1:A:337:PHE:HD1	1:A:347:LYS:HE2	1.53	0.72
1:A:340:LEU:HB2	1:A:447:THR:HB	1.69	0.72
1:A:834:ALA:C	1:A:836:VAL:N	2.42	0.72
3:C:52:ALA:O	3:C:53:VAL:HG13	1.90	0.72
1:A:162:ASN:HB3	1:A:170:GLN:NE2	2.04	0.72
1:A:163:MET:O	1:A:165:THR:N	2.22	0.72
1:A:253:PHE:CA	1:A:456:TYR:O	2.38	0.72
3:C:96:ARG:O	3:C:97:GLU:CG	2.38	0.72
1:A:12:TYR:HB2	1:A:14:ALA:H	1.55	0.72
1:A:50:SER:C	1:A:52:LYS:N	2.47	0.72
1:A:75:GLN:OE1	1:A:97:ALA:HB2	1.90	0.72
1:A:55:GLU:O	1:A:56:ILE:HG22	1.89	0.71
1:A:351:PHE:O	1:A:354:THR:HB	1.90	0.71
1:A:441:VAL:O	1:A:442:LYS:C	2.33	0.71
1:A:500:GLU:CG	1:A:501:GLU:H	2.01	0.71
1:A:458:ILE:HG13	1:A:459:GLY:H	1.51	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:615:SER:C	1:A:617:GLU:H	1.98	0.71
2:B:27:LYS:C	2:B:27:LYS:HD3	2.15	0.71
1:A:162:ASN:HB3	1:A:170:GLN:HE22	1.55	0.71
1:A:368:ARG:HG2	1:A:373:GLN:O	1.91	0.71
1:A:507:ILE:CG1	1:A:508:GLN:N	2.52	0.71
2:B:83:SER:C	2:B:85:LYS:N	2.41	0.71
1:A:54:GLU:CA	1:A:55:GLU:OE1	2.39	0.71
1:A:84:LYS:HE3	1:A:102:ASN:HA	1.73	0.71
1:A:764:PHE:N	1:A:764:PHE:CD1	2.57	0.71
1:A:4:ASP:O	1:A:5:PHE:HD2	1.73	0.71
1:A:17:ARG:C	1:A:18:LYS:HD3	2.16	0.71
1:A:77:MET:HG2	1:A:78:ASN:OD1	1.89	0.71
1:A:64:ASN:C	1:A:64:ASN:OD1	2.30	0.71
1:A:80:PRO:C	1:A:82:PHE:H	1.99	0.71
1:A:608:VAL:HG13	1:A:611:LEU:CA	2.20	0.71
1:A:56:ILE:CG2	1:A:69:VAL:HG22	2.21	0.70
1:A:694:LEU:C	1:A:696:CYS:H	1.98	0.70
1:A:801:TYR:CD2	1:A:805:GLN:NE2	2.59	0.70
1:A:228:LEU:C	1:A:230:ALA:H	1.97	0.70
1:A:337:PHE:HB3	1:A:342:PHE:CE2	2.25	0.70
1:A:674:ILE:HD12	1:A:676:PRO:HD2	1.70	0.70
1:A:807:GLN:HB2	3:C:22:TRP:CZ2	2.25	0.70
2:B:108:LYS:O	2:B:109:LYS:HG2	1.90	0.70
1:A:19:LYS:CG	1:A:20:MET:H	2.04	0.70
1:A:524:LEU:HD23	1:A:524:LEU:O	1.92	0.70
1:A:800:ALA:O	1:A:804:LEU:HB2	1.90	0.70
2:B:41:ILE:HG12	2:B:45:ASP:CA	2.19	0.70
1:A:153:PHE:N	1:A:153:PHE:CD2	2.56	0.70
1:A:443:ARG:HG2	1:A:446:ARG:HG3	1.73	0.70
1:A:479:ILE:HG23	1:A:483:ASN:HD21	1.56	0.70
1:A:609:VAL:HG11	1:A:624:PHE:CD2	2.25	0.70
1:A:737:ASP:HB3	1:A:740:THR:OG1	1.91	0.70
1:A:791:HIS:HA	3:C:44:ASN:OD1	1.91	0.70
1:A:85:LEU:N	1:A:102:ASN:HD21	1.85	0.70
1:A:206:GLU:HG2	1:A:207:GLU:H	1.56	0.70
1:A:431:SER:O	1:A:434:ASP:HB3	1.92	0.70
1:A:305:THR:CG2	1:A:306:PRO:HD2	2.21	0.70
1:A:535:LEU:HD13	1:A:536:GLU:N	2.06	0.70
1:A:731:ILE:CG2	1:A:732:PRO:HD2	2.22	0.70
1:A:304:ILE:CD1	1:A:305:THR:H	2.04	0.70
1:A:466:PHE:N	1:A:483:ASN:HD21	1.87	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:622:GLU:HG2	1:A:622:GLU:O	1.91	0.70
1:A:55:GLU:CG	1:A:68:THR:CG2	2.70	0.70
1:A:343:THR:O	1:A:343:THR:HG23	1.89	0.70
1:A:350:MET:HA	1:A:353:CYS:HG	1.57	0.70
1:A:357:ILE:HG13	1:A:358:LEU:H	1.56	0.70
2:B:150:PHE:O	2:B:153:MET:HG3	1.92	0.70
1:A:35:TRP:HH2	1:A:101:ASN:CB	2.05	0.69
1:A:52:LYS:CB	1:A:54:GLU:O	2.40	0.69
1:A:535:LEU:HA	1:A:549:PHE:CE1	2.27	0.69
1:A:441:VAL:HA	1:A:444:VAL:CG2	2.22	0.69
1:A:807:GLN:CB	3:C:22:TRP:CZ2	2.74	0.69
2:B:114:TYR:O	2:B:118:LEU:HG	1.92	0.69
1:A:228:LEU:C	1:A:230:ALA:N	2.50	0.69
1:A:528:PRO:C	1:A:530:GLY:H	1.98	0.69
1:A:564:PHE:CZ	1:A:583:HIS:CB	2.74	0.69
3:C:134:GLU:OE2	3:C:138:GLY:C	2.35	0.69
1:A:237:THR:HG23	1:A:238:ARG:H	1.53	0.69
1:A:535:LEU:HB2	1:A:549:PHE:HZ	1.55	0.69
1:A:289:GLN:HA	1:A:326:ASP:HB3	0.84	0.69
1:A:425:VAL:O	1:A:427:ALA:N	2.24	0.69
1:A:614:VAL:C	1:A:616:LYS:N	2.48	0.69
2:B:108:LYS:HA	2:B:147:TYR:OH	1.92	0.69
1:A:450:THR:O	1:A:452:ALA:N	2.19	0.69
1:A:49:GLN:N	1:A:58:VAL:HG21	2.08	0.69
1:A:184:GLU:HB3	1:A:187:LYS:HE3	1.73	0.69
1:A:350:MET:CA	1:A:353:CYS:SG	2.80	0.69
1:A:801:TYR:OH	3:C:15:VAL:HG22	1.93	0.69
1:A:837:LYS:HA	1:A:837:LYS:HZ2	1.56	0.69
2:B:154:ILE:O	2:B:155:LYS:HB2	1.91	0.69
1:A:392:ASN:C	1:A:394:GLY:H	2.00	0.69
1:A:501:GLU:O	1:A:504:LYS:N	2.25	0.69
1:A:267:TYR:CZ	1:A:659:LEU:HD13	2.28	0.69
1:A:435:ARG:HD3	1:A:623:LEU:O	1.92	0.69
1:A:440:LEU:O	1:A:444:VAL:HG22	1.93	0.69
1:A:614:VAL:HG22	1:A:615:SER:H	1.58	0.69
1:A:828:GLN:C	1:A:830:TRP:N	2.50	0.69
1:A:280:ALA:C	1:A:282:ARG:H	2.01	0.68
1:A:487:GLN:HG3	1:A:585:TYR:CE2	2.27	0.68
1:A:24:GLN:O	1:A:25:THR:CG2	2.41	0.68
1:A:112:ILE:C	1:A:113:TYR:HD1	2.02	0.68
3:C:38:CYS:CB	3:C:43:ILE:HD11	2.22	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:48:ILE:CA	1:A:58:VAL:HG21	2.22	0.68
1:A:108:THR:HG23	1:A:684:LEU:CD2	2.23	0.68
1:A:599:LYS:C	1:A:601:LYS:N	2.44	0.68
3:C:32:PHE:H	3:C:56:THR:CG2	2.07	0.68
1:A:193:LEU:O	1:A:197:ALA:HB2	1.94	0.68
1:A:810:GLY:CA	2:B:101:MET:HE1	2.24	0.68
1:A:124:ASN:CB	1:A:674:ILE:HG21	2.22	0.68
1:A:153:PHE:HA	1:A:156:ALA:CB	2.22	0.68
1:A:551:ASP:O	1:A:554:TYR:N	2.26	0.68
1:A:819:ARG:O	1:A:823:VAL:HB	1.94	0.68
2:B:64:ALA:HA	2:B:67:LYS:CB	2.11	0.68
1:A:229:GLU:CA	1:A:232:GLY:C	2.67	0.68
1:A:233:ASN:O	1:A:234:ALA:HB2	1.93	0.68
1:A:391:ILE:HG21	1:A:611:LEU:CD2	2.23	0.68
1:A:675:ILE:H	1:A:676:PRO:CD	2.06	0.68
2:B:33:ILE:O	2:B:45:ASP:C	2.37	0.68
1:A:225:ASN:O	1:A:229:GLU:HB2	1.94	0.68
1:A:337:PHE:HB3	1:A:342:PHE:HE2	1.57	0.68
1:A:284:TYR:HD2	1:A:433:TYR:HH	1.41	0.68
1:A:535:LEU:HB2	1:A:549:PHE:CZ	2.29	0.68
3:C:67:GLU:H	3:C:67:GLU:CD	2.00	0.68
3:C:142:TYR:O	3:C:145:PHE:HB3	1.94	0.68
1:A:123:VAL:CG1	1:A:124:ASN:N	2.56	0.68
1:A:140:TYR:CE2	1:A:148:ILE:HG21	2.29	0.68
1:A:161:GLN:O	1:A:163:MET:O	2.11	0.68
1:A:193:LEU:H	1:A:193:LEU:CD1	1.96	0.68
1:A:487:GLN:NE2	1:A:698:GLY:HA2	2.09	0.68
1:A:536:GLU:OE1	1:A:653:ARG:NH1	2.27	0.68
3:C:118:LEU:CD2	3:C:122:GLU:OE1	2.41	0.68
1:A:38:ASP:HB3	1:A:39:PRO:HD3	1.76	0.67
1:A:190:ILE:HG13	1:A:191:MET:H	1.58	0.67
1:A:593:ILE:O	1:A:594:ALA:HB2	1.93	0.67
1:A:680:LYS:O	1:A:682:PRO:HD3	1.94	0.67
1:A:104:ARG:HA	1:A:107:TYR:CE2	2.29	0.67
1:A:347:LYS:HD3	1:A:351:PHE:CZ	2.28	0.67
1:A:606:GLU:CA	1:A:610:SER:HB3	2.22	0.67
2:B:33:ILE:HG12	2:B:34:ASP:N	2.09	0.67
2:B:148:VAL:O	2:B:148:VAL:HG12	1.94	0.67
1:A:334:ASP:O	1:A:335:GLU:HB2	1.93	0.67
1:A:375:GLU:HG2	1:A:377:ASP:N	2.08	0.67
1:A:469:PHE:O	1:A:471:PHE:N	2.27	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:719:PHE:CE1	1:A:723:TYR:HD1	2.11	0.67
2:B:41:ILE:C	2:B:41:ILE:HD12	2.17	0.67
3:C:34:LEU:HD12	3:C:69:PHE:CE1	2.29	0.67
1:A:55:GLU:CB	1:A:69:VAL:O	2.43	0.67
1:A:189:VAL:HG23	1:A:190:ILE:N	2.10	0.67
1:A:250:ARG:O	1:A:250:ARG:HG2	1.93	0.67
1:A:794:GLY:CA	3:C:39:ARG:HG2	2.23	0.67
3:C:132:LEU:HD22	3:C:145:PHE:CE1	2.28	0.67
1:A:302:MET:SD	1:A:388:LEU:HD21	2.34	0.67
1:A:487:GLN:O	1:A:489:PHE:N	2.27	0.67
1:A:569:LYS:HG2	1:A:570:PRO:CD	2.25	0.67
1:A:822:LEU:HD23	1:A:822:LEU:O	1.94	0.67
1:A:86:GLU:CD	1:A:150:PRO:HD3	2.20	0.67
1:A:112:ILE:HG13	1:A:113:TYR:CD1	2.29	0.67
2:B:33:ILE:O	2:B:46:LEU:HA	1.95	0.67
1:A:56:ILE:CD1	1:A:57:THR:N	2.56	0.67
1:A:134:ASP:C	1:A:136:VAL:H	1.99	0.67
1:A:184:GLU:HA	1:A:187:LYS:HB2	1.76	0.67
1:A:421:VAL:CG2	1:A:422:ILE:H	2.08	0.67
1:A:556:ASN:OD1	1:A:557:HIS:N	2.27	0.67
1:A:614:VAL:HG23	1:A:616:LYS:HE3	1.76	0.67
3:C:117:ARG:H	3:C:117:ARG:NE	1.93	0.67
1:A:7:ASP:H	1:A:9:ASP:H	1.41	0.67
1:A:182:LYS:NZ	1:A:182:LYS:CB	2.57	0.67
1:A:191:MET:O	1:A:195:LYS:CG	2.35	0.67
1:A:220:GLN:O	1:A:222:ILE:N	2.27	0.67
1:A:253:PHE:HB2	1:A:456:TYR:O	1.95	0.67
1:A:324:ILE:HD13	1:A:324:ILE:H	1.59	0.67
1:A:443:ARG:O	1:A:446:ARG:N	2.27	0.67
1:A:455:ASN:C	1:A:456:TYR:CG	2.71	0.67
1:A:836:VAL:O	1:A:838:PRO:HD3	1.95	0.67
1:A:153:PHE:O	1:A:157:ASP:N	2.24	0.67
1:A:329:GLU:O	1:A:333:CYS:HB3	1.94	0.67
2:B:56:THR:CG2	2:B:57:PRO:HD2	2.24	0.67
3:C:92:LYS:C	3:C:94:PHE:H	2.01	0.67
3:C:129:LEU:HD12	3:C:129:LEU:H	1.58	0.67
1:A:10:PHE:C	1:A:12:TYR:N	2.52	0.67
1:A:55:GLU:CG	1:A:68:THR:HG22	2.23	0.67
1:A:685:VAL:HG22	1:A:686:ASP:N	2.09	0.67
3:C:31:ALA:O	3:C:32:PHE:C	2.36	0.67
1:A:131:ILE:HG22	1:A:151:HIS:CE1	2.29	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:322:ASP:O	1:A:324:ILE:N	2.28	0.66
1:A:418:LEU:HD23	1:A:419:GLN:N	2.10	0.66
1:A:618:PRO:HD2	1:A:619:LEU:HD22	1.76	0.66
2:B:62:LEU:HG	2:B:63:THR:N	2.09	0.66
2:B:77:MET:HG2	2:B:77:MET:O	1.93	0.66
1:A:725:ILE:C	1:A:725:ILE:HD12	2.20	0.66
1:A:793:ARG:O	3:C:39:ARG:HD3	1.95	0.66
1:A:412:VAL:HG12	1:A:413:THR:H	1.59	0.66
1:A:692:HIS:O	1:A:695:GLN:HB3	1.95	0.66
1:A:180:ALA:HB2	1:A:674:ILE:HG12	1.77	0.66
1:A:259:ILE:O	1:A:260:ALA:HB2	1.95	0.66
1:A:481:TYR:CD1	1:A:525:ILE:HD11	2.31	0.66
1:A:554:TYR:O	1:A:555:GLN:C	2.36	0.66
1:A:618:PRO:HA	1:A:621:ALA:CB	2.21	0.66
1:A:225:ASN:O	1:A:228:LEU:O	2.14	0.66
1:A:367:GLN:CG	1:A:418:LEU:HD13	2.22	0.66
1:A:567:PRO:HG3	1:A:580:PHE:H	1.59	0.66
1:A:618:PRO:C	1:A:620:VAL:N	2.50	0.66
1:A:184:GLU:C	1:A:187:LYS:H	2.03	0.66
1:A:186:THR:HG23	1:A:460:VAL:CG1	2.06	0.66
1:A:193:LEU:HD12	1:A:193:LEU:N	1.98	0.66
1:A:209:GLU:HG2	1:A:211:ASP:OD2	1.96	0.66
1:A:229:GLU:CA	1:A:232:GLY:HA2	2.19	0.66
1:A:828:GLN:HA	1:A:831:LYS:HB3	1.77	0.66
3:C:10:ASP:OD2	3:C:10:ASP:N	2.20	0.66
1:A:319:LEU:O	1:A:320:THR:HB	1.95	0.66
1:A:367:GLN:HG2	1:A:418:LEU:HD22	1.78	0.66
3:C:142:TYR:O	3:C:143:GLU:C	2.39	0.66
1:A:248:PHE:O	1:A:250:ARG:N	2.27	0.66
1:A:271:LYS:O	1:A:274:VAL:HG23	1.96	0.66
1:A:412:VAL:HG12	1:A:413:THR:N	2.10	0.66
1:A:78:ASN:ND2	1:A:92:THR:O	2.28	0.66
1:A:129:LEU:HD23	1:A:129:LEU:H	1.60	0.66
1:A:184:GLU:O	1:A:186:THR:N	2.29	0.66
1:A:236:THR:O	1:A:280:ALA:O	2.14	0.66
1:A:554:TYR:C	1:A:556:ASN:H	2.02	0.66
1:A:832:LEU:HD13	2:B:46:LEU:HD13	1.76	0.66
1:A:7:ASP:H	1:A:9:ASP:N	1.94	0.66
1:A:826:ASN:HA	1:A:831:LYS:NZ	2.11	0.66
1:A:597:LEU:HD13	1:A:597:LEU:N	2.11	0.65
1:A:703:ILE:HD12	1:A:703:ILE:C	2.21	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:776:MET:O	1:A:780:ARG:N	2.26	0.65
1:A:783:LYS:O	1:A:787:MET:HE2	1.96	0.65
1:A:519:GLN:HE22	1:A:523:ASP:CG	2.04	0.65
1:A:579:HIS:O	1:A:591:TYR:O	2.15	0.65
1:A:19:LYS:HG3	1:A:20:MET:N	2.07	0.65
1:A:277:GLN:OE1	1:A:283:ASN:HB3	1.97	0.65
1:A:834:ALA:CB	1:A:837:LYS:HD2	2.26	0.65
1:A:26:ALA:H	1:A:27:PRO:HD2	1.61	0.65
1:A:256:THR:HG23	1:A:258:LYS:HG2	1.78	0.65
1:A:255:PRO:HD3	1:A:454:ARG:HB2	1.77	0.65
1:A:690:VAL:HA	1:A:693:GLN:HG3	1.79	0.65
1:A:50:SER:O	1:A:52:LYS:N	2.30	0.65
1:A:59:LYS:CB	1:A:65:SER:OG	2.44	0.65
1:A:85:LEU:C	1:A:86:GLU:HG2	2.22	0.65
1:A:133:THR:HG22	1:A:134:ASP:N	2.08	0.65
1:A:152:LEU:HD23	1:A:152:LEU:H	1.56	0.65
1:A:176:GLY:HA2	1:A:673:CYS:HB2	1.78	0.65
1:A:305:THR:HG23	1:A:306:PRO:HD2	1.77	0.65
3:C:10:ASP:HA	3:C:13:LYS:CE	2.25	0.65
1:A:141:ARG:HD2	1:A:142:GLY:N	2.11	0.65
1:A:475:GLU:N	1:A:475:GLU:OE2	2.30	0.65
1:A:810:GLY:HA3	2:B:101:MET:HE1	1.78	0.65
1:A:290:ILE:HB	1:A:330:PHE:CE1	2.32	0.65
1:A:672:ARG:CD	1:A:697:ASN:HB3	2.25	0.65
2:B:33:ILE:HG12	2:B:34:ASP:H	1.60	0.65
3:C:67:GLU:O	3:C:71:PRO:HD3	1.96	0.65
1:A:220:GLN:O	1:A:223:GLN:N	2.31	0.65
1:A:303:LEU:C	1:A:304:ILE:HG13	2.22	0.65
1:A:391:ILE:HD12	1:A:611:LEU:CD2	2.12	0.65
1:A:449:ASP:C	1:A:451:LYS:H	2.04	0.65
1:A:600:ASN:HB3	1:A:647:THR:OG1	1.96	0.65
1:A:797:ILE:HG22	3:C:40:CYS:SG	2.37	0.65
1:A:84:LYS:HD3	1:A:105:GLY:O	1.97	0.64
1:A:699:VAL:HG13	1:A:700:LEU:H	1.62	0.64
1:A:69:VAL:HG23	1:A:70:LYS:N	2.13	0.64
1:A:253:PHE:O	1:A:454:ARG:O	2.14	0.64
1:A:549:PHE:CD2	1:A:593:ILE:HG13	2.32	0.64
1:A:21:MET:C	1:A:22:LYS:HD3	2.21	0.64
1:A:230:ALA:H	1:A:232:GLY:CA	2.04	0.64
1:A:296:PRO:N	1:A:299:ASN:CB	2.61	0.64
1:A:321:VAL:H	1:A:324:ILE:HG13	1.62	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:512:ILE:O	1:A:514:PHE:N	2.30	0.64
1:A:802:LYS:HA	1:A:805:GLN:HG2	1.79	0.64
2:B:43:ILE:HG13	2:B:66:LEU:CD2	2.27	0.64
1:A:38:ASP:O	1:A:42:GLY:N	2.30	0.64
1:A:38:ASP:N	1:A:42:GLY:O	2.30	0.64
1:A:43:PHE:CD2	1:A:97:ALA:HB2	2.31	0.64
1:A:172:CYS:SG	1:A:174:ILE:HD11	2.38	0.64
1:A:297:GLU:O	1:A:298:LEU:HG	1.97	0.64
1:A:686:ASP:O	1:A:690:VAL:HG23	1.96	0.64
2:B:41:ILE:HG12	2:B:45:ASP:HB3	1.78	0.64
1:A:346:GLU:O	1:A:347:LYS:C	2.40	0.64
1:A:519:GLN:O	1:A:520:MET:C	2.41	0.64
1:A:731:ILE:HG23	1:A:732:PRO:HD2	1.79	0.64
1:A:746:LEU:HD23	1:A:751:MET:HE3	1.78	0.64
2:B:77:MET:HB2	2:B:80:SER:HB3	1.77	0.64
1:A:37:PRO:HA	1:A:43:PHE:HA	1.78	0.64
1:A:659:LEU:O	1:A:663:LEU:HD12	1.97	0.64
1:A:737:ASP:C	1:A:737:ASP:OD1	2.40	0.64
1:A:810:GLY:HA3	2:B:101:MET:CE	2.27	0.64
3:C:58:LYS:HD2	3:C:61:GLU:OE2	1.97	0.64
1:A:184:GLU:CB	1:A:187:LYS:HB3	2.27	0.64
1:A:233:ASN:OD1	1:A:242:SER:O	2.16	0.64
1:A:312:SER:O	1:A:313:PHE:HB2	1.97	0.64
1:A:324:ILE:H	1:A:324:ILE:CD1	2.10	0.64
1:A:466:PHE:HE2	1:A:468:ILE:CG2	2.10	0.64
1:A:485:ARG:HE	1:A:660:MET:HG2	1.63	0.64
1:A:712:SER:HB3	1:A:770:LEU:HD22	1.80	0.64
1:A:824:LEU:C	1:A:826:ASN:H	2.04	0.64
2:B:73:LEU:O	2:B:74:ASN:CG	2.41	0.64
1:A:171:SER:O	1:A:172:CYS:HB3	1.97	0.64
1:A:182:LYS:C	1:A:184:GLU:H	2.04	0.64
1:A:230:ALA:HB1	1:A:286:ILE:HD12	1.78	0.64
1:A:597:LEU:HD22	1:A:598:ASP:N	2.13	0.64
3:C:47:ASN:O	3:C:50:VAL:HG23	1.98	0.64
1:A:54:GLU:HA	1:A:55:GLU:OE1	1.98	0.64
1:A:95:ASN:CG	1:A:98:SER:HB3	2.23	0.64
1:A:190:ILE:O	1:A:191:MET:C	2.40	0.64
1:A:321:VAL:C	1:A:324:ILE:HD12	2.23	0.64
1:A:563:MET:HE3	1:A:564:PHE:CE1	2.33	0.64
3:C:96:ARG:HD2	3:C:96:ARG:N	2.12	0.64
1:A:46:ALA:HA	1:A:60:ILE:HA	1.79	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:302:MET:HG2	1:A:303:LEU:HD22	1.79	0.64
1:A:475:GLU:HB2	1:A:476:GLN:OE1	1.98	0.64
1:A:675:ILE:N	1:A:676:PRO:CD	2.61	0.64
1:A:725:ILE:HD11	1:A:777:ARG:HA	1.79	0.64
1:A:171:SER:O	1:A:172:CYS:CB	2.45	0.63
1:A:252:HIS:HA	1:A:457:TYR:CB	2.27	0.63
2:B:47:LYS:HG3	2:B:48:GLU:H	1.59	0.63
1:A:385:VAL:C	1:A:387:PHE:H	2.06	0.63
3:C:21:PHE:C	3:C:21:PHE:CD2	2.76	0.63
1:A:75:GLN:OE1	1:A:97:ALA:CB	2.47	0.63
1:A:152:LEU:N	1:A:152:LEU:CD2	2.48	0.63
1:A:185:ASN:C	1:A:187:LYS:N	2.50	0.63
1:A:277:GLN:NE2	1:A:282:ARG:HA	2.12	0.63
2:B:149:ARG:O	2:B:152:ALA:N	2.31	0.63
3:C:47:ASN:HD22	3:C:116:GLU:HG2	1.61	0.63
1:A:212:GLN:HG3	1:A:214:LYS:NZ	2.11	0.63
1:A:647:THR:OG1	1:A:648:ILE:N	2.31	0.63
1:A:8:PRO:HG2	1:A:10:PHE:H	1.63	0.63
1:A:441:VAL:HA	1:A:444:VAL:HG22	1.80	0.63
1:A:832:LEU:HD21	1:A:835:LYS:HB2	1.79	0.63
1:A:28:PHE:O	1:A:29:ASP:HB2	1.99	0.63
1:A:85:LEU:HD23	1:A:102:ASN:HD21	1.61	0.63
1:A:153:PHE:CA	1:A:156:ALA:HB3	2.24	0.63
1:A:367:GLN:HE21	1:A:368:ARG:H	1.46	0.63
2:B:62:LEU:HG	2:B:64:ALA:H	1.62	0.63
1:A:208:GLU:O	1:A:209:GLU:HB2	1.99	0.63
1:A:537:GLU:O	1:A:539:CYS:N	2.26	0.63
3:C:66:PHE:HD1	3:C:66:PHE:C	2.07	0.63
3:C:127:ILE:O	3:C:128:ASN:CG	2.41	0.63
1:A:345:GLU:HG3	1:A:346:GLU:HG3	1.80	0.63
1:A:368:ARG:HB2	1:A:371:GLU:O	1.99	0.63
1:A:674:ILE:HD12	1:A:676:PRO:CD	2.29	0.63
1:A:152:LEU:C	1:A:154:SER:H	2.05	0.63
1:A:256:THR:HG23	1:A:258:LYS:CG	2.29	0.63
1:A:262:ALA:O	1:A:263:ASP:CB	2.47	0.63
1:A:703:ILE:O	1:A:707:ARG:N	2.31	0.63
1:A:56:ILE:CD1	1:A:58:VAL:N	2.62	0.62
1:A:392:ASN:O	1:A:395:ASP:N	2.22	0.62
1:A:439:TRP:CD1	1:A:623:LEU:HG	2.33	0.62
2:B:82:PHE:HD1	2:B:83:SER:OG	1.81	0.62
1:A:271:LYS:O	1:A:272:SER:C	2.42	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:593:ILE:C	1:A:593:ILE:HD13	2.24	0.62
1:A:821:TRP:C	1:A:823:VAL:H	2.07	0.62
2:B:77:MET:O	2:B:77:MET:CG	2.46	0.62
1:A:383:GLU:CA	1:A:393:ALA:HB2	2.26	0.62
1:A:397:LEU:HB3	1:A:401:LEU:HD11	1.81	0.62
1:A:595:GLY:O	1:A:599:LYS:HB3	2.00	0.62
1:A:618:PRO:C	1:A:620:VAL:H	2.06	0.62
2:B:126:PHE:HB3	2:B:131:MET:HG2	1.81	0.62
2:B:24:GLN:C	2:B:26:MET:N	2.51	0.62
3:C:70:LEU:HD23	3:C:71:PRO:N	2.15	0.62
1:A:2:ASN:ND2	1:A:3:ILE:O	2.33	0.62
1:A:81:LYS:O	1:A:81:LYS:CD	2.48	0.62
1:A:100:LEU:O	1:A:103:LEU:N	2.32	0.62
1:A:493:HIS:O	1:A:497:LEU:HD12	1.98	0.62
1:A:685:VAL:CG2	1:A:686:ASP:H	2.09	0.62
1:A:118:LEU:HD12	1:A:118:LEU:N	2.15	0.62
1:A:160:TYR:CD1	1:A:160:TYR:C	2.78	0.62
1:A:304:ILE:CD1	1:A:305:THR:N	2.56	0.62
1:A:377:ASP:OD1	1:A:378:GLY:N	2.33	0.62
1:A:396:LEU:H	1:A:396:LEU:HD22	1.63	0.62
1:A:532:LEU:HD12	1:A:653:ARG:HD3	1.81	0.62
1:A:615:SER:C	1:A:617:GLU:N	2.56	0.62
1:A:623:LEU:N	1:A:623:LEU:HD12	2.14	0.62
1:A:721:GLN:CD	1:A:722:ARG:N	2.58	0.62
1:A:55:GLU:HB3	1:A:68:THR:HG22	1.82	0.62
1:A:124:ASN:CB	1:A:674:ILE:HD13	2.30	0.62
1:A:535:LEU:O	1:A:535:LEU:HD22	2.00	0.62
1:A:720:LYS:CG	1:A:721:GLN:H	2.12	0.62
1:A:725:ILE:C	1:A:728:PRO:HD3	2.24	0.62
3:C:66:PHE:C	3:C:66:PHE:CD1	2.78	0.62
1:A:11:GLN:CB	1:A:13:LEU:N	2.63	0.62
1:A:15:VAL:O	1:A:15:VAL:HG23	1.98	0.62
1:A:48:ILE:C	1:A:58:VAL:HG11	2.25	0.62
1:A:173:LEU:HD13	1:A:461:LEU:HB3	1.82	0.62
1:A:276:TYR:CE2	1:A:278:GLN:NE2	2.68	0.62
1:A:420:GLN:O	1:A:422:ILE:N	2.33	0.62
1:A:558:ILE:O	1:A:558:ILE:HG23	1.98	0.62
1:A:772:ASN:O	1:A:776:MET:HG3	2.00	0.62
1:A:808:ARG:HG3	3:C:21:PHE:CE2	2.34	0.62
1:A:75:GLN:O	1:A:76:GLN:HB2	2.00	0.62
1:A:84:LYS:HA	1:A:102:ASN:ND2	2.14	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:184:GLU:C	1:A:186:THR:N	2.53	0.62
1:A:353:CYS:C	1:A:356:SER:OG	2.43	0.62
1:A:479:ILE:CG2	1:A:483:ASN:HD21	2.10	0.62
1:A:480:ASN:O	1:A:484:GLU:HB3	2.00	0.62
1:A:56:ILE:HD12	1:A:56:ILE:C	2.25	0.61
1:A:229:GLU:HA	1:A:232:GLY:CA	2.20	0.61
1:A:621:ALA:H	1:A:623:LEU:HD13	1.65	0.61
1:A:716:TYR:CE1	1:A:763:VAL:HB	2.31	0.61
1:A:819:ARG:NE	2:B:130:GLU:OE2	2.25	0.61
1:A:362:GLU:OE1	1:A:362:GLU:CA	2.48	0.61
2:B:41:ILE:HG12	2:B:45:ASP:CB	2.29	0.61
2:B:94:THR:O	2:B:97:ASN:N	2.32	0.61
3:C:107:LEU:HD12	3:C:111:LEU:CD1	2.28	0.61
1:A:26:ALA:C	1:A:28:PHE:N	2.58	0.61
1:A:38:ASP:HB3	1:A:39:PRO:CD	2.30	0.61
1:A:74:ILE:HG23	1:A:75:GLN:N	2.11	0.61
1:A:569:LYS:CE	1:A:570:PRO:HD2	2.30	0.61
1:A:715:ILE:CA	1:A:762:LYS:HB3	2.30	0.61
2:B:68:GLU:O	2:B:68:GLU:HG2	1.99	0.61
1:A:176:GLY:O	1:A:177:GLU:O	2.19	0.61
1:A:439:TRP:O	1:A:440:LEU:C	2.43	0.61
1:A:443:ARG:O	1:A:444:VAL:C	2.43	0.61
1:A:618:PRO:O	1:A:623:LEU:CD1	2.45	0.61
1:A:273:ARG:HA	1:A:273:ARG:HE	1.65	0.61
1:A:397:LEU:O	1:A:398:LYS:C	2.44	0.61
2:B:67:LYS:HD2	2:B:67:LYS:O	2.00	0.61
1:A:20:MET:HA	1:A:23:GLU:HG2	1.81	0.61
1:A:112:ILE:CD1	1:A:125:PRO:HD3	2.31	0.61
1:A:335:GLU:O	1:A:336:ALA:C	2.43	0.61
1:A:245:PHE:HA	1:A:268:LEU:O	2.01	0.61
1:A:278:GLN:H	1:A:281:GLU:HB3	1.66	0.61
1:A:397:LEU:O	1:A:399:ALA:N	2.33	0.61
1:A:479:ILE:O	1:A:482:THR:N	2.34	0.61
2:B:92:GLU:HG3	2:B:92:GLU:O	2.00	0.61
1:A:103:LEU:HA	1:A:106:ARG:CG	2.30	0.61
1:A:172:CYS:HB2	1:A:669:HIS:HB2	1.82	0.61
1:A:255:PRO:HD3	1:A:454:ARG:HB3	1.83	0.61
1:A:296:PRO:O	1:A:298:LEU:N	2.33	0.61
1:A:351:PHE:O	1:A:354:THR:N	2.30	0.61
1:A:674:ILE:CB	1:A:676:PRO:HD3	2.29	0.61
1:A:683:GLY:O	1:A:684:LEU:HB3	2.01	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:834:ALA:C	1:A:836:VAL:H	2.09	0.61
1:A:61:VAL:O	1:A:62:SER:C	2.44	0.60
1:A:132:TYR:CD2	1:A:188:LYS:HD3	2.36	0.60
1:A:500:GLU:O	1:A:502:TYR:N	2.34	0.60
1:A:534:ILE:HD11	1:A:553:SER:OG	2.01	0.60
1:A:367:GLN:CG	1:A:418:LEU:HD22	2.32	0.60
2:B:27:LYS:C	2:B:27:LYS:CD	2.73	0.60
3:C:67:GLU:O	3:C:71:PRO:CD	2.49	0.60
1:A:4:ASP:CA	1:A:5:PHE:CD2	2.84	0.60
1:A:103:LEU:HA	1:A:106:ARG:HG3	1.83	0.60
1:A:227:VAL:O	1:A:231:TYR:HD1	1.84	0.60
1:A:403:PRO:HB3	1:A:607:ASN:OD1	2.00	0.60
1:A:656:LEU:O	1:A:659:LEU:HB3	2.02	0.60
1:A:56:ILE:HD13	1:A:58:VAL:N	2.11	0.60
1:A:81:LYS:C	1:A:81:LYS:HD3	2.26	0.60
1:A:231:TYR:CB	1:A:437:PHE:CD1	2.83	0.60
1:A:239:ASN:O	1:A:240:ASN:ND2	2.34	0.60
1:A:279:SER:C	1:A:281:GLU:N	2.54	0.60
1:A:304:ILE:HD13	1:A:311:TYR:HD2	1.63	0.60
1:A:398:LYS:H	1:A:401:LEU:CD1	2.14	0.60
1:A:445:ASN:HD22	1:A:445:ASN:N	1.99	0.60
2:B:98:ALA:HA	2:B:101:MET:HE3	1.83	0.60
1:A:75:GLN:O	1:A:76:GLN:CB	2.50	0.60
1:A:115:TYR:HE2	1:A:145:LYS:HG2	1.67	0.60
1:A:152:LEU:C	1:A:154:SER:N	2.56	0.60
1:A:254:GLY:HA2	1:A:454:ARG:HB2	1.83	0.60
1:A:478:CYS:O	1:A:481:TYR:HB3	2.00	0.60
1:A:774:GLU:O	1:A:778:ASP:HB3	2.02	0.60
2:B:31:THR:O	2:B:32:MET:HB3	2.00	0.60
2:B:124:ASP:OD1	3:C:25:ARG:NH2	2.35	0.60
1:A:134:ASP:HA	1:A:137:ILE:CG2	2.12	0.60
1:A:279:SER:C	1:A:281:GLU:H	2.07	0.60
2:B:77:MET:CB	2:B:80:SER:HB3	2.32	0.60
1:A:206:GLU:HG2	1:A:207:GLU:N	2.16	0.60
1:A:362:GLU:OE1	1:A:362:GLU:HA	2.02	0.60
1:A:807:GLN:HB3	3:C:22:TRP:CZ2	2.37	0.60
3:C:9:ILE:O	3:C:12:LEU:HB3	2.02	0.60
1:A:152:LEU:O	1:A:155:VAL:N	2.35	0.60
1:A:300:GLU:O	1:A:302:MET:N	2.34	0.60
1:A:341:GLY:HA3	1:A:443:ARG:HD2	1.82	0.60
1:A:391:ILE:HG21	1:A:611:LEU:HD21	1.84	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:330:PHE:O	1:A:331:LYS:C	2.44	0.60
1:A:383:GLU:HA	1:A:393:ALA:CB	2.27	0.60
1:A:535:LEU:HD13	1:A:535:LEU:C	2.27	0.60
1:A:567:PRO:HG3	1:A:580:PHE:CA	2.32	0.60
1:A:693:GLN:O	1:A:696:CYS:N	2.35	0.60
1:A:725:ILE:HG22	3:C:89:GLU:HB3	1.84	0.60
2:B:104:GLU:C	2:B:106:ALA:H	2.09	0.60
1:A:37:PRO:CG	1:A:73:ASP:O	2.49	0.59
1:A:54:GLU:C	1:A:55:GLU:OE1	2.44	0.59
1:A:189:VAL:O	1:A:191:MET:HG2	2.01	0.59
3:C:125:GLU:O	3:C:128:ASN:HB2	2.02	0.59
1:A:2:ASN:CG	1:A:3:ILE:N	2.59	0.59
1:A:64:ASN:OD1	1:A:64:ASN:N	2.27	0.59
1:A:263:ASP:O	1:A:264:ILE:HG22	2.03	0.59
1:A:357:ILE:HG13	1:A:358:LEU:N	2.16	0.59
1:A:546:ASP:CG	1:A:597:LEU:HD11	2.27	0.59
1:A:796:LEU:HD21	3:C:126:ILE:CG1	2.31	0.59
2:B:112:ILE:HD13	2:B:145:PHE:HB2	1.84	0.59
1:A:43:PHE:CE1	1:A:97:ALA:HA	2.36	0.59
1:A:184:GLU:HB3	1:A:187:LYS:CE	2.32	0.59
1:A:238:ARG:O	1:A:239:ASN:HB2	2.01	0.59
1:A:284:TYR:HD2	1:A:433:TYR:OH	1.83	0.59
1:A:386:ALA:HB1	1:A:393:ALA:H	1.60	0.59
2:B:81:ILE:CG1	2:B:82:PHE:H	2.15	0.59
1:A:451:LYS:HB2	1:A:451:LYS:HZ2	1.62	0.59
1:A:518:LEU:O	1:A:519:GLN:C	2.46	0.59
1:A:94:LEU:O	1:A:703:ILE:HD13	2.01	0.59
1:A:123:VAL:HG12	1:A:124:ASN:N	2.17	0.59
1:A:129:LEU:HB2	1:A:131:ILE:HD11	1.84	0.59
1:A:495:PHE:O	1:A:499:GLN:HB2	2.03	0.59
1:A:528:PRO:C	1:A:530:GLY:N	2.61	0.59
2:B:83:SER:HB3	2:B:86:LEU:HD22	1.83	0.59
3:C:32:PHE:HB2	3:C:56:THR:HG23	1.82	0.59
3:C:102:ILE:O	3:C:140:VAL:HG22	2.02	0.59
1:A:63:ASP:OD2	1:A:63:ASP:N	2.29	0.59
1:A:340:LEU:HG	1:A:444:VAL:O	2.03	0.59
1:A:799:LYS:HD3	3:C:153:PRO:HB3	1.84	0.59
2:B:63:THR:O	2:B:63:THR:HG23	2.00	0.59
1:A:180:ALA:CA	1:A:674:ILE:HG12	2.33	0.59
1:A:235:LYS:CA	1:A:240:ASN:O	2.50	0.59
1:A:563:MET:C	1:A:564:PHE:CD1	2.80	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:99:PHE:CD2	2:B:147:TYR:HB2	2.37	0.59
2:B:103:ASP:HB2	2:B:110:LEU:CD2	2.33	0.59
3:C:89:GLU:O	3:C:90:ALA:C	2.46	0.59
3:C:107:LEU:CD2	3:C:140:VAL:HG21	2.33	0.59
1:A:18:LYS:HE2	1:A:21:MET:HG3	1.85	0.59
1:A:139:LYS:O	1:A:140:TYR:C	2.44	0.59
1:A:200:VAL:CG2	1:A:258:LYS:HE2	2.17	0.59
1:A:237:THR:CG2	1:A:281:GLU:OE1	2.51	0.59
1:A:304:ILE:HD12	1:A:305:THR:CA	2.32	0.59
3:C:103:SER:HA	3:C:139:ASN:CG	2.27	0.59
1:A:53:GLY:H	1:A:54:GLU:HB3	1.66	0.59
1:A:75:GLN:CG	1:A:95:ASN:HD22	2.12	0.59
1:A:113:TYR:HD2	1:A:151:HIS:HA	1.67	0.59
1:A:125:PRO:C	1:A:127:ARG:H	2.11	0.59
1:A:160:TYR:O	1:A:163:MET:N	2.36	0.59
1:A:536:GLU:O	1:A:537:GLU:C	2.45	0.59
1:A:550:GLN:CG	1:A:551:ASP:N	2.63	0.59
1:A:604:ILE:N	1:A:604:ILE:HD12	2.16	0.59
1:A:35:TRP:NE1	1:A:77:MET:HB2	2.18	0.59
1:A:104:ARG:HA	1:A:107:TYR:HD2	1.68	0.59
1:A:231:TYR:CE1	1:A:440:LEU:HD11	2.38	0.59
2:B:42:ASP:CG	2:B:43:ILE:H	2.10	0.59
1:A:57:THR:HG23	1:A:66:THR:HA	1.84	0.58
1:A:229:GLU:H	1:A:232:GLY:HA2	1.62	0.58
1:A:425:VAL:C	1:A:427:ALA:N	2.61	0.58
1:A:693:GLN:O	1:A:694:LEU:C	2.46	0.58
1:A:789:GLN:O	3:C:118:LEU:HD21	2.02	0.58
1:A:126:TYR:CD1	1:A:126:TYR:N	2.72	0.58
1:A:140:TYR:HA	1:A:143:LYS:CG	2.34	0.58
1:A:500:GLU:CG	1:A:501:GLU:N	2.65	0.58
1:A:507:ILE:CD1	1:A:757:ARG:HG2	2.33	0.58
1:A:552:TYR:HD1	1:A:552:TYR:O	1.84	0.58
2:B:45:ASP:OD2	2:B:45:ASP:N	2.30	0.58
3:C:12:LEU:HD13	3:C:73:TYR:CE2	2.38	0.58
1:A:124:ASN:N	1:A:674:ILE:CG2	2.66	0.58
1:A:288:TYR:O	1:A:290:ILE:N	2.37	0.58
1:A:555:GLN:O	1:A:556:ASN:HB3	2.02	0.58
1:A:593:ILE:HA	1:A:596:TRP:CE2	2.38	0.58
3:C:51:PHE:CD2	3:C:51:PHE:N	2.72	0.58
3:C:124:ASP:O	3:C:128:ASN:CB	2.51	0.58
1:A:258:LYS:HA	1:A:258:LYS:HE3	1.84	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:263:ASP:C	1:A:264:ILE:HG22	2.28	0.58
1:A:270:GLU:O	1:A:273:ARG:HB2	2.04	0.58
1:A:561:ASN:O	1:A:562:ARG:CB	2.52	0.58
1:A:324:ILE:CD1	1:A:325:ASP:H	2.14	0.58
1:A:390:GLY:C	1:A:391:ILE:HG12	2.29	0.58
1:A:603:PRO:HB2	1:A:645:PHE:CD2	2.39	0.58
1:A:607:ASN:O	1:A:608:VAL:CG1	2.41	0.58
1:A:765:PHE:HB3	1:A:769:VAL:CG1	2.33	0.58
1:A:50:SER:C	1:A:52:LYS:H	2.10	0.58
1:A:189:VAL:HG23	1:A:190:ILE:H	1.68	0.58
1:A:231:TYR:HB2	1:A:437:PHE:CD1	2.27	0.58
1:A:296:PRO:N	1:A:299:ASN:HB2	2.19	0.58
1:A:358:LEU:H	1:A:358:LEU:HD12	1.68	0.58
2:B:41:ILE:CG1	2:B:45:ASP:HA	2.29	0.58
1:A:124:ASN:HB2	1:A:674:ILE:HD13	1.86	0.58
1:A:335:GLU:C	1:A:337:PHE:N	2.57	0.58
1:A:385:VAL:O	1:A:389:CYS:HB3	2.04	0.58
1:A:826:ASN:HA	1:A:831:LYS:HZ1	1.68	0.58
1:A:125:PRO:O	1:A:127:ARG:N	2.37	0.58
1:A:192:TYR:O	1:A:194:ALA:N	2.36	0.58
1:A:418:LEU:O	1:A:421:VAL:HG22	2.03	0.58
1:A:484:GLU:OE1	1:A:584:HIS:CB	2.45	0.58
1:A:615:SER:OG	1:A:617:GLU:HB2	2.04	0.58
2:B:32:MET:O	2:B:49:GLU:CB	2.51	0.58
1:A:32:LYS:NZ	1:A:47:GLU:HG3	2.19	0.58
1:A:312:SER:HB3	1:A:361:GLY:O	2.04	0.58
1:A:355:ALA:HA	1:A:358:LEU:HD13	1.85	0.58
1:A:486:LEU:O	1:A:487:GLN:C	2.47	0.58
1:A:48:ILE:C	1:A:58:VAL:HG21	2.28	0.58
1:A:232:GLY:O	1:A:233:ASN:HB2	2.04	0.58
1:A:234:ALA:O	1:A:235:LYS:CB	2.51	0.58
1:A:236:THR:OG1	1:A:237:THR:N	2.37	0.58
1:A:398:LYS:HD3	1:A:399:ALA:N	2.05	0.58
1:A:441:VAL:CA	1:A:444:VAL:HG22	2.34	0.58
1:A:474:PHE:HB2	1:A:596:TRP:CD2	2.39	0.58
1:A:810:GLY:O	2:B:98:ALA:HB1	2.03	0.58
3:C:123:VAL:O	3:C:127:ILE:HG12	2.04	0.58
1:A:129:LEU:HD23	1:A:129:LEU:N	2.18	0.57
1:A:194:ALA:O	1:A:197:ALA:N	2.32	0.57
1:A:325:ASP:HB3	1:A:327:VAL:HG13	1.84	0.57
1:A:384:LYS:O	1:A:387:PHE:HB3	2.04	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:792:ILE:O	1:A:792:ILE:CG1	2.51	0.57
1:A:808:ARG:HG3	3:C:21:PHE:CZ	2.39	0.57
1:A:115:TYR:CD2	1:A:145:LYS:HD2	2.39	0.57
1:A:137:ILE:O	1:A:139:LYS:N	2.37	0.57
1:A:157:ASP:O	1:A:160:TYR:HB3	2.04	0.57
1:A:214:LYS:CD	1:A:214:LYS:N	2.60	0.57
1:A:337:PHE:O	1:A:339:ILE:N	2.37	0.57
1:A:533:SER:HA	1:A:536:GLU:HB2	1.86	0.57
3:C:83:THR:O	3:C:84:PHE:C	2.45	0.57
1:A:65:SER:O	1:A:66:THR:HB	2.03	0.57
1:A:100:LEU:HA	1:A:103:LEU:HD13	1.85	0.57
1:A:270:GLU:HB2	1:A:284:TYR:OH	2.03	0.57
1:A:324:ILE:HD13	1:A:325:ASP:N	2.13	0.57
1:A:399:ALA:HA	1:A:403:PRO:CG	2.35	0.57
1:A:501:GLU:HA	1:A:504:LYS:HB3	1.87	0.57
1:A:819:ARG:O	1:A:821:TRP:O	2.22	0.57
3:C:92:LYS:C	3:C:94:PHE:N	2.61	0.57
1:A:50:SER:OG	1:A:56:ILE:HA	2.03	0.57
1:A:206:GLU:CG	1:A:207:GLU:H	2.17	0.57
1:A:290:ILE:HG13	1:A:291:CYS:N	2.19	0.57
1:A:296:PRO:N	1:A:299:ASN:HB3	2.18	0.57
1:A:463:ILE:HD13	1:A:464:ALA:N	2.19	0.57
1:A:501:GLU:O	1:A:502:TYR:C	2.48	0.57
1:A:563:MET:CE	1:A:564:PHE:HE1	2.17	0.57
1:A:783:LYS:O	1:A:783:LYS:HG3	2.03	0.57
1:A:119:PHE:CE2	1:A:490:PHE:CZ	2.93	0.57
1:A:247:LYS:HG2	1:A:248:PHE:H	1.69	0.57
1:A:272:SER:O	1:A:274:VAL:N	2.37	0.57
1:A:501:GLU:O	1:A:505:GLU:N	2.38	0.57
1:A:656:LEU:O	1:A:659:LEU:N	2.34	0.57
1:A:26:ALA:O	1:A:28:PHE:N	2.37	0.57
1:A:34:CYS:HB3	1:A:76:GLN:HA	1.86	0.57
1:A:398:LYS:C	1:A:400:LEU:H	2.11	0.57
1:A:427:ALA:HB1	1:A:603:PRO:HD2	1.86	0.57
1:A:509:TRP:O	1:A:510:GLU:C	2.47	0.57
1:A:623:LEU:C	1:A:624:PHE:CD1	2.82	0.57
3:C:51:PHE:N	3:C:51:PHE:HD2	2.03	0.57
3:C:74:GLU:HA	3:C:77:MET:HE2	1.86	0.57
3:C:108:ARG:HA	3:C:111:LEU:HD12	1.85	0.57
1:A:120:CYS:O	1:A:120:CYS:SG	2.63	0.57
1:A:123:VAL:CA	1:A:674:ILE:HG22	2.30	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:312:SER:C	1:A:314:ILE:H	2.09	0.57
1:A:759:GLY:O	1:A:760:THR:HG23	2.04	0.57
2:B:108:LYS:O	2:B:109:LYS:CG	2.53	0.57
2:B:133:MET:HA	2:B:136:LYS:HG3	1.86	0.57
1:A:96:GLU:CD	1:A:96:GLU:H	2.11	0.57
1:A:98:SER:O	1:A:99:VAL:C	2.48	0.57
1:A:99:VAL:O	1:A:100:LEU:C	2.47	0.57
1:A:156:ALA:O	1:A:160:TYR:HB2	2.04	0.57
1:A:324:ILE:O	1:A:325:ASP:C	2.48	0.57
1:A:397:LEU:CA	1:A:400:LEU:HB3	2.35	0.57
1:A:35:TRP:CH2	1:A:101:ASN:CB	2.86	0.57
1:A:63:ASP:C	1:A:64:ASN:OD1	2.46	0.57
1:A:599:LYS:C	1:A:601:LYS:H	2.13	0.57
1:A:162:ASN:CB	1:A:170:GLN:NE2	2.68	0.57
1:A:223:GLN:O	1:A:226:PRO:CD	2.37	0.57
1:A:249:ILE:O	1:A:249:ILE:HG22	2.04	0.57
1:A:298:LEU:O	1:A:300:GLU:N	2.38	0.57
1:A:337:PHE:C	1:A:342:PHE:CE2	2.83	0.57
1:A:346:GLU:N	1:A:346:GLU:OE2	2.29	0.57
1:A:455:ASN:C	1:A:456:TYR:CD2	2.83	0.57
1:A:561:ASN:OD1	1:A:563:MET:HB2	2.04	0.57
1:A:794:GLY:HA2	3:C:39:ARG:CG	2.32	0.57
1:A:797:ILE:HD12	3:C:36:ASP:OD2	2.05	0.57
1:A:85:LEU:HD11	1:A:88:MET:HA	1.86	0.56
1:A:277:GLN:HG3	1:A:281:GLU:O	2.05	0.56
1:A:531:ILE:HA	1:A:534:ILE:HD12	1.88	0.56
1:A:740:THR:HA	1:A:743:GLU:OE2	2.05	0.56
3:C:84:PHE:O	3:C:85:ALA:C	2.46	0.56
3:C:96:ARG:HD2	3:C:96:ARG:H	1.70	0.56
3:C:101:PHE:HB2	5:C:166:HOH:O	2.05	0.56
3:C:107:LEU:HD23	3:C:140:VAL:HG21	1.85	0.56
1:A:180:ALA:CB	1:A:674:ILE:HG23	2.33	0.56
1:A:235:LYS:N	1:A:240:ASN:O	2.38	0.56
1:A:386:ALA:HB1	1:A:392:ASN:HA	1.87	0.56
1:A:580:PHE:HE1	1:A:591:TYR:HB2	1.69	0.56
1:A:106:ARG:O	1:A:111:LEU:N	2.39	0.56
1:A:247:LYS:O	1:A:248:PHE:HB2	2.05	0.56
1:A:258:LYS:C	1:A:259:ILE:O	2.47	0.56
1:A:401:LEU:O	1:A:402:LYS:HG3	2.05	0.56
1:A:434:ASP:O	1:A:438:ASN:ND2	2.37	0.56
1:A:445:ASN:ND2	1:A:445:ASN:H	2.03	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:684:LEU:HD12	1:A:685:VAL:CB	2.35	0.56
1:A:698:GLY:O	1:A:702:GLY:N	2.38	0.56
3:C:11:ASP:O	3:C:15:VAL:HG23	2.05	0.56
3:C:144:GLU:HA	3:C:147:LYS:HG3	1.87	0.56
1:A:4:ASP:O	1:A:5:PHE:CD2	2.54	0.56
1:A:103:LEU:HD23	1:A:103:LEU:C	2.23	0.56
1:A:137:ILE:CG2	1:A:138:ALA:H	2.18	0.56
1:A:242:SER:O	1:A:243:SER:C	2.48	0.56
1:A:312:SER:C	1:A:314:ILE:N	2.61	0.56
2:B:115:ILE:C	2:B:117:ASP:N	2.63	0.56
3:C:49:ASP:OD2	3:C:79:CYS:SG	2.63	0.56
1:A:601:LYS:O	1:A:601:LYS:HG2	2.05	0.56
1:A:722:ARG:O	1:A:777:ARG:HD2	2.06	0.56
2:B:149:ARG:O	2:B:150:PHE:C	2.48	0.56
3:C:10:ASP:C	3:C:12:LEU:H	2.13	0.56
1:A:175:THR:CG2	1:A:176:GLY:N	2.67	0.56
1:A:330:PHE:O	1:A:332:LEU:N	2.38	0.56
1:A:368:ARG:CB	1:A:371:GLU:O	2.54	0.56
1:A:531:ILE:HA	1:A:534:ILE:HG23	1.87	0.56
2:B:26:MET:C	2:B:28:GLU:H	2.12	0.56
3:C:20:ASP:OD1	3:C:28:ALA:O	2.23	0.56
1:A:37:PRO:HD3	1:A:73:ASP:O	2.05	0.56
1:A:39:PRO:C	1:A:41:GLU:N	2.63	0.56
1:A:231:TYR:CD1	1:A:440:LEU:HD11	2.41	0.56
2:B:34:ASP:OD2	2:B:41:ILE:HD13	2.05	0.56
1:A:98:SER:O	1:A:99:VAL:O	2.24	0.56
1:A:189:VAL:O	1:A:190:ILE:CG1	2.53	0.56
1:A:418:LEU:C	1:A:420:GLN:N	2.61	0.56
1:A:827:TRP:O	1:A:828:GLN:HB2	2.04	0.56
1:A:828:GLN:HA	1:A:828:GLN:OE1	2.05	0.56
1:A:160:TYR:O	1:A:163:MET:CB	2.53	0.56
1:A:350:MET:C	1:A:353:CYS:SG	2.89	0.56
1:A:447:THR:HG23	1:A:448:LEU:CD2	2.36	0.56
1:A:567:PRO:CG	1:A:580:PHE:H	2.17	0.56
1:A:617:GLU:CD	1:A:619:LEU:HD23	2.31	0.56
1:A:723:TYR:OH	1:A:774:GLU:OE2	2.20	0.56
2:B:123:GLY:HA2	3:C:21:PHE:CD1	2.41	0.56
1:A:267:TYR:CE2	1:A:659:LEU:HD13	2.41	0.56
1:A:657:ASN:C	1:A:659:LEU:H	2.14	0.56
1:A:776:MET:O	1:A:777:ARG:C	2.49	0.56
1:A:832:LEU:HD13	2:B:46:LEU:CD1	2.36	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:122:MET:O	2:B:123:GLY:C	2.49	0.56
1:A:29:ASP:CB	1:A:33:ASN:HD22	2.15	0.55
1:A:84:LYS:HZ1	1:A:84:LYS:H	1.54	0.55
2:B:34:ASP:HA	2:B:45:ASP:C	2.28	0.55
3:C:30:ASP:OD2	3:C:60:GLY:N	2.38	0.55
1:A:3:ILE:CG2	1:A:4:ASP:H	1.88	0.55
1:A:6:ASN:O	1:A:7:ASP:CB	2.54	0.55
1:A:166:ASP:O	1:A:167:ARG:HB2	2.05	0.55
1:A:397:LEU:HA	1:A:401:LEU:HG	1.87	0.55
1:A:502:TYR:O	1:A:507:ILE:O	2.24	0.55
1:A:595:GLY:HA2	1:A:598:ASP:OD2	2.06	0.55
1:A:621:ALA:N	1:A:623:LEU:HD13	2.21	0.55
3:C:102:ILE:CG2	3:C:107:LEU:HB2	2.36	0.55
1:A:61:VAL:HG23	1:A:62:SER:N	2.20	0.55
1:A:112:ILE:HD12	1:A:123:VAL:C	2.31	0.55
1:A:152:LEU:O	1:A:154:SER:N	2.40	0.55
1:A:227:VAL:C	1:A:228:LEU:O	2.42	0.55
1:A:397:LEU:HD22	1:A:401:LEU:HD21	1.88	0.55
1:A:403:PRO:CB	1:A:607:ASN:OD1	2.53	0.55
1:A:433:TYR:HA	1:A:436:MET:SD	2.46	0.55
1:A:532:LEU:CD1	1:A:653:ARG:HD3	2.36	0.55
1:A:545:ASP:O	1:A:546:ASP:CB	2.54	0.55
1:A:583:HIS:CB	1:A:588:ASN:HA	2.36	0.55
1:A:687:ALA:O	1:A:691:LEU:N	2.22	0.55
1:A:39:PRO:C	1:A:41:GLU:H	2.13	0.55
1:A:152:LEU:H	1:A:152:LEU:CD2	2.12	0.55
1:A:200:VAL:HG11	1:A:258:LYS:HZ1	1.70	0.55
1:A:230:ALA:O	1:A:285:HIS:O	2.24	0.55
1:A:299:ASN:ND2	1:A:299:ASN:O	2.37	0.55
1:A:305:THR:HG23	1:A:306:PRO:CD	2.37	0.55
1:A:792:ILE:HG12	3:C:126:ILE:HG13	1.89	0.55
2:B:52:SER:C	2:B:53:LEU:HG	2.31	0.55
3:C:133:GLN:O	3:C:134:GLU:O	2.25	0.55
1:A:100:LEU:HD12	1:A:103:LEU:HD11	1.89	0.55
1:A:185:ASN:C	1:A:187:LYS:H	2.14	0.55
1:A:310:LEU:CG	1:A:311:TYR:N	2.56	0.55
1:A:569:LYS:HB3	1:A:569:LYS:HZ2	1.67	0.55
2:B:62:LEU:N	2:B:62:LEU:HD23	2.22	0.55
2:B:62:LEU:HD11	2:B:64:ALA:HB3	1.89	0.55
1:A:272:SER:O	1:A:273:ARG:C	2.49	0.55
1:A:786:SER:HA	1:A:789:GLN:HG3	1.89	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:827:TRP:O	1:A:828:GLN:CB	2.54	0.55
2:B:56:THR:HG23	2:B:57:PRO:CG	2.35	0.55
1:A:160:TYR:C	1:A:160:TYR:HD1	2.14	0.55
1:A:192:TYR:HB3	1:A:193:LEU:HD12	1.89	0.55
1:A:296:PRO:HD2	1:A:299:ASN:OD1	2.06	0.55
1:A:343:THR:N	1:A:346:GLU:OE1	2.39	0.55
1:A:620:VAL:O	1:A:620:VAL:HG12	2.07	0.55
1:A:790:ALA:HA	1:A:793:ARG:CG	2.37	0.55
2:B:23:MET:O	2:B:24:GLN:CB	2.54	0.55
2:B:154:ILE:O	2:B:155:LYS:CB	2.54	0.55
3:C:145:PHE:O	3:C:149:VAL:HG23	2.07	0.55
1:A:334:ASP:O	1:A:335:GLU:CB	2.54	0.55
1:A:551:ASP:O	1:A:554:TYR:CB	2.52	0.55
1:A:823:VAL:HG12	1:A:824:LEU:N	2.20	0.55
1:A:88:MET:HE3	1:A:99:VAL:HG13	1.87	0.55
1:A:602:ASP:OD2	1:A:648:ILE:HG22	2.06	0.55
1:A:830:TRP:O	1:A:831:LYS:C	2.49	0.55
3:C:103:SER:OG	3:C:106:GLU:HB2	2.07	0.55
1:A:324:ILE:HD13	1:A:324:ILE:N	2.21	0.55
1:A:340:LEU:HB2	1:A:447:THR:CB	2.36	0.55
1:A:396:LEU:O	1:A:398:LYS:HG3	2.07	0.55
1:A:421:VAL:CA	1:A:424:SER:HB2	2.32	0.55
1:A:507:ILE:HG22	1:A:759:GLY:HA2	1.89	0.55
3:C:7:ASP:N	3:C:10:ASP:OD2	2.40	0.55
3:C:119:SER:C	3:C:121:GLU:N	2.65	0.55
1:A:48:ILE:O	1:A:49:GLN:CG	2.55	0.54
1:A:56:ILE:HG12	1:A:69:VAL:HG13	1.88	0.54
1:A:140:TYR:CZ	1:A:148:ILE:HG21	2.42	0.54
1:A:405:VAL:HG22	1:A:412:VAL:HB	1.87	0.54
3:C:70:LEU:HD23	3:C:71:PRO:HD3	1.88	0.54
3:C:144:GLU:O	3:C:145:PHE:HB2	2.07	0.54
1:A:28:PHE:O	1:A:29:ASP:CB	2.55	0.54
1:A:404:LYS:CB	1:A:411:MET:HB3	2.34	0.54
3:C:43:ILE:HG12	3:C:45:PRO:HD3	1.89	0.54
1:A:176:GLY:C	1:A:177:GLU:O	2.49	0.54
1:A:371:GLU:O	1:A:373:GLN:N	2.40	0.54
1:A:3:ILE:O	1:A:4:ASP:HB3	2.07	0.54
1:A:115:TYR:CE2	1:A:145:LYS:HD2	2.42	0.54
1:A:232:GLY:N	1:A:437:PHE:CE1	2.74	0.54
1:A:367:GLN:NE2	1:A:368:ARG:H	2.04	0.54
1:A:43:PHE:CZ	1:A:97:ALA:HB2	2.42	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:48:ILE:O	1:A:49:GLN:CB	2.55	0.54
1:A:65:SER:O	1:A:66:THR:CB	2.54	0.54
1:A:180:ALA:CB	1:A:674:ILE:HG12	2.37	0.54
1:A:302:MET:HG3	1:A:303:LEU:HD22	1.89	0.54
1:A:351:PHE:O	1:A:352:LYS:C	2.49	0.54
1:A:535:LEU:HD22	1:A:535:LEU:C	2.32	0.54
1:A:681:GLN:O	1:A:683:GLY:N	2.41	0.54
2:B:120:GLU:OE2	2:B:131:MET:HE2	2.08	0.54
3:C:9:ILE:O	3:C:9:ILE:HD13	2.07	0.54
3:C:89:GLU:O	3:C:92:LYS:HB2	2.07	0.54
1:A:29:ASP:HB3	1:A:32:LYS:HB2	1.89	0.54
1:A:357:ILE:CG1	1:A:358:LEU:N	2.70	0.54
1:A:502:TYR:HB3	1:A:508:GLN:HA	1.90	0.54
1:A:609:VAL:C	1:A:611:LEU:N	2.61	0.54
2:B:57:PRO:HB2	2:B:62:LEU:HD22	1.90	0.54
2:B:62:LEU:HG	2:B:63:THR:H	1.71	0.54
2:B:81:ILE:HG13	2:B:82:PHE:H	1.72	0.54
3:C:101:PHE:HA	3:C:140:VAL:O	2.06	0.54
3:C:124:ASP:O	3:C:128:ASN:ND2	2.41	0.54
1:A:97:ALA:O	1:A:98:SER:C	2.49	0.54
1:A:123:VAL:HG13	1:A:124:ASN:H	1.73	0.54
1:A:430:LYS:O	1:A:431:SER:C	2.50	0.54
1:A:832:LEU:CD2	1:A:835:LYS:HB2	2.37	0.54
2:B:43:ILE:HG13	2:B:66:LEU:HD22	1.88	0.54
2:B:43:ILE:HG13	2:B:66:LEU:HD21	1.90	0.54
3:C:141:LYS:O	3:C:142:TYR:C	2.51	0.54
1:A:119:PHE:CE2	1:A:490:PHE:CE2	2.96	0.54
1:A:200:VAL:HG21	1:A:258:LYS:CE	2.18	0.54
1:A:367:GLN:HG2	1:A:418:LEU:CD2	2.37	0.54
1:A:580:PHE:CD1	1:A:580:PHE:C	2.85	0.54
2:B:103:ASP:CG	2:B:103:ASP:O	2.49	0.54
3:C:67:GLU:CD	3:C:67:GLU:N	2.65	0.54
3:C:153:PRO:O	3:C:155:PRO:HD3	2.08	0.54
1:A:112:ILE:C	1:A:113:TYR:CD1	2.84	0.54
1:A:119:PHE:HE1	1:A:699:VAL:N	2.06	0.54
1:A:184:GLU:CG	1:A:188:LYS:HZ3	2.21	0.54
1:A:373:GLN:HA	1:A:373:GLN:OE1	2.08	0.54
1:A:556:ASN:O	1:A:558:ILE:N	2.40	0.54
1:A:593:ILE:O	1:A:594:ALA:CB	2.55	0.54
1:A:815:GLN:NE2	2:B:124:ASP:H	1.98	0.54
3:C:65:PRO:CG	3:C:68:GLU:OE1	2.55	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:126:TYR:N	1:A:126:TYR:HD1	2.05	0.54
1:A:185:ASN:N	1:A:187:LYS:H	2.06	0.54
1:A:449:ASP:C	1:A:451:LYS:N	2.63	0.54
1:A:784:ILE:HD13	1:A:787:MET:CE	2.37	0.54
1:A:800:ALA:O	1:A:804:LEU:N	2.42	0.54
1:A:233:ASN:O	1:A:234:ALA:CB	2.55	0.53
1:A:286:ILE:O	1:A:290:ILE:CG2	2.42	0.53
1:A:304:ILE:CD1	1:A:311:TYR:CD2	2.91	0.53
1:A:608:VAL:HG13	1:A:611:LEU:N	2.23	0.53
2:B:153:MET:SD	2:B:154:ILE:HG22	2.48	0.53
1:A:34:CYS:CB	1:A:77:MET:H	2.21	0.53
1:A:37:PRO:CB	1:A:43:PHE:CD2	2.85	0.53
1:A:303:LEU:HD11	1:A:384:LYS:HD3	1.91	0.53
1:A:677:ASN:HB3	1:A:685:VAL:O	2.08	0.53
2:B:115:ILE:C	2:B:117:ASP:H	2.15	0.53
3:C:126:ILE:HG22	3:C:127:ILE:N	2.23	0.53
1:A:64:ASN:HA	1:A:65:SER:HB3	1.90	0.53
1:A:99:VAL:HG12	1:A:100:LEU:N	2.23	0.53
1:A:572:ARG:CG	1:A:573:PRO:CD	2.77	0.53
1:A:578:ALA:O	1:A:579:HIS:CB	2.53	0.53
1:A:679:LEU:O	1:A:681:GLN:N	2.40	0.53
1:A:798:ARG:HG2	3:C:40:CYS:HA	1.90	0.53
1:A:813:VAL:O	1:A:817:ASN:HB2	2.07	0.53
2:B:123:GLY:HA2	3:C:21:PHE:CE1	2.43	0.53
3:C:64:LEU:HD12	3:C:69:PHE:HD1	1.72	0.53
3:C:122:GLU:O	3:C:124:ASP:N	2.42	0.53
1:A:112:ILE:O	1:A:113:TYR:HD1	1.91	0.53
1:A:399:ALA:HA	1:A:403:PRO:HG3	1.91	0.53
1:A:473:SER:C	1:A:475:GLU:H	2.15	0.53
1:A:532:LEU:CD1	1:A:653:ARG:CD	2.86	0.53
3:C:5:SER:H	3:C:8:GLU:HB3	1.73	0.53
1:A:16:ASP:O	1:A:17:ARG:CB	2.56	0.53
1:A:382:ALA:O	1:A:385:VAL:HG13	2.09	0.53
3:C:12:LEU:HD12	3:C:41:LEU:CD1	2.39	0.53
3:C:67:GLU:C	3:C:69:PHE:N	2.66	0.53
1:A:251:ILE:HA	1:A:262:ALA:O	2.09	0.53
1:A:450:THR:C	1:A:452:ALA:H	2.14	0.53
1:A:554:TYR:CE2	1:A:558:ILE:HB	2.44	0.53
1:A:621:ALA:H	1:A:623:LEU:HD12	1.73	0.53
1:A:783:LYS:HZ1	3:C:46:ARG:NH1	2.06	0.53
1:A:220:GLN:HE22	1:A:448:LEU:HD22	1.73	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:322:ASP:C	1:A:324:ILE:N	2.66	0.53
1:A:346:GLU:OE2	1:A:347:LYS:N	2.37	0.53
1:A:606:GLU:HB2	1:A:610:SER:H	1.71	0.53
3:C:89:GLU:N	3:C:89:GLU:OE2	2.42	0.53
3:C:119:SER:C	3:C:121:GLU:H	2.17	0.53
1:A:8:PRO:C	1:A:10:PHE:N	2.66	0.53
1:A:22:LYS:N	1:A:22:LYS:CD	2.67	0.53
1:A:24:GLN:O	1:A:25:THR:CB	2.57	0.53
1:A:123:VAL:CG1	1:A:124:ASN:H	2.21	0.53
1:A:245:PHE:N	1:A:245:PHE:CD1	2.77	0.53
1:A:248:PHE:HA	1:A:460:VAL:O	2.09	0.53
1:A:284:TYR:N	1:A:284:TYR:CD1	2.75	0.53
1:A:421:VAL:O	1:A:425:VAL:N	2.41	0.53
1:A:468:ILE:HG22	1:A:589:VAL:CG1	2.39	0.53
1:A:487:GLN:NE2	1:A:698:GLY:CA	2.71	0.53
1:A:489:PHE:CE2	1:A:668:PRO:HB3	2.44	0.53
1:A:648:ILE:HG13	1:A:649:SER:N	2.22	0.53
2:B:63:THR:O	2:B:67:LYS:CB	2.56	0.53
3:C:111:LEU:HB3	3:C:118:LEU:HD12	1.91	0.53
1:A:231:TYR:HA	1:A:433:TYR:OH	2.09	0.53
1:A:368:ARG:CG	1:A:373:GLN:O	2.57	0.53
1:A:397:LEU:O	1:A:400:LEU:HB3	2.08	0.53
1:A:502:TYR:CB	1:A:508:GLN:HG2	2.38	0.53
1:A:522:ILE:H	1:A:522:ILE:HD12	1.73	0.53
1:A:821:TRP:O	1:A:823:VAL:N	2.41	0.53
3:C:34:LEU:HB2	3:C:69:PHE:HE1	1.74	0.53
1:A:10:PHE:O	1:A:12:TYR:N	2.41	0.53
1:A:124:ASN:C	1:A:126:TYR:HD1	2.17	0.53
1:A:340:LEU:HG	1:A:447:THR:CG2	2.39	0.53
1:A:347:LYS:CD	1:A:351:PHE:HZ	2.21	0.53
1:A:436:MET:HA	1:A:439:TRP:HB2	1.90	0.53
1:A:489:PHE:HE1	1:A:664:TYR:HA	1.74	0.53
1:A:693:GLN:O	1:A:695:GLN:N	2.41	0.53
2:B:120:GLU:HB2	2:B:131:MET:HE2	1.91	0.53
1:A:56:ILE:HG13	1:A:68:THR:HA	1.90	0.52
1:A:227:VAL:O	1:A:231:TYR:CD1	2.61	0.52
1:A:352:LYS:C	1:A:354:THR:N	2.65	0.52
1:A:418:LEU:HD23	1:A:419:GLN:HG2	1.90	0.52
1:A:514:PHE:O	1:A:515:GLY:C	2.52	0.52
1:A:788:PHE:O	1:A:791:HIS:N	2.42	0.52
1:A:837:LYS:HA	1:A:837:LYS:NZ	2.24	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:64:LEU:HB2	3:C:69:PHE:HB2	1.91	0.52
3:C:67:GLU:C	3:C:69:PHE:H	2.17	0.52
3:C:103:SER:O	3:C:104:GLY:C	2.51	0.52
3:C:107:LEU:HD12	3:C:107:LEU:C	2.34	0.52
1:A:29:ASP:O	1:A:33:ASN:N	2.38	0.52
1:A:41:GLU:OE1	1:A:41:GLU:CA	2.45	0.52
1:A:400:LEU:N	1:A:403:PRO:HG3	2.24	0.52
1:A:408:GLY:O	1:A:409:THR:C	2.52	0.52
1:A:420:GLN:HG3	1:A:421:VAL:HG13	1.91	0.52
1:A:552:TYR:O	1:A:553:SER:C	2.51	0.52
1:A:681:GLN:C	1:A:683:GLY:H	2.17	0.52
1:A:719:PHE:HD2	1:A:742:SER:HG	1.56	0.52
1:A:74:ILE:O	1:A:75:GLN:HB2	2.09	0.52
1:A:355:ALA:HA	1:A:358:LEU:HD11	1.91	0.52
1:A:657:ASN:C	1:A:659:LEU:N	2.68	0.52
3:C:12:LEU:HD13	3:C:73:TYR:CD2	2.44	0.52
1:A:224:ALA:O	1:A:225:ASN:C	2.50	0.52
1:A:367:GLN:HA	1:A:418:LEU:HD13	1.91	0.52
1:A:386:ALA:HB1	1:A:392:ASN:CA	2.39	0.52
1:A:532:LEU:HD23	1:A:533:SER:CA	2.39	0.52
2:B:27:LYS:HD3	2:B:27:LYS:O	2.10	0.52
2:B:81:ILE:HD12	2:B:82:PHE:N	2.24	0.52
2:B:150:PHE:O	2:B:154:ILE:HG23	2.09	0.52
1:A:563:MET:HE3	1:A:563:MET:HA	1.90	0.52
1:A:675:ILE:O	1:A:689:LEU:HD23	2.08	0.52
1:A:789:GLN:NE2	3:C:111:LEU:HA	2.12	0.52
2:B:115:ILE:O	2:B:117:ASP:N	2.43	0.52
3:C:13:LYS:HG2	3:C:14:ASP:H	1.75	0.52
3:C:65:PRO:HG2	3:C:68:GLU:OE1	2.10	0.52
1:A:209:GLU:HG2	1:A:211:ASP:CG	2.35	0.52
1:A:220:GLN:O	1:A:223:GLN:CG	2.58	0.52
1:A:327:VAL:CG2	1:A:328:GLU:N	2.53	0.52
1:A:360:MET:C	1:A:362:GLU:N	2.66	0.52
1:A:608:VAL:HG11	1:A:611:LEU:HD12	1.92	0.52
1:A:674:ILE:O	1:A:675:ILE:CB	2.58	0.52
1:A:19:LYS:CG	1:A:20:MET:N	2.71	0.52
1:A:468:ILE:HG22	1:A:589:VAL:HG13	1.91	0.52
1:A:501:GLU:C	1:A:504:LYS:H	2.18	0.52
1:A:505:GLU:OE2	1:A:761:THR:CG2	2.56	0.52
1:A:35:TRP:HB3	1:A:44:ALA:C	2.34	0.52
1:A:652:HIS:O	1:A:655:SER:N	2.37	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:719:PHE:O	1:A:720:LYS:C	2.52	0.52
1:A:119:PHE:CE1	1:A:699:VAL:N	2.78	0.52
1:A:132:TYR:CG	1:A:188:LYS:HD3	2.43	0.52
1:A:217:LEU:O	1:A:218:GLU:C	2.52	0.52
1:A:308:SER:OG	1:A:309:GLY:N	2.43	0.52
1:A:391:ILE:HB	1:A:395:ASP:OD2	2.10	0.52
1:A:398:LYS:O	1:A:402:LYS:C	2.53	0.52
1:A:463:ILE:HD13	1:A:464:ALA:O	2.10	0.52
1:A:565:THR:OG1	1:A:581:GLU:HB3	2.10	0.52
1:A:612:LEU:O	1:A:620:VAL:O	2.28	0.52
1:A:621:ALA:C	1:A:623:LEU:H	2.18	0.52
1:A:677:ASN:O	1:A:678:GLU:C	2.52	0.52
2:B:54:GLY:C	2:B:55:ARG:HG3	2.33	0.52
1:A:107:TYR:C	1:A:109:ALA:H	2.17	0.52
1:A:347:LYS:HD3	1:A:351:PHE:HZ	1.72	0.52
1:A:730:ALA:O	1:A:744:LYS:HD3	2.10	0.52
1:A:37:PRO:HG3	1:A:73:ASP:O	2.09	0.51
1:A:80:PRO:C	1:A:82:PHE:N	2.68	0.51
1:A:104:ARG:C	1:A:106:ARG:H	2.18	0.51
1:A:113:TYR:OH	1:A:132:TYR:OH	2.26	0.51
1:A:217:LEU:O	1:A:220:GLN:HB2	2.10	0.51
1:A:262:ALA:O	1:A:263:ASP:HB2	2.10	0.51
1:A:391:ILE:C	1:A:392:ASN:OD1	2.54	0.51
1:A:484:GLU:OE2	1:A:518:LEU:HB3	2.10	0.51
1:A:36:VAL:O	1:A:43:PHE:HB3	2.10	0.51
1:A:227:VAL:O	1:A:230:ALA:HB3	2.10	0.51
1:A:233:ASN:HB3	1:A:243:SER:CA	2.40	0.51
1:A:558:ILE:O	1:A:558:ILE:CG2	2.58	0.51
1:A:789:GLN:O	1:A:792:ILE:HG23	2.11	0.51
3:C:44:ASN:N	3:C:45:PRO:HD3	2.24	0.51
1:A:81:LYS:O	1:A:81:LYS:HD3	2.10	0.51
1:A:221:ILE:HD13	1:A:221:ILE:N	2.26	0.51
1:A:399:ALA:HA	1:A:403:PRO:CA	2.40	0.51
1:A:476:GLN:CD	1:A:476:GLN:N	2.68	0.51
1:A:483:ASN:O	1:A:486:LEU:N	2.43	0.51
2:B:33:ILE:O	2:B:45:ASP:O	2.29	0.51
2:B:72:PRO:O	2:B:74:ASN:ND2	2.44	0.51
3:C:65:PRO:O	3:C:66:PHE:C	2.53	0.51
1:A:63:ASP:O	1:A:64:ASN:OD1	2.27	0.51
1:A:123:VAL:C	1:A:674:ILE:HG22	2.35	0.51
1:A:304:ILE:CD1	1:A:311:TYR:HD2	2.22	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:328:GLU:C	1:A:330:PHE:N	2.67	0.51
2:B:132:ARG:O	2:B:136:LYS:HG2	2.11	0.51
3:C:10:ASP:C	3:C:12:LEU:N	2.68	0.51
3:C:82:GLY:C	3:C:83:THR:HG22	2.36	0.51
3:C:108:ARG:NH2	3:C:124:ASP:OD1	2.43	0.51
1:A:35:TRP:CH2	1:A:101:ASN:HB2	2.45	0.51
1:A:551:ASP:O	1:A:552:TYR:C	2.54	0.51
1:A:765:PHE:HB3	1:A:769:VAL:HG12	1.92	0.51
3:C:10:ASP:CA	3:C:13:LYS:HE3	2.35	0.51
3:C:58:LYS:HD2	3:C:61:GLU:CD	2.36	0.51
3:C:107:LEU:O	3:C:111:LEU:HD12	2.11	0.51
1:A:74:ILE:CG2	1:A:75:GLN:H	2.19	0.51
1:A:231:TYR:CD1	1:A:231:TYR:N	2.76	0.51
1:A:328:GLU:O	1:A:332:LEU:HB2	2.11	0.51
1:A:352:LYS:O	1:A:354:THR:N	2.43	0.51
1:A:357:ILE:O	1:A:358:LEU:C	2.52	0.51
1:A:563:MET:CE	1:A:564:PHE:CE1	2.91	0.51
1:A:744:LYS:HA	1:A:747:THR:OG1	2.11	0.51
2:B:75:PHE:CG	2:B:75:PHE:O	2.63	0.51
2:B:129:ASP:O	2:B:130:GLU:C	2.52	0.51
3:C:2:PRO:N	3:C:77:MET:HE3	2.25	0.51
3:C:91:PHE:O	3:C:92:LYS:CG	2.58	0.51
3:C:95:ASP:O	3:C:97:GLU:N	2.43	0.51
1:A:175:THR:O	1:A:673:CYS:SG	2.65	0.51
1:A:428:LEU:O	1:A:432:LEU:N	2.26	0.51
1:A:445:ASN:N	1:A:445:ASN:ND2	2.59	0.51
1:A:502:TYR:HB2	1:A:508:GLN:HG2	1.92	0.51
1:A:563:MET:HE2	1:A:564:PHE:HE1	1.75	0.51
1:A:811:LEU:C	1:A:813:VAL:H	2.19	0.51
2:B:105:ASP:O	2:B:106:ALA:C	2.54	0.51
1:A:184:GLU:CD	1:A:188:LYS:HZ3	2.18	0.51
1:A:463:ILE:HD13	1:A:463:ILE:C	2.36	0.51
1:A:716:TYR:O	1:A:719:PHE:HB3	2.11	0.51
1:A:828:GLN:NE2	1:A:831:LYS:HD2	2.26	0.51
1:A:830:TRP:O	1:A:833:TYR:N	2.43	0.51
3:C:118:LEU:O	3:C:119:SER:C	2.54	0.51
3:C:129:LEU:C	3:C:131:ASP:N	2.68	0.51
1:A:48:ILE:O	1:A:49:GLN:HG2	2.11	0.51
1:A:720:LYS:HB2	1:A:720:LYS:NZ	2.26	0.51
1:A:790:ALA:HA	1:A:793:ARG:HG2	1.92	0.51
2:B:131:MET:O	2:B:134:THR:OG1	2.28	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:121:GLU:O	3:C:122:GLU:O	2.29	0.51
1:A:48:ILE:CG1	1:A:49:GLN:H	2.17	0.51
1:A:111:LEU:HD13	1:A:111:LEU:C	2.35	0.51
1:A:124:ASN:N	1:A:674:ILE:HG21	2.26	0.51
1:A:125:PRO:O	1:A:682:PRO:HB3	2.11	0.51
1:A:190:ILE:HD12	1:A:218:GLU:CB	2.32	0.51
1:A:323:ASN:C	1:A:323:ASN:HD22	2.18	0.51
1:A:381:GLU:OE1	1:A:384:LYS:HD2	2.11	0.51
1:A:593:ILE:HA	1:A:596:TRP:NE1	2.26	0.51
1:A:694:LEU:O	1:A:696:CYS:N	2.43	0.51
1:A:720:LYS:HG2	1:A:721:GLN:H	1.76	0.51
2:B:84:ASP:CG	2:B:84:ASP:O	2.54	0.51
1:A:296:PRO:CD	1:A:299:ASN:HB2	2.41	0.50
1:A:340:LEU:HB2	1:A:447:THR:CG2	2.41	0.50
1:A:357:ILE:O	1:A:359:HIS:N	2.44	0.50
1:A:437:PHE:C	1:A:439:TRP:N	2.62	0.50
1:A:495:PHE:CE2	1:A:513:ASP:HA	2.46	0.50
1:A:595:GLY:O	1:A:599:LYS:HE3	2.10	0.50
1:A:606:GLU:O	1:A:607:ASN:HB2	2.09	0.50
1:A:608:VAL:HG11	1:A:611:LEU:CD1	2.41	0.50
2:B:26:MET:O	2:B:28:GLU:N	2.45	0.50
3:C:83:THR:HG23	3:C:86:ASP:CG	2.36	0.50
1:A:425:VAL:C	1:A:427:ALA:H	2.14	0.50
1:A:797:ILE:C	1:A:799:LYS:H	2.19	0.50
1:A:813:VAL:HG12	1:A:814:ILE:N	2.26	0.50
1:A:107:TYR:C	1:A:109:ALA:N	2.69	0.50
1:A:346:GLU:HG2	1:A:443:ARG:NH2	2.27	0.50
1:A:423:ASN:C	1:A:425:VAL:N	2.66	0.50
1:A:705:ILE:O	1:A:706:CYS:C	2.54	0.50
1:A:12:TYR:O	1:A:12:TYR:HD2	1.93	0.50
1:A:155:VAL:O	1:A:159:ALA:CB	2.59	0.50
1:A:180:ALA:N	1:A:674:ILE:CD1	2.75	0.50
1:A:473:SER:C	1:A:475:GLU:N	2.68	0.50
1:A:522:ILE:HD12	1:A:522:ILE:N	2.27	0.50
1:A:599:LYS:HA	1:A:601:LYS:HB3	1.93	0.50
1:A:801:TYR:O	1:A:804:LEU:HB3	2.11	0.50
3:C:11:ASP:OD2	3:C:11:ASP:N	2.43	0.50
3:C:89:GLU:O	3:C:93:THR:HG23	2.11	0.50
1:A:26:ALA:N	1:A:27:PRO:HD2	2.24	0.50
1:A:151:HIS:C	1:A:152:LEU:HD23	2.35	0.50
1:A:155:VAL:O	1:A:159:ALA:HB2	2.12	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:290:ILE:CG1	1:A:291:CYS:N	2.74	0.50
1:A:119:PHE:HE2	1:A:490:PHE:CE2	2.29	0.50
1:A:352:LYS:C	1:A:354:THR:H	2.18	0.50
1:A:402:LYS:N	1:A:403:PRO:HD3	2.26	0.50
2:B:34:ASP:HB2	2:B:41:ILE:HG12	1.92	0.50
2:B:77:MET:HE2	2:B:81:ILE:HG23	1.92	0.50
1:A:113:TYR:HH	1:A:132:TYR:HH	1.58	0.50
1:A:124:ASN:O	1:A:126:TYR:CE1	2.65	0.50
1:A:140:TYR:O	1:A:157:ASP:OD2	2.29	0.50
1:A:223:GLN:O	1:A:225:ASN:N	2.45	0.50
1:A:249:ILE:O	1:A:251:ILE:HG23	2.12	0.50
1:A:505:GLU:C	1:A:507:ILE:H	2.20	0.50
1:A:625:ARG:O	1:A:625:ARG:CG	2.59	0.50
2:B:83:SER:HB3	2:B:86:LEU:CD2	2.41	0.50
2:B:114:TYR:CE1	2:B:118:LEU:HD21	2.47	0.50
3:C:47:ASN:O	3:C:48:GLU:C	2.53	0.50
1:A:335:GLU:O	1:A:338:ASP:N	2.45	0.50
1:A:412:VAL:CG1	1:A:414:LYS:HD3	2.42	0.50
1:A:445:ASN:HD22	1:A:445:ASN:H	1.59	0.50
1:A:553:SER:O	1:A:554:TYR:O	2.29	0.50
1:A:606:GLU:O	1:A:607:ASN:CB	2.60	0.50
1:A:32:LYS:O	1:A:48:ILE:HB	2.12	0.50
1:A:84:LYS:H	1:A:84:LYS:NZ	2.10	0.50
1:A:217:LEU:HD12	1:A:218:GLU:N	2.27	0.50
1:A:466:PHE:H	1:A:479:ILE:CG2	2.25	0.50
1:A:517:ASP:C	1:A:517:ASP:OD1	2.54	0.50
1:A:519:GLN:O	1:A:522:ILE:N	2.45	0.50
1:A:546:ASP:O	1:A:549:PHE:HB3	2.11	0.50
2:B:151:VAL:O	2:B:154:ILE:HG13	2.12	0.50
3:C:13:LYS:HG2	3:C:14:ASP:N	2.27	0.50
1:A:222:ILE:O	1:A:222:ILE:HG12	2.12	0.49
1:A:392:ASN:H	1:A:395:ASP:HB2	1.76	0.49
1:A:421:VAL:O	1:A:425:VAL:HG23	2.12	0.49
1:A:507:ILE:HD12	1:A:757:ARG:HG2	1.94	0.49
1:A:676:PRO:O	1:A:686:ASP:CB	2.60	0.49
1:A:157:ASP:HB2	1:A:192:TYR:HH	1.75	0.49
1:A:368:ARG:HD2	1:A:373:GLN:HB2	1.94	0.49
1:A:398:LYS:C	1:A:400:LEU:N	2.69	0.49
1:A:418:LEU:C	1:A:420:GLN:H	2.20	0.49
1:A:466:PHE:H	1:A:479:ILE:HG21	1.75	0.49
1:A:483:ASN:O	1:A:486:LEU:CB	2.59	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:609:VAL:CG1	1:A:624:PHE:HD2	2.21	0.49
1:A:837:LYS:O	1:A:838:PRO:O	2.29	0.49
1:A:77:MET:HG2	1:A:98:SER:HB2	1.92	0.49
1:A:77:MET:HE3	1:A:78:ASN:HB2	1.94	0.49
1:A:491:ASN:O	1:A:492:HIS:C	2.55	0.49
1:A:600:ASN:HB3	1:A:647:THR:CB	2.42	0.49
1:A:820:LYS:O	1:A:824:LEU:HG	2.11	0.49
1:A:825:ARG:O	1:A:825:ARG:HG3	2.12	0.49
1:A:58:VAL:O	1:A:59:LYS:CB	2.58	0.49
1:A:386:ALA:HB1	1:A:392:ASN:C	2.37	0.49
1:A:398:LYS:O	1:A:400:LEU:N	2.38	0.49
1:A:441:VAL:O	1:A:444:VAL:HG22	2.13	0.49
1:A:663:LEU:C	1:A:665:SER:H	2.19	0.49
1:A:781:LEU:O	1:A:785:ILE:HG12	2.12	0.49
1:A:827:TRP:O	1:A:828:GLN:HG2	2.13	0.49
3:C:41:LEU:O	3:C:41:LEU:HD23	2.12	0.49
1:A:469:PHE:CD2	1:A:469:PHE:N	2.80	0.49
1:A:811:LEU:C	1:A:813:VAL:N	2.68	0.49
1:A:830:TRP:HA	1:A:833:TYR:HB2	1.95	0.49
3:C:92:LYS:C	3:C:95:ASP:H	2.20	0.49
3:C:124:ASP:O	3:C:128:ASN:CG	2.55	0.49
1:A:165:THR:HG22	1:A:166:ASP:N	2.27	0.49
1:A:189:VAL:C	1:A:191:MET:N	2.70	0.49
1:A:194:ALA:HA	1:A:197:ALA:HB3	1.94	0.49
1:A:249:ILE:HG22	1:A:251:ILE:CG2	2.43	0.49
1:A:253:PHE:HB2	1:A:457:TYR:CA	2.22	0.49
1:A:608:VAL:HG13	1:A:608:VAL:O	2.11	0.49
1:A:688:GLU:HA	1:A:691:LEU:HB2	1.94	0.49
1:A:786:SER:HA	1:A:789:GLN:CG	2.43	0.49
3:C:47:ASN:HD22	3:C:116:GLU:CG	2.25	0.49
1:A:223:GLN:C	1:A:225:ASN:N	2.68	0.49
1:A:232:GLY:H	1:A:437:PHE:HE1	1.56	0.49
1:A:614:VAL:HG13	1:A:615:SER:H	1.76	0.49
2:B:69:ALA:O	2:B:70:PRO:C	2.55	0.49
3:C:143:GLU:O	3:C:145:PHE:N	2.44	0.49
1:A:43:PHE:CD1	1:A:43:PHE:N	2.80	0.49
1:A:178:SER:CB	1:A:239:ASN:ND2	2.67	0.49
1:A:649:SER:O	1:A:650:ALA:C	2.55	0.49
1:A:833:TYR:O	1:A:834:ALA:HB3	2.12	0.49
2:B:56:THR:CB	2:B:57:PRO:HD2	2.39	0.49
1:A:84:LYS:HD3	1:A:105:GLY:C	2.37	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:87:ASP:C	1:A:89:ALA:N	2.58	0.49
1:A:159:ALA:O	1:A:170:GLN:NE2	2.46	0.49
1:A:259:ILE:O	1:A:260:ALA:CB	2.60	0.49
1:A:397:LEU:C	1:A:400:LEU:HB3	2.38	0.49
1:A:487:GLN:HG3	1:A:585:TYR:CZ	2.47	0.49
1:A:739:LYS:O	1:A:743:GLU:HG3	2.13	0.49
1:A:788:PHE:O	1:A:789:GLN:C	2.56	0.49
1:A:32:LYS:HD2	1:A:48:ILE:HG22	1.94	0.49
1:A:48:ILE:HA	1:A:58:VAL:CG2	2.38	0.49
1:A:247:LYS:O	1:A:461:LEU:HD22	2.12	0.49
1:A:286:ILE:O	1:A:287:PHE:C	2.55	0.49
1:A:620:VAL:HA	1:A:623:LEU:HD13	1.95	0.49
1:A:695:GLN:HG3	1:A:695:GLN:O	2.13	0.49
1:A:710:PHE:HB3	1:A:764:PHE:HB3	1.95	0.49
1:A:836:VAL:HG12	2:B:32:MET:HE1	1.95	0.49
1:A:28:PHE:O	1:A:33:ASN:ND2	2.46	0.48
1:A:175:THR:HG22	1:A:176:GLY:N	2.28	0.48
1:A:421:VAL:O	1:A:422:ILE:C	2.54	0.48
2:B:83:SER:O	2:B:85:LYS:N	2.46	0.48
1:A:169:ASN:OD1	1:A:666:THR:HG23	2.14	0.48
1:A:374:ALA:HB2	1:A:418:LEU:CB	2.37	0.48
1:A:442:LYS:O	1:A:446:ARG:HG2	2.13	0.48
1:A:490:PHE:O	1:A:491:ASN:C	2.57	0.48
1:A:525:ILE:HD12	1:A:526:GLU:N	2.29	0.48
1:A:553:SER:O	1:A:557:HIS:HD2	1.96	0.48
3:C:31:ALA:O	3:C:34:LEU:HB3	2.12	0.48
1:A:28:PHE:CD1	1:A:80:PRO:HD3	2.48	0.48
1:A:53:GLY:N	1:A:54:GLU:HB3	2.25	0.48
1:A:148:ILE:O	1:A:149:PRO:O	2.31	0.48
1:A:385:VAL:C	1:A:387:PHE:N	2.72	0.48
1:A:472:ASN:HB3	1:A:591:TYR:CD1	2.31	0.48
1:A:567:PRO:CG	1:A:580:PHE:HA	2.43	0.48
1:A:660:MET:C	1:A:662:ASN:N	2.63	0.48
1:A:727:ALA:HB1	1:A:730:ALA:CB	2.34	0.48
2:B:125:ASN:N	2:B:125:ASN:OD1	2.46	0.48
1:A:31:LYS:O	1:A:48:ILE:HG21	2.13	0.48
1:A:239:ASN:C	1:A:240:ASN:ND2	2.72	0.48
1:A:273:ARG:HG3	1:A:284:TYR:CZ	2.48	0.48
1:A:320:THR:HG23	1:A:324:ILE:CD1	2.43	0.48
1:A:476:GLN:CD	1:A:476:GLN:H	2.21	0.48
1:A:614:VAL:CG2	1:A:615:SER:N	2.61	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:77:MET:HB2	2:B:80:SER:CB	2.43	0.48
1:A:286:ILE:HG23	1:A:287:PHE:N	2.28	0.48
3:C:125:GLU:O	3:C:129:LEU:HD11	2.13	0.48
3:C:134:GLU:O	3:C:135:ASP:CB	2.61	0.48
1:A:15:VAL:O	1:A:15:VAL:CG2	2.61	0.48
1:A:693:GLN:C	1:A:695:GLN:N	2.70	0.48
1:A:814:ILE:HD12	2:B:99:PHE:CE2	2.48	0.48
1:A:814:ILE:CG2	1:A:818:ILE:HD13	2.43	0.48
2:B:81:ILE:CD1	2:B:82:PHE:H	2.26	0.48
2:B:153:MET:SD	2:B:154:ILE:CG2	3.02	0.48
1:A:163:MET:HE1	1:A:169:ASN:HA	1.95	0.48
1:A:324:ILE:O	1:A:325:ASP:O	2.32	0.48
1:A:484:GLU:HA	1:A:585:TYR:HE2	1.78	0.48
1:A:502:TYR:N	1:A:502:TYR:CD1	2.79	0.48
1:A:532:LEU:HD23	1:A:533:SER:CB	2.43	0.48
1:A:536:GLU:O	1:A:538:GLU:N	2.47	0.48
3:C:66:PHE:O	3:C:69:PHE:HB3	2.14	0.48
1:A:308:SER:CA	1:A:311:TYR:CE1	2.90	0.48
1:A:366:LYS:HG3	1:A:367:GLN:N	2.29	0.48
1:A:417:ASN:O	1:A:418:LEU:C	2.56	0.48
1:A:612:LEU:CB	1:A:624:PHE:CE2	2.97	0.48
1:A:694:LEU:HA	1:A:699:VAL:CG1	2.44	0.48
1:A:695:GLN:N	1:A:700:LEU:HD12	2.29	0.48
1:A:772:ASN:HA	1:A:775:GLU:HG2	1.95	0.48
1:A:801:TYR:CE1	3:C:18:LEU:HD23	2.49	0.48
1:A:50:SER:CB	1:A:56:ILE:HA	2.44	0.48
1:A:124:ASN:N	1:A:674:ILE:HG22	2.29	0.48
1:A:182:LYS:HB3	1:A:182:LYS:HZ1	1.73	0.48
1:A:194:ALA:O	1:A:195:LYS:C	2.55	0.48
1:A:302:MET:CG	1:A:303:LEU:N	2.70	0.48
1:A:321:VAL:O	1:A:324:ILE:HD12	2.14	0.48
1:A:534:ILE:O	1:A:534:ILE:HG12	2.13	0.48
1:A:564:PHE:CD2	1:A:565:THR:HG23	2.48	0.48
1:A:600:ASN:CB	1:A:647:THR:OG1	2.62	0.48
1:A:608:VAL:C	1:A:611:LEU:H	2.22	0.48
1:A:793:ARG:HD2	3:C:118:LEU:CD2	2.44	0.48
2:B:41:ILE:HD12	2:B:42:ASP:N	2.27	0.48
1:A:29:ASP:O	1:A:32:LYS:HB2	2.14	0.48
1:A:185:ASN:HA	1:A:188:LYS:HB3	1.95	0.48
1:A:418:LEU:O	1:A:420:GLN:N	2.46	0.48
1:A:441:VAL:O	1:A:443:ARG:N	2.46	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:472:ASN:HD22	1:A:590:PRO:C	2.22	0.48
1:A:483:ASN:HA	1:A:486:LEU:HB2	1.96	0.48
1:A:514:PHE:C	1:A:516:MET:N	2.70	0.48
1:A:772:ASN:C	1:A:774:GLU:H	2.21	0.48
2:B:81:ILE:HD12	2:B:82:PHE:H	1.79	0.48
3:C:9:ILE:HD13	3:C:9:ILE:C	2.39	0.48
3:C:84:PHE:O	3:C:88:MET:N	2.45	0.48
3:C:102:ILE:O	3:C:102:ILE:HG22	2.13	0.48
1:A:63:ASP:O	1:A:64:ASN:ND2	2.47	0.47
1:A:299:ASN:C	1:A:299:ASN:HD22	2.19	0.47
1:A:357:ILE:O	1:A:360:MET:SD	2.71	0.47
1:A:398:LYS:HE3	1:A:404:LYS:HZ3	1.78	0.47
1:A:514:PHE:O	1:A:517:ASP:N	2.40	0.47
3:C:49:ASP:CG	3:C:79:CYS:HG	2.19	0.47
1:A:505:GLU:O	1:A:507:ILE:HG22	2.14	0.47
1:A:507:ILE:HD12	1:A:757:ARG:CG	2.44	0.47
1:A:552:TYR:C	1:A:554:TYR:N	2.68	0.47
1:A:600:ASN:O	1:A:602:ASP:N	2.46	0.47
1:A:834:ALA:O	1:A:835:LYS:C	2.57	0.47
2:B:30:PHE:HA	2:B:33:ILE:HD12	1.96	0.47
2:B:112:ILE:CD1	2:B:145:PHE:HB2	2.42	0.47
3:C:34:LEU:HD23	3:C:35:GLY:N	2.29	0.47
3:C:56:THR:OG1	3:C:57:HIS:N	2.46	0.47
3:C:66:PHE:O	3:C:67:GLU:C	2.58	0.47
3:C:83:THR:O	3:C:84:PHE:O	2.32	0.47
1:A:167:ARG:HD3	1:A:168:GLU:N	2.30	0.47
1:A:186:THR:HG22	1:A:249:ILE:HD12	1.96	0.47
1:A:227:VAL:HG21	1:A:337:PHE:CE2	2.49	0.47
1:A:507:ILE:CG1	1:A:508:GLN:H	2.27	0.47
1:A:606:GLU:CD	1:A:606:GLU:N	2.70	0.47
1:A:775:GLU:O	1:A:779:GLU:HB3	2.15	0.47
2:B:133:MET:O	2:B:134:THR:C	2.56	0.47
1:A:220:GLN:NE2	1:A:221:ILE:HG23	2.29	0.47
1:A:280:ALA:C	1:A:282:ARG:N	2.68	0.47
1:A:502:TYR:N	1:A:502:TYR:HD1	2.12	0.47
1:A:513:ASP:O	1:A:516:MET:CG	2.58	0.47
1:A:255:PRO:HD2	1:A:256:THR:HG22	1.97	0.47
1:A:269:LEU:O	1:A:271:LYS:N	2.47	0.47
1:A:306:PRO:C	1:A:311:TYR:OH	2.57	0.47
1:A:312:SER:HB2	1:A:315:ASN:OD1	2.14	0.47
1:A:341:GLY:O	1:A:342:PHE:CD1	2.68	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:489:PHE:CE1	1:A:664:TYR:HA	2.48	0.47
1:A:502:TYR:C	1:A:507:ILE:O	2.58	0.47
1:A:608:VAL:C	1:A:609:VAL:HG23	2.39	0.47
1:A:723:TYR:CE2	1:A:773:LEU:O	2.68	0.47
1:A:727:ALA:N	1:A:728:PRO:CD	2.77	0.47
2:B:43:ILE:CG1	2:B:44:ASN:N	2.78	0.47
2:B:110:LEU:HB2	2:B:115:ILE:CD1	2.40	0.47
1:A:120:CYS:O	1:A:121:ILE:C	2.58	0.47
1:A:141:ARG:HE	1:A:143:LYS:CG	2.27	0.47
1:A:238:ARG:O	1:A:239:ASN:CB	2.62	0.47
1:A:446:ARG:HA	1:A:449:ASP:HB2	1.97	0.47
1:A:519:GLN:NE2	1:A:523:ASP:HB2	2.30	0.47
1:A:19:LYS:HD3	1:A:20:MET:HG2	1.96	0.47
1:A:64:ASN:CA	1:A:65:SER:HB3	2.44	0.47
1:A:87:ASP:HA	1:A:115:TYR:HB2	1.97	0.47
1:A:154:SER:O	1:A:158:ASN:ND2	2.47	0.47
1:A:330:PHE:O	1:A:333:CYS:SG	2.72	0.47
1:A:391:ILE:CD1	1:A:611:LEU:CD2	2.78	0.47
1:A:403:PRO:O	1:A:413:THR:HG23	2.14	0.47
1:A:420:GLN:O	1:A:421:VAL:HG22	2.15	0.47
1:A:423:ASN:O	1:A:424:SER:C	2.57	0.47
1:A:479:ILE:HG22	1:A:483:ASN:HD22	1.80	0.47
1:A:483:ASN:O	1:A:487:GLN:N	2.47	0.47
1:A:532:LEU:O	1:A:536:GLU:HG3	2.15	0.47
1:A:550:GLN:O	1:A:551:ASP:C	2.57	0.47
1:A:722:ARG:CD	1:A:777:ARG:NE	2.74	0.47
2:B:33:ILE:CG1	2:B:34:ASP:N	2.78	0.47
2:B:56:THR:HG23	2:B:57:PRO:HG2	1.95	0.47
2:B:112:ILE:O	2:B:113:GLU:C	2.57	0.47
3:C:10:ASP:O	3:C:13:LYS:HG2	2.14	0.47
1:A:100:LEU:CA	1:A:103:LEU:HD22	2.44	0.47
1:A:437:PHE:O	1:A:438:ASN:C	2.57	0.47
2:B:103:ASP:OD2	2:B:108:LYS:N	2.48	0.47
2:B:109:LYS:HD2	2:B:144:LYS:HB3	1.96	0.47
3:C:34:LEU:O	3:C:37:VAL:HB	2.15	0.47
1:A:26:ALA:C	1:A:28:PHE:H	2.22	0.47
1:A:106:ARG:HB3	1:A:111:LEU:O	2.15	0.47
1:A:343:THR:O	1:A:343:THR:CG2	2.60	0.47
1:A:399:ALA:C	1:A:403:PRO:HG3	2.40	0.47
1:A:447:THR:HG23	1:A:448:LEU:HD23	1.96	0.47
1:A:688:GLU:O	1:A:692:HIS:HB2	2.14	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:125:PRO:CD	1:A:126:TYR:H	2.26	0.47
1:A:160:TYR:HD1	1:A:161:GLN:N	2.13	0.47
1:A:206:GLU:CG	1:A:207:GLU:N	2.76	0.47
1:A:324:ILE:CG1	1:A:325:ASP:N	2.78	0.47
1:A:524:LEU:C	1:A:524:LEU:CD2	2.88	0.47
1:A:525:ILE:HG13	1:A:526:GLU:H	1.80	0.47
1:A:567:PRO:HG3	1:A:580:PHE:HA	1.95	0.47
1:A:579:HIS:O	1:A:580:PHE:HD1	1.97	0.47
2:B:154:ILE:O	2:B:154:ILE:HD12	2.14	0.47
3:C:127:ILE:HG22	3:C:145:PHE:CE1	2.50	0.47
3:C:131:ASP:O	3:C:131:ASP:OD2	2.32	0.47
1:A:84:LYS:NZ	1:A:84:LYS:N	2.63	0.46
1:A:310:LEU:O	1:A:311:TYR:C	2.57	0.46
2:B:112:ILE:CG2	2:B:116:LYS:HG3	2.35	0.46
1:A:37:PRO:HD2	1:A:73:ASP:O	2.14	0.46
1:A:54:GLU:CG	1:A:55:GLU:OE1	2.63	0.46
1:A:125:PRO:C	1:A:127:ARG:N	2.73	0.46
1:A:234:ALA:HA	1:A:241:ASN:HA	1.96	0.46
1:A:357:ILE:HD12	1:A:358:LEU:N	2.31	0.46
1:A:445:ASN:O	1:A:446:ARG:C	2.58	0.46
1:A:490:PHE:O	1:A:493:HIS:HB3	2.15	0.46
1:A:564:PHE:CE1	1:A:583:HIS:CB	2.97	0.46
1:A:579:HIS:HB3	1:A:592:SER:HA	1.97	0.46
1:A:599:LYS:O	1:A:600:ASN:C	2.56	0.46
1:A:751:MET:HE1	1:A:765:PHE:CE1	2.50	0.46
3:C:31:ALA:O	3:C:33:LYS:N	2.48	0.46
3:C:78:ASP:O	3:C:79:CYS:C	2.58	0.46
3:C:84:PHE:O	3:C:87:TYR:N	2.48	0.46
1:A:180:ALA:N	1:A:674:ILE:CG1	2.72	0.46
1:A:184:GLU:HG3	1:A:188:LYS:HZ3	1.80	0.46
1:A:220:GLN:HE21	1:A:221:ILE:HG23	1.80	0.46
1:A:341:GLY:O	1:A:342:PHE:HB3	2.16	0.46
1:A:368:ARG:O	1:A:369:PRO:C	2.59	0.46
1:A:535:LEU:O	1:A:536:GLU:O	2.33	0.46
1:A:593:ILE:HG12	1:A:594:ALA:N	2.30	0.46
1:A:680:LYS:O	1:A:682:PRO:CD	2.63	0.46
1:A:795:TYR:N	1:A:798:ARG:NH2	2.63	0.46
1:A:303:LEU:O	1:A:304:ILE:C	2.59	0.46
1:A:585:TYR:CD1	1:A:586:ALA:N	2.83	0.46
1:A:833:TYR:C	1:A:833:TYR:CD2	2.92	0.46
3:C:103:SER:C	3:C:105:ALA:N	2.73	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:18:LYS:HD3	1:A:18:LYS:N	2.30	0.46
1:A:111:LEU:C	1:A:112:ILE:HG23	2.40	0.46
1:A:341:GLY:O	1:A:342:PHE:CB	2.63	0.46
1:A:524:LEU:HD23	1:A:524:LEU:C	2.40	0.46
1:A:593:ILE:HA	1:A:596:TRP:CD1	2.50	0.46
1:A:603:PRO:HB2	1:A:645:PHE:CE2	2.50	0.46
1:A:687:ALA:O	1:A:690:VAL:N	2.49	0.46
1:A:784:ILE:HD12	3:C:86:ASP:HB3	1.98	0.46
2:B:118:LEU:HA	2:B:122:MET:CG	2.32	0.46
1:A:35:TRP:HH2	1:A:101:ASN:HB3	1.80	0.46
1:A:187:LYS:HA	1:A:190:ILE:HD11	1.98	0.46
1:A:500:GLU:OE2	1:A:501:GLU:N	2.41	0.46
1:A:611:LEU:O	1:A:612:LEU:CB	2.64	0.46
1:A:725:ILE:HD12	1:A:726:LEU:N	2.30	0.46
1:A:820:LYS:O	1:A:823:VAL:HG12	2.15	0.46
2:B:64:ALA:C	2:B:66:LEU:H	2.22	0.46
2:B:81:ILE:CG1	2:B:82:PHE:N	2.79	0.46
3:C:70:LEU:HD23	3:C:71:PRO:CG	2.45	0.46
1:A:100:LEU:HA	1:A:103:LEU:CD1	2.46	0.46
1:A:103:LEU:HD23	1:A:104:ARG:CA	2.39	0.46
1:A:165:THR:CG2	1:A:166:ASP:N	2.78	0.46
1:A:170:GLN:O	1:A:171:SER:OG	2.30	0.46
1:A:384:LYS:O	1:A:388:LEU:N	2.42	0.46
1:A:403:PRO:O	1:A:412:VAL:O	2.33	0.46
1:A:703:ILE:HD12	1:A:703:ILE:O	2.15	0.46
1:A:792:ILE:CG1	3:C:126:ILE:HG13	2.45	0.46
2:B:33:ILE:HA	2:B:46:LEU:HD23	1.97	0.46
2:B:65:MET:O	2:B:66:LEU:CB	2.64	0.46
2:B:118:LEU:CA	2:B:122:MET:HG3	2.33	0.46
3:C:64:LEU:HD12	3:C:69:PHE:CD1	2.49	0.46
1:A:84:LYS:CA	1:A:102:ASN:ND2	2.78	0.46
1:A:92:THR:O	1:A:93:TYR:C	2.57	0.46
1:A:144:ARG:O	1:A:145:LYS:C	2.58	0.46
1:A:246:GLY:O	1:A:267:TYR:HD1	1.99	0.46
1:A:328:GLU:O	1:A:329:GLU:C	2.59	0.46
3:C:58:LYS:HB2	3:C:61:GLU:CD	2.41	0.46
1:A:84:LYS:HE2	1:A:105:GLY:HA3	1.98	0.46
1:A:124:ASN:C	1:A:126:TYR:CD1	2.94	0.46
1:A:147:GLU:O	1:A:148:ILE:CG1	2.58	0.46
1:A:218:GLU:H	1:A:218:GLU:HG3	1.36	0.46
1:A:357:ILE:HA	1:A:360:MET:SD	2.56	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:399:ALA:CA	1:A:403:PRO:HG3	2.46	0.46
1:A:603:PRO:HB2	1:A:645:PHE:HD2	1.80	0.46
1:A:667:HIS:HA	1:A:668:PRO:HD2	1.66	0.46
1:A:696:CYS:O	1:A:697:ASN:C	2.57	0.46
1:A:793:ARG:NH2	3:C:47:ASN:OD1	2.45	0.46
1:A:12:TYR:O	1:A:12:TYR:CD2	2.69	0.46
1:A:139:LYS:HA	1:A:139:LYS:HD2	1.43	0.46
1:A:220:GLN:C	1:A:222:ILE:H	2.24	0.46
1:A:288:TYR:C	1:A:290:ILE:N	2.57	0.46
1:A:397:LEU:CA	1:A:401:LEU:HG	2.46	0.46
1:A:527:LYS:HD3	1:A:530:GLY:HA2	1.98	0.46
1:A:569:LYS:HE2	1:A:570:PRO:CD	2.43	0.46
1:A:728:PRO:C	1:A:730:ALA:H	2.24	0.46
2:B:141:GLU:O	2:B:144:LYS:HB2	2.16	0.46
1:A:100:LEU:C	1:A:102:ASN:N	2.74	0.45
1:A:188:LYS:HZ2	1:A:188:LYS:CB	1.98	0.45
1:A:322:ASP:O	1:A:324:ILE:CG2	2.54	0.45
1:A:367:GLN:HB3	1:A:368:ARG:H	1.37	0.45
1:A:451:LYS:NZ	1:A:451:LYS:CB	2.66	0.45
1:A:479:ILE:C	1:A:482:THR:H	2.24	0.45
1:A:559:GLY:O	1:A:560:LYS:CB	2.63	0.45
1:A:681:GLN:C	1:A:683:GLY:N	2.72	0.45
1:A:827:TRP:CE3	1:A:830:TRP:HB2	2.51	0.45
2:B:64:ALA:C	2:B:66:LEU:N	2.74	0.45
3:C:120:ASP:O	3:C:124:ASP:OD1	2.34	0.45
1:A:61:VAL:O	1:A:63:ASP:N	2.50	0.45
1:A:180:ALA:H	1:A:674:ILE:CD1	2.29	0.45
1:A:396:LEU:H	1:A:396:LEU:HD23	1.79	0.45
1:A:400:LEU:C	1:A:400:LEU:HD13	2.41	0.45
1:A:569:LYS:CB	1:A:570:PRO:HD2	2.45	0.45
1:A:674:ILE:O	1:A:693:GLN:OE1	2.33	0.45
1:A:796:LEU:HD21	3:C:126:ILE:CD1	2.46	0.45
1:A:837:LYS:NZ	1:A:838:PRO:HD2	2.31	0.45
3:C:38:CYS:HB3	3:C:43:ILE:CD1	2.42	0.45
1:A:55:GLU:CB	1:A:68:THR:HG22	2.35	0.45
1:A:303:LEU:HD11	1:A:384:LYS:HE2	1.98	0.45
1:A:347:LYS:HZ2	1:A:351:PHE:HZ	1.58	0.45
1:A:802:LYS:O	1:A:803:LYS:C	2.58	0.45
2:B:151:VAL:O	2:B:152:ALA:C	2.58	0.45
3:C:46:ARG:O	3:C:49:ASP:HB2	2.16	0.45
3:C:70:LEU:O	3:C:73:TYR:HB3	2.17	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:49:GLN:HG2	1:A:58:VAL:HG13	1.98	0.45
1:A:49:GLN:C	1:A:50:SER:OG	2.59	0.45
1:A:107:TYR:O	1:A:110:GLY:N	2.50	0.45
1:A:192:TYR:C	1:A:194:ALA:N	2.74	0.45
1:A:256:THR:O	1:A:256:THR:OG1	2.28	0.45
1:A:276:TYR:HE2	1:A:278:GLN:NE2	2.13	0.45
1:A:408:GLY:O	1:A:409:THR:O	2.33	0.45
1:A:579:HIS:CB	1:A:592:SER:HB2	2.46	0.45
1:A:676:PRO:O	1:A:686:ASP:HB2	2.15	0.45
1:A:722:ARG:HD3	1:A:777:ARG:HE	1.79	0.45
2:B:151:VAL:HA	2:B:154:ILE:CG1	2.46	0.45
1:A:312:SER:OG	1:A:313:PHE:N	2.50	0.45
1:A:398:LYS:O	1:A:402:LYS:N	2.34	0.45
1:A:398:LYS:N	1:A:401:LEU:CD1	2.80	0.45
1:A:477:LEU:HD13	1:A:477:LEU:C	2.41	0.45
1:A:716:TYR:CE1	1:A:762:LYS:C	2.95	0.45
3:C:4:LEU:HA	3:C:8:GLU:OE1	2.16	0.45
1:A:49:GLN:H	1:A:58:VAL:HG21	1.81	0.45
1:A:53:GLY:H	1:A:54:GLU:CA	2.30	0.45
1:A:65:SER:OG	1:A:66:THR:N	2.49	0.45
1:A:140:TYR:N	1:A:140:TYR:CD1	2.84	0.45
1:A:180:ALA:HB2	1:A:674:ILE:CG2	2.38	0.45
1:A:189:VAL:C	1:A:190:ILE:CG1	2.90	0.45
1:A:421:VAL:O	1:A:424:SER:N	2.50	0.45
1:A:438:ASN:H	1:A:438:ASN:HD22	1.65	0.45
1:A:481:TYR:CD1	1:A:481:TYR:O	2.70	0.45
1:A:487:GLN:C	1:A:489:PHE:N	2.73	0.45
1:A:619:LEU:O	1:A:623:LEU:HD21	2.17	0.45
1:A:655:SER:O	1:A:656:LEU:C	2.59	0.45
2:B:26:MET:C	2:B:28:GLU:N	2.74	0.45
2:B:90:ASP:CG	2:B:94:THR:HG21	2.41	0.45
1:A:4:ASP:HA	1:A:5:PHE:CD2	2.51	0.45
1:A:126:TYR:HE2	1:A:680:LYS:CB	2.22	0.45
1:A:160:TYR:O	1:A:161:GLN:C	2.59	0.45
1:A:290:ILE:CG2	1:A:330:PHE:CE1	3.00	0.45
1:A:320:THR:CG2	1:A:321:VAL:N	2.79	0.45
1:A:528:PRO:O	1:A:530:GLY:N	2.45	0.45
1:A:709:GLY:C	1:A:711:PRO:HD3	2.42	0.45
3:C:125:GLU:C	3:C:129:LEU:HD11	2.42	0.45
1:A:7:ASP:H	1:A:8:PRO:C	2.24	0.45
1:A:232:GLY:N	1:A:437:PHE:HE1	2.14	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:322:ASP:C	1:A:324:ILE:H	2.23	0.45
1:A:328:GLU:O	1:A:332:LEU:HD23	2.17	0.45
1:A:340:LEU:HG	1:A:447:THR:HG21	1.97	0.45
1:A:362:GLU:HA	1:A:363:MET:HE3	1.99	0.45
1:A:468:ILE:O	1:A:468:ILE:HG13	2.17	0.45
1:A:772:ASN:HA	1:A:775:GLU:CG	2.46	0.45
3:C:15:VAL:O	3:C:16:PHE:C	2.57	0.45
3:C:84:PHE:CZ	3:C:88:MET:HE2	2.52	0.45
3:C:101:PHE:O	3:C:102:ILE:HD12	2.16	0.45
1:A:37:PRO:HA	1:A:43:PHE:CA	2.46	0.45
1:A:81:LYS:HG2	1:A:722:ARG:NH2	2.32	0.45
1:A:115:TYR:HE2	1:A:145:LYS:CG	2.28	0.45
1:A:276:TYR:CG	1:A:277:GLN:N	2.85	0.45
1:A:305:THR:HG23	1:A:306:PRO:CG	2.47	0.45
1:A:311:TYR:O	1:A:311:TYR:HD1	2.00	0.45
1:A:509:TRP:O	1:A:510:GLU:O	2.35	0.45
1:A:625:ARG:O	1:A:625:ARG:HG3	2.17	0.45
1:A:703:ILE:O	1:A:704:ARG:C	2.58	0.45
1:A:794:GLY:HA2	3:C:39:ARG:HB3	1.98	0.45
2:B:74:ASN:OD1	2:B:76:THR:N	2.49	0.45
1:A:79:PRO:O	1:A:80:PRO:C	2.61	0.45
1:A:192:TYR:O	1:A:195:LYS:N	2.50	0.45
1:A:325:ASP:C	1:A:327:VAL:H	2.24	0.45
1:A:328:GLU:C	1:A:332:LEU:HD23	2.40	0.45
1:A:385:VAL:HG22	1:A:386:ALA:N	2.32	0.45
1:A:398:LYS:CE	1:A:404:LYS:NZ	2.80	0.45
1:A:419:GLN:O	1:A:423:ASN:OD1	2.35	0.45
1:A:456:TYR:CD2	1:A:456:TYR:N	2.82	0.45
1:A:466:PHE:CA	1:A:483:ASN:ND2	2.80	0.45
1:A:479:ILE:C	1:A:481:TYR:N	2.72	0.45
1:A:691:LEU:HD23	1:A:691:LEU:HA	1.83	0.45
1:A:777:ARG:O	1:A:778:ASP:C	2.60	0.45
1:A:797:ILE:C	1:A:799:LYS:N	2.73	0.45
3:C:134:GLU:O	3:C:135:ASP:HB2	2.17	0.45
1:A:159:ALA:CB	1:A:669:HIS:CE1	2.99	0.44
1:A:170:GLN:CA	1:A:170:GLN:OE1	2.65	0.44
1:A:206:GLU:HG2	1:A:207:GLU:HG2	1.99	0.44
1:A:820:LYS:C	1:A:821:TRP:O	2.51	0.44
3:C:30:ASP:CG	3:C:60:GLY:H	2.25	0.44
3:C:50:VAL:O	3:C:51:PHE:C	2.60	0.44
3:C:126:ILE:HA	3:C:129:LEU:CD1	2.46	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:26:ALA:O	1:A:27:PRO:C	2.60	0.44
1:A:184:GLU:HB2	1:A:188:LYS:NZ	2.31	0.44
1:A:303:LEU:HD12	1:A:303:LEU:HA	1.54	0.44
1:A:685:VAL:HG13	1:A:686:ASP:N	2.33	0.44
1:A:778:ASP:C	1:A:778:ASP:OD1	2.60	0.44
2:B:33:ILE:O	2:B:46:LEU:CA	2.64	0.44
2:B:62:LEU:CG	2:B:63:THR:N	2.72	0.44
2:B:86:LEU:O	2:B:89:THR:HB	2.17	0.44
3:C:10:ASP:O	3:C:12:LEU:N	2.51	0.44
3:C:84:PHE:CD1	3:C:88:MET:HG2	2.52	0.44
1:A:140:TYR:HA	1:A:143:LYS:HB2	1.99	0.44
1:A:162:ASN:O	1:A:165:THR:O	2.36	0.44
1:A:172:CYS:SG	1:A:174:ILE:CD1	3.04	0.44
1:A:337:PHE:C	1:A:342:PHE:CZ	2.95	0.44
1:A:345:GLU:HG3	1:A:346:GLU:CG	2.46	0.44
1:A:423:ASN:O	1:A:425:VAL:N	2.50	0.44
1:A:507:ILE:HD11	1:A:757:ARG:HG2	1.98	0.44
2:B:77:MET:O	2:B:81:ILE:HG13	2.17	0.44
2:B:109:LYS:N	2:B:147:TYR:HE1	2.15	0.44
1:A:11:GLN:CB	1:A:12:TYR:O	2.65	0.44
1:A:55:GLU:HB3	1:A:69:VAL:O	2.18	0.44
1:A:56:ILE:HG23	1:A:69:VAL:HG22	1.99	0.44
1:A:235:LYS:HA	1:A:240:ASN:C	2.43	0.44
1:A:282:ARG:NH1	1:A:285:HIS:HA	2.33	0.44
1:A:518:LEU:O	1:A:521:CYS:N	2.49	0.44
1:A:567:PRO:O	1:A:581:GLU:OE2	2.35	0.44
1:A:665:SER:C	1:A:666:THR:OG1	2.59	0.44
1:A:703:ILE:HG13	1:A:704:ARG:N	2.31	0.44
2:B:149:ARG:O	2:B:152:ALA:HB3	2.16	0.44
3:C:66:PHE:O	3:C:67:GLU:O	2.36	0.44
3:C:67:GLU:O	3:C:71:PRO:HD2	2.18	0.44
1:A:123:VAL:HG13	1:A:676:PRO:HG3	1.99	0.44
1:A:329:GLU:O	1:A:329:GLU:OE1	2.36	0.44
1:A:390:GLY:O	1:A:391:ILE:C	2.60	0.44
1:A:532:LEU:CD2	1:A:533:SER:N	2.70	0.44
1:A:646:GLN:HE21	1:A:646:GLN:HB2	1.59	0.44
3:C:102:ILE:O	3:C:103:SER:C	2.59	0.44
1:A:156:ALA:O	1:A:160:TYR:CB	2.64	0.44
1:A:192:TYR:O	1:A:193:LEU:C	2.60	0.44
1:A:398:LYS:H	1:A:401:LEU:HD11	1.80	0.44
1:A:428:LEU:O	1:A:429:SER:C	2.61	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:485:ARG:O	1:A:485:ARG:HG3	2.18	0.44
1:A:492:HIS:O	1:A:495:PHE:HB3	2.17	0.44
1:A:614:VAL:O	1:A:616:LYS:N	2.50	0.44
1:A:695:GLN:O	1:A:695:GLN:CG	2.66	0.44
1:A:104:ARG:CA	1:A:107:TYR:CD2	2.99	0.44
1:A:104:ARG:HD3	1:A:685:VAL:HG21	2.00	0.44
1:A:157:ASP:CA	1:A:160:TYR:HB3	2.48	0.44
1:A:158:ASN:HA	1:A:161:GLN:CB	2.45	0.44
1:A:322:ASP:O	1:A:323:ASN:C	2.60	0.44
1:A:509:TRP:C	1:A:509:TRP:CE3	2.96	0.44
1:A:532:LEU:HD11	1:A:653:ARG:CD	2.46	0.44
1:A:704:ARG:NH1	1:A:705:ILE:HG12	2.32	0.44
3:C:51:PHE:C	3:C:53:VAL:H	2.26	0.44
1:A:110:GLY:O	1:A:111:LEU:HB2	2.17	0.44
1:A:212:GLN:HE21	1:A:212:GLN:HB2	1.56	0.44
1:A:248:PHE:C	1:A:250:ARG:N	2.75	0.44
1:A:325:ASP:HB3	1:A:327:VAL:CG1	2.48	0.44
1:A:513:ASP:O	1:A:516:MET:N	2.43	0.44
1:A:547:LYS:O	1:A:548:SER:C	2.60	0.44
1:A:699:VAL:HG13	1:A:700:LEU:N	2.30	0.44
2:B:73:LEU:HA	2:B:73:LEU:HD13	1.66	0.44
3:C:123:VAL:O	3:C:127:ILE:N	2.40	0.44
1:A:33:ASN:HA	1:A:46:ALA:O	2.18	0.44
1:A:139:LYS:HB3	1:A:140:TYR:H	1.58	0.44
1:A:237:THR:HG22	1:A:238:ARG:H	1.81	0.44
1:A:517:ASP:OD1	1:A:518:LEU:HD23	2.18	0.44
1:A:603:PRO:C	1:A:604:ILE:HD12	2.43	0.44
1:A:703:ILE:HD12	1:A:707:ARG:HB2	2.00	0.44
1:A:808:ARG:HG3	3:C:21:PHE:CD2	2.52	0.44
3:C:45:PRO:HG2	3:C:76:LEU:HB3	2.00	0.44
3:C:76:LEU:HA	3:C:76:LEU:HD12	1.59	0.44
3:C:102:ILE:HG22	3:C:107:LEU:HB2	1.99	0.44
3:C:102:ILE:HG21	3:C:107:LEU:HB2	1.99	0.44
1:A:5:PHE:O	1:A:6:ASN:O	2.35	0.43
1:A:112:ILE:O	1:A:122:ALA:HA	2.18	0.43
1:A:146:THR:O	1:A:146:THR:HG22	2.18	0.43
1:A:157:ASP:HA	1:A:160:TYR:HB3	1.99	0.43
1:A:308:SER:CA	1:A:311:TYR:HE1	2.18	0.43
1:A:386:ALA:HB3	1:A:393:ALA:H	1.81	0.43
1:A:512:ILE:O	1:A:513:ASP:C	2.61	0.43
1:A:557:HIS:O	1:A:558:ILE:C	2.61	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:684:LEU:CD1	1:A:685:VAL:HB	2.43	0.43
1:A:719:PHE:CD1	1:A:723:TYR:HD1	2.36	0.43
2:B:84:ASP:C	2:B:86:LEU:H	2.15	0.43
3:C:43:ILE:HG12	3:C:45:PRO:CD	2.48	0.43
3:C:100:GLY:O	3:C:141:LYS:HA	2.18	0.43
1:A:55:GLU:HB2	1:A:68:THR:HG23	1.94	0.43
1:A:78:ASN:HA	1:A:79:PRO:HD2	1.84	0.43
1:A:221:ILE:HG21	1:A:448:LEU:HD13	2.00	0.43
1:A:243:SER:HB3	1:A:245:PHE:CZ	2.53	0.43
1:A:326:ASP:O	1:A:327:VAL:O	2.35	0.43
1:A:347:LYS:O	1:A:351:PHE:CE1	2.71	0.43
1:A:391:ILE:O	1:A:392:ASN:OD1	2.36	0.43
1:A:397:LEU:N	1:A:400:LEU:HB3	2.33	0.43
1:A:412:VAL:HG12	1:A:414:LYS:HD3	2.00	0.43
1:A:438:ASN:ND2	1:A:438:ASN:H	2.16	0.43
1:A:464:ALA:CB	1:A:479:ILE:HD11	2.48	0.43
1:A:476:GLN:O	1:A:478:CYS:N	2.51	0.43
1:A:686:ASP:O	1:A:687:ALA:C	2.61	0.43
1:A:819:ARG:C	1:A:821:TRP:O	2.61	0.43
3:C:34:LEU:HD12	3:C:69:PHE:HE1	1.81	0.43
3:C:41:LEU:O	3:C:41:LEU:CD2	2.65	0.43
3:C:60:GLY:O	3:C:61:GLU:OE1	2.36	0.43
3:C:67:GLU:O	3:C:70:LEU:N	2.50	0.43
1:A:15:VAL:HG21	1:A:18:LYS:HG3	2.00	0.43
1:A:75:GLN:CG	1:A:95:ASN:ND2	2.75	0.43
1:A:141:ARG:HH21	1:A:143:LYS:HD3	1.82	0.43
1:A:167:ARG:O	1:A:168:GLU:O	2.37	0.43
1:A:278:GLN:H	1:A:281:GLU:CB	2.29	0.43
1:A:345:GLU:HG3	1:A:346:GLU:OE1	2.18	0.43
1:A:490:PHE:HD2	1:A:670:PHE:CE1	2.36	0.43
1:A:556:ASN:OD1	1:A:557:HIS:CD2	2.71	0.43
1:A:608:VAL:O	1:A:611:LEU:HA	2.18	0.43
1:A:163:MET:CE	1:A:170:GLN:H	2.30	0.43
1:A:355:ALA:C	1:A:357:ILE:H	2.26	0.43
1:A:360:MET:C	1:A:362:GLU:H	2.25	0.43
1:A:699:VAL:O	1:A:702:GLY:N	2.48	0.43
1:A:815:GLN:HE22	2:B:124:ASP:N	2.01	0.43
2:B:102:PHE:O	2:B:110:LEU:HD22	2.18	0.43
3:C:95:ASP:OD2	3:C:100:GLY:N	2.46	0.43
3:C:107:LEU:HD12	3:C:107:LEU:O	2.19	0.43
1:A:48:ILE:O	1:A:49:GLN:HB3	2.18	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:180:ALA:N	1:A:674:ILE:HD11	2.34	0.43
1:A:215:GLY:C	1:A:216:SER:OG	2.59	0.43
1:A:663:LEU:C	1:A:665:SER:N	2.75	0.43
1:A:694:LEU:HA	1:A:699:VAL:HG11	2.00	0.43
1:A:833:TYR:C	1:A:833:TYR:HD2	2.26	0.43
1:A:837:LYS:HA	1:A:837:LYS:CE	2.48	0.43
3:C:65:PRO:HG3	3:C:68:GLU:OE1	2.17	0.43
1:A:20:MET:HA	1:A:23:GLU:CG	2.46	0.43
1:A:91:MET:C	1:A:92:THR:O	2.58	0.43
1:A:106:ARG:C	1:A:111:LEU:O	2.61	0.43
1:A:164:VAL:C	1:A:165:THR:O	2.59	0.43
1:A:228:LEU:O	1:A:229:GLU:C	2.60	0.43
1:A:625:ARG:O	1:A:625:ARG:HD3	2.19	0.43
2:B:33:ILE:CG1	2:B:34:ASP:H	2.27	0.43
3:C:55:GLY:O	3:C:56:THR:O	2.37	0.43
3:C:67:GLU:O	3:C:68:GLU:C	2.62	0.43
1:A:34:CYS:HB3	1:A:77:MET:N	2.34	0.43
1:A:103:LEU:HA	1:A:106:ARG:HG2	1.99	0.43
1:A:113:TYR:CD1	1:A:113:TYR:N	2.84	0.43
1:A:305:THR:OG1	1:A:306:PRO:CD	2.53	0.43
1:A:307:ASP:N	1:A:311:TYR:OH	2.52	0.43
1:A:504:LYS:CG	1:A:504:LYS:O	2.66	0.43
1:A:505:GLU:O	1:A:507:ILE:N	2.52	0.43
1:A:531:ILE:O	1:A:532:LEU:C	2.61	0.43
2:B:62:LEU:CG	2:B:63:THR:H	2.27	0.43
2:B:113:GLU:O	2:B:114:TYR:C	2.61	0.43
3:C:43:ILE:C	3:C:45:PRO:HD3	2.43	0.43
3:C:89:GLU:OE2	3:C:89:GLU:CA	2.66	0.43
1:A:195:LYS:HE3	1:A:195:LYS:HB3	1.76	0.43
1:A:249:ILE:HG22	1:A:251:ILE:HG22	1.99	0.43
1:A:254:GLY:N	1:A:258:LYS:O	2.49	0.43
1:A:311:TYR:HB2	1:A:358:LEU:HB3	2.01	0.43
1:A:324:ILE:CD1	1:A:325:ASP:N	2.78	0.43
1:A:395:ASP:HB3	1:A:611:LEU:CD2	2.48	0.43
1:A:763:VAL:O	1:A:763:VAL:HG13	2.18	0.43
3:C:106:GLU:CA	3:C:106:GLU:OE1	2.66	0.43
1:A:26:ALA:O	1:A:28:PHE:HB2	2.17	0.43
1:A:49:GLN:N	1:A:58:VAL:CG2	2.80	0.43
1:A:214:LYS:HG2	1:A:215:GLY:H	1.83	0.43
1:A:251:ILE:HA	1:A:262:ALA:C	2.43	0.43
1:A:368:ARG:HD3	1:A:371:GLU:HB3	2.00	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:463:ILE:O	1:A:464:ALA:C	2.60	0.43
1:A:606:GLU:OE1	1:A:607:ASN:N	2.52	0.43
1:A:660:MET:O	1:A:662:ASN:N	2.50	0.43
2:B:28:GLU:O	2:B:29:ALA:HB3	2.19	0.43
1:A:179:GLY:O	1:A:180:ALA:C	2.62	0.43
1:A:250:ARG:O	1:A:250:ARG:CG	2.63	0.43
1:A:340:LEU:CB	1:A:447:THR:CG2	2.97	0.43
1:A:606:GLU:CB	1:A:610:SER:N	2.79	0.43
1:A:721:GLN:NE2	1:A:722:ARG:HA	2.34	0.43
1:A:770:LEU:HA	1:A:770:LEU:HD12	1.72	0.43
1:A:836:VAL:O	1:A:836:VAL:HG13	2.19	0.43
2:B:112:ILE:O	2:B:115:ILE:N	2.51	0.43
2:B:115:ILE:HD12	2:B:145:PHE:CD2	2.54	0.43
1:A:72:ASP:O	1:A:72:ASP:OD2	2.37	0.42
1:A:182:LYS:O	1:A:184:GLU:N	2.50	0.42
1:A:286:ILE:HG23	1:A:287:PHE:H	1.83	0.42
1:A:315:ASN:HD22	1:A:315:ASN:C	2.20	0.42
1:A:340:LEU:CB	1:A:447:THR:HB	2.44	0.42
1:A:487:GLN:O	1:A:488:GLN:C	2.62	0.42
1:A:501:GLU:C	1:A:503:LYS:N	2.70	0.42
1:A:647:THR:O	1:A:650:ALA:HB3	2.19	0.42
1:A:836:VAL:CG1	2:B:32:MET:HE1	2.49	0.42
2:B:34:ASP:OD2	2:B:41:ILE:CD1	2.67	0.42
3:C:46:ARG:O	3:C:50:VAL:HG22	2.19	0.42
3:C:48:GLU:O	3:C:49:ASP:C	2.62	0.42
1:A:49:GLN:O	1:A:58:VAL:HG22	2.19	0.42
1:A:184:GLU:C	1:A:185:ASN:OD1	2.62	0.42
1:A:184:GLU:CG	1:A:188:LYS:NZ	2.81	0.42
1:A:250:ARG:O	1:A:251:ILE:C	2.62	0.42
1:A:352:LYS:O	1:A:355:ALA:N	2.52	0.42
1:A:398:LYS:H	1:A:401:LEU:HD12	1.84	0.42
1:A:455:ASN:HB3	1:A:456:TYR:CE2	2.53	0.42
1:A:461:LEU:HD13	1:A:461:LEU:C	2.43	0.42
1:A:507:ILE:HG22	1:A:759:GLY:CA	2.49	0.42
1:A:715:ILE:HA	1:A:762:LYS:CB	2.40	0.42
3:C:9:ILE:HG23	3:C:10:ASP:N	2.35	0.42
3:C:127:ILE:O	3:C:128:ASN:OD1	2.38	0.42
1:A:100:LEU:C	1:A:102:ASN:H	2.27	0.42
1:A:214:LYS:CG	1:A:215:GLY:H	2.32	0.42
1:A:217:LEU:HB3	1:A:218:GLU:H	1.59	0.42
1:A:270:GLU:O	1:A:271:LYS:C	2.63	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:323:ASN:C	1:A:323:ASN:ND2	2.74	0.42
1:A:495:PHE:CE2	1:A:513:ASP:N	2.87	0.42
2:B:124:ASP:OD1	3:C:25:ARG:CZ	2.67	0.42
3:C:12:LEU:O	3:C:15:VAL:N	2.48	0.42
1:A:191:MET:H	1:A:191:MET:HG2	1.65	0.42
1:A:465:GLY:O	1:A:466:PHE:HB3	2.19	0.42
1:A:523:ASP:C	1:A:527:LYS:HB2	2.44	0.42
1:A:620:VAL:CA	1:A:623:LEU:HD13	2.50	0.42
2:B:129:ASP:OD1	2:B:132:ARG:NH1	2.51	0.42
3:C:135:ASP:O	3:C:136:LEU:C	2.61	0.42
3:C:143:GLU:HG2	3:C:144:GLU:N	2.35	0.42
1:A:104:ARG:C	1:A:106:ARG:N	2.76	0.42
1:A:106:ARG:HE	1:A:111:LEU:HD12	1.78	0.42
1:A:221:ILE:N	1:A:221:ILE:CD1	2.83	0.42
1:A:255:PRO:CD	1:A:256:THR:H	2.31	0.42
1:A:305:THR:HG1	1:A:306:PRO:HD2	1.80	0.42
1:A:367:GLN:OE1	1:A:418:LEU:HB3	2.19	0.42
1:A:532:LEU:HD23	1:A:533:SER:H	1.75	0.42
1:A:571:THR:HG23	1:A:572:ARG:H	1.85	0.42
1:A:829:TRP:HH2	2:B:65:MET:C	2.27	0.42
2:B:131:MET:SD	2:B:135:PHE:HE2	2.42	0.42
3:C:34:LEU:C	3:C:37:VAL:H	2.27	0.42
1:A:2:ASN:CG	1:A:3:ILE:H	2.26	0.42
1:A:26:ALA:CB	1:A:27:PRO:HD3	2.27	0.42
1:A:361:GLY:O	1:A:363:MET:HG3	2.20	0.42
1:A:645:PHE:HD2	1:A:645:PHE:HA	1.66	0.42
1:A:703:ILE:C	1:A:703:ILE:CD1	2.85	0.42
1:A:1:MET:O	1:A:2:ASN:CB	2.67	0.42
1:A:100:LEU:O	1:A:101:ASN:C	2.62	0.42
1:A:119:PHE:CE1	1:A:698:GLY:C	2.98	0.42
1:A:124:ASN:O	1:A:126:TYR:HE1	2.03	0.42
1:A:367:GLN:CA	1:A:418:LEU:HD13	2.50	0.42
1:A:391:ILE:CG2	1:A:611:LEU:HD21	2.46	0.42
1:A:530:GLY:O	1:A:534:ILE:CG2	2.67	0.42
1:A:690:VAL:O	1:A:691:LEU:C	2.63	0.42
1:A:705:ILE:O	1:A:708:LYS:HB2	2.20	0.42
1:A:790:ALA:O	3:C:44:ASN:OD1	2.37	0.42
3:C:129:LEU:HD12	3:C:129:LEU:N	2.32	0.42
1:A:192:TYR:HD1	1:A:193:LEU:N	2.18	0.42
1:A:209:GLU:C	1:A:211:ASP:H	2.28	0.42
1:A:265:GLU:O	1:A:266:THR:HG23	2.20	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:303:LEU:HD11	1:A:384:LYS:CD	2.50	0.42
1:A:519:GLN:O	1:A:521:CYS:N	2.53	0.42
1:A:585:TYR:O	1:A:586:ALA:HB3	2.18	0.42
1:A:623:LEU:HD13	1:A:624:PHE:HE1	1.84	0.42
1:A:814:ILE:HG23	1:A:818:ILE:HD13	2.00	0.42
1:A:827:TRP:HE3	1:A:830:TRP:HB2	1.84	0.42
1:A:829:TRP:HA	1:A:829:TRP:CE3	2.54	0.42
1:A:34:CYS:HB3	1:A:77:MET:H	1.85	0.42
1:A:50:SER:HB2	1:A:52:LYS:H	1.85	0.42
1:A:218:GLU:C	1:A:220:GLN:H	2.28	0.42
1:A:273:ARG:HH22	1:A:281:GLU:HG2	1.85	0.42
1:A:290:ILE:CB	1:A:330:PHE:CE1	3.02	0.42
1:A:368:ARG:C	1:A:370:ARG:N	2.77	0.42
1:A:404:LYS:N	1:A:404:LYS:HD3	2.35	0.42
1:A:527:LYS:HD3	1:A:530:GLY:CA	2.49	0.42
1:A:719:PHE:HD2	1:A:742:SER:OG	2.02	0.42
1:A:804:LEU:HD12	1:A:804:LEU:O	2.20	0.42
1:A:807:GLN:HB3	3:C:22:TRP:CH2	2.54	0.42
1:A:7:ASP:N	1:A:9:ASP:N	2.55	0.42
1:A:107:TYR:O	1:A:109:ALA:N	2.53	0.42
1:A:284:TYR:CE2	1:A:433:TYR:HE2	2.38	0.42
1:A:311:TYR:CA	1:A:362:GLU:OE2	2.53	0.42
1:A:377:ASP:O	1:A:378:GLY:C	2.62	0.42
1:A:406:LYS:O	1:A:409:THR:O	2.38	0.42
1:A:474:PHE:N	1:A:596:TRP:CZ2	2.88	0.42
1:A:513:ASP:O	1:A:514:PHE:C	2.63	0.42
1:A:531:ILE:O	1:A:534:ILE:N	2.53	0.42
1:A:579:HIS:HB3	1:A:592:SER:CB	2.50	0.42
1:A:728:PRO:HG2	1:A:729:ASN:H	1.85	0.42
1:A:731:ILE:HG22	1:A:732:PRO:CD	2.49	0.42
2:B:151:VAL:HA	2:B:154:ILE:HG13	2.02	0.42
2:B:153:MET:SD	2:B:153:MET:C	3.03	0.42
3:C:130:THR:O	3:C:148:LYS:HD3	2.19	0.42
1:A:409:THR:HB	1:A:410:GLU:H	1.57	0.41
1:A:479:ILE:O	1:A:483:ASN:N	2.53	0.41
1:A:491:ASN:HD22	1:A:491:ASN:N	2.17	0.41
3:C:135:ASP:O	3:C:137:GLU:N	2.52	0.41
1:A:144:ARG:HH21	1:A:147:GLU:HG3	1.83	0.41
1:A:337:PHE:CB	1:A:342:PHE:CE2	3.01	0.41
1:A:473:SER:OG	1:A:474:PHE:N	2.52	0.41
1:A:546:ASP:OD1	1:A:597:LEU:HD11	2.20	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:744:LYS:O	1:A:748:GLY:N	2.41	0.41
2:B:136:LYS:HA	2:B:136:LYS:HE3	2.02	0.41
3:C:147:LYS:H	3:C:147:LYS:HG2	1.67	0.41
1:A:26:ALA:CB	1:A:27:PRO:CD	2.70	0.41
1:A:78:ASN:CB	1:A:82:PHE:HB3	2.43	0.41
1:A:79:PRO:C	1:A:81:LYS:N	2.75	0.41
1:A:154:SER:C	1:A:158:ASN:ND2	2.78	0.41
1:A:216:SER:CB	1:A:219:ASP:OD2	2.68	0.41
1:A:247:LYS:CG	1:A:248:PHE:H	2.34	0.41
1:A:273:ARG:HG3	1:A:284:TYR:HE1	1.75	0.41
1:A:328:GLU:HB3	1:A:332:LEU:HG	2.01	0.41
1:A:345:GLU:HG3	1:A:346:GLU:CD	2.45	0.41
1:A:472:ASN:HA	1:A:476:GLN:HG2	2.03	0.41
1:A:487:GLN:O	1:A:490:PHE:HB3	2.20	0.41
1:A:675:ILE:CB	1:A:693:GLN:NE2	2.83	0.41
1:A:723:TYR:HB3	1:A:726:LEU:CD1	2.43	0.41
1:A:777:ARG:O	1:A:780:ARG:N	2.52	0.41
1:A:808:ARG:O	1:A:809:ILE:C	2.63	0.41
1:A:815:GLN:O	1:A:816:ARG:C	2.63	0.41
1:A:77:MET:CG	1:A:98:SER:HA	2.42	0.41
1:A:98:SER:OG	1:A:99:VAL:N	2.52	0.41
1:A:129:LEU:HB2	1:A:131:ILE:CD1	2.49	0.41
1:A:190:ILE:CD1	1:A:218:GLU:HB3	2.38	0.41
1:A:412:VAL:CG1	1:A:413:THR:H	2.28	0.41
1:A:462:ASP:OD2	1:A:463:ILE:N	2.53	0.41
1:A:500:GLU:O	1:A:501:GLU:C	2.63	0.41
1:A:501:GLU:O	1:A:504:LYS:C	2.64	0.41
1:A:549:PHE:O	1:A:550:GLN:C	2.64	0.41
1:A:746:LEU:HD23	1:A:751:MET:CE	2.48	0.41
1:A:802:LYS:HA	1:A:805:GLN:CG	2.49	0.41
1:A:829:TRP:HA	1:A:829:TRP:HE3	1.85	0.41
2:B:111:ASN:O	2:B:112:ILE:C	2.63	0.41
2:B:115:ILE:HD12	2:B:145:PHE:CG	2.55	0.41
3:C:13:LYS:CG	3:C:14:ASP:N	2.84	0.41
3:C:94:PHE:CB	3:C:102:ILE:HD11	2.50	0.41
3:C:122:GLU:O	3:C:123:VAL:C	2.63	0.41
1:A:50:SER:O	1:A:52:LYS:CA	2.68	0.41
1:A:95:ASN:OD1	1:A:98:SER:CB	2.59	0.41
1:A:194:ALA:HA	1:A:197:ALA:CB	2.49	0.41
1:A:304:ILE:HD13	1:A:311:TYR:CE2	2.56	0.41
1:A:333:CYS:SG	1:A:334:ASP:N	2.92	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:345:GLU:H	1:A:346:GLU:CD	2.29	0.41
1:A:368:ARG:CD	1:A:373:GLN:HB2	2.51	0.41
1:A:439:TRP:CD1	1:A:623:LEU:CG	3.02	0.41
1:A:514:PHE:O	1:A:516:MET:N	2.53	0.41
1:A:821:TRP:CE3	1:A:822:LEU:HB2	2.55	0.41
2:B:76:THR:C	2:B:78:PHE:H	2.29	0.41
3:C:26:ASP:OD2	3:C:26:ASP:C	2.60	0.41
1:A:153:PHE:HB3	1:A:192:TYR:CE2	2.56	0.41
1:A:162:ASN:O	1:A:166:ASP:HB2	2.20	0.41
1:A:223:GLN:O	1:A:224:ALA:C	2.64	0.41
1:A:337:PHE:CD2	1:A:342:PHE:CZ	3.09	0.41
1:A:448:LEU:H	1:A:448:LEU:HG	1.66	0.41
1:A:495:PHE:HA	1:A:514:PHE:CE2	2.55	0.41
1:A:606:GLU:HB2	1:A:609:VAL:C	2.45	0.41
2:B:69:ALA:N	2:B:70:PRO:HD3	2.34	0.41
3:C:127:ILE:O	3:C:128:ASN:CB	2.68	0.41
3:C:136:LEU:HB2	3:C:137:GLU:H	1.77	0.41
1:A:486:LEU:HD12	1:A:486:LEU:HA	1.68	0.41
3:C:50:VAL:O	3:C:53:VAL:HG23	2.20	0.41
3:C:129:LEU:C	3:C:131:ASP:H	2.29	0.41
1:A:20:MET:H	1:A:20:MET:HG2	1.68	0.41
1:A:29:ASP:C	1:A:33:ASN:ND2	2.78	0.41
1:A:85:LEU:HD23	1:A:85:LEU:N	2.36	0.41
1:A:113:TYR:HE2	1:A:151:HIS:CD2	2.39	0.41
1:A:191:MET:SD	1:A:218:GLU:OE1	2.79	0.41
1:A:298:LEU:C	1:A:300:GLU:N	2.55	0.41
1:A:353:CYS:O	1:A:356:SER:OG	2.38	0.41
1:A:359:HIS:O	1:A:362:GLU:CG	2.62	0.41
1:A:445:ASN:HD22	1:A:446:ARG:H	1.68	0.41
1:A:532:LEU:HD23	1:A:533:SER:OG	2.19	0.41
1:A:569:LYS:NZ	1:A:569:LYS:CB	2.68	0.41
1:A:619:LEU:H	1:A:619:LEU:CD2	2.25	0.41
1:A:785:ILE:C	1:A:789:GLN:HG2	2.43	0.41
2:B:41:ILE:HD11	2:B:43:ILE:O	2.20	0.41
2:B:103:ASP:HB2	2:B:110:LEU:HD22	2.02	0.41
3:C:43:ILE:CG1	3:C:45:PRO:HD3	2.49	0.41
3:C:70:LEU:HD23	3:C:71:PRO:HG3	2.02	0.41
3:C:104:GLY:O	3:C:105:ALA:C	2.62	0.41
1:A:4:ASP:C	1:A:5:PHE:CG	2.89	0.41
1:A:17:ARG:C	1:A:19:LYS:N	2.77	0.41
1:A:24:GLN:O	1:A:24:GLN:HG2	2.21	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:53:GLY:HA3	1:A:54:GLU:CD	2.46	0.41
1:A:54:GLU:O	1:A:55:GLU:C	2.63	0.41
1:A:226:PRO:C	1:A:228:LEU:O	2.64	0.41
1:A:277:GLN:HE22	1:A:282:ARG:HA	1.84	0.41
1:A:297:GLU:CG	1:A:298:LEU:CD1	2.86	0.41
1:A:308:SER:C	1:A:310:LEU:N	2.77	0.41
1:A:324:ILE:HG12	1:A:325:ASP:N	2.36	0.41
1:A:340:LEU:HG	1:A:447:THR:HG22	2.02	0.41
1:A:397:LEU:C	1:A:398:LYS:HG3	2.45	0.41
1:A:440:LEU:O	1:A:444:VAL:HG13	2.20	0.41
1:A:472:ASN:HD21	1:A:590:PRO:HD2	1.86	0.41
1:A:535:LEU:HD21	1:A:600:ASN:HD21	1.81	0.41
1:A:565:THR:HB	1:A:566:LYS:H	1.58	0.41
2:B:77:MET:HG3	2:B:81:ILE:HG23	2.03	0.41
2:B:94:THR:HG22	2:B:95:ILE:N	2.35	0.41
2:B:117:ASP:OD1	2:B:117:ASP:O	2.38	0.41
1:A:124:ASN:HB3	1:A:126:TYR:CE1	2.56	0.41
1:A:220:GLN:HB3	1:A:221:ILE:H	1.72	0.41
1:A:290:ILE:HG22	1:A:330:PHE:CE1	2.55	0.41
1:A:296:PRO:HD2	1:A:299:ASN:HB2	2.03	0.41
1:A:328:GLU:H	1:A:328:GLU:HG3	1.52	0.41
1:A:392:ASN:O	1:A:395:ASP:HB2	2.21	0.41
1:A:675:ILE:CB	1:A:693:GLN:CD	2.94	0.41
3:C:69:PHE:O	3:C:70:LEU:C	2.64	0.41
3:C:90:ALA:O	3:C:94:PHE:HD1	2.04	0.41
1:A:14:ALA:C	1:A:15:VAL:HG13	2.46	0.40
1:A:32:LYS:HZ1	1:A:47:GLU:CG	2.34	0.40
1:A:151:HIS:CD2	1:A:153:PHE:CZ	3.09	0.40
1:A:334:ASP:OD2	1:A:334:ASP:C	2.63	0.40
1:A:367:GLN:HG2	1:A:418:LEU:CG	2.49	0.40
1:A:370:ARG:NH2	1:A:371:GLU:OE1	2.55	0.40
1:A:398:LYS:O	1:A:403:PRO:N	2.54	0.40
1:A:447:THR:HG23	1:A:448:LEU:H	1.86	0.40
2:B:62:LEU:N	2:B:62:LEU:CD2	2.84	0.40
1:A:113:TYR:O	1:A:150:PRO:CB	2.70	0.40
1:A:124:ASN:CG	1:A:126:TYR:CD1	3.00	0.40
1:A:134:ASP:C	1:A:136:VAL:N	2.69	0.40
1:A:357:ILE:CD1	1:A:358:LEU:N	2.85	0.40
1:A:613:ALA:C	1:A:614:VAL:HG12	2.45	0.40
1:A:731:ILE:CG2	1:A:732:PRO:CD	2.96	0.40
1:A:813:VAL:HG11	2:B:98:ALA:HB2	2.03	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:116:GLU:HA	3:C:117:ARG:HH21	1.86	0.40
1:A:100:LEU:HD12	1:A:103:LEU:CD1	2.51	0.40
1:A:185:ASN:O	1:A:189:VAL:N	2.35	0.40
1:A:222:ILE:H	1:A:222:ILE:HD13	1.87	0.40
1:A:311:TYR:O	1:A:311:TYR:CD1	2.74	0.40
1:A:338:ASP:N	1:A:342:PHE:HE2	2.20	0.40
1:A:352:LYS:O	1:A:356:SER:N	2.39	0.40
1:A:484:GLU:HA	1:A:585:TYR:CE2	2.55	0.40
1:A:493:HIS:NE2	1:A:668:PRO:HG2	2.37	0.40
1:A:686:ASP:HB3	1:A:689:LEU:HB3	2.02	0.40
1:A:802:LYS:C	1:A:804:LEU:N	2.74	0.40
1:A:836:VAL:O	1:A:838:PRO:CD	2.67	0.40
2:B:78:PHE:C	2:B:80:SER:N	2.78	0.40
1:A:7:ASP:HA	1:A:8:PRO:HA	1.88	0.40
1:A:17:ARG:O	1:A:18:LYS:C	2.64	0.40
1:A:18:LYS:O	1:A:19:LYS:CG	2.70	0.40
1:A:184:GLU:CD	1:A:188:LYS:NZ	2.79	0.40
1:A:233:ASN:HB2	1:A:245:PHE:HE1	1.87	0.40
1:A:290:ILE:CB	1:A:330:PHE:CZ	2.79	0.40
1:A:320:THR:O	1:A:321:VAL:HG13	2.21	0.40
1:A:337:PHE:C	1:A:342:PHE:HE2	2.27	0.40
1:A:367:GLN:NE2	1:A:368:ARG:N	2.70	0.40
1:A:375:GLU:OE2	1:A:377:ASP:HB2	2.21	0.40
1:A:394:GLY:C	1:A:396:LEU:N	2.77	0.40
1:A:405:VAL:O	1:A:411:MET:HA	2.22	0.40
1:A:613:ALA:C	1:A:614:VAL:CG1	2.94	0.40
1:A:789:GLN:O	1:A:793:ARG:HG2	2.21	0.40
1:A:829:TRP:O	2:B:82:PHE:HE2	2.05	0.40
2:B:94:THR:O	2:B:97:ASN:HB2	2.21	0.40
3:C:16:PHE:C	3:C:16:PHE:CD1	2.99	0.40
3:C:69:PHE:CD2	3:C:69:PHE:C	3.00	0.40
1:A:10:PHE:O	1:A:11:GLN:C	2.64	0.40
1:A:48:ILE:CA	1:A:58:VAL:HG11	2.51	0.40
1:A:48:ILE:O	1:A:58:VAL:HG11	2.21	0.40
1:A:106:ARG:CZ	1:A:111:LEU:HD12	2.50	0.40
1:A:118:LEU:N	1:A:118:LEU:CD1	2.84	0.40
1:A:119:PHE:HE1	1:A:698:GLY:C	2.30	0.40
1:A:231:TYR:HB3	1:A:437:PHE:CD1	2.57	0.40
1:A:341:GLY:O	1:A:443:ARG:CZ	2.70	0.40
1:A:367:GLN:OE1	1:A:372:GLU:O	2.39	0.40
1:A:457:TYR:CD2	1:A:457:TYR:N	2.89	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:464:ALA:CB	1:A:479:ILE:CD1	2.99	0.40
1:A:474:PHE:N	1:A:596:TRP:CE2	2.90	0.40
1:A:491:ASN:HB2	1:A:515:GLY:HA2	2.02	0.40
1:A:537:GLU:C	1:A:539:CYS:N	2.77	0.40
1:A:765:PHE:HB3	1:A:769:VAL:HG11	2.01	0.40
1:A:795:TYR:CD1	3:C:126:ILE:CD1	3.04	0.40
2:B:151:VAL:O	2:B:154:ILE:N	2.55	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	784/838 (94%)	329 (42%)	224 (29%)	231 (30%)	0	0
2	B	120/133 (90%)	69 (58%)	31 (26%)	20 (17%)	0	1
3	C	153/156 (98%)	77 (50%)	42 (28%)	34 (22%)	0	0
All	All	1057/1127 (94%)	475 (45%)	297 (28%)	285 (27%)	0	0

All (285) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2	ASN
1	A	5	PHE
1	A	7	ASP
1	A	9	ASP
1	A	11	GLN
1	A	14	ALA
1	A	25	THR
1	A	27	PRO
1	A	29	ASP
1	A	39	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	40	LYS
1	A	49	GLN
1	A	50	SER
1	A	51	SER
1	A	52	LYS
1	A	54	GLU
1	A	60	ILE
1	A	61	VAL
1	A	63	ASP
1	A	64	ASN
1	A	66	THR
1	A	78	ASN
1	A	99	VAL
1	A	100	LEU
1	A	101	ASN
1	A	110	GLY
1	A	126	TYR
1	A	138	ALA
1	A	139	LYS
1	A	149	PRO
1	A	151	HIS
1	A	167	ARG
1	A	168	GLU
1	A	172	CYS
1	A	177	GLU
1	A	180	ALA
1	A	189	VAL
1	A	221	ILE
1	A	229	GLU
1	A	234	ALA
1	A	235	LYS
1	A	239	ASN
1	A	243	SER
1	A	248	PHE
1	A	250	ARG
1	A	260	ALA
1	A	264	ILE
1	A	273	ARG
1	A	284	TYR
1	A	286	ILE
1	A	297	GLU
1	A	301	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	302	MET
1	A	306	PRO
1	A	308	SER
1	A	321	VAL
1	A	323	ASN
1	A	325	ASP
1	A	327	VAL
1	A	338	ASP
1	A	363	MET
1	A	364	LYS
1	A	365	PHE
1	A	372	GLU
1	A	393	ALA
1	A	409	THR
1	A	418	LEU
1	A	442	LYS
1	A	450	THR
1	A	451	LYS
1	A	455	ASN
1	A	470	ASP
1	A	488	GLN
1	A	501	GLU
1	A	513	ASP
1	A	536	GLU
1	A	538	GLU
1	A	546	ASP
1	A	550	GLN
1	A	554	TYR
1	A	556	ASN
1	A	560	LYS
1	A	562	ARG
1	A	570	PRO
1	A	578	ALA
1	A	579	HIS
1	A	580	PHE
1	A	594	ALA
1	A	601	LYS
1	A	607	ASN
1	A	612	LEU
1	A	674	ILE
1	A	675	ILE
1	A	680	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	685	VAL
1	A	686	ASP
1	A	697	ASN
1	A	761	THR
1	A	825	ARG
2	B	24	GLN
2	B	42	ASP
2	B	46	LEU
2	B	66	LEU
2	B	73	LEU
2	B	76	THR
2	B	112	ILE
2	B	125	ASN
3	C	7	ASP
3	C	53	VAL
3	C	55	GLY
3	C	56	THR
3	C	66	PHE
3	C	67	GLU
3	C	68	GLU
3	C	79	CYS
3	C	84	PHE
3	C	92	LYS
3	C	122	GLU
3	C	123	VAL
3	C	134	GLU
3	C	135	ASP
3	C	136	LEU
3	C	143	GLU
3	C	144	GLU
3	C	145	PHE
1	A	3	ILE
1	A	12	TYR
1	A	35	TRP
1	A	56	ILE
1	A	62	SER
1	A	84	LYS
1	A	88	MET
1	A	140	TYR
1	A	190	ILE
1	A	192	TYR
1	A	193	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	209	GLU
1	A	249	ILE
1	A	259	ILE
1	A	263	ASP
1	A	268	LEU
1	A	270	GLU
1	A	289	GLN
1	A	299	ASN
1	A	304	ILE
1	A	307	ASP
1	A	309	GLY
1	A	311	TYR
1	A	328	GLU
1	A	331	LYS
1	A	333	CYS
1	A	335	GLU
1	A	337	PHE
1	A	341	GLY
1	A	342	PHE
1	A	353	CYS
1	A	377	ASP
1	A	378	GLY
1	A	386	ALA
1	A	391	ILE
1	A	398	LYS
1	A	419	GLN
1	A	421	VAL
1	A	432	LEU
1	A	444	VAL
1	A	458	ILE
1	A	464	ALA
1	A	477	LEU
1	A	487	GLN
1	A	510	GLU
1	A	537	GLU
1	A	555	GLN
1	A	557	HIS
1	A	608	VAL
1	A	614	VAL
1	A	668	PRO
1	A	678	GLU
1	A	687	ALA

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	693	GLN
1	A	721	GLN
1	A	759	GLY
1	A	760	THR
1	A	766	LYS
1	A	826	ASN
1	A	828	GLN
2	B	27	LYS
2	B	28	GLU
2	B	41	ILE
3	C	31	ALA
3	C	32	PHE
3	C	52	ALA
3	C	82	GLY
3	C	97	GLU
3	C	125	GLU
3	C	128	ASN
3	C	130	THR
3	C	131	ASP
1	A	6	ASN
1	A	26	ALA
1	A	65	SER
1	A	75	GLN
1	A	130	PRO
1	A	164	VAL
1	A	218	GLU
1	A	224	ALA
1	A	272	SER
1	A	330	PHE
1	A	366	LYS
1	A	400	LEU
1	A	420	GLN
1	A	427	ALA
1	A	466	PHE
1	A	528	PRO
1	A	694	LEU
1	A	695	GLN
1	A	712	SER
2	B	116	LYS
3	C	80	GLU
3	C	105	ALA
3	C	155	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	28	PHE
1	A	37	PRO
1	A	93	TYR
1	A	111	LEU
1	A	153	PHE
1	A	171	SER
1	A	176	GLY
1	A	251	ILE
1	A	254	GLY
1	A	279	SER
1	A	358	LEU
1	A	486	LEU
1	A	499	GLN
1	A	500	GLU
1	A	520	MET
1	A	574	ASN
1	A	664	TYR
1	A	682	PRO
1	A	711	PRO
1	A	753	PRO
1	A	834	ALA
2	B	149	ARG
3	C	34	LEU
1	A	20	MET
1	A	76	GLN
1	A	81	LYS
1	A	298	LEU
1	A	305	THR
1	A	379	THR
1	A	430	LYS
1	A	433	TYR
1	A	456	TYR
1	A	508	GLN
1	A	563	MET
1	A	621	ALA
1	A	661	LYS
1	A	822	LEU
2	B	33	ILE
2	B	128	LYS
2	B	148	VAL
3	C	11	ASP
1	A	219	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	225	ASN
1	A	441	VAL
1	A	453	LYS
1	A	506	GLY
1	A	609	VAL
1	A	676	PRO
2	B	83	SER
3	C	110	VAL
3	C	142	TYR
1	A	403	PRO
2	B	39	GLY
1	A	129	LEU
1	A	255	PRO
2	B	81	ILE
1	A	131	ILE
1	A	558	ILE
1	A	620	VAL
1	A	681	GLN
2	B	123	GLY
1	A	112	ILE
1	A	573	PRO
1	A	727	ALA
1	A	181	GLY

5.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	671/734 (91%)	437 (65%)	234 (35%)	0	0
2	B	102/118 (86%)	70 (69%)	32 (31%)	0	1
3	C	131/132 (99%)	87 (66%)	44 (34%)	0	1
All	All	904/984 (92%)	594 (66%)	310 (34%)	0	1

All (310) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1	MET
1	A	3	ILE
1	A	13	LEU
1	A	18	LYS
1	A	20	MET
1	A	21	MET
1	A	22	LYS
1	A	34	CYS
1	A	38	ASP
1	A	41	GLU
1	A	43	PHE
1	A	45	SER
1	A	47	GLU
1	A	50	SER
1	A	51	SER
1	A	54	GLU
1	A	56	ILE
1	A	58	VAL
1	A	60	ILE
1	A	66	THR
1	A	67	ARG
1	A	69	VAL
1	A	73	ASP
1	A	77	MET
1	A	81	LYS
1	A	84	LYS
1	A	85	LEU
1	A	86	GLU
1	A	88	MET
1	A	98	SER
1	A	103	LEU
1	A	104	ARG
1	A	108	THR
1	A	118	LEU
1	A	126	TYR
1	A	129	LEU
1	A	134	ASP
1	A	135	SER
1	A	139	LYS
1	A	140	TYR
1	A	141	ARG
1	A	144	ARG
1	A	152	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	154	SER
1	A	160	TYR
1	A	163	MET
1	A	166	ASP
1	A	168	GLU
1	A	170	GLN
1	A	172	CYS
1	A	175	THR
1	A	177	GLU
1	A	182	LYS
1	A	183	THR
1	A	188	LYS
1	A	191	MET
1	A	193	LEU
1	A	198	CYS
1	A	207	GLU
1	A	212	GLN
1	A	214	LYS
1	A	216	SER
1	A	217	LEU
1	A	218	GLU
1	A	220	GLN
1	A	221	ILE
1	A	222	ILE
1	A	223	GLN
1	A	231	TYR
1	A	233	ASN
1	A	236	THR
1	A	238	ARG
1	A	245	PHE
1	A	251	ILE
1	A	252	HIS
1	A	253	PHE
1	A	255	PRO
1	A	256	THR
1	A	258	LYS
1	A	264	ILE
1	A	266	THR
1	A	268	LEU
1	A	269	LEU
1	A	273	ARG
1	A	274	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	297	GLU
1	A	301	VAL
1	A	302	MET
1	A	303	LEU
1	A	305	THR
1	A	311	TYR
1	A	312	SER
1	A	315	ASN
1	A	321	VAL
1	A	323	ASN
1	A	324	ILE
1	A	329	GLU
1	A	330	PHE
1	A	332	LEU
1	A	337	PHE
1	A	338	ASP
1	A	340	LEU
1	A	345	GLU
1	A	346	GLU
1	A	350	MET
1	A	353	CYS
1	A	357	ILE
1	A	360	MET
1	A	362	GLU
1	A	363	MET
1	A	365	PHE
1	A	366	LYS
1	A	367	GLN
1	A	368	ARG
1	A	369	PRO
1	A	370	ARG
1	A	371	GLU
1	A	379	THR
1	A	385	VAL
1	A	389	CYS
1	A	396	LEU
1	A	398	LYS
1	A	400	LEU
1	A	401	LEU
1	A	402	LYS
1	A	404	LYS
1	A	409	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	413	THR
1	A	414	LYS
1	A	418	LEU
1	A	423	ASN
1	A	429	SER
1	A	439	TRP
1	A	443	ARG
1	A	445	ASN
1	A	447	THR
1	A	448	LEU
1	A	449	ASP
1	A	451	LYS
1	A	454	ARG
1	A	462	ASP
1	A	463	ILE
1	A	469	PHE
1	A	477	LEU
1	A	485	ARG
1	A	488	GLN
1	A	500	GLU
1	A	504	LYS
1	A	507	ILE
1	A	508	GLN
1	A	509	TRP
1	A	512	ILE
1	A	514	PHE
1	A	517	ASP
1	A	519	GLN
1	A	521	CYS
1	A	523	ASP
1	A	524	LEU
1	A	526	GLU
1	A	531	ILE
1	A	532	LEU
1	A	534	ILE
1	A	535	LEU
1	A	543	LYS
1	A	550	GLN
1	A	551	ASP
1	A	552	TYR
1	A	563	MET
1	A	569	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	570	PRO
1	A	571	THR
1	A	572	ARG
1	A	573	PRO
1	A	580	PHE
1	A	589	VAL
1	A	593	ILE
1	A	597	LEU
1	A	599	LYS
1	A	601	LYS
1	A	602	ASP
1	A	606	GLU
1	A	614	VAL
1	A	617	GLU
1	A	619	LEU
1	A	623	LEU
1	A	645	PHE
1	A	646	GLN
1	A	648	ILE
1	A	654	GLU
1	A	656	LEU
1	A	666	THR
1	A	678	GLU
1	A	685	VAL
1	A	690	VAL
1	A	691	LEU
1	A	693	GLN
1	A	697	ASN
1	A	699	VAL
1	A	703	ILE
1	A	706	CYS
1	A	708	LYS
1	A	713	ARG
1	A	714	LEU
1	A	715	ILE
1	A	717	SER
1	A	720	LYS
1	A	722	ARG
1	A	724	SER
1	A	737	ASP
1	A	751	MET
1	A	755	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	760	THR
1	A	764	PHE
1	A	766	LYS
1	A	769	VAL
1	A	770	LEU
1	A	778	ASP
1	A	779	GLU
1	A	781	LEU
1	A	783	LYS
1	A	792	ILE
1	A	797	ILE
1	A	804	LEU
1	A	813	VAL
1	A	817	ASN
1	A	818	ILE
1	A	820	LYS
1	A	822	LEU
1	A	823	VAL
1	A	830	TRP
1	A	832	LEU
1	A	836	VAL
1	A	837	LYS
1	A	838	PRO
2	B	24	GLN
2	B	27	LYS
2	B	31	THR
2	B	33	ILE
2	B	38	ASP
2	B	40	PHE
2	B	41	ILE
2	B	45	ASP
2	B	47	LYS
2	B	56	THR
2	B	63	THR
2	B	73	LEU
2	B	77	MET
2	B	81	ILE
2	B	83	SER
2	B	84	ASP
2	B	85	LYS
2	B	86	LEU
2	B	90	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
2	B	92	GLU
2	B	95	ILE
2	B	97	ASN
2	B	108	LYS
2	B	110	LEU
2	B	115	ILE
2	B	125	ASN
2	B	127	ASN
2	B	128	LYS
2	B	136	LYS
2	B	137	GLU
2	B	153	MET
2	B	155	LYS
3	C	3	LYS
3	C	4	LEU
3	C	6	GLN
3	C	7	ASP
3	C	9	ILE
3	C	10	ASP
3	C	11	ASP
3	C	18	LEU
3	C	21	PHE
3	C	33	LYS
3	C	34	LEU
3	C	37	VAL
3	C	41	LEU
3	C	43	ILE
3	C	50	VAL
3	C	51	PHE
3	C	59	MET
3	C	61	GLU
3	C	64	LEU
3	C	67	GLU
3	C	70	LEU
3	C	73	TYR
3	C	76	LEU
3	C	77	MET
3	C	83	THR
3	C	88	MET
3	C	89	GLU
3	C	93	THR
3	C	96	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
3	C	99	GLN
3	C	102	ILE
3	C	106	GLU
3	C	107	LEU
3	C	111	LEU
3	C	117	ARG
3	C	123	VAL
3	C	124	ASP
3	C	126	ILE
3	C	129	LEU
3	C	131	ASP
3	C	133	GLN
3	C	135	ASP
3	C	136	LEU
3	C	147	LYS

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (40) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2	ASN
1	A	24	GLN
1	A	33	ASN
1	A	90	ASN
1	A	95	ASN
1	A	102	ASN
1	A	124	ASN
1	A	158	ASN
1	A	162	ASN
1	A	212	GLN
1	A	220	GLN
1	A	239	ASN
1	A	240	ASN
1	A	252	HIS
1	A	323	ASN
1	A	445	ASN
1	A	472	ASN
1	A	480	ASN
1	A	483	ASN
1	A	487	GLN
1	A	491	ASN
1	A	508	GLN
1	A	519	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	557	HIS
1	A	574	ASN
1	A	646	GLN
1	A	662	ASN
1	A	669	HIS
1	A	681	GLN
1	A	697	ASN
1	A	721	GLN
1	A	789	GLN
1	A	805	GLN
1	A	807	GLN
1	A	815	GLN
2	B	24	GLN
2	B	97	ASN
2	B	111	ASN
3	C	81	GLN
3	C	99	GLN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

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

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

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	802/838 (95%)	0.20	12 (1%) 72 53	0, 45, 83, 97	0
2	B	126/133 (94%)	0.36	6 (4%) 35 24	0, 19, 87, 100	0
3	C	155/156 (99%)	-0.13	2 (1%) 75 56	0, 16, 38, 48	0
All	All	1083/1127 (96%)	0.17	20 (1%) 67 48	0, 38, 84, 100	0

All (20) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
2	B	34	ASP	3.4
3	C	122	GLU	3.4
1	A	161	GLN	3.1
2	B	70	PRO	2.8
1	A	27	PRO	2.7
3	C	77	MET	2.7
1	A	468	ILE	2.5
2	B	42	ASP	2.4
1	A	38	ASP	2.4
1	A	339	ILE	2.4
2	B	69	ALA	2.4
1	A	337	PHE	2.3
1	A	35	TRP	2.2
1	A	607	ASN	2.1
2	B	33	ILE	2.1
1	A	77	MET	2.1
1	A	675	ILE	2.1
1	A	61	VAL	2.1
2	B	71	GLY	2.1
1	A	397	LEU	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(Å ²)	Q<0.9
4	CA	C	1	1/1	0.96	0.17	23,23,23,23	0

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.