



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 7, 2026 – 01:20 AM UTC

PDB ID : 1HKG / pdb_00001hkg
Title : STRUCTURAL DYNAMICS OF YEAST HEXOKINASE DURING CATALYSIS
Authors : Bennett Jr., W.S.; Steitz, T.A.
Deposited on : 1980-12-22
Resolution : 3.50 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.0
Xtriage (Phenix)	:	NOT EXECUTED
EDS	:	NOT EXECUTED
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

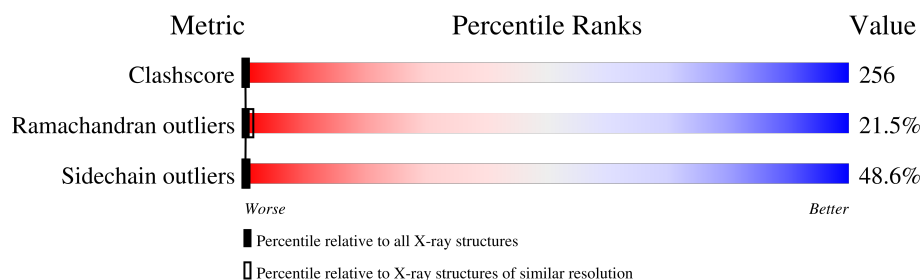
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.50 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	190562	1140 (3.54-3.46)
Ramachandran outliers	187476	1113 (3.54-3.46)
Sidechain outliers	187428	1114 (3.54-3.46)

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

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	457	

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3298 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 HEXOKINASE A.

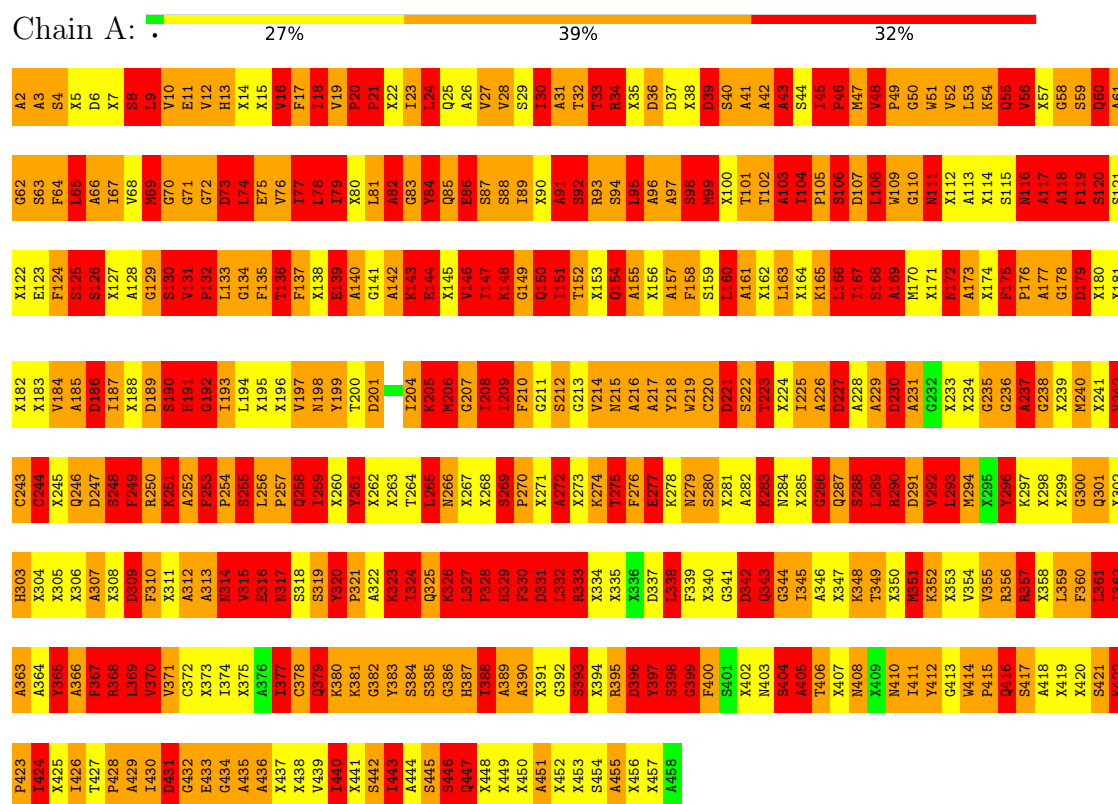
Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	457	3298	2131	543	611	13	0	0	0

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. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

Note EDS was not executed.

• Molecule 1: HEXOKINASE A



4 Data and refinement statistics

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

Property	Value	Source
Space group	P 21 21 21	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	144.80Å 78.80Å 61.90Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	(Not available) – 3.50	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	(Not available) ((Not available)-3.50)	Depositor
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
Refinement program	PROLSQ	Depositor
R, R_{free}	(Not available) , (Not available)	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	3298	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	0.0	wwPDB-VP

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	4.24	477/2729 (17.5%)	2.91	277/3600 (7.7%)

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	2

All (477) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	51	TRP	NE1-CE2	59.18	2.02	1.37
1	A	109	TRP	NE1-CE2	-35.17	0.98	1.37
1	A	191	HIS	CE1-NE2	33.01	1.65	1.32
1	A	387	HIS	CE1-NE2	-29.83	1.02	1.32
1	A	45	ILE	N-CA	27.80	1.66	1.46
1	A	219	TRP	NE1-CE2	24.56	1.64	1.37
1	A	109	TRP	CZ3-CH2	-21.23	0.87	1.40
1	A	303	HIS	CE1-NE2	21.02	1.53	1.32
1	A	13	HIS	CE1-NE2	-20.86	1.11	1.32
1	A	414	TRP	NE1-CE2	19.96	1.59	1.37
1	A	329	HIS	CE1-NE2	-18.67	1.13	1.32
1	A	51	TRP	CZ3-CH2	-17.74	0.96	1.40
1	A	249	PHE	CE2-CZ	16.71	1.88	1.38
1	A	414	TRP	CZ3-CH2	16.67	1.82	1.40
1	A	199	TYR	CE2-CZ	15.86	1.76	1.38
1	A	49	PRO	CA-C	-15.84	1.32	1.52
1	A	276	PHE	CE2-CZ	15.08	1.83	1.38
1	A	431	ASP	N-CA	14.92	1.65	1.46
1	A	365	TYR	CE2-CZ	13.21	1.70	1.38
1	A	13	HIS	ND1-CE1	-12.43	1.20	1.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	411	ILE	CA-CB	-12.40	1.39	1.54
1	A	101	THR	C-N	-12.37	1.20	1.33
1	A	412	TYR	CE2-CZ	12.34	1.67	1.38
1	A	423	PRO	C-O	12.04	1.39	1.24
1	A	104	ILE	N-CA	-11.99	1.31	1.46
1	A	360	PHE	CA-C	-11.54	1.40	1.53
1	A	175	PHE	CE2-CZ	11.37	1.72	1.38
1	A	400	PHE	CE2-CZ	11.24	1.72	1.38
1	A	333	ARG	NE-CZ	11.21	1.45	1.33
1	A	277	GLU	CD-OE1	-11.06	1.04	1.25
1	A	64	PHE	CA-C	-10.98	1.39	1.52
1	A	131	VAL	CA-C	10.85	1.64	1.52
1	A	74	LEU	C-O	10.76	1.36	1.24
1	A	435	ALA	N-CA	10.68	1.59	1.46
1	A	140	ALA	N-CA	10.60	1.59	1.46
1	A	360	PHE	C-O	-10.59	1.13	1.23
1	A	19	VAL	N-CA	10.56	1.54	1.46
1	A	46	PRO	N-CA	10.50	1.60	1.47
1	A	310	PHE	CE2-CZ	10.43	1.70	1.38
1	A	97	ALA	N-CA	10.31	1.58	1.46
1	A	103	ALA	CA-C	-10.24	1.39	1.52
1	A	110	GLY	C-O	10.22	1.35	1.24
1	A	150	GLN	CG-CD	-10.22	1.26	1.52
1	A	47	MET	N-CA	10.20	1.59	1.46
1	A	366	ALA	CA-C	10.18	1.66	1.52
1	A	228	ALA	C-O	10.11	1.35	1.23
1	A	296	TYR	CE2-CZ	10.09	1.62	1.38
1	A	355	VAL	C-O	10.09	1.35	1.24
1	A	315	VAL	CA-C	10.07	1.67	1.52
1	A	32	THR	CA-C	-10.06	1.40	1.52
1	A	86	GLU	C-O	10.03	1.36	1.24
1	A	363	ALA	CA-C	-10.01	1.41	1.53
1	A	49	PRO	CA-CB	-9.91	1.39	1.53
1	A	422	LYS	C-O	-9.89	1.12	1.24
1	A	316	GLU	N-CA	9.79	1.57	1.45
1	A	168	SER	CA-C	9.78	1.58	1.52
1	A	243	CYS	N-CA	9.69	1.59	1.46
1	A	20	PRO	CA-C	-9.60	1.43	1.52
1	A	236	GLY	CA-C	9.60	1.65	1.51
1	A	432	GLY	CA-C	9.55	1.63	1.51
1	A	367	PHE	N-CA	9.47	1.58	1.46
1	A	124	PHE	CE2-CZ	9.46	1.67	1.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	118	ALA	C-O	-9.37	1.12	1.24
1	A	326	LYS	C-O	9.37	1.36	1.24
1	A	209	ILE	N-CA	9.36	1.56	1.46
1	A	314	ASN	N-CA	9.36	1.60	1.46
1	A	205	LYS	C-O	9.22	1.36	1.24
1	A	191	HIS	CD2-NE2	9.17	1.48	1.37
1	A	199	TYR	N-CA	-9.16	1.35	1.46
1	A	431	ASP	CA-C	9.13	1.65	1.52
1	A	432	GLY	N-CA	8.96	1.56	1.45
1	A	135	PHE	N-CA	8.96	1.57	1.46
1	A	400	PHE	N-CA	8.95	1.56	1.46
1	A	64	PHE	CE2-CZ	8.95	1.65	1.38
1	A	399	GLY	CA-C	8.90	1.64	1.51
1	A	250	ARG	CZ-NH2	8.89	1.45	1.33
1	A	252	ALA	CA-C	8.87	1.65	1.52
1	A	277	GLU	C-O	-8.84	1.12	1.24
1	A	428	PRO	CB-CG	8.84	1.93	1.49
1	A	185	ALA	CA-C	-8.83	1.41	1.52
1	A	363	ALA	CA-CB	-8.82	1.40	1.53
1	A	399	GLY	N-CA	8.80	1.58	1.45
1	A	41	ALA	CA-C	8.78	1.63	1.53
1	A	130	SER	C-O	8.71	1.34	1.24
1	A	445	SER	N-CA	-8.71	1.36	1.46
1	A	414	TRP	CG-CD2	-8.71	1.28	1.43
1	A	83	GLY	C-O	8.69	1.35	1.23
1	A	362	ILE	C-N	-8.65	1.22	1.33
1	A	257	PRO	CB-CG	8.61	1.92	1.49
1	A	331	ASP	CG-OD1	8.61	1.41	1.25
1	A	109	TRP	C-O	8.59	1.35	1.24
1	A	29	SER	C-O	-8.50	1.12	1.24
1	A	387	HIS	CD2-NE2	-8.49	1.28	1.37
1	A	240	MET	SD-CE	8.45	2.00	1.79
1	A	279	ASN	N-CA	8.44	1.57	1.45
1	A	253	PHE	N-CA	8.35	1.57	1.46
1	A	434	GLY	CA-C	8.33	1.63	1.51
1	A	104	ILE	CA-C	-8.33	1.44	1.52
1	A	136	THR	CA-C	8.31	1.62	1.52
1	A	363	ALA	N-CA	-8.30	1.36	1.46
1	A	97	ALA	C-O	-8.26	1.13	1.24
1	A	356	ARG	N-CA	8.25	1.56	1.46
1	A	84	TYR	CA-C	8.25	1.65	1.52
1	A	395	ARG	CZ-NH2	8.22	1.44	1.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	443	ILE	C-O	-8.20	1.14	1.24
1	A	59	SER	C-O	8.16	1.35	1.24
1	A	377	ILE	C-O	-8.15	1.14	1.24
1	A	62	GLY	N-CA	8.14	1.52	1.45
1	A	93	ARG	CD-NE	8.14	1.57	1.46
1	A	389	ALA	C-O	8.14	1.33	1.24
1	A	443	ILE	CA-CB	8.13	1.65	1.54
1	A	265	LEU	CA-C	8.13	1.63	1.52
1	A	74	LEU	CA-C	8.12	1.62	1.52
1	A	332	LEU	CA-C	8.10	1.61	1.53
1	A	93	ARG	C-O	8.08	1.33	1.23
1	A	323	LYS	CA-C	-8.08	1.41	1.52
1	A	250	ARG	CA-C	8.07	1.62	1.53
1	A	18	ILE	C-N	8.07	1.41	1.33
1	A	258	GLN	CA-C	8.06	1.63	1.52
1	A	243	CYS	CA-C	8.05	1.62	1.53
1	A	411	ILE	CA-C	-8.05	1.43	1.52
1	A	254	PRO	C-O	8.04	1.34	1.24
1	A	423	PRO	CA-C	8.03	1.63	1.52
1	A	329	HIS	C-O	-7.99	1.14	1.24
1	A	108	LEU	N-CA	7.97	1.56	1.46
1	A	98	SER	N-CA	7.96	1.56	1.46
1	A	415	PRO	CA-C	-7.96	1.44	1.53
1	A	13	HIS	CG-CD2	-7.91	1.27	1.35
1	A	247	ASP	CG-OD1	7.88	1.40	1.25
1	A	77	ILE	C-O	-7.87	1.14	1.24
1	A	423	PRO	N-CA	7.85	1.57	1.47
1	A	209	ILE	CA-C	7.84	1.62	1.52
1	A	363	ALA	C-O	-7.83	1.15	1.24
1	A	256	LEU	N-CA	7.81	1.57	1.45
1	A	275	THR	N-CA	7.80	1.56	1.46
1	A	43	ALA	C-O	7.79	1.33	1.24
1	A	36	ASP	CG-OD1	7.79	1.40	1.25
1	A	210	PHE	N-CA	7.79	1.57	1.46
1	A	416	GLN	C-O	7.79	1.33	1.23
1	A	102	THR	CA-C	-7.77	1.43	1.53
1	A	317	ASN	N-CA	7.74	1.56	1.45
1	A	48	VAL	CA-CB	7.72	1.64	1.54
1	A	416	GLN	N-CA	7.67	1.55	1.45
1	A	432	GLY	C-O	7.65	1.33	1.23
1	A	236	GLY	N-CA	7.63	1.57	1.45
1	A	46	PRO	CA-C	7.62	1.63	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	30	ILE	N-CA	7.62	1.55	1.46
1	A	331	ASP	N-CA	7.61	1.56	1.46
1	A	445	SER	CA-C	-7.60	1.43	1.52
1	A	344	GLY	C-N	-7.60	1.25	1.33
1	A	191	HIS	CG-ND1	7.58	1.46	1.38
1	A	428	PRO	N-CA	7.57	1.56	1.47
1	A	168	SER	CA-CB	-7.54	1.45	1.54
1	A	11	GLU	CD-OE1	7.53	1.39	1.25
1	A	109	TRP	CA-C	7.53	1.62	1.52
1	A	93	ARG	NE-CZ	7.50	1.41	1.33
1	A	333	ARG	CD-NE	7.50	1.56	1.46
1	A	370	VAL	CA-CB	-7.50	1.44	1.54
1	A	108	LEU	CA-C	7.50	1.62	1.52
1	A	383	TYR	CE2-CZ	7.49	1.56	1.38
1	A	388	ILE	CA-C	-7.49	1.43	1.52
1	A	303	HIS	CD2-NE2	-7.48	1.29	1.37
1	A	387	HIS	C-O	7.45	1.34	1.23
1	A	39	ASP	CG-OD1	7.42	1.39	1.25
1	A	229	ALA	N-CA	7.40	1.53	1.47
1	A	45	ILE	CA-C	7.39	1.58	1.53
1	A	40	SER	C-N	-7.38	1.24	1.33
1	A	338	LEU	C-O	-7.38	1.14	1.24
1	A	313	ALA	CA-C	7.38	1.62	1.52
1	A	134	GLY	CA-C	7.37	1.62	1.51
1	A	388	ILE	C-O	-7.35	1.15	1.24
1	A	129	GLY	C-O	7.35	1.33	1.23
1	A	28	VAL	N-CA	7.33	1.56	1.46
1	A	61	ALA	C-N	7.31	1.40	1.32
1	A	330	PHE	C-N	7.27	1.43	1.33
1	A	3	ALA	CA-C	7.25	1.61	1.53
1	A	61	ALA	N-CA	7.23	1.54	1.46
1	A	257	PRO	N-CD	7.23	1.57	1.47
1	A	92	SER	N-CA	7.21	1.55	1.46
1	A	107	ASP	CG-OD2	7.21	1.39	1.25
1	A	333	ARG	CZ-NH2	7.20	1.42	1.33
1	A	151	ILE	CA-CB	-7.18	1.47	1.54
1	A	309	ASP	CG-OD2	7.18	1.39	1.25
1	A	395	ARG	CZ-NH1	7.16	1.42	1.32
1	A	131	VAL	C-N	7.16	1.50	1.33
1	A	292	VAL	C-O	7.14	1.31	1.23
1	A	369	LEU	N-CA	7.12	1.55	1.46
1	A	398	SER	CA-C	-7.10	1.43	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	175	PHE	C-N	7.10	1.42	1.33
1	A	400	PHE	C-O	7.06	1.31	1.24
1	A	185	ALA	CA-CB	-7.05	1.42	1.53
1	A	429	ALA	N-CA	7.04	1.54	1.45
1	A	329	HIS	ND1-CE1	-7.03	1.25	1.32
1	A	48	VAL	C-O	-7.01	1.15	1.24
1	A	186	ASP	C-O	7.01	1.31	1.24
1	A	18	ILE	C-O	7.00	1.31	1.24
1	A	431	ASP	CG-OD2	6.98	1.38	1.25
1	A	151	ILE	C-O	6.96	1.30	1.24
1	A	221	ASP	CG-OD2	6.95	1.38	1.25
1	A	414	TRP	CD1-NE1	6.93	1.52	1.37
1	A	185	ALA	N-CA	-6.92	1.37	1.46
1	A	316	GLU	C-O	6.92	1.32	1.23
1	A	413	GLY	N-CA	6.89	1.55	1.45
1	A	102	THR	C-N	-6.89	1.24	1.33
1	A	389	ALA	N-CA	-6.88	1.37	1.46
1	A	147	ILE	N-CA	-6.87	1.37	1.46
1	A	291	ASP	C-O	6.85	1.32	1.23
1	A	190	SER	CA-C	-6.85	1.43	1.52
1	A	384	SER	C-O	-6.83	1.14	1.23
1	A	219	TRP	C-O	-6.83	1.16	1.24
1	A	411	ILE	CB-CG1	-6.82	1.39	1.53
1	A	192	GLY	C-O	-6.80	1.14	1.23
1	A	34	ARG	NE-CZ	6.77	1.40	1.33
1	A	69	MET	C-O	6.77	1.32	1.24
1	A	193	ILE	C-N	-6.75	1.23	1.33
1	A	69	MET	CA-C	6.75	1.61	1.52
1	A	238	GLY	N-CA	6.74	1.56	1.45
1	A	388	ILE	C-N	-6.74	1.24	1.33
1	A	250	ARG	N-CA	6.70	1.55	1.46
1	A	30	ILE	C-O	-6.69	1.15	1.24
1	A	368	ARG	CZ-NH1	6.67	1.42	1.32
1	A	269	SER	N-CA	6.66	1.58	1.46
1	A	434	GLY	C-N	6.66	1.42	1.33
1	A	259	ILE	N-CA	6.64	1.58	1.46
1	A	255	SER	C-O	-6.63	1.15	1.24
1	A	18	ILE	N-CA	6.61	1.54	1.46
1	A	444	ALA	C-O	6.60	1.31	1.24
1	A	205	LYS	N-CA	6.59	1.54	1.46
1	A	147	ILE	CA-C	6.56	1.61	1.52
1	A	252	ALA	C-O	6.54	1.32	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	158	PHE	N-CA	6.53	1.54	1.45
1	A	388	ILE	CA-CB	6.53	1.63	1.54
1	A	133	LEU	N-CA	6.51	1.54	1.46
1	A	27	VAL	C-N	6.51	1.41	1.33
1	A	367	PHE	CE2-CZ	6.51	1.58	1.38
1	A	49	PRO	C-N	-6.50	1.23	1.33
1	A	10	VAL	C-N	-6.49	1.24	1.33
1	A	70	GLY	C-O	6.47	1.32	1.23
1	A	86	GLU	CD-OE1	6.45	1.37	1.25
1	A	291	ASP	CG-OD1	6.44	1.37	1.25
1	A	354	VAL	CA-C	-6.44	1.39	1.52
1	A	72	GLY	C-O	-6.42	1.15	1.23
1	A	286	GLY	N-CA	6.40	1.55	1.45
1	A	117	ALA	CA-C	-6.39	1.44	1.52
1	A	354	VAL	C-N	-6.39	1.25	1.33
1	A	191	HIS	C-O	-6.38	1.15	1.24
1	A	64	PHE	C-O	-6.38	1.15	1.23
1	A	150	GLN	CA-CB	-6.32	1.43	1.53
1	A	324	ILE	N-CA	-6.32	1.38	1.46
1	A	393	SER	CB-OG	6.32	1.54	1.42
1	A	316	GLU	C-N	6.31	1.43	1.33
1	A	341	GLY	CA-C	-6.31	1.40	1.52
1	A	237	ALA	C-O	6.31	1.31	1.24
1	A	134	GLY	N-CA	6.30	1.54	1.45
1	A	429	ALA	CA-C	6.29	1.61	1.53
1	A	396	ASP	CG-OD2	6.29	1.37	1.25
1	A	212	SER	CA-C	-6.28	1.44	1.52
1	A	242	VAL	C-O	6.28	1.36	1.23
1	A	169	ALA	C-O	6.28	1.31	1.24
1	A	107	ASP	CA-C	-6.27	1.44	1.52
1	A	91	ALA	C-N	-6.26	1.25	1.33
1	A	62	GLY	CA-C	6.24	1.58	1.52
1	A	319	SER	CA-C	6.24	1.61	1.52
1	A	410	ASN	C-N	6.24	1.41	1.33
1	A	13	HIS	CD2-NE2	-6.24	1.30	1.37
1	A	60	GLN	N-CA	6.23	1.53	1.46
1	A	284	ASN	C-O	6.23	1.36	1.23
1	A	55	GLN	CA-C	-6.22	1.45	1.53
1	A	124	PHE	CA-C	-6.17	1.45	1.52
1	A	249	PHE	CA-C	6.16	1.61	1.52
1	A	120	SER	N-CA	-6.16	1.38	1.46
1	A	429	ALA	CA-CB	6.16	1.63	1.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	94	SER	C-O	-6.15	1.16	1.23
1	A	436	ALA	C-O	6.15	1.35	1.23
1	A	98	SER	CA-C	6.12	1.60	1.52
1	A	143	LYS	N-CA	6.12	1.53	1.46
1	A	283	LYS	C-O	-6.11	1.16	1.24
1	A	108	LEU	C-O	6.11	1.31	1.24
1	A	423	PRO	C-N	6.11	1.42	1.33
1	A	215	ASN	N-CA	6.10	1.53	1.46
1	A	405	ALA	C-N	-6.08	1.24	1.33
1	A	132	PRO	N-CA	6.08	1.55	1.47
1	A	139	GLU	C-N	6.08	1.41	1.33
1	A	40	SER	C-O	-6.06	1.17	1.23
1	A	158	PHE	CE2-CZ	-6.05	1.20	1.38
1	A	421	SER	CA-CB	6.05	1.65	1.53
1	A	154	GLN	C-N	6.02	1.41	1.33
1	A	192	GLY	C-N	-6.01	1.25	1.33
1	A	41	ALA	C-N	6.01	1.42	1.33
1	A	269	SER	C-N	6.01	1.44	1.34
1	A	287	GLN	C-O	6.01	1.31	1.24
1	A	133	LEU	C-O	-6.01	1.16	1.23
1	A	33	THR	N-CA	-6.01	1.38	1.46
1	A	92	SER	CB-OG	6.00	1.54	1.42
1	A	440	ILE	C-O	5.98	1.35	1.23
1	A	52	VAL	N-CA	5.98	1.53	1.46
1	A	117	ALA	C-O	-5.98	1.16	1.24
1	A	31	ALA	CA-CB	5.97	1.64	1.53
1	A	85	GLN	N-CA	5.95	1.53	1.46
1	A	251	LYS	CA-C	-5.95	1.45	1.52
1	A	103	ALA	C-N	-5.92	1.26	1.33
1	A	270	PRO	C-O	5.90	1.35	1.23
1	A	106	SER	C-O	5.90	1.31	1.24
1	A	31	ALA	C-O	-5.90	1.16	1.24
1	A	325	GLN	N-CA	5.90	1.53	1.46
1	A	266	ASN	CA-C	-5.89	1.40	1.52
1	A	155	ALA	C-O	5.87	1.35	1.23
1	A	355	VAL	N-CA	-5.86	1.39	1.46
1	A	321	PRO	CB-CG	-5.86	1.20	1.49
1	A	246	GLN	C-N	-5.86	1.26	1.34
1	A	20	PRO	N-CD	-5.84	1.39	1.47
1	A	98	SER	C-O	5.84	1.31	1.24
1	A	105	PRO	C-O	5.84	1.32	1.24
1	A	338	LEU	C-N	-5.83	1.25	1.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	84	TYR	C-O	5.83	1.33	1.24
1	A	367	PHE	C-O	-5.83	1.16	1.24
1	A	136	THR	CB-OG1	-5.82	1.34	1.43
1	A	356	ARG	CA-C	5.80	1.60	1.52
1	A	9	LEU	CA-C	5.80	1.60	1.52
1	A	284	ASN	N-CA	5.80	1.57	1.46
1	A	386	GLY	CA-C	-5.79	1.45	1.52
1	A	280	SER	CB-OG	-5.78	1.30	1.42
1	A	277	GLU	CA-CB	5.78	1.62	1.53
1	A	186	ASP	CA-C	5.78	1.60	1.53
1	A	60	GLN	C-O	5.77	1.31	1.23
1	A	85	GLN	CD-NE2	-5.77	1.21	1.33
1	A	329	HIS	CA-C	-5.76	1.45	1.52
1	A	320	TYR	C-O	-5.76	1.16	1.24
1	A	398	SER	C-O	-5.76	1.16	1.24
1	A	328	PRO	N-CA	5.75	1.54	1.47
1	A	412	TYR	C-O	-5.75	1.16	1.24
1	A	379	GLN	C-O	-5.75	1.15	1.23
1	A	130	SER	CA-CB	5.75	1.63	1.53
1	A	342	ASP	CG-OD1	5.75	1.36	1.25
1	A	39	ASP	C-O	-5.74	1.12	1.23
1	A	287	GLN	N-CA	5.74	1.53	1.46
1	A	351	MET	C-O	-5.73	1.12	1.23
1	A	230	ASP	CA-C	-5.72	1.45	1.52
1	A	25	GLN	N-CA	5.72	1.53	1.46
1	A	44	SER	C-N	5.72	1.38	1.33
1	A	208	ILE	CA-C	5.72	1.59	1.52
1	A	78	LEU	C-O	-5.70	1.16	1.23
1	A	230	ASP	CG-OD2	5.70	1.36	1.25
1	A	261	TYR	CB-CG	-5.70	1.39	1.51
1	A	359	LEU	C-O	5.69	1.34	1.23
1	A	117	ALA	C-N	-5.69	1.25	1.33
1	A	424	ILE	N-CA	5.68	1.57	1.46
1	A	383	TYR	C-O	5.68	1.30	1.23
1	A	382	GLY	C-N	-5.67	1.25	1.33
1	A	65	LEU	CA-C	5.66	1.59	1.52
1	A	235	GLY	C-O	5.66	1.34	1.23
1	A	362	ILE	CA-C	5.65	1.60	1.52
1	A	286	GLY	CA-C	5.65	1.62	1.52
1	A	368	ARG	CZ-NH2	-5.63	1.26	1.33
1	A	10	VAL	C-O	-5.62	1.17	1.24
1	A	29	SER	N-CA	-5.61	1.39	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	342	ASP	C-O	-5.61	1.17	1.24
1	A	397	TYR	CA-C	5.61	1.59	1.52
1	A	288	SER	CA-C	-5.61	1.45	1.52
1	A	325	GLN	C-O	5.61	1.30	1.24
1	A	17	PHE	CA-CB	-5.59	1.44	1.53
1	A	132	PRO	C-O	-5.58	1.16	1.24
1	A	217	ALA	C-N	-5.57	1.25	1.33
1	A	148	LYS	N-CA	5.57	1.53	1.46
1	A	79	ILE	CB-CG1	-5.56	1.42	1.53
1	A	365	TYR	C-N	-5.56	1.27	1.33
1	A	25	GLN	C-N	-5.55	1.25	1.33
1	A	279	ASN	CG-ND2	5.55	1.44	1.33
1	A	88	SER	CA-C	5.54	1.60	1.53
1	A	215	ASN	C-O	-5.54	1.17	1.23
1	A	275	THR	CB-OG1	5.54	1.52	1.43
1	A	439	VAL	N-CA	5.53	1.56	1.46
1	A	219	TRP	CZ3-CH2	5.53	1.54	1.40
1	A	73	ASP	CA-CB	5.52	1.62	1.53
1	A	354	VAL	C-O	-5.52	1.12	1.23
1	A	184	VAL	C-O	5.51	1.34	1.23
1	A	39	ASP	N-CA	-5.51	1.35	1.46
1	A	140	ALA	C-O	-5.51	1.17	1.23
1	A	144	GLU	CA-C	5.50	1.64	1.52
1	A	331	ASP	C-O	5.50	1.30	1.24
1	A	126	SER	CB-OG	5.49	1.53	1.42
1	A	19	VAL	CA-CB	-5.48	1.48	1.53
1	A	87	SER	CA-CB	-5.47	1.46	1.53
1	A	317	ASN	CG-OD1	5.47	1.33	1.23
1	A	231	ALA	CA-CB	5.46	1.62	1.53
1	A	398	SER	N-CA	5.46	1.53	1.46
1	A	131	VAL	C-O	5.46	1.31	1.24
1	A	324	ILE	C-N	5.45	1.41	1.33
1	A	135	PHE	CG-CD2	5.45	1.50	1.38
1	A	314	ASN	CA-C	5.43	1.60	1.53
1	A	137	PHE	CA-C	-5.42	1.41	1.52
1	A	126	SER	C-O	5.41	1.34	1.23
1	A	28	VAL	C-N	-5.41	1.25	1.33
1	A	398	SER	C-N	-5.40	1.25	1.33
1	A	216	ALA	CA-C	5.39	1.59	1.52
1	A	250	ARG	CD-NE	5.39	1.53	1.46
1	A	252	ALA	CA-CB	5.39	1.62	1.53
1	A	290	ARG	C-N	-5.38	1.26	1.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	433	GLU	CD-OE2	5.37	1.35	1.25
1	A	176	PRO	N-CA	5.36	1.54	1.47
1	A	110	GLY	N-CA	5.36	1.52	1.45
1	A	67	ILE	N-CA	-5.35	1.39	1.46
1	A	11	GLU	C-N	-5.34	1.28	1.34
1	A	385	SER	C-O	-5.34	1.16	1.23
1	A	193	ILE	C-O	-5.34	1.17	1.24
1	A	154	GLN	N-CA	-5.32	1.36	1.46
1	A	17	PHE	CE2-CZ	-5.32	1.22	1.38
1	A	223	THR	C-O	5.32	1.34	1.23
1	A	415	PRO	CB-CG	5.32	1.76	1.49
1	A	383	TYR	CB-CG	5.32	1.63	1.51
1	A	143	LYS	CA-C	5.31	1.59	1.52
1	A	346	ALA	C-O	5.31	1.34	1.23
1	A	446	SER	CA-C	5.30	1.59	1.52
1	A	33	THR	C-O	5.29	1.30	1.24
1	A	218	TYR	CE1-CZ	5.29	1.50	1.38
1	A	78	LEU	CA-CB	-5.29	1.45	1.53
1	A	387	HIS	C-N	5.29	1.40	1.33
1	A	32	THR	C-O	-5.28	1.17	1.24
1	A	66	ALA	C-N	-5.28	1.26	1.33
1	A	49	PRO	C-O	-5.28	1.17	1.23
1	A	59	SER	N-CA	5.28	1.53	1.46
1	A	250	ARG	CZ-NH1	5.28	1.40	1.32
1	A	300	GLY	N-CA	5.28	1.53	1.45
1	A	383	TYR	CA-C	-5.27	1.46	1.52
1	A	410	ASN	CG-ND2	-5.27	1.22	1.33
1	A	313	ALA	CA-CB	5.26	1.62	1.53
1	A	176	PRO	C-O	5.26	1.31	1.24
1	A	69	MET	N-CA	5.26	1.52	1.46
1	A	179	ASP	C-O	5.26	1.34	1.23
1	A	157	ALA	CA-C	5.24	1.64	1.52
1	A	430	ILE	C-O	5.23	1.31	1.23
1	A	455	ALA	C-O	-5.23	1.13	1.23
1	A	406	THR	CA-C	5.23	1.64	1.52
1	A	9	LEU	C-O	5.23	1.30	1.24
1	A	39	ASP	CA-C	-5.22	1.42	1.52
1	A	257	PRO	CA-CB	-5.22	1.46	1.53
1	A	44	SER	CA-C	5.21	1.59	1.52
1	A	221	ASP	CG-OD1	5.21	1.35	1.25
1	A	296	TYR	CG-CD2	5.20	1.50	1.39
1	A	357	ARG	CA-C	-5.19	1.42	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	236	GLY	C-O	5.18	1.31	1.24
1	A	254	PRO	N-CA	5.17	1.53	1.47
1	A	64	PHE	C-N	-5.16	1.26	1.33
1	A	433	GLU	CA-C	5.16	1.59	1.52
1	A	160	LEU	CA-C	5.15	1.59	1.52
1	A	444	ALA	N-CA	-5.14	1.40	1.46
1	A	359	LEU	CA-C	5.13	1.63	1.52
1	A	269	SER	CA-CB	5.12	1.63	1.53
1	A	141	GLY	CA-C	5.12	1.59	1.51
1	A	415	PRO	C-N	5.12	1.40	1.33
1	A	189	ASP	CG-OD1	5.12	1.35	1.25
1	A	94	SER	CA-CB	-5.12	1.45	1.53
1	A	454	SER	C-O	-5.11	1.13	1.23
1	A	272	ALA	CA-C	5.10	1.63	1.52
1	A	307	ALA	C-O	5.10	1.33	1.23
1	A	320	TYR	CE1-CZ	5.10	1.50	1.38
1	A	325	GLN	CD-NE2	5.10	1.44	1.33
1	A	165	LYS	C-O	5.09	1.33	1.23
1	A	158	PHE	CG-CD2	-5.08	1.28	1.38
1	A	99	MET	CA-C	5.07	1.63	1.52
1	A	319	SER	N-CA	5.06	1.52	1.46
1	A	16	VAL	C-O	5.05	1.33	1.23
1	A	58	GLY	CA-C	5.05	1.61	1.52
1	A	146	VAL	C-N	-5.05	1.26	1.33
1	A	8	SER	C-N	-5.05	1.27	1.33
1	A	66	ALA	N-CA	-5.03	1.40	1.46
1	A	230	ASP	CG-OD1	5.03	1.34	1.25
1	A	167	ILE	C-N	-5.02	1.27	1.34
1	A	439	VAL	CA-C	5.02	1.63	1.52
1	A	226	ALA	CA-C	5.02	1.60	1.52
1	A	154	GLN	CD-OE1	5.02	1.33	1.23
1	A	316	GLU	CA-C	5.02	1.58	1.52
1	A	149	GLY	CA-C	5.01	1.57	1.51
1	A	416	GLN	C-N	5.01	1.40	1.33
1	A	276	PHE	CA-CB	-5.00	1.45	1.53
1	A	277	GLU	N-CA	5.00	1.52	1.46
1	A	259	ILE	CA-C	5.00	1.63	1.52

All (277) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	185	ALA	O-C-N	16.01	141.74	123.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	150	GLN	OE1-CD-NE2	15.43	138.03	122.60
1	A	414	TRP	CE2-CD2-CE3	14.63	133.43	118.80
1	A	45	ILE	CB-CA-C	-14.59	94.03	110.95
1	A	18	ILE	O-C-N	14.50	138.57	123.20
1	A	331	ASP	O-C-N	14.39	141.73	122.59
1	A	252	ALA	N-CA-C	-13.65	96.63	113.01
1	A	277	GLU	N-CA-CB	13.63	130.57	110.26
1	A	75	GLU	O-C-N	13.15	140.28	123.19
1	A	104	ILE	O-C-N	13.11	136.05	121.10
1	A	208	ILE	O-C-N	-12.43	109.83	123.26
1	A	323	LYS	O-C-N	11.91	136.09	122.27
1	A	215	ASN	OD1-CG-ND2	-11.66	110.94	122.60
1	A	301	GLN	OE1-CD-NE2	-11.36	111.24	122.60
1	A	109	TRP	CD1-NE1-CE2	11.24	129.13	108.90
1	A	366	ALA	O-C-N	-11.13	110.17	122.08
1	A	109	TRP	NE1-CE2-CD2	-11.04	93.05	107.40
1	A	249	PHE	CA-CB-CG	-10.94	102.86	113.80
1	A	20	PRO	O-C-N	10.92	134.35	121.46
1	A	414	TRP	CG-CD2-CE3	-10.82	123.08	133.90
1	A	172	ASN	OD1-CG-ND2	-10.80	111.80	122.60
1	A	343	GLN	O-C-N	10.69	132.86	121.85
1	A	111	ASN	OD1-CG-ND2	-10.54	112.06	122.60
1	A	50	GLY	O-C-N	10.46	137.97	122.18
1	A	19	VAL	N-CA-C	10.35	118.67	107.60
1	A	288	SER	O-C-N	10.21	134.82	122.27
1	A	416	GLN	O-C-N	10.18	135.08	123.27
1	A	445	SER	O-C-N	10.11	132.54	122.03
1	A	404	SER	O-C-N	10.06	133.68	122.11
1	A	105	PRO	N-CA-C	-10.00	102.20	114.20
1	A	387	HIS	CA-CB-CG	-9.98	103.81	113.80
1	A	45	ILE	N-CA-CB	9.91	122.20	111.20
1	A	258	GLN	OE1-CD-NE2	-9.58	113.02	122.60
1	A	414	TRP	CD1-NE1-CE2	-9.53	91.75	108.90
1	A	49	PRO	O-C-N	9.46	134.54	123.00
1	A	45	ILE	N-CA-C	9.41	116.13	107.56
1	A	333	ARG	NE-CZ-NH2	9.34	127.61	119.20
1	A	206	MET	O-C-N	9.33	134.72	122.96
1	A	178	GLY	O-C-N	9.29	134.77	122.70
1	A	34	ARG	NE-CZ-NH2	9.29	127.56	119.20
1	A	365	TYR	O-C-N	-9.22	112.14	122.09
1	A	93	ARG	NE-CZ-NH2	9.19	127.47	119.20
1	A	169	ALA	O-C-N	9.18	134.79	122.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	329	HIS	CE1-NE2-CD2	9.06	118.06	109.00
1	A	247	ASP	O-C-N	8.95	132.69	122.22
1	A	454	SER	O-C-N	-8.85	108.84	123.00
1	A	26	ALA	O-C-N	8.71	133.06	122.35
1	A	132	PRO	CA-N-CD	-8.65	99.89	112.00
1	A	198	ASN	OD1-CG-ND2	-8.62	113.98	122.60
1	A	266	ASN	OD1-CG-ND2	-8.56	114.04	122.60
1	A	51	TRP	CD1-CG-CD2	8.54	119.95	106.30
1	A	135	PHE	O-C-N	8.53	134.50	123.24
1	A	341	GLY	O-C-N	8.49	136.58	123.00
1	A	277	GLU	CB-CA-C	-8.47	94.11	110.11
1	A	227	ASP	N-CA-C	-8.43	103.01	113.38
1	A	207	GLY	O-C-N	8.34	133.54	122.70
1	A	51	TRP	NE1-CE2-CD2	-8.32	96.58	107.40
1	A	249	PHE	CB-CA-C	-8.30	98.21	110.16
1	A	191	HIS	ND1-CE1-NE2	-8.29	100.11	108.40
1	A	383	TYR	O-C-N	8.29	132.63	123.10
1	A	279	ASN	CB-CA-C	-8.27	95.60	109.99
1	A	380	LYS	O-C-N	8.25	131.87	122.22
1	A	109	TRP	CG-CD1-NE1	-8.19	99.56	110.20
1	A	229	ALA	O-C-N	8.16	129.44	121.85
1	A	134	GLY	O-C-N	-8.15	112.10	122.70
1	A	324	ILE	N-CA-C	-8.14	102.13	111.00
1	A	236	GLY	CA-C-O	8.06	126.93	118.95
1	A	85	GLN	OE1-CD-NE2	-8.00	114.60	122.60
1	A	333	ARG	NH1-CZ-NH2	-7.97	108.94	119.30
1	A	383	TYR	N-CA-C	-7.93	97.40	110.17
1	A	107	ASP	O-C-N	7.89	133.09	122.59
1	A	317	ASN	CB-CA-C	-7.88	97.84	113.45
1	A	324	ILE	O-C-N	7.88	132.23	121.84
1	A	400	PHE	CB-CA-C	-7.84	98.85	109.28
1	A	386	GLY	O-C-N	7.84	134.49	123.67
1	A	51	TRP	NE1-CE2-CZ2	7.78	141.76	130.10
1	A	109	TRP	CZ3-CH2-CZ2	7.71	131.52	121.50
1	A	253	PHE	O-C-N	7.70	130.18	121.32
1	A	414	TRP	CB-CG-CD2	-7.70	116.02	126.80
1	A	149	GLY	O-C-N	-7.68	115.58	122.57
1	A	212	SER	O-C-N	7.68	133.06	122.46
1	A	360	PHE	CB-CA-C	-7.68	99.19	111.39
1	A	87	SER	CB-CA-C	-7.67	99.54	111.74
1	A	154	GLN	OE1-CD-NE2	-7.67	114.93	122.60
1	A	135	PHE	CA-C-N	7.62	131.64	120.90

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	135	PHE	C-N-CA	7.62	131.64	120.90
1	A	343	GLN	N-CA-C	-7.59	102.93	114.16
1	A	124	PHE	O-C-N	7.52	130.84	122.11
1	A	120	SER	O-C-N	7.49	132.55	122.59
1	A	276	PHE	CD1-CG-CD2	7.49	129.83	118.60
1	A	176	PRO	O-C-N	7.43	132.20	122.24
1	A	76	VAL	O-C-N	7.42	131.20	123.18
1	A	34	ARG	NH1-CZ-NH2	-7.41	109.67	119.30
1	A	131	VAL	CA-C-N	7.39	129.08	119.84
1	A	131	VAL	C-N-CA	7.39	129.08	119.84
1	A	219	TRP	O-C-N	-7.38	112.81	122.77
1	A	147	ILE	N-CA-CB	-7.37	99.07	111.23
1	A	155	ALA	CB-CA-C	-7.33	99.50	110.50
1	A	410	ASN	OD1-CG-ND2	-7.32	115.28	122.60
1	A	276	PHE	O-C-N	-7.30	113.88	122.20
1	A	16	VAL	N-CA-CB	-7.28	99.12	111.50
1	A	147	ILE	CB-CA-C	7.25	123.19	111.29
1	A	258	GLN	O-C-N	-7.24	112.96	122.59
1	A	109	TRP	NE1-CE2-CZ2	7.18	140.88	130.10
1	A	185	ALA	CA-C-O	-7.18	111.96	120.43
1	A	243	CYS	CB-CA-C	-7.18	100.35	111.83
1	A	320	TYR	CA-C-N	7.15	128.78	119.84
1	A	320	TYR	C-N-CA	7.15	128.78	119.84
1	A	191	HIS	ND1-CG-CD2	7.11	113.21	106.10
1	A	411	ILE	O-C-N	7.11	128.88	121.91
1	A	19	VAL	CB-CA-C	-7.10	103.01	111.18
1	A	125	SER	O-C-N	7.07	131.99	122.59
1	A	97	ALA	CB-CA-C	-7.04	101.14	109.80
1	A	109	TRP	CE3-CZ3-CH2	6.96	130.14	121.10
1	A	136	THR	CA-C-O	6.96	128.80	121.15
1	A	150	GLN	CG-CD-NE2	-6.86	106.11	116.40
1	A	219	TRP	CB-CA-C	-6.81	100.32	110.67
1	A	44	SER	CA-C-N	-6.81	117.97	122.60
1	A	44	SER	C-N-CA	-6.81	117.97	122.60
1	A	303	HIS	ND1-CG-CD2	6.80	112.90	106.10
1	A	277	GLU	CA-CB-CG	6.76	127.62	114.10
1	A	69	MET	N-CA-C	6.74	119.51	108.52
1	A	291	ASP	N-CA-C	-6.70	105.39	113.97
1	A	13	HIS	CE1-NE2-CD2	6.67	115.67	109.00
1	A	415	PRO	N-CA-CB	6.67	107.60	102.73
1	A	151	ILE	O-C-N	6.67	129.89	122.75
1	A	310	PHE	CZ-CE2-CD2	-6.67	107.99	120.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	210	PHE	CB-CA-C	-6.65	101.99	111.76
1	A	84	TYR	N-CA-CB	-6.62	102.15	112.41
1	A	321	PRO	CA-N-CD	-6.60	102.76	112.00
1	A	51	TRP	CE2-CD2-CE3	-6.58	112.22	118.80
1	A	186	ASP	CA-CB-CG	-6.55	106.05	112.60
1	A	45	ILE	CA-C-N	6.54	128.02	119.84
1	A	45	ILE	C-N-CA	6.54	128.02	119.84
1	A	330	PHE	O-C-N	6.53	131.28	122.59
1	A	390	ALA	CB-CA-C	6.47	120.21	110.50
1	A	135	PHE	CA-CB-CG	6.46	120.25	113.80
1	A	317	ASN	O-C-N	6.38	129.22	122.20
1	A	396	ASP	CA-CB-CG	6.38	118.98	112.60
1	A	314	ASN	OD1-CG-ND2	-6.37	116.23	122.60
1	A	33	THR	O-C-N	6.36	131.05	122.59
1	A	424	ILE	CB-CA-C	-6.35	98.89	111.60
1	A	86	GLU	O-C-N	6.35	131.28	123.21
1	A	198	ASN	N-CA-C	-6.34	104.23	112.23
1	A	9	LEU	N-CA-C	-6.34	104.37	111.28
1	A	270	PRO	N-CA-CB	6.33	109.97	103.00
1	A	136	THR	O-C-N	-6.32	115.26	122.97
1	A	338	LEU	O-C-N	-6.32	114.19	122.59
1	A	102	THR	N-CA-C	-6.31	99.53	108.23
1	A	395	ARG	O-C-N	6.29	133.07	123.00
1	A	292	VAL	CG1-CB-CG2	-6.28	96.99	110.80
1	A	250	ARG	CB-CA-C	-6.27	102.96	112.11
1	A	140	ALA	CB-CA-C	-6.27	101.52	111.17
1	A	105	PRO	O-C-N	6.25	132.61	122.17
1	A	327	LEU	O-C-N	6.23	128.49	121.32
1	A	331	ASP	CA-C-N	6.20	132.30	122.93
1	A	331	ASP	C-N-CA	6.20	132.30	122.93
1	A	414	TRP	CD1-CG-CD2	6.20	116.22	106.30
1	A	317	ASN	N-CA-C	6.19	118.85	109.63
1	A	209	ILE	O-C-N	-6.17	116.55	123.03
1	A	248	SER	O-C-N	6.16	130.88	122.37
1	A	370	VAL	CB-CA-C	-6.16	101.20	111.29
1	A	309	ASP	O-C-N	6.15	132.84	123.00
1	A	132	PRO	O-C-N	-6.15	114.34	122.64
1	A	252	ALA	CB-CA-C	6.14	122.71	110.17
1	A	39	ASP	N-CA-C	-6.14	93.80	111.00
1	A	66	ALA	O-C-N	6.12	129.41	123.29
1	A	47	MET	CB-CA-C	-6.12	98.24	110.42
1	A	255	SER	CB-CA-C	-6.11	98.25	110.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	201	ASP	O-C-N	6.11	131.09	123.14
1	A	240	MET	CG-SD-CE	6.11	114.34	100.90
1	A	49	PRO	CA-C-O	-6.10	114.27	122.08
1	A	226	ALA	N-CA-C	-6.10	103.54	111.71
1	A	93	ARG	NH1-CZ-NH2	-6.07	111.41	119.30
1	A	158	PHE	CZ-CE2-CD2	6.07	130.93	120.00
1	A	290	ARG	O-C-N	-6.04	113.45	122.39
1	A	109	TRP	CE2-CD2-CE3	-6.03	112.77	118.80
1	A	356	ARG	NE-CZ-NH2	6.03	124.62	119.20
1	A	424	ILE	N-CA-CB	6.02	121.73	111.50
1	A	87	SER	N-CA-C	6.00	120.96	108.53
1	A	210	PHE	N-CA-C	5.98	119.07	107.71
1	A	82	ALA	O-C-N	5.96	130.51	122.59
1	A	52	VAL	O-C-N	5.94	129.99	122.57
1	A	361	LEU	O-C-N	5.92	128.92	122.11
1	A	51	TRP	CE3-CZ3-CH2	5.92	128.79	121.10
1	A	293	LEU	N-CA-C	-5.88	104.87	111.28
1	A	119	PHE	O-C-N	5.86	130.38	122.59
1	A	24	LEU	O-C-N	5.83	128.29	122.12
1	A	286	GLY	CA-C-N	5.82	129.16	120.31
1	A	286	GLY	C-N-CA	5.82	129.16	120.31
1	A	310	PHE	CD1-CG-CD2	5.82	127.32	118.60
1	A	176	PRO	CB-CA-C	-5.81	103.60	111.85
1	A	414	TRP	NE1-CE2-CD2	5.77	114.90	107.40
1	A	175	PHE	CA-C-N	5.76	125.44	119.56
1	A	175	PHE	C-N-CA	5.76	125.44	119.56
1	A	128	ALA	O-C-N	-5.76	113.79	123.00
1	A	242	VAL	CG1-CB-CG2	-5.73	98.20	110.80
1	A	314	ASN	CB-CA-C	-5.70	103.87	111.63
1	A	338	LEU	CD1-CG-CD2	-5.68	98.30	110.80
1	A	172	ASN	CB-CG-ND2	5.68	124.91	116.40
1	A	412	TYR	CD1-CG-CD2	5.67	126.60	118.10
1	A	116	ASN	CA-CB-CG	5.64	118.25	112.60
1	A	289	LEU	N-CA-C	-5.63	105.04	111.07
1	A	142	ALA	O-C-N	5.62	129.30	121.83
1	A	400	PHE	N-CA-C	5.62	121.02	114.62
1	A	342	ASP	O-C-N	5.60	130.03	122.59
1	A	426	ILE	O-C-N	5.60	131.96	123.00
1	A	212	SER	N-CA-C	-5.59	105.95	112.89
1	A	147	ILE	N-CA-C	-5.58	97.73	109.34
1	A	47	MET	CG-SD-CE	5.56	113.14	100.90
1	A	368	ARG	O-C-N	5.56	129.99	122.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	21	PRO	CA-CB-CG	-5.55	93.96	104.50
1	A	108	LEU	CD1-CG-CD2	-5.53	98.64	110.80
1	A	312	ALA	O-C-N	5.52	131.84	123.00
1	A	315	VAL	N-CA-CB	-5.50	100.82	110.77
1	A	27	VAL	O-C-N	5.49	132.34	121.91
1	A	64	PHE	O-C-N	5.49	129.41	123.10
1	A	279	ASN	O-C-N	5.49	128.68	122.20
1	A	414	TRP	CE3-CZ3-CH2	-5.47	113.99	121.10
1	A	236	GLY	O-C-N	-5.47	115.72	122.23
1	A	455	ALA	CB-CA-C	-5.46	102.30	110.50
1	A	395	ARG	NE-CZ-NH1	-5.46	116.04	121.50
1	A	75	GLU	CA-C-N	5.45	130.58	123.06
1	A	75	GLU	C-N-CA	5.45	130.58	123.06
1	A	51	TRP	CB-CG-CD2	-5.45	119.18	126.80
1	A	214	VAL	O-C-N	5.45	128.90	122.69
1	A	219	TRP	CD1-NE1-CE2	-5.43	99.12	108.90
1	A	150	GLN	CB-CG-CD	-5.42	103.38	112.60
1	A	275	THR	O-C-N	-5.42	115.38	122.59
1	A	10	VAL	O-C-N	-5.42	116.60	121.91
1	A	283	LYS	N-CA-C	5.41	119.60	112.89
1	A	158	PHE	N-CA-C	5.38	116.86	110.19
1	A	43	ALA	O-C-N	5.38	129.74	122.59
1	A	28	VAL	CB-CA-C	-5.37	103.40	112.16
1	A	215	ASN	CB-CG-ND2	5.37	124.46	116.40
1	A	184	VAL	CG1-CB-CG2	-5.35	99.03	110.80
1	A	93	ARG	O-C-N	5.33	129.77	123.33
1	A	357	ARG	NE-CZ-NH2	5.32	123.99	119.20
1	A	198	ASN	CB-CG-ND2	5.32	124.38	116.40
1	A	246	GLN	OE1-CD-NE2	5.31	127.91	122.60
1	A	58	GLY	O-C-N	-5.31	114.50	123.00
1	A	70	GLY	O-C-N	5.31	129.60	122.70
1	A	416	GLN	CB-CA-C	-5.31	97.78	109.56
1	A	439	VAL	CG1-CB-CG2	-5.31	99.12	110.80
1	A	193	ILE	CA-CB-CG1	5.30	119.42	110.40
1	A	284	ASN	CB-CA-C	-5.29	100.04	110.10
1	A	116	ASN	OD1-CG-ND2	-5.28	117.33	122.60
1	A	51	TRP	O-C-N	5.27	131.33	122.21
1	A	135	PHE	N-CA-C	5.26	116.77	107.61
1	A	387	HIS	ND1-CE1-NE2	5.24	113.64	108.40
1	A	11	GLU	O-C-N	5.23	129.55	122.59
1	A	206	MET	N-CA-C	5.22	116.92	109.14
1	A	16	VAL	O-C-N	5.22	131.35	123.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	2	ALA	CB-CA-C	-5.21	102.69	110.50
1	A	443	ILE	CA-CB-CG2	5.20	119.35	110.50
1	A	326	LYS	N-CA-C	-5.20	106.20	112.54
1	A	189	ASP	O-C-N	5.20	131.31	123.00
1	A	321	PRO	CA-CB-CG	5.18	114.34	104.50
1	A	177	ALA	O-C-N	5.18	127.68	122.09
1	A	219	TRP	CE2-CD2-CE3	5.17	123.97	118.80
1	A	102	THR	N-CA-CB	-5.16	103.18	110.51
1	A	48	VAL	CG1-CB-CG2	-5.15	99.47	110.80
1	A	109	TRP	CH2-CZ2-CE2	-5.13	110.83	117.50
1	A	226	ALA	CA-C-O	5.13	125.55	120.32
1	A	29	SER	N-CA-C	-5.12	106.19	112.90
1	A	50	GLY	CA-C-N	5.11	129.80	122.40
1	A	50	GLY	C-N-CA	5.11	129.80	122.40
1	A	277	GLU	CB-CG-CD	5.11	121.28	112.60
1	A	301	GLN	CG-CD-NE2	5.10	124.05	116.40
1	A	69	MET	CA-C-O	5.09	125.92	120.32
1	A	250	ARG	NE-CZ-NH1	-5.05	116.45	121.50
1	A	133	LEU	CD1-CG-CD2	-5.04	99.70	110.80
1	A	111	ASN	CB-CG-ND2	5.03	123.95	116.40
1	A	250	ARG	N-CA-C	5.03	118.07	111.28
1	A	47	MET	O-C-N	5.02	129.27	122.59
1	A	423	PRO	CA-N-CD	5.02	119.02	112.00
1	A	19	VAL	O-C-N	-5.00	116.32	120.92

There are no chirality outliers.

All (2) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	296	TYR	Sidechain
1	A	84	TYR	Sidechain

5.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	3298	0	3134	1649	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
All	All	3298	0	3134	1649	1

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 256.

All (1649) 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:414:TRP:CH2	1:A:414:TRP:CZ3	1.82	1.66
1:A:148:LYS:HZ1	1:A:186:ASP:CA	1.08	1.62
1:A:199:TYR:CE2	1:A:199:TYR:CZ	1.76	1.62
1:A:276:PHE:CZ	1:A:276:PHE:CE2	1.83	1.61
1:A:347:UNK:CB	1:A:351:MET:HE2	1.18	1.61
1:A:312:ALA:HB3	1:A:315:VAL:CB	1.24	1.61
1:A:389:ALA:HB1	1:A:429:ALA:CB	1.31	1.60
1:A:95:LEU:CD2	1:A:99:MET:HE3	1.16	1.60
1:A:312:ALA:CB	1:A:315:VAL:HB	1.27	1.59
1:A:95:LEU:HD22	1:A:99:MET:CE	1.32	1.57
1:A:140:ALA:HB3	1:A:151:ILE:CD1	1.14	1.57
1:A:389:ALA:CB	1:A:429:ALA:HB2	1.34	1.56
1:A:249:PHE:CZ	1:A:249:PHE:CE2	1.88	1.56
1:A:347:UNK:HB1	1:A:351:MET:CE	1.12	1.55
1:A:22:UNK:HG2	1:A:23:ILE:CD1	1.31	1.55
1:A:252:ALA:C	1:A:254:PRO:HD3	1.31	1.53
1:A:250:ARG:CD	1:A:256:LEU:HB2	1.31	1.53
1:A:249:PHE:CE2	1:A:250:ARG:HB3	1.41	1.52
1:A:105:PRO:C	1:A:109:TRP:HB2	1.21	1.52
1:A:16:VAL:HG13	1:A:259:ILE:CD1	1.42	1.50
1:A:289:LEU:HD21	1:A:359:LEU:CD2	1.41	1.49
1:A:140:ALA:CB	1:A:151:ILE:CD1	1.85	1.49
1:A:166:LEU:CD1	1:A:169:ALA:HB3	1.38	1.49
1:A:166:LEU:CD1	1:A:169:ALA:CB	1.92	1.47
1:A:143:LYS:NZ	1:A:191:HIS:CE1	1.82	1.47
1:A:210:PHE:HE2	1:A:370:VAL:CG2	1.29	1.45
1:A:251:LYS:CG	1:A:275:THR:CG2	1.91	1.45
1:A:58:GLY:HA2	1:A:199:TYR:CE2	1.50	1.45
1:A:148:LYS:NZ	1:A:186:ASP:C	1.74	1.44
1:A:371:VAL:HG11	1:A:404:SER:CA	1.44	1.43
1:A:415:PRO:CG	1:A:415:PRO:CB	1.76	1.43
1:A:210:PHE:CE2	1:A:370:VAL:HG21	1.52	1.41
1:A:146:VAL:CA	1:A:148:LYS:HD2	1.50	1.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:348:LYS:HA	1:A:348:LYS:CE	1.43	1.41
1:A:348:LYS:HE3	1:A:348:LYS:CA	1.47	1.41
1:A:397:TYR:CE2	1:A:398:SER:O	1.73	1.40
1:A:22:UNK:CG	1:A:23:ILE:HD13	1.49	1.40
1:A:416:GLN:NE2	1:A:423:PRO:HD3	1.29	1.39
1:A:95:LEU:CD2	1:A:99:MET:CE	1.91	1.39
1:A:105:PRO:O	1:A:109:TRP:CB	1.70	1.39
1:A:148:LYS:NZ	1:A:186:ASP:CA	1.86	1.38
1:A:428:PRO:CG	1:A:428:PRO:CB	1.93	1.37
1:A:250:ARG:NH1	1:A:253:PHE:HD2	1.21	1.37
1:A:436:ALA:O	1:A:440:ILE:HG13	1.21	1.36
1:A:251:LYS:HG3	1:A:275:THR:CG2	1.53	1.35
1:A:76:VAL:CG2	1:A:119:PHE:HE1	1.36	1.35
1:A:431:ASP:O	1:A:435:ALA:HB3	1.26	1.35
1:A:58:GLY:O	1:A:84:TYR:N	1.58	1.34
1:A:265:LEU:O	1:A:269:SER:HB3	1.21	1.33
1:A:146:VAL:O	1:A:148:LYS:HD3	1.29	1.33
1:A:148:LYS:NZ	1:A:186:ASP:O	1.62	1.33
1:A:397:TYR:C	1:A:397:TYR:CD2	1.97	1.32
1:A:303:HIS:H	1:A:351:MET:CE	1.41	1.32
1:A:172:ASN:O	1:A:175:PHE:HB2	1.16	1.31
1:A:416:GLN:NE2	1:A:423:PRO:CD	1.88	1.31
1:A:249:PHE:CE2	1:A:256:LEU:HD22	1.65	1.31
1:A:191:HIS:CG	1:A:241:UNK:CE	2.12	1.31
1:A:257:PRO:CB	1:A:257:PRO:CG	1.92	1.31
1:A:370:VAL:CG1	1:A:371:VAL:H	1.31	1.30
1:A:251:LYS:CG	1:A:275:THR:HG22	1.51	1.30
1:A:82:ALA:O	1:A:85:GLN:CD	1.72	1.30
1:A:105:PRO:CA	1:A:109:TRP:HB2	1.51	1.30
1:A:250:ARG:NE	1:A:256:LEU:H	1.28	1.30
1:A:397:TYR:HD2	1:A:397:TYR:O	1.12	1.30
1:A:148:LYS:HZ1	1:A:186:ASP:C	1.30	1.30
1:A:108:LEU:HD12	1:A:160:LEU:CD1	1.62	1.29
1:A:234:UNK:O	1:A:236:GLY:N	1.62	1.29
1:A:148:LYS:HZ1	1:A:186:ASP:CB	1.44	1.29
1:A:172:ASN:HA	1:A:175:PHE:CD1	1.67	1.29
1:A:317:ASN:C	1:A:317:ASN:HD22	1.34	1.28
1:A:221:ASP:O	1:A:223:THR:N	1.64	1.27
1:A:339:PHE:O	1:A:340:UNK:C	1.71	1.27
1:A:175:PHE:O	1:A:179:ASP:CA	1.80	1.27
1:A:9:LEU:HD22	1:A:296:TYR:OH	1.29	1.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:67:ILE:HA	1:A:75:GLU:O	1.15	1.26
1:A:76:VAL:CG2	1:A:119:PHE:CE1	2.18	1.26
1:A:249:PHE:CZ	1:A:250:ARG:CB	2.19	1.26
1:A:419:UNK:HA	1:A:422:LYS:CD	1.65	1.26
1:A:146:VAL:O	1:A:148:LYS:N	1.65	1.26
1:A:250:ARG:CD	1:A:256:LEU:CB	2.14	1.26
1:A:370:VAL:CG1	1:A:371:VAL:N	1.74	1.26
1:A:191:HIS:CB	1:A:241:UNK:CE	2.14	1.26
1:A:140:ALA:CB	1:A:153:UNK:H	1.48	1.25
1:A:371:VAL:CG1	1:A:404:SER:HA	1.65	1.25
1:A:249:PHE:CZ	1:A:250:ARG:HB3	1.69	1.25
1:A:142:ALA:HB2	1:A:152:THR:OG1	1.11	1.25
1:A:250:ARG:HE	1:A:256:LEU:N	1.35	1.25
1:A:234:UNK:C	1:A:236:GLY:H	1.48	1.24
1:A:147:ILE:HD12	1:A:183:UNK:O	1.18	1.24
1:A:327:LEU:CD1	1:A:332:LEU:HB3	1.65	1.24
1:A:105:PRO:O	1:A:109:TRP:HB2	1.13	1.23
1:A:250:ARG:CD	1:A:256:LEU:H	1.51	1.23
1:A:166:LEU:HD12	1:A:169:ALA:CB	1.58	1.23
1:A:269:SER:OG	1:A:270:PRO:CD	1.85	1.23
1:A:210:PHE:CE2	1:A:370:VAL:CG2	2.14	1.22
1:A:355:VAL:O	1:A:359:LEU:HG	1.34	1.22
1:A:140:ALA:CB	1:A:151:ILE:HD13	1.50	1.22
1:A:144:GLU:OE2	1:A:148:LYS:HB2	1.33	1.22
1:A:148:LYS:CE	1:A:186:ASP:HB3	1.69	1.22
1:A:55:GLN:NE2	1:A:239:UNK:CG	2.01	1.22
1:A:329:HIS:HB2	1:A:333:ARG:NH1	1.52	1.22
1:A:289:LEU:CD2	1:A:359:LEU:HD23	1.68	1.21
1:A:114:UNK:O	1:A:117:ALA:CB	1.86	1.21
1:A:64:PHE:CB	1:A:438:UNK:HG2	1.69	1.21
1:A:269:SER:OG	1:A:270:PRO:HD2	1.40	1.21
1:A:75:GLU:HA	1:A:92:SER:OG	1.40	1.21
1:A:16:VAL:CG1	1:A:259:ILE:HD11	1.71	1.21
1:A:58:GLY:CA	1:A:199:TYR:CE2	2.23	1.21
1:A:140:ALA:HB1	1:A:153:UNK:N	1.55	1.20
1:A:103:ALA:O	1:A:104:ILE:CB	1.90	1.20
1:A:192:GLY:CA	1:A:436:ALA:CB	2.19	1.20
1:A:251:LYS:HG2	1:A:275:THR:CG2	1.57	1.20
1:A:250:ARG:NE	1:A:256:LEU:N	1.86	1.20
1:A:175:PHE:O	1:A:179:ASP:HA	1.02	1.19
1:A:419:UNK:C	1:A:422:LYS:HB2	1.71	1.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:109:TRP:CZ3	1:A:109:TRP:CZ2	2.01	1.19
1:A:114:UNK:O	1:A:117:ALA:HB3	1.05	1.19
1:A:3:ALA:O	1:A:5:UNK:N	1.75	1.19
1:A:221:ASP:OD2	1:A:223:THR:HG23	1.41	1.19
1:A:265:LEU:O	1:A:269:SER:CB	1.91	1.19
1:A:304:UNK:O	1:A:305:UNK:HG2	1.43	1.18
1:A:36:ASP:OD2	1:A:380:LYS:HE2	1.43	1.17
1:A:166:LEU:HD11	1:A:169:ALA:CB	1.73	1.17
1:A:175:PHE:CE1	1:A:183:UNK:CG	2.26	1.17
1:A:109:TRP:CH2	1:A:109:TRP:CE3	2.06	1.17
1:A:419:UNK:O	1:A:422:LYS:HB2	1.44	1.17
1:A:148:LYS:HE2	1:A:186:ASP:HB3	1.24	1.17
1:A:193:ILE:O	1:A:197:VAL:HG13	1.44	1.17
1:A:197:VAL:CG2	1:A:204:ILE:CD1	2.21	1.17
1:A:246:GLN:NE2	1:A:373:UNK:HG1	1.60	1.17
1:A:150:GLN:HB2	1:A:166:LEU:HD23	1.27	1.17
1:A:51:TRP:HE1	1:A:143:LYS:C	1.51	1.16
1:A:146:VAL:C	1:A:148:LYS:N	1.91	1.16
1:A:70:GLY:HA2	1:A:158:PHE:CE2	1.80	1.16
1:A:148:LYS:HE2	1:A:149:GLY:CA	1.75	1.16
1:A:419:UNK:CA	1:A:422:LYS:HD2	1.73	1.16
1:A:192:GLY:HA3	1:A:436:ALA:CB	1.76	1.16
1:A:375:UNK:CD	1:A:411:ILE:HD13	1.75	1.15
1:A:79:ILE:HG23	1:A:438:UNK:HG1	1.21	1.15
1:A:108:LEU:HD12	1:A:160:LEU:HD13	1.26	1.15
1:A:317:ASN:ND2	1:A:318:SER:N	1.92	1.15
1:A:42:ALA:O	1:A:43:ALA:CB	1.86	1.15
1:A:77:ILE:CG2	1:A:88:SER:HB2	1.76	1.15
1:A:34:ARG:NH2	1:A:45:ILE:H	1.43	1.14
1:A:156:UNK:O	1:A:157:ALA:CB	1.94	1.14
1:A:175:PHE:HE2	1:A:181:UNK:CD	1.59	1.14
1:A:365:TYR:O	1:A:369:LEU:HB2	1.46	1.14
1:A:148:LYS:HE2	1:A:149:GLY:HA3	1.16	1.14
1:A:221:ASP:CG	1:A:223:THR:HG23	1.73	1.13
1:A:213:GLY:CA	1:A:277:GLU:OE2	1.96	1.13
1:A:299:UNK:HB2	1:A:301:GLN:NE2	1.62	1.13
1:A:140:ALA:CB	1:A:151:ILE:HD11	1.59	1.13
1:A:367:PHE:HZ	1:A:397:TYR:CE1	1.67	1.13
1:A:89:ILE:O	1:A:89:ILE:HG13	1.40	1.12
1:A:194:LEU:O	1:A:198:ASN:HB2	1.46	1.12
1:A:414:TRP:CZ3	1:A:422:LYS:HG2	1.83	1.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:414:TRP:HZ3	1:A:422:LYS:CG	1.62	1.12
1:A:251:LYS:HG3	1:A:275:THR:HG21	1.27	1.12
1:A:56:VAL:CG2	1:A:199:TYR:HD2	1.63	1.11
1:A:142:ALA:CB	1:A:152:THR:OG1	1.97	1.11
1:A:148:LYS:CE	1:A:149:GLY:CA	2.24	1.11
1:A:156:UNK:O	1:A:157:ALA:HB3	1.35	1.11
1:A:16:VAL:HG13	1:A:259:ILE:HD11	1.17	1.11
1:A:76:VAL:HG23	1:A:119:PHE:HE1	0.97	1.11
1:A:166:LEU:HD11	1:A:169:ALA:HB2	1.24	1.11
1:A:339:PHE:O	1:A:340:UNK:O	1.68	1.11
1:A:436:ALA:O	1:A:440:ILE:CG1	1.97	1.11
1:A:16:VAL:HG13	1:A:259:ILE:HD12	1.21	1.11
1:A:137:PHE:CE2	1:A:139:GLU:HB3	1.85	1.10
1:A:328:PRO:HG2	1:A:334:UNK:CE	1.79	1.10
1:A:94:SER:O	1:A:96:ALA:N	1.83	1.10
1:A:102:THR:HG22	1:A:160:LEU:HA	1.32	1.10
1:A:103:ALA:HB1	1:A:162:UNK:HB2	1.30	1.10
1:A:320:TYR:HD2	1:A:338:LEU:HD21	0.96	1.10
1:A:253:PHE:N	1:A:254:PRO:HD3	1.67	1.10
1:A:450:UNK:CG	1:A:452:UNK:HG2	1.80	1.10
1:A:144:GLU:O	1:A:455:ALA:HB1	1.50	1.10
1:A:250:ARG:CD	1:A:256:LEU:N	2.15	1.10
1:A:259:ILE:HG23	1:A:260:UNK:N	1.65	1.09
1:A:320:TYR:CD2	1:A:338:LEU:HD21	1.86	1.09
1:A:150:GLN:CB	1:A:166:LEU:HD23	1.82	1.09
1:A:166:LEU:C	1:A:168:SER:H	1.59	1.09
1:A:312:ALA:O	1:A:315:VAL:HG12	1.50	1.09
1:A:326:LYS:HB3	1:A:326:LYS:NZ	1.65	1.09
1:A:397:TYR:C	1:A:397:TYR:HD2	1.45	1.09
1:A:143:LYS:HZ1	1:A:191:HIS:CE1	1.53	1.09
1:A:192:GLY:HA2	1:A:436:ALA:HB1	1.25	1.09
1:A:197:VAL:HG21	1:A:204:ILE:CD1	1.82	1.09
1:A:210:PHE:HE2	1:A:370:VAL:HG22	1.15	1.09
1:A:397:TYR:HE2	1:A:398:SER:O	1.15	1.09
1:A:51:TRP:NE1	1:A:51:TRP:CE2	2.02	1.08
1:A:82:ALA:O	1:A:85:GLN:CG	2.01	1.08
1:A:414:TRP:HZ3	1:A:422:LYS:HG2	0.95	1.08
1:A:54:LYS:H	1:A:54:LYS:HE2	0.98	1.08
1:A:56:VAL:HG21	1:A:199:TYR:CB	1.82	1.08
1:A:108:LEU:HG	1:A:160:LEU:HD22	1.31	1.08
1:A:386:GLY:O	1:A:387:HIS:HD2	1.33	1.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:397:TYR:CD2	1:A:398:SER:O	2.06	1.08
1:A:303:HIS:N	1:A:351:MET:CE	2.15	1.08
1:A:14:UNK:O	1:A:18:ILE:HB	1.53	1.08
1:A:172:ASN:O	1:A:175:PHE:CB	2.00	1.08
1:A:252:ALA:C	1:A:254:PRO:CD	2.26	1.08
1:A:64:PHE:HB2	1:A:438:UNK:CG	1.81	1.07
1:A:77:ILE:HG22	1:A:88:SER:HB2	1.12	1.07
1:A:84:TYR:HE1	1:A:199:TYR:O	1.37	1.07
1:A:431:ASP:O	1:A:435:ALA:CB	2.01	1.07
1:A:16:VAL:CG1	1:A:259:ILE:CD1	2.29	1.07
1:A:258:GLN:HA	1:A:279:ASN:HD21	1.09	1.07
1:A:317:ASN:HD21	1:A:319:SER:N	1.52	1.07
1:A:68:VAL:CG2	1:A:433:GLU:HG2	1.85	1.07
1:A:102:THR:CG2	1:A:160:LEU:HB3	1.83	1.07
1:A:39:ASP:O	1:A:226:ALA:HB3	1.54	1.07
1:A:130:SER:O	1:A:131:VAL:O	1.71	1.06
1:A:103:ALA:O	1:A:104:ILE:HB	1.30	1.06
1:A:419:UNK:O	1:A:422:LYS:CB	2.04	1.06
1:A:108:LEU:CG	1:A:160:LEU:HD22	1.84	1.06
1:A:149:GLY:O	1:A:168:SER:HB3	1.54	1.06
1:A:166:LEU:HD13	1:A:169:ALA:N	1.69	1.06
1:A:249:PHE:CE2	1:A:250:ARG:CB	2.37	1.06
1:A:61:ALA:HA	1:A:81:LEU:HB2	1.33	1.06
1:A:146:VAL:C	1:A:148:LYS:H	1.45	1.06
1:A:48:VAL:O	1:A:243:CYS:HB3	1.56	1.05
1:A:148:LYS:NZ	1:A:186:ASP:CB	2.10	1.05
1:A:370:VAL:HG13	1:A:371:VAL:N	1.41	1.05
1:A:76:VAL:O	1:A:90:UNK:CB	2.05	1.05
1:A:146:VAL:HA	1:A:148:LYS:CD	1.87	1.05
1:A:299:UNK:HB2	1:A:301:GLN:HE21	0.91	1.05
1:A:303:HIS:N	1:A:351:MET:HE3	1.72	1.05
1:A:79:ILE:HG13	1:A:80:UNK:N	1.64	1.04
1:A:250:ARG:O	1:A:250:ARG:HG2	1.49	1.04
1:A:371:VAL:HG11	1:A:404:SER:CB	1.88	1.04
1:A:22:UNK:CG	1:A:23:ILE:CD1	2.19	1.04
1:A:78:LEU:O	1:A:88:SER:HA	1.56	1.04
1:A:108:LEU:CD1	1:A:160:LEU:HD13	1.86	1.04
1:A:113:ALA:O	1:A:116:ASN:N	1.89	1.04
1:A:56:VAL:CG2	1:A:199:TYR:CD2	2.41	1.04
1:A:68:VAL:HG23	1:A:433:GLU:HG2	1.36	1.04
1:A:143:LYS:NZ	1:A:191:HIS:HE1	1.31	1.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:42:ALA:O	1:A:43:ALA:HB2	1.22	1.04
1:A:167:ILE:HA	1:A:170:MET:HE3	1.36	1.04
1:A:168:SER:O	1:A:170:MET:N	1.89	1.04
1:A:172:ASN:HA	1:A:175:PHE:HD1	0.88	1.04
1:A:233:UNK:O	1:A:233:UNK:HG3	1.50	1.04
1:A:371:VAL:HG11	1:A:404:SER:HA	1.07	1.04
1:A:95:LEU:HD23	1:A:99:MET:HE3	1.34	1.03
1:A:38:UNK:HB2	1:A:43:ALA:CB	1.89	1.03
1:A:108:LEU:HD12	1:A:160:LEU:HD11	1.41	1.03
1:A:150:GLN:HA	1:A:166:LEU:HD22	1.39	1.03
1:A:172:ASN:CA	1:A:175:PHE:HD1	1.69	1.03
1:A:213:GLY:HA2	1:A:277:GLU:OE2	1.55	1.03
1:A:367:PHE:HZ	1:A:397:TYR:CZ	1.76	1.03
1:A:76:VAL:HG23	1:A:119:PHE:CE1	1.87	1.02
1:A:192:GLY:CA	1:A:436:ALA:HB2	1.85	1.02
1:A:250:ARG:NH1	1:A:253:PHE:CD2	2.06	1.02
1:A:371:VAL:HG21	1:A:404:SER:O	1.57	1.02
1:A:419:UNK:CA	1:A:422:LYS:HB2	1.88	1.02
1:A:38:UNK:HB2	1:A:43:ALA:HB3	1.38	1.02
1:A:70:GLY:O	1:A:158:PHE:HZ	1.43	1.02
1:A:146:VAL:CA	1:A:148:LYS:CD	2.36	1.02
1:A:175:PHE:C	1:A:179:ASP:HA	1.85	1.02
1:A:397:TYR:CD2	1:A:397:TYR:O	2.03	1.02
1:A:249:PHE:HE2	1:A:256:LEU:HD22	0.99	1.02
1:A:250:ARG:HD3	1:A:256:LEU:CB	1.84	1.02
1:A:9:LEU:CD2	1:A:296:TYR:OH	2.08	1.02
1:A:55:GLN:HE22	1:A:239:UNK:HG2	1.23	1.02
1:A:253:PHE:N	1:A:254:PRO:CD	2.22	1.01
1:A:129:GLY:O	1:A:130:SER:HB3	1.55	1.01
1:A:133:LEU:O	1:A:184:VAL:HG22	1.57	1.01
1:A:163:LEU:O	1:A:164:UNK:CB	2.08	1.01
1:A:250:ARG:HD2	1:A:256:LEU:N	1.75	1.01
1:A:302:UNK:HB2	1:A:351:MET:SD	1.99	1.01
1:A:371:VAL:CG1	1:A:404:SER:CA	2.28	1.01
1:A:246:GLN:HE22	1:A:373:UNK:CG	1.72	1.01
1:A:286:GLY:HA2	1:A:321:PRO:HG3	1.05	1.01
1:A:264:THR:O	1:A:266:ASN:N	1.94	1.01
1:A:299:UNK:CB	1:A:301:GLN:HE21	1.74	1.01
1:A:412:TYR:HB3	1:A:414:TRP:NE1	1.76	1.01
1:A:207:GLY:O	1:A:217:ALA:N	1.92	1.01
1:A:76:VAL:HG21	1:A:119:PHE:CE1	1.93	1.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:329:HIS:ND1	1:A:333:ARG:CZ	2.24	1.00
1:A:387:HIS:HA	1:A:425:UNK:O	1.58	1.00
1:A:144:GLU:OE2	1:A:148:LYS:CB	2.09	1.00
1:A:148:LYS:NZ	1:A:186:ASP:N	2.08	1.00
1:A:317:ASN:ND2	1:A:319:SER:N	2.09	1.00
1:A:149:GLY:O	1:A:168:SER:CB	2.10	1.00
1:A:163:LEU:O	1:A:164:UNK:HB1	1.58	1.00
1:A:249:PHE:CZ	1:A:250:ARG:HB2	1.95	1.00
1:A:56:VAL:HG23	1:A:199:TYR:CD2	1.96	1.00
1:A:197:VAL:CG2	1:A:204:ILE:HD12	1.87	1.00
1:A:140:ALA:HB3	1:A:151:ILE:HD11	1.14	1.00
1:A:140:ALA:HB2	1:A:153:UNK:C	1.90	1.00
1:A:188:UNK:CD	1:A:190:SER:HB2	1.91	0.99
1:A:148:LYS:NZ	1:A:186:ASP:HB3	1.75	0.99
1:A:58:GLY:HA2	1:A:199:TYR:CD2	1.97	0.99
1:A:193:ILE:CG1	1:A:207:GLY:HA2	1.92	0.99
1:A:84:TYR:CE1	1:A:199:TYR:O	2.16	0.99
1:A:286:GLY:HA2	1:A:321:PRO:CG	1.92	0.99
1:A:67:ILE:CA	1:A:75:GLU:O	2.09	0.99
1:A:180:UNK:O	1:A:180:UNK:CD	2.11	0.99
1:A:168:SER:C	1:A:170:MET:H	1.66	0.99
1:A:164:UNK:CD	1:A:164:UNK:O	2.10	0.99
1:A:70:GLY:C	1:A:158:PHE:HZ	1.71	0.99
1:A:95:LEU:HD23	1:A:99:MET:CE	1.82	0.99
1:A:108:LEU:CD1	1:A:160:LEU:CD1	2.41	0.99
1:A:147:ILE:CD1	1:A:183:UNK:O	2.11	0.99
1:A:50:GLY:HA3	1:A:241:UNK:CD	1.93	0.98
1:A:167:ILE:CA	1:A:170:MET:HE3	1.92	0.98
1:A:219:TRP:CZ3	1:A:241:UNK:N	2.31	0.98
1:A:286:GLY:O	1:A:289:LEU:HB2	1.62	0.98
1:A:46:PRO:HG2	1:A:248:SER:OG	1.63	0.98
1:A:192:GLY:HA2	1:A:436:ALA:CB	1.85	0.98
1:A:246:GLN:HE22	1:A:373:UNK:HG1	1.12	0.98
1:A:416:GLN:HE22	1:A:423:PRO:HD2	1.26	0.98
1:A:55:GLN:NE2	1:A:239:UNK:HG1	1.78	0.98
1:A:56:VAL:HG21	1:A:199:TYR:HB2	1.42	0.98
1:A:193:ILE:HG13	1:A:207:GLY:HA2	1.42	0.98
1:A:243:CYS:O	1:A:243:CYS:SG	2.21	0.98
1:A:431:ASP:HB3	1:A:435:ALA:HB2	1.44	0.98
1:A:449:UNK:HG2	1:A:450:UNK:H2	1.28	0.98
1:A:310:PHE:O	1:A:315:VAL:HG11	1.62	0.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:450:UNK:HG3	1:A:452:UNK:HG2	1.45	0.98
1:A:175:PHE:CB	1:A:176:PRO:CD	2.42	0.98
1:A:48:VAL:O	1:A:243:CYS:N	1.96	0.98
1:A:193:ILE:O	1:A:197:VAL:CG1	2.12	0.97
1:A:303:HIS:H	1:A:351:MET:HE1	1.28	0.97
1:A:146:VAL:O	1:A:147:ILE:C	2.04	0.97
1:A:370:VAL:HG12	1:A:371:VAL:HG13	1.46	0.97
1:A:175:PHE:HB3	1:A:176:PRO:HD3	1.46	0.97
1:A:282:ALA:CB	1:A:394:UNK:CD	2.42	0.97
1:A:79:ILE:HD12	1:A:87:SER:H	1.28	0.97
1:A:281:UNK:HG3	1:A:282:ALA:N	1.74	0.97
1:A:249:PHE:CD2	1:A:276:PHE:HB2	1.99	0.97
1:A:109:TRP:HZ2	1:A:167:ILE:O	1.45	0.97
1:A:146:VAL:HA	1:A:148:LYS:HD2	0.98	0.97
1:A:191:HIS:O	1:A:193:ILE:N	1.97	0.97
1:A:70:GLY:HA2	1:A:158:PHE:CZ	2.00	0.97
1:A:9:LEU:CD2	1:A:296:TYR:CZ	2.47	0.96
1:A:69:MET:HE2	1:A:108:LEU:HD11	1.46	0.96
1:A:166:LEU:O	1:A:168:SER:N	1.99	0.96
1:A:324:ILE:O	1:A:327:LEU:HB2	1.62	0.96
1:A:82:ALA:O	1:A:85:GLN:HG2	1.62	0.96
1:A:329:HIS:HB2	1:A:333:ARG:HH11	1.09	0.96
1:A:329:HIS:CB	1:A:333:ARG:HH11	1.77	0.96
1:A:416:GLN:HE22	1:A:423:PRO:CD	1.64	0.96
1:A:175:PHE:O	1:A:179:ASP:N	1.96	0.96
1:A:289:LEU:CD2	1:A:359:LEU:CD2	2.35	0.96
1:A:251:LYS:CG	1:A:275:THR:HG21	1.81	0.96
1:A:166:LEU:HD13	1:A:169:ALA:H	1.24	0.96
1:A:200:THR:HG21	1:A:430:ILE:HG13	1.44	0.96
1:A:371:VAL:CG1	1:A:404:SER:CB	2.44	0.96
1:A:303:HIS:HD2	1:A:308:UNK:CE	1.78	0.96
1:A:143:LYS:HZ2	1:A:191:HIS:CE1	1.80	0.95
1:A:146:VAL:O	1:A:148:LYS:CD	2.14	0.95
1:A:20:PRO:CD	1:A:23:ILE:HG12	1.94	0.95
1:A:193:ILE:HA	1:A:197:VAL:CG1	1.94	0.95
1:A:175:PHE:CB	1:A:176:PRO:HD3	1.97	0.95
1:A:175:PHE:CE2	1:A:181:UNK:CD	2.49	0.95
1:A:102:THR:HG22	1:A:160:LEU:CA	1.96	0.95
1:A:140:ALA:HB2	1:A:151:ILE:HD11	1.46	0.95
1:A:386:GLY:C	1:A:387:HIS:HD2	1.73	0.95
1:A:49:PRO:HA	1:A:242:VAL:HA	1.47	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:326:LYS:HB3	1:A:326:LYS:HZ3	1.23	0.94
1:A:102:THR:CG2	1:A:160:LEU:HA	1.97	0.94
1:A:148:LYS:HZ3	1:A:186:ASP:N	1.62	0.94
1:A:69:MET:CE	1:A:108:LEU:CD1	2.45	0.94
1:A:325:GLN:NE2	1:A:359:LEU:O	2.01	0.94
1:A:327:LEU:CD1	1:A:332:LEU:CB	2.45	0.94
1:A:20:PRO:HD2	1:A:23:ILE:HG12	1.46	0.94
1:A:68:VAL:HG13	1:A:68:VAL:O	1.67	0.94
1:A:108:LEU:CG	1:A:160:LEU:HD13	1.97	0.94
1:A:192:GLY:CA	1:A:436:ALA:HB1	1.87	0.94
1:A:193:ILE:C	1:A:197:VAL:HG13	1.92	0.94
1:A:265:LEU:H	1:A:265:LEU:HD23	1.31	0.94
1:A:365:TYR:HD1	1:A:366:ALA:H	1.14	0.94
1:A:38:UNK:CB	1:A:43:ALA:HB3	1.97	0.94
1:A:46:PRO:CG	1:A:248:SER:OG	2.16	0.94
1:A:213:GLY:HA3	1:A:277:GLU:OE2	1.64	0.94
1:A:108:LEU:HG	1:A:160:LEU:CD2	1.97	0.94
1:A:303:HIS:H	1:A:351:MET:HE3	1.29	0.94
1:A:148:LYS:HZ3	1:A:186:ASP:H	0.96	0.93
1:A:206:MET:HE2	1:A:216:ALA:HB1	1.49	0.93
1:A:282:ALA:HB2	1:A:394:UNK:CD	1.98	0.93
1:A:424:ILE:HG22	1:A:424:ILE:O	1.66	0.93
1:A:367:PHE:CZ	1:A:397:TYR:CZ	2.55	0.93
1:A:103:ALA:O	1:A:104:ILE:CG2	2.16	0.93
1:A:414:TRP:CZ3	1:A:422:LYS:CG	2.47	0.93
1:A:196:UNK:HG1	1:A:435:ALA:HB1	1.50	0.93
1:A:105:PRO:HA	1:A:109:TRP:CB	1.92	0.93
1:A:211:GLY:O	1:A:282:ALA:HB3	1.67	0.93
1:A:320:TYR:HB2	1:A:321:PRO:HD2	1.51	0.93
1:A:77:ILE:HG22	1:A:88:SER:CB	1.99	0.93
1:A:298:UNK:C	1:A:300:GLY:H	1.79	0.93
1:A:329:HIS:NE2	1:A:332:LEU:N	2.17	0.93
1:A:143:LYS:HZ3	1:A:191:HIS:HE1	1.09	0.92
1:A:148:LYS:CE	1:A:186:ASP:O	2.16	0.92
1:A:151:ILE:HG21	1:A:164:UNK:C	1.98	0.92
1:A:220:CYS:SG	1:A:224:UNK:CB	2.56	0.92
1:A:34:ARG:HH21	1:A:45:ILE:H	1.05	0.92
1:A:58:GLY:CA	1:A:199:TYR:HE2	1.76	0.92
1:A:69:MET:HE2	1:A:108:LEU:CD1	1.98	0.92
1:A:220:CYS:SG	1:A:224:UNK:HB1	2.09	0.92
1:A:105:PRO:C	1:A:109:TRP:CB	2.18	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:50:GLY:HA2	1:A:143:LYS:NZ	1.85	0.92
1:A:302:UNK:O	1:A:303:HIS:HB2	1.68	0.92
1:A:250:ARG:HD2	1:A:256:LEU:HB2	1.51	0.92
1:A:89:ILE:O	1:A:89:ILE:CG1	2.18	0.92
1:A:327:LEU:HD11	1:A:332:LEU:HB3	1.52	0.92
1:A:54:LYS:HE2	1:A:54:LYS:N	1.84	0.92
1:A:192:GLY:HA3	1:A:436:ALA:HB2	1.47	0.92
1:A:89:ILE:HD13	1:A:123:GLU:OE2	1.69	0.91
1:A:191:HIS:HB2	1:A:241:UNK:CE	2.00	0.91
1:A:367:PHE:CZ	1:A:397:TYR:CE1	2.57	0.91
1:A:194:LEU:O	1:A:198:ASN:CB	2.18	0.91
1:A:416:GLN:HE21	1:A:423:PRO:HD3	1.12	0.91
1:A:445:SER:O	1:A:448:UNK:HB2	1.69	0.91
1:A:370:VAL:HG12	1:A:371:VAL:H	0.75	0.91
1:A:219:TRP:CE3	1:A:240:MET:C	2.48	0.91
1:A:56:VAL:HG23	1:A:199:TYR:HD2	1.27	0.91
1:A:79:ILE:CG2	1:A:438:UNK:HG1	2.00	0.91
1:A:102:THR:CG2	1:A:160:LEU:CB	2.48	0.91
1:A:317:ASN:HD22	1:A:318:SER:N	1.62	0.91
1:A:246:GLN:NE2	1:A:373:UNK:CG	2.32	0.90
1:A:186:ASP:C	1:A:186:ASP:OD2	2.15	0.90
1:A:70:GLY:C	1:A:158:PHE:CZ	2.48	0.90
1:A:273:UNK:O	1:A:278:LYS:HD2	1.70	0.90
1:A:331:ASP:O	1:A:349:THR:HG23	1.72	0.90
1:A:450:UNK:HG2	1:A:452:UNK:HG2	1.52	0.90
1:A:208:ILE:HD11	1:A:390:ALA:HB2	1.51	0.90
1:A:317:ASN:C	1:A:317:ASN:ND2	2.06	0.90
1:A:329:HIS:CB	1:A:333:ARG:NH1	2.34	0.90
1:A:386:GLY:C	1:A:387:HIS:CD2	2.49	0.90
1:A:419:UNK:HA	1:A:422:LYS:HD2	0.93	0.90
1:A:14:UNK:O	1:A:18:ILE:CB	2.20	0.90
1:A:329:HIS:CD2	1:A:332:LEU:H	1.88	0.90
1:A:241:UNK:O	1:A:241:UNK:CG	2.11	0.89
1:A:79:ILE:HD12	1:A:87:SER:N	1.87	0.89
1:A:148:LYS:CE	1:A:186:ASP:CB	2.46	0.89
1:A:148:LYS:HE2	1:A:186:ASP:CB	2.01	0.89
1:A:95:LEU:CD2	1:A:99:MET:HE1	1.99	0.89
1:A:355:VAL:O	1:A:359:LEU:CG	2.21	0.89
1:A:448:UNK:O	1:A:449:UNK:O	1.88	0.89
1:A:79:ILE:HG23	1:A:438:UNK:CG	2.02	0.89
1:A:191:HIS:HB3	1:A:241:UNK:CE	2.03	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:414:TRP:CE3	1:A:423:PRO:HD2	2.06	0.89
1:A:68:VAL:HG23	1:A:433:GLU:CG	2.02	0.89
1:A:70:GLY:CA	1:A:158:PHE:CE2	2.56	0.89
1:A:236:GLY:O	1:A:237:ALA:HB2	1.71	0.89
1:A:371:VAL:O	1:A:375:UNK:CD	2.21	0.89
1:A:55:GLN:HE22	1:A:239:UNK:CG	1.78	0.89
1:A:148:LYS:NZ	1:A:186:ASP:H	1.70	0.88
1:A:148:LYS:HZ2	1:A:186:ASP:C	1.55	0.88
1:A:58:GLY:H	1:A:60:GLN:HE22	1.15	0.88
1:A:105:PRO:CA	1:A:109:TRP:CB	2.13	0.88
1:A:288:SER:O	1:A:292:VAL:HG22	1.73	0.88
1:A:210:PHE:O	1:A:394:UNK:HB2	1.72	0.88
1:A:58:GLY:O	1:A:84:TYR:CA	2.20	0.88
1:A:95:LEU:O	1:A:96:ALA:C	2.15	0.88
1:A:197:VAL:HG21	1:A:204:ILE:HD11	1.53	0.87
1:A:250:ARG:HD3	1:A:256:LEU:HB2	0.88	0.87
1:A:23:ILE:CD1	1:A:23:ILE:N	2.37	0.87
1:A:251:LYS:C	1:A:253:PHE:H	1.78	0.87
1:A:75:GLU:HG3	1:A:91:ALA:O	1.75	0.87
1:A:150:GLN:CB	1:A:166:LEU:CD2	2.52	0.87
1:A:326:LYS:HD2	1:A:398:SER:HA	1.57	0.87
1:A:150:GLN:CA	1:A:166:LEU:CD2	2.52	0.87
1:A:320:TYR:HD2	1:A:338:LEU:CD2	1.85	0.87
1:A:371:VAL:CG1	1:A:404:SER:HB3	2.05	0.87
1:A:54:LYS:H	1:A:54:LYS:CE	1.87	0.87
1:A:150:GLN:CA	1:A:166:LEU:HD22	2.03	0.87
1:A:249:PHE:HD2	1:A:276:PHE:HB2	1.37	0.87
1:A:365:TYR:CD1	1:A:366:ALA:N	2.43	0.87
1:A:20:PRO:HD2	1:A:23:ILE:CG1	2.05	0.87
1:A:191:HIS:C	1:A:193:ILE:H	1.78	0.87
1:A:146:VAL:C	1:A:148:LYS:HD3	2.00	0.86
1:A:250:ARG:NE	1:A:256:LEU:CB	2.37	0.86
1:A:109:TRP:CZ3	1:A:109:TRP:CH2	0.87	0.86
1:A:402:UNK:HG2	1:A:406:THR:CG2	2.04	0.86
1:A:146:VAL:C	1:A:148:LYS:CD	2.49	0.86
1:A:20:PRO:HD2	1:A:23:ILE:HB	1.58	0.86
1:A:48:VAL:O	1:A:243:CYS:CB	2.23	0.86
1:A:75:GLU:CG	1:A:90:UNK:HB2	2.06	0.86
1:A:299:UNK:CB	1:A:301:GLN:NE2	2.35	0.86
1:A:216:ALA:O	1:A:244:CYS:HB2	1.75	0.86
1:A:317:ASN:CG	1:A:318:SER:N	2.23	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:397:TYR:CD2	1:A:398:SER:N	2.44	0.86
1:A:75:GLU:CA	1:A:92:SER:OG	2.24	0.86
1:A:50:GLY:HA2	1:A:143:LYS:CE	2.06	0.85
1:A:197:VAL:CG2	1:A:204:ILE:CG1	2.54	0.85
1:A:39:ASP:O	1:A:226:ALA:CB	2.24	0.85
1:A:140:ALA:HB1	1:A:153:UNK:H	0.71	0.85
1:A:312:ALA:HB3	1:A:315:VAL:CG1	2.06	0.85
1:A:208:ILE:HG12	1:A:388:ILE:HG22	1.59	0.85
1:A:99:MET:SD	1:A:108:LEU:CD2	2.64	0.85
1:A:208:ILE:HD12	1:A:390:ALA:HA	1.57	0.85
1:A:348:LYS:O	1:A:351:MET:N	2.09	0.85
1:A:66:ALA:C	1:A:67:ILE:HG23	2.00	0.85
1:A:386:GLY:O	1:A:387:HIS:CD2	2.26	0.85
1:A:38:UNK:CB	1:A:43:ALA:CB	2.53	0.85
1:A:175:PHE:CE1	1:A:183:UNK:HG2	2.10	0.85
1:A:251:LYS:C	1:A:253:PHE:N	2.31	0.85
1:A:20:PRO:HG2	1:A:22:UNK:CD	2.07	0.85
1:A:357:ARG:O	1:A:360:PHE:HB2	1.77	0.85
1:A:104:ILE:CG2	1:A:106:SER:HB2	2.06	0.84
1:A:286:GLY:CA	1:A:321:PRO:HG3	1.99	0.84
1:A:221:ASP:OD2	1:A:223:THR:CG2	2.24	0.84
1:A:259:ILE:CG2	1:A:260:UNK:N	2.37	0.84
1:A:250:ARG:HD2	1:A:256:LEU:CA	2.07	0.84
1:A:2:ALA:CB	1:A:350:UNK:HB1	2.07	0.84
1:A:250:ARG:NE	1:A:256:LEU:CA	2.39	0.84
1:A:70:GLY:CA	1:A:158:PHE:CZ	2.60	0.84
1:A:120:SER:O	1:A:123:GLU:N	2.11	0.84
1:A:329:HIS:ND1	1:A:333:ARG:NE	2.24	0.84
1:A:322:ALA:O	1:A:326:LYS:HG2	1.78	0.84
1:A:189:ASP:HB3	1:A:433:GLU:HG3	1.57	0.84
1:A:51:TRP:NE1	1:A:143:LYS:C	2.35	0.84
1:A:95:LEU:HA	1:A:99:MET:CE	2.08	0.84
1:A:104:ILE:C	1:A:106:SER:H	1.82	0.84
1:A:175:PHE:CE1	1:A:183:UNK:HG3	2.11	0.84
1:A:250:ARG:O	1:A:250:ARG:CG	2.26	0.84
1:A:303:HIS:CD2	1:A:308:UNK:CE	2.60	0.84
1:A:365:TYR:HD1	1:A:366:ALA:N	1.75	0.84
1:A:126:SER:OG	1:A:127:UNK:N	2.11	0.83
1:A:197:VAL:HG22	1:A:204:ILE:CD1	2.07	0.83
1:A:250:ARG:CD	1:A:256:LEU:CA	2.55	0.83
1:A:137:PHE:CE2	1:A:139:GLU:CB	2.60	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:70:GLY:HA2	1:A:158:PHE:HE2	1.43	0.83
1:A:197:VAL:HG21	1:A:204:ILE:HD12	1.49	0.83
1:A:221:ASP:OD1	1:A:223:THR:N	2.03	0.83
1:A:20:PRO:O	1:A:23:ILE:HB	1.79	0.83
1:A:140:ALA:HB3	1:A:151:ILE:HD13	0.83	0.83
1:A:20:PRO:HD2	1:A:23:ILE:CB	2.08	0.83
1:A:56:VAL:HG21	1:A:199:TYR:CA	2.06	0.83
1:A:178:GLY:O	1:A:179:ASP:OD1	1.97	0.83
1:A:197:VAL:CG2	1:A:204:ILE:HG13	2.08	0.83
1:A:105:PRO:O	1:A:109:TRP:CA	2.26	0.83
1:A:230:ASP:OD2	1:A:230:ASP:N	2.10	0.83
1:A:402:UNK:HG2	1:A:406:THR:HG23	1.59	0.83
1:A:30:ILE:HD12	1:A:255:SER:HB2	1.61	0.83
1:A:281:UNK:CG	1:A:282:ALA:N	2.40	0.83
1:A:307:ALA:O	1:A:345:ILE:HD11	1.78	0.83
1:A:449:UNK:HG2	1:A:450:UNK:N	1.94	0.83
1:A:93:ARG:HH22	1:A:118:ALA:HB3	1.44	0.82
1:A:287:GLN:NE2	1:A:314:ASN:ND2	2.26	0.82
1:A:370:VAL:HG12	1:A:371:VAL:N	1.57	0.82
1:A:371:VAL:HG12	1:A:404:SER:HB3	1.60	0.82
1:A:221:ASP:C	1:A:223:THR:H	1.87	0.82
1:A:269:SER:OG	1:A:270:PRO:HD3	1.77	0.82
1:A:397:TYR:CE2	1:A:398:SER:C	2.56	0.82
1:A:66:ALA:HB1	1:A:434:GLY:HA2	1.59	0.82
1:A:209:ILE:HA	1:A:391:UNK:O	1.78	0.82
1:A:64:PHE:HB2	1:A:438:UNK:HG2	0.86	0.82
1:A:178:GLY:C	1:A:179:ASP:OD1	2.22	0.82
1:A:370:VAL:CG1	1:A:371:VAL:CG1	2.58	0.82
1:A:66:ALA:O	1:A:67:ILE:HG23	1.79	0.82
1:A:144:GLU:OE2	1:A:145:UNK:CE	2.27	0.82
1:A:298:UNK:O	1:A:300:GLY:N	2.12	0.82
1:A:10:VAL:HA	1:A:13:HIS:CE1	2.15	0.82
1:A:371:VAL:HG13	1:A:404:SER:HA	1.62	0.82
1:A:109:TRP:HE1	1:A:163:LEU:HD21	1.45	0.82
1:A:251:LYS:HG3	1:A:275:THR:HG23	1.59	0.82
1:A:76:VAL:O	1:A:90:UNK:CA	2.27	0.82
1:A:22:UNK:HG2	1:A:23:ILE:HD12	1.56	0.82
1:A:317:ASN:ND2	1:A:319:SER:H	1.76	0.82
1:A:412:TYR:HB3	1:A:414:TRP:CD1	2.15	0.82
1:A:450:UNK:CG	1:A:452:UNK:CG	2.58	0.82
1:A:76:VAL:O	1:A:90:UNK:HB2	1.79	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:219:TRP:CZ3	1:A:240:MET:C	2.58	0.81
1:A:252:ALA:O	1:A:254:PRO:HD3	1.80	0.81
1:A:51:TRP:CE3	1:A:240:MET:HE1	2.16	0.81
1:A:148:LYS:HE3	1:A:149:GLY:HA2	1.62	0.81
1:A:148:LYS:CE	1:A:149:GLY:HA2	2.11	0.81
1:A:23:ILE:HD13	1:A:23:ILE:N	1.95	0.81
1:A:193:ILE:HA	1:A:197:VAL:HG12	1.62	0.81
1:A:327:LEU:HD13	1:A:332:LEU:HB3	1.61	0.81
1:A:109:TRP:CZ3	1:A:109:TRP:HH2	1.51	0.81
1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:O	1.81	0.81
1:A:52:VAL:HA	1:A:54:LYS:HZ1	1.44	0.81
1:A:53:LEU:HD11	1:A:240:MET:SD	2.19	0.81
1:A:206:MET:HE3	1:A:377:ILE:HD12	1.61	0.81
1:A:448:UNK:O	1:A:449:UNK:C	2.28	0.81
1:A:53:LEU:CD1	1:A:240:MET:SD	2.69	0.80
1:A:79:ILE:HD11	1:A:81:LEU:CD1	2.11	0.80
1:A:233:UNK:HG1	1:A:452:UNK:C	2.11	0.80
1:A:36:ASP:OD2	1:A:380:LYS:CE	2.26	0.80
1:A:22:UNK:HG2	1:A:23:ILE:HD13	0.81	0.80
1:A:30:ILE:HD12	1:A:255:SER:CB	2.11	0.80
1:A:95:LEU:HA	1:A:99:MET:HE3	1.62	0.80
1:A:156:UNK:HB1	1:A:158:PHE:HD2	1.46	0.80
1:A:208:ILE:CD1	1:A:390:ALA:HB2	2.11	0.80
1:A:250:ARG:HD2	1:A:256:LEU:CB	2.05	0.80
1:A:144:GLU:O	1:A:455:ALA:CB	2.29	0.80
1:A:197:VAL:HG22	1:A:204:ILE:HD12	1.60	0.80
1:A:320:TYR:HB2	1:A:321:PRO:CD	2.11	0.80
1:A:58:GLY:N	1:A:60:GLN:NE2	2.28	0.80
1:A:66:ALA:O	1:A:67:ILE:CG2	2.28	0.80
1:A:46:PRO:CD	1:A:248:SER:OG	2.30	0.80
1:A:186:ASP:O	1:A:186:ASP:OD2	1.98	0.80
1:A:330:PHE:C	1:A:332:LEU:H	1.82	0.80
1:A:172:ASN:O	1:A:176:PRO:HD2	1.79	0.79
1:A:206:MET:CE	1:A:377:ILE:HD12	2.12	0.79
1:A:371:VAL:HG11	1:A:404:SER:C	2.06	0.79
1:A:412:TYR:CB	1:A:414:TRP:NE1	2.44	0.79
1:A:364:ALA:O	1:A:368:ARG:HB2	1.83	0.79
1:A:68:VAL:O	1:A:68:VAL:CG1	2.30	0.79
1:A:312:ALA:O	1:A:315:VAL:CG1	2.30	0.79
1:A:434:GLY:O	1:A:437:UNK:HB1	1.83	0.79
1:A:67:ILE:HD11	1:A:135:PHE:HB2	1.65	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:109:TRP:CH2	1:A:109:TRP:HZ3	1.52	0.79
1:A:250:ARG:NE	1:A:256:LEU:HB2	1.98	0.79
1:A:16:VAL:HG12	1:A:17:PHE:N	1.96	0.79
1:A:320:TYR:CB	1:A:321:PRO:CD	2.61	0.79
1:A:287:GLN:CD	1:A:314:ASN:ND2	2.41	0.79
1:A:196:UNK:HG1	1:A:435:ALA:CB	2.12	0.78
1:A:20:PRO:HB2	1:A:22:UNK:CD	2.13	0.78
1:A:51:TRP:HE1	1:A:144:GLU:N	1.81	0.78
1:A:175:PHE:HB2	1:A:176:PRO:CD	2.11	0.78
1:A:193:ILE:CA	1:A:197:VAL:CG1	2.62	0.78
1:A:34:ARG:NH2	1:A:45:ILE:N	2.27	0.78
1:A:151:ILE:HD13	1:A:152:THR:H	1.49	0.78
1:A:312:ALA:HB1	1:A:315:VAL:HB	1.62	0.78
1:A:62:GLY:O	1:A:80:UNK:HA	1.84	0.78
1:A:102:THR:HG21	1:A:160:LEU:HB3	1.66	0.78
1:A:140:ALA:HB1	1:A:151:ILE:HD13	1.63	0.78
1:A:310:PHE:O	1:A:315:VAL:CG1	2.32	0.78
1:A:407:UNK:CG	1:A:407:UNK:O	2.32	0.78
1:A:9:LEU:HD22	1:A:296:TYR:CZ	2.17	0.77
1:A:48:VAL:O	1:A:243:CYS:CA	2.32	0.77
1:A:105:PRO:O	1:A:109:TRP:HB3	1.83	0.77
1:A:234:UNK:C	1:A:236:GLY:N	2.22	0.77
1:A:147:ILE:HD13	1:A:184:VAL:HA	1.65	0.77
1:A:197:VAL:HG22	1:A:204:ILE:CG1	2.13	0.77
1:A:370:VAL:CG1	1:A:371:VAL:HG13	2.13	0.77
1:A:233:UNK:O	1:A:233:UNK:CG	2.27	0.77
1:A:258:GLN:HA	1:A:279:ASN:ND2	1.94	0.77
1:A:76:VAL:HG21	1:A:119:PHE:CD1	2.20	0.77
1:A:76:VAL:C	1:A:77:ILE:HG13	2.09	0.77
1:A:95:LEU:O	1:A:96:ALA:O	2.03	0.77
1:A:140:ALA:CB	1:A:153:UNK:N	2.28	0.77
1:A:140:ALA:HB2	1:A:153:UNK:O	1.85	0.77
1:A:83:GLY:O	1:A:85:GLN:OE1	2.01	0.77
1:A:138:UNK:O	1:A:156:UNK:CD	2.32	0.77
1:A:58:GLY:H	1:A:60:GLN:NE2	1.81	0.77
1:A:289:LEU:HD11	1:A:359:LEU:HD22	1.67	0.77
1:A:54:LYS:HG2	1:A:447:GLN:HG3	1.65	0.76
1:A:419:UNK:HA	1:A:422:LYS:HB2	1.57	0.76
1:A:166:LEU:CD1	1:A:169:ALA:N	2.48	0.76
1:A:193:ILE:C	1:A:197:VAL:CG1	2.55	0.76
1:A:208:ILE:CD1	1:A:390:ALA:CB	2.63	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:150:GLN:HA	1:A:166:LEU:CD2	2.12	0.76
1:A:137:PHE:CZ	1:A:167:ILE:HG23	2.19	0.76
1:A:309:ASP:OD1	1:A:309:ASP:O	2.03	0.76
1:A:166:LEU:CD1	1:A:169:ALA:CA	2.63	0.76
1:A:7:UNK:O	1:A:11:GLU:HG3	1.85	0.76
1:A:142:ALA:HB2	1:A:152:THR:CB	2.15	0.76
1:A:167:ILE:N	1:A:170:MET:HE3	2.00	0.76
1:A:208:ILE:HA	1:A:216:ALA:HA	1.68	0.76
1:A:245:UNK:HA	1:A:247:ASP:OD1	1.85	0.76
1:A:78:LEU:HG	1:A:79:ILE:N	2.00	0.76
1:A:327:LEU:CD1	1:A:335:UNK:HG2	2.16	0.76
1:A:82:ALA:O	1:A:85:GLN:NE2	2.17	0.76
1:A:229:ALA:C	1:A:230:ASP:CG	2.54	0.76
1:A:303:HIS:CA	1:A:351:MET:HE3	2.16	0.76
1:A:167:ILE:HA	1:A:170:MET:CE	2.14	0.76
1:A:296:TYR:CG	1:A:301:GLN:HG3	2.21	0.76
1:A:327:LEU:HD11	1:A:332:LEU:CB	2.13	0.76
1:A:302:UNK:CB	1:A:351:MET:SD	2.72	0.75
1:A:64:PHE:O	1:A:78:LEU:HA	1.86	0.75
1:A:303:HIS:CA	1:A:351:MET:CE	2.64	0.75
1:A:148:LYS:HE3	1:A:149:GLY:CA	2.17	0.75
1:A:164:UNK:O	1:A:164:UNK:CG	2.33	0.75
1:A:176:PRO:HA	1:A:179:ASP:HB3	1.69	0.75
1:A:46:PRO:CD	1:A:248:SER:CB	2.65	0.75
1:A:303:HIS:N	1:A:351:MET:HE1	1.93	0.75
1:A:347:UNK:HB2	1:A:351:MET:CB	2.17	0.75
1:A:196:UNK:HB2	1:A:436:ALA:HA	1.69	0.75
1:A:175:PHE:CE2	1:A:181:UNK:CG	2.70	0.75
1:A:264:THR:O	1:A:265:LEU:C	2.30	0.75
1:A:251:LYS:HZ1	1:A:274:LYS:H	1.34	0.74
1:A:124:PHE:O	1:A:125:SER:HB2	1.87	0.74
1:A:69:MET:CE	1:A:108:LEU:HD13	2.16	0.74
1:A:294:MET:O	1:A:297:LYS:HB3	1.86	0.74
1:A:104:ILE:HG21	1:A:106:SER:HB2	1.69	0.74
1:A:308:UNK:HB1	1:A:311:UNK:HG3	1.68	0.74
1:A:137:PHE:CZ	1:A:167:ILE:CG2	2.71	0.74
1:A:144:GLU:HG2	1:A:145:UNK:HG3	1.69	0.74
1:A:211:GLY:C	1:A:282:ALA:HB3	2.12	0.74
1:A:58:GLY:N	1:A:60:GLN:HE22	1.85	0.74
1:A:99:MET:SD	1:A:108:LEU:HD23	2.28	0.74
1:A:375:UNK:CD	1:A:411:ILE:CD1	2.63	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:408:ASN:HA	1:A:411:ILE:HD12	1.68	0.74
1:A:14:UNK:CD	1:A:357:ARG:HH11	2.01	0.74
1:A:55:GLN:CD	1:A:239:UNK:CG	2.60	0.74
1:A:172:ASN:O	1:A:175:PHE:N	2.20	0.74
1:A:213:GLY:HA2	1:A:277:GLU:CD	2.12	0.74
1:A:403:ASN:O	1:A:407:UNK:N	2.20	0.74
1:A:55:GLN:O	1:A:56:VAL:C	2.31	0.74
1:A:194:LEU:HD13	1:A:206:MET:HA	1.70	0.74
1:A:219:TRP:HE3	1:A:240:MET:C	1.94	0.74
1:A:271:UNK:HG3	1:A:272:ALA:N	2.01	0.73
1:A:330:PHE:C	1:A:332:LEU:N	2.46	0.73
1:A:389:ALA:HB1	1:A:429:ALA:CA	2.18	0.73
1:A:159:SER:O	1:A:161:ALA:N	2.21	0.73
1:A:56:VAL:CG2	1:A:199:TYR:HA	2.18	0.73
1:A:146:VAL:C	1:A:148:LYS:HD2	2.13	0.73
1:A:148:LYS:CE	1:A:149:GLY:HA3	1.99	0.73
1:A:236:GLY:O	1:A:237:ALA:CB	2.34	0.73
1:A:210:PHE:HB3	1:A:394:UNK:HB1	1.69	0.73
1:A:46:PRO:HB2	1:A:245:UNK:HB1	1.70	0.73
1:A:126:SER:O	1:A:127:UNK:HB1	1.88	0.73
1:A:191:HIS:ND1	1:A:241:UNK:CE	2.51	0.73
1:A:273:UNK:O	1:A:278:LYS:CD	2.35	0.73
1:A:35:UNK:CD	1:A:377:ILE:HG12	2.18	0.73
1:A:81:LEU:HD13	1:A:81:LEU:N	2.03	0.73
1:A:55:GLN:NE2	1:A:239:UNK:HG2	1.84	0.73
1:A:151:ILE:HG21	1:A:164:UNK:O	1.86	0.73
1:A:249:PHE:HE2	1:A:256:LEU:CD2	1.91	0.72
1:A:289:LEU:HD21	1:A:359:LEU:HD23	0.74	0.72
1:A:188:UNK:CD	1:A:190:SER:CB	2.67	0.72
1:A:234:UNK:O	1:A:236:GLY:CA	2.36	0.72
1:A:113:ALA:O	1:A:114:UNK:C	2.37	0.72
1:A:164:UNK:O	1:A:164:UNK:HG3	1.87	0.72
1:A:261:TYR:O	1:A:264:THR:HB	1.88	0.72
1:A:304:UNK:O	1:A:305:UNK:CG	2.31	0.72
1:A:448:UNK:O	1:A:451:ALA:N	2.21	0.72
1:A:448:UNK:O	1:A:451:ALA:CA	2.38	0.72
1:A:66:ALA:C	1:A:67:ILE:CG2	2.62	0.72
1:A:108:LEU:HG	1:A:160:LEU:CG	2.19	0.72
1:A:108:LEU:CB	1:A:160:LEU:HD13	2.19	0.72
1:A:120:SER:O	1:A:122:UNK:N	2.23	0.72
1:A:193:ILE:CG1	1:A:207:GLY:CA	2.67	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:94:SER:C	1:A:96:ALA:N	2.48	0.72
1:A:221:ASP:OD1	1:A:223:THR:HG23	1.88	0.72
1:A:365:TYR:O	1:A:366:ALA:C	2.28	0.72
1:A:32:THR:O	1:A:33:THR:C	2.33	0.71
1:A:102:THR:CG2	1:A:160:LEU:CA	2.61	0.71
1:A:381:LYS:HD3	1:A:383:TYR:OH	1.90	0.71
1:A:109:TRP:CZ2	1:A:167:ILE:O	2.38	0.71
1:A:147:ILE:CD1	1:A:184:VAL:HA	2.19	0.71
1:A:419:UNK:HA	1:A:422:LYS:CB	2.20	0.71
1:A:14:UNK:HG3	1:A:361:LEU:HD21	1.72	0.71
1:A:16:VAL:CG2	1:A:259:ILE:HD11	2.20	0.71
1:A:281:UNK:O	1:A:285:UNK:CD	2.38	0.71
1:A:387:HIS:O	1:A:388:ILE:HD13	1.91	0.71
1:A:327:LEU:HD13	1:A:332:LEU:CB	2.18	0.71
1:A:446:SER:OG	1:A:447:GLN:N	2.22	0.71
1:A:192:GLY:O	1:A:432:GLY:HA2	1.89	0.71
1:A:317:ASN:ND2	1:A:318:SER:C	2.49	0.71
1:A:148:LYS:HD3	1:A:148:LYS:N	2.06	0.71
1:A:97:ALA:O	1:A:98:SER:HB3	1.91	0.71
1:A:68:VAL:CG2	1:A:433:GLU:CG	2.64	0.71
1:A:94:SER:C	1:A:96:ALA:H	1.94	0.71
1:A:249:PHE:CE2	1:A:256:LEU:CD2	2.60	0.71
1:A:307:ALA:O	1:A:345:ILE:CD1	2.39	0.71
1:A:166:LEU:C	1:A:168:SER:N	2.29	0.70
1:A:103:ALA:O	1:A:104:ILE:HG22	1.88	0.70
1:A:194:LEU:HD22	1:A:217:ALA:O	1.90	0.70
1:A:316:GLU:HG3	1:A:320:TYR:CD1	2.26	0.70
1:A:163:LEU:HD13	1:A:167:ILE:HA	1.73	0.70
1:A:329:HIS:HE2	1:A:332:LEU:N	1.81	0.70
1:A:372:CYS:HA	1:A:375:UNK:CD	2.20	0.70
1:A:209:ILE:CA	1:A:391:UNK:O	2.40	0.70
1:A:282:ALA:CA	1:A:394:UNK:CD	2.69	0.70
1:A:448:UNK:O	1:A:451:ALA:HA	1.90	0.70
1:A:197:VAL:CG2	1:A:204:ILE:HD11	2.10	0.70
1:A:414:TRP:CH2	1:A:424:ILE:N	2.58	0.70
1:A:75:GLU:HG2	1:A:90:UNK:HB2	1.72	0.70
1:A:148:LYS:HE3	1:A:186:ASP:O	1.92	0.70
1:A:175:PHE:HB2	1:A:176:PRO:HD2	1.74	0.70
1:A:303:HIS:CE1	1:A:347:UNK:HG1	2.26	0.70
1:A:436:ALA:O	1:A:440:ILE:CB	2.39	0.70
1:A:104:ILE:C	1:A:106:SER:N	2.42	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:210:PHE:HB3	1:A:394:UNK:CB	2.21	0.70
1:A:402:UNK:CG	1:A:402:UNK:O	2.40	0.70
1:A:17:PHE:HB3	1:A:361:LEU:HB3	1.72	0.70
1:A:377:ILE:O	1:A:379:GLN:N	2.24	0.70
1:A:197:VAL:HG22	1:A:204:ILE:HG13	1.72	0.70
1:A:56:VAL:HG21	1:A:199:TYR:HA	1.72	0.69
1:A:70:GLY:CA	1:A:158:PHE:HE2	1.98	0.69
1:A:251:LYS:HG2	1:A:275:THR:HG22	0.75	0.69
1:A:271:UNK:CG	1:A:272:ALA:N	2.52	0.69
1:A:219:TRP:CE3	1:A:241:UNK:N	2.59	0.69
1:A:397:TYR:HE2	1:A:398:SER:C	1.94	0.69
1:A:133:LEU:HB3	1:A:182:UNK:O	1.92	0.69
1:A:374:ILE:O	1:A:378:CYS:SG	2.50	0.69
1:A:175:PHE:CE1	1:A:183:UNK:HG1	2.22	0.69
1:A:445:SER:HA	1:A:448:UNK:CD	2.22	0.69
1:A:223:THR:HG22	1:A:237:ALA:CB	2.22	0.69
1:A:77:ILE:HA	1:A:89:ILE:O	1.91	0.69
1:A:95:LEU:HD22	1:A:99:MET:HE3	0.70	0.69
1:A:219:TRP:HZ3	1:A:241:UNK:N	1.86	0.69
1:A:287:GLN:NE2	1:A:314:ASN:HD22	1.91	0.69
1:A:144:GLU:OE2	1:A:148:LYS:CG	2.40	0.69
1:A:265:LEU:H	1:A:265:LEU:CD2	2.03	0.69
1:A:69:MET:HE1	1:A:108:LEU:CD1	2.21	0.69
1:A:261:TYR:O	1:A:265:LEU:HD23	1.92	0.69
1:A:327:LEU:HD11	1:A:332:LEU:CA	2.22	0.69
1:A:258:GLN:CA	1:A:279:ASN:HD21	1.99	0.69
1:A:282:ALA:HA	1:A:394:UNK:CD	2.23	0.69
1:A:52:VAL:O	1:A:219:TRP:CZ3	2.45	0.69
1:A:70:GLY:O	1:A:158:PHE:CZ	2.35	0.69
1:A:135:PHE:CZ	1:A:171:UNK:HB2	2.28	0.69
1:A:56:VAL:HG21	1:A:199:TYR:CD2	2.24	0.68
1:A:146:VAL:N	1:A:148:LYS:HD2	2.08	0.68
1:A:191:HIS:NE2	1:A:243:CYS:HB2	2.08	0.68
1:A:196:UNK:O	1:A:199:TYR:HB3	1.93	0.68
1:A:430:ILE:HG22	1:A:431:ASP:N	2.08	0.68
1:A:108:LEU:CG	1:A:160:LEU:CD2	2.62	0.68
1:A:440:ILE:CG2	1:A:440:ILE:O	2.42	0.68
1:A:327:LEU:HD12	1:A:332:LEU:HB3	1.71	0.68
1:A:95:LEU:HD22	1:A:99:MET:SD	2.34	0.68
1:A:303:HIS:O	1:A:305:UNK:N	2.26	0.68
1:A:289:LEU:O	1:A:292:VAL:HG23	1.94	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:19:VAL:CG2	1:A:365:TYR:HB2	2.24	0.68
1:A:223:THR:CG2	1:A:237:ALA:HB1	2.24	0.68
1:A:19:VAL:HG21	1:A:365:TYR:HB2	1.75	0.68
1:A:229:ALA:C	1:A:230:ASP:OD2	2.36	0.68
1:A:308:UNK:CE	1:A:345:ILE:HD12	2.24	0.68
1:A:347:UNK:CB	1:A:351:MET:CE	2.06	0.68
1:A:419:UNK:HA	1:A:422:LYS:CG	2.24	0.68
1:A:20:PRO:CG	1:A:22:UNK:CD	2.71	0.68
1:A:48:VAL:C	1:A:243:CYS:H	2.02	0.68
1:A:52:VAL:O	1:A:219:TRP:CH2	2.46	0.68
1:A:208:ILE:HD12	1:A:390:ALA:CB	2.24	0.68
1:A:49:PRO:HA	1:A:242:VAL:CA	2.22	0.68
1:A:50:GLY:HA2	1:A:143:LYS:HE3	1.74	0.68
1:A:46:PRO:CD	1:A:248:SER:HB2	2.24	0.67
1:A:261:TYR:HE1	1:A:292:VAL:HA	1.59	0.67
1:A:419:UNK:O	1:A:422:LYS:HB3	1.93	0.67
1:A:76:VAL:O	1:A:90:UNK:HA	1.93	0.67
1:A:245:UNK:C	1:A:247:ASP:OD1	2.42	0.67
1:A:327:LEU:CD1	1:A:332:LEU:HA	2.24	0.67
1:A:356:ARG:HA	1:A:359:LEU:HD12	1.75	0.67
1:A:389:ALA:CB	1:A:429:ALA:CB	2.20	0.67
1:A:2:ALA:HB1	1:A:350:UNK:CG	2.24	0.67
1:A:99:MET:SD	1:A:108:LEU:HD21	2.34	0.67
1:A:219:TRP:CZ3	1:A:240:MET:CA	2.77	0.67
1:A:450:UNK:HG3	1:A:452:UNK:CG	2.24	0.67
1:A:306:UNK:CE	1:A:345:ILE:HA	2.24	0.67
1:A:327:LEU:CD1	1:A:332:LEU:CA	2.72	0.67
1:A:265:LEU:O	1:A:269:SER:HB2	1.91	0.67
1:A:133:LEU:HG	1:A:134:GLY:H	1.60	0.67
1:A:261:TYR:N	1:A:261:TYR:CD2	2.63	0.67
1:A:14:UNK:CD	1:A:357:ARG:NH1	2.57	0.67
1:A:210:PHE:CE2	1:A:370:VAL:HG22	2.06	0.67
1:A:420:UNK:O	1:A:425:UNK:CD	2.43	0.67
1:A:34:ARG:HH21	1:A:45:ILE:N	1.86	0.67
1:A:38:UNK:CG	1:A:43:ALA:HB3	2.25	0.67
1:A:72:GLY:O	1:A:73:ASP:HB2	1.94	0.67
1:A:251:LYS:CA	1:A:275:THR:HG21	2.25	0.67
1:A:281:UNK:CG	1:A:282:ALA:H	2.07	0.67
1:A:154:GLN:NE2	1:A:164:UNK:HA	2.11	0.66
1:A:23:ILE:HD13	1:A:23:ILE:H	1.60	0.66
1:A:76:VAL:CB	1:A:119:PHE:CE1	2.78	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:105:PRO:O	1:A:109:TRP:C	2.38	0.66
1:A:151:ILE:HD13	1:A:152:THR:N	2.09	0.66
1:A:173:ALA:O	1:A:177:ALA:HB2	1.95	0.66
1:A:206:MET:HE2	1:A:216:ALA:CB	2.22	0.66
1:A:271:UNK:CG	1:A:272:ALA:H	2.08	0.66
1:A:328:PRO:CG	1:A:334:UNK:CE	2.66	0.66
1:A:208:ILE:HG13	1:A:389:ALA:O	1.96	0.66
1:A:407:UNK:O	1:A:410:ASN:HB2	1.95	0.66
1:A:13:HIS:HA	1:A:16:VAL:HB	1.78	0.66
1:A:298:UNK:C	1:A:300:GLY:N	2.45	0.66
1:A:208:ILE:HD12	1:A:390:ALA:CA	2.25	0.66
1:A:370:VAL:HG13	1:A:371:VAL:CA	2.24	0.66
1:A:181:UNK:HG2	1:A:182:UNK:N	2.10	0.66
1:A:2:ALA:CB	1:A:350:UNK:CB	2.74	0.66
1:A:225:ILE:HG22	1:A:227:ASP:HB3	1.78	0.66
1:A:316:GLU:HB2	1:A:320:TYR:CE1	2.31	0.66
1:A:76:VAL:O	1:A:90:UNK:HB1	1.91	0.66
1:A:90:UNK:HG2	1:A:91:ALA:N	2.11	0.65
1:A:108:LEU:CG	1:A:160:LEU:CD1	2.71	0.65
1:A:322:ALA:O	1:A:326:LYS:CG	2.44	0.65
1:A:75:GLU:HG2	1:A:76:VAL:N	2.12	0.65
1:A:245:UNK:CA	1:A:247:ASP:OD1	2.43	0.65
1:A:133:LEU:HG	1:A:134:GLY:N	2.12	0.65
1:A:197:VAL:HG23	1:A:204:ILE:HG13	1.76	0.65
1:A:261:TYR:CE1	1:A:292:VAL:HG13	2.31	0.65
1:A:435:ALA:C	1:A:437:UNK:N	2.53	0.65
1:A:102:THR:HG23	1:A:160:LEU:CB	2.26	0.65
1:A:294:MET:HE3	1:A:294:MET:HA	1.78	0.65
1:A:416:GLN:HE21	1:A:422:LYS:HA	1.61	0.65
1:A:68:VAL:CG2	1:A:433:GLU:HB3	2.26	0.65
1:A:175:PHE:CD1	1:A:183:UNK:HG2	2.31	0.65
1:A:414:TRP:CZ3	1:A:423:PRO:HD2	2.31	0.65
1:A:414:TRP:HB3	1:A:416:GLN:OE1	1.96	0.65
1:A:14:UNK:O	1:A:18:ILE:CG1	2.44	0.65
1:A:326:LYS:CD	1:A:398:SER:HA	2.25	0.65
1:A:347:UNK:HB2	1:A:351:MET:CG	2.26	0.65
1:A:55:GLN:CD	1:A:239:UNK:HG3	2.21	0.65
1:A:67:ILE:HD11	1:A:135:PHE:CB	2.28	0.64
1:A:273:UNK:O	1:A:278:LYS:CE	2.45	0.64
1:A:407:UNK:O	1:A:407:UNK:HG3	1.92	0.64
1:A:104:ILE:HG23	1:A:107:ASP:N	2.12	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:206:MET:HE3	1:A:377:ILE:CD1	2.27	0.64
1:A:296:TYR:O	1:A:301:GLN:HG2	1.97	0.64
1:A:317:ASN:ND2	1:A:318:SER:CA	2.60	0.64
1:A:16:VAL:CG1	1:A:259:ILE:HD12	2.11	0.64
1:A:16:VAL:CB	1:A:259:ILE:HD11	2.26	0.64
1:A:20:PRO:CB	1:A:22:UNK:CD	2.75	0.64
1:A:93:ARG:CZ	1:A:115:SER:HA	2.27	0.64
1:A:166:LEU:HD12	1:A:169:ALA:HB3	0.68	0.64
1:A:327:LEU:HD23	1:A:328:PRO:HD2	1.79	0.64
1:A:367:PHE:CD1	1:A:367:PHE:N	2.64	0.64
1:A:9:LEU:HD11	1:A:296:TYR:CD1	2.14	0.64
1:A:14:UNK:O	1:A:18:ILE:HG13	1.98	0.64
1:A:56:VAL:HG21	1:A:199:TYR:CG	2.32	0.64
1:A:212:SER:HA	1:A:283:LYS:HB2	1.80	0.64
1:A:68:VAL:HG21	1:A:433:GLU:HG2	1.79	0.64
1:A:136:THR:HG21	1:A:433:GLU:O	1.97	0.64
1:A:288:SER:OG	1:A:362:ILE:HD11	1.98	0.64
1:A:264:THR:C	1:A:266:ASN:N	2.54	0.64
1:A:356:ARG:HD2	1:A:356:ARG:O	1.97	0.64
1:A:46:PRO:HD2	1:A:248:SER:CB	2.28	0.64
1:A:249:PHE:CE1	1:A:250:ARG:HB2	2.33	0.64
1:A:308:UNK:CE	1:A:345:ILE:CD1	2.76	0.64
1:A:51:TRP:NE1	1:A:144:GLU:N	2.45	0.64
1:A:257:PRO:O	1:A:258:GLN:C	2.41	0.64
1:A:331:ASP:O	1:A:349:THR:CG2	2.44	0.64
1:A:16:VAL:HG12	1:A:17:PHE:H	1.62	0.63
1:A:259:ILE:HG22	1:A:262:UNK:CD	2.28	0.63
1:A:393:SER:C	1:A:395:ARG:H	2.05	0.63
1:A:404:SER:HB2	1:A:426:ILE:HD12	1.79	0.63
1:A:79:ILE:HD11	1:A:81:LEU:HD12	1.80	0.63
1:A:103:ALA:C	1:A:104:ILE:HG22	2.23	0.63
1:A:220:CYS:SG	1:A:224:UNK:HB2	2.36	0.63
1:A:281:UNK:HG3	1:A:283:LYS:H	1.62	0.63
1:A:95:LEU:HA	1:A:99:MET:HE2	1.80	0.63
1:A:175:PHE:CZ	1:A:183:UNK:CG	2.80	0.63
1:A:208:ILE:CD1	1:A:390:ALA:HA	2.27	0.63
1:A:37:ASP:O	1:A:43:ALA:HB2	1.99	0.63
1:A:145:UNK:CD	1:A:146:VAL:H	2.12	0.63
1:A:187:ILE:HD13	1:A:440:ILE:HG21	1.80	0.63
1:A:109:TRP:HH2	1:A:135:PHE:HE2	1.47	0.63
1:A:351:MET:O	1:A:355:VAL:HG23	1.97	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:418:ALA:H	1:A:421:SER:HB3	1.63	0.63
1:A:317:ASN:CG	1:A:318:SER:H	1.99	0.63
1:A:46:PRO:HD2	1:A:248:SER:OG	1.97	0.63
1:A:103:ALA:C	1:A:104:ILE:CG2	2.70	0.63
1:A:102:THR:HG22	1:A:160:LEU:CB	2.23	0.63
1:A:402:UNK:HG2	1:A:406:THR:HG21	1.80	0.63
1:A:50:GLY:N	1:A:241:UNK:O	2.26	0.62
1:A:81:LEU:O	1:A:82:ALA:HB2	1.99	0.62
1:A:129:GLY:O	1:A:130:SER:CB	2.38	0.62
1:A:95:LEU:CD1	1:A:158:PHE:HE1	2.11	0.62
1:A:375:UNK:HB1	1:A:408:ASN:HD21	1.63	0.62
1:A:6:ASP:C	1:A:8:SER:H	2.08	0.62
1:A:211:GLY:O	1:A:281:UNK:CG	2.47	0.62
1:A:54:LYS:CG	1:A:447:GLN:HG3	2.29	0.62
1:A:133:LEU:CG	1:A:134:GLY:N	2.63	0.62
1:A:215:ASN:OD1	1:A:245:UNK:HA	2.00	0.62
1:A:38:UNK:HB2	1:A:43:ALA:HB1	1.79	0.62
1:A:120:SER:C	1:A:122:UNK:N	2.57	0.62
1:A:66:ALA:HB1	1:A:434:GLY:CA	2.27	0.62
1:A:347:UNK:HB1	1:A:351:MET:SD	2.38	0.62
1:A:58:GLY:C	1:A:199:TYR:CE2	2.78	0.62
1:A:68:VAL:HG23	1:A:433:GLU:CB	2.29	0.62
1:A:77:ILE:HG21	1:A:88:SER:HB2	1.78	0.62
1:A:208:ILE:HG21	1:A:374:ILE:HG12	1.80	0.62
1:A:449:UNK:CG	1:A:450:UNK:N	2.58	0.62
1:A:68:VAL:HG23	1:A:433:GLU:HB3	1.82	0.62
1:A:370:VAL:HG12	1:A:371:VAL:CG1	2.17	0.62
1:A:392:GLY:O	1:A:395:ARG:HB2	2.00	0.62
1:A:111:ASN:C	1:A:113:ALA:H	2.07	0.61
1:A:24:LEU:O	1:A:372:CYS:SG	2.58	0.61
1:A:75:GLU:CG	1:A:90:UNK:CB	2.77	0.61
1:A:175:PHE:CZ	1:A:183:UNK:HG3	2.35	0.61
1:A:397:TYR:O	1:A:398:SER:O	2.18	0.61
1:A:2:ALA:HB1	1:A:350:UNK:HB1	1.82	0.61
1:A:175:PHE:CD1	1:A:183:UNK:CG	2.83	0.61
1:A:446:SER:O	1:A:449:UNK:HG3	2.01	0.61
1:A:46:PRO:CB	1:A:245:UNK:HB1	2.30	0.61
1:A:193:ILE:HG13	1:A:207:GLY:CA	2.26	0.61
1:A:219:TRP:CE3	1:A:240:MET:N	2.69	0.61
1:A:233:UNK:HB1	1:A:453:UNK:HB2	1.81	0.61
1:A:259:ILE:O	1:A:263:UNK:CD	2.48	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:137:PHE:CE2	1:A:167:ILE:CG2	2.83	0.61
1:A:2:ALA:HB1	1:A:350:UNK:HG3	1.82	0.61
1:A:191:HIS:CG	1:A:241:UNK:CD	2.84	0.61
1:A:281:UNK:O	1:A:285:UNK:CG	2.49	0.61
1:A:16:VAL:CG1	1:A:17:PHE:N	2.60	0.61
1:A:370:VAL:CG1	1:A:371:VAL:HG12	2.30	0.61
1:A:64:PHE:CZ	1:A:442:SER:HA	2.36	0.60
1:A:206:MET:CE	1:A:216:ALA:HB1	2.29	0.60
1:A:348:LYS:HE2	1:A:349:THR:H	1.66	0.60
1:A:395:ARG:O	1:A:396:ASP:HB3	2.01	0.60
1:A:397:TYR:CE2	1:A:398:SER:HB2	2.36	0.60
1:A:2:ALA:HB1	1:A:350:UNK:CB	2.31	0.60
1:A:233:UNK:CB	1:A:452:UNK:O	2.49	0.60
1:A:419:UNK:N	1:A:422:LYS:HD2	2.16	0.60
1:A:135:PHE:CZ	1:A:171:UNK:CB	2.84	0.60
1:A:281:UNK:HG3	1:A:282:ALA:H	1.61	0.60
1:A:75:GLU:HA	1:A:92:SER:CB	2.28	0.60
1:A:108:LEU:CD1	1:A:160:LEU:CD2	2.79	0.60
1:A:261:TYR:CE1	1:A:292:VAL:HA	2.36	0.60
1:A:331:ASP:C	1:A:332:LEU:HG	2.25	0.60
1:A:197:VAL:HG22	1:A:204:ILE:HG21	1.82	0.60
1:A:367:PHE:CZ	1:A:397:TYR:CE2	2.90	0.60
1:A:210:PHE:CD2	1:A:370:VAL:HG21	2.26	0.60
1:A:414:TRP:CZ3	1:A:422:LYS:HG3	2.37	0.60
1:A:58:GLY:C	1:A:199:TYR:HE2	2.08	0.60
1:A:63:SER:OG	1:A:78:LEU:HD11	2.00	0.60
1:A:249:PHE:CE2	1:A:256:LEU:HD13	2.37	0.60
1:A:276:PHE:O	1:A:280:SER:HB3	2.01	0.60
1:A:324:ILE:HA	1:A:335:UNK:HG3	1.83	0.60
1:A:324:ILE:HD13	1:A:359:LEU:CD1	2.32	0.60
1:A:168:SER:C	1:A:170:MET:N	2.40	0.60
1:A:223:THR:CG2	1:A:237:ALA:CB	2.79	0.60
1:A:241:UNK:CD	1:A:241:UNK:O	2.49	0.60
1:A:189:ASP:OD2	1:A:189:ASP:N	2.29	0.60
1:A:46:PRO:HD2	1:A:248:SER:HB2	1.84	0.59
1:A:72:GLY:O	1:A:73:ASP:CB	2.50	0.59
1:A:377:ILE:HG22	1:A:378:CYS:N	2.18	0.59
1:A:436:ALA:C	1:A:440:ILE:HG13	2.23	0.59
1:A:450:UNK:HG2	1:A:452:UNK:CG	2.25	0.59
1:A:49:PRO:CA	1:A:242:VAL:HA	2.26	0.59
1:A:146:VAL:O	1:A:148:LYS:CA	2.50	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:166:LEU:CD1	1:A:169:ALA:H	2.08	0.59
1:A:53:LEU:HD13	1:A:53:LEU:N	2.17	0.59
1:A:210:PHE:CB	1:A:394:UNK:HB1	2.32	0.59
1:A:223:THR:HG21	1:A:237:ALA:HB1	1.84	0.59
1:A:412:TYR:HB3	1:A:414:TRP:HE1	1.65	0.59
1:A:79:ILE:CD1	1:A:87:SER:H	2.09	0.59
1:A:261:TYR:CE1	1:A:292:VAL:CG1	2.85	0.59
1:A:108:LEU:CD2	1:A:160:LEU:HD22	2.32	0.59
1:A:208:ILE:HD11	1:A:390:ALA:CB	2.26	0.59
1:A:317:ASN:CG	1:A:319:SER:H	2.10	0.59
1:A:373:UNK:C	1:A:375:UNK:N	2.63	0.59
1:A:95:LEU:HD11	1:A:158:PHE:CE1	2.38	0.59
1:A:219:TRP:HZ3	1:A:240:MET:CA	2.16	0.59
1:A:41:ALA:O	1:A:42:ALA:CB	2.50	0.59
1:A:233:UNK:HG1	1:A:452:UNK:CA	2.33	0.59
1:A:326:LYS:HB3	1:A:326:LYS:HZ2	1.66	0.59
1:A:166:LEU:C	1:A:170:MET:HE3	2.28	0.59
1:A:17:PHE:O	1:A:361:LEU:HB3	2.03	0.58
1:A:194:LEU:HD13	1:A:206:MET:CA	2.34	0.58
1:A:342:ASP:HB2	1:A:343:GLN:HG2	1.84	0.58
1:A:347:UNK:CA	1:A:351:MET:HE2	2.24	0.58
1:A:10:VAL:HA	1:A:13:HIS:NE2	2.18	0.58
1:A:63:SER:HA	1:A:79:ILE:O	2.02	0.58
1:A:77:ILE:CG2	1:A:88:SER:CB	2.65	0.58
1:A:320:TYR:CD2	1:A:338:LEU:CD2	2.70	0.58
1:A:104:ILE:HG12	1:A:105:PRO:HD2	1.85	0.58
1:A:109:TRP:CE3	1:A:112:UNK:CE	2.86	0.58
1:A:133:LEU:HD23	1:A:134:GLY:N	2.18	0.58
1:A:150:GLN:HG3	1:A:151:ILE:O	2.04	0.58
1:A:191:HIS:C	1:A:193:ILE:N	2.42	0.58
1:A:208:ILE:CG1	1:A:388:ILE:HG22	2.33	0.58
1:A:225:ILE:CG2	1:A:227:ASP:HB3	2.33	0.58
1:A:296:TYR:CB	1:A:301:GLN:HG3	2.33	0.58
1:A:8:SER:O	1:A:12:VAL:CG1	2.51	0.58
1:A:102:THR:HG22	1:A:160:LEU:HB3	1.77	0.58
1:A:261:TYR:HE1	1:A:292:VAL:CA	2.15	0.58
1:A:298:UNK:O	1:A:299:UNK:C	2.45	0.58
1:A:367:PHE:HZ	1:A:397:TYR:CD1	2.20	0.58
1:A:16:VAL:HG22	1:A:259:ILE:HD11	1.85	0.58
1:A:45:ILE:HG12	1:A:249:PHE:HA	1.85	0.58
1:A:68:VAL:CG2	1:A:433:GLU:CB	2.82	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:175:PHE:HB3	1:A:176:PRO:CD	2.14	0.58
1:A:200:THR:HG21	1:A:430:ILE:CG1	2.26	0.58
1:A:377:ILE:C	1:A:379:GLN:H	2.11	0.58
1:A:402:UNK:O	1:A:402:UNK:CD	2.52	0.58
1:A:440:ILE:O	1:A:440:ILE:HG22	2.03	0.58
1:A:27:VAL:O	1:A:30:ILE:HG22	2.04	0.58
1:A:49:PRO:CA	1:A:243:CYS:H	2.17	0.58
1:A:303:HIS:CA	1:A:351:MET:HE1	2.31	0.58
1:A:113:ALA:C	1:A:115:SER:N	2.54	0.58
1:A:130:SER:O	1:A:131:VAL:C	2.47	0.58
1:A:22:UNK:CD	1:A:23:ILE:HD13	2.32	0.58
1:A:108:LEU:CD1	1:A:160:LEU:HD22	2.32	0.58
1:A:303:HIS:ND1	1:A:347:UNK:HG1	2.18	0.58
1:A:348:LYS:CE	1:A:348:LYS:CA	2.31	0.58
1:A:6:ASP:C	1:A:8:SER:N	2.58	0.57
1:A:22:UNK:HG2	1:A:23:ILE:N	2.19	0.57
1:A:193:ILE:HG22	1:A:432:GLY:HA3	1.86	0.57
1:A:117:ALA:C	1:A:119:PHE:H	2.12	0.57
1:A:130:SER:C	1:A:131:VAL:O	2.48	0.57
1:A:273:UNK:O	1:A:278:LYS:HE3	2.04	0.57
1:A:49:PRO:O	1:A:143:LYS:HE3	2.04	0.57
1:A:208:ILE:CD1	1:A:390:ALA:CA	2.82	0.57
1:A:114:UNK:C	1:A:117:ALA:HB3	2.20	0.57
1:A:146:VAL:CG1	1:A:148:LYS:HZ3	2.18	0.57
1:A:171:UNK:O	1:A:174:UNK:HB2	2.04	0.57
1:A:79:ILE:CD1	1:A:81:LEU:CD1	2.81	0.57
1:A:79:ILE:CD1	1:A:86:GLU:CB	2.83	0.57
1:A:108:LEU:HG	1:A:160:LEU:CB	2.35	0.57
1:A:261:TYR:N	1:A:261:TYR:HD2	2.01	0.57
1:A:193:ILE:HG12	1:A:207:GLY:CA	2.35	0.57
1:A:371:VAL:HB	1:A:374:ILE:HD12	1.87	0.57
1:A:220:CYS:HA	1:A:381:LYS:HE3	1.85	0.57
1:A:221:ASP:O	1:A:222:SER:C	2.37	0.57
1:A:19:VAL:HG12	1:A:19:VAL:O	2.04	0.57
1:A:38:UNK:CA	1:A:43:ALA:CB	2.82	0.57
1:A:69:MET:HB2	1:A:74:LEU:CD1	2.34	0.57
1:A:108:LEU:HB3	1:A:160:LEU:HD13	1.86	0.57
1:A:256:LEU:HD21	1:A:276:PHE:HA	1.86	0.57
1:A:269:SER:CB	1:A:270:PRO:CD	2.83	0.57
1:A:367:PHE:O	1:A:368:ARG:C	2.48	0.57
1:A:289:LEU:HD21	1:A:359:LEU:HD21	1.72	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:13:HIS:O	1:A:17:PHE:HB2	2.05	0.56
1:A:24:LEU:O	1:A:28:VAL:HG23	2.05	0.56
1:A:95:LEU:CD1	1:A:158:PHE:CE1	2.88	0.56
1:A:95:LEU:CG	1:A:99:MET:HE3	2.24	0.56
1:A:286:GLY:HA3	1:A:317:ASN:O	2.05	0.56
1:A:49:PRO:HA	1:A:243:CYS:H	1.69	0.56
1:A:329:HIS:ND1	1:A:333:ARG:CD	2.68	0.56
1:A:9:LEU:HD22	1:A:296:TYR:HH	1.63	0.56
1:A:48:VAL:HG22	1:A:243:CYS:HB3	1.86	0.56
1:A:97:ALA:O	1:A:98:SER:CB	2.53	0.56
1:A:151:ILE:CG2	1:A:164:UNK:C	2.79	0.56
1:A:304:UNK:C	1:A:305:UNK:HG2	2.30	0.56
1:A:327:LEU:CD1	1:A:335:UNK:CG	2.82	0.56
1:A:329:HIS:ND1	1:A:333:ARG:NH1	2.52	0.56
1:A:347:UNK:CB	1:A:351:MET:SD	2.92	0.56
1:A:351:MET:C	1:A:353:UNK:N	2.61	0.56
1:A:367:PHE:CD2	1:A:400:PHE:HA	2.40	0.56
1:A:135:PHE:N	1:A:185:ALA:O	2.35	0.56
1:A:249:PHE:CD2	1:A:250:ARG:HB3	2.30	0.56
1:A:327:LEU:HD13	1:A:332:LEU:HA	1.87	0.56
1:A:116:ASN:O	1:A:119:PHE:CB	2.54	0.56
1:A:208:ILE:HG22	1:A:216:ALA:HB2	1.88	0.56
1:A:310:PHE:C	1:A:315:VAL:HG11	2.29	0.56
1:A:312:ALA:CB	1:A:315:VAL:CB	2.17	0.56
1:A:367:PHE:O	1:A:370:VAL:HG12	2.06	0.56
1:A:264:THR:C	1:A:266:ASN:H	2.13	0.56
1:A:111:ASN:HA	1:A:114:UNK:HG2	1.86	0.56
1:A:113:ALA:O	1:A:115:SER:N	2.38	0.56
1:A:294:MET:HA	1:A:294:MET:CE	2.34	0.56
1:A:22:UNK:HG2	1:A:23:ILE:HD11	1.66	0.56
1:A:196:UNK:O	1:A:200:THR:HG23	2.06	0.56
1:A:266:ASN:O	1:A:271:UNK:HA	2.05	0.56
1:A:393:SER:C	1:A:395:ARG:N	2.63	0.56
1:A:32:THR:O	1:A:33:THR:O	2.24	0.55
1:A:79:ILE:CG1	1:A:81:LEU:HD13	2.36	0.55
1:A:52:VAL:HG13	1:A:54:LYS:HE3	1.88	0.55
1:A:212:SER:HA	1:A:283:LYS:CB	2.35	0.55
1:A:286:GLY:O	1:A:289:LEU:CB	2.45	0.55
1:A:347:UNK:HB2	1:A:351:MET:HB3	1.87	0.55
1:A:37:ASP:O	1:A:40:SER:OG	2.23	0.55
1:A:326:LYS:NZ	1:A:326:LYS:CB	2.53	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:208:ILE:HA	1:A:216:ALA:CA	2.37	0.55
1:A:81:LEU:CD1	1:A:81:LEU:N	2.70	0.55
1:A:294:MET:HE1	1:A:308:UNK:CG	2.36	0.55
1:A:367:PHE:N	1:A:367:PHE:HD1	2.04	0.55
1:A:9:LEU:HD21	1:A:296:TYR:CZ	2.41	0.55
1:A:153:UNK:O	1:A:154:GLN:C	2.46	0.55
1:A:219:TRP:CZ3	1:A:240:MET:N	2.75	0.55
1:A:261:TYR:HE1	1:A:291:ASP:C	2.14	0.55
1:A:412:TYR:CG	1:A:414:TRP:NE1	2.74	0.55
1:A:283:LYS:O	1:A:283:LYS:HG2	2.06	0.55
1:A:276:PHE:O	1:A:280:SER:CB	2.54	0.55
1:A:21:PRO:O	1:A:22:UNK:C	2.55	0.55
1:A:327:LEU:HD11	1:A:335:UNK:HG2	1.86	0.55
1:A:405:ALA:O	1:A:406:THR:C	2.48	0.55
1:A:420:UNK:C	1:A:420:UNK:CD	2.85	0.55
1:A:249:PHE:CZ	1:A:256:LEU:HD13	2.42	0.54
1:A:253:PHE:CE2	1:A:275:THR:HB	2.42	0.54
1:A:290:ARG:HH21	1:A:311:UNK:C	2.20	0.54
1:A:105:PRO:O	1:A:110:GLY:N	2.41	0.54
1:A:175:PHE:HB2	1:A:176:PRO:HD3	1.78	0.54
1:A:326:LYS:O	1:A:327:LEU:C	2.50	0.54
1:A:50:GLY:HA2	1:A:143:LYS:HZ2	1.67	0.54
1:A:402:UNK:CG	1:A:406:THR:HG21	2.38	0.54
1:A:135:PHE:CG	1:A:135:PHE:O	2.60	0.54
1:A:327:LEU:HB3	1:A:356:ARG:HH12	1.71	0.54
1:A:367:PHE:CD2	1:A:400:PHE:CA	2.90	0.54
1:A:290:ARG:HH21	1:A:311:UNK:CA	2.21	0.54
1:A:290:ARG:HH21	1:A:311:UNK:HA	1.71	0.54
1:A:10:VAL:O	1:A:11:GLU:C	2.49	0.54
1:A:64:PHE:CG	1:A:438:UNK:HG2	2.43	0.54
1:A:19:VAL:CG1	1:A:24:LEU:HD21	2.37	0.54
1:A:196:UNK:HB2	1:A:436:ALA:CA	2.37	0.54
1:A:211:GLY:O	1:A:281:UNK:HG2	2.07	0.54
1:A:53:LEU:HD11	1:A:240:MET:CE	2.37	0.54
1:A:67:ILE:O	1:A:136:THR:HG23	2.08	0.54
1:A:206:MET:HE1	1:A:377:ILE:HD12	1.90	0.53
1:A:312:ALA:HB3	1:A:315:VAL:CG2	2.26	0.53
1:A:58:GLY:N	1:A:199:TYR:CE2	2.76	0.53
1:A:137:PHE:CZ	1:A:167:ILE:HG21	2.42	0.53
1:A:246:GLN:CD	1:A:373:UNK:HG1	2.32	0.53
1:A:251:LYS:CB	1:A:275:THR:HG21	2.36	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:261:TYR:HD2	1:A:261:TYR:H	1.56	0.53
1:A:20:PRO:CG	1:A:23:ILE:HG12	2.37	0.53
1:A:54:LYS:HG2	1:A:447:GLN:CG	2.34	0.53
1:A:329:HIS:CG	1:A:333:ARG:NH1	2.75	0.53
1:A:17:PHE:HB3	1:A:361:LEU:CB	2.38	0.53
1:A:156:UNK:HB1	1:A:158:PHE:CD2	2.36	0.53
1:A:302:UNK:HB2	1:A:351:MET:CG	2.38	0.53
1:A:333:ARG:O	1:A:337:ASP:OD2	2.26	0.53
1:A:449:UNK:CG	1:A:450:UNK:H2	1.96	0.53
1:A:3:ALA:O	1:A:6:ASP:N	2.35	0.53
1:A:46:PRO:HG2	1:A:245:UNK:O	2.08	0.53
1:A:326:LYS:HG2	1:A:398:SER:HG	1.73	0.53
1:A:3:ALA:O	1:A:4:SER:C	2.50	0.53
1:A:196:UNK:CG	1:A:435:ALA:HB1	2.31	0.53
1:A:69:MET:HG2	1:A:70:GLY:N	2.19	0.53
1:A:146:VAL:HB	1:A:184:VAL:O	2.09	0.53
1:A:210:PHE:N	1:A:391:UNK:O	2.42	0.53
1:A:296:TYR:HB3	1:A:301:GLN:HB2	1.91	0.53
1:A:133:LEU:H	1:A:184:VAL:HG13	1.74	0.53
1:A:143:LYS:HZ3	1:A:191:HIS:CE1	1.89	0.53
1:A:269:SER:C	1:A:271:UNK:N	2.67	0.53
1:A:414:TRP:CD1	1:A:414:TRP:H	2.24	0.53
1:A:419:UNK:O	1:A:425:UNK:HG3	2.09	0.53
1:A:56:VAL:HG22	1:A:199:TYR:HA	1.89	0.52
1:A:77:ILE:HG13	1:A:90:UNK:HB1	1.91	0.52
1:A:431:ASP:CB	1:A:435:ALA:HB2	2.28	0.52
1:A:431:ASP:C	1:A:435:ALA:HB3	2.23	0.52
1:A:7:UNK:O	1:A:7:UNK:CD	2.57	0.52
1:A:22:UNK:CG	1:A:23:ILE:HD11	2.31	0.52
1:A:144:GLU:HG2	1:A:145:UNK:CG	2.38	0.52
1:A:192:GLY:HA3	1:A:436:ALA:HB3	1.84	0.52
1:A:51:TRP:CZ3	1:A:240:MET:HE1	2.45	0.52
1:A:30:ILE:O	1:A:33:THR:HB	2.09	0.52
1:A:348:LYS:C	1:A:350:UNK:N	2.67	0.52
1:A:46:PRO:HG2	1:A:248:SER:HG	1.71	0.52
1:A:351:MET:O	1:A:353:UNK:N	2.43	0.52
1:A:46:PRO:HD3	1:A:248:SER:HB2	1.91	0.52
1:A:75:GLU:HA	1:A:91:ALA:O	2.02	0.52
1:A:88:SER:C	1:A:89:ILE:CG2	2.82	0.52
1:A:326:LYS:O	1:A:328:PRO:N	2.43	0.52
1:A:327:LEU:HD12	1:A:335:UNK:CG	2.39	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:368:ARG:O	1:A:407:UNK:HG1	2.10	0.52
1:A:416:GLN:NE2	1:A:422:LYS:HA	2.25	0.52
1:A:446:SER:O	1:A:447:GLN:C	2.53	0.52
1:A:148:LYS:HE2	1:A:186:ASP:CG	2.35	0.52
1:A:293:LEU:HD23	1:A:339:PHE:HZ	1.75	0.52
1:A:294:MET:HE1	1:A:308:UNK:HG1	1.92	0.52
1:A:66:ALA:HB2	1:A:434:GLY:O	2.09	0.52
1:A:105:PRO:HA	1:A:109:TRP:N	2.25	0.52
1:A:119:PHE:O	1:A:120:SER:C	2.53	0.52
1:A:212:SER:O	1:A:281:UNK:HG1	2.10	0.52
1:A:266:ASN:O	1:A:267:UNK:C	2.56	0.52
1:A:289:LEU:HD11	1:A:359:LEU:CD2	2.39	0.52
1:A:251:LYS:NZ	1:A:274:LYS:H	2.05	0.52
1:A:303:HIS:HA	1:A:351:MET:CE	2.38	0.52
1:A:430:ILE:CG2	1:A:431:ASP:N	2.73	0.52
1:A:95:LEU:HD11	1:A:158:PHE:HE1	1.73	0.51
1:A:168:SER:OG	1:A:169:ALA:N	2.42	0.51
1:A:309:ASP:OD1	1:A:309:ASP:C	2.53	0.51
1:A:49:PRO:HA	1:A:243:CYS:N	2.25	0.51
1:A:51:TRP:CZ3	1:A:240:MET:CE	2.93	0.51
1:A:76:VAL:HB	1:A:119:PHE:CE1	2.45	0.51
1:A:103:ALA:HA	1:A:161:ALA:O	2.10	0.51
1:A:133:LEU:HD23	1:A:134:GLY:CA	2.40	0.51
1:A:154:GLN:HE22	1:A:164:UNK:HA	1.76	0.51
1:A:30:ILE:HD12	1:A:255:SER:HB3	1.88	0.51
1:A:34:ARG:CZ	1:A:37:ASP:HB3	2.41	0.51
1:A:172:ASN:O	1:A:175:PHE:CA	2.59	0.51
1:A:360:PHE:O	1:A:361:LEU:C	2.49	0.51
1:A:390:ALA:HB2	1:A:426:ILE:CG2	2.40	0.51
1:A:397:TYR:O	1:A:398:SER:C	2.52	0.51
1:A:371:VAL:HG12	1:A:404:SER:CB	2.27	0.51
1:A:93:ARG:HD2	1:A:115:SER:OG	2.10	0.51
1:A:207:GLY:O	1:A:216:ALA:HA	2.10	0.51
1:A:303:HIS:ND1	1:A:351:MET:HE3	2.26	0.51
1:A:321:PRO:HA	1:A:324:ILE:HD12	1.93	0.51
1:A:132:PRO:HD2	1:A:132:PRO:O	2.11	0.51
1:A:283:LYS:O	1:A:283:LYS:CG	2.59	0.51
1:A:75:GLU:HG3	1:A:90:UNK:HB2	1.92	0.51
1:A:312:ALA:O	1:A:314:ASN:N	2.44	0.51
1:A:377:ILE:C	1:A:379:GLN:N	2.67	0.51
1:A:450:UNK:O	1:A:451:ALA:C	2.54	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:66:ALA:O	1:A:67:ILE:HG22	2.10	0.51
1:A:24:LEU:O	1:A:27:VAL:HB	2.10	0.51
1:A:227:ASP:O	1:A:230:ASP:OD2	2.29	0.51
1:A:58:GLY:CA	1:A:199:TYR:CD2	2.78	0.50
1:A:187:ILE:CD1	1:A:440:ILE:HD12	2.41	0.50
1:A:211:GLY:O	1:A:282:ALA:CB	2.51	0.50
1:A:289:LEU:O	1:A:293:LEU:HB2	2.11	0.50
1:A:23:ILE:N	1:A:23:ILE:HD12	2.24	0.50
1:A:347:UNK:CG	1:A:351:MET:HE2	2.26	0.50
1:A:261:TYR:CE1	1:A:292:VAL:CA	2.94	0.50
1:A:327:LEU:HD13	1:A:332:LEU:CA	2.39	0.50
1:A:332:LEU:HD12	1:A:352:LYS:HB2	1.92	0.50
1:A:371:VAL:C	1:A:373:UNK:N	2.69	0.50
1:A:403:ASN:O	1:A:407:UNK:CB	2.59	0.50
1:A:450:UNK:HG2	1:A:450:UNK:O	2.12	0.50
1:A:221:ASP:OD1	1:A:223:THR:CG2	2.59	0.50
1:A:60:GLN:O	1:A:81:LEU:HB3	2.12	0.50
1:A:312:ALA:HB3	1:A:315:VAL:HB	0.52	0.50
1:A:387:HIS:CD2	1:A:387:HIS:N	2.74	0.50
1:A:76:VAL:O	1:A:77:ILE:HG13	2.12	0.50
1:A:109:TRP:CZ3	1:A:112:UNK:CE	2.94	0.50
1:A:137:PHE:CZ	1:A:139:GLU:OE1	2.65	0.50
1:A:151:ILE:O	1:A:151:ILE:HG22	2.11	0.50
1:A:145:UNK:CD	1:A:146:VAL:N	2.75	0.50
1:A:215:ASN:OD1	1:A:245:UNK:CA	2.60	0.50
1:A:287:GLN:O	1:A:290:ARG:HB3	2.11	0.50
1:A:79:ILE:CG1	1:A:81:LEU:CD1	2.89	0.50
1:A:105:PRO:HA	1:A:109:TRP:H	1.77	0.50
1:A:325:GLN:HE21	1:A:359:LEU:C	2.16	0.50
1:A:75:GLU:CG	1:A:76:VAL:N	2.75	0.50
1:A:151:ILE:CD1	1:A:153:UNK:H	2.25	0.50
1:A:12:VAL:HG23	1:A:12:VAL:O	2.12	0.49
1:A:69:MET:HB2	1:A:74:LEU:HD12	1.93	0.49
1:A:84:TYR:HA	1:A:199:TYR:CZ	2.47	0.49
1:A:137:PHE:CD2	1:A:139:GLU:HB3	2.45	0.49
1:A:367:PHE:CB	1:A:400:PHE:CE2	2.94	0.49
1:A:436:ALA:O	1:A:440:ILE:HB	2.11	0.49
1:A:153:UNK:HG3	1:A:154:GLN:O	2.11	0.49
1:A:326:LYS:HD2	1:A:398:SER:CA	2.35	0.49
1:A:6:ASP:O	1:A:8:SER:N	2.46	0.49
1:A:285:UNK:O	1:A:286:GLY:C	2.56	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:365:TYR:CD1	1:A:365:TYR:C	2.91	0.49
1:A:114:UNK:C	1:A:117:ALA:CB	2.82	0.49
1:A:261:TYR:HD1	1:A:291:ASP:CB	2.25	0.49
1:A:140:ALA:HB2	1:A:151:ILE:CD1	2.07	0.49
1:A:142:ALA:HB3	1:A:150:GLN:O	2.12	0.49
1:A:193:ILE:HA	1:A:197:VAL:HG11	1.88	0.49
1:A:64:PHE:CB	1:A:438:UNK:CG	2.63	0.49
1:A:116:ASN:O	1:A:119:PHE:HB2	2.13	0.49
1:A:191:HIS:CD2	1:A:241:UNK:CD	2.96	0.49
1:A:8:SER:O	1:A:12:VAL:HG12	2.13	0.49
1:A:58:GLY:O	1:A:84:TYR:HA	2.11	0.49
1:A:75:GLU:HG3	1:A:91:ALA:H	1.77	0.49
1:A:22:UNK:CG	1:A:23:ILE:N	2.76	0.49
1:A:90:UNK:CG	1:A:91:ALA:N	2.56	0.49
1:A:150:GLN:HA	1:A:166:LEU:HA	1.94	0.49
1:A:197:VAL:HG11	1:A:429:ALA:HB1	1.94	0.49
1:A:159:SER:O	1:A:160:LEU:C	2.56	0.49
1:A:59:SER:HA	1:A:83:GLY:HA2	1.95	0.49
1:A:70:GLY:CA	1:A:156:UNK:CD	2.91	0.49
1:A:261:TYR:CE1	1:A:291:ASP:C	2.91	0.49
1:A:390:ALA:HB2	1:A:426:ILE:HG23	1.95	0.49
1:A:142:ALA:CA	1:A:152:THR:OG1	2.61	0.48
1:A:187:ILE:HD13	1:A:440:ILE:HD12	1.95	0.48
1:A:258:GLN:O	1:A:259:ILE:O	2.32	0.48
1:A:367:PHE:CE2	1:A:397:TYR:CE2	3.01	0.48
1:A:397:TYR:CE2	1:A:398:SER:CA	2.96	0.48
1:A:75:GLU:CG	1:A:91:ALA:O	2.56	0.48
1:A:137:PHE:CZ	1:A:139:GLU:CB	2.95	0.48
1:A:206:MET:HB2	1:A:388:ILE:HG23	1.94	0.48
1:A:269:SER:CB	1:A:270:PRO:HD3	2.42	0.48
1:A:216:ALA:O	1:A:244:CYS:CB	2.56	0.48
1:A:67:ILE:CD1	1:A:135:PHE:HB2	2.40	0.48
1:A:117:ALA:C	1:A:119:PHE:N	2.68	0.48
1:A:18:ILE:HG21	1:A:18:ILE:HD12	1.56	0.48
1:A:261:TYR:CD1	1:A:292:VAL:HG13	2.49	0.48
1:A:268:UNK:CG	1:A:269:SER:N	2.76	0.48
1:A:375:UNK:HB1	1:A:408:ASN:ND2	2.27	0.48
1:A:378:CYS:O	1:A:383:TYR:N	2.31	0.48
1:A:388:ILE:HG13	1:A:426:ILE:HG12	1.95	0.48
1:A:403:ASN:O	1:A:407:UNK:HB1	2.13	0.48
1:A:197:VAL:HG21	1:A:389:ALA:HB2	1.96	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:418:ALA:O	1:A:422:LYS:N	2.47	0.48
1:A:144:GLU:C	1:A:145:UNK:HG3	2.38	0.48
1:A:328:PRO:HD2	1:A:334:UNK:CD	2.43	0.48
1:A:356:ARG:HA	1:A:359:LEU:CD1	2.43	0.48
1:A:2:ALA:HB2	1:A:350:UNK:HA	1.96	0.48
1:A:108:LEU:HG	1:A:160:LEU:CD1	2.44	0.48
1:A:109:TRP:CH2	1:A:135:PHE:HE2	2.28	0.48
1:A:193:ILE:HD11	1:A:208:ILE:N	2.28	0.48
1:A:210:PHE:O	1:A:394:UNK:CB	2.54	0.48
1:A:246:GLN:HE22	1:A:373:UNK:HG3	1.71	0.48
1:A:261:TYR:CD1	1:A:291:ASP:HB3	2.49	0.48
1:A:404:SER:HB2	1:A:426:ILE:CD1	2.44	0.48
1:A:23:ILE:CG2	1:A:257:PRO:HG3	2.43	0.48
1:A:109:TRP:NE1	1:A:163:LEU:HD21	2.23	0.48
1:A:176:PRO:CA	1:A:179:ASP:HB3	2.42	0.48
1:A:337:ASP:O	1:A:338:LEU:C	2.56	0.48
1:A:377:ILE:O	1:A:380:LYS:N	2.47	0.48
1:A:146:VAL:HB	1:A:147:ILE:H	1.54	0.47
1:A:156:UNK:CD	1:A:158:PHE:CE2	2.97	0.47
1:A:172:ASN:C	1:A:175:PHE:HB2	2.14	0.47
1:A:193:ILE:O	1:A:197:VAL:HG11	2.07	0.47
1:A:330:PHE:CD1	1:A:331:ASP:N	2.82	0.47
1:A:63:SER:C	1:A:64:PHE:CD2	2.92	0.47
1:A:182:UNK:HG3	1:A:184:VAL:CG1	2.44	0.47
1:A:296:TYR:CD1	1:A:301:GLN:HG3	2.49	0.47
1:A:77:ILE:HG22	1:A:89:ILE:N	2.29	0.47
1:A:208:ILE:HA	1:A:215:ASN:O	2.15	0.47
1:A:52:VAL:HA	1:A:54:LYS:NZ	2.22	0.47
1:A:133:LEU:CD2	1:A:134:GLY:N	2.77	0.47
1:A:111:ASN:HA	1:A:114:UNK:CG	2.45	0.47
1:A:255:SER:O	1:A:255:SER:OG	2.30	0.47
1:A:294:MET:CE	1:A:308:UNK:HG1	2.44	0.47
1:A:77:ILE:CG1	1:A:90:UNK:HB1	2.45	0.47
1:A:108:LEU:HG	1:A:160:LEU:HB3	1.97	0.47
1:A:116:ASN:O	1:A:119:PHE:HB3	2.15	0.47
1:A:167:ILE:N	1:A:170:MET:CE	2.75	0.47
1:A:181:UNK:CG	1:A:182:UNK:N	2.68	0.47
1:A:253:PHE:N	1:A:254:PRO:HD2	2.21	0.47
1:A:431:ASP:C	1:A:431:ASP:OD2	2.58	0.47
1:A:79:ILE:HG12	1:A:81:LEU:CD1	2.45	0.47
1:A:109:TRP:CE3	1:A:171:UNK:HG2	2.50	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:137:PHE:N	1:A:187:ILE:O	2.39	0.47
1:A:312:ALA:CB	1:A:315:VAL:CG2	2.90	0.47
1:A:367:PHE:HD2	1:A:400:PHE:HA	1.78	0.47
1:A:394:UNK:O	1:A:397:TYR:HB3	2.15	0.47
1:A:144:GLU:CD	1:A:148:LYS:HB2	2.32	0.47
1:A:146:VAL:O	1:A:148:LYS:C	2.57	0.47
1:A:194:LEU:HD12	1:A:194:LEU:HA	1.79	0.47
1:A:245:UNK:C	1:A:247:ASP:H	2.28	0.47
1:A:249:PHE:CE1	1:A:250:ARG:CB	2.86	0.47
1:A:367:PHE:CG	1:A:400:PHE:CD2	2.83	0.47
1:A:45:ILE:O	1:A:45:ILE:CG2	2.49	0.47
1:A:209:ILE:HD11	1:A:391:UNK:CE	2.45	0.47
1:A:281:UNK:HG3	1:A:283:LYS:N	2.29	0.47
1:A:105:PRO:HA	1:A:109:TRP:HB2	1.60	0.46
1:A:209:ILE:HG12	1:A:391:UNK:HB1	1.97	0.46
1:A:331:ASP:O	1:A:352:LYS:HE3	2.15	0.46
1:A:398:SER:O	1:A:399:GLY:C	2.58	0.46
1:A:111:ASN:C	1:A:113:ALA:N	2.65	0.46
1:A:137:PHE:CE2	1:A:167:ILE:HG21	2.48	0.46
1:A:146:VAL:HG13	1:A:148:LYS:HZ3	1.80	0.46
1:A:221:ASP:OD1	1:A:223:THR:CA	2.63	0.46
1:A:256:LEU:HD23	1:A:275:THR:OG1	2.15	0.46
1:A:324:ILE:HD13	1:A:359:LEU:HD11	1.97	0.46
1:A:329:HIS:CE1	1:A:333:ARG:NE	2.83	0.46
1:A:51:TRP:NE1	1:A:143:LYS:HB3	2.30	0.46
1:A:349:THR:O	1:A:353:UNK:HB2	2.16	0.46
1:A:390:ALA:CB	1:A:426:ILE:CG2	2.93	0.46
1:A:133:LEU:HD23	1:A:134:GLY:C	2.39	0.46
1:A:182:UNK:HG3	1:A:184:VAL:HG12	1.96	0.46
1:A:197:VAL:O	1:A:204:ILE:HG13	2.15	0.46
1:A:256:LEU:HD21	1:A:276:PHE:HD1	1.80	0.46
1:A:327:LEU:HB3	1:A:356:ARG:NH1	2.30	0.46
1:A:51:TRP:CD1	1:A:145:UNK:O	2.68	0.46
1:A:397:TYR:HD2	1:A:398:SER:O	1.85	0.46
1:A:218:TYR:H	1:A:218:TYR:HD1	1.64	0.46
1:A:367:PHE:CE2	1:A:400:PHE:CA	2.99	0.46
1:A:98:SER:O	1:A:100:UNK:N	2.48	0.46
1:A:148:LYS:CE	1:A:186:ASP:CG	2.89	0.46
1:A:150:GLN:O	1:A:150:GLN:HG2	2.15	0.46
1:A:265:LEU:CD2	1:A:265:LEU:N	2.71	0.46
1:A:325:GLN:O	1:A:356:ARG:NH2	2.49	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:326:LYS:HG2	1:A:398:SER:OG	2.15	0.46
1:A:23:ILE:O	1:A:27:VAL:HG23	2.16	0.46
1:A:101:THR:O	1:A:102:THR:HB	2.16	0.46
1:A:156:UNK:CB	1:A:158:PHE:HD2	2.24	0.46
1:A:233:UNK:HG1	1:A:452:UNK:O	2.14	0.46
1:A:261:TYR:HD1	1:A:291:ASP:HB3	1.80	0.46
1:A:324:ILE:HD13	1:A:359:LEU:CD2	2.45	0.46
1:A:327:LEU:HD12	1:A:335:UNK:HG1	1.97	0.46
1:A:70:GLY:C	1:A:158:PHE:CE2	2.87	0.46
1:A:150:GLN:HB2	1:A:166:LEU:CD2	2.17	0.46
1:A:182:UNK:CG	1:A:184:VAL:HG12	2.46	0.46
1:A:367:PHE:CZ	1:A:397:TYR:CD1	3.00	0.46
1:A:416:GLN:NE2	1:A:423:PRO:HD2	1.88	0.46
1:A:456:UNK:O	1:A:457:UNK:C	2.63	0.46
1:A:64:PHE:CE1	1:A:442:SER:HA	2.51	0.46
1:A:292:VAL:HG21	1:A:358:UNK:HG1	1.96	0.46
1:A:397:TYR:CE2	1:A:398:SER:CB	2.99	0.46
1:A:192:GLY:C	1:A:436:ALA:HB2	2.36	0.45
1:A:193:ILE:CA	1:A:197:VAL:HG11	2.44	0.45
1:A:358:UNK:C	1:A:360:PHE:N	2.79	0.45
1:A:397:TYR:CD2	1:A:398:SER:C	2.87	0.45
1:A:34:ARG:NH2	1:A:37:ASP:HB3	2.30	0.45
1:A:249:PHE:CE2	1:A:250:ARG:CD	3.00	0.45
1:A:51:TRP:HD1	1:A:143:LYS:HG2	1.79	0.45
1:A:62:GLY:O	1:A:79:ILE:O	2.34	0.45
1:A:109:TRP:CH2	1:A:135:PHE:CE2	3.04	0.45
1:A:109:TRP:HH2	1:A:135:PHE:CE2	2.30	0.45
1:A:166:LEU:CD1	1:A:169:ALA:HB2	1.90	0.45
1:A:11:GLU:O	1:A:14:UNK:HB2	2.16	0.45
1:A:52:VAL:O	1:A:219:TRP:HH2	1.97	0.45
1:A:57:UNK:N	1:A:60:GLN:NE2	2.65	0.45
1:A:189:ASP:CB	1:A:433:GLU:HG3	2.39	0.45
1:A:234:UNK:O	1:A:236:GLY:HA2	2.16	0.45
1:A:371:VAL:C	1:A:373:UNK:H	2.24	0.45
1:A:447:GLN:O	1:A:452:UNK:HB2	2.16	0.45
1:A:151:ILE:CD1	1:A:153:UNK:N	2.79	0.45
1:A:163:LEU:O	1:A:164:UNK:HB2	2.09	0.45
1:A:197:VAL:CG2	1:A:197:VAL:O	2.62	0.45
1:A:368:ARG:HG2	1:A:407:UNK:HB2	1.98	0.45
1:A:381:LYS:HD3	1:A:383:TYR:CZ	2.51	0.45
1:A:140:ALA:HB1	1:A:151:ILE:CD1	2.18	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:18:ILE:HG12	1:A:361:LEU:HG	1.98	0.45
1:A:66:ALA:CB	1:A:434:GLY:O	2.64	0.45
1:A:81:LEU:O	1:A:82:ALA:CB	2.63	0.45
1:A:81:LEU:HA	1:A:85:GLN:O	2.17	0.45
1:A:218:TYR:CD1	1:A:377:ILE:HD13	2.52	0.45
1:A:264:THR:HB	1:A:265:LEU:HD23	1.98	0.45
1:A:31:ALA:O	1:A:35:UNK:HB2	2.17	0.45
1:A:113:ALA:O	1:A:115:SER:C	2.56	0.45
1:A:151:ILE:HG13	1:A:154:GLN:HE22	1.81	0.45
1:A:38:UNK:HG2	1:A:42:ALA:O	2.17	0.45
1:A:193:ILE:HD11	1:A:208:ILE:H	1.82	0.45
1:A:355:VAL:HG12	1:A:359:LEU:HD21	1.98	0.45
1:A:374:ILE:HD13	1:A:374:ILE:HG21	1.50	0.45
1:A:35:UNK:CD	1:A:377:ILE:CG1	2.92	0.44
1:A:371:VAL:O	1:A:373:UNK:N	2.46	0.44
1:A:38:UNK:HG2	1:A:43:ALA:HB3	1.99	0.44
1:A:136:THR:HA	1:A:187:ILE:O	2.17	0.44
1:A:151:ILE:HB	1:A:165:LYS:O	2.17	0.44
1:A:70:GLY:HA2	1:A:156:UNK:CD	2.48	0.44
1:A:293:LEU:HD21	1:A:355:VAL:HG13	1.99	0.44
1:A:414:TRP:CD1	1:A:414:TRP:N	2.86	0.44
1:A:60:GLN:O	1:A:81:LEU:CB	2.65	0.44
1:A:319:SER:O	1:A:323:LYS:HD3	2.17	0.44
1:A:327:LEU:HG	1:A:335:UNK:HG2	1.99	0.44
1:A:79:ILE:CD1	1:A:86:GLU:HB3	2.48	0.44
1:A:144:GLU:OE2	1:A:148:LYS:HG2	2.18	0.44
1:A:276:PHE:O	1:A:280:SER:OG	2.34	0.44
1:A:308:UNK:CE	1:A:345:ILE:HD11	2.47	0.44
1:A:347:UNK:HB2	1:A:351:MET:SD	2.57	0.44
1:A:151:ILE:HG21	1:A:164:UNK:CA	2.47	0.44
1:A:201:ASP:OD2	1:A:201:ASP:C	2.61	0.44
1:A:205:LYS:HB2	1:A:387:HIS:O	2.18	0.44
1:A:416:GLN:NE2	1:A:423:PRO:CG	2.72	0.44
1:A:446:SER:O	1:A:448:UNK:N	2.50	0.44
1:A:249:PHE:HB3	1:A:276:PHE:HB2	2.00	0.44
1:A:275:THR:OG1	1:A:276:PHE:N	2.49	0.44
1:A:348:LYS:O	1:A:351:MET:CA	2.65	0.44
1:A:132:PRO:O	1:A:132:PRO:CD	2.65	0.44
1:A:219:TRP:HZ3	1:A:240:MET:HA	1.83	0.44
1:A:414:TRP:CE3	1:A:422:LYS:HG3	2.53	0.44
1:A:38:UNK:O	1:A:47:MET:HG3	2.18	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:207:GLY:O	1:A:216:ALA:C	2.56	0.43
1:A:331:ASP:HB2	1:A:333:ARG:NE	2.33	0.43
1:A:151:ILE:CD1	1:A:152:THR:N	2.80	0.43
1:A:153:UNK:C	1:A:154:GLN:O	2.66	0.43
1:A:394:UNK:O	1:A:394:UNK:HG3	2.18	0.43
1:A:4:SER:HA	1:A:7:UNK:HB1	2.00	0.43
1:A:19:VAL:HA	1:A:20:PRO:HD3	1.83	0.43
1:A:108:LEU:HD11	1:A:160:LEU:CD2	2.49	0.43
1:A:160:LEU:C	1:A:161:ALA:O	2.57	0.43
1:A:172:ASN:CA	1:A:175:PHE:CD1	2.58	0.43
1:A:175:PHE:CD2	1:A:181:UNK:CG	3.01	0.43
1:A:193:ILE:HG21	1:A:193:ILE:HD13	1.48	0.43
1:A:197:VAL:HG23	1:A:204:ILE:CG1	2.40	0.43
1:A:282:ALA:HB1	1:A:394:UNK:CD	2.41	0.43
1:A:70:GLY:HA3	1:A:156:UNK:CD	2.48	0.43
1:A:105:PRO:C	1:A:109:TRP:H	2.25	0.43
1:A:54:LYS:O	1:A:219:TRP:CH2	2.71	0.43
1:A:70:GLY:O	1:A:71:GLY:C	2.61	0.43
1:A:146:VAL:HA	1:A:148:LYS:NZ	2.32	0.43
1:A:21:PRO:HD3	1:A:368:ARG:HH21	1.84	0.43
1:A:51:TRP:HZ3	1:A:240:MET:CE	2.32	0.43
1:A:69:MET:HE1	1:A:108:LEU:HD12	1.99	0.43
1:A:146:VAL:HG13	1:A:148:LYS:NZ	2.34	0.43
1:A:204:ILE:HD12	1:A:204:ILE:HG21	1.72	0.43
1:A:209:ILE:N	1:A:215:ASN:O	2.48	0.43
1:A:374:ILE:HG23	1:A:388:ILE:HG21	2.00	0.43
1:A:46:PRO:HD3	1:A:248:SER:CB	2.45	0.43
1:A:75:GLU:HG2	1:A:76:VAL:H	1.83	0.43
1:A:93:ARG:NE	1:A:115:SER:HA	2.34	0.43
1:A:134:GLY:HA3	1:A:441:UNK:HG1	2.01	0.43
1:A:191:HIS:O	1:A:194:LEU:N	2.43	0.43
1:A:316:GLU:CB	1:A:320:TYR:CE1	3.00	0.43
1:A:358:UNK:C	1:A:360:PHE:H	2.31	0.43
1:A:211:GLY:CA	1:A:282:ALA:HB3	2.49	0.43
1:A:249:PHE:CE2	1:A:250:ARG:HD3	2.54	0.43
1:A:271:UNK:HG2	1:A:272:ALA:H	1.80	0.43
1:A:367:PHE:CA	1:A:400:PHE:CZ	3.02	0.43
1:A:38:UNK:CA	1:A:43:ALA:HB2	2.49	0.42
1:A:172:ASN:O	1:A:176:PRO:CD	2.59	0.42
1:A:195:UNK:O	1:A:196:UNK:C	2.63	0.42
1:A:392:GLY:C	1:A:394:UNK:N	2.76	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:79:ILE:CG2	1:A:438:UNK:CG	2.79	0.42
1:A:253:PHE:HE2	1:A:275:THR:HB	1.85	0.42
1:A:13:HIS:C	1:A:15:UNK:N	2.76	0.42
1:A:73:ASP:H	1:A:95:LEU:HG	1.84	0.42
1:A:207:GLY:O	1:A:216:ALA:CA	2.67	0.42
1:A:306:UNK:CE	1:A:345:ILE:HG23	2.49	0.42
1:A:37:ASP:C	1:A:43:ALA:HB2	2.44	0.42
1:A:53:LEU:H	1:A:54:LYS:NZ	2.18	0.42
1:A:65:LEU:HD23	1:A:131:VAL:HG21	2.00	0.42
1:A:151:ILE:CG2	1:A:164:UNK:O	2.63	0.42
1:A:322:ALA:O	1:A:398:SER:OG	2.35	0.42
1:A:58:GLY:N	1:A:199:TYR:HE2	2.17	0.42
1:A:150:GLN:N	1:A:166:LEU:CD2	2.82	0.42
1:A:251:LYS:HA	1:A:275:THR:HG21	1.97	0.42
1:A:348:LYS:O	1:A:351:MET:CB	2.67	0.42
1:A:50:GLY:CA	1:A:143:LYS:HZ2	2.33	0.42
1:A:79:ILE:HG12	1:A:81:LEU:HD11	2.00	0.42
1:A:305:UNK:O	1:A:306:UNK:O	2.37	0.42
1:A:317:ASN:H	1:A:320:TYR:HE1	1.66	0.42
1:A:325:GLN:HE22	1:A:363:ALA:CB	2.33	0.42
1:A:327:LEU:HD23	1:A:327:LEU:HA	1.65	0.42
1:A:135:PHE:CZ	1:A:171:UNK:HB1	2.53	0.42
1:A:275:THR:O	1:A:276:PHE:C	2.61	0.42
1:A:402:UNK:CG	1:A:406:THR:CG2	2.85	0.42
1:A:37:ASP:O	1:A:42:ALA:O	2.38	0.42
1:A:79:ILE:HD11	1:A:86:GLU:HA	2.02	0.42
1:A:225:ILE:HD13	1:A:242:VAL:HG23	2.02	0.42
1:A:246:GLN:O	1:A:249:PHE:HB3	2.20	0.42
1:A:251:LYS:N	1:A:275:THR:HG21	2.35	0.42
1:A:325:GLN:HE22	1:A:363:ALA:HB2	1.85	0.42
1:A:119:PHE:HB3	1:A:120:SER:H	0.98	0.42
1:A:193:ILE:CD1	1:A:389:ALA:O	2.68	0.41
1:A:371:VAL:HA	1:A:374:ILE:HD12	2.02	0.41
1:A:260:UNK:HG3	1:A:261:TYR:CD2	2.55	0.41
1:A:2:ALA:HB2	1:A:350:UNK:CA	2.50	0.41
1:A:51:TRP:CD1	1:A:143:LYS:HG2	2.55	0.41
1:A:101:THR:HA	1:A:159:SER:OG	2.21	0.41
1:A:299:UNK:HB1	1:A:301:GLN:NE2	2.32	0.41
1:A:332:LEU:HB2	1:A:352:LYS:HD2	2.01	0.41
1:A:41:ALA:O	1:A:42:ALA:HB2	2.20	0.41
1:A:175:PHE:CB	1:A:176:PRO:HD2	2.35	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:211:GLY:O	1:A:281:UNK:HG3	2.20	0.41
1:A:311:UNK:O	1:A:312:ALA:C	2.57	0.41
1:A:426:ILE:HG21	1:A:426:ILE:HD13	1.57	0.41
1:A:432:GLY:O	1:A:436:ALA:HB3	2.20	0.41
1:A:441:UNK:C	1:A:443:ILE:N	2.81	0.41
1:A:84:TYR:CD1	1:A:199:TYR:O	2.69	0.41
1:A:140:ALA:HB2	1:A:153:UNK:CA	2.50	0.41
1:A:296:TYR:HA	1:A:301:GLN:HG3	2.01	0.41
1:A:349:THR:HA	1:A:352:LYS:HE2	2.02	0.41
1:A:117:ALA:O	1:A:119:PHE:N	2.54	0.41
1:A:317:ASN:N	1:A:320:TYR:CD1	2.89	0.41
1:A:324:ILE:CD1	1:A:359:LEU:HD13	2.48	0.41
1:A:133:LEU:CB	1:A:182:UNK:O	2.66	0.41
1:A:174:UNK:HA	1:A:177:ALA:HB3	2.03	0.41
1:A:209:ILE:HG21	1:A:209:ILE:HD12	1.51	0.41
1:A:256:LEU:HD12	1:A:256:LEU:HA	1.92	0.41
1:A:327:LEU:CD2	1:A:334:UNK:HB2	2.51	0.41
1:A:51:TRP:CD1	1:A:143:LYS:CG	3.03	0.41
1:A:58:GLY:N	1:A:60:GLN:HE21	2.16	0.41
1:A:64:PHE:CG	1:A:438:UNK:CG	3.03	0.41
1:A:114:UNK:O	1:A:117:ALA:CA	2.63	0.41
1:A:160:LEU:O	1:A:161:ALA:O	2.38	0.41
1:A:229:ALA:N	1:A:230:ASP:OD2	2.54	0.41
1:A:238:GLY:O	1:A:239:UNK:O	2.38	0.41
1:A:296:TYR:CA	1:A:301:GLN:HG3	2.51	0.41
1:A:327:LEU:CG	1:A:335:UNK:HG2	2.51	0.41
1:A:356:ARG:NE	1:A:360:PHE:CE1	2.84	0.41
1:A:95:LEU:CA	1:A:99:MET:HE3	2.43	0.41
1:A:151:ILE:HD12	1:A:153:UNK:N	2.36	0.41
1:A:153:UNK:O	1:A:154:GLN:O	2.39	0.41
1:A:209:ILE:HG23	1:A:391:UNK:O	2.22	0.41
1:A:303:HIS:CD2	1:A:345:ILE:HG21	2.56	0.41
1:A:303:HIS:O	1:A:304:UNK:C	2.69	0.41
1:A:320:TYR:HB3	1:A:321:PRO:CD	2.46	0.41
1:A:82:ALA:O	1:A:85:GLN:OE1	2.29	0.40
1:A:150:GLN:N	1:A:166:LEU:HD22	2.34	0.40
1:A:8:SER:O	1:A:12:VAL:HG13	2.21	0.40
1:A:249:PHE:CZ	1:A:250:ARG:HD2	2.55	0.40
1:A:250:ARG:CZ	1:A:253:PHE:HD2	2.17	0.40
1:A:256:LEU:C	1:A:258:GLN:H	2.29	0.40
1:A:72:GLY:HA2	1:A:95:LEU:HB2	2.03	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:104:ILE:HA	1:A:105:PRO:HD2	1.44	0.40
1:A:148:LYS:N	1:A:148:LYS:CD	2.82	0.40
1:A:197:VAL:HB	1:A:430:ILE:H	1.86	0.40
1:A:277:GLU:HB3	1:A:281:UNK:HB2	2.02	0.40
1:A:377:ILE:CG2	1:A:378:CYS:N	2.83	0.40
1:A:42:ALA:O	1:A:43:ALA:HB3	2.05	0.40
1:A:46:PRO:O	1:A:47:MET:HB2	2.21	0.40
1:A:51:TRP:CD1	1:A:143:LYS:HD2	2.57	0.40
1:A:75:GLU:HG2	1:A:90:UNK:CB	2.46	0.40
1:A:90:UNK:HB2	1:A:91:ALA:H	1.13	0.40
1:A:178:GLY:C	1:A:179:ASP:CG	2.90	0.40
1:A:259:ILE:HG23	1:A:259:ILE:HD13	1.80	0.40
1:A:367:PHE:O	1:A:370:VAL:CG1	2.68	0.40
1:A:440:ILE:O	1:A:440:ILE:HG23	2.19	0.40
1:A:60:GLN:HE21	1:A:60:GLN:H	1.68	0.40
1:A:329:HIS:CG	1:A:333:ARG:CD	3.04	0.40
1:A:405:ALA:O	1:A:407:UNK:N	2.55	0.40

All (1) symmetry-related close contacts are listed below. The label for Atom-2 includes the symmetry operator and encoded unit-cell translations to be applied.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:106:SER:OG	1:A:223:THR:OG1[3_555]	1.98	0.22

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	372/457 (81%)	214 (58%)	78 (21%)	80 (22%)	0 1

All (80) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	4	SER
1	A	39	ASP
1	A	42	ALA
1	A	43	ALA
1	A	46	PRO
1	A	73	ASP
1	A	91	ALA
1	A	92	SER
1	A	95	LEU
1	A	96	ALA
1	A	99	MET
1	A	104	ILE
1	A	120	SER
1	A	121	SER
1	A	126	SER
1	A	130	SER
1	A	131	VAL
1	A	139	GLU
1	A	146	VAL
1	A	147	ILE
1	A	155	ALA
1	A	161	ALA
1	A	166	LEU
1	A	167	ILE
1	A	169	ALA
1	A	222	SER
1	A	235	GLY
1	A	237	ALA
1	A	253	PHE
1	A	259	ILE
1	A	265	LEU
1	A	272	ALA
1	A	313	ALA
1	A	378	CYS
1	A	396	ASP
1	A	398	SER
1	A	431	ASP
1	A	446	SER
1	A	33	THR
1	A	56	VAL
1	A	71	GLY
1	A	82	ALA
1	A	98	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	103	ALA
1	A	117	ALA
1	A	125	SER
1	A	148	LYS
1	A	160	LEU
1	A	192	GLY
1	A	255	SER
1	A	258	GLN
1	A	330	PHE
1	A	344	GLY
1	A	377	ILE
1	A	399	GLY
1	A	405	ALA
1	A	417	SER
1	A	447	GLN
1	A	451	ALA
1	A	21	PRO
1	A	231	ALA
1	A	244	CYS
1	A	320	TYR
1	A	329	HIS
1	A	338	LEU
1	A	118	ALA
1	A	119	PHE
1	A	132	PRO
1	A	154	GLN
1	A	173	ALA
1	A	342	ASP
1	A	352	LYS
1	A	172	ASN
1	A	269	SER
1	A	327	LEU
1	A	328	PRO
1	A	175	PHE
1	A	382	GLY
1	A	20	PRO
1	A	286	GLY

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

resolution.

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	284/284 (100%)	146 (51%)	138 (49%)	0 0

All (138) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	8	SER
1	A	9	LEU
1	A	12	VAL
1	A	16	VAL
1	A	18	ILE
1	A	21	PRO
1	A	23	ILE
1	A	24	LEU
1	A	30	ILE
1	A	34	ARG
1	A	45	ILE
1	A	46	PRO
1	A	48	VAL
1	A	53	LEU
1	A	54	LYS
1	A	55	GLN
1	A	56	VAL
1	A	60	GLN
1	A	63	SER
1	A	65	LEU
1	A	69	MET
1	A	73	ASP
1	A	74	LEU
1	A	77	ILE
1	A	78	LEU
1	A	79	ILE
1	A	81	LEU
1	A	84	TYR
1	A	86	GLU
1	A	89	ILE
1	A	92	SER
1	A	95	LEU
1	A	99	MET
1	A	104	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	106	SER
1	A	108	LEU
1	A	111	ASN
1	A	116	ASN
1	A	130	SER
1	A	136	THR
1	A	139	GLU
1	A	143	LYS
1	A	144	GLU
1	A	148	LYS
1	A	150	GLN
1	A	151	ILE
1	A	152	THR
1	A	154	GLN
1	A	160	LEU
1	A	163	LEU
1	A	166	LEU
1	A	168	SER
1	A	179	ASP
1	A	186	ASP
1	A	187	ILE
1	A	190	SER
1	A	191	HIS
1	A	197	VAL
1	A	204	ILE
1	A	205	LYS
1	A	206	MET
1	A	208	ILE
1	A	209	ILE
1	A	214	VAL
1	A	220	CYS
1	A	221	ASP
1	A	223	THR
1	A	225	ILE
1	A	227	ASP
1	A	230	ASP
1	A	242	VAL
1	A	244	CYS
1	A	248	SER
1	A	249	PHE
1	A	251	LYS
1	A	258	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	259	ILE
1	A	261	TYR
1	A	265	LEU
1	A	274	LYS
1	A	275	THR
1	A	277	GLU
1	A	283	LYS
1	A	288	SER
1	A	289	LEU
1	A	290	ARG
1	A	292	VAL
1	A	293	LEU
1	A	294	MET
1	A	309	ASP
1	A	314	ASN
1	A	315	VAL
1	A	316	GLU
1	A	317	ASN
1	A	323	LYS
1	A	324	ILE
1	A	326	LYS
1	A	327	LEU
1	A	329	HIS
1	A	331	ASP
1	A	332	LEU
1	A	333	ARG
1	A	343	GLN
1	A	345	ILE
1	A	348	LYS
1	A	349	THR
1	A	351	MET
1	A	357	ARG
1	A	361	LEU
1	A	362	ILE
1	A	365	TYR
1	A	367	PHE
1	A	368	ARG
1	A	369	LEU
1	A	370	VAL
1	A	371	VAL
1	A	377	ILE
1	A	379	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	381	LYS
1	A	384	SER
1	A	385	SER
1	A	388	ILE
1	A	393	SER
1	A	396	ASP
1	A	397	TYR
1	A	398	SER
1	A	404	SER
1	A	408	ASN
1	A	416	GLN
1	A	417	SER
1	A	422	LYS
1	A	424	ILE
1	A	427	THR
1	A	440	ILE
1	A	442	SER
1	A	443	ILE
1	A	446	SER
1	A	447	GLN

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (15) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	55	GLN
1	A	60	GLN
1	A	85	GLN
1	A	150	GLN
1	A	154	GLN
1	A	191	HIS
1	A	246	GLN
1	A	279	ASN
1	A	301	GLN
1	A	303	HIS
1	A	314	ASN
1	A	317	ASN
1	A	325	GLN
1	A	387	HIS
1	A	408	ASN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	A	2

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	101:THR	C	102:THR	N	1.20
1	A	38:UNK	C	39:ASP	N	1.15

6 Fit of model and data

6.1 Protein, DNA and RNA chains

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.2 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.3 Carbohydrates

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.4 Ligands

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.5 Other polymers

EDS was not executed - this section is therefore empty.