



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 06:51 AM UTC

PDB ID : 2INY / pdb_00002iny
Title : Nanoporous Crystals of Chicken Embryo Lethal Orphan (CELO) Adenovirus
Major Coat Protein, Hexon
Authors : Xu, L.; Benson, S.D.; Burnett, R.M.
Deposited on : 2006-10-09
Resolution : 3.90 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)	:	2.0
EDS	:	3.0
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
CCP4	:	9.0.010 (Gargrove)
Density-Fitness	:	1.0.12
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

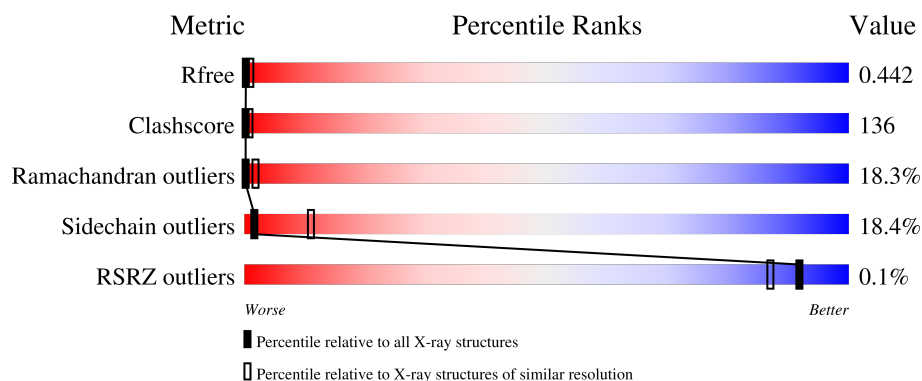
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

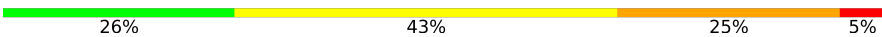
The reported resolution of this entry is 3.90 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
R_{free}	180053	1270 (4.10-3.70)
Clashscore	190562	1034 (4.08-3.72)
Ramachandran outliers	187476	1251 (4.10-3.70)
Sidechain outliers	187428	1243 (4.10-3.70)
RSRZ outliers	180081	1269 (4.10-3.70)

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	942	

2 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 7523 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.

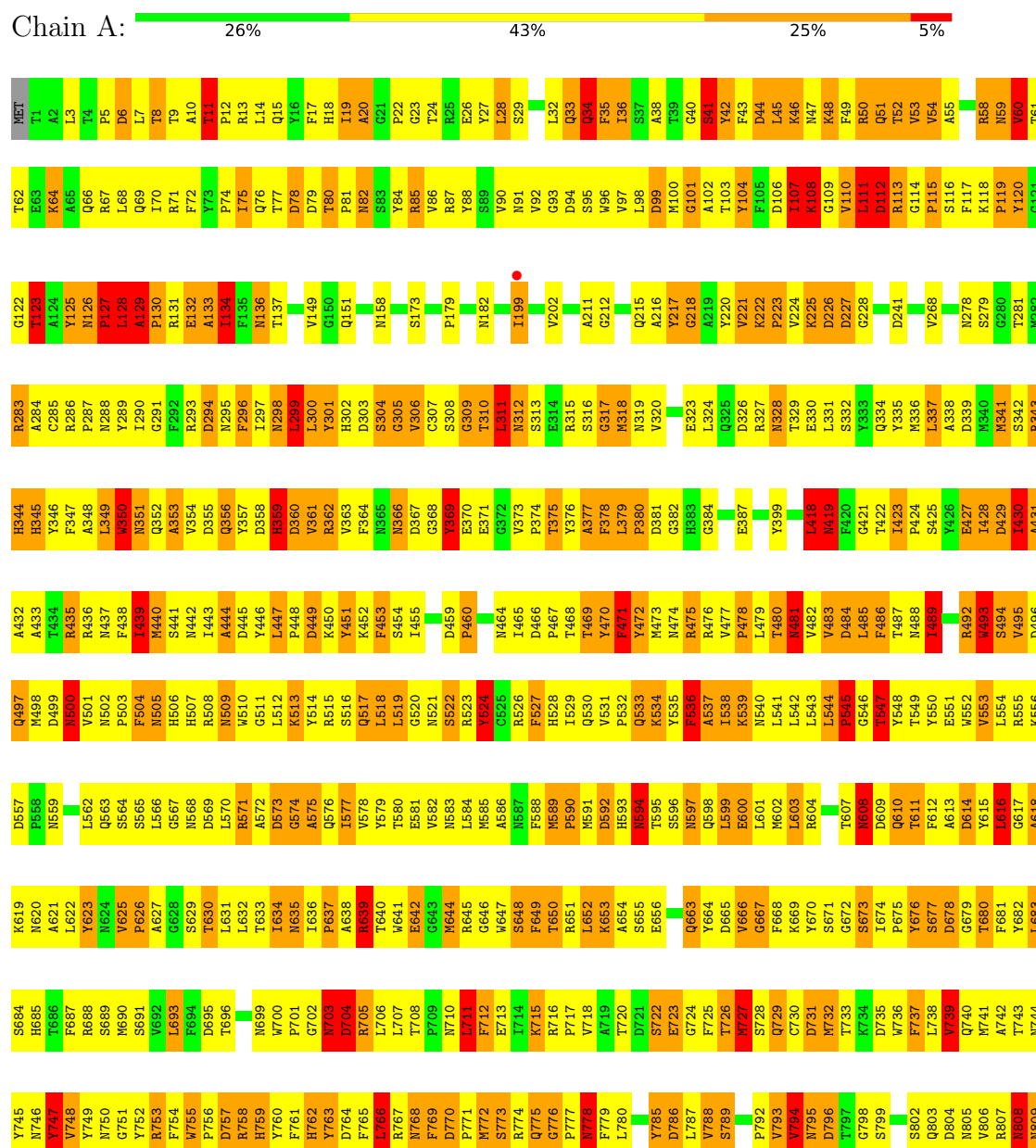
- Molecule 1 is a protein called Hexon protein.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	941	Total	C	N	O	S	1667	0	0
			7523	4764	1281	1444	34			

3 Residue-property plots

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

• Molecule 1: Hexon protein





4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 3 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	157.77Å 157.77Å 114.20Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	47.06 – 3.90 47.06 – 3.90	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	92.3 (47.06-3.90) 92.3 (47.06-3.90)	Depositor EDS
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	0.20	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	3.86 (at 3.88Å)	Xtriage
Refinement program	CNS 1.1	Depositor
R, R_{free}	0.372 , 0.416 0.350 , 0.442	Depositor DCC
R_{free} test set	731 reflections (4.99%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	64.5	Xtriage
Anisotropy	0.113	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.27 , 577.8	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.45$, $\langle L^2 \rangle = 0.28$	Xtriage
Estimated twinning fraction	0.046 for -h,-k,l	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.75	EDS
Total number of atoms	7523	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	30.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.19% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

²Theoretical values of $\langle |L| \rangle$, $\langle L^2 \rangle$ for acentric reflections are 0.5, 0.333 respectively for untwinned datasets, and 0.375, 0.2 for perfectly twinned datasets.

5 Model quality i

5.1 Standard geometry i

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	0.79	7/7728 (0.1%)	1.22	97/10545 (0.9%)

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

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	2

All (7) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	847	GLN	CB-CG	30.75	2.44	1.52
1	A	524	TYR	CD2-CE2	14.10	1.80	1.38
1	A	524	TYR	CD1-CE1	12.00	1.74	1.38
1	A	524	TYR	CE2-CZ	10.35	1.63	1.38
1	A	524	TYR	CE1-CZ	9.44	1.60	1.38
1	A	524	TYR	CG-CD2	8.71	1.57	1.39
1	A	524	TYR	CG-CD1	8.31	1.56	1.39

All (97) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	500	ASN	N-CA-C	11.06	126.32	113.15
1	A	847	GLN	CA-CB-CG	10.51	135.12	114.10
1	A	367	ASP	N-CA-C	-10.43	100.22	113.16
1	A	439	ILE	N-CA-C	-10.33	100.80	110.82
1	A	876	THR	N-CA-C	9.93	125.90	110.20
1	A	537	ALA	N-CA-C	9.84	123.69	112.57
1	A	94	ASP	N-CA-C	-9.41	96.59	110.23
1	A	222	LYS	CA-C-N	9.33	129.91	119.92
1	A	222	LYS	C-N-CA	9.33	129.91	119.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	676	TYR	N-CA-C	-8.88	102.58	113.15
1	A	881	ASN	CA-C-N	8.75	128.97	119.87
1	A	881	ASN	C-N-CA	8.75	128.97	119.87
1	A	553	VAL	N-CA-C	8.54	120.65	108.17
1	A	776	GLY	CA-C-N	8.21	130.10	119.84
1	A	776	GLY	C-N-CA	8.21	130.10	119.84
1	A	847	GLN	CB-CG-CD	8.19	126.52	112.60
1	A	575	ALA	N-CA-C	-8.18	99.50	110.55
1	A	885	THR	N-CA-C	-7.96	102.09	112.68
1	A	770	ASP	CA-C-N	7.89	129.70	119.84
1	A	770	ASP	C-N-CA	7.89	129.70	119.84
1	A	723	GLU	N-CA-C	-7.78	102.89	112.38
1	A	484	ASP	N-CA-C	7.59	120.37	110.43
1	A	877	ASP	N-CA-C	-7.53	102.55	112.34
1	A	796	ASP	N-CA-C	-7.48	99.70	110.24
1	A	101	GLY	N-CA-C	-7.42	105.47	114.66
1	A	926	LEU	N-CA-C	7.36	117.73	108.45
1	A	798	GLY	N-CA-C	-7.35	101.93	112.81
1	A	129	ALA	CA-C-N	7.32	128.99	119.84
1	A	129	ALA	C-N-CA	7.32	128.99	119.84
1	A	283	ARG	N-CA-C	7.30	119.84	108.96
1	A	493	TRP	N-CA-C	7.29	120.49	110.06
1	A	361	VAL	N-CA-C	7.25	117.85	110.82
1	A	789	SER	N-CA-C	7.20	119.09	108.14
1	A	19	ILE	N-CA-C	-7.19	105.60	113.43
1	A	594	ASN	N-CA-C	-7.17	102.27	111.02
1	A	826	GLY	N-CA-C	7.16	119.86	111.63
1	A	133	ALA	N-CA-C	7.15	119.33	109.18
1	A	883	MET	N-CA-C	-7.09	104.51	113.02
1	A	884	TYR	N-CA-C	-7.07	103.13	114.09
1	A	377	ALA	N-CA-C	-7.04	98.84	110.17
1	A	423	ILE	CA-C-N	6.93	128.50	119.84
1	A	423	ILE	C-N-CA	6.93	128.50	119.84
1	A	881	ASN	N-CA-C	6.89	119.49	109.71
1	A	527	PHE	N-CA-C	6.79	119.99	109.60
1	A	861	TRP	N-CA-C	-6.56	99.23	109.72
1	A	328	ASN	N-CA-C	-6.54	100.49	110.30
1	A	464	ASN	N-CA-C	-6.41	104.16	114.09
1	A	513	LYS	N-CA-C	-6.39	104.41	111.82
1	A	544	LEU	CA-C-N	6.37	127.80	119.84
1	A	544	LEU	C-N-CA	6.37	127.80	119.84
1	A	866	SER	N-CA-C	6.34	116.94	108.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	747	TYR	N-CA-C	-6.33	99.38	109.76
1	A	648	SER	N-CA-C	-6.28	98.96	109.07
1	A	914	ASP	N-CA-C	-6.25	105.51	112.57
1	A	778	ASN	N-CA-C	-6.24	97.50	110.80
1	A	366	ASN	N-CA-C	6.20	120.89	107.49
1	A	311	LEU	N-CA-C	-6.16	102.40	110.53
1	A	786	ASP	N-CA-C	6.09	120.25	112.34
1	A	693	LEU	N-CA-C	6.08	118.67	108.02
1	A	848	THR	N-CA-C	6.06	118.83	110.35
1	A	715	LYS	N-CA-C	6.02	117.69	108.42
1	A	759	HIS	N-CA-C	-6.00	104.61	112.41
1	A	600	GLU	N-CA-C	-5.98	104.69	111.14
1	A	829	TRP	N-CA-C	5.88	118.15	109.62
1	A	766	LEU	N-CA-C	5.86	118.54	111.40
1	A	112	ASP	N-CA-C	-5.85	101.62	110.28
1	A	891	MET	N-CA-C	5.82	117.37	108.52
1	A	673	SER	N-CA-C	5.81	119.15	110.14
1	A	509	ASN	N-CA-C	-5.74	99.45	108.63
1	A	608	ASN	N-CA-C	5.70	119.35	111.55
1	A	844	SER	N-CA-C	-5.69	98.44	108.23
1	A	223	PRO	N-CA-C	5.64	120.09	111.34
1	A	614	ASP	N-CA-C	5.61	118.67	109.76
1	A	573	ASP	N-CA-C	-5.57	99.32	109.56
1	A	649	PHE	N-CA-C	5.56	117.55	108.55
1	A	199	ILE	N-CA-C	5.54	114.34	106.53
1	A	616	LEU	N-CA-C	-5.54	104.27	111.02
1	A	45	LEU	N-CA-C	-5.51	106.00	114.16
1	A	618	ALA	N-CA-C	5.49	116.57	107.73
1	A	439	ILE	CB-CA-C	-5.46	104.89	112.04
1	A	483	VAL	N-CA-C	5.46	120.69	109.34
1	A	447	LEU	CA-C-N	5.35	125.52	119.90
1	A	447	LEU	C-N-CA	5.35	125.52	119.90
1	A	60	VAL	CB-CA-C	-5.31	102.58	111.29
1	A	339	ASP	N-CA-C	5.23	117.41	111.02
1	A	829	TRP	CA-C-N	5.19	125.20	119.90
1	A	829	TRP	C-N-CA	5.19	125.20	119.90
1	A	737	PHE	N-CA-C	-5.19	105.05	111.33
1	A	310	THR	N-CA-C	5.19	121.85	110.80
1	A	739	VAL	N-CA-C	-5.16	98.62	109.34
1	A	41	SER	N-CA-C	-5.14	107.30	113.21
1	A	642	GLU	N-CA-C	5.10	116.57	108.67
1	A	931	PHE	N-CA-C	5.08	116.14	108.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	680	THR	N-CA-C	-5.06	106.32	113.20
1	A	182	ASN	CB-CA-C	-5.05	110.36	117.23
1	A	775	GLN	N-CA-C	5.04	117.31	110.35
1	A	17	PHE	N-CA-C	5.01	118.29	112.97

There are no chirality outliers.

All (2) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	301	TYR	Sidechain
1	A	747	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	7523	0	7147	1549	12
All	All	7523	0	7147	1549	12

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 136.

All (1549) 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:524:TYR:CE2	1:A:524:TYR:CD2	1.80	1.65
1:A:524:TYR:CE1	1:A:524:TYR:CD1	1.74	1.64
1:A:376:TYR:HE2	1:A:427:GLU:HG2	1.08	1.18
1:A:433:ALA:HA	1:A:436:ARG:NH1	1.58	1.17
1:A:433:ALA:CA	1:A:436:ARG:HH12	1.57	1.16
1:A:811:GLY:HA2	1:A:826:GLY:HA3	1.27	1.16
1:A:882:PRO:HA	1:A:885:THR:CB	1.76	1.13
1:A:134:ILE:H	1:A:134:ILE:HD13	0.98	1.11
1:A:363:VAL:HA	1:A:494:SER:HB3	1.16	1.11
1:A:22:PRO:HB2	1:A:26:GLU:HB2	1.30	1.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:296:PHE:HB3	1:A:299:LEU:HD22	1.24	1.11
1:A:376:TYR:CE2	1:A:427:GLU:HG2	1.84	1.11
1:A:604:ARG:HH11	1:A:922:GLU:HA	1.02	1.10
1:A:9:THR:HA	1:A:13:ARG:HG3	1.33	1.10
1:A:793:VAL:HA	1:A:796:ASP:OD1	1.54	1.08
1:A:465:ILE:HG21	1:A:471:PHE:HB2	1.28	1.07
1:A:726:THR:O	1:A:727:MET:HB3	1.53	1.07
1:A:28:LEU:HD22	1:A:32:LEU:HD23	1.36	1.06
1:A:82:ASN:ND2	1:A:663:GLN:HE21	1.54	1.06
1:A:310:THR:HG23	1:A:319:ASN:ND2	1.72	1.04
1:A:882:PRO:HA	1:A:885:THR:HB	1.05	1.04
1:A:536:PHE:CD2	1:A:614:ASP:HB2	1.94	1.03
1:A:640:THR:HB	1:A:642:GLU:OE1	1.57	1.02
1:A:654:ALA:HA	1:A:905:TYR:CE2	1.95	1.01
1:A:774:ARG:HD2	1:A:775:GLN:N	1.74	1.01
1:A:874:GLU:HG2	1:A:913:PHE:CE1	1.95	1.01
1:A:436:ARG:NH1	1:A:436:ARG:HB3	1.75	1.01
1:A:745:TYR:HE2	1:A:766:LEU:HD23	1.26	1.00
1:A:108:LYS:HA	1:A:528:HIS:HA	1.41	1.00
1:A:433:ALA:HA	1:A:436:ARG:HH12	0.83	0.99
1:A:785:TYR:CD2	1:A:788:VAL:HB	1.97	0.99
1:A:343:ARG:HH12	1:A:354:VAL:N	1.61	0.99
1:A:355:ASP:HB3	1:A:509:ASN:HD21	1.28	0.99
1:A:752:TYR:H	1:A:753:ARG:HH11	1.10	0.99
1:A:768:ASN:ND2	1:A:858:ASN:HD22	1.58	0.99
1:A:808:ASN:CG	1:A:809:ASN:H	1.71	0.99
1:A:64:LYS:H	1:A:64:LYS:HD3	1.22	0.99
1:A:544:LEU:HD21	1:A:603:LEU:HB3	1.41	0.99
1:A:85:ARG:HA	1:A:553:VAL:HG22	1.43	0.98
1:A:512:LEU:HD22	1:A:563:GLN:HE21	1.29	0.98
1:A:604:ARG:NH1	1:A:922:GLU:HA	1.79	0.97
1:A:419:ASN:HD21	1:A:421:GLY:C	1.73	0.97
1:A:920:GLN:HG2	1:A:926:LEU:HD21	1.46	0.97
1:A:28:LEU:HB3	1:A:33:GLN:HE22	1.30	0.96
1:A:379:LEU:HB2	1:A:424:PRO:HG2	1.47	0.95
1:A:332:SER:HA	1:A:616:LEU:HD23	1.48	0.95
1:A:745:TYR:CE2	1:A:766:LEU:HD23	2.01	0.95
1:A:130:PRO:O	1:A:217:TYR:HB2	1.67	0.94
1:A:517:GLN:C	1:A:519:LEU:H	1.74	0.94
1:A:136:ASN:H	1:A:136:ASN:HD22	1.10	0.94
1:A:343:ARG:HH12	1:A:354:VAL:H	1.10	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:535:TYR:CZ	1:A:537:ALA:HB3	2.02	0.94
1:A:882:PRO:CA	1:A:885:THR:HB	1.96	0.94
1:A:84:TYR:HD2	1:A:554:LEU:HD22	1.33	0.94
1:A:635:ASN:HA	1:A:892:VAL:HG13	1.49	0.94
1:A:106:ASP:OD1	1:A:530:GLN:HG3	1.68	0.94
1:A:874:GLU:HG2	1:A:913:PHE:HE1	1.26	0.93
1:A:768:ASN:HD21	1:A:858:ASN:ND2	1.67	0.93
1:A:779:PHE:HZ	1:A:843:ILE:H	1.14	0.93
1:A:134:ILE:HD13	1:A:134:ILE:N	1.84	0.93
1:A:24:THR:HA	1:A:27:TYR:CE2	2.03	0.92
1:A:594:ASN:H	1:A:594:ASN:HD22	1.04	0.92
1:A:28:LEU:HB3	1:A:33:GLN:NE2	1.84	0.92
1:A:310:THR:HB	1:A:551:GLU:HG3	1.50	0.92
1:A:134:ILE:H	1:A:134:ILE:CD1	1.76	0.92
1:A:114:GLY:O	1:A:523:ARG:HD2	1.70	0.91
1:A:640:THR:HB	1:A:642:GLU:CD	1.94	0.91
1:A:541:LEU:HD12	1:A:542:LEU:H	1.32	0.91
1:A:113:ARG:HB2	1:A:523:ARG:HA	1.53	0.90
1:A:376:TYR:HB3	1:A:425:SER:HB3	1.50	0.90
1:A:916:VAL:HG22	1:A:917:ARG:H	1.35	0.90
1:A:64:LYS:HD3	1:A:64:LYS:N	1.85	0.90
1:A:752:TYR:H	1:A:753:ARG:NH1	1.69	0.90
1:A:738:LEU:HD11	1:A:752:TYR:OH	1.73	0.89
1:A:113:ARG:HG2	1:A:290:ILE:HB	1.55	0.89
1:A:297:ILE:HD13	1:A:677:SER:O	1.71	0.89
1:A:444:ALA:O	1:A:447:LEU:HD12	1.73	0.89
1:A:337:LEU:HD12	1:A:343:ARG:HD2	1.53	0.89
1:A:465:ILE:HG23	1:A:469:THR:OG1	1.71	0.89
1:A:297:ILE:HD11	1:A:334:GLN:HG3	1.53	0.89
1:A:356:GLN:O	1:A:509:ASN:HA	1.72	0.88
1:A:639:ARG:HG3	1:A:640:THR:N	1.85	0.88
1:A:758:ARG:HH21	1:A:761:PHE:HE1	1.20	0.88
1:A:11:THR:O	1:A:15:GLN:HG3	1.73	0.88
1:A:675:PRO:HG3	1:A:680:THR:OG1	1.74	0.88
1:A:127:PRO:HG2	1:A:128:LEU:HD23	1.56	0.88
1:A:772:MET:HE2	1:A:855:LEU:HD12	1.53	0.87
1:A:72:PHE:O	1:A:583:ASN:HB3	1.74	0.87
1:A:675:PRO:HA	1:A:678:ASP:OD1	1.75	0.87
1:A:647:TRP:O	1:A:862:THR:HA	1.75	0.86
1:A:297:ILE:HA	1:A:330:GLU:OE1	1.76	0.86
1:A:577:ILE:HD13	1:A:578:VAL:N	1.91	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:303:ASP:H	1:A:323:GLU:CD	1.83	0.86
1:A:757:ASP:CG	1:A:767:ARG:NH2	2.33	0.86
1:A:20:ALA:N	1:A:52:THR:HG21	1.90	0.85
1:A:703:ASN:H	1:A:703:ASN:HD22	1.22	0.85
1:A:12:PRO:HA	1:A:15:GLN:OE1	1.76	0.85
1:A:465:ILE:HG12	1:A:471:PHE:CG	2.12	0.85
1:A:580:THR:HG22	1:A:581:GLU:HG2	1.56	0.85
1:A:11:THR:HB	1:A:12:PRO:HD3	1.56	0.85
1:A:120:TYR:O	1:A:287:PRO:HB3	1.75	0.85
1:A:855:LEU:HD23	1:A:856:CYS:H	1.40	0.85
1:A:447:LEU:HG	1:A:498:MET:HE2	1.59	0.85
1:A:47:ASN:O	1:A:49:PHE:N	2.10	0.85
1:A:299:LEU:HB3	1:A:300:LEU:HD12	1.57	0.85
1:A:50:ARG:HG2	1:A:50:ARG:HH11	1.40	0.84
1:A:112:ASP:HB2	1:A:524:TYR:HD1	1.42	0.84
1:A:296:PHE:CB	1:A:299:LEU:HD22	2.06	0.84
1:A:493:TRP:HZ3	1:A:773:SER:N	1.75	0.84
1:A:508:ARG:HG2	1:A:510:TRP:NE1	1.91	0.84
1:A:363:VAL:HA	1:A:494:SER:CB	2.03	0.84
1:A:722:SER:O	1:A:726:THR:HG23	1.76	0.84
1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:HH11	1.39	0.84
1:A:618:ALA:HB1	1:A:910:TYR:O	1.78	0.83
1:A:648:SER:HA	1:A:862:THR:HG22	1.60	0.83
1:A:536:PHE:CE1	1:A:537:ALA:HB2	2.14	0.83
1:A:774:ARG:HD2	1:A:775:GLN:H	1.40	0.83
1:A:541:LEU:HD12	1:A:542:LEU:N	1.91	0.83
1:A:64:LYS:H	1:A:64:LYS:CD	1.90	0.83
1:A:84:TYR:CD2	1:A:554:LEU:HD22	2.13	0.83
1:A:866:SER:HA	1:A:878:LEU:HD23	1.59	0.83
1:A:610:GLN:HB2	1:A:918:VAL:CG1	2.06	0.83
1:A:489:ILE:HD13	1:A:489:ILE:H	1.44	0.82
1:A:109:GLY:HA2	1:A:526:ARG:HH12	1.44	0.82
1:A:22:PRO:HB2	1:A:26:GLU:CB	2.08	0.82
1:A:754:PHE:O	1:A:755:TRP:C	2.22	0.82
1:A:343:ARG:NH1	1:A:354:VAL:H	1.78	0.82
1:A:634:ILE:HG13	1:A:893:ILE:O	1.80	0.82
1:A:486:PHE:CE1	1:A:489:ILE:HG13	2.14	0.82
1:A:808:ASN:CG	1:A:809:ASN:N	2.33	0.82
1:A:635:ASN:CA	1:A:892:VAL:HG13	2.10	0.82
1:A:780:LEU:O	1:A:788:VAL:HG21	1.79	0.82
1:A:881:ASN:HD22	1:A:883:MET:H	1.27	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:482:VAL:HG13	1:A:483:VAL:HG22	1.62	0.81
1:A:865:PHE:CD2	1:A:878:LEU:HB3	2.15	0.81
1:A:320:VAL:HB	1:A:928:MET:CG	2.10	0.81
1:A:779:PHE:O	1:A:780:LEU:HB3	1.79	0.81
1:A:82:ASN:HD21	1:A:663:GLN:HB2	1.44	0.81
1:A:358:ASP:HA	1:A:510:TRP:CH2	2.15	0.81
1:A:481:ASN:CG	1:A:793:VAL:HB	2.06	0.81
1:A:881:ASN:ND2	1:A:883:MET:H	1.77	0.81
1:A:767:ARG:HG2	1:A:767:ARG:HH11	1.45	0.81
1:A:481:ASN:ND2	1:A:793:VAL:HB	1.96	0.81
1:A:118:LYS:HB3	1:A:287:PRO:HA	1.63	0.81
1:A:98:LEU:C	1:A:542:LEU:HD12	2.06	0.81
1:A:24:THR:HG22	1:A:27:TYR:OH	1.80	0.81
1:A:836:PRO:C	1:A:837:LEU:HD23	2.06	0.81
1:A:768:ASN:HD21	1:A:858:ASN:HD22	0.83	0.81
1:A:836:PRO:O	1:A:837:LEU:HD23	1.80	0.81
1:A:113:ARG:NH1	1:A:520:GLY:O	2.14	0.80
1:A:446:TYR:O	1:A:498:MET:HE1	1.81	0.80
1:A:915:THR:HG22	1:A:916:VAL:H	1.45	0.80
1:A:707:LEU:HD13	1:A:725:PHE:CE1	2.16	0.80
1:A:344:HIS:CG	1:A:344:HIS:O	2.34	0.80
1:A:428:ILE:HG23	1:A:428:ILE:O	1.82	0.80
1:A:706:LEU:C	1:A:708:THR:H	1.89	0.80
1:A:355:ASP:HB3	1:A:509:ASN:ND2	1.97	0.80
1:A:690:MET:O	1:A:690:MET:HG2	1.82	0.80
1:A:29:SER:HB3	1:A:32:LEU:HB2	1.64	0.80
1:A:512:LEU:HD22	1:A:563:GLN:NE2	1.95	0.80
1:A:875:LEU:HD22	1:A:913:PHE:CE2	2.17	0.80
1:A:636:ILE:HG21	1:A:641:TRP:HH2	1.45	0.79
1:A:28:LEU:HD22	1:A:32:LEU:CD2	2.12	0.79
1:A:82:ASN:HD21	1:A:663:GLN:HE21	1.26	0.79
1:A:813:ILE:HG23	1:A:814:ALA:N	1.94	0.79
1:A:104:TYR:HD1	1:A:530:GLN:HB3	1.47	0.79
1:A:678:ASP:OD1	1:A:680:THR:HG23	1.82	0.79
1:A:765:PHE:O	1:A:769:PHE:HB2	1.81	0.79
1:A:745:TYR:HB3	1:A:755:TRP:CD1	2.18	0.79
1:A:320:VAL:HG11	1:A:927:ALA:HA	1.64	0.79
1:A:711:LEU:HD12	1:A:711:LEU:O	1.82	0.79
1:A:436:ARG:NH2	1:A:437:ASN:ND2	2.31	0.79
1:A:701:PRO:HB2	1:A:705:ARG:HD3	1.63	0.79
1:A:77:THR:O	1:A:78:ASP:HB2	1.80	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:470:TYR:HE1	1:A:474:ASN:ND2	1.81	0.78
1:A:13:ARG:HA	1:A:13:ARG:CZ	2.12	0.78
1:A:488:ASN:HD21	1:A:777:PRO:HB3	1.48	0.78
1:A:600:GLU:HG3	1:A:604:ARG:HG3	1.64	0.78
1:A:596:SER:O	1:A:598:GLN:N	2.16	0.78
1:A:868:ASP:O	1:A:869:PHE:HB2	1.82	0.78
1:A:631:LEU:HA	1:A:896:GLU:HA	1.65	0.78
1:A:216:ALA:C	1:A:218:GLY:H	1.91	0.78
1:A:493:TRP:CE2	1:A:774:ARG:HB3	2.19	0.78
1:A:639:ARG:HG3	1:A:640:THR:H	1.48	0.78
1:A:743:THR:CG2	1:A:864:PRO:HB3	2.13	0.78
1:A:93:GLY:CA	1:A:96:TRP:HB2	2.14	0.77
1:A:473:MET:HE1	1:A:568:ASN:HB3	1.66	0.77
1:A:35:PHE:HA	1:A:38:ALA:HB3	1.64	0.77
1:A:118:LYS:HE3	1:A:287:PRO:N	2.00	0.77
1:A:76:GLN:HB3	1:A:87:ARG:HB2	1.65	0.77
1:A:687:PHE:O	1:A:715:LYS:HE2	1.85	0.77
1:A:757:ASP:HA	1:A:760:TYR:HB2	1.67	0.77
1:A:489:ILE:HD13	1:A:489:ILE:N	1.99	0.77
1:A:301:TYR:HA	1:A:555:ARG:NH2	2.00	0.77
1:A:594:ASN:H	1:A:594:ASN:ND2	1.74	0.77
1:A:308:SER:OG	1:A:323:GLU:HG2	1.85	0.76
1:A:742:ALA:HB1	1:A:869:PHE:HB3	1.68	0.76
1:A:559:ASN:OD1	1:A:569:ASP:HA	1.86	0.76
1:A:743:THR:HG23	1:A:864:PRO:HB3	1.65	0.76
1:A:293:ARG:HH22	1:A:563:GLN:HG3	1.49	0.76
1:A:118:LYS:HE3	1:A:286:ARG:C	2.10	0.76
1:A:72:PHE:HD2	1:A:584:LEU:HD23	1.51	0.75
1:A:355:ASP:CB	1:A:509:ASN:HD21	1.99	0.75
1:A:222:LYS:HG2	1:A:223:PRO:HD2	1.68	0.75
1:A:466:ASP:CG	1:A:468:THR:H	1.95	0.75
1:A:779:PHE:HB3	1:A:785:TYR:CE2	2.21	0.75
1:A:286:ARG:HB2	1:A:474:ASN:OD1	1.86	0.75
1:A:517:GLN:C	1:A:519:LEU:N	2.45	0.75
1:A:912:VAL:HB	1:A:933:THR:O	1.87	0.75
1:A:453:PHE:O	1:A:477:VAL:HG12	1.87	0.75
1:A:648:SER:O	1:A:909:LEU:HB2	1.87	0.75
1:A:48:LYS:O	1:A:49:PHE:CD1	2.39	0.74
1:A:603:LEU:HD11	1:A:610:GLN:HE21	1.52	0.74
1:A:651:ARG:NH2	1:A:900:MET:HB2	2.01	0.74
1:A:111:LEU:HB2	1:A:577:ILE:HA	1.68	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:770:ASP:O	1:A:855:LEU:N	2.19	0.74
1:A:730:CYS:HB2	1:A:854:PHE:HB3	1.69	0.74
1:A:8:THR:O	1:A:9:THR:HG22	1.86	0.74
1:A:435:ARG:HB3	1:A:485:LEU:HD21	1.69	0.74
1:A:466:ASP:OD2	1:A:468:THR:N	2.20	0.74
1:A:98:LEU:O	1:A:542:LEU:HD12	1.87	0.74
1:A:465:ILE:HG12	1:A:471:PHE:CD2	2.22	0.74
1:A:76:GLN:HG2	1:A:87:ARG:HD3	1.68	0.73
1:A:369:TYR:CD1	1:A:369:TYR:C	2.64	0.73
1:A:544:LEU:HD11	1:A:603:LEU:HG	1.69	0.73
1:A:866:SER:HA	1:A:878:LEU:CD2	2.18	0.73
1:A:107:ILE:HG22	1:A:108:LYS:H	1.53	0.73
1:A:493:TRP:CZ3	1:A:773:SER:N	2.55	0.73
1:A:760:TYR:CE2	1:A:766:LEU:HB2	2.23	0.73
1:A:570:LEU:HB3	1:A:575:ALA:HB2	1.69	0.73
1:A:599:LEU:O	1:A:603:LEU:N	2.17	0.73
1:A:109:GLY:HA2	1:A:526:ARG:NH1	2.03	0.73
1:A:604:ARG:HD2	1:A:921:PRO:O	1.89	0.73
1:A:129:ALA:O	1:A:217:TYR:HD1	1.71	0.73
1:A:29:SER:HB3	1:A:32:LEU:CB	2.18	0.73
1:A:747:TYR:HE2	1:A:755:TRP:HA	1.54	0.73
1:A:297:ILE:O	1:A:298:ASN:HB2	1.88	0.72
1:A:505:ASN:HD21	1:A:673:SER:H	1.34	0.72
1:A:912:VAL:HG12	1:A:934:PRO:HD2	1.71	0.72
1:A:779:PHE:HZ	1:A:843:ILE:N	1.87	0.72
1:A:84:TYR:HB3	1:A:554:LEU:HB2	1.72	0.72
1:A:99:ASP:HA	1:A:542:LEU:HA	1.72	0.72
1:A:648:SER:HA	1:A:861:TRP:O	1.89	0.72
1:A:691:SER:O	1:A:893:ILE:HA	1.88	0.72
1:A:705:ARG:HG2	1:A:705:ARG:HH11	1.54	0.72
1:A:358:ASP:HB2	1:A:508:ARG:HD2	1.72	0.72
1:A:379:LEU:HB2	1:A:424:PRO:CG	2.17	0.72
1:A:222:LYS:HD3	1:A:222:LYS:C	2.15	0.72
1:A:436:ARG:O	1:A:440:MET:HB2	1.90	0.72
1:A:541:LEU:HD21	1:A:543:LEU:HD21	1.70	0.72
1:A:133:ALA:HA	1:A:216:ALA:N	2.05	0.72
1:A:523:ARG:O	1:A:524:TYR:HB2	1.87	0.72
1:A:688:ARG:NH2	1:A:715:LYS:O	2.23	0.72
1:A:536:PHE:HD2	1:A:614:ASP:HB2	1.51	0.71
1:A:9:THR:CA	1:A:13:ARG:HG3	2.17	0.71
1:A:67:ARG:NH2	1:A:70:ILE:HA	2.05	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:320:VAL:HB	1:A:928:MET:HB2	1.72	0.71
1:A:604:ARG:HH11	1:A:922:GLU:CA	1.92	0.71
1:A:66:GLN:NE2	1:A:590:PRO:HA	2.05	0.71
1:A:429:ASP:O	1:A:430:ILE:C	2.34	0.71
1:A:429:ASP:OD1	1:A:431:ALA:HB3	1.90	0.71
1:A:731:ASP:OD2	1:A:853:LYS:HA	1.90	0.71
1:A:338:ALA:HB2	1:A:343:ARG:HG2	1.73	0.71
1:A:564:SER:OG	1:A:567:GLY:HA2	1.89	0.71
1:A:716:ARG:HD2	1:A:716:ARG:O	1.90	0.71
1:A:68:LEU:O	1:A:588:PHE:N	2.24	0.71
1:A:376:TYR:CE2	1:A:427:GLU:CG	2.69	0.71
1:A:546:GLY:C	1:A:924:ASN:OD1	2.32	0.71
1:A:554:LEU:HD12	1:A:554:LEU:N	2.06	0.71
1:A:688:ARG:HB2	1:A:896:GLU:O	1.90	0.71
1:A:132:GLU:O	1:A:215:GLN:HB3	1.89	0.71
1:A:448:PRO:C	1:A:450:LYS:H	1.99	0.71
1:A:470:TYR:HE1	1:A:474:ASN:HD22	1.39	0.71
1:A:315:ARG:HB3	1:A:925:VAL:HG23	1.72	0.71
1:A:811:GLY:CA	1:A:826:GLY:HA3	2.15	0.71
1:A:371:GLU:OE2	1:A:429:ASP:HA	1.91	0.71
1:A:484:ASP:CG	1:A:485:LEU:N	2.46	0.71
1:A:793:VAL:C	1:A:795:ASN:H	1.99	0.71
1:A:107:ILE:HB	1:A:529:ILE:HG13	1.72	0.70
1:A:492:ARG:O	1:A:493:TRP:HE3	1.74	0.70
1:A:376:TYR:CB	1:A:425:SER:HB3	2.20	0.70
1:A:703:ASN:O	1:A:704:ASP:C	2.35	0.70
1:A:82:ASN:ND2	1:A:663:GLN:NE2	2.36	0.70
1:A:82:ASN:CA	1:A:556:LYS:HD3	2.19	0.70
1:A:95:SER:HB3	1:A:593:HIS:ND1	2.06	0.70
1:A:477:VAL:HG22	1:A:478:PRO:HD2	1.73	0.70
1:A:737:PHE:HE2	1:A:741:MET:HG2	1.57	0.70
1:A:755:TRP:HB3	1:A:760:TYR:OH	1.92	0.70
1:A:341:MET:HE1	1:A:345:HIS:HB2	1.72	0.70
1:A:864:PRO:O	1:A:866:SER:N	2.25	0.70
1:A:678:ASP:CG	1:A:680:THR:HG23	2.17	0.70
1:A:294:ASP:OD1	1:A:352:GLN:HA	1.90	0.70
1:A:310:THR:HB	1:A:551:GLU:CG	2.22	0.70
1:A:419:ASN:CG	1:A:421:GLY:H	2.00	0.70
1:A:739:VAL:HG22	1:A:869:PHE:HE2	1.56	0.69
1:A:336:MET:HE1	1:A:539:LYS:NZ	2.07	0.69
1:A:470:TYR:O	1:A:473:MET:HB3	1.92	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:640:THR:HB	1:A:642:GLU:OE2	1.92	0.69
1:A:216:ALA:O	1:A:218:GLY:N	2.25	0.69
1:A:503:PRO:HG2	1:A:504:PHE:H	1.56	0.69
1:A:917:ARG:HG2	1:A:918:VAL:N	2.07	0.69
1:A:599:LEU:O	1:A:599:LEU:HD23	1.93	0.69
1:A:758:ARG:CZ	1:A:758:ARG:HA	2.22	0.69
1:A:33:GLN:HE21	1:A:33:GLN:CA	2.05	0.69
1:A:493:TRP:HZ3	1:A:773:SER:H	1.39	0.69
1:A:684:SER:O	1:A:687:PHE:HD1	1.76	0.69
1:A:775:GLN:O	1:A:777:PRO:HD3	1.92	0.69
1:A:93:GLY:O	1:A:96:TRP:HB2	1.92	0.69
1:A:465:ILE:HG23	1:A:469:THR:HG1	1.56	0.69
1:A:703:ASN:O	1:A:705:ARG:HG2	1.93	0.69
1:A:99:ASP:HB2	1:A:542:LEU:HD13	1.73	0.69
1:A:112:ASP:HA	1:A:524:TYR:HA	1.74	0.69
1:A:713:GLU:HB2	1:A:733:THR:HG21	1.73	0.69
1:A:739:VAL:C	1:A:741:MET:H	2.00	0.69
1:A:897:LEU:HD13	1:A:897:LEU:N	2.07	0.69
1:A:118:LYS:HE3	1:A:287:PRO:CA	2.23	0.69
1:A:288:ASN:HD21	1:A:566:LEU:HB2	1.58	0.69
1:A:622:LEU:HD23	1:A:907:TYR:HA	1.75	0.69
1:A:53:VAL:O	1:A:54:VAL:HB	1.91	0.68
1:A:922:GLU:O	1:A:923:ARG:O	2.10	0.68
1:A:133:ALA:HA	1:A:216:ALA:H	1.57	0.68
1:A:342:SER:OG	1:A:344:HIS:HB3	1.93	0.68
1:A:636:ILE:N	1:A:891:MET:O	2.27	0.68
1:A:484:ASP:OD1	1:A:485:LEU:N	2.26	0.68
1:A:679:GLY:C	1:A:681:PHE:H	2.01	0.68
1:A:433:ALA:C	1:A:436:ARG:HH12	1.99	0.68
1:A:822:THR:OG1	1:A:823:ALA:N	2.27	0.68
1:A:111:LEU:HB2	1:A:576:GLN:O	1.94	0.68
1:A:820:VAL:HG22	1:A:822:THR:HG23	1.75	0.68
1:A:435:ARG:O	1:A:438:PHE:HB3	1.92	0.68
1:A:610:GLN:HB2	1:A:918:VAL:HG11	1.76	0.68
1:A:670:TYR:CZ	1:A:672:GLY:HA3	2.29	0.68
1:A:875:LEU:HD22	1:A:913:PHE:HE2	1.59	0.68
1:A:222:LYS:NZ	1:A:223:PRO:HG2	2.08	0.68
1:A:443:ILE:HG21	1:A:495:VAL:HG21	1.75	0.68
1:A:635:ASN:HA	1:A:892:VAL:HG22	1.75	0.68
1:A:934:PRO:O	1:A:935:PHE:HB2	1.93	0.68
1:A:28:LEU:CB	1:A:33:GLN:HE22	2.04	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:760:TYR:HE2	1:A:766:LEU:HB2	1.56	0.67
1:A:535:TYR:HD2	1:A:538:ILE:HG12	1.57	0.67
1:A:652:LEU:N	1:A:652:LEU:HD23	2.09	0.67
1:A:5:PRO:C	1:A:7:LEU:H	2.00	0.67
1:A:112:ASP:HB2	1:A:524:TYR:CD1	2.28	0.67
1:A:293:ARG:HG2	1:A:293:ARG:HH21	1.59	0.67
1:A:931:PHE:CZ	1:A:933:THR:HB	2.29	0.67
1:A:320:VAL:HB	1:A:928:MET:CB	2.23	0.67
1:A:502:ASN:CG	1:A:505:ASN:HD22	2.03	0.67
1:A:747:TYR:CE2	1:A:755:TRP:HE3	2.13	0.67
1:A:36:ILE:HG23	1:A:46:LYS:HZ2	1.60	0.67
1:A:653:LYS:HB2	1:A:656:GLU:HB2	1.75	0.67
1:A:109:GLY:CA	1:A:526:ARG:NH1	2.57	0.67
1:A:702:GLY:O	1:A:704:ASP:N	2.28	0.67
1:A:921:PRO:HG2	1:A:922:GLU:H	1.59	0.67
1:A:369:TYR:CD2	1:A:432:ALA:HB2	2.29	0.67
1:A:749:TYR:OH	1:A:868:ASP:O	2.09	0.67
1:A:479:LEU:O	1:A:482:VAL:HG12	1.94	0.66
1:A:358:ASP:OD2	1:A:508:ARG:NH1	2.27	0.66
1:A:471:PHE:HD1	1:A:471:PHE:H	1.43	0.66
1:A:300:LEU:HD12	1:A:300:LEU:N	2.10	0.66
1:A:304:SER:O	1:A:307:CYS:N	2.29	0.66
1:A:436:ARG:O	1:A:440:MET:CB	2.43	0.66
1:A:504:PHE:C	1:A:506:HIS:H	2.03	0.66
1:A:576:GLN:HA	1:A:576:GLN:NE2	2.11	0.66
1:A:220:TYR:CD1	1:A:221:VAL:N	2.64	0.66
1:A:776:GLY:O	1:A:779:PHE:N	2.29	0.66
1:A:642:GLU:CD	1:A:642:GLU:H	2.03	0.66
1:A:757:ASP:CG	1:A:760:TYR:HB2	2.21	0.66
1:A:769:PHE:C	1:A:769:PHE:HD2	2.03	0.66
1:A:419:ASN:HD21	1:A:422:THR:N	1.93	0.66
1:A:813:ILE:HG13	1:A:814:ALA:H	1.61	0.66
1:A:113:ARG:HB2	1:A:523:ARG:CA	2.26	0.66
1:A:289:TYR:HB3	1:A:516:SER:CB	2.26	0.66
1:A:618:ALA:HB2	1:A:911:GLY:HA2	1.78	0.66
1:A:548:TYR:HE1	1:A:924:ASN:HA	1.61	0.66
1:A:589:MET:O	1:A:591:MET:N	2.25	0.66
1:A:754:PHE:O	1:A:755:TRP:O	2.12	0.66
1:A:136:ASN:HD22	1:A:136:ASN:N	1.85	0.66
1:A:641:TRP:CD1	1:A:641:TRP:N	2.63	0.66
1:A:757:ASP:O	1:A:760:TYR:N	2.25	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:825:GLN:HG3	1:A:826:GLY:N	2.11	0.66
1:A:313:SER:O	1:A:317:GLY:HA2	1.95	0.65
1:A:47:ASN:C	1:A:49:PHE:H	2.03	0.65
1:A:66:GLN:HG2	1:A:67:ARG:H	1.61	0.65
1:A:300:LEU:HD12	1:A:300:LEU:H	1.60	0.65
1:A:762:HIS:C	1:A:764:ASP:H	2.03	0.65
1:A:598:GLN:OE1	1:A:601:LEU:HD23	1.96	0.65
1:A:881:ASN:HD22	1:A:881:ASN:C	2.03	0.65
1:A:897:LEU:HD13	1:A:897:LEU:H	1.62	0.65
1:A:924:ASN:O	1:A:925:VAL:HG23	1.97	0.65
1:A:19:ILE:C	1:A:52:THR:HG21	2.22	0.65
1:A:47:ASN:OD1	1:A:48:LYS:HG3	1.97	0.65
1:A:338:ALA:N	1:A:343:ARG:HG2	2.11	0.65
1:A:703:ASN:H	1:A:703:ASN:ND2	1.93	0.65
1:A:716:ARG:HG2	1:A:726:THR:HG22	1.77	0.65
1:A:84:TYR:C	1:A:553:VAL:HG13	2.22	0.65
1:A:631:LEU:HD23	1:A:631:LEU:H	1.60	0.65
1:A:312:ASN:O	1:A:549:THR:N	2.29	0.65
1:A:754:PHE:O	1:A:754:PHE:HD2	1.79	0.65
1:A:907:TYR:CE2	1:A:909:LEU:HD11	2.32	0.65
1:A:919:ASN:O	1:A:921:PRO:HD3	1.97	0.65
1:A:478:PRO:O	1:A:479:LEU:HD23	1.97	0.64
1:A:300:LEU:HB2	1:A:302:HIS:CE1	2.32	0.64
1:A:595:THR:O	1:A:598:GLN:HB3	1.97	0.64
1:A:92:VAL:HB	1:A:545:PRO:HA	1.78	0.64
1:A:93:GLY:C	1:A:96:TRP:HB2	2.22	0.64
1:A:344:HIS:O	1:A:344:HIS:ND1	2.30	0.64
1:A:362:ARG:NH2	1:A:857:ASP:OD1	2.30	0.64
1:A:363:VAL:HG23	1:A:363:VAL:O	1.97	0.64
1:A:453:PHE:HD2	1:A:454:SER:N	1.94	0.64
1:A:713:GLU:O	1:A:736:TRP:HB2	1.97	0.64
1:A:793:VAL:CA	1:A:796:ASP:OD1	2.40	0.64
1:A:808:ASN:OD1	1:A:809:ASN:N	2.29	0.64
1:A:74:PRO:C	1:A:75:ILE:HD13	2.22	0.64
1:A:303:ASP:HA	1:A:323:GLU:HB2	1.79	0.64
1:A:315:ARG:CZ	1:A:924:ASN:HB3	2.28	0.64
1:A:752:TYR:N	1:A:753:ARG:HE	1.95	0.64
1:A:918:VAL:O	1:A:918:VAL:HG13	1.97	0.64
1:A:24:THR:O	1:A:28:LEU:HB2	1.97	0.64
1:A:757:ASP:OD1	1:A:760:TYR:HB2	1.96	0.64
1:A:14:LEU:HA	1:A:19:ILE:HB	1.79	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:82:ASN:HD22	1:A:663:GLN:HE21	1.45	0.64
1:A:533:GLN:C	1:A:534:LYS:HD2	2.22	0.64
1:A:601:LEU:HG	1:A:602:MET:SD	2.37	0.64
1:A:875:LEU:HD23	1:A:875:LEU:H	1.62	0.64
1:A:104:TYR:CD1	1:A:530:GLN:HB3	2.31	0.64
1:A:538:ILE:O	1:A:541:LEU:N	2.23	0.64
1:A:768:ASN:ND2	1:A:858:ASN:ND2	2.33	0.64
1:A:376:TYR:O	1:A:378:PHE:HE2	1.81	0.63
1:A:742:ALA:C	1:A:744:ASN:H	2.06	0.63
1:A:841:ASP:O	1:A:842:ALA:CB	2.47	0.63
1:A:598:GLN:O	1:A:601:LEU:HB3	1.98	0.63
1:A:338:ALA:CA	1:A:343:ARG:HG2	2.28	0.63
1:A:377:ALA:O	1:A:425:SER:HA	1.99	0.63
1:A:432:ALA:O	1:A:435:ARG:N	2.32	0.63
1:A:635:ASN:HA	1:A:892:VAL:CG1	2.25	0.63
1:A:706:LEU:C	1:A:708:THR:N	2.55	0.63
1:A:99:ASP:CG	1:A:101:GLY:H	2.07	0.63
1:A:294:ASP:HA	1:A:351:ASN:O	1.99	0.63
1:A:451:TYR:CE2	1:A:497:GLN:NE2	2.66	0.63
1:A:569:ASP:HB2	1:A:571:ARG:HG3	1.81	0.63
1:A:875:LEU:HD22	1:A:913:PHE:CZ	2.33	0.63
1:A:80:THR:O	1:A:556:LYS:NZ	2.30	0.63
1:A:289:TYR:CZ	1:A:513:LYS:HG3	2.34	0.63
1:A:107:ILE:HB	1:A:529:ILE:CG1	2.28	0.63
1:A:288:ASN:OD1	1:A:566:LEU:HB2	1.99	0.63
1:A:337:LEU:HB3	1:A:343:ARG:HD2	1.79	0.63
1:A:636:ILE:HG21	1:A:641:TRP:CH2	2.30	0.63
1:A:727:MET:HE3	1:A:728:SER:HB2	1.80	0.63
1:A:747:TYR:O	1:A:748:VAL:HB	1.99	0.63
1:A:118:LYS:HE3	1:A:287:PRO:HA	1.80	0.63
1:A:631:LEU:HA	1:A:895:PHE:O	1.98	0.63
1:A:82:ASN:ND2	1:A:663:GLN:HB2	2.14	0.63
1:A:364:PHE:H	1:A:494:SER:HA	1.64	0.63
1:A:14:LEU:HD22	1:A:19:ILE:HG21	1.81	0.62
1:A:82:ASN:HD21	1:A:663:GLN:CB	2.12	0.62
1:A:881:ASN:HD22	1:A:882:PRO:N	1.97	0.62
1:A:136:ASN:H	1:A:136:ASN:ND2	1.88	0.62
1:A:23:GLY:O	1:A:27:TYR:CD2	2.52	0.62
1:A:104:TYR:CD2	1:A:104:TYR:N	2.65	0.62
1:A:446:TYR:OH	1:A:507:HIS:CD2	2.52	0.62
1:A:470:TYR:O	1:A:471:PHE:C	2.43	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:559:ASN:OD1	1:A:670:TYR:N	2.32	0.62
1:A:60:VAL:O	1:A:592:ASP:HB2	1.99	0.62
1:A:310:THR:CB	1:A:551:GLU:HG3	2.28	0.62
1:A:468:THR:HG22	1:A:468:THR:O	2.00	0.62
1:A:487:THR:O	1:A:488:ASN:HB2	1.99	0.62
1:A:727:MET:HE2	1:A:737:PHE:CD1	2.35	0.62
1:A:769:PHE:C	1:A:769:PHE:CD2	2.75	0.62
1:A:813:ILE:HG23	1:A:814:ALA:H	1.63	0.62
1:A:131:ARG:HH12	1:A:822:THR:HA	1.64	0.62
1:A:430:ILE:HD13	1:A:430:ILE:H	1.65	0.62
1:A:626:PRO:HD2	1:A:629:SER:HB2	1.81	0.62
1:A:837:LEU:HA	1:A:842:ALA:HB1	1.81	0.62
1:A:13:ARG:HG2	1:A:13:ARG:HH11	1.65	0.62
1:A:29:SER:O	1:A:32:LEU:HB3	2.00	0.62
1:A:374:PRO:HB2	1:A:376:TYR:CE2	2.35	0.62
1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:GLN:HA	1.80	0.62
1:A:299:LEU:HD23	1:A:531:VAL:HG11	1.80	0.62
1:A:528:HIS:O	1:A:529:ILE:HG23	1.99	0.62
1:A:596:SER:C	1:A:598:GLN:H	2.06	0.62
1:A:618:ALA:CB	1:A:911:GLY:HA2	2.30	0.62
1:A:653:LYS:HA	1:A:904:THR:HG23	1.81	0.62
1:A:665:ASP:O	1:A:667:GLY:N	2.32	0.62
1:A:765:PHE:HD1	1:A:859:TYR:CE2	2.18	0.62
1:A:13:ARG:HA	1:A:13:ARG:NE	2.14	0.62
1:A:856:CYS:SG	1:A:859:TYR:HD2	2.23	0.62
1:A:72:PHE:CE2	1:A:90:VAL:HG13	2.35	0.61
1:A:108:LYS:HG2	1:A:526:ARG:HH22	1.64	0.61
1:A:610:GLN:HB2	1:A:918:VAL:HG12	1.81	0.61
1:A:131:ARG:O	1:A:215:GLN:NE2	2.32	0.61
1:A:488:ASN:ND2	1:A:774:ARG:HH21	1.98	0.61
1:A:71:ARG:HB2	1:A:585:MET:SD	2.40	0.61
1:A:82:ASN:C	1:A:556:LYS:HD3	2.25	0.61
1:A:288:ASN:ND2	1:A:566:LEU:HB2	2.14	0.61
1:A:564:SER:OG	1:A:671:SER:HB2	2.00	0.61
1:A:785:TYR:O	1:A:788:VAL:HG12	2.00	0.61
1:A:316:SER:O	1:A:318:MET:HG3	2.00	0.61
1:A:328:ASN:HB2	1:A:620:ASN:HD21	1.64	0.61
1:A:570:LEU:HD12	1:A:671:SER:OG	2.00	0.61
1:A:596:SER:C	1:A:598:GLN:N	2.54	0.61
1:A:378:PHE:HD2	1:A:378:PHE:N	1.99	0.61
1:A:726:THR:O	1:A:727:MET:CB	2.39	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:747:TYR:CE2	1:A:755:TRP:CE3	2.88	0.61
1:A:912:VAL:CG1	1:A:934:PRO:HD2	2.30	0.61
1:A:125:TYR:O	1:A:126:ASN:C	2.44	0.61
1:A:315:ARG:NE	1:A:924:ASN:HB3	2.16	0.61
1:A:378:PHE:N	1:A:378:PHE:CD2	2.67	0.61
1:A:493:TRP:O	1:A:494:SER:C	2.43	0.61
1:A:543:LEU:HD13	1:A:548:TYR:CD2	2.36	0.61
1:A:599:LEU:CD2	1:A:603:LEU:HD23	2.30	0.61
1:A:29:SER:O	1:A:33:GLN:HG2	2.01	0.61
1:A:436:ARG:HH11	1:A:436:ARG:CB	2.11	0.61
1:A:578:VAL:HG13	1:A:578:VAL:O	2.00	0.61
1:A:626:PRO:HG2	1:A:629:SER:OG	2.00	0.61
1:A:912:VAL:HB	1:A:933:THR:C	2.24	0.61
1:A:301:TYR:CE2	1:A:663:GLN:HA	2.36	0.61
1:A:544:LEU:HB3	1:A:545:PRO:HD2	1.83	0.61
1:A:644:MET:HE1	1:A:646:GLY:O	2.00	0.61
1:A:733:THR:C	1:A:735:ASP:H	2.08	0.61
1:A:747:TYR:CE2	1:A:755:TRP:HA	2.33	0.61
1:A:47:ASN:CG	1:A:48:LYS:N	2.58	0.61
1:A:614:ASP:OD2	1:A:615:TYR:N	2.34	0.61
1:A:446:TYR:C	1:A:498:MET:HE1	2.24	0.61
1:A:675:PRO:C	1:A:677:SER:H	2.07	0.60
1:A:22:PRO:HG2	1:A:27:TYR:HB3	1.84	0.60
1:A:117:PHE:CZ	1:A:119:PRO:HB3	2.36	0.60
1:A:359:HIS:CG	1:A:360:ASP:N	2.69	0.60
1:A:648:SER:CA	1:A:862:THR:HG22	2.29	0.60
1:A:876:THR:O	1:A:879:GLY:N	2.34	0.60
1:A:906:VAL:O	1:A:907:TYR:O	2.18	0.60
1:A:320:VAL:CG1	1:A:927:ALA:HA	2.31	0.60
1:A:320:VAL:CG1	1:A:928:MET:H	2.15	0.60
1:A:438:PHE:CD1	1:A:442:ASN:ND2	2.69	0.60
1:A:504:PHE:HZ	1:A:858:ASN:OD1	1.84	0.60
1:A:767:ARG:HG2	1:A:767:ARG:NH1	2.16	0.60
1:A:419:ASN:OD1	1:A:421:GLY:N	2.35	0.60
1:A:448:PRO:C	1:A:450:LYS:N	2.59	0.60
1:A:674:ILE:O	1:A:677:SER:N	2.34	0.60
1:A:758:ARG:HA	1:A:758:ARG:NE	2.16	0.60
1:A:91:ASN:HA	1:A:547:THR:HA	1.84	0.60
1:A:288:ASN:HD21	1:A:566:LEU:CB	2.14	0.60
1:A:535:TYR:CE2	1:A:537:ALA:HB3	2.36	0.60
1:A:28:LEU:HD13	1:A:32:LEU:HG	1.82	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:706:LEU:HD12	1:A:712:PHE:HA	1.83	0.60
1:A:876:THR:C	1:A:878:LEU:N	2.54	0.60
1:A:33:GLN:HE21	1:A:33:GLN:N	1.99	0.60
1:A:362:ARG:O	1:A:494:SER:HB2	2.02	0.60
1:A:759:HIS:C	1:A:760:TYR:CD1	2.80	0.60
1:A:85:ARG:CA	1:A:553:VAL:HG22	2.25	0.60
1:A:374:PRO:HB2	1:A:376:TYR:HE2	1.66	0.60
1:A:569:ASP:OD2	1:A:669:LYS:HB3	2.02	0.60
1:A:603:LEU:HD11	1:A:610:GLN:NE2	2.16	0.60
1:A:473:MET:CE	1:A:568:ASN:HB3	2.32	0.59
1:A:728:SER:C	1:A:729:GLN:HG3	2.26	0.59
1:A:838:ILE:CG1	1:A:839:GLY:H	2.15	0.59
1:A:559:ASN:ND2	1:A:571:ARG:HH11	1.99	0.59
1:A:739:VAL:HG13	1:A:869:PHE:CE2	2.35	0.59
1:A:933:THR:HA	1:A:934:PRO:C	2.26	0.59
1:A:11:THR:HB	1:A:12:PRO:CD	2.25	0.59
1:A:127:PRO:HD2	1:A:128:LEU:H	1.67	0.59
1:A:536:PHE:CD2	1:A:614:ASP:CB	2.78	0.59
1:A:916:VAL:HG22	1:A:917:ARG:N	2.14	0.59
1:A:224:VAL:HG12	1:A:224:VAL:O	2.01	0.59
1:A:538:ILE:O	1:A:540:ASN:N	2.35	0.59
1:A:559:ASN:OD1	1:A:670:TYR:C	2.45	0.59
1:A:377:ALA:C	1:A:378:PHE:CD2	2.80	0.59
1:A:625:VAL:HG22	1:A:632:LEU:HD23	1.84	0.59
1:A:648:SER:CB	1:A:862:THR:HG22	2.31	0.59
1:A:752:TYR:N	1:A:753:ARG:HH11	1.92	0.59
1:A:809:ASN:O	1:A:810:SER:O	2.20	0.59
1:A:53:VAL:O	1:A:54:VAL:CB	2.50	0.59
1:A:356:GLN:OE1	1:A:510:TRP:HE3	1.85	0.59
1:A:503:PRO:O	1:A:504:PHE:C	2.45	0.59
1:A:725:PHE:O	1:A:733:THR:HA	2.02	0.59
1:A:728:SER:HB3	1:A:730:CYS:SG	2.43	0.59
1:A:222:LYS:HD3	1:A:223:PRO:O	2.02	0.59
1:A:548:TYR:CE1	1:A:924:ASN:HA	2.37	0.59
1:A:917:ARG:HG2	1:A:918:VAL:H	1.65	0.59
1:A:5:PRO:O	1:A:7:LEU:N	2.36	0.59
1:A:448:PRO:O	1:A:450:LYS:N	2.35	0.59
1:A:651:ARG:NH1	1:A:900:MET:SD	2.76	0.59
1:A:795:ASN:OD1	1:A:795:ASN:C	2.46	0.59
1:A:93:GLY:HA3	1:A:96:TRP:CG	2.38	0.59
1:A:337:LEU:HB3	1:A:343:ARG:CD	2.33	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:371:GLU:OE1	1:A:431:ALA:HB2	2.03	0.59
1:A:419:ASN:ND2	1:A:421:GLY:C	2.55	0.59
1:A:127:PRO:CD	1:A:128:LEU:H	2.14	0.59
1:A:433:ALA:O	1:A:436:ARG:NH1	2.35	0.59
1:A:435:ARG:O	1:A:438:PHE:N	2.34	0.59
1:A:443:ILE:O	1:A:498:MET:HE2	2.03	0.58
1:A:508:ARG:HG2	1:A:510:TRP:HE1	1.67	0.58
1:A:684:SER:O	1:A:687:PHE:CD1	2.56	0.58
1:A:738:LEU:CD1	1:A:752:TYR:OH	2.47	0.58
1:A:755:TRP:HB3	1:A:760:TYR:CE1	2.38	0.58
1:A:72:PHE:CE2	1:A:90:VAL:HG22	2.38	0.58
1:A:102:ALA:O	1:A:103:THR:HG23	2.03	0.58
1:A:752:TYR:H	1:A:753:ARG:CZ	2.16	0.58
1:A:900:MET:HE3	1:A:901:ASP:H	1.68	0.58
1:A:33:GLN:HE21	1:A:33:GLN:HA	1.67	0.58
1:A:439:ILE:C	1:A:441:SER:H	2.11	0.58
1:A:876:THR:C	1:A:878:LEU:H	2.10	0.58
1:A:296:PHE:CD2	1:A:531:VAL:HG22	2.38	0.58
1:A:76:GLN:HB3	1:A:87:ARG:CB	2.34	0.58
1:A:337:LEU:CD1	1:A:343:ARG:HD2	2.30	0.58
1:A:370:GLU:OE2	1:A:371:GLU:O	2.21	0.58
1:A:720:THR:CG2	1:A:723:GLU:HB2	2.33	0.58
1:A:730:CYS:HB2	1:A:854:PHE:CB	2.31	0.58
1:A:24:THR:HG23	1:A:51:GLN:HG2	1.85	0.58
1:A:472:TYR:CE1	1:A:476:ARG:HD2	2.38	0.58
1:A:503:PRO:O	1:A:506:HIS:N	2.36	0.58
1:A:695:ASP:OD1	1:A:889:HIS:HB3	2.03	0.58
1:A:28:LEU:CD1	1:A:33:GLN:HE22	2.17	0.58
1:A:299:LEU:CD2	1:A:531:VAL:HG21	2.34	0.58
1:A:377:ALA:C	1:A:378:PHE:HD2	2.12	0.58
1:A:517:GLN:O	1:A:519:LEU:N	2.37	0.58
1:A:654:ALA:HA	1:A:905:TYR:CZ	2.39	0.58
1:A:705:ARG:HH11	1:A:705:ARG:CG	2.15	0.58
1:A:297:ILE:HG23	1:A:330:GLU:CD	2.29	0.57
1:A:338:ALA:CB	1:A:343:ARG:HG2	2.33	0.57
1:A:43:PHE:CG	1:A:43:PHE:O	2.55	0.57
1:A:315:ARG:NH2	1:A:924:ASN:HB3	2.19	0.57
1:A:368:GLY:O	1:A:369:TYR:HB3	2.03	0.57
1:A:438:PHE:CE1	1:A:442:ASN:ND2	2.71	0.57
1:A:543:LEU:HD13	1:A:548:TYR:HD2	1.69	0.57
1:A:739:VAL:C	1:A:741:MET:N	2.61	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:316:SER:O	1:A:318:MET:SD	2.62	0.57
1:A:423:ILE:O	1:A:423:ILE:HG13	2.03	0.57
1:A:453:PHE:N	1:A:477:VAL:O	2.36	0.57
1:A:630:THR:O	1:A:897:LEU:N	2.37	0.57
1:A:914:ASP:HA	1:A:932:ARG:HB2	1.85	0.57
1:A:107:ILE:CG1	1:A:529:ILE:HG13	2.34	0.57
1:A:332:SER:CA	1:A:616:LEU:HD23	2.30	0.57
1:A:303:ASP:N	1:A:323:GLU:CD	2.58	0.57
1:A:338:ALA:HB2	1:A:343:ARG:CG	2.35	0.57
1:A:645:ARG:HH21	1:A:911:GLY:HA3	1.68	0.57
1:A:756:PRO:O	1:A:758:ARG:N	2.37	0.57
1:A:770:ASP:HB3	1:A:855:LEU:HB3	1.85	0.57
1:A:793:VAL:O	1:A:795:ASN:N	2.37	0.57
1:A:482:VAL:HG13	1:A:483:VAL:HG13	1.87	0.57
1:A:621:ALA:O	1:A:622:LEU:HD23	2.05	0.57
1:A:651:ARG:CZ	1:A:900:MET:HB2	2.34	0.57
1:A:699:ASN:OD1	1:A:700:TRP:N	2.38	0.57
1:A:742:ALA:C	1:A:744:ASN:N	2.63	0.57
1:A:759:HIS:C	1:A:760:TYR:HD1	2.12	0.57
1:A:315:ARG:NH2	1:A:924:ASN:CB	2.68	0.57
1:A:335:TYR:OH	1:A:763:TYR:HB3	2.04	0.57
1:A:706:LEU:CD1	1:A:712:PHE:HA	2.34	0.57
1:A:110:VAL:O	1:A:111:LEU:HB3	2.04	0.57
1:A:286:ARG:O	1:A:470:TYR:OH	2.21	0.57
1:A:441:SER:O	1:A:446:TYR:HE1	1.88	0.57
1:A:454:SER:HA	1:A:476:ARG:HA	1.86	0.57
1:A:670:TYR:OH	1:A:673:SER:N	2.38	0.57
1:A:733:THR:C	1:A:735:ASP:N	2.61	0.57
1:A:793:VAL:C	1:A:795:ASN:N	2.63	0.57
1:A:109:GLY:HA2	1:A:580:THR:OG1	2.04	0.57
1:A:119:PRO:HG3	1:A:521:ASN:O	2.05	0.57
1:A:127:PRO:C	1:A:217:TYR:HE1	2.13	0.57
1:A:612:PHE:O	1:A:916:VAL:HG12	2.05	0.57
1:A:131:ARG:C	1:A:215:GLN:NE2	2.63	0.56
1:A:436:ARG:HB3	1:A:436:ARG:CZ	2.35	0.56
1:A:685:HIS:HB2	1:A:854:PHE:CZ	2.40	0.56
1:A:795:ASN:O	1:A:796:ASP:C	2.48	0.56
1:A:651:ARG:HH22	1:A:900:MET:HB2	1.68	0.56
1:A:813:ILE:CG2	1:A:814:ALA:N	2.64	0.56
1:A:28:LEU:HB3	1:A:33:GLN:CD	2.29	0.56
1:A:66:GLN:HE21	1:A:590:PRO:HA	1.70	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:90:VAL:O	1:A:547:THR:HA	2.04	0.56
1:A:297:ILE:HG12	1:A:330:GLU:OE1	2.04	0.56
1:A:471:PHE:HA	1:A:475:ARG:HD2	1.86	0.56
1:A:506:HIS:CE1	1:A:507:HIS:ND1	2.73	0.56
1:A:471:PHE:O	1:A:475:ARG:HB2	2.06	0.56
1:A:522:SER:O	1:A:524:TYR:N	2.38	0.56
1:A:844:SER:O	1:A:845:SER:C	2.47	0.56
1:A:304:SER:O	1:A:305:GLY:C	2.48	0.56
1:A:362:ARG:HH22	1:A:682:TYR:HB2	1.69	0.56
1:A:301:TYR:HA	1:A:555:ARG:HH21	1.71	0.56
1:A:600:GLU:C	1:A:602:MET:N	2.63	0.56
1:A:623:TYR:CE2	1:A:634:ILE:HG21	2.40	0.56
1:A:645:ARG:NH2	1:A:911:GLY:HA3	2.21	0.56
1:A:907:TYR:OH	1:A:909:LEU:HD21	2.05	0.56
1:A:471:PHE:CD2	1:A:475:ARG:NH1	2.74	0.56
1:A:747:TYR:HD2	1:A:755:TRP:HB2	1.71	0.56
1:A:72:PHE:HE2	1:A:90:VAL:HG13	1.70	0.56
1:A:125:TYR:O	1:A:126:ASN:O	2.23	0.56
1:A:127:PRO:HA	1:A:217:TYR:OH	2.05	0.56
1:A:222:LYS:HZ2	1:A:223:PRO:HG2	1.71	0.56
1:A:341:MET:HE1	1:A:352:GLN:NE2	2.21	0.56
1:A:357:TYR:CD2	1:A:357:TYR:N	2.70	0.56
1:A:486:PHE:HA	1:A:489:ILE:HD12	1.88	0.56
1:A:600:GLU:O	1:A:601:LEU:C	2.48	0.56
1:A:703:ASN:O	1:A:705:ARG:NH1	2.38	0.56
1:A:712:PHE:HD1	1:A:712:PHE:N	2.02	0.56
1:A:754:PHE:O	1:A:754:PHE:CD2	2.57	0.56
1:A:789:SER:HG	1:A:835:TYR:HH	1.54	0.56
1:A:652:LEU:HD21	1:A:906:VAL:C	2.31	0.56
1:A:874:GLU:HG2	1:A:913:PHE:CZ	2.41	0.56
1:A:36:ILE:O	1:A:46:LYS:NZ	2.39	0.56
1:A:128:LEU:O	1:A:129:ALA:C	2.48	0.56
1:A:131:ARG:HB3	1:A:215:GLN:HE22	1.71	0.56
1:A:536:PHE:HD2	1:A:614:ASP:CB	2.15	0.56
1:A:343:ARG:NH2	1:A:354:VAL:HB	2.21	0.55
1:A:482:VAL:CG1	1:A:483:VAL:HG22	2.36	0.55
1:A:502:ASN:H	1:A:653:LYS:NZ	2.04	0.55
1:A:599:LEU:HD21	1:A:603:LEU:HD23	1.88	0.55
1:A:693:LEU:O	1:A:891:MET:HA	2.06	0.55
1:A:757:ASP:OD2	1:A:767:ARG:NH2	2.38	0.55
1:A:841:ASP:O	1:A:842:ALA:HB3	2.06	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:122:GLY:O	1:A:123:THR:O	2.25	0.55
1:A:336:MET:HE1	1:A:539:LYS:HZ2	1.68	0.55
1:A:568:ASN:O	1:A:569:ASP:C	2.48	0.55
1:A:654:ALA:CA	1:A:905:TYR:CE2	2.82	0.55
1:A:913:PHE:HB3	1:A:915:THR:OG1	2.05	0.55
1:A:473:MET:HE1	1:A:568:ASN:CB	2.36	0.55
1:A:488:ASN:N	1:A:489:ILE:HD13	2.21	0.55
1:A:745:TYR:O	1:A:747:TYR:N	2.39	0.55
1:A:745:TYR:C	1:A:747:TYR:H	2.14	0.55
1:A:107:ILE:O	1:A:108:LYS:HB2	2.07	0.55
1:A:547:THR:O	1:A:924:ASN:OD1	2.24	0.55
1:A:76:GLN:CG	1:A:87:ARG:HD3	2.34	0.55
1:A:118:LYS:HE2	1:A:285:CYS:C	2.31	0.55
1:A:747:TYR:O	1:A:748:VAL:CB	2.54	0.55
1:A:288:ASN:HA	1:A:565:SER:OG	2.07	0.55
1:A:486:PHE:CD1	1:A:489:ILE:HG13	2.41	0.55
1:A:638:ALA:O	1:A:639:ARG:CB	2.55	0.55
1:A:293:ARG:NH2	1:A:563:GLN:HG3	2.19	0.55
1:A:472:TYR:CZ	1:A:476:ARG:HD2	2.42	0.55
1:A:755:TRP:CE3	1:A:756:PRO:HD2	2.42	0.55
1:A:757:ASP:OD2	1:A:760:TYR:O	2.24	0.55
1:A:768:ASN:OD1	1:A:858:ASN:ND2	2.40	0.55
1:A:48:LYS:C	1:A:49:PHE:CG	2.85	0.55
1:A:108:LYS:HG2	1:A:526:ARG:NH2	2.21	0.55
1:A:293:ARG:HH22	1:A:563:GLN:CG	2.19	0.55
1:A:297:ILE:HG23	1:A:330:GLU:CG	2.36	0.55
1:A:366:ASN:ND2	1:A:489:ILE:HG22	2.22	0.55
1:A:447:LEU:O	1:A:452:LYS:HE3	2.06	0.55
1:A:496:ASP:HA	1:A:499:ASP:OD1	2.07	0.55
1:A:865:PHE:O	1:A:878:LEU:HB2	2.06	0.55
1:A:916:VAL:HG13	1:A:917:ARG:N	2.22	0.55
1:A:308:SER:O	1:A:309:GLY:O	2.25	0.55
1:A:429:ASP:O	1:A:429:ASP:OD1	2.25	0.54
1:A:745:TYR:HE2	1:A:766:LEU:CD2	2.11	0.54
1:A:894:ASN:C	1:A:895:PHE:CD2	2.85	0.54
1:A:898:ASP:O	1:A:899:PRO:C	2.49	0.54
1:A:376:TYR:O	1:A:378:PHE:CE2	2.60	0.54
1:A:479:LEU:O	1:A:480:THR:C	2.50	0.54
1:A:679:GLY:C	1:A:681:PHE:N	2.66	0.54
1:A:728:SER:O	1:A:729:GLN:CB	2.54	0.54
1:A:757:ASP:OD1	1:A:760:TYR:CB	2.55	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:854:PHE:C	1:A:854:PHE:CD2	2.85	0.54
1:A:929:ALA:O	1:A:930:TYR:CG	2.61	0.54
1:A:351:ASN:HD22	1:A:515:ARG:HD2	1.72	0.54
1:A:474:ASN:O	1:A:475:ARG:HG3	2.07	0.54
1:A:738:LEU:O	1:A:739:VAL:HG22	2.07	0.54
1:A:779:PHE:O	1:A:785:TYR:CD2	2.60	0.54
1:A:40:GLY:C	1:A:42:TYR:H	2.14	0.54
1:A:311:LEU:O	1:A:312:ASN:HB3	2.08	0.54
1:A:345:HIS:O	1:A:346:TYR:HD1	1.90	0.54
1:A:467:PRO:HA	1:A:472:TYR:CD1	2.41	0.54
1:A:652:LEU:O	1:A:904:THR:HG22	2.07	0.54
1:A:712:PHE:N	1:A:712:PHE:CD1	2.73	0.54
1:A:5:PRO:C	1:A:7:LEU:N	2.65	0.54
1:A:116:SER:CB	1:A:470:TYR:HD2	2.21	0.54
1:A:470:TYR:CD1	1:A:474:ASN:HB3	2.43	0.54
1:A:113:ARG:HB3	1:A:117:PHE:HB2	1.90	0.54
1:A:496:ASP:C	1:A:498:MET:H	2.15	0.54
1:A:536:PHE:HD2	1:A:614:ASP:CA	2.21	0.54
1:A:907:TYR:CZ	1:A:909:LEU:HD11	2.42	0.54
1:A:355:ASP:CA	1:A:509:ASN:HD21	2.21	0.54
1:A:428:ILE:O	1:A:428:ILE:CG2	2.55	0.54
1:A:645:ARG:O	1:A:865:PHE:CB	2.56	0.54
1:A:222:LYS:HD3	1:A:223:PRO:N	2.23	0.54
1:A:469:THR:O	1:A:470:TYR:C	2.50	0.54
1:A:639:ARG:CG	1:A:640:THR:N	2.64	0.54
1:A:737:PHE:CE2	1:A:741:MET:SD	3.01	0.54
1:A:757:ASP:CA	1:A:760:TYR:HB2	2.36	0.54
1:A:343:ARG:CZ	1:A:354:VAL:HB	2.37	0.54
1:A:481:ASN:OD1	1:A:793:VAL:CG1	2.56	0.54
1:A:494:SER:O	1:A:495:VAL:C	2.51	0.54
1:A:570:LEU:O	1:A:573:ASP:O	2.25	0.54
1:A:441:SER:O	1:A:446:TYR:CE1	2.61	0.54
1:A:756:PRO:C	1:A:758:ARG:N	2.66	0.54
1:A:813:ILE:HG13	1:A:814:ALA:N	2.23	0.54
1:A:6:ASP:O	1:A:6:ASP:OD2	2.27	0.53
1:A:289:TYR:HB3	1:A:516:SER:OG	2.08	0.53
1:A:447:LEU:HG	1:A:498:MET:CE	2.36	0.53
1:A:535:TYR:CD2	1:A:538:ILE:HG12	2.42	0.53
1:A:809:ASN:OD1	1:A:810:SER:N	2.41	0.53
1:A:358:ASP:O	1:A:359:HIS:C	2.51	0.53
1:A:688:ARG:HB2	1:A:896:GLU:HB3	1.89	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:36:ILE:HG23	1:A:46:LYS:NZ	2.23	0.53
1:A:320:VAL:HG12	1:A:928:MET:H	1.74	0.53
1:A:67:ARG:HH21	1:A:70:ILE:HA	1.73	0.53
1:A:75:ILE:HG12	1:A:87:ARG:O	2.08	0.53
1:A:118:LYS:HG2	1:A:120:TYR:CE1	2.44	0.53
1:A:536:PHE:HE2	1:A:613:ALA:HA	1.72	0.53
1:A:878:LEU:O	1:A:884:TYR:HD2	1.92	0.53
1:A:922:GLU:O	1:A:923:ARG:C	2.51	0.53
1:A:536:PHE:CD1	1:A:537:ALA:HB2	2.43	0.53
1:A:679:GLY:HA2	1:A:681:PHE:CE2	2.43	0.53
1:A:72:PHE:CD2	1:A:90:VAL:HG22	2.43	0.53
1:A:226:ASP:O	1:A:227:ASP:HB3	2.08	0.53
1:A:617:GLY:O	1:A:618:ALA:HB2	2.08	0.53
1:A:288:ASN:CG	1:A:566:LEU:HB2	2.34	0.53
1:A:298:ASN:O	1:A:300:LEU:N	2.41	0.53
1:A:478:PRO:C	1:A:479:LEU:HD23	2.34	0.53
1:A:502:ASN:OD1	1:A:504:PHE:HB2	2.09	0.53
1:A:614:ASP:OD2	1:A:614:ASP:C	2.50	0.53
1:A:638:ALA:O	1:A:639:ARG:HB3	2.09	0.53
1:A:752:TYR:N	1:A:753:ARG:NE	2.56	0.53
1:A:779:PHE:CZ	1:A:843:ILE:C	2.87	0.53
1:A:900:MET:HE3	1:A:900:MET:HA	1.91	0.53
1:A:33:GLN:O	1:A:36:ILE:HB	2.08	0.53
1:A:113:ARG:CZ	1:A:520:GLY:O	2.57	0.53
1:A:670:TYR:CE1	1:A:672:GLY:HA3	2.44	0.53
1:A:737:PHE:CE2	1:A:741:MET:HG2	2.41	0.53
1:A:834:PRO:O	1:A:835:TYR:C	2.51	0.53
1:A:375:THR:C	1:A:376:TYR:HD2	2.16	0.53
1:A:766:LEU:O	1:A:769:PHE:HB3	2.08	0.53
1:A:320:VAL:HG11	1:A:927:ALA:CA	2.38	0.52
1:A:363:VAL:HG11	1:A:770:ASP:OD2	2.09	0.52
1:A:484:ASP:OD1	1:A:484:ASP:C	2.53	0.52
1:A:505:ASN:ND2	1:A:673:SER:H	2.06	0.52
1:A:736:TRP:O	1:A:737:PHE:C	2.48	0.52
1:A:837:LEU:HA	1:A:842:ALA:CB	2.39	0.52
1:A:347:PHE:CZ	1:A:349:LEU:HD22	2.44	0.52
1:A:436:ARG:NH2	1:A:437:ASN:HD21	2.03	0.52
1:A:609:ASP:OD1	1:A:919:ASN:HA	2.09	0.52
1:A:81:PRO:HA	1:A:556:LYS:HZ3	1.73	0.52
1:A:82:ASN:HA	1:A:556:LYS:HD3	1.90	0.52
1:A:112:ASP:CB	1:A:524:TYR:HD1	2.17	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:435:ARG:HB3	1:A:485:LEU:CD2	2.39	0.52
1:A:740:GLN:HB2	1:A:765:PHE:CZ	2.44	0.52
1:A:222:LYS:HZ3	1:A:223:PRO:HG2	1.74	0.52
1:A:716:ARG:HB3	1:A:722:SER:HB3	1.91	0.52
1:A:737:PHE:O	1:A:741:MET:HB2	2.09	0.52
1:A:738:LEU:C	1:A:739:VAL:CG2	2.83	0.52
1:A:85:ARG:NH1	1:A:85:ARG:HG2	2.23	0.52
1:A:99:ASP:N	1:A:542:LEU:HD12	2.25	0.52
1:A:116:SER:HB2	1:A:470:TYR:CD2	2.45	0.52
1:A:217:TYR:O	1:A:217:TYR:CD2	2.62	0.52
1:A:356:GLN:OE1	1:A:510:TRP:CE3	2.62	0.52
1:A:428:ILE:O	1:A:430:ILE:HD13	2.09	0.52
1:A:536:PHE:CD2	1:A:614:ASP:N	2.77	0.52
1:A:599:LEU:HD22	1:A:603:LEU:HB2	1.90	0.52
1:A:41:SER:O	1:A:42:TYR:HB3	2.10	0.52
1:A:122:GLY:O	1:A:123:THR:C	2.52	0.52
1:A:216:ALA:C	1:A:218:GLY:N	2.61	0.52
1:A:452:LYS:HG2	1:A:478:PRO:HA	1.92	0.52
1:A:599:LEU:O	1:A:603:LEU:HB2	2.09	0.52
1:A:652:LEU:O	1:A:653:LYS:O	2.26	0.52
1:A:757:ASP:OD1	1:A:767:ARG:NH2	2.41	0.52
1:A:13:ARG:C	1:A:15:GLN:N	2.66	0.52
1:A:504:PHE:CG	1:A:680:THR:HB	2.44	0.52
1:A:571:ARG:C	1:A:573:ASP:N	2.67	0.52
1:A:678:ASP:OD1	1:A:680:THR:N	2.34	0.52
1:A:825:GLN:HG3	1:A:826:GLY:H	1.74	0.52
1:A:526:ARG:HG3	1:A:526:ARG:O	2.10	0.52
1:A:559:ASN:CG	1:A:569:ASP:HA	2.35	0.52
1:A:618:ALA:HB2	1:A:645:ARG:HH21	1.75	0.52
1:A:928:MET:C	1:A:929:ALA:O	2.52	0.52
1:A:85:ARG:CG	1:A:85:ARG:HH11	2.23	0.52
1:A:92:VAL:HB	1:A:546:GLY:N	2.24	0.52
1:A:326:ASP:HA	1:A:620:ASN:HB2	1.92	0.52
1:A:582:VAL:HG12	1:A:583:ASN:N	2.25	0.52
1:A:619:LYS:HG2	1:A:620:ASN:N	2.25	0.52
1:A:778:ASN:O	1:A:788:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:447:LEU:HB3	1:A:448:PRO:HD2	1.93	0.52
1:A:570:LEU:O	1:A:575:ALA:N	2.42	0.52
1:A:592:ASP:O	1:A:596:SER:HB3	2.09	0.52
1:A:452:LYS:O	1:A:453:PHE:HB2	2.09	0.51
1:A:619:LYS:HG3	1:A:932:ARG:NH2	2.25	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:363:VAL:HG12	1:A:772:MET:HE1	1.92	0.51
1:A:489:ILE:H	1:A:489:ILE:CD1	2.19	0.51
1:A:874:GLU:CG	1:A:913:PHE:HE1	2.12	0.51
1:A:24:THR:HG21	1:A:49:PHE:O	2.11	0.51
1:A:108:LYS:HZ2	1:A:528:HIS:CG	2.26	0.51
1:A:132:GLU:HG2	1:A:133:ALA:H	1.74	0.51
1:A:598:GLN:O	1:A:602:MET:HG2	2.11	0.51
1:A:743:THR:HG21	1:A:864:PRO:HB3	1.93	0.51
1:A:779:PHE:O	1:A:785:TYR:HD2	1.92	0.51
1:A:855:LEU:CD2	1:A:856:CYS:H	2.19	0.51
1:A:451:TYR:O	1:A:479:LEU:HG	2.10	0.51
1:A:493:TRP:CZ2	1:A:774:ARG:HB3	2.45	0.51
1:A:820:VAL:CG2	1:A:822:THR:HG23	2.39	0.51
1:A:836:PRO:O	1:A:842:ALA:HB2	2.11	0.51
1:A:427:GLU:CD	1:A:428:ILE:H	2.19	0.51
1:A:343:ARG:NH1	1:A:354:VAL:HB	2.26	0.51
1:A:453:PHE:H	1:A:476:ARG:HG2	1.76	0.51
1:A:636:ILE:HB	1:A:891:MET:O	2.11	0.51
1:A:33:GLN:O	1:A:34:GLN:O	2.28	0.51
1:A:107:ILE:CB	1:A:529:ILE:HG13	2.38	0.51
1:A:320:VAL:HB	1:A:928:MET:HG2	1.92	0.51
1:A:514:TYR:OH	1:A:518:LEU:HD21	2.10	0.51
1:A:58:ARG:O	1:A:60:VAL:HG22	2.10	0.51
1:A:92:VAL:HB	1:A:545:PRO:CA	2.40	0.51
1:A:104:TYR:H	1:A:104:TYR:HD2	1.56	0.51
1:A:350:TRP:CZ3	1:A:532:PRO:HD3	2.46	0.51
1:A:670:TYR:CZ	1:A:672:GLY:CA	2.93	0.51
1:A:93:GLY:HA3	1:A:96:TRP:HB2	1.91	0.51
1:A:99:ASP:CA	1:A:542:LEU:HD12	2.41	0.51
1:A:506:HIS:CD2	1:A:508:ARG:H	2.29	0.51
1:A:727:MET:HG3	1:A:728:SER:N	2.20	0.51
1:A:742:ALA:CB	1:A:869:PHE:HB3	2.40	0.51
1:A:825:GLN:CG	1:A:826:GLY:N	2.73	0.51
1:A:432:ALA:O	1:A:433:ALA:C	2.53	0.51
1:A:472:TYR:O	1:A:473:MET:C	2.53	0.51
1:A:481:ASN:CG	1:A:793:VAL:CB	2.82	0.51
1:A:618:ALA:CB	1:A:910:TYR:O	2.55	0.51
1:A:104:TYR:N	1:A:104:TYR:HD2	2.07	0.50
1:A:107:ILE:O	1:A:108:LYS:CB	2.59	0.50
1:A:129:ALA:O	1:A:217:TYR:CD1	2.59	0.50
1:A:337:LEU:HD12	1:A:343:ARG:CD	2.35	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:350:TRP:O	1:A:351:ASN:C	2.53	0.50
1:A:430:ILE:HD13	1:A:430:ILE:N	2.26	0.50
1:A:511:GLY:O	1:A:514:TYR:N	2.43	0.50
1:A:675:PRO:HA	1:A:680:THR:H	1.75	0.50
1:A:728:SER:O	1:A:729:GLN:HB2	2.09	0.50
1:A:855:LEU:HD23	1:A:856:CYS:N	2.17	0.50
1:A:98:LEU:HG	1:A:99:ASP:N	2.26	0.50
1:A:99:ASP:C	1:A:101:GLY:H	2.20	0.50
1:A:324:LEU:HD12	1:A:327:ARG:HG3	1.94	0.50
1:A:593:HIS:O	1:A:594:ASN:C	2.53	0.50
1:A:768:ASN:CG	1:A:858:ASN:ND2	2.68	0.50
1:A:50:ARG:HH11	1:A:50:ARG:CG	2.15	0.50
1:A:342:SER:C	1:A:344:HIS:N	2.65	0.50
1:A:506:HIS:CG	1:A:507:HIS:N	2.80	0.50
1:A:527:PHE:CD1	1:A:528:HIS:N	2.80	0.50
1:A:533:GLN:CD	1:A:533:GLN:H	2.19	0.50
1:A:556:LYS:O	1:A:557:ASP:C	2.54	0.50
1:A:760:TYR:HE2	1:A:766:LEU:CB	2.24	0.50
1:A:296:PHE:CZ	1:A:351:ASN:HB2	2.47	0.50
1:A:309:GLY:O	1:A:310:THR:OG1	2.28	0.50
1:A:436:ARG:HB2	1:A:485:LEU:HD11	1.93	0.50
1:A:757:ASP:C	1:A:759:HIS:N	2.68	0.50
1:A:897:LEU:N	1:A:897:LEU:CD1	2.75	0.50
1:A:925:VAL:O	1:A:926:LEU:HD23	2.12	0.50
1:A:82:ASN:OD1	1:A:82:ASN:O	2.29	0.50
1:A:315:ARG:HB2	1:A:924:ASN:HD22	1.76	0.50
1:A:332:SER:HA	1:A:616:LEU:CD2	2.33	0.50
1:A:440:MET:HG3	1:A:821:TRP:CZ2	2.46	0.50
1:A:444:ALA:C	1:A:447:LEU:HD12	2.37	0.50
1:A:535:TYR:OH	1:A:537:ALA:HB3	2.11	0.50
1:A:554:LEU:HD23	1:A:579:TYR:CZ	2.47	0.50
1:A:559:ASN:OD1	1:A:569:ASP:CA	2.56	0.50
1:A:596:SER:OG	1:A:597:ASN:N	2.44	0.50
1:A:685:HIS:HB2	1:A:854:PHE:CE2	2.46	0.50
1:A:756:PRO:C	1:A:758:ARG:H	2.19	0.50
1:A:9:THR:HG23	1:A:9:THR:O	2.12	0.50
1:A:95:SER:CB	1:A:593:HIS:ND1	2.74	0.50
1:A:304:SER:O	1:A:306:VAL:N	2.44	0.50
1:A:488:ASN:HD22	1:A:774:ARG:HH21	1.58	0.50
1:A:505:ASN:ND2	1:A:670:TYR:OH	2.45	0.50
1:A:515:ARG:HH21	1:A:515:ARG:HG3	1.76	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:85:ARG:NH1	1:A:551:GLU:OE2	2.44	0.50
1:A:109:GLY:C	1:A:526:ARG:HH11	2.19	0.50
1:A:117:PHE:HE1	1:A:289:TYR:HA	1.77	0.50
1:A:298:ASN:H	1:A:330:GLU:CD	2.19	0.50
1:A:484:ASP:CG	1:A:485:LEU:H	2.20	0.50
1:A:554:LEU:N	1:A:554:LEU:CD1	2.74	0.50
1:A:738:LEU:O	1:A:739:VAL:CG2	2.59	0.50
1:A:738:LEU:C	1:A:739:VAL:HG23	2.37	0.50
1:A:11:THR:O	1:A:12:PRO:C	2.54	0.50
1:A:43:PHE:O	1:A:44:ASP:C	2.53	0.50
1:A:349:LEU:C	1:A:351:ASN:H	2.19	0.50
1:A:564:SER:HG	1:A:567:GLY:HA2	1.75	0.50
1:A:625:VAL:HG13	1:A:626:PRO:HD2	1.93	0.50
1:A:755:TRP:HB3	1:A:760:TYR:CZ	2.46	0.50
1:A:82:ASN:HA	1:A:556:LYS:HB2	1.93	0.50
1:A:342:SER:C	1:A:344:HIS:H	2.20	0.50
1:A:484:ASP:OD1	1:A:485:LEU:HB2	2.11	0.50
1:A:865:PHE:CE2	1:A:878:LEU:HB3	2.45	0.50
1:A:868:ASP:OD2	1:A:872:MET:SD	2.70	0.50
1:A:295:ASN:N	1:A:351:ASN:O	2.44	0.49
1:A:477:VAL:CG2	1:A:478:PRO:HD2	2.41	0.49
1:A:496:ASP:O	1:A:498:MET:N	2.44	0.49
1:A:8:THR:O	1:A:9:THR:CG2	2.59	0.49
1:A:11:THR:C	1:A:15:GLN:HG3	2.36	0.49
1:A:33:GLN:NE2	1:A:33:GLN:CA	2.74	0.49
1:A:48:LYS:O	1:A:49:PHE:CG	2.65	0.49
1:A:91:ASN:HA	1:A:547:THR:CA	2.41	0.49
1:A:337:LEU:HD11	1:A:352:GLN:NE2	2.27	0.49
1:A:486:PHE:CD2	1:A:834:PRO:HG3	2.47	0.49
1:A:544:LEU:HD12	1:A:544:LEU:N	2.28	0.49
1:A:666:VAL:HG13	1:A:666:VAL:O	2.13	0.49
1:A:85:ARG:HD3	1:A:553:VAL:HG21	1.94	0.49
1:A:343:ARG:HH12	1:A:354:VAL:CA	2.25	0.49
1:A:376:TYR:HD1	1:A:425:SER:CB	2.25	0.49
1:A:479:LEU:O	1:A:482:VAL:N	2.43	0.49
1:A:535:TYR:CE2	1:A:538:ILE:HG23	2.46	0.49
1:A:600:GLU:O	1:A:602:MET:N	2.45	0.49
1:A:633:THR:HG23	1:A:894:ASN:ND2	2.27	0.49
1:A:706:LEU:HB2	1:A:708:THR:O	2.12	0.49
1:A:838:ILE:O	1:A:841:ASP:O	2.30	0.49
1:A:838:ILE:O	1:A:839:GLY:C	2.54	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:362:ARG:HH21	1:A:857:ASP:CG	2.18	0.49
1:A:635:ASN:N	1:A:892:VAL:HG13	2.27	0.49
1:A:703:ASN:HD22	1:A:703:ASN:N	2.00	0.49
1:A:727:MET:C	1:A:729:GLN:H	2.19	0.49
1:A:87:ARG:NH1	1:A:551:GLU:OE1	2.41	0.49
1:A:328:ASN:HB2	1:A:620:ASN:ND2	2.27	0.49
1:A:331:LEU:O	1:A:335:TYR:HB2	2.12	0.49
1:A:332:SER:O	1:A:335:TYR:N	2.40	0.49
1:A:465:ILE:HG23	1:A:469:THR:CB	2.41	0.49
1:A:465:ILE:CG2	1:A:466:ASP:N	2.76	0.49
1:A:501:VAL:HG12	1:A:502:ASN:N	2.27	0.49
1:A:569:ASP:OD1	1:A:569:ASP:O	2.30	0.49
1:A:825:GLN:CG	1:A:826:GLY:H	2.25	0.49
1:A:838:ILE:HG13	1:A:839:GLY:N	2.27	0.49
1:A:438:PHE:HE1	1:A:442:ASN:HD22	1.56	0.49
1:A:465:ILE:N	1:A:465:ILE:HD12	2.27	0.49
1:A:504:PHE:CE2	1:A:680:THR:HG22	2.48	0.49
1:A:615:TYR:O	1:A:616:LEU:C	2.54	0.49
1:A:635:ASN:HA	1:A:892:VAL:CG2	2.43	0.49
1:A:647:TRP:HZ3	1:A:700:TRP:CZ3	2.31	0.49
1:A:793:VAL:CG2	1:A:794:VAL:N	2.75	0.49
1:A:449:ASP:OD2	1:A:467:PRO:HB3	2.12	0.49
1:A:611:THR:HA	1:A:917:ARG:HA	1.95	0.49
1:A:13:ARG:C	1:A:15:GLN:H	2.20	0.49
1:A:472:TYR:CD1	1:A:472:TYR:C	2.91	0.49
1:A:536:PHE:CE2	1:A:614:ASP:N	2.80	0.49
1:A:127:PRO:CD	1:A:128:LEU:N	2.76	0.49
1:A:361:VAL:O	1:A:443:ILE:HD11	2.12	0.49
1:A:514:TYR:CZ	1:A:518:LEU:HD11	2.48	0.49
1:A:647:TRP:HE3	1:A:863:VAL:HB	1.78	0.49
1:A:293:ARG:HG2	1:A:293:ARG:NH2	2.28	0.49
1:A:369:TYR:HD2	1:A:432:ALA:N	2.10	0.49
1:A:868:ASP:O	1:A:869:PHE:CB	2.55	0.49
1:A:92:VAL:CB	1:A:545:PRO:HA	2.43	0.48
1:A:449:ASP:HB2	1:A:472:TYR:OH	2.13	0.48
1:A:594:ASN:ND2	1:A:594:ASN:N	2.48	0.48
1:A:19:ILE:O	1:A:19:ILE:HG22	2.13	0.48
1:A:72:PHE:CD2	1:A:584:LEU:HD23	2.39	0.48
1:A:350:TRP:HE3	1:A:350:TRP:HA	1.78	0.48
1:A:66:GLN:CG	1:A:67:ARG:H	2.24	0.48
1:A:77:THR:O	1:A:78:ASP:CB	2.53	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:379:LEU:HD13	1:A:380:PRO:HD2	1.95	0.48
1:A:444:ALA:C	1:A:446:TYR:H	2.20	0.48
1:A:468:THR:O	1:A:568:ASN:HB2	2.12	0.48
1:A:645:ARG:HH21	1:A:911:GLY:CA	2.27	0.48
1:A:113:ARG:HH12	1:A:520:GLY:C	2.22	0.48
1:A:311:LEU:C	1:A:311:LEU:HD23	2.38	0.48
1:A:350:TRP:HA	1:A:350:TRP:CE3	2.49	0.48
1:A:549:THR:HG22	1:A:550:TYR:N	2.28	0.48
1:A:591:MET:O	1:A:592:ASP:O	2.32	0.48
1:A:745:TYR:HB3	1:A:755:TRP:CG	2.49	0.48
1:A:34:GLN:O	1:A:35:PHE:C	2.56	0.48
1:A:311:LEU:HG	1:A:312:ASN:N	2.27	0.48
1:A:881:ASN:ND2	1:A:881:ASN:C	2.71	0.48
1:A:85:ARG:C	1:A:86:VAL:HG13	2.38	0.48
1:A:309:GLY:C	1:A:310:THR:OG1	2.57	0.48
1:A:472:TYR:OH	1:A:476:ARG:CZ	2.61	0.48
1:A:488:ASN:ND2	1:A:777:PRO:HB3	2.23	0.48
1:A:504:PHE:C	1:A:506:HIS:N	2.70	0.48
1:A:757:ASP:CG	1:A:767:ARG:HH21	2.19	0.48
1:A:24:THR:HG22	1:A:27:TYR:CZ	2.48	0.48
1:A:436:ARG:HH22	1:A:437:ASN:ND2	2.09	0.48
1:A:577:ILE:HD13	1:A:577:ILE:C	2.38	0.48
1:A:666:VAL:O	1:A:666:VAL:HG22	2.13	0.48
1:A:762:HIS:O	1:A:764:ASP:N	2.44	0.48
1:A:776:GLY:O	1:A:779:PHE:CA	2.61	0.48
1:A:22:PRO:CB	1:A:26:GLU:HB2	2.23	0.48
1:A:23:GLY:O	1:A:27:TYR:HD2	1.97	0.48
1:A:487:THR:N	1:A:489:ILE:HD12	2.29	0.48
1:A:651:ARG:HD3	1:A:683:LEU:HD12	1.96	0.48
1:A:755:TRP:O	1:A:760:TYR:CE1	2.67	0.48
1:A:923:ARG:O	1:A:924:ASN:O	2.32	0.48
1:A:66:GLN:HG3	1:A:96:TRP:CE2	2.49	0.48
1:A:315:ARG:HD2	1:A:925:VAL:HG23	1.95	0.48
1:A:443:ILE:HG23	1:A:498:MET:HG3	1.95	0.48
1:A:480:THR:C	1:A:482:VAL:H	2.22	0.48
1:A:675:PRO:C	1:A:677:SER:N	2.71	0.48
1:A:745:TYR:C	1:A:747:TYR:N	2.72	0.48
1:A:338:ALA:HB3	1:A:763:TYR:HE2	1.79	0.48
1:A:506:HIS:CE1	1:A:507:HIS:CE1	3.02	0.48
1:A:544:LEU:CD2	1:A:600:GLU:HA	2.44	0.48
1:A:737:PHE:HE2	1:A:741:MET:CG	2.26	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:838:ILE:CG1	1:A:839:GLY:N	2.76	0.48
1:A:96:TRP:O	1:A:545:PRO:HG3	2.14	0.47
1:A:482:VAL:HG13	1:A:483:VAL:N	2.28	0.47
1:A:503:PRO:HG2	1:A:504:PHE:CD1	2.49	0.47
1:A:504:PHE:CD2	1:A:680:THR:HG22	2.48	0.47
1:A:776:GLY:O	1:A:779:PHE:HA	2.14	0.47
1:A:12:PRO:O	1:A:15:GLN:HB2	2.14	0.47
1:A:79:ASP:OD1	1:A:80:THR:N	2.48	0.47
1:A:286:ARG:HD2	1:A:566:LEU:HD21	1.96	0.47
1:A:465:ILE:N	1:A:465:ILE:CD1	2.76	0.47
1:A:673:SER:C	1:A:674:ILE:HD13	2.39	0.47
1:A:701:PRO:CB	1:A:705:ARG:HD3	2.41	0.47
1:A:336:MET:HE1	1:A:539:LYS:HZ1	1.78	0.47
1:A:432:ALA:HB1	1:A:485:LEU:HD13	1.97	0.47
1:A:432:ALA:HA	1:A:435:ARG:HB2	1.94	0.47
1:A:480:THR:HG22	1:A:821:TRP:CD1	2.49	0.47
1:A:502:ASN:ND2	1:A:682:TYR:HE2	2.12	0.47
1:A:569:ASP:HB3	1:A:669:LYS:C	2.38	0.47
1:A:793:VAL:HG23	1:A:794:VAL:N	2.29	0.47
1:A:913:PHE:O	1:A:932:ARG:HA	2.14	0.47
1:A:109:GLY:C	1:A:526:ARG:NH1	2.72	0.47
1:A:120:TYR:O	1:A:287:PRO:CB	2.55	0.47
1:A:225:LYS:O	1:A:227:ASP:N	2.45	0.47
1:A:676:TYR:C	1:A:677:SER:OG	2.57	0.47
1:A:736:TRP:NE1	1:A:740:GLN:NE2	2.61	0.47
1:A:621:ALA:HB1	1:A:623:TYR:CE1	2.49	0.47
1:A:809:ASN:CG	1:A:810:SER:H	2.22	0.47
1:A:526:ARG:C	1:A:526:ARG:HD2	2.40	0.47
1:A:571:ARG:HG3	1:A:571:ARG:H	1.52	0.47
1:A:736:TRP:O	1:A:739:VAL:HG23	2.14	0.47
1:A:14:LEU:HD22	1:A:19:ILE:CG2	2.45	0.47
1:A:446:TYR:OH	1:A:507:HIS:CG	2.66	0.47
1:A:468:THR:O	1:A:468:THR:CG2	2.62	0.47
1:A:487:THR:C	1:A:489:ILE:H	2.22	0.47
1:A:493:TRP:CZ3	1:A:772:MET:HB3	2.50	0.47
1:A:511:GLY:O	1:A:514:TYR:HB3	2.15	0.47
1:A:533:GLN:C	1:A:533:GLN:CD	2.82	0.47
1:A:741:MET:HE3	1:A:745:TYR:HD2	1.79	0.47
1:A:747:TYR:HE2	1:A:755:TRP:HE3	1.61	0.47
1:A:113:ARG:HD3	1:A:523:ARG:HA	1.96	0.47
1:A:117:PHE:CD1	1:A:290:ILE:HG12	2.50	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:546:GLY:O	1:A:924:ASN:OD1	2.32	0.47
1:A:549:THR:CG2	1:A:550:TYR:N	2.78	0.47
1:A:630:THR:O	1:A:896:GLU:HA	2.15	0.47
1:A:638:ALA:HA	1:A:889:HIS:O	2.15	0.47
1:A:649:PHE:O	1:A:649:PHE:CD1	2.67	0.47
1:A:688:ARG:CZ	1:A:715:LYS:O	2.62	0.47
1:A:762:HIS:C	1:A:764:ASP:N	2.70	0.47
1:A:316:SER:O	1:A:317:GLY:C	2.58	0.47
1:A:376:TYR:CD1	1:A:425:SER:HB3	2.50	0.47
1:A:644:MET:N	1:A:934:PRO:HD3	2.30	0.47
1:A:45:LEU:HD23	1:A:48:LYS:CE	2.45	0.47
1:A:99:ASP:O	1:A:101:GLY:N	2.48	0.47
1:A:117:PHE:HB3	1:A:523:ARG:HB3	1.95	0.47
1:A:328:ASN:OD1	1:A:331:LEU:HB3	2.15	0.47
1:A:374:PRO:HB2	1:A:427:GLU:HG2	1.96	0.47
1:A:486:PHE:C	1:A:489:ILE:HD12	2.40	0.47
1:A:502:ASN:N	1:A:653:LYS:HZ1	2.12	0.47
1:A:650:THR:HG22	1:A:651:ARG:O	2.14	0.47
1:A:757:ASP:HA	1:A:760:TYR:CB	2.41	0.47
1:A:895:PHE:CD2	1:A:895:PHE:N	2.83	0.47
1:A:924:ASN:O	1:A:925:VAL:CB	2.63	0.47
1:A:72:PHE:HB2	1:A:584:LEU:HB3	1.96	0.46
1:A:300:LEU:HD11	1:A:531:VAL:HG11	1.97	0.46
1:A:329:THR:O	1:A:330:GLU:C	2.56	0.46
1:A:428:ILE:HG23	1:A:430:ILE:HD11	1.96	0.46
1:A:439:ILE:HD12	1:A:484:ASP:HA	1.97	0.46
1:A:924:ASN:O	1:A:925:VAL:CG2	2.63	0.46
1:A:12:PRO:CA	1:A:15:GLN:OE1	2.57	0.46
1:A:24:THR:HA	1:A:27:TYR:CD2	2.49	0.46
1:A:504:PHE:CZ	1:A:858:ASN:OD1	2.65	0.46
1:A:506:HIS:CG	1:A:507:HIS:H	2.33	0.46
1:A:747:TYR:CD2	1:A:755:TRP:HB2	2.50	0.46
1:A:293:ARG:O	1:A:294:ASP:C	2.55	0.46
1:A:376:TYR:N	1:A:376:TYR:CD2	2.82	0.46
1:A:482:VAL:HG22	1:A:483:VAL:HG13	1.96	0.46
1:A:504:PHE:O	1:A:506:HIS:N	2.44	0.46
1:A:921:PRO:CG	1:A:922:GLU:H	2.28	0.46
1:A:92:VAL:HB	1:A:545:PRO:C	2.41	0.46
1:A:350:TRP:CE3	1:A:532:PRO:HD3	2.50	0.46
1:A:554:LEU:HD23	1:A:579:TYR:CE2	2.50	0.46
1:A:774:ARG:HH11	1:A:775:GLN:HB2	1.80	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:883:MET:O	1:A:889:HIS:NE2	2.48	0.46
1:A:93:GLY:O	1:A:96:TRP:N	2.44	0.46
1:A:116:SER:CB	1:A:470:TYR:CD2	2.98	0.46
1:A:309:GLY:HA3	1:A:552:TRP:CZ3	2.50	0.46
1:A:554:LEU:HD12	1:A:554:LEU:H	1.80	0.46
1:A:599:LEU:CD2	1:A:603:LEU:HB2	2.46	0.46
1:A:638:ALA:HA	1:A:890:SER:HA	1.98	0.46
1:A:727:MET:CG	1:A:728:SER:N	2.79	0.46
1:A:757:ASP:CG	1:A:760:TYR:O	2.58	0.46
1:A:50:ARG:HG2	1:A:50:ARG:NH1	2.18	0.46
1:A:111:LEU:CB	1:A:576:GLN:O	2.64	0.46
1:A:116:SER:HB3	1:A:470:TYR:HD2	1.80	0.46
1:A:349:LEU:O	1:A:351:ASN:N	2.48	0.46
1:A:379:LEU:CB	1:A:424:PRO:HG2	2.32	0.46
1:A:486:PHE:CD2	1:A:834:PRO:CG	2.98	0.46
1:A:625:VAL:HG13	1:A:626:PRO:CD	2.46	0.46
1:A:649:PHE:O	1:A:861:TRP:HB2	2.16	0.46
1:A:837:LEU:O	1:A:838:ILE:HG23	2.16	0.46
1:A:108:LYS:O	1:A:580:THR:HB	2.15	0.46
1:A:502:ASN:CG	1:A:505:ASN:ND2	2.71	0.46
1:A:67:ARG:O	1:A:588:PHE:HB2	2.16	0.46
1:A:568:ASN:O	1:A:568:ASN:OD1	2.34	0.46
1:A:596:SER:O	1:A:597:ASN:C	2.59	0.46
1:A:779:PHE:HZ	1:A:843:ILE:C	2.24	0.46
1:A:779:PHE:HB3	1:A:785:TYR:CD2	2.50	0.46
1:A:114:GLY:C	1:A:523:ARG:HD2	2.40	0.46
1:A:291:GLY:O	1:A:562:LEU:HD23	2.16	0.46
1:A:299:LEU:HD21	1:A:531:VAL:HG21	1.97	0.46
1:A:316:SER:O	1:A:318:MET:CG	2.63	0.46
1:A:611:THR:O	1:A:612:PHE:CD1	2.69	0.46
1:A:33:GLN:O	1:A:34:GLN:C	2.57	0.46
1:A:66:GLN:HG3	1:A:96:TRP:CZ2	2.51	0.46
1:A:128:LEU:HD23	1:A:128:LEU:N	2.30	0.46
1:A:315:ARG:NH2	1:A:924:ASN:HB2	2.30	0.46
1:A:533:GLN:O	1:A:533:GLN:NE2	2.49	0.46
1:A:559:ASN:HB2	1:A:571:ARG:NH1	2.31	0.46
1:A:737:PHE:CE2	1:A:741:MET:CG	2.98	0.46
1:A:786:ASP:C	1:A:787:LEU:HG	2.40	0.46
1:A:85:ARG:HD3	1:A:553:VAL:CG2	2.46	0.45
1:A:305:GLY:HA2	1:A:308:SER:HB2	1.98	0.45
1:A:326:ASP:OD1	1:A:620:ASN:O	2.34	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:376:TYR:HD1	1:A:425:SER:HB2	1.81	0.45
1:A:453:PHE:N	1:A:476:ARG:HG2	2.32	0.45
1:A:476:ARG:NH1	1:A:476:ARG:HG3	2.31	0.45
1:A:545:PRO:O	1:A:923:ARG:HG2	2.16	0.45
1:A:599:LEU:HD22	1:A:603:LEU:HD23	1.97	0.45
1:A:737:PHE:C	1:A:737:PHE:CD2	2.94	0.45
1:A:838:ILE:O	1:A:839:GLY:O	2.34	0.45
1:A:859:TYR:CE2	1:A:860:LEU:O	2.69	0.45
1:A:859:TYR:CG	1:A:860:LEU:N	2.83	0.45
1:A:655:SER:O	1:A:668:PHE:HE1	1.98	0.45
1:A:668:PHE:CZ	1:A:670:TYR:HD2	2.34	0.45
1:A:722:SER:C	1:A:724:GLY:N	2.70	0.45
1:A:788:VAL:CG2	1:A:789:SER:N	2.78	0.45
1:A:107:ILE:HA	1:A:582:VAL:HG22	1.99	0.45
1:A:222:LYS:C	1:A:222:LYS:CD	2.85	0.45
1:A:308:SER:HA	1:A:323:GLU:OE2	2.16	0.45
1:A:442:ASN:OD1	1:A:507:HIS:HE1	1.98	0.45
1:A:444:ALA:O	1:A:446:TYR:N	2.49	0.45
1:A:481:ASN:HB2	1:A:796:ASP:OD2	2.16	0.45
1:A:636:ILE:CB	1:A:891:MET:O	2.64	0.45
1:A:653:LYS:NZ	1:A:682:TYR:OH	2.50	0.45
1:A:689:SER:OG	1:A:711:LEU:HB2	2.16	0.45
1:A:716:ARG:HG2	1:A:726:THR:CG2	2.45	0.45
1:A:780:LEU:HD23	1:A:785:TYR:H	1.80	0.45
1:A:328:ASN:CG	1:A:331:LEU:HB3	2.41	0.45
1:A:484:ASP:O	1:A:487:THR:OG1	2.28	0.45
1:A:652:LEU:N	1:A:652:LEU:CD2	2.78	0.45
1:A:882:PRO:C	1:A:885:THR:H	2.25	0.45
1:A:303:ASP:CG	1:A:329:THR:HG1	2.25	0.45
1:A:453:PHE:O	1:A:477:VAL:N	2.49	0.45
1:A:593:HIS:O	1:A:596:SER:OG	2.34	0.45
1:A:700:TRP:CH2	1:A:865:PHE:HA	2.52	0.45
1:A:764:ASP:CG	1:A:765:PHE:N	2.75	0.45
1:A:50:ARG:CG	1:A:50:ARG:NH1	2.78	0.45
1:A:62:THR:OG1	1:A:64:LYS:HE2	2.17	0.45
1:A:113:ARG:H	1:A:523:ARG:C	2.24	0.45
1:A:439:ILE:C	1:A:441:SER:N	2.74	0.45
1:A:439:ILE:O	1:A:441:SER:N	2.50	0.45
1:A:471:PHE:CA	1:A:475:ARG:HD2	2.47	0.45
1:A:571:ARG:O	1:A:574:GLY:N	2.49	0.45
1:A:625:VAL:CG1	1:A:626:PRO:N	2.78	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:654:ALA:HA	1:A:905:TYR:CD2	2.48	0.45
1:A:710:ASN:C	1:A:711:LEU:HG	2.41	0.45
1:A:123:THR:HG23	1:A:125:TYR:O	2.16	0.45
1:A:430:ILE:O	1:A:431:ALA:C	2.60	0.45
1:A:442:ASN:OD1	1:A:507:HIS:CE1	2.69	0.45
1:A:503:PRO:O	1:A:505:ASN:N	2.50	0.45
1:A:547:THR:OG1	1:A:548:TYR:N	2.48	0.45
1:A:683:LEU:HD22	1:A:683:LEU:HA	1.69	0.45
1:A:67:ARG:HB2	1:A:96:TRP:CH2	2.52	0.45
1:A:129:ALA:O	1:A:130:PRO:O	2.35	0.45
1:A:222:LYS:CG	1:A:223:PRO:HD2	2.40	0.45
1:A:544:LEU:CB	1:A:545:PRO:HD2	2.47	0.45
1:A:576:GLN:HA	1:A:576:GLN:HE21	1.82	0.45
1:A:598:GLN:CD	1:A:601:LEU:HD23	2.41	0.45
1:A:706:LEU:HB2	1:A:708:THR:C	2.42	0.45
1:A:81:PRO:HA	1:A:556:LYS:NZ	2.32	0.45
1:A:293:ARG:NH2	1:A:563:GLN:CG	2.79	0.45
1:A:418:LEU:HD12	1:A:418:LEU:N	2.32	0.45
1:A:623:TYR:CD1	1:A:623:TYR:N	2.82	0.45
1:A:654:ALA:HB2	1:A:903:ASN:C	2.41	0.45
1:A:733:THR:O	1:A:735:ASP:N	2.50	0.45
1:A:24:THR:HA	1:A:27:TYR:CZ	2.47	0.45
1:A:486:PHE:CA	1:A:489:ILE:HD12	2.47	0.45
1:A:493:TRP:CZ3	1:A:772:MET:CB	3.00	0.45
1:A:553:VAL:HG12	1:A:554:LEU:O	2.16	0.45
1:A:568:ASN:O	1:A:671:SER:OG	2.29	0.45
1:A:707:LEU:O	1:A:708:THR:HG23	2.17	0.45
1:A:71:ARG:NH1	1:A:106:ASP:OD2	2.50	0.44
1:A:355:ASP:C	1:A:509:ASN:HD21	2.25	0.44
1:A:111:LEU:HD23	1:A:111:LEU:O	2.16	0.44
1:A:449:ASP:OD1	1:A:449:ASP:C	2.60	0.44
1:A:535:TYR:O	1:A:537:ALA:N	2.51	0.44
1:A:632:LEU:CD1	1:A:634:ILE:HG12	2.48	0.44
1:A:894:ASN:C	1:A:895:PHE:HD2	2.25	0.44
1:A:109:GLY:CA	1:A:526:ARG:HH12	2.19	0.44
1:A:289:TYR:CE2	1:A:513:LYS:HG3	2.52	0.44
1:A:327:ARG:O	1:A:328:ASN:C	2.58	0.44
1:A:366:ASN:ND2	1:A:489:ILE:CG2	2.80	0.44
1:A:649:PHE:CD1	1:A:649:PHE:C	2.96	0.44
1:A:861:TRP:O	1:A:862:THR:CG2	2.65	0.44
1:A:882:PRO:HA	1:A:885:THR:OG1	2.15	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:118:LYS:HE2	1:A:285:CYS:O	2.16	0.44
1:A:501:VAL:CG1	1:A:502:ASN:N	2.80	0.44
1:A:599:LEU:O	1:A:599:LEU:CD2	2.64	0.44
1:A:705:ARG:CG	1:A:705:ARG:NH1	2.75	0.44
1:A:752:TYR:H	1:A:753:ARG:NE	2.14	0.44
1:A:86:VAL:HG23	1:A:86:VAL:O	2.17	0.44
1:A:436:ARG:C	1:A:438:PHE:H	2.26	0.44
1:A:526:ARG:O	1:A:526:ARG:CG	2.63	0.44
1:A:300:LEU:N	1:A:300:LEU:CD1	2.81	0.44
1:A:449:ASP:HB2	1:A:476:ARG:CD	2.47	0.44
1:A:470:TYR:HD1	1:A:474:ASN:HB3	1.82	0.44
1:A:642:GLU:C	1:A:934:PRO:HG3	2.42	0.44
1:A:678:ASP:OD1	1:A:680:THR:CG2	2.61	0.44
1:A:117:PHE:HD1	1:A:290:ILE:HG12	1.83	0.44
1:A:133:ALA:CB	1:A:215:GLN:HA	2.48	0.44
1:A:536:PHE:CD1	1:A:537:ALA:N	2.85	0.44
1:A:609:ASP:C	1:A:610:GLN:O	2.60	0.44
1:A:637:PRO:O	1:A:890:SER:HA	2.18	0.44
1:A:679:GLY:HA2	1:A:681:PHE:CZ	2.52	0.44
1:A:738:LEU:N	1:A:738:LEU:HD12	2.32	0.44
1:A:18:HIS:CE1	1:A:27:TYR:OH	2.71	0.44
1:A:76:GLN:CB	1:A:87:ARG:HD3	2.48	0.44
1:A:99:ASP:CB	1:A:542:LEU:HD13	2.45	0.44
1:A:113:ARG:HB2	1:A:523:ARG:CB	2.47	0.44
1:A:117:PHE:CE1	1:A:289:TYR:HA	2.53	0.44
1:A:132:GLU:CG	1:A:133:ALA:N	2.80	0.44
1:A:299:LEU:HD23	1:A:531:VAL:HG21	1.99	0.44
1:A:487:THR:O	1:A:487:THR:HG22	2.17	0.44
1:A:591:MET:C	1:A:592:ASP:O	2.59	0.44
1:A:650:THR:O	1:A:906:VAL:O	2.36	0.44
1:A:651:ARG:C	1:A:652:LEU:HD23	2.42	0.44
1:A:29:SER:HB3	1:A:32:LEU:HB3	1.96	0.44
1:A:505:ASN:OD1	1:A:672:GLY:CA	2.66	0.44
1:A:727:MET:O	1:A:728:SER:HB3	2.17	0.44
1:A:58:ARG:O	1:A:60:VAL:CG2	2.66	0.43
1:A:133:ALA:C	1:A:216:ALA:HB2	2.43	0.43
1:A:293:ARG:NH2	1:A:563:GLN:HB2	2.33	0.43
1:A:338:ALA:HB3	1:A:763:TYR:CE2	2.53	0.43
1:A:524:TYR:CD1	1:A:524:TYR:CZ	2.90	0.43
1:A:652:LEU:C	1:A:653:LYS:O	2.61	0.43
1:A:93:GLY:N	1:A:96:TRP:HB2	2.33	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:137:THR:O	1:A:137:THR:HG22	2.18	0.43
1:A:423:ILE:HA	1:A:424:PRO:HD2	1.68	0.43
1:A:433:ALA:CA	1:A:436:ARG:NH1	2.42	0.43
1:A:785:TYR:OH	1:A:835:TYR:CE1	2.71	0.43
1:A:19:ILE:C	1:A:52:THR:HG1	2.26	0.43
1:A:504:PHE:CZ	1:A:680:THR:HA	2.53	0.43
1:A:534:LYS:HD2	1:A:534:LYS:N	2.33	0.43
1:A:569:ASP:OD1	1:A:572:ALA:CB	2.66	0.43
1:A:575:ALA:O	1:A:576:GLN:NE2	2.51	0.43
1:A:577:ILE:HD11	1:A:579:TYR:CE1	2.53	0.43
1:A:617:GLY:O	1:A:645:ARG:NH2	2.50	0.43
1:A:36:ILE:CG2	1:A:46:LYS:NZ	2.81	0.43
1:A:47:ASN:OD1	1:A:48:LYS:N	2.52	0.43
1:A:303:ASP:OD1	1:A:327:ARG:O	2.36	0.43
1:A:362:ARG:NH1	1:A:503:PRO:HD3	2.33	0.43
1:A:453:PHE:HD2	1:A:454:SER:H	1.62	0.43
1:A:625:VAL:HG13	1:A:626:PRO:N	2.33	0.43
1:A:640:THR:CB	1:A:642:GLU:OE2	2.64	0.43
1:A:730:CYS:SG	1:A:732:MET:HG3	2.59	0.43
1:A:881:ASN:HA	1:A:882:PRO:HD3	1.74	0.43
1:A:40:GLY:C	1:A:42:TYR:N	2.77	0.43
1:A:80:THR:CB	1:A:81:PRO:HD2	2.48	0.43
1:A:96:TRP:C	1:A:97:VAL:HG13	2.44	0.43
1:A:108:LYS:CA	1:A:528:HIS:HA	2.30	0.43
1:A:559:ASN:O	1:A:668:PHE:CE2	2.72	0.43
1:A:635:ASN:OD1	1:A:635:ASN:C	2.60	0.43
1:A:656:GLU:HG2	1:A:670:TYR:CZ	2.53	0.43
1:A:674:ILE:HG22	1:A:676:TYR:HB3	2.01	0.43
1:A:774:ARG:CD	1:A:775:GLN:N	2.64	0.43
1:A:11:THR:CB	1:A:12:PRO:HD3	2.38	0.43
1:A:302:HIS:O	1:A:303:ASP:CB	2.65	0.43
1:A:341:MET:HE1	1:A:352:GLN:HE22	1.82	0.43
1:A:539:LYS:HD2	1:A:539:LYS:C	2.43	0.43
1:A:726:THR:O	1:A:732:MET:O	2.36	0.43
1:A:760:TYR:N	1:A:760:TYR:CD1	2.86	0.43
1:A:107:ILE:HG13	1:A:529:ILE:HG13	1.99	0.43
1:A:488:ASN:HD22	1:A:774:ARG:NH2	2.17	0.43
1:A:544:LEU:HD21	1:A:600:GLU:HA	2.01	0.43
1:A:582:VAL:CG1	1:A:583:ASN:N	2.82	0.43
1:A:639:ARG:HE	1:A:639:ARG:HB2	1.60	0.43
1:A:923:ARG:O	1:A:924:ASN:C	2.59	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:112:ASP:HA	1:A:524:TYR:CA	2.46	0.43
1:A:289:TYR:HB3	1:A:516:SER:HB3	2.00	0.43
1:A:447:LEU:CB	1:A:448:PRO:HD2	2.49	0.43
1:A:450:LYS:HA	1:A:450:LYS:HD3	1.74	0.43
1:A:50:ARG:HG2	1:A:50:ARG:H	1.68	0.43
1:A:433:ALA:O	1:A:436:ARG:CZ	2.66	0.43
1:A:559:ASN:HB3	1:A:670:TYR:O	2.18	0.43
1:A:619:LYS:HG2	1:A:620:ASN:H	1.83	0.43
1:A:28:LEU:CB	1:A:33:GLN:OE1	2.67	0.43
1:A:294:ASP:OD1	1:A:295:ASN:ND2	2.52	0.43
1:A:312:ASN:HB3	1:A:319:ASN:HA	1.99	0.43
1:A:539:LYS:HE3	1:A:540:ASN:ND2	2.33	0.43
1:A:632:LEU:C	1:A:632:LEU:HD13	2.44	0.43
1:A:739:VAL:HG22	1:A:869:PHE:CE2	2.45	0.43
1:A:740:GLN:HG3	1:A:861:TRP:HZ3	1.83	0.43
1:A:747:TYR:C	1:A:748:VAL:HG12	2.44	0.43
1:A:833:TRP:CD1	1:A:833:TRP:C	2.97	0.43
1:A:315:ARG:HD2	1:A:924:ASN:O	2.18	0.42
1:A:358:ASP:HB3	1:A:361:VAL:CG2	2.48	0.42
1:A:504:PHE:CD2	1:A:680:THR:CG2	3.02	0.42
1:A:544:LEU:N	1:A:544:LEU:CD1	2.82	0.42
1:A:702:GLY:O	1:A:703:ASN:C	2.60	0.42
1:A:716:ARG:NH1	1:A:720:THR:OG1	2.52	0.42
1:A:35:PHE:O	1:A:36:ILE:C	2.61	0.42
1:A:82:ASN:HD21	1:A:663:GLN:NE2	2.05	0.42
1:A:88:TYR:N	1:A:550:TYR:O	2.52	0.42
1:A:110:VAL:O	1:A:111:LEU:CB	2.68	0.42
1:A:113:ARG:NH2	1:A:520:GLY:O	2.52	0.42
1:A:302:HIS:O	1:A:303:ASP:HB2	2.18	0.42
1:A:495:VAL:O	1:A:498:MET:HB2	2.18	0.42
1:A:496:ASP:C	1:A:498:MET:N	2.77	0.42
1:A:591:MET:O	1:A:592:ASP:C	2.62	0.42
1:A:682:TYR:CD1	1:A:682:TYR:C	2.97	0.42
1:A:757:ASP:C	1:A:759:HIS:H	2.26	0.42
1:A:912:VAL:HG21	1:A:934:PRO:O	2.19	0.42
1:A:34:GLN:OE1	1:A:34:GLN:HA	2.19	0.42
1:A:34:GLN:HB3	1:A:35:PHE:H	1.64	0.42
1:A:429:ASP:O	1:A:431:ALA:N	2.52	0.42
1:A:527:PHE:HD1	1:A:528:HIS:N	2.17	0.42
1:A:779:PHE:HE2	1:A:844:SER:CA	2.32	0.42
1:A:788:VAL:HG22	1:A:789:SER:N	2.33	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:893:ILE:HD12	1:A:893:ILE:N	2.34	0.42
1:A:41:SER:C	1:A:42:TYR:HD1	2.27	0.42
1:A:288:ASN:OD1	1:A:566:LEU:HD22	2.20	0.42
1:A:300:LEU:H	1:A:300:LEU:CD1	2.31	0.42
1:A:524:TYR:CD2	1:A:524:TYR:CZ	2.94	0.42
1:A:589:MET:HA	1:A:590:PRO:HD2	1.86	0.42
1:A:631:LEU:CA	1:A:895:PHE:O	2.64	0.42
1:A:651:ARG:CD	1:A:683:LEU:HD12	2.50	0.42
1:A:688:ARG:CB	1:A:896:GLU:O	2.64	0.42
1:A:690:MET:HA	1:A:894:ASN:O	2.19	0.42
1:A:704:ASP:N	1:A:704:ASP:OD1	2.52	0.42
1:A:740:GLN:HB3	1:A:859:TYR:OH	2.19	0.42
1:A:758:ARG:HG2	1:A:758:ARG:HH11	1.84	0.42
1:A:99:ASP:HB2	1:A:542:LEU:CD1	2.44	0.42
1:A:504:PHE:CD1	1:A:680:THR:HB	2.54	0.42
1:A:508:ARG:CG	1:A:510:TRP:HE1	2.32	0.42
1:A:539:LYS:HE2	1:A:539:LYS:HB3	1.87	0.42
1:A:619:LYS:NZ	1:A:935:PHE:CZ	2.85	0.42
1:A:900:MET:HE3	1:A:901:ASP:N	2.33	0.42
1:A:480:THR:OG1	1:A:481:ASN:N	2.50	0.42
1:A:493:TRP:CD2	1:A:774:ARG:HB3	2.54	0.42
1:A:559:ASN:HB2	1:A:571:ARG:HH12	1.85	0.42
1:A:609:ASP:HB2	1:A:917:ARG:CZ	2.50	0.42
1:A:650:THR:CG2	1:A:651:ARG:O	2.67	0.42
1:A:674:ILE:HB	1:A:677:SER:HB2	2.01	0.42
1:A:881:ASN:HD22	1:A:883:MET:N	2.06	0.42
1:A:116:SER:HB2	1:A:470:TYR:HD2	1.83	0.42
1:A:297:ILE:CA	1:A:330:GLU:OE1	2.58	0.42
1:A:353:ALA:HB3	1:A:515:ARG:HD3	2.01	0.42
1:A:472:TYR:HD1	1:A:473:MET:N	2.17	0.42
1:A:502:ASN:CB	1:A:505:ASN:HD22	2.32	0.42
1:A:559:ASN:O	1:A:668:PHE:HE2	2.03	0.42
1:A:82:ASN:OD1	1:A:301:TYR:OH	2.38	0.42
1:A:297:ILE:HA	1:A:330:GLU:CD	2.41	0.42
1:A:356:GLN:N	1:A:509:ASN:ND2	2.67	0.42
1:A:376:TYR:CE2	1:A:427:GLU:CB	3.03	0.42
1:A:61:THR:OG1	1:A:62:THR:N	2.53	0.42
1:A:736:TRP:CE2	1:A:740:GLN:NE2	2.88	0.42
1:A:50:ARG:HH11	1:A:50:ARG:H	1.68	0.42
1:A:133:ALA:HB1	1:A:134:ILE:HD13	2.02	0.42
1:A:438:PHE:HD1	1:A:442:ASN:ND2	2.16	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:566:LEU:HD12	1:A:566:LEU:HA	1.78	0.42
1:A:571:ARG:C	1:A:573:ASP:H	2.27	0.42
1:A:679:GLY:O	1:A:681:PHE:N	2.51	0.42
1:A:703:ASN:C	1:A:705:ARG:HG2	2.45	0.42
1:A:751:GLY:HA2	1:A:753:ARG:CZ	2.50	0.42
1:A:10:ALA:O	1:A:12:PRO:HD2	2.20	0.41
1:A:82:ASN:HD22	1:A:663:GLN:NE2	2.10	0.41
1:A:122:GLY:H	1:A:287:PRO:HD3	1.85	0.41
1:A:443:ILE:O	1:A:444:ALA:O	2.38	0.41
1:A:508:ARG:O	1:A:510:TRP:N	2.53	0.41
1:A:728:SER:O	1:A:729:GLN:CG	2.68	0.41
1:A:785:TYR:OH	1:A:835:TYR:CD1	2.73	0.41
1:A:499:ASP:OD2	1:A:853:LYS:HE2	2.20	0.41
1:A:751:GLY:HA2	1:A:753:ARG:NH1	2.34	0.41
1:A:51:GLN:O	1:A:52:THR:C	2.63	0.41
1:A:115:PRO:HD2	1:A:116:SER:H	1.84	0.41
1:A:297:ILE:HG23	1:A:330:GLU:OE1	2.21	0.41
1:A:315:ARG:HH21	1:A:924:ASN:CB	2.33	0.41
1:A:645:ARG:O	1:A:865:PHE:HB2	2.20	0.41
1:A:653:LYS:HD2	1:A:656:GLU:CD	2.45	0.41
1:A:857:ASP:O	1:A:858:ASN:C	2.64	0.41
1:A:11:THR:C	1:A:13:ARG:N	2.76	0.41
1:A:80:THR:OG1	1:A:81:PRO:N	2.54	0.41
1:A:640:THR:C	1:A:641:TRP:CD1	2.98	0.41
1:A:708:THR:OG1	1:A:713:GLU:HG3	2.20	0.41
1:A:809:ASN:O	1:A:810:SER:C	2.62	0.41
1:A:76:GLN:HB3	1:A:87:ARG:HD3	2.01	0.41
1:A:84:TYR:HD2	1:A:554:LEU:CD2	2.19	0.41
1:A:452:LYS:HB3	1:A:477:VAL:O	2.21	0.41
1:A:505:ASN:O	1:A:565:SER:O	2.38	0.41
1:A:534:LYS:O	1:A:535:TYR:C	2.62	0.41
1:A:752:TYR:N	1:A:753:ARG:NH1	2.53	0.41
1:A:858:ASN:OD1	1:A:858:ASN:N	2.53	0.41
1:A:68:LEU:HD23	1:A:590:PRO:HD3	2.03	0.41
1:A:76:GLN:HB3	1:A:87:ARG:CD	2.51	0.41
1:A:309:GLY:HA3	1:A:552:TRP:CH2	2.56	0.41
1:A:348:ALA:O	1:A:349:LEU:O	2.39	0.41
1:A:712:PHE:HD1	1:A:712:PHE:H	1.66	0.41
1:A:918:VAL:CG1	1:A:918:VAL:O	2.67	0.41
1:A:93:GLY:HA3	1:A:96:TRP:CB	2.50	0.41
1:A:296:PHE:O	1:A:297:ILE:C	2.64	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:315:ARG:CZ	1:A:923:ARG:O	2.69	0.41
1:A:315:ARG:NH1	1:A:923:ARG:O	2.54	0.41
1:A:516:SER:O	1:A:517:GLN:HG2	2.19	0.41
1:A:767:ARG:HH11	1:A:767:ARG:CG	2.25	0.41
1:A:118:LYS:HG2	1:A:120:TYR:CD1	2.56	0.41
1:A:476:ARG:HG3	1:A:476:ARG:HH11	1.84	0.41
1:A:503:PRO:O	1:A:506:HIS:HB2	2.21	0.41
1:A:564:SER:OG	1:A:671:SER:CB	2.67	0.41
1:A:813:ILE:CG1	1:A:814:ALA:H	2.27	0.41
1:A:54:VAL:HG22	1:A:55:ALA:N	2.36	0.41
1:A:58:ARG:O	1:A:60:VAL:N	2.53	0.41
1:A:69:GLN:HA	1:A:586:ALA:O	2.21	0.41
1:A:108:LYS:CG	1:A:526:ARG:NH2	2.84	0.41
1:A:361:VAL:HG13	1:A:442:ASN:HB3	2.02	0.41
1:A:482:VAL:C	1:A:483:VAL:HG13	2.45	0.41
1:A:500:ASN:OD1	1:A:500:ASN:N	2.37	0.41
1:A:503:PRO:CG	1:A:504:PHE:H	2.29	0.41
1:A:543:LEU:HB3	1:A:548:TYR:HE2	1.85	0.41
1:A:559:ASN:HD21	1:A:569:ASP:HB2	1.86	0.41
1:A:594:ASN:HD22	1:A:594:ASN:N	1.87	0.41
1:A:602:MET:O	1:A:603:LEU:C	2.63	0.41
1:A:622:LEU:CD2	1:A:907:TYR:HA	2.48	0.41
1:A:632:LEU:HD13	1:A:632:LEU:O	2.20	0.41
1:A:645:ARG:O	1:A:865:PHE:HB3	2.19	0.41
1:A:738:LEU:O	1:A:869:PHE:CE2	2.74	0.41
1:A:740:GLN:HB2	1:A:765:PHE:CE2	2.56	0.41
1:A:745:TYR:CZ	1:A:760:TYR:CE2	3.09	0.41
1:A:813:ILE:C	1:A:814:ALA:O	2.58	0.41
1:A:856:CYS:SG	1:A:859:TYR:CD2	3.09	0.41
1:A:881:ASN:HB3	1:A:884:TYR:CD2	2.55	0.41
1:A:905:TYR:O	1:A:906:VAL:CG2	2.69	0.41
1:A:28:LEU:HD23	1:A:28:LEU:HA	1.85	0.41
1:A:79:ASP:CG	1:A:80:THR:N	2.79	0.41
1:A:449:ASP:OD1	1:A:450:LYS:HG2	2.21	0.41
1:A:497:GLN:O	1:A:498:MET:HG2	2.21	0.41
1:A:640:THR:CB	1:A:642:GLU:OE1	2.47	0.41
1:A:720:THR:HG23	1:A:723:GLU:HB2	2.01	0.41
1:A:85:ARG:O	1:A:86:VAL:HG13	2.21	0.40
1:A:110:VAL:HB	1:A:578:VAL:CG1	2.52	0.40
1:A:311:LEU:HG	1:A:312:ASN:H	1.84	0.40
1:A:311:LEU:CG	1:A:312:ASN:N	2.84	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:343:ARG:HB2	1:A:762:HIS:HD2	1.86	0.40
1:A:428:ILE:HG23	1:A:430:ILE:CD1	2.51	0.40
1:A:498:MET:O	1:A:499:ASP:C	2.64	0.40
1:A:301:TYR:HE2	1:A:663:GLN:HA	1.81	0.40
1:A:466:ASP:CB	1:A:467:PRO:CD	2.99	0.40
1:A:472:TYR:OH	1:A:476:ARG:NE	2.54	0.40
1:A:528:HIS:O	1:A:529:ILE:CG2	2.67	0.40
1:A:618:ALA:HB1	1:A:910:TYR:C	2.45	0.40
1:A:99:ASP:CB	1:A:542:LEU:CD1	2.99	0.40
1:A:112:ASP:OD1	1:A:523:ARG:O	2.38	0.40
1:A:127:PRO:O	1:A:217:TYR:HE1	2.03	0.40
1:A:312:ASN:N	1:A:312:ASN:OD1	2.54	0.40
1:A:444:ALA:CA	1:A:447:LEU:HD12	2.52	0.40
1:A:99:ASP:C	1:A:101:GLY:N	2.80	0.40
1:A:118:LYS:HB3	1:A:288:ASN:H	1.87	0.40
1:A:470:TYR:CE1	1:A:474:ASN:ND2	2.73	0.40
1:A:512:LEU:HD21	1:A:565:SER:N	2.36	0.40
1:A:42:TYR:N	1:A:42:TYR:CD1	2.89	0.40
1:A:85:ARG:HG3	1:A:86:VAL:N	2.36	0.40
1:A:444:ALA:HA	1:A:447:LEU:HD12	2.02	0.40
1:A:466:ASP:OD2	1:A:468:THR:HB	2.21	0.40
1:A:740:GLN:O	1:A:744:ASN:ND2	2.55	0.40

All (12) 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:635:ASN:ND2	1:A:635:ASN:ND2[6_555]	1.53	0.67
1:A:524:TYR:CE2	1:A:847:GLN:CG[3_455]	1.85	0.35
1:A:524:TYR:CZ	1:A:847:GLN:CG[3_455]	1.89	0.31
1:A:524:TYR:CD1	1:A:847:GLN:CB[3_455]	2.00	0.20
1:A:524:TYR:CD2	1:A:847:GLN:CB[3_455]	2.01	0.19
1:A:524:TYR:CG	1:A:847:GLN:CB[3_455]	2.03	0.17
1:A:524:TYR:CE1	1:A:847:GLN:CG[3_455]	2.03	0.17
1:A:524:TYR:CD2	1:A:847:GLN:CG[3_455]	2.04	0.16
1:A:524:TYR:CE1	1:A:847:GLN:CB[3_455]	2.08	0.12
1:A:524:TYR:CE2	1:A:847:GLN:CB[3_455]	2.11	0.09
1:A:29:SER:N	1:A:608:ASN:OD1[3_455]	2.16	0.04
1:A:524:TYR:CZ	1:A:847:GLN:CB[3_455]	2.16	0.04

5.3 Torsion angles

5.3.1 Protein backbone

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	939/942 (100%)	508 (54%)	259 (28%)	172 (18%)	0 2

All (172) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	6	ASP
1	A	11	THR
1	A	34	GLN
1	A	42	TYR
1	A	48	LYS
1	A	53	VAL
1	A	54	VAL
1	A	59	ASN
1	A	78	ASP
1	A	108	LYS
1	A	115	PRO
1	A	123	THR
1	A	125	TYR
1	A	127	PRO
1	A	130	PRO
1	A	217	TYR
1	A	227	ASP
1	A	278	ASN
1	A	299	LEU
1	A	317	GLY
1	A	349	LEU
1	A	382	GLY
1	A	444	ALA
1	A	471	PHE
1	A	485	LEU
1	A	489	ILE
1	A	495	VAL
1	A	524	TYR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	539	LYS
1	A	545	PRO
1	A	547	THR
1	A	592	ASP
1	A	597	ASN
1	A	626	PRO
1	A	627	ALA
1	A	653	LYS
1	A	666	VAL
1	A	703	ASN
1	A	718	VAL
1	A	726	THR
1	A	727	MET
1	A	739	VAL
1	A	746	ASN
1	A	748	VAL
1	A	778	ASN
1	A	792	PRO
1	A	805	ASN
1	A	810	SER
1	A	828	ALA
1	A	838	ILE
1	A	842	ALA
1	A	843	ILE
1	A	845	SER
1	A	846	ASN
1	A	865	PHE
1	A	888	SER
1	A	915	THR
1	A	916	VAL
1	A	923	ARG
1	A	925	VAL
1	A	44	ASP
1	A	100	MET
1	A	111	LEU
1	A	202	VAL
1	A	211	ALA
1	A	228	GLY
1	A	281	THR
1	A	284	ALA
1	A	296	PHE
1	A	298	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	305	GLY
1	A	309	GLY
1	A	350	TRP
1	A	359	HIS
1	A	360	ASP
1	A	369	TYR
1	A	384	GLY
1	A	399	TYR
1	A	430	ILE
1	A	440	MET
1	A	445	ASP
1	A	449	ASP
1	A	481	ASN
1	A	536	PHE
1	A	574	GLY
1	A	639	ARG
1	A	678	ASP
1	A	704	ASP
1	A	711	LEU
1	A	729	GLN
1	A	750	ASN
1	A	757	ASP
1	A	794	VAL
1	A	795	ASN
1	A	799	SER
1	A	802	SER
1	A	804	ASP
1	A	807	ARG
1	A	809	ASN
1	A	839	GLY
1	A	864	PRO
1	A	899	PRO
1	A	906	VAL
1	A	907	TYR
1	A	921	PRO
1	A	924	ASN
1	A	929	ALA
1	A	936	ALA
1	A	20	ALA
1	A	35	PHE
1	A	46	LYS
1	A	128	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	158	ASN
1	A	173	SER
1	A	179	PRO
1	A	212	GLY
1	A	241	ASP
1	A	312	ASN
1	A	431	ALA
1	A	459	ASP
1	A	470	TYR
1	A	480	THR
1	A	494	SER
1	A	497	GLN
1	A	505	ASN
1	A	517	GLN
1	A	518	LEU
1	A	610	GLN
1	A	717	PRO
1	A	763	TYR
1	A	785	TYR
1	A	815	PRO
1	A	819	PRO
1	A	886	ASN
1	A	126	ASN
1	A	225	LYS
1	A	362	ARG
1	A	381	ASP
1	A	419	ASN
1	A	429	ASP
1	A	504	PHE
1	A	590	PRO
1	A	667	GLY
1	A	696	THR
1	A	803	GLN
1	A	808	ASN
1	A	813	ILE
1	A	897	LEU
1	A	129	ALA
1	A	134	ILE
1	A	149	VAL
1	A	226	ASP
1	A	353	ALA
1	A	380	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	418	LEU
1	A	453	PHE
1	A	460	PRO
1	A	475	ARG
1	A	478	PRO
1	A	637	PRO
1	A	755	TRP
1	A	771	PRO
1	A	279	SER
1	A	428	ILE
1	A	806	VAL
1	A	927	ALA
1	A	538	ILE
1	A	107	ILE
1	A	119	PRO
1	A	818	TRP
1	A	218	GLY
1	A	268	VAL

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	821/822 (100%)	670 (82%)	151 (18%)	1 11

All (151) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	3	LEU
1	A	8	THR
1	A	11	THR
1	A	28	LEU
1	A	33	GLN
1	A	34	GLN
1	A	36	ILE
1	A	41	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	50	ARG
1	A	51	GLN
1	A	52	THR
1	A	58	ARG
1	A	59	ASN
1	A	60	VAL
1	A	64	LYS
1	A	75	ILE
1	A	80	THR
1	A	82	ASN
1	A	85	ARG
1	A	99	ASP
1	A	104	TYR
1	A	107	ILE
1	A	108	LYS
1	A	110	VAL
1	A	111	LEU
1	A	112	ASP
1	A	113	ARG
1	A	120	TYR
1	A	123	THR
1	A	127	PRO
1	A	128	LEU
1	A	132	GLU
1	A	134	ILE
1	A	136	ASN
1	A	151	GLN
1	A	199	ILE
1	A	221	VAL
1	A	283	ARG
1	A	294	ASP
1	A	299	LEU
1	A	300	LEU
1	A	304	SER
1	A	306	VAL
1	A	311	LEU
1	A	318	MET
1	A	337	LEU
1	A	341	MET
1	A	343	ARG
1	A	344	HIS
1	A	345	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	350	TRP
1	A	351	ASN
1	A	356	GLN
1	A	359	HIS
1	A	369	TYR
1	A	373	VAL
1	A	375	THR
1	A	378	PHE
1	A	379	LEU
1	A	387	GLU
1	A	418	LEU
1	A	419	ASN
1	A	427	GLU
1	A	430	ILE
1	A	435	ARG
1	A	439	ILE
1	A	451	TYR
1	A	455	ILE
1	A	460	PRO
1	A	469	THR
1	A	471	PHE
1	A	472	TYR
1	A	481	ASN
1	A	486	PHE
1	A	489	ILE
1	A	492	ARG
1	A	493	TRP
1	A	500	ASN
1	A	519	LEU
1	A	522	SER
1	A	533	GLN
1	A	534	LYS
1	A	536	PHE
1	A	545	PRO
1	A	547	THR
1	A	571	ARG
1	A	577	ILE
1	A	589	MET
1	A	594	ASN
1	A	599	LEU
1	A	603	LEU
1	A	607	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	608	ASN
1	A	611	THR
1	A	616	LEU
1	A	623	TYR
1	A	625	VAL
1	A	630	THR
1	A	634	ILE
1	A	635	ASN
1	A	639	ARG
1	A	644	MET
1	A	650	THR
1	A	652	LEU
1	A	663	GLN
1	A	664	TYR
1	A	677	SER
1	A	683	LEU
1	A	703	ASN
1	A	704	ASP
1	A	705	ARG
1	A	711	LEU
1	A	712	PHE
1	A	722	SER
1	A	727	MET
1	A	731	ASP
1	A	732	MET
1	A	747	TYR
1	A	753	ARG
1	A	758	ARG
1	A	762	HIS
1	A	766	LEU
1	A	768	ASN
1	A	769	PHE
1	A	772	MET
1	A	773	SER
1	A	788	VAL
1	A	793	VAL
1	A	794	VAL
1	A	808	ASN
1	A	820	VAL
1	A	824	GLN
1	A	827	GLU
1	A	847	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	853	LYS
1	A	854	PHE
1	A	855	LEU
1	A	858	ASN
1	A	867	SER
1	A	869	PHE
1	A	872	MET
1	A	874	GLU
1	A	880	GLN
1	A	881	ASN
1	A	897	LEU
1	A	902	GLU
1	A	904	THR
1	A	915	THR
1	A	917	ARG
1	A	925	VAL
1	A	926	LEU

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (30) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	33	GLN
1	A	66	GLN
1	A	82	ASN
1	A	136	ASN
1	A	215	GLN
1	A	288	ASN
1	A	302	HIS
1	A	351	ASN
1	A	352	GLN
1	A	366	ASN
1	A	419	ASN
1	A	437	ASN
1	A	488	ASN
1	A	497	GLN
1	A	505	ASN
1	A	528	HIS
1	A	540	ASN
1	A	563	GLN
1	A	576	GLN
1	A	594	ASN
1	A	597	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	605	ASN
1	A	610	GLN
1	A	703	ASN
1	A	740	GLN
1	A	744	ASN
1	A	759	HIS
1	A	858	ASN
1	A	881	ASN
1	A	894	ASN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data [i](#)

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

In the following table, the column labelled ‘#RSRZ> 2’ contains the number (and percentage) of RSRZ outliers, followed by percent RSRZ outliers for the chain as percentile scores relative to all X-ray entries and entries of similar resolution. The OWAB column contains the minimum, median, 95th percentile and maximum values of the occupancy-weighted average B-factor per residue. The column labelled ‘Q< 0.9’ lists the number of (and percentage) of residues with an average occupancy less than 0.9.

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	719/942 (76%)	-0.62	1 (0%) 92 87	4, 30, 30, 30	4 (0%)

All (1) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	199	ILE	2.4

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

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

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.