



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 03:51 AM UTC

PDB ID : 3K0I / pdb_00003k0i
Title : Crystal structure of Cu(I)CusA
Authors : Su, C.-C.
Deposited on : 2009-09-24
Resolution : 4.12 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

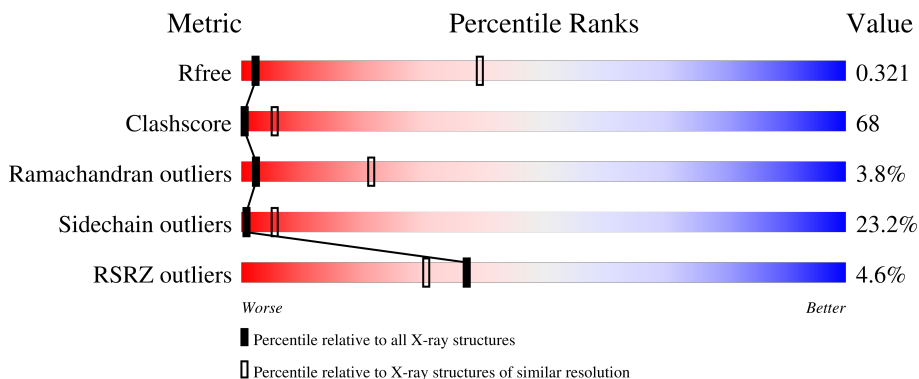
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

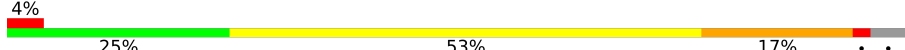
The reported resolution of this entry is 4.12 Å.

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	1249 (4.44-3.80)
Clashscore	190562	1031 (4.42-3.82)
Ramachandran outliers	187476	1211 (4.44-3.80)
Sidechain outliers	187428	1198 (4.44-3.80)
RSRZ outliers	180081	1246 (4.44-3.80)

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	1055	

2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 7804 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 Cation efflux system protein cusA.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	1015	Total	C	N	O	S	0	0	0
			7802	5047	1305	1414	36			

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-7	MET	-	expression tag	UNP P38054
A	-6	GLY	-	expression tag	UNP P38054
A	-5	HIS	-	expression tag	UNP P38054
A	-4	HIS	-	expression tag	UNP P38054
A	-3	HIS	-	expression tag	UNP P38054
A	-2	HIS	-	expression tag	UNP P38054
A	-1	HIS	-	expression tag	UNP P38054
A	0	HIS	-	expression tag	UNP P38054

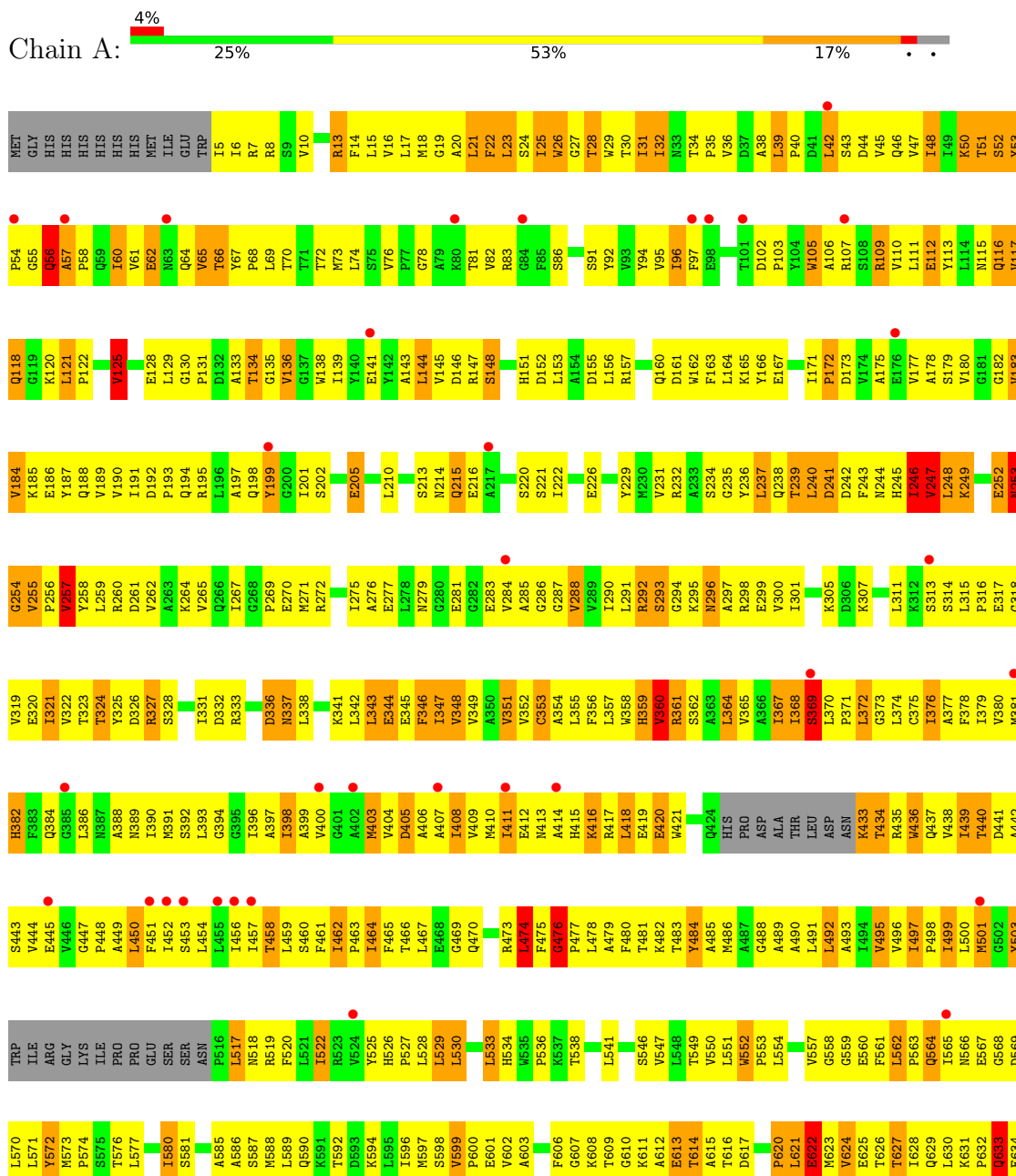
- Molecule 2 is COPPER (I) ION (CCD ID: CU1) (formula: Cu).

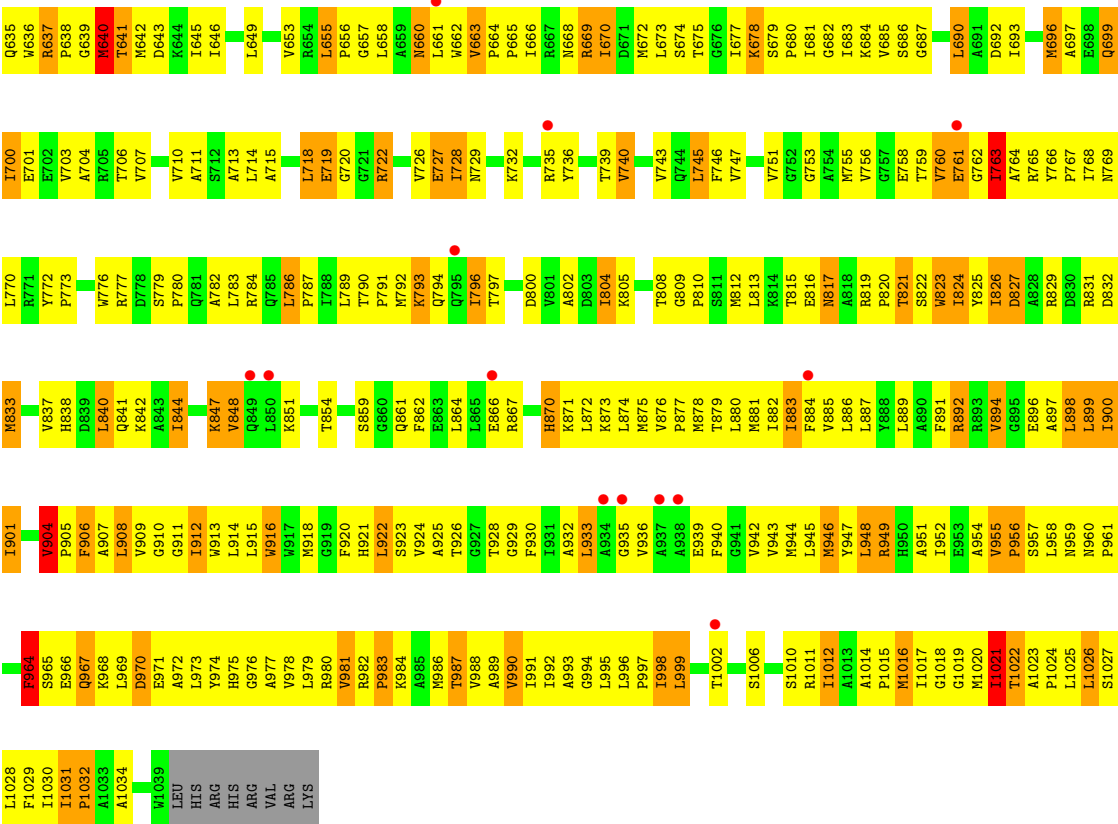
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
2	A	2	Total	Cu	0	0
			2	2		

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: Cation efflux system protein *cusA*





4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	H 3 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	179.26 Å 179.26 Å 286.27 Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	38.46 – 4.12 38.46 – 4.12	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	91.3 (38.46-4.12) 98.1 (38.46-4.12)	Depositor EDS
R_{merge}	0.09	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	2.36 (at 4.13 Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX	Depositor
R, R_{free}	0.269 , 0.308 0.272 , 0.321	Depositor DCC
R_{free} test set	680 reflections (4.95%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	132.4	Xtriage
Anisotropy	0.243	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.24 , 133.4	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.48$, $\langle L^2 \rangle = 0.30$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.87	EDS
Total number of atoms	7804	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	190.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.44% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality i

5.1 Standard geometry i

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: CU1

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	0.51	7/7960 (0.1%)	0.98	51/10834 (0.5%)

All (7) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	254	GLY	N-CA	-9.17	1.33	1.45
1	A	254	GLY	CA-C	-8.49	1.40	1.52
1	A	247	VAL	CA-C	-6.88	1.44	1.52
1	A	904	VAL	CA-CB	6.37	1.57	1.54
1	A	248	LEU	CA-C	-5.35	1.47	1.52
1	A	249	LYS	CA-C	-5.31	1.46	1.52
1	A	669	ARG	C-O	-5.28	1.17	1.24

All (51) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	253	ASN	O-C-N	12.23	138.86	122.59
1	A	257	VAL	O-C-N	11.66	135.97	123.03
1	A	254	GLY	CA-C-O	11.31	134.68	122.47
1	A	254	GLY	N-CA-C	9.60	127.58	112.31
1	A	255	VAL	C-N-CD	-8.21	91.33	125.00
1	A	125	VAL	N-CA-C	7.73	120.05	108.23
1	A	57	ALA	CA-C-N	7.65	128.05	119.32
1	A	57	ALA	C-N-CA	7.65	128.05	119.32
1	A	1021	ILE	N-CA-C	-7.28	103.09	113.07
1	A	727	GLU	N-CA-C	-6.91	97.46	108.73
1	A	128	GLU	N-CA-C	6.32	119.25	109.07
1	A	827	ASP	N-CA-C	6.21	117.84	108.46
1	A	257	VAL	CA-C-N	-6.08	112.30	122.64
1	A	257	VAL	C-N-CA	-6.08	112.30	122.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	577	LEU	CA-C-N	6.07	127.43	119.84
1	A	577	LEU	C-N-CA	6.07	127.43	119.84
1	A	809	GLY	CA-C-N	6.07	127.02	119.98
1	A	809	GLY	C-N-CA	6.07	127.02	119.98
1	A	901	ILE	N-CA-C	6.06	116.72	110.36
1	A	52	SER	N-CA-C	6.01	118.20	108.34
1	A	247	VAL	CA-C-N	-5.99	112.94	122.17
1	A	247	VAL	C-N-CA	-5.99	112.94	122.17
1	A	255	VAL	N-CA-C	-5.93	96.06	108.88
1	A	43	SER	N-CA-C	-5.90	104.54	110.97
1	A	249	LYS	N-CA-C	-5.86	97.63	107.99
1	A	246	ILE	CA-C-N	-5.76	114.67	122.91
1	A	246	ILE	C-N-CA	-5.76	114.67	122.91
1	A	622	GLU	N-CA-C	-5.70	105.82	112.89
1	A	474	LEU	N-CA-C	-5.53	104.94	110.97
1	A	908	LEU	CA-C-N	5.50	127.98	120.77
1	A	908	LEU	C-N-CA	5.50	127.98	120.77
1	A	192	ASP	CA-C-N	5.47	125.82	119.47
1	A	192	ASP	C-N-CA	5.47	125.82	119.47
1	A	633	GLN	N-CA-C	5.45	119.93	113.28
1	A	22	PHE	N-CA-C	-5.43	104.60	111.11
1	A	125	VAL	CB-CA-C	-5.41	104.41	110.96
1	A	447	GLY	CA-C-N	5.36	124.55	118.97
1	A	447	GLY	C-N-CA	5.36	124.55	118.97
1	A	369	SER	N-CA-C	5.28	117.03	111.28
1	A	247	VAL	N-CA-C	5.23	116.50	108.71
1	A	634	GLU	N-CA-C	-5.20	105.04	111.33
1	A	253	ASN	CA-C-N	5.19	129.12	121.96
1	A	253	ASN	C-N-CA	5.19	129.12	121.96
1	A	476	GLY	CA-C-N	5.17	126.31	119.84
1	A	476	GLY	C-N-CA	5.17	126.31	119.84
1	A	241	ASP	N-CA-C	-5.12	105.69	111.28
1	A	599	VAL	CA-C-N	5.10	126.11	120.45
1	A	599	VAL	C-N-CA	5.10	126.11	120.45
1	A	254	GLY	CA-C-N	5.01	131.40	122.13
1	A	254	GLY	C-N-CA	5.01	131.40	122.13
1	A	955	VAL	CB-CA-C	-5.01	108.94	113.70

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	7802	0	8064	1073	0
2	A	2	0	0	0	0
All	All	7804	0	8064	1073	0

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 68.

All (1073) 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:669:ARG:NH2	1:A:672:MET:HB2	1.48	1.26
1:A:669:ARG:NH2	1:A:672:MET:HE3	1.46	1.26
1:A:249:LYS:HB3	1:A:257:VAL:CG2	1.65	1.25
1:A:573:MET:CE	1:A:668:ASN:HD21	1.52	1.22
1:A:669:ARG:CZ	1:A:672:MET:HE3	1.74	1.17
1:A:249:LYS:HB3	1:A:257:VAL:HG21	1.29	1.11
1:A:62:GLU:HA	1:A:66:THR:HG23	1.26	1.10
1:A:573:MET:HE1	1:A:668:ASN:HD21	0.98	1.10
1:A:635:GLN:HB3	1:A:636:TRP:HE3	1.10	1.10
1:A:922:LEU:HA	1:A:926:THR:HG21	1.29	1.09
1:A:635:GLN:HB3	1:A:636:TRP:CE3	1.86	1.09
1:A:444:VAL:O	1:A:448:PRO:HD2	1.53	1.07
1:A:249:LYS:CB	1:A:257:VAL:HG21	1.83	1.07
1:A:249:LYS:O	1:A:257:VAL:HG23	1.54	1.07
1:A:376:ILE:HD13	1:A:488:GLY:HA3	1.37	1.06
1:A:51:THR:HG21	1:A:65:VAL:HG21	1.40	1.03
1:A:669:ARG:NH1	1:A:672:MET:HE3	1.73	1.02
1:A:19:GLY:HA2	1:A:22:PHE:HD2	1.25	1.01
1:A:614:THR:HG22	1:A:616:THR:H	1.22	1.01
1:A:669:ARG:HH21	1:A:672:MET:HB2	0.95	1.01
1:A:35:PRO:HA	1:A:296:ASN:HB3	1.43	1.01
1:A:369:SER:O	1:A:492:LEU:HD11	1.63	0.98
1:A:249:LYS:CB	1:A:257:VAL:CG2	2.39	0.98
1:A:550:VAL:HB	1:A:909:VAL:HG13	1.43	0.97
1:A:364:LEU:HG	1:A:503:TYR:HD2	1.30	0.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:573:MET:CE	1:A:668:ASN:ND2	2.27	0.96
1:A:669:ARG:NH2	1:A:672:MET:CE	2.28	0.96
1:A:370:LEU:HD13	1:A:400:VAL:HG13	1.48	0.95
1:A:607:GLY:HA2	1:A:626:THR:HG22	1.48	0.95
1:A:391:MET:HB3	1:A:478:LEU:HB2	1.46	0.94
1:A:522:ILE:HG22	1:A:526:HIS:NE2	1.82	0.94
1:A:669:ARG:NH2	1:A:672:MET:CB	2.30	0.94
1:A:669:ARG:NH1	1:A:672:MET:CE	2.30	0.94
1:A:26:TRP:HE1	1:A:379:ILE:HG12	1.33	0.93
1:A:573:MET:HE1	1:A:668:ASN:ND2	1.84	0.93
1:A:887:LEU:HD22	1:A:900:ILE:HG21	1.49	0.92
1:A:572:TYR:HE1	1:A:574:PRO:HG3	1.34	0.90
1:A:991:ILE:HG12	1:A:1020:MET:HE2	1.53	0.90
1:A:370:LEU:HD21	1:A:403:MET:HB2	1.51	0.89
1:A:546:SER:O	1:A:549:THR:HG22	1.73	0.89
1:A:201:ILE:HD12	1:A:248:LEU:HD13	1.55	0.89
1:A:669:ARG:CZ	1:A:672:MET:CE	2.51	0.88
1:A:572:TYR:CE1	1:A:574:PRO:HG3	2.09	0.88
1:A:458:THR:HG22	1:A:486:MET:HB2	1.54	0.87
1:A:553:PRO:HB2	1:A:912:ILE:HD11	1.56	0.87
1:A:669:ARG:HH22	1:A:672:MET:HE3	1.08	0.87
1:A:789:LEU:HD21	1:A:793:LYS:HD3	1.56	0.87
1:A:240:LEU:HD23	1:A:265:VAL:HG12	1.55	0.87
1:A:496:VAL:HG12	1:A:500:LEU:HD12	1.55	0.87
1:A:669:ARG:HH22	1:A:672:MET:CE	1.87	0.87
1:A:833:MET:HE2	1:A:833:MET:H	1.38	0.87
1:A:333:ARG:HH12	1:A:568:GLY:HA3	1.38	0.87
1:A:139:ILE:HD11	1:A:291:LEU:HB2	1.57	0.86
1:A:376:ILE:HA	1:A:379:ILE:HD12	1.56	0.86
1:A:16:VAL:HG21	1:A:498:PRO:HB2	1.56	0.86
1:A:669:ARG:HA	1:A:669:ARG:NE	1.88	0.86
1:A:758:GLU:HG2	1:A:767:PRO:HA	1.56	0.86
1:A:847:LYS:HE3	1:A:847:LYS:HA	1.56	0.86
1:A:408:ILE:HD13	1:A:986:MET:HE2	1.56	0.86
1:A:669:ARG:HH12	1:A:672:MET:CE	1.88	0.86
1:A:991:ILE:HG21	1:A:1020:MET:HG2	1.58	0.86
1:A:891:PHE:HE2	1:A:946:MET:HG2	1.38	0.86
1:A:784:ARG:HH21	1:A:784:ARG:HG3	1.39	0.86
1:A:39:LEU:HG	1:A:666:ILE:HG21	1.58	0.85
1:A:34:THR:HG22	1:A:382:HIS:CE1	2.11	0.85
1:A:118:GLN:HE21	1:A:118:GLN:HA	1.40	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:907:ALA:HA	1:A:1022:THR:HG22	1.59	0.84
1:A:30:THR:O	1:A:34:THR:HG23	1.78	0.84
1:A:55:GLY:C	1:A:56:GLN:HG2	2.02	0.84
1:A:444:VAL:O	1:A:448:PRO:CD	2.25	0.83
1:A:522:ILE:HG22	1:A:526:HIS:CD2	2.12	0.83
1:A:876:VAL:HG23	1:A:877:PRO:HD3	1.60	0.83
1:A:48:ILE:HG23	1:A:94:TYR:CE2	2.12	0.83
1:A:899:LEU:HD21	1:A:1034:ALA:HB1	1.60	0.83
1:A:19:GLY:HA2	1:A:22:PHE:CD2	2.12	0.83
1:A:213:SER:HB2	1:A:246:ILE:HD11	1.60	0.83
1:A:364:LEU:HG	1:A:503:TYR:CD2	2.14	0.83
1:A:60:ILE:HG12	1:A:64:GLN:HG3	1.60	0.82
1:A:580:ILE:HD11	1:A:585:ALA:HB2	1.62	0.82
1:A:696:MET:HE2	1:A:851:LYS:HG3	1.59	0.82
1:A:50:LYS:HD2	1:A:92:TYR:HE2	1.44	0.82
1:A:547:VAL:O	1:A:550:VAL:HG12	1.80	0.81
1:A:944:MET:HG3	1:A:1031:ILE:HD13	1.63	0.81
1:A:62:GLU:HA	1:A:66:THR:CG2	2.07	0.81
1:A:26:TRP:HZ2	1:A:379:ILE:CG2	1.93	0.81
1:A:240:LEU:CD2	1:A:265:VAL:HG12	2.10	0.81
1:A:416:LYS:HE2	1:A:417:ARG:HD2	1.61	0.81
1:A:844:ILE:HG13	1:A:848:VAL:HG22	1.63	0.80
1:A:790:THR:HG21	1:A:794:GLN:HE21	1.45	0.80
1:A:461:PHE:O	1:A:464:ILE:HG22	1.81	0.80
1:A:964:PHE:HD2	1:A:964:PHE:C	1.87	0.80
1:A:700:ILE:HG21	1:A:824:ILE:HD13	1.63	0.80
1:A:462:ILE:HG23	1:A:463:PRO:HD3	1.62	0.80
1:A:964:PHE:C	1:A:964:PHE:CD2	2.59	0.80
1:A:19:GLY:O	1:A:23:LEU:HD23	1.81	0.80
1:A:600:PRO:HB2	1:A:637:ARG:HH12	1.45	0.80
1:A:960:ASN:H	1:A:961:PRO:HD3	1.47	0.80
1:A:550:VAL:C	1:A:553:PRO:HD2	2.06	0.79
1:A:567:GLU:OE2	1:A:666:ILE:HB	1.83	0.79
1:A:48:ILE:HG23	1:A:94:TYR:HE2	1.48	0.79
1:A:905:PRO:O	1:A:909:VAL:HG23	1.83	0.78
1:A:249:LYS:O	1:A:257:VAL:CG2	2.31	0.77
1:A:180:VAL:HG22	1:A:276:ALA:HB2	1.67	0.77
1:A:185:LYS:HE3	1:A:267:ILE:HD13	1.65	0.77
1:A:40:PRO:HB3	1:A:389:ASN:HD22	1.50	0.77
1:A:53:TYR:HD1	1:A:54:PRO:HD3	1.48	0.77
1:A:464:ILE:HD11	1:A:475:PHE:CD1	2.19	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:480:PHE:HB3	1:A:484:TYR:OH	1.85	0.77
1:A:122:PRO:O	1:A:125:VAL:HG23	1.84	0.77
1:A:297:ALA:O	1:A:301:ILE:HG13	1.84	0.77
1:A:550:VAL:HG23	1:A:912:ILE:HD13	1.66	0.76
1:A:497:ILE:HD13	1:A:497:ILE:H	1.50	0.76
1:A:922:LEU:HA	1:A:926:THR:CG2	2.11	0.76
1:A:977:ALA:O	1:A:980:ARG:HG3	1.85	0.75
1:A:960:ASN:N	1:A:961:PRO:HD3	2.01	0.75
1:A:930:PHE:CD1	1:A:1015:PRO:HB3	2.21	0.75
1:A:433:LYS:HA	1:A:436:TRP:CD1	2.22	0.75
1:A:24:SER:O	1:A:28:THR:HG22	1.87	0.74
1:A:183:VAL:HG23	1:A:272:ARG:NH2	2.01	0.74
1:A:980:ARG:HD3	1:A:980:ARG:C	2.12	0.74
1:A:5:ILE:HA	1:A:8:ARG:CZ	2.16	0.74
1:A:572:TYR:C	1:A:572:TYR:HD1	1.94	0.74
1:A:66:THR:O	1:A:70:THR:HG23	1.86	0.74
1:A:1016:MET:O	1:A:1020:MET:HB2	1.87	0.74
1:A:147:ARG:O	1:A:148:SER:HB3	1.85	0.74
1:A:980:ARG:NH1	1:A:1028:LEU:HA	2.02	0.74
1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HD2	1.52	0.74
1:A:50:LYS:HD2	1:A:92:TYR:CE2	2.22	0.74
1:A:139:ILE:HG21	1:A:301:ILE:HG12	1.70	0.74
1:A:911:GLY:HA2	1:A:1019:GLY:N	2.03	0.74
1:A:669:ARG:HH12	1:A:672:MET:HE3	1.42	0.74
1:A:995:LEU:CD1	1:A:1016:MET:HB3	2.18	0.74
1:A:489:ALA:O	1:A:493:ALA:N	2.21	0.74
1:A:1016:MET:N	1:A:1016:MET:HE3	2.02	0.73
1:A:55:GLY:O	1:A:56:GLN:HG2	1.89	0.73
1:A:178:ALA:HB2	1:A:614:THR:OG1	1.87	0.73
1:A:969:LEU:HD12	1:A:970:ASP:N	2.04	0.73
1:A:557:VAL:HB	1:A:922:LEU:HD21	1.71	0.73
1:A:906:PHE:HZ	1:A:1025:LEU:HD22	1.53	0.73
1:A:66:THR:HG21	1:A:86:SER:HB3	1.69	0.73
1:A:141:GLU:HB2	1:A:325:TYR:HB3	1.71	0.73
1:A:876:VAL:CG2	1:A:877:PRO:HD3	2.18	0.73
1:A:751:VAL:O	1:A:777:ARG:HD2	1.89	0.73
1:A:397:ALA:O	1:A:400:VAL:HB	1.89	0.73
1:A:550:VAL:CG2	1:A:912:ILE:HD13	2.20	0.72
1:A:844:ILE:HG13	1:A:848:VAL:CG2	2.20	0.72
1:A:27:GLY:O	1:A:31:ILE:HG22	1.89	0.72
1:A:370:LEU:CD1	1:A:400:VAL:HG13	2.17	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:18:MET:HA	1:A:21:LEU:HD13	1.69	0.72
1:A:26:TRP:HZ2	1:A:379:ILE:HG21	1.53	0.72
1:A:972:ALA:HA	1:A:975:HIS:HD2	1.55	0.71
1:A:66:THR:HB	1:A:91:SER:OG	1.89	0.71
1:A:62:GLU:HG3	1:A:86:SER:OG	1.91	0.71
1:A:249:LYS:C	1:A:257:VAL:HG23	2.14	0.71
1:A:728:ILE:HG21	1:A:740:VAL:HG12	1.72	0.71
1:A:783:LEU:HD23	1:A:804:ILE:HD12	1.73	0.71
1:A:616:THR:HG23	1:A:673:LEU:HD11	1.72	0.71
1:A:573:MET:HE2	1:A:668:ASN:OD1	1.91	0.70
1:A:633:GLN:HA	1:A:633:GLN:OE1	1.90	0.70
1:A:866:GLU:O	1:A:870:HIS:HB3	1.90	0.70
1:A:987:THR:O	1:A:990:VAL:HG23	1.91	0.70
1:A:887:LEU:CD2	1:A:900:ILE:HD12	2.21	0.70
1:A:26:TRP:CD1	1:A:26:TRP:C	2.69	0.70
1:A:249:LYS:HB2	1:A:257:VAL:HG21	1.69	0.70
1:A:815:THR:HG22	1:A:820:PRO:HA	1.74	0.70
1:A:908:LEU:O	1:A:912:ILE:HG22	1.91	0.70
1:A:391:MET:HE1	1:A:474:LEU:O	1.91	0.70
1:A:722:ARG:HH11	1:A:808:THR:HG23	1.56	0.70
1:A:833:MET:H	1:A:833:MET:CE	2.05	0.70
1:A:201:ILE:HD11	1:A:262:VAL:HG11	1.73	0.70
1:A:462:ILE:CG2	1:A:463:PRO:HD3	2.21	0.70
1:A:940:PHE:HA	1:A:943:VAL:HG12	1.74	0.70
1:A:376:ILE:CD1	1:A:488:GLY:HA3	2.19	0.69
1:A:790:THR:HG21	1:A:794:GLN:NE2	2.06	0.69
1:A:891:PHE:CE2	1:A:946:MET:HG2	2.25	0.69
1:A:202:SER:H	1:A:205:GLU:HG3	1.58	0.69
1:A:492:LEU:O	1:A:495:VAL:HG12	1.93	0.69
1:A:728:ILE:HG21	1:A:740:VAL:CG1	2.22	0.69
1:A:475:PHE:HZ	1:A:928:THR:HG1	1.40	0.69
1:A:600:PRO:CB	1:A:637:ARG:HH12	2.04	0.69
1:A:923:SER:H	1:A:926:THR:HG23	1.58	0.69
1:A:930:PHE:HD1	1:A:1015:PRO:HB3	1.57	0.69
1:A:840:LEU:O	1:A:844:ILE:HG22	1.92	0.69
1:A:904:VAL:HG13	1:A:905:PRO:HD3	1.74	0.69
1:A:349:VAL:HA	1:A:990:VAL:HG12	1.74	0.69
1:A:414:ALA:HB1	1:A:501:MET:HE1	1.73	0.69
1:A:417:ARG:CZ	1:A:442:ALA:HB1	2.22	0.69
1:A:907:ALA:HA	1:A:1022:THR:CG2	2.23	0.69
1:A:573:MET:O	1:A:661:LEU: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:19:GLY:O	1:A:22:PHE:HB2	1.93	0.68
1:A:572:TYR:C	1:A:572:TYR:CD1	2.68	0.68
1:A:464:ILE:HD11	1:A:475:PHE:HD1	1.59	0.68
1:A:669:ARG:HA	1:A:669:ARG:HE	1.58	0.68
1:A:874:LEU:O	1:A:877:PRO:HD2	1.93	0.68
1:A:26:TRP:HE1	1:A:379:ILE:CG1	2.06	0.68
1:A:185:LYS:HB3	1:A:766:TYR:CD2	2.28	0.68
1:A:476:GLY:O	1:A:479:ALA:HB3	1.93	0.68
1:A:552:TRP:CD1	1:A:552:TRP:C	2.71	0.68
1:A:420:GLU:HG3	1:A:421:TRP:CZ3	2.28	0.68
1:A:497:ILE:HG12	1:A:498:PRO:CD	2.24	0.68
1:A:784:ARG:HG3	1:A:784:ARG:NH2	2.09	0.68
1:A:213:SER:CB	1:A:246:ILE:HD11	2.23	0.67
1:A:497:ILE:HG12	1:A:498:PRO:HD3	1.75	0.67
1:A:873:LYS:O	1:A:876:VAL:HG22	1.95	0.67
1:A:600:PRO:HB2	1:A:637:ARG:NH1	2.09	0.67
1:A:18:MET:HA	1:A:21:LEU:CD1	2.23	0.67
1:A:239:THR:OG1	1:A:242:ASP:HB2	1.95	0.67
1:A:496:VAL:O	1:A:500:LEU:HB2	1.94	0.67
1:A:26:TRP:NE1	1:A:379:ILE:HG12	2.08	0.67
1:A:763:ILE:HG12	1:A:763:ILE:O	1.94	0.67
1:A:138:TRP:CE3	1:A:288:VAL:HG21	2.30	0.67
1:A:906:PHE:O	1:A:909:VAL:HB	1.94	0.67
1:A:987:THR:O	1:A:991:ILE:HD13	1.95	0.67
1:A:459:LEU:HD21	1:A:882:ILE:HG12	1.76	0.67
1:A:489:ALA:HA	1:A:492:LEU:HB3	1.76	0.67
1:A:871:LYS:O	1:A:875:MET:HG2	1.95	0.66
1:A:979:LEU:HA	1:A:982:ARG:HH22	1.60	0.66
1:A:105:TRP:CD1	1:A:106:ALA:N	2.63	0.66
1:A:202:SER:N	1:A:205:GLU:HG3	2.10	0.66
1:A:918:MET:SD	1:A:999:LEU:HG	2.35	0.66
1:A:929:GLY:C	1:A:1016:MET:HE1	2.20	0.66
1:A:475:PHE:CE1	1:A:478:LEU:HD22	2.30	0.66
1:A:996:LEU:N	1:A:997:PRO:HD2	2.10	0.66
1:A:292:ARG:HH21	1:A:292:ARG:CG	2.08	0.66
1:A:173:ASP:CG	1:A:295:LYS:HD3	2.20	0.66
1:A:568:GLY:O	1:A:630:LEU:HB2	1.96	0.66
1:A:610:GLY:HA2	1:A:620:PRO:O	1.96	0.65
1:A:991:ILE:CG2	1:A:1020:MET:HG2	2.26	0.65
1:A:122:PRO:HD2	1:A:125:VAL:HG21	1.78	0.65
1:A:403:MET:CE	1:A:486:MET:HA	2.26	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:727:GLU:O	1:A:802:ALA:HB1	1.96	0.65
1:A:614:THR:HG22	1:A:616:THR:N	2.04	0.65
1:A:906:PHE:CD1	1:A:906:PHE:C	2.75	0.65
1:A:102:ASP:HB3	1:A:105:TRP:HB3	1.79	0.65
1:A:103:PRO:O	1:A:106:ALA:HB3	1.97	0.65
1:A:458:THR:CG2	1:A:486:MET:HB2	2.26	0.65
1:A:729:ASN:HD22	1:A:732:LYS:CE	2.09	0.65
1:A:118:GLN:O	1:A:121:LEU:HD12	1.96	0.65
1:A:450:LEU:HD21	1:A:493:ALA:HB1	1.78	0.65
1:A:988:VAL:O	1:A:992:ILE:HG12	1.96	0.65
1:A:1031:ILE:N	1:A:1032:PRO:HD2	2.12	0.65
1:A:1028:LEU:HB2	1:A:1029:PHE:CD2	2.32	0.64
1:A:995:LEU:HD11	1:A:1016:MET:HB3	1.79	0.64
1:A:139:ILE:CD1	1:A:291:LEU:HB2	2.27	0.64
1:A:187:TYR:HE2	1:A:759:THR:HG1	1.45	0.64
1:A:352:VAL:HG11	1:A:989:ALA:HB3	1.78	0.64
1:A:884:PHE:HA	1:A:887:LEU:HD12	1.79	0.64
1:A:729:ASN:HD22	1:A:732:LYS:HE3	1.62	0.64
1:A:960:ASN:N	1:A:961:PRO:CD	2.60	0.64
1:A:922:LEU:HD23	1:A:922:LEU:H	1.63	0.64
1:A:403:MET:HE3	1:A:489:ALA:HB3	1.79	0.64
1:A:914:LEU:HD23	1:A:1014:ALA:O	1.98	0.64
1:A:301:ILE:HG22	1:A:305:LYS:HE3	1.80	0.64
1:A:789:LEU:HD21	1:A:793:LYS:HA	1.80	0.64
1:A:877:PRO:O	1:A:881:MET:HG2	1.97	0.64
1:A:461:PHE:CE1	1:A:479:ALA:HA	2.33	0.64
1:A:118:GLN:HA	1:A:118:GLN:NE2	2.12	0.63
1:A:178:ALA:HB3	1:A:288:VAL:HG13	1.80	0.63
1:A:324:THR:HG21	1:A:606:PHE:CD2	2.34	0.63
1:A:333:ARG:HH12	1:A:568:GLY:CA	2.10	0.63
1:A:690:LEU:HD22	1:A:693:ILE:HD11	1.79	0.63
1:A:920:PHE:HD1	1:A:1011:ARG:NH2	1.95	0.63
1:A:450:LEU:HD21	1:A:493:ALA:CB	2.29	0.63
1:A:812:MET:HG2	1:A:813:LEU:N	2.13	0.63
1:A:69:LEU:CD1	1:A:117:VAL:HG11	2.28	0.63
1:A:912:ILE:O	1:A:915:LEU:HG	1.97	0.63
1:A:400:VAL:O	1:A:404:VAL:HG23	1.99	0.63
1:A:876:VAL:O	1:A:880:LEU:HG	1.99	0.63
1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD2	1.81	0.63
1:A:328:SER:O	1:A:331:ILE:HB	1.99	0.63
1:A:360:VAL:C	1:A:362:SER:H	2.07	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:461:PHE:CE2	1:A:464:ILE:HG21	2.33	0.63
1:A:482:LYS:O	1:A:486:MET:HG2	1.97	0.63
1:A:980:ARG:CZ	1:A:1028:LEU:HD23	2.29	0.63
1:A:916:TRP:N	1:A:916:TRP:HE3	1.97	0.63
1:A:1002:THR:HB	1:A:1006:SER:HB2	1.81	0.63
1:A:496:VAL:CG1	1:A:500:LEU:HD12	2.29	0.62
1:A:728:ILE:HA	1:A:802:ALA:HB2	1.81	0.62
1:A:975:HIS:O	1:A:978:VAL:HG12	1.98	0.62
1:A:649:LEU:HB3	1:A:662:TRP:CH2	2.35	0.62
1:A:732:LYS:HD2	1:A:800:ASP:O	1.99	0.62
1:A:887:LEU:HD21	1:A:900:ILE:HD12	1.81	0.62
1:A:240:LEU:HD23	1:A:265:VAL:CG1	2.26	0.62
1:A:562:LEU:H	1:A:923:SER:CB	2.12	0.62
1:A:72:THR:HG22	1:A:113:TYR:HB3	1.82	0.62
1:A:597:MET:HE1	1:A:603:ALA:O	1.99	0.62
1:A:461:PHE:HE1	1:A:479:ALA:O	1.81	0.62
1:A:870:HIS:ND1	1:A:870:HIS:C	2.56	0.62
1:A:920:PHE:CE1	1:A:1010:SER:HB3	2.34	0.62
1:A:249:LYS:HB3	1:A:257:VAL:HG23	1.75	0.62
1:A:357:LEU:HD21	1:A:411:ILE:HG23	1.81	0.62
1:A:550:VAL:HG11	1:A:909:VAL:HG22	1.81	0.62
1:A:416:LYS:HD3	1:A:417:ARG:N	2.15	0.62
1:A:968:LYS:HA	1:A:971:GLU:OE2	1.99	0.61
1:A:995:LEU:HD13	1:A:1016:MET:HB3	1.82	0.61
1:A:972:ALA:HA	1:A:975:HIS:CD2	2.34	0.61
1:A:1014:ALA:HB3	1:A:1015:PRO:HD3	1.82	0.61
1:A:249:LYS:CB	1:A:257:VAL:HG23	2.28	0.61
1:A:454:LEU:HD12	1:A:490:ALA:HA	1.82	0.61
1:A:910:GLY:HA3	1:A:1022:THR:OG1	2.01	0.61
1:A:353:CYS:SG	1:A:362:SER:CB	2.89	0.61
1:A:560:GLU:C	1:A:561:PHE:HD2	2.09	0.61
1:A:991:ILE:O	1:A:995:LEU:HD12	2.00	0.61
1:A:249:LYS:CA	1:A:257:VAL:HG23	2.31	0.61
1:A:517:LEU:HD13	1:A:517:LEU:H	1.66	0.61
1:A:920:PHE:CZ	1:A:999:LEU:HD11	2.36	0.61
1:A:389:ASN:O	1:A:393:LEU:HG	2.01	0.61
1:A:457:ILE:HG23	1:A:935:GLY:HA3	1.83	0.61
1:A:458:THR:HG22	1:A:486:MET:CB	2.29	0.61
1:A:560:GLU:C	1:A:561:PHE:CD2	2.79	0.61
1:A:614:THR:CG2	1:A:616:THR:H	2.07	0.61
1:A:40:PRO:CB	1:A:389:ASN:HD22	2.13	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:759:THR:HG22	1:A:768:ILE:HD11	1.81	0.60
1:A:891:PHE:O	1:A:892:ARG:HB3	2.00	0.60
1:A:945:LEU:HD11	1:A:949:ARG:HG3	1.82	0.60
1:A:187:TYR:O	1:A:768:ILE:HA	2.02	0.60
1:A:109:ARG:O	1:A:112:GLU:HB2	2.01	0.60
1:A:189:VAL:HG22	1:A:265:VAL:HG22	1.81	0.60
1:A:349:VAL:HG13	1:A:990:VAL:HG11	1.82	0.60
1:A:719:GLU:HG3	1:A:719:GLU:O	1.99	0.60
1:A:1028:LEU:C	1:A:1029:PHE:HD2	2.10	0.60
1:A:980:ARG:HH22	1:A:1027:SER:CB	2.15	0.60
1:A:42:LEU:HD21	1:A:473:ARG:HB3	1.82	0.60
1:A:5:ILE:HA	1:A:8:ARG:NH1	2.17	0.60
1:A:450:LEU:HD23	1:A:451:PHE:N	2.17	0.60
1:A:439:ILE:O	1:A:442:ALA:HB3	2.02	0.60
1:A:249:LYS:H	1:A:257:VAL:HG23	1.67	0.60
1:A:324:THR:HG21	1:A:606:PHE:CG	2.37	0.60
1:A:294:GLY:O	1:A:295:LYS:HG3	2.02	0.59
1:A:438:VAL:HA	1:A:441:ASP:OD2	2.01	0.59
1:A:183:VAL:HG23	1:A:272:ARG:HH22	1.67	0.59
1:A:669:ARG:NE	1:A:669:ARG:CA	2.63	0.59
1:A:991:ILE:HG21	1:A:1020:MET:CG	2.29	0.59
1:A:435:ARG:O	1:A:438:VAL:HG12	2.02	0.59
1:A:692:ASP:O	1:A:696:MET:HG2	2.03	0.59
1:A:20:ALA:O	1:A:23:LEU:HB2	2.02	0.59
1:A:179:SER:O	1:A:613:GLU:HB2	2.02	0.59
1:A:252:GLU:C	1:A:254:GLY:N	2.56	0.59
1:A:906:PHE:HE1	1:A:1022:THR:O	1.86	0.59
1:A:933:LEU:C	1:A:933:LEU:HD23	2.25	0.59
1:A:959:ASN:HB2	1:A:968:LYS:HG3	1.85	0.59
1:A:34:THR:HB	1:A:35:PRO:HD2	1.85	0.59
1:A:609:THR:HG22	1:A:621:LEU:O	2.03	0.59
1:A:186:GLU:OE2	1:A:769:ASN:HB2	2.02	0.59
1:A:417:ARG:HB3	1:A:439:ILE:HG23	1.85	0.59
1:A:922:LEU:H	1:A:922:LEU:CD2	2.15	0.59
1:A:390:ILE:HD12	1:A:391:MET:N	2.16	0.59
1:A:464:ILE:HD13	1:A:464:ILE:C	2.27	0.59
1:A:153:LEU:HD21	1:A:182:GLY:HA2	1.84	0.59
1:A:275:ILE:HD13	1:A:586:ALA:HB2	1.84	0.59
1:A:745:LEU:HD12	1:A:745:LEU:O	2.03	0.58
1:A:912:ILE:HB	1:A:930:PHE:HZ	1.68	0.58
1:A:152:ASP:HB3	1:A:155:ASP:HB2	1.84	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:15:LEU:HD23	1:A:15:LEU:C	2.27	0.58
1:A:980:ARG:NH2	1:A:1028:LEU:HD23	2.18	0.58
1:A:996:LEU:N	1:A:997:PRO:CD	2.66	0.58
1:A:972:ALA:O	1:A:975:HIS:CD2	2.56	0.58
1:A:602:VAL:HA	1:A:630:LEU:HD23	1.86	0.58
1:A:180:VAL:HG12	1:A:286:GLY:O	2.04	0.58
1:A:188:GLN:HG3	1:A:769:ASN:HB3	1.85	0.58
1:A:559:GLY:O	1:A:560:GLU:HB2	2.02	0.58
1:A:786:LEU:O	1:A:797:THR:HA	2.04	0.58
1:A:14:PHE:O	1:A:18:MET:HG2	2.04	0.58
1:A:908:LEU:HD23	1:A:933:LEU:HD22	1.85	0.58
1:A:7:ARG:O	1:A:10:VAL:HG22	2.03	0.58
1:A:65:VAL:HG22	1:A:66:THR:N	2.18	0.58
1:A:493:ALA:HA	1:A:496:VAL:HG23	1.85	0.58
1:A:520:PHE:CD1	1:A:520:PHE:C	2.82	0.58
1:A:22:PHE:O	1:A:26:TRP:HB3	2.04	0.58
1:A:48:ILE:HD12	1:A:131:PRO:HD2	1.85	0.58
1:A:736:TYR:HE1	1:A:796:ILE:HG21	1.69	0.58
1:A:292:ARG:NH2	1:A:292:ARG:HG3	2.19	0.57
1:A:376:ILE:HD13	1:A:488:GLY:CA	2.24	0.57
1:A:190:VAL:HG12	1:A:264:LYS:O	2.04	0.57
1:A:420:GLU:HG3	1:A:421:TRP:CE3	2.38	0.57
1:A:433:LYS:HA	1:A:436:TRP:NE1	2.19	0.57
1:A:292:ARG:HH21	1:A:292:ARG:HG3	1.68	0.57
1:A:315:LEU:HD11	1:A:321:ILE:HD11	1.86	0.57
1:A:346:PHE:CD1	1:A:347:ILE:N	2.72	0.57
1:A:138:TRP:HE1	1:A:616:THR:HG21	1.69	0.57
1:A:569:ASP:OD2	1:A:629:GLN:HG2	2.04	0.57
1:A:572:TYR:HD1	1:A:573:MET:N	2.02	0.57
1:A:333:ARG:HA	1:A:336:ASP:OD1	2.05	0.57
1:A:550:VAL:O	1:A:553:PRO:HD2	2.03	0.57
1:A:26:TRP:HD1	1:A:27:GLY:N	2.03	0.57
1:A:61:VAL:O	1:A:65:VAL:HG13	2.04	0.57
1:A:38:ALA:O	1:A:39:LEU:HB2	2.05	0.57
1:A:380:VAL:CG1	1:A:484:TYR:CD1	2.88	0.57
1:A:324:THR:HG23	1:A:606:PHE:HB2	1.87	0.57
1:A:948:LEU:HD12	1:A:948:LEU:C	2.30	0.57
1:A:50:LYS:CD	1:A:92:TYR:HE2	2.17	0.56
1:A:417:ARG:NH2	1:A:442:ALA:HB1	2.20	0.56
1:A:145:VAL:HG12	1:A:284:VAL:HG21	1.87	0.56
1:A:365:VAL:O	1:A:369:SER:HB3	2.03	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:522:ILE:HG23	1:A:981:VAL:HG21	1.87	0.56
1:A:608:LYS:HE2	1:A:625:GLU:HB3	1.87	0.56
1:A:968:LYS:O	1:A:968:LYS:HD3	2.05	0.56
1:A:245:HIS:CE1	1:A:260:ARG:NH1	2.73	0.56
1:A:562:LEU:H	1:A:923:SER:HB2	1.71	0.56
1:A:641:THR:O	1:A:645:ILE:HG12	2.06	0.56
1:A:690:LEU:O	1:A:693:ILE:HG12	2.05	0.56
1:A:345:GLU:O	1:A:349:VAL:HG23	2.05	0.56
1:A:728:ILE:CG1	1:A:743:VAL:HG11	2.34	0.56
1:A:945:LEU:CD1	1:A:949:ARG:HG3	2.36	0.56
1:A:637:ARG:HG3	1:A:638:PRO:HD2	1.87	0.56
1:A:249:LYS:HB3	1:A:257:VAL:HG22	1.81	0.56
1:A:412:GLU:HG2	1:A:983:PRO:HB3	1.88	0.56
1:A:790:THR:CG2	1:A:794:GLN:HE21	2.16	0.56
1:A:26:TRP:HZ2	1:A:379:ILE:HG23	1.67	0.56
1:A:241:ASP:HA	1:A:244:ASN:HD22	1.71	0.56
1:A:736:TYR:CD1	1:A:796:ILE:HD13	2.41	0.56
1:A:918:MET:SD	1:A:920:PHE:HE2	2.29	0.56
1:A:949:ARG:HH22	1:A:952:ILE:HD12	1.71	0.56
1:A:343:LEU:O	1:A:347:ILE:HG22	2.06	0.56
1:A:482:LYS:HB3	1:A:486:MET:HE2	1.88	0.56
1:A:669:ARG:HE	1:A:669:ARG:CA	2.18	0.56
1:A:50:LYS:HG3	1:A:51:THR:N	2.21	0.56
1:A:343:LEU:HD12	1:A:343:LEU:C	2.31	0.56
1:A:703:VAL:O	1:A:707:VAL:HG12	2.05	0.56
1:A:920:PHE:CE2	1:A:999:LEU:HD11	2.41	0.56
1:A:237:LEU:HD23	1:A:243:PHE:CZ	2.41	0.56
1:A:50:LYS:HB2	1:A:92:TYR:CE2	2.40	0.55
1:A:452:ILE:HD11	1:A:942:VAL:HG11	1.89	0.55
1:A:374:LEU:HD11	1:A:378:PHE:CZ	2.42	0.55
1:A:50:LYS:HB2	1:A:92:TYR:CD2	2.41	0.55
1:A:553:PRO:HB3	1:A:916:TRP:CZ2	2.41	0.55
1:A:932:ALA:HB3	1:A:1016:MET:SD	2.46	0.55
1:A:786:LEU:HD22	1:A:787:PRO:HD2	1.88	0.55
1:A:360:VAL:HG12	1:A:362:SER:N	2.21	0.55
1:A:569:ASP:O	1:A:570:LEU:HD23	2.06	0.55
1:A:952:ILE:O	1:A:957:SER:HB3	2.07	0.55
1:A:83:ARG:HH22	1:A:684:LYS:HE2	1.70	0.55
1:A:360:VAL:HG13	1:A:361:ARG:N	2.22	0.55
1:A:549:THR:HG23	1:A:913:TRP:NE1	2.21	0.55
1:A:686:SER:O	1:A:854:THR:HG23	2.06	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:906:PHE:CE1	1:A:1022:THR:HG23	2.41	0.55
1:A:213:SER:HB2	1:A:246:ILE:CD1	2.36	0.55
1:A:384:GLN:HE22	1:A:480:PHE:HD2	1.54	0.55
1:A:440:THR:HA	1:A:443:SER:OG	2.07	0.55
1:A:465:PHE:HZ	1:A:480:PHE:HA	1.72	0.55
1:A:380:VAL:HG11	1:A:484:TYR:CD1	2.42	0.55
1:A:896:GLU:O	1:A:900:ILE:HG22	2.07	0.55
1:A:915:LEU:HB2	1:A:916:TRP:CE3	2.42	0.55
1:A:191:ILE:HD11	1:A:770:LEU:HD11	1.87	0.54
1:A:277:GLU:OE1	1:A:590:GLN:HG3	2.07	0.54
1:A:341:LYS:HD3	1:A:341:LYS:C	2.32	0.54
1:A:390:ILE:CD1	1:A:391:MET:HG3	2.37	0.54
1:A:1031:ILE:N	1:A:1032:PRO:CD	2.70	0.54
1:A:408:ILE:HD11	1:A:986:MET:HB3	1.89	0.54
1:A:475:PHE:CZ	1:A:928:THR:OG1	2.58	0.54
1:A:526:HIS:HA	1:A:529:LEU:HD23	1.89	0.54
1:A:599:VAL:O	1:A:602:VAL:HG22	2.07	0.54
1:A:631:LYS:HD2	1:A:635:GLN:OE1	2.07	0.54
1:A:390:ILE:O	1:A:394:GLY:N	2.41	0.54
1:A:453:SER:O	1:A:456:ILE:HG22	2.07	0.54
1:A:684:LYS:HE3	1:A:859:SER:OG	2.07	0.54
1:A:911:GLY:HA2	1:A:1018:GLY:C	2.33	0.54
1:A:341:LYS:HD3	1:A:342:LEU:N	2.21	0.54
1:A:786:LEU:HD22	1:A:787:PRO:CD	2.38	0.54
1:A:153:LEU:CD2	1:A:182:GLY:HA2	2.37	0.54
1:A:249:LYS:N	1:A:257:VAL:HG23	2.23	0.54
1:A:703:VAL:HA	1:A:706:THR:HG22	1.88	0.54
1:A:143:ALA:HB2	1:A:606:PHE:CE1	2.43	0.54
1:A:405:ASP:OD2	1:A:939:GLU:CD	2.50	0.54
1:A:554:LEU:O	1:A:557:VAL:HG13	2.06	0.54
1:A:683:ILE:HB	1:A:824:ILE:HD12	1.88	0.54
1:A:861:GLN:O	1:A:864:LEU:HB3	2.08	0.54
1:A:557:VAL:HB	1:A:922:LEU:CD2	2.35	0.54
1:A:810:PRO:HB3	1:A:813:LEU:HD11	1.88	0.54
1:A:163:PHE:O	1:A:167:GLU:HG2	2.07	0.54
1:A:403:MET:HE1	1:A:486:MET:HA	1.88	0.54
1:A:497:ILE:HA	1:A:500:LEU:HB3	1.89	0.54
1:A:601:GLU:OE1	1:A:645:ILE:HG13	2.07	0.54
1:A:975:HIS:ND1	1:A:976:GLY:N	2.55	0.54
1:A:298:ARG:C	1:A:298:ARG:HD2	2.32	0.54
1:A:144:LEU:HD12	1:A:156:LEU:HD22	1.90	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:929:GLY:O	1:A:1016:MET:HE1	2.06	0.54
1:A:587:SER:C	1:A:589:LEU:H	2.16	0.53
1:A:790:THR:CG2	1:A:791:PRO:HD2	2.38	0.53
1:A:881:MET:O	1:A:885:VAL:HG23	2.08	0.53
1:A:887:LEU:CD1	1:A:900:ILE:HD12	2.38	0.53
1:A:390:ILE:HD12	1:A:391:MET:HG3	1.89	0.53
1:A:559:GLY:O	1:A:921:HIS:CG	2.60	0.53
1:A:925:ALA:CB	1:A:1011:ARG:HB2	2.38	0.53
1:A:292:ARG:HH21	1:A:292:ARG:CB	2.21	0.53
1:A:5:ILE:HG23	1:A:8:ARG:NH2	2.24	0.53
1:A:18:MET:O	1:A:21:LEU:HD22	2.09	0.53
1:A:31:ILE:HB	1:A:378:PHE:CD2	2.42	0.53
1:A:83:ARG:CZ	1:A:816:GLU:OE1	2.57	0.53
1:A:244:ASN:HB3	1:A:260:ARG:HB3	1.90	0.53
1:A:270:GLU:O	1:A:271:MET:C	2.51	0.53
1:A:549:THR:O	1:A:553:PRO:CD	2.57	0.53
1:A:388:ALA:HB1	1:A:393:LEU:HD21	1.89	0.53
1:A:461:PHE:HE1	1:A:479:ALA:CA	2.21	0.53
1:A:173:ASP:HB3	1:A:295:LYS:HD3	1.91	0.53
1:A:841:GLN:HG3	1:A:842:LYS:N	2.24	0.53
1:A:914:LEU:CD2	1:A:1017:ILE:HB	2.39	0.53
1:A:906:PHE:HD1	1:A:907:ALA:N	2.07	0.53
1:A:182:GLY:CA	1:A:285:ALA:HB2	2.38	0.53
1:A:979:LEU:HD12	1:A:980:ARG:N	2.24	0.53
1:A:373:GLY:O	1:A:376:ILE:HG23	2.08	0.53
1:A:413:ASN:OD1	1:A:443:SER:HA	2.08	0.53
1:A:992:ILE:HD11	1:A:1020:MET:HB3	1.90	0.53
1:A:384:GLN:NE2	1:A:480:PHE:CD2	2.76	0.53
1:A:522:ILE:CG2	1:A:526:HIS:NE2	2.65	0.53
1:A:638:PRO:O	1:A:639:GLY:C	2.52	0.53
1:A:789:LEU:CD2	1:A:793:LYS:HA	2.38	0.53
1:A:823:TRP:CD1	1:A:823:TRP:N	2.76	0.53
1:A:898:LEU:C	1:A:898:LEU:HD23	2.34	0.53
1:A:327:ARG:NE	1:A:666:ILE:HD11	2.23	0.52
1:A:408:ILE:HG22	1:A:409:VAL:HG23	1.91	0.52
1:A:525:TYR:OH	1:A:977:ALA:HB1	2.10	0.52
1:A:410:MET:CE	1:A:443:SER:HB3	2.38	0.52
1:A:580:ILE:HD11	1:A:585:ALA:CB	2.37	0.52
1:A:631:LYS:HG3	1:A:632:PRO:HD2	1.90	0.52
1:A:920:PHE:CZ	1:A:999:LEU:CD1	2.92	0.52
1:A:982:ARG:N	1:A:983:PRO:HD2	2.24	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:184:VAL:HB	1:A:270:GLU:HB3	1.92	0.52
1:A:356:PHE:CD2	1:A:986:MET:HB2	2.44	0.52
1:A:526:HIS:HB3	1:A:974:TYR:CE1	2.45	0.52
1:A:773:PRO:HD2	1:A:776:TRP:CD1	2.44	0.52
1:A:998:ILE:HD12	1:A:998:ILE:O	2.10	0.52
1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:CD	2.16	0.52
1:A:213:SER:CB	1:A:246:ILE:CD1	2.87	0.52
1:A:686:SER:HA	1:A:821:THR:HG22	1.91	0.52
1:A:874:LEU:C	1:A:877:PRO:HD2	2.34	0.52
1:A:876:VAL:HA	1:A:879:THR:HG22	1.90	0.52
1:A:25:ILE:O	1:A:29:TRP:HE3	1.92	0.52
1:A:277:GLU:OE2	1:A:590:GLN:HA	2.09	0.52
1:A:377:ALA:HA	1:A:380:VAL:HG12	1.90	0.52
1:A:549:THR:O	1:A:553:PRO:HD3	2.09	0.52
1:A:954:ALA:O	1:A:958:LEU:HD23	2.09	0.52
1:A:407:ALA:O	1:A:411:ILE:HB	2.10	0.52
1:A:461:PHE:HE2	1:A:928:THR:HG23	1.75	0.52
1:A:16:VAL:HG21	1:A:498:PRO:CB	2.35	0.52
1:A:590:GLN:HG2	1:A:594:LYS:HE3	1.92	0.52
1:A:569:ASP:HB3	1:A:628:ILE:O	2.09	0.52
1:A:580:ILE:HG13	1:A:581:SER:O	2.10	0.52
1:A:726:VAL:HG12	1:A:728:ILE:HD12	1.92	0.52
1:A:758:GLU:HG2	1:A:767:PRO:CA	2.34	0.52
1:A:398:ILE:C	1:A:398:ILE:HD13	2.35	0.52
1:A:493:ALA:HA	1:A:496:VAL:CG2	2.40	0.52
1:A:642:MET:O	1:A:646:ILE:HG12	2.10	0.52
1:A:701:GLU:HA	1:A:713:ALA:CB	2.40	0.52
1:A:897:ALA:O	1:A:900:ILE:HG23	2.09	0.52
1:A:984:LYS:NZ	1:A:987:THR:HG21	2.25	0.52
1:A:69:LEU:HD13	1:A:117:VAL:HG11	1.90	0.51
1:A:199:TYR:N	1:A:199:TYR:CD2	2.78	0.51
1:A:916:TRP:N	1:A:916:TRP:CE3	2.78	0.51
1:A:947:TYR:CE1	1:A:979:LEU:HD13	2.45	0.51
1:A:40:PRO:HB3	1:A:389:ASN:ND2	2.24	0.51
1:A:51:THR:HG23	1:A:125:VAL:HG12	1.92	0.51
1:A:162:TRP:CD1	1:A:763:ILE:O	2.64	0.51
1:A:499:ILE:HG22	1:A:503:TYR:HE1	1.74	0.51
1:A:97:PHE:HZ	1:A:110:VAL:HG23	1.75	0.51
1:A:252:GLU:CD	1:A:252:GLU:H	2.19	0.51
1:A:792:MET:HB2	1:A:794:GLN:HG3	1.92	0.51
1:A:136:VAL:O	1:A:327:ARG:NH1	2.43	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:345:GLU:OE2	1:A:994:GLY:HA3	2.11	0.51
1:A:518:ASN:ND2	1:A:982:ARG:HG2	2.24	0.51
1:A:655:LEU:HB3	1:A:656:PRO:HD2	1.91	0.51
1:A:34:THR:CG2	1:A:382:HIS:CE1	2.90	0.51
1:A:696:MET:CE	1:A:851:LYS:HG3	2.37	0.51
1:A:762:GLY:C	1:A:764:ALA:N	2.68	0.51
1:A:914:LEU:HD22	1:A:1017:ILE:HB	1.92	0.51
1:A:325:TYR:C	1:A:325:TYR:CD2	2.88	0.51
1:A:995:LEU:CB	1:A:1017:ILE:HG13	2.41	0.51
1:A:45:VAL:CG1	1:A:97:PHE:HB2	2.40	0.51
1:A:56:GLN:HB3	1:A:60:ILE:HD12	1.91	0.51
1:A:74:LEU:HD22	1:A:817:ASN:HB3	1.93	0.51
1:A:279:ASN:HD22	1:A:279:ASN:N	2.09	0.51
1:A:410:MET:CE	1:A:497:ILE:HG21	2.41	0.51
1:A:680:PRO:HA	1:A:861:GLN:HB2	1.92	0.51
1:A:736:TYR:CE1	1:A:796:ILE:HD13	2.46	0.51
1:A:185:LYS:O	1:A:767:PRO:HD2	2.11	0.51
1:A:377:ALA:O	1:A:380:VAL:HG12	2.10	0.51
1:A:448:PRO:O	1:A:452:ILE:HG12	2.11	0.51
1:A:460:SER:O	1:A:463:PRO:HD2	2.11	0.51
1:A:900:ILE:HD13	1:A:901:ILE:HG13	1.93	0.51
1:A:461:PHE:CE1	1:A:479:ALA:CA	2.93	0.51
1:A:669:ARG:HH22	1:A:672:MET:CB	2.16	0.51
1:A:307:LYS:O	1:A:311:LEU:HG	2.11	0.51
1:A:677:ILE:HG23	1:A:825:TYR:CE1	2.46	0.51
1:A:687:GLY:O	1:A:820:PRO:HD2	2.11	0.51
1:A:408:ILE:CD1	1:A:986:MET:HB3	2.41	0.50
1:A:552:TRP:CB	1:A:553:PRO:HD3	2.41	0.50
1:A:681:ILE:HB	1:A:826:ILE:HD13	1.93	0.50
1:A:469:GLY:O	1:A:473:ARG:HB2	2.12	0.50
1:A:910:GLY:HA3	1:A:1022:THR:CB	2.41	0.50
1:A:173:ASP:CB	1:A:295:LYS:HD3	2.41	0.50
1:A:60:ILE:O	1:A:64:GLN:HB2	2.11	0.50
1:A:182:GLY:HA3	1:A:285:ALA:HB2	1.92	0.50
1:A:461:PHE:CZ	1:A:479:ALA:HA	2.46	0.50
1:A:891:PHE:HE2	1:A:946:MET:CG	2.18	0.50
1:A:964:PHE:HD2	1:A:965:SER:N	2.08	0.50
1:A:97:PHE:CE1	1:A:106:ALA:HB1	2.47	0.50
1:A:450:LEU:HD23	1:A:450:LEU:C	2.36	0.50
1:A:573:MET:CE	1:A:668:ASN:CG	2.84	0.50
1:A:944:MET:CE	1:A:980:ARG:HG2	2.41	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:178:ALA:HB1	1:A:612:ALA:O	2.12	0.50
1:A:474:LEU:O	1:A:477:PRO:HD2	2.11	0.50
1:A:762:GLY:O	1:A:764:ALA:N	2.45	0.50
1:A:533:LEU:CD2	1:A:973:LEU:HD22	2.42	0.50
1:A:657:GLY:C	1:A:658:LEU:HD23	2.37	0.50
1:A:384:GLN:NE2	1:A:480:PHE:HD2	2.10	0.49
1:A:26:TRP:CD1	1:A:27:GLY:N	2.80	0.49
1:A:173:ASP:HB2	1:A:300:VAL:CG2	2.42	0.49
1:A:201:ILE:HD12	1:A:248:LEU:CD1	2.35	0.49
1:A:324:THR:CG2	1:A:606:PHE:HB2	2.42	0.49
1:A:359:HIS:ND1	1:A:359:HIS:C	2.70	0.49
1:A:1026:LEU:HD23	1:A:1027:SER:N	2.28	0.49
1:A:1027:SER:O	1:A:1031:ILE:HD11	2.12	0.49
1:A:418:LEU:HD13	1:A:419:GLU:N	2.27	0.49
1:A:437:GLN:O	1:A:441:ASP:N	2.38	0.49
1:A:557:VAL:CG1	1:A:922:LEU:HD11	2.42	0.49
1:A:564:GLN:HE22	1:A:664:PRO:HD3	1.77	0.49
1:A:614:THR:HG22	1:A:616:THR:HB	1.93	0.49
1:A:930:PHE:CE1	1:A:1015:PRO:HB3	2.47	0.49
1:A:27:GLY:O	1:A:31:ILE:CG2	2.58	0.49
1:A:139:ILE:HD11	1:A:291:LEU:CB	2.37	0.49
1:A:526:HIS:HE1	1:A:978:VAL:HB	1.77	0.49
1:A:73:MET:O	1:A:76:VAL:HG12	2.13	0.49
1:A:146:ASP:HA	1:A:319:VAL:HA	1.94	0.49
1:A:160:GLN:NE2	1:A:287:GLY:HA3	2.26	0.49
1:A:187:TYR:CD2	1:A:759:THR:HG21	2.48	0.49
1:A:461:PHE:HE1	1:A:479:ALA:HA	1.74	0.49
1:A:465:PHE:CE2	1:A:479:ALA:CB	2.95	0.49
1:A:965:SER:O	1:A:966:GLU:HB2	2.13	0.49
1:A:78:GLY:O	1:A:97:PHE:HD2	1.95	0.49
1:A:277:GLU:CD	1:A:590:GLN:HA	2.38	0.49
1:A:291:LEU:CD2	1:A:300:VAL:HG21	2.42	0.49
1:A:65:VAL:O	1:A:68:PRO:HD2	2.13	0.49
1:A:438:VAL:HA	1:A:441:ASP:CG	2.37	0.49
1:A:448:PRO:HG2	1:A:449:ALA:H	1.77	0.49
1:A:980:ARG:C	1:A:983:PRO:HD2	2.37	0.49
1:A:259:LEU:O	1:A:259:LEU:HD23	2.13	0.49
1:A:370:LEU:CD1	1:A:404:VAL:HG22	2.42	0.49
1:A:370:LEU:HD11	1:A:404:VAL:HG22	1.95	0.49
1:A:476:GLY:O	1:A:480:PHE:N	2.42	0.49
1:A:65:VAL:C	1:A:68:PRO:HD2	2.38	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:133:ALA:HB3	1:A:290:ILE:CG2	2.43	0.49
1:A:410:MET:HE3	1:A:443:SER:HB3	1.93	0.49
1:A:525:TYR:HE2	1:A:1028:LEU:HB3	1.78	0.49
1:A:701:GLU:HA	1:A:713:ALA:HB3	1.95	0.49
1:A:1024:PRO:O	1:A:1028:LEU:HG	2.13	0.49
1:A:408:ILE:HD12	1:A:983:PRO:O	2.13	0.49
1:A:680:PRO:O	1:A:861:GLN:N	2.46	0.49
1:A:26:TRP:CZ2	1:A:379:ILE:HG23	2.47	0.48
1:A:403:MET:HE2	1:A:486:MET:HA	1.94	0.48
1:A:867:ARG:O	1:A:871:LYS:HB2	2.13	0.48
1:A:957:SER:HA	1:A:960:ASN:ND2	2.28	0.48
1:A:959:ASN:CB	1:A:968:LYS:HG3	2.43	0.48
1:A:979:LEU:HD12	1:A:979:LEU:C	2.38	0.48
1:A:980:ARG:HD3	1:A:981:VAL:N	2.27	0.48
1:A:16:VAL:HG23	1:A:499:ILE:HG12	1.94	0.48
1:A:191:ILE:O	1:A:773:PRO:HD3	2.13	0.48
1:A:499:ILE:HG22	1:A:503:TYR:CE1	2.48	0.48
1:A:696:MET:O	1:A:699:GLN:HG2	2.12	0.48
1:A:1026:LEU:O	1:A:1030:ILE:HG12	2.12	0.48
1:A:26:TRP:CZ2	1:A:379:ILE:HG21	2.41	0.48
1:A:122:PRO:C	1:A:125:VAL:HG23	2.38	0.48
1:A:197:ALA:HA	1:A:789:LEU:HD12	1.95	0.48
1:A:728:ILE:O	1:A:728:ILE:HG22	2.13	0.48
1:A:951:ALA:HB2	1:A:975:HIS:CE1	2.48	0.48
1:A:361:ARG:N	1:A:361:ARG:CD	2.76	0.48
1:A:420:GLU:HG3	1:A:421:TRP:HZ3	1.74	0.48
1:A:614:THR:CG2	1:A:616:THR:HB	2.43	0.48
1:A:945:LEU:HD13	1:A:945:LEU:C	2.38	0.48
1:A:337:ASN:C	1:A:337:ASN:ND2	2.71	0.48
1:A:456:ILE:HD11	1:A:883:ILE:HG13	1.96	0.48
1:A:589:LEU:HD22	1:A:609:THR:OG1	2.12	0.48
1:A:925:ALA:HB1	1:A:1012:ILE:HG22	1.94	0.48
1:A:933:LEU:O	1:A:936:VAL:HG12	2.12	0.48
1:A:116:GLN:O	1:A:120:LYS:HE3	2.13	0.48
1:A:349:VAL:HG22	1:A:990:VAL:HG12	1.94	0.48
1:A:434:THR:HG22	1:A:435:ARG:CZ	2.43	0.48
1:A:463:PRO:HA	1:A:466:THR:OG1	2.12	0.48
1:A:915:LEU:HB2	1:A:916:TRP:HE3	1.79	0.48
1:A:1025:LEU:HD23	1:A:1025:LEU:C	2.38	0.48
1:A:82:VAL:HG12	1:A:82:VAL:O	2.13	0.48
1:A:215:GLN:O	1:A:235:GLY:HA3	2.14	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:573:MET:HE2	1:A:668:ASN:CG	2.38	0.48
1:A:925:ALA:HB3	1:A:1011:ARG:HB2	1.96	0.48
1:A:197:ALA:HA	1:A:789:LEU:CD1	2.44	0.47
1:A:529:LEU:O	1:A:533:LEU:HD13	2.14	0.47
1:A:746:PHE:O	1:A:751:VAL:HG23	2.14	0.47
1:A:146:ASP:HA	1:A:319:VAL:HG12	1.96	0.47
1:A:220:SER:OG	1:A:221:SER:N	2.47	0.47
1:A:319:VAL:C	1:A:320:GLU:HG3	2.39	0.47
1:A:361:ARG:N	1:A:361:ARG:HD3	2.29	0.47
1:A:403:MET:HE3	1:A:489:ALA:CB	2.44	0.47
1:A:549:THR:O	1:A:913:TRP:HZ2	1.97	0.47
1:A:36:VAL:O	1:A:36:VAL:HG13	2.14	0.47
1:A:762:GLY:C	1:A:764:ALA:H	2.22	0.47
1:A:360:VAL:HG12	1:A:362:SER:H	1.80	0.47
1:A:538:THR:HA	1:A:541:LEU:HD12	1.95	0.47
1:A:554:LEU:CD2	1:A:912:ILE:HD12	2.44	0.47
1:A:661:LEU:C	1:A:661:LEU:HD23	2.39	0.47
1:A:678:LYS:O	1:A:679:SER:C	2.57	0.47
1:A:837:VAL:HG21	1:A:862:PHE:CZ	2.49	0.47
1:A:906:PHE:C	1:A:906:PHE:HD1	2.21	0.47
1:A:372:LEU:N	1:A:372:LEU:HD23	2.30	0.47
1:A:533:LEU:HD21	1:A:973:LEU:HD22	1.97	0.47
1:A:955:VAL:HB	1:A:956:PRO:HD3	1.96	0.47
1:A:399:ALA:O	1:A:403:MET:HG2	2.15	0.47
1:A:549:THR:HG23	1:A:913:TRP:HE1	1.79	0.47
1:A:947:TYR:CD1	1:A:979:LEU:CD1	2.97	0.47
1:A:62:GLU:HG2	1:A:66:THR:HG23	1.96	0.47
1:A:156:LEU:O	1:A:157:ARG:C	2.58	0.47
1:A:332:ASP:O	1:A:336:ASP:OD1	2.33	0.47
1:A:349:VAL:HG13	1:A:990:VAL:CG1	2.44	0.47
1:A:410:MET:HE3	1:A:497:ILE:HG21	1.96	0.47
1:A:633:GLN:HA	1:A:635:GLN:O	2.13	0.47
1:A:758:GLU:OE1	1:A:765:ARG:NH2	2.48	0.47
1:A:906:PHE:CE1	1:A:1022:THR:O	2.66	0.47
1:A:976:GLY:O	1:A:979:LEU:HD11	2.15	0.47
1:A:111:LEU:HD23	1:A:111:LEU:C	2.40	0.47
1:A:375:CYS:O	1:A:379:ILE:HG13	2.14	0.47
1:A:497:ILE:N	1:A:498:PRO:HD2	2.30	0.47
1:A:252:GLU:O	1:A:253:ASN:C	2.57	0.47
1:A:433:LYS:N	1:A:433:LYS:HD2	2.30	0.47
1:A:529:LEU:O	1:A:533:LEU:HD22	2.15	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:147:ARG:N	1:A:318:GLY:O	2.48	0.47
1:A:236:TYR:CE2	1:A:760:VAL:HG21	2.50	0.47
1:A:408:ILE:HG13	1:A:987:THR:HA	1.97	0.47
1:A:980:ARG:HH12	1:A:1028:LEU:HA	1.79	0.47
1:A:139:ILE:HG21	1:A:301:ILE:CG1	2.44	0.46
1:A:357:LEU:HD21	1:A:411:ILE:CG2	2.43	0.46
1:A:561:PHE:CD2	1:A:561:PHE:N	2.83	0.46
1:A:784:ARG:NH2	1:A:784:ARG:CG	2.78	0.46
1:A:62:GLU:HG3	1:A:86:SER:CB	2.45	0.46
1:A:969:LEU:O	1:A:972:ALA:HB3	2.15	0.46
1:A:669:ARG:NH2	1:A:672:MET:CG	2.78	0.46
1:A:687:GLY:HA3	1:A:693:ILE:CG2	2.45	0.46
1:A:878:MET:O	1:A:882:ILE:HG22	2.15	0.46
1:A:995:LEU:O	1:A:999:LEU:HD23	2.16	0.46
1:A:51:THR:CG2	1:A:52:SER:N	2.78	0.46
1:A:279:ASN:OD1	1:A:597:MET:HE2	2.15	0.46
1:A:403:MET:SD	1:A:403:MET:N	2.89	0.46
1:A:948:LEU:C	1:A:948:LEU:CD1	2.88	0.46
1:A:53:TYR:CE1	1:A:56:GLN:OE1	2.68	0.46
1:A:83:ARG:HA	1:A:815:THR:O	2.15	0.46
1:A:353:CYS:SG	1:A:362:SER:HB3	2.55	0.46
1:A:933:LEU:HD23	1:A:933:LEU:O	2.15	0.46
1:A:25:ILE:CG2	1:A:26:TRP:N	2.79	0.46
1:A:139:ILE:HG23	1:A:327:ARG:HB3	1.98	0.46
1:A:480:PHE:HD2	1:A:484:TYR:OH	1.98	0.46
1:A:482:LYS:NZ	1:A:928:THR:HG22	2.31	0.46
1:A:653:VAL:O	1:A:660:ASN:ND2	2.47	0.46
1:A:729:ASN:HD22	1:A:732:LYS:HE2	1.80	0.46
1:A:933:LEU:HD12	1:A:1015:PRO:O	2.15	0.46
1:A:975:HIS:CG	1:A:976:GLY:N	2.83	0.46
1:A:980:ARG:HH22	1:A:1027:SER:HB3	1.79	0.46
1:A:5:ILE:HG13	1:A:8:ARG:HH22	1.81	0.46
1:A:51:THR:CG2	1:A:125:VAL:HG12	2.45	0.46
1:A:164:LEU:O	1:A:167:GLU:N	2.47	0.46
1:A:433:LYS:N	1:A:433:LYS:CD	2.78	0.46
1:A:360:VAL:CG1	1:A:361:ARG:N	2.77	0.46
1:A:518:ASN:HD22	1:A:982:ARG:HG2	1.81	0.46
1:A:552:TRP:HB3	1:A:553:PRO:HD3	1.97	0.46
1:A:713:ALA:O	1:A:714:LEU:HD23	2.15	0.46
1:A:910:GLY:HA3	1:A:1022:THR:HG21	1.98	0.46
1:A:13:ARG:HD2	1:A:13:ARG:N	2.25	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:553:PRO:HB3	1:A:916:TRP:CE2	2.51	0.46
1:A:677:ILE:HG23	1:A:825:TYR:CD1	2.51	0.46
1:A:995:LEU:HB2	1:A:1017:ILE:HG13	1.98	0.46
1:A:23:LEU:O	1:A:27:GLY:N	2.43	0.46
1:A:195:ARG:HB3	1:A:262:VAL:HG12	1.98	0.46
1:A:358:TRP:O	1:A:359:HIS:ND1	2.49	0.46
1:A:414:ALA:CB	1:A:501:MET:HE1	2.44	0.46
1:A:529:LEU:HG	1:A:530:LEU:N	2.31	0.46
1:A:435:ARG:O	1:A:438:VAL:CG1	2.64	0.45
1:A:792:MET:C	1:A:794:GLN:H	2.22	0.45
1:A:933:LEU:C	1:A:933:LEU:CD2	2.89	0.45
1:A:187:TYR:HE2	1:A:759:THR:OG1	1.99	0.45
1:A:326:ASP:O	1:A:327:ARG:C	2.59	0.45
1:A:462:ILE:O	1:A:465:PHE:HB2	2.16	0.45
1:A:534:HIS:C	1:A:536:PRO:HD3	2.41	0.45
1:A:661:LEU:HD23	1:A:662:TRP:N	2.30	0.45
1:A:666:ILE:HD12	1:A:666:ILE:H	1.81	0.45
1:A:826:ILE:O	1:A:826:ILE:HD12	2.17	0.45
1:A:982:ARG:H	1:A:983:PRO:HD2	1.80	0.45
1:A:984:LYS:O	1:A:987:THR:HG22	2.17	0.45
1:A:32:ILE:HD13	1:A:32:ILE:O	2.16	0.45
1:A:258:TYR:O	1:A:261:ASP:HB2	2.16	0.45
1:A:351:VAL:O	1:A:355:LEU:HG	2.17	0.45
1:A:367:ILE:HA	1:A:371:PRO:HG2	1.97	0.45
1:A:412:GLU:CD	1:A:413:ASN:N	2.74	0.45
1:A:681:ILE:HD11	1:A:833:MET:HB2	1.99	0.45
1:A:62:GLU:OE1	1:A:67:TYR:HE2	1.99	0.45
1:A:229:TYR:CD1	1:A:229:TYR:N	2.85	0.45
1:A:380:VAL:HG13	1:A:484:TYR:CD1	2.52	0.45
1:A:461:PHE:HE1	1:A:479:ALA:C	2.24	0.45
1:A:473:ARG:HD2	1:A:473:ARG:HA	1.63	0.45
1:A:980:ARG:C	1:A:980:ARG:CD	2.86	0.45
1:A:343:LEU:O	1:A:347:ILE:CG2	2.64	0.45
1:A:518:ASN:HD22	1:A:982:ARG:HD3	1.81	0.45
1:A:462:ILE:HG23	1:A:463:PRO:CD	2.40	0.45
1:A:887:LEU:HD11	1:A:900:ILE:HD12	1.97	0.45
1:A:944:MET:CG	1:A:1031:ILE:HD13	2.39	0.45
1:A:57:ALA:O	1:A:61:VAL:HG23	2.17	0.45
1:A:526:HIS:CE1	1:A:978:VAL:HB	2.52	0.45
1:A:613:GLU:OE1	1:A:613:GLU:HA	2.16	0.45
1:A:792:MET:C	1:A:794:GLN:N	2.75	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:980:ARG:NH2	1:A:1027:SER:CB	2.80	0.45
1:A:45:VAL:HG11	1:A:97:PHE:HB2	1.98	0.45
1:A:58:PRO:HB3	1:A:813:LEU:HD13	1.99	0.45
1:A:62:GLU:OE1	1:A:67:TYR:CE2	2.69	0.45
1:A:115:ASN:CG	1:A:116:GLN:HE21	2.25	0.45
1:A:186:GLU:CD	1:A:769:ASN:HB2	2.42	0.45
1:A:272:ARG:CZ	1:A:283:GLU:OE1	2.65	0.45
1:A:372:LEU:O	1:A:376:ILE:HG22	2.15	0.45
1:A:517:LEU:N	1:A:517:LEU:HD22	2.31	0.45
1:A:701:GLU:HG2	1:A:713:ALA:O	2.17	0.45
1:A:728:ILE:HA	1:A:802:ALA:CB	2.46	0.45
1:A:53:TYR:CZ	1:A:56:GLN:OE1	2.70	0.45
1:A:53:TYR:OH	1:A:122:PRO:HG2	2.17	0.45
1:A:62:GLU:HG2	1:A:66:THR:CG2	2.47	0.45
1:A:187:TYR:HB2	1:A:768:ILE:HG12	1.99	0.45
1:A:347:ILE:HD13	1:A:348:VAL:N	2.32	0.45
1:A:413:ASN:HA	1:A:416:LYS:HG3	1.98	0.45
1:A:616:THR:HG23	1:A:673:LEU:HD21	1.99	0.45
1:A:837:VAL:HG23	1:A:838:HIS:N	2.32	0.45
1:A:887:LEU:HD11	1:A:900:ILE:CD1	2.47	0.45
1:A:952:ILE:HG23	1:A:957:SER:CB	2.46	0.45
1:A:18:MET:HE2	1:A:18:MET:HB3	1.75	0.44
1:A:202:SER:O	1:A:205:GLU:HB2	2.17	0.44
1:A:301:ILE:CG2	1:A:305:LYS:HE3	2.46	0.44
1:A:399:ALA:O	1:A:403:MET:SD	2.75	0.44
1:A:416:LYS:CE	1:A:417:ARG:HD2	2.40	0.44
1:A:465:PHE:CE2	1:A:479:ALA:HB3	2.52	0.44
1:A:465:PHE:HE2	1:A:479:ALA:HB3	1.81	0.44
1:A:526:HIS:N	1:A:527:PRO:HD2	2.31	0.44
1:A:611:LYS:HA	1:A:617:ASP:CG	2.42	0.44
1:A:710:VAL:HG23	1:A:710:VAL:O	2.17	0.44
1:A:789:LEU:C	1:A:789:LEU:HD23	2.42	0.44
1:A:984:LYS:HD2	1:A:984:LYS:HA	1.59	0.44
1:A:408:ILE:HD11	1:A:986:MET:CB	2.46	0.44
1:A:493:ALA:CA	1:A:496:VAL:HG23	2.47	0.44
1:A:564:GLN:HE22	1:A:664:PRO:CD	2.30	0.44
1:A:599:VAL:HA	1:A:600:PRO:HD3	1.73	0.44
1:A:718:LEU:O	1:A:719:GLU:C	2.60	0.44
1:A:391:MET:HE3	1:A:391:MET:HB2	1.41	0.44
1:A:491:LEU:N	1:A:491:LEU:HD23	2.31	0.44
1:A:496:VAL:C	1:A:500:LEU:HB2	2.41	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:598:SER:O	1:A:599:VAL:C	2.59	0.44
1:A:600:PRO:HG2	1:A:637:ARG:NH2	2.33	0.44
1:A:47:VAL:HG11	1:A:129:LEU:HD11	1.99	0.44
1:A:193:PRO:HB3	1:A:787:PRO:HG2	1.99	0.44
1:A:352:VAL:HG11	1:A:989:ALA:CB	2.44	0.44
1:A:418:LEU:HD22	1:A:418:LEU:O	2.17	0.44
1:A:481:THR:O	1:A:485:ALA:HB2	2.18	0.44
1:A:1011:ARG:H	1:A:1011:ARG:HG2	1.62	0.44
1:A:364:LEU:O	1:A:367:ILE:HG22	2.17	0.44
1:A:829:ARG:HE	1:A:829:ARG:HA	1.83	0.44
1:A:951:ALA:O	1:A:956:PRO:HD2	2.17	0.44
1:A:980:ARG:HA	1:A:983:PRO:CG	2.47	0.44
1:A:1029:PHE:CD2	1:A:1029:PHE:N	2.85	0.44
1:A:503:TYR:CD1	1:A:503:TYR:N	2.84	0.44
1:A:760:VAL:C	1:A:761:GLU:HG2	2.39	0.44
1:A:900:ILE:HD13	1:A:901:ILE:N	2.33	0.44
1:A:51:THR:HG22	1:A:52:SER:N	2.32	0.44
1:A:136:VAL:HG23	1:A:670:ILE:CG1	2.48	0.44
1:A:195:ARG:HD3	1:A:195:ARG:HA	1.82	0.44
1:A:420:GLU:H	1:A:420:GLU:HG2	1.59	0.44
1:A:478:LEU:C	1:A:478:LEU:HD23	2.43	0.44
1:A:681:ILE:HD13	1:A:837:VAL:HG12	1.99	0.44
1:A:109:ARG:HA	1:A:109:ARG:HD3	1.61	0.44
1:A:551:LEU:HD23	1:A:551:LEU:HA	1.87	0.44
1:A:611:LYS:HA	1:A:617:ASP:OD2	2.18	0.44
1:A:645:ILE:N	1:A:645:ILE:HD13	2.32	0.44
1:A:685:VAL:HG12	1:A:822:SER:O	2.17	0.44
1:A:1016:MET:O	1:A:1020:MET:N	2.51	0.44
1:A:55:GLY:O	1:A:56:GLN:CG	2.61	0.44
1:A:367:ILE:HD13	1:A:371:PRO:HG2	1.99	0.44
1:A:550:VAL:CA	1:A:553:PRO:HD2	2.47	0.44
1:A:151:HIS:NE2	1:A:316:PRO:HB3	2.33	0.43
1:A:252:GLU:O	1:A:254:GLY:N	2.51	0.43
1:A:367:ILE:HD13	1:A:367:ILE:O	2.17	0.43
1:A:819:ARG:HA	1:A:820:PRO:HD3	1.82	0.43
1:A:907:ALA:HB1	1:A:933:LEU:HD21	2.00	0.43
1:A:354:ALA:O	1:A:359:HIS:N	2.41	0.43
1:A:370:LEU:HD11	1:A:400:VAL:O	2.18	0.43
1:A:940:PHE:CZ	1:A:984:LYS:HB2	2.53	0.43
1:A:17:LEU:O	1:A:21:LEU:HD13	2.18	0.43
1:A:134:THR:OG1	1:A:135:GLY:N	2.52	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:194:GLN:O	1:A:198:GLN:HG3	2.18	0.43
1:A:301:ILE:HG21	1:A:326:ASP:OD1	2.18	0.43
1:A:326:ASP:OD2	1:A:328:SER:HB3	2.18	0.43
1:A:464:ILE:HD12	1:A:479:ALA:HB2	2.01	0.43
1:A:475:PHE:HZ	1:A:928:THR:OG1	1.98	0.43
1:A:944:MET:SD	1:A:947:TYR:HD1	2.41	0.43
1:A:462:ILE:C	1:A:462:ILE:HD13	2.43	0.43
1:A:883:ILE:HG22	1:A:884:PHE:N	2.33	0.43
1:A:216:GLU:CD	1:A:232:ARG:NH1	2.76	0.43
1:A:454:LEU:CB	1:A:490:ALA:HB2	2.49	0.43
1:A:660:ASN:OD1	1:A:660:ASN:N	2.51	0.43
1:A:841:GLN:O	1:A:844:ILE:HG23	2.19	0.43
1:A:977:ALA:C	1:A:980:ARG:HG3	2.43	0.43
1:A:995:LEU:HB2	1:A:1017:ILE:CG1	2.49	0.43
1:A:81:THR:OG1	1:A:96:ILE:HG13	2.19	0.43
1:A:164:LEU:HD23	1:A:164:LEU:HA	1.80	0.43
1:A:296:ASN:CG	1:A:299:GLU:HB3	2.43	0.43
1:A:311:LEU:C	1:A:313:SER:N	2.76	0.43
1:A:779:SER:H	1:A:782:ALA:HB3	1.84	0.43
1:A:810:PRO:CB	1:A:813:LEU:HD11	2.48	0.43
1:A:14:PHE:HB2	1:A:18:MET:HE3	2.01	0.43
1:A:360:VAL:C	1:A:362:SER:N	2.74	0.43
1:A:559:GLY:O	1:A:921:HIS:CD2	2.72	0.43
1:A:829:ARG:HA	1:A:829:ARG:NE	2.32	0.43
1:A:874:LEU:C	1:A:874:LEU:HD13	2.43	0.43
1:A:944:MET:HE1	1:A:977:ALA:HA	1.99	0.43
1:A:5:ILE:HD12	1:A:5:ILE:N	2.34	0.43
1:A:28:THR:HG23	1:A:29:TRP:CE3	2.54	0.43
1:A:391:MET:O	1:A:394:GLY:N	2.51	0.43
1:A:565:ILE:CG2	1:A:566:ASN:N	2.81	0.43
1:A:587:SER:C	1:A:589:LEU:N	2.77	0.43
1:A:805:LYS:HB2	1:A:805:LYS:HE3	1.77	0.43
1:A:147:ARG:O	1:A:148:SER:CB	2.62	0.43
1:A:164:LEU:O	1:A:166:TYR:N	2.52	0.43
1:A:182:GLY:N	1:A:285:ALA:HB2	2.34	0.43
1:A:325:TYR:HB2	1:A:627:THR:HG21	2.00	0.43
1:A:418:LEU:HD22	1:A:418:LEU:C	2.44	0.43
1:A:478:LEU:HD21	1:A:928:THR:HG21	2.01	0.43
1:A:562:LEU:H	1:A:923:SER:HB3	1.84	0.43
1:A:697:ALA:HB1	1:A:715:ALA:HB1	2.00	0.43
1:A:999:LEU:HD13	1:A:999:LEU:HA	1.61	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:295:LYS:O	1:A:296:ASN:C	2.62	0.43
1:A:416:LYS:HB2	1:A:416:LYS:HE3	1.67	0.43
1:A:475:PHE:O	1:A:476:GLY:C	2.62	0.43
1:A:574:PRO:CD	1:A:624:VAL:HG13	2.49	0.43
1:A:635:GLN:HA	1:A:636:TRP:HA	1.76	0.43
1:A:758:GLU:OE1	1:A:765:ARG:CZ	2.67	0.43
1:A:34:THR:HG22	1:A:382:HIS:HE1	1.78	0.42
1:A:436:TRP:CD2	1:A:436:TRP:N	2.87	0.42
1:A:639:GLY:O	1:A:640:MET:C	2.62	0.42
1:A:790:THR:HG23	1:A:791:PRO:HD2	2.01	0.42
1:A:980:ARG:HH22	1:A:1027:SER:C	2.27	0.42
1:A:118:GLN:HE21	1:A:118:GLN:CA	2.21	0.42
1:A:354:ALA:O	1:A:358:TRP:N	2.53	0.42
1:A:370:LEU:H	1:A:371:PRO:HD2	1.84	0.42
1:A:370:LEU:HA	1:A:370:LEU:HD23	1.82	0.42
1:A:707:VAL:HG11	1:A:840:LEU:HD12	2.01	0.42
1:A:1015:PRO:HB2	1:A:1016:MET:CE	2.49	0.42
1:A:72:THR:CG2	1:A:113:TYR:HB3	2.49	0.42
1:A:292:ARG:O	1:A:293:SER:C	2.62	0.42
1:A:343:LEU:HD12	1:A:344:GLU:N	2.34	0.42
1:A:669:ARG:HH12	1:A:672:MET:HE1	1.79	0.42
1:A:804:ILE:O	1:A:804:ILE:CG1	2.67	0.42
1:A:886:LEU:HD23	1:A:889:LEU:HD13	2.01	0.42
1:A:76:VAL:HA	1:A:113:TYR:CE1	2.55	0.42
1:A:408:ILE:HD11	1:A:987:THR:N	2.34	0.42
1:A:464:ILE:HD12	1:A:479:ALA:CB	2.49	0.42
1:A:679:SER:O	1:A:680:PRO:C	2.62	0.42
1:A:438:VAL:O	1:A:441:ASP:HB2	2.19	0.42
1:A:500:LEU:HA	1:A:503:TYR:CD1	2.54	0.42
1:A:566:ASN:OD1	1:A:566:ASN:C	2.62	0.42
1:A:707:VAL:HG13	1:A:707:VAL:O	2.18	0.42
1:A:773:PRO:HD2	1:A:776:TRP:HD1	1.83	0.42
1:A:157:ARG:HD2	1:A:161:ASP:OD2	2.20	0.42
1:A:353:CYS:SG	1:A:362:SER:HB2	2.59	0.42
1:A:416:LYS:HD2	1:A:417:ARG:HH21	1.84	0.42
1:A:105:TRP:CD1	1:A:105:TRP:C	2.94	0.42
1:A:177:VAL:O	1:A:177:VAL:HG12	2.19	0.42
1:A:345:GLU:OE1	1:A:345:GLU:HA	2.19	0.42
1:A:370:LEU:HD21	1:A:403:MET:CB	2.36	0.42
1:A:378:PHE:O	1:A:381:MET:HG2	2.19	0.42
1:A:391:MET:C	1:A:394:GLY:H	2.27	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:499:ILE:C	1:A:503:TYR:CE1	2.98	0.42
1:A:704:ALA:O	1:A:711:ALA:HB3	2.19	0.42
1:A:920:PHE:HD1	1:A:1011:ARG:HH22	1.65	0.42
1:A:247:VAL:O	1:A:247:VAL:CG1	2.66	0.42
1:A:249:LYS:HA	1:A:249:LYS:HD2	1.69	0.42
1:A:279:ASN:N	1:A:279:ASN:ND2	2.67	0.42
1:A:368:ILE:CD1	1:A:496:VAL:HA	2.49	0.42
1:A:499:ILE:O	1:A:503:TYR:CD1	2.73	0.42
1:A:817:ASN:C	1:A:819:ARG:H	2.28	0.42
1:A:940:PHE:HE1	1:A:980:ARG:NH2	2.18	0.42
1:A:947:TYR:CD1	1:A:979:LEU:HD11	2.54	0.42
1:A:376:ILE:CD1	1:A:488:GLY:CA	2.90	0.42
1:A:627:THR:O	1:A:627:THR:HG22	2.19	0.42
1:A:735:ARG:NH2	1:A:736:TYR:HE2	2.18	0.42
1:A:949:ARG:HH12	1:A:952:ILE:HB	1.84	0.42
1:A:967:GLN:O	1:A:967:GLN:HG2	2.20	0.42
1:A:185:LYS:O	1:A:766:TYR:HB3	2.19	0.42
1:A:291:LEU:HD23	1:A:300:VAL:HG21	2.02	0.42
1:A:311:LEU:O	1:A:314:SER:N	2.47	0.42
1:A:445:GLU:OE2	1:A:946:MET:HE3	2.19	0.42
1:A:454:LEU:HB2	1:A:490:ALA:HB2	2.02	0.42
1:A:475:PHE:CE2	1:A:924:VAL:HG12	2.55	0.42
1:A:677:ILE:N	1:A:677:ILE:HD12	2.35	0.42
1:A:884:PHE:CE2	1:A:894:VAL:HB	2.55	0.42
1:A:925:ALA:HB1	1:A:1011:ARG:HB2	2.01	0.42
1:A:993:ALA:O	1:A:997:PRO:HD3	2.19	0.42
1:A:315:LEU:HD11	1:A:321:ILE:CD1	2.49	0.41
1:A:520:PHE:C	1:A:520:PHE:HD1	2.25	0.41
1:A:596:ILE:HD12	1:A:662:TRP:HH2	1.85	0.41
1:A:606:PHE:O	1:A:626:THR:HA	2.20	0.41
1:A:911:GLY:CA	1:A:1019:GLY:N	2.78	0.41
1:A:237:LEU:HD12	1:A:237:LEU:HA	1.88	0.41
1:A:368:ILE:HD13	1:A:368:ILE:C	2.44	0.41
1:A:500:LEU:HD23	1:A:500:LEU:O	2.19	0.41
1:A:561:PHE:HD2	1:A:561:PHE:N	2.19	0.41
1:A:682:GLY:O	1:A:859:SER:N	2.51	0.41
1:A:15:LEU:O	1:A:18:MET:HG2	2.20	0.41
1:A:216:GLU:CD	1:A:232:ARG:HH12	2.28	0.41
1:A:461:PHE:CE1	1:A:479:ALA:O	2.68	0.41
1:A:517:LEU:H	1:A:517:LEU:HD22	1.84	0.41
1:A:661:LEU:HD21	1:A:663:VAL:HG13	2.03	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:984:LYS:O	1:A:988:VAL:HG23	2.20	0.41
1:A:199:TYR:CD1	1:A:257:VAL:HG11	2.56	0.41
1:A:925:ALA:O	1:A:1012:ILE:HG22	2.20	0.41
1:A:929:GLY:CA	1:A:1016:MET:HE1	2.50	0.41
1:A:46:GLN:HA	1:A:95:VAL:O	2.20	0.41
1:A:554:LEU:HD23	1:A:912:ILE:HD12	2.02	0.41
1:A:728:ILE:HG12	1:A:743:VAL:HG11	2.00	0.41
1:A:812:MET:C	1:A:813:LEU:HD12	2.46	0.41
1:A:951:ALA:HB1	1:A:956:PRO:HG2	2.03	0.41
1:A:991:ILE:HG22	1:A:992:ILE:HD13	2.03	0.41
1:A:995:LEU:O	1:A:999:LEU:HB2	2.21	0.41
1:A:1027:SER:O	1:A:1031:ILE:HG13	2.21	0.41
1:A:129:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HA	1.60	0.41
1:A:131:PRO:HD3	1:A:615:ALA:HB3	2.02	0.41
1:A:503:TYR:HD1	1:A:503:TYR:H	1.68	0.41
1:A:549:THR:O	1:A:913:TRP:CZ2	2.74	0.41
1:A:658:LEU:HD23	1:A:658:LEU:N	2.35	0.41
1:A:683:ILE:HD12	1:A:700:ILE:HD13	2.03	0.41
1:A:739:THR:O	1:A:740:VAL:C	2.64	0.41
1:A:756:VAL:HG22	1:A:756:VAL:O	2.20	0.41
1:A:337:ASN:HD22	1:A:338:LEU:N	2.19	0.41
1:A:368:ILE:HD11	1:A:496:VAL:HA	2.01	0.41
1:A:519:ARG:HA	1:A:522:ILE:HG13	2.02	0.41
1:A:959:ASN:ND2	1:A:968:LYS:HE3	2.36	0.41
1:A:48:ILE:CG2	1:A:94:TYR:CE2	2.96	0.41
1:A:435:ARG:HA	1:A:438:VAL:HG12	2.03	0.41
1:A:453:SER:O	1:A:457:ILE:HG13	2.21	0.41
1:A:526:HIS:NE2	1:A:978:VAL:HG23	2.36	0.41
1:A:614:THR:HG22	1:A:616:THR:CB	2.51	0.41
1:A:947:TYR:CD1	1:A:979:LEU:HD13	2.55	0.41
1:A:1002:THR:CB	1:A:1006:SER:HB2	2.47	0.41
1:A:1023:ALA:N	1:A:1024:PRO:CD	2.84	0.41
1:A:576:THR:HG21	1:A:622:GLU:HB2	2.02	0.41
1:A:631:LYS:CG	1:A:632:PRO:HD2	2.50	0.41
1:A:1021:ILE:HA	1:A:1021:ILE:HD12	1.73	0.41
1:A:1028:LEU:HB2	1:A:1029:PHE:CE2	2.56	0.41
1:A:241:ASP:O	1:A:244:ASN:HB2	2.22	0.40
1:A:324:THR:HG21	1:A:606:PHE:CB	2.51	0.40
1:A:436:TRP:N	1:A:436:TRP:CE3	2.89	0.40
1:A:780:PRO:CB	1:A:784:ARG:HH22	2.34	0.40
1:A:899:LEU:CD2	1:A:1034:ALA:HB1	2.40	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:951:ALA:HB2	1:A:975:HIS:HE1	1.85	0.40
1:A:26:TRP:CZ2	1:A:379:ILE:CG2	2.86	0.40
1:A:199:TYR:CD1	1:A:257:VAL:CG1	3.05	0.40
1:A:500:LEU:HD23	1:A:500:LEU:C	2.47	0.40
1:A:550:VAL:CG2	1:A:912:ILE:HG21	2.51	0.40
1:A:599:VAL:HG21	1:A:649:LEU:HD22	2.01	0.40
1:A:614:THR:C	1:A:616:THR:H	2.29	0.40
1:A:964:PHE:CD2	1:A:965:SER:HB2	2.57	0.40
1:A:42:LEU:HD12	1:A:470:GLN:HB2	2.03	0.40
1:A:345:GLU:OE1	1:A:994:GLY:HA2	2.21	0.40
1:A:772:TYR:HD1	1:A:786:LEU:HD21	1.86	0.40
1:A:780:PRO:HB2	1:A:784:ARG:HH22	1.85	0.40
1:A:914:LEU:HD23	1:A:1014:ALA:C	2.46	0.40
1:A:164:LEU:O	1:A:165:LYS:C	2.65	0.40
1:A:18:MET:HA	1:A:21:LEU:HD11	2.01	0.40
1:A:391:MET:O	1:A:392:SER:C	2.65	0.40
1:A:406:ALA:HB1	1:A:450:LEU:HD11	2.04	0.40
1:A:417:ARG:CZ	1:A:442:ALA:CB	2.94	0.40
1:A:552:TRP:O	1:A:552:TRP:HD1	2.05	0.40
1:A:596:ILE:CD1	1:A:662:TRP:HH2	2.34	0.40
1:A:879:THR:O	1:A:883:ILE:HD13	2.22	0.40
1:A:944:MET:HE2	1:A:980:ARG:HG2	2.03	0.40
1:A:1031:ILE:H	1:A:1032:PRO:HD2	1.81	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	1009/1055 (96%)	868 (86%)	103 (10%)	38 (4%)	2 21

All (38) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	44	ASP
1	A	148	SER
1	A	238	GLN
1	A	256	PRO
1	A	640	MET
1	A	56	GLN
1	A	293	SER
1	A	296	ASN
1	A	360	VAL
1	A	832	ASP
1	A	964	PHE
1	A	234	SER
1	A	588	MET
1	A	665	PRO
1	A	674	SER
1	A	718	LEU
1	A	130	GLY
1	A	175	ALA
1	A	214	ASN
1	A	269	PRO
1	A	361	ARG
1	A	956	PRO
1	A	327	ARG
1	A	386	LEU
1	A	562	LEU
1	A	620	PRO
1	A	719	GLU
1	A	817	ASN
1	A	892	ARG
1	A	558	GLY
1	A	763	ILE
1	A	1032	PRO
1	A	563	PRO
1	A	753	GLY
1	A	172	PRO
1	A	720	GLY
1	A	476	GLY
1	A	983	PRO

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

resolution.

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	835/872 (96%)	641 (77%)	194 (23%)	1 5

All (194) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	6	ILE
1	A	13	ARG
1	A	21	LEU
1	A	23	LEU
1	A	25	ILE
1	A	26	TRP
1	A	28	THR
1	A	31	ILE
1	A	32	ILE
1	A	39	LEU
1	A	42	LEU
1	A	48	ILE
1	A	50	LYS
1	A	51	THR
1	A	53	TYR
1	A	56	GLN
1	A	60	ILE
1	A	62	GLU
1	A	65	VAL
1	A	66	THR
1	A	96	ILE
1	A	105	TRP
1	A	107	ARG
1	A	109	ARG
1	A	112	GLU
1	A	116	GLN
1	A	117	VAL
1	A	118	GLN
1	A	121	LEU
1	A	125	VAL
1	A	134	THR
1	A	136	VAL
1	A	144	LEU
1	A	183	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	184	VAL
1	A	199	TYR
1	A	205	GLU
1	A	210	LEU
1	A	215	GLN
1	A	222	ILE
1	A	226	GLU
1	A	231	VAL
1	A	237	LEU
1	A	239	THR
1	A	240	LEU
1	A	246	ILE
1	A	247	VAL
1	A	252	GLU
1	A	253	ASN
1	A	255	VAL
1	A	257	VAL
1	A	281	GLU
1	A	288	VAL
1	A	292	ARG
1	A	317	GLU
1	A	321	ILE
1	A	322	VAL
1	A	323	THR
1	A	324	THR
1	A	336	ASP
1	A	337	ASN
1	A	343	LEU
1	A	344	GLU
1	A	346	PHE
1	A	347	ILE
1	A	348	VAL
1	A	351	VAL
1	A	353	CYS
1	A	359	HIS
1	A	360	VAL
1	A	364	LEU
1	A	367	ILE
1	A	368	ILE
1	A	369	SER
1	A	372	LEU
1	A	376	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	382	HIS
1	A	396	ILE
1	A	398	ILE
1	A	403	MET
1	A	405	ASP
1	A	408	ILE
1	A	411	ILE
1	A	415	HIS
1	A	416	LYS
1	A	418	LEU
1	A	420	GLU
1	A	433	LYS
1	A	434	THR
1	A	436	TRP
1	A	439	ILE
1	A	440	THR
1	A	450	LEU
1	A	458	THR
1	A	462	ILE
1	A	464	ILE
1	A	467	LEU
1	A	474	LEU
1	A	483	THR
1	A	484	TYR
1	A	492	LEU
1	A	495	VAL
1	A	497	ILE
1	A	499	ILE
1	A	501	MET
1	A	503	TYR
1	A	517	LEU
1	A	522	ILE
1	A	528	LEU
1	A	529	LEU
1	A	530	LEU
1	A	533	LEU
1	A	552	TRP
1	A	564	GLN
1	A	571	LEU
1	A	572	TYR
1	A	580	ILE
1	A	592	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	613	GLU
1	A	614	THR
1	A	621	LEU
1	A	622	GLU
1	A	623	MET
1	A	624	VAL
1	A	627	THR
1	A	633	GLN
1	A	637	ARG
1	A	640	MET
1	A	641	THR
1	A	643	ASP
1	A	655	LEU
1	A	660	ASN
1	A	663	VAL
1	A	670	ILE
1	A	675	THR
1	A	678	LYS
1	A	690	LEU
1	A	696	MET
1	A	699	GLN
1	A	700	ILE
1	A	722	ARG
1	A	728	ILE
1	A	740	VAL
1	A	745	LEU
1	A	747	VAL
1	A	755	MET
1	A	760	VAL
1	A	761	GLU
1	A	763	ILE
1	A	786	LEU
1	A	793	LYS
1	A	796	ILE
1	A	804	ILE
1	A	821	THR
1	A	823	TRP
1	A	824	ILE
1	A	826	ILE
1	A	827	ASP
1	A	831	ARG
1	A	833	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	840	LEU
1	A	844	ILE
1	A	847	LYS
1	A	848	VAL
1	A	870	HIS
1	A	872	LEU
1	A	883	ILE
1	A	894	VAL
1	A	898	LEU
1	A	899	LEU
1	A	900	ILE
1	A	904	VAL
1	A	906	PHE
1	A	912	ILE
1	A	916	TRP
1	A	922	LEU
1	A	933	LEU
1	A	946	MET
1	A	948	LEU
1	A	949	ARG
1	A	964	PHE
1	A	967	GLN
1	A	970	ASP
1	A	981	VAL
1	A	987	THR
1	A	990	VAL
1	A	998	ILE
1	A	999	LEU
1	A	1012	ILE
1	A	1016	MET
1	A	1021	ILE
1	A	1022	THR
1	A	1026	LEU
1	A	1031	ILE

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (18) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	116	GLN
1	A	118	GLN
1	A	198	GLN
1	A	244	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	245	HIS
1	A	279	ASN
1	A	337	ASN
1	A	382	HIS
1	A	384	GLN
1	A	389	ASN
1	A	564	GLN
1	A	590	GLN
1	A	629	GLN
1	A	668	ASN
1	A	699	GLN
1	A	729	ASN
1	A	744	GLN
1	A	794	GLN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 2 ligands modelled in this entry, 2 are monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data

6.1 Protein, DNA and RNA chains

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	1015/1055 (96%)	0.37	47 (4%) 37 30	58, 169, 341, 564	0

All (47) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	938	ALA	7.4
1	A	935	GLY	6.8
1	A	381	MET	4.3
1	A	934	ALA	4.2
1	A	452	ILE	4.2
1	A	456	ILE	4.1
1	A	565	ILE	3.5
1	A	850	LEU	3.4
1	A	661	LEU	3.3
1	A	141	GLU	3.3
1	A	84	GLY	3.1
1	A	849	GLN	3.1
1	A	80	LYS	3.1
1	A	407	ALA	3.0
1	A	313	SER	3.0
1	A	414	ALA	2.9
1	A	217	ALA	2.9
1	A	501	MET	2.8
1	A	57	ALA	2.7
1	A	54	PRO	2.6
1	A	455	LEU	2.6
1	A	795	GLN	2.6
1	A	937	ALA	2.5
1	A	735	ARG	2.5
1	A	457	ILE	2.5
1	A	761	GLU	2.4
1	A	385	GLY	2.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	98	GLU	2.4
1	A	199	TYR	2.4
1	A	176	GLU	2.4
1	A	369	SER	2.4
1	A	42	LEU	2.4
1	A	445	GLU	2.3
1	A	884	PHE	2.3
1	A	411	ILE	2.3
1	A	402	ALA	2.2
1	A	1002	THR	2.2
1	A	524	VAL	2.2
1	A	107	ARG	2.2
1	A	453	SER	2.2
1	A	451	PHE	2.2
1	A	63	ASN	2.2
1	A	97	PHE	2.1
1	A	101	THR	2.1
1	A	400	VAL	2.0
1	A	866	GLU	2.0
1	A	284	VAL	2.0

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

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

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

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

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors(Å ²)	Q<0.9
2	CU1	A	1049	1/1	0.81	0.29	197,197,197,197	0
2	CU1	A	1048	1/1	0.92	0.12	146,146,146,146	0

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.