



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 04:40 AM UTC

PDB ID : 1LDJ / pdb_00001ldj
Title : Structure of the Cul1-Rbx1-Skp1-F boxSkp2 SCF Ubiquitin Ligase Complex
Authors : Zheng, N.; Schulman, B.A.; Song, L.; Miller, J.J.; Jeffrey, P.D.; Wang, P.;
Chu, C.; Koepp, D.M.; Elledge, S.J.; Pagano, M.; Conaway, R.C.; Conaway,
J.W.; Harper, J.W.; Pavletich, N.P.
Deposited on : 2002-04-08
Resolution : 3.00 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

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

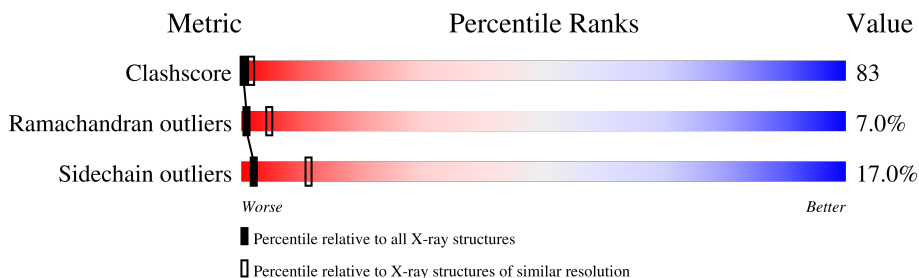
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.00 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	190562	2977 (3.00-3.00)
Ramachandran outliers	187476	2877 (3.00-3.00)
Sidechain outliers	187428	2880 (3.00-3.00)

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

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	760	
2	B	90	

2 Entry composition

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 6668 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 Cullin homolog 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	725	Total	C	N	O	S	0	0	0
			5934	3764	1011	1130	29			

- Molecule 2 is a protein called ring-box protein 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
2	B	88	Total	C	N	O	S	0	0	0
			731	464	133	125	9			

- Molecule 3 is ZINC ION (CCD ID: ZN) (formula: Zn).

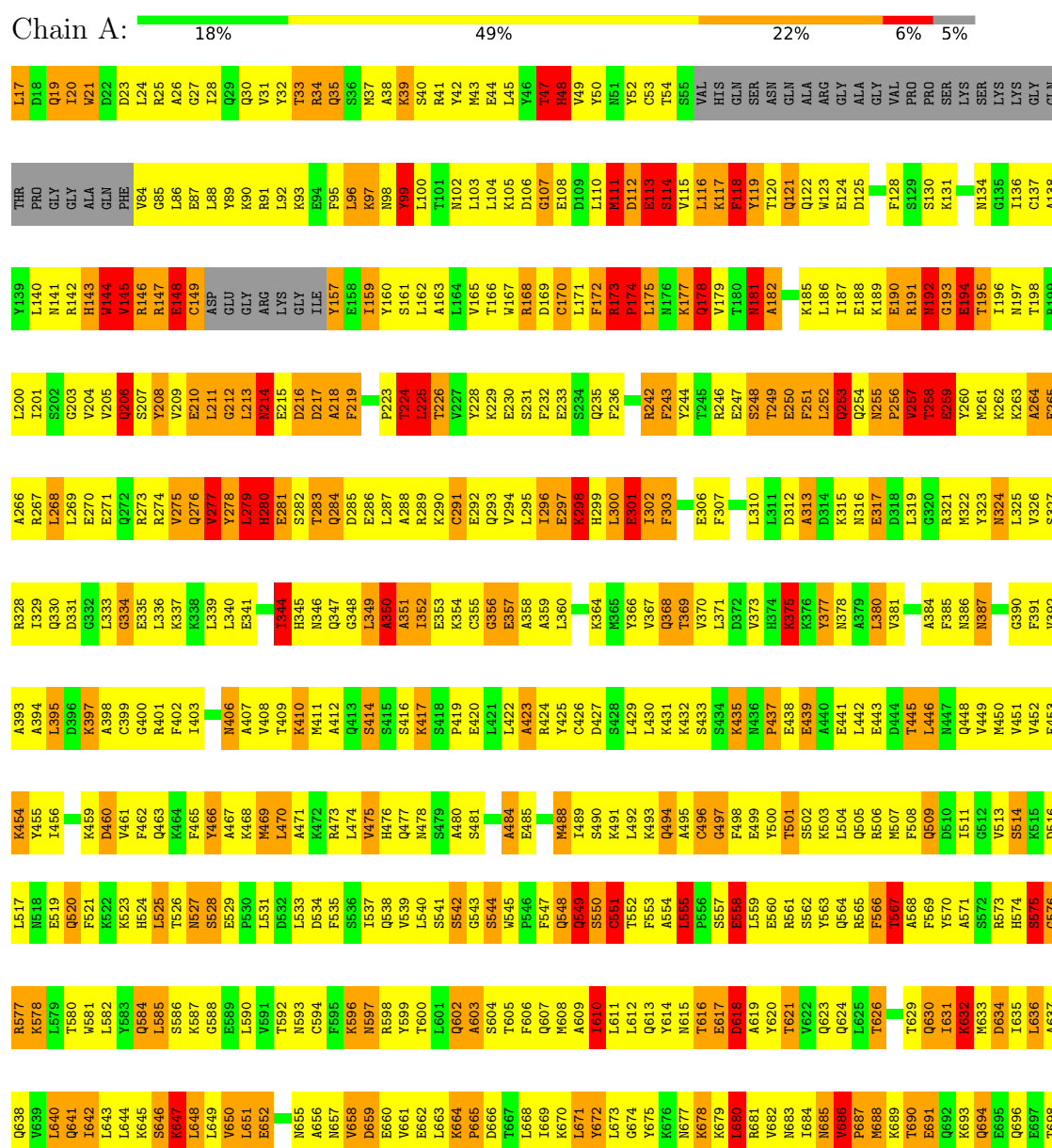
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	B	3	Total	Zn	0	0
			3	3		

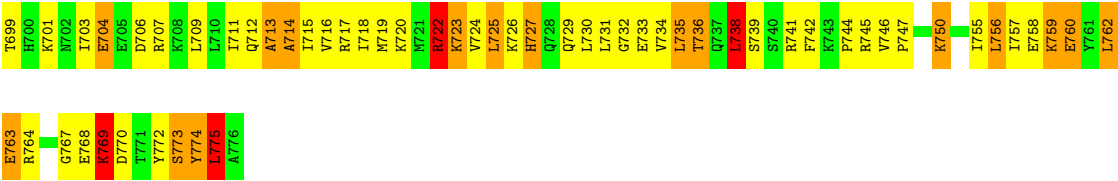
3 Residue-property plots

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

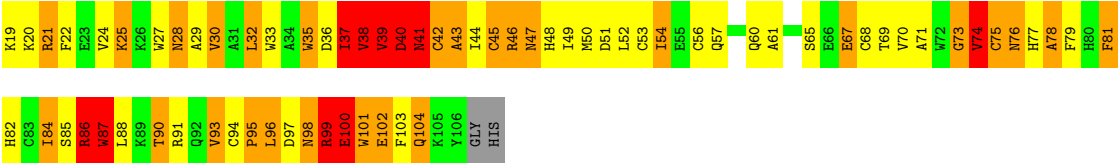
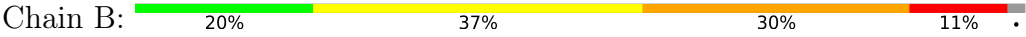
Note EDS was not executed.

• Molecule 1: Cullin homolog 1





• Molecule 2: ring-box protein 1



4 Data and refinement statistics

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

Property	Value	Source
Space group	P 1 21 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	113.97Å 49.97Å 135.88Å 90.00° 107.83° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	15.00 – 3.00	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	(Not available) (15.00-3.00)	Depositor
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
Refinement program	CNS 1.0	Depositor
R, R_{free}	0.247 , 0.288	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	6668	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	95.0	wwPDB-VP

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

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	1.71	66/6032 (1.1%)	2.35	267/8122 (3.3%)
2	B	1.66	11/752 (1.5%)	1.93	24/1020 (2.4%)
All	All	1.70	77/6784 (1.1%)	2.30	291/9142 (3.2%)

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

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	1	13
2	B	0	1
All	All	1	14

All (77) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	300	LEU	C-N	-46.73	0.68	1.33
1	A	301	GLU	C-N	-42.32	0.83	1.33
1	A	20	ILE	N-CA	34.74	1.92	1.46
1	A	149	CYS	N-CA	34.48	2.11	1.46
1	A	146	ARG	N-CA	31.00	1.90	1.46
1	A	714	ALA	N-CA	26.07	1.79	1.46
2	B	86	ARG	C-N	-24.41	1.01	1.34
1	A	119	TYR	N-CA	23.46	1.77	1.46
2	B	87	TRP	N-CA	21.08	1.72	1.46
1	A	578	LYS	CB-CG	-20.46	0.91	1.52
1	A	351	ALA	N-CA	20.25	1.72	1.46
1	A	218	ALA	CA-C	-20.23	1.42	1.52
1	A	182	ALA	N-CA	16.84	1.67	1.46
1	A	217	ASP	C-N	-15.95	1.15	1.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	214	ASN	C-N	-15.77	1.11	1.33
1	A	226	THR	CB-OG1	-14.50	1.20	1.43
1	A	114	SER	N-CA	13.90	1.64	1.46
1	A	686	VAL	N-CA	-13.80	1.34	1.46
1	A	225	LEU	CB-CG	-11.96	1.29	1.53
1	A	279	LEU	N-CA	-11.76	1.31	1.46
2	B	36	ASP	N-CA	-11.37	1.31	1.46
1	A	277	VAL	C-N	10.83	1.47	1.33
1	A	496	CYS	N-CA	10.59	1.58	1.46
2	B	40	ASP	C-N	-9.98	1.19	1.33
1	A	111	MET	N-CA	-9.83	1.33	1.46
2	B	35	TRP	CA-C	-9.73	1.40	1.52
1	A	194	GLU	C-N	-9.63	1.21	1.33
2	B	40	ASP	CA-C	-9.63	1.39	1.52
1	A	324	ASN	N-CA	9.55	1.58	1.46
1	A	224	THR	C-N	-9.51	1.20	1.33
1	A	685	ASN	C-N	-9.46	1.24	1.33
1	A	19	GLN	N-CA	9.37	1.58	1.46
1	A	194	GLU	CA-C	-9.07	1.40	1.52
2	B	41	ASN	N-CA	-8.91	1.34	1.46
1	A	194	GLU	N-CA	-8.86	1.33	1.46
1	A	618	ASP	CA-C	8.80	1.64	1.52
1	A	278	TYR	C-N	-8.12	1.22	1.33
2	B	35	TRP	C-N	-8.09	1.23	1.33
1	A	278	TYR	N-CA	7.95	1.58	1.46
1	A	250	GLU	CA-C	-7.89	1.42	1.53
1	A	738	LEU	N-CA	7.71	1.56	1.46
1	A	175	LEU	CA-C	-7.60	1.45	1.53
1	A	219	PHE	N-CA	-7.58	1.37	1.45
1	A	618	ASP	C-N	7.49	1.43	1.33
1	A	249	THR	C-N	-7.49	1.23	1.33
1	A	282	SER	C-N	-7.48	1.23	1.33
1	A	278	TYR	CA-CB	-7.32	1.42	1.53
2	B	35	TRP	N-CA	-7.29	1.37	1.46
1	A	257	VAL	C-N	7.25	1.44	1.33
2	B	85	SER	C-N	-7.23	1.23	1.33
1	A	125	ASP	N-CA	7.01	1.55	1.46
1	A	251	PHE	CA-C	-6.92	1.43	1.52
1	A	177	LYS	C-N	-6.85	1.24	1.33
1	A	280	HIS	CA-CB	-6.73	1.42	1.53
1	A	173	ARG	N-CA	-6.60	1.36	1.46
1	A	736	THR	N-CA	6.28	1.54	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	258	THR	CA-C	-6.21	1.46	1.53
1	A	145	VAL	N-CA	5.95	1.53	1.46
1	A	578	LYS	C-N	5.94	1.41	1.33
1	A	218	ALA	C-N	-5.84	1.25	1.33
1	A	250	GLU	N-CA	-5.73	1.39	1.46
1	A	566	PHE	N-CA	5.57	1.53	1.46
1	A	211	LEU	C-N	5.49	1.41	1.33
1	A	254	GLN	N-CA	-5.49	1.39	1.46
1	A	219	PHE	CA-C	-5.39	1.45	1.52
1	A	175	LEU	C-N	-5.37	1.26	1.33
1	A	47	THR	N-CA	5.33	1.53	1.46
1	A	276	GLN	C-N	-5.33	1.26	1.33
1	A	208	TYR	N-CA	5.21	1.52	1.46
2	B	38	VAL	C-N	-5.19	1.26	1.33
1	A	617	GLU	N-CA	-5.18	1.39	1.46
1	A	617	GLU	CA-C	5.18	1.59	1.52
1	A	610	ILE	CA-CB	5.16	1.61	1.54
1	A	280	HIS	C-N	-5.16	1.26	1.33
1	A	435	LYS	N-CA	-5.11	1.39	1.46
1	A	686	VAL	CA-C	-5.06	1.47	1.52
1	A	212	GLY	N-CA	5.04	1.52	1.45

All (291) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	217	ASP	O-C-N	-44.92	62.85	122.59
1	A	194	GLU	CA-C-N	-37.81	57.14	121.80
1	A	194	GLU	C-N-CA	-37.81	57.14	121.80
1	A	316	ASN	N-CA-C	30.49	148.27	113.21
1	A	216	ASP	N-CA-C	29.10	150.31	111.90
2	B	87	TRP	N-CA-C	24.96	140.41	111.71
1	A	646	SER	N-CA-C	-21.70	75.23	110.17
1	A	112	ASP	N-CA-C	20.98	140.21	108.96
1	A	216	ASP	CB-CA-C	-20.76	79.07	111.66
1	A	111	MET	CA-C-N	-20.56	88.15	121.87
1	A	111	MET	C-N-CA	-20.56	88.15	121.87
1	A	195	THR	N-CA-C	20.52	138.56	108.60
1	A	280	HIS	CA-CB-CG	-20.29	93.52	113.80
1	A	576	GLY	O-C-N	19.90	148.57	122.70
1	A	218	ALA	CA-C-N	-19.40	87.43	122.74
1	A	218	ALA	C-N-CA	-19.40	87.43	122.74
1	A	193	GLY	CA-C-N	-19.01	86.63	121.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	193	GLY	C-N-CA	-19.01	86.63	121.41
1	A	119	TYR	N-CA-C	-18.80	89.91	113.23
1	A	19	GLN	CA-C-N	-18.53	88.42	120.29
1	A	19	GLN	C-N-CA	-18.53	88.42	120.29
1	A	194	GLU	O-C-N	-18.38	102.45	121.93
1	A	357	GLU	N-CA-C	-18.14	91.55	114.04
1	A	351	ALA	N-CA-C	-17.77	89.62	112.90
1	A	631	ILE	CB-CA-C	-17.66	89.09	111.88
1	A	647	LYS	N-CA-CB	-17.50	85.81	110.65
1	A	182	ALA	N-CA-C	17.27	132.23	111.33
1	A	549	GLN	CA-C-N	-17.20	88.68	121.54
1	A	549	GLN	C-N-CA	-17.20	88.68	121.54
1	A	316	ASN	CB-CA-C	-17.01	80.61	110.72
2	B	86	ARG	CA-C-N	-16.86	96.00	120.28
2	B	86	ARG	C-N-CA	-16.86	96.00	120.28
1	A	217	ASP	N-CA-CB	-16.71	82.25	110.49
1	A	672	TYR	CB-CA-C	-16.47	83.51	110.19
2	B	87	TRP	N-CA-CB	-16.46	84.88	110.22
1	A	146	ARG	N-CA-C	-16.13	90.13	114.64
1	A	317	GLU	N-CA-C	-16.12	91.72	114.12
1	A	651	LEU	N-CA-CB	-16.10	85.95	110.42
1	A	113	GLU	CA-C-N	15.76	151.64	121.54
1	A	113	GLU	C-N-CA	15.76	151.64	121.54
1	A	112	ASP	CA-CB-CG	15.03	127.63	112.60
1	A	300	LEU	O-C-N	-14.97	102.92	122.39
1	A	194	GLU	N-CA-C	14.65	136.91	114.64
1	A	356	GLY	N-CA-C	14.18	146.79	113.18
1	A	264	ALA	N-CA-C	-13.92	96.34	113.18
1	A	774	TYR	CB-CA-C	-13.87	87.55	110.29
1	A	775	LEU	N-CA-CB	-13.71	87.64	110.68
1	A	213	LEU	N-CA-C	13.23	131.33	109.24
1	A	212	GLY	CA-C-N	-13.15	101.43	122.73
1	A	212	GLY	C-N-CA	-13.15	101.43	122.73
1	A	146	ARG	N-CA-CB	-13.06	90.29	111.06
1	A	344	ILE	N-CA-C	-12.99	97.60	110.72
1	A	722	ARG	N-CA-C	-12.98	91.25	110.46
1	A	301	GLU	O-C-N	-12.97	106.54	122.24
1	A	145	VAL	CA-C-N	-12.88	97.85	121.41
1	A	145	VAL	C-N-CA	-12.88	97.85	121.41
1	A	148	GLU	CA-C-N	-12.72	98.80	121.70
1	A	148	GLU	C-N-CA	-12.72	98.80	121.70
1	A	112	ASP	CA-C-N	12.69	140.08	122.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	112	ASP	C-N-CA	12.69	140.08	122.19
1	A	714	ALA	N-CA-C	12.44	137.31	110.80
1	A	324	ASN	N-CA-C	-12.44	97.81	111.36
1	A	713	ALA	CA-C-N	-12.22	98.19	121.54
1	A	713	ALA	C-N-CA	-12.22	98.19	121.54
1	A	566	PHE	N-CA-C	-12.18	96.88	112.23
1	A	298	LYS	N-CA-C	-12.07	94.83	113.89
1	A	357	GLU	N-CA-CB	-11.89	93.22	110.81
1	A	213	LEU	CA-C-O	11.75	134.17	120.66
1	A	47	THR	N-CA-C	-11.74	98.33	112.89
1	A	300	LEU	CA-C-N	11.70	140.63	122.49
1	A	300	LEU	C-N-CA	11.70	140.63	122.49
1	A	650	VAL	CB-CA-C	-11.53	89.97	111.30
1	A	257	VAL	N-CA-C	-11.47	98.09	113.00
1	A	317	GLU	N-CA-CB	-11.44	95.09	110.88
1	A	618	ASP	N-CA-C	11.39	126.33	111.75
1	A	208	TYR	N-CA-C	-11.38	98.96	111.36
1	A	206	GLN	N-CA-C	-11.31	98.74	112.54
1	A	113	GLU	N-CA-C	-11.29	96.50	111.74
1	A	293	GLN	OE1-CD-NE2	-11.23	111.37	122.60
1	A	686	VAL	N-CA-C	-11.23	97.03	108.15
2	B	40	ASP	CA-CB-CG	-11.16	101.44	112.60
1	A	281	GLU	N-CA-C	11.11	123.47	111.36
1	A	219	PHE	CA-CB-CG	-10.99	102.81	113.80
1	A	125	ASP	N-CA-C	-10.97	99.28	112.89
1	A	279	LEU	O-C-N	10.91	137.10	122.59
1	A	630	GLN	OE1-CD-NE2	-10.70	111.91	122.60
1	A	174	PRO	CA-C-N	-10.69	108.47	122.79
1	A	174	PRO	C-N-CA	-10.69	108.47	122.79
1	A	258	THR	O-C-N	10.52	135.48	123.28
1	A	20	ILE	N-CA-CB	-10.48	91.14	110.95
1	A	549	GLN	OE1-CD-NE2	-10.44	112.16	122.60
1	A	578	LYS	CA-C-N	-10.44	108.60	123.00
1	A	578	LYS	C-N-CA	-10.44	108.60	123.00
1	A	118	PHE	CA-C-N	-10.43	103.31	121.66
1	A	118	PHE	C-N-CA	-10.43	103.31	121.66
1	A	578	LYS	CB-CG-CD	-10.42	87.33	111.30
1	A	301	GLU	N-CA-C	-10.36	99.42	113.30
1	A	258	THR	CA-C-O	10.24	133.90	120.89
1	A	302	ILE	N-CA-C	-10.18	102.34	113.43
1	A	213	LEU	O-C-N	10.15	135.65	123.27
1	A	279	LEU	CA-C-N	10.13	140.88	121.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	279	LEU	C-N-CA	10.13	140.88	121.54
2	B	40	ASP	CA-C-N	-10.03	102.38	121.54
2	B	40	ASP	C-N-CA	-10.03	102.38	121.54
1	A	143	HIS	CA-CB-CG	-10.03	103.77	113.80
1	A	280	HIS	CB-CA-C	10.00	130.31	110.42
1	A	680	LEU	N-CA-C	-9.99	94.43	110.32
1	A	312	ASP	N-CA-C	-9.97	100.37	112.54
1	A	258	THR	N-CA-C	9.84	123.56	107.32
1	A	194	GLU	CA-C-O	-9.80	106.17	118.43
1	A	253	GLN	OE1-CD-NE2	-9.77	112.83	122.60
1	A	284	GLN	CA-C-N	-9.76	106.44	120.29
1	A	284	GLN	C-N-CA	-9.76	106.44	120.29
1	A	284	GLN	OE1-CD-NE2	-9.75	112.85	122.60
1	A	278	TYR	CB-CA-C	-9.74	92.58	111.97
1	A	775	LEU	N-CA-C	-9.73	93.03	108.90
1	A	276	GLN	OE1-CD-NE2	-9.66	112.94	122.60
1	A	291	CYS	N-CA-C	-9.59	100.70	111.82
1	A	254	GLN	OE1-CD-NE2	-9.59	113.01	122.60
1	A	548	GLN	OE1-CD-NE2	-9.58	113.02	122.60
1	A	178	GLN	OE1-CD-NE2	-9.58	113.02	122.60
1	A	736	THR	N-CA-C	-9.55	99.77	111.33
1	A	650	VAL	N-CA-C	-9.53	95.77	108.35
1	A	213	LEU	CA-C-N	9.36	143.42	121.52
1	A	213	LEU	C-N-CA	9.36	143.42	121.52
1	A	494	GLN	OE1-CD-NE2	-9.23	113.37	122.60
1	A	225	LEU	CB-CG-CD2	-9.18	83.17	110.70
1	A	224	THR	O-C-N	-9.07	110.37	122.43
1	A	550	SER	N-CA-C	9.03	130.04	110.80
1	A	181	ASN	CA-C-N	-9.03	108.01	120.38
1	A	181	ASN	C-N-CA	-9.03	108.01	120.38
1	A	224	THR	CA-C-N	8.97	138.67	121.54
1	A	224	THR	C-N-CA	8.97	138.67	121.54
1	A	350	ALA	CA-C-N	-8.91	105.13	121.52
1	A	350	ALA	C-N-CA	-8.91	105.13	121.52
1	A	686	VAL	CB-CA-C	-8.88	102.64	111.08
1	A	576	GLY	CA-C-N	-8.69	107.42	122.37
1	A	576	GLY	C-N-CA	-8.69	107.42	122.37
1	A	226	THR	OG1-CB-CG2	8.61	126.52	109.30
1	A	121	GLN	N-CA-C	-8.58	102.00	111.36
1	A	460	ASP	N-CA-C	-8.58	102.01	111.36
2	B	36	ASP	CB-CA-C	8.53	124.29	111.76
1	A	301	GLU	CA-C-N	8.49	132.85	122.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	301	GLU	C-N-CA	8.49	132.85	122.16
1	A	375	LYS	N-CA-C	-8.48	102.38	112.89
1	A	774	TYR	N-CA-C	-8.22	96.67	109.25
1	A	585	LEU	N-CA-C	8.19	124.28	113.30
1	A	111	MET	O-C-N	-8.16	111.73	122.59
1	A	144	TRP	CB-CA-C	8.16	125.94	109.38
1	A	423	ALA	N-CA-C	-8.11	102.02	111.03
1	A	175	LEU	N-CA-C	8.10	120.61	109.11
1	A	617	GLU	CA-C-N	8.08	132.18	120.38
1	A	617	GLU	C-N-CA	8.08	132.18	120.38
1	A	527	ASN	N-CA-C	-7.95	98.24	109.69
1	A	114	SER	N-CA-C	7.94	127.70	110.80
1	A	509	GLN	N-CA-C	-7.93	102.62	111.82
1	A	226	THR	CA-CB-OG1	7.91	121.46	109.60
1	A	714	ALA	N-CA-CB	-7.87	97.20	110.49
1	A	466	TYR	N-CA-C	-7.83	103.48	112.87
1	A	214	ASN	O-C-N	-7.79	109.94	122.41
1	A	738	LEU	N-CA-C	-7.78	103.93	113.50
2	B	75	CYS	N-CA-C	-7.77	103.80	113.28
1	A	648	LEU	N-CA-C	-7.76	102.81	111.82
1	A	279	LEU	CA-C-O	7.75	131.59	120.51
1	A	192	ASN	CA-C-N	-7.70	106.32	121.41
1	A	192	ASN	C-N-CA	-7.70	106.32	121.41
1	A	251	PHE	CA-CB-CG	-7.67	106.13	113.80
2	B	35	TRP	N-CA-C	-7.67	95.64	108.75
1	A	255	ASN	O-C-N	7.59	130.05	121.32
1	A	190	GLU	N-CA-C	-7.45	103.66	112.89
1	A	257	VAL	CA-C-N	-7.31	108.50	121.87
1	A	257	VAL	C-N-CA	-7.31	108.50	121.87
1	A	575	SER	CA-C-N	-7.28	107.14	121.41
1	A	575	SER	C-N-CA	-7.28	107.14	121.41
1	A	630	GLN	CG-CD-NE2	7.23	127.24	116.40
1	A	178	GLN	CG-CD-NE2	7.15	127.12	116.40
1	A	377	TYR	N-CA-C	-7.12	104.41	113.23
1	A	293	GLN	CG-CD-NE2	7.08	127.03	116.40
1	A	217	ASP	CA-C-N	7.05	131.31	121.79
1	A	217	ASP	C-N-CA	7.05	131.31	121.79
1	A	618	ASP	N-CA-CB	-7.03	99.04	110.14
2	B	39	VAL	N-CA-CB	-7.02	99.65	111.23
1	A	250	GLU	N-CA-C	-7.00	101.97	112.04
1	A	144	TRP	N-CA-C	-6.96	97.23	109.06
1	A	253	GLN	CG-CD-NE2	6.94	126.81	116.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	97	LYS	N-CA-C	-6.92	103.94	112.38
1	A	182	ALA	N-CA-CB	-6.90	99.71	110.06
1	A	603	ALA	N-CA-C	6.89	119.64	109.24
1	A	549	GLN	O-C-N	-6.88	113.44	122.59
1	A	112	ASP	O-C-N	6.86	130.99	123.10
1	A	256	PRO	N-CA-C	6.85	121.97	111.15
1	A	145	VAL	O-C-N	6.83	131.10	122.57
1	A	672	TYR	N-CA-C	-6.82	97.61	108.73
1	A	258	THR	CA-C-N	6.82	134.56	121.54
1	A	258	THR	C-N-CA	6.82	134.56	121.54
1	A	195	THR	CA-C-O	6.80	128.59	121.38
1	A	417	LYS	N-CA-C	-6.79	103.81	111.14
2	B	21	ARG	N-CA-C	6.77	119.44	108.41
1	A	148	GLU	N-CA-C	-6.75	96.42	110.80
1	A	149	CYS	N-CA-CB	-6.75	99.03	110.50
1	A	297	GLU	N-CA-C	6.68	126.65	113.29
1	A	148	GLU	N-CA-CB	6.65	121.73	110.49
1	A	111	MET	CA-C-O	-6.62	111.05	120.51
1	A	284	GLN	CG-CD-NE2	6.61	126.32	116.40
1	A	435	LYS	N-CA-C	-6.58	96.80	110.80
1	A	251	PHE	CB-CA-C	-6.57	99.69	110.85
1	A	254	GLN	CA-C-N	-6.56	105.80	121.80
1	A	254	GLN	C-N-CA	-6.56	105.80	121.80
1	A	219	PHE	O-C-N	6.54	130.42	123.03
1	A	736	THR	N-CA-CB	-6.49	100.32	110.06
2	B	37	ILE	CA-C-N	6.44	133.57	121.97
2	B	37	ILE	C-N-CA	6.44	133.57	121.97
1	A	548	GLN	CG-CD-NE2	6.43	126.04	116.40
1	A	671	LEU	N-CA-C	-6.43	99.54	109.76
1	A	616	THR	CA-C-N	-6.41	111.06	121.26
1	A	616	THR	C-N-CA	-6.41	111.06	121.26
1	A	278	TYR	O-C-N	6.36	130.51	121.92
1	A	254	GLN	CG-CD-NE2	6.35	125.92	116.40
1	A	276	GLN	CG-CD-NE2	6.30	125.86	116.40
1	A	255	ASN	CA-C-N	6.28	126.30	119.90
1	A	255	ASN	C-N-CA	6.28	126.30	119.90
1	A	549	GLN	CG-CD-NE2	6.24	125.75	116.40
1	A	494	GLN	CG-CD-NE2	6.22	125.73	116.40
1	A	278	TYR	CA-CB-CG	-6.21	102.71	113.90
1	A	664	LYS	CA-C-N	6.21	127.60	119.84
1	A	664	LYS	C-N-CA	6.21	127.60	119.84
1	A	112	ASP	N-CA-CB	-6.20	101.76	111.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	B	38	VAL	CB-CA-C	-6.18	101.15	111.29
1	A	735	LEU	N-CA-C	-6.17	104.47	111.07
1	A	214	ASN	N-CA-C	6.16	120.52	113.19
1	A	250	GLU	CA-C-N	-6.14	111.56	120.29
1	A	250	GLU	C-N-CA	-6.14	111.56	120.29
1	A	33	THR	N-CA-C	-6.10	104.43	112.24
1	A	170	CYS	N-CA-C	-5.99	98.03	110.80
2	B	100	GLU	N-CA-C	5.97	118.03	110.33
1	A	313	ALA	N-CA-C	-5.95	99.21	108.90
1	A	48	HIS	N-CA-C	-5.92	104.82	111.28
1	A	279	LEU	CB-CA-C	-5.92	98.64	110.42
1	A	173	ARG	O-C-N	5.91	128.12	121.32
1	A	392	VAL	N-CA-C	-5.88	103.74	111.09
1	A	255	ASN	CB-CA-C	5.86	121.72	110.17
2	B	38	VAL	N-CA-C	5.84	121.48	109.34
1	A	281	GLU	N-CA-CB	-5.77	101.62	110.16
1	A	275	VAL	N-CA-C	-5.74	107.68	113.47
1	A	145	VAL	N-CA-CB	5.73	120.69	111.23
1	A	281	GLU	CA-CB-CG	-5.71	102.68	114.10
1	A	276	GLN	N-CA-C	-5.67	106.26	112.72
1	A	632	LYS	CB-CA-C	-5.62	99.23	110.42
1	A	672	TYR	CA-C-N	5.60	131.52	121.66
1	A	672	TYR	C-N-CA	5.60	131.52	121.66
2	B	35	TRP	CA-C-O	5.58	127.40	120.54
1	A	632	LYS	N-CA-C	5.57	122.67	110.80
1	A	723	LYS	N-CA-C	-5.55	105.61	112.72
2	B	74	VAL	N-CA-C	-5.55	97.80	109.34
1	A	475	VAL	CB-CA-C	-5.52	104.00	112.05
1	A	544	SER	N-CA-C	5.51	119.26	112.54
1	A	760	GLU	N-CA-C	5.50	118.78	111.30
2	B	81	PHE	N-CA-C	-5.50	104.98	110.97
1	A	674	GLY	N-CA-C	-5.50	108.12	115.32
1	A	254	GLN	CB-CA-C	5.49	120.71	109.67
1	A	704	GLU	CA-C-N	-5.48	111.36	120.68
1	A	704	GLU	C-N-CA	-5.48	111.36	120.68
1	A	256	PRO	CA-C-N	-5.48	112.47	121.19
1	A	256	PRO	C-N-CA	-5.48	112.47	121.19
1	A	195	THR	CB-CA-C	-5.39	100.60	111.17
2	B	32	LEU	N-CA-C	-5.39	101.49	110.17
1	A	268	LEU	N-CA-C	-5.38	105.32	111.07
1	A	195	THR	O-C-N	5.38	128.91	123.26
1	A	484	ALA	N-CA-C	-5.37	104.31	111.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	642	ILE	CB-CA-C	-5.36	105.10	111.97
1	A	578	LYS	O-C-N	5.36	129.32	123.27
1	A	640	LEU	N-CA-C	-5.35	105.56	111.71
1	A	161	SER	N-CA-C	-5.25	104.81	111.11
1	A	248	SER	N-CA-C	-5.19	105.27	111.03
1	A	602	GLN	N-CA-C	-5.19	100.06	108.41
1	A	107	GLY	N-CA-C	-5.17	108.70	115.47
1	A	435	LYS	CB-CA-C	5.16	120.68	110.42
1	A	277	VAL	CA-C-N	5.14	131.00	122.62
1	A	277	VAL	C-N-CA	5.14	131.00	122.62
1	A	725	LEU	N-CA-C	5.14	117.19	109.23
1	A	112	ASP	CA-C-O	5.13	126.94	121.45
1	A	99	TYR	N-CA-C	-5.11	105.60	111.07
1	A	621	THR	N-CA-C	-5.11	103.30	110.35
1	A	177	LYS	CA-C-N	-5.10	112.44	120.60
1	A	177	LYS	C-N-CA	-5.10	112.44	120.60
2	B	39	VAL	CA-C-N	5.08	131.25	121.54
2	B	39	VAL	C-N-CA	5.08	131.25	121.54
1	A	567	THR	N-CA-C	-5.08	105.87	111.71
1	A	195	THR	CA-C-N	5.03	127.62	120.53
1	A	195	THR	C-N-CA	5.03	127.62	120.53
2	B	51	ASP	N-CA-C	-5.03	107.43	113.21

All (1) chirality outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atom
1	A	226	THR	CB

All (14) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	113	GLU	Peptide
1	A	118	PHE	Peptide
1	A	145	VAL	Peptide
1	A	148	GLU	Peptide
1	A	181	ASN	Peptide
1	A	214	ASN	Mainchain
1	A	217	ASP	Mainchain,Peptide
1	A	224	THR	Mainchain,Peptide
1	A	301	GLU	Mainchain
1	A	350	ALA	Peptide
1	A	599	TYR	Sidechain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
2	B	86	ARG	Peptide

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	5934	0	5956	975	1
2	B	731	0	686	159	0
3	B	3	0	0	0	0
All	All	6668	0	6642	1099	1

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 83.

All (1099) 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:275:VAL:HG12	1:A:279:LEU:CD1	1.28	1.57
1:A:275:VAL:CG1	1:A:279:LEU:CD1	1.77	1.55
1:A:275:VAL:CG1	1:A:279:LEU:HD11	1.26	1.53
1:A:351:ALA:CA	1:A:351:ALA:N	1.72	1.52
2:B:87:TRP:N	2:B:87:TRP:CA	1.72	1.51
1:A:257:VAL:HG21	1:A:306:GLU:CD	1.28	1.50
1:A:714:ALA:N	1:A:714:ALA:CA	1.79	1.44
1:A:119:TYR:N	1:A:119:TYR:CA	1.77	1.44
1:A:257:VAL:CG2	1:A:306:GLU:CD	1.90	1.41
1:A:259:GLU:OE1	1:A:262:LYS:CD	1.67	1.40
1:A:577:ARG:O	1:A:577:ARG:HD3	1.22	1.35
1:A:146:ARG:N	1:A:146:ARG:CA	1.90	1.33
1:A:119:TYR:CD2	1:A:175:LEU:CD1	2.09	1.33
1:A:283:THR:O	1:A:287:LEU:CB	1.76	1.32
1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:CA	1.92	1.30
1:A:257:VAL:HG21	1:A:306:GLU:CG	1.62	1.28
1:A:189:LYS:CD	1:A:192:ASN:O	1.82	1.27
2:B:86:ARG:C	2:B:87:TRP:CA	2.08	1.26
1:A:301:GLU:O	1:A:302:ILE:N	1.66	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:189:LYS:HD2	1:A:192:ASN:O	1.07	1.23
1:A:301:GLU:C	1:A:302:ILE:CA	2.11	1.22
1:A:283:THR:O	1:A:287:LEU:HB2	1.10	1.22
1:A:275:VAL:HG11	1:A:284:GLN:CG	1.68	1.21
1:A:259:GLU:OE1	1:A:262:LYS:HD3	1.06	1.21
1:A:194:GLU:CB	1:A:195:THR:HB	1.63	1.19
1:A:577:ARG:O	1:A:577:ARG:CD	1.90	1.19
1:A:173:ARG:HB3	1:A:174:PRO:CD	1.71	1.19
1:A:298:LYS:HZ3	1:A:298:LYS:HB3	1.07	1.17
1:A:257:VAL:CG2	1:A:306:GLU:CG	2.22	1.17
1:A:205:VAL:HG11	1:A:280:HIS:CD2	1.80	1.17
1:A:223:PRO:CB	1:A:225:LEU:HD11	1.74	1.16
1:A:257:VAL:HG21	1:A:306:GLU:OE1	1.45	1.16
1:A:618:ASP:OD1	2:B:20:LYS:CD	1.76	1.15
1:A:275:VAL:HG13	1:A:279:LEU:HD12	1.17	1.15
1:A:298:LYS:HB3	1:A:298:LYS:NZ	1.61	1.14
1:A:149:CYS:N	1:A:149:CYS:CA	2.11	1.13
1:A:223:PRO:HB2	1:A:225:LEU:CD1	1.78	1.13
1:A:119:TYR:CD2	1:A:175:LEU:HD12	1.76	1.12
1:A:356:GLY:O	1:A:411:MET:SD	2.07	1.13
1:A:297:GLU:HA	1:A:300:LEU:HG	1.21	1.12
1:A:301:GLU:CA	1:A:302:ILE:N	2.11	1.12
2:B:41:ASN:HA	2:B:48:HIS:H	0.96	1.10
2:B:74:VAL:HG21	2:B:102:GLU:HB2	1.26	1.10
1:A:275:VAL:HG11	1:A:284:GLN:HG3	1.33	1.10
1:A:650:VAL:HG23	1:A:650:VAL:O	1.36	1.09
1:A:251:PHE:CE2	1:A:255:ASN:HB2	1.86	1.09
1:A:255:ASN:HB3	1:A:256:PRO:HD2	1.33	1.09
1:A:550:SER:HB2	1:A:584:GLN:NE2	1.68	1.09
1:A:257:VAL:CG2	1:A:306:GLU:HG2	1.79	1.08
1:A:195:THR:OG1	1:A:196:ILE:N	1.78	1.07
1:A:252:LEU:C	1:A:253:GLN:HE21	1.60	1.07
1:A:223:PRO:HB2	1:A:225:LEU:HD11	1.29	1.07
1:A:593:ASN:ND2	2:B:21:ARG:HG2	1.68	1.06
1:A:593:ASN:HD22	2:B:21:ARG:HG2	0.95	1.06
1:A:650:VAL:O	1:A:650:VAL:CG2	2.00	1.06
1:A:205:VAL:CG1	1:A:280:HIS:CD2	2.38	1.06
1:A:618:ASP:OD1	2:B:20:LYS:HD2	1.27	1.05
2:B:87:TRP:N	2:B:87:TRP:CB	2.19	1.05
1:A:297:GLU:CG	1:A:297:GLU:O	2.01	1.05
1:A:297:GLU:O	1:A:297:GLU:HG3	1.55	1.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:570:TYR:CE2	1:A:577:ARG:HG2	1.90	1.05
1:A:450:MET:HG3	1:A:491:LYS:HG2	1.35	1.04
2:B:38:VAL:HG12	2:B:40:ASP:H	1.22	1.04
1:A:375:LYS:HA	1:A:375:LYS:HE2	1.32	1.04
1:A:19:GLN:C	1:A:20:ILE:CA	2.31	1.04
1:A:275:VAL:HG11	1:A:284:GLN:HG2	1.40	1.04
1:A:688:MET:HE3	1:A:688:MET:N	1.72	1.03
1:A:111:MET:SD	1:A:112:ASP:N	2.32	1.03
2:B:41:ASN:HA	2:B:48:HIS:N	1.73	1.03
1:A:119:TYR:CD2	1:A:175:LEU:HD13	1.86	1.02
1:A:173:ARG:HB3	1:A:174:PRO:HD2	1.04	1.02
1:A:252:LEU:O	1:A:253:GLN:NE2	1.92	1.02
1:A:229:LYS:HA	1:A:233:GLU:HB3	1.38	1.01
1:A:352:ILE:HD13	1:A:408:VAL:HG23	1.38	1.01
1:A:275:VAL:CG1	1:A:279:LEU:HD12	1.71	1.01
2:B:38:VAL:CG1	2:B:40:ASP:H	1.74	1.00
1:A:298:LYS:NZ	1:A:298:LYS:CB	2.25	1.00
1:A:255:ASN:CB	1:A:256:PRO:HD2	1.90	0.98
1:A:201:ILE:HB	1:A:278:TYR:CE2	1.97	0.98
1:A:550:SER:CB	1:A:584:GLN:HE22	1.77	0.97
1:A:253:GLN:HE21	1:A:253:GLN:HA	1.29	0.97
1:A:252:LEU:C	1:A:253:GLN:NE2	2.21	0.97
1:A:550:SER:CB	1:A:584:GLN:NE2	2.28	0.96
1:A:145:VAL:HG12	1:A:145:VAL:O	1.66	0.96
2:B:39:VAL:O	2:B:41:ASN:N	1.97	0.96
2:B:86:ARG:O	2:B:87:TRP:CA	2.14	0.96
1:A:642:ILE:CD1	1:A:687:PRO:HA	1.96	0.95
1:A:550:SER:HB3	1:A:584:GLN:HE22	1.31	0.95
1:A:577:ARG:HD3	1:A:577:ARG:C	1.88	0.95
1:A:119:TYR:CG	1:A:175:LEU:CD1	2.48	0.95
1:A:259:GLU:OE1	1:A:262:LYS:HD2	1.67	0.95
1:A:115:VAL:O	1:A:119:TYR:N	2.00	0.95
1:A:713:ALA:C	1:A:714:ALA:CA	2.38	0.95
1:A:253:GLN:HE21	1:A:253:GLN:CA	1.81	0.94
1:A:529:GLU:HB3	1:A:565:ARG:HH12	1.31	0.94
1:A:719:MET:HE1	1:A:725:LEU:HB3	1.50	0.94
1:A:119:TYR:CG	1:A:175:LEU:HD13	2.02	0.94
1:A:171:LEU:HD12	1:A:175:LEU:O	1.68	0.94
2:B:74:VAL:CG2	2:B:102:GLU:HB2	1.98	0.94
1:A:471:ALA:O	1:A:475:VAL:HG23	1.68	0.93
2:B:47:ASN:HD22	2:B:52:LEU:HD23	1.31	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:301:GLU:C	1:A:302:ILE:N	0.83	0.93
1:A:103:LEU:HD21	1:A:122:GLN:NE2	1.84	0.93
1:A:275:VAL:CG1	1:A:284:GLN:CG	2.47	0.92
1:A:357:GLU:HA	1:A:411:MET:HE1	1.50	0.91
1:A:608:MET:HE1	2:B:24:VAL:HG13	1.51	0.91
1:A:19:GLN:O	1:A:20:ILE:CA	2.19	0.91
1:A:593:ASN:HD22	2:B:21:ARG:CG	1.83	0.91
1:A:560:GLU:HG3	1:A:564:GLN:HE21	1.36	0.90
1:A:118:PHE:C	1:A:119:TYR:CA	2.45	0.90
1:A:686:VAL:HG23	1:A:686:VAL:O	1.70	0.90
2:B:87:TRP:N	2:B:87:TRP:HB2	1.86	0.90
1:A:350:ALA:C	1:A:351:ALA:CA	2.43	0.90
1:A:173:ARG:CB	1:A:174:PRO:HD2	1.99	0.90
1:A:351:ALA:N	1:A:351:ALA:C	2.29	0.89
1:A:89:TYR:HE2	1:A:162:LEU:HG	1.37	0.89
1:A:191:ARG:C	1:A:192:ASN:CG	2.37	0.89
1:A:146:ARG:N	1:A:147:ARG:H	1.70	0.89
1:A:279:LEU:HG	1:A:280:HIS:O	1.73	0.88
1:A:194:GLU:HB2	1:A:195:THR:HB	0.89	0.88
1:A:146:ARG:N	1:A:147:ARG:N	2.22	0.87
1:A:538:GLN:HB2	2:B:30:VAL:HG22	1.54	0.87
1:A:205:VAL:CG1	1:A:280:HIS:NE2	2.37	0.87
1:A:146:ARG:H	1:A:147:ARG:H	1.20	0.87
1:A:205:VAL:HG11	1:A:280:HIS:NE2	1.88	0.87
1:A:111:MET:CE	1:A:112:ASP:OD1	2.23	0.87
1:A:119:TYR:N	1:A:119:TYR:C	2.33	0.86
1:A:145:VAL:C	1:A:146:ARG:CA	2.47	0.86
1:A:191:ARG:HH11	1:A:192:ASN:HD21	1.20	0.85
1:A:586:SER:OG	1:A:605:THR:OG1	1.63	0.85
2:B:38:VAL:HG12	2:B:40:ASP:N	1.92	0.85
1:A:201:ILE:HB	1:A:278:TYR:HE2	1.39	0.85
1:A:525:LEU:HD21	1:A:531:LEU:HB2	1.57	0.85
1:A:587:LYS:HB2	2:B:28:ASN:HB2	1.59	0.85
1:A:226:THR:O	1:A:230:GLU:HG2	1.77	0.84
1:A:119:TYR:N	1:A:120:THR:N	2.26	0.84
1:A:171:LEU:C	1:A:173:ARG:H	1.85	0.84
1:A:493:LYS:NZ	1:A:505:GLN:HE22	1.75	0.84
1:A:275:VAL:CG1	1:A:284:GLN:HG2	2.08	0.83
1:A:193:GLY:O	1:A:194:GLU:HB3	1.76	0.83
1:A:275:VAL:CB	1:A:279:LEU:HD11	2.08	0.83
1:A:520:GLN:HG2	1:A:573:ARG:HH22	1.41	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:570:TYR:HE2	1:A:577:ARG:HG2	1.39	0.83
1:A:257:VAL:HG23	1:A:306:GLU:CD	2.03	0.83
2:B:86:ARG:O	2:B:87:TRP:HA	1.76	0.83
1:A:493:LYS:HZ1	1:A:505:GLN:HE22	1.25	0.83
1:A:244:TYR:CE2	1:A:267:ARG:HD3	2.14	0.83
2:B:39:VAL:C	2:B:41:ASN:H	1.87	0.83
1:A:223:PRO:HB3	1:A:225:LEU:HD11	1.59	0.82
1:A:540:LEU:HB3	1:A:545:TRP:CD1	2.13	0.82
2:B:84:ILE:O	2:B:88:LEU:HG	1.79	0.82
1:A:574:HIS:HB3	1:A:577:ARG:HB3	1.59	0.82
1:A:678:LYS:O	1:A:679:LYS:HD3	1.79	0.82
1:A:96:LEU:HB3	1:A:166:THR:HG21	1.59	0.82
1:A:470:LEU:HD22	1:A:474:LEU:HG	1.61	0.82
1:A:213:LEU:HD12	1:A:214:ASN:ND2	1.95	0.81
2:B:37:ILE:CG2	2:B:37:ILE:O	2.28	0.81
1:A:257:VAL:HG23	1:A:306:GLU:CG	2.10	0.81
1:A:426:CYS:SG	1:A:449:VAL:HG11	2.21	0.81
1:A:173:ARG:O	1:A:175:LEU:N	2.13	0.81
1:A:229:LYS:HA	1:A:233:GLU:CB	2.11	0.81
1:A:506:ARG:HH11	2:B:104:GLN:HE22	1.26	0.81
1:A:191:ARG:O	1:A:192:ASN:OD1	1.99	0.80
1:A:257:VAL:HG23	1:A:306:GLU:HG2	1.61	0.80
2:B:47:ASN:ND2	2:B:52:LEU:HB3	1.96	0.80
1:A:652:GLU:CD	1:A:652:GLU:H	1.88	0.80
1:A:688:MET:N	1:A:688:MET:CE	2.45	0.80
1:A:204:VAL:HG12	1:A:208:TYR:HE1	1.44	0.80
1:A:422:LEU:HD22	1:A:449:VAL:HG13	1.63	0.79
1:A:584:GLN:HG2	1:A:585:LEU:HG	1.64	0.79
1:A:174:PRO:O	1:A:175:LEU:HD23	1.82	0.79
1:A:554:ALA:HB2	1:A:630:GLN:HB2	1.65	0.79
1:A:86:LEU:HA	1:A:144:TRP:HE1	1.48	0.79
1:A:146:ARG:N	1:A:146:ARG:CB	2.45	0.79
1:A:189:LYS:CE	1:A:192:ASN:O	2.30	0.79
1:A:688:MET:HE3	1:A:688:MET:CA	2.12	0.79
1:A:348:GLY:HA2	1:A:373:VAL:HG21	1.65	0.79
1:A:297:GLU:HA	1:A:300:LEU:CG	2.09	0.79
1:A:406:ASN:C	1:A:406:ASN:HD22	1.90	0.78
1:A:528:SER:O	1:A:529:GLU:HG3	1.83	0.78
1:A:617:GLU:O	1:A:620:TYR:HE1	1.63	0.78
2:B:41:ASN:CA	2:B:48:HIS:H	1.87	0.78
1:A:233:GLU:OE1	1:A:283:THR:OG1	1.99	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:213:LEU:HG	1:A:214:ASN:N	1.98	0.78
1:A:719:MET:O	1:A:722:ARG:O	2.00	0.78
1:A:212:GLY:HA3	1:A:224:THR:HB	1.66	0.78
1:A:255:ASN:CB	1:A:256:PRO:CD	2.61	0.78
1:A:213:LEU:HD12	1:A:214:ASN:CG	2.09	0.78
1:A:549:GLN:NE2	1:A:550:SER:N	2.31	0.78
2:B:87:TRP:CZ2	2:B:95:PRO:HB3	2.18	0.78
1:A:251:PHE:CE2	1:A:255:ASN:CB	2.67	0.77
1:A:297:GLU:O	1:A:297:GLU:HG2	1.82	0.77
1:A:253:GLN:HE21	1:A:253:GLN:N	1.81	0.77
1:A:253:GLN:NE2	1:A:253:GLN:HA	1.91	0.77
1:A:298:LYS:CB	1:A:298:LYS:HZ2	1.97	0.77
1:A:353:GLU:HG2	1:A:407:ALA:HB2	1.65	0.77
1:A:276:GLN:HA	1:A:279:LEU:HD22	1.65	0.77
1:A:351:ALA:N	1:A:352:ILE:N	2.32	0.77
1:A:433:SER:O	1:A:435:LYS:O	2.02	0.77
2:B:94:CYS:HB3	2:B:97:ASP:OD2	1.85	0.77
1:A:146:ARG:N	1:A:146:ARG:C	2.43	0.77
2:B:37:ILE:O	2:B:37:ILE:HG22	1.84	0.77
1:A:205:VAL:HG11	1:A:280:HIS:HD2	1.48	0.76
1:A:134:ASN:HD22	1:A:160:TYR:H	1.31	0.76
1:A:84:VAL:C	1:A:86:LEU:H	1.93	0.76
1:A:119:TYR:HD2	1:A:175:LEU:HD12	1.46	0.76
2:B:99:ARG:HE	2:B:99:ARG:H	1.30	0.76
1:A:205:VAL:O	1:A:209:VAL:HG23	1.85	0.75
1:A:283:THR:O	1:A:287:LEU:HB3	1.83	0.75
2:B:45:CYS:HB2	2:B:54:ILE:HD12	1.68	0.75
1:A:714:ALA:N	1:A:714:ALA:CB	2.48	0.75
2:B:93:VAL:HB	2:B:98:ASN:O	1.86	0.75
1:A:617:GLU:O	1:A:620:TYR:CE1	2.38	0.75
1:A:167:TRP:C	1:A:169:ASP:H	1.94	0.75
1:A:261:MET:O	1:A:265:GLU:HB2	1.86	0.75
1:A:213:LEU:HD12	1:A:214:ASN:H	1.51	0.75
1:A:271:GLU:HB3	1:A:287:LEU:HD11	1.68	0.75
1:A:301:GLU:O	1:A:302:ILE:CA	2.25	0.74
1:A:577:ARG:O	1:A:577:ARG:HD2	1.86	0.74
1:A:275:VAL:CG1	1:A:284:GLN:HG3	2.15	0.74
1:A:574:HIS:HB2	1:A:577:ARG:HG3	1.68	0.74
1:A:610:ILE:O	1:A:613:GLN:HB2	1.86	0.74
1:A:525:LEU:C	1:A:527:ASN:H	1.93	0.74
1:A:643:LEU:HB3	1:A:649:LEU:HD23	1.68	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:77:HIS:CE1	2:B:97:ASP:HB3	2.23	0.74
2:B:86:ARG:NH1	2:B:86:ARG:HB2	2.02	0.74
1:A:727:HIS:HB2	1:A:770:ASP:HB3	1.68	0.74
1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:CB	2.50	0.74
1:A:87:GLU:HA	1:A:90:LYS:HE2	1.68	0.74
1:A:244:TYR:HE2	1:A:267:ARG:HD3	1.53	0.74
1:A:463:GLN:HB2	1:A:500:TYR:CZ	2.22	0.74
1:A:116:LEU:HD23	1:A:117:LYS:N	2.02	0.74
1:A:549:GLN:O	1:A:550:SER:CB	2.13	0.74
1:A:134:ASN:HD22	1:A:160:TYR:CB	2.01	0.73
1:A:453:PHE:HA	1:A:456:ILE:HG12	1.70	0.73
1:A:549:GLN:O	1:A:550:SER:HB3	1.87	0.73
1:A:145:VAL:O	1:A:145:VAL:CG1	2.35	0.73
1:A:701:LYS:HG3	1:A:704:GLU:OE2	1.88	0.73
1:A:397:LYS:O	1:A:401:ARG:HG2	1.89	0.73
1:A:86:LEU:HG	1:A:144:TRP:HZ2	1.53	0.73
2:B:47:ASN:HD22	2:B:52:LEU:CD2	2.01	0.73
2:B:77:HIS:HE1	2:B:97:ASP:HB3	1.53	0.72
1:A:119:TYR:N	1:A:120:THR:H	1.86	0.72
1:A:642:ILE:HD11	1:A:687:PRO:HA	1.69	0.72
1:A:642:ILE:HD13	1:A:687:PRO:HA	1.69	0.72
2:B:56:CYS:SG	2:B:65:SER:HA	2.29	0.72
1:A:134:ASN:ND2	1:A:160:TYR:H	1.86	0.72
1:A:191:ARG:HB2	1:A:192:ASN:ND2	2.04	0.72
1:A:255:ASN:HB3	1:A:256:PRO:CD	2.17	0.72
1:A:327:SER:HA	1:A:333:LEU:HD21	1.72	0.72
1:A:213:LEU:CG	1:A:214:ASN:N	2.51	0.72
1:A:340:LEU:O	1:A:344:ILE:HG23	1.90	0.72
1:A:549:GLN:NE2	1:A:550:SER:H	1.87	0.72
1:A:171:LEU:O	1:A:173:ARG:O	2.08	0.71
1:A:508:PHE:O	1:A:511:ILE:HG22	1.89	0.71
1:A:719:MET:HE1	1:A:725:LEU:CB	2.20	0.71
1:A:194:GLU:HB2	1:A:195:THR:CB	1.83	0.71
1:A:111:MET:HE2	1:A:112:ASP:OD1	1.89	0.71
2:B:93:VAL:HA	2:B:100:GLU:HA	1.73	0.71
1:A:301:GLU:N	1:A:302:ILE:N	2.38	0.71
2:B:47:ASN:HB2	2:B:52:LEU:HD23	1.72	0.71
2:B:44:ILE:HD11	2:B:95:PRO:HB2	1.72	0.70
2:B:87:TRP:O	2:B:90:THR:HG23	1.91	0.70
1:A:189:LYS:HD2	1:A:192:ASN:C	2.10	0.70
1:A:257:VAL:CG2	1:A:306:GLU:OE1	2.19	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:271:GLU:O	1:A:275:VAL:HG23	1.91	0.70
1:A:574:HIS:CB	1:A:577:ARG:HB3	2.21	0.70
1:A:89:TYR:CE2	1:A:162:LEU:HG	2.23	0.70
1:A:407:ALA:O	1:A:411:MET:HG3	1.91	0.70
2:B:47:ASN:ND2	2:B:52:LEU:HD23	2.06	0.70
1:A:173:ARG:CB	1:A:174:PRO:CD	2.50	0.70
1:A:763:GLU:HB3	1:A:775:LEU:HD12	1.72	0.70
1:A:549:GLN:HE21	1:A:550:SER:H	1.37	0.70
1:A:715:ILE:HB	1:A:756:LEU:HD12	1.74	0.70
1:A:445:THR:O	1:A:449:VAL:HG23	1.91	0.69
1:A:488:MET:HE1	1:A:492:LEU:HD21	1.74	0.69
1:A:191:ARG:C	1:A:192:ASN:OD1	2.35	0.69
1:A:520:GLN:HB3	1:A:569:PHE:HZ	1.56	0.69
1:A:540:LEU:O	2:B:32:LEU:HA	1.92	0.69
1:A:116:LEU:HD11	1:A:200:LEU:HD13	1.74	0.69
1:A:191:ARG:HB2	1:A:192:ASN:HD21	1.56	0.69
1:A:427:ASP:O	1:A:431:LYS:HG3	1.92	0.69
1:A:549:GLN:HE21	1:A:550:SER:N	1.90	0.69
1:A:465:PHE:CE2	1:A:699:THR:HG21	2.27	0.69
1:A:205:VAL:HG12	1:A:280:HIS:NE2	2.07	0.69
1:A:251:PHE:CZ	1:A:255:ASN:HB2	2.28	0.69
1:A:360:LEU:HD22	1:A:411:MET:HE2	1.72	0.69
1:A:337:LYS:O	1:A:341:GLU:HB2	1.92	0.69
1:A:584:GLN:H	1:A:584:GLN:HE21	1.39	0.69
1:A:724:VAL:HG22	1:A:773:SER:OG	1.92	0.69
1:A:427:ASP:CG	1:A:469:MET:HG2	2.18	0.69
1:A:594:CYS:HB3	2:B:21:ARG:H	1.58	0.69
2:B:103:PHE:O	2:B:104:GLN:HB3	1.92	0.69
1:A:223:PRO:HB2	1:A:225:LEU:HD12	1.72	0.68
1:A:351:ALA:N	1:A:351:ALA:CB	2.54	0.68
1:A:517:LEU:HD23	1:A:517:LEU:O	1.93	0.68
1:A:460:ASP:OD2	1:A:707:ARG:HD3	1.93	0.68
1:A:541:SER:O	1:A:543:GLY:N	2.27	0.68
1:A:578:LYS:C	1:A:578:LYS:HG3	2.14	0.68
1:A:148:GLU:C	1:A:149:CYS:CA	2.66	0.68
1:A:506:ARG:HH11	2:B:104:GLN:NE2	1.91	0.68
2:B:28:ASN:N	2:B:28:ASN:HD22	1.91	0.68
1:A:296:ILE:N	1:A:296:ILE:HD12	2.09	0.68
1:A:107:GLY:HA2	1:A:110:LEU:HD12	1.76	0.68
1:A:600:THR:O	1:A:681:ARG:HA	1.94	0.68
1:A:642:ILE:HD11	1:A:687:PRO:C	2.19	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:191:ARG:HH11	1:A:192:ASN:ND2	1.92	0.68
1:A:333:LEU:H	1:A:333:LEU:HD22	1.57	0.68
1:A:204:VAL:HG12	1:A:208:TYR:CE1	2.27	0.68
2:B:47:ASN:HD22	2:B:52:LEU:HB3	1.59	0.68
1:A:496:CYS:HB2	1:A:500:TYR:CB	2.23	0.67
1:A:364:LYS:O	1:A:368:GLN:HB2	1.94	0.67
2:B:49:ILE:CG2	2:B:70:VAL:HG12	2.23	0.67
1:A:276:GLN:HA	1:A:279:LEU:CD2	2.23	0.67
1:A:614:TYR:CD1	1:A:618:ASP:O	2.47	0.67
1:A:636:LEU:HD22	1:A:640:LEU:HG	1.76	0.67
1:A:103:LEU:HD21	1:A:122:GLN:HE21	1.55	0.67
1:A:116:LEU:HD21	1:A:200:LEU:HD22	1.77	0.67
1:A:49:VAL:HG13	1:A:88:LEU:HD21	1.77	0.67
1:A:643:LEU:O	1:A:646:SER:O	2.13	0.67
1:A:735:LEU:O	1:A:736:THR:C	2.37	0.67
1:A:602:GLN:HB2	1:A:683:ASN:HA	1.76	0.67
2:B:44:ILE:O	2:B:45:CYS:HB3	1.92	0.67
1:A:596:LYS:HG3	1:A:596:LYS:O	1.94	0.67
1:A:279:LEU:HD11	1:A:284:GLN:HE21	1.59	0.66
1:A:616:THR:O	1:A:617:GLU:C	2.32	0.66
1:A:644:LEU:O	1:A:646:SER:O	2.13	0.66
1:A:715:ILE:HB	1:A:756:LEU:CD1	2.25	0.66
1:A:207:SER:O	1:A:211:LEU:HD23	1.96	0.66
1:A:553:PHE:HZ	1:A:609:ALA:HB2	1.60	0.66
1:A:696:GLN:O	1:A:699:THR:HG22	1.94	0.66
1:A:726:LYS:HB2	1:A:729:GLN:NE2	2.11	0.66
1:A:688:MET:N	1:A:688:MET:SD	2.68	0.66
1:A:31:VAL:HG13	1:A:32:TYR:CD1	2.31	0.66
1:A:688:MET:HB2	1:A:690:THR:HG23	1.78	0.66
1:A:190:GLU:HB2	1:A:243:PHE:CE2	2.31	0.66
1:A:24:LEU:HD11	1:A:49:VAL:HG22	1.78	0.66
1:A:298:LYS:HZ2	1:A:298:LYS:HB2	1.60	0.66
1:A:422:LEU:HD22	1:A:449:VAL:CG1	2.25	0.66
1:A:592:THR:HG22	2:B:22:PHE:CD2	2.31	0.66
2:B:38:VAL:HG12	2:B:40:ASP:CB	2.26	0.66
1:A:223:PRO:CB	1:A:225:LEU:CD1	2.51	0.65
1:A:205:VAL:HG11	1:A:279:LEU:O	1.95	0.65
1:A:626:THR:HG23	1:A:636:LEU:HD12	1.77	0.65
1:A:279:LEU:HG	1:A:280:HIS:C	2.21	0.65
1:A:520:GLN:HG2	1:A:573:ARG:NH2	2.11	0.65
1:A:207:SER:O	1:A:211:LEU:CD2	2.44	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:406:ASN:HD21	1:A:408:VAL:HB	1.60	0.65
1:A:638:GLN:O	1:A:641:GLN:HB3	1.97	0.65
1:A:191:ARG:NH1	1:A:192:ASN:HD21	1.94	0.65
1:A:450:MET:SD	1:A:492:LEU:HD23	2.35	0.65
1:A:213:LEU:CD1	1:A:214:ASN:H	2.09	0.65
1:A:475:VAL:CG2	1:A:547:PHE:HZ	2.10	0.65
1:A:268:LEU:HG	1:A:295:LEU:HD12	1.79	0.65
1:A:506:ARG:HD3	1:A:544:SER:OG	1.97	0.65
1:A:191:ARG:HD3	1:A:192:ASN:ND2	2.12	0.64
1:A:352:ILE:C	1:A:352:ILE:HD12	2.22	0.64
1:A:548:GLN:O	1:A:549:GLN:O	2.15	0.64
2:B:38:VAL:HG12	2:B:38:VAL:O	1.97	0.64
1:A:172:PHE:O	1:A:173:ARG:HG2	1.97	0.64
1:A:145:VAL:HG21	1:A:157:TYR:CB	2.27	0.64
1:A:173:ARG:C	1:A:175:LEU:N	2.55	0.64
2:B:86:ARG:CB	2:B:86:ARG:HH11	2.09	0.64
1:A:137:CYS:HB2	1:A:159:ILE:HG21	1.79	0.64
1:A:275:VAL:HG13	1:A:279:LEU:CD1	1.74	0.64
2:B:90:THR:OG1	2:B:91:ARG:N	2.26	0.64
1:A:146:ARG:N	1:A:146:ARG:HB2	2.12	0.64
1:A:275:VAL:HG12	1:A:284:GLN:HE21	1.62	0.64
1:A:652:GLU:CD	1:A:652:GLU:N	2.56	0.64
1:A:430:LEU:HD21	1:A:446:LEU:HD21	1.79	0.64
1:A:475:VAL:HG21	1:A:547:PHE:CZ	2.33	0.64
1:A:550:SER:O	1:A:551:CYS:SG	2.54	0.64
1:A:707:ARG:HB3	1:A:742:PHE:CZ	2.33	0.64
2:B:98:ASN:HB3	2:B:99:ARG:HH21	1.62	0.64
1:A:119:TYR:CE2	1:A:175:LEU:CD1	2.79	0.64
1:A:296:ILE:HG22	1:A:329:ILE:HG13	1.80	0.64
1:A:614:TYR:HD1	1:A:618:ASP:O	1.79	0.64
1:A:621:THR:H	1:A:624:GLN:HG3	1.63	0.64
1:A:656:ALA:HB1	1:A:661:VAL:HG21	1.78	0.64
1:A:276:GLN:CA	1:A:279:LEU:HD22	2.27	0.63
1:A:529:GLU:HB3	1:A:565:ARG:NH1	2.09	0.63
1:A:644:LEU:C	1:A:646:SER:O	2.40	0.63
1:A:295:LEU:HB2	1:A:296:ILE:HD12	1.78	0.63
1:A:350:ALA:O	1:A:354:LYS:HE2	1.98	0.63
2:B:25:LYS:HE3	2:B:25:LYS:HA	1.80	0.63
1:A:113:GLU:O	1:A:113:GLU:OE2	2.17	0.63
1:A:145:VAL:HG21	1:A:157:TYR:N	2.14	0.63
1:A:256:PRO:C	1:A:258:THR:N	2.55	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:574:HIS:HB2	1:A:577:ARG:CG	2.28	0.63
1:A:626:THR:HG21	1:A:633:MET:HG2	1.79	0.63
1:A:21:TRP:O	1:A:25:ARG:HG3	1.98	0.63
1:A:563:TYR:O	1:A:567:THR:HB	1.99	0.63
1:A:733:GLU:O	1:A:736:THR:N	2.32	0.63
1:A:119:TYR:N	1:A:119:TYR:CB	2.61	0.63
1:A:213:LEU:CG	1:A:214:ASN:H	2.11	0.63
1:A:31:VAL:O	1:A:34:ARG:HG3	1.99	0.63
1:A:422:LEU:CD2	1:A:449:VAL:HG13	2.29	0.63
1:A:430:LEU:HB2	1:A:473:ARG:NH1	2.14	0.62
1:A:248:SER:O	1:A:252:LEU:N	2.24	0.62
1:A:296:ILE:HD11	1:A:325:LEU:HD22	1.80	0.62
1:A:587:LYS:N	2:B:28:ASN:O	2.31	0.62
1:A:604:SER:OG	1:A:607:GLN:HG3	1.98	0.62
2:B:39:VAL:O	2:B:41:ASN:O	2.18	0.62
1:A:416:SER:HB2	1:A:461:VAL:HG21	1.82	0.62
1:A:587:LYS:O	2:B:27:TRP:CD1	2.52	0.62
1:A:642:ILE:HD11	1:A:688:MET:CE	2.29	0.62
1:A:100:LEU:HD22	1:A:166:THR:O	2.00	0.62
1:A:553:PHE:CE1	1:A:631:ILE:HD11	2.34	0.62
1:A:205:VAL:HG12	1:A:280:HIS:CD2	2.34	0.62
1:A:299:HIS:O	1:A:302:ILE:HB	1.99	0.62
1:A:713:ALA:O	1:A:714:ALA:CA	2.47	0.61
1:A:86:LEU:HA	1:A:144:TRP:NE1	2.15	0.61
1:A:333:LEU:HB3	1:A:391:PHE:HE1	1.63	0.61
1:A:520:GLN:HB3	1:A:569:PHE:CZ	2.36	0.61
2:B:86:ARG:HB2	2:B:86:ARG:HH11	1.64	0.61
1:A:550:SER:HB2	1:A:584:GLN:HE21	1.63	0.61
1:A:549:GLN:HG3	1:A:580:THR:HB	1.82	0.61
1:A:212:GLY:O	1:A:214:ASN:ND2	2.33	0.61
1:A:286:GLU:O	1:A:290:LYS:HG2	2.00	0.61
1:A:470:LEU:HD22	1:A:474:LEU:CG	2.30	0.61
2:B:74:VAL:HG21	2:B:102:GLU:CB	2.16	0.61
2:B:101:TRP:O	2:B:102:GLU:HG2	2.01	0.61
1:A:179:VAL:O	1:A:182:ALA:HB3	2.01	0.61
1:A:303:PHE:CG	1:A:322:MET:HE1	2.36	0.61
1:A:549:GLN:HA	1:A:582:LEU:CD2	2.31	0.61
1:A:310:LEU:O	1:A:313:ALA:O	2.19	0.61
2:B:38:VAL:O	2:B:40:ASP:N	2.34	0.61
1:A:606:PHE:O	1:A:610:ILE:HG23	2.02	0.60
2:B:94:CYS:N	2:B:99:ARG:O	2.34	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:119:TYR:HB2	1:A:175:LEU:HD11	1.82	0.60
1:A:582:LEU:HB2	2:B:30:VAL:HG12	1.84	0.60
1:A:553:PHE:CZ	1:A:609:ALA:HB2	2.36	0.60
1:A:119:TYR:CE2	1:A:175:LEU:HD13	2.33	0.60
1:A:762:LEU:HD23	1:A:772:TYR:HB3	1.82	0.60
1:A:352:ILE:HD13	1:A:408:VAL:CG2	2.25	0.60
1:A:381:VAL:HA	1:A:385:PHE:HB2	1.83	0.60
1:A:195:THR:HG1	1:A:196:ILE:N	1.96	0.60
1:A:707:ARG:HB3	1:A:742:PHE:CE1	2.37	0.60
1:A:701:LYS:HA	1:A:704:GLU:OE2	2.02	0.60
1:A:173:ARG:HE	1:A:173:ARG:HA	1.67	0.60
1:A:134:ASN:HD22	1:A:160:TYR:N	2.00	0.59
1:A:182:ALA:O	1:A:186:LEU:HD23	2.02	0.59
1:A:186:LEU:O	1:A:189:LYS:HB2	2.01	0.59
1:A:380:LEU:CD2	1:A:384:ALA:HB3	2.32	0.59
1:A:527:ASN:O	1:A:529:GLU:N	2.32	0.59
1:A:608:MET:CE	2:B:24:VAL:HG13	2.29	0.59
1:A:89:TYR:OH	1:A:162:LEU:HD23	2.02	0.59
1:A:351:ALA:N	1:A:352:ILE:H	1.99	0.59
1:A:204:VAL:CG1	1:A:208:TYR:HE1	2.16	0.59
1:A:187:ILE:O	1:A:190:GLU:HG3	2.03	0.59
1:A:252:LEU:HD11	1:A:302:ILE:HG21	1.83	0.59
1:A:733:GLU:O	1:A:736:THR:HB	2.03	0.59
1:A:422:LEU:HD11	1:A:452:VAL:HB	1.83	0.59
1:A:441:GLU:O	1:A:445:THR:HG22	2.03	0.59
1:A:506:ARG:NH1	2:B:104:GLN:NE2	2.51	0.59
2:B:38:VAL:HG13	2:B:40:ASP:H	1.66	0.59
1:A:243:PHE:CD1	1:A:243:PHE:C	2.80	0.59
1:A:417:LYS:O	1:A:420:GLU:HB3	2.03	0.59
1:A:257:VAL:CB	1:A:306:GLU:HG2	2.33	0.58
2:B:74:VAL:HG11	2:B:102:GLU:HB3	1.85	0.58
1:A:37:MET:HG3	1:A:42:TYR:CE1	2.38	0.58
1:A:260:TYR:C	1:A:260:TYR:CD2	2.81	0.58
1:A:540:LEU:HD13	1:A:545:TRP:CE2	2.38	0.58
1:A:557:SER:O	1:A:559:LEU:N	2.36	0.58
1:A:758:GLU:C	1:A:760:GLU:H	2.11	0.58
1:A:344:ILE:C	1:A:344:ILE:HD12	2.28	0.58
1:A:578:LYS:O	2:B:33:TRP:HA	2.02	0.58
1:A:251:PHE:CD2	1:A:255:ASN:HB2	2.38	0.58
2:B:87:TRP:CZ3	2:B:95:PRO:HD3	2.39	0.58
1:A:34:ARG:HD2	1:A:34:ARG:N	2.19	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:86:LEU:HG	1:A:144:TRP:CZ2	2.37	0.58
1:A:406:ASN:C	1:A:406:ASN:ND2	2.61	0.58
1:A:720:LYS:C	1:A:722:ARG:O	2.46	0.58
2:B:38:VAL:HG12	2:B:40:ASP:HB2	1.85	0.58
2:B:60:GLN:HG2	2:B:61:ALA:H	1.69	0.58
1:A:470:LEU:O	1:A:474:LEU:HG	2.03	0.58
1:A:475:VAL:CG2	1:A:547:PHE:CZ	2.87	0.58
2:B:49:ILE:HG21	2:B:70:VAL:HG12	1.86	0.58
1:A:242:ARG:HG3	1:A:243:PHE:N	2.19	0.58
1:A:529:GLU:CA	1:A:565:ARG:HH22	2.17	0.58
1:A:142:ARG:HB3	1:A:143:HIS:CD2	2.39	0.58
1:A:181:ASN:N	1:A:181:ASN:HD22	2.01	0.58
1:A:100:LEU:HD12	1:A:100:LEU:H	1.69	0.57
1:A:115:VAL:HB	1:A:179:VAL:HG22	1.86	0.57
1:A:191:ARG:CB	1:A:192:ASN:ND2	2.67	0.57
1:A:713:ALA:O	1:A:714:ALA:HA	2.04	0.57
2:B:97:ASP:OD2	2:B:97:ASP:C	2.47	0.57
1:A:84:VAL:C	1:A:86:LEU:N	2.61	0.57
1:A:167:TRP:C	1:A:169:ASP:N	2.61	0.57
2:B:42:CYS:O	2:B:43:ALA:HB2	2.03	0.57
1:A:419:PRO:HG2	1:A:461:VAL:CG1	2.33	0.57
1:A:213:LEU:HD12	1:A:214:ASN:CB	2.34	0.57
1:A:251:PHE:O	1:A:252:LEU:C	2.47	0.57
1:A:366:TYR:O	1:A:370:VAL:HG23	2.05	0.57
1:A:354:LYS:HD3	1:A:354:LYS:N	2.20	0.57
1:A:553:PHE:CD1	1:A:631:ILE:HD11	2.39	0.57
1:A:582:LEU:HD13	1:A:585:LEU:HD12	1.87	0.57
1:A:621:THR:HG22	1:A:668:LEU:HD12	1.86	0.57
1:A:19:GLN:O	1:A:20:ILE:C	2.48	0.57
1:A:92:LEU:O	1:A:96:LEU:HD22	2.05	0.57
1:A:340:LEU:HD22	1:A:385:PHE:CE2	2.39	0.57
1:A:506:ARG:NH1	1:A:544:SER:HB2	2.19	0.57
1:A:584:GLN:NE2	1:A:584:GLN:H	2.01	0.57
1:A:39:LYS:HE3	1:A:39:LYS:H	1.69	0.57
1:A:99:TYR:HA	1:A:102:ASN:HD22	1.70	0.57
1:A:574:HIS:O	1:A:575:SER:C	2.45	0.57
1:A:725:LEU:HD12	1:A:726:LYS:H	1.70	0.57
1:A:148:GLU:O	1:A:149:CYS:O	2.23	0.57
1:A:165:VAL:O	1:A:168:ARG:HG3	2.05	0.57
1:A:243:PHE:C	1:A:243:PHE:HD1	2.12	0.57
1:A:767:GLY:O	1:A:768:GLU:HG2	2.04	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:333:LEU:HD22	1:A:333:LEU:N	2.20	0.56
1:A:450:MET:CG	1:A:491:LYS:HG2	2.23	0.56
1:A:453:PHE:HA	1:A:456:ILE:CG1	2.34	0.56
2:B:98:ASN:HB3	2:B:99:ARG:NH2	2.20	0.56
1:A:23:ASP:O	1:A:26:ALA:HB3	2.04	0.56
1:A:42:TYR:HA	1:A:45:LEU:HD12	1.86	0.56
1:A:145:VAL:CG2	1:A:157:TYR:CB	2.83	0.56
1:A:323:TYR:O	1:A:327:SER:N	2.38	0.56
1:A:378:ASN:HA	1:A:395:LEU:HD11	1.88	0.56
1:A:537:ILE:HG21	1:A:566:PHE:CE1	2.40	0.56
1:A:160:TYR:O	1:A:163:ALA:HB3	2.05	0.56
1:A:168:ARG:HA	1:A:171:LEU:HB3	1.86	0.56
1:A:296:ILE:HD12	1:A:296:ILE:H	1.70	0.56
1:A:317:GLU:O	1:A:321:ARG:HG3	2.06	0.56
1:A:366:TYR:CD2	1:A:408:VAL:HG21	2.41	0.56
1:A:637:ALA:HA	1:A:663:LEU:HD12	1.87	0.56
2:B:19:LYS:HG2	2:B:20:LYS:HG3	1.87	0.56
1:A:191:ARG:CG	1:A:192:ASN:ND2	2.68	0.56
2:B:41:ASN:HA	2:B:48:HIS:CA	2.36	0.56
1:A:380:LEU:HD23	1:A:384:ALA:HB3	1.87	0.56
1:A:544:SER:HA	2:B:104:GLN:NE2	2.20	0.56
1:A:618:ASP:CB	2:B:20:LYS:HD3	2.35	0.56
1:A:33:THR:O	1:A:33:THR:HG22	2.05	0.56
1:A:37:MET:HE3	1:A:41:ARG:HB3	1.87	0.56
1:A:168:ARG:NE	1:A:169:ASP:OD2	2.31	0.56
1:A:610:ILE:HG13	1:A:611:LEU:N	2.19	0.56
1:A:96:LEU:O	1:A:100:LEU:HD13	2.06	0.56
1:A:145:VAL:HG21	1:A:157:TYR:CA	2.36	0.56
1:A:466:TYR:O	1:A:466:TYR:CD1	2.59	0.56
1:A:257:VAL:CG2	1:A:306:GLU:OE2	2.52	0.56
1:A:588:GLY:HA2	2:B:27:TRP:HA	1.88	0.56
2:B:44:ILE:CD1	2:B:95:PRO:HB2	2.34	0.56
1:A:276:GLN:O	1:A:277:VAL:HG13	2.06	0.55
1:A:347:GLN:HG3	1:A:377:TYR:CE1	2.41	0.55
2:B:44:ILE:O	2:B:44:ILE:HG22	2.05	0.55
1:A:203:GLY:O	1:A:206:GLN:HG3	2.06	0.55
1:A:299:HIS:HA	1:A:302:ILE:HD12	1.87	0.55
1:A:438:GLU:O	1:A:441:GLU:HB3	2.07	0.55
1:A:496:CYS:HB2	1:A:500:TYR:CG	2.41	0.55
2:B:38:VAL:HG11	2:B:40:ASP:CG	2.31	0.55
2:B:53:CYS:O	2:B:54:ILE:HB	2.06	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:136:ILE:C	1:A:138:ALA:H	2.15	0.55
1:A:21:TRP:HA	1:A:21:TRP:CE3	2.42	0.55
1:A:159:ILE:O	1:A:162:LEU:HB3	2.06	0.55
1:A:533:LEU:HD12	1:A:534:ASP:C	2.32	0.55
1:A:550:SER:C	1:A:551:CYS:SG	2.89	0.55
1:A:307:PHE:HD1	1:A:322:MET:HG2	1.72	0.55
1:A:511:ILE:HD11	1:A:538:GLN:NE2	2.21	0.55
1:A:720:LYS:O	1:A:722:ARG:O	2.24	0.55
1:A:171:LEU:O	1:A:173:ARG:N	2.37	0.55
1:A:21:TRP:CE2	1:A:91:ARG:HB3	2.40	0.55
1:A:212:GLY:O	1:A:214:ASN:CG	2.50	0.55
1:A:266:ALA:O	1:A:269:LEU:HB3	2.06	0.55
1:A:541:SER:HA	2:B:33:TRP:CD1	2.41	0.55
1:A:53:CYS:SG	1:A:140:LEU:HD23	2.47	0.55
1:A:205:VAL:CG1	1:A:280:HIS:HD2	2.08	0.55
1:A:275:VAL:CB	1:A:284:GLN:HG2	2.37	0.55
1:A:397:LYS:HA	1:A:397:LYS:NZ	2.22	0.55
1:A:636:LEU:HD22	1:A:640:LEU:CG	2.36	0.55
1:A:642:ILE:HD13	1:A:686:VAL:O	2.07	0.55
2:B:43:ALA:HB3	2:B:79:PHE:CD2	2.42	0.55
2:B:43:ALA:HB3	2:B:79:PHE:HD2	1.72	0.55
1:A:39:LYS:O	1:A:43:MET:HG3	2.07	0.55
1:A:98:ASN:O	1:A:102:ASN:ND2	2.40	0.55
1:A:100:LEU:HD22	1:A:166:THR:HG22	1.88	0.55
1:A:519:GLU:HA	1:A:519:GLU:OE2	2.07	0.55
1:A:115:VAL:CB	1:A:179:VAL:HG22	2.37	0.55
1:A:419:PRO:HB3	1:A:456:ILE:HG21	1.88	0.55
1:A:419:PRO:HG2	1:A:461:VAL:HG11	1.88	0.54
1:A:511:ILE:HD11	1:A:538:GLN:HE21	1.71	0.54
1:A:677:ASN:HA	1:A:678:LYS:HZ1	1.72	0.54
1:A:642:ILE:HD11	1:A:688:MET:HE3	1.88	0.54
2:B:88:LEU:HA	2:B:91:ARG:O	2.08	0.54
1:A:28:ILE:O	1:A:31:VAL:HG12	2.07	0.54
1:A:111:MET:O	1:A:112:ASP:HB3	2.07	0.54
1:A:187:ILE:C	1:A:189:LYS:H	2.15	0.54
1:A:707:ARG:O	1:A:711:ILE:HG13	2.07	0.54
2:B:101:TRP:HA	2:B:101:TRP:CE3	2.41	0.54
1:A:571:ALA:N	1:A:577:ARG:HH21	2.06	0.54
1:A:173:ARG:C	1:A:175:LEU:H	2.15	0.54
1:A:257:VAL:HG22	1:A:306:GLU:CD	2.21	0.54
1:A:322:MET:O	1:A:326:VAL:HG23	2.07	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:461:VAL:HA	1:A:703:ILE:HD13	1.90	0.54
1:A:501:THR:HG22	1:A:504:LEU:HD12	1.89	0.54
1:A:712:GLN:HG2	1:A:756:LEU:HG	1.89	0.54
1:A:49:VAL:HG13	1:A:88:LEU:CD2	2.37	0.54
1:A:287:LEU:C	1:A:287:LEU:HD13	2.33	0.54
2:B:27:TRP:C	2:B:28:ASN:HD22	2.16	0.54
1:A:244:TYR:O	1:A:248:SER:N	2.33	0.54
1:A:493:LYS:NZ	1:A:505:GLN:NE2	2.53	0.54
1:A:141:ASN:HD21	1:A:159:ILE:HG22	1.73	0.54
1:A:236:PHE:CE2	1:A:287:LEU:HD23	2.43	0.54
1:A:465:PHE:C	1:A:467:ALA:N	2.65	0.54
1:A:144:TRP:HA	1:A:144:TRP:CE3	2.41	0.54
1:A:542:SER:HA	2:B:32:LEU:HD22	1.89	0.54
2:B:38:VAL:CG1	2:B:40:ASP:CG	2.81	0.54
1:A:21:TRP:CE3	1:A:24:LEU:HB3	2.44	0.53
1:A:119:TYR:CG	1:A:175:LEU:HD11	2.38	0.53
1:A:215:GLU:O	1:A:216:ASP:HB2	2.07	0.53
1:A:623:GLN:HA	1:A:633:MET:HE1	1.89	0.53
1:A:638:GLN:HB3	1:A:688:MET:HE2	1.88	0.53
1:A:677:ASN:C	1:A:679:LYS:H	2.16	0.53
1:A:88:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD23	1.90	0.53
1:A:553:PHE:CD1	1:A:631:ILE:CD1	2.91	0.53
1:A:576:GLY:O	2:B:35:TRP:HE3	1.91	0.53
1:A:407:ALA:HA	1:A:410:LYS:NZ	2.23	0.53
1:A:443:GLU:OE1	1:A:491:LYS:NZ	2.41	0.53
1:A:525:LEU:C	1:A:527:ASN:N	2.63	0.53
1:A:560:GLU:HG3	1:A:564:GLN:NE2	2.15	0.53
1:A:21:TRP:HA	1:A:21:TRP:HE3	1.73	0.53
1:A:406:ASN:ND2	1:A:409:THR:H	2.06	0.53
1:A:478:ASN:OD1	1:A:478:ASN:O	2.26	0.53
1:A:427:ASP:OD2	1:A:431:LYS:HD2	2.07	0.53
1:A:93:LYS:HA	1:A:162:LEU:HD11	1.91	0.53
1:A:191:ARG:O	1:A:192:ASN:CG	2.51	0.53
1:A:577:ARG:HD2	1:A:577:ARG:H	1.73	0.53
1:A:683:ASN:HD21	1:A:685:ASN:HB3	1.73	0.53
1:A:87:GLU:HA	1:A:90:LYS:CE	2.39	0.53
1:A:121:GLN:O	1:A:124:GLU:HB3	2.08	0.53
1:A:553:PHE:HD1	1:A:631:ILE:CD1	2.21	0.53
1:A:746:VAL:HB	1:A:747:PRO:HD3	1.90	0.53
1:A:287:LEU:O	1:A:290:LYS:HB2	2.08	0.53
1:A:412:ALA:CB	1:A:417:LYS:HD3	2.38	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:344:ILE:HG13	1:A:345:HIS:N	2.24	0.53
1:A:621:THR:HA	1:A:668:LEU:HA	1.91	0.53
1:A:324:ASN:O	1:A:327:SER:HB2	2.09	0.53
1:A:347:GLN:HG3	1:A:377:TYR:CZ	2.44	0.53
1:A:453:PHE:CA	1:A:456:ILE:HG12	2.38	0.53
1:A:553:PHE:HD1	1:A:631:ILE:HD13	1.74	0.53
2:B:74:VAL:HG11	2:B:102:GLU:CB	2.39	0.52
1:A:371:LEU:HD13	1:A:448:GLN:HB3	1.92	0.52
1:A:756:LEU:HB3	1:A:762:LEU:HD12	1.91	0.52
1:A:99:TYR:C	1:A:99:TYR:CD2	2.86	0.52
1:A:680:LEU:O	1:A:681:ARG:HB3	2.09	0.52
1:A:115:VAL:HG21	1:A:179:VAL:HA	1.92	0.52
1:A:123:TRP:HE1	1:A:206:GLN:NE2	2.08	0.52
1:A:197:ASN:HB3	1:A:200:LEU:HG	1.92	0.52
1:A:337:LYS:HE2	1:A:390:GLY:O	2.10	0.52
1:A:524:HIS:O	1:A:527:ASN:HB3	2.09	0.52
1:A:662:GLU:H	1:A:662:GLU:CD	2.18	0.52
1:A:119:TYR:CE2	1:A:175:LEU:HD12	2.39	0.52
1:A:669:ILE:HG22	1:A:669:ILE:O	2.09	0.52
1:A:252:LEU:HD23	1:A:253:GLN:HE22	1.74	0.52
1:A:608:MET:O	1:A:612:LEU:HG	2.10	0.52
1:A:688:MET:CE	1:A:688:MET:CA	2.85	0.52
1:A:111:MET:HE1	1:A:112:ASP:OD1	2.06	0.52
2:B:94:CYS:O	2:B:96:LEU:N	2.37	0.52
1:A:52:TYR:HD2	1:A:52:TYR:O	1.94	0.51
1:A:453:PHE:CZ	1:A:459:LYS:HD3	2.45	0.51
1:A:134:ASN:HD22	1:A:160:TYR:HB3	1.75	0.51
1:A:269:LEU:C	1:A:269:LEU:HD23	2.35	0.51
1:A:442:LEU:O	1:A:445:THR:HG23	2.10	0.51
1:A:352:ILE:HG22	1:A:369:THR:HG22	1.91	0.51
1:A:619:ALA:CB	1:A:670:LYS:HA	2.39	0.51
2:B:73:GLY:C	2:B:74:VAL:HG22	2.36	0.51
1:A:21:TRP:NE1	1:A:91:ARG:HD2	2.25	0.51
1:A:341:GLU:HG2	1:A:394:ALA:HA	1.92	0.51
1:A:465:PHE:CZ	1:A:699:THR:CG2	2.94	0.51
1:A:720:LYS:HD2	1:A:774:TYR:OH	2.10	0.51
1:A:267:ARG:NH1	1:A:267:ARG:HG2	2.26	0.51
1:A:375:LYS:HE2	1:A:375:LYS:CA	2.22	0.51
1:A:460:ASP:OD1	1:A:460:ASP:N	2.44	0.51
1:A:547:PHE:N	1:A:547:PHE:CD2	2.77	0.51
1:A:615:ASN:OD1	2:B:21:ARG:HA	2.11	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:103:PHE:O	2:B:104:GLN:CB	2.58	0.51
1:A:17:LEU:HD23	1:A:17:LEU:N	2.25	0.51
1:A:204:VAL:O	1:A:207:SER:HB3	2.10	0.51
1:A:465:PHE:CZ	1:A:699:THR:HG21	2.46	0.51
2:B:88:LEU:C	2:B:90:THR:N	2.68	0.51
1:A:345:HIS:CE1	1:A:349:LEU:HD12	2.46	0.51
1:A:540:LEU:HB3	1:A:545:TRP:NE1	2.25	0.51
1:A:17:LEU:O	1:A:20:ILE:N	2.44	0.50
1:A:84:VAL:O	1:A:86:LEU:N	2.44	0.50
1:A:252:LEU:HD21	1:A:302:ILE:HG21	1.92	0.50
1:A:333:LEU:O	1:A:335:GLU:N	2.44	0.50
2:B:77:HIS:O	2:B:78:ALA:O	2.29	0.50
2:B:101:TRP:HA	2:B:101:TRP:HE3	1.76	0.50
2:B:50:MET:C	2:B:52:LEU:H	2.19	0.50
1:A:201:ILE:HB	1:A:278:TYR:CD2	2.43	0.50
1:A:463:GLN:HB2	1:A:500:TYR:CE1	2.45	0.50
1:A:719:MET:HE3	1:A:730:LEU:HD22	1.92	0.50
1:A:111:MET:SD	1:A:111:MET:C	2.94	0.50
1:A:352:ILE:HA	1:A:369:THR:HG21	1.93	0.50
1:A:412:ALA:HB1	1:A:417:LYS:HD3	1.93	0.50
1:A:103:LEU:HD21	1:A:122:GLN:CD	2.36	0.50
1:A:191:ARG:HD3	1:A:192:ASN:HD21	1.76	0.50
1:A:618:ASP:CB	2:B:20:LYS:CD	2.84	0.50
1:A:629:THR:OG1	1:A:631:ILE:HG12	2.12	0.50
1:A:642:ILE:HD11	1:A:687:PRO:CA	2.41	0.50
1:A:642:ILE:HD11	1:A:688:MET:HE1	1.93	0.50
1:A:712:GLN:HE22	1:A:755:ILE:HG21	1.76	0.50
1:A:171:LEU:C	1:A:173:ARG:N	2.59	0.50
1:A:204:VAL:O	1:A:208:TYR:HD1	1.94	0.50
1:A:253:GLN:NE2	1:A:253:GLN:N	2.51	0.50
1:A:283:THR:O	1:A:287:LEU:CA	2.54	0.50
1:A:610:ILE:HD13	1:A:640:LEU:HD23	1.94	0.50
1:A:719:MET:HG3	1:A:762:LEU:HG	1.94	0.50
2:B:47:ASN:HD22	2:B:52:LEU:CG	2.25	0.50
1:A:27:GLY:O	1:A:30:GLN:N	2.43	0.50
1:A:44:GLU:O	1:A:48:HIS:HB2	2.12	0.50
1:A:463:GLN:HB2	1:A:500:TYR:OH	2.11	0.50
1:A:540:LEU:HD13	1:A:545:TRP:CD2	2.47	0.50
1:A:187:ILE:C	1:A:189:LYS:N	2.67	0.49
1:A:279:LEU:CG	1:A:280:HIS:O	2.52	0.49
1:A:212:GLY:HA3	1:A:224:THR:CB	2.40	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:291:CYS:O	1:A:295:LEU:HG	2.12	0.49
1:A:134:ASN:HB2	1:A:160:TYR:HB2	1.94	0.49
1:A:270:GLU:O	1:A:273:ARG:HB2	2.12	0.49
1:A:100:LEU:HD12	1:A:100:LEU:N	2.26	0.49
1:A:577:ARG:HD2	1:A:577:ARG:N	2.26	0.49
1:A:610:ILE:HD13	1:A:640:LEU:CD2	2.43	0.49
1:A:378:ASN:HA	1:A:395:LEU:CD1	2.42	0.49
2:B:71:ALA:HB2	2:B:81:PHE:HA	1.93	0.49
1:A:218:ALA:O	1:A:219:PHE:CD1	2.65	0.49
1:A:229:LYS:CA	1:A:233:GLU:HB3	2.26	0.49
1:A:496:CYS:HB2	1:A:500:TYR:HB2	1.94	0.49
1:A:593:ASN:OD1	1:A:598:ARG:NH1	2.45	0.49
1:A:632:LYS:O	1:A:633:MET:C	2.54	0.49
1:A:686:VAL:O	1:A:686:VAL:CG2	2.42	0.49
1:A:288:ALA:O	1:A:292:GLU:HG3	2.13	0.49
2:B:47:ASN:HD22	2:B:52:LEU:CB	2.25	0.49
1:A:21:TRP:HZ3	1:A:24:LEU:HD22	1.78	0.49
1:A:352:ILE:CD1	1:A:407:ALA:HB3	2.43	0.49
1:A:657:ASN:O	1:A:659:ASP:N	2.45	0.49
1:A:243:PHE:HE1	1:A:247:GLU:OE2	1.95	0.49
2:B:86:ARG:NH1	2:B:86:ARG:CB	2.70	0.49
1:A:611:LEU:HD11	1:A:643:LEU:HD11	1.95	0.49
1:A:680:LEU:H	1:A:680:LEU:HD22	1.77	0.49
1:A:21:TRP:HE1	1:A:25:ARG:NH2	2.11	0.48
1:A:106:ASP:C	1:A:108:GLU:H	2.20	0.48
1:A:399:CYS:O	1:A:403:ILE:HG13	2.12	0.48
1:A:588:GLY:CA	2:B:27:TRP:HA	2.43	0.48
1:A:615:ASN:HA	2:B:20:LYS:O	2.13	0.48
1:A:110:LEU:O	1:A:114:SER:HB3	2.12	0.48
1:A:167:TRP:O	1:A:170:CYS:HB3	2.14	0.48
1:A:323:TYR:O	1:A:327:SER:OG	2.26	0.48
1:A:358:ALA:O	1:A:359:ALA:C	2.56	0.48
1:A:533:LEU:HD12	1:A:533:LEU:C	2.38	0.48
1:A:658:VAL:HG23	1:A:659:ASP:N	2.29	0.48
1:A:191:ARG:CD	1:A:192:ASN:ND2	2.76	0.48
1:A:270:GLU:O	1:A:273:ARG:N	2.46	0.48
1:A:592:THR:O	1:A:598:ARG:HD2	2.13	0.48
1:A:640:LEU:O	1:A:644:LEU:HG	2.13	0.48
1:A:769:LYS:HG3	1:A:770:ASP:H	1.78	0.48
2:B:39:VAL:C	2:B:41:ASN:N	2.47	0.48
1:A:267:ARG:HG2	1:A:267:ARG:HH11	1.77	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:347:GLN:HG3	1:A:377:TYR:OH	2.13	0.48
1:A:657:ASN:O	1:A:660:GLU:N	2.44	0.48
1:A:40:SER:O	1:A:44:GLU:HG3	2.12	0.48
1:A:87:GLU:O	1:A:90:LYS:HB2	2.13	0.48
1:A:427:ASP:CB	1:A:469:MET:HG2	2.43	0.48
1:A:677:ASN:HA	1:A:678:LYS:NZ	2.29	0.48
2:B:52:LEU:C	2:B:54:ILE:H	2.20	0.48
1:A:685:ASN:C	1:A:687:PRO:HD3	2.39	0.48
2:B:41:ASN:HD22	2:B:46:ARG:C	2.21	0.48
1:A:336:LEU:HB2	1:A:391:PHE:HZ	1.78	0.48
1:A:521:PHE:HD1	1:A:569:PHE:CG	2.32	0.48
1:A:716:VAL:HG23	1:A:756:LEU:HD13	1.96	0.48
1:A:723:LYS:O	1:A:774:TYR:N	2.45	0.48
2:B:84:ILE:HG21	2:B:101:TRP:HE1	1.79	0.48
1:A:360:LEU:HD22	1:A:411:MET:CE	2.41	0.48
1:A:602:GLN:HE21	1:A:683:ASN:HB2	1.77	0.48
1:A:757:ILE:HG12	1:A:762:LEU:O	2.13	0.48
1:A:205:VAL:HG13	1:A:228:TYR:CE2	2.48	0.48
1:A:471:ALA:HB1	1:A:547:PHE:HE2	1.78	0.47
1:A:489:ILE:O	1:A:501:THR:HG21	2.13	0.47
1:A:618:ASP:HB3	2:B:20:LYS:HD3	1.96	0.47
1:A:104:LEU:HD12	1:A:104:LEU:O	2.13	0.47
1:A:296:ILE:HG22	1:A:329:ILE:CG1	2.44	0.47
1:A:580:THR:OG1	2:B:32:LEU:HB2	2.14	0.47
1:A:113:GLU:O	1:A:113:GLU:CD	2.56	0.47
1:A:271:GLU:HB3	1:A:287:LEU:CD1	2.43	0.47
2:B:84:ILE:HG21	2:B:101:TRP:NE1	2.28	0.47
1:A:162:LEU:HD13	1:A:162:LEU:C	2.40	0.47
1:A:213:LEU:CD1	1:A:214:ASN:HB2	2.44	0.47
1:A:481:SER:O	1:A:484:ALA:HB3	2.14	0.47
1:A:207:SER:O	1:A:211:LEU:HD22	2.13	0.47
1:A:368:GLN:HE21	1:A:368:GLN:CA	2.28	0.47
1:A:430:LEU:CB	1:A:473:ARG:NH1	2.77	0.47
1:A:541:SER:C	1:A:543:GLY:N	2.73	0.47
1:A:564:GLN:O	1:A:567:THR:HG22	2.13	0.47
1:A:600:THR:HB	1:A:681:ARG:HA	1.97	0.47
1:A:762:LEU:HD23	1:A:772:TYR:CB	2.45	0.47
2:B:96:LEU:HD23	2:B:96:LEU:O	2.14	0.47
1:A:86:LEU:HD22	1:A:90:LYS:HD3	1.97	0.47
1:A:111:MET:O	1:A:112:ASP:CB	2.38	0.47
1:A:144:TRP:HA	1:A:144:TRP:HE3	1.78	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:260:TYR:CE2	1:A:264:ALA:HB2	2.50	0.47
1:A:366:TYR:HD2	1:A:408:VAL:HG21	1.80	0.47
1:A:476:HIS:C	1:A:478:ASN:N	2.71	0.47
1:A:557:SER:C	1:A:559:LEU:H	2.23	0.47
1:A:691:GLU:HA	1:A:694:GLN:CG	2.44	0.47
1:A:750:LYS:HE3	1:A:750:LYS:HA	1.96	0.47
1:A:323:TYR:HE1	1:A:333:LEU:HG	1.79	0.47
1:A:476:HIS:O	1:A:477:GLN:C	2.58	0.47
1:A:476:HIS:HB3	1:A:587:LYS:NZ	2.29	0.47
1:A:529:GLU:CB	1:A:565:ARG:HH22	2.28	0.47
1:A:330:GLN:HG2	1:A:331:ASP:OD2	2.15	0.47
1:A:406:ASN:O	1:A:407:ALA:C	2.58	0.47
2:B:28:ASN:N	2:B:28:ASN:ND2	2.61	0.47
1:A:52:TYR:CD1	1:A:88:LEU:HD13	2.50	0.47
1:A:473:ARG:NH1	1:A:485:GLU:OE2	2.47	0.47
1:A:350:ALA:O	1:A:351:ALA:CA	2.63	0.46
1:A:466:TYR:CE2	1:A:488:MET:HE2	2.50	0.46
1:A:535:PHE:CD1	1:A:562:SER:HB3	2.49	0.46
1:A:539:VAL:HG21	1:A:566:PHE:HZ	1.79	0.46
1:A:563:TYR:CE1	1:A:581:TRP:CE2	3.03	0.46
1:A:638:GLN:O	1:A:642:ILE:HG13	2.15	0.46
1:A:232:PHE:O	1:A:233:GLU:C	2.58	0.46
1:A:296:ILE:N	1:A:296:ILE:CD1	2.78	0.46
1:A:346:ASN:O	1:A:347:GLN:C	2.58	0.46
1:A:611:LEU:HD21	1:A:649:LEU:HD21	1.96	0.46
1:A:633:MET:O	1:A:634:ASP:C	2.58	0.46
1:A:173:ARG:O	1:A:174:PRO:C	2.54	0.46
1:A:263:LYS:C	1:A:265:GLU:N	2.71	0.46
1:A:451:VAL:O	1:A:454:LYS:HB3	2.15	0.46
1:A:470:LEU:HD12	1:A:504:LEU:HD22	1.97	0.46
2:B:42:CYS:O	2:B:43:ALA:CB	2.64	0.46
1:A:30:GLN:HB3	1:A:35:GLN:HE22	1.80	0.46
1:A:117:LYS:HE3	1:A:121:GLN:HE22	1.80	0.46
1:A:212:GLY:CA	1:A:224:THR:HB	2.40	0.46
1:A:574:HIS:O	1:A:575:SER:O	2.32	0.46
1:A:745:ARG:O	1:A:746:VAL:C	2.59	0.46
1:A:341:GLU:O	1:A:398:ALA:HB2	2.15	0.46
1:A:712:GLN:O	1:A:715:ILE:N	2.49	0.46
1:A:715:ILE:CB	1:A:756:LEU:HD12	2.45	0.46
1:A:649:LEU:N	1:A:649:LEU:HD22	2.31	0.46
1:A:763:GLU:HG2	1:A:764:ARG:N	2.27	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:344:ILE:CD1	1:A:402:PHE:HE2	2.28	0.46
1:A:493:LYS:HZ1	1:A:505:GLN:NE2	2.04	0.46
1:A:540:LEU:HD12	1:A:547:PHE:CE1	2.51	0.46
1:A:648:LEU:C	1:A:649:LEU:HD22	2.41	0.46
1:A:431:LYS:O	1:A:432:LYS:C	2.59	0.46
1:A:478:ASN:O	1:A:478:ASN:CG	2.59	0.46
1:A:643:LEU:HD12	1:A:649:LEU:CD2	2.46	0.46
1:A:718:ILE:HD13	1:A:733:GLU:HB2	1.97	0.46
2:B:42:CYS:SG	2:B:43:ALA:N	2.89	0.46
1:A:621:THR:N	1:A:624:GLN:HG3	2.31	0.46
1:A:687:PRO:C	1:A:688:MET:HE3	2.38	0.46
1:A:96:LEU:HD23	1:A:162:LEU:CD1	2.46	0.46
1:A:189:LYS:HD3	1:A:189:LYS:HA	1.71	0.46
1:A:252:LEU:HD23	1:A:253:GLN:NE2	2.31	0.46
1:A:513:VAL:O	1:A:516:ASP:HB3	2.15	0.46
1:A:541:SER:O	1:A:542:SER:C	2.58	0.46
1:A:694:GLN:HE21	1:A:694:GLN:HB3	1.53	0.46
2:B:82:HIS:C	2:B:84:ILE:H	2.24	0.46
1:A:324:ASN:HA	1:A:327:SER:OG	2.16	0.45
1:A:430:LEU:HB3	1:A:485:GLU:OE1	2.16	0.45
1:A:514:SER:OG	1:A:539:VAL:N	2.44	0.45
1:A:549:GLN:HG2	1:A:582:LEU:HD23	1.98	0.45
1:A:636:LEU:HD22	1:A:640:LEU:CD1	2.45	0.45
1:A:716:VAL:HG23	1:A:756:LEU:CD1	2.46	0.45
1:A:108:GLU:O	1:A:110:LEU:HG	2.16	0.45
1:A:191:ARG:HB2	1:A:192:ASN:CG	2.41	0.45
1:A:621:THR:HG23	1:A:624:GLN:HE21	1.80	0.45
1:A:119:TYR:CB	1:A:175:LEU:HD11	2.45	0.45
1:A:677:ASN:ND2	1:A:682:VAL:HG11	2.32	0.45
2:B:60:GLN:HG2	2:B:61:ALA:N	2.31	0.45
2:B:102:GLU:O	2:B:103:PHE:HB2	2.15	0.45
1:A:200:LEU:O	1:A:204:VAL:HG23	2.16	0.45
1:A:618:ASP:HB3	2:B:20:LYS:CD	2.45	0.45
1:A:719:MET:HA	1:A:719:MET:HE2	1.98	0.45
2:B:37:ILE:O	2:B:37:ILE:HG23	2.13	0.45
1:A:21:TRP:HE1	1:A:25:ARG:HH21	1.64	0.45
1:A:96:LEU:HD23	1:A:162:LEU:HD12	1.98	0.45
1:A:292:GLU:O	1:A:296:ILE:O	2.34	0.45
1:A:333:LEU:O	1:A:334:GLY:C	2.59	0.45
1:A:21:TRP:NE1	1:A:91:ARG:HB3	2.31	0.45
1:A:193:GLY:O	1:A:194:GLU:CB	2.23	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:283:THR:O	1:A:287:LEU:N	2.49	0.45
1:A:430:LEU:HD13	1:A:473:ARG:HH12	1.80	0.45
2:B:52:LEU:C	2:B:54:ILE:N	2.73	0.45
2:B:67:GLU:O	2:B:69:THR:HG23	2.17	0.45
2:B:88:LEU:C	2:B:90:THR:H	2.24	0.45
2:B:100:GLU:N	2:B:100:GLU:OE1	2.50	0.45
1:A:198:THR:HG22	1:A:278:TYR:CE1	2.52	0.45
1:A:246:ARG:O	1:A:250:GLU:HB2	2.16	0.45
1:A:261:MET:HG2	1:A:303:PHE:CZ	2.52	0.45
1:A:310:LEU:HB2	1:A:319:LEU:HD21	1.98	0.45
1:A:643:LEU:O	1:A:646:SER:OG	2.35	0.45
1:A:664:LYS:O	1:A:666:ASP:N	2.49	0.45
1:A:419:PRO:HB3	1:A:456:ILE:CG2	2.47	0.45
1:A:493:LYS:O	1:A:497:GLY:N	2.50	0.45
1:A:632:LYS:HB3	1:A:632:LYS:HE2	1.40	0.45
1:A:19:GLN:O	1:A:20:ILE:HA	2.13	0.45
1:A:42:TYR:HD1	1:A:42:TYR:H	1.64	0.45
1:A:207:SER:C	1:A:211:LEU:HD23	2.42	0.45
1:A:481:SER:HB3	1:A:484:ALA:HB2	1.99	0.45
1:A:643:LEU:HD13	1:A:648:LEU:HD12	1.99	0.45
2:B:94:CYS:C	2:B:96:LEU:H	2.23	0.45
1:A:116:LEU:HG	1:A:200:LEU:HB3	1.99	0.45
1:A:248:SER:OG	1:A:249:THR:N	2.49	0.45
1:A:647:LYS:O	1:A:672:TYR:HB2	2.17	0.45
1:A:733:GLU:O	1:A:734:VAL:C	2.59	0.45
1:A:99:TYR:HD2	1:A:99:TYR:O	2.00	0.44
1:A:292:GLU:OE2	1:A:328:ARG:HB3	2.17	0.44
1:A:526:THR:HG22	1:A:526:THR:O	2.17	0.44
1:A:644:LEU:HD22	1:A:651:LEU:HG	1.99	0.44
2:B:82:HIS:C	2:B:84:ILE:N	2.75	0.44
1:A:47:THR:HA	1:A:50:TYR:HB3	1.99	0.44
1:A:531:LEU:HD13	1:A:535:PHE:HB3	1.99	0.44
2:B:19:LYS:C	2:B:20:LYS:HG3	2.42	0.44
1:A:417:LYS:O	1:A:420:GLU:N	2.49	0.44
1:A:540:LEU:HD12	1:A:547:PHE:HE1	1.83	0.44
1:A:557:SER:C	1:A:559:LEU:N	2.75	0.44
1:A:638:GLN:CB	1:A:688:MET:HE2	2.48	0.44
1:A:20:ILE:N	1:A:20:ILE:HB	2.32	0.44
1:A:41:ARG:O	1:A:45:LEU:HG	2.17	0.44
1:A:116:LEU:HD21	1:A:200:LEU:HD13	1.99	0.44
1:A:257:VAL:HB	1:A:306:GLU:HG2	2.00	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:764:ARG:NH1	1:A:764:ARG:HG3	2.33	0.44
2:B:38:VAL:C	2:B:40:ASP:N	2.75	0.44
2:B:57:GLN:O	2:B:60:GLN:HB2	2.17	0.44
1:A:96:LEU:O	1:A:100:LEU:CD1	2.65	0.44
1:A:294:VAL:O	1:A:299:HIS:CE1	2.71	0.44
1:A:345:HIS:NE2	1:A:349:LEU:HD12	2.33	0.44
1:A:465:PHE:C	1:A:467:ALA:H	2.23	0.44
1:A:514:SER:HG	1:A:539:VAL:H	1.65	0.44
1:A:731:LEU:O	1:A:732:GLY:C	2.61	0.44
1:A:145:VAL:CG2	1:A:157:TYR:HB2	2.48	0.44
1:A:181:ASN:O	1:A:185:LYS:HG2	2.16	0.44
1:A:251:PHE:O	1:A:255:ASN:N	2.48	0.44
1:A:313:ALA:C	1:A:315:LYS:H	2.25	0.44
1:A:113:GLU:HA	1:A:116:LEU:HB3	2.00	0.44
1:A:188:GLU:O	1:A:188:GLU:HG2	2.18	0.44
1:A:213:LEU:CD1	1:A:214:ASN:ND2	2.76	0.44
1:A:273:ARG:C	1:A:275:VAL:H	2.25	0.44
1:A:423:ALA:HA	1:A:462:PHE:CE1	2.53	0.44
1:A:191:ARG:CD	1:A:192:ASN:HD21	2.29	0.44
1:A:371:LEU:CD1	1:A:448:GLN:HB3	2.47	0.44
1:A:397:LYS:HA	1:A:397:LYS:HZ3	1.83	0.44
1:A:460:ASP:OD2	1:A:707:ARG:CD	2.64	0.44
1:A:738:LEU:O	1:A:739:SER:C	2.60	0.44
1:A:268:LEU:CG	1:A:295:LEU:HD12	2.45	0.43
1:A:279:LEU:HG	1:A:280:HIS:H	1.71	0.43
1:A:350:ALA:C	1:A:351:ALA:C	2.83	0.43
1:A:386:ASN:O	1:A:387:ASN:C	2.60	0.43
1:A:642:ILE:CD1	1:A:688:MET:HE1	2.48	0.43
1:A:189:LYS:NZ	1:A:193:GLY:HA3	2.33	0.43
1:A:301:GLU:O	1:A:302:ILE:HA	2.13	0.43
1:A:427:ASP:HB2	1:A:469:MET:HG2	2.00	0.43
1:A:597:ASN:HD22	1:A:597:ASN:HA	1.58	0.43
1:A:142:ARG:HA	1:A:142:ARG:HD2	1.74	0.43
1:A:333:LEU:H	1:A:333:LEU:CD2	2.28	0.43
1:A:367:VAL:HG11	1:A:425:TYR:CD1	2.52	0.43
1:A:496:CYS:CB	1:A:500:TYR:HB2	2.48	0.43
1:A:28:ILE:HG22	1:A:95:PHE:CE2	2.53	0.43
1:A:187:ILE:O	1:A:189:LYS:N	2.51	0.43
1:A:188:GLU:C	1:A:190:GLU:H	2.27	0.43
1:A:285:ASP:O	1:A:289:ARG:N	2.32	0.43
1:A:400:GLY:HA2	1:A:455:TYR:HB3	2.00	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:87:TRP:HZ3	2:B:93:VAL:O	2.02	0.43
1:A:554:ALA:O	1:A:555:LEU:O	2.36	0.43
1:A:558:GLU:HB3	2:B:24:VAL:HG21	2.00	0.43
1:A:586:SER:HB2	2:B:29:ALA:HA	2.01	0.43
1:A:21:TRP:NE1	1:A:25:ARG:HH21	2.17	0.43
1:A:118:PHE:O	1:A:119:TYR:CA	2.64	0.43
1:A:204:VAL:O	1:A:208:TYR:CD1	2.70	0.43
1:A:231:SER:C	1:A:235:GLN:OE1	2.61	0.43
1:A:352:ILE:HD12	1:A:353:GLU:N	2.33	0.43
1:A:402:PHE:CD1	1:A:402:PHE:C	2.95	0.43
2:B:47:ASN:CB	2:B:52:LEU:HD23	2.45	0.43
2:B:77:HIS:NE2	2:B:96:LEU:HD22	2.33	0.43
1:A:354:LYS:O	1:A:355:CYS:C	2.62	0.43
1:A:367:VAL:HG11	1:A:425:TYR:HD1	1.83	0.43
1:A:529:GLU:HA	1:A:565:ARG:HH22	1.83	0.43
1:A:725:LEU:HD11	1:A:729:GLN:CB	2.49	0.43
1:A:764:ARG:HG3	1:A:764:ARG:HH11	1.83	0.43
2:B:38:VAL:HG12	2:B:40:ASP:CA	2.48	0.43
1:A:102:ASN:O	1:A:105:LYS:HB3	2.19	0.43
1:A:205:VAL:HG13	1:A:228:TYR:HE2	1.83	0.43
1:A:288:ALA:C	1:A:290:LYS:N	2.75	0.43
1:A:344:ILE:O	1:A:345:HIS:C	2.61	0.43
1:A:461:VAL:HA	1:A:703:ILE:CD1	2.49	0.43
1:A:521:PHE:CE1	1:A:566:PHE:HA	2.53	0.43
1:A:349:LEU:O	1:A:353:GLU:HB2	2.19	0.43
1:A:496:CYS:CB	1:A:500:TYR:CG	3.02	0.43
1:A:519:GLU:O	1:A:520:GLN:C	2.62	0.43
1:A:548:GLN:O	1:A:584:GLN:OE1	2.37	0.43
1:A:693:LYS:HD2	1:A:693:LYS:HA	1.60	0.43
1:A:128:PHE:O	1:A:131:LYS:HB3	2.19	0.42
1:A:168:ARG:HD2	1:A:168:ARG:O	2.19	0.42
1:A:213:LEU:CD1	1:A:214:ASN:CB	2.97	0.42
1:A:438:GLU:O	1:A:439:GLU:C	2.62	0.42
1:A:476:HIS:O	1:A:478:ASN:N	2.52	0.42
2:B:38:VAL:HG13	2:B:39:VAL:HB	2.01	0.42
2:B:77:HIS:CD2	2:B:96:LEU:HD13	2.54	0.42
1:A:141:ASN:ND2	1:A:159:ILE:HG22	2.34	0.42
1:A:427:ASP:C	1:A:429:LEU:N	2.77	0.42
1:A:466:TYR:OH	1:A:488:MET:HB3	2.19	0.42
1:A:471:ALA:C	1:A:475:VAL:HG23	2.39	0.42
1:A:21:TRP:HB2	1:A:52:TYR:CE1	2.55	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:498:PHE:O	1:A:502:SER:N	2.52	0.42
1:A:149:CYS:N	1:A:149:CYS:C	2.77	0.42
1:A:288:ALA:O	1:A:289:ARG:C	2.62	0.42
1:A:175:LEU:HD23	1:A:175:LEU:HA	1.34	0.42
1:A:409:THR:HB	1:A:414:SER:O	2.20	0.42
1:A:224:THR:O	1:A:226:THR:N	2.50	0.42
1:A:106:ASP:C	1:A:108:GLU:N	2.77	0.42
1:A:116:LEU:C	1:A:118:PHE:N	2.78	0.42
1:A:711:ILE:HD11	1:A:744:PRO:HB3	2.01	0.42
1:A:103:LEU:HD11	1:A:122:GLN:CD	2.44	0.42
1:A:201:ILE:O	1:A:205:VAL:HG23	2.19	0.42
1:A:210:GLU:C	1:A:212:GLY:H	2.28	0.42
1:A:504:LEU:HA	1:A:507:MET:HE3	2.02	0.42
1:A:636:LEU:HD22	1:A:640:LEU:HD11	2.02	0.42
1:A:252:LEU:HD21	1:A:302:ILE:CG2	2.49	0.42
1:A:435:LYS:HD3	1:A:435:LYS:HA	1.90	0.42
1:A:677:ASN:OD1	1:A:678:LYS:HE2	2.19	0.42
1:A:28:ILE:HA	1:A:31:VAL:HG12	2.01	0.41
1:A:104:LEU:O	1:A:108:GLU:HB2	2.20	0.41
1:A:168:ARG:HA	1:A:171:LEU:CB	2.50	0.41
1:A:211:LEU:O	1:A:213:LEU:HD13	2.20	0.41
1:A:537:ILE:HG21	1:A:566:PHE:CZ	2.54	0.41
1:A:86:LEU:CD2	1:A:90:LYS:HD3	2.50	0.41
1:A:145:VAL:CG2	1:A:157:TYR:HB3	2.49	0.41
1:A:325:LEU:O	1:A:328:ARG:HB2	2.20	0.41
1:A:420:GLU:O	1:A:424:ARG:HG2	2.20	0.41
1:A:724:VAL:HA	1:A:772:TYR:O	2.20	0.41
1:A:730:LEU:HD12	1:A:730:LEU:O	2.20	0.41
2:B:47:ASN:HD21	2:B:53:CYS:N	2.18	0.41
2:B:97:ASP:O	2:B:99:ARG:N	2.54	0.41
1:A:149:CYS:N	1:A:149:CYS:CB	2.80	0.41
1:A:393:ALA:O	1:A:394:ALA:C	2.63	0.41
1:A:333:LEU:HB3	1:A:391:PHE:CE1	2.48	0.41
1:A:645:LYS:HA	1:A:645:LYS:HD2	1.81	0.41
1:A:191:ARG:CB	1:A:192:ASN:HD21	2.28	0.41
1:A:407:ALA:HA	1:A:410:LYS:HZ2	1.85	0.41
1:A:502:SER:OG	1:A:503:LYS:N	2.53	0.41
1:A:715:ILE:O	1:A:716:VAL:C	2.62	0.41
1:A:719:MET:HE1	1:A:725:LEU:HD23	2.03	0.41
1:A:725:LEU:HD11	1:A:729:GLN:HB2	2.03	0.41
2:B:35:TRP:HD1	2:B:76:ASN:O	2.03	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:98:ASN:C	2:B:98:ASN:HD22	2.27	0.41
1:A:284:GLN:O	1:A:288:ALA:CB	2.68	0.41
1:A:344:ILE:HG13	1:A:398:ALA:CB	2.51	0.41
1:A:758:GLU:C	1:A:760:GLU:N	2.79	0.41
1:A:406:ASN:ND2	1:A:409:THR:HG23	2.36	0.41
1:A:499:GLU:OE1	1:A:741:ARG:NH2	2.54	0.41
1:A:634:ASP:OD2	1:A:634:ASP:N	2.47	0.41
1:A:755:ILE:HG22	1:A:759:LYS:CD	2.51	0.41
1:A:344:ILE:CG1	1:A:345:HIS:N	2.84	0.41
1:A:371:LEU:HG	1:A:452:VAL:CG2	2.50	0.41
1:A:433:SER:C	1:A:435:LYS:O	2.64	0.41
1:A:756:LEU:HD23	1:A:756:LEU:HA	1.82	0.41
2:B:49:ILE:HG22	2:B:70:VAL:HG12	1.99	0.41
2:B:81:PHE:HE2	2:B:103:PHE:CZ	2.39	0.41
1:A:134:ASN:ND2	1:A:160:TYR:CB	2.78	0.41
1:A:147:ARG:HA	1:A:147:ARG:HE	1.86	0.41
1:A:290:LYS:O	1:A:294:VAL:HG23	2.21	0.41
1:A:523:LYS:C	1:A:525:LEU:N	2.79	0.41
2:B:60:GLN:CG	2:B:61:ALA:H	2.32	0.41
1:A:38:ALA:C	1:A:40:SER:N	2.79	0.40
1:A:275:VAL:HG12	1:A:284:GLN:NE2	2.33	0.40
1:A:590:LEU:HD23	1:A:590:LEU:HA	1.81	0.40
1:A:631:ILE:O	1:A:632:LYS:C	2.64	0.40
1:A:643:LEU:HB3	1:A:649:LEU:CD2	2.44	0.40
1:A:657:ASN:C	1:A:661:VAL:HG23	2.46	0.40
1:A:39:LYS:H	1:A:39:LYS:CE	2.33	0.40
1:A:118:PHE:C	1:A:119:TYR:C	2.86	0.40
1:A:275:VAL:HG12	1:A:279:LEU:HD11	0.46	0.40
1:A:494:GLN:O	1:A:495:ALA:C	2.64	0.40
1:A:633:MET:O	1:A:635:ILE:N	2.54	0.40
2:B:38:VAL:HG12	2:B:40:ASP:CG	2.46	0.40
1:A:110:LEU:O	1:A:115:VAL:HG13	2.21	0.40
1:A:162:LEU:HD13	1:A:162:LEU:O	2.20	0.40
1:A:177:LYS:O	1:A:178:GLN:C	2.60	0.40
1:A:279:LEU:CG	1:A:280:HIS:H	1.82	0.40
1:A:352:ILE:C	1:A:352:ILE:CD1	2.90	0.40
1:A:471:ALA:HB1	1:A:547:PHE:CE2	2.56	0.40
1:A:565:ARG:O	1:A:568:ALA:HB3	2.21	0.40
1:A:603:ALA:HA	1:A:685:ASN:HB2	2.03	0.40
1:A:716:VAL:O	1:A:717:ARG:C	2.63	0.40
1:A:735:LEU:O	1:A:738:LEU:N	2.52	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:21:TRP:HE3	1:A:24:LEU:HB3	1.84	0.40
1:A:134:ASN:ND2	1:A:160:TYR:HB3	2.36	0.40
1:A:366:TYR:CD1	1:A:366:TYR:C	3.00	0.40
1:A:517:LEU:HD23	1:A:517:LEU:C	2.47	0.40
1:A:553:PHE:CE2	1:A:605:THR:HG22	2.57	0.40
1:A:563:TYR:HE1	1:A:581:TRP:CE2	2.40	0.40
1:A:719:MET:CE	1:A:725:LEU:HD23	2.52	0.40
2:B:94:CYS:HA	2:B:95:PRO:HD2	1.94	0.40
1:A:130:SER:HB3	1:A:163:ALA:CB	2.52	0.40
1:A:173:ARG:HA	1:A:173:ARG:NE	2.35	0.40
1:A:570:TYR:CD2	1:A:577:ARG:HG2	2.51	0.40
1:A:657:ASN:O	1:A:658:VAL:C	2.64	0.40
1:A:709:LEU:HD22	2:B:81:PHE:HE1	1.86	0.40
2:B:49:ILE:HG21	2:B:70:VAL:CG1	2.51	0.40

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

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:655:ASN:OD1	1:A:680:LEU:O[2_755]	2.13	0.07

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	719/760 (95%)	556 (77%)	127 (18%)	36 (5%)	1	10
2	B	86/90 (96%)	44 (51%)	22 (26%)	20 (23%)	0	0
All	All	805/850 (95%)	600 (74%)	149 (18%)	56 (7%)	1	4

All (56) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	259	GLU
1	A	280	HIS
1	A	480	ALA
1	A	542	SER
1	A	549	GLN
1	A	658	VAL
1	A	769	LYS
2	B	38	VAL
2	B	39	VAL
2	B	40	ASP
2	B	41	ASN
2	B	43	ALA
2	B	45	CYS
2	B	46	ARG
2	B	47	ASN
2	B	78	ALA
2	B	104	GLN
1	A	114	SER
1	A	274	ARG
1	A	334	GLY
1	A	387	ASN
1	A	414	SER
1	A	528	SER
1	A	558	GLU
1	A	575	SER
1	A	675	TYR
1	A	687	PRO
2	B	67	GLU
2	B	73	GLY
2	B	74	VAL
2	B	96	LEU
1	A	111	MET
1	A	116	LEU
1	A	439	GLU
1	A	551	CYS
1	A	632	LYS
1	A	665	PRO
2	B	98	ASN
2	B	102	GLU
1	A	85	GLY
1	A	172	PHE
1	A	174	PRO
1	A	552	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	759	LYS
1	A	173	ARG
1	A	555	LEU
1	A	727	HIS
2	B	95	PRO
2	B	99	ARG
1	A	277	VAL
1	A	596	LYS
1	A	684	ILE
2	B	54	ILE
2	B	93	VAL
1	A	437	PRO
1	A	497	GLY

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	659/684 (96%)	551 (84%)	108 (16%)	2	12
2	B	78/79 (99%)	61 (78%)	17 (22%)	1	6
All	All	737/763 (97%)	612 (83%)	125 (17%)	2	11

All (125) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	17	LEU
1	A	21	TRP
1	A	34	ARG
1	A	35	GLN
1	A	39	LYS
1	A	47	THR
1	A	48	HIS
1	A	54	THR
1	A	96	LEU
1	A	97	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	99	TYR
1	A	114	SER
1	A	117	LYS
1	A	144	TRP
1	A	147	ARG
1	A	157	TYR
1	A	159	ILE
1	A	168	ARG
1	A	178	GLN
1	A	181	ASN
1	A	191	ARG
1	A	192	ASN
1	A	194	GLU
1	A	206	GLN
1	A	210	GLU
1	A	225	LEU
1	A	242	ARG
1	A	243	PHE
1	A	252	LEU
1	A	253	GLN
1	A	257	VAL
1	A	258	THR
1	A	259	GLU
1	A	265	GLU
1	A	277	VAL
1	A	279	LEU
1	A	281	GLU
1	A	283	THR
1	A	296	ILE
1	A	298	LYS
1	A	303	PHE
1	A	339	LEU
1	A	344	ILE
1	A	349	LEU
1	A	352	ILE
1	A	368	GLN
1	A	369	THR
1	A	375	LYS
1	A	380	LEU
1	A	395	LEU
1	A	397	LYS
1	A	406	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	410	LYS
1	A	437	PRO
1	A	445	THR
1	A	446	LEU
1	A	454	LYS
1	A	468	LYS
1	A	469	MET
1	A	470	LEU
1	A	488	MET
1	A	490	SER
1	A	501	THR
1	A	509	GLN
1	A	514	SER
1	A	520	GLN
1	A	525	LEU
1	A	549	GLN
1	A	551	CYS
1	A	555	LEU
1	A	558	GLU
1	A	561	ARG
1	A	567	THR
1	A	577	ARG
1	A	584	GLN
1	A	597	ASN
1	A	610	ILE
1	A	618	ASP
1	A	626	THR
1	A	632	LYS
1	A	634	ASP
1	A	636	LEU
1	A	641	GLN
1	A	647	LYS
1	A	652	GLU
1	A	659	ASP
1	A	665	PRO
1	A	671	LEU
1	A	673	LEU
1	A	678	LYS
1	A	680	LEU
1	A	686	VAL
1	A	688	MET
1	A	689	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	690	THR
1	A	691	GLU
1	A	694	GLN
1	A	698	THR
1	A	706	ASP
1	A	722	ARG
1	A	738	LEU
1	A	750	LYS
1	A	756	LEU
1	A	762	LEU
1	A	763	GLU
1	A	769	LYS
1	A	773	SER
1	A	775	LEU
2	B	25	LYS
2	B	28	ASN
2	B	30	VAL
2	B	37	ILE
2	B	38	VAL
2	B	39	VAL
2	B	42	CYS
2	B	68	CYS
2	B	74	VAL
2	B	75	CYS
2	B	76	ASN
2	B	84	ILE
2	B	87	TRP
2	B	90	THR
2	B	99	ARG
2	B	100	GLU
2	B	101	TRP

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (44) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	29	GLN
1	A	30	GLN
1	A	35	GLN
1	A	51	ASN
1	A	98	ASN
1	A	102	ASN
1	A	121	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	122	GLN
1	A	134	ASN
1	A	143	HIS
1	A	178	GLN
1	A	181	ASN
1	A	192	ASN
1	A	253	GLN
1	A	280	HIS
1	A	284	GLN
1	A	304	HIS
1	A	324	ASN
1	A	330	GLN
1	A	368	GLN
1	A	386	ASN
1	A	387	ASN
1	A	406	ASN
1	A	448	GLN
1	A	477	GLN
1	A	505	GLN
1	A	518	ASN
1	A	538	GLN
1	A	549	GLN
1	A	564	GLN
1	A	584	GLN
1	A	597	ASN
1	A	602	GLN
1	A	613	GLN
1	A	624	GLN
1	A	677	ASN
1	A	683	ASN
1	A	692	GLN
1	A	702	ASN
1	A	737	GLN
2	B	28	ASN
2	B	47	ASN
2	B	98	ASN
2	B	104	GLN

5.3.3 RNA ⓘ

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 3 ligands modelled in this entry, 3 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](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	A	5
2	B	2

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	224:THR	C	225:LEU	N	1.20
1	B	40:ASP	C	41:ASN	N	1.19
1	A	217:ASP	C	218:ALA	N	1.15
1	A	214:ASN	C	215:GLU	N	1.11
1	B	86:ARG	C	87:TRP	N	1.01
1	A	301:GLU	C	302:ILE	N	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	300:LEU	C	301:GLU	N	0.68

6 Fit of model and data ⓘ

6.1 Protein, DNA and RNA chains ⓘ

EDS was not executed - this section is therefore empty.

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

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.3 Carbohydrates ⓘ

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.4 Ligands ⓘ

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.5 Other polymers ⓘ

EDS was not executed - this section is therefore empty.