



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 12:48 AM UTC

PDB ID : 1LDM / pdb_00001ldm
Title : Refined crystal structure of dogfish M4 apo-lactate dehydrogenase
Authors : Griffith, J.P.; Rossmann, M.G.
Deposited on : 1987-11-25
Resolution : 2.10 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
Mogul	:	2022.3.0, CSD as543be (2022)
Xtriage (Phenix)	:	NOT EXECUTED
EDS	:	NOT EXECUTED
Buster-report	:	wwPDB partial adaption of 1.1.7 (2018)
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

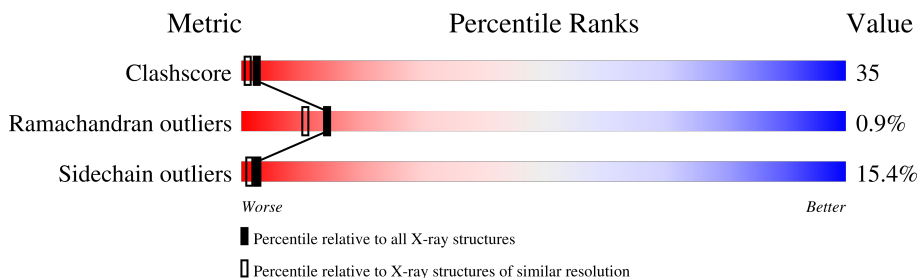
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 2.10 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	7164 (2.10-2.10)
Ramachandran outliers	187476	7099 (2.10-2.10)
Sidechain outliers	187428	7100 (2.10-2.10)

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	329	

The following table lists non-polymeric compounds, carbohydrate monomers and non-standard residues in protein, DNA, RNA chains that are outliers for geometric or electron-density-fit criteria:

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
2	NAD	A	330	-	-	X	-
3	OXM	A	332	-	-	X	-

2 Entry composition [i](#)

There are 4 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2843 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.

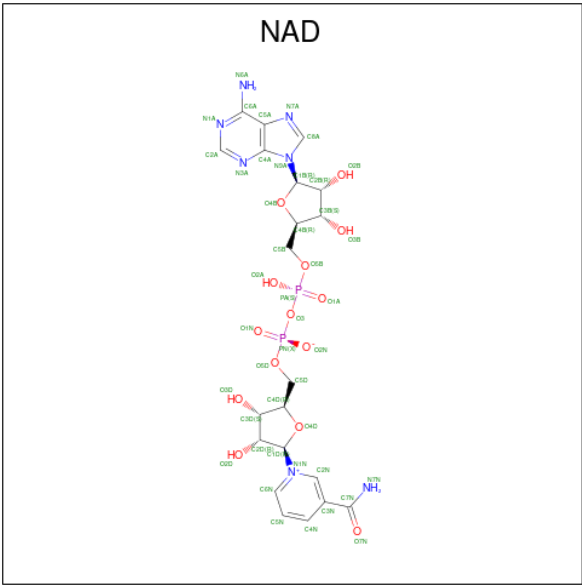
- Molecule 1 is a protein called M4 LACTATE DEHYDROGENASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	329	2542	1618	439	467	18	0	0	0

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

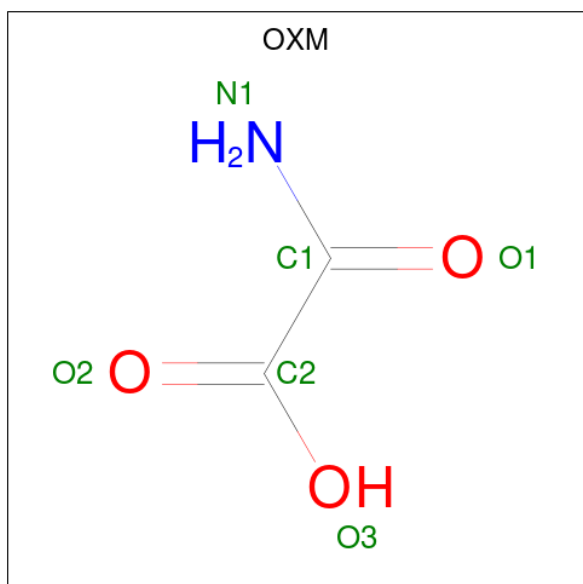
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	205	ASN	TRP	conflict	UNP P00341
A	206	VAL	ASN	conflict	UNP P00341
A	208	SER	LEU	conflict	UNP P00341
A	209	ILE	LYS	conflict	UNP P00341
A	210	LYS	GLU	conflict	UNP P00341
A	214	LEU	GLU	conflict	UNP P00341
A	215	ASP	LEU	conflict	UNP P00341
A	308	ASN	ASP	conflict	UNP P00341

- Molecule 2 is NICOTINAMIDE-ADENINE-DINUCLEOTIDE (CCD ID: NAD) (formula: C₂₁H₂₇N₇O₁₄P₂).



Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	A	1	Total	C	N	O	P	0	0
			44	21	7	14	2		

- Molecule 3 is OXAMIC ACID (CCD ID: OXM) (formula: $C_2H_3NO_3$).



Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
3	A	1	Total	C	N	O	0	0
			6	2	1	3		
3	A	1	Total	C	N	O	0	0
			6	2	1	3		

- Molecule 4 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	A	245	Total	O	0	0
			245	245		

4 Data and refinement statistics

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

Property	Value	Source
Space group	C 4 21 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	134.50Å 134.50Å 85.90Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	6.00 – 2.10	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	(Not available) (6.00-2.10)	Depositor
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
Refinement program	PROLSQ	Depositor
R, R_{free}	0.173 , (Not available)	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	2843	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	20.0	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: OXM, NAD

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	1.37	12/2589 (0.5%)	2.38	176/3500 (5.0%)

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

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	3

All (12) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	187	GLY	N-CA	7.19	1.52	1.45
1	A	288	LEU	N-CA	6.59	1.55	1.46
1	A	160	GLY	N-CA	6.13	1.52	1.45
1	A	101	GLN	N-CA	6.07	1.53	1.45
1	A	13	THR	CA-CB	6.06	1.64	1.53
1	A	49	ALA	N-CA	5.91	1.53	1.46
1	A	48	VAL	N-CA	5.43	1.52	1.46
1	A	197	VAL	CA-CB	5.18	1.62	1.54
1	A	110	VAL	C-O	5.13	1.29	1.24
1	A	8	ILE	CA-CB	5.11	1.59	1.53
1	A	22	LYS	N-CA	5.04	1.52	1.46
1	A	38	SER	N-CA	5.02	1.52	1.46

All (176) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	299	ASN	CA-CB-CG	15.66	128.26	112.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	197	VAL	N-CA-CB	-14.88	93.65	110.17
1	A	218	ASN	CA-CB-CG	12.31	124.92	112.60
1	A	171	ARG	CA-CB-CG	10.23	134.56	114.10
1	A	171	ARG	NE-CZ-NH2	-9.94	110.25	119.20
1	A	176	GLU	CA-CB-CG	9.43	132.95	114.10
1	A	294	ASP	CA-CB-CG	9.24	121.84	112.60
1	A	101	GLN	N-CA-C	-9.10	97.39	110.59
1	A	171	ARG	CD-NE-CZ	8.89	136.85	124.40
1	A	321	TRP	N-CA-CB	8.82	122.86	110.07
1	A	119	PHE	CA-C-N	8.74	132.82	120.42
1	A	119	PHE	C-N-CA	8.74	132.82	120.42
1	A	176	GLU	CB-CG-CD	8.50	127.05	112.60
1	A	197	VAL	CA-CB-CG1	8.48	124.81	110.40
1	A	160	GLY	CA-C-O	-8.32	112.24	121.23
1	A	186	HIS	CA-CB-CG	-8.29	105.52	113.80
1	A	142	VAL	CA-C-O	-8.05	112.58	120.95
1	A	1	ALA	CA-C-N	7.96	135.31	122.10
1	A	1	ALA	C-N-CA	7.96	135.31	122.10
1	A	101	GLN	CA-C-O	-7.86	112.70	121.89
1	A	261	MET	CA-C-O	-7.84	111.24	120.10
1	A	128	SER	O-C-N	7.72	127.48	121.23
1	A	55	GLU	N-CA-C	7.67	120.72	111.82
1	A	223	ASP	CA-CB-CG	-7.63	104.97	112.60
1	A	286	LEU	CA-C-O	-7.48	113.45	121.38
1	A	82	ASP	CA-CB-CG	7.42	120.02	112.60
1	A	71	PHE	CA-CB-CG	7.38	121.18	113.80
1	A	256	LEU	CB-CA-C	7.30	122.43	110.90
1	A	127	HIS	CA-CB-CG	-7.19	106.61	113.80
1	A	2	THR	CA-C-O	-7.10	113.71	121.31
1	A	120	ILE	N-CA-C	7.06	117.85	110.72
1	A	195	ASP	CA-C-O	-7.03	112.16	120.10
1	A	228	HIS	CA-C-O	7.01	127.85	120.42
1	A	308	ASN	CA-C-N	6.98	129.93	120.44
1	A	308	ASN	C-N-CA	6.98	129.93	120.44
1	A	195	ASP	CA-CB-CG	6.92	119.52	112.60
1	A	51	VAL	CA-C-O	-6.92	112.92	120.67
1	A	159	ILE	CA-C-N	-6.91	114.92	122.38
1	A	159	ILE	C-N-CA	-6.91	114.92	122.38
1	A	283	ASN	CA-CB-CG	6.86	119.46	112.60
1	A	291	VAL	CA-C-O	-6.83	112.99	120.71
1	A	48	VAL	O-C-N	6.83	130.57	123.20
1	A	17	PRO	N-CA-C	-6.81	100.78	111.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	193	HIS	N-CA-CB	6.75	120.30	110.58
1	A	51	VAL	O-C-N	6.74	130.32	123.10
1	A	121	ILE	CB-CA-C	6.63	123.43	111.36
1	A	188	TRP	N-CA-C	6.62	119.68	108.90
1	A	228	HIS	CA-CB-CG	-6.58	107.22	113.80
1	A	115	ASN	CA-C-O	-6.54	112.88	120.20
1	A	101	GLN	CB-CG-CD	6.52	123.68	112.60
1	A	295	HIS	CA-C-O	-6.51	111.80	119.48
1	A	170	PHE	CA-CB-CG	6.49	120.28	113.80
1	A	187	GLY	CA-C-O	-6.47	115.23	121.06
1	A	262	LYS	CA-CB-CG	6.47	127.05	114.10
1	A	18	ARG	CA-C-O	-6.47	113.00	120.31
1	A	93	VAL	CA-C-N	-6.46	115.18	123.19
1	A	93	VAL	C-N-CA	-6.46	115.18	123.19
1	A	266	ARG	CD-NE-CZ	6.46	133.44	124.40
1	A	8	ILE	N-CA-C	6.39	117.70	107.73
1	A	13	THR	N-CA-CB	-6.39	100.63	110.85
1	A	118	LYS	CA-CB-CG	6.37	126.83	114.10
1	A	81	LYS	CA-CB-CG	6.35	126.80	114.10
1	A	45	ALA	CA-C-O	-6.31	114.07	121.46
1	A	238	VAL	CB-CA-C	6.31	120.66	112.14
1	A	157	ARG	CD-NE-CZ	-6.30	115.58	124.40
1	A	17	PRO	O-C-N	6.25	130.47	122.91
1	A	2	THR	N-CA-C	-6.25	99.94	108.38
1	A	181	HIS	CA-CB-CG	-6.21	107.59	113.80
1	A	250	GLY	N-CA-C	-6.20	105.31	112.50
1	A	221	LYS	N-CA-C	6.19	120.36	109.96
1	A	295	HIS	O-C-N	6.15	129.63	122.19
1	A	294	ASP	O-C-N	6.09	132.16	122.41
1	A	47	GLU	CA-C-N	-6.06	114.56	122.99
1	A	47	GLU	C-N-CA	-6.06	114.56	122.99
1	A	175	GLY	CA-C-N	6.04	128.66	120.38
1	A	175	GLY	C-N-CA	6.04	128.66	120.38
1	A	24	THR	O-C-N	5.98	130.21	123.27
1	A	13	THR	N-CA-C	5.97	119.44	109.95
1	A	228	HIS	CA-C-N	5.97	129.09	120.79
1	A	228	HIS	C-N-CA	5.97	129.09	120.79
1	A	110	VAL	O-C-N	5.91	127.70	121.91
1	A	32	GLY	CA-C-N	5.88	128.74	120.28
1	A	32	GLY	C-N-CA	5.88	128.74	120.28
1	A	229	LYS	O-C-N	5.86	128.35	122.08
1	A	249	ILE	CB-CA-C	5.86	121.71	112.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	84	SER	CA-C-O	5.86	126.70	119.79
1	A	132	ILE	CA-C-O	-5.83	114.29	120.53
1	A	87	ALA	CA-C-O	-5.80	114.30	120.92
1	A	212	HIS	CA-C-N	5.79	126.30	120.04
1	A	212	HIS	C-N-CA	5.79	126.30	120.04
1	A	310	GLU	CA-CB-CG	5.79	125.67	114.10
1	A	7	LEU	CA-C-N	5.78	129.71	122.43
1	A	7	LEU	C-N-CA	5.78	129.71	122.43
1	A	288	LEU	CA-C-O	-5.76	112.27	120.16
1	A	290	CYS	N-CA-C	5.75	118.78	109.40
1	A	110	VAL	CA-C-O	-5.72	115.10	121.17
1	A	277	PHE	CA-CB-CG	5.72	119.53	113.80
1	A	288	LEU	N-CA-C	-5.72	97.17	109.81
1	A	189	VAL	CB-CA-C	5.71	119.34	110.83
1	A	112	ARG	CD-NE-CZ	-5.68	116.45	124.40
1	A	187	GLY	N-CA-C	-5.64	102.18	110.87
1	A	139	PRO	CA-C-N	5.64	132.11	121.97
1	A	139	PRO	C-N-CA	5.64	132.11	121.97
1	A	263	ASN	N-CA-CB	-5.63	103.37	111.70
1	A	85	VAL	N-CA-CB	-5.62	101.03	110.65
1	A	11	LEU	CA-C-O	-5.61	115.04	121.82
1	A	192	GLU	CA-C-O	5.60	127.48	121.55
1	A	272	THR	OG1-CB-CG2	5.58	120.46	109.30
1	A	142	VAL	O-C-N	5.58	127.28	121.87
1	A	127	HIS	N-CA-C	5.57	119.80	112.89
1	A	310	GLU	CG-CD-OE1	5.57	131.22	118.40
1	A	102	GLU	N-CA-CB	5.57	118.15	109.97
1	A	158	ILE	O-C-N	5.54	129.08	123.20
1	A	289	PRO	N-CA-CB	5.54	106.94	103.23
1	A	272	THR	CB-CA-C	-5.54	98.36	111.65
1	A	208	SER	O-C-N	5.53	127.68	121.87
1	A	165	LEU	O-C-N	5.53	128.85	122.17
1	A	224	TRP	N-CA-C	-5.51	106.05	112.89
1	A	222	GLN	OE1-CD-NE2	-5.50	117.10	122.60
1	A	161	SER	N-CA-C	-5.48	105.31	111.28
1	A	261	MET	CB-CA-C	5.47	120.75	110.63
1	A	171	ARG	NE-CZ-NH1	5.47	126.97	121.50
1	A	213	PRO	N-CA-CB	5.45	108.38	103.20
1	A	28	VAL	CA-C-N	5.45	128.36	122.69
1	A	28	VAL	C-N-CA	5.45	128.36	122.69
1	A	91	LEU	CA-C-O	5.44	126.97	120.28
1	A	134	LEU	CA-C-N	-5.43	113.57	121.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	134	LEU	C-N-CA	-5.43	113.57	121.71
1	A	225	LYS	N-CA-C	-5.42	105.93	112.54
1	A	189	VAL	O-C-N	-5.40	117.51	123.18
1	A	288	LEU	O-C-N	5.36	127.48	121.32
1	A	243	GLY	CA-C-O	5.35	124.22	119.56
1	A	21	ASN	CB-CG-ND2	5.34	124.41	116.40
1	A	159	ILE	N-CA-CB	-5.31	102.10	111.93
1	A	95	THR	OG1-CB-CG2	5.30	119.91	109.30
1	A	11	LEU	N-CA-C	-5.30	102.14	110.36
1	A	310	GLU	CB-CG-CD	5.29	121.58	112.60
1	A	256	LEU	N-CA-CB	-5.28	102.41	110.07
1	A	3	LEU	CA-C-N	5.26	127.59	120.38
1	A	3	LEU	C-N-CA	5.26	127.59	120.38
1	A	17	PRO	CB-CA-C	5.26	117.91	111.12
1	A	24	THR	CA-C-O	-5.26	114.67	120.30
1	A	266	ARG	NE-CZ-NH2	-5.25	114.47	119.20
1	A	116	ILE	CA-C-O	5.25	126.33	120.71
1	A	311	GLN	N-CA-CB	5.25	117.92	110.16
1	A	103	GLY	CA-C-N	-5.21	114.38	122.09
1	A	103	GLY	C-N-CA	-5.21	114.38	122.09
1	A	134	LEU	CA-C-O	-5.19	114.78	120.70
1	A	277	PHE	CA-C-O	-5.19	115.10	120.70
1	A	63	MET	CA-C-N	5.18	127.23	120.28
1	A	63	MET	C-N-CA	5.18	127.23	120.28
1	A	263	ASN	CA-CB-CG	5.18	117.78	112.60
1	A	265	CYS	CA-C-O	-5.17	115.56	122.03
1	A	193	HIS	CB-CA-C	-5.16	103.58	111.83
1	A	218	ASN	OD1-CG-ND2	-5.14	117.46	122.60
1	A	23	ILE	CA-C-O	-5.13	114.92	120.36
1	A	243	GLY	O-C-N	-5.13	117.95	122.77
1	A	159	ILE	CA-C-O	-5.13	115.33	121.28
1	A	101	GLN	CB-CA-C	5.11	120.17	110.51
1	A	326	ASP	CA-CB-CG	-5.11	107.49	112.60
1	A	167	SER	N-CA-C	-5.11	106.31	112.54
1	A	99	ARG	CD-NE-CZ	-5.11	117.25	124.40
1	A	320	LEU	CA-C-O	-5.10	113.77	119.79
1	A	17	PRO	CA-C-O	-5.10	115.57	121.95
1	A	128	SER	CA-C-O	-5.10	115.67	121.28
1	A	200	VAL	CA-C-N	5.09	127.61	120.28
1	A	200	VAL	C-N-CA	5.09	127.61	120.28
1	A	230	ASP	CA-CB-CG	5.09	117.69	112.60
1	A	321	TRP	CA-C-O	-5.08	115.47	120.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	82	ASP	CB-CA-C	5.07	118.69	110.22
1	A	39	ILE	O-C-N	-5.06	116.25	122.57
1	A	80	GLY	CA-C-O	-5.05	116.64	121.49
1	A	199	SER	CA-C-O	-5.05	114.96	120.36
1	A	21	ASN	OD1-CG-ND2	-5.02	117.58	122.60
1	A	272	THR	N-CA-C	5.02	115.94	108.86
1	A	310	GLU	CG-CD-OE2	-5.01	106.89	118.40

There are no chirality outliers.

All (3) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	106	ARG	Sidechain
1	A	171	ARG	Sidechain
1	A	266	ARG	Sidechain

5.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	2542	0	2613	181	1301
2	A	44	0	25	1	32
3	A	12	0	4	0	3
4	A	245	0	0	17	223
All	All	2843	0	2642	181	1322

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 35.

All (181) 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:284:VAL:HG23	1:A:321:TRP:HD1	1.09	1.13
1:A:197:VAL:HG12	1:A:228:HIS:HE1	1.14	1.06
1:A:284:VAL:HG23	1:A:321:TRP:CD1	1.95	1.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:275:LYS:O	1:A:276:ASP:HB2	1.60	1.00
1:A:248:ALA:HB3	4:A:421:HOH:O	1.61	0.99
1:A:181:HIS:HD2	1:A:183:CYS:SG	1.90	0.94
1:A:23:ILE:HD12	1:A:45:ALA:HB2	1.52	0.92
1:A:197:VAL:HG12	1:A:228:HIS:CE1	2.04	0.91
1:A:2:THR:O	1:A:6:LYS:HG3	1.71	0.90
1:A:284:VAL:CG1	1:A:286:LEU:HD13	2.04	0.88
1:A:285:PHE:O	1:A:286:LEU:HD12	1.75	0.87
1:A:312:GLN:NE2	4:A:413:HOH:O	2.07	0.87
1:A:210:LYS:HB3	1:A:213:PRO:HG2	1.59	0.85
1:A:281:LYS:HD2	1:A:282:ASP:OD2	1.76	0.84
1:A:321:TRP:HZ3	1:A:325:LYS:HE2	1.43	0.84
1:A:272:THR:HG23	1:A:297:ILE:CD1	2.08	0.82
1:A:121:ILE:HD13	1:A:147:ALA:HA	1.62	0.81
1:A:284:VAL:CG2	1:A:321:TRP:HD1	1.93	0.81
1:A:192:GLU:O	1:A:197:VAL:HG23	1.82	0.80
1:A:190:ILE:O	1:A:198:PRO:HD2	1.81	0.80
1:A:192:GLU:O	1:A:197:VAL:CG2	2.30	0.79
1:A:181:HIS:CD2	1:A:183:CYS:SG	2.77	0.77
1:A:171:ARG:HD3	1:A:185:CYS:O	1.85	0.76
1:A:272:THR:HG23	1:A:297:ILE:HD13	1.68	0.75
1:A:57:LYS:HE3	1:A:61:GLU:OE1	1.86	0.74
1:A:210:LYS:CG	1:A:213:PRO:HD3	2.18	0.74
1:A:171:ARG:CD	1:A:185:CYS:O	2.36	0.73
1:A:210:LYS:O	1:A:213:PRO:HD2	1.88	0.73
1:A:17:PRO:HA	4:A:479:HOH:O	1.90	0.72
1:A:270:VAL:O	1:A:287:SER:HA	1.90	0.72
1:A:177:ARG:HE	1:A:227:LEU:HD11	1.54	0.71
1:A:210:LYS:HB3	1:A:213:PRO:CG	2.22	0.70
1:A:55:GLU:HG3	1:A:81:LYS:HE3	1.74	0.69
1:A:210:LYS:HG2	1:A:213:PRO:HD3	1.75	0.69
1:A:272:THR:O	1:A:285:PHE:HA	1.94	0.67
1:A:293:ASN:C	1:A:293:ASN:HD22	2.02	0.67
1:A:212:HIS:HE1	1:A:219:LYS:HE2	1.60	0.67
1:A:274:VAL:HG13	1:A:284:VAL:O	1.93	0.67
1:A:40:LEU:HD22	1:A:74:THR:HG21	1.76	0.67
1:A:107:LEU:HD22	1:A:323:ILE:HD13	1.75	0.67
1:A:311:GLN:OE1	4:A:458:HOH:O	2.11	0.66
1:A:321:TRP:CZ3	1:A:325:LYS:HE2	2.29	0.66
1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:HD12	2.11	0.66
1:A:40:LEU:CD2	1:A:74:THR:HG21	2.26	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:284:VAL:HG13	1:A:286:LEU:HD13	1.76	0.64
1:A:189:VAL:CG1	1:A:197:VAL:HG13	2.27	0.64
1:A:190:ILE:O	1:A:198:PRO:CD	2.45	0.64
1:A:144:THR:HG21	1:A:160:GLY:HA3	1.79	0.64
1:A:224:TRP:CZ3	1:A:227:LEU:HD22	2.33	0.63
1:A:2:THR:HG22	1:A:5:ASP:H	1.64	0.63
1:A:108:ASN:ND2	4:A:444:HOH:O	2.31	0.63
1:A:284:VAL:HA	1:A:324:GLN:HE22	1.63	0.62
1:A:274:VAL:HG23	1:A:280:ILE:HD13	1.82	0.62
1:A:321:TRP:CD1	1:A:324:GLN:HE21	2.18	0.62
1:A:210:LYS:CG	1:A:213:PRO:CD	2.78	0.61
1:A:206:VAL:O	1:A:209:ILE:HD12	2.00	0.61
1:A:272:THR:CG2	1:A:297:ILE:HD13	2.29	0.61
1:A:210:LYS:C	1:A:213:PRO:HD2	2.26	0.60
1:A:210:LYS:HB3	1:A:213:PRO:CD	2.31	0.60
1:A:191:GLY:HA3	1:A:198:PRO:HD2	1.84	0.60
1:A:138:ASN:HA	1:A:140:VAL:N	2.18	0.58
1:A:321:TRP:CZ3	1:A:325:LYS:HG2	2.39	0.58
1:A:191:GLY:HA3	1:A:198:PRO:CD	2.34	0.58
1:A:212:HIS:O	1:A:216:GLY:N	2.36	0.58
1:A:42:LYS:O	1:A:43:ASP:C	2.45	0.57
1:A:197:VAL:HG21	4:A:410:HOH:O	2.03	0.57
1:A:177:ARG:NE	1:A:227:LEU:HD11	2.19	0.57
1:A:210:LYS:HG3	4:A:414:HOH:O	2.05	0.56
1:A:274:VAL:CG2	1:A:280:ILE:HD13	2.36	0.56
1:A:210:LYS:HG2	1:A:213:PRO:CD	2.36	0.55
1:A:160:GLY:O	1:A:270:VAL:HB	2.07	0.55
1:A:144:THR:HG21	1:A:160:GLY:CA	2.36	0.55
1:A:180:VAL:O	1:A:181:HIS:C	2.49	0.55
1:A:202:SER:HB3	1:A:306:LYS:HD2	1.89	0.54
1:A:327:LEU:HD23	4:A:437:HOH:O	2.07	0.54
1:A:192:GLU:HG2	1:A:193:HIS:C	2.32	0.54
1:A:274:VAL:HG11	1:A:286:LEU:HB2	1.89	0.54
1:A:324:GLN:O	1:A:325:LYS:C	2.50	0.54
1:A:224:TRP:HZ3	1:A:227:LEU:HD22	1.72	0.54
1:A:171:ARG:HD2	1:A:185:CYS:O	2.07	0.54
1:A:192:GLU:O	1:A:197:VAL:HG22	2.08	0.54
1:A:202:SER:CB	1:A:306:LYS:HD2	2.38	0.53
1:A:284:VAL:HG13	1:A:286:LEU:CD1	2.39	0.53
1:A:218:ASN:O	1:A:220:ASP:N	2.42	0.53
1:A:293:ASN:ND2	1:A:295:HIS:H	2.06	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:286:LEU:CD1	1:A:320:LEU:HD12	2.39	0.53
1:A:166:ASP:OD2	1:A:193:HIS:ND1	2.38	0.52
1:A:42:LYS:O	1:A:44:LEU:HD13	2.09	0.52
1:A:165:LEU:HD13	1:A:169:ARG:NH2	2.25	0.52
1:A:20:TYR:HB3	4:A:482:HOH:O	2.10	0.52
1:A:322:ASP:HA	4:A:449:HOH:O	2.10	0.51
1:A:321:TRP:HZ3	1:A:325:LYS:CE	2.17	0.51
1:A:172:TYR:CD1	1:A:173:LEU:HD23	2.46	0.51
1:A:286:LEU:HD11	1:A:320:LEU:HD12	1.92	0.50
1:A:249:ILE:HD12	1:A:253:VAL:HG23	1.94	0.50
1:A:148:TRP:HA	1:A:158:ILE:HD12	1.92	0.50
1:A:262:LYS:O	1:A:263:ASN:C	2.54	0.50
1:A:107:LEU:O	1:A:110:VAL:HG12	2.11	0.50
1:A:192:GLU:HG2	1:A:194:GLY:N	2.27	0.49
1:A:210:LYS:CB	1:A:213:PRO:CD	2.89	0.49
1:A:155:MET:HE3	1:A:273:MET:HB3	1.94	0.49
1:A:275:LYS:O	1:A:276:ASP:CB	2.43	0.49
1:A:137:SER:O	1:A:140:VAL:HA	2.13	0.49
1:A:134:LEU:HD21	1:A:159:ILE:HG22	1.94	0.49
1:A:262:LYS:HB3	1:A:264:LEU:HG	1.94	0.49
1:A:226:LYS:HA	1:A:229:LYS:HB2	1.95	0.49
1:A:315:LYS:NZ	4:A:566:HOH:O	2.46	0.49
1:A:74:THR:HG23	1:A:74:THR:O	2.13	0.48
1:A:134:LEU:HD23	1:A:159:ILE:HB	1.94	0.48
1:A:197:VAL:CG1	1:A:228:HIS:HE1	2.05	0.48
1:A:73:HIS:HE1	4:A:345:HOH:O	1.95	0.48
1:A:212:HIS:CE1	1:A:219:LYS:HE2	2.44	0.48
1:A:55:GLU:CD	1:A:81:LYS:HD2	2.38	0.48
1:A:91:LEU:HD23	1:A:92:VAL:N	2.29	0.47
1:A:190:ILE:C	1:A:198:PRO:HD2	2.37	0.47
1:A:131:CYS:O	1:A:157:ARG:HD2	2.14	0.47
1:A:82:ASP:C	1:A:84:SER:H	2.23	0.47
1:A:113:ASN:ND2	1:A:138:ASN:O	2.41	0.47
1:A:274:VAL:HG23	1:A:280:ILE:CD1	2.43	0.46
1:A:32:GLY:HA2	1:A:95:THR:HG21	1.97	0.46
1:A:138:ASN:C	1:A:143:LEU:HD12	2.41	0.46
1:A:321:TRP:CE3	1:A:325:LYS:HG2	2.51	0.46
1:A:218:ASN:C	1:A:220:ASP:H	2.24	0.45
1:A:281:LYS:H	1:A:281:LYS:HG3	1.05	0.45
1:A:239:ILE:O	1:A:243:GLY:N	2.46	0.45
1:A:115:ASN:O	1:A:119:PHE:CD1	2.70	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:126:LYS:HB2	1:A:126:LYS:HE2	1.63	0.44
1:A:201:TRP:HB2	1:A:219:LYS:HD3	1.99	0.44
1:A:265:CYS:HA	1:A:292:LEU:O	2.17	0.44
1:A:142:VAL:O	1:A:145:TYR:HB3	2.17	0.44
1:A:31:VAL:HG21	2:A:330:NAD:C6N	2.46	0.44
1:A:55:GLU:HG3	1:A:81:LYS:CE	2.47	0.44
1:A:221:LYS:O	1:A:222:GLN:HB2	2.17	0.44
1:A:158:ILE:C	1:A:159:ILE:HG13	2.41	0.44
1:A:192:GLU:HG2	1:A:193:HIS:N	2.30	0.44
1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CD1	2.79	0.44
1:A:293:ASN:C	1:A:293:ASN:ND2	2.68	0.44
1:A:121:ILE:HD13	1:A:147:ALA:CA	2.40	0.43
1:A:53:VAL:O	1:A:81:LYS:HE3	2.18	0.43
1:A:189:VAL:HG11	1:A:197:VAL:HG13	2.00	0.43
1:A:220:ASP:N	1:A:220:ASP:OD1	2.50	0.43
1:A:210:LYS:HG3	1:A:213:PRO:HD3	1.96	0.43
1:A:272:THR:CG2	1:A:297:ILE:CD1	2.86	0.43
1:A:59:LYS:NZ	1:A:59:LYS:HB3	2.34	0.43
1:A:210:LYS:HB3	1:A:213:PRO:HD2	2.00	0.43
1:A:213:PRO:HG3	4:A:561:HOH:O	2.18	0.43
1:A:118:LYS:HE3	1:A:118:LYS:HB3	1.76	0.42
1:A:33:MET:H	1:A:33:MET:HG2	1.63	0.42
1:A:173:LEU:HB3	4:A:514:HOH:O	2.19	0.42
1:A:115:ASN:O	1:A:119:PHE:CE1	2.72	0.42
1:A:3:LEU:HA	1:A:3:LEU:HD23	1.77	0.42
1:A:201:TRP:CD1	1:A:219:LYS:HG3	2.55	0.42
1:A:39:ILE:O	1:A:40:LEU:C	2.62	0.42
1:A:1:ALA:HB1	1:A:6:LYS:HE3	2.01	0.42
1:A:90:LYS:HG2	4:A:367:HOH:O	2.20	0.42
1:A:202:SER:HB3	1:A:306:LYS:CD	2.49	0.42
1:A:321:TRP:HZ3	1:A:325:LYS:HG2	1.84	0.42
1:A:180:VAL:HG12	1:A:181:HIS:O	2.19	0.42
1:A:16:GLU:HA	1:A:17:PRO:HD3	1.90	0.42
1:A:134:LEU:HA	1:A:134:LEU:HD22	1.63	0.42
1:A:95:THR:O	1:A:95:THR:CG2	2.67	0.41
1:A:221:LYS:O	1:A:222:GLN:CB	2.68	0.41
1:A:322:ASP:HB3	4:A:446:HOH:O	2.20	0.41
1:A:40:LEU:CD1	1:A:65:LEU:HD22	2.50	0.41
1:A:137:SER:O	1:A:140:VAL:CA	2.68	0.41
1:A:284:VAL:HG11	1:A:286:LEU:HD13	1.96	0.41
1:A:43:ASP:HB3	4:A:380:HOH:O	2.20	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:210:LYS:HG2	1:A:213:PRO:CG	2.50	0.41
1:A:28:VAL:HG21	1:A:58:LEU:HA	2.03	0.41
1:A:191:GLY:HA3	1:A:198:PRO:HD3	2.03	0.41
1:A:315:LYS:O	1:A:316:SER:C	2.64	0.41
1:A:32:GLY:CA	1:A:95:THR:HG21	2.49	0.41
1:A:147:ALA:O	1:A:151:SER:HB3	2.21	0.41
1:A:249:ILE:CD1	1:A:253:VAL:HG23	2.50	0.41
1:A:282:ASP:HB3	1:A:321:TRP:NE1	2.35	0.41
1:A:284:VAL:HA	1:A:324:GLN:NE2	2.33	0.41
1:A:321:TRP:C	1:A:323:ILE:N	2.78	0.41
1:A:321:TRP:CZ3	1:A:325:LYS:CG	3.04	0.41
1:A:202:SER:O	1:A:210:LYS:HE2	2.21	0.40
1:A:16:GLU:C	1:A:17:PRO:O	2.59	0.40
1:A:181:HIS:CD2	1:A:183:CYS:H	2.39	0.40

All (1322) 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:175:GLY:C	1:A:285:PHE:CE2[3_545]	0.18	2.02
1:A:119:PHE:CE1	1:A:258:GLU:CB[4_555]	0.20	2.00
1:A:81:LYS:CG	1:A:244:TYR:CE2[16_555]	0.22	1.98
1:A:29:GLY:C	1:A:52:ASP:N[16_555]	0.23	1.97
1:A:75:ALA:O	1:A:157:ARG:NE[16_555]	0.35	1.85
1:A:56:ASP:N	1:A:99:ARG:CD[16_555]	0.36	1.84
1:A:245:THR:O	4:A:537:HOH:O[16_555]	0.36	1.84
1:A:4:LYS:C	1:A:5:ASP:OD1[12_555]	0.37	1.83
1:A:76:LYS:NZ	1:A:118:LYS:NZ[6_455]	0.38	1.82
1:A:15:GLN:OE1	1:A:115:ASN:N[6_455]	0.41	1.79
1:A:31:VAL:N	1:A:80:GLY:O[16_555]	0.44	1.76
1:A:327:LEU:CD1	4:A:476:HOH:O[6_555]	0.44	1.76
1:A:29:GLY:CA	1:A:52:ASP:CB[16_555]	0.46	1.74
1:A:186:HIS:NE2	1:A:299:ASN:CG[10_555]	0.49	1.71
1:A:261:MET:CE	4:A:525:HOH:O[16_555]	0.49	1.71
1:A:301:VAL:CG2	4:A:436:HOH:O[12_565]	0.51	1.69
1:A:27:GLY:CA	1:A:28:VAL:CB[16_555]	0.53	1.67
1:A:98:ALA:CA	1:A:242:LYS:N[4_555]	0.53	1.67
1:A:144:THR:N	1:A:172:TYR:CE1[4_555]	0.54	1.66
1:A:78:VAL:O	1:A:93:VAL:C[16_555]	0.55	1.65
1:A:304:LYS:CE	1:A:311:GLN:OE1[12_565]	0.55	1.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:57:LYS:CB	2:A:330:NAD:O5B[16_555]	0.56	1.64
1:A:34:ALA:CB	1:A:84:SER:CA[16_555]	0.57	1.63
1:A:177:ARG:CB	1:A:320:LEU:CD1[3_545]	0.57	1.63
1:A:4:LYS:CG	1:A:10:HIS:CD2[12_555]	0.58	1.62
1:A:264:LEU:O	1:A:293:ASN:N[10_555]	0.58	1.62
1:A:190:ILE:CD1	1:A:321:TRP:CG[12_565]	0.59	1.61
1:A:199:SER:N	4:A:446:HOH:O[12_565]	0.59	1.61
1:A:283:ASN:O	1:A:300:ILE:CB[11_655]	0.60	1.60
1:A:176:GLU:N	1:A:285:PHE:CD2[3_545]	0.62	1.58
1:A:31:VAL:CB	1:A:80:GLY:CA[16_555]	0.63	1.57
1:A:263:ASN:C	1:A:294:ASP:N[10_555]	0.63	1.57
1:A:207:ALA:O	1:A:301:VAL:C[10_555]	0.64	1.56
1:A:53:VAL:CB	4:A:495:HOH:O[16_555]	0.66	1.54
1:A:47:GLU:OE2	1:A:91:LEU:CD2[16_555]	0.68	1.52
1:A:57:LYS:CG	2:A:330:NAD:C4B[16_555]	0.69	1.51
1:A:7:LEU:O	1:A:275:LYS:N[5_545]	0.70	1.50
1:A:67:HIS:ND1	1:A:147:ALA:C[16_555]	0.70	1.50
1:A:244:TYR:OH	2:A:330:NAD:C6A[3_545]	0.70	1.50
1:A:14:SER:CB	1:A:145:TYR:C[6_455]	0.71	1.49
1:A:59:LYS:CG	2:A:330:NAD:C1D[16_555]	0.71	1.49
1:A:116:ILE:CB	1:A:247:TRP:C[4_555]	0.72	1.48
1:A:9:GLY:N	4:A:333:HOH:O[2_555]	0.73	1.47
1:A:300:ILE:N	4:A:475:HOH:O[16_555]	0.73	1.47
1:A:74:THR:CB	1:A:130:ASP:OD1[16_555]	0.75	1.45
1:A:110:VAL:CG2	1:A:171:ARG:NH1[4_555]	0.75	1.45
1:A:283:ASN:C	1:A:300:ILE:CG2[11_655]	0.75	1.45
4:A:373:HOH:O	4:A:496:HOH:O[4_555]	0.75	1.45
1:A:77:ILE:O	1:A:133:ILE:C[16_555]	0.76	1.44
1:A:281:LYS:CA	1:A:312:GLN:CB[11_655]	0.76	1.44
1:A:288:LEU:C	1:A:323:ILE:O[12_565]	0.76	1.44
1:A:55:GLU:OE2	1:A:243:GLY:C[16_555]	0.77	1.43
1:A:56:ASP:CA	1:A:99:ARG:CG[16_555]	0.77	1.43
1:A:115:ASN:ND2	1:A:266:ARG:NE[4_555]	0.77	1.43
1:A:155:MET:SD	4:A:334:HOH:O[6_555]	0.79	1.41
1:A:238:VAL:O	4:A:505:HOH:O[3_545]	0.79	1.41
1:A:278:TYR:CA	4:A:468:HOH:O[16_555]	0.79	1.41
1:A:32:GLY:C	1:A:51:VAL:CG2[16_555]	0.80	1.40
1:A:209:ILE:CD1	1:A:284:VAL:CG2[3_545]	0.80	1.40
1:A:158:ILE:CG1	1:A:172:TYR:OH[4_555]	0.81	1.39
1:A:177:ARG:CA	1:A:285:PHE:C[3_545]	0.81	1.39
1:A:264:LEU:CG	1:A:295:HIS:CD2[10_555]	0.81	1.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2:THR:N	4:A:544:HOH:O[5_545]	0.82	1.38
1:A:121:ILE:N	1:A:251:LEU:CG[4_555]	0.83	1.37
1:A:4:LYS:CG	1:A:8:ILE:CA[11_555]	0.84	1.36
1:A:121:ILE:O	1:A:251:LEU:CD1[4_555]	0.84	1.36
1:A:300:ILE:C	1:A:324:GLN:CG[12_565]	0.84	1.36
1:A:20:TYR:CZ	1:A:261:MET:O[7_555]	0.85	1.35
1:A:8:ILE:CA	1:A:10:HIS:CD2[2_555]	0.86	1.34
1:A:107:LEU:CD2	1:A:174:MET:N[4_555]	0.86	1.34
1:A:143:LEU:CA	1:A:172:TYR:CD1[4_555]	0.86	1.34
1:A:264:LEU:C	1:A:293:ASN:CA[10_555]	0.86	1.34
1:A:5:ASP:N	1:A:5:ASP:OD1[12_555]	0.87	1.33
1:A:40:LEU:CD1	1:A:129:PRO:N[16_555]	0.87	1.33
1:A:148:TRP:N	1:A:182:SER:OG[4_555]	0.87	1.33
1:A:190:ILE:C	1:A:325:LYS:N[12_565]	0.87	1.33
1:A:303:MET:CB	1:A:318:THR:O[12_565]	0.87	1.33
1:A:13:THR:C	1:A:145:TYR:CA[6_455]	0.88	1.32
1:A:15:GLN:O	1:A:114:VAL:CG1[6_455]	0.88	1.32
1:A:16:GLU:C	1:A:293:ASN:ND2[16_555]	0.88	1.32
1:A:20:TYR:CZ	1:A:261:MET:C[7_555]	0.88	1.32
1:A:108:ASN:OD1	1:A:169:ARG:CA[4_555]	0.88	1.32
1:A:115:ASN:CB	1:A:266:ARG:NH2[4_555]	0.88	1.32
1:A:56:ASP:CB	1:A:99:ARG:CG[16_555]	0.89	1.31
1:A:71:PHE:CE2	1:A:153:LEU:CB[5_545]	0.89	1.31
1:A:123:ASN:O	1:A:247:TRP:CE2[4_555]	0.89	1.31
1:A:198:PRO:CD	1:A:321:TRP:CZ2[12_565]	0.89	1.31
1:A:16:GLU:CA	1:A:293:ASN:ND2[16_555]	0.91	1.29
1:A:58:LEU:CD1	1:A:95:THR:CG2[16_555]	0.91	1.29
1:A:65:LEU:CG	1:A:124:ILE:CG2[16_555]	0.91	1.29
1:A:15:GLN:CD	1:A:115:ASN:CB[6_455]	0.92	1.28
1:A:38:SER:CA	1:A:123:ASN:ND2[3_545]	0.92	1.28
1:A:108:ASN:CB	1:A:169:ARG:O[4_555]	0.92	1.28
1:A:177:ARG:N	1:A:285:PHE:CB[3_545]	0.92	1.28
1:A:31:VAL:CG2	1:A:80:GLY:CA[16_555]	0.93	1.27
1:A:36:ALA:O	1:A:127:HIS:O[16_555]	0.93	1.27
1:A:195:ASP:OD1	4:A:426:HOH:O[12_565]	0.93	1.27
1:A:8:ILE:CB	1:A:9:GLY:C[11_555]	0.94	1.26
1:A:39:ILE:C	4:A:532:HOH:O[16_555]	0.94	1.26
1:A:207:ALA:N	1:A:300:ILE:O[10_555]	0.94	1.26
1:A:1:ALA:CA	4:A:466:HOH:O[12_555]	0.95	1.25
1:A:17:PRO:CD	1:A:296:GLY:O[16_555]	0.95	1.25
1:A:24:THR:C	1:A:49:ALA:O[16_555]	0.95	1.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:28:VAL:N	1:A:28:VAL:N[16_555]	0.95	1.25
1:A:180:VAL:O	4:A:369:HOH:O[7_555]	0.95	1.25
1:A:17:PRO:CB	1:A:295:HIS:C[16_555]	0.96	1.24
1:A:53:VAL:C	4:A:494:HOH:O[16_555]	0.96	1.24
1:A:301:VAL:C	1:A:321:TRP:N[12_565]	0.96	1.24
1:A:13:THR:OG1	1:A:145:TYR:N[6_455]	0.97	1.23
1:A:27:GLY:N	1:A:28:VAL:CB[16_555]	0.97	1.23
1:A:58:LEU:C	1:A:95:THR:O[16_555]	0.97	1.23
1:A:67:HIS:O	1:A:152:GLY:O[16_555]	0.97	1.23
4:A:465:HOH:O	4:A:544:HOH:O[16_555]	0.97	1.23
1:A:12:ALA:CB	1:A:177:ARG:O[7_555]	0.98	1.22
1:A:18:ARG:CA	1:A:294:ASP:O[16_555]	0.98	1.22
1:A:26:VAL:N	1:A:50:LEU:CB[16_555]	0.98	1.22
1:A:38:SER:O	1:A:126:LYS:CE[3_545]	0.98	1.22
1:A:2:THR:CA	4:A:545:HOH:O[16_555]	0.99	1.21
1:A:76:LYS:C	1:A:131:CYS:C[16_555]	0.99	1.21
1:A:207:ALA:O	1:A:321:TRP:N[3_545]	0.99	1.21
1:A:264:LEU:N	1:A:293:ASN:C[10_555]	0.99	1.21
1:A:302:LYS:O	1:A:318:THR:C[12_565]	0.99	1.21
1:A:303:MET:CA	1:A:318:THR:CA[12_565]	0.99	1.21
1:A:107:LEU:O	1:A:171:ARG:CA[4_555]	1.00	1.20
1:A:16:GLU:N	1:A:293:ASN:ND2[16_555]	1.01	1.19
1:A:16:GLU:CG	1:A:292:LEU:CB[16_555]	1.01	1.19
1:A:54:MET:CG	4:A:499:HOH:O[16_555]	1.01	1.19
1:A:70:LEU:CD2	4:A:407:HOH:O[8_555]	1.01	1.19
1:A:73:HIS:ND1	1:A:73:HIS:CE1[11_555]	1.01	1.19
1:A:207:ALA:O	1:A:301:VAL:O[10_555]	1.01	1.19
1:A:55:GLU:CD	1:A:243:GLY:CA[16_555]	1.02	1.18
1:A:59:LYS:N	2:A:330:NAD:C4D[16_555]	1.02	1.18
1:A:62:MET:N	1:A:94:ILE:CG2[16_555]	1.02	1.18
1:A:70:LEU:CG	1:A:154:PRO:N[5_545]	1.02	1.18
1:A:118:LYS:CD	1:A:295:HIS:C[11_655]	1.02	1.18
1:A:148:TRP:NE1	1:A:184:SER:CB[4_555]	1.02	1.18
1:A:264:LEU:N	4:A:481:HOH:O[7_555]	1.02	1.18
1:A:301:VAL:O	1:A:321:TRP:N[12_565]	1.02	1.18
1:A:177:ARG:CD	4:A:388:HOH:O[3_545]	1.03	1.17
1:A:265:CYS:O	1:A:266:ARG:O[10_555]	1.03	1.17
1:A:16:GLU:CB	1:A:264:LEU:O[7_555]	1.04	1.16
1:A:20:TYR:CE2	1:A:262:LYS:CA[7_555]	1.04	1.16
1:A:20:TYR:OH	1:A:262:LYS:N[7_555]	1.04	1.16
1:A:59:LYS:CE	1:A:138:ASN:OD1[16_555]	1.04	1.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:266:ARG:CD	1:A:293:ASN:OD1[10_555]	1.04	1.16
1:A:71:PHE:CZ	1:A:153:LEU:CB[5_545]	1.05	1.15
1:A:121:ILE:CA	1:A:251:LEU:CD1[4_555]	1.05	1.15
1:A:186:HIS:CA	4:A:441:HOH:O[3_545]	1.05	1.15
1:A:262:LYS:CD	4:A:368:HOH:O[7_555]	1.05	1.15
1:A:15:GLN:OE1	1:A:114:VAL:C[6_455]	1.06	1.14
1:A:40:LEU:CG	1:A:128:SER:C[16_555]	1.06	1.14
1:A:59:LYS:CG	2:A:330:NAD:C2D[16_555]	1.06	1.14
1:A:283:ASN:N	1:A:288:LEU:CD1[11_655]	1.06	1.14
1:A:4:LYS:CE	1:A:11:LEU:CA[12_555]	1.07	1.13
1:A:27:GLY:N	1:A:28:VAL:CG1[16_555]	1.07	1.13
1:A:108:ASN:OD1	1:A:169:ARG:N[4_555]	1.07	1.13
1:A:116:ILE:CG1	1:A:248:ALA:N[4_555]	1.07	1.13
1:A:123:ASN:C	1:A:247:TRP:CE3[4_555]	1.07	1.13
1:A:207:ALA:CA	1:A:300:ILE:O[10_555]	1.07	1.13
1:A:107:LEU:CD2	1:A:174:MET:CA[4_555]	1.08	1.12
1:A:155:MET:CE	1:A:178:LEU:C[4_555]	1.08	1.12
1:A:76:LYS:O	1:A:131:CYS:CA[16_555]	1.09	1.11
1:A:148:TRP:CA	1:A:183:CYS:N[4_555]	1.09	1.11
1:A:321:TRP:CZ3	4:A:405:HOH:O[11_655]	1.09	1.11
4:A:351:HOH:O	4:A:365:HOH:O[10_555]	1.09	1.11
4:A:495:HOH:O	4:A:495:HOH:O[14_555]	1.09	1.11
1:A:31:VAL:N	1:A:80:GLY:C[16_555]	1.10	1.10
1:A:33:MET:C	1:A:83:TYR:O[16_555]	1.10	1.10
1:A:53:VAL:CG2	4:A:495:HOH:O[16_555]	1.10	1.10
1:A:98:ALA:CA	1:A:241:LEU:C[4_555]	1.10	1.10
1:A:98:ALA:N	1:A:242:LYS:CA[4_555]	1.10	1.10
1:A:300:ILE:N	1:A:324:GLN:CD[12_565]	1.10	1.10
1:A:57:LYS:CB	2:A:330:NAD:C5B[16_555]	1.11	1.09
1:A:74:THR:OG1	1:A:130:ASP:CB[16_555]	1.11	1.09
1:A:83:TYR:N	2:A:330:NAD:N6A[13_655]	1.11	1.09
1:A:145:TYR:CB	1:A:184:SER:C[4_555]	1.11	1.09
1:A:262:LYS:CG	4:A:368:HOH:O[7_555]	1.11	1.09
1:A:283:ASN:CA	1:A:288:LEU:CG[11_655]	1.11	1.09
1:A:47:GLU:O	1:A:89:SER:O[16_555]	1.12	1.08
1:A:55:GLU:C	1:A:99:ARG:CD[16_555]	1.12	1.08
1:A:81:LYS:C	1:A:244:TYR:CE1[16_555]	1.12	1.08
1:A:107:LEU:CG	1:A:174:MET:N[4_555]	1.12	1.08
1:A:252:SER:N	4:A:390:HOH:O[3_545]	1.12	1.08
1:A:264:LEU:CD2	1:A:295:HIS:CA[10_555]	1.12	1.08
1:A:282:ASP:OD2	1:A:312:GLN:CD[11_655]	1.12	1.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:287:SER:OG	1:A:327:LEU:CA[12_565]	1.12	1.08
1:A:1:ALA:N	4:A:465:HOH:O[12_555]	1.13	1.07
1:A:11:LEU:O	1:A:178:LEU:C[7_555]	1.13	1.07
1:A:76:LYS:CD	1:A:132:ILE:CG2[16_555]	1.13	1.07
1:A:118:LYS:CG	1:A:295:HIS:CB[11_655]	1.13	1.07
1:A:157:ARG:N	4:A:406:HOH:O[16_555]	1.13	1.07
1:A:193:HIS:CG	1:A:328:LYS:CB[12_565]	1.13	1.07
1:A:207:ALA:C	1:A:320:LEU:O[3_545]	1.13	1.07
1:A:307:PRO:CB	1:A:307:PRO:CG[13_654]	1.13	1.07
1:A:13:THR:N	1:A:285:PHE:CG[6_455]	1.14	1.06
1:A:123:ASN:O	1:A:247:TRP:CZ2[4_555]	1.14	1.06
1:A:154:PRO:O	4:A:518:HOH:O[4_555]	1.14	1.06
1:A:197:VAL:CB	1:A:326:ASP:N[12_565]	1.14	1.06
1:A:260:ILE:O	1:A:294:ASP:OD2[10_555]	1.14	1.06
1:A:20:TYR:OH	1:A:261:MET:C[7_555]	1.15	1.05
1:A:73:HIS:CD2	1:A:73:HIS:NE2[11_555]	1.15	1.05
1:A:143:LEU:C	1:A:172:TYR:CG[4_555]	1.15	1.05
1:A:197:VAL:CB	1:A:326:ASP:CA[12_565]	1.15	1.05
1:A:289:PRO:N	1:A:323:ILE:O[12_565]	1.15	1.05
1:A:13:THR:CB	1:A:175:GLY:CA[7_555]	1.16	1.04
1:A:1:ALA:C	4:A:544:HOH:O[5_545]	1.18	1.02
1:A:4:LYS:CB	1:A:8:ILE:CA[11_555]	1.18	1.02
1:A:13:THR:CG2	1:A:182:SER:CA[7_555]	1.18	1.02
1:A:30:ALA:N	1:A:52:ASP:N[16_555]	1.18	1.02
1:A:66:GLN:O	1:A:71:PHE:CE2[11_555]	1.18	1.02
1:A:146:VAL:O	4:A:336:HOH:O[6_555]	1.18	1.02
1:A:180:VAL:CG2	4:A:334:HOH:O[7_555]	1.18	1.02
1:A:197:VAL:CG2	1:A:326:ASP:CA[12_565]	1.18	1.02
1:A:58:LEU:C	1:A:95:THR:C[16_555]	1.19	1.01
1:A:178:LEU:N	1:A:285:PHE:CA[3_545]	1.19	1.01
1:A:209:ILE:CG1	1:A:302:LYS:O[10_555]	1.19	1.01
1:A:289:PRO:CD	1:A:323:ILE:C[12_565]	1.19	1.01
1:A:3:LEU:CB	1:A:278:TYR:CD2[5_545]	1.20	1.00
1:A:16:GLU:N	1:A:293:ASN:OD1[16_555]	1.20	1.00
1:A:24:THR:O	1:A:49:ALA:CA[16_555]	1.20	1.00
1:A:38:SER:O	1:A:126:LYS:CD[3_545]	1.20	1.00
1:A:66:GLN:C	1:A:153:LEU:CB[16_555]	1.20	1.00
1:A:114:VAL:CA	4:A:396:HOH:O[4_555]	1.20	1.00
1:A:197:VAL:CG1	1:A:326:ASP:CB[12_565]	1.20	1.00
1:A:207:ALA:CA	1:A:324:GLN:CD[3_545]	1.20	1.00
1:A:289:PRO:CG	4:A:435:HOH:O[12_565]	1.20	1.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
4:A:470:HOH:O	4:A:471:HOH:O[16_555]	1.20	1.00
1:A:14:SER:CA	1:A:146:VAL:N[6_455]	1.21	0.99
1:A:15:GLN:CD	1:A:266:ARG:NH2[7_555]	1.21	0.99
1:A:98:ALA:N	1:A:242:LYS:N[4_555]	1.21	0.99
1:A:107:LEU:O	1:A:171:ARG:CB[4_555]	1.21	0.99
1:A:123:ASN:C	1:A:247:TRP:CD2[4_555]	1.21	0.99
1:A:310:GLU:CA	4:A:463:HOH:O[12_565]	1.21	0.99
1:A:34:ALA:CA	1:A:83:TYR:O[16_555]	1.22	0.98
1:A:48:VAL:O	1:A:92:VAL:CA[16_555]	1.22	0.98
1:A:54:MET:C	1:A:99:ARG:NH1[16_555]	1.22	0.98
1:A:57:LYS:NZ	2:A:330:NAD:N3A[16_555]	1.22	0.98
1:A:62:MET:CB	1:A:94:ILE:CB[16_555]	1.22	0.98
1:A:163:CYS:SG	1:A:326:ASP:O[12_565]	1.22	0.98
1:A:264:LEU:N	1:A:294:ASP:N[10_555]	1.22	0.98
1:A:1:ALA:C	4:A:543:HOH:O[16_555]	1.23	0.97
1:A:3:LEU:C	1:A:277:PHE:CB[5_545]	1.23	0.97
1:A:13:THR:O	1:A:285:PHE:CZ[6_455]	1.23	0.97
1:A:61:GLU:CA	1:A:94:ILE:CG2[16_555]	1.23	0.97
1:A:78:VAL:N	1:A:92:VAL:O[16_555]	1.23	0.97
1:A:142:VAL:CB	1:A:171:ARG:O[4_555]	1.23	0.97
1:A:155:MET:CE	1:A:179:GLY:N[4_555]	1.23	0.97
1:A:189:VAL:CA	4:A:440:HOH:O[12_565]	1.23	0.97
1:A:17:PRO:CA	1:A:296:GLY:N[16_555]	1.24	0.96
1:A:36:ALA:C	1:A:127:HIS:O[16_555]	1.24	0.96
1:A:55:GLU:OE2	1:A:244:TYR:N[16_555]	1.24	0.96
1:A:74:THR:OG1	1:A:130:ASP:CA[16_555]	1.24	0.96
1:A:124:ILE:N	1:A:247:TRP:CD2[4_555]	1.24	0.96
1:A:143:LEU:CA	1:A:172:TYR:CG[4_555]	1.24	0.96
1:A:158:ILE:CB	1:A:172:TYR:OH[4_555]	1.24	0.96
1:A:250:GLY:C	4:A:530:HOH:O[16_555]	1.24	0.96
1:A:283:ASN:C	1:A:300:ILE:CB[11_655]	1.24	0.96
1:A:17:PRO:CA	1:A:295:HIS:CA[16_555]	1.25	0.95
1:A:67:HIS:C	1:A:153:LEU:N[16_555]	1.25	0.95
1:A:118:LYS:CD	1:A:296:GLY:CA[11_655]	1.25	0.95
1:A:143:LEU:N	1:A:172:TYR:CD1[4_555]	1.25	0.95
1:A:147:ALA:C	1:A:182:SER:OG[4_555]	1.25	0.95
1:A:263:ASN:C	1:A:294:ASP:CA[10_555]	1.25	0.95
1:A:266:ARG:CG	1:A:293:ASN:CG[10_555]	1.25	0.95
1:A:297:ILE:CG1	1:A:329:PHE:CE2[12_565]	1.25	0.95
1:A:14:SER:N	1:A:146:VAL:N[6_455]	1.26	0.94
1:A:17:PRO:C	1:A:295:HIS:N[16_555]	1.26	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:32:GLY:CA	1:A:51:VAL:CA[16_555]	1.26	0.94
1:A:55:GLU:N	1:A:99:ARG:NH1[16_555]	1.26	0.94
1:A:69:SER:N	1:A:181:HIS:NE2[14_555]	1.26	0.94
1:A:73:HIS:ND1	1:A:73:HIS:NE2[11_555]	1.26	0.94
1:A:107:LEU:CD1	1:A:174:MET:CA[4_555]	1.26	0.94
1:A:108:ASN:ND2	1:A:171:ARG:CG[4_555]	1.26	0.94
1:A:123:ASN:OD1	1:A:127:HIS:CB[13_655]	1.26	0.94
1:A:206:VAL:O	1:A:320:LEU:C[3_545]	1.26	0.94
1:A:287:SER:CB	1:A:327:LEU:CA[12_565]	1.26	0.94
1:A:3:LEU:CA	1:A:278:TYR:CG[5_545]	1.27	0.93
1:A:8:ILE:CA	1:A:10:HIS:NE2[2_555]	1.27	0.93
1:A:57:LYS:NZ	2:A:330:NAD:N9A[16_555]	1.27	0.93
1:A:57:LYS:CD	2:A:330:NAD:O4B[16_555]	1.27	0.93
1:A:62:MET:CA	1:A:94:ILE:CG1[16_555]	1.27	0.93
1:A:62:MET:N	1:A:94:ILE:CB[16_555]	1.27	0.93
1:A:145:TYR:C	1:A:183:CYS:C[4_555]	1.27	0.93
1:A:178:LEU:CB	1:A:285:PHE:N[3_545]	1.27	0.93
1:A:59:LYS:C	1:A:137:SER:OG[16_555]	1.28	0.92
1:A:67:HIS:ND1	1:A:147:ALA:O[16_555]	1.28	0.92
1:A:149:LYS:C	1:A:156:HIS:ND1[11_655]	1.28	0.92
1:A:76:LYS:CD	1:A:132:ILE:CB[16_555]	1.29	0.91
1:A:115:ASN:CG	1:A:266:ARG:NE[4_555]	1.29	0.91
1:A:171:ARG:CG	4:A:444:HOH:O[3_545]	1.29	0.91
1:A:197:VAL:CB	1:A:325:LYS:C[12_565]	1.29	0.91
1:A:300:ILE:CA	1:A:324:GLN:CG[12_565]	1.29	0.91
1:A:40:LEU:CB	1:A:129:PRO:CD[16_555]	1.30	0.90
1:A:193:HIS:CB	1:A:329:PHE:N[12_565]	1.30	0.90
1:A:228:HIS:CE1	4:A:429:HOH:O[12_565]	1.30	0.90
1:A:61:GLU:O	1:A:94:ILE:CD1[16_555]	1.31	0.89
1:A:144:THR:CG2	4:A:515:HOH:O[4_555]	1.31	0.89
1:A:265:CYS:N	1:A:292:LEU:O[10_555]	1.31	0.89
1:A:67:HIS:ND1	1:A:182:SER:OG[14_555]	1.32	0.88
1:A:74:THR:OG1	1:A:130:ASP:CG[16_555]	1.32	0.88
1:A:108:ASN:O	1:A:168:ALA:C[4_555]	1.32	0.88
1:A:174:MET:CG	4:A:442:HOH:O[3_545]	1.32	0.88
1:A:289:PRO:CD	1:A:323:ILE:CA[12_565]	1.32	0.88
1:A:15:GLN:N	1:A:114:VAL:CG2[6_455]	1.33	0.87
1:A:17:PRO:N	1:A:115:ASN:OD1[6_455]	1.33	0.87
1:A:77:ILE:O	1:A:133:ILE:CA[16_555]	1.33	0.87
1:A:82:ASP:CG	1:A:246:SER:OG[16_555]	1.33	0.87
1:A:143:LEU:C	1:A:172:TYR:CE1[4_555]	1.33	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:197:VAL:C	1:A:325:LYS:CA[12_565]	1.33	0.87
1:A:264:LEU:C	1:A:292:LEU:C[10_555]	1.33	0.87
1:A:283:ASN:CB	1:A:288:LEU:CG[11_655]	1.33	0.87
1:A:36:ALA:CB	1:A:86:SER:OG[16_555]	1.34	0.86
1:A:53:VAL:O	4:A:494:HOH:O[16_555]	1.34	0.86
1:A:57:LYS:CG	2:A:330:NAD:C5B[16_555]	1.34	0.86
1:A:59:LYS:O	1:A:137:SER:CB[16_555]	1.34	0.86
1:A:64:ASP:CG	1:A:121:ILE:CG1[16_555]	1.34	0.86
1:A:83:TYR:CE1	4:A:348:HOH:O[13_655]	1.34	0.86
1:A:145:TYR:O	1:A:183:CYS:C[4_555]	1.34	0.86
1:A:2:THR:CG2	1:A:5:ASP:O[11_555]	1.35	0.85
1:A:64:ASP:OD1	1:A:121:ILE:CG1[16_555]	1.35	0.85
1:A:277:PHE:N	1:A:302:LYS:NZ[11_655]	1.35	0.85
1:A:2:THR:N	4:A:543:HOH:O[16_555]	1.36	0.84
1:A:12:ALA:CB	1:A:273:MET:N[6_455]	1.36	0.84
1:A:14:SER:O	1:A:114:VAL:CG2[6_455]	1.36	0.84
1:A:17:PRO:CB	1:A:118:LYS:CD[6_455]	1.36	0.84
1:A:48:VAL:C	1:A:92:VAL:N[16_555]	1.36	0.84
1:A:62:MET:N	1:A:94:ILE:CG1[16_555]	1.36	0.84
1:A:66:GLN:C	1:A:71:PHE:CE2[11_555]	1.36	0.84
1:A:108:ASN:OD1	1:A:169:ARG:C[4_555]	1.36	0.84
1:A:173:LEU:CD1	4:A:386:HOH:O[3_545]	1.36	0.84
1:A:190:ILE:O	1:A:325:LYS:N[12_565]	1.36	0.84
1:A:271:SER:N	1:A:329:PHE:CE1[12_565]	1.36	0.84
1:A:4:LYS:CE	1:A:11:LEU:N[12_555]	1.37	0.83
1:A:12:ALA:CA	1:A:273:MET:CA[6_455]	1.37	0.83
1:A:35:CYS:C	1:A:87:ALA:CB[16_555]	1.37	0.83
1:A:61:GLU:N	1:A:94:ILE:CG2[16_555]	1.37	0.83
1:A:70:LEU:CD1	1:A:153:LEU:C[5_545]	1.37	0.83
1:A:158:ILE:CD1	1:A:172:TYR:CE2[4_555]	1.37	0.83
1:A:306:LYS:CB	4:A:453:HOH:O[12_565]	1.37	0.83
1:A:14:SER:OG	1:A:183:CYS:O[7_555]	1.38	0.82
1:A:14:SER:CB	1:A:183:CYS:C[7_555]	1.38	0.82
1:A:42:LYS:NZ	1:A:122:PRO:CD[3_545]	1.38	0.82
1:A:55:GLU:CA	1:A:99:ARG:CZ[16_555]	1.38	0.82
1:A:55:GLU:N	1:A:99:ARG:NH2[16_555]	1.38	0.82
1:A:67:HIS:CG	1:A:151:SER:OG[16_555]	1.38	0.82
1:A:70:LEU:CA	4:A:520:HOH:O[8_555]	1.38	0.82
1:A:107:LEU:CA	1:A:173:LEU:CB[4_555]	1.38	0.82
1:A:116:ILE:CA	1:A:251:LEU:CA[4_555]	1.38	0.82
1:A:120:ILE:CA	1:A:247:TRP:CB[4_555]	1.38	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:143:LEU:O	1:A:172:TYR:CG[4_555]	1.38	0.82
1:A:178:LEU:CD1	1:A:320:LEU:CB[3_545]	1.38	0.82
1:A:186:HIS:CE1	1:A:299:ASN:ND2[10_555]	1.38	0.82
1:A:190:ILE:CD1	1:A:321:TRP:CB[12_565]	1.38	0.82
1:A:3:LEU:O	1:A:277:PHE:CB[5_545]	1.39	0.81
1:A:18:ARG:CB	1:A:294:ASP:O[16_555]	1.39	0.81
1:A:31:VAL:CA	1:A:80:GLY:O[16_555]	1.39	0.81
1:A:108:ASN:CG	1:A:168:ALA:C[4_555]	1.39	0.81
1:A:115:ASN:ND2	1:A:266:ARG:CD[4_555]	1.39	0.81
1:A:198:PRO:CB	1:A:321:TRP:CD2[12_565]	1.39	0.81
1:A:207:ALA:CA	1:A:324:GLN:NE2[3_545]	1.39	0.81
1:A:207:ALA:C	1:A:301:VAL:C[10_555]	1.39	0.81
1:A:263:ASN:C	1:A:293:ASN:C[10_555]	1.39	0.81
1:A:263:ASN:N	1:A:294:ASP:OD1[10_555]	1.39	0.81
1:A:16:GLU:CB	1:A:293:ASN:N[16_555]	1.40	0.80
1:A:17:PRO:CB	1:A:296:GLY:CA[16_555]	1.40	0.80
1:A:17:PRO:O	1:A:293:ASN:O[16_555]	1.40	0.80
1:A:27:GLY:CA	1:A:28:VAL:CG1[16_555]	1.40	0.80
1:A:78:VAL:C	1:A:93:VAL:C[16_555]	1.40	0.80
1:A:83:TYR:CZ	4:A:348:HOH:O[13_655]	1.40	0.80
1:A:97:GLY:CA	1:A:241:LEU:O[4_555]	1.40	0.80
1:A:155:MET:CE	1:A:178:LEU:O[4_555]	1.40	0.80
1:A:283:ASN:O	1:A:300:ILE:CG2[11_655]	1.40	0.80
1:A:9:GLY:CA	4:A:333:HOH:O[2_555]	1.41	0.79
1:A:14:SER:CA	1:A:146:VAL:CA[6_455]	1.41	0.79
1:A:67:HIS:N	1:A:71:PHE:CE2[11_555]	1.41	0.79
1:A:67:HIS:C	4:A:400:HOH:O[8_555]	1.41	0.79
1:A:76:LYS:O	1:A:132:ILE:N[16_555]	1.41	0.79
1:A:118:LYS:CB	1:A:266:ARG:NH1[4_555]	1.41	0.79
1:A:155:MET:C	4:A:518:HOH:O[4_555]	1.41	0.79
1:A:263:ASN:CB	1:A:294:ASP:CA[10_555]	1.41	0.79
4:A:387:HOH:O	4:A:573:HOH:O[4_555]	1.41	0.79
4:A:482:HOH:O	4:A:482:HOH:O[7_555]	1.41	0.79
1:A:3:LEU:CB	1:A:278:TYR:CG[5_545]	1.42	0.78
1:A:7:LEU:CA	1:A:274:VAL:O[5_545]	1.42	0.78
1:A:13:THR:CG2	1:A:145:TYR:N[6_455]	1.42	0.78
1:A:77:ILE:N	1:A:133:ILE:N[16_555]	1.42	0.78
1:A:289:PRO:CD	1:A:323:ILE:N[12_565]	1.42	0.78
1:A:4:LYS:CA	1:A:5:ASP:OD1[12_555]	1.43	0.77
1:A:4:LYS:O	1:A:5:ASP:OD1[12_555]	1.43	0.77
1:A:34:ALA:CB	1:A:84:SER:N[16_555]	1.43	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:38:SER:C	1:A:123:ASN:ND2[3_545]	1.43	0.77
1:A:60:GLY:N	1:A:137:SER:OG[16_555]	1.43	0.77
1:A:144:THR:CA	1:A:172:TYR:CE1[4_555]	1.43	0.77
1:A:180:VAL:CB	4:A:334:HOH:O[7_555]	1.43	0.77
1:A:282:ASP:C	1:A:288:LEU:CD1[11_655]	1.43	0.77
1:A:14:SER:CB	1:A:183:CYS:O[7_555]	1.44	0.76
1:A:18:ARG:C	1:A:262:LYS:O[7_555]	1.44	0.76
1:A:37:ILE:N	1:A:127:HIS:O[16_555]	1.44	0.76
1:A:38:SER:N	4:A:531:HOH:O[16_555]	1.44	0.76
1:A:59:LYS:NZ	1:A:138:ASN:CG[16_555]	1.44	0.76
1:A:69:SER:O	4:A:376:HOH:O[11_555]	1.44	0.76
1:A:76:LYS:CA	1:A:131:CYS:O[16_555]	1.44	0.76
1:A:155:MET:SD	1:A:180:VAL:CG2[4_555]	1.44	0.76
1:A:264:LEU:CA	1:A:293:ASN:O[10_555]	1.44	0.76
1:A:273:MET:CE	1:A:300:ILE:CD1[11_655]	1.44	0.76
1:A:31:VAL:CG1	1:A:80:GLY:N[16_555]	1.45	0.75
1:A:110:VAL:N	1:A:168:ALA:O[4_555]	1.45	0.75
1:A:155:MET:CG	1:A:180:VAL:CB[4_555]	1.45	0.75
1:A:178:LEU:CA	1:A:273:MET:CA[3_545]	1.45	0.75
1:A:197:VAL:CA	1:A:325:LYS:CA[12_565]	1.45	0.75
1:A:197:VAL:O	1:A:325:LYS:CB[12_565]	1.45	0.75
1:A:264:LEU:O	1:A:292:LEU:C[10_555]	1.45	0.75
1:A:5:ASP:CA	1:A:5:ASP:OD1[12_555]	1.46	0.74
1:A:7:LEU:CB	1:A:274:VAL:C[5_545]	1.46	0.74
1:A:55:GLU:CB	1:A:243:GLY:O[16_555]	1.46	0.74
1:A:55:GLU:OE1	1:A:243:GLY:CA[16_555]	1.46	0.74
1:A:79:SER:CA	1:A:95:THR:OG1[16_555]	1.46	0.74
1:A:81:LYS:NZ	4:A:507:HOH:O[13_655]	1.46	0.74
1:A:107:LEU:CB	1:A:174:MET:N[4_555]	1.46	0.74
1:A:120:ILE:CB	1:A:247:TRP:CB[4_555]	1.46	0.74
1:A:207:ALA:C	1:A:301:VAL:N[10_555]	1.46	0.74
1:A:263:ASN:O	1:A:293:ASN:C[10_555]	1.46	0.74
1:A:5:ASP:CA	1:A:5:ASP:CG[12_555]	1.47	0.73
1:A:12:ALA:CA	1:A:177:ARG:O[7_555]	1.47	0.73
1:A:18:ARG:N	1:A:295:HIS:N[16_555]	1.47	0.73
1:A:24:THR:O	1:A:49:ALA:C[16_555]	1.47	0.73
1:A:35:CYS:CA	1:A:84:SER:O[16_555]	1.47	0.73
1:A:177:ARG:CA	1:A:285:PHE:O[3_545]	1.47	0.73
1:A:262:LYS:CD	4:A:350:HOH:O[3_545]	1.47	0.73
1:A:275:LYS:CD	1:A:313:LEU:CD2[11_655]	1.47	0.73
1:A:300:ILE:CA	1:A:324:GLN:NE2[12_565]	1.47	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:8:ILE:C	1:A:10:HIS:N[11_555]	1.48	0.72
1:A:8:ILE:CG2	1:A:8:ILE:CG2[12_555]	1.48	0.72
1:A:25:VAL:C	1:A:50:LEU:CA[16_555]	1.48	0.72
1:A:42:LYS:CE	4:A:392:HOH:O[3_545]	1.48	0.72
1:A:62:MET:C	1:A:94:ILE:CD1[16_555]	1.48	0.72
1:A:69:SER:CA	1:A:181:HIS:CE1[14_555]	1.48	0.72
1:A:115:ASN:CG	1:A:266:ARG:CD[4_555]	1.48	0.72
1:A:127:HIS:CE1	1:A:247:TRP:CE3[16_555]	1.48	0.72
1:A:143:LEU:N	1:A:172:TYR:CG[4_555]	1.48	0.72
1:A:321:TRP:CH2	4:A:405:HOH:O[11_655]	1.48	0.72
1:A:48:VAL:C	1:A:92:VAL:CA[16_555]	1.49	0.71
1:A:56:ASP:OD2	1:A:100:GLN:O[16_555]	1.49	0.71
1:A:67:HIS:NE2	1:A:182:SER:OG[14_555]	1.49	0.71
1:A:82:ASP:N	1:A:244:TYR:CE1[16_555]	1.49	0.71
1:A:281:LYS:CB	1:A:312:GLN:CG[11_655]	1.49	0.71
1:A:300:ILE:N	1:A:324:GLN:CG[12_565]	1.49	0.71
1:A:304:LYS:CE	1:A:311:GLN:CD[12_565]	1.49	0.71
1:A:3:LEU:C	1:A:277:PHE:CG[5_545]	1.50	0.70
1:A:9:GLY:N	1:A:10:HIS:O[11_555]	1.50	0.70
1:A:38:SER:OG	4:A:529:HOH:O[16_555]	1.50	0.70
1:A:70:LEU:CB	1:A:154:PRO:CB[5_545]	1.50	0.70
1:A:83:TYR:OH	4:A:348:HOH:O[13_655]	1.50	0.70
1:A:104:GLU:CB	1:A:237:GLU:OE2[4_555]	1.50	0.70
1:A:116:ILE:CB	1:A:248:ALA:N[4_555]	1.50	0.70
1:A:149:LYS:CG	1:A:297:ILE:CD1[11_655]	1.50	0.70
1:A:206:VAL:CA	1:A:320:LEU:CA[3_545]	1.50	0.70
1:A:2:THR:N	4:A:545:HOH:O[16_555]	1.51	0.69
1:A:2:THR:C	4:A:545:HOH:O[16_555]	1.51	0.69
1:A:7:LEU:CB	1:A:274:VAL:O[5_545]	1.51	0.69
1:A:14:SER:N	1:A:182:SER:O[7_555]	1.51	0.69
1:A:47:GLU:CB	1:A:90:LYS:O[16_555]	1.51	0.69
1:A:197:VAL:N	1:A:321:TRP:CH2[12_565]	1.51	0.69
1:A:277:PHE:C	1:A:302:LYS:NZ[11_655]	1.51	0.69
1:A:16:GLU:N	1:A:266:ARG:CD[7_555]	1.52	0.68
1:A:78:VAL:CG1	1:A:134:LEU:CB[16_555]	1.52	0.68
1:A:157:ARG:CA	4:A:522:HOH:O[12_565]	1.52	0.68
1:A:253:VAL:CG1	4:A:526:HOH:O[16_555]	1.52	0.68
1:A:276:ASP:OD2	1:A:313:LEU:CB[11_655]	1.52	0.68
1:A:7:LEU:N	1:A:274:VAL:O[5_545]	1.53	0.67
1:A:13:THR:CG2	1:A:182:SER:CB[7_555]	1.53	0.67
1:A:15:GLN:OE1	1:A:115:ASN:CA[6_455]	1.53	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:35:CYS:C	1:A:87:ALA:CA[16_555]	1.53	0.67
1:A:35:CYS:SG	1:A:85:VAL:CA[16_555]	1.53	0.67
1:A:119:PHE:CB	1:A:254:ALA:CB[4_555]	1.53	0.67
1:A:209:ILE:CG1	1:A:302:LYS:N[10_555]	1.53	0.67
1:A:120:ILE:O	1:A:247:TRP:CB[4_555]	1.54	0.66
1:A:304:LYS:N	1:A:318:THR:CB[12_565]	1.54	0.66
1:A:15:GLN:CG	1:A:266:ARG:CZ[7_555]	1.55	0.65
1:A:16:GLU:C	1:A:115:ASN:OD1[6_455]	1.55	0.65
1:A:20:TYR:CZ	1:A:262:LYS:N[7_555]	1.55	0.65
1:A:39:ILE:O	4:A:484:HOH:O[3_545]	1.55	0.65
1:A:58:LEU:CG	1:A:95:THR:CG2[16_555]	1.55	0.65
1:A:70:LEU:C	4:A:520:HOH:O[8_555]	1.55	0.65
1:A:74:THR:CG2	1:A:130:ASP:OD1[16_555]	1.55	0.65
1:A:81:LYS:CA	1:A:244:TYR:CD1[16_555]	1.55	0.65
1:A:175:GLY:C	1:A:285:PHE:CD2[3_545]	1.55	0.65
1:A:181:HIS:O	4:A:369:HOH:O[7_555]	1.55	0.65
1:A:304:LYS:N	1:A:318:THR:CA[12_565]	1.55	0.65
3:A:332:OXM:O2	4:A:439:HOH:O[3_545]	1.55	0.65
1:A:6:LYS:O	1:A:280:ILE:CG1[5_545]	1.56	0.64
1:A:12:ALA:C	1:A:285:PHE:CG[6_455]	1.56	0.64
1:A:29:GLY:N	1:A:52:ASP:CB[16_555]	1.56	0.64
1:A:30:ALA:N	1:A:52:ASP:CA[16_555]	1.56	0.64
1:A:35:CYS:N	1:A:84:SER:C[16_555]	1.56	0.64
1:A:81:LYS:CB	1:A:244:TYR:CD1[16_555]	1.56	0.64
1:A:81:LYS:CE	4:A:507:HOH:O[13_655]	1.56	0.64
1:A:121:ILE:C	1:A:251:LEU:CD1[4_555]	1.56	0.64
1:A:123:ASN:N	1:A:251:LEU:CD2[4_555]	1.56	0.64
1:A:141:ASP:O	1:A:172:TYR:O[4_555]	1.56	0.64
1:A:171:ARG:NH2	4:A:424:HOH:O[10_555]	1.56	0.64
1:A:177:ARG:N	1:A:285:PHE:C[3_545]	1.56	0.64
1:A:197:VAL:O	1:A:325:LYS:CA[12_565]	1.56	0.64
1:A:243:GLY:N	4:A:506:HOH:O[3_545]	1.56	0.64
1:A:276:ASP:OD1	1:A:313:LEU:CD1[11_655]	1.56	0.64
1:A:281:LYS:CG	1:A:312:GLN:CG[11_655]	1.56	0.64
1:A:324:GLN:CD	4:A:475:HOH:O[6_555]	1.56	0.64
1:A:16:GLU:O	1:A:295:HIS:N[16_555]	1.57	0.63
1:A:37:ILE:N	1:A:127:HIS:C[16_555]	1.57	0.63
1:A:98:ALA:N	1:A:242:LYS:CB[4_555]	1.57	0.63
1:A:118:LYS:CG	4:A:479:HOH:O[6_555]	1.57	0.63
1:A:123:ASN:CB	1:A:127:HIS:ND1[13_655]	1.57	0.63
1:A:153:LEU:O	1:A:181:HIS:C[4_555]	1.57	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:176:GLU:N	1:A:285:PHE:CE2[3_545]	1.57	0.63
1:A:190:ILE:CG1	1:A:321:TRP:O[12_565]	1.57	0.63
1:A:207:ALA:CB	1:A:284:VAL:N[3_545]	1.57	0.63
1:A:264:LEU:CG	1:A:295:HIS:CG[10_555]	1.57	0.63
1:A:278:TYR:N	4:A:468:HOH:O[16_555]	1.57	0.63
1:A:279:GLY:N	4:A:547:HOH:O[11_655]	1.57	0.63
1:A:8:ILE:CG2	1:A:9:GLY:O[12_555]	1.58	0.62
1:A:18:ARG:NH2	1:A:261:MET:CG[16_555]	1.58	0.62
1:A:29:GLY:C	1:A:51:VAL:C[16_555]	1.58	0.62
1:A:31:VAL:CA	1:A:80:GLY:C[16_555]	1.58	0.62
1:A:55:GLU:CG	1:A:243:GLY:C[16_555]	1.58	0.62
1:A:66:GLN:O	1:A:153:LEU:CB[16_555]	1.58	0.62
1:A:71:PHE:C	4:A:345:HOH:O[11_555]	1.58	0.62
1:A:76:LYS:O	1:A:131:CYS:C[16_555]	1.58	0.62
1:A:84:SER:CB	1:A:247:TRP:N[16_555]	1.58	0.62
1:A:123:ASN:O	1:A:247:TRP:CH2[4_555]	1.58	0.62
1:A:158:ILE:CG2	1:A:172:TYR:OH[4_555]	1.58	0.62
1:A:281:LYS:CA	1:A:312:GLN:CG[11_655]	1.58	0.62
1:A:290:CYS:SG	1:A:327:LEU:CG[12_565]	1.58	0.62
3:A:332:OXM:O3	4:A:424:HOH:O[10_555]	1.58	0.62
1:A:14:SER:CB	1:A:145:TYR:O[6_455]	1.59	0.61
1:A:16:GLU:CG	1:A:292:LEU:CG[16_555]	1.59	0.61
1:A:29:GLY:O	1:A:51:VAL:CB[16_555]	1.59	0.61
1:A:112:ARG:NH1	4:A:354:HOH:O[4_555]	1.59	0.61
1:A:148:TRP:CD1	1:A:181:HIS:O[4_555]	1.59	0.61
1:A:207:ALA:C	1:A:320:LEU:C[3_545]	1.59	0.61
1:A:263:ASN:CA	1:A:294:ASP:CA[10_555]	1.59	0.61
1:A:277:PHE:O	1:A:302:LYS:NZ[11_655]	1.59	0.61
1:A:279:GLY:O	1:A:310:GLU:N[11_655]	1.59	0.61
1:A:286:LEU:CG	4:A:577:HOH:O[4_555]	1.59	0.61
1:A:10:HIS:O	4:A:333:HOH:O[11_555]	1.60	0.60
1:A:11:LEU:C	1:A:155:MET:CE[6_455]	1.60	0.60
1:A:15:GLN:CD	1:A:115:ASN:CA[6_455]	1.60	0.60
1:A:16:GLU:O	1:A:264:LEU:CB[7_555]	1.60	0.60
1:A:17:PRO:N	1:A:296:GLY:O[16_555]	1.60	0.60
1:A:67:HIS:O	1:A:152:GLY:C[16_555]	1.60	0.60
1:A:70:LEU:CB	1:A:154:PRO:CG[5_545]	1.60	0.60
1:A:97:GLY:C	1:A:241:LEU:O[4_555]	1.60	0.60
1:A:197:VAL:CG1	4:A:432:HOH:O[12_565]	1.60	0.60
1:A:264:LEU:C	1:A:293:ASN:N[10_555]	1.60	0.60
1:A:285:PHE:CE1	4:A:470:HOH:O[11_655]	1.60	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:288:LEU:O	4:A:437:HOH:O[12_565]	1.60	0.60
1:A:15:GLN:OE1	1:A:114:VAL:O[6_455]	1.61	0.59
1:A:34:ALA:N	1:A:83:TYR:O[16_555]	1.61	0.59
1:A:69:SER:OG	1:A:71:PHE:CD2[11_555]	1.61	0.59
1:A:70:LEU:CD2	4:A:517:HOH:O[8_555]	1.61	0.59
1:A:76:LYS:CE	1:A:132:ILE:CG2[16_555]	1.61	0.59
1:A:81:LYS:CD	1:A:244:TYR:CE2[16_555]	1.61	0.59
1:A:123:ASN:OD1	1:A:127:HIS:CG[13_655]	1.61	0.59
1:A:142:VAL:CG1	1:A:185:CYS:CA[4_555]	1.61	0.59
1:A:154:PRO:CB	4:A:519:HOH:O[4_555]	1.61	0.59
1:A:156:HIS:C	4:A:406:HOH:O[16_555]	1.61	0.59
1:A:184:SER:CA	4:A:470:HOH:O[10_555]	1.61	0.59
1:A:264:LEU:CD1	1:A:295:HIS:CG[10_555]	1.61	0.59
1:A:304:LYS:CD	1:A:314:GLN:NE2[12_565]	1.61	0.59
1:A:5:ASP:CA	1:A:5:ASP:OD2[12_555]	1.62	0.58
1:A:39:ILE:CD1	1:A:87:ALA:C[16_555]	1.62	0.58
1:A:57:LYS:CG	2:A:330:NAD:O5B[16_555]	1.62	0.58
1:A:97:GLY:C	1:A:241:LEU:C[4_555]	1.62	0.58
1:A:98:ALA:CA	1:A:241:LEU:CA[4_555]	1.62	0.58
1:A:175:GLY:CA	1:A:285:PHE:CG[3_545]	1.62	0.58
1:A:304:LYS:CG	4:A:458:HOH:O[12_565]	1.62	0.58
1:A:328:LYS:CD	4:A:419:HOH:O[11_655]	1.62	0.58
1:A:16:GLU:CG	1:A:292:LEU:CA[16_555]	1.63	0.57
1:A:29:GLY:C	1:A:52:ASP:CA[16_555]	1.63	0.57
1:A:47:GLU:C	1:A:89:SER:O[16_555]	1.63	0.57
1:A:59:LYS:CB	2:A:330:NAD:C3D[16_555]	1.63	0.57
1:A:98:ALA:C	1:A:241:LEU:C[4_555]	1.63	0.57
1:A:124:ILE:N	1:A:247:TRP:CE2[4_555]	1.63	0.57
1:A:183:CYS:CA	4:A:336:HOH:O[7_555]	1.63	0.57
1:A:208:SER:OG	1:A:303:MET:CG[10_555]	1.63	0.57
1:A:264:LEU:CB	1:A:295:HIS:N[10_555]	1.63	0.57
1:A:280:ILE:CG2	1:A:302:LYS:CB[11_655]	1.63	0.57
1:A:304:LYS:CD	1:A:314:GLN:CD[12_565]	1.63	0.57
1:A:14:SER:OG	4:A:370:HOH:O[16_555]	1.64	0.56
1:A:56:ASP:O	2:A:330:NAD:C3D[16_555]	1.64	0.56
1:A:98:ALA:N	1:A:241:LEU:C[4_555]	1.64	0.56
1:A:124:ILE:N	1:A:247:TRP:NE1[4_555]	1.64	0.56
1:A:277:PHE:N	1:A:302:LYS:CD[11_655]	1.64	0.56
1:A:281:LYS:C	1:A:312:GLN:CB[11_655]	1.64	0.56
1:A:300:ILE:O	1:A:324:GLN:CD[12_565]	1.64	0.56
1:A:70:LEU:O	1:A:181:HIS:ND1[8_555]	1.65	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:110:VAL:CG1	1:A:171:ARG:NH1[4_555]	1.65	0.55
1:A:208:SER:CA	1:A:301:VAL:CG1[10_555]	1.65	0.55
1:A:247:TRP:CH2	1:A:247:TRP:CH2[14_555]	1.65	0.55
1:A:281:LYS:N	1:A:309:GLU:C[11_655]	1.65	0.55
1:A:1:ALA:CB	1:A:310:GLU:OE2[5_545]	1.66	0.54
1:A:7:LEU:C	1:A:274:VAL:O[5_545]	1.66	0.54
1:A:35:CYS:CB	1:A:86:SER:N[16_555]	1.66	0.54
1:A:55:GLU:CD	1:A:244:TYR:N[16_555]	1.66	0.54
1:A:55:GLU:CD	1:A:243:GLY:C[16_555]	1.66	0.54
1:A:70:LEU:CG	1:A:154:PRO:CD[5_545]	1.66	0.54
1:A:77:ILE:C	1:A:134:LEU:N[16_555]	1.66	0.54
1:A:78:VAL:O	1:A:93:VAL:CA[16_555]	1.66	0.54
1:A:84:SER:OG	1:A:246:SER:C[16_555]	1.66	0.54
1:A:127:HIS:NE2	1:A:247:TRP:CE2[16_555]	1.66	0.54
1:A:127:HIS:CE1	1:A:247:TRP:CD2[16_555]	1.66	0.54
1:A:146:VAL:N	1:A:182:SER:C[4_555]	1.66	0.54
1:A:148:TRP:CB	1:A:183:CYS:N[4_555]	1.66	0.54
1:A:176:GLU:CA	1:A:285:PHE:CD2[3_545]	1.66	0.54
1:A:177:ARG:CA	1:A:285:PHE:CB[3_545]	1.66	0.54
1:A:260:ILE:CB	1:A:263:ASN:ND2[10_555]	1.66	0.54
1:A:264:LEU:C	1:A:293:ASN:C[10_555]	1.66	0.54
1:A:279:GLY:N	4:A:553:HOH:O[11_655]	1.66	0.54
1:A:311:GLN:NE2	4:A:552:HOH:O[11_655]	1.66	0.54
1:A:123:ASN:O	1:A:247:TRP:CZ3[4_555]	1.67	0.53
1:A:145:TYR:O	1:A:183:CYS:O[4_555]	1.67	0.53
1:A:186:HIS:NE2	1:A:323:ILE:CG2[3_545]	1.67	0.53
1:A:207:ALA:CA	1:A:300:ILE:C[10_555]	1.67	0.53
1:A:244:TYR:OH	2:A:330:NAD:N7A[3_545]	1.67	0.53
1:A:303:MET:CA	1:A:318:THR:C[12_565]	1.67	0.53
1:A:6:LYS:N	1:A:277:PHE:CA[5_545]	1.68	0.52
1:A:16:GLU:N	1:A:293:ASN:CG[16_555]	1.68	0.52
1:A:16:GLU:O	1:A:293:ASN:ND2[16_555]	1.68	0.52
1:A:68:GLY:N	4:A:400:HOH:O[8_555]	1.68	0.52
1:A:106:ARG:CB	4:A:356:HOH:O[4_555]	1.68	0.52
1:A:108:ASN:C	1:A:168:ALA:O[4_555]	1.68	0.52
1:A:145:TYR:CB	1:A:185:CYS:N[4_555]	1.68	0.52
1:A:145:TYR:CA	1:A:182:SER:C[4_555]	1.68	0.52
1:A:250:GLY:CA	4:A:530:HOH:O[16_555]	1.68	0.52
1:A:264:LEU:CA	4:A:481:HOH:O[7_555]	1.68	0.52
1:A:313:LEU:CD1	4:A:541:HOH:O[12_565]	1.68	0.52
1:A:20:TYR:CE2	1:A:262:LYS:N[7_555]	1.69	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:82:ASP:OD1	1:A:246:SER:OG[16_555]	1.69	0.51
1:A:111:GLN:CA	4:A:480:HOH:O[6_555]	1.69	0.51
1:A:111:GLN:NE2	1:A:296:GLY:O[11_655]	1.69	0.51
1:A:120:ILE:O	1:A:247:TRP:CG[4_555]	1.69	0.51
1:A:136:VAL:CA	4:A:383:HOH:O[16_555]	1.69	0.51
1:A:141:ASP:CB	1:A:176:GLU:OE2[4_555]	1.69	0.51
1:A:146:VAL:C	4:A:336:HOH:O[6_555]	1.69	0.51
1:A:209:ILE:CG1	1:A:318:THR:C[3_545]	1.69	0.51
1:A:293:ASN:C	4:A:481:HOH:O[16_555]	1.69	0.51
1:A:4:LYS:CG	1:A:10:HIS:NE2[12_555]	1.70	0.50
1:A:14:SER:CB	1:A:145:TYR:CB[6_455]	1.70	0.50
1:A:20:TYR:O	1:A:90:LYS:CE[16_555]	1.70	0.50
1:A:40:LEU:CD2	1:A:128:SER:C[16_555]	1.70	0.50
1:A:40:LEU:CD1	1:A:128:SER:C[16_555]	1.70	0.50
1:A:40:LEU:CD1	1:A:129:PRO:CD[16_555]	1.70	0.50
1:A:42:LYS:NZ	1:A:122:PRO:CA[3_545]	1.70	0.50
1:A:47:GLU:CG	1:A:90:LYS:O[16_555]	1.70	0.50
1:A:67:HIS:CE1	1:A:147:ALA:C[16_555]	1.70	0.50
1:A:67:HIS:CE1	1:A:147:ALA:CA[16_555]	1.70	0.50
1:A:98:ALA:O	1:A:241:LEU:C[4_555]	1.70	0.50
1:A:123:ASN:CB	1:A:247:TRP:CE3[4_555]	1.70	0.50
1:A:123:ASN:C	1:A:247:TRP:CZ3[4_555]	1.70	0.50
1:A:148:TRP:CG	1:A:184:SER:N[4_555]	1.70	0.50
1:A:263:ASN:CA	1:A:294:ASP:CB[10_555]	1.70	0.50
1:A:4:LYS:CB	1:A:10:HIS:NE2[12_555]	1.71	0.49
1:A:40:LEU:CD2	1:A:130:ASP:N[16_555]	1.71	0.49
1:A:62:MET:O	1:A:133:ILE:CG2[16_555]	1.71	0.49
1:A:76:LYS:CG	1:A:132:ILE:CA[16_555]	1.71	0.49
1:A:124:ILE:CA	1:A:247:TRP:NE1[4_555]	1.71	0.49
1:A:263:ASN:CA	1:A:294:ASP:N[10_555]	1.71	0.49
1:A:281:LYS:N	1:A:309:GLU:O[11_655]	1.71	0.49
1:A:1:ALA:C	4:A:465:HOH:O[12_555]	1.72	0.48
1:A:4:LYS:CD	1:A:10:HIS:CA[12_555]	1.72	0.48
1:A:6:LYS:C	1:A:280:ILE:CD1[5_545]	1.72	0.48
1:A:27:GLY:CA	1:A:28:VAL:CG2[16_555]	1.72	0.48
1:A:56:ASP:C	1:A:99:ARG:CB[16_555]	1.72	0.48
1:A:58:LEU:O	1:A:96:ALA:N[16_555]	1.72	0.48
1:A:70:LEU:O	1:A:181:HIS:CE1[8_555]	1.72	0.48
1:A:116:ILE:C	1:A:251:LEU:CA[4_555]	1.72	0.48
1:A:116:ILE:O	1:A:251:LEU:CB[4_555]	1.72	0.48
1:A:119:PHE:CZ	1:A:262:LYS:CB[4_555]	1.72	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:121:ILE:C	1:A:251:LEU:CD2[4_555]	1.72	0.48
1:A:122:PRO:C	1:A:251:LEU:CD2[4_555]	1.72	0.48
1:A:143:LEU:C	1:A:172:TYR:CD1[4_555]	1.72	0.48
1:A:157:ARG:C	4:A:522:HOH:O[12_565]	1.72	0.48
1:A:207:ALA:C	1:A:301:VAL:CA[10_555]	1.72	0.48
1:A:300:ILE:CA	4:A:475:HOH:O[16_555]	1.72	0.48
1:A:300:ILE:CA	1:A:324:GLN:CD[12_565]	1.72	0.48
1:A:14:SER:OG	1:A:185:CYS:N[7_555]	1.73	0.47
1:A:59:LYS:O	1:A:137:SER:OG[16_555]	1.73	0.47
1:A:69:SER:CA	1:A:181:HIS:NE2[14_555]	1.73	0.47
1:A:157:ARG:CB	4:A:406:HOH:O[16_555]	1.73	0.47
1:A:186:HIS:CD2	1:A:323:ILE:CG2[3_545]	1.73	0.47
1:A:271:SER:N	1:A:329:PHE:CG[12_565]	1.73	0.47
1:A:14:SER:OG	1:A:184:SER:C[7_555]	1.74	0.46
1:A:18:ARG:CA	1:A:294:ASP:C[16_555]	1.74	0.46
1:A:20:TYR:CD2	1:A:262:LYS:CA[7_555]	1.74	0.46
1:A:32:GLY:N	1:A:80:GLY:O[16_555]	1.74	0.46
1:A:47:GLU:CD	1:A:91:LEU:CA[16_555]	1.74	0.46
1:A:58:LEU:CD2	2:A:330:NAD:O2N[16_555]	1.74	0.46
1:A:16:GLU:CB	1:A:293:ASN:O[16_555]	1.75	0.45
1:A:17:PRO:CG	1:A:296:GLY:C[16_555]	1.75	0.45
1:A:40:LEU:CG	1:A:129:PRO:CD[16_555]	1.75	0.45
1:A:48:VAL:O	1:A:92:VAL:C[16_555]	1.75	0.45
1:A:52:ASP:OD2	4:A:492:HOH:O[16_555]	1.75	0.45
1:A:67:HIS:CE1	1:A:182:SER:OG[14_555]	1.75	0.45
1:A:69:SER:CB	1:A:154:PRO:CD[16_555]	1.75	0.45
1:A:98:ALA:CA	1:A:242:LYS:CA[4_555]	1.75	0.45
1:A:183:CYS:O	4:A:370:HOH:O[10_555]	1.75	0.45
1:A:263:ASN:CB	1:A:294:ASP:CB[10_555]	1.75	0.45
1:A:264:LEU:CD2	1:A:295:HIS:CG[10_555]	1.75	0.45
1:A:303:MET:CE	4:A:434:HOH:O[12_565]	1.75	0.45
1:A:11:LEU:O	1:A:155:MET:CE[6_455]	1.76	0.44
1:A:12:ALA:C	1:A:178:LEU:N[7_555]	1.76	0.44
1:A:16:GLU:CG	1:A:264:LEU:O[7_555]	1.76	0.44
1:A:17:PRO:CB	1:A:296:GLY:C[16_555]	1.76	0.44
1:A:30:ALA:O	1:A:82:ASP:O[16_555]	1.76	0.44
1:A:55:GLU:OE2	1:A:244:TYR:CA[16_555]	1.76	0.44
1:A:104:GLU:CA	1:A:237:GLU:OE2[4_555]	1.76	0.44
1:A:107:LEU:CG	1:A:173:LEU:C[4_555]	1.76	0.44
1:A:115:ASN:OD1	1:A:293:ASN:ND2[11_655]	1.76	0.44
1:A:149:LYS:NZ	1:A:287:SER:N[11_655]	1.76	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:177:ARG:CA	1:A:285:PHE:CA[3_545]	1.76	0.44
1:A:185:CYS:SG	4:A:393:HOH:O[3_545]	1.76	0.44
1:A:186:HIS:NE2	1:A:299:ASN:CB[10_555]	1.76	0.44
1:A:194:GLY:O	1:A:325:LYS:O[12_565]	1.76	0.44
1:A:207:ALA:CB	1:A:300:ILE:CB[10_555]	1.76	0.44
1:A:207:ALA:N	1:A:324:GLN:CD[3_545]	1.76	0.44
1:A:236:TYR:CD2	1:A:328:LYS:NZ[12_565]	1.76	0.44
1:A:288:LEU:O	1:A:323:ILE:O[12_565]	1.76	0.44
1:A:2:THR:N	4:A:465:HOH:O[12_555]	1.77	0.43
1:A:59:LYS:C	1:A:137:SER:CA[16_555]	1.77	0.43
1:A:60:GLY:CA	1:A:137:SER:CB[16_555]	1.77	0.43
1:A:177:ARG:C	1:A:285:PHE:CA[3_545]	1.77	0.43
1:A:253:VAL:C	4:A:527:HOH:O[16_555]	1.77	0.43
1:A:276:ASP:CA	1:A:278:TYR:CE1[11_655]	1.77	0.43
1:A:4:LYS:CD	1:A:10:HIS:C[12_555]	1.78	0.42
1:A:54:MET:O	2:A:330:NAD:O2A[16_555]	1.78	0.42
1:A:65:LEU:CD2	1:A:124:ILE:C[16_555]	1.78	0.42
1:A:116:ILE:CA	1:A:251:LEU:N[4_555]	1.78	0.42
1:A:123:ASN:CB	1:A:127:HIS:CE1[13_655]	1.78	0.42
1:A:123:ASN:OD1	1:A:127:HIS:ND1[13_655]	1.78	0.42
1:A:207:ALA:CB	1:A:283:ASN:O[3_545]	1.78	0.42
1:A:277:PHE:CA	1:A:302:LYS:NZ[11_655]	1.78	0.42
1:A:301:VAL:N	1:A:320:LEU:O[12_565]	1.78	0.42
4:A:350:HOH:O	4:A:368:HOH:O[6_555]	1.78	0.42
1:A:3:LEU:N	4:A:545:HOH:O[16_555]	1.79	0.41
1:A:8:ILE:O	1:A:9:GLY:C[11_555]	1.79	0.41
1:A:38:SER:CB	1:A:119:PHE:O[3_545]	1.79	0.41
1:A:40:LEU:CG	1:A:128:SER:O[16_555]	1.79	0.41
1:A:44:LEU:N	4:A:484:HOH:O[3_545]	1.79	0.41
1:A:61:GLU:O	1:A:124:ILE:CD1[16_555]	1.79	0.41
1:A:139:PRO:CA	4:A:398:HOH:O[4_555]	1.79	0.41
1:A:206:VAL:C	1:A:300:ILE:O[10_555]	1.79	0.41
1:A:300:ILE:C	1:A:320:LEU:O[12_565]	1.79	0.41
1:A:57:LYS:CD	2:A:330:NAD:C1B[16_555]	1.80	0.40
1:A:58:LEU:O	1:A:95:THR:C[16_555]	1.80	0.40
1:A:66:GLN:C	1:A:71:PHE:CZ[11_555]	1.80	0.40
1:A:149:LYS:CE	1:A:271:SER:C[11_655]	1.80	0.40
1:A:190:ILE:CB	1:A:324:GLN:C[12_565]	1.80	0.40
1:A:299:ASN:O	4:A:476:HOH:O[16_555]	1.80	0.40
1:A:329:PHE:CD1	4:A:394:HOH:O[11_655]	1.80	0.40
2:A:330:NAD:N1A	4:A:496:HOH:O[4_555]	1.80	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1:ALA:CB	1:A:310:GLU:CD[5_545]	1.81	0.39
1:A:11:LEU:C	1:A:178:LEU:C[7_555]	1.81	0.39
1:A:20:TYR:OH	1:A:261:MET:O[7_555]	1.81	0.39
1:A:40:LEU:CD2	1:A:128:SER:O[16_555]	1.81	0.39
1:A:46:ASP:O	1:A:130:ASP:O[16_555]	1.81	0.39
1:A:54:MET:C	1:A:99:ARG:NH2[16_555]	1.81	0.39
1:A:57:LYS:NZ	2:A:330:NAD:C4A[16_555]	1.81	0.39
1:A:57:LYS:CB	2:A:330:NAD:C4B[16_555]	1.81	0.39
1:A:107:LEU:CD2	1:A:173:LEU:C[4_555]	1.81	0.39
1:A:186:HIS:CB	4:A:441:HOH:O[3_545]	1.81	0.39
1:A:207:ALA:CA	1:A:300:ILE:CA[10_555]	1.81	0.39
1:A:300:ILE:O	1:A:320:LEU:O[12_565]	1.81	0.39
1:A:4:LYS:CG	1:A:8:ILE:CD1[11_555]	1.82	0.38
1:A:6:LYS:NZ	1:A:310:GLU:O[5_545]	1.82	0.38
1:A:12:ALA:CA	1:A:178:LEU:CA[7_555]	1.82	0.38
1:A:57:LYS:CE	2:A:330:NAD:C1B[16_555]	1.82	0.38
1:A:65:LEU:O	1:A:153:LEU:CG[16_555]	1.82	0.38
1:A:66:GLN:C	1:A:153:LEU:CG[16_555]	1.82	0.38
1:A:67:HIS:ND1	1:A:148:TRP:N[16_555]	1.82	0.38
1:A:77:ILE:CA	1:A:133:ILE:CA[16_555]	1.82	0.38
1:A:112:ARG:CZ	4:A:354:HOH:O[4_555]	1.82	0.38
1:A:123:ASN:O	1:A:247:TRP:NE1[4_555]	1.82	0.38
1:A:19:SER:O	1:A:90:LYS:CB[16_555]	1.83	0.37
1:A:34:ALA:CB	1:A:84:SER:CB[16_555]	1.83	0.37
1:A:57:LYS:O	1:A:96:ALA:N[16_555]	1.83	0.37
1:A:63:MET:CE	1:A:143:LEU:CB[16_555]	1.83	0.37
1:A:111:GLN:NE2	1:A:292:LEU:CD2[11_655]	1.83	0.37
1:A:120:ILE:CD1	1:A:242:LYS:NZ[4_555]	1.83	0.37
1:A:176:GLU:C	1:A:285:PHE:CD2[3_545]	1.83	0.37
1:A:288:LEU:C	1:A:323:ILE:C[12_565]	1.83	0.37
1:A:304:LYS:CD	1:A:311:GLN:OE1[12_565]	1.83	0.37
1:A:309:GLU:OE2	1:A:318:THR:CG2[12_565]	1.83	0.37
1:A:17:PRO:CB	1:A:296:GLY:N[16_555]	1.84	0.36
1:A:42:LYS:NZ	1:A:122:PRO:CB[3_545]	1.84	0.36
1:A:76:LYS:CB	1:A:131:CYS:C[16_555]	1.84	0.36
1:A:139:PRO:CA	4:A:402:HOH:O[4_555]	1.84	0.36
1:A:181:HIS:C	4:A:369:HOH:O[7_555]	1.84	0.36
1:A:206:VAL:C	1:A:320:LEU:C[3_545]	1.84	0.36
1:A:209:ILE:CD1	1:A:317:ALA:O[3_545]	1.84	0.36
1:A:299:ASN:O	1:A:327:LEU:CD1[12_565]	1.84	0.36
1:A:301:VAL:C	1:A:320:LEU:C[12_565]	1.84	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:303:MET:CA	1:A:318:THR:O[12_565]	1.84	0.36
1:A:4:LYS:CB	1:A:9:GLY:N[11_555]	1.85	0.35
1:A:37:ILE:CG1	1:A:126:LYS:O[16_555]	1.85	0.35
1:A:62:MET:SD	1:A:136:VAL:N[16_555]	1.85	0.35
1:A:64:ASP:OD1	1:A:121:ILE:CA[16_555]	1.85	0.35
1:A:77:ILE:CA	1:A:133:ILE:N[16_555]	1.85	0.35
1:A:146:VAL:CA	4:A:336:HOH:O[6_555]	1.85	0.35
1:A:208:SER:N	4:A:451:HOH:O[3_545]	1.85	0.35
1:A:263:ASN:N	1:A:294:ASP:CA[10_555]	1.85	0.35
1:A:264:LEU:N	1:A:293:ASN:CA[10_555]	1.85	0.35
1:A:264:LEU:CD2	1:A:295:HIS:CB[10_555]	1.85	0.35
1:A:274:VAL:CA	4:A:478:HOH:O[15_555]	1.85	0.35
1:A:289:PRO:CD	1:A:323:ILE:O[12_565]	1.85	0.35
1:A:289:PRO:N	1:A:323:ILE:C[12_565]	1.85	0.35
1:A:302:LYS:C	1:A:318:THR:CA[12_565]	1.85	0.35
4:A:361:HOH:O	4:A:384:HOH:O[16_555]	1.85	0.35
1:A:4:LYS:CB	1:A:10:HIS:CD2[12_555]	1.86	0.34
1:A:18:ARG:O	1:A:295:HIS:CD2[16_555]	1.86	0.34
1:A:53:VAL:CB	1:A:53:VAL:CB[13_655]	1.86	0.34
1:A:56:ASP:CG	1:A:99:ARG:CG[16_555]	1.86	0.34
1:A:91:LEU:CD1	4:A:342:HOH:O[16_555]	1.86	0.34
1:A:116:ILE:C	1:A:251:LEU:CB[4_555]	1.86	0.34
1:A:145:TYR:C	1:A:183:CYS:O[4_555]	1.86	0.34
1:A:3:LEU:CD1	1:A:313:LEU:C[5_545]	1.87	0.33
1:A:54:MET:SD	4:A:499:HOH:O[16_555]	1.87	0.33
1:A:55:GLU:CA	1:A:99:ARG:NH1[16_555]	1.87	0.33
1:A:76:LYS:CD	1:A:132:ILE:CG1[16_555]	1.87	0.33
1:A:145:TYR:OH	1:A:287:SER:C[11_655]	1.87	0.33
1:A:154:PRO:CA	1:A:181:HIS:CA[4_555]	1.87	0.33
1:A:155:MET:CB	1:A:180:VAL:C[4_555]	1.87	0.33
1:A:297:ILE:CA	4:A:397:HOH:O[10_555]	1.87	0.33
1:A:6:LYS:NZ	1:A:311:GLN:CA[5_545]	1.88	0.32
1:A:7:LEU:CD2	1:A:274:VAL:C[5_545]	1.88	0.32
1:A:7:LEU:N	1:A:280:ILE:CD1[5_545]	1.88	0.32
1:A:10:HIS:O	1:A:10:HIS:NE2[11_555]	1.88	0.32
1:A:13:THR:CA	1:A:145:TYR:CA[6_455]	1.88	0.32
1:A:18:ARG:NH2	1:A:261:MET:CA[16_555]	1.88	0.32
1:A:20:TYR:O	1:A:90:LYS:NZ[16_555]	1.88	0.32
1:A:31:VAL:C	1:A:80:GLY:O[16_555]	1.88	0.32
1:A:59:LYS:CE	2:A:330:NAD:O2D[16_555]	1.88	0.32
1:A:91:LEU:CG	4:A:342:HOH:O[16_555]	1.88	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:109:LEU:CD1	1:A:241:LEU:CD2[4_555]	1.88	0.32
1:A:119:PHE:CE2	1:A:262:LYS:CB[4_555]	1.88	0.32
1:A:122:PRO:CG	1:A:258:GLU:CD[4_555]	1.88	0.32
1:A:123:ASN:C	1:A:247:TRP:CE2[4_555]	1.88	0.32
1:A:142:VAL:N	1:A:172:TYR:O[4_555]	1.88	0.32
1:A:146:VAL:CA	1:A:183:CYS:O[4_555]	1.88	0.32
1:A:197:VAL:CG2	1:A:326:ASP:N[12_565]	1.88	0.32
1:A:251:LEU:C	4:A:390:HOH:O[3_545]	1.88	0.32
1:A:264:LEU:CG	1:A:295:HIS:CA[10_555]	1.88	0.32
1:A:286:LEU:N	4:A:576:HOH:O[4_555]	1.88	0.32
1:A:305:LEU:CD2	1:A:318:THR:OG1[12_565]	1.88	0.32
1:A:35:CYS:SG	1:A:85:VAL:CB[16_555]	1.89	0.31
1:A:52:ASP:CG	4:A:492:HOH:O[16_555]	1.89	0.31
1:A:67:HIS:CD2	1:A:148:TRP:N[16_555]	1.89	0.31
1:A:67:HIS:CA	1:A:153:LEU:CA[16_555]	1.89	0.31
1:A:76:LYS:CB	1:A:132:ILE:CA[16_555]	1.89	0.31
1:A:105:SER:OG	1:A:173:LEU:CG[4_555]	1.89	0.31
1:A:108:ASN:CA	1:A:169:ARG:O[4_555]	1.89	0.31
1:A:117:PHE:N	1:A:251:LEU:CB[4_555]	1.89	0.31
1:A:121:ILE:O	1:A:251:LEU:CD2[4_555]	1.89	0.31
1:A:143:LEU:N	1:A:172:TYR:CB[4_555]	1.89	0.31
1:A:206:VAL:N	1:A:323:ILE:CD1[3_545]	1.89	0.31
1:A:262:LYS:CG	4:A:350:HOH:O[3_545]	1.89	0.31
1:A:6:LYS:CB	1:A:314:GLN:CA[5_545]	1.90	0.30
1:A:7:LEU:CD1	1:A:317:ALA:CB[5_545]	1.90	0.30
1:A:61:GLU:C	1:A:94:ILE:CG2[16_555]	1.90	0.30
1:A:75:ALA:C	1:A:157:ARG:NE[16_555]	1.90	0.30
1:A:118:LYS:CD	1:A:296:GLY:N[11_655]	1.90	0.30
1:A:208:SER:N	1:A:301:VAL:CA[10_555]	1.90	0.30
1:A:263:ASN:O	1:A:294:ASP:N[10_555]	1.90	0.30
1:A:275:LYS:CE	1:A:313:LEU:CD2[11_655]	1.90	0.30
1:A:278:TYR:OH	1:A:282:ASP:O[12_565]	1.90	0.30
1:A:279:GLY:O	1:A:309:GLU:C[11_655]	1.90	0.30
1:A:11:LEU:C	1:A:178:LEU:O[7_555]	1.91	0.29
1:A:17:PRO:CD	1:A:296:GLY:C[16_555]	1.91	0.29
1:A:62:MET:SD	1:A:135:VAL:C[16_555]	1.91	0.29
1:A:67:HIS:CG	1:A:148:TRP:N[16_555]	1.91	0.29
1:A:70:LEU:CD1	1:A:181:HIS:C[8_555]	1.91	0.29
1:A:76:LYS:O	1:A:131:CYS:CB[16_555]	1.91	0.29
1:A:97:GLY:N	1:A:241:LEU:O[4_555]	1.91	0.29
1:A:123:ASN:OD1	1:A:127:HIS:CA[13_655]	1.91	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:145:TYR:C	1:A:183:CYS:CA[4_555]	1.91	0.29
1:A:183:CYS:C	4:A:336:HOH:O[7_555]	1.91	0.29
1:A:299:ASN:C	4:A:415:HOH:O[10_555]	1.91	0.29
1:A:1:ALA:N	4:A:544:HOH:O[5_545]	1.92	0.28
1:A:14:SER:CA	1:A:146:VAL:CB[6_455]	1.92	0.28
1:A:34:ALA:CA	1:A:83:TYR:C[16_555]	1.92	0.28
1:A:37:ILE:O	4:A:535:HOH:O[16_555]	1.92	0.28
1:A:58:LEU:CB	2:A:330:NAD:PN[16_555]	1.92	0.28
1:A:77:ILE:CB	1:A:131:CYS:SG[16_555]	1.92	0.28
1:A:127:HIS:NE2	1:A:247:TRP:CZ3[16_555]	1.92	0.28
1:A:147:ALA:N	1:A:182:SER:CB[4_555]	1.92	0.28
1:A:149:LYS:O	1:A:156:HIS:ND1[11_655]	1.92	0.28
1:A:177:ARG:O	1:A:274:VAL:CG1[3_545]	1.92	0.28
1:A:206:VAL:CG2	1:A:320:LEU:CB[3_545]	1.92	0.28
1:A:300:ILE:O	1:A:324:GLN:CG[12_565]	1.92	0.28
1:A:303:MET:N	1:A:318:THR:CA[12_565]	1.92	0.28
1:A:304:LYS:O	1:A:318:THR:CB[12_565]	1.92	0.28
1:A:6:LYS:CE	1:A:311:GLN:O[5_545]	1.93	0.27
1:A:32:GLY:N	1:A:51:VAL:CA[16_555]	1.93	0.27
1:A:32:GLY:C	1:A:51:VAL:CB[16_555]	1.93	0.27
1:A:35:CYS:CA	1:A:87:ALA:N[16_555]	1.93	0.27
1:A:47:GLU:OE1	1:A:90:LYS:O[16_555]	1.93	0.27
1:A:69:SER:CB	1:A:181:HIS:CE1[14_555]	1.93	0.27
1:A:97:GLY:CA	1:A:242:LYS:CA[4_555]	1.93	0.27
1:A:98:ALA:C	1:A:241:LEU:CA[4_555]	1.93	0.27
1:A:107:LEU:CD1	1:A:174:MET:N[4_555]	1.93	0.27
1:A:111:GLN:CD	1:A:292:LEU:CD2[11_655]	1.93	0.27
1:A:207:ALA:CA	1:A:300:ILE:N[10_555]	1.93	0.27
1:A:285:PHE:CE1	4:A:471:HOH:O[6_555]	1.93	0.27
1:A:8:ILE:CG1	1:A:10:HIS:CA[2_555]	1.94	0.26
1:A:14:SER:O	1:A:110:VAL:CG2[6_455]	1.94	0.26
1:A:17:PRO:N	1:A:296:GLY:N[16_555]	1.94	0.26
1:A:29:GLY:CA	1:A:52:ASP:OD1[16_555]	1.94	0.26
1:A:47:GLU:OE2	1:A:91:LEU:CA[16_555]	1.94	0.26
1:A:91:LEU:CB	4:A:342:HOH:O[16_555]	1.94	0.26
1:A:142:VAL:CA	1:A:175:GLY:N[4_555]	1.94	0.26
1:A:142:VAL:CA	1:A:171:ARG:O[4_555]	1.94	0.26
1:A:148:TRP:CA	1:A:183:CYS:CB[4_555]	1.94	0.26
1:A:264:LEU:O	1:A:292:LEU:CB[10_555]	1.94	0.26
1:A:264:LEU:CA	1:A:293:ASN:C[10_555]	1.94	0.26
1:A:307:PRO:CG	1:A:307:PRO:CG[13_654]	1.94	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:40:LEU:CB	1:A:129:PRO:N[16_555]	1.95	0.25
1:A:64:ASP:OD1	1:A:251:LEU:CD1[14_555]	1.95	0.25
1:A:68:GLY:CA	4:A:400:HOH:O[8_555]	1.95	0.25
1:A:83:TYR:CD1	4:A:348:HOH:O[13_655]	1.95	0.25
1:A:112:ARG:CG	1:A:248:ALA:O[4_555]	1.95	0.25
1:A:124:ILE:N	1:A:247:TRP:CE3[4_555]	1.95	0.25
1:A:207:ALA:CA	1:A:324:GLN:CG[3_545]	1.95	0.25
1:A:302:LYS:N	1:A:317:ALA:O[12_565]	1.95	0.25
1:A:4:LYS:CB	1:A:8:ILE:C[11_555]	1.96	0.24
1:A:13:THR:CB	1:A:145:TYR:N[6_455]	1.96	0.24
1:A:32:GLY:O	1:A:51:VAL:CG2[16_555]	1.96	0.24
1:A:35:CYS:O	1:A:87:ALA:CB[16_555]	1.96	0.24
1:A:38:SER:N	1:A:123:ASN:ND2[3_545]	1.96	0.24
1:A:55:GLU:C	1:A:99:ARG:NE[16_555]	1.96	0.24
1:A:64:ASP:O	1:A:125:VAL:CG2[16_555]	1.96	0.24
1:A:82:ASP:OD1	1:A:242:LYS:NZ[16_555]	1.96	0.24
1:A:108:ASN:OD1	1:A:168:ALA:C[4_555]	1.96	0.24
1:A:115:ASN:CA	1:A:255:ASP:OD2[4_555]	1.96	0.24
1:A:116:ILE:CG1	1:A:247:TRP:C[4_555]	1.96	0.24
1:A:160:GLY:O	1:A:328:LYS:O[12_565]	1.96	0.24
1:A:197:VAL:CB	1:A:325:LYS:O[12_565]	1.96	0.24
1:A:206:VAL:O	1:A:300:ILE:O[10_555]	1.96	0.24
1:A:208:SER:N	1:A:323:ILE:CG1[3_545]	1.96	0.24
1:A:209:ILE:CD1	1:A:302:LYS:CA[10_555]	1.96	0.24
1:A:282:ASP:CG	1:A:312:GLN:CD[11_655]	1.96	0.24
1:A:17:PRO:CD	1:A:296:GLY:N[16_555]	1.97	0.23
1:A:40:LEU:N	4:A:532:HOH:O[16_555]	1.97	0.23
1:A:55:GLU:CG	1:A:244:TYR:CB[16_555]	1.97	0.23
1:A:67:HIS:CD2	1:A:182:SER:OG[14_555]	1.97	0.23
1:A:70:LEU:CG	4:A:407:HOH:O[8_555]	1.97	0.23
1:A:82:ASP:C	1:A:246:SER:CB[16_555]	1.97	0.23
1:A:122:PRO:O	1:A:251:LEU:CD2[4_555]	1.97	0.23
1:A:142:VAL:CG1	1:A:185:CYS:CB[4_555]	1.97	0.23
1:A:189:VAL:CB	4:A:440:HOH:O[12_565]	1.97	0.23
1:A:286:LEU:CB	4:A:577:HOH:O[4_555]	1.97	0.23
1:A:300:ILE:O	1:A:320:LEU:C[12_565]	1.97	0.23
1:A:15:GLN:CD	1:A:266:ARG:CZ[7_555]	1.98	0.22
1:A:15:GLN:CA	1:A:114:VAL:CB[6_455]	1.98	0.22
1:A:17:PRO:CA	1:A:264:LEU:CD2[7_555]	1.98	0.22
1:A:20:TYR:C	1:A:90:LYS:CE[16_555]	1.98	0.22
1:A:25:VAL:CA	1:A:49:ALA:O[16_555]	1.98	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:28:VAL:C	1:A:52:ASP:OD1[16_555]	1.98	0.22
1:A:35:CYS:SG	1:A:85:VAL:C[16_555]	1.98	0.22
1:A:59:LYS:CG	2:A:330:NAD:C4D[16_555]	1.98	0.22
1:A:74:THR:CA	1:A:130:ASP:OD1[16_555]	1.98	0.22
1:A:82:ASP:OD2	1:A:246:SER:CB[16_555]	1.98	0.22
1:A:104:GLU:C	1:A:237:GLU:OE2[4_555]	1.98	0.22
1:A:110:VAL:CB	1:A:171:ARG:NH1[4_555]	1.98	0.22
1:A:147:ALA:O	1:A:182:SER:OG[4_555]	1.98	0.22
1:A:156:HIS:O	4:A:522:HOH:O[12_565]	1.98	0.22
1:A:193:HIS:CA	1:A:327:LEU:O[12_565]	1.98	0.22
1:A:259:THR:OG1	4:A:422:HOH:O[10_555]	1.98	0.22
1:A:266:ARG:CZ	1:A:295:HIS:ND1[10_555]	1.98	0.22
1:A:14:SER:CB	1:A:146:VAL:N[6_455]	1.99	0.21
1:A:15:GLN:CD	1:A:255:ASP:OD2[7_555]	1.99	0.21
1:A:29:GLY:CA	1:A:52:ASP:CG[16_555]	1.99	0.21
1:A:67:HIS:CG	1:A:147:ALA:O[16_555]	1.99	0.21
1:A:70:LEU:CD1	1:A:153:LEU:O[5_545]	1.99	0.21
1:A:114:VAL:C	4:A:396:HOH:O[4_555]	1.99	0.21
1:A:117:PHE:CA	1:A:251:LEU:CB[4_555]	1.99	0.21
1:A:121:ILE:CA	1:A:251:LEU:CG[4_555]	1.99	0.21
1:A:198:PRO:O	1:A:322:ASP:O[12_565]	1.99	0.21
1:A:207:ALA:C	1:A:300:ILE:C[10_555]	1.99	0.21
1:A:238:VAL:CA	4:A:505:HOH:O[3_545]	1.99	0.21
1:A:270:VAL:O	1:A:329:PHE:CE1[12_565]	1.99	0.21
1:A:298:SER:N	4:A:397:HOH:O[10_555]	1.99	0.21
1:A:301:VAL:CA	1:A:320:LEU:O[12_565]	1.99	0.21
1:A:308:ASN:N	4:A:457:HOH:O[12_565]	1.99	0.21
1:A:311:GLN:CD	4:A:552:HOH:O[11_655]	1.99	0.21
1:A:1:ALA:O	4:A:543:HOH:O[16_555]	2.00	0.20
1:A:3:LEU:CD2	1:A:314:GLN:N[5_545]	2.00	0.20
1:A:16:GLU:CA	1:A:293:ASN:CG[16_555]	2.00	0.20
1:A:17:PRO:CA	1:A:115:ASN:OD1[6_455]	2.00	0.20
1:A:67:HIS:CA	1:A:153:LEU:N[16_555]	2.00	0.20
1:A:96:ALA:O	1:A:241:LEU:O[4_555]	2.00	0.20
1:A:108:ASN:O	1:A:168:ALA:O[4_555]	2.00	0.20
1:A:116:ILE:CB	1:A:247:TRP:O[4_555]	2.00	0.20
1:A:123:ASN:O	1:A:127:HIS:NE2[13_655]	2.00	0.20
1:A:263:ASN:CA	1:A:294:ASP:CG[10_555]	2.00	0.20
1:A:275:LYS:CD	1:A:313:LEU:CG[11_655]	2.00	0.20
1:A:276:ASP:CG	1:A:278:TYR:CE2[11_655]	2.00	0.20
1:A:281:LYS:O	1:A:312:GLN:CG[11_655]	2.00	0.20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:287:SER:OG	1:A:327:LEU:C[12_565]	2.00	0.20
1:A:300:ILE:C	1:A:324:GLN:CD[12_565]	2.00	0.20
3:A:332:OXM:C2	4:A:439:HOH:O[3_545]	2.00	0.20
1:A:20:TYR:CG	1:A:261:MET:O[7_555]	2.01	0.19
1:A:62:MET:CE	1:A:135:VAL:CA[16_555]	2.01	0.19
1:A:69:SER:C	4:A:376:HOH:O[11_555]	2.01	0.19
1:A:82:ASP:O	1:A:246:SER:CB[16_555]	2.01	0.19
1:A:145:TYR:CE1	1:A:297:ILE:CG2[11_655]	2.01	0.19
1:A:14:SER:OG	1:A:145:TYR:CB[6_455]	2.02	0.18
1:A:18:ARG:NH2	1:A:261:MET:N[16_555]	2.02	0.18
1:A:37:ILE:O	1:A:126:LYS:CG[3_545]	2.02	0.18
1:A:56:ASP:CB	1:A:99:ARG:CB[16_555]	2.02	0.18
1:A:62:MET:CA	1:A:94:ILE:CB[16_555]	2.02	0.18
1:A:72:LEU:O	4:A:374:HOH:O[11_555]	2.02	0.18
1:A:73:HIS:CB	4:A:379:HOH:O[11_555]	2.02	0.18
1:A:76:LYS:O	1:A:132:ILE:CA[16_555]	2.02	0.18
1:A:79:SER:N	1:A:136:VAL:CG2[16_555]	2.02	0.18
1:A:83:TYR:OH	4:A:496:HOH:O[4_555]	2.02	0.18
1:A:98:ALA:O	1:A:241:LEU:CA[4_555]	2.02	0.18
1:A:110:VAL:CG1	1:A:171:ARG:CZ[4_555]	2.02	0.18
1:A:124:ILE:N	1:A:247:TRP:CD1[4_555]	2.02	0.18
1:A:262:LYS:CG	4:A:363:HOH:O[10_555]	2.02	0.18
1:A:264:LEU:O	1:A:292:LEU:CA[10_555]	2.02	0.18
1:A:276:ASP:OD2	1:A:313:LEU:CD1[11_655]	2.02	0.18
1:A:299:ASN:CG	1:A:323:ILE:CG2[12_565]	2.02	0.18
1:A:302:LYS:N	1:A:321:TRP:N[12_565]	2.02	0.18
4:A:339:HOH:O	4:A:484:HOH:O[3_545]	2.02	0.18
1:A:8:ILE:CD1	1:A:10:HIS:CD2[2_555]	2.03	0.17
1:A:47:GLU:O	1:A:89:SER:C[16_555]	2.03	0.17
1:A:82:ASP:CB	1:A:246:SER:OG[16_555]	2.03	0.17
1:A:98:ALA:O	1:A:241:LEU:CB[4_555]	2.03	0.17
1:A:186:HIS:CE1	1:A:299:ASN:CG[10_555]	2.03	0.17
1:A:207:ALA:N	1:A:300:ILE:C[10_555]	2.03	0.17
1:A:209:ILE:CG1	1:A:321:TRP:N[3_545]	2.03	0.17
1:A:327:LEU:CD2	4:A:397:HOH:O[4_555]	2.03	0.17
4:A:543:HOH:O	4:A:544:HOH:O[11_655]	2.03	0.17
1:A:4:LYS:CB	4:A:538:HOH:O[12_555]	2.04	0.16
1:A:12:ALA:O	1:A:185:CYS:SG[7_555]	2.04	0.16
1:A:14:SER:CB	1:A:184:SER:C[7_555]	2.04	0.16
1:A:56:ASP:CG	1:A:100:GLN:O[16_555]	2.04	0.16
1:A:75:ALA:C	1:A:157:ARG:CD[16_555]	2.04	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:149:LYS:O	1:A:156:HIS:C[11_655]	2.04	0.16
1:A:157:ARG:CA	4:A:406:HOH:O[16_555]	2.04	0.16
1:A:191:GLY:N	1:A:321:TRP:CE2[12_565]	2.04	0.16
1:A:198:PRO:C	4:A:446:HOH:O[12_565]	2.04	0.16
1:A:209:ILE:N	4:A:451:HOH:O[3_545]	2.04	0.16
1:A:293:ASN:CB	4:A:481:HOH:O[16_555]	2.04	0.16
1:A:305:LEU:CD2	1:A:318:THR:CG2[12_565]	2.04	0.16
1:A:7:LEU:CA	1:A:274:VAL:C[5_545]	2.05	0.15
1:A:15:GLN:CD	1:A:111:GLN:O[6_455]	2.05	0.15
1:A:38:SER:N	1:A:123:ASN:CG[3_545]	2.05	0.15
1:A:57:LYS:C	1:A:95:THR:O[16_555]	2.05	0.15
1:A:58:LEU:N	2:A:330:NAD:C5B[16_555]	2.05	0.15
1:A:70:LEU:CD1	4:A:407:HOH:O[8_555]	2.05	0.15
1:A:78:VAL:C	1:A:93:VAL:CA[16_555]	2.05	0.15
1:A:115:ASN:CB	1:A:255:ASP:OD2[4_555]	2.05	0.15
1:A:115:ASN:CG	1:A:266:ARG:CZ[4_555]	2.05	0.15
1:A:118:LYS:O	1:A:258:GLU:CG[4_555]	2.05	0.15
1:A:140:VAL:CG1	1:A:329:PHE:C[12_565]	2.05	0.15
1:A:153:LEU:N	1:A:183:CYS:SG[4_555]	2.05	0.15
1:A:177:ARG:N	1:A:285:PHE:O[3_545]	2.05	0.15
1:A:198:PRO:CG	1:A:282:ASP:CB[12_565]	2.05	0.15
1:A:264:LEU:N	1:A:294:ASP:CA[10_555]	2.05	0.15
1:A:281:LYS:CD	1:A:312:GLN:CD[11_655]	2.05	0.15
1:A:289:PRO:O	1:A:323:ILE:CA[12_565]	2.05	0.15
1:A:3:LEU:CD1	1:A:313:LEU:O[5_545]	2.06	0.14
1:A:12:ALA:N	1:A:178:LEU:C[7_555]	2.06	0.14
1:A:14:SER:N	1:A:182:SER:C[7_555]	2.06	0.14
1:A:18:ARG:CB	1:A:294:ASP:C[16_555]	2.06	0.14
1:A:29:GLY:N	1:A:52:ASP:OD1[16_555]	2.06	0.14
1:A:35:CYS:CB	1:A:85:VAL:C[16_555]	2.06	0.14
1:A:53:VAL:CB	1:A:53:VAL:CG2[13_655]	2.06	0.14
1:A:67:HIS:CB	1:A:151:SER:OG[16_555]	2.06	0.14
1:A:104:GLU:CG	1:A:237:GLU:OE1[4_555]	2.06	0.14
1:A:112:ARG:CB	1:A:248:ALA:O[4_555]	2.06	0.14
1:A:122:PRO:CG	1:A:258:GLU:OE2[4_555]	2.06	0.14
1:A:127:HIS:NE2	1:A:247:TRP:CD2[16_555]	2.06	0.14
1:A:148:TRP:CB	1:A:182:SER:N[4_555]	2.06	0.14
1:A:175:GLY:C	1:A:285:PHE:CG[3_545]	2.06	0.14
1:A:228:HIS:CE1	4:A:432:HOH:O[12_565]	2.06	0.14
1:A:236:TYR:OH	4:A:426:HOH:O[12_565]	2.06	0.14
1:A:264:LEU:CG	1:A:295:HIS:ND1[10_555]	2.06	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:301:VAL:CA	1:A:323:ILE:CB[12_565]	2.06	0.14
4:A:363:HOH:O	4:A:368:HOH:O[16_555]	2.06	0.14
1:A:4:LYS:CG	1:A:8:ILE:C[11_555]	2.07	0.13
1:A:12:ALA:C	1:A:285:PHE:CA[6_455]	2.07	0.13
1:A:16:GLU:CB	1:A:292:LEU:CA[16_555]	2.07	0.13
1:A:37:ILE:CA	1:A:127:HIS:CA[16_555]	2.07	0.13
1:A:59:LYS:N	1:A:95:THR:O[16_555]	2.07	0.13
1:A:67:HIS:NE2	1:A:147:ALA:C[16_555]	2.07	0.13
1:A:81:LYS:O	1:A:244:TYR:CZ[16_555]	2.07	0.13
1:A:139:PRO:CG	1:A:173:LEU:CD2[4_555]	2.07	0.13
1:A:143:LEU:O	1:A:172:TYR:CE1[4_555]	2.07	0.13
1:A:158:ILE:CG2	1:A:172:TYR:CZ[4_555]	2.07	0.13
1:A:193:HIS:CB	1:A:328:LYS:CA[12_565]	2.07	0.13
1:A:250:GLY:O	4:A:530:HOH:O[16_555]	2.07	0.13
1:A:275:LYS:CA	1:A:302:LYS:CG[11_655]	2.07	0.13
1:A:283:ASN:ND2	1:A:286:LEU:C[11_655]	2.07	0.13
1:A:299:ASN:N	1:A:327:LEU:CD1[12_565]	2.07	0.13
1:A:302:LYS:C	1:A:317:ALA:O[12_565]	2.07	0.13
1:A:303:MET:SD	1:A:323:ILE:N[12_565]	2.07	0.13
4:A:544:HOH:O	4:A:545:HOH:O[12_565]	2.07	0.13
1:A:14:SER:CA	1:A:183:CYS:O[7_555]	2.08	0.12
1:A:22:LYS:O	1:A:22:LYS:CG[16_555]	2.08	0.12
1:A:56:ASP:CA	1:A:99:ARG:CB[16_555]	2.08	0.12
1:A:64:ASP:OD2	1:A:121:ILE:CG2[16_555]	2.08	0.12
1:A:66:GLN:O	1:A:71:PHE:CD2[11_555]	2.08	0.12
1:A:70:LEU:CG	1:A:153:LEU:C[5_545]	2.08	0.12
1:A:70:LEU:CB	4:A:520:HOH:O[8_555]	2.08	0.12
1:A:111:GLN:CG	1:A:291:VAL:C[11_655]	2.08	0.12
1:A:115:ASN:CB	1:A:266:ARG:CZ[4_555]	2.08	0.12
1:A:118:LYS:CB	4:A:479:HOH:O[6_555]	2.08	0.12
1:A:123:ASN:ND2	4:A:531:HOH:O[13_655]	2.08	0.12
1:A:135:VAL:CA	4:A:382:HOH:O[16_555]	2.08	0.12
1:A:145:TYR:N	1:A:182:SER:CB[4_555]	2.08	0.12
1:A:177:ARG:N	1:A:285:PHE:CD2[3_545]	2.08	0.12
1:A:193:HIS:CG	1:A:328:LYS:CG[12_565]	2.08	0.12
1:A:5:ASP:OD2	4:A:546:HOH:O[16_555]	2.09	0.11
1:A:14:SER:O	1:A:171:ARG:NH1[7_555]	2.09	0.11
1:A:24:THR:C	1:A:49:ALA:CB[16_555]	2.09	0.11
1:A:24:THR:CA	1:A:49:ALA:O[16_555]	2.09	0.11
1:A:25:VAL:C	1:A:49:ALA:O[16_555]	2.09	0.11
1:A:26:VAL:CG1	1:A:33:MET:SD[16_555]	2.09	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:30:ALA:CB	1:A:81:LYS:N[16_555]	2.09	0.11
1:A:48:VAL:O	1:A:92:VAL:N[16_555]	2.09	0.11
1:A:49:ALA:N	1:A:91:LEU:O[16_555]	2.09	0.11
1:A:65:LEU:CD2	1:A:124:ILE:O[16_555]	2.09	0.11
1:A:67:HIS:N	1:A:153:LEU:CB[16_555]	2.09	0.11
1:A:78:VAL:CA	1:A:92:VAL:O[16_555]	2.09	0.11
1:A:104:GLU:CB	1:A:237:GLU:CD[4_555]	2.09	0.11
1:A:115:ASN:ND2	1:A:293:ASN:OD1[11_655]	2.09	0.11
1:A:123:ASN:CB	1:A:127:HIS:CG[13_655]	2.09	0.11
1:A:142:VAL:N	1:A:172:TYR:C[4_555]	2.09	0.11
1:A:149:LYS:CE	1:A:287:SER:N[11_655]	2.09	0.11
1:A:174:MET:C	1:A:320:LEU:CD2[3_545]	2.09	0.11
1:A:184:SER:O	1:A:324:GLN:OE1[3_545]	2.09	0.11
1:A:206:VAL:C	1:A:320:LEU:O[3_545]	2.09	0.11
1:A:266:ARG:NE	1:A:293:ASN:OD1[10_555]	2.09	0.11
1:A:282:ASP:OD2	1:A:312:GLN:OE1[11_655]	2.09	0.11
1:A:302:LYS:O	1:A:319:THR:N[12_565]	2.09	0.11
1:A:6:LYS:CE	1:A:311:GLN:CB[5_545]	2.10	0.10
1:A:70:LEU:CG	1:A:154:PRO:CA[5_545]	2.10	0.10
1:A:79:SER:C	1:A:95:THR:OG1[16_555]	2.10	0.10
1:A:82:ASP:CA	1:A:246:SER:OG[16_555]	2.10	0.10
1:A:107:LEU:CG	1:A:173:LEU:CA[4_555]	2.10	0.10
1:A:112:ARG:CD	1:A:248:ALA:C[4_555]	2.10	0.10
1:A:118:LYS:C	1:A:258:GLU:OE1[4_555]	2.10	0.10
1:A:142:VAL:CG2	1:A:171:ARG:O[4_555]	2.10	0.10
1:A:148:TRP:N	1:A:183:CYS:N[4_555]	2.10	0.10
1:A:206:VAL:O	1:A:320:LEU:O[3_545]	2.10	0.10
1:A:264:LEU:C	1:A:293:ASN:CB[10_555]	2.10	0.10
1:A:281:LYS:C	1:A:312:GLN:CG[11_655]	2.10	0.10
1:A:323:ILE:CB	4:A:415:HOH:O[4_555]	2.10	0.10
1:A:37:ILE:CA	1:A:128:SER:N[16_555]	2.11	0.09
1:A:66:GLN:O	4:A:407:HOH:O[14_555]	2.11	0.09
1:A:96:ALA:C	1:A:241:LEU:O[4_555]	2.11	0.09
1:A:115:ASN:CG	1:A:295:HIS:ND1[11_655]	2.11	0.09
1:A:116:ILE:CD1	1:A:247:TRP:N[4_555]	2.11	0.09
1:A:116:ILE:CG1	1:A:247:TRP:N[4_555]	2.11	0.09
1:A:120:ILE:C	1:A:247:TRP:CB[4_555]	2.11	0.09
1:A:127:HIS:N	1:A:247:TRP:CZ2[4_555]	2.11	0.09
1:A:144:THR:C	1:A:172:TYR:CD2[4_555]	2.11	0.09
1:A:145:TYR:CD1	4:A:475:HOH:O[6_555]	2.11	0.09
1:A:149:LYS:NZ	1:A:271:SER:CA[11_655]	2.11	0.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:263:ASN:O	1:A:294:ASP:CA[10_555]	2.11	0.09
1:A:281:LYS:NZ	1:A:312:GLN:NE2[11_655]	2.11	0.09
1:A:324:GLN:CG	4:A:475:HOH:O[6_555]	2.11	0.09
4:A:491:HOH:O	4:A:491:HOH:O[16_555]	2.11	0.09
1:A:7:LEU:CD2	1:A:274:VAL:CG2[5_545]	2.12	0.08
1:A:12:ALA:CA	1:A:273:MET:C[6_455]	2.12	0.08
1:A:23:ILE:CG1	1:A:88:GLY:O[16_555]	2.12	0.08
1:A:29:GLY:O	1:A:52:ASP:N[16_555]	2.12	0.08
1:A:38:SER:CB	1:A:123:ASN:ND2[3_545]	2.12	0.08
1:A:40:LEU:CD1	1:A:128:SER:O[16_555]	2.12	0.08
1:A:58:LEU:N	2:A:330:NAD:C5D[16_555]	2.12	0.08
1:A:66:GLN:C	1:A:153:LEU:CD2[16_555]	2.12	0.08
1:A:78:VAL:O	1:A:93:VAL:N[16_555]	2.12	0.08
1:A:81:LYS:CB	1:A:244:TYR:CE2[16_555]	2.12	0.08
1:A:141:ASP:CA	1:A:176:GLU:OE1[4_555]	2.12	0.08
1:A:141:ASP:C	1:A:176:GLU:OE2[4_555]	2.12	0.08
1:A:148:TRP:CG	1:A:181:HIS:O[4_555]	2.12	0.08
1:A:148:TRP:N	1:A:182:SER:CA[4_555]	2.12	0.08
1:A:155:MET:SD	1:A:180:VAL:CB[4_555]	2.12	0.08
1:A:191:GLY:CA	1:A:283:ASN:ND2[12_565]	2.12	0.08
1:A:207:ALA:N	1:A:320:LEU:O[3_545]	2.12	0.08
1:A:299:ASN:CB	4:A:415:HOH:O[10_555]	2.12	0.08
1:A:301:VAL:N	1:A:324:GLN:CG[12_565]	2.12	0.08
1:A:11:LEU:C	1:A:179:GLY:N[7_555]	2.13	0.07
1:A:13:THR:CA	1:A:175:GLY:CA[7_555]	2.13	0.07
1:A:15:GLN:CB	1:A:111:GLN:O[6_455]	2.13	0.07
1:A:17:PRO:CA	1:A:295:HIS:C[16_555]	2.13	0.07
1:A:31:VAL:CB	1:A:80:GLY:N[16_555]	2.13	0.07
1:A:67:HIS:CG	1:A:182:SER:OG[14_555]	2.13	0.07
1:A:74:THR:OG1	1:A:130:ASP:OD2[16_555]	2.13	0.07
1:A:78:VAL:CG2	1:A:93:VAL:CA[16_555]	2.13	0.07
1:A:139:PRO:CB	1:A:173:LEU:CD2[4_555]	2.13	0.07
1:A:144:THR:O	1:A:172:TYR:CD2[4_555]	2.13	0.07
1:A:177:ARG:O	1:A:273:MET:N[3_545]	2.13	0.07
1:A:190:ILE:CG1	1:A:322:ASP:CA[12_565]	2.13	0.07
1:A:198:PRO:N	1:A:321:TRP:CE3[12_565]	2.13	0.07
1:A:294:ASP:N	4:A:481:HOH:O[16_555]	2.13	0.07
1:A:299:ASN:O	4:A:415:HOH:O[10_555]	2.13	0.07
1:A:1:ALA:CB	1:A:310:GLU:CG[5_545]	2.14	0.06
1:A:2:THR:OG1	1:A:277:PHE:CA[16_555]	2.14	0.06
1:A:8:ILE:CD1	1:A:10:HIS:CG[2_555]	2.14	0.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:11:LEU:O	1:A:273:MET:O[6_455]	2.14	0.06
1:A:12:ALA:C	1:A:178:LEU:CB[7_555]	2.14	0.06
1:A:17:PRO:CG	1:A:296:GLY:CA[16_555]	2.14	0.06
1:A:35:CYS:N	1:A:84:SER:O[16_555]	2.14	0.06
1:A:70:LEU:CG	1:A:154:PRO:C[5_545]	2.14	0.06
1:A:70:LEU:CD1	1:A:153:LEU:CA[5_545]	2.14	0.06
1:A:76:LYS:N	1:A:157:ARG:CD[16_555]	2.14	0.06
1:A:112:ARG:O	1:A:251:LEU:C[4_555]	2.14	0.06
1:A:118:LYS:NZ	1:A:159:ILE:CD1[11_655]	2.14	0.06
1:A:123:ASN:CG	4:A:529:HOH:O[13_655]	2.14	0.06
1:A:127:HIS:NE2	1:A:247:TRP:CE3[16_555]	2.14	0.06
1:A:181:HIS:NE2	4:A:400:HOH:O[11_555]	2.14	0.06
1:A:209:ILE:CG1	1:A:301:VAL:C[10_555]	2.14	0.06
1:A:280:ILE:CB	1:A:302:LYS:CG[11_655]	2.14	0.06
1:A:281:LYS:O	1:A:312:GLN:CB[11_655]	2.14	0.06
1:A:283:ASN:N	1:A:288:LEU:CG[11_655]	2.14	0.06
1:A:293:ASN:CA	4:A:481:HOH:O[16_555]	2.14	0.06
1:A:300:ILE:N	1:A:324:GLN:NE2[12_565]	2.14	0.06
4:A:360:HOH:O	4:A:360:HOH:O[14_555]	2.14	0.06
4:A:458:HOH:O	4:A:510:HOH:O[11_655]	2.14	0.06
1:A:7:LEU:C	1:A:275:LYS:N[5_545]	2.15	0.05
1:A:13:THR:C	1:A:182:SER:CA[7_555]	2.15	0.05
1:A:36:ALA:N	1:A:87:ALA:CA[16_555]	2.15	0.05
1:A:57:LYS:CE	2:A:330:NAD:O4B[16_555]	2.15	0.05
1:A:61:GLU:OE1	1:A:96:ALA:CB[16_555]	2.15	0.05
1:A:70:LEU:C	4:A:344:HOH:O[12_555]	2.15	0.05
1:A:81:LYS:CB	1:A:244:TYR:CD2[16_555]	2.15	0.05
1:A:119:PHE:CD2	1:A:258:GLU:CB[4_555]	2.15	0.05
1:A:135:VAL:N	4:A:382:HOH:O[16_555]	2.15	0.05
1:A:148:TRP:CB	1:A:181:HIS:O[4_555]	2.15	0.05
1:A:163:CYS:SG	1:A:326:ASP:C[12_565]	2.15	0.05
1:A:244:TYR:OH	2:A:330:NAD:C5A[3_545]	2.15	0.05
1:A:279:GLY:O	1:A:306:LYS:O[11_655]	2.15	0.05
1:A:6:LYS:CA	1:A:280:ILE:CD1[5_545]	2.16	0.04
1:A:20:TYR:CD2	1:A:262:LYS:N[7_555]	2.16	0.04
1:A:34:ALA:CA	1:A:84:SER:N[16_555]	2.16	0.04
1:A:64:ASP:CG	1:A:121:ILE:CA[16_555]	2.16	0.04
1:A:78:VAL:O	1:A:93:VAL:O[16_555]	2.16	0.04
1:A:121:ILE:N	1:A:251:LEU:CD1[4_555]	2.16	0.04
1:A:139:PRO:CB	4:A:398:HOH:O[4_555]	2.16	0.04
1:A:145:TYR:CD2	4:A:475:HOH:O[6_555]	2.16	0.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:264:LEU:CG	1:A:295:HIS:NE2[10_555]	2.16	0.04
1:A:286:LEU:CG	4:A:511:HOH:O[4_555]	2.16	0.04
1:A:301:VAL:C	1:A:320:LEU:O[12_565]	2.16	0.04
1:A:3:LEU:CA	1:A:278:TYR:CD2[5_545]	2.17	0.03
1:A:6:LYS:CD	1:A:311:GLN:O[5_545]	2.17	0.03
1:A:7:LEU:CA	1:A:302:LYS:CE[15_445]	2.17	0.03
1:A:7:LEU:C	1:A:274:VAL:C[5_545]	2.17	0.03
1:A:7:LEU:CB	1:A:280:ILE:CD1[5_545]	2.17	0.03
1:A:14:SER:N	1:A:145:TYR:C[6_455]	2.17	0.03
1:A:16:GLU:CB	1:A:292:LEU:CB[16_555]	2.17	0.03
1:A:30:ALA:CB	1:A:52:ASP:O[16_555]	2.17	0.03
1:A:39:ILE:CD1	1:A:87:ALA:O[16_555]	2.17	0.03
1:A:55:GLU:O	1:A:99:ARG:CD[16_555]	2.17	0.03
1:A:58:LEU:CA	2:A:330:NAD:C5D[16_555]	2.17	0.03
1:A:58:LEU:C	1:A:95:THR:CA[16_555]	2.17	0.03
1:A:66:GLN:OE1	1:A:133:ILE:CG2[16_555]	2.17	0.03
1:A:68:GLY:N	1:A:153:LEU:CA[16_555]	2.17	0.03
1:A:77:ILE:O	1:A:133:ILE:O[16_555]	2.17	0.03
1:A:108:ASN:CA	1:A:168:ALA:O[4_555]	2.17	0.03
1:A:108:ASN:CG	1:A:168:ALA:CA[4_555]	2.17	0.03
1:A:108:ASN:CG	1:A:169:ARG:C[4_555]	2.17	0.03
1:A:116:ILE:O	1:A:251:LEU:CA[4_555]	2.17	0.03
1:A:149:LYS:O	1:A:156:HIS:O[11_655]	2.17	0.03
1:A:190:ILE:CB	1:A:325:LYS:N[12_565]	2.17	0.03
1:A:251:LEU:O	4:A:390:HOH:O[3_545]	2.17	0.03
1:A:259:THR:O	1:A:294:ASP:CG[10_555]	2.17	0.03
1:A:279:GLY:CA	4:A:553:HOH:O[11_655]	2.17	0.03
1:A:283:ASN:CB	1:A:288:LEU:CD1[11_655]	2.17	0.03
4:A:465:HOH:O	4:A:546:HOH:O[16_555]	2.17	0.03
1:A:14:SER:CA	1:A:145:TYR:C[6_455]	2.18	0.02
1:A:14:SER:O	1:A:114:VAL:CB[6_455]	2.18	0.02
1:A:14:SER:CA	1:A:182:SER:O[7_555]	2.18	0.02
1:A:28:VAL:C	1:A:51:VAL:O[16_555]	2.18	0.02
1:A:33:MET:C	1:A:83:TYR:C[16_555]	2.18	0.02
1:A:36:ALA:C	4:A:534:HOH:O[16_555]	2.18	0.02
1:A:38:SER:CA	4:A:531:HOH:O[16_555]	2.18	0.02
1:A:49:ALA:CA	1:A:93:VAL:CB[16_555]	2.18	0.02
1:A:55:GLU:OE2	1:A:244:TYR:CB[16_555]	2.18	0.02
1:A:69:SER:CB	1:A:181:HIS:NE2[14_555]	2.18	0.02
1:A:70:LEU:O	4:A:344:HOH:O[12_555]	2.18	0.02
1:A:71:PHE:CE2	4:A:407:HOH:O[8_555]	2.18	0.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:73:HIS:CD2	1:A:73:HIS:CE1[11_555]	2.18	0.02
1:A:106:ARG:NE	4:A:427:HOH:O[12_565]	2.18	0.02
1:A:106:ARG:CD	4:A:431:HOH:O[12_565]	2.18	0.02
1:A:107:LEU:CD1	1:A:174:MET:CB[4_555]	2.18	0.02
1:A:116:ILE:CG2	1:A:247:TRP:N[4_555]	2.18	0.02
1:A:118:LYS:O	1:A:258:GLU:OE1[4_555]	2.18	0.02
1:A:178:LEU:CD2	1:A:316:SER:O[3_545]	2.18	0.02
1:A:181:HIS:CD2	4:A:400:HOH:O[11_555]	2.18	0.02
1:A:262:LYS:O	1:A:294:ASP:O[10_555]	2.18	0.02
1:A:262:LYS:C	1:A:294:ASP:O[10_555]	2.18	0.02
1:A:4:LYS:CE	1:A:10:HIS:C[12_555]	2.19	0.01
1:A:13:THR:OG1	1:A:175:GLY:CA[7_555]	2.19	0.01
1:A:15:GLN:N	1:A:114:VAL:CB[6_455]	2.19	0.01
1:A:16:GLU:N	1:A:115:ASN:OD1[6_455]	2.19	0.01
1:A:35:CYS:CA	1:A:84:SER:C[16_555]	2.19	0.01
1:A:55:GLU:O	2:A:330:NAD:O5D[16_555]	2.19	0.01
1:A:55:GLU:N	1:A:99:ARG:CZ[16_555]	2.19	0.01
1:A:67:HIS:CG	1:A:147:ALA:C[16_555]	2.19	0.01
1:A:70:LEU:O	4:A:520:HOH:O[8_555]	2.19	0.01
1:A:74:THR:O	1:A:157:ARG:CZ[16_555]	2.19	0.01
1:A:81:LYS:CD	1:A:242:LYS:O[16_555]	2.19	0.01
1:A:106:ARG:CA	4:A:356:HOH:O[4_555]	2.19	0.01
1:A:111:GLN:CB	4:A:335:HOH:O[6_555]	2.19	0.01
1:A:118:LYS:CG	1:A:295:HIS:C[11_655]	2.19	0.01
1:A:127:HIS:CD2	1:A:247:TRP:CZ3[16_555]	2.19	0.01
1:A:130:ASP:OD2	4:A:339:HOH:O[16_555]	2.19	0.01
1:A:153:LEU:CA	4:A:400:HOH:O[9_555]	2.19	0.01
1:A:259:THR:CG2	1:A:265:CYS:SG[10_555]	2.19	0.01
1:A:264:LEU:CD2	1:A:295:HIS:C[10_555]	2.19	0.01
1:A:289:PRO:CD	1:A:324:GLN:N[12_565]	2.19	0.01

5.3 Torsion angles

5.3.1 Protein backbone

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	327/329 (99%)	292 (89%)	32 (10%)	3 (1%)	14 10

All (3) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	219	LYS
1	A	222	GLN
1	A	83	TYR

5.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	286/286 (100%)	242 (85%)	44 (15%)	2 1

All (44) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2	THR
1	A	3	LEU
1	A	37	ILE
1	A	41	MET
1	A	44	LEU
1	A	59	LYS
1	A	63	MET
1	A	76	LYS
1	A	78	VAL
1	A	82	ASP
1	A	85	VAL
1	A	91	LEU
1	A	126	LYS
1	A	134	LEU
1	A	137	SER
1	A	144	THR
1	A	153	LEU
1	A	158	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	165	LEU
1	A	197	VAL
1	A	199	SER
1	A	209	ILE
1	A	210	LYS
1	A	219	LYS
1	A	220	ASP
1	A	229	LYS
1	A	231	VAL
1	A	241	LEU
1	A	256	LEU
1	A	272	THR
1	A	273	MET
1	A	274	VAL
1	A	281	LYS
1	A	284	VAL
1	A	293	ASN
1	A	299	ASN
1	A	303	MET
1	A	304	LYS
1	A	306	LYS
1	A	311	GLN
1	A	313	LEU
1	A	319	THR
1	A	321	TRP
1	A	325	LYS

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (13) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	73	HIS
1	A	108	ASN
1	A	111	GLN
1	A	115	ASN
1	A	123	ASN
1	A	181	HIS
1	A	186	HIS
1	A	212	HIS
1	A	228	HIS
1	A	283	ASN
1	A	293	ASN
1	A	311	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	314	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](#)

3 ligands are modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the Chemical Component Dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. 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 $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# $ Z > 2$	Counts	RMSZ	# $ Z > 2$
3	OXM	A	332	-	5,5,5	1.27	1 (20%)	2,6,6	0.97	0
2	NAD	A	330	-	46,48,48	1.31	3 (6%)	64,73,73	2.24	16 (25%)
3	OXM	A	331	-	5,5,5	1.38	0	2,6,6	0.98	0

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the Chemical Component Dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
3	OXM	A	332	-	-	1/4/4/4	-
2	NAD	A	330	-	-	7/30/62/62	0/5/5/5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
3	OXM	A	331	-	-	2/4/4/4	-

All (4) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	A	330	NAD	C3N-C7N	4.20	1.56	1.50
2	A	330	NAD	C6N-N1N	3.28	1.42	1.35
2	A	330	NAD	C2A-N3A	-2.52	1.29	1.33
3	A	332	OXM	C1-C2	2.03	1.58	1.55

All (16) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	A	330	NAD	C5N-C4N-C3N	-9.37	111.15	120.36
2	A	330	NAD	C6N-C5N-C4N	5.97	128.05	119.45
2	A	330	NAD	C2N-C3N-C4N	5.09	124.17	118.26
2	A	330	NAD	O3-PA-O1A	4.78	125.08	110.70
2	A	330	NAD	C4D-O4D-C1D	-4.06	106.21	109.92
2	A	330	NAD	O4B-C1B-N9A	3.75	115.30	108.09
2	A	330	NAD	C5N-C6N-N1N	-3.69	115.35	120.38
2	A	330	NAD	O7N-C7N-N7N	3.41	127.55	122.62
2	A	330	NAD	C5B-C4B-C3B	3.39	127.41	115.21
2	A	330	NAD	C4N-C3N-C7N	-3.21	112.33	121.06
2	A	330	NAD	C3N-C7N-N7N	-2.73	114.37	117.74
2	A	330	NAD	O3D-C3D-C4D	-2.64	103.50	111.08
2	A	330	NAD	O4B-C4B-C5B	2.38	116.95	109.33
2	A	330	NAD	C4A-N9A-C1B	-2.27	121.32	126.63
2	A	330	NAD	C1B-N9A-C8A	2.13	131.82	127.09
2	A	330	NAD	O5B-C5B-C4B	2.13	116.24	108.99

There are no chirality outliers.

All (10) torsion outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
2	A	330	NAD	O4D-C1D-N1N-C2N
2	A	330	NAD	O4D-C1D-N1N-C6N
2	A	330	NAD	C2D-C1D-N1N-C2N
3	A	331	OXM	N1-C1-C2-O3
3	A	331	OXM	O1-C1-C2-O3
2	A	330	NAD	O4B-C4B-C5B-O5B
3	A	332	OXM	O1-C1-C2-O2

Continued on next page...

Continued from previous page...

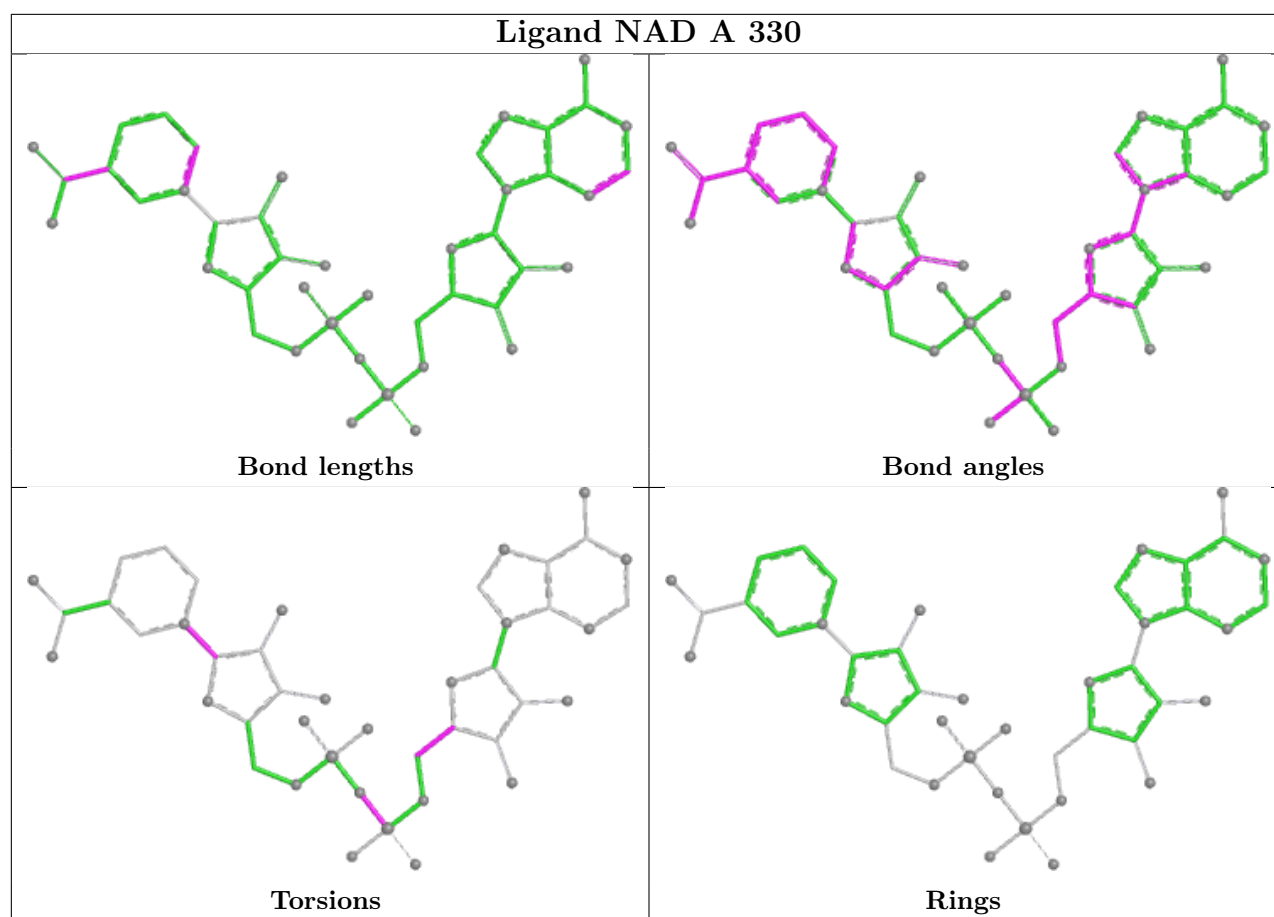
Mol	Chain	Res	Type	Atoms
2	A	330	NAD	PN-O3-PA-O2A
2	A	330	NAD	C2D-C1D-N1N-C6N
2	A	330	NAD	PN-O3-PA-O1A

There are no ring outliers.

2 monomers are involved in 36 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
3	A	332	OXM	0	3
2	A	330	NAD	1	32

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less than 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient equivalents in the CSD to analyse the geometry.



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

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.