



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 02:39 AM UTC

PDB ID : 3LDH / pdb_00003ldh
Title : A comparison of the structures of apo dogfish m4 lactate dehydrogenase and its ternary complexes
Authors : White, J.L.; Hackert, M.L.; Buehner, M.; Adams, M.J.; Ford, G.C.; Lentzjunior, P.J.; Smiley, I.E.; Steindel, S.J.; Rossmann, M.G.
Deposited on : 1974-06-06
Resolution : 3.00 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.0
Mogul	:	2022.3.0, CSD as543be (2022)
Xtrriage (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

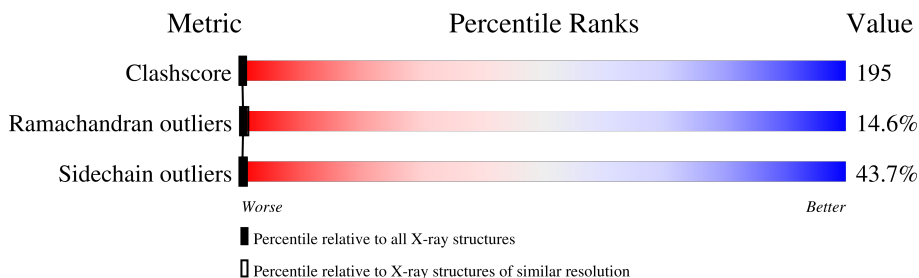
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.00 Å.

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



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

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

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	330	

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	332	-	-	X	-
3	PYR	A	333	-	X	X	-

2 Entry composition [i](#)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2604 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 LACTATE DEHYDROGENASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	330	Total	C	N	O	S	0	0	0
			2554	1624	437	474	19			

- Molecule 2 is NICOTINAMIDE-ADENINE-DINUCLEOTIDE (CCD ID: NAD) (formula: $C_{21}H_{27}N_7O_{14}P_2$).



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

- Molecule 3 is PYRUVIC ACID (CCD ID: PYR) (formula: $C_3H_4O_3$).



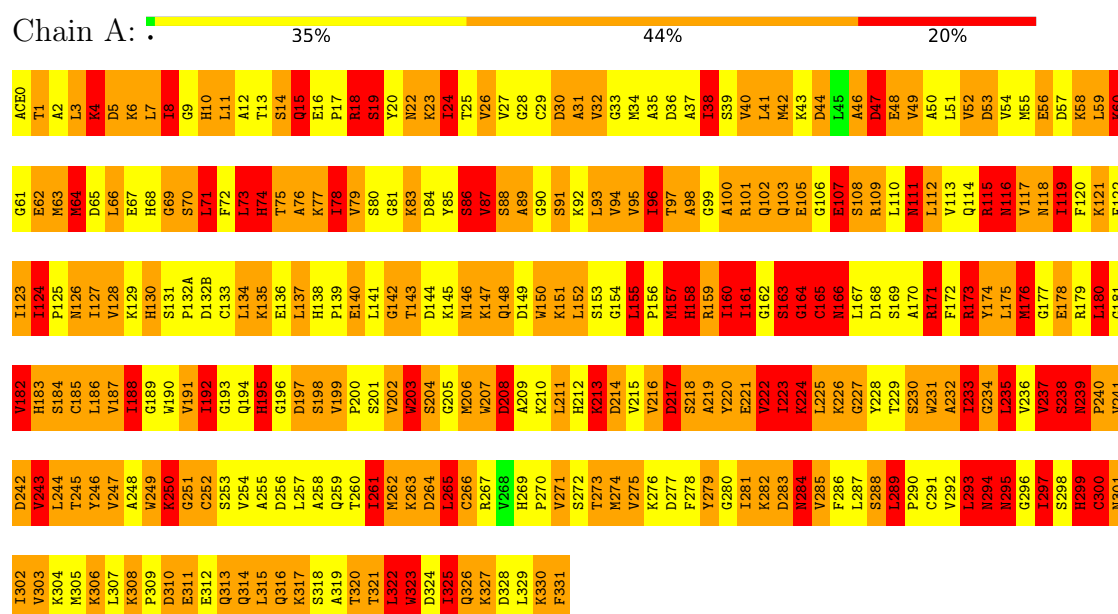
Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
3	A	1	Total	C	O	0	0
			6	3	3		

3 Residue-property plots

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

Note EDS was not executed.

• Molecule 1: LACTATE DEHYDROGENASE



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)	(Not available) – 3.00	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	(Not available) ((Not available)-3.00)	Depositor
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
Refinement program	unknown	Depositor
R, R_{free}	(Not available) , (Not available)	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	2604	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	0.0	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: PYR, NAD, ACE

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	1.25	31/2600 (1.2%)	2.00	130/3515 (3.7%)

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

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	4

All (31) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	231	TRP	NE1-CE2	-8.63	1.27	1.37
1	A	150	TRP	NE1-CE2	-8.61	1.27	1.37
1	A	249	TRP	NE1-CE2	-8.59	1.27	1.37
1	A	323	TRP	NE1-CE2	-8.56	1.28	1.37
1	A	203	TRP	NE1-CE2	-8.56	1.28	1.37
1	A	190	TRP	NE1-CE2	-8.54	1.28	1.37
1	A	207	TRP	NE1-CE2	-8.53	1.28	1.37
1	A	295	ASN	CG-OD1	8.38	1.39	1.23
1	A	301	ASN	CG-OD1	8.36	1.39	1.23
1	A	111	ASN	CG-OD1	8.34	1.39	1.23
1	A	146	ASN	CG-OD1	8.34	1.39	1.23
1	A	166	ASN	CG-OD1	8.33	1.39	1.23
1	A	294	ASN	CG-OD1	8.33	1.39	1.23
1	A	284	ASN	CG-OD1	8.32	1.39	1.23
1	A	126	ASN	CG-OD1	8.31	1.39	1.23
1	A	116	ASN	CG-OD1	8.31	1.39	1.23
1	A	239	ASN	CG-OD1	8.31	1.39	1.23
1	A	22	ASN	CG-OD1	8.30	1.39	1.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	118	ASN	CG-OD1	8.30	1.39	1.23
1	A	146	ASN	CG-ND2	-5.23	1.22	1.33
1	A	116	ASN	CG-ND2	-5.22	1.22	1.33
1	A	301	ASN	CG-ND2	-5.22	1.22	1.33
1	A	118	ASN	CG-ND2	-5.22	1.22	1.33
1	A	295	ASN	CG-ND2	-5.22	1.22	1.33
1	A	111	ASN	CG-ND2	-5.21	1.22	1.33
1	A	22	ASN	CG-ND2	-5.21	1.22	1.33
1	A	166	ASN	CG-ND2	-5.20	1.22	1.33
1	A	126	ASN	CG-ND2	-5.19	1.22	1.33
1	A	239	ASN	CG-ND2	-5.19	1.22	1.33
1	A	294	ASN	CG-ND2	-5.19	1.22	1.33
1	A	284	ASN	CG-ND2	-5.18	1.22	1.33

All (130) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	243	VAL	N-CA-C	-24.52	84.61	112.80
1	A	220	TYR	N-CA-C	18.75	150.74	110.80
1	A	250	LYS	N-CA-C	-18.42	90.91	113.20
1	A	291	CYS	N-CA-C	-14.40	87.18	109.07
1	A	227	GLY	N-CA-C	-13.27	95.62	113.27
1	A	234	GLY	N-CA-C	-12.29	84.06	113.18
1	A	325	ILE	N-CA-C	12.03	124.34	110.62
1	A	265	LEU	N-CA-C	11.94	127.85	113.28
1	A	190	TRP	N-CA-C	11.36	127.36	109.07
1	A	182	VAL	N-CA-C	-11.34	85.75	109.34
1	A	220	TYR	CB-CA-C	-11.23	88.06	110.42
1	A	316	GLN	N-CA-C	-10.95	99.04	110.97
1	A	23	LYS	N-CA-C	10.84	127.05	109.59
1	A	155	LEU	N-CA-C	-10.84	96.50	109.93
1	A	175	LEU	N-CA-C	-10.42	98.72	111.33
1	A	5	ASP	N-CA-C	10.41	123.61	111.11
1	A	239	ASN	N-CA-C	10.31	132.61	109.81
1	A	71	LEU	N-CA-C	10.13	125.17	113.01
1	A	302	ILE	N-CA-C	-10.00	94.11	108.11
1	A	174	TYR	N-CA-C	9.79	121.54	111.07
1	A	135	LYS	N-CA-C	9.70	124.54	108.73
1	A	111	ASN	N-CA-C	-9.70	99.47	111.11
1	A	165	CYS	N-CA-C	9.65	124.31	113.21
1	A	293	LEU	N-CA-C	9.20	124.58	109.95
1	A	325	ILE	CB-CA-C	-9.12	100.09	112.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	222	VAL	N-CA-C	-8.96	90.70	109.34
1	A	86	SER	N-CA-C	-8.86	101.38	112.72
1	A	4	LYS	N-CA-C	-8.68	100.70	111.11
1	A	66	LEU	N-CA-C	-8.48	100.68	111.02
1	A	116	ASN	N-CA-C	8.45	124.21	112.04
1	A	151	LYS	N-CA-C	-8.43	101.00	111.11
1	A	226	LYS	N-CA-C	8.36	123.13	111.92
1	A	183	HIS	N-CA-C	8.13	121.77	109.41
1	A	15	GLN	N-CA-C	-8.05	93.81	107.99
1	A	295	ASN	N-CA-C	7.93	127.70	110.80
1	A	8	ILE	N-CA-C	7.92	119.32	106.72
1	A	164	GLY	N-CA-C	7.88	131.85	113.18
1	A	53	ASP	N-CA-C	7.43	119.34	108.86
1	A	310	ASP	N-CA-C	-7.36	102.04	111.02
1	A	249	TRP	N-CA-C	7.32	126.39	110.80
1	A	91	SER	N-CA-C	7.25	121.65	109.76
1	A	109	ARG	N-CA-C	-7.22	103.41	111.71
1	A	180	LEU	N-CA-C	7.19	120.18	111.40
1	A	69	GLY	N-CA-C	-7.17	104.09	112.83
1	A	47	ASP	N-CA-C	-7.16	103.40	111.07
1	A	226	LYS	CB-CA-C	-7.16	101.89	111.63
1	A	124	ILE	N-CA-C	7.13	124.28	108.88
1	A	14	SER	N-CA-C	7.11	125.93	110.80
1	A	235	LEU	N-CA-C	-7.09	103.49	111.14
1	A	195	HIS	N-CA-C	7.07	125.86	110.80
1	A	8	ILE	CB-CA-C	-6.92	102.94	111.32
1	A	73	LEU	N-CA-C	-6.88	99.32	108.19
1	A	74	HIS	N-CA-C	6.83	119.49	107.61
1	A	137	LEU	N-CA-C	6.74	120.28	107.75
1	A	300	CYS	N-CA-C	6.62	124.90	110.80
1	A	171	ARG	N-CA-C	-6.57	104.12	111.28
1	A	7	LEU	N-CA-C	-6.53	103.66	111.69
1	A	127	ILE	N-CA-C	6.48	119.15	111.05
1	A	88	SER	N-CA-C	6.46	118.32	111.28
1	A	303	VAL	N-CA-C	6.37	117.97	108.54
1	A	182	VAL	CB-CA-C	6.30	121.62	111.29
1	A	208	ASP	N-CA-C	-6.29	99.11	108.99
1	A	231	TRP	N-CA-C	6.26	118.66	111.02
1	A	22	ASN	N-CA-C	6.24	118.35	108.67
1	A	176	MET	N-CA-C	6.21	121.61	111.37
1	A	124	ILE	CB-CA-C	-6.19	100.10	111.36
1	A	239	ASN	CB-CA-C	-6.15	98.05	110.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	26	VAL	N-CA-C	6.13	116.70	108.11
1	A	206	MET	N-CA-C	-6.07	98.51	108.76
1	A	46	ALA	N-CA-C	6.01	119.17	110.28
1	A	247	VAL	N-CA-C	-5.91	99.84	108.11
1	A	127	ILE	CB-CA-C	-5.90	103.02	112.16
1	A	244	LEU	N-CA-C	-5.86	104.82	113.61
1	A	322	LEU	N-CA-C	5.75	117.24	110.97
1	A	266	CYS	N-CA-C	5.72	117.61	110.91
1	A	87	VAL	N-CA-C	5.71	121.22	109.34
1	A	126	ASN	CB-CG-ND2	5.68	124.92	116.40
1	A	294	ASN	CB-CG-ND2	5.68	124.91	116.40
1	A	295	ASN	CB-CG-ND2	5.68	124.91	116.40
1	A	301	ASN	CB-CG-ND2	5.68	124.92	116.40
1	A	213	LYS	N-CA-C	5.67	122.88	110.80
1	A	232	ALA	N-CA-C	5.67	120.73	111.37
1	A	146	ASN	CB-CG-ND2	5.66	124.89	116.40
1	A	166	ASN	CB-CG-ND2	5.65	124.88	116.40
1	A	111	ASN	CB-CG-ND2	5.65	124.87	116.40
1	A	135	LYS	CB-CA-C	-5.65	101.04	110.19
1	A	239	ASN	CB-CG-ND2	5.65	124.87	116.40
1	A	284	ASN	CB-CG-ND2	5.64	124.86	116.40
1	A	118	ASN	CB-CG-ND2	5.64	124.86	116.40
1	A	116	ASN	CB-CG-ND2	5.63	124.85	116.40
1	A	22	ASN	CB-CG-ND2	5.62	124.82	116.40
1	A	294	ASN	N-CA-C	5.62	115.96	108.38
1	A	77	LYS	N-CA-C	5.59	118.58	109.24
1	A	23	LYS	CB-CA-C	-5.47	99.53	109.38
1	A	289	LEU	N-CA-C	5.45	115.14	108.11
1	A	60	LYS	N-CA-C	-5.39	99.32	110.80
1	A	279	TYR	N-CA-C	-5.33	99.44	110.80
1	A	79	VAL	N-CA-C	5.31	116.96	108.89
1	A	64	MET	N-CA-C	5.31	116.92	111.03
1	A	107	GLU	N-CA-C	5.23	121.95	110.80
1	A	160	ILE	CA-CB-CG2	-5.17	101.71	110.50
1	A	78	ILE	CA-CB-CG2	-5.16	101.72	110.50
1	A	119	ILE	CA-CB-CG2	-5.16	101.72	110.50
1	A	302	ILE	CA-CB-CG2	-5.16	101.72	110.50
1	A	222	VAL	CB-CA-C	5.16	119.76	111.29
1	A	8	ILE	CA-CB-CG2	-5.15	101.74	110.50
1	A	123	ILE	CA-CB-CG2	-5.15	101.74	110.50
1	A	188	ILE	CA-CB-CG2	-5.15	101.75	110.50
1	A	261	ILE	CA-CB-CG2	-5.15	101.74	110.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	223	ILE	CA-CB-CG2	-5.14	101.75	110.50
1	A	24	ILE	CA-CB-CG2	-5.14	101.76	110.50
1	A	161	ILE	CA-CB-CG2	-5.14	101.76	110.50
1	A	192	ILE	CA-CB-CG2	-5.14	101.76	110.50
1	A	96	ILE	CA-CB-CG2	-5.13	101.77	110.50
1	A	38	ILE	CA-CB-CG2	-5.13	101.78	110.50
1	A	281	ILE	CA-CB-CG2	-5.13	101.78	110.50
1	A	297	ILE	CA-CB-CG2	-5.13	101.78	110.50
1	A	325	ILE	CA-CB-CG2	-5.13	101.78	110.50
1	A	119	ILE	CB-CA-C	-5.13	105.30	112.02
1	A	52	VAL	N-CA-C	5.12	119.99	109.34
1	A	124	ILE	CA-CB-CG2	-5.12	101.80	110.50
1	A	127	ILE	CA-CB-CG2	-5.11	101.81	110.50
1	A	233	ILE	CA-CB-CG2	-5.11	101.81	110.50
1	A	158	HIS	N-CA-C	5.10	121.65	110.80
1	A	219	ALA	N-CA-C	5.09	118.46	109.80
1	A	123	ILE	N-CA-C	-5.09	104.82	110.62
1	A	155	LEU	CB-CA-C	5.08	116.73	109.26
1	A	102	GLN	N-CA-C	5.06	117.37	110.24
1	A	165	CYS	CB-CA-C	-5.03	101.81	110.72
1	A	217	ASP	N-CA-C	-5.03	106.84	113.12

There are no chirality outliers.

All (4) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	115	ARG	Sidechain
1	A	159	ARG	Sidechain
1	A	171	ARG	Sidechain
1	A	173	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	2554	0	2601	1016	1107
2	A	44	0	25	52	22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
3	A	6	0	0	10	0
All	All	2604	0	2626	1021	1107

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 195.

All (1021) 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:123:ILE:HG22	1:A:127:ILE:CD1	1.25	1.57
1:A:281:ILE:HG21	1:A:285:VAL:CG2	1.34	1.53
1:A:289:LEU:CD2	1:A:290:PRO:HD2	1.35	1.52
1:A:123:ILE:CG2	1:A:127:ILE:HD11	1.39	1.52
1:A:199:VAL:HG13	1:A:231:TRP:CZ2	1.44	1.50
1:A:137:LEU:C	1:A:139:PRO:HD2	1.35	1.46
1:A:289:LEU:HD23	1:A:290:PRO:CD	1.43	1.46
2:A:332:NAD:C4N	3:A:333:PYR:CB	1.94	1.43
1:A:195:HIS:CE1	3:A:333:PYR:O	1.79	1.36
1:A:281:ILE:CG2	1:A:285:VAL:HG21	1.55	1.34
1:A:85:TYR:O	1:A:130:HIS:CE1	1.80	1.34
1:A:32:VAL:HG13	1:A:138:HIS:ND1	1.39	1.33
1:A:92:LYS:NZ	1:A:295:ASN:HD22	1.25	1.33
1:A:275:VAL:CG2	1:A:285:VAL:HG23	1.59	1.32
1:A:160:ILE:HD12	1:A:160:ILE:O	1.28	1.32
1:A:195:HIS:HE1	3:A:333:PYR:O	0.99	1.31
1:A:28:GLY:HA2	2:A:332:NAD:O2B	1.26	1.31
1:A:166:ASN:ND2	1:A:253:SER:HB3	1.46	1.30
1:A:120:PHE:HA	1:A:123:ILE:CD1	1.59	1.30
1:A:193:GLY:O	1:A:288:SER:CB	1.78	1.30
1:A:92:LYS:HZ1	1:A:295:ASN:ND2	1.31	1.29
1:A:201:SER:O	1:A:311:GLU:CD	1.75	1.29
1:A:214:ASP:OD1	1:A:220:TYR:CE2	1.83	1.29
1:A:199:VAL:CG1	1:A:231:TRP:CZ2	2.14	1.29
1:A:266:CYS:SG	1:A:299:HIS:CE1	2.25	1.29
1:A:110:LEU:HD22	1:A:325:ILE:CD1	1.60	1.28
1:A:96:ILE:O	1:A:139:PRO:HD3	1.30	1.28
1:A:28:GLY:CA	2:A:332:NAD:O2B	1.82	1.27
1:A:166:ASN:ND2	1:A:253:SER:CB	2.00	1.25
1:A:192:ILE:HD13	1:A:192:ILE:O	1.09	1.25
1:A:140:GLU:OE2	2:A:332:NAD:H2D	1.22	1.23
1:A:203:TRP:O	1:A:206:MET:HG3	1.39	1.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:264:ASP:OD1	1:A:295:ASN:N	1.69	1.23
1:A:30:ASP:OD1	2:A:332:NAD:H4B	1.07	1.22
1:A:165:CYS:HB2	1:A:288:SER:OG	1.37	1.22
1:A:281:ILE:CG2	1:A:285:VAL:CG2	2.13	1.22
1:A:79:VAL:HG11	1:A:87:VAL:CG1	1.68	1.21
1:A:32:VAL:HG13	1:A:138:HIS:CE1	1.75	1.21
1:A:102:GLN:OE1	1:A:109:ARG:CB	1.89	1.21
1:A:285:VAL:HG13	1:A:323:TRP:CD1	1.74	1.21
1:A:275:VAL:HG23	1:A:285:VAL:CG2	1.71	1.20
1:A:160:ILE:C	1:A:161:ILE:HD13	1.66	1.20
1:A:120:PHE:CD1	1:A:145:LYS:CE	2.25	1.20
1:A:85:TYR:O	1:A:130:HIS:ND1	1.72	1.19
1:A:329:LEU:HD13	1:A:331:PHE:H	1.07	1.19
1:A:79:VAL:CG1	1:A:87:VAL:HG11	1.70	1.19
1:A:161:ILE:CG2	1:A:271:VAL:CG2	2.22	1.18
1:A:199:VAL:CG1	1:A:231:TRP:CH2	2.26	1.18
1:A:138:HIS:O	2:A:332:NAD:C2N	1.90	1.18
1:A:281:ILE:CG1	1:A:319:ALA:CB	2.22	1.18
1:A:199:VAL:O	1:A:231:TRP:CZ2	1.97	1.17
1:A:53:ASP:HB2	1:A:59:LEU:HD11	1.18	1.17
1:A:92:LYS:NZ	1:A:295:ASN:ND2	1.90	1.17
1:A:120:PHE:CA	1:A:123:ILE:HD12	1.74	1.17
1:A:110:LEU:HD22	1:A:325:ILE:HD12	1.26	1.16
1:A:235:LEU:CD2	1:A:235:LEU:H	1.59	1.16
1:A:329:LEU:CD1	1:A:331:PHE:H	1.59	1.15
1:A:285:VAL:CG1	1:A:323:TRP:CD1	2.29	1.14
1:A:69:GLY:O	1:A:71:LEU:N	1.79	1.14
1:A:329:LEU:HD13	1:A:331:PHE:N	1.62	1.14
1:A:102:GLN:OE1	1:A:109:ARG:HB2	1.39	1.14
1:A:233:ILE:HG13	1:A:233:ILE:O	1.45	1.13
1:A:67:GLU:O	1:A:70:SER:CB	1.96	1.13
1:A:167:LEU:HD21	1:A:195:HIS:HE1	1.06	1.11
1:A:131:SER:CB	1:A:133:CYS:SG	2.39	1.11
1:A:199:VAL:HG13	1:A:231:TRP:CH2	1.86	1.11
1:A:233:ILE:HA	1:A:236:VAL:HB	1.11	1.10
1:A:285:VAL:CG1	1:A:323:TRP:HD1	1.61	1.10
1:A:193:GLY:O	1:A:288:SER:HB2	1.46	1.10
1:A:199:VAL:HG22	1:A:231:TRP:CZ2	1.86	1.10
1:A:122:PHE:O	1:A:125:PRO:HD2	1.50	1.10
1:A:131:SER:HB2	1:A:133:CYS:SG	1.91	1.09
1:A:199:VAL:CG2	1:A:231:TRP:CH2	2.35	1.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:194:GLN:HA	1:A:288:SER:HB2	1.34	1.09
1:A:191:VAL:HG21	1:A:231:TRP:CZ3	1.86	1.09
1:A:281:ILE:HG12	1:A:319:ALA:HB2	1.34	1.09
1:A:32:VAL:CG1	1:A:97:THR:HG21	1.83	1.09
1:A:32:VAL:HG11	1:A:97:THR:HG21	1.31	1.09
1:A:138:HIS:N	1:A:139:PRO:CD	2.13	1.08
1:A:281:ILE:HG12	1:A:319:ALA:CB	1.80	1.08
1:A:32:VAL:HG11	1:A:97:THR:CG2	1.82	1.08
1:A:308:LYS:O	1:A:312:GLU:N	1.85	1.08
1:A:42:MET:HA	1:A:73:LEU:CD2	1.85	1.07
1:A:192:ILE:O	1:A:192:ILE:CD1	2.03	1.07
1:A:97:THR:O	1:A:139:PRO:HB3	1.52	1.07
1:A:137:LEU:C	1:A:139:PRO:CD	2.26	1.06
1:A:239:ASN:HB3	1:A:240:PRO:HD3	1.38	1.06
1:A:28:GLY:CA	2:A:332:NAD:H1B	1.85	1.06
1:A:194:GLN:NE2	1:A:322:LEU:HD23	1.69	1.06
1:A:30:ASP:OD1	2:A:332:NAD:C4B	2.02	1.06
1:A:143:THR:HG21	1:A:194:GLN:HB2	1.10	1.06
1:A:264:ASP:CG	1:A:295:ASN:H	1.64	1.06
1:A:199:VAL:CB	1:A:231:TRP:CZ2	2.39	1.06
1:A:131:SER:OG	1:A:133:CYS:SG	2.15	1.05
1:A:197:ASP:HA	1:A:235:LEU:HB3	1.32	1.05
1:A:266:CYS:SG	1:A:299:HIS:ND1	2.29	1.05
1:A:67:GLU:O	1:A:70:SER:HB2	1.53	1.04
1:A:120:PHE:CD1	1:A:145:LYS:HE3	1.92	1.04
1:A:134:LEU:HD23	1:A:134:LEU:N	1.71	1.04
1:A:199:VAL:CB	1:A:231:TRP:HZ2	1.70	1.04
1:A:161:ILE:HG23	1:A:271:VAL:CG2	1.85	1.04
1:A:206:MET:HB3	1:A:213:LYS:HE2	1.38	1.04
1:A:231:TRP:O	1:A:235:LEU:CD2	2.05	1.04
1:A:171:ARG:CZ	1:A:237:VAL:HG11	1.87	1.03
1:A:199:VAL:CG2	1:A:231:TRP:CZ2	2.42	1.03
1:A:199:VAL:O	1:A:231:TRP:CE2	2.11	1.03
1:A:264:ASP:OD1	1:A:294:ASN:HB2	1.59	1.03
1:A:199:VAL:HG13	1:A:235:LEU:CD1	1.89	1.02
1:A:28:GLY:C	2:A:332:NAD:O2B	2.01	1.02
1:A:166:ASN:HD21	1:A:253:SER:CB	1.66	1.02
1:A:28:GLY:HA2	2:A:332:NAD:C2B	1.88	1.02
1:A:53:ASP:O	1:A:83:LYS:HG2	1.59	1.02
1:A:103:GLN:HE21	1:A:103:GLN:HA	1.15	1.02
1:A:193:GLY:C	1:A:288:SER:HB2	1.84	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:103:GLN:HA	1:A:103:GLN:NE2	1.66	1.02
1:A:165:CYS:SG	1:A:168:ASP:OD2	2.18	1.02
1:A:194:GLN:NE2	1:A:322:LEU:CD2	2.23	1.02
2:A:332:NAD:C3N	3:A:333:PYR:CB	2.38	1.02
1:A:138:HIS:N	1:A:139:PRO:HD2	1.68	1.01
1:A:123:ILE:O	1:A:127:ILE:HD12	1.61	1.01
1:A:43:LYS:O	1:A:44:ASP:HB2	1.57	1.01
1:A:65:ASP:O	1:A:68:HIS:CB	2.07	1.01
1:A:161:ILE:CG2	1:A:271:VAL:HG21	1.86	1.01
1:A:167:LEU:HD12	1:A:171:ARG:NH1	1.73	1.01
1:A:272:SER:HA	1:A:287:LEU:O	1.59	1.00
1:A:281:ILE:HG13	1:A:319:ALA:CB	1.89	1.00
1:A:199:VAL:HG13	1:A:235:LEU:HD13	1.44	1.00
1:A:150:TRP:HZ2	1:A:157:MET:SD	1.84	0.99
1:A:253:SER:O	1:A:257:LEU:HG	1.61	0.99
1:A:294:ASN:HD22	1:A:299:HIS:H	1.03	0.99
1:A:31:ALA:HB3	2:A:332:NAD:O2N	1.60	0.99
1:A:160:ILE:HD12	1:A:160:ILE:C	1.84	0.99
1:A:274:MET:HG3	1:A:286:PHE:CE2	1.97	0.98
1:A:120:PHE:HD1	1:A:145:LYS:HZ1	1.06	0.98
1:A:91:SER:O	1:A:133:CYS:HB3	1.63	0.98
1:A:166:ASN:ND2	1:A:253:SER:OG	1.97	0.98
1:A:158:HIS:O	1:A:298:SER:N	1.97	0.98
1:A:160:ILE:C	1:A:161:ILE:CD1	2.37	0.98
1:A:199:VAL:HG22	1:A:231:TRP:CH2	1.98	0.98
1:A:102:GLN:OE1	1:A:109:ARG:CA	2.12	0.97
1:A:143:THR:HG21	1:A:194:GLN:CB	1.93	0.97
1:A:30:ASP:O	1:A:34:MET:HB2	1.64	0.97
1:A:79:VAL:HG11	1:A:87:VAL:HG12	1.42	0.97
1:A:235:LEU:HD22	1:A:235:LEU:N	1.76	0.97
1:A:204:SER:O	1:A:212:HIS:NE2	1.98	0.96
1:A:32:VAL:CG1	1:A:138:HIS:ND1	2.26	0.96
1:A:158:HIS:HD2	1:A:297:ILE:HB	1.30	0.96
1:A:158:HIS:CD2	1:A:297:ILE:HD12	2.00	0.96
1:A:221:GLU:HG2	1:A:228:TYR:HD2	1.28	0.96
1:A:231:TRP:CE2	1:A:235:LEU:HD11	2.00	0.96
1:A:207:TRP:HZ3	1:A:209:ALA:N	1.63	0.96
1:A:264:ASP:CG	1:A:295:ASN:HB2	1.88	0.96
1:A:161:ILE:HG23	1:A:271:VAL:HG21	1.44	0.96
1:A:120:PHE:CD1	1:A:145:LYS:NZ	2.33	0.96
1:A:79:VAL:HG12	1:A:87:VAL:HG11	1.43	0.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:30:ASP:O	1:A:34:MET:CB	2.14	0.95
1:A:120:PHE:HD1	1:A:145:LYS:NZ	1.63	0.95
1:A:194:GLN:HE22	1:A:322:LEU:HD23	1.28	0.95
1:A:173:ARG:HD2	1:A:188:ILE:HA	1.46	0.95
1:A:123:ILE:CG2	1:A:127:ILE:CD1	2.17	0.95
1:A:233:ILE:O	1:A:237:VAL:HG23	1.66	0.95
1:A:281:ILE:HD11	1:A:316:GLN:HA	1.48	0.95
1:A:67:GLU:OE2	1:A:78:ILE:HG12	1.67	0.95
1:A:143:THR:HB	1:A:287:LEU:HA	1.48	0.95
1:A:160:ILE:O	1:A:160:ILE:CD1	2.14	0.95
1:A:270:PRO:O	1:A:271:VAL:HB	1.65	0.95
1:A:192:ILE:HD13	1:A:192:ILE:C	1.92	0.94
1:A:124:ILE:HG21	1:A:152:LEU:HD12	1.48	0.94
1:A:167:LEU:CD2	1:A:195:HIS:HE1	1.79	0.94
1:A:65:ASP:O	1:A:68:HIS:HB3	1.67	0.94
2:A:332:NAD:H4N	3:A:333:PYR:CB	1.97	0.94
1:A:202:VAL:O	1:A:202:VAL:HG22	1.68	0.93
1:A:102:GLN:OE1	1:A:109:ARG:HA	1.68	0.93
1:A:199:VAL:CG1	1:A:235:LEU:HD13	1.98	0.93
1:A:195:HIS:NE2	3:A:333:PYR:CB	2.31	0.93
1:A:279:TYR:HE1	1:A:315:LEU:HD23	1.31	0.93
1:A:193:GLY:C	1:A:288:SER:CB	2.40	0.93
1:A:329:LEU:HD22	1:A:331:PHE:HD1	1.30	0.93
1:A:32:VAL:HG23	2:A:332:NAD:H51N	1.50	0.93
1:A:131:SER:O	1:A:133:CYS:SG	2.27	0.93
1:A:235:LEU:CD2	1:A:235:LEU:N	2.27	0.92
1:A:134:LEU:HD23	1:A:134:LEU:H	1.29	0.92
1:A:137:LEU:CA	1:A:139:PRO:HD2	1.99	0.92
1:A:296:GLY:C	1:A:297:ILE:HG22	1.94	0.92
1:A:309:PRO:HA	1:A:312:GLU:HB3	1.51	0.92
1:A:37:ALA:O	1:A:41:LEU:HB2	1.68	0.92
1:A:150:TRP:O	1:A:154:GLY:N	2.02	0.92
1:A:198:SER:H	1:A:235:LEU:HD12	1.33	0.92
1:A:239:ASN:HB3	1:A:240:PRO:CD	1.94	0.92
1:A:274:MET:HG3	1:A:286:PHE:HE2	1.34	0.91
1:A:273:THR:O	1:A:286:PHE:HA	1.69	0.91
1:A:329:LEU:CD2	1:A:331:PHE:CD1	2.53	0.91
1:A:34:MET:HE3	1:A:34:MET:HA	1.49	0.91
1:A:172:PHE:O	1:A:176:MET:HE3	1.70	0.91
1:A:235:LEU:H	1:A:235:LEU:HD23	1.34	0.91
1:A:140:GLU:OE2	2:A:332:NAD:C2D	2.15	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:207:TRP:CE3	1:A:208:ASP:C	2.49	0.91
1:A:235:LEU:H	1:A:235:LEU:HD22	1.34	0.91
1:A:29:CYS:SG	1:A:51:LEU:HD22	2.11	0.90
1:A:166:ASN:HB2	1:A:257:LEU:HD21	1.49	0.90
1:A:197:ASP:O	1:A:198:SER:HB3	1.72	0.90
1:A:147:LYS:HE3	1:A:326:GLN:NE2	1.87	0.90
1:A:328:ASP:HB3	1:A:330:LYS:HE2	1.54	0.90
1:A:123:ILE:HG22	1:A:127:ILE:HD12	1.48	0.90
1:A:56:GLU:OE1	1:A:83:LYS:NZ	2.03	0.90
1:A:193:GLY:O	1:A:288:SER:HB3	1.71	0.90
1:A:329:LEU:CD2	1:A:331:PHE:HD1	1.84	0.89
1:A:138:HIS:O	2:A:332:NAD:H2N	1.70	0.89
1:A:232:ALA:C	1:A:235:LEU:HD23	1.97	0.89
1:A:294:ASN:ND2	1:A:299:HIS:H	1.70	0.89
1:A:173:ARG:O	1:A:176:MET:HB2	1.71	0.89
1:A:28:GLY:HA2	2:A:332:NAD:C1B	2.02	0.89
1:A:32:VAL:CG2	2:A:332:NAD:H51N	2.03	0.89
1:A:53:ASP:HB2	1:A:59:LEU:CD1	2.01	0.88
1:A:92:LYS:O	1:A:134:LEU:CD2	2.22	0.88
1:A:161:ILE:HD13	1:A:161:ILE:N	1.84	0.88
1:A:281:ILE:HG21	1:A:285:VAL:HG21	0.89	0.88
1:A:256:ASP:OD2	1:A:259:GLN:OE1	1.92	0.88
1:A:109:ARG:O	1:A:112:LEU:HG	1.73	0.88
1:A:67:GLU:OE2	1:A:78:ILE:CG1	2.21	0.88
1:A:281:ILE:HG21	1:A:285:VAL:HG22	1.56	0.88
1:A:32:VAL:CG1	1:A:138:HIS:CE1	2.57	0.88
1:A:203:TRP:HB2	1:A:220:TYR:CE1	2.08	0.88
1:A:94:VAL:CG2	1:A:133:CYS:HB2	2.03	0.87
1:A:148:GLN:O	1:A:152:LEU:HB2	1.73	0.87
1:A:150:TRP:CZ2	1:A:157:MET:SD	2.66	0.87
1:A:110:LEU:HD22	1:A:325:ILE:HD11	1.56	0.87
1:A:16:GLU:HB3	1:A:17:PRO:HD2	1.54	0.87
1:A:63:MET:HG3	1:A:64:MET:N	1.87	0.87
1:A:281:ILE:CG2	1:A:285:VAL:HG22	2.04	0.87
1:A:28:GLY:HA2	2:A:332:NAD:H1B	1.52	0.87
1:A:231:TRP:CZ2	1:A:235:LEU:HD11	2.09	0.86
1:A:290:PRO:O	1:A:302:ILE:HG23	1.75	0.86
1:A:201:SER:O	1:A:311:GLU:CG	2.22	0.86
1:A:161:ILE:CG2	1:A:271:VAL:HG22	2.04	0.86
1:A:207:TRP:CZ3	1:A:209:ALA:N	2.44	0.86
1:A:259:GLN:O	1:A:263:LYS:HG2	1.75	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:32:VAL:CG1	1:A:138:HIS:CG	2.59	0.86
1:A:329:LEU:HD11	1:A:331:PHE:HB2	1.55	0.85
1:A:35:ALA:O	1:A:38:ILE:HG22	1.76	0.85
1:A:13:THR:HG23	1:A:14:SER:H	1.40	0.85
1:A:294:ASN:HD22	1:A:299:HIS:N	1.73	0.85
1:A:91:SER:O	1:A:133:CYS:CB	2.24	0.85
1:A:167:LEU:HD12	1:A:171:ARG:CZ	2.07	0.85
1:A:95:VAL:HG23	1:A:136:GLU:O	1.75	0.85
1:A:42:MET:HA	1:A:73:LEU:HD22	1.58	0.85
1:A:69:GLY:O	1:A:70:SER:C	2.19	0.85
1:A:110:LEU:CD2	1:A:325:ILE:CD1	2.52	0.85
1:A:162:GLY:O	1:A:163:SER:HB2	1.74	0.85
1:A:124:ILE:HD13	1:A:124:ILE:H	1.42	0.85
1:A:194:GLN:CA	1:A:288:SER:HB2	2.07	0.85
1:A:199:VAL:O	1:A:231:TRP:NE1	2.09	0.84
1:A:167:LEU:CD1	1:A:171:ARG:NH1	2.39	0.84
1:A:158:HIS:CD2	1:A:297:ILE:HB	2.13	0.84
1:A:193:GLY:O	1:A:288:SER:CA	2.24	0.84
1:A:28:GLY:HA3	2:A:332:NAD:H1B	1.58	0.84
1:A:92:LYS:O	1:A:134:LEU:HD23	1.78	0.84
1:A:135:LYS:HD2	1:A:135:LYS:N	1.91	0.84
1:A:119:ILE:HG12	1:A:120:PHE:N	1.90	0.84
1:A:67:GLU:HG3	1:A:78:ILE:HG12	1.58	0.84
1:A:165:CYS:CB	1:A:288:SER:OG	2.25	0.83
1:A:167:LEU:HD21	1:A:195:HIS:CE1	1.89	0.83
1:A:231:TRP:O	1:A:235:LEU:HD23	1.76	0.83
1:A:0:ACE:O	1:A:1:THR:CB	2.26	0.83
1:A:166:ASN:ND2	1:A:167:LEU:N	2.26	0.83
1:A:281:ILE:HG13	1:A:319:ALA:HB3	1.58	0.83
1:A:112:LEU:O	1:A:116:ASN:HB2	1.78	0.83
1:A:194:GLN:HE21	1:A:322:LEU:CD2	1.90	0.83
1:A:138:HIS:O	1:A:138:HIS:HD2	1.61	0.83
1:A:281:ILE:CD1	1:A:316:GLN:HA	2.08	0.82
1:A:138:HIS:NE2	2:A:332:NAD:C5N	2.42	0.82
1:A:207:TRP:HE3	1:A:208:ASP:N	1.76	0.82
1:A:199:VAL:HG13	1:A:231:TRP:HZ2	1.38	0.82
1:A:326:GLN:O	1:A:329:LEU:N	2.13	0.82
1:A:4:LYS:O	1:A:8:ILE:HG13	1.80	0.82
1:A:42:MET:HA	1:A:73:LEU:HD23	1.59	0.82
1:A:28:GLY:CA	2:A:332:NAD:C1B	2.57	0.82
1:A:202:VAL:HA	1:A:311:GLU:HG2	1.59	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:283:ASP:O	1:A:284:ASN:OD1	1.98	0.82
1:A:97:THR:O	1:A:98:ALA:HB3	1.80	0.82
1:A:120:PHE:HA	1:A:123:ILE:HD12	0.85	0.82
1:A:207:TRP:CE3	1:A:208:ASP:N	2.48	0.82
1:A:297:ILE:HD11	1:A:300:CYS:SG	2.19	0.82
1:A:161:ILE:HG23	1:A:271:VAL:HG22	1.61	0.81
1:A:201:SER:O	1:A:311:GLU:OE1	1.96	0.81
1:A:138:HIS:NE2	2:A:332:NAD:C6N	2.44	0.81
1:A:166:ASN:CG	1:A:253:SER:HB3	2.05	0.81
1:A:103:GLN:HE21	1:A:103:GLN:CA	1.92	0.81
1:A:63:MET:O	1:A:67:GLU:HB2	1.81	0.80
1:A:152:LEU:HD23	1:A:331:PHE:HE2	1.46	0.80
1:A:199:VAL:CA	1:A:231:TRP:HZ2	1.93	0.80
1:A:199:VAL:CG1	1:A:231:TRP:HZ2	1.81	0.80
1:A:279:TYR:HE1	1:A:315:LEU:CD2	1.95	0.80
1:A:217:ASP:O	1:A:218:SER:HB3	1.82	0.80
1:A:221:GLU:CG	1:A:228:TYR:HD2	1.95	0.80
1:A:279:TYR:CE1	1:A:315:LEU:HD23	2.17	0.80
1:A:287:LEU:HD12	1:A:288:SER:N	1.96	0.80
1:A:329:LEU:HD21	1:A:331:PHE:HB2	1.63	0.80
1:A:53:ASP:CB	1:A:59:LEU:HD11	2.09	0.80
1:A:32:VAL:HG13	1:A:138:HIS:CG	2.14	0.80
1:A:111:ASN:O	1:A:113:VAL:N	2.14	0.80
1:A:199:VAL:HG11	1:A:231:TRP:CH2	2.15	0.80
1:A:137:LEU:O	1:A:163:SER:HB2	1.82	0.80
1:A:242:ASP:OD2	1:A:246:TYR:HA	1.81	0.80
1:A:221:GLU:HG2	1:A:228:TYR:CD2	2.17	0.79
1:A:121:LYS:O	1:A:124:ILE:HG12	1.81	0.79
1:A:294:ASN:ND2	1:A:299:HIS:N	2.30	0.79
1:A:200:PRO:HB3	1:A:314:GLN:HB3	1.64	0.79
1:A:158:HIS:HB2	1:A:297:ILE:HG13	1.62	0.79
1:A:214:ASP:O	1:A:218:SER:N	2.11	0.79
1:A:329:LEU:HD21	1:A:331:PHE:CD1	2.18	0.79
1:A:71:LEU:HD12	1:A:71:LEU:O	1.83	0.79
1:A:123:ILE:HG22	1:A:127:ILE:HD11	0.79	0.79
1:A:164:GLY:O	1:A:195:HIS:ND1	2.15	0.79
1:A:207:TRP:HE3	1:A:208:ASP:C	1.90	0.79
1:A:281:ILE:CG1	1:A:319:ALA:HB1	2.13	0.79
1:A:30:ASP:O	1:A:34:MET:N	2.15	0.79
1:A:160:ILE:HD11	1:A:286:PHE:HE1	1.47	0.79
1:A:275:VAL:HG23	1:A:285:VAL:HG23	0.84	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:24:ILE:HD13	1:A:40:VAL:HG11	1.64	0.78
1:A:213:LYS:HZ3	1:A:213:LYS:HB2	1.48	0.78
1:A:285:VAL:HG12	1:A:323:TRP:CD1	2.18	0.78
1:A:329:LEU:CD1	1:A:331:PHE:HB2	2.13	0.78
1:A:109:ARG:O	1:A:112:LEU:CG	2.31	0.78
1:A:217:ASP:O	1:A:218:SER:CB	2.31	0.78
1:A:197:ASP:O	1:A:198:SER:CB	2.32	0.78
1:A:214:ASP:CG	1:A:220:TYR:CE2	2.61	0.78
1:A:112:LEU:CD1	1:A:140:GLU:HG3	2.14	0.78
1:A:11:LEU:HB2	1:A:13:THR:HG22	1.66	0.78
1:A:124:ILE:HD13	1:A:124:ILE:N	1.99	0.77
1:A:281:ILE:CG1	1:A:319:ALA:HB2	2.03	0.77
1:A:97:THR:O	1:A:98:ALA:CB	2.32	0.77
1:A:120:PHE:CE1	1:A:145:LYS:CE	2.68	0.77
1:A:256:ASP:O	1:A:259:GLN:CB	2.33	0.77
1:A:263:LYS:HG3	1:A:265:LEU:CD1	2.14	0.77
1:A:78:ILE:O	1:A:78:ILE:HG13	1.83	0.77
1:A:146:ASN:OD1	1:A:272:SER:OG	2.03	0.77
1:A:166:ASN:CG	1:A:167:LEU:N	2.42	0.77
1:A:199:VAL:CG1	1:A:235:LEU:CD1	2.58	0.77
1:A:150:TRP:CD1	1:A:160:ILE:HG12	2.18	0.77
1:A:160:ILE:C	1:A:160:ILE:CD1	2.56	0.77
1:A:165:CYS:HB2	1:A:288:SER:HG	1.47	0.77
1:A:203:TRP:CB	1:A:220:TYR:HE1	1.98	0.77
1:A:232:ALA:CA	1:A:235:LEU:HD23	2.15	0.77
1:A:181:GLY:O	1:A:182:VAL:CG2	2.32	0.77
1:A:194:GLN:HE21	1:A:322:LEU:HD21	1.50	0.76
1:A:31:ALA:CB	2:A:332:NAD:O2N	2.32	0.76
1:A:34:MET:HA	1:A:34:MET:CE	2.11	0.76
1:A:101:ARG:HB3	2:A:332:NAD:O3D	1.85	0.76
1:A:127:ILE:O	1:A:131:SER:OG	2.03	0.76
1:A:38:ILE:CG2	1:A:39:SER:N	2.47	0.76
1:A:67:GLU:O	1:A:70:SER:HB3	1.84	0.76
1:A:75:THR:O	1:A:76:ALA:HB2	1.83	0.76
1:A:264:ASP:OD1	1:A:294:ASN:CB	2.33	0.76
1:A:298:SER:O	1:A:300:CYS:N	2.18	0.76
1:A:75:THR:O	1:A:76:ALA:CB	2.34	0.75
1:A:194:GLN:O	1:A:195:HIS:CB	2.33	0.75
1:A:2:ALA:HB1	1:A:5:ASP:HB2	1.68	0.75
1:A:244:LEU:O	1:A:245:THR:CB	2.34	0.75
1:A:329:LEU:CD1	1:A:331:PHE:N	2.35	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:143:THR:OG1	1:A:144:ASP:N	2.19	0.75
1:A:279:TYR:CE1	1:A:315:LEU:CD2	2.69	0.75
1:A:24:ILE:HG22	1:A:24:ILE:O	1.85	0.75
1:A:134:LEU:HD12	1:A:261:ILE:HD13	1.69	0.75
1:A:127:ILE:O	1:A:127:ILE:HG22	1.87	0.75
1:A:199:VAL:HG21	1:A:231:TRP:CH2	2.20	0.75
1:A:242:ASP:C	1:A:244:LEU:N	2.39	0.75
1:A:264:ASP:CG	1:A:295:ASN:CB	2.59	0.75
1:A:107:GLU:O	1:A:108:SER:HB2	1.86	0.74
1:A:161:ILE:HG21	1:A:271:VAL:HG21	1.67	0.74
1:A:134:LEU:CD1	1:A:261:ILE:HG21	2.16	0.74
1:A:219:ALA:C	1:A:220:TYR:HD2	1.95	0.74
1:A:213:LYS:O	1:A:214:ASP:C	2.31	0.74
1:A:191:VAL:CG2	1:A:231:TRP:CZ3	2.68	0.74
1:A:122:PHE:O	1:A:125:PRO:CD	2.33	0.74
1:A:166:ASN:CG	1:A:167:LEU:H	1.94	0.74
1:A:211:LEU:HD23	1:A:211:LEU:O	1.86	0.74
1:A:65:ASP:O	1:A:68:HIS:HB2	1.87	0.74
1:A:263:LYS:HG3	1:A:265:LEU:HD11	1.70	0.74
1:A:79:VAL:CG1	1:A:87:VAL:CG1	2.40	0.74
1:A:294:ASN:ND2	1:A:299:HIS:CA	2.50	0.74
1:A:161:ILE:CD1	1:A:161:ILE:N	2.50	0.73
1:A:309:PRO:O	1:A:313:GLN:HG3	1.88	0.73
1:A:123:ILE:HG22	1:A:127:ILE:HD13	1.63	0.73
1:A:194:GLN:O	1:A:195:HIS:HB2	1.86	0.73
1:A:171:ARG:HD2	1:A:237:VAL:HG21	1.69	0.73
1:A:134:LEU:HD11	1:A:261:ILE:CG2	2.18	0.73
1:A:328:ASP:HB3	1:A:330:LYS:CE	2.18	0.73
1:A:134:LEU:N	1:A:134:LEU:CD2	2.45	0.73
1:A:197:ASP:OD2	1:A:197:ASP:N	2.16	0.73
1:A:199:VAL:C	1:A:231:TRP:CZ2	2.67	0.73
1:A:97:THR:HG23	1:A:138:HIS:HB3	1.70	0.73
1:A:283:ASP:C	1:A:284:ASN:OD1	2.32	0.72
1:A:320:THR:HG22	1:A:321:THR:N	2.04	0.72
1:A:94:VAL:HG23	1:A:133:CYS:HB2	1.69	0.72
1:A:172:PHE:C	1:A:176:MET:HE3	2.14	0.72
1:A:138:HIS:O	1:A:138:HIS:CD2	2.42	0.72
1:A:207:TRP:CZ3	1:A:208:ASP:C	2.68	0.72
1:A:52:VAL:HG23	1:A:52:VAL:O	1.88	0.72
1:A:32:VAL:HG11	1:A:138:HIS:CG	2.23	0.72
1:A:166:ASN:CB	1:A:257:LEU:HD21	2.18	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:143:THR:HG23	1:A:194:GLN:O	1.90	0.72
1:A:199:VAL:O	1:A:231:TRP:HZ2	1.72	0.72
1:A:199:VAL:CG2	1:A:231:TRP:HH2	1.99	0.72
1:A:297:ILE:HG13	1:A:298:SER:N	2.03	0.72
1:A:239:ASN:CB	1:A:240:PRO:CD	2.68	0.72
1:A:281:ILE:HG23	1:A:285:VAL:HG21	1.67	0.72
1:A:329:LEU:HD13	1:A:330:LYS:N	2.04	0.72
1:A:329:LEU:HD22	1:A:331:PHE:CD1	2.18	0.72
1:A:18:ARG:O	1:A:19:SER:HB2	1.89	0.72
1:A:98:ALA:HA	2:A:332:NAD:C8A	2.20	0.72
1:A:92:LYS:HZ2	1:A:295:ASN:ND2	1.85	0.71
1:A:281:ILE:HG21	1:A:285:VAL:HG23	1.65	0.71
1:A:329:LEU:CD2	1:A:331:PHE:HB2	2.19	0.71
1:A:231:TRP:CZ2	1:A:235:LEU:CD1	2.73	0.71
1:A:242:ASP:C	1:A:244:LEU:H	1.83	0.71
1:A:281:ILE:H	1:A:281:ILE:HD12	1.55	0.71
1:A:138:HIS:CD2	2:A:332:NAD:C6N	2.73	0.71
1:A:221:GLU:O	1:A:222:VAL:HB	1.91	0.71
1:A:120:PHE:CD1	1:A:145:LYS:HE2	2.25	0.71
1:A:143:THR:CG2	1:A:194:GLN:O	2.38	0.71
1:A:67:GLU:O	1:A:70:SER:N	2.24	0.71
1:A:264:ASP:HB2	1:A:295:ASN:CG	2.15	0.71
1:A:156:PRO:HB2	1:A:158:HIS:HE1	1.55	0.71
1:A:307:LEU:CD1	1:A:315:LEU:HD23	2.21	0.71
1:A:181:GLY:C	1:A:182:VAL:HG23	2.16	0.70
1:A:30:ASP:O	1:A:34:MET:CG	2.39	0.70
1:A:307:LEU:HD11	1:A:315:LEU:HD23	1.71	0.70
1:A:201:SER:O	1:A:311:GLU:HG2	1.89	0.70
1:A:283:ASP:O	1:A:323:TRP:NE1	2.23	0.70
1:A:69:GLY:C	1:A:71:LEU:N	2.50	0.70
1:A:250:LYS:HD2	2:A:332:NAD:H5N	1.73	0.70
1:A:38:ILE:HG22	1:A:39:SER:N	2.07	0.70
1:A:156:PRO:HB2	1:A:158:HIS:CE1	2.26	0.70
1:A:199:VAL:CG1	1:A:231:TRP:HH2	1.98	0.69
1:A:112:LEU:HD13	1:A:140:GLU:CG	2.22	0.69
1:A:120:PHE:CE1	1:A:145:LYS:HE3	2.27	0.69
1:A:43:LYS:NZ	1:A:259:GLN:NE2	2.40	0.69
1:A:161:ILE:HG21	1:A:271:VAL:CG2	2.18	0.69
1:A:187:VAL:HG12	1:A:187:VAL:O	1.91	0.69
1:A:199:VAL:C	1:A:231:TRP:HZ2	2.01	0.69
1:A:157:MET:O	1:A:159:ARG:N	2.26	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:200:PRO:HB2	1:A:311:GLU:OE2	1.93	0.69
1:A:41:LEU:O	1:A:73:LEU:HD22	1.92	0.69
1:A:109:ARG:NE	1:A:140:GLU:OE1	2.25	0.69
1:A:152:LEU:HD23	1:A:331:PHE:CE2	2.28	0.69
1:A:47:ASP:O	1:A:76:ALA:HB3	1.93	0.69
1:A:137:LEU:HB3	1:A:139:PRO:HG2	1.74	0.69
1:A:203:TRP:C	1:A:206:MET:HG3	2.16	0.69
1:A:186:LEU:O	1:A:188:ILE:HG12	1.93	0.69
1:A:24:ILE:HD13	1:A:40:VAL:CG1	2.23	0.68
1:A:138:HIS:HD2	2:A:332:NAD:C2N	2.06	0.68
1:A:183:HIS:O	1:A:185:CYS:N	2.26	0.68
1:A:242:ASP:C	1:A:245:THR:H	2.01	0.68
1:A:214:ASP:OD1	1:A:220:TYR:CD2	2.46	0.68
1:A:260:THR:HA	1:A:265:LEU:HD12	1.74	0.68
1:A:120:PHE:CE1	1:A:145:LYS:HE2	2.29	0.68
1:A:160:ILE:O	1:A:161:ILE:HD12	1.93	0.68
1:A:166:ASN:HA	1:A:270:PRO:HG2	1.74	0.68
1:A:199:VAL:HG11	1:A:231:TRP:HH2	1.58	0.68
1:A:207:TRP:CE3	1:A:208:ASP:CA	2.77	0.68
1:A:112:LEU:CD1	1:A:140:GLU:CG	2.72	0.68
1:A:274:MET:HG3	1:A:286:PHE:CD2	2.28	0.68
1:A:195:HIS:CE1	3:A:333:PYR:C	2.76	0.68
1:A:244:LEU:O	1:A:245:THR:HB	1.93	0.68
1:A:114:GLN:OE1	1:A:330:LYS:HE3	1.93	0.67
1:A:199:VAL:CB	1:A:231:TRP:CH2	2.73	0.67
1:A:2:ALA:HB1	1:A:5:ASP:CB	2.23	0.67
1:A:119:ILE:HG12	1:A:123:ILE:HD11	1.75	0.67
1:A:181:GLY:O	1:A:182:VAL:HG23	1.93	0.67
1:A:326:GLN:O	1:A:328:ASP:N	2.26	0.67
1:A:121:LYS:O	1:A:124:ILE:CG1	2.43	0.67
1:A:162:GLY:O	1:A:163:SER:CB	2.42	0.67
1:A:202:VAL:O	1:A:202:VAL:CG2	2.38	0.67
1:A:203:TRP:O	1:A:206:MET:CG	2.32	0.67
1:A:15:GLN:HG2	1:A:18:ARG:NH2	2.08	0.67
1:A:199:VAL:HG21	1:A:231:TRP:HH2	1.57	0.67
1:A:134:LEU:CD1	1:A:261:ILE:CG2	2.71	0.67
1:A:137:LEU:HB3	1:A:139:PRO:CG	2.25	0.67
1:A:193:GLY:C	1:A:288:SER:HB3	2.14	0.67
1:A:256:ASP:O	1:A:259:GLN:HB2	1.95	0.66
1:A:281:ILE:CG1	1:A:319:ALA:HB3	2.16	0.66
1:A:32:VAL:HG22	1:A:138:HIS:NE2	2.09	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:111:ASN:C	1:A:113:VAL:H	2.04	0.66
1:A:285:VAL:HG13	1:A:323:TRP:HD1	1.23	0.66
1:A:187:VAL:O	1:A:187:VAL:CG1	2.44	0.66
1:A:30:ASP:O	1:A:34:MET:HG2	1.95	0.66
1:A:194:GLN:N	1:A:288:SER:HB2	2.09	0.66
1:A:102:GLN:CD	1:A:109:ARG:HB2	2.18	0.66
1:A:207:TRP:HZ3	1:A:209:ALA:CA	2.08	0.66
1:A:233:ILE:CA	1:A:236:VAL:HB	2.07	0.66
1:A:120:PHE:HB2	1:A:145:LYS:HZ1	1.61	0.66
1:A:124:ILE:CG2	1:A:152:LEU:HD12	2.24	0.66
1:A:167:LEU:CD1	1:A:171:ARG:CZ	2.74	0.66
1:A:207:TRP:HB2	1:A:211:LEU:O	1.96	0.66
1:A:110:LEU:HD22	1:A:325:ILE:CG1	2.26	0.65
1:A:131:SER:HB2	1:A:133:CYS:CB	2.24	0.65
1:A:122:PHE:C	1:A:125:PRO:HD2	2.20	0.65
1:A:198:SER:N	1:A:235:LEU:HD12	2.09	0.65
1:A:137:LEU:N	1:A:162:GLY:O	2.29	0.65
1:A:207:TRP:CZ3	1:A:209:ALA:O	2.50	0.65
1:A:329:LEU:HD13	1:A:329:LEU:C	2.21	0.65
1:A:138:HIS:CD2	2:A:332:NAD:N1N	2.65	0.65
1:A:120:PHE:O	1:A:124:ILE:HD13	1.96	0.65
1:A:245:THR:HG22	1:A:246:TYR:HD1	1.62	0.65
1:A:84:ASP:O	1:A:85:TYR:C	2.40	0.65
1:A:173:ARG:HG3	1:A:187:VAL:O	1.96	0.65
1:A:199:VAL:HG13	1:A:235:LEU:HD11	1.79	0.65
1:A:173:ARG:CD	1:A:189:GLY:H	2.10	0.65
1:A:246:TYR:HD2	1:A:247:VAL:O	1.78	0.65
1:A:167:LEU:O	1:A:168:ASP:C	2.40	0.65
1:A:204:SER:O	1:A:212:HIS:CE1	2.50	0.65
1:A:309:PRO:HA	1:A:312:GLU:CB	2.26	0.65
1:A:0:ACE:O	1:A:1:THR:HB	1.96	0.64
1:A:296:GLY:C	1:A:297:ILE:CG2	2.67	0.64
1:A:123:ILE:C	1:A:127:ILE:HD12	2.21	0.64
1:A:67:GLU:CG	1:A:78:ILE:HG12	2.27	0.64
1:A:197:ASP:CA	1:A:235:LEU:HB3	2.18	0.64
1:A:4:LYS:CG	1:A:8:ILE:HD11	2.27	0.64
1:A:69:GLY:O	1:A:72:PHE:N	2.30	0.64
1:A:75:THR:HG22	1:A:76:ALA:N	2.12	0.64
1:A:110:LEU:CD2	1:A:325:ILE:HD11	2.25	0.64
1:A:231:TRP:O	1:A:235:LEU:HD21	1.95	0.64
1:A:120:PHE:CA	1:A:123:ILE:CD1	2.54	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4:LYS:HG3	1:A:8:ILE:HD11	1.79	0.64
1:A:149:ASP:O	1:A:153:SER:N	2.20	0.64
1:A:94:VAL:HG21	1:A:133:CYS:HB2	1.78	0.63
1:A:231:TRP:C	1:A:235:LEU:CD2	2.70	0.63
1:A:52:VAL:O	1:A:52:VAL:CG2	2.47	0.63
1:A:138:HIS:HD2	2:A:332:NAD:N1N	1.96	0.63
1:A:248:ALA:O	1:A:249:TRP:CG	2.50	0.63
1:A:294:ASN:HD21	1:A:297:ILE:HG12	1.63	0.63
1:A:26:VAL:N	1:A:50:ALA:O	2.25	0.63
1:A:71:LEU:HD12	1:A:71:LEU:C	2.24	0.63
1:A:328:ASP:OD1	1:A:330:LYS:NZ	2.31	0.63
1:A:170:ALA:O	1:A:174:TYR:HB3	1.98	0.63
1:A:173:ARG:O	1:A:176:MET:CB	2.46	0.63
1:A:229:THR:O	1:A:230:SER:C	2.42	0.63
1:A:130:HIS:C	1:A:132(A):PRO:HD3	2.23	0.63
1:A:29:CYS:N	2:A:332:NAD:O2B	2.32	0.63
1:A:259:GLN:O	1:A:263:LYS:CG	2.45	0.63
1:A:274:MET:HE3	1:A:284:ASN:CB	2.29	0.63
1:A:135:LYS:O	1:A:161:ILE:O	2.16	0.62
1:A:66:LEU:O	1:A:67:GLU:C	2.42	0.62
1:A:231:TRP:C	1:A:235:LEU:HD21	2.23	0.62
1:A:289:LEU:CD2	1:A:290:PRO:CD	2.31	0.62
1:A:98:ALA:HB1	1:A:119:ILE:HD11	1.79	0.62
1:A:134:LEU:HD11	1:A:261:ILE:HG21	1.78	0.62
1:A:207:TRP:CB	1:A:212:HIS:HA	2.29	0.62
1:A:326:GLN:O	1:A:327:LYS:C	2.43	0.62
1:A:109:ARG:C	1:A:112:LEU:HG	2.25	0.62
1:A:264:ASP:OD2	1:A:295:ASN:HB2	2.00	0.62
1:A:320:THR:CG2	1:A:321:THR:N	2.61	0.62
1:A:249:TRP:C	1:A:251:GLY:N	2.49	0.62
1:A:0:ACE:O	1:A:1:THR:OG1	2.18	0.62
1:A:53:ASP:OD1	2:A:332:NAD:H2B	1.99	0.62
1:A:207:TRP:CZ3	1:A:209:ALA:C	2.78	0.62
1:A:281:ILE:HG13	1:A:319:ALA:HB1	1.73	0.62
1:A:141:LEU:HB3	1:A:144:ASP:HB3	1.82	0.62
1:A:24:ILE:O	1:A:50:ALA:N	2.31	0.62
1:A:141:LEU:O	1:A:142:GLY:C	2.42	0.61
1:A:160:ILE:O	1:A:161:ILE:CD1	2.46	0.61
1:A:236:VAL:O	1:A:237:VAL:C	2.43	0.61
1:A:32:VAL:CG2	2:A:332:NAD:C5D	2.76	0.61
1:A:108:SER:HB3	1:A:111:ASN:HB2	1.81	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:135:LYS:N	1:A:135:LYS:CD	2.61	0.61
1:A:241:VAL:C	1:A:243:VAL:H	2.09	0.61
1:A:274:MET:CG	1:A:286:PHE:HE2	2.09	0.61
1:A:124:ILE:HB	1:A:125:PRO:HD3	1.82	0.61
1:A:134:LEU:HD13	1:A:296:GLY:HA2	1.82	0.61
1:A:214:ASP:OD1	1:A:220:TYR:CZ	2.51	0.61
1:A:43:LYS:HZ1	1:A:259:GLN:NE2	1.99	0.61
1:A:150:TRP:HD1	1:A:160:ILE:HG21	1.66	0.61
1:A:226:LYS:C	1:A:228:TYR:N	2.53	0.61
1:A:147:LYS:HE3	1:A:326:GLN:HE21	1.65	0.60
1:A:193:GLY:O	1:A:288:SER:N	2.34	0.60
1:A:274:MET:HE3	1:A:284:ASN:HB3	1.82	0.60
1:A:138:HIS:CE1	1:A:250:LYS:CE	2.84	0.60
1:A:29:CYS:SG	1:A:59:LEU:HG	2.40	0.60
1:A:30:ASP:C	1:A:34:MET:HG2	2.25	0.60
1:A:32:VAL:HG23	2:A:332:NAD:C5D	2.29	0.60
1:A:51:LEU:O	1:A:80:SER:HA	1.99	0.60
1:A:271:VAL:O	1:A:288:SER:HA	2.01	0.60
1:A:30:ASP:CA	1:A:34:MET:HG2	2.32	0.60
1:A:85:TYR:O	1:A:130:HIS:HE1	1.76	0.60
1:A:99:GLY:O	1:A:100:ALA:HB2	2.02	0.60
1:A:201:SER:N	1:A:311:GLU:OE2	2.35	0.60
1:A:234:GLY:O	1:A:237:VAL:HB	2.02	0.60
1:A:24:ILE:HB	1:A:46:ALA:CB	2.32	0.60
1:A:112:LEU:HD13	1:A:140:GLU:HG2	1.83	0.60
1:A:249:TRP:C	1:A:251:GLY:H	1.97	0.60
1:A:197:ASP:HA	1:A:235:LEU:CB	2.19	0.60
1:A:261:ILE:HG22	1:A:262:MET:N	2.16	0.59
1:A:282:LYS:O	1:A:283:ASP:HB2	2.01	0.59
1:A:28:GLY:HA3	2:A:332:NAD:C1B	2.28	0.59
1:A:67:GLU:OE2	1:A:78:ILE:HG13	2.03	0.59
1:A:328:ASP:O	1:A:329:LEU:HB3	2.02	0.59
1:A:2:ALA:O	1:A:6:LYS:N	2.32	0.59
1:A:32:VAL:HG22	1:A:138:HIS:CE1	2.37	0.59
1:A:88:SER:O	1:A:89:ALA:C	2.45	0.59
1:A:96:ILE:HD12	1:A:97:THR:N	2.17	0.59
1:A:149:ASP:OD2	1:A:149:ASP:C	2.46	0.59
1:A:158:HIS:HA	1:A:298:SER:OG	2.03	0.59
1:A:329:LEU:HD21	1:A:331:PHE:CB	2.33	0.59
1:A:181:GLY:C	1:A:182:VAL:CG2	2.76	0.59
1:A:275:VAL:HG22	1:A:285:VAL:O	2.03	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:134:LEU:CD1	1:A:296:GLY:HA2	2.32	0.59
1:A:231:TRP:CD2	1:A:235:LEU:HD21	2.38	0.58
1:A:124:ILE:HG21	1:A:152:LEU:CD1	2.30	0.58
1:A:219:ALA:O	1:A:220:TYR:HD2	1.85	0.58
1:A:264:ASP:CB	1:A:295:ASN:OD1	2.51	0.58
1:A:147:LYS:HE3	1:A:326:GLN:HE22	1.64	0.58
1:A:103:GLN:O	1:A:106:GLY:N	2.36	0.58
1:A:161:ILE:HG22	1:A:271:VAL:CG2	2.29	0.58
1:A:232:ALA:HA	1:A:235:LEU:CD2	2.33	0.58
1:A:294:ASN:ND2	1:A:299:HIS:HA	2.18	0.58
2:A:332:NAD:C5N	3:A:333:PYR:CB	2.80	0.58
1:A:17:PRO:C	1:A:18:ARG:HG3	2.27	0.58
1:A:120:PHE:HA	1:A:123:ILE:HD11	1.75	0.58
1:A:65:ASP:O	1:A:68:HIS:N	2.36	0.58
1:A:134:LEU:HD12	1:A:261:ILE:HG21	1.85	0.58
1:A:38:ILE:HG22	1:A:39:SER:H	1.69	0.58
1:A:329:LEU:O	1:A:330:LYS:C	2.45	0.58
1:A:112:LEU:HB2	1:A:141:LEU:HD11	1.86	0.58
1:A:183:HIS:O	1:A:184:SER:C	2.47	0.58
1:A:232:ALA:HA	1:A:235:LEU:HD23	1.85	0.58
1:A:112:LEU:HD12	1:A:140:GLU:HG3	1.84	0.58
1:A:13:THR:O	1:A:14:SER:HB3	2.03	0.57
1:A:240:PRO:O	1:A:242:ASP:N	2.37	0.57
1:A:31:ALA:O	1:A:32:VAL:C	2.47	0.57
1:A:130:HIS:N	1:A:130:HIS:CD2	2.72	0.57
1:A:296:GLY:O	1:A:297:ILE:HG22	2.04	0.57
1:A:43:LYS:HZ2	1:A:259:GLN:HE21	1.53	0.57
1:A:109:ARG:NH2	1:A:238:SER:OG	2.33	0.57
1:A:173:ARG:NH2	1:A:188:ILE:HG23	2.19	0.57
1:A:32:VAL:CG1	1:A:97:THR:CG2	2.58	0.57
1:A:63:MET:HB2	1:A:78:ILE:HD11	1.85	0.57
1:A:239:ASN:HD22	1:A:240:PRO:N	2.02	0.57
1:A:248:ALA:C	1:A:249:TRP:CD1	2.82	0.57
1:A:285:VAL:HG13	1:A:323:TRP:NE1	2.19	0.57
1:A:32:VAL:CG2	1:A:138:HIS:NE2	2.68	0.57
1:A:287:LEU:CD1	1:A:288:SER:N	2.67	0.57
1:A:320:THR:HG22	1:A:321:THR:H	1.67	0.57
1:A:67:GLU:O	1:A:70:SER:CA	2.53	0.56
1:A:34:MET:HE3	1:A:34:MET:CA	2.29	0.56
1:A:127:ILE:O	1:A:127:ILE:CG2	2.52	0.56
1:A:138:HIS:N	1:A:139:PRO:HD3	2.11	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:138:HIS:CD2	2:A:332:NAD:C2N	2.89	0.56
1:A:203:TRP:H	1:A:203:TRP:CD1	2.21	0.56
1:A:256:ASP:O	1:A:259:GLN:HB3	2.03	0.56
1:A:264:ASP:OD1	1:A:295:ASN:HB2	2.05	0.56
1:A:329:LEU:HD21	1:A:331:PHE:CG	2.40	0.56
1:A:124:ILE:N	1:A:124:ILE:CD1	2.66	0.56
1:A:16:GLU:CB	1:A:17:PRO:HD2	2.31	0.56
1:A:200:PRO:CB	1:A:314:GLN:HB3	2.35	0.56
1:A:279:TYR:CE1	1:A:315:LEU:HD21	2.40	0.56
1:A:32:VAL:HG11	1:A:97:THR:HG22	1.85	0.56
1:A:120:PHE:HB2	1:A:145:LYS:NZ	2.21	0.56
1:A:181:GLY:O	1:A:182:VAL:HG22	2.02	0.56
1:A:138:HIS:CD2	2:A:332:NAD:C5N	2.87	0.56
1:A:43:LYS:O	1:A:44:ASP:CB	2.39	0.56
1:A:93:LEU:HD11	1:A:258:ALA:CB	2.36	0.56
1:A:195:HIS:NE2	3:A:333:PYR:CA	2.69	0.55
1:A:279:TYR:HE1	1:A:307:LEU:HD11	1.72	0.55
1:A:287:LEU:HD12	1:A:288:SER:C	2.31	0.55
1:A:128:VAL:HG21	1:A:153:SER:CB	2.37	0.55
1:A:213:LYS:O	1:A:216:VAL:N	2.39	0.55
1:A:313:GLN:O	1:A:317:LYS:N	2.31	0.55
1:A:329:LEU:HD11	1:A:331:PHE:CB	2.32	0.55
1:A:32:VAL:O	1:A:36:ASP:OD1	2.25	0.55
1:A:24:ILE:HB	1:A:46:ALA:HB2	1.88	0.55
1:A:137:LEU:CB	1:A:139:PRO:HD2	2.36	0.55
1:A:200:PRO:HB3	1:A:314:GLN:CB	2.34	0.55
1:A:123:ILE:HG21	1:A:127:ILE:HD11	1.71	0.55
1:A:135:LYS:HD2	1:A:135:LYS:H	1.68	0.55
1:A:158:HIS:HD2	1:A:297:ILE:HD12	1.68	0.55
1:A:204:SER:OG	1:A:308:LYS:HG2	2.06	0.55
1:A:274:MET:HE2	1:A:276:LYS:HB2	1.88	0.55
1:A:13:THR:HG23	1:A:14:SER:N	2.17	0.55
1:A:69:GLY:O	1:A:71:LEU:CA	2.55	0.55
1:A:102:GLN:OE1	1:A:109:ARG:CG	2.55	0.55
1:A:140:GLU:HB3	1:A:141:LEU:HD12	1.87	0.55
1:A:120:PHE:HD1	1:A:145:LYS:CE	1.94	0.55
1:A:196:GLY:O	1:A:197:ASP:C	2.50	0.55
1:A:250:LYS:O	1:A:252:CYS:N	2.40	0.55
1:A:298:SER:O	1:A:299:HIS:C	2.49	0.55
1:A:226:LYS:O	1:A:227:GLY:C	2.49	0.55
1:A:120:PHE:CD2	1:A:124:ILE:HD11	2.42	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:93:LEU:HD21	1:A:258:ALA:HB1	1.87	0.54
1:A:2:ALA:CB	1:A:5:ASP:HB2	2.35	0.54
1:A:171:ARG:NE	1:A:237:VAL:HG11	2.22	0.54
1:A:201:SER:C	1:A:311:GLU:CD	2.69	0.54
1:A:206:MET:O	1:A:213:LYS:N	2.39	0.54
1:A:208:ASP:O	1:A:211:LEU:HD23	2.08	0.54
1:A:272:SER:CA	1:A:287:LEU:O	2.46	0.54
1:A:273:THR:O	1:A:286:PHE:CG	2.61	0.54
1:A:329:LEU:HD11	1:A:331:PHE:H	1.61	0.54
1:A:91:SER:O	1:A:133:CYS:CA	2.56	0.54
1:A:32:VAL:HG12	1:A:97:THR:HG21	1.81	0.54
1:A:136:GLU:HA	1:A:161:ILE:O	2.07	0.54
1:A:294:ASN:CG	1:A:299:HIS:ND1	2.66	0.54
1:A:315:LEU:O	1:A:315:LEU:HD12	2.07	0.54
1:A:25:THR:HA	1:A:50:ALA:HB3	1.88	0.54
1:A:297:ILE:CD1	1:A:300:CYS:SG	2.95	0.54
1:A:309:PRO:O	1:A:310:ASP:C	2.51	0.54
1:A:156:PRO:HG2	1:A:158:HIS:CE1	2.42	0.54
1:A:232:ALA:O	1:A:236:VAL:N	2.33	0.54
1:A:287:LEU:HD12	1:A:287:LEU:C	2.32	0.54
1:A:207:TRP:HE3	1:A:208:ASP:CA	2.20	0.54
1:A:207:TRP:HB2	1:A:212:HIS:HA	1.88	0.54
1:A:221:GLU:CG	1:A:228:TYR:CD2	2.82	0.54
1:A:274:MET:CG	1:A:286:PHE:CE2	2.80	0.54
1:A:232:ALA:CA	1:A:235:LEU:CD2	2.86	0.54
1:A:171:ARG:HD2	1:A:237:VAL:CG2	2.37	0.53
1:A:173:ARG:CG	1:A:187:VAL:O	2.57	0.53
1:A:239:ASN:C	1:A:239:ASN:ND2	2.66	0.53
1:A:248:ALA:C	1:A:249:TRP:CG	2.87	0.53
1:A:67:GLU:O	1:A:68:HIS:C	2.51	0.53
1:A:111:ASN:C	1:A:113:VAL:N	2.62	0.53
1:A:206:MET:CB	1:A:213:LYS:HE2	2.27	0.53
1:A:323:TRP:O	1:A:324:ASP:C	2.51	0.53
1:A:264:ASP:CB	1:A:295:ASN:H	2.21	0.53
1:A:222:VAL:HG12	1:A:223:ILE:CG1	2.38	0.53
1:A:131:SER:HB2	1:A:133:CYS:HB3	1.90	0.53
1:A:188:ILE:CD1	1:A:207:TRP:CZ2	2.92	0.53
1:A:54:VAL:HG23	1:A:54:VAL:O	2.09	0.53
1:A:264:ASP:HB2	1:A:295:ASN:OD1	2.09	0.53
1:A:275:VAL:HG23	1:A:281:ILE:HG21	1.90	0.53
1:A:93:LEU:HD11	1:A:258:ALA:HB2	1.91	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:274:MET:HE3	1:A:284:ASN:CA	2.39	0.53
1:A:120:PHE:O	1:A:124:ILE:CD1	2.57	0.52
1:A:226:LYS:HB3	1:A:229:THR:OG1	2.09	0.52
1:A:279:TYR:CE1	1:A:307:LEU:CD1	2.92	0.52
1:A:2:ALA:CA	1:A:5:ASP:HB2	2.39	0.52
1:A:32:VAL:HG21	2:A:332:NAD:H51N	1.86	0.52
1:A:160:ILE:HD11	1:A:286:PHE:CE1	2.37	0.52
1:A:246:TYR:CD2	1:A:247:VAL:O	2.61	0.52
1:A:240:PRO:O	1:A:241:VAL:C	2.53	0.52
1:A:232:ALA:O	1:A:235:LEU:HD23	2.08	0.52
1:A:16:GLU:HB3	1:A:17:PRO:CD	2.31	0.52
1:A:24:ILE:HD12	1:A:46:ALA:HB2	1.91	0.52
1:A:307:LEU:O	1:A:312:GLU:HB2	2.10	0.52
1:A:231:TRP:O	1:A:234:GLY:N	2.41	0.52
1:A:322:LEU:O	1:A:325:ILE:HG12	2.10	0.52
1:A:22:ASN:OD1	1:A:47:ASP:OD1	2.28	0.52
1:A:137:LEU:HB3	1:A:139:PRO:HD2	1.91	0.52
1:A:161:ILE:HG22	1:A:271:VAL:HG22	1.88	0.52
1:A:315:LEU:HD12	1:A:315:LEU:C	2.35	0.52
1:A:63:MET:CB	1:A:78:ILE:HD11	2.40	0.51
1:A:264:ASP:CG	1:A:295:ASN:N	2.43	0.51
1:A:266:CYS:HG	1:A:299:HIS:CG	2.25	0.51
1:A:75:THR:CG2	1:A:76:ALA:N	2.74	0.51
1:A:138:HIS:CE1	1:A:250:LYS:HE3	2.45	0.51
1:A:167:LEU:CD1	1:A:171:ARG:HH12	2.21	0.51
1:A:173:ARG:HD2	1:A:188:ILE:CA	2.31	0.51
1:A:248:ALA:O	1:A:249:TRP:CD1	2.63	0.51
1:A:294:ASN:O	1:A:297:ILE:O	2.27	0.51
1:A:158:HIS:CD2	1:A:297:ILE:CD1	2.85	0.51
1:A:183:HIS:CG	1:A:184:SER:N	2.79	0.51
1:A:207:TRP:HB3	1:A:212:HIS:HA	1.92	0.51
1:A:2:ALA:O	1:A:5:ASP:HB2	2.11	0.51
1:A:134:LEU:HD13	1:A:296:GLY:CA	2.40	0.51
1:A:221:GLU:O	1:A:222:VAL:CB	2.58	0.51
1:A:145:LYS:O	1:A:146:ASN:C	2.53	0.50
1:A:281:ILE:HD11	1:A:316:GLN:CA	2.32	0.50
1:A:128:VAL:HG21	1:A:153:SER:HB2	1.93	0.50
1:A:261:ILE:O	1:A:262:MET:C	2.54	0.50
1:A:307:LEU:HB2	1:A:312:GLU:HA	1.93	0.50
1:A:329:LEU:HD13	1:A:330:LYS:C	2.31	0.50
1:A:188:ILE:HD12	1:A:207:TRP:CZ2	2.45	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:224:LYS:HG3	1:A:225:LEU:H	1.76	0.50
1:A:241:VAL:O	1:A:244:LEU:N	2.45	0.50
1:A:275:VAL:CG2	1:A:285:VAL:CG2	2.54	0.50
1:A:156:PRO:O	1:A:157:MET:C	2.54	0.50
1:A:158:HIS:CG	1:A:297:ILE:HD12	2.43	0.50
1:A:14:SER:O	1:A:14:SER:OG	2.19	0.50
1:A:43:LYS:HZ2	1:A:259:GLN:NE2	2.08	0.50
1:A:156:PRO:CB	1:A:158:HIS:HE1	2.21	0.50
1:A:258:ALA:O	1:A:259:GLN:C	2.53	0.50
1:A:110:LEU:O	1:A:111:ASN:C	2.55	0.50
1:A:225:LEU:O	1:A:226:LYS:HB2	2.12	0.50
1:A:256:ASP:HA	1:A:259:GLN:HB2	1.94	0.50
1:A:38:ILE:HG23	1:A:39:SER:N	2.20	0.50
1:A:120:PHE:CE2	1:A:149:ASP:HB2	2.47	0.50
1:A:173:ARG:HD2	1:A:189:GLY:H	1.75	0.50
1:A:292:VAL:O	1:A:298:SER:C	2.55	0.50
1:A:32:VAL:HG21	2:A:332:NAD:C5D	2.40	0.50
1:A:94:VAL:HG21	1:A:133:CYS:CB	2.41	0.50
1:A:134:LEU:HD12	1:A:261:ILE:CG2	2.42	0.50
1:A:203:TRP:CB	1:A:220:TYR:CE1	2.78	0.50
1:A:130:HIS:C	1:A:132(A):PRO:CD	2.85	0.49
1:A:124:ILE:HB	1:A:125:PRO:CD	2.43	0.49
1:A:158:HIS:HB2	1:A:297:ILE:CG1	2.37	0.49
1:A:173:ARG:CZ	1:A:188:ILE:HG23	2.42	0.49
1:A:160:ILE:CA	1:A:161:ILE:HD13	2.39	0.49
1:A:183:HIS:C	1:A:185:CYS:N	2.71	0.49
1:A:213:LYS:O	1:A:216:VAL:HG12	2.13	0.49
1:A:246:TYR:HD2	1:A:247:VAL:C	2.21	0.49
1:A:316:GLN:O	1:A:317:LYS:C	2.56	0.49
1:A:329:LEU:CD1	1:A:330:LYS:N	2.75	0.49
1:A:55:MET:O	1:A:56:GLU:C	2.53	0.49
1:A:99:GLY:N	2:A:332:NAD:H8A	2.27	0.49
1:A:297:ILE:CG1	1:A:298:SER:N	2.75	0.49
1:A:266:CYS:SG	1:A:299:HIS:CG	3.05	0.49
1:A:281:ILE:HG23	1:A:285:VAL:CG2	2.28	0.49
1:A:274:MET:HE3	1:A:284:ASN:HA	1.94	0.49
1:A:101:ARG:NE	2:A:332:NAD:O1N	2.46	0.49
1:A:222:VAL:HG12	1:A:223:ILE:HG12	1.94	0.49
1:A:245:THR:HG22	1:A:246:TYR:CD1	2.44	0.49
1:A:120:PHE:C	1:A:123:ILE:HD12	2.34	0.48
1:A:200:PRO:HB3	1:A:314:GLN:HG3	1.95	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:67:GLU:C	1:A:70:SER:HB2	2.35	0.48
1:A:101:ARG:NH2	1:A:246:TYR:CD1	2.80	0.48
1:A:137:LEU:HB3	1:A:139:PRO:CD	2.43	0.48
1:A:222:VAL:C	1:A:223:ILE:HG12	2.38	0.48
1:A:120:PHE:CE2	1:A:124:ILE:HD11	2.48	0.48
1:A:120:PHE:CB	1:A:145:LYS:HZ1	2.27	0.48
1:A:279:TYR:CE1	1:A:307:LEU:HD11	2.48	0.48
1:A:98:ALA:HA	2:A:332:NAD:N9A	2.29	0.48
1:A:135:LYS:NZ	1:A:155:LEU:HG	2.27	0.48
1:A:194:GLN:HA	1:A:288:SER:CB	2.23	0.48
1:A:311:GLU:O	1:A:312:GLU:C	2.55	0.48
1:A:91:SER:OG	1:A:94:VAL:HG22	2.13	0.48
1:A:137:LEU:CA	1:A:139:PRO:CD	2.79	0.48
1:A:171:ARG:CD	1:A:237:VAL:HG11	2.44	0.48
1:A:259:GLN:O	1:A:263:LYS:CD	2.62	0.48
1:A:28:GLY:C	2:A:332:NAD:HO2A	2.17	0.48
1:A:113:VAL:HG13	1:A:114:GLN:N	2.29	0.48
1:A:158:HIS:C	1:A:298:SER:H	2.21	0.48
1:A:4:LYS:HG2	1:A:8:ILE:HD11	1.95	0.47
1:A:143:THR:HG21	1:A:194:GLN:CA	2.42	0.47
1:A:219:ALA:O	1:A:220:TYR:CD2	2.65	0.47
1:A:233:ILE:O	1:A:233:ILE:CG1	2.34	0.47
1:A:30:ASP:O	1:A:34:MET:CA	2.61	0.47
1:A:174:TYR:O	1:A:175:LEU:C	2.57	0.47
1:A:317:LYS:O	1:A:318:SER:C	2.57	0.47
1:A:97:THR:CG2	1:A:138:HIS:HB3	2.41	0.47
1:A:203:TRP:C	1:A:205:GLY:N	2.72	0.47
1:A:3:LEU:O	1:A:4:LYS:C	2.57	0.47
1:A:97:THR:C	1:A:139:PRO:HB3	2.32	0.47
1:A:110:LEU:CD2	1:A:325:ILE:HG13	2.44	0.47
1:A:167:LEU:CD2	1:A:195:HIS:CE1	2.69	0.47
1:A:109:ARG:O	1:A:112:LEU:CD1	2.62	0.47
1:A:96:ILE:HG13	1:A:139:PRO:HG3	1.96	0.47
1:A:299:HIS:O	1:A:301:ASN:OD1	2.32	0.47
1:A:2:ALA:C	1:A:5:ASP:HB2	2.39	0.47
1:A:17:PRO:C	1:A:18:ARG:CG	2.88	0.47
1:A:92:LYS:O	1:A:134:LEU:HD21	2.12	0.47
1:A:233:ILE:HD12	1:A:236:VAL:HG12	1.97	0.47
1:A:292:VAL:HG12	1:A:299:HIS:HB3	1.96	0.47
1:A:309:PRO:CA	1:A:312:GLU:HB3	2.33	0.47
1:A:166:ASN:ND2	1:A:167:LEU:H	2.00	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:119:ILE:CG1	1:A:120:PHE:N	2.70	0.46
1:A:152:LEU:CD2	1:A:331:PHE:HE2	2.21	0.46
1:A:263:LYS:CG	1:A:265:LEU:HD11	2.43	0.46
1:A:66:LEU:C	1:A:68:HIS:N	2.71	0.46
1:A:212:HIS:HB3	1:A:215:VAL:CG2	2.46	0.46
1:A:108:SER:O	1:A:111:ASN:HB2	2.15	0.46
1:A:24:ILE:CG2	1:A:49:VAL:HB	2.46	0.46
1:A:242:ASP:OD2	1:A:246:TYR:CA	2.57	0.46
1:A:250:LYS:HE2	2:A:332:NAD:C4N	2.44	0.46
1:A:284:ASN:O	1:A:284:ASN:CG	2.59	0.46
1:A:30:ASP:HA	1:A:34:MET:HG2	1.98	0.46
1:A:68:HIS:O	1:A:69:GLY:C	2.59	0.46
1:A:119:ILE:CG1	1:A:123:ILE:HD11	2.44	0.46
1:A:165:CYS:O	1:A:168:ASP:HB2	2.16	0.46
1:A:294:ASN:HD21	1:A:299:HIS:HA	1.80	0.46
1:A:120:PHE:CZ	1:A:149:ASP:HB2	2.50	0.45
1:A:219:ALA:C	1:A:220:TYR:CD2	2.85	0.45
1:A:307:LEU:O	1:A:308:LYS:C	2.58	0.45
1:A:32:VAL:CG2	1:A:138:HIS:CE1	2.99	0.45
1:A:67:GLU:CD	1:A:78:ILE:HG12	2.38	0.45
1:A:113:VAL:HG11	1:A:325:ILE:CG2	2.46	0.45
1:A:128:VAL:HG21	1:A:153:SER:HB3	1.97	0.45
1:A:170:ALA:O	1:A:174:TYR:N	2.34	0.45
1:A:173:ARG:HD3	1:A:189:GLY:H	1.78	0.45
1:A:124:ILE:CB	1:A:152:LEU:HD12	2.46	0.45
1:A:38:ILE:HG21	1:A:249:TRP:HZ3	1.82	0.45
1:A:63:MET:CA	1:A:78:ILE:HD11	2.47	0.45
1:A:171:ARG:CZ	1:A:237:VAL:CG1	2.78	0.45
1:A:22:ASN:O	1:A:47:ASP:N	2.46	0.45
1:A:101:ARG:NH2	2:A:332:NAD:O1N	2.49	0.45
1:A:107:GLU:O	1:A:108:SER:CB	2.60	0.45
1:A:18:ARG:HB2	1:A:19:SER:H	1.49	0.45
1:A:27:VAL:HB	1:A:96:ILE:HA	1.99	0.45
1:A:120:PHE:HE1	1:A:137:LEU:HD23	1.81	0.45
1:A:134:LEU:CD1	1:A:261:ILE:HG23	2.46	0.45
1:A:148:GLN:NE2	1:A:148:GLN:HA	2.32	0.45
1:A:160:ILE:O	1:A:160:ILE:CG1	2.65	0.45
1:A:252:CYS:O	1:A:255:ALA:HB3	2.16	0.45
1:A:279:TYR:N	1:A:279:TYR:CD2	2.81	0.45
1:A:24:ILE:HG22	1:A:49:VAL:HB	1.99	0.44
1:A:138:HIS:O	2:A:332:NAD:H1D	2.17	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:64:MET:HB3	1:A:64:MET:HE2	1.59	0.44
1:A:293:LEU:HA	1:A:298:SER:HA	1.99	0.44
1:A:308:LYS:O	1:A:312:GLU:CA	2.64	0.44
1:A:24:ILE:HG22	1:A:49:VAL:HA	1.99	0.44
1:A:65:ASP:O	1:A:66:LEU:C	2.61	0.44
1:A:173:ARG:NH1	1:A:185:CYS:O	2.51	0.44
1:A:213:LYS:HB2	1:A:213:LYS:NZ	2.13	0.44
1:A:216:VAL:HG13	1:A:217:ASP:OD1	2.17	0.44
1:A:23:LYS:NZ	1:A:88:SER:HA	2.32	0.44
1:A:77:LYS:HG3	1:A:78:ILE:N	2.33	0.44
1:A:169:SER:O	1:A:173:ARG:N	2.32	0.44
1:A:191:VAL:HG21	1:A:231:TRP:CE3	2.45	0.44
1:A:110:LEU:CD2	1:A:325:ILE:CG1	2.94	0.44
1:A:135:LYS:HZ3	1:A:155:LEU:HG	1.82	0.44
1:A:15:GLN:HE21	1:A:15:GLN:HB2	1.67	0.44
1:A:34:MET:SD	1:A:62:GLU:HG3	2.58	0.44
1:A:36:ASP:O	1:A:39:SER:N	2.50	0.44
1:A:22:ASN:HD22	1:A:262:MET:HE1	1.83	0.44
1:A:94:VAL:O	1:A:135:LYS:HA	2.17	0.44
1:A:96:ILE:HD12	1:A:97:THR:H	1.81	0.44
1:A:200:PRO:HG3	1:A:315:LEU:HA	2.00	0.44
1:A:32:VAL:HG13	1:A:138:HIS:HD1	1.63	0.43
1:A:158:HIS:O	1:A:297:ILE:HA	2.18	0.43
1:A:283:ASP:O	1:A:323:TRP:CZ2	2.71	0.43
1:A:317:LYS:O	1:A:321:THR:HG23	2.18	0.43
1:A:120:PHE:HE1	1:A:137:LEU:CD2	2.31	0.43
1:A:159:ARG:HG2	1:A:296:GLY:O	2.18	0.43
1:A:231:TRP:NE1	1:A:235:LEU:HD11	2.28	0.43
1:A:264:ASP:CB	1:A:295:ASN:CG	2.88	0.43
1:A:32:VAL:HG21	2:A:332:NAD:O4D	2.18	0.43
1:A:96:ILE:O	1:A:139:PRO:CD	2.26	0.43
1:A:237:VAL:O	1:A:238:SER:C	2.61	0.43
1:A:101:ARG:CB	2:A:332:NAD:O3D	2.59	0.43
1:A:174:TYR:CD1	1:A:174:TYR:C	2.92	0.43
1:A:156:PRO:CG	1:A:158:HIS:HE1	2.31	0.43
1:A:169:SER:HA	1:A:191:VAL:CG1	2.49	0.43
1:A:195:HIS:CG	1:A:195:HIS:O	2.71	0.43
1:A:232:ALA:C	1:A:234:GLY:H	2.25	0.43
1:A:244:LEU:C	1:A:245:THR:OG1	2.61	0.43
1:A:256:ASP:O	1:A:259:GLN:N	2.52	0.43
1:A:103:GLN:O	1:A:105:GLU:HB3	2.18	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:138:HIS:O	2:A:332:NAD:C1D	2.66	0.43
1:A:160:ILE:CD1	1:A:286:PHE:HE1	2.23	0.43
1:A:109:ARG:HH22	1:A:238:SER:HG	1.62	0.43
1:A:183:HIS:CG	1:A:184:SER:H	2.36	0.43
1:A:183:HIS:CE1	1:A:184:SER:OG	2.72	0.43
1:A:317:LYS:HD3	1:A:317:LYS:HA	1.72	0.43
1:A:192:ILE:CD1	1:A:192:ILE:C	2.59	0.43
1:A:241:VAL:O	1:A:244:LEU:CB	2.67	0.43
1:A:289:LEU:HD23	1:A:290:PRO:HD2	0.51	0.43
1:A:25:THR:HB	1:A:94:VAL:HG13	2.00	0.43
1:A:30:ASP:O	1:A:31:ALA:O	2.37	0.43
1:A:200:PRO:HB3	1:A:314:GLN:CG	2.49	0.43
1:A:330:LYS:N	1:A:330:LYS:HD3	2.33	0.43
1:A:263:LYS:O	1:A:264:ASP:CB	2.66	0.42
1:A:308:LYS:O	1:A:312:GLU:CB	2.67	0.42
1:A:130:HIS:O	1:A:132(A):PRO:CD	2.67	0.42
1:A:48:GLU:HB2	1:A:77:LYS:HB3	2.01	0.42
1:A:123:ILE:HG23	1:A:127:ILE:HD11	1.71	0.42
1:A:184:SER:O	1:A:185:CYS:O	2.37	0.42
1:A:244:LEU:O	1:A:245:THR:OG1	2.37	0.42
1:A:308:LYS:HD3	1:A:308:LYS:N	2.33	0.42
1:A:214:ASP:CG	1:A:220:TYR:CZ	2.96	0.42
1:A:109:ARG:O	1:A:112:LEU:HD12	2.19	0.42
1:A:156:PRO:CG	1:A:158:HIS:CE1	3.02	0.42
1:A:109:ARG:O	1:A:112:LEU:CB	2.68	0.42
1:A:138:HIS:CE1	1:A:250:LYS:HE2	2.54	0.42
1:A:328:ASP:O	1:A:329:LEU:CB	2.68	0.42
1:A:42:MET:HE2	1:A:42:MET:HB2	1.65	0.42
1:A:117:VAL:O	1:A:118:ASN:C	2.63	0.42
1:A:149:ASP:O	1:A:152:LEU:CB	2.68	0.42
1:A:158:HIS:HD2	1:A:297:ILE:CD1	2.30	0.42
1:A:137:LEU:HD13	1:A:146:ASN:HA	2.01	0.42
1:A:155:LEU:CD1	1:A:159:ARG:NH2	2.82	0.42
1:A:191:VAL:CG2	1:A:231:TRP:CH2	3.03	0.42
1:A:262:MET:O	1:A:262:MET:HE2	2.20	0.42
1:A:140:GLU:C	1:A:141:LEU:HD12	2.44	0.42
1:A:147:LYS:O	1:A:148:GLN:C	2.62	0.42
1:A:207:TRP:CE3	1:A:207:TRP:C	2.98	0.42
1:A:250:LYS:HE3	1:A:254:VAL:CG2	2.50	0.42
1:A:254:VAL:HA	1:A:257:LEU:HD12	2.02	0.42
1:A:282:LYS:O	1:A:282:LYS:HG2	2.20	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:57:ASP:O	1:A:58:LYS:C	2.62	0.42
1:A:315:LEU:O	1:A:316:GLN:C	2.63	0.42
1:A:214:ASP:OD1	1:A:220:TYR:HE2	1.78	0.41
1:A:119:ILE:O	1:A:123:ILE:HG13	2.20	0.41
1:A:294:ASN:ND2	1:A:299:HIS:CB	2.83	0.41
1:A:318:SER:O	1:A:319:ALA:C	2.63	0.41
1:A:2:ALA:HB1	1:A:5:ASP:HB3	2.00	0.41
1:A:81:GLY:C	1:A:83:LYS:HG3	2.45	0.41
1:A:91:SER:O	1:A:133:CYS:HA	2.20	0.41
1:A:85:TYR:CG	1:A:126:ASN:HB3	2.55	0.41
1:A:261:ILE:O	1:A:264:ASP:N	2.53	0.41
1:A:263:LYS:O	1:A:264:ASP:HB3	2.19	0.41
1:A:140:GLU:OE2	1:A:140:GLU:HA	2.19	0.41
1:A:281:ILE:HG12	1:A:319:ALA:HB1	1.77	0.41
1:A:93:LEU:HD11	1:A:258:ALA:HB1	2.02	0.41
1:A:241:VAL:O	1:A:243:VAL:N	2.52	0.41
1:A:329:LEU:HD13	1:A:330:LYS:CA	2.51	0.41
1:A:274:MET:HE1	1:A:276:LYS:HD3	2.03	0.41
1:A:287:LEU:HD12	1:A:288:SER:CA	2.51	0.41
1:A:137:LEU:O	1:A:163:SER:CB	2.62	0.41
1:A:245:THR:O	1:A:246:TYR:HB3	2.21	0.41
1:A:109:ARG:HG3	1:A:112:LEU:CD1	2.51	0.41
1:A:122:PHE:O	1:A:123:ILE:C	2.63	0.41
1:A:260:THR:O	1:A:264:ASP:N	2.48	0.41
1:A:263:LYS:HG2	1:A:263:LYS:H	1.66	0.41
1:A:27:VAL:O	1:A:97:THR:OG1	2.39	0.40
1:A:95:VAL:HA	1:A:136:GLU:O	2.21	0.40
1:A:128:VAL:HG12	1:A:129:LYS:N	2.37	0.40
1:A:225:LEU:N	1:A:225:LEU:CD2	2.83	0.40
1:A:59:LEU:O	1:A:60:LYS:C	2.65	0.40
1:A:124:ILE:CB	1:A:125:PRO:CD	2.99	0.40
1:A:141:LEU:O	1:A:142:GLY:O	2.39	0.40
1:A:211:LEU:O	1:A:211:LEU:CD2	2.64	0.40
1:A:313:GLN:O	1:A:314:GLN:C	2.65	0.40
1:A:32:VAL:CG1	1:A:138:HIS:CD2	3.02	0.40
1:A:158:HIS:O	1:A:297:ILE:C	2.62	0.40
1:A:173:ARG:NH2	1:A:188:ILE:CG2	2.84	0.40
1:A:174:TYR:CG	1:A:175:LEU:N	2.88	0.40
1:A:213:LYS:C	1:A:215:VAL:N	2.79	0.40
2:A:332:NAD:C4N	3:A:333:PYR:CA	2.93	0.40
1:A:24:ILE:CD1	1:A:40:VAL:HG11	2.42	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:120:PHE:CD2	1:A:120:PHE:C	3.00	0.40
1:A:134:LEU:HA	1:A:159:ARG:O	2.21	0.40
1:A:159:ARG:CG	1:A:296:GLY:O	2.69	0.40
1:A:183:HIS:ND1	1:A:184:SER:OG	2.49	0.40
1:A:293:LEU:H	1:A:293:LEU:HG	1.73	0.40

All (1107) 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:38:ILE:CD1	1:A:129:LYS:C[16_555]	0.17	2.03
1:A:119:ILE:C	1:A:252:CYS:CA[4_555]	0.20	2.00
1:A:33:GLY:CA	1:A:52:VAL:CG1[16_555]	0.21	1.99
1:A:211:LEU:CG	1:A:321:THR:CA[3_545]	0.21	1.99
1:A:99:GLY:C	1:A:244:LEU:CA[4_555]	0.22	1.98
1:A:108:SER:CA	1:A:175:LEU:CD1[4_555]	0.24	1.96
1:A:15:GLN:CD	1:A:117:VAL:C[6_455]	0.32	1.88
1:A:72:PHE:O	1:A:74:HIS:CA[12_555]	0.32	1.88
1:A:264:ASP:OD1	1:A:265:LEU:N[10_555]	0.38	1.82
1:A:13:THR:OG1	1:A:184:SER:CA[7_555]	0.41	1.79
1:A:155:LEU:C	1:A:183:HIS:ND1[4_555]	0.42	1.78
1:A:15:GLN:C	1:A:117:VAL:CG2[6_455]	0.43	1.77
1:A:305:MET:CG	1:A:320:THR:O[12_565]	0.45	1.75
1:A:60:LYS:C	1:A:139:PRO:CB[16_555]	0.49	1.71
1:A:71:LEU:CD1	1:A:156:PRO:CD[5_545]	0.52	1.68
1:A:114:GLN:OE1	1:A:269:HIS:O[11_655]	0.53	1.67
1:A:15:GLN:OE1	1:A:118:ASN:CA[6_455]	0.55	1.65
1:A:41:LEU:CB	1:A:132(A):PRO:CG[16_555]	0.55	1.65
1:A:199:VAL:CG2	1:A:328:ASP:N[12_565]	0.55	1.65
1:A:16:GLU:CD	1:A:114:GLN:CG[6_455]	0.56	1.64
1:A:130:HIS:CD2	1:A:130:HIS:CD2[13_655]	0.56	1.64
1:A:18:ARG:CB	1:A:295:ASN:C[16_555]	0.57	1.63
1:A:60:LYS:CG	1:A:140:GLU:N[16_555]	0.57	1.63
1:A:290:PRO:O	1:A:326:GLN:NE2[12_565]	0.57	1.63
1:A:264:ASP:CA	1:A:264:ASP:CG[10_555]	0.58	1.62
1:A:48:GLU:N	1:A:132(B):ASP:O[16_555]	0.60	1.60
1:A:11:LEU:CA	1:A:180:LEU:O[7_555]	0.62	1.58
1:A:76:ALA:O	1:A:159:ARG:NE[16_555]	0.64	1.56
1:A:180:LEU:N	1:A:274:MET:N[3_545]	0.64	1.56
1:A:0:ACE:CH3	1:A:312:GLU:OE1[5_545]	0.65	1.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:290:PRO:CB	1:A:325:ILE:O[12_565]	0.65	1.55
1:A:200:PRO:CB	1:A:283:ASP:CB[12_565]	0.66	1.54
1:A:150:TRP:NE1	1:A:183:HIS:C[4_555]	0.67	1.53
1:A:266:CYS:C	1:A:266:CYS:C[10_555]	0.68	1.52
1:A:43:LYS:CD	1:A:129:LYS:CE[3_545]	0.69	1.51
1:A:266:CYS:SG	1:A:267:ARG:CB[10_555]	0.69	1.51
1:A:305:MET:CA	1:A:320:THR:CA[12_565]	0.69	1.51
1:A:4:LYS:CG	1:A:8:ILE:CA[11_555]	0.70	1.50
1:A:15:GLN:CD	1:A:117:VAL:O[6_455]	0.70	1.50
1:A:60:LYS:CE	1:A:140:GLU:O[16_555]	0.72	1.48
1:A:83:LYS:CG	1:A:246:TYR:CD2[16_555]	0.72	1.48
1:A:192:ILE:O	1:A:323:TRP:CZ3[12_565]	0.72	1.48
1:A:18:ARG:CD	1:A:265:LEU:CG[7_555]	0.73	1.47
1:A:62:GLU:CA	1:A:244:LEU:CD1[14_555]	0.73	1.47
1:A:123:ILE:CB	1:A:249:TRP:CB[4_555]	0.73	1.47
1:A:36:ASP:CG	1:A:87:VAL:CA[16_555]	0.74	1.46
1:A:28:GLY:N	1:A:29:CYS:CA[16_555]	0.75	1.45
1:A:71:LEU:CD1	1:A:183:HIS:CD2[8_555]	0.75	1.45
1:A:85:TYR:CD1	1:A:85:TYR:CD1[13_655]	0.76	1.44
1:A:210:LYS:CB	1:A:323:TRP:CA[3_545]	0.76	1.44
1:A:18:ARG:O	1:A:296:GLY:CA[16_555]	0.78	1.42
1:A:127:ILE:N	1:A:249:TRP:CD2[4_555]	0.78	1.42
1:A:145:LYS:C	1:A:174:TYR:CG[4_555]	0.78	1.42
1:A:12:ALA:CA	1:A:180:LEU:CB[7_555]	0.79	1.41
1:A:178:GLU:N	1:A:286:PHE:CE1[3_545]	0.79	1.41
1:A:4:LYS:CA	1:A:5:ASP:OD1[12_555]	0.81	1.39
1:A:122:PHE:N	1:A:259:GLN:CD[4_555]	0.81	1.39
1:A:199:VAL:O	1:A:327:LYS:CB[12_565]	0.81	1.39
1:A:209:ALA:CB	1:A:285:VAL:N[3_545]	0.82	1.38
1:A:11:LEU:N	1:A:180:LEU:O[7_555]	0.83	1.37
1:A:12:ALA:CB	1:A:274:MET:N[6_455]	0.83	1.37
1:A:57:ASP:CA	1:A:101:ARG:CG[16_555]	0.83	1.37
1:A:86:SER:CB	1:A:249:TRP:N[16_555]	0.83	1.37
1:A:30:ASP:CB	1:A:53:ASP:CG[16_555]	0.84	1.36
1:A:49:VAL:C	1:A:94:VAL:CA[16_555]	0.84	1.36
1:A:36:ASP:OD1	1:A:87:VAL:CA[16_555]	0.85	1.35
1:A:85:TYR:CD1	1:A:85:TYR:CE1[13_655]	0.85	1.35
1:A:126:ASN:O	1:A:249:TRP:CE3[4_555]	0.85	1.35
1:A:6:LYS:CA	1:A:278:PHE:CB[5_545]	0.86	1.34
1:A:165:CYS:N	1:A:330:LYS:CA[12_565]	0.86	1.34
1:A:285:VAL:CG1	1:A:304:LYS:N[11_655]	0.86	1.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:77:LYS:O	1:A:133:CYS:C[16_555]	0.87	1.33
1:A:208:ASP:O	1:A:322:LEU:C[3_545]	0.87	1.33
1:A:100:ALA:N	1:A:243:VAL:O[4_555]	0.88	1.32
1:A:147:LYS:CD	1:A:300:CYS:C[11_655]	0.88	1.32
1:A:277:ASP:CB	1:A:279:TYR:CZ[11_655]	0.88	1.32
1:A:79:VAL:N	1:A:94:VAL:O[16_555]	0.89	1.31
1:A:271:VAL:CG1	1:A:331:PHE:CD1[12_565]	0.89	1.31
1:A:18:ARG:CA	1:A:296:GLY:N[16_555]	0.90	1.30
1:A:35:ALA:CB	1:A:86:SER:CA[16_555]	0.90	1.30
1:A:66:LEU:CD2	1:A:127:ILE:O[16_555]	0.91	1.29
1:A:264:ASP:CA	1:A:264:ASP:OD2[10_555]	0.91	1.29
1:A:266:CYS:CB	1:A:267:ARG:CA[10_555]	0.92	1.28
1:A:38:ILE:CD1	1:A:129:LYS:O[16_555]	0.94	1.26
1:A:119:ILE:O	1:A:252:CYS:CA[4_555]	0.94	1.26
1:A:126:ASN:O	1:A:249:TRP:CD2[4_555]	0.94	1.26
1:A:151:LYS:O	1:A:158:HIS:CB[11_655]	0.94	1.26
1:A:13:THR:N	1:A:286:PHE:CG[6_455]	0.95	1.25
1:A:305:MET:CE	1:A:324:ASP:N[12_565]	0.95	1.25
1:A:24:ILE:CG2	1:A:91:SER:CB[16_555]	0.96	1.24
1:A:47:ASP:C	1:A:132(B):ASP:CG[16_555]	0.96	1.24
1:A:147:LYS:C	1:A:185:CYS:O[4_555]	0.96	1.24
1:A:147:LYS:CD	1:A:301:ASN:N[11_655]	0.96	1.24
1:A:156:PRO:N	1:A:183:HIS:ND1[4_555]	0.96	1.24
1:A:156:PRO:N	1:A:183:HIS:CG[4_555]	0.96	1.24
1:A:198:SER:O	1:A:283:ASP:OD2[12_565]	0.96	1.24
1:A:77:LYS:N	1:A:159:ARG:NH1[16_555]	0.97	1.23
1:A:231:TRP:CE2	1:A:328:ASP:OD2[12_565]	0.97	1.23
1:A:210:LYS:N	1:A:323:TRP:N[3_545]	0.98	1.22
1:A:16:GLU:C	1:A:117:VAL:CG1[6_455]	0.99	1.21
1:A:32:VAL:CG2	1:A:81:GLY:N[16_555]	0.99	1.21
1:A:41:LEU:CD1	1:A:131:SER:CA[16_555]	0.99	1.21
1:A:147:LYS:CB	1:A:186:LEU:C[4_555]	0.99	1.21
1:A:150:TRP:CZ3	1:A:186:LEU:CD1[4_555]	0.99	1.21
1:A:180:LEU:CD1	1:A:285:VAL:O[3_545]	0.99	1.21
1:A:192:ILE:CG1	1:A:323:TRP:CE3[12_565]	0.99	1.21
1:A:195:HIS:CA	1:A:329:LEU:CG[12_565]	0.99	1.21
1:A:3:LEU:CB	1:A:279:TYR:CE2[5_545]	1.00	1.20
1:A:41:LEU:CG	1:A:131:SER:C[16_555]	1.00	1.20
1:A:30:ASP:CA	1:A:52:VAL:O[16_555]	1.01	1.19
1:A:57:ASP:CB	1:A:101:ARG:CG[16_555]	1.01	1.19
1:A:276:LYS:C	1:A:279:TYR:OH[11_655]	1.01	1.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4:LYS:O	1:A:5:ASP:OD2[12_555]	1.03	1.17
1:A:78:ILE:N	1:A:135:LYS:N[16_555]	1.03	1.17
1:A:114:GLN:CA	1:A:299:HIS:CD2[11_655]	1.03	1.17
1:A:120:PHE:O	1:A:252:CYS:CB[4_555]	1.03	1.17
1:A:147:LYS:CB	1:A:187:VAL:N[4_555]	1.03	1.17
1:A:57:ASP:CA	1:A:101:ARG:CB[16_555]	1.04	1.16
1:A:58:LYS:O	1:A:97:THR:C[16_555]	1.04	1.16
1:A:4:LYS:C	1:A:5:ASP:OD2[12_555]	1.05	1.15
1:A:35:ALA:CB	1:A:86:SER:N[16_555]	1.05	1.15
1:A:62:GLU:N	1:A:96:ILE:CD1[16_555]	1.05	1.15
1:A:84:ASP:CA	2:A:332:NAD:N6A[13_655]	1.05	1.15
1:A:110:LEU:C	1:A:173:ARG:CB[4_555]	1.05	1.15
1:A:150:TRP:CD2	1:A:186:LEU:N[4_555]	1.05	1.15
1:A:210:LYS:CG	1:A:303:VAL:O[10_555]	1.05	1.15
1:A:15:GLN:OE1	1:A:118:ASN:CB[6_455]	1.06	1.14
1:A:20:TYR:CE2	1:A:122:PHE:CE1[6_455]	1.06	1.14
1:A:41:LEU:CA	1:A:132(A):PRO:CG[16_555]	1.06	1.14
1:A:126:ASN:C	1:A:249:TRP:CD2[4_555]	1.06	1.14
1:A:281:ILE:CA	1:A:305:MET:O[11_655]	1.06	1.14
1:A:68:HIS:CD2	1:A:154:GLY:N[16_555]	1.07	1.13
1:A:150:TRP:CZ2	1:A:186:LEU:CB[4_555]	1.07	1.13
1:A:156:PRO:CA	1:A:183:HIS:CG[4_555]	1.07	1.13
1:A:192:ILE:CB	1:A:324:ASP:O[12_565]	1.07	1.13
1:A:84:ASP:CA	1:A:248:ALA:CB[16_555]	1.08	1.12
1:A:179:ARG:C	1:A:274:MET:N[3_545]	1.09	1.11
1:A:38:ILE:CG1	1:A:129:LYS:O[16_555]	1.10	1.10
1:A:265:LEU:O	1:A:293:LEU:O[10_555]	1.11	1.09
1:A:12:ALA:CB	1:A:180:LEU:CA[7_555]	1.12	1.08
1:A:12:ALA:C	1:A:286:PHE:CG[6_455]	1.12	1.08
1:A:13:THR:C	1:A:184:SER:O[7_555]	1.12	1.08
1:A:30:ASP:CB	1:A:53:ASP:CB[16_555]	1.12	1.08
1:A:41:LEU:CG	1:A:132(A):PRO:CD[16_555]	1.12	1.08
1:A:48:GLU:C	1:A:91:SER:O[16_555]	1.12	1.08
1:A:65:ASP:CA	1:A:149:ASP:CG[16_555]	1.12	1.08
1:A:111:ASN:N	1:A:173:ARG:CA[4_555]	1.12	1.08
1:A:156:PRO:CD	1:A:183:HIS:CD2[4_555]	1.12	1.08
1:A:165:CYS:CA	1:A:330:LYS:CG[12_565]	1.12	1.08
1:A:200:PRO:CG	1:A:283:ASP:CB[12_565]	1.12	1.08
1:A:284:ASN:C	1:A:302:ILE:O[11_655]	1.12	1.08
1:A:17:PRO:O	1:A:294:ASN:O[16_555]	1.13	1.07
1:A:83:LYS:CA	1:A:246:TYR:CE2[16_555]	1.13	1.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:145:LYS:CA	1:A:174:TYR:CG[4_555]	1.13	1.07
1:A:284:ASN:CB	1:A:302:ILE:CG2[11_655]	1.13	1.07
1:A:3:LEU:C	1:A:278:PHE:CD1[5_545]	1.14	1.06
1:A:4:LYS:C	1:A:5:ASP:CG[12_555]	1.14	1.06
1:A:13:THR:OG1	1:A:184:SER:C[7_555]	1.14	1.06
1:A:37:ALA:C	1:A:130:HIS:O[16_555]	1.14	1.06
1:A:49:VAL:CG1	1:A:133:CYS:CB[16_555]	1.14	1.06
1:A:68:HIS:CG	1:A:154:GLY:N[16_555]	1.14	1.06
1:A:108:SER:OG	1:A:172:PHE:C[4_555]	1.14	1.06
1:A:115:ARG:NH2	1:A:241:VAL:CG2[4_555]	1.14	1.06
1:A:83:LYS:CB	1:A:246:TYR:CE2[16_555]	1.15	1.05
1:A:18:ARG:CG	1:A:295:ASN:O[16_555]	1.16	1.04
1:A:25:THR:C	1:A:50:ALA:O[16_555]	1.16	1.04
1:A:65:ASP:CG	1:A:149:ASP:OD2[16_555]	1.16	1.04
1:A:130:HIS:CD2	1:A:130:HIS:NE2[13_655]	1.16	1.04
1:A:148:GLN:N	1:A:185:CYS:O[4_555]	1.16	1.04
1:A:266:CYS:CA	1:A:266:CYS:C[10_555]	1.16	1.04
1:A:277:ASP:OD1	1:A:315:LEU:N[11_655]	1.16	1.04
1:A:3:LEU:O	1:A:278:PHE:CG[5_545]	1.18	1.02
1:A:8:ILE:CG1	1:A:10:HIS:N[2_555]	1.18	1.02
1:A:11:LEU:CB	1:A:181:GLY:N[7_555]	1.18	1.02
1:A:28:GLY:N	1:A:29:CYS:CB[16_555]	1.18	1.02
1:A:49:VAL:O	1:A:94:VAL:C[16_555]	1.18	1.02
1:A:63:MET:N	1:A:96:ILE:CG2[16_555]	1.18	1.02
1:A:68:HIS:CD2	1:A:154:GLY:CA[16_555]	1.18	1.02
1:A:110:LEU:O	1:A:173:ARG:CG[4_555]	1.18	1.02
1:A:267:ARG:CG	1:A:299:HIS:CE1[10_555]	1.18	1.02
1:A:305:MET:CE	1:A:323:TRP:C[12_565]	1.18	1.02
1:A:11:LEU:CD1	1:A:181:GLY:N[7_555]	1.19	1.01
1:A:48:GLU:CG	1:A:92:LYS:O[16_555]	1.19	1.01
1:A:49:VAL:CG2	1:A:94:VAL:CG2[16_555]	1.19	1.01
1:A:58:LYS:CE	2:A:332:NAD:C3B[16_555]	1.19	1.01
1:A:110:LEU:C	1:A:173:ARG:CA[4_555]	1.19	1.01
1:A:112:LEU:N	1:A:170:ALA:C[4_555]	1.19	1.01
1:A:119:ILE:CG2	1:A:251:GLY:C[4_555]	1.19	1.01
1:A:290:PRO:C	1:A:326:GLN:CA[12_565]	1.19	1.01
1:A:12:ALA:CA	1:A:180:LEU:CA[7_555]	1.20	1.00
1:A:38:ILE:N	1:A:130:HIS:C[16_555]	1.20	1.00
1:A:65:ASP:N	1:A:149:ASP:OD1[16_555]	1.20	1.00
1:A:85:TYR:CE1	1:A:85:TYR:CE1[13_655]	1.20	1.00
1:A:110:LEU:CG	1:A:176:MET:CB[4_555]	1.20	1.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:115:ARG:CA	1:A:256:ASP:OD1[4_555]	1.20	1.00
1:A:192:ILE:C	1:A:327:LYS:N[12_565]	1.20	1.00
1:A:17:PRO:CB	1:A:297:ILE:C[16_555]	1.21	0.99
1:A:119:ILE:CG1	1:A:249:TRP:CA[4_555]	1.21	0.99
1:A:12:ALA:CB	1:A:179:ARG:O[7_555]	1.22	0.98
1:A:32:VAL:CG1	1:A:81:GLY:N[16_555]	1.22	0.98
1:A:290:PRO:CA	1:A:325:ILE:O[12_565]	1.22	0.98
1:A:295:ASN:OD1	1:A:295:ASN:ND2[10_555]	1.22	0.98
1:A:32:VAL:CB	1:A:81:GLY:N[16_555]	1.23	0.97
1:A:119:ILE:CG1	1:A:249:TRP:C[4_555]	1.23	0.97
1:A:120:PHE:N	1:A:252:CYS:CA[4_555]	1.23	0.97
1:A:126:ASN:C	1:A:249:TRP:CE3[4_555]	1.23	0.97
1:A:150:TRP:CB	1:A:184:SER:N[4_555]	1.23	0.97
1:A:155:LEU:CA	1:A:183:HIS:CE1[4_555]	1.23	0.97
1:A:284:ASN:CG	1:A:289:LEU:CD2[11_655]	1.23	0.97
1:A:28:GLY:CA	1:A:29:CYS:CA[16_555]	1.24	0.96
1:A:60:LYS:CA	1:A:139:PRO:CA[16_555]	1.24	0.96
1:A:266:CYS:C	1:A:267:ARG:N[10_555]	1.24	0.96
1:A:37:ALA:O	1:A:130:HIS:C[16_555]	1.25	0.95
1:A:84:ASP:CB	1:A:248:ALA:CB[16_555]	1.25	0.95
1:A:12:ALA:CB	1:A:180:LEU:N[7_555]	1.26	0.94
1:A:28:GLY:C	1:A:29:CYS:N[16_555]	1.26	0.94
1:A:32:VAL:N	1:A:81:GLY:O[16_555]	1.26	0.94
1:A:48:GLU:CA	1:A:132(B):ASP:O[16_555]	1.26	0.94
1:A:114:GLN:CB	1:A:299:HIS:CG[11_655]	1.26	0.94
1:A:156:PRO:CB	1:A:183:HIS:CB[4_555]	1.26	0.94
1:A:281:ILE:N	1:A:305:MET:O[11_655]	1.26	0.94
1:A:14:SER:N	1:A:147:LYS:CA[6_455]	1.27	0.93
1:A:77:LYS:NZ	1:A:161:ILE:CB[16_555]	1.27	0.93
1:A:83:LYS:CB	1:A:246:TYR:CZ[16_555]	1.27	0.93
1:A:147:LYS:CA	1:A:184:SER:C[4_555]	1.27	0.93
1:A:207:TRP:CH2	1:A:325:ILE:CB[3_545]	1.27	0.93
1:A:25:THR:O	1:A:50:ALA:C[16_555]	1.28	0.92
1:A:36:ASP:CG	1:A:87:VAL:C[16_555]	1.28	0.92
1:A:47:ASP:CA	1:A:132(B):ASP:CG[16_555]	1.28	0.92
1:A:48:GLU:O	1:A:91:SER:C[16_555]	1.28	0.92
1:A:62:GLU:CA	1:A:96:ILE:CG1[16_555]	1.28	0.92
1:A:64:MET:SD	1:A:174:TYR:CE2[14_555]	1.28	0.92
1:A:146:ASN:N	1:A:174:TYR:CE2[4_555]	1.28	0.92
1:A:150:TRP:CG	1:A:185:CYS:N[4_555]	1.28	0.92
1:A:264:ASP:C	1:A:264:ASP:OD1[10_555]	1.28	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:284:ASN:CG	1:A:289:LEU:CB[11_655]	1.28	0.92
1:A:118:ASN:O	1:A:259:GLN:CG[4_555]	1.29	0.91
1:A:157:MET:CG	1:A:177:GLY:O[4_555]	1.29	0.91
1:A:208:ASP:OD1	1:A:286:PHE:N[3_545]	1.29	0.91
1:A:210:LYS:N	1:A:303:VAL:CA[10_555]	1.29	0.91
1:A:4:LYS:C	1:A:5:ASP:OD1[12_555]	1.30	0.90
1:A:24:ILE:CB	1:A:91:SER:CB[16_555]	1.30	0.90
1:A:36:ASP:OD1	1:A:87:VAL:CG2[16_555]	1.30	0.90
1:A:41:LEU:CG	1:A:132(A):PRO:N[16_555]	1.30	0.90
1:A:55:MET:CA	1:A:101:ARG:NH2[16_555]	1.30	0.90
1:A:113:VAL:CB	1:A:173:ARG:CZ[4_555]	1.30	0.90
1:A:150:TRP:CG	1:A:184:SER:N[4_555]	1.30	0.90
1:A:290:PRO:CB	1:A:325:ILE:C[12_565]	1.30	0.90
1:A:17:PRO:N	1:A:117:VAL:CG1[6_455]	1.31	0.89
1:A:20:TYR:CD2	1:A:122:PHE:CE1[6_455]	1.31	0.89
1:A:86:SER:CB	1:A:248:ALA:C[16_555]	1.31	0.89
1:A:145:LYS:N	1:A:174:TYR:CB[4_555]	1.31	0.89
1:A:146:ASN:CA	1:A:174:TYR:CZ[4_555]	1.31	0.89
1:A:211:LEU:CB	1:A:321:THR:CA[3_545]	1.31	0.89
1:A:281:ILE:CB	1:A:304:LYS:CB[11_655]	1.31	0.89
1:A:8:ILE:CD1	1:A:9:GLY:O[2_555]	1.32	0.88
1:A:27:VAL:N	1:A:51:LEU:CD2[16_555]	1.32	0.88
1:A:36:ASP:OD2	1:A:87:VAL:C[16_555]	1.32	0.88
1:A:306:LYS:CB	1:A:316:GLN:NE2[12_565]	1.32	0.88
1:A:25:THR:N	1:A:25:THR:N[16_555]	1.33	0.87
1:A:64:MET:SD	1:A:146:ASN:N[16_555]	1.33	0.87
1:A:76:ALA:C	1:A:159:ARG:CD[16_555]	1.33	0.87
1:A:179:ARG:N	1:A:273:THR:C[3_545]	1.33	0.87
1:A:27:VAL:C	1:A:29:CYS:CB[16_555]	1.34	0.86
1:A:41:LEU:CD1	1:A:131:SER:CB[16_555]	1.34	0.86
1:A:63:MET:SD	1:A:137:LEU:CA[16_555]	1.34	0.86
1:A:78:ILE:O	1:A:135:LYS:C[16_555]	1.34	0.86
1:A:271:VAL:CA	1:A:329:LEU:O[12_565]	1.34	0.86
1:A:282:LYS:CB	1:A:314:GLN:CB[11_655]	1.34	0.86
1:A:284:ASN:O	1:A:302:ILE:CA[11_655]	1.34	0.86
1:A:284:ASN:CA	1:A:302:ILE:CG2[11_655]	1.34	0.86
1:A:41:LEU:CD2	1:A:132(A):PRO:N[16_555]	1.35	0.85
1:A:59:LEU:C	1:A:97:THR:CA[16_555]	1.35	0.85
1:A:67:GLU:C	1:A:155:LEU:CG[16_555]	1.35	0.85
1:A:76:ALA:C	1:A:159:ARG:CZ[16_555]	1.35	0.85
1:A:248:ALA:CB	2:A:332:NAD:N6A[3_545]	1.35	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:267:ARG:CG	1:A:299:HIS:ND1[10_555]	1.35	0.85
1:A:15:GLN:CA	1:A:117:VAL:CG2[6_455]	1.36	0.84
1:A:41:LEU:CB	1:A:132(A):PRO:N[16_555]	1.36	0.84
1:A:71:LEU:CD1	1:A:156:PRO:CG[5_545]	1.36	0.84
1:A:6:LYS:CG	1:A:279:TYR:CB[5_545]	1.37	0.83
1:A:100:ALA:C	1:A:243:VAL:CG1[4_555]	1.37	0.83
1:A:111:ASN:N	1:A:173:ARG:CB[4_555]	1.37	0.83
1:A:265:LEU:CA	1:A:294:ASN:CB[10_555]	1.37	0.83
1:A:271:VAL:N	1:A:329:LEU:O[12_565]	1.37	0.83
1:A:304:LYS:O	1:A:320:THR:N[12_565]	1.37	0.83
1:A:12:ALA:O	1:A:187:VAL:CG2[7_555]	1.38	0.82
1:A:179:ARG:CD	1:A:194:GLN:NE2[3_545]	1.38	0.82
1:A:266:CYS:CA	1:A:267:ARG:N[10_555]	1.38	0.82
1:A:13:THR:CG2	1:A:286:PHE:CZ[6_455]	1.39	0.81
1:A:24:ILE:CD1	1:A:90:GLY:C[16_555]	1.39	0.81
1:A:67:GLU:OE2	1:A:135:LYS:CB[16_555]	1.39	0.81
1:A:110:LEU:N	1:A:175:LEU:CG[4_555]	1.39	0.81
1:A:145:LYS:N	1:A:174:TYR:CG[4_555]	1.39	0.81
1:A:156:PRO:CB	1:A:183:HIS:CG[4_555]	1.39	0.81
1:A:208:ASP:OD1	1:A:285:VAL:C[3_545]	1.39	0.81
1:A:54:VAL:CG2	1:A:54:VAL:CG2[13_655]	1.40	0.80
1:A:60:LYS:CE	1:A:140:GLU:C[16_555]	1.40	0.80
1:A:78:ILE:C	1:A:136:GLU:N[16_555]	1.40	0.80
1:A:231:TRP:CH2	1:A:328:ASP:OD1[12_565]	1.40	0.80
1:A:18:ARG:C	1:A:296:GLY:N[16_555]	1.41	0.79
1:A:49:VAL:O	1:A:94:VAL:CA[16_555]	1.41	0.79
1:A:58:LYS:NZ	2:A:332:NAD:O3B[16_555]	1.41	0.79
1:A:304:LYS:O	1:A:319:ALA:O[12_565]	1.41	0.79
1:A:14:SER:N	1:A:147:LYS:C[6_455]	1.42	0.78
1:A:150:TRP:CG	1:A:183:HIS:O[4_555]	1.42	0.78
1:A:207:TRP:CZ3	1:A:322:LEU:O[3_545]	1.42	0.78
1:A:15:GLN:CD	1:A:117:VAL:CA[6_455]	1.43	0.77
1:A:16:GLU:OE1	1:A:293:LEU:N[16_555]	1.43	0.77
1:A:56:GLU:OE2	1:A:242:ASP:CB[16_555]	1.43	0.77
1:A:145:LYS:CA	1:A:174:TYR:CB[4_555]	1.43	0.77
1:A:156:PRO:CG	1:A:183:HIS:CD2[4_555]	1.43	0.77
1:A:165:CYS:CB	1:A:330:LYS:CD[12_565]	1.43	0.77
1:A:12:ALA:CB	1:A:179:ARG:C[7_555]	1.44	0.76
1:A:30:ASP:N	1:A:52:VAL:O[16_555]	1.44	0.76
1:A:33:GLY:N	1:A:52:VAL:CG1[16_555]	1.44	0.76
1:A:63:MET:N	1:A:96:ILE:CG1[16_555]	1.44	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:74:HIS:ND1	1:A:74:HIS:CE1[11_555]	1.44	0.76
1:A:125:PRO:CG	1:A:259:GLN:NE2[4_555]	1.44	0.76
1:A:178:GLU:N	1:A:286:PHE:CD1[3_545]	1.44	0.76
1:A:277:ASP:OD1	1:A:315:LEU:CA[11_655]	1.44	0.76
1:A:62:GLU:N	1:A:96:ILE:CG1[16_555]	1.45	0.75
1:A:144:ASP:N	1:A:175:LEU:O[4_555]	1.45	0.75
1:A:264:ASP:CB	1:A:264:ASP:CG[10_555]	1.45	0.75
1:A:38:ILE:N	1:A:130:HIS:CB[16_555]	1.46	0.74
1:A:62:GLU:OE2	1:A:84:ASP:OD1[3_545]	1.46	0.74
1:A:177:GLY:CA	1:A:286:PHE:CG[3_545]	1.46	0.74
1:A:231:TRP:CH2	1:A:328:ASP:CG[12_565]	1.46	0.74
1:A:18:ARG:NH2	1:A:121:LYS:CB[6_455]	1.47	0.73
1:A:35:ALA:O	1:A:126:ASN:OD1[3_545]	1.47	0.73
1:A:38:ILE:CB	1:A:249:TRP:CH2[14_555]	1.47	0.73
1:A:58:LYS:C	1:A:98:ALA:O[16_555]	1.47	0.73
1:A:62:GLU:CA	1:A:96:ILE:CD1[16_555]	1.47	0.73
1:A:67:GLU:O	1:A:155:LEU:CD2[16_555]	1.47	0.73
1:A:68:HIS:CD2	1:A:150:TRP:O[16_555]	1.47	0.73
1:A:80:SER:O	1:A:138:HIS:CG[16_555]	1.47	0.73
1:A:85:TYR:CE1	1:A:85:TYR:CZ[13_655]	1.47	0.73
1:A:125:PRO:CD	1:A:259:GLN:NE2[4_555]	1.47	0.73
1:A:199:VAL:CG1	1:A:327:LYS:C[12_565]	1.47	0.73
1:A:231:TRP:CZ2	1:A:328:ASP:OD2[12_565]	1.47	0.73
1:A:290:PRO:N	1:A:326:GLN:CA[12_565]	1.47	0.73
1:A:5:ASP:C	1:A:5:ASP:CG[12_555]	1.48	0.72
1:A:8:ILE:CD1	1:A:9:GLY:C[2_555]	1.48	0.72
1:A:15:GLN:CG	1:A:117:VAL:C[6_455]	1.48	0.72
1:A:18:ARG:CG	1:A:265:LEU:CG[7_555]	1.48	0.72
1:A:280:GLY:C	1:A:307:LEU:CB[11_655]	1.48	0.72
1:A:289:LEU:C	1:A:326:GLN:CD[12_565]	1.48	0.72
1:A:295:ASN:CG	1:A:295:ASN:OD1[10_555]	1.48	0.72
1:A:12:ALA:C	1:A:286:PHE:CB[6_455]	1.49	0.71
1:A:14:SER:N	1:A:185:CYS:O[7_555]	1.49	0.71
1:A:15:GLN:CD	1:A:118:ASN:N[6_455]	1.49	0.71
1:A:17:PRO:CD	1:A:299:HIS:N[16_555]	1.49	0.71
1:A:18:ARG:CA	1:A:295:ASN:C[16_555]	1.49	0.71
1:A:39:SER:CB	1:A:126:ASN:ND2[3_545]	1.49	0.71
1:A:55:MET:CB	1:A:101:ARG:NH2[16_555]	1.49	0.71
1:A:79:VAL:O	1:A:95:VAL:CG2[16_555]	1.49	0.71
1:A:83:LYS:N	1:A:247:VAL:O[16_555]	1.49	0.71
1:A:98:ALA:CB	1:A:244:LEU:CG[4_555]	1.49	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:114:GLN:CA	1:A:299:HIS:CG[11_655]	1.49	0.71
1:A:119:ILE:CD1	1:A:249:TRP:N[4_555]	1.49	0.71
1:A:156:PRO:CD	1:A:183:HIS:NE2[4_555]	1.49	0.71
1:A:282:LYS:CB	1:A:314:GLN:CG[11_655]	1.49	0.71
1:A:289:LEU:C	1:A:326:GLN:OE1[12_565]	1.49	0.71
1:A:290:PRO:C	1:A:326:GLN:CB[12_565]	1.49	0.71
1:A:12:ALA:C	1:A:286:PHE:CA[6_455]	1.50	0.70
1:A:18:ARG:CD	1:A:265:LEU:CD1[7_555]	1.50	0.70
1:A:38:ILE:CB	1:A:249:TRP:CZ2[14_555]	1.50	0.70
1:A:118:ASN:ND2	1:A:267:ARG:NE[4_555]	1.50	0.70
1:A:130:HIS:N	1:A:249:TRP:CZ2[4_555]	1.50	0.70
1:A:155:LEU:O	1:A:183:HIS:ND1[4_555]	1.50	0.70
1:A:192:ILE:CD1	1:A:323:TRP:CZ2[12_565]	1.50	0.70
1:A:8:ILE:O	1:A:9:GLY:CA[11_555]	1.51	0.69
1:A:15:GLN:C	1:A:117:VAL:CB[6_455]	1.51	0.69
1:A:15:GLN:CG	1:A:117:VAL:O[6_455]	1.51	0.69
1:A:26:VAL:O	1:A:26:VAL:CG1[16_555]	1.51	0.69
1:A:47:ASP:CA	1:A:132(B):ASP:OD2[16_555]	1.51	0.69
1:A:64:MET:C	1:A:149:ASP:OD1[16_555]	1.51	0.69
1:A:83:LYS:O	2:A:332:NAD:C6A[13_655]	1.51	0.69
1:A:110:LEU:O	1:A:173:ARG:CB[4_555]	1.51	0.69
1:A:15:GLN:N	1:A:148:GLN:CG[6_455]	1.52	0.68
1:A:30:ASP:C	1:A:52:VAL:O[16_555]	1.52	0.68
1:A:48:GLU:CB	1:A:134:LEU:CD2[16_555]	1.52	0.68
1:A:63:MET:CA	1:A:96:ILE:CG2[16_555]	1.52	0.68
1:A:148:GLN:NE2	1:A:300:CYS:N[11_655]	1.52	0.68
1:A:150:TRP:CG	1:A:183:HIS:C[4_555]	1.52	0.68
1:A:150:TRP:CE3	1:A:186:LEU:CA[4_555]	1.52	0.68
1:A:47:ASP:C	1:A:132(B):ASP:CB[16_555]	1.53	0.67
1:A:76:ALA:O	1:A:159:ARG:CD[16_555]	1.53	0.67
1:A:77:LYS:C	1:A:133:CYS:C[16_555]	1.53	0.67
1:A:77:LYS:CG	1:A:134:LEU:CA[16_555]	1.53	0.67
1:A:121:LYS:C	1:A:259:GLN:CD[4_555]	1.53	0.67
1:A:165:CYS:N	1:A:330:LYS:N[12_565]	1.53	0.67
1:A:209:ALA:O	1:A:303:VAL:CA[10_555]	1.53	0.67
1:A:266:CYS:N	1:A:266:CYS:CA[10_555]	1.53	0.67
1:A:276:LYS:O	1:A:315:LEU:CD2[11_655]	1.53	0.67
1:A:13:THR:OG1	1:A:184:SER:CB[7_555]	1.54	0.66
1:A:100:ALA:N	1:A:244:LEU:CA[4_555]	1.54	0.66
1:A:114:GLN:CA	1:A:299:HIS:NE2[11_655]	1.54	0.66
1:A:118:ASN:OD1	1:A:265:LEU:CD1[4_555]	1.54	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:155:LEU:CA	1:A:183:HIS:ND1[4_555]	1.54	0.66
1:A:231:TRP:CZ2	1:A:328:ASP:CA[12_565]	1.54	0.66
1:A:276:LYS:CG	1:A:315:LEU:CD2[11_655]	1.54	0.66
1:A:4:LYS:CA	1:A:5:ASP:OD2[12_555]	1.55	0.65
1:A:18:ARG:CA	1:A:294:ASN:O[16_555]	1.55	0.65
1:A:71:LEU:CD1	1:A:183:HIS:NE2[8_555]	1.55	0.65
1:A:119:ILE:CG1	1:A:249:TRP:N[4_555]	1.55	0.65
1:A:119:ILE:CA	1:A:252:CYS:CA[4_555]	1.55	0.65
1:A:145:LYS:N	1:A:174:TYR:C[4_555]	1.55	0.65
1:A:201:SER:C	1:A:324:ASP:OD2[12_565]	1.55	0.65
1:A:265:LEU:CA	1:A:294:ASN:CA[10_555]	1.55	0.65
1:A:271:VAL:CB	1:A:329:LEU:O[12_565]	1.55	0.65
1:A:15:GLN:OE1	1:A:118:ASN:N[6_455]	1.56	0.64
1:A:19:SER:N	1:A:296:GLY:N[16_555]	1.56	0.64
1:A:33:GLY:N	1:A:52:VAL:CA[16_555]	1.56	0.64
1:A:55:MET:C	2:A:332:NAD:O1N[16_555]	1.56	0.64
1:A:126:ASN:O	1:A:249:TRP:CE2[4_555]	1.56	0.64
1:A:28:GLY:N	1:A:29:CYS:C[16_555]	1.57	0.63
1:A:68:HIS:ND1	1:A:153:SER:O[16_555]	1.57	0.63
1:A:84:ASP:C	1:A:248:ALA:CB[16_555]	1.57	0.63
1:A:124:ILE:N	1:A:252:CYS:SG[4_555]	1.57	0.63
1:A:127:ILE:CD1	1:A:249:TRP:CD1[4_555]	1.57	0.63
1:A:141:LEU:CD2	1:A:175:LEU:N[4_555]	1.57	0.63
1:A:179:ARG:N	1:A:273:THR:O[3_545]	1.57	0.63
1:A:180:LEU:CA	1:A:274:MET:N[3_545]	1.57	0.63
1:A:192:ILE:CD1	1:A:323:TRP:CE3[12_565]	1.57	0.63
1:A:199:VAL:CG2	1:A:327:LYS:C[12_565]	1.57	0.63
1:A:284:ASN:O	1:A:302:ILE:C[11_655]	1.57	0.63
1:A:3:LEU:CD1	1:A:304:LYS:NZ[5_545]	1.58	0.62
1:A:25:THR:O	1:A:50:ALA:O[16_555]	1.58	0.62
1:A:77:LYS:O	1:A:134:LEU:N[16_555]	1.58	0.62
1:A:79:VAL:CB	1:A:95:VAL:CG2[16_555]	1.58	0.62
1:A:80:SER:CB	1:A:97:THR:CG2[16_555]	1.58	0.62
1:A:179:ARG:CA	1:A:273:THR:C[3_545]	1.58	0.62
1:A:4:LYS:O	1:A:5:ASP:CG[12_555]	1.59	0.61
1:A:16:GLU:CD	1:A:293:LEU:N[16_555]	1.59	0.61
1:A:43:LYS:CD	1:A:129:LYS:CD[3_545]	1.59	0.61
1:A:62:GLU:OE2	1:A:244:LEU:CD1[14_555]	1.59	0.61
1:A:77:LYS:O	1:A:134:LEU:CA[16_555]	1.59	0.61
1:A:179:ARG:CA	1:A:273:THR:O[3_545]	1.59	0.61
1:A:290:PRO:CG	1:A:326:GLN:N[12_565]	1.59	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:25:THR:O	1:A:50:ALA:CA[16_555]	1.60	0.60
1:A:49:VAL:CG2	1:A:94:VAL:CB[16_555]	1.60	0.60
1:A:60:LYS:O	1:A:139:PRO:CG[16_555]	1.60	0.60
1:A:60:LYS:CD	1:A:140:GLU:CB[16_555]	1.60	0.60
1:A:80:SER:OG	1:A:138:HIS:CA[16_555]	1.60	0.60
1:A:118:ASN:OD1	1:A:265:LEU:CG[4_555]	1.60	0.60
1:A:155:LEU:C	1:A:183:HIS:CE1[4_555]	1.60	0.60
1:A:36:ASP:OD2	1:A:87:VAL:O[16_555]	1.61	0.59
1:A:47:ASP:C	1:A:132(B):ASP:OD2[16_555]	1.61	0.59
1:A:110:LEU:N	1:A:175:LEU:CB[4_555]	1.61	0.59
1:A:127:ILE:CA	1:A:249:TRP:NE1[4_555]	1.61	0.59
1:A:198:SER:O	1:A:283:ASP:CG[12_565]	1.61	0.59
1:A:49:VAL:CB	1:A:94:VAL:CG2[16_555]	1.62	0.58
1:A:60:LYS:CE	1:A:141:LEU:N[16_555]	1.62	0.58
1:A:118:ASN:CG	1:A:267:ARG:NH2[4_555]	1.62	0.58
1:A:150:TRP:CH2	1:A:186:LEU:CG[4_555]	1.62	0.58
1:A:177:GLY:CA	1:A:286:PHE:CD1[3_545]	1.62	0.58
1:A:265:LEU:C	1:A:293:LEU:O[10_555]	1.62	0.58
1:A:278:PHE:N	1:A:304:LYS:CD[11_655]	1.62	0.58
1:A:13:THR:CB	1:A:184:SER:N[7_555]	1.63	0.57
1:A:16:GLU:CA	1:A:117:VAL:CG1[6_455]	1.63	0.57
1:A:24:ILE:CB	1:A:91:SER:CA[16_555]	1.63	0.57
1:A:74:HIS:CG	1:A:74:HIS:NE2[11_555]	1.63	0.57
1:A:122:PHE:CD1	1:A:263:LYS:CD[4_555]	1.63	0.57
1:A:207:TRP:CH2	1:A:325:ILE:CG1[3_545]	1.63	0.57
1:A:306:LYS:CB	1:A:316:GLN:CD[12_565]	1.63	0.57
1:A:16:GLU:CB	1:A:294:ASN:CG[16_555]	1.64	0.56
1:A:28:GLY:N	1:A:29:CYS:SG[16_555]	1.64	0.56
1:A:40:VAL:N	1:A:126:ASN:ND2[3_545]	1.64	0.56
1:A:61:GLY:N	1:A:139:PRO:CB[16_555]	1.64	0.56
1:A:77:LYS:CG	1:A:134:LEU:C[16_555]	1.64	0.56
1:A:80:SER:O	1:A:138:HIS:NE2[16_555]	1.64	0.56
1:A:86:SER:CB	1:A:119:ILE:CG1[13_655]	1.64	0.56
1:A:163:SER:N	1:A:331:PHE:O[12_565]	1.64	0.56
1:A:211:LEU:CD2	1:A:321:THR:C[3_545]	1.64	0.56
1:A:211:LEU:CD1	1:A:319:ALA:C[3_545]	1.64	0.56
1:A:211:LEU:CD1	1:A:321:THR:N[3_545]	1.64	0.56
1:A:4:LYS:CG	1:A:8:ILE:CG2[11_555]	1.65	0.55
1:A:36:ASP:OD2	1:A:87:VAL:CA[16_555]	1.65	0.55
1:A:68:HIS:ND1	1:A:154:GLY:CA[16_555]	1.65	0.55
1:A:77:LYS:O	1:A:133:CYS:CA[16_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:79:VAL:C	1:A:95:VAL:CG2[16_555]	1.65	0.55
1:A:168:ASP:OD2	1:A:330:LYS:CD[12_565]	1.65	0.55
1:A:199:VAL:O	1:A:327:LYS:CA[12_565]	1.65	0.55
1:A:211:LEU:CG	1:A:321:THR:N[3_545]	1.65	0.55
1:A:290:PRO:O	1:A:326:GLN:CD[12_565]	1.65	0.55
1:A:305:MET:SD	1:A:324:ASP:CB[12_565]	1.65	0.55
1:A:57:ASP:N	1:A:101:ARG:CD[16_555]	1.66	0.54
1:A:114:GLN:O	1:A:267:ARG:NH1[4_555]	1.66	0.54
1:A:147:LYS:CD	1:A:301:ASN:CA[11_655]	1.66	0.54
1:A:264:ASP:C	1:A:264:ASP:CG[10_555]	1.66	0.54
1:A:277:ASP:CA	1:A:279:TYR:OH[11_655]	1.66	0.54
1:A:20:TYR:CE2	1:A:263:LYS:CB[7_555]	1.67	0.53
1:A:31:ALA:N	1:A:52:VAL:O[16_555]	1.67	0.53
1:A:32:VAL:N	1:A:81:GLY:C[16_555]	1.67	0.53
1:A:48:GLU:OE2	1:A:92:LYS:C[16_555]	1.67	0.53
1:A:84:ASP:OD1	1:A:244:LEU:CD2[16_555]	1.67	0.53
1:A:101:ARG:N	1:A:243:VAL:CG1[4_555]	1.67	0.53
1:A:119:ILE:C	1:A:252:CYS:N[4_555]	1.67	0.53
1:A:119:ILE:CA	1:A:252:CYS:N[4_555]	1.67	0.53
1:A:121:LYS:CD	1:A:297:ILE:CG2[11_655]	1.67	0.53
1:A:267:ARG:CD	1:A:299:HIS:NE2[10_555]	1.67	0.53
1:A:281:ILE:CG2	1:A:304:LYS:CA[11_655]	1.67	0.53
1:A:288:SER:OG	1:A:329:LEU:CD2[12_565]	1.67	0.53
1:A:290:PRO:CA	1:A:326:GLN:CA[12_565]	1.67	0.53
1:A:305:MET:CB	1:A:320:THR:O[12_565]	1.67	0.53
1:A:8:ILE:O	1:A:9:GLY:C[2_555]	1.68	0.52
1:A:11:LEU:CB	1:A:180:LEU:O[7_555]	1.68	0.52
1:A:11:LEU:O	1:A:274:MET:CA[6_455]	1.68	0.52
1:A:38:ILE:CG1	1:A:129:LYS:C[16_555]	1.68	0.52
1:A:58:LYS:O	1:A:98:ALA:N[16_555]	1.68	0.52
1:A:122:PHE:CE1	1:A:263:LYS:CB[4_555]	1.68	0.52
1:A:130:HIS:N	1:A:249:TRP:CZ3[4_555]	1.68	0.52
1:A:150:TRP:CB	1:A:184:SER:OG[4_555]	1.68	0.52
1:A:165:CYS:CA	1:A:330:LYS:CD[12_565]	1.68	0.52
1:A:13:THR:N	1:A:286:PHE:CZ[6_455]	1.69	0.51
1:A:14:SER:C	1:A:148:GLN:CG[6_455]	1.69	0.51
1:A:18:ARG:CB	1:A:296:GLY:N[16_555]	1.69	0.51
1:A:26:VAL:CA	1:A:50:ALA:O[16_555]	1.69	0.51
1:A:30:ASP:O	1:A:52:VAL:CG2[16_555]	1.69	0.51
1:A:56:GLU:CD	1:A:242:ASP:CB[16_555]	1.69	0.51
1:A:84:ASP:OD1	1:A:244:LEU:CG[16_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:114:GLN:C	1:A:267:ARG:NH1[4_555]	1.69	0.51
1:A:147:LYS:O	1:A:185:CYS:O[4_555]	1.69	0.51
1:A:179:ARG:O	1:A:274:MET:N[3_545]	1.69	0.51
1:A:290:PRO:CG	1:A:326:GLN:CA[12_565]	1.69	0.51
1:A:112:LEU:C	1:A:170:ALA:O[4_555]	1.70	0.50
1:A:114:GLN:CG	1:A:293:LEU:N[11_655]	1.70	0.50
1:A:156:PRO:CD	1:A:183:HIS:CG[4_555]	1.70	0.50
1:A:192:ILE:O	1:A:323:TRP:CH2[12_565]	1.70	0.50
1:A:266:CYS:O	1:A:267:ARG:C[10_555]	1.70	0.50
1:A:280:GLY:CA	1:A:307:LEU:C[11_655]	1.70	0.50
1:A:295:ASN:OD1	1:A:295:ASN:OD1[10_555]	1.70	0.50
1:A:14:SER:CB	1:A:148:GLN:OE1[6_455]	1.71	0.49
1:A:41:LEU:CD2	1:A:131:SER:O[16_555]	1.71	0.49
1:A:71:LEU:CD1	1:A:183:HIS:CG[8_555]	1.71	0.49
1:A:150:TRP:CA	1:A:184:SER:OG[4_555]	1.71	0.49
1:A:180:LEU:CG	1:A:285:VAL:O[3_545]	1.71	0.49
1:A:211:LEU:CG	1:A:321:THR:C[3_545]	1.71	0.49
1:A:264:ASP:CB	1:A:295:ASN:CG[10_555]	1.71	0.49
1:A:280:GLY:C	1:A:307:LEU:C[11_655]	1.71	0.49
1:A:303:VAL:CA	1:A:323:TRP:N[12_565]	1.71	0.49
1:A:8:ILE:O	1:A:8:ILE:O[11_555]	1.72	0.48
1:A:32:VAL:C	1:A:52:VAL:CG1[16_555]	1.72	0.48
1:A:36:ASP:CA	1:A:86:SER:O[16_555]	1.72	0.48
1:A:86:SER:OG	1:A:248:ALA:O[16_555]	1.72	0.48
1:A:110:LEU:O	1:A:173:ARG:NE[4_555]	1.72	0.48
1:A:147:LYS:CE	1:A:302:ILE:CA[11_655]	1.72	0.48
1:A:192:ILE:O	1:A:323:TRP:CE3[12_565]	1.72	0.48
1:A:285:VAL:N	1:A:302:ILE:O[11_655]	1.72	0.48
1:A:13:THR:CG2	1:A:183:HIS:C[7_555]	1.73	0.47
1:A:14:SER:CA	1:A:148:GLN:N[6_455]	1.73	0.47
1:A:29:CYS:O	2:A:332:NAD:O2B[16_555]	1.73	0.47
1:A:41:LEU:CB	1:A:132(A):PRO:CD[16_555]	1.73	0.47
1:A:108:SER:OG	1:A:173:ARG:N[4_555]	1.73	0.47
1:A:114:GLN:O	1:A:267:ARG:CZ[4_555]	1.73	0.47
1:A:211:LEU:CB	1:A:321:THR:N[3_545]	1.73	0.47
1:A:15:GLN:CG	1:A:117:VAL:CA[6_455]	1.74	0.46
1:A:68:HIS:CA	1:A:155:LEU:N[16_555]	1.74	0.46
1:A:79:VAL:CA	1:A:95:VAL:CA[16_555]	1.74	0.46
1:A:85:TYR:C	1:A:248:ALA:O[16_555]	1.74	0.46
1:A:130:HIS:NE2	1:A:249:TRP:CZ2[16_555]	1.74	0.46
1:A:147:LYS:CD	1:A:300:CYS:CA[11_655]	1.74	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:150:TRP:NE1	1:A:183:HIS:O[4_555]	1.74	0.46
1:A:156:PRO:CA	1:A:183:HIS:CB[4_555]	1.74	0.46
1:A:156:PRO:N	1:A:183:HIS:CD2[4_555]	1.74	0.46
1:A:180:LEU:N	1:A:273:THR:O[3_545]	1.74	0.46
1:A:199:VAL:CB	1:A:327:LYS:CA[12_565]	1.74	0.46
1:A:16:GLU:O	1:A:117:VAL:CG1[6_455]	1.75	0.45
1:A:18:ARG:NH1	1:A:263:LYS:CD[7_555]	1.75	0.45
1:A:43:LYS:CE	1:A:129:LYS:CD[3_545]	1.75	0.45
1:A:60:LYS:C	1:A:139:PRO:CG[16_555]	1.75	0.45
1:A:118:ASN:CG	1:A:265:LEU:CD1[4_555]	1.75	0.45
1:A:165:CYS:CB	1:A:330:LYS:CE[12_565]	1.75	0.45
1:A:177:GLY:C	1:A:286:PHE:CE1[3_545]	1.75	0.45
1:A:192:ILE:CD1	1:A:323:TRP:CD2[12_565]	1.75	0.45
1:A:209:ALA:CB	1:A:302:ILE:O[10_555]	1.75	0.45
1:A:281:ILE:C	1:A:307:LEU:CG[11_655]	1.75	0.45
1:A:60:LYS:CB	2:A:332:NAD:O2D[16_555]	1.76	0.44
1:A:120:PHE:C	1:A:252:CYS:CB[4_555]	1.76	0.44
1:A:150:TRP:N	1:A:184:SER:OG[4_555]	1.76	0.44
1:A:156:PRO:CB	1:A:183:HIS:CD2[4_555]	1.76	0.44
1:A:3:LEU:CA	1:A:279:TYR:CE2[5_545]	1.77	0.43
1:A:12:ALA:CA	1:A:274:MET:N[6_455]	1.77	0.43
1:A:43:LYS:CE	1:A:129:LYS:CG[3_545]	1.77	0.43
1:A:43:LYS:CE	1:A:129:LYS:CE[3_545]	1.77	0.43
1:A:67:GLU:C	1:A:155:LEU:CB[16_555]	1.77	0.43
1:A:83:LYS:CD	1:A:246:TYR:CD2[16_555]	1.77	0.43
1:A:83:LYS:NZ	1:A:246:TYR:N[16_555]	1.77	0.43
1:A:111:ASN:CA	1:A:173:ARG:CB[4_555]	1.77	0.43
1:A:144:ASP:OD2	1:A:187:VAL:C[4_555]	1.77	0.43
1:A:210:LYS:N	1:A:303:VAL:C[10_555]	1.77	0.43
1:A:266:CYS:CB	1:A:267:ARG:N[10_555]	1.77	0.43
1:A:281:ILE:CG2	1:A:304:LYS:CB[11_655]	1.77	0.43
1:A:305:MET:CA	1:A:320:THR:C[12_565]	1.77	0.43
1:A:12:ALA:CA	1:A:180:LEU:N[7_555]	1.78	0.42
1:A:30:ASP:CB	1:A:53:ASP:OD2[16_555]	1.78	0.42
1:A:36:ASP:CB	1:A:88:SER:N[16_555]	1.78	0.42
1:A:51:LEU:CG	1:A:95:VAL:O[16_555]	1.78	0.42
1:A:58:LYS:O	1:A:98:ALA:CA[16_555]	1.78	0.42
1:A:59:LEU:O	1:A:97:THR:C[16_555]	1.78	0.42
1:A:84:ASP:C	2:A:332:NAD:N6A[13_655]	1.78	0.42
1:A:86:SER:OG	1:A:123:ILE:CG1[13_655]	1.78	0.42
1:A:96:ILE:CD1	1:A:244:LEU:CD1[4_555]	1.78	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:103:GLN:CB	1:A:243:VAL:CG2[4_555]	1.78	0.42
1:A:152:LEU:CA	1:A:297:ILE:CD1[11_655]	1.78	0.42
1:A:199:VAL:CB	1:A:327:LYS:C[12_565]	1.78	0.42
1:A:277:ASP:CB	1:A:279:TYR:CE1[11_655]	1.78	0.42
1:A:16:GLU:OE2	1:A:299:HIS:CB[16_555]	1.79	0.41
1:A:56:GLU:CD	1:A:245:THR:O[16_555]	1.79	0.41
1:A:60:LYS:CG	1:A:139:PRO:C[16_555]	1.79	0.41
1:A:70:SER:OG	1:A:72:PHE:CE2[11_555]	1.79	0.41
1:A:78:ILE:CA	1:A:134:LEU:C[16_555]	1.79	0.41
1:A:79:VAL:CB	1:A:95:VAL:CB[16_555]	1.79	0.41
1:A:150:TRP:CB	1:A:185:CYS:N[4_555]	1.79	0.41
1:A:151:LYS:CA	1:A:300:CYS:SG[11_655]	1.79	0.41
1:A:165:CYS:SG	1:A:328:ASP:CB[12_565]	1.79	0.41
1:A:208:ASP:CA	1:A:322:LEU:CA[3_545]	1.79	0.41
1:A:211:LEU:N	1:A:321:THR:O[3_545]	1.79	0.41
1:A:235:LEU:CD1	1:A:327:LYS:O[12_565]	1.79	0.41
1:A:3:LEU:CD2	1:A:279:TYR:CZ[5_545]	1.80	0.40
1:A:6:LYS:CD	1:A:316:GLN:CB[5_545]	1.80	0.40
1:A:19:SER:N	1:A:295:ASN:O[16_555]	1.80	0.40
1:A:23:LYS:CD	1:A:93:LEU:O[16_555]	1.80	0.40
1:A:60:LYS:CG	1:A:140:GLU:CA[16_555]	1.80	0.40
1:A:79:VAL:CG1	1:A:95:VAL:CG2[16_555]	1.80	0.40
1:A:147:LYS:CB	1:A:185:CYS:O[4_555]	1.80	0.40
1:A:210:LYS:CG	1:A:303:VAL:C[10_555]	1.80	0.40
1:A:15:GLN:N	1:A:148:GLN:CB[6_455]	1.81	0.39
1:A:20:TYR:CE2	1:A:263:LYS:CD[7_555]	1.81	0.39
1:A:36:ASP:CG	1:A:88:SER:N[16_555]	1.81	0.39
1:A:37:ALA:C	1:A:130:HIS:C[16_555]	1.81	0.39
1:A:63:MET:CE	1:A:137:LEU:CA[16_555]	1.81	0.39
1:A:64:MET:CB	1:A:137:LEU:CD2[16_555]	1.81	0.39
1:A:65:ASP:CB	1:A:149:ASP:CG[16_555]	1.81	0.39
1:A:71:LEU:CD2	1:A:156:PRO:CG[5_545]	1.81	0.39
1:A:208:ASP:OD2	1:A:322:LEU:CB[3_545]	1.81	0.39
1:A:271:VAL:CG2	1:A:330:LYS:O[12_565]	1.81	0.39
1:A:6:LYS:C	1:A:278:PHE:CB[5_545]	1.82	0.38
1:A:13:THR:CG2	1:A:150:TRP:NE1[6_455]	1.82	0.38
1:A:20:TYR:CZ	1:A:263:LYS:CA[7_555]	1.82	0.38
1:A:30:ASP:C	1:A:52:VAL:CG2[16_555]	1.82	0.38
1:A:63:MET:CB	1:A:96:ILE:CG2[16_555]	1.82	0.38
1:A:118:ASN:CB	1:A:259:GLN:CB[4_555]	1.82	0.38
1:A:122:PHE:CE1	1:A:263:LYS:CD[4_555]	1.82	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:123:ILE:C	1:A:252:CYS:SG[4_555]	1.82	0.38
1:A:126:ASN:CB	1:A:130:HIS:ND1[13_655]	1.82	0.38
1:A:280:GLY:O	1:A:311:GLU:C[11_655]	1.82	0.38
1:A:16:GLU:OE2	1:A:292:VAL:C[16_555]	1.83	0.37
1:A:38:ILE:CA	1:A:130:HIS:CA[16_555]	1.83	0.37
1:A:57:ASP:CB	1:A:101:ARG:CB[16_555]	1.83	0.37
1:A:58:LYS:CB	2:A:332:NAD:C5B[16_555]	1.83	0.37
1:A:77:LYS:CA	1:A:133:CYS:O[16_555]	1.83	0.37
1:A:84:ASP:OD2	1:A:99:GLY:O[13_655]	1.83	0.37
1:A:114:GLN:O	1:A:267:ARG:NE[4_555]	1.83	0.37
1:A:119:ILE:CG2	1:A:251:GLY:CA[4_555]	1.83	0.37
1:A:150:TRP:CE3	1:A:186:LEU:CB[4_555]	1.83	0.37
1:A:179:ARG:C	1:A:273:THR:C[3_545]	1.83	0.37
1:A:274:MET:CE	1:A:302:ILE:CB[11_655]	1.83	0.37
1:A:7:LEU:O	1:A:275:VAL:C[5_545]	1.84	0.36
1:A:17:PRO:C	1:A:297:ILE:O[16_555]	1.84	0.36
1:A:41:LEU:CG	1:A:131:SER:O[16_555]	1.84	0.36
1:A:84:ASP:CG	1:A:244:LEU:CD2[16_555]	1.84	0.36
1:A:120:PHE:CA	1:A:252:CYS:CB[4_555]	1.84	0.36
1:A:192:ILE:CD1	1:A:323:TRP:CE2[12_565]	1.84	0.36
1:A:209:ALA:C	1:A:303:VAL:CA[10_555]	1.84	0.36
1:A:276:LYS:O	1:A:307:LEU:CD1[11_655]	1.84	0.36
1:A:282:LYS:CG	1:A:314:GLN:CG[11_655]	1.84	0.36
1:A:7:LEU:CD2	1:A:275:VAL:CA[5_545]	1.85	0.35
1:A:9:GLY:CA	1:A:9:GLY:C[11_555]	1.85	0.35
1:A:56:GLU:N	1:A:101:ARG:NH2[16_555]	1.85	0.35
1:A:108:SER:C	1:A:175:LEU:CD1[4_555]	1.85	0.35
1:A:163:SER:N	1:A:331:PHE:C[12_565]	1.85	0.35
1:A:193:GLY:CA	1:A:323:TRP:CH2[12_565]	1.85	0.35
1:A:7:LEU:CB	1:A:275:VAL:CA[5_545]	1.86	0.34
1:A:13:THR:C	1:A:147:LYS:CA[6_455]	1.86	0.34
1:A:43:LYS:CD	1:A:129:LYS:NZ[3_545]	1.86	0.34
1:A:48:GLU:N	1:A:132(B):ASP:OD1[16_555]	1.86	0.34
1:A:56:GLU:CD	1:A:242:ASP:OD2[16_555]	1.86	0.34
1:A:63:MET:N	1:A:96:ILE:CB[16_555]	1.86	0.34
1:A:108:SER:CB	1:A:171:ARG:C[4_555]	1.86	0.34
1:A:130:HIS:N	1:A:249:TRP:CH2[4_555]	1.86	0.34
1:A:200:PRO:CG	1:A:283:ASP:CA[12_565]	1.86	0.34
1:A:265:LEU:CA	1:A:295:ASN:N[10_555]	1.86	0.34
1:A:266:CYS:CA	1:A:266:CYS:O[10_555]	1.86	0.34
1:A:277:ASP:OD1	1:A:315:LEU:CB[11_655]	1.86	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:289:LEU:O	1:A:326:GLN:OE1[12_565]	1.86	0.34
1:A:290:PRO:C	1:A:326:GLN:CG[12_565]	1.86	0.34
1:A:6:LYS:NZ	1:A:316:GLN:CG[5_545]	1.87	0.33
1:A:17:PRO:CA	1:A:117:VAL:CG1[6_455]	1.87	0.33
1:A:27:VAL:O	1:A:29:CYS:CB[16_555]	1.87	0.33
1:A:36:ASP:OD2	1:A:87:VAL:CB[16_555]	1.87	0.33
1:A:36:ASP:CA	1:A:89:ALA:N[16_555]	1.87	0.33
1:A:49:VAL:CG1	1:A:133:CYS:CA[16_555]	1.87	0.33
1:A:58:LYS:CE	2:A:332:NAD:C2B[16_555]	1.87	0.33
1:A:68:HIS:CG	1:A:154:GLY:C[16_555]	1.87	0.33
1:A:110:LEU:O	1:A:173:ARG:CD[4_555]	1.87	0.33
1:A:123:ILE:CG1	1:A:249:TRP:CB[4_555]	1.87	0.33
1:A:151:LYS:O	1:A:158:HIS:CD2[11_655]	1.87	0.33
1:A:156:PRO:CA	1:A:183:HIS:CA[4_555]	1.87	0.33
1:A:211:LEU:CD1	1:A:320:THR:N[3_545]	1.87	0.33
1:A:276:LYS:N	1:A:304:LYS:CG[11_655]	1.87	0.33
1:A:3:LEU:CA	1:A:278:PHE:CD1[5_545]	1.88	0.32
1:A:8:ILE:C	1:A:8:ILE:CD1[12_555]	1.88	0.32
1:A:14:SER:N	1:A:147:LYS:CB[6_455]	1.88	0.32
1:A:16:GLU:OE1	1:A:293:LEU:CA[16_555]	1.88	0.32
1:A:26:VAL:N	1:A:50:ALA:O[16_555]	1.88	0.32
1:A:80:SER:N	1:A:138:HIS:CB[16_555]	1.88	0.32
1:A:85:TYR:N	2:A:332:NAD:N6A[13_655]	1.88	0.32
1:A:108:SER:CB	1:A:175:LEU:CD1[4_555]	1.88	0.32
1:A:144:ASP:C	1:A:174:TYR:C[4_555]	1.88	0.32
1:A:147:LYS:CE	1:A:302:ILE:N[11_655]	1.88	0.32
1:A:150:TRP:CD1	1:A:184:SER:N[4_555]	1.88	0.32
1:A:208:ASP:C	1:A:322:LEU:C[3_545]	1.88	0.32
1:A:11:LEU:CA	1:A:180:LEU:C[7_555]	1.89	0.31
1:A:11:LEU:CD1	1:A:182:VAL:O[7_555]	1.89	0.31
1:A:47:ASP:CB	1:A:132(B):ASP:CG[16_555]	1.89	0.31
1:A:49:VAL:CG2	1:A:94:VAL:CG1[16_555]	1.89	0.31
1:A:64:MET:N	1:A:137:LEU:CG[16_555]	1.89	0.31
1:A:68:HIS:CG	1:A:153:SER:C[16_555]	1.89	0.31
1:A:199:VAL:CG2	1:A:327:LYS:CA[12_565]	1.89	0.31
1:A:271:VAL:CB	1:A:330:LYS:O[12_565]	1.89	0.31
1:A:8:ILE:CB	1:A:10:HIS:N[2_555]	1.90	0.30
1:A:16:GLU:C	1:A:294:ASN:ND2[16_555]	1.90	0.30
1:A:146:ASN:C	1:A:174:TYR:CD1[4_555]	1.90	0.30
1:A:188:ILE:CD1	1:A:325:ILE:CG2[3_545]	1.90	0.30
1:A:231:TRP:CH2	1:A:328:ASP:OD2[12_565]	1.90	0.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:260:THR:O	1:A:264:ASP:OD2[10_555]	1.90	0.30
1:A:12:ALA:O	1:A:187:VAL:CB[7_555]	1.91	0.29
1:A:13:THR:OG1	1:A:147:LYS:CA[6_455]	1.91	0.29
1:A:49:VAL:N	1:A:91:SER:O[16_555]	1.91	0.29
1:A:49:VAL:CA	1:A:94:VAL:CG2[16_555]	1.91	0.29
1:A:63:MET:CB	1:A:96:ILE:CB[16_555]	1.91	0.29
1:A:64:MET:SD	1:A:146:ASN:CA[16_555]	1.91	0.29
1:A:114:GLN:NE2	1:A:292:VAL:C[11_655]	1.91	0.29
1:A:118:ASN:C	1:A:256:ASP:OD2[4_555]	1.91	0.29
1:A:130:HIS:NE2	1:A:249:TRP:CE2[16_555]	1.91	0.29
1:A:144:ASP:CA	1:A:174:TYR:C[4_555]	1.91	0.29
1:A:150:TRP:CD1	1:A:183:HIS:C[4_555]	1.91	0.29
1:A:150:TRP:CE2	1:A:183:HIS:O[4_555]	1.91	0.29
1:A:195:HIS:CB	1:A:329:LEU:CG[12_565]	1.91	0.29
1:A:303:VAL:O	1:A:323:TRP:CA[12_565]	1.91	0.29
1:A:11:LEU:C	1:A:180:LEU:C[7_555]	1.92	0.28
1:A:18:ARG:CZ	1:A:121:LYS:CB[6_455]	1.92	0.28
1:A:26:VAL:N	1:A:26:VAL:N[16_555]	1.92	0.28
1:A:36:ASP:C	1:A:89:ALA:CA[16_555]	1.92	0.28
1:A:71:LEU:CD1	1:A:156:PRO:N[5_545]	1.92	0.28
1:A:79:VAL:O	1:A:95:VAL:CB[16_555]	1.92	0.28
1:A:85:TYR:CG	1:A:85:TYR:CE1[13_655]	1.92	0.28
1:A:147:LYS:N	1:A:184:SER:CB[4_555]	1.92	0.28
1:A:150:TRP:CA	1:A:185:CYS:N[4_555]	1.92	0.28
1:A:265:LEU:O	1:A:294:ASN:CA[10_555]	1.92	0.28
1:A:271:VAL:CA	1:A:331:PHE:CA[12_565]	1.92	0.28
1:A:290:PRO:CG	1:A:326:GLN:CB[12_565]	1.92	0.28
1:A:305:MET:CB	1:A:320:THR:C[12_565]	1.92	0.28
1:A:305:MET:SD	1:A:324:ASP:N[12_565]	1.92	0.28
1:A:7:LEU:N	1:A:278:PHE:CB[5_545]	1.93	0.27
1:A:14:SER:CA	1:A:185:CYS:O[7_555]	1.93	0.27
1:A:16:GLU:N	1:A:117:VAL:CB[6_455]	1.93	0.27
1:A:18:ARG:C	1:A:296:GLY:CA[16_555]	1.93	0.27
1:A:24:ILE:CG1	1:A:90:GLY:O[16_555]	1.93	0.27
1:A:43:LYS:CG	1:A:129:LYS:CD[3_545]	1.93	0.27
1:A:56:GLU:OE1	1:A:245:THR:C[16_555]	1.93	0.27
1:A:58:LYS:CB	2:A:332:NAD:O4B[16_555]	1.93	0.27
1:A:127:ILE:N	1:A:249:TRP:CG[4_555]	1.93	0.27
1:A:150:TRP:CZ2	1:A:186:LEU:CG[4_555]	1.93	0.27
1:A:309:PRO:CG	1:A:309:PRO:CG[13_654]	1.93	0.27
1:A:5:ASP:O	1:A:5:ASP:CB[12_555]	1.94	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:6:LYS:CB	1:A:279:TYR:CB[5_545]	1.94	0.26
1:A:16:GLU:OE2	1:A:292:VAL:CA[16_555]	1.94	0.26
1:A:18:ARG:C	1:A:295:ASN:O[16_555]	1.94	0.26
1:A:55:MET:C	1:A:101:ARG:NH2[16_555]	1.94	0.26
1:A:58:LYS:CD	2:A:332:NAD:C5B[16_555]	1.94	0.26
1:A:72:PHE:O	1:A:74:HIS:N[12_555]	1.94	0.26
1:A:84:ASP:CB	2:A:332:NAD:N6A[13_655]	1.94	0.26
1:A:144:ASP:CB	1:A:174:TYR:CA[4_555]	1.94	0.26
1:A:177:GLY:C	1:A:286:PHE:CZ[3_545]	1.94	0.26
1:A:267:ARG:CD	1:A:299:HIS:ND1[10_555]	1.94	0.26
1:A:274:MET:CE	1:A:302:ILE:CG1[11_655]	1.94	0.26
1:A:284:ASN:N	1:A:289:LEU:CG[11_655]	1.94	0.26
1:A:5:ASP:N	1:A:5:ASP:OD1[12_555]	1.95	0.25
1:A:16:GLU:CG	1:A:114:GLN:CG[6_455]	1.95	0.25
1:A:46:ALA:O	1:A:132(B):ASP:CB[16_555]	1.95	0.25
1:A:145:LYS:CA	1:A:174:TYR:CD2[4_555]	1.95	0.25
1:A:280:GLY:CA	1:A:307:LEU:O[11_655]	1.95	0.25
1:A:303:VAL:CB	1:A:325:ILE:CA[12_565]	1.95	0.25
1:A:15:GLN:CA	1:A:117:VAL:CB[6_455]	1.96	0.24
1:A:33:GLY:CA	1:A:52:VAL:CB[16_555]	1.96	0.24
1:A:35:ALA:CA	1:A:85:TYR:C[16_555]	1.96	0.24
1:A:43:LYS:CG	1:A:129:LYS:CG[3_545]	1.96	0.24
1:A:49:VAL:C	1:A:94:VAL:N[16_555]	1.96	0.24
1:A:57:ASP:O	1:A:98:ALA:O[16_555]	1.96	0.24
1:A:150:TRP:CD2	1:A:183:HIS:O[4_555]	1.96	0.24
1:A:165:CYS:CB	1:A:330:LYS:CG[12_565]	1.96	0.24
1:A:179:ARG:CB	1:A:287:LEU:CB[3_545]	1.96	0.24
1:A:277:ASP:CG	1:A:315:LEU:CG[11_655]	1.96	0.24
1:A:284:ASN:O	1:A:302:ILE:O[11_655]	1.96	0.24
1:A:284:ASN:ND2	1:A:289:LEU:CD2[11_655]	1.96	0.24
1:A:290:PRO:CA	1:A:325:ILE:C[12_565]	1.96	0.24
1:A:16:GLU:OE2	1:A:292:VAL:O[16_555]	1.97	0.23
1:A:56:GLU:OE1	1:A:246:TYR:CA[16_555]	1.97	0.23
1:A:96:ILE:CG1	1:A:244:LEU:CD1[4_555]	1.97	0.23
1:A:284:ASN:CA	1:A:302:ILE:CB[11_655]	1.97	0.23
1:A:17:PRO:CB	1:A:299:HIS:N[16_555]	1.98	0.22
1:A:27:VAL:C	1:A:29:CYS:SG[16_555]	1.98	0.22
1:A:31:ALA:CB	1:A:83:LYS:N[16_555]	1.98	0.22
1:A:56:GLU:CB	1:A:245:THR:O[16_555]	1.98	0.22
1:A:62:GLU:N	1:A:244:LEU:CD1[14_555]	1.98	0.22
1:A:68:HIS:N	1:A:155:LEU:CD2[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:74:HIS:CG	1:A:74:HIS:CE1[11_555]	1.98	0.22
1:A:78:ILE:CG1	1:A:135:LYS:CB[16_555]	1.98	0.22
1:A:118:ASN:O	1:A:259:GLN:OE1[4_555]	1.98	0.22
1:A:119:ILE:CG2	1:A:252:CYS:N[4_555]	1.98	0.22
1:A:121:LYS:CD	1:A:296:GLY:C[11_655]	1.98	0.22
1:A:179:ARG:C	1:A:273:THR:O[3_545]	1.98	0.22
1:A:192:ILE:CB	1:A:326:GLN:C[12_565]	1.98	0.22
1:A:15:GLN:OE1	1:A:256:ASP:OD2[7_555]	1.99	0.21
1:A:16:GLU:CA	1:A:294:ASN:ND2[16_555]	1.99	0.21
1:A:20:TYR:OH	1:A:263:LYS:CA[7_555]	1.99	0.21
1:A:48:GLU:CD	1:A:92:LYS:O[16_555]	1.99	0.21
1:A:55:MET:O	2:A:332:NAD:O3[16_555]	1.99	0.21
1:A:60:LYS:CD	1:A:140:GLU:CA[16_555]	1.99	0.21
1:A:78:ILE:CA	1:A:135:LYS:CA[16_555]	1.99	0.21
1:A:79:VAL:CG2	1:A:136:GLU:CG[16_555]	1.99	0.21
1:A:145:LYS:N	1:A:174:TYR:CA[4_555]	1.99	0.21
1:A:147:LYS:N	1:A:184:SER:CA[4_555]	1.99	0.21
1:A:211:LEU:CD1	1:A:304:LYS:O[10_555]	1.99	0.21
1:A:265:LEU:N	1:A:295:ASN:N[10_555]	1.99	0.21
1:A:289:LEU:O	1:A:326:GLN:CD[12_565]	1.99	0.21
1:A:3:LEU:O	1:A:278:PHE:CD1[5_545]	2.00	0.20
1:A:8:ILE:CB	1:A:8:ILE:CD1[12_555]	2.00	0.20
1:A:12:ALA:N	1:A:180:LEU:CA[7_555]	2.00	0.20
1:A:14:SER:O	1:A:117:VAL:CG2[6_455]	2.00	0.20
1:A:55:MET:C	1:A:101:ARG:CZ[16_555]	2.00	0.20
1:A:59:LEU:CD1	2:A:332:NAD:O3[16_555]	2.00	0.20
1:A:65:ASP:OD1	1:A:149:ASP:OD2[16_555]	2.00	0.20
1:A:84:ASP:N	1:A:248:ALA:CA[16_555]	2.00	0.20
1:A:99:GLY:CA	1:A:243:VAL:O[4_555]	2.00	0.20
1:A:109:ARG:C	1:A:175:LEU:CG[4_555]	2.00	0.20
1:A:130:HIS:CD2	1:A:249:TRP:CZ2[4_555]	2.00	0.20
1:A:156:PRO:C	1:A:183:HIS:CD2[4_555]	2.00	0.20
1:A:180:LEU:CG	1:A:286:PHE:CA[3_545]	2.00	0.20
1:A:195:HIS:CA	1:A:329:LEU:CB[12_565]	2.00	0.20
1:A:209:ALA:C	1:A:303:VAL:N[10_555]	2.00	0.20
1:A:284:ASN:ND2	1:A:289:LEU:CB[11_655]	2.00	0.20
1:A:305:MET:CA	1:A:320:THR:CB[12_565]	2.00	0.20
1:A:13:THR:N	1:A:177:GLY:CA[7_555]	2.01	0.19
1:A:27:VAL:CA	1:A:51:LEU:CD2[16_555]	2.01	0.19
1:A:60:LYS:CD	1:A:140:GLU:C[16_555]	2.01	0.19
1:A:78:ILE:CG2	1:A:133:CYS:O[16_555]	2.01	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:111:ASN:CB	1:A:170:ALA:CA[4_555]	2.01	0.19
1:A:118:ASN:OD1	1:A:265:LEU:CB[4_555]	2.01	0.19
1:A:122:PHE:CD2	1:A:263:LYS:CE[4_555]	2.01	0.19
1:A:177:GLY:N	1:A:286:PHE:O[3_545]	2.01	0.19
1:A:195:HIS:CB	1:A:329:LEU:CD1[12_565]	2.01	0.19
1:A:199:VAL:CG1	1:A:327:LYS:O[12_565]	2.01	0.19
1:A:264:ASP:O	1:A:264:ASP:OD1[10_555]	2.01	0.19
1:A:271:VAL:N	1:A:330:LYS:C[12_565]	2.01	0.19
1:A:3:LEU:CD2	1:A:277:ASP:CB[16_555]	2.02	0.18
1:A:12:ALA:C	1:A:286:PHE:CD2[6_455]	2.02	0.18
1:A:13:THR:CA	1:A:147:LYS:CA[6_455]	2.02	0.18
1:A:47:ASP:O	1:A:132(B):ASP:OD2[16_555]	2.02	0.18
1:A:66:LEU:N	1:A:149:ASP:OD1[16_555]	2.02	0.18
1:A:80:SER:N	1:A:95:VAL:CG2[16_555]	2.02	0.18
1:A:119:ILE:CG2	1:A:251:GLY:N[4_555]	2.02	0.18
1:A:127:ILE:N	1:A:249:TRP:NE1[4_555]	2.02	0.18
1:A:146:ASN:CB	1:A:174:TYR:CZ[4_555]	2.02	0.18
1:A:195:HIS:CA	1:A:329:LEU:CD1[12_565]	2.02	0.18
1:A:195:HIS:C	1:A:329:LEU:CG[12_565]	2.02	0.18
1:A:284:ASN:CG	1:A:289:LEU:CG[11_655]	2.02	0.18
1:A:304:LYS:O	1:A:321:THR:N[12_565]	2.02	0.18
1:A:13:THR:N	1:A:286:PHE:CB[6_455]	2.03	0.17
1:A:31:ALA:N	1:A:53:ASP:CA[16_555]	2.03	0.17
1:A:62:GLU:OE1	1:A:98:ALA:CA[16_555]	2.03	0.17
1:A:66:LEU:O	1:A:155:LEU:CG[16_555]	2.03	0.17
1:A:68:HIS:CD2	1:A:153:SER:C[16_555]	2.03	0.17
1:A:70:SER:OG	1:A:72:PHE:CD2[11_555]	2.03	0.17
1:A:83:LYS:N	1:A:246:TYR:CD2[16_555]	2.03	0.17
1:A:86:SER:CB	1:A:249:TRP:CA[16_555]	2.03	0.17
1:A:108:SER:O	1:A:175:LEU:CD1[4_555]	2.03	0.17
1:A:115:ARG:O	1:A:253:SER:N[4_555]	2.03	0.17
1:A:118:ASN:ND2	1:A:267:ARG:CZ[4_555]	2.03	0.17
1:A:144:ASP:CG	1:A:187:VAL:CG1[4_555]	2.03	0.17
1:A:148:GLN:NE2	1:A:299:HIS:C[11_655]	2.03	0.17
1:A:156:PRO:CA	1:A:183:HIS:CD2[4_555]	2.03	0.17
1:A:208:ASP:O	1:A:322:LEU:O[3_545]	2.03	0.17
1:A:298:SER:CB	1:A:331:PHE:CZ[12_565]	2.03	0.17
1:A:4:LYS:CG	1:A:8:ILE:CB[11_555]	2.04	0.16
1:A:14:SER:N	1:A:184:SER:O[7_555]	2.04	0.16
1:A:19:SER:OG	1:A:296:GLY:CA[16_555]	2.04	0.16
1:A:20:TYR:CD2	1:A:263:LYS:CB[7_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:41:LEU:CD2	1:A:132(A):PRO:CA[16_555]	2.04	0.16
1:A:55:MET:O	1:A:101:ARG:NE[16_555]	2.04	0.16
1:A:98:ALA:CB	1:A:244:LEU:CB[4_555]	2.04	0.16
1:A:113:VAL:CA	1:A:173:ARG:CZ[4_555]	2.04	0.16
1:A:144:ASP:C	1:A:174:TYR:CA[4_555]	2.04	0.16
1:A:151:LYS:O	1:A:158:HIS:CA[11_655]	2.04	0.16
1:A:157:MET:CB	1:A:178:GLU:O[4_555]	2.04	0.16
1:A:165:CYS:SG	1:A:330:LYS:N[12_565]	2.04	0.16
1:A:193:GLY:N	1:A:323:TRP:CZ3[12_565]	2.04	0.16
1:A:199:VAL:CG1	1:A:328:ASP:CA[12_565]	2.04	0.16
1:A:231:TRP:NE1	1:A:327:LYS:CB[12_565]	2.04	0.16
1:A:24:ILE:CG2	1:A:91:SER:CA[16_555]	2.05	0.15
1:A:29:CYS:O	1:A:53:ASP:OD2[16_555]	2.05	0.15
1:A:34:MET:N	1:A:52:VAL:CG2[16_555]	2.05	0.15
1:A:39:SER:OG	1:A:126:ASN:ND2[3_545]	2.05	0.15
1:A:56:GLU:N	2:A:332:NAD:O1N[16_555]	2.05	0.15
1:A:58:LYS:CB	2:A:332:NAD:O2A[16_555]	2.05	0.15
1:A:66:LEU:CD1	1:A:128:VAL:N[16_555]	2.05	0.15
1:A:71:LEU:CG	1:A:156:PRO:CG[5_545]	2.05	0.15
1:A:76:ALA:C	1:A:159:ARG:NE[16_555]	2.05	0.15
1:A:100:ALA:N	1:A:243:VAL:C[4_555]	2.05	0.15
1:A:118:ASN:CB	1:A:256:ASP:OD2[4_555]	2.05	0.15
1:A:130:HIS:CE1	1:A:249:TRP:NE1[16_555]	2.05	0.15
1:A:148:GLN:N	1:A:184:SER:O[4_555]	2.05	0.15
1:A:164:GLY:C	1:A:330:LYS:CA[12_565]	2.05	0.15
1:A:210:LYS:CG	1:A:323:TRP:CA[3_545]	2.05	0.15
1:A:271:VAL:CA	1:A:330:LYS:C[12_565]	2.05	0.15
1:A:14:SER:N	1:A:148:GLN:N[6_455]	2.06	0.14
1:A:17:PRO:N	1:A:299:HIS:N[16_555]	2.06	0.14
1:A:19:SER:N	1:A:295:ASN:C[16_555]	2.06	0.14
1:A:27:VAL:CG2	1:A:51:LEU:CD1[16_555]	2.06	0.14
1:A:68:HIS:C	1:A:155:LEU:N[16_555]	2.06	0.14
1:A:118:ASN:ND2	1:A:294:ASN:OD1[11_655]	2.06	0.14
1:A:180:LEU:CB	1:A:274:MET:CA[3_545]	2.06	0.14
1:A:210:LYS:CB	1:A:303:VAL:O[10_555]	2.06	0.14
1:A:290:PRO:C	1:A:326:GLN:N[12_565]	2.06	0.14
1:A:14:SER:CA	1:A:148:GLN:CA[6_455]	2.07	0.13
1:A:40:VAL:CG2	1:A:89:ALA:C[16_555]	2.07	0.13
1:A:76:ALA:O	1:A:159:ARG:CZ[16_555]	2.07	0.13
1:A:79:VAL:CG2	1:A:136:GLU:CB[16_555]	2.07	0.13
1:A:146:ASN:N	1:A:174:TYR:CG[4_555]	2.07	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:210:LYS:NZ	1:A:276:LYS:CB[3_545]	2.07	0.13
1:A:264:ASP:CB	1:A:264:ASP:OD2[10_555]	2.07	0.13
1:A:265:LEU:O	1:A:294:ASN:CB[10_555]	2.07	0.13
1:A:15:GLN:NE2	1:A:117:VAL:CA[6_455]	2.08	0.12
1:A:20:TYR:CD2	1:A:122:PHE:CE2[6_455]	2.08	0.12
1:A:27:VAL:N	1:A:51:LEU:CB[16_555]	2.08	0.12
1:A:37:ALA:O	1:A:131:SER:N[16_555]	2.08	0.12
1:A:57:ASP:OD2	1:A:103:GLN:NE2[16_555]	2.08	0.12
1:A:78:ILE:CB	1:A:135:LYS:CA[16_555]	2.08	0.12
1:A:78:ILE:O	1:A:136:GLU:N[16_555]	2.08	0.12
1:A:83:LYS:N	1:A:247:VAL:C[16_555]	2.08	0.12
1:A:156:PRO:N	1:A:183:HIS:NE2[4_555]	2.08	0.12
1:A:199:VAL:CG1	1:A:328:ASP:C[12_565]	2.08	0.12
1:A:210:LYS:CE	1:A:284:ASN:CA[3_545]	2.08	0.12
1:A:211:LEU:CD1	1:A:319:ALA:O[3_545]	2.08	0.12
1:A:270:PRO:C	1:A:330:LYS:CB[12_565]	2.08	0.12
1:A:7:LEU:N	1:A:278:PHE:CD2[5_545]	2.09	0.11
1:A:46:ALA:C	1:A:132(B):ASP:CG[16_555]	2.09	0.11
1:A:47:ASP:N	1:A:132(B):ASP:CG[16_555]	2.09	0.11
1:A:53:ASP:O	1:A:246:TYR:CE1[16_555]	2.09	0.11
1:A:54:VAL:C	1:A:246:TYR:CE1[16_555]	2.09	0.11
1:A:59:LEU:C	1:A:97:THR:C[16_555]	2.09	0.11
1:A:78:ILE:CG1	1:A:135:LYS:CA[16_555]	2.09	0.11
1:A:78:ILE:CB	1:A:135:LYS:N[16_555]	2.09	0.11
1:A:86:SER:OG	1:A:123:ILE:CD1[13_655]	2.09	0.11
1:A:125:PRO:CB	1:A:259:GLN:NE2[4_555]	2.09	0.11
1:A:145:LYS:CB	1:A:174:TYR:CE2[4_555]	2.09	0.11
1:A:148:GLN:NE2	1:A:298:SER:O[11_655]	2.09	0.11
1:A:151:LYS:CE	1:A:288:SER:CA[11_655]	2.09	0.11
1:A:177:GLY:CA	1:A:286:PHE:CB[3_545]	2.09	0.11
1:A:192:ILE:CG2	1:A:324:ASP:O[12_565]	2.09	0.11
1:A:208:ASP:CA	1:A:322:LEU:C[3_545]	2.09	0.11
1:A:277:ASP:CG	1:A:279:TYR:CE1[11_655]	2.09	0.11
1:A:304:LYS:C	1:A:320:THR:N[12_565]	2.09	0.11
1:A:13:THR:O	1:A:144:ASP:OD2[6_455]	2.10	0.10
1:A:14:SER:N	1:A:187:VAL:N[7_555]	2.10	0.10
1:A:18:ARG:CB	1:A:294:ASN:O[16_555]	2.10	0.10
1:A:26:VAL:C	1:A:51:LEU:CA[16_555]	2.10	0.10
1:A:29:CYS:O	1:A:53:ASP:CG[16_555]	2.10	0.10
1:A:58:LYS:CG	2:A:332:NAD:O4B[16_555]	2.10	0.10
1:A:67:GLU:OE2	1:A:135:LYS:CG[16_555]	2.10	0.10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:72:PHE:C	1:A:74:HIS:CA[12_555]	2.10	0.10
1:A:143:THR:OG1	1:A:175:LEU:O[4_555]	2.10	0.10
1:A:144:ASP:CB	1:A:174:TYR:C[4_555]	2.10	0.10
1:A:152:LEU:CD2	1:A:158:HIS:O[11_655]	2.10	0.10
1:A:165:CYS:CB	1:A:330:LYS:CA[12_565]	2.10	0.10
1:A:199:VAL:CG2	1:A:328:ASP:CA[12_565]	2.10	0.10
1:A:211:LEU:CD2	1:A:321:THR:CA[3_545]	2.10	0.10
1:A:216:VAL:CG2	1:A:321:THR:CG2[3_545]	2.10	0.10
1:A:4:LYS:CB	1:A:8:ILE:CA[11_555]	2.11	0.09
1:A:11:LEU:CG	1:A:181:GLY:N[7_555]	2.11	0.09
1:A:11:LEU:CB	1:A:180:LEU:C[7_555]	2.11	0.09
1:A:16:GLU:CA	1:A:299:HIS:CB[16_555]	2.11	0.09
1:A:74:HIS:CG	1:A:74:HIS:CD2[11_555]	2.11	0.09
1:A:108:SER:OG	1:A:172:PHE:N[4_555]	2.11	0.09
1:A:150:TRP:C	1:A:185:CYS:C[4_555]	2.11	0.09
1:A:200:PRO:CD	1:A:283:ASP:CB[12_565]	2.11	0.09
1:A:277:ASP:OD2	1:A:279:TYR:CE1[11_655]	2.11	0.09
1:A:277:ASP:OD1	1:A:315:LEU:CG[11_655]	2.11	0.09
1:A:24:ILE:CB	1:A:90:GLY:O[16_555]	2.12	0.08
1:A:29:CYS:O	2:A:332:NAD:C2B[16_555]	2.12	0.08
1:A:49:VAL:CA	1:A:91:SER:O[16_555]	2.12	0.08
1:A:114:GLN:CG	1:A:292:VAL:CG1[11_655]	2.12	0.08
1:A:147:LYS:CA	1:A:184:SER:CA[4_555]	2.12	0.08
1:A:211:LEU:CD2	1:A:322:LEU:N[3_545]	2.12	0.08
1:A:231:TRP:CZ2	1:A:328:ASP:N[12_565]	2.12	0.08
1:A:265:LEU:CB	1:A:294:ASN:OD1[10_555]	2.12	0.08
1:A:265:LEU:CA	1:A:294:ASN:C[10_555]	2.12	0.08
1:A:289:LEU:CD2	1:A:323:TRP:NE1[12_565]	2.12	0.08
1:A:7:LEU:CB	1:A:275:VAL:CB[5_545]	2.13	0.07
1:A:11:LEU:CD1	1:A:182:VAL:C[7_555]	2.13	0.07
1:A:14:SER:OG	1:A:113:VAL:CG2[6_455]	2.13	0.07
1:A:41:LEU:CD2	1:A:132(A):PRO:C[16_555]	2.13	0.07
1:A:60:LYS:O	1:A:139:PRO:CB[16_555]	2.13	0.07
1:A:62:GLU:C	1:A:244:LEU:CD1[14_555]	2.13	0.07
1:A:80:SER:C	1:A:138:HIS:NE2[16_555]	2.13	0.07
1:A:83:LYS:CA	1:A:246:TYR:CZ[16_555]	2.13	0.07
1:A:145:LYS:N	1:A:174:TYR:CD2[4_555]	2.13	0.07
1:A:165:CYS:CB	1:A:330:LYS:N[12_565]	2.13	0.07
1:A:264:ASP:N	1:A:295:ASN:CB[10_555]	2.13	0.07
1:A:281:ILE:N	1:A:307:LEU:N[11_655]	2.13	0.07
1:A:290:PRO:O	1:A:326:GLN:CG[12_565]	2.13	0.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:6:LYS:CA	1:A:278:PHE:CD2[5_545]	2.14	0.06
1:A:17:PRO:O	1:A:294:ASN:N[16_555]	2.14	0.06
1:A:32:VAL:CG1	1:A:80:SER:C[16_555]	2.14	0.06
1:A:49:VAL:O	1:A:94:VAL:CB[16_555]	2.14	0.06
1:A:55:MET:O	2:A:332:NAD:PA[16_555]	2.14	0.06
1:A:68:HIS:CB	1:A:153:SER:CB[16_555]	2.14	0.06
1:A:71:LEU:CD2	1:A:178:GLU:OE2[8_555]	2.14	0.06
1:A:118:ASN:N	1:A:256:ASP:OD2[4_555]	2.14	0.06
1:A:122:PHE:N	1:A:259:GLN:OE1[4_555]	2.14	0.06
1:A:165:CYS:SG	1:A:329:LEU:N[12_565]	2.14	0.06
1:A:209:ALA:C	1:A:323:TRP:N[3_545]	2.14	0.06
1:A:284:ASN:O	1:A:302:ILE:N[11_655]	2.14	0.06
1:A:16:GLU:OE2	1:A:292:VAL:CB[16_555]	2.15	0.05
1:A:17:PRO:CD	1:A:292:VAL:O[16_555]	2.15	0.05
1:A:18:ARG:CD	1:A:118:ASN:OD1[6_455]	2.15	0.05
1:A:26:VAL:O	1:A:26:VAL:CB[16_555]	2.15	0.05
1:A:30:ASP:CA	1:A:53:ASP:OD1[16_555]	2.15	0.05
1:A:58:LYS:C	1:A:98:ALA:N[16_555]	2.15	0.05
1:A:62:GLU:CB	1:A:96:ILE:CB[16_555]	2.15	0.05
1:A:74:HIS:CB	1:A:74:HIS:NE2[11_555]	2.15	0.05
1:A:99:GLY:C	1:A:243:VAL:O[4_555]	2.15	0.05
1:A:119:ILE:CB	1:A:251:GLY:C[4_555]	2.15	0.05
1:A:130:HIS:CD2	1:A:249:TRP:CE2[4_555]	2.15	0.05
1:A:150:TRP:CH2	1:A:186:LEU:CD1[4_555]	2.15	0.05
1:A:156:PRO:CD	1:A:183:HIS:ND1[4_555]	2.15	0.05
1:A:165:CYS:N	1:A:331:PHE:N[12_565]	2.15	0.05
1:A:266:CYS:C	1:A:266:CYS:O[10_555]	2.15	0.05
1:A:305:MET:CE	1:A:323:TRP:O[12_565]	2.15	0.05
1:A:16:GLU:CD	1:A:292:VAL:C[16_555]	2.16	0.04
1:A:36:ASP:OD1	1:A:87:VAL:C[16_555]	2.16	0.04
1:A:41:LEU:CG	1:A:132(A):PRO:CG[16_555]	2.16	0.04
1:A:64:MET:CE	1:A:146:ASN:N[16_555]	2.16	0.04
1:A:78:ILE:O	1:A:135:LYS:CA[16_555]	2.16	0.04
1:A:123:ILE:N	1:A:252:CYS:CB[4_555]	2.16	0.04
1:A:127:ILE:N	1:A:249:TRP:CE3[4_555]	2.16	0.04
1:A:150:TRP:CE3	1:A:186:LEU:N[4_555]	2.16	0.04
1:A:150:TRP:CZ3	1:A:300:CYS:CB[11_655]	2.16	0.04
1:A:158:HIS:ND1	1:A:178:GLU:OE1[4_555]	2.16	0.04
1:A:163:SER:N	1:A:331:PHE:OXT[12_565]	2.16	0.04
1:A:180:LEU:N	1:A:273:THR:C[3_545]	2.16	0.04
1:A:271:VAL:CG2	1:A:330:LYS:C[12_565]	2.16	0.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:305:MET:CE	1:A:323:TRP:CB[12_565]	2.16	0.04
1:A:11:LEU:CA	1:A:181:GLY:N[7_555]	2.17	0.03
1:A:16:GLU:CB	1:A:294:ASN:ND2[16_555]	2.17	0.03
1:A:25:THR:C	1:A:50:ALA:CB[16_555]	2.17	0.03
1:A:32:VAL:CB	1:A:81:GLY:CA[16_555]	2.17	0.03
1:A:40:VAL:CG1	1:A:90:GLY:N[16_555]	2.17	0.03
1:A:59:LEU:C	1:A:98:ALA:N[16_555]	2.17	0.03
1:A:65:ASP:C	1:A:149:ASP:CG[16_555]	2.17	0.03
1:A:79:VAL:C	1:A:95:VAL:CA[16_555]	2.17	0.03
1:A:80:SER:O	1:A:138:HIS:CD2[16_555]	2.17	0.03
1:A:86:SER:O	1:A:251:GLY:CA[16_555]	2.17	0.03
1:A:121:LYS:NZ	1:A:161:ILE:CG1[11_655]	2.17	0.03
1:A:122:PHE:CD1	1:A:259:GLN:CG[4_555]	2.17	0.03
1:A:130:HIS:NE2	1:A:130:HIS:NE2[13_655]	2.17	0.03
1:A:150:TRP:CE2	1:A:186:LEU:N[4_555]	2.17	0.03
1:A:163:SER:C	1:A:331:PHE:OXT[12_565]	2.17	0.03
1:A:267:ARG:CD	1:A:299:HIS:CE1[10_555]	2.17	0.03
1:A:271:VAL:N	1:A:330:LYS:CB[12_565]	2.17	0.03
1:A:1:THR:O	1:A:6:LYS:N[11_555]	2.18	0.02
1:A:6:LYS:CB	1:A:278:PHE:CB[5_545]	2.18	0.02
1:A:6:LYS:CD	1:A:279:TYR:CB[5_545]	2.18	0.02
1:A:13:THR:CG2	1:A:183:HIS:O[7_555]	2.18	0.02
1:A:29:CYS:C	1:A:53:ASP:CG[16_555]	2.18	0.02
1:A:36:ASP:N	1:A:86:SER:O[16_555]	2.18	0.02
1:A:78:ILE:N	1:A:135:LYS:CA[16_555]	2.18	0.02
1:A:86:SER:N	1:A:248:ALA:C[16_555]	2.18	0.02
1:A:119:ILE:CA	1:A:255:ALA:CB[4_555]	2.18	0.02
1:A:123:ILE:CG2	1:A:249:TRP:CD1[4_555]	2.18	0.02
1:A:127:ILE:N	1:A:249:TRP:CD1[4_555]	2.18	0.02
1:A:164:GLY:CA	1:A:331:PHE:N[12_565]	2.18	0.02
1:A:177:GLY:CA	1:A:286:PHE:CZ[3_545]	2.18	0.02
1:A:186:LEU:CD1	1:A:300:CYS:O[10_555]	2.18	0.02
1:A:207:TRP:CZ3	1:A:325:ILE:CG1[3_545]	2.18	0.02
1:A:210:LYS:CB	1:A:303:VAL:CA[10_555]	2.18	0.02
1:A:281:ILE:C	1:A:307:LEU:CB[11_655]	2.18	0.02
1:A:290:PRO:N	1:A:326:GLN:CD[12_565]	2.18	0.02
1:A:306:LYS:O	1:A:320:THR:CB[12_565]	2.18	0.02
1:A:18:ARG:CG	1:A:118:ASN:OD1[6_455]	2.19	0.01
1:A:27:VAL:O	1:A:29:CYS:SG[16_555]	2.19	0.01
1:A:64:MET:CA	1:A:137:LEU:CD2[16_555]	2.19	0.01
1:A:66:LEU:CD1	1:A:128:VAL:O[16_555]	2.19	0.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:77:LYS:C	1:A:134:LEU:CA[16_555]	2.19	0.01
1:A:77:LYS:C	1:A:135:LYS:N[16_555]	2.19	0.01
1:A:110:LEU:CD1	1:A:176:MET:CG[4_555]	2.19	0.01
1:A:114:GLN:CB	1:A:299:HIS:NE2[11_655]	2.19	0.01
1:A:118:ASN:CG	1:A:267:ARG:CZ[4_555]	2.19	0.01
1:A:119:ILE:O	1:A:252:CYS:N[4_555]	2.19	0.01
1:A:121:LYS:CA	1:A:259:GLN:CD[4_555]	2.19	0.01
1:A:122:PHE:CD2	1:A:263:LYS:CD[4_555]	2.19	0.01
1:A:165:CYS:SG	1:A:330:LYS:CD[12_565]	2.19	0.01
1:A:290:PRO:N	1:A:326:GLN:CB[12_565]	2.19	0.01
1:A:306:LYS:N	1:A:320:THR:CB[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	328/330 (99%)	184 (56%)	96 (29%)	48 (15%)	0 0

All (48) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	19	SER
1	A	30	ASP
1	A	31	ALA
1	A	70	SER
1	A	76	ALA
1	A	100	ALA
1	A	112	LEU
1	A	157	MET
1	A	158	HIS
1	A	184	SER
1	A	185	CYS
1	A	195	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	198	SER
1	A	218	SER
1	A	222	VAL
1	A	223	ILE
1	A	241	VAL
1	A	251	GLY
1	A	261	ILE
1	A	271	VAL
1	A	283	ASP
1	A	295	ASN
1	A	299	HIS
1	A	300	CYS
1	A	327	LYS
1	A	1	THR
1	A	18	ARG
1	A	44	ASP
1	A	89	ALA
1	A	98	ALA
1	A	163	SER
1	A	164	GLY
1	A	237	VAL
1	A	242	ASP
1	A	224	LYS
1	A	239	ASN
1	A	245	THR
1	A	246	TYR
1	A	284	ASN
1	A	107	GLU
1	A	238	SER
1	A	240	PRO
1	A	32	VAL
1	A	60	LYS
1	A	105	GLU
1	A	264	ASP
1	A	142	GLY
1	A	182	VAL

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	286/286 (100%)	161 (56%)	125 (44%)	0 0

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

Mol	Chain	Res	Type
1	A	3	LEU
1	A	4	LYS
1	A	6	LYS
1	A	8	ILE
1	A	10	HIS
1	A	11	LEU
1	A	15	GLN
1	A	18	ARG
1	A	19	SER
1	A	24	ILE
1	A	38	ILE
1	A	40	VAL
1	A	41	LEU
1	A	42	MET
1	A	47	ASP
1	A	48	GLU
1	A	49	VAL
1	A	56	GLU
1	A	58	LYS
1	A	59	LEU
1	A	62	GLU
1	A	63	MET
1	A	64	MET
1	A	71	LEU
1	A	73	LEU
1	A	74	HIS
1	A	75	THR
1	A	78	ILE
1	A	83	LYS
1	A	86	SER
1	A	87	VAL
1	A	93	LEU
1	A	94	VAL
1	A	95	VAL
1	A	96	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	97	THR
1	A	101	ARG
1	A	103	GLN
1	A	108	SER
1	A	111	ASN
1	A	115	ARG
1	A	116	ASN
1	A	117	VAL
1	A	119	ILE
1	A	121	LYS
1	A	124	ILE
1	A	128	VAL
1	A	130	HIS
1	A	134	LEU
1	A	140	GLU
1	A	143	THR
1	A	147	LYS
1	A	148	GLN
1	A	152	LEU
1	A	155	LEU
1	A	157	MET
1	A	160	ILE
1	A	161	ILE
1	A	163	SER
1	A	165	CYS
1	A	166	ASN
1	A	171	ARG
1	A	173	ARG
1	A	176	MET
1	A	178	GLU
1	A	180	LEU
1	A	186	LEU
1	A	187	VAL
1	A	188	ILE
1	A	191	VAL
1	A	192	ILE
1	A	197	ASP
1	A	199	VAL
1	A	202	VAL
1	A	203	TRP
1	A	204	SER
1	A	208	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	211	LEU
1	A	213	LYS
1	A	214	ASP
1	A	216	VAL
1	A	217	ASP
1	A	221	GLU
1	A	222	VAL
1	A	223	ILE
1	A	224	LYS
1	A	225	LEU
1	A	230	SER
1	A	233	ILE
1	A	235	LEU
1	A	237	VAL
1	A	238	SER
1	A	243	VAL
1	A	250	LYS
1	A	252	CYS
1	A	262	MET
1	A	263	LYS
1	A	265	LEU
1	A	273	THR
1	A	274	MET
1	A	275	VAL
1	A	282	LYS
1	A	285	VAL
1	A	288	SER
1	A	289	LEU
1	A	293	LEU
1	A	294	ASN
1	A	295	ASN
1	A	297	ILE
1	A	299	HIS
1	A	306	LYS
1	A	308	LYS
1	A	311	GLU
1	A	313	GLN
1	A	314	GLN
1	A	315	LEU
1	A	317	LYS
1	A	320	THR
1	A	321	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	322	LEU
1	A	323	TRP
1	A	325	ILE
1	A	326	GLN
1	A	330	LYS
1	A	331	PHE

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (16) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	15	GLN
1	A	22	ASN
1	A	103	GLN
1	A	116	ASN
1	A	130	HIS
1	A	148	GLN
1	A	158	HIS
1	A	166	ASN
1	A	194	GLN
1	A	239	ASN
1	A	259	GLN
1	A	294	ASN
1	A	295	ASN
1	A	301	ASN
1	A	316	GLN
1	A	326	GLN

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry

2 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	PYR	A	333	-	5,5,5	6.20	4 (80%)	3,6,6	4.16	3 (100%)
2	NAD	A	332	-	46,48,48	2.66	17 (36%)	64,73,73	2.62	17 (26%)

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	PYR	A	333	-	-	0/4/4/4	-
2	NAD	A	332	-	-	6/30/62/62	0/5/5/5

All (21) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
3	A	333	PYR	CB-CA	9.18	1.68	1.50
2	A	332	NAD	C4N-C3N	8.38	1.52	1.39
3	A	333	PYR	O3-CA	8.21	1.41	1.23
2	A	332	NAD	C5N-C4N	5.97	1.49	1.38
2	A	332	NAD	C2N-N1N	5.63	1.41	1.35
2	A	332	NAD	C7N-N7N	-4.78	1.24	1.33
2	A	332	NAD	PA-O3	4.60	1.64	1.59
2	A	332	NAD	O3D-C3D	-4.43	1.32	1.43
3	A	333	PYR	O-C	4.43	1.33	1.22
2	A	332	NAD	C1B-N9A	4.42	1.58	1.46
3	A	333	PYR	CA-C	-4.41	1.39	1.54
2	A	332	NAD	PN-O2N	-3.76	1.37	1.55
2	A	332	NAD	C6N-C5N	-3.56	1.31	1.38
2	A	332	NAD	O4B-C4B	3.05	1.51	1.45
2	A	332	NAD	C3D-C4D	2.69	1.59	1.53
2	A	332	NAD	C5D-C4D	2.43	1.58	1.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	A	332	NAD	C2N-C3N	-2.30	1.35	1.39
2	A	332	NAD	C5B-C4B	2.22	1.58	1.51
2	A	332	NAD	C2B-C3B	-2.19	1.47	1.53
2	A	332	NAD	PA-O1A	2.05	1.57	1.50
2	A	332	NAD	PN-O3	-2.04	1.57	1.59

All (20) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	A	332	NAD	C5N-C4N-C3N	-10.57	109.97	120.36
2	A	332	NAD	C6N-N1N-C1D	8.65	136.71	119.73
2	A	332	NAD	C2N-N1N-C1D	-6.42	104.97	119.13
2	A	332	NAD	O7N-C7N-C3N	-5.71	112.62	119.60
3	A	333	PYR	O3-CA-CB	-5.62	107.17	119.77
2	A	332	NAD	C6N-C5N-C4N	4.23	125.54	119.45
2	A	332	NAD	C6N-N1N-C2N	-4.17	118.33	121.88
2	A	332	NAD	C2D-C3D-C4D	-3.79	95.28	102.61
3	A	333	PYR	OXT-C-CA	3.37	122.92	113.59
2	A	332	NAD	C4A-N9A-C8A	3.35	109.26	105.74
2	A	332	NAD	C3N-C7N-N7N	3.34	121.85	117.74
2	A	332	NAD	N9A-C8A-N7A	-3.19	109.42	113.94
3	A	333	PYR	OXT-C-O	-2.99	116.79	123.90
2	A	332	NAD	C2N-C3N-C4N	2.81	121.53	118.26
2	A	332	NAD	O4B-C1B-N9A	-2.49	103.31	108.09
2	A	332	NAD	O2N-PN-O3	2.41	113.80	107.27
2	A	332	NAD	C5A-N7A-C8A	2.33	107.12	103.45
2	A	332	NAD	C2N-C3N-C7N	-2.13	113.32	119.46
2	A	332	NAD	O2A-PA-O1A	-2.10	102.66	112.44
2	A	332	NAD	C6A-C5A-N7A	2.06	136.07	132.09

There are no chirality outliers.

All (6) torsion outliers are listed below:

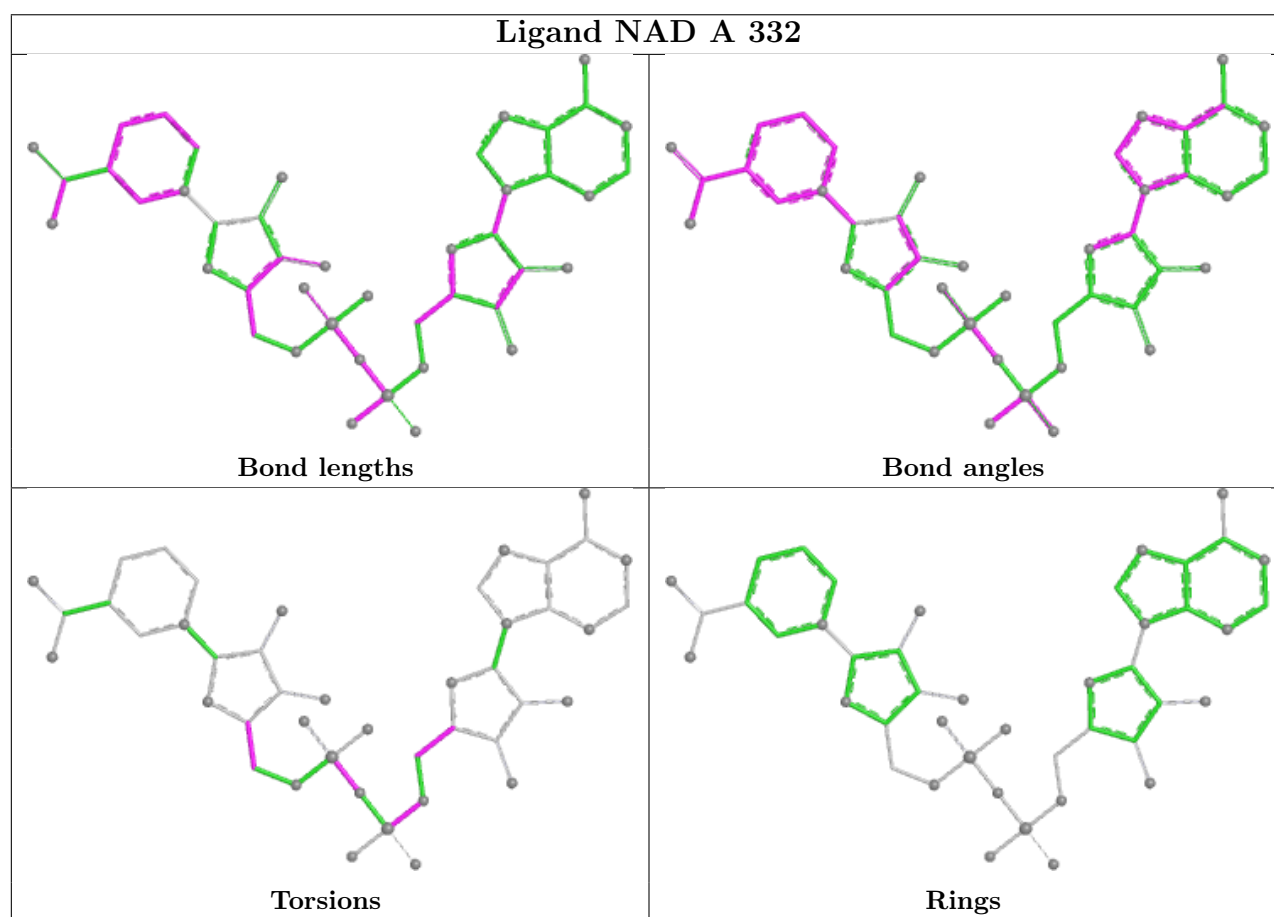
Mol	Chain	Res	Type	Atoms
2	A	332	NAD	C5B-O5B-PA-O1A
2	A	332	NAD	C5B-O5B-PA-O2A
2	A	332	NAD	C5B-O5B-PA-O3
2	A	332	NAD	PA-O3-PN-O5D
2	A	332	NAD	O4B-C4B-C5B-O5B
2	A	332	NAD	O4D-C4D-C5D-O5D

There are no ring outliers.

2 monomers are involved in 79 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
3	A	333	PYR	10	0
2	A	332	NAD	52	22

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 ⓘ

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues

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.