



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 05:39 PM UTC

PDB ID : 1N7D / pdb_00001n7d
Title : Extracellular domain of the LDL receptor
Authors : Rudenko, G.; Henry, L.; Henderson, K.; Ichtchenko, K.; Brown, M.S.; Goldstein, J.L.; Deisenhofer, J.
Deposited on : 2002-11-13
Resolution : 3.70 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.0
Mogul	:	2022.3.0, CSD as543be (2022)
Xtriage (Phenix)	:	NOT EXECUTED
EDS	:	NOT EXECUTED
Buster-report	:	wwPDB partial adaption of 1.1.7 (2018)
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

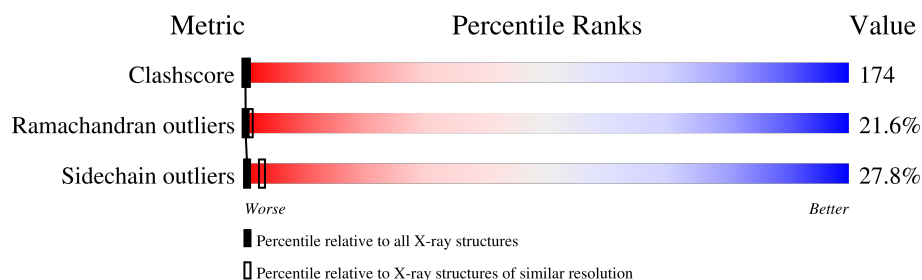
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.70 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	1171 (3.80-3.60)
Ramachandran outliers	187476	1129 (3.80-3.60)
Sidechain outliers	187428	1126 (3.80-3.60)

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	699	
2	B	5	
3	C	4	

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	NAG	B	1	-	-	X	-
3	NAG	C	1	-	-	X	-

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
5	KEG	A	6003	-	-	X	-

2 Entry composition [i](#)

There are 5 unique types of molecules in this entry. The entry contains 4956 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.

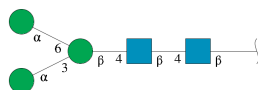
- Molecule 1 is a protein called Low-density lipoprotein receptor.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	639	4702	2874	800	966	62	0	0	0

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	494	GLN	ASN	engineered mutation	UNP P01130
A	636	GLN	ASN	engineered mutation	UNP P01130

- Molecule 2 is an oligosaccharide called alpha-D-mannopyranose-(1-3)-[alpha-D-mannopyranose-(1-6)]beta-D-mannopyranose-(1-4)-2-acetamido-2-deoxy-beta-D-glucopyranose-(1-4)-2-acetamido-2-deoxy-beta-D-glucopyranose.



Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O			
2	B	5	61	34	2	25	0	0	0

- Molecule 3 is an oligosaccharide called alpha-D-mannopyranose-(1-6)-beta-D-mannopyranose-(1-4)-2-acetamido-2-deoxy-beta-D-glucopyranose-(1-4)-2-acetamido-2-deoxy-beta-D-glucopyranose.

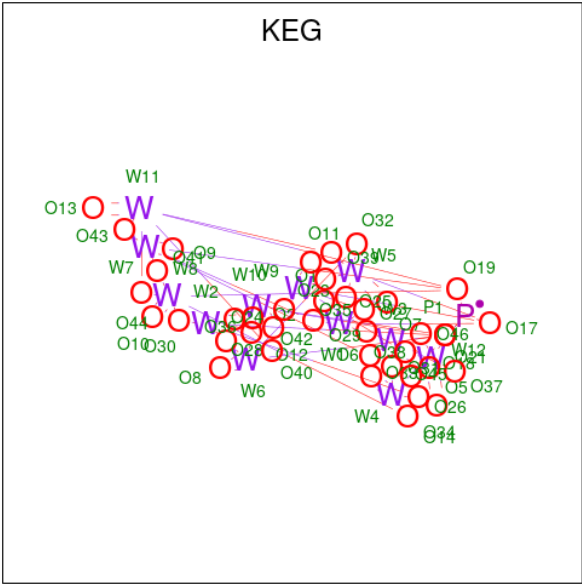


Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf	Trace
3	C	4	Total	C	N	O	0	0	0
			50	28	2	20			

- Molecule 4 is CALCIUM ION (CCD ID: CA) (formula: Ca).

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	A	8	Total	Ca	0	0
			8	8		

- Molecule 5 is 12-TUNGSTOPHOSPHATE (CCD ID: KEG) (formula: O₄₀PW₁₂).



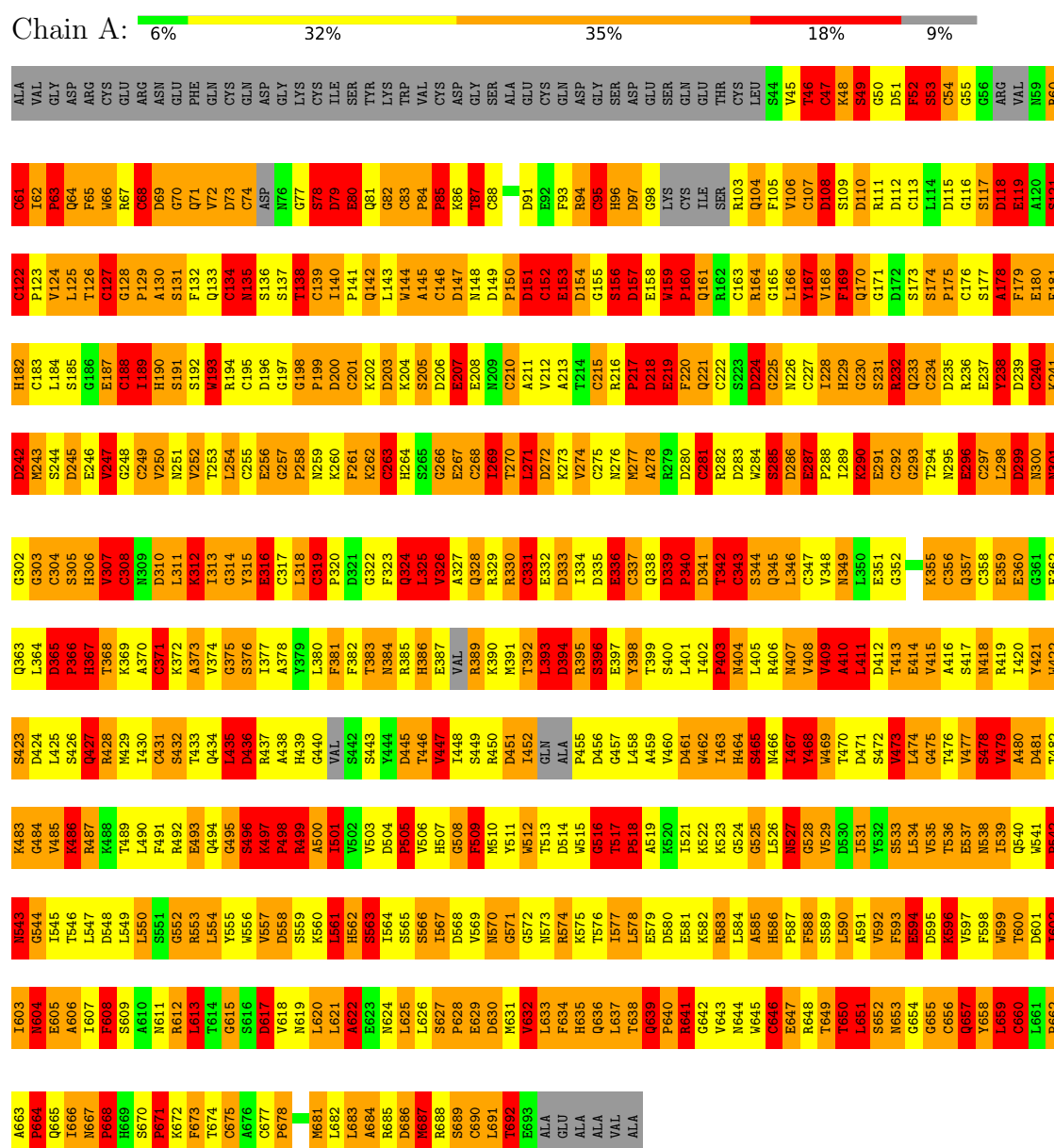
Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
5	A	1	Total	O	P	W	0	0
			53	40	1	12		
5	A	1	Total	O	P	W	0	0
			53	40	1	12		
5	A	1	Total	O	P	W	0	0
			29	21	1	7		

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: Low-density lipoprotein receptor



- Molecule 2: α -D-mannopyranose-(1-3)-[α -D-mannopyranose-(1-6)] β -D-mannopyranose-(1-4)-2-acetamido-2-deoxy- β -D-glucopyranose-(1-4)-2-acetamido-2-deoxy- β -D-glucopyranose

Chain B:  20% 80%

MAG1	MAG2	BM13	MAN4	MAN5
------	------	------	------	------

- Molecule 3: α -D-mannopyranose-(1-6)- β -D-mannopyranose-(1-4)-2-acetamido-2-deoxy- β -D-glucopyranose-(1-4)-2-acetamido-2-deoxy- β -D-glucopyranose

Chain C:  25% 75%

MAG1	MAG2	BM13	MAN4
------	------	------	------

4 Data and refinement statistics

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

Property	Value	Source
Space group	P 31 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	185.29Å 185.29Å 85.19Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	45.30 – 3.70	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	87.8 (45.30-3.70)	Depositor
R_{merge}	0.09	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
Refinement program	CNS 1.1	Depositor
R, R_{free}	0.381 , 0.382	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	4956	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	124.0	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: BMA, KEG, MAN, CA, NAG

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	1.27	39/4796 (0.8%)	2.66	398/6528 (6.1%)

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

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

All (39) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	189	ILE	CA-C	9.75	1.64	1.52
1	A	140	ILE	CA-C	9.22	1.62	1.52
1	A	190	HIS	N-CA	8.19	1.56	1.45
1	A	54	CYS	N-CA	8.18	1.53	1.46
1	A	54	CYS	CA-C	7.49	1.57	1.53
1	A	53	SER	N-CA	6.83	1.54	1.46
1	A	180	GLU	CA-C	6.82	1.61	1.52
1	A	180	GLU	N-CA	6.74	1.54	1.46
1	A	409	VAL	CA-C	6.55	1.61	1.52
1	A	52	PHE	CA-C	6.49	1.61	1.52
1	A	131	SER	CA-C	-6.36	1.45	1.52
1	A	373	ALA	CA-CB	-6.23	1.43	1.53
1	A	247	VAL	CA-CB	6.21	1.62	1.54
1	A	188	CYS	CA-C	6.09	1.60	1.52
1	A	500	ALA	CA-C	-6.07	1.44	1.52
1	A	145	ALA	CA-C	-6.07	1.44	1.52
1	A	152	CYS	CA-C	-6.06	1.45	1.53
1	A	478	SER	CA-C	-5.97	1.44	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	553	ARG	N-CA	-5.93	1.38	1.45
1	A	497	LYS	CA-C	5.86	1.60	1.52
1	A	189	ILE	N-CA	5.79	1.52	1.46
1	A	188	CYS	N-CA	5.50	1.53	1.46
1	A	410	ALA	N-CA	5.49	1.53	1.46
1	A	481	ASP	CA-C	-5.48	1.45	1.53
1	A	599	TRP	CA-C	-5.40	1.45	1.52
1	A	53	SER	CA-C	5.39	1.59	1.52
1	A	326	VAL	N-CA	5.23	1.51	1.46
1	A	480	ALA	CA-C	-5.22	1.46	1.52
1	A	325	LEU	CA-C	5.19	1.59	1.52
1	A	501	ILE	N-CA	-5.18	1.40	1.46
1	A	153	GLU	CA-C	5.17	1.59	1.52
1	A	169	PHE	CA-C	5.15	1.59	1.52
1	A	179	PHE	CA-C	5.11	1.59	1.53
1	A	324	GLN	CA-C	5.11	1.58	1.52
1	A	408	VAL	CA-C	5.09	1.58	1.53
1	A	557	VAL	CA-CB	-5.08	1.48	1.54
1	A	139	CYS	CA-C	5.06	1.58	1.52
1	A	602	ILE	CA-CB	-5.02	1.47	1.54
1	A	52	PHE	N-CA	5.01	1.52	1.46

All (398) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	179	PHE	N-CA-C	-20.73	82.65	111.87
1	A	473	VAL	N-CA-C	-19.62	79.47	108.71
1	A	341	ASP	N-CA-C	-18.42	84.72	112.54
1	A	649	THR	N-CA-C	-18.37	82.95	108.86
1	A	201	CYS	N-CA-C	-17.36	86.02	110.50
1	A	134	CYS	N-CA-C	-17.17	81.66	108.96
1	A	467	ILE	N-CA-C	17.16	129.75	108.82
1	A	180	GLU	N-CA-C	16.63	130.84	108.38
1	A	299	ASP	N-CA-C	-16.38	85.31	110.70
1	A	411	LEU	N-CA-C	16.13	133.67	108.67
1	A	168	VAL	N-CA-C	15.77	130.78	109.80
1	A	339	ASP	N-CA-C	15.74	132.06	109.71
1	A	660	CYS	N-CA-C	15.68	133.28	111.17
1	A	66	TRP	N-CA-C	-15.66	94.08	112.87
1	A	83	CYS	CA-C-N	15.55	136.40	120.38
1	A	83	CYS	C-N-CA	15.55	136.40	120.38
1	A	659	LEU	N-CA-C	15.46	130.93	110.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	166	LEU	N-CA-C	15.36	129.25	112.97
1	A	365	ASP	CA-C-N	15.32	138.99	119.84
1	A	365	ASP	C-N-CA	15.32	138.99	119.84
1	A	638	THR	N-CA-C	-15.27	90.34	111.87
1	A	131	SER	N-CA-C	15.22	130.82	108.60
1	A	339	ASP	CA-C-N	14.81	162.54	127.00
1	A	339	ASP	C-N-CA	14.81	162.54	127.00
1	A	318	LEU	N-CA-C	14.48	129.27	108.86
1	A	339	ASP	C-N-CD	-14.47	88.76	120.60
1	A	346	LEU	N-CA-C	14.47	130.81	111.28
1	A	367	HIS	N-CA-C	-14.45	93.10	112.03
1	A	230	GLY	CA-C-N	-14.33	102.21	122.41
1	A	230	GLY	C-N-CA	-14.33	102.21	122.41
1	A	229	HIS	N-CA-C	14.18	130.49	108.79
1	A	213	ALA	N-CA-C	14.16	128.80	110.53
1	A	443	SER	N-CA-C	13.96	130.32	112.03
1	A	578	LEU	N-CA-C	13.95	130.51	111.54
1	A	144	TRP	N-CA-C	-13.65	92.62	111.87
1	A	629	GLU	N-CA-C	13.48	130.06	112.26
1	A	78	SER	N-CA-C	13.47	129.40	108.79
1	A	245	ASP	N-CA-C	-13.42	86.31	108.32
1	A	314	GLY	N-CA-C	-13.39	81.45	113.18
1	A	54	CYS	N-CA-C	13.34	121.56	108.75
1	A	163	CYS	N-CA-C	-13.10	93.63	110.53
1	A	324	GLN	N-CA-C	13.02	131.20	109.06
1	A	395	ARG	N-CA-C	-12.98	83.05	107.71
1	A	445	ASP	N-CA-C	12.92	138.31	110.80
1	A	303	GLY	N-CA-C	-12.79	93.75	115.62
1	A	417	SER	N-CA-C	-12.78	83.57	110.80
1	A	154	ASP	N-CA-C	12.69	137.83	110.80
1	A	210	CYS	N-CA-C	-12.59	94.88	110.61
1	A	161	GLN	N-CA-C	-12.58	94.80	110.65
1	A	272	ASP	N-CA-C	-12.50	94.86	111.74
1	A	87	THR	N-CA-C	12.39	125.84	108.74
1	A	330	ARG	N-CA-C	12.37	128.84	111.52
1	A	604	ASN	N-CA-C	-12.35	84.49	110.80
1	A	83	CYS	N-CA-C	12.32	127.95	110.20
1	A	509	PHE	N-CA-C	12.27	136.94	110.80
1	A	658	TYR	N-CA-C	-12.15	94.51	111.52
1	A	306	HIS	CA-C-N	12.13	143.81	121.97
1	A	306	HIS	C-N-CA	12.13	143.81	121.97
1	A	189	ILE	N-CA-C	12.11	129.00	108.90

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	69	ASP	N-CA-C	-12.01	98.67	113.20
1	A	417	SER	CA-C-N	-11.94	105.47	123.14
1	A	417	SER	C-N-CA	-11.94	105.47	123.14
1	A	94	ARG	N-CA-C	-11.90	90.47	109.39
1	A	326	VAL	N-CA-C	11.79	124.50	107.75
1	A	517	THR	CA-C-N	11.77	134.55	119.84
1	A	517	THR	C-N-CA	11.77	134.55	119.84
1	A	48	LYS	N-CA-C	-11.69	93.34	110.64
1	A	170	GLN	N-CA-C	11.59	129.68	108.58
1	A	216	ARG	CA-C-N	11.24	133.90	119.84
1	A	216	ARG	C-N-CA	11.24	133.90	119.84
1	A	446	THR	N-CA-C	11.24	127.25	109.50
1	A	46	THR	N-CA-C	-11.13	87.10	110.80
1	A	313	ILE	N-CA-C	11.08	132.38	109.34
1	A	62	ILE	CA-C-N	10.88	133.44	119.84
1	A	62	ILE	C-N-CA	10.88	133.44	119.84
1	A	622	ALA	CA-C-N	-10.85	106.04	122.09
1	A	622	ALA	C-N-CA	-10.85	106.04	122.09
1	A	287	GLU	CA-C-N	-10.75	108.07	120.11
1	A	287	GLU	C-N-CA	-10.75	108.07	120.11
1	A	409	VAL	N-CA-C	10.68	131.56	109.34
1	A	483	LYS	N-CA-C	-10.63	97.38	111.74
1	A	415	VAL	N-CA-C	10.61	123.91	109.80
1	A	512	TRP	N-CA-C	10.60	122.83	107.88
1	A	153	GLU	CA-C-N	10.49	141.59	121.54
1	A	153	GLU	C-N-CA	10.49	141.59	121.54
1	A	118	ASP	N-CA-C	-10.39	88.67	110.80
1	A	544	GLY	N-CA-C	-10.38	98.27	112.18
1	A	655	GLY	N-CA-C	-10.31	101.08	115.32
1	A	188	CYS	N-CA-C	10.22	132.57	110.80
1	A	495	GLY	N-CA-C	-10.10	89.25	113.18
1	A	212	VAL	N-CA-C	10.04	121.84	109.30
1	A	561	LEU	N-CA-C	-9.92	89.66	110.80
1	A	52	PHE	N-CA-C	9.90	131.89	110.80
1	A	666	ILE	N-CA-C	9.88	122.54	108.42
1	A	181	PHE	N-CA-C	9.84	124.45	108.41
1	A	151	ASP	CA-C-N	-9.70	108.98	122.95
1	A	151	ASP	C-N-CA	-9.70	108.98	122.95
1	A	603	ILE	CA-C-N	9.69	140.05	121.54
1	A	603	ILE	C-N-CA	9.69	140.05	121.54
1	A	634	PHE	N-CA-C	9.64	122.05	108.74
1	A	68	CYS	CA-CB-SG	-9.64	92.23	114.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	53	SER	N-CA-C	9.54	123.39	108.79
1	A	230	GLY	N-CA-C	-9.51	92.47	112.45
1	A	198	GLY	CA-C-N	9.48	131.70	119.84
1	A	198	GLY	C-N-CA	9.48	131.70	119.84
1	A	461	ASP	N-CA-C	-9.46	94.94	110.17
1	A	307	VAL	N-CA-C	9.45	129.00	109.34
1	A	167	TYR	N-CA-C	9.40	125.03	109.06
1	A	130	ALA	CA-C-N	-9.33	105.85	121.80
1	A	130	ALA	C-N-CA	-9.33	105.85	121.80
1	A	529	VAL	N-CA-C	9.29	128.67	109.34
1	A	233	GLN	N-CA-C	9.29	130.58	110.80
1	A	200	ASP	N-CA-C	9.19	127.40	113.61
1	A	336	GLU	N-CA-C	9.19	122.23	110.65
1	A	423	SER	CA-C-N	-9.16	108.33	121.42
1	A	423	SER	C-N-CA	-9.16	108.33	121.42
1	A	567	ILE	N-CA-C	9.06	119.66	108.06
1	A	205	SER	N-CA-C	-8.98	97.98	111.81
1	A	82	GLY	N-CA-C	-8.94	91.99	113.18
1	A	628	PRO	N-CA-C	8.88	128.94	112.33
1	A	199	PRO	CA-C-N	-8.87	108.45	122.29
1	A	199	PRO	C-N-CA	-8.87	108.45	122.29
1	A	375	GLY	N-CA-C	-8.83	92.25	113.18
1	A	498	PRO	N-CA-C	8.82	130.63	112.47
1	A	473	VAL	CA-C-N	-8.74	108.35	122.34
1	A	473	VAL	C-N-CA	-8.74	108.35	122.34
1	A	305	SER	N-CA-C	8.71	121.14	108.86
1	A	518	PRO	N-CA-C	-8.68	94.59	112.47
1	A	692	THR	N-CA-C	8.65	123.52	109.85
1	A	646	CYS	N-CA-C	-8.64	92.40	110.80
1	A	138	THR	N-CA-C	8.60	122.48	108.99
1	A	459	ALA	N-CA-C	-8.57	95.22	108.42
1	A	404	ASN	N-CA-C	8.56	121.72	111.02
1	A	54	CYS	CB-CA-C	-8.49	104.05	116.53
1	A	563	SER	N-CA-C	8.46	119.82	107.88
1	A	253	THR	N-CA-C	8.46	122.20	108.41
1	A	121	SER	N-CA-C	-8.45	92.81	110.80
1	A	220	PHE	N-CA-C	8.45	120.93	108.60
1	A	653	ASN	N-CA-C	-8.37	92.97	110.80
1	A	445	ASP	CA-C-N	-8.35	109.60	122.62
1	A	445	ASP	C-N-CA	-8.35	109.60	122.62
1	A	474	LEU	N-CA-C	8.31	123.60	107.98
1	A	331	CYS	N-CA-C	8.12	128.09	110.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	547	LEU	N-CA-C	8.07	121.66	108.99
1	A	617	ASP	N-CA-C	-8.07	93.62	110.80
1	A	648	ARG	N-CA-C	8.06	123.25	108.58
1	A	270	THR	N-CA-C	7.98	120.27	108.14
1	A	274	VAL	N-CA-C	7.98	125.93	109.34
1	A	122	CYS	CA-C-N	7.97	129.81	119.84
1	A	122	CYS	C-N-CA	7.97	129.81	119.84
1	A	80	GLU	N-CA-C	-7.92	93.94	110.80
1	A	368	THR	N-CA-C	7.91	118.33	107.73
1	A	657	GLN	N-CA-C	-7.90	96.80	109.76
1	A	464	HIS	N-CA-C	-7.88	93.50	107.28
1	A	342	THR	N-CA-C	-7.85	97.78	108.38
1	A	360	GLU	N-CA-C	7.84	120.08	110.91
1	A	407	ASN	N-CA-C	7.83	122.04	111.24
1	A	583	ARG	N-CA-C	-7.82	100.57	111.52
1	A	427	GLN	N-CA-C	-7.82	94.15	110.80
1	A	606	ALA	N-CA-C	7.77	119.94	108.60
1	A	95	CYS	N-CA-C	-7.77	94.26	110.80
1	A	281	CYS	N-CA-C	-7.76	94.26	110.80
1	A	647	GLU	N-CA-C	7.71	121.89	110.48
1	A	636	GLN	N-CA-C	7.70	122.07	111.90
1	A	480	ALA	CA-C-N	-7.67	107.52	122.02
1	A	480	ALA	C-N-CA	-7.67	107.52	122.02
1	A	468	TYR	N-CA-C	7.66	120.56	109.14
1	A	297	CYS	N-CA-C	-7.65	100.46	110.33
1	A	125	LEU	N-CA-C	-7.64	99.96	110.35
1	A	61	CYS	N-CA-C	7.63	127.05	110.80
1	A	480	ALA	N-CA-C	-7.62	98.33	110.14
1	A	156	SER	N-CA-C	7.61	125.24	112.99
1	A	639	GLN	CA-C-N	7.58	129.32	119.84
1	A	639	GLN	C-N-CA	7.58	129.32	119.84
1	A	217	PRO	N-CA-C	7.58	128.09	112.47
1	A	108	ASP	N-CA-C	-7.54	100.95	111.81
1	A	79	ASP	N-CA-C	7.51	126.80	110.80
1	A	615	GLY	N-CA-C	-7.50	95.39	113.18
1	A	381	PHE	N-CA-C	7.48	120.28	109.14
1	A	54	CYS	CA-C-O	7.47	123.04	118.33
1	A	398	TYR	N-CA-C	7.47	121.99	108.17
1	A	603	ILE	O-C-N	7.47	131.90	122.57
1	A	414	GLU	CA-C-N	7.46	131.64	120.75
1	A	414	GLU	C-N-CA	7.46	131.64	120.75
1	A	77	GLY	N-CA-C	-7.42	95.60	113.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	366	PRO	N-CA-C	7.40	127.72	112.47
1	A	435	LEU	N-CA-C	7.38	126.52	110.80
1	A	393	LEU	CA-C-N	7.38	132.92	122.08
1	A	393	LEU	C-N-CA	7.38	132.92	122.08
1	A	290	LYS	N-CA-C	-7.37	92.12	107.67
1	A	340	PRO	CA-N-CD	-7.37	101.19	111.50
1	A	394	ASP	N-CA-C	7.36	121.61	111.90
1	A	558	ASP	N-CA-C	-7.36	97.25	109.24
1	A	487	ARG	N-CA-C	7.31	121.63	108.69
1	A	667	ASN	CA-C-N	7.26	128.91	119.84
1	A	667	ASN	C-N-CA	7.26	128.91	119.84
1	A	285	SER	N-CA-C	-7.25	100.64	111.81
1	A	151	ASP	N-CA-C	-7.21	95.44	110.80
1	A	301	ASN	N-CA-C	-7.19	95.48	110.80
1	A	221	GLN	N-CA-C	7.18	120.63	109.07
1	A	174	SER	N-CA-C	7.16	125.64	109.81
1	A	378	ALA	N-CA-C	7.14	121.67	110.32
1	A	95	CYS	CA-CB-SG	7.11	130.76	114.40
1	A	517	THR	C-N-CD	-7.11	95.86	125.00
1	A	252	VAL	N-CA-C	-7.08	97.31	108.86
1	A	436	ASP	N-CA-C	-7.08	95.72	110.80
1	A	538	ASN	N-CA-C	-7.04	102.60	111.90
1	A	665	GLN	CA-C-N	-7.04	112.10	122.23
1	A	665	GLN	C-N-CA	-7.04	112.10	122.23
1	A	613	LEU	N-CA-C	-7.00	97.65	108.42
1	A	263	CYS	N-CA-C	-6.99	95.92	110.80
1	A	200	ASP	CA-C-N	-6.98	109.98	120.94
1	A	200	ASP	C-N-CA	-6.98	109.98	120.94
1	A	262	LYS	N-CA-C	-6.98	95.94	110.80
1	A	300	ASN	N-CA-C	-6.96	95.98	110.80
1	A	529	VAL	CA-C-N	-6.91	112.06	123.04
1	A	529	VAL	C-N-CA	-6.91	112.06	123.04
1	A	169	PHE	N-CA-C	6.86	125.42	110.80
1	A	477	VAL	N-CA-C	-6.85	95.09	109.34
1	A	268	CYS	N-CA-C	-6.83	97.38	108.52
1	A	543	ASN	N-CA-C	6.82	125.33	110.80
1	A	552	GLY	CA-C-O	6.81	127.91	121.64
1	A	396	SER	N-CA-C	6.80	125.28	110.80
1	A	298	LEU	N-CA-C	-6.79	104.57	112.86
1	A	306	HIS	O-C-N	6.74	131.56	122.59
1	A	525	GLY	N-CA-C	-6.74	97.21	113.18
1	A	60	ARG	N-CA-C	6.72	120.39	110.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	527	ASN	N-CA-C	-6.72	96.47	110.80
1	A	252	VAL	CA-C-N	-6.72	113.53	123.00
1	A	252	VAL	C-N-CA	-6.72	113.53	123.00
1	A	293	GLY	N-CA-C	-6.70	101.64	111.03
1	A	261	PHE	N-CA-C	6.67	120.38	109.24
1	A	178	ALA	N-CA-C	6.66	124.99	110.80
1	A	224	ASP	N-CA-C	-6.65	96.64	110.80
1	A	414	GLU	N-CA-C	6.65	119.32	108.55
1	A	344	SER	N-CA-C	-6.63	100.49	110.24
1	A	110	ASP	N-CA-C	6.61	118.83	107.93
1	A	675	CYS	N-CA-C	-6.61	100.93	110.24
1	A	431	CYS	N-CA-C	6.55	118.89	109.14
1	A	383	THR	N-CA-C	6.50	119.75	108.76
1	A	497	LYS	N-CA-C	6.48	124.14	109.81
1	A	312	LYS	CA-C-N	6.46	133.59	121.97
1	A	312	LYS	C-N-CA	6.46	133.59	121.97
1	A	175	PRO	N-CA-C	6.45	125.75	112.47
1	A	469	TRP	N-CA-C	6.44	118.31	108.07
1	A	627	SER	N-CA-C	6.44	124.03	109.81
1	A	345	GLN	CA-C-N	6.43	131.89	122.63
1	A	345	GLN	C-N-CA	6.43	131.89	122.63
1	A	635	HIS	CA-C-N	6.42	131.52	122.08
1	A	635	HIS	C-N-CA	6.42	131.52	122.08
1	A	537	GLU	N-CA-C	6.40	118.04	107.73
1	A	603	ILE	CA-C-O	6.38	128.76	120.78
1	A	659	LEU	CA-C-N	6.38	131.88	122.82
1	A	659	LEU	C-N-CA	6.38	131.88	122.82
1	A	316	GLU	N-CA-C	6.35	118.29	109.15
1	A	140	ILE	N-CA-CB	-6.32	102.37	111.21
1	A	586	HIS	CA-C-N	-6.31	111.95	119.84
1	A	586	HIS	C-N-CA	-6.31	111.95	119.84
1	A	147	ASP	CA-C-N	-6.30	109.77	122.55
1	A	147	ASP	C-N-CA	-6.30	109.77	122.55
1	A	232	ARG	N-CA-C	-6.29	97.41	110.80
1	A	628	PRO	CA-C-N	-6.27	113.27	122.86
1	A	628	PRO	C-N-CA	-6.27	113.27	122.86
1	A	596	LYS	N-CA-C	-6.26	98.41	108.55
1	A	359	GLU	N-CA-C	6.25	118.92	108.73
1	A	516	GLY	N-CA-C	-6.23	98.42	113.18
1	A	371	CYS	N-CA-C	-6.22	99.51	109.39
1	A	122	CYS	N-CA-C	6.20	119.86	108.94
1	A	686	ASP	N-CA-C	-6.18	97.63	110.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	171	GLY	N-CA-C	6.18	124.14	115.43
1	A	189	ILE	CA-C-N	6.17	132.67	121.06
1	A	189	ILE	C-N-CA	6.17	132.67	121.06
1	A	639	GLN	N-CA-C	6.17	123.45	109.81
1	A	529	VAL	O-C-N	-6.17	114.86	122.57
1	A	667	ASN	N-CA-C	-6.15	99.66	112.40
1	A	462	TRP	N-CA-C	6.15	120.04	111.56
1	A	248	GLY	N-CA-C	-6.12	104.32	114.48
1	A	167	TYR	CA-C-N	6.11	129.67	120.75
1	A	167	TYR	C-N-CA	6.11	129.67	120.75
1	A	267	GLU	N-CA-C	6.11	116.14	108.45
1	A	641	ARG	N-CA-C	6.11	123.80	110.80
1	A	328	GLN	N-CA-C	-6.09	104.91	112.47
1	A	574	ARG	N-CA-C	-6.09	101.03	110.10
1	A	287	GLU	N-CA-C	6.09	123.26	109.81
1	A	307	VAL	CA-C-N	6.08	130.19	121.50
1	A	307	VAL	C-N-CA	6.08	130.19	121.50
1	A	174	SER	CA-C-N	6.04	127.38	119.84
1	A	174	SER	C-N-CA	6.04	127.38	119.84
1	A	355	LYS	N-CA-C	6.02	117.55	108.46
1	A	290	LYS	CA-C-N	6.01	131.13	122.35
1	A	290	LYS	C-N-CA	6.01	131.13	122.35
1	A	691	LEU	N-CA-C	6.01	117.34	108.86
1	A	554	LEU	N-CA-C	5.99	119.14	110.28
1	A	467	ILE	CB-CA-C	-5.98	102.97	111.34
1	A	145	ALA	O-C-N	5.93	130.48	122.59
1	A	592	VAL	CA-C-N	-5.92	111.96	122.74
1	A	592	VAL	C-N-CA	-5.92	111.96	122.74
1	A	656	CYS	CA-C-N	-5.92	113.82	122.65
1	A	656	CYS	C-N-CA	-5.92	113.82	122.65
1	A	550	LEU	CA-C-N	5.92	130.54	122.07
1	A	550	LEU	C-N-CA	5.92	130.54	122.07
1	A	408	VAL	N-CA-C	5.92	116.50	110.05
1	A	518	PRO	CA-N-CD	-5.90	103.74	112.00
1	A	650	THR	N-CA-C	5.90	123.36	110.80
1	A	492	ARG	N-CA-C	-5.89	101.69	110.23
1	A	229	HIS	N-CA-CB	-5.87	102.46	111.56
1	A	271	LEU	N-CA-C	-5.87	98.31	110.80
1	A	232	ARG	CA-C-N	5.86	132.73	121.54
1	A	232	ARG	C-N-CA	5.86	132.73	121.54
1	A	218	ASP	N-CA-C	-5.84	98.36	110.80
1	A	681	MET	N-CA-C	5.82	118.21	110.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	286	ASP	N-CA-C	-5.81	95.42	107.67
1	A	640	PRO	N-CA-C	5.79	124.40	112.47
1	A	164	ARG	N-CA-C	5.77	117.98	110.53
1	A	531	ILE	CB-CA-C	-5.77	103.65	111.15
1	A	500	ALA	CA-C-N	-5.75	114.98	122.51
1	A	500	ALA	C-N-CA	-5.75	114.98	122.51
1	A	253	THR	CA-C-N	5.74	128.87	120.71
1	A	253	THR	C-N-CA	5.74	128.87	120.71
1	A	215	CYS	N-CA-C	5.68	118.80	109.76
1	A	578	LEU	CA-C-N	-5.68	112.81	120.82
1	A	578	LEU	C-N-CA	-5.68	112.81	120.82
1	A	632	VAL	N-CA-C	-5.68	100.04	108.45
1	A	146	CYS	CA-C-N	-5.68	110.63	120.97
1	A	146	CYS	C-N-CA	-5.68	110.63	120.97
1	A	486	LYS	CA-C-N	-5.67	112.81	122.33
1	A	486	LYS	C-N-CA	-5.67	112.81	122.33
1	A	349	ASN	N-CA-C	5.64	117.55	107.80
1	A	153	GLU	CB-CA-C	5.63	121.62	110.42
1	A	365	ASP	N-CA-C	5.58	121.27	108.81
1	A	134	CYS	CA-CB-SG	5.55	127.16	114.40
1	A	633	LEU	CA-C-N	-5.54	113.29	122.11
1	A	633	LEU	C-N-CA	-5.54	113.29	122.11
1	A	627	SER	CA-C-N	5.54	134.48	120.25
1	A	627	SER	C-N-CA	5.54	134.48	120.25
1	A	413	THR	N-CA-C	5.53	117.38	109.14
1	A	586	HIS	CB-CA-C	-5.53	107.28	111.20
1	A	593	PHE	N-CA-CB	5.53	119.18	110.56
1	A	418	ASN	CA-C-N	-5.52	112.35	121.80
1	A	418	ASN	C-N-CA	-5.52	112.35	121.80
1	A	553	ARG	N-CA-C	-5.48	103.47	110.53
1	A	157	ASP	N-CA-C	-5.47	99.14	110.80
1	A	604	ASN	CB-CA-C	-5.45	99.57	110.42
1	A	189	ILE	N-CA-CB	-5.43	102.31	112.36
1	A	635	HIS	N-CA-C	5.39	122.29	110.80
1	A	499	ARG	CA-C-N	-5.39	111.25	121.54
1	A	499	ARG	C-N-CA	-5.39	111.25	121.54
1	A	63	PRO	N-CA-C	5.36	123.52	112.47
1	A	628	PRO	CB-CA-C	-5.34	105.83	113.09
1	A	594	GLU	CA-C-N	5.34	129.76	122.34
1	A	594	GLU	C-N-CA	5.34	129.76	122.34
1	A	308	CYS	N-CA-C	5.33	118.23	109.76
1	A	137	SER	N-CA-C	5.33	122.14	110.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	529	VAL	CB-CA-C	-5.32	102.56	111.29
1	A	652	SER	N-CA-C	-5.32	99.47	110.80
1	A	211	ALA	CA-C-N	5.31	128.21	120.98
1	A	211	ALA	C-N-CA	5.31	128.21	120.98
1	A	594	GLU	N-CA-C	5.31	122.11	110.80
1	A	340	PRO	CB-CG-CD	-5.29	93.23	105.40
1	A	496	SER	CA-C-N	-5.29	108.89	121.80
1	A	496	SER	C-N-CA	-5.29	108.89	121.80
1	A	278	ALA	N-CA-C	5.29	116.44	108.46
1	A	608	PHE	N-CA-C	5.28	116.68	109.18
1	A	386	HIS	CA-C-N	5.28	131.20	121.70
1	A	386	HIS	C-N-CA	5.28	131.20	121.70
1	A	241	LYS	N-CA-C	-5.24	104.16	111.39
1	A	357	GLN	N-CA-C	5.24	116.11	108.14
1	A	479	VAL	N-CA-C	-5.22	98.48	109.34
1	A	219	GLU	N-CA-C	5.20	115.20	107.88
1	A	464	HIS	CB-CA-C	-5.20	104.34	111.51
1	A	269	ILE	N-CA-C	5.18	115.19	108.35
1	A	228	ILE	CA-C-N	-5.18	112.14	121.62
1	A	228	ILE	C-N-CA	-5.18	112.14	121.62
1	A	573	ASN	N-CA-C	5.17	121.82	110.80
1	A	326	VAL	CB-CA-C	-5.17	104.12	111.40
1	A	384	ASN	N-CA-C	-5.16	101.92	109.81
1	A	230	GLY	O-C-N	-5.15	117.75	123.05
1	A	331	CYS	CA-C-N	5.14	130.66	122.94
1	A	331	CYS	C-N-CA	5.14	130.66	122.94
1	A	474	LEU	CA-CB-CG	-5.14	98.30	116.30
1	A	690	CYS	N-CA-C	5.14	117.22	109.41
1	A	255	CYS	N-CA-C	-5.14	99.86	110.80
1	A	484	GLY	N-CA-C	5.14	125.36	113.18
1	A	187	GLU	CA-C-N	5.12	131.32	121.54
1	A	187	GLU	C-N-CA	5.12	131.32	121.54
1	A	639	GLN	N-CA-CB	-5.12	101.26	110.37
1	A	73	ASP	N-CA-C	-5.11	99.64	108.69
1	A	343	CYS	N-CA-CB	-5.10	102.27	110.69
1	A	376	SER	CA-C-N	5.10	128.22	120.77
1	A	376	SER	C-N-CA	5.10	128.22	120.77
1	A	159	TRP	CA-C-N	5.09	126.20	119.84
1	A	159	TRP	C-N-CA	5.09	126.20	119.84
1	A	319	CYS	N-CA-C	5.08	117.00	110.39
1	A	340	PRO	CA-CB-CG	-5.07	94.36	104.00
1	A	240	CYS	N-CA-C	5.05	121.56	110.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	296	GLU	N-CA-C	-5.04	104.05	111.81
1	A	217	PRO	CA-C-N	5.02	131.13	121.54
1	A	217	PRO	C-N-CA	5.02	131.13	121.54

There are no chirality outliers.

All (2) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	167	TYR	Sidechain
1	A	468	TYR	Sidechain

5.2 Too-close contacts [i](#)

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	4702	0	4113	1574	4
2	B	61	0	50	25	0
3	C	50	0	43	31	0
4	A	8	0	0	0	0
5	A	135	0	0	19	12
All	All	4956	0	4206	1591	16

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 174.

All (1591) 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:586:HIS:CB	1:A:602:ILE:HG21	1.37	1.55
1:A:251:ASN:CA	3:C:1:NAG:H82	1.11	1.54
1:A:586:HIS:HB2	1:A:602:ILE:CG2	1.39	1.51
1:A:251:ASN:HB3	3:C:1:NAG:C8	1.41	1.48
1:A:251:ASN:HB3	3:C:1:NAG:C7	1.43	1.47
1:A:251:ASN:CG	3:C:1:NAG:N2	1.75	1.45
1:A:519:ALA:CB	1:A:539:ILE:HG23	1.46	1.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:251:ASN:CB	3:C:1:NAG:N2	1.78	1.45
1:A:251:ASN:CB	3:C:1:NAG:C8	2.00	1.38
1:A:251:ASN:CB	3:C:1:NAG:HN2	1.31	1.38
1:A:391:MET:CE	1:A:621:LEU:HD21	1.56	1.35
1:A:251:ASN:CB	3:C:1:NAG:H82	1.56	1.33
1:A:593:PHE:CD1	1:A:633:LEU:HD21	1.63	1.32
1:A:185:SER:CB	1:A:203:ASP:HB2	1.57	1.32
1:A:660:CYS:HB2	1:A:673:PHE:CE2	1.65	1.31
1:A:251:ASN:CA	3:C:1:NAG:C8	2.07	1.31
1:A:135:ASN:CG	2:B:1:NAG:C1	2.04	1.29
1:A:508:GLY:O	1:A:526:LEU:HB3	1.30	1.28
1:A:132:PHE:CD2	1:A:156:SER:HB2	1.70	1.26
1:A:251:ASN:HB3	3:C:1:NAG:N2	1.37	1.25
1:A:611:ASN:HB3	1:A:615:GLY:O	1.14	1.25
1:A:519:ALA:HB3	1:A:539:ILE:CG2	1.67	1.24
1:A:195:CYS:HA	1:A:207:GLU:CB	1.68	1.24
1:A:467:ILE:O	1:A:479:VAL:HA	1.39	1.23
1:A:305:SER:HB3	1:A:330:ARG:CB	1.68	1.22
1:A:389:ARG:HA	1:A:401:LEU:N	1.50	1.22
1:A:325:LEU:O	1:A:331:CYS:HB3	1.37	1.22
1:A:251:ASN:C	3:C:1:NAG:H82	1.67	1.20
1:A:562:HIS:C	1:A:584:LEU:HD21	1.64	1.20
1:A:554:LEU:O	1:A:566:SER:HA	1.42	1.20
1:A:585:ALA:HB3	1:A:602:ILE:HD11	1.19	1.17
1:A:251:ASN:HD21	3:C:1:NAG:C1	1.49	1.17
1:A:275:CYS:HA	1:A:287:GLU:HG2	1.22	1.17
1:A:507:HIS:HB3	1:A:509:PHE:CD1	1.80	1.16
1:A:585:ALA:CB	1:A:602:ILE:HD11	1.73	1.16
1:A:193:TRP:CE3	1:A:582:LYS:HE2	1.79	1.16
1:A:342:THR:HG23	1:A:347:CYS:CB	1.76	1.16
1:A:498:PRO:HG3	1:A:513:THR:O	1.46	1.16
1:A:622:ALA:HB1	1:A:625:LEU:CD2	1.75	1.16
1:A:339:ASP:OD1	1:A:342:THR:HG21	1.43	1.16
1:A:231:SER:C	1:A:233:GLN:H	1.38	1.15
1:A:222:CYS:SG	1:A:244:SER:HB2	1.87	1.15
1:A:185:SER:HB2	1:A:203:ASP:CB	1.74	1.15
1:A:251:ASN:CB	3:C:1:NAG:C7	2.11	1.15
1:A:317:CYS:O	1:A:318:LEU:HD23	1.47	1.14
1:A:152:CYS:SG	1:A:155:GLY:N	2.18	1.14
1:A:185:SER:HB2	1:A:203:ASP:HB2	1.15	1.13
1:A:411:LEU:H	1:A:411:LEU:CD2	1.54	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:409:VAL:HG12	1:A:409:VAL:O	1.48	1.13
1:A:481:ASP:HB2	1:A:486:LYS:HB2	1.22	1.12
1:A:500:ALA:HB3	1:A:513:THR:OG1	1.45	1.13
1:A:133:GLN:O	2:B:1:NAG:C8	1.96	1.12
1:A:588:PHE:HB3	1:A:629:GLU:CG	1.78	1.12
1:A:132:PHE:CE2	2:B:1:NAG:H81	1.84	1.11
1:A:234:CYS:HA	1:A:246:GLU:HG3	1.29	1.11
1:A:654:GLY:N	1:A:659:LEU:HD12	1.63	1.11
1:A:65:PHE:O	1:A:69:ASP:HB3	1.50	1.10
1:A:391:MET:HE1	1:A:621:LEU:CD2	1.81	1.10
1:A:468:TYR:CE2	1:A:526:LEU:HD13	1.84	1.10
1:A:150:PRO:HA	1:A:158:GLU:OE1	1.52	1.09
1:A:588:PHE:HB3	1:A:629:GLU:HG3	1.20	1.09
1:A:294:THR:OG1	1:A:312:LYS:HA	1.50	1.09
1:A:654:GLY:H	1:A:659:LEU:HD12	0.95	1.09
1:A:663:ALA:CB	1:A:672:LYS:HA	1.81	1.08
1:A:663:ALA:HB3	1:A:672:LYS:CA	1.82	1.08
1:A:275:CYS:HA	1:A:287:GLU:CG	1.83	1.08
1:A:468:TYR:OH	1:A:526:LEU:CD2	2.01	1.08
1:A:467:ILE:HG12	1:A:468:TYR:H	1.09	1.08
1:A:195:CYS:HA	1:A:207:GLU:HB2	1.15	1.07
1:A:339:ASP:HA	1:A:342:THR:HB	1.37	1.07
1:A:622:ALA:HB1	1:A:625:LEU:HD21	1.27	1.07
1:A:411:LEU:H	1:A:411:LEU:HD23	0.92	1.07
1:A:653:ASN:CB	1:A:659:LEU:HD13	1.84	1.07
1:A:468:TYR:OH	1:A:526:LEU:CD1	2.02	1.06
1:A:300:ASN:C	1:A:302:GLY:H	1.44	1.06
1:A:152:CYS:O	1:A:154:ASP:N	1.88	1.06
1:A:464:HIS:HB3	1:A:466:ASN:HD22	1.14	1.06
1:A:392:THR:HB	1:A:395:ARG:O	1.53	1.06
1:A:166:LEU:O	1:A:167:TYR:HD1	1.39	1.05
1:A:249:CYS:O	1:A:250:VAL:HG23	1.56	1.05
1:A:305:SER:HB3	1:A:330:ARG:HB3	1.29	1.05
1:A:251:ASN:CG	3:C:1:NAG:C1	2.28	1.05
1:A:653:ASN:HB2	1:A:659:LEU:HD13	1.11	1.05
1:A:251:ASN:HA	3:C:1:NAG:H82	1.06	1.05
1:A:134:CYS:O	1:A:136:SER:N	1.90	1.04
1:A:134:CYS:C	1:A:136:SER:H	1.61	1.04
1:A:594:GLU:OE1	1:A:594:GLU:HA	1.55	1.04
1:A:183:CYS:HB2	1:A:205:SER:HB3	1.38	1.04
1:A:421:TYR:CD2	1:A:432:SER:HB2	1.92	1.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:342:THR:HG23	1:A:347:CYS:HB2	1.05	1.04
1:A:607:ILE:C	1:A:608:PHE:HD2	1.66	1.04
1:A:548:ASP:HB3	1:A:552:GLY:HA3	1.06	1.03
1:A:593:PHE:HD1	1:A:633:LEU:CD2	1.69	1.03
1:A:301:ASN:HD21	1:A:308:CYS:HB3	1.25	1.02
1:A:270:THR:CG2	1:A:272:ASP:H	1.72	1.02
1:A:559:SER:HB3	1:A:586:HIS:HA	1.36	1.02
1:A:411:LEU:HD23	1:A:411:LEU:N	1.71	1.02
1:A:585:ALA:HB3	1:A:602:ILE:CD1	1.90	1.02
1:A:74:CYS:HB3	1:A:78:SER:OG	1.59	1.02
1:A:236:ARG:H	1:A:246:GLU:HG2	1.20	1.02
1:A:242:ASP:OD1	1:A:243:MET:N	1.91	1.01
1:A:251:ASN:C	3:C:1:NAG:C8	2.29	1.01
1:A:519:ALA:O	1:A:539:ILE:HG21	1.58	1.01
1:A:133:GLN:O	2:B:1:NAG:H81	1.60	1.01
1:A:527:ASN:O	1:A:529:VAL:HG23	1.59	1.01
1:A:236:ARG:N	1:A:246:GLU:HG2	1.75	1.01
1:A:467:ILE:HG22	1:A:480:ALA:O	1.61	1.01
1:A:185:SER:OG	1:A:203:ASP:HB2	1.61	1.00
1:A:358:CYS:CB	1:A:362:PHE:HB3	1.92	1.00
1:A:456:ASP:O	1:A:499:ARG:HA	1.62	1.00
1:A:270:THR:HG22	1:A:272:ASP:H	1.25	1.00
1:A:600:THR:HG21	1:A:628:PRO:O	1.61	1.00
1:A:505:PRO:O	1:A:506:VAL:HG12	1.59	0.99
1:A:325:LEU:O	1:A:331:CYS:CB	2.10	0.99
1:A:554:LEU:N	1:A:567:ILE:O	1.95	0.99
1:A:622:ALA:CB	1:A:625:LEU:HD21	1.91	0.99
1:A:251:ASN:ND2	3:C:1:NAG:C2	2.26	0.99
1:A:585:ALA:CB	1:A:602:ILE:CD1	2.40	0.99
1:A:146:CYS:HA	1:A:157:ASP:CA	1.92	0.98
1:A:358:CYS:HB3	1:A:362:PHE:HB3	0.99	0.98
1:A:586:HIS:HB3	1:A:588:PHE:CE1	1.98	0.98
1:A:286:ASP:C	1:A:287:GLU:HG3	1.85	0.98
1:A:195:CYS:CA	1:A:207:GLU:HB3	1.92	0.98
1:A:543:ASN:ND2	1:A:559:SER:OG	1.96	0.98
1:A:612:ARG:O	1:A:613:LEU:HD13	1.64	0.98
1:A:195:CYS:CA	1:A:207:GLU:CB	2.41	0.98
1:A:141:PRO:O	1:A:143:LEU:N	1.96	0.98
1:A:559:SER:HA	1:A:587:PRO:HD2	1.43	0.98
1:A:611:ASN:CB	1:A:615:GLY:O	2.10	0.98
1:A:240:CYS:SG	1:A:242:ASP:HB3	2.04	0.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:364:LEU:HD11	1:A:369:LYS:HA	1.44	0.97
1:A:134:CYS:SG	1:A:154:ASP:C	2.46	0.97
1:A:654:GLY:H	1:A:659:LEU:CD1	1.77	0.97
1:A:507:HIS:HB3	1:A:509:PHE:CE1	1.99	0.97
1:A:110:ASP:H	1:A:119:GLU:CD	1.71	0.97
1:A:660:CYS:HB2	1:A:673:PHE:HE2	1.17	0.97
1:A:264:HIS:HB3	1:A:285:SER:HB3	1.45	0.97
1:A:548:ASP:HB3	1:A:552:GLY:CA	1.94	0.97
1:A:193:TRP:H	1:A:193:TRP:CD1	1.72	0.97
1:A:391:MET:SD	1:A:621:LEU:HD21	2.04	0.97
1:A:418:ASN:O	1:A:434:GLN:HA	1.63	0.96
1:A:510:MET:CG	1:A:524:GLY:HA3	1.94	0.96
1:A:639:GLN:H	1:A:640:PRO:HD3	1.30	0.96
1:A:132:PHE:HD2	1:A:156:SER:HB2	1.26	0.96
1:A:160:PRO:HB3	1:A:166:LEU:HD21	1.47	0.96
1:A:339:ASP:CA	1:A:342:THR:HB	1.94	0.96
1:A:342:THR:CG2	1:A:343:CYS:N	2.28	0.96
1:A:195:CYS:N	1:A:207:GLU:HB3	1.78	0.96
1:A:87:THR:HG22	1:A:88:CYS:H	1.30	0.96
1:A:578:LEU:O	1:A:578:LEU:HG	1.63	0.96
1:A:391:MET:HE1	1:A:621:LEU:HD21	0.98	0.95
1:A:295:ASN:HA	1:A:310:ASP:OD2	1.64	0.95
1:A:107:CYS:CB	1:A:119:GLU:HG3	1.97	0.95
1:A:157:ASP:O	1:A:158:GLU:HG3	1.66	0.95
1:A:95:CYS:C	1:A:97:ASP:H	1.73	0.95
1:A:251:ASN:CG	3:C:1:NAG:C2	2.40	0.95
1:A:135:ASN:HD22	2:B:1:NAG:C1	1.79	0.95
1:A:468:TYR:CZ	1:A:526:LEU:HD13	2.02	0.95
1:A:629:GLU:O	1:A:629:GLU:HG2	1.66	0.95
1:A:358:CYS:HB3	1:A:362:PHE:CB	1.95	0.95
1:A:133:GLN:O	2:B:1:NAG:H82	1.67	0.94
1:A:593:PHE:HD1	1:A:633:LEU:HD21	0.97	0.94
1:A:663:ALA:HB3	1:A:672:LYS:HA	0.95	0.94
1:A:409:VAL:O	1:A:409:VAL:CG1	2.11	0.94
1:A:342:THR:HG22	1:A:343:CYS:N	1.81	0.94
1:A:421:TYR:HD2	1:A:432:SER:HB2	1.28	0.94
1:A:135:ASN:ND2	2:B:1:NAG:O5	1.98	0.94
1:A:251:ASN:CG	3:C:1:NAG:C7	2.36	0.94
1:A:340:PRO:HA	1:A:342:THR:O	1.66	0.94
1:A:548:ASP:CB	1:A:552:GLY:HA3	1.98	0.94
1:A:510:MET:HG2	1:A:524:GLY:HA3	1.50	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:231:SER:C	1:A:233:GLN:N	2.20	0.93
1:A:300:ASN:C	1:A:302:GLY:N	2.20	0.93
1:A:305:SER:CB	1:A:330:ARG:CB	2.46	0.93
1:A:339:ASP:N	1:A:342:THR:HB	1.83	0.93
1:A:469:TRP:CZ3	1:A:480:ALA:HB2	2.03	0.93
1:A:515:TRP:HB3	1:A:542:PRO:HD2	1.48	0.93
1:A:588:PHE:CE1	1:A:602:ILE:HG22	2.03	0.93
1:A:238:TYR:CE2	1:A:243:MET:HA	2.04	0.93
1:A:467:ILE:HG12	1:A:468:TYR:N	1.78	0.93
1:A:133:GLN:HG2	1:A:138:THR:H	1.33	0.93
1:A:185:SER:CB	1:A:203:ASP:CB	2.39	0.93
1:A:481:ASP:HB2	1:A:486:LYS:CB	1.99	0.93
1:A:553:ARG:HB2	1:A:567:ILE:C	1.94	0.93
1:A:342:THR:CG2	1:A:347:CYS:HB2	1.98	0.92
1:A:605:GLU:HB2	1:A:624:ASN:HA	1.51	0.92
1:A:607:ILE:C	1:A:608:PHE:CD2	2.48	0.92
1:A:613:LEU:C	1:A:615:GLY:H	1.77	0.92
1:A:107:CYS:HB2	1:A:119:GLU:HG3	1.52	0.92
1:A:263:CYS:SG	1:A:266:GLY:HA3	2.09	0.92
1:A:467:ILE:O	1:A:479:VAL:CA	2.17	0.92
1:A:468:TYR:CZ	1:A:526:LEU:CD1	2.53	0.92
1:A:192:SER:O	1:A:194:ARG:N	2.02	0.92
1:A:291:GLU:C	1:A:293:GLY:H	1.78	0.92
1:A:468:TYR:CE2	1:A:526:LEU:CD1	2.51	0.91
1:A:107:CYS:HB2	1:A:119:GLU:CA	2.00	0.91
1:A:325:LEU:O	1:A:326:VAL:HG12	1.71	0.91
1:A:499:ARG:NH2	1:A:629:GLU:O	2.04	0.91
1:A:640:PRO:O	1:A:641:ARG:HB2	1.71	0.91
1:A:517:THR:N	1:A:518:PRO:HD2	1.85	0.91
1:A:660:CYS:HB2	1:A:673:PHE:CZ	2.04	0.91
1:A:132:PHE:CE2	1:A:156:SER:HB2	2.06	0.91
1:A:310:ASP:HB2	1:A:315:TYR:HA	1.54	0.90
1:A:338:GLN:O	1:A:341:ASP:HB2	1.72	0.90
1:A:474:LEU:O	1:A:494:GLN:HA	1.70	0.90
1:A:588:PHE:HD2	1:A:629:GLU:OE2	1.53	0.90
1:A:613:LEU:O	1:A:615:GLY:N	2.04	0.90
1:A:485:VAL:O	1:A:486:LYS:HG2	1.71	0.90
1:A:73:ASP:O	1:A:74:CYS:HB2	1.70	0.90
1:A:115:ASP:OD2	1:A:117:SER:HB2	1.72	0.90
1:A:275:CYS:CA	1:A:287:GLU:HG2	2.01	0.90
1:A:84:PRO:HB2	1:A:85:PRO:CD	2.02	0.90

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:519:ALA:CB	1:A:539:ILE:CG2	2.39	0.90
1:A:190:HIS:O	1:A:193:TRP:CD1	2.25	0.90
1:A:238:TYR:CZ	1:A:243:MET:HB3	2.07	0.90
1:A:384:ASN:HB2	1:A:626:LEU:O	1.72	0.90
1:A:595:ASP:HA	1:A:612:ARG:HD3	1.53	0.90
1:A:66:TRP:O	1:A:79:ASP:HB2	1.71	0.89
1:A:464:HIS:HB3	1:A:466:ASN:ND2	1.86	0.89
1:A:515:TRP:O	1:A:516:GLY:O	1.90	0.89
1:A:554:LEU:O	1:A:566:SER:CA	2.19	0.89
1:A:201:CYS:SG	1:A:205:SER:HB2	2.11	0.89
1:A:291:GLU:HA	1:A:291:GLU:OE1	1.71	0.89
1:A:451:ASP:OD2	1:A:487:ARG:NH1	2.04	0.89
1:A:134:CYS:SG	1:A:154:ASP:CA	2.61	0.89
1:A:496:SER:O	1:A:498:PRO:HD2	1.71	0.89
1:A:588:PHE:CB	1:A:629:GLU:HG3	2.00	0.89
1:A:54:CYS:SG	1:A:55:GLY:N	2.46	0.89
1:A:251:ASN:HA	3:C:1:NAG:C8	1.89	0.89
1:A:107:CYS:HB2	1:A:119:GLU:HA	1.54	0.89
1:A:427:GLN:HG3	1:A:429:MET:SD	2.13	0.89
1:A:107:CYS:O	1:A:107:CYS:SG	2.31	0.88
1:A:238:TYR:OH	1:A:243:MET:HB3	1.72	0.88
1:A:562:HIS:O	1:A:584:LEU:HD21	1.72	0.88
1:A:242:ASP:CG	1:A:243:MET:H	1.81	0.88
1:A:333:ASP:HB3	1:A:351:GLU:HG2	1.54	0.88
1:A:48:LYS:O	1:A:50:GLY:N	2.05	0.88
1:A:118:ASP:O	1:A:119:GLU:HB2	1.71	0.88
1:A:507:HIS:HB3	1:A:509:PHE:HD1	1.36	0.88
1:A:514:ASP:O	1:A:542:PRO:HG2	1.71	0.88
1:A:65:PHE:C	1:A:67:ARG:N	2.25	0.88
1:A:105:PHE:O	1:A:107:CYS:N	2.06	0.88
1:A:586:HIS:O	1:A:602:ILE:CG2	2.21	0.88
1:A:150:PRO:CA	1:A:158:GLU:OE1	2.21	0.88
1:A:326:VAL:HG23	1:A:328:GLN:H	1.38	0.88
1:A:468:TYR:OH	1:A:526:LEU:HD11	1.72	0.88
1:A:183:CYS:HB2	1:A:205:SER:CB	2.04	0.88
1:A:166:LEU:O	1:A:167:TYR:CD1	2.26	0.88
1:A:641:ARG:HG3	1:A:642:GLY:H	1.37	0.88
1:A:317:CYS:C	1:A:318:LEU:HD23	1.99	0.87
1:A:557:VAL:HG13	1:A:590:LEU:HD13	1.54	0.87
1:A:259:ASN:O	1:A:270:THR:HB	1.73	0.87
1:A:133:GLN:C	2:B:1:NAG:H82	2.00	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:289:ILE:HA	1:A:292:CYS:HB2	1.56	0.87
1:A:342:THR:CG2	1:A:343:CYS:H	1.87	0.87
1:A:410:ALA:HB1	1:A:457:GLY:HA2	1.54	0.87
1:A:73:ASP:O	1:A:79:ASP:OD1	1.93	0.87
1:A:333:ASP:OD1	1:A:351:GLU:HA	1.73	0.87
1:A:176:CYS:O	1:A:178:ALA:N	2.07	0.87
1:A:633:LEU:HG	1:A:634:PHE:H	1.38	0.87
1:A:269:ILE:HD13	1:A:280:ASP:O	1.75	0.86
1:A:261:PHE:HD2	1:A:262:LYS:N	1.72	0.86
1:A:526:LEU:HD23	1:A:662:PRO:HG2	1.57	0.86
1:A:658:TYR:CZ	1:A:678:PRO:HD3	2.11	0.86
1:A:677:CYS:HB3	1:A:678:PRO:HD2	1.55	0.86
1:A:462:TRP:CD2	1:A:639:GLN:HG3	2.11	0.86
1:A:497:LYS:O	1:A:515:TRP:CH2	2.29	0.86
1:A:499:ARG:O	1:A:499:ARG:HG2	1.72	0.86
1:A:374:VAL:HG22	1:A:375:GLY:H	1.39	0.86
1:A:468:TYR:OH	1:A:526:LEU:HD21	1.75	0.86
1:A:251:ASN:HB3	3:C:1:NAG:H83	1.53	0.85
1:A:339:ASP:OD1	1:A:342:THR:CG2	2.24	0.85
1:A:180:GLU:CD	1:A:189:ILE:O	2.19	0.85
1:A:263:CYS:HB3	1:A:267:GLU:H	1.40	0.85
1:A:48:LYS:HG3	1:A:61:CYS:HB2	1.58	0.85
1:A:301:ASN:ND2	1:A:308:CYS:HB3	1.90	0.85
1:A:337:CYS:C	1:A:342:THR:OG1	2.19	0.85
1:A:559:SER:CB	1:A:586:HIS:HA	2.05	0.85
1:A:193:TRP:CD1	1:A:193:TRP:N	2.38	0.85
1:A:109:SER:HA	1:A:119:GLU:HG2	1.58	0.85
1:A:164:ARG:HG2	1:A:165:GLY:H	1.38	0.85
1:A:389:ARG:HA	1:A:401:LEU:H	1.40	0.85
1:A:392:THR:CG2	1:A:395:ARG:HG3	2.07	0.85
1:A:427:GLN:O	1:A:429:MET:N	2.09	0.85
1:A:65:PHE:C	1:A:67:ARG:H	1.83	0.85
1:A:496:SER:C	1:A:498:PRO:HD2	2.01	0.84
1:A:390:LYS:N	1:A:399:THR:O	2.09	0.84
1:A:465:SER:OG	1:A:482:THR:HG21	1.76	0.84
1:A:60:ARG:C	1:A:61:CYS:SG	2.61	0.84
1:A:589:SER:HB2	1:A:600:THR:H	1.42	0.84
1:A:600:THR:CG2	1:A:628:PRO:O	2.24	0.84
1:A:195:CYS:HA	1:A:207:GLU:HB3	1.55	0.84
1:A:411:LEU:CD2	1:A:411:LEU:N	2.34	0.84
1:A:427:GLN:HG3	1:A:429:MET:CG	2.07	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:527:ASN:OD1	1:A:674:THR:OG1	1.95	0.84
1:A:629:GLU:CG	1:A:629:GLU:O	2.25	0.83
1:A:146:CYS:HA	1:A:157:ASP:C	2.02	0.83
1:A:343:CYS:H	1:A:347:CYS:HB2	1.43	0.83
1:A:588:PHE:HE1	1:A:602:ILE:HG22	1.39	0.83
1:A:464:HIS:O	1:A:466:ASN:N	2.12	0.83
1:A:301:ASN:HD22	1:A:304:CYS:HB3	1.44	0.83
1:A:627:SER:N	1:A:628:PRO:HD3	1.92	0.83
1:A:242:ASP:CG	1:A:243:MET:N	2.32	0.82
1:A:462:TRP:CD1	1:A:463:ILE:HG23	2.14	0.82
1:A:625:LEU:HB2	1:A:628:PRO:CG	2.09	0.82
1:A:536:THR:O	1:A:537:GLU:HB2	1.79	0.82
1:A:195:CYS:H	1:A:207:GLU:HB3	1.39	0.82
1:A:517:THR:H	1:A:518:PRO:HD2	1.44	0.82
1:A:588:PHE:O	1:A:629:GLU:HG3	1.79	0.82
1:A:599:TRP:CZ3	1:A:601:ASP:OD2	2.32	0.82
1:A:263:CYS:CB	1:A:267:GLU:H	1.93	0.82
1:A:566:SER:O	1:A:575:LYS:N	2.13	0.82
1:A:638:THR:O	1:A:639:GLN:HB2	1.80	0.82
1:A:157:ASP:C	1:A:158:GLU:HG3	2.05	0.81
1:A:362:PHE:CG	1:A:373:ALA:HB2	2.15	0.81
1:A:150:PRO:O	1:A:586:HIS:CE1	2.33	0.81
1:A:251:ASN:ND2	3:C:1:NAG:N2	2.26	0.81
1:A:435:LEU:O	1:A:436:ASP:CG	2.24	0.81
1:A:514:ASP:CG	1:A:515:TRP:N	2.36	0.81
1:A:94:ARG:C	1:A:95:CYS:O	2.19	0.81
1:A:362:PHE:HE1	1:A:637:LEU:HD22	1.44	0.81
1:A:586:HIS:CB	1:A:602:ILE:CG2	2.20	0.81
1:A:681:MET:HA	1:A:691:LEU:O	1.80	0.81
1:A:261:PHE:HD2	1:A:262:LYS:H	1.29	0.81
1:A:298:LEU:HD23	1:A:301:ASN:CB	2.10	0.81
1:A:512:TRP:O	1:A:521:ILE:HG23	1.80	0.81
1:A:604:ASN:O	1:A:606:ALA:N	2.13	0.81
1:A:221:GLN:OE1	1:A:225:GLY:HA2	1.80	0.81
1:A:585:ALA:HB1	1:A:602:ILE:HD11	1.63	0.81
1:A:607:ILE:O	1:A:608:PHE:HD2	1.63	0.81
1:A:270:THR:HG22	1:A:271:LEU:N	1.96	0.81
1:A:135:ASN:CB	2:B:1:NAG:C1	2.59	0.81
1:A:283:ASP:C	1:A:285:SER:H	1.86	0.81
1:A:519:ALA:HB3	1:A:539:ILE:HG23	0.81	0.80
1:A:557:VAL:HG21	1:A:587:PRO:HB2	1.61	0.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:236:ARG:H	1:A:246:GLU:CG	1.92	0.80
1:A:427:GLN:NE2	1:A:429:MET:SD	2.52	0.80
1:A:448:ILE:HG23	1:A:448:ILE:O	1.81	0.80
1:A:310:ASP:CB	1:A:315:TYR:HA	2.11	0.80
1:A:62:ILE:HG23	1:A:63:PRO:HD2	1.61	0.80
1:A:152:CYS:SG	1:A:154:ASP:HA	2.22	0.80
1:A:260:LYS:HA	1:A:270:THR:OG1	1.81	0.80
1:A:288:PRO:O	1:A:292:CYS:HB2	1.82	0.80
1:A:576:THR:O	1:A:577:ILE:HG12	1.82	0.80
1:A:517:THR:N	1:A:518:PRO:CD	2.45	0.80
1:A:461:ASP:HB3	1:A:466:ASN:O	1.81	0.80
1:A:222:CYS:SG	1:A:244:SER:CB	2.68	0.80
1:A:149:ASP:OD1	1:A:586:HIS:NE2	2.15	0.79
1:A:506:VAL:HG13	1:A:507:HIS:CD2	2.17	0.79
1:A:468:TYR:OH	1:A:526:LEU:CG	2.29	0.79
1:A:539:ILE:HD13	1:A:540:GLN:H	1.47	0.79
1:A:231:SER:OG	1:A:233:GLN:CB	2.31	0.79
1:A:151:ASP:HB2	1:A:541:TRP:CZ3	2.18	0.79
1:A:238:TYR:CE2	1:A:243:MET:CA	2.65	0.79
1:A:504:ASP:OD1	1:A:507:HIS:HD2	1.66	0.79
1:A:146:CYS:HA	1:A:157:ASP:O	1.82	0.79
1:A:193:TRP:N	1:A:193:TRP:HD1	1.81	0.79
1:A:401:LEU:O	1:A:403:PRO:HD3	1.82	0.79
1:A:611:ASN:ND2	1:A:615:GLY:HA3	1.97	0.79
1:A:391:MET:SD	1:A:621:LEU:CD2	2.72	0.79
1:A:543:ASN:HB3	1:A:557:VAL:HG23	1.63	0.79
1:A:250:VAL:O	1:A:251:ASN:C	2.23	0.78
1:A:263:CYS:HB3	1:A:267:GLU:O	1.83	0.78
1:A:264:HIS:HB3	1:A:285:SER:CB	2.12	0.78
1:A:305:SER:CB	1:A:330:ARG:CA	2.61	0.78
1:A:507:HIS:O	1:A:508:GLY:C	2.26	0.78
1:A:519:ALA:HB1	1:A:539:ILE:HG23	1.63	0.78
1:A:497:LYS:HB2	1:A:515:TRP:CE2	2.19	0.78
1:A:656:CYS:HB2	1:A:659:LEU:CA	2.13	0.78
1:A:160:PRO:CB	1:A:166:LEU:HD21	2.14	0.78
1:A:570:ASN:O	1:A:571:GLY:C	2.26	0.78
1:A:633:LEU:HG	1:A:634:PHE:N	1.98	0.78
1:A:342:THR:HG23	1:A:343:CYS:H	1.49	0.78
1:A:468:TYR:HE2	1:A:526:LEU:HD13	1.47	0.78
1:A:625:LEU:HB2	1:A:628:PRO:HG2	1.64	0.78
1:A:206:ASP:O	1:A:208:GLU:N	2.16	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:519:ALA:O	1:A:539:ILE:CG2	2.32	0.78
1:A:521:ILE:HG22	1:A:522:LYS:N	1.99	0.78
1:A:53:SER:CB	1:A:61:CYS:H	1.97	0.77
1:A:146:CYS:HA	1:A:157:ASP:HA	1.66	0.77
1:A:74:CYS:CB	1:A:78:SER:OG	2.31	0.77
1:A:134:CYS:SG	1:A:154:ASP:N	2.57	0.77
1:A:507:HIS:O	1:A:509:PHE:N	2.17	0.77
1:A:103:ARG:HB2	5:A:6002:KEG:O13	1.84	0.77
1:A:499:ARG:NH2	1:A:629:GLU:HG2	1.98	0.77
1:A:280:ASP:N	1:A:286:ASP:OD2	2.13	0.77
1:A:474:LEU:HD13	1:A:497:LYS:HD3	1.65	0.77
1:A:568:ASP:C	1:A:570:ASN:H	1.93	0.77
1:A:656:CYS:O	1:A:659:LEU:HB3	1.84	0.77
1:A:298:LEU:C	1:A:300:ASN:N	2.38	0.77
1:A:507:HIS:CB	1:A:509:PHE:CD1	2.66	0.77
1:A:251:ASN:HB3	3:C:1:NAG:HN2	1.12	0.77
1:A:51:ASP:O	1:A:52:PHE:HB2	1.84	0.76
1:A:389:ARG:HA	1:A:401:LEU:CA	2.15	0.76
1:A:392:THR:HG22	1:A:395:ARG:HE	1.51	0.76
1:A:529:VAL:HG12	1:A:529:VAL:O	1.84	0.76
1:A:586:HIS:HB3	1:A:588:PHE:CZ	2.19	0.76
1:A:510:MET:HG3	1:A:524:GLY:HA3	1.67	0.76
1:A:84:PRO:O	1:A:85:PRO:C	2.27	0.76
1:A:132:PHE:CE2	1:A:133:GLN:O	2.38	0.76
1:A:328:GLN:C	1:A:329:ARG:HG2	2.11	0.76
1:A:421:TYR:HA	1:A:422:TRP:HE3	1.50	0.76
1:A:456:ASP:O	1:A:499:ARG:CA	2.32	0.76
1:A:508:GLY:HA3	1:A:664:PRO:HA	1.65	0.76
1:A:179:PHE:O	1:A:180:GLU:CD	2.28	0.76
1:A:435:LEU:O	1:A:436:ASP:OD2	2.03	0.76
1:A:95:CYS:C	1:A:97:ASP:N	2.42	0.76
1:A:586:HIS:CA	1:A:602:ILE:HG21	2.15	0.76
1:A:612:ARG:O	1:A:612:ARG:HG2	1.83	0.76
1:A:383:THR:O	1:A:628:PRO:HA	1.85	0.76
1:A:656:CYS:HB2	1:A:659:LEU:HB2	1.67	0.76
1:A:115:ASP:C	1:A:117:SER:H	1.94	0.76
1:A:238:TYR:HE2	1:A:243:MET:CA	1.99	0.76
1:A:245:ASP:C	1:A:246:GLU:OE1	2.29	0.76
1:A:134:CYS:C	1:A:136:SER:N	2.32	0.75
1:A:262:LYS:O	1:A:264:HIS:N	2.19	0.75
1:A:296:GLU:CD	1:A:296:GLU:H	1.93	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:305:SER:HB3	1:A:330:ARG:CA	2.16	0.75
1:A:508:GLY:HA3	1:A:664:PRO:CA	2.16	0.75
1:A:462:TRP:HD1	1:A:463:ILE:HG23	1.49	0.75
1:A:526:LEU:O	1:A:526:LEU:HG	1.86	0.75
1:A:537:GLU:HG2	1:A:538:ASN:N	2.00	0.75
1:A:185:SER:HB2	1:A:203:ASP:HB3	1.66	0.75
1:A:592:VAL:HG23	1:A:592:VAL:O	1.87	0.75
1:A:159:TRP:HA	1:A:159:TRP:CE3	2.21	0.75
1:A:580:ASP:O	1:A:584:LEU:HD23	1.86	0.75
1:A:576:THR:C	1:A:577:ILE:HG12	2.11	0.75
1:A:594:GLU:OE1	1:A:594:GLU:CA	2.35	0.75
1:A:169:PHE:HD2	1:A:170:GLN:H	1.35	0.75
1:A:298:LEU:HD23	1:A:301:ASN:HB2	1.67	0.75
1:A:115:ASP:O	1:A:117:SER:N	2.19	0.75
1:A:236:ARG:CA	1:A:246:GLU:HG2	2.16	0.75
1:A:519:ALA:C	1:A:539:ILE:HG21	2.10	0.75
1:A:330:ARG:O	1:A:330:ARG:HG3	1.85	0.74
1:A:465:SER:CB	1:A:482:THR:HG21	2.17	0.74
1:A:500:ALA:HB3	1:A:513:THR:HG1	1.49	0.74
1:A:427:GLN:HG3	1:A:429:MET:HG2	1.68	0.74
1:A:427:GLN:O	1:A:429:MET:HG2	1.88	0.74
1:A:47:CYS:O	1:A:48:LYS:C	2.29	0.74
1:A:658:TYR:CE2	1:A:678:PRO:HD3	2.21	0.74
1:A:620:LEU:N	1:A:620:LEU:HD23	2.02	0.74
1:A:296:GLU:O	1:A:299:ASP:HB2	1.87	0.74
1:A:506:VAL:HG13	1:A:506:VAL:O	1.87	0.74
1:A:629:GLU:O	1:A:630:ASP:HB2	1.84	0.74
1:A:656:CYS:HB2	1:A:659:LEU:CB	2.17	0.74
1:A:78:SER:HA	1:A:82:GLY:CA	2.16	0.74
1:A:300:ASN:O	1:A:303:GLY:N	2.17	0.73
1:A:345:GLN:NE2	1:A:594:GLU:HG3	2.03	0.73
1:A:622:ALA:HB1	1:A:625:LEU:HD22	1.65	0.73
1:A:238:TYR:CE2	1:A:243:MET:HB3	2.23	0.73
1:A:310:ASP:OD1	1:A:315:TYR:HA	1.88	0.73
1:A:337:CYS:SG	1:A:349:ASN:HB2	2.27	0.73
1:A:132:PHE:CZ	2:B:1:NAG:O7	2.41	0.73
1:A:256:GLU:O	1:A:258:PRO:N	2.22	0.73
1:A:281:CYS:C	1:A:283:ASP:H	1.96	0.73
1:A:653:ASN:CA	1:A:659:LEU:HD13	2.19	0.73
1:A:301:ASN:HA	1:A:304:CYS:CB	2.19	0.73
1:A:310:ASP:OD1	1:A:311:LEU:N	2.22	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:319:CYS:HB2	1:A:331:CYS:H	1.53	0.73
1:A:586:HIS:O	1:A:602:ILE:HG23	1.89	0.73
1:A:653:ASN:CA	1:A:659:LEU:CD1	2.67	0.73
1:A:337:CYS:SG	1:A:348:VAL:C	2.72	0.73
1:A:316:GLU:HG2	1:A:318:LEU:HG	1.70	0.72
1:A:490:LEU:HD13	1:A:528:GLY:HA2	1.71	0.72
1:A:613:LEU:C	1:A:615:GLY:N	2.39	0.72
1:A:561:LEU:O	1:A:563:SER:N	2.21	0.72
1:A:296:GLU:OE1	1:A:315:TYR:HB2	1.89	0.72
1:A:515:TRP:C	1:A:516:GLY:O	2.31	0.72
1:A:537:GLU:HG2	1:A:538:ASN:H	1.55	0.72
1:A:131:SER:OG	1:A:132:PHE:N	2.19	0.72
1:A:687:MET:O	1:A:688:ARG:HG3	1.89	0.72
1:A:143:LEU:C	1:A:144:TRP:HD1	1.97	0.72
1:A:234:CYS:HA	1:A:246:GLU:CG	2.16	0.72
1:A:239:ASP:O	1:A:240:CYS:HB3	1.88	0.72
1:A:71:GLN:H	1:A:80:GLU:CB	2.02	0.72
1:A:421:TYR:HA	1:A:422:TRP:CE3	2.25	0.72
1:A:639:GLN:N	1:A:640:PRO:HD3	1.95	0.72
1:A:410:ALA:CB	1:A:457:GLY:HA2	2.20	0.71
1:A:151:ASP:HB2	1:A:541:TRP:HZ3	1.54	0.71
1:A:263:CYS:SG	1:A:267:GLU:N	2.63	0.71
1:A:127:CYS:HB3	1:A:131:SER:OG	1.89	0.71
1:A:344:SER:O	1:A:345:GLN:OE1	2.06	0.71
1:A:301:ASN:HA	1:A:304:CYS:HB2	1.73	0.71
1:A:468:TYR:HE2	1:A:526:LEU:CD1	1.99	0.71
1:A:234:CYS:SG	1:A:246:GLU:HA	2.29	0.71
1:A:251:ASN:HB2	3:C:1:NAG:HN2	1.47	0.71
1:A:270:THR:CG2	1:A:271:LEU:H	2.03	0.71
1:A:557:VAL:HB	1:A:587:PRO:HG2	1.72	0.71
1:A:107:CYS:HB2	1:A:119:GLU:CG	2.21	0.71
1:A:526:LEU:CD2	1:A:662:PRO:HG2	2.19	0.71
1:A:585:ALA:C	1:A:602:ILE:HD13	2.16	0.71
1:A:421:TYR:HD2	1:A:432:SER:CB	2.01	0.71
1:A:133:GLN:C	2:B:1:NAG:C8	2.62	0.71
1:A:219:GLU:HB2	1:A:228:ILE:O	1.89	0.71
1:A:305:SER:CB	1:A:330:ARG:HB2	2.21	0.71
1:A:308:CYS:O	1:A:308:CYS:SG	2.49	0.71
1:A:135:ASN:HD22	2:B:1:NAG:C5	2.03	0.71
1:A:603:ILE:HG22	1:A:605:GLU:OE2	1.91	0.71
1:A:176:CYS:C	1:A:178:ALA:N	2.47	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:438:ALA:O	1:A:440:GLY:N	2.24	0.70
1:A:481:ASP:OD1	1:A:482:THR:N	2.15	0.70
1:A:588:PHE:CD2	1:A:629:GLU:OE2	2.42	0.70
1:A:362:PHE:HE1	1:A:637:LEU:CD2	2.03	0.70
1:A:588:PHE:CD2	1:A:629:GLU:CD	2.69	0.70
1:A:107:CYS:CA	1:A:119:GLU:HG3	2.21	0.70
1:A:270:THR:HG22	1:A:272:ASP:N	2.04	0.70
1:A:311:LEU:O	1:A:313:ILE:N	2.25	0.70
1:A:557:VAL:CG2	1:A:587:PRO:HB2	2.22	0.70
1:A:190:HIS:O	1:A:193:TRP:NE1	2.24	0.70
1:A:243:MET:O	1:A:247:VAL:HG13	1.92	0.70
1:A:507:HIS:CB	1:A:509:PHE:HD1	2.04	0.70
1:A:235:ASP:OD1	1:A:237:GLU:HB2	1.92	0.70
1:A:252:VAL:N	3:C:1:NAG:C8	2.54	0.70
1:A:286:ASP:OD1	1:A:287:GLU:HG3	1.91	0.70
1:A:139:CYS:C	1:A:140:ILE:HG13	2.16	0.70
1:A:647:GLU:O	1:A:651:LEU:HD11	1.92	0.70
1:A:164:ARG:HG2	1:A:165:GLY:N	2.07	0.69
1:A:682:LEU:N	1:A:690:CYS:HB3	2.07	0.69
1:A:392:THR:HG22	1:A:395:ARG:HG3	1.73	0.69
1:A:505:PRO:O	1:A:506:VAL:CG1	2.38	0.69
1:A:328:GLN:O	1:A:329:ARG:HG2	1.91	0.69
1:A:553:ARG:CB	1:A:567:ILE:C	2.65	0.69
1:A:337:CYS:HB2	1:A:349:ASN:HB3	1.74	0.69
1:A:482:THR:HG22	1:A:483:LYS:HG2	1.73	0.69
1:A:296:GLU:O	1:A:299:ASP:CB	2.40	0.69
1:A:599:TRP:HZ3	1:A:601:ASP:OD2	1.74	0.69
1:A:206:ASP:OD1	1:A:207:GLU:HG2	1.92	0.69
1:A:256:GLU:C	1:A:258:PRO:HD2	2.18	0.69
1:A:521:ILE:O	1:A:533:SER:HA	1.91	0.69
1:A:66:TRP:C	1:A:79:ASP:HB2	2.17	0.69
1:A:84:PRO:HB2	1:A:85:PRO:HD2	1.74	0.69
1:A:108:ASP:OD1	1:A:108:ASP:N	2.25	0.69
1:A:135:ASN:HB3	2:B:1:NAG:C1	2.22	0.69
1:A:383:THR:HG23	1:A:411:LEU:CD2	2.22	0.69
1:A:384:ASN:HA	1:A:627:SER:O	1.92	0.69
1:A:585:ALA:HB1	1:A:602:ILE:CD1	2.18	0.69
1:A:612:ARG:O	1:A:612:ARG:CG	2.40	0.69
1:A:362:PHE:CE1	1:A:637:LEU:CD2	2.75	0.69
1:A:660:CYS:CB	1:A:673:PHE:CE2	2.60	0.69
1:A:95:CYS:O	1:A:97:ASP:N	2.27	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:462:TRP:CZ2	1:A:505:PRO:HG2	2.27	0.68
1:A:594:GLU:OE1	1:A:612:ARG:NH1	2.26	0.68
1:A:243:MET:O	1:A:247:VAL:CG1	2.41	0.68
1:A:660:CYS:CB	1:A:673:PHE:HE2	1.98	0.68
1:A:206:ASP:CG	1:A:207:GLU:H	2.02	0.68
1:A:132:PHE:CD2	1:A:133:GLN:N	2.62	0.68
1:A:298:LEU:C	1:A:300:ASN:H	1.99	0.68
1:A:362:PHE:HA	1:A:373:ALA:CB	2.23	0.68
1:A:554:LEU:H	1:A:567:ILE:C	1.98	0.68
1:A:159:TRP:HA	1:A:159:TRP:HE3	1.57	0.68
1:A:208:GLU:HA	1:A:208:GLU:OE1	1.91	0.68
1:A:233:GLN:HA	1:A:245:ASP:OD1	1.93	0.68
1:A:588:PHE:HD2	1:A:629:GLU:CD	2.02	0.68
1:A:68:CYS:C	1:A:70:GLY:H	2.01	0.68
1:A:310:ASP:CG	1:A:315:TYR:HA	2.19	0.68
1:A:391:MET:CE	1:A:621:LEU:CD2	2.50	0.68
1:A:510:MET:O	1:A:524:GLY:N	2.27	0.68
1:A:71:GLN:O	1:A:80:GLU:OE1	2.12	0.68
1:A:132:PHE:CE2	2:B:1:NAG:C8	2.71	0.68
1:A:270:THR:CG2	1:A:271:LEU:N	2.56	0.68
1:A:326:VAL:HG23	1:A:328:GLN:N	2.09	0.68
1:A:348:VAL:HG22	1:A:355:LYS:O	1.94	0.68
1:A:462:TRP:CE2	1:A:505:PRO:HG2	2.29	0.68
1:A:527:ASN:O	1:A:529:VAL:N	2.23	0.68
1:A:144:TRP:CZ3	1:A:541:TRP:HE3	2.12	0.67
1:A:356:CYS:O	1:A:357:GLN:CG	2.42	0.67
1:A:362:PHE:CD1	1:A:373:ALA:CB	2.77	0.67
1:A:421:TYR:CE2	1:A:432:SER:HB2	2.29	0.67
1:A:469:TRP:HZ3	1:A:480:ALA:N	1.91	0.67
1:A:611:ASN:HD22	1:A:615:GLY:HA3	1.57	0.67
1:A:219:GLU:HB2	1:A:229:HIS:HB2	1.75	0.67
1:A:307:VAL:HG12	1:A:307:VAL:O	1.92	0.67
1:A:382:PHE:HB3	1:A:631:MET:HG2	1.75	0.67
1:A:291:GLU:C	1:A:293:GLY:N	2.46	0.67
1:A:475:GLY:HA3	1:A:493:GLU:O	1.94	0.67
1:A:147:ASP:OD1	1:A:157:ASP:OD2	2.13	0.67
1:A:422:TRP:CE3	1:A:422:TRP:N	2.62	0.67
1:A:469:TRP:CH2	1:A:480:ALA:HB2	2.30	0.67
1:A:589:SER:OG	1:A:630:ASP:HA	1.94	0.67
1:A:597:VAL:O	1:A:609:SER:HA	1.94	0.67
1:A:605:GLU:HB3	1:A:625:LEU:N	2.09	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:337:CYS:SG	1:A:349:ASN:CB	2.82	0.67
1:A:414:GLU:OE1	1:A:462:TRP:HB3	1.93	0.67
1:A:562:HIS:HB3	1:A:584:LEU:HD23	1.75	0.67
1:A:578:LEU:O	1:A:578:LEU:CG	2.35	0.67
1:A:133:GLN:HG2	1:A:138:THR:N	2.07	0.67
1:A:270:THR:HG23	1:A:272:ASP:H	1.59	0.67
1:A:147:ASP:OD1	1:A:147:ASP:N	2.28	0.67
1:A:383:THR:CG2	1:A:411:LEU:HD22	2.24	0.67
1:A:514:ASP:CG	1:A:515:TRP:H	2.03	0.67
1:A:314:GLY:C	1:A:316:GLU:H	2.01	0.67
1:A:356:CYS:O	1:A:357:GLN:HG3	1.94	0.67
1:A:169:PHE:CD2	1:A:170:GLN:N	2.63	0.66
1:A:298:LEU:HA	1:A:301:ASN:H	1.61	0.66
1:A:427:GLN:OE1	1:A:427:GLN:HA	1.95	0.66
1:A:451:ASP:CG	1:A:487:ARG:HH12	2.02	0.66
1:A:607:ILE:HG12	1:A:625:LEU:CD1	2.24	0.66
1:A:641:ARG:HG3	1:A:642:GLY:N	2.10	0.66
1:A:259:ASN:O	1:A:270:THR:CB	2.43	0.66
1:A:273:LYS:O	1:A:273:LYS:HG2	1.93	0.66
1:A:346:LEU:O	1:A:346:LEU:HG	1.93	0.66
1:A:304:CYS:HA	1:A:317:CYS:HB3	1.77	0.66
1:A:599:TRP:HZ3	1:A:601:ASP:CG	2.04	0.66
1:A:334:ILE:HG23	1:A:336:GLU:OE2	1.96	0.66
1:A:562:HIS:CA	1:A:584:LEU:HD21	2.25	0.66
1:A:588:PHE:HB3	1:A:629:GLU:CB	2.26	0.66
1:A:155:GLY:HA2	1:A:159:TRP:CB	2.25	0.66
1:A:269:ILE:O	1:A:269:ILE:HG13	1.94	0.66
1:A:269:ILE:O	1:A:270:THR:OG1	2.10	0.66
1:A:294:THR:HA	1:A:296:GLU:OE2	1.96	0.66
1:A:559:SER:OG	1:A:587:PRO:N	2.29	0.66
1:A:654:GLY:N	1:A:659:LEU:CD1	2.45	0.66
1:A:656:CYS:HB2	1:A:659:LEU:HA	1.78	0.66
1:A:72:VAL:HA	1:A:80:GLU:OE2	1.95	0.66
1:A:169:PHE:HD2	1:A:170:GLN:N	1.93	0.66
1:A:503:VAL:HA	1:A:510:MET:HA	1.75	0.66
1:A:250:VAL:O	1:A:252:VAL:HG23	1.96	0.66
1:A:152:CYS:C	1:A:154:ASP:N	2.53	0.65
1:A:48:LYS:CG	1:A:61:CYS:HB2	2.26	0.65
1:A:190:HIS:O	1:A:192:SER:N	2.30	0.65
1:A:256:GLU:O	1:A:258:PRO:HD2	1.97	0.65
1:A:261:PHE:CD2	1:A:262:LYS:N	2.60	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:193:TRP:HE3	1:A:582:LYS:HE2	1.49	0.65
1:A:430:ILE:HG12	1:A:448:ILE:HG22	1.78	0.65
1:A:499:ARG:O	1:A:499:ARG:CG	2.45	0.65
1:A:117:SER:O	1:A:118:ASP:HB3	1.94	0.65
1:A:275:CYS:HA	1:A:287:GLU:CB	2.26	0.65
1:A:411:LEU:HD23	1:A:630:ASP:HB3	1.78	0.65
1:A:261:PHE:C	1:A:263:CYS:N	2.54	0.65
1:A:270:THR:HG22	1:A:271:LEU:H	1.57	0.65
1:A:283:ASP:C	1:A:285:SER:N	2.55	0.65
1:A:562:HIS:O	1:A:584:LEU:CD2	2.45	0.65
1:A:634:PHE:CD2	1:A:635:HIS:N	2.64	0.65
1:A:147:ASP:OD2	1:A:560:LYS:HE2	1.97	0.65
1:A:271:LEU:HB2	1:A:273:LYS:HB2	1.79	0.65
1:A:289:ILE:HG23	1:A:289:ILE:O	1.97	0.65
1:A:298:LEU:HD23	1:A:301:ASN:HB3	1.76	0.65
1:A:374:VAL:HG22	1:A:375:GLY:N	2.12	0.65
1:A:421:TYR:HB3	1:A:431:CYS:O	1.96	0.65
1:A:452:ILE:C	1:A:471:ASP:OD1	2.39	0.65
1:A:147:ASP:O	1:A:158:GLU:OE2	2.14	0.65
1:A:190:HIS:HB2	1:A:193:TRP:HE1	1.62	0.65
1:A:251:ASN:OD1	3:C:1:NAG:C1	2.44	0.65
1:A:684:ALA:O	1:A:686:ASP:N	2.27	0.65
1:A:132:PHE:CD2	2:B:1:NAG:H81	2.30	0.64
1:A:298:LEU:HA	1:A:301:ASN:HB2	1.77	0.64
1:A:481:ASP:HB2	1:A:486:LYS:CG	2.26	0.64
1:A:481:ASP:CG	1:A:482:THR:H	2.05	0.64
1:A:333:ASP:CG	1:A:351:GLU:HA	2.22	0.64
1:A:310:ASP:CG	1:A:311:LEU:N	2.55	0.64
1:A:508:GLY:O	1:A:526:LEU:CB	2.25	0.64
1:A:509:PHE:HA	1:A:524:GLY:O	1.97	0.64
1:A:462:TRP:CE3	1:A:639:GLN:HG3	2.33	0.64
1:A:496:SER:O	1:A:498:PRO:CD	2.43	0.64
1:A:496:SER:O	1:A:496:SER:OG	1.99	0.64
1:A:583:ARG:O	1:A:599:TRP:HH2	1.80	0.64
1:A:176:CYS:C	1:A:178:ALA:H	2.01	0.64
1:A:605:GLU:CB	1:A:624:ASN:HA	2.26	0.64
1:A:66:TRP:O	1:A:79:ASP:O	2.16	0.64
1:A:367:HIS:O	1:A:368:THR:HG23	1.96	0.64
1:A:599:TRP:CZ3	1:A:601:ASP:CG	2.76	0.64
1:A:392:THR:O	1:A:394:ASP:N	2.30	0.64
1:A:539:ILE:HD13	1:A:540:GLN:N	2.11	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:135:ASN:HB3	2:B:1:NAG:N2	2.12	0.64
1:A:159:TRP:O	1:A:161:GLN:N	2.31	0.64
1:A:261:PHE:O	1:A:263:CYS:N	2.28	0.64
1:A:514:ASP:O	1:A:542:PRO:CG	2.44	0.64
1:A:521:ILE:CG2	1:A:522:LYS:N	2.61	0.64
1:A:256:GLU:O	1:A:258:PRO:CD	2.46	0.64
1:A:384:ASN:CG	1:A:387:GLU:HB3	2.24	0.63
1:A:600:THR:CG2	1:A:601:ASP:N	2.59	0.63
1:A:607:ILE:HG12	1:A:625:LEU:HD11	1.80	0.63
1:A:557:VAL:CG1	1:A:590:LEU:HD13	2.25	0.63
1:A:362:PHE:HA	1:A:373:ALA:HB2	1.81	0.63
1:A:482:THR:HG22	1:A:483:LYS:CG	2.28	0.63
1:A:521:ILE:HG22	1:A:522:LYS:H	1.61	0.63
1:A:68:CYS:SG	1:A:80:GLU:CA	2.87	0.63
1:A:103:ARG:HG3	1:A:104:GLN:N	2.13	0.63
1:A:134:CYS:SG	1:A:155:GLY:N	2.71	0.63
1:A:296:GLU:CD	1:A:296:GLU:N	2.55	0.63
1:A:333:ASP:CB	1:A:351:GLU:HG2	2.27	0.63
1:A:345:GLN:NE2	1:A:612:ARG:NH2	2.46	0.63
1:A:625:LEU:N	1:A:625:LEU:HD23	2.12	0.63
1:A:135:ASN:OD1	1:A:135:ASN:N	2.29	0.63
1:A:622:ALA:O	1:A:625:LEU:HD21	1.98	0.63
1:A:182:HIS:ND1	1:A:187:GLU:OE1	2.32	0.63
1:A:299:ASP:OD1	1:A:299:ASP:O	2.16	0.63
1:A:316:GLU:HG2	1:A:318:LEU:CG	2.29	0.63
1:A:324:GLN:H	1:A:334:ILE:HG22	1.63	0.63
1:A:452:ILE:C	1:A:471:ASP:OD2	2.42	0.63
1:A:504:ASP:O	1:A:507:HIS:HB2	1.99	0.63
1:A:658:TYR:CD2	1:A:677:CYS:HA	2.34	0.63
1:A:155:GLY:HA2	1:A:159:TRP:HB3	1.81	0.62
1:A:310:ASP:HB2	1:A:315:TYR:CA	2.27	0.62
1:A:345:GLN:CB	1:A:371:CYS:HB2	2.28	0.62
1:A:63:PRO:C	1:A:65:PHE:H	2.08	0.62
1:A:261:PHE:O	1:A:267:GLU:O	2.16	0.62
1:A:314:GLY:O	1:A:316:GLU:N	2.20	0.62
1:A:629:GLU:O	1:A:630:ASP:CB	2.47	0.62
1:A:651:LEU:HD13	1:A:653:ASN:O	1.99	0.62
1:A:224:ASP:O	1:A:226:ASN:N	2.33	0.62
1:A:153:GLU:HA	1:A:153:GLU:OE1	1.98	0.62
1:A:305:SER:CB	1:A:330:ARG:HA	2.29	0.62
1:A:527:ASN:OD1	1:A:674:THR:CB	2.47	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:534:LEU:HG	1:A:535:VAL:N	2.13	0.62
1:A:340:PRO:HG2	1:A:613:LEU:CD2	2.29	0.62
1:A:381:PHE:O	1:A:631:MET:HG2	2.00	0.62
1:A:392:THR:HG22	1:A:395:ARG:NE	2.14	0.62
1:A:493:GLU:OE1	1:A:493:GLU:HA	1.98	0.62
1:A:525:GLY:HA2	1:A:664:PRO:HG3	1.82	0.62
1:A:606:ALA:C	1:A:625:LEU:HD11	2.25	0.62
1:A:411:LEU:HD21	1:A:630:ASP:O	2.00	0.62
1:A:605:GLU:C	1:A:625:LEU:HG	2.24	0.62
1:A:447:VAL:O	1:A:448:ILE:HG22	1.99	0.62
1:A:499:ARG:O	1:A:500:ALA:HB2	1.98	0.62
1:A:501:ILE:HG22	1:A:512:TRP:HB2	1.82	0.62
1:A:586:HIS:O	1:A:588:PHE:CD1	2.53	0.62
1:A:684:ALA:HB3	1:A:686:ASP:OD1	2.00	0.62
1:A:53:SER:HB3	1:A:61:CYS:H	1.63	0.62
1:A:83:CYS:SG	1:A:84:PRO:HD2	2.40	0.62
1:A:249:CYS:O	1:A:250:VAL:CG2	2.42	0.62
1:A:298:LEU:CA	1:A:301:ASN:HB2	2.30	0.62
1:A:305:SER:HB3	1:A:330:ARG:HB2	1.71	0.62
1:A:456:ASP:CG	1:A:472:SER:OG	2.43	0.62
1:A:48:LYS:HD2	1:A:61:CYS:O	2.00	0.61
1:A:231:SER:CB	1:A:233:GLN:CB	2.77	0.61
1:A:484:GLY:O	1:A:485:VAL:HG22	2.00	0.61
1:A:539:ILE:HD11	1:A:542:PRO:HG3	1.82	0.61
1:A:562:HIS:HB3	1:A:584:LEU:CD2	2.29	0.61
1:A:653:ASN:HA	1:A:659:LEU:CD1	2.29	0.61
1:A:135:ASN:HD22	2:B:1:NAG:H5	1.63	0.61
1:A:149:ASP:C	1:A:158:GLU:OE2	2.43	0.61
1:A:587:PRO:O	1:A:588:PHE:CG	2.54	0.61
1:A:686:ASP:O	1:A:688:ARG:N	2.32	0.61
1:A:135:ASN:HB3	2:B:1:NAG:C2	2.30	0.61
1:A:193:TRP:H	1:A:193:TRP:HD1	1.29	0.61
1:A:229:HIS:C	1:A:230:GLY:O	2.39	0.61
1:A:262:LYS:O	1:A:263:CYS:C	2.44	0.61
1:A:469:TRP:CZ3	1:A:480:ALA:CB	2.81	0.61
1:A:517:THR:O	1:A:517:THR:HG22	2.00	0.61
1:A:654:GLY:HA3	1:A:673:PHE:CZ	2.36	0.61
1:A:53:SER:HB3	1:A:61:CYS:N	2.14	0.61
1:A:636:GLN:OE1	1:A:636:GLN:HA	2.01	0.61
1:A:130:ALA:O	1:A:131:SER:HB2	2.00	0.61
1:A:240:CYS:SG	1:A:242:ASP:CB	2.85	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:189:ILE:HG22	1:A:193:TRP:CE2	2.36	0.61
1:A:293:GLY:O	1:A:296:GLU:OE2	2.18	0.61
1:A:367:HIS:O	1:A:368:THR:CG2	2.49	0.61
1:A:493:GLU:HG3	1:A:495:GLY:O	2.00	0.61
1:A:521:ILE:CG2	1:A:522:LYS:H	2.14	0.61
1:A:152:CYS:SG	1:A:154:ASP:C	2.83	0.61
1:A:334:ILE:HG13	1:A:336:GLU:HG3	1.82	0.61
1:A:422:TRP:HE3	1:A:422:TRP:N	1.98	0.61
1:A:427:GLN:CG	1:A:429:MET:SD	2.88	0.61
1:A:146:CYS:CA	1:A:157:ASP:O	2.48	0.61
1:A:620:LEU:O	1:A:621:LEU:HB2	2.00	0.61
1:A:245:ASP:HB3	1:A:246:GLU:OE1	2.00	0.61
1:A:506:VAL:CG1	1:A:507:HIS:CD2	2.83	0.61
1:A:586:HIS:HB2	1:A:602:ILE:CB	2.23	0.61
1:A:139:CYS:O	1:A:140:ILE:HG13	2.01	0.60
1:A:144:TRP:CZ3	1:A:541:TRP:CE3	2.88	0.60
1:A:276:ASN:O	1:A:277:MET:C	2.42	0.60
1:A:403:PRO:O	1:A:404:ASN:OD1	2.18	0.60
1:A:606:ALA:HA	1:A:625:LEU:HD11	1.84	0.60
1:A:625:LEU:HB2	1:A:628:PRO:HG3	1.81	0.60
1:A:115:ASP:C	1:A:117:SER:N	2.58	0.60
1:A:143:LEU:C	1:A:144:TRP:CD1	2.79	0.60
1:A:424:ASP:OD1	1:A:425:LEU:N	2.34	0.60
1:A:78:SER:C	1:A:82:GLY:N	2.59	0.60
1:A:106:VAL:HG13	1:A:106:VAL:O	2.01	0.60
1:A:107:CYS:CB	1:A:119:GLU:HA	2.27	0.60
1:A:250:VAL:O	1:A:250:VAL:CG1	2.49	0.60
1:A:484:GLY:O	1:A:485:VAL:CG2	2.50	0.60
1:A:682:LEU:O	1:A:684:ALA:N	2.35	0.60
1:A:190:HIS:HB2	1:A:193:TRP:NE1	2.16	0.60
1:A:485:VAL:O	1:A:486:LYS:CG	2.46	0.60
1:A:356:CYS:C	1:A:357:GLN:HG3	2.26	0.60
1:A:591:ALA:HB3	1:A:598:PHE:HB2	1.84	0.60
1:A:286:ASP:O	1:A:287:GLU:HG3	2.02	0.60
1:A:313:ILE:HG22	1:A:313:ILE:O	2.01	0.60
1:A:622:ALA:C	1:A:625:LEU:HD21	2.26	0.60
1:A:115:ASP:CG	1:A:117:SER:HB2	2.27	0.60
1:A:195:CYS:CA	1:A:207:GLU:HB2	2.08	0.60
1:A:278:ALA:O	1:A:286:ASP:OD2	2.20	0.60
1:A:469:TRP:CE3	1:A:478:SER:OG	2.55	0.60
1:A:585:ALA:CB	1:A:602:ILE:HD13	2.31	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:600:THR:HA	1:A:607:ILE:HD13	1.83	0.60
1:A:684:ALA:N	1:A:689:SER:O	2.34	0.60
1:A:48:LYS:CE	1:A:61:CYS:O	2.50	0.60
1:A:301:ASN:CA	1:A:304:CYS:HB2	2.31	0.60
1:A:345:GLN:O	1:A:357:GLN:O	2.20	0.60
1:A:68:CYS:H	1:A:79:ASP:C	2.09	0.59
1:A:151:ASP:OD1	1:A:151:ASP:C	2.45	0.59
1:A:170:GLN:O	1:A:170:GLN:HG2	2.00	0.59
1:A:274:VAL:HG23	1:A:274:VAL:O	2.02	0.59
1:A:327:ALA:O	1:A:328:GLN:HG2	2.02	0.59
1:A:605:GLU:O	1:A:624:ASN:N	2.35	0.59
1:A:677:CYS:HB3	1:A:678:PRO:CD	2.28	0.59
1:A:107:CYS:HA	1:A:119:GLU:OE2	2.01	0.59
1:A:190:HIS:C	1:A:193:TRP:HE1	2.11	0.59
1:A:414:GLU:OE1	1:A:462:TRP:CB	2.50	0.59
1:A:536:THR:O	1:A:536:THR:HG23	2.02	0.59
1:A:47:CYS:O	1:A:49:SER:N	2.35	0.59
1:A:127:CYS:HB3	1:A:131:SER:CB	2.33	0.59
1:A:221:GLN:OE1	1:A:225:GLY:CA	2.51	0.59
1:A:457:GLY:C	1:A:458:LEU:HG	2.26	0.59
1:A:71:GLN:H	1:A:80:GLU:HB3	1.67	0.59
1:A:84:PRO:HB2	1:A:85:PRO:HD3	1.85	0.59
1:A:133:GLN:HG3	1:A:138:THR:O	2.02	0.59
1:A:260:LYS:CA	1:A:270:THR:OG1	2.48	0.59
1:A:263:CYS:HB3	1:A:267:GLU:N	2.13	0.59
1:A:325:LEU:C	1:A:326:VAL:CG1	2.76	0.59
1:A:335:ASP:CA	1:A:349:ASN:HD21	2.15	0.59
1:A:455:PRO:HA	1:A:470:THR:O	2.01	0.59
1:A:363:GLN:OE1	1:A:363:GLN:HA	2.01	0.59
1:A:527:ASN:C	1:A:529:VAL:H	2.10	0.59
1:A:608:PHE:CD2	1:A:608:PHE:N	2.67	0.59
1:A:667:ASN:N	1:A:668:PRO:CD	2.64	0.59
1:A:334:ILE:HG23	1:A:336:GLU:CG	2.32	0.59
1:A:358:CYS:SG	1:A:363:GLN:C	2.86	0.59
1:A:490:LEU:HD13	1:A:528:GLY:CA	2.32	0.59
1:A:510:MET:HG2	1:A:524:GLY:CA	2.28	0.59
1:A:583:ARG:CB	1:A:608:PHE:HE1	2.15	0.59
1:A:300:ASN:C	1:A:303:GLY:H	2.11	0.58
1:A:472:SER:HA	1:A:474:LEU:HD21	1.83	0.58
1:A:473:VAL:O	1:A:474:LEU:HD23	2.03	0.58
1:A:564:ILE:O	1:A:564:ILE:HG23	2.03	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:238:TYR:CE2	1:A:243:MET:CB	2.85	0.58
1:A:421:TYR:CA	1:A:422:TRP:HE3	2.15	0.58
1:A:450:ARG:CB	5:A:6002:KEG:O26	2.51	0.58
1:A:325:LEU:O	1:A:326:VAL:CG1	2.48	0.58
1:A:496:SER:C	1:A:498:PRO:CD	2.73	0.58
1:A:513:THR:HG23	1:A:542:PRO:CB	2.33	0.58
1:A:553:ARG:HB2	1:A:567:ILE:CA	2.33	0.58
1:A:68:CYS:HA	1:A:80:GLU:HA	1.84	0.58
1:A:87:THR:CG2	1:A:88:CYS:H	2.08	0.58
1:A:118:ASP:O	1:A:119:GLU:CB	2.50	0.58
1:A:338:GLN:N	1:A:342:THR:OG1	2.36	0.58
1:A:593:PHE:CD1	1:A:633:LEU:CD2	2.52	0.58
1:A:190:HIS:HB2	1:A:193:TRP:CZ2	2.38	0.58
1:A:87:THR:HG22	1:A:88:CYS:N	2.10	0.58
1:A:462:TRP:CD2	1:A:639:GLN:CG	2.86	0.58
1:A:482:THR:HG22	1:A:483:LYS:N	2.18	0.58
1:A:654:GLY:CA	1:A:673:PHE:CZ	2.87	0.58
1:A:127:CYS:O	1:A:128:GLY:O	2.21	0.58
1:A:594:GLU:O	1:A:595:ASP:OD2	2.22	0.58
1:A:81:GLN:C	1:A:83:CYS:H	2.08	0.58
1:A:498:PRO:HD3	1:A:514:ASP:HA	1.85	0.58
1:A:504:ASP:OD1	1:A:549:LEU:HD11	2.03	0.58
1:A:651:LEU:HB2	1:A:653:ASN:O	2.03	0.58
1:A:468:TYR:OH	1:A:526:LEU:HD22	1.96	0.58
1:A:497:LYS:O	1:A:515:TRP:CZ2	2.56	0.58
1:A:543:ASN:O	1:A:557:VAL:CG2	2.52	0.58
1:A:70:GLY:HA2	1:A:80:GLU:HB2	1.85	0.57
1:A:134:CYS:SG	1:A:153:GLU:C	2.87	0.57
1:A:150:PRO:O	1:A:586:HIS:NE2	2.37	0.57
1:A:559:SER:CA	1:A:587:PRO:HD2	2.25	0.57
1:A:660:CYS:O	1:A:660:CYS:SG	2.62	0.57
1:A:392:THR:CB	1:A:395:ARG:HG3	2.34	0.57
1:A:475:GLY:N	1:A:496:SER:OG	2.37	0.57
1:A:146:CYS:CA	1:A:157:ASP:HB2	2.33	0.57
1:A:149:ASP:OD1	1:A:149:ASP:C	2.46	0.57
1:A:383:THR:HG23	1:A:411:LEU:HD21	1.85	0.57
1:A:462:TRP:CE2	1:A:639:GLN:HG3	2.38	0.57
1:A:447:VAL:HG22	1:A:484:GLY:HA3	1.85	0.57
1:A:481:ASP:CB	1:A:486:LYS:CG	2.82	0.57
1:A:539:ILE:CD1	1:A:542:PRO:HG3	2.35	0.57
1:A:63:PRO:O	1:A:65:PHE:N	2.38	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:126:THR:O	1:A:128:GLY:N	2.38	0.57
1:A:334:ILE:HD12	1:A:335:ASP:N	2.19	0.57
1:A:415:VAL:CG1	1:A:416:ALA:N	2.67	0.57
1:A:452:ILE:C	1:A:471:ASP:CG	2.72	0.57
1:A:105:PHE:HB3	1:A:108:ASP:OD2	2.05	0.57
1:A:251:ASN:CG	3:C:1:NAG:HN2	1.72	0.57
1:A:252:VAL:N	3:C:1:NAG:H82	2.15	0.57
1:A:93:PHE:O	1:A:98:GLY:HA2	2.03	0.57
1:A:513:THR:HG23	1:A:542:PRO:HB2	1.86	0.57
1:A:588:PHE:O	1:A:629:GLU:O	2.22	0.57
1:A:589:SER:HG	1:A:630:ASP:HA	1.67	0.57
1:A:653:ASN:OD1	1:A:655:GLY:N	2.38	0.57
1:A:656:CYS:CB	1:A:659:LEU:HA	2.35	0.57
1:A:68:CYS:SG	1:A:80:GLU:N	2.78	0.57
1:A:465:SER:HB3	1:A:482:THR:HG21	1.87	0.57
1:A:300:ASN:O	1:A:302:GLY:N	2.35	0.57
1:A:335:ASP:C	1:A:349:ASN:HD21	2.13	0.57
1:A:384:ASN:OD1	1:A:387:GLU:HB3	2.05	0.57
1:A:557:VAL:HB	1:A:587:PRO:CG	2.33	0.57
1:A:607:ILE:HG22	1:A:608:PHE:N	2.20	0.57
1:A:344:SER:HB2	1:A:612:ARG:HH21	1.70	0.57
1:A:402:ILE:O	1:A:404:ASN:N	2.34	0.57
1:A:527:ASN:C	1:A:527:ASN:ND2	2.59	0.57
1:A:160:PRO:HB3	1:A:166:LEU:CD2	2.30	0.56
1:A:284:TRP:C	1:A:286:ASP:H	2.13	0.56
1:A:501:ILE:HB	1:A:511:TYR:O	2.05	0.56
1:A:556:TRP:O	1:A:564:ILE:HG13	2.05	0.56
1:A:687:MET:C	1:A:688:ARG:HG3	2.30	0.56
1:A:108:ASP:N	1:A:119:GLU:OE2	2.38	0.56
1:A:144:TRP:CD1	1:A:144:TRP:N	2.71	0.56
1:A:190:HIS:CB	1:A:193:TRP:HE1	2.17	0.56
1:A:250:VAL:O	1:A:250:VAL:HG12	2.04	0.56
1:A:301:ASN:CA	1:A:304:CYS:CB	2.83	0.56
1:A:392:THR:HG22	1:A:395:ARG:CG	2.34	0.56
1:A:482:THR:CG2	1:A:483:LYS:N	2.68	0.56
1:A:52:PHE:C	1:A:52:PHE:CD2	2.83	0.56
1:A:151:ASP:CB	1:A:541:TRP:CZ3	2.88	0.56
1:A:160:PRO:HB3	1:A:166:LEU:HD11	1.87	0.56
1:A:332:GLU:HA	1:A:351:GLU:OE2	2.06	0.56
1:A:362:PHE:O	1:A:363:GLN:CD	2.48	0.56
1:A:641:ARG:CG	1:A:642:GLY:H	2.13	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:281:CYS:O	1:A:283:ASP:N	2.35	0.56
1:A:383:THR:HG23	1:A:411:LEU:HD22	1.87	0.56
1:A:656:CYS:O	1:A:659:LEU:CB	2.53	0.56
1:A:251:ASN:OD1	3:C:1:NAG:C7	2.53	0.56
1:A:384:ASN:OD1	1:A:387:GLU:CB	2.54	0.56
1:A:456:ASP:OD2	1:A:472:SER:OG	2.21	0.56
1:A:299:ASP:O	1:A:300:ASN:O	2.24	0.56
1:A:84:PRO:CB	1:A:85:PRO:CD	2.79	0.56
1:A:179:PHE:O	1:A:180:GLU:CG	2.53	0.56
1:A:553:ARG:CB	1:A:568:ASP:N	2.69	0.56
1:A:663:ALA:HB2	1:A:673:PHE:H	1.70	0.56
1:A:362:PHE:CG	1:A:373:ALA:CB	2.88	0.56
1:A:537:GLU:C	1:A:539:ILE:N	2.59	0.56
1:A:554:LEU:O	1:A:567:ILE:N	2.39	0.56
1:A:330:ARG:O	1:A:330:ARG:CG	2.53	0.56
1:A:431:CYS:SG	1:A:445:ASP:O	2.56	0.56
1:A:469:TRP:CD2	1:A:478:SER:OG	2.59	0.56
1:A:663:ALA:HB2	1:A:673:PHE:N	2.21	0.56
1:A:94:ARG:O	1:A:95:CYS:O	2.22	0.55
1:A:202:LYS:O	1:A:202:LYS:HG2	2.06	0.55
1:A:231:SER:O	1:A:233:GLN:N	2.30	0.55
1:A:296:GLU:OE1	1:A:315:TYR:CB	2.53	0.55
1:A:323:PHE:HB3	1:A:333:ASP:HB2	1.88	0.55
1:A:477:VAL:O	1:A:478:SER:HB3	2.05	0.55
1:A:535:VAL:O	1:A:537:GLU:N	2.37	0.55
1:A:537:GLU:O	1:A:538:ASN:C	2.49	0.55
5:A:6002:KEG:O17	5:A:6002:KEG:O35	2.24	0.55
1:A:259:ASN:O	1:A:260:LYS:HG2	2.06	0.55
1:A:526:LEU:CG	1:A:526:LEU:O	2.54	0.55
1:A:549:LEU:O	1:A:549:LEU:HG	2.06	0.55
1:A:682:LEU:C	1:A:690:CYS:HB3	2.32	0.55
1:A:690:CYS:C	1:A:691:LEU:HG	2.31	0.55
1:A:234:CYS:CA	1:A:246:GLU:HG3	2.19	0.55
1:A:314:GLY:C	1:A:316:GLU:N	2.62	0.55
1:A:179:PHE:C	1:A:180:GLU:HG2	2.31	0.55
1:A:250:VAL:O	1:A:252:VAL:N	2.38	0.55
1:A:392:THR:HB	1:A:395:ARG:HG3	1.88	0.55
1:A:446:THR:CG2	1:A:447:VAL:N	2.68	0.55
1:A:524:GLY:O	1:A:525:GLY:C	2.50	0.55
1:A:107:CYS:HA	1:A:119:GLU:CD	2.31	0.55
1:A:588:PHE:C	1:A:629:GLU:HG3	2.32	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:146:CYS:HA	1:A:157:ASP:CB	2.36	0.55
1:A:281:CYS:C	1:A:283:ASP:N	2.61	0.55
1:A:301:ASN:HD22	1:A:304:CYS:CB	2.18	0.55
1:A:519:ALA:C	1:A:539:ILE:CG2	2.79	0.55
1:A:132:PHE:HZ	2:B:1:NAG:O7	1.87	0.55
1:A:469:TRP:O	1:A:477:VAL:HA	2.06	0.55
1:A:529:VAL:O	1:A:529:VAL:CG1	2.53	0.55
1:A:687:MET:O	1:A:688:ARG:CG	2.55	0.55
1:A:109:SER:CA	1:A:119:GLU:HG2	2.33	0.55
1:A:374:VAL:CG2	1:A:375:GLY:H	2.15	0.55
1:A:634:PHE:CD2	1:A:635:HIS:HB2	2.42	0.55
1:A:259:ASN:C	1:A:260:LYS:HG2	2.33	0.54
1:A:384:ASN:OD1	1:A:384:ASN:C	2.49	0.54
1:A:513:THR:CG2	1:A:542:PRO:HB2	2.36	0.54
1:A:254:LEU:CD1	1:A:256:GLU:HB3	2.36	0.54
1:A:537:GLU:CG	1:A:538:ASN:N	2.70	0.54
1:A:621:LEU:O	1:A:622:ALA:HB2	2.08	0.54
1:A:269:ILE:CD1	1:A:280:ASP:O	2.52	0.54
1:A:468:TYR:HH	1:A:526:LEU:HD21	1.72	0.54
1:A:474:LEU:C	1:A:496:SER:OG	2.50	0.54
1:A:542:PRO:O	1:A:543:ASN:CB	2.53	0.54
1:A:506:VAL:O	1:A:507:HIS:CG	2.59	0.54
1:A:602:ILE:HG13	1:A:603:ILE:N	2.23	0.54
1:A:448:ILE:O	1:A:448:ILE:CG2	2.54	0.54
1:A:340:PRO:HG2	1:A:613:LEU:HD21	1.88	0.54
1:A:568:ASP:C	1:A:570:ASN:N	2.63	0.54
1:A:588:PHE:CA	1:A:629:GLU:HG3	2.38	0.54
1:A:657:GLN:O	1:A:658:TYR:CB	2.56	0.54
1:A:298:LEU:HA	1:A:301:ASN:N	2.22	0.54
1:A:392:THR:CG2	1:A:395:ARG:NE	2.70	0.54
1:A:504:ASP:OD1	1:A:507:HIS:CD2	2.54	0.54
1:A:333:ASP:OD1	1:A:333:ASP:C	2.51	0.54
1:A:484:GLY:C	1:A:485:VAL:HG23	2.31	0.54
1:A:485:VAL:C	1:A:486:LYS:HG2	2.33	0.54
1:A:580:ASP:O	1:A:584:LEU:CD2	2.53	0.54
1:A:681:MET:HE2	1:A:690:CYS:O	2.08	0.54
1:A:62:ILE:HG23	1:A:63:PRO:CD	2.36	0.54
1:A:68:CYS:SG	1:A:80:GLU:HA	2.48	0.54
1:A:107:CYS:HB2	1:A:119:GLU:N	2.23	0.54
1:A:263:CYS:HB3	1:A:267:GLU:C	2.33	0.54
1:A:484:GLY:C	1:A:485:VAL:CG2	2.80	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:68:CYS:SG	1:A:84:PRO:HD2	2.48	0.53
1:A:72:VAL:HA	1:A:80:GLU:CD	2.33	0.53
1:A:169:PHE:HD2	1:A:170:GLN:HB2	1.73	0.53
1:A:204:LYS:C	1:A:206:ASP:H	2.16	0.53
1:A:391:MET:SD	1:A:621:LEU:CG	2.96	0.53
1:A:220:PHE:HZ	1:A:244:SER:O	1.91	0.53
1:A:324:GLN:H	1:A:334:ILE:H	1.55	0.53
1:A:422:TRP:O	1:A:430:ILE:HB	2.08	0.53
1:A:499:ARG:HH21	1:A:629:GLU:HG2	1.70	0.53
1:A:122:CYS:N	1:A:123:PRO:HD3	2.23	0.53
1:A:238:TYR:HE2	1:A:243:MET:C	2.16	0.53
1:A:467:ILE:O	1:A:479:VAL:CB	2.57	0.53
1:A:527:ASN:C	1:A:527:ASN:HD22	2.14	0.53
1:A:555:TYR:C	1:A:590:LEU:HD21	2.32	0.53
1:A:563:SER:OG	1:A:564:ILE:N	2.39	0.53
1:A:597:VAL:HG22	1:A:598:PHE:N	2.22	0.53
1:A:130:ALA:O	1:A:131:SER:CB	2.49	0.53
1:A:139:CYS:O	1:A:140:ILE:CG1	2.56	0.53
1:A:456:ASP:HB3	1:A:499:ARG:CB	2.38	0.53
1:A:169:PHE:CD2	1:A:170:GLN:HB2	2.43	0.53
1:A:220:PHE:CD1	1:A:221:GLN:N	2.76	0.53
1:A:468:TYR:CZ	1:A:526:LEU:HD11	2.32	0.53
1:A:215:CYS:O	1:A:217:PRO:HD3	2.09	0.53
1:A:291:GLU:O	1:A:293:GLY:N	2.41	0.53
1:A:317:CYS:O	1:A:318:LEU:CD2	2.39	0.53
1:A:537:GLU:O	1:A:539:ILE:HB	2.09	0.53
1:A:592:VAL:O	1:A:592:VAL:CG2	2.57	0.53
1:A:683:LEU:HA	1:A:690:CYS:SG	2.49	0.53
1:A:362:PHE:CE1	1:A:373:ALA:HB3	2.44	0.53
1:A:539:ILE:HD12	1:A:542:PRO:HD3	1.91	0.53
1:A:185:SER:O	1:A:201:CYS:SG	2.67	0.53
1:A:276:ASN:O	1:A:276:ASN:OD1	2.27	0.53
1:A:302:GLY:C	1:A:304:CYS:H	1.96	0.53
1:A:362:PHE:CD2	1:A:373:ALA:HB2	2.43	0.53
1:A:370:ALA:C	1:A:372:LYS:N	2.66	0.53
5:A:6002:KEG:O21	5:A:6002:KEG:O38	2.27	0.53
1:A:48:LYS:O	1:A:49:SER:C	2.47	0.53
1:A:226:ASN:O	1:A:228:ILE:N	2.42	0.53
1:A:254:LEU:HD12	1:A:256:GLU:HB3	1.91	0.53
1:A:584:LEU:O	1:A:585:ALA:HB2	2.08	0.53
1:A:647:GLU:O	1:A:651:LEU:CD1	2.56	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:138:THR:HG22	1:A:139:CYS:N	2.24	0.53
1:A:152:CYS:SG	1:A:154:ASP:CA	2.95	0.53
1:A:181:PHE:C	1:A:188:CYS:HB3	2.34	0.53
1:A:325:LEU:C	1:A:326:VAL:HG12	2.32	0.53
1:A:409:VAL:O	1:A:410:ALA:HB2	2.07	0.53
1:A:428:ARG:CB	1:A:452:ILE:HG21	2.39	0.53
1:A:467:ILE:O	1:A:479:VAL:HG23	2.08	0.53
1:A:611:ASN:HB3	1:A:615:GLY:C	2.18	0.53
1:A:446:THR:O	1:A:447:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:334:ILE:HD12	1:A:335:ASP:H	1.75	0.52
1:A:392:THR:OG1	1:A:397:GLU:HB3	2.09	0.52
1:A:553:ARG:HA	1:A:568:ASP:HA	1.92	0.52
1:A:135:ASN:ND2	2:B:1:NAG:C5	2.69	0.52
1:A:206:ASP:CG	1:A:207:GLU:N	2.66	0.52
1:A:242:ASP:OD2	1:A:244:SER:HB2	2.08	0.52
1:A:586:HIS:C	1:A:602:ILE:CG2	2.82	0.52
1:A:150:PRO:O	1:A:586:HIS:HE1	1.88	0.52
1:A:391:MET:SD	1:A:621:LEU:HG	2.49	0.52
1:A:392:THR:CG2	1:A:395:ARG:HE	2.21	0.52
1:A:617:ASP:OD2	1:A:617:ASP:O	2.27	0.52
1:A:683:LEU:O	1:A:684:ALA:O	2.26	0.52
1:A:302:GLY:C	1:A:304:CYS:N	2.57	0.52
1:A:345:GLN:CG	1:A:371:CYS:HB2	2.39	0.52
1:A:508:GLY:C	1:A:526:LEU:HB3	2.23	0.52
1:A:222:CYS:HB3	1:A:242:ASP:OD2	2.09	0.52
1:A:421:TYR:C	1:A:422:TRP:HE3	2.18	0.52
1:A:627:SER:N	1:A:628:PRO:CD	2.70	0.52
1:A:634:PHE:CG	1:A:635:HIS:N	2.75	0.52
1:A:190:HIS:O	1:A:191:SER:C	2.51	0.52
1:A:229:HIS:CG	1:A:230:GLY:N	2.76	0.52
1:A:539:ILE:CD1	1:A:540:GLN:N	2.72	0.52
1:A:555:TYR:C	1:A:590:LEU:CD2	2.83	0.52
1:A:151:ASP:HB2	1:A:541:TRP:CH2	2.45	0.52
1:A:546:THR:HG22	1:A:590:LEU:HD23	1.90	0.52
1:A:93:PHE:C	1:A:95:CYS:N	2.68	0.52
1:A:198:GLY:N	1:A:207:GLU:OE2	2.43	0.52
1:A:251:ASN:C	3:C:1:NAG:H83	2.27	0.52
1:A:344:SER:C	1:A:345:GLN:OE1	2.53	0.52
1:A:508:GLY:HA3	1:A:664:PRO:N	2.24	0.52
1:A:690:CYS:O	1:A:691:LEU:HG	2.10	0.52
1:A:139:CYS:C	1:A:140:ILE:CG1	2.82	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:585:ALA:O	1:A:602:ILE:HG23	2.10	0.52
1:A:83:CYS:CB	1:A:84:PRO:HD2	2.34	0.51
1:A:408:VAL:C	1:A:409:VAL:HG23	2.35	0.51
1:A:558:ASP:HB3	1:A:561:LEU:HB2	1.92	0.51
1:A:634:PHE:HD2	1:A:635:HIS:HB2	1.75	0.51
1:A:46:THR:O	1:A:47:CYS:O	2.28	0.51
1:A:64:GLN:C	1:A:67:ARG:HB3	2.35	0.51
1:A:107:CYS:HB2	1:A:119:GLU:CB	2.41	0.51
1:A:146:CYS:N	1:A:157:ASP:HB2	2.26	0.51
1:A:386:HIS:CB	1:A:405:LEU:O	2.57	0.51
1:A:456:ASP:HB3	1:A:499:ARG:HB2	1.92	0.51
1:A:663:ALA:O	1:A:664:PRO:C	2.54	0.51
1:A:663:ALA:C	1:A:664:PRO:O	2.51	0.51
1:A:53:SER:CB	1:A:61:CYS:N	2.71	0.51
1:A:118:ASP:O	1:A:118:ASP:CG	2.53	0.51
1:A:206:ASP:C	1:A:208:GLU:N	2.67	0.51
1:A:498:PRO:HD3	1:A:514:ASP:CB	2.40	0.51
1:A:499:ARG:NH1	1:A:544:GLY:HA2	2.25	0.51
1:A:63:PRO:C	1:A:65:PHE:N	2.66	0.51
1:A:66:TRP:O	1:A:79:ASP:CB	2.52	0.51
1:A:68:CYS:C	1:A:70:GLY:N	2.61	0.51
1:A:206:ASP:CG	1:A:207:GLU:HG2	2.36	0.51
1:A:464:HIS:O	1:A:465:SER:C	2.48	0.51
1:A:64:GLN:O	1:A:67:ARG:HB3	2.11	0.51
1:A:132:PHE:CE2	1:A:156:SER:CB	2.89	0.51
1:A:392:THR:CG2	1:A:395:ARG:CG	2.86	0.51
1:A:418:ASN:O	1:A:434:GLN:OE1	2.28	0.51
1:A:598:PHE:CE2	1:A:609:SER:HB2	2.45	0.51
1:A:53:SER:CB	1:A:60:ARG:HA	2.40	0.51
1:A:179:PHE:O	1:A:180:GLU:HG2	2.10	0.51
1:A:337:CYS:SG	1:A:349:ASN:N	2.84	0.51
1:A:188:CYS:C	1:A:189:ILE:HG12	2.35	0.51
1:A:419:ARG:HA	1:A:433:THR:O	2.11	0.51
1:A:474:LEU:O	1:A:493:GLU:O	2.29	0.51
1:A:534:LEU:HD23	1:A:535:VAL:HG23	1.93	0.51
1:A:548:ASP:C	1:A:550:LEU:H	2.18	0.51
1:A:220:PHE:CD1	1:A:220:PHE:C	2.86	0.51
1:A:307:VAL:O	1:A:307:VAL:CG1	2.57	0.51
1:A:497:LYS:CB	1:A:515:TRP:CE2	2.92	0.51
1:A:537:GLU:CG	1:A:538:ASN:H	2.22	0.51
1:A:367:HIS:C	1:A:368:THR:HG23	2.36	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:564:ILE:HG23	1:A:577:ILE:HB	1.93	0.50
1:A:688:ARG:O	1:A:689:SER:HB2	2.10	0.50
1:A:393:LEU:HD11	1:A:598:PHE:CE2	2.46	0.50
1:A:471:ASP:C	1:A:473:VAL:H	2.19	0.50
1:A:370:ALA:O	1:A:372:LYS:N	2.40	0.50
1:A:422:TRP:CE3	1:A:431:CYS:O	2.65	0.50
1:A:468:TYR:CE2	1:A:526:LEU:HD11	2.42	0.50
1:A:195:CYS:H	1:A:207:GLU:CB	2.17	0.50
1:A:413:THR:OG1	1:A:414:GLU:N	2.44	0.50
1:A:469:TRP:CZ3	1:A:478:SER:OG	2.64	0.50
1:A:383:THR:CG2	1:A:411:LEU:CD2	2.85	0.50
1:A:84:PRO:O	1:A:86:LYS:N	2.44	0.50
1:A:364:LEU:HG	1:A:365:ASP:N	2.27	0.50
1:A:525:GLY:CA	1:A:664:PRO:HG3	2.40	0.50
1:A:643:VAL:HG12	1:A:644:ASN:N	2.26	0.50
1:A:143:LEU:C	1:A:145:ALA:H	2.08	0.50
1:A:481:ASP:CB	1:A:486:LYS:HG3	2.42	0.50
1:A:682:LEU:O	1:A:690:CYS:HA	2.12	0.50
1:A:74:CYS:HB3	1:A:78:SER:CB	2.40	0.50
1:A:169:PHE:HD2	1:A:170:GLN:CB	2.24	0.50
1:A:256:GLU:C	1:A:258:PRO:CD	2.85	0.50
1:A:333:ASP:CG	1:A:352:GLY:H	2.18	0.50
1:A:543:ASN:O	1:A:557:VAL:HG23	2.12	0.50
1:A:143:LEU:O	1:A:144:TRP:HD1	1.95	0.50
1:A:345:GLN:HE21	1:A:594:GLU:HG3	1.77	0.50
1:A:581:GLU:O	1:A:582:LYS:CG	2.60	0.50
1:A:124:VAL:O	1:A:125:LEU:C	2.55	0.49
1:A:132:PHE:HD2	1:A:156:SER:CB	2.13	0.49
1:A:159:TRP:CE3	1:A:159:TRP:CA	2.95	0.49
1:A:324:GLN:O	1:A:325:LEU:HB2	2.12	0.49
1:A:338:GLN:C	1:A:342:THR:HB	2.36	0.49
1:A:360:GLU:HA	1:A:360:GLU:OE1	2.11	0.49
1:A:554:LEU:N	1:A:567:ILE:H	2.10	0.49
1:A:296:GLU:C	1:A:297:CYS:O	2.53	0.49
1:A:320:PRO:HD2	1:A:331:CYS:SG	2.52	0.49
1:A:499:ARG:NH2	1:A:630:ASP:OD2	2.45	0.49
1:A:586:HIS:O	1:A:602:ILE:HG22	2.08	0.49
1:A:653:ASN:CG	1:A:655:GLY:H	2.20	0.49
1:A:48:LYS:HE3	1:A:61:CYS:O	2.12	0.49
1:A:600:THR:HG22	1:A:601:ASP:N	2.26	0.49
1:A:645:TRP:O	1:A:646:CYS:SG	2.70	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:190:HIS:HB2	1:A:193:TRP:CE2	2.47	0.49
1:A:221:GLN:O	1:A:221:GLN:HG3	2.12	0.49
1:A:381:PHE:O	1:A:631:MET:HA	2.12	0.49
1:A:472:SER:HA	1:A:474:LEU:CD2	2.42	0.49
1:A:499:ARG:CZ	1:A:629:GLU:HG2	2.42	0.49
1:A:618:VAL:HG12	1:A:619:ASN:N	2.28	0.49
1:A:48:LYS:N	1:A:61:CYS:SG	2.81	0.49
1:A:96:HIS:ND1	1:A:115:ASP:OD2	2.46	0.49
1:A:284:TRP:O	1:A:288:PRO:HG3	2.12	0.49
1:A:465:SER:C	1:A:482:THR:OG1	2.55	0.49
1:A:469:TRP:HZ3	1:A:480:ALA:CB	2.23	0.49
1:A:514:ASP:OD1	1:A:515:TRP:N	2.45	0.49
1:A:178:ALA:C	1:A:180:GLU:H	2.20	0.49
1:A:180:GLU:OE2	1:A:189:ILE:O	2.30	0.49
1:A:560:LYS:O	1:A:561:LEU:HD23	2.12	0.49
1:A:643:VAL:CG1	1:A:644:ASN:N	2.75	0.49
1:A:132:PHE:HE2	1:A:133:GLN:O	1.91	0.49
1:A:298:LEU:N	1:A:301:ASN:HB2	2.27	0.49
1:A:383:THR:HG21	1:A:411:LEU:HD22	1.95	0.49
1:A:411:LEU:CD2	1:A:630:ASP:O	2.61	0.49
1:A:299:ASP:O	1:A:300:ASN:C	2.56	0.49
1:A:197:GLY:C	1:A:207:GLU:OE2	2.56	0.49
1:A:389:ARG:CA	1:A:401:LEU:H	2.18	0.49
1:A:48:LYS:CD	1:A:61:CYS:O	2.60	0.49
1:A:586:HIS:C	1:A:587:PRO:O	2.54	0.49
1:A:193:TRP:HB3	1:A:196:ASP:OD2	2.13	0.48
1:A:254:LEU:HD12	1:A:256:GLU:OE1	2.13	0.48
1:A:288:PRO:O	1:A:292:CYS:CB	2.55	0.48
1:A:333:ASP:CG	1:A:352:GLY:N	2.71	0.48
1:A:339:ASP:HA	1:A:342:THR:CB	2.26	0.48
1:A:447:VAL:O	1:A:447:VAL:HG12	2.13	0.48
1:A:477:VAL:HG23	1:A:491:PHE:HB3	1.94	0.48
1:A:519:ALA:HB1	1:A:539:ILE:HD12	1.94	0.48
1:A:543:ASN:HB2	1:A:557:VAL:O	2.13	0.48
1:A:554:LEU:CB	1:A:567:ILE:HG22	2.43	0.48
1:A:639:GLN:O	1:A:639:GLN:HG2	2.13	0.48
1:A:180:GLU:CA	1:A:180:GLU:OE1	2.61	0.48
1:A:310:ASP:OD1	1:A:315:TYR:CA	2.60	0.48
1:A:340:PRO:CA	1:A:342:THR:O	2.51	0.48
1:A:553:ARG:HB2	1:A:568:ASP:N	2.25	0.48
1:A:146:CYS:CA	1:A:157:ASP:HA	2.42	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:462:TRP:CE2	1:A:639:GLN:CG	2.96	0.48
1:A:498:PRO:HD3	1:A:514:ASP:HB2	1.95	0.48
1:A:543:ASN:HD22	1:A:559:SER:HG	1.59	0.48
1:A:180:GLU:OE1	1:A:189:ILE:O	2.31	0.48
1:A:234:CYS:SG	1:A:246:GLU:CA	3.01	0.48
1:A:297:CYS:C	1:A:299:ASP:N	2.68	0.48
1:A:342:THR:HG23	1:A:347:CYS:HB3	1.81	0.48
1:A:345:GLN:HE21	1:A:594:GLU:CD	2.22	0.48
1:A:599:TRP:N	1:A:631:MET:HE1	2.28	0.48
1:A:667:ASN:N	1:A:668:PRO:HD3	2.27	0.48
1:A:148:ASN:O	1:A:150:PRO:HD3	2.12	0.48
1:A:384:ASN:CG	1:A:387:GLU:CB	2.87	0.48
1:A:408:VAL:CG2	1:A:422:TRP:HD1	2.27	0.48
1:A:461:ASP:OD1	1:A:462:TRP:N	2.46	0.48
1:A:477:VAL:HG12	1:A:478:SER:N	2.29	0.48
1:A:556:TRP:CZ2	1:A:565:SER:OG	2.66	0.48
1:A:78:SER:HA	1:A:82:GLY:HA3	1.94	0.48
1:A:506:VAL:O	1:A:506:VAL:HG22	2.14	0.48
1:A:588:PHE:CD1	1:A:602:ILE:HG22	2.48	0.48
1:A:188:CYS:C	1:A:189:ILE:CG1	2.85	0.48
1:A:292:CYS:SG	1:A:313:ILE:HD11	2.54	0.48
1:A:96:HIS:CE1	1:A:115:ASP:CG	2.92	0.48
1:A:133:GLN:HA	1:A:138:THR:HB	1.96	0.48
1:A:555:TYR:O	1:A:590:LEU:CD2	2.61	0.48
1:A:606:ALA:CA	1:A:625:LEU:HD11	2.43	0.48
1:A:683:LEU:N	1:A:690:CYS:SG	2.87	0.48
1:A:339:ASP:N	1:A:342:THR:CB	2.68	0.48
1:A:477:VAL:HG12	1:A:478:SER:H	1.79	0.48
1:A:654:GLY:CA	1:A:673:PHE:HZ	2.26	0.48
1:A:149:ASP:N	1:A:158:GLU:OE2	2.47	0.48
1:A:295:ASN:ND2	1:A:310:ASP:OD2	2.46	0.48
1:A:476:THR:C	1:A:477:VAL:HG23	2.39	0.48
1:A:501:ILE:HG22	1:A:512:TRP:CB	2.43	0.48
1:A:539:ILE:O	1:A:540:GLN:NE2	2.45	0.48
5:A:6001:KEG:O41	5:A:6001:KEG:O19	2.32	0.48
1:A:60:ARG:O	1:A:61:CYS:SG	2.72	0.47
1:A:149:ASP:HB3	1:A:560:LYS:NZ	2.29	0.47
1:A:298:LEU:H	1:A:301:ASN:HB2	1.79	0.47
1:A:337:CYS:C	1:A:342:THR:HG1	2.22	0.47
1:A:362:PHE:HA	1:A:373:ALA:HB1	1.95	0.47
1:A:380:LEU:HG	1:A:381:PHE:N	2.29	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:389:ARG:CA	1:A:401:LEU:N	2.46	0.47
1:A:408:VAL:HG22	1:A:409:VAL:N	2.29	0.47
1:A:585:ALA:O	1:A:586:HIS:C	2.57	0.47
5:A:6002:KEG:O21	5:A:6002:KEG:O37	2.32	0.47
1:A:269:ILE:C	1:A:270:THR:HG1	2.17	0.47
1:A:411:LEU:O	1:A:632:VAL:HG11	2.14	0.47
1:A:543:ASN:CB	1:A:557:VAL:O	2.62	0.47
1:A:132:PHE:CD2	1:A:133:GLN:O	2.67	0.47
1:A:261:PHE:H	1:A:269:ILE:H	1.60	0.47
1:A:263:CYS:SG	1:A:266:GLY:CA	2.93	0.47
1:A:578:LEU:O	1:A:579:GLU:C	2.52	0.47
1:A:135:ASN:HB3	2:B:1:NAG:HN2	1.77	0.47
1:A:503:VAL:HG23	1:A:505:PRO:HD3	1.97	0.47
1:A:180:GLU:OE1	1:A:180:GLU:HA	2.13	0.47
1:A:222:CYS:SG	1:A:244:SER:O	2.73	0.47
1:A:345:GLN:HE21	1:A:594:GLU:CG	2.28	0.47
1:A:105:PHE:HB3	1:A:108:ASP:CG	2.39	0.47
1:A:305:SER:HB2	1:A:330:ARG:CA	2.44	0.47
1:A:327:ALA:C	1:A:329:ARG:N	2.70	0.47
1:A:335:ASP:HA	1:A:349:ASN:HD21	1.79	0.47
1:A:377:ILE:O	1:A:377:ILE:HG13	2.14	0.47
1:A:499:ARG:HH12	1:A:544:GLY:HA2	1.79	0.47
1:A:512:TRP:CD1	1:A:512:TRP:C	2.92	0.47
1:A:559:SER:OG	1:A:587:PRO:CD	2.63	0.47
1:A:639:GLN:N	1:A:640:PRO:CD	2.75	0.47
1:A:107:CYS:C	1:A:109:SER:H	2.22	0.47
1:A:150:PRO:CG	1:A:158:GLU:OE1	2.62	0.47
1:A:389:ARG:HA	1:A:400:SER:C	2.32	0.47
1:A:605:GLU:HB3	1:A:624:ASN:C	2.40	0.47
1:A:666:ILE:HG23	1:A:667:ASN:ND2	2.30	0.47
1:A:598:PHE:HB3	1:A:631:MET:HE1	1.97	0.47
1:A:117:SER:O	1:A:118:ASP:CB	2.61	0.46
1:A:316:GLU:HG2	1:A:318:LEU:CD2	2.45	0.46
1:A:413:THR:OG1	1:A:420:ILE:HG22	2.14	0.46
1:A:654:GLY:HA2	1:A:673:PHE:CZ	2.50	0.46
1:A:658:TYR:OH	1:A:678:PRO:HB3	2.16	0.46
1:A:298:LEU:HA	1:A:301:ASN:CB	2.46	0.46
1:A:588:PHE:O	1:A:629:GLU:CG	2.58	0.46
1:A:78:SER:OG	1:A:79:ASP:OD1	2.33	0.46
1:A:362:PHE:CE1	1:A:637:LEU:HD22	2.33	0.46
1:A:451:ASP:OD2	1:A:487:ARG:CZ	2.61	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:598:PHE:CD2	1:A:609:SER:HB2	2.50	0.46
1:A:283:ASP:HB3	1:A:285:SER:HB2	1.96	0.46
1:A:244:SER:HA	1:A:247:VAL:CG1	2.46	0.46
1:A:332:GLU:HB2	1:A:351:GLU:CD	2.41	0.46
1:A:381:PHE:O	1:A:631:MET:CB	2.63	0.46
1:A:52:PHE:HB3	1:A:62:ILE:O	2.15	0.46
1:A:150:PRO:HG3	1:A:158:GLU:OE1	2.16	0.46
1:A:415:VAL:HG11	1:A:636:GLN:OE1	2.15	0.46
1:A:670:SER:N	1:A:671:PRO:HD3	2.30	0.46
5:A:6001:KEG:O38	5:A:6001:KEG:O21	2.34	0.46
1:A:235:ASP:H	1:A:246:GLU:CG	2.29	0.46
1:A:456:ASP:HB3	1:A:499:ARG:HG3	1.97	0.46
1:A:456:ASP:HB2	1:A:498:PRO:O	2.16	0.46
1:A:491:PHE:O	1:A:491:PHE:CD2	2.69	0.46
1:A:543:ASN:ND2	1:A:587:PRO:O	2.49	0.46
1:A:677:CYS:CB	1:A:678:PRO:HD2	2.38	0.46
5:A:6001:KEG:O35	5:A:6001:KEG:O17	2.33	0.46
1:A:128:GLY:O	1:A:130:ALA:N	2.37	0.46
1:A:182:HIS:CE1	1:A:187:GLU:OE1	2.69	0.46
1:A:356:CYS:C	1:A:357:GLN:CG	2.88	0.46
1:A:468:TYR:CD2	1:A:478:SER:O	2.69	0.46
1:A:497:LYS:HB2	1:A:515:TRP:NE1	2.30	0.46
1:A:500:ALA:C	1:A:501:ILE:CG2	2.89	0.46
1:A:527:ASN:O	1:A:527:ASN:CG	2.56	0.46
1:A:564:ILE:O	1:A:577:ILE:O	2.34	0.46
1:A:604:ASN:O	1:A:605:GLU:C	2.56	0.46
1:A:666:ILE:HG12	1:A:667:ASN:OD1	2.15	0.46
1:A:201:CYS:HB3	1:A:205:SER:H	1.81	0.46
1:A:287:GLU:O	1:A:288:PRO:C	2.52	0.46
1:A:446:THR:HG23	1:A:447:VAL:N	2.31	0.46
1:A:465:SER:O	1:A:482:THR:HB	2.16	0.46
5:A:6001:KEG:O19	5:A:6001:KEG:O43	2.34	0.46
1:A:337:CYS:HB2	1:A:349:ASN:CB	2.45	0.45
1:A:337:CYS:CB	1:A:349:ASN:HB3	2.43	0.45
1:A:358:CYS:CB	1:A:362:PHE:C	2.89	0.45
1:A:427:GLN:C	1:A:429:MET:N	2.74	0.45
1:A:568:ASP:N	1:A:568:ASP:OD1	2.49	0.45
1:A:607:ILE:CG2	1:A:608:PHE:N	2.78	0.45
1:A:611:ASN:OD1	1:A:612:ARG:N	2.49	0.45
1:A:133:GLN:CB	2:B:1:NAG:H82	2.45	0.45
1:A:251:ASN:ND2	3:C:1:NAG:C3	2.78	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:300:ASN:O	1:A:304:CYS:HB2	2.15	0.45
1:A:319:CYS:HB2	1:A:331:CYS:N	2.26	0.45
1:A:499:ARG:NH1	1:A:544:GLY:CA	2.79	0.45
1:A:593:PHE:O	1:A:596:LYS:O	2.35	0.45
1:A:110:ASP:O	1:A:112:ASP:N	2.49	0.45
1:A:236:ARG:HA	1:A:246:GLU:HG2	1.95	0.45
1:A:238:TYR:HH	1:A:243:MET:HB3	1.74	0.45
1:A:462:TRP:CD1	1:A:462:TRP:C	2.95	0.45
1:A:617:ASP:OD2	1:A:617:ASP:C	2.59	0.45
1:A:673:PHE:O	1:A:674:THR:HG23	2.17	0.45
1:A:105:PHE:HB3	1:A:108:ASP:OD1	2.16	0.45
1:A:381:PHE:O	1:A:631:MET:CG	2.64	0.45
1:A:474:LEU:HD23	1:A:474:LEU:HA	1.62	0.45
1:A:525:GLY:CA	1:A:664:PRO:CG	2.94	0.45
1:A:586:HIS:O	1:A:587:PRO:C	2.56	0.45
1:A:588:PHE:HB3	1:A:629:GLU:CD	2.37	0.45
1:A:301:ASN:CA	1:A:304:CYS:HB3	2.47	0.45
1:A:328:GLN:O	1:A:329:ARG:CG	2.64	0.45
1:A:489:THR:HG22	1:A:490:LEU:N	2.32	0.45
1:A:132:PHE:CE2	2:B:1:NAG:O7	2.69	0.45
1:A:193:TRP:CZ3	1:A:582:LYS:HG2	2.51	0.45
1:A:404:ASN:OD1	1:A:404:ASN:O	2.34	0.45
1:A:556:TRP:CH2	1:A:565:SER:OG	2.68	0.45
1:A:305:SER:HB2	1:A:330:ARG:HB2	1.96	0.45
1:A:663:ALA:CB	1:A:671:PRO:O	2.64	0.45
1:A:147:ASP:OD2	1:A:560:LYS:CE	2.64	0.45
1:A:286:ASP:OD1	1:A:287:GLU:CG	2.62	0.45
1:A:305:SER:O	1:A:307:VAL:N	2.50	0.45
1:A:472:SER:CA	1:A:474:LEU:HD21	2.45	0.45
1:A:535:VAL:C	1:A:537:GLU:N	2.74	0.45
1:A:550:LEU:HD12	1:A:550:LEU:HA	1.78	0.45
1:A:60:ARG:HB3	1:A:61:CYS:SG	2.57	0.45
1:A:179:PHE:C	1:A:180:GLU:CG	2.89	0.45
1:A:271:LEU:C	1:A:273:LYS:N	2.70	0.45
1:A:286:ASP:O	1:A:287:GLU:CG	2.64	0.45
1:A:288:PRO:O	1:A:292:CYS:SG	2.74	0.45
1:A:301:ASN:HA	1:A:304:CYS:HB3	1.97	0.45
1:A:289:ILE:HA	1:A:292:CYS:CB	2.39	0.44
1:A:464:HIS:CB	1:A:466:ASN:HD22	2.05	0.44
1:A:481:ASP:OD2	1:A:486:LYS:HG3	2.17	0.44
1:A:496:SER:HA	1:A:514:ASP:OD2	2.18	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:586:HIS:CB	1:A:602:ILE:HG22	2.36	0.44
1:A:626:LEU:O	1:A:627:SER:HB2	2.17	0.44
1:A:270:THR:CG2	1:A:272:ASP:N	2.57	0.44
1:A:334:ILE:O	1:A:336:GLU:HG3	2.17	0.44
1:A:413:THR:O	1:A:414:GLU:HB3	2.16	0.44
1:A:613:LEU:HA	1:A:613:LEU:HD12	1.33	0.44
1:A:673:PHE:HD2	1:A:673:PHE:HA	1.53	0.44
1:A:682:LEU:C	1:A:690:CYS:CB	2.91	0.44
1:A:319:CYS:HA	1:A:320:PRO:HD3	1.85	0.44
1:A:427:GLN:CD	1:A:429:MET:SD	3.00	0.44
1:A:605:GLU:HB3	1:A:625:LEU:O	2.16	0.44
1:A:190:HIS:C	1:A:193:TRP:NE1	2.75	0.44
1:A:222:CYS:SG	1:A:242:ASP:OD2	2.75	0.44
1:A:268:CYS:C	1:A:269:ILE:HG23	2.42	0.44
1:A:286:ASP:O	1:A:287:GLU:CB	2.65	0.44
1:A:470:THR:O	1:A:470:THR:HG23	2.17	0.44
1:A:276:ASN:H	1:A:287:GLU:CD	2.24	0.44
1:A:595:ASP:HA	1:A:612:ARG:CD	2.34	0.44
5:A:6003:KEG:O18	5:A:6003:KEG:O24	2.36	0.44
1:A:198:GLY:O	1:A:207:GLU:CD	2.60	0.44
1:A:336:GLU:N	1:A:349:ASN:CG	2.76	0.44
1:A:519:ALA:O	1:A:539:ILE:HG13	2.18	0.44
1:A:132:PHE:CZ	2:B:1:NAG:H81	2.47	0.44
1:A:149:ASP:OD1	1:A:150:PRO:O	2.35	0.44
1:A:273:LYS:NZ	1:A:280:ASP:CG	2.76	0.44
1:A:504:ASP:O	1:A:505:PRO:O	2.36	0.44
1:A:666:ILE:HG12	1:A:667:ASN:CG	2.43	0.44
1:A:682:LEU:C	1:A:690:CYS:SG	3.01	0.44
1:A:51:ASP:O	1:A:52:PHE:CB	2.54	0.44
1:A:345:GLN:NE2	1:A:594:GLU:CG	2.79	0.44
1:A:345:GLN:CB	1:A:371:CYS:CB	2.95	0.44
1:A:301:ASN:C	1:A:304:CYS:CB	2.91	0.44
1:A:465:SER:O	1:A:466:ASN:OD1	2.36	0.44
1:A:467:ILE:CG1	1:A:468:TYR:N	2.61	0.44
1:A:527:ASN:O	1:A:527:ASN:ND2	2.51	0.44
1:A:654:GLY:HA3	1:A:660:CYS:HB3	1.99	0.44
1:A:670:SER:N	1:A:671:PRO:CD	2.81	0.44
1:A:185:SER:HB3	1:A:201:CYS:SG	2.58	0.43
1:A:305:SER:HB2	1:A:330:ARG:HA	1.99	0.43
1:A:567:ILE:HG12	1:A:568:ASP:N	2.33	0.43
1:A:683:LEU:O	1:A:684:ALA:C	2.61	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
5:A:6002:KEG:O19	5:A:6002:KEG:O43	2.36	0.43
1:A:149:ASP:HB3	1:A:560:LYS:HZ3	1.83	0.43
1:A:182:HIS:CD2	1:A:182:HIS:C	2.96	0.43
1:A:301:ASN:C	1:A:304:CYS:HB3	2.43	0.43
1:A:429:MET:CE	1:A:446:THR:OG1	2.66	0.43
1:A:451:ASP:OD2	1:A:487:ARG:NH2	2.51	0.43
1:A:461:ASP:CB	1:A:466:ASN:O	2.61	0.43
1:A:511:TYR:HA	1:A:522:LYS:O	2.18	0.43
1:A:585:ALA:O	1:A:602:ILE:CG2	2.67	0.43
1:A:674:THR:O	1:A:675:CYS:C	2.61	0.43
1:A:337:CYS:CB	1:A:349:ASN:CB	2.97	0.43
1:A:73:ASP:O	1:A:74:CYS:CB	2.51	0.43
1:A:146:CYS:HA	1:A:157:ASP:HB2	1.98	0.43
1:A:318:LEU:HB3	1:A:319:CYS:H	1.64	0.43
1:A:389:ARG:HB3	1:A:400:SER:CA	2.48	0.43
1:A:462:TRP:HD1	1:A:463:ILE:CG2	2.23	0.43
1:A:221:GLN:HA	1:A:226:ASN:O	2.18	0.43
1:A:586:HIS:HB3	1:A:602:ILE:CG2	2.37	0.43
1:A:233:GLN:O	1:A:246:GLU:OE2	2.37	0.43
1:A:344:SER:C	1:A:345:GLN:CD	2.86	0.43
1:A:384:ASN:OD1	1:A:387:GLU:HB2	2.17	0.43
1:A:515:TRP:O	1:A:515:TRP:CD1	2.71	0.43
1:A:558:ASP:CB	1:A:561:LEU:HB2	2.48	0.43
1:A:261:PHE:C	1:A:263:CYS:H	2.10	0.43
1:A:273:LYS:CE	1:A:280:ASP:OD2	2.67	0.43
1:A:297:CYS:C	1:A:299:ASP:H	2.26	0.43
1:A:331:CYS:HB2	1:A:332:GLU:H	1.57	0.43
1:A:540:GLN:HB2	1:A:561:LEU:HD21	2.01	0.43
5:A:6003:KEG:O17	5:A:6003:KEG:O23	2.36	0.43
1:A:71:GLN:H	1:A:80:GLU:CG	2.31	0.43
1:A:272:ASP:C	1:A:274:VAL:HG13	2.43	0.43
1:A:345:GLN:HB3	1:A:371:CYS:CB	2.48	0.43
1:A:358:CYS:HB2	1:A:362:PHE:C	2.44	0.43
1:A:393:LEU:HD11	1:A:598:PHE:CZ	2.54	0.43
1:A:393:LEU:HD12	1:A:393:LEU:HA	1.77	0.43
1:A:469:TRP:CZ3	1:A:480:ALA:N	2.80	0.43
1:A:555:TYR:CB	1:A:590:LEU:HD21	2.49	0.43
1:A:586:HIS:O	1:A:588:PHE:CE1	2.72	0.43
1:A:599:TRP:N	1:A:599:TRP:CD1	2.87	0.43
1:A:138:THR:HG22	1:A:140:ILE:HG13	2.01	0.43
1:A:240:CYS:O	1:A:241:LYS:C	2.61	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:305:SER:HB2	1:A:330:ARG:CB	2.45	0.43
1:A:362:PHE:CE1	1:A:373:ALA:CB	3.02	0.43
1:A:365:ASP:HA	1:A:366:PRO:HD2	1.60	0.43
1:A:105:PHE:C	1:A:107:CYS:N	2.76	0.43
1:A:221:GLN:OE1	1:A:225:GLY:N	2.52	0.43
1:A:336:GLU:N	1:A:349:ASN:ND2	2.66	0.43
1:A:594:GLU:CD	1:A:612:ARG:NH1	2.77	0.43
1:A:691:LEU:HD23	1:A:691:LEU:HA	1.77	0.43
5:A:6001:KEG:O21	5:A:6001:KEG:O37	2.36	0.43
1:A:332:GLU:CA	1:A:351:GLU:OE2	2.66	0.42
1:A:499:ARG:HH21	1:A:630:ASP:HB2	1.84	0.42
1:A:553:ARG:HB3	1:A:568:ASP:N	2.33	0.42
1:A:564:ILE:HG22	1:A:577:ILE:O	2.19	0.42
1:A:638:THR:O	1:A:638:THR:HG22	2.18	0.42
1:A:192:SER:O	1:A:192:SER:OG	2.32	0.42
1:A:290:LYS:HA	1:A:290:LYS:HD3	1.35	0.42
1:A:512:TRP:CZ2	1:A:522:LYS:CB	3.01	0.42
5:A:6001:KEG:O19	5:A:6001:KEG:O44	2.37	0.42
1:A:152:CYS:O	1:A:154:ASP:HA	2.18	0.42
1:A:357:GLN:C	1:A:371:CYS:SG	3.02	0.42
1:A:381:PHE:O	1:A:382:PHE:HB3	2.19	0.42
1:A:429:MET:CB	1:A:449:SER:HA	2.48	0.42
1:A:586:HIS:CB	1:A:588:PHE:CE1	2.87	0.42
1:A:151:ASP:CB	1:A:541:TRP:HZ3	2.26	0.42
1:A:607:ILE:O	1:A:608:PHE:CD2	2.55	0.42
1:A:621:LEU:O	1:A:621:LEU:HG	2.19	0.42
5:A:6003:KEG:O17	5:A:6003:KEG:O27	2.38	0.42
1:A:195:CYS:N	1:A:207:GLU:CB	2.61	0.42
1:A:507:HIS:HB3	1:A:509:PHE:HE1	1.75	0.42
1:A:235:ASP:OD1	1:A:246:GLU:OE2	2.38	0.42
1:A:415:VAL:CG1	1:A:636:GLN:OE1	2.67	0.42
1:A:498:PRO:HD3	1:A:514:ASP:CA	2.49	0.42
1:A:589:SER:O	1:A:590:LEU:HB2	2.18	0.42
1:A:656:CYS:HB2	1:A:660:CYS:H	1.84	0.42
1:A:289:ILE:O	1:A:289:ILE:CG2	2.67	0.42
1:A:325:LEU:O	1:A:331:CYS:HB2	2.10	0.42
1:A:504:ASP:OD1	1:A:504:ASP:C	2.63	0.42
1:A:543:ASN:ND2	1:A:559:SER:CB	2.82	0.42
1:A:335:ASP:C	1:A:349:ASN:ND2	2.78	0.42
1:A:421:TYR:HD2	1:A:432:SER:CA	2.32	0.42
1:A:489:THR:O	1:A:490:LEU:HD23	2.19	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:582:LYS:O	1:A:583:ARG:C	2.63	0.42
1:A:588:PHE:CE1	1:A:602:ILE:CG2	2.91	0.42
1:A:589:SER:HB2	1:A:600:THR:N	2.22	0.42
1:A:617:ASP:O	1:A:617:ASP:CG	2.63	0.42
1:A:201:CYS:HB2	1:A:205:SER:O	2.18	0.42
1:A:235:ASP:N	1:A:246:GLU:HG3	2.34	0.42
1:A:256:GLU:O	1:A:257:GLY:C	2.63	0.42
1:A:272:ASP:C	1:A:274:VAL:H	2.28	0.42
1:A:476:THR:O	1:A:477:VAL:CG2	2.68	0.42
1:A:513:THR:HG22	1:A:514:ASP:N	2.35	0.42
1:A:586:HIS:HD2	1:A:602:ILE:CD1	2.32	0.42
1:A:277:MET:O	1:A:278:ALA:HB2	2.20	0.42
1:A:316:GLU:HG2	1:A:316:GLU:O	2.20	0.42
1:A:423:SER:O	1:A:423:SER:OG	2.30	0.42
1:A:564:ILE:CG2	1:A:577:ILE:O	2.68	0.42
5:A:6003:KEG:O17	5:A:6003:KEG:O35	2.37	0.42
1:A:70:GLY:O	1:A:71:GLN:CB	2.67	0.41
1:A:147:ASP:C	1:A:149:ASP:H	2.28	0.41
1:A:190:HIS:C	1:A:192:SER:N	2.76	0.41
1:A:201:CYS:CB	1:A:205:SER:HB2	2.49	0.41
1:A:553:ARG:HB3	1:A:568:ASP:CA	2.50	0.41
1:A:681:MET:HG2	1:A:692:THR:HG22	2.00	0.41
1:A:46:THR:O	1:A:47:CYS:C	2.62	0.41
1:A:112:ASP:HB2	1:A:118:ASP:OD2	2.20	0.41
1:A:158:GLU:O	1:A:159:TRP:HB2	2.20	0.41
1:A:345:GLN:HG2	1:A:371:CYS:HB2	2.01	0.41
1:A:391:MET:HE3	1:A:621:LEU:HD11	2.01	0.41
1:A:606:ALA:HA	1:A:625:LEU:CD1	2.48	0.41
1:A:654:GLY:HA2	1:A:673:PHE:HZ	1.83	0.41
5:A:6003:KEG:O18	5:A:6003:KEG:O36	2.37	0.41
1:A:411:LEU:CD2	1:A:630:ASP:HB3	2.46	0.41
1:A:467:ILE:HG22	1:A:480:ALA:C	2.38	0.41
1:A:591:ALA:O	1:A:598:PHE:N	2.50	0.41
1:A:94:ARG:O	1:A:95:CYS:C	2.63	0.41
1:A:190:HIS:O	1:A:193:TRP:HD1	1.95	0.41
1:A:408:VAL:HG23	1:A:422:TRP:HD1	1.85	0.41
1:A:425:LEU:O	1:A:425:LEU:HG	2.20	0.41
1:A:219:GLU:CB	1:A:229:HIS:HB2	2.46	0.41
1:A:233:GLN:O	1:A:235:ASP:N	2.53	0.41
1:A:310:ASP:HB2	1:A:315:TYR:C	2.45	0.41
1:A:316:GLU:HG2	1:A:318:LEU:HD21	2.01	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:333:ASP:H	1:A:351:GLU:HG2	1.86	0.41
1:A:142:GLN:O	1:A:143:LEU:HD23	2.20	0.41
1:A:605:GLU:HB3	1:A:625:LEU:C	2.45	0.41
1:A:606:ALA:HA	1:A:625:LEU:CG	2.51	0.41
1:A:68:CYS:N	1:A:79:ASP:C	2.77	0.41
1:A:151:ASP:OD1	1:A:151:ASP:O	2.38	0.41
1:A:412:ASP:HB3	1:A:460:VAL:CG2	2.51	0.41
1:A:525:GLY:HA2	1:A:664:PRO:CG	2.50	0.41
1:A:567:ILE:HD11	1:A:571:GLY:HA2	2.02	0.41
1:A:626:LEU:C	1:A:628:PRO:HD3	2.42	0.41
1:A:415:VAL:HG12	1:A:416:ALA:N	2.34	0.41
1:A:467:ILE:O	1:A:479:VAL:CG2	2.69	0.41
1:A:568:ASP:O	1:A:570:ASN:N	2.51	0.41
1:A:603:ILE:CG2	1:A:605:GLU:OE2	2.65	0.41
1:A:653:ASN:HA	1:A:659:LEU:HD11	2.03	0.41
1:A:653:ASN:C	1:A:659:LEU:CD1	2.93	0.41
1:A:299:ASP:O	1:A:299:ASP:CG	2.63	0.41
1:A:322:GLY:C	1:A:323:PHE:CD1	2.99	0.41
1:A:387:GLU:HG3	1:A:389:ARG:HG2	2.03	0.41
1:A:435:LEU:C	1:A:436:ASP:CG	2.88	0.41
1:A:553:ARG:HB3	1:A:568:ASP:HA	2.03	0.41
1:A:556:TRP:HA	1:A:590:LEU:HD22	2.02	0.41
1:A:605:GLU:C	1:A:625:LEU:H	2.29	0.41
1:A:660:CYS:CB	1:A:673:PHE:CZ	2.92	0.41
5:A:6003:KEG:O18	5:A:6003:KEG:O28	2.38	0.41
1:A:121:SER:O	1:A:121:SER:OG	2.35	0.41
1:A:133:GLN:CG	1:A:138:THR:H	2.19	0.41
1:A:274:VAL:O	1:A:275:CYS:C	2.64	0.41
1:A:409:VAL:H	1:A:423:SER:HG	1.68	0.41
1:A:475:GLY:HA2	1:A:496:SER:CB	2.51	0.41
1:A:481:ASP:CG	1:A:482:THR:N	2.73	0.41
1:A:511:TYR:CD1	1:A:523:LYS:HA	2.56	0.41
1:A:568:ASP:HB2	1:A:570:ASN:O	2.21	0.41
1:A:633:LEU:HD12	1:A:633:LEU:HA	1.92	0.41
1:A:644:ASN:OD1	1:A:644:ASN:C	2.64	0.41
1:A:684:ALA:C	1:A:686:ASP:N	2.79	0.41
1:A:52:PHE:CZ	1:A:67:ARG:HB2	2.56	0.40
1:A:198:GLY:HA2	1:A:199:PRO:HD3	1.68	0.40
1:A:322:GLY:C	1:A:323:PHE:CG	2.99	0.40
1:A:334:ILE:HG23	1:A:336:GLU:CD	2.46	0.40
1:A:337:CYS:SG	1:A:348:VAL:N	2.94	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:65:PHE:O	1:A:66:TRP:C	2.58	0.40
1:A:71:GLN:C	1:A:80:GLU:CD	2.88	0.40
1:A:201:CYS:HB3	1:A:205:SER:C	2.47	0.40
1:A:235:ASP:H	1:A:246:GLU:HG3	1.86	0.40
1:A:276:ASN:N	1:A:287:GLU:CD	2.79	0.40
1:A:329:ARG:O	1:A:330:ARG:HG2	2.20	0.40
1:A:462:TRP:C	1:A:463:ILE:HG23	2.46	0.40
1:A:468:TYR:O	1:A:469:TRP:HB3	2.20	0.40
1:A:553:ARG:HB3	1:A:568:ASP:OD1	2.21	0.40
1:A:193:TRP:HE3	1:A:200:ASP:OD2	2.04	0.40
1:A:237:GLU:H	1:A:246:GLU:CD	2.28	0.40
1:A:333:ASP:N	1:A:351:GLU:HG2	2.36	0.40
1:A:499:ARG:HH12	1:A:544:GLY:CA	2.34	0.40
1:A:605:GLU:O	1:A:625:LEU:N	2.49	0.40
1:A:653:ASN:OD1	1:A:653:ASN:C	2.64	0.40
1:A:83:CYS:CB	1:A:84:PRO:CD	2.95	0.40
1:A:300:ASN:HD22	1:A:300:ASN:HA	1.74	0.40
1:A:506:VAL:HG13	1:A:507:HIS:NE2	2.36	0.40
1:A:658:TYR:CZ	1:A:678:PRO:CD	2.93	0.40
5:A:6002:KEG:O21	5:A:6002:KEG:O31	2.39	0.40
1:A:133:GLN:CB	2:B:1:NAG:C8	3.00	0.40
1:A:144:TRP:O	1:A:157:ASP:HB2	2.20	0.40
1:A:184:LEU:N	1:A:205:SER:OG	2.54	0.40
1:A:383:THR:HG22	1:A:411:LEU:HD13	2.03	0.40
1:A:476:THR:C	1:A:477:VAL:CG2	2.94	0.40
1:A:491:PHE:HD1	1:A:531:ILE:HD13	1.86	0.40

All (16) 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)
5:A:6003:KEG:P1	5:A:6003:KEG:O17[4_556]	1.52	0.68
5:A:6003:KEG:P1	5:A:6003:KEG:O18[4_556]	1.52	0.68
5:A:6003:KEG:W1	5:A:6003:KEG:O1[4_556]	1.62	0.58
5:A:6003:KEG:W2	5:A:6003:KEG:O2[4_556]	1.63	0.57
5:A:6003:KEG:O18	5:A:6003:KEG:O18[4_556]	1.70	0.50
5:A:6003:KEG:O17	5:A:6003:KEG:O17[4_556]	1.72	0.48
5:A:6003:KEG:W2	5:A:6003:KEG:O28[4_556]	1.83	0.37
5:A:6003:KEG:W1	5:A:6003:KEG:O27[4_556]	1.85	0.35
5:A:6003:KEG:W2	5:A:6003:KEG:O24[4_556]	1.85	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
5:A:6003:KEG:W6	5:A:6003:KEG:O38[4_556]	1.86	0.34
5:A:6003:KEG:W5	5:A:6003:KEG:O37[4_556]	1.86	0.34
5:A:6003:KEG:W1	5:A:6003:KEG:O23[4_556]	1.89	0.31
1:A:218:ASP:OD1	1:A:673:PHE:O[2_665]	1.95	0.25
1:A:251:ASN:O	1:A:570:ASN:ND2[2_665]	1.97	0.23
1:A:404:ASN:ND2	1:A:427:GLN:OE1[4_556]	2.14	0.06
1:A:267:GLU:CD	1:A:574:ARG:O[2_665]	2.17	0.03

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	625/699 (89%)	334 (53%)	156 (25%)	135 (22%)	0 1

All (135) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	46	THR
1	A	47	CYS
1	A	49	SER
1	A	63	PRO
1	A	64	GLN
1	A	71	GLN
1	A	72	VAL
1	A	79	ASP
1	A	80	GLU
1	A	84	PRO
1	A	91	ASP
1	A	106	VAL
1	A	111	ARG
1	A	113	CYS
1	A	119	GLU
1	A	135	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	142	GLN
1	A	157	ASP
1	A	160	PRO
1	A	178	ALA
1	A	188	CYS
1	A	191	SER
1	A	193	TRP
1	A	207	GLU
1	A	218	ASP
1	A	225	GLY
1	A	234	CYS
1	A	240	CYS
1	A	250	VAL
1	A	257	GLY
1	A	271	LEU
1	A	312	LYS
1	A	315	TYR
1	A	366	PRO
1	A	385	ARG
1	A	393	LEU
1	A	396	SER
1	A	410	ALA
1	A	428	ARG
1	A	436	ASP
1	A	437	ARG
1	A	439	HIS
1	A	485	VAL
1	A	497	LYS
1	A	508	GLY
1	A	509	PHE
1	A	527	ASN
1	A	543	ASN
1	A	562	HIS
1	A	605	GLU
1	A	621	LEU
1	A	668	PRO
1	A	683	LEU
1	A	684	ALA
1	A	68	CYS
1	A	70	GLY
1	A	95	CYS
1	A	96	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	116	GLY
1	A	128	GLY
1	A	153	GLU
1	A	177	SER
1	A	287	GLU
1	A	331	CYS
1	A	465	SER
1	A	496	SER
1	A	516	GLY
1	A	528	GLY
1	A	569	VAL
1	A	571	GLY
1	A	572	GLY
1	A	585	ALA
1	A	604	ASN
1	A	622	ALA
1	A	641	ARG
1	A	650	THR
1	A	651	LEU
1	A	652	SER
1	A	662	PRO
1	A	685	ARG
1	A	687	MET
1	A	97	ASP
1	A	121	SER
1	A	129	PRO
1	A	224	ASP
1	A	232	ARG
1	A	242	ASP
1	A	263	CYS
1	A	281	CYS
1	A	282	ARG
1	A	292	CYS
1	A	325	LEU
1	A	406	ARG
1	A	427	GLN
1	A	451	ASP
1	A	493	GLU
1	A	498	PRO
1	A	536	THR
1	A	52	PHE
1	A	85	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	127	CYS
1	A	169	PHE
1	A	227	CYS
1	A	238	TYR
1	A	258	PRO
1	A	277	MET
1	A	301	ASN
1	A	478	SER
1	A	486	LYS
1	A	505	PRO
1	A	617	ASP
1	A	639	GLN
1	A	151	ASP
1	A	307	VAL
1	A	426	SER
1	A	463	ILE
1	A	499	ARG
1	A	561	LEU
1	A	590	LEU
1	A	602	ILE
1	A	630	ASP
1	A	646	CYS
1	A	306	HIS
1	A	517	THR
1	A	588	PHE
1	A	671	PRO
1	A	403	PRO
1	A	266	GLY
1	A	475	GLY
1	A	409	VAL
1	A	542	PRO
1	A	518	PRO
1	A	664	PRO
1	A	175	PRO
1	A	447	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	508/614 (83%)	367 (72%)	141 (28%)	0 3

All (141) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	45	VAL
1	A	46	THR
1	A	47	CYS
1	A	49	SER
1	A	53	SER
1	A	61	CYS
1	A	63	PRO
1	A	65	PHE
1	A	74	CYS
1	A	78	SER
1	A	85	PRO
1	A	87	THR
1	A	104	GLN
1	A	107	CYS
1	A	108	ASP
1	A	117	SER
1	A	118	ASP
1	A	119	GLU
1	A	121	SER
1	A	122	CYS
1	A	124	VAL
1	A	126	THR
1	A	127	CYS
1	A	129	PRO
1	A	134	CYS
1	A	135	ASN
1	A	138	THR
1	A	150	PRO
1	A	152	CYS
1	A	156	SER
1	A	159	TRP
1	A	160	PRO
1	A	167	TYR
1	A	168	VAL
1	A	173	SER
1	A	174	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	182	HIS
1	A	189	ILE
1	A	193	TRP
1	A	203	ASP
1	A	207	GLU
1	A	210	CYS
1	A	217	PRO
1	A	218	ASP
1	A	219	GLU
1	A	231	SER
1	A	232	ARG
1	A	238	TYR
1	A	242	ASP
1	A	243	MET
1	A	247	VAL
1	A	249	CYS
1	A	254	LEU
1	A	256	GLU
1	A	263	CYS
1	A	269	ILE
1	A	285	SER
1	A	290	LYS
1	A	291	GLU
1	A	296	GLU
1	A	299	ASP
1	A	304	CYS
1	A	308	CYS
1	A	310	ASP
1	A	311	LEU
1	A	316	GLU
1	A	319	CYS
1	A	324	GLN
1	A	326	VAL
1	A	333	ASP
1	A	336	GLU
1	A	337	CYS
1	A	339	ASP
1	A	340	PRO
1	A	342	THR
1	A	343	CYS
1	A	356	CYS
1	A	359	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	365	ASP
1	A	366	PRO
1	A	367	HIS
1	A	371	CYS
1	A	376	SER
1	A	389	ARG
1	A	392	THR
1	A	394	ASP
1	A	396	SER
1	A	398	TYR
1	A	403	PRO
1	A	407	ASN
1	A	411	LEU
1	A	421	TYR
1	A	422	TRP
1	A	432	SER
1	A	435	LEU
1	A	447	VAL
1	A	452	ILE
1	A	465	SER
1	A	467	ILE
1	A	473	VAL
1	A	479	VAL
1	A	498	PRO
1	A	501	ILE
1	A	505	PRO
1	A	518	PRO
1	A	527	ASN
1	A	533	SER
1	A	534	LEU
1	A	535	VAL
1	A	539	ILE
1	A	542	PRO
1	A	545	ILE
1	A	563	SER
1	A	566	SER
1	A	570	ASN
1	A	577	ILE
1	A	594	GLU
1	A	596	LYS
1	A	600	THR
1	A	608	PHE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	612	ARG
1	A	613	LEU
1	A	617	ASP
1	A	620	LEU
1	A	625	LEU
1	A	632	VAL
1	A	637	LEU
1	A	649	THR
1	A	650	THR
1	A	651	LEU
1	A	657	GLN
1	A	659	LEU
1	A	660	CYS
1	A	664	PRO
1	A	668	PRO
1	A	671	PRO
1	A	673	PHE
1	A	678	PRO
1	A	687	MET
1	A	689	SER
1	A	692	THR

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (14) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	148	ASN
1	A	190	HIS
1	A	251	ASN
1	A	264	HIS
1	A	300	ASN
1	A	301	ASN
1	A	309	ASN
1	A	345	GLN
1	A	407	ASN
1	A	464	HIS
1	A	466	ASN
1	A	507	HIS
1	A	538	ASN
1	A	543	ASN

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 ⓘ

9 monosaccharides 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
2	NAG	B	1	1,2	14,14,15	0.78	0	17,19,21	0.69	0
2	NAG	B	2	2	14,14,15	0.88	1 (7%)	17,19,21	0.57	0
2	BMA	B	3	2	11,11,12	0.76	0	15,15,17	0.37	0
2	MAN	B	4	2	11,11,12	14.21	1 (9%)	15,15,17	4.97	2 (13%)
2	MAN	B	5	2	11,11,12	0.90	1 (9%)	15,15,17	0.66	0
3	NAG	C	1	1,3	14,14,15	0.78	0	17,19,21	0.68	0
3	NAG	C	2	3	14,14,15	0.87	1 (7%)	17,19,21	0.56	0
3	BMA	C	3	3	11,11,12	0.76	0	15,15,17	0.37	0
3	MAN	C	4	3	11,11,12	0.89	1 (9%)	15,15,17	0.67	0

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	NAG	B	1	1,2	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	NAG	B	2	2	-	0/6/23/26	0/1/1/1
2	BMA	B	3	2	-	0/2/19/22	0/1/1/1
2	MAN	B	4	2	-	0/2/19/22	0/1/1/1
2	MAN	B	5	2	-	2/2/19/22	0/1/1/1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
3	NAG	C	1	1,3	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NAG	C	2	3	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	BMA	C	3	3	-	0/2/19/22	0/1/1/1
3	MAN	C	4	3	-	2/2/19/22	0/1/1/1

All (5) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	B	4	MAN	O6-C6	47.09	3.40	1.42
2	B	5	MAN	C2-C3	2.32	1.56	1.52
2	B	2	NAG	C1-C2	2.30	1.55	1.52
3	C	4	MAN	C2-C3	2.29	1.56	1.52
3	C	2	NAG	C1-C2	2.27	1.55	1.52

All (2) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	B	4	MAN	O6-C6-C5	19.01	176.06	111.33
2	B	4	MAN	C1-O5-C5	2.18	115.11	112.19

There are no chirality outliers.

All (4) torsion outliers are listed below:

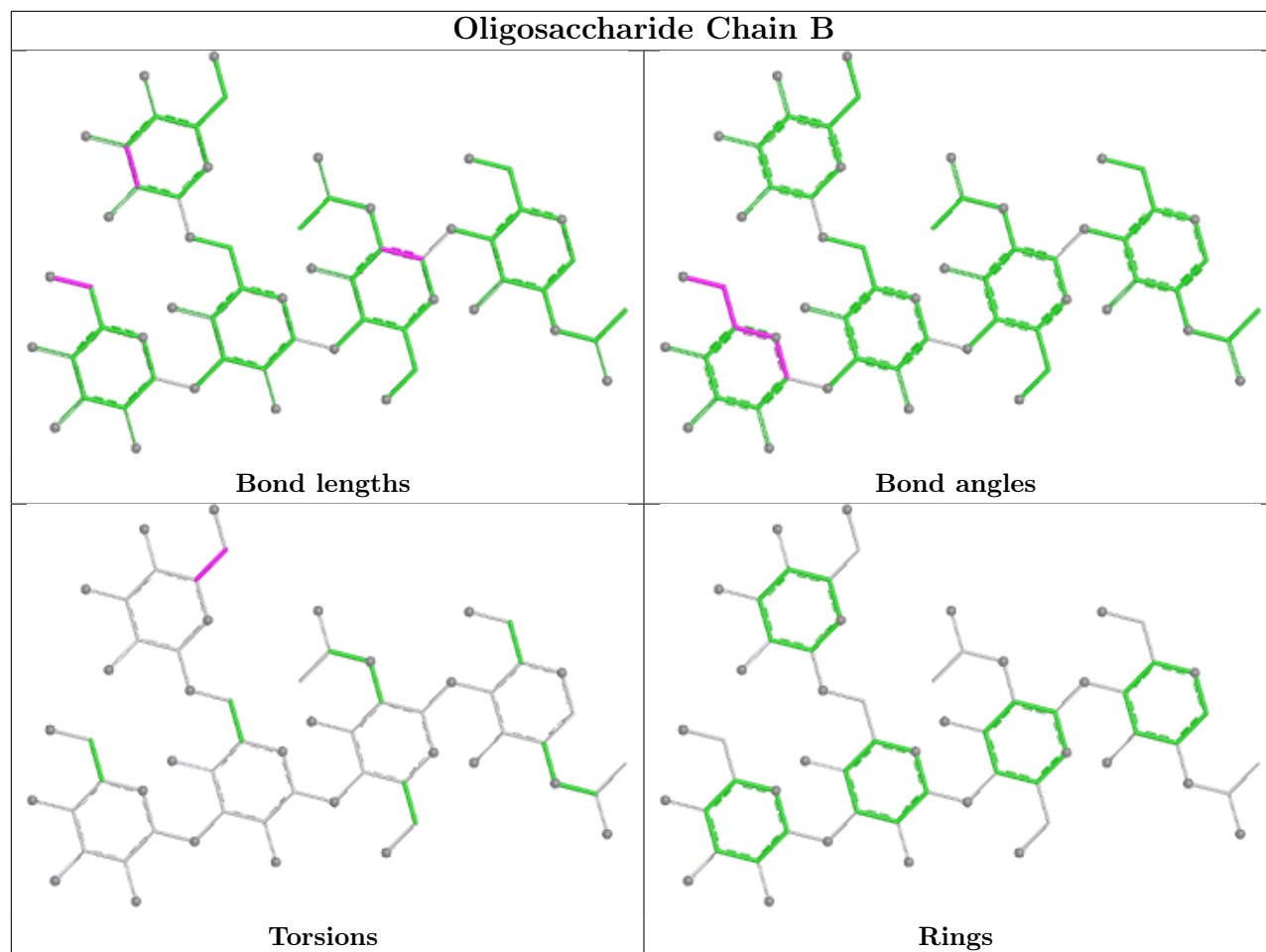
Mol	Chain	Res	Type	Atoms
2	B	5	MAN	C4-C5-C6-O6
3	C	4	MAN	C4-C5-C6-O6
2	B	5	MAN	O5-C5-C6-O6
3	C	4	MAN	O5-C5-C6-O6

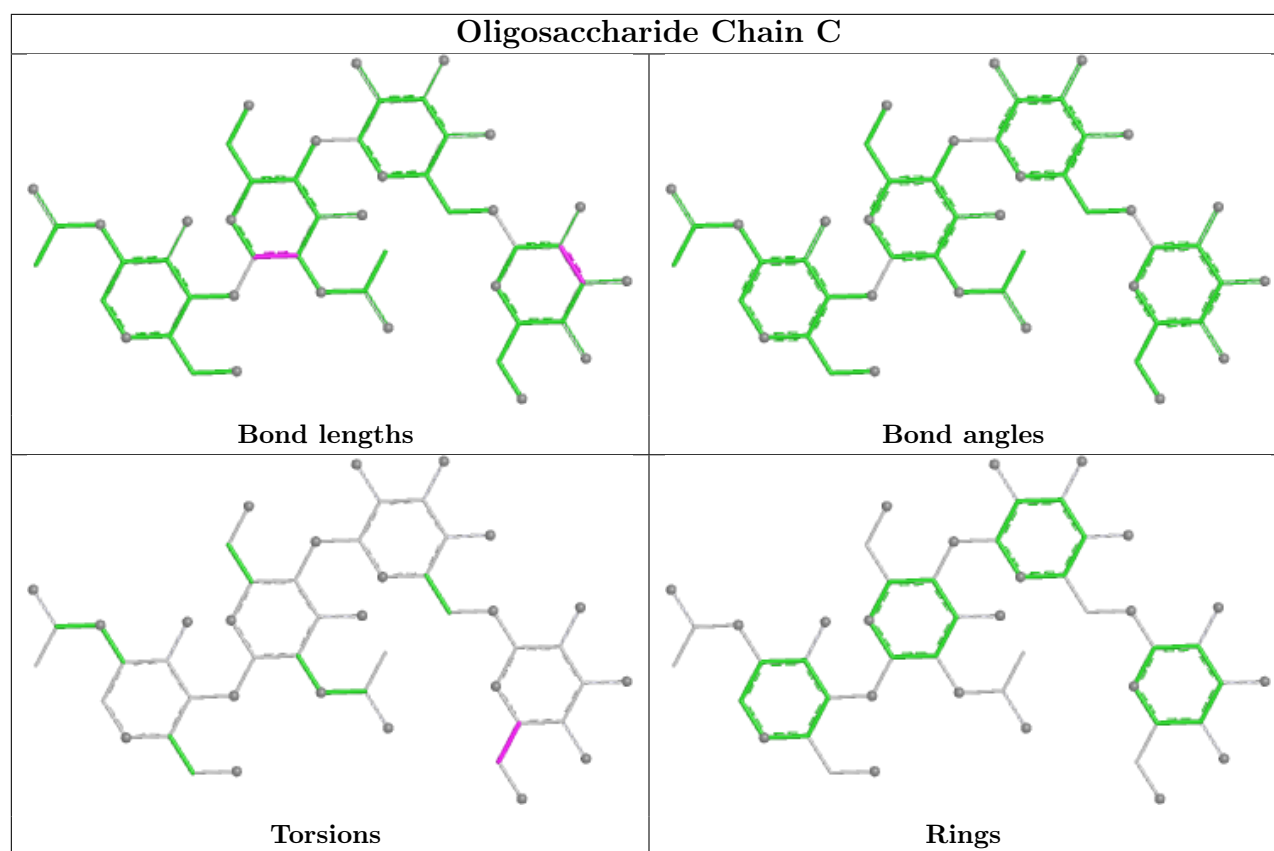
There are no ring outliers.

2 monomers are involved in 56 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
3	C	1	NAG	31	0
2	B	1	NAG	25	0

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for oligosaccharide.





5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 11 ligands modelled in this entry, 8 are monoatomic - leaving 3 for Mogul analysis.

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
5	KEG	A	6001	-	76,76,76	3.13	42 (55%)	6,234,234	1.38	2 (33%)
5	KEG	A	6002	-	76,76,76	2.61	32 (42%)	6,234,234	2.76	3 (50%)
5	KEG	A	6003	-	21,37,76	1.27	5 (23%)	0,95,234	-	-

All (79) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
5	A	6001	KEG	P1-O18	-7.87	1.27	1.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
5	A	6001	KEG	W2-O28	-7.50	1.55	1.93
5	A	6001	KEG	W1-O29	-7.18	1.60	1.91
5	A	6001	KEG	W3-O33	-7.05	1.61	1.91
5	A	6001	KEG	W6-O36	-7.01	1.58	1.93
5	A	6002	KEG	P1-O18	-6.69	1.31	1.54
5	A	6002	KEG	W11-O13	-5.49	1.56	1.71
5	A	6001	KEG	W10-O28	-5.45	1.66	1.93
5	A	6002	KEG	W1-O23	-5.37	1.66	1.93
5	A	6002	KEG	W4-O26	-5.04	1.69	1.91
5	A	6001	KEG	W5-O23	-5.03	1.68	1.93
5	A	6002	KEG	W2-O18	-4.96	2.16	2.43
5	A	6001	KEG	W7-O29	-4.80	1.70	1.91
5	A	6001	KEG	P1-O19	-4.72	1.38	1.54
5	A	6002	KEG	W3-O33	-4.65	1.71	1.91
5	A	6001	KEG	W2-O2	-4.64	1.58	1.71
5	A	6002	KEG	P1-O17	-4.55	1.38	1.54
5	A	6002	KEG	W1-O25	-4.51	1.72	1.91
5	A	6001	KEG	W10-O18	-4.38	2.19	2.43
5	A	6002	KEG	W5-O23	-4.33	1.71	1.93
5	A	6001	KEG	W1-O23	-4.32	1.71	1.93
5	A	6001	KEG	W2-O18	-4.29	2.19	2.43
5	A	6002	KEG	W12-O14	-4.25	1.59	1.71
5	A	6001	KEG	W11-O13	-4.12	1.60	1.71
5	A	6002	KEG	W10-O42	-4.07	1.73	1.91
5	A	6001	KEG	W9-O42	-4.06	1.73	1.91
5	A	6002	KEG	W7-O33	-4.02	1.74	1.91
5	A	6001	KEG	W12-O14	-3.97	1.60	1.71
5	A	6002	KEG	W12-O37	-3.78	1.74	1.93
5	A	6001	KEG	W1-O17	-3.77	2.22	2.43
5	A	6002	KEG	W5-O39	-3.75	1.75	1.91
5	A	6001	KEG	W10-O36	-3.72	1.74	1.93
5	A	6001	KEG	W8-O10	-3.59	1.61	1.71
5	A	6002	KEG	W1-O17	-3.56	2.23	2.43
5	A	6002	KEG	W11-O39	-3.49	1.76	1.91
5	A	6002	KEG	W8-O34	3.45	2.05	1.91
5	A	6002	KEG	W10-O12	-3.45	1.62	1.71
5	A	6001	KEG	W3-O21	3.33	2.61	2.43
5	A	6002	KEG	W1-O1	-3.28	1.62	1.71
5	A	6001	KEG	W6-O24	-3.28	1.77	1.93
5	A	6002	KEG	W1-O27	-3.27	1.77	1.93
5	A	6002	KEG	W4-O21	3.13	2.60	2.43
5	A	6002	KEG	W9-O42	-3.10	1.78	1.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
5	A	6001	KEG	W9-O11	-3.07	1.63	1.71
5	A	6001	KEG	W3-O25	-3.06	1.78	1.91
5	A	6001	KEG	W2-O24	-3.03	1.78	1.93
5	A	6003	KEG	W12-O14	-2.90	1.60	1.70
5	A	6001	KEG	W10-O12	-2.89	1.63	1.71
5	A	6001	KEG	W6-O8	-2.81	1.63	1.71
5	A	6001	KEG	W8-O44	-2.81	1.79	1.93
5	A	6002	KEG	W2-O26	-2.81	1.79	1.91
5	A	6001	KEG	W5-O7	-2.70	1.64	1.71
5	A	6001	KEG	W3-O37	2.68	2.07	1.93
5	A	6002	KEG	W12-O45	-2.63	1.80	1.91
5	A	6002	KEG	W9-O45	-2.62	1.80	1.91
5	A	6001	KEG	P1-O21	2.57	1.63	1.54
5	A	6001	KEG	W11-O40	-2.52	1.80	1.91
5	A	6003	KEG	W9-O17	2.52	2.47	2.34
5	A	6001	KEG	W1-O1	-2.52	1.64	1.71
5	A	6003	KEG	W10-O18	2.51	2.47	2.34
5	A	6001	KEG	W5-O32	2.47	2.01	1.91
5	A	6002	KEG	W8-O44	-2.38	1.81	1.93
5	A	6002	KEG	W6-O32	-2.37	1.81	1.91
5	A	6001	KEG	W6-O32	2.34	2.01	1.91
5	A	6001	KEG	W4-O6	-2.34	1.65	1.71
5	A	6002	KEG	W9-O27	-2.34	1.81	1.93
5	A	6003	KEG	W9-O11	-2.33	1.65	1.71
5	A	6001	KEG	W4-O21	2.33	2.55	2.43
5	A	6003	KEG	W10-O12	-2.32	1.65	1.71
5	A	6001	KEG	W1-O25	-2.29	1.81	1.91
5	A	6002	KEG	W2-O2	-2.28	1.65	1.71
5	A	6001	KEG	W7-O33	-2.28	1.81	1.91
5	A	6001	KEG	W4-O26	-2.26	1.81	1.91
5	A	6001	KEG	W2-O26	-2.22	1.81	1.91
5	A	6001	KEG	W8-O41	-2.11	1.83	1.93
5	A	6002	KEG	W3-O25	-2.11	1.82	1.91
5	A	6001	KEG	W11-O44	-2.10	1.83	1.93
5	A	6002	KEG	W6-O18	2.09	2.54	2.43
5	A	6002	KEG	W7-O9	-2.08	1.65	1.71

All (5) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
5	A	6002	KEG	O18-P1-O17	-4.86	99.61	108.92
5	A	6002	KEG	O19-P1-O18	3.89	116.37	108.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
5	A	6002	KEG	O19-P1-O17	2.33	113.38	108.92
5	A	6001	KEG	O19-P1-O18	-2.19	104.72	108.92
5	A	6001	KEG	O21-P1-O18	2.09	112.92	108.92

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

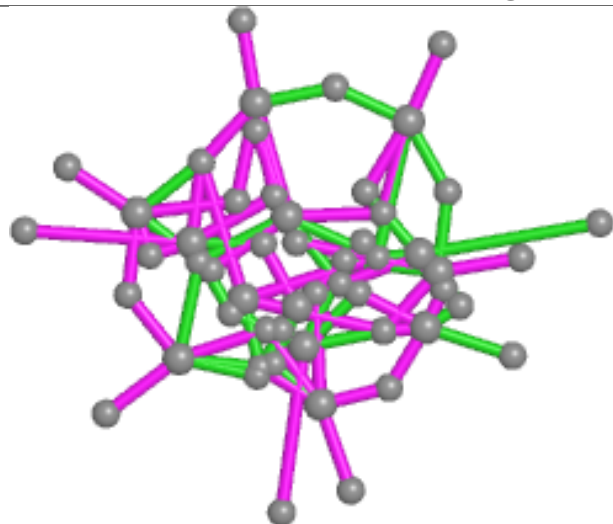
There are no ring outliers.

3 monomers are involved in 31 short contacts:

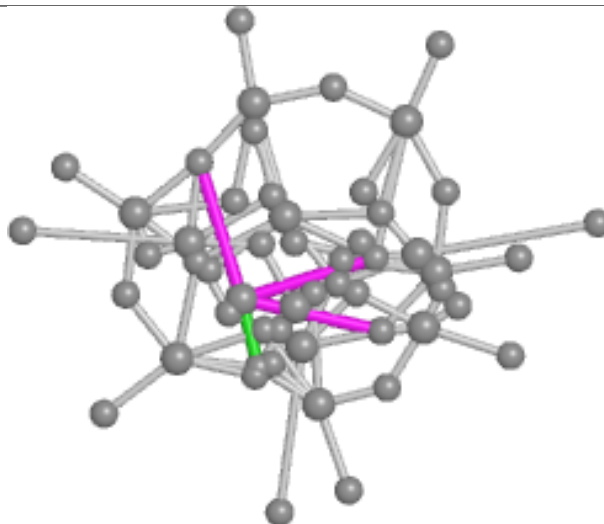
Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
5	A	6001	KEG	6	0
5	A	6002	KEG	7	0
5	A	6003	KEG	6	12

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.

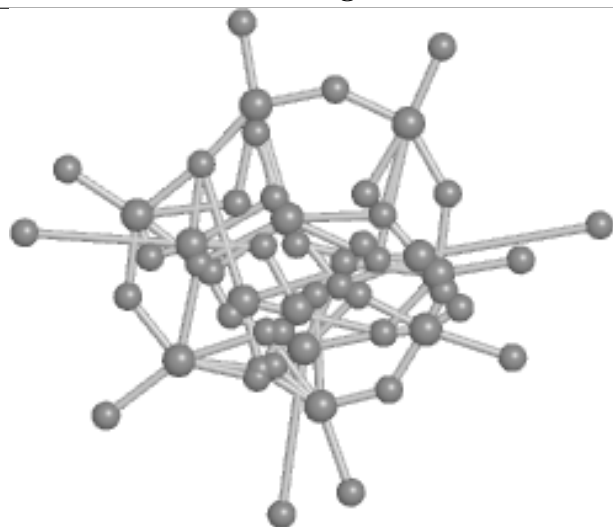
Ligand KEG A 6001



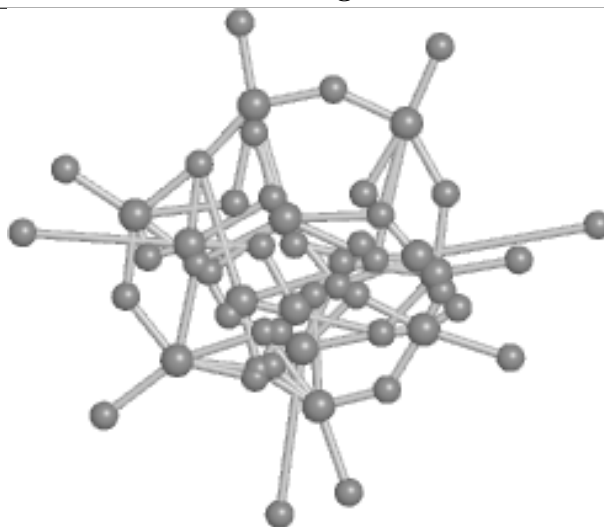
Bond lengths



Bond angles

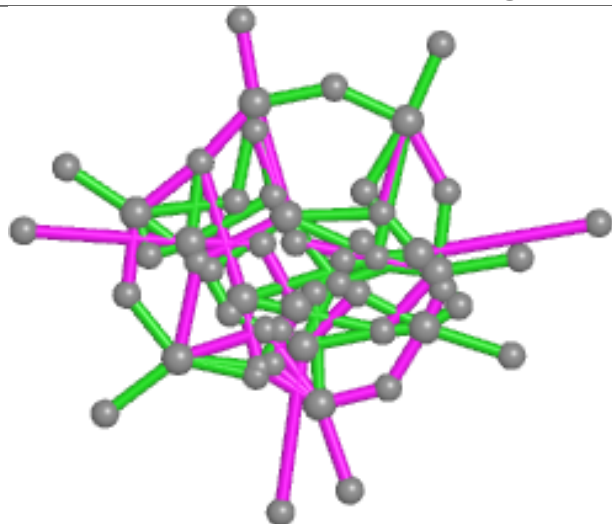


Torsions

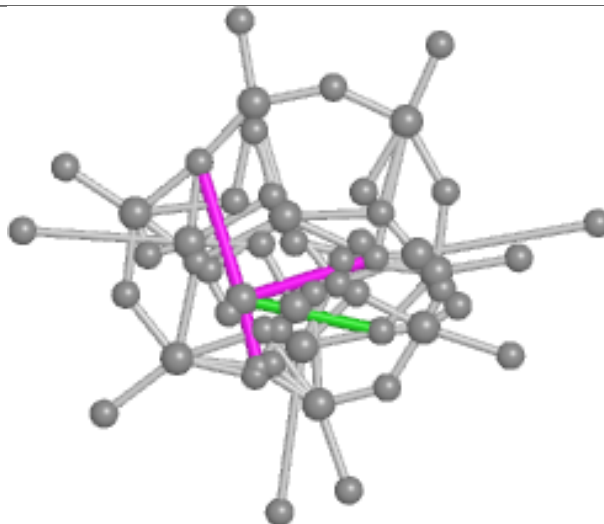


Rings

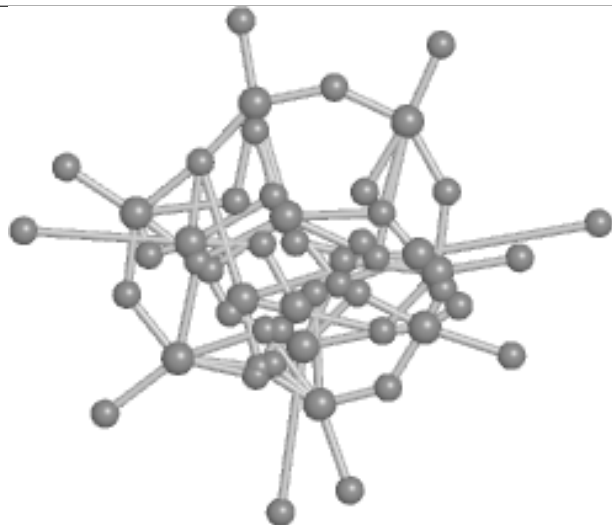
Ligand KEG A 6002



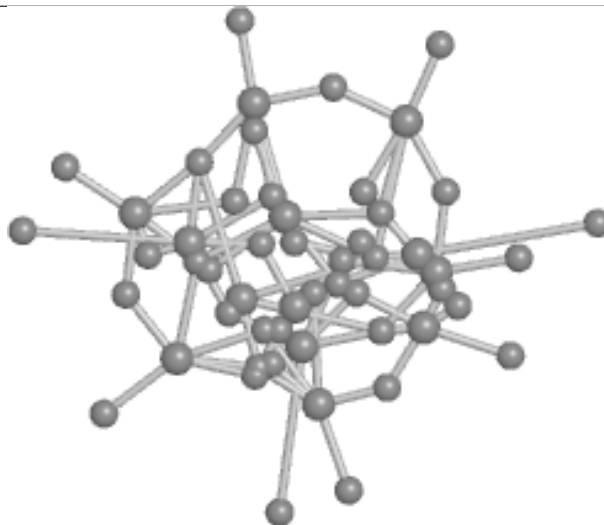
Bond lengths



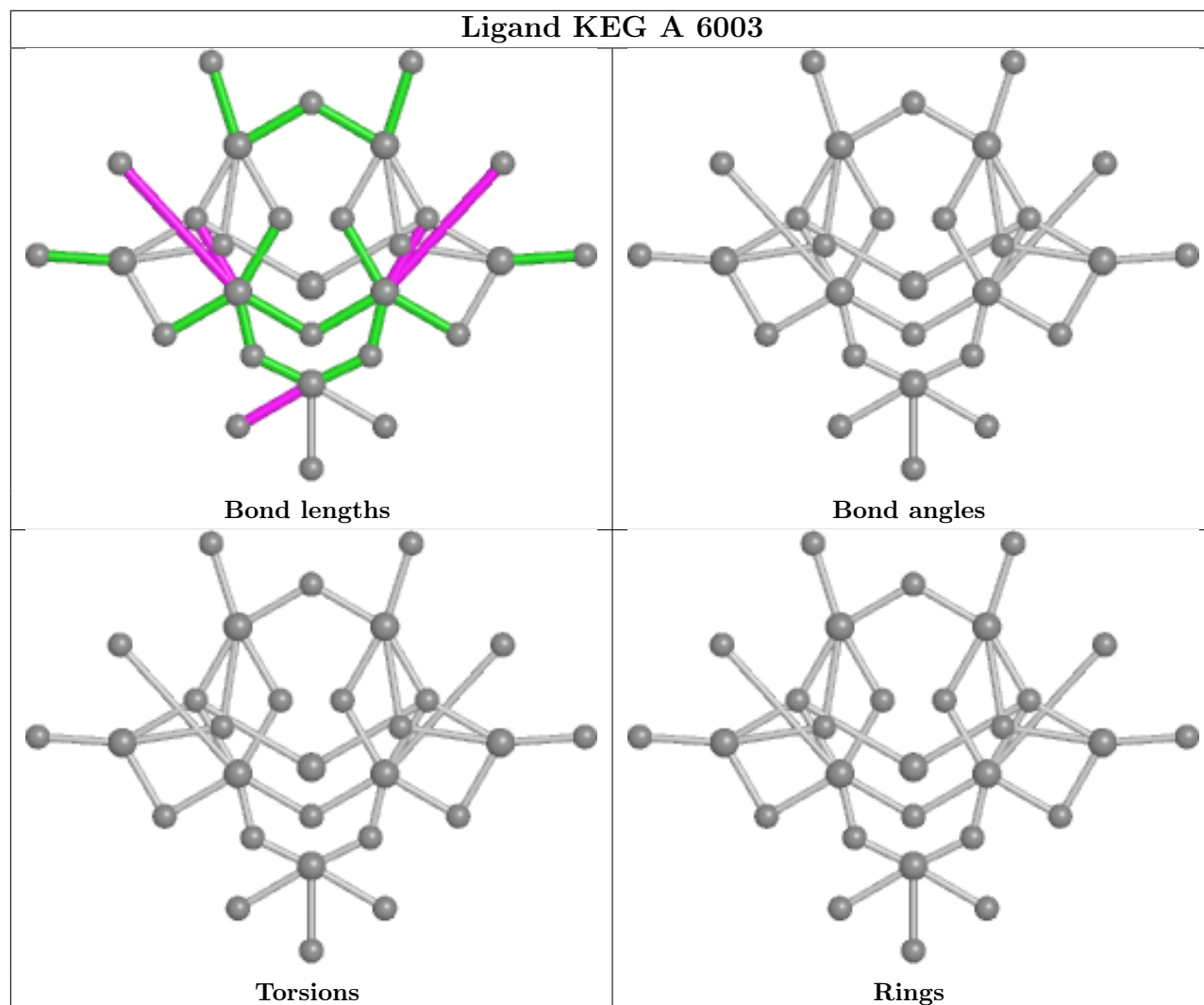
Bond angles



Torsions



Rings



5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data

6.1 Protein, DNA and RNA chains

EDS was not executed - this section is therefore empty.

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

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.3 Carbohydrates

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.4 Ligands

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.5 Other polymers

EDS was not executed - this section is therefore empty.