



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 01:16 PM UTC

PDB ID : 2RDD / pdb_00002rdd
Title : X-ray crystal structure of AcrB in complex with a novel transmembrane helix.
Authors : Tornroth-Horsefield, S.; Gourdon, P.; Horsefield, R.; Neutze, R.
Deposited on : 2007-09-22
Resolution : 3.50 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) : 2.0
EDS : 3.0
Buster-report : wwPDB partial adaption of 1.1.7 (2018)
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
CCP4 : 9.0.010 (Gargrove)
Density-Fitness : 1.0.12
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.49

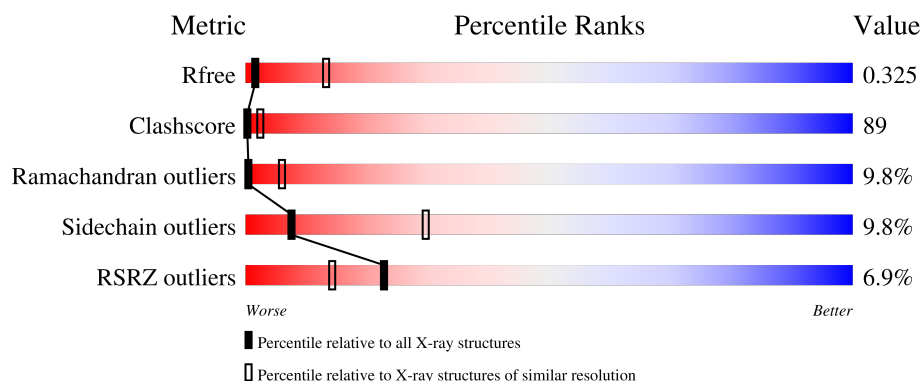
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.50 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
R_{free}	180053	1085 (3.54-3.46)
Clashscore	190562	1140 (3.54-3.46)
Ramachandran outliers	187476	1113 (3.54-3.46)
Sidechain outliers	187428	1114 (3.54-3.46)
RSRZ outliers	180081	1084 (3.54-3.46)

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	1049	
2	B	37	

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
3	AIC	A	1110	-	-	X	-

2 Entry composition [i](#)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 8026 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.

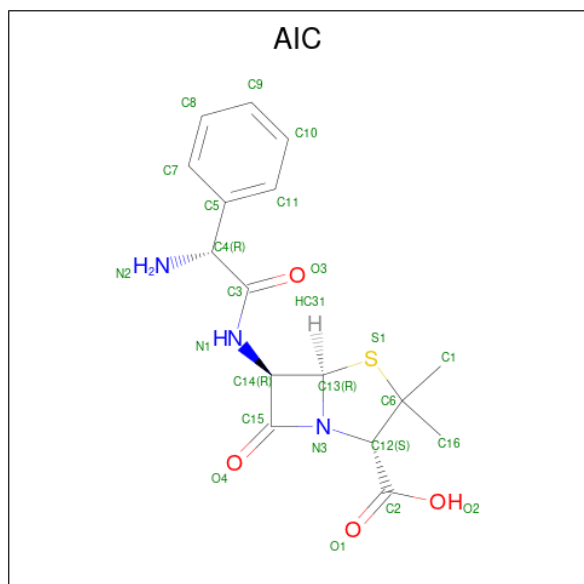
- Molecule 1 is a protein called Acriflavine resistance protein B.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	1018	7760	5000	1281	1435	44	0	0	0

- Molecule 2 is a protein called UPF0092 membrane protein yajC.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
2	B	37	218	138	39	38	3	23	0	0

- Molecule 3 is (2S,5R,6R)-6-[(2R)-2-AMINO-2-PHENYLETHANOYL]AMINO}-3,3-DIMETHYL-7-OXO-4-THIA-1-AZABICYCLO[3.2.0]HEPTANE-2-CARBOXYLIC ACID (CCD ID: AIC) (formula: C₁₆H₁₉N₃O₄S).



Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
			Total	C	N	O	S		
3	A	1	24	16	3	4	1	0	0

Continued on next page...

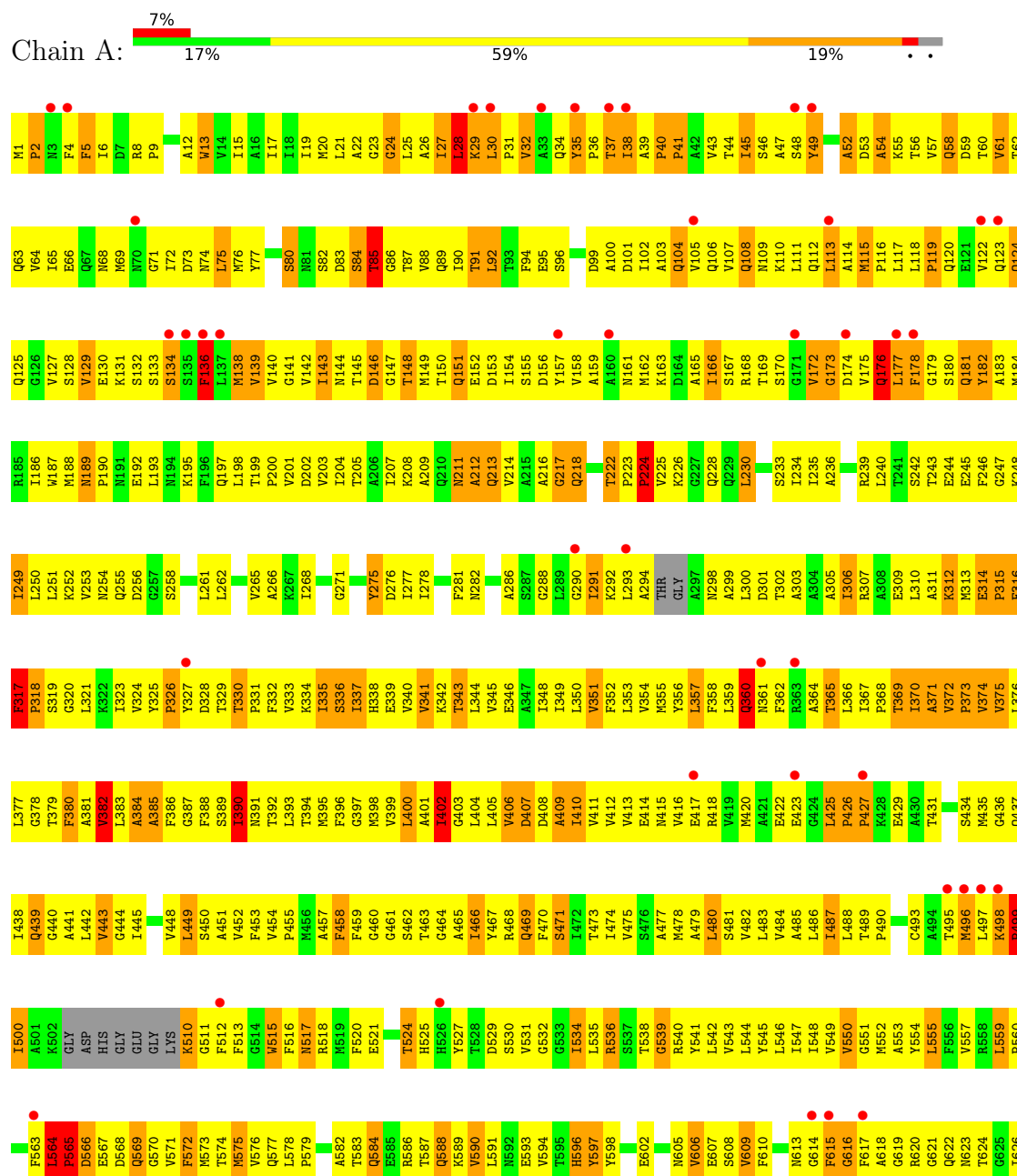
Continued from previous page...

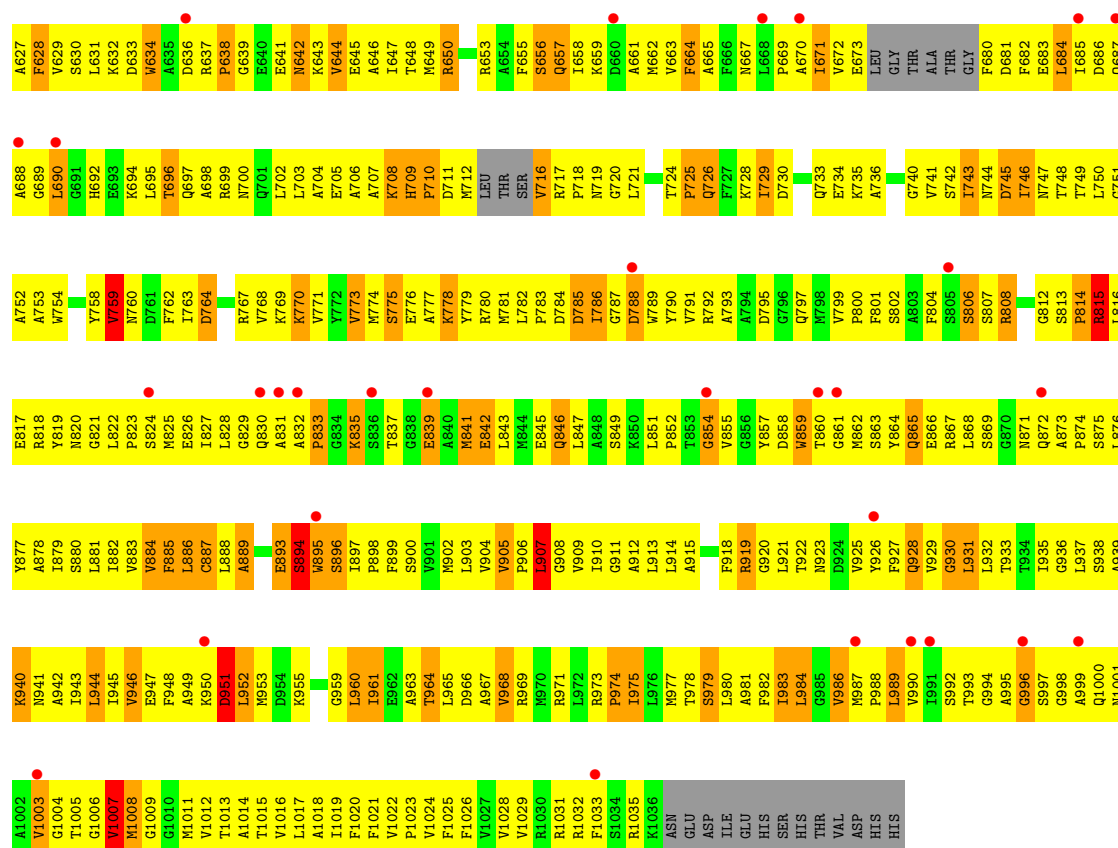
Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
3	A	1	Total	C	N	O	S	0	0
			24	16	3	4	1		

3 Residue-property plots

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

• Molecule 1: Acriflavine resistance protein B





● Molecule 2: UPF0092 membrane protein yajC

Chain B: 59% 30% 11%



4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	H 3 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	145.10Å 145.10Å 511.64Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	50.00 – 3.50 50.00 – 3.50	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	88.0 (50.00-3.50) 88.0 (50.00-3.50)	Depositor EDS
R_{merge}	0.10	Depositor
R_{sym}	0.10	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	2.06 (at 3.49Å)	Xtriage
Refinement program	CNS 1.2	Depositor
R, R_{free}	0.279 , 0.317 0.286 , 0.325	Depositor DCC
R_{free} test set	1182 reflections (4.42%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	101.4	Xtriage
Anisotropy	0.342	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.31 , 71.3	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.46$, $\langle L^2 \rangle = 0.28$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.88	EDS
Total number of atoms	8026	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	65.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.90% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	0.77	9/7905 (0.1%)	1.40	148/10728 (1.4%)
2	B	0.50	0/220	1.18	3/302 (1.0%)
All	All	0.77	9/8125 (0.1%)	1.39	151/11030 (1.4%)

All (9) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	85	THR	N-CA	7.58	1.55	1.46
1	A	173	GLY	N-CA	6.94	1.50	1.44
1	A	84	SER	CA-C	5.94	1.60	1.53
1	A	565	PRO	N-CD	5.79	1.55	1.47
1	A	495	THR	CA-C	-5.43	1.46	1.52
1	A	49	TYR	C-N	-5.42	1.27	1.33
1	A	905	VAL	CA-C	5.39	1.58	1.52
1	A	889	ALA	C-N	-5.34	1.26	1.33
1	A	894	SER	N-CA	5.25	1.52	1.46

All (151) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	370	ILE	N-CA-C	-10.97	102.13	111.56
1	A	726	GLN	OE1-CD-NE2	-10.70	111.91	122.60
1	A	584	GLN	OE1-CD-NE2	-10.55	112.05	122.60
1	A	197	GLN	OE1-CD-NE2	-10.28	112.32	122.60
1	A	622	GLN	OE1-CD-NE2	-10.21	112.39	122.60
1	A	846	GLN	OE1-CD-NE2	-10.21	112.39	122.60
1	A	89	GLN	OE1-CD-NE2	-10.12	112.48	122.60
1	A	176	GLN	OE1-CD-NE2	-10.07	112.53	122.60
1	A	181	GLN	OE1-CD-NE2	-10.06	112.54	122.60
1	A	569	GLN	OE1-CD-NE2	-10.04	112.56	122.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	577	GLN	OE1-CD-NE2	-10.00	112.60	122.60
1	A	125	GLN	OE1-CD-NE2	-9.92	112.68	122.60
1	A	865	GLN	OE1-CD-NE2	-9.86	112.74	122.60
1	A	124	GLN	OE1-CD-NE2	-9.84	112.76	122.60
1	A	123	GLN	OE1-CD-NE2	-9.80	112.80	122.60
1	A	657	GLN	OE1-CD-NE2	-9.80	112.80	122.60
1	A	120	GLN	OE1-CD-NE2	-9.79	112.81	122.60
1	A	469	GLN	OE1-CD-NE2	-9.79	112.81	122.60
1	A	830	GLN	OE1-CD-NE2	-9.68	112.92	122.60
1	A	360	GLN	OE1-CD-NE2	-9.68	112.92	122.60
1	A	588	GLN	OE1-CD-NE2	-9.66	112.94	122.60
1	A	151	GLN	OE1-CD-NE2	-9.56	113.04	122.60
1	A	34	GLN	OE1-CD-NE2	-9.45	113.15	122.60
1	A	218	GLN	OE1-CD-NE2	-9.38	113.22	122.60
1	A	687	GLN	OE1-CD-NE2	-9.05	113.55	122.60
1	A	515	TRP	N-CA-C	-8.90	102.19	113.23
1	A	317	PHE	CA-C-N	8.47	129.29	119.47
1	A	317	PHE	C-N-CA	8.47	129.29	119.47
1	A	123	GLN	CA-C-N	8.43	131.91	120.54
1	A	123	GLN	C-N-CA	8.43	131.91	120.54
1	A	469	GLN	N-CA-C	-8.18	101.71	112.34
1	A	425	LEU	CA-C-N	7.72	128.33	120.38
1	A	425	LEU	C-N-CA	7.72	128.33	120.38
1	A	306	ILE	N-CA-C	-7.65	101.53	111.09
1	A	384	ALA	N-CA-C	-7.62	103.96	113.18
1	A	139	VAL	N-CA-C	7.55	118.47	106.32
1	A	89	GLN	CG-CD-NE2	7.52	127.69	116.40
1	A	989	LEU	N-CA-C	7.50	119.45	111.28
1	A	181	GLN	CG-CD-NE2	7.41	127.51	116.40
1	A	495	THR	CA-C-N	-7.40	112.61	123.11
1	A	495	THR	C-N-CA	-7.40	112.61	123.11
1	A	729	ILE	N-CA-C	7.25	117.80	111.56
1	A	282	ASN	N-CA-C	-7.25	101.95	111.74
1	A	815	ARG	N-CA-C	-7.25	99.79	110.52
1	A	886	LEU	N-CA-C	7.18	118.75	111.07
1	A	498	LYS	CA-C-N	7.11	128.72	119.84
1	A	498	LYS	C-N-CA	7.11	128.72	119.84
1	A	524	THR	N-CA-C	-7.08	103.18	111.03
1	A	218	GLN	CG-CD-NE2	7.04	126.96	116.40
1	A	197	GLN	CG-CD-NE2	7.03	126.95	116.40
1	A	125	GLN	CG-CD-NE2	6.92	126.78	116.40
1	A	40	PRO	CB-CA-C	6.87	119.30	110.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	687	GLN	CG-CD-NE2	6.79	126.59	116.40
1	A	337	ILE	N-CA-C	-6.78	102.89	110.62
1	A	569	GLN	CG-CD-NE2	6.78	126.56	116.40
1	A	622	GLN	CG-CD-NE2	6.76	126.55	116.40
1	A	176	GLN	CG-CD-NE2	6.75	126.53	116.40
1	A	644	VAL	N-CA-C	6.74	117.24	110.23
1	A	34	GLN	CG-CD-NE2	6.72	126.48	116.40
1	A	865	GLN	CG-CD-NE2	6.67	126.40	116.40
1	A	120	GLN	CG-CD-NE2	6.67	126.40	116.40
1	A	469	GLN	CG-CD-NE2	6.66	126.39	116.40
1	A	124	GLN	CG-CD-NE2	6.66	126.39	116.40
1	A	672	VAL	N-CA-C	6.66	117.62	109.30
1	A	123	GLN	CG-CD-NE2	6.65	126.37	116.40
1	A	115	MET	CA-C-N	-6.63	112.97	119.87
1	A	115	MET	C-N-CA	-6.63	112.97	119.87
1	A	726	GLN	CG-CD-NE2	6.63	126.34	116.40
2	B	41	PRO	N-CA-CB	6.51	110.20	103.23
1	A	498	LYS	O-C-N	6.49	128.78	121.32
1	A	830	GLN	CG-CD-NE2	6.49	126.14	116.40
1	A	584	GLN	CG-CD-NE2	6.46	126.09	116.40
1	A	657	GLN	CG-CD-NE2	6.46	126.08	116.40
1	A	885	PHE	N-CA-C	-6.44	104.26	111.28
1	A	425	LEU	O-C-N	6.40	128.69	121.53
1	A	146	ASP	CB-CA-C	6.36	119.81	110.26
1	A	588	GLN	CG-CD-NE2	6.36	125.95	116.40
1	A	566	ASP	CB-CA-C	6.34	119.58	111.40
1	A	846	GLN	CG-CD-NE2	6.33	125.90	116.40
1	A	334	LYS	N-CA-C	-6.32	103.69	111.33
1	A	385	ALA	N-CA-C	-6.30	104.33	111.07
1	A	564	LEU	CA-C-N	-6.26	112.02	119.84
1	A	564	LEU	C-N-CA	-6.26	112.02	119.84
1	A	316	PHE	CB-CA-C	6.25	119.65	109.90
1	A	224	PRO	CA-C-N	-6.24	114.58	122.37
1	A	224	PRO	C-N-CA	-6.24	114.58	122.37
1	A	80	SER	N-CA-C	6.22	117.86	108.46
1	A	1007	VAL	N-CA-C	6.18	117.74	111.00
1	A	151	GLN	CG-CD-NE2	6.17	125.66	116.40
1	A	884	VAL	N-CA-C	-6.17	106.26	111.56
1	A	360	GLN	CG-CD-NE2	6.16	125.63	116.40
1	A	41	PRO	CB-CA-C	6.15	121.71	111.56
1	A	510	LYS	CA-C-N	6.15	133.47	121.41
1	A	510	LYS	C-N-CA	6.15	133.47	121.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	318	PRO	N-CA-C	6.14	122.71	113.81
1	A	566	ASP	N-CA-C	-6.09	103.21	111.55
2	B	47	LYS	N-CA-C	-6.08	105.96	113.19
1	A	577	GLN	CG-CD-NE2	5.97	125.36	116.40
1	A	134	SER	CB-CA-C	5.96	117.14	109.80
1	A	38	ILE	CB-CA-C	-5.95	105.35	112.19
1	A	315	PRO	O-C-N	5.92	129.34	122.23
1	A	119	PRO	CB-CA-C	5.90	119.06	111.56
1	A	871	ASN	N-CA-C	-5.83	106.16	113.28
1	A	198	LEU	N-CA-C	5.79	119.15	109.95
1	A	499	PRO	CA-C-N	5.69	132.21	121.97
1	A	499	PRO	C-N-CA	5.69	132.21	121.97
1	A	839	GLU	N-CA-C	-5.67	106.41	113.55
1	A	365	THR	N-CA-C	-5.64	106.40	113.28
1	A	559	LEU	CA-C-N	5.61	126.85	119.84
1	A	559	LEU	C-N-CA	5.61	126.85	119.84
1	A	842	GLU	CA-C-N	-5.54	113.33	120.65
1	A	842	GLU	C-N-CA	-5.54	113.33	120.65
1	A	35	TYR	N-CA-C	5.53	117.19	108.23
1	A	936	GLY	N-CA-C	-5.53	106.08	112.50
1	A	91	THR	N-CA-C	-5.52	100.70	109.76
1	A	48	SER	CA-C-N	5.52	129.21	122.42
1	A	48	SER	C-N-CA	5.52	129.21	122.42
1	A	616	GLY	O-C-N	-5.50	118.30	123.25
1	A	859	TRP	N-CA-C	5.48	117.89	109.07
1	A	928	GLN	N-CA-C	-5.44	104.78	111.75
1	A	893	GLU	N-CA-C	5.43	121.11	113.56
2	B	54	ASP	N-CA-C	-5.41	106.52	113.23
1	A	148	THR	CA-C-N	-5.41	114.83	122.94
1	A	148	THR	C-N-CA	-5.41	114.83	122.94
1	A	696	THR	N-CA-C	-5.40	106.20	112.89
1	A	854	GLY	N-CA-C	-5.37	107.51	113.79
1	A	575	MET	N-CA-C	5.37	118.46	110.14
1	A	833	PRO	O-C-N	5.36	128.66	122.23
1	A	846	GLN	CA-C-N	5.34	129.68	121.19
1	A	846	GLN	C-N-CA	5.34	129.68	121.19
1	A	172	VAL	N-CA-C	5.33	115.04	108.53
1	A	634	TRP	N-CA-C	5.33	117.51	111.11
1	A	835	LYS	N-CA-C	5.33	118.91	109.96
1	A	30	LEU	N-CA-C	5.31	116.35	109.65
1	A	889	ALA	CA-C-N	-5.25	110.78	121.18
1	A	889	ALA	C-N-CA	-5.25	110.78	121.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	938	SER	N-CA-C	-5.23	105.00	111.33
1	A	131	LYS	N-CA-C	-5.22	101.37	109.72
1	A	426	PRO	N-CA-C	5.16	117.00	110.70
1	A	984	LEU	N-CA-C	-5.15	107.65	114.04
1	A	623	ASN	N-CA-C	-5.14	107.67	114.04
1	A	725	PRO	CB-CA-C	5.12	118.01	111.21
1	A	178	PHE	N-CA-C	-5.09	101.51	108.38
1	A	314	GLU	N-CA-C	-5.08	105.26	112.17
1	A	498	LYS	CA-C-O	5.07	127.10	120.16
1	A	684	LEU	CB-CA-C	5.05	118.13	109.80
1	A	174	ASP	N-CA-C	5.04	117.74	111.24
1	A	30	LEU	CA-C-N	5.01	126.10	119.84
1	A	30	LEU	C-N-CA	5.01	126.10	119.84
1	A	633	ASP	CA-C-N	5.00	127.29	120.54
1	A	633	ASP	C-N-CA	5.00	127.29	120.54

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	7760	0	7920	1413	1
2	B	218	0	145	15	0
3	A	48	0	36	13	0
All	All	8026	0	8101	1426	1

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 89.

All (1426) 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:49:TYR:CD2	1:A:52:ALA:HB2	1.67	1.27
1:A:462:SER:CB	1:A:865:GLN:HE22	1.51	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:670:ALA:O	1:A:671:ILE:HG12	1.33	1.22
1:A:499:PRO:O	1:A:500:ILE:HG13	1.30	1.22
1:A:448:VAL:HG21	1:A:888:LEU:CD2	1.70	1.22
1:A:496:MET:O	1:A:497:LEU:HG	1.40	1.22
1:A:386:PHE:HA	3:A:1110:AIC:HN21	1.04	1.20
1:A:163:LYS:O	1:A:166:ILE:HG23	1.38	1.19
1:A:990:VAL:HG22	1:A:1005:THR:N	1.56	1.19
1:A:662:MET:HE3	1:A:664:PHE:HZ	1.07	1.15
1:A:724:THR:CG2	1:A:725:PRO:HD2	1.77	1.14
1:A:313:MET:HE3	1:A:321:LEU:HD23	1.24	1.14
1:A:166:ILE:HG21	1:A:176:GLN:OE1	1.48	1.12
1:A:867:ARG:HH11	1:A:872:GLN:HG3	1.14	1.12
1:A:990:VAL:HG13	1:A:1005:THR:OG1	1.49	1.11
1:A:425:LEU:HB3	1:A:426:PRO:HD2	1.14	1.11
1:A:36:PRO:HG3	1:A:391:ASN:ND2	1.64	1.11
1:A:49:TYR:HD1	1:A:122:VAL:HG23	1.04	1.11
1:A:426:PRO:HG2	1:A:429:GLU:HB2	1.31	1.11
1:A:462:SER:HB2	1:A:865:GLN:HE22	1.07	1.11
1:A:309:GLU:OE1	1:A:312:LYS:HG3	1.47	1.10
1:A:393:LEU:HD13	1:A:466:ILE:HG23	1.31	1.10
1:A:49:TYR:HD2	1:A:52:ALA:HB2	0.98	1.09
1:A:709:HIS:H	1:A:710:PRO:CD	1.60	1.09
1:A:903:LEU:O	1:A:906:PRO:HD2	1.52	1.09
1:A:384:ALA:HB1	3:A:1110:AIC:C16	1.84	1.08
1:A:313:MET:HE3	1:A:321:LEU:CD2	1.83	1.07
1:A:448:VAL:HG21	1:A:888:LEU:HD23	1.25	1.07
1:A:154:ILE:O	1:A:158:VAL:HG23	1.52	1.07
1:A:142:VAL:C	1:A:143:ILE:HD12	1.81	1.06
1:A:364:ALA:HB2	1:A:497:LEU:HD21	1.34	1.06
1:A:49:TYR:HD1	1:A:122:VAL:CG2	1.68	1.05
1:A:169:THR:HG23	1:A:305:ALA:HB3	1.38	1.05
1:A:790:TYR:CE1	1:A:800:PRO:HG3	1.92	1.04
1:A:724:THR:HG23	1:A:725:PRO:HD2	1.34	1.04
1:A:758:TYR:HE1	1:A:770:LYS:HG3	1.23	1.04
1:A:662:MET:HE3	1:A:664:PHE:CZ	1.90	1.04
1:A:364:ALA:HB2	1:A:497:LEU:CD2	1.86	1.04
1:A:496:MET:O	1:A:497:LEU:CG	2.05	1.03
1:A:49:TYR:CD1	1:A:122:VAL:HG23	1.93	1.02
1:A:573:MET:HE1	1:A:628:PHE:HA	1.40	1.01
1:A:177:LEU:O	1:A:178:PHE:CD1	2.14	1.00
1:A:343:THR:HG21	1:A:399:VAL:HG13	1.40	1.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:207:ILE:HG22	1:A:760:ASN:HD22	1.21	0.99
1:A:364:ALA:CB	1:A:497:LEU:HD21	1.91	0.99
1:A:438:ILE:HG22	1:A:442:LEU:HG	1.43	0.98
1:A:38:ILE:HG22	1:A:38:ILE:O	1.58	0.98
1:A:462:SER:CB	1:A:865:GLN:NE2	2.27	0.98
1:A:703:LEU:HD12	1:A:716:VAL:HG12	1.40	0.98
1:A:425:LEU:HB3	1:A:426:PRO:CD	1.93	0.98
1:A:186:ILE:HD13	1:A:262:LEU:HD21	1.44	0.97
1:A:448:VAL:CG2	1:A:888:LEU:HD23	1.94	0.97
1:A:709:HIS:H	1:A:710:PRO:HD3	1.30	0.96
1:A:167:SER:HA	1:A:172:VAL:HG21	1.46	0.95
1:A:386:PHE:HA	3:A:1110:AIC:N2	1.79	0.95
1:A:662:MET:CE	1:A:664:PHE:HZ	1.78	0.95
1:A:670:ALA:O	1:A:671:ILE:CG1	2.13	0.95
1:A:36:PRO:HG2	1:A:393:LEU:HD12	1.48	0.95
1:A:451:ALA:CB	1:A:883:VAL:HG12	1.97	0.94
1:A:683:GLU:HG3	1:A:860:THR:OG1	1.67	0.94
1:A:375:VAL:HG12	1:A:480:LEU:HB2	1.50	0.94
1:A:598:TYR:HB3	1:A:606:VAL:HG11	1.49	0.94
1:A:876:LEU:HA	1:A:879:ILE:HD12	1.51	0.93
1:A:172:VAL:C	1:A:294:ALA:HA	1.93	0.93
1:A:384:ALA:HB1	3:A:1110:AIC:H163	1.48	0.93
1:A:35:TYR:OH	1:A:134:SER:HB3	1.68	0.93
1:A:36:PRO:HG3	1:A:391:ASN:HD21	1.22	0.93
1:A:449:LEU:HB2	1:A:478:MET:SD	2.09	0.93
1:A:790:TYR:HE1	1:A:800:PRO:HG3	1.35	0.92
1:A:632:LYS:HE2	1:A:636:ASP:OD2	1.69	0.91
1:A:144:ASN:HB3	1:A:149:MET:HG3	1.53	0.91
1:A:926:TYR:O	1:A:929:VAL:HB	1.70	0.91
1:A:133:SER:HB2	1:A:293:LEU:HD11	1.53	0.91
1:A:161:ASN:O	1:A:165:ALA:HB2	1.70	0.91
1:A:907:LEU:HD12	1:A:1018:ALA:HA	1.50	0.90
1:A:889:ALA:HA	1:A:894:SER:CB	2.02	0.90
1:A:634:TRP:CD1	1:A:994:GLY:O	2.25	0.90
1:A:166:ILE:HG21	1:A:176:GLN:NE2	1.87	0.90
1:A:993:THR:HG22	1:A:993:THR:O	1.72	0.89
1:A:527:TYR:OH	1:A:1019:ILE:HB	1.71	0.89
1:A:448:VAL:HG21	1:A:888:LEU:HD21	1.54	0.89
1:A:749:THR:HG21	1:A:791:VAL:HG22	1.53	0.89
1:A:451:ALA:HB2	1:A:883:VAL:HG12	1.54	0.89
1:A:166:ILE:HG13	1:A:167:SER:N	1.85	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:187:TRP:O	1:A:266:ALA:HB1	1.71	0.89
1:A:148:THR:O	1:A:148:THR:HG22	1.72	0.89
1:A:222:THR:OG1	1:A:223:PRO:HD2	1.73	0.89
1:A:462:SER:HB3	1:A:865:GLN:HE22	1.38	0.89
1:A:32:VAL:HG22	1:A:390:ILE:HD12	1.55	0.88
1:A:573:MET:CE	1:A:628:PHE:HA	2.02	0.88
1:A:399:VAL:O	1:A:402:ILE:HB	1.73	0.88
1:A:560:PRO:HB2	1:A:922:THR:HG22	1.56	0.87
1:A:964:THR:O	1:A:968:VAL:HG23	1.74	0.87
1:A:462:SER:HB2	1:A:865:GLN:NE2	1.87	0.87
1:A:36:PRO:CG	1:A:393:LEU:HD12	2.03	0.87
1:A:425:LEU:CB	1:A:426:PRO:HD2	1.98	0.87
1:A:242:SER:HB2	1:A:245:GLU:HG3	1.56	0.86
1:A:903:LEU:O	1:A:906:PRO:CD	2.23	0.86
1:A:893:GLU:HG2	1:A:893:GLU:O	1.73	0.86
1:A:166:ILE:HG21	1:A:176:GLN:CD	2.00	0.86
1:A:448:VAL:CG2	1:A:888:LEU:CD2	2.53	0.86
1:A:578:LEU:HD21	1:A:590:VAL:HG11	1.55	0.86
1:A:166:ILE:HG21	1:A:176:GLN:HE22	1.40	0.86
1:A:882:ILE:O	1:A:886:LEU:HB2	1.74	0.86
1:A:386:PHE:CA	3:A:1110:AIC:HN21	1.88	0.86
1:A:673:GLU:OE2	1:A:862:MET:CE	2.24	0.86
1:A:214:VAL:CG1	1:A:236:ALA:HB3	2.06	0.85
1:A:156:ASP:OD2	1:A:182:TYR:HB2	1.75	0.85
1:A:724:THR:HG22	1:A:725:PRO:HD2	1.57	0.85
1:A:578:LEU:HB3	1:A:579:PRO:HD2	1.57	0.85
1:A:449:LEU:HB3	1:A:453:PHE:HE1	1.41	0.85
1:A:66:GLU:HG3	1:A:90:ILE:HD13	1.58	0.84
1:A:163:LYS:O	1:A:166:ILE:CG2	2.25	0.84
1:A:278:ILE:HG13	1:A:613:ASN:HB3	1.56	0.84
1:A:709:HIS:N	1:A:710:PRO:CD	2.39	0.84
1:A:1:MET:H3	1:A:2:PRO:HD3	1.42	0.84
1:A:66:GLU:HG3	1:A:90:ILE:CD1	2.08	0.84
1:A:110:LYS:HD3	1:A:113:LEU:HD12	1.59	0.84
1:A:166:ILE:HD12	1:A:172:VAL:HG11	1.58	0.84
1:A:351:VAL:HG21	1:A:406:VAL:HG11	1.58	0.84
1:A:499:PRO:O	1:A:500:ILE:CG1	2.22	0.84
1:A:49:TYR:HD2	1:A:52:ALA:CB	1.88	0.83
1:A:619:GLY:C	1:A:624:THR:HG21	2.01	0.83
1:A:499:PRO:C	1:A:500:ILE:HG13	2.02	0.83
1:A:36:PRO:O	1:A:38:ILE:HG13	1.78	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:119:PRO:HG2	1:A:122:VAL:CG2	2.07	0.83
1:A:631:LEU:HD13	1:A:637:ARG:NH1	1.93	0.83
1:A:57:VAL:HG21	1:A:86:GLY:HA2	1.60	0.83
1:A:177:LEU:HG	1:A:178:PHE:N	1.92	0.83
1:A:527:TYR:HE2	1:A:968:VAL:HG12	1.41	0.83
1:A:166:ILE:CG2	1:A:176:GLN:HE22	1.91	0.83
1:A:546:LEU:O	1:A:550:VAL:HG23	1.78	0.82
1:A:149:MET:HB3	1:A:154:ILE:HD11	1.60	0.82
1:A:463:THR:CG2	1:A:869:SER:HB3	2.09	0.82
1:A:758:TYR:HE1	1:A:770:LYS:CG	1.91	0.82
1:A:632:LYS:HE2	1:A:636:ASP:CG	2.04	0.82
1:A:378:GLY:C	1:A:480:LEU:HD11	2.03	0.82
1:A:997:SER:HA	1:A:1000:GLN:HG3	1.61	0.82
1:A:758:TYR:CE1	1:A:770:LYS:HG3	2.14	0.82
1:A:144:ASN:HB3	1:A:149:MET:CG	2.09	0.82
1:A:207:ILE:HG22	1:A:760:ASN:ND2	1.94	0.82
1:A:418:ARG:HG3	1:A:422:GLU:OE2	1.79	0.82
1:A:462:SER:HB3	1:A:865:GLN:NE2	1.92	0.82
1:A:724:THR:OG1	1:A:814:PRO:HG3	1.78	0.82
1:A:309:GLU:OE1	1:A:312:LYS:CG	2.28	0.81
1:A:49:TYR:CD1	1:A:122:VAL:CG2	2.60	0.81
1:A:247:GLY:HA2	1:A:268:ILE:HD13	1.63	0.81
1:A:396:PHE:HZ	1:A:1000:GLN:HG2	1.45	0.81
1:A:841:MET:HB3	1:A:859:TRP:CZ2	2.16	0.81
1:A:330:THR:HB	1:A:331:PRO:HD3	1.61	0.81
1:A:133:SER:CB	1:A:293:LEU:HD11	2.10	0.81
1:A:87:THR:HG21	1:A:620:ARG:HH22	1.46	0.80
1:A:959:GLY:O	1:A:963:ALA:HB2	1.81	0.80
1:A:73:ASP:HB2	1:A:106:GLN:HE22	1.46	0.80
1:A:166:ILE:CB	1:A:176:GLN:HE22	1.94	0.80
1:A:310:LEU:HD12	1:A:323:ILE:HD12	1.63	0.80
1:A:437:GLN:NE2	1:A:948:PHE:HE2	1.78	0.80
1:A:467:TYR:HE2	1:A:925:VAL:HG13	1.45	0.80
1:A:313:MET:CE	1:A:321:LEU:CD2	2.60	0.80
1:A:867:ARG:NH1	1:A:872:GLN:HG3	1.95	0.80
1:A:176:GLN:O	1:A:177:LEU:HB2	1.79	0.80
1:A:448:VAL:HG13	1:A:884:VAL:HG13	1.63	0.80
1:A:686:ASP:HB3	1:A:823:PRO:HB2	1.63	0.80
1:A:38:ILE:O	1:A:38:ILE:CG2	2.31	0.80
1:A:527:TYR:CE2	1:A:968:VAL:HG12	2.15	0.80
1:A:172:VAL:CG1	1:A:173:GLY:H	1.95	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:189:ASN:C	1:A:189:ASN:OD1	2.25	0.79
1:A:310:LEU:CD1	1:A:323:ILE:HD12	2.12	0.79
1:A:359:LEU:HD22	1:A:417:GLU:OE1	1.81	0.79
1:A:136:PHE:HA	1:A:292:LYS:HA	1.63	0.79
1:A:154:ILE:O	1:A:158:VAL:CG2	2.31	0.79
1:A:959:GLY:O	1:A:963:ALA:CB	2.31	0.79
1:A:990:VAL:HG22	1:A:1004:GLY:C	2.08	0.79
1:A:213:GLN:CG	1:A:239:ARG:HG2	2.12	0.79
1:A:340:VAL:HG21	1:A:395:MET:SD	2.23	0.79
1:A:386:PHE:CA	3:A:1110:AIC:N2	2.44	0.79
1:A:868:LEU:HG	1:A:869:SER:H	1.48	0.79
1:A:445:ILE:HG12	1:A:943:ILE:HD13	1.64	0.79
1:A:897:ILE:N	1:A:898:PRO:HD3	1.97	0.79
1:A:65:ILE:HD11	1:A:118:LEU:HD11	1.65	0.78
1:A:119:PRO:HG2	1:A:122:VAL:HG23	1.63	0.78
1:A:643:LYS:O	1:A:647:ILE:HG13	1.84	0.78
1:A:860:THR:HG22	1:A:861:GLY:N	1.97	0.78
1:A:724:THR:CG2	1:A:725:PRO:CD	2.60	0.78
1:A:186:ILE:CD1	1:A:262:LEU:HD21	2.13	0.78
1:A:896:SER:O	1:A:1029:VAL:HG12	1.83	0.78
1:A:222:THR:HB	1:A:223:PRO:HD3	1.66	0.78
1:A:360:GLN:HE22	1:A:517:ASN:ND2	1.82	0.78
1:A:375:VAL:CG1	1:A:480:LEU:HB2	2.13	0.78
1:A:172:VAL:CG1	1:A:173:GLY:N	2.46	0.77
1:A:213:GLN:HG2	1:A:239:ARG:HG2	1.66	0.77
1:A:807:SER:O	1:A:808:ARG:HB3	1.84	0.77
1:A:68:ASN:ND2	1:A:114:ALA:HB2	1.99	0.77
1:A:750:LEU:HD12	1:A:754:TRP:CD1	2.20	0.77
1:A:785:ASP:O	1:A:788:ASP:HB2	1.83	0.77
1:A:897:ILE:H	1:A:898:PRO:HD3	1.46	0.77
1:A:36:PRO:O	1:A:37:THR:C	2.23	0.77
1:A:166:ILE:CG2	1:A:176:GLN:OE1	2.30	0.77
1:A:876:LEU:O	1:A:879:ILE:HB	1.85	0.77
1:A:896:SER:O	1:A:1029:VAL:CG1	2.32	0.76
1:A:344:LEU:HD12	1:A:376:LEU:HD23	1.67	0.76
1:A:187:TRP:HZ3	1:A:774:MET:HE2	1.48	0.76
1:A:416:VAL:HA	1:A:434:SER:HB3	1.68	0.76
1:A:462:SER:O	1:A:465:ALA:HB3	1.86	0.76
1:A:222:THR:O	1:A:224:PRO:HD3	1.84	0.76
1:A:177:LEU:O	1:A:178:PHE:CG	2.38	0.76
1:A:673:GLU:OE2	1:A:862:MET:HE3	1.83	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:987:MET:N	1:A:988:PRO:CD	2.49	0.76
1:A:827:ILE:C	1:A:828:LEU:HD23	2.11	0.76
1:A:208:LYS:HA	1:A:760:ASN:HD21	1.49	0.76
1:A:300:LEU:HD13	1:A:333:VAL:HB	1.66	0.76
1:A:386:PHE:C	3:A:1110:AIC:N2	2.44	0.75
1:A:905:VAL:O	1:A:909:VAL:HG23	1.87	0.75
1:A:168:ARG:HG2	1:A:309:GLU:CD	2.11	0.75
1:A:573:MET:HE2	1:A:573:MET:HA	1.68	0.75
1:A:35:TYR:CE2	1:A:134:SER:HB3	2.21	0.75
1:A:167:SER:HA	1:A:172:VAL:CG2	2.16	0.75
1:A:379:THR:N	1:A:480:LEU:HD11	2.01	0.75
1:A:68:ASN:CG	1:A:114:ALA:HB2	2.10	0.75
1:A:572:PHE:CE1	1:A:665:ALA:HB1	2.22	0.75
1:A:742:SER:C	1:A:744:ASN:H	1.94	0.75
1:A:746:ILE:O	1:A:749:THR:HG22	1.87	0.75
1:A:2:PRO:O	1:A:6:ILE:HG13	1.87	0.75
1:A:841:MET:HE2	1:A:841:MET:HA	1.67	0.75
2:B:49:HIS:C	2:B:51:LYS:H	1.92	0.75
1:A:173:GLY:HA3	1:A:293:LEU:O	1.87	0.75
1:A:384:ALA:HB1	3:A:1110:AIC:H161	1.67	0.75
1:A:841:MET:SD	1:A:859:TRP:CH2	2.79	0.74
1:A:451:ALA:HB1	1:A:883:VAL:HG12	1.69	0.74
1:A:162:MET:HA	1:A:165:ALA:HB3	1.70	0.74
1:A:555:LEU:HD11	1:A:914:LEU:HD23	1.69	0.74
1:A:564:LEU:CD1	1:A:925:VAL:HB	2.17	0.74
1:A:610:PHE:HB3	1:A:628:PHE:HB2	1.68	0.74
1:A:815:ARG:CB	1:A:815:ARG:HH11	1.99	0.74
1:A:889:ALA:HA	1:A:894:SER:HB3	1.68	0.74
1:A:726:GLN:CD	1:A:812:GLY:HA3	2.13	0.74
1:A:222:THR:CB	1:A:223:PRO:CD	2.66	0.74
1:A:345:VAL:O	1:A:349:ILE:HG13	1.88	0.74
1:A:858:ASP:OD1	1:A:859:TRP:N	2.19	0.74
1:A:138:MET:HE3	1:A:306:ILE:HD13	1.70	0.74
1:A:167:SER:CA	1:A:172:VAL:HG21	2.18	0.74
1:A:971:ARG:O	1:A:975:ILE:HG13	1.88	0.74
1:A:49:TYR:HE1	1:A:119:PRO:HB2	1.53	0.73
1:A:36:PRO:CD	1:A:393:LEU:HD12	2.17	0.73
1:A:483:LEU:HB3	1:A:487:ILE:HD11	1.69	0.73
1:A:396:PHE:CZ	1:A:1000:GLN:HG2	2.22	0.73
1:A:478:MET:O	1:A:481:SER:HB3	1.88	0.73
1:A:172:VAL:HG13	1:A:173:GLY:H	1.52	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:889:ALA:HB1	1:A:894:SER:OG	1.89	0.73
1:A:897:ILE:N	1:A:898:PRO:CD	2.50	0.73
1:A:332:PHE:CE2	1:A:569:GLN:HG2	2.24	0.73
1:A:471:SER:O	1:A:475:VAL:HG23	1.88	0.73
1:A:35:TYR:CZ	1:A:134:SER:HB3	2.24	0.73
1:A:133:SER:HB2	1:A:293:LEU:CD1	2.18	0.73
1:A:71:GLY:O	1:A:72:ILE:HD13	1.88	0.72
1:A:987:MET:N	1:A:988:PRO:HD2	2.05	0.72
1:A:1025:PHE:O	1:A:1029:VAL:HG23	1.88	0.72
1:A:449:LEU:O	1:A:452:VAL:HG22	1.89	0.72
1:A:894:SER:O	1:A:895:TRP:C	2.30	0.72
1:A:405:LEU:HD21	1:A:477:ALA:HB1	1.72	0.71
1:A:1:MET:N	1:A:2:PRO:HD3	2.04	0.71
1:A:375:VAL:CG1	1:A:480:LEU:CB	2.67	0.71
1:A:36:PRO:CG	1:A:391:ASN:ND2	2.47	0.71
1:A:889:ALA:HA	1:A:894:SER:HB2	1.70	0.71
1:A:733:GLN:OE1	1:A:743:ILE:HD12	1.90	0.71
1:A:190:PRO:CG	1:A:779:TYR:CD2	2.74	0.71
1:A:298:ASN:HD21	1:A:300:LEU:HB3	1.56	0.71
1:A:574:THR:HG23	1:A:627:ALA:HB3	1.71	0.71
1:A:684:LEU:HD11	1:A:855:VAL:CG1	2.21	0.71
1:A:688:ALA:H	1:A:854:GLY:CA	2.04	0.71
1:A:36:PRO:O	1:A:38:ILE:N	2.24	0.71
1:A:172:VAL:HG12	1:A:173:GLY:N	2.03	0.71
1:A:144:ASN:HB3	1:A:149:MET:HB2	1.73	0.71
1:A:199:THR:HG23	1:A:202:ASP:H	1.55	0.71
1:A:925:VAL:O	1:A:929:VAL:HG23	1.90	0.70
1:A:746:ILE:HD13	1:A:804:PHE:CE1	2.26	0.70
1:A:156:ASP:OD2	1:A:182:TYR:CB	2.39	0.70
1:A:208:LYS:CA	1:A:760:ASN:HD21	2.03	0.70
1:A:367:ILE:HB	1:A:368:PRO:HD3	1.74	0.70
1:A:703:LEU:HD12	1:A:716:VAL:CG1	2.19	0.70
1:A:819:TYR:CZ	1:A:860:THR:OG1	2.43	0.70
1:A:12:ALA:O	1:A:15:ILE:HG22	1.91	0.70
1:A:130:GLU:OE1	1:A:175:VAL:HG21	1.91	0.70
1:A:161:ASN:OD1	1:A:162:MET:HG3	1.90	0.70
1:A:703:LEU:HD11	1:A:717:ARG:HA	1.72	0.70
1:A:989:LEU:HB3	1:A:1000:GLN:O	1.92	0.70
1:A:313:MET:HE1	1:A:321:LEU:HG	1.74	0.70
1:A:404:LEU:O	1:A:407:ASP:HB3	1.91	0.70
1:A:417:GLU:HA	1:A:420:MET:HG2	1.74	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:84:SER:O	1:A:85:THR:HG23	1.91	0.69
1:A:317:PHE:CG	1:A:318:PRO:HD2	2.26	0.69
1:A:115:MET:SD	1:A:127:VAL:HG21	2.31	0.69
1:A:574:THR:HA	1:A:665:ALA:HA	1.72	0.69
1:A:375:VAL:HG13	1:A:480:LEU:HB3	1.73	0.69
1:A:582:ALA:HA	1:A:586:ARG:NH1	2.07	0.69
1:A:130:GLU:OE1	1:A:175:VAL:CG2	2.39	0.69
1:A:569:GLN:O	1:A:571:VAL:N	2.23	0.69
1:A:166:ILE:HG13	1:A:167:SER:H	1.56	0.69
1:A:76:MET:HE2	1:A:77:TYR:HE2	1.57	0.69
1:A:619:GLY:O	1:A:624:THR:HG21	1.93	0.69
1:A:249:ILE:O	1:A:261:LEU:HD22	1.93	0.69
1:A:346:GLU:O	1:A:350:LEU:HB2	1.92	0.69
1:A:463:THR:HG23	1:A:869:SER:HB3	1.74	0.69
1:A:468:ARG:HA	1:A:471:SER:HB3	1.75	0.69
1:A:573:MET:HE1	1:A:628:PHE:CA	2.21	0.69
1:A:87:THR:HG21	1:A:620:ARG:NH2	2.07	0.69
1:A:572:PHE:HZ	1:A:598:TYR:CE2	2.11	0.69
1:A:74:ASN:HB3	1:A:95:GLU:OE1	1.92	0.69
1:A:218:GLN:CB	1:A:233:SER:HA	2.23	0.69
1:A:393:LEU:HD13	1:A:466:ILE:CG2	2.16	0.69
1:A:557:VAL:O	1:A:835:LYS:NZ	2.25	0.69
1:A:538:THR:HG21	1:A:1028:VAL:HG21	1.75	0.68
1:A:728:LYS:HE3	1:A:730:ASP:OD2	1.92	0.68
1:A:843:LEU:O	1:A:846:GLN:HG2	1.94	0.68
1:A:882:ILE:O	1:A:886:LEU:CB	2.40	0.68
1:A:990:VAL:CG2	1:A:1004:GLY:C	2.67	0.68
1:A:169:THR:HG22	1:A:170:SER:H	1.57	0.68
1:A:313:MET:CE	1:A:321:LEU:HG	2.24	0.68
1:A:69:MET:HE1	1:A:92:LEU:HD21	1.75	0.68
1:A:673:GLU:OE2	1:A:862:MET:HE1	1.94	0.68
1:A:889:ALA:CA	1:A:894:SER:CB	2.71	0.68
1:A:564:LEU:O	1:A:565:PRO:O	2.11	0.68
1:A:986:VAL:HG13	1:A:1004:GLY:HA2	1.74	0.68
1:A:396:PHE:O	1:A:400:LEU:N	2.24	0.68
1:A:451:ALA:CB	1:A:883:VAL:CG1	2.70	0.68
1:A:166:ILE:CD1	1:A:176:GLN:NE2	2.56	0.68
1:A:454:VAL:HB	1:A:455:PRO:HD3	1.75	0.68
1:A:169:THR:HG22	1:A:170:SER:N	2.06	0.67
1:A:631:LEU:HD13	1:A:637:ARG:HH12	1.57	0.67
1:A:695:LEU:HD11	1:A:825:MET:HG3	1.75	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:724:THR:HG22	1:A:725:PRO:CD	2.22	0.67
1:A:375:VAL:HG12	1:A:480:LEU:CB	2.24	0.67
1:A:445:ILE:HG12	1:A:943:ILE:CD1	2.25	0.67
1:A:531:VAL:HA	1:A:534:ILE:CG2	2.25	0.67
1:A:990:VAL:CG2	1:A:1005:THR:N	2.47	0.67
1:A:846:GLN:O	1:A:849:SER:HB2	1.95	0.67
1:A:75:LEU:HD12	1:A:92:LEU:HD23	1.75	0.67
1:A:143:ILE:HG13	1:A:286:ALA:HB2	1.77	0.67
1:A:314:GLU:N	1:A:315:PRO:HD2	2.10	0.67
1:A:937:LEU:HD13	1:A:1011:MET:SD	2.34	0.67
1:A:569:GLN:NE2	1:A:670:ALA:HA	2.10	0.67
1:A:703:LEU:HD22	1:A:718:PRO:HD3	1.74	0.67
1:A:80:SER:HB3	1:A:818:ARG:O	1.95	0.67
1:A:176:GLN:O	1:A:177:LEU:CB	2.39	0.67
1:A:335:ILE:HG22	1:A:335:ILE:O	1.94	0.67
1:A:572:PHE:HE1	1:A:665:ALA:HB1	1.57	0.67
1:A:662:MET:HG2	1:A:664:PHE:CZ	2.29	0.67
1:A:162:MET:O	1:A:165:ALA:N	2.29	0.66
1:A:278:ILE:CG1	1:A:613:ASN:HB3	2.25	0.66
1:A:59:ASP:HA	1:A:63:GLN:HG3	1.75	0.66
1:A:166:ILE:CD1	1:A:176:GLN:HE22	2.07	0.66
1:A:983:ILE:HG12	1:A:1011:MET:HB3	1.77	0.66
1:A:36:PRO:CG	1:A:391:ASN:HD21	2.04	0.66
1:A:564:LEU:HD12	1:A:925:VAL:HB	1.77	0.66
1:A:682:PHE:CZ	1:A:857:TYR:HB2	2.30	0.66
1:A:143:ILE:HG13	1:A:286:ALA:CB	2.25	0.66
1:A:531:VAL:HA	1:A:534:ILE:HG23	1.77	0.66
1:A:831:ALA:C	1:A:833:PRO:HD3	2.20	0.66
1:A:967:ALA:O	1:A:969:ARG:N	2.29	0.66
1:A:986:VAL:C	1:A:988:PRO:HD2	2.21	0.66
1:A:993:THR:HA	1:A:997:SER:OG	1.95	0.66
1:A:72:ILE:CD1	1:A:110:LYS:HG3	2.25	0.66
1:A:225:VAL:O	1:A:226:LYS:C	2.38	0.66
1:A:572:PHE:CE2	1:A:629:VAL:HG11	2.30	0.66
1:A:281:PHE:HZ	1:A:324:VAL:HG11	1.61	0.66
1:A:313:MET:O	1:A:313:MET:HG2	1.96	0.66
1:A:149:MET:SD	1:A:317:PHE:CE2	2.89	0.66
1:A:306:ILE:HD12	1:A:306:ILE:H	1.60	0.66
1:A:208:LYS:N	1:A:760:ASN:HD21	1.93	0.66
1:A:372:VAL:HB	1:A:373:PRO:HD3	1.78	0.66
1:A:384:ALA:O	3:A:1110:AIC:H161	1.96	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:145:THR:HB	1:A:320:GLY:CA	2.27	0.65
1:A:148:THR:O	1:A:148:THR:CG2	2.44	0.65
1:A:391:ASN:O	1:A:395:MET:HG2	1.97	0.65
1:A:743:ILE:HG12	1:A:743:ILE:O	1.95	0.65
1:A:758:TYR:CE1	1:A:770:LYS:CG	2.77	0.65
1:A:929:VAL:O	1:A:932:LEU:HB2	1.96	0.65
1:A:980:LEU:O	1:A:984:LEU:HB2	1.96	0.65
1:A:327:TYR:CE1	1:A:571:VAL:HG11	2.32	0.65
1:A:990:VAL:HG13	1:A:1005:THR:HG1	1.60	0.65
1:A:166:ILE:CD1	1:A:172:VAL:HG11	2.26	0.65
1:A:395:MET:O	1:A:398:MET:HB2	1.96	0.65
1:A:538:THR:HG21	1:A:1028:VAL:CG2	2.26	0.65
1:A:990:VAL:HG22	1:A:1005:THR:CA	2.26	0.65
1:A:555:LEU:HD11	1:A:914:LEU:CD2	2.26	0.65
1:A:574:THR:CG2	1:A:627:ALA:HB3	2.26	0.65
1:A:860:THR:CG2	1:A:861:GLY:N	2.58	0.65
1:A:58:GLN:CD	1:A:818:ARG:HD3	2.21	0.65
1:A:880:SER:C	1:A:882:ILE:H	2.04	0.65
1:A:889:ALA:O	1:A:894:SER:HB3	1.97	0.65
1:A:443:VAL:HG12	1:A:444:GLY:N	2.12	0.65
1:A:486:LEU:O	1:A:490:PRO:HG2	1.97	0.65
1:A:184:MET:HG2	1:A:246:PHE:CD1	2.32	0.65
1:A:310:LEU:HD12	1:A:323:ILE:CD1	2.26	0.65
1:A:444:GLY:O	1:A:448:VAL:HG23	1.97	0.65
1:A:144:ASN:HB3	1:A:149:MET:CB	2.26	0.65
1:A:407:ASP:OD2	1:A:940:LYS:HE2	1.97	0.65
1:A:415:ASN:HB3	1:A:438:ILE:HD11	1.79	0.65
1:A:145:THR:HB	1:A:320:GLY:HA3	1.78	0.64
1:A:340:VAL:HA	1:A:399:VAL:CG2	2.27	0.64
1:A:468:ARG:C	1:A:470:PHE:N	2.44	0.64
1:A:568:ASP:OD1	1:A:644:VAL:CG2	2.45	0.64
1:A:785:ASP:HA	1:A:788:ASP:OD2	1.97	0.64
1:A:393:LEU:CD1	1:A:466:ILE:HG23	2.18	0.64
1:A:457:ALA:HB2	1:A:471:SER:CB	2.27	0.64
1:A:83:ASP:HB2	1:A:87:THR:HB	1.77	0.64
1:A:150:THR:CG2	1:A:152:GLU:OE1	2.45	0.64
1:A:150:THR:HG22	1:A:152:GLU:OE1	1.98	0.64
1:A:214:VAL:HG13	1:A:236:ALA:HB3	1.77	0.64
1:A:327:TYR:CD1	1:A:571:VAL:HG11	2.33	0.64
1:A:416:VAL:HA	1:A:434:SER:CB	2.27	0.64
1:A:568:ASP:OD1	1:A:644:VAL:HG21	1.97	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:688:ALA:H	1:A:854:GLY:HA2	1.63	0.64
1:A:351:VAL:HG21	1:A:406:VAL:CG1	2.27	0.64
1:A:754:TRP:CH2	1:A:786:ILE:HD12	2.33	0.64
1:A:143:ILE:HD12	1:A:143:ILE:N	2.12	0.64
1:A:298:ASN:OD1	1:A:301:ASP:HB2	1.97	0.64
1:A:450:SER:O	1:A:455:PRO:HD3	1.98	0.64
1:A:313:MET:HE3	1:A:321:LEU:CG	2.27	0.64
1:A:177:LEU:C	1:A:178:PHE:CD1	2.76	0.64
1:A:775:SER:HB2	1:A:789:TRP:CZ2	2.33	0.63
1:A:292:LYS:O	1:A:293:LEU:HG	1.99	0.63
1:A:222:THR:OG1	1:A:223:PRO:CD	2.46	0.63
1:A:451:ALA:HB1	1:A:883:VAL:CG1	2.28	0.63
1:A:815:ARG:HH11	1:A:815:ARG:HB3	1.62	0.63
1:A:176:GLN:HA	1:A:290:GLY:O	1.98	0.63
1:A:402:ILE:O	1:A:406:VAL:HG23	1.99	0.63
1:A:386:PHE:C	3:A:1110:AIC:HN22	2.06	0.63
1:A:496:MET:O	1:A:497:LEU:CD2	2.47	0.63
1:A:617:PHE:CE1	1:A:626:ILE:HD13	2.33	0.63
1:A:841:MET:HB3	1:A:859:TRP:CH2	2.34	0.63
1:A:997:SER:HA	1:A:1000:GLN:CG	2.27	0.63
1:A:184:MET:HG2	1:A:246:PHE:CE1	2.34	0.63
1:A:28:LEU:O	1:A:30:LEU:N	2.32	0.63
1:A:703:LEU:CD1	1:A:717:ARG:HA	2.28	0.63
1:A:742:SER:O	1:A:744:ASN:N	2.32	0.63
1:A:173:GLY:HA3	1:A:293:LEU:C	2.23	0.62
1:A:344:LEU:C	1:A:344:LEU:HD23	2.24	0.62
1:A:418:ARG:CG	1:A:422:GLU:OE2	2.46	0.62
1:A:449:LEU:HB3	1:A:453:PHE:CE1	2.30	0.62
1:A:578:LEU:HB3	1:A:579:PRO:CD	2.28	0.62
1:A:312:LYS:O	1:A:316:PHE:CD1	2.52	0.62
1:A:313:MET:CE	1:A:321:LEU:HD23	2.16	0.62
1:A:489:THR:HB	1:A:490:PRO:HD3	1.80	0.62
1:A:115:MET:SD	1:A:127:VAL:CG2	2.87	0.62
1:A:166:ILE:CG1	1:A:167:SER:N	2.61	0.62
1:A:398:MET:O	1:A:402:ILE:HG13	1.98	0.62
1:A:531:VAL:O	1:A:534:ILE:HG23	2.00	0.62
1:A:426:PRO:CG	1:A:429:GLU:HB2	2.20	0.62
1:A:441:ALA:O	1:A:445:ILE:HG13	1.99	0.62
1:A:512:PHE:HD2	1:A:513:PHE:H	1.44	0.62
1:A:889:ALA:CA	1:A:894:SER:HB3	2.30	0.62
1:A:1019:ILE:HG13	1:A:1020:PHE:H	1.63	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:12:ALA:O	1:A:13:TRP:C	2.41	0.62
1:A:58:GLN:NE2	1:A:818:ARG:HD3	2.14	0.62
1:A:112:GLN:C	1:A:114:ALA:H	2.06	0.62
1:A:555:LEU:HD12	1:A:910:ILE:CD1	2.30	0.62
1:A:166:ILE:HD12	1:A:172:VAL:CG1	2.28	0.62
1:A:222:THR:HB	1:A:223:PRO:CD	2.28	0.62
1:A:228:GLN:NE2	1:A:230:LEU:HG	2.13	0.62
1:A:312:LYS:O	1:A:316:PHE:CE1	2.53	0.62
1:A:379:THR:N	1:A:480:LEU:CD1	2.62	0.62
1:A:614:GLY:O	1:A:615:PHE:HB2	2.00	0.62
1:A:567:GLU:HB3	1:A:670:ALA:CB	2.30	0.62
1:A:632:LYS:HE2	1:A:636:ASP:CB	2.30	0.62
1:A:827:ILE:O	1:A:828:LEU:HD23	2.00	0.62
1:A:534:ILE:HG13	1:A:541:TYR:CE1	2.35	0.62
1:A:576:VAL:HG21	1:A:591:LEU:CD2	2.30	0.62
1:A:775:SER:HB2	1:A:789:TRP:HZ2	1.64	0.62
2:B:51:LYS:C	2:B:53:MET:H	2.06	0.62
1:A:1:MET:N	1:A:2:PRO:CD	2.63	0.62
1:A:149:MET:CB	1:A:154:ILE:HD11	2.27	0.62
1:A:582:ALA:HA	1:A:586:ARG:HH11	1.62	0.62
1:A:967:ALA:C	1:A:969:ARG:N	2.57	0.62
1:A:468:ARG:C	1:A:470:PHE:H	2.07	0.61
1:A:807:SER:O	1:A:808:ARG:CB	2.48	0.61
1:A:415:ASN:HD21	1:A:437:GLN:NE2	1.97	0.61
1:A:467:TYR:O	1:A:471:SER:N	2.29	0.61
1:A:993:THR:O	1:A:993:THR:CG2	2.43	0.61
1:A:118:LEU:HB3	1:A:119:PRO:HD2	1.82	0.61
1:A:883:VAL:HG12	1:A:883:VAL:O	1.99	0.61
2:B:33:ILE:HG22	2:B:34:PHE:N	2.14	0.61
1:A:36:PRO:HG3	1:A:391:ASN:HD22	1.62	0.61
1:A:176:GLN:HB3	1:A:290:GLY:C	2.26	0.61
1:A:574:THR:HB	1:A:665:ALA:HB2	1.82	0.61
1:A:1015:THR:O	1:A:1019:ILE:HG12	2.00	0.61
1:A:148:THR:O	1:A:149:MET:HE2	2.00	0.61
1:A:578:LEU:HD21	1:A:590:VAL:CG1	2.30	0.61
1:A:819:TYR:CE1	1:A:860:THR:OG1	2.50	0.61
1:A:155:SER:OG	1:A:179:GLY:HA3	2.00	0.61
1:A:878:ALA:O	1:A:881:LEU:HB3	2.01	0.61
1:A:150:THR:HG22	1:A:151:GLN:N	2.15	0.61
1:A:208:LYS:HA	1:A:760:ASN:ND2	2.16	0.61
1:A:1016:VAL:HG23	1:A:1017:LEU:N	2.15	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:375:VAL:HG13	1:A:480:LEU:CB	2.31	0.61
1:A:885:PHE:HA	1:A:902:MET:HE1	1.83	0.61
1:A:373:PRO:O	1:A:374:VAL:C	2.43	0.60
1:A:400:LEU:C	1:A:400:LEU:HD12	2.26	0.60
1:A:467:TYR:CE2	1:A:925:VAL:HG13	2.34	0.60
1:A:49:TYR:CD2	1:A:52:ALA:CB	2.63	0.60
1:A:341:VAL:O	1:A:342:LYS:C	2.43	0.60
1:A:410:ILE:C	1:A:412:VAL:N	2.58	0.60
1:A:482:VAL:O	1:A:486:LEU:N	2.34	0.60
1:A:568:ASP:OD2	1:A:643:LYS:HE3	2.00	0.60
1:A:593:GLU:O	1:A:596:HIS:HB3	2.01	0.60
1:A:658:ILE:HG23	1:A:658:ILE:O	2.00	0.60
1:A:57:VAL:HG13	1:A:88:VAL:CG2	2.32	0.60
1:A:218:GLN:HB3	1:A:233:SER:HA	1.83	0.60
1:A:396:PHE:O	1:A:397:GLY:C	2.42	0.60
1:A:146:ASP:O	1:A:148:THR:N	2.32	0.60
1:A:166:ILE:CG2	1:A:176:GLN:NE2	2.56	0.60
1:A:368:PRO:O	1:A:372:VAL:HG23	2.00	0.60
1:A:416:VAL:HG22	1:A:434:SER:HB3	1.82	0.60
1:A:9:PRO:O	1:A:12:ALA:HB3	2.02	0.60
1:A:364:ALA:HB1	1:A:497:LEU:HD21	1.81	0.60
1:A:402:ILE:HG22	1:A:403:GLY:N	2.15	0.60
1:A:568:ASP:HA	1:A:667:ASN:HD21	1.67	0.60
1:A:750:LEU:HG	1:A:751:GLY:N	2.16	0.60
1:A:314:GLU:N	1:A:315:PRO:CD	2.64	0.59
1:A:538:THR:O	1:A:540:ARG:N	2.34	0.59
1:A:686:ASP:CB	1:A:823:PRO:HB2	2.31	0.59
1:A:149:MET:HE1	1:A:317:PHE:HZ	1.66	0.59
1:A:166:ILE:HD13	1:A:176:GLN:NE2	2.17	0.59
1:A:572:PHE:HE1	1:A:665:ALA:CB	2.15	0.59
1:A:673:GLU:CD	1:A:862:MET:CE	2.75	0.59
1:A:926:TYR:HB3	1:A:1003:VAL:HG22	1.83	0.59
1:A:148:THR:O	1:A:149:MET:CE	2.50	0.59
1:A:350:LEU:HD22	1:A:984:LEU:HD23	1.85	0.59
1:A:602:GLU:HB3	1:A:606:VAL:CG2	2.31	0.59
1:A:815:ARG:NH1	1:A:815:ARG:HB2	2.17	0.59
1:A:72:ILE:HD11	1:A:110:LYS:HG3	1.85	0.59
1:A:150:THR:HB	1:A:153:ASP:OD1	2.01	0.59
1:A:190:PRO:HG2	1:A:779:TYR:CD2	2.38	0.59
1:A:382:VAL:HA	1:A:385:ALA:HB2	1.83	0.59
1:A:408:ASP:O	1:A:412:VAL:HG23	2.02	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:511:GLY:O	1:A:512:PHE:HB3	2.02	0.59
1:A:568:ASP:OD2	1:A:643:LYS:CE	2.51	0.59
1:A:893:GLU:O	1:A:893:GLU:CG	2.45	0.59
1:A:69:MET:CE	1:A:92:LEU:HD21	2.33	0.59
1:A:392:THR:O	1:A:395:MET:HB2	2.02	0.59
1:A:415:ASN:HD21	1:A:437:GLN:HE21	1.49	0.59
1:A:449:LEU:N	1:A:449:LEU:HD23	2.17	0.59
1:A:912:ALA:O	1:A:915:ALA:HB3	2.02	0.59
1:A:944:LEU:HD13	1:A:971:ARG:NH2	2.17	0.59
1:A:973:ARG:HB3	1:A:974:PRO:HD3	1.84	0.59
1:A:15:ILE:HG12	1:A:15:ILE:O	2.02	0.59
1:A:76:MET:HE2	1:A:77:TYR:CE2	2.37	0.59
1:A:203:VAL:O	1:A:207:ILE:HG12	2.03	0.59
1:A:213:GLN:HG3	1:A:239:ARG:HG2	1.85	0.59
1:A:161:ASN:OD1	1:A:162:MET:N	2.36	0.59
1:A:417:GLU:HA	1:A:420:MET:CG	2.32	0.59
1:A:631:LEU:CD1	1:A:644:VAL:HG22	2.33	0.59
1:A:949:ALA:HB1	1:A:1026:PHE:CE2	2.38	0.59
1:A:138:MET:O	1:A:138:MET:HG3	2.01	0.58
1:A:177:LEU:N	1:A:290:GLY:H	2.00	0.58
2:B:49:HIS:C	2:B:51:LYS:N	2.54	0.58
1:A:450:SER:N	1:A:478:MET:HE1	2.18	0.58
1:A:525:HIS:HE1	1:A:529:ASP:OD2	1.85	0.58
1:A:605:ASN:HB3	1:A:637:ARG:HD3	1.83	0.58
1:A:281:PHE:CZ	1:A:324:VAL:HG11	2.37	0.58
1:A:412:VAL:HG13	1:A:435:MET:CE	2.33	0.58
1:A:416:VAL:HG13	1:A:431:THR:HA	1.85	0.58
1:A:479:ALA:C	1:A:481:SER:H	2.10	0.58
1:A:166:ILE:HB	1:A:176:GLN:HE22	1.68	0.58
1:A:367:ILE:HG21	1:A:493:CYS:SG	2.43	0.58
1:A:19:ILE:O	1:A:22:ALA:HB3	2.03	0.58
1:A:375:VAL:O	1:A:480:LEU:HD12	2.03	0.58
1:A:567:GLU:HB3	1:A:670:ALA:HB1	1.84	0.58
1:A:688:ALA:CB	1:A:854:GLY:CA	2.82	0.58
1:A:746:ILE:HD13	1:A:804:PHE:CZ	2.39	0.58
1:A:860:THR:CG2	1:A:861:GLY:H	2.17	0.58
1:A:998:GLY:O	1:A:1001:ASN:HB2	2.04	0.58
1:A:142:VAL:HG11	1:A:321:LEU:HD11	1.86	0.58
1:A:310:LEU:HD13	1:A:325:TYR:OH	2.03	0.58
1:A:173:GLY:CA	1:A:293:LEU:O	2.52	0.58
1:A:931:LEU:H	1:A:931:LEU:HD23	1.69	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:724:THR:OG1	1:A:814:PRO:CG	2.52	0.58
1:A:775:SER:O	1:A:780:ARG:NE	2.36	0.58
1:A:775:SER:CB	1:A:789:TRP:HZ2	2.17	0.58
1:A:156:ASP:OD2	1:A:182:TYR:CG	2.56	0.58
1:A:400:LEU:HD11	1:A:933:THR:HG21	1.86	0.58
1:A:705:GLU:O	1:A:708:LYS:HG2	2.04	0.58
1:A:728:LYS:HG2	1:A:808:ARG:HE	1.68	0.58
1:A:4:PHE:HD2	1:A:8:ARG:NH2	2.01	0.58
1:A:375:VAL:O	1:A:480:LEU:CD1	2.51	0.58
1:A:344:LEU:HD12	1:A:376:LEU:CD2	2.33	0.57
1:A:414:GLU:O	1:A:418:ARG:N	2.34	0.57
1:A:378:GLY:O	1:A:382:VAL:HG23	2.05	0.57
1:A:815:ARG:CB	1:A:815:ARG:NH1	2.65	0.57
1:A:410:ILE:C	1:A:412:VAL:H	2.11	0.57
1:A:703:LEU:CD2	1:A:718:PRO:HD3	2.33	0.57
1:A:841:MET:SD	1:A:859:TRP:CZ3	2.98	0.57
1:A:875:SER:O	1:A:879:ILE:HG13	2.04	0.57
1:A:102:ILE:O	1:A:106:GLN:HB3	2.05	0.57
1:A:485:ALA:HA	1:A:489:THR:OG1	2.04	0.57
1:A:567:GLU:OE2	1:A:996:GLY:C	2.47	0.57
1:A:441:ALA:HB2	1:A:947:GLU:OE2	2.04	0.57
1:A:688:ALA:HB3	1:A:854:GLY:HA3	1.86	0.57
1:A:704:ALA:O	1:A:707:ALA:HB3	2.05	0.57
1:A:23:GLY:C	1:A:25:LEU:N	2.60	0.57
1:A:387:GLY:C	1:A:388:PHE:HD1	2.12	0.57
1:A:110:LYS:HA	1:A:113:LEU:HD12	1.86	0.57
1:A:740:GLY:O	1:A:793:ALA:HB1	2.04	0.57
1:A:817:GLU:HG3	1:A:824:SER:O	2.05	0.57
1:A:177:LEU:H	1:A:290:GLY:H	1.50	0.57
1:A:313:MET:CE	1:A:321:LEU:CG	2.83	0.57
1:A:343:THR:HG22	1:A:344:LEU:N	2.19	0.57
1:A:1008:MET:CG	1:A:1009:GLY:H	2.18	0.57
1:A:149:MET:HE2	1:A:149:MET:HA	1.86	0.57
1:A:817:GLU:C	1:A:818:ARG:HG2	2.29	0.57
1:A:564:LEU:O	1:A:565:PRO:C	2.40	0.56
1:A:662:MET:SD	1:A:664:PHE:CZ	2.98	0.56
1:A:971:ARG:O	1:A:974:PRO:HD2	2.05	0.56
1:A:35:TYR:HE2	1:A:134:SER:CB	2.18	0.56
1:A:58:GLN:O	1:A:63:GLN:HG3	2.06	0.56
1:A:344:LEU:HA	1:A:402:ILE:HD13	1.87	0.56
1:A:359:LEU:C	1:A:361:ASN:H	2.12	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:389:SER:H	1:A:469:GLN:HE22	1.52	0.56
1:A:784:ASP:O	1:A:786:ILE:N	2.38	0.56
1:A:949:ALA:HB1	1:A:1026:PHE:HE2	1.70	0.56
1:A:1008:MET:SD	1:A:1009:GLY:N	2.78	0.56
1:A:310:LEU:CD1	1:A:323:ILE:CD1	2.84	0.56
1:A:403:GLY:O	1:A:406:VAL:HG23	2.05	0.56
1:A:448:VAL:O	1:A:451:ALA:HB3	2.06	0.56
1:A:451:ALA:HB3	1:A:884:VAL:HG22	1.87	0.56
1:A:733:GLN:O	1:A:736:ALA:HB3	2.05	0.56
1:A:343:THR:CG2	1:A:399:VAL:HG13	2.27	0.56
1:A:559:LEU:HD11	1:A:921:LEU:O	2.05	0.56
1:A:744:ASN:O	1:A:746:ILE:N	2.39	0.56
1:A:876:LEU:HD23	1:A:879:ILE:HD12	1.88	0.56
1:A:186:ILE:O	1:A:186:ILE:HG22	2.04	0.56
1:A:744:ASN:O	1:A:745:ASP:C	2.49	0.56
1:A:942:ALA:O	1:A:946:VAL:HG23	2.06	0.56
1:A:995:ALA:O	1:A:996:GLY:C	2.48	0.56
1:A:337:ILE:O	1:A:341:VAL:HG23	2.05	0.56
1:A:564:LEU:HG	1:A:926:TYR:CE1	2.41	0.56
1:A:643:LYS:NZ	1:A:993:THR:HG22	2.20	0.56
1:A:846:GLN:HA	1:A:849:SER:OG	2.05	0.56
1:A:971:ARG:C	1:A:974:PRO:HD2	2.31	0.56
1:A:188:MET:HA	1:A:266:ALA:CB	2.36	0.56
1:A:226:LYS:HE2	1:A:226:LYS:HA	1.87	0.56
1:A:27:ILE:O	1:A:30:LEU:HB2	2.05	0.56
1:A:64:VAL:HG11	1:A:117:LEU:HB2	1.87	0.56
1:A:145:THR:H	1:A:320:GLY:HA3	1.71	0.56
1:A:538:THR:HG23	1:A:1024:VAL:HG13	1.88	0.56
1:A:662:MET:CE	1:A:664:PHE:CZ	2.69	0.56
1:A:99:ASP:OD1	1:A:103:ALA:N	2.39	0.56
1:A:351:VAL:HG12	1:A:352:PHE:N	2.21	0.56
1:A:662:MET:SD	1:A:664:PHE:HZ	2.29	0.56
1:A:688:ALA:HB3	1:A:854:GLY:CA	2.36	0.56
1:A:35:TYR:CE2	1:A:134:SER:CB	2.89	0.55
1:A:313:MET:HA	1:A:316:PHE:CD1	2.41	0.55
1:A:423:GLU:OE1	1:A:425:LEU:HD12	2.06	0.55
1:A:463:THR:HG21	1:A:869:SER:HB3	1.88	0.55
1:A:879:ILE:O	1:A:882:ILE:N	2.39	0.55
1:A:162:MET:O	1:A:165:ALA:HB3	2.06	0.55
1:A:310:LEU:HD11	1:A:323:ILE:HB	1.87	0.55
1:A:324:VAL:C	1:A:326:PRO:HD3	2.30	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:344:LEU:HD23	1:A:345:VAL:N	2.21	0.55
1:A:418:ARG:HG3	1:A:422:GLU:CD	2.31	0.55
1:A:618:ALA:HB1	1:A:719:ASN:ND2	2.21	0.55
1:A:656:SER:C	1:A:658:ILE:H	2.14	0.55
1:A:1008:MET:HG3	1:A:1009:GLY:H	1.71	0.55
1:A:28:LEU:C	1:A:30:LEU:H	2.14	0.55
1:A:30:LEU:HB3	1:A:390:ILE:HG12	1.87	0.55
1:A:251:LEU:HD23	1:A:262:LEU:N	2.21	0.55
1:A:357:LEU:C	1:A:358:PHE:HD1	2.15	0.55
1:A:525:HIS:CE1	1:A:529:ASP:OD2	2.58	0.55
1:A:527:TYR:CE2	1:A:968:VAL:CG1	2.88	0.55
1:A:45:ILE:HD11	1:A:92:LEU:HD11	1.87	0.55
1:A:149:MET:HE1	1:A:317:PHE:CZ	2.42	0.55
1:A:394:THR:HG23	1:A:473:THR:OG1	2.07	0.55
1:A:578:LEU:HD13	1:A:661:ALA:HB2	1.88	0.55
1:A:583:THR:HG22	1:A:584:GLN:N	2.20	0.55
1:A:4:PHE:CD2	1:A:8:ARG:NH2	2.75	0.55
1:A:188:MET:O	1:A:776:GLU:HG2	2.06	0.55
1:A:381:ALA:C	1:A:383:LEU:H	2.14	0.55
1:A:744:ASN:C	1:A:746:ILE:N	2.62	0.55
1:A:333:VAL:O	1:A:337:ILE:HG13	2.06	0.55
1:A:339:GLU:HG2	1:A:1000:GLN:NE2	2.22	0.55
1:A:1007:VAL:O	1:A:1011:MET:N	2.34	0.55
1:A:84:SER:C	1:A:85:THR:HG23	2.32	0.55
1:A:109:ASN:O	1:A:113:LEU:HG	2.07	0.55
1:A:187:TRP:CZ3	1:A:774:MET:HE2	2.34	0.55
1:A:397:GLY:O	1:A:401:ALA:N	2.40	0.55
1:A:967:ALA:C	1:A:969:ARG:H	2.13	0.55
1:A:1022:VAL:HB	1:A:1023:PRO:HD3	1.89	0.55
1:A:352:PHE:HE1	1:A:365:THR:HG21	1.71	0.55
1:A:188:MET:O	1:A:189:ASN:CB	2.54	0.55
1:A:310:LEU:HD11	1:A:323:ILE:HD12	1.88	0.55
1:A:387:GLY:C	1:A:388:PHE:CD1	2.85	0.55
1:A:449:LEU:C	1:A:451:ALA:N	2.63	0.55
1:A:45:ILE:HG13	1:A:90:ILE:O	2.07	0.54
1:A:449:LEU:CB	1:A:478:MET:SD	2.90	0.54
1:A:470:PHE:O	1:A:473:THR:N	2.40	0.54
1:A:534:ILE:HG13	1:A:541:TYR:CD1	2.43	0.54
1:A:108:GLN:O	1:A:111:LEU:HB3	2.07	0.54
1:A:341:VAL:O	1:A:345:VAL:HG23	2.08	0.54
1:A:407:ASP:O	1:A:408:ASP:C	2.50	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:84:SER:O	1:A:85:THR:CG2	2.55	0.54
1:A:655:PHE:O	1:A:656:SER:C	2.50	0.54
1:A:307:ARG:HG2	1:A:325:TYR:CE2	2.41	0.54
1:A:479:ALA:C	1:A:481:SER:N	2.64	0.54
1:A:32:VAL:HG22	1:A:390:ILE:CD1	2.32	0.54
1:A:669:PRO:O	1:A:670:ALA:HB3	2.08	0.54
1:A:2:PRO:HG3	1:A:486:LEU:CD1	2.37	0.54
1:A:411:VAL:HG13	1:A:971:ARG:NH2	2.23	0.54
1:A:449:LEU:C	1:A:451:ALA:H	2.15	0.54
1:A:564:LEU:HG	1:A:926:TYR:HE1	1.71	0.54
1:A:608:SER:OG	1:A:609:VAL:N	2.39	0.54
1:A:979:SER:OG	1:A:1011:MET:HE3	2.08	0.54
1:A:66:GLU:HG3	1:A:90:ILE:HD11	1.84	0.54
1:A:211:ASN:HB2	1:A:240:LEU:CD1	2.38	0.54
1:A:383:LEU:HD21	1:A:394:THR:HG21	1.90	0.54
1:A:578:LEU:CB	1:A:579:PRO:HD2	2.34	0.54
1:A:859:TRP:O	1:A:864:TYR:HB2	2.08	0.54
1:A:169:THR:OG1	1:A:306:ILE:HG13	2.06	0.54
1:A:249:ILE:CG2	1:A:250:LEU:N	2.70	0.54
1:A:673:GLU:CD	1:A:862:MET:HE3	2.33	0.54
1:A:883:VAL:O	1:A:887:CYS:HB2	2.08	0.54
1:A:944:LEU:HD13	1:A:971:ARG:HH21	1.73	0.54
1:A:115:MET:HG3	1:A:118:LEU:HD12	1.90	0.54
1:A:527:TYR:CE1	1:A:1019:ILE:HD12	2.43	0.54
1:A:352:PHE:CE1	1:A:365:THR:HG21	2.42	0.54
1:A:406:VAL:O	1:A:407:ASP:C	2.51	0.54
1:A:417:GLU:O	1:A:420:MET:HB2	2.07	0.54
1:A:698:ALA:C	1:A:700:ASN:N	2.60	0.54
1:A:795:ASP:HB3	1:A:797:GLN:HG2	1.89	0.54
1:A:911:GLY:HA3	1:A:1013:THR:HB	1.90	0.54
1:A:23:GLY:O	1:A:25:LEU:N	2.41	0.53
1:A:73:ASP:CB	1:A:106:GLN:HE22	2.17	0.53
1:A:569:GLN:C	1:A:571:VAL:H	2.14	0.53
1:A:759:VAL:CG2	1:A:773:VAL:HG23	2.39	0.53
1:A:907:LEU:HD23	1:A:907:LEU:N	2.22	0.53
1:A:1012:VAL:C	1:A:1014:ALA:H	2.16	0.53
1:A:974:PRO:O	1:A:977:MET:N	2.41	0.53
2:B:51:LYS:C	2:B:53:MET:N	2.66	0.53
1:A:156:ASP:OD2	1:A:182:TYR:CD2	2.61	0.53
1:A:333:VAL:HG12	1:A:337:ILE:HD11	1.91	0.53
1:A:719:ASN:HB2	1:A:828:LEU:HD21	1.90	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:880:SER:C	1:A:882:ILE:N	2.67	0.53
1:A:35:TYR:HH	1:A:134:SER:HB3	1.68	0.53
1:A:366:LEU:O	1:A:367:ILE:C	2.52	0.53
1:A:412:VAL:O	1:A:416:VAL:HG23	2.09	0.53
1:A:819:TYR:CD2	1:A:820:ASN:ND2	2.76	0.53
1:A:845:GLU:O	1:A:849:SER:OG	2.25	0.53
1:A:23:GLY:HA2	1:A:26:ALA:HB3	1.91	0.53
1:A:133:SER:O	1:A:134:SER:C	2.50	0.53
1:A:343:THR:HG21	1:A:399:VAL:CG1	2.27	0.53
1:A:300:LEU:HD13	1:A:333:VAL:CB	2.35	0.53
1:A:412:VAL:O	1:A:416:VAL:CG2	2.56	0.53
1:A:139:VAL:HG23	1:A:327:TYR:HD2	1.73	0.53
1:A:682:PHE:HB3	1:A:827:ILE:HB	1.89	0.53
1:A:868:LEU:HG	1:A:869:SER:N	2.22	0.53
1:A:138:MET:CE	1:A:306:ILE:HD13	2.38	0.53
1:A:175:VAL:O	1:A:292:LYS:HB2	2.09	0.53
1:A:281:PHE:CE1	1:A:326:PRO:HG3	2.44	0.53
1:A:449:LEU:O	1:A:452:VAL:N	2.39	0.53
1:A:463:THR:O	1:A:466:ILE:HG13	2.09	0.53
1:A:620:ARG:HG2	1:A:621:GLY:H	1.74	0.53
1:A:643:LYS:HZ2	1:A:993:THR:HG22	1.74	0.53
1:A:698:ALA:C	1:A:700:ASN:H	2.16	0.53
1:A:742:SER:C	1:A:744:ASN:N	2.55	0.53
1:A:157:TYR:CE2	1:A:161:ASN:ND2	2.77	0.53
1:A:394:THR:HG22	1:A:394:THR:O	2.07	0.53
1:A:290:GLY:O	1:A:292:LYS:N	2.42	0.53
1:A:315:PRO:HG2	1:A:316:PHE:CD1	2.43	0.53
1:A:355:MET:SD	1:A:410:ILE:CG2	2.97	0.53
1:A:688:ALA:N	1:A:854:GLY:HA2	2.24	0.53
1:A:913:LEU:O	1:A:914:LEU:C	2.50	0.53
1:A:932:LEU:O	1:A:933:THR:C	2.51	0.53
1:A:317:PHE:CD2	1:A:318:PRO:HD2	2.44	0.52
1:A:513:PHE:CD2	1:A:513:PHE:O	2.62	0.52
1:A:946:VAL:HG13	1:A:1026:PHE:CG	2.44	0.52
1:A:2:PRO:CG	1:A:486:LEU:HD11	2.39	0.52
1:A:114:ALA:C	1:A:116:PRO:CD	2.82	0.52
1:A:141:GLY:HA2	1:A:288:GLY:HA2	1.91	0.52
1:A:200:PRO:O	1:A:203:VAL:HB	2.08	0.52
1:A:339:GLU:O	1:A:343:THR:HB	2.10	0.52
1:A:367:ILE:HB	1:A:368:PRO:CD	2.39	0.52
1:A:575:MET:O	1:A:663:VAL:HG13	2.10	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:927:PHE:C	1:A:929:VAL:N	2.63	0.52
2:B:49:HIS:O	2:B:51:LYS:N	2.42	0.52
1:A:162:MET:HA	1:A:165:ALA:CB	2.37	0.52
1:A:889:ALA:C	1:A:894:SER:HB3	2.35	0.52
1:A:931:LEU:O	1:A:935:ILE:HG13	2.09	0.52
1:A:181:GLN:HG2	1:A:769:LYS:HE3	1.92	0.52
1:A:313:MET:HA	1:A:316:PHE:HD1	1.73	0.52
1:A:360:GLN:NE2	1:A:517:ASN:ND2	2.55	0.52
1:A:414:GLU:OE2	1:A:415:ASN:N	2.42	0.52
1:A:904:VAL:CG2	1:A:1022:VAL:HG22	2.40	0.52
1:A:173:GLY:N	1:A:293:LEU:O	2.42	0.52
1:A:542:LEU:O	1:A:545:TYR:HB3	2.10	0.52
1:A:71:GLY:C	1:A:72:ILE:HD13	2.35	0.52
1:A:378:GLY:O	1:A:381:ALA:HB3	2.08	0.52
1:A:527:TYR:HE2	1:A:968:VAL:CG1	2.15	0.52
1:A:688:ALA:CB	1:A:854:GLY:HA2	2.39	0.52
1:A:741:VAL:CG1	1:A:793:ALA:HB2	2.39	0.52
1:A:188:MET:HA	1:A:266:ALA:HB2	1.91	0.52
1:A:401:ALA:O	1:A:402:ILE:C	2.53	0.52
1:A:705:GLU:C	1:A:707:ALA:N	2.67	0.52
1:A:818:ARG:HA	1:A:824:SER:H	1.73	0.52
1:A:1020:PHE:O	1:A:1024:VAL:HG23	2.10	0.52
1:A:28:LEU:C	1:A:30:LEU:N	2.67	0.52
1:A:248:LYS:HA	1:A:261:LEU:HD13	1.92	0.52
1:A:335:ILE:HD12	1:A:634:TRP:HZ3	1.75	0.52
1:A:402:ILE:O	1:A:405:LEU:HB2	2.09	0.52
1:A:983:ILE:CG1	1:A:1011:MET:HB3	2.39	0.52
1:A:136:PHE:CB	1:A:139:VAL:HG22	2.40	0.52
1:A:187:TRP:HB3	1:A:776:GLU:HB3	1.92	0.52
1:A:124:GLN:NE2	1:A:758:TYR:HD2	2.07	0.52
1:A:602:GLU:HB3	1:A:606:VAL:HG21	1.90	0.52
1:A:1014:ALA:O	1:A:1018:ALA:HB3	2.10	0.52
1:A:356:TYR:O	1:A:360:GLN:HG2	2.09	0.51
1:A:786:ILE:HG22	1:A:787:GLY:N	2.25	0.51
1:A:842:GLU:O	1:A:843:LEU:C	2.53	0.51
1:A:102:ILE:O	1:A:106:GLN:CB	2.59	0.51
1:A:62:THR:HG22	1:A:66:GLU:OE1	2.10	0.51
1:A:143:ILE:O	1:A:321:LEU:HA	2.10	0.51
1:A:172:VAL:HA	1:A:294:ALA:CB	2.40	0.51
1:A:483:LEU:O	1:A:486:LEU:N	2.41	0.51
1:A:484:VAL:O	1:A:488:LEU:HB3	2.10	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:214:VAL:HG11	1:A:236:ALA:HB3	1.91	0.51
1:A:253:VAL:HG13	1:A:258:SER:O	2.10	0.51
1:A:521:GLU:O	1:A:524:THR:HB	2.11	0.51
1:A:683:GLU:CG	1:A:860:THR:OG1	2.49	0.51
1:A:705:GLU:O	1:A:706:ALA:C	2.52	0.51
2:B:46:THR:C	2:B:48:GLU:H	2.19	0.51
1:A:277:ILE:O	1:A:277:ILE:HG13	2.10	0.51
1:A:524:THR:HG22	1:A:969:ARG:HE	1.76	0.51
1:A:136:PHE:HB3	1:A:139:VAL:HG22	1.91	0.51
1:A:144:ASN:CB	1:A:149:MET:HB2	2.39	0.51
1:A:230:LEU:C	1:A:230:LEU:HD12	2.36	0.51
1:A:344:LEU:HB2	1:A:402:ILE:HD11	1.92	0.51
1:A:669:PRO:HB2	1:A:671:ILE:O	2.11	0.51
1:A:673:GLU:CD	1:A:862:MET:HE1	2.34	0.51
1:A:842:GLU:O	1:A:846:GLN:HG2	2.11	0.51
1:A:355:MET:HE1	1:A:410:ILE:HG21	1.93	0.51
1:A:609:VAL:HG12	1:A:609:VAL:O	2.10	0.51
1:A:745:ASP:O	1:A:749:THR:HG22	2.11	0.51
1:A:36:PRO:CD	1:A:393:LEU:CD1	2.86	0.51
1:A:182:TYR:HB2	1:A:769:LYS:HE2	1.92	0.51
1:A:252:LYS:HG2	1:A:253:VAL:N	2.26	0.51
1:A:535:LEU:HD12	1:A:965:LEU:HD21	1.93	0.51
1:A:879:ILE:O	1:A:882:ILE:HB	2.10	0.51
1:A:54:ALA:O	1:A:58:GLN:HB2	2.10	0.51
1:A:216:ALA:O	1:A:234:ILE:HB	2.10	0.51
1:A:99:ASP:OD1	1:A:99:ASP:O	2.29	0.51
1:A:335:ILE:HD12	1:A:634:TRP:CZ3	2.46	0.51
1:A:365:THR:O	1:A:368:PRO:HD2	2.10	0.51
1:A:692:HIS:O	1:A:696:THR:N	2.39	0.51
1:A:22:ALA:O	1:A:26:ALA:HB2	2.11	0.50
1:A:49:TYR:CE2	1:A:52:ALA:HB2	2.38	0.50
1:A:244:GLU:O	1:A:247:GLY:N	2.44	0.50
1:A:353:LEU:O	1:A:354:VAL:C	2.52	0.50
1:A:578:LEU:CD2	1:A:590:VAL:HG11	2.35	0.50
1:A:650:ARG:O	1:A:653:ARG:HB3	2.11	0.50
1:A:328:ASP:OD1	1:A:330:THR:CB	2.59	0.50
1:A:777:ALA:O	1:A:779:TYR:N	2.43	0.50
1:A:99:ASP:O	1:A:100:ALA:C	2.54	0.50
1:A:306:ILE:HD12	1:A:306:ILE:N	2.26	0.50
1:A:339:GLU:O	1:A:340:VAL:C	2.54	0.50
1:A:396:PHE:O	1:A:399:VAL:N	2.45	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:986:VAL:N	1:A:988:PRO:HD2	2.27	0.50
1:A:997:SER:O	1:A:1001:ASN:N	2.45	0.50
1:A:5:PHE:CD2	1:A:487:ILE:HG22	2.46	0.50
1:A:705:GLU:HA	1:A:708:LYS:HD3	1.92	0.50
1:A:52:ALA:HB1	1:A:56:THR:OG1	2.10	0.50
1:A:192:GLU:O	1:A:195:LYS:HB3	2.11	0.50
1:A:360:GLN:NE2	1:A:517:ASN:HD22	2.09	0.50
1:A:440:GLY:O	1:A:441:ALA:C	2.54	0.50
1:A:201:VAL:HG21	1:A:745:ASP:OD1	2.11	0.50
1:A:28:LEU:HD23	1:A:28:LEU:N	2.26	0.50
1:A:336:SER:OG	1:A:392:THR:HG22	2.12	0.50
1:A:49:TYR:HE1	1:A:119:PRO:CB	2.21	0.50
1:A:373:PRO:O	1:A:375:VAL:N	2.45	0.50
1:A:453:PHE:CE2	1:A:474:ILE:HG21	2.47	0.50
1:A:531:VAL:CA	1:A:534:ILE:HG23	2.42	0.50
1:A:664:PHE:CD1	1:A:664:PHE:N	2.77	0.50
1:A:680:PHE:O	1:A:828:LEU:HA	2.12	0.50
1:A:982:PHE:C	1:A:984:LEU:H	2.19	0.50
1:A:207:ILE:C	1:A:760:ASN:HD21	2.19	0.49
1:A:974:PRO:O	1:A:977:MET:HB3	2.11	0.49
1:A:44:THR:HG23	1:A:91:THR:HA	1.95	0.49
1:A:553:ALA:O	1:A:554:TYR:C	2.54	0.49
1:A:750:LEU:O	1:A:751:GLY:C	2.54	0.49
1:A:762:PHE:CE1	1:A:764:ASP:HB2	2.47	0.49
1:A:894:SER:O	1:A:895:TRP:O	2.30	0.49
1:A:12:ALA:O	1:A:15:ILE:N	2.45	0.49
1:A:166:ILE:CG1	1:A:167:SER:H	2.20	0.49
1:A:188:MET:HE1	1:A:200:PRO:HG3	1.94	0.49
1:A:1008:MET:CG	1:A:1009:GLY:N	2.75	0.49
1:A:75:LEU:CD1	1:A:92:LEU:HD23	2.43	0.49
1:A:275:TYR:CD1	1:A:275:TYR:N	2.80	0.49
1:A:325:TYR:CD1	1:A:325:TYR:N	2.80	0.49
1:A:370:ILE:C	1:A:372:VAL:H	2.21	0.49
1:A:377:LEU:O	1:A:380:PHE:N	2.45	0.49
1:A:736:ALA:O	1:A:741:VAL:HG22	2.12	0.49
1:A:24:GLY:O	1:A:28:LEU:HD11	2.13	0.49
1:A:344:LEU:CD1	1:A:376:LEU:HD23	2.41	0.49
1:A:983:ILE:HG22	1:A:983:ILE:O	2.12	0.49
1:A:1013:THR:HG22	1:A:1013:THR:O	2.12	0.49
1:A:450:SER:O	1:A:454:VAL:HB	2.13	0.49
1:A:464:GLY:C	1:A:466:ILE:H	2.20	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:468:ARG:O	1:A:470:PHE:N	2.46	0.49
1:A:469:GLN:O	1:A:473:THR:OG1	2.26	0.49
1:A:496:MET:O	1:A:497:LEU:CB	2.57	0.49
1:A:943:ILE:O	1:A:945:ILE:N	2.46	0.49
1:A:112:GLN:C	1:A:114:ALA:N	2.70	0.49
1:A:166:ILE:HD12	1:A:176:GLN:NE2	2.27	0.49
1:A:190:PRO:CD	1:A:779:TYR:CG	2.96	0.49
1:A:344:LEU:HD21	1:A:348:ILE:HD12	1.95	0.49
1:A:470:PHE:O	1:A:471:SER:C	2.55	0.49
1:A:548:ILE:O	1:A:549:VAL:C	2.53	0.49
1:A:576:VAL:HG21	1:A:591:LEU:HD23	1.94	0.49
1:A:644:VAL:O	1:A:645:GLU:C	2.55	0.49
1:A:974:PRO:O	1:A:975:ILE:C	2.56	0.49
1:A:338:HIS:O	1:A:339:GLU:C	2.56	0.49
1:A:362:PHE:O	1:A:365:THR:HG22	2.13	0.49
1:A:416:VAL:HG22	1:A:434:SER:CB	2.43	0.49
1:A:455:PRO:O	1:A:876:LEU:HD13	2.12	0.49
1:A:564:LEU:HG	1:A:565:PRO:CD	2.43	0.49
1:A:791:VAL:HG12	1:A:792:ARG:N	2.28	0.49
1:A:172:VAL:CA	1:A:294:ALA:HA	2.41	0.49
1:A:234:ILE:O	1:A:235:ILE:HD13	2.13	0.49
1:A:244:GLU:O	1:A:245:GLU:C	2.56	0.49
1:A:415:ASN:CB	1:A:438:ILE:HD11	2.43	0.49
1:A:454:VAL:HA	1:A:471:SER:OG	2.13	0.49
1:A:462:SER:O	1:A:465:ALA:CB	2.59	0.49
1:A:564:LEU:C	1:A:565:PRO:O	2.56	0.49
1:A:602:GLU:HB3	1:A:606:VAL:HG23	1.95	0.49
1:A:894:SER:O	1:A:897:ILE:HB	2.13	0.49
1:A:900:SER:O	1:A:904:VAL:HG23	2.13	0.49
1:A:2:PRO:C	1:A:4:PHE:N	2.69	0.49
1:A:26:ALA:O	1:A:27:ILE:C	2.55	0.49
1:A:405:LEU:CD2	1:A:477:ALA:O	2.61	0.49
1:A:670:ALA:C	1:A:671:ILE:HG12	2.26	0.49
1:A:590:VAL:O	1:A:594:VAL:HG23	2.12	0.48
1:A:741:VAL:HG13	1:A:793:ALA:HB2	1.95	0.48
1:A:340:VAL:O	1:A:343:THR:HB	2.13	0.48
1:A:655:PHE:O	1:A:658:ILE:N	2.46	0.48
1:A:813:SER:O	1:A:814:PRO:C	2.55	0.48
1:A:907:LEU:HD13	1:A:1017:LEU:HG	1.95	0.48
1:A:968:VAL:HG22	1:A:1023:PRO:HG3	1.94	0.48
1:A:143:ILE:HG22	1:A:144:ASN:N	2.29	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:140:VAL:HG22	1:A:325:TYR:CD2	2.48	0.48
1:A:368:PRO:HA	1:A:371:ALA:HB3	1.94	0.48
1:A:375:VAL:CG1	1:A:480:LEU:HB3	2.36	0.48
1:A:454:VAL:HG22	1:A:475:VAL:HG21	1.95	0.48
1:A:545:TYR:O	1:A:549:VAL:HG23	2.13	0.48
1:A:695:LEU:CD1	1:A:825:MET:SD	3.02	0.48
1:A:1012:VAL:C	1:A:1014:ALA:N	2.70	0.48
1:A:339:GLU:HG2	1:A:1000:GLN:HE22	1.76	0.48
1:A:381:ALA:O	1:A:383:LEU:N	2.47	0.48
1:A:538:THR:O	1:A:539:GLY:C	2.55	0.48
1:A:607:GLU:HB3	1:A:630:SER:O	2.14	0.48
1:A:983:ILE:HG12	1:A:1011:MET:CB	2.41	0.48
1:A:99:ASP:CG	1:A:102:ILE:HB	2.38	0.48
1:A:169:THR:CG2	1:A:170:SER:H	2.22	0.48
1:A:39:ALA:HB1	1:A:40:PRO:HD2	1.96	0.48
1:A:670:ALA:O	1:A:671:ILE:CD1	2.60	0.48
1:A:876:LEU:HA	1:A:879:ILE:CD1	2.32	0.48
1:A:943:ILE:C	1:A:945:ILE:H	2.22	0.48
1:A:946:VAL:HG13	1:A:1026:PHE:CD1	2.49	0.48
1:A:47:ALA:HB3	1:A:88:VAL:HB	1.96	0.48
1:A:112:GLN:O	1:A:116:PRO:HD3	2.14	0.48
1:A:384:ALA:CB	3:A:1110:AIC:H161	2.39	0.48
1:A:787:GLY:O	1:A:789:TRP:N	2.46	0.48
1:A:76:MET:HE3	1:A:864:TYR:CE2	2.49	0.48
1:A:134:SER:OG	1:A:293:LEU:HD21	2.14	0.48
1:A:150:THR:HG22	1:A:152:GLU:H	1.78	0.48
1:A:454:VAL:O	1:A:455:PRO:C	2.56	0.48
1:A:457:ALA:HB2	1:A:471:SER:OG	2.14	0.48
1:A:680:PHE:O	1:A:829:GLY:N	2.47	0.48
1:A:746:ILE:O	1:A:747:ASN:C	2.57	0.48
1:A:763:ILE:HD11	1:A:768:VAL:HG22	1.96	0.48
1:A:939:ALA:O	1:A:943:ILE:HG13	2.14	0.48
1:A:357:LEU:O	1:A:358:PHE:HD1	1.97	0.48
1:A:451:ALA:C	1:A:455:PRO:HG2	2.38	0.48
1:A:464:GLY:C	1:A:466:ILE:N	2.71	0.48
1:A:646:ALA:HA	1:A:649:MET:HB3	1.95	0.48
1:A:1016:VAL:CG2	1:A:1017:LEU:N	2.76	0.48
1:A:23:GLY:O	1:A:24:GLY:C	2.56	0.47
1:A:302:THR:O	1:A:303:ALA:C	2.57	0.47
1:A:351:VAL:CG1	1:A:352:PHE:N	2.75	0.47
1:A:688:ALA:HB2	1:A:854:GLY:HA2	1.96	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:818:ARG:NH2	1:A:821:GLY:O	2.47	0.47
1:A:845:GLU:HG2	1:A:857:TYR:CE1	2.49	0.47
1:A:883:VAL:CG1	1:A:883:VAL:O	2.62	0.47
1:A:564:LEU:HG	1:A:565:PRO:HD3	1.96	0.47
1:A:990:VAL:HG22	1:A:1005:THR:H	1.66	0.47
1:A:20:MET:HA	1:A:377:LEU:HD13	1.96	0.47
1:A:145:THR:HB	1:A:320:GLY:HA2	1.94	0.47
1:A:915:ALA:HB2	1:A:1009:GLY:HA3	1.96	0.47
1:A:968:VAL:CG2	1:A:1023:PRO:HG3	2.45	0.47
1:A:2:PRO:HG2	1:A:486:LEU:HD11	1.97	0.47
1:A:36:PRO:HG2	1:A:393:LEU:CD1	2.32	0.47
1:A:36:PRO:CG	1:A:469:GLN:HG2	2.43	0.47
1:A:298:ASN:ND2	1:A:300:LEU:HB3	2.26	0.47
1:A:369:THR:HG22	1:A:369:THR:O	2.14	0.47
1:A:578:LEU:CB	1:A:579:PRO:CD	2.91	0.47
1:A:774:MET:HE3	1:A:780:ARG:NH2	2.30	0.47
1:A:775:SER:CB	1:A:789:TRP:CZ2	2.96	0.47
1:A:819:TYR:N	1:A:822:LEU:O	2.46	0.47
1:A:941:ASN:O	1:A:945:ILE:HG13	2.14	0.47
1:A:43:VAL:HA	1:A:130:GLU:O	2.15	0.47
1:A:65:ILE:HG13	1:A:118:LEU:HD21	1.96	0.47
1:A:115:MET:HA	1:A:118:LEU:HG	1.95	0.47
1:A:218:GLN:HA	1:A:234:ILE:HG13	1.96	0.47
1:A:359:LEU:C	1:A:361:ASN:N	2.72	0.47
1:A:479:ALA:O	1:A:481:SER:N	2.47	0.47
1:A:551:GLY:O	1:A:552:MET:C	2.58	0.47
1:A:681:ASP:OD1	1:A:826:GLU:HG3	2.15	0.47
1:A:746:ILE:HA	1:A:749:THR:HG22	1.96	0.47
1:A:23:GLY:C	1:A:25:LEU:H	2.22	0.47
1:A:115:MET:N	1:A:116:PRO:HD3	2.30	0.47
1:A:115:MET:N	1:A:116:PRO:CD	2.78	0.47
1:A:311:ALA:C	1:A:313:MET:H	2.22	0.47
1:A:445:ILE:CG1	1:A:943:ILE:HG21	2.45	0.47
1:A:884:VAL:O	1:A:885:PHE:C	2.57	0.47
1:A:20:MET:C	1:A:22:ALA:N	2.73	0.47
1:A:342:LYS:HE2	1:A:346:GLU:OE1	2.14	0.47
1:A:390:ILE:HG22	1:A:395:MET:HE3	1.97	0.47
1:A:426:PRO:O	1:A:427:PRO:C	2.54	0.47
1:A:563:PHE:O	1:A:925:VAL:HG23	2.15	0.47
1:A:918:PHE:C	1:A:920:GLY:H	2.21	0.47
1:A:162:MET:O	1:A:163:LYS:C	2.58	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:634:TRP:HD1	1:A:994:GLY:O	1.92	0.47
1:A:759:VAL:HG23	1:A:771:VAL:O	2.15	0.47
1:A:57:VAL:HA	1:A:61:VAL:HG23	1.96	0.47
1:A:149:MET:HB3	1:A:154:ILE:CD1	2.39	0.47
1:A:389:SER:H	1:A:469:GLN:NE2	2.13	0.47
1:A:443:VAL:O	1:A:444:GLY:C	2.58	0.47
1:A:458:PHE:H	1:A:458:PHE:HD1	1.57	0.47
1:A:568:ASP:OD1	1:A:644:VAL:HG23	2.13	0.47
1:A:576:VAL:HG21	1:A:591:LEU:HD21	1.96	0.47
1:A:142:VAL:CG1	1:A:321:LEU:CD1	2.93	0.46
1:A:459:PHE:CZ	1:A:872:GLN:HB3	2.50	0.46
1:A:689:GLY:O	1:A:690:LEU:O	2.32	0.46
1:A:695:LEU:C	1:A:695:LEU:HD13	2.40	0.46
1:A:729:ILE:O	1:A:806:SER:O	2.33	0.46
1:A:904:VAL:HG21	1:A:1022:VAL:HG22	1.97	0.46
1:A:944:LEU:O	1:A:948:PHE:HD1	1.98	0.46
1:A:57:VAL:CG2	1:A:86:GLY:HA2	2.39	0.46
1:A:119:PRO:HG2	1:A:122:VAL:HG21	1.94	0.46
1:A:328:ASP:OD1	1:A:330:THR:HB	2.16	0.46
1:A:480:LEU:O	1:A:484:VAL:HB	2.15	0.46
1:A:515:TRP:O	1:A:516:PHE:C	2.57	0.46
1:A:567:GLU:OE2	1:A:996:GLY:CA	2.62	0.46
1:A:593:GLU:O	1:A:594:VAL:C	2.56	0.46
1:A:643:LYS:NZ	1:A:993:THR:CG2	2.79	0.46
1:A:837:THR:C	1:A:839:GLU:H	2.22	0.46
1:A:930:GLY:O	1:A:933:THR:N	2.48	0.46
1:A:979:SER:OG	1:A:983:ILE:HD11	2.15	0.46
1:A:1007:VAL:O	1:A:1008:MET:C	2.58	0.46
1:A:353:LEU:HB3	2:B:33:ILE:HD12	1.97	0.46
1:A:404:LEU:O	1:A:405:LEU:C	2.58	0.46
1:A:724:THR:HG23	1:A:725:PRO:CD	2.23	0.46
1:A:841:MET:HE2	1:A:859:TRP:HH2	1.80	0.46
1:A:930:GLY:O	1:A:931:LEU:C	2.57	0.46
1:A:156:ASP:CG	1:A:182:TYR:CD2	2.94	0.46
1:A:193:LEU:HD23	1:A:265:VAL:HG11	1.97	0.46
1:A:588:GLN:HB2	1:A:613:ASN:ND2	2.30	0.46
1:A:20:MET:O	1:A:22:ALA:N	2.48	0.46
1:A:189:ASN:OD1	1:A:189:ASN:O	2.34	0.46
1:A:359:LEU:O	1:A:361:ASN:N	2.48	0.46
1:A:594:VAL:HA	1:A:655:PHE:HE2	1.79	0.46
1:A:777:ALA:O	1:A:778:LYS:C	2.57	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:907:LEU:C	1:A:909:VAL:N	2.73	0.46
1:A:128:SER:C	1:A:129:VAL:CG2	2.89	0.46
1:A:138:MET:HE2	1:A:303:ALA:HA	1.98	0.46
1:A:192:GLU:OE1	1:A:192:GLU:HA	2.16	0.46
1:A:340:VAL:HA	1:A:399:VAL:HG22	1.97	0.46
1:A:751:GLY:O	1:A:752:ALA:C	2.59	0.46
1:A:764:ASP:HB3	1:A:769:LYS:HD2	1.98	0.46
1:A:894:SER:O	1:A:898:PRO:HD3	2.15	0.46
1:A:136:PHE:HA	1:A:291:ILE:O	2.16	0.46
1:A:150:THR:HG21	1:A:152:GLU:OE1	2.14	0.46
1:A:415:ASN:ND2	1:A:437:GLN:HE21	2.13	0.46
1:A:587:THR:HG22	1:A:591:LEU:HD12	1.98	0.46
1:A:1007:VAL:HG12	1:A:1011:MET:HG2	1.98	0.46
2:B:51:LYS:O	2:B:53:MET:N	2.48	0.46
1:A:298:ASN:ND2	1:A:298:ASN:C	2.74	0.46
1:A:703:LEU:CD1	1:A:716:VAL:HG12	2.29	0.46
1:A:703:LEU:HD13	1:A:718:PRO:HD3	1.97	0.46
1:A:786:ILE:O	1:A:787:GLY:C	2.57	0.46
1:A:142:VAL:HB	1:A:154:ILE:CG2	2.46	0.46
1:A:355:MET:HE2	1:A:355:MET:HA	1.97	0.46
1:A:709:HIS:N	1:A:710:PRO:HD2	2.26	0.46
1:A:1032:ARG:O	1:A:1032:ARG:HG2	2.15	0.46
1:A:31:PRO:O	1:A:32:VAL:C	2.57	0.46
1:A:155:SER:HB3	1:A:180:SER:H	1.79	0.46
1:A:402:ILE:O	1:A:403:GLY:C	2.57	0.46
1:A:596:HIS:O	1:A:597:TYR:C	2.58	0.46
1:A:703:LEU:HD11	1:A:716:VAL:O	2.16	0.46
1:A:783:PRO:O	1:A:784:ASP:C	2.56	0.46
1:A:877:TYR:C	1:A:879:ILE:N	2.72	0.46
1:A:150:THR:CG2	1:A:151:GLN:N	2.78	0.45
1:A:184:MET:HE1	1:A:243:THR:HA	1.97	0.45
1:A:383:LEU:HD11	1:A:394:THR:HG21	1.98	0.45
1:A:397:GLY:O	1:A:398:MET:C	2.59	0.45
1:A:457:ALA:HB2	1:A:471:SER:HB3	1.97	0.45
1:A:540:ARG:HB3	2:B:53:MET:HE2	1.96	0.45
1:A:705:GLU:O	1:A:707:ALA:N	2.50	0.45
1:A:827:ILE:HG22	1:A:828:LEU:N	2.31	0.45
1:A:927:PHE:O	1:A:928:GLN:C	2.58	0.45
1:A:29:LYS:HD3	3:A:1110:AIC:O1	2.15	0.45
1:A:73:ASP:O	1:A:74:ASN:HB2	2.16	0.45
1:A:695:LEU:HD13	1:A:825:MET:SD	2.56	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:708:LYS:C	1:A:709:HIS:ND1	2.74	0.45
1:A:782:LEU:O	1:A:785:ASP:HB2	2.17	0.45
1:A:183:ALA:N	1:A:271:GLY:O	2.47	0.45
1:A:468:ARG:O	1:A:469:GLN:C	2.58	0.45
1:A:818:ARG:HA	1:A:824:SER:N	2.31	0.45
1:A:818:ARG:HB3	1:A:822:LEU:C	2.42	0.45
1:A:990:VAL:CG1	1:A:1005:THR:OG1	2.42	0.45
1:A:20:MET:C	1:A:22:ALA:H	2.25	0.45
1:A:298:ASN:O	1:A:301:ASP:N	2.48	0.45
1:A:429:GLU:OE1	1:A:429:GLU:HA	2.15	0.45
1:A:462:SER:H	1:A:865:GLN:HE21	1.63	0.45
1:A:790:TYR:CE1	1:A:800:PRO:CG	2.83	0.45
1:A:107:VAL:O	1:A:109:ASN:N	2.49	0.45
1:A:213:GLN:HE21	1:A:213:GLN:HB3	1.60	0.45
1:A:480:LEU:O	1:A:484:VAL:HG23	2.15	0.45
1:A:539:GLY:O	1:A:543:VAL:HG23	2.16	0.45
1:A:619:GLY:HA3	1:A:721:LEU:HD21	1.97	0.45
1:A:662:MET:CG	1:A:664:PHE:CZ	2.99	0.45
1:A:709:HIS:H	1:A:710:PRO:HD2	1.68	0.45
1:A:965:LEU:O	1:A:966:ASP:C	2.60	0.45
1:A:381:ALA:C	1:A:383:LEU:N	2.74	0.45
1:A:724:THR:HG22	1:A:725:PRO:N	2.31	0.45
1:A:961:ILE:O	1:A:965:LEU:HG	2.17	0.45
1:A:410:ILE:O	1:A:413:VAL:N	2.50	0.45
1:A:496:MET:O	1:A:497:LEU:HD23	2.15	0.45
1:A:997:SER:O	1:A:998:GLY:C	2.58	0.45
1:A:40:PRO:O	1:A:41:PRO:C	2.54	0.45
1:A:112:GLN:O	1:A:114:ALA:N	2.50	0.45
1:A:328:ASP:OD1	1:A:328:ASP:C	2.60	0.45
1:A:748:THR:O	1:A:752:ALA:CB	2.65	0.45
1:A:754:TRP:CZ2	1:A:786:ILE:HD12	2.50	0.45
1:A:950:LYS:O	1:A:951:ASP:C	2.60	0.45
1:A:1019:ILE:HG13	1:A:1020:PHE:N	2.31	0.45
1:A:56:THR:OG1	1:A:57:VAL:N	2.49	0.45
1:A:144:ASN:CB	1:A:149:MET:HG3	2.36	0.45
1:A:175:VAL:O	1:A:290:GLY:O	2.34	0.45
1:A:589:LYS:HD3	1:A:589:LYS:C	2.42	0.45
1:A:211:ASN:O	1:A:212:ALA:HB2	2.17	0.45
1:A:245:GLU:O	1:A:246:PHE:C	2.58	0.45
1:A:275:TYR:N	1:A:275:TYR:HD1	2.15	0.45
1:A:470:PHE:O	1:A:473:THR:HB	2.16	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:532:GLY:HA2	1:A:965:LEU:HD21	1.99	0.45
1:A:573:MET:HE1	1:A:628:PHE:CG	2.52	0.45
1:A:423:GLU:HB3	1:A:425:LEU:HG	1.99	0.44
1:A:439:GLN:O	1:A:442:LEU:HB2	2.17	0.44
1:A:641:GLU:O	1:A:650:ARG:NH2	2.50	0.44
1:A:681:ASP:HA	1:A:827:ILE:O	2.16	0.44
1:A:49:TYR:HB2	1:A:122:VAL:HG22	2.00	0.44
1:A:292:LYS:O	1:A:293:LEU:CG	2.64	0.44
1:A:535:LEU:O	1:A:536:ARG:C	2.60	0.44
1:A:544:LEU:O	1:A:548:ILE:HG13	2.17	0.44
1:A:841:MET:CE	1:A:859:TRP:CH2	3.00	0.44
1:A:142:VAL:C	1:A:143:ILE:CD1	2.72	0.44
1:A:298:ASN:C	1:A:298:ASN:HD22	2.24	0.44
1:A:410:ILE:O	1:A:412:VAL:N	2.50	0.44
1:A:531:VAL:C	1:A:534:ILE:HG23	2.42	0.44
1:A:568:ASP:OD2	1:A:643:LYS:HE2	2.17	0.44
1:A:610:PHE:CB	1:A:628:PHE:HB2	2.41	0.44
1:A:663:VAL:C	1:A:664:PHE:CG	2.94	0.44
1:A:846:GLN:O	1:A:849:SER:CB	2.65	0.44
1:A:953:MET:SD	1:A:960:LEU:HD12	2.57	0.44
1:A:967:ALA:O	1:A:968:VAL:C	2.60	0.44
1:A:351:VAL:O	1:A:352:PHE:C	2.60	0.44
1:A:358:PHE:CD2	1:A:977:MET:SD	3.11	0.44
1:A:388:PHE:CD1	1:A:388:PHE:N	2.86	0.44
1:A:726:GLN:NE2	1:A:812:GLY:HA3	2.32	0.44
1:A:409:ALA:O	1:A:412:VAL:HB	2.18	0.44
1:A:445:ILE:HG12	1:A:943:ILE:HG21	1.99	0.44
1:A:685:ILE:HG22	1:A:686:ASP:N	2.32	0.44
1:A:694:LYS:O	1:A:697:GLN:HB3	2.17	0.44
1:A:978:THR:O	1:A:981:ALA:HB3	2.17	0.44
2:B:46:THR:C	2:B:48:GLU:N	2.74	0.44
1:A:175:VAL:C	1:A:176:GLN:CG	2.91	0.44
1:A:277:ILE:HG22	1:A:614:GLY:O	2.17	0.44
1:A:448:VAL:HG11	1:A:888:LEU:HD21	1.99	0.44
1:A:656:SER:O	1:A:658:ILE:N	2.50	0.44
1:A:753:ALA:HB1	1:A:775:SER:HB3	1.99	0.44
1:A:412:VAL:HG13	1:A:435:MET:HE2	1.99	0.44
1:A:448:VAL:CG2	1:A:888:LEU:HD21	2.34	0.44
1:A:583:THR:HG22	1:A:584:GLN:H	1.82	0.44
1:A:695:LEU:CD1	1:A:825:MET:HG3	2.47	0.44
1:A:165:ALA:O	1:A:166:ILE:C	2.61	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:190:PRO:CD	1:A:779:TYR:CD2	3.01	0.44
1:A:451:ALA:HB2	1:A:883:VAL:CG1	2.34	0.44
1:A:986:VAL:CG1	1:A:1004:GLY:HA2	2.43	0.44
1:A:143:ILE:HG13	1:A:286:ALA:HB1	1.98	0.44
1:A:362:PHE:C	1:A:364:ALA:H	2.24	0.44
1:A:515:TRP:O	1:A:518:ARG:N	2.47	0.44
1:A:763:ILE:HA	1:A:767:ARG:O	2.18	0.44
2:B:42:GLN:C	2:B:44:LYS:N	2.74	0.44
1:A:162:MET:CA	1:A:165:ALA:HB3	2.45	0.43
1:A:139:VAL:N	1:A:327:TYR:O	2.41	0.43
1:A:324:VAL:O	1:A:326:PRO:HD3	2.19	0.43
1:A:372:VAL:O	1:A:373:PRO:C	2.60	0.43
1:A:728:LYS:HG2	1:A:808:ARG:NE	2.31	0.43
1:A:799:VAL:HA	1:A:800:PRO:HD3	1.88	0.43
1:A:222:THR:HG1	1:A:223:PRO:HD2	1.79	0.43
1:A:1029:VAL:O	1:A:1032:ARG:HB3	2.17	0.43
1:A:144:ASN:CB	1:A:149:MET:CG	2.91	0.43
1:A:169:THR:CG2	1:A:170:SER:N	2.73	0.43
1:A:330:THR:CB	1:A:331:PRO:HD3	2.40	0.43
1:A:405:LEU:HD21	1:A:477:ALA:O	2.19	0.43
1:A:572:PHE:CE1	1:A:665:ALA:CB	2.94	0.43
1:A:919:ARG:O	1:A:919:ARG:HG3	2.19	0.43
1:A:68:ASN:CB	1:A:114:ALA:HB2	2.47	0.43
1:A:143:ILE:N	1:A:143:ILE:CD1	2.81	0.43
1:A:201:VAL:O	1:A:202:ASP:C	2.62	0.43
1:A:245:GLU:O	1:A:248:LYS:N	2.52	0.43
1:A:368:PRO:C	1:A:370:ILE:H	2.26	0.43
1:A:394:THR:O	1:A:394:THR:CG2	2.66	0.43
1:A:567:GLU:HB3	1:A:670:ALA:HB2	1.99	0.43
1:A:926:TYR:CZ	1:A:999:ALA:HB1	2.54	0.43
1:A:927:PHE:O	1:A:931:LEU:HD23	2.18	0.43
2:B:50:LYS:C	2:B:52:LEU:H	2.25	0.43
1:A:200:PRO:HD2	1:A:749:THR:OG1	2.18	0.43
1:A:211:ASN:O	1:A:211:ASN:CG	2.60	0.43
1:A:332:PHE:O	1:A:336:SER:HB2	2.18	0.43
1:A:341:VAL:HG12	1:A:345:VAL:CG2	2.48	0.43
1:A:364:ALA:CB	1:A:497:LEU:CD2	2.66	0.43
1:A:403:GLY:C	1:A:406:VAL:HG23	2.43	0.43
1:A:784:ASP:C	1:A:786:ILE:N	2.76	0.43
1:A:57:VAL:CG1	1:A:88:VAL:CG2	2.95	0.43
1:A:104:GLN:HG3	1:A:105:VAL:N	2.32	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:115:MET:SD	1:A:127:VAL:HG23	2.59	0.43
1:A:222:THR:O	1:A:224:PRO:CD	2.61	0.43
1:A:281:PHE:CE2	1:A:324:VAL:HG21	2.54	0.43
1:A:321:LEU:HG	1:A:321:LEU:O	2.19	0.43
1:A:426:PRO:HG2	1:A:429:GLU:CB	2.23	0.43
1:A:602:GLU:OE2	1:A:650:ARG:NH1	2.52	0.43
1:A:873:ALA:HB3	1:A:874:PRO:HD3	1.99	0.43
1:A:17:ILE:O	1:A:20:MET:HB2	2.19	0.43
1:A:155:SER:CB	1:A:179:GLY:HA3	2.49	0.43
1:A:177:LEU:CG	1:A:178:PHE:N	2.71	0.43
1:A:207:ILE:C	1:A:209:ALA:N	2.77	0.43
1:A:438:ILE:HG22	1:A:442:LEU:CG	2.31	0.43
1:A:711:ASP:O	1:A:712:MET:HB3	2.19	0.43
1:A:946:VAL:O	1:A:949:ALA:HB3	2.18	0.43
2:B:52:LEU:C	2:B:54:ASP:H	2.27	0.43
1:A:73:ASP:HB2	1:A:106:GLN:NE2	2.23	0.43
1:A:136:PHE:CD1	1:A:136:PHE:N	2.87	0.43
1:A:200:PRO:O	1:A:204:ILE:HG13	2.19	0.43
1:A:254:ASN:ND2	1:A:256:ASP:OD2	2.52	0.43
1:A:448:VAL:CG1	1:A:884:VAL:HG13	2.41	0.43
1:A:559:LEU:HA	1:A:560:PRO:HD3	1.79	0.43
1:A:148:THR:HB	1:A:319:SER:HB3	2.01	0.43
1:A:169:THR:HG23	1:A:305:ALA:CB	2.27	0.43
1:A:634:TRP:CG	1:A:994:GLY:O	2.70	0.43
1:A:899:PHE:O	1:A:902:MET:HB3	2.19	0.43
1:A:418:ARG:NE	1:A:422:GLU:OE2	2.51	0.42
1:A:437:GLN:C	1:A:439:GLN:N	2.75	0.42
1:A:951:ASP:O	1:A:952:LEU:C	2.62	0.42
1:A:982:PHE:C	1:A:984:LEU:N	2.77	0.42
2:B:42:GLN:C	2:B:44:LYS:H	2.27	0.42
1:A:156:ASP:O	1:A:159:ALA:HB3	2.19	0.42
1:A:169:THR:CG2	1:A:302:THR:HA	2.48	0.42
1:A:375:VAL:HG22	1:A:484:VAL:HG11	2.01	0.42
1:A:449:LEU:HD12	1:A:478:MET:SD	2.59	0.42
1:A:673:GLU:CG	1:A:862:MET:HE1	2.49	0.42
1:A:734:GLU:O	1:A:735:LYS:C	2.62	0.42
1:A:907:LEU:HD12	1:A:1018:ALA:CA	2.36	0.42
1:A:162:MET:C	1:A:165:ALA:H	2.27	0.42
1:A:357:LEU:O	1:A:358:PHE:CD1	2.72	0.42
1:A:663:VAL:HG12	1:A:664:PHE:N	2.34	0.42
1:A:907:LEU:O	1:A:909:VAL:N	2.52	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:943:ILE:C	1:A:945:ILE:N	2.77	0.42
1:A:951:ASP:O	1:A:955:LYS:N	2.46	0.42
1:A:982:PHE:CE2	1:A:1007:VAL:HG11	2.53	0.42
1:A:155:SER:CB	1:A:180:SER:H	2.32	0.42
1:A:367:ILE:CB	1:A:368:PRO:HD3	2.47	0.42
1:A:559:LEU:HA	1:A:559:LEU:HD12	1.88	0.42
1:A:837:THR:C	1:A:839:GLU:N	2.78	0.42
1:A:249:ILE:HG22	1:A:251:LEU:HD22	2.00	0.42
1:A:393:LEU:C	1:A:395:MET:H	2.27	0.42
1:A:444:GLY:O	1:A:445:ILE:C	2.62	0.42
1:A:19:ILE:H	1:A:19:ILE:HG13	1.56	0.42
1:A:61:VAL:HG13	1:A:122:VAL:HG11	2.00	0.42
1:A:204:ILE:HG23	1:A:759:VAL:HG13	2.02	0.42
1:A:298:ASN:O	1:A:299:ALA:C	2.63	0.42
1:A:338:HIS:O	1:A:341:VAL:N	2.52	0.42
1:A:384:ALA:CA	3:A:1110:AIC:H161	2.50	0.42
1:A:483:LEU:O	1:A:487:ILE:HG13	2.19	0.42
1:A:616:GLY:HA2	1:A:626:ILE:HD11	2.00	0.42
1:A:907:LEU:O	1:A:908:GLY:C	2.60	0.42
1:A:944:LEU:HD13	1:A:971:ARG:CZ	2.50	0.42
1:A:2:PRO:C	1:A:4:PHE:H	2.28	0.42
1:A:362:PHE:O	1:A:362:PHE:HD2	2.02	0.42
1:A:437:GLN:C	1:A:439:GLN:H	2.27	0.42
1:A:530:SER:O	1:A:531:VAL:C	2.62	0.42
1:A:982:PHE:CE2	1:A:986:VAL:HG21	2.55	0.42
1:A:75:LEU:HD12	1:A:92:LEU:CD2	2.47	0.42
1:A:330:THR:O	1:A:333:VAL:HG23	2.20	0.42
1:A:373:PRO:O	1:A:376:LEU:N	2.52	0.42
1:A:520:PHE:O	1:A:521:GLU:C	2.62	0.42
1:A:632:LYS:CE	1:A:636:ASP:OD2	2.54	0.42
1:A:851:LEU:HD13	1:A:855:VAL:HG11	2.00	0.42
1:A:1019:ILE:O	1:A:1023:PRO:HD3	2.19	0.42
1:A:128:SER:O	1:A:129:VAL:HG22	2.19	0.42
1:A:377:LEU:O	1:A:378:GLY:C	2.63	0.42
1:A:380:PHE:HD2	1:A:380:PHE:HA	1.70	0.42
1:A:416:VAL:HA	1:A:434:SER:OG	2.19	0.42
1:A:423:GLU:OE1	1:A:425:LEU:CD1	2.67	0.42
1:A:480:LEU:O	1:A:484:VAL:CG2	2.68	0.42
1:A:702:LEU:O	1:A:703:LEU:C	2.63	0.42
1:A:983:ILE:CD1	1:A:1011:MET:HB3	2.49	0.42
1:A:291:ILE:O	1:A:291:ILE:HG22	2.19	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:530:SER:O	1:A:534:ILE:HG22	2.20	0.42
1:A:643:LYS:HE2	1:A:643:LYS:HB3	1.87	0.42
1:A:43:VAL:HG23	1:A:94:PHE:HE1	1.84	0.41
1:A:44:THR:HG23	1:A:91:THR:OG1	2.20	0.41
1:A:192:GLU:O	1:A:193:LEU:C	2.63	0.41
1:A:368:PRO:C	1:A:370:ILE:N	2.78	0.41
1:A:449:LEU:HD23	1:A:449:LEU:H	1.84	0.41
1:A:471:SER:C	1:A:475:VAL:HG23	2.44	0.41
1:A:720:GLY:HA2	1:A:815:ARG:HD3	2.01	0.41
1:A:1003:VAL:O	1:A:1006:GLY:N	2.53	0.41
1:A:2:PRO:HG3	1:A:486:LEU:HD11	2.00	0.41
1:A:5:PHE:HE2	1:A:12:ALA:HA	1.85	0.41
1:A:43:VAL:HG23	1:A:94:PHE:CE1	2.55	0.41
1:A:149:MET:CE	1:A:317:PHE:CZ	3.03	0.41
1:A:379:THR:O	1:A:380:PHE:C	2.60	0.41
1:A:396:PHE:HE1	1:A:999:ALA:HB1	1.84	0.41
1:A:437:GLN:NE2	1:A:948:PHE:CE2	2.70	0.41
1:A:703:LEU:CD1	1:A:718:PRO:HD3	2.50	0.41
1:A:978:THR:O	1:A:981:ALA:N	2.51	0.41
1:A:40:PRO:C	1:A:41:PRO:O	2.63	0.41
1:A:281:PHE:HE2	1:A:324:VAL:HG21	1.85	0.41
1:A:546:LEU:O	1:A:549:VAL:HB	2.19	0.41
1:A:608:SER:O	1:A:609:VAL:HG23	2.20	0.41
1:A:724:THR:N	1:A:814:PRO:HD3	2.35	0.41
1:A:818:ARG:HB3	1:A:822:LEU:O	2.20	0.41
1:A:251:LEU:HD21	1:A:262:LEU:CA	2.50	0.41
1:A:411:VAL:O	1:A:438:ILE:HD13	2.20	0.41
1:A:894:SER:OG	1:A:895:TRP:N	2.53	0.41
1:A:5:PHE:CE2	1:A:12:ALA:HA	2.55	0.41
1:A:55:LYS:O	1:A:56:THR:C	2.61	0.41
1:A:138:MET:CE	1:A:303:ALA:HA	2.50	0.41
1:A:393:LEU:C	1:A:395:MET:N	2.77	0.41
1:A:527:TYR:OH	1:A:1019:ILE:CB	2.57	0.41
1:A:608:SER:C	1:A:609:VAL:HG23	2.46	0.41
1:A:873:ALA:N	1:A:874:PRO:CD	2.83	0.41
1:A:6:ILE:HG22	1:A:6:ILE:O	2.20	0.41
1:A:177:LEU:H	1:A:290:GLY:N	2.17	0.41
1:A:524:THR:CG2	1:A:969:ARG:HE	2.32	0.41
1:A:546:LEU:O	1:A:547:ILE:C	2.63	0.41
1:A:618:ALA:CB	1:A:719:ASN:HD21	2.33	0.41
1:A:644:VAL:O	1:A:648:THR:HG23	2.21	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:36:PRO:HG2	1:A:469:GLN:HG2	2.03	0.41
1:A:99:ASP:C	1:A:101:ASP:N	2.79	0.41
1:A:124:GLN:NE2	1:A:758:TYR:CD2	2.88	0.41
1:A:148:THR:O	1:A:149:MET:HE3	2.20	0.41
1:A:188:MET:HB3	1:A:189:ASN:H	1.65	0.41
1:A:302:THR:OG1	1:A:303:ALA:N	2.53	0.41
1:A:377:LEU:C	1:A:379:THR:N	2.75	0.41
1:A:380:PHE:O	1:A:383:LEU:HB3	2.19	0.41
1:A:383:LEU:O	1:A:388:PHE:HB2	2.21	0.41
1:A:1019:ILE:O	1:A:1023:PRO:CD	2.68	0.41
1:A:574:THR:HB	1:A:665:ALA:CB	2.50	0.41
1:A:637:ARG:HD2	1:A:642:ASN:O	2.21	0.41
1:A:746:ILE:CD1	1:A:804:PHE:CZ	3.04	0.41
1:A:918:PHE:C	1:A:920:GLY:N	2.78	0.41
1:A:971:ARG:HD2	1:A:971:ARG:HA	1.77	0.41
1:A:5:PHE:CG	1:A:487:ILE:HG22	2.56	0.41
1:A:20:MET:HA	1:A:377:LEU:CD1	2.51	0.41
1:A:203:VAL:O	1:A:204:ILE:C	2.64	0.41
1:A:379:THR:OG1	1:A:480:LEU:HD12	2.20	0.41
1:A:454:VAL:O	1:A:457:ALA:N	2.53	0.41
1:A:557:VAL:O	1:A:557:VAL:HG12	2.21	0.41
1:A:686:ASP:OD1	1:A:686:ASP:O	2.39	0.41
1:A:748:THR:C	1:A:750:LEU:N	2.78	0.41
1:A:820:ASN:C	1:A:822:LEU:H	2.28	0.41
1:A:923:ASN:HA	1:A:927:PHE:CD2	2.56	0.41
1:A:999:ALA:O	1:A:1003:VAL:HG23	2.21	0.41
1:A:1031:ARG:O	1:A:1035:ARG:HG2	2.20	0.41
1:A:188:MET:O	1:A:189:ASN:HB2	2.20	0.41
1:A:498:LYS:HA	1:A:499:PRO:HD3	1.43	0.41
1:A:822:LEU:HA	1:A:823:PRO:HD3	1.91	0.41
1:A:995:ALA:O	1:A:997:SER:N	2.53	0.41
1:A:1021:PHE:O	1:A:1025:PHE:N	2.37	0.41
1:A:216:ALA:O	1:A:217:GLY:C	2.64	0.40
1:A:349:ILE:O	1:A:350:LEU:C	2.64	0.40
1:A:434:SER:C	1:A:436:GLY:H	2.29	0.40
1:A:458:PHE:CD1	1:A:458:PHE:N	2.86	0.40
1:A:546:LEU:O	1:A:550:VAL:CG2	2.61	0.40
1:A:663:VAL:O	1:A:664:PHE:CG	2.74	0.40
1:A:781:MET:O	1:A:782:LEU:HD23	2.21	0.40
1:A:817:GLU:O	1:A:818:ARG:HG2	2.20	0.40
1:A:45:ILE:HD11	1:A:92:LEU:CD1	2.51	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:330:THR:HB	1:A:331:PRO:CD	2.42	0.40
1:A:409:ALA:O	1:A:413:VAL:HG23	2.20	0.40
1:A:527:TYR:CZ	1:A:1019:ILE:HD12	2.55	0.40
1:A:720:GLY:HA2	1:A:815:ARG:CD	2.52	0.40
1:A:759:VAL:HG21	1:A:773:VAL:CG2	2.51	0.40
1:A:997:SER:O	1:A:1000:GLN:N	2.54	0.40
1:A:242:SER:C	1:A:244:GLU:N	2.76	0.40
1:A:510:LYS:HG3	1:A:511:GLY:O	2.20	0.40
1:A:596:HIS:O	1:A:598:TYR:N	2.53	0.40
1:A:638:PRO:HB2	1:A:639:GLY:H	1.51	0.40
1:A:902:MET:O	1:A:905:VAL:HG23	2.21	0.40
1:A:919:ARG:CG	1:A:921:LEU:HG	2.52	0.40
1:A:181:GLN:O	1:A:182:TYR:O	2.39	0.40
1:A:207:ILE:C	1:A:209:ALA:H	2.28	0.40
1:A:341:VAL:O	1:A:344:LEU:N	2.54	0.40
1:A:414:GLU:CD	1:A:974:PRO:HG3	2.47	0.40
1:A:425:LEU:CB	1:A:426:PRO:CD	2.60	0.40
1:A:538:THR:O	1:A:541:TYR:N	2.46	0.40
1:A:586:ARG:O	1:A:587:THR:C	2.63	0.40
1:A:706:ALA:HA	1:A:847:LEU:HD21	2.03	0.40
1:A:728:LYS:HB3	1:A:808:ARG:HG2	2.04	0.40
1:A:881:LEU:O	1:A:881:LEU:HG	2.21	0.40
1:A:885:PHE:CA	1:A:902:MET:HE1	2.50	0.40
1:A:1024:VAL:O	1:A:1025:PHE:C	2.64	0.40
1:A:1033:PHE:C	1:A:1035:ARG:H	2.29	0.40
1:A:32:VAL:O	1:A:299:ALA:HB3	2.21	0.40
1:A:364:ALA:HB2	1:A:497:LEU:HD23	1.92	0.40
1:A:566:ASP:O	1:A:567:GLU:C	2.65	0.40
1:A:816:LEU:HD12	1:A:816:LEU:HA	1.84	0.40
1:A:1021:PHE:O	1:A:1024:VAL:HB	2.21	0.40

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

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:105:VAL:CG1	1:A:105:VAL:CG1[2_445]	2.12	0.08

5.3 Torsion angles ⓘ

5.3.1 Protein backbone ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	1008/1049 (96%)	678 (67%)	231 (23%)	99 (10%)	0	6
2	B	35/37 (95%)	26 (74%)	6 (17%)	3 (9%)	0	7
All	All	1043/1086 (96%)	704 (68%)	237 (23%)	102 (10%)	0	6

All (102) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	52	ALA
1	A	108	GLN
1	A	182	TYR
1	A	222	THR
1	A	407	ASP
1	A	439	GLN
1	A	471	SER
1	A	500	ILE
1	A	565	PRO
1	A	606	VAL
1	A	638	PRO
1	A	656	SER
1	A	657	GLN
1	A	659	LYS
1	A	671	ILE
1	A	690	LEU
1	A	709	HIS
1	A	788	ASP
1	A	808	ARG
1	A	940	LYS
1	A	960	LEU
1	A	29	LYS
1	A	37	THR
1	A	85	THR
1	A	113	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	136	PHE
1	A	147	GLY
1	A	177	LEU
1	A	291	ILE
1	A	360	GLN
1	A	374	VAL
1	A	382	VAL
1	A	409	ALA
1	A	460	GLY
1	A	539	GLY
1	A	570	GLY
1	A	596	HIS
1	A	597	TYR
1	A	609	VAL
1	A	615	PHE
1	A	743	ILE
1	A	746	ILE
1	A	759	VAL
1	A	778	LYS
1	A	785	ASP
1	A	832	ALA
1	A	852	PRO
1	A	894	SER
1	A	895	TRP
1	A	907	LEU
1	A	930	GLY
1	A	944	LEU
1	A	968	VAL
2	B	52	LEU
1	A	21	LEU
1	A	53	ASP
1	A	54	ALA
1	A	217	GLY
1	A	312	LYS
1	A	330	THR
1	A	371	ALA
1	A	458	PHE
1	A	814	PRO
1	A	866	GLU
1	A	896	SER
1	A	951	ASP
1	A	961	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	996	GLY
2	B	33	ILE
2	B	50	LYS
1	A	28	LEU
1	A	96	SER
1	A	212	ALA
1	A	317	PHE
1	A	336	SER
1	A	372	VAL
1	A	443	VAL
1	A	499	PRO
1	A	745	ASP
1	A	1003	VAL
1	A	369	THR
1	A	461	GLY
1	A	480	LEU
1	A	919	ARG
1	A	974	PRO
1	A	975	ILE
1	A	75	LEU
1	A	166	ILE
1	A	224	PRO
1	A	341	VAL
1	A	402	ILE
1	A	427	PRO
1	A	536	ARG
1	A	27	ILE
1	A	390	ILE
1	A	986	VAL
1	A	249	ILE
1	A	2	PRO
1	A	24	GLY
1	A	373	PRO
1	A	335	ILE
1	A	983	ILE

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	831/855 (97%)	750 (90%)	81 (10%)	8	30
2	B	10/36 (28%)	9 (90%)	1 (10%)	7	28
All	All	841/891 (94%)	759 (90%)	82 (10%)	7	30

All (82) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	5	PHE
1	A	13	TRP
1	A	28	LEU
1	A	32	VAL
1	A	45	ILE
1	A	46	SER
1	A	58	GLN
1	A	60	THR
1	A	61	VAL
1	A	82	SER
1	A	92	LEU
1	A	104	GLN
1	A	129	VAL
1	A	132	SER
1	A	136	PHE
1	A	138	MET
1	A	143	ILE
1	A	176	GLN
1	A	189	ASN
1	A	205	THR
1	A	211	ASN
1	A	213	GLN
1	A	230	LEU
1	A	255	GLN
1	A	275	TYR
1	A	276	ASP
1	A	326	PRO
1	A	329	THR
1	A	343	THR
1	A	351	VAL
1	A	357	LEU
1	A	375	VAL
1	A	380	PHE
1	A	382	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	390	ILE
1	A	400	LEU
1	A	402	ILE
1	A	406	VAL
1	A	410	ILE
1	A	449	LEU
1	A	466	ILE
1	A	487	ILE
1	A	496	MET
1	A	517	ASN
1	A	534	ILE
1	A	550	VAL
1	A	555	LEU
1	A	564	LEU
1	A	572	PHE
1	A	590	VAL
1	A	628	PHE
1	A	642	ASN
1	A	650	ARG
1	A	664	PHE
1	A	699	ARG
1	A	708	LYS
1	A	710	PRO
1	A	716	VAL
1	A	759	VAL
1	A	764	ASP
1	A	770	LYS
1	A	773	VAL
1	A	775	SER
1	A	786	ILE
1	A	801	PHE
1	A	802	SER
1	A	806	SER
1	A	815	ARG
1	A	841	MET
1	A	863	SER
1	A	887	CYS
1	A	907	LEU
1	A	931	LEU
1	A	946	VAL
1	A	951	ASP
1	A	952	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	964	THR
1	A	979	SER
1	A	992	SER
1	A	1007	VAL
1	A	1008	MET
2	B	35	TYR

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (27) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	106	GLN
1	A	112	GLN
1	A	124	GLN
1	A	176	GLN
1	A	181	GLN
1	A	191	ASN
1	A	213	GLN
1	A	228	GLN
1	A	255	GLN
1	A	298	ASN
1	A	338	HIS
1	A	361	ASN
1	A	437	GLN
1	A	469	GLN
1	A	517	ASN
1	A	525	HIS
1	A	569	GLN
1	A	588	GLN
1	A	623	ASN
1	A	642	ASN
1	A	697	GLN
1	A	760	ASN
1	A	865	GLN
1	A	871	ASN
1	A	1000	GLN
1	A	1001	ASN
2	B	49	HIS

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

2 ligands are modelled in this entry.

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	$\# Z > 2$	Counts	RMSZ	$\# Z > 2$
3	AIC	A	1110	-	24,26,26	1.48	2 (8%)	36,40,40	1.95	10 (27%)
3	AIC	A	1109	-	24,26,26	1.46	2 (8%)	36,40,40	1.80	9 (25%)

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
3	AIC	A	1110	-	-	2/16/47/47	0/3/3/3
3	AIC	A	1109	-	-	6/16/47/47	0/3/3/3

All (4) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
3	A	1109	AIC	C6-C12	2.49	1.61	1.56
3	A	1110	AIC	C6-C12	2.49	1.61	1.56
3	A	1109	AIC	C11-C5	2.43	1.43	1.39
3	A	1110	AIC	C11-C5	2.36	1.42	1.39

All (19) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
3	A	1110	AIC	C12-C6-S1	-4.93	96.17	104.13
3	A	1110	AIC	C4-C3-N1	4.76	120.51	114.68
3	A	1109	AIC	C4-C3-N1	4.72	120.45	114.68
3	A	1109	AIC	C12-C6-S1	-3.80	97.99	104.13
3	A	1110	AIC	C1-C6-S1	3.72	115.17	109.18
3	A	1110	AIC	C13-N3-C12	-3.41	113.29	117.30
3	A	1109	AIC	C13-N3-C12	-3.40	113.30	117.30
3	A	1110	AIC	C6-C12-N3	3.08	110.89	106.43
3	A	1109	AIC	C6-C12-N3	3.06	110.86	106.43
3	A	1109	AIC	C6-C12-C2	3.02	117.44	112.87
3	A	1110	AIC	C6-C12-C2	3.00	117.41	112.87
3	A	1110	AIC	C12-N3-C15	-2.79	118.65	126.38
3	A	1109	AIC	C12-N3-C15	-2.78	118.67	126.38
3	A	1109	AIC	C2-C12-N3	-2.76	107.53	112.10
3	A	1110	AIC	C2-C12-N3	-2.74	107.56	112.10
3	A	1110	AIC	O2-C2-O1	-2.36	118.72	124.08
3	A	1109	AIC	O2-C2-O1	-2.35	118.75	124.08
3	A	1109	AIC	O2-C2-C12	2.14	118.62	112.47
3	A	1110	AIC	O2-C2-C12	2.13	118.59	112.47

There are no chirality outliers.

All (8) torsion outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
3	A	1109	AIC	C6-C12-C2-O2
3	A	1109	AIC	N1-C3-C4-C5
3	A	1109	AIC	O3-C3-C4-C5
3	A	1109	AIC	N1-C3-C4-N2
3	A	1109	AIC	O3-C3-C4-N2
3	A	1110	AIC	C6-C12-C2-O2
3	A	1109	AIC	C6-C12-C2-O1
3	A	1110	AIC	C6-C12-C2-O1

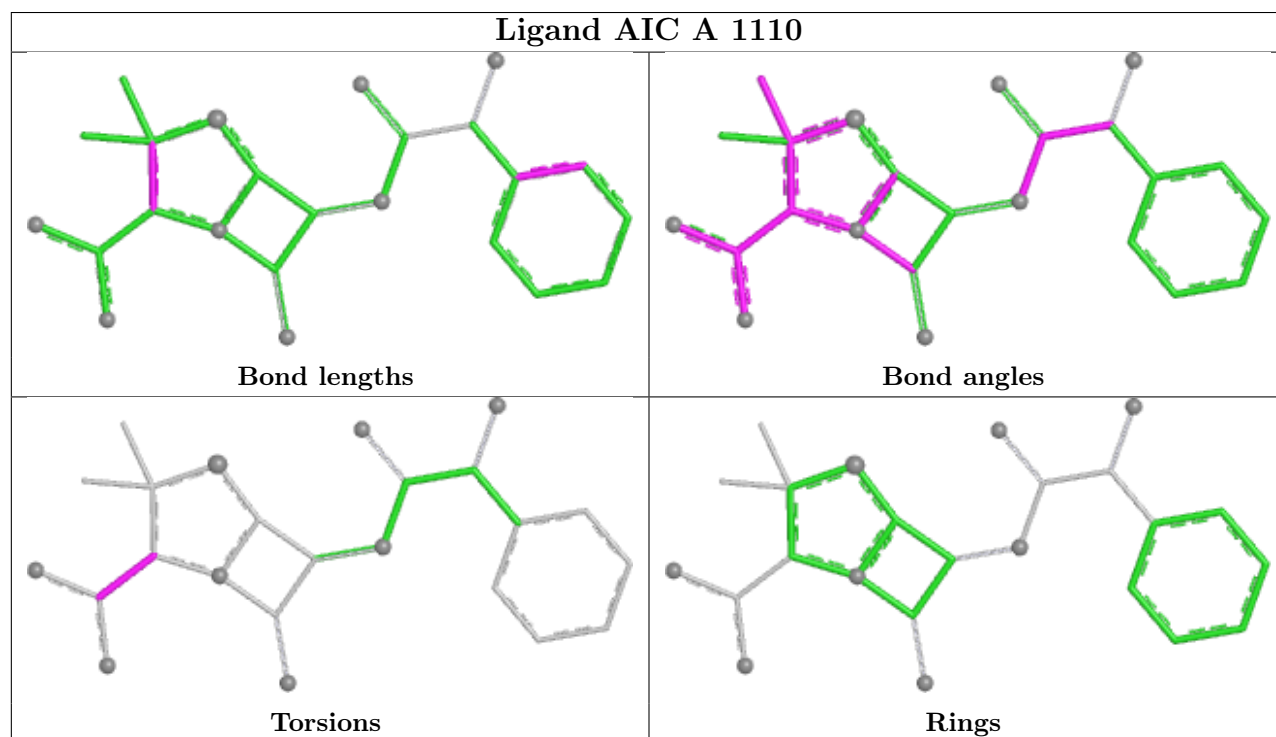
There are no ring outliers.

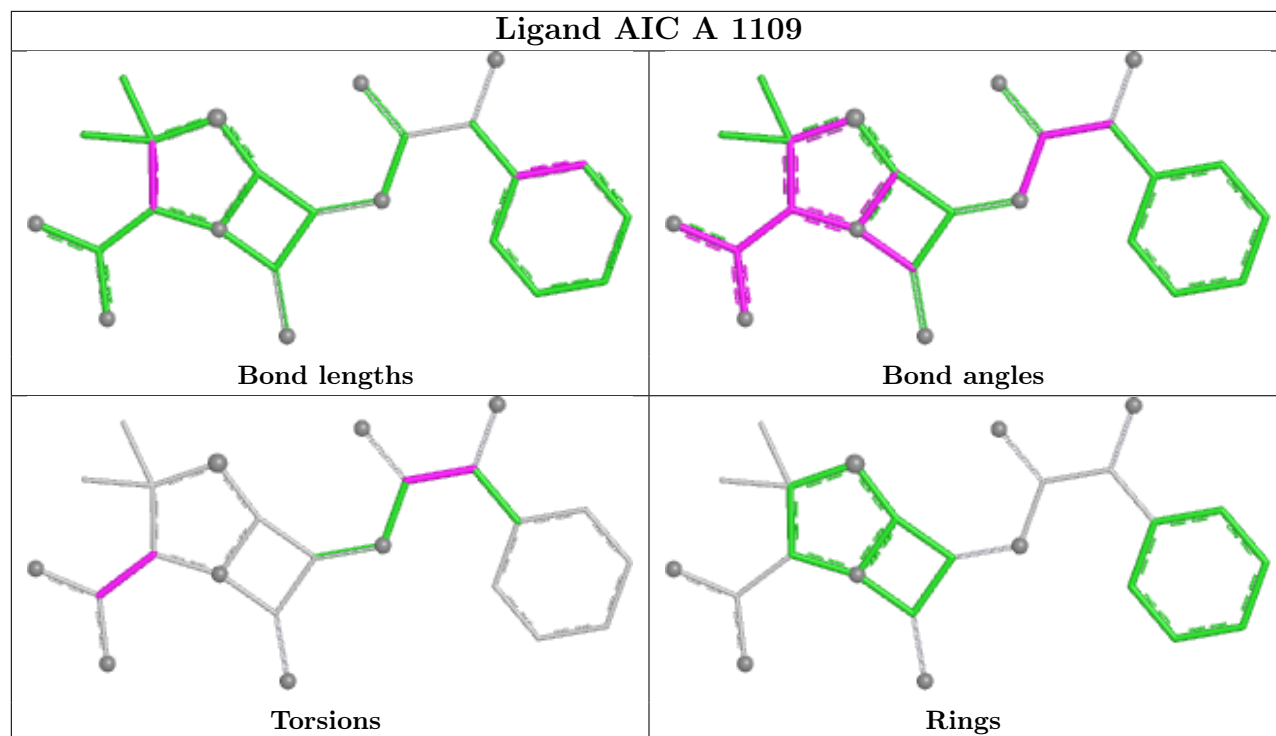
1 monomer is involved in 13 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
3	A	1110	AIC	13	0

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will

also be included. For torsion angles, if less than 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient equivalents in the CSD to analyse the geometry.





5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data

6.1 Protein, DNA and RNA chains

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	1018/1049 (97%)	0.34	73 (7%) 21 14	15, 61, 132, 173	0
2	B	37/37 (100%)	-0.17	0 100 100	16, 76, 133, 145	8 (21%)
All	All	1055/1086 (97%)	0.32	73 (6%) 23 14	15, 62, 132, 173	8 (0%)

All (73) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	830	GLN	6.2
1	A	105	VAL	5.3
1	A	361	ASN	4.9
1	A	660	ASP	4.2
1	A	688	ALA	4.2
1	A	670	ALA	4.1
1	A	617	PHE	4.0
1	A	174	ASP	3.9
1	A	137	LEU	3.9
1	A	123	GLN	3.8
1	A	895	TRP	3.8
1	A	29	LYS	3.7
1	A	178	PHE	3.7
1	A	854	GLY	3.4
1	A	668	LEU	3.4
1	A	160	ALA	3.3
1	A	135	SER	3.3
1	A	70	ASN	3.3
1	A	991	ILE	3.3
1	A	498	LYS	3.3
1	A	831	ALA	3.2
1	A	35	TYR	3.1
1	A	171	GLY	3.1
1	A	49	TYR	3.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	614	GLY	3.1
1	A	134	SER	3.0
1	A	615	PHE	3.0
1	A	157	TYR	3.0
1	A	290	GLY	2.9
1	A	987	MET	2.8
1	A	293	LEU	2.8
1	A	563	PHE	2.7
1	A	636	ASP	2.7
1	A	860	THR	2.7
1	A	38	ILE	2.7
1	A	788	ASP	2.7
1	A	495	THR	2.7
1	A	836	SER	2.7
1	A	122	VAL	2.6
1	A	526	HIS	2.6
1	A	3	ASN	2.6
1	A	327	TYR	2.6
1	A	496	MET	2.5
1	A	30	LEU	2.5
1	A	990	VAL	2.5
1	A	685	ILE	2.4
1	A	687	GLN	2.4
1	A	872	GLN	2.4
1	A	805	SER	2.4
1	A	417	GLU	2.4
1	A	839	GLU	2.4
1	A	4	PHE	2.3
1	A	497	LEU	2.3
1	A	926	TYR	2.3
1	A	177	LEU	2.3
1	A	33	ALA	2.3
1	A	423	GLU	2.2
1	A	950	LYS	2.2
1	A	48	SER	2.2
1	A	427	PRO	2.2
1	A	861	GLY	2.2
1	A	363	ARG	2.2
1	A	136	PHE	2.1
1	A	512	PHE	2.1
1	A	37	THR	2.1
1	A	832	ALA	2.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	1033	PHE	2.1
1	A	999	ALA	2.1
1	A	113	LEU	2.1
1	A	996	GLY	2.1
1	A	824	SER	2.1
1	A	690	LEU	2.1
1	A	1003	VAL	2.0

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

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

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

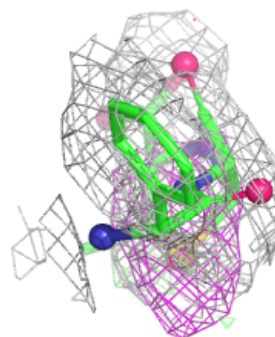
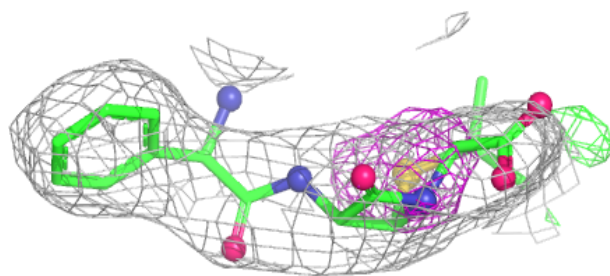
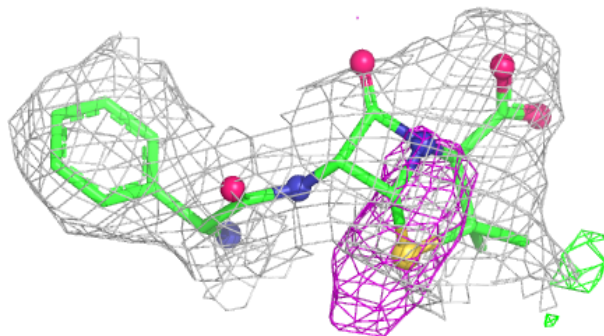
In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. The B-factors column lists the minimum, median, 95th percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled 'Q< 0.9' lists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

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
3	AIC	A	1110	24/24	0.61	0.18	49,49,49,49	0
3	AIC	A	1109	24/24	0.69	0.18	49,49,49,49	0

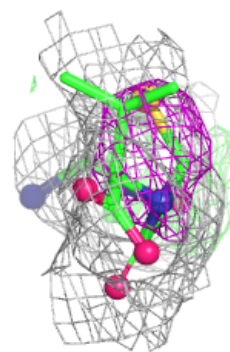
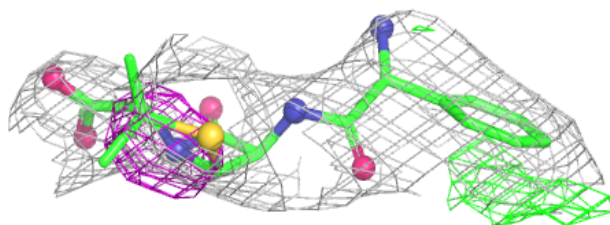
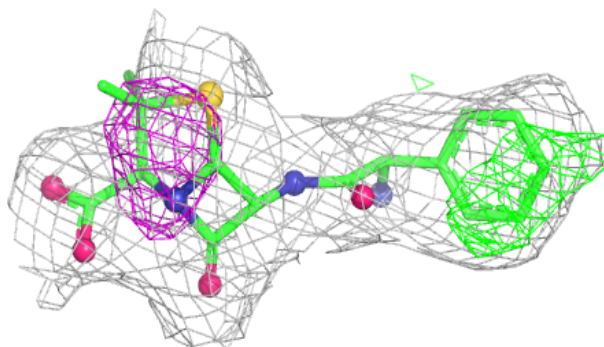
The following is a graphical depiction of the model fit to experimental electron density of all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the geometry validation Tables will also be included. Each fit is shown from different orientation to approximate a three-dimensional view.

Electron density around AIC A 1110:

$2mF_o-DF_c$ (at 0.7 rmsd) in gray
 mF_o-DF_c (at 3 rmsd) in purple (negative)
and green (positive)

**Electron density around AIC A 1109:**

$2mF_o-DF_c$ (at 0.7 rmsd) in gray
 mF_o-DF_c (at 3 rmsd) in purple (negative)
and green (positive)



6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.