



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 03:12 PM UTC

PDB ID : 3S4D / pdb_00003s4d
Title : Lactose phosphorylase in a ternary complex with cellobiose and sulfate
Authors : Van Hoorebeke, A.; Stout, J.; Soetaert, W.; Van Beeumen, J.; Desmet, T.; Savvides, S.
Deposited on : 2011-05-19
Resolution : 3.30 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
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

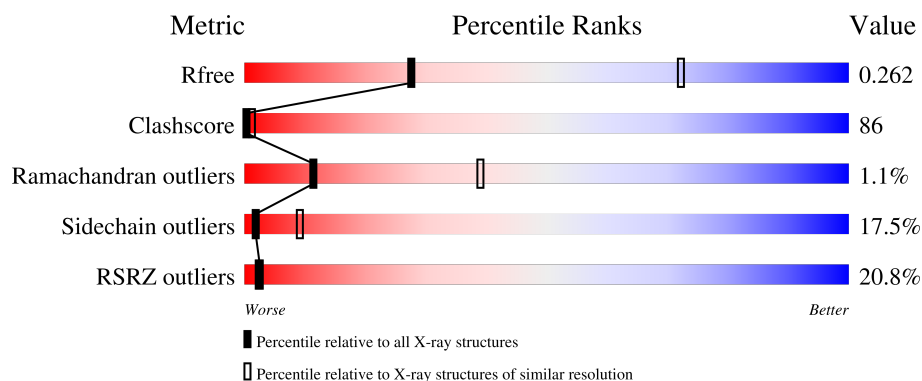
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.30 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	1169 (3.32-3.28)
Clashscore	190562	1209 (3.32-3.28)
Ramachandran outliers	187476	1188 (3.32-3.28)
Sidechain outliers	187428	1187 (3.32-3.28)
RSRZ outliers	180081	1169 (3.32-3.28)

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	822	21% 23% 62% 14%
2	B	2	100%

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	BGC	B	2	-	-	X	-
3	SO4	A	823	-	-	X	-

2 Entry composition [i](#)

There are 4 unique types of molecules in this entry. The entry contains 6328 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 Lactose Phosphorylase.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	822	6296	3985	1069	1225	17	1	0	0

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	508	ILE	THR	engineered mutation	UNP Q7WTR6
A	667	ALA	ASN	engineered mutation	UNP Q7WTR6

- Molecule 2 is an oligosaccharide called beta-D-glucopyranose-(1-4)-beta-D-glucopyranose.



Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	O			
2	B	2	23	12	11	0	0	0

- Molecule 3 is SULFATE ION (CCD ID: SO4) (formula: O₄S).



Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
3	A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		

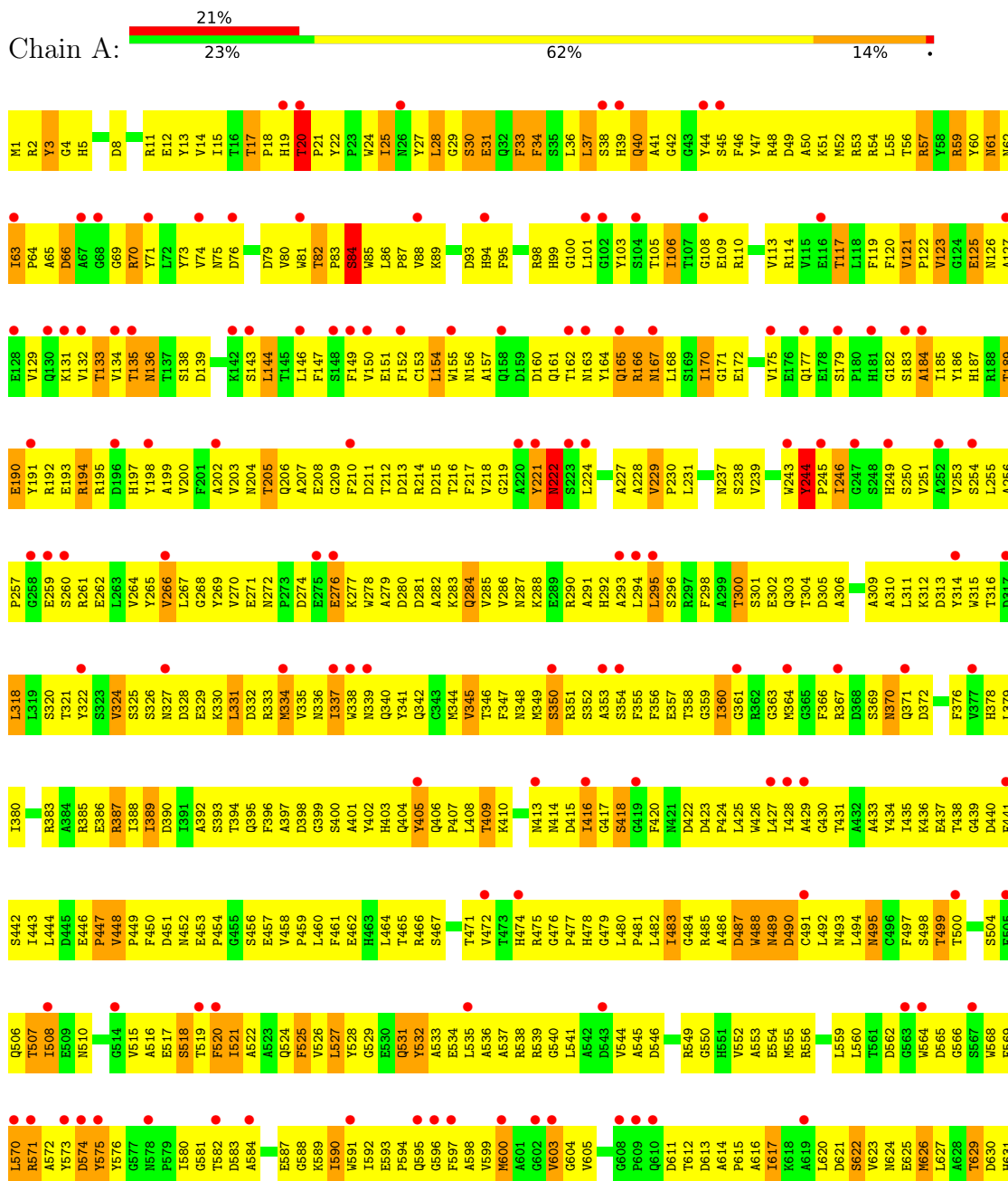
- Molecule 4 is water.

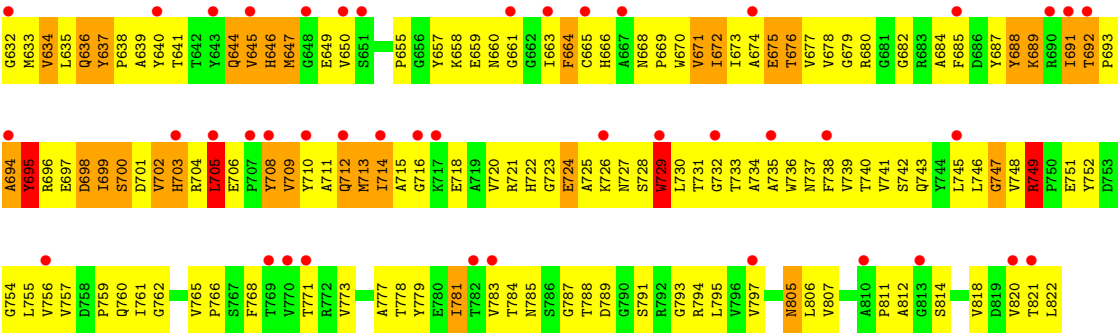
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	A	4	Total	O	0	0
			4	4		

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: Lactose Phosphorylase





● Molecule 2: beta-D-glucopyranose-(1-4)-beta-D-glucopyranose

Chain B:  100%

B6C1
B6C2

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 21 21 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	84.71 Å 92.88 Å 104.42 Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	38.54 – 3.30 38.54 – 3.30	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	98.9 (38.54-3.30) 98.8 (38.54-3.30)	Depositor EDS
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	3.45 (at 3.32 Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX 1.6.4 _486	Depositor
R, R_{free}	0.296 , 0.340 0.293 , 0.262	Depositor DCC
R_{free} test set	127 reflections (0.99%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	41.9	Xtriage
Anisotropy	0.675	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.30 , 42.0	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.50$, $\langle L^2 \rangle = 0.33$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.83	EDS
Total number of atoms	6328	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	27.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 16.17% 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: BGC, SO4

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	0.59	1/6468 (0.0%)	1.11	45/8843 (0.5%)

All (1) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	694	ALA	CA-CB	-5.84	1.44	1.53

All (45) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	749	ARG	CA-C-N	12.37	132.28	120.03
1	A	749	ARG	C-N-CA	12.37	132.28	120.03
1	A	82	THR	CA-C-N	9.14	129.33	119.28
1	A	82	THR	C-N-CA	9.14	129.33	119.28
1	A	281	ASP	N-CA-C	-9.02	102.29	113.38
1	A	692	THR	CA-C-N	8.99	128.72	119.64
1	A	692	THR	C-N-CA	8.99	128.72	119.64
1	A	244	TYR	CA-C-N	8.80	130.84	119.84
1	A	244	TYR	C-N-CA	8.80	130.84	119.84
1	A	399	GLY	N-CA-C	-7.64	104.84	113.79
1	A	453	GLU	CA-C-N	7.22	127.15	119.85
1	A	453	GLU	C-N-CA	7.22	127.15	119.85
1	A	184	ALA	N-CA-C	7.09	117.62	108.34
1	A	61	ASN	N-CA-C	-6.67	102.04	111.24
1	A	448	VAL	CA-C-N	6.57	128.01	120.98
1	A	448	VAL	C-N-CA	6.57	128.01	120.98
1	A	121	VAL	N-CA-C	-6.40	100.61	107.77
1	A	17	THR	CA-C-N	6.20	127.33	120.45
1	A	17	THR	C-N-CA	6.20	127.33	120.45
1	A	575	TYR	N-CA-C	6.00	117.82	111.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	20	THR	CA-C-N	5.94	125.14	118.97
1	A	20	THR	C-N-CA	5.94	125.14	118.97
1	A	805	ASN	N-CA-C	-5.92	105.82	113.16
1	A	479	GLY	N-CA-C	-5.84	107.59	115.36
1	A	705	LEU	N-CA-C	5.77	117.38	109.18
1	A	521	ILE	CB-CA-C	-5.73	104.64	111.81
1	A	447	PRO	CA-C-N	-5.65	118.41	123.33
1	A	447	PRO	C-N-CA	-5.65	118.41	123.33
1	A	695	TYR	N-CA-C	-5.54	106.55	113.15
1	A	712	GLN	N-CA-C	-5.41	103.35	110.43
1	A	324	VAL	N-CA-C	5.38	116.11	108.42
1	A	350	SER	N-CA-C	-5.26	100.31	108.31
1	A	414	ASN	N-CA-C	-5.22	106.31	113.30
1	A	350	SER	CB-CA-C	-5.16	110.61	116.54
1	A	57	ARG	N-CA-C	5.15	117.15	108.96
1	A	714	ILE	N-CA-C	-5.15	100.90	108.11
1	A	222	ASN	N-CA-C	5.14	117.49	109.52
1	A	709	VAL	N-CA-C	5.13	116.10	108.46
1	A	694	ALA	N-CA-C	-5.12	104.97	111.11
1	A	360	ILE	N-CA-C	-5.08	107.60	111.62
1	A	84	SER	N-CA-C	-5.07	106.79	112.87
1	A	416	ILE	N-CA-C	5.04	114.04	106.42
1	A	723	GLY	N-CA-C	-5.02	108.89	115.47
1	A	337	ILE	CB-CA-C	-5.01	103.07	111.29
1	A	487	ASP	N-CA-C	-5.00	103.45	110.35

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	6296	0	5801	1043	0
2	B	23	0	21	11	0
3	A	5	0	0	2	0
4	A	4	0	0	1	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
All	All	6328	0	5822	1045	0

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 86.

All (1045) 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:31:GLU:HA	1:A:383:ARG:HH22	1.09	1.14
1:A:334:MET:HG3	1:A:694:ALA:HB2	1.24	1.13
1:A:120:PHE:HE1	1:A:122:PRO:HB3	1.12	1.06
1:A:672:ILE:HG23	1:A:684:ALA:HB1	1.37	1.05
1:A:73:TYR:HB2	1:A:147:PHE:HB2	1.39	1.04
1:A:740:THR:HG22	1:A:745:LEU:HD13	1.41	1.03
1:A:369:SER:HA	1:A:372:ASP:HB2	1.39	1.02
1:A:322:TYR:CE1	1:A:748:VAL:HG11	1.95	1.02
1:A:334:MET:CG	1:A:694:ALA:HB2	1.90	1.01
1:A:334:MET:O	1:A:339:ASN:HB3	1.62	0.99
1:A:71:TYR:HD1	1:A:84:SER:HG	1.07	0.98
1:A:28:LEU:HB3	1:A:121:VAL:HG23	1.46	0.98
1:A:436:LYS:HG2	1:A:752:TYR:CE1	1.99	0.98
1:A:766:PRO:HA	1:A:785:ASN:HB3	1.44	0.97
1:A:418:SER:O	1:A:485:ARG:HD2	1.63	0.97
1:A:524:GLN:HA	1:A:597:PHE:HE2	1.29	0.97
1:A:25:ILE:HG22	1:A:38:SER:HA	1.42	0.97
1:A:120:PHE:CE1	1:A:122:PRO:HB3	2.00	0.97
1:A:350:SER:HB2	1:A:364:MET:HG2	1.46	0.96
1:A:436:LYS:CG	1:A:752:TYR:HE1	1.79	0.95
1:A:31:GLU:HA	1:A:383:ARG:NH2	1.81	0.95
1:A:155:TRP:CB	1:A:195:ARG:HH12	1.78	0.94
1:A:633:MET:H	1:A:668:ASN:HD21	1.13	0.94
1:A:191:TYR:OH	1:A:277:LYS:HG2	1.67	0.94
1:A:598:ALA:O	1:A:603:VAL:HG23	1.68	0.94
1:A:568:TRP:HZ3	1:A:626:MET:SD	1.91	0.94
1:A:340:GLN:NE2	1:A:378:HIS:NE2	2.16	0.93
1:A:42:GLY:HA2	1:A:69:GLY:HA3	1.50	0.93
1:A:44:TYR:CE1	1:A:54:ARG:HD2	2.04	0.93
1:A:743:GLN:HB3	1:A:749:ARG:HB2	1.51	0.93
1:A:531:GLN:O	1:A:535:LEU:HD13	1.69	0.92
1:A:788:THR:HB	1:A:791:SER:HB3	1.51	0.92
1:A:629:THR:HG23	1:A:631:HIS:H	1.34	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:388:ILE:HG21	1:A:443:ILE:HD11	1.52	0.92
1:A:52:MET:O	1:A:155:TRP:O	1.89	0.91
1:A:448:VAL:HG21	1:A:460:LEU:HD12	1.51	0.91
1:A:366:PHE:CE1	1:A:401:ALA:HB1	2.05	0.90
1:A:675:GLU:HB2	1:A:684:ALA:HB2	1.55	0.89
1:A:186:TYR:CE2	1:A:288:LYS:HD3	2.07	0.89
1:A:494:LEU:HD12	1:A:516:ALA:HB1	1.53	0.89
1:A:748:VAL:O	1:A:748:VAL:HG13	1.69	0.88
1:A:164:TYR:O	1:A:168:LEU:HD12	1.74	0.88
1:A:435:ILE:HG21	1:A:441:PHE:CE2	2.09	0.88
1:A:3:TYR:HE2	1:A:700:SER:HB2	1.37	0.87
1:A:350:SER:CB	1:A:364:MET:HG2	2.04	0.87
1:A:18:PRO:HD3	1:A:95:PHE:CD2	2.09	0.87
1:A:322:TYR:HE1	1:A:748:VAL:CG1	1.88	0.87
1:A:185:ILE:O	1:A:186:TYR:HD1	1.58	0.87
1:A:629:THR:HG22	1:A:632:GLY:H	1.40	0.87
1:A:186:TYR:HE2	1:A:288:LYS:HD3	1.40	0.86
1:A:568:TRP:CZ3	1:A:626:MET:SD	2.68	0.86
1:A:12:GLU:HG2	1:A:100:GLY:HA2	1.57	0.86
1:A:101:LEU:HB3	1:A:315:TRP:CD1	2.10	0.86
1:A:754:GLY:HA3	1:A:806:LEU:HD11	1.58	0.85
1:A:665:CYS:SG	1:A:714:ILE:HD11	2.16	0.85
1:A:25:ILE:HG22	1:A:38:SER:CA	2.05	0.85
1:A:621:ASP:O	1:A:624:ASN:HB3	1.76	0.85
1:A:488:TRP:CE3	1:A:489:ASN:HB3	2.11	0.85
1:A:350:SER:O	1:A:730:LEU:HD22	1.77	0.85
1:A:520:PHE:HB2	1:A:571:ARG:HH12	1.41	0.85
1:A:462:GLU:O	1:A:466:ARG:HG2	1.78	0.84
1:A:705:LEU:HD13	1:A:725:ALA:O	1.76	0.84
1:A:735:ALA:O	1:A:739:VAL:HG23	1.76	0.84
1:A:366:PHE:HE1	1:A:401:ALA:CB	1.91	0.84
1:A:524:GLN:HA	1:A:597:PHE:CE2	2.12	0.84
1:A:155:TRP:HB3	1:A:195:ARG:HH12	1.40	0.84
1:A:685:PHE:CE1	1:A:761:ILE:HD11	2.13	0.84
1:A:385:ARG:HB2	1:A:434:TYR:OH	1.78	0.83
1:A:629:THR:HG22	1:A:632:GLY:N	1.93	0.83
1:A:48:ARG:NH2	1:A:408:LEU:O	2.11	0.83
1:A:3:TYR:CE2	1:A:700:SER:HB2	2.13	0.83
1:A:417:GLY:HA2	1:A:506:GLN:O	1.79	0.83
1:A:315:TRP:CZ2	1:A:341:TYR:HE2	1.97	0.82
1:A:671:VAL:O	1:A:674:ALA:HB3	1.79	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:322:TYR:CE1	1:A:748:VAL:CG1	2.60	0.82
1:A:729:TRP:HE3	1:A:729:TRP:O	1.60	0.82
1:A:675:GLU:OE2	1:A:675:GLU:HA	1.80	0.82
1:A:28:LEU:HD11	1:A:37:LEU:HD23	1.60	0.82
1:A:184:ALA:HB2	1:A:202:ALA:HB2	1.61	0.82
1:A:342:GLN:HG2	1:A:734:ALA:HB1	1.61	0.82
1:A:728:SER:O	1:A:729:TRP:HB2	1.78	0.82
1:A:435:ILE:HG21	1:A:441:PHE:HE2	1.43	0.82
1:A:186:TYR:HE2	1:A:288:LYS:CD	1.94	0.81
1:A:519:THR:HG21	1:A:570:LEU:O	1.80	0.81
1:A:749:ARG:O	1:A:756:VAL:HB	1.81	0.81
1:A:528:TYR:HA	1:A:531:GLN:HB2	1.63	0.81
1:A:194:ARG:H	1:A:194:ARG:HD3	1.46	0.80
1:A:483:ILE:HG13	1:A:518:SER:HB2	1.63	0.80
1:A:693:PRO:HA	1:A:696:ARG:CB	2.10	0.80
1:A:11:ARG:O	1:A:12:GLU:HG3	1.81	0.80
1:A:216:THR:HG21	1:A:238:SER:HB3	1.63	0.80
1:A:783:VAL:HG22	1:A:820:VAL:HG12	1.64	0.80
1:A:335:VAL:HG22	1:A:741:VAL:HG21	1.63	0.80
1:A:692:THR:HG23	1:A:693:PRO:HD2	1.64	0.79
1:A:194:ARG:H	1:A:194:ARG:CD	1.93	0.79
1:A:31:GLU:CA	1:A:383:ARG:HH22	1.91	0.79
1:A:71:TYR:HE1	1:A:84:SER:HB2	1.46	0.79
1:A:339:ASN:HD21	1:A:738:PHE:HA	1.46	0.79
1:A:423:ASP:HB2	1:A:424:PRO:HD3	1.63	0.79
1:A:218:VAL:HG13	1:A:227:ALA:HA	1.65	0.79
1:A:623:VAL:HG23	1:A:627:LEU:HD22	1.65	0.78
1:A:79:ASP:OD1	1:A:110:ARG:NH2	2.17	0.78
1:A:106:ILE:HD12	1:A:119:PHE:HE2	1.49	0.78
1:A:370:ASN:OD1	1:A:427:LEU:HA	1.83	0.78
1:A:11:ARG:HH22	1:A:316:THR:HG23	1.48	0.78
1:A:153:CYS:O	1:A:155:TRP:N	2.16	0.78
1:A:106:ILE:CD1	1:A:119:PHE:HE2	1.97	0.78
1:A:494:LEU:CD1	1:A:516:ALA:HB1	2.13	0.78
1:A:520:PHE:HB2	1:A:571:ARG:NH1	1.99	0.78
1:A:596:GLY:O	1:A:600:MET:HG3	1.84	0.78
1:A:604:GLY:O	1:A:616:ALA:HB2	1.84	0.78
1:A:152:PHE:CD2	1:A:187:HIS:HB2	2.19	0.77
1:A:366:PHE:HE1	1:A:401:ALA:HB1	1.44	0.77
1:A:592:ILE:HB	1:A:627:LEU:HD23	1.66	0.77
1:A:614:ALA:HB3	1:A:617:ILE:CG1	2.14	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:536:ALA:O	1:A:539:ARG:HB3	1.84	0.77
1:A:574:ASP:HB3	1:A:580:ILE:HD11	1.67	0.77
1:A:672:ILE:CG2	1:A:684:ALA:HB1	2.14	0.77
1:A:425:LEU:HD11	1:A:525:PHE:HB2	1.66	0.77
1:A:436:LYS:HG3	1:A:752:TYR:HE1	1.50	0.77
1:A:541:LEU:HB3	1:A:544:VAL:HG12	1.65	0.77
1:A:385:ARG:HB2	1:A:434:TYR:CZ	2.19	0.77
1:A:12:GLU:HA	1:A:338:TRP:CZ2	2.20	0.77
1:A:328:ASP:OD1	1:A:330:LYS:HB2	1.84	0.77
1:A:685:PHE:CE2	1:A:689:LYS:HD2	2.20	0.76
1:A:637:TYR:C	1:A:637:TYR:CD2	2.64	0.76
1:A:272:ASN:ND2	1:A:287:ASN:HB3	2.01	0.76
1:A:59:ARG:HH12	1:A:214:ARG:HH12	1.34	0.76
1:A:189:THR:O	1:A:190:GLU:HB2	1.86	0.76
1:A:429:ALA:HB2	1:A:528:TYR:CZ	2.20	0.76
1:A:552:VAL:O	1:A:556:ARG:N	2.18	0.76
1:A:315:TRP:CZ2	1:A:341:TYR:CE2	2.74	0.75
1:A:388:ILE:CG2	1:A:443:ILE:HD11	2.16	0.75
1:A:674:ALA:O	1:A:678:VAL:HG23	1.87	0.75
1:A:131:LYS:HB2	1:A:304:THR:HG21	1.67	0.75
1:A:571:ARG:HG2	1:A:591:TRP:CG	2.22	0.75
1:A:218:VAL:O	1:A:222:ASN:OD1	2.04	0.75
1:A:806:LEU:HD12	1:A:807:VAL:H	1.51	0.75
1:A:44:TYR:CE1	1:A:54:ARG:CD	2.69	0.75
1:A:685:PHE:O	1:A:689:LYS:HG2	1.86	0.75
1:A:564:TRP:NE1	1:A:566:GLY:HA2	2.02	0.75
1:A:227:ALA:O	1:A:231:LEU:HD13	1.87	0.75
1:A:495:ASN:N	1:A:495:ASN:HD22	1.84	0.74
1:A:342:GLN:HG2	1:A:734:ALA:CB	2.17	0.74
1:A:759:PRO:O	1:A:760:GLN:HG2	1.87	0.74
1:A:477:PRO:HG3	1:A:515:VAL:CG1	2.17	0.74
1:A:367:ARG:O	1:A:371:GLN:HG3	1.88	0.74
1:A:366:PHE:CE1	1:A:401:ALA:CB	2.70	0.74
1:A:520:PHE:CB	1:A:571:ARG:HH12	2.01	0.74
1:A:689:LYS:HE2	1:A:695:TYR:CE1	2.21	0.74
1:A:689:LYS:HE2	1:A:695:TYR:HE1	1.52	0.74
1:A:278:TRP:HE3	1:A:285:VAL:O	1.71	0.73
1:A:685:PHE:CD2	1:A:689:LYS:HD2	2.23	0.73
1:A:378:HIS:HA	1:A:437:GLU:OE2	1.88	0.73
1:A:617:ILE:CG2	1:A:680:ARG:HH21	2.01	0.73
1:A:221:TYR:N	1:A:221:TYR:CD1	2.51	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:489:ASN:HB2	2:B:2:BGC:O6	1.88	0.73
1:A:291:ALA:O	1:A:295:LEU:HD12	1.86	0.73
1:A:370:ASN:OD1	1:A:426:TRP:C	2.32	0.73
1:A:187:HIS:O	1:A:198:TYR:HB2	1.88	0.73
1:A:478:HIS:HB2	1:A:480:LEU:HD12	1.70	0.73
1:A:28:LEU:CD1	1:A:37:LEU:HD23	2.18	0.73
1:A:75:ASN:HA	1:A:79:ASP:O	1.87	0.73
1:A:694:ALA:HB3	1:A:695:TYR:CD2	2.24	0.73
1:A:167:ASN:OD1	1:A:167:ASN:C	2.32	0.72
1:A:322:TYR:HE1	1:A:748:VAL:HG11	1.44	0.72
1:A:587:GLU:OE2	1:A:641:THR:OG1	2.06	0.72
1:A:665:CYS:SG	1:A:714:ILE:CD1	2.77	0.72
1:A:684:ALA:O	1:A:687:TYR:HB2	1.90	0.72
1:A:436:LYS:HG2	1:A:752:TYR:CD1	2.23	0.72
1:A:448:VAL:HG21	1:A:460:LEU:CD1	2.19	0.72
1:A:673:ILE:O	1:A:677:VAL:N	2.18	0.72
1:A:185:ILE:O	1:A:186:TYR:CD1	2.42	0.72
1:A:28:LEU:CB	1:A:121:VAL:HG23	2.19	0.72
1:A:693:PRO:C	1:A:696:ARG:H	1.98	0.72
1:A:185:ILE:C	1:A:186:TYR:CD1	2.68	0.71
1:A:187:HIS:NE2	1:A:189:THR:OG1	2.23	0.71
1:A:475:ARG:HA	1:A:482:LEU:HD13	1.73	0.71
1:A:520:PHE:C	1:A:520:PHE:CD2	2.68	0.71
1:A:694:ALA:HB3	1:A:695:TYR:HD2	1.55	0.71
1:A:345:VAL:HB	1:A:729:TRP:CZ3	2.25	0.71
1:A:28:LEU:HB3	1:A:121:VAL:CG2	2.20	0.71
1:A:79:ASP:CG	1:A:110:ARG:HH21	1.99	0.71
1:A:535:LEU:HD11	1:A:752:TYR:OH	1.91	0.71
1:A:617:ILE:HG22	1:A:680:ARG:HH21	1.56	0.71
1:A:673:ILE:O	1:A:677:VAL:HG23	1.91	0.71
1:A:806:LEU:HD12	1:A:807:VAL:N	2.06	0.71
1:A:106:ILE:CD1	1:A:119:PHE:CE2	2.73	0.71
1:A:99:HIS:CD2	1:A:708:TYR:OH	2.43	0.71
1:A:215:ASP:O	1:A:219:GLY:N	2.21	0.71
1:A:322:TYR:CZ	1:A:748:VAL:HG11	2.26	0.70
1:A:614:ALA:HB3	1:A:617:ILE:HG12	1.73	0.70
1:A:138:SER:O	1:A:257:PRO:HB3	1.90	0.70
1:A:664:PHE:HE2	2:B:2:BGC:H6C2	1.56	0.70
1:A:342:GLN:OE1	1:A:710:TYR:N	2.20	0.70
1:A:450:PHE:O	1:A:451:ASP:HB3	1.88	0.70
1:A:348:ASN:O	1:A:364:MET:CE	2.39	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:30:SER:HB3	1:A:344:MET:HE2	1.73	0.69
1:A:436:LYS:CG	1:A:752:TYR:CE1	2.62	0.69
1:A:33:PHE:HD2	1:A:33:PHE:O	1.75	0.69
1:A:339:ASN:HD21	1:A:738:PHE:CA	2.06	0.69
1:A:751:GLU:HG3	1:A:752:TYR:N	2.07	0.69
1:A:175:VAL:HG21	1:A:210:PHE:CE1	2.28	0.69
1:A:423:ASP:HA	1:A:426:TRP:HD1	1.58	0.69
1:A:98:ARG:H	1:A:105:THR:HG23	1.56	0.69
1:A:191:TYR:HA	1:A:195:ARG:HB2	1.74	0.69
1:A:203:VAL:HG23	1:A:265:TYR:CE2	2.28	0.69
1:A:706:GLU:HB2	1:A:709:VAL:HG22	1.75	0.69
1:A:794:ARG:O	1:A:820:VAL:HA	1.93	0.69
1:A:40:GLN:HA	1:A:40:GLN:OE1	1.91	0.69
1:A:565:ASP:HB3	1:A:568:TRP:CD1	2.28	0.69
1:A:171:GLY:HA2	1:A:189:THR:HG23	1.73	0.68
1:A:370:ASN:OD1	1:A:427:LEU:N	2.27	0.68
1:A:695:TYR:CD2	1:A:695:TYR:N	2.59	0.68
1:A:351:ARG:NH2	1:A:732:GLY:CA	2.56	0.68
1:A:705:LEU:CD1	1:A:725:ALA:O	2.41	0.68
1:A:311:LEU:HD12	1:A:312:LYS:N	2.08	0.68
1:A:370:ASN:OD1	1:A:427:LEU:CA	2.41	0.68
1:A:600:MET:HE3	1:A:673:ILE:HD11	1.75	0.68
1:A:522:ALA:O	1:A:526:VAL:HG23	1.94	0.68
1:A:12:GLU:CA	1:A:338:TRP:HZ2	2.06	0.68
1:A:748:VAL:O	1:A:748:VAL:CG1	2.42	0.68
1:A:313:ASP:HA	1:A:316:THR:HB	1.76	0.68
1:A:646:HIS:H	1:A:646:HIS:CD2	2.11	0.67
1:A:12:GLU:HA	1:A:338:TRP:HZ2	1.57	0.67
1:A:71:TYR:CE1	1:A:84:SER:HB2	2.28	0.67
1:A:286:VAL:O	1:A:288:LYS:HG2	1.95	0.67
1:A:354:SER:H	1:A:357:GLU:HB2	1.60	0.67
1:A:424:PRO:O	1:A:467:SER:HB3	1.95	0.67
1:A:519:THR:HG23	1:A:594:PRO:HB3	1.76	0.67
1:A:565:ASP:OD2	1:A:568:TRP:NE1	2.27	0.67
1:A:592:ILE:HG22	1:A:635:LEU:O	1.93	0.67
1:A:711:ALA:CB	1:A:728:SER:HA	2.24	0.67
1:A:44:TYR:CD1	1:A:54:ARG:HD2	2.30	0.67
1:A:487:ASP:O	1:A:488:TRP:C	2.37	0.67
1:A:520:PHE:HE1	1:A:670:TRP:CZ3	2.12	0.67
1:A:600:MET:SD	1:A:673:ILE:HD11	2.34	0.67
1:A:740:THR:HG22	1:A:745:LEU:CD1	2.21	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:350:SER:O	1:A:730:LEU:CD2	2.42	0.67
1:A:28:LEU:HD11	1:A:37:LEU:CD2	2.25	0.67
1:A:172:GLU:OE2	1:A:192:ARG:NE	2.28	0.67
1:A:184:ALA:CB	1:A:202:ALA:HB2	2.25	0.67
1:A:200:VAL:HG21	1:A:291:ALA:HB1	1.77	0.67
1:A:378:HIS:CE1	1:A:379:LEU:HD12	2.29	0.67
1:A:462:GLU:OE1	1:A:462:GLU:HA	1.94	0.67
1:A:695:TYR:HD2	1:A:695:TYR:N	1.92	0.67
1:A:71:TYR:HE1	1:A:84:SER:CB	2.08	0.66
1:A:34:PHE:HE1	1:A:348:ASN:ND2	1.92	0.66
1:A:221:TYR:N	1:A:221:TYR:HD1	1.91	0.66
1:A:12:GLU:C	1:A:338:TRP:HZ2	2.04	0.66
1:A:475:ARG:CA	1:A:482:LEU:HD13	2.25	0.66
1:A:205:THR:OG1	1:A:261:ARG:NH2	2.28	0.66
1:A:216:THR:CG2	1:A:238:SER:HB3	2.24	0.66
1:A:675:GLU:CB	1:A:684:ALA:HB2	2.26	0.66
1:A:532:TYR:C	1:A:532:TYR:CD2	2.74	0.66
1:A:422:ASP:OD2	1:A:426:TRP:NE1	2.28	0.65
1:A:520:PHE:HD1	1:A:593:GLU:HB3	1.61	0.65
1:A:582:THR:HG22	1:A:584:ALA:H	1.61	0.65
1:A:639:ALA:HB3	1:A:718:GLU:OE2	1.94	0.65
1:A:385:ARG:NH2	1:A:440:ASP:OD2	2.29	0.65
1:A:202:ALA:HB3	1:A:295:LEU:CD2	2.25	0.65
1:A:45:SER:HG	1:A:70:ARG:HH22	1.43	0.65
1:A:153:CYS:C	1:A:155:TRP:H	2.05	0.65
1:A:721:ARG:O	1:A:724:GLU:CB	2.44	0.65
1:A:155:TRP:CZ2	1:A:198:TYR:HA	2.32	0.65
1:A:81:TRP:HZ2	1:A:113:VAL:HG23	1.61	0.65
1:A:388:ILE:HG21	1:A:443:ILE:CD1	2.26	0.65
1:A:106:ILE:HD12	1:A:119:PHE:CE2	2.29	0.64
1:A:639:ALA:HB2	1:A:661:GLY:HA3	1.79	0.64
1:A:269:TYR:CE2	1:A:271:GLU:OE1	2.50	0.64
1:A:629:THR:CG2	1:A:631:HIS:H	2.08	0.64
1:A:185:ILE:HG22	1:A:186:TYR:N	2.12	0.64
1:A:18:PRO:HB3	1:A:40:GLN:HE22	1.62	0.64
1:A:673:ILE:HG22	1:A:740:THR:HG23	1.79	0.64
1:A:345:VAL:HG21	1:A:729:TRP:CH2	2.32	0.64
1:A:699:ILE:O	1:A:701:ASP:N	2.31	0.64
1:A:292:HIS:ND1	4:A:827:HOH:O	2.08	0.64
1:A:136:ASN:C	1:A:136:ASN:OD1	2.42	0.63
1:A:243:TRP:O	1:A:245:PRO:HD3	1.98	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:42:GLY:HA2	1:A:69:GLY:CA	2.25	0.63
1:A:54:ARG:NH1	1:A:157:ALA:HB2	2.13	0.63
1:A:378:HIS:CB	1:A:437:GLU:OE2	2.46	0.63
1:A:378:HIS:CA	1:A:437:GLU:OE2	2.46	0.63
1:A:73:TYR:N	1:A:147:PHE:O	2.28	0.63
1:A:150:VAL:O	1:A:246:ILE:HB	1.99	0.63
1:A:475:ARG:HB2	1:A:480:LEU:O	1.99	0.63
1:A:163:ASN:O	1:A:167:ASN:HB3	1.97	0.63
1:A:731:THR:HA	3:A:823:SO4:O4	1.99	0.63
1:A:164:TYR:HB3	1:A:168:LEU:HD11	1.81	0.63
1:A:170:ILE:O	1:A:189:THR:HG23	1.98	0.63
1:A:396:PHE:HB2	1:A:400:SER:O	1.99	0.63
1:A:5:HIS:HA	1:A:697:GLU:OE1	1.99	0.63
1:A:81:TRP:CZ2	1:A:113:VAL:HG23	2.33	0.63
1:A:478:HIS:CB	1:A:480:LEU:HD12	2.28	0.63
1:A:517:GLU:O	1:A:572:ALA:HB1	1.99	0.63
1:A:565:ASP:CB	1:A:568:TRP:CD1	2.81	0.62
1:A:614:ALA:HB3	1:A:617:ILE:HG13	1.79	0.62
1:A:25:ILE:CG2	1:A:38:SER:HA	2.26	0.62
1:A:106:ILE:HD11	1:A:119:PHE:CE2	2.33	0.62
1:A:526:VAL:HA	1:A:552:VAL:HG13	1.81	0.62
1:A:629:THR:HG23	1:A:631:HIS:N	2.11	0.62
1:A:217:PHE:HD2	1:A:218:VAL:HG23	1.63	0.62
1:A:354:SER:N	1:A:357:GLU:HB2	2.13	0.62
1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CD2	2.66	0.62
1:A:54:ARG:NH1	1:A:157:ALA:CB	2.63	0.62
1:A:71:TYR:CE1	1:A:84:SER:CB	2.83	0.62
1:A:423:ASP:HA	1:A:426:TRP:CD1	2.34	0.62
1:A:69:GLY:N	1:A:71:TYR:CE2	2.68	0.62
1:A:311:LEU:O	1:A:314:TYR:HB3	1.99	0.62
1:A:525:PHE:C	1:A:525:PHE:CD2	2.78	0.62
1:A:483:ILE:HG23	1:A:484:GLY:O	2.00	0.62
1:A:490:ASP:HB2	1:A:506:GLN:HE21	1.64	0.62
1:A:793:GLY:HA3	1:A:820:VAL:HG22	1.82	0.62
1:A:450:PHE:O	1:A:451:ASP:CB	2.45	0.62
1:A:685:PHE:CD2	1:A:689:LYS:CD	2.82	0.62
1:A:715:ALA:N	1:A:724:GLU:O	2.32	0.62
1:A:366:PHE:CD1	1:A:401:ALA:HB1	2.34	0.62
1:A:640:TYR:H	1:A:660:ASN:HD21	1.48	0.62
1:A:711:ALA:HA	1:A:728:SER:HA	1.81	0.62
1:A:408:LEU:HD23	1:A:409:THR:N	2.15	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:274:ASP:O	1:A:277:LYS:HB2	1.99	0.61
1:A:574:ASP:HB3	1:A:580:ILE:CD1	2.29	0.61
1:A:751:GLU:HG3	1:A:752:TYR:H	1.63	0.61
1:A:337:ILE:HG22	1:A:338:TRP:N	2.14	0.61
1:A:448:VAL:CG1	1:A:449:PRO:HD2	2.30	0.61
1:A:278:TRP:CE3	1:A:285:VAL:O	2.53	0.61
1:A:33:PHE:O	1:A:33:PHE:CD2	2.54	0.61
1:A:79:ASP:CG	1:A:110:ARG:NH2	2.57	0.61
1:A:536:ALA:O	1:A:539:ARG:CB	2.49	0.61
1:A:754:GLY:CA	1:A:806:LEU:HD11	2.28	0.61
1:A:353:ALA:O	1:A:730:LEU:CD1	2.49	0.61
1:A:504:SER:HB3	1:A:507:THR:HG23	1.81	0.61
1:A:710:TYR:CE1	1:A:737:ASN:ND2	2.69	0.61
1:A:420:PHE:HB2	1:A:423:ASP:OD2	2.01	0.61
1:A:101:LEU:O	1:A:315:TRP:CD1	2.54	0.61
1:A:418:SER:O	1:A:485:ARG:CD	2.45	0.61
1:A:184:ALA:HB2	1:A:202:ALA:CB	2.29	0.61
1:A:483:ILE:HG13	1:A:518:SER:CB	2.29	0.61
1:A:191:TYR:CE2	1:A:278:TRP:CH2	2.89	0.60
1:A:329:GLU:HG3	1:A:330:LYS:H	1.66	0.60
1:A:714:ILE:HA	1:A:725:ALA:HA	1.81	0.60
1:A:47:TYR:O	1:A:49:ASP:N	2.31	0.60
1:A:300:THR:OG1	1:A:303:GLN:OE1	2.10	0.60
1:A:369:SER:O	1:A:372:ASP:N	2.34	0.60
1:A:743:GLN:O	1:A:747:GLY:HA2	2.00	0.60
1:A:33:PHE:CD2	1:A:33:PHE:C	2.79	0.60
1:A:334:MET:HG3	1:A:694:ALA:CB	2.17	0.60
1:A:564:TRP:HE1	1:A:566:GLY:HA2	1.65	0.60
1:A:22:TYR:HB2	1:A:704:ARG:HG2	1.83	0.60
1:A:24:TRP:HB2	1:A:39:HIS:HD2	1.65	0.60
1:A:623:VAL:HG23	1:A:627:LEU:CD2	2.32	0.60
1:A:62:ASN:OD1	1:A:63:ILE:N	2.34	0.60
1:A:742:SER:O	1:A:748:VAL:HG12	2.02	0.60
1:A:101:LEU:CB	1:A:315:TRP:CD1	2.85	0.60
1:A:600:MET:CE	1:A:673:ILE:HD11	2.32	0.60
1:A:378:HIS:CE1	1:A:379:LEU:CD1	2.84	0.60
1:A:435:ILE:O	1:A:439:GLY:N	2.32	0.60
1:A:448:VAL:HG13	1:A:449:PRO:HD2	1.84	0.60
1:A:556:ARG:O	1:A:560:LEU:HD12	2.01	0.60
1:A:191:TYR:CZ	1:A:277:LYS:HG2	2.37	0.59
1:A:743:GLN:HB3	1:A:749:ARG:CB	2.29	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:191:TYR:CE2	1:A:286:VAL:HG12	2.37	0.59
1:A:22:TYR:O	1:A:24:TRP:CD1	2.55	0.59
1:A:703:HIS:O	1:A:704:ARG:HB3	2.02	0.59
1:A:200:VAL:O	1:A:267:LEU:HA	2.02	0.59
1:A:360:ILE:HG13	1:A:361:GLY:H	1.68	0.59
1:A:433:ALA:O	1:A:434:TYR:C	2.44	0.59
1:A:524:GLN:CA	1:A:597:PHE:CE2	2.85	0.59
1:A:525:PHE:CD2	1:A:555:MET:HG2	2.37	0.59
1:A:623:VAL:HG23	1:A:627:LEU:HB2	1.84	0.59
1:A:741:VAL:HA	1:A:745:LEU:HB2	1.84	0.59
1:A:793:GLY:HA2	1:A:822:LEU:HB3	1.84	0.59
1:A:778:THR:C	1:A:779:TYR:HD2	2.11	0.59
1:A:327:ASN:OD1	1:A:328:ASP:N	2.36	0.58
1:A:541:LEU:HB3	1:A:544:VAL:CG1	2.32	0.58
1:A:590:ILE:HG23	1:A:627:LEU:HD11	1.85	0.58
1:A:31:GLU:CA	1:A:383:ARG:NH2	2.60	0.58
1:A:82:THR:HG22	1:A:84:SER:OG	2.03	0.58
1:A:571:ARG:HG2	1:A:591:TRP:CB	2.32	0.58
1:A:535:LEU:HD11	1:A:752:TYR:CE2	2.38	0.58
1:A:575:TYR:HD2	1:A:576:TYR:CE2	2.21	0.58
1:A:665:CYS:O	1:A:669:PRO:HD2	2.03	0.58
1:A:30:SER:CB	1:A:344:MET:HE2	2.33	0.58
1:A:497:PHE:CE2	1:A:646:HIS:HA	2.39	0.58
1:A:635:LEU:HD13	1:A:659:GLU:HA	1.85	0.58
1:A:666:HIS:HE2	1:A:736:TRP:CD1	2.21	0.58
1:A:62:ASN:OD1	1:A:64:PRO:O	2.22	0.58
1:A:195:ARG:HD2	1:A:197:HIS:NE2	2.18	0.58
1:A:634:VAL:HA	1:A:663:ILE:HA	1.85	0.58
1:A:788:THR:HG22	1:A:789:ASP:O	2.04	0.58
1:A:152:PHE:CE2	1:A:187:HIS:HB2	2.39	0.58
1:A:356:PHE:CD2	1:A:727:ASN:HA	2.38	0.58
1:A:360:ILE:HG13	1:A:361:GLY:N	2.19	0.58
1:A:446:GLU:O	1:A:459:PRO:HA	2.04	0.58
1:A:481:PRO:CD	1:A:522:ALA:HB2	2.34	0.58
1:A:494:LEU:HB2	1:A:495:ASN:ND2	2.19	0.58
1:A:527:LEU:HD12	1:A:527:LEU:O	2.03	0.58
1:A:125:GLU:CD	1:A:298:PHE:CE2	2.81	0.58
1:A:29:GLY:O	1:A:34:PHE:CD1	2.56	0.58
1:A:569:PHE:HD2	1:A:595:GLN:OE1	1.86	0.58
1:A:4:GLY:HA3	1:A:14:VAL:O	2.04	0.57
1:A:504:SER:O	1:A:508:ILE:HB	2.04	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:135:THR:HG23	1:A:260:SER:CB	2.34	0.57
1:A:185:ILE:C	1:A:186:TYR:HD1	2.09	0.57
1:A:276:GLU:O	1:A:287:ASN:ND2	2.37	0.57
1:A:351:ARG:HH21	1:A:732:GLY:N	2.02	0.57
1:A:428:ILE:HG13	1:A:464:LEU:HD22	1.86	0.57
1:A:429:ALA:CB	1:A:528:TYR:CZ	2.88	0.57
1:A:622:SER:O	1:A:626:MET:HG3	2.03	0.57
1:A:664:PHE:O	1:A:665:CYS:C	2.48	0.57
1:A:212:THR:HA	1:A:246:ILE:O	2.05	0.57
1:A:349:MET:HE2	1:A:349:MET:HA	1.85	0.57
1:A:535:LEU:CD1	1:A:752:TYR:HE2	2.17	0.57
1:A:74:VAL:O	1:A:80:VAL:HA	2.05	0.57
1:A:471:THR:O	1:A:474:HIS:N	2.37	0.57
1:A:19:HIS:HE1	1:A:85:TRP:CZ2	2.23	0.57
1:A:202:ALA:HB3	1:A:295:LEU:HD23	1.85	0.57
1:A:262:GLU:OE1	1:A:301:SER:CB	2.53	0.57
1:A:553:ALA:O	1:A:554:GLU:C	2.46	0.57
1:A:185:ILE:HG22	1:A:186:TYR:H	1.69	0.57
1:A:451:ASP:O	1:A:452:ASN:HB2	2.04	0.57
1:A:117:THR:HG21	1:A:119:PHE:CZ	2.40	0.57
1:A:266:VAL:HG12	1:A:266:VAL:O	2.04	0.57
1:A:497:PHE:CE2	1:A:646:HIS:HB3	2.40	0.57
1:A:84:SER:HB2	1:A:86:LEU:O	2.05	0.56
1:A:11:ARG:NH1	1:A:316:THR:OG1	2.34	0.56
1:A:36:LEU:O	1:A:70:ARG:NH1	2.39	0.56
1:A:46:PHE:CG	1:A:50:ALA:HB2	2.41	0.56
1:A:415:ASP:O	1:A:416:ILE:HD13	2.04	0.56
1:A:729:TRP:O	1:A:729:TRP:CE3	2.51	0.56
1:A:40:GLN:O	1:A:41:ALA:HB3	2.06	0.56
1:A:191:TYR:HE2	1:A:278:TRP:CZ3	2.22	0.56
1:A:202:ALA:CB	1:A:295:LEU:CD2	2.83	0.56
1:A:721:ARG:O	1:A:724:GLU:HB2	2.05	0.56
1:A:334:MET:SD	1:A:694:ALA:HB2	2.46	0.56
1:A:394:THR:HG21	1:A:405:TYR:HB3	1.87	0.56
1:A:752:TYR:CD1	1:A:752:TYR:N	2.73	0.56
1:A:604:GLY:O	1:A:616:ALA:CB	2.53	0.56
1:A:282:ALA:C	1:A:283:LYS:HG3	2.31	0.56
1:A:66:ASP:CG	1:A:66:ASP:O	2.49	0.56
1:A:120:PHE:CE1	1:A:122:PRO:CB	2.84	0.56
1:A:293:ALA:O	1:A:296:SER:HB3	2.06	0.56
1:A:571:ARG:HD2	1:A:571:ARG:O	2.05	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:699:ILE:HD13	1:A:702:VAL:HB	1.86	0.56
1:A:99:HIS:HD2	1:A:708:TYR:CZ	2.24	0.56
1:A:380:ILE:CG2	1:A:383:ARG:HB2	2.36	0.56
1:A:741:VAL:O	1:A:742:SER:C	2.49	0.56
1:A:18:PRO:HB3	1:A:40:GLN:NE2	2.21	0.56
1:A:330:LYS:HB3	1:A:695:TYR:CE2	2.41	0.56
1:A:475:ARG:C	1:A:482:LEU:HD13	2.31	0.56
1:A:519:THR:CG2	1:A:570:LEU:O	2.51	0.56
1:A:761:ILE:CG2	1:A:785:ASN:ND2	2.69	0.56
1:A:60:TYR:O	1:A:61:ASN:C	2.49	0.55
1:A:156:ASN:OD1	1:A:156:ASN:C	2.49	0.55
1:A:177:GLN:O	1:A:183:SER:HB3	2.06	0.55
1:A:322:TYR:HE1	1:A:748:VAL:HG13	1.69	0.55
1:A:79:ASP:OD2	1:A:110:ARG:NH2	2.40	0.55
1:A:673:ILE:CG2	1:A:740:THR:HG23	2.36	0.55
1:A:389:ILE:CG1	1:A:448:VAL:HG22	2.36	0.55
1:A:57:ARG:NH1	1:A:151:GLU:OE2	2.39	0.55
1:A:244:TYR:CD2	1:A:244:TYR:N	2.73	0.55
1:A:117:THR:HG21	1:A:119:PHE:CE2	2.42	0.55
1:A:3:TYR:CE2	1:A:700:SER:CB	2.88	0.55
1:A:41:ALA:O	1:A:70:ARG:HG2	2.07	0.55
1:A:147:PHE:CE2	1:A:230:PRO:HA	2.41	0.55
1:A:293:ALA:HA	1:A:296:SER:HB3	1.88	0.55
1:A:322:TYR:OH	1:A:748:VAL:CG1	2.55	0.55
1:A:397:ALA:HA	1:A:450:PHE:CE1	2.42	0.55
1:A:535:LEU:HD11	1:A:752:TYR:CZ	2.42	0.55
1:A:695:TYR:HD2	1:A:695:TYR:H	1.53	0.55
1:A:85:TRP:O	1:A:89:LYS:N	2.40	0.55
1:A:349:MET:HB2	1:A:730:LEU:HD21	1.89	0.55
1:A:460:LEU:O	1:A:460:LEU:HG	2.06	0.55
1:A:646:HIS:H	1:A:646:HIS:HD2	1.53	0.55
1:A:728:SER:O	1:A:729:TRP:CB	2.51	0.55
1:A:101:LEU:C	1:A:315:TRP:NE1	2.65	0.55
1:A:165:GLN:HG3	1:A:166:ARG:H	1.72	0.55
1:A:218:VAL:HA	1:A:228:ALA:H	1.71	0.55
1:A:202:ALA:CB	1:A:295:LEU:HD22	2.37	0.55
1:A:524:GLN:CB	1:A:597:PHE:CE2	2.90	0.54
1:A:31:GLU:OE1	1:A:123:VAL:HG12	2.06	0.54
1:A:425:LEU:CD1	1:A:525:PHE:HB2	2.36	0.54
1:A:429:ALA:HB2	1:A:528:TYR:CE2	2.42	0.54
1:A:544:VAL:O	1:A:544:VAL:HG22	2.07	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:582:THR:HG22	1:A:583:ASP:N	2.22	0.54
1:A:57:ARG:HD2	1:A:151:GLU:OE2	2.07	0.54
1:A:204:ASN:CG	1:A:264:VAL:HG12	2.33	0.54
1:A:743:GLN:CB	1:A:749:ARG:HB2	2.31	0.54
1:A:171:GLY:HA2	1:A:189:THR:CG2	2.38	0.54
1:A:668:ASN:ND2	1:A:691:ILE:HG21	2.23	0.54
1:A:199:ALA:HA	1:A:268:GLY:O	2.08	0.54
1:A:339:ASN:HD21	1:A:738:PHE:CB	2.20	0.54
1:A:2:ARG:C	1:A:3:TYR:CD2	2.85	0.54
1:A:452:ASN:O	1:A:454:PRO:HD3	2.08	0.54
1:A:480:LEU:HB2	1:A:517:GLU:CD	2.33	0.54
1:A:155:TRP:HB3	1:A:195:ARG:NH1	2.18	0.54
1:A:202:ALA:O	1:A:265:TYR:HA	2.07	0.54
1:A:334:MET:O	1:A:339:ASN:CB	2.47	0.54
1:A:788:THR:O	1:A:791:SER:HB3	2.08	0.54
1:A:255:LEU:HD13	1:A:260:SER:HA	1.90	0.54
1:A:604:GLY:O	1:A:616:ALA:N	2.38	0.54
1:A:699:ILE:O	1:A:700:SER:C	2.49	0.54
1:A:705:LEU:HD22	1:A:728:SER:HB3	1.90	0.54
1:A:710:TYR:CD1	1:A:733:THR:HG22	2.43	0.54
1:A:49:ASP:HB2	1:A:408:LEU:HB2	1.90	0.54
1:A:621:ASP:OD1	1:A:680:ARG:NH2	2.40	0.54
1:A:685:PHE:CD1	1:A:761:ILE:HD11	2.42	0.54
1:A:272:ASN:OD1	1:A:290:ARG:HD3	2.08	0.53
1:A:321:THR:HG23	1:A:773:VAL:HB	1.88	0.53
1:A:11:ARG:NH2	1:A:316:THR:HG23	2.21	0.53
1:A:449:PRO:HB3	1:A:457:GLU:HG3	1.90	0.53
1:A:478:HIS:HE1	1:A:573:TYR:CD1	2.26	0.53
1:A:560:LEU:HD11	1:A:603:VAL:HG12	1.91	0.53
1:A:398:ASP:OD2	1:A:400:SER:HB2	2.07	0.53
1:A:788:THR:HB	1:A:791:SER:CB	2.34	0.53
1:A:11:ARG:HH12	1:A:316:THR:CB	2.21	0.53
1:A:131:LYS:HB2	1:A:304:THR:CG2	2.38	0.53
1:A:175:VAL:HG21	1:A:210:PHE:HE1	1.74	0.53
1:A:210:PHE:O	1:A:237:ASN:HA	2.07	0.53
1:A:620:LEU:CD1	1:A:678:VAL:HG21	2.39	0.53
1:A:203:VAL:HG13	1:A:205:THR:H	1.73	0.53
1:A:612:THR:HG22	1:A:612:THR:O	2.09	0.53
1:A:423:ASP:HB2	1:A:424:PRO:CD	2.36	0.53
1:A:698:ASP:OD1	1:A:698:ASP:N	2.39	0.53
1:A:360:ILE:CG1	1:A:361:GLY:N	2.72	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:591:TRP:HA	1:A:636:GLN:HB2	1.91	0.53
1:A:711:ALA:CA	1:A:728:SER:HA	2.39	0.53
1:A:793:GLY:CA	1:A:822:LEU:HB3	2.39	0.53
1:A:591:TRP:HA	1:A:636:GLN:CB	2.39	0.52
1:A:76:ASP:OD2	1:A:144:LEU:CD2	2.56	0.52
1:A:101:LEU:C	1:A:315:TRP:HE1	2.15	0.52
1:A:186:TYR:HE2	1:A:288:LYS:HD2	1.74	0.52
1:A:346:THR:O	1:A:347:PHE:C	2.52	0.52
1:A:420:PHE:CB	1:A:423:ASP:OD2	2.58	0.52
1:A:571:ARG:HD2	1:A:571:ARG:C	2.34	0.52
1:A:623:VAL:CG2	1:A:627:LEU:HB2	2.40	0.52
1:A:716:GLY:O	1:A:722:HIS:CB	2.58	0.52
1:A:329:GLU:HG3	1:A:330:LYS:N	2.25	0.52
1:A:389:ILE:HG13	1:A:448:VAL:CG2	2.39	0.52
1:A:564:TRP:CD1	1:A:566:GLY:H	2.27	0.52
1:A:571:ARG:HG2	1:A:591:TRP:CD2	2.44	0.52
1:A:590:ILE:O	1:A:636:GLN:HB2	2.08	0.52
1:A:69:GLY:H	1:A:71:TYR:HE2	1.52	0.52
1:A:125:GLU:CD	1:A:298:PHE:HE2	2.17	0.52
1:A:149:PHE:HE2	1:A:224:LEU:HD21	1.75	0.52
1:A:55:LEU:HD12	1:A:155:TRP:CZ3	2.44	0.52
1:A:165:GLN:HG3	1:A:166:ARG:N	2.25	0.52
1:A:302:GLU:O	1:A:306:ALA:HB2	2.08	0.52
1:A:351:ARG:HH12	1:A:372:ASP:CG	2.17	0.52
1:A:428:ILE:CG2	1:A:531:GLN:HB3	2.38	0.52
1:A:339:ASN:ND2	1:A:738:PHE:HA	2.19	0.52
1:A:427:LEU:O	1:A:431:THR:HB	2.09	0.52
1:A:428:ILE:HG21	1:A:531:GLN:HB3	1.91	0.52
1:A:581:GLY:O	1:A:589:LYS:O	2.28	0.52
1:A:592:ILE:HB	1:A:627:LEU:CD2	2.37	0.52
1:A:659:GLU:OE1	2:B:1:BGC:O2	2.21	0.52
1:A:342:GLN:NE2	1:A:734:ALA:HB2	2.25	0.52
1:A:487:ASP:O	1:A:488:TRP:O	2.28	0.52
1:A:666:HIS:O	1:A:669:PRO:HD2	2.10	0.52
1:A:270:VAL:HG21	1:A:291:ALA:HB2	1.92	0.52
1:A:562:ASP:O	1:A:573:TYR:OH	2.19	0.52
1:A:186:TYR:O	1:A:187:HIS:C	2.53	0.51
1:A:269:TYR:HE2	1:A:271:GLU:OE1	1.93	0.51
1:A:94:HIS:CD2	1:A:95:PHE:N	2.78	0.51
1:A:135:THR:HG23	1:A:260:SER:HB3	1.90	0.51
1:A:483:ILE:HD11	1:A:492:LEU:HD23	1.91	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:8:ASP:O	1:A:11:ARG:N	2.42	0.51
1:A:83:PRO:C	1:A:85:TRP:H	2.18	0.51
1:A:629:THR:CG2	1:A:631:HIS:N	2.71	0.51
1:A:490:ASP:OD1	1:A:490:ASP:N	2.44	0.51
1:A:793:GLY:HA2	1:A:821:THR:O	2.10	0.51
1:A:731:THR:CG2	1:A:733:THR:HB	2.40	0.51
1:A:135:THR:CG2	1:A:260:SER:HB3	2.41	0.51
1:A:422:ASP:O	1:A:423:ASP:C	2.53	0.51
1:A:475:ARG:C	1:A:482:LEU:CD1	2.84	0.51
1:A:537:ALA:C	1:A:539:ARG:N	2.67	0.51
1:A:757:VAL:HB	1:A:795:LEU:HD21	1.92	0.51
1:A:100:GLY:N	1:A:103:TYR:O	2.43	0.51
1:A:156:ASN:O	1:A:160:ASP:CB	2.59	0.51
1:A:617:ILE:HG23	1:A:680:ARG:HH21	1.75	0.51
1:A:15:ILE:HD11	1:A:24:TRP:HE3	1.76	0.51
1:A:395:GLN:O	1:A:450:PHE:HD1	1.93	0.51
1:A:19:HIS:HE1	1:A:85:TRP:CH2	2.29	0.51
1:A:351:ARG:NH2	1:A:732:GLY:HA2	2.26	0.51
1:A:426:TRP:O	1:A:427:LEU:C	2.54	0.51
1:A:435:ILE:CG2	1:A:441:PHE:HE2	2.20	0.51
1:A:633:MET:H	1:A:668:ASN:ND2	1.96	0.51
1:A:699:ILE:C	1:A:701:ASP:N	2.68	0.51
1:A:552:VAL:O	1:A:555:MET:HB3	2.11	0.51
1:A:209:GLY:HA3	1:A:250:SER:CB	2.40	0.50
1:A:380:ILE:HG22	1:A:383:ARG:H	1.76	0.50
1:A:389:ILE:HD13	1:A:446:GLU:HG2	1.92	0.50
1:A:611:ASP:OD1	1:A:613:ASP:N	2.43	0.50
1:A:731:THR:HG23	1:A:733:THR:HB	1.93	0.50
1:A:22:TYR:HB3	1:A:704:ARG:O	2.12	0.50
1:A:101:LEU:HB3	1:A:315:TRP:CG	2.46	0.50
1:A:106:ILE:HD11	1:A:119:PHE:CD2	2.47	0.50
1:A:627:LEU:HD12	1:A:637:TYR:HB3	1.91	0.50
1:A:664:PHE:CE2	2:B:2:BGC:H6C2	2.41	0.50
1:A:779:TYR:HD2	1:A:779:TYR:N	2.09	0.50
1:A:55:LEU:CD1	1:A:155:TRP:CZ3	2.94	0.50
1:A:56:THR:C	1:A:153:CYS:HB2	2.36	0.50
1:A:191:TYR:HE2	1:A:278:TRP:CH2	2.27	0.50
1:A:424:PRO:O	1:A:467:SER:CB	2.60	0.50
1:A:488:TRP:CZ3	1:A:489:ASN:HB3	2.45	0.50
1:A:535:LEU:CD1	1:A:752:TYR:CE2	2.94	0.50
1:A:575:TYR:HE2	1:A:576:TYR:CE1	2.27	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:666:HIS:HB2	3:A:823:SO4:O3	2.11	0.50
1:A:714:ILE:HG23	1:A:725:ALA:HB2	1.92	0.50
1:A:29:GLY:O	1:A:34:PHE:HD1	1.92	0.50
1:A:688:TYR:C	1:A:688:TYR:CD2	2.90	0.50
1:A:822:LEU:HD12	1:A:822:LEU:C	2.37	0.50
1:A:34:PHE:N	1:A:34:PHE:CD2	2.79	0.50
1:A:49:ASP:OD1	1:A:51:LYS:N	2.42	0.50
1:A:227:ALA:O	1:A:231:LEU:CD1	2.58	0.50
1:A:350:SER:HB2	1:A:364:MET:CG	2.30	0.50
1:A:426:TRP:CE3	1:A:426:TRP:HA	2.47	0.50
1:A:688:TYR:CE1	1:A:741:VAL:CG1	2.95	0.50
1:A:779:TYR:N	1:A:779:TYR:CD2	2.80	0.50
1:A:47:TYR:CE1	1:A:126:ASN:ND2	2.79	0.50
1:A:525:PHE:CE2	1:A:552:VAL:HA	2.46	0.50
1:A:582:THR:HG22	1:A:584:ALA:N	2.25	0.50
1:A:25:ILE:HG22	1:A:38:SER:N	2.26	0.50
1:A:186:TYR:CD2	1:A:288:LYS:HD3	2.46	0.50
1:A:200:VAL:CG1	1:A:295:LEU:HD21	2.42	0.50
1:A:219:GLY:O	1:A:222:ASN:HB2	2.12	0.50
1:A:761:ILE:HG13	1:A:761:ILE:O	2.12	0.50
1:A:83:PRO:C	1:A:85:TRP:N	2.69	0.50
1:A:345:VAL:CB	1:A:729:TRP:CZ3	2.94	0.50
1:A:568:TRP:HZ2	1:A:583:ASP:HB2	1.77	0.50
1:A:40:GLN:OE1	1:A:40:GLN:CA	2.59	0.49
1:A:65:ALA:O	1:A:66:ASP:HB3	2.10	0.49
1:A:164:TYR:O	1:A:168:LEU:CD1	2.55	0.49
1:A:217:PHE:HD2	1:A:218:VAL:CG2	2.25	0.49
1:A:363:GLY:HA3	1:A:407:PRO:HD3	1.94	0.49
1:A:519:THR:CG2	1:A:594:PRO:HG3	2.42	0.49
1:A:783:VAL:HG22	1:A:820:VAL:CG1	2.39	0.49
1:A:322:TYR:CZ	1:A:748:VAL:CG1	2.94	0.49
1:A:480:LEU:HB2	1:A:517:GLU:OE2	2.12	0.49
1:A:655:PRO:HA	1:A:660:ASN:OD1	2.12	0.49
1:A:688:TYR:O	1:A:692:THR:HB	2.12	0.49
1:A:20:THR:HG21	1:A:39:HIS:CE1	2.48	0.49
1:A:261:ARG:HG3	1:A:262:GLU:N	2.26	0.49
1:A:280:ASP:HB2	1:A:283:LYS:H	1.75	0.49
1:A:633:MET:N	1:A:668:ASN:HD21	1.96	0.49
1:A:31:GLU:HB3	1:A:383:ARG:NH2	2.28	0.49
1:A:481:PRO:HD3	1:A:522:ALA:HB2	1.93	0.49
1:A:759:PRO:C	1:A:760:GLN:HG2	2.37	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:12:GLU:OE2	1:A:103:TYR:OH	2.18	0.49
1:A:20:THR:HG21	1:A:39:HIS:NE2	2.27	0.49
1:A:31:GLU:HB3	1:A:383:ARG:HH21	1.77	0.49
1:A:155:TRP:CG	1:A:195:ARG:HH12	2.26	0.49
1:A:581:GLY:HA2	1:A:588:GLY:O	2.11	0.49
1:A:591:TRP:CD2	1:A:636:GLN:HG3	2.48	0.49
1:A:693:PRO:O	1:A:694:ALA:C	2.52	0.49
1:A:742:SER:HB3	1:A:743:GLN:HG3	1.95	0.49
1:A:329:GLU:O	1:A:333:ARG:HG2	2.13	0.49
1:A:351:ARG:NH2	1:A:732:GLY:N	2.60	0.49
1:A:632:GLY:HA3	1:A:691:ILE:HG22	1.94	0.49
1:A:721:ARG:O	1:A:724:GLU:HB3	2.10	0.49
1:A:342:GLN:NE2	1:A:710:TYR:HB2	2.28	0.49
1:A:390:ASP:OD2	1:A:410:LYS:HE3	2.13	0.49
1:A:693:PRO:O	1:A:696:ARG:N	2.40	0.49
1:A:187:HIS:CD2	1:A:189:THR:OG1	2.66	0.49
1:A:322:TYR:OH	1:A:748:VAL:HG12	2.13	0.49
1:A:392:ALA:O	1:A:395:GLN:HB2	2.12	0.49
1:A:94:HIS:ND1	1:A:114:ARG:NH1	2.59	0.49
1:A:99:HIS:HD2	1:A:708:TYR:OH	1.91	0.49
1:A:326:SER:OG	1:A:327:ASN:N	2.45	0.49
1:A:755:LEU:O	1:A:807:VAL:HG23	2.13	0.49
1:A:812:ALA:C	1:A:814:SER:H	2.20	0.49
1:A:177:GLN:O	1:A:183:SER:CB	2.61	0.48
1:A:489:ASN:O	1:A:489:ASN:ND2	2.46	0.48
1:A:495:ASN:N	1:A:495:ASN:ND2	2.49	0.48
1:A:152:PHE:CD1	1:A:152:PHE:N	2.80	0.48
1:A:11:ARG:C	1:A:12:GLU:HG3	2.38	0.48
1:A:562:ASP:O	1:A:573:TYR:CE2	2.66	0.48
1:A:675:GLU:O	1:A:679:GLY:N	2.45	0.48
1:A:705:LEU:HD23	1:A:728:SER:OG	2.13	0.48
1:A:785:ASN:OD1	1:A:822:LEU:HD11	2.13	0.48
1:A:132:VAL:HG21	1:A:265:TYR:HE1	1.79	0.48
1:A:146:LEU:N	1:A:251:VAL:O	2.29	0.48
1:A:272:ASN:HD22	1:A:287:ASN:HB3	1.74	0.48
1:A:345:VAL:HB	1:A:729:TRP:HZ3	1.75	0.48
1:A:351:ARG:HH21	1:A:732:GLY:CA	2.27	0.48
1:A:637:TYR:CD2	1:A:638:PRO:N	2.81	0.48
1:A:149:PHE:CE2	1:A:224:LEU:HD21	2.48	0.48
1:A:386:GLU:O	1:A:390:ASP:N	2.44	0.48
1:A:696:ARG:C	1:A:698:ASP:OD1	2.57	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:761:ILE:HG23	1:A:785:ASN:ND2	2.28	0.48
1:A:59:ARG:HH12	1:A:214:ARG:NH1	2.07	0.48
1:A:485:ARG:O	1:A:486:ALA:HB2	2.13	0.48
1:A:560:LEU:O	1:A:564:TRP:HB2	2.14	0.48
1:A:739:VAL:O	1:A:742:SER:HB3	2.14	0.48
1:A:15:ILE:HD13	1:A:24:TRP:CE3	2.49	0.48
1:A:194:ARG:HD3	1:A:194:ARG:N	2.24	0.48
1:A:788:THR:CB	1:A:791:SER:HB3	2.34	0.48
1:A:344:MET:HE3	1:A:348:ASN:ND2	2.29	0.48
1:A:448:VAL:CG2	1:A:460:LEU:HD12	2.35	0.48
1:A:781:ILE:HG23	1:A:818:VAL:HB	1.94	0.48
1:A:389:ILE:HG13	1:A:448:VAL:HG22	1.96	0.47
1:A:537:ALA:C	1:A:539:ARG:H	2.22	0.47
1:A:644:GLN:OE1	1:A:644:GLN:N	2.47	0.47
1:A:389:ILE:HG12	1:A:448:VAL:HG22	1.96	0.47
1:A:493:ASN:N	1:A:647:MET:O	2.47	0.47
1:A:533:ALA:O	1:A:545:ALA:HB1	2.14	0.47
1:A:537:ALA:O	1:A:540:GLY:N	2.34	0.47
1:A:685:PHE:CD1	1:A:761:ILE:CD1	2.96	0.47
1:A:74:VAL:HG13	1:A:146:LEU:CD2	2.44	0.47
1:A:127:ALA:HB1	1:A:267:LEU:O	2.14	0.47
1:A:134:VAL:HG13	1:A:134:VAL:O	2.13	0.47
1:A:385:ARG:CB	1:A:434:TYR:OH	2.57	0.47
1:A:406:GLN:HB3	1:A:409:THR:HG23	1.96	0.47
1:A:575:TYR:HD2	1:A:576:TYR:CD2	2.32	0.47
1:A:147:PHE:CD2	1:A:230:PRO:HA	2.49	0.47
1:A:392:ALA:O	1:A:395:GLN:CB	2.63	0.47
1:A:394:THR:HG21	1:A:405:TYR:CB	2.44	0.47
1:A:465:THR:O	1:A:466:ARG:C	2.57	0.47
1:A:553:ALA:C	1:A:555:MET:N	2.71	0.47
1:A:688:TYR:O	1:A:692:THR:CB	2.62	0.47
1:A:13:TYR:N	1:A:338:TRP:CZ2	2.83	0.47
1:A:224:LEU:HD23	1:A:224:LEU:HA	1.66	0.47
1:A:342:GLN:NE2	1:A:710:TYR:O	2.38	0.47
1:A:444:LEU:HD23	1:A:539:ARG:HH11	1.79	0.47
1:A:582:THR:C	1:A:584:ALA:H	2.23	0.47
1:A:325:SER:O	1:A:768:PHE:HA	2.13	0.47
1:A:538:ARG:NH1	1:A:752:TYR:HB2	2.30	0.47
1:A:3:TYR:CE1	1:A:21:PRO:HD3	2.50	0.47
1:A:520:PHE:CD1	1:A:593:GLU:HB3	2.44	0.47
1:A:527:LEU:HD12	1:A:527:LEU:C	2.39	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:569:PHE:CD2	1:A:595:GLN:OE1	2.67	0.47
1:A:575:TYR:CE2	1:A:576:TYR:CE1	3.02	0.47
1:A:646:HIS:CD2	1:A:646:HIS:N	2.82	0.47
1:A:706:GLU:HB3	1:A:708:TYR:CE1	2.50	0.47
1:A:757:VAL:O	1:A:757:VAL:HG12	2.13	0.47
1:A:185:ILE:HD13	1:A:212:THR:HG22	1.97	0.47
1:A:195:ARG:O	1:A:277:LYS:NZ	2.41	0.47
1:A:214:ARG:HE	1:A:214:ARG:HB3	1.52	0.47
1:A:214:ARG:HG3	1:A:246:ILE:HG21	1.97	0.47
1:A:216:THR:HG21	1:A:238:SER:CB	2.40	0.47
1:A:314:TYR:O	1:A:318:LEU:HB2	2.15	0.47
1:A:328:ASP:O	1:A:332:ASP:OD1	2.32	0.47
1:A:366:PHE:C	1:A:366:PHE:CD2	2.90	0.47
1:A:387:ARG:HG3	1:A:387:ARG:HH11	1.80	0.47
1:A:478:HIS:ND1	1:A:573:TYR:CD2	2.82	0.47
1:A:57:ARG:HH12	1:A:244:TYR:HD1	1.62	0.47
1:A:499:THR:O	1:A:499:THR:OG1	2.33	0.47
1:A:647:MET:HB3	1:A:650:VAL:CG1	2.44	0.47
1:A:449:PRO:HA	1:A:457:GLU:HA	1.96	0.47
1:A:793:GLY:CA	1:A:820:VAL:HG22	2.44	0.47
1:A:425:LEU:HB2	1:A:524:GLN:NE2	2.30	0.46
1:A:671:VAL:O	1:A:674:ALA:CB	2.59	0.46
1:A:244:TYR:HA	1:A:245:PRO:HD3	1.57	0.46
1:A:309:ALA:O	1:A:310:ALA:C	2.58	0.46
1:A:315:TRP:HH2	1:A:344:MET:HG2	1.80	0.46
1:A:611:ASP:OD1	1:A:611:ASP:C	2.59	0.46
1:A:369:SER:CA	1:A:372:ASP:HB2	2.28	0.46
1:A:489:ASN:ND2	1:A:489:ASN:C	2.73	0.46
1:A:685:PHE:CE2	1:A:689:LYS:CD	2.94	0.46
1:A:31:GLU:OE1	1:A:123:VAL:CG1	2.64	0.46
1:A:131:LYS:HE2	1:A:305:ASP:OD1	2.15	0.46
1:A:218:VAL:O	1:A:228:ALA:HB2	2.16	0.46
1:A:387:ARG:HA	1:A:387:ARG:HD3	1.47	0.46
1:A:519:THR:CG2	1:A:594:PRO:CG	2.94	0.46
1:A:525:PHE:CE2	1:A:555:MET:HG2	2.50	0.46
1:A:620:LEU:O	1:A:621:ASP:C	2.56	0.46
1:A:40:GLN:O	1:A:84:SER:HB3	2.16	0.46
1:A:74:VAL:HG13	1:A:146:LEU:HD21	1.97	0.46
1:A:279:ALA:C	1:A:280:ASP:OD1	2.59	0.46
1:A:327:ASN:OD1	1:A:327:ASN:C	2.58	0.46
1:A:331:LEU:CD2	1:A:335:VAL:HG23	2.46	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:345:VAL:CG2	1:A:729:TRP:CH2	2.98	0.46
1:A:565:ASP:CG	1:A:568:TRP:HE1	2.23	0.46
1:A:15:ILE:CD1	1:A:24:TRP:HE3	2.29	0.46
1:A:366:PHE:HD2	1:A:366:PHE:O	1.99	0.46
1:A:575:TYR:CD2	1:A:576:TYR:CE2	3.03	0.46
1:A:620:LEU:O	1:A:623:VAL:HG12	2.16	0.46
1:A:74:VAL:HG22	1:A:146:LEU:HD22	1.98	0.46
1:A:471:THR:HG22	1:A:472:VAL:N	2.31	0.46
1:A:574:ASP:OD1	1:A:574:ASP:C	2.59	0.46
1:A:657:TYR:HD1	1:A:713:MET:HE1	1.81	0.46
1:A:186:TYR:CE2	1:A:288:LYS:CD	2.79	0.46
1:A:203:VAL:CG2	1:A:265:TYR:CE2	2.98	0.46
1:A:459:PRO:C	1:A:461:PHE:H	2.24	0.46
1:A:752:TYR:N	1:A:752:TYR:HD1	2.12	0.46
1:A:15:ILE:CD1	1:A:24:TRP:CE3	2.99	0.46
1:A:344:MET:CE	1:A:348:ASN:ND2	2.79	0.46
1:A:444:LEU:HD23	1:A:539:ARG:NH1	2.31	0.46
1:A:665:CYS:SG	1:A:714:ILE:HD12	2.55	0.46
1:A:741:VAL:HG23	1:A:742:SER:N	2.31	0.46
1:A:771:THR:HA	1:A:779:TYR:O	2.16	0.46
1:A:99:HIS:CD2	1:A:708:TYR:CZ	3.04	0.46
1:A:324:VAL:HG22	1:A:325:SER:N	2.31	0.46
1:A:458:VAL:O	1:A:459:PRO:C	2.59	0.46
1:A:487:ASP:OD2	1:A:571:ARG:NH2	2.45	0.46
1:A:357:GLU:C	1:A:359:GLY:N	2.74	0.45
1:A:280:ASP:HB3	1:A:282:ALA:H	1.81	0.45
1:A:659:GLU:OE2	2:B:2:BGC:O6	2.26	0.45
1:A:688:TYR:CE1	1:A:741:VAL:HG11	2.51	0.45
1:A:44:TYR:CE1	1:A:54:ARG:HD3	2.52	0.45
1:A:330:LYS:NZ	1:A:695:TYR:HA	2.32	0.45
1:A:348:ASN:O	1:A:364:MET:HE2	2.15	0.45
1:A:615:PRO:O	1:A:616:ALA:C	2.58	0.45
1:A:658:LYS:C	1:A:660:ASN:H	2.25	0.45
1:A:795:LEU:HD12	1:A:795:LEU:N	2.31	0.45
1:A:339:ASN:HD21	1:A:738:PHE:HB2	1.81	0.45
1:A:394:THR:O	1:A:402:TYR:HB2	2.16	0.45
1:A:559:LEU:HD23	1:A:603:VAL:HG11	1.97	0.45
1:A:688:TYR:O	1:A:692:THR:OG1	2.32	0.45
1:A:765:VAL:O	1:A:785:ASN:ND2	2.48	0.45
1:A:36:LEU:HD23	1:A:355:PHE:CE1	2.51	0.45
1:A:253:VAL:HG11	1:A:261:ARG:HB3	1.98	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:435:ILE:CG2	1:A:441:PHE:CE2	2.90	0.45
1:A:497:PHE:HD2	1:A:645:VAL:HG13	1.81	0.45
1:A:751:GLU:CG	1:A:752:TYR:N	2.77	0.45
1:A:322:TYR:OH	1:A:748:VAL:HG11	2.15	0.45
1:A:599:VAL:O	1:A:677:VAL:HG11	2.17	0.45
1:A:293:ALA:O	1:A:294:LEU:C	2.60	0.45
1:A:40:GLN:NE2	1:A:84:SER:O	2.50	0.45
1:A:47:TYR:HE1	1:A:126:ASN:ND2	2.13	0.45
1:A:379:LEU:C	1:A:380:ILE:HG13	2.42	0.45
1:A:98:ARG:O	1:A:105:THR:HG22	2.17	0.45
1:A:350:SER:HB3	1:A:364:MET:HG2	1.91	0.45
1:A:520:PHE:C	1:A:520:PHE:HD2	2.19	0.45
1:A:665:CYS:O	1:A:666:HIS:C	2.60	0.45
1:A:665:CYS:O	1:A:668:ASN:HB2	2.16	0.45
1:A:733:THR:O	1:A:737:ASN:HB2	2.17	0.45
1:A:162:THR:O	1:A:162:THR:CG2	2.64	0.45
1:A:164:TYR:CD1	1:A:167:ASN:ND2	2.85	0.45
1:A:284:GLN:HE21	1:A:284:GLN:HB2	1.51	0.45
1:A:488:TRP:CE2	2:B:2:BGC:O4	2.70	0.45
1:A:495:ASN:HD22	1:A:495:ASN:H	1.58	0.45
1:A:37:LEU:HG	1:A:37:LEU:O	2.17	0.44
1:A:45:SER:OG	1:A:70:ARG:NH2	2.49	0.44
1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:HD12	2.32	0.44
1:A:629:THR:HB	1:A:632:GLY:O	2.17	0.44
1:A:75:ASN:OD1	1:A:79:ASP:N	2.50	0.44
1:A:185:ILE:CG2	1:A:186:TYR:N	2.81	0.44
1:A:545:ALA:O	1:A:549:ARG:HB2	2.17	0.44
1:A:793:GLY:HA3	1:A:820:VAL:CG2	2.45	0.44
1:A:56:THR:HA	1:A:153:CYS:H	1.82	0.44
1:A:156:ASN:O	1:A:160:ASP:HB3	2.18	0.44
1:A:347:PHE:HB2	1:A:376:PHE:CD2	2.53	0.44
1:A:614:ALA:O	1:A:617:ILE:N	2.50	0.44
1:A:644:GLN:O	1:A:645:VAL:C	2.60	0.44
1:A:28:LEU:HD23	1:A:121:VAL:HG23	2.00	0.44
1:A:69:GLY:N	1:A:71:TYR:HE2	2.14	0.44
1:A:83:PRO:HB3	1:A:108:GLY:HA3	1.99	0.44
1:A:257:PRO:C	1:A:259:GLU:H	2.25	0.44
1:A:342:GLN:HG2	1:A:734:ALA:HB2	1.98	0.44
1:A:570:LEU:HD23	1:A:570:LEU:HA	1.66	0.44
1:A:706:GLU:HB2	1:A:709:VAL:CG2	2.45	0.44
1:A:712:GLN:HG2	1:A:713:MET:N	2.32	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:746:LEU:O	1:A:748:VAL:N	2.50	0.44
1:A:213:ASP:OD1	1:A:214:ARG:N	2.51	0.44
1:A:353:ALA:O	1:A:730:LEU:HD12	2.17	0.44
1:A:364:MET:HB2	1:A:405:TYR:CE1	2.52	0.44
1:A:369:SER:O	1:A:370:ASN:C	2.60	0.44
1:A:389:ILE:CD1	1:A:446:GLU:HG2	2.47	0.44
1:A:478:HIS:HE1	1:A:573:TYR:CE1	2.35	0.44
1:A:488:TRP:CH2	2:B:2:BGC:H6C1	2.53	0.44
1:A:534:GLU:O	1:A:537:ALA:N	2.49	0.44
1:A:660:ASN:OD1	1:A:660:ASN:O	2.35	0.44
1:A:87:PRO:HD2	1:A:88:VAL:H	1.82	0.44
1:A:179:SER:HB2	1:A:182:GLY:O	2.18	0.44
1:A:254:SER:C	1:A:255:LEU:HG	2.41	0.44
1:A:591:TRP:CE2	1:A:636:GLN:HG3	2.52	0.44
1:A:645:VAL:HG12	1:A:646:HIS:N	2.33	0.44
1:A:721:ARG:HB3	1:A:724:GLU:HB2	1.98	0.44
1:A:46:PHE:CD2	1:A:50:ALA:HB2	2.53	0.44
1:A:673:ILE:HA	1:A:676:THR:HG23	1.99	0.44
1:A:788:THR:O	1:A:791:SER:CB	2.66	0.44
1:A:22:TYR:CB	1:A:704:ARG:O	2.65	0.44
1:A:44:TYR:CD1	1:A:54:ARG:CD	2.99	0.44
1:A:98:ARG:H	1:A:105:THR:CG2	2.28	0.44
1:A:17:THR:OG1	1:A:18:PRO:HD2	2.17	0.44
1:A:27:TYR:HB2	1:A:345:VAL:CG2	2.48	0.44
1:A:369:SER:C	1:A:372:ASP:H	2.26	0.44
1:A:428:ILE:HG22	1:A:531:GLN:HG2	1.99	0.44
1:A:135:THR:HG23	1:A:260:SER:HB2	1.99	0.43
1:A:478:HIS:ND1	1:A:573:TYR:CE2	2.86	0.43
1:A:575:TYR:CD2	1:A:576:TYR:CZ	3.06	0.43
1:A:751:GLU:CG	1:A:752:TYR:H	2.28	0.43
2:B:1:BGC:H3	2:B:2:BGC:O5	2.17	0.43
1:A:46:PHE:HB2	1:A:53:ARG:O	2.17	0.43
1:A:389:ILE:HD11	1:A:446:GLU:HB3	2.00	0.43
1:A:526:VAL:HG13	1:A:552:VAL:HG12	2.01	0.43
1:A:546:ASP:O	1:A:550:GLY:N	2.47	0.43
1:A:692:THR:HA	1:A:693:PRO:HD3	1.88	0.43
1:A:715:ALA:HB2	1:A:724:GLU:HB3	2.00	0.43
1:A:27:TYR:HB2	1:A:345:VAL:HG21	2.00	0.43
1:A:270:VAL:HG21	1:A:291:ALA:CB	2.47	0.43
1:A:271:GLU:O	1:A:290:ARG:NE	2.50	0.43
1:A:324:VAL:N	1:A:336:ASN:OD1	2.51	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:378:HIS:NE2	1:A:379:LEU:HD12	2.34	0.43
1:A:521:ILE:O	1:A:522:ALA:C	2.60	0.43
1:A:575:TYR:CE2	1:A:576:TYR:CZ	3.06	0.43
1:A:668:ASN:N	1:A:669:PRO:HD2	2.33	0.43
1:A:710:TYR:O	1:A:731:THR:HG22	2.18	0.43
1:A:787:GLY:O	1:A:788:THR:C	2.60	0.43
1:A:393:SER:C	1:A:395:GLN:H	2.26	0.43
1:A:560:LEU:O	1:A:564:TRP:CB	2.66	0.43
1:A:663:ILE:HD12	1:A:715:ALA:O	2.18	0.43
1:A:101:LEU:HB3	1:A:315:TRP:NE1	2.32	0.43
1:A:229:VAL:N	1:A:230:PRO:CD	2.81	0.43
1:A:494:LEU:HD13	1:A:574:ASP:HA	1.99	0.43
1:A:591:TRP:O	1:A:594:PRO:HD2	2.18	0.43
1:A:30:SER:O	1:A:383:ARG:NH1	2.48	0.43
1:A:38:SER:C	1:A:40:GLN:N	2.74	0.43
1:A:568:TRP:HZ2	1:A:583:ASP:CB	2.31	0.43
1:A:622:SER:O	1:A:626:MET:CG	2.65	0.43
1:A:689:LYS:HB3	1:A:695:TYR:CE1	2.54	0.43
1:A:93:ASP:N	1:A:109:GLU:O	2.45	0.43
1:A:200:VAL:HG21	1:A:291:ALA:CB	2.48	0.43
1:A:345:VAL:O	1:A:349:MET:HG2	2.19	0.43
1:A:378:HIS:HB2	1:A:437:GLU:OE2	2.18	0.43
1:A:459:PRO:C	1:A:461:PHE:N	2.76	0.43
1:A:525:PHE:HE2	1:A:552:VAL:HA	1.84	0.43
1:A:622:SER:O	1:A:625:GLU:N	2.52	0.43
1:A:155:TRP:HB2	1:A:195:ARG:HH12	1.75	0.43
1:A:205:THR:HG22	1:A:206:GLN:O	2.19	0.43
1:A:430:GLY:O	1:A:433:ALA:HB3	2.19	0.43
1:A:672:ILE:O	1:A:675:GLU:N	2.52	0.43
1:A:162:THR:O	1:A:162:THR:HG22	2.18	0.43
1:A:266:VAL:HG13	1:A:294:LEU:CD2	2.49	0.43
1:A:388:ILE:O	1:A:392:ALA:HB2	2.19	0.43
1:A:489:ASN:HA	2:B:2:BGC:H4	1.99	0.43
1:A:569:PHE:HB2	1:A:594:PRO:HB2	2.01	0.43
1:A:676:THR:O	1:A:677:VAL:C	2.62	0.43
1:A:737:ASN:O	1:A:738:PHE:C	2.57	0.43
1:A:24:TRP:HB2	1:A:39:HIS:CD2	2.51	0.43
1:A:693:PRO:CA	1:A:696:ARG:CB	2.91	0.43
1:A:12:GLU:HG2	1:A:99:HIS:O	2.19	0.42
1:A:309:ALA:O	1:A:312:LYS:N	2.52	0.42
1:A:402:TYR:O	1:A:403:HIS:C	2.62	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:756:VAL:HG13	1:A:805:ASN:HB3	2.00	0.42
1:A:62:ASN:OD1	1:A:62:ASN:C	2.62	0.42
1:A:183:SER:OG	1:A:207:ALA:HB2	2.18	0.42
1:A:489:ASN:CB	2:B:2:BGC:O6	2.63	0.42
1:A:370:ASN:HB3	1:A:426:TRP:HB3	2.01	0.42
1:A:380:ILE:HG22	1:A:383:ARG:HB2	2.00	0.42
1:A:396:PHE:C	1:A:398:ASP:N	2.76	0.42
1:A:456:SER:O	1:A:457:GLU:C	2.62	0.42
1:A:673:ILE:O	1:A:677:VAL:CG2	2.66	0.42
1:A:812:ALA:C	1:A:814:SER:N	2.77	0.42
1:A:524:GLN:O	1:A:527:LEU:HB3	2.19	0.42
1:A:682:GLY:HA2	1:A:762:GLY:HA3	2.01	0.42
1:A:712:GLN:O	1:A:726:LYS:O	2.37	0.42
1:A:34:PHE:CE1	1:A:348:ASN:HB3	2.55	0.42
1:A:254:SER:O	1:A:255:LEU:HD23	2.20	0.42
1:A:595:GLN:O	1:A:599:VAL:HG23	2.19	0.42
2:B:1:BGC:C3	2:B:2:BGC:O5	2.67	0.42
1:A:132:VAL:HG12	1:A:133:THR:N	2.35	0.42
1:A:207:ALA:CB	1:A:249:HIS:HB3	2.50	0.42
1:A:525:PHE:CD2	1:A:525:PHE:O	2.73	0.42
1:A:590:ILE:HG23	1:A:627:LEU:CD1	2.49	0.42
1:A:271:GLU:O	1:A:290:ARG:CZ	2.67	0.42
1:A:291:ALA:O	1:A:295:LEU:CD1	2.64	0.42
1:A:418:SER:H	1:A:485:ARG:CD	2.33	0.42
1:A:665:CYS:O	1:A:669:PRO:CD	2.68	0.42
1:A:101:LEU:N	1:A:101:LEU:CD1	2.83	0.42
1:A:149:PHE:CE1	1:A:246:ILE:HD12	2.55	0.42
1:A:491:CYS:O	1:A:650:VAL:HB	2.19	0.42
1:A:519:THR:CG2	1:A:594:PRO:HB3	2.47	0.42
1:A:528:TYR:O	1:A:529:GLY:C	2.62	0.42
1:A:588:GLY:H	1:A:638:PRO:HD2	1.84	0.42
1:A:120:PHE:O	1:A:129:VAL:N	2.49	0.42
1:A:360:ILE:HD12	1:A:361:GLY:N	2.34	0.42
1:A:396:PHE:CE1	1:A:402:TYR:CE2	3.07	0.42
1:A:538:ARG:NH1	1:A:752:TYR:CB	2.82	0.42
1:A:672:ILE:CD1	1:A:688:TYR:HB2	2.50	0.42
1:A:184:ALA:HA	1:A:249:HIS:NE2	2.35	0.42
1:A:404:GLN:HG3	1:A:413:ASN:HB2	2.02	0.42
1:A:54:ARG:HH11	1:A:157:ALA:CB	2.33	0.41
1:A:82:THR:CG2	1:A:84:SER:OG	2.66	0.41
1:A:387:ARG:HH11	1:A:387:ARG:CG	2.33	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:426:TRP:O	1:A:429:ALA:N	2.52	0.41
1:A:13:TYR:N	1:A:338:TRP:HZ2	2.17	0.41
1:A:101:LEU:O	1:A:315:TRP:NE1	2.54	0.41
1:A:320:SER:C	1:A:322:TYR:N	2.75	0.41
1:A:331:LEU:CD2	1:A:331:LEU:C	2.93	0.41
1:A:497:PHE:HE2	1:A:646:HIS:HB3	1.85	0.41
1:A:582:THR:CG2	1:A:584:ALA:H	2.30	0.41
1:A:672:ILE:O	1:A:676:THR:HG23	2.20	0.41
1:A:342:GLN:O	1:A:346:THR:HG23	2.20	0.41
1:A:358:THR:O	1:A:359:GLY:C	2.63	0.41
1:A:477:PRO:HG3	1:A:515:VAL:HG13	1.99	0.41
1:A:669:PRO:HB3	1:A:737:ASN:OD1	2.21	0.41
1:A:84:SER:O	1:A:85:TRP:HB3	2.21	0.41
1:A:327:ASN:ND2	1:A:766:PRO:HD2	2.35	0.41
1:A:559:LEU:HD21	1:A:603:VAL:HG21	2.02	0.41
1:A:685:PHE:O	1:A:688:TYR:N	2.54	0.41
1:A:685:PHE:CD2	1:A:689:LYS:HD3	2.54	0.41
1:A:811:PRO:O	1:A:814:SER:HB2	2.20	0.41
1:A:40:GLN:C	1:A:42:GLY:H	2.28	0.41
1:A:88:VAL:O	1:A:89:LYS:C	2.63	0.41
1:A:207:ALA:HB2	1:A:249:HIS:HB3	2.02	0.41
1:A:425:LEU:HB2	1:A:524:GLN:HE21	1.85	0.41
1:A:649:GLU:O	1:A:649:GLU:HG2	2.20	0.41
1:A:190:GLU:O	1:A:193:GLU:CB	2.68	0.41
1:A:200:VAL:HG21	1:A:270:VAL:HG21	2.03	0.41
1:A:262:GLU:OE1	1:A:301:SER:HB3	2.20	0.41
1:A:347:PHE:CZ	1:A:387:ARG:HG2	2.56	0.41
1:A:352:SER:O	1:A:359:GLY:HA2	2.20	0.41
1:A:440:ASP:CG	1:A:442:SER:HB3	2.45	0.41
1:A:481:PRO:HG3	1:A:522:ALA:N	2.36	0.41
1:A:695:TYR:O	1:A:698:ASP:CG	2.63	0.41
1:A:488:TRP:CG	1:A:489:ASN:N	2.89	0.41
1:A:713:MET:O	1:A:725:ALA:HA	2.20	0.41
1:A:715:ALA:HB3	1:A:722:HIS:HA	2.02	0.41
1:A:84:SER:O	1:A:86:LEU:N	2.53	0.41
1:A:98:ARG:CB	1:A:105:THR:CG2	2.99	0.41
1:A:214:ARG:HG3	1:A:246:ILE:CG2	2.51	0.41
1:A:311:LEU:O	1:A:312:LYS:C	2.63	0.41
1:A:438:THR:OG1	1:A:440:ASP:HB2	2.21	0.41
1:A:446:GLU:HG3	1:A:447:PRO:HD2	2.03	0.41
1:A:475:ARG:HB2	1:A:480:LEU:C	2.46	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:497:PHE:CD2	1:A:646:HIS:HA	2.56	0.41
1:A:647:MET:HB3	1:A:650:VAL:HG11	2.02	0.41
1:A:357:GLU:C	1:A:359:GLY:H	2.27	0.41
1:A:387:ARG:CG	1:A:387:ARG:NH1	2.84	0.41
1:A:82:THR:HG22	1:A:84:SER:H	1.86	0.40
1:A:218:VAL:HG12	1:A:222:ASN:HB3	2.02	0.40
1:A:256:ALA:O	1:A:259:GLU:CB	2.68	0.40
1:A:476:GLY:N	1:A:480:LEU:O	2.35	0.40
1:A:564:TRP:NE1	1:A:566:GLY:CA	2.77	0.40
1:A:363:GLY:CA	1:A:407:PRO:HD3	2.50	0.40
1:A:520:PHE:HE1	1:A:670:TRP:CH2	2.39	0.40
1:A:526:VAL:O	1:A:526:VAL:HG12	2.20	0.40
1:A:31:GLU:CB	1:A:383:ARG:NH2	2.84	0.40
1:A:42:GLY:CA	1:A:69:GLY:HA3	2.38	0.40
1:A:154:LEU:HA	1:A:187:HIS:HE1	1.87	0.40
1:A:762:GLY:O	1:A:785:ASN:ND2	2.49	0.40
1:A:44:TYR:HE1	1:A:54:ARG:CD	2.29	0.40
1:A:282:ALA:C	1:A:283:LYS:CG	2.94	0.40
1:A:629:THR:HG23	1:A:630:ASP:N	2.35	0.40
1:A:777:ALA:HB3	1:A:779:TYR:HE2	1.86	0.40
1:A:138:SER:O	1:A:257:PRO:CB	2.63	0.40
1:A:183:SER:OG	1:A:207:ALA:CB	2.70	0.40
1:A:354:SER:HB3	1:A:357:GLU:HG2	2.02	0.40
1:A:520:PHE:CB	1:A:571:ARG:NH1	2.72	0.40
1:A:629:THR:HG22	1:A:632:GLY:O	2.22	0.40
1:A:645:VAL:CG1	1:A:646:HIS:N	2.83	0.40
1:A:711:ALA:HB2	1:A:728:SER:HA	2.01	0.40
1:A:761:ILE:HG23	1:A:762:GLY:O	2.21	0.40

There are no symmetry-related clashes.

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	820/822 (100%)	715 (87%)	96 (12%)	9 (1%)	11	39

All (9) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	154	LEU
1	A	488	TRP
1	A	66	ASP
1	A	700	SER
1	A	729	TRP
1	A	574	ASP
1	A	508	ILE
1	A	713	MET
1	A	747	GLY

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	636/674 (94%)	525 (82%)	111 (18%)	2	9

All (111) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1	MET
1	A	3	TYR
1	A	20	THR
1	A	25	ILE
1	A	28	LEU
1	A	30	SER
1	A	31	GLU
1	A	33	PHE
1	A	34	PHE
1	A	37	LEU
1	A	40	GLN
1	A	59	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	63	ILE
1	A	70	ARG
1	A	84	SER
1	A	106	ILE
1	A	117	THR
1	A	123	VAL
1	A	125	GLU
1	A	133	THR
1	A	135	THR
1	A	136	ASN
1	A	139	ASP
1	A	143	SER
1	A	144	LEU
1	A	161	GLN
1	A	165	GLN
1	A	166	ARG
1	A	167	ASN
1	A	170	ILE
1	A	189	THR
1	A	190	GLU
1	A	194	ARG
1	A	205	THR
1	A	208	GLU
1	A	211	ASP
1	A	221	TYR
1	A	222	ASN
1	A	229	VAL
1	A	239	VAL
1	A	244	TYR
1	A	246	ILE
1	A	266	VAL
1	A	276	GLU
1	A	284	GLN
1	A	295	LEU
1	A	300	THR
1	A	318	LEU
1	A	331	LEU
1	A	334	MET
1	A	345	VAL
1	A	370	ASN
1	A	387	ARG
1	A	389	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	405	TYR
1	A	409	THR
1	A	418	SER
1	A	483	ILE
1	A	489	ASN
1	A	490	ASP
1	A	495	ASN
1	A	498	SER
1	A	499	THR
1	A	500	THR
1	A	507	THR
1	A	510	ASN
1	A	518	SER
1	A	520	PHE
1	A	525	PHE
1	A	527	LEU
1	A	531	GLN
1	A	532	TYR
1	A	570	LEU
1	A	571	ARG
1	A	590	ILE
1	A	600	MET
1	A	603	VAL
1	A	605	VAL
1	A	617	ILE
1	A	622	SER
1	A	626	MET
1	A	629	THR
1	A	634	VAL
1	A	636	GLN
1	A	637	TYR
1	A	644	GLN
1	A	645	VAL
1	A	646	HIS
1	A	647	MET
1	A	664	PHE
1	A	671	VAL
1	A	672	ILE
1	A	675	GLU
1	A	676	THR
1	A	688	TYR
1	A	689	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	691	ILE
1	A	695	TYR
1	A	698	ASP
1	A	699	ILE
1	A	702	VAL
1	A	703	HIS
1	A	705	LEU
1	A	708	TYR
1	A	720	VAL
1	A	724	GLU
1	A	729	TRP
1	A	749	ARG
1	A	781	ILE
1	A	784	THR
1	A	797	VAL

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (17) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	19	HIS
1	A	99	HIS
1	A	126	ASN
1	A	177	GLN
1	A	222	ASN
1	A	237	ASN
1	A	284	GLN
1	A	287	ASN
1	A	339	ASN
1	A	340	GLN
1	A	403	HIS
1	A	452	ASN
1	A	495	ASN
1	A	646	HIS
1	A	668	ASN
1	A	703	HIS
1	A	712	GLN

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates ⓘ

2 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	BGC	B	1	2	12,12,12	0.97	1 (8%)	17,17,17	1.33	2 (11%)
2	BGC	B	2	2	11,11,12	1.54	3 (27%)	15,15,17	2.21	5 (33%)

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	BGC	B	1	2	-	1/2/22/22	0/1/1/1
2	BGC	B	2	2	-	0/2/19/22	0/1/1/1

All (4) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	B	2	BGC	O5-C5	-2.58	1.38	1.43
2	B	2	BGC	C4-C5	-2.20	1.48	1.53
2	B	2	BGC	O3-C3	-2.20	1.37	1.43
2	B	1	BGC	O5-C1	-2.01	1.38	1.42

All (7) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	B	2	BGC	C1-C2-C3	4.87	116.74	109.64
2	B	2	BGC	O5-C1-C2	3.98	120.28	110.79
2	B	2	BGC	C6-C5-C4	-3.54	104.33	113.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	B	2	BGC	C1-O5-C5	3.00	116.20	112.19
2	B	1	BGC	C3-C4-C5	2.89	115.47	110.23
2	B	1	BGC	O5-C5-C4	2.87	114.86	109.70
2	B	2	BGC	O6-C6-C5	-2.29	103.55	111.33

There are no chirality outliers.

All (1) torsion outliers are listed below:

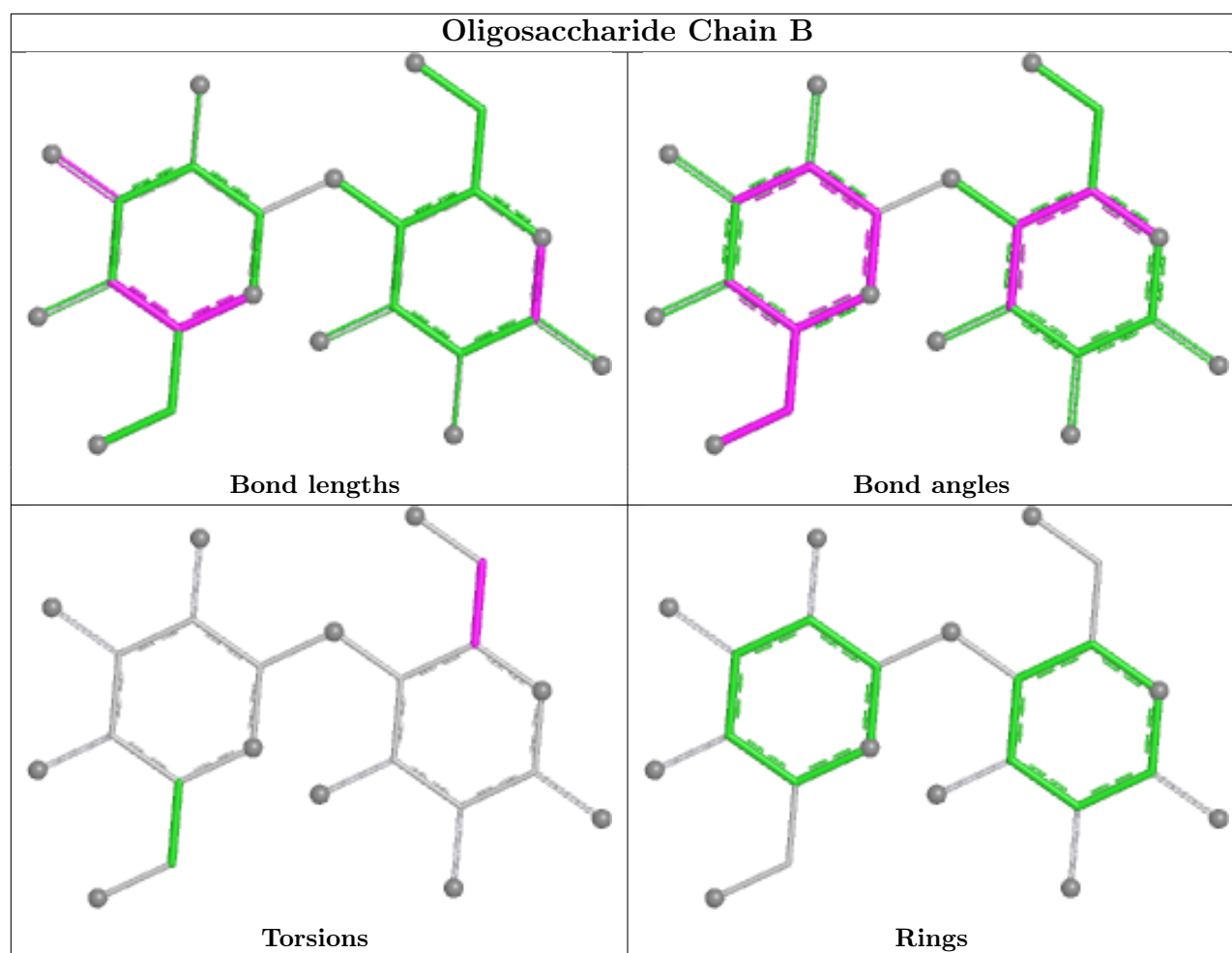
Mol	Chain	Res	Type	Atoms
2	B	1	BGC	O5-C5-C6-O6

There are no ring outliers.

2 monomers are involved in 11 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
2	B	2	BGC	10	0
2	B	1	BGC	3	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](#)

1 ligand is 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	SO4	A	823	-	4,4,4	0.27	0	6,6,6	0.14	0

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

1 monomer is involved in 2 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
3	A	823	SO4	2	0

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	822/822 (100%)	1.42	171 (20%) 2 2	16, 27, 42, 62	0

All (171) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	602	GLY	5.7
1	A	519	THR	5.6
1	A	108	GLY	4.4
1	A	419	GLY	4.4
1	A	520	PHE	4.4
1	A	339	ASN	4.2
1	A	441	PHE	4.1
1	A	745	LEU	3.9
1	A	714	ILE	3.9
1	A	130	GLN	3.8
1	A	645	VAL	3.7
1	A	694	ALA	3.7
1	A	810	ALA	3.6
1	A	155	TRP	3.6
1	A	708	TYR	3.6
1	A	354	SER	3.6
1	A	338	TRP	3.6
1	A	68	GLY	3.5
1	A	674	ALA	3.5
1	A	691	ILE	3.5
1	A	184	ALA	3.4
1	A	769	THR	3.4
1	A	39	HIS	3.4
1	A	183	SER	3.4
1	A	705	LEU	3.4
1	A	88	VAL	3.3
1	A	134	VAL	3.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	797	VAL	3.3
1	A	663	ILE	3.3
1	A	26	ASN	3.3
1	A	20	THR	3.3
1	A	821	THR	3.3
1	A	81	TRP	3.3
1	A	198	TYR	3.2
1	A	640	TYR	3.2
1	A	610	GLN	3.2
1	A	245	PRO	3.2
1	A	820	VAL	3.2
1	A	152	PHE	3.2
1	A	127	ALA	3.2
1	A	63	ILE	3.1
1	A	578	ASN	3.1
1	A	71	TYR	3.1
1	A	707	PRO	3.0
1	A	716	GLY	3.0
1	A	570	LEU	3.0
1	A	165	GLN	3.0
1	A	101	LEU	2.9
1	A	535	LEU	2.9
1	A	416	ILE	2.9
1	A	505	PHE	2.9
1	A	179	SER	2.8
1	A	254	SER	2.8
1	A	143	SER	2.8
1	A	266	VAL	2.8
1	A	717	LYS	2.8
1	A	783	VAL	2.8
1	A	337	ILE	2.8
1	A	260	SER	2.8
1	A	196	ASP	2.7
1	A	202	ALA	2.7
1	A	146	LEU	2.7
1	A	429	ALA	2.7
1	A	643	TYR	2.7
1	A	275	GLU	2.7
1	A	690	ARG	2.7
1	A	571	ARG	2.7
1	A	500	THR	2.7
1	A	413	ASN	2.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	104	SER	2.6
1	A	472	VAL	2.6
1	A	582	THR	2.6
1	A	564	TRP	2.6
1	A	94	HIS	2.6
1	A	703	HIS	2.6
1	A	367	ARG	2.6
1	A	259	GLU	2.6
1	A	295	LEU	2.6
1	A	149	PHE	2.6
1	A	76	ASP	2.6
1	A	45	SER	2.5
1	A	220	ALA	2.5
1	A	210	PHE	2.5
1	A	322	TYR	2.5
1	A	573	TYR	2.5
1	A	135	THR	2.5
1	A	692	THR	2.5
1	A	102	GLY	2.5
1	A	632	GLY	2.5
1	A	813	GLY	2.5
1	A	223	SER	2.5
1	A	148	SER	2.5
1	A	428	ILE	2.5
1	A	575	TYR	2.5
1	A	596	GLY	2.5
1	A	150	VAL	2.5
1	A	177	GLN	2.5
1	A	595	GLN	2.5
1	A	364	MET	2.4
1	A	648	GLY	2.4
1	A	667	ALA	2.4
1	A	38	SER	2.4
1	A	224	LEU	2.4
1	A	191	TYR	2.4
1	A	221	TYR	2.4
1	A	729	TRP	2.4
1	A	782	THR	2.4
1	A	167	ASN	2.4
1	A	712	GLN	2.4
1	A	252	ALA	2.3
1	A	243	TRP	2.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	597	PHE	2.3
1	A	258	GLY	2.3
1	A	514	GLY	2.3
1	A	327	ASN	2.3
1	A	609	PRO	2.3
1	A	247	GLY	2.3
1	A	371	GLN	2.3
1	A	726	LYS	2.3
1	A	756	VAL	2.3
1	A	491	CYS	2.3
1	A	293	ALA	2.2
1	A	249	HIS	2.2
1	A	314	TYR	2.2
1	A	128	GLU	2.2
1	A	67	ALA	2.2
1	A	142	LYS	2.2
1	A	163	ASN	2.2
1	A	665	CYS	2.2
1	A	353	ALA	2.2
1	A	74	VAL	2.2
1	A	132	VAL	2.2
1	A	175	VAL	2.2
1	A	603	VAL	2.2
1	A	567	SER	2.2
1	A	619	ALA	2.2
1	A	710	TYR	2.2
1	A	584	ALA	2.2
1	A	361	GLY	2.2
1	A	661	GLY	2.2
1	A	574	ASP	2.2
1	A	770	VAL	2.1
1	A	508	ILE	2.1
1	A	427	LEU	2.1
1	A	116	GLU	2.1
1	A	276	GLU	2.1
1	A	563	GLY	2.1
1	A	600	MET	2.1
1	A	543	ASP	2.1
1	A	405	TYR	2.1
1	A	158	GLN	2.1
1	A	608	GLY	2.1
1	A	732	GLY	2.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	650	VAL	2.1
1	A	317	ASP	2.1
1	A	474	HIS	2.1
1	A	591	TRP	2.1
1	A	44	TYR	2.1
1	A	350	SER	2.1
1	A	131	LYS	2.1
1	A	181	HIS	2.1
1	A	162	THR	2.1
1	A	685	PHE	2.1
1	A	738	PHE	2.1
1	A	19	HIS	2.0
1	A	334	MET	2.0
1	A	771	THR	2.0
1	A	294	LEU	2.0
1	A	651	SER	2.0
1	A	735	ALA	2.0
1	A	377	VAL	2.0

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

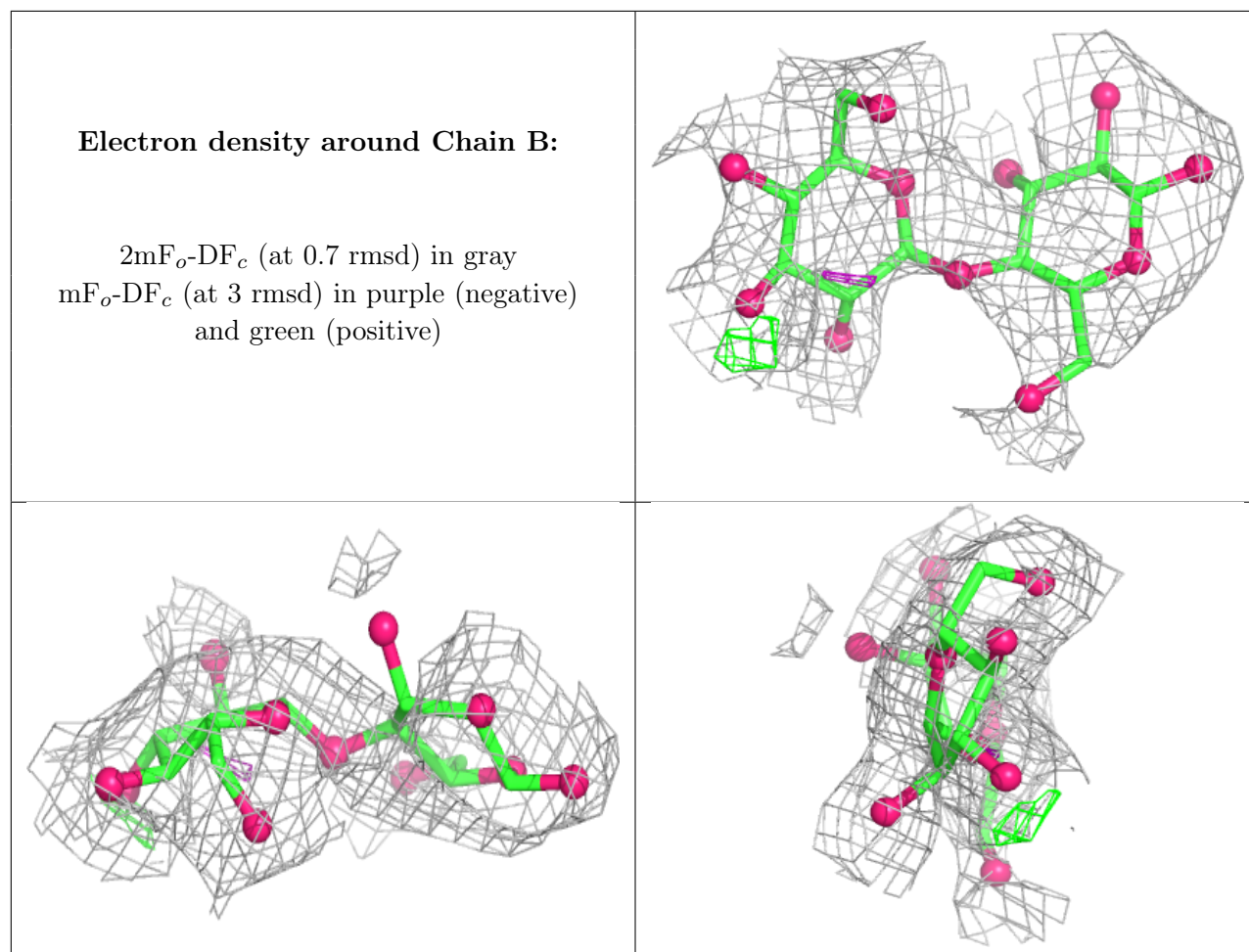
There are no non-standard protein/DNA/RNA residues in this entry.

6.3 Carbohydrates [i](#)

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
2	BGC	B	2	11/12	0.66	0.18	22,24,27,29	0
2	BGC	B	1	12/12	0.79	0.17	20,24,26,26	0

The following is a graphical depiction of the model fit to experimental electron density for oligosaccharide. Each fit is shown from different orientation to approximate a three-dimensional view.



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	SO4	A	823	5/5	0.93	0.11	23,24,25,27	0

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.