



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 06:34 PM UTC

PDB ID : 1S58 / pdb_00001s58
Title : The structure of B19 parvovirus capsid
Authors : Kaufmann, B.; Simpson, A.A.; Rossmann, M.G.
Deposited on : 2004-01-20
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
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

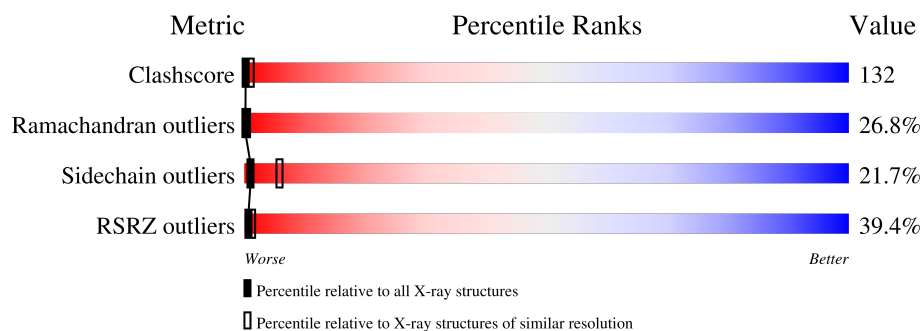
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.50 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))
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	554	

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 4108 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.

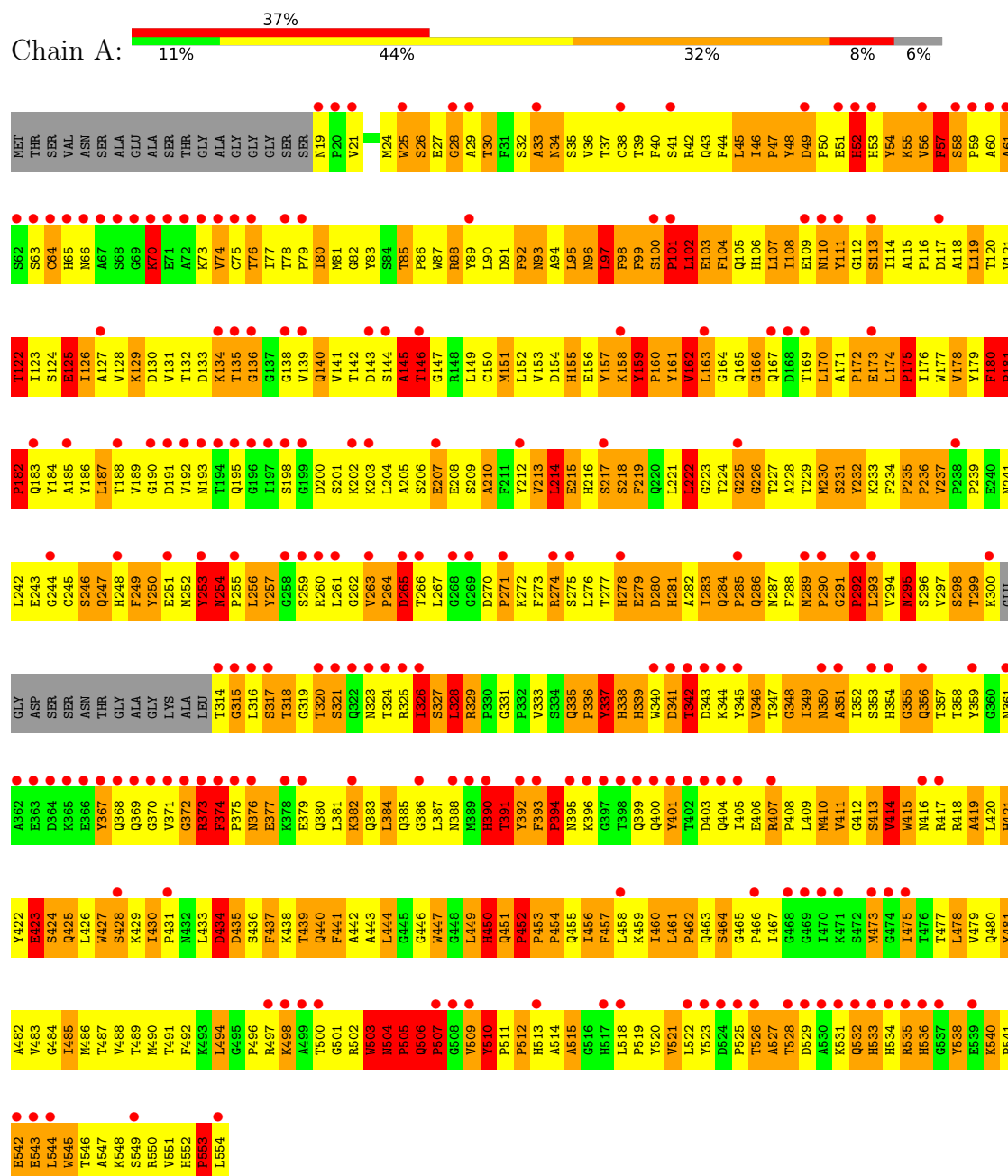
- Molecule 1 is a protein called B19 parvovirus capsid.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	523	4108	2625	695	772	16	0	0	0

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: B19 parvovirus capsid



4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 21 3	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	351.39Å 351.39Å 351.39Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	20.00 – 3.50 20.00 – 3.50	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	62.4 (20.00-3.50) 58.0 (20.00-3.50)	Depositor EDS
R_{merge}	0.10	Depositor
R_{sym}	0.10	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	0.92 (at 3.52Å)	Xtriage
Refinement program	CNS, REFMAC	Depositor
R, R_{free}	0.313 , 0.316 0.299 , (Not available)	Depositor DCC
R_{free} test set	No test flags present.	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	90.5	Xtriage
Anisotropy	0.000	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.27 , 0.0	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.55$, $\langle L^2 \rangle = 0.40$	Xtriage
Estimated twinning fraction	0.027 for l,-k,h	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.41	EDS
Total number of atoms	4108	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	93.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 2.70% 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

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	0.71	0/4238	1.30	72/5779 (1.2%)

There are no bond length outliers.

All (72) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	376	ASN	N-CA-C	-11.90	98.74	113.38
1	A	158	LYS	N-CA-C	-8.89	96.19	110.32
1	A	24	MET	N-CA-C	8.42	120.93	108.14
1	A	136	GLY	N-CA-C	-8.39	103.97	113.79
1	A	425	GLN	N-CA-C	-8.25	97.81	110.10
1	A	423	GLU	N-CA-C	-8.20	97.28	110.32
1	A	341	ASP	N-CA-C	-8.11	102.44	111.28
1	A	102	LEU	N-CA-C	-7.88	98.36	111.37
1	A	404	GLN	N-CA-C	-7.47	103.11	112.90
1	A	263	VAL	CA-C-N	7.42	129.11	119.84
1	A	263	VAL	C-N-CA	7.42	129.11	119.84
1	A	503	TRP	N-CA-C	-7.39	102.92	112.23
1	A	207	GLU	N-CA-C	-7.37	102.94	110.97
1	A	279	GLU	N-CA-C	7.24	117.80	108.24
1	A	110	ASN	N-CA-C	7.15	122.30	113.50
1	A	181	PRO	N-CA-C	6.98	119.21	110.70
1	A	374	PHE	N-CA-C	6.82	123.39	108.66
1	A	506	GLN	CA-C-N	6.64	128.14	119.84
1	A	506	GLN	C-N-CA	6.64	128.14	119.84
1	A	175	PRO	CA-N-CD	-6.62	102.73	112.00
1	A	257	TYR	N-CA-C	6.59	119.08	109.07
1	A	326	ILE	N-CA-C	6.55	122.96	109.34
1	A	46	ILE	CA-C-N	6.55	128.02	119.84
1	A	46	ILE	C-N-CA	6.55	128.02	119.84
1	A	291	GLY	CA-C-N	6.54	128.01	119.84
1	A	291	GLY	C-N-CA	6.54	128.01	119.84
1	A	510	TYR	CA-C-N	6.52	127.10	120.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	510	TYR	C-N-CA	6.52	127.10	120.38
1	A	180	PHE	CA-C-N	6.47	127.04	120.38
1	A	180	PHE	C-N-CA	6.47	127.04	120.38
1	A	461	LEU	CA-C-N	6.35	127.78	119.84
1	A	461	LEU	C-N-CA	6.35	127.78	119.84
1	A	374	PHE	CA-C-N	6.27	127.67	119.84
1	A	374	PHE	C-N-CA	6.27	127.67	119.84
1	A	452	PRO	CA-C-N	6.27	126.84	120.38
1	A	452	PRO	C-N-CA	6.27	126.84	120.38
1	A	504	ASN	CA-C-N	6.19	127.58	119.84
1	A	504	ASN	C-N-CA	6.19	127.58	119.84
1	A	64	CYS	N-CA-C	-6.18	104.79	113.20
1	A	19	ASN	CA-C-N	6.17	125.39	118.97
1	A	19	ASN	C-N-CA	6.17	125.39	118.97
1	A	377	GLU	N-CA-C	-6.15	103.73	111.11
1	A	450	HIS	N-CA-C	-5.96	101.22	110.10
1	A	85	THR	CA-C-N	5.95	127.28	119.84
1	A	85	THR	C-N-CA	5.95	127.28	119.84
1	A	145	ALA	N-CA-C	-5.95	98.13	110.80
1	A	219	PHE	N-CA-C	-5.89	100.36	109.14
1	A	441	PHE	N-CA-C	5.87	118.78	109.50
1	A	181	PRO	CA-C-N	5.77	127.05	119.84
1	A	181	PRO	C-N-CA	5.77	127.05	119.84
1	A	100	SER	CA-C-N	5.70	126.96	119.84
1	A	100	SER	C-N-CA	5.70	126.96	119.84
1	A	210	ALA	N-CA-C	5.68	117.65	108.34
1	A	501	GLY	N-CA-C	-5.59	106.35	115.46
1	A	392	TYR	N-CA-C	-5.53	104.19	112.54
1	A	88	ARG	N-CA-C	-5.51	100.26	109.24
1	A	174	LEU	O-C-N	5.48	125.77	121.88
1	A	382	LYS	N-CA-C	5.46	121.49	114.56
1	A	28	GLY	N-CA-C	-5.41	103.12	110.43
1	A	428	SER	N-CA-C	5.41	117.61	109.23
1	A	159	TYR	CA-C-N	5.40	126.59	119.84
1	A	159	TYR	C-N-CA	5.40	126.59	119.84
1	A	122	THR	N-CA-C	5.38	117.11	107.80
1	A	282	ALA	N-CA-C	-5.37	105.50	111.36
1	A	278	HIS	N-CA-CB	-5.27	108.16	114.17
1	A	92	PHE	N-CA-C	-5.22	106.44	114.16
1	A	430	ILE	N-CA-C	-5.18	97.69	108.88
1	A	264	PRO	N-CA-C	5.18	123.14	112.47
1	A	25	TRP	N-CA-C	-5.12	102.81	110.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	265	ASP	N-CA-C	5.11	121.68	110.80
1	A	253	TYR	N-CA-C	5.08	121.62	110.80
1	A	175	PRO	CB-CA-C	5.03	117.94	111.56

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	4108	0	3959	1061	0
All	All	4108	0	3959	1061	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 132.

All (1061) 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:42:ARG:HH12	1:A:175:PRO:CD	1.15	1.57
1:A:42:ARG:NH1	1:A:175:PRO:HD3	1.25	1.43
1:A:176:ILE:O	1:A:177:TRP:HD1	1.16	1.29
1:A:176:ILE:O	1:A:177:TRP:CD1	2.02	1.11
1:A:127:ALA:HB3	1:A:483:VAL:H	1.15	1.08
1:A:39:THR:HB	1:A:489:THR:HG23	1.10	1.08
1:A:250:TYR:HA	1:A:286:GLN:NE2	1.68	1.08
1:A:56:VAL:HG22	1:A:57:PHE:H	1.14	1.07
1:A:510:TYR:HD2	1:A:511:PRO:HD2	1.18	1.07
1:A:506:GLN:HE22	1:A:551:VAL:N	1.52	1.06
1:A:94:ALA:HB3	1:A:97:LEU:HD11	1.33	1.05
1:A:294:VAL:H	1:A:335:GLN:NE2	1.51	1.05
1:A:525:PRO:HB3	1:A:535:ARG:HB2	1.38	1.04
1:A:42:ARG:CZ	1:A:175:PRO:HD3	1.88	1.01
1:A:42:ARG:NH1	1:A:175:PRO:CD	1.95	1.00
1:A:425:GLN:HG2	1:A:444:LEU:HD23	1.43	1.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:506:GLN:NE2	1:A:551:VAL:H	1.59	1.00
1:A:510:TYR:CD2	1:A:511:PRO:HD2	1.96	0.99
1:A:504:ASN:H	1:A:504:ASN:HD22	1.08	0.99
1:A:293:LEU:HD23	1:A:407:ARG:HD3	1.41	0.99
1:A:263:VAL:HG13	1:A:272:LYS:HZ3	1.25	0.98
1:A:42:ARG:HH12	1:A:175:PRO:CG	1.75	0.97
1:A:506:GLN:HE22	1:A:551:VAL:H	1.07	0.97
1:A:188:THR:HG21	1:A:210:ALA:H	1.29	0.96
1:A:414:VAL:O	1:A:415:TRP:HB3	1.64	0.96
1:A:457:PHE:H	1:A:457:PHE:HD2	1.07	0.96
1:A:129:LYS:HB3	1:A:129:LYS:HZ2	1.31	0.96
1:A:292:PRO:HD3	1:A:409:LEU:HA	1.46	0.95
1:A:100:SER:H	1:A:103:GLU:HB2	1.31	0.94
1:A:130:ASP:HA	1:A:480:GLN:HA	1.48	0.94
1:A:126:ILE:HG22	1:A:224:THR:HA	1.46	0.94
1:A:375:PRO:HB3	1:A:377:GLU:HG3	1.50	0.94
1:A:126:ILE:HD12	1:A:222:LEU:HD22	1.48	0.94
1:A:506:GLN:NE2	1:A:551:VAL:N	2.13	0.93
1:A:320:THR:HG22	1:A:321:SER:H	1.35	0.92
1:A:295:ASN:HD21	1:A:350:ASN:ND2	1.65	0.92
1:A:294:VAL:H	1:A:335:GLN:HE21	1.17	0.91
1:A:39:THR:CB	1:A:489:THR:HG23	1.99	0.91
1:A:274:ARG:HG3	1:A:275:SER:H	1.36	0.91
1:A:152:LEU:HD12	1:A:219:PHE:HB3	1.53	0.90
1:A:227:THR:HG22	1:A:228:ALA:N	1.86	0.90
1:A:444:LEU:H	1:A:444:LEU:HD22	1.33	0.90
1:A:504:ASN:H	1:A:504:ASN:ND2	1.64	0.90
1:A:503:TRP:HE3	1:A:503:TRP:O	1.53	0.90
1:A:121:VAL:O	1:A:229:THR:HG23	1.70	0.90
1:A:124:SER:HB2	1:A:485:ILE:HG23	1.50	0.90
1:A:227:THR:HG22	1:A:228:ALA:H	1.34	0.90
1:A:172:PRO:HG2	1:A:179:TYR:HB2	1.55	0.89
1:A:423:GLU:HB2	1:A:540:LYS:HZ1	1.38	0.88
1:A:188:THR:HG22	1:A:189:VAL:H	1.39	0.88
1:A:188:THR:HG22	1:A:189:VAL:N	1.89	0.88
1:A:79:PRO:HB2	1:A:203:LYS:HB2	1.55	0.88
1:A:145:ALA:O	1:A:147:GLY:N	2.07	0.88
1:A:419:ALA:HB1	1:A:547:ALA:HB3	1.56	0.87
1:A:235:PRO:HB2	1:A:236:PRO:HD2	1.54	0.87
1:A:244:GLY:C	1:A:551:VAL:HG23	1.99	0.87
1:A:26:SER:HB2	1:A:487:THR:HG21	1.53	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:162:VAL:HG22	1:A:163:LEU:N	1.87	0.87
1:A:109:GLU:HB2	1:A:550:ARG:HH21	1.37	0.87
1:A:383:GLN:O	1:A:385:GLN:HG2	1.74	0.86
1:A:45:LEU:HD11	1:A:481:TYR:CD1	2.11	0.86
1:A:264:PRO:CG	1:A:273:PHE:H	1.89	0.86
1:A:56:VAL:HG22	1:A:57:PHE:N	1.89	0.86
1:A:90:LEU:HD13	1:A:486:MET:HE1	1.58	0.85
1:A:449:LEU:HD22	1:A:449:LEU:O	1.76	0.85
1:A:449:LEU:HD21	1:A:452:PRO:HB3	1.59	0.85
1:A:523:TYR:HB2	1:A:536:HIS:HB3	1.58	0.85
1:A:96:ASN:HB3	1:A:97:LEU:HD13	1.55	0.85
1:A:179:TYR:C	1:A:181:PRO:HD3	2.01	0.85
1:A:478:LEU:H	1:A:478:LEU:CD2	1.89	0.85
1:A:245:CYS:N	1:A:551:VAL:HG23	1.91	0.85
1:A:349:ILE:HG22	1:A:350:ASN:H	1.41	0.85
1:A:114:ILE:HG13	1:A:242:LEU:HD11	1.59	0.85
1:A:229:THR:HG22	1:A:230:MET:N	1.92	0.85
1:A:387:LEU:HD11	1:A:407:ARG:HG3	1.58	0.85
1:A:293:LEU:HB2	1:A:407:ARG:HB3	1.59	0.84
1:A:374:PHE:N	1:A:374:PHE:CD1	2.45	0.84
1:A:421:HIS:HA	1:A:545:TRP:O	1.76	0.84
1:A:383:GLN:HG3	1:A:384:LEU:H	1.42	0.84
1:A:502:ARG:NH1	1:A:506:GLN:HB2	1.92	0.83
1:A:32:SER:O	1:A:34:ASN:N	2.11	0.83
1:A:510:TYR:HD2	1:A:511:PRO:CD	1.91	0.83
1:A:449:LEU:CD2	1:A:452:PRO:HB3	2.08	0.83
1:A:88:ARG:HH12	1:A:180:PHE:HA	1.44	0.83
1:A:298:SER:HA	1:A:348:GLY:HA2	1.60	0.83
1:A:440:GLN:HB2	1:A:441:PHE:CE1	2.14	0.82
1:A:30:THR:O	1:A:36:VAL:HG23	1.78	0.82
1:A:229:THR:HG22	1:A:230:MET:H	1.44	0.82
1:A:78:THR:HA	1:A:325:ARG:HH11	1.43	0.82
1:A:457:PHE:N	1:A:457:PHE:CD2	2.44	0.82
1:A:46:ILE:HG12	1:A:460:ILE:HG13	1.60	0.82
1:A:96:ASN:O	1:A:98:PHE:N	2.13	0.82
1:A:338:HIS:CD2	1:A:339:HIS:H	1.97	0.82
1:A:504:ASN:HD22	1:A:504:ASN:N	1.77	0.82
1:A:45:LEU:HD11	1:A:481:TYR:HD1	1.41	0.82
1:A:318:THR:OG1	1:A:326:ILE:HG22	1.79	0.82
1:A:162:VAL:HG13	1:A:163:LEU:H	1.45	0.82
1:A:249:PHE:CE1	1:A:290:PRO:HD3	2.14	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:248:HIS:HB2	1:A:251:GLU:HB2	1.61	0.81
1:A:248:HIS:HA	1:A:380:GLN:HE22	1.43	0.81
1:A:338:HIS:HD2	1:A:339:HIS:H	1.25	0.81
1:A:425:GLN:CG	1:A:444:LEU:HD23	2.10	0.81
1:A:295:ASN:CG	1:A:296:SER:H	1.87	0.81
1:A:46:ILE:HG22	1:A:482:ALA:O	1.79	0.81
1:A:457:PHE:HD2	1:A:457:PHE:N	1.78	0.81
1:A:129:LYS:HB3	1:A:129:LYS:NZ	1.94	0.81
1:A:94:ALA:HB3	1:A:97:LEU:CD1	2.09	0.80
1:A:129:LYS:HZ2	1:A:143:ASP:HA	1.45	0.80
1:A:243:GLU:OE1	1:A:498:LYS:HG2	1.82	0.80
1:A:452:PRO:HB2	1:A:453:PRO:HD2	1.62	0.80
1:A:320:THR:HG22	1:A:321:SER:N	1.94	0.80
1:A:478:LEU:H	1:A:478:LEU:HD23	1.46	0.80
1:A:295:ASN:HD21	1:A:350:ASN:HD21	1.27	0.80
1:A:320:THR:HG23	1:A:325:ARG:C	2.06	0.80
1:A:95:LEU:HD13	1:A:95:LEU:O	1.81	0.80
1:A:107:LEU:CD2	1:A:114:ILE:HD11	2.11	0.80
1:A:420:LEU:H	1:A:547:ALA:HB2	1.45	0.80
1:A:263:VAL:HG13	1:A:272:LYS:NZ	1.97	0.80
1:A:427:TRP:HA	1:A:447:TRP:H	1.47	0.80
1:A:340:TRP:HE3	1:A:343:ASP:H	1.30	0.79
1:A:118:ALA:HB1	1:A:232:TYR:O	1.82	0.79
1:A:118:ALA:HB2	1:A:233:LYS:HA	1.63	0.79
1:A:290:PRO:HG2	1:A:381:LEU:HD12	1.63	0.79
1:A:442:ALA:HB1	1:A:444:LEU:CD2	2.13	0.79
1:A:27:GLU:HG3	1:A:40:PHE:HA	1.64	0.79
1:A:130:ASP:HB2	1:A:479:VAL:O	1.83	0.78
1:A:502:ARG:NH1	1:A:504:ASN:O	2.16	0.78
1:A:463:GLN:HB2	1:A:480:GLN:OE1	1.83	0.78
1:A:295:ASN:CG	1:A:296:SER:N	2.41	0.78
1:A:413:SER:O	1:A:414:VAL:HG23	1.84	0.78
1:A:547:ALA:O	1:A:549:SER:N	2.16	0.78
1:A:170:LEU:HG	1:A:171:ALA:H	1.49	0.77
1:A:434:ASP:O	1:A:435:ASP:O	2.01	0.77
1:A:83:TYR:O	1:A:185:ALA:HA	1.84	0.77
1:A:161:TYR:HA	1:A:455:GLN:OE1	1.84	0.77
1:A:523:TYR:HB2	1:A:536:HIS:CB	2.13	0.77
1:A:63:SER:HB2	1:A:76:THR:HB	1.67	0.77
1:A:78:THR:HG22	1:A:79:PRO:HD2	1.67	0.76
1:A:149:LEU:HD11	1:A:458:LEU:HB2	1.67	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:227:THR:CG2	1:A:228:ALA:H	1.98	0.76
1:A:403:ASP:HB3	1:A:406:GLU:HB2	1.66	0.76
1:A:421:HIS:N	1:A:421:HIS:ND1	2.33	0.76
1:A:131:VAL:O	1:A:479:VAL:HB	1.86	0.76
1:A:341:ASP:O	1:A:342:THR:HG23	1.86	0.76
1:A:51:GLU:HG2	1:A:52:HIS:H	1.49	0.76
1:A:255:PRO:C	1:A:256:LEU:HD23	2.11	0.76
1:A:41:SER:HB2	1:A:485:ILE:HD11	1.67	0.76
1:A:394:PRO:HB3	1:A:399:GLN:HB2	1.68	0.76
1:A:520:TYR:HA	1:A:538:TYR:CE1	2.21	0.76
1:A:101:PRO:O	1:A:102:LEU:C	2.28	0.75
1:A:92:PHE:O	1:A:94:ALA:N	2.17	0.75
1:A:109:GLU:HB2	1:A:550:ARG:NH2	2.01	0.75
1:A:88:ARG:HA	1:A:183:GLN:HA	1.68	0.75
1:A:420:LEU:H	1:A:547:ALA:CB	1.99	0.75
1:A:392:TYR:O	1:A:393:PHE:HB2	1.84	0.75
1:A:213:VAL:O	1:A:213:VAL:HG22	1.87	0.75
1:A:444:LEU:HD22	1:A:444:LEU:N	2.01	0.75
1:A:461:LEU:HD22	1:A:462:PRO:HD2	1.67	0.75
1:A:359:TYR:HB3	1:A:534:HIS:ND1	2.02	0.74
1:A:90:LEU:HD22	1:A:486:MET:CE	2.16	0.74
1:A:504:ASN:O	1:A:506:GLN:N	2.19	0.74
1:A:206:SER:O	1:A:209:SER:HB2	1.87	0.74
1:A:128:VAL:HG13	1:A:128:VAL:O	1.87	0.74
1:A:87:TRP:NE1	1:A:215:GLU:OE2	2.20	0.74
1:A:103:GLU:O	1:A:104:PHE:C	2.28	0.74
1:A:94:ALA:C	1:A:96:ASN:N	2.39	0.74
1:A:426:LEU:HG	1:A:427:TRP:HD1	1.52	0.74
1:A:506:GLN:HG2	1:A:550:ARG:HD2	1.69	0.74
1:A:521:VAL:HG22	1:A:522:LEU:N	2.01	0.74
1:A:249:PHE:HE1	1:A:290:PRO:HD3	1.53	0.74
1:A:535:ARG:HH11	1:A:535:ARG:HB3	1.53	0.74
1:A:188:THR:CG2	1:A:189:VAL:H	2.00	0.73
1:A:353:SER:HB2	1:A:371:VAL:HG22	1.69	0.73
1:A:94:ALA:O	1:A:96:ASN:N	2.21	0.73
1:A:295:ASN:HA	1:A:405:ILE:HA	1.70	0.73
1:A:249:PHE:C	1:A:249:PHE:CD2	2.66	0.73
1:A:456:ILE:HD12	1:A:456:ILE:N	2.04	0.73
1:A:118:ALA:CB	1:A:233:LYS:HA	2.19	0.73
1:A:90:LEU:HD23	1:A:458:LEU:HD21	1.69	0.73
1:A:116:PRO:HB2	1:A:234:PHE:CD1	2.24	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:56:VAL:CG2	1:A:57:PHE:H	1.96	0.72
1:A:372:GLY:O	1:A:544:LEU:HB2	1.89	0.72
1:A:411:VAL:HG13	1:A:411:VAL:O	1.89	0.72
1:A:195:GLN:HB2	1:A:202:LYS:HE2	1.70	0.72
1:A:264:PRO:HG2	1:A:273:PHE:H	1.54	0.72
1:A:48:TYR:CE1	1:A:479:VAL:HA	2.25	0.72
1:A:188:THR:CG2	1:A:210:ALA:H	2.01	0.72
1:A:391:THR:HG23	1:A:394:PRO:HD2	1.72	0.72
1:A:46:ILE:HG21	1:A:482:ALA:HB3	1.69	0.71
1:A:117:ASP:HB3	1:A:491:THR:OG1	1.88	0.71
1:A:250:TYR:HA	1:A:286:GLN:HE21	1.53	0.71
1:A:346:VAL:HG12	1:A:347:THR:N	2.04	0.71
1:A:367:TYR:O	1:A:369:GLN:HG2	1.90	0.71
1:A:373:ARG:HE	1:A:375:PRO:HD3	1.56	0.71
1:A:526:THR:C	1:A:528:THR:H	1.97	0.71
1:A:52:HIS:CB	1:A:86:PRO:HB3	2.21	0.71
1:A:284:GLN:OE1	1:A:284:GLN:HA	1.89	0.71
1:A:346:VAL:HG12	1:A:347:THR:H	1.55	0.71
1:A:187:LEU:HD22	1:A:187:LEU:N	2.06	0.71
1:A:107:LEU:HD21	1:A:114:ILE:HD11	1.71	0.71
1:A:161:TYR:HB2	1:A:429:LYS:HD3	1.72	0.71
1:A:506:GLN:NE2	1:A:550:ARG:HG3	2.06	0.71
1:A:39:THR:HB	1:A:489:THR:CG2	2.05	0.70
1:A:46:ILE:CG1	1:A:460:ILE:HG13	2.20	0.70
1:A:320:THR:CG2	1:A:321:SER:H	2.00	0.70
1:A:264:PRO:HG3	1:A:273:PHE:H	1.53	0.70
1:A:393:PHE:H	1:A:394:PRO:HD3	1.57	0.70
1:A:440:GLN:HB2	1:A:441:PHE:CD1	2.27	0.70
1:A:80:ILE:C	1:A:203:LYS:HG2	2.17	0.70
1:A:293:LEU:HD23	1:A:407:ARG:CD	2.18	0.70
1:A:460:ILE:CD1	1:A:481:TYR:HA	2.21	0.70
1:A:252:MET:HE3	1:A:554:LEU:HD12	1.71	0.70
1:A:422:TYR:H	1:A:545:TRP:HB3	1.56	0.70
1:A:94:ALA:C	1:A:96:ASN:H	2.00	0.70
1:A:119:LEU:HD22	1:A:120:THR:N	2.06	0.70
1:A:41:SER:O	1:A:42:ARG:HD3	1.92	0.69
1:A:51:GLU:CG	1:A:52:HIS:H	2.04	0.69
1:A:152:LEU:HB2	1:A:219:PHE:CB	2.21	0.69
1:A:337:TYR:O	1:A:338:HIS:HB2	1.92	0.69
1:A:477:THR:O	1:A:478:LEU:C	2.35	0.69
1:A:119:LEU:HB2	1:A:489:THR:O	1.93	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:172:PRO:O	1:A:174:LEU:N	2.25	0.69
1:A:374:PHE:CE1	1:A:543:GLU:HG3	2.26	0.69
1:A:444:LEU:N	1:A:444:LEU:HD13	2.07	0.69
1:A:109:GLU:CB	1:A:550:ARG:HH21	2.05	0.69
1:A:45:LEU:C	1:A:88:ARG:NH2	2.50	0.69
1:A:122:THR:HG23	1:A:229:THR:OG1	1.93	0.69
1:A:244:GLY:H	1:A:551:VAL:HA	1.57	0.69
1:A:465:GLY:CA	1:A:478:LEU:HD21	2.22	0.69
1:A:88:ARG:NH1	1:A:180:PHE:HA	2.07	0.69
1:A:292:PRO:HG3	1:A:409:LEU:HB2	1.73	0.69
1:A:373:ARG:HD3	1:A:373:ARG:N	2.07	0.69
1:A:129:LYS:HB2	1:A:142:THR:O	1.92	0.69
1:A:328:LEU:O	1:A:329:ARG:HB3	1.93	0.69
1:A:437:PHE:CE2	1:A:438:LYS:HG3	2.28	0.69
1:A:410:MET:HE2	1:A:410:MET:H	1.58	0.68
1:A:162:VAL:HG22	1:A:163:LEU:H	1.58	0.68
1:A:53:HIS:C	1:A:55:LYS:H	2.02	0.68
1:A:45:LEU:HD12	1:A:46:ILE:N	2.08	0.68
1:A:79:PRO:HG3	1:A:192:VAL:HG23	1.74	0.68
1:A:465:GLY:HA3	1:A:478:LEU:HD21	1.75	0.68
1:A:110:ASN:O	1:A:497:ARG:HD2	1.94	0.68
1:A:337:TYR:O	1:A:337:TYR:HD1	1.77	0.68
1:A:423:GLU:O	1:A:424:SER:HB2	1.94	0.68
1:A:265:ASP:OD1	1:A:271:PRO:HD2	1.93	0.68
1:A:383:GLN:CG	1:A:384:LEU:H	2.07	0.68
1:A:46:ILE:HD12	1:A:47:PRO:HD2	1.76	0.67
1:A:500:THR:HG22	1:A:553:PRO:HD3	1.76	0.67
1:A:162:VAL:O	1:A:164:GLY:N	2.27	0.67
1:A:291:GLY:HA2	1:A:410:MET:HE1	1.76	0.67
1:A:525:PRO:HA	1:A:535:ARG:HA	1.77	0.67
1:A:502:ARG:NH1	1:A:502:ARG:HB3	2.10	0.67
1:A:293:LEU:HD13	1:A:335:GLN:HG2	1.75	0.66
1:A:427:TRP:HA	1:A:447:TRP:N	2.09	0.66
1:A:316:LEU:O	1:A:318:THR:HG22	1.95	0.66
1:A:207:GLU:C	1:A:209:SER:H	2.03	0.66
1:A:414:VAL:O	1:A:415:TRP:HE3	1.78	0.66
1:A:414:VAL:O	1:A:415:TRP:CB	2.39	0.66
1:A:45:LEU:C	1:A:45:LEU:HD12	2.21	0.66
1:A:554:LEU:HD12	1:A:554:LEU:OXT	1.95	0.66
1:A:167:GLN:OE1	1:A:170:LEU:HB3	1.95	0.66
1:A:279:GLU:HA	1:A:281:HIS:CE1	2.30	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:241:ASN:O	1:A:242:LEU:HD23	1.95	0.66
1:A:391:THR:HG23	1:A:394:PRO:CD	2.26	0.66
1:A:400:GLN:O	1:A:401:TYR:HB2	1.95	0.66
1:A:78:THR:CG2	1:A:79:PRO:HD2	2.25	0.65
1:A:373:ARG:N	1:A:373:ARG:CD	2.59	0.65
1:A:156:GLU:O	1:A:157:TYR:HB2	1.95	0.65
1:A:162:VAL:CG2	1:A:163:LEU:N	2.58	0.65
1:A:177:TRP:O	1:A:178:VAL:O	2.14	0.65
1:A:234:PHE:O	1:A:235:PRO:O	2.14	0.65
1:A:425:GLN:NE2	1:A:444:LEU:HD23	2.12	0.65
1:A:85:THR:CG2	1:A:86:PRO:HD2	2.27	0.65
1:A:99:PHE:CE2	1:A:107:LEU:HD22	2.31	0.65
1:A:338:HIS:O	1:A:339:HIS:ND1	2.28	0.65
1:A:420:LEU:N	1:A:547:ALA:HB2	2.12	0.65
1:A:130:ASP:HB3	1:A:480:GLN:HB3	1.78	0.65
1:A:167:GLN:HG2	1:A:169:THR:OG1	1.97	0.65
1:A:96:ASN:ND2	1:A:97:LEU:H	1.94	0.65
1:A:349:ILE:O	1:A:351:ALA:N	2.29	0.65
1:A:46:ILE:CG2	1:A:482:ALA:HB3	2.26	0.65
1:A:229:THR:CG2	1:A:230:MET:N	2.60	0.65
1:A:315:GLY:O	1:A:316:LEU:HD23	1.97	0.64
1:A:63:SER:C	1:A:65:HIS:H	2.04	0.64
1:A:100:SER:H	1:A:103:GLU:CB	2.06	0.64
1:A:106:HIS:O	1:A:109:GLU:HG2	1.97	0.64
1:A:145:ALA:C	1:A:147:GLY:H	2.02	0.64
1:A:377:GLU:HB3	1:A:382:LYS:HG3	1.80	0.64
1:A:229:THR:CG2	1:A:230:MET:H	2.09	0.64
1:A:48:TYR:HE2	1:A:50:PRO:HG3	1.61	0.64
1:A:52:HIS:HB3	1:A:86:PRO:HB3	1.80	0.64
1:A:128:VAL:HA	1:A:482:ALA:HB2	1.79	0.64
1:A:159:TYR:CE1	1:A:214:LEU:HD22	2.33	0.64
1:A:333:VAL:HG12	1:A:417:ARG:HB3	1.80	0.64
1:A:428:SER:N	1:A:447:TRP:O	2.29	0.64
1:A:30:THR:C	1:A:36:VAL:HG23	2.22	0.64
1:A:42:ARG:NH2	1:A:175:PRO:HD3	2.13	0.64
1:A:101:PRO:HA	1:A:104:PHE:HB3	1.80	0.64
1:A:133:ASP:HA	1:A:139:VAL:HA	1.80	0.64
1:A:249:PHE:CB	1:A:380:GLN:OE1	2.46	0.64
1:A:521:VAL:HG22	1:A:522:LEU:H	1.63	0.64
1:A:42:ARG:HH12	1:A:175:PRO:HD3	0.70	0.64
1:A:63:SER:CB	1:A:76:THR:HB	2.27	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:87:TRP:HZ3	1:A:458:LEU:HA	1.62	0.64
1:A:170:LEU:CG	1:A:171:ALA:H	2.06	0.64
1:A:552:HIS:HE1	1:A:554:LEU:HB3	1.63	0.64
1:A:444:LEU:H	1:A:444:LEU:HD13	1.63	0.63
1:A:190:GLY:HA3	1:A:206:SER:HB3	1.81	0.63
1:A:505:PRO:O	1:A:506:GLN:O	2.17	0.63
1:A:506:GLN:CG	1:A:550:ARG:HD2	2.28	0.63
1:A:112:GLY:O	1:A:113:SER:CB	2.44	0.63
1:A:316:LEU:HD22	1:A:349:ILE:HG22	1.80	0.63
1:A:58:SER:HB2	1:A:203:LYS:O	1.98	0.63
1:A:347:THR:O	1:A:349:ILE:N	2.31	0.63
1:A:42:ARG:NH1	1:A:175:PRO:CA	2.62	0.63
1:A:134:LYS:HB3	1:A:138:GLY:H	1.62	0.63
1:A:158:LYS:O	1:A:159:TYR:HB2	1.99	0.63
1:A:250:TYR:CE2	1:A:381:LEU:HD21	2.33	0.63
1:A:46:ILE:HG23	1:A:460:ILE:HD11	1.81	0.63
1:A:74:VAL:HG12	1:A:74:VAL:O	1.98	0.63
1:A:111:TYR:CE2	1:A:494:LEU:HD12	2.34	0.62
1:A:252:MET:HE3	1:A:554:LEU:CD1	2.28	0.62
1:A:338:HIS:HD2	1:A:339:HIS:N	1.95	0.62
1:A:181:PRO:O	1:A:183:GLN:NE2	2.31	0.62
1:A:520:TYR:HD2	1:A:538:TYR:HH	1.46	0.62
1:A:440:GLN:HE21	1:A:440:GLN:HA	1.65	0.62
1:A:42:ARG:HH11	1:A:175:PRO:HA	1.64	0.62
1:A:295:ASN:CA	1:A:405:ILE:HA	2.30	0.62
1:A:157:TYR:CE2	1:A:451:GLN:HA	2.34	0.62
1:A:288:PHE:HB3	1:A:412:GLY:O	2.00	0.62
1:A:425:GLN:HG3	1:A:446:GLY:HA3	1.81	0.62
1:A:452:PRO:O	1:A:454:PRO:N	2.33	0.62
1:A:450:HIS:ND1	1:A:450:HIS:N	2.47	0.62
1:A:414:VAL:CG1	1:A:415:TRP:N	2.62	0.62
1:A:329:ARG:C	1:A:331:GLY:H	2.08	0.62
1:A:383:GLN:HG3	1:A:384:LEU:N	2.13	0.62
1:A:328:LEU:CD2	1:A:329:ARG:H	2.12	0.62
1:A:375:PRO:HB3	1:A:377:GLU:CG	2.27	0.61
1:A:430:ILE:HG23	1:A:431:PRO:HD2	1.82	0.61
1:A:99:PHE:HD1	1:A:99:PHE:H	1.47	0.61
1:A:254:ASN:HB2	1:A:257:TYR:HB2	1.82	0.61
1:A:434:ASP:OD1	1:A:434:ASP:N	2.34	0.61
1:A:82:GLY:HA2	1:A:186:TYR:O	1.99	0.61
1:A:485:ILE:HD12	1:A:485:ILE:C	2.26	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:521:VAL:CG2	1:A:522:LEU:N	2.64	0.61
1:A:42:ARG:NH1	1:A:175:PRO:N	2.48	0.61
1:A:128:VAL:HG21	1:A:147:GLY:C	2.26	0.61
1:A:165:GLN:O	1:A:166:GLY:C	2.43	0.61
1:A:294:VAL:O	1:A:295:ASN:HB3	2.00	0.61
1:A:298:SER:CA	1:A:348:GLY:HA2	2.29	0.61
1:A:27:GLU:HG2	1:A:28:GLY:N	2.14	0.61
1:A:100:SER:O	1:A:102:LEU:N	2.33	0.61
1:A:414:VAL:HG12	1:A:415:TRP:N	2.16	0.61
1:A:92:PHE:HA	1:A:171:ALA:HB2	1.82	0.61
1:A:236:PRO:O	1:A:237:VAL:HB	2.00	0.61
1:A:353:SER:HA	1:A:371:VAL:HG13	1.81	0.61
1:A:386:GLY:O	1:A:387:LEU:HD22	2.01	0.61
1:A:475:ILE:HG13	1:A:475:ILE:O	2.00	0.61
1:A:93:ASN:OD1	1:A:426:LEU:HB3	2.00	0.61
1:A:40:PHE:O	1:A:487:THR:HG23	2.01	0.61
1:A:245:CYS:O	1:A:247:GLN:N	2.32	0.60
1:A:506:GLN:NE2	1:A:551:VAL:HG12	2.15	0.60
1:A:338:HIS:CD2	1:A:339:HIS:N	2.67	0.60
1:A:372:GLY:C	1:A:373:ARG:HD3	2.26	0.60
1:A:421:HIS:CG	1:A:423:GLU:O	2.55	0.60
1:A:63:SER:OG	1:A:74:VAL:HG13	2.02	0.60
1:A:97:LEU:HD13	1:A:97:LEU:N	2.17	0.60
1:A:523:TYR:HD2	1:A:536:HIS:CD2	2.19	0.60
1:A:119:LEU:HG	1:A:490:MET:HE2	1.83	0.60
1:A:337:TYR:O	1:A:337:TYR:CD1	2.55	0.60
1:A:90:LEU:HD22	1:A:486:MET:HE2	1.83	0.60
1:A:57:PHE:HB2	1:A:82:GLY:O	2.02	0.60
1:A:100:SER:HB2	1:A:103:GLU:HG3	1.83	0.60
1:A:294:VAL:N	1:A:335:GLN:HE21	1.95	0.60
1:A:425:GLN:HB2	1:A:444:LEU:HB2	1.83	0.60
1:A:455:GLN:HB2	1:A:457:PHE:CE2	2.37	0.60
1:A:46:ILE:CG2	1:A:482:ALA:H	2.14	0.60
1:A:132:THR:O	1:A:140:GLN:HB3	2.02	0.60
1:A:346:VAL:HG12	1:A:348:GLY:H	1.67	0.60
1:A:384:LEU:O	1:A:384:LEU:HD12	2.01	0.60
1:A:440:GLN:HE21	1:A:440:GLN:CA	2.13	0.60
1:A:51:GLU:HG2	1:A:52:HIS:N	2.16	0.59
1:A:522:LEU:HD11	1:A:538:TYR:HB2	1.84	0.59
1:A:114:ILE:HG22	1:A:115:ALA:N	2.16	0.59
1:A:338:HIS:ND1	1:A:371:VAL:HB	2.17	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:430:ILE:CG2	1:A:431:PRO:HD2	2.31	0.59
1:A:46:ILE:HD13	1:A:458:LEU:O	2.03	0.59
1:A:52:HIS:HB2	1:A:86:PRO:HB3	1.83	0.59
1:A:123:ILE:HD13	1:A:151:MET:HE2	1.83	0.59
1:A:131:VAL:HG22	1:A:141:VAL:HG23	1.83	0.59
1:A:314:THR:HG22	1:A:315:GLY:N	2.18	0.59
1:A:35:SER:HA	1:A:494:LEU:HG	1.84	0.59
1:A:160:PRO:O	1:A:184:TYR:OH	2.18	0.59
1:A:155:HIS:H	1:A:454:PRO:HB3	1.67	0.59
1:A:100:SER:O	1:A:103:GLU:HG3	2.02	0.59
1:A:244:GLY:N	1:A:551:VAL:HA	2.17	0.59
1:A:423:GLU:HB2	1:A:540:LYS:NZ	2.15	0.59
1:A:521:VAL:CG2	1:A:522:LEU:H	2.16	0.59
1:A:46:ILE:CG2	1:A:460:ILE:HD11	2.33	0.59
1:A:246:SER:H	1:A:551:VAL:CG2	2.16	0.59
1:A:419:ALA:O	1:A:420:LEU:HD23	2.03	0.59
1:A:449:LEU:HD21	1:A:452:PRO:CB	2.30	0.59
1:A:87:TRP:CH2	1:A:459:LYS:HG2	2.38	0.58
1:A:192:VAL:HG13	1:A:192:VAL:O	2.03	0.58
1:A:393:PHE:N	1:A:394:PRO:HD3	2.17	0.58
1:A:452:PRO:HB2	1:A:453:PRO:CD	2.31	0.58
1:A:157:TYR:CE1	1:A:454:PRO:HG3	2.38	0.58
1:A:44:PHE:CZ	1:A:484:GLY:HA3	2.38	0.58
1:A:152:LEU:HB2	1:A:219:PHE:HB3	1.84	0.58
1:A:161:TYR:HH	1:A:427:TRP:HZ3	1.50	0.58
1:A:129:LYS:NZ	1:A:143:ASP:HA	2.17	0.58
1:A:295:ASN:ND2	1:A:350:ASN:HD21	1.99	0.58
1:A:371:VAL:O	1:A:372:GLY:C	2.46	0.58
1:A:36:VAL:HG22	1:A:37:THR:N	2.18	0.58
1:A:87:TRP:CZ2	1:A:459:LYS:HG2	2.39	0.58
1:A:180:PHE:CD1	1:A:180:PHE:N	2.71	0.58
1:A:377:GLU:C	1:A:382:LYS:HB2	2.28	0.58
1:A:374:PHE:CZ	1:A:543:GLU:HG3	2.38	0.58
1:A:414:VAL:O	1:A:415:TRP:CE3	2.57	0.58
1:A:430:ILE:CG2	1:A:439:THR:HG21	2.34	0.58
1:A:60:ALA:HA	1:A:202:LYS:HA	1.86	0.58
1:A:107:LEU:HD11	1:A:242:LEU:CD1	2.34	0.58
1:A:410:MET:HE2	1:A:410:MET:N	2.18	0.58
1:A:421:HIS:O	1:A:423:GLU:O	2.22	0.58
1:A:425:GLN:CD	1:A:444:LEU:HD23	2.29	0.58
1:A:500:THR:HB	1:A:502:ARG:HG3	1.85	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:263:VAL:HG22	1:A:272:LYS:HZ2	1.68	0.58
1:A:40:PHE:CD1	1:A:40:PHE:C	2.81	0.57
1:A:189:VAL:HG12	1:A:190:GLY:N	2.18	0.57
1:A:113:SER:OG	1:A:239:PRO:HB2	2.04	0.57
1:A:529:ASP:HB3	1:A:533:HIS:HA	1.87	0.57
1:A:48:TYR:O	1:A:49:ASP:C	2.47	0.57
1:A:81:MET:CE	1:A:205:ALA:HB2	2.33	0.57
1:A:158:LYS:O	1:A:159:TYR:CB	2.52	0.57
1:A:251:GLU:HA	1:A:253:TYR:CE2	2.39	0.57
1:A:535:ARG:HB3	1:A:535:ARG:NH1	2.19	0.57
1:A:94:ALA:O	1:A:97:LEU:CD2	2.53	0.57
1:A:170:LEU:CG	1:A:171:ALA:N	2.66	0.57
1:A:176:ILE:O	1:A:176:ILE:HG22	2.05	0.57
1:A:64:CYS:O	1:A:65:HIS:HB2	2.02	0.57
1:A:99:PHE:N	1:A:99:PHE:CD1	2.72	0.57
1:A:511:PRO:HB3	1:A:545:TRP:NE1	2.20	0.57
1:A:382:LYS:HE3	1:A:415:TRP:HB2	1.85	0.57
1:A:415:TRP:HD1	1:A:416:ASN:O	1.88	0.57
1:A:550:ARG:HG3	1:A:551:VAL:H	1.69	0.57
1:A:27:GLU:HA	1:A:39:THR:O	2.05	0.57
1:A:44:PHE:HA	1:A:179:TYR:O	2.05	0.57
1:A:42:ARG:NH1	1:A:175:PRO:HA	2.18	0.57
1:A:45:LEU:N	1:A:88:ARG:HH22	2.03	0.57
1:A:95:LEU:HD13	1:A:95:LEU:C	2.30	0.57
1:A:107:LEU:HD22	1:A:114:ILE:HD11	1.87	0.57
1:A:152:LEU:C	1:A:152:LEU:HD23	2.30	0.57
1:A:300:LYS:HE2	1:A:300:LYS:HA	1.86	0.57
1:A:526:THR:C	1:A:528:THR:N	2.63	0.57
1:A:45:LEU:C	1:A:88:ARG:HH22	2.13	0.56
1:A:81:MET:HG2	1:A:203:LYS:HG3	1.86	0.56
1:A:127:ALA:HB3	1:A:483:VAL:N	2.01	0.56
1:A:188:THR:HG21	1:A:210:ALA:N	2.09	0.56
1:A:127:ALA:CB	1:A:483:VAL:H	2.04	0.56
1:A:237:VAL:HG21	1:A:447:TRP:CD1	2.40	0.56
1:A:316:LEU:HD12	1:A:328:LEU:HD11	1.85	0.56
1:A:506:GLN:HE22	1:A:551:VAL:CA	2.16	0.56
1:A:513:HIS:HA	1:A:542:GLU:HG2	1.88	0.56
1:A:65:HIS:HB3	1:A:200:ASP:OD1	2.05	0.56
1:A:320:THR:OG1	1:A:326:ILE:HG23	2.04	0.56
1:A:407:ARG:H	1:A:408:PRO:HD3	1.70	0.56
1:A:94:ALA:O	1:A:95:LEU:C	2.48	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:392:TYR:H	1:A:394:PRO:HD3	1.71	0.56
1:A:442:ALA:HB1	1:A:444:LEU:HD22	1.87	0.56
1:A:551:VAL:HG22	1:A:552:HIS:N	2.21	0.56
1:A:552:HIS:ND1	1:A:552:HIS:C	2.64	0.56
1:A:252:MET:O	1:A:253:TYR:O	2.24	0.56
1:A:367:TYR:O	1:A:369:GLN:N	2.38	0.56
1:A:249:PHE:HB3	1:A:380:GLN:OE1	2.07	0.56
1:A:350:ASN:O	1:A:351:ALA:O	2.22	0.56
1:A:506:GLN:O	1:A:507:PRO:O	2.24	0.56
1:A:96:ASN:C	1:A:97:LEU:HD22	2.31	0.55
1:A:551:VAL:HG22	1:A:552:HIS:O	2.06	0.55
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:HD12	2.31	0.55
1:A:134:LYS:C	1:A:136:GLY:H	2.13	0.55
1:A:216:HIS:O	1:A:217:SER:HB3	2.05	0.55
1:A:87:TRP:CE2	1:A:459:LYS:HG2	2.41	0.55
1:A:157:TYR:CZ	1:A:451:GLN:HA	2.41	0.55
1:A:505:PRO:O	1:A:506:GLN:HB3	2.05	0.55
1:A:46:ILE:N	1:A:88:ARG:NH2	2.55	0.55
1:A:172:PRO:CG	1:A:179:TYR:HB2	2.34	0.55
1:A:179:TYR:CZ	1:A:181:PRO:HG3	2.41	0.55
1:A:433:LEU:O	1:A:434:ASP:O	2.25	0.55
1:A:544:LEU:H	1:A:544:LEU:HD22	1.72	0.55
1:A:295:ASN:ND2	1:A:317:SER:OG	2.40	0.55
1:A:340:TRP:HE3	1:A:342:THR:HA	1.71	0.55
1:A:442:ALA:O	1:A:443:ALA:C	2.49	0.55
1:A:45:LEU:O	1:A:88:ARG:NH1	2.40	0.55
1:A:78:THR:HA	1:A:325:ARG:NH1	2.16	0.55
1:A:100:SER:N	1:A:103:GLU:HB2	2.14	0.55
1:A:421:HIS:CD2	1:A:423:GLU:O	2.59	0.55
1:A:503:TRP:O	1:A:503:TRP:CE3	2.46	0.55
1:A:96:ASN:HA	1:A:422:TYR:O	2.07	0.55
1:A:161:TYR:OH	1:A:452:PRO:HG2	2.07	0.55
1:A:179:TYR:O	1:A:181:PRO:HD3	2.05	0.55
1:A:295:ASN:ND2	1:A:296:SER:H	2.04	0.55
1:A:326:ILE:O	1:A:327:SER:CB	2.55	0.55
1:A:426:LEU:HB3	1:A:427:TRP:CD1	2.42	0.55
1:A:162:VAL:HG13	1:A:163:LEU:N	2.18	0.54
1:A:250:TYR:O	1:A:253:TYR:HE2	1.90	0.54
1:A:95:LEU:O	1:A:96:ASN:O	2.25	0.54
1:A:107:LEU:HD12	1:A:107:LEU:O	2.06	0.54
1:A:392:TYR:CE2	1:A:399:GLN:HB3	2.41	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:453:PRO:O	1:A:454:PRO:C	2.49	0.54
1:A:46:ILE:HG23	1:A:482:ALA:H	1.71	0.54
1:A:129:LYS:HZ2	1:A:129:LYS:CB	2.13	0.54
1:A:207:GLU:O	1:A:209:SER:N	2.36	0.54
1:A:413:SER:O	1:A:414:VAL:CG2	2.53	0.54
1:A:500:THR:HG22	1:A:553:PRO:CD	2.37	0.54
1:A:503:TRP:O	1:A:505:PRO:HD3	2.06	0.54
1:A:27:GLU:CG	1:A:40:PHE:HA	2.35	0.54
1:A:57:PHE:HB2	1:A:82:GLY:C	2.31	0.54
1:A:122:THR:HG23	1:A:229:THR:HG1	1.73	0.54
1:A:123:ILE:O	1:A:227:THR:HG23	2.06	0.54
1:A:292:PRO:CD	1:A:409:LEU:HA	2.30	0.54
1:A:338:HIS:HE2	1:A:345:TYR:HD2	1.54	0.54
1:A:427:TRP:HA	1:A:447:TRP:O	2.07	0.54
1:A:529:ASP:HB2	1:A:534:HIS:H	1.72	0.54
1:A:249:PHE:C	1:A:249:PHE:HD2	2.14	0.54
1:A:353:SER:CB	1:A:371:VAL:HG22	2.37	0.54
1:A:406:GLU:O	1:A:407:ARG:HB2	2.05	0.54
1:A:107:LEU:HD21	1:A:114:ILE:CD1	2.38	0.54
1:A:449:LEU:HD22	1:A:452:PRO:HB3	1.86	0.54
1:A:177:TRP:O	1:A:178:VAL:C	2.50	0.54
1:A:42:ARG:C	1:A:43:GLN:O	2.49	0.54
1:A:388:ASN:C	1:A:390:HIS:H	2.16	0.54
1:A:391:THR:HG23	1:A:393:PHE:H	1.73	0.54
1:A:426:LEU:CG	1:A:427:TRP:HD1	2.20	0.54
1:A:263:VAL:HG22	1:A:272:LYS:NZ	2.22	0.54
1:A:400:GLN:O	1:A:401:TYR:CB	2.54	0.54
1:A:161:TYR:OH	1:A:427:TRP:HZ3	1.90	0.54
1:A:162:VAL:CG1	1:A:163:LEU:H	2.12	0.54
1:A:235:PRO:CB	1:A:236:PRO:HD2	2.33	0.54
1:A:320:THR:HG23	1:A:326:ILE:N	2.23	0.54
1:A:455:GLN:HB2	1:A:457:PHE:HE2	1.72	0.54
1:A:44:PHE:CE2	1:A:486:MET:HB3	2.43	0.53
1:A:241:ASN:OD1	1:A:242:LEU:N	2.42	0.53
1:A:54:TYR:HE2	1:A:213:VAL:HA	1.72	0.53
1:A:152:LEU:HB2	1:A:219:PHE:HB2	1.90	0.53
1:A:298:SER:H	1:A:384:LEU:HD23	1.73	0.53
1:A:328:LEU:HD22	1:A:329:ARG:H	1.73	0.53
1:A:96:ASN:HD22	1:A:97:LEU:H	1.56	0.53
1:A:241:ASN:OD1	1:A:243:GLU:N	2.42	0.53
1:A:26:SER:HB2	1:A:487:THR:CG2	2.32	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:87:TRP:HE1	1:A:215:GLU:CD	2.15	0.53
1:A:193:ASN:O	1:A:202:LYS:HG2	2.09	0.53
1:A:427:TRP:CA	1:A:447:TRP:H	2.19	0.53
1:A:427:TRP:CZ3	1:A:453:PRO:HD2	2.43	0.53
1:A:522:LEU:CD1	1:A:538:TYR:HB2	2.38	0.53
1:A:81:MET:HE2	1:A:205:ALA:HB2	1.89	0.53
1:A:42:ARG:NH1	1:A:175:PRO:CG	2.52	0.53
1:A:96:ASN:HD21	1:A:173:GLU:HG3	1.73	0.53
1:A:114:ILE:CG2	1:A:115:ALA:N	2.72	0.53
1:A:124:SER:O	1:A:125:GLU:C	2.51	0.53
1:A:316:LEU:HD22	1:A:349:ILE:CG2	2.38	0.53
1:A:115:ALA:O	1:A:492:PHE:HA	2.08	0.53
1:A:129:LYS:NZ	1:A:129:LYS:CB	2.71	0.53
1:A:485:ILE:HG13	1:A:485:ILE:O	2.09	0.53
1:A:88:ARG:HB2	1:A:182:PRO:O	2.09	0.53
1:A:105:GLN:O	1:A:108:ILE:HG12	2.08	0.53
1:A:373:ARG:HH21	1:A:375:PRO:CD	2.22	0.53
1:A:248:HIS:CE1	1:A:379:GLU:HB3	2.43	0.53
1:A:340:TRP:CE3	1:A:342:THR:HA	2.44	0.53
1:A:478:LEU:CD2	1:A:478:LEU:N	2.59	0.53
1:A:525:PRO:O	1:A:528:THR:HB	2.09	0.53
1:A:76:THR:HG23	1:A:76:THR:O	2.09	0.52
1:A:230:MET:SD	1:A:230:MET:C	2.92	0.52
1:A:298:SER:H	1:A:384:LEU:CD2	2.21	0.52
1:A:316:LEU:O	1:A:317:SER:C	2.51	0.52
1:A:545:TRP:HE3	1:A:545:TRP:C	2.17	0.52
1:A:94:ALA:O	1:A:97:LEU:HD22	2.08	0.52
1:A:150:CYS:SG	1:A:461:LEU:HD23	2.49	0.52
1:A:161:TYR:C	1:A:162:VAL:HG12	2.33	0.52
1:A:246:SER:O	1:A:247:GLN:HB2	2.09	0.52
1:A:452:PRO:O	1:A:454:PRO:CD	2.57	0.52
1:A:87:TRP:CZ3	1:A:458:LEU:HA	2.43	0.52
1:A:141:VAL:O	1:A:141:VAL:HG13	2.09	0.52
1:A:48:TYR:CE2	1:A:50:PRO:HG3	2.42	0.52
1:A:63:SER:OG	1:A:64:CYS:N	2.43	0.52
1:A:119:LEU:HD22	1:A:119:LEU:C	2.35	0.52
1:A:265:ASP:OD2	1:A:270:ASP:HA	2.09	0.52
1:A:460:ILE:CG2	1:A:461:LEU:N	2.73	0.52
1:A:126:ILE:CG2	1:A:224:THR:HA	2.30	0.52
1:A:154:ASP:OD1	1:A:157:TYR:HA	2.10	0.52
1:A:186:TYR:C	1:A:187:LEU:HD22	2.34	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:232:TYR:OH	1:A:453:PRO:HD3	2.09	0.52
1:A:105:GLN:O	1:A:106:HIS:C	2.53	0.52
1:A:425:GLN:NE2	1:A:444:LEU:CD2	2.73	0.52
1:A:276:LEU:HB2	1:A:280:ASP:HB3	1.91	0.52
1:A:276:LEU:O	1:A:279:GLU:O	2.27	0.52
1:A:87:TRP:CZ3	1:A:459:LYS:HG2	2.45	0.52
1:A:131:VAL:HB	1:A:479:VAL:HG11	1.91	0.52
1:A:154:ASP:O	1:A:156:GLU:N	2.42	0.52
1:A:523:TYR:CD2	1:A:536:HIS:CD2	2.98	0.52
1:A:186:TYR:OH	1:A:212:TYR:N	2.43	0.52
1:A:340:TRP:HE3	1:A:343:ASP:N	2.02	0.52
1:A:434:ASP:O	1:A:435:ASP:C	2.53	0.52
1:A:157:TYR:HE2	1:A:451:GLN:CB	2.23	0.51
1:A:165:GLN:O	1:A:166:GLY:O	2.29	0.51
1:A:170:LEU:HG	1:A:171:ALA:N	2.23	0.51
1:A:174:LEU:O	1:A:177:TRP:HB2	2.10	0.51
1:A:249:PHE:N	1:A:380:GLN:OE1	2.38	0.51
1:A:381:LEU:CB	1:A:407:ARG:HH22	2.23	0.51
1:A:123:ILE:HD12	1:A:123:ILE:N	2.26	0.51
1:A:340:TRP:HA	1:A:344:LYS:O	2.10	0.51
1:A:81:MET:N	1:A:203:LYS:HG2	2.25	0.51
1:A:112:GLY:O	1:A:113:SER:HB2	2.09	0.51
1:A:179:TYR:CE2	1:A:181:PRO:HA	2.45	0.51
1:A:206:SER:OG	1:A:207:GLU:N	2.41	0.51
1:A:207:GLU:C	1:A:209:SER:N	2.69	0.51
1:A:338:HIS:C	1:A:339:HIS:HD1	2.18	0.51
1:A:346:VAL:CG1	1:A:347:THR:N	2.73	0.51
1:A:393:PHE:H	1:A:394:PRO:CD	2.22	0.51
1:A:46:ILE:CG2	1:A:482:ALA:N	2.74	0.51
1:A:131:VAL:HB	1:A:479:VAL:CG1	2.41	0.51
1:A:234:PHE:C	1:A:235:PRO:O	2.53	0.51
1:A:273:PHE:HZ	1:A:276:LEU:HG	1.75	0.51
1:A:320:THR:HG1	1:A:326:ILE:HA	1.76	0.51
1:A:526:THR:O	1:A:528:THR:N	2.35	0.51
1:A:54:TYR:CE2	1:A:213:VAL:HA	2.46	0.50
1:A:244:GLY:N	1:A:550:ARG:O	2.44	0.50
1:A:294:VAL:O	1:A:294:VAL:HG12	2.12	0.50
1:A:521:VAL:O	1:A:538:TYR:HA	2.11	0.50
1:A:144:SER:C	1:A:145:ALA:O	2.51	0.50
1:A:329:ARG:C	1:A:331:GLY:N	2.68	0.50
1:A:54:TYR:CZ	1:A:85:THR:HG23	2.46	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:204:LEU:HG	1:A:205:ALA:H	1.77	0.50
1:A:217:SER:O	1:A:218:SER:C	2.53	0.50
1:A:411:VAL:O	1:A:411:VAL:CG1	2.59	0.50
1:A:425:GLN:CB	1:A:444:LEU:HB2	2.41	0.50
1:A:59:PRO:HD2	1:A:80:ILE:HD12	1.93	0.50
1:A:250:TYR:HE2	1:A:381:LEU:HG	1.77	0.50
1:A:314:THR:O	1:A:315:GLY:O	2.28	0.50
1:A:387:LEU:HB2	1:A:403:ASP:O	2.12	0.50
1:A:400:GLN:HG3	1:A:401:TYR:H	1.75	0.50
1:A:449:LEU:HD13	1:A:449:LEU:N	2.27	0.50
1:A:460:ILE:HD12	1:A:481:TYR:HA	1.93	0.50
1:A:29:ALA:HA	1:A:37:THR:O	2.12	0.50
1:A:162:VAL:CG2	1:A:163:LEU:H	2.21	0.50
1:A:213:VAL:O	1:A:213:VAL:CG2	2.59	0.50
1:A:250:TYR:CE2	1:A:381:LEU:CD2	2.95	0.50
1:A:256:LEU:HD23	1:A:256:LEU:N	2.24	0.50
1:A:333:VAL:CG1	1:A:417:ARG:HB3	2.41	0.50
1:A:374:PHE:HE1	1:A:543:GLU:HG3	1.71	0.50
1:A:429:LYS:HG2	1:A:430:ILE:O	2.12	0.50
1:A:289:MET:O	1:A:290:PRO:C	2.55	0.50
1:A:512:PRO:O	1:A:541:PRO:HB3	2.12	0.50
1:A:63:SER:C	1:A:65:HIS:N	2.70	0.49
1:A:386:GLY:C	1:A:387:LEU:HD22	2.37	0.49
1:A:77:ILE:C	1:A:78:THR:O	2.56	0.49
1:A:111:TYR:CD1	1:A:111:TYR:N	2.80	0.49
1:A:393:PHE:N	1:A:394:PRO:CD	2.75	0.49
1:A:85:THR:C	1:A:87:TRP:H	2.19	0.49
1:A:298:SER:HA	1:A:348:GLY:CA	2.39	0.49
1:A:338:HIS:O	1:A:339:HIS:HB3	2.11	0.49
1:A:339:HIS:HE1	1:A:383:GLN:CG	2.26	0.49
1:A:104:PHE:O	1:A:105:GLN:C	2.55	0.49
1:A:157:TYR:HE2	1:A:451:GLN:HB3	1.76	0.49
1:A:372:GLY:O	1:A:373:ARG:HB3	2.12	0.49
1:A:418:ARG:O	1:A:419:ALA:O	2.31	0.49
1:A:423:GLU:OE1	1:A:424:SER:N	2.46	0.49
1:A:349:ILE:HG22	1:A:350:ASN:N	2.19	0.49
1:A:107:LEU:HG	1:A:108:ILE:HD13	1.93	0.49
1:A:114:ILE:HG23	1:A:492:PHE:HB3	1.92	0.49
1:A:117:ASP:OD1	1:A:233:LYS:HE2	2.13	0.49
1:A:244:GLY:CA	1:A:551:VAL:HG23	2.43	0.49
1:A:353:SER:CA	1:A:371:VAL:HG13	2.42	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:452:PRO:O	1:A:454:PRO:HD3	2.12	0.49
1:A:116:PRO:O	1:A:234:PHE:HB2	2.13	0.49
1:A:338:HIS:O	1:A:339:HIS:CB	2.60	0.49
1:A:373:ARG:O	1:A:375:PRO:HD3	2.13	0.49
1:A:455:GLN:CB	1:A:457:PHE:CE2	2.96	0.49
1:A:232:TYR:CZ	1:A:453:PRO:HD3	2.48	0.49
1:A:426:LEU:HG	1:A:427:TRP:CD1	2.40	0.49
1:A:460:ILE:O	1:A:462:PRO:HD3	2.12	0.49
1:A:91:ASP:OD2	1:A:93:ASN:HB2	2.13	0.49
1:A:111:TYR:CD2	1:A:494:LEU:HD12	2.46	0.49
1:A:176:ILE:C	1:A:177:TRP:CD1	2.86	0.49
1:A:373:ARG:HH21	1:A:375:PRO:CG	2.25	0.48
1:A:413:SER:O	1:A:414:VAL:CB	2.60	0.48
1:A:453:PRO:O	1:A:454:PRO:O	2.31	0.48
1:A:88:ARG:NH1	1:A:180:PHE:CA	2.74	0.48
1:A:161:TYR:CZ	1:A:452:PRO:HG2	2.48	0.48
1:A:248:HIS:ND1	1:A:379:GLU:O	2.46	0.48
1:A:425:GLN:HE21	1:A:444:LEU:HD23	1.77	0.48
1:A:456:ILE:N	1:A:456:ILE:CD1	2.70	0.48
1:A:83:TYR:HB2	1:A:186:TYR:CE2	2.48	0.48
1:A:101:PRO:HD3	1:A:422:TYR:CD1	2.48	0.48
1:A:461:LEU:HD13	1:A:461:LEU:C	2.38	0.48
1:A:181:PRO:O	1:A:182:PRO:O	2.32	0.48
1:A:264:PRO:HG3	1:A:273:PHE:HB3	1.94	0.48
1:A:372:GLY:N	1:A:544:LEU:HD23	2.28	0.48
1:A:274:ARG:O	1:A:275:SER:OG	2.28	0.48
1:A:430:ILE:HG12	1:A:439:THR:HG22	1.95	0.48
1:A:53:HIS:O	1:A:54:TYR:HB2	2.13	0.48
1:A:87:TRP:CD2	1:A:459:LYS:HG2	2.49	0.48
1:A:129:LYS:HG3	1:A:481:TYR:CE2	2.48	0.48
1:A:449:LEU:N	1:A:449:LEU:CD1	2.77	0.48
1:A:381:LEU:HB3	1:A:407:ARG:HH22	1.78	0.48
1:A:520:TYR:HD2	1:A:538:TYR:OH	1.97	0.48
1:A:45:LEU:HD21	1:A:481:TYR:CD1	2.49	0.48
1:A:53:HIS:C	1:A:55:LYS:N	2.65	0.48
1:A:358:THR:HB	1:A:361:ASN:O	2.13	0.48
1:A:373:ARG:NE	1:A:373:ARG:C	2.72	0.48
1:A:455:GLN:C	1:A:456:ILE:HD12	2.38	0.48
1:A:172:PRO:C	1:A:174:LEU:H	2.21	0.48
1:A:420:LEU:CA	1:A:547:ALA:HB2	2.44	0.48
1:A:46:ILE:HG23	1:A:46:ILE:O	2.14	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:97:LEU:HD22	1:A:98:PHE:H	1.79	0.48
1:A:100:SER:C	1:A:103:GLU:HG3	2.38	0.48
1:A:347:THR:O	1:A:347:THR:HG22	2.14	0.48
1:A:36:VAL:CG2	1:A:37:THR:N	2.77	0.47
1:A:464:SER:OG	1:A:465:GLY:N	2.47	0.47
1:A:107:LEU:HG	1:A:108:ILE:N	2.28	0.47
1:A:120:THR:HB	1:A:231:SER:HB3	1.96	0.47
1:A:152:LEU:CD1	1:A:219:PHE:HB3	2.35	0.47
1:A:337:TYR:HB2	1:A:351:ALA:HB2	1.95	0.47
1:A:101:PRO:C	1:A:103:GLU:N	2.62	0.47
1:A:293:LEU:HB2	1:A:407:ARG:CB	2.38	0.47
1:A:425:GLN:CG	1:A:446:GLY:H	2.28	0.47
1:A:93:ASN:OD1	1:A:93:ASN:O	2.32	0.47
1:A:289:MET:O	1:A:290:PRO:O	2.32	0.47
1:A:450:HIS:O	1:A:451:GLN:HB2	2.14	0.47
1:A:526:THR:HG22	1:A:527:ALA:N	2.29	0.47
1:A:532:GLN:O	1:A:533:HIS:O	2.31	0.47
1:A:214:LEU:HD11	1:A:457:PHE:CD1	2.49	0.47
1:A:249:PHE:CZ	1:A:288:PHE:HB2	2.49	0.47
1:A:346:VAL:CG1	1:A:347:THR:H	2.23	0.47
1:A:41:SER:C	1:A:42:ARG:HG2	2.39	0.47
1:A:104:PHE:CG	1:A:108:ILE:HD11	2.49	0.47
1:A:502:ARG:HH11	1:A:502:ARG:CB	2.28	0.47
1:A:513:HIS:HB3	1:A:519:PRO:HD3	1.96	0.47
1:A:36:VAL:HG12	1:A:494:LEU:HD21	1.96	0.47
1:A:95:LEU:HA	1:A:426:LEU:HD22	1.96	0.47
1:A:116:PRO:HB2	1:A:234:PHE:CE1	2.49	0.47
1:A:246:SER:N	1:A:551:VAL:HG21	2.30	0.47
1:A:256:LEU:C	1:A:257:TYR:CD1	2.93	0.47
1:A:59:PRO:O	1:A:60:ALA:HB3	2.14	0.47
1:A:89:TYR:HA	1:A:457:PHE:HA	1.96	0.47
1:A:342:THR:C	1:A:344:LYS:H	2.23	0.47
1:A:478:LEU:H	1:A:478:LEU:HD22	1.75	0.47
1:A:490:MET:CG	1:A:491:THR:N	2.78	0.47
1:A:513:HIS:ND1	1:A:518:LEU:HD23	2.30	0.47
1:A:532:GLN:O	1:A:533:HIS:C	2.57	0.47
1:A:129:LYS:HG3	1:A:481:TYR:HE2	1.80	0.47
1:A:246:SER:N	1:A:551:VAL:CG2	2.77	0.47
1:A:145:ALA:C	1:A:146:THR:CG2	2.88	0.47
1:A:161:TYR:CB	1:A:429:LYS:HD3	2.42	0.47
1:A:293:LEU:CD2	1:A:407:ARG:HH11	2.28	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:326:ILE:HB	1:A:327:SER:H	1.46	0.47
1:A:427:TRP:CE3	1:A:452:PRO:HB2	2.49	0.47
1:A:502:ARG:NH2	1:A:504:ASN:O	2.48	0.47
1:A:529:ASP:HB2	1:A:534:HIS:N	2.29	0.47
1:A:133:ASP:HB2	1:A:138:GLY:O	2.15	0.46
1:A:187:LEU:N	1:A:187:LEU:CD2	2.76	0.46
1:A:463:GLN:OE1	1:A:480:GLN:NE2	2.46	0.46
1:A:488:VAL:HG12	1:A:489:THR:N	2.30	0.46
1:A:519:PRO:CG	1:A:541:PRO:HA	2.45	0.46
1:A:553:PRO:O	1:A:553:PRO:HG2	2.15	0.46
1:A:85:THR:HG23	1:A:86:PRO:HD2	1.96	0.46
1:A:101:PRO:O	1:A:105:GLN:N	2.49	0.46
1:A:221:LEU:O	1:A:222:LEU:CB	2.63	0.46
1:A:232:TYR:OH	1:A:452:PRO:HA	2.15	0.46
1:A:425:GLN:HE21	1:A:444:LEU:CD2	2.28	0.46
1:A:502:ARG:NH1	1:A:502:ARG:CB	2.77	0.46
1:A:27:GLU:CB	1:A:40:PHE:HA	2.45	0.46
1:A:97:LEU:HD13	1:A:97:LEU:H	1.79	0.46
1:A:234:PHE:O	1:A:235:PRO:C	2.59	0.46
1:A:52:HIS:O	1:A:52:HIS:ND1	2.48	0.46
1:A:104:PHE:CD2	1:A:108:ILE:HD11	2.50	0.46
1:A:179:TYR:CE1	1:A:181:PRO:HG3	2.51	0.46
1:A:77:ILE:O	1:A:78:THR:O	2.33	0.46
1:A:101:PRO:HD2	1:A:422:TYR:CZ	2.51	0.46
1:A:129:LYS:O	1:A:481:TYR:HD2	1.99	0.46
1:A:131:VAL:HG22	1:A:141:VAL:CG2	2.46	0.46
1:A:179:TYR:C	1:A:181:PRO:CD	2.83	0.46
1:A:295:ASN:CG	1:A:317:SER:OG	2.58	0.46
1:A:46:ILE:HD12	1:A:47:PRO:CD	2.43	0.46
1:A:59:PRO:HD2	1:A:80:ILE:CD1	2.46	0.46
1:A:96:ASN:HA	1:A:422:TYR:CE1	2.51	0.46
1:A:128:VAL:H	1:A:482:ALA:CB	2.28	0.46
1:A:153:VAL:HG22	1:A:456:ILE:HG23	1.96	0.46
1:A:204:LEU:HD12	1:A:204:LEU:HA	1.78	0.46
1:A:210:ALA:HB1	1:A:212:TYR:CZ	2.51	0.46
1:A:224:THR:HG22	1:A:225:GLY:N	2.31	0.46
1:A:387:LEU:HD23	1:A:403:ASP:O	2.16	0.46
1:A:388:ASN:C	1:A:390:HIS:N	2.73	0.46
1:A:180:PHE:N	1:A:181:PRO:HD3	2.30	0.46
1:A:264:PRO:HG3	1:A:273:PHE:CB	2.46	0.46
1:A:127:ALA:O	1:A:128:VAL:C	2.59	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:170:LEU:O	1:A:172:PRO:HD3	2.16	0.46
1:A:245:CYS:N	1:A:551:VAL:CG2	2.73	0.46
1:A:374:PHE:N	1:A:374:PHE:HD1	2.10	0.46
1:A:423:GLU:O	1:A:424:SER:CB	2.56	0.46
1:A:427:TRP:CH2	1:A:453:PRO:HB2	2.51	0.46
1:A:117:ASP:O	1:A:234:PHE:N	2.48	0.46
1:A:121:VAL:HB	1:A:230:MET:SD	2.55	0.46
1:A:320:THR:HG23	1:A:326:ILE:HA	1.98	0.46
1:A:85:THR:HG22	1:A:86:PRO:HD2	1.96	0.46
1:A:190:GLY:CA	1:A:206:SER:HB3	2.46	0.46
1:A:328:LEU:O	1:A:329:ARG:CB	2.62	0.46
1:A:407:ARG:H	1:A:408:PRO:CD	2.28	0.46
1:A:430:ILE:HG21	1:A:439:THR:HG21	1.98	0.46
1:A:104:PHE:O	1:A:107:LEU:HB3	2.16	0.45
1:A:179:TYR:CE2	1:A:181:PRO:HG3	2.51	0.45
1:A:407:ARG:N	1:A:408:PRO:HD3	2.31	0.45
1:A:235:PRO:C	1:A:236:PRO:O	2.55	0.45
1:A:249:PHE:HE1	1:A:290:PRO:CD	2.25	0.45
1:A:316:LEU:C	1:A:318:THR:HG22	2.41	0.45
1:A:494:LEU:HD23	1:A:494:LEU:N	2.30	0.45
1:A:502:ARG:CZ	1:A:504:ASN:O	2.63	0.45
1:A:44:PHE:HB2	1:A:179:TYR:O	2.17	0.45
1:A:47:PRO:HD3	1:A:88:ARG:HD3	1.97	0.45
1:A:327:SER:O	1:A:328:LEU:O	2.33	0.45
1:A:333:VAL:HA	1:A:418:ARG:CZ	2.46	0.45
1:A:46:ILE:HA	1:A:88:ARG:CZ	2.46	0.45
1:A:145:ALA:C	1:A:147:GLY:N	2.67	0.45
1:A:236:PRO:O	1:A:237:VAL:CB	2.62	0.45
1:A:260:ARG:O	1:A:261:LEU:HG	2.17	0.45
1:A:437:PHE:CZ	1:A:438:LYS:HG3	2.52	0.45
1:A:444:LEU:N	1:A:444:LEU:CD1	2.75	0.45
1:A:329:ARG:CG	1:A:329:ARG:O	2.64	0.45
1:A:350:ASN:HB2	1:A:351:ALA:H	1.61	0.45
1:A:410:MET:H	1:A:410:MET:CE	2.29	0.45
1:A:412:GLY:O	1:A:413:SER:O	2.34	0.45
1:A:460:ILE:HD11	1:A:482:ALA:N	2.31	0.45
1:A:490:MET:HG3	1:A:491:THR:H	1.80	0.45
1:A:45:LEU:HD21	1:A:481:TYR:CE1	2.52	0.45
1:A:320:THR:OG1	1:A:326:ILE:HA	2.17	0.45
1:A:383:GLN:HE21	1:A:384:LEU:H	1.65	0.45
1:A:88:ARG:HB3	1:A:183:GLN:OE1	2.16	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:172:PRO:C	1:A:174:LEU:N	2.75	0.45
1:A:441:PHE:CD1	1:A:441:PHE:N	2.84	0.45
1:A:191:ASP:CB	1:A:204:LEU:HB3	2.47	0.45
1:A:283:ILE:O	1:A:284:GLN:C	2.59	0.45
1:A:284:GLN:O	1:A:285:PRO:C	2.59	0.45
1:A:436:SER:O	1:A:439:THR:OG1	2.31	0.45
1:A:443:ALA:HB3	1:A:444:LEU:HD13	1.99	0.45
1:A:44:PHE:HD1	1:A:88:ARG:NH2	2.14	0.45
1:A:78:THR:HG22	1:A:79:PRO:CD	2.43	0.45
1:A:85:THR:C	1:A:87:TRP:N	2.74	0.45
1:A:426:LEU:O	1:A:427:TRP:HB3	2.17	0.45
1:A:87:TRP:CE3	1:A:459:LYS:HG2	2.52	0.45
1:A:279:GLU:O	1:A:280:ASP:CG	2.60	0.45
1:A:252:MET:CE	1:A:554:LEU:HD12	2.43	0.44
1:A:290:PRO:CG	1:A:381:LEU:HD12	2.40	0.44
1:A:130:ASP:HA	1:A:480:GLN:CA	2.33	0.44
1:A:157:TYR:OH	1:A:452:PRO:N	2.50	0.44
1:A:245:CYS:HB3	1:A:554:LEU:CD2	2.47	0.44
1:A:421:HIS:O	1:A:422:TYR:C	2.60	0.44
1:A:128:VAL:HG13	1:A:144:SER:O	2.18	0.44
1:A:135:THR:O	1:A:135:THR:HG22	2.16	0.44
1:A:248:HIS:O	1:A:249:PHE:C	2.59	0.44
1:A:280:ASP:OD2	1:A:280:ASP:C	2.60	0.44
1:A:314:THR:O	1:A:315:GLY:C	2.60	0.44
1:A:81:MET:HE2	1:A:205:ALA:CA	2.47	0.44
1:A:94:ALA:O	1:A:97:LEU:HD21	2.17	0.44
1:A:100:SER:CB	1:A:103:GLU:HG3	2.47	0.44
1:A:288:PHE:C	1:A:289:MET:HG2	2.42	0.44
1:A:326:ILE:O	1:A:327:SER:HB2	2.17	0.44
1:A:417:ARG:CZ	1:A:441:PHE:CZ	3.00	0.44
1:A:43:GLN:HA	1:A:485:ILE:HA	2.00	0.44
1:A:126:ILE:HD11	1:A:149:LEU:HD23	1.98	0.44
1:A:145:ALA:C	1:A:146:THR:HG22	2.42	0.44
1:A:339:HIS:CE1	1:A:383:GLN:HB2	2.52	0.44
1:A:478:LEU:N	1:A:478:LEU:HD22	2.31	0.44
1:A:42:ARG:NH1	1:A:175:PRO:HG3	2.28	0.44
1:A:46:ILE:HG22	1:A:482:ALA:C	2.40	0.44
1:A:373:ARG:HE	1:A:373:ARG:C	2.25	0.44
1:A:45:LEU:CD1	1:A:482:ALA:O	2.66	0.44
1:A:65:HIS:HB3	1:A:200:ASP:CG	2.43	0.44
1:A:81:MET:HE2	1:A:205:ALA:CB	2.48	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:100:SER:HA	1:A:101:PRO:HD2	1.65	0.44
1:A:149:LEU:O	1:A:150:CYS:C	2.58	0.44
1:A:232:TYR:C	1:A:232:TYR:CD2	2.94	0.44
1:A:274:ARG:CG	1:A:275:SER:H	2.13	0.44
1:A:395:ASN:O	1:A:396:LYS:HB2	2.17	0.44
1:A:66:ASN:O	1:A:76:THR:HG21	2.17	0.44
1:A:388:ASN:N	1:A:388:ASN:HD22	2.16	0.44
1:A:81:MET:HE1	1:A:205:ALA:HB2	2.00	0.43
1:A:274:ARG:HG3	1:A:275:SER:N	2.17	0.43
1:A:45:LEU:CD1	1:A:481:TYR:CD1	2.92	0.43
1:A:103:GLU:O	1:A:106:HIS:N	2.52	0.43
1:A:126:ILE:HG21	1:A:223:GLY:O	2.17	0.43
1:A:161:TYR:OH	1:A:427:TRP:CZ3	2.67	0.43
1:A:189:VAL:CG1	1:A:190:GLY:N	2.81	0.43
1:A:45:LEU:CD1	1:A:481:TYR:HD1	2.22	0.43
1:A:161:TYR:CD2	1:A:429:LYS:HB2	2.53	0.43
1:A:502:ARG:CZ	1:A:506:GLN:HB2	2.48	0.43
1:A:40:PHE:C	1:A:40:PHE:HD1	2.24	0.43
1:A:79:PRO:O	1:A:80:ILE:HG23	2.17	0.43
1:A:119:LEU:HG	1:A:490:MET:CE	2.46	0.43
1:A:266:THR:HG21	1:A:396:LYS:HG2	1.99	0.43
1:A:485:ILE:O	1:A:485:ILE:CG1	2.66	0.43
1:A:54:TYR:CE2	1:A:85:THR:HG23	2.53	0.43
1:A:87:TRP:HA	1:A:459:LYS:HB3	2.00	0.43
1:A:181:PRO:HA	1:A:182:PRO:HD3	1.81	0.43
1:A:286:GLN:OE1	1:A:286:GLN:HA	2.13	0.43
1:A:339:HIS:HE1	1:A:383:GLN:HG2	1.83	0.43
1:A:427:TRP:O	1:A:427:TRP:CD2	2.72	0.43
1:A:455:GLN:HA	1:A:456:ILE:HD12	1.99	0.43
1:A:32:SER:O	1:A:33:ALA:C	2.62	0.43
1:A:54:TYR:N	1:A:54:TYR:CD1	2.87	0.43
1:A:55:LYS:O	1:A:56:VAL:O	2.36	0.43
1:A:88:ARG:NH1	1:A:180:PHE:C	2.77	0.43
1:A:256:LEU:O	1:A:257:TYR:CD1	2.72	0.43
1:A:337:TYR:CD1	1:A:337:TYR:C	2.97	0.43
1:A:383:GLN:CG	1:A:384:LEU:N	2.71	0.43
1:A:464:SER:C	1:A:478:LEU:CD2	2.92	0.43
1:A:60:ALA:HB1	1:A:202:LYS:HB3	2.01	0.43
1:A:509:VAL:O	1:A:545:TRP:HH2	2.01	0.43
1:A:160:PRO:HD3	1:A:212:TYR:CE1	2.54	0.43
1:A:179:TYR:CD2	1:A:181:PRO:HD3	2.54	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:191:ASP:HB2	1:A:204:LEU:HB3	1.99	0.43
1:A:213:VAL:O	1:A:214:LEU:C	2.62	0.43
1:A:224:THR:C	1:A:226:GLY:H	2.27	0.43
1:A:450:HIS:O	1:A:451:GLN:CB	2.67	0.43
1:A:552:HIS:CE1	1:A:554:LEU:N	2.87	0.43
1:A:104:PHE:O	1:A:108:ILE:HG12	2.18	0.43
1:A:123:ILE:CD1	1:A:151:MET:HE2	2.49	0.43
1:A:359:TYR:HD2	1:A:534:HIS:CG	2.36	0.43
1:A:383:GLN:C	1:A:385:GLN:HG2	2.41	0.43
1:A:38:CYS:O	1:A:490:MET:N	2.52	0.43
1:A:41:SER:O	1:A:42:ARG:CD	2.64	0.43
1:A:104:PHE:CD2	1:A:422:TYR:HB2	2.54	0.43
1:A:356:GLN:O	1:A:358:THR:HG23	2.18	0.43
1:A:384:LEU:O	1:A:385:GLN:OE1	2.36	0.43
1:A:420:LEU:C	1:A:421:HIS:ND1	2.76	0.43
1:A:95:LEU:HB3	1:A:424:SER:HB3	2.00	0.42
1:A:159:TYR:HA	1:A:160:PRO:HD2	1.74	0.42
1:A:164:GLY:HA3	1:A:428:SER:CB	2.49	0.42
1:A:433:LEU:C	1:A:434:ASP:O	2.59	0.42
1:A:55:LYS:C	1:A:56:VAL:HG12	2.44	0.42
1:A:82:GLY:O	1:A:83:TYR:CD1	2.72	0.42
1:A:89:TYR:CE1	1:A:182:PRO:HB2	2.55	0.42
1:A:331:GLY:O	1:A:418:ARG:NH2	2.50	0.42
1:A:333:VAL:HA	1:A:418:ARG:NH2	2.34	0.42
1:A:370:GLY:HA2	1:A:542:GLU:O	2.19	0.42
1:A:426:LEU:C	1:A:427:TRP:CD1	2.97	0.42
1:A:500:THR:CG2	1:A:553:PRO:HD3	2.47	0.42
1:A:529:ASP:HB3	1:A:533:HIS:CA	2.48	0.42
1:A:57:PHE:O	1:A:58:SER:HB3	2.19	0.42
1:A:106:HIS:ND1	1:A:110:ASN:ND2	2.66	0.42
1:A:145:ALA:O	1:A:146:THR:HG23	2.19	0.42
1:A:272:LYS:HD3	1:A:272:LYS:HA	1.80	0.42
1:A:430:ILE:HD13	1:A:439:THR:CG2	2.49	0.42
1:A:80:ILE:HD12	1:A:80:ILE:O	2.19	0.42
1:A:80:ILE:N	1:A:203:LYS:HB2	2.34	0.42
1:A:149:LEU:O	1:A:149:LEU:HG	2.19	0.42
1:A:245:CYS:HB3	1:A:554:LEU:HD23	2.00	0.42
1:A:267:LEU:HD12	1:A:267:LEU:O	2.19	0.42
1:A:276:LEU:HB3	1:A:279:GLU:HG3	2.01	0.42
1:A:277:THR:O	1:A:278:HIS:HB3	2.19	0.42
1:A:518:LEU:HA	1:A:519:PRO:HD3	1.91	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:371:VAL:C	1:A:544:LEU:HD23	2.44	0.42
1:A:490:MET:CG	1:A:491:THR:H	2.33	0.42
1:A:34:ASN:O	1:A:35:SER:HB3	2.19	0.42
1:A:164:GLY:HA3	1:A:428:SER:OG	2.18	0.42
1:A:295:ASN:HA	1:A:405:ILE:HG23	2.02	0.42
1:A:333:VAL:HG12	1:A:418:ARG:H	1.85	0.42
1:A:426:LEU:CB	1:A:427:TRP:HD1	2.32	0.42
1:A:427:TRP:CZ3	1:A:452:PRO:HB2	2.55	0.42
1:A:511:PRO:HB3	1:A:545:TRP:CE2	2.55	0.42
1:A:87:TRP:NE1	1:A:214:LEU:HB3	2.34	0.42
1:A:150:CYS:HB3	1:A:219:PHE:CE1	2.54	0.42
1:A:172:PRO:HG2	1:A:179:TYR:CB	2.37	0.42
1:A:319:GLY:C	1:A:320:THR:OG1	2.62	0.42
1:A:376:ASN:O	1:A:377:GLU:C	2.63	0.42
1:A:85:THR:HG22	1:A:86:PRO:CD	2.49	0.42
1:A:88:ARG:HD2	1:A:181:PRO:O	2.20	0.42
1:A:106:HIS:O	1:A:107:LEU:C	2.63	0.42
1:A:164:GLY:O	1:A:425:GLN:NE2	2.48	0.42
1:A:338:HIS:NE2	1:A:345:TYR:HD2	2.17	0.42
1:A:118:ALA:HB2	1:A:233:LYS:HG2	2.02	0.42
1:A:217:SER:O	1:A:218:SER:O	2.38	0.42
1:A:129:LYS:O	1:A:481:TYR:CD2	2.73	0.42
1:A:151:MET:HE3	1:A:228:ALA:HB3	2.02	0.42
1:A:504:ASN:ND2	1:A:504:ASN:N	2.39	0.42
1:A:40:PHE:HE2	1:A:97:LEU:HD23	1.84	0.41
1:A:180:PHE:N	1:A:181:PRO:CD	2.83	0.41
1:A:551:VAL:CG2	1:A:552:HIS:N	2.83	0.41
1:A:25:TRP:CE2	1:A:41:SER:OG	2.69	0.41
1:A:91:ASP:OD2	1:A:92:PHE:N	2.52	0.41
1:A:101:PRO:HD3	1:A:422:TYR:CE1	2.55	0.41
1:A:204:LEU:HG	1:A:205:ALA:N	2.35	0.41
1:A:519:PRO:O	1:A:520:TYR:HB2	2.20	0.41
1:A:373:ARG:C	1:A:374:PHE:HD1	2.28	0.41
1:A:81:MET:HE2	1:A:205:ALA:HA	2.02	0.41
1:A:289:MET:SD	1:A:410:MET:HG3	2.60	0.41
1:A:320:THR:HG23	1:A:325:ARG:O	2.19	0.41
1:A:449:LEU:O	1:A:450:HIS:C	2.60	0.41
1:A:75:CYS:O	1:A:76:THR:C	2.64	0.41
1:A:77:ILE:HG21	1:A:327:SER:OG	2.19	0.41
1:A:249:PHE:H	1:A:380:GLN:CD	2.27	0.41
1:A:314:THR:CG2	1:A:315:GLY:N	2.82	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:513:HIS:HB3	1:A:519:PRO:CD	2.51	0.41
1:A:35:SER:HA	1:A:494:LEU:H	1.86	0.41
1:A:45:LEU:HD12	1:A:482:ALA:O	2.19	0.41
1:A:337:TYR:HD1	1:A:337:TYR:C	2.28	0.41
1:A:32:SER:OG	1:A:35:SER:O	2.32	0.41
1:A:48:TYR:O	1:A:49:ASP:O	2.38	0.41
1:A:56:VAL:O	1:A:57:PHE:CD1	2.74	0.41
1:A:100:SER:CA	1:A:103:GLU:HG3	2.50	0.41
1:A:101:PRO:O	1:A:105:GLN:HB3	2.20	0.41
1:A:277:THR:O	1:A:278:HIS:CB	2.67	0.41
1:A:455:GLN:NE2	1:A:457:PHE:HZ	2.17	0.41
1:A:510:TYR:HA	1:A:511:PRO:HD2	1.70	0.41
1:A:55:LYS:O	1:A:56:VAL:C	2.63	0.41
1:A:88:ARG:HB2	1:A:183:GLN:CD	2.46	0.41
1:A:392:TYR:O	1:A:393:PHE:CB	2.62	0.41
1:A:128:VAL:O	1:A:128:VAL:CG1	2.59	0.41
1:A:130:ASP:CB	1:A:480:GLN:HB3	2.48	0.41
1:A:227:THR:CG2	1:A:228:ALA:N	2.54	0.41
1:A:249:PHE:HD2	1:A:249:PHE:O	2.03	0.41
1:A:262:GLY:O	1:A:264:PRO:HD3	2.20	0.41
1:A:297:VAL:O	1:A:348:GLY:HA2	2.21	0.41
1:A:319:GLY:O	1:A:320:THR:OG1	2.32	0.41
1:A:324:THR:O	1:A:324:THR:HG22	2.21	0.41
1:A:423:GLU:CB	1:A:540:LYS:NZ	2.82	0.41
1:A:427:TRP:CE3	1:A:427:TRP:O	2.74	0.41
1:A:467:ILE:O	1:A:473:MET:O	2.39	0.41
1:A:81:MET:HG2	1:A:203:LYS:CG	2.51	0.41
1:A:105:GLN:O	1:A:108:ILE:N	2.54	0.41
1:A:149:LEU:HD12	1:A:150:CYS:O	2.21	0.41
1:A:359:TYR:CD1	1:A:359:TYR:N	2.88	0.41
1:A:440:GLN:CA	1:A:440:GLN:NE2	2.82	0.41
1:A:481:TYR:HD2	1:A:481:TYR:H	1.69	0.41
1:A:54:TYR:N	1:A:54:TYR:HD1	2.19	0.40
1:A:70:LYS:NZ	1:A:70:LYS:HB3	2.36	0.40
1:A:319:GLY:C	1:A:320:THR:HG1	2.28	0.40
1:A:61:ALA:HB2	1:A:201:SER:O	2.21	0.40
1:A:88:ARG:NH1	1:A:181:PRO:HD2	2.36	0.40
1:A:105:GLN:C	1:A:108:ILE:HG12	2.46	0.40
1:A:161:TYR:CZ	1:A:163:LEU:HD12	2.57	0.40
1:A:46:ILE:HG23	1:A:460:ILE:CD1	2.49	0.40
1:A:52:HIS:N	1:A:52:HIS:ND1	2.68	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:83:TYR:O	1:A:185:ALA:CA	2.63	0.40
1:A:96:ASN:OD1	1:A:422:TYR:CE2	2.74	0.40
1:A:288:PHE:O	1:A:289:MET:CB	2.69	0.40
1:A:295:ASN:HD21	1:A:350:ASN:CG	2.23	0.40
1:A:531:LYS:C	1:A:533:HIS:H	2.29	0.40
1:A:65:HIS:HB3	1:A:200:ASP:CB	2.51	0.40
1:A:95:LEU:HD11	1:A:104:PHE:CE1	2.57	0.40
1:A:262:GLY:O	1:A:272:LYS:HD2	2.21	0.40
1:A:354:HIS:O	1:A:355:GLY:O	2.39	0.40
1:A:373:ARG:C	1:A:374:PHE:CD1	2.99	0.40
1:A:444:LEU:CD2	1:A:444:LEU:N	2.72	0.40
1:A:106:HIS:CE1	1:A:110:ASN:ND2	2.89	0.40
1:A:180:PHE:O	1:A:181:PRO:O	2.40	0.40
1:A:235:PRO:O	1:A:236:PRO:O	2.40	0.40
1:A:249:PHE:C	1:A:251:GLU:H	2.30	0.40
1:A:294:VAL:O	1:A:295:ASN:CB	2.67	0.40
1:A:299:THR:HA	1:A:349:ILE:HG12	2.03	0.40
1:A:405:ILE:H	1:A:405:ILE:HG13	1.69	0.40
1:A:436:SER:O	1:A:437:PHE:C	2.64	0.40
1:A:514:ALA:O	1:A:515:ALA:C	2.65	0.40

There are no symmetry-related clashes.

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	519/554 (94%)	261 (50%)	119 (23%)	139 (27%)	0 0

All (139) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	33	ALA

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	47	PRO
1	A	52	HIS
1	A	55	LYS
1	A	56	VAL
1	A	93	ASN
1	A	96	ASN
1	A	97	LEU
1	A	101	PRO
1	A	113	SER
1	A	134	LYS
1	A	146	THR
1	A	162	VAL
1	A	163	LEU
1	A	166	GLY
1	A	173	GLU
1	A	178	VAL
1	A	181	PRO
1	A	182	PRO
1	A	198	SER
1	A	217	SER
1	A	218	SER
1	A	222	LEU
1	A	235	PRO
1	A	253	TYR
1	A	274	ARG
1	A	283	ILE
1	A	292	PRO
1	A	326	ILE
1	A	327	SER
1	A	328	LEU
1	A	329	ARG
1	A	339	HIS
1	A	348	GLY
1	A	349	ILE
1	A	351	ALA
1	A	367	TYR
1	A	368	GLN
1	A	390	HIS
1	A	393	PHE
1	A	401	TYR
1	A	407	ARG
1	A	413	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	414	VAL
1	A	415	TRP
1	A	419	ALA
1	A	434	ASP
1	A	435	ASP
1	A	437	PHE
1	A	453	PRO
1	A	505	PRO
1	A	507	PRO
1	A	510	TYR
1	A	515	ALA
1	A	528	THR
1	A	533	HIS
1	A	544	LEU
1	A	548	LYS
1	A	553	PRO
1	A	21	VAL
1	A	48	TYR
1	A	58	SER
1	A	76	THR
1	A	95	LEU
1	A	125	GLU
1	A	161	TYR
1	A	208	GLU
1	A	237	VAL
1	A	246	SER
1	A	259	SER
1	A	295	ASN
1	A	315	GLY
1	A	323	ASN
1	A	337	TYR
1	A	346	VAL
1	A	350	ASN
1	A	352	ILE
1	A	355	GLY
1	A	372	GLY
1	A	373	ARG
1	A	391	THR
1	A	452	PRO
1	A	454	PRO
1	A	526	THR
1	A	49	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	70	LYS
1	A	74	VAL
1	A	98	PHE
1	A	103	GLU
1	A	104	PHE
1	A	145	ALA
1	A	155	HIS
1	A	157	TYR
1	A	160	PRO
1	A	214	LEU
1	A	226	GLY
1	A	254	ASN
1	A	271	PRO
1	A	280	ASP
1	A	281	HIS
1	A	317	SER
1	A	320	THR
1	A	321	SER
1	A	336	PRO
1	A	338	HIS
1	A	357	THR
1	A	464	SER
1	A	532	GLN
1	A	536	HIS
1	A	542	GLU
1	A	61	ALA
1	A	159	TYR
1	A	247	GLN
1	A	290	PRO
1	A	298	SER
1	A	342	THR
1	A	427	TRP
1	A	462	PRO
1	A	498	LYS
1	A	527	ALA
1	A	538	TYR
1	A	57	PHE
1	A	289	MET
1	A	424	SER
1	A	506	GLN
1	A	546	THR
1	A	135	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	250	TYR
1	A	285	PRO
1	A	451	GLN
1	A	225	GLY
1	A	236	PRO
1	A	411	VAL
1	A	496	PRO
1	A	540	LYS
1	A	394	PRO
1	A	475	ILE
1	A	521	VAL
1	A	172	PRO

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	448/467 (96%)	351 (78%)	97 (22%)	1 6

All (97) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	26	SER
1	A	30	THR
1	A	34	ASN
1	A	45	LEU
1	A	52	HIS
1	A	54	TYR
1	A	57	PHE
1	A	70	LYS
1	A	73	LYS
1	A	80	ILE
1	A	97	LEU
1	A	99	PHE
1	A	101	PRO
1	A	102	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	107	LEU
1	A	108	ILE
1	A	111	TYR
1	A	119	LEU
1	A	122	THR
1	A	125	GLU
1	A	126	ILE
1	A	129	LYS
1	A	140	GLN
1	A	146	THR
1	A	151	MET
1	A	162	VAL
1	A	170	LEU
1	A	175	PRO
1	A	180	PHE
1	A	181	PRO
1	A	182	PRO
1	A	187	LEU
1	A	213	VAL
1	A	214	LEU
1	A	215	GLU
1	A	222	LEU
1	A	230	MET
1	A	231	SER
1	A	232	TYR
1	A	249	PHE
1	A	254	ASN
1	A	256	LEU
1	A	265	ASP
1	A	284	GLN
1	A	286	GLN
1	A	287	ASN
1	A	292	PRO
1	A	293	LEU
1	A	295	ASN
1	A	299	THR
1	A	318	THR
1	A	326	ILE
1	A	328	LEU
1	A	335	GLN
1	A	336	PRO
1	A	337	TYR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	342	THR
1	A	356	GLN
1	A	373	ARG
1	A	374	PHE
1	A	384	LEU
1	A	390	HIS
1	A	391	THR
1	A	394	PRO
1	A	410	MET
1	A	414	VAL
1	A	421	HIS
1	A	423	GLU
1	A	434	ASP
1	A	439	THR
1	A	440	GLN
1	A	444	LEU
1	A	447	TRP
1	A	449	LEU
1	A	450	HIS
1	A	452	PRO
1	A	456	ILE
1	A	457	PHE
1	A	460	ILE
1	A	466	PRO
1	A	473	MET
1	A	478	LEU
1	A	481	TYR
1	A	485	ILE
1	A	494	LEU
1	A	503	TRP
1	A	504	ASN
1	A	505	PRO
1	A	506	GLN
1	A	507	PRO
1	A	509	VAL
1	A	510	TYR
1	A	512	PRO
1	A	535	ARG
1	A	543	GLU
1	A	545	TRP
1	A	553	PRO

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (20)

such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	34	ASN
1	A	96	ASN
1	A	278	HIS
1	A	281	HIS
1	A	287	ASN
1	A	295	ASN
1	A	335	GLN
1	A	338	HIS
1	A	339	HIS
1	A	350	ASN
1	A	356	GLN
1	A	376	ASN
1	A	383	GLN
1	A	388	ASN
1	A	399	GLN
1	A	440	GLN
1	A	504	ASN
1	A	506	GLN
1	A	517	HIS
1	A	536	HIS

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry ⓘ

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data ⓘ

6.1 Protein, DNA and RNA chains ⓘ

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	523/554 (94%)	2.03	206 (39%) 1 1	32, 78, 175, 211	0

All (206) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	68	SER	16.4
1	A	536	HIS	11.3
1	A	69	GLY	10.7
1	A	62	SER	9.3
1	A	399	GLN	8.6
1	A	193	ASN	8.5
1	A	198	SER	8.3
1	A	323	ASN	8.2
1	A	367	TYR	8.2
1	A	363	GLU	7.9
1	A	392	TYR	7.5
1	A	75	CYS	7.4
1	A	28	GLY	7.4
1	A	321	SER	7.4
1	A	398	THR	7.3
1	A	390	HIS	7.0
1	A	268	GLY	6.9
1	A	401	TYR	6.6
1	A	400	GLN	6.6
1	A	265	ASP	6.6
1	A	534	HIS	6.5
1	A	266	THR	6.4
1	A	314	THR	6.3
1	A	396	LYS	6.3
1	A	21	VAL	6.2
1	A	67	ALA	6.1
1	A	533	HIS	6.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	63	SER	6.0
1	A	320	THR	6.0
1	A	368	GLN	5.9
1	A	341	ASP	5.8
1	A	199	GLY	5.7
1	A	535	ARG	5.6
1	A	473	MET	5.5
1	A	196	GLY	5.4
1	A	468	GLY	5.4
1	A	517	HIS	5.4
1	A	389	MET	5.3
1	A	59	PRO	5.2
1	A	365	LYS	5.1
1	A	537	GLY	5.0
1	A	78	THR	5.0
1	A	64	CYS	5.0
1	A	190	GLY	4.9
1	A	325	ARG	4.9
1	A	469	GLY	4.9
1	A	259	SER	4.8
1	A	135	THR	4.8
1	A	362	ALA	4.7
1	A	271	PRO	4.7
1	A	73	LYS	4.7
1	A	202	LYS	4.6
1	A	361	ASN	4.6
1	A	300	LYS	4.5
1	A	404	GLN	4.4
1	A	523	TYR	4.4
1	A	508	GLY	4.4
1	A	359	TYR	4.3
1	A	70	LYS	4.3
1	A	144	SER	4.2
1	A	395	ASN	4.2
1	A	354	HIS	4.1
1	A	269	GLY	4.0
1	A	317	SER	4.0
1	A	195	GLN	4.0
1	A	278	HIS	4.0
1	A	528	THR	3.9
1	A	532	GLN	3.9
1	A	353	SER	3.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	203	LYS	3.9
1	A	225	GLY	3.8
1	A	275	SER	3.8
1	A	100	SER	3.8
1	A	529	ASP	3.8
1	A	539	GLU	3.8
1	A	322	GLN	3.7
1	A	71	GLU	3.7
1	A	74	VAL	3.7
1	A	292	PRO	3.7
1	A	356	GLN	3.7
1	A	542	GLU	3.7
1	A	386	GLY	3.6
1	A	379	GLU	3.6
1	A	345	TYR	3.6
1	A	139	VAL	3.6
1	A	344	LYS	3.5
1	A	364	ASP	3.5
1	A	191	ASP	3.5
1	A	72	ALA	3.5
1	A	324	THR	3.5
1	A	397	GLY	3.4
1	A	416	ASN	3.4
1	A	274	ARG	3.4
1	A	458	LEU	3.4
1	A	507	PRO	3.4
1	A	549	SER	3.4
1	A	315	GLY	3.3
1	A	370	GLY	3.3
1	A	378	LYS	3.3
1	A	366	GLU	3.3
1	A	382	LYS	3.2
1	A	499	ALA	3.2
1	A	498	LYS	3.2
1	A	163	LEU	3.2
1	A	76	THR	3.1
1	A	188	THR	3.1
1	A	66	ASN	3.1
1	A	244	GLY	3.1
1	A	403	ASP	3.1
1	A	525	PRO	3.1
1	A	158	LYS	3.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	197	ILE	3.0
1	A	351	ALA	3.0
1	A	111	TYR	3.0
1	A	343	ASP	3.0
1	A	373	ARG	3.0
1	A	522	LEU	3.0
1	A	393	PHE	3.0
1	A	290	PRO	2.9
1	A	316	LEU	2.9
1	A	173	GLU	2.9
1	A	475	ILE	2.9
1	A	168	ASP	2.8
1	A	369	GLN	2.8
1	A	253	TYR	2.8
1	A	65	HIS	2.8
1	A	143	ASP	2.8
1	A	194	THR	2.8
1	A	544	LEU	2.7
1	A	136	GLY	2.7
1	A	248	HIS	2.7
1	A	38	CYS	2.7
1	A	388	ASN	2.7
1	A	134	LYS	2.7
1	A	374	PHE	2.7
1	A	530	ALA	2.7
1	A	51	GLU	2.7
1	A	350	ASN	2.7
1	A	167	GLN	2.6
1	A	474	GLY	2.6
1	A	531	LYS	2.6
1	A	29	ALA	2.6
1	A	326	ILE	2.6
1	A	371	VAL	2.6
1	A	513	HIS	2.5
1	A	509	VAL	2.5
1	A	52	HIS	2.5
1	A	261	LEU	2.5
1	A	146	THR	2.5
1	A	19	ASN	2.5
1	A	405	ILE	2.5
1	A	372	GLY	2.5
1	A	407	ARG	2.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	251	GLU	2.4
1	A	49	ASP	2.4
1	A	255	PRO	2.4
1	A	526	THR	2.4
1	A	117	ASP	2.4
1	A	101	PRO	2.4
1	A	524	ASP	2.4
1	A	212	TYR	2.4
1	A	543	GLU	2.4
1	A	60	ALA	2.4
1	A	183	GLN	2.4
1	A	25	TRP	2.4
1	A	428	SER	2.4
1	A	466	PRO	2.3
1	A	217	SER	2.3
1	A	260	ARG	2.3
1	A	20	PRO	2.3
1	A	53	HIS	2.3
1	A	402	THR	2.3
1	A	185	ALA	2.3
1	A	41	SER	2.3
1	A	263	VAL	2.3
1	A	342	THR	2.3
1	A	470	ILE	2.2
1	A	33	ALA	2.2
1	A	113	SER	2.2
1	A	169	THR	2.2
1	A	207	GLU	2.2
1	A	500	THR	2.2
1	A	375	PRO	2.2
1	A	340	TRP	2.2
1	A	293	LEU	2.2
1	A	471	LYS	2.2
1	A	518	LEU	2.2
1	A	79	PRO	2.2
1	A	109	GLU	2.2
1	A	289	MET	2.2
1	A	554	LEU	2.2
1	A	417	ARG	2.1
1	A	497	ARG	2.1
1	A	258	GLY	2.1
1	A	110	ASN	2.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	58	SER	2.1
1	A	138	GLY	2.1
1	A	431	PRO	2.1
1	A	127	ALA	2.1
1	A	89	TYR	2.1
1	A	192	VAL	2.1
1	A	376	ASN	2.0
1	A	61	ALA	2.0
1	A	56	VAL	2.0
1	A	238	PRO	2.0
1	A	285	PRO	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](#)

There are no ligands in this entry.

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.