



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 6, 2026 – 08:30 PM UTC

PDB ID : 3S5K / pdb_00003s5k
Title : Crystal structures of falcilysin, a M16 metalloprotease from the malaria parasite *Plasmodium falciparum*
Authors : Morgunova, E.; Ponpuak, M.; Istvan, E.; Popov, A.; Goldberg, D.; Eneqvist, T.
Deposited on : 2011-05-23
Resolution : 3.20 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

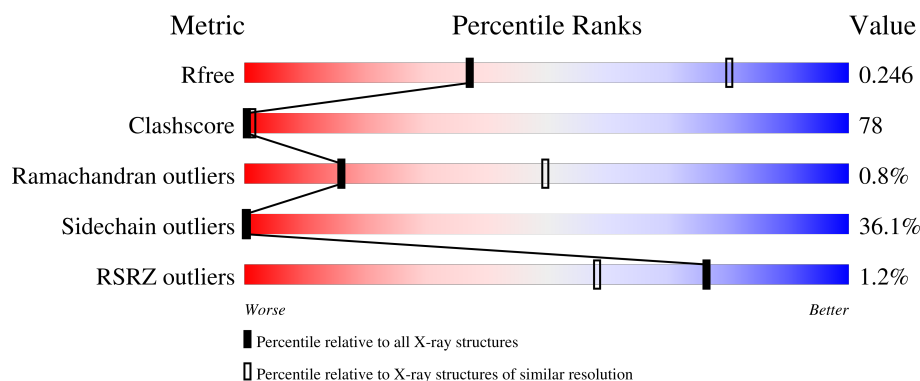
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.20 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	1466 (3.20-3.20)
Clashscore	190562	1573 (3.20-3.20)
Ramachandran outliers	187476	1548 (3.20-3.20)
Sidechain outliers	187428	1547 (3.20-3.20)
RSRZ outliers	180081	1466 (3.20-3.20)

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	1193	14% 36% 30% 8% 12%

2 Entry composition

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 8741 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 Falcilysin.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	1053	Total	C	N	O	S	0	0	0
			8674	5577	1418	1653	26			

- Molecule 2 is ZINC ION (CCD ID: ZN) (formula: Zn).

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
2	A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		

- Molecule 3 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	A	66	Total	O	0	0
			66	66		

K678	L739	H802	K366	K927	K988	Y1049	K1110	E1174
T679	V740	L803	G867	N928	L989	G1050	F1111	K1175
M690	V741	M804	Y868	L929	F990	V1051	R1112	A1176
E681	L742	N805	A869	N930	D991	F1052	R1113	N1177
M682	Q743	T806	L870	N931	E992	A1053	G1114	E1178
M683	F744	D807	L871	S932	E993	D1054	T1115	Y1179
L684	V745	K808	M872	N933	K994	T1085	E1116	I1180
K685	F746	Y809	K873	T934	N995	E1086	L1117	A1181
D686	S747	M810	K874	S935	K996	Y1057	S1118	N1182
M687	L748	A811	H875	D936	K997	D1058	V1183	N1183
M688	D749	Q812	K876	Y937	E998	G1059	L1120	D1184
D689	H750	A813	L879	G938	F999	S1060	S1121	G1185
V690	L751	L834	H880	A939	F1000	V1061	F1122	E1186
F691	T752	F815	K881	L940	V1001	V1062	L1123	F1187
L692	V753	M816	K882	K941	L1002	F1063	L1124	K1188
K693	L756	L817	S881	H942	P1003	L1064	L1125	K1189
K694	A757	E818	H883	L943	T1004	S1065	T1126	V1190
Y695	L758	M819	Y884	F944	F1005	A1066	S1127	L1191
V696	H759	H820	A885	V945	V1006	R1067	N1128	I1192
L697	N760	V821	H886	N946	M1007	D1068	Q1132	E1193
K698	L761	L822	N887	S947	S1010	P1069	V1135	
ASN	F762	S823	L888	N948	M1011	L1070	F1136	
ASP	F763	C826	Y890	E949	S1012	E1072	E1136	
LYS	K763	N827	H891	S950	G1013	K1073	F1137	
HIS	T764	D828	Y892	L951	L1015	T1074	R1138	
ASN	L765		E893	K952	F1016	L1075	K1139	
THR	L766		N894	N953	F1017	A1076	R1140	
ASN	L767		Y895	Y955	K1018	T1077	T1141	
ASN	E768		H896	S956	P1018	F1078	M1142	
ASN	N769	L834	K897	Y957	G1019	R1079	N1143	
ASN	K770	E835	L988	F958	E1020	E1080	T1144	
ASN	T771	A836	Q899	E959	Y1021	S1081	K1145	
ASN		K837	E900	E960	L1022	A1082	K1146	
ASN	R774	K838	Q901	N961	D1023	K1083	E1147	
ASN	S775	E839	L902	D962	P1024	G1084	D1148	
ASN	E776	S840	E903	K963	S1025	L1085	F1149	
MET	E777	D841	L904	Y964	F1026	R1086		
ASP	D778	F842	A905	L965	T1027	K1087	F1152	
TYR	F779	S843	E906	ASN	V1028	M1088	A1153	
SER	V780	K846	N907	ASP	I1029		D1154	
PHE	L781	K847	D908	MET	Y1030	T1091	L1155	
THR	L782	R783	F909	GLN	A1031	M1092	E1156	
E720	E784	E849	K910	ASN	L1032	T1093	E1157	
T721	K785	D850	T911	LYS	L1033	E1094	S1158	
K722	N786	L852	E913	VAL	M1035	N1095	K1159	
Y723	L787	T851	N914	ASN	Y1037	D1096	V1160	
E724	G788	K853	K915	ASP	L1038	L1097	N1161	
G725	S789	K854	L916	PRO	M1039	L1098	E1162	
N726	M790	K855	V917	THR	D1040	R1099	F1163	
V727	S791	L856	N918	VAL	T1101	Y1100	E1164	
F728	A792	N857	T919	MET	T1041	I1102	K1165	
I729		G858	N921		V1042	N1103	N1166	
		H859	K922		R920	T1104	V1168	
		K860	T923		N981	T1105	T1169	
Y732	A795	T861	L924	T984	G1044	G1105	T1170	
E733	L796	T862	F924	K985	L1045	G1106	T1171	
M734	Y797	F883	N925	K986	M1046	T1107	T1172	
F735	S798	S864	K926	K987	A1048	D1109	K1173	
T736	K799							
D800								
T737								
G738	D801							

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 21 21 21	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	93.78Å 105.29Å 114.76Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	42.83 – 3.20 42.83 – 3.20	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.9 (42.83-3.20) 99.9 (42.83-3.20)	Depositor EDS
R_{merge}	0.26	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	1.24 (at 2.86Å)	Xtrriage
Refinement program	PHENIX (phenix.refine: 1.6_289)	Depositor
R, R_{free}	0.210 , 0.316 0.222 , 0.246	Depositor DCC
R_{free} test set	1075 reflections (4.11%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	50.1	Xtrriage
Anisotropy	0.258	Xtrriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.36 , 84.3	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.42$, $\langle L^2 \rangle = 0.24$	Xtrriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtrriage
F_o, F_c correlation	0.88	EDS
Total number of atoms	8741	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	36.0	wwPDB-VP

Xtrriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.34% 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 (i)

5.1 Standard geometry (i)

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

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	2.25	221/8849 (2.5%)	1.66	231/11918 (1.9%)

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

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

All (221) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	821	VAL	CA-CB	-9.20	1.41	1.55
1	A	148	ILE	CA-CB	-8.46	1.44	1.54
1	A	502	ALA	CA-CB	-8.42	1.39	1.53
1	A	510	ILE	CA-CB	-8.05	1.45	1.54
1	A	888	ILE	CA-CB	-7.89	1.45	1.54
1	A	1190	VAL	CA-CB	-7.84	1.45	1.54
1	A	1153	ALA	CA-CB	-7.77	1.41	1.53
1	A	848	VAL	CA-CB	-7.75	1.44	1.54
1	A	528	VAL	CA-CB	-7.66	1.45	1.54
1	A	849	ILE	CA-CB	-7.49	1.45	1.54
1	A	493	VAL	CA-C	-7.37	1.45	1.53
1	A	169	THR	CA-CB	-7.33	1.42	1.53
1	A	510	ILE	C-O	-7.08	1.16	1.24
1	A	915	ILE	CA-CB	-7.03	1.46	1.54
1	A	933	VAL	CA-CB	-7.01	1.45	1.54
1	A	1102	ILE	CA-CB	-6.91	1.45	1.54
1	A	367	VAL	C-O	-6.80	1.16	1.24
1	A	763	LYS	C-O	-6.74	1.16	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	366	SER	C-O	-6.72	1.16	1.24
1	A	1066	ALA	C-O	-6.59	1.15	1.23
1	A	162	ALA	CA-CB	-6.59	1.42	1.53
1	A	170	VAL	C-O	-6.58	1.17	1.24
1	A	103	THR	CA-CB	-6.54	1.42	1.53
1	A	419	ILE	CA-CB	-6.53	1.46	1.54
1	A	434	ALA	C-O	-6.46	1.16	1.24
1	A	780	VAL	C-O	-6.40	1.16	1.24
1	A	1082	ALA	CA-CB	-6.39	1.43	1.53
1	A	187	VAL	C-O	-6.38	1.17	1.24
1	A	1038	LEU	C-O	-6.37	1.16	1.24
1	A	1051	VAL	CA-CB	-6.37	1.46	1.55
1	A	256	TYR	C-O	-6.36	1.16	1.24
1	A	513	ILE	CA-CB	-6.33	1.46	1.54
1	A	292	TYR	CA-C	-6.33	1.45	1.52
1	A	781	ILE	C-O	-6.32	1.16	1.24
1	A	815	PHE	C-O	-6.29	1.16	1.24
1	A	856	ILE	CA-CB	-6.28	1.46	1.54
1	A	1006	VAL	CA-CB	-6.28	1.44	1.55
1	A	1013	GLY	C-O	-6.28	1.17	1.24
1	A	885	ALA	CA-CB	-6.27	1.43	1.53
1	A	485	VAL	CA-CB	-6.26	1.46	1.54
1	A	493	VAL	CA-CB	-6.26	1.46	1.54
1	A	577	ALA	CA-CB	-6.25	1.43	1.53
1	A	933	VAL	C-O	-6.24	1.17	1.24
1	A	753	VAL	CA-CB	-6.20	1.46	1.54
1	A	811	ALA	CA-CB	-6.18	1.43	1.53
1	A	98	VAL	C-O	-6.17	1.17	1.24
1	A	1028	VAL	CA-CB	-6.16	1.46	1.54
1	A	955	VAL	CA-CB	-6.15	1.45	1.54
1	A	981	ASN	CA-C	-6.14	1.44	1.52
1	A	1038	LEU	CA-C	-6.13	1.45	1.52
1	A	446	ASP	CA-C	-6.10	1.46	1.53
1	A	179	LYS	C-O	-6.10	1.17	1.24
1	A	1076	ALA	CA-CB	-6.09	1.43	1.53
1	A	1163	PHE	C-O	-6.09	1.17	1.24
1	A	661	PHE	CA-C	-6.04	1.45	1.52
1	A	350	ILE	CA-CB	-6.02	1.46	1.54
1	A	158	THR	CA-CB	-6.00	1.43	1.53
1	A	94	ALA	CA-CB	-5.99	1.44	1.53
1	A	181	PHE	N-CA	-5.99	1.39	1.46
1	A	75	GLU	CA-C	-5.96	1.45	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	305	PHE	C-O	-5.94	1.16	1.23
1	A	792	ALA	CA-CB	-5.94	1.42	1.53
1	A	338	VAL	CA-CB	-5.92	1.47	1.53
1	A	645	ILE	CA-CB	-5.92	1.46	1.54
1	A	734	MET	CA-C	-5.89	1.45	1.52
1	A	775	SER	CA-C	-5.89	1.45	1.53
1	A	503	VAL	CA-CB	-5.88	1.47	1.54
1	A	482	VAL	C-O	-5.87	1.17	1.24
1	A	917	VAL	CA-CB	-5.87	1.47	1.54
1	A	114	ALA	CA-CB	-5.86	1.41	1.54
1	A	655	VAL	CA-CB	-5.86	1.46	1.54
1	A	483	GLU	C-O	-5.84	1.17	1.24
1	A	238	GLY	C-O	-5.83	1.17	1.24
1	A	815	PHE	CA-C	-5.83	1.45	1.52
1	A	1002	LEU	CA-C	-5.81	1.46	1.52
1	A	808	LYS	CA-C	-5.80	1.45	1.52
1	A	1001	VAL	CA-CB	-5.80	1.47	1.53
1	A	321	TYR	C-O	-5.79	1.17	1.24
1	A	913	GLU	C-O	-5.78	1.17	1.24
1	A	426	THR	CA-CB	-5.77	1.44	1.53
1	A	240	VAL	CA-CB	-5.75	1.47	1.54
1	A	507	ILE	CA-CB	-5.75	1.47	1.54
1	A	303	VAL	C-O	-5.73	1.17	1.23
1	A	365	VAL	C-O	-5.71	1.18	1.24
1	A	932	SER	C-O	-5.70	1.17	1.24
1	A	558	ILE	CA-CB	-5.70	1.46	1.54
1	A	170	VAL	CA-CB	-5.69	1.47	1.54
1	A	434	ALA	CA-C	-5.69	1.45	1.52
1	A	1169	ILE	C-O	-5.69	1.18	1.23
1	A	185	MET	C-O	-5.69	1.17	1.24
1	A	654	GLU	CA-C	-5.69	1.45	1.52
1	A	111	GLN	C-O	-5.68	1.17	1.24
1	A	762	PHE	C-O	-5.67	1.17	1.24
1	A	888	ILE	CA-C	-5.65	1.46	1.52
1	A	73	ILE	CA-C	-5.64	1.48	1.52
1	A	984	ILE	CA-CB	-5.64	1.47	1.54
1	A	114	ALA	C-O	-5.63	1.17	1.23
1	A	848	VAL	C-O	-5.63	1.17	1.24
1	A	1105	ILE	CA-CB	-5.63	1.46	1.54
1	A	781	ILE	CA-CB	-5.61	1.47	1.54
1	A	1190	VAL	C-O	-5.61	1.18	1.24
1	A	732	TYR	C-O	-5.60	1.17	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	1056	GLU	C-O	-5.60	1.17	1.23
1	A	1091	THR	CA-CB	-5.60	1.44	1.53
1	A	109	VAL	CA-CB	-5.59	1.47	1.54
1	A	301	VAL	CA-CB	-5.58	1.47	1.53
1	A	584	LEU	C-O	-5.58	1.17	1.24
1	A	1040	ASP	C-O	-5.58	1.17	1.24
1	A	1033	LEU	C-O	-5.57	1.17	1.24
1	A	292	TYR	C-O	-5.57	1.17	1.24
1	A	149	GLY	C-O	-5.56	1.17	1.23
1	A	1125	LEU	C-O	-5.56	1.17	1.24
1	A	184	ILE	C-O	-5.55	1.17	1.24
1	A	848	VAL	CA-C	-5.55	1.45	1.52
1	A	1110	LYS	CA-C	-5.55	1.47	1.53
1	A	234	VAL	CA-CB	-5.54	1.49	1.55
1	A	945	VAL	CA-CB	-5.54	1.47	1.54
1	A	1101	ILE	CA-CB	-5.53	1.47	1.54
1	A	954	LEU	C-O	-5.50	1.17	1.24
1	A	832	ILE	CA-CB	-5.49	1.47	1.54
1	A	875	VAL	CA-CB	-5.49	1.46	1.54
1	A	586	GLY	CA-C	-5.48	1.47	1.51
1	A	729	ILE	CA-C	-5.47	1.46	1.52
1	A	152	GLU	C-O	-5.46	1.17	1.24
1	A	1168	VAL	CA-CB	-5.46	1.47	1.54
1	A	1135	VAL	CA-CB	-5.44	1.47	1.54
1	A	795	ALA	C-O	-5.44	1.17	1.23
1	A	1022	LEU	C-O	-5.42	1.17	1.24
1	A	112	ALA	CA-CB	-5.42	1.44	1.54
1	A	544	ILE	CA-CB	-5.42	1.47	1.54
1	A	536	ASN	CA-C	-5.42	1.45	1.52
1	A	837	VAL	CA-CB	-5.41	1.48	1.54
1	A	924	PHE	CA-C	-5.40	1.46	1.53
1	A	97	GLN	C-O	-5.40	1.17	1.24
1	A	1119	LYS	C-O	-5.39	1.17	1.24
1	A	566	GLU	C-O	-5.38	1.17	1.24
1	A	768	GLU	C-O	-5.38	1.18	1.24
1	A	833	ALA	CA-CB	-5.38	1.44	1.53
1	A	1060	SER	CA-C	-5.38	1.46	1.52
1	A	197	VAL	CA-CB	-5.37	1.47	1.54
1	A	580	SER	C-O	-5.36	1.18	1.24
1	A	1030	VAL	C-O	-5.35	1.17	1.24
1	A	117	VAL	C-O	-5.35	1.18	1.24
1	A	818	GLU	CA-C	-5.34	1.46	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	72	ASP	C-O	-5.34	1.17	1.24
1	A	569	VAL	CA-CB	-5.34	1.48	1.54
1	A	319	ASP	C-O	-5.33	1.17	1.24
1	A	173	ALA	CA-CB	-5.32	1.44	1.53
1	A	898	LEU	C-O	-5.32	1.17	1.24
1	A	1032	ALA	CA-CB	-5.32	1.44	1.53
1	A	728	PRO	C-O	-5.30	1.17	1.24
1	A	502	ALA	CA-C	-5.30	1.46	1.52
1	A	1114	GLY	C-O	-5.29	1.17	1.24
1	A	833	ALA	C-O	-5.29	1.17	1.24
1	A	105	ASP	CA-C	-5.28	1.47	1.53
1	A	318	VAL	C-O	-5.28	1.18	1.24
1	A	847	LYS	CA-C	-5.27	1.46	1.52
1	A	1167	ILE	CA-CB	-5.27	1.46	1.54
1	A	1167	ILE	C-O	-5.26	1.18	1.24
1	A	839	GLU	CA-C	-5.26	1.46	1.53
1	A	75	GLU	C-O	-5.26	1.18	1.23
1	A	1060	SER	C-O	-5.25	1.17	1.24
1	A	996	LYS	C-O	-5.24	1.18	1.24
1	A	103	THR	CA-C	-5.24	1.46	1.52
1	A	1149	PHE	C-O	-5.24	1.18	1.24
1	A	664	ILE	CA-CB	-5.23	1.48	1.54
1	A	954	LEU	CA-C	-5.22	1.46	1.52
1	A	1039	TRP	C-O	-5.22	1.17	1.24
1	A	814	LEU	C-O	-5.19	1.17	1.23
1	A	782	LEU	C-O	-5.18	1.18	1.24
1	A	645	ILE	C-O	-5.18	1.18	1.24
1	A	996	LYS	CA-C	-5.17	1.46	1.52
1	A	464	GLY	C-O	-5.16	1.18	1.24
1	A	1064	LEU	C-O	-5.16	1.17	1.23
1	A	737	THR	CA-CB	-5.15	1.46	1.53
1	A	200	ASN	C-O	-5.14	1.18	1.24
1	A	1043	ARG	CA-C	-5.14	1.47	1.53
1	A	415	VAL	C-O	-5.14	1.18	1.24
1	A	507	ILE	C-O	-5.14	1.18	1.24
1	A	743	GLN	CA-C	-5.14	1.46	1.52
1	A	765	LEU	C-O	-5.14	1.18	1.24
1	A	576	ASN	CA-C	-5.14	1.46	1.52
1	A	489	ALA	C-O	-5.13	1.18	1.24
1	A	734	MET	C-O	-5.13	1.18	1.24
1	A	253	GLU	CA-C	-5.12	1.46	1.52
1	A	510	ILE	N-CA	-5.12	1.40	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	842	PHE	CA-C	-5.11	1.46	1.52
1	A	105	ASP	C-O	-5.11	1.17	1.24
1	A	579	ARG	CA-C	-5.10	1.46	1.52
1	A	745	VAL	C-O	-5.10	1.18	1.24
1	A	321	TYR	CA-C	-5.10	1.46	1.52
1	A	358	SER	CA-C	-5.10	1.46	1.53
1	A	630	ALA	CA-CB	-5.10	1.46	1.53
1	A	675	ASN	C-O	-5.10	1.18	1.24
1	A	758	TYR	C-O	-5.09	1.17	1.24
1	A	847	LYS	C-O	-5.09	1.18	1.24
1	A	490	LEU	C-O	-5.09	1.18	1.24
1	A	1166	ASN	C-O	-5.09	1.18	1.23
1	A	506	SER	C-O	-5.09	1.18	1.24
1	A	955	VAL	C-O	-5.09	1.18	1.24
1	A	771	THR	N-CA	-5.08	1.39	1.46
1	A	802	HIS	CA-C	-5.08	1.46	1.52
1	A	1098	LEU	C-O	-5.08	1.18	1.24
1	A	916	LEU	C-O	-5.07	1.18	1.24
1	A	350	ILE	C-O	-5.07	1.19	1.24
1	A	778	ASP	C-O	-5.06	1.18	1.24
1	A	247	ALA	CA-CB	-5.06	1.44	1.53
1	A	98	VAL	CA-CB	-5.05	1.48	1.54
1	A	371	LEU	C-O	-5.05	1.18	1.24
1	A	1050	GLY	C-O	-5.05	1.18	1.23
1	A	485	VAL	C-O	-5.05	1.18	1.24
1	A	1127	SER	C-O	-5.05	1.17	1.24
1	A	1082	ALA	C-O	-5.04	1.18	1.24
1	A	113	PHE	C-O	-5.04	1.17	1.23
1	A	691	PHE	CA-C	-5.04	1.46	1.52
1	A	422	LEU	C-O	-5.03	1.18	1.24
1	A	241	TYR	C-O	-5.03	1.18	1.24
1	A	435	LEU	C-O	-5.03	1.18	1.24
1	A	760	ASN	C-O	-5.03	1.18	1.24
1	A	554	VAL	C-O	-5.02	1.18	1.24
1	A	1077	THR	C-O	-5.01	1.18	1.24

All (231) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	786	ASN	N-CA-C	14.01	126.63	111.36
1	A	181	PHE	N-CA-C	-13.21	96.89	111.28
1	A	292	TYR	N-CA-C	-12.59	97.24	110.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	646	SER	N-CA-C	-12.20	97.50	112.38
1	A	915	ILE	CB-CA-C	-11.86	96.80	111.97
1	A	856	ILE	N-CA-C	11.81	122.64	110.72
1	A	242	ASN	N-CA-C	11.52	126.59	112.54
1	A	1038	LEU	N-CA-C	-11.11	98.86	110.97
1	A	895	TYR	N-CA-C	-11.03	99.27	111.07
1	A	957	TYR	N-CA-C	-10.96	99.42	111.36
1	A	471	LYS	N-CA-C	10.84	123.18	111.36
1	A	1176	ALA	N-CA-C	10.72	122.72	111.14
1	A	64	LYS	N-CA-C	-10.64	99.76	113.17
1	A	253	GLU	N-CA-C	-10.58	99.83	111.36
1	A	493	VAL	CB-CA-C	-10.58	100.03	112.19
1	A	837	VAL	CB-CA-C	-10.12	99.16	111.81
1	A	499	ASN	N-CA-C	-9.86	96.94	110.35
1	A	275	GLY	N-CA-C	-9.84	98.99	112.18
1	A	856	ILE	CB-CA-C	-9.70	98.83	112.22
1	A	689	ASP	N-CA-C	-9.66	101.42	113.01
1	A	563	MET	N-CA-C	-9.55	101.21	112.86
1	A	243	GLU	N-CA-C	-9.52	100.76	111.71
1	A	241	TYR	N-CA-C	-9.51	99.69	111.11
1	A	838	LYS	N-CA-C	9.47	121.69	111.36
1	A	429	SER	N-CA-C	-9.47	98.12	110.33
1	A	322	LEU	N-CA-C	-9.35	102.06	113.19
1	A	1041	THR	N-CA-C	9.26	121.14	111.14
1	A	358	SER	N-CA-C	-9.01	98.63	110.43
1	A	486	ILE	CB-CA-C	-8.96	100.04	112.14
1	A	510	ILE	CB-CA-C	-8.90	100.58	111.97
1	A	684	LEU	N-CA-C	-8.89	101.59	111.28
1	A	770	LYS	N-CA-C	-8.87	99.19	110.19
1	A	691	PHE	N-CA-C	-8.81	101.68	111.28
1	A	671	MET	N-CA-C	8.80	120.95	111.36
1	A	528	VAL	CB-CA-C	-8.60	100.96	111.97
1	A	1120	LEU	N-CA-C	8.50	120.63	111.36
1	A	661	PHE	N-CA-C	-8.41	94.81	108.52
1	A	593	GLU	N-CA-C	-8.41	102.04	111.71
1	A	331	ARG	N-CA-C	8.39	120.04	111.07
1	A	850	ASP	N-CA-C	-8.26	102.28	111.28
1	A	775	SER	N-CA-C	-8.23	100.29	110.41
1	A	598	GLU	N-CA-C	-8.20	102.30	111.07
1	A	301	VAL	CB-CA-C	-8.13	100.92	111.25
1	A	1102	ILE	CB-CA-C	-8.13	101.16	112.14
1	A	848	VAL	CB-CA-C	-8.03	101.30	112.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1058	ASP	N-CA-C	-7.99	102.57	112.88
1	A	470	GLU	N-CA-C	-7.94	102.70	112.38
1	A	628	LYS	N-CA-C	-7.88	103.81	113.50
1	A	911	THR	N-CA-C	-7.85	102.73	111.28
1	A	93	LYS	N-CA-C	7.81	119.58	111.14
1	A	888	ILE	CB-CA-C	-7.80	101.99	111.97
1	A	196	ASN	N-CA-C	-7.79	103.77	113.28
1	A	596	ASN	N-CA-C	7.65	119.62	111.28
1	A	1088	MET	N-CA-C	-7.64	102.89	111.07
1	A	597	LEU	N-CA-C	-7.62	102.95	111.71
1	A	485	VAL	CB-CA-C	-7.60	101.88	112.14
1	A	1002	LEU	N-CA-C	-7.58	99.46	108.25
1	A	649	ASN	N-CA-C	-7.57	101.09	110.41
1	A	991	ASP	N-CA-C	-7.55	95.28	108.20
1	A	781	ILE	CB-CA-C	-7.50	102.01	112.14
1	A	417	LEU	N-CA-C	-7.49	103.12	111.28
1	A	555	LYS	N-CA-C	-7.48	102.28	111.33
1	A	589	ASN	N-CA-C	7.47	120.49	111.82
1	A	945	VAL	CB-CA-C	-7.45	99.07	111.29
1	A	959	GLU	N-CA-C	-7.43	103.47	112.54
1	A	472	ILE	N-CA-C	-7.41	99.37	109.37
1	A	1122	PHE	N-CA-C	-7.39	103.23	111.28
1	A	1042	VAL	N-CA-C	7.35	118.14	110.72
1	A	626	LYS	N-CA-C	-7.33	103.32	111.82
1	A	418	ILE	CB-CA-C	-7.30	102.15	112.22
1	A	485	VAL	N-CA-C	-7.25	103.22	110.62
1	A	1029	ILE	CB-CA-C	-7.24	102.53	111.87
1	A	907	ASN	N-CA-C	7.23	118.94	111.14
1	A	832	ILE	CB-CA-C	-7.13	102.38	112.22
1	A	644	SER	N-CA-C	-7.12	101.10	110.43
1	A	1167	ILE	CB-CA-C	-7.10	102.28	110.73
1	A	333	ASP	N-CA-C	-7.10	104.61	113.20
1	A	1135	VAL	CB-CA-C	-7.10	102.42	112.22
1	A	851	ILE	CB-CA-C	-7.09	102.43	112.22
1	A	984	ILE	CB-CA-C	-7.09	102.57	112.14
1	A	590	TYR	N-CA-C	-7.07	103.76	112.38
1	A	842	PHE	N-CA-C	-7.01	103.91	113.30
1	A	167	ASP	N-CA-C	6.99	118.98	111.36
1	A	419	ILE	CB-CA-C	-6.96	103.06	111.97
1	A	1094	GLU	N-CA-C	-6.94	103.72	111.28
1	A	917	VAL	CB-CA-C	-6.89	102.83	112.14
1	A	1101	ILE	CB-CA-C	-6.88	102.73	112.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1142	MET	N-CA-C	6.86	118.83	111.36
1	A	620	ASN	N-CA-C	-6.85	103.74	111.07
1	A	893	GLU	N-CA-C	-6.84	103.84	111.71
1	A	79	ASN	N-CA-C	6.82	119.53	108.41
1	A	912	LEU	N-CA-C	6.79	118.76	111.36
1	A	234	VAL	N-CA-C	6.76	117.21	107.88
1	A	365	VAL	CB-CA-C	-6.75	99.02	110.71
1	A	854	ARG	N-CA-C	6.75	118.72	111.36
1	A	151	LEU	N-CA-C	6.70	118.67	111.36
1	A	170	VAL	N-CA-C	6.70	117.52	107.80
1	A	871	LEU	N-CA-C	-6.70	103.90	111.07
1	A	1183	VAL	N-CA-C	6.65	117.41	110.62
1	A	1087	LYS	N-CA-C	6.64	118.60	111.36
1	A	594	GLN	N-CA-C	6.64	118.60	111.36
1	A	857	ASN	N-CA-C	6.54	118.48	111.36
1	A	139	SER	N-CA-C	-6.51	99.43	109.52
1	A	1028	VAL	CB-CA-C	-6.50	103.36	112.14
1	A	602	LEU	N-CA-C	-6.46	104.16	111.07
1	A	134	SER	N-CA-C	6.46	121.43	112.45
1	A	509	ASN	N-CA-C	6.46	118.40	111.36
1	A	513	ILE	CB-CA-C	-6.45	103.43	112.14
1	A	879	LEU	N-CA-C	6.44	118.38	111.36
1	A	822	LEU	N-CA-C	-6.43	102.50	110.41
1	A	1125	LEU	N-CA-C	6.43	118.08	111.14
1	A	1124	ARG	N-CA-C	-6.39	104.32	111.28
1	A	297	ASN	N-CA-C	-6.38	100.85	108.25
1	A	870	ILE	N-CA-C	6.37	116.52	110.53
1	A	821	VAL	CB-CA-C	-6.34	99.76	111.18
1	A	692	LEU	N-CA-C	6.34	117.85	111.07
1	A	1178	GLU	N-CA-C	6.33	117.98	111.14
1	A	604	LYS	N-CA-C	-6.32	104.44	111.71
1	A	256	TYR	N-CA-C	-6.31	104.09	110.97
1	A	1045	LEU	N-CA-C	6.30	118.03	111.03
1	A	184	ILE	CB-CA-C	-6.30	103.91	111.97
1	A	863	PHE	N-CA-C	-6.27	104.45	111.28
1	A	338	VAL	CB-CA-C	-6.27	104.46	111.23
1	A	1055	ILE	N-CA-C	-6.27	98.61	108.95
1	A	1037	TYR	CA-C-N	-6.20	112.46	120.65
1	A	1037	TYR	C-N-CA	-6.20	112.46	120.65
1	A	252	LEU	N-CA-C	6.19	121.77	113.72
1	A	451	ASP	N-CA-C	6.17	120.43	112.41
1	A	582	ILE	CB-CA-C	-6.16	101.33	110.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	237	ASN	N-CA-C	6.16	119.28	108.75
1	A	558	ILE	N-CA-C	6.12	118.74	111.09
1	A	410	PRO	N-CA-C	-6.11	105.41	113.65
1	A	725	GLY	N-CA-C	-6.10	106.90	115.32
1	A	170	VAL	CB-CA-C	-6.09	102.07	110.96
1	A	788	GLY	N-CA-C	6.09	119.86	112.49
1	A	280	ILE	CB-CA-C	-6.07	102.75	112.16
1	A	277	PRO	N-CA-C	-6.05	105.97	113.84
1	A	544	ILE	N-CA-C	-6.04	105.15	113.00
1	A	318	VAL	N-CA-C	6.03	116.20	110.53
1	A	802	HIS	N-CA-C	-6.00	98.02	110.80
1	A	582	ILE	N-CA-C	6.00	116.76	108.12
1	A	923	ILE	CB-CA-C	-5.99	104.17	112.02
1	A	922	LYS	N-CA-C	5.99	117.61	111.14
1	A	638	ASN	N-CA-C	-5.95	106.37	113.21
1	A	503	VAL	N-CA-C	5.93	116.67	110.62
1	A	366	SER	N-CA-C	5.89	118.71	108.76
1	A	955	VAL	CB-CA-C	-5.88	103.05	112.16
1	A	654	GLU	N-CA-C	-5.87	100.33	109.72
1	A	1170	ILE	CB-CA-C	-5.86	102.45	110.77
1	A	1060	SER	N-CA-C	5.78	118.14	108.73
1	A	261	LYS	N-CA-C	-5.77	104.99	111.28
1	A	502	ALA	N-CA-C	-5.77	105.08	111.36
1	A	736	THR	CA-C-N	-5.76	114.02	122.78
1	A	736	THR	C-N-CA	-5.76	114.02	122.78
1	A	785	LYS	CA-C-N	5.76	128.47	120.29
1	A	785	LYS	C-N-CA	5.76	128.47	120.29
1	A	260	MET	N-CA-C	-5.76	106.25	113.28
1	A	554	VAL	N-CA-C	5.75	115.93	110.53
1	A	327	TYR	N-CA-C	-5.75	106.25	113.20
1	A	1074	THR	N-CA-C	5.72	117.31	111.14
1	A	919	ILE	N-CA-C	5.71	116.49	110.72
1	A	679	THR	CB-CA-C	-5.71	101.92	110.88
1	A	72	ASP	CA-C-N	-5.70	116.30	121.65
1	A	72	ASP	C-N-CA	-5.70	116.30	121.65
1	A	169	THR	CB-CA-C	-5.69	100.72	110.16
1	A	413	TYR	N-CA-C	-5.68	105.00	111.07
1	A	1052	PHE	N-CA-C	5.67	118.02	109.23
1	A	771	THR	CB-CA-C	5.66	121.16	110.62
1	A	165	PHE	N-CA-C	-5.65	100.83	109.41
1	A	342	THR	N-CA-C	-5.64	103.19	110.19
1	A	891	GLY	N-CA-C	5.64	120.87	112.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	869	ALA	N-CA-C	-5.62	105.15	111.28
1	A	898	LEU	N-CA-C	-5.61	105.25	111.71
1	A	1041	THR	CB-CA-C	-5.61	102.04	110.90
1	A	839	GLU	CB-CA-C	-5.59	103.63	111.85
1	A	99	ILE	CB-CA-C	-5.59	102.81	110.96
1	A	758	TYR	N-CA-C	-5.59	106.31	113.01
1	A	1101	ILE	N-CA-C	5.55	116.33	110.72
1	A	423	LEU	N-CA-C	5.53	117.39	111.36
1	A	1177	ASN	N-CA-C	-5.53	105.35	111.71
1	A	287	GLU	CA-C-N	5.50	127.65	120.28
1	A	287	GLU	C-N-CA	5.50	127.65	120.28
1	A	851	ILE	N-CA-C	5.49	116.26	110.72
1	A	569	VAL	N-CA-C	-5.46	105.18	110.42
1	A	807	ASP	N-CA-C	-5.46	101.25	109.60
1	A	764	THR	N-CA-C	5.44	118.13	111.82
1	A	436	THR	CB-CA-C	-5.43	102.35	110.88
1	A	855	LYS	CA-C-N	5.43	128.13	120.42
1	A	855	LYS	C-N-CA	5.43	128.13	120.42
1	A	779	PHE	N-CA-C	5.42	116.99	111.14
1	A	913	GLU	N-CA-C	-5.39	105.31	111.07
1	A	476	ASP	N-CA-C	-5.37	105.59	111.82
1	A	318	VAL	CB-CA-C	-5.37	104.99	112.02
1	A	300	LYS	N-CA-C	5.34	118.01	111.82
1	A	610	ASN	N-CA-C	-5.32	99.48	110.80
1	A	135	VAL	CB-CA-C	-5.31	104.98	112.14
1	A	826	CYS	N-CA-C	5.30	116.75	111.07
1	A	507	ILE	CB-CA-C	-5.28	105.10	112.02
1	A	1014	ILE	CB-CA-C	-5.24	103.80	110.98
1	A	721	THR	CB-CA-C	-5.23	99.68	109.72
1	A	533	SER	N-CA-C	-5.22	105.58	111.28
1	A	446	ASP	CB-CA-C	-5.20	104.00	111.91
1	A	493	VAL	N-CA-C	-5.19	107.29	111.91
1	A	682	HIS	N-CA-C	-5.19	106.03	112.93
1	A	861	THR	N-CA-C	-5.19	105.74	111.71
1	A	1007	ASN	N-CA-C	5.19	117.23	110.53
1	A	445	ILE	CB-CA-C	-5.18	102.79	111.29
1	A	267	ASN	N-CA-C	5.17	116.14	108.86
1	A	1086	ARG	N-CA-C	5.16	116.98	111.36
1	A	335	VAL	N-CA-C	5.15	115.14	108.35
1	A	308	LYS	N-CA-C	-5.14	105.86	111.82
1	A	568	PHE	CA-C-N	-5.12	114.11	120.56
1	A	568	PHE	C-N-CA	-5.12	114.11	120.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	426	THR	N-CA-C	-5.12	98.50	109.81
1	A	554	VAL	CA-C-N	-5.12	113.37	120.38
1	A	554	VAL	C-N-CA	-5.12	113.37	120.38
1	A	884	TYR	N-CA-C	-5.12	105.70	111.28
1	A	529	PHE	N-CA-C	-5.10	105.72	111.28
1	A	74	ILE	N-CA-C	5.09	115.81	110.62
1	A	182	PHE	N-CA-C	5.08	117.71	111.82
1	A	523	LYS	N-CA-C	-5.07	106.93	113.01
1	A	618	ILE	CB-CA-C	-5.06	105.50	111.97
1	A	848	VAL	N-CA-C	-5.03	105.49	110.62
1	A	607	GLU	N-CA-C	5.03	116.57	111.14
1	A	185	MET	CA-C-N	5.02	126.60	120.22
1	A	185	MET	C-N-CA	5.02	126.60	120.22
1	A	892	TYR	CA-C-N	-5.02	113.05	120.28
1	A	892	TYR	C-N-CA	-5.02	113.05	120.28
1	A	542	LEU	CA-C-N	-5.02	113.92	120.44
1	A	542	LEU	C-N-CA	-5.02	113.92	120.44
1	A	1042	VAL	CB-CA-C	-5.01	105.31	112.22

There are no chirality outliers.

All (1) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	560	ASN	Peptide

5.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	8674	0	8613	1346	2
2	A	1	0	0	0	0
3	A	66	0	0	7	0
All	All	8741	0	8613	1346	2

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 78.

All (1346) 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:263:MET:CE	1:A:457:ILE:HD12	1.14	1.54
1:A:263:MET:CE	1:A:457:ILE:CD1	1.80	1.53
1:A:610:ASN:C	1:A:613:GLU:CG	1.75	1.47
1:A:232:TYR:HB2	1:A:614:LYS:NZ	1.30	1.45
1:A:151:LEU:O	1:A:155:THR:CG2	1.67	1.42
1:A:263:MET:HE1	1:A:457:ILE:CD1	1.39	1.42
1:A:612:GLN:CB	1:A:616:GLN:HB3	1.49	1.42
1:A:543:LEU:HD23	1:A:544:ILE:N	1.30	1.39
1:A:612:GLN:HG2	1:A:616:GLN:CB	1.52	1.39
1:A:612:GLN:CG	1:A:616:GLN:CB	2.02	1.38
1:A:653:LEU:HD12	1:A:654:GLU:N	1.33	1.38
1:A:770:LYS:O	1:A:771:THR:CG2	1.70	1.37
1:A:350:ILE:HD13	1:A:581:VAL:O	1.20	1.36
1:A:611:GLU:HA	1:A:613:GLU:CB	1.56	1.34
1:A:1017:LYS:N	1:A:1020:GLU:OE2	1.61	1.34
1:A:266:ASP:OD2	1:A:341:GLN:NE2	1.56	1.33
1:A:612:GLN:CA	1:A:613:GLU:HB2	1.60	1.30
1:A:612:GLN:CG	1:A:616:GLN:HB3	1.56	1.29
1:A:348:PHE:O	1:A:350:ILE:HD11	1.11	1.29
1:A:770:LYS:O	1:A:771:THR:HG22	1.15	1.27
1:A:612:GLN:HB2	1:A:616:GLN:N	1.47	1.27
1:A:141:ASN:HB2	1:A:190:ASP:OD2	1.28	1.26
1:A:294:LYS:O	1:A:300:LYS:NZ	1.69	1.26
1:A:846:LYS:NZ	1:A:850:ASP:OD1	1.65	1.26
1:A:314:LEU:HD12	1:A:314:LEU:C	1.49	1.26
1:A:925:ASN:CG	1:A:965:ILE:HD11	1.60	1.25
1:A:624:LEU:HD23	1:A:624:LEU:C	1.48	1.24
1:A:1024:PRO:O	1:A:1141:ILE:CD1	1.86	1.23
1:A:522:SER:O	1:A:525:ILE:HD13	1.38	1.22
1:A:612:GLN:HB3	1:A:615:GLU:CB	1.68	1.22
1:A:942:HIS:O	1:A:947:SER:OG	1.54	1.22
1:A:119:THR:O	1:A:167:ASP:O	1.58	1.22
1:A:612:GLN:HA	1:A:613:GLU:CB	1.62	1.21
1:A:263:MET:HE2	1:A:457:ILE:CD1	1.57	1.20
1:A:625:SER:O	1:A:629:ASN:ND2	1.72	1.20
1:A:143:ASN:OD1	1:A:196:ASN:ND2	1.71	1.19
1:A:263:MET:CE	1:A:457:ILE:HG23	1.69	1.19
1:A:614:LYS:O	1:A:618:ILE:HD13	1.42	1.19
1:A:145:LYS:NZ	1:A:628:LYS:O	1.76	1.18
1:A:677:LEU:O	1:A:677:LEU:HD12	1.37	1.18
1:A:407:LEU:N	1:A:407:LEU:HD23	1.51	1.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:525:ILE:HD12	1:A:525:ILE:N	1.55	1.17
1:A:610:ASN:C	1:A:613:GLU:HG2	0.84	1.17
1:A:834:LEU:O	1:A:834:LEU:HD12	1.42	1.17
1:A:237:ASN:C	1:A:237:ASN:HD22	1.54	1.16
1:A:556:ASN:O	1:A:560:ASN:ND2	1.77	1.16
1:A:202:TYR:CD1	1:A:624:LEU:HB2	1.81	1.16
1:A:314:LEU:HD12	1:A:314:LEU:O	1.43	1.16
1:A:231:ASP:O	1:A:233:LYS:HD2	1.43	1.15
1:A:348:PHE:O	1:A:350:ILE:CD1	1.94	1.15
1:A:957:TYR:O	1:A:960:GLU:HB2	1.47	1.15
1:A:1180:ILE:O	1:A:1184:ASP:O	1.64	1.15
1:A:599:LYS:O	1:A:603:LYS:HD3	1.46	1.14
1:A:65:SER:OG	1:A:87:THR:CG2	1.94	1.14
1:A:605:ARG:O	1:A:609:PHE:CE1	2.00	1.13
1:A:612:GLN:HG2	1:A:616:GLN:HB2	1.15	1.13
1:A:611:GLU:CA	1:A:613:GLU:CB	2.27	1.13
1:A:65:SER:OG	1:A:87:THR:HG21	1.44	1.13
1:A:263:MET:HE1	1:A:457:ILE:CG2	1.77	1.13
1:A:522:SER:O	1:A:525:ILE:CD1	1.95	1.13
1:A:925:ASN:OD1	1:A:965:ILE:HD11	1.47	1.12
1:A:525:ILE:CD1	1:A:525:ILE:H	1.50	1.12
1:A:610:ASN:O	1:A:613:GLU:HG2	1.44	1.12
1:A:770:LYS:C	1:A:771:THR:HG23	1.68	1.12
1:A:151:LEU:O	1:A:155:THR:HG21	1.41	1.12
1:A:1099:ARG:HH11	1:A:1099:ARG:CG	1.59	1.11
1:A:350:ILE:N	1:A:350:ILE:HD12	1.63	1.11
1:A:406:SER:C	1:A:407:LEU:HD23	1.76	1.10
1:A:621:PHE:O	1:A:625:SER:OG	1.67	1.10
1:A:624:LEU:HD23	1:A:625:SER:N	1.64	1.10
1:A:349:TYR:C	1:A:350:ILE:HD12	1.76	1.10
1:A:349:TYR:CA	1:A:350:ILE:HD12	1.81	1.09
1:A:593:GLU:O	1:A:597:LEU:HD12	1.52	1.09
1:A:610:ASN:CA	1:A:613:GLU:HG2	1.81	1.09
1:A:1189:LYS:HD2	1:A:1189:LYS:N	1.54	1.09
1:A:81:GLU:OE2	1:A:548:GLU:HB2	1.51	1.09
1:A:151:LEU:O	1:A:155:THR:HG23	1.37	1.09
1:A:770:LYS:C	1:A:771:THR:CG2	2.18	1.09
1:A:667:ASN:O	1:A:952:LYS:NZ	1.85	1.09
1:A:407:LEU:N	1:A:408:GLU:OE2	1.85	1.08
1:A:419:ILE:HG22	1:A:420:ASN:N	1.65	1.08
1:A:858:GLY:HA2	1:A:861:THR:CG2	1.82	1.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:521:THR:O	1:A:522:SER:OG	1.68	1.08
1:A:600:GLN:HA	1:A:600:GLN:NE2	1.59	1.08
1:A:1189:LYS:H	1:A:1189:LYS:CD	1.63	1.07
1:A:232:TYR:C	1:A:232:TYR:CD2	2.30	1.07
1:A:332:ASP:OD1	1:A:334:ALA:CB	2.03	1.07
1:A:1103:ASN:O	1:A:1107:THR:HG23	1.54	1.07
1:A:139:SER:O	1:A:142:TYR:O	1.69	1.06
1:A:945:VAL:O	1:A:948:ASN:OD1	1.71	1.06
1:A:312:THR:O	1:A:316:ASN:ND2	1.89	1.06
1:A:1145:LYS:HD2	1:A:1147:GLU:OE1	1.55	1.06
1:A:493:VAL:O	1:A:493:VAL:HG13	1.56	1.05
1:A:1145:LYS:CD	1:A:1147:GLU:OE1	2.03	1.05
1:A:742:LEU:HD21	1:A:943:LEU:HD13	1.35	1.05
1:A:611:GLU:HA	1:A:613:GLU:HB2	1.20	1.05
1:A:1099:ARG:NH1	1:A:1099:ARG:HG3	1.51	1.05
1:A:263:MET:CE	1:A:457:ILE:HD13	1.82	1.04
1:A:860:LYS:HB2	1:A:860:LYS:NZ	1.65	1.04
1:A:745:VAL:CG1	1:A:814:LEU:CD2	2.35	1.04
1:A:301:VAL:HG12	1:A:301:VAL:O	1.54	1.04
1:A:837:VAL:HG12	1:A:838:LYS:N	1.65	1.04
1:A:996:LYS:O	1:A:996:LYS:HG2	1.55	1.04
1:A:445:ILE:HG22	1:A:445:ILE:O	1.56	1.04
1:A:600:GLN:HA	1:A:600:GLN:HE21	0.91	1.04
1:A:624:LEU:C	1:A:624:LEU:CD2	2.29	1.04
1:A:628:LYS:O	3:A:1200:HOH:O	1.76	1.03
1:A:603:LYS:HD2	1:A:603:LYS:N	1.71	1.03
1:A:145:LYS:HD3	1:A:630:ALA:O	1.57	1.02
1:A:263:MET:HE1	1:A:457:ILE:HG23	1.09	1.02
1:A:593:GLU:O	1:A:597:LEU:CD1	2.06	1.02
1:A:406:SER:C	1:A:408:GLU:OE2	2.02	1.02
1:A:557:LYS:HB2	1:A:564:TYR:CE2	1.94	1.02
1:A:68:HIS:ND1	1:A:71:TYR:HD1	1.57	1.02
1:A:548:GLU:OE1	1:A:548:GLU:HA	1.60	1.01
1:A:697:LEU:O	1:A:698:LYS:HD3	1.60	1.01
1:A:874:TYR:C	1:A:874:TYR:CD2	2.34	1.01
1:A:745:VAL:HG11	1:A:814:LEU:HD22	1.43	1.01
1:A:1007:ASN:ND2	1:A:1070:ASN:O	1.94	1.01
1:A:610:ASN:O	1:A:613:GLU:HB3	1.59	1.00
1:A:612:GLN:HB2	1:A:616:GLN:HB3	1.43	1.00
1:A:542:LEU:HD23	1:A:542:LEU:N	1.73	1.00
1:A:624:LEU:O	1:A:627:TYR:N	1.93	1.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:745:VAL:HG12	1:A:814:LEU:HD23	1.41	1.00
1:A:1099:ARG:HH11	1:A:1099:ARG:HG3	0.86	0.99
1:A:544:ILE:HD12	1:A:544:ILE:O	1.60	0.99
1:A:806:THR:OG1	1:A:1057:TYR:O	1.80	0.99
1:A:612:GLN:CB	1:A:616:GLN:CB	2.36	0.99
1:A:314:LEU:C	1:A:314:LEU:CD1	2.29	0.99
1:A:424:ILE:HG23	1:A:424:ILE:O	1.61	0.99
1:A:660:TYR:OH	1:A:670:ILE:O	1.80	0.99
1:A:332:ASP:OD1	1:A:334:ALA:HB2	1.60	0.98
1:A:611:GLU:CA	1:A:613:GLU:HB2	1.91	0.98
1:A:145:LYS:CD	1:A:630:ALA:O	2.12	0.98
1:A:232:TYR:HD2	1:A:232:TYR:O	1.43	0.98
1:A:543:LEU:CD2	1:A:544:ILE:N	2.25	0.98
1:A:372:ASN:O	1:A:455:GLN:NE2	1.94	0.98
1:A:1024:PRO:O	1:A:1141:ILE:HD11	1.63	0.98
1:A:612:GLN:CB	1:A:616:GLN:N	2.26	0.97
1:A:350:ILE:CD1	1:A:581:VAL:O	2.10	0.97
1:A:925:ASN:OD1	1:A:965:ILE:CD1	2.13	0.97
1:A:614:LYS:C	1:A:616:GLN:H	1.72	0.97
1:A:612:GLN:C	1:A:616:GLN:HB3	1.90	0.96
1:A:1026:PHE:O	1:A:1030:VAL:HG23	1.64	0.96
1:A:278:LYS:HB2	1:A:278:LYS:HZ2	1.29	0.96
1:A:745:VAL:CG1	1:A:814:LEU:HD22	1.93	0.96
1:A:624:LEU:CD2	1:A:625:SER:N	2.27	0.96
1:A:653:LEU:HD12	1:A:654:GLU:H	1.13	0.96
1:A:232:TYR:CB	1:A:614:LYS:NZ	2.27	0.96
1:A:349:TYR:HA	1:A:350:ILE:HD12	1.47	0.96
1:A:612:GLN:O	1:A:616:GLN:HG2	1.66	0.96
1:A:543:LEU:CD2	1:A:544:ILE:H	1.78	0.95
1:A:1064:LEU:HD12	1:A:1065:SER:N	1.81	0.95
1:A:515:LYS:NZ	3:A:1224:HOH:O	1.98	0.95
1:A:120:LEU:N	1:A:120:LEU:HD12	1.77	0.95
1:A:611:GLU:HA	1:A:613:GLU:HB3	1.47	0.95
1:A:858:GLY:CA	1:A:861:THR:HG22	1.97	0.95
1:A:653:LEU:HD12	1:A:653:LEU:C	1.87	0.95
1:A:860:LYS:HB2	1:A:860:LYS:HZ3	1.17	0.95
1:A:612:GLN:HB3	1:A:615:GLU:HB3	1.45	0.94
1:A:1109:ASP:OD2	1:A:1138:ARG:NH1	2.01	0.94
1:A:874:TYR:C	1:A:874:TYR:HD2	1.73	0.93
1:A:610:ASN:O	1:A:613:GLU:CB	2.15	0.93
1:A:202:TYR:HD1	1:A:624:LEU:HB2	1.19	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:542:LEU:N	1:A:542:LEU:CD2	2.29	0.93
1:A:521:THR:C	1:A:522:SER:HG	1.75	0.93
1:A:1170:ILE:HG22	1:A:1170:ILE:O	1.68	0.93
1:A:677:LEU:HD12	1:A:677:LEU:C	1.84	0.92
1:A:373:PRO:O	1:A:373:PRO:HG2	1.69	0.92
1:A:1024:PRO:O	1:A:1141:ILE:HD13	1.69	0.92
1:A:278:LYS:CB	1:A:278:LYS:NZ	2.30	0.92
1:A:1145:LYS:CE	1:A:1147:GLU:OE1	2.18	0.92
1:A:908:ASP:HB3	1:A:911:THR:OG1	1.69	0.92
1:A:858:GLY:HA2	1:A:861:THR:HG21	1.51	0.92
1:A:645:ILE:HG12	1:A:648:LEU:HD12	1.49	0.91
1:A:614:LYS:HA	1:A:617:VAL:HB	1.51	0.91
1:A:605:ARG:O	1:A:609:PHE:HE1	1.50	0.91
1:A:1176:ALA:O	1:A:1180:ILE:HD12	1.69	0.91
1:A:653:LEU:CD1	1:A:654:GLU:N	2.30	0.91
1:A:812:GLN:HE21	1:A:812:GLN:N	1.67	0.91
1:A:263:MET:SD	1:A:457:ILE:HD12	2.09	0.91
1:A:148:ILE:HG12	1:A:148:ILE:O	1.68	0.91
1:A:407:LEU:CA	1:A:408:GLU:OE2	2.19	0.91
1:A:1104:THR:O	1:A:1107:THR:OG1	1.89	0.91
1:A:611:GLU:CA	1:A:613:GLU:CG	2.38	0.90
1:A:1189:LYS:HD2	1:A:1189:LYS:H	0.76	0.90
1:A:232:TYR:C	1:A:232:TYR:HD2	1.77	0.90
1:A:350:ILE:CD1	1:A:350:ILE:N	2.30	0.90
1:A:237:ASN:HD22	1:A:238:GLY:N	1.68	0.89
1:A:104:ASN:O	1:A:106:PRO:HD3	1.72	0.89
1:A:419:ILE:CG2	1:A:420:ASN:N	2.35	0.89
1:A:131:LEU:O	1:A:135:VAL:HG13	1.71	0.89
1:A:497:GLY:HA2	1:A:566:GLU:OE2	1.72	0.89
1:A:278:LYS:HB2	1:A:278:LYS:NZ	1.87	0.89
1:A:263:MET:HE2	1:A:457:ILE:HD12	1.24	0.89
1:A:233:LYS:O	1:A:234:VAL:HG22	1.73	0.89
1:A:748:LEU:HD21	1:A:923:ILE:HG23	1.54	0.89
1:A:232:TYR:HB2	1:A:614:LYS:HZ3	1.07	0.89
1:A:1029:ILE:O	1:A:1032:ALA:HB3	1.73	0.89
1:A:858:GLY:HA2	1:A:861:THR:HG22	1.55	0.89
1:A:858:GLY:C	1:A:861:THR:HG22	1.97	0.89
1:A:102:GLY:C	1:A:103:THR:HG22	1.99	0.88
1:A:1144:THR:HG22	1:A:1144:THR:O	1.73	0.88
1:A:145:LYS:NZ	3:A:1200:HOH:O	2.06	0.88
1:A:407:LEU:C	1:A:408:GLU:OE2	2.16	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1017:LYS:CA	1:A:1020:GLU:OE2	2.22	0.88
1:A:645:ILE:O	1:A:645:ILE:HD13	1.73	0.88
1:A:688:MET:O	1:A:692:LEU:HG	1.74	0.88
1:A:992:GLU:C	1:A:994:LYS:H	1.76	0.88
1:A:252:LEU:H	1:A:252:LEU:HD12	1.39	0.88
1:A:200:ASN:OD1	1:A:202:TYR:HD2	1.57	0.88
1:A:525:ILE:HD12	1:A:525:ILE:H	0.74	0.88
1:A:594:GLN:OE1	1:A:594:GLN:HA	1.74	0.87
1:A:672:GLU:OE2	1:A:672:GLU:HA	1.72	0.87
1:A:686:ASP:O	1:A:690:VAL:HG23	1.74	0.87
1:A:445:ILE:HB	1:A:461:GLY:HA3	1.54	0.87
1:A:682:HIS:O	1:A:685:LYS:CB	2.22	0.87
1:A:846:LYS:NZ	1:A:850:ASP:CG	2.32	0.87
1:A:348:PHE:C	1:A:350:ILE:HD11	1.98	0.87
1:A:605:ARG:O	1:A:609:PHE:CD1	2.26	0.87
1:A:821:VAL:O	1:A:821:VAL:HG23	1.70	0.87
1:A:141:ASN:CB	1:A:190:ASP:OD2	2.21	0.87
1:A:232:TYR:CB	1:A:614:LYS:HZ3	1.88	0.87
1:A:283:LEU:HD11	1:A:287:GLU:HG2	1.57	0.87
1:A:682:HIS:O	1:A:685:LYS:HB3	1.75	0.87
1:A:307:SER:OG	1:A:309:ASN:N	2.08	0.86
1:A:612:GLN:C	1:A:616:GLN:CG	2.48	0.86
1:A:1110:LYS:HG3	1:A:1110:LYS:O	1.75	0.86
1:A:188:TYR:O	1:A:192:VAL:HG23	1.76	0.86
1:A:1174:GLU:H	1:A:1174:GLU:CD	1.83	0.86
1:A:670:ILE:HG21	1:A:944:PHE:CD1	2.11	0.86
1:A:981:ASN:ND2	3:A:1238:HOH:O	2.08	0.86
1:A:1017:LYS:HB2	1:A:1020:GLU:OE2	1.75	0.86
1:A:232:TYR:HB2	1:A:614:LYS:HZ2	1.39	0.86
1:A:860:LYS:HZ3	1:A:860:LYS:CB	1.85	0.86
1:A:885:ALA:O	1:A:889:ILE:HG13	1.75	0.86
1:A:603:LYS:N	1:A:603:LYS:CD	2.39	0.85
1:A:612:GLN:CA	1:A:616:GLN:HB3	2.05	0.85
1:A:949:GLU:O	1:A:953:ASN:ND2	2.08	0.85
1:A:745:VAL:HG11	1:A:814:LEU:CD2	2.04	0.85
1:A:151:LEU:C	1:A:155:THR:HG21	2.02	0.85
1:A:874:TYR:CD2	1:A:874:TYR:O	2.29	0.85
1:A:213:VAL:O	1:A:214:GLU:HB2	1.77	0.84
1:A:139:SER:OG	1:A:190:ASP:C	2.21	0.84
1:A:627:TYR:O	1:A:627:TYR:CD2	2.30	0.84
1:A:984:ILE:HG23	1:A:989:LEU:HD12	1.57	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:206:THR:HG23	1:A:628:LYS:NZ	1.93	0.84
1:A:487:MET:O	1:A:491:LYS:CG	2.26	0.84
1:A:689:ASP:O	1:A:693:LYS:HG3	1.78	0.84
1:A:811:ALA:C	1:A:812:GLN:NE2	2.36	0.84
1:A:68:HIS:HB3	1:A:71:TYR:HB2	1.58	0.84
1:A:138:GLY:HA2	1:A:147:SER:OG	1.78	0.84
1:A:263:MET:HE1	1:A:457:ILE:CG1	2.07	0.84
1:A:600:GLN:NE2	1:A:600:GLN:CA	2.41	0.84
1:A:612:GLN:HB3	1:A:615:GLU:HB2	1.55	0.84
1:A:612:GLN:C	1:A:616:GLN:HG2	2.03	0.84
1:A:485:VAL:HG12	1:A:486:ILE:N	1.90	0.83
1:A:1039:TRP:CD1	1:A:1039:TRP:O	2.30	0.83
1:A:809:TYR:CZ	1:A:990:PHE:HD2	1.95	0.83
1:A:1017:LYS:CB	1:A:1020:GLU:OE2	2.27	0.83
1:A:541:PRO:HB2	1:A:542:LEU:CD2	2.09	0.83
1:A:612:GLN:HB2	1:A:616:GLN:H	1.41	0.83
1:A:283:LEU:HD12	1:A:284:THR:N	1.94	0.83
1:A:543:LEU:HD21	1:A:544:ILE:HG22	1.59	0.83
1:A:561:GLU:HB3	1:A:564:TYR:HB2	1.60	0.83
1:A:857:ASN:O	1:A:861:THR:HB	1.79	0.83
1:A:252:LEU:HD12	1:A:252:LEU:N	1.92	0.83
1:A:862:THR:O	1:A:862:THR:HG22	1.77	0.83
1:A:1039:TRP:CD1	1:A:1039:TRP:C	2.55	0.83
1:A:614:LYS:O	1:A:618:ILE:CD1	2.24	0.82
1:A:645:ILE:CG1	1:A:648:LEU:HD12	2.08	0.82
1:A:134:SER:O	1:A:137:SER:OG	1.97	0.82
1:A:102:GLY:O	1:A:103:THR:HG22	1.77	0.82
1:A:102:GLY:C	1:A:103:THR:CG2	2.52	0.82
1:A:809:TYR:OH	1:A:990:PHE:HD2	1.63	0.82
1:A:237:ASN:C	1:A:237:ASN:ND2	2.30	0.82
1:A:745:VAL:HG12	1:A:814:LEU:CD2	2.07	0.82
1:A:113:PHE:CE1	1:A:115:PHE:HE2	1.97	0.82
1:A:670:ILE:HG21	1:A:944:PHE:HD1	1.44	0.82
1:A:885:ALA:O	1:A:889:ILE:CG1	2.28	0.82
1:A:902:LEU:HD12	1:A:902:LEU:O	1.80	0.82
1:A:425:HIS:C	1:A:429:SER:OG	2.22	0.81
1:A:161:ASN:HD22	1:A:162:ALA:H	1.28	0.81
1:A:543:LEU:CD2	1:A:544:ILE:HG22	2.09	0.81
1:A:557:LYS:HB2	1:A:564:TYR:HE2	1.44	0.81
1:A:612:GLN:HG3	1:A:616:GLN:CB	2.11	0.81
1:A:460:ILE:HD12	1:A:486:ILE:CD1	2.11	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:834:LEU:HD12	1:A:834:LEU:C	1.93	0.81
1:A:612:GLN:C	1:A:616:GLN:CB	2.53	0.81
1:A:1160:VAL:CG2	1:A:1160:VAL:O	2.29	0.81
1:A:291:PHE:O	1:A:292:TYR:C	2.19	0.81
1:A:68:HIS:ND1	1:A:71:TYR:CD1	2.40	0.81
1:A:612:GLN:O	1:A:616:GLN:CG	2.29	0.81
1:A:1145:LYS:HE2	1:A:1147:GLU:OE1	1.81	0.81
1:A:610:ASN:C	1:A:613:GLU:CB	2.54	0.80
1:A:193:PHE:O	1:A:194:GLN:CG	2.30	0.80
1:A:68:HIS:HD1	1:A:71:TYR:HD1	0.82	0.80
1:A:237:ASN:ND2	1:A:238:GLY:N	2.30	0.80
1:A:424:ILE:O	1:A:424:ILE:CG2	2.30	0.80
1:A:812:GLN:N	1:A:812:GLN:NE2	2.29	0.80
1:A:603:LYS:CD	1:A:603:LYS:H	1.94	0.80
1:A:543:LEU:HD23	1:A:543:LEU:C	2.07	0.80
1:A:957:TYR:O	1:A:960:GLU:CB	2.28	0.80
1:A:148:ILE:O	1:A:148:ILE:CG1	2.30	0.80
1:A:992:GLU:O	1:A:994:LYS:N	2.13	0.80
1:A:544:ILE:O	1:A:544:ILE:CD1	2.29	0.80
1:A:569:VAL:O	1:A:573:PHE:HB2	1.81	0.80
1:A:1127:SER:O	1:A:1128:ASN:CB	2.27	0.80
1:A:645:ILE:O	1:A:645:ILE:CG1	2.30	0.80
1:A:531:MET:HG2	1:A:541:PRO:HB3	1.62	0.80
1:A:493:VAL:O	1:A:493:VAL:HG22	1.80	0.79
1:A:151:LEU:C	1:A:155:THR:CG2	2.55	0.79
1:A:594:GLN:OE1	1:A:594:GLN:CA	2.29	0.79
1:A:765:LEU:O	1:A:765:LEU:HD12	1.83	0.79
1:A:612:GLN:O	1:A:616:GLN:CB	2.29	0.79
1:A:197:VAL:CG2	1:A:197:VAL:O	2.30	0.79
1:A:742:LEU:HD23	1:A:933:VAL:HG13	1.64	0.79
1:A:645:ILE:O	1:A:645:ILE:CD1	2.30	0.79
1:A:736:THR:O	1:A:737:THR:C	2.24	0.79
1:A:996:LYS:O	1:A:996:LYS:CG	2.29	0.79
1:A:612:GLN:CG	1:A:616:GLN:CA	2.61	0.79
1:A:697:LEU:O	1:A:698:LYS:CD	2.30	0.79
1:A:487:MET:O	1:A:491:LYS:HG3	1.83	0.79
1:A:610:ASN:O	1:A:613:GLU:CG	2.07	0.79
1:A:612:GLN:HG3	1:A:616:GLN:CA	2.13	0.78
1:A:513:ILE:HG22	1:A:514:LEU:N	1.95	0.78
1:A:1177:ASN:ND2	3:A:1259:HOH:O	2.15	0.78
1:A:672:GLU:OE2	1:A:672:GLU:CA	2.30	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:61:ILE:CG1	1:A:61:ILE:O	2.30	0.78
1:A:612:GLN:HA	1:A:613:GLU:HB2	0.80	0.78
1:A:680:ASN:ND2	1:A:683:MET:HB2	1.99	0.78
1:A:135:VAL:HG23	1:A:136:LEU:N	1.99	0.78
1:A:742:LEU:CD2	1:A:943:LEU:HD13	2.13	0.78
1:A:1145:LYS:O	1:A:1148:ASP:OD2	2.02	0.78
1:A:363:ASN:OD1	1:A:585:GLU:HA	1.83	0.78
1:A:682:HIS:O	1:A:685:LYS:N	2.18	0.77
1:A:721:THR:O	1:A:721:THR:HG23	1.83	0.77
1:A:745:VAL:CG1	1:A:814:LEU:HD23	2.04	0.77
1:A:332:ASP:OD1	1:A:334:ALA:N	2.17	0.77
1:A:680:ASN:HD22	1:A:683:MET:HE2	1.50	0.77
1:A:232:TYR:CD2	1:A:232:TYR:O	2.29	0.77
1:A:542:LEU:HD23	1:A:542:LEU:H	1.48	0.77
1:A:612:GLN:HB3	1:A:615:GLU:CA	2.15	0.77
1:A:674:TYR:OH	1:A:733:GLU:OE2	2.03	0.77
1:A:1103:ASN:OD1	1:A:1103:ASN:C	2.28	0.77
1:A:616:GLN:HG3	1:A:617:VAL:H	1.50	0.77
1:A:312:THR:HG22	1:A:313:GLU:N	1.98	0.77
1:A:425:HIS:O	1:A:429:SER:OG	2.00	0.77
1:A:135:VAL:CG2	1:A:136:LEU:N	2.45	0.76
1:A:232:TYR:HB2	1:A:614:LYS:HZ1	1.46	0.76
1:A:570:GLU:HA	1:A:574:ILE:HD12	1.66	0.76
1:A:119:THR:O	1:A:167:ASP:C	2.27	0.76
1:A:679:THR:OG1	1:A:680:ASN:N	2.17	0.76
1:A:816:ASN:OD1	1:A:816:ASN:C	2.29	0.76
1:A:548:GLU:OE1	1:A:548:GLU:CA	2.30	0.76
1:A:373:PRO:O	1:A:373:PRO:CG	2.30	0.76
1:A:614:LYS:C	1:A:616:GLN:N	2.36	0.76
1:A:596:ASN:O	1:A:600:GLN:N	2.19	0.76
1:A:1028:VAL:O	1:A:1032:ALA:HB2	1.86	0.76
1:A:139:SER:C	1:A:196:ASN:OD1	2.27	0.76
1:A:510:ILE:HG22	1:A:511:GLU:N	1.99	0.76
1:A:600:GLN:HE21	1:A:600:GLN:CA	1.85	0.76
1:A:278:LYS:CB	1:A:278:LYS:HZ3	1.97	0.76
1:A:263:MET:HE1	1:A:457:ILE:CB	2.16	0.76
1:A:272:ASN:OD1	1:A:274:GLY:N	2.18	0.76
1:A:616:GLN:C	1:A:616:GLN:OE1	2.29	0.75
1:A:645:ILE:C	1:A:647:ASP:H	1.93	0.75
1:A:570:GLU:O	1:A:575:ASN:ND2	2.19	0.75
1:A:231:ASP:O	1:A:233:LYS:CD	2.30	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:616:GLN:HG3	1:A:617:VAL:N	2.02	0.75
1:A:616:GLN:C	1:A:616:GLN:CD	2.53	0.75
1:A:105:ASP:OD1	1:A:107:LEU:HD12	1.86	0.75
1:A:265:PRO:HD2	1:A:341:GLN:OE1	1.86	0.75
1:A:587:ASP:OD1	1:A:587:ASP:C	2.29	0.75
1:A:653:LEU:HD11	1:A:654:GLU:O	1.86	0.75
1:A:1039:TRP:CZ2	1:A:1043:ARG:HD2	2.21	0.75
1:A:79:ASN:OD1	1:A:79:ASN:C	2.30	0.75
1:A:65:SER:N	1:A:66:PRO:HD3	2.01	0.75
1:A:554:VAL:O	1:A:555:LYS:C	2.25	0.75
1:A:606:ILE:O	1:A:606:ILE:HG23	1.84	0.75
1:A:1036:SER:O	1:A:1040:ASP:HB2	1.87	0.75
1:A:543:LEU:HD23	1:A:544:ILE:H	0.93	0.75
1:A:65:SER:OG	1:A:87:THR:HG23	1.87	0.74
1:A:612:GLN:CB	1:A:615:GLU:C	2.59	0.74
1:A:619:LYS:HE2	1:A:623:GLU:CG	2.16	0.74
1:A:528:VAL:O	1:A:532:THR:HG23	1.87	0.74
1:A:653:LEU:CD1	1:A:654:GLU:O	2.35	0.74
1:A:509:ASN:C	1:A:509:ASN:OD1	2.30	0.74
1:A:233:LYS:C	1:A:234:VAL:CG2	2.60	0.74
1:A:409:ASN:HB2	1:A:412:ASP:OD2	1.85	0.74
1:A:254:ASP:OD1	1:A:254:ASP:C	2.29	0.74
1:A:450:ASN:C	1:A:450:ASN:OD1	2.29	0.74
1:A:1095:ASN:O	1:A:1099:ARG:NH1	2.20	0.74
1:A:609:PHE:C	1:A:610:ASN:O	2.29	0.74
1:A:677:LEU:O	1:A:677:LEU:CD1	2.30	0.74
1:A:723:TYR:C	1:A:726:ASN:HD22	1.94	0.74
1:A:132:GLU:OE1	1:A:164:THR:OG1	2.06	0.74
1:A:206:THR:HG23	1:A:628:LYS:HZ3	1.49	0.74
1:A:1154:ASP:O	1:A:1158:SER:HB3	1.88	0.74
1:A:1014:ILE:O	1:A:1014:ILE:HG22	1.86	0.74
1:A:742:LEU:HD21	1:A:943:LEU:CD1	2.15	0.73
1:A:1179:TYR:CE1	1:A:1183:VAL:HB	2.23	0.73
1:A:321:TYR:C	1:A:323:GLY:H	1.95	0.73
1:A:627:TYR:O	1:A:627:TYR:CG	2.40	0.73
1:A:810:ASN:C	1:A:810:ASN:OD1	2.31	0.73
1:A:856:ILE:CG2	1:A:856:ILE:O	2.34	0.73
1:A:612:GLN:HB2	1:A:616:GLN:CB	2.08	0.73
1:A:1037:TYR:O	1:A:1038:LEU:C	2.22	0.73
1:A:362:GLU:OE1	1:A:466:LYS:NZ	2.22	0.73
1:A:750:HIS:ND1	1:A:750:HIS:N	2.37	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:243:GLU:HG3	1:A:1049:TYR:CE1	2.24	0.73
1:A:612:GLN:HB2	1:A:616:GLN:CA	2.19	0.73
1:A:1127:SER:O	1:A:1128:ASN:HB3	1.88	0.73
1:A:487:MET:O	1:A:491:LYS:HG2	1.87	0.73
1:A:860:LYS:HB2	1:A:860:LYS:HZ2	1.54	0.72
1:A:595:GLU:O	1:A:598:GLU:HB3	1.88	0.72
1:A:612:GLN:HG2	1:A:616:GLN:HB3	1.31	0.72
1:A:821:VAL:O	1:A:821:VAL:CG2	2.30	0.72
1:A:278:LYS:HZ3	1:A:278:LYS:HB3	1.54	0.72
1:A:502:ALA:O	1:A:505:ALA:HB3	1.89	0.72
1:A:653:LEU:CD1	1:A:654:GLU:H	1.97	0.72
1:A:846:LYS:HZ2	1:A:850:ASP:CG	1.96	0.72
1:A:892:TYR:O	1:A:893:GLU:C	2.27	0.72
1:A:202:TYR:CE1	1:A:624:LEU:HB2	2.24	0.72
1:A:209:TRP:HE1	1:A:283:LEU:HB3	1.55	0.72
1:A:834:LEU:O	1:A:834:LEU:CD1	2.30	0.72
1:A:663:ASN:OD1	1:A:663:ASN:C	2.30	0.72
1:A:105:ASP:OD1	1:A:105:ASP:C	2.30	0.71
1:A:193:PHE:O	1:A:194:GLN:HG2	1.90	0.71
1:A:769:ASN:ND2	1:A:841:ASP:O	2.20	0.71
1:A:887:ASN:O	1:A:891:GLY:N	2.23	0.71
1:A:1029:ILE:O	1:A:1032:ALA:N	2.23	0.71
1:A:180:ASP:O	1:A:181:PHE:C	2.31	0.71
1:A:1139:LYS:O	1:A:1139:LYS:CG	2.38	0.71
1:A:1176:ALA:O	1:A:1180:ILE:CD1	2.38	0.71
1:A:807:ASP:OD2	1:A:807:ASP:C	2.29	0.71
1:A:797:TYR:HE1	1:A:814:LEU:HD12	1.55	0.71
1:A:860:LYS:NZ	1:A:860:LYS:CB	2.30	0.71
1:A:614:LYS:C	1:A:618:ILE:HD13	2.14	0.71
1:A:894:ASN:O	1:A:895:TYR:C	2.32	0.71
1:A:255:LEU:HD21	1:A:366:SER:HB3	1.71	0.71
1:A:460:ILE:HD12	1:A:486:ILE:HD13	1.73	0.71
1:A:233:LYS:O	1:A:234:VAL:CG2	2.39	0.71
1:A:560:ASN:ND2	1:A:560:ASN:H	1.89	0.71
1:A:606:ILE:O	1:A:606:ILE:CG2	2.35	0.71
1:A:240:VAL:O	1:A:241:TYR:C	2.32	0.70
1:A:807:ASP:OD2	1:A:809:TYR:N	2.23	0.70
1:A:145:LYS:HD2	1:A:630:ALA:O	1.89	0.70
1:A:299:LYS:O	1:A:302:LYS:HE3	1.91	0.70
1:A:332:ASP:CG	1:A:334:ALA:HB3	2.16	0.70
1:A:263:MET:HE2	1:A:457:ILE:HD13	1.58	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:856:ILE:O	1:A:856:ILE:HG22	1.85	0.70
1:A:200:ASN:HB3	1:A:203:ILE:HG13	1.73	0.70
1:A:612:GLN:CG	1:A:616:GLN:HB2	1.89	0.70
1:A:925:ASN:CG	1:A:965:ILE:CD1	2.53	0.70
1:A:91:HIS:HD2	1:A:322:LEU:HD13	1.55	0.70
1:A:332:ASP:CG	1:A:334:ALA:CB	2.64	0.70
1:A:645:ILE:HG12	1:A:645:ILE:O	1.90	0.70
1:A:937:TYR:HD2	1:A:937:TYR:O	1.75	0.70
1:A:213:VAL:HG23	1:A:214:GLU:N	2.06	0.70
1:A:598:GLU:HG2	1:A:599:LYS:HE3	1.74	0.70
1:A:1139:LYS:O	1:A:1139:LYS:HG3	1.92	0.70
1:A:283:LEU:HD12	1:A:283:LEU:C	2.17	0.69
1:A:1025:SER:O	1:A:1029:ILE:CD1	2.40	0.69
1:A:945:VAL:HG12	1:A:946:ASN:N	2.03	0.69
1:A:1064:LEU:HD12	1:A:1065:SER:H	1.56	0.69
1:A:145:LYS:N	1:A:632:GLU:OE1	2.24	0.69
1:A:443:ASN:ND2	1:A:463:LYS:HZ2	1.91	0.69
1:A:1058:ASP:C	1:A:1058:ASP:OD1	2.30	0.69
1:A:498:PHE:O	1:A:499:ASN:C	2.33	0.69
1:A:284:THR:HB	1:A:287:GLU:H	1.57	0.69
1:A:360:GLU:OE1	1:A:468:ASN:ND2	2.26	0.69
1:A:285:TYR:CE2	1:A:289:LYS:HE2	2.28	0.69
1:A:564:TYR:CD1	1:A:564:TYR:C	2.66	0.69
1:A:1025:SER:O	1:A:1029:ILE:HD13	1.92	0.69
1:A:94:ALA:O	1:A:95:LYS:HB2	1.90	0.69
1:A:283:LEU:CD1	1:A:287:GLU:HG2	2.22	0.69
1:A:575:ASN:ND2	1:A:575:ASN:N	2.38	0.69
1:A:612:GLN:N	1:A:613:GLU:HB2	2.08	0.69
1:A:887:ASN:HA	1:A:891:GLY:HA3	1.73	0.69
1:A:1101:ILE:CD1	1:A:1141:ILE:O	2.40	0.69
1:A:645:ILE:HG12	1:A:648:LEU:CD1	2.23	0.69
1:A:266:ASP:CG	1:A:341:GLN:NE2	2.48	0.69
1:A:407:LEU:N	1:A:407:LEU:CD2	2.30	0.68
1:A:1079:ARG:NE	1:A:1164:GLU:OE1	2.25	0.68
1:A:60:TRP:HE3	1:A:60:TRP:O	1.75	0.68
1:A:200:ASN:OD1	1:A:202:TYR:CD2	2.45	0.68
1:A:348:PHE:N	1:A:348:PHE:CD1	2.55	0.68
1:A:166:ASN:HD21	1:A:269:HIS:HA	1.59	0.68
1:A:180:ASP:O	1:A:183:ASN:N	2.27	0.68
1:A:623:GLU:O	1:A:626:LYS:HG3	1.93	0.68
1:A:612:GLN:CB	1:A:615:GLU:CB	2.61	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:612:GLN:CB	1:A:615:GLU:HB3	2.21	0.68
1:A:909:PHE:CE1	1:A:912:LEU:HD23	2.29	0.68
1:A:119:THR:C	1:A:120:LEU:HD12	2.19	0.68
1:A:925:ASN:ND2	1:A:965:ILE:HD11	2.08	0.68
1:A:321:TYR:C	1:A:323:GLY:N	2.48	0.68
1:A:431:LEU:HD13	1:A:460:ILE:HD13	1.76	0.68
1:A:116:TYR:OH	1:A:536:ASN:OD1	2.06	0.68
1:A:263:MET:HE1	1:A:457:ILE:HD13	1.50	0.68
1:A:809:TYR:OH	1:A:990:PHE:CD2	2.43	0.68
1:A:1103:ASN:O	1:A:1107:THR:CG2	2.39	0.68
1:A:1145:LYS:HD2	1:A:1147:GLU:CD	2.18	0.68
1:A:139:SER:OG	1:A:190:ASP:O	2.10	0.68
1:A:166:ASN:C	1:A:166:ASN:OD1	2.33	0.68
1:A:575:ASN:N	1:A:575:ASN:HD22	1.92	0.68
1:A:455:GLN:C	1:A:456:TYR:HD2	2.02	0.67
1:A:1000:PHE:HD2	1:A:1192:ILE:HD11	1.59	0.67
1:A:1034:LYS:HD3	1:A:1053:ALA:H	1.59	0.67
1:A:85:THR:O	1:A:101:LEU:HA	1.93	0.67
1:A:560:ASN:H	1:A:560:ASN:HD22	1.39	0.67
1:A:851:ILE:HG22	1:A:852:LEU:N	2.04	0.67
1:A:66:PRO:O	1:A:73:ILE:HD11	1.94	0.67
1:A:299:LYS:H	1:A:299:LYS:HD2	1.59	0.67
1:A:551:LEU:O	1:A:555:LYS:HG3	1.95	0.67
1:A:624:LEU:O	1:A:627:TYR:HB3	1.95	0.67
1:A:512:PHE:C	1:A:512:PHE:CD2	2.71	0.67
1:A:1023:ASP:OD1	1:A:1024:PRO:N	2.28	0.67
1:A:61:ILE:O	1:A:61:ILE:HG12	1.93	0.67
1:A:79:ASN:OD1	1:A:81:GLU:N	2.28	0.67
1:A:838:LYS:HG2	1:A:839:GLU:HG2	1.77	0.67
1:A:1000:PHE:CD2	1:A:1192:ILE:HD11	2.29	0.67
1:A:312:THR:HG23	1:A:316:ASN:HD21	1.58	0.67
1:A:1179:TYR:HE2	1:A:1187:PHE:CE1	2.13	0.67
1:A:443:ASN:ND2	1:A:463:LYS:NZ	2.43	0.66
1:A:868:TYR:O	1:A:869:ALA:C	2.38	0.66
1:A:193:PHE:C	1:A:194:GLN:HG3	2.20	0.66
1:A:460:ILE:CD1	1:A:486:ILE:HD13	2.24	0.66
1:A:797:TYR:CE1	1:A:814:LEU:HD12	2.30	0.66
1:A:1112:ARG:HB3	1:A:1116:GLU:HB2	1.77	0.66
1:A:624:LEU:HD23	1:A:625:SER:CA	2.25	0.66
1:A:488:ASN:O	1:A:492:LYS:HB2	1.96	0.66
1:A:1180:ILE:C	1:A:1184:ASP:O	2.36	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:349:TYR:HA	1:A:350:ILE:CD1	2.24	0.66
1:A:119:THR:C	1:A:167:ASP:O	2.39	0.66
1:A:408:GLU:OE2	1:A:408:GLU:N	2.29	0.66
1:A:557:LYS:O	1:A:561:GLU:N	2.29	0.66
1:A:1105:ILE:O	1:A:1109:ASP:HB2	1.96	0.66
1:A:242:ASN:ND2	1:A:1047:GLY:O	2.29	0.66
1:A:291:PHE:O	1:A:292:TYR:O	2.13	0.66
1:A:369:TRP:CD1	1:A:576:ASN:HB3	2.30	0.66
1:A:1029:ILE:O	1:A:1033:LEU:N	2.28	0.66
1:A:619:LYS:O	1:A:623:GLU:N	2.22	0.66
1:A:756:LEU:O	1:A:759:LEU:HB2	1.95	0.66
1:A:259:GLU:O	1:A:263:MET:HG3	1.95	0.65
1:A:441:GLY:HA3	1:A:462:LEU:HG	1.78	0.65
1:A:442:ASN:CB	1:A:857:ASN:HD22	2.09	0.65
1:A:594:GLN:OE1	1:A:594:GLN:N	2.29	0.65
1:A:846:LYS:HZ3	1:A:850:ASP:CG	1.98	0.65
1:A:926:LYS:HD2	1:A:959:GLU:HG2	1.78	0.65
1:A:419:ILE:O	1:A:422:LEU:N	2.29	0.65
1:A:474:ASN:OD1	1:A:475:PHE:N	2.30	0.65
1:A:543:LEU:CD2	1:A:544:ILE:CG2	2.74	0.65
1:A:616:GLN:CG	1:A:617:VAL:N	2.60	0.65
1:A:1178:GLU:OE2	1:A:1178:GLU:N	2.30	0.65
1:A:1182:ASN:OD1	1:A:1182:ASN:N	2.30	0.65
1:A:91:HIS:CD2	1:A:322:LEU:HD13	2.32	0.65
1:A:127:ILE:N	1:A:128:PRO:CD	2.59	0.65
1:A:614:LYS:HD2	1:A:618:ILE:HD11	1.78	0.65
1:A:614:LYS:O	1:A:616:GLN:N	2.30	0.65
1:A:809:TYR:CZ	1:A:990:PHE:CD2	2.84	0.65
1:A:670:ILE:CG2	1:A:944:PHE:CD1	2.79	0.65
1:A:1010:SER:OG	1:A:1168:VAL:O	2.14	0.65
1:A:105:ASP:OD1	1:A:106:PRO:N	2.30	0.65
1:A:124:GLY:O	1:A:275:GLY:HA2	1.96	0.65
1:A:151:LEU:CA	1:A:155:THR:HG21	2.27	0.65
1:A:557:LYS:O	1:A:561:GLU:HB2	1.96	0.65
1:A:645:ILE:HD13	1:A:645:ILE:C	2.21	0.65
1:A:857:ASN:O	1:A:861:THR:CB	2.44	0.65
1:A:139:SER:OG	1:A:191:SER:HA	1.97	0.64
1:A:202:TYR:O	1:A:206:THR:OG1	2.15	0.64
1:A:645:ILE:C	1:A:647:ASP:N	2.42	0.64
1:A:682:HIS:O	1:A:685:LYS:CA	2.45	0.64
1:A:1029:ILE:O	1:A:1032:ALA:CB	2.43	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1101:ILE:HG22	1:A:1102:ILE:N	2.06	0.64
1:A:575:ASN:HD22	1:A:575:ASN:H	1.44	0.64
1:A:858:GLY:O	1:A:861:THR:HG22	1.96	0.64
1:A:372:ASN:OD1	1:A:372:ASN:N	2.30	0.64
1:A:742:LEU:CD2	1:A:943:LEU:CD1	2.73	0.64
1:A:141:ASN:HD21	1:A:324:GLN:HE22	1.46	0.64
1:A:942:HIS:HA	1:A:946:ASN:HB2	1.80	0.64
1:A:957:TYR:O	1:A:960:GLU:N	2.28	0.64
1:A:332:ASP:OD1	1:A:334:ALA:HB3	1.94	0.64
1:A:509:ASN:OD1	1:A:510:ILE:N	2.30	0.64
1:A:550:TYR:HA	1:A:553:ILE:HG13	1.78	0.64
1:A:862:THR:O	1:A:862:THR:CG2	2.46	0.64
1:A:894:ASN:O	1:A:894:ASN:ND2	2.30	0.64
1:A:193:PHE:O	1:A:194:GLN:HG3	1.97	0.64
1:A:232:TYR:O	1:A:233:LYS:HD2	1.98	0.64
1:A:981:ASN:ND2	1:A:981:ASN:O	2.30	0.64
1:A:645:ILE:CG1	1:A:648:LEU:CD1	2.76	0.63
1:A:567:LYS:O	1:A:571:LYS:HB3	1.98	0.63
1:A:105:ASP:CG	1:A:107:LEU:HD12	2.24	0.63
1:A:347:PRO:HG3	1:A:579:ARG:NH2	2.13	0.63
1:A:1138:ARG:O	1:A:1142:MET:HG3	1.99	0.63
1:A:642:ILE:HG23	1:A:643:ILE:N	2.13	0.63
1:A:799:LYS:H	1:A:810:ASN:HD21	1.47	0.63
1:A:860:LYS:CG	1:A:861:THR:N	2.62	0.63
1:A:416:LEU:O	1:A:420:ASN:HB3	1.99	0.63
1:A:858:GLY:O	1:A:862:THR:OG1	2.14	0.63
1:A:992:GLU:C	1:A:994:LYS:N	2.46	0.63
1:A:443:ASN:HD22	1:A:463:LYS:HZ2	1.47	0.62
1:A:680:ASN:ND2	1:A:683:MET:HE2	2.14	0.62
1:A:902:LEU:O	1:A:906:GLU:OE1	2.17	0.62
1:A:1110:LYS:O	1:A:1110:LYS:CG	2.43	0.62
1:A:81:GLU:OE2	1:A:548:GLU:CB	2.40	0.62
1:A:309:ASN:O	1:A:311:PRO:HD3	1.99	0.62
1:A:349:TYR:CA	1:A:350:ILE:CD1	2.69	0.62
1:A:765:LEU:HD12	1:A:765:LEU:C	2.22	0.62
1:A:1113:ARG:O	1:A:1116:GLU:CG	2.47	0.62
1:A:771:THR:HB	1:A:839:GLU:O	1.99	0.62
1:A:858:GLY:O	1:A:862:THR:CB	2.47	0.62
1:A:1160:VAL:O	1:A:1160:VAL:HG22	1.96	0.62
1:A:185:MET:HG2	1:A:317:PHE:HE2	1.64	0.62
1:A:276:ASP:HB3	1:A:278:LYS:HG3	1.81	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:316:ASN:O	1:A:320:GLN:HG2	2.00	0.62
1:A:732:TYR:OH	1:A:1121:SER:HB3	1.99	0.62
1:A:888:ILE:O	1:A:894:ASN:HB2	1.99	0.62
1:A:233:LYS:C	1:A:234:VAL:HG23	2.22	0.62
1:A:350:ILE:HD12	1:A:350:ILE:H	1.63	0.62
1:A:460:ILE:HD12	1:A:486:ILE:HD11	1.80	0.62
1:A:263:MET:SD	1:A:457:ILE:HG23	2.40	0.62
1:A:358:SER:O	1:A:361:LYS:HE2	1.99	0.62
1:A:369:TRP:NE1	1:A:579:ARG:HD3	2.14	0.62
1:A:571:LYS:HG2	1:A:572:HIS:CD2	2.34	0.62
1:A:1113:ARG:O	1:A:1116:GLU:HG2	1.99	0.62
1:A:441:GLY:HA2	1:A:465:ILE:HG23	1.81	0.62
1:A:781:ILE:O	1:A:781:ILE:CG2	2.41	0.62
1:A:805:VAL:HG23	1:A:1020:GLU:O	2.00	0.62
1:A:258:GLU:O	1:A:262:TYR:HD2	1.83	0.62
1:A:665:ASN:HD21	1:A:956:SER:HB2	1.63	0.62
1:A:725:GLY:O	1:A:926:LYS:NZ	2.32	0.62
1:A:876:LYS:NZ	1:A:1056:GLU:OE2	2.32	0.62
1:A:197:VAL:O	1:A:197:VAL:HG23	2.00	0.61
1:A:612:GLN:CB	1:A:615:GLU:CA	2.77	0.61
1:A:624:LEU:HD22	1:A:625:SER:N	2.14	0.61
1:A:665:ASN:ND2	1:A:956:SER:HB2	2.16	0.61
1:A:321:TYR:O	1:A:323:GLY:N	2.33	0.61
1:A:442:ASN:HB3	1:A:857:ASN:HD22	1.64	0.61
1:A:571:LYS:HD3	1:A:572:HIS:NE2	2.16	0.61
1:A:728:PRO:O	1:A:728:PRO:HG2	2.00	0.61
1:A:452:SER:C	1:A:453:LEU:HD23	2.26	0.61
1:A:767:LEU:O	1:A:783:ARG:NH1	2.34	0.61
1:A:834:LEU:C	1:A:834:LEU:CD1	2.60	0.61
1:A:739:ILE:HG22	1:A:740:VAL:N	2.16	0.61
1:A:1070:ASN:OD1	1:A:1073:LYS:HE3	2.01	0.61
1:A:1189:LYS:N	1:A:1189:LYS:CD	2.30	0.61
1:A:619:LYS:HG2	1:A:623:GLU:HG2	1.81	0.60
1:A:149:GLY:O	1:A:153:LYS:HG3	2.01	0.60
1:A:129:HIS:NE2	1:A:243:GLU:OE1	2.31	0.60
1:A:285:TYR:N	1:A:286:GLU:OE1	2.34	0.60
1:A:348:PHE:C	1:A:350:ILE:CD1	2.68	0.60
1:A:542:LEU:O	1:A:545:PHE:HB2	2.02	0.60
1:A:677:LEU:HD11	1:A:684:LEU:HG	1.84	0.60
1:A:948:ASN:O	1:A:952:LYS:HG3	2.01	0.60
1:A:541:PRO:HB2	1:A:542:LEU:HD23	1.84	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:610:ASN:C	1:A:611:GLU:HG2	2.24	0.60
1:A:120:LEU:N	1:A:120:LEU:CD1	2.54	0.60
1:A:1029:ILE:O	1:A:1032:ALA:CA	2.49	0.60
1:A:139:SER:OG	1:A:191:SER:N	2.35	0.60
1:A:419:ILE:O	1:A:422:LEU:HB2	2.01	0.60
1:A:619:LYS:HE2	1:A:623:GLU:HG3	1.84	0.60
1:A:166:ASN:ND2	1:A:269:HIS:HA	2.15	0.60
1:A:857:ASN:O	1:A:861:THR:CG2	2.48	0.60
1:A:743:GLN:HG2	1:A:818:GLU:HG3	1.84	0.59
1:A:1126:ILE:HG13	1:A:1126:ILE:O	2.00	0.59
1:A:356:ASP:OD2	1:A:358:SER:OG	2.19	0.59
1:A:797:TYR:HE1	1:A:814:LEU:CD1	2.14	0.59
1:A:827:ASN:HB2	1:A:950:SER:OG	2.00	0.59
1:A:1093:THR:OG1	1:A:1094:GLU:N	2.35	0.59
1:A:805:VAL:HG12	1:A:806:THR:H	1.67	0.59
1:A:876:LYS:NZ	1:A:1060:SER:OG	2.33	0.59
1:A:881:SER:OG	3:A:1238:HOH:O	2.17	0.59
1:A:612:GLN:CA	1:A:613:GLU:CB	2.42	0.59
1:A:763:LYS:HG2	1:A:764:THR:N	2.15	0.59
1:A:769:ASN:OD1	1:A:770:LYS:N	2.33	0.59
1:A:334:ALA:C	1:A:335:VAL:CG2	2.75	0.59
1:A:346:GLY:N	1:A:577:ALA:O	2.34	0.59
1:A:490:LEU:HD22	1:A:569:VAL:CG1	2.32	0.59
1:A:560:ASN:ND2	1:A:560:ASN:N	2.42	0.59
1:A:612:GLN:HG2	1:A:612:GLN:O	2.03	0.59
1:A:542:LEU:HA	1:A:545:PHE:CD1	2.36	0.59
1:A:995:VAL:HG22	1:A:1165:LYS:HB3	1.85	0.59
1:A:193:PHE:C	1:A:194:GLN:CG	2.75	0.59
1:A:680:ASN:HD21	1:A:683:MET:HB2	1.68	0.59
1:A:934:THR:CG2	1:A:1118:SER:OG	2.50	0.59
1:A:619:LYS:CG	1:A:623:GLU:HG2	2.33	0.59
1:A:156:LEU:HD12	1:A:177:ASN:HB2	1.85	0.59
1:A:596:ASN:OD1	1:A:596:ASN:N	2.30	0.59
1:A:612:GLN:CB	1:A:615:GLU:N	2.66	0.59
1:A:953:ASN:HD22	1:A:953:ASN:H	1.49	0.59
1:A:746:PHE:CE1	1:A:924:PHE:CD1	2.90	0.59
1:A:805:VAL:HG12	1:A:806:THR:N	2.18	0.59
1:A:445:ILE:HB	1:A:461:GLY:CA	2.31	0.58
1:A:543:LEU:HD23	1:A:544:ILE:CG2	2.32	0.58
1:A:643:ILE:O	1:A:644:SER:C	2.45	0.58
1:A:107:LEU:HD13	1:A:1113:ARG:CZ	2.32	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:197:VAL:O	1:A:197:VAL:HG22	1.98	0.58
1:A:1160:VAL:O	1:A:1160:VAL:HG23	2.02	0.58
1:A:425:HIS:C	1:A:429:SER:HG	2.03	0.58
1:A:657:VAL:CG2	1:A:658:ASN:N	2.66	0.58
1:A:191:SER:O	1:A:195:PRO:HG3	2.03	0.58
1:A:504:GLU:O	1:A:508:ASN:HB2	2.03	0.58
1:A:1086:ARG:NH2	1:A:1154:ASP:OD1	2.37	0.58
1:A:113:PHE:CD1	1:A:115:PHE:HE2	2.22	0.58
1:A:132:GLU:HG2	1:A:133:HIS:N	2.17	0.58
1:A:753:VAL:HG22	1:A:980:TRP:HB2	1.86	0.58
1:A:892:TYR:O	1:A:895:TYR:N	2.37	0.58
1:A:1003:PRO:O	1:A:1003:PRO:HG2	2.03	0.58
1:A:113:PHE:CE2	1:A:173:ALA:HB3	2.38	0.58
1:A:258:GLU:O	1:A:262:TYR:CD2	2.57	0.58
1:A:611:GLU:C	1:A:613:GLU:HB2	2.28	0.58
1:A:613:GLU:O	1:A:617:VAL:HG23	2.03	0.58
1:A:1111:PRO:C	1:A:1112:ARG:HG3	2.29	0.58
1:A:232:TYR:O	1:A:233:LYS:HG3	2.04	0.58
1:A:557:LYS:CB	1:A:564:TYR:CE2	2.79	0.58
1:A:746:PHE:CE2	1:A:929:LEU:HD13	2.38	0.58
1:A:759:LEU:O	1:A:763:LYS:HB3	2.04	0.58
1:A:872:MET:HE3	1:A:1064:LEU:HD23	1.86	0.57
1:A:1171:THR:OG1	1:A:1172:THR:N	2.36	0.57
1:A:316:ASN:O	1:A:320:GLN:CG	2.52	0.57
1:A:562:PRO:C	1:A:564:TYR:N	2.54	0.57
1:A:675:ASN:H	1:A:675:ASN:ND2	2.02	0.57
1:A:372:ASN:HB3	1:A:406:SER:HA	1.85	0.57
1:A:619:LYS:HG2	1:A:623:GLU:CG	2.35	0.57
1:A:645:ILE:HA	1:A:648:LEU:HD12	1.86	0.57
1:A:935:SER:OG	1:A:939:ALA:HB3	2.04	0.57
1:A:544:ILE:O	1:A:544:ILE:CG1	2.44	0.57
1:A:283:LEU:HD12	1:A:284:THR:H	1.68	0.57
1:A:769:ASN:O	1:A:771:THR:HG23	2.03	0.57
1:A:613:GLU:O	1:A:617:VAL:CG2	2.53	0.57
1:A:1029:ILE:HA	1:A:1032:ALA:HB3	1.86	0.57
1:A:612:GLN:O	1:A:616:GLN:HB3	1.98	0.56
1:A:113:PHE:CE1	1:A:115:PHE:CE2	2.87	0.56
1:A:572:HIS:C	1:A:573:PHE:HD1	2.13	0.56
1:A:612:GLN:HB2	1:A:615:GLU:C	2.17	0.56
1:A:60:TRP:CE3	1:A:60:TRP:C	2.83	0.56
1:A:522:SER:O	1:A:525:ILE:HD11	1.96	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:597:LEU:HA	1:A:600:GLN:HB2	1.87	0.56
1:A:659:VAL:HB	1:A:687:ASN:HB3	1.86	0.56
1:A:902:LEU:HD12	1:A:902:LEU:C	2.27	0.56
1:A:1115:ILE:HG13	1:A:1119:LYS:HG3	1.87	0.56
1:A:113:PHE:CD1	1:A:115:PHE:CE2	2.94	0.56
1:A:334:ALA:O	1:A:335:VAL:HG22	2.05	0.56
1:A:1093:THR:O	1:A:1097:LEU:N	2.34	0.56
1:A:801:ASP:O	1:A:802:HIS:HB2	2.05	0.56
1:A:834:LEU:HB2	1:A:954:LEU:HD13	1.87	0.56
1:A:91:HIS:HD2	1:A:322:LEU:CD1	2.19	0.56
1:A:255:LEU:O	1:A:256:TYR:C	2.48	0.56
1:A:408:GLU:N	1:A:408:GLU:CD	2.63	0.56
1:A:618:ILE:N	1:A:618:ILE:HD12	2.20	0.56
1:A:1055:ILE:HG13	1:A:1056:GLU:N	2.19	0.56
1:A:349:TYR:C	1:A:350:ILE:CD1	2.63	0.56
1:A:858:GLY:CA	1:A:861:THR:CG2	2.58	0.56
1:A:469:ASN:C	1:A:471:LYS:N	2.58	0.56
1:A:797:TYR:CE1	1:A:814:LEU:CD1	2.88	0.56
1:A:1049:TYR:HB3	1:A:1067:ARG:HB2	1.88	0.56
1:A:681:GLU:HA	1:A:684:LEU:HD12	1.88	0.56
1:A:948:ASN:OD1	1:A:948:ASN:N	2.30	0.56
1:A:1180:ILE:HA	1:A:1184:ASP:O	2.05	0.56
1:A:425:HIS:N	1:A:429:SER:OG	2.39	0.55
1:A:542:LEU:HA	1:A:545:PHE:HD1	1.71	0.55
1:A:564:TYR:CD1	1:A:564:TYR:O	2.59	0.55
1:A:696:VAL:C	1:A:698:LYS:H	2.14	0.55
1:A:232:TYR:O	1:A:233:LYS:CG	2.54	0.55
1:A:612:GLN:HB2	1:A:615:GLU:N	2.21	0.55
1:A:286:GLU:H	1:A:286:GLU:CD	2.07	0.55
1:A:428:GLU:C	1:A:429:SER:O	2.41	0.55
1:A:471:LYS:O	1:A:472:ILE:C	2.47	0.55
1:A:624:LEU:O	1:A:627:TYR:CA	2.54	0.55
1:A:688:MET:C	1:A:690:VAL:H	2.15	0.55
1:A:1113:ARG:H	1:A:1116:GLU:HG3	1.70	0.55
1:A:589:ASN:C	1:A:591:ALA:N	2.59	0.55
1:A:151:LEU:HA	1:A:155:THR:CG2	2.37	0.55
1:A:407:LEU:HD21	1:A:572:HIS:CE1	2.41	0.55
1:A:875:VAL:HG12	1:A:876:LYS:N	2.22	0.55
1:A:252:LEU:N	1:A:252:LEU:CD1	2.65	0.55
1:A:645:ILE:CA	1:A:648:LEU:HD12	2.37	0.55
1:A:889:ILE:O	1:A:894:ASN:OD1	2.25	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:601:GLU:O	1:A:602:LEU:C	2.46	0.55
1:A:1023:ASP:OD1	1:A:1024:PRO:HD2	2.07	0.55
1:A:267:ASN:O	1:A:270:SER:OG	2.22	0.55
1:A:573:PHE:CD1	1:A:573:PHE:N	2.72	0.55
1:A:604:LYS:O	1:A:607:GLU:HG2	2.06	0.55
1:A:542:LEU:N	1:A:542:LEU:HD22	2.20	0.55
1:A:1072:GLU:OE2	1:A:1179:TYR:CD1	2.60	0.55
1:A:876:LYS:CE	1:A:1060:SER:OG	2.54	0.54
1:A:151:LEU:HA	1:A:155:THR:HG21	1.89	0.54
1:A:619:LYS:HE2	1:A:623:GLU:CD	2.32	0.54
1:A:790:MET:HG3	1:A:819:MET:HG2	1.88	0.54
1:A:1098:LEU:O	1:A:1099:ARG:C	2.46	0.54
1:A:347:PRO:C	1:A:348:PHE:HD1	2.14	0.54
1:A:348:PHE:N	1:A:348:PHE:HD1	2.01	0.54
1:A:645:ILE:O	1:A:646:SER:C	2.47	0.54
1:A:657:VAL:HG22	1:A:658:ASN:N	2.22	0.54
1:A:71:TYR:HE1	1:A:319:ASP:HB2	1.73	0.54
1:A:207:GLU:O	1:A:240:VAL:HG23	2.08	0.54
1:A:690:VAL:O	1:A:691:PHE:C	2.44	0.54
1:A:860:LYS:HG2	1:A:861:THR:N	2.22	0.54
1:A:154:GLY:CA	1:A:1099:ARG:O	2.55	0.54
1:A:1011:MET:HE2	1:A:1163:PHE:HB3	1.89	0.54
1:A:1028:VAL:O	1:A:1032:ALA:CB	2.55	0.54
1:A:498:PHE:C	1:A:499:ASN:O	2.39	0.54
1:A:572:HIS:C	1:A:573:PHE:CD1	2.86	0.54
1:A:748:LEU:HD21	1:A:923:ILE:HD13	1.90	0.54
1:A:1023:ASP:OD1	1:A:1024:PRO:CD	2.55	0.54
1:A:490:LEU:HD22	1:A:569:VAL:HG11	1.90	0.54
1:A:593:GLU:C	1:A:594:GLN:OE1	2.51	0.54
1:A:446:ASP:CG	1:A:446:ASP:O	2.45	0.54
1:A:645:ILE:CB	1:A:648:LEU:HD12	2.37	0.54
1:A:688:MET:O	1:A:688:MET:HG3	2.08	0.54
1:A:1101:ILE:HD11	1:A:1141:ILE:O	2.06	0.54
1:A:139:SER:O	1:A:196:ASN:OD1	2.26	0.54
1:A:582:ILE:HG22	1:A:582:ILE:O	1.99	0.54
1:A:723:TYR:C	1:A:726:ASN:ND2	2.65	0.54
1:A:1038:LEU:HB3	1:A:1051:VAL:HG21	1.89	0.54
1:A:231:ASP:O	1:A:232:TYR:C	2.51	0.53
1:A:589:ASN:O	1:A:590:TYR:C	2.47	0.53
1:A:688:MET:C	1:A:690:VAL:N	2.59	0.53
1:A:837:VAL:CG1	1:A:957:TYR:CE2	2.90	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:114:ALA:HA	1:A:171:TYR:O	2.09	0.53
1:A:769:ASN:O	1:A:771:THR:CG2	2.55	0.53
1:A:61:ILE:O	1:A:61:ILE:HG13	2.08	0.53
1:A:862:THR:HG23	1:A:865:GLU:HB2	1.89	0.53
1:A:60:TRP:CE3	1:A:61:ILE:HA	2.44	0.53
1:A:268:VAL:HG23	1:A:268:VAL:O	2.09	0.53
1:A:806:THR:C	1:A:807:ASP:O	2.42	0.53
1:A:1034:LYS:HD3	1:A:1053:ALA:N	2.22	0.53
1:A:107:LEU:HD13	1:A:1113:ARG:NH1	2.23	0.53
1:A:624:LEU:CD2	1:A:625:SER:CA	2.86	0.53
1:A:940:LEU:O	1:A:941:LYS:C	2.52	0.53
1:A:96:THR:O	1:A:96:THR:HG22	2.04	0.53
1:A:167:ASP:OD1	1:A:167:ASP:N	2.30	0.53
1:A:549:LYS:O	1:A:553:ILE:HG13	2.08	0.53
1:A:624:LEU:O	1:A:627:TYR:CB	2.56	0.53
1:A:857:ASN:O	1:A:861:THR:HG22	2.08	0.53
1:A:885:ALA:O	1:A:889:ILE:HG12	2.08	0.53
1:A:1179:TYR:CD1	1:A:1183:VAL:HB	2.44	0.53
1:A:682:HIS:O	1:A:686:ASP:N	2.39	0.53
1:A:887:ASN:O	1:A:891:GLY:CA	2.56	0.53
1:A:1029:ILE:C	1:A:1032:ALA:HB3	2.32	0.53
1:A:624:LEU:HD21	1:A:628:LYS:HD2	1.91	0.53
1:A:154:GLY:HA3	1:A:1099:ARG:O	2.09	0.53
1:A:255:LEU:HD13	1:A:584:LEU:HD12	1.91	0.53
1:A:356:ASP:CG	1:A:358:SER:OG	2.52	0.53
1:A:847:LYS:O	1:A:848:VAL:C	2.50	0.53
1:A:871:LEU:O	1:A:874:TYR:N	2.38	0.53
1:A:872:MET:HE1	1:A:1052:PHE:CD1	2.44	0.53
1:A:82:PHE:CE1	1:A:545:PHE:CD2	2.97	0.52
1:A:407:LEU:HD12	1:A:416:LEU:HD11	1.91	0.52
1:A:746:PHE:CE1	1:A:924:PHE:HD1	2.27	0.52
1:A:750:HIS:O	1:A:922:LYS:NZ	2.41	0.52
1:A:1024:PRO:C	1:A:1141:ILE:HD13	2.33	0.52
1:A:183:ASN:HD21	1:A:643:ILE:HG22	1.74	0.52
1:A:264:PHE:HB3	1:A:267:ASN:OD1	2.09	0.52
1:A:562:PRO:O	1:A:563:MET:C	2.52	0.52
1:A:612:GLN:CB	1:A:616:GLN:CA	2.81	0.52
1:A:739:ILE:CG2	1:A:740:VAL:N	2.73	0.52
1:A:807:ASP:OD2	1:A:808:LYS:N	2.43	0.52
1:A:1115:ILE:HA	1:A:1118:SER:HB2	1.91	0.52
1:A:525:ILE:N	1:A:525:ILE:CD1	2.30	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:748:LEU:CD2	1:A:923:ILE:HG23	2.36	0.52
1:A:827:ASN:OD1	1:A:828:ASP:N	2.42	0.52
1:A:653:LEU:HD12	1:A:654:GLU:O	2.06	0.52
1:A:561:GLU:O	1:A:564:TYR:CB	2.58	0.52
1:A:612:GLN:HG3	1:A:615:GLU:C	2.35	0.52
1:A:686:ASP:O	1:A:690:VAL:CG2	2.52	0.52
1:A:746:PHE:CE1	1:A:924:PHE:CE1	2.98	0.52
1:A:152:GLU:O	1:A:152:GLU:HG3	2.08	0.52
1:A:365:VAL:HG21	1:A:482:VAL:HG21	1.92	0.52
1:A:573:PHE:HD1	1:A:573:PHE:N	2.07	0.52
1:A:282:ASN:N	1:A:282:ASN:HD22	2.08	0.52
1:A:428:GLU:O	1:A:429:SER:O	2.28	0.52
1:A:597:LEU:O	1:A:598:GLU:C	2.51	0.52
1:A:984:ILE:HG23	1:A:989:LEU:CD1	2.36	0.52
1:A:1036:SER:O	1:A:1040:ASP:CB	2.56	0.52
1:A:419:ILE:HG22	1:A:420:ASN:CA	2.39	0.52
1:A:801:ASP:O	1:A:802:HIS:C	2.52	0.52
1:A:333:ASP:O	1:A:335:VAL:CG2	2.58	0.51
1:A:71:TYR:CE1	1:A:319:ASP:HB2	2.45	0.51
1:A:81:GLU:OE2	1:A:548:GLU:N	2.42	0.51
1:A:139:SER:OG	1:A:191:SER:CA	2.57	0.51
1:A:801:ASP:C	1:A:802:HIS:O	2.43	0.51
1:A:874:TYR:HD2	1:A:875:VAL:N	2.08	0.51
1:A:300:LYS:HE2	1:A:334:ALA:O	2.11	0.51
1:A:412:ASP:O	1:A:413:TYR:C	2.52	0.51
1:A:683:MET:O	1:A:687:ASN:HB2	2.10	0.51
1:A:870:ILE:O	1:A:871:LEU:C	2.53	0.51
1:A:897:LYS:HE2	1:A:900:GLU:OE1	2.11	0.51
1:A:232:TYR:O	1:A:233:LYS:CD	2.58	0.51
1:A:897:LYS:O	1:A:901:GLN:HG3	2.09	0.51
1:A:918:ARG:O	1:A:918:ARG:HG3	2.08	0.51
1:A:367:VAL:HA	1:A:580:SER:O	2.11	0.51
1:A:435:LEU:HD13	1:A:461:GLY:O	2.10	0.51
1:A:522:SER:C	1:A:525:ILE:CD1	2.76	0.51
1:A:1093:THR:O	1:A:1094:GLU:C	2.52	0.51
1:A:91:HIS:HB3	1:A:95:LYS:H	1.76	0.51
1:A:637:LEU:C	1:A:639:LYS:H	2.17	0.51
1:A:806:THR:OG1	1:A:1058:ASP:HA	2.11	0.51
1:A:847:LYS:O	1:A:850:ASP:HB2	2.10	0.51
1:A:995:VAL:HG22	1:A:1165:LYS:HA	1.92	0.51
1:A:596:ASN:O	1:A:597:LEU:C	2.50	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:663:ASN:OD1	1:A:663:ASN:O	2.29	0.51
1:A:689:ASP:O	1:A:693:LYS:CG	2.57	0.50
1:A:897:LYS:O	1:A:898:LEU:C	2.53	0.50
1:A:119:THR:H	1:A:168:ARG:HA	1.75	0.50
1:A:146:ASN:OD1	1:A:148:ILE:HG22	2.11	0.50
1:A:543:LEU:C	1:A:545:PHE:N	2.68	0.50
1:A:562:PRO:O	1:A:564:TYR:N	2.44	0.50
1:A:1036:SER:O	1:A:1040:ASP:N	2.33	0.50
1:A:190:ASP:O	1:A:190:ASP:OD1	2.29	0.50
1:A:760:ASN:O	1:A:760:ASN:OD1	2.30	0.50
1:A:806:THR:O	1:A:807:ASP:O	2.29	0.50
1:A:955:VAL:O	1:A:955:VAL:CG1	2.47	0.50
1:A:1037:TYR:O	1:A:1038:LEU:O	2.29	0.50
1:A:1006:VAL:O	1:A:1006:VAL:HG23	2.10	0.50
1:A:80:GLU:OE2	1:A:80:GLU:O	2.30	0.50
1:A:372:ASN:CB	1:A:406:SER:HA	2.41	0.50
1:A:503:VAL:HG12	1:A:504:GLU:N	2.23	0.50
1:A:564:TYR:O	1:A:564:TYR:HD1	1.95	0.50
1:A:810:ASN:OD1	1:A:810:ASN:O	2.29	0.50
1:A:857:ASN:O	1:A:857:ASN:OD1	2.29	0.50
1:A:1180:ILE:CA	1:A:1184:ASP:O	2.60	0.50
1:A:1184:ASP:OD1	1:A:1186:GLU:N	2.41	0.50
1:A:860:LYS:HG2	1:A:861:THR:H	1.77	0.50
1:A:85:THR:O	1:A:85:THR:OG1	2.29	0.50
1:A:261:LYS:O	1:A:265:PRO:HB3	2.12	0.50
1:A:1029:ILE:CA	1:A:1032:ALA:HB3	2.41	0.50
1:A:127:ILE:N	1:A:128:PRO:HD2	2.27	0.50
1:A:240:VAL:O	1:A:243:GLU:N	2.45	0.50
1:A:509:ASN:O	1:A:510:ILE:C	2.47	0.50
1:A:612:GLN:CG	1:A:616:GLN:N	2.71	0.50
1:A:894:ASN:ND2	1:A:894:ASN:C	2.63	0.50
1:A:332:ASP:OD1	1:A:334:ALA:CA	2.58	0.49
1:A:858:GLY:O	1:A:862:THR:HB	2.12	0.49
1:A:894:ASN:C	1:A:894:ASN:HD22	2.02	0.49
1:A:452:SER:O	1:A:453:LEU:HD23	2.11	0.49
1:A:570:GLU:HA	1:A:574:ILE:CD1	2.41	0.49
1:A:807:ASP:HA	1:A:1018:PRO:HG3	1.94	0.49
1:A:166:ASN:OD1	1:A:166:ASN:O	2.29	0.49
1:A:250:SER:OG	1:A:253:GLU:HB2	2.12	0.49
1:A:347:PRO:CG	1:A:579:ARG:NH2	2.75	0.49
1:A:484:ASP:O	1:A:485:VAL:C	2.52	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:589:ASN:O	1:A:591:ALA:N	2.45	0.49
1:A:437:ASP:N	1:A:437:ASP:OD1	2.39	0.49
1:A:446:ASP:O	1:A:446:ASP:OD1	2.30	0.49
1:A:571:LYS:HG2	1:A:572:HIS:N	2.25	0.49
1:A:614:LYS:CD	1:A:618:ILE:HD11	2.41	0.49
1:A:284:THR:HB	1:A:287:GLU:HB3	1.94	0.49
1:A:1039:TRP:O	1:A:1039:TRP:CG	2.62	0.49
1:A:467:ARG:O	1:A:467:ARG:CG	2.60	0.49
1:A:672:GLU:OE2	1:A:672:GLU:O	2.29	0.49
1:A:781:ILE:O	1:A:781:ILE:HG23	2.13	0.49
1:A:319:ASP:OD1	1:A:319:ASP:O	2.29	0.49
1:A:624:LEU:HD23	1:A:624:LEU:O	2.00	0.49
1:A:816:ASN:OD1	1:A:816:ASN:O	2.30	0.49
1:A:213:VAL:HG22	1:A:621:PHE:CD2	2.47	0.49
1:A:373:PRO:O	1:A:373:PRO:CD	2.58	0.49
1:A:426:THR:O	1:A:429:SER:OG	2.31	0.49
1:A:528:VAL:O	1:A:529:PHE:C	2.55	0.49
1:A:609:PHE:O	1:A:610:ASN:O	2.30	0.49
1:A:423:LEU:O	1:A:431:LEU:HB2	2.12	0.49
1:A:587:ASP:OD1	1:A:587:ASP:O	2.30	0.49
1:A:748:LEU:HD13	1:A:759:LEU:HD11	1.95	0.49
1:A:79:ASN:OD1	1:A:79:ASN:O	2.30	0.48
1:A:1138:ARG:O	1:A:1138:ARG:HG3	2.13	0.48
1:A:264:PHE:N	1:A:265:PRO:HD3	2.28	0.48
1:A:307:SER:CB	1:A:309:ASN:H	2.23	0.48
1:A:330:TYR:CD2	1:A:330:TYR:N	2.80	0.48
1:A:603:LYS:HD3	1:A:603:LYS:H	1.74	0.48
1:A:156:LEU:N	1:A:180:ASP:OD2	2.44	0.48
1:A:542:LEU:O	1:A:543:LEU:C	2.54	0.48
1:A:612:GLN:HG3	1:A:616:GLN:HA	1.95	0.48
1:A:616:GLN:OE1	1:A:616:GLN:O	2.30	0.48
1:A:757:ALA:C	1:A:759:LEU:H	2.21	0.48
1:A:927:LYS:HE2	1:A:927:LYS:HB2	1.63	0.48
1:A:1184:ASP:OD1	1:A:1186:GLU:CG	2.61	0.48
1:A:254:ASP:OD1	1:A:254:ASP:O	2.30	0.48
1:A:446:ASP:OD1	1:A:446:ASP:C	2.55	0.48
1:A:503:VAL:O	1:A:507:ILE:HG13	2.13	0.48
1:A:113:PHE:CD1	1:A:113:PHE:C	2.92	0.48
1:A:370:LEU:HB2	1:A:578:HIS:CD2	2.48	0.48
1:A:915:ILE:HG22	1:A:916:LEU:N	2.14	0.48
1:A:1029:ILE:HD12	1:A:1029:ILE:N	2.28	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1087:LYS:O	1:A:1091:THR:HG23	2.14	0.48
1:A:477:LYS:O	1:A:481:GLU:HG3	2.13	0.48
1:A:815:PHE:CD1	1:A:815:PHE:C	2.91	0.48
1:A:263:MET:SD	1:A:457:ILE:CG2	3.01	0.48
1:A:662:THR:OG1	1:A:667:ASN:ND2	2.46	0.48
1:A:742:LEU:HD22	1:A:943:LEU:HD11	1.95	0.48
1:A:82:PHE:HE1	1:A:545:PHE:CD2	2.32	0.48
1:A:612:GLN:N	1:A:612:GLN:OE1	2.46	0.48
1:A:925:ASN:OD1	1:A:965:ILE:HD13	2.11	0.48
1:A:139:SER:HG	1:A:190:ASP:C	2.18	0.48
1:A:183:ASN:ND2	1:A:643:ILE:HG22	2.29	0.48
1:A:428:GLU:O	1:A:429:SER:C	2.51	0.48
1:A:1034:LYS:HB2	1:A:1053:ALA:HB3	1.95	0.48
1:A:133:HIS:CE1	1:A:1043:ARG:HH22	2.32	0.48
1:A:612:GLN:HB3	1:A:615:GLU:N	2.27	0.48
1:A:1101:ILE:HD11	1:A:1144:THR:HB	1.96	0.48
1:A:1107:THR:OG1	1:A:1108:ILE:N	2.46	0.48
1:A:660:TYR:HB3	1:A:729:ILE:HB	1.96	0.47
1:A:332:ASP:CG	1:A:334:ALA:HB2	2.33	0.47
1:A:560:ASN:HD22	1:A:560:ASN:N	2.01	0.47
1:A:892:TYR:C	1:A:894:ASN:N	2.66	0.47
1:A:521:THR:O	1:A:522:SER:CB	2.56	0.47
1:A:166:ASN:HA	1:A:273:SER:OG	2.13	0.47
1:A:180:ASP:O	1:A:182:PHE:N	2.47	0.47
1:A:934:THR:CB	1:A:1118:SER:OG	2.60	0.47
1:A:1060:SER:OG	1:A:1060:SER:O	2.29	0.47
1:A:138:GLY:HA2	1:A:147:SER:HG	1.75	0.47
1:A:601:GLU:O	1:A:601:GLU:HG3	2.13	0.47
1:A:652:THR:O	1:A:653:LEU:C	2.54	0.47
1:A:661:PHE:CD2	1:A:723:TYR:CE1	3.02	0.47
1:A:120:LEU:HD12	1:A:120:LEU:H	1.72	0.47
1:A:995:VAL:O	1:A:995:VAL:HG12	2.08	0.47
1:A:126:GLY:O	1:A:130:ILE:HG13	2.15	0.47
1:A:154:GLY:C	1:A:155:THR:CG2	2.87	0.47
1:A:267:ASN:OD1	1:A:267:ASN:C	2.54	0.47
1:A:285:TYR:CZ	1:A:289:LYS:HE2	2.49	0.47
1:A:529:PHE:O	1:A:533:SER:HB3	2.14	0.47
1:A:648:LEU:C	1:A:649:ASN:O	2.51	0.47
1:A:953:ASN:HD22	1:A:953:ASN:N	2.13	0.47
1:A:1007:ASN:HB3	1:A:1170:ILE:O	2.15	0.47
1:A:82:PHE:O	1:A:83:LYS:C	2.58	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:534:LYS:HG3	1:A:540:ASP:O	2.15	0.47
1:A:610:ASN:N	1:A:613:GLU:HG2	2.29	0.47
1:A:666:GLU:CG	1:A:666:GLU:O	2.62	0.47
1:A:992:GLU:H	1:A:992:GLU:HG2	1.38	0.47
1:A:82:PHE:CE1	1:A:545:PHE:HD2	2.33	0.47
1:A:121:THR:CG2	1:A:128:PRO:HG2	2.45	0.47
1:A:178:ASN:O	1:A:179:LYS:C	2.51	0.47
1:A:318:VAL:HG12	1:A:319:ASP:N	2.29	0.47
1:A:910:LYS:O	1:A:911:THR:C	2.54	0.47
1:A:613:GLU:N	1:A:616:GLN:HG2	2.30	0.47
1:A:805:VAL:HG21	1:A:1016:PHE:HB3	1.97	0.47
1:A:937:TYR:C	1:A:937:TYR:CD2	2.92	0.47
1:A:1011:MET:CE	1:A:1163:PHE:HB3	2.45	0.47
1:A:1063:PHE:HE2	1:A:1163:PHE:CE1	2.33	0.47
1:A:264:PHE:HA	1:A:341:GLN:OE1	2.14	0.46
1:A:616:GLN:CA	1:A:616:GLN:OE1	2.56	0.46
1:A:618:ILE:CD1	1:A:618:ILE:N	2.77	0.46
1:A:619:LYS:CE	1:A:623:GLU:CG	2.92	0.46
1:A:1007:ASN:OD1	1:A:1007:ASN:N	2.48	0.46
1:A:144:TYR:HB3	1:A:632:GLU:OE1	2.15	0.46
1:A:416:LEU:O	1:A:420:ASN:CB	2.64	0.46
1:A:573:PHE:O	1:A:574:ILE:C	2.55	0.46
1:A:612:GLN:CG	1:A:615:GLU:HB3	2.45	0.46
1:A:783:ARG:O	1:A:783:ARG:CG	2.58	0.46
1:A:929:LEU:C	1:A:930:MET:CG	2.88	0.46
1:A:128:PRO:HG3	1:A:291:PHE:CZ	2.50	0.46
1:A:369:TRP:CE2	1:A:579:ARG:HD3	2.50	0.46
1:A:469:ASN:C	1:A:471:LYS:H	2.21	0.46
1:A:644:SER:HB2	1:A:646:SER:OG	2.15	0.46
1:A:724:GLU:N	1:A:726:ASN:HD22	2.13	0.46
1:A:783:ARG:O	1:A:783:ARG:HG3	2.15	0.46
1:A:154:GLY:HA3	1:A:1099:ARG:CA	2.45	0.46
1:A:635:GLU:H	1:A:635:GLU:HG2	1.41	0.46
1:A:350:ILE:CD1	1:A:350:ILE:H	2.24	0.46
1:A:428:GLU:HA	1:A:433:LYS:HB2	1.98	0.46
1:A:805:VAL:HG22	1:A:1022:LEU:HD12	1.97	0.46
1:A:807:ASP:OD2	1:A:810:ASN:N	2.48	0.46
1:A:812:GLN:NE2	1:A:812:GLN:CA	2.74	0.46
1:A:105:ASP:OD2	1:A:107:LEU:HD12	2.14	0.46
1:A:358:SER:HB2	1:A:360:GLU:O	2.15	0.46
1:A:447:ARG:HD3	1:A:447:ARG:C	2.41	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:495:LYS:O	1:A:495:LYS:HG3	2.08	0.46
1:A:607:GLU:C	1:A:609:PHE:H	2.23	0.46
1:A:624:LEU:HD23	1:A:625:SER:HA	1.97	0.46
1:A:661:PHE:CE1	1:A:728:PRO:HB3	2.51	0.46
1:A:741:TYR:HD2	1:A:820:HIS:CD2	2.33	0.46
1:A:801:ASP:OD2	1:A:804:ASN:HB2	2.16	0.46
1:A:872:MET:HB3	1:A:1064:LEU:HD23	1.98	0.46
1:A:895:TYR:C	1:A:895:TYR:CD1	2.89	0.46
1:A:1137:PHE:CE2	1:A:1141:ILE:HG13	2.51	0.46
1:A:82:PHE:CD1	1:A:545:PHE:HD2	2.33	0.46
1:A:135:VAL:HG22	1:A:136:LEU:N	2.30	0.46
1:A:264:PHE:CE2	1:A:457:ILE:HD11	2.51	0.46
1:A:691:PHE:O	1:A:695:TYR:HB2	2.15	0.46
1:A:955:VAL:O	1:A:955:VAL:HG13	2.13	0.46
1:A:1016:PHE:HZ	1:A:1026:PHE:CE2	2.33	0.46
1:A:1034:LYS:HA	1:A:1038:LEU:HB2	1.97	0.46
1:A:332:ASP:C	1:A:334:ALA:H	2.23	0.46
1:A:419:ILE:HG22	1:A:420:ASN:H	1.69	0.46
1:A:694:LYS:HB3	1:A:695:TYR:CD1	2.50	0.46
1:A:761:LEU:O	1:A:765:LEU:N	2.46	0.46
1:A:1029:ILE:HG22	1:A:1030:VAL:N	2.25	0.46
1:A:1051:VAL:HG22	1:A:1052:PHE:N	2.30	0.46
1:A:447:ARG:HD3	1:A:447:ARG:O	2.16	0.46
1:A:473:LYS:HB2	1:A:481:GLU:OE2	2.15	0.46
1:A:680:ASN:O	1:A:684:LEU:HD12	2.16	0.46
1:A:1092:MET:HB3	1:A:1092:MET:HE3	1.40	0.46
1:A:1104:THR:C	1:A:1107:THR:HG1	2.08	0.46
1:A:305:PHE:CZ	1:A:307:SER:HB3	2.50	0.46
1:A:561:GLU:O	1:A:564:TYR:HB3	2.15	0.46
1:A:589:ASN:C	1:A:591:ALA:H	2.23	0.46
1:A:590:TYR:O	1:A:594:GLN:HB2	2.16	0.46
1:A:763:LYS:HE2	1:A:792:ALA:O	2.16	0.46
1:A:644:SER:O	1:A:647:ASP:HB2	2.17	0.45
1:A:115:PHE:HE1	1:A:189:MET:HG3	1.81	0.45
1:A:135:VAL:HG22	1:A:136:LEU:H	1.81	0.45
1:A:156:LEU:HB2	1:A:180:ASP:OD2	2.16	0.45
1:A:161:ASN:HD22	1:A:162:ALA:N	2.05	0.45
1:A:671:MET:HG3	1:A:675:ASN:ND2	2.31	0.45
1:A:66:PRO:HD2	1:A:311:PRO:HG2	1.98	0.45
1:A:180:ASP:C	1:A:182:PHE:N	2.66	0.45
1:A:622:GLU:O	1:A:626:LYS:HG2	2.17	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:105:ASP:OD2	1:A:1113:ARG:NH1	2.38	0.45
1:A:454:VAL:O	1:A:454:VAL:HG22	2.15	0.45
1:A:607:GLU:HG3	1:A:608:ASN:N	2.32	0.45
1:A:613:GLU:N	1:A:616:GLN:CG	2.80	0.45
1:A:696:VAL:O	1:A:698:LYS:N	2.49	0.45
1:A:909:PHE:CD1	1:A:912:LEU:HD23	2.51	0.45
1:A:409:ASN:O	1:A:410:PRO:C	2.55	0.45
1:A:413:TYR:CE2	1:A:417:LEU:HD11	2.51	0.45
1:A:418:ILE:HG22	1:A:419:ILE:N	2.21	0.45
1:A:542:LEU:O	1:A:545:PHE:N	2.49	0.45
1:A:664:ILE:HG23	1:A:664:ILE:HD13	1.56	0.45
1:A:858:GLY:O	1:A:861:THR:CG2	2.64	0.45
1:A:325:LEU:HD23	1:A:325:LEU:HA	1.48	0.45
1:A:751:LEU:O	1:A:980:TRP:HB3	2.17	0.45
1:A:263:MET:HE3	1:A:369:TRP:O	2.17	0.45
1:A:357:HIS:O	1:A:358:SER:C	2.59	0.45
1:A:612:GLN:CG	1:A:615:GLU:C	2.90	0.45
1:A:156:LEU:HD12	1:A:177:ASN:CB	2.45	0.45
1:A:465:ILE:H	1:A:465:ILE:HG12	1.45	0.45
1:A:696:VAL:C	1:A:698:LYS:N	2.75	0.45
1:A:187:VAL:HG12	1:A:188:TYR:N	2.28	0.45
1:A:478:VAL:O	1:A:482:VAL:HG23	2.17	0.45
1:A:1055:ILE:C	1:A:1056:GLU:HG3	2.42	0.45
1:A:472:ILE:HG22	1:A:474:ASN:O	2.17	0.44
1:A:535:LEU:HA	1:A:535:LEU:HD23	1.61	0.44
1:A:732:TYR:OH	1:A:1121:SER:CB	2.63	0.44
1:A:997:LYS:HB3	1:A:1187:PHE:CE2	2.52	0.44
1:A:206:THR:HG23	1:A:628:LYS:HZ1	1.77	0.44
1:A:980:TRP:CE3	1:A:981:ASN:HA	2.53	0.44
1:A:1179:TYR:HE2	1:A:1187:PHE:HE1	1.60	0.44
1:A:1010:SER:OG	1:A:1010:SER:O	2.33	0.44
1:A:1121:SER:O	1:A:1122:PHE:C	2.59	0.44
1:A:1162:GLU:O	1:A:1165:LYS:HG3	2.15	0.44
1:A:135:VAL:O	1:A:191:SER:OG	2.35	0.44
1:A:417:LEU:N	1:A:417:LEU:HD23	2.32	0.44
1:A:672:GLU:HA	1:A:675:ASN:ND2	2.32	0.44
1:A:876:LYS:HZ1	1:A:1060:SER:HG	1.63	0.44
1:A:284:THR:CB	1:A:287:GLU:HB3	2.48	0.44
1:A:285:TYR:O	1:A:288:PHE:HB3	2.17	0.44
1:A:369:TRP:HD1	1:A:576:ASN:HB3	1.79	0.44
1:A:736:THR:O	1:A:737:THR:O	2.34	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:892:TYR:O	1:A:894:ASN:N	2.50	0.44
1:A:110:GLU:HG3	1:A:158:THR:HG21	1.99	0.44
1:A:314:LEU:CG	1:A:315:LEU:N	2.80	0.44
1:A:368:ALA:HA	1:A:458:PHE:O	2.18	0.44
1:A:424:ILE:HD11	1:A:460:ILE:CG2	2.48	0.44
1:A:469:ASN:O	1:A:470:GLU:C	2.60	0.44
1:A:532:THR:O	1:A:533:SER:C	2.55	0.44
1:A:562:PRO:C	1:A:564:TYR:H	2.26	0.44
1:A:748:LEU:HD22	1:A:751:LEU:HD22	1.98	0.44
1:A:346:GLY:HA3	1:A:347:PRO:HA	1.79	0.44
1:A:543:LEU:C	1:A:545:PHE:H	2.26	0.44
1:A:611:GLU:HA	1:A:612:GLN:HA	1.79	0.44
1:A:955:VAL:O	1:A:958:PHE:HB2	2.18	0.44
1:A:1132:GLN:H	1:A:1132:GLN:HG2	1.39	0.44
1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HG	1.51	0.44
1:A:103:THR:O	1:A:308:LYS:HA	2.18	0.44
1:A:133:HIS:HE1	1:A:1043:ARG:NH2	2.15	0.44
1:A:264:PHE:N	1:A:265:PRO:CD	2.81	0.44
1:A:269:HIS:NE2	1:A:454:VAL:HG12	2.33	0.44
1:A:478:VAL:CG1	1:A:479:HIS:N	2.77	0.44
1:A:612:GLN:HG3	1:A:616:GLN:N	2.32	0.44
1:A:613:GLU:O	1:A:617:VAL:HB	2.18	0.44
1:A:151:LEU:C	1:A:155:THR:HG23	2.28	0.43
1:A:807:ASP:CG	1:A:809:TYR:H	2.25	0.43
1:A:937:TYR:HD2	1:A:937:TYR:C	2.24	0.43
1:A:234:VAL:HG12	1:A:235:SER:N	2.33	0.43
1:A:435:LEU:HD23	1:A:485:VAL:HG11	2.00	0.43
1:A:882:LYS:O	1:A:882:LYS:HG2	2.18	0.43
1:A:1064:LEU:HD12	1:A:1064:LEU:C	2.28	0.43
1:A:1174:GLU:CD	1:A:1174:GLU:N	2.57	0.43
1:A:189:MET:HE1	1:A:317:PHE:CZ	2.53	0.43
1:A:980:TRP:CD2	1:A:981:ASN:N	2.86	0.43
1:A:190:ASP:C	1:A:190:ASP:OD1	2.59	0.43
1:A:244:MET:HE3	1:A:244:MET:HB3	1.77	0.43
1:A:334:ALA:C	1:A:335:VAL:HG22	2.43	0.43
1:A:554:VAL:C	1:A:556:ASN:N	2.71	0.43
1:A:154:GLY:C	1:A:155:THR:HG23	2.44	0.43
1:A:334:ALA:C	1:A:335:VAL:HG23	2.44	0.43
1:A:357:HIS:C	1:A:358:SER:O	2.52	0.43
1:A:893:GLU:O	1:A:893:GLU:HG3	2.17	0.43
1:A:1083:LYS:HB3	1:A:1083:LYS:HE3	1.32	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1179:TYR:CE2	1:A:1187:PHE:CE1	3.01	0.43
1:A:133:HIS:HE1	1:A:1043:ARG:HH22	1.66	0.43
1:A:436:THR:HG22	1:A:437:ASP:N	2.28	0.43
1:A:956:SER:O	1:A:956:SER:OG	2.30	0.43
1:A:1169:ILE:HG21	1:A:1169:ILE:HD13	1.73	0.43
1:A:1179:TYR:CE1	1:A:1183:VAL:CB	2.97	0.43
1:A:249:SER:O	1:A:251:PRO:HD3	2.18	0.43
1:A:472:ILE:CG2	1:A:478:VAL:HG23	2.49	0.43
1:A:624:LEU:CD2	1:A:625:SER:HA	2.48	0.43
1:A:923:ILE:HG23	1:A:923:ILE:HD13	1.71	0.43
1:A:1042:VAL:O	1:A:1042:VAL:CG1	2.57	0.43
1:A:107:LEU:CD1	1:A:1113:ARG:NH1	2.82	0.43
1:A:366:SER:O	1:A:366:SER:OG	2.30	0.43
1:A:614:LYS:O	1:A:615:GLU:C	2.60	0.43
1:A:683:MET:O	1:A:687:ASN:CB	2.67	0.43
1:A:766:ILE:HD13	1:A:766:ILE:HG21	1.82	0.43
1:A:995:VAL:CG2	1:A:1165:LYS:HB3	2.49	0.43
1:A:1039:TRP:CE2	1:A:1043:ARG:HD2	2.52	0.43
1:A:272:ASN:OD1	1:A:272:ASN:C	2.61	0.43
1:A:454:VAL:O	1:A:539:ARG:NH2	2.52	0.43
1:A:809:TYR:CE1	1:A:990:PHE:CD2	3.07	0.43
1:A:837:VAL:HG12	1:A:838:LYS:CA	2.43	0.43
1:A:64:LYS:C	1:A:66:PRO:HD3	2.43	0.43
1:A:276:ASP:C	1:A:278:LYS:N	2.72	0.43
1:A:437:ASP:C	1:A:439:GLY:N	2.75	0.43
1:A:470:GLU:H	1:A:470:GLU:CD	2.27	0.43
1:A:344:LYS:HD3	3:A:1213:HOH:O	2.18	0.42
1:A:472:ILE:HG23	1:A:478:VAL:HG23	2.00	0.42
1:A:764:THR:O	1:A:764:THR:HG23	2.19	0.42
1:A:832:ILE:HG22	1:A:833:ALA:N	2.20	0.42
1:A:849:ILE:O	1:A:850:ASP:C	2.61	0.42
1:A:875:VAL:O	1:A:875:VAL:HG13	2.14	0.42
1:A:997:LYS:O	1:A:998:GLU:HG3	2.19	0.42
1:A:148:ILE:HG23	1:A:149:GLY:N	2.34	0.42
1:A:365:VAL:HG12	1:A:366:SER:N	2.32	0.42
1:A:596:ASN:O	1:A:599:LYS:N	2.52	0.42
1:A:760:ASN:OD1	1:A:760:ASN:C	2.61	0.42
1:A:801:ASP:O	1:A:802:HIS:O	2.37	0.42
1:A:979:GLY:O	1:A:980:TRP:C	2.61	0.42
1:A:333:ASP:O	1:A:335:VAL:HG23	2.19	0.42
1:A:769:ASN:C	1:A:770:LYS:O	2.55	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1029:ILE:HG23	1:A:1085:LEU:HD11	2.00	0.42
1:A:1093:THR:HG23	1:A:1096:ASP:H	1.84	0.42
1:A:91:HIS:HB3	1:A:95:LYS:N	2.34	0.42
1:A:285:TYR:CE2	1:A:289:LYS:CE	3.01	0.42
1:A:857:ASN:OD1	1:A:857:ASN:C	2.62	0.42
1:A:981:ASN:ND2	1:A:981:ASN:C	2.69	0.42
1:A:1138:ARG:O	1:A:1142:MET:CG	2.67	0.42
1:A:512:PHE:CD2	1:A:512:PHE:O	2.72	0.42
1:A:569:VAL:O	1:A:573:PHE:CB	2.63	0.42
1:A:987:LYS:O	1:A:988:LYS:C	2.62	0.42
1:A:115:PHE:CE1	1:A:189:MET:HG3	2.54	0.42
1:A:321:TYR:O	1:A:324:GLN:HG2	2.19	0.42
1:A:568:PHE:O	1:A:569:VAL:C	2.53	0.42
1:A:672:GLU:OE2	1:A:672:GLU:C	2.62	0.42
1:A:997:LYS:C	1:A:998:GLU:HG3	2.45	0.42
1:A:1016:PHE:HZ	1:A:1026:PHE:HE2	1.67	0.42
1:A:213:VAL:O	1:A:214:GLU:CB	2.52	0.42
1:A:936:ASP:OD1	1:A:936:ASP:N	2.30	0.42
1:A:1049:TYR:HB3	1:A:1067:ARG:CB	2.50	0.42
1:A:162:ALA:HB1	1:A:171:TYR:HD2	1.85	0.42
1:A:312:THR:CG2	1:A:313:GLU:N	2.58	0.42
1:A:365:VAL:O	1:A:461:GLY:HA2	2.19	0.42
1:A:875:VAL:HG23	1:A:1168:VAL:HB	2.01	0.42
1:A:917:VAL:O	1:A:918:ARG:C	2.62	0.42
1:A:1137:PHE:O	1:A:1141:ILE:HG12	2.20	0.42
1:A:1146:LYS:O	1:A:1149:PHE:HB2	2.20	0.42
1:A:456:TYR:N	1:A:456:TYR:CD2	2.86	0.42
1:A:653:LEU:HD12	1:A:654:GLU:C	2.44	0.42
1:A:746:PHE:CZ	1:A:924:PHE:HD1	2.38	0.42
1:A:801:ASP:O	1:A:804:ASN:HB2	2.20	0.42
1:A:1023:ASP:HA	1:A:1024:PRO:HD3	1.86	0.42
1:A:1026:PHE:HA	1:A:1029:ILE:HD13	2.02	0.42
1:A:151:LEU:HD11	1:A:187:VAL:HG21	2.02	0.42
1:A:411:THR:O	1:A:411:THR:HG22	2.17	0.42
1:A:741:TYR:CD2	1:A:820:HIS:CD2	3.08	0.42
1:A:805:VAL:CG1	1:A:806:THR:N	2.83	0.42
1:A:851:ILE:O	1:A:854:ARG:HG2	2.19	0.42
1:A:889:ILE:HG23	1:A:889:ILE:HD13	1.58	0.42
1:A:1007:ASN:N	1:A:1068:ASP:O	2.53	0.42
1:A:469:ASN:O	1:A:471:LYS:N	2.53	0.41
1:A:648:LEU:HD22	1:A:1105:ILE:HD12	2.01	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:782:LEU:O	1:A:783:ARG:C	2.62	0.41
1:A:1120:LEU:O	1:A:1120:LEU:HG	2.08	0.41
1:A:206:THR:H	1:A:206:THR:HG1	1.58	0.41
1:A:346:GLY:CA	1:A:348:PHE:CE1	3.03	0.41
1:A:540:ASP:HA	1:A:541:PRO:HD2	1.81	0.41
1:A:722:LYS:HB2	1:A:722:LYS:HE2	1.70	0.41
1:A:762:PHE:CD1	1:A:762:PHE:C	2.99	0.41
1:A:849:ILE:HD13	1:A:849:ILE:HG23	1.81	0.41
1:A:1068:ASP:OD1	1:A:1069:PRO:HD2	2.20	0.41
1:A:1184:ASP:HB3	1:A:1187:PHE:HD1	1.86	0.41
1:A:116:TYR:N	1:A:302:LYS:O	2.42	0.41
1:A:190:ASP:O	1:A:194:GLN:N	2.51	0.41
1:A:346:GLY:CA	1:A:348:PHE:HE1	2.32	0.41
1:A:541:PRO:C	1:A:542:LEU:CD2	2.92	0.41
1:A:561:GLU:O	1:A:564:TYR:HB2	2.19	0.41
1:A:619:LYS:O	1:A:623:GLU:HB2	2.20	0.41
1:A:664:ILE:HD12	1:A:664:ILE:HG21	1.67	0.41
1:A:723:TYR:HA	1:A:726:ASN:ND2	2.36	0.41
1:A:803:LEU:O	1:A:1021:TYR:HD1	2.03	0.41
1:A:937:TYR:O	1:A:937:TYR:CD2	2.65	0.41
1:A:1014:ILE:HG23	1:A:1016:PHE:H	1.86	0.41
1:A:172:MET:HE2	1:A:172:MET:HB3	1.81	0.41
1:A:276:ASP:O	1:A:277:PRO:C	2.63	0.41
1:A:370:LEU:HD11	1:A:455:GLN:HB3	2.02	0.41
1:A:437:ASP:O	1:A:439:GLY:N	2.54	0.41
1:A:527:PHE:O	1:A:528:VAL:C	2.60	0.41
1:A:995:VAL:HG22	1:A:1165:LYS:CB	2.50	0.41
1:A:1029:ILE:C	1:A:1032:ALA:H	2.28	0.41
1:A:131:LEU:O	1:A:131:LEU:HD23	2.21	0.41
1:A:151:LEU:CA	1:A:155:THR:CG2	2.94	0.41
1:A:203:ILE:HD12	1:A:203:ILE:HG21	1.87	0.41
1:A:418:ILE:O	1:A:418:ILE:CG2	2.55	0.41
1:A:592:GLN:O	1:A:593:GLU:C	2.59	0.41
1:A:776:SER:O	1:A:780:VAL:HG23	2.21	0.41
1:A:873:LYS:HE2	1:A:873:LYS:HB3	1.67	0.41
1:A:887:ASN:CA	1:A:891:GLY:HA3	2.47	0.41
1:A:68:HIS:CB	1:A:71:TYR:HB2	2.38	0.41
1:A:119:THR:N	1:A:167:ASP:O	2.54	0.41
1:A:263:MET:CE	1:A:457:ILE:CG2	2.55	0.41
1:A:1173:LYS:HB2	1:A:1173:LYS:HE2	1.76	0.41
1:A:423:LEU:HD23	1:A:430:VAL:HB	2.03	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:589:ASN:O	1:A:592:GLN:N	2.53	0.41
1:A:650:LYS:O	1:A:651:LYS:HG2	2.21	0.41
1:A:888:ILE:O	1:A:894:ASN:CB	2.69	0.41
1:A:72:ASP:O	1:A:89:TYR:HA	2.21	0.41
1:A:74:ILE:HD13	1:A:74:ILE:HG21	1.69	0.41
1:A:422:LEU:HD13	1:A:498:PHE:CD1	2.56	0.41
1:A:542:LEU:HB3	1:A:545:PHE:HB2	2.03	0.41
1:A:519:LEU:HD12	1:A:739:ILE:HD13	2.04	0.40
1:A:597:LEU:HD12	1:A:597:LEU:H	1.86	0.40
1:A:805:VAL:CG1	1:A:806:THR:H	2.31	0.40
1:A:819:MET:HE3	1:A:819:MET:HB2	1.79	0.40
1:A:827:ASN:O	1:A:828:ASP:C	2.62	0.40
1:A:1137:PHE:CE2	1:A:1141:ILE:CG1	3.05	0.40
1:A:1152:PHE:O	1:A:1156:LEU:HB2	2.21	0.40
1:A:213:VAL:HG23	1:A:214:GLU:H	1.82	0.40
1:A:301:VAL:C	1:A:302:LYS:HD3	2.47	0.40
1:A:498:PHE:O	1:A:499:ASN:O	2.37	0.40
1:A:657:VAL:CG2	1:A:658:ASN:H	2.32	0.40
1:A:657:VAL:HG23	1:A:658:ASN:H	1.86	0.40
1:A:670:ILE:O	1:A:670:ILE:CG2	2.60	0.40
1:A:1093:THR:H	1:A:1096:ASP:HB2	1.86	0.40
1:A:1113:ARG:N	1:A:1116:GLU:HG3	2.36	0.40
1:A:524:SER:O	1:A:528:VAL:HG23	2.20	0.40
1:A:612:GLN:CD	1:A:615:GLU:HB3	2.47	0.40
1:A:774:ARG:HG3	1:A:779:PHE:HB2	2.04	0.40
1:A:1063:PHE:CE2	1:A:1163:PHE:CE1	3.10	0.40
1:A:257:HIS:O	1:A:261:LYS:HB2	2.22	0.40
1:A:263:MET:HE1	1:A:457:ILE:HD12	0.96	0.40
1:A:655:VAL:HA	1:A:656:PRO:HD2	1.83	0.40
1:A:748:LEU:HD11	1:A:815:PHE:HB2	2.03	0.40
1:A:867:GLY:O	1:A:868:TYR:C	2.59	0.40
1:A:1037:TYR:CE2	1:A:1077:THR:HG22	2.56	0.40
1:A:1095:ASN:C	1:A:1099:ARG:HH12	2.29	0.40
1:A:1123:LEU:O	1:A:1124:ARG:C	2.62	0.40

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

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:608:ASN:ND2	1:A:988:LYS:CG[2_554]	1.98	0.22
1:A:538:ASN:O	1:A:679:THR:OG1[2_654]	2.10	0.10

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	1043/1193 (87%)	998 (96%)	37 (4%)	8 (1%)	16	50

All (8) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	213	VAL
1	A	610	ASN
1	A	613	GLU
1	A	1128	ASN
1	A	373	PRO
1	A	615	GLU
1	A	697	LEU
1	A	426	THR

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	972/1104 (88%)	621 (64%)	351 (36%)	0	0

All (351) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	60	TRP
1	A	61	ILE
1	A	62	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	65	SER
1	A	66	PRO
1	A	67	LYS
1	A	68	HIS
1	A	69	ASN
1	A	72	ASP
1	A	73	ILE
1	A	75	GLU
1	A	80	GLU
1	A	81	GLU
1	A	84	MET
1	A	85	THR
1	A	87	THR
1	A	95	LYS
1	A	96	THR
1	A	99	ILE
1	A	100	SER
1	A	101	LEU
1	A	103	THR
1	A	107	LEU
1	A	110	GLU
1	A	111	GLN
1	A	119	THR
1	A	120	LEU
1	A	123	SER
1	A	125	LYS
1	A	132	GLU
1	A	135	VAL
1	A	137	SER
1	A	139	SER
1	A	145	LYS
1	A	147	SER
1	A	158	THR
1	A	161	ASN
1	A	167	ASP
1	A	168	ARG
1	A	172	MET
1	A	175	SER
1	A	176	MET
1	A	179	LYS
1	A	180	ASP
1	A	185	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	191	SER
1	A	197	VAL
1	A	203	ILE
1	A	206	THR
1	A	212	GLU
1	A	214	GLU
1	A	232	TYR
1	A	233	LYS
1	A	234	VAL
1	A	235	SER
1	A	236	PHE
1	A	237	ASN
1	A	239	ILE
1	A	242	ASN
1	A	248	LEU
1	A	249	SER
1	A	252	LEU
1	A	253	GLU
1	A	254	ASP
1	A	260	MET
1	A	261	LYS
1	A	268	VAL
1	A	270	SER
1	A	273	SER
1	A	277	PRO
1	A	278	LYS
1	A	280	ILE
1	A	281	THR
1	A	284	THR
1	A	286	GLU
1	A	287	GLU
1	A	289	LYS
1	A	290	GLU
1	A	299	LYS
1	A	301	VAL
1	A	302	LYS
1	A	309	ASN
1	A	312	THR
1	A	314	LEU
1	A	325	LEU
1	A	329	LYS
1	A	331	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	335	VAL
1	A	338	VAL
1	A	341	GLN
1	A	342	THR
1	A	348	PHE
1	A	350	ILE
1	A	353	LYS
1	A	358	SER
1	A	359	GLU
1	A	364	LEU
1	A	366	SER
1	A	370	LEU
1	A	372	ASN
1	A	373	PRO
1	A	374	LYS
1	A	407	LEU
1	A	408	GLU
1	A	417	LEU
1	A	418	ILE
1	A	419	ILE
1	A	421	ASN
1	A	424	ILE
1	A	426	THR
1	A	427	PRO
1	A	428	GLU
1	A	433	LYS
1	A	440	LEU
1	A	452	SER
1	A	453	LEU
1	A	455	GLN
1	A	459	SER
1	A	460	ILE
1	A	465	ILE
1	A	467	ARG
1	A	468	ASN
1	A	469	ASN
1	A	471	LYS
1	A	472	ILE
1	A	476	ASP
1	A	478	VAL
1	A	485	VAL
1	A	491	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	495	LYS
1	A	499	ASN
1	A	500	LYS
1	A	503	VAL
1	A	509	ASN
1	A	510	ILE
1	A	513	ILE
1	A	520	LYS
1	A	521	THR
1	A	523	LYS
1	A	524	SER
1	A	525	ILE
1	A	530	GLU
1	A	531	MET
1	A	533	SER
1	A	534	LYS
1	A	536	ASN
1	A	542	LEU
1	A	543	LEU
1	A	544	ILE
1	A	548	GLU
1	A	552	ASN
1	A	553	ILE
1	A	557	LYS
1	A	560	ASN
1	A	563	MET
1	A	564	TYR
1	A	565	LEU
1	A	568	PHE
1	A	570	GLU
1	A	571	LYS
1	A	575	ASN
1	A	582	ILE
1	A	584	LEU
1	A	587	ASP
1	A	588	GLU
1	A	594	GLN
1	A	595	GLU
1	A	596	ASN
1	A	599	LYS
1	A	600	GLN
1	A	601	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	602	LEU
1	A	603	LYS
1	A	604	LYS
1	A	605	ARG
1	A	608	ASN
1	A	611	GLU
1	A	613	GLU
1	A	614	LYS
1	A	616	GLN
1	A	617	VAL
1	A	620	ASN
1	A	624	LEU
1	A	625	SER
1	A	626	LYS
1	A	628	LYS
1	A	629	ASN
1	A	635	GLU
1	A	641	PRO
1	A	642	ILE
1	A	643	ILE
1	A	644	SER
1	A	645	ILE
1	A	646	SER
1	A	653	LEU
1	A	657	VAL
1	A	659	VAL
1	A	661	PHE
1	A	663	ASN
1	A	664	ILE
1	A	665	ASN
1	A	669	ASN
1	A	670	ILE
1	A	672	GLU
1	A	673	THR
1	A	675	ASN
1	A	676	LYS
1	A	677	LEU
1	A	678	LYS
1	A	681	GLU
1	A	683	MET
1	A	685	LYS
1	A	688	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	698	LYS
1	A	720	GLU
1	A	721	THR
1	A	722	LYS
1	A	724	GLU
1	A	733	GLU
1	A	734	MET
1	A	737	THR
1	A	739	ILE
1	A	742	LEU
1	A	750	HIS
1	A	752	THR
1	A	759	LEU
1	A	761	LEU
1	A	763	LYS
1	A	764	THR
1	A	767	LEU
1	A	776	SER
1	A	781	ILE
1	A	782	LEU
1	A	783	ARG
1	A	787	ILE
1	A	789	SER
1	A	791	SER
1	A	798	SER
1	A	806	THR
1	A	808	LYS
1	A	810	ASN
1	A	812	GLN
1	A	814	LEU
1	A	816	ASN
1	A	822	LEU
1	A	823	SER
1	A	832	ILE
1	A	834	LEU
1	A	835	GLU
1	A	837	VAL
1	A	843	SER
1	A	846	LYS
1	A	849	ILE
1	A	851	ILE
1	A	855	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	860	LYS
1	A	863	PHE
1	A	868	TYR
1	A	870	ILE
1	A	872	MET
1	A	873	LYS
1	A	874	TYR
1	A	875	VAL
1	A	889	ILE
1	A	895	TYR
1	A	902	LEU
1	A	903	GLU
1	A	904	LEU
1	A	910	LYS
1	A	911	THR
1	A	915	ILE
1	A	918	ARG
1	A	920	ARG
1	A	923	ILE
1	A	927	LYS
1	A	930	MET
1	A	933	VAL
1	A	935	SER
1	A	936	ASP
1	A	941	LYS
1	A	943	LEU
1	A	947	SER
1	A	948	ASN
1	A	951	LEU
1	A	953	ASN
1	A	955	VAL
1	A	959	GLU
1	A	962	ASP
1	A	963	LYS
1	A	964	TYR
1	A	986	SER
1	A	988	LYS
1	A	989	LEU
1	A	992	GLU
1	A	993	GLU
1	A	995	VAL
1	A	996	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1004	THR
1	A	1007	ASN
1	A	1011	MET
1	A	1014	ILE
1	A	1017	LYS
1	A	1025	SER
1	A	1030	VAL
1	A	1036	SER
1	A	1045	LEU
1	A	1055	ILE
1	A	1062	VAL
1	A	1064	LEU
1	A	1071	LEU
1	A	1081	SER
1	A	1083	LYS
1	A	1087	LYS
1	A	1088	MET
1	A	1091	THR
1	A	1092	MET
1	A	1099	ARG
1	A	1101	ILE
1	A	1103	ASN
1	A	1105	ILE
1	A	1108	ILE
1	A	1112	ARG
1	A	1116	GLU
1	A	1118	SER
1	A	1120	LEU
1	A	1127	SER
1	A	1132	GLN
1	A	1140	ARG
1	A	1142	MET
1	A	1143	ASN
1	A	1144	THR
1	A	1146	LYS
1	A	1147	GLU
1	A	1148	ASP
1	A	1156	LEU
1	A	1158	SER
1	A	1160	VAL
1	A	1162	GLU
1	A	1164	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1165	LYS
1	A	1170	ILE
1	A	1173	LYS
1	A	1178	GLU
1	A	1180	ILE
1	A	1182	ASN
1	A	1183	VAL
1	A	1186	GLU
1	A	1188	LYS
1	A	1189	LYS
1	A	1191	LEU
1	A	1192	ILE

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (36) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	90	GLN
1	A	91	HIS
1	A	111	GLN
1	A	133	HIS
1	A	159	HIS
1	A	161	ASN
1	A	177	ASN
1	A	183	ASN
1	A	237	ASN
1	A	242	ASN
1	A	282	ASN
1	A	316	ASN
1	A	324	GLN
1	A	357	HIS
1	A	443	ASN
1	A	468	ASN
1	A	538	ASN
1	A	560	ASN
1	A	572	HIS
1	A	575	ASN
1	A	600	GLN
1	A	665	ASN
1	A	667	ASN
1	A	680	ASN
1	A	687	ASN
1	A	726	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	812	GLN
1	A	857	ASN
1	A	880	ASN
1	A	894	ASN
1	A	928	ASN
1	A	946	ASN
1	A	953	ASN
1	A	981	ASN
1	A	1128	ASN
1	A	1177	ASN

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry ⓘ

Of 1 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

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.

No monomer is involved in short contacts.

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 [i](#)

6.1 Protein, DNA and RNA chains [i](#)

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	1053/1193 (88%)	0.08	13 (1%) 76 58	9, 32, 70, 128	0

All (13) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	610	ASN	4.9
1	A	612	GLN	4.3
1	A	908	ASP	3.9
1	A	1145	LYS	3.7
1	A	263	MET	3.1
1	A	331	ARG	2.8
1	A	613	GLU	2.4
1	A	827	ASN	2.4
1	A	129	HIS	2.3
1	A	62	HIS	2.1
1	A	606	ILE	2.0
1	A	992	GLU	2.0
1	A	133	HIS	2.0

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

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

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

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

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
2	ZN	A	1194	1/1	0.65	0.20	38,38,38,38	0

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.