



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 4, 2026 – 10:29 PM UTC

PDB ID : 3V0C / pdb_00003v0c
Title : 4.3 angstrom crystal structure of an inactive BoNT/A (E224Q/R363A/Y366F)
Authors : Gu, S.; Rumpel, S.; Zhou, J.; Strotmeier, J.; Bigalke, H.; Perry, K.; Shoemaker, C.B.; Rummel, A.; Jin, R.
Deposited on : 2011-12-07
Resolution : 4.30 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0
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

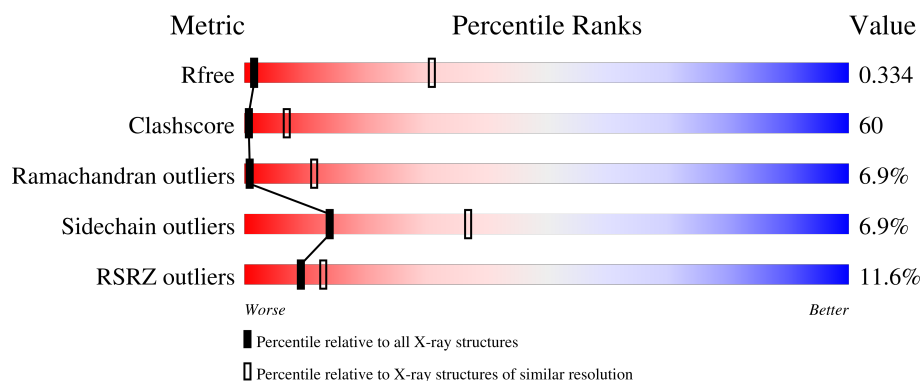
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 4.30 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
R_{free}	180053	1052 (4.70-3.90)
Clashscore	190562	1097 (4.70-3.90)
Ramachandran outliers	187476	1001 (4.70-3.90)
Sidechain outliers	187428	1007 (4.72-3.88)
RSRZ outliers	180081	1049 (4.70-3.90)

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	1312	

2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 10390 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 BoNT/A.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	1277	Total	C	N	O	S	0	0	0
			10389	6664	1714	1979	32			

There are 20 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	224	GLN	GLU	engineered mutation	UNP Q7B8V4
A	363	ALA	ARG	engineered mutation	UNP Q7B8V4
A	366	PHE	TYR	engineered mutation	UNP Q7B8V4
A	1158	ALA	THR	conflict	UNP Q7B8V4
A	1297	VAL	-	expression tag	UNP Q7B8V4
A	1298	PRO	-	expression tag	UNP Q7B8V4
A	1299	PRO	-	expression tag	UNP Q7B8V4
A	1300	THR	-	expression tag	UNP Q7B8V4
A	1301	PRO	-	expression tag	UNP Q7B8V4
A	1302	GLY	-	expression tag	UNP Q7B8V4
A	1303	SER	-	expression tag	UNP Q7B8V4
A	1304	ALA	-	expression tag	UNP Q7B8V4
A	1305	TRP	-	expression tag	UNP Q7B8V4
A	1306	SER	-	expression tag	UNP Q7B8V4
A	1307	HIS	-	expression tag	UNP Q7B8V4
A	1308	PRO	-	expression tag	UNP Q7B8V4
A	1309	GLN	-	expression tag	UNP Q7B8V4
A	1310	PHE	-	expression tag	UNP Q7B8V4
A	1311	GLU	-	expression tag	UNP Q7B8V4
A	1312	LYS	-	expression tag	UNP Q7B8V4

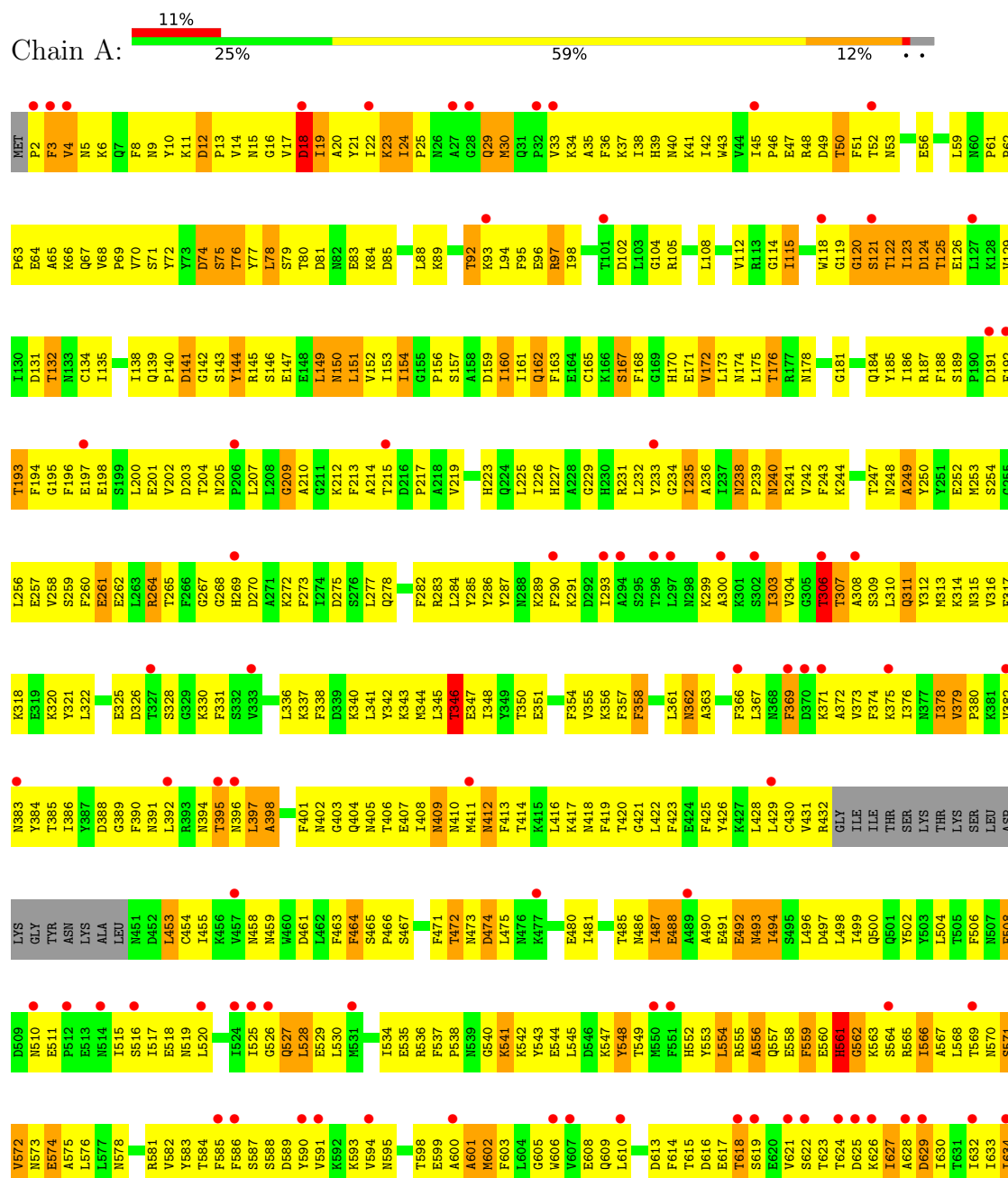
- Molecule 2 is ZINC ION (CCD ID: ZN) (formula: Zn).

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

3 Residue-property plots [i](#)

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

• Molecule 1: BoNT/A





4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 31 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	167.52Å 167.52Å 158.73Å 90.00° 90.00° 120.00°	Depositor
Resolution (Å)	45.11 – 4.30 45.11 – 4.30	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.9 (45.11-4.30) 99.8 (45.11-4.30)	Depositor EDS
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	2.96 (at 4.28Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX (phenix.refine: 1.7.2_869)	Depositor
R, R_{free}	0.322 , 0.349 0.308 , 0.334	Depositor DCC
R_{free} test set	913 reflections (5.10%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	161.8	Xtriage
Anisotropy	0.203	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.35 , 304.7	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.48$, $\langle L^2 \rangle = 0.31$	Xtriage
Estimated twinning fraction	0.021 for -h,-k,l	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.83	EDS
Total number of atoms	10390	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	235.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 2.53% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality

5.1 Standard geometry

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: 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	1.56	1/10610 (0.0%)	1.01	61/14367 (0.4%)

All (1) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	61	PRO	CA-CB	-5.24	1.49	1.54

All (61) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	769	LEU	N-CA-C	-9.40	100.92	111.82
1	A	5	ASN	N-CA-C	8.59	120.42	111.14
1	A	829	THR	N-CA-C	-8.58	102.99	113.97
1	A	1205	ILE	N-CA-C	8.19	122.47	111.17
1	A	1098	LYS	N-CA-C	7.83	121.65	109.52
1	A	1138	GLY	CA-C-N	7.79	129.58	119.84
1	A	1138	GLY	C-N-CA	7.79	129.58	119.84
1	A	358	PHE	N-CA-C	-7.56	97.74	109.76
1	A	797	MET	N-CA-C	6.90	119.82	111.82
1	A	744	LYS	N-CA-C	-6.89	105.15	113.97
1	A	936	SER	N-CA-C	-6.85	105.71	112.97
1	A	956	ILE	N-CA-C	-6.69	103.33	110.36
1	A	634	ILE	CA-C-N	6.54	125.97	118.85
1	A	634	ILE	C-N-CA	6.54	125.97	118.85
1	A	307	THR	N-CA-C	-6.50	102.60	111.56
1	A	369	PHE	N-CA-C	6.45	119.56	109.96
1	A	998	VAL	N-CA-C	6.30	119.12	108.86
1	A	238	ASN	CA-C-N	-6.26	114.44	120.83
1	A	238	ASN	C-N-CA	-6.26	114.44	120.83
1	A	1144	MET	N-CA-C	6.24	116.67	107.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	640	ALA	N-CA-C	-6.15	105.80	113.55
1	A	95	PHE	N-CA-C	-6.14	104.67	111.36
1	A	1106	GLN	N-CA-C	6.13	118.73	109.23
1	A	933	VAL	N-CA-C	5.99	116.74	107.99
1	A	529	GLU	N-CA-C	-5.99	102.21	110.35
1	A	378	ILE	N-CA-C	5.91	118.48	111.09
1	A	372	ALA	N-CA-C	5.87	116.30	108.38
1	A	1248	GLY	N-CA-C	5.86	118.06	111.85
1	A	508	PHE	N-CA-C	5.78	120.33	113.28
1	A	830	LEU	N-CA-C	-5.76	104.65	112.26
1	A	752	ASN	N-CA-C	-5.75	106.23	113.18
1	A	1100	PHE	N-CA-C	-5.71	105.42	112.38
1	A	1177	ASN	N-CA-C	5.68	119.42	111.30
1	A	668	ILE	N-CA-C	5.66	113.48	107.76
1	A	601	ALA	N-CA-C	-5.65	104.49	111.33
1	A	1118	ASP	CA-C-N	5.65	125.32	119.56
1	A	1118	ASP	C-N-CA	5.65	125.32	119.56
1	A	837	LEU	N-CA-C	-5.57	105.36	111.82
1	A	76	THR	N-CA-C	5.57	119.79	112.89
1	A	240	ASN	N-CA-C	-5.56	106.27	113.16
1	A	346	THR	N-CA-C	5.50	120.00	112.68
1	A	1026	ASN	N-CA-C	5.42	118.11	109.81
1	A	810	ASP	N-CA-C	-5.41	105.02	111.03
1	A	685	ILE	N-CA-C	5.40	115.36	108.12
1	A	379	VAL	CB-CA-C	-5.39	108.58	113.70
1	A	409	ASN	N-CA-C	-5.39	105.88	113.20
1	A	487	ILE	N-CA-C	5.36	116.27	110.21
1	A	306	THR	CB-CA-C	-5.29	104.84	113.37
1	A	548	TYR	N-CA-C	-5.25	103.59	110.53
1	A	50	THR	N-CA-C	-5.21	107.59	114.31
1	A	530	LEU	N-CA-C	5.21	116.79	108.41
1	A	681	LEU	N-CA-C	5.15	117.77	107.62
1	A	528	LEU	N-CA-C	5.13	116.91	110.24
1	A	12	ASP	CA-C-N	5.13	125.37	119.83
1	A	12	ASP	C-N-CA	5.13	125.37	119.83
1	A	219	VAL	CB-CA-C	-5.13	105.41	111.97
1	A	472	THR	N-CA-C	-5.13	103.28	110.35
1	A	1179	ARG	N-CA-C	-5.12	100.95	109.46
1	A	718	LEU	N-CA-C	5.10	117.74	111.82
1	A	1277	THR	N-CA-C	-5.08	102.53	110.10
1	A	13	PRO	N-CA-C	5.04	118.80	111.03

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	10389	0	10255	1240	9
2	A	1	0	0	0	0
All	All	10390	0	10255	1240	9

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 60.

All (1240) 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:277:LEU:HD22	1:A:474:ASP:HB3	1.24	1.13
1:A:872:ASN:HD21	1:A:874:ILE:HB	1.12	1.11
1:A:948:ARG:HB3	1:A:1068:TRP:HB2	1.28	1.10
1:A:310:LEU:HD11	1:A:314:LYS:HE3	1.38	1.05
1:A:969:GLU:H	1:A:972:SER:HB3	1.24	1.02
1:A:1027:SER:HB2	1:A:1041:ILE:HD11	1.37	1.02
1:A:1248:GLY:HA2	1:A:1268:ASN:HD21	1.16	1.02
1:A:927:ILE:HG12	1:A:1052:ASN:HB3	1.36	1.01
1:A:346:THR:HG22	1:A:347:GLU:HG3	1.41	1.01
1:A:1010:TYR:HB3	1:A:1015:ILE:HD11	1.41	0.99
1:A:52:THR:HG22	1:A:528:LEU:HD11	1.47	0.96
1:A:806:LYS:HD2	1:A:934:TYR:HB3	1.48	0.95
1:A:910:ASP:HB3	1:A:913:GLN:HE21	1.30	0.95
1:A:566:ILE:HG12	1:A:749:TYR:CD1	2.02	0.95
1:A:576:LEU:HA	1:A:581:ARG:HB2	1.49	0.95
1:A:763:ASN:HB2	1:A:765:ASN:ND2	1.82	0.95
1:A:2:PRO:HG2	1:A:39:HIS:CD2	2.03	0.94
1:A:629:ASP:OD1	1:A:630:ILE:HG13	1.71	0.91
1:A:264:ARG:HG2	1:A:264:ARG:HH11	1.33	0.91
1:A:217:PRO:HG2	1:A:378:ILE:HD11	1.49	0.90
1:A:584:THR:HG22	1:A:586:PHE:H	1.38	0.89
1:A:242:VAL:HG11	1:A:257:GLU:HB2	1.53	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1027:SER:HB2	1:A:1041:ILE:CD1	2.02	0.89
1:A:21:TYR:HE1	1:A:34:LYS:HB2	1.36	0.88
1:A:418:ASN:HD21	1:A:420:THR:HB	1.36	0.88
1:A:17:VAL:HG12	1:A:145:ARG:HH22	1.39	0.87
1:A:1113:MET:HE3	1:A:1160:PHE:HB2	1.54	0.87
1:A:428:LEU:HB3	1:A:542:LYS:HA	1.57	0.87
1:A:559:PHE:HB3	1:A:582:VAL:HG22	1.57	0.86
1:A:41:LYS:HB3	1:A:150:ASN:HB2	1.58	0.85
1:A:49:ASP:HB3	1:A:187:ARG:HE	1.41	0.85
1:A:815:LEU:HD23	1:A:845:LEU:HD11	1.58	0.85
1:A:575:ALA:O	1:A:581:ARG:HB2	1.77	0.85
1:A:426:TYR:CE1	1:A:540:GLY:HA2	2.11	0.84
1:A:984:ILE:HG12	1:A:998:VAL:HG22	1.60	0.84
1:A:24:ILE:HD11	1:A:45:ILE:HD11	1.59	0.84
1:A:556:ALA:O	1:A:583:TYR:HB3	1.78	0.84
1:A:969:GLU:N	1:A:972:SER:HB3	1.93	0.84
1:A:755:THR:O	1:A:756:GLU:HB2	1.78	0.84
1:A:968:MET:HG2	1:A:972:SER:O	1.78	0.84
1:A:969:GLU:H	1:A:972:SER:CB	1.90	0.84
1:A:968:MET:HA	1:A:972:SER:HB3	1.59	0.83
1:A:1019:ILE:HG12	1:A:1029:ILE:HD12	1.59	0.83
1:A:122:THR:O	1:A:126:GLU:HB3	1.79	0.83
1:A:952:TYR:HB2	1:A:1003:GLN:HE22	1.43	0.83
1:A:605:GLY:HA2	1:A:608:GLU:OE1	1.77	0.83
1:A:22:ILE:HD13	1:A:35:ALA:HB3	1.61	0.83
1:A:35:ALA:HB2	1:A:45:ILE:HG12	1.61	0.83
1:A:43:TRP:HD1	1:A:149:LEU:HD21	1.44	0.83
1:A:306:THR:HG22	1:A:516:SER:O	1.78	0.82
1:A:872:ASN:ND2	1:A:874:ILE:HB	1.93	0.82
1:A:1163:LYS:HB2	1:A:1181:TYR:HB2	1.61	0.82
1:A:789:ASN:HD21	1:A:861:ARG:HE	1.26	0.82
1:A:872:ASN:ND2	1:A:874:ILE:H	1.78	0.82
1:A:713:ILE:HD11	1:A:796:LEU:HD21	1.61	0.82
1:A:594:VAL:HG12	1:A:746:ILE:HG21	1.59	0.82
1:A:21:TYR:CE1	1:A:34:LYS:HB2	2.15	0.82
1:A:573:ASN:O	1:A:576:LEU:HG	1.80	0.82
1:A:1248:GLY:HA2	1:A:1268:ASN:ND2	1.95	0.82
1:A:979:ASN:O	1:A:982:GLU:HG2	1.79	0.82
1:A:52:THR:CG2	1:A:528:LEU:HD11	2.09	0.81
1:A:70:VAL:HG12	1:A:161:ILE:HD11	1.62	0.81
1:A:624:THR:HB	1:A:627:ILE:HD13	1.62	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:927:ILE:HG12	1:A:1052:ASN:CB	2.10	0.81
1:A:397:LEU:HA	1:A:402:ASN:HB2	1.60	0.81
1:A:487:ILE:HG23	1:A:488:GLU:OE1	1.81	0.81
1:A:702:ARG:HG3	1:A:702:ARG:HH11	1.46	0.81
1:A:473:ASN:OD1	1:A:475:LEU:HD12	1.79	0.81
1:A:610:LEU:HD12	1:A:747:ILE:HD11	1.63	0.80
1:A:1110:PRO:HB2	1:A:1159:LYS:HD3	1.63	0.80
1:A:872:ASN:HD21	1:A:874:ILE:CB	1.94	0.80
1:A:1013:ARG:HG2	1:A:1101:TRP:HA	1.64	0.80
1:A:391:ASN:HD21	1:A:404:GLN:HE21	1.25	0.80
1:A:464:PHE:CE2	1:A:466:PRO:HG3	2.17	0.80
1:A:277:LEU:HD23	1:A:472:THR:HG22	1.62	0.80
1:A:763:ASN:HD22	1:A:765:ASN:HD21	1.29	0.80
1:A:1203:GLU:O	1:A:1204:LYS:HD3	1.81	0.80
1:A:385:THR:HG23	1:A:388:ASP:H	1.47	0.79
1:A:643:ILE:HG21	1:A:664:LEU:HD23	1.64	0.79
1:A:986:THR:HG22	1:A:996:ARG:HB3	1.63	0.79
1:A:929:LYS:O	1:A:932:ILE:HG22	1.82	0.79
1:A:277:LEU:CD2	1:A:474:ASP:HB3	2.10	0.79
1:A:1099:ASP:HB2	1:A:1103:ASP:H	1.47	0.78
1:A:375:LYS:HB3	1:A:414:THR:HB	1.63	0.78
1:A:18:ASP:HA	1:A:37:LYS:HB2	1.65	0.78
1:A:122:THR:HB	1:A:126:GLU:OE1	1.84	0.78
1:A:961:GLU:HB2	1:A:979:ASN:HD22	1.46	0.78
1:A:306:THR:HG21	1:A:515:ILE:HG22	1.66	0.78
1:A:344:MET:HE3	1:A:502:TYR:CD2	2.19	0.78
1:A:798:ASN:ND2	1:A:893:ARG:HG3	1.99	0.77
1:A:962:TYR:HD1	1:A:962:TYR:H	1.32	0.77
1:A:395:THR:C	1:A:397:LEU:H	1.93	0.77
1:A:1057:LEU:H	1:A:1057:LEU:HD12	1.48	0.77
1:A:626:LYS:C	1:A:627:ILE:HD12	2.10	0.77
1:A:590:TYR:O	1:A:594:VAL:HG23	1.84	0.77
1:A:1227:ASN:ND2	1:A:1229:GLN:HB3	2.00	0.77
1:A:1196:ASN:O	1:A:1199:GLN:HG3	1.85	0.76
1:A:170:HIS:CD2	1:A:172:VAL:H	2.02	0.76
1:A:2:PRO:O	1:A:39:HIS:HD2	1.69	0.76
1:A:1265:ASN:HA	1:A:1268:ASN:HD22	1.48	0.76
1:A:935:ASN:HA	1:A:1049:ALA:HB2	1.67	0.76
1:A:1233:ASN:ND2	1:A:1271:ILE:HG23	2.01	0.76
1:A:598:THR:HG23	1:A:602:MET:HE3	1.67	0.75
1:A:1211:ILE:HD12	1:A:1211:ILE:H	1.51	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:547:LYS:NZ	1:A:646:MET:HB3	2.02	0.75
1:A:985:TRP:CD2	1:A:1019:ILE:HG21	2.22	0.75
1:A:11:LYS:NZ	1:A:81:ASP:HB3	2.01	0.75
1:A:935:ASN:HA	1:A:1049:ALA:CB	2.16	0.75
1:A:733:LYS:HB2	1:A:781:MET:HE2	1.68	0.75
1:A:42:ILE:HD12	1:A:151:LEU:HD12	1.68	0.75
1:A:1020:THR:HG23	1:A:1078:GLU:HG3	1.67	0.75
1:A:873:ILE:O	1:A:876:THR:HB	1.85	0.74
1:A:154:ILE:HD12	1:A:154:ILE:H	1.51	0.74
1:A:987:LEU:HD12	1:A:1041:ILE:HD13	1.68	0.74
1:A:1203:GLU:HB3	1:A:1262:VAL:HG11	1.70	0.74
1:A:14:VAL:HG13	1:A:20:ALA:HA	1.69	0.74
1:A:39:HIS:ND1	1:A:40:ASN:N	2.35	0.74
1:A:903:LYS:HB2	1:A:922:SER:HB3	1.69	0.74
1:A:264:ARG:HG2	1:A:264:ARG:NH1	1.98	0.74
1:A:634:ILE:HG22	1:A:637:ILE:HG13	1.68	0.74
1:A:952:TYR:CE2	1:A:980:TYR:HA	2.23	0.74
1:A:1248:GLY:CA	1:A:1268:ASN:HD21	1.98	0.74
1:A:713:ILE:HG12	1:A:801:ILE:HD13	1.69	0.73
1:A:765:ASN:HB3	1:A:768:ASP:HB2	1.69	0.73
1:A:417:LYS:HE3	1:A:419:PHE:CE1	2.23	0.73
1:A:418:ASN:ND2	1:A:420:THR:H	1.86	0.73
1:A:1100:PHE:HD1	1:A:1283:GLU:HG2	1.54	0.73
1:A:584:THR:HG22	1:A:586:PHE:N	2.02	0.73
1:A:809:GLU:HG2	1:A:934:TYR:CE2	2.23	0.73
1:A:641:LEU:HB2	1:A:643:ILE:HG12	1.68	0.73
1:A:584:THR:HG22	1:A:585:PHE:N	2.01	0.73
1:A:984:ILE:HG23	1:A:998:VAL:HG22	1.69	0.73
1:A:622:SER:HB2	1:A:633:ILE:HB	1.70	0.73
1:A:918:ASN:ND2	1:A:1065:ARG:HB3	2.03	0.73
1:A:17:VAL:HG12	1:A:145:ARG:NH2	2.03	0.73
1:A:102:ASP:HB2	1:A:357:PHE:HE2	1.54	0.73
1:A:882:ARG:HH22	1:A:1073:ASN:ND2	1.86	0.73
1:A:790:GLN:O	1:A:794:SER:HB3	1.89	0.72
1:A:1168:GLY:C	1:A:1170:LYS:H	1.95	0.72
1:A:420:THR:O	1:A:420:THR:HG22	1.90	0.72
1:A:1155:TYR:CE2	1:A:1287:VAL:HG13	2.23	0.72
1:A:344:MET:HE3	1:A:502:TYR:HD2	1.52	0.72
1:A:201:GLU:HG3	1:A:361:LEU:CD1	2.20	0.72
1:A:644:GLY:O	1:A:647:LEU:HG	1.90	0.72
1:A:167:SER:HB3	1:A:231:ARG:HH12	1.53	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:210:ALA:H	1:A:405:ASN:ND2	1.88	0.72
1:A:755:THR:OG1	1:A:757:GLU:HG2	1.89	0.72
1:A:429:LEU:HD23	1:A:543:TYR:HB2	1.72	0.71
1:A:702:ARG:O	1:A:705:LYS:HB3	1.89	0.71
1:A:18:ASP:HA	1:A:37:LYS:CB	2.20	0.71
1:A:153:ILE:HD13	1:A:186:ILE:HB	1.69	0.71
1:A:990:THR:C	1:A:992:GLU:H	1.95	0.71
1:A:1011:ILE:HG21	1:A:1291:TRP:HZ3	1.54	0.71
1:A:306:THR:HG21	1:A:515:ILE:CG2	2.21	0.71
1:A:226:ILE:HD13	1:A:350:THR:HA	1.73	0.71
1:A:946:TRP:HB2	1:A:1070:LYS:HB3	1.73	0.70
1:A:249:ALA:HB3	1:A:252:GLU:HG3	1.72	0.70
1:A:1193:LEU:C	1:A:1193:LEU:HD12	2.16	0.70
1:A:481:ILE:HD13	1:A:698:ALA:HA	1.74	0.70
1:A:201:GLU:HG3	1:A:361:LEU:HD11	1.73	0.70
1:A:974:TRP:HB2	1:A:985:TRP:CH2	2.27	0.70
1:A:798:ASN:HD22	1:A:893:ARG:CG	2.05	0.70
1:A:210:ALA:N	1:A:405:ASN:ND2	2.40	0.70
1:A:264:ARG:HH11	1:A:264:ARG:CG	2.05	0.70
1:A:598:THR:HG22	1:A:602:MET:O	1.92	0.70
1:A:210:ALA:N	1:A:405:ASN:HD21	1.90	0.70
1:A:1249:PHE:CE2	1:A:1271:ILE:HD12	2.27	0.69
1:A:1044:LEU:HD23	1:A:1047:ILE:HD11	1.74	0.69
1:A:1193:LEU:HD11	1:A:1206:LEU:HD13	1.73	0.69
1:A:549:THR:H	1:A:552:HIS:HD2	1.41	0.69
1:A:49:ASP:CB	1:A:187:ARG:HE	2.05	0.69
1:A:184:GLN:OE1	1:A:231:ARG:HD3	1.92	0.69
1:A:575:ALA:HB1	1:A:582:VAL:O	1.92	0.69
1:A:757:GLU:HB2	1:A:760:ASN:ND2	2.08	0.69
1:A:181:GLY:HA2	1:A:231:ARG:O	1.93	0.68
1:A:598:THR:CG2	1:A:602:MET:HE3	2.22	0.68
1:A:749:TYR:O	1:A:752:ASN:HB3	1.92	0.68
1:A:1096:ILE:O	1:A:1098:LYS:HE3	1.93	0.68
1:A:789:ASN:ND2	1:A:861:ARG:HE	1.92	0.68
1:A:1041:ILE:O	1:A:1041:ILE:HG22	1.93	0.68
1:A:202:VAL:HG11	1:A:778:ASN:O	1.93	0.68
1:A:745:ALA:O	1:A:748:ASN:HB3	1.94	0.68
1:A:967:CYS:SG	1:A:1050:SER:HB2	2.34	0.68
1:A:1210:GLU:HG3	1:A:1212:PRO:HD2	1.75	0.68
1:A:944:SER:HB3	1:A:1018:THR:HG23	1.75	0.68
1:A:193:THR:HG21	1:A:215:THR:O	1.93	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1227:ASN:O	1:A:1230:GLY:N	2.27	0.68
1:A:310:LEU:CD1	1:A:314:LYS:HE3	2.20	0.68
1:A:1010:TYR:CB	1:A:1015:ILE:HD11	2.19	0.68
1:A:212:LYS:HE2	1:A:371:LYS:HB2	1.76	0.67
1:A:463:PHE:CE1	1:A:727:LEU:HD23	2.29	0.67
1:A:23:LYS:HB2	1:A:23:LYS:NZ	2.09	0.67
1:A:409:ASN:OD1	1:A:412:ASN:HB2	1.94	0.67
1:A:426:TYR:CZ	1:A:540:GLY:HA2	2.28	0.67
1:A:105:ARG:HG2	1:A:508:PHE:CE1	2.28	0.67
1:A:585:PHE:HB3	1:A:639:PRO:O	1.95	0.67
1:A:656:LEU:HA	1:A:663:ILE:HD12	1.76	0.67
1:A:1023:ARG:HD3	1:A:1023:ARG:O	1.95	0.67
1:A:1241:ASP:OD2	1:A:1245:ASN:HB2	1.95	0.67
1:A:984:ILE:HG23	1:A:998:VAL:CG2	2.24	0.67
1:A:43:TRP:CD1	1:A:149:LEU:HD21	2.29	0.67
1:A:820:LEU:HD21	1:A:842:ASN:OD1	1.94	0.66
1:A:1099:ASP:OD2	1:A:1103:ASP:HB2	1.96	0.66
1:A:22:ILE:HD11	1:A:43:TRP:CZ3	2.30	0.66
1:A:646:MET:O	1:A:647:LEU:HD23	1.96	0.66
1:A:713:ILE:HD11	1:A:796:LEU:CD2	2.25	0.66
1:A:145:ARG:HA	1:A:519:ASN:OD1	1.96	0.66
1:A:176:THR:CG2	1:A:236:ALA:HB3	2.26	0.66
1:A:455:ILE:CG2	1:A:555:ARG:HD2	2.26	0.66
1:A:275:ASP:OD2	1:A:472:THR:HB	1.95	0.66
1:A:500:GLN:HE22	1:A:504:LEU:HD21	1.60	0.66
1:A:830:LEU:HB2	1:A:834:VAL:HG13	1.76	0.66
1:A:209:GLY:HA3	1:A:405:ASN:HD22	1.61	0.66
1:A:643:ILE:C	1:A:645:ASN:H	2.04	0.66
1:A:181:GLY:HA3	1:A:232:LEU:O	1.97	0.65
1:A:839:ASP:O	1:A:843:ASN:HB2	1.97	0.65
1:A:986:THR:HG22	1:A:996:ARG:CB	2.26	0.65
1:A:1155:TYR:CD2	1:A:1287:VAL:HG22	2.31	0.65
1:A:1101:TRP:CZ3	1:A:1286:PRO:O	2.49	0.65
1:A:643:ILE:O	1:A:645:ASN:N	2.28	0.65
1:A:671:ILE:HD12	1:A:671:ILE:N	2.12	0.65
1:A:253:MET:HG3	1:A:463:PHE:O	1.97	0.65
1:A:485:THR:HB	1:A:697:ASN:HD22	1.60	0.65
1:A:985:TRP:HB2	1:A:1019:ILE:HD13	1.77	0.65
1:A:593:LYS:HD3	1:A:609:GLN:CD	2.21	0.65
1:A:576:LEU:HA	1:A:581:ARG:CB	2.27	0.65
1:A:754:TYR:OH	1:A:757:GLU:HG3	1.96	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:798:ASN:HD22	1:A:893:ARG:HG3	1.58	0.65
1:A:968:MET:CA	1:A:972:SER:HB3	2.27	0.65
1:A:115:ILE:HG22	1:A:317:PHE:HE1	1.62	0.64
1:A:526:GLY:O	1:A:527:GLN:HB2	1.95	0.64
1:A:557:GLN:O	1:A:738:ASN:HB3	1.95	0.64
1:A:22:ILE:CD1	1:A:35:ALA:HB3	2.26	0.64
1:A:22:ILE:HD12	1:A:22:ILE:N	2.12	0.64
1:A:1145:THR:HG22	1:A:1145:THR:O	1.96	0.64
1:A:356:LYS:HD2	1:A:496:LEU:HD21	1.79	0.64
1:A:1061:ARG:HH11	1:A:1061:ARG:HG2	1.61	0.64
1:A:948:ARG:HG2	1:A:948:ARG:HH11	1.62	0.64
1:A:406:THR:HG22	1:A:413:PHE:CG	2.33	0.64
1:A:634:ILE:HD11	1:A:783:ASN:HB3	1.79	0.64
1:A:634:ILE:HG12	1:A:784:ILE:HG12	1.78	0.64
1:A:1265:ASN:HA	1:A:1268:ASN:ND2	2.12	0.64
1:A:11:LYS:HZ1	1:A:81:ASP:CB	2.11	0.64
1:A:463:PHE:CZ	1:A:727:LEU:HD23	2.33	0.64
1:A:882:ARG:HA	1:A:912:ASN:HD21	1.61	0.64
1:A:464:PHE:O	1:A:465:SER:HB3	1.96	0.64
1:A:628:ALA:O	1:A:629:ASP:HB2	1.97	0.64
1:A:906:PHE:O	1:A:907:ASP:C	2.41	0.64
1:A:1296:LEU:H	1:A:1296:LEU:HD23	1.62	0.64
1:A:306:THR:HG23	1:A:517:ILE:HG22	1.80	0.64
1:A:1080:ASN:O	1:A:1084:ILE:HG12	1.97	0.64
1:A:253:MET:HE1	1:A:369:PHE:CE2	2.33	0.64
1:A:733:LYS:HB2	1:A:781:MET:CE	2.28	0.63
1:A:1195:THR:HB	1:A:1206:LEU:HD23	1.80	0.63
1:A:1241:ASP:CG	1:A:1245:ASN:HB2	2.23	0.63
1:A:24:ILE:CD1	1:A:45:ILE:HD11	2.28	0.63
1:A:636:TYR:C	1:A:639:PRO:HD2	2.23	0.63
1:A:167:SER:HB3	1:A:231:ARG:NH1	2.13	0.63
1:A:913:GLN:HG2	1:A:1070:LYS:HE2	1.79	0.63
1:A:1192:ARG:HD3	1:A:1219:GLN:OE1	1.98	0.63
1:A:336:LEU:O	1:A:336:LEU:HD12	1.99	0.63
1:A:458:ASN:HB3	1:A:461:ASP:HB2	1.79	0.63
1:A:965:ILE:HD12	1:A:976:VAL:HG21	1.80	0.63
1:A:987:LEU:HD12	1:A:1041:ILE:CD1	2.28	0.63
1:A:740:ALA:O	1:A:744:LYS:HG3	1.98	0.63
1:A:881:LEU:HD11	1:A:1072:PHE:HB3	1.79	0.63
1:A:819:LEU:HD23	1:A:841:VAL:HB	1.80	0.63
1:A:397:LEU:O	1:A:398:ALA:HB2	1.98	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:744:LYS:O	1:A:748:ASN:HB2	1.99	0.62
1:A:547:LYS:HE2	1:A:646:MET:SD	2.39	0.62
1:A:122:THR:O	1:A:123:ILE:HB	1.99	0.62
1:A:572:VAL:HG12	1:A:574:GLU:H	1.64	0.62
1:A:918:ASN:HD22	1:A:1065:ARG:HB3	1.61	0.62
1:A:1062:ASP:OD1	1:A:1064:HIS:N	2.32	0.62
1:A:1112:TYR:C	1:A:1113:MET:HE2	2.24	0.62
1:A:1117:TYR:HD2	1:A:1252:PHE:HZ	1.47	0.62
1:A:161:ILE:HD12	1:A:194:PHE:CE2	2.34	0.62
1:A:320:LYS:HD3	1:A:321:TYR:CE2	2.35	0.62
1:A:53:ASN:HB3	1:A:56:GLU:HB2	1.80	0.62
1:A:115:ILE:HA	1:A:150:ASN:HD21	1.64	0.62
1:A:549:THR:H	1:A:552:HIS:CD2	2.18	0.62
1:A:98:ILE:O	1:A:104:GLY:HA3	1.98	0.62
1:A:940:ASN:HA	1:A:1021:ASN:O	1.99	0.62
1:A:951:LYS:HG3	1:A:952:TYR:N	2.14	0.62
1:A:85:ASP:O	1:A:89:LYS:HD3	2.00	0.62
1:A:1011:ILE:CG2	1:A:1291:TRP:HZ3	2.13	0.62
1:A:223:HIS:ND1	1:A:351:GLU:OE1	2.32	0.61
1:A:917:PHE:O	1:A:1057:LEU:HD13	2.00	0.61
1:A:1255:PHE:CD2	1:A:1260:LYS:HD2	2.35	0.61
1:A:500:GLN:NE2	1:A:504:LEU:HD21	2.14	0.61
1:A:637:ILE:HD11	1:A:784:ILE:HG23	1.82	0.61
1:A:764:PHE:CZ	1:A:769:LEU:HD22	2.34	0.61
1:A:797:MET:HE2	1:A:866:PHE:CE1	2.35	0.61
1:A:1168:GLY:O	1:A:1170:LYS:HG2	1.99	0.61
1:A:556:ALA:HB2	1:A:576:LEU:HD23	1.81	0.61
1:A:747:ILE:HG21	1:A:764:PHE:CZ	2.36	0.61
1:A:361:LEU:H	1:A:404:GLN:HE22	1.48	0.61
1:A:23:LYS:HB2	1:A:23:LYS:HZ2	1.64	0.61
1:A:789:ASN:OD1	1:A:861:ARG:HG2	2.00	0.61
1:A:962:TYR:CE2	1:A:1057:LEU:HD23	2.35	0.61
1:A:682:VAL:HG12	1:A:684:TYR:CE1	2.35	0.61
1:A:731:LYS:O	1:A:734:GLU:HB3	2.01	0.61
1:A:287:TYR:CE2	1:A:291:LYS:HD2	2.36	0.61
1:A:1101:TRP:HZ3	1:A:1286:PRO:O	1.84	0.61
1:A:325:GLU:HB3	1:A:331:PHE:CD1	2.36	0.60
1:A:455:ILE:HG21	1:A:555:ARG:HD2	1.81	0.60
1:A:584:THR:HG22	1:A:585:PHE:H	1.64	0.60
1:A:15:ASN:OD1	1:A:17:VAL:O	2.19	0.60
1:A:250:TYR:HB2	1:A:429:LEU:CD2	2.31	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:306:THR:HG22	1:A:517:ILE:HA	1.82	0.60
1:A:406:THR:O	1:A:410:ASN:HA	2.01	0.60
1:A:618:THR:HG23	1:A:780:ALA:HB2	1.83	0.60
1:A:769:LEU:O	1:A:772:LYS:HB2	2.01	0.60
1:A:574:GLU:C	1:A:576:LEU:H	2.07	0.60
1:A:872:ASN:HD22	1:A:874:ILE:H	1.47	0.60
1:A:49:ASP:OD1	1:A:52:THR:HB	2.01	0.60
1:A:135:ILE:CG2	1:A:149:LEU:HD12	2.31	0.60
1:A:325:GLU:HB3	1:A:331:PHE:CE1	2.36	0.60
1:A:348:ILE:HG23	1:A:499:ILE:HG12	1.83	0.60
1:A:1128:VAL:HG11	1:A:1191:TYR:CE2	2.37	0.60
1:A:559:PHE:CD1	1:A:559:PHE:C	2.79	0.60
1:A:643:ILE:C	1:A:645:ASN:N	2.58	0.60
1:A:903:LYS:HG3	1:A:921:SER:HB2	1.83	0.60
1:A:702:ARG:HG3	1:A:702:ARG:NH1	2.17	0.59
1:A:961:GLU:HA	1:A:978:LEU:O	2.02	0.59
1:A:1075:PHE:CD2	1:A:1079:LEU:HD11	2.36	0.59
1:A:30:MET:HE3	1:A:33:VAL:HG23	1.83	0.59
1:A:52:THR:HG23	1:A:528:LEU:HD21	1.82	0.59
1:A:163:PHE:HA	1:A:187:ARG:O	2.01	0.59
1:A:250:TYR:HB2	1:A:429:LEU:HD22	1.84	0.59
1:A:591:VAL:HG12	1:A:595:ASN:HD22	1.66	0.59
1:A:852:GLN:OE1	1:A:855:LYS:HE3	2.01	0.59
1:A:974:TRP:HA	1:A:986:THR:O	2.01	0.59
1:A:1099:ASP:HB2	1:A:1103:ASP:N	2.15	0.59
1:A:134:CYS:HB3	1:A:147:GLU:O	2.02	0.59
1:A:170:HIS:HD2	1:A:172:VAL:H	1.45	0.59
1:A:249:ALA:HB3	1:A:252:GLU:CG	2.32	0.59
1:A:336:LEU:CD1	1:A:340:LYS:HE3	2.32	0.59
1:A:634:ILE:CG2	1:A:637:ILE:HG13	2.31	0.59
1:A:872:ASN:ND2	1:A:874:ILE:N	2.50	0.59
1:A:535:GLU:HG3	1:A:537:PHE:CZ	2.37	0.59
1:A:702:ARG:HE	1:A:812:ASP:CG	2.09	0.59
1:A:961:GLU:CB	1:A:979:ASN:HD22	2.13	0.59
1:A:8:PHE:HD1	1:A:19:ILE:HD11	1.67	0.59
1:A:923:LYS:HD3	1:A:1056:LYS:HD3	1.84	0.59
1:A:277:LEU:HD23	1:A:472:THR:CG2	2.30	0.59
1:A:802:PRO:HB3	1:A:932:ILE:HD11	1.84	0.59
1:A:949:ILE:O	1:A:1012:ASN:HA	2.03	0.59
1:A:318:LYS:HZ2	1:A:325:GLU:HG2	1.68	0.59
1:A:428:LEU:O	1:A:543:TYR:N	2.35	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:706:TRP:CZ3	1:A:848:ASP:HB2	2.38	0.59
1:A:576:LEU:HA	1:A:581:ARG:HD2	1.85	0.59
1:A:995:GLN:OE1	1:A:996:ARG:N	2.35	0.59
1:A:1016:PHE:CE2	1:A:1088:TYR:HB2	2.38	0.59
1:A:97:ARG:HG2	1:A:386:ILE:O	2.03	0.58
1:A:498:LEU:O	1:A:502:TYR:HD1	1.85	0.58
1:A:587:SER:H	1:A:617:GLU:CD	2.10	0.58
1:A:1101:TRP:CZ3	1:A:1288:ASP:HB2	2.38	0.58
1:A:573:ASN:C	1:A:575:ALA:H	2.10	0.58
1:A:934:TYR:O	1:A:937:MET:HB2	2.03	0.58
1:A:952:TYR:CE1	1:A:1065:ARG:CZ	2.86	0.58
1:A:566:ILE:HG12	1:A:749:TYR:CG	2.39	0.58
1:A:625:ASP:C	1:A:627:ILE:H	2.10	0.58
1:A:658:PHE:CD1	1:A:889:ILE:HG21	2.38	0.58
1:A:1014:TRP:CH2	1:A:1070:LYS:HE3	2.38	0.58
1:A:1193:LEU:CD1	1:A:1206:LEU:HD13	2.33	0.58
1:A:1255:PHE:O	1:A:1256:ASN:HB2	2.03	0.58
1:A:578:ASN:O	1:A:581:ARG:HB3	2.04	0.58
1:A:857:VAL:O	1:A:863:LEU:HD11	2.01	0.58
1:A:950:PRO:O	1:A:1065:ARG:NH2	2.36	0.58
1:A:1164:LYS:HD3	1:A:1168:GLY:HA2	1.86	0.58
1:A:1211:ILE:HD12	1:A:1211:ILE:N	2.18	0.58
1:A:312:TYR:CE2	1:A:515:ILE:HG13	2.39	0.58
1:A:584:THR:CG2	1:A:585:PHE:N	2.66	0.58
1:A:984:ILE:HG22	1:A:985:TRP:N	2.18	0.58
1:A:11:LYS:HZ1	1:A:81:ASP:HB3	1.69	0.58
1:A:425:PHE:CZ	1:A:537:PHE:HB2	2.39	0.58
1:A:226:ILE:CG2	1:A:265:THR:HG23	2.34	0.58
1:A:455:ILE:HD12	1:A:552:HIS:ND1	2.19	0.58
1:A:566:ILE:HD13	1:A:749:TYR:HB3	1.86	0.58
1:A:764:PHE:HZ	1:A:769:LEU:HD22	1.68	0.58
1:A:1234:LYS:O	1:A:1236:LYS:HG3	2.04	0.58
1:A:1239:LEU:HD13	1:A:1240:GLN:N	2.19	0.58
1:A:952:TYR:CD2	1:A:980:TYR:HA	2.39	0.57
1:A:242:VAL:HG13	1:A:258:VAL:O	2.03	0.57
1:A:258:VAL:HG21	1:A:367:LEU:HD21	1.87	0.57
1:A:1097:LEU:HD23	1:A:1236:LYS:HD2	1.87	0.57
1:A:624:THR:HG21	1:A:633:ILE:HD12	1.85	0.57
1:A:487:ILE:CG2	1:A:488:GLU:N	2.66	0.57
1:A:960:ASN:HD21	1:A:1061:ARG:H	1.52	0.57
1:A:229:GLY:O	1:A:233:TYR:HD1	1.88	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:542:LYS:HE2	1:A:544:GLU:HG3	1.87	0.57
1:A:2:PRO:O	1:A:4:VAL:N	2.37	0.57
1:A:193:THR:HG22	1:A:194:PHE:H	1.70	0.57
1:A:866:PHE:O	1:A:870:ILE:HG12	2.05	0.57
1:A:903:LYS:CB	1:A:922:SER:HB3	2.34	0.57
1:A:72:TYR:CE2	1:A:160:ILE:HD12	2.39	0.57
1:A:140:PRO:C	1:A:142:GLY:H	2.13	0.57
1:A:861:ARG:NH2	1:A:862:LEU:HD21	2.19	0.57
1:A:562:GLY:C	1:A:564:SER:H	2.13	0.57
1:A:963:THR:O	1:A:1057:LEU:HA	2.04	0.57
1:A:1155:TYR:CE2	1:A:1287:VAL:HG22	2.40	0.57
1:A:1296:LEU:HD23	1:A:1296:LEU:N	2.20	0.57
1:A:30:MET:CE	1:A:33:VAL:HG23	2.35	0.56
1:A:473:ASN:ND2	1:A:475:LEU:H	2.03	0.56
1:A:669:PRO:HB3	1:A:720:LYS:HB3	1.87	0.56
1:A:1168:GLY:O	1:A:1170:LYS:N	2.37	0.56
1:A:72:TYR:CZ	1:A:416:LEU:HD13	2.40	0.56
1:A:80:THR:OG1	1:A:83:GLU:HG3	2.06	0.56
1:A:259:SER:OG	1:A:262:GLU:HB2	2.05	0.56
1:A:362:ASN:ND2	1:A:363:ALA:O	2.38	0.56
1:A:395:THR:O	1:A:397:LEU:N	2.37	0.56
1:A:405:ASN:CG	1:A:408:ILE:HD13	2.30	0.56
1:A:480:GLU:HA	1:A:680:ALA:HB3	1.86	0.56
1:A:948:ARG:HB3	1:A:1068:TRP:CB	2.19	0.56
1:A:195:GLY:HA3	1:A:374:PHE:HE1	1.70	0.56
1:A:267:GLY:O	1:A:268:GLY:C	2.48	0.56
1:A:918:ASN:OD1	1:A:1060:CYS:HB3	2.04	0.56
1:A:1080:ASN:HD21	1:A:1082:LYS:HB3	1.69	0.56
1:A:1096:ILE:HG21	1:A:1104:TYR:CD1	2.41	0.56
1:A:1210:GLU:HB3	1:A:1213:ASP:OD2	2.05	0.56
1:A:935:ASN:OD1	1:A:1049:ALA:HB3	2.06	0.56
1:A:1075:PHE:CE2	1:A:1079:LEU:HD11	2.41	0.56
1:A:1114:LEU:HD12	1:A:1115:ASN:N	2.20	0.56
1:A:8:PHE:CD1	1:A:19:ILE:HD11	2.41	0.56
1:A:594:VAL:CG1	1:A:746:ILE:HG21	2.32	0.56
1:A:963:THR:HA	1:A:977:SER:HA	1.88	0.56
1:A:1127:ASN:O	1:A:1132:GLY:HA3	2.06	0.56
1:A:9:ASN:HB2	1:A:12:ASP:CG	2.31	0.56
1:A:115:ILE:HD12	1:A:316:VAL:HG11	1.86	0.56
1:A:628:ALA:O	1:A:629:ASP:CB	2.53	0.56
1:A:1155:TYR:OH	1:A:1291:TRP:HB3	2.06	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:733:LYS:O	1:A:737:GLU:HG3	2.06	0.56
1:A:1168:GLY:C	1:A:1170:LYS:N	2.64	0.56
1:A:1227:ASN:HB3	1:A:1231:ILE:O	2.06	0.56
1:A:660:GLY:O	1:A:662:VAL:N	2.39	0.56
1:A:17:VAL:C	1:A:19:ILE:H	2.13	0.56
1:A:269:HIS:O	1:A:272:LYS:N	2.35	0.56
1:A:879:LEU:HB3	1:A:1074:LEU:HB3	1.88	0.56
1:A:1114:LEU:HD12	1:A:1114:LEU:C	2.30	0.56
1:A:154:ILE:HD13	1:A:187:ARG:HG3	1.87	0.56
1:A:547:LYS:HZ3	1:A:646:MET:HB3	1.71	0.56
1:A:856:TYR:O	1:A:857:VAL:HG23	2.06	0.56
1:A:1029:ILE:HG23	1:A:1029:ILE:O	2.05	0.56
1:A:337:LYS:HA	1:A:340:LYS:HD2	1.88	0.55
1:A:575:ALA:O	1:A:581:ARG:CB	2.53	0.55
1:A:952:TYR:HB2	1:A:1003:GLN:NE2	2.18	0.55
1:A:1136:LEU:HD11	1:A:1252:PHE:CD2	2.41	0.55
1:A:1085:LYS:HE3	1:A:1089:ASP:OD2	2.06	0.55
1:A:1137:LYS:HG3	1:A:1138:GLY:H	1.70	0.55
1:A:1173:ILE:HB	1:A:1175:ARG:HH12	1.71	0.55
1:A:176:THR:HG22	1:A:236:ALA:HB3	1.88	0.55
1:A:951:LYS:NZ	1:A:1151:ASN:OD1	2.40	0.55
1:A:990:THR:C	1:A:992:GLU:N	2.65	0.55
1:A:1167:SER:HB3	1:A:1170:LYS:NZ	2.21	0.55
1:A:1204:LYS:H	1:A:1262:VAL:HG13	1.71	0.55
1:A:9:ASN:HB2	1:A:12:ASP:OD1	2.06	0.55
1:A:542:LYS:HE2	1:A:544:GLU:CG	2.36	0.55
1:A:706:TRP:CD2	1:A:808:LEU:HD13	2.41	0.55
1:A:972:SER:HB2	1:A:1048:HIS:HB2	1.88	0.55
1:A:1130:ILE:HD12	1:A:1131:ARG:N	2.22	0.55
1:A:555:ARG:O	1:A:558:GLU:HG3	2.07	0.55
1:A:1155:TYR:CZ	1:A:1287:VAL:HA	2.41	0.55
1:A:1211:ILE:H	1:A:1211:ILE:CD1	2.18	0.55
1:A:22:ILE:CG2	1:A:24:ILE:HD12	2.37	0.55
1:A:888:LEU:HB3	1:A:900:ILE:HD11	1.89	0.55
1:A:243:PHE:CZ	1:A:273:PHE:HB3	2.41	0.55
1:A:429:LEU:O	1:A:454:CYS:HA	2.06	0.55
1:A:1276:ARG:O	1:A:1278:LEU:HG	2.07	0.55
1:A:1022:ASN:HB2	1:A:1078:GLU:OE2	2.07	0.55
1:A:226:ILE:HD13	1:A:350:THR:CA	2.36	0.54
1:A:395:THR:C	1:A:397:LEU:N	2.58	0.54
1:A:754:TYR:OH	1:A:757:GLU:O	2.23	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1013:ARG:HG3	1:A:1101:TRP:HD1	1.72	0.54
1:A:1277:THR:HG22	1:A:1277:THR:O	2.07	0.54
1:A:2:PRO:HG2	1:A:39:HIS:NE2	2.22	0.54
1:A:212:LYS:CE	1:A:371:LYS:HB2	2.37	0.54
1:A:458:ASN:HD22	1:A:459:ASN:H	1.55	0.54
1:A:797:MET:HE2	1:A:866:PHE:HE1	1.72	0.54
1:A:827:ARG:C	1:A:829:THR:H	2.14	0.54
1:A:1020:THR:CG2	1:A:1078:GLU:HG3	2.36	0.54
1:A:48:ARG:CZ	1:A:59:LEU:HD13	2.36	0.54
1:A:422:LEU:HD23	1:A:423:PHE:CE1	2.42	0.54
1:A:888:LEU:HD21	1:A:914:ILE:HD11	1.89	0.54
1:A:984:ILE:HG12	1:A:998:VAL:CG2	2.32	0.54
1:A:1034:ARG:CZ	1:A:1036:ILE:HD11	2.36	0.54
1:A:322:LEU:HD12	1:A:341:LEU:HB2	1.88	0.54
1:A:632:ILE:HD12	1:A:786:LYS:HB3	1.89	0.54
1:A:815:LEU:HD23	1:A:845:LEU:CD1	2.36	0.54
1:A:1112:TYR:CZ	1:A:1159:LYS:HE2	2.42	0.54
1:A:566:ILE:CD1	1:A:749:TYR:HB3	2.37	0.54
1:A:1130:ILE:HD12	1:A:1130:ILE:C	2.32	0.54
1:A:72:TYR:CE1	1:A:416:LEU:HD13	2.43	0.54
1:A:115:ILE:CG2	1:A:317:PHE:HE1	2.21	0.54
1:A:394:ASN:O	1:A:395:THR:C	2.51	0.54
1:A:584:THR:CG2	1:A:585:PHE:H	2.21	0.54
1:A:669:PRO:HG3	1:A:721:VAL:HG22	1.89	0.54
1:A:746:ILE:O	1:A:747:ILE:C	2.49	0.54
1:A:1113:MET:HE1	1:A:1284:PHE:CD2	2.41	0.54
1:A:647:LEU:O	1:A:648:TYR:C	2.51	0.54
1:A:1077:LYS:HE3	1:A:1083:GLU:OE1	2.08	0.54
1:A:11:LYS:HZ2	1:A:81:ASP:HB3	1.72	0.54
1:A:97:ARG:HD3	1:A:358:PHE:CE1	2.43	0.54
1:A:178:ASN:O	1:A:289:LYS:HB3	2.08	0.54
1:A:816:LYS:O	1:A:820:LEU:HD23	2.08	0.54
1:A:11:LYS:NZ	1:A:81:ASP:CB	2.70	0.54
1:A:663:ILE:O	1:A:663:ILE:HG22	2.08	0.54
1:A:903:LYS:CG	1:A:921:SER:HB2	2.38	0.53
1:A:309:SER:O	1:A:312:TYR:N	2.41	0.53
1:A:540:GLY:O	1:A:541:LYS:C	2.50	0.53
1:A:754:TYR:CG	1:A:755:THR:N	2.76	0.53
1:A:123:ILE:HD12	1:A:123:ILE:N	2.23	0.53
1:A:515:ILE:HG22	1:A:515:ILE:O	2.08	0.53
1:A:418:ASN:ND2	1:A:420:THR:N	2.56	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:423:PHE:O	1:A:426:TYR:HD2	1.90	0.53
1:A:909:ILE:HD11	1:A:1106:GLN:OE1	2.08	0.53
1:A:1163:LYS:HD3	1:A:1183:ASN:ND2	2.24	0.53
1:A:573:ASN:C	1:A:575:ALA:N	2.63	0.53
1:A:658:PHE:HD1	1:A:889:ILE:HG21	1.72	0.53
1:A:661:ALA:HB1	1:A:791:CYS:HB3	1.89	0.53
1:A:17:VAL:O	1:A:18:ASP:OD1	2.27	0.53
1:A:458:ASN:ND2	1:A:459:ASN:N	2.57	0.53
1:A:772:LYS:O	1:A:774:ASN:N	2.41	0.53
1:A:925:GLU:HB2	1:A:1054:MET:SD	2.49	0.53
1:A:432:ARG:N	1:A:545:LEU:O	2.42	0.53
1:A:797:MET:CE	1:A:866:PHE:HE1	2.22	0.53
1:A:1005:ILE:O	1:A:1151:ASN:HA	2.09	0.53
1:A:1164:LYS:HD3	1:A:1168:GLY:CA	2.39	0.53
1:A:52:THR:CG2	1:A:528:LEU:HD21	2.39	0.53
1:A:269:HIS:O	1:A:272:LYS:HB2	2.09	0.53
1:A:318:LYS:CG	1:A:331:PHE:CE1	2.92	0.53
1:A:535:GLU:HG3	1:A:535:GLU:O	2.09	0.53
1:A:824:TYR:O	1:A:827:ARG:HG2	2.09	0.53
1:A:1117:TYR:C	1:A:1119:PRO:HD3	2.34	0.53
1:A:549:THR:N	1:A:552:HIS:HD2	2.05	0.53
1:A:641:LEU:HD11	1:A:732:MET:SD	2.49	0.53
1:A:816:LYS:HE3	1:A:842:ASN:HA	1.89	0.53
1:A:1116:LEU:HB2	1:A:1281:SER:O	2.09	0.53
1:A:594:VAL:HG12	1:A:746:ILE:HD13	1.91	0.52
1:A:1146:THR:O	1:A:1147:ASN:HB2	2.09	0.52
1:A:1241:ASP:HB3	1:A:1247:ILE:HD11	1.91	0.52
1:A:903:LYS:HA	1:A:903:LYS:HE2	1.89	0.52
1:A:22:ILE:HD12	1:A:22:ILE:H	1.72	0.52
1:A:144:TYR:CD1	1:A:144:TYR:C	2.87	0.52
1:A:226:ILE:HG21	1:A:265:THR:HG23	1.90	0.52
1:A:407:GLU:O	1:A:410:ASN:HB2	2.08	0.52
1:A:552:HIS:O	1:A:555:ARG:HB3	2.09	0.52
1:A:1112:TYR:CE1	1:A:1159:LYS:HE2	2.44	0.52
1:A:1205:ILE:O	1:A:1206:LEU:HB2	2.08	0.52
1:A:906:PHE:CE2	1:A:914:ILE:HG12	2.44	0.52
1:A:1241:ASP:OD1	1:A:1241:ASP:C	2.51	0.52
1:A:318:LYS:NZ	1:A:325:GLU:HG2	2.25	0.52
1:A:348:ILE:HD13	1:A:494:ILE:HG23	1.90	0.52
1:A:589:ASP:OD1	1:A:593:LYS:HE3	2.10	0.52
1:A:702:ARG:C	1:A:702:ARG:HD2	2.35	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:947:ILE:CG2	1:A:1015:ILE:HB	2.40	0.52
1:A:420:THR:O	1:A:421:GLY:C	2.51	0.52
1:A:874:ILE:C	1:A:876:THR:H	2.17	0.52
1:A:1163:LYS:HG3	1:A:1183:ASN:ND2	2.24	0.52
1:A:238:ASN:HD21	1:A:240:ASN:HD22	1.58	0.52
1:A:669:PRO:HG3	1:A:721:VAL:CG2	2.39	0.52
1:A:684:TYR:CD2	1:A:690:LEU:HD23	2.44	0.52
1:A:735:ALA:O	1:A:738:ASN:N	2.42	0.52
1:A:952:TYR:HE2	1:A:981:GLY:H	1.56	0.52
1:A:1009:ASP:HA	1:A:1013:ARG:HH11	1.73	0.52
1:A:614:PHE:CD2	1:A:773:LEU:HD22	2.45	0.52
1:A:15:ASN:O	1:A:17:VAL:N	2.42	0.52
1:A:197:GLU:CG	1:A:212:LYS:HG2	2.39	0.52
1:A:989:ASP:HB2	1:A:1046:ASN:O	2.10	0.52
1:A:660:GLY:C	1:A:662:VAL:H	2.18	0.52
1:A:761:ASN:C	1:A:763:ASN:H	2.16	0.51
1:A:872:ASN:HD22	1:A:874:ILE:N	2.05	0.51
1:A:872:ASN:HB3	1:A:875:ASN:ND2	2.26	0.51
1:A:574:GLU:N	1:A:574:GLU:CD	2.66	0.51
1:A:1041:ILE:C	1:A:1043:ASN:H	2.18	0.51
1:A:1154:LEU:O	1:A:1156:ARG:N	2.40	0.51
1:A:1163:LYS:HD3	1:A:1183:ASN:HD22	1.75	0.51
1:A:46:PRO:O	1:A:84:LYS:HD3	2.09	0.51
1:A:258:VAL:HG22	1:A:366:PHE:HE2	1.74	0.51
1:A:282:PHE:O	1:A:285:TYR:HB3	2.10	0.51
1:A:554:LEU:HA	1:A:557:GLN:NE2	2.26	0.51
1:A:742:ALA:C	1:A:744:LYS:H	2.18	0.51
1:A:763:ASN:ND2	1:A:765:ASN:HD21	2.04	0.51
1:A:139:GLN:NE2	1:A:145:ARG:NH1	2.59	0.51
1:A:674:PRO:C	1:A:807:ARG:NH1	2.69	0.51
1:A:948:ARG:HG2	1:A:948:ARG:NH1	2.23	0.51
1:A:1288:ASP:C	1:A:1290:GLY:H	2.18	0.51
1:A:973:GLY:N	1:A:988:GLN:O	2.44	0.51
1:A:114:GLY:O	1:A:320:LYS:HD2	2.11	0.51
1:A:146:SER:OG	1:A:520:LEU:N	2.42	0.51
1:A:193:THR:OG1	1:A:376:ILE:HD13	2.11	0.51
1:A:258:VAL:HG13	1:A:366:PHE:CE2	2.46	0.51
1:A:275:ASP:OD1	1:A:278:GLN:HG3	2.11	0.51
1:A:336:LEU:HD12	1:A:340:LYS:HE3	1.93	0.51
1:A:649:LYS:O	1:A:650:ASP:O	2.28	0.51
1:A:1012:ASN:CG	1:A:1012:ASN:O	2.53	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:29:GLN:CD	1:A:29:GLN:N	2.68	0.51
1:A:755:THR:O	1:A:756:GLU:CB	2.55	0.51
1:A:310:LEU:O	1:A:314:LYS:HG3	2.11	0.51
1:A:614:PHE:O	1:A:618:THR:HB	2.10	0.51
1:A:35:ALA:CB	1:A:45:ILE:HG12	2.38	0.50
1:A:429:LEU:CD2	1:A:543:TYR:HB2	2.39	0.50
1:A:535:GLU:O	1:A:536:ARG:C	2.54	0.50
1:A:972:SER:O	1:A:973:GLY:O	2.30	0.50
1:A:74:ASP:O	1:A:76:THR:N	2.44	0.50
1:A:139:GLN:CD	1:A:145:ARG:NH1	2.69	0.50
1:A:351:GLU:O	1:A:355:VAL:HG23	2.10	0.50
1:A:487:ILE:HG22	1:A:488:GLU:N	2.26	0.50
1:A:929:LYS:O	1:A:933:VAL:HG23	2.12	0.50
1:A:1041:ILE:HG23	1:A:1044:LEU:HB2	1.92	0.50
1:A:1197:ALA:HB2	1:A:1247:ILE:CD1	2.42	0.50
1:A:3:PHE:O	1:A:4:VAL:HB	2.10	0.50
1:A:167:SER:HB2	1:A:184:GLN:NE2	2.26	0.50
1:A:763:ASN:HB2	1:A:765:ASN:HD21	1.73	0.50
1:A:962:TYR:CE1	1:A:978:LEU:HB2	2.46	0.50
1:A:36:PHE:CD1	1:A:36:PHE:N	2.79	0.50
1:A:492:GLU:C	1:A:494:ILE:H	2.18	0.50
1:A:947:ILE:O	1:A:1014:TRP:HA	2.11	0.50
1:A:21:TYR:O	1:A:138:ILE:HB	2.12	0.50
1:A:1161:ILE:HG22	1:A:1163:LYS:HD3	1.93	0.50
1:A:70:VAL:HG12	1:A:71:SER:N	2.27	0.50
1:A:150:ASN:O	1:A:232:LEU:HD21	2.12	0.50
1:A:428:LEU:HD23	1:A:542:LYS:HG3	1.92	0.50
1:A:431:VAL:HB	1:A:453:LEU:HD23	1.94	0.50
1:A:746:ILE:HG22	1:A:747:ILE:N	2.26	0.50
1:A:1010:TYR:HB3	1:A:1015:ILE:CD1	2.29	0.50
1:A:1133:TYR:CD2	1:A:1260:LYS:NZ	2.80	0.50
1:A:38:ILE:O	1:A:39:HIS:HB2	2.11	0.50
1:A:123:ILE:O	1:A:124:ASP:C	2.53	0.50
1:A:247:THR:HG21	1:A:254:SER:O	2.12	0.50
1:A:355:VAL:HG12	1:A:355:VAL:O	2.12	0.50
1:A:574:GLU:C	1:A:576:LEU:N	2.70	0.50
1:A:674:PRO:C	1:A:807:ARG:HH11	2.19	0.50
1:A:1026:ASN:HB3	1:A:1040:PRO:HA	1.94	0.50
1:A:1062:ASP:OD1	1:A:1062:ASP:C	2.54	0.50
1:A:1122:TYR:CE1	1:A:1137:LYS:HB3	2.47	0.50
1:A:422:LEU:HD23	1:A:423:PHE:HE1	1.77	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:458:ASN:ND2	1:A:459:ASN:H	2.10	0.50
1:A:481:ILE:CD1	1:A:698:ALA:HA	2.40	0.50
1:A:624:THR:CG2	1:A:633:ILE:HD12	2.41	0.50
1:A:1104:TYR:CD2	1:A:1173:ILE:HD13	2.47	0.50
1:A:1288:ASP:O	1:A:1290:GLY:N	2.45	0.50
1:A:74:ASP:O	1:A:75:SER:C	2.55	0.49
1:A:201:GLU:HG3	1:A:361:LEU:HD13	1.92	0.49
1:A:537:PHE:HB3	1:A:538:PRO:HD2	1.94	0.49
1:A:673:ILE:O	1:A:807:ARG:NH1	2.45	0.49
1:A:920:GLU:O	1:A:920:GLU:HG3	2.12	0.49
1:A:10:TYR:HA	1:A:36:PHE:HZ	1.76	0.49
1:A:11:LYS:HZ1	1:A:81:ASP:CG	2.19	0.49
1:A:379:VAL:N	1:A:380:PRO:HD2	2.28	0.49
1:A:641:LEU:HD11	1:A:732:MET:HG2	1.95	0.49
1:A:935:ASN:C	1:A:937:MET:H	2.20	0.49
1:A:1236:LYS:NZ	1:A:1282:TRP:O	2.43	0.49
1:A:156:PRO:HD3	1:A:189:SER:HB2	1.93	0.49
1:A:247:THR:HG23	1:A:254:SER:HA	1.93	0.49
1:A:487:ILE:HG23	1:A:488:GLU:CD	2.37	0.49
1:A:638:GLY:N	1:A:639:PRO:HD2	2.27	0.49
1:A:965:ILE:O	1:A:976:VAL:N	2.45	0.49
1:A:114:GLY:O	1:A:320:LYS:CE	2.60	0.49
1:A:571:SER:OG	1:A:572:VAL:N	2.44	0.49
1:A:743:THR:CG2	1:A:743:THR:O	2.61	0.49
1:A:869:TYR:CD1	1:A:869:TYR:C	2.91	0.49
1:A:979:ASN:O	1:A:980:TYR:C	2.55	0.49
1:A:1233:ASN:HD22	1:A:1271:ILE:HG23	1.75	0.49
1:A:1291:TRP:O	1:A:1293:GLU:N	2.46	0.49
1:A:79:SER:N	1:A:83:GLU:OE1	2.45	0.49
1:A:318:LYS:HG3	1:A:331:PHE:HE1	1.77	0.49
1:A:380:PRO:HG2	1:A:383:ASN:HB2	1.95	0.49
1:A:883:TYR:H	1:A:912:ASN:CG	2.21	0.49
1:A:1209:LEU:CD1	1:A:1217:LEU:HD12	2.43	0.49
1:A:1255:PHE:HD2	1:A:1260:LYS:HD2	1.76	0.49
1:A:72:TYR:CD2	1:A:160:ILE:HD12	2.48	0.49
1:A:269:HIS:HE1	1:A:859:ASN:HD22	1.59	0.49
1:A:872:ASN:ND2	1:A:874:ILE:CB	2.64	0.49
1:A:986:THR:HG21	1:A:996:ARG:NH2	2.27	0.49
1:A:22:ILE:HD13	1:A:35:ALA:CB	2.37	0.49
1:A:961:GLU:CA	1:A:979:ASN:HD22	2.26	0.49
1:A:962:TYR:CD2	1:A:1057:LEU:HD23	2.48	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1288:ASP:C	1:A:1290:GLY:N	2.68	0.49
1:A:209:GLY:HA3	1:A:213:PHE:CZ	2.48	0.49
1:A:243:PHE:HD1	1:A:260:PHE:HE1	1.59	0.49
1:A:378:ILE:HG23	1:A:384:TYR:CD1	2.48	0.49
1:A:583:TYR:CG	1:A:584:THR:N	2.80	0.49
1:A:688:LYS:O	1:A:689:VAL:C	2.55	0.49
1:A:717:TRP:HA	1:A:800:MET:HE1	1.94	0.49
1:A:504:LEU:C	1:A:506:PHE:H	2.21	0.49
1:A:526:GLY:O	1:A:527:GLN:CB	2.61	0.48
1:A:559:PHE:HB3	1:A:582:VAL:CG2	2.37	0.48
1:A:966:ASN:HD22	1:A:975:LYS:HG3	1.78	0.48
1:A:3:PHE:HA	1:A:96:GLU:OE1	2.12	0.48
1:A:172:VAL:HG12	1:A:172:VAL:O	2.12	0.48
1:A:702:ARG:NH1	1:A:702:ARG:CG	2.76	0.48
1:A:954:ASN:O	1:A:1148:ILE:HD13	2.13	0.48
1:A:966:ASN:HA	1:A:975:LYS:HB2	1.95	0.48
1:A:1105:LEU:HD21	1:A:1162:ILE:CD1	2.43	0.48
1:A:1109:LYS:NZ	1:A:1286:PRO:CB	2.76	0.48
1:A:45:ILE:HG22	1:A:47:GLU:HG2	1.96	0.48
1:A:235:ILE:HG23	1:A:235:ILE:O	2.12	0.48
1:A:1111:TYR:CD1	1:A:1286:PRO:HB3	2.47	0.48
1:A:135:ILE:HG21	1:A:149:LEU:HD12	1.94	0.48
1:A:306:THR:CG2	1:A:517:ILE:HG22	2.42	0.48
1:A:384:TYR:HA	1:A:389:GLY:O	2.12	0.48
1:A:1171:ASP:OD2	1:A:1173:ILE:HB	2.13	0.48
1:A:1173:ILE:HB	1:A:1175:ARG:NH1	2.28	0.48
1:A:15:ASN:C	1:A:17:VAL:H	2.20	0.48
1:A:159:ASP:C	1:A:159:ASP:OD1	2.57	0.48
1:A:555:ARG:HE	1:A:555:ARG:HA	1.78	0.48
1:A:647:LEU:O	1:A:649:LYS:N	2.46	0.48
1:A:748:ASN:O	1:A:749:TYR:C	2.56	0.48
1:A:974:TRP:H	1:A:987:LEU:HA	1.77	0.48
1:A:1027:SER:CB	1:A:1041:ILE:HD11	2.24	0.48
1:A:1267:TYR:O	1:A:1268:ASN:C	2.57	0.48
1:A:17:VAL:O	1:A:19:ILE:N	2.46	0.48
1:A:309:SER:C	1:A:311:GLN:N	2.69	0.48
1:A:609:GLN:HG2	1:A:613:ASP:OD2	2.14	0.48
1:A:621:VAL:CG1	1:A:632:ILE:HG23	2.44	0.48
1:A:772:LYS:C	1:A:774:ASN:N	2.70	0.48
1:A:119:GLY:C	1:A:121:SER:N	2.70	0.48
1:A:214:ALA:CB	1:A:413:PHE:CE1	2.97	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:408:ILE:C	1:A:410:ASN:H	2.22	0.48
1:A:641:LEU:HB2	1:A:643:ILE:CG1	2.39	0.48
1:A:676:LEU:CD1	1:A:808:LEU:HD23	2.44	0.48
1:A:742:ALA:C	1:A:744:LYS:N	2.71	0.48
1:A:1137:LYS:HG3	1:A:1138:GLY:N	2.28	0.48
1:A:118:TRP:CD1	1:A:317:PHE:HZ	2.31	0.48
1:A:210:ALA:H	1:A:405:ASN:HD21	1.51	0.48
1:A:1253:HIS:O	1:A:1259:ALA:HA	2.14	0.48
1:A:171:GLU:HG2	1:A:172:VAL:CG2	2.43	0.48
1:A:311:GLN:NE2	1:A:312:TYR:N	2.61	0.48
1:A:559:PHE:CD1	1:A:559:PHE:O	2.67	0.48
1:A:903:LYS:HB2	1:A:922:SER:CB	2.41	0.48
1:A:662:VAL:C	1:A:664:LEU:H	2.22	0.48
1:A:760:ASN:O	1:A:761:ASN:CB	2.62	0.48
1:A:1135:TYR:CD1	1:A:1135:TYR:N	2.81	0.48
1:A:22:ILE:HG21	1:A:24:ILE:HD12	1.96	0.47
1:A:33:VAL:HG12	1:A:34:LYS:N	2.29	0.47
1:A:970:ASN:O	1:A:971:ASN:HB2	2.13	0.47
1:A:77:TYR:OH	1:A:191:ASP:OD2	2.27	0.47
1:A:569:THR:O	1:A:595:ASN:ND2	2.45	0.47
1:A:796:LEU:CD2	1:A:801:ILE:HG12	2.44	0.47
1:A:838:LYS:NZ	1:A:838:LYS:HB3	2.29	0.47
1:A:1104:TYR:HB3	1:A:1173:ILE:HG23	1.96	0.47
1:A:1199:GLN:NE2	1:A:1204:LYS:HA	2.29	0.47
1:A:304:VAL:HG23	1:A:304:VAL:O	2.14	0.47
1:A:455:ILE:CD1	1:A:552:HIS:ND1	2.78	0.47
1:A:974:TRP:HB2	1:A:985:TRP:CZ2	2.50	0.47
1:A:1100:PHE:CD1	1:A:1283:GLU:HG2	2.43	0.47
1:A:1242:ASN:C	1:A:1244:GLY:H	2.22	0.47
1:A:1296:LEU:H	1:A:1296:LEU:CD2	2.27	0.47
1:A:135:ILE:HG23	1:A:149:LEU:HD12	1.96	0.47
1:A:757:GLU:HB2	1:A:760:ASN:HD22	1.76	0.47
1:A:997:VAL:HG11	1:A:1027:SER:O	2.14	0.47
1:A:1009:ASP:HA	1:A:1013:ARG:NH1	2.29	0.47
1:A:1023:ARG:HD3	1:A:1023:ARG:C	2.38	0.47
1:A:1269:ARG:NH1	1:A:1273:ARG:HH11	2.11	0.47
1:A:93:LYS:NZ	1:A:378:ILE:O	2.34	0.47
1:A:459:ASN:C	1:A:461:ASP:H	2.21	0.47
1:A:671:ILE:HG22	1:A:673:ILE:HD11	1.97	0.47
1:A:705:LYS:O	1:A:705:LYS:HD3	2.15	0.47
1:A:1113:MET:HE2	1:A:1113:MET:N	2.29	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1193:LEU:HD12	1:A:1194:ALA:N	2.28	0.47
1:A:149:LEU:HD13	1:A:152:VAL:CG2	2.45	0.47
1:A:212:LYS:HE2	1:A:371:LYS:CB	2.43	0.47
1:A:217:PRO:CG	1:A:378:ILE:HD11	2.33	0.47
1:A:248:ASN:O	1:A:249:ALA:HB2	2.14	0.47
1:A:299:LYS:HE3	1:A:299:LYS:HB2	1.74	0.47
1:A:491:GLU:O	1:A:492:GLU:C	2.58	0.47
1:A:944:SER:HA	1:A:1017:VAL:O	2.15	0.47
1:A:974:TRP:CE3	1:A:985:TRP:CZ3	3.02	0.47
1:A:1010:TYR:HD2	1:A:1015:ILE:CD1	2.28	0.47
1:A:554:LEU:HD11	1:A:734:GLU:HG2	1.97	0.47
1:A:761:ASN:C	1:A:763:ASN:N	2.73	0.47
1:A:802:PRO:CB	1:A:932:ILE:HD11	2.45	0.47
1:A:968:MET:HA	1:A:972:SER:CB	2.39	0.47
1:A:145:ARG:HG3	1:A:145:ARG:O	2.15	0.47
1:A:197:GLU:HG2	1:A:212:LYS:HG2	1.96	0.47
1:A:627:ILE:HD12	1:A:627:ILE:N	2.30	0.47
1:A:758:GLU:C	1:A:760:ASN:H	2.22	0.47
1:A:947:ILE:HG22	1:A:1015:ILE:HB	1.97	0.47
1:A:948:ARG:HA	1:A:1013:ARG:O	2.15	0.47
1:A:168:PHE:HA	1:A:528:LEU:HA	1.96	0.47
1:A:420:THR:O	1:A:420:THR:CG2	2.59	0.47
1:A:576:LEU:CA	1:A:581:ARG:HB2	2.35	0.47
1:A:585:PHE:CE1	1:A:586:PHE:CE1	3.03	0.47
1:A:663:ILE:O	1:A:663:ILE:CG2	2.62	0.47
1:A:702:ARG:O	1:A:702:ARG:HD2	2.14	0.47
1:A:1099:ASP:C	1:A:1101:TRP:N	2.71	0.47
1:A:1205:ILE:O	1:A:1261:LEU:O	2.33	0.47
1:A:18:ASP:HA	1:A:37:LYS:HB3	1.97	0.46
1:A:105:ARG:NH1	1:A:508:PHE:CZ	2.83	0.46
1:A:171:GLU:HG2	1:A:172:VAL:HG23	1.97	0.46
1:A:198:GLU:CD	1:A:201:GLU:HG2	2.40	0.46
1:A:757:GLU:CB	1:A:760:ASN:ND2	2.78	0.46
1:A:987:LEU:CD1	1:A:1041:ILE:HD13	2.43	0.46
1:A:1014:TRP:HD1	1:A:1102:GLY:HA3	1.80	0.46
1:A:1096:ILE:HD12	1:A:1104:TYR:CE1	2.50	0.46
1:A:1124:ASP:HB2	1:A:1137:LYS:HB2	1.97	0.46
1:A:195:GLY:HA3	1:A:374:PHE:CE1	2.49	0.46
1:A:910:ASP:C	1:A:912:ASN:H	2.24	0.46
1:A:954:ASN:HB3	1:A:956:ILE:HG13	1.97	0.46
1:A:1233:ASN:OD1	1:A:1235:CYS:N	2.43	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:167:SER:HB2	1:A:184:GLN:HE22	1.81	0.46
1:A:227:HIS:CE1	1:A:261:GLU:OE1	2.68	0.46
1:A:346:THR:HG22	1:A:347:GLU:N	2.30	0.46
1:A:553:TYR:CD2	1:A:642:ASN:HB2	2.51	0.46
1:A:915:GLN:HB2	1:A:1068:TRP:CZ3	2.50	0.46
1:A:21:TYR:HD1	1:A:21:TYR:HA	1.68	0.46
1:A:565:ARG:O	1:A:566:ILE:C	2.58	0.46
1:A:729:ARG:HH22	1:A:789:ASN:ND2	2.12	0.46
1:A:757:GLU:CB	1:A:760:ASN:HD22	2.28	0.46
1:A:2:PRO:HA	1:A:108:LEU:HD13	1.98	0.46
1:A:6:LYS:HD2	1:A:18:ASP:OD2	2.16	0.46
1:A:78:LEU:H	1:A:83:GLU:CD	2.24	0.46
1:A:943:THR:CG2	1:A:1019:ILE:HB	2.46	0.46
1:A:1018:THR:HG21	1:A:1084:ILE:HD12	1.97	0.46
1:A:1041:ILE:O	1:A:1041:ILE:CG2	2.62	0.46
1:A:1111:TYR:CE1	1:A:1286:PRO:HB3	2.50	0.46
1:A:161:ILE:HB	1:A:194:PHE:CZ	2.51	0.46
1:A:174:ASN:C	1:A:176:THR:H	2.24	0.46
1:A:660:GLY:C	1:A:662:VAL:N	2.73	0.46
1:A:1028:LYS:HB3	1:A:1035:LEU:CD1	2.46	0.46
1:A:119:GLY:O	1:A:121:SER:N	2.48	0.46
1:A:397:LEU:O	1:A:398:ALA:CB	2.62	0.46
1:A:574:GLU:HA	1:A:574:GLU:OE1	2.15	0.46
1:A:671:ILE:HD13	1:A:803:TYR:CD2	2.50	0.46
1:A:719:ALA:HA	1:A:723:THR:HG23	1.98	0.46
1:A:919:LEU:C	1:A:921:SER:H	2.21	0.46
1:A:24:ILE:CD1	1:A:45:ILE:CD1	2.94	0.46
1:A:65:ALA:O	1:A:536:ARG:NH2	2.48	0.46
1:A:643:ILE:CG2	1:A:664:LEU:HD23	2.40	0.46
1:A:1080:ASN:OD1	1:A:1083:GLU:HG3	2.16	0.46
1:A:119:GLY:C	1:A:121:SER:H	2.23	0.46
1:A:318:LYS:HG3	1:A:331:PHE:CE1	2.51	0.46
1:A:534:ILE:HG22	1:A:534:ILE:O	2.15	0.46
1:A:586:PHE:HB3	1:A:617:GLU:OE2	2.15	0.46
1:A:696:ASP:OD1	1:A:840:LYS:NZ	2.41	0.46
1:A:757:GLU:HG3	1:A:757:GLU:O	2.16	0.46
1:A:763:ASN:C	1:A:765:ASN:N	2.72	0.46
1:A:772:LYS:O	1:A:773:LEU:C	2.59	0.46
1:A:965:ILE:HB	1:A:976:VAL:HG23	1.97	0.46
1:A:984:ILE:CG2	1:A:998:VAL:HG22	2.44	0.46
1:A:1205:ILE:HA	1:A:1262:VAL:HG22	1.98	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:92:THR:HG22	1:A:93:LYS:N	2.29	0.46
1:A:105:ARG:HG2	1:A:508:PHE:HE1	1.78	0.46
1:A:207:LEU:HD21	1:A:775:GLU:OE2	2.16	0.46
1:A:706:TRP:CE3	1:A:808:LEU:HD13	2.51	0.46
1:A:1199:GLN:HE22	1:A:1204:LYS:HB3	1.80	0.46
1:A:30:MET:HE3	1:A:33:VAL:CG2	2.46	0.45
1:A:115:ILE:HG22	1:A:317:PHE:CE1	2.48	0.45
1:A:318:LYS:HG2	1:A:331:PHE:CE1	2.51	0.45
1:A:326:ASP:OD1	1:A:328:SER:N	2.49	0.45
1:A:566:ILE:HG23	1:A:749:TYR:CB	2.46	0.45
1:A:1099:ASP:N	1:A:1103:ASP:O	2.47	0.45
1:A:1143:VAL:HG12	1:A:1149:TYR:HE1	1.81	0.45
1:A:3:PHE:O	1:A:96:GLU:CD	2.58	0.45
1:A:3:PHE:O	1:A:96:GLU:OE2	2.35	0.45
1:A:39:HIS:HE1	1:A:511:GLU:OE2	1.97	0.45
1:A:48:ARG:NH1	1:A:77:TYR:HB3	2.32	0.45
1:A:62:PRO:HG2	1:A:64:GLU:O	2.16	0.45
1:A:798:ASN:HD22	1:A:893:ARG:HG2	1.81	0.45
1:A:824:TYR:C	1:A:826:ASN:H	2.24	0.45
1:A:1197:ALA:HB2	1:A:1247:ILE:HD13	1.98	0.45
1:A:1203:GLU:HB3	1:A:1262:VAL:CG1	2.44	0.45
1:A:1238:ASN:HA	1:A:1249:PHE:HA	1.97	0.45
1:A:225:LEU:C	1:A:227:HIS:N	2.68	0.45
1:A:315:ASN:O	1:A:318:LYS:HB3	2.16	0.45
1:A:390:PHE:O	1:A:392:LEU:N	2.48	0.45
1:A:458:ASN:HD22	1:A:459:ASN:N	2.13	0.45
1:A:661:ALA:CB	1:A:791:CYS:HB3	2.46	0.45
1:A:843:ASN:O	1:A:846:SER:OG	2.34	0.45
1:A:906:PHE:HD2	1:A:911:LYS:O	2.00	0.45
1:A:1109:LYS:HA	1:A:1110:PRO:HD2	1.79	0.45
1:A:1268:ASN:O	1:A:1272:GLU:HG3	2.16	0.45
1:A:102:ASP:HB2	1:A:357:PHE:CE2	2.44	0.45
1:A:426:TYR:CD1	1:A:426:TYR:C	2.94	0.45
1:A:566:ILE:HG23	1:A:749:TYR:CG	2.51	0.45
1:A:671:ILE:HD13	1:A:803:TYR:HD2	1.82	0.45
1:A:683:SER:HA	1:A:822:TYR:OH	2.17	0.45
1:A:764:PHE:O	1:A:764:PHE:CD1	2.70	0.45
1:A:1100:PHE:CB	1:A:1285:ILE:HG12	2.47	0.45
1:A:14:VAL:HA	1:A:19:ILE:HG22	1.99	0.45
1:A:144:TYR:OH	1:A:520:LEU:O	2.27	0.45
1:A:606:TRP:O	1:A:609:GLN:HB3	2.16	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:610:LEU:HD12	1:A:747:ILE:CD1	2.41	0.45
1:A:943:THR:HG22	1:A:1019:ILE:HB	1.99	0.45
1:A:1186:VAL:N	1:A:1189:LYS:O	2.49	0.45
1:A:289:LYS:HD3	1:A:289:LYS:HA	1.71	0.45
1:A:998:VAL:CG1	1:A:999:PHE:N	2.80	0.45
1:A:1130:ILE:HG23	1:A:1209:LEU:HD22	1.99	0.45
1:A:1161:ILE:HG22	1:A:1163:LYS:CD	2.47	0.45
1:A:70:VAL:CG1	1:A:71:SER:N	2.80	0.45
1:A:143:SER:O	1:A:144:TYR:HB3	2.16	0.45
1:A:560:GLU:O	1:A:561:HIS:C	2.59	0.45
1:A:567:ALA:O	1:A:746:ILE:HG12	2.17	0.45
1:A:593:LYS:NZ	1:A:613:ASP:OD2	2.40	0.45
1:A:599:GLU:O	1:A:602:MET:O	2.35	0.45
1:A:999:PHE:CG	1:A:1031:ILE:HG13	2.52	0.45
1:A:1008:SER:O	1:A:1013:ARG:NH1	2.50	0.45
1:A:124:ASP:C	1:A:124:ASP:OD1	2.60	0.45
1:A:455:ILE:HD12	1:A:552:HIS:HA	1.99	0.45
1:A:964:ILE:HG13	1:A:965:ILE:N	2.31	0.45
1:A:984:ILE:CG1	1:A:998:VAL:HG22	2.39	0.45
1:A:1109:LYS:NZ	1:A:1286:PRO:HB3	2.32	0.45
1:A:269:HIS:O	1:A:270:ASP:C	2.60	0.44
1:A:306:THR:CG2	1:A:517:ILE:HA	2.47	0.44
1:A:547:LYS:HZ2	1:A:646:MET:HB3	1.78	0.44
1:A:737:GLU:O	1:A:741:GLU:HB2	2.16	0.44
1:A:902:SER:O	1:A:903:LYS:HE2	2.17	0.44
1:A:952:TYR:CD1	1:A:1065:ARG:CZ	3.00	0.44
1:A:985:TRP:CG	1:A:1019:ILE:HG21	2.51	0.44
1:A:2:PRO:O	1:A:39:HIS:CD2	2.60	0.44
1:A:562:GLY:C	1:A:564:SER:N	2.76	0.44
1:A:691:THR:C	1:A:693:GLN:N	2.75	0.44
1:A:760:ASN:O	1:A:761:ASN:HB2	2.17	0.44
1:A:1269:ARG:CZ	1:A:1270:GLN:NE2	2.80	0.44
1:A:36:PHE:CZ	1:A:88:LEU:HD22	2.52	0.44
1:A:425:PHE:HZ	1:A:537:PHE:HB2	1.80	0.44
1:A:473:ASN:CG	1:A:475:LEU:H	2.25	0.44
1:A:581:ARG:O	1:A:581:ARG:HG3	2.17	0.44
1:A:719:ALA:HA	1:A:723:THR:CG2	2.46	0.44
1:A:955:SER:HA	1:A:958:LEU:HG	1.99	0.44
1:A:1104:TYR:CD2	1:A:1173:ILE:CD1	3.00	0.44
1:A:122:THR:CB	1:A:126:GLU:OE1	2.61	0.44
1:A:227:HIS:ND1	1:A:261:GLU:OE1	2.50	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:318:LYS:CG	1:A:331:PHE:HE1	2.31	0.44
1:A:326:ASP:OD1	1:A:326:ASP:C	2.60	0.44
1:A:431:VAL:HG11	1:A:548:TYR:CE1	2.53	0.44
1:A:555:ARG:C	1:A:557:GLN:H	2.25	0.44
1:A:632:ILE:CD1	1:A:786:LYS:HD3	2.47	0.44
1:A:1029:ILE:HG23	1:A:1036:ILE:HB	1.98	0.44
1:A:1146:THR:HG22	1:A:1147:ASN:ND2	2.33	0.44
1:A:153:ILE:CD1	1:A:186:ILE:HB	2.42	0.44
1:A:238:ASN:OD1	1:A:239:PRO:HD2	2.16	0.44
1:A:659:SER:HB2	1:A:663:ILE:HG13	1.98	0.44
1:A:964:ILE:HG13	1:A:965:ILE:HG13	2.00	0.44
1:A:2:PRO:HD3	1:A:108:LEU:HD22	2.00	0.44
1:A:269:HIS:CE1	1:A:859:ASN:HD22	2.36	0.44
1:A:455:ILE:HG23	1:A:555:ARG:HD2	1.98	0.44
1:A:764:PHE:CE2	1:A:766:ILE:HG12	2.52	0.44
1:A:923:LYS:HB2	1:A:1056:LYS:HB2	1.99	0.44
1:A:1012:ASN:O	1:A:1101:TRP:CD1	2.70	0.44
1:A:1163:LYS:CD	1:A:1183:ASN:ND2	2.80	0.44
1:A:42:ILE:CD1	1:A:151:LEU:HB3	2.48	0.44
1:A:603:PHE:O	1:A:606:TRP:HB3	2.17	0.44
1:A:621:VAL:HG11	1:A:632:ILE:HG23	1.98	0.44
1:A:1180:VAL:HG22	1:A:1221:VAL:O	2.18	0.44
1:A:1206:LEU:HD11	1:A:1250:ILE:HG12	2.00	0.44
1:A:430:CYS:HA	1:A:454:CYS:HA	2.00	0.44
1:A:485:THR:HG22	1:A:486:ASN:N	2.33	0.44
1:A:610:LEU:CD1	1:A:747:ILE:HD11	2.41	0.44
1:A:754:TYR:CD1	1:A:755:THR:N	2.78	0.44
1:A:880:ASN:C	1:A:880:ASN:ND2	2.74	0.44
1:A:948:ARG:HD2	1:A:1013:ARG:C	2.43	0.44
1:A:948:ARG:CB	1:A:1068:TRP:HB2	2.20	0.44
1:A:1057:LEU:HD12	1:A:1057:LEU:N	2.23	0.44
1:A:1211:ILE:HB	1:A:1212:PRO:HD3	1.99	0.44
1:A:22:ILE:CD1	1:A:22:ILE:N	2.79	0.44
1:A:198:GLU:OE2	1:A:200:LEU:HB2	2.18	0.44
1:A:202:VAL:HA	1:A:205:ASN:O	2.18	0.44
1:A:403:GLY:HA2	1:A:409:ASN:HD22	1.83	0.44
1:A:417:LYS:HE3	1:A:419:PHE:CZ	2.53	0.44
1:A:458:ASN:HB3	1:A:461:ASP:CB	2.45	0.44
1:A:625:ASP:C	1:A:627:ILE:N	2.76	0.44
1:A:844:THR:O	1:A:846:SER:N	2.40	0.44
1:A:874:ILE:C	1:A:876:THR:N	2.73	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:891:LEU:HD23	1:A:891:LEU:HA	1.81	0.44
1:A:928:LEU:O	1:A:929:LYS:C	2.60	0.44
1:A:949:ILE:HG22	1:A:950:PRO:O	2.17	0.44
1:A:1194:ALA:O	1:A:1206:LEU:HA	2.18	0.44
1:A:1199:GLN:NE2	1:A:1204:LYS:HB3	2.32	0.44
1:A:97:ARG:NH1	1:A:358:PHE:CD1	2.86	0.43
1:A:167:SER:CB	1:A:184:GLN:HE22	2.31	0.43
1:A:176:THR:CG2	1:A:176:THR:O	2.65	0.43
1:A:195:GLY:HA2	1:A:213:PHE:O	2.18	0.43
1:A:234:GLY:O	1:A:235:ILE:HD12	2.17	0.43
1:A:515:ILE:HD13	1:A:515:ILE:HA	1.82	0.43
1:A:549:THR:HG23	1:A:552:HIS:CD2	2.53	0.43
1:A:575:ALA:O	1:A:581:ARG:CA	2.66	0.43
1:A:763:ASN:HB2	1:A:765:ASN:HD22	1.75	0.43
1:A:859:ASN:HD21	1:A:861:ARG:HH12	1.66	0.43
1:A:991:GLN:O	1:A:993:ILE:N	2.50	0.43
1:A:192:PHE:HA	1:A:374:PHE:O	2.18	0.43
1:A:591:VAL:HG12	1:A:595:ASN:ND2	2.32	0.43
1:A:1025:ASN:HB3	1:A:1026:ASN:H	1.50	0.43
1:A:1144:MET:HB3	1:A:1150:LEU:HD13	2.00	0.43
1:A:24:ILE:HG23	1:A:25:PRO:N	2.33	0.43
1:A:67:GLN:HB3	1:A:425:PHE:CD2	2.53	0.43
1:A:126:GLU:OE2	1:A:304:VAL:CG1	2.66	0.43
1:A:354:PHE:C	1:A:356:LYS:N	2.76	0.43
1:A:562:GLY:O	1:A:564:SER:N	2.51	0.43
1:A:907:ASP:O	1:A:911:LYS:HG2	2.17	0.43
1:A:1215:GLY:C	1:A:1217:LEU:H	2.26	0.43
1:A:1233:ASN:OD1	1:A:1235:CYS:HB2	2.18	0.43
1:A:243:PHE:HD1	1:A:260:PHE:CE1	2.36	0.43
1:A:105:ARG:NH1	1:A:508:PHE:CE1	2.86	0.43
1:A:203:ASP:OD1	1:A:204:THR:N	2.52	0.43
1:A:346:THR:CG2	1:A:347:GLU:HG3	2.29	0.43
1:A:411:MET:O	1:A:411:MET:HG3	2.19	0.43
1:A:429:LEU:O	1:A:552:HIS:HE1	2.02	0.43
1:A:981:GLY:HA2	1:A:1001:TYR:CZ	2.54	0.43
1:A:1034:ARG:NH1	1:A:1036:ILE:CD1	2.81	0.43
1:A:1168:GLY:C	1:A:1170:LYS:HG2	2.43	0.43
1:A:1199:GLN:HE22	1:A:1204:LYS:CA	2.31	0.43
1:A:310:LEU:HD13	1:A:314:LYS:HG3	2.00	0.43
1:A:778:ASN:O	1:A:782:ILE:HG13	2.18	0.43
1:A:950:PRO:C	1:A:1065:ARG:HH22	2.27	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:960:ASN:C	1:A:979:ASN:ND2	2.76	0.43
1:A:1087:LEU:O	1:A:1091:GLN:HG3	2.18	0.43
1:A:39:HIS:O	1:A:40:ASN:C	2.58	0.43
1:A:162:GLN:HE21	1:A:162:GLN:HB3	1.56	0.43
1:A:320:LYS:HD3	1:A:321:TYR:CZ	2.53	0.43
1:A:540:GLY:O	1:A:541:LYS:O	2.37	0.43
1:A:566:ILE:HG12	1:A:749:TYR:HB3	2.00	0.43
1:A:648:TYR:O	1:A:649:LYS:O	2.36	0.43
1:A:722:ASN:ND2	1:A:792:SER:OG	2.52	0.43
1:A:750:GLN:C	1:A:752:ASN:N	2.75	0.43
1:A:809:GLU:HG2	1:A:934:TYR:CD2	2.53	0.43
1:A:874:ILE:HD13	1:A:874:ILE:HA	1.73	0.43
1:A:388:ASP:HB3	1:A:391:ASN:O	2.18	0.43
1:A:473:ASN:OD1	1:A:475:LEU:CD1	2.60	0.43
1:A:585:PHE:HZ	1:A:736:LEU:HD23	1.84	0.43
1:A:1010:TYR:CD1	1:A:1010:TYR:N	2.86	0.43
1:A:1061:ARG:HH11	1:A:1061:ARG:CG	2.27	0.43
1:A:614:PHE:C	1:A:616:ASP:N	2.77	0.43
1:A:995:GLN:NE2	1:A:1039:LYS:HB3	2.34	0.43
1:A:1070:LYS:HG2	1:A:1071:TYR:CG	2.53	0.43
1:A:1125:VAL:HG22	1:A:1134:MET:SD	2.59	0.43
1:A:344:MET:CE	1:A:502:TYR:HD2	2.27	0.42
1:A:491:GLU:OE2	1:A:711:LYS:HD2	2.19	0.42
1:A:558:GLU:O	1:A:559:PHE:CG	2.72	0.42
1:A:716:ASN:OD1	1:A:720:LYS:HE3	2.19	0.42
1:A:919:LEU:C	1:A:921:SER:N	2.76	0.42
1:A:132:THR:O	1:A:132:THR:HG23	2.17	0.42
1:A:196:PHE:CZ	1:A:362:ASN:HA	2.54	0.42
1:A:343:LYS:HD3	1:A:502:TYR:OH	2.19	0.42
1:A:464:PHE:O	1:A:465:SER:CB	2.65	0.42
1:A:571:SER:O	1:A:572:VAL:HB	2.19	0.42
1:A:634:ILE:HD12	1:A:634:ILE:N	2.34	0.42
1:A:885:SER:OG	1:A:886:ASN:N	2.52	0.42
1:A:973:GLY:HA2	1:A:988:GLN:H	1.83	0.42
1:A:1026:ASN:ND2	1:A:1028:LYS:HE2	2.34	0.42
1:A:1242:ASN:C	1:A:1244:GLY:N	2.76	0.42
1:A:22:ILE:HG22	1:A:24:ILE:HD12	2.00	0.42
1:A:471:PHE:CE2	1:A:720:LYS:HE2	2.54	0.42
1:A:584:THR:HG21	1:A:586:PHE:HB2	2.01	0.42
1:A:713:ILE:HD12	1:A:713:ILE:C	2.44	0.42
1:A:879:LEU:HD23	1:A:1072:PHE:HE2	1.83	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:913:GLN:OE1	1:A:1014:TRP:CZ2	2.72	0.42
1:A:1175:ARG:O	1:A:1176:ASN:C	2.61	0.42
1:A:115:ILE:HD12	1:A:316:VAL:CG1	2.50	0.42
1:A:140:PRO:C	1:A:142:GLY:N	2.77	0.42
1:A:194:PHE:CD1	1:A:194:PHE:N	2.87	0.42
1:A:235:ILE:HD11	1:A:286:TYR:HB3	2.01	0.42
1:A:244:LYS:HB2	1:A:467:SER:OG	2.20	0.42
1:A:459:ASN:O	1:A:461:ASP:N	2.45	0.42
1:A:711:LYS:HB2	1:A:856:TYR:CE2	2.54	0.42
1:A:729:ARG:HH22	1:A:789:ASN:HD22	1.66	0.42
1:A:869:TYR:HD1	1:A:870:ILE:HD13	1.84	0.42
1:A:917:PHE:O	1:A:1057:LEU:CD1	2.67	0.42
1:A:969:GLU:O	1:A:970:ASN:HB3	2.17	0.42
1:A:1149:TYR:CD1	1:A:1149:TYR:C	2.97	0.42
1:A:1221:VAL:CG2	1:A:1239:LEU:HD23	2.49	0.42
1:A:325:GLU:HA	1:A:330:LYS:O	2.20	0.42
1:A:535:GLU:OE2	1:A:537:PHE:CE2	2.73	0.42
1:A:559:PHE:HE2	1:A:742:ALA:HA	1.84	0.42
1:A:750:GLN:C	1:A:752:ASN:H	2.26	0.42
1:A:824:TYR:C	1:A:826:ASN:N	2.76	0.42
1:A:923:LYS:CD	1:A:1056:LYS:HD3	2.50	0.42
1:A:283:ARG:O	1:A:284:LEU:C	2.61	0.42
1:A:357:PHE:N	1:A:357:PHE:CD1	2.87	0.42
1:A:374:PHE:CE2	1:A:406:THR:HG21	2.53	0.42
1:A:494:ILE:N	1:A:494:ILE:HD12	2.35	0.42
1:A:882:ARG:HB3	1:A:912:ASN:OD1	2.19	0.42
1:A:915:GLN:HB2	1:A:1068:TRP:CE3	2.54	0.42
1:A:1221:VAL:HG23	1:A:1239:LEU:HD23	2.02	0.42
1:A:40:ASN:O	1:A:112:VAL:HG23	2.20	0.42
1:A:68:VAL:CG1	1:A:69:PRO:HD2	2.50	0.42
1:A:170:HIS:HD2	1:A:173:LEU:N	2.18	0.42
1:A:801:ILE:O	1:A:802:PRO:C	2.60	0.42
1:A:833:GLN:C	1:A:835:ASP:H	2.27	0.42
1:A:1041:ILE:C	1:A:1043:ASN:N	2.76	0.42
1:A:1163:LYS:CG	1:A:1183:ASN:ND2	2.83	0.42
1:A:125:THR:O	1:A:300:ALA:HA	2.20	0.42
1:A:318:LYS:HD3	1:A:318:LYS:C	2.44	0.42
1:A:430:CYS:HA	1:A:453:LEU:O	2.20	0.42
1:A:487:ILE:O	1:A:488:GLU:O	2.37	0.42
1:A:498:LEU:HG	1:A:502:TYR:CE1	2.55	0.42
1:A:638:GLY:O	1:A:642:ASN:CA	2.68	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:675:VAL:HA	1:A:807:ARG:HD2	2.02	0.42
1:A:1061:ARG:HG2	1:A:1061:ARG:NH1	2.32	0.42
1:A:1062:ASP:OD1	1:A:1063:THR:N	2.53	0.42
1:A:1115:ASN:HB2	1:A:1282:TRP:CZ3	2.55	0.42
1:A:1209:LEU:HD11	1:A:1217:LEU:HD12	2.01	0.42
1:A:1235:CYS:HA	1:A:1280:CYS:O	2.19	0.42
1:A:114:GLY:O	1:A:320:LYS:CD	2.68	0.42
1:A:154:ILE:HD12	1:A:186:ILE:O	2.19	0.42
1:A:405:ASN:OD1	1:A:407:GLU:N	2.51	0.42
1:A:623:THR:O	1:A:624:THR:C	2.61	0.42
1:A:638:GLY:N	1:A:639:PRO:CD	2.83	0.42
1:A:641:LEU:CD1	1:A:732:MET:SD	3.08	0.42
1:A:659:SER:HB2	1:A:663:ILE:CD1	2.49	0.42
1:A:779:LYS:HA	1:A:782:ILE:HD12	2.02	0.42
1:A:1128:VAL:CG1	1:A:1129:GLY:N	2.83	0.42
1:A:1155:TYR:CD1	1:A:1155:TYR:N	2.87	0.42
1:A:1166:ALA:O	1:A:1167:SER:HB2	2.20	0.42
1:A:1252:PHE:O	1:A:1253:HIS:HB2	2.19	0.42
1:A:74:ASP:O	1:A:74:ASP:OD1	2.38	0.42
1:A:170:HIS:CG	1:A:173:LEU:HB2	2.55	0.42
1:A:373:VAL:HG12	1:A:374:PHE:N	2.35	0.42
1:A:568:LEU:HB3	1:A:595:ASN:OD1	2.19	0.42
1:A:872:ASN:HD22	1:A:872:ASN:C	2.27	0.42
1:A:907:ASP:O	1:A:911:LYS:HA	2.20	0.42
1:A:927:ILE:HA	1:A:1052:ASN:HB3	2.02	0.42
1:A:961:GLU:HB2	1:A:979:ASN:ND2	2.23	0.42
1:A:1061:ARG:CG	1:A:1061:ARG:NH1	2.82	0.42
1:A:17:VAL:C	1:A:19:ILE:N	2.78	0.41
1:A:120:GLY:O	1:A:121:SER:C	2.63	0.41
1:A:149:LEU:CD2	1:A:150:ASN:H	2.33	0.41
1:A:303:ILE:HG22	1:A:310:LEU:HB2	2.02	0.41
1:A:502:TYR:O	1:A:506:PHE:HB2	2.20	0.41
1:A:566:ILE:CG1	1:A:749:TYR:HB3	2.50	0.41
1:A:588:SER:O	1:A:591:VAL:N	2.53	0.41
1:A:662:VAL:C	1:A:664:LEU:N	2.77	0.41
1:A:684:TYR:N	1:A:684:TYR:CD1	2.87	0.41
1:A:735:ALA:O	1:A:736:LEU:C	2.60	0.41
1:A:794:SER:O	1:A:798:ASN:OD1	2.38	0.41
1:A:862:LEU:O	1:A:865:THR:HB	2.20	0.41
1:A:1144:MET:HB3	1:A:1150:LEU:CD1	2.50	0.41
1:A:163:PHE:CD1	1:A:188:PHE:HA	2.55	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:217:PRO:HG2	1:A:378:ILE:CD1	2.35	0.41
1:A:290:PHE:O	1:A:293:ILE:N	2.53	0.41
1:A:309:SER:O	1:A:312:TYR:HB3	2.19	0.41
1:A:322:LEU:HD23	1:A:322:LEU:HA	1.83	0.41
1:A:518:GLU:O	1:A:519:ASN:C	2.63	0.41
1:A:585:PHE:CE1	1:A:586:PHE:HE1	2.37	0.41
1:A:965:ILE:HD12	1:A:976:VAL:CG2	2.48	0.41
1:A:1125:VAL:O	1:A:1126:ASN:C	2.63	0.41
1:A:66:LYS:HE2	1:A:68:VAL:HG21	2.02	0.41
1:A:265:THR:O	1:A:265:THR:HG22	2.20	0.41
1:A:385:THR:HG23	1:A:388:ASP:N	2.24	0.41
1:A:872:ASN:ND2	1:A:872:ASN:C	2.78	0.41
1:A:1133:TYR:CD1	1:A:1133:TYR:C	2.98	0.41
1:A:1227:ASN:HD21	1:A:1229:GLN:HB3	1.80	0.41
1:A:22:ILE:CD1	1:A:22:ILE:H	2.32	0.41
1:A:430:CYS:HB2	1:A:544:GLU:HA	2.02	0.41
1:A:589:ASP:OD1	1:A:589:ASP:C	2.63	0.41
1:A:742:ALA:O	1:A:745:ALA:N	2.48	0.41
1:A:801:ILE:HB	1:A:802:PRO:HD3	2.01	0.41
1:A:897:LYS:HG3	1:A:899:ASN:OD1	2.20	0.41
1:A:927:ILE:HG23	1:A:1051:ASN:ND2	2.35	0.41
1:A:1026:ASN:OD1	1:A:1026:ASN:N	2.53	0.41
1:A:23:LYS:NZ	1:A:23:LYS:CB	2.81	0.41
1:A:70:VAL:CG1	1:A:161:ILE:HD11	2.42	0.41
1:A:473:ASN:HD21	1:A:674:PRO:HG3	1.86	0.41
1:A:638:GLY:HA2	1:A:643:ILE:HB	2.02	0.41
1:A:662:VAL:O	1:A:664:LEU:N	2.53	0.41
1:A:684:TYR:HD2	1:A:690:LEU:HD23	1.85	0.41
1:A:819:LEU:O	1:A:823:ILE:HG13	2.21	0.41
1:A:884:GLU:HG3	1:A:891:LEU:HD11	2.02	0.41
1:A:910:ASP:C	1:A:912:ASN:N	2.78	0.41
1:A:941:PHE:O	1:A:1021:ASN:HB2	2.20	0.41
1:A:942:SER:HA	1:A:1019:ILE:O	2.20	0.41
1:A:1241:ASP:OD1	1:A:1241:ASP:O	2.39	0.41
1:A:93:LYS:NZ	1:A:384:TYR:O	2.53	0.41
1:A:93:LYS:HE2	1:A:384:TYR:HD1	1.86	0.41
1:A:309:SER:O	1:A:310:LEU:C	2.62	0.41
1:A:342:TYR:O	1:A:346:THR:HB	2.19	0.41
1:A:1099:ASP:CG	1:A:1103:ASP:HB2	2.46	0.41
1:A:1266:TRP:O	1:A:1267:TYR:C	2.62	0.41
1:A:205:ASN:ND2	1:A:401:PHE:HE2	2.18	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:303:ILE:O	1:A:303:ILE:HG12	2.19	0.41
1:A:588:SER:O	1:A:591:VAL:HG23	2.20	0.41
1:A:652:PHE:C	1:A:654:GLY:N	2.78	0.41
1:A:757:GLU:CG	1:A:760:ASN:ND2	2.84	0.41
1:A:765:ASN:CB	1:A:768:ASP:HB2	2.45	0.41
1:A:903:LYS:HB2	1:A:922:SER:CA	2.51	0.41
1:A:919:LEU:HD23	1:A:919:LEU:N	2.36	0.41
1:A:1267:TYR:CD2	1:A:1280:CYS:SG	3.14	0.41
1:A:88:LEU:HD12	1:A:88:LEU:HA	1.82	0.41
1:A:250:TYR:HB2	1:A:429:LEU:HD21	2.01	0.41
1:A:566:ILE:HG12	1:A:749:TYR:HD1	1.74	0.41
1:A:594:VAL:HG12	1:A:746:ILE:CD1	2.50	0.41
1:A:758:GLU:O	1:A:759:LYS:HB2	2.21	0.41
1:A:996:ARG:O	1:A:1039:LYS:HD2	2.20	0.41
1:A:1018:THR:HG21	1:A:1084:ILE:CD1	2.51	0.41
1:A:1138:GLY:HA3	1:A:1139:PRO:HD2	1.73	0.41
1:A:25:PRO:HD2	1:A:185:TYR:OH	2.20	0.41
1:A:193:THR:CG2	1:A:215:THR:O	2.65	0.41
1:A:289:LYS:O	1:A:293:ILE:HG12	2.21	0.41
1:A:313:MET:C	1:A:315:ASN:N	2.78	0.41
1:A:493:ASN:C	1:A:494:ILE:HD12	2.45	0.41
1:A:554:LEU:HD23	1:A:641:LEU:CD2	2.51	0.41
1:A:763:ASN:C	1:A:765:ASN:H	2.28	0.41
1:A:975:LYS:O	1:A:975:LYS:HD3	2.20	0.41
1:A:1029:ILE:O	1:A:1029:ILE:CG2	2.67	0.41
1:A:1065:ARG:HD2	1:A:1065:ARG:HA	1.85	0.41
1:A:1291:TRP:C	1:A:1293:GLU:N	2.78	0.41
1:A:494:ILE:O	1:A:494:ILE:HG22	2.21	0.41
1:A:747:ILE:CG2	1:A:764:PHE:CZ	3.02	0.41
1:A:754:TYR:OH	1:A:757:GLU:CG	2.65	0.41
1:A:950:PRO:CD	1:A:1066:TYR:O	2.69	0.41
1:A:1022:ASN:HD22	1:A:1025:ASN:N	2.19	0.41
1:A:131:ASP:OD1	1:A:131:ASP:N	2.53	0.40
1:A:141:ASP:OD2	1:A:143:SER:OG	2.40	0.40
1:A:311:GLN:O	1:A:312:TYR:C	2.62	0.40
1:A:553:TYR:CG	1:A:642:ASN:HB2	2.56	0.40
1:A:761:ASN:O	1:A:763:ASN:N	2.42	0.40
1:A:1196:ASN:C	1:A:1198:SER:H	2.29	0.40
1:A:171:GLU:C	1:A:172:VAL:CG2	2.95	0.40
1:A:504:LEU:C	1:A:506:PHE:N	2.78	0.40
1:A:583:TYR:O	1:A:739:GLN:NE2	2.53	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:600:ALA:O	1:A:601:ALA:C	2.64	0.40
1:A:619:SER:O	1:A:621:VAL:HG23	2.20	0.40
1:A:740:ALA:HB2	1:A:777:ILE:HD11	2.03	0.40
1:A:832:GLY:C	1:A:833:GLN:HG2	2.45	0.40
1:A:1077:LYS:HE2	1:A:1079:LEU:HD23	2.03	0.40
1:A:1137:LYS:CG	1:A:1138:GLY:H	2.34	0.40
1:A:94:LEU:O	1:A:98:ILE:HG13	2.20	0.40
1:A:192:PHE:CZ	1:A:375:LYS:NZ	2.78	0.40
1:A:226:ILE:O	1:A:226:ILE:HG22	2.20	0.40
1:A:311:GLN:CD	1:A:311:GLN:C	2.89	0.40
1:A:336:LEU:HD11	1:A:340:LYS:HE3	2.03	0.40
1:A:338:PHE:C	1:A:340:LYS:N	2.75	0.40
1:A:392:LEU:HB2	1:A:395:THR:OG1	2.22	0.40
1:A:492:GLU:O	1:A:494:ILE:N	2.51	0.40
1:A:506:PHE:HB3	1:A:508:PHE:CE2	2.57	0.40
1:A:568:LEU:HA	1:A:595:ASN:OD1	2.21	0.40
1:A:690:LEU:HD12	1:A:690:LEU:HA	1.80	0.40
1:A:1193:LEU:C	1:A:1193:LEU:CD1	2.87	0.40
1:A:1198:SER:O	1:A:1199:GLN:O	2.38	0.40
1:A:471:PHE:CE2	1:A:720:LYS:CE	3.05	0.40
1:A:497:ASP:O	1:A:500:GLN:HB3	2.22	0.40
1:A:856:TYR:C	1:A:857:VAL:HG23	2.46	0.40
1:A:1269:ARG:CZ	1:A:1270:GLN:HE22	2.35	0.40
1:A:313:MET:O	1:A:314:LYS:C	2.63	0.40
1:A:474:ASP:O	1:A:474:ASP:CG	2.65	0.40
1:A:774:ASN:O	1:A:775:GLU:C	2.65	0.40
1:A:815:LEU:O	1:A:819:LEU:HB2	2.21	0.40
1:A:962:TYR:HE2	1:A:1057:LEU:HD23	1.81	0.40
1:A:1030:TYR:CE1	1:A:1035:LEU:HB2	2.57	0.40

All (9) 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:486:ASN:OD1	1:A:1273:ARG:NH2[6_555]	1.12	1.08
1:A:63:PRO:O	1:A:309:SER:N[3_564]	1.82	0.38
1:A:486:ASN:CG	1:A:1273:ARG:NH2[6_555]	1.90	0.30
1:A:693:GLN:NE2	1:A:1276:ARG:CB[6_555]	1.96	0.24
1:A:697:ASN:ND2	1:A:1276:ARG:NH2[6_555]	2.00	0.20
1:A:486:ASN:OD1	1:A:1273:ARG:CZ[6_555]	2.02	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:64:GLU:CG	1:A:307:THR:O[3_564]	2.07	0.13
1:A:693:GLN:NE2	1:A:1276:ARG:CG[6_555]	2.17	0.03
1:A:63:PRO:O	1:A:308:ALA:CA[3_564]	2.18	0.02

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	1273/1312 (97%)	1008 (79%)	177 (14%)	88 (7%)	1 11

All (88) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	121	SER
1	A	398	ALA
1	A	488	GLU
1	A	541	LYS
1	A	559	PHE
1	A	561	HIS
1	A	566	ILE
1	A	571	SER
1	A	629	ASP
1	A	649	LYS
1	A	650	ASP
1	A	831	ILE
1	A	973	GLY
1	A	974	TRP
1	A	992	GLU
1	A	1146	THR
1	A	1199	GLN
1	A	1245	ASN
1	A	1273	ARG
1	A	16	GLY

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	18	ASP
1	A	75	SER
1	A	123	ILE
1	A	160	ILE
1	A	209	GLY
1	A	256	LEU
1	A	396	ASN
1	A	464	PHE
1	A	490	ALA
1	A	492	GLU
1	A	493	ASN
1	A	510	ASN
1	A	527	GLN
1	A	556	ALA
1	A	563	LYS
1	A	572	VAL
1	A	644	GLY
1	A	648	TYR
1	A	661	ALA
1	A	763	ASN
1	A	773	LEU
1	A	980	TYR
1	A	1138	GLY
1	A	1176	ASN
1	A	1292	GLY
1	A	3	PHE
1	A	30	MET
1	A	115	ILE
1	A	124	ASP
1	A	157	SER
1	A	249	ALA
1	A	562	GLY
1	A	689	VAL
1	A	859	ASN
1	A	891	LEU
1	A	911	LYS
1	A	1155	TYR
1	A	1206	LEU
1	A	1216	ASN
1	A	1289	ASP
1	A	19	ILE
1	A	125	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	453	LEU
1	A	646	MET
1	A	663	ILE
1	A	688	LYS
1	A	761	ASN
1	A	762	ILE
1	A	845	LEU
1	A	848	ASP
1	A	885	SER
1	A	1145	THR
1	A	4	VAL
1	A	74	ASP
1	A	141	ASP
1	A	175	LEU
1	A	395	THR
1	A	735	ALA
1	A	825	ASP
1	A	1165	TYR
1	A	1169	ASN
1	A	674	PRO
1	A	677	GLY
1	A	120	GLY
1	A	746	ILE
1	A	494	ILE
1	A	172	VAL
1	A	627	ILE

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	1158/1190 (97%)	1078 (93%)	80 (7%)	14	37

All (80) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	18	ASP
1	A	23	LYS
1	A	24	ILE
1	A	29	GLN
1	A	50	THR
1	A	51	PHE
1	A	78	LEU
1	A	92	THR
1	A	97	ARG
1	A	122	THR
1	A	129	VAL
1	A	132	THR
1	A	144	TYR
1	A	149	LEU
1	A	150	ASN
1	A	151	LEU
1	A	154	ILE
1	A	162	GLN
1	A	165	CYS
1	A	167	SER
1	A	176	THR
1	A	193	THR
1	A	235	ILE
1	A	241	ARG
1	A	261	GLU
1	A	264	ARG
1	A	303	ILE
1	A	306	THR
1	A	311	GLN
1	A	345	LEU
1	A	346	THR
1	A	362	ASN
1	A	382	VAL
1	A	397	LEU
1	A	412	ASN
1	A	474	ASP
1	A	525	ILE
1	A	554	LEU
1	A	561	HIS
1	A	570	ASN
1	A	574	GLU
1	A	602	MET
1	A	615	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	618	THR
1	A	671	ILE
1	A	690	LEU
1	A	702	ARG
1	A	713	ILE
1	A	743	THR
1	A	750	GLN
1	A	763	ASN
1	A	796	LEU
1	A	802	PRO
1	A	834	VAL
1	A	835	ASP
1	A	838	LYS
1	A	842	ASN
1	A	843	ASN
1	A	872	ASN
1	A	874	ILE
1	A	881	LEU
1	A	882	ARG
1	A	909	ILE
1	A	912	ASN
1	A	918	ASN
1	A	956	ILE
1	A	962	TYR
1	A	974	TRP
1	A	975	LYS
1	A	1018	THR
1	A	1020	THR
1	A	1026	ASN
1	A	1036	ILE
1	A	1057	LEU
1	A	1077	LYS
1	A	1114	LEU
1	A	1193	LEU
1	A	1243	ASN
1	A	1262	VAL
1	A	1277	THR

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (54) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	39	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	40	ASN
1	A	150	ASN
1	A	162	GLN
1	A	170	HIS
1	A	205	ASN
1	A	227	HIS
1	A	240	ASN
1	A	269	HIS
1	A	288	ASN
1	A	311	GLN
1	A	315	ASN
1	A	362	ASN
1	A	377	ASN
1	A	396	ASN
1	A	404	GLN
1	A	410	ASN
1	A	418	ASN
1	A	458	ASN
1	A	500	GLN
1	A	552	HIS
1	A	557	GLN
1	A	645	ASN
1	A	693	GLN
1	A	697	ASN
1	A	722	ASN
1	A	760	ASN
1	A	761	ASN
1	A	765	ASN
1	A	872	ASN
1	A	880	ASN
1	A	913	GLN
1	A	915	GLN
1	A	960	ASN
1	A	966	ASN
1	A	979	ASN
1	A	988	GLN
1	A	1003	GLN
1	A	1012	ASN
1	A	1021	ASN
1	A	1022	ASN
1	A	1026	ASN
1	A	1051	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1073	ASN
1	A	1120	ASN
1	A	1126	ASN
1	A	1147	ASN
1	A	1199	GLN
1	A	1219	GLN
1	A	1243	ASN
1	A	1254	GLN
1	A	1265	ASN
1	A	1268	ASN
1	A	1270	GLN

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates ⓘ

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

6.1 Protein, DNA and RNA chains

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	1277/1312 (97%)	0.94	148 (11%) 9 13	119, 222, 356, 750	0

All (148) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	192	PHE	7.1
1	A	628	ALA	6.2
1	A	297	LEU	5.9
1	A	626	LYS	5.3
1	A	525	ILE	4.8
1	A	569	THR	4.4
1	A	1214	VAL	4.4
1	A	366	PHE	4.3
1	A	629	ASP	4.2
1	A	594	VAL	3.9
1	A	1151	ASN	3.9
1	A	308	ALA	3.9
1	A	127	LEU	3.9
1	A	395	THR	3.7
1	A	294	ALA	3.7
1	A	931	ALA	3.7
1	A	233	TYR	3.7
1	A	932	ILE	3.7
1	A	33	VAL	3.6
1	A	1292	GLY	3.6
1	A	1003	GLN	3.5
1	A	1044	LEU	3.5
1	A	622	SER	3.5
1	A	369	PHE	3.5
1	A	1216	ASN	3.5
1	A	429	LEU	3.4
1	A	692	VAL	3.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	371	LYS	3.4
1	A	1218	SER	3.4
1	A	550	MET	3.4
1	A	1277	THR	3.4
1	A	293	ILE	3.3
1	A	645	ASN	3.3
1	A	1119	PRO	3.3
1	A	1196	ASN	3.3
1	A	951	LYS	3.3
1	A	632	ILE	3.3
1	A	3	PHE	3.2
1	A	302	SER	3.1
1	A	512	PRO	3.1
1	A	514	ASN	3.1
1	A	619	SER	3.1
1	A	621	VAL	3.1
1	A	669	PRO	3.1
1	A	1205	ILE	3.1
1	A	1007	ILE	3.0
1	A	1034	ARG	3.0
1	A	526	GLY	3.0
1	A	661	ALA	2.9
1	A	1149	TYR	2.9
1	A	585	PHE	2.8
1	A	396	ASN	2.8
1	A	590	TYR	2.8
1	A	215	THR	2.8
1	A	637	ILE	2.8
1	A	1182	ILE	2.8
1	A	953	PHE	2.8
1	A	375	LYS	2.8
1	A	600	ALA	2.8
1	A	643	ILE	2.7
1	A	370	ASP	2.7
1	A	664	LEU	2.7
1	A	820	LEU	2.6
1	A	610	LEU	2.6
1	A	1033	GLY	2.6
1	A	586	PHE	2.6
1	A	306	THR	2.6
1	A	1195	THR	2.6
1	A	531	MET	2.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	489	ALA	2.6
1	A	896	SER	2.6
1	A	1213	ASP	2.6
1	A	884	GLU	2.6
1	A	1001	TYR	2.6
1	A	564	SER	2.5
1	A	779	LYS	2.5
1	A	624	THR	2.5
1	A	990	THR	2.5
1	A	1266	TRP	2.5
1	A	1211	ILE	2.5
1	A	688	LYS	2.5
1	A	524	ILE	2.5
1	A	269	HIS	2.5
1	A	93	LYS	2.5
1	A	1096	ILE	2.5
1	A	625	ASP	2.4
1	A	651	ASP	2.4
1	A	27	ALA	2.4
1	A	477	LYS	2.4
1	A	118	TRP	2.4
1	A	1040	PRO	2.4
1	A	22	ILE	2.4
1	A	457	VAL	2.4
1	A	383	ASN	2.4
1	A	1039	LYS	2.4
1	A	382	VAL	2.4
1	A	45	ILE	2.3
1	A	775	GLU	2.3
1	A	1130	ILE	2.3
1	A	191	ASP	2.3
1	A	2	PRO	2.3
1	A	300	ALA	2.3
1	A	634	ILE	2.3
1	A	1227	ASN	2.3
1	A	551	PHE	2.3
1	A	900	ILE	2.3
1	A	736	LEU	2.3
1	A	1005	ILE	2.3
1	A	756	GLU	2.3
1	A	618	THR	2.3
1	A	392	LEU	2.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	607	VAL	2.3
1	A	290	PHE	2.2
1	A	937	MET	2.2
1	A	906	PHE	2.2
1	A	18	ASP	2.2
1	A	333	VAL	2.2
1	A	1209	LEU	2.2
1	A	657	ILE	2.1
1	A	296	THR	2.1
1	A	996	ARG	2.1
1	A	1023	ARG	2.1
1	A	28	GLY	2.1
1	A	4	VAL	2.1
1	A	121	SER	2.1
1	A	32	PRO	2.1
1	A	762	ILE	2.1
1	A	591	VAL	2.1
1	A	101	THR	2.1
1	A	327	THR	2.1
1	A	516	SER	2.1
1	A	197	GLU	2.1
1	A	665	LEU	2.1
1	A	999	PHE	2.1
1	A	206	PRO	2.1
1	A	1002	SER	2.1
1	A	520	LEU	2.1
1	A	1133	TYR	2.1
1	A	52	THR	2.1
1	A	606	TRP	2.1
1	A	653	VAL	2.1
1	A	1000	LYS	2.0
1	A	510	ASN	2.0
1	A	411	MET	2.0
1	A	636	TYR	2.0
1	A	1229	GLN	2.0
1	A	935	ASN	2.0
1	A	888	LEU	2.0

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

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	1313	1/1	0.89	0.14	147,147,147,147	0

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.