



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Oct 23, 2024 – 05:07 AM EDT

PDB ID : 7ADH
Title : THREE-DIMENSIONAL STRUCTURE OF ISONICOTINIMIDYLATED
LIVER ALCOHOL DEHYDROGENASE
Authors : Plapp, B.; Eklund, H.
Deposited on : 1984-01-16
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	:	4.02b-467
Mogul	:	2022.3.0, CSD as543be (2022)
Xtriage (Phenix)	:	NOT EXECUTED
EDS	:	NOT EXECUTED
Percentile statistics	:	20231227.v01 (using entries in the PDB archive December 27th 2023)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.39

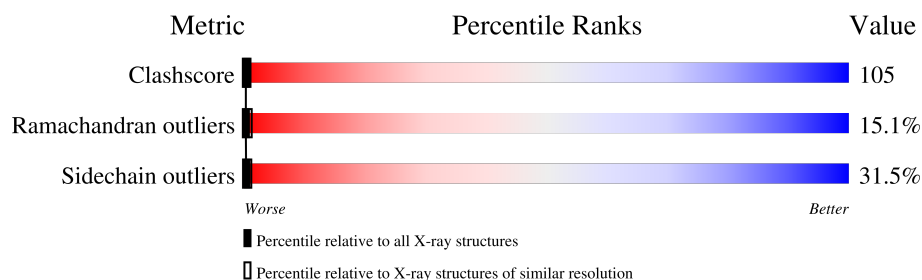
1 Overall quality at a glance

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))
Clashscore	180529	1497 (3.20-3.20)
Ramachandran outliers	177936	1479 (3.20-3.20)
Sidechain outliers	177891	1478 (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 $\leq 5\%$.

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	374	

The following table lists non-polymeric compounds, carbohydrate monomers and non-standard residues in protein, DNA, RNA chains that are outliers for geometric or electron-density-fit criteria:

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
3	NTN	A	377	-	-	X	-
3	NTN	A	378	-	-	X	-
3	NTN	A	379	-	-	X	-
3	NTN	A	382	-	-	X	-
3	NTN	A	383	-	-	X	-

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
3	NTN	A	385	-	-	X	-
3	NTN	A	386	-	-	X	-
3	NTN	A	390	-	-	X	-
3	NTN	A	391	-	-	X	-
3	NTN	A	397	-	-	X	-

2 Entry composition [i](#)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2970 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.

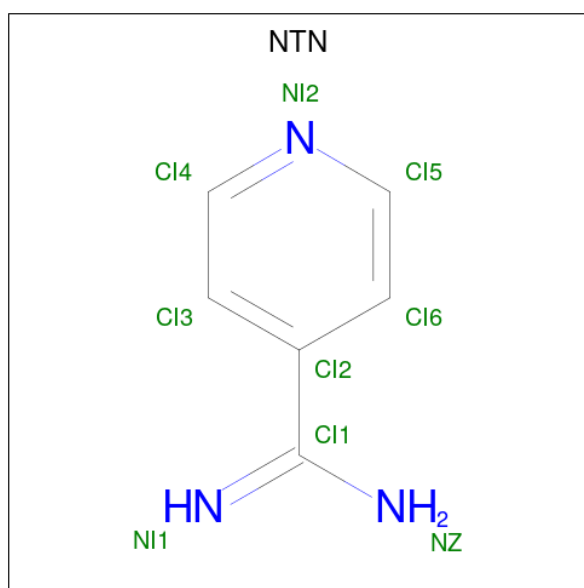
- Molecule 1 is a protein called ISONICOTINIMIDYLATED LIVER ALCOHOL DEHYDROGENASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	374	Total	C	N	O	S	32	0	0
			2784	1769	472	520	23			

- Molecule 2 is ZINC ION (three-letter code: ZN) (formula: Zn).

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

- Molecule 3 is ISONICOTINAMIDINE (three-letter code: NTN) (formula: C₆H₇N₃).



Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		

Continued on next page...

Continued from previous page...

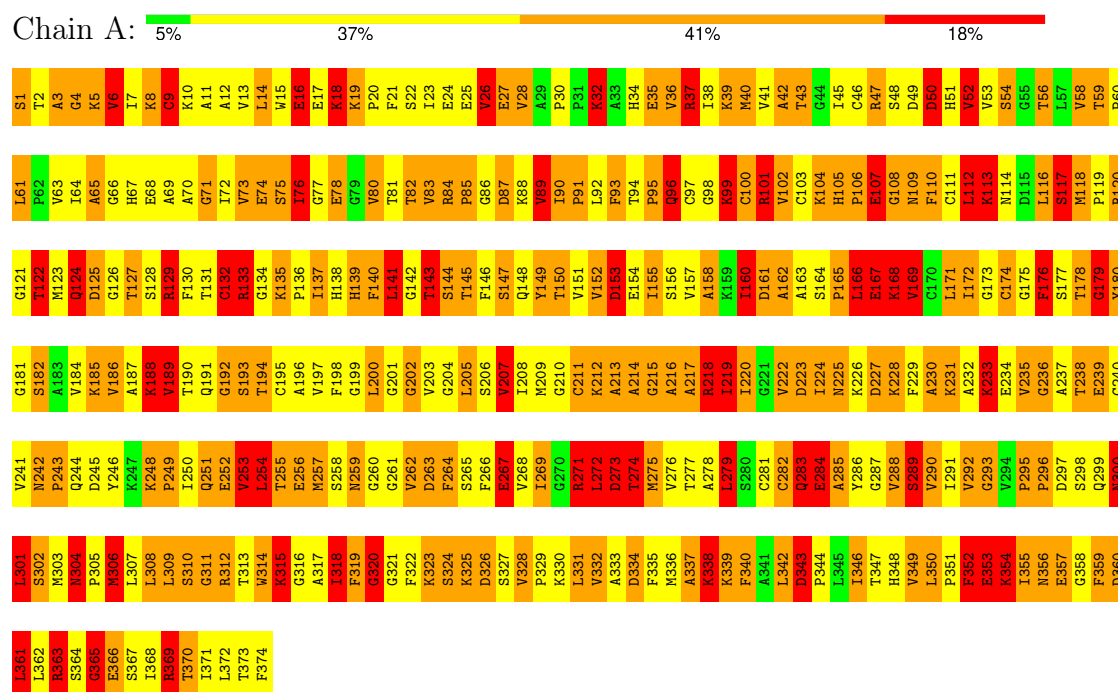
Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		
3	A	1	Total	C	N	0	0
			8	6	2		

3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry. 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. 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.

Note EDS was not executed.

• Molecule 1: ISONICOTINIMIDYLATED LIVER ALCOHOL DEHYDROGENASE



4 Data and refinement statistics

Xtriage (Phenix) and EDS were not executed - this section is therefore incomplete.

Property	Value	Source
Space group	C 1 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	177.80Å 61.20Å 56.50Å 90.00° 104.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	(Not available) – 3.20	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	(Not available) ((Not available)-3.20)	Depositor
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
Refinement program	CORELS	Depositor
R, R_{free}	0.290 , (Not available)	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	2970	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	20.0	wwPDB-VP

5 Model quality

5.1 Standard geometry

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: NTN, 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	1.68	20/2836 (0.7%)	2.78	264/3834 (6.9%)

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	4

All (20) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	96	GLN	CA-CB	-23.87	1.01	1.53
1	A	96	GLN	N-CA	11.88	1.70	1.46
1	A	364	SER	CB-OG	8.78	1.53	1.42
1	A	35	GLU	CG-CD	-6.34	1.42	1.51
1	A	192	GLY	N-CA	6.29	1.55	1.46
1	A	16	GLU	CB-CG	5.98	1.63	1.52
1	A	144	SER	CA-CB	-5.86	1.44	1.52
1	A	366	GLU	C-O	5.84	1.34	1.23
1	A	357	GLU	CD-OE2	5.75	1.31	1.25
1	A	107	GLU	CD-OE2	5.74	1.31	1.25
1	A	212	LYS	CE-NZ	-5.70	1.34	1.49
1	A	298	SER	CA-CB	5.65	1.61	1.52
1	A	236	GLY	N-CA	5.59	1.54	1.46
1	A	281	CYS	CB-SG	-5.52	1.72	1.81
1	A	184	VAL	C-O	5.50	1.33	1.23
1	A	215	GLY	C-O	5.43	1.32	1.23
1	A	215	GLY	N-CA	5.23	1.53	1.46
1	A	167	GLU	CD-OE2	5.21	1.31	1.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	129	ARG	CG-CD	-5.19	1.39	1.51
1	A	354	LYS	N-CA	5.03	1.56	1.46

All (264) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	37	ARG	NE-CZ-NH2	-21.26	109.67	120.30
1	A	120	ARG	NE-CZ-NH2	-17.88	111.36	120.30
1	A	363	ARG	NE-CZ-NH2	-14.40	113.10	120.30
1	A	117	SER	N-CA-CB	13.27	130.41	110.50
1	A	239	GLU	OE1-CD-OE2	13.20	139.14	123.30
1	A	334	ASP	CB-CG-OD1	13.20	130.18	118.30
1	A	216	ALA	O-C-N	12.47	142.65	122.70
1	A	107	GLU	N-CA-CB	11.96	132.12	110.60
1	A	363	ARG	NE-CZ-NH1	11.92	126.26	120.30
1	A	149	TYR	CB-CG-CD1	11.21	127.72	121.00
1	A	120	ARG	NE-CZ-NH1	11.14	125.87	120.30
1	A	252	GLU	CA-CB-CG	11.01	137.63	113.40
1	A	149	TYR	CB-CG-CD2	-10.70	114.58	121.00
1	A	267	GLU	CA-CB-CG	10.31	136.07	113.40
1	A	275	MET	CA-CB-CG	10.22	130.67	113.30
1	A	343	ASP	CB-CG-OD2	10.16	127.45	118.30
1	A	254	LEU	CA-CB-CG	9.70	137.62	115.30
1	A	27	GLU	OE1-CD-OE2	9.56	134.77	123.30
1	A	37	ARG	NE-CZ-NH1	9.55	125.07	120.30
1	A	27	GLU	CA-CB-CG	9.51	134.32	113.40
1	A	16	GLU	C-N-CA	9.50	145.45	121.70
1	A	353	GLU	OE1-CD-OE2	9.45	134.64	123.30
1	A	125	ASP	CB-CG-OD1	9.39	126.75	118.30
1	A	35	GLU	CB-CG-CD	9.30	139.31	114.20
1	A	129	ARG	CB-CG-CD	9.29	135.76	111.60
1	A	343	ASP	CB-CG-OD1	-9.21	110.01	118.30
1	A	263	ASP	C-N-CA	9.16	144.61	121.70
1	A	267	GLU	OE1-CD-OE2	9.04	134.15	123.30
1	A	141	LEU	CB-CA-C	9.00	127.30	110.20
1	A	132	CYS	O-C-N	8.94	137.01	122.70
1	A	311	GLY	C-N-CA	8.65	143.31	121.70
1	A	50	ASP	O-C-N	8.60	136.46	122.70
1	A	112	LEU	CA-CB-CG	8.54	134.94	115.30
1	A	338	LYS	N-CA-CB	8.52	125.93	110.60
1	A	262	VAL	C-N-CA	8.52	142.99	121.70
1	A	285	ALA	C-N-CA	8.42	142.75	121.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	315	LYS	C-N-CA	8.41	139.97	122.30
1	A	89	VAL	N-CA-CB	-8.35	93.13	111.50
1	A	245	ASP	C-N-CA	8.33	142.52	121.70
1	A	145	THR	CA-CB-CG2	8.29	124.00	112.40
1	A	216	ALA	CA-C-N	-8.19	99.17	117.20
1	A	227	ASP	CB-CG-OD1	8.18	125.66	118.30
1	A	96	GLN	N-CA-CB	8.14	125.26	110.60
1	A	271	ARG	NE-CZ-NH1	-8.12	116.24	120.30
1	A	59	THR	N-CA-CB	8.10	125.69	110.30
1	A	215	GLY	CA-C-O	-7.98	106.24	120.60
1	A	286	TYR	CB-CG-CD2	7.98	125.79	121.00
1	A	332	VAL	CA-C-N	-7.95	99.71	117.20
1	A	3	ALA	O-C-N	7.76	136.39	123.20
1	A	282	CYS	N-CA-CB	-7.74	96.68	110.60
1	A	109	ASN	CB-CG-OD1	-7.73	106.15	121.60
1	A	161	ASP	CB-CG-OD1	-7.72	111.35	118.30
1	A	354	LYS	CB-CA-C	7.71	125.82	110.40
1	A	110	PHE	O-C-N	7.70	135.01	122.70
1	A	176	PHE	CA-C-N	7.66	134.05	117.20
1	A	233	LYS	CB-CA-C	7.60	125.59	110.40
1	A	116	LEU	CA-CB-CG	7.56	132.69	115.30
1	A	47	ARG	NE-CZ-NH2	7.52	124.06	120.30
1	A	141	LEU	N-CA-C	-7.49	90.78	111.00
1	A	218	ARG	NE-CZ-NH2	7.49	124.04	120.30
1	A	16	GLU	CB-CA-C	7.42	125.25	110.40
1	A	153	ASP	CB-CG-OD2	-7.39	111.65	118.30
1	A	89	VAL	CB-CA-C	7.39	125.44	111.40
1	A	301	LEU	CA-CB-CG	7.38	132.28	115.30
1	A	343	ASP	CB-CA-C	7.36	125.13	110.40
1	A	52	VAL	CB-CA-C	7.30	125.27	111.40
1	A	281	CYS	CA-CB-SG	7.26	127.06	114.00
1	A	35	GLU	CA-CB-CG	7.25	129.36	113.40
1	A	334	ASP	CB-CG-OD2	-7.25	111.78	118.30
1	A	324	SER	N-CA-C	7.24	130.55	111.00
1	A	234	GLU	O-C-N	7.20	134.21	122.70
1	A	142	GLY	O-C-N	7.19	134.21	122.70
1	A	168	LYS	CB-CA-C	-7.14	96.12	110.40
1	A	1	SER	O-C-N	7.13	134.10	122.70
1	A	279	LEU	N-CA-C	-7.11	91.80	111.00
1	A	167	GLU	C-N-CA	7.09	139.43	121.70
1	A	189	VAL	C-N-CA	7.08	139.40	121.70
1	A	76	ILE	CB-CG1-CD1	7.07	133.71	113.90

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	112	LEU	CB-CG-CD2	-7.06	98.99	111.00
1	A	35	GLU	OE1-CD-OE2	-7.03	114.86	123.30
1	A	42	ALA	CB-CA-C	-7.03	99.56	110.10
1	A	65	ALA	C-N-CA	7.02	137.04	122.30
1	A	194	THR	O-C-N	7.01	133.91	122.70
1	A	101	ARG	NE-CZ-NH2	7.00	123.80	120.30
1	A	304	ASN	CA-CB-CG	-7.00	98.00	113.40
1	A	353	GLU	N-CA-CB	-7.00	98.01	110.60
1	A	216	ALA	N-CA-CB	-6.99	100.31	110.10
1	A	158	ALA	CB-CA-C	-6.97	99.65	110.10
1	A	152	VAL	CA-C-N	6.95	132.48	117.20
1	A	78	GLU	CB-CG-CD	6.94	132.95	114.20
1	A	271	ARG	NE-CZ-NH2	6.93	123.76	120.30
1	A	179	GLY	N-CA-C	-6.89	95.87	113.10
1	A	54	SER	CA-C-N	6.85	129.91	116.20
1	A	139	HIS	N-CA-CB	6.85	122.93	110.60
1	A	132	CYS	CA-C-N	-6.85	102.13	117.20
1	A	48	SER	C-N-CA	6.83	138.78	121.70
1	A	211	CYS	CA-C-N	-6.83	102.17	117.20
1	A	273	ASP	CB-CG-OD1	-6.83	112.15	118.30
1	A	289	SER	N-CA-CB	6.82	120.73	110.50
1	A	239	GLU	N-CA-CB	-6.78	98.41	110.60
1	A	3	ALA	CA-C-N	-6.75	102.71	116.20
1	A	162	ALA	CA-C-N	6.74	132.03	117.20
1	A	207	VAL	C-N-CA	6.73	138.53	121.70
1	A	211	CYS	CA-C-O	6.71	134.20	120.10
1	A	302	SER	C-N-CA	-6.71	104.91	121.70
1	A	75	SER	CB-CA-C	6.71	122.84	110.10
1	A	152	VAL	CA-C-O	-6.68	106.08	120.10
1	A	350	LEU	CA-CB-CG	6.63	130.56	115.30
1	A	214	ALA	C-N-CA	-6.57	108.51	122.30
1	A	155	ILE	CA-CB-CG1	6.57	123.47	111.00
1	A	28	VAL	CG1-CB-CG2	6.52	121.33	110.90
1	A	234	GLU	CG-CD-OE2	-6.42	105.45	118.30
1	A	350	LEU	N-CA-C	6.42	128.34	111.00
1	A	369	ARG	NE-CZ-NH2	6.42	123.51	120.30
1	A	27	GLU	N-CA-CB	-6.42	99.04	110.60
1	A	122	THR	C-N-CA	6.41	137.73	121.70
1	A	215	GLY	C-N-CA	-6.40	105.69	121.70
1	A	152	VAL	N-CA-CB	-6.39	97.44	111.50
1	A	26	VAL	CA-C-N	-6.38	103.16	117.20
1	A	306	MET	CA-CB-CG	-6.38	102.46	113.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	194	THR	N-CA-CB	6.38	122.41	110.30
1	A	284	GLU	CB-CA-C	-6.36	97.67	110.40
1	A	301	LEU	N-CA-CB	6.34	123.08	110.40
1	A	311	GLY	N-CA-C	6.34	128.95	113.10
1	A	144	SER	CB-CA-C	6.34	122.14	110.10
1	A	28	VAL	CA-C-N	6.31	131.08	117.20
1	A	356	ASN	CA-C-N	6.30	131.05	117.20
1	A	325	LYS	N-CA-CB	6.29	121.92	110.60
1	A	312	ARG	NE-CZ-NH1	-6.28	117.16	120.30
1	A	315	LYS	CB-CA-C	6.24	122.87	110.40
1	A	90	ILE	CG1-CB-CG2	-6.21	97.73	111.40
1	A	18	LYS	O-C-N	6.19	132.61	122.70
1	A	219	ILE	N-CA-CB	6.18	125.01	110.80
1	A	54	SER	CA-C-O	-6.17	107.15	120.10
1	A	248	LYS	N-CA-CB	6.16	121.68	110.60
1	A	300	ASN	CA-CB-CG	-6.14	99.88	113.40
1	A	304	ASN	OD1-CG-ND2	6.14	136.03	121.90
1	A	3	ALA	CB-CA-C	-6.14	100.90	110.10
1	A	161	ASP	CB-CG-OD2	6.14	123.82	118.30
1	A	14	LEU	N-CA-CB	6.12	122.65	110.40
1	A	365	GLY	N-CA-C	6.12	128.41	113.10
1	A	104	LYS	CA-C-O	-6.12	107.25	120.10
1	A	109	ASN	CB-CG-ND2	6.12	131.39	116.70
1	A	193	SER	N-CA-CB	-6.11	101.33	110.50
1	A	184	VAL	N-CA-C	6.11	127.49	111.00
1	A	59	THR	CA-CB-OG1	-6.07	96.24	109.00
1	A	332	VAL	CA-C-O	6.05	132.81	120.10
1	A	132	CYS	N-CA-CB	6.04	121.47	110.60
1	A	182	SER	CA-C-N	-6.04	103.91	117.20
1	A	301	LEU	CA-C-N	-6.03	103.92	117.20
1	A	82	THR	N-CA-C	6.02	127.26	111.00
1	A	16	GLU	CA-C-O	6.01	132.72	120.10
1	A	169	VAL	CA-CB-CG1	6.01	119.91	110.90
1	A	194	THR	N-CA-C	-5.99	94.82	111.00
1	A	285	ALA	O-C-N	5.99	132.28	122.70
1	A	141	LEU	CA-CB-CG	5.96	129.00	115.30
1	A	6	VAL	N-CA-CB	-5.95	98.41	111.50
1	A	169	VAL	CG1-CB-CG2	-5.94	101.40	110.90
1	A	43	THR	CB-CA-C	-5.92	95.63	111.60
1	A	71	GLY	C-N-CA	5.91	136.47	121.70
1	A	238	THR	O-C-N	5.90	132.14	122.70
1	A	75	SER	CA-C-N	5.88	130.13	117.20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	14	LEU	CA-C-N	-5.87	104.29	117.20
1	A	78	GLU	CA-CB-CG	5.86	126.30	113.40
1	A	340	PHE	CA-C-O	-5.85	107.82	120.10
1	A	246	TYR	CB-CA-C	-5.83	98.75	110.40
1	A	145	THR	CB-CA-C	5.82	127.32	111.60
1	A	272	LEU	CB-CA-C	5.80	121.23	110.20
1	A	361	LEU	CA-CB-CG	5.77	128.57	115.30
1	A	271	ARG	CG-CD-NE	-5.76	99.70	111.80
1	A	176	PHE	CA-C-O	-5.75	108.03	120.10
1	A	361	LEU	CB-CA-C	5.75	121.12	110.20
1	A	99	LYS	N-CA-CB	5.73	120.91	110.60
1	A	108	GLY	O-C-N	5.73	131.86	122.70
1	A	106	PRO	CA-C-N	5.72	129.78	117.20
1	A	267	GLU	CG-CD-OE2	-5.71	106.88	118.30
1	A	140	PHE	CA-C-N	-5.70	104.65	117.20
1	A	315	LYS	N-CA-CB	-5.70	100.34	110.60
1	A	133	ARG	NE-CZ-NH2	5.69	123.14	120.30
1	A	308	LEU	CA-C-O	-5.68	108.17	120.10
1	A	108	GLY	N-CA-C	-5.67	98.91	113.10
1	A	116	LEU	O-C-N	5.65	131.75	122.70
1	A	117	SER	CA-C-O	-5.65	108.24	120.10
1	A	167	GLU	CB-CG-CD	5.65	129.44	114.20
1	A	84	ARG	NE-CZ-NH2	5.64	123.12	120.30
1	A	138	HIS	CB-CA-C	-5.64	99.11	110.40
1	A	91	PRO	CA-C-N	5.63	129.58	117.20
1	A	212	LYS	CA-CB-CG	5.62	125.76	113.40
1	A	215	GLY	N-CA-C	-5.61	99.08	113.10
1	A	1	SER	CA-C-N	-5.59	104.91	117.20
1	A	293	GLY	CA-C-N	-5.58	104.92	117.20
1	A	193	SER	CA-C-O	5.58	131.81	120.10
1	A	16	GLU	CA-CB-CG	-5.57	101.14	113.40
1	A	370	THR	O-C-N	5.56	131.60	122.70
1	A	155	ILE	CB-CA-C	5.56	122.72	111.60
1	A	78	GLU	N-CA-C	-5.54	96.04	111.00
1	A	150	THR	CA-CB-CG2	5.54	120.16	112.40
1	A	328	VAL	CA-CB-CG2	5.53	119.20	110.90
1	A	113	LYS	CB-CA-C	-5.53	99.35	110.40
1	A	295	PRO	O-C-N	5.51	131.57	121.10
1	A	27	GLU	CG-CD-OE2	-5.50	107.31	118.30
1	A	264	PHE	CB-CG-CD2	-5.49	116.96	120.80
1	A	337	ALA	C-N-CA	5.49	135.42	121.70
1	A	153	ASP	N-CA-CB	5.49	120.48	110.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	140	PHE	O-C-N	5.46	131.44	122.70
1	A	75	SER	CA-C-O	-5.46	108.63	120.10
1	A	249	PRO	O-C-N	5.46	131.43	122.70
1	A	124	GLN	CA-CB-CG	5.45	125.38	113.40
1	A	28	VAL	N-CA-CB	-5.43	99.56	111.50
1	A	3	ALA	C-N-CA	5.41	133.66	122.30
1	A	323	LYS	CD-CE-NZ	5.39	124.10	111.70
1	A	28	VAL	CA-C-O	-5.39	108.78	120.10
1	A	370	THR	CA-C-N	-5.38	105.36	117.20
1	A	89	VAL	CA-CB-CG1	5.37	118.96	110.90
1	A	194	THR	CA-CB-CG2	5.37	119.92	112.40
1	A	80	VAL	CA-CB-CG2	5.37	118.95	110.90
1	A	50	ASP	CB-CG-OD2	-5.36	113.48	118.30
1	A	264	PHE	CB-CA-C	-5.36	99.68	110.40
1	A	300	ASN	C-N-CA	5.35	135.08	121.70
1	A	144	SER	N-CA-C	-5.35	96.55	111.00
1	A	286	TYR	O-C-N	-5.34	114.12	123.20
1	A	363	ARG	CB-CG-CD	5.34	125.49	111.60
1	A	290	VAL	O-C-N	5.33	131.24	122.70
1	A	216	ALA	C-N-CA	5.32	134.99	121.70
1	A	259	ASN	O-C-N	5.32	132.24	123.20
1	A	223	ASP	CB-CG-OD1	-5.30	113.53	118.30
1	A	212	LYS	CB-CG-CD	-5.28	97.87	111.60
1	A	292	VAL	CA-C-O	5.28	131.18	120.10
1	A	202	GLY	CA-C-O	-5.27	111.12	120.60
1	A	99	LYS	CB-CA-C	-5.27	99.87	110.40
1	A	296	PRO	O-C-N	5.26	131.12	122.70
1	A	54	SER	N-CA-C	5.26	125.20	111.00
1	A	127	THR	N-CA-CB	-5.26	100.31	110.30
1	A	220	ILE	N-CA-C	-5.25	96.81	111.00
1	A	50	ASP	CB-CA-C	-5.23	99.94	110.40
1	A	37	ARG	NH1-CZ-NH2	5.23	125.15	119.40
1	A	234	GLU	CA-C-O	-5.22	109.13	120.10
1	A	279	LEU	N-CA-CB	5.22	120.84	110.40
1	A	326	ASP	CA-C-O	-5.22	109.14	120.10
1	A	37	ARG	CB-CA-C	5.21	120.83	110.40
1	A	239	GLU	CB-CA-C	-5.21	99.97	110.40
1	A	370	THR	CA-CB-OG1	-5.20	98.07	109.00
1	A	295	PRO	CA-CB-CG	-5.20	94.12	104.00
1	A	125	ASP	OD1-CG-OD2	-5.18	113.47	123.30
1	A	200	LEU	CB-CA-C	5.17	120.02	110.20
1	A	278	ALA	N-CA-CB	5.16	117.32	110.10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	182	SER	O-C-N	5.15	130.94	122.70
1	A	112	LEU	CB-CG-CD1	5.15	119.75	111.00
1	A	140	PHE	CA-CB-CG	5.14	126.24	113.90
1	A	142	GLY	N-CA-C	-5.13	100.26	113.10
1	A	143	THR	CB-CA-C	5.13	125.46	111.60
1	A	342	LEU	N-CA-CB	-5.13	100.15	110.40
1	A	360	ASP	CB-CG-OD1	-5.11	113.70	118.30
1	A	332	VAL	C-N-CA	5.10	134.46	121.70
1	A	63	VAL	CA-CB-CG2	5.09	118.53	110.90
1	A	100	CYS	O-C-N	-5.09	114.56	122.70
1	A	271	ARG	CD-NE-CZ	-5.06	116.52	123.60
1	A	283	GLN	N-CA-CB	-5.04	101.53	110.60
1	A	167	GLU	CG-CD-OE1	5.03	128.36	118.30
1	A	320	GLY	N-CA-C	5.03	125.67	113.10
1	A	215	GLY	O-C-N	5.02	130.74	122.70
1	A	107	GLU	N-CA-C	-5.01	97.46	111.00
1	A	213	ALA	CB-CA-C	5.01	117.62	110.10
1	A	318	ILE	CA-CB-CG2	5.00	120.90	110.90

There are no chirality outliers.

All (4) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	129	ARG	Sidechain
1	A	271	ARG	Sidechain
1	A	363	ARG	Sidechain
1	A	37	ARG	Sidechain

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	2784	0	2788	603	730
2	A	2	0	0	0	1
3	A	184	0	92	9	145
All	All	2970	0	2880	604	734

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 105.

All (604) 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:96:GLN:N	1:A:96:GLN:CA	1.70	1.55
1:A:45:ILE:HD12	1:A:359:PHE:CE1	1.69	1.27
1:A:15:TRP:O	1:A:16:GLU:HG3	1.45	1.16
1:A:5:LYS:O	1:A:6:VAL:O	1.62	1.14
1:A:14:LEU:HB2	1:A:21:PHE:HE2	1.08	1.13
1:A:15:TRP:C	1:A:16:GLU:HG3	1.66	1.13
1:A:347:THR:HG21	1:A:368:ILE:H	1.11	1.12
1:A:110:PHE:HE1	1:A:116:LEU:HD13	1.06	1.12
1:A:76:ILE:HG13	1:A:80:VAL:HG22	1.27	1.12
1:A:19:LYS:HD3	3:A:381:NTN:NI1	1.51	1.11
1:A:194:THR:HG22	1:A:262:VAL:HG12	1.23	1.11
1:A:125:ASP:OD1	1:A:127:THR:HB	1.49	1.11
1:A:101:ARG:HG2	1:A:101:ARG:HH11	1.08	1.10
1:A:218:ARG:HG3	1:A:218:ARG:HH11	0.97	1.10
1:A:272:LEU:HD22	1:A:301:LEU:HB3	1.15	1.10
1:A:11:ALA:HB2	1:A:147:SER:HB2	1.35	1.08
1:A:224:ILE:HA	1:A:242:ASN:ND2	1.70	1.07
1:A:229:PHE:O	1:A:232:ALA:HB3	1.54	1.07
1:A:113:LYS:O	1:A:113:LYS:HG3	1.52	1.05
1:A:194:THR:CG2	1:A:262:VAL:HG12	1.87	1.03
1:A:194:THR:O	1:A:263:ASP:HB2	1.56	1.03
1:A:110:PHE:CE1	1:A:116:LEU:HD13	1.93	1.02
1:A:11:ALA:CB	1:A:147:SER:HB2	1.89	1.02
1:A:121:GLY:O	1:A:139:HIS:N	1.93	1.01
1:A:90:ILE:HG12	1:A:160:ILE:HG21	1.41	1.01
1:A:304:ASN:O	1:A:307:LEU:HD12	1.61	1.01
1:A:45:ILE:HD12	1:A:359:PHE:HE1	1.09	1.00
1:A:26:VAL:HG12	1:A:131:THR:O	1.61	1.00
1:A:200:LEU:HD11	1:A:208:ILE:HD11	1.44	0.99
1:A:224:ILE:HA	1:A:242:ASN:HD22	1.20	0.99
1:A:272:LEU:HD11	1:A:299:GLN:O	1.63	0.99
1:A:334:ASP:HB3	1:A:339:LYS:HD2	1.45	0.99
1:A:233:LYS:HA	1:A:237:ALA:HB3	1.43	0.98
1:A:205:LEU:O	1:A:209:MET:HB2	1.63	0.98
1:A:14:LEU:HB2	1:A:21:PHE:CE2	1.98	0.98
1:A:30:PRO:HA	1:A:37:ARG:NH1	1.78	0.98
1:A:269:ILE:HG23	1:A:271:ARG:HG3	1.46	0.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:269:ILE:CG2	1:A:271:ARG:HG3	1.94	0.97
1:A:272:LEU:CD2	1:A:301:LEU:HB3	1.95	0.97
1:A:110:PHE:HE1	1:A:116:LEU:CD1	1.77	0.97
1:A:60:PRO:C	1:A:61:LEU:HD23	1.85	0.97
1:A:15:TRP:O	1:A:16:GLU:CG	2.13	0.96
1:A:187:ALA:O	1:A:189:VAL:N	1.97	0.96
1:A:269:ILE:HG22	1:A:271:ARG:H	1.28	0.96
1:A:69:ALA:HB3	1:A:145:THR:CG2	1.95	0.96
1:A:129:ARG:HG3	1:A:129:ARG:HH11	1.25	0.96
1:A:64:ILE:HD12	1:A:130:PHE:CE1	2.00	0.96
1:A:346:ILE:HD12	1:A:371:ILE:HD13	1.47	0.95
1:A:218:ARG:NH2	1:A:239:GLU:OE2	1.99	0.95
1:A:355:ILE:HG12	1:A:372:LEU:HD21	1.43	0.95
1:A:288:VAL:HG23	1:A:313:THR:HB	1.49	0.95
1:A:218:ARG:HH11	1:A:218:ARG:CG	1.80	0.94
1:A:218:ARG:HG3	1:A:218:ARG:NH1	1.68	0.94
1:A:346:ILE:HD12	1:A:371:ILE:CD1	1.97	0.94
1:A:132:CYS:C	1:A:134:GLY:H	1.69	0.94
1:A:200:LEU:HB2	1:A:223:ASP:HB2	1.51	0.93
1:A:73:VAL:HG23	1:A:87:ASP:O	1.67	0.93
1:A:15:TRP:C	1:A:16:GLU:CG	2.37	0.93
1:A:3:ALA:HB1	1:A:5:LYS:H	1.33	0.92
1:A:123:MET:HE1	1:A:151:VAL:HG12	1.48	0.91
1:A:45:ILE:HD12	1:A:359:PHE:CD1	2.06	0.91
1:A:101:ARG:HG2	1:A:101:ARG:NH1	1.82	0.91
1:A:90:ILE:CG1	1:A:160:ILE:HG21	2.00	0.91
1:A:272:LEU:HD21	1:A:300:ASN:O	1.71	0.91
1:A:52:VAL:CG1	1:A:59:THR:HG22	2.01	0.90
1:A:101:ARG:HH11	1:A:101:ARG:CG	1.83	0.90
1:A:82:THR:HG22	1:A:83:VAL:HG22	1.51	0.89
1:A:200:LEU:O	1:A:228:LYS:CG	2.21	0.89
1:A:347:THR:HG21	1:A:368:ILE:N	1.85	0.88
1:A:358:GLY:O	1:A:361:LEU:HD12	1.72	0.88
1:A:200:LEU:O	1:A:228:LYS:HG2	1.73	0.88
1:A:265:SER:OG	1:A:289:SER:OG	1.69	0.88
1:A:95:PRO:HB3	1:A:155:ILE:HD13	1.54	0.88
1:A:346:ILE:HG23	1:A:371:ILE:HD13	1.54	0.87
1:A:88:LYS:O	1:A:89:VAL:HG23	1.72	0.87
1:A:51:HIS:CE1	1:A:296:PRO:HD3	2.09	0.87
1:A:69:ALA:HB3	1:A:145:THR:HG22	1.57	0.87
1:A:231:LYS:O	1:A:235:VAL:HG13	1.76	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:198:PHE:CE1	1:A:222:VAL:HG21	2.10	0.86
1:A:334:ASP:CB	1:A:339:LYS:HD2	2.04	0.86
1:A:74:GLU:OE2	1:A:75:SER:HB2	1.76	0.85
1:A:110:PHE:CE1	1:A:116:LEU:CD1	2.57	0.85
1:A:38:ILE:HD11	1:A:152:VAL:HG21	1.58	0.85
1:A:42:ALA:O	1:A:69:ALA:HB1	1.77	0.85
1:A:284:GLU:O	1:A:310:SER:HB2	1.75	0.85
1:A:194:THR:HG22	1:A:262:VAL:CG1	2.06	0.85
1:A:43:THR:CG2	1:A:69:ALA:HB2	2.06	0.85
1:A:132:CYS:O	1:A:134:GLY:N	2.10	0.85
1:A:137:ILE:HD13	1:A:137:ILE:N	1.91	0.85
1:A:113:LYS:O	1:A:113:LYS:CG	2.20	0.84
1:A:196:ALA:HB2	1:A:262:VAL:HG21	1.60	0.83
1:A:129:ARG:CD	1:A:151:VAL:HG11	2.09	0.83
1:A:283:GLN:HE22	1:A:285:ALA:CB	1.91	0.83
1:A:348:HIS:ND1	1:A:361:LEU:HD22	1.94	0.83
1:A:99:LYS:HG3	1:A:104:LYS:HE3	1.61	0.83
1:A:217:ALA:O	1:A:238:THR:HG21	1.80	0.82
1:A:49:ASP:O	1:A:52:VAL:HG23	1.78	0.82
1:A:90:ILE:HG12	1:A:160:ILE:CG2	2.10	0.81
1:A:21:PHE:HB2	1:A:356:ASN:HD21	1.44	0.81
1:A:100:CYS:O	1:A:101:ARG:C	2.14	0.81
1:A:333:ALA:O	1:A:337:ALA:N	2.13	0.81
1:A:35:GLU:O	1:A:36:VAL:HG23	1.80	0.81
1:A:348:HIS:O	1:A:370:THR:OG1	1.98	0.81
1:A:45:ILE:CD1	1:A:359:PHE:HE1	1.93	0.81
1:A:197:VAL:HG21	1:A:208:ILE:HG12	1.62	0.81
1:A:332:VAL:O	1:A:335:PHE:HB3	1.80	0.81
1:A:283:GLN:NE2	1:A:285:ALA:HB3	1.96	0.81
1:A:204:GLY:O	1:A:207:VAL:HG12	1.81	0.80
1:A:84:ARG:O	1:A:87:ASP:HB2	1.80	0.80
1:A:35:GLU:OE1	1:A:129:ARG:NE	2.14	0.80
1:A:71:GLY:O	1:A:166:LEU:HD11	1.81	0.80
1:A:283:GLN:HE22	1:A:285:ALA:HB3	1.46	0.80
1:A:76:ILE:HG13	1:A:80:VAL:CG2	2.09	0.80
1:A:129:ARG:HD3	1:A:151:VAL:HG11	1.64	0.80
1:A:194:THR:OG1	1:A:218:ARG:HB3	1.82	0.80
1:A:176:PHE:O	1:A:176:PHE:CD1	2.36	0.79
1:A:51:HIS:ND1	1:A:296:PRO:CD	2.46	0.79
1:A:269:ILE:HG22	1:A:271:ARG:N	1.97	0.79
1:A:256:GLU:O	1:A:259:ASN:N	2.16	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:340:PHE:O	1:A:340:PHE:CD2	2.36	0.79
1:A:171:LEU:HD22	1:A:346:ILE:HD11	1.65	0.78
1:A:233:LYS:CA	1:A:237:ALA:HB3	2.13	0.78
1:A:69:ALA:CB	1:A:145:THR:HG22	2.11	0.78
1:A:369:ARG:HB2	1:A:369:ARG:HH11	1.46	0.78
1:A:161:ASP:O	1:A:163:ALA:N	2.17	0.77
1:A:11:ALA:HA	1:A:147:SER:HA	1.65	0.77
1:A:64:ILE:HD11	1:A:130:PHE:CD1	2.20	0.77
1:A:171:LEU:HD11	1:A:369:ARG:HG2	1.65	0.77
1:A:229:PHE:HD1	1:A:240:CYS:HG	1.31	0.77
1:A:132:CYS:C	1:A:134:GLY:N	2.38	0.77
1:A:348:HIS:CE1	1:A:367:SER:HB3	2.20	0.76
1:A:129:ARG:HG3	1:A:129:ARG:NH1	1.95	0.76
1:A:304:ASN:ND2	1:A:305:PRO:HD2	1.99	0.76
1:A:95:PRO:C	1:A:96:GLN:CA	2.54	0.75
1:A:355:ILE:CG1	1:A:372:LEU:HD21	2.16	0.75
1:A:279:LEU:HD11	1:A:308:LEU:HD23	1.68	0.75
1:A:51:HIS:ND1	1:A:296:PRO:HD3	2.00	0.75
1:A:218:ARG:CZ	1:A:239:GLU:OE2	2.34	0.75
1:A:176:PHE:CD1	1:A:176:PHE:C	2.59	0.75
1:A:64:ILE:CD1	1:A:130:PHE:CE1	2.70	0.74
1:A:43:THR:HG22	1:A:69:ALA:HB2	1.68	0.74
1:A:74:GLU:HG2	1:A:149:TYR:HE1	1.52	0.74
1:A:349:VAL:HG13	1:A:371:ILE:HG22	1.69	0.74
1:A:64:ILE:CD1	1:A:130:PHE:CD1	2.71	0.73
1:A:122:THR:HG21	1:A:126:GLY:HA2	1.69	0.73
1:A:274:THR:HA	1:A:277:THR:HB	1.68	0.73
1:A:224:ILE:CA	1:A:242:ASN:ND2	2.50	0.73
1:A:229:PHE:O	1:A:232:ALA:CB	2.36	0.73
1:A:95:PRO:HB3	1:A:155:ILE:CD1	2.17	0.72
1:A:304:ASN:HD22	1:A:305:PRO:HD2	1.53	0.72
1:A:111:CYS:C	1:A:113:LYS:H	1.93	0.72
1:A:212:LYS:HE3	1:A:236:GLY:HA2	1.70	0.72
1:A:16:GLU:O	1:A:19:LYS:HG3	1.89	0.72
1:A:61:LEU:HD23	1:A:61:LEU:N	1.98	0.72
1:A:110:PHE:CD1	1:A:318:ILE:HG21	2.24	0.72
1:A:349:VAL:HG13	1:A:371:ILE:CG2	2.20	0.72
1:A:19:LYS:CD	3:A:381:NTN:NI1	2.37	0.72
1:A:85:PRO:C	1:A:87:ASP:H	1.94	0.72
1:A:204:GLY:CA	1:A:268:VAL:HG21	2.19	0.72
1:A:267:GLU:OE2	1:A:275:MET:HG3	1.90	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:369:ARG:HB2	1:A:369:ARG:NH1	2.04	0.72
1:A:209:MET:HE2	1:A:235:VAL:HB	1.72	0.71
1:A:21:PHE:HB2	1:A:356:ASN:ND2	2.04	0.71
1:A:369:ARG:HH11	1:A:369:ARG:CB	2.03	0.71
1:A:52:VAL:HG11	1:A:59:THR:HG22	1.73	0.71
1:A:15:TRP:O	1:A:16:GLU:CB	2.37	0.71
1:A:171:LEU:CD2	1:A:346:ILE:HD11	2.21	0.71
1:A:140:PHE:CE2	1:A:141:LEU:HD22	2.26	0.70
1:A:272:LEU:CD1	1:A:299:GLN:O	2.39	0.70
1:A:45:ILE:HG23	1:A:359:PHE:CE1	2.26	0.70
1:A:82:THR:CG2	1:A:82:THR:O	2.40	0.70
1:A:229:PHE:CD1	1:A:240:CYS:SG	2.85	0.70
1:A:248:LYS:HB3	1:A:249:PRO:HD2	1.73	0.70
1:A:154:GLU:HA	1:A:157:VAL:HG12	1.74	0.69
1:A:132:CYS:N	1:A:135:LYS:O	2.24	0.69
1:A:225:ASN:O	1:A:227:ASP:N	2.25	0.69
1:A:264:PHE:HD2	1:A:288:VAL:HG12	1.57	0.69
1:A:3:ALA:CB	1:A:5:LYS:HD2	2.22	0.69
1:A:30:PRO:CA	1:A:37:ARG:NH1	2.55	0.69
1:A:52:VAL:HG11	1:A:59:THR:CG2	2.22	0.69
1:A:182:SER:HA	1:A:186:VAL:CG2	2.23	0.69
1:A:82:THR:O	1:A:82:THR:HG23	1.93	0.69
1:A:365:GLY:O	1:A:367:SER:N	2.26	0.69
1:A:347:THR:HG22	1:A:369:ARG:H	1.55	0.69
1:A:67:HIS:HA	1:A:143:THR:OG1	1.93	0.69
1:A:243:PRO:HG3	1:A:250:ILE:HD13	1.75	0.69
1:A:273:ASP:OD1	1:A:273:ASP:N	2.26	0.69
1:A:319:PHE:O	1:A:321:GLY:N	2.25	0.68
1:A:56:THR:HB	1:A:297:ASP:HB3	1.75	0.68
1:A:13:VAL:N	1:A:22:SER:O	2.27	0.68
1:A:264:PHE:CD2	1:A:288:VAL:HG12	2.29	0.68
1:A:347:THR:CG2	1:A:368:ILE:H	1.99	0.68
1:A:255:THR:O	1:A:260:GLY:N	2.25	0.68
1:A:272:LEU:HD22	1:A:301:LEU:CB	2.09	0.68
1:A:271:ARG:O	1:A:275:MET:HE3	1.93	0.67
1:A:176:PHE:O	1:A:176:PHE:CG	2.47	0.67
1:A:96:GLN:N	1:A:96:GLN:C	2.47	0.67
1:A:129:ARG:HD2	1:A:151:VAL:HG11	1.77	0.67
1:A:328:VAL:N	1:A:329:PRO:CD	2.58	0.67
1:A:105:HIS:HD2	1:A:107:GLU:H	1.44	0.66
1:A:304:ASN:HD22	1:A:305:PRO:CD	2.07	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:83:VAL:HG12	1:A:87:ASP:OD2	1.94	0.66
1:A:346:ILE:HD12	1:A:371:ILE:HD11	1.77	0.66
1:A:30:PRO:O	1:A:30:PRO:HG2	1.93	0.66
1:A:279:LEU:HD11	1:A:308:LEU:CD2	2.24	0.66
1:A:347:THR:CG2	1:A:368:ILE:N	2.57	0.66
1:A:113:LYS:HG2	1:A:155:ILE:CD1	2.26	0.66
1:A:204:GLY:HA3	1:A:268:VAL:HG21	1.78	0.65
1:A:330:LYS:O	1:A:333:ALA:HB3	1.95	0.65
1:A:69:ALA:O	1:A:91:PRO:HD2	1.96	0.65
1:A:204:GLY:HA2	1:A:207:VAL:HG12	1.77	0.65
1:A:277:THR:O	1:A:277:THR:CG2	2.43	0.65
1:A:174:CYS:O	1:A:178:THR:HB	1.95	0.65
1:A:243:PRO:HG3	1:A:250:ILE:CD1	2.26	0.65
1:A:182:SER:HA	1:A:186:VAL:HG23	1.79	0.65
1:A:219:ILE:HD13	1:A:236:GLY:O	1.97	0.65
1:A:179:GLY:CA	1:A:203:VAL:HG13	2.26	0.65
1:A:288:VAL:HG23	1:A:313:THR:CB	2.27	0.64
1:A:323:LYS:O	1:A:327:SER:OG	2.09	0.64
1:A:41:VAL:CG2	1:A:166:LEU:HD12	2.27	0.64
1:A:41:VAL:HG21	1:A:166:LEU:HD12	1.78	0.64
1:A:147:SER:OG	1:A:149:TYR:O	2.15	0.64
1:A:284:GLU:HB2	1:A:310:SER:CB	2.27	0.64
1:A:307:LEU:O	1:A:312:ARG:HD2	1.97	0.64
1:A:329:PRO:HA	1:A:332:VAL:HG23	1.80	0.64
1:A:24:GLU:OE2	1:A:132:CYS:SG	2.55	0.64
1:A:262:VAL:O	1:A:282:CYS:HA	1.98	0.64
1:A:172:ILE:HG22	1:A:328:VAL:HG13	1.81	0.63
1:A:332:VAL:O	1:A:335:PHE:N	2.31	0.63
1:A:65:ALA:O	1:A:146:PHE:HB2	1.98	0.63
1:A:150:THR:OG1	1:A:151:VAL:N	2.31	0.63
1:A:211:CYS:O	1:A:214:ALA:N	2.32	0.63
1:A:171:LEU:C	1:A:173:GLY:H	2.00	0.63
1:A:347:THR:O	1:A:348:HIS:CD2	2.52	0.63
1:A:50:ASP:OD1	1:A:363:ARG:NH1	2.32	0.62
1:A:331:LEU:HD12	1:A:340:PHE:HZ	1.63	0.62
1:A:43:THR:HG23	1:A:69:ALA:HB2	1.80	0.62
1:A:102:VAL:CG1	1:A:112:LEU:HD23	2.29	0.62
1:A:219:ILE:HD12	1:A:238:THR:HG23	1.82	0.62
1:A:81:THR:OG1	1:A:82:THR:N	2.33	0.62
1:A:348:HIS:HB2	1:A:370:THR:CB	2.30	0.62
1:A:258:SER:OG	1:A:261:GLY:CA	2.48	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:333:ALA:HA	1:A:336:MET:HB2	1.81	0.62
1:A:218:ARG:NH2	1:A:239:GLU:CD	2.53	0.62
1:A:250:ILE:HG12	1:A:254:LEU:HD23	1.82	0.62
1:A:200:LEU:O	1:A:228:LYS:HG3	1.99	0.61
1:A:343:ASP:O	1:A:346:ILE:N	2.33	0.61
1:A:200:LEU:HB2	1:A:223:ASP:CB	2.29	0.61
1:A:92:LEU:HD21	1:A:328:VAL:HG21	1.82	0.61
1:A:252:GLU:C	1:A:254:LEU:H	2.02	0.61
1:A:219:ILE:N	1:A:238:THR:OG1	2.32	0.61
1:A:268:VAL:HG12	1:A:292:VAL:HG21	1.83	0.61
1:A:83:VAL:O	1:A:84:ARG:HG2	2.01	0.60
1:A:192:GLY:O	1:A:217:ALA:HB3	2.01	0.60
1:A:194:THR:HG23	1:A:220:ILE:CD1	2.31	0.60
1:A:95:PRO:HB2	1:A:111:CYS:HB3	1.81	0.60
1:A:258:SER:OG	1:A:261:GLY:HA2	2.00	0.60
3:A:381:NTN:H5	3:A:387:NTN:H4	1.82	0.60
1:A:99:LYS:HG2	1:A:100:CYS:N	2.16	0.60
1:A:284:GLU:HB2	1:A:310:SER:HB2	1.84	0.60
1:A:110:PHE:HD1	1:A:318:ILE:HG21	1.64	0.60
1:A:90:ILE:CG1	1:A:160:ILE:CG2	2.77	0.60
1:A:111:CYS:O	1:A:113:LYS:N	2.34	0.60
1:A:288:VAL:HG22	1:A:313:THR:HG22	1.83	0.60
1:A:102:VAL:HG21	1:A:110:PHE:O	2.02	0.59
1:A:198:PHE:HB2	1:A:266:PHE:O	2.03	0.59
1:A:219:ILE:CD1	1:A:238:THR:HG23	2.33	0.59
1:A:348:HIS:HB2	1:A:370:THR:HB	1.83	0.59
1:A:288:VAL:CG2	1:A:313:THR:CG2	2.81	0.59
1:A:343:ASP:OD2	1:A:343:ASP:N	2.35	0.59
1:A:249:PRO:CB	1:A:251:GLN:HG3	2.32	0.59
1:A:3:ALA:HB1	1:A:5:LYS:N	2.13	0.58
1:A:129:ARG:HD2	1:A:151:VAL:CG1	2.32	0.58
1:A:100:CYS:SG	1:A:103:CYS:HB2	2.44	0.58
1:A:252:GLU:O	1:A:254:LEU:N	2.36	0.58
1:A:74:GLU:OE2	1:A:75:SER:CB	2.49	0.58
1:A:277:THR:O	1:A:277:THR:HG22	2.02	0.58
1:A:105:HIS:CD2	1:A:107:GLU:H	2.21	0.58
1:A:283:GLN:HE22	1:A:285:ALA:HB2	1.68	0.58
1:A:229:PHE:HZ	1:A:242:ASN:HB2	1.68	0.58
1:A:283:GLN:NE2	1:A:285:ALA:CB	2.61	0.58
1:A:352:PHE:CD2	1:A:374:PHE:CZ	2.92	0.58
1:A:64:ILE:HB	1:A:144:SER:HB3	1.85	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:292:VAL:HG12	1:A:293:GLY:N	2.18	0.58
1:A:69:ALA:CB	1:A:145:THR:CG2	2.72	0.57
1:A:211:CYS:C	1:A:213:ALA:N	2.54	0.57
1:A:267:GLU:HG3	1:A:275:MET:HA	1.86	0.57
1:A:60:PRO:O	1:A:61:LEU:HD23	2.04	0.57
1:A:74:GLU:HG2	1:A:149:TYR:CE1	2.38	0.57
1:A:267:GLU:OE2	1:A:275:MET:HE3	2.04	0.57
1:A:66:GLY:N	1:A:146:PHE:CD1	2.72	0.57
1:A:122:THR:OG1	1:A:123:MET:N	2.28	0.57
1:A:65:ALA:C	1:A:146:PHE:HD1	2.08	0.57
1:A:161:ASP:O	1:A:164:SER:OG	2.16	0.57
1:A:327:SER:C	1:A:329:PRO:HD2	2.24	0.57
1:A:96:GLN:C	1:A:98:GLY:H	2.07	0.57
1:A:347:THR:HG23	1:A:367:SER:HB2	1.87	0.57
1:A:85:PRO:O	1:A:87:ASP:N	2.38	0.57
1:A:90:ILE:CD1	1:A:169:VAL:O	2.53	0.57
1:A:92:LEU:HD21	1:A:328:VAL:CG2	2.34	0.57
1:A:113:LYS:HG2	1:A:155:ILE:HD11	1.85	0.57
1:A:96:GLN:N	1:A:96:GLN:CB	2.42	0.56
1:A:273:ASP:O	1:A:276:VAL:HG12	2.05	0.56
1:A:14:LEU:HD13	1:A:16:GLU:H	1.70	0.56
1:A:35:GLU:O	1:A:36:VAL:CG2	2.51	0.56
1:A:70:ALA:HB1	1:A:166:LEU:HD22	1.86	0.56
1:A:250:ILE:HA	1:A:253:VAL:HG13	1.87	0.56
1:A:332:VAL:O	1:A:335:PHE:CB	2.53	0.56
1:A:21:PHE:CB	1:A:356:ASN:HD21	2.17	0.56
1:A:42:ALA:O	1:A:69:ALA:CB	2.52	0.56
1:A:59:THR:HA	1:A:119:PRO:HB2	1.87	0.56
1:A:113:LYS:HE2	1:A:124:GLN:HG2	1.86	0.56
1:A:154:GLU:HA	1:A:157:VAL:CG1	2.36	0.56
1:A:327:SER:O	1:A:328:VAL:C	2.44	0.56
1:A:334:ASP:HB3	1:A:339:LYS:CD	2.28	0.56
1:A:10:LYS:HG2	1:A:24:GLU:O	2.05	0.56
1:A:14:LEU:CD1	1:A:61:LEU:HD13	2.35	0.56
1:A:333:ALA:O	1:A:336:MET:N	2.39	0.56
1:A:132:CYS:HB2	1:A:137:ILE:HD11	1.86	0.56
1:A:59:THR:OG1	1:A:60:PRO:CD	2.54	0.55
1:A:93:PHE:HE1	1:A:174:CYS:SG	2.29	0.55
1:A:194:THR:HG23	1:A:220:ILE:HD12	1.87	0.55
1:A:7:ILE:HG22	1:A:8:LYS:N	2.21	0.55
1:A:267:GLU:HG2	1:A:274:THR:O	2.05	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:350:LEU:O	1:A:373:THR:N	2.39	0.55
1:A:99:LYS:HG3	1:A:104:LYS:CE	2.34	0.55
1:A:204:GLY:O	1:A:207:VAL:N	2.40	0.55
1:A:228:LYS:O	1:A:232:ALA:HB2	2.06	0.55
1:A:360:ASP:O	1:A:363:ARG:N	2.39	0.55
1:A:11:ALA:HB1	1:A:147:SER:HB2	1.84	0.55
1:A:16:GLU:HA	1:A:61:LEU:HD12	1.88	0.55
1:A:41:VAL:HG13	3:A:383:NTN:H5	1.87	0.55
1:A:223:ASP:C	1:A:225:ASN:H	2.10	0.55
1:A:99:LYS:CG	1:A:104:LYS:HD2	2.37	0.55
1:A:14:LEU:HD12	1:A:61:LEU:HD13	1.87	0.54
1:A:26:VAL:CG1	1:A:131:THR:O	2.47	0.54
1:A:180:TYR:CA	1:A:206:SER:O	2.56	0.54
1:A:52:VAL:C	1:A:54:SER:N	2.59	0.54
1:A:225:ASN:C	1:A:227:ASP:H	2.11	0.54
1:A:74:GLU:O	1:A:75:SER:HB2	2.07	0.54
1:A:171:LEU:CD2	1:A:346:ILE:CD1	2.84	0.54
1:A:65:ALA:C	1:A:146:PHE:CD1	2.81	0.54
1:A:124:GLN:NE2	1:A:155:ILE:HD11	2.22	0.54
1:A:109:ASN:N	1:A:109:ASN:OD1	2.39	0.54
1:A:218:ARG:HD3	1:A:220:ILE:HD11	1.89	0.54
1:A:288:VAL:CG2	1:A:313:THR:HG22	2.38	0.54
1:A:73:VAL:CG2	1:A:87:ASP:HB3	2.38	0.54
1:A:93:PHE:CE1	1:A:174:CYS:SG	3.01	0.54
1:A:272:LEU:HD23	1:A:275:MET:SD	2.48	0.54
1:A:276:VAL:HB	1:A:301:LEU:HD22	1.90	0.54
1:A:334:ASP:O	1:A:339:LYS:HB2	2.07	0.54
1:A:105:HIS:CD2	1:A:106:PRO:HD2	2.43	0.54
1:A:11:ALA:HB3	1:A:26:VAL:HG21	1.90	0.53
1:A:215:GLY:O	1:A:216:ALA:HB2	2.07	0.53
1:A:46:CYS:O	1:A:49:ASP:HB2	2.08	0.53
1:A:96:GLN:HE21	1:A:325:LYS:HB2	1.73	0.53
1:A:291:ILE:HD11	1:A:314:TRP:CE2	2.43	0.53
1:A:59:THR:OG1	1:A:60:PRO:HD2	2.08	0.53
1:A:90:ILE:HG13	1:A:328:VAL:HG11	1.90	0.53
1:A:182:SER:HA	1:A:186:VAL:HG21	1.91	0.53
1:A:99:LYS:HG3	1:A:104:LYS:HD2	1.89	0.53
1:A:11:ALA:HB3	1:A:26:VAL:CG2	2.38	0.53
1:A:178:THR:HA	1:A:320:GLY:H	1.73	0.53
1:A:250:ILE:CG1	1:A:254:LEU:HD23	2.39	0.53
1:A:201:GLY:O	1:A:205:LEU:HD13	2.09	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:195:CYS:HA	1:A:264:PHE:O	2.09	0.52
1:A:198:PHE:HE1	1:A:222:VAL:HG21	1.71	0.52
1:A:23:ILE:HD11	1:A:353:GLU:O	2.10	0.52
1:A:67:HIS:HA	1:A:143:THR:HG1	1.73	0.52
1:A:146:PHE:CE2	1:A:355:ILE:HD11	2.44	0.52
1:A:64:ILE:HD12	1:A:130:PHE:CZ	2.44	0.52
1:A:180:TYR:HA	1:A:206:SER:O	2.10	0.52
1:A:198:PHE:CE1	1:A:222:VAL:CG2	2.88	0.52
1:A:273:ASP:C	1:A:275:MET:H	2.13	0.52
1:A:9:CYS:SG	1:A:28:VAL:CG2	2.98	0.52
1:A:70:ALA:O	1:A:166:LEU:HD13	2.10	0.52
1:A:252:GLU:HA	1:A:255:THR:OG1	2.10	0.52
1:A:349:VAL:HG12	1:A:373:THR:HG23	1.92	0.52
1:A:288:VAL:HG23	1:A:313:THR:CG2	2.40	0.51
1:A:360:ASP:O	1:A:362:LEU:N	2.42	0.51
1:A:284:GLU:O	1:A:310:SER:CB	2.51	0.51
1:A:229:PHE:CD1	1:A:240:CYS:HB3	2.45	0.51
1:A:21:PHE:HD1	1:A:355:ILE:HG23	1.76	0.51
1:A:352:PHE:CE2	1:A:374:PHE:CZ	2.98	0.51
1:A:351:PRO:O	1:A:354:LYS:HG3	2.10	0.51
1:A:15:TRP:O	1:A:16:GLU:HB2	2.08	0.51
1:A:40:MET:HE1	1:A:145:THR:HG23	1.92	0.51
1:A:200:LEU:C	1:A:228:LYS:HG2	2.31	0.51
1:A:229:PHE:O	1:A:230:ALA:C	2.49	0.51
1:A:333:ALA:O	1:A:336:MET:HB2	2.10	0.51
1:A:328:VAL:HB	1:A:329:PRO:HD3	1.91	0.51
1:A:346:ILE:CG2	1:A:371:ILE:HD13	2.34	0.51
1:A:64:ILE:HD12	1:A:130:PHE:CD1	2.41	0.51
1:A:100:CYS:HB2	1:A:112:LEU:HG	1.93	0.51
1:A:331:LEU:HD12	1:A:340:PHE:CZ	2.43	0.50
1:A:335:PHE:CD2	1:A:342:LEU:HD12	2.46	0.50
1:A:349:VAL:CG2	3:A:389:NTN:CI5	2.89	0.50
1:A:165:PRO:O	1:A:169:VAL:HG22	2.11	0.50
1:A:73:VAL:HG21	1:A:87:ASP:HB3	1.93	0.50
1:A:100:CYS:O	1:A:101:ARG:O	2.29	0.50
1:A:185:LYS:O	1:A:185:LYS:CD	2.60	0.50
1:A:224:ILE:HD12	1:A:244:GLN:NE2	2.27	0.50
1:A:300:ASN:OD1	1:A:300:ASN:N	2.24	0.50
1:A:229:PHE:HD1	1:A:240:CYS:SG	2.28	0.50
1:A:110:PHE:CE1	1:A:116:LEU:HD12	2.43	0.50
1:A:113:LYS:HD3	1:A:155:ILE:HD11	1.93	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:187:ALA:O	1:A:189:VAL:HG23	2.11	0.50
1:A:225:ASN:C	1:A:227:ASP:N	2.64	0.50
1:A:161:ASP:HB3	1:A:164:SER:OG	2.10	0.50
1:A:171:LEU:O	1:A:173:GLY:N	2.45	0.50
1:A:200:LEU:HB3	1:A:228:LYS:HG2	1.93	0.50
1:A:69:ALA:HB2	1:A:145:THR:HG22	1.93	0.50
1:A:88:LYS:O	1:A:89:VAL:CG2	2.53	0.50
1:A:102:VAL:HG23	1:A:108:GLY:C	2.31	0.50
1:A:113:LYS:HG2	1:A:155:ILE:HD13	1.93	0.50
1:A:340:PHE:O	1:A:340:PHE:CG	2.59	0.50
1:A:249:PRO:HB3	1:A:251:GLN:HG3	1.95	0.49
1:A:23:ILE:CD1	1:A:353:GLU:O	2.61	0.49
1:A:82:THR:HG22	1:A:83:VAL:CG2	2.34	0.49
1:A:113:LYS:HD3	1:A:155:ILE:CD1	2.42	0.49
1:A:121:GLY:HA2	1:A:139:HIS:O	2.12	0.49
1:A:229:PHE:HB3	1:A:240:CYS:SG	2.52	0.49
1:A:205:LEU:HD12	1:A:205:LEU:H	1.77	0.49
1:A:205:LEU:O	1:A:209:MET:CB	2.51	0.49
1:A:332:VAL:O	1:A:336:MET:N	2.46	0.49
1:A:355:ILE:HA	1:A:372:LEU:HD11	1.93	0.49
1:A:8:LYS:HG2	1:A:9:CYS:N	2.28	0.49
1:A:111:CYS:C	1:A:113:LYS:N	2.65	0.49
1:A:267:GLU:OE1	1:A:269:ILE:HB	2.13	0.49
1:A:171:LEU:HD22	1:A:346:ILE:CD1	2.37	0.49
1:A:327:SER:C	1:A:329:PRO:CD	2.80	0.49
1:A:303:MET:O	1:A:305:PRO:HD3	2.13	0.49
1:A:90:ILE:HD11	1:A:169:VAL:O	2.13	0.49
1:A:52:VAL:C	1:A:54:SER:H	2.16	0.48
1:A:360:ASP:C	1:A:362:LEU:N	2.66	0.48
1:A:13:VAL:O	1:A:22:SER:N	2.37	0.48
1:A:113:LYS:CG	1:A:155:ILE:HD11	2.43	0.48
1:A:302:SER:O	1:A:303:MET:HB2	2.12	0.48
1:A:5:LYS:C	1:A:6:VAL:O	2.43	0.48
1:A:30:PRO:HA	1:A:37:ARG:CZ	2.41	0.48
1:A:5:LYS:O	1:A:6:VAL:C	2.44	0.48
1:A:229:PHE:HA	1:A:232:ALA:CB	2.43	0.48
1:A:40:MET:HE2	1:A:69:ALA:HB3	1.96	0.48
1:A:75:SER:O	1:A:76:ILE:HG22	2.14	0.48
1:A:250:ILE:C	1:A:252:GLU:H	2.16	0.48
1:A:88:LYS:HD3	1:A:166:LEU:HG	1.96	0.48
1:A:88:LYS:C	1:A:89:VAL:HG23	2.33	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:116:LEU:O	1:A:117:SER:O	2.32	0.48
1:A:252:GLU:C	1:A:254:LEU:N	2.67	0.48
1:A:49:ASP:OD2	1:A:140:PHE:HE1	1.97	0.48
1:A:56:THR:OG1	1:A:296:PRO:HD2	2.14	0.48
1:A:146:PHE:HE2	1:A:372:LEU:CD2	2.27	0.48
1:A:169:VAL:CG1	1:A:332:VAL:HG13	2.45	0.47
1:A:219:ILE:HD12	1:A:219:ILE:N	2.29	0.47
1:A:309:LEU:C	1:A:311:GLY:H	2.16	0.47
1:A:90:ILE:HG13	1:A:160:ILE:HG21	1.90	0.47
1:A:123:MET:HB3	1:A:127:THR:O	2.15	0.47
1:A:249:PRO:O	1:A:252:GLU:HB3	2.13	0.47
1:A:52:VAL:CG1	1:A:59:THR:CG2	2.77	0.47
1:A:96:GLN:N	1:A:97:CYS:N	2.62	0.47
1:A:182:SER:CA	1:A:186:VAL:HG23	2.42	0.47
1:A:332:VAL:O	1:A:335:PHE:CA	2.63	0.47
1:A:346:ILE:HG21	3:A:389:NTN:H6	1.96	0.47
1:A:192:GLY:O	1:A:217:ALA:CB	2.62	0.47
1:A:250:ILE:C	1:A:252:GLU:N	2.68	0.47
1:A:205:LEU:H	1:A:205:LEU:CD1	2.27	0.47
1:A:131:THR:HG22	1:A:133:ARG:C	2.35	0.47
1:A:164:SER:O	1:A:166:LEU:N	2.47	0.47
1:A:171:LEU:C	1:A:173:GLY:N	2.67	0.47
1:A:3:ALA:HB2	1:A:5:LYS:HD2	1.96	0.47
1:A:26:VAL:CG1	1:A:132:CYS:HA	2.45	0.47
1:A:258:SER:OG	1:A:261:GLY:N	2.48	0.47
1:A:357:GLU:OE2	3:A:399:NTN:H6	2.15	0.47
1:A:358:GLY:C	1:A:360:ASP:H	2.16	0.47
1:A:180:TYR:CD1	1:A:180:TYR:C	2.88	0.47
1:A:95:PRO:HB2	1:A:111:CYS:CB	2.44	0.46
1:A:290:VAL:HG22	1:A:315:LYS:HB3	1.97	0.46
1:A:211:CYS:O	1:A:212:LYS:C	2.53	0.46
1:A:279:LEU:HD22	1:A:312:ARG:HD3	1.97	0.46
1:A:186:VAL:C	1:A:188:LYS:H	2.19	0.46
1:A:272:LEU:HD23	1:A:272:LEU:HA	1.83	0.46
1:A:46:CYS:HB3	1:A:67:HIS:HE1	1.81	0.46
1:A:69:ALA:HB3	1:A:145:THR:HG23	1.92	0.46
1:A:165:PRO:O	1:A:167:GLU:N	2.49	0.46
1:A:333:ALA:CA	1:A:336:MET:HB2	2.45	0.46
1:A:220:ILE:CG2	1:A:241:VAL:CG2	2.94	0.46
1:A:224:ILE:HD12	1:A:244:GLN:HE21	1.81	0.46
1:A:118:MET:HA	1:A:119:PRO:HD2	1.79	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:160:ILE:HG13	1:A:161:ASP:H	1.80	0.46
1:A:195:CYS:SG	1:A:264:PHE:HB2	2.56	0.46
1:A:198:PHE:CD1	1:A:222:VAL:CG2	2.99	0.46
1:A:153:ASP:HB3	1:A:154:GLU:H	1.45	0.45
1:A:210:GLY:O	1:A:213:ALA:HB3	2.16	0.45
1:A:224:ILE:HG22	1:A:243:PRO:HD2	1.97	0.45
1:A:148:GLN:HB3	1:A:374:PHE:CE2	2.52	0.45
1:A:369:ARG:HH11	1:A:369:ARG:HA	1.80	0.45
1:A:7:ILE:CG2	1:A:8:LYS:N	2.79	0.45
1:A:11:ALA:CB	1:A:147:SER:CB	2.80	0.45
1:A:220:ILE:CG2	1:A:241:VAL:HG23	2.47	0.45
1:A:249:PRO:HB2	1:A:251:GLN:HG3	1.97	0.45
1:A:309:LEU:C	1:A:311:GLY:N	2.70	0.45
1:A:3:ALA:CA	1:A:5:LYS:HD2	2.46	0.45
1:A:224:ILE:CA	1:A:242:ASN:HD22	2.09	0.45
1:A:268:VAL:HG23	1:A:268:VAL:O	2.15	0.45
1:A:272:LEU:HD11	1:A:299:GLN:C	2.32	0.45
1:A:160:ILE:HG13	1:A:164:SER:OG	2.15	0.45
1:A:284:GLU:HB2	1:A:310:SER:HB3	1.99	0.45
1:A:329:PRO:O	1:A:332:VAL:HG23	2.16	0.45
1:A:357:GLU:HA	1:A:360:ASP:OD1	2.16	0.45
1:A:137:ILE:HD12	1:A:137:ILE:HA	1.71	0.45
1:A:171:LEU:HD12	1:A:171:LEU:HA	1.75	0.45
1:A:190:THR:OG1	1:A:264:PHE:HE1	1.99	0.45
1:A:204:GLY:HA2	1:A:207:VAL:CG1	2.44	0.45
1:A:94:THR:O	1:A:95:PRO:O	2.35	0.45
1:A:188:LYS:O	1:A:189:VAL:C	2.54	0.44
1:A:338:LYS:O	1:A:339:LYS:C	2.56	0.44
1:A:358:GLY:O	1:A:360:ASP:N	2.50	0.44
1:A:51:HIS:ND1	1:A:296:PRO:CG	2.81	0.44
1:A:194:THR:OG1	1:A:218:ARG:CB	2.59	0.44
1:A:253:VAL:O	1:A:257:MET:HG3	2.18	0.44
1:A:328:VAL:O	1:A:331:LEU:HB3	2.17	0.44
1:A:229:PHE:C	1:A:232:ALA:HB3	2.36	0.44
1:A:349:VAL:CG1	1:A:371:ILE:HG22	2.41	0.44
1:A:99:LYS:HG3	1:A:104:LYS:CD	2.47	0.44
1:A:267:GLU:OE2	1:A:275:MET:CG	2.63	0.44
1:A:105:HIS:CD2	1:A:106:PRO:N	2.86	0.44
1:A:194:THR:HG22	1:A:262:VAL:CB	2.47	0.44
1:A:204:GLY:CA	1:A:207:VAL:HG12	2.44	0.44
1:A:187:ALA:HB2	1:A:290:VAL:HG21	1.99	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:315:LYS:HE3	3:A:391:NTN:H5	1.98	0.44
1:A:82:THR:HB	1:A:154:GLU:OE2	2.18	0.44
1:A:169:VAL:HG12	1:A:332:VAL:HG13	2.00	0.44
1:A:348:HIS:CE1	1:A:367:SER:CB	2.97	0.44
1:A:95:PRO:HB3	1:A:113:LYS:HG2	2.00	0.43
1:A:243:PRO:HG3	1:A:250:ILE:HD12	2.00	0.43
1:A:68:GLU:OE1	1:A:369:ARG:NE	2.45	0.43
1:A:166:LEU:HA	1:A:169:VAL:HG23	1.99	0.43
1:A:279:LEU:CD1	1:A:308:LEU:HD23	2.43	0.43
1:A:76:ILE:HG12	1:A:77:GLY:O	2.19	0.43
1:A:200:LEU:O	1:A:205:LEU:HD11	2.18	0.43
1:A:205:LEU:HD12	1:A:205:LEU:N	2.33	0.43
1:A:129:ARG:NH1	1:A:129:ARG:CG	2.76	0.43
1:A:220:ILE:HD13	1:A:262:VAL:CG1	2.49	0.43
1:A:232:ALA:O	1:A:237:ALA:HB2	2.18	0.43
1:A:39:LYS:O	1:A:39:LYS:CG	2.67	0.43
1:A:109:ASN:O	1:A:111:CYS:N	2.52	0.43
1:A:67:HIS:HD1	1:A:67:HIS:N	2.16	0.43
1:A:64:ILE:HG12	1:A:137:ILE:HG21	2.01	0.43
1:A:351:PRO:O	1:A:354:LYS:CG	2.66	0.42
1:A:140:PHE:O	1:A:141:LEU:HB2	2.19	0.42
1:A:154:GLU:O	1:A:157:VAL:HG12	2.19	0.42
1:A:166:LEU:HD22	1:A:166:LEU:HA	1.39	0.42
1:A:10:LYS:HA	1:A:25:GLU:HA	2.01	0.42
1:A:30:PRO:O	1:A:30:PRO:CG	2.66	0.42
1:A:39:LYS:HG3	1:A:40:MET:O	2.19	0.42
1:A:74:GLU:OE2	1:A:74:GLU:O	2.37	0.42
1:A:18:LYS:N	1:A:53:VAL:O	2.51	0.42
1:A:269:ILE:CG2	1:A:271:ARG:CG	2.81	0.42
1:A:348:HIS:ND1	1:A:367:SER:CB	2.81	0.42
1:A:368:ILE:HD13	1:A:368:ILE:HG21	1.67	0.42
1:A:273:ASP:C	1:A:275:MET:N	2.73	0.42
1:A:307:LEU:O	1:A:312:ARG:CD	2.66	0.42
1:A:58:VAL:O	1:A:58:VAL:HG12	2.19	0.42
1:A:279:LEU:HD23	1:A:279:LEU:HA	1.71	0.42
1:A:38:ILE:HD11	1:A:152:VAL:CG2	2.39	0.42
1:A:312:ARG:HD2	1:A:312:ARG:HH11	1.60	0.42
1:A:357:GLU:OE2	3:A:399:NTN:CI6	2.68	0.42
1:A:21:PHE:CD1	1:A:355:ILE:HG23	2.55	0.41
1:A:26:VAL:HG12	1:A:132:CYS:HA	2.02	0.41
1:A:160:ILE:HG13	1:A:161:ASP:N	2.34	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:340:PHE:O	1:A:340:PHE:HD2	2.00	0.41
1:A:348:HIS:HB2	1:A:370:THR:OG1	2.20	0.41
1:A:220:ILE:HG23	1:A:241:VAL:HG23	2.01	0.41
1:A:102:VAL:HG23	1:A:102:VAL:O	2.19	0.41
1:A:35:GLU:C	1:A:36:VAL:HG23	2.39	0.41
1:A:198:PHE:CD1	1:A:222:VAL:HG22	2.54	0.41
1:A:211:CYS:O	1:A:215:GLY:N	2.45	0.41
1:A:334:ASP:HA	1:A:337:ALA:HB3	2.01	0.41
1:A:346:ILE:HD12	1:A:346:ILE:HG23	1.83	0.41
1:A:85:PRO:C	1:A:87:ASP:N	2.65	0.41
1:A:309:LEU:HA	1:A:309:LEU:HD12	1.29	0.41
1:A:35:GLU:OE1	1:A:129:ARG:NH2	2.52	0.41
1:A:51:HIS:CE1	1:A:296:PRO:CD	2.91	0.41
1:A:140:PHE:CD2	1:A:141:LEU:HD22	2.56	0.41
1:A:178:THR:O	1:A:179:GLY:O	2.39	0.41
1:A:268:VAL:HG12	1:A:292:VAL:HG11	2.03	0.41
1:A:176:PHE:CZ	1:A:340:PHE:CE2	3.09	0.41
1:A:272:LEU:HD11	1:A:300:ASN:C	2.41	0.41
1:A:136:PRO:C	1:A:137:ILE:HD13	2.39	0.41
1:A:168:LYS:HG2	1:A:342:LEU:HB2	2.03	0.41
1:A:161:ASP:C	1:A:164:SER:HG	2.18	0.41
1:A:209:MET:CE	1:A:235:VAL:HB	2.46	0.41
1:A:304:ASN:O	1:A:305:PRO:C	2.58	0.41
1:A:338:LYS:O	1:A:340:PHE:N	2.54	0.41
1:A:121:GLY:O	1:A:139:HIS:CA	2.65	0.40
1:A:179:GLY:HA3	1:A:206:SER:HB2	2.03	0.40
1:A:273:ASP:O	1:A:275:MET:N	2.54	0.40
1:A:152:VAL:CG2	1:A:152:VAL:O	2.69	0.40
1:A:179:GLY:O	1:A:181:GLY:N	2.54	0.40
1:A:200:LEU:HA	1:A:200:LEU:HD12	1.71	0.40
1:A:96:GLN:C	1:A:98:GLY:N	2.73	0.40
1:A:250:ILE:HG12	1:A:254:LEU:CD2	2.49	0.40
1:A:146:PHE:CE2	1:A:372:LEU:CD2	3.04	0.40
1:A:199:GLY:HA3	1:A:268:VAL:HG23	2.03	0.40

All (734) 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:103:CYS:C	1:A:325:LYS:N[2_556]	0.24	1.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:9:CYS:C	1:A:10:LYS:N[2_555]	0.30	1.90
1:A:34:HIS:CB	1:A:188:LYS:NZ[2_556]	0.31	1.89
1:A:24:GLU:CG	3:A:379:NTN:CI5[2_555]	0.38	1.82
1:A:123:MET:O	1:A:316:GLY:N[2_556]	0.38	1.82
1:A:24:GLU:O	1:A:25:GLU:CA[2_555]	0.40	1.80
1:A:34:HIS:C	3:A:391:NTN:CI2[2_556]	0.41	1.79
1:A:94:THR:O	1:A:102:VAL:CG2[2_556]	0.45	1.75
1:A:94:THR:CA	1:A:110:PHE:O[2_556]	0.46	1.74
1:A:120:ARG:CZ	1:A:291:ILE:O[2_556]	0.47	1.73
1:A:7:ILE:O	1:A:148:GLN:NE2[2_555]	0.50	1.70
1:A:1:SER:OG	1:A:40:MET:CA[2_555]	0.53	1.67
1:A:105:HIS:NE2	1:A:157:VAL:CB[2_556]	0.57	1.63
1:A:125:ASP:O	1:A:290:VAL:N[2_556]	0.57	1.63
1:A:1:SER:CB	1:A:40:MET:N[2_555]	0.58	1.62
1:A:5:LYS:N	3:A:383:NTN:NI2[2_555]	0.58	1.62
1:A:114:ASN:N	1:A:318:ILE:CG2[2_556]	0.59	1.61
1:A:34:HIS:CG	1:A:188:LYS:CE[2_556]	0.60	1.60
1:A:107:GLU:N	1:A:154:GLU:O[2_556]	0.61	1.59
1:A:166:LEU:O	3:A:377:NTN:CI4[2_555]	0.64	1.56
1:A:34:HIS:CA	3:A:391:NTN:CI1[2_556]	0.65	1.55
1:A:105:HIS:CG	1:A:157:VAL:C[2_556]	0.67	1.53
1:A:110:PHE:CE1	1:A:114:ASN:ND2[2_556]	0.67	1.53
1:A:11:ALA:C	1:A:25:GLU:CD[2_555]	0.69	1.51
1:A:27:GLU:CD	1:A:353:GLU:CG[2_555]	0.69	1.51
1:A:35:GLU:N	3:A:391:NTN:CI3[2_556]	0.69	1.51
1:A:100:CYS:CB	1:A:319:PHE:CE2[2_556]	0.71	1.49
1:A:113:LYS:CA	1:A:318:ILE:O[2_556]	0.72	1.48
1:A:97:CYS:SG	1:A:322:PHE:C[2_556]	0.73	1.47
1:A:107:GLU:C	1:A:155:ILE:C[2_556]	0.73	1.47
1:A:127:THR:CG2	1:A:314:TRP:N[2_556]	0.73	1.47
1:A:3:ALA:CB	3:A:383:NTN:CI6[2_555]	0.74	1.46
1:A:8:LYS:N	1:A:148:GLN:CB[2_555]	0.74	1.46
1:A:24:GLU:CD	3:A:379:NTN:NI2[2_555]	0.74	1.46
1:A:35:GLU:CB	3:A:391:NTN:NI2[2_556]	0.75	1.45
1:A:34:HIS:CD2	1:A:188:LYS:CD[2_556]	0.77	1.43
1:A:99:LYS:CB	1:A:327:SER:CB[2_556]	0.77	1.43
1:A:103:CYS:CB	1:A:324:SER:N[2_556]	0.77	1.43
1:A:116:LEU:CD2	1:A:117:SER:OG[2_556]	0.78	1.42
1:A:151:VAL:CG2	3:A:378:NTN:CI4[2_555]	0.78	1.42
1:A:10:LYS:CD	1:A:26:VAL:CB[2_555]	0.80	1.40
1:A:99:LYS:CA	1:A:327:SER:CB[2_556]	0.80	1.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:11:ALA:O	1:A:25:GLU:CD[2_555]	0.81	1.39
1:A:11:ALA:C	1:A:25:GLU:OE2[2_555]	0.81	1.39
1:A:110:PHE:CD1	1:A:114:ASN:CB[2_556]	0.81	1.39
1:A:108:GLY:N	1:A:155:ILE:C[2_556]	0.83	1.37
1:A:8:LYS:CA	1:A:148:GLN:CB[2_555]	0.84	1.36
1:A:10:LYS:CE	1:A:26:VAL:CG2[2_555]	0.84	1.36
1:A:24:GLU:OE2	3:A:379:NTN:CI4[2_555]	0.84	1.36
1:A:9:CYS:O	1:A:10:LYS:CA[2_555]	0.85	1.35
1:A:1:SER:O	1:A:39:LYS:CA[2_555]	0.86	1.34
1:A:108:GLY:N	1:A:155:ILE:O[2_556]	0.87	1.33
1:A:1:SER:CA	1:A:39:LYS:C[2_555]	0.88	1.32
1:A:134:GLY:O	1:A:305:PRO:CB[2_556]	0.88	1.32
1:A:23:ILE:CG2	1:A:133:ARG:CG[2_555]	0.89	1.31
1:A:105:HIS:CE1	1:A:157:VAL:CB[2_556]	0.89	1.31
1:A:92:LEU:CD2	1:A:101:ARG:C[2_556]	0.90	1.30
1:A:151:VAL:CB	3:A:378:NTN:CI4[2_555]	0.90	1.30
1:A:5:LYS:CE	1:A:41:VAL:CG1[2_555]	0.91	1.29
1:A:313:THR:N	3:A:382:NTN:NI1[2_556]	0.91	1.29
1:A:96:GLN:O	1:A:323:LYS:CG[2_556]	0.92	1.28
1:A:103:CYS:CB	1:A:324:SER:CA[2_556]	0.92	1.28
1:A:328:VAL:CG1	3:A:385:NTN:CI5[2_556]	0.93	1.27
1:A:8:LYS:C	1:A:148:GLN:CG[2_555]	0.94	1.26
1:A:11:ALA:CA	1:A:25:GLU:OE2[2_555]	0.94	1.26
1:A:94:THR:CG2	1:A:111:CYS:N[2_556]	0.94	1.26
1:A:1:SER:CB	1:A:39:LYS:C[2_555]	0.95	1.25
1:A:10:LYS:CG	1:A:26:VAL:N[2_555]	0.95	1.25
1:A:35:GLU:CA	3:A:391:NTN:CI4[2_556]	0.95	1.25
1:A:127:THR:CG2	1:A:313:THR:C[2_556]	0.95	1.25
3:A:390:NTN:NI1	3:A:397:NTN:NI2[2_556]	0.95	1.25
1:A:9:CYS:O	1:A:10:LYS:N[2_555]	0.96	1.24
1:A:150:THR:N	3:A:378:NTN:NI1[2_555]	0.96	1.24
1:A:99:LYS:N	1:A:323:LYS:O[2_556]	0.97	1.23
1:A:107:GLU:C	1:A:156:SER:N[2_556]	0.97	1.23
1:A:120:ARG:NH1	1:A:291:ILE:O[2_556]	0.97	1.23
1:A:24:GLU:CB	3:A:379:NTN:CI6[2_555]	0.98	1.22
1:A:123:MET:O	1:A:315:LYS:C[2_556]	0.98	1.22
1:A:125:ASP:O	1:A:290:VAL:CA[2_556]	0.98	1.22
1:A:149:TYR:OH	1:A:149:TYR:OH[2_555]	0.98	1.22
1:A:172:ILE:CG2	3:A:385:NTN:CI3[2_556]	0.99	1.21
1:A:5:LYS:NZ	1:A:41:VAL:CG1[2_555]	1.00	1.20
1:A:95:PRO:CA	1:A:109:ASN:N[2_556]	1.00	1.20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:107:GLU:CA	1:A:155:ILE:N[2_556]	1.00	1.20
1:A:120:ARG:NH2	1:A:292:VAL:N[2_556]	1.00	1.20
1:A:8:LYS:CB	1:A:148:GLN:CA[2_555]	1.01	1.19
1:A:96:GLN:C	1:A:323:LYS:CG[2_556]	1.01	1.19
1:A:8:LYS:CE	1:A:149:TYR:C[2_555]	1.02	1.18
1:A:125:ASP:C	1:A:290:VAL:CA[2_556]	1.02	1.18
1:A:1:SER:O	1:A:39:LYS:CB[2_555]	1.03	1.17
1:A:150:THR:CA	3:A:378:NTN:NI1[2_555]	1.03	1.17
1:A:105:HIS:O	1:A:325:LYS:CD[2_556]	1.04	1.16
1:A:24:GLU:C	1:A:25:GLU:N[2_555]	1.05	1.15
1:A:35:GLU:CA	3:A:391:NTN:NI2[2_556]	1.05	1.15
1:A:127:THR:O	1:A:314:TRP:O[2_556]	1.05	1.15
1:A:34:HIS:CB	3:A:391:NTN:CI1[2_556]	1.06	1.14
1:A:104:LYS:NZ	1:A:329:PRO:C[2_556]	1.07	1.13
1:A:105:HIS:CG	1:A:157:VAL:CA[2_556]	1.07	1.13
1:A:107:GLU:O	1:A:156:SER:CA[2_556]	1.07	1.13
1:A:129:ARG:NH2	1:A:313:THR:CG2[2_556]	1.08	1.12
1:A:35:GLU:N	3:A:391:NTN:CI4[2_556]	1.09	1.11
1:A:95:PRO:CB	1:A:109:ASN:OD1[2_556]	1.09	1.11
1:A:127:THR:O	1:A:314:TRP:C[2_556]	1.10	1.10
1:A:178:THR:O	3:A:386:NTN:NI2[2_556]	1.10	1.10
1:A:1:SER:C	1:A:39:LYS:CA[2_555]	1.12	1.08
1:A:101:ARG:CZ	1:A:173:GLY:CA[2_556]	1.12	1.08
1:A:27:GLU:OE1	1:A:353:GLU:CG[2_555]	1.14	1.06
1:A:104:LYS:CA	1:A:325:LYS:C[2_556]	1.14	1.06
1:A:1:SER:CA	1:A:39:LYS:O[2_555]	1.15	1.05
1:A:5:LYS:CE	1:A:41:VAL:CB[2_555]	1.15	1.05
1:A:97:CYS:SG	1:A:322:PHE:O[2_556]	1.15	1.05
1:A:331:LEU:CG	3:A:385:NTN:NI1[2_556]	1.15	1.05
1:A:5:LYS:NZ	1:A:41:VAL:CB[2_555]	1.16	1.04
1:A:10:LYS:CB	1:A:26:VAL:N[2_555]	1.16	1.04
1:A:34:HIS:CD2	1:A:188:LYS:CG[2_556]	1.16	1.04
1:A:8:LYS:CB	1:A:148:GLN:C[2_555]	1.17	1.03
1:A:95:PRO:C	1:A:109:ASN:N[2_556]	1.17	1.03
1:A:166:LEU:O	3:A:377:NTN:CI3[2_555]	1.17	1.03
1:A:22:SER:C	1:A:133:ARG:NH2[2_555]	1.18	1.02
1:A:34:HIS:ND1	1:A:188:LYS:CE[2_556]	1.18	1.02
1:A:98:GLY:N	1:A:323:LYS:CB[2_556]	1.18	1.02
1:A:101:ARG:NH2	1:A:173:GLY:C[2_556]	1.18	1.02
1:A:104:LYS:N	1:A:324:SER:C[2_556]	1.18	1.02
1:A:104:LYS:N	1:A:324:SER:O[2_556]	1.18	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:105:HIS:ND1	1:A:157:VAL:CA[2_556]	1.18	1.02
1:A:8:LYS:CE	1:A:149:TYR:O[2_555]	1.19	1.01
1:A:104:LYS:CA	1:A:325:LYS:O[2_556]	1.19	1.01
1:A:127:THR:C	1:A:314:TRP:CB[2_556]	1.19	1.01
1:A:9:CYS:C	1:A:9:CYS:C[2_555]	1.20	1.00
1:A:10:LYS:CD	1:A:26:VAL:CG2[2_555]	1.20	1.00
1:A:24:GLU:CB	3:A:379:NTN:CI5[2_555]	1.20	1.00
1:A:105:HIS:NE2	1:A:157:VAL:CG1[2_556]	1.20	1.00
1:A:127:THR:CA	1:A:314:TRP:CA[2_556]	1.20	1.00
1:A:127:THR:CB	1:A:314:TRP:CA[2_556]	1.20	1.00
1:A:34:HIS:C	3:A:391:NTN:CI3[2_556]	1.21	0.99
1:A:107:GLU:O	1:A:156:SER:N[2_556]	1.21	0.99
1:A:112:LEU:O	1:A:319:PHE:N[2_556]	1.21	0.99
1:A:24:GLU:CG	3:A:379:NTN:NI2[2_555]	1.22	0.98
1:A:34:HIS:CG	1:A:188:LYS:NZ[2_556]	1.22	0.98
1:A:107:GLU:CB	1:A:155:ILE:N[2_556]	1.22	0.98
1:A:96:GLN:N	1:A:109:ASN:CA[2_556]	1.23	0.97
1:A:99:LYS:N	1:A:327:SER:OG[2_556]	1.23	0.97
1:A:11:ALA:O	1:A:25:GLU:CG[2_555]	1.24	0.96
1:A:103:CYS:C	1:A:324:SER:C[2_556]	1.24	0.96
1:A:127:THR:CA	1:A:314:TRP:CB[2_556]	1.24	0.96
1:A:34:HIS:NE2	1:A:188:LYS:CD[2_556]	1.25	0.95
1:A:99:LYS:CA	1:A:327:SER:OG[2_556]	1.25	0.95
1:A:99:LYS:CE	1:A:331:LEU:CD2[2_556]	1.25	0.95
1:A:23:ILE:CG1	1:A:133:ARG:NE[2_555]	1.26	0.94
1:A:95:PRO:CD	1:A:110:PHE:N[2_556]	1.26	0.94
1:A:97:CYS:CB	1:A:322:PHE:C[2_556]	1.26	0.94
1:A:107:GLU:CA	1:A:154:GLU:C[2_556]	1.26	0.94
1:A:109:ASN:ND2	1:A:113:LYS:CB[2_556]	1.26	0.94
1:A:114:ASN:O	1:A:318:ILE:CD1[2_556]	1.26	0.94
1:A:101:ARG:NH1	1:A:173:GLY:CA[2_556]	1.27	0.93
1:A:105:HIS:CE1	1:A:157:VAL:CG2[2_556]	1.27	0.93
1:A:110:PHE:CE1	1:A:114:ASN:CG[2_556]	1.27	0.93
1:A:34:HIS:NE2	1:A:188:LYS:CG[2_556]	1.28	0.92
1:A:105:HIS:CD2	1:A:157:VAL:CA[2_556]	1.28	0.92
1:A:120:ARG:NH2	1:A:292:VAL:CA[2_556]	1.28	0.92
1:A:123:MET:C	1:A:316:GLY:N[2_556]	1.28	0.92
1:A:8:LYS:CA	1:A:148:GLN:CA[2_555]	1.29	0.91
1:A:103:CYS:O	1:A:325:LYS:N[2_556]	1.29	0.91
1:A:112:LEU:CB	1:A:319:PHE:CG[2_556]	1.29	0.91
1:A:120:ARG:NH2	1:A:291:ILE:C[2_556]	1.29	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:151:VAL:CG2	3:A:378:NTN:NI2[2_555]	1.29	0.91
1:A:8:LYS:CE	1:A:149:TYR:CA[2_555]	1.31	0.89
1:A:97:CYS:C	1:A:323:LYS:N[2_556]	1.31	0.89
1:A:24:GLU:O	1:A:25:GLU:N[2_555]	1.32	0.88
1:A:120:ARG:CZ	1:A:291:ILE:C[2_556]	1.32	0.88
1:A:288:VAL:CA	3:A:382:NTN:CI6[2_556]	1.32	0.88
1:A:1:SER:C	1:A:39:LYS:CB[2_555]	1.33	0.87
1:A:9:CYS:N	1:A:148:GLN:CG[2_555]	1.33	0.87
1:A:103:CYS:SG	1:A:324:SER:N[2_556]	1.33	0.87
1:A:113:LYS:NZ	1:A:321:GLY:N[2_556]	1.33	0.87
1:A:104:LYS:CD	1:A:329:PRO:CD[2_556]	1.34	0.86
1:A:24:GLU:OE2	3:A:379:NTN:CI3[2_555]	1.36	0.84
1:A:34:HIS:CA	3:A:391:NTN:CI2[2_556]	1.36	0.84
1:A:104:LYS:N	1:A:325:LYS:N[2_556]	1.36	0.84
1:A:122:THR:CG2	1:A:291:ILE:CD1[2_556]	1.36	0.84
1:A:23:ILE:N	1:A:133:ARG:NH2[2_555]	1.37	0.83
1:A:95:PRO:C	1:A:109:ASN:CA[2_556]	1.37	0.83
1:A:320:GLY:CA	3:A:386:NTN:CI6[2_556]	1.37	0.83
1:A:24:GLU:O	1:A:25:GLU:CB[2_555]	1.38	0.82
1:A:27:GLU:OE2	1:A:353:GLU:CG[2_555]	1.38	0.82
1:A:34:HIS:CA	3:A:391:NTN:NI1[2_556]	1.38	0.82
1:A:104:LYS:NZ	1:A:329:PRO:CA[2_556]	1.38	0.82
1:A:35:GLU:N	3:A:391:NTN:CI2[2_556]	1.39	0.81
1:A:94:THR:CG2	1:A:110:PHE:C[2_556]	1.39	0.81
1:A:112:LEU:CG	1:A:319:PHE:CD1[2_556]	1.39	0.81
1:A:103:CYS:CA	1:A:325:LYS:N[2_556]	1.40	0.80
1:A:107:GLU:C	1:A:155:ILE:O[2_556]	1.40	0.80
1:A:110:PHE:CD1	1:A:114:ASN:CG[2_556]	1.40	0.80
1:A:113:LYS:CA	1:A:318:ILE:C[2_556]	1.40	0.80
1:A:10:LYS:CD	1:A:26:VAL:CA[2_555]	1.41	0.79
1:A:95:PRO:CD	1:A:110:PHE:CA[2_556]	1.41	0.79
1:A:103:CYS:N	1:A:324:SER:CB[2_556]	1.41	0.79
1:A:105:HIS:CE1	1:A:157:VAL:CA[2_556]	1.41	0.79
1:A:107:GLU:CA	1:A:155:ILE:CA[2_556]	1.41	0.79
1:A:128:SER:N	1:A:314:TRP:CB[2_556]	1.41	0.79
1:A:92:LEU:CD2	1:A:102:VAL:N[2_556]	1.42	0.78
1:A:22:SER:O	1:A:133:ARG:NH2[2_555]	1.43	0.77
1:A:94:THR:CB	1:A:110:PHE:O[2_556]	1.43	0.77
1:A:105:HIS:NE2	1:A:157:VAL:CA[2_556]	1.43	0.77
1:A:112:LEU:CB	1:A:319:PHE:CB[2_556]	1.43	0.77
1:A:125:ASP:CA	1:A:290:VAL:CG2[2_556]	1.43	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:103:CYS:CA	1:A:324:SER:C[2_556]	1.44	0.76
1:A:113:LYS:CB	1:A:318:ILE:O[2_556]	1.44	0.76
1:A:127:THR:C	1:A:314:TRP:CA[2_556]	1.44	0.76
1:A:34:HIS:O	3:A:391:NTN:CI2[2_556]	1.45	0.75
1:A:106:PRO:C	1:A:154:GLU:O[2_556]	1.45	0.75
1:A:8:LYS:CA	1:A:148:GLN:CG[2_555]	1.46	0.74
1:A:95:PRO:N	1:A:110:PHE:N[2_556]	1.46	0.74
1:A:97:CYS:CB	1:A:322:PHE:CA[2_556]	1.46	0.74
1:A:10:LYS:CE	1:A:26:VAL:CB[2_555]	1.47	0.73
1:A:11:ALA:C	1:A:25:GLU:OE1[2_555]	1.47	0.73
1:A:37:ARG:NH2	3:A:383:NTN:NI1[2_555]	1.47	0.73
1:A:101:ARG:CZ	1:A:173:GLY:C[2_556]	1.47	0.73
1:A:104:LYS:NZ	1:A:330:LYS:N[2_556]	1.47	0.73
1:A:105:HIS:CD2	1:A:157:VAL:C[2_556]	1.47	0.73
1:A:116:LEU:CD2	1:A:117:SER:CB[2_556]	1.47	0.73
1:A:1:SER:CB	1:A:40:MET:CA[2_555]	1.48	0.72
1:A:23:ILE:CA	1:A:133:ARG:CZ[2_555]	1.48	0.72
1:A:104:LYS:CD	1:A:327:SER:C[2_556]	1.48	0.72
1:A:107:GLU:O	1:A:156:SER:C[2_556]	1.48	0.72
1:A:149:TYR:CZ	1:A:149:TYR:OH[2_555]	1.48	0.72
1:A:3:ALA:CB	3:A:383:NTN:CI2[2_555]	1.49	0.71
1:A:98:GLY:C	1:A:323:LYS:O[2_556]	1.49	0.71
1:A:107:GLU:N	1:A:154:GLU:C[2_556]	1.49	0.71
1:A:114:ASN:N	1:A:318:ILE:CB[2_556]	1.49	0.71
1:A:166:LEU:CD1	3:A:377:NTN:NI1[2_555]	1.49	0.71
1:A:320:GLY:N	3:A:386:NTN:CI6[2_556]	1.49	0.71
1:A:1:SER:C	1:A:39:LYS:C[2_555]	1.50	0.70
1:A:24:GLU:OE2	3:A:379:NTN:NI2[2_555]	1.50	0.70
1:A:82:THR:CG2	1:A:106:PRO:CG[2_556]	1.50	0.70
1:A:103:CYS:C	1:A:325:LYS:CA[2_556]	1.50	0.70
1:A:131:THR:CG2	1:A:353:GLU:OE1[2_555]	1.50	0.70
1:A:24:GLU:C	1:A:25:GLU:CA[2_555]	1.51	0.69
1:A:34:HIS:CD2	1:A:188:LYS:CE[2_556]	1.51	0.69
1:A:96:GLN:N	1:A:109:ASN:N[2_556]	1.51	0.69
1:A:98:GLY:C	1:A:327:SER:OG[2_556]	1.51	0.69
1:A:172:ILE:CG2	3:A:385:NTN:CI2[2_556]	1.51	0.69
1:A:282:CYS:SG	3:A:382:NTN:NI2[2_556]	1.51	0.69
1:A:10:LYS:N	1:A:10:LYS:N[2_555]	1.52	0.68
1:A:24:GLU:CD	3:A:379:NTN:CI4[2_555]	1.52	0.68
1:A:94:THR:C	1:A:110:PHE:O[2_556]	1.52	0.68
1:A:95:PRO:C	1:A:108:GLY:C[2_556]	1.52	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:97:CYS:CA	1:A:323:LYS:N[2_556]	1.52	0.68
1:A:126:GLY:O	1:A:314:TRP:CD1[2_556]	1.52	0.68
1:A:5:LYS:N	3:A:383:NTN:CI4[2_555]	1.53	0.67
1:A:95:PRO:CD	1:A:110:PHE:CB[2_556]	1.53	0.67
1:A:96:GLN:O	1:A:323:LYS:CD[2_556]	1.53	0.67
1:A:113:LYS:CD	1:A:321:GLY:CA[2_556]	1.53	0.67
1:A:123:MET:C	1:A:315:LYS:C[2_556]	1.53	0.67
1:A:135:LYS:CA	1:A:305:PRO:CG[2_556]	1.53	0.67
1:A:1:SER:OG	1:A:40:MET:C[2_555]	1.55	0.65
1:A:24:GLU:O	1:A:25:GLU:C[2_555]	1.55	0.65
1:A:28:VAL:CG1	3:A:378:NTN:CI6[2_555]	1.55	0.65
1:A:35:GLU:C	3:A:391:NTN:CI4[2_556]	1.55	0.65
1:A:105:HIS:CB	1:A:158:ALA:N[2_556]	1.55	0.65
1:A:113:LYS:C	1:A:318:ILE:CG2[2_556]	1.55	0.65
1:A:134:GLY:C	1:A:305:PRO:CB[2_556]	1.55	0.65
1:A:172:ILE:CG2	3:A:385:NTN:CI4[2_556]	1.55	0.65
1:A:7:ILE:O	1:A:148:GLN:CD[2_555]	1.56	0.64
1:A:97:CYS:SG	1:A:322:PHE:CA[2_556]	1.56	0.64
1:A:133:ARG:CA	1:A:353:GLU:OE2[2_555]	1.56	0.64
1:A:312:ARG:C	3:A:382:NTN:NI1[2_556]	1.56	0.64
1:A:1:SER:OG	1:A:40:MET:N[2_555]	1.57	0.63
1:A:2:THR:N	1:A:39:LYS:O[2_555]	1.57	0.63
1:A:101:ARG:NH2	1:A:173:GLY:CA[2_556]	1.57	0.63
1:A:104:LYS:N	1:A:325:LYS:CA[2_556]	1.57	0.63
1:A:104:LYS:CG	1:A:329:PRO:CD[2_556]	1.57	0.63
1:A:105:HIS:CB	1:A:157:VAL:C[2_556]	1.57	0.63
1:A:107:GLU:OE1	1:A:155:ILE:CG1[2_556]	1.57	0.63
1:A:127:THR:CG2	1:A:313:THR:O[2_556]	1.57	0.63
1:A:107:GLU:CA	1:A:155:ILE:C[2_556]	1.58	0.62
1:A:127:THR:CG2	1:A:314:TRP:CA[2_556]	1.58	0.62
1:A:127:THR:CA	1:A:314:TRP:CG[2_556]	1.58	0.62
1:A:132:CYS:SG	3:A:379:NTN:CI3[2_555]	1.58	0.62
1:A:1:SER:N	1:A:39:LYS:N[2_555]	1.59	0.61
1:A:11:ALA:O	1:A:25:GLU:OE1[2_555]	1.59	0.61
1:A:23:ILE:CB	1:A:133:ARG:NE[2_555]	1.59	0.61
1:A:99:LYS:CB	1:A:327:SER:OG[2_556]	1.59	0.61
1:A:105:HIS:CG	1:A:158:ALA:N[2_556]	1.59	0.61
1:A:106:PRO:CD	1:A:157:VAL:O[2_556]	1.59	0.61
1:A:107:GLU:OE2	1:A:153:ASP:CG[2_556]	1.59	0.61
1:A:125:ASP:O	1:A:289:SER:C[2_556]	1.59	0.61
1:A:7:ILE:C	1:A:148:GLN:NE2[2_555]	1.60	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:8:LYS:CG	1:A:149:TYR:N[2_555]	1.60	0.60
1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:N[2_555]	1.60	0.60
1:A:103:CYS:CA	1:A:324:SER:CA[2_556]	1.60	0.60
1:A:103:CYS:O	1:A:325:LYS:CA[2_556]	1.60	0.60
1:A:104:LYS:CD	1:A:328:VAL:N[2_556]	1.60	0.60
1:A:107:GLU:CB	1:A:154:GLU:C[2_556]	1.60	0.60
1:A:123:MET:O	1:A:316:GLY:CA[2_556]	1.60	0.60
1:A:288:VAL:N	3:A:382:NTN:CI6[2_556]	1.60	0.60
1:A:1:SER:C	1:A:39:LYS:O[2_555]	1.61	0.59
1:A:3:ALA:CB	3:A:383:NTN:CI5[2_555]	1.61	0.59
1:A:35:GLU:CG	3:A:391:NTN:CI5[2_556]	1.61	0.59
1:A:94:THR:O	1:A:102:VAL:CB[2_556]	1.61	0.59
1:A:101:ARG:NH2	1:A:174:CYS:N[2_556]	1.61	0.59
1:A:101:ARG:NH1	1:A:173:GLY:C[2_556]	1.61	0.59
1:A:107:GLU:OE2	1:A:153:ASP:CB[2_556]	1.61	0.59
1:A:120:ARG:NH2	1:A:291:ILE:O[2_556]	1.61	0.59
1:A:12:ALA:N	1:A:25:GLU:OE1[2_555]	1.62	0.58
1:A:41:VAL:CB	3:A:377:NTN:CI1[2_555]	1.62	0.58
1:A:92:LEU:CD2	1:A:101:ARG:O[2_556]	1.62	0.58
1:A:101:ARG:CA	1:A:328:VAL:CG2[2_556]	1.62	0.58
1:A:104:LYS:CE	1:A:327:SER:O[2_556]	1.62	0.58
1:A:110:PHE:CZ	1:A:114:ASN:ND2[2_556]	1.62	0.58
1:A:320:GLY:CA	3:A:386:NTN:CI2[2_556]	1.62	0.58
1:A:9:CYS:O	1:A:10:LYS:CB[2_555]	1.63	0.57
1:A:98:GLY:O	1:A:327:SER:OG[2_556]	1.63	0.57
1:A:104:LYS:CD	1:A:329:PRO:N[2_556]	1.63	0.57
3:A:390:NTN:CI1	3:A:397:NTN:NI2[2_556]	1.63	0.57
1:A:1:SER:O	1:A:39:LYS:N[2_555]	1.64	0.56
1:A:34:HIS:C	3:A:391:NTN:CI1[2_556]	1.64	0.56
1:A:99:LYS:CB	1:A:327:SER:CA[2_556]	1.64	0.56
1:A:105:HIS:CD2	1:A:157:VAL:O[2_556]	1.64	0.56
1:A:151:VAL:CG2	3:A:378:NTN:CI3[2_555]	1.64	0.56
1:A:24:GLU:CD	3:A:379:NTN:CI5[2_555]	1.65	0.55
1:A:34:HIS:C	3:A:391:NTN:CI6[2_556]	1.65	0.55
1:A:94:THR:OG1	1:A:112:LEU:N[2_556]	1.65	0.55
1:A:94:THR:C	1:A:102:VAL:CG2[2_556]	1.65	0.55
1:A:104:LYS:CA	1:A:325:LYS:CA[2_556]	1.65	0.55
1:A:104:LYS:NZ	1:A:329:PRO:N[2_556]	1.65	0.55
1:A:136:PRO:CG	1:A:303:MET:CE[2_556]	1.65	0.55
1:A:182:SER:N	3:A:386:NTN:CI4[2_556]	1.65	0.55
1:A:4:GLY:C	3:A:383:NTN:NI2[2_555]	1.66	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:94:THR:CB	1:A:110:PHE:C[2_556]	1.66	0.54
1:A:100:CYS:CB	1:A:319:PHE:CD2[2_556]	1.66	0.54
1:A:105:HIS:O	1:A:325:LYS:CG[2_556]	1.66	0.54
1:A:125:ASP:N	1:A:315:LYS:CB[2_556]	1.66	0.54
1:A:151:VAL:N	3:A:378:NTN:CI3[2_555]	1.66	0.54
1:A:287:GLY:O	3:A:382:NTN:CI1[2_556]	1.66	0.54
1:A:8:LYS:CD	1:A:149:TYR:N[2_555]	1.67	0.53
1:A:27:GLU:OE2	1:A:353:GLU:CB[2_555]	1.67	0.53
1:A:109:ASN:O	1:A:111:CYS:CB[2_556]	1.67	0.53
1:A:110:PHE:CG	1:A:114:ASN:CB[2_556]	1.67	0.53
1:A:306:MET:CE	1:A:354:LYS:CD[1_556]	1.67	0.53
1:A:322:PHE:O	2:A:376:ZN:ZN[2_556]	1.67	0.53
3:A:390:NTN:NI1	3:A:397:NTN:CI4[2_556]	1.67	0.53
1:A:23:ILE:CG1	1:A:133:ARG:CD[2_555]	1.68	0.52
1:A:99:LYS:CG	1:A:327:SER:C[2_556]	1.68	0.52
1:A:127:THR:C	1:A:314:TRP:C[2_556]	1.68	0.52
1:A:288:VAL:C	3:A:382:NTN:CI6[2_556]	1.68	0.52
1:A:34:HIS:CG	1:A:188:LYS:CD[2_556]	1.69	0.51
1:A:8:LYS:CB	1:A:148:GLN:N[2_555]	1.70	0.50
1:A:12:ALA:N	1:A:25:GLU:OE2[2_555]	1.70	0.50
1:A:94:THR:CA	1:A:110:PHE:C[2_556]	1.70	0.50
1:A:95:PRO:CB	1:A:109:ASN:N[2_556]	1.70	0.50
1:A:105:HIS:ND1	1:A:157:VAL:C[2_556]	1.70	0.50
1:A:112:LEU:C	1:A:319:PHE:CB[2_556]	1.70	0.50
1:A:120:ARG:NE	1:A:291:ILE:O[2_556]	1.70	0.50
1:A:150:THR:C	3:A:378:NTN:NI1[2_555]	1.70	0.50
1:A:5:LYS:CD	1:A:41:VAL:CG1[2_555]	1.71	0.49
1:A:24:GLU:OE1	3:A:379:NTN:NI2[2_555]	1.71	0.49
1:A:103:CYS:N	1:A:324:SER:OG[2_556]	1.71	0.49
1:A:105:HIS:C	1:A:325:LYS:CG[2_556]	1.71	0.49
1:A:134:GLY:O	1:A:305:PRO:CG[2_556]	1.71	0.49
1:A:8:LYS:CA	1:A:148:GLN:N[2_555]	1.72	0.48
1:A:94:THR:CG2	1:A:111:CYS:CA[2_556]	1.72	0.48
1:A:104:LYS:CB	1:A:325:LYS:O[2_556]	1.72	0.48
1:A:107:GLU:CA	1:A:154:GLU:O[2_556]	1.72	0.48
1:A:107:GLU:OE2	1:A:153:ASP:OD1[2_556]	1.72	0.48
1:A:112:LEU:CD1	1:A:319:PHE:CD1[2_556]	1.72	0.48
1:A:178:THR:C	3:A:386:NTN:NI2[2_556]	1.72	0.48
1:A:331:LEU:CG	3:A:385:NTN:CI1[2_556]	1.72	0.48
1:A:5:LYS:CE	1:A:41:VAL:CG2[2_555]	1.73	0.47
1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CA[2_555]	1.73	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:24:GLU:C	1:A:25:GLU:CB[2_555]	1.73	0.47
1:A:105:HIS:C	1:A:325:LYS:CD[2_556]	1.73	0.47
1:A:108:GLY:CA	1:A:155:ILE:O[2_556]	1.73	0.47
1:A:109:ASN:CB	1:A:111:CYS:SG[2_556]	1.73	0.47
1:A:113:LYS:N	1:A:318:ILE:O[2_556]	1.73	0.47
1:A:1:SER:N	1:A:38:ILE:C[2_555]	1.74	0.46
1:A:23:ILE:CG2	1:A:133:ARG:CD[2_555]	1.74	0.46
1:A:42:ALA:CB	3:A:377:NTN:CI5[2_555]	1.74	0.46
1:A:105:HIS:CD2	1:A:157:VAL:N[2_556]	1.74	0.46
1:A:126:GLY:CA	1:A:291:ILE:N[2_556]	1.74	0.46
1:A:34:HIS:CB	1:A:188:LYS:CE[2_556]	1.75	0.45
1:A:96:GLN:N	1:A:108:GLY:C[2_556]	1.75	0.45
1:A:98:GLY:N	1:A:323:LYS:CA[2_556]	1.75	0.45
1:A:1:SER:CB	1:A:39:LYS:O[2_555]	1.76	0.44
1:A:1:SER:CA	1:A:39:LYS:CA[2_555]	1.76	0.44
1:A:2:THR:CG2	1:A:72:ILE:CG2[2_555]	1.76	0.44
1:A:104:LYS:CE	1:A:330:LYS:N[2_556]	1.76	0.44
1:A:106:PRO:N	1:A:157:VAL:O[2_556]	1.76	0.44
1:A:123:MET:N	1:A:315:LYS:O[2_556]	1.76	0.44
1:A:126:GLY:N	1:A:290:VAL:CA[2_556]	1.76	0.44
1:A:11:ALA:CA	1:A:25:GLU:CD[2_555]	1.77	0.43
1:A:35:GLU:CB	3:A:391:NTN:CI5[2_556]	1.77	0.43
1:A:92:LEU:CB	1:A:102:VAL:CA[2_556]	1.77	0.43
1:A:96:GLN:CB	1:A:108:GLY:O[2_556]	1.77	0.43
1:A:105:HIS:CG	1:A:157:VAL:O[2_556]	1.77	0.43
1:A:24:GLU:CG	3:A:379:NTN:CI6[2_555]	1.78	0.42
1:A:24:GLU:C	1:A:24:GLU:C[2_555]	1.78	0.42
1:A:95:PRO:CG	1:A:110:PHE:N[2_556]	1.78	0.42
1:A:9:CYS:CA	1:A:10:LYS:N[2_555]	1.79	0.41
1:A:34:HIS:CA	1:A:188:LYS:NZ[2_556]	1.79	0.41
1:A:35:GLU:N	3:A:391:NTN:NI2[2_556]	1.79	0.41
1:A:125:ASP:C	1:A:290:VAL:N[2_556]	1.79	0.41
1:A:2:THR:CA	1:A:39:LYS:CG[2_555]	1.80	0.40
1:A:8:LYS:CD	1:A:149:TYR:CB[2_555]	1.80	0.40
1:A:9:CYS:C	1:A:10:LYS:CA[2_555]	1.80	0.40
1:A:23:ILE:CB	1:A:133:ARG:CG[2_555]	1.80	0.40
1:A:112:LEU:CB	1:A:319:PHE:CD1[2_556]	1.80	0.40
1:A:166:LEU:C	3:A:377:NTN:CI4[2_555]	1.80	0.40
1:A:1:SER:C	1:A:39:LYS:N[2_555]	1.81	0.39
1:A:2:THR:N	1:A:39:LYS:CG[2_555]	1.81	0.39
1:A:8:LYS:NZ	1:A:149:TYR:O[2_555]	1.81	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:94:THR:OG1	1:A:111:CYS:C[2_556]	1.81	0.39
1:A:108:GLY:N	1:A:156:SER:N[2_556]	1.81	0.39
1:A:110:PHE:CE1	1:A:114:ASN:CB[2_556]	1.81	0.39
1:A:166:LEU:O	3:A:377:NTN:NI2[2_555]	1.81	0.39
1:A:178:THR:CA	3:A:386:NTN:CI5[2_556]	1.81	0.39
1:A:26:VAL:CG1	3:A:379:NTN:NI1[2_555]	1.82	0.38
1:A:35:GLU:CG	3:A:391:NTN:NI2[2_556]	1.82	0.38
1:A:92:LEU:CD1	1:A:102:VAL:CA[2_556]	1.82	0.38
1:A:92:LEU:CD1	1:A:102:VAL:C[2_556]	1.82	0.38
1:A:95:PRO:CB	1:A:109:ASN:CA[2_556]	1.82	0.38
1:A:99:LYS:CG	1:A:327:SER:CB[2_556]	1.82	0.38
1:A:99:LYS:CD	1:A:331:LEU:CD2[2_556]	1.82	0.38
1:A:123:MET:O	1:A:315:LYS:O[2_556]	1.82	0.38
1:A:126:GLY:O	1:A:314:TRP:NE1[2_556]	1.82	0.38
1:A:4:GLY:C	3:A:383:NTN:CI4[2_555]	1.83	0.37
1:A:8:LYS:CE	1:A:149:TYR:CB[2_555]	1.83	0.37
1:A:8:LYS:CB	1:A:149:TYR:N[2_555]	1.83	0.37
1:A:10:LYS:CG	1:A:25:GLU:C[2_555]	1.83	0.37
1:A:37:ARG:CZ	3:A:383:NTN:NI1[2_555]	1.83	0.37
1:A:92:LEU:CG	1:A:102:VAL:CA[2_556]	1.83	0.37
1:A:95:PRO:CB	1:A:110:PHE:N[2_556]	1.83	0.37
1:A:105:HIS:CD2	1:A:157:VAL:CB[2_556]	1.83	0.37
1:A:112:LEU:CA	1:A:319:PHE:CB[2_556]	1.83	0.37
1:A:113:LYS:CE	1:A:321:GLY:CA[2_556]	1.83	0.37
1:A:178:THR:O	3:A:386:NTN:CI5[2_556]	1.83	0.37
1:A:8:LYS:CD	1:A:149:TYR:CA[2_555]	1.84	0.36
1:A:10:LYS:CG	1:A:26:VAL:CA[2_555]	1.84	0.36
1:A:11:ALA:O	1:A:25:GLU:OE2[2_555]	1.84	0.36
1:A:11:ALA:O	1:A:25:GLU:CB[2_555]	1.84	0.36
1:A:12:ALA:N	1:A:25:GLU:CD[2_555]	1.84	0.36
1:A:23:ILE:CA	1:A:133:ARG:NH2[2_555]	1.84	0.36
1:A:27:GLU:CD	1:A:353:GLU:CB[2_555]	1.84	0.36
1:A:96:GLN:CB	1:A:323:LYS:NZ[2_556]	1.84	0.36
1:A:99:LYS:CG	1:A:327:SER:O[2_556]	1.84	0.36
1:A:101:ARG:NH1	1:A:173:GLY:O[2_556]	1.84	0.36
1:A:104:LYS:C	1:A:325:LYS:CA[2_556]	1.84	0.36
1:A:112:LEU:O	1:A:319:PHE:CA[2_556]	1.84	0.36
1:A:122:THR:CB	1:A:315:LYS:O[2_556]	1.84	0.36
1:A:8:LYS:CB	1:A:148:GLN:CB[2_555]	1.85	0.35
1:A:35:GLU:O	3:A:391:NTN:CI4[2_556]	1.85	0.35
1:A:135:LYS:N	1:A:305:PRO:CG[2_556]	1.85	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:288:VAL:C	3:A:382:NTN:CI5[2_556]	1.85	0.35
1:A:1:SER:CA	1:A:40:MET:N[2_555]	1.86	0.34
1:A:5:LYS:CA	3:A:383:NTN:NI2[2_555]	1.86	0.34
1:A:97:CYS:CB	1:A:323:LYS:N[2_556]	1.86	0.34
1:A:97:CYS:SG	1:A:323:LYS:N[2_556]	1.86	0.34
1:A:99:LYS:C	1:A:327:SER:CB[2_556]	1.86	0.34
1:A:313:THR:N	3:A:382:NTN:CI1[2_556]	1.86	0.34
1:A:96:GLN:N	1:A:108:GLY:O[2_556]	1.87	0.33
1:A:100:CYS:SG	1:A:319:PHE:CD2[2_556]	1.87	0.33
1:A:113:LYS:CE	1:A:321:GLY:N[2_556]	1.87	0.33
1:A:5:LYS:N	3:A:383:NTN:CI5[2_555]	1.88	0.32
1:A:7:ILE:C	1:A:148:GLN:CD[2_555]	1.88	0.32
1:A:8:LYS:NZ	1:A:149:TYR:C[2_555]	1.88	0.32
1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:CB[2_555]	1.88	0.32
1:A:11:ALA:N	1:A:25:GLU:CG[2_555]	1.88	0.32
1:A:27:GLU:OE1	1:A:353:GLU:CB[2_555]	1.88	0.32
1:A:100:CYS:CA	1:A:319:PHE:CE2[2_556]	1.88	0.32
1:A:100:CYS:CB	1:A:319:PHE:CZ[2_556]	1.88	0.32
1:A:103:CYS:O	1:A:326:ASP:N[2_556]	1.88	0.32
1:A:103:CYS:CB	1:A:323:LYS:C[2_556]	1.88	0.32
1:A:104:LYS:CE	1:A:329:PRO:N[2_556]	1.88	0.32
1:A:112:LEU:CG	1:A:319:PHE:CG[2_556]	1.88	0.32
1:A:124:GLN:CG	1:A:317:ALA:CB[2_556]	1.88	0.32
1:A:166:LEU:C	3:A:377:NTN:CI3[2_555]	1.88	0.32
1:A:321:GLY:N	3:A:386:NTN:CI1[2_556]	1.88	0.32
1:A:32:LYS:CE	1:A:313:THR:CB[2_556]	1.89	0.31
1:A:94:THR:CB	1:A:111:CYS:C[2_556]	1.89	0.31
1:A:99:LYS:O	1:A:322:PHE:CB[2_556]	1.89	0.31
1:A:101:ARG:CZ	1:A:173:GLY:O[2_556]	1.89	0.31
1:A:105:HIS:CD2	1:A:157:VAL:CG1[2_556]	1.89	0.31
1:A:149:TYR:C	3:A:378:NTN:NI1[2_555]	1.89	0.31
1:A:150:THR:C	3:A:378:NTN:CI3[2_555]	1.89	0.31
1:A:35:GLU:OE2	1:A:315:LYS:NZ[2_556]	1.90	0.30
1:A:95:PRO:CA	1:A:110:PHE:N[2_556]	1.90	0.30
1:A:320:GLY:C	3:A:386:NTN:CI1[2_556]	1.90	0.30
1:A:2:THR:N	1:A:39:LYS:CB[2_555]	1.91	0.29
1:A:8:LYS:N	1:A:148:GLN:CG[2_555]	1.91	0.29
1:A:10:LYS:CE	1:A:26:VAL:CG1[2_555]	1.91	0.29
1:A:95:PRO:CG	1:A:109:ASN:OD1[2_556]	1.91	0.29
1:A:96:GLN:CA	1:A:108:GLY:O[2_556]	1.91	0.29
1:A:178:THR:C	3:A:386:NTN:CI5[2_556]	1.91	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:282:CYS:SG	3:A:382:NTN:CI5[2_556]	1.91	0.29
1:A:95:PRO:CA	1:A:109:ASN:CA[2_556]	1.92	0.28
1:A:103:CYS:N	1:A:324:SER:C[2_556]	1.92	0.28
1:A:103:CYS:SG	1:A:323:LYS:C[2_556]	1.92	0.28
1:A:107:GLU:O	1:A:157:VAL:N[2_556]	1.92	0.28
1:A:107:GLU:C	1:A:156:SER:CA[2_556]	1.92	0.28
1:A:178:THR:O	3:A:386:NTN:CI4[2_556]	1.92	0.28
1:A:331:LEU:CD1	3:A:385:NTN:NI1[2_556]	1.92	0.28
1:A:10:LYS:CD	1:A:26:VAL:N[2_555]	1.93	0.27
1:A:34:HIS:O	3:A:391:NTN:CI6[2_556]	1.93	0.27
1:A:35:GLU:CA	3:A:391:NTN:CI3[2_556]	1.93	0.27
1:A:92:LEU:CD2	1:A:101:ARG:CA[2_556]	1.93	0.27
1:A:95:PRO:CB	1:A:109:ASN:CG[2_556]	1.93	0.27
1:A:96:GLN:OE1	1:A:96:GLN:OE1[2_556]	1.93	0.27
1:A:103:CYS:CB	1:A:324:SER:C[2_556]	1.93	0.27
1:A:104:LYS:N	1:A:325:LYS:C[2_556]	1.93	0.27
1:A:105:HIS:ND1	1:A:158:ALA:N[2_556]	1.93	0.27
1:A:106:PRO:CA	3:A:397:NTN:NI1[2_556]	1.93	0.27
1:A:114:ASN:ND2	1:A:116:LEU:CD1[2_556]	1.93	0.27
1:A:23:ILE:CB	1:A:133:ARG:CD[2_555]	1.94	0.26
1:A:98:GLY:N	1:A:323:LYS:N[2_556]	1.94	0.26
1:A:100:CYS:SG	1:A:319:PHE:CE2[2_556]	1.94	0.26
1:A:110:PHE:CD1	1:A:114:ASN:ND2[2_556]	1.94	0.26
1:A:113:LYS:C	1:A:318:ILE:CB[2_556]	1.94	0.26
1:A:114:ASN:CA	1:A:318:ILE:CG2[2_556]	1.94	0.26
1:A:125:ASP:C	1:A:290:VAL:CB[2_556]	1.94	0.26
1:A:127:THR:N	1:A:315:LYS:N[2_556]	1.94	0.26
1:A:1:SER:CA	1:A:39:LYS:N[2_555]	1.95	0.25
1:A:10:LYS:NZ	1:A:26:VAL:CG2[2_555]	1.95	0.25
1:A:92:LEU:CG	1:A:102:VAL:N[2_556]	1.95	0.25
1:A:94:THR:N	1:A:110:PHE:O[2_556]	1.95	0.25
1:A:96:GLN:N	1:A:109:ASN:CB[2_556]	1.95	0.25
1:A:97:CYS:CB	1:A:322:PHE:N[2_556]	1.95	0.25
1:A:103:CYS:CA	1:A:324:SER:OG[2_556]	1.95	0.25
1:A:104:LYS:CB	1:A:329:PRO:CD[2_556]	1.95	0.25
1:A:107:GLU:O	1:A:155:ILE:C[2_556]	1.95	0.25
1:A:122:THR:OG1	1:A:315:LYS:O[2_556]	1.95	0.25
1:A:127:THR:CB	1:A:314:TRP:N[2_556]	1.95	0.25
1:A:41:VAL:CB	3:A:377:NTN:NI1[2_555]	1.96	0.24
1:A:95:PRO:CA	1:A:108:GLY:C[2_556]	1.96	0.24
1:A:114:ASN:O	1:A:318:ILE:CB[2_556]	1.96	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:134:GLY:C	1:A:305:PRO:CG[2_556]	1.96	0.24
1:A:94:THR:CB	1:A:111:CYS:N[2_556]	1.97	0.23
1:A:126:GLY:C	1:A:314:TRP:CD1[2_556]	1.97	0.23
1:A:129:ARG:CZ	1:A:313:THR:OG1[2_556]	1.97	0.23
1:A:150:THR:N	3:A:378:NTN:CI1[2_555]	1.97	0.23
1:A:8:LYS:O	1:A:148:GLN:CG[2_555]	1.98	0.22
1:A:35:GLU:N	3:A:391:NTN:CI6[2_556]	1.98	0.22
1:A:95:PRO:CB	1:A:109:ASN:C[2_556]	1.98	0.22
1:A:97:CYS:SG	1:A:322:PHE:CB[2_556]	1.98	0.22
1:A:105:HIS:ND1	1:A:157:VAL:CB[2_556]	1.98	0.22
1:A:113:LYS:N	1:A:318:ILE:C[2_556]	1.98	0.22
1:A:150:THR:O	3:A:378:NTN:NI1[2_555]	1.98	0.22
1:A:150:THR:CA	3:A:378:NTN:CI1[2_555]	1.98	0.22
1:A:23:ILE:O	1:A:25:GLU:O[2_555]	1.99	0.21
1:A:35:GLU:CB	3:A:391:NTN:CI4[2_556]	1.99	0.21
1:A:94:THR:CB	1:A:111:CYS:CA[2_556]	1.99	0.21
1:A:104:LYS:CD	1:A:327:SER:O[2_556]	1.99	0.21
1:A:105:HIS:NE2	1:A:157:VAL:CG2[2_556]	1.99	0.21
1:A:127:THR:CA	1:A:314:TRP:CD1[2_556]	1.99	0.21
1:A:151:VAL:CB	3:A:378:NTN:CI3[2_555]	1.99	0.21
1:A:7:ILE:C	1:A:148:GLN:CB[2_555]	2.00	0.20
1:A:12:ALA:CA	1:A:25:GLU:OE1[2_555]	2.00	0.20
1:A:34:HIS:O	3:A:391:NTN:CI1[2_556]	2.00	0.20
1:A:37:ARG:NH2	3:A:383:NTN:CI1[2_555]	2.00	0.20
1:A:94:THR:CG2	1:A:111:CYS:C[2_556]	2.00	0.20
1:A:114:ASN:O	1:A:318:ILE:CG1[2_556]	2.00	0.20
1:A:124:GLN:CB	1:A:186:VAL:CG1[2_556]	2.00	0.20
1:A:328:VAL:CG1	3:A:385:NTN:NI2[2_556]	2.00	0.20
1:A:34:HIS:CD2	1:A:188:LYS:CB[2_556]	2.01	0.19
1:A:34:HIS:CE1	1:A:188:LYS:CE[2_556]	2.01	0.19
1:A:97:CYS:N	1:A:323:LYS:CG[2_556]	2.01	0.19
1:A:99:LYS:CG	1:A:327:SER:CA[2_556]	2.01	0.19
1:A:103:CYS:N	1:A:324:SER:CA[2_556]	2.01	0.19
1:A:108:GLY:N	1:A:155:ILE:CA[2_556]	2.01	0.19
1:A:129:ARG:NH2	1:A:313:THR:CB[2_556]	2.01	0.19
1:A:151:VAL:CA	3:A:378:NTN:CI4[2_555]	2.01	0.19
1:A:151:VAL:CA	3:A:378:NTN:CI3[2_555]	2.01	0.19
1:A:8:LYS:N	1:A:148:GLN:CA[2_555]	2.02	0.18
1:A:23:ILE:CA	1:A:133:ARG:NE[2_555]	2.02	0.18
1:A:27:GLU:OE1	1:A:353:GLU:CA[2_555]	2.02	0.18
1:A:95:PRO:C	1:A:108:GLY:O[2_556]	2.02	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:97:CYS:O	1:A:323:LYS:N[2_556]	2.02	0.18
1:A:104:LYS:O	1:A:325:LYS:O[2_556]	2.02	0.18
1:A:105:HIS:N	1:A:325:LYS:CG[2_556]	2.02	0.18
1:A:112:LEU:CG	1:A:319:PHE:CE1[2_556]	2.02	0.18
1:A:172:ILE:CB	3:A:385:NTN:CI3[2_556]	2.02	0.18
1:A:1:SER:OG	1:A:40:MET:CB[2_555]	2.03	0.17
1:A:1:SER:N	1:A:39:LYS:C[2_555]	2.03	0.17
1:A:4:GLY:CA	3:A:383:NTN:CI4[2_555]	2.03	0.17
1:A:35:GLU:CA	3:A:391:NTN:CI5[2_556]	2.03	0.17
1:A:97:CYS:N	1:A:323:LYS:CA[2_556]	2.03	0.17
1:A:104:LYS:C	1:A:325:LYS:O[2_556]	2.03	0.17
1:A:112:LEU:C	1:A:319:PHE:N[2_556]	2.03	0.17
1:A:124:GLN:O	1:A:290:VAL:CG1[2_556]	2.03	0.17
1:A:136:PRO:CG	1:A:303:MET:SD[2_556]	2.03	0.17
1:A:328:VAL:CG1	3:A:385:NTN:CI6[2_556]	2.03	0.17
1:A:5:LYS:NZ	1:A:41:VAL:CA[2_555]	2.04	0.16
1:A:8:LYS:C	1:A:148:GLN:CB[2_555]	2.04	0.16
1:A:8:LYS:CG	1:A:148:GLN:N[2_555]	2.04	0.16
1:A:8:LYS:CE	1:A:149:TYR:N[2_555]	2.04	0.16
1:A:8:LYS:O	1:A:10:LYS:O[2_555]	2.04	0.16
1:A:10:LYS:CB	1:A:26:VAL:CA[2_555]	2.04	0.16
1:A:11:ALA:N	1:A:25:GLU:OE2[2_555]	2.04	0.16
1:A:27:GLU:CG	1:A:353:GLU:CG[2_555]	2.04	0.16
1:A:32:LYS:NZ	1:A:287:GLY:O[2_556]	2.04	0.16
1:A:96:GLN:CA	1:A:323:LYS:CG[2_556]	2.04	0.16
1:A:101:ARG:N	1:A:328:VAL:CG2[2_556]	2.04	0.16
1:A:112:LEU:O	1:A:318:ILE:C[2_556]	2.04	0.16
1:A:172:ILE:CB	3:A:385:NTN:CI4[2_556]	2.04	0.16
1:A:8:LYS:C	1:A:148:GLN:CD[2_555]	2.05	0.15
1:A:34:HIS:N	3:A:391:NTN:CI1[2_556]	2.05	0.15
1:A:104:LYS:CE	1:A:327:SER:C[2_556]	2.05	0.15
1:A:112:LEU:CD1	1:A:319:PHE:CE1[2_556]	2.05	0.15
1:A:120:ARG:NH1	1:A:291:ILE:C[2_556]	2.05	0.15
1:A:122:THR:CG2	1:A:291:ILE:CG1[2_556]	2.05	0.15
1:A:127:THR:O	1:A:314:TRP:CA[2_556]	2.05	0.15
1:A:151:VAL:CB	3:A:378:NTN:NI2[2_555]	2.05	0.15
1:A:23:ILE:CA	1:A:133:ARG:NH1[2_555]	2.06	0.14
1:A:92:LEU:CD1	1:A:102:VAL:O[2_556]	2.06	0.14
1:A:99:LYS:N	1:A:323:LYS:C[2_556]	2.06	0.14
1:A:99:LYS:CA	1:A:327:SER:CA[2_556]	2.06	0.14
1:A:105:HIS:CG	1:A:157:VAL:N[2_556]	2.06	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:124:GLN:OE1	1:A:316:GLY:O[2_556]	2.06	0.14
1:A:124:GLN:N	1:A:316:GLY:N[2_556]	2.06	0.14
1:A:125:ASP:CB	1:A:290:VAL:CG2[2_556]	2.06	0.14
1:A:287:GLY:O	3:A:382:NTN:CI2[2_556]	2.06	0.14
1:A:34:HIS:CE1	1:A:188:LYS:CD[2_556]	2.07	0.13
1:A:94:THR:C	1:A:110:PHE:C[2_556]	2.07	0.13
1:A:113:LYS:NZ	1:A:320:GLY:C[2_556]	2.07	0.13
1:A:114:ASN:C	1:A:318:ILE:CD1[2_556]	2.07	0.13
1:A:127:THR:CA	1:A:314:TRP:C[2_556]	2.07	0.13
1:A:10:LYS:CG	1:A:26:VAL:CG2[2_555]	2.08	0.12
1:A:23:ILE:N	1:A:133:ARG:CZ[2_555]	2.08	0.12
1:A:96:GLN:C	1:A:323:LYS:CB[2_556]	2.08	0.12
1:A:97:CYS:CA	1:A:322:PHE:C[2_556]	2.08	0.12
1:A:99:LYS:N	1:A:327:SER:CB[2_556]	2.08	0.12
1:A:107:GLU:C	1:A:155:ILE:CA[2_556]	2.08	0.12
1:A:107:GLU:CB	1:A:154:GLU:N[2_556]	2.08	0.12
1:A:113:LYS:C	1:A:318:ILE:O[2_556]	2.08	0.12
1:A:1:SER:C	1:A:39:LYS:CG[2_555]	2.09	0.11
1:A:41:VAL:CG1	3:A:377:NTN:CI1[2_555]	2.09	0.11
1:A:97:CYS:CB	1:A:322:PHE:O[2_556]	2.09	0.11
1:A:103:CYS:O	1:A:325:LYS:CB[2_556]	2.09	0.11
1:A:103:CYS:O	1:A:325:LYS:C[2_556]	2.09	0.11
1:A:104:LYS:CG	1:A:327:SER:N[2_556]	2.09	0.11
1:A:125:ASP:OD1	1:A:315:LYS:N[2_556]	2.09	0.11
1:A:125:ASP:O	1:A:290:VAL:CB[2_556]	2.09	0.11
1:A:125:ASP:CA	1:A:290:VAL:CB[2_556]	2.09	0.11
1:A:4:GLY:N	3:A:383:NTN:NI2[2_555]	2.10	0.10
1:A:37:ARG:NE	3:A:383:NTN:NI1[2_555]	2.10	0.10
1:A:95:PRO:CA	1:A:109:ASN:C[2_556]	2.10	0.10
1:A:97:CYS:N	1:A:323:LYS:N[2_556]	2.10	0.10
1:A:98:GLY:CA	1:A:323:LYS:CB[2_556]	2.10	0.10
1:A:101:ARG:NH2	1:A:173:GLY:O[2_556]	2.10	0.10
1:A:103:CYS:CA	1:A:324:SER:CB[2_556]	2.10	0.10
1:A:106:PRO:CB	3:A:397:NTN:NI1[2_556]	2.10	0.10
1:A:107:GLU:CA	1:A:156:SER:N[2_556]	2.10	0.10
1:A:124:GLN:CA	1:A:316:GLY:O[2_556]	2.10	0.10
1:A:135:LYS:N	1:A:305:PRO:CB[2_556]	2.10	0.10
1:A:185:LYS:NZ	3:A:397:NTN:NI2[2_556]	2.10	0.10
1:A:331:LEU:CB	3:A:385:NTN:CI1[2_556]	2.10	0.10
1:A:9:CYS:CA	1:A:9:CYS:C[2_555]	2.11	0.09
1:A:34:HIS:CB	3:A:391:NTN:NI1[2_556]	2.11	0.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:92:LEU:CB	1:A:102:VAL:CB[2_556]	2.11	0.09
1:A:95:PRO:C	1:A:109:ASN:C[2_556]	2.11	0.09
1:A:100:CYS:SG	1:A:324:SER:CB[2_556]	2.11	0.09
1:A:103:CYS:CB	1:A:324:SER:CB[2_556]	2.11	0.09
1:A:104:LYS:CA	1:A:324:SER:O[2_556]	2.11	0.09
1:A:105:HIS:C	1:A:157:VAL:O[2_556]	2.11	0.09
1:A:110:PHE:CE2	1:A:116:LEU:CG[2_556]	2.11	0.09
1:A:127:THR:OG1	1:A:289:SER:O[2_556]	2.11	0.09
1:A:312:ARG:CA	3:A:382:NTN:NI1[2_556]	2.11	0.09
1:A:4:GLY:N	3:A:383:NTN:CI4[2_555]	2.12	0.08
1:A:12:ALA:CA	1:A:133:ARG:NH1[2_555]	2.12	0.08
1:A:104:LYS:CD	1:A:328:VAL:C[2_556]	2.12	0.08
1:A:112:LEU:CD1	1:A:173:GLY:O[2_556]	2.12	0.08
1:A:120:ARG:CZ	1:A:292:VAL:N[2_556]	2.12	0.08
1:A:179:GLY:O	3:A:386:NTN:NI2[2_556]	2.12	0.08
1:A:5:LYS:CD	3:A:383:NTN:CI5[2_555]	2.13	0.07
1:A:7:ILE:CD1	1:A:39:LYS:CE[2_555]	2.13	0.07
1:A:8:LYS:CG	1:A:148:GLN:C[2_555]	2.13	0.07
1:A:24:GLU:OE2	3:A:379:NTN:CI2[2_555]	2.13	0.07
1:A:27:GLU:OE2	1:A:309:LEU:CD2[2_556]	2.13	0.07
1:A:34:HIS:CG	3:A:391:NTN:CI1[2_556]	2.13	0.07
1:A:35:GLU:N	3:A:391:NTN:CI5[2_556]	2.13	0.07
1:A:105:HIS:CA	1:A:325:LYS:CG[2_556]	2.13	0.07
1:A:109:ASN:ND2	1:A:113:LYS:CG[2_556]	2.13	0.07
1:A:127:THR:C	1:A:314:TRP:O[2_556]	2.13	0.07
1:A:127:THR:O	1:A:315:LYS:N[2_556]	2.13	0.07
1:A:172:ILE:CD1	3:A:385:NTN:CI3[2_556]	2.13	0.07
1:A:11:ALA:C	1:A:25:GLU:CG[2_555]	2.14	0.06
1:A:23:ILE:CD1	1:A:133:ARG:CB[2_555]	2.14	0.06
1:A:39:LYS:CE	1:A:74:GLU:OE1[2_555]	2.14	0.06
1:A:105:HIS:N	1:A:325:LYS:CA[2_556]	2.14	0.06
1:A:123:MET:CA	1:A:315:LYS:C[2_556]	2.14	0.06
1:A:127:THR:CB	1:A:289:SER:O[2_556]	2.14	0.06
1:A:136:PRO:CB	1:A:303:MET:CE[2_556]	2.14	0.06
1:A:5:LYS:CG	1:A:41:VAL:CG1[2_555]	2.15	0.05
1:A:35:GLU:CD	3:A:391:NTN:CI5[2_556]	2.15	0.05
1:A:94:THR:OG1	1:A:112:LEU:CA[2_556]	2.15	0.05
1:A:104:LYS:NZ	1:A:328:VAL:C[2_556]	2.15	0.05
1:A:105:HIS:NE2	1:A:157:VAL:N[2_556]	2.15	0.05
1:A:109:ASN:C	1:A:111:CYS:CB[2_556]	2.15	0.05
1:A:127:THR:CB	1:A:313:THR:O[2_556]	2.15	0.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:132:CYS:SG	3:A:379:NTN:NI1[2_555]	2.15	0.05
1:A:149:TYR:C	3:A:378:NTN:CI1[2_555]	2.15	0.05
1:A:185:LYS:CE	3:A:397:NTN:NI2[2_556]	2.15	0.05
1:A:288:VAL:O	3:A:382:NTN:CI5[2_556]	2.15	0.05
3:A:390:NTN:NI1	3:A:397:NTN:CI5[2_556]	2.15	0.05
1:A:9:CYS:SG	1:A:148:GLN:OE1[2_555]	2.16	0.04
1:A:23:ILE:CB	1:A:133:ARG:CB[2_555]	2.16	0.04
1:A:27:GLU:OE1	1:A:353:GLU:CD[2_555]	2.16	0.04
1:A:34:HIS:NE2	1:A:188:LYS:CE[2_556]	2.16	0.04
1:A:34:HIS:N	3:A:391:NTN:CI2[2_556]	2.16	0.04
1:A:97:CYS:C	1:A:323:LYS:CA[2_556]	2.16	0.04
1:A:112:LEU:O	1:A:319:PHE:CB[2_556]	2.16	0.04
1:A:10:LYS:CD	1:A:26:VAL:CG1[2_555]	2.17	0.03
1:A:23:ILE:CB	1:A:133:ARG:CZ[2_555]	2.17	0.03
1:A:82:THR:CG2	1:A:106:PRO:CB[2_556]	2.17	0.03
1:A:92:LEU:CG	1:A:101:ARG:C[2_556]	2.17	0.03
1:A:99:LYS:CA	1:A:323:LYS:O[2_556]	2.17	0.03
1:A:99:LYS:NZ	1:A:331:LEU:CD2[2_556]	2.17	0.03
1:A:105:HIS:ND1	1:A:157:VAL:CG2[2_556]	2.17	0.03
1:A:120:ARG:NE	1:A:291:ILE:C[2_556]	2.17	0.03
1:A:123:MET:C	1:A:315:LYS:CA[2_556]	2.17	0.03
1:A:320:GLY:CA	3:A:386:NTN:CI1[2_556]	2.17	0.03
1:A:94:THR:CB	1:A:112:LEU:N[2_556]	2.18	0.02
1:A:94:THR:CG2	1:A:111:CYS:O[2_556]	2.18	0.02
1:A:105:HIS:CA	1:A:157:VAL:O[2_556]	2.18	0.02
1:A:106:PRO:C	1:A:154:GLU:C[2_556]	2.18	0.02
1:A:120:ARG:NH2	1:A:292:VAL:C[2_556]	2.18	0.02
1:A:124:GLN:N	1:A:316:GLY:O[2_556]	2.18	0.02
1:A:127:THR:N	1:A:314:TRP:CD1[2_556]	2.18	0.02
1:A:151:VAL:CG2	3:A:378:NTN:CI5[2_555]	2.18	0.02
1:A:10:LYS:C	1:A:25:GLU:CG[2_555]	2.19	0.01
1:A:74:GLU:OE2	3:A:383:NTN:NI1[2_555]	2.19	0.01
1:A:98:GLY:CA	1:A:323:LYS:O[2_556]	2.19	0.01
1:A:104:LYS:NZ	1:A:329:PRO:O[2_556]	2.19	0.01
1:A:125:ASP:O	1:A:290:VAL:C[2_556]	2.19	0.01
1:A:133:ARG:N	1:A:353:GLU:OE2[2_555]	2.19	0.01

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	372/374 (100%)	247 (66%)	69 (18%)	56 (15%)	0 1

All (56) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	6	VAL
1	A	8	LYS
1	A	9	CYS
1	A	16	GLU
1	A	32	LYS
1	A	85	PRO
1	A	95	PRO
1	A	96	GLN
1	A	112	LEU
1	A	129	ARG
1	A	133	ARG
1	A	162	ALA
1	A	166	LEU
1	A	180	TYR
1	A	188	LYS
1	A	193	SER
1	A	226	LYS
1	A	301	LEU
1	A	320	GLY
1	A	338	LYS
1	A	339	LYS
1	A	365	GLY
1	A	366	GLU
1	A	17	GLU
1	A	20	PRO
1	A	86	GLY
1	A	99	LYS
1	A	117	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	153	ASP
1	A	172	ILE
1	A	253	VAL
1	A	256	GLU
1	A	257	MET
1	A	352	PHE
1	A	359	PHE
1	A	361	LEU
1	A	4	GLY
1	A	122	THR
1	A	165	PRO
1	A	217	ALA
1	A	230	ALA
1	A	274	THR
1	A	300	ASN
1	A	306	MET
1	A	36	VAL
1	A	179	GLY
1	A	189	VAL
1	A	243	PRO
1	A	160	ILE
1	A	224	ILE
1	A	346	ILE
1	A	73	VAL
1	A	202	GLY
1	A	319	PHE
1	A	175	GLY
1	A	344	PRO

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	308/308 (100%)	211 (68%)	97 (32%)	0 0

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

Mol	Chain	Res	Type
1	A	5	LYS
1	A	9	CYS
1	A	18	LYS
1	A	19	LYS
1	A	26	VAL
1	A	32	LYS
1	A	39	LYS
1	A	40	MET
1	A	47	ARG
1	A	50	ASP
1	A	52	VAL
1	A	56	THR
1	A	58	VAL
1	A	61	LEU
1	A	74	GLU
1	A	76	ILE
1	A	78	GLU
1	A	83	VAL
1	A	87	ASP
1	A	89	VAL
1	A	93	PHE
1	A	96	GLN
1	A	99	LYS
1	A	101	ARG
1	A	102	VAL
1	A	105	HIS
1	A	107	GLU
1	A	112	LEU
1	A	113	LYS
1	A	118	MET
1	A	124	GLN
1	A	129	ARG
1	A	132	CYS
1	A	135	LYS
1	A	137	ILE
1	A	141	LEU
1	A	143	THR
1	A	147	SER
1	A	153	ASP
1	A	160	ILE
1	A	166	LEU
1	A	167	GLU
1	A	168	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	169	VAL
1	A	171	LEU
1	A	174	CYS
1	A	176	PHE
1	A	177	SER
1	A	178	THR
1	A	185	LYS
1	A	186	VAL
1	A	188	LYS
1	A	191	GLN
1	A	205	LEU
1	A	207	VAL
1	A	218	ARG
1	A	219	ILE
1	A	222	VAL
1	A	225	ASN
1	A	228	LYS
1	A	231	LYS
1	A	233	LYS
1	A	235	VAL
1	A	242	ASN
1	A	251	GLN
1	A	253	VAL
1	A	254	LEU
1	A	255	THR
1	A	267	GLU
1	A	269	ILE
1	A	272	LEU
1	A	273	ASP
1	A	274	THR
1	A	279	LEU
1	A	283	GLN
1	A	284	GLU
1	A	288	VAL
1	A	289	SER
1	A	295	PRO
1	A	301	LEU
1	A	304	ASN
1	A	306	MET
1	A	309	LEU
1	A	310	SER
1	A	314	TRP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	315	LYS
1	A	318	ILE
1	A	331	LEU
1	A	338	LYS
1	A	343	ASP
1	A	349	VAL
1	A	352	PHE
1	A	353	GLU
1	A	354	LYS
1	A	355	ILE
1	A	361	LEU
1	A	369	ARG

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (9) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	96	GLN
1	A	105	HIS
1	A	124	GLN
1	A	191	GLN
1	A	242	ASN
1	A	244	GLN
1	A	251	GLN
1	A	283	GLN
1	A	304	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 25 ligands modelled in this entry, 2 are monoatomic - leaving 23 for Mogul analysis.

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# $ Z > 2$	Counts	RMSZ	# $ Z > 2$
3	NTN	A	387	1	7,8,9	1.46	2 (28%)	7,9,11	1.87	3 (42%)
3	NTN	A	381	1	7,8,9	1.64	3 (42%)	7,9,11	1.89	3 (42%)
3	NTN	A	390	1	7,8,9	1.39	2 (28%)	7,9,11	1.88	2 (28%)
3	NTN	A	380	1	7,8,9	1.37	2 (28%)	7,9,11	1.46	1 (14%)
3	NTN	A	395	1	7,8,9	2.25	4 (57%)	7,9,11	1.41	1 (14%)
3	NTN	A	396	1	7,8,9	1.28	2 (28%)	7,9,11	1.78	3 (42%)
3	NTN	A	398	1	7,8,9	1.43	2 (28%)	7,9,11	1.97	3 (42%)
3	NTN	A	382	1	7,8,9	1.33	2 (28%)	7,9,11	1.47	2 (28%)
3	NTN	A	377	1	7,8,9	1.48	2 (28%)	7,9,11	1.39	2 (28%)
3	NTN	A	394	1	7,8,9	1.36	2 (28%)	7,9,11	1.74	2 (28%)
3	NTN	A	379	1	7,8,9	1.50	2 (28%)	7,9,11	1.40	2 (28%)
3	NTN	A	393	1	7,8,9	1.56	2 (28%)	7,9,11	1.41	2 (28%)
3	NTN	A	391	1	7,8,9	2.07	3 (42%)	7,9,11	1.67	2 (28%)
3	NTN	A	392	1	7,8,9	1.45	2 (28%)	7,9,11	3.25	4 (57%)
3	NTN	A	386	1	7,8,9	1.40	2 (28%)	7,9,11	2.01	4 (57%)
3	NTN	A	378	1	7,8,9	2.52	5 (71%)	7,9,11	1.73	2 (28%)
3	NTN	A	384	1	7,8,9	1.43	2 (28%)	7,9,11	1.41	2 (28%)
3	NTN	A	383	1	7,8,9	1.48	2 (28%)	7,9,11	2.63	3 (42%)
3	NTN	A	385	1	7,8,9	1.46	3 (42%)	7,9,11	2.25	2 (28%)
3	NTN	A	389	1	7,8,9	2.04	4 (57%)	7,9,11	1.37	1 (14%)
3	NTN	A	399	1	7,8,9	1.27	2 (28%)	7,9,11	1.64	2 (28%)
3	NTN	A	388	1	7,8,9	1.57	2 (28%)	7,9,11	1.49	2 (28%)
3	NTN	A	397	1	7,8,9	1.32	2 (28%)	7,9,11	1.64	2 (28%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the

Chemical Component Dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns.
'-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
3	NTN	A	387	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	381	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	390	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	380	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	395	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	396	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	398	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	382	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	377	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	394	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	379	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	393	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	391	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	392	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	386	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	378	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	384	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	383	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	385	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	389	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	399	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	388	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1
3	NTN	A	397	1	-	0/2/2/4	0/1/1/1

All (56) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
3	A	378	NTN	CI2-CI1	4.26	1.56	1.47
3	A	395	NTN	CI2-CI1	3.40	1.54	1.47
3	A	391	NTN	CI2-CI1	3.28	1.54	1.47
3	A	389	NTN	CI2-CI1	3.01	1.53	1.47
3	A	395	NTN	CI3-CI4	2.85	1.44	1.38
3	A	378	NTN	CI3-CI4	2.63	1.43	1.38
3	A	378	NTN	CI5-NI2	2.46	1.40	1.33
3	A	387	NTN	CI5-NI2	2.46	1.40	1.33
3	A	381	NTN	CI3-CI4	2.45	1.43	1.38
3	A	386	NTN	CI5-NI2	2.45	1.40	1.33
3	A	391	NTN	CI5-NI2	2.44	1.40	1.33
3	A	397	NTN	CI4-NI2	2.40	1.40	1.33
3	A	398	NTN	CI4-NI2	2.40	1.40	1.33
3	A	394	NTN	CI5-NI2	2.40	1.40	1.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
3	A	394	NTN	CI4-NI2	2.40	1.40	1.33
3	A	384	NTN	CI4-NI2	2.39	1.40	1.33
3	A	388	NTN	CI5-NI2	2.39	1.40	1.33
3	A	386	NTN	CI4-NI2	2.38	1.40	1.33
3	A	379	NTN	CI4-NI2	2.38	1.40	1.33
3	A	381	NTN	CI4-NI2	2.37	1.40	1.33
3	A	383	NTN	CI4-NI2	2.37	1.40	1.33
3	A	387	NTN	CI4-NI2	2.37	1.40	1.33
3	A	377	NTN	CI4-NI2	2.37	1.40	1.33
3	A	395	NTN	CI5-NI2	2.36	1.40	1.33
3	A	380	NTN	CI4-NI2	2.36	1.40	1.33
3	A	399	NTN	CI4-NI2	2.36	1.40	1.33
3	A	382	NTN	CI4-NI2	2.35	1.40	1.33
3	A	393	NTN	CI4-NI2	2.35	1.40	1.33
3	A	388	NTN	CI4-NI2	2.35	1.40	1.33
3	A	391	NTN	CI4-NI2	2.35	1.40	1.33
3	A	389	NTN	CI5-NI2	2.34	1.40	1.33
3	A	382	NTN	CI5-NI2	2.34	1.40	1.33
3	A	378	NTN	CI4-NI2	2.34	1.40	1.33
3	A	389	NTN	CI4-NI2	2.34	1.40	1.33
3	A	392	NTN	CI4-NI2	2.34	1.40	1.33
3	A	396	NTN	CI4-NI2	2.33	1.40	1.33
3	A	390	NTN	CI4-NI2	2.33	1.40	1.33
3	A	385	NTN	CI4-NI2	2.33	1.40	1.33
3	A	379	NTN	CI5-NI2	2.33	1.40	1.33
3	A	377	NTN	CI5-NI2	2.32	1.40	1.33
3	A	395	NTN	CI4-NI2	2.30	1.40	1.33
3	A	384	NTN	CI5-NI2	2.30	1.40	1.33
3	A	393	NTN	CI5-NI2	2.29	1.40	1.33
3	A	380	NTN	CI5-NI2	2.29	1.40	1.33
3	A	389	NTN	CI3-CI4	2.28	1.43	1.38
3	A	397	NTN	CI5-NI2	2.27	1.40	1.33
3	A	399	NTN	CI5-NI2	2.22	1.40	1.33
3	A	396	NTN	CI5-NI2	2.22	1.40	1.33
3	A	385	NTN	CI3-CI4	2.21	1.42	1.38
3	A	381	NTN	CI5-NI2	2.19	1.40	1.33
3	A	398	NTN	CI5-NI2	2.19	1.40	1.33
3	A	390	NTN	CI5-NI2	2.14	1.39	1.33
3	A	385	NTN	CI5-NI2	2.11	1.39	1.33
3	A	378	NTN	CI3-CI2	2.07	1.43	1.39
3	A	383	NTN	CI5-NI2	2.05	1.39	1.33
3	A	392	NTN	CI5-NI2	2.01	1.39	1.33

All (52) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
3	A	392	NTN	CI2-CI1-NI1	7.01	138.53	121.48
3	A	383	NTN	CI2-CI1-NI1	4.97	133.57	121.48
3	A	385	NTN	CI2-CI1-NI1	4.17	131.63	121.48
3	A	386	NTN	CI2-CI1-NI1	-3.25	113.59	121.48
3	A	381	NTN	CI2-CI1-NI1	3.20	129.25	121.48
3	A	398	NTN	CI6-CI2-CI3	3.10	122.25	117.65
3	A	390	NTN	CI2-CI1-NI1	3.03	128.85	121.48
3	A	383	NTN	CI6-CI2-CI3	2.99	122.09	117.65
3	A	387	NTN	CI2-CI1-NI1	-2.95	114.32	121.48
3	A	392	NTN	CI6-CI2-CI3	2.82	121.84	117.65
3	A	392	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.74	118.93	123.60
3	A	397	NTN	CI6-CI2-CI3	2.71	121.67	117.65
3	A	383	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.69	119.02	123.60
3	A	398	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.67	119.05	123.60
3	A	378	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.66	119.06	123.60
3	A	394	NTN	CI6-CI2-CI3	2.64	121.57	117.65
3	A	397	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.50	119.34	123.60
3	A	395	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.48	119.36	123.60
3	A	391	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.48	119.38	123.60
3	A	396	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.43	119.45	123.60
3	A	399	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.41	119.49	123.60
3	A	391	NTN	CI2-CI1-NI1	-2.40	115.65	121.48
3	A	396	NTN	CI6-CI2-CI3	2.38	121.18	117.65
3	A	386	NTN	CI6-CI2-CI3	2.37	121.17	117.65
3	A	394	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.35	119.58	123.60
3	A	389	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.35	119.59	123.60
3	A	399	NTN	CI6-CI2-CI3	2.34	121.12	117.65
3	A	378	NTN	CI2-CI1-NI1	-2.34	115.80	121.48
3	A	382	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.28	119.70	123.60
3	A	392	NTN	CI4-CI3-CI2	-2.26	117.24	119.63
3	A	398	NTN	CI2-CI1-NI1	2.25	126.95	121.48
3	A	386	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.24	119.78	123.60
3	A	390	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.23	119.80	123.60
3	A	385	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.21	119.83	123.60
3	A	380	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.20	119.84	123.60
3	A	387	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.17	119.90	123.60
3	A	393	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.15	119.92	123.60
3	A	388	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.14	119.94	123.60
3	A	387	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.14	119.95	123.60
3	A	384	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.13	119.97	123.60
3	A	377	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.13	119.97	123.60
3	A	396	NTN	CI2-CI1-NI1	2.12	126.63	121.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
3	A	379	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.11	120.00	123.60
3	A	393	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.09	120.03	123.60
3	A	379	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.09	120.04	123.60
3	A	384	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.09	120.04	123.60
3	A	388	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.08	120.05	123.60
3	A	381	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.08	120.05	123.60
3	A	382	NTN	CI6-CI2-CI3	2.06	120.71	117.65
3	A	386	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.05	120.10	123.60
3	A	381	NTN	CI6-CI5-NI2	-2.04	120.11	123.60
3	A	377	NTN	CI3-CI4-NI2	-2.04	120.11	123.60

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

14 monomers are involved in 154 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
3	A	387	NTN	1	0
3	A	381	NTN	3	0
3	A	390	NTN	0	4
3	A	382	NTN	0	13
3	A	377	NTN	0	10
3	A	379	NTN	0	16
3	A	391	NTN	1	33
3	A	386	NTN	0	14
3	A	378	NTN	0	20
3	A	383	NTN	1	18
3	A	385	NTN	0	13
3	A	389	NTN	2	0
3	A	399	NTN	2	0
3	A	397	NTN	0	8

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data

6.1 Protein, DNA and RNA chains

EDS was not executed - this section is therefore empty.

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

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.3 Carbohydrates

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.4 Ligands

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.5 Other polymers

EDS was not executed - this section is therefore empty.