



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Jun 22, 2024 – 06:08 PM EDT

PDB ID : 5L5N  
Title : Plexin A4 full extracellular region, domains 1 to 7 modeled, data to 8.5 angstrom, spacegroup P4(3)22  
Authors : Janssen, B.J.C.; Kong, Y.; Malinauskas, T.; Vangoor, V.R.; Coles, C.H.; Kaufmann, R.; Ni, T.; Gilbert, R.J.C.; Padilla-Parra, S.; Pasterkamp, R.J.; Jones, E.Y.  
Deposited on : 2016-05-28  
Resolution : 8.50 Å(reported)

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

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto: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
Xtriage (Phenix)	:	1.13
EDS	:	2.37.1
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Refmac	:	5.8.0158
CCP4	:	7.0.044 (Gargrove)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.37.1

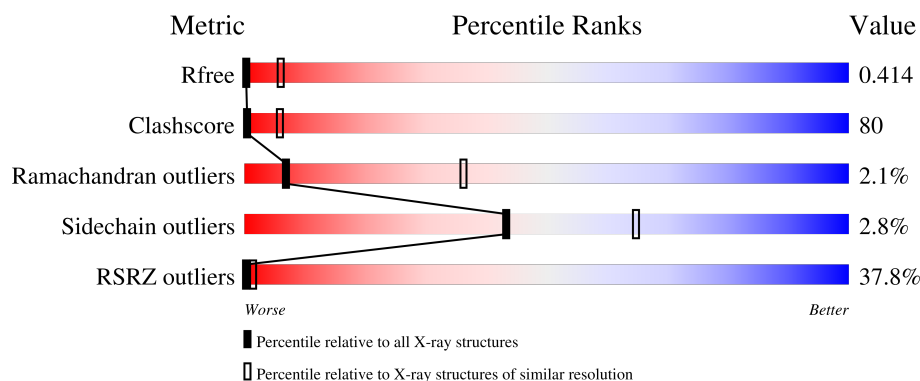
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*X-RAY DIFFRACTION*

The reported resolution of this entry is 8.50 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
$R_{free}$	130704	1005 (11.50-3.90)
Clashscore	141614	1070 (11.50-3.90)
Ramachandran outliers	138981	1003 (11.50-3.90)
Sidechain outliers	138945	1003 (11.50-3.86)
RSRZ outliers	127900	1004 (9.50-3.80)

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  $\geq 3$ , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria respectively. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions  $\leq 5\%$ . The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the electron density. The numeric value is given above the bar.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	1207	

## 2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 7189 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 Plexin-A4.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	915	Total	C	N	O	S	0	0	0
			7189	4533	1239	1357	60			

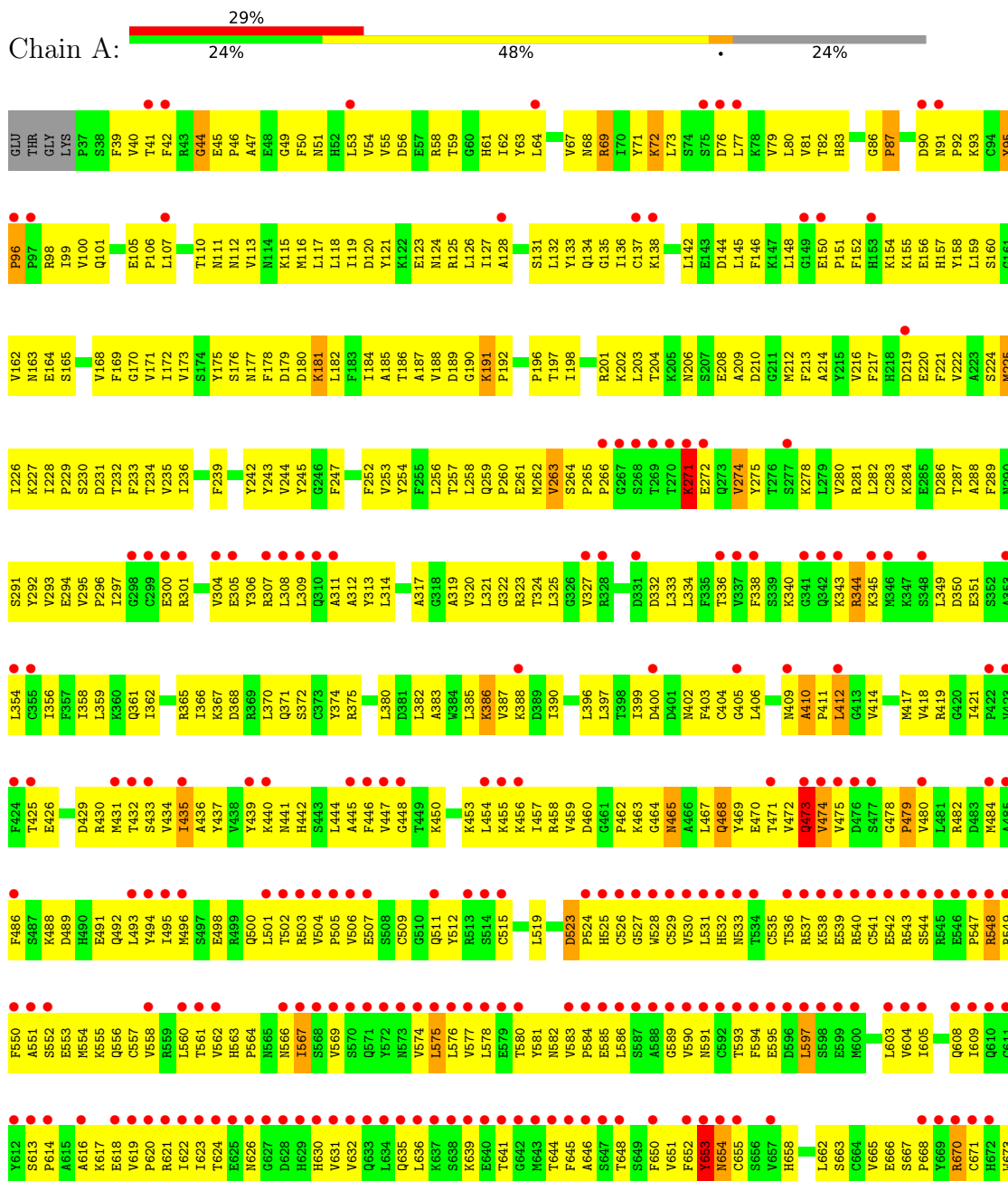
There are 13 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	33	GLU	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	34	THR	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	35	GLY	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1230	GLY	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1231	ARG	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1232	THR	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1233	LYS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1234	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1235	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1236	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1237	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1238	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2
A	1239	HIS	-	expression tag	UNP Q80UG2

### 3 Residue-property plots

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

#### • Molecule 1: Plexin-A4





## 4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 43 2 2	Depositor
Cell constants a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	189.48Å 189.48Å 252.59Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	70.37 – 8.50 70.37 – 8.50	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.5 (70.37-8.50) 99.6 (70.37-8.50)	Depositor EDS
$R_{merge}$	0.33	Depositor
$R_{sym}$	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ <sup>1</sup>	1.94 (at 8.39Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX 1.8.2_1309	Depositor
R, $R_{free}$	0.401 , 0.412 0.411 , 0.414	Depositor DCC
$R_{free}$ test set	203 reflections (4.64%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å <sup>2</sup> )	502.9	Xtriage
Anisotropy	0.294	Xtriage
Bulk solvent $k_{sol}$ (e/Å <sup>3</sup> ), $B_{sol}$ (Å <sup>2</sup> )	0.30 , 149.4	EDS
L-test for twinning <sup>2</sup>	$\langle  L  \rangle = 0.34$ , $\langle L^2 \rangle = 0.17$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
$F_o, F_c$ correlation	0.53	EDS
Total number of atoms	7189	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	162.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 8.07% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

<sup>1</sup>Intensities estimated from amplitudes.

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

## 5 Model quality i

### 5.1 Standard geometry i

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	1.10	4/7343 (0.1%)	1.26	20/9940 (0.2%)

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 (4) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	653	TYR	C-N	-36.36	0.50	1.34
1	A	700	CYS	C-N	-33.68	0.70	1.34
1	A	49	GLY	CA-C	6.43	1.62	1.51
1	A	49	GLY	C-N	5.09	1.45	1.34

All (20) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	747	GLN	CG-CD-OE1	-38.83	43.94	121.60
1	A	653	TYR	O-C-N	-20.66	89.64	122.70
1	A	700	CYS	C-N-CD	-19.18	78.41	120.60
1	A	700	CYS	O-C-N	-10.23	101.67	121.10
1	A	747	GLN	CG-CD-NE2	-9.56	93.74	116.70
1	A	479	PRO	N-CA-C	8.17	133.35	112.10
1	A	653	TYR	CA-C-N	-7.88	99.87	117.20
1	A	843	ARG	C-N-CA	7.75	141.07	121.70
1	A	653	TYR	C-N-CA	-6.96	104.30	121.70
1	A	478	GLY	CA-C-O	-6.89	108.19	120.60
1	A	747	GLN	OE1-CD-NE2	6.86	137.69	121.90
1	A	473	GLN	C-N-CA	-6.68	105.00	121.70

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	892	HIS	CA-CB-CG	6.56	124.75	113.60
1	A	225	MET	CG-SD-CE	-5.69	91.09	100.20
1	A	409	ASN	C-N-CA	5.67	135.88	121.70
1	A	49	GLY	C-N-CA	5.58	135.66	121.70
1	A	274	VAL	CG1-CB-CG2	5.44	119.60	110.90
1	A	919	GLU	C-N-CA	5.27	134.88	121.70
1	A	803	CYS	C-N-CA	5.09	132.99	122.30
1	A	676	TYR	CA-CB-CG	-5.08	103.75	113.40

There are no chirality outliers.

All (4) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	653	TYR	Mainchain
1	A	700	CYS	Mainchain
1	A	863	ILE	Peptide
1	A	95	TYR	Peptide

## 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	7189	0	7049	1133	32
All	All	7189	0	7049	1133	32

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 80.

All (1133) 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:468:GLN:HG3	1:A:524:PRO:CD	1.18	1.58
1:A:530:VAL:HG11	1:A:584:PRO:CD	1.11	1.56
1:A:439:TYR:CE2	1:A:538:LYS:NZ	1.78	1.51
1:A:468:GLN:CG	1:A:524:PRO:HD3	1.39	1.51

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:439:TYR:HE2	1:A:538:LYS:NZ	1.11	1.44
1:A:530:VAL:CG1	1:A:584:PRO:HD2	1.48	1.42
1:A:556:GLN:HA	1:A:582:ASN:ND2	1.33	1.36
1:A:530:VAL:CG1	1:A:584:PRO:CD	2.00	1.35
1:A:815:LYS:CE	1:A:910:ALA:HB3	1.55	1.34
1:A:662:LEU:HD23	1:A:791:ASP:OD2	1.27	1.32
1:A:557:CYS:O	1:A:582:ASN:CB	1.74	1.32
1:A:812:LEU:HD21	1:A:880:GLU:O	1.23	1.31
1:A:699:ASP:HA	1:A:725:ASN:OD1	1.11	1.28
1:A:810:CYS:SG	1:A:855:THR:HG22	1.76	1.24
1:A:557:CYS:C	1:A:582:ASN:HB2	1.58	1.24
1:A:569:VAL:CG2	1:A:654:ASN:HB2	1.66	1.23
1:A:555:LYS:O	1:A:582:ASN:OD1	1.57	1.20
1:A:569:VAL:HB	1:A:654:ASN:ND2	1.56	1.20
1:A:662:LEU:CD2	1:A:791:ASP:OD2	1.91	1.17
1:A:469:TYR:CG	1:A:523:ASP:OD2	1.98	1.17
1:A:439:TYR:HE2	1:A:538:LYS:CE	1.59	1.16
1:A:468:GLN:CG	1:A:524:PRO:CD	2.08	1.15
1:A:453:LYS:HG2	1:A:472:VAL:HG22	1.25	1.14
1:A:435:ILE:HG22	1:A:446:PHE:HB2	1.22	1.13
1:A:295:VAL:HG12	1:A:414:VAL:HG11	1.27	1.13
1:A:468:GLN:HG3	1:A:524:PRO:HD2	1.27	1.13
1:A:533:ASN:ND2	1:A:644:THR:O	1.82	1.13
1:A:324:THR:HB	1:A:462:PRO:HB3	1.27	1.13
1:A:469:TYR:CB	1:A:523:ASP:OD2	1.98	1.12
1:A:533:ASN:ND2	1:A:644:THR:C	2.03	1.12
1:A:533:ASN:HD21	1:A:644:THR:C	1.51	1.12
1:A:468:GLN:CB	1:A:524:PRO:HD3	1.79	1.11
1:A:699:ASP:CA	1:A:725:ASN:OD1	1.98	1.11
1:A:595:GLU:HB2	1:A:597:LEU:HD23	1.32	1.11
1:A:359:LEU:HD12	1:A:362:ILE:HD11	1.24	1.11
1:A:530:VAL:HB	1:A:584:PRO:HG3	1.21	1.09
1:A:118:LEU:HD12	1:A:172:ILE:HD12	1.17	1.09
1:A:806:MET:H	1:A:806:MET:HE3	1.14	1.08
1:A:556:GLN:CA	1:A:582:ASN:ND2	2.16	1.07
1:A:474:VAL:HG12	1:A:475:VAL:HG23	1.33	1.06
1:A:662:LEU:HD23	1:A:791:ASP:CG	1.76	1.05
1:A:530:VAL:CG1	1:A:584:PRO:CG	2.33	1.05
1:A:469:TYR:HB2	1:A:523:ASP:CG	1.76	1.04
1:A:469:TYR:HB2	1:A:523:ASP:OD2	1.55	1.04
1:A:815:LYS:CD	1:A:910:ALA:HB3	1.87	1.04

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:815:LYS:HE3	1:A:910:ALA:HB3	1.31	1.04
1:A:569:VAL:HG23	1:A:654:ASN:CB	1.87	1.04
1:A:812:LEU:CD2	1:A:880:GLU:O	2.05	1.03
1:A:560:LEU:HD23	1:A:648:THR:HG23	1.37	1.03
1:A:812:LEU:HG	1:A:881:ASN:OD1	1.59	1.02
1:A:620:PRO:HA	1:A:623:ILE:HG13	1.41	1.02
1:A:494:TYR:HB3	1:A:501:LEU:HD21	1.40	1.01
1:A:458:ARG:HD2	1:A:524:PRO:CB	1.89	1.01
1:A:301:ARG:HD2	1:A:425:THR:HG21	1.37	1.01
1:A:854:CYS:HB3	1:A:855:THR:N	1.75	0.99
1:A:623:ILE:HA	1:A:626:ASN:HD21	1.28	0.99
1:A:444:LEU:HD12	1:A:446:PHE:CE1	1.98	0.98
1:A:533:ASN:CG	1:A:645:PHE:HB3	1.83	0.98
1:A:117:LEU:HD11	1:A:126:LEU:HD21	1.45	0.98
1:A:46:PRO:HG2	1:A:69:ARG:HG3	1.41	0.97
1:A:557:CYS:C	1:A:558:VAL:HA	1.85	0.97
1:A:530:VAL:HG11	1:A:584:PRO:HD3	1.47	0.97
1:A:563:HIS:HB3	1:A:564:PRO:HD3	1.44	0.95
1:A:42:PHE:HE1	1:A:79:VAL:HG22	1.31	0.95
1:A:439:TYR:CE2	1:A:538:LYS:CE	2.40	0.95
1:A:557:CYS:O	1:A:582:ASN:HB2	0.77	0.94
1:A:72:LYS:HE3	1:A:80:LEU:HD13	1.49	0.94
1:A:808:GLU:OE2	1:A:880:GLU:OE1	1.83	0.94
1:A:297:ILE:HG22	1:A:418:VAL:CG1	1.97	0.94
1:A:530:VAL:HG11	1:A:584:PRO:CG	1.96	0.94
1:A:862:ILE:HG22	1:A:877:ILE:HA	1.46	0.93
1:A:863:ILE:HG22	1:A:876:THR:HB	1.48	0.93
1:A:865:VAL:HG13	1:A:866:THR:HG23	1.50	0.93
1:A:804:GLY:HA2	1:A:806:MET:SD	2.09	0.92
1:A:39:PHE:CE2	1:A:473:GLN:HG3	2.04	0.92
1:A:62:ILE:CG1	1:A:73:LEU:HB2	1.98	0.92
1:A:297:ILE:HG22	1:A:418:VAL:HG12	1.49	0.92
1:A:458:ARG:HD2	1:A:524:PRO:HB3	1.48	0.92
1:A:530:VAL:CB	1:A:584:PRO:HG3	1.99	0.91
1:A:239:PHE:HA	1:A:260:PRO:HG2	1.51	0.91
1:A:566:ASN:HA	1:A:651:VAL:HG23	1.49	0.91
1:A:435:ILE:HD13	1:A:436:ALA:H	1.34	0.91
1:A:933:VAL:HG23	1:A:934:ALA:H	1.36	0.91
1:A:527:GLY:HA3	1:A:550:PHE:CZ	2.04	0.91
1:A:806:MET:SD	1:A:807:ARG:HG3	2.11	0.91
1:A:815:LYS:CE	1:A:909:PRO:O	2.19	0.91

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:815:LYS:HD2	1:A:910:ALA:CB	2.00	0.90
1:A:569:VAL:HG23	1:A:654:ASN:HB2	0.91	0.90
1:A:359:LEU:CD1	1:A:362:ILE:HD11	2.02	0.90
1:A:271:LYS:HG3	1:A:272:GLU:H	1.34	0.89
1:A:447:VAL:HG22	1:A:455:LYS:HB2	1.53	0.89
1:A:533:ASN:OD1	1:A:645:PHE:CB	2.20	0.89
1:A:446:PHE:HD2	1:A:454:LEU:HD21	1.38	0.88
1:A:453:LYS:CG	1:A:472:VAL:HG22	2.03	0.88
1:A:95:TYR:CD2	1:A:96:PRO:HD3	2.08	0.88
1:A:486:PHE:CD1	1:A:493:LEU:HD13	2.09	0.88
1:A:833:LEU:HB2	1:A:836:HIS:HD2	1.39	0.88
1:A:532:HIS:HA	1:A:641:THR:OG1	1.72	0.88
1:A:447:VAL:CG2	1:A:455:LYS:HB2	2.03	0.88
1:A:256:LEU:HB3	1:A:309:LEU:HD22	1.56	0.87
1:A:892:HIS:HB2	1:A:932:CYS:O	1.74	0.87
1:A:181:LYS:CD	1:A:202:LYS:HA	2.04	0.87
1:A:295:VAL:HA	1:A:414:VAL:CG2	2.05	0.87
1:A:468:GLN:HG3	1:A:524:PRO:CG	2.05	0.86
1:A:39:PHE:CE1	1:A:505:PRO:HD2	2.11	0.86
1:A:439:TYR:CD2	1:A:538:LYS:NZ	2.42	0.86
1:A:110:THR:CG2	1:A:132:LEU:HD21	2.05	0.86
1:A:473:GLN:CG	1:A:504:VAL:HG22	2.06	0.86
1:A:603:LEU:HD23	1:A:604:VAL:N	1.90	0.86
1:A:863:ILE:HG23	1:A:864:PRO:HD2	1.56	0.86
1:A:133:TYR:CG	1:A:136:ILE:HG12	2.11	0.85
1:A:847:LEU:HD11	1:A:850:ALA:HA	1.58	0.85
1:A:118:LEU:HD13	1:A:119:ILE:N	1.91	0.85
1:A:370:LEU:CD1	1:A:399:ILE:HD12	2.05	0.85
1:A:882:LEU:HB2	1:A:910:ALA:HA	1.58	0.85
1:A:854:CYS:O	1:A:940:PHE:CZ	2.28	0.85
1:A:118:LEU:HD12	1:A:172:ILE:CD1	2.05	0.85
1:A:847:LEU:HD12	1:A:852:SER:HB3	1.58	0.85
1:A:815:LYS:HD2	1:A:910:ALA:HB3	1.55	0.85
1:A:863:ILE:CG2	1:A:876:THR:HB	2.07	0.85
1:A:706:VAL:HG22	1:A:707:ASP:H	1.42	0.84
1:A:42:PHE:CZ	1:A:45:GLU:HB2	2.12	0.84
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:H	1.39	0.84
1:A:295:VAL:CG1	1:A:414:VAL:HG11	2.07	0.84
1:A:458:ARG:CD	1:A:524:PRO:HB3	2.07	0.84
1:A:50:PHE:HB2	1:A:498:GLU:O	1.78	0.83
1:A:229:PRO:O	1:A:232:THR:HG22	1.79	0.83

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:557:CYS:C	1:A:582:ASN:CB	2.36	0.83
1:A:569:VAL:CG2	1:A:654:ASN:CB	2.52	0.83
1:A:358:ILE:HG23	1:A:361:GLN:H	1.44	0.83
1:A:295:VAL:HA	1:A:414:VAL:HG22	1.60	0.83
1:A:812:LEU:HD11	1:A:880:GLU:HB3	1.60	0.83
1:A:100:VAL:HG12	1:A:101:GLN:HG3	1.58	0.82
1:A:133:TYR:CB	1:A:136:ILE:HG12	2.09	0.82
1:A:356:ILE:CG2	1:A:421:ILE:HB	2.07	0.82
1:A:830:GLN:HG2	1:A:831:CYS:H	1.43	0.82
1:A:785:ASN:HB3	1:A:788:PHE:CD2	2.14	0.82
1:A:809:SER:HB3	1:A:856:ASN:HD21	1.44	0.82
1:A:53:LEU:HD23	1:A:54:VAL:N	1.94	0.82
1:A:42:PHE:CE1	1:A:79:VAL:HG22	2.14	0.82
1:A:435:ILE:CG2	1:A:446:PHE:HB2	2.06	0.82
1:A:40:VAL:CG1	1:A:503:ARG:HB3	2.08	0.82
1:A:468:GLN:HG3	1:A:524:PRO:HD3	0.88	0.82
1:A:533:ASN:OD1	1:A:645:PHE:HA	1.78	0.82
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CE1	2.15	0.82
1:A:44:GLY:HA2	1:A:50:PHE:CE2	2.15	0.82
1:A:336:THR:O	1:A:354:LEU:HD12	1.78	0.82
1:A:474:VAL:HG22	1:A:495:ILE:HG21	1.61	0.82
1:A:530:VAL:HB	1:A:584:PRO:CG	2.05	0.81
1:A:863:ILE:HG13	1:A:864:PRO:HD3	1.62	0.81
1:A:533:ASN:CG	1:A:645:PHE:CB	2.48	0.81
1:A:397:LEU:HD23	1:A:399:ILE:HD13	1.61	0.81
1:A:926:ALA:HB1	1:A:947:LEU:HD12	1.63	0.81
1:A:486:PHE:CE1	1:A:493:LEU:HD13	2.16	0.81
1:A:889:ILE:HG23	1:A:892:HIS:CE1	2.16	0.81
1:A:359:LEU:HD12	1:A:362:ILE:CD1	2.09	0.81
1:A:397:LEU:HD23	1:A:399:ILE:CD1	2.11	0.81
1:A:154:LYS:HD3	1:A:210:ASP:OD1	1.81	0.81
1:A:533:ASN:ND2	1:A:645:PHE:N	2.28	0.80
1:A:295:VAL:HG12	1:A:414:VAL:CG1	2.09	0.80
1:A:62:ILE:HG13	1:A:73:LEU:HB2	1.62	0.80
1:A:370:LEU:HD12	1:A:399:ILE:HD12	1.63	0.80
1:A:154:LYS:HB2	1:A:157:HIS:CD2	2.16	0.80
1:A:356:ILE:HG22	1:A:421:ILE:HB	1.61	0.80
1:A:380:LEU:HD12	1:A:386:LYS:HE3	1.64	0.80
1:A:468:GLN:HB2	1:A:523:ASP:HA	1.64	0.80
1:A:468:GLN:CD	1:A:524:PRO:HG3	2.03	0.80
1:A:314:LEU:HD11	1:A:332:ASP:HB3	1.64	0.79

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:239:PHE:CE1	1:A:260:PRO:HD2	2.17	0.79
1:A:321:LEU:HD12	1:A:462:PRO:HG2	1.64	0.79
1:A:244:VAL:HG13	1:A:482:ARG:NH1	1.98	0.79
1:A:556:GLN:HA	1:A:582:ASN:HD21	1.43	0.79
1:A:192:PRO:HB3	1:A:233:PHE:CE1	2.17	0.79
1:A:444:LEU:HD13	1:A:445:ALA:N	1.97	0.79
1:A:715:VAL:HG21	1:A:717:LYS:HD2	1.65	0.78
1:A:56:ASP:OD2	1:A:142:LEU:HD11	1.83	0.78
1:A:569:VAL:CB	1:A:654:ASN:ND2	2.42	0.78
1:A:317:ALA:HB1	1:A:321:LEU:HB3	1.64	0.78
1:A:319:ALA:H	1:A:441:ASN:HD22	1.31	0.78
1:A:623:ILE:HD12	1:A:624:THR:N	1.96	0.78
1:A:327:VAL:HG12	1:A:358:ILE:HD11	1.65	0.78
1:A:700:CYS:CB	1:A:701:PRO:N	2.25	0.78
1:A:815:LYS:HE3	1:A:910:ALA:CB	2.13	0.78
1:A:181:LYS:NZ	1:A:216:VAL:HG23	1.99	0.78
1:A:320:VAL:HG21	1:A:442:HIS:CD2	2.19	0.78
1:A:44:GLY:HA2	1:A:50:PHE:HE2	1.44	0.78
1:A:742:ILE:HB	1:A:745:ILE:O	1.84	0.78
1:A:168:VAL:HG23	1:A:185:ALA:O	1.84	0.77
1:A:324:THR:HB	1:A:462:PRO:CB	2.10	0.77
1:A:620:PRO:HA	1:A:623:ILE:CG1	2.12	0.77
1:A:51:ASN:HD21	1:A:67:VAL:HG23	1.50	0.77
1:A:785:ASN:HB3	1:A:788:PHE:HD2	1.48	0.77
1:A:806:MET:H	1:A:806:MET:CE	1.97	0.77
1:A:284:LYS:O	1:A:284:LYS:HD3	1.85	0.77
1:A:439:TYR:CE2	1:A:538:LYS:HE3	2.19	0.77
1:A:616:ALA:O	1:A:620:PRO:HD2	1.85	0.77
1:A:854:CYS:O	1:A:940:PHE:HZ	1.66	0.77
1:A:847:LEU:CG	1:A:850:ALA:HA	2.13	0.77
1:A:403:PHE:CE1	1:A:406:LEU:HD23	2.20	0.77
1:A:453:LYS:HE3	1:A:472:VAL:CG2	2.13	0.77
1:A:327:VAL:CG1	1:A:358:ILE:HD11	2.14	0.77
1:A:710:LEU:HD12	1:A:710:LEU:O	1.84	0.77
1:A:181:LYS:HZ3	1:A:216:VAL:HG23	1.50	0.77
1:A:196:PRO:HB3	1:A:225:MET:HE1	1.67	0.77
1:A:231:ASP:O	1:A:234:THR:HG22	1.84	0.77
1:A:591:ASN:OD1	1:A:639:LYS:HE2	1.83	0.76
1:A:533:ASN:OD1	1:A:645:PHE:CA	2.33	0.76
1:A:595:GLU:CB	1:A:597:LEU:HD23	2.14	0.76
1:A:204:THR:HG21	1:A:209:ALA:HB3	1.66	0.76

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:64:LEU:HD12	1:A:496:MET:CE	2.16	0.76
1:A:547:PRO:O	1:A:548:ARG:HG2	1.84	0.76
1:A:780:LEU:HD12	1:A:780:LEU:O	1.86	0.76
1:A:806:MET:HE3	1:A:806:MET:N	1.98	0.76
1:A:456:LYS:HD3	1:A:525:HIS:CE1	2.20	0.76
1:A:847:LEU:CD1	1:A:850:ALA:HA	2.16	0.76
1:A:120:ASP:OD2	1:A:123:GLU:HG3	1.86	0.76
1:A:869:ARG:O	1:A:920:ALA:HB3	1.86	0.76
1:A:278:LYS:HE3	1:A:296:PRO:HG3	1.67	0.75
1:A:172:ILE:HG12	1:A:182:LEU:HD13	1.68	0.75
1:A:556:GLN:CA	1:A:582:ASN:CG	2.52	0.75
1:A:847:LEU:HD12	1:A:852:SER:CB	2.16	0.75
1:A:448:GLY:HA3	1:A:480:VAL:HG21	1.68	0.75
1:A:473:GLN:CB	1:A:504:VAL:HG22	2.17	0.75
1:A:42:PHE:HZ	1:A:45:GLU:HB2	1.50	0.75
1:A:323:ARG:HG3	1:A:324:THR:N	2.02	0.75
1:A:676:TYR:HE1	1:A:730:GLN:HG2	1.52	0.75
1:A:256:LEU:CB	1:A:309:LEU:HD22	2.16	0.75
1:A:188:VAL:HG22	1:A:191:LYS:H	1.52	0.74
1:A:739:ILE:CD1	1:A:748:ARG:HG2	2.17	0.74
1:A:151:PRO:HB2	1:A:157:HIS:ND1	2.02	0.74
1:A:321:LEU:CD1	1:A:462:PRO:HG2	2.17	0.74
1:A:460:ASP:HB3	1:A:464:GLY:N	2.00	0.74
1:A:567:ILE:HD12	1:A:650:PHE:CZ	2.22	0.74
1:A:439:TYR:OH	1:A:538:LYS:HE3	1.88	0.74
1:A:567:ILE:HD13	1:A:567:ILE:H	1.50	0.74
1:A:815:LYS:HE2	1:A:910:ALA:HB3	1.67	0.74
1:A:569:VAL:HB	1:A:654:ASN:CG	2.08	0.74
1:A:822:CYS:HA	1:A:833:LEU:HD23	1.70	0.74
1:A:873:THR:HB	1:A:917:MET:CE	2.17	0.74
1:A:202:LYS:HD3	1:A:214:ALA:HB3	1.69	0.74
1:A:683:ASP:O	1:A:686:THR:HG22	1.87	0.74
1:A:704:LEU:HD11	1:A:724:LYS:HE3	1.70	0.74
1:A:784:TRP:HD1	1:A:790:ILE:HD11	1.51	0.74
1:A:530:VAL:CB	1:A:584:PRO:CG	2.61	0.74
1:A:533:ASN:CG	1:A:645:PHE:CA	2.56	0.74
1:A:154:LYS:H	1:A:157:HIS:HD2	1.36	0.74
1:A:456:LYS:HD3	1:A:525:HIS:HE1	1.53	0.74
1:A:562:VAL:HG22	1:A:578:LEU:CD2	2.18	0.74
1:A:99:ILE:HD11	1:A:152:PHE:HB2	1.69	0.73
1:A:278:LYS:HG2	1:A:296:PRO:HA	1.68	0.73

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:468:GLN:HB2	1:A:524:PRO:HD3	1.71	0.73
1:A:225:MET:CE	1:A:227:LYS:HG3	2.19	0.73
1:A:435:ILE:HD13	1:A:436:ALA:N	2.03	0.73
1:A:446:PHE:HB3	1:A:454:LEU:HD11	1.69	0.73
1:A:469:TYR:CD1	1:A:523:ASP:OD2	2.42	0.73
1:A:556:GLN:HA	1:A:582:ASN:CG	2.08	0.73
1:A:676:TYR:CE1	1:A:730:GLN:CG	2.72	0.73
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CZ	2.23	0.73
1:A:324:THR:HG21	1:A:462:PRO:HA	1.70	0.73
1:A:458:ARG:HD2	1:A:524:PRO:HB2	1.71	0.73
1:A:321:LEU:HG	1:A:325:LEU:HD11	1.71	0.72
1:A:623:ILE:HA	1:A:626:ASN:ND2	2.01	0.72
1:A:184:ILE:HD12	1:A:184:ILE:O	1.89	0.72
1:A:225:MET:HE1	1:A:227:LYS:HG3	1.72	0.72
1:A:704:LEU:HB2	1:A:722:LYS:HG3	1.71	0.72
1:A:115:LYS:HB3	1:A:168:VAL:HG11	1.71	0.72
1:A:670:ARG:HE	1:A:670:ARG:HA	1.54	0.72
1:A:321:LEU:HG	1:A:325:LEU:CD1	2.20	0.72
1:A:619:VAL:HB	1:A:620:PRO:HD3	1.72	0.72
1:A:814:LEU:HB3	1:A:847:LEU:HB2	1.70	0.72
1:A:261:GLU:HA	1:A:264:SER:O	1.89	0.72
1:A:832:THR:CG2	1:A:836:HIS:HB2	2.20	0.72
1:A:39:PHE:CD2	1:A:473:GLN:HG3	2.23	0.72
1:A:380:LEU:HB2	1:A:386:LYS:CE	2.20	0.72
1:A:847:LEU:CD1	1:A:852:SER:HB3	2.20	0.71
1:A:676:TYR:CE1	1:A:730:GLN:HG2	2.25	0.71
1:A:700:CYS:HB3	1:A:701:PRO:N	2.04	0.71
1:A:446:PHE:CD2	1:A:454:LEU:HD21	2.24	0.71
1:A:46:PRO:HG2	1:A:69:ARG:CG	2.17	0.71
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:OE1	1.90	0.71
1:A:446:PHE:HZ	1:A:506:VAL:HG23	1.55	0.71
1:A:662:LEU:CD2	1:A:791:ASP:CB	2.69	0.71
1:A:304:VAL:HG11	1:A:351:GLU:OE2	1.91	0.71
1:A:480:VAL:HB	1:A:484:MET:CE	2.21	0.71
1:A:558:VAL:HG11	1:A:646:ALA:HB2	1.71	0.71
1:A:73:LEU:HD22	1:A:79:VAL:HA	1.72	0.71
1:A:533:ASN:ND2	1:A:645:PHE:CA	2.54	0.71
1:A:847:LEU:HD21	1:A:850:ALA:HA	1.73	0.71
1:A:53:LEU:HB2	1:A:496:MET:HE1	1.71	0.70
1:A:519:LEU:HD12	1:A:552:SER:O	1.90	0.70
1:A:595:GLU:HG2	1:A:632:VAL:HG13	1.72	0.70

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:937:ARG:CG	1:A:938:PRO:HD2	2.20	0.70
1:A:40:VAL:HG12	1:A:503:ARG:HB3	1.73	0.70
1:A:530:VAL:CB	1:A:584:PRO:CD	2.69	0.70
1:A:812:LEU:HD21	1:A:880:GLU:C	2.09	0.70
1:A:188:VAL:HG13	1:A:190:GLY:H	1.56	0.70
1:A:533:ASN:CG	1:A:645:PHE:HA	2.11	0.70
1:A:575:LEU:HD22	1:A:575:LEU:H	1.56	0.70
1:A:63:TYR:C	1:A:64:LEU:HD22	2.12	0.70
1:A:380:LEU:HB2	1:A:386:LYS:HE3	1.74	0.70
1:A:471:THR:HG23	1:A:473:GLN:HE22	1.55	0.70
1:A:181:LYS:HD2	1:A:202:LYS:HA	1.71	0.70
1:A:93:LYS:HD2	1:A:105:GLU:OE1	1.91	0.70
1:A:281:ARG:HB3	1:A:293:VAL:CG1	2.22	0.70
1:A:551:ALA:HA	1:A:556:GLN:OE1	1.92	0.70
1:A:563:HIS:HB2	1:A:577:VAL:CG1	2.21	0.70
1:A:450:LYS:HA	1:A:479:PRO:HB3	1.73	0.70
1:A:216:VAL:HG12	1:A:224:SER:OG	1.92	0.69
1:A:367:LYS:HE2	1:A:399:ILE:O	1.91	0.69
1:A:370:LEU:HD21	1:A:374:TYR:HE1	1.55	0.69
1:A:809:SER:CB	1:A:856:ASN:HD21	2.04	0.69
1:A:533:ASN:ND2	1:A:645:PHE:HA	2.07	0.69
1:A:110:THR:HG22	1:A:132:LEU:HD21	1.73	0.69
1:A:815:LYS:HE3	1:A:909:PRO:O	1.93	0.69
1:A:39:PHE:HE1	1:A:505:PRO:HD2	1.56	0.69
1:A:474:VAL:HG21	1:A:495:ILE:HD13	1.72	0.69
1:A:507:GLU:HG3	1:A:537:ARG:HG3	1.73	0.69
1:A:689:PHE:CD1	1:A:691:GLU:HG2	2.28	0.69
1:A:812:LEU:HG	1:A:881:ASN:CG	2.13	0.69
1:A:863:ILE:HG23	1:A:864:PRO:CD	2.23	0.69
1:A:435:ILE:HD12	1:A:486:PHE:CD1	2.27	0.69
1:A:473:GLN:OE1	1:A:504:VAL:HG13	1.93	0.69
1:A:815:LYS:HE2	1:A:909:PRO:O	1.92	0.69
1:A:474:VAL:CG1	1:A:475:VAL:HG23	2.18	0.68
1:A:515:CYS:O	1:A:519:LEU:HD23	1.91	0.68
1:A:595:GLU:CG	1:A:632:VAL:HG13	2.22	0.68
1:A:453:LYS:HE3	1:A:472:VAL:HG21	1.73	0.68
1:A:594:PHE:O	1:A:595:GLU:HG2	1.94	0.68
1:A:72:LYS:HE3	1:A:80:LEU:CD1	2.21	0.68
1:A:62:ILE:HD12	1:A:64:LEU:HD21	1.76	0.68
1:A:73:LEU:CD2	1:A:79:VAL:HA	2.24	0.68
1:A:323:ARG:HG3	1:A:324:THR:H	1.58	0.68

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:506:VAL:HG13	1:A:537:ARG:NH1	2.08	0.68
1:A:773:ILE:HD13	1:A:773:ILE:H	1.59	0.68
1:A:533:ASN:OD1	1:A:645:PHE:HB3	1.89	0.68
1:A:739:ILE:HD12	1:A:748:ARG:HG2	1.76	0.68
1:A:739:ILE:HB	1:A:781:THR:CG2	2.22	0.68
1:A:62:ILE:HD11	1:A:73:LEU:HD12	1.76	0.68
1:A:98:ARG:HE	1:A:107:LEU:CD1	2.07	0.68
1:A:133:TYR:HB2	1:A:136:ILE:HG12	1.75	0.68
1:A:532:HIS:O	1:A:641:THR:HG21	1.94	0.68
1:A:46:PRO:HG3	1:A:69:ARG:HD2	1.75	0.67
1:A:190:GLY:HA2	1:A:233:PHE:CE2	2.29	0.67
1:A:98:ARG:HH21	1:A:107:LEU:HD12	1.60	0.67
1:A:133:TYR:CD2	1:A:136:ILE:HG12	2.28	0.67
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:N	2.10	0.67
1:A:412:LEU:HD13	1:A:412:LEU:H	1.59	0.67
1:A:62:ILE:HG13	1:A:62:ILE:O	1.94	0.67
1:A:662:LEU:CD2	1:A:791:ASP:CG	2.54	0.67
1:A:555:LYS:HG3	1:A:556:GLN:N	2.09	0.67
1:A:239:PHE:CD1	1:A:260:PRO:HD2	2.30	0.67
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:NE	2.09	0.67
1:A:137:CYS:HB2	1:A:213:PHE:CZ	2.30	0.67
1:A:98:ARG:HE	1:A:107:LEU:HD11	1.60	0.67
1:A:620:PRO:CA	1:A:623:ILE:HG13	2.23	0.67
1:A:703:LEU:HD13	1:A:723:ALA:HB2	1.76	0.67
1:A:446:PHE:CZ	1:A:486:PHE:HZ	2.13	0.66
1:A:515:CYS:HB2	1:A:558:VAL:HG23	1.76	0.66
1:A:560:LEU:CD2	1:A:648:THR:HG23	2.20	0.66
1:A:595:GLU:HG2	1:A:632:VAL:CG1	2.25	0.66
1:A:863:ILE:HG13	1:A:864:PRO:CD	2.25	0.66
1:A:42:PHE:HE1	1:A:79:VAL:CG2	2.05	0.66
1:A:662:LEU:HD21	1:A:791:ASP:CB	2.25	0.66
1:A:867:GLY:HA3	1:A:948:TYR:OH	1.94	0.66
1:A:410:ALA:HB1	1:A:411:PRO:HD2	1.78	0.66
1:A:216:VAL:HG12	1:A:224:SER:CB	2.26	0.66
1:A:321:LEU:O	1:A:325:LEU:HG	1.95	0.66
1:A:474:VAL:HG12	1:A:475:VAL:CG2	2.21	0.66
1:A:439:TYR:CZ	1:A:538:LYS:HE3	2.31	0.66
1:A:706:VAL:HG13	1:A:707:ASP:O	1.96	0.66
1:A:797:LYS:N	1:A:797:LYS:HD2	2.11	0.65
1:A:460:ASP:HB3	1:A:463:LYS:HB3	1.77	0.65
1:A:830:GLN:HG2	1:A:831:CYS:N	2.09	0.65

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:325:LEU:CD1	1:A:333:LEU:HD11	2.26	0.65
1:A:892:HIS:NE2	1:A:931:ILE:HB	2.11	0.65
1:A:133:TYR:HB2	1:A:136:ILE:H	1.61	0.65
1:A:296:PRO:HD2	1:A:414:VAL:CG2	2.27	0.65
1:A:432:THR:OG1	1:A:480:VAL:HG23	1.96	0.65
1:A:713:VAL:HG12	1:A:714:GLU:HG3	1.79	0.65
1:A:847:LEU:CD2	1:A:850:ALA:HA	2.27	0.65
1:A:812:LEU:N	1:A:881:ASN:OD1	2.29	0.65
1:A:110:THR:HB	1:A:132:LEU:CD2	2.26	0.65
1:A:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:C	2.17	0.65
1:A:261:GLU:HG2	1:A:264:SER:C	2.17	0.64
1:A:368:ASP:O	1:A:371:GLN:HG2	1.97	0.64
1:A:567:ILE:HD13	1:A:651:VAL:O	1.96	0.64
1:A:53:LEU:HG	1:A:64:LEU:CD1	2.28	0.64
1:A:56:ASP:OD1	1:A:119:ILE:HD12	1.98	0.64
1:A:154:LYS:H	1:A:157:HIS:CD2	2.15	0.64
1:A:181:LYS:HD3	1:A:202:LYS:HA	1.78	0.64
1:A:105:GLU:HB3	1:A:106:PRO:HD2	1.80	0.64
1:A:566:ASN:HA	1:A:651:VAL:CG2	2.25	0.64
1:A:118:LEU:HG	1:A:172:ILE:HG13	1.80	0.64
1:A:309:LEU:HD11	1:A:311:ALA:O	1.98	0.64
1:A:926:ALA:HB1	1:A:947:LEU:CD1	2.27	0.64
1:A:53:LEU:HB2	1:A:496:MET:CE	2.27	0.64
1:A:295:VAL:HA	1:A:414:VAL:HG21	1.80	0.64
1:A:933:VAL:HG23	1:A:934:ALA:N	2.10	0.64
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CD1	2.33	0.64
1:A:782:VAL:HG23	1:A:790:ILE:HB	1.78	0.64
1:A:815:LYS:CE	1:A:910:ALA:CB	2.52	0.64
1:A:265:PRO:HD3	1:A:274:VAL:CG2	2.27	0.64
1:A:405:GLY:O	1:A:406:LEU:HD22	1.98	0.64
1:A:440:LYS:HD2	1:A:538:LYS:HD2	1.79	0.63
1:A:806:MET:HG2	1:A:807:ARG:HG3	1.80	0.63
1:A:320:VAL:O	1:A:323:ARG:HG2	1.98	0.63
1:A:432:THR:HG1	1:A:480:VAL:HG23	1.62	0.63
1:A:675:LYS:HE3	1:A:694:VAL:HG22	1.79	0.63
1:A:706:VAL:HG22	1:A:707:ASP:N	2.12	0.63
1:A:854:CYS:O	1:A:940:PHE:CE1	2.51	0.63
1:A:386:LYS:O	1:A:386:LYS:HG3	1.99	0.63
1:A:474:VAL:CG2	1:A:495:ILE:HD13	2.29	0.63
1:A:372:SER:O	1:A:375:ARG:HB2	1.99	0.63
1:A:446:PHE:CE1	1:A:486:PHE:HZ	2.16	0.63

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:460:ASP:CB	1:A:463:LYS:HB3	2.28	0.63
1:A:186:THR:HG22	1:A:187:ALA:N	2.12	0.63
1:A:480:VAL:HG11	1:A:495:ILE:HD11	1.81	0.63
1:A:530:VAL:HG12	1:A:584:PRO:CG	2.27	0.63
1:A:855:THR:HG23	1:A:856:ASN:OD1	1.99	0.62
1:A:405:GLY:C	1:A:406:LEU:HD22	2.19	0.62
1:A:533:ASN:CB	1:A:645:PHE:HB3	2.29	0.62
1:A:180:ASP:O	1:A:181:LYS:HG2	1.99	0.62
1:A:410:ALA:HB1	1:A:411:PRO:CD	2.30	0.62
1:A:448:GLY:CA	1:A:480:VAL:HG21	2.28	0.62
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:CZ	2.29	0.62
1:A:473:GLN:HG2	1:A:504:VAL:HG22	1.79	0.62
1:A:741:ASN:O	1:A:778:VAL:HG13	1.98	0.62
1:A:555:LYS:O	1:A:582:ASN:CG	2.36	0.62
1:A:204:THR:HG22	1:A:212:MET:SD	2.40	0.62
1:A:473:GLN:HB2	1:A:504:VAL:HG22	1.80	0.62
1:A:492:GLN:HG2	1:A:503:ARG:CG	2.29	0.62
1:A:320:VAL:HG21	1:A:442:HIS:HD2	1.64	0.62
1:A:446:PHE:CZ	1:A:506:VAL:HG23	2.33	0.62
1:A:894:LYS:HD3	1:A:899:GLU:HA	1.80	0.62
1:A:530:VAL:HG21	1:A:584:PRO:HD3	1.82	0.62
1:A:175:TYR:HD2	1:A:179:ASP:HB3	1.63	0.62
1:A:181:LYS:HE2	1:A:202:LYS:HG2	1.80	0.61
1:A:296:PRO:HB2	1:A:417:MET:SD	2.39	0.61
1:A:949:TYR:HE2	1:A:951:MET:CE	2.12	0.61
1:A:333:LEU:CD2	1:A:358:ILE:HG13	2.31	0.61
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:CD	2.20	0.61
1:A:506:VAL:CG1	1:A:537:ARG:HH12	2.14	0.61
1:A:41:THR:HG22	1:A:502:THR:HA	1.81	0.61
1:A:110:THR:HG22	1:A:111:ASN:N	2.14	0.61
1:A:575:LEU:HD22	1:A:575:LEU:N	2.14	0.61
1:A:175:TYR:CD2	1:A:179:ASP:HB3	2.36	0.61
1:A:676:TYR:CD1	1:A:730:GLN:HG3	2.36	0.61
1:A:197:THR:HG21	1:A:228:ILE:HD11	1.82	0.61
1:A:257:THR:C	1:A:258:LEU:HD12	2.21	0.61
1:A:382:LEU:HD23	1:A:385:LEU:HB3	1.81	0.61
1:A:488:LYS:HG3	1:A:489:ASP:N	2.14	0.61
1:A:566:ASN:HB3	1:A:651:VAL:HG21	1.80	0.61
1:A:119:ILE:HD13	1:A:121:TYR:CZ	2.36	0.61
1:A:182:LEU:HG	1:A:184:ILE:HG23	1.82	0.61
1:A:474:VAL:HG22	1:A:495:ILE:CG2	2.29	0.61

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:468:GLN:OE1	1:A:524:PRO:HG3	2.00	0.60
1:A:469:TYR:CE2	1:A:471:THR:HB	2.36	0.60
1:A:712:PRO:HG3	1:A:801:TYR:OH	2.01	0.60
1:A:458:ARG:CD	1:A:524:PRO:CB	2.71	0.60
1:A:662:LEU:HD23	1:A:791:ASP:CB	2.29	0.60
1:A:696:LEU:N	1:A:696:LEU:HD12	2.15	0.60
1:A:46:PRO:HD2	1:A:71:TYR:CZ	2.37	0.60
1:A:469:TYR:HE2	1:A:471:THR:HB	1.65	0.60
1:A:806:MET:CG	1:A:807:ARG:HG3	2.30	0.60
1:A:440:LYS:CD	1:A:538:LYS:HD2	2.31	0.60
1:A:630:HIS:HD2	1:A:632:VAL:CG2	2.15	0.60
1:A:46:PRO:HD2	1:A:71:TYR:CE1	2.35	0.60
1:A:403:PHE:CZ	1:A:406:LEU:HD23	2.37	0.60
1:A:323:ARG:HH21	1:A:463:LYS:HD2	1.67	0.60
1:A:715:VAL:CG2	1:A:717:LYS:HD2	2.30	0.60
1:A:62:ILE:HD13	1:A:77:LEU:CD2	2.32	0.59
1:A:95:TYR:CG	1:A:96:PRO:HD3	2.36	0.59
1:A:313:TYR:CE1	1:A:435:ILE:HG12	2.37	0.59
1:A:314:LEU:HD12	1:A:333:LEU:O	2.01	0.59
1:A:457:ILE:HG12	1:A:467:LEU:HD13	1.84	0.59
1:A:41:THR:HG22	1:A:502:THR:HG23	1.83	0.59
1:A:72:LYS:CD	1:A:80:LEU:HD12	2.30	0.59
1:A:665:VAL:HG12	1:A:697:PRO:HG3	1.83	0.59
1:A:773:ILE:HD13	1:A:773:ILE:N	2.17	0.59
1:A:453:LYS:HG2	1:A:472:VAL:CG2	2.16	0.59
1:A:566:ASN:CA	1:A:651:VAL:HG23	2.28	0.59
1:A:515:CYS:CB	1:A:558:VAL:HG23	2.31	0.59
1:A:665:VAL:HG11	1:A:697:PRO:HD3	1.84	0.59
1:A:847:LEU:HD11	1:A:850:ALA:CA	2.29	0.59
1:A:188:VAL:HG22	1:A:191:LYS:N	2.18	0.59
1:A:387:VAL:HG13	1:A:388:LYS:HG3	1.83	0.59
1:A:387:VAL:HG13	1:A:388:LYS:N	2.18	0.59
1:A:473:GLN:NE2	1:A:473:GLN:H	2.01	0.59
1:A:759:VAL:HG12	1:A:760:GLN:N	2.18	0.59
1:A:51:ASN:HD21	1:A:67:VAL:CG2	2.15	0.59
1:A:99:ILE:HG13	1:A:100:VAL:N	2.16	0.59
1:A:495:ILE:CG2	1:A:502:THR:HB	2.32	0.59
1:A:560:LEU:HD23	1:A:648:THR:CG2	2.25	0.59
1:A:62:ILE:HD12	1:A:501:LEU:CD1	2.33	0.58
1:A:243:TYR:CD2	1:A:257:THR:HG22	2.37	0.58
1:A:350:ASP:HA	1:A:430:ARG:HB2	1.86	0.58

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:931:ILE:HG13	1:A:931:ILE:O	2.02	0.58
1:A:585:GLU:OE1	1:A:585:GLU:HA	2.03	0.58
1:A:873:THR:HB	1:A:917:MET:HE2	1.85	0.58
1:A:110:THR:HB	1:A:132:LEU:HD23	1.85	0.58
1:A:171:VAL:O	1:A:182:LEU:HD12	2.02	0.58
1:A:904:VAL:HG13	1:A:905:ASP:N	2.18	0.58
1:A:814:LEU:HD22	1:A:847:LEU:N	2.18	0.58
1:A:889:ILE:HD12	1:A:907:TYR:CZ	2.38	0.58
1:A:530:VAL:HG11	1:A:584:PRO:HD2	0.59	0.58
1:A:196:PRO:HB3	1:A:225:MET:CE	2.33	0.58
1:A:263:VAL:HG12	1:A:263:VAL:O	2.04	0.58
1:A:699:ASP:O	1:A:725:ASN:CB	2.51	0.58
1:A:40:VAL:HG13	1:A:503:ARG:HB3	1.85	0.58
1:A:578:LEU:HD13	1:A:636:LEU:HD21	1.85	0.58
1:A:569:VAL:HB	1:A:654:ASN:HD22	1.63	0.57
1:A:349:LEU:N	1:A:349:LEU:HD22	2.18	0.57
1:A:506:VAL:CG1	1:A:537:ARG:NH1	2.67	0.57
1:A:832:THR:HG23	1:A:836:HIS:HB2	1.85	0.57
1:A:892:HIS:CE1	1:A:931:ILE:HB	2.40	0.57
1:A:154:LYS:N	1:A:157:HIS:HD2	2.00	0.57
1:A:198:ILE:HB	1:A:226:ILE:CG2	2.34	0.57
1:A:430:ARG:HH21	1:A:432:THR:HG22	1.68	0.57
1:A:254:TYR:CZ	1:A:281:ARG:HD2	2.39	0.57
1:A:321:LEU:HD12	1:A:462:PRO:CG	2.34	0.57
1:A:426:GLU:OE1	1:A:426:GLU:HA	2.04	0.57
1:A:434:VAL:HG22	1:A:435:ILE:N	2.20	0.57
1:A:459:VAL:HG23	1:A:459:VAL:O	2.05	0.57
1:A:506:VAL:C	1:A:507:GLU:N	2.58	0.57
1:A:42:PHE:CE2	1:A:50:PHE:HZ	2.23	0.57
1:A:833:LEU:HB2	1:A:836:HIS:CD2	2.29	0.57
1:A:446:PHE:CE1	1:A:486:PHE:CZ	2.93	0.56
1:A:468:GLN:CG	1:A:524:PRO:CG	2.75	0.56
1:A:380:LEU:HB2	1:A:386:LYS:HE2	1.87	0.56
1:A:703:LEU:HD21	1:A:782:VAL:HG21	1.87	0.56
1:A:45:GLU:HB3	1:A:46:PRO:CD	2.35	0.56
1:A:72:LYS:HD2	1:A:80:LEU:HB2	1.87	0.56
1:A:239:PHE:CA	1:A:260:PRO:HG2	2.30	0.56
1:A:265:PRO:HD3	1:A:274:VAL:HG21	1.87	0.56
1:A:324:THR:CG2	1:A:462:PRO:HA	2.34	0.56
1:A:456:LYS:O	1:A:468:GLN:HG2	2.04	0.56
1:A:474:VAL:CG2	1:A:495:ILE:HG21	2.35	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:501:LEU:HD23	1:A:502:THR:H	1.70	0.56
1:A:710:LEU:HB2	1:A:801:TYR:HE1	1.70	0.56
1:A:885:GLU:HG3	1:A:887:ARG:H	1.70	0.56
1:A:41:THR:CG2	1:A:502:THR:HG23	2.36	0.56
1:A:262:MET:O	1:A:262:MET:HG3	2.05	0.56
1:A:433:SER:HB3	1:A:484:MET:SD	2.45	0.56
1:A:814:LEU:HD22	1:A:847:LEU:H	1.68	0.56
1:A:865:VAL:HG13	1:A:866:THR:N	2.21	0.56
1:A:370:LEU:HD21	1:A:374:TYR:CE1	2.39	0.56
1:A:435:ILE:CG2	1:A:486:PHE:HE1	2.19	0.56
1:A:435:ILE:HD12	1:A:486:PHE:HD1	1.70	0.56
1:A:785:ASN:ND2	1:A:788:PHE:HE2	2.03	0.56
1:A:926:ALA:CB	1:A:947:LEU:HD12	2.35	0.56
1:A:271:LYS:HG3	1:A:272:GLU:N	2.13	0.56
1:A:882:LEU:N	1:A:882:LEU:HD12	2.21	0.56
1:A:665:VAL:CG1	1:A:697:PRO:HD3	2.35	0.56
1:A:305:GLU:O	1:A:340:LYS:HG3	2.06	0.56
1:A:937:ARG:HG2	1:A:938:PRO:HD2	1.85	0.56
1:A:597:LEU:N	1:A:597:LEU:HD22	2.21	0.56
1:A:785:ASN:HD22	1:A:788:PHE:HE2	1.54	0.56
1:A:46:PRO:CG	1:A:69:ARG:HD2	2.36	0.55
1:A:118:LEU:HB3	1:A:127:ILE:CG2	2.36	0.55
1:A:382:LEU:HD23	1:A:385:LEU:CB	2.36	0.55
1:A:53:LEU:HG	1:A:64:LEU:HD13	1.87	0.55
1:A:526:CYS:HB3	1:A:535:CYS:SG	2.46	0.55
1:A:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:O	2.07	0.55
1:A:820:PHE:O	1:A:821:GLU:HB3	2.06	0.55
1:A:845:LEU:HD13	1:A:845:LEU:C	2.26	0.55
1:A:116:MET:HG3	1:A:117:LEU:N	2.21	0.55
1:A:190:GLY:O	1:A:192:PRO:HD3	2.07	0.55
1:A:557:CYS:C	1:A:558:VAL:CA	2.65	0.55
1:A:861:GLU:HG3	1:A:862:ILE:N	2.21	0.55
1:A:448:GLY:HA3	1:A:480:VAL:CG2	2.37	0.55
1:A:710:LEU:HB2	1:A:801:TYR:CE1	2.41	0.55
1:A:676:TYR:CE1	1:A:730:GLN:HG3	2.42	0.55
1:A:412:LEU:HD13	1:A:412:LEU:N	2.21	0.55
1:A:804:GLY:HA2	1:A:806:MET:CE	2.36	0.55
1:A:370:LEU:C	1:A:370:LEU:HD13	2.27	0.55
1:A:474:VAL:HG12	1:A:475:VAL:N	2.21	0.55
1:A:531:LEU:O	1:A:641:THR:OG1	2.16	0.55
1:A:937:ARG:HG3	1:A:938:PRO:HD2	1.89	0.55

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:236:ILE:HG23	1:A:236:ILE:O	2.07	0.55
1:A:563:HIS:HB3	1:A:564:PRO:CD	2.28	0.55
1:A:62:ILE:HG12	1:A:73:LEU:HB2	1.84	0.55
1:A:447:VAL:HG23	1:A:447:VAL:O	2.06	0.55
1:A:168:VAL:HG22	1:A:169:PHE:N	2.22	0.55
1:A:175:TYR:HB3	1:A:179:ASP:HB3	1.89	0.55
1:A:370:LEU:HD13	1:A:370:LEU:O	2.07	0.55
1:A:509:CYS:HB3	1:A:535:CYS:SG	2.47	0.55
1:A:460:ASP:OD2	1:A:463:LYS:HB3	2.06	0.54
1:A:619:VAL:CB	1:A:620:PRO:HD3	2.36	0.54
1:A:780:LEU:HD12	1:A:780:LEU:C	2.27	0.54
1:A:709:ILE:O	1:A:799:TYR:HD1	1.90	0.54
1:A:91:ASN:CG	1:A:92:PRO:HD2	2.27	0.54
1:A:226:ILE:HG23	1:A:226:ILE:O	2.06	0.54
1:A:242:TYR:CD1	1:A:345:LYS:HE2	2.41	0.54
1:A:412:LEU:C	1:A:412:LEU:HD22	2.28	0.54
1:A:110:THR:HG22	1:A:111:ASN:H	1.72	0.54
1:A:151:PRO:O	1:A:157:HIS:HB3	2.07	0.54
1:A:280:VAL:HG12	1:A:281:ARG:N	2.22	0.54
1:A:495:ILE:O	1:A:495:ILE:HG23	2.08	0.54
1:A:704:LEU:HD11	1:A:724:LYS:CE	2.36	0.54
1:A:713:VAL:HG13	1:A:766:TYR:O	2.06	0.54
1:A:51:ASN:ND2	1:A:67:VAL:HG23	2.20	0.54
1:A:63:TYR:CE2	1:A:72:LYS:HG2	2.43	0.54
1:A:930:GLU:OE2	1:A:941:MET:HG3	2.07	0.54
1:A:921:LYS:N	1:A:922:PRO:HD2	2.23	0.54
1:A:947:LEU:H	1:A:947:LEU:CD2	2.21	0.54
1:A:370:LEU:HD11	1:A:399:ILE:HD12	1.88	0.53
1:A:630:HIS:HD2	1:A:632:VAL:HG23	1.73	0.53
1:A:135:GLY:O	1:A:159:LEU:HD13	2.08	0.53
1:A:359:LEU:HA	1:A:362:ILE:HG12	1.89	0.53
1:A:501:LEU:HD23	1:A:502:THR:N	2.22	0.53
1:A:662:LEU:HD21	1:A:791:ASP:HB2	1.88	0.53
1:A:679:VAL:HG12	1:A:680:CYS:N	2.23	0.53
1:A:429:ASP:OD1	1:A:450:LYS:HB3	2.08	0.53
1:A:42:PHE:HE2	1:A:50:PHE:HZ	1.54	0.53
1:A:46:PRO:CG	1:A:69:ARG:HG3	2.27	0.53
1:A:72:LYS:HD2	1:A:80:LEU:HD12	1.90	0.53
1:A:426:GLU:HG2	1:A:429:ASP:O	2.08	0.53
1:A:797:LYS:HD2	1:A:797:LYS:H	1.72	0.53
1:A:807:ARG:HD2	1:A:813:CYS:HA	1.90	0.53

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:NH2	2.24	0.53
1:A:321:LEU:CD2	1:A:325:LEU:HD11	2.39	0.53
1:A:875:VAL:HG22	1:A:915:CYS:O	2.09	0.53
1:A:882:LEU:HD13	1:A:910:ALA:O	2.09	0.53
1:A:119:ILE:HG23	1:A:119:ILE:O	2.08	0.53
1:A:185:ALA:HB3	1:A:243:TYR:CG	2.44	0.53
1:A:947:LEU:HD23	1:A:947:LEU:O	2.09	0.53
1:A:39:PHE:CD1	1:A:505:PRO:HD2	2.44	0.53
1:A:371:GLN:O	1:A:375:ARG:HG3	2.09	0.53
1:A:716:ILE:HG12	1:A:763:ASN:HB3	1.90	0.53
1:A:924:GLN:O	1:A:925:HIS:HB2	2.09	0.53
1:A:806:MET:HG2	1:A:807:ARG:CG	2.39	0.53
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:HA	1.91	0.53
1:A:42:PHE:HZ	1:A:45:GLU:CB	2.22	0.53
1:A:716:ILE:HG23	1:A:716:ILE:O	2.09	0.53
1:A:739:ILE:HB	1:A:781:THR:HG23	1.90	0.53
1:A:783:VAL:HG12	1:A:784:TRP:N	2.24	0.53
1:A:825:CYS:HB3	1:A:828:PRO:HG2	1.89	0.53
1:A:553:GLU:HG3	1:A:554:MET:N	2.24	0.52
1:A:739:ILE:HB	1:A:781:THR:HG22	1.90	0.52
1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:N	2.24	0.52
1:A:578:LEU:HB2	1:A:609:ILE:HB	1.91	0.52
1:A:949:TYR:HE2	1:A:951:MET:HE2	1.74	0.52
1:A:589:GLY:HA3	1:A:639:LYS:HG3	1.90	0.52
1:A:827:SER:HB2	1:A:828:PRO:HD3	1.91	0.52
1:A:925:HIS:O	1:A:950:PHE:HD2	1.91	0.52
1:A:471:THR:CG2	1:A:473:GLN:HE22	2.20	0.52
1:A:308:LEU:O	1:A:338:PHE:HA	2.09	0.52
1:A:458:ARG:HG3	1:A:524:PRO:HG3	1.90	0.52
1:A:623:ILE:HD12	1:A:623:ILE:C	2.29	0.52
1:A:396:LEU:HD13	1:A:396:LEU:C	2.30	0.52
1:A:472:VAL:HG12	1:A:472:VAL:O	2.09	0.52
1:A:712:PRO:O	1:A:715:VAL:HG22	2.09	0.52
1:A:181:LYS:CE	1:A:202:LYS:HG2	2.39	0.52
1:A:356:ILE:HG22	1:A:421:ILE:O	2.09	0.52
1:A:580:THR:HG21	1:A:583:VAL:HG11	1.91	0.52
1:A:458:ARG:HD3	1:A:524:PRO:HB3	1.90	0.52
1:A:933:VAL:HG22	1:A:940:PHE:HB3	1.91	0.52
1:A:93:LYS:HD3	1:A:105:GLU:OE2	2.10	0.52
1:A:127:ILE:HG23	1:A:127:ILE:O	2.09	0.52
1:A:228:ILE:HG22	1:A:233:PHE:CE1	2.45	0.52

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:281:ARG:O	1:A:282:LEU:HD23	2.09	0.52
1:A:380:LEU:CD1	1:A:386:LYS:HE3	2.37	0.52
1:A:385:LEU:C	1:A:385:LEU:HD13	2.29	0.52
1:A:716:ILE:CG1	1:A:763:ASN:HB3	2.40	0.52
1:A:805:ALA:H	1:A:806:MET:CE	2.22	0.52
1:A:198:ILE:HB	1:A:226:ILE:HG22	1.91	0.52
1:A:712:PRO:HG3	1:A:801:TYR:CZ	2.45	0.52
1:A:64:LEU:HD11	1:A:501:LEU:HD12	1.92	0.51
1:A:473:GLN:HB2	1:A:504:VAL:CG2	2.40	0.51
1:A:790:ILE:HD12	1:A:790:ILE:N	2.25	0.51
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CG	2.94	0.51
1:A:509:CYS:HB2	1:A:536:THR:HA	1.91	0.51
1:A:53:LEU:HD23	1:A:53:LEU:C	2.31	0.51
1:A:321:LEU:CG	1:A:325:LEU:HD11	2.40	0.51
1:A:560:LEU:HG	1:A:648:THR:HG21	1.92	0.51
1:A:575:LEU:H	1:A:575:LEU:CD2	2.22	0.51
1:A:930:GLU:HG3	1:A:941:MET:SD	2.51	0.51
1:A:59:THR:HB	1:A:61:HIS:CE1	2.45	0.51
1:A:827:SER:HB2	1:A:828:PRO:CD	2.40	0.51
1:A:895:VAL:O	1:A:896:ALA:HB3	2.11	0.51
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CD2	2.94	0.51
1:A:567:ILE:CD1	1:A:650:PHE:CE2	2.94	0.51
1:A:798:VAL:O	1:A:798:VAL:HG13	2.10	0.51
1:A:823:GLY:HA3	1:A:844:TRP:CZ2	2.46	0.51
1:A:53:LEU:HG	1:A:64:LEU:HD11	1.92	0.51
1:A:204:THR:HG23	1:A:206:ASN:O	2.11	0.51
1:A:216:VAL:HG13	1:A:217:PHE:N	2.26	0.51
1:A:278:LYS:HG2	1:A:296:PRO:CA	2.38	0.51
1:A:519:LEU:N	1:A:519:LEU:HD22	2.26	0.51
1:A:530:VAL:HG12	1:A:584:PRO:HG2	1.93	0.51
1:A:541:CYS:SG	1:A:550:PHE:HD2	2.33	0.51
1:A:889:ILE:CD1	1:A:907:TYR:CE1	2.94	0.51
1:A:133:TYR:O	1:A:134:GLN:HB2	2.11	0.51
1:A:261:GLU:HG2	1:A:265:PRO:N	2.25	0.51
1:A:593:THR:HG23	1:A:593:THR:O	2.10	0.51
1:A:76:ASP:O	1:A:77:LEU:HB2	2.11	0.51
1:A:322:GLY:CA	1:A:327:VAL:HG22	2.40	0.51
1:A:370:LEU:HD13	1:A:374:TYR:CD1	2.46	0.51
1:A:426:GLU:HG3	1:A:429:ASP:H	1.76	0.51
1:A:444:LEU:HD12	1:A:446:PHE:CZ	2.44	0.51
1:A:853:LYS:H	1:A:853:LYS:HD2	1.76	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:171:VAL:HG12	1:A:172:ILE:N	2.26	0.51
1:A:358:ILE:CG2	1:A:361:GLN:HB2	2.41	0.51
1:A:531:LEU:HD23	1:A:584:PRO:HG2	1.93	0.51
1:A:695:LYS:CB	1:A:696:LEU:HD12	2.41	0.51
1:A:785:ASN:HB3	1:A:788:PHE:CE2	2.46	0.51
1:A:81:VAL:HG12	1:A:82:THR:N	2.26	0.50
1:A:184:ILE:HD12	1:A:184:ILE:C	2.31	0.50
1:A:703:LEU:N	1:A:703:LEU:HD22	2.26	0.50
1:A:892:HIS:HD2	1:A:893:VAL:N	2.10	0.50
1:A:228:ILE:CG2	1:A:233:PHE:CE1	2.94	0.50
1:A:491:GLU:O	1:A:506:VAL:HG12	2.11	0.50
1:A:566:ASN:HB3	1:A:651:VAL:CG2	2.40	0.50
1:A:567:ILE:HD13	1:A:567:ILE:N	2.20	0.50
1:A:689:PHE:CE1	1:A:691:GLU:CG	2.94	0.50
1:A:507:GLU:HG3	1:A:537:ARG:CG	2.40	0.50
1:A:533:ASN:HD21	1:A:645:PHE:HA	1.68	0.50
1:A:863:ILE:CG1	1:A:864:PRO:HD3	2.39	0.50
1:A:727:PRO:O	1:A:729:PRO:HD3	2.11	0.50
1:A:370:LEU:HD11	1:A:374:TYR:CE1	2.46	0.50
1:A:569:VAL:CB	1:A:654:ASN:HD22	2.21	0.50
1:A:54:VAL:HG22	1:A:55:VAL:N	2.25	0.50
1:A:119:ILE:CG2	1:A:121:TYR:CE1	2.95	0.50
1:A:284:LYS:HD3	1:A:284:LYS:C	2.31	0.50
1:A:296:PRO:HD2	1:A:414:VAL:HG22	1.92	0.50
1:A:418:VAL:O	1:A:418:VAL:HG13	2.11	0.50
1:A:473:GLN:HB3	1:A:502:THR:HG21	1.94	0.50
1:A:699:ASP:C	1:A:725:ASN:OD1	2.50	0.50
1:A:412:LEU:HD22	1:A:412:LEU:O	2.11	0.50
1:A:673:TRP:HB3	1:A:694:VAL:HB	1.94	0.50
1:A:473:GLN:CD	1:A:504:VAL:HG13	2.31	0.50
1:A:506:VAL:HG11	1:A:537:ARG:HH12	1.77	0.50
1:A:541:CYS:CB	1:A:544:SER:HB3	2.42	0.50
1:A:713:VAL:HG13	1:A:767:SER:HA	1.94	0.50
1:A:782:VAL:CG2	1:A:790:ILE:HB	2.41	0.50
1:A:792:ASN:HD21	1:A:796:ASN:N	2.10	0.50
1:A:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:HB3	1.93	0.50
1:A:278:LYS:CE	1:A:296:PRO:HG3	2.41	0.50
1:A:295:VAL:HG23	1:A:295:VAL:O	2.12	0.50
1:A:370:LEU:CD1	1:A:374:TYR:CD1	2.95	0.50
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:CA	2.42	0.50
1:A:320:VAL:HG23	1:A:441:ASN:HB3	1.94	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:333:LEU:HD21	1:A:358:ILE:HG13	1.94	0.49
1:A:882:LEU:HD23	1:A:913:ILE:HD11	1.94	0.49
1:A:39:PHE:CD2	1:A:473:GLN:CG	2.95	0.49
1:A:110:THR:CB	1:A:132:LEU:HD21	2.42	0.49
1:A:400:ASP:HB2	1:A:402:ASN:OD1	2.11	0.49
1:A:841:GLU:HG3	1:A:842:SER:H	1.77	0.49
1:A:653:TYR:HE2	1:A:655:CYS:SG	2.35	0.49
1:A:59:THR:HB	1:A:61:HIS:ND1	2.27	0.49
1:A:265:PRO:CD	1:A:274:VAL:HG22	2.42	0.49
1:A:312:ALA:HB1	1:A:334:LEU:HD11	1.94	0.49
1:A:557:CYS:O	1:A:581:TYR:O	2.30	0.49
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CE2	2.47	0.49
1:A:457:ILE:HG12	1:A:467:LEU:CD1	2.42	0.49
1:A:468:GLN:CD	1:A:524:PRO:CG	2.78	0.49
1:A:623:ILE:HD12	1:A:624:THR:CA	2.42	0.49
1:A:40:VAL:HG21	1:A:76:ASP:O	2.12	0.49
1:A:254:TYR:CE2	1:A:281:ARG:HD2	2.48	0.49
1:A:265:PRO:HD3	1:A:274:VAL:HG22	1.92	0.49
1:A:433:SER:HB3	1:A:484:MET:HE3	1.95	0.49
1:A:681:THR:HG21	1:A:686:THR:HG21	1.94	0.49
1:A:790:ILE:HD12	1:A:790:ILE:H	1.77	0.49
1:A:856:ASN:N	1:A:857:PRO:HD3	2.27	0.49
1:A:863:ILE:HG13	1:A:864:PRO:N	2.28	0.49
1:A:182:LEU:HD21	1:A:184:ILE:HG21	1.94	0.49
1:A:234:THR:HG23	1:A:235:VAL:N	2.26	0.49
1:A:300:GLU:HG2	1:A:305:GLU:HA	1.93	0.49
1:A:736:TYR:CD2	1:A:784:TRP:HB3	2.47	0.49
1:A:894:LYS:CD	1:A:899:GLU:HA	2.41	0.49
1:A:133:TYR:HB3	1:A:136:ILE:HG23	1.94	0.49
1:A:190:GLY:C	1:A:192:PRO:HD3	2.33	0.49
1:A:475:VAL:HG22	1:A:500:GLN:OE1	2.13	0.49
1:A:590:VAL:HG12	1:A:591:ASN:N	2.27	0.49
1:A:781:THR:HG23	1:A:781:THR:O	2.12	0.49
1:A:810:CYS:SG	1:A:855:THR:CG2	2.72	0.49
1:A:132:LEU:HD11	1:A:163:ASN:HD22	1.77	0.49
1:A:361:GLN:HE21	1:A:365:ARG:HH21	1.61	0.49
1:A:597:LEU:CD2	1:A:597:LEU:H	2.25	0.49
1:A:809:SER:HB3	1:A:856:ASN:ND2	2.19	0.49
1:A:190:GLY:HA2	1:A:233:PHE:HE2	1.73	0.48
1:A:783:VAL:HG13	1:A:788:PHE:O	2.13	0.48
1:A:64:LEU:HB2	1:A:71:TYR:HD2	1.77	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:541:CYS:SG	1:A:550:PHE:CD2	3.06	0.48
1:A:603:LEU:HD23	1:A:603:LEU:C	2.33	0.48
1:A:716:ILE:HD11	1:A:763:ASN:HB3	1.95	0.48
1:A:782:VAL:HG23	1:A:782:VAL:O	2.12	0.48
1:A:807:ARG:HB3	1:A:812:LEU:HB2	1.95	0.48
1:A:99:ILE:HD11	1:A:152:PHE:CB	2.41	0.48
1:A:185:ALA:HA	1:A:197:THR:O	2.12	0.48
1:A:790:ILE:HG22	1:A:791:ASP:N	2.28	0.48
1:A:144:ASP:O	1:A:145:LEU:HB2	2.13	0.48
1:A:258:LEU:HD12	1:A:258:LEU:N	2.28	0.48
1:A:597:LEU:HD22	1:A:597:LEU:H	1.77	0.48
1:A:710:LEU:HD13	1:A:801:TYR:OH	2.13	0.48
1:A:715:VAL:O	1:A:715:VAL:HG23	2.13	0.48
1:A:935:VAL:HG12	1:A:936:CYS:N	2.28	0.48
1:A:435:ILE:HG21	1:A:486:PHE:CE1	2.48	0.48
1:A:626:ASN:ND2	1:A:630:HIS:HB2	2.29	0.48
1:A:662:LEU:HD22	1:A:791:ASP:OD2	2.00	0.48
1:A:949:TYR:CE2	1:A:951:MET:CE	2.95	0.48
1:A:265:PRO:HB2	1:A:266:PRO:HD2	1.94	0.48
1:A:473:GLN:CD	1:A:504:VAL:HG22	2.34	0.48
1:A:907:TYR:CZ	1:A:909:PRO:HA	2.48	0.48
1:A:82:THR:HG23	1:A:82:THR:O	2.14	0.48
1:A:453:LYS:HE3	1:A:472:VAL:HG22	1.94	0.48
1:A:527:GLY:HA3	1:A:550:PHE:CE1	2.45	0.48
1:A:239:PHE:CD1	1:A:260:PRO:HG2	2.48	0.48
1:A:374:TYR:CE2	1:A:397:LEU:HD22	2.48	0.48
1:A:862:ILE:CG2	1:A:877:ILE:HG23	2.44	0.48
1:A:175:TYR:CG	1:A:176:SER:N	2.82	0.47
1:A:372:SER:HA	1:A:375:ARG:NE	2.30	0.47
1:A:403:PHE:CE1	1:A:406:LEU:CD2	2.94	0.47
1:A:556:GLN:HA	1:A:582:ASN:HD22	1.59	0.47
1:A:702:GLN:O	1:A:723:ALA:HB1	2.14	0.47
1:A:745:ILE:O	1:A:745:ILE:HG23	2.14	0.47
1:A:77:LEU:HD22	1:A:501:LEU:HD13	1.96	0.47
1:A:154:LYS:HB2	1:A:157:HIS:HD2	1.70	0.47
1:A:740:LEU:HD12	1:A:740:LEU:N	2.29	0.47
1:A:814:LEU:HD11	1:A:845:LEU:CD1	2.44	0.47
1:A:68:ASN:ND2	1:A:87:PRO:HD3	2.29	0.47
1:A:118:LEU:HD13	1:A:118:LEU:C	2.34	0.47
1:A:160:SER:OG	1:A:162:VAL:HG23	2.14	0.47
1:A:440:LYS:HD3	1:A:538:LYS:CD	2.44	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:567:ILE:HD12	1:A:650:PHE:CE2	2.49	0.47
1:A:728:GLN:HA	1:A:753:ARG:NH2	2.30	0.47
1:A:892:HIS:CD2	1:A:893:VAL:CG2	2.98	0.47
1:A:430:ARG:HG2	1:A:431:MET:O	2.14	0.47
1:A:439:TYR:HE2	1:A:538:LYS:HZ1	0.83	0.47
1:A:843:ARG:HB2	1:A:843:ARG:NH1	2.30	0.47
1:A:68:ASN:HB3	1:A:86:GLY:HA3	1.97	0.47
1:A:72:LYS:O	1:A:80:LEU:HB2	2.15	0.47
1:A:133:TYR:CG	1:A:136:ILE:CG1	2.94	0.47
1:A:239:PHE:HA	1:A:260:PRO:CG	2.32	0.47
1:A:253:VAL:HG23	1:A:253:VAL:O	2.15	0.47
1:A:530:VAL:CB	1:A:584:PRO:HD3	2.45	0.47
1:A:262:MET:O	1:A:263:VAL:HB	2.15	0.47
1:A:889:ILE:O	1:A:892:HIS:HB3	2.13	0.47
1:A:244:VAL:HB	1:A:309:LEU:HD23	1.97	0.47
1:A:440:LYS:O	1:A:440:LYS:HG2	2.14	0.47
1:A:480:VAL:HB	1:A:484:MET:HE1	1.95	0.47
1:A:561:THR:HG22	1:A:562:VAL:N	2.29	0.47
1:A:124:ASN:OD1	1:A:142:LEU:HB3	2.14	0.47
1:A:252:PHE:CD1	1:A:283:CYS:HA	2.50	0.47
1:A:296:PRO:CD	1:A:414:VAL:HG22	2.45	0.47
1:A:704:LEU:H	1:A:723:ALA:HA	1.79	0.47
1:A:947:LEU:H	1:A:947:LEU:HD23	1.79	0.47
1:A:527:GLY:HA3	1:A:550:PHE:HZ	1.72	0.46
1:A:805:ALA:N	1:A:806:MET:HE3	2.28	0.46
1:A:256:LEU:HD22	1:A:256:LEU:N	2.31	0.46
1:A:333:LEU:CD2	1:A:358:ILE:HA	2.45	0.46
1:A:343:LYS:HG2	1:A:344:ARG:HG2	1.97	0.46
1:A:495:ILE:HG22	1:A:502:THR:HB	1.96	0.46
1:A:783:VAL:HG11	1:A:786:GLY:O	2.15	0.46
1:A:812:LEU:CG	1:A:881:ASN:OD1	2.47	0.46
1:A:902:PRO:HA	1:A:915:CYS:HA	1.97	0.46
1:A:380:LEU:HD12	1:A:390:ILE:CG2	2.45	0.46
1:A:873:THR:HG22	1:A:874:LYS:N	2.31	0.46
1:A:62:ILE:HD11	1:A:73:LEU:CD1	2.45	0.46
1:A:245:TYR:CE2	1:A:247:PHE:HD2	2.34	0.46
1:A:46:PRO:HD2	1:A:71:TYR:OH	2.16	0.46
1:A:695:LYS:HB2	1:A:696:LEU:HD12	1.97	0.46
1:A:265:PRO:CB	1:A:266:PRO:HD2	2.45	0.46
1:A:492:GLN:HG2	1:A:503:ARG:HG2	1.98	0.46
1:A:676:TYR:CD1	1:A:730:GLN:CG	2.98	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:45:GLU:HB3	1:A:46:PRO:HD3	1.97	0.46
1:A:113:VAL:HG11	1:A:165:SER:HB3	1.96	0.46
1:A:226:ILE:HD11	1:A:385:LEU:CD2	2.46	0.46
1:A:64:LEU:HD12	1:A:496:MET:HE3	1.98	0.46
1:A:515:CYS:HB3	1:A:558:VAL:N	2.31	0.46
1:A:530:VAL:CG1	1:A:584:PRO:HG2	2.38	0.46
1:A:543:ARG:HH11	1:A:549:ARG:HH22	1.62	0.46
1:A:566:ASN:CB	1:A:651:VAL:CG2	2.95	0.46
1:A:569:VAL:CG1	1:A:620:PRO:HG3	2.45	0.46
1:A:695:LYS:C	1:A:696:LEU:HD12	2.37	0.46
1:A:264:SER:HA	1:A:265:PRO:HA	1.53	0.45
1:A:286:ASP:OD1	1:A:288:ALA:HB3	2.16	0.45
1:A:469:TYR:CG	1:A:470:GLU:N	2.84	0.45
1:A:503:ARG:O	1:A:505:PRO:HD3	2.15	0.45
1:A:62:ILE:CD1	1:A:77:LEU:CD2	2.94	0.45
1:A:361:GLN:O	1:A:365:ARG:HG2	2.15	0.45
1:A:563:HIS:CB	1:A:577:VAL:HG12	2.46	0.45
1:A:358:ILE:CG2	1:A:361:GLN:CB	2.95	0.45
1:A:624:THR:HG23	1:A:624:THR:O	2.15	0.45
1:A:863:ILE:HG21	1:A:876:THR:HB	1.97	0.45
1:A:98:ARG:NH2	1:A:107:LEU:HD12	2.29	0.45
1:A:435:ILE:HG23	1:A:486:PHE:HE1	1.81	0.45
1:A:586:LEU:HD13	1:A:590:VAL:HG21	1.99	0.45
1:A:663:SER:O	1:A:667:SER:HB2	2.17	0.45
1:A:828:PRO:HG3	1:A:837:CYS:SG	2.57	0.45
1:A:110:THR:CB	1:A:132:LEU:CD2	2.95	0.45
1:A:159:LEU:HG	1:A:201:ARG:HH12	1.81	0.45
1:A:947:LEU:HD23	1:A:947:LEU:N	2.30	0.45
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:HE	1.80	0.45
1:A:40:VAL:HG13	1:A:40:VAL:O	2.17	0.45
1:A:182:LEU:HB2	1:A:203:LEU:HD11	1.99	0.45
1:A:192:PRO:HB3	1:A:233:PHE:CZ	2.51	0.45
1:A:247:PHE:CD1	1:A:314:LEU:HD22	2.52	0.45
1:A:305:GLU:HG2	1:A:307:ARG:HG2	1.99	0.45
1:A:442:HIS:CD2	1:A:458:ARG:HH21	2.35	0.45
1:A:671:CYS:HB3	1:A:680:CYS:SG	2.57	0.45
1:A:892:HIS:CD2	1:A:893:VAL:HG22	2.51	0.45
1:A:91:ASN:OD1	1:A:92:PRO:HD2	2.16	0.45
1:A:118:LEU:HB3	1:A:127:ILE:HG22	1.98	0.45
1:A:151:PRO:HB2	1:A:157:HIS:CE1	2.52	0.45
1:A:539:GLU:HG3	1:A:540:ARG:N	2.31	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:541:CYS:HB3	1:A:544:SER:HB3	1.99	0.45
1:A:743:GLN:HG2	1:A:744:GLY:N	2.31	0.45
1:A:815:LYS:CD	1:A:910:ALA:CB	2.63	0.45
1:A:437:TYR:CE2	1:A:439:TYR:HB2	2.51	0.45
1:A:511:GLN:HG3	1:A:512:TYR:CD2	2.51	0.45
1:A:653:TYR:CE2	1:A:655:CYS:SG	3.10	0.45
1:A:58:ARG:NH1	1:A:58:ARG:HG2	2.31	0.45
1:A:116:MET:SD	1:A:169:PHE:HA	2.57	0.45
1:A:245:TYR:CD2	1:A:312:ALA:HB3	2.51	0.45
1:A:288:ALA:O	1:A:289:PHE:HB2	2.17	0.45
1:A:306:TYR:HE1	1:A:351:GLU:HG2	1.82	0.45
1:A:892:HIS:CD2	1:A:893:VAL:N	2.85	0.45
1:A:118:LEU:O	1:A:127:ILE:HG22	2.17	0.45
1:A:370:LEU:CD2	1:A:374:TYR:HE1	2.28	0.45
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:NE2	2.32	0.45
1:A:574:VAL:HG22	1:A:613:SER:OG	2.17	0.45
1:A:594:PHE:CZ	1:A:614:PRO:HD3	2.51	0.45
1:A:295:VAL:CA	1:A:414:VAL:HG21	2.45	0.44
1:A:435:ILE:HG21	1:A:486:PHE:HE1	1.81	0.44
1:A:564:PRO:HB2	1:A:576:LEU:CD2	2.47	0.44
1:A:42:PHE:CZ	1:A:45:GLU:CB	2.95	0.44
1:A:62:ILE:CD1	1:A:73:LEU:HB2	2.47	0.44
1:A:322:GLY:HA2	1:A:327:VAL:HG22	1.99	0.44
1:A:805:ALA:H	1:A:806:MET:HE3	1.80	0.44
1:A:949:TYR:CE2	1:A:951:MET:HE1	2.52	0.44
1:A:119:ILE:HG23	1:A:121:TYR:CE1	2.53	0.44
1:A:162:VAL:HG21	1:A:187:ALA:HB3	1.99	0.44
1:A:189:ASP:HB3	1:A:191:LYS:HD3	1.99	0.44
1:A:327:VAL:HG11	1:A:358:ILE:HD11	1.97	0.44
1:A:567:ILE:HD11	1:A:652:PHE:CD1	2.53	0.44
1:A:689:PHE:CE1	1:A:691:GLU:HG2	2.50	0.44
1:A:278:LYS:HD3	1:A:294:GLU:HG2	1.98	0.44
1:A:301:ARG:CD	1:A:425:THR:HG21	2.26	0.44
1:A:492:GLN:HG2	1:A:503:ARG:HD2	1.98	0.44
1:A:531:LEU:CD2	1:A:584:PRO:HG2	2.47	0.44
1:A:53:LEU:HD12	1:A:501:LEU:HG	1.99	0.44
1:A:274:VAL:HG23	1:A:275:TYR:N	2.30	0.44
1:A:281:ARG:NH1	1:A:366:ILE:HG21	2.33	0.44
1:A:296:PRO:HB2	1:A:417:MET:CE	2.48	0.44
1:A:446:PHE:CB	1:A:454:LEU:HD11	2.43	0.44
1:A:530:VAL:CG2	1:A:584:PRO:HD3	2.46	0.44

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:217:PHE:CE2	1:A:219:ASP:HB2	2.53	0.44
1:A:635:GLN:HB3	1:A:644:THR:HB	1.99	0.44
1:A:179:ASP:O	1:A:180:ASP:HB3	2.17	0.44
1:A:471:THR:HG23	1:A:473:GLN:NE2	2.28	0.44
1:A:703:LEU:CD2	1:A:790:ILE:CG2	2.95	0.44
1:A:778:VAL:O	1:A:797:LYS:HB2	2.17	0.44
1:A:889:ILE:HA	1:A:892:HIS:ND1	2.33	0.44
1:A:890:ALA:O	1:A:891:SER:HB2	2.17	0.44
1:A:53:LEU:HD11	1:A:501:LEU:HD11	2.00	0.44
1:A:173:VAL:O	1:A:173:VAL:HG23	2.18	0.44
1:A:252:PHE:HD1	1:A:283:CYS:HA	1.82	0.44
1:A:262:MET:SD	1:A:383:ALA:HB3	2.58	0.44
1:A:863:ILE:HG22	1:A:876:THR:CB	2.35	0.44
1:A:62:ILE:CD1	1:A:73:LEU:HD12	2.45	0.43
1:A:256:LEU:CB	1:A:309:LEU:CD2	2.94	0.43
1:A:291:SER:HB3	1:A:404:CYS:O	2.18	0.43
1:A:358:ILE:HG23	1:A:358:ILE:O	2.18	0.43
1:A:370:LEU:HD12	1:A:399:ILE:HG23	2.00	0.43
1:A:458:ARG:HB2	1:A:468:GLN:HE22	1.83	0.43
1:A:567:ILE:HD11	1:A:650:PHE:CE2	2.53	0.43
1:A:759:VAL:CG1	1:A:760:GLN:N	2.81	0.43
1:A:889:ILE:CD1	1:A:907:TYR:CZ	3.01	0.43
1:A:123:GLU:HB2	1:A:125:ARG:HG2	2.00	0.43
1:A:542:GLU:HG2	1:A:543:ARG:HG3	2.00	0.43
1:A:620:PRO:O	1:A:623:ILE:HG13	2.18	0.43
1:A:711:VAL:HG21	1:A:798:VAL:CG2	2.48	0.43
1:A:295:VAL:CB	1:A:414:VAL:HG21	2.48	0.43
1:A:336:THR:HG1	1:A:338:PHE:HE2	1.62	0.43
1:A:528:TRP:HZ2	1:A:533:ASN:OD1	2.01	0.43
1:A:743:GLN:CD	1:A:743:GLN:H	2.22	0.43
1:A:839:ALA:HB1	1:A:841:GLU:O	2.18	0.43
1:A:841:GLU:HG3	1:A:842:SER:N	2.32	0.43
1:A:862:ILE:HG22	1:A:877:ILE:CA	2.32	0.43
1:A:90:ASP:C	1:A:107:LEU:HD22	2.39	0.43
1:A:324:THR:O	1:A:324:THR:HG22	2.18	0.43
1:A:444:LEU:HD12	1:A:446:PHE:CD1	2.51	0.43
1:A:555:LYS:NZ	1:A:556:GLN:HG2	2.34	0.43
1:A:557:CYS:C	1:A:582:ASN:HB3	2.35	0.43
1:A:53:LEU:CG	1:A:64:LEU:CD1	2.96	0.43
1:A:464:GLY:O	1:A:465:ASN:HB3	2.17	0.43
1:A:597:LEU:HG	1:A:622:ILE:HG12	1.99	0.43

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:764:THR:HG23	1:A:766:TYR:CZ	2.54	0.43
1:A:832:THR:CG2	1:A:836:HIS:CB	2.95	0.43
1:A:832:THR:HG21	1:A:836:HIS:CB	2.48	0.43
1:A:98:ARG:HE	1:A:107:LEU:HD12	1.83	0.43
1:A:117:LEU:HG	1:A:126:LEU:HD11	2.01	0.43
1:A:574:VAL:CG2	1:A:613:SER:HB3	2.48	0.43
1:A:590:VAL:CG1	1:A:591:ASN:N	2.82	0.43
1:A:699:ASP:O	1:A:725:ASN:HB3	2.18	0.43
1:A:865:VAL:CG1	1:A:866:THR:N	2.82	0.43
1:A:55:VAL:HG22	1:A:62:ILE:HG22	2.00	0.43
1:A:713:VAL:O	1:A:714:GLU:HB2	2.18	0.43
1:A:117:LEU:HD11	1:A:126:LEU:CD2	2.31	0.43
1:A:332:ASP:O	1:A:333:LEU:HD23	2.18	0.43
1:A:62:ILE:CD1	1:A:501:LEU:CD1	2.95	0.43
1:A:679:VAL:CG1	1:A:680:CYS:N	2.82	0.43
1:A:764:THR:CG2	1:A:766:TYR:CZ	3.01	0.43
1:A:224:SER:HA	1:A:289:PHE:CD1	2.54	0.43
1:A:460:ASP:CG	1:A:463:LYS:HB3	2.39	0.43
1:A:567:ILE:CD1	1:A:567:ILE:N	2.82	0.43
1:A:716:ILE:CD1	1:A:763:ASN:HB3	2.48	0.43
1:A:119:ILE:HG21	1:A:121:TYR:CE1	2.54	0.42
1:A:128:ALA:O	1:A:138:LYS:HG2	2.19	0.42
1:A:178:PHE:HD1	1:A:178:PHE:O	2.02	0.42
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CD1	3.00	0.42
1:A:380:LEU:CB	1:A:386:LYS:HE3	2.43	0.42
1:A:162:VAL:HG12	1:A:164:GLU:H	1.84	0.42
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CE2	3.02	0.42
1:A:412:LEU:N	1:A:412:LEU:CD1	2.82	0.42
1:A:435:ILE:CD1	1:A:486:PHE:HD1	2.31	0.42
1:A:589:GLY:C	1:A:639:LYS:HG2	2.39	0.42
1:A:181:LYS:HZ2	1:A:216:VAL:HG23	1.81	0.42
1:A:501:LEU:CD2	1:A:502:THR:N	2.82	0.42
1:A:333:LEU:HD23	1:A:358:ILE:HA	2.01	0.42
1:A:471:THR:HG21	1:A:473:GLN:OE1	2.19	0.42
1:A:617:LYS:HG3	1:A:618:GLU:N	2.34	0.42
1:A:68:ASN:CB	1:A:86:GLY:HA3	2.50	0.42
1:A:133:TYR:CB	1:A:136:ILE:HG23	2.49	0.42
1:A:541:CYS:HB2	1:A:544:SER:HB3	2.01	0.42
1:A:562:VAL:HG22	1:A:578:LEU:HD22	1.98	0.42
1:A:789:ASN:HD22	1:A:790:ILE:N	2.17	0.42
1:A:805:ALA:N	1:A:806:MET:CE	2.82	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:885:GLU:HG3	1:A:886:PHE:N	2.34	0.42
1:A:62:ILE:CD1	1:A:501:LEU:HD13	2.49	0.42
1:A:380:LEU:CB	1:A:386:LYS:CE	2.95	0.42
1:A:543:ARG:HB2	1:A:549:ARG:NH1	2.34	0.42
1:A:563:HIS:HB2	1:A:577:VAL:HG13	2.01	0.42
1:A:72:LYS:CD	1:A:80:LEU:CD1	2.97	0.42
1:A:100:VAL:HG21	1:A:158:TYR:OH	2.19	0.42
1:A:112:ASN:ND2	1:A:133:TYR:HE2	2.17	0.42
1:A:169:PHE:CD2	1:A:170:GLY:N	2.84	0.42
1:A:728:GLN:HG3	1:A:753:ARG:NH2	2.34	0.42
1:A:889:ILE:HG23	1:A:892:HIS:NE2	2.33	0.42
1:A:234:THR:CG2	1:A:235:VAL:N	2.82	0.42
1:A:281:ARG:HB3	1:A:293:VAL:HG11	1.97	0.42
1:A:403:PHE:CE2	1:A:405:GLY:HA2	2.55	0.42
1:A:470:GLU:HG2	1:A:471:THR:N	2.34	0.42
1:A:926:ALA:HB2	1:A:949:TYR:CD1	2.55	0.42
1:A:44:GLY:O	1:A:47:ALA:HA	2.20	0.42
1:A:216:VAL:CG1	1:A:217:PHE:N	2.82	0.42
1:A:888:ASP:OD1	1:A:889:ILE:HG13	2.20	0.42
1:A:947:LEU:CD2	1:A:947:LEU:N	2.83	0.42
1:A:67:VAL:CG1	1:A:111:ASN:HB3	2.50	0.42
1:A:111:ASN:O	1:A:132:LEU:HD13	2.20	0.42
1:A:380:LEU:HD22	1:A:412:LEU:HB3	2.02	0.42
1:A:387:VAL:CG1	1:A:388:LYS:N	2.82	0.42
1:A:562:VAL:HG22	1:A:578:LEU:HD23	1.99	0.42
1:A:662:LEU:O	1:A:666:GLU:HB3	2.20	0.42
1:A:711:VAL:HB	1:A:800:LEU:HD23	2.02	0.42
1:A:773:ILE:N	1:A:773:ILE:CD1	2.82	0.42
1:A:845:LEU:HD11	1:A:852:SER:OG	2.20	0.42
1:A:321:LEU:HD23	1:A:333:LEU:CD1	2.50	0.41
1:A:528:TRP:CZ2	1:A:533:ASN:OD1	2.73	0.41
1:A:623:ILE:HD12	1:A:624:THR:HA	2.01	0.41
1:A:563:HIS:CB	1:A:577:VAL:CG1	2.95	0.41
1:A:597:LEU:N	1:A:597:LEU:CD2	2.83	0.41
1:A:630:HIS:CD2	1:A:632:VAL:CG2	3.00	0.41
1:A:665:VAL:HG11	1:A:697:PRO:CD	2.48	0.41
1:A:44:GLY:CA	1:A:50:PHE:HE2	2.23	0.41
1:A:225:MET:HE1	1:A:227:LYS:CG	2.46	0.41
1:A:256:LEU:HD12	1:A:297:ILE:HD11	2.02	0.41
1:A:333:LEU:HD23	1:A:358:ILE:HG13	2.00	0.41
1:A:555:LYS:CG	1:A:556:GLN:N	2.83	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:920:ALA:C	1:A:922:PRO:HD2	2.41	0.41
1:A:137:CYS:SG	1:A:159:LEU:CD1	3.09	0.41
1:A:605:ILE:O	1:A:608:GLN:HG2	2.19	0.41
1:A:696:LEU:N	1:A:696:LEU:CD1	2.83	0.41
1:A:710:LEU:HD12	1:A:710:LEU:C	2.40	0.41
1:A:435:ILE:CD1	1:A:436:ALA:N	2.81	0.41
1:A:494:TYR:CB	1:A:501:LEU:HD21	2.30	0.41
1:A:658:HIS:ND1	1:A:663:SER:HB3	2.36	0.41
1:A:783:VAL:CG1	1:A:784:TRP:N	2.83	0.41
1:A:817:ASP:OD1	1:A:820:PHE:CD2	2.73	0.41
1:A:847:LEU:HD12	1:A:852:SER:HB2	2.00	0.41
1:A:904:VAL:CG1	1:A:905:ASP:N	2.82	0.41
1:A:131:SER:O	1:A:133:TYR:CD2	2.74	0.41
1:A:177:ASN:O	1:A:178:PHE:CG	2.73	0.41
1:A:226:ILE:HD11	1:A:385:LEU:HD23	2.03	0.41
1:A:259:GLN:HA	1:A:260:PRO:HD3	1.82	0.41
1:A:370:LEU:CD2	1:A:374:TYR:CE1	3.03	0.41
1:A:551:ALA:HB1	1:A:556:GLN:HB2	2.03	0.41
1:A:560:LEU:CG	1:A:648:THR:CG2	2.98	0.41
1:A:282:LEU:HD23	1:A:292:TYR:HA	2.03	0.41
1:A:435:ILE:HD12	1:A:486:PHE:CE1	2.56	0.41
1:A:843:ARG:CZ	1:A:843:ARG:CB	2.99	0.41
1:A:39:PHE:CZ	1:A:473:GLN:HG3	2.53	0.41
1:A:188:VAL:HG22	1:A:188:VAL:O	2.21	0.41
1:A:403:PHE:HE1	1:A:406:LEU:HD23	1.75	0.41
1:A:492:GLN:HB3	1:A:503:ARG:HG3	2.02	0.41
1:A:884:LEU:HD23	1:A:884:LEU:HA	1.75	0.41
1:A:62:ILE:CD1	1:A:64:LEU:HD21	2.46	0.41
1:A:72:LYS:CE	1:A:80:LEU:CD1	2.95	0.41
1:A:111:ASN:O	1:A:132:LEU:HD22	2.21	0.41
1:A:159:LEU:HG	1:A:201:ARG:NH1	2.36	0.41
1:A:225:MET:CE	1:A:227:LYS:CG	2.94	0.41
1:A:236:ILE:CG2	1:A:239:PHE:HB2	2.51	0.41
1:A:307:ARG:HD3	1:A:307:ARG:HA	1.88	0.41
1:A:631:VAL:O	1:A:631:VAL:HG13	2.19	0.41
1:A:833:LEU:CB	1:A:836:HIS:HD2	2.22	0.41
1:A:862:ILE:HG21	1:A:877:ILE:HG12	2.03	0.41
1:A:188:VAL:CG2	1:A:191:LYS:HB2	2.51	0.41
1:A:566:ASN:CA	1:A:651:VAL:CG2	2.95	0.41
1:A:703:LEU:HD13	1:A:723:ALA:CB	2.47	0.41
1:A:803:CYS:SG	1:A:832:THR:HA	2.61	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:943:ARG:CZ	1:A:943:ARG:HB2	2.51	0.41
1:A:188:VAL:HG13	1:A:189:ASP:N	2.36	0.40
1:A:280:VAL:CG1	1:A:281:ARG:N	2.83	0.40
1:A:419:ARG:HH11	1:A:419:ARG:HD3	1.72	0.40
1:A:681:THR:OG1	1:A:686:THR:HG21	2.21	0.40
1:A:867:GLY:HA2	1:A:868:PRO:HD3	1.91	0.40
1:A:889:ILE:HD12	1:A:907:TYR:CE1	2.56	0.40
1:A:137:CYS:O	1:A:150:GLU:HG3	2.20	0.40
1:A:689:PHE:HD1	1:A:691:GLU:HG2	1.80	0.40
1:A:897:GLY:H	1:A:924:GLN:HE22	1.69	0.40
1:A:105:GLU:CB	1:A:106:PRO:HD2	2.42	0.40
1:A:219:ASP:HB3	1:A:222:VAL:H	1.86	0.40
1:A:327:VAL:CG1	1:A:358:ILE:CD1	2.94	0.40
1:A:667:SER:HB3	1:A:668:PRO:CD	2.51	0.40
1:A:778:VAL:HG12	1:A:779:GLU:O	2.20	0.40
1:A:901:SER:HA	1:A:902:PRO:HD2	1.89	0.40
1:A:252:PHE:HE1	1:A:283:CYS:SG	2.44	0.40
1:A:349:LEU:N	1:A:349:LEU:CD2	2.84	0.40
1:A:469:TYR:CZ	1:A:470:GLU:O	2.74	0.40
1:A:492:GLN:CG	1:A:503:ARG:HD2	2.51	0.40
1:A:287:THR:CG2	1:A:288:ALA:N	2.85	0.40
1:A:460:ASP:HB2	1:A:465:ASN:N	2.37	0.40

All (32) 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:234:THR:CA	1:A:234:THR:CA[5_455]	0.86	1.34
1:A:233:PHE:O	1:A:234:THR:OG1[5_455]	0.87	1.33
1:A:146:PHE:CE1	1:A:730:GLN:OE1[4_555]	1.03	1.17
1:A:146:PHE:CE1	1:A:730:GLN:CD[4_555]	1.26	0.94
1:A:146:PHE:CD1	1:A:730:GLN:OE1[4_555]	1.26	0.94
1:A:155:LYS:NZ	1:A:221:PHE:N[5_455]	1.34	0.86
1:A:234:THR:O	1:A:234:THR:O[5_455]	1.40	0.80
1:A:233:PHE:O	1:A:234:THR:CB[5_455]	1.48	0.72
1:A:83:HIS:CE1	1:A:731:SER:OG[4_555]	1.57	0.63
1:A:175:TYR:CE1	1:A:842:SER:CB[8_454]	1.57	0.63
1:A:233:PHE:C	1:A:234:THR:CB[5_455]	1.63	0.57
1:A:208:GLU:OE2	1:A:728:GLN:NE2[4_555]	1.77	0.43
1:A:234:THR:N	1:A:234:THR:CB[5_455]	1.78	0.42

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:233:PHE:C	1:A:234:THR:OG1[5_455]	1.80	0.40
1:A:234:THR:CA	1:A:234:THR:CB[5_455]	1.82	0.38
1:A:146:PHE:CZ	1:A:730:GLN:NE2[4_555]	1.84	0.36
1:A:155:LYS:NZ	1:A:221:PHE:CA[5_455]	1.84	0.36
1:A:234:THR:N	1:A:234:THR:CA[5_455]	1.89	0.31
1:A:155:LYS:NZ	1:A:221:PHE:CG[5_455]	1.99	0.21
1:A:175:TYR:CD1	1:A:842:SER:CB[8_454]	2.01	0.19
1:A:230:SER:CA	1:A:230:SER:OG[5_455]	2.01	0.19
1:A:146:PHE:CZ	1:A:730:GLN:CD[4_555]	2.04	0.16
1:A:146:PHE:CE1	1:A:730:GLN:NE2[4_555]	2.04	0.16
1:A:155:LYS:NZ	1:A:221:PHE:CD2[5_455]	2.04	0.16
1:A:156:GLU:OE1	1:A:220:GLU:OE2[5_455]	2.05	0.15
1:A:234:THR:CA	1:A:234:THR:C[5_455]	2.07	0.13
1:A:175:TYR:OH	1:A:843:ARG:CG[8_454]	2.10	0.10
1:A:175:TYR:CD1	1:A:842:SER:OG[8_454]	2.12	0.08
1:A:148:LEU:O	1:A:728:GLN:NE2[4_555]	2.16	0.04
1:A:148:LEU:O	1:A:728:GLN:OE1[4_555]	2.19	0.01
1:A:155:LYS:NZ	1:A:220:GLU:C[5_455]	2.19	0.01
1:A:234:THR:C	1:A:234:THR:O[5_455]	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	905/1207 (75%)	842 (93%)	44 (5%)	19 (2%)	<b>7</b> 36

All (19) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	96	PRO
1	A	181	LYS
1	A	191	LYS
1	A	410	ALA

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	465	ASN
1	A	654	ASN
1	A	700	CYS
1	A	701	PRO
1	A	804	GLY
1	A	864	PRO
1	A	87	PRO
1	A	271	LYS
1	A	474	VAL
1	A	849	GLY
1	A	263	VAL
1	A	344	ARG
1	A	933	VAL
1	A	44	GLY
1	A	921	LYS

### 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	812/1067 (76%)	789 (97%)	23 (3%)	43 65

All (23) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	69	ARG
1	A	72	LYS
1	A	271	LYS
1	A	386	LYS
1	A	412	LEU
1	A	435	ILE
1	A	468	GLN
1	A	473	GLN
1	A	523	ASP
1	A	529	CYS
1	A	548	ARG

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	567	ILE
1	A	575	LEU
1	A	597	LEU
1	A	621	ARG
1	A	670	ARG
1	A	743	GLN
1	A	773	ILE
1	A	797	LYS
1	A	806	MET
1	A	853	LYS
1	A	854	CYS
1	A	892	HIS

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (27) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	51	ASN
1	A	52	HIS
1	A	101	GLN
1	A	157	HIS
1	A	163	ASN
1	A	273	GLN
1	A	361	GLN
1	A	441	ASN
1	A	442	HIS
1	A	473	GLN
1	A	500	GLN
1	A	582	ASN
1	A	626	ASN
1	A	629	HIS
1	A	630	HIS
1	A	672	HIS
1	A	685	ASN
1	A	690	GLN
1	A	702	GLN
1	A	728	GLN
1	A	747	GLN
1	A	789	ASN
1	A	792	ASN
1	A	826	GLN
1	A	836	HIS
1	A	856	ASN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	892	HIS

### 5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

### 5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

### 5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

### 5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

### 5.8 Polymer linkage issues [i](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	A	6

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	802:LYS	C	803:CYS	N	4.06
1	A	854:CYS	C	855:THR	N	3.30
1	A	557:CYS	C	558:VAL	N	2.81
1	A	506:VAL	C	507:GLU	N	2.58
1	A	700:CYS	C	701:PRO	N	0.70
1	A	653:TYR	C	654:ASN	N	0.50



## 6 Fit of model and data ⓘ

### 6.1 Protein, DNA and RNA chains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å <sup>2</sup> )	Q<0.9
1	A	915/1207 (75%)	1.97	346 (37%) 0 1	100, 150, 216, 216	0

All (346) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	584	PRO	11.0
1	A	859	ILE	9.9
1	A	585	GLU	9.7
1	A	902	PRO	9.5
1	A	860	THR	9.3
1	A	945	SER	8.4
1	A	586	LEU	8.4
1	A	587	SER	8.3
1	A	924	GLN	8.1
1	A	854	CYS	8.0
1	A	628	ASP	7.9
1	A	946	GLN	7.5
1	A	922	PRO	7.3
1	A	549	ARG	7.3
1	A	640	GLU	7.2
1	A	646	ALA	7.2
1	A	890	ALA	7.2
1	A	531	LEU	7.1
1	A	473	GLN	7.1
1	A	857	PRO	6.9
1	A	530	VAL	6.9
1	A	670	ARG	6.8
1	A	931	ILE	6.5
1	A	893	VAL	6.4
1	A	858	ARG	6.4
1	A	925	HIS	6.3
1	A	569	VAL	6.3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	636	LEU	6.2
1	A	568	SER	6.2
1	A	892	HIS	6.1
1	A	669	TYR	6.1
1	A	622	ILE	6.0
1	A	901	SER	6.0
1	A	891	SER	6.0
1	A	623	ILE	5.9
1	A	269	THR	5.9
1	A	877	ILE	5.8
1	A	495	ILE	5.8
1	A	547	PRO	5.8
1	A	645	PHE	5.8
1	A	882	LEU	5.7
1	A	944	SER	5.7
1	A	899	GLU	5.7
1	A	900	CYS	5.6
1	A	548	ARG	5.6
1	A	862	ILE	5.6
1	A	621	ARG	5.5
1	A	654	ASN	5.5
1	A	879	GLY	5.5
1	A	629	HIS	5.4
1	A	641	THR	5.4
1	A	915	CYS	5.4
1	A	423	VAL	5.4
1	A	926	ALA	5.4
1	A	529	CYS	5.3
1	A	853	LYS	5.3
1	A	571	GLN	5.2
1	A	588	ALA	5.2
1	A	570	SER	5.1
1	A	546	GLU	5.1
1	A	532	HIS	5.1
1	A	635	GLN	5.1
1	A	883	GLY	5.0
1	A	811	GLY	5.0
1	A	644	THR	5.0
1	A	880	GLU	5.0
1	A	894	LYS	5.0
1	A	593	THR	5.0
1	A	485	ALA	4.9

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	619	VAL	4.9
1	A	942	ALA	4.9
1	A	620	PRO	4.9
1	A	861	GLU	4.8
1	A	551	ALA	4.8
1	A	923	SER	4.8
1	A	913	ILE	4.8
1	A	592	CYS	4.8
1	A	270	THR	4.7
1	A	589	GLY	4.7
1	A	594	PHE	4.7
1	A	647	SER	4.7
1	A	634	LEU	4.7
1	A	624	THR	4.6
1	A	424	PHE	4.6
1	A	533	ASN	4.6
1	A	888	ASP	4.6
1	A	637	LYS	4.6
1	A	583	VAL	4.6
1	A	560	LEU	4.6
1	A	552	SER	4.6
1	A	929	VAL	4.6
1	A	502	THR	4.6
1	A	446	PHE	4.5
1	A	920	ALA	4.5
1	A	652	PHE	4.4
1	A	638	SER	4.4
1	A	767	SER	4.4
1	A	869	ARG	4.4
1	A	486	PHE	4.3
1	A	930	GLU	4.3
1	A	578	LEU	4.3
1	A	591	ASN	4.3
1	A	653	TYR	4.3
1	A	613	SER	4.2
1	A	271	LYS	4.2
1	A	919	GLU	4.2
1	A	474	VAL	4.2
1	A	933	VAL	4.2
1	A	353	ALA	4.2
1	A	543	ARG	4.2
1	A	672	HIS	4.2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	682	HIS	4.1
1	A	816	ALA	4.1
1	A	875	VAL	4.1
1	A	947	LEU	4.1
1	A	447	VAL	4.1
1	A	775	ASN	4.1
1	A	513	ARG	4.1
1	A	810	CYS	4.1
1	A	493	LEU	4.1
1	A	494	TYR	4.1
1	A	431	MET	4.1
1	A	948	TYR	4.0
1	A	815	LYS	4.0
1	A	814	LEU	4.0
1	A	550	PHE	4.0
1	A	544	SER	4.0
1	A	504	VAL	3.9
1	A	865	VAL	3.9
1	A	671	CYS	3.9
1	A	889	ILE	3.9
1	A	934	ALA	3.9
1	A	843	ARG	3.8
1	A	881	ASN	3.8
1	A	538	LYS	3.8
1	A	558	VAL	3.8
1	A	895	VAL	3.8
1	A	580	THR	3.8
1	A	943	ARG	3.8
1	A	528	TRP	3.8
1	A	721	LEU	3.8
1	A	927	GLY	3.7
1	A	542	GLU	3.7
1	A	422	PRO	3.7
1	A	917	MET	3.7
1	A	898	VAL	3.7
1	A	354	LEU	3.7
1	A	886	PHE	3.7
1	A	648	THR	3.7
1	A	921	LYS	3.7
1	A	611	CYS	3.6
1	A	695	LYS	3.6
1	A	727	PRO	3.6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	950	PHE	3.6
1	A	596	ASP	3.6
1	A	639	LYS	3.5
1	A	897	GLY	3.5
1	A	501	LEU	3.5
1	A	299	CYS	3.5
1	A	918	GLY	3.5
1	A	855	THR	3.5
1	A	267	GLY	3.5
1	A	614	PRO	3.5
1	A	668	PRO	3.4
1	A	683	ASP	3.4
1	A	64	LEU	3.4
1	A	574	VAL	3.4
1	A	527	GLY	3.4
1	A	590	VAL	3.3
1	A	448	GLY	3.3
1	A	310	GLN	3.3
1	A	505	PRO	3.3
1	A	887	ARG	3.3
1	A	612	TYR	3.3
1	A	630	HIS	3.3
1	A	595	GLU	3.3
1	A	878	ARG	3.2
1	A	435	ILE	3.2
1	A	355	CYS	3.2
1	A	916	GLU	3.2
1	A	744	GLY	3.2
1	A	949	TYR	3.2
1	A	618	GLU	3.2
1	A	884	LEU	3.2
1	A	576	LEU	3.2
1	A	76	ASP	3.2
1	A	847	LEU	3.2
1	A	433	SER	3.2
1	A	506	VAL	3.2
1	A	343	LYS	3.1
1	A	633	GLN	3.1
1	A	454	LEU	3.1
1	A	604	VAL	3.1
1	A	514	SER	3.1
1	A	642	GLY	3.1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	868	PRO	3.1
1	A	609	ILE	3.1
1	A	432	THR	3.1
1	A	867	GLY	3.1
1	A	940	PHE	3.1
1	A	626	ASN	3.1
1	A	610	GLN	3.0
1	A	545	ARG	3.0
1	A	625	GLU	3.0
1	A	541	CYS	3.0
1	A	567	ILE	3.0
1	A	650	PHE	3.0
1	A	904	VAL	3.0
1	A	722	LYS	3.0
1	A	525	HIS	2.9
1	A	914	VAL	2.9
1	A	307	ARG	2.9
1	A	864	PRO	2.9
1	A	598	SER	2.9
1	A	842	SER	2.9
1	A	852	SER	2.9
1	A	643	MET	2.9
1	A	932	CYS	2.9
1	A	309	LEU	2.9
1	A	476	ASP	2.9
1	A	896	ALA	2.9
1	A	471	THR	2.9
1	A	866	THR	2.9
1	A	709	ILE	2.8
1	A	562	VAL	2.8
1	A	484	MET	2.8
1	A	561	THR	2.8
1	A	627	GLY	2.8
1	A	597	LEU	2.8
1	A	903	LEU	2.8
1	A	137	CYS	2.8
1	A	539	GLU	2.8
1	A	577	VAL	2.8
1	A	425	THR	2.8
1	A	540	ARG	2.7
1	A	910	ALA	2.7
1	A	328	ARG	2.7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	496	MET	2.7
1	A	301	ARG	2.7
1	A	475	VAL	2.7
1	A	817	ASP	2.7
1	A	149	GLY	2.7
1	A	575	LEU	2.7
1	A	272	GLU	2.7
1	A	684	PRO	2.7
1	A	599	GLU	2.7
1	A	681	THR	2.7
1	A	774	ASN	2.7
1	A	42	PHE	2.7
1	A	515	CYS	2.7
1	A	77	LEU	2.6
1	A	768	TYR	2.6
1	A	573	ASN	2.6
1	A	41	THR	2.6
1	A	400	ASP	2.6
1	A	341	GLY	2.6
1	A	150	GLU	2.6
1	A	870	GLU	2.6
1	A	305	GLU	2.6
1	A	678	HIS	2.6
1	A	769	GLU	2.6
1	A	928	PHE	2.6
1	A	300	GLU	2.6
1	A	53	LEU	2.6
1	A	75	SER	2.6
1	A	90	ASP	2.5
1	A	759	VAL	2.5
1	A	776	LEU	2.5
1	A	311	ALA	2.5
1	A	819	ASP	2.5
1	A	723	ALA	2.5
1	A	97	PRO	2.5
1	A	526	CYS	2.5
1	A	616	ALA	2.5
1	A	477	SER	2.4
1	A	632	VAL	2.4
1	A	337	VAL	2.4
1	A	268	SER	2.4
1	A	107	LEU	2.4

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	480	VAL	2.4
1	A	511	GLN	2.4
1	A	138	LYS	2.4
1	A	745	ILE	2.4
1	A	600	MET	2.4
1	A	336	THR	2.4
1	A	876	THR	2.4
1	A	657	VAL	2.3
1	A	534	THR	2.3
1	A	579	GLU	2.3
1	A	631	VAL	2.3
1	A	440	LYS	2.3
1	A	800	LEU	2.3
1	A	537	ARG	2.3
1	A	655	CYS	2.3
1	A	841	GLU	2.3
1	A	856	ASN	2.3
1	A	96	PRO	2.3
1	A	871	GLY	2.3
1	A	885	GLU	2.3
1	A	850	ALA	2.3
1	A	308	LEU	2.3
1	A	342	GLN	2.3
1	A	507	GLU	2.2
1	A	455	LYS	2.2
1	A	572	TYR	2.2
1	A	409	ASN	2.2
1	A	603	LEU	2.2
1	A	277	SER	2.2
1	A	456	LYS	2.2
1	A	719	ILE	2.2
1	A	219	ASP	2.2
1	A	266	PRO	2.2
1	A	327	VAL	2.2
1	A	605	ILE	2.2
1	A	720	THR	2.2
1	A	445	ALA	2.2
1	A	346	MET	2.2
1	A	536	THR	2.2
1	A	405	GLY	2.2
1	A	331	ASP	2.2
1	A	873	THR	2.2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	694	VAL	2.2
1	A	863	ILE	2.2
1	A	439	TYR	2.2
1	A	812	LEU	2.2
1	A	304	VAL	2.2
1	A	412	LEU	2.2
1	A	935	VAL	2.1
1	A	348	SER	2.1
1	A	91	ASN	2.1
1	A	911	GLU	2.1
1	A	128	ALA	2.1
1	A	566	ASN	2.1
1	A	773	ILE	2.1
1	A	338	PHE	2.1
1	A	503	ARG	2.1
1	A	153	HIS	2.1
1	A	912	GLN	2.1
1	A	345	LYS	2.1
1	A	524	PRO	2.1
1	A	298	GLY	2.0
1	A	818	PRO	2.0
1	A	846	GLU	2.0
1	A	388	LYS	2.0
1	A	608	GLN	2.0
1	A	951	MET	2.0

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

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

## 6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

## 6.4 Ligands [i](#)

There are no ligands in this entry.

## 6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.