



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

May 26, 2020 – 07:30 am BST

PDB ID : 1GM5
Title : Structure of RecG bound to three-way DNA junction
Authors : Singleton, M.R.; Scaife, S.; Wigley, D.B.
Deposited on : 2001-09-11
Resolution : 3.24 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 following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

MolProbity : 4.02b-467
Mogul : 1.8.5 (274361), CSD as541be (2020)
Xtriage (Phenix) : 1.13
EDS : 2.11
buster-report : 1.1.7 (2018)
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) : 2.11

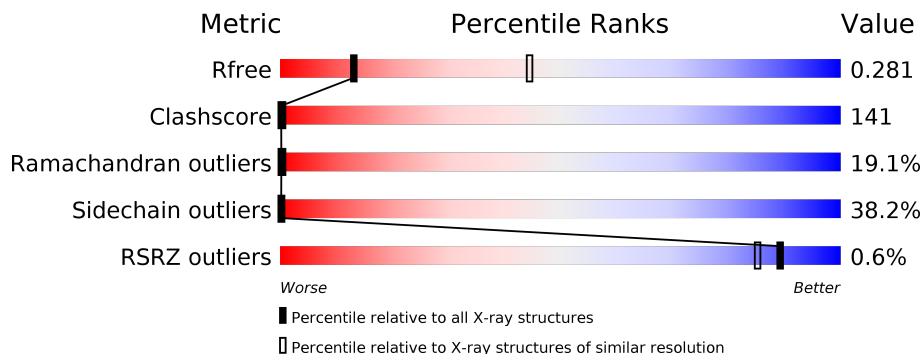
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.24 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	1619 (3.28-3.20)
Clashscore	141614	1755 (3.28-3.20)
Ramachandran outliers	138981	1728 (3.28-3.20)
Sidechain outliers	138945	1727 (3.28-3.20)
RSRZ outliers	127900	1567 (3.28-3.20)

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	780	
2	X	20	
3	Y	20	
4	Z	9	

2 Entry composition [i](#)

There are 6 unique types of molecules in this entry. The entry contains 6779 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 RECG.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	729	5919	3794	1017	1083	25	0	0	0

- Molecule 2 is a DNA chain called DNA (5'-(*CP*AP*GP*CP*TP*CP*CP*AP*TP*GP*AP*TP*CP*AP*TP*TP*GP*GP*CP*A)-3').

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	P			
2	X	12	239	116	43	69	11	0	0	0

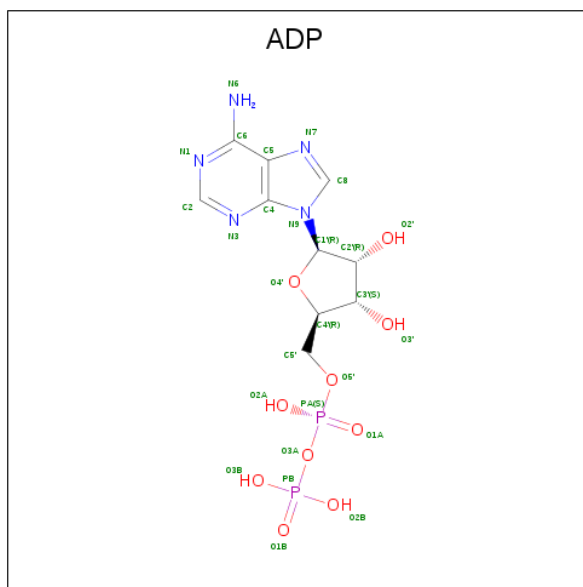
- Molecule 3 is a DNA chain called DNA (5'-(*GP*CP*AP*GP*TP*GP*CP*TP*CP*GP*CP*AP*TP*GP*GP*AP*GP*CP*TP*G)-3').

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	P			
3	Y	20	411	195	78	119	19	0	0	0

- Molecule 4 is a DNA chain called DNA (5'-(*GP*AP*GP*CP*AP*CP*TP*GP*C)-3').

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	P			
4	Z	9	182	87	36	51	8	0	0	0

- Molecule 5 is ADENOSINE-5'-DIPHOSPHATE (three-letter code: ADP) (formula: C₁₀H₁₅N₅O₁₀P₂).



Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
			Total	C	N	O	P		
5	A	1	27	10	5	10	2	0	0

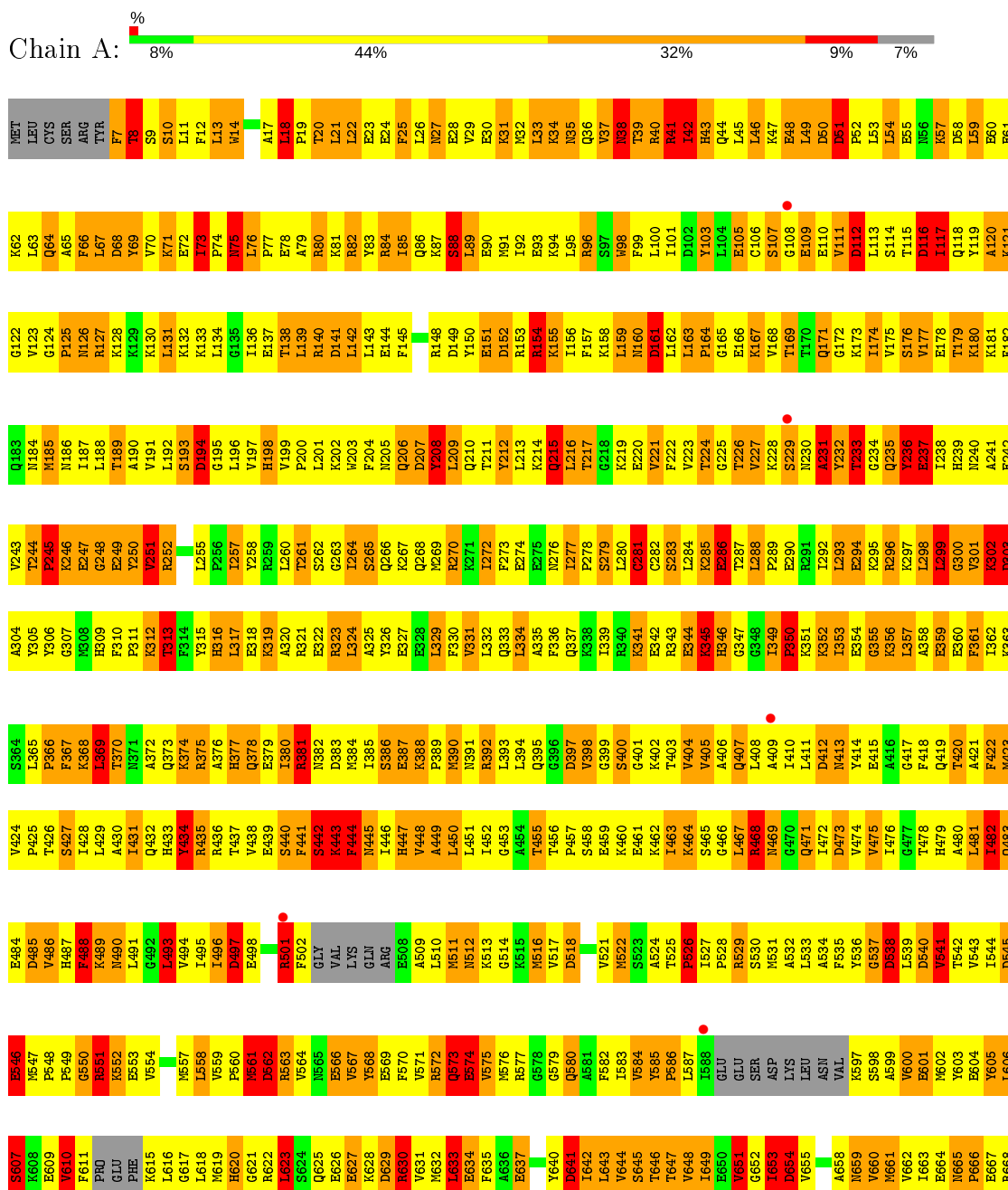
- Molecule 6 is MAGNESIUM ION (three-letter code: MG) (formula: Mg).

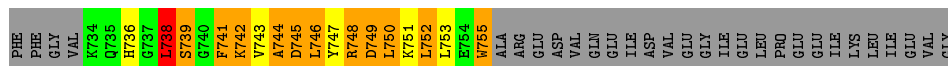
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
			Total	Mg		
6	A	1	1	1	0	0

3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA and DNA 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: RECG





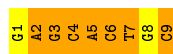
- Molecule 2: DNA (5'-(*CP*AP*GP*CP*TP*CP*CP*AP*TP*GP*AP*TP* CP*AP*TP*TP*GP*GP*CP*A)-3')



- Molecule 3: DNA (5'-(*GP*CP*AP*GP*TP*GP*CP*TP*CP*GP*CP*AP* TP*GP*GP*AP*GP*CP*TP*G)-3')



- Molecule 4: DNA (5'-(*GP*AP*GP*CP*AP*CP*TP*GP*C)-3')



4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	C 1 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	133.70Å 144.60Å 84.02Å 90.00° 113.82° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	20.00 – 3.24 19.59 – 3.25	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.3 (20.00-3.24) 98.2 (19.59-3.25)	Depositor EDS
R_{merge}	0.04	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	3.53 (at 3.22Å)	Xtrriage
Refinement program	REFMAC 5.0	Depositor
R, R_{free}	0.272 , 0.328 0.273 , 0.281	Depositor DCC
R_{free} test set	2282 reflections (5.13%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	96.2	Xtrriage
Anisotropy	0.209	Xtrriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.24 , 94.1	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.50$, $\langle L^2 \rangle = 0.33$	Xtrriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtrriage
F_o, F_c correlation	0.91	EDS
Total number of atoms	6779	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	94.0	wwPDB-VP

Xtrriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.51% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality i

5.1 Standard geometry i

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

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# $ Z > 5$	RMSZ	# $ Z > 5$
1	A	0.96	8/6025 (0.1%)	1.26	52/8101 (0.6%)
2	X	1.19	0/267	1.99	11/410 (2.7%)
3	Y	1.67	5/461 (1.1%)	3.13	66/711 (9.3%)
4	Z	1.81	4/204 (2.0%)	4.22	58/313 (18.5%)
All	All	1.07	17/6957 (0.2%)	1.68	187/9535 (2.0%)

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	10

All (17) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	55	GLU	CD-OE1	8.25	1.34	1.25
1	A	553	GLU	CD-OE2	6.75	1.33	1.25
3	Y	10	DG	C2-N3	6.19	1.37	1.32
3	Y	9	DC	N1-C6	-6.14	1.33	1.37
1	A	55	GLU	CG-CD	6.09	1.61	1.51
1	A	251	VAL	CA-CB	-5.83	1.42	1.54
4	Z	5	DA	C2-N3	5.81	1.38	1.33
3	Y	5	DT	C1'-N1	5.78	1.56	1.49
4	Z	4	DC	C4-C5	5.69	1.47	1.43
3	Y	10	DG	C3'-O3'	-5.59	1.36	1.44
4	Z	3	DG	C2-N3	5.59	1.37	1.32
3	Y	6	DG	N3-C4	-5.46	1.31	1.35
4	Z	5	DA	N1-C2	5.44	1.39	1.34
1	A	553	GLU	CD-OE1	5.12	1.31	1.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	553	GLU	CG-CD	5.07	1.59	1.51
1	A	755	TRP	CE3-CZ3	5.05	1.47	1.38
1	A	610	VAL	CA-CB	-5.05	1.44	1.54

All (187) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
3	Y	5	DT	N3-C4-O4	16.48	129.79	119.90
4	Z	2	DA	O4'-C1'-N9	-15.33	97.27	108.00
4	Z	7	DT	O4'-C1'-N1	14.47	118.13	108.00
3	Y	8	DT	N3-C4-O4	14.32	128.49	119.90
3	Y	8	DT	O4'-C1'-N1	14.00	117.80	108.00
4	Z	3	DG	C6-N1-C2	-13.85	116.79	125.10
4	Z	7	DT	C5-C4-O4	-13.71	115.31	124.90
3	Y	10	DG	O4'-C1'-N9	-13.69	98.42	108.00
3	Y	5	DT	C5-C4-O4	-13.56	115.41	124.90
4	Z	7	DT	C4-C5-C7	-13.33	111.00	119.00
4	Z	7	DT	C2-N3-C4	-13.17	119.30	127.20
3	Y	12	DA	O4'-C1'-N9	-13.10	98.83	108.00
4	Z	5	DA	N1-C6-N6	13.05	126.43	118.60
4	Z	7	DT	N3-C4-O4	12.38	127.33	119.90
3	Y	5	DT	O5'-P-OP1	-11.95	94.95	105.70
3	Y	8	DT	C5-C4-O4	-11.95	116.54	124.90
4	Z	6	DC	C5-C4-N4	-11.93	111.85	120.20
4	Z	3	DG	N3-C4-C5	-11.84	122.68	128.60
4	Z	6	DC	C2-N3-C4	-11.75	114.02	119.90
3	Y	9	DC	O4'-C1'-N1	11.25	115.88	108.00
4	Z	5	DA	C5-C6-N6	-10.95	114.94	123.70
4	Z	7	DT	N1-C2-N3	10.62	120.97	114.60
4	Z	3	DG	N1-C2-N2	-9.93	107.26	116.20
4	Z	5	DA	O4'-C1'-N9	9.87	114.91	108.00
4	Z	5	DA	C2-N3-C4	-9.85	105.67	110.60
3	Y	4	DG	C5-C6-O6	-9.79	122.72	128.60
3	Y	7	DC	C2-N3-C4	-9.69	115.05	119.90
3	Y	8	DT	C4'-C3'-C2'	-9.67	94.39	103.10
3	Y	8	DT	C4-C5-C7	-9.55	113.27	119.00
4	Z	6	DC	N1-C2-O2	-9.53	113.18	118.90
3	Y	4	DG	N1-C6-O6	9.52	125.61	119.90
1	A	623	LEU	N-CA-C	-9.39	85.66	111.00
3	Y	8	DT	N3-C2-O2	9.30	127.88	122.30
3	Y	8	DT	N1-C2-O2	-9.28	115.68	123.10
4	Z	3	DG	C5-C6-N1	9.27	116.14	111.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
3	Y	6	DG	N9-C4-C5	9.23	109.09	105.40
4	Z	5	DA	N1-C2-N3	8.94	133.77	129.30
3	Y	2	DC	P-O3'-C3'	-8.88	109.05	119.70
1	A	630	ARG	NE-CZ-NH1	8.54	124.57	120.30
3	Y	9	DC	O4'-C1'-C2'	-8.45	99.14	105.90
4	Z	4	DC	C5-C6-N1	-8.38	116.81	121.00
3	Y	10	DG	O4'-C1'-C2'	-8.36	99.21	105.90
4	Z	7	DT	N1-C2-O2	-8.28	116.48	123.10
4	Z	5	DA	C6-N1-C2	-8.27	113.64	118.60
2	X	9	DT	N3-C4-O4	8.27	124.86	119.90
4	Z	6	DC	N3-C4-C5	8.19	125.17	121.90
3	Y	6	DG	N3-C4-C5	-8.17	124.52	128.60
3	Y	5	DT	N3-C2-O2	-8.15	117.41	122.30
2	X	9	DT	C5-C4-O4	-8.09	119.23	124.90
3	Y	9	DC	C4'-C3'-C2'	-7.95	95.94	103.10
4	Z	3	DG	C5-C6-O6	-7.95	123.83	128.60
3	Y	13	DT	N3-C4-O4	7.88	124.63	119.90
4	Z	4	DC	C5-C4-N4	7.86	125.70	120.20
2	X	11	DA	O4'-C4'-C3'	-7.80	101.32	106.00
4	Z	4	DC	C4'-C3'-C2'	-7.76	96.12	103.10
3	Y	10	DG	N1-C2-N2	-7.75	109.22	116.20
3	Y	2	DC	P-O5'-C5'	-7.75	108.51	120.90
3	Y	9	DC	C4-C5-C6	7.65	121.23	117.40
4	Z	4	DC	N3-C4-N4	-7.65	112.65	118.00
3	Y	3	DA	P-O5'-C5'	-7.63	108.69	120.90
2	X	5	DT	N3-C4-O4	7.62	124.47	119.90
4	Z	7	DT	C6-C5-C7	7.60	127.46	122.90
4	Z	9	DC	C4'-C3'-C2'	-7.59	96.27	103.10
3	Y	2	DC	O4'-C1'-C2'	-7.57	99.84	105.90
1	A	518	ASP	CB-CG-OD2	7.49	125.04	118.30
1	A	390	MET	N-CA-C	-7.43	90.94	111.00
1	A	637	GLU	N-CA-C	-7.42	90.96	111.00
3	Y	6	DG	O4'-C1'-N9	-7.42	102.81	108.00
1	A	497	ASP	CB-CG-OD2	7.39	124.95	118.30
3	Y	9	DC	P-O5'-C5'	-7.37	109.11	120.90
4	Z	5	DA	C6-C5-N7	-7.31	127.18	132.30
1	A	444	PHE	N-CA-C	-7.29	91.32	111.00
3	Y	2	DC	O4'-C4'-C3'	-7.29	101.58	104.50
4	Z	3	DG	N1-C2-N3	7.25	128.25	123.90
1	A	350	PRO	N-CD-CG	-7.25	92.33	103.20
2	X	10	DG	O4'-C1'-N9	7.15	113.00	108.00
1	A	738	LEU	N-CA-C	7.13	130.24	111.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	745	ASP	CB-CG-OD2	7.12	124.71	118.30
3	Y	6	DG	C6-N1-C2	-7.12	120.83	125.10
4	Z	6	DC	N3-C4-N4	7.11	122.98	118.00
4	Z	9	DC	N3-C2-O2	7.10	126.87	121.90
4	Z	6	DC	C6-N1-C2	7.06	123.12	120.30
1	A	538	ASP	CB-CG-OD2	7.05	124.65	118.30
3	Y	4	DG	C6-C5-N7	-7.01	126.19	130.40
4	Z	2	DA	O4'-C1'-C2'	-7.00	100.30	105.90
3	Y	6	DG	C4-C5-N7	-6.98	108.01	110.80
1	A	633	LEU	CA-CB-CG	-6.97	99.28	115.30
4	Z	3	DG	N3-C4-N9	6.94	130.17	126.00
3	Y	5	DT	C4-C5-C7	-6.92	114.84	119.00
3	Y	10	DG	P-O3'-C3'	-6.89	111.43	119.70
4	Z	4	DC	O5'-P-OP2	6.87	118.95	110.70
2	X	5	DT	C5-C4-O4	-6.83	120.12	124.90
4	Z	3	DG	OP1-P-O3'	6.82	120.20	105.20
3	Y	20	DG	O4'-C4'-C3'	-6.82	101.77	104.50
3	Y	2	DC	C3'-C2'-C1'	-6.79	94.35	102.50
4	Z	9	DC	C6-N1-C2	6.78	123.01	120.30
1	A	236	TYR	N-CA-C	6.76	129.26	111.00
1	A	551	ARG	CA-CB-CG	-6.75	98.54	113.40
4	Z	7	DT	C5-C6-N1	-6.75	119.65	123.70
1	A	541	VAL	CB-CA-C	-6.74	98.60	111.40
4	Z	2	DA	N1-C2-N3	6.68	132.64	129.30
4	Z	4	DC	O5'-P-OP1	-6.63	99.73	105.70
4	Z	3	DG	N3-C2-N2	6.55	124.49	119.90
3	Y	13	DT	C5-C4-O4	-6.48	120.36	124.90
2	X	10	DG	C5-C6-O6	6.47	132.48	128.60
1	A	21	LEU	CA-CB-CG	6.46	130.17	115.30
1	A	551	ARG	NE-CZ-NH1	-6.43	117.08	120.30
4	Z	6	DC	N3-C2-O2	6.43	126.40	121.90
4	Z	3	DG	O4'-C1'-N9	-6.39	103.53	108.00
1	A	270	ARG	NE-CZ-NH2	-6.37	117.11	120.30
3	Y	11	DC	O4'-C1'-N1	6.33	112.43	108.00
3	Y	10	DG	P-O5'-C5'	-6.32	110.79	120.90
1	A	654	ASP	CB-CG-OD2	6.30	123.97	118.30
1	A	141	ASP	CB-CG-OD2	6.30	123.97	118.30
3	Y	5	DT	C6-C5-C7	6.27	126.67	122.90
1	A	233	THR	N-CA-C	-6.26	94.11	111.00
4	Z	9	DC	O4'-C1'-C2'	-6.25	100.90	105.90
3	Y	6	DG	O4'-C1'-C2'	-6.24	100.91	105.90
3	Y	6	DG	N1-C6-O6	-6.23	116.16	119.90

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
3	Y	10	DG	C2-N3-C4	-6.22	108.79	111.90
3	Y	10	DG	C6-N1-C2	-6.19	121.39	125.10
1	A	742	LYS	N-CA-C	-6.13	94.46	111.00
1	A	313	THR	N-CA-C	-6.10	94.53	111.00
1	A	249	GLU	N-CA-C	-6.09	94.57	111.00
1	A	749	ASP	CB-CG-OD2	6.07	123.76	118.30
3	Y	16	DA	N1-C2-N3	6.06	132.33	129.30
1	A	161	ASP	CB-CG-OD2	6.06	123.75	118.30
3	Y	5	DT	N1-C2-O2	6.03	127.93	123.10
2	X	9	DT	O4'-C1'-N1	-6.01	103.80	108.00
3	Y	5	DT	C6-N1-C2	-6.01	118.30	121.30
4	Z	6	DC	O4'-C1'-N1	6.00	112.20	108.00
1	A	625	GLN	N-CA-C	-5.98	94.85	111.00
4	Z	6	DC	C5-C6-N1	-5.96	118.02	121.00
4	Z	4	DC	C4-C5-C6	5.94	120.37	117.40
3	Y	6	DG	C8-N9-C4	-5.93	104.03	106.40
1	A	383	ASP	CB-CG-OD2	5.92	123.63	118.30
1	A	194	ASP	CB-CG-OD2	5.88	123.59	118.30
1	A	551	ARG	CA-C-N	-5.84	104.36	117.20
4	Z	7	DT	C4-C5-C6	5.83	121.50	118.00
1	A	245	PRO	C-N-CA	-5.82	107.15	121.70
2	X	5	DT	C4-C5-C7	-5.81	115.52	119.00
3	Y	8	DT	C6-C5-C7	5.79	126.38	122.90
1	A	552	LYS	N-CA-CB	-5.79	100.18	110.60
1	A	245	PRO	N-CA-C	-5.78	97.08	112.10
3	Y	13	DT	C4-C5-C7	-5.75	115.55	119.00
1	A	721	ASP	CB-CG-OD1	5.73	123.46	118.30
1	A	739	SER	N-CA-C	5.66	126.27	111.00
3	Y	10	DG	C6-C5-N7	-5.62	127.03	130.40
3	Y	7	DC	N1-C2-N3	5.61	123.13	119.20
4	Z	4	DC	OP1-P-O3'	5.59	117.50	105.20
1	A	562	ASP	CB-CG-OD2	5.58	123.32	118.30
1	A	112	ASP	CB-CG-OD2	5.57	123.31	118.30
1	A	303	ASP	CB-CG-OD2	5.56	123.30	118.30
3	Y	14	DG	C5-C6-O6	5.55	131.93	128.60
1	A	112	ASP	C-N-CA	-5.54	107.86	121.70
4	Z	2	DA	N9-C1'-C2'	5.52	123.09	112.60
4	Z	6	DC	C1'-O4'-C4'	-5.49	104.61	110.10
4	Z	3	DG	C8-N9-C4	-5.44	104.22	106.40
1	A	231	ALA	N-CA-C	-5.42	96.38	111.00
1	A	671	LEU	N-CA-C	-5.39	96.44	111.00
3	Y	10	DG	N3-C2-N2	5.39	123.67	119.90

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	412	ASP	CB-CG-OD2	5.38	123.15	118.30
3	Y	7	DC	O4'-C1'-N1	-5.34	104.26	108.00
3	Y	12	DA	C5'-C4'-O4'	-5.34	99.16	109.30
3	Y	10	DG	N1-C2-N3	5.33	127.10	123.90
1	A	116	ASP	CB-CG-OD2	5.33	123.10	118.30
1	A	473	ASP	CB-CG-OD2	5.33	123.10	118.30
3	Y	9	DC	O5'-P-OP2	-5.33	100.91	105.70
3	Y	5	DT	P-O5'-C5'	-5.31	112.41	120.90
1	A	488	PHE	N-CA-C	-5.30	96.69	111.00
4	Z	2	DA	C6-N1-C2	-5.30	115.42	118.60
1	A	397	ASP	CB-CG-OD2	5.28	123.05	118.30
3	Y	7	DC	O4'-C1'-C2'	5.27	110.11	105.90
3	Y	2	DC	O5'-P-OP1	5.25	117.00	110.70
1	A	103	TYR	CB-CG-CD2	-5.24	117.86	121.00
1	A	627	GLU	N-CA-C	-5.21	96.93	111.00
4	Z	3	DG	C2-N3-C4	5.20	114.50	111.90
2	X	4	DC	C4'-C3'-C2'	-5.18	98.43	103.10
4	Z	5	DA	C4-C5-C6	5.17	119.58	117.00
1	A	633	LEU	CB-CG-CD2	-5.17	102.21	111.00
3	Y	9	DC	C5-C6-N1	-5.15	118.43	121.00
3	Y	9	DC	C2-N3-C4	-5.13	117.34	119.90
4	Z	5	DA	C4'-C3'-C2'	-5.10	98.51	103.10
1	A	551	ARG	O-C-N	5.08	130.84	122.70
2	X	11	DA	C3'-C2'-C1'	-5.07	96.42	102.50
1	A	207	ASP	N-CA-C	-5.05	97.36	111.00
1	A	545	ASP	CB-CG-OD2	5.01	122.81	118.30

There are no chirality outliers.

All (10) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	444	PHE	Peptide
1	A	449	ALA	Peptide
1	A	471	GLN	Peptide
1	A	546	GLU	Peptide
1	A	607	SER	Peptide
1	A	623	LEU	Peptide
1	A	626	GLU	Peptide
1	A	651	VAL	Peptide
1	A	653	ILE	Peptide
1	A	684	GLY	Peptide

5.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	5919	0	6036	1776	23
2	X	239	0	133	30	0
3	Y	411	0	226	59	5
4	Z	182	0	102	18	0
5	A	27	0	12	0	0
6	A	1	0	0	0	0
All	All	6779	0	6509	1868	23

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 141.

All (1868) 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:7:PHE:CD2	1:A:11:LEU:HD11	1.14	1.63
1:A:621:GLY:HA3	1:A:647:THR:CG2	1.31	1.61
1:A:615:LYS:HD3	1:A:641:ASP:CB	1.15	1.59
1:A:615:LYS:CD	1:A:641:ASP:HB2	1.29	1.58
1:A:7:PHE:HD2	1:A:11:LEU:CD1	1.14	1.57
1:A:37:VAL:HG21	1:A:73:ILE:CD1	1.33	1.55
1:A:621:GLY:CA	1:A:647:THR:HG21	1.35	1.54
1:A:620:HIS:CD2	1:A:623:LEU:HD12	1.40	1.51
1:A:174:ILE:HD11	1:A:216:LEU:CD2	1.39	1.51
1:A:228:LYS:HE3	1:A:239:HIS:CG	1.42	1.51
1:A:419:GLN:NE2	1:A:488:PHE:CD1	1.83	1.47
1:A:419:GLN:HG2	1:A:488:PHE:CE1	1.49	1.47
1:A:108:GLY:O	1:A:109:GLU:CG	1.64	1.46
1:A:37:VAL:CG2	1:A:73:ILE:HD13	0.99	1.46
1:A:336:PHE:CE1	1:A:536:TYR:O	1.74	1.39
1:A:615:LYS:HD3	1:A:641:ASP:CG	1.40	1.38
1:A:298:LEU:CD1	1:A:322:GLU:HG2	1.51	1.38
1:A:615:LYS:CD	1:A:641:ASP:CG	1.89	1.37
1:A:153:ARG:O	1:A:155:LYS:N	1.57	1.37
1:A:584:VAL:CA	1:A:645:SER:OG	1.72	1.37
1:A:447:HIS:CE1	1:A:471:GLN:HG2	1.58	1.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:201:LEU:HD12	1:A:238:ILE:CG2	1.55	1.35
1:A:283:SER:O	1:A:284:LEU:CD2	1.73	1.34
1:A:707:PHE:CZ	1:A:711:ASN:ND2	1.94	1.34
1:A:646:THR:O	1:A:647:THR:CG2	1.75	1.34
1:A:615:LYS:CD	1:A:641:ASP:CB	1.84	1.33
1:A:117:ILE:CD1	1:A:117:ILE:O	1.77	1.32
1:A:615:LYS:CG	1:A:641:ASP:HB2	1.59	1.32
1:A:108:GLY:O	1:A:109:GLU:HG2	1.14	1.30
1:A:216:LEU:HD23	1:A:217:THR:N	1.40	1.30
1:A:493:LEU:HD23	1:A:494:VAL:N	1.00	1.30
1:A:230:ASN:OD1	1:A:232:TYR:CE2	1.83	1.30
1:A:547:MET:HG3	1:A:548:PRO:CD	1.62	1.30
1:A:743:VAL:HG12	1:A:747:TYR:CE1	1.66	1.30
1:A:622:ARG:O	1:A:623:LEU:CD2	1.79	1.29
1:A:467:LEU:CD1	1:A:472:ILE:CG2	2.10	1.29
1:A:563:ARG:CG	1:A:566:GLU:OE2	1.81	1.29
1:A:436:ARG:O	1:A:440:SER:HB2	1.19	1.29
1:A:33:LEU:HD22	1:A:85:ILE:CG2	1.61	1.29
1:A:286:GLU:OE1	1:A:287:THR:N	1.63	1.28
1:A:381:ARG:NH1	1:A:412:ASP:OD2	1.66	1.28
1:A:749:ASP:O	1:A:753:LEU:CG	1.77	1.27
1:A:336:PHE:CD1	1:A:538:ASP:HB3	1.67	1.27
1:A:493:LEU:HD23	1:A:493:LEU:C	1.51	1.27
1:A:216:LEU:HD23	1:A:216:LEU:C	1.51	1.27
1:A:701:ALA:O	1:A:704:ARG:HG2	1.34	1.27
1:A:680:ARG:HH11	1:A:680:ARG:CG	1.31	1.26
1:A:447:HIS:ND1	1:A:471:GLN:O	1.66	1.26
1:A:174:ILE:CD1	1:A:216:LEU:HD21	1.65	1.26
1:A:746:LEU:HA	1:A:749:ASP:OD2	1.28	1.26
1:A:493:LEU:CD2	1:A:494:VAL:N	1.97	1.25
1:A:138:THR:CG2	1:A:139:LEU:H	1.50	1.25
1:A:615:LYS:CE	1:A:641:ASP:OD2	1.84	1.25
1:A:37:VAL:CG2	1:A:73:ILE:CD1	1.95	1.24
1:A:646:THR:O	1:A:647:THR:HG23	1.08	1.24
1:A:126:ASN:HD22	1:A:126:ASN:C	1.36	1.23
1:A:299:LEU:CD2	1:A:299:LEU:H	1.49	1.23
1:A:563:ARG:HG3	1:A:566:GLU:OE2	1.07	1.23
1:A:154:ARG:CG	1:A:154:ARG:HH11	1.50	1.23
1:A:584:VAL:HG12	1:A:645:SER:CB	1.70	1.21
1:A:561:MET:SD	1:A:695:GLY:HA2	1.79	1.21
1:A:441:PHE:O	1:A:443:LYS:N	1.73	1.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:434:TYR:CD2	1:A:450:LEU:HG	1.75	1.20
1:A:216:LEU:CD2	1:A:217:THR:N	2.04	1.20
1:A:246:LYS:CG	1:A:247:GLU:H	1.36	1.20
1:A:450:LEU:N	1:A:450:LEU:HD12	1.27	1.20
1:A:298:LEU:CD2	1:A:322:GLU:OE1	1.90	1.19
1:A:299:LEU:HD23	1:A:299:LEU:N	1.42	1.19
1:A:448:VAL:HG22	1:A:474:VAL:CG2	1.69	1.19
1:A:176:SER:O	1:A:190:ALA:CA	1.89	1.19
1:A:189:THR:CG2	1:A:202:LYS:HG2	1.72	1.18
1:A:313:THR:CG2	1:A:315:TYR:HB3	1.70	1.18
1:A:24:GLU:O	1:A:27:ASN:HB2	1.41	1.18
1:A:622:ARG:C	1:A:623:LEU:HD23	1.61	1.18
1:A:615:LYS:CD	1:A:641:ASP:OD2	1.89	1.18
1:A:752:LEU:CD1	1:A:753:LEU:HD21	1.73	1.18
1:A:707:PHE:CE2	1:A:711:ASN:ND2	2.10	1.18
1:A:126:ASN:ND2	1:A:126:ASN:C	1.93	1.17
1:A:130:LYS:HE2	1:A:263:GLY:HA3	1.20	1.17
1:A:615:LYS:HE2	1:A:641:ASP:OD2	1.34	1.17
1:A:33:LEU:CD2	1:A:85:ILE:HG23	1.73	1.16
1:A:529:ARG:NH1	1:A:533:LEU:HD11	1.58	1.16
1:A:752:LEU:HD12	1:A:753:LEU:CD2	1.76	1.16
3:Y:7:DC:H2'	3:Y:8:DT:C5'	1.75	1.16
1:A:49:LEU:HD22	1:A:54:LEU:HD21	1.27	1.16
1:A:683:ARG:O	1:A:686:GLN:HG3	1.46	1.15
1:A:434:TYR:CE2	1:A:450:LEU:HD11	1.82	1.15
1:A:467:LEU:HD13	1:A:472:ILE:CG2	1.75	1.15
1:A:228:LYS:HE3	1:A:239:HIS:ND1	1.60	1.14
1:A:191:VAL:HG13	1:A:199:VAL:O	1.48	1.14
1:A:610:VAL:O	1:A:611:PHE:HB2	1.38	1.14
1:A:269:MET:HE3	1:A:273:PHE:HE1	1.07	1.14
1:A:450:LEU:N	1:A:450:LEU:CD1	2.04	1.13
1:A:201:LEU:CD1	1:A:238:ILE:HG21	1.78	1.13
1:A:449:ALA:C	1:A:450:LEU:HD12	1.67	1.13
1:A:547:MET:CG	1:A:548:PRO:HD2	1.79	1.13
1:A:298:LEU:HD11	1:A:322:GLU:HG2	1.24	1.13
1:A:296:ARG:HH11	1:A:296:ARG:HG2	1.07	1.12
1:A:357:LEU:CD1	1:A:415:GLU:HB2	1.78	1.12
1:A:20:THR:O	1:A:20:THR:CG2	1.90	1.12
1:A:244:THR:O	1:A:245:PRO:O	1.67	1.12
1:A:392:ARG:HH11	1:A:541:VAL:HB	1.03	1.12
1:A:586:PRO:HG2	1:A:668:ARG:HD2	1.32	1.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:138:THR:CG2	1:A:139:LEU:N	2.02	1.11
1:A:467:LEU:HD11	1:A:472:ILE:HG22	1.17	1.11
1:A:176:SER:O	1:A:190:ALA:HA	0.93	1.11
1:A:357:LEU:HD12	1:A:415:GLU:HB2	1.11	1.11
1:A:354:GLU:HB2	1:A:415:GLU:OE1	1.50	1.10
3:Y:7:DC:C2'	3:Y:8:DT:H5'	1.81	1.10
1:A:395:GLN:HE21	1:A:526:PRO:HA	0.97	1.10
1:A:434:TYR:HE2	1:A:450:LEU:HD11	1.05	1.10
1:A:572:ARG:HH11	1:A:572:ARG:HG3	1.00	1.10
1:A:748:ARG:O	1:A:752:LEU:HD11	1.50	1.10
1:A:752:LEU:HD12	1:A:753:LEU:HD21	1.16	1.10
1:A:467:LEU:CD1	1:A:472:ILE:HG22	1.76	1.09
1:A:49:LEU:CD2	1:A:54:LEU:HD21	1.81	1.09
1:A:139:LEU:O	1:A:142:LEU:N	1.85	1.09
1:A:154:ARG:HG3	1:A:154:ARG:NH1	1.41	1.09
1:A:269:MET:O	1:A:272:ILE:CG2	1.99	1.09
1:A:467:LEU:HD11	1:A:472:ILE:CG2	1.75	1.09
1:A:395:GLN:NE2	1:A:526:PRO:HA	1.66	1.09
1:A:680:ARG:NH1	1:A:680:ARG:HG2	1.13	1.09
1:A:76:LEU:HD23	1:A:80:ARG:O	1.52	1.09
1:A:201:LEU:HD12	1:A:238:ILE:HG21	1.09	1.09
1:A:419:GLN:CG	1:A:488:PHE:CE1	2.34	1.09
1:A:286:GLU:OE1	1:A:286:GLU:CA	1.94	1.09
1:A:77:PRO:CD	1:A:80:ARG:HD2	1.82	1.09
1:A:748:ARG:O	1:A:752:LEU:CD1	2.00	1.09
1:A:73:ILE:HB	1:A:74:PRO:HD3	1.11	1.08
1:A:313:THR:HG21	1:A:315:TYR:HB3	1.25	1.08
1:A:50:ASP:O	1:A:51:ASP:HB3	1.50	1.08
1:A:584:VAL:HG12	1:A:645:SER:HB3	1.30	1.08
1:A:189:THR:HG22	1:A:202:LYS:HG2	1.33	1.08
1:A:298:LEU:HD22	1:A:322:GLU:OE1	1.50	1.08
1:A:228:LYS:CE	1:A:239:HIS:CG	2.37	1.08
1:A:269:MET:HE3	1:A:273:PHE:CE1	1.89	1.08
1:A:117:ILE:HD12	1:A:117:ILE:C	1.70	1.07
1:A:493:LEU:C	1:A:493:LEU:CD2	2.14	1.07
1:A:426:THR:HG23	1:A:429:LEU:HB2	1.35	1.07
1:A:301:VAL:O	1:A:302:LYS:C	1.90	1.07
3:Y:16:DA:H2''	3:Y:17:DG:C8	1.89	1.07
1:A:620:HIS:CD2	1:A:623:LEU:CD1	2.37	1.07
1:A:37:VAL:HG22	1:A:73:ILE:HD13	1.13	1.07
1:A:174:ILE:HD12	1:A:216:LEU:HD11	1.28	1.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:250:TYR:CD1	1:A:250:TYR:O	2.07	1.07
1:A:174:ILE:CD1	1:A:216:LEU:HD11	1.84	1.07
1:A:269:MET:O	1:A:272:ILE:HG23	1.54	1.07
1:A:50:ASP:OD2	1:A:252:ARG:NH2	1.86	1.07
1:A:298:LEU:CD1	1:A:323:ARG:N	2.17	1.06
1:A:323:ARG:NH2	1:A:327:GLU:OE2	1.87	1.06
1:A:378:GLN:HA	1:A:378:GLN:HE21	0.94	1.06
1:A:117:ILE:HD11	1:A:123:VAL:HG11	1.27	1.06
1:A:209:LEU:H	1:A:209:LEU:HD23	1.20	1.06
1:A:354:GLU:CA	1:A:415:GLU:OE1	2.02	1.06
1:A:584:VAL:HG23	1:A:663:ILE:HA	1.34	1.06
1:A:216:LEU:HD23	1:A:217:THR:CA	1.86	1.06
1:A:286:GLU:OE1	1:A:286:GLU:HA	1.53	1.06
1:A:748:ARG:HG2	1:A:748:ARG:NH1	1.66	1.06
1:A:246:LYS:CG	1:A:247:GLU:N	2.00	1.05
1:A:622:ARG:O	1:A:623:LEU:HD23	0.88	1.05
1:A:33:LEU:HD22	1:A:85:ILE:HG23	1.08	1.05
1:A:169:THR:HG23	1:A:224:THR:HG23	1.10	1.05
1:A:33:LEU:O	1:A:35:ASN:N	1.88	1.05
1:A:73:ILE:HB	1:A:74:PRO:CD	1.87	1.05
1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:HD23	1.67	1.05
1:A:137:GLU:O	1:A:141:ASP:HB2	1.53	1.05
1:A:261:THR:O	1:A:261:THR:HG22	1.51	1.05
1:A:138:THR:HG22	1:A:139:LEU:N	1.44	1.05
1:A:73:ILE:O	1:A:76:LEU:HB2	1.56	1.05
1:A:108:GLY:C	1:A:109:GLU:HG2	1.77	1.04
1:A:343:ARG:NH2	1:A:391:ASN:ND2	2.05	1.04
1:A:419:GLN:HG2	1:A:488:PHE:CZ	1.92	1.04
1:A:448:VAL:HG22	1:A:474:VAL:HG22	1.06	1.04
1:A:77:PRO:HD2	1:A:80:ARG:CD	1.86	1.04
1:A:336:PHE:CE1	1:A:538:ASP:HB3	1.92	1.04
1:A:610:VAL:O	1:A:611:PHE:CB	2.03	1.04
1:A:748:ARG:HG2	1:A:748:ARG:HH11	1.14	1.04
1:A:586:PRO:HB2	1:A:668:ARG:NH1	1.71	1.04
1:A:574:GLU:OE2	1:A:574:GLU:HA	1.53	1.04
1:A:646:THR:C	1:A:647:THR:HG23	1.74	1.04
1:A:388:LYS:HB2	1:A:389:PRO:CD	1.88	1.04
1:A:392:ARG:NH1	1:A:541:VAL:HB	1.71	1.04
1:A:257:ILE:HG22	1:A:257:ILE:O	1.53	1.03
1:A:336:PHE:HE1	1:A:536:TYR:O	1.17	1.03
1:A:290:GLU:HA	1:A:293:LEU:HD12	1.40	1.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:467:LEU:CD1	1:A:472:ILE:HG21	1.88	1.03
1:A:84:ARG:NH2	1:A:85:ILE:HG13	1.72	1.03
1:A:48:GLU:OE1	1:A:48:GLU:HA	1.58	1.03
1:A:215:GLN:HE21	1:A:215:GLN:HA	0.90	1.03
1:A:173:LYS:O	1:A:192:LEU:HD12	1.58	1.03
1:A:714:GLY:HA2	1:A:717:ILE:HG13	1.05	1.02
1:A:152:ASP:OD1	1:A:153:ARG:N	1.92	1.02
1:A:298:LEU:HD11	1:A:322:GLU:C	1.80	1.02
1:A:49:LEU:CD2	1:A:54:LEU:CD2	2.38	1.02
1:A:615:LYS:HD2	1:A:641:ASP:CG	1.75	1.02
1:A:72:GLU:O	1:A:75:ASN:ND2	1.92	1.02
1:A:215:GLN:HE21	1:A:215:GLN:CA	1.72	1.02
1:A:343:ARG:NH2	1:A:391:ASN:HD21	1.56	1.02
1:A:152:ASP:OD2	1:A:154:ARG:NH1	1.93	1.02
1:A:207:ASP:O	1:A:208:TYR:C	1.98	1.02
1:A:298:LEU:CD2	1:A:322:GLU:HG2	1.89	1.02
1:A:125:PRO:O	1:A:128:LYS:HB3	1.58	1.01
1:A:447:HIS:HE1	1:A:471:GLN:CG	1.72	1.01
1:A:164:PRO:HG3	1:A:236:TYR:OH	1.61	1.01
1:A:393:LEU:HD12	1:A:521:VAL:HG13	1.40	1.01
1:A:354:GLU:CB	1:A:415:GLU:OE1	2.08	1.01
1:A:211:THR:O	1:A:215:GLN:N	1.93	1.01
1:A:410:ILE:CG2	1:A:441:PHE:HZ	1.72	1.01
1:A:91:MET:HA	1:A:94:LYS:HB2	1.38	1.01
1:A:296:ARG:HH11	1:A:296:ARG:CG	1.72	1.01
1:A:378:GLN:HA	1:A:378:GLN:NE2	1.76	1.01
1:A:380:ILE:HG12	1:A:390:MET:HE1	1.38	1.00
1:A:434:TYR:HD2	1:A:450:LEU:CG	1.72	1.00
4:Z:7:DT:H2 ^{''}	4:Z:8:DG:H5 ^{''}	1.40	1.00
1:A:748:ARG:HD3	1:A:752:LEU:HD21	1.43	1.00
1:A:434:TYR:HD2	1:A:450:LEU:HG	0.85	1.00
1:A:283:SER:C	1:A:284:LEU:HD23	1.82	1.00
1:A:448:VAL:CG2	1:A:474:VAL:HG22	1.92	1.00
1:A:151:GLU:OE1	1:A:153:ARG:NE	1.94	1.00
1:A:584:VAL:HA	1:A:645:SER:HG	1.20	1.00
1:A:167:LYS:HA	1:A:225:GLY:O	1.61	1.00
1:A:117:ILE:HD12	1:A:117:ILE:O	0.84	1.00
1:A:221:VAL:HG12	1:A:244:THR:O	1.62	1.00
1:A:246:LYS:HG2	1:A:247:GLU:H	0.83	1.00
1:A:33:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD11	1.41	1.00
1:A:584:VAL:CG1	1:A:645:SER:HB3	1.92	0.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:633:LEU:N	1:A:653:ILE:HD11	1.76	0.99
1:A:157:PHE:CD1	1:A:168:VAL:HG22	1.98	0.99
1:A:138:THR:HG23	1:A:139:LEU:H	1.26	0.99
1:A:215:GLN:NE2	1:A:215:GLN:HA	1.70	0.99
1:A:344:GLU:OE2	1:A:388:LYS:NZ	1.94	0.99
1:A:210:GLN:NE2	1:A:214:LYS:HZ1	1.60	0.99
1:A:699:GLU:O	1:A:703:GLU:N	1.95	0.99
1:A:298:LEU:CD1	1:A:322:GLU:CG	2.41	0.99
1:A:436:ARG:O	1:A:440:SER:CB	2.11	0.99
1:A:743:VAL:HG12	1:A:747:TYR:HE1	1.20	0.99
1:A:298:LEU:HD11	1:A:322:GLU:CG	1.92	0.99
1:A:447:HIS:CE1	1:A:471:GLN:CG	2.44	0.98
1:A:352:LYS:C	1:A:353:ILE:HG12	1.80	0.98
1:A:392:ARG:HH11	1:A:541:VAL:CB	1.75	0.98
1:A:534:ALA:HB2	1:A:746:LEU:HD21	1.43	0.98
1:A:448:VAL:HG23	1:A:474:VAL:HG13	1.43	0.98
1:A:448:VAL:CG2	1:A:474:VAL:HG13	1.94	0.98
1:A:108:GLY:O	1:A:109:GLU:HG3	1.59	0.98
1:A:49:LEU:HD23	1:A:54:LEU:CD2	1.92	0.98
1:A:521:VAL:HG13	1:A:521:VAL:O	1.58	0.98
1:A:130:LYS:CE	1:A:263:GLY:HA3	1.93	0.98
1:A:286:GLU:OE1	1:A:286:GLU:C	2.02	0.98
1:A:228:LYS:CE	1:A:239:HIS:ND1	2.27	0.97
1:A:230:ASN:OD1	1:A:232:TYR:CD2	2.17	0.97
1:A:246:LYS:HG2	1:A:247:GLU:N	1.66	0.97
1:A:269:MET:CE	1:A:273:PHE:HE1	1.75	0.97
1:A:289:PRO:HD2	1:A:292:ILE:HD11	1.46	0.97
1:A:313:THR:HG22	1:A:315:TYR:N	1.79	0.97
1:A:668:ARG:HG3	1:A:669:PHE:CD2	1.98	0.97
1:A:426:THR:HG21	1:A:629:ASP:OD1	1.65	0.97
4:Z:2:DA:H2''	4:Z:3:DG:H5'	1.46	0.97
1:A:441:PHE:C	1:A:443:LYS:H	1.64	0.97
1:A:381:ARG:NH1	1:A:412:ASP:CG	1.89	0.97
1:A:69:TYR:HE2	1:A:87:LYS:HD3	1.26	0.97
1:A:635:PHE:CD1	1:A:643:LEU:HD22	2.00	0.96
1:A:33:LEU:CD2	1:A:85:ILE:CG2	2.36	0.96
1:A:584:VAL:HA	1:A:645:SER:CB	1.93	0.96
1:A:646:THR:O	1:A:647:THR:CB	2.12	0.96
1:A:212:TYR:HA	1:A:215:GLN:CB	1.95	0.96
1:A:201:LEU:HD12	1:A:238:ILE:HG22	1.44	0.96
1:A:20:THR:O	1:A:20:THR:HG22	1.16	0.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:283:SER:O	1:A:284:LEU:HD23	0.78	0.96
1:A:714:GLY:HA2	1:A:717:ILE:CG1	1.96	0.96
1:A:299:LEU:O	1:A:323:ARG:HG3	1.65	0.96
1:A:743:VAL:CG1	1:A:747:TYR:CE1	2.48	0.96
2:X:1:DC:H2''	2:X:2:DA:OP2	1.64	0.96
1:A:586:PRO:CB	1:A:668:ARG:HH11	1.79	0.95
1:A:19:PRO:O	1:A:20:THR:HB	1.66	0.95
1:A:493:LEU:HD23	1:A:494:VAL:CA	1.95	0.95
1:A:546:GLU:HA	1:A:546:GLU:OE1	1.63	0.95
1:A:714:GLY:CA	1:A:717:ILE:HG13	1.95	0.95
1:A:539:LEU:O	1:A:541:VAL:N	1.99	0.95
1:A:529:ARG:NH1	1:A:533:LEU:CD1	2.30	0.95
1:A:704:ARG:NE	1:A:725:ARG:HH22	1.58	0.95
1:A:746:LEU:CA	1:A:749:ASP:OD2	2.14	0.95
1:A:210:GLN:HE21	1:A:214:LYS:HZ1	1.12	0.94
1:A:313:THR:CG2	1:A:315:TYR:CB	2.45	0.94
1:A:398:VAL:HG23	1:A:398:VAL:O	1.67	0.94
1:A:228:LYS:HE3	1:A:239:HIS:CD2	2.02	0.94
1:A:354:GLU:N	1:A:415:GLU:OE1	2.00	0.94
1:A:478:THR:C	1:A:480:ALA:H	1.65	0.94
1:A:573:GLN:HA	1:A:573:GLN:OE1	1.67	0.94
1:A:346:HIS:HD2	1:A:511:MET:CE	1.79	0.94
1:A:649:ILE:O	1:A:676:GLN:NE2	2.01	0.94
1:A:298:LEU:HD12	1:A:323:ARG:N	1.82	0.94
3:Y:7:DC:H2'	3:Y:8:DT:C6	2.03	0.94
1:A:368:LYS:O	1:A:369:LEU:HB2	1.67	0.94
1:A:584:VAL:HA	1:A:645:SER:OG	0.76	0.94
1:A:586:PRO:HB2	1:A:668:ARG:HH11	1.30	0.94
1:A:597:LYS:O	1:A:600:VAL:HG23	1.67	0.94
1:A:298:LEU:CD2	1:A:322:GLU:CG	2.46	0.94
1:A:156:ILE:HD13	1:A:222:PHE:HE2	1.31	0.94
1:A:207:ASP:O	1:A:210:GLN:N	2.01	0.94
1:A:467:LEU:HD13	1:A:472:ILE:HG21	1.43	0.94
1:A:156:ILE:CD1	1:A:222:PHE:CE2	2.51	0.94
1:A:718:ALA:O	1:A:719:GLU:C	2.01	0.94
1:A:24:GLU:OE1	1:A:155:LYS:NZ	2.00	0.94
1:A:207:ASP:O	1:A:208:TYR:O	1.84	0.94
1:A:379:GLU:HG3	1:A:392:ARG:NE	1.83	0.94
1:A:746:LEU:HD12	1:A:749:ASP:OD2	1.68	0.94
1:A:615:LYS:CB	1:A:641:ASP:HB2	1.99	0.93
1:A:404:VAL:O	1:A:407:GLN:HG3	1.68	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:561:MET:O	1:A:563:ARG:N	2.00	0.93
1:A:379:GLU:HG3	1:A:392:ARG:CZ	1.98	0.93
1:A:572:ARG:HG3	1:A:572:ARG:NH1	1.81	0.93
1:A:298:LEU:HD11	1:A:323:ARG:N	1.82	0.93
1:A:350:PRO:HB3	1:A:385:ILE:O	1.66	0.93
1:A:563:ARG:CD	1:A:566:GLU:OE2	2.16	0.93
1:A:392:ARG:HH12	1:A:541:VAL:HG21	1.34	0.93
1:A:434:TYR:CD2	1:A:450:LEU:CG	2.51	0.93
1:A:652:GLY:O	1:A:654:ASP:OD2	1.87	0.93
1:A:749:ASP:O	1:A:753:LEU:HG	1.01	0.93
1:A:117:ILE:CD1	1:A:123:VAL:HG11	1.98	0.93
1:A:678:ARG:HD3	1:A:708:PHE:HZ	1.30	0.93
1:A:248:GLY:CA	1:A:251:VAL:HG12	2.00	0.92
1:A:370:THR:HG23	1:A:373:GLN:CD	1.89	0.92
1:A:379:GLU:CG	1:A:392:ARG:NE	2.32	0.92
1:A:336:PHE:HD1	1:A:538:ASP:HB3	1.20	0.92
1:A:201:LEU:HA	1:A:238:ILE:HG22	1.51	0.92
1:A:381:ARG:HH12	1:A:412:ASP:CG	1.44	0.92
1:A:682:GLY:O	1:A:683:ARG:O	1.88	0.92
1:A:222:PHE:CE1	1:A:246:LYS:HD2	2.04	0.91
1:A:696:ASP:O	1:A:697:VAL:O	1.86	0.91
1:A:191:VAL:HG12	1:A:192:LEU:H	1.35	0.91
1:A:393:LEU:HD12	1:A:521:VAL:CG1	1.99	0.91
1:A:341:LYS:HD3	1:A:342:GLU:N	1.85	0.91
1:A:493:LEU:HD23	1:A:494:VAL:H	1.29	0.91
1:A:561:MET:SD	1:A:695:GLY:CA	2.58	0.91
1:A:298:LEU:HD21	1:A:322:GLU:CG	2.00	0.91
1:A:678:ARG:HD3	1:A:708:PHE:CZ	2.05	0.91
1:A:198:HIS:C	1:A:198:HIS:HD1	1.74	0.91
1:A:290:GLU:HA	1:A:293:LEU:CD1	2.01	0.91
1:A:572:ARG:HH11	1:A:572:ARG:CG	1.84	0.91
1:A:392:ARG:HH12	1:A:541:VAL:CG2	1.84	0.91
1:A:115:THR:HG23	1:A:139:LEU:HD11	1.51	0.91
1:A:246:LYS:HG3	1:A:247:GLU:N	1.84	0.91
3:Y:7:DC:H2''	3:Y:8:DT:H5'	0.93	0.91
1:A:749:ASP:O	1:A:753:LEU:CB	2.18	0.90
1:A:216:LEU:CD2	1:A:217:THR:CA	2.48	0.90
1:A:410:ILE:HG21	1:A:441:PHE:HZ	1.33	0.90
1:A:296:ARG:NH1	1:A:296:ARG:HG2	1.74	0.90
1:A:678:ARG:CD	1:A:708:PHE:CZ	2.55	0.90
4:Z:8:DG:H2''	4:Z:9:DC:H5''	1.50	0.90

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:584:VAL:CG1	1:A:645:SER:CB	2.49	0.90
1:A:73:ILE:CB	1:A:74:PRO:HD3	1.99	0.90
1:A:313:THR:HG22	1:A:316:HIS:H	1.37	0.90
1:A:615:LYS:HD3	1:A:641:ASP:CA	2.02	0.90
1:A:154:ARG:O	1:A:252:ARG:NE	2.06	0.89
1:A:392:ARG:NH1	1:A:541:VAL:CB	2.34	0.89
1:A:707:PHE:CE1	1:A:711:ASN:ND2	2.24	0.89
1:A:423:MET:CE	1:A:478:THR:O	2.20	0.89
1:A:392:ARG:NH1	1:A:541:VAL:CG2	2.36	0.89
1:A:73:ILE:HG23	1:A:84:ARG:CZ	2.02	0.89
1:A:7:PHE:CE2	1:A:11:LEU:HD21	2.08	0.89
1:A:309:HIS:HB3	1:A:310:PHE:CD1	2.08	0.89
1:A:70:VAL:CG1	1:A:73:ILE:HD11	2.03	0.89
1:A:261:THR:O	1:A:261:THR:CG2	2.21	0.89
1:A:298:LEU:CG	1:A:322:GLU:HG2	2.01	0.89
1:A:378:GLN:HE21	1:A:378:GLN:CA	1.79	0.89
1:A:616:LEU:CD2	1:A:642:ILE:HD11	2.02	0.89
1:A:77:PRO:HD2	1:A:80:ARG:HD2	0.93	0.89
1:A:616:LEU:HD21	1:A:642:ILE:HD11	1.53	0.88
1:A:191:VAL:CG1	1:A:199:VAL:O	2.21	0.88
1:A:434:TYR:CE2	1:A:450:LEU:CD1	2.57	0.88
1:A:350:PRO:HG3	1:A:387:GLU:HA	1.51	0.88
1:A:298:LEU:HD22	1:A:322:GLU:CD	1.94	0.88
1:A:633:LEU:N	1:A:653:ILE:CD1	2.35	0.88
1:A:370:THR:HG23	1:A:373:GLN:CG	2.03	0.88
1:A:198:HIS:O	1:A:198:HIS:ND1	2.06	0.88
1:A:370:THR:HG23	1:A:373:GLN:NE2	1.89	0.88
1:A:67:LEU:HD12	1:A:67:LEU:N	1.88	0.88
1:A:43:HIS:NE2	1:A:71:LYS:NZ	2.22	0.88
3:Y:11:DC:O2	3:Y:11:DC:H2'	1.74	0.88
1:A:467:LEU:HD13	1:A:472:ILE:CB	2.03	0.88
1:A:426:THR:HG22	1:A:429:LEU:HD12	1.55	0.88
1:A:159:LEU:HB2	1:A:194:ASP:OD1	1.72	0.87
1:A:434:TYR:HE2	1:A:450:LEU:CD1	1.87	0.87
1:A:448:VAL:CG2	1:A:474:VAL:CG2	2.50	0.87
1:A:349:ILE:HD11	1:A:418:PHE:CZ	2.09	0.87
1:A:174:ILE:CD1	1:A:216:LEU:CD1	2.52	0.87
1:A:174:ILE:HD12	1:A:216:LEU:CD1	2.04	0.87
1:A:335:ALA:O	1:A:339:ILE:CD1	2.22	0.87
1:A:73:ILE:HG23	1:A:84:ARG:NH1	1.89	0.87
1:A:248:GLY:HA3	1:A:251:VAL:CG1	2.03	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:298:LEU:HD13	1:A:322:GLU:HG2	1.57	0.87
1:A:153:ARG:O	1:A:154:ARG:C	2.13	0.87
1:A:313:THR:CG2	1:A:316:HIS:H	1.88	0.87
4:Z:7:DT:H2''	4:Z:8:DG:C5'	2.04	0.87
1:A:615:LYS:HD2	1:A:641:ASP:CB	1.98	0.87
1:A:159:LEU:CB	1:A:194:ASP:OD2	2.23	0.87
1:A:419:GLN:NE2	1:A:488:PHE:HD1	1.60	0.87
1:A:586:PRO:HG2	1:A:668:ARG:CD	2.04	0.87
1:A:704:ARG:HH11	1:A:724:THR:HG21	1.39	0.87
1:A:450:LEU:H	1:A:450:LEU:HD12	1.37	0.86
1:A:752:LEU:HD12	1:A:753:LEU:CG	2.05	0.86
1:A:442:SER:O	1:A:443:LYS:HB2	1.72	0.86
1:A:448:VAL:CG2	1:A:474:VAL:CG1	2.53	0.86
1:A:76:LEU:HD23	1:A:80:ARG:C	1.96	0.86
1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD23	1.35	0.86
1:A:269:MET:C	1:A:272:ILE:HG22	1.96	0.86
1:A:237:GLU:OE1	1:A:239:HIS:NE2	2.07	0.86
2:X:11:DA:H2'	2:X:11:DA:OP1	1.75	0.86
1:A:156:ILE:HD13	1:A:222:PHE:CE2	2.10	0.86
1:A:521:VAL:CG1	1:A:521:VAL:O	2.20	0.86
1:A:212:TYR:HA	1:A:215:GLN:HB3	1.58	0.86
1:A:370:THR:CG2	1:A:373:GLN:CD	2.45	0.86
1:A:69:TYR:CE2	1:A:87:LYS:HD3	2.09	0.86
1:A:33:LEU:C	1:A:35:ASN:H	1.79	0.86
1:A:447:HIS:HE1	1:A:471:GLN:HG2	1.12	0.86
1:A:228:LYS:HG3	1:A:239:HIS:CD2	2.10	0.85
1:A:357:LEU:HD12	1:A:415:GLU:CB	2.02	0.85
1:A:584:VAL:HG12	1:A:645:SER:HB2	1.58	0.85
1:A:647:THR:O	1:A:648:VAL:C	2.15	0.85
1:A:701:ALA:HA	1:A:704:ARG:HD2	1.59	0.85
1:A:215:GLN:NE2	1:A:215:GLN:CA	2.34	0.85
1:A:91:MET:CA	1:A:94:LYS:HB2	2.06	0.85
1:A:210:GLN:NE2	1:A:214:LYS:NZ	2.24	0.85
1:A:174:ILE:CD1	1:A:216:LEU:CD2	2.36	0.85
1:A:410:ILE:HG21	1:A:441:PHE:CZ	2.11	0.85
1:A:459:GLU:O	1:A:463:ILE:HG13	1.77	0.85
1:A:655:VAL:HG22	1:A:658:ALA:HB2	1.58	0.85
1:A:168:VAL:HG13	1:A:169:THR:N	1.91	0.84
1:A:41:ARG:O	1:A:42:ILE:C	2.15	0.84
1:A:648:VAL:HG21	1:A:673:GLN:OE1	1.76	0.84
1:A:214:LYS:C	1:A:216:LEU:H	1.77	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:536:TYR:O	1:A:538:ASP:N	2.10	0.84
1:A:209:LEU:N	1:A:209:LEU:HD23	1.81	0.84
1:A:458:SER:O	1:A:461:GLU:N	2.11	0.84
1:A:748:ARG:CG	1:A:748:ARG:HH11	1.87	0.84
1:A:269:MET:O	1:A:272:ILE:HG22	1.77	0.84
1:A:526:PRO:HB3	1:A:715:PHE:CE2	2.12	0.84
1:A:169:THR:HG23	1:A:224:THR:CG2	2.04	0.84
1:A:468:ARG:HG3	1:A:468:ARG:HH11	1.41	0.84
1:A:210:GLN:HE21	1:A:214:LYS:NZ	1.73	0.84
1:A:305:TYR:CE1	1:A:324:LEU:HD21	2.12	0.84
1:A:336:PHE:HD1	1:A:538:ASP:CB	1.90	0.84
1:A:419:GLN:CD	1:A:488:PHE:CD1	2.51	0.84
1:A:46:LEU:HD11	1:A:67:LEU:HD23	1.57	0.83
1:A:598:SER:O	1:A:602:MET:N	2.11	0.83
1:A:84:ARG:NH2	1:A:85:ILE:CG1	2.41	0.83
1:A:244:THR:C	1:A:245:PRO:O	2.15	0.83
1:A:292:ILE:O	1:A:295:LYS:N	2.10	0.83
1:A:336:PHE:CD1	1:A:538:ASP:CB	2.57	0.83
1:A:646:THR:O	1:A:647:THR:OG1	1.96	0.83
1:A:298:LEU:CD2	1:A:322:GLU:CD	2.45	0.83
1:A:298:LEU:HD21	1:A:322:GLU:OE1	1.78	0.83
1:A:24:GLU:O	1:A:27:ASN:CB	2.26	0.83
1:A:447:HIS:CE1	1:A:471:GLN:O	2.32	0.83
4:Z:7:DT:C2'	4:Z:8:DG:H5''	2.09	0.83
1:A:181:LYS:C	1:A:182:PHE:HD1	1.81	0.83
1:A:313:THR:HG22	1:A:315:TYR:CA	2.09	0.82
1:A:76:LEU:CD2	1:A:80:ARG:O	2.26	0.82
1:A:701:ALA:O	1:A:704:ARG:CG	2.22	0.82
1:A:159:LEU:HD12	1:A:194:ASP:OD2	1.78	0.82
1:A:298:LEU:HD12	1:A:323:ARG:CA	2.08	0.82
1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CD2	2.39	0.82
1:A:248:GLY:HA3	1:A:251:VAL:HG12	1.61	0.82
1:A:467:LEU:HD13	1:A:472:ILE:HB	1.62	0.82
1:A:468:ARG:O	1:A:469:ASN:ND2	2.11	0.82
1:A:29:VAL:O	1:A:32:MET:CB	2.28	0.82
1:A:110:GLU:HG2	1:A:110:GLU:O	1.76	0.82
1:A:549:PRO:C	1:A:551:ARG:H	1.80	0.82
1:A:126:ASN:ND2	1:A:127:ARG:N	2.27	0.81
1:A:198:HIS:C	1:A:198:HIS:ND1	2.32	0.81
1:A:191:VAL:CG1	1:A:199:VAL:C	2.49	0.81
1:A:313:THR:HG22	1:A:316:HIS:N	1.93	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:335:ALA:O	1:A:339:ILE:HD13	1.80	0.81
1:A:346:HIS:CD2	1:A:511:MET:HE1	2.15	0.81
1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:CD2	1.91	0.81
1:A:168:VAL:CG1	1:A:169:THR:N	2.43	0.81
1:A:33:LEU:HD21	1:A:89:LEU:CD1	2.09	0.81
1:A:346:HIS:HD2	1:A:511:MET:HE1	1.45	0.81
1:A:478:THR:OG1	1:A:480:ALA:HB2	1.80	0.81
1:A:269:MET:HA	1:A:272:ILE:HG21	1.62	0.81
1:A:531:MET:HG2	1:A:535:PHE:HD2	1.45	0.81
1:A:572:ARG:O	1:A:576:MET:HB2	1.78	0.81
2:X:3:DG:H1'	2:X:4:DC:H5''	1.61	0.81
1:A:205:ASN:HB2	3:Y:11:DC:H6	1.44	0.81
1:A:563:ARG:HG3	1:A:566:GLU:CD	2.01	0.81
1:A:377:HIS:HE1	1:A:381:ARG:HH11	1.29	0.81
1:A:573:GLN:O	1:A:575:VAL:N	2.13	0.81
1:A:549:PRO:C	1:A:551:ARG:N	2.32	0.81
1:A:748:ARG:O	1:A:752:LEU:CG	2.28	0.81
3:Y:1:DG:H8	3:Y:1:DG:HO5'	1.29	0.81
1:A:121:LYS:HG3	1:A:122:GLY:N	1.94	0.81
1:A:29:VAL:HA	1:A:32:MET:HB2	1.63	0.81
1:A:301:VAL:O	1:A:304:ALA:N	2.13	0.81
1:A:531:MET:HG3	1:A:535:PHE:CE2	2.16	0.81
1:A:615:LYS:HD3	1:A:641:ASP:OD2	1.65	0.81
1:A:748:ARG:CD	1:A:752:LEU:HD21	2.11	0.81
1:A:70:VAL:HG13	1:A:73:ILE:HD11	1.60	0.80
1:A:156:ILE:HD11	1:A:222:PHE:CE2	2.13	0.80
1:A:303:ASP:O	1:A:306:TYR:HB3	1.82	0.80
1:A:434:TYR:C	1:A:434:TYR:HD1	1.84	0.80
1:A:75:ASN:O	1:A:76:LEU:HD12	1.80	0.80
3:Y:19:DT:H2''	3:Y:20:DG:OP2	1.81	0.80
1:A:280:LEU:O	1:A:281:CYS:C	2.16	0.80
1:A:298:LEU:HD12	1:A:323:ARG:HB2	1.63	0.80
1:A:678:ARG:CD	1:A:708:PHE:HZ	1.93	0.80
1:A:73:ILE:O	1:A:76:LEU:CB	2.30	0.80
1:A:174:ILE:HD11	1:A:216:LEU:HD21	0.82	0.80
1:A:301:VAL:O	1:A:303:ASP:N	2.14	0.80
1:A:309:HIS:C	1:A:310:PHE:CD1	2.55	0.80
1:A:405:VAL:HA	1:A:408:LEU:HD13	1.64	0.80
1:A:212:TYR:O	1:A:215:GLN:HB3	1.82	0.80
1:A:675:HIS:O	1:A:676:GLN:C	2.19	0.80
1:A:70:VAL:O	1:A:72:GLU:N	2.14	0.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:410:ILE:CG2	1:A:441:PHE:CZ	2.61	0.80
1:A:295:LYS:HD3	1:A:296:ARG:NH1	1.96	0.80
1:A:309:HIS:HB3	1:A:310:PHE:CE1	2.16	0.80
1:A:33:LEU:HD22	1:A:85:ILE:HG21	1.60	0.80
1:A:547:MET:HG3	1:A:548:PRO:HD2	0.82	0.80
1:A:620:HIS:HD2	1:A:623:LEU:CD1	1.83	0.80
1:A:550:GLY:O	1:A:552:LYS:HG3	1.81	0.80
1:A:618:LEU:HG	1:A:619:MET:N	1.95	0.80
1:A:531:MET:HG3	1:A:535:PHE:HE2	1.48	0.79
1:A:584:VAL:CG2	1:A:663:ILE:HA	2.12	0.79
1:A:188:LEU:HD21	1:A:213:LEU:CD1	2.13	0.79
1:A:51:ASP:C	1:A:51:ASP:OD1	2.18	0.79
1:A:91:MET:HA	1:A:94:LYS:HD2	1.63	0.79
1:A:573:GLN:O	1:A:576:MET:N	2.14	0.79
1:A:438:VAL:O	1:A:442:SER:N	2.16	0.79
1:A:46:LEU:HD11	1:A:67:LEU:CD2	2.13	0.79
1:A:309:HIS:C	1:A:310:PHE:HD1	1.85	0.79
1:A:201:LEU:CD1	1:A:238:ILE:CG2	2.44	0.79
1:A:269:MET:C	1:A:272:ILE:CG2	2.51	0.79
1:A:289:PRO:HD2	1:A:292:ILE:CD1	2.13	0.79
1:A:312:LYS:O	1:A:312:LYS:HD2	1.82	0.79
1:A:392:ARG:NH1	1:A:541:VAL:HG21	1.96	0.79
1:A:704:ARG:NE	1:A:725:ARG:NH2	2.26	0.79
1:A:88:SER:O	1:A:91:MET:N	2.16	0.79
1:A:257:ILE:CG2	1:A:257:ILE:O	2.26	0.79
1:A:426:THR:CG2	1:A:429:LEU:HB2	2.11	0.79
1:A:168:VAL:HG13	1:A:169:THR:H	1.48	0.78
1:A:529:ARG:HH12	1:A:533:LEU:HD11	1.47	0.78
1:A:205:ASN:CB	3:Y:11:DC:H6	1.96	0.78
1:A:255:LEU:CD1	1:A:270:ARG:CZ	2.61	0.78
1:A:67:LEU:HD12	1:A:67:LEU:H	1.45	0.78
1:A:216:LEU:HD22	1:A:217:THR:N	1.98	0.78
1:A:309:HIS:CB	1:A:310:PHE:HD1	1.97	0.78
1:A:313:THR:CG2	1:A:315:TYR:N	2.47	0.78
1:A:440:SER:C	1:A:442:SER:H	1.86	0.78
1:A:682:GLY:O	1:A:686:GLN:HB2	1.83	0.78
1:A:67:LEU:O	1:A:71:LYS:HG2	1.83	0.78
1:A:156:ILE:CD1	1:A:222:PHE:HE2	1.90	0.78
1:A:24:GLU:CD	1:A:155:LYS:NZ	2.36	0.78
1:A:212:TYR:HD2	1:A:212:TYR:C	1.87	0.78
1:A:388:LYS:HB2	1:A:389:PRO:HD2	1.64	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:408:LEU:H	1:A:408:LEU:HD12	1.48	0.78
1:A:186:ASN:O	1:A:187:ILE:HG13	1.84	0.78
1:A:563:ARG:CG	1:A:566:GLU:CD	2.52	0.78
1:A:459:GLU:O	1:A:463:ILE:CG1	2.31	0.78
1:A:586:PRO:HG3	1:A:669:PHE:CZ	2.18	0.78
1:A:292:ILE:O	1:A:293:LEU:C	2.21	0.78
1:A:615:LYS:HB3	1:A:641:ASP:HB2	1.66	0.78
1:A:743:VAL:O	1:A:745:ASP:N	2.17	0.78
1:A:7:PHE:HE2	1:A:11:LEU:HD21	1.46	0.78
1:A:191:VAL:HG12	1:A:192:LEU:N	1.98	0.77
1:A:377:HIS:CE1	1:A:381:ARG:HH11	2.02	0.77
1:A:37:VAL:HG12	1:A:38:ASN:N	1.99	0.77
1:A:632:MET:C	1:A:653:ILE:HD11	2.05	0.77
1:A:37:VAL:HG21	1:A:73:ILE:CG1	2.14	0.77
1:A:174:ILE:HG12	1:A:174:ILE:O	1.84	0.77
1:A:524:ALA:CB	1:A:651:VAL:HG11	2.14	0.77
1:A:173:LYS:HA	1:A:220:GLU:HA	1.67	0.77
1:A:58:ASP:O	1:A:59:LEU:C	2.21	0.77
1:A:324:LEU:HB3	1:A:738:LEU:HD13	1.66	0.77
1:A:211:THR:O	1:A:215:GLN:HB2	1.84	0.77
1:A:741:PHE:H	1:A:741:PHE:HD1	1.32	0.77
1:A:534:ALA:CB	1:A:746:LEU:HD21	2.15	0.77
1:A:214:LYS:C	1:A:216:LEU:N	2.34	0.77
1:A:48:GLU:OE1	1:A:48:GLU:CA	2.33	0.77
1:A:643:LEU:O	1:A:644:VAL:HG23	1.84	0.77
1:A:228:LYS:NZ	1:A:239:HIS:ND1	2.33	0.77
1:A:117:ILE:HG21	1:A:137:GLU:HA	1.66	0.77
1:A:326:TYR:CE1	1:A:752:LEU:HD13	2.19	0.77
1:A:341:LYS:HD3	1:A:342:GLU:H	1.50	0.77
1:A:269:MET:CE	1:A:273:PHE:CE1	2.58	0.76
1:A:380:ILE:CG2	1:A:384:MET:CE	2.62	0.76
1:A:586:PRO:CG	1:A:668:ARG:HD2	2.13	0.76
1:A:478:THR:C	1:A:480:ALA:N	2.38	0.76
1:A:77:PRO:O	1:A:80:ARG:HB2	1.84	0.76
1:A:93:GLU:HA	1:A:96:ARG:HG3	1.67	0.76
1:A:157:PHE:CD1	1:A:168:VAL:CG2	2.67	0.76
1:A:424:VAL:HG13	1:A:425:PRO:HD2	1.68	0.76
1:A:616:LEU:HG	1:A:642:ILE:CG1	2.15	0.76
1:A:544:ILE:HG23	1:A:715:PHE:CZ	2.20	0.76
1:A:299:LEU:HD23	1:A:299:LEU:H	0.64	0.76
1:A:67:LEU:H	1:A:67:LEU:CD1	1.98	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:106:CYS:O	1:A:107:SER:HB3	1.85	0.76
1:A:174:ILE:HD11	1:A:216:LEU:CG	2.14	0.76
1:A:216:LEU:CD2	1:A:217:THR:HA	2.15	0.76
1:A:368:LYS:HE3	1:A:549:PRO:HG2	1.68	0.76
1:A:752:LEU:HB2	1:A:753:LEU:HD23	1.67	0.76
1:A:434:TYR:C	1:A:434:TYR:CD1	2.57	0.76
1:A:336:PHE:CZ	1:A:536:TYR:O	2.39	0.76
1:A:671:LEU:O	1:A:721:ASP:OD2	2.04	0.76
2:X:8:DA:H2''	2:X:9:DT:OP2	1.85	0.76
1:A:546:GLU:OE1	1:A:546:GLU:CA	2.34	0.76
1:A:704:ARG:HE	1:A:725:ARG:HH22	1.33	0.76
1:A:488:PHE:HD2	1:A:489:LYS:N	1.84	0.75
1:A:620:HIS:HD2	1:A:623:LEU:HD12	0.95	0.75
1:A:629:ASP:O	1:A:630:ARG:C	2.23	0.75
1:A:685:GLY:O	1:A:687:GLU:N	2.20	0.75
1:A:354:GLU:O	1:A:415:GLU:OE1	2.05	0.75
1:A:159:LEU:O	1:A:160:ASN:HB2	1.86	0.75
1:A:159:LEU:O	1:A:160:ASN:CB	2.35	0.75
1:A:526:PRO:O	1:A:527:ILE:HG13	1.86	0.75
1:A:138:THR:HG22	1:A:141:ASP:H	1.50	0.75
1:A:212:TYR:HA	1:A:215:GLN:HB2	1.67	0.75
1:A:33:LEU:C	1:A:35:ASN:N	2.39	0.75
1:A:370:THR:CG2	1:A:373:GLN:NE2	2.49	0.75
1:A:370:THR:HG23	1:A:373:GLN:HG3	1.66	0.75
1:A:191:VAL:CG1	1:A:192:LEU:H	2.00	0.75
1:A:245:PRO:O	1:A:246:LYS:HB2	1.85	0.75
1:A:524:ALA:HB3	1:A:651:VAL:HG11	1.69	0.75
1:A:84:ARG:HB3	1:A:84:ARG:CZ	2.15	0.75
1:A:269:MET:HA	1:A:272:ILE:CG2	2.17	0.75
1:A:295:LYS:HD3	1:A:296:ARG:HH12	1.50	0.75
1:A:370:THR:HG1	1:A:372:ALA:HB3	1.51	0.75
1:A:379:GLU:HG3	1:A:392:ARG:NH2	2.01	0.75
1:A:423:MET:HE1	1:A:479:HIS:HA	1.69	0.75
1:A:528:PRO:HD3	1:A:718:ALA:HB1	1.69	0.74
1:A:369:LEU:HD12	1:A:373:GLN:NE2	2.02	0.74
1:A:630:ARG:O	1:A:634:GLU:HG3	1.88	0.74
1:A:564:VAL:CG2	1:A:568:TYR:CE1	2.70	0.74
1:A:205:ASN:HB2	3:Y:11:DC:C6	2.22	0.74
1:A:354:GLU:C	1:A:415:GLU:OE1	2.26	0.74
1:A:357:LEU:HB2	1:A:415:GLU:OE2	1.87	0.74
3:Y:11:DC:H2''	3:Y:12:DA:C8	2.23	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:Y:18:DC:N1	3:Y:19:DT:H72	2.03	0.74
2:X:11:DA:OP1	2:X:11:DA:H8	1.70	0.74
3:Y:10:DG:H2"	3:Y:11:DC:O5'	1.86	0.74
1:A:295:LYS:CD	1:A:296:ARG:HH12	2.01	0.74
1:A:82:ARG:O	1:A:85:ILE:N	2.20	0.74
1:A:509:ALA:O	1:A:510:LEU:HD23	1.86	0.74
1:A:50:ASP:O	1:A:51:ASP:CB	2.31	0.74
1:A:531:MET:HG2	1:A:535:PHE:CD2	2.23	0.73
1:A:668:ARG:HD2	1:A:669:PHE:HE2	1.52	0.73
1:A:179:THR:HG21	1:A:210:GLN:HE22	1.53	0.73
1:A:180:LYS:N	1:A:187:ILE:O	2.21	0.73
1:A:388:LYS:HB2	1:A:389:PRO:HD3	1.69	0.73
1:A:188:LEU:HD21	1:A:213:LEU:HD11	1.70	0.73
1:A:380:ILE:HG12	1:A:390:MET:CE	2.14	0.73
1:A:138:THR:CG2	1:A:141:ASP:H	2.01	0.73
1:A:398:VAL:CG2	1:A:398:VAL:O	2.36	0.73
1:A:629:ASP:OD2	1:A:629:ASP:N	2.18	0.73
1:A:123:VAL:CG1	1:A:124:GLY:N	2.50	0.73
1:A:455:THR:O	1:A:460:LYS:NZ	2.16	0.73
1:A:81:LYS:HA	1:A:84:ARG:NH1	2.03	0.73
1:A:752:LEU:C	1:A:753:LEU:HD23	2.09	0.73
1:A:117:ILE:HG22	1:A:138:THR:N	2.04	0.73
1:A:133:LYS:O	1:A:134:LEU:HD23	1.89	0.73
1:A:549:PRO:O	1:A:551:ARG:N	2.21	0.73
1:A:610:VAL:O	1:A:611:PHE:CG	2.40	0.73
1:A:630:ARG:HH11	1:A:630:ARG:HA	1.51	0.73
1:A:166:GLU:OE1	1:A:166:GLU:HA	1.88	0.73
1:A:419:GLN:HG2	1:A:488:PHE:CD1	2.22	0.73
1:A:423:MET:CE	1:A:479:HIS:HA	2.18	0.73
1:A:748:ARG:C	1:A:752:LEU:HD11	2.07	0.73
1:A:410:ILE:HG22	1:A:441:PHE:HZ	1.50	0.73
1:A:25:PHE:HE1	1:A:45:LEU:HB3	1.54	0.73
2:X:11:DA:C8	2:X:11:DA:OP1	2.42	0.73
1:A:309:HIS:CB	1:A:310:PHE:CD1	2.72	0.72
1:A:212:TYR:CD2	1:A:212:TYR:C	2.62	0.72
1:A:440:SER:C	1:A:442:SER:N	2.42	0.72
1:A:580:GLN:HB3	1:A:641:ASP:O	1.89	0.72
1:A:748:ARG:O	1:A:752:LEU:HG	1.88	0.72
1:A:143:LEU:C	1:A:145:PHE:H	1.91	0.72
1:A:228:LYS:HE3	1:A:239:HIS:CE1	2.24	0.72
1:A:298:LEU:HD12	1:A:323:ARG:CB	2.19	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:380:ILE:HG23	1:A:384:MET:CE	2.19	0.72
1:A:59:LEU:HD12	1:A:99:PHE:CD2	2.24	0.72
1:A:615:LYS:HB3	1:A:641:ASP:CB	2.18	0.72
1:A:38:ASN:O	1:A:39:THR:C	2.28	0.72
1:A:561:MET:CE	1:A:695:GLY:HA2	2.19	0.72
1:A:564:VAL:HG22	1:A:568:TYR:CE1	2.24	0.72
4:Z:3:DG:H1'	4:Z:4:DC:H5'	1.71	0.72
1:A:205:ASN:C	1:A:206:GLN:HG2	2.08	0.72
1:A:188:LEU:CD2	1:A:209:LEU:HB2	2.20	0.72
1:A:448:VAL:HG22	1:A:474:VAL:CB	2.19	0.72
1:A:632:MET:O	1:A:633:LEU:C	2.25	0.72
1:A:239:HIS:O	1:A:240:ASN:HB2	1.90	0.71
1:A:185:MET:HE1	1:A:204:PHE:HD1	1.55	0.71
1:A:231:ALA:O	1:A:233:THR:N	2.22	0.71
1:A:551:ARG:HG3	1:A:552:LYS:N	2.05	0.71
1:A:92:ILE:O	1:A:95:LEU:N	2.23	0.71
1:A:58:ASP:O	1:A:61:GLU:N	2.23	0.71
1:A:707:PHE:CD2	1:A:711:ASN:ND2	2.48	0.71
1:A:563:ARG:HD2	1:A:566:GLU:CD	2.11	0.71
1:A:668:ARG:HG3	1:A:669:PHE:HD2	1.55	0.71
1:A:313:THR:CG2	1:A:315:TYR:CA	2.67	0.71
1:A:127:ARG:HH21	1:A:127:ARG:HG2	1.55	0.71
1:A:58:ASP:O	1:A:60:GLU:N	2.22	0.71
1:A:64:GLN:O	1:A:65:ALA:C	2.29	0.71
1:A:124:GLY:HA3	4:Z:4:DC:OP1	1.90	0.71
1:A:137:GLU:O	1:A:141:ASP:CB	2.36	0.71
1:A:341:LYS:CD	1:A:342:GLU:N	2.54	0.71
1:A:346:HIS:CD2	1:A:511:MET:CE	2.67	0.71
1:A:122:GLY:O	4:Z:4:DC:H4'	1.91	0.71
1:A:67:LEU:O	1:A:71:LYS:CG	2.39	0.71
1:A:752:LEU:HD13	1:A:753:LEU:HD21	1.72	0.71
1:A:185:MET:HG3	1:A:186:ASN:N	2.05	0.71
1:A:447:HIS:HE1	1:A:471:GLN:CB	2.04	0.70
1:A:529:ARG:HH11	1:A:533:LEU:HG	1.56	0.70
1:A:529:ARG:NH1	1:A:533:LEU:CG	2.53	0.70
1:A:678:ARG:HD2	1:A:708:PHE:CZ	2.26	0.70
1:A:63:LEU:O	1:A:66:PHE:N	2.23	0.70
1:A:7:PHE:CD2	1:A:11:LEU:CD1	2.07	0.70
1:A:9:SER:O	1:A:11:LEU:N	2.24	0.70
1:A:395:GLN:NE2	1:A:526:PRO:CA	2.51	0.70
1:A:488:PHE:HD2	1:A:490:ASN:H	1.39	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:620:HIS:ND1	1:A:620:HIS:N	2.36	0.70
2:X:5:DT:H73	3:Y:16:DA:H61	1.55	0.70
3:Y:8:DT:H2'	3:Y:8:DT:O5'	1.91	0.70
1:A:29:VAL:O	1:A:32:MET:HB3	1.91	0.70
1:A:335:ALA:O	1:A:339:ILE:HD12	1.89	0.70
1:A:180:LYS:HD2	1:A:187:ILE:CG2	2.21	0.70
1:A:230:ASN:O	1:A:231:ALA:CB	2.40	0.70
1:A:25:PHE:HE1	1:A:45:LEU:CB	2.04	0.70
1:A:69:TYR:HE2	1:A:87:LYS:CD	2.02	0.70
1:A:152:ASP:O	1:A:153:ARG:CG	2.40	0.70
1:A:152:ASP:CG	1:A:154:ARG:HH12	1.92	0.70
1:A:326:TYR:HE1	1:A:752:LEU:CD1	2.04	0.70
1:A:486:VAL:CG1	1:A:487:HIS:N	2.54	0.70
1:A:139:LEU:C	1:A:142:LEU:H	1.92	0.70
1:A:152:ASP:CG	1:A:154:ARG:NH1	2.44	0.70
1:A:164:PRO:HG3	1:A:236:TYR:CZ	2.27	0.70
1:A:395:GLN:HE22	1:A:527:ILE:N	1.89	0.70
1:A:116:ASP:HB2	1:A:128:LYS:NZ	2.07	0.70
1:A:268:GLN:O	1:A:272:ILE:HG22	1.91	0.70
1:A:395:GLN:HE22	1:A:527:ILE:H	1.36	0.70
1:A:604:GLU:HG2	1:A:604:GLU:O	1.89	0.70
1:A:67:LEU:N	1:A:67:LEU:CD1	2.55	0.69
1:A:69:TYR:O	1:A:72:GLU:HG2	1.92	0.69
1:A:212:TYR:CA	1:A:215:GLN:CB	2.68	0.69
1:A:380:ILE:HG23	1:A:384:MET:HE2	1.74	0.69
1:A:380:ILE:CG2	1:A:384:MET:HE3	2.22	0.69
3:Y:5:DT:H2''	3:Y:6:DG:H5'	1.73	0.69
1:A:113:LEU:O	1:A:139:LEU:HD13	1.93	0.69
1:A:164:PRO:CA	1:A:236:TYR:HE2	2.04	0.69
1:A:746:LEU:CD1	1:A:749:ASP:OD2	2.40	0.69
1:A:573:GLN:O	1:A:574:GLU:C	2.27	0.69
1:A:24:GLU:OE2	1:A:155:LYS:NZ	2.26	0.69
1:A:510:LEU:O	1:A:517:VAL:HG23	1.92	0.69
1:A:51:ASP:OD1	1:A:53:LEU:N	2.25	0.69
1:A:209:LEU:O	1:A:213:LEU:HG	1.93	0.69
1:A:91:MET:HA	1:A:94:LYS:CB	2.21	0.69
1:A:223:VAL:HG22	1:A:243:VAL:HG22	1.75	0.69
1:A:544:ILE:CG2	1:A:715:PHE:CZ	2.75	0.69
1:A:380:ILE:CG2	1:A:384:MET:HE2	2.23	0.69
1:A:618:LEU:O	1:A:644:VAL:O	2.10	0.69
1:A:563:ARG:O	1:A:566:GLU:HB2	1.93	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:Y:18:DC:C6	3:Y:19:DT:H72	2.28	0.69
1:A:166:GLU:O	1:A:227:VAL:HG23	1.92	0.69
1:A:395:GLN:HE21	1:A:526:PRO:CA	1.91	0.69
1:A:558:LEU:HB3	1:A:692:LEU:HD11	1.75	0.69
3:Y:18:DC:C2'	3:Y:19:DT:H72	2.23	0.69
1:A:224:THR:O	1:A:241:ALA:HA	1.93	0.68
1:A:298:LEU:HB3	1:A:319:LYS:HG3	1.73	0.68
3:Y:5:DT:H2''	3:Y:6:DG:C5'	2.22	0.68
1:A:298:LEU:CD1	1:A:323:ARG:CA	2.68	0.68
1:A:35:ASN:C	1:A:36:GLN:HG3	2.12	0.68
1:A:93:GLU:OE1	1:A:96:ARG:NH2	2.26	0.68
1:A:482:ILE:CG2	1:A:482:ILE:O	2.41	0.68
1:A:659:ASN:O	1:A:688:ALA:HB1	1.93	0.68
1:A:660:VAL:HG23	1:A:689:TYR:HB2	1.75	0.68
1:A:354:GLU:HB2	1:A:415:GLU:CD	2.12	0.68
1:A:426:THR:HG23	1:A:429:LEU:CB	2.18	0.68
1:A:655:VAL:CG2	1:A:658:ALA:HB2	2.23	0.68
1:A:743:VAL:CG1	1:A:747:TYR:HE1	2.00	0.68
1:A:261:THR:O	1:A:262:SER:C	2.32	0.68
1:A:547:MET:CG	1:A:548:PRO:CD	2.53	0.68
1:A:357:LEU:O	1:A:360:GLU:HB2	1.93	0.68
1:A:336:PHE:CE1	1:A:536:TYR:C	2.67	0.68
1:A:123:VAL:HG12	1:A:124:GLY:N	2.09	0.67
1:A:214:LYS:O	1:A:216:LEU:N	2.27	0.67
1:A:633:LEU:H	1:A:653:ILE:CD1	2.05	0.67
1:A:191:VAL:HG11	1:A:199:VAL:C	2.13	0.67
1:A:405:VAL:HA	1:A:408:LEU:CD1	2.23	0.67
1:A:457:PRO:HA	1:A:460:LYS:HG3	1.75	0.67
1:A:646:THR:C	1:A:647:THR:CG2	2.46	0.67
1:A:159:LEU:HB2	1:A:194:ASP:CG	2.15	0.67
1:A:675:HIS:O	1:A:676:GLN:O	2.12	0.67
1:A:719:GLU:HA	1:A:719:GLU:OE2	1.94	0.67
1:A:530:SER:OG	1:A:741:PHE:CE2	2.46	0.67
1:A:486:VAL:HG13	1:A:487:HIS:N	2.09	0.67
1:A:618:LEU:O	1:A:619:MET:HB3	1.94	0.67
1:A:749:ASP:O	1:A:753:LEU:HB2	1.92	0.67
1:A:331:VAL:HG12	1:A:332:LEU:HD23	1.76	0.67
1:A:38:ASN:O	1:A:41:ARG:N	2.28	0.67
1:A:440:SER:O	1:A:442:SER:N	2.28	0.67
1:A:230:ASN:O	1:A:231:ALA:HB3	1.94	0.67
1:A:434:TYR:HD1	1:A:435:ARG:N	1.93	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:620:HIS:O	1:A:647:THR:CG2	2.42	0.67
1:A:704:ARG:HH11	1:A:724:THR:CG2	2.08	0.67
1:A:413:ASN:C	1:A:413:ASN:HD22	1.98	0.67
1:A:9:SER:C	1:A:11:LEU:H	1.98	0.67
1:A:332:LEU:HD12	1:A:534:ALA:O	1.95	0.67
1:A:423:MET:HE1	1:A:478:THR:O	1.93	0.67
1:A:538:ASP:C	1:A:538:ASP:OD1	2.33	0.67
1:A:212:TYR:CA	1:A:215:GLN:HB2	2.24	0.67
1:A:419:GLN:CG	1:A:488:PHE:CD1	2.77	0.67
1:A:627:GLU:HB3	1:A:630:ARG:HB2	1.77	0.67
1:A:441:PHE:C	1:A:443:LYS:N	2.33	0.66
3:Y:14:DG:O5'	3:Y:14:DG:H2'	1.95	0.66
1:A:212:TYR:CA	1:A:215:GLN:HB3	2.24	0.66
1:A:468:ARG:HH11	1:A:468:ARG:CG	2.06	0.66
1:A:708:PHE:HD2	1:A:708:PHE:C	1.99	0.66
1:A:379:GLU:HG3	1:A:392:ARG:HE	1.58	0.66
1:A:42:ILE:O	1:A:45:LEU:N	2.28	0.66
1:A:25:PHE:CE1	1:A:45:LEU:HB3	2.30	0.66
1:A:313:THR:HG23	1:A:315:TYR:HB3	1.72	0.66
1:A:298:LEU:HD21	1:A:322:GLU:HG2	1.70	0.66
1:A:400:SER:HA	1:A:548:PRO:CD	2.26	0.66
1:A:38:ASN:ND2	1:A:40:ARG:HB2	2.11	0.66
1:A:707:PHE:CD1	1:A:711:ASN:ND2	2.60	0.66
1:A:116:ASP:N	1:A:116:ASP:OD2	2.29	0.66
1:A:410:ILE:HG22	1:A:441:PHE:CZ	2.29	0.66
1:A:493:LEU:C	1:A:493:LEU:HD22	2.16	0.66
1:A:370:THR:CG2	1:A:373:GLN:HG3	2.25	0.66
1:A:529:ARG:HH11	1:A:533:LEU:CG	2.09	0.66
1:A:664:GLU:C	1:A:666:PRO:HD3	2.16	0.66
1:A:321:ARG:O	1:A:324:LEU:N	2.29	0.66
1:A:90:GLU:OE2	1:A:94:LYS:NZ	2.22	0.66
1:A:159:LEU:CD1	1:A:194:ASP:OD2	2.42	0.66
1:A:558:LEU:H	1:A:558:LEU:HD23	1.61	0.65
1:A:49:LEU:HD22	1:A:54:LEU:CD2	2.09	0.65
1:A:37:VAL:HG21	1:A:73:ILE:HD13	0.66	0.65
1:A:119:TYR:C	1:A:120:ALA:O	2.33	0.65
1:A:128:LYS:O	1:A:132:LYS:HG3	1.96	0.65
1:A:326:TYR:HE1	1:A:752:LEU:HD13	1.57	0.65
1:A:93:GLU:OE1	1:A:96:ARG:NE	2.29	0.65
1:A:152:ASP:O	1:A:153:ARG:HG3	1.95	0.65
1:A:280:LEU:O	1:A:282:CYS:N	2.29	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:376:ALA:HA	1:A:543:VAL:HG11	1.79	0.65
1:A:7:PHE:CD2	1:A:11:LEU:CG	2.77	0.65
1:A:269:MET:CA	1:A:272:ILE:CG2	2.74	0.65
1:A:531:MET:CG	1:A:535:PHE:CD2	2.80	0.65
1:A:563:ARG:CD	1:A:566:GLU:CD	2.64	0.65
1:A:528:PRO:HD3	1:A:718:ALA:CB	2.26	0.65
1:A:124:GLY:CA	4:Z:4:DC:OP1	2.45	0.65
1:A:264:ILE:HG22	1:A:268:GLN:HB2	1.78	0.65
1:A:378:GLN:O	1:A:382:ASN:OD1	2.15	0.65
1:A:85:ILE:O	1:A:88:SER:N	2.29	0.65
1:A:228:LYS:HE3	1:A:239:HIS:CB	2.23	0.65
1:A:501:ARG:O	1:A:502:PHE:HB2	1.96	0.65
1:A:616:LEU:HG	1:A:642:ILE:HG12	1.77	0.65
1:A:682:GLY:O	1:A:683:ARG:C	2.31	0.65
1:A:708:PHE:C	1:A:708:PHE:CD2	2.65	0.65
1:A:643:LEU:O	1:A:644:VAL:CG2	2.45	0.65
1:A:321:ARG:HB3	1:A:738:LEU:CD2	2.26	0.65
1:A:91:MET:O	1:A:95:LEU:N	2.29	0.65
1:A:159:LEU:HB3	1:A:194:ASP:OD2	1.97	0.65
1:A:389:PRO:HG3	1:A:516:MET:HB2	1.79	0.65
1:A:159:LEU:HB2	1:A:194:ASP:OD2	1.97	0.64
1:A:422:PHE:CE1	1:A:495:ILE:HG22	2.31	0.64
1:A:647:THR:O	1:A:648:VAL:O	2.15	0.64
1:A:404:VAL:O	1:A:407:GLN:CG	2.45	0.64
1:A:98:TRP:HE3	1:A:98:TRP:HA	1.62	0.64
1:A:14:TRP:CE3	1:A:14:TRP:HA	2.32	0.64
1:A:179:THR:HA	1:A:187:ILE:O	1.97	0.64
1:A:185:MET:HE1	1:A:204:PHE:CD1	2.32	0.64
1:A:668:ARG:HG3	1:A:669:PHE:CE2	2.31	0.64
1:A:582:PHE:CE2	1:A:681:VAL:CG2	2.80	0.64
1:A:74:PRO:O	1:A:76:LEU:N	2.28	0.64
1:A:38:ASN:O	1:A:40:ARG:N	2.31	0.64
1:A:419:GLN:NE2	1:A:488:PHE:CG	2.35	0.64
1:A:204:PHE:HB2	3:Y:11:DC:H5	1.63	0.64
1:A:37:VAL:HG22	1:A:73:ILE:CD1	1.90	0.64
1:A:494:VAL:HG21	1:A:510:LEU:HD12	1.79	0.64
1:A:635:PHE:CE1	1:A:643:LEU:HD22	2.31	0.64
1:A:678:ARG:CD	1:A:708:PHE:CE2	2.79	0.64
1:A:749:ASP:O	1:A:750:LEU:C	2.35	0.64
1:A:466:GLY:HA3	1:A:472:ILE:HD12	1.79	0.64
1:A:189:THR:HG21	1:A:202:LYS:HG2	1.76	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:423:MET:HE2	1:A:478:THR:C	2.18	0.64
1:A:682:GLY:HA2	1:A:688:ALA:CB	2.28	0.64
1:A:683:ARG:O	1:A:686:GLN:CG	2.36	0.64
1:A:216:LEU:O	1:A:217:THR:C	2.37	0.64
1:A:222:PHE:CD1	1:A:246:LYS:CD	2.81	0.64
1:A:238:ILE:CG2	1:A:238:ILE:O	2.45	0.64
1:A:28:GLU:O	1:A:32:MET:N	2.26	0.63
1:A:379:GLU:CG	1:A:392:ARG:CZ	2.72	0.63
1:A:434:TYR:CE1	1:A:438:VAL:HG21	2.34	0.63
1:A:531:MET:CG	1:A:535:PHE:CE2	2.81	0.63
1:A:82:ARG:O	1:A:83:TYR:C	2.33	0.63
1:A:116:ASP:O	1:A:118:GLN:N	2.30	0.63
1:A:212:TYR:OH	1:A:245:PRO:HD3	1.97	0.63
1:A:264:ILE:HA	1:A:268:GLN:NE2	2.13	0.63
1:A:246:LYS:O	1:A:247:GLU:HB2	1.98	0.63
1:A:318:GLU:O	1:A:320:ALA:N	2.31	0.63
1:A:380:ILE:CG1	1:A:390:MET:HE1	2.21	0.63
1:A:244:THR:HG22	1:A:245:PRO:HD2	1.79	0.63
1:A:108:GLY:O	1:A:109:GLU:CB	2.44	0.63
1:A:33:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HG	1.81	0.63
1:A:602:MET:HA	1:A:602:MET:HE3	1.79	0.63
1:A:743:VAL:C	1:A:745:ASP:H	2.02	0.63
1:A:126:ASN:ND2	1:A:126:ASN:O	2.11	0.63
1:A:98:TRP:CE3	1:A:98:TRP:HA	2.33	0.63
1:A:298:LEU:HD21	1:A:322:GLU:CD	2.17	0.63
1:A:411:LEU:HD21	1:A:444:PHE:HE2	1.63	0.63
1:A:563:ARG:HD2	1:A:566:GLU:OE1	1.98	0.63
1:A:585:TYR:OH	1:A:598:SER:OG	1.85	0.63
1:A:379:GLU:CG	1:A:392:ARG:HE	2.09	0.63
3:Y:3:DA:O5'	3:Y:3:DA:H2'	1.99	0.63
1:A:125:PRO:O	1:A:128:LYS:CB	2.43	0.63
1:A:180:LYS:O	1:A:187:ILE:N	2.32	0.63
1:A:32:MET:HE1	1:A:41:ARG:HH11	1.64	0.63
1:A:678:ARG:HG3	1:A:690:CYS:SG	2.39	0.63
1:A:680:ARG:O	1:A:681:VAL:HG23	1.97	0.63
1:A:346:HIS:HD2	1:A:511:MET:HE3	1.64	0.62
1:A:32:MET:SD	1:A:37:VAL:O	2.58	0.62
1:A:434:TYR:O	1:A:435:ARG:C	2.36	0.62
1:A:481:LEU:O	1:A:483:GLN:N	2.32	0.62
1:A:73:ILE:HG23	1:A:84:ARG:NH2	2.13	0.62
1:A:375:ARG:O	1:A:376:ALA:C	2.36	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:357:LEU:CG	1:A:415:GLU:OE2	2.47	0.62
1:A:561:MET:O	1:A:562:ASP:OD1	2.17	0.62
1:A:179:THR:HG21	1:A:210:GLN:NE2	2.15	0.62
1:A:366:PRO:HG2	1:A:367:PHE:H	1.63	0.62
1:A:529:ARG:HH12	1:A:533:LEU:HD21	1.64	0.62
1:A:296:ARG:HH21	1:A:748:ARG:HE	1.47	0.62
1:A:618:LEU:O	1:A:619:MET:CB	2.42	0.62
1:A:635:PHE:CG	1:A:643:LEU:HD22	2.33	0.62
1:A:752:LEU:HB2	1:A:753:LEU:CD2	2.29	0.62
3:Y:16:DA:H2''	3:Y:17:DG:N7	2.14	0.62
1:A:236:TYR:O	1:A:237:GLU:O	2.18	0.62
4:Z:3:DG:H2''	4:Z:4:DC:O5'	1.99	0.62
1:A:50:ASP:OD1	1:A:50:ASP:O	2.17	0.62
1:A:569:GLU:OE1	1:A:572:ARG:CD	2.48	0.62
1:A:669:PHE:N	1:A:669:PHE:CD2	2.66	0.62
1:A:250:TYR:CG	1:A:250:TYR:O	2.52	0.62
1:A:248:GLY:HA2	1:A:251:VAL:HG12	1.79	0.62
1:A:380:ILE:HA	1:A:390:MET:HE3	1.81	0.62
1:A:38:ASN:HD21	1:A:40:ARG:HB2	1.63	0.62
1:A:423:MET:O	1:A:424:VAL:HG23	2.00	0.62
1:A:238:ILE:HG23	1:A:238:ILE:O	2.00	0.62
1:A:493:LEU:HA	1:A:518:ASP:O	1.99	0.62
1:A:143:LEU:C	1:A:145:PHE:N	2.49	0.61
1:A:222:PHE:CD1	1:A:246:LYS:HD3	2.35	0.61
1:A:228:LYS:CE	1:A:239:HIS:CE1	2.80	0.61
1:A:661:MET:HG3	1:A:662:VAL:N	2.15	0.61
3:Y:1:DG:H2''	3:Y:2:DC:OP2	1.99	0.61
1:A:138:THR:HB	1:A:141:ASP:OD2	1.99	0.61
1:A:413:ASN:ND2	1:A:413:ASN:C	2.53	0.61
1:A:414:TYR:CD2	1:A:446:ILE:HD13	2.35	0.61
1:A:41:ARG:O	1:A:44:GLN:N	2.22	0.61
1:A:559:VAL:HG13	1:A:560:PRO:O	1.99	0.61
1:A:668:ARG:HD2	1:A:669:PHE:CE2	2.35	0.61
1:A:70:VAL:HG12	1:A:73:ILE:HD11	1.81	0.61
1:A:139:LEU:O	1:A:140:ARG:C	2.37	0.61
1:A:343:ARG:CZ	1:A:391:ASN:ND2	2.64	0.61
1:A:49:LEU:HD23	1:A:54:LEU:HD22	1.83	0.61
1:A:370:THR:CG2	1:A:373:GLN:CG	2.77	0.61
1:A:685:GLY:C	1:A:687:GLU:H	2.02	0.61
1:A:743:VAL:C	1:A:745:ASP:N	2.49	0.61
1:A:296:ARG:HH21	1:A:748:ARG:NE	1.97	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:310:PHE:N	1:A:310:PHE:CD1	2.68	0.61
1:A:602:MET:O	1:A:606:LEU:HB2	1.99	0.61
1:A:251:VAL:HG22	1:A:251:VAL:O	1.98	0.61
1:A:290:GLU:O	1:A:294:GLU:HG2	2.01	0.61
1:A:707:PHE:CD1	1:A:707:PHE:C	2.74	0.61
1:A:35:ASN:O	1:A:36:GLN:CG	2.49	0.61
1:A:467:LEU:CD1	1:A:472:ILE:HB	2.30	0.61
1:A:423:MET:CE	1:A:478:THR:C	2.69	0.61
1:A:33:LEU:CD2	1:A:89:LEU:HD11	2.25	0.61
1:A:212:TYR:O	1:A:215:GLN:CB	2.49	0.60
1:A:341:LYS:HE3	1:A:342:GLU:HA	1.82	0.60
1:A:345:LYS:O	1:A:347:GLY:N	2.34	0.60
1:A:682:GLY:O	1:A:686:GLN:CB	2.48	0.60
1:A:70:VAL:O	1:A:73:ILE:HG13	2.01	0.60
1:A:108:GLY:C	1:A:109:GLU:CG	2.47	0.60
1:A:29:VAL:O	1:A:32:MET:HB2	2.00	0.60
1:A:29:VAL:CA	1:A:32:MET:HB2	2.30	0.60
1:A:434:TYR:CD1	1:A:435:ARG:N	2.69	0.60
1:A:741:PHE:HD1	1:A:741:PHE:N	1.89	0.60
1:A:74:PRO:C	1:A:76:LEU:H	2.05	0.60
1:A:211:THR:C	1:A:215:GLN:HB2	2.22	0.60
1:A:237:GLU:OE2	2:X:11:DA:N6	2.34	0.60
1:A:248:GLY:C	1:A:250:TYR:H	1.94	0.60
1:A:246:LYS:HG3	1:A:248:GLY:N	2.17	0.60
1:A:299:LEU:O	1:A:323:ARG:CG	2.46	0.60
1:A:710:LEU:CD2	1:A:710:LEU:O	2.50	0.60
1:A:399:GLY:O	1:A:547:MET:CE	2.49	0.60
3:Y:2:DC:H2'	3:Y:2:DC:O5'	2.00	0.60
1:A:174:ILE:HD11	1:A:216:LEU:HD22	1.68	0.60
1:A:370:THR:H	1:A:373:GLN:HE21	1.47	0.60
1:A:171:GLN:CG	1:A:172:GLY:N	2.65	0.60
1:A:323:ARG:NH2	1:A:327:GLU:HB2	2.16	0.60
1:A:434:TYR:CD2	1:A:450:LEU:CD1	2.84	0.60
1:A:480:ALA:O	1:A:481:LEU:C	2.39	0.60
1:A:63:LEU:O	1:A:64:GLN:C	2.40	0.60
1:A:115:THR:O	1:A:138:THR:HA	2.02	0.60
1:A:419:GLN:HG3	1:A:490:ASN:O	2.02	0.60
1:A:660:VAL:HA	1:A:689:TYR:O	2.00	0.60
1:A:752:LEU:CD1	1:A:753:LEU:CD2	2.53	0.60
1:A:154:ARG:CG	1:A:154:ARG:NH1	2.25	0.60
1:A:336:PHE:CZ	1:A:536:TYR:C	2.75	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:538:ASP:OD1	1:A:539:LEU:HD12	2.02	0.60
1:A:743:VAL:O	1:A:746:LEU:N	2.34	0.60
1:A:228:LYS:O	1:A:236:TYR:O	2.20	0.60
1:A:323:ARG:C	1:A:323:ARG:HD2	2.22	0.60
1:A:370:THR:OG1	1:A:372:ALA:HB3	2.00	0.60
1:A:537:GLY:O	1:A:539:LEU:N	2.35	0.60
1:A:711:ASN:C	1:A:713:ASP:H	2.05	0.60
1:A:208:TYR:OH	3:Y:11:DC:H5''	2.01	0.60
1:A:33:LEU:HD23	1:A:85:ILE:HG23	1.75	0.60
1:A:66:PHE:HE1	1:A:91:MET:HB3	1.66	0.60
1:A:189:THR:HG21	1:A:202:LYS:HE2	1.82	0.59
1:A:35:ASN:C	1:A:36:GLN:CG	2.71	0.59
1:A:393:LEU:HA	1:A:521:VAL:HG12	1.83	0.59
1:A:682:GLY:HA2	1:A:688:ALA:HB2	1.83	0.59
1:A:698:GLY:O	1:A:702:MET:N	2.34	0.59
1:A:82:ARG:C	1:A:84:ARG:N	2.52	0.59
1:A:82:ARG:O	1:A:84:ARG:N	2.35	0.59
1:A:91:MET:C	1:A:94:LYS:HB2	2.21	0.59
1:A:173:LYS:C	1:A:174:ILE:CG2	2.71	0.59
1:A:223:VAL:HG13	1:A:241:ALA:HB1	1.84	0.59
1:A:298:LEU:O	1:A:323:ARG:HG2	2.01	0.59
1:A:358:ALA:O	1:A:362:ILE:HD12	2.02	0.59
1:A:148:ARG:HB3	1:A:257:ILE:CG2	2.33	0.59
1:A:223:VAL:HG13	1:A:241:ALA:CB	2.33	0.59
1:A:25:PHE:O	1:A:26:LEU:C	2.38	0.59
1:A:343:ARG:HH22	1:A:391:ASN:ND2	1.95	0.59
1:A:378:GLN:NE2	1:A:378:GLN:CA	2.49	0.59
1:A:629:ASP:HB3	1:A:653:ILE:HG21	1.83	0.59
1:A:26:LEU:O	1:A:27:ASN:C	2.40	0.59
1:A:422:PHE:CE1	1:A:495:ILE:CG2	2.85	0.59
1:A:296:ARG:NH2	1:A:748:ARG:NE	2.49	0.59
2:X:11:DA:H2'	2:X:11:DA:P	2.42	0.59
1:A:299:LEU:CD2	1:A:299:LEU:N	2.18	0.59
1:A:313:THR:CG2	1:A:315:TYR:H	2.14	0.59
1:A:447:HIS:HE1	1:A:471:GLN:HB3	1.68	0.59
1:A:139:LEU:C	1:A:141:ASP:N	2.49	0.59
1:A:380:ILE:HG22	1:A:384:MET:HE3	1.84	0.59
1:A:747:TYR:C	1:A:749:ASP:N	2.54	0.59
1:A:575:VAL:HG23	1:A:579:GLY:O	2.02	0.59
1:A:609:GLU:O	1:A:611:PHE:N	2.35	0.59
1:A:669:PHE:HD2	1:A:669:PHE:H	1.51	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:530:SER:OG	1:A:741:PHE:HE2	1.86	0.59
3:Y:1:DG:H8	3:Y:1:DG:O5'	1.85	0.59
1:A:21:LEU:HD22	1:A:155:LYS:HD2	1.83	0.58
1:A:323:ARG:HH21	1:A:327:GLU:HB2	1.67	0.58
1:A:357:LEU:HG	1:A:415:GLU:OE2	2.02	0.58
1:A:370:THR:OG1	1:A:372:ALA:N	2.37	0.58
1:A:586:PRO:HG3	1:A:669:PHE:CE2	2.38	0.58
1:A:632:MET:CB	1:A:653:ILE:HD11	2.34	0.58
1:A:575:VAL:CG2	1:A:579:GLY:O	2.52	0.58
1:A:584:VAL:HG22	1:A:661:MET:CE	2.34	0.58
1:A:23:GLU:O	1:A:24:GLU:C	2.40	0.58
1:A:448:VAL:HG22	1:A:474:VAL:CG1	2.26	0.58
1:A:571:VAL:O	1:A:572:ARG:C	2.39	0.58
1:A:569:GLU:OE1	1:A:572:ARG:HD3	2.03	0.58
1:A:66:PHE:O	1:A:68:ASP:N	2.36	0.58
1:A:208:TYR:CD1	1:A:209:LEU:CD2	2.87	0.58
1:A:246:LYS:HG3	1:A:248:GLY:H	1.66	0.58
1:A:357:LEU:CB	1:A:415:GLU:OE2	2.51	0.58
1:A:635:PHE:HD2	1:A:655:VAL:HG11	1.68	0.58
1:A:152:ASP:C	1:A:153:ARG:HG3	2.24	0.58
1:A:313:THR:CG2	1:A:316:HIS:N	2.59	0.58
1:A:530:SER:HG	1:A:741:PHE:HE2	1.45	0.58
1:A:165:GLY:O	1:A:166:GLU:HG2	2.03	0.58
1:A:164:PRO:HA	1:A:236:TYR:HE2	1.69	0.58
1:A:696:ASP:C	1:A:697:VAL:O	2.42	0.58
1:A:95:LEU:O	1:A:98:TRP:HB2	2.04	0.58
1:A:157:PHE:CE1	1:A:168:VAL:HG22	2.38	0.58
1:A:286:GLU:OE2	1:A:301:VAL:CG2	2.52	0.58
1:A:450:LEU:HA	1:A:476:ILE:O	2.04	0.58
1:A:691:PHE:N	1:A:691:PHE:CD1	2.72	0.58
1:A:164:PRO:CB	1:A:236:TYR:HE2	2.17	0.57
1:A:354:GLU:O	1:A:356:LYS:N	2.37	0.57
1:A:357:LEU:HD11	1:A:415:GLU:HB2	1.81	0.57
1:A:143:LEU:O	1:A:145:PHE:N	2.37	0.57
1:A:632:MET:O	1:A:635:PHE:N	2.37	0.57
1:A:113:LEU:O	1:A:139:LEU:CD1	2.53	0.57
1:A:174:ILE:HD11	1:A:216:LEU:CD1	2.27	0.57
1:A:250:TYR:CD1	1:A:250:TYR:C	2.78	0.57
1:A:389:PRO:HG3	1:A:516:MET:CB	2.34	0.57
1:A:484:GLU:O	1:A:485:ASP:CB	2.51	0.57
1:A:586:PRO:HB3	1:A:668:ARG:HH11	1.68	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:288:LEU:HB2	1:A:292:ILE:HD13	1.86	0.57
1:A:246:LYS:C	1:A:248:GLY:H	2.07	0.57
1:A:41:ARG:O	1:A:43:HIS:N	2.37	0.57
1:A:467:LEU:CD1	1:A:472:ILE:CB	2.71	0.57
1:A:324:LEU:HB3	1:A:738:LEU:CD1	2.34	0.57
1:A:450:LEU:H	1:A:450:LEU:CD1	1.97	0.57
1:A:686:GLN:O	1:A:687:GLU:C	2.43	0.57
1:A:643:LEU:C	1:A:644:VAL:HG23	2.25	0.57
2:X:8:DA:C5	2:X:9:DT:H73	2.40	0.57
1:A:428:ILE:CG2	1:A:633:LEU:HD13	2.35	0.57
1:A:615:LYS:HD3	1:A:641:ASP:HB2	1.02	0.57
1:A:680:ARG:NH1	1:A:680:ARG:CG	2.05	0.57
1:A:14:TRP:HE3	1:A:14:TRP:HA	1.69	0.57
1:A:297:LYS:O	1:A:297:LYS:HG2	2.05	0.57
1:A:413:ASN:HD22	1:A:414:TYR:N	2.03	0.57
1:A:586:PRO:CG	1:A:668:ARG:CD	2.77	0.57
1:A:83:TYR:O	1:A:87:LYS:HB2	2.05	0.57
1:A:90:GLU:HG2	1:A:94:LYS:HE3	1.86	0.57
1:A:119:TYR:O	1:A:120:ALA:O	2.23	0.56
1:A:336:PHE:O	1:A:337:GLN:C	2.43	0.56
1:A:368:LYS:HE3	1:A:549:PRO:CG	2.34	0.56
1:A:181:LYS:O	1:A:182:PHE:CD1	2.58	0.56
1:A:336:PHE:CE1	1:A:538:ASP:CB	2.81	0.56
1:A:35:ASN:O	1:A:36:GLN:HG2	2.05	0.56
1:A:404:VAL:O	1:A:407:GLN:N	2.38	0.56
2:X:5:DT:H2''	2:X:6:DC:H6	1.69	0.56
1:A:21:LEU:O	1:A:22:LEU:C	2.43	0.56
1:A:352:LYS:O	1:A:353:ILE:HG12	2.03	0.56
1:A:181:LYS:C	1:A:182:PHE:CD1	2.71	0.56
1:A:285:LYS:O	1:A:286:GLU:C	2.42	0.56
1:A:354:GLU:C	1:A:356:LYS:N	2.55	0.56
1:A:463:ILE:O	1:A:464:LYS:C	2.43	0.56
1:A:564:VAL:C	1:A:566:GLU:H	2.09	0.56
1:A:586:PRO:CB	1:A:668:ARG:NH1	2.47	0.56
1:A:558:LEU:HA	1:A:692:LEU:HD12	1.87	0.56
1:A:290:GLU:CA	1:A:293:LEU:HD12	2.26	0.56
1:A:298:LEU:HA	1:A:299:LEU:HD23	1.86	0.56
1:A:301:VAL:O	1:A:302:LYS:O	2.21	0.56
1:A:313:THR:HG21	1:A:315:TYR:CB	2.16	0.56
1:A:718:ALA:O	1:A:719:GLU:O	2.22	0.56
1:A:93:GLU:OE1	1:A:96:ARG:CZ	2.54	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:X:3:DG:H1'	2:X:4:DC:C5'	2.34	0.56
1:A:370:THR:HG1	1:A:372:ALA:CB	2.18	0.56
1:A:701:ALA:CA	1:A:704:ARG:HD2	2.31	0.56
1:A:69:TYR:CE2	1:A:87:LYS:CD	2.82	0.56
1:A:191:VAL:HG13	1:A:199:VAL:C	2.13	0.56
1:A:354:GLU:HB3	1:A:356:LYS:HB2	1.88	0.56
1:A:696:ASP:O	1:A:697:VAL:C	2.44	0.56
3:Y:19:DT:C2'	3:Y:20:DG:OP2	2.46	0.56
1:A:74:PRO:C	1:A:76:LEU:N	2.59	0.56
1:A:181:LYS:O	1:A:182:PHE:HD1	1.87	0.56
1:A:33:LEU:HD11	1:A:34:LYS:HG2	1.86	0.56
1:A:509:ALA:C	1:A:510:LEU:HD23	2.26	0.56
1:A:707:PHE:CG	1:A:711:ASN:ND2	2.73	0.56
1:A:400:SER:HA	1:A:548:PRO:HD3	1.88	0.56
1:A:419:GLN:HE21	1:A:488:PHE:CB	2.17	0.56
1:A:487:HIS:HB3	1:A:489:LYS:NZ	2.21	0.56
1:A:704:ARG:O	1:A:707:PHE:N	2.37	0.56
1:A:157:PHE:HD1	1:A:168:VAL:HG22	1.60	0.56
1:A:173:LYS:C	1:A:174:ILE:HG22	2.26	0.56
1:A:189:THR:HG22	1:A:202:LYS:CG	2.21	0.56
1:A:320:ALA:O	1:A:324:LEU:HB2	2.05	0.56
1:A:481:LEU:HD23	1:A:481:LEU:N	2.21	0.56
1:A:216:LEU:HD23	1:A:216:LEU:O	2.02	0.55
1:A:567:VAL:O	1:A:568:TYR:C	2.43	0.55
1:A:694:VAL:HG12	1:A:695:GLY:N	2.21	0.55
1:A:360:GLU:O	1:A:361:PHE:C	2.44	0.55
1:A:426:THR:CG2	1:A:429:LEU:HD12	2.33	0.55
1:A:211:THR:O	1:A:215:GLN:CB	2.52	0.55
1:A:167:LYS:CA	1:A:225:GLY:O	2.46	0.55
1:A:467:LEU:HD21	1:A:475:VAL:HG13	1.88	0.55
1:A:478:THR:OG1	1:A:480:ALA:CB	2.53	0.55
1:A:419:GLN:CD	1:A:488:PHE:CE1	2.76	0.55
1:A:399:GLY:O	1:A:547:MET:HE2	2.05	0.55
1:A:568:TYR:HD1	1:A:568:TYR:H	1.54	0.55
1:A:178:GLU:N	1:A:189:THR:O	2.37	0.55
1:A:582:PHE:CE2	1:A:681:VAL:HG23	2.41	0.55
1:A:526:PRO:HB3	1:A:715:PHE:CD2	2.41	0.55
1:A:151:GLU:OE1	1:A:153:ARG:CZ	2.54	0.55
1:A:563:ARG:HG3	1:A:566:GLU:HB2	1.88	0.55
1:A:582:PHE:CD2	1:A:681:VAL:HG21	2.40	0.55
3:Y:4:DG:H2''	3:Y:5:DT:OP2	2.06	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:154:ARG:HG3	1:A:154:ARG:HH11	0.57	0.55
1:A:296:ARG:O	1:A:297:LYS:CB	2.55	0.55
1:A:298:LEU:CB	1:A:319:LYS:HG3	2.36	0.55
3:Y:11:DC:O2	3:Y:11:DC:C2'	2.50	0.55
1:A:395:GLN:NE2	1:A:527:ILE:N	2.55	0.55
1:A:567:VAL:HG13	1:A:691:PHE:CD2	2.42	0.55
2:X:8:DA:O5'	2:X:8:DA:H2'	2.07	0.55
3:Y:16:DA:C2'	3:Y:17:DG:C8	2.78	0.55
4:Z:1:DG:H2''	4:Z:2:DA:H8	1.70	0.55
1:A:22:LEU:CD2	1:A:26:LEU:HG	2.36	0.55
1:A:288:LEU:HD12	1:A:288:LEU:O	2.07	0.55
1:A:616:LEU:HG	1:A:642:ILE:HG13	1.86	0.55
1:A:133:LYS:C	1:A:134:LEU:HD23	2.27	0.55
1:A:164:PRO:HA	1:A:236:TYR:CE2	2.41	0.55
1:A:164:PRO:CG	1:A:236:TYR:CE2	2.90	0.55
1:A:379:GLU:OE1	1:A:392:ARG:CD	2.55	0.55
1:A:437:THR:O	1:A:441:PHE:CG	2.60	0.55
1:A:59:LEU:O	1:A:63:LEU:HB2	2.07	0.55
1:A:582:PHE:HD2	1:A:681:VAL:HG21	1.71	0.55
3:Y:15:DG:H2''	3:Y:16:DA:O5'	2.06	0.55
1:A:180:LYS:HD2	1:A:187:ILE:HG22	1.88	0.55
1:A:34:LYS:C	1:A:35:ASN:OD1	2.45	0.55
1:A:212:TYR:C	1:A:215:GLN:HB3	2.27	0.54
1:A:411:LEU:HD21	1:A:444:PHE:CE2	2.42	0.54
1:A:563:ARG:O	1:A:566:GLU:CB	2.55	0.54
1:A:603:TYR:OH	1:A:617:GLY:CA	2.55	0.54
1:A:326:TYR:CE1	1:A:752:LEU:CD1	2.86	0.54
1:A:341:LYS:CE	1:A:342:GLU:HA	2.37	0.54
1:A:116:ASP:C	1:A:117:ILE:HG23	2.26	0.54
1:A:393:LEU:HD12	1:A:521:VAL:HG11	1.89	0.54
1:A:529:ARG:HH11	1:A:529:ARG:CG	2.21	0.54
1:A:321:ARG:HB3	1:A:738:LEU:HD21	1.88	0.54
1:A:743:VAL:O	1:A:744:ALA:C	2.43	0.54
4:Z:1:DG:H2''	4:Z:2:DA:C8	2.41	0.54
1:A:459:GLU:O	1:A:463:ILE:HG12	2.06	0.54
1:A:572:ARG:CG	1:A:572:ARG:NH1	2.51	0.54
1:A:111:VAL:CG1	1:A:112:ASP:N	2.71	0.54
1:A:258:TYR:OH	1:A:309:HIS:HD2	1.90	0.54
1:A:486:VAL:HG13	1:A:487:HIS:H	1.73	0.54
1:A:547:MET:HG3	1:A:548:PRO:N	2.20	0.54
1:A:59:LEU:HD12	1:A:99:PHE:CG	2.42	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:37:VAL:HG21	1:A:73:ILE:HD12	1.67	0.54
1:A:529:ARG:NH1	1:A:533:LEU:HD21	2.23	0.54
1:A:101:ILE:HG22	1:A:103:TYR:CD1	2.43	0.54
1:A:119:TYR:O	1:A:120:ALA:C	2.43	0.54
1:A:414:TYR:HE2	1:A:473:ASP:CG	2.11	0.54
1:A:582:PHE:HE2	1:A:681:VAL:CG2	2.19	0.54
1:A:185:MET:CE	1:A:204:PHE:HD1	2.20	0.54
1:A:482:ILE:O	1:A:482:ILE:HG23	2.07	0.54
1:A:694:VAL:HG12	1:A:695:GLY:H	1.73	0.54
1:A:713:ASP:O	1:A:717:ILE:HG12	2.08	0.54
1:A:752:LEU:CB	1:A:753:LEU:HD23	2.37	0.54
1:A:213:LEU:O	1:A:216:LEU:N	2.40	0.54
1:A:351:LYS:CG	1:A:352:LYS:H	2.21	0.54
1:A:374:LYS:O	1:A:377:HIS:CB	2.56	0.54
1:A:448:VAL:HG22	1:A:474:VAL:HG13	1.85	0.54
3:Y:7:DC:C2'	3:Y:8:DT:C5'	2.61	0.54
1:A:313:THR:HG23	1:A:315:TYR:CB	2.35	0.53
1:A:615:LYS:HB3	1:A:641:ASP:HB3	1.90	0.53
1:A:115:THR:C	1:A:117:ILE:H	2.12	0.53
1:A:380:ILE:HA	1:A:390:MET:CE	2.38	0.53
1:A:615:LYS:HG2	1:A:641:ASP:H	1.74	0.53
1:A:69:TYR:HE1	1:A:84:ARG:HG2	1.73	0.53
3:Y:20:DG:H2'	3:Y:20:DG:O5'	2.07	0.53
4:Z:5:DA:H2''	4:Z:6:DC:O5'	2.08	0.53
1:A:655:VAL:HG22	1:A:658:ALA:CB	2.34	0.53
1:A:497:ASP:OD1	1:A:522:MET:CE	2.56	0.53
1:A:336:PHE:CE1	1:A:538:ASP:N	2.75	0.53
1:A:622:ARG:C	1:A:623:LEU:CD2	2.53	0.53
1:A:43:HIS:CE1	1:A:71:LYS:HZ2	2.23	0.53
1:A:69:TYR:OH	1:A:87:LYS:HD2	2.08	0.53
3:Y:1:DG:C2'	3:Y:2:DC:OP2	2.52	0.53
1:A:248:GLY:CA	1:A:251:VAL:CG1	2.71	0.53
1:A:64:GLN:O	1:A:68:ASP:HB2	2.09	0.53
1:A:403:THR:O	1:A:404:VAL:C	2.46	0.53
1:A:446:ILE:HG22	1:A:473:ASP:HB2	1.91	0.53
1:A:616:LEU:HD23	1:A:642:ILE:HD11	1.89	0.53
1:A:66:PHE:O	1:A:67:LEU:C	2.47	0.53
1:A:166:GLU:OE1	1:A:166:GLU:CA	2.55	0.53
1:A:374:LYS:O	1:A:377:HIS:HB3	2.09	0.53
1:A:37:VAL:HG11	1:A:73:ILE:HD12	1.90	0.53
1:A:493:LEU:CD2	1:A:494:VAL:CA	2.72	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:393:LEU:HA	1:A:521:VAL:CG1	2.39	0.53
1:A:569:GLU:O	1:A:572:ARG:HB2	2.08	0.53
1:A:75:ASN:N	1:A:75:ASN:HD22	2.05	0.53
1:A:91:MET:HA	1:A:94:LYS:CD	2.36	0.53
4:Z:8:DG:C2'	4:Z:9:DC:H5''	2.32	0.53
1:A:180:LYS:CD	1:A:187:ILE:CG2	2.87	0.53
1:A:198:HIS:CE1	1:A:200:PRO:HD3	2.44	0.53
1:A:164:PRO:HG3	1:A:236:TYR:CE2	2.42	0.53
1:A:285:LYS:O	1:A:286:GLU:O	2.27	0.53
1:A:295:LYS:CG	1:A:296:ARG:HH12	2.22	0.53
1:A:93:GLU:CA	1:A:96:ARG:HG3	2.38	0.53
1:A:248:GLY:HA3	1:A:251:VAL:HG11	1.86	0.53
1:A:370:THR:H	1:A:373:GLN:NE2	2.07	0.53
1:A:669:PHE:HD2	1:A:669:PHE:N	2.06	0.53
1:A:73:ILE:CB	1:A:74:PRO:CD	2.64	0.53
1:A:753:LEU:N	1:A:753:LEU:HD23	2.20	0.53
1:A:116:ASP:HB2	1:A:128:LYS:HZ2	1.72	0.52
1:A:130:LYS:CE	1:A:263:GLY:CA	2.78	0.52
1:A:177:VAL:HA	1:A:189:THR:O	2.10	0.52
1:A:33:LEU:O	1:A:34:LYS:C	2.47	0.52
1:A:738:LEU:O	1:A:738:LEU:HD23	2.09	0.52
1:A:33:LEU:CD2	1:A:89:LEU:CD1	2.85	0.52
1:A:466:GLY:HA3	1:A:472:ILE:CD1	2.38	0.52
1:A:496:ILE:CG2	1:A:497:ASP:N	2.71	0.52
1:A:597:LYS:C	1:A:599:ALA:N	2.60	0.52
1:A:544:ILE:CG2	1:A:715:PHE:CE1	2.92	0.52
1:A:704:ARG:NH1	1:A:724:THR:CG2	2.71	0.52
3:Y:14:DG:C2'	3:Y:14:DG:O5'	2.53	0.52
1:A:138:THR:HG22	1:A:139:LEU:CA	2.33	0.52
1:A:30:GLU:OE2	1:A:96:ARG:NH2	2.43	0.52
1:A:685:GLY:C	1:A:687:GLU:N	2.61	0.52
1:A:326:TYR:O	1:A:327:GLU:C	2.46	0.52
1:A:446:ILE:CG2	1:A:473:ASP:HB2	2.38	0.52
1:A:57:LYS:O	1:A:58:ASP:C	2.45	0.52
1:A:185:MET:HE1	1:A:204:PHE:HB3	1.90	0.52
1:A:208:TYR:CD1	1:A:209:LEU:HD23	2.45	0.52
1:A:215:GLN:O	1:A:215:GLN:NE2	2.42	0.52
1:A:411:LEU:O	1:A:415:GLU:N	2.36	0.52
1:A:534:ALA:HB2	1:A:746:LEU:CD2	2.30	0.52
1:A:212:TYR:O	1:A:215:GLN:N	2.43	0.52
1:A:369:LEU:HD12	1:A:373:GLN:HE21	1.71	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:37:VAL:CG1	1:A:73:ILE:CD1	2.88	0.52
1:A:269:MET:O	1:A:273:PHE:HD1	1.93	0.52
1:A:296:ARG:O	1:A:297:LYS:HB3	2.09	0.52
1:A:309:HIS:HB3	1:A:310:PHE:HE1	1.74	0.52
1:A:423:MET:CE	1:A:479:HIS:CA	2.88	0.52
1:A:558:LEU:HA	1:A:692:LEU:CD1	2.40	0.52
1:A:744:ALA:O	1:A:748:ARG:HB2	2.09	0.52
1:A:698:GLY:O	1:A:701:ALA:HB3	2.10	0.52
1:A:710:LEU:HD22	1:A:710:LEU:O	2.09	0.52
1:A:436:ARG:O	1:A:440:SER:N	2.43	0.51
1:A:142:LEU:O	1:A:143:LEU:HD23	2.11	0.51
1:A:479:HIS:CG	1:A:479:HIS:O	2.63	0.51
1:A:562:ASP:C	1:A:564:VAL:H	2.13	0.51
1:A:667:GLU:C	1:A:669:PHE:N	2.60	0.51
1:A:326:TYR:CZ	1:A:752:LEU:HD13	2.45	0.51
1:A:84:ARG:HH22	1:A:85:ILE:CG1	2.21	0.51
1:A:174:ILE:CD1	1:A:216:LEU:CG	2.84	0.51
1:A:564:VAL:C	1:A:566:GLU:N	2.63	0.51
1:A:615:LYS:HG2	1:A:641:ASP:HB2	1.79	0.51
1:A:123:VAL:HG13	1:A:124:GLY:H	1.75	0.51
1:A:138:THR:HG22	1:A:140:ARG:N	2.25	0.51
1:A:186:ASN:C	1:A:187:ILE:HG13	2.30	0.51
1:A:397:ASP:O	1:A:398:VAL:C	2.48	0.51
1:A:288:LEU:HB2	1:A:292:ILE:CD1	2.41	0.51
1:A:310:PHE:N	1:A:310:PHE:HD1	2.04	0.51
1:A:354:GLU:O	1:A:355:GLY:C	2.48	0.51
1:A:130:LYS:HE3	1:A:262:SER:O	2.10	0.51
1:A:298:LEU:HD13	1:A:322:GLU:CG	2.30	0.51
1:A:419:GLN:NE2	1:A:488:PHE:CB	2.73	0.51
1:A:635:PHE:CD2	1:A:655:VAL:HG11	2.45	0.51
1:A:24:GLU:C	1:A:27:ASN:HB2	2.23	0.51
1:A:380:ILE:HG22	1:A:381:ARG:N	2.25	0.51
1:A:480:ALA:O	1:A:481:LEU:O	2.28	0.51
1:A:315:TYR:O	1:A:316:HIS:C	2.49	0.51
1:A:31:LYS:O	1:A:32:MET:C	2.47	0.51
1:A:325:ALA:O	1:A:326:TYR:C	2.49	0.51
1:A:180:LYS:HD2	1:A:187:ILE:HG21	1.93	0.51
1:A:315:TYR:O	1:A:316:HIS:O	2.29	0.51
1:A:380:ILE:O	1:A:381:ARG:C	2.49	0.51
3:Y:18:DC:C2'	3:Y:19:DT:C7	2.87	0.51
1:A:116:ASP:O	1:A:118:GLN:HG3	2.11	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:380:ILE:HG23	1:A:384:MET:HE3	1.91	0.51
1:A:468:ARG:NH1	1:A:468:ARG:CG	2.68	0.51
1:A:559:VAL:CG1	1:A:560:PRO:O	2.59	0.51
1:A:668:ARG:CG	1:A:669:PHE:CD2	2.85	0.51
3:Y:16:DA:C2'	3:Y:17:DG:N7	2.74	0.51
3:Y:9:DC:H2'	3:Y:9:DC:O5'	2.10	0.51
1:A:393:LEU:O	1:A:542:THR:HA	2.11	0.50
1:A:574:GLU:OE2	1:A:574:GLU:CA	2.41	0.50
1:A:58:ASP:O	1:A:62:LYS:N	2.44	0.50
1:A:671:LEU:O	1:A:672:ALA:HB2	2.11	0.50
1:A:558:LEU:CB	1:A:692:LEU:HD11	2.40	0.50
1:A:747:TYR:O	1:A:748:ARG:C	2.47	0.50
1:A:255:LEU:CD1	1:A:270:ARG:NH2	2.74	0.50
1:A:268:GLN:O	1:A:269:MET:C	2.44	0.50
1:A:327:GLU:O	1:A:330:PHE:HB3	2.12	0.50
1:A:361:PHE:CE2	1:A:365:LEU:HD21	2.47	0.50
1:A:447:HIS:CE1	1:A:471:GLN:CB	2.89	0.50
1:A:659:ASN:O	1:A:688:ALA:CB	2.58	0.50
1:A:752:LEU:HD12	1:A:753:LEU:CD1	2.41	0.50
1:A:88:SER:O	1:A:90:GLU:N	2.45	0.50
1:A:361:PHE:CD1	1:A:411:LEU:HD11	2.46	0.50
1:A:582:PHE:CD2	1:A:681:VAL:CG2	2.94	0.50
1:A:316:HIS:O	1:A:319:LYS:N	2.44	0.50
1:A:439:GLU:O	1:A:442:SER:CA	2.59	0.50
1:A:441:PHE:O	1:A:443:LYS:O	2.30	0.50
1:A:601:GLU:O	1:A:605:TYR:HB3	2.12	0.50
1:A:91:MET:O	1:A:94:LYS:CB	2.59	0.50
1:A:130:LYS:HE2	1:A:263:GLY:CA	2.14	0.50
1:A:165:GLY:H	1:A:227:VAL:HB	1.77	0.50
1:A:22:LEU:O	1:A:25:PHE:HB3	2.11	0.50
1:A:370:THR:N	1:A:373:GLN:NE2	2.60	0.50
1:A:478:THR:O	1:A:480:ALA:N	2.42	0.50
3:Y:15:DG:H1'	3:Y:16:DA:H5'	1.94	0.50
3:Y:7:DC:H2'	3:Y:8:DT:C5	2.47	0.50
1:A:148:ARG:CB	1:A:257:ILE:CG2	2.89	0.50
1:A:512:ASN:O	1:A:513:LYS:C	2.50	0.50
1:A:18:LEU:H	1:A:19:PRO:HD2	1.76	0.50
1:A:224:THR:O	1:A:241:ALA:CA	2.59	0.50
1:A:255:LEU:HD11	1:A:270:ARG:CZ	2.42	0.50
1:A:358:ALA:HB1	1:A:362:ILE:CD1	2.41	0.50
1:A:366:PRO:CG	1:A:367:PHE:H	2.23	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:58:ASP:C	1:A:60:GLU:N	2.62	0.50
3:Y:18:DC:H2'	3:Y:19:DT:H72	1.93	0.50
1:A:245:PRO:O	1:A:246:LYS:CB	2.44	0.50
1:A:313:THR:HG23	1:A:315:TYR:H	1.76	0.50
1:A:633:LEU:O	1:A:637:GLU:HB2	2.11	0.50
1:A:69:TYR:CE1	1:A:84:ARG:HG2	2.46	0.50
1:A:236:TYR:H	1:A:236:TYR:HD1	1.60	0.50
1:A:266:GLN:O	1:A:270:ARG:HB2	2.12	0.50
1:A:269:MET:CA	1:A:272:ILE:HG22	2.41	0.50
1:A:111:VAL:HG13	1:A:112:ASP:N	2.27	0.49
1:A:164:PRO:CB	1:A:236:TYR:CE2	2.94	0.49
1:A:193:SER:O	1:A:193:SER:OG	2.29	0.49
1:A:673:GLN:O	1:A:677:LEU:HG	2.12	0.49
2:X:1:DC:C2'	2:X:2:DA:OP2	2.45	0.49
1:A:106:CYS:O	1:A:107:SER:CB	2.52	0.49
1:A:211:THR:O	1:A:215:GLN:CA	2.60	0.49
1:A:668:ARG:CG	1:A:669:PHE:CE2	2.95	0.49
1:A:109:GLU:HB3	1:A:110:GLU:OE1	2.12	0.49
1:A:212:TYR:O	1:A:213:LEU:C	2.50	0.49
1:A:52:PRO:HB3	1:A:249:GLU:OE2	2.11	0.49
1:A:717:ILE:O	1:A:721:ASP:N	2.44	0.49
1:A:66:PHE:CE1	1:A:91:MET:HB3	2.45	0.49
1:A:189:THR:HG21	1:A:202:LYS:CE	2.42	0.49
1:A:164:PRO:CG	1:A:236:TYR:HE2	2.24	0.49
1:A:255:LEU:HD11	1:A:270:ARG:NH2	2.27	0.49
1:A:351:LYS:HG2	1:A:352:LYS:H	1.78	0.49
1:A:51:ASP:OD1	1:A:52:PRO:N	2.45	0.49
1:A:584:VAL:HG13	1:A:645:SER:HB3	1.88	0.49
1:A:621:GLY:N	1:A:647:THR:HG21	2.18	0.49
1:A:91:MET:O	1:A:94:LYS:HB2	2.11	0.49
1:A:573:GLN:C	1:A:575:VAL:N	2.64	0.49
3:Y:3:DA:O5'	3:Y:3:DA:C2'	2.60	0.49
1:A:163:LEU:O	1:A:164:PRO:C	2.51	0.49
1:A:255:LEU:HD12	1:A:270:ARG:CZ	2.41	0.49
1:A:434:TYR:HA	1:A:476:ILE:HD12	1.95	0.49
1:A:619:MET:HE2	1:A:649:ILE:HG23	1.94	0.49
1:A:711:ASN:O	1:A:713:ASP:N	2.45	0.49
1:A:330:PHE:O	1:A:331:VAL:C	2.51	0.49
1:A:401:GLY:O	1:A:402:LYS:C	2.51	0.49
1:A:92:ILE:O	1:A:93:GLU:C	2.50	0.49
1:A:208:TYR:HD1	1:A:209:LEU:HD23	1.77	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:408:LEU:O	1:A:409:ALA:C	2.46	0.49
1:A:424:VAL:HG13	1:A:425:PRO:CD	2.39	0.49
1:A:400:SER:HA	1:A:547:MET:HE2	1.95	0.49
1:A:620:HIS:O	1:A:647:THR:HG23	2.12	0.49
1:A:635:PHE:CE2	1:A:655:VAL:HG21	2.48	0.49
1:A:69:TYR:HD1	1:A:69:TYR:O	1.96	0.49
1:A:298:LEU:HD11	1:A:322:GLU:CB	2.42	0.49
1:A:37:VAL:HG21	1:A:73:ILE:CB	2.43	0.49
1:A:437:THR:O	1:A:441:PHE:HB2	2.12	0.49
1:A:438:VAL:O	1:A:439:GLU:C	2.48	0.49
1:A:9:SER:C	1:A:11:LEU:N	2.63	0.49
1:A:123:VAL:CG1	1:A:124:GLY:H	2.25	0.49
1:A:148:ARG:HB3	1:A:257:ILE:HG21	1.95	0.49
1:A:201:LEU:HD11	1:A:238:ILE:HG21	1.85	0.49
1:A:610:VAL:O	1:A:611:PHE:CD2	2.65	0.49
1:A:176:SER:OG	1:A:191:VAL:N	2.46	0.48
1:A:206:GLN:HE21	1:A:209:LEU:HD11	1.77	0.48
1:A:318:GLU:O	1:A:319:LYS:C	2.49	0.48
1:A:414:TYR:HD2	1:A:473:ASP:HB3	1.77	0.48
1:A:747:TYR:O	1:A:749:ASP:N	2.46	0.48
1:A:81:LYS:HA	1:A:84:ARG:HH12	1.76	0.48
1:A:401:GLY:O	1:A:405:VAL:HG23	2.12	0.48
1:A:439:GLU:C	1:A:442:SER:H	2.17	0.48
1:A:326:TYR:OH	1:A:752:LEU:HD13	2.12	0.48
3:Y:13:DT:H2"	3:Y:14:DG:OP2	2.13	0.48
1:A:138:THR:HG22	1:A:139:LEU:H	1.22	0.48
1:A:210:GLN:HE21	1:A:214:LYS:CE	2.27	0.48
1:A:212:TYR:O	1:A:216:LEU:N	2.47	0.48
1:A:277:ILE:O	1:A:278:PRO:C	2.50	0.48
1:A:558:LEU:HD23	1:A:558:LEU:N	2.28	0.48
4:Z:4:DC:H2"	4:Z:5:DA:OP2	2.14	0.48
1:A:171:GLN:HG2	1:A:172:GLY:N	2.27	0.48
1:A:369:LEU:HA	1:A:373:GLN:HE22	1.78	0.48
1:A:375:ARG:C	1:A:377:HIS:N	2.65	0.48
1:A:66:PHE:C	1:A:68:ASP:N	2.66	0.48
1:A:696:ASP:O	1:A:702:MET:CE	2.62	0.48
1:A:704:ARG:HB3	1:A:725:ARG:HH22	1.78	0.48
1:A:112:ASP:O	1:A:113:LEU:HD23	2.13	0.48
1:A:131:LEU:O	1:A:136:ILE:HB	2.14	0.48
1:A:227:VAL:C	1:A:228:LYS:HG2	2.33	0.48
1:A:269:MET:HE1	1:A:273:PHE:CE1	2.48	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:497:ASP:OD1	1:A:522:MET:HE3	2.12	0.48
1:A:69:TYR:C	1:A:69:TYR:CD1	2.85	0.48
1:A:264:ILE:HA	1:A:268:GLN:HE21	1.79	0.48
1:A:313:THR:HG22	1:A:315:TYR:C	2.33	0.48
1:A:423:MET:HE2	1:A:479:HIS:N	2.28	0.48
1:A:494:VAL:CG2	1:A:510:LEU:HD12	2.42	0.48
1:A:632:MET:CB	1:A:653:ILE:CD1	2.92	0.48
1:A:640:TYR:O	1:A:641:ASP:C	2.52	0.48
1:A:116:ASP:CB	1:A:128:LYS:NZ	2.75	0.48
1:A:173:LYS:O	1:A:174:ILE:HG22	2.14	0.48
1:A:547:MET:CG	1:A:548:PRO:N	2.75	0.48
1:A:752:LEU:HD12	1:A:753:LEU:HD11	1.96	0.48
1:A:7:PHE:HB3	1:A:11:LEU:HD12	1.95	0.48
1:A:154:ARG:O	1:A:252:ARG:CD	2.62	0.48
1:A:191:VAL:CG1	1:A:192:LEU:N	2.63	0.48
1:A:88:SER:O	1:A:89:LEU:C	2.52	0.48
1:A:138:THR:CG2	1:A:140:ARG:N	2.77	0.47
1:A:193:SER:O	1:A:194:ASP:C	2.51	0.47
1:A:210:GLN:O	1:A:214:LYS:HG3	2.14	0.47
1:A:289:PRO:CD	1:A:292:ILE:CD1	2.89	0.47
1:A:704:ARG:O	1:A:707:PHE:HB3	2.14	0.47
1:A:70:VAL:O	1:A:71:LYS:C	2.50	0.47
3:Y:2:DC:C2	3:Y:3:DA:N7	2.82	0.47
1:A:152:ASP:C	1:A:152:ASP:OD1	2.47	0.47
1:A:180:LYS:HD3	1:A:187:ILE:HB	1.96	0.47
1:A:23:GLU:HG3	1:A:24:GLU:N	2.28	0.47
1:A:247:GLU:O	1:A:249:GLU:N	2.47	0.47
1:A:298:LEU:CD1	1:A:322:GLU:CB	2.91	0.47
1:A:342:GLU:OE1	1:A:342:GLU:CA	2.63	0.47
1:A:529:ARG:CZ	1:A:533:LEU:HD11	2.36	0.47
1:A:683:ARG:HB3	1:A:683:ARG:HE	1.30	0.47
1:A:126:ASN:ND2	1:A:130:LYS:HG2	2.29	0.47
1:A:226:THR:O	1:A:238:ILE:HG13	2.15	0.47
1:A:323:ARG:HD2	1:A:323:ARG:O	2.14	0.47
1:A:368:LYS:O	1:A:369:LEU:CB	2.49	0.47
1:A:350:PRO:CB	1:A:385:ILE:O	2.52	0.47
1:A:386:SER:O	1:A:388:LYS:N	2.47	0.47
1:A:569:GLU:OE1	1:A:572:ARG:HD2	2.13	0.47
1:A:635:PHE:CG	1:A:643:LEU:CD2	2.97	0.47
1:A:745:ASP:O	1:A:749:ASP:CG	2.53	0.47
1:A:148:ARG:CB	1:A:257:ILE:HG22	2.44	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:23:GLU:HG3	1:A:24:GLU:H	1.80	0.47
1:A:361:PHE:CD2	1:A:365:LEU:HD21	2.48	0.47
3:Y:1:DG:H2"	3:Y:2:DC:C6	2.48	0.47
2:X:6:DC:C2	2:X:7:DC:C5	3.03	0.47
1:A:105:GLU:O	1:A:105:GLU:CG	2.63	0.47
1:A:188:LEU:HD22	1:A:209:LEU:HB2	1.97	0.47
1:A:447:HIS:N	1:A:473:ASP:OD2	2.40	0.47
1:A:488:PHE:CD2	1:A:489:LYS:N	2.74	0.47
1:A:85:ILE:O	1:A:86:GLN:C	2.51	0.47
1:A:14:TRP:O	1:A:17:ALA:HB3	2.15	0.47
1:A:202:LYS:HD2	1:A:237:GLU:CD	2.35	0.47
1:A:295:LYS:HG2	1:A:296:ARG:HH12	1.79	0.47
1:A:342:GLU:HA	1:A:342:GLU:OE1	2.15	0.47
1:A:367:PHE:CD1	1:A:367:PHE:C	2.88	0.47
1:A:37:VAL:O	1:A:38:ASN:CB	2.62	0.47
1:A:404:VAL:C	1:A:407:GLN:HG3	2.35	0.47
1:A:49:LEU:HD23	1:A:54:LEU:HD23	1.92	0.47
1:A:274:GLU:HG2	1:A:310:PHE:HE2	1.78	0.47
1:A:406:ALA:O	1:A:409:ALA:HB3	2.14	0.47
1:A:441:PHE:O	1:A:443:LYS:CA	2.58	0.47
1:A:22:LEU:HD22	1:A:26:LEU:HG	1.97	0.47
1:A:222:PHE:HE1	1:A:246:LYS:HD2	1.71	0.47
1:A:301:VAL:HB	1:A:302:LYS:H	1.25	0.47
1:A:358:ALA:C	1:A:362:ILE:HD12	2.35	0.47
1:A:463:ILE:O	1:A:466:GLY:N	2.47	0.47
1:A:399:GLY:O	1:A:547:MET:HE1	2.15	0.47
1:A:548:PRO:HA	1:A:549:PRO:HD3	1.82	0.47
1:A:182:PHE:N	1:A:182:PHE:HD1	2.13	0.47
1:A:188:LEU:CD2	1:A:209:LEU:CB	2.92	0.47
1:A:216:LEU:HD23	1:A:217:THR:C	2.32	0.47
1:A:37:VAL:CG1	1:A:38:ASN:N	2.67	0.47
1:A:446:ILE:CG2	1:A:473:ASP:CB	2.92	0.47
1:A:665:ASN:O	1:A:668:ARG:NE	2.48	0.47
1:A:453:GLY:HA2	1:A:460:LYS:HE3	1.97	0.47
1:A:458:SER:O	1:A:460:LYS:N	2.48	0.47
1:A:664:GLU:O	1:A:665:ASN:C	2.52	0.47
1:A:668:ARG:CD	1:A:669:PHE:CE2	2.97	0.47
1:A:46:LEU:CD1	1:A:67:LEU:HD23	2.37	0.47
1:A:379:GLU:HG2	1:A:392:ARG:NE	2.25	0.46
1:A:420:THR:HB	1:A:493:LEU:HD13	1.97	0.46
1:A:674:LEU:HB3	1:A:708:PHE:HE1	1.80	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:Y:18:DC:H2''	3:Y:19:DT:OP2	2.14	0.46
1:A:117:ILE:O	1:A:120:ALA:CB	2.63	0.46
1:A:35:ASN:OD1	1:A:35:ASN:N	2.46	0.46
1:A:386:SER:C	1:A:388:LYS:H	2.17	0.46
1:A:414:TYR:CD2	1:A:473:ASP:HB3	2.50	0.46
1:A:298:LEU:HD12	1:A:323:ARG:H	1.75	0.46
1:A:300:GLY:O	1:A:323:ARG:NE	2.43	0.46
1:A:447:HIS:CE1	1:A:471:GLN:HB3	2.49	0.46
1:A:741:PHE:CD1	1:A:741:PHE:N	2.55	0.46
1:A:201:LEU:HD21	1:A:223:VAL:HG21	1.98	0.46
1:A:423:MET:HE1	1:A:479:HIS:CA	2.42	0.46
1:A:368:LYS:CE	1:A:549:PRO:HG2	2.43	0.46
1:A:584:VAL:CG2	1:A:661:MET:HE1	2.46	0.46
1:A:209:LEU:HB3	1:A:213:LEU:HD11	1.97	0.46
1:A:25:PHE:HE1	1:A:45:LEU:HB2	1.78	0.46
1:A:551:ARG:HG3	1:A:552:LYS:H	1.81	0.46
1:A:299:LEU:O	1:A:300:GLY:O	2.33	0.46
1:A:561:MET:O	1:A:562:ASP:C	2.52	0.46
1:A:70:VAL:C	1:A:72:GLU:N	2.69	0.46
3:Y:15:DG:C4	3:Y:16:DA:C8	3.04	0.46
1:A:139:LEU:N	1:A:139:LEU:HD12	2.30	0.46
1:A:290:GLU:HG2	1:A:293:LEU:HD12	1.97	0.46
1:A:298:LEU:HD22	1:A:322:GLU:CG	2.33	0.46
1:A:458:SER:O	1:A:459:GLU:C	2.54	0.46
1:A:664:GLU:C	1:A:666:PRO:CD	2.82	0.46
4:Z:2:DA:H2''	4:Z:3:DG:C5'	2.29	0.46
1:A:18:LEU:HB2	1:A:19:PRO:HD3	1.98	0.46
1:A:289:PRO:O	1:A:292:ILE:HD12	2.16	0.46
1:A:394:LEU:O	1:A:522:MET:HA	2.14	0.46
1:A:700:GLU:OE2	1:A:703:GLU:OE1	2.34	0.46
1:A:117:ILE:CD1	1:A:117:ILE:C	2.44	0.46
1:A:193:SER:O	1:A:194:ASP:O	2.34	0.46
1:A:185:MET:CE	1:A:204:PHE:HB3	2.46	0.46
1:A:164:PRO:CG	1:A:236:TYR:OH	2.49	0.46
1:A:32:MET:HG3	1:A:37:VAL:HA	1.97	0.46
3:Y:3:DA:H2''	3:Y:4:DG:OP2	2.16	0.46
1:A:10:SER:O	1:A:14:TRP:HD1	1.99	0.46
1:A:180:LYS:O	1:A:186:ASN:HA	2.16	0.46
1:A:437:THR:O	1:A:441:PHE:CB	2.64	0.46
1:A:468:ARG:O	1:A:468:ARG:HD3	2.16	0.46
1:A:446:ILE:HG23	1:A:473:ASP:CB	2.46	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:619:MET:CE	1:A:649:ILE:HG23	2.45	0.46
1:A:7:PHE:O	1:A:10:SER:OG	2.29	0.46
1:A:208:TYR:HD1	1:A:209:LEU:CD2	2.26	0.45
1:A:212:TYR:O	1:A:212:TYR:HD2	1.99	0.45
1:A:255:LEU:CD1	1:A:270:ARG:NH1	2.79	0.45
1:A:529:ARG:NH1	1:A:529:ARG:CG	2.78	0.45
1:A:708:PHE:HD2	1:A:708:PHE:O	1.98	0.45
2:X:4:DC:H1'	2:X:5:DT:H5''	1.98	0.45
2:X:7:DC:C2	2:X:8:DA:N7	2.84	0.45
1:A:289:PRO:N	1:A:292:ILE:HD12	2.32	0.45
1:A:379:GLU:OE1	1:A:392:ARG:HD3	2.16	0.45
1:A:25:PHE:CE1	1:A:45:LEU:CB	2.92	0.45
1:A:529:ARG:NH1	1:A:533:LEU:CD2	2.79	0.45
3:Y:18:DC:C1'	3:Y:19:DT:H72	2.46	0.45
1:A:190:ALA:O	1:A:191:VAL:HG22	2.15	0.45
1:A:510:LEU:C	1:A:517:VAL:HG23	2.36	0.45
1:A:606:LEU:O	1:A:609:GLU:HB3	2.17	0.45
1:A:66:PHE:O	1:A:69:TYR:N	2.49	0.45
1:A:69:TYR:C	1:A:69:TYR:HD1	2.20	0.45
1:A:61:GLU:O	1:A:62:LYS:C	2.55	0.45
2:X:5:DT:H2''	2:X:6:DC:C6	2.50	0.45
1:A:101:ILE:HG22	1:A:103:TYR:CE1	2.52	0.45
1:A:126:ASN:ND2	1:A:127:ARG:CA	2.78	0.45
1:A:228:LYS:CE	1:A:239:HIS:CB	2.90	0.45
1:A:298:LEU:CA	1:A:299:LEU:HD23	2.46	0.45
1:A:558:LEU:HD22	1:A:709:THR:HG21	1.98	0.45
1:A:321:ARG:CB	1:A:738:LEU:HD21	2.46	0.45
1:A:205:ASN:H	3:Y:11:DC:H5	1.64	0.45
1:A:151:GLU:OE1	1:A:153:ARG:NH2	2.50	0.45
1:A:180:LYS:CD	1:A:187:ILE:HB	2.47	0.45
1:A:645:SER:O	1:A:646:THR:HB	2.17	0.45
1:A:127:ARG:NH2	1:A:127:ARG:HG2	2.26	0.45
1:A:137:GLU:O	1:A:138:THR:HB	2.15	0.45
1:A:138:THR:HG22	1:A:139:LEU:C	2.37	0.45
1:A:188:LEU:HD21	1:A:213:LEU:HD12	1.95	0.45
1:A:260:LEU:HA	1:A:260:LEU:HD23	1.71	0.45
2:X:8:DA:N9	2:X:9:DT:H71	2.32	0.45
1:A:465:SER:OG	1:A:466:GLY:N	2.50	0.45
1:A:524:ALA:O	1:A:526:PRO:HD3	2.17	0.45
2:X:9:DT:C4	2:X:10:DG:O6	2.70	0.45
1:A:215:GLN:C	1:A:215:GLN:NE2	2.70	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:231:ALA:O	1:A:234:GLY:N	2.37	0.45
1:A:376:ALA:HB1	1:A:405:VAL:HG11	1.99	0.45
1:A:424:VAL:HG11	1:A:429:LEU:HB3	1.98	0.45
1:A:427:SER:O	1:A:431:ILE:HG13	2.16	0.45
1:A:529:ARG:HH11	1:A:533:LEU:CD1	2.24	0.45
1:A:682:GLY:HA2	1:A:688:ALA:HB3	1.96	0.45
1:A:73:ILE:HG23	1:A:84:ARG:HH12	1.77	0.45
1:A:286:GLU:OE2	1:A:301:VAL:HG22	2.17	0.45
1:A:303:ASP:O	1:A:306:TYR:CB	2.60	0.45
1:A:330:PHE:O	1:A:332:LEU:N	2.50	0.45
1:A:366:PRO:O	1:A:367:PHE:O	2.35	0.45
1:A:586:PRO:HG3	1:A:669:PHE:HZ	1.77	0.45
1:A:649:ILE:HG12	1:A:649:ILE:H	1.10	0.45
1:A:632:MET:HB3	1:A:653:ILE:HD11	1.98	0.45
1:A:711:ASN:C	1:A:713:ASP:N	2.69	0.45
1:A:121:LYS:O	1:A:123:VAL:N	2.49	0.44
1:A:276:ASN:O	1:A:277:ILE:C	2.53	0.44
1:A:281:CYS:O	1:A:284:LEU:HG	2.17	0.44
1:A:423:MET:C	1:A:424:VAL:HG23	2.37	0.44
1:A:635:PHE:CE1	1:A:640:TYR:O	2.70	0.44
1:A:84:ARG:HH22	1:A:85:ILE:HG13	1.73	0.44
1:A:255:LEU:HD12	1:A:270:ARG:NH1	2.32	0.44
1:A:488:PHE:CD2	1:A:488:PHE:C	2.90	0.44
1:A:700:GLU:O	1:A:704:ARG:HD2	2.17	0.44
2:X:9:DT:C4	2:X:10:DG:C6	3.05	0.44
1:A:187:ILE:HD13	2:X:11:DA:C2	2.52	0.44
1:A:154:ARG:O	1:A:252:ARG:HG2	2.17	0.44
1:A:599:ALA:O	1:A:603:TYR:N	2.51	0.44
1:A:182:PHE:CD1	1:A:182:PHE:N	2.83	0.44
1:A:748:ARG:HA	1:A:748:ARG:NE	2.32	0.44
1:A:336:PHE:HZ	1:A:536:TYR:CA	2.30	0.44
1:A:430:ALA:O	1:A:431:ILE:C	2.54	0.44
1:A:583:ILE:HD11	1:A:642:ILE:HD13	2.00	0.44
1:A:699:GLU:O	1:A:700:GLU:C	2.54	0.44
1:A:159:LEU:CG	1:A:194:ASP:OD2	2.66	0.44
1:A:351:LYS:CG	1:A:352:LYS:N	2.81	0.44
1:A:497:ASP:OD1	1:A:522:MET:HE2	2.18	0.44
1:A:645:SER:H	1:A:645:SER:HG	1.45	0.44
1:A:150:TYR:CZ	1:A:317:LEU:CD1	3.01	0.44
1:A:246:LYS:C	1:A:248:GLY:N	2.70	0.44
1:A:460:LYS:O	1:A:463:ILE:HB	2.17	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:479:HIS:CD2	1:A:479:HIS:O	2.71	0.44
1:A:393:LEU:HB2	1:A:539:LEU:HD23	2.00	0.44
1:A:213:LEU:H	1:A:213:LEU:HG	1.41	0.44
1:A:29:VAL:C	1:A:32:MET:HB2	2.38	0.44
1:A:388:LYS:CB	1:A:389:PRO:HD3	2.42	0.44
1:A:484:GLU:O	1:A:485:ASP:HB3	2.18	0.44
1:A:544:ILE:HG23	1:A:715:PHE:HZ	1.74	0.44
1:A:603:TYR:OH	1:A:617:GLY:N	2.51	0.44
1:A:655:VAL:O	1:A:655:VAL:HG22	2.18	0.44
1:A:92:ILE:O	1:A:96:ARG:HG2	2.18	0.44
1:A:125:PRO:O	1:A:128:LYS:N	2.48	0.44
1:A:115:THR:H	1:A:139:LEU:CD1	2.31	0.44
1:A:191:VAL:CG2	1:A:200:PRO:HA	2.48	0.44
1:A:208:TYR:CD1	1:A:209:LEU:HD21	2.52	0.44
1:A:25:PHE:HZ	1:A:46:LEU:HD12	1.83	0.44
1:A:539:LEU:O	1:A:540:ASP:C	2.53	0.44
2:X:9:DT:C2	2:X:10:DG:C5	3.05	0.44
1:A:115:THR:C	1:A:117:ILE:N	2.71	0.43
1:A:117:ILE:O	1:A:120:ALA:HB3	2.18	0.43
1:A:120:ALA:HB3	1:A:123:VAL:HB	2.00	0.43
1:A:292:ILE:O	1:A:294:GLU:N	2.49	0.43
1:A:439:GLU:O	1:A:442:SER:HA	2.18	0.43
1:A:440:SER:O	1:A:441:PHE:C	2.57	0.43
1:A:456:THR:O	1:A:459:GLU:HB3	2.17	0.43
2:X:8:DA:C4	2:X:9:DT:C7	3.01	0.43
3:Y:10:DG:C2'	3:Y:11:DC:O5'	2.57	0.43
1:A:290:GLU:CG	1:A:293:LEU:HD12	2.48	0.43
1:A:458:SER:O	1:A:461:GLU:HB2	2.18	0.43
1:A:191:VAL:HG22	1:A:200:PRO:HA	1.99	0.43
1:A:380:ILE:O	1:A:384:MET:HG3	2.18	0.43
1:A:488:PHE:C	1:A:488:PHE:HD2	2.20	0.43
1:A:54:LEU:HD13	1:A:54:LEU:HA	1.59	0.43
1:A:666:PRO:C	1:A:668:ARG:H	2.20	0.43
2:X:9:DT:N3	2:X:10:DG:C6	2.85	0.43
1:A:153:ARG:C	1:A:155:LYS:N	2.53	0.43
1:A:307:GLY:O	1:A:311:PRO:HD3	2.19	0.43
1:A:37:VAL:HG12	1:A:38:ASN:H	1.77	0.43
1:A:571:VAL:HG12	1:A:575:VAL:HB	2.00	0.43
1:A:602:MET:CA	1:A:602:MET:HE3	2.47	0.43
1:A:91:MET:O	1:A:91:MET:HG3	2.19	0.43
3:Y:2:DC:C2'	3:Y:2:DC:O5'	2.66	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:457:PRO:O	1:A:460:LYS:HB2	2.17	0.43
1:A:585:TYR:CZ	1:A:598:SER:OG	2.67	0.43
1:A:669:PHE:C	1:A:670:GLY:O	2.55	0.43
1:A:715:PHE:O	1:A:718:ALA:N	2.51	0.43
1:A:115:THR:O	1:A:117:ILE:N	2.50	0.43
1:A:228:LYS:CE	1:A:239:HIS:HB2	2.48	0.43
1:A:456:THR:HG23	1:A:456:THR:H	1.55	0.43
1:A:648:VAL:HG12	1:A:676:GLN:NE2	2.34	0.43
1:A:73:ILE:HG13	1:A:73:ILE:H	1.54	0.43
1:A:79:ALA:O	1:A:80:ARG:C	2.56	0.43
1:A:206:GLN:HE21	1:A:209:LEU:CD1	2.31	0.43
1:A:260:LEU:HB2	2:X:6:DC:OP2	2.18	0.43
1:A:487:HIS:HB3	1:A:489:LYS:HZ3	1.83	0.43
1:A:163:LEU:HA	1:A:164:PRO:HD2	1.92	0.43
1:A:202:LYS:HD2	1:A:237:GLU:OE2	2.19	0.43
1:A:337:GLN:C	1:A:339:ILE:N	2.72	0.43
1:A:420:THR:OG1	1:A:421:ALA:N	2.52	0.43
1:A:115:THR:H	1:A:139:LEU:HD11	1.84	0.43
1:A:229:SER:OG	1:A:229:SER:O	2.36	0.43
1:A:152:ASP:O	1:A:153:ARG:HG2	2.18	0.43
1:A:370:THR:HG1	1:A:372:ALA:H	1.67	0.43
1:A:67:LEU:O	1:A:71:LYS:HG3	2.16	0.43
3:Y:9:DC:C2'	3:Y:9:DC:O5'	2.67	0.43
1:A:751:LYS:H	1:A:751:LYS:HG2	1.66	0.42
1:A:9:SER:OG	1:A:10:SER:N	2.52	0.42
1:A:204:PHE:HB2	3:Y:11:DC:C5	2.49	0.42
1:A:456:THR:HA	1:A:457:PRO:HD3	1.87	0.42
1:A:264:ILE:HG21	1:A:269:MET:HG2	2.01	0.42
1:A:571:VAL:C	1:A:573:GLN:N	2.65	0.42
1:A:630:ARG:HA	1:A:630:ARG:HD3	1.39	0.42
1:A:71:LYS:H	1:A:71:LYS:HG2	1.61	0.42
1:A:718:ALA:C	1:A:720:TYR:N	2.66	0.42
4:Z:7:DT:H2''	4:Z:8:DG:H5'	1.96	0.42
1:A:296:ARG:HD2	1:A:748:ARG:HG3	1.65	0.42
1:A:321:ARG:O	1:A:322:GLU:C	2.56	0.42
1:A:76:LEU:CG	1:A:80:ARG:HB3	2.50	0.42
2:X:7:DC:H1'	2:X:8:DA:H5'	2.00	0.42
1:A:159:LEU:CB	1:A:194:ASP:CG	2.77	0.42
1:A:205:ASN:O	1:A:206:GLN:HG2	2.18	0.42
1:A:25:PHE:HB3	1:A:26:LEU:H	1.69	0.42
1:A:332:LEU:O	1:A:334:LEU:N	2.53	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:584:VAL:CG2	1:A:661:MET:CE	2.98	0.42
1:A:696:ASP:O	1:A:702:MET:HE3	2.20	0.42
1:A:749:ASP:HB2	1:A:750:LEU:H	1.69	0.42
1:A:442:SER:O	1:A:443:LYS:CB	2.54	0.42
1:A:66:PHE:CD1	1:A:91:MET:HG2	2.55	0.42
1:A:715:PHE:C	1:A:717:ILE:N	2.73	0.42
1:A:128:LYS:HD2	1:A:132:LYS:HE3	1.38	0.42
1:A:164:PRO:CA	1:A:236:TYR:CE2	2.92	0.42
1:A:185:MET:HG3	1:A:186:ASN:O	2.18	0.42
1:A:341:LYS:CE	1:A:342:GLU:CA	2.97	0.42
1:A:541:VAL:C	1:A:542:THR:CG2	2.87	0.42
1:A:567:VAL:CG1	1:A:691:PHE:CG	3.02	0.42
1:A:680:ARG:O	1:A:681:VAL:CG2	2.67	0.42
1:A:91:MET:CA	1:A:94:LYS:HD2	2.43	0.42
1:A:337:GLN:O	1:A:339:ILE:N	2.53	0.42
1:A:323:ARG:HH22	1:A:327:GLU:CD	2.11	0.42
1:A:329:LEU:HD12	1:A:329:LEU:HA	1.76	0.42
1:A:529:ARG:O	1:A:532:ALA:HB3	2.19	0.42
1:A:752:LEU:HG	1:A:752:LEU:H	1.35	0.42
1:A:18:LEU:O	1:A:24:GLU:HB3	2.20	0.42
1:A:277:ILE:N	1:A:278:PRO:CD	2.83	0.42
1:A:290:GLU:O	1:A:294:GLU:CG	2.67	0.42
1:A:449:ALA:C	1:A:450:LEU:CD1	2.61	0.42
1:A:567:VAL:O	1:A:570:PHE:N	2.53	0.42
1:A:599:ALA:HA	1:A:602:MET:HB2	2.02	0.42
1:A:121:LYS:C	1:A:123:VAL:H	2.24	0.41
1:A:208:TYR:O	1:A:211:THR:N	2.52	0.41
1:A:174:ILE:HG21	1:A:221:VAL:HG21	2.02	0.41
1:A:265:SER:H	1:A:268:GLN:HB2	1.85	0.41
1:A:302:LYS:O	1:A:303:ASP:C	2.56	0.41
1:A:349:ILE:HA	1:A:350:PRO:HD3	1.87	0.41
1:A:373:GLN:O	1:A:376:ALA:HB3	2.19	0.41
2:X:8:DA:C8	2:X:9:DT:C7	3.03	0.41
3:Y:5:DT:H2''	3:Y:6:DG:O5'	2.20	0.41
4:Z:5:DA:C8	4:Z:5:DA:H5'	2.55	0.41
1:A:239:HIS:O	1:A:240:ASN:CB	2.62	0.41
1:A:270:ARG:O	1:A:274:GLU:HG3	2.20	0.41
1:A:288:LEU:CD2	1:A:326:TYR:HE2	2.33	0.41
1:A:672:ALA:O	1:A:676:GLN:N	2.50	0.41
1:A:81:LYS:O	1:A:84:ARG:HB3	2.19	0.41
1:A:165:GLY:O	1:A:166:GLU:CG	2.68	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:264:ILE:HG22	1:A:268:GLN:CB	2.47	0.41
1:A:365:LEU:H	1:A:365:LEU:HG	1.31	0.41
1:A:375:ARG:O	1:A:377:HIS:N	2.52	0.41
1:A:456:THR:O	1:A:456:THR:OG1	2.39	0.41
1:A:628:LYS:O	1:A:631:VAL:N	2.53	0.41
1:A:635:PHE:HD1	1:A:640:TYR:HB2	1.84	0.41
1:A:208:TYR:OH	3:Y:11:DC:C5'	2.69	0.41
1:A:173:LYS:NZ	1:A:220:GLU:OE1	2.53	0.41
1:A:232:TYR:HD1	1:A:232:TYR:HA	1.74	0.41
1:A:223:VAL:HA	1:A:242:GLU:O	2.20	0.41
1:A:306:TYR:HA	1:A:306:TYR:HD1	1.74	0.41
1:A:609:GLU:C	1:A:611:PHE:H	2.24	0.41
1:A:96:ARG:O	1:A:100:LEU:HB2	2.21	0.41
1:A:180:LYS:CD	1:A:187:ILE:HG21	2.50	0.41
1:A:212:TYR:O	1:A:215:GLN:CA	2.69	0.41
1:A:285:LYS:C	1:A:286:GLU:O	2.56	0.41
1:A:318:GLU:C	1:A:320:ALA:N	2.74	0.41
1:A:33:LEU:HD11	1:A:34:LYS:CG	2.50	0.41
1:A:726:GLY:O	1:A:728:GLY:N	2.53	0.41
1:A:190:ALA:C	1:A:191:VAL:CG2	2.88	0.41
1:A:19:PRO:O	1:A:20:THR:CB	2.45	0.41
1:A:26:LEU:HD23	1:A:26:LEU:HA	1.50	0.41
1:A:539:LEU:C	1:A:541:VAL:N	2.65	0.41
1:A:564:VAL:CG2	1:A:568:TYR:HE1	2.29	0.41
1:A:98:TRP:CE3	1:A:98:TRP:CA	3.02	0.41
2:X:8:DA:O5'	2:X:8:DA:C2'	2.59	0.41
1:A:280:LEU:H	1:A:280:LEU:HG	1.77	0.41
1:A:451:LEU:HD23	1:A:451:LEU:O	2.21	0.41
1:A:679:GLY:O	1:A:681:VAL:N	2.54	0.41
1:A:752:LEU:CB	1:A:753:LEU:CD2	2.96	0.41
1:A:266:GLN:O	1:A:267:LYS:C	2.55	0.41
1:A:343:ARG:HH21	1:A:391:ASN:HD21	1.59	0.41
1:A:414:TYR:CG	1:A:446:ILE:HD13	2.55	0.41
1:A:292:ILE:HB	1:A:293:LEU:H	1.76	0.41
1:A:323:ARG:CD	1:A:323:ARG:C	2.88	0.41
1:A:488:PHE:HE2	1:A:490:ASN:HB2	1.85	0.41
1:A:585:TYR:N	1:A:645:SER:OG	2.53	0.41
1:A:431:ILE:O	1:A:434:TYR:HB3	2.20	0.41
1:A:705:LEU:O	1:A:708:PHE:HB3	2.21	0.41
1:A:92:ILE:O	1:A:95:LEU:HB2	2.21	0.41
1:A:264:ILE:HG22	1:A:265:SER:H	1.85	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:358:ALA:O	1:A:359:GLU:C	2.60	0.41
1:A:620:HIS:C	1:A:647:THR:HG21	2.41	0.41
1:A:89:LEU:HA	1:A:89:LEU:HD23	1.75	0.41
1:A:7:PHE:CD2	1:A:11:LEU:HD21	2.53	0.40
1:A:136:ILE:HG21	1:A:136:ILE:HD13	1.71	0.40
1:A:179:THR:CG2	1:A:210:GLN:NE2	2.84	0.40
1:A:269:MET:HB3	1:A:269:MET:HE3	1.86	0.40
1:A:272:ILE:H	1:A:272:ILE:HG22	1.65	0.40
1:A:482:ILE:HG22	1:A:482:ILE:O	2.17	0.40
2:X:11:DA:O5'	2:X:11:DA:H2'	2.20	0.40
3:Y:1:DG:C8	3:Y:1:DG:O5'	2.65	0.40
1:A:177:VAL:HG13	1:A:190:ALA:HB2	2.03	0.40
1:A:110:GLU:HB2	1:A:283:SER:HB3	2.02	0.40
1:A:501:ARG:O	1:A:502:PHE:CB	2.62	0.40
1:A:529:ARG:HG3	1:A:529:ARG:NH1	2.36	0.40
1:A:527:ILE:HG23	1:A:531:MET:HB3	2.02	0.40
1:A:550:GLY:O	1:A:552:LYS:CG	2.61	0.40
1:A:69:TYR:CE1	1:A:72:GLU:OE1	2.75	0.40
1:A:159:LEU:HA	1:A:159:LEU:HD23	1.25	0.40
1:A:174:ILE:HG21	1:A:221:VAL:CG2	2.51	0.40
1:A:584:VAL:HG21	1:A:661:MET:HE1	2.03	0.40
1:A:604:GLU:HA	1:A:607:SER:OG	2.22	0.40
1:A:27:ASN:HB3	1:A:28:GLU:H	1.45	0.40
1:A:439:GLU:O	1:A:442:SER:N	2.54	0.40
1:A:488:PHE:CE2	1:A:490:ASN:HB2	2.57	0.40
1:A:51:ASP:HA	1:A:252:ARG:NH1	2.37	0.40
1:A:686:GLN:HE21	1:A:686:GLN:HB3	1.43	0.40
1:A:704:ARG:HE	1:A:704:ARG:HB3	1.55	0.40
1:A:544:ILE:HG21	1:A:715:PHE:CZ	2.54	0.40
1:A:70:VAL:C	1:A:72:GLU:H	2.25	0.40
1:A:73:ILE:HA	1:A:84:ARG:NH1	2.36	0.40
1:A:92:ILE:HG22	1:A:96:ARG:HD3	2.03	0.40
1:A:149:ASP:CG	1:A:150:TYR:H	2.25	0.40
1:A:209:LEU:O	1:A:210:GLN:C	2.60	0.40
1:A:300:GLY:C	1:A:301:VAL:CG2	2.86	0.40
1:A:318:GLU:C	1:A:320:ALA:H	2.24	0.40
1:A:336:PHE:CD1	1:A:538:ASP:N	2.81	0.40
1:A:350:PRO:O	1:A:351:LYS:HB2	2.20	0.40
1:A:362:ILE:HA	1:A:365:LEU:HD11	2.03	0.40
1:A:580:GLN:HE21	1:A:580:GLN:HB3	1.67	0.40
1:A:616:LEU:HD21	1:A:642:ILE:CD1	2.38	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:691:PHE:N	1:A:691:PHE:HD1	2.16	0.40
1:A:72:GLU:O	1:A:73:ILE:C	2.59	0.40

All (23) 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:40:ARG:CZ	1:A:40:ARG:NH1[2_557]	0.36	1.84
1:A:12:PHE:CE1	1:A:563:ARG:NH2[2_556]	0.56	1.64
1:A:40:ARG:NE	1:A:40:ARG:NH1[2_557]	1.02	1.18
1:A:40:ARG:CZ	1:A:40:ARG:CZ[2_557]	1.13	1.07
1:A:12:PHE:CE1	1:A:563:ARG:CZ[2_556]	1.28	0.92
1:A:12:PHE:CD1	1:A:563:ARG:NH2[2_556]	1.30	0.90
1:A:469:ASN:OD1	3:Y:12:DA:O3'[4_556]	1.32	0.88
1:A:12:PHE:CZ	1:A:563:ARG:NH2[2_556]	1.36	0.84
1:A:469:ASN:OD1	3:Y:13:DT:P[4_556]	1.38	0.82
1:A:40:ARG:NH1	1:A:40:ARG:NH2[2_557]	1.50	0.70
1:A:469:ASN:OD1	3:Y:13:DT:OP1[4_556]	1.50	0.70
1:A:8:THR:CA	1:A:563:ARG:NH1[2_556]	1.52	0.68
1:A:40:ARG:NH1	1:A:40:ARG:NH1[2_557]	1.55	0.65
1:A:469:ASN:ND2	3:Y:13:DT:OP1[4_556]	1.73	0.47
1:A:469:ASN:CG	3:Y:13:DT:OP1[4_556]	1.76	0.44
1:A:8:THR:CG2	1:A:563:ARG:NH1[2_556]	1.92	0.28
1:A:12:PHE:CZ	1:A:563:ARG:CZ[2_556]	1.93	0.27
1:A:12:PHE:CE1	1:A:563:ARG:NE[2_556]	1.95	0.25
1:A:8:THR:CB	1:A:563:ARG:NH1[2_556]	1.95	0.25
1:A:40:ARG:NE	1:A:40:ARG:CZ[2_557]	2.01	0.19
1:A:48:GLU:CG	1:A:577:ARG:NH1[2_556]	2.09	0.11
1:A:12:PHE:CG	1:A:563:ARG:NH2[2_556]	2.14	0.06
1:A:12:PHE:CE2	1:A:563:ARG:NH2[2_556]	2.17	0.03

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

The Analysed column shows the number of residues for which the backbone conformation was

analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	719/780 (92%)	405 (56%)	177 (25%)	137 (19%)	0 0

All (137) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	8	THR
1	A	10	SER
1	A	27	ASN
1	A	34	LYS
1	A	37	VAL
1	A	38	ASN
1	A	39	THR
1	A	42	ILE
1	A	51	ASP
1	A	71	LYS
1	A	78	GLU
1	A	107	SER
1	A	109	GLU
1	A	154	ARG
1	A	160	ASN
1	A	161	ASP
1	A	208	TYR
1	A	209	LEU
1	A	231	ALA
1	A	232	TYR
1	A	235	GLN
1	A	236	TYR
1	A	237	GLU
1	A	245	PRO
1	A	246	LYS
1	A	248	GLY
1	A	299	LEU
1	A	301	VAL
1	A	302	LYS
1	A	316	HIS
1	A	345	LYS
1	A	366	PRO
1	A	367	PHE
1	A	369	LEU
1	A	404	VAL
1	A	442	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	443	LYS
1	A	445	ASN
1	A	485	ASP
1	A	512	ASN
1	A	526	PRO
1	A	537	GLY
1	A	538	ASP
1	A	540	ASP
1	A	561	MET
1	A	562	ASP
1	A	586	PRO
1	A	610	VAL
1	A	623	LEU
1	A	647	THR
1	A	648	VAL
1	A	672	ALA
1	A	683	ARG
1	A	697	VAL
1	A	20	THR
1	A	25	PHE
1	A	41	ARG
1	A	82	ARG
1	A	117	ILE
1	A	194	ASP
1	A	195	GLY
1	A	217	THR
1	A	233	THR
1	A	281	CYS
1	A	293	LEU
1	A	300	GLY
1	A	346	HIS
1	A	356	LYS
1	A	398	VAL
1	A	405	VAL
1	A	441	PHE
1	A	444	PHE
1	A	481	LEU
1	A	482	ILE
1	A	563	ARG
1	A	573	GLN
1	A	574	GLU
1	A	645	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	676	GLN
1	A	680	ARG
1	A	699	GLU
1	A	712	THR
1	A	741	PHE
1	A	744	ALA
1	A	59	LEU
1	A	66	PHE
1	A	89	LEU
1	A	120	ALA
1	A	215	GLN
1	A	286	GLU
1	A	319	LYS
1	A	357	LEU
1	A	387	GLU
1	A	417	GLY
1	A	464	LYS
1	A	468	ARG
1	A	550	GLY
1	A	727	PRO
1	A	18	LEU
1	A	43	HIS
1	A	67	LEU
1	A	75	ASN
1	A	88	SER
1	A	164	PRO
1	A	333	GLN
1	A	381	ARG
1	A	392	ARG
1	A	434	TYR
1	A	435	ARG
1	A	493	LEU
1	A	498	GLU
1	A	501	ARG
1	A	514	GLY
1	A	646	THR
1	A	686	GLN
1	A	687	GLU
1	A	73	ILE
1	A	125	PRO
1	A	144	GLU
1	A	279	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	350	PRO
1	A	568	TYR
1	A	641	ASP
1	A	665	ASN
1	A	724	THR
1	A	64	GLN
1	A	251	VAL
1	A	355	GLY
1	A	488	PHE
1	A	541	VAL
1	A	701	ALA
1	A	380	ILE
1	A	666	PRO
1	A	431	ILE
1	A	554	VAL
1	A	644	VAL
1	A	85	ILE

5.3.2 Protein sidechains [i](#)

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	646/692 (93%)	399 (62%)	247 (38%)	0 0

All (247) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	7	PHE
1	A	8	THR
1	A	13	LEU
1	A	14	TRP
1	A	18	LEU
1	A	22	LEU
1	A	31	LYS
1	A	33	LEU
1	A	35	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	38	ASN
1	A	40	ARG
1	A	41	ARG
1	A	42	ILE
1	A	46	LEU
1	A	47	LYS
1	A	48	GLU
1	A	49	LEU
1	A	50	ASP
1	A	51	ASP
1	A	54	LEU
1	A	57	LYS
1	A	68	ASP
1	A	69	TYR
1	A	73	ILE
1	A	75	ASN
1	A	76	LEU
1	A	80	ARG
1	A	84	ARG
1	A	88	SER
1	A	96	ARG
1	A	98	TRP
1	A	105	GLU
1	A	111	VAL
1	A	112	ASP
1	A	114	SER
1	A	116	ASP
1	A	117	ILE
1	A	121	LYS
1	A	126	ASN
1	A	127	ARG
1	A	131	LEU
1	A	138	THR
1	A	139	LEU
1	A	140	ARG
1	A	142	LEU
1	A	151	GLU
1	A	152	ASP
1	A	154	ARG
1	A	155	LYS
1	A	158	LYS
1	A	159	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	161	ASP
1	A	162	LEU
1	A	163	LEU
1	A	167	LYS
1	A	169	THR
1	A	171	GLN
1	A	174	ILE
1	A	175	VAL
1	A	176	SER
1	A	177	VAL
1	A	179	THR
1	A	180	LYS
1	A	184	ASN
1	A	185	MET
1	A	189	THR
1	A	193	SER
1	A	194	ASP
1	A	196	LEU
1	A	197	VAL
1	A	198	HIS
1	A	203	TRP
1	A	206	GLN
1	A	208	TYR
1	A	212	TYR
1	A	215	GLN
1	A	216	LEU
1	A	219	LYS
1	A	221	VAL
1	A	224	THR
1	A	226	THR
1	A	227	VAL
1	A	229	SER
1	A	233	THR
1	A	235	GLN
1	A	237	GLU
1	A	244	THR
1	A	247	GLU
1	A	250	TYR
1	A	252	ARG
1	A	257	ILE
1	A	261	THR
1	A	264	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	265	SER
1	A	272	ILE
1	A	277	ILE
1	A	279	SER
1	A	281	CYS
1	A	283	SER
1	A	285	LYS
1	A	286	GLU
1	A	288	LEU
1	A	294	GLU
1	A	296	ARG
1	A	298	LEU
1	A	299	LEU
1	A	302	LYS
1	A	303	ASP
1	A	312	LYS
1	A	313	THR
1	A	317	LEU
1	A	323	ARG
1	A	324	LEU
1	A	329	LEU
1	A	331	VAL
1	A	334	LEU
1	A	341	LYS
1	A	344	GLU
1	A	345	LYS
1	A	349	ILE
1	A	350	PRO
1	A	352	LYS
1	A	353	ILE
1	A	359	GLU
1	A	361	PHE
1	A	363	LYS
1	A	368	LYS
1	A	369	LEU
1	A	370	THR
1	A	374	LYS
1	A	375	ARG
1	A	377	HIS
1	A	378	GLN
1	A	381	ARG
1	A	386	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	388	LYS
1	A	400	SER
1	A	407	GLN
1	A	413	ASN
1	A	420	THR
1	A	422	PHE
1	A	423	MET
1	A	427	SER
1	A	432	GLN
1	A	433	HIS
1	A	434	TYR
1	A	440	SER
1	A	442	SER
1	A	443	LYS
1	A	445	ASN
1	A	447	HIS
1	A	448	VAL
1	A	450	LEU
1	A	452	ILE
1	A	455	THR
1	A	462	LYS
1	A	463	ILE
1	A	467	LEU
1	A	468	ARG
1	A	469	ASN
1	A	475	VAL
1	A	482	ILE
1	A	483	GLN
1	A	486	VAL
1	A	488	PHE
1	A	489	LYS
1	A	490	ASN
1	A	491	LEU
1	A	493	LEU
1	A	496	ILE
1	A	497	ASP
1	A	501	ARG
1	A	511	MET
1	A	516	MET
1	A	522	MET
1	A	525	THR
1	A	526	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	529	ARG
1	A	538	ASP
1	A	545	ASP
1	A	546	GLU
1	A	551	ARG
1	A	557	MET
1	A	558	LEU
1	A	561	MET
1	A	566	GLU
1	A	567	VAL
1	A	572	ARG
1	A	573	GLN
1	A	574	GLU
1	A	575	VAL
1	A	580	GLN
1	A	584	VAL
1	A	585	TYR
1	A	587	LEU
1	A	600	VAL
1	A	601	GLU
1	A	605	TYR
1	A	606	LEU
1	A	607	SER
1	A	610	VAL
1	A	620	HIS
1	A	623	LEU
1	A	629	ASP
1	A	630	ARG
1	A	633	LEU
1	A	634	GLU
1	A	641	ASP
1	A	642	ILE
1	A	643	LEU
1	A	649	ILE
1	A	651	VAL
1	A	653	ILE
1	A	654	ASP
1	A	659	ASN
1	A	660	VAL
1	A	661	MET
1	A	669	PHE
1	A	675	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	676	GLN
1	A	680	ARG
1	A	683	ARG
1	A	686	GLN
1	A	692	LEU
1	A	697	VAL
1	A	699	GLU
1	A	702	MET
1	A	704	ARG
1	A	706	ARG
1	A	707	PHE
1	A	708	PHE
1	A	710	LEU
1	A	712	THR
1	A	719	GLU
1	A	721	ASP
1	A	724	THR
1	A	725	ARG
1	A	729	GLU
1	A	736	HIS
1	A	738	LEU
1	A	739	SER
1	A	742	LYS
1	A	746	LEU
1	A	748	ARG
1	A	750	LEU
1	A	752	LEU
1	A	755	TRP

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (26) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	38	ASN
1	A	44	GLN
1	A	75	ASN
1	A	126	ASN
1	A	183	GLN
1	A	184	ASN
1	A	206	GLN
1	A	210	GLN
1	A	215	GLN
1	A	235	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	268	GLN
1	A	309	HIS
1	A	346	HIS
1	A	373	GLN
1	A	377	HIS
1	A	378	GLN
1	A	382	ASN
1	A	391	ASN
1	A	395	GLN
1	A	413	ASN
1	A	479	HIS
1	A	490	ASN
1	A	512	ASN
1	A	676	GLN
1	A	686	GLN
1	A	736	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 carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 2 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 1 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
5	ADP	A	1756	6	24,29,29	1.31	1 (4%)	29,45,45	1.42	2 (6%)

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
5	ADP	A	1756	6	-	8/12/32/32	0/3/3/3

All (1) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
5	A	1756	ADP	C2-N3	3.29	1.37	1.32

All (2) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
5	A	1756	ADP	N3-C2-N1	-5.26	120.45	128.68
5	A	1756	ADP	O4'-C4'-C3'	-2.19	100.79	105.11

There are no chirality outliers.

All (8) torsion outliers are listed below:

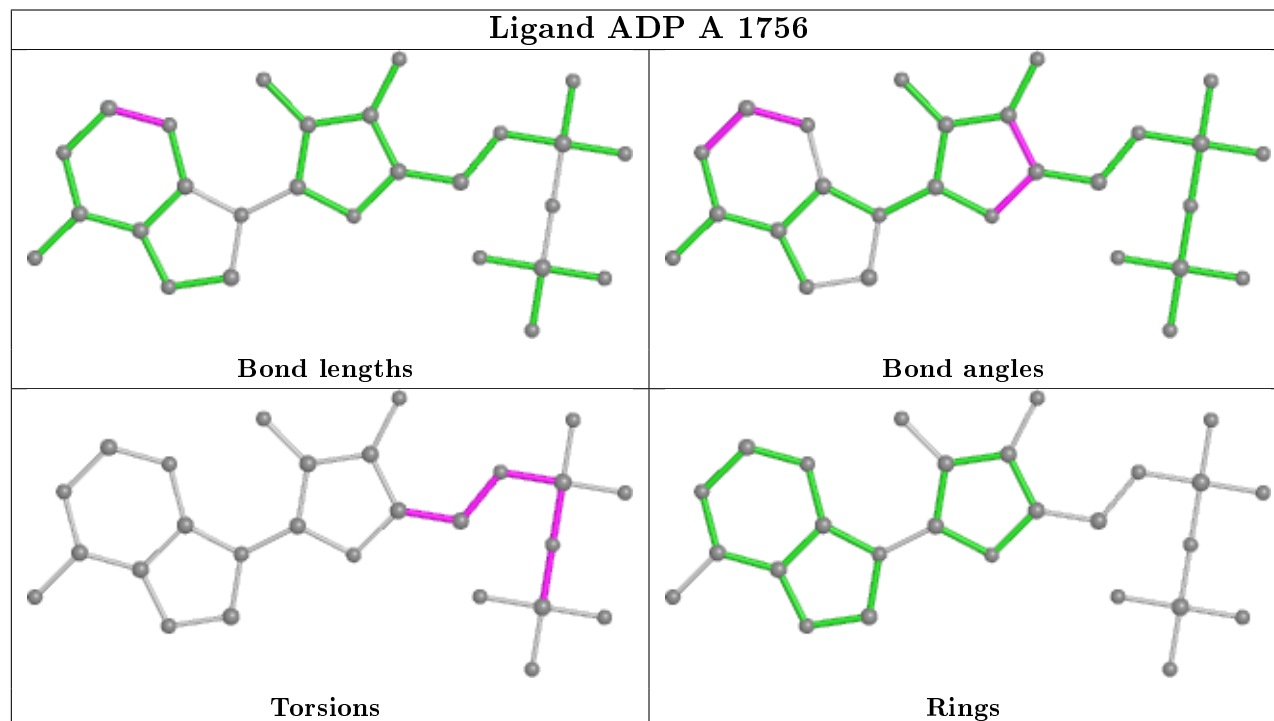
Mol	Chain	Res	Type	Atoms
5	A	1756	ADP	C5'-O5'-PA-O1A
5	A	1756	ADP	C5'-O5'-PA-O2A
5	A	1756	ADP	C4'-C5'-O5'-PA
5	A	1756	ADP	PB-O3A-PA-O5'
5	A	1756	ADP	PB-O3A-PA-O1A
5	A	1756	ADP	PA-O3A-PB-O3B
5	A	1756	ADP	C5'-O5'-PA-O3A
5	A	1756	ADP	O4'-C4'-C5'-O5'

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less than 5% of the Mogul distribution of torsion angles is

within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient equivalents in the CSD to analyse the geometry.



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 [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	729/780 (93%)	-0.33	5 (0%) 87 83	34, 89, 140, 175	0
2	X	12/20 (60%)	-0.16	0 100 100	83, 103, 145, 160	0
3	Y	20/20 (100%)	-0.31	0 100 100	44, 101, 153, 165	0
4	Z	9/9 (100%)	-0.36	0 100 100	53, 64, 90, 97	0
All	All	770/829 (92%)	-0.32	5 (0%) 89 85	34, 90, 142, 175	0

All (5) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	501	ARG	2.5
1	A	588	ILE	2.4
1	A	229	SER	2.3
1	A	108	GLY	2.0
1	A	409	ALA	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 carbohydrates in this entry.

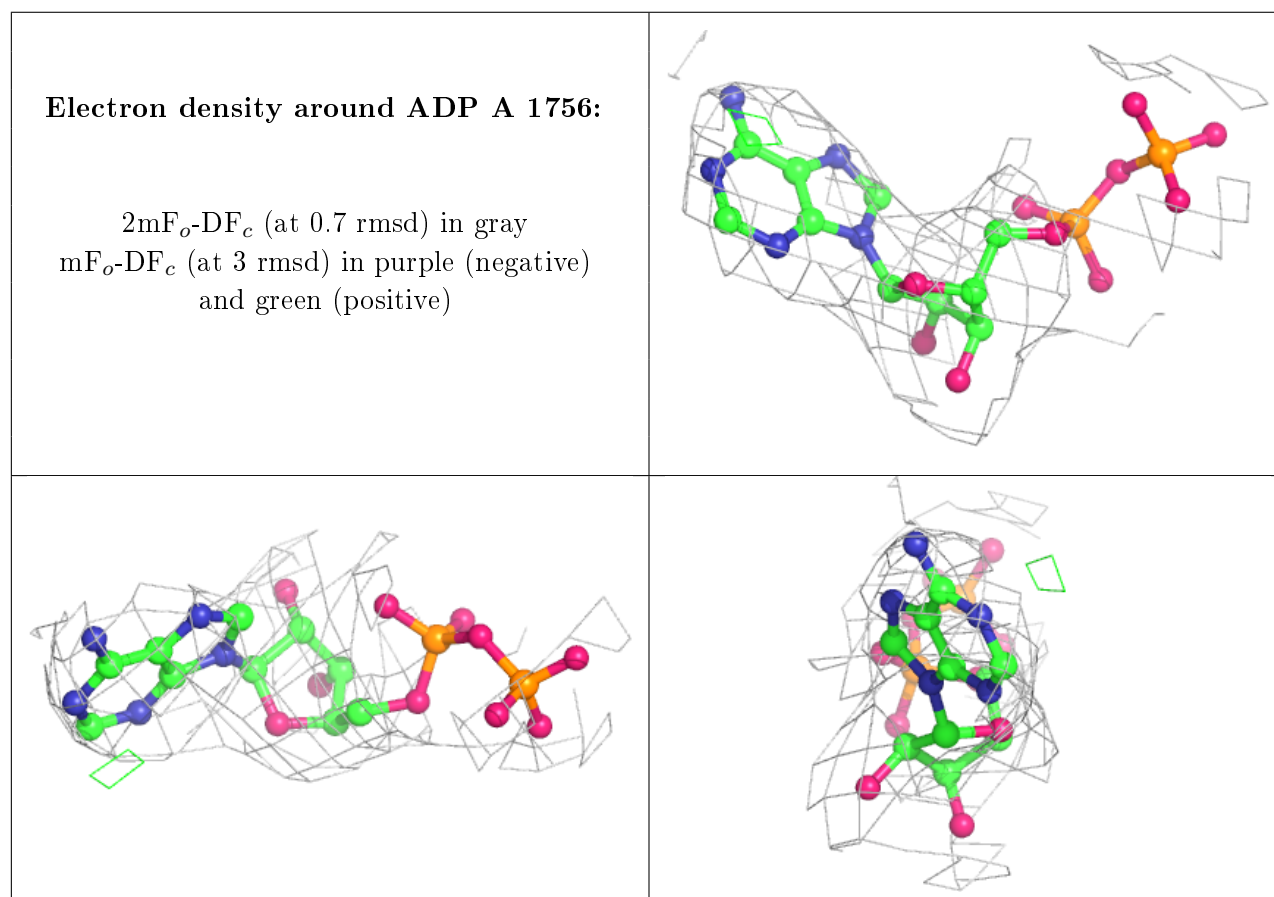
6.4 Ligands [i](#)

In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. The B-factors column lists the minimum,

median, 95th percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled 'Q< 0.9' lists the number of atoms with occupancy less than 0.9.

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors(Å ²)	Q<0.9
6	MG	A	1757	1/1	0.90	0.94	93,93,93,93	0
5	ADP	A	1756	27/27	0.91	0.18	50,83,100,103	0

The following is a graphical depiction of the model fit to experimental electron density of all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the geometry validation Tables will also be included. Each fit is shown from different orientation to approximate a three-dimensional view.



6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.