



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Jan 30, 2024 – 01:45 PM EST

PDB ID : 1HKG
Title : STRUCTURAL DYNAMICS OF YEAST HEXOKINASE DURING CATALYSIS
Authors : Bennett Jr., W.S.; Steitz, T.A.
Deposited on : 1980-12-22
Resolution : 3.50 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

MolProbity : 4.02b-467
Xtrriage (Phenix) : **NOT EXECUTED**
EDS : **NOT EXECUTED**
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.36

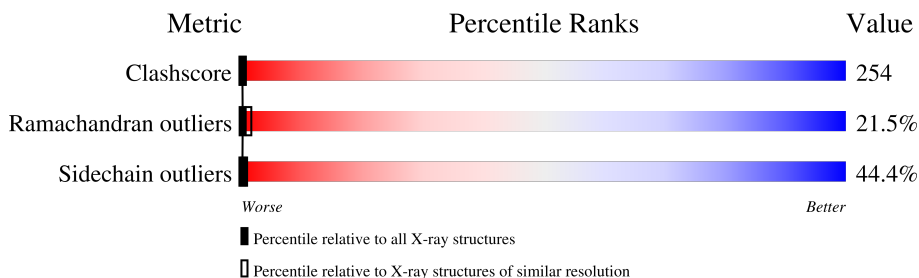
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.50 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	141614	1036 (3.58-3.42)
Ramachandran outliers	138981	1005 (3.58-3.42)
Sidechain outliers	138945	1006 (3.58-3.42)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments of the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria respectively. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$.

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	457	

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3298 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 HEXOKINASE A.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	457	3298	2131	543	611	13	0	0	0

4 Data and refinement statistics

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

Property	Value	Source
Space group	P 21 21 21	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	144.80Å 78.80Å 61.90Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	(Not available) – 3.50	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	(Not available) ((Not available)-3.50)	Depositor
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
Refinement program	PROLSQ	Depositor
R, R_{free}	(Not available) , (Not available)	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtrriage
Total number of atoms	3298	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	0.0	wwPDB-VP

5 Model quality i

5.1 Standard geometry i

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z >5	RMSZ	# Z >5
1	A	3.74	297/2729 (10.9%)	2.67	224/3600 (6.2%)

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

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	2

All (297) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	51	TRP	NE1-CE2	50.00	2.02	1.37
1	A	109	TRP	CZ3-CH2	-32.93	0.87	1.40
1	A	109	TRP	NE1-CE2	-29.84	0.98	1.37
1	A	199	TYR	CE2-CZ	29.05	1.76	1.38
1	A	51	TRP	CZ3-CH2	-27.46	0.96	1.40
1	A	249	PHE	CE2-CZ	27.07	1.88	1.37
1	A	414	TRP	CZ3-CH2	26.30	1.82	1.40
1	A	276	PHE	CE2-CZ	24.49	1.83	1.37
1	A	365	TYR	CE2-CZ	24.15	1.70	1.38
1	A	412	TYR	CE2-CZ	22.55	1.67	1.38
1	A	219	TRP	NE1-CE2	20.70	1.64	1.37
1	A	277	GLU	CD-OE1	-19.37	1.04	1.25
1	A	175	PHE	CE2-CZ	18.63	1.72	1.37
1	A	400	PHE	CE2-CZ	18.44	1.72	1.37
1	A	296	TYR	CE2-CZ	18.40	1.62	1.38
1	A	310	PHE	CE2-CZ	17.16	1.70	1.37
1	A	414	TRP	NE1-CE2	16.82	1.59	1.37
1	A	124	PHE	CE2-CZ	15.62	1.67	1.37
1	A	64	PHE	CE2-CZ	14.81	1.65	1.37
1	A	191	HIS	CE1-NE2	14.31	1.65	1.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	383	TYR	CE2-CZ	13.60	1.56	1.38
1	A	387	HIS	CE1-NE2	-13.02	1.02	1.32
1	A	11	GLU	CD-OE1	12.73	1.39	1.25
1	A	367	PHE	CE2-CZ	10.97	1.58	1.37
1	A	86	GLU	CD-OE1	10.87	1.37	1.25
1	A	150	GLN	CG-CD	-10.68	1.26	1.51
1	A	45	ILE	N-CA	10.21	1.66	1.46
1	A	49	PRO	CA-C	-10.07	1.32	1.52
1	A	393	SER	CB-OG	9.64	1.54	1.42
1	A	431	ASP	N-CA	9.55	1.65	1.46
1	A	218	TYR	CE1-CZ	9.54	1.50	1.38
1	A	333	ARG	NE-CZ	9.48	1.45	1.33
1	A	250	ARG	CZ-NH2	9.20	1.45	1.33
1	A	320	TYR	CE1-CZ	9.18	1.50	1.38
1	A	92	SER	CB-OG	9.16	1.54	1.42
1	A	414	TRP	CG-CD2	-9.16	1.28	1.43
1	A	13	HIS	CE1-NE2	-9.11	1.11	1.32
1	A	303	HIS	CE1-NE2	9.09	1.53	1.32
1	A	433	GLU	CD-OE2	9.00	1.35	1.25
1	A	280	SER	CB-OG	-8.97	1.30	1.42
1	A	219	TRP	CZ3-CH2	8.89	1.54	1.40
1	A	158	PHE	CE2-CZ	-8.87	1.20	1.37
1	A	428	PRO	CB-CG	8.78	1.93	1.50
1	A	320	TYR	CE2-CZ	8.72	1.49	1.38
1	A	131	VAL	C-N	8.60	1.50	1.34
1	A	257	PRO	CB-CG	8.55	1.92	1.50
1	A	296	TYR	CG-CD2	8.55	1.50	1.39
1	A	395	ARG	CZ-NH2	8.53	1.44	1.33
1	A	236	GLY	CA-C	8.51	1.65	1.51
1	A	414	TRP	CD1-NE1	8.50	1.52	1.38
1	A	421	SER	CA-CB	8.40	1.65	1.52
1	A	126	SER	CB-OG	8.37	1.53	1.42
1	A	261	TYR	CB-CG	-8.35	1.39	1.51
1	A	218	TYR	CE2-CZ	8.34	1.49	1.38
1	A	277	GLU	CD-OE2	8.21	1.34	1.25
1	A	320	TYR	CG-CD2	8.20	1.49	1.39
1	A	423	PRO	C-O	8.18	1.39	1.23
1	A	329	HIS	CE1-NE2	-8.16	1.13	1.32
1	A	399	GLY	N-CA	8.05	1.58	1.46
1	A	46	PRO	N-CA	7.95	1.60	1.47
1	A	399	GLY	CA-C	7.86	1.64	1.51
1	A	360	PHE	CE2-CZ	7.82	1.52	1.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	144	GLU	CD-OE2	7.81	1.34	1.25
1	A	383	TYR	CB-CG	7.80	1.63	1.51
1	A	17	PHE	CE2-CZ	-7.71	1.22	1.37
1	A	135	PHE	CG-CD2	7.69	1.50	1.38
1	A	119	PHE	CE1-CZ	7.61	1.51	1.37
1	A	123	GLU	CG-CD	7.59	1.63	1.51
1	A	454	SER	CB-OG	7.55	1.52	1.42
1	A	236	GLY	N-CA	7.54	1.57	1.46
1	A	333	ARG	CZ-NH2	7.51	1.42	1.33
1	A	432	GLY	CA-C	7.51	1.63	1.51
1	A	83	GLY	C-O	7.50	1.35	1.23
1	A	395	ARG	CZ-NH1	7.48	1.42	1.33
1	A	384	SER	CB-OG	-7.43	1.32	1.42
1	A	319	SER	CB-OG	7.39	1.51	1.42
1	A	212	SER	CB-OG	7.36	1.51	1.42
1	A	434	GLY	CA-C	7.36	1.63	1.51
1	A	417	SER	CB-OG	-7.33	1.32	1.42
1	A	110	GLY	C-O	7.31	1.35	1.23
1	A	104	ILE	N-CA	-7.27	1.31	1.46
1	A	432	GLY	N-CA	7.27	1.56	1.46
1	A	144	GLU	CG-CD	-7.18	1.41	1.51
1	A	137	PHE	CE1-CZ	7.17	1.50	1.37
1	A	4	SER	CB-OG	7.17	1.51	1.42
1	A	269	SER	CA-CB	7.16	1.63	1.52
1	A	257	PRO	N-CD	7.16	1.57	1.47
1	A	199	TYR	CG-CD2	7.15	1.48	1.39
1	A	314	ASN	N-CA	7.15	1.60	1.46
1	A	331	ASP	CG-OD1	7.12	1.41	1.25
1	A	360	PHE	CE1-CZ	7.10	1.50	1.37
1	A	158	PHE	CG-CD2	-7.04	1.28	1.38
1	A	235	GLY	C-O	7.01	1.34	1.23
1	A	341	GLY	CA-C	-6.97	1.40	1.51
1	A	368	ARG	CZ-NH1	6.95	1.42	1.33
1	A	135	PHE	CE1-CZ	6.91	1.50	1.37
1	A	49	PRO	CA-CB	-6.89	1.39	1.53
1	A	190	SER	CB-OG	-6.89	1.33	1.42
1	A	238	GLY	N-CA	6.86	1.56	1.46
1	A	130	SER	CA-CB	6.82	1.63	1.52
1	A	86	GLU	C-O	6.82	1.36	1.23
1	A	74	LEU	C-O	6.78	1.36	1.23
1	A	242	VAL	C-O	6.72	1.36	1.23
1	A	326	LYS	C-O	6.71	1.36	1.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	205	LYS	C-O	6.69	1.36	1.23
1	A	442	SER	CB-OG	-6.69	1.33	1.42
1	A	284	ASN	C-O	6.66	1.36	1.23
1	A	288	SER	CB-OG	6.64	1.50	1.42
1	A	93	ARG	CD-NE	6.58	1.57	1.46
1	A	261	TYR	CE1-CZ	6.58	1.47	1.38
1	A	436	ALA	C-O	6.58	1.35	1.23
1	A	435	ALA	N-CA	6.55	1.59	1.46
1	A	140	ALA	N-CA	6.54	1.59	1.46
1	A	247	ASP	CG-OD1	6.51	1.40	1.25
1	A	159	SER	CB-OG	6.51	1.50	1.42
1	A	134	GLY	CA-C	6.51	1.62	1.51
1	A	411	ILE	CA-CB	-6.50	1.39	1.54
1	A	47	MET	N-CA	6.50	1.59	1.46
1	A	109	TRP	CG-CD1	-6.50	1.27	1.36
1	A	286	GLY	N-CA	6.50	1.55	1.46
1	A	243	CYS	N-CA	6.49	1.59	1.46
1	A	286	GLY	CA-C	6.48	1.62	1.51
1	A	36	ASP	CG-OD1	6.43	1.40	1.25
1	A	84	TYR	CE2-CZ	6.41	1.46	1.38
1	A	440	ILE	C-O	6.40	1.35	1.23
1	A	367	PHE	CE1-CZ	6.39	1.49	1.37
1	A	139	GLU	CD-OE1	6.38	1.32	1.25
1	A	269	SER	CB-OG	6.38	1.50	1.42
1	A	218	TYR	CD1-CE1	6.37	1.49	1.39
1	A	218	TYR	CG-CD2	6.37	1.47	1.39
1	A	129	GLY	C-O	6.37	1.33	1.23
1	A	109	TRP	C-O	6.36	1.35	1.23
1	A	168	SER	CB-OG	6.35	1.50	1.42
1	A	93	ARG	NE-CZ	6.35	1.41	1.33
1	A	123	GLU	CD-OE1	6.33	1.32	1.25
1	A	59	SER	C-O	6.32	1.35	1.23
1	A	228	ALA	C-O	6.31	1.35	1.23
1	A	158	PHE	CG-CD1	-6.31	1.29	1.38
1	A	155	ALA	C-O	6.28	1.35	1.23
1	A	269	SER	N-CA	6.28	1.58	1.46
1	A	97	ALA	N-CA	6.26	1.58	1.46
1	A	259	ILE	N-CA	6.26	1.58	1.46
1	A	310	PHE	CE1-CZ	6.23	1.49	1.37
1	A	355	VAL	C-O	6.22	1.35	1.23
1	A	383	TYR	CG-CD2	6.22	1.47	1.39
1	A	413	GLY	N-CA	6.21	1.55	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	137	PHE	CD2-CE2	6.20	1.51	1.39
1	A	94	SER	CB-OG	6.17	1.50	1.42
1	A	296	TYR	CB-CG	6.16	1.60	1.51
1	A	125	SER	CB-OG	-6.15	1.34	1.42
1	A	199	TYR	CE1-CZ	6.13	1.46	1.38
1	A	39	ASP	CG-OD1	6.13	1.39	1.25
1	A	130	SER	C-O	6.11	1.34	1.23
1	A	359	LEU	C-O	6.10	1.34	1.23
1	A	333	ARG	CD-NE	6.06	1.56	1.46
1	A	270	PRO	C-O	6.05	1.35	1.23
1	A	432	GLY	C-O	6.04	1.33	1.23
1	A	367	PHE	N-CA	6.03	1.58	1.46
1	A	316	GLU	CD-OE2	-5.96	1.19	1.25
1	A	423	PRO	N-CA	5.96	1.57	1.47
1	A	107	ASP	CG-OD2	5.95	1.39	1.25
1	A	39	ASP	C-O	-5.93	1.12	1.23
1	A	309	ASP	CG-OD2	5.93	1.39	1.25
1	A	351	MET	C-O	-5.93	1.12	1.23
1	A	101	THR	C-N	-5.93	1.20	1.34
1	A	321	PRO	CB-CG	-5.92	1.20	1.50
1	A	20	PRO	N-CD	-5.92	1.39	1.47
1	A	184	VAL	C-O	5.91	1.34	1.23
1	A	218	TYR	CD2-CE2	5.91	1.48	1.39
1	A	118	ALA	C-O	-5.88	1.12	1.23
1	A	261	TYR	CD2-CE2	5.88	1.48	1.39
1	A	422	LYS	C-O	-5.86	1.12	1.23
1	A	367	PHE	CG-CD2	5.86	1.47	1.38
1	A	13	HIS	ND1-CE1	-5.85	1.20	1.34
1	A	261	TYR	CZ-OH	5.85	1.47	1.37
1	A	39	ASP	CB-CG	5.82	1.64	1.51
1	A	58	GLY	CA-C	5.81	1.61	1.51
1	A	126	SER	C-O	5.80	1.34	1.23
1	A	255	SER	CB-OG	5.79	1.49	1.42
1	A	414	TRP	CE3-CZ3	-5.79	1.28	1.38
1	A	253	PHE	N-CA	5.78	1.57	1.46
1	A	431	ASP	CG-OD2	5.77	1.38	1.25
1	A	31	ALA	CA-CB	5.76	1.64	1.52
1	A	316	GLU	N-CA	5.75	1.57	1.46
1	A	221	ASP	CG-OD2	5.74	1.38	1.25
1	A	339	PHE	CB-CG	5.73	1.61	1.51
1	A	17	PHE	CB-CG	-5.73	1.41	1.51
1	A	34	ARG	NE-CZ	5.73	1.40	1.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	401	SER	CB-OG	5.71	1.49	1.42
1	A	330	PHE	CB-CG	5.71	1.61	1.51
1	A	354	VAL	C-O	-5.71	1.12	1.23
1	A	223	THR	C-O	5.70	1.34	1.23
1	A	346	ALA	C-O	5.70	1.34	1.23
1	A	316	GLU	CD-OE1	-5.68	1.19	1.25
1	A	199	TYR	CD2-CE2	5.64	1.47	1.39
1	A	179	ASP	C-O	5.64	1.34	1.23
1	A	387	HIS	C-O	5.64	1.34	1.23
1	A	119	PHE	CG-CD2	5.63	1.47	1.38
1	A	134	GLY	N-CA	5.63	1.54	1.46
1	A	70	GLY	C-O	5.63	1.32	1.23
1	A	272	ALA	CA-CB	5.63	1.64	1.52
1	A	75	GLU	CG-CD	5.62	1.60	1.51
1	A	17	PHE	CG-CD1	-5.62	1.30	1.38
1	A	400	PHE	CG-CD2	5.61	1.47	1.38
1	A	279	ASN	N-CA	5.61	1.57	1.46
1	A	277	GLU	C-O	-5.60	1.12	1.23
1	A	49	PRO	C-N	-5.59	1.23	1.33
1	A	254	PRO	C-O	5.58	1.34	1.23
1	A	315	VAL	CA-C	5.58	1.67	1.52
1	A	28	VAL	CB-CG2	-5.57	1.41	1.52
1	A	192	GLY	C-O	-5.57	1.14	1.23
1	A	124	PHE	CD2-CE2	5.55	1.50	1.39
1	A	389	ALA	C-O	5.55	1.33	1.23
1	A	363	ALA	CA-CB	-5.51	1.40	1.52
1	A	360	PHE	CD2-CE2	5.51	1.50	1.39
1	A	276	PHE	CE1-CZ	5.50	1.47	1.37
1	A	43	ALA	C-O	5.50	1.33	1.23
1	A	309	ASP	CB-CG	5.50	1.63	1.51
1	A	210	PHE	N-CA	5.50	1.57	1.46
1	A	423	PRO	CA-C	5.48	1.63	1.52
1	A	307	ALA	C-O	5.47	1.33	1.23
1	A	29	SER	C-O	-5.46	1.12	1.23
1	A	165	LYS	C-O	5.46	1.33	1.23
1	A	284	ASN	N-CA	5.46	1.57	1.46
1	A	250	ARG	CZ-NH1	5.45	1.40	1.33
1	A	360	PHE	C-O	-5.44	1.13	1.23
1	A	135	PHE	N-CA	5.43	1.57	1.46
1	A	256	LEU	N-CA	5.43	1.57	1.46
1	A	16	VAL	C-O	5.43	1.33	1.23
1	A	455	ALA	C-O	-5.40	1.13	1.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	135	PHE	CE2-CZ	5.40	1.47	1.37
1	A	367	PHE	CB-CG	5.40	1.60	1.51
1	A	199	TYR	N-CA	-5.36	1.35	1.46
1	A	300	GLY	C-O	5.36	1.32	1.23
1	A	64	PHE	CA-C	-5.36	1.39	1.52
1	A	84	TYR	CZ-OH	-5.35	1.28	1.37
1	A	103	ALA	CA-C	-5.35	1.39	1.52
1	A	424	ILE	N-CA	5.35	1.57	1.46
1	A	454	SER	CA-CB	5.34	1.60	1.52
1	A	175	PHE	CD2-CE2	-5.33	1.28	1.39
1	A	417	SER	CA-CB	5.33	1.60	1.52
1	A	291	ASP	CG-OD1	5.32	1.37	1.25
1	A	368	ARG	CZ-NH2	-5.32	1.26	1.33
1	A	135	PHE	CD2-CE2	5.31	1.49	1.39
1	A	168	SER	CA-CB	-5.31	1.45	1.52
1	A	84	TYR	C-O	5.30	1.33	1.23
1	A	261	TYR	C-O	5.30	1.33	1.23
1	A	356	ARG	N-CA	5.30	1.56	1.46
1	A	300	GLY	N-CA	5.29	1.53	1.46
1	A	93	ARG	C-O	5.29	1.33	1.23
1	A	157	ALA	C-O	5.29	1.33	1.23
1	A	39	ASP	N-CA	-5.29	1.35	1.46
1	A	209	ILE	N-CA	5.27	1.56	1.46
1	A	454	SER	C-O	-5.27	1.13	1.23
1	A	415	PRO	CB-CG	5.26	1.76	1.50
1	A	429	ALA	CA-CB	5.25	1.63	1.52
1	A	416	GLN	C-O	5.25	1.33	1.23
1	A	72	GLY	C-O	-5.25	1.15	1.23
1	A	428	PRO	N-CA	5.23	1.56	1.47
1	A	458	ALA	C-O	5.22	1.33	1.23
1	A	269	SER	C-N	5.22	1.44	1.34
1	A	439	VAL	N-CA	5.21	1.56	1.46
1	A	339	PHE	CG-CD2	5.20	1.46	1.38
1	A	158	PHE	CB-CG	-5.20	1.42	1.51
1	A	354	VAL	CA-C	-5.20	1.39	1.52
1	A	396	ASP	CG-OD2	5.19	1.37	1.25
1	A	238	GLY	C-O	-5.19	1.15	1.23
1	A	46	PRO	CA-C	5.19	1.63	1.52
1	A	124	PHE	CG-CD2	5.17	1.46	1.38
1	A	371	VAL	CB-CG1	-5.17	1.42	1.52
1	A	400	PHE	N-CA	5.15	1.56	1.46
1	A	97	ALA	C-O	-5.14	1.13	1.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	249	PHE	CD1-CE1	5.13	1.49	1.39
1	A	422	LYS	C-N	-5.13	1.24	1.34
1	A	123	GLU	CD-OE2	5.12	1.31	1.25
1	A	64	PHE	CD2-CE2	5.11	1.49	1.39
1	A	199	TYR	CZ-OH	5.11	1.46	1.37
1	A	154	GLN	N-CA	-5.10	1.36	1.46
1	A	317	ASN	N-CA	5.10	1.56	1.46
1	A	445	SER	N-CA	-5.09	1.36	1.46
1	A	124	PHE	CB-CG	5.09	1.60	1.51
1	A	64	PHE	CE1-CZ	5.09	1.47	1.37
1	A	411	ILE	CB-CG1	-5.08	1.39	1.54
1	A	357	ARG	C-O	-5.08	1.13	1.23
1	A	63	SER	CB-OG	5.06	1.48	1.42
1	A	13	HIS	CG-CD2	-5.06	1.27	1.35
1	A	98	SER	N-CA	5.05	1.56	1.46
1	A	249	PHE	CG-CD1	5.04	1.46	1.38
1	A	121	SER	CA-CB	5.04	1.60	1.52
1	A	236	GLY	C-O	5.04	1.31	1.23
1	A	261	TYR	CD1-CE1	-5.03	1.31	1.39
1	A	363	ALA	N-CA	-5.03	1.36	1.46
1	A	393	SER	C-O	-5.02	1.13	1.23
1	A	130	SER	CB-OG	5.02	1.48	1.42
1	A	252	ALA	CA-CB	5.01	1.62	1.52
1	A	360	PHE	CD1-CE1	5.01	1.49	1.39
1	A	94	SER	CA-CB	-5.01	1.45	1.52

All (224) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	109	TRP	CD1-NE1-CE2	22.37	129.13	109.00
1	A	414	TRP	CD1-NE1-CE2	-19.17	91.75	109.00
1	A	51	TRP	CD1-CG-CD2	17.07	119.95	106.30
1	A	333	ARG	NE-CZ-NH2	14.62	127.61	120.30
1	A	34	ARG	NE-CZ-NH2	14.51	127.56	120.30
1	A	93	ARG	NE-CZ-NH2	14.34	127.47	120.30
1	A	109	TRP	NE1-CE2-CD2	-14.25	93.05	107.30
1	A	414	TRP	CD1-CG-CD2	12.40	116.22	106.30
1	A	414	TRP	CE2-CD2-CE3	12.28	133.43	118.70
1	A	414	TRP	CG-CD2-CE3	-12.02	123.08	133.90
1	A	185	ALA	O-C-N	11.90	141.74	122.70
1	A	331	ASP	O-C-N	11.90	141.73	122.70
1	A	277	GLU	N-CA-CB	11.09	130.57	110.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	75	GLU	O-C-N	10.99	140.28	122.70
1	A	219	TRP	CD1-NE1-CE2	-10.98	99.12	109.00
1	A	51	TRP	NE1-CE2-CD2	-10.72	96.58	107.30
1	A	109	TRP	CG-CD1-NE1	-10.54	99.56	110.10
1	A	368	ARG	NE-CZ-NH1	10.53	125.56	120.30
1	A	51	TRP	NE1-CE2-CZ2	10.33	141.76	130.40
1	A	310	PHE	CZ-CE2-CD2	-10.09	107.99	120.10
1	A	18	ILE	O-C-N	9.92	138.57	122.70
1	A	219	TRP	CD1-CG-CD2	9.77	114.11	106.30
1	A	50	GLY	O-C-N	9.55	137.97	122.70
1	A	109	TRP	NE1-CE2-CZ2	9.53	140.88	130.40
1	A	333	ARG	NH1-CZ-NH2	-9.51	108.94	119.40
1	A	51	TRP	CD1-NE1-CE2	-9.12	100.80	109.00
1	A	158	PHE	CZ-CE2-CD2	9.02	130.93	120.10
1	A	276	PHE	CD1-CG-CD2	8.87	129.83	118.30
1	A	34	ARG	NH1-CZ-NH2	-8.85	109.67	119.40
1	A	240	MET	CG-SD-CE	8.84	114.34	100.20
1	A	45	ILE	CB-CA-C	-8.79	94.03	111.60
1	A	292	VAL	CG1-CB-CG2	-8.70	96.99	110.90
1	A	341	GLY	O-C-N	8.68	136.58	122.70
1	A	454	SER	O-C-N	-8.66	108.84	122.70
1	A	412	TYR	CB-CG-CD2	-8.66	115.81	121.00
1	A	356	ARG	NE-CZ-NH2	8.65	124.62	120.30
1	A	123	GLU	OE1-CD-OE2	-8.59	112.99	123.30
1	A	365	TYR	CB-CG-CD2	-8.54	115.87	121.00
1	A	395	ARG	NE-CZ-NH1	-8.51	116.04	120.30
1	A	84	TYR	CB-CG-CD2	-8.48	115.91	121.00
1	A	310	PHE	CB-CG-CD1	-8.42	114.90	120.80
1	A	252	ALA	CB-CA-C	8.40	122.71	110.10
1	A	323	LYS	O-C-N	8.37	136.09	122.70
1	A	132	PRO	CA-N-CD	-8.29	99.89	111.50
1	A	109	TRP	CZ3-CH2-CZ2	8.27	131.52	121.60
1	A	276	PHE	CB-CG-CD2	-8.19	115.07	120.80
1	A	276	PHE	CB-CG-CD1	-8.18	115.08	120.80
1	A	277	GLU	CB-CA-C	-8.14	94.11	110.40
1	A	414	TRP	CB-CG-CD2	-8.14	116.02	126.60
1	A	109	TRP	CE3-CZ3-CH2	8.13	130.14	121.20
1	A	47	MET	CG-SD-CE	8.09	113.14	100.20
1	A	208	ILE	O-C-N	-8.04	109.83	122.70
1	A	242	VAL	CG1-CB-CG2	-7.94	98.20	110.90
1	A	412	TYR	CD1-CG-CD2	7.91	126.60	117.90
1	A	75	GLU	OE1-CD-OE2	-7.87	113.85	123.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	104	ILE	O-C-N	7.87	136.05	121.10
1	A	366	ALA	O-C-N	-7.83	110.17	122.70
1	A	199	TYR	CZ-CE2-CD2	-7.79	112.79	119.80
1	A	416	GLN	O-C-N	7.74	135.08	122.70
1	A	250	ARG	NE-CZ-NH1	-7.70	116.45	120.30
1	A	320	TYR	CB-CG-CD1	-7.62	116.43	121.00
1	A	414	TRP	NE1-CE2-CD2	7.60	114.90	107.30
1	A	249	PHE	CB-CG-CD2	-7.60	115.48	120.80
1	A	288	SER	O-C-N	7.58	134.82	122.70
1	A	169	ALA	O-C-N	7.56	134.79	122.70
1	A	178	GLY	O-C-N	7.54	134.77	122.70
1	A	218	TYR	CZ-CE2-CD2	-7.45	113.09	119.80
1	A	184	VAL	CG1-CB-CG2	-7.42	99.03	110.90
1	A	279	ASN	CB-CA-C	-7.40	95.60	110.40
1	A	201	ASP	CB-CG-OD1	7.38	124.94	118.30
1	A	357	ARG	NE-CZ-NH2	7.38	123.99	120.30
1	A	135	PHE	O-C-N	7.37	134.50	122.70
1	A	386	GLY	O-C-N	7.37	134.49	122.70
1	A	439	VAL	CG1-CB-CG2	-7.36	99.12	110.90
1	A	93	ARG	NH1-CZ-NH2	-7.27	111.41	119.40
1	A	109	TRP	CD1-CG-CD2	-7.23	100.51	106.30
1	A	119	PHE	CB-CG-CD1	-7.21	115.75	120.80
1	A	48	VAL	CG1-CB-CG2	-7.14	99.47	110.90
1	A	155	ALA	CB-CA-C	-7.07	99.50	110.10
1	A	150	GLN	OE1-CD-NE2	7.01	138.03	121.90
1	A	20	PRO	O-C-N	6.97	134.35	121.10
1	A	310	PHE	CD1-CG-CD2	6.94	127.32	118.30
1	A	51	TRP	CE3-CZ3-CH2	6.90	128.79	121.20
1	A	276	PHE	CZ-CE2-CD2	-6.86	111.86	120.10
1	A	404	SER	O-C-N	6.86	133.68	122.70
1	A	99	MET	CG-SD-CE	6.77	111.04	100.20
1	A	206	MET	O-C-N	6.77	134.72	123.20
1	A	207	GLY	O-C-N	6.77	133.54	122.70
1	A	261	TYR	CB-CG-CD2	-6.74	116.95	121.00
1	A	390	ALA	CB-CA-C	6.74	120.21	110.10
1	A	277	GLU	OE1-CD-OE2	-6.72	115.23	123.30
1	A	51	TRP	CE2-CD2-CG	6.70	112.66	107.30
1	A	49	PRO	O-C-N	6.67	134.54	123.20
1	A	134	GLY	O-C-N	-6.62	112.10	122.70
1	A	75	GLU	CA-C-N	-6.62	102.63	117.20
1	A	365	TYR	O-C-N	-6.60	112.14	122.70
1	A	109	TRP	CH2-CZ2-CE2	-6.57	110.83	117.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	175	PHE	CB-CG-CD2	-6.56	116.21	120.80
1	A	414	TRP	CE3-CZ3-CH2	-6.56	113.99	121.20
1	A	107	ASP	O-C-N	6.49	133.09	122.70
1	A	395	ARG	O-C-N	6.48	133.07	122.70
1	A	28	VAL	CG1-CB-CG2	-6.48	100.53	110.90
1	A	26	ALA	O-C-N	6.47	133.06	122.70
1	A	277	GLU	CA-CB-CG	6.46	127.62	113.40
1	A	261	TYR	CD1-CG-CD2	6.46	125.00	117.90
1	A	27	VAL	CG1-CB-CG2	-6.45	100.59	110.90
1	A	371	VAL	CG1-CB-CG2	-6.39	100.68	110.90
1	A	39	ASP	N-CA-C	-6.37	93.80	111.00
1	A	424	ILE	CB-CA-C	-6.35	98.89	111.60
1	A	309	ASP	O-C-N	6.34	132.84	122.70
1	A	416	GLN	CB-CA-C	-6.31	97.78	110.40
1	A	333	ARG	NE-CZ-NH1	6.30	123.45	120.30
1	A	317	ASN	CB-CA-C	-6.28	97.84	110.40
1	A	331	ASP	CA-C-N	-6.27	103.41	117.20
1	A	247	ASP	O-C-N	6.24	132.69	122.70
1	A	321	PRO	CA-N-CD	-6.24	102.76	111.50
1	A	255	SER	CB-CA-C	-6.24	98.25	110.10
1	A	383	TYR	O-C-N	6.21	132.63	122.70
1	A	105	PRO	O-C-N	6.20	132.61	122.70
1	A	219	TRP	O-C-N	-6.18	112.81	122.70
1	A	209	ILE	CG1-CB-CG2	-6.16	97.84	111.40
1	A	120	SER	O-C-N	6.16	132.55	122.70
1	A	445	SER	O-C-N	6.15	132.54	122.70
1	A	137	PHE	CB-CG-CD1	-6.14	116.50	120.80
1	A	144	GLU	OE1-CD-OE2	6.13	130.65	123.30
1	A	309	ASP	CA-C-N	-6.10	103.78	117.20
1	A	249	PHE	CB-CA-C	-6.09	98.21	110.40
1	A	258	GLN	O-C-N	-6.09	112.96	122.70
1	A	47	MET	CB-CA-C	-6.08	98.24	110.40
1	A	27	VAL	O-C-N	6.03	132.34	122.70
1	A	259	ILE	CG1-CB-CG2	-6.03	98.14	111.40
1	A	97	ALA	CB-CA-C	-5.97	101.14	110.10
1	A	170	MET	CG-SD-CE	5.97	109.75	100.20
1	A	324	ILE	O-C-N	5.96	132.23	122.70
1	A	176	PRO	O-C-N	5.93	132.20	122.70
1	A	206	MET	CA-C-N	-5.93	104.34	116.20
1	A	320	TYR	CD1-CG-CD2	5.89	124.38	117.90
1	A	84	TYR	CD1-CG-CD2	5.88	124.37	117.90
1	A	365	TYR	CD1-CG-CD2	5.82	124.30	117.90

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	412	TYR	CZ-CE2-CD2	-5.81	114.57	119.80
1	A	125	SER	O-C-N	5.80	131.99	122.70
1	A	212	SER	O-C-N	5.80	133.06	123.20
1	A	147	ILE	CB-CA-C	5.79	123.19	111.60
1	A	426	ILE	O-C-N	5.79	131.96	122.70
1	A	290	ARG	O-C-N	-5.78	113.45	122.70
1	A	443	ILE	CG1-CB-CG2	-5.78	98.69	111.40
1	A	249	PHE	CD1-CG-CD2	5.78	125.81	118.30
1	A	309	ASP	CB-CG-OD2	5.78	123.50	118.30
1	A	397	TYR	CB-CG-CD2	-5.78	117.53	121.00
1	A	400	PHE	CB-CA-C	-5.78	98.85	110.40
1	A	18	ILE	CG1-CB-CG2	-5.77	98.70	111.40
1	A	291	ASP	CB-CG-OD1	5.77	123.49	118.30
1	A	387	HIS	CA-CB-CG	-5.76	103.81	113.60
1	A	400	PHE	CZ-CE2-CD2	-5.75	113.20	120.10
1	A	37	ASP	CB-CG-OD2	5.75	123.47	118.30
1	A	380	LYS	O-C-N	5.73	131.87	122.70
1	A	412	TYR	CB-CG-CD1	-5.73	117.56	121.00
1	A	140	ALA	CB-CA-C	-5.72	101.52	110.10
1	A	201	ASP	OD1-CG-OD2	-5.71	112.44	123.30
1	A	312	ALA	O-C-N	5.71	131.84	122.70
1	A	51	TRP	CB-CG-CD2	-5.71	119.18	126.60
1	A	37	ASP	CB-CG-OD1	5.70	123.43	118.30
1	A	343	GLN	O-C-N	5.68	132.86	123.20
1	A	313	ALA	CB-CA-C	5.64	118.56	110.10
1	A	16	VAL	N-CA-CB	-5.62	99.12	111.50
1	A	360	PHE	CB-CA-C	-5.61	99.19	110.40
1	A	218	TYR	CG-CD1-CE1	-5.59	116.83	121.30
1	A	135	PHE	CA-C-N	-5.59	104.90	117.20
1	A	6	ASP	CB-CG-OD2	5.59	123.33	118.30
1	A	227	ASP	CB-CG-OD1	5.58	123.33	118.30
1	A	87	SER	CB-CA-C	-5.56	99.54	110.10
1	A	270	PRO	N-CA-CB	5.55	109.97	103.30
1	A	227	ASP	CB-CG-OD2	5.54	123.29	118.30
1	A	128	ALA	O-C-N	-5.54	113.79	123.20
1	A	276	PHE	O-C-N	-5.51	113.88	122.70
1	A	294	MET	CG-SD-CE	5.43	108.89	100.20
1	A	16	VAL	O-C-N	5.41	131.35	122.70
1	A	51	TRP	CE2-CD2-CE3	-5.40	112.22	118.70
1	A	342	ASP	CB-CG-OD2	-5.40	113.44	118.30
1	A	51	TRP	O-C-N	5.40	131.33	122.70
1	A	189	ASP	O-C-N	5.38	131.31	122.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	61	ALA	CB-CA-C	-5.38	102.03	110.10
1	A	37	ASP	OD1-CG-OD2	-5.37	113.09	123.30
1	A	370	VAL	CB-CA-C	-5.37	101.20	111.40
1	A	330	PHE	O-C-N	5.36	131.28	122.70
1	A	86	GLU	O-C-N	5.36	131.28	122.70
1	A	252	ALA	N-CA-C	-5.32	96.63	111.00
1	A	338	LEU	O-C-N	-5.32	114.19	122.70
1	A	189	ASP	CB-CG-OD1	5.31	123.08	118.30
1	A	283	LYS	CB-CA-C	-5.31	99.77	110.40
1	A	76	VAL	O-C-N	5.31	131.20	122.70
1	A	435	ALA	CB-CA-C	-5.29	102.16	110.10
1	A	21	PRO	CA-CB-CG	-5.29	93.96	104.00
1	A	201	ASP	O-C-N	5.24	131.09	122.70
1	A	423	PRO	CA-N-CD	5.23	119.02	111.70
1	A	132	PRO	O-C-N	-5.22	114.34	122.70
1	A	33	THR	O-C-N	5.22	131.05	122.70
1	A	227	ASP	OD1-CG-OD2	-5.22	113.38	123.30
1	A	18	ILE	CA-C-N	-5.22	105.72	117.20
1	A	179	ASP	CB-CG-OD1	5.22	123.00	118.30
1	A	65	LEU	CB-CG-CD2	5.22	119.87	111.00
1	A	455	ALA	CB-CA-C	-5.20	102.30	110.10
1	A	284	ASN	CB-CA-C	-5.18	100.04	110.40
1	A	218	TYR	CB-CG-CD1	-5.16	117.90	121.00
1	A	365	TYR	CZ-CE2-CD2	-5.16	115.16	119.80
1	A	193	ILE	CG1-CB-CG2	-5.14	100.09	111.40
1	A	58	GLY	O-C-N	-5.12	114.50	122.70
1	A	206	MET	CG-SD-CE	5.11	108.38	100.20
1	A	248	SER	O-C-N	5.11	130.88	122.70
1	A	250	ARG	NE-CZ-NH2	5.11	122.86	120.30
1	A	56	VAL	CG1-CB-CG2	-5.11	102.73	110.90
1	A	48	VAL	CA-CB-CG1	5.11	118.56	110.90
1	A	84	TYR	CZ-CE2-CD2	-5.10	115.21	119.80
1	A	147	ILE	N-CA-CB	-5.10	99.07	110.80
1	A	45	ILE	CG1-CB-CG2	-5.09	100.21	111.40
1	A	124	PHE	O-C-N	5.09	130.84	122.70
1	A	50	GLY	CA-C-N	-5.08	106.02	117.20
1	A	169	ALA	CB-CA-C	-5.05	102.52	110.10
1	A	219	TRP	CB-CA-C	-5.04	100.32	110.40
1	A	392	GLY	O-C-N	5.04	130.76	122.70
1	A	383	TYR	N-CA-C	-5.04	97.40	111.00
1	A	76	VAL	CG1-CB-CG2	-5.03	102.86	110.90
1	A	243	CYS	CB-CA-C	-5.03	100.35	110.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	321	PRO	CA-CB-CG	5.02	114.34	104.80

There are no chirality outliers.

All (2) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	296	TYR	Sidechain
1	A	84	TYR	Sidechain

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	3298	0	3129	1631	1
All	All	3298	0	3129	1631	1

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 254.

All (1631) 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:414:TRP:CH2	1:A:414:TRP:CZ3	1.82	1.66
1:A:148:LYS:HZ1	1:A:186:ASP:CA	1.08	1.62
1:A:199:TYR:CE2	1:A:199:TYR:CZ	1.76	1.62
1:A:276:PHE:CZ	1:A:276:PHE:CE2	1.83	1.61
1:A:312:ALA:HB3	1:A:315:VAL:CB	1.24	1.61
1:A:389:ALA:HB1	1:A:429:ALA:CB	1.31	1.60
1:A:312:ALA:CB	1:A:315:VAL:HB	1.27	1.59
1:A:95:LEU:HD22	1:A:99:MET:CE	1.32	1.57
1:A:140:ALA:HB3	1:A:151:ILE:CD1	1.14	1.57
1:A:389:ALA:CB	1:A:429:ALA:HB2	1.34	1.56
1:A:249:PHE:CZ	1:A:249:PHE:CE2	1.88	1.56
1:A:347:UNK:HB1	1:A:351:MET:CE	1.12	1.55
1:A:22:UNK:HG2	1:A:23:ILE:CD1	1.31	1.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:95:LEU:CD2	1:A:99:MET:HE3	1.33	1.55
1:A:347:UNK:CB	1:A:351:MET:HE2	1.21	1.55
1:A:250:ARG:CD	1:A:256:LEU:HB2	1.31	1.53
1:A:249:PHE:CE2	1:A:250:ARG:HB3	1.41	1.52
1:A:16:VAL:HG13	1:A:259:ILE:CD1	1.42	1.50
1:A:289:LEU:HD21	1:A:359:LEU:CD2	1.41	1.49
1:A:140:ALA:CB	1:A:151:ILE:CD1	1.85	1.49
1:A:166:LEU:CD1	1:A:169:ALA:HB3	1.38	1.49
1:A:252:ALA:C	1:A:254:PRO:HD3	1.31	1.48
1:A:105:PRO:C	1:A:109:TRP:HB2	1.21	1.47
1:A:166:LEU:CD1	1:A:169:ALA:CB	1.92	1.47
1:A:143:LYS:NZ	1:A:191:HIS:CE1	1.82	1.47
1:A:210:PHE:HE2	1:A:370:VAL:CG2	1.29	1.45
1:A:251:LYS:CG	1:A:275:THR:CG2	1.91	1.45
1:A:58:GLY:HA2	1:A:199:TYR:CE2	1.50	1.45
1:A:371:VAL:HG11	1:A:404:SER:CA	1.44	1.43
1:A:415:PRO:CG	1:A:415:PRO:CB	1.76	1.43
1:A:210:PHE:CE2	1:A:370:VAL:HG21	1.52	1.41
1:A:146:VAL:CA	1:A:148:LYS:HD2	1.50	1.41
1:A:348:LYS:HA	1:A:348:LYS:CE	1.43	1.41
1:A:348:LYS:HE3	1:A:348:LYS:CA	1.47	1.41
1:A:397:TYR:CE2	1:A:398:SER:O	1.73	1.40
1:A:148:LYS:NZ	1:A:186:ASP:C	1.74	1.40
1:A:22:UNK:CG	1:A:23:ILE:HD13	1.49	1.40
1:A:416:GLN:NE2	1:A:423:PRO:HD3	1.29	1.39
1:A:95:LEU:CD2	1:A:99:MET:CE	1.91	1.39
1:A:105:PRO:O	1:A:109:TRP:CB	1.70	1.39
1:A:148:LYS:NZ	1:A:186:ASP:CA	1.86	1.38
1:A:428:PRO:CG	1:A:428:PRO:CB	1.93	1.37
1:A:250:ARG:NH1	1:A:253:PHE:HD2	1.21	1.37
1:A:436:ALA:O	1:A:440:ILE:HG13	1.21	1.36
1:A:251:LYS:HG3	1:A:275:THR:CG2	1.53	1.35
1:A:76:VAL:CG2	1:A:119:PHE:HE1	1.36	1.35
1:A:431:ASP:O	1:A:435:ALA:HB3	1.26	1.35
1:A:58:GLY:O	1:A:84:TYR:N	1.58	1.34
1:A:265:LEU:O	1:A:269:SER:HB3	1.21	1.33
1:A:146:VAL:O	1:A:148:LYS:HD3	1.29	1.33
1:A:148:LYS:NZ	1:A:186:ASP:O	1.62	1.33
1:A:303:HIS:H	1:A:351:MET:CE	1.41	1.32
1:A:172:ASN:O	1:A:175:PHE:HB2	1.16	1.31
1:A:416:GLN:NE2	1:A:423:PRO:CD	1.88	1.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:249:PHE:CE2	1:A:256:LEU:HD22	1.65	1.31
1:A:191:HIS:CG	1:A:241:UNK:CE	2.12	1.31
1:A:257:PRO:CB	1:A:257:PRO:CG	1.92	1.31
1:A:370:VAL:CG1	1:A:371:VAL:H	1.31	1.30
1:A:251:LYS:CG	1:A:275:THR:HG22	1.51	1.30
1:A:105:PRO:CA	1:A:109:TRP:HB2	1.51	1.30
1:A:250:ARG:NE	1:A:256:LEU:H	1.28	1.30
1:A:397:TYR:HD2	1:A:397:TYR:O	1.12	1.30
1:A:108:LEU:HD12	1:A:160:LEU:CD1	1.62	1.29
1:A:234:UNK:O	1:A:236:GLY:N	1.62	1.29
1:A:148:LYS:HZ1	1:A:186:ASP:CB	1.44	1.29
1:A:172:ASN:HA	1:A:175:PHE:CD1	1.67	1.29
1:A:397:TYR:C	1:A:397:TYR:CD2	1.97	1.28
1:A:221:ASP:O	1:A:223:THR:N	1.64	1.27
1:A:339:PHE:O	1:A:340:UNK:C	1.71	1.27
1:A:175:PHE:O	1:A:179:ASP:CA	1.80	1.27
1:A:9:LEU:HD22	1:A:296:TYR:OH	1.29	1.26
1:A:67:ILE:HA	1:A:75:GLU:O	1.15	1.26
1:A:76:VAL:CG2	1:A:119:PHE:CE1	2.18	1.26
1:A:249:PHE:CZ	1:A:250:ARG:CB	2.19	1.26
1:A:419:UNK:HA	1:A:422:LYS:CD	1.65	1.26
1:A:146:VAL:O	1:A:148:LYS:N	1.65	1.26
1:A:250:ARG:CD	1:A:256:LEU:CB	2.14	1.26
1:A:370:VAL:CG1	1:A:371:VAL:N	1.74	1.26
1:A:191:HIS:CB	1:A:241:UNK:CE	2.14	1.26
1:A:140:ALA:CB	1:A:153:UNK:H	1.48	1.25
1:A:371:VAL:CG1	1:A:404:SER:HA	1.65	1.25
1:A:82:ALA:O	1:A:85:GLN:CD	1.72	1.25
1:A:249:PHE:CZ	1:A:250:ARG:HB3	1.69	1.25
1:A:142:ALA:HB2	1:A:152:THR:OG1	1.11	1.25
1:A:148:LYS:HZ1	1:A:186:ASP:C	1.30	1.25
1:A:250:ARG:HE	1:A:256:LEU:N	1.35	1.25
1:A:234:UNK:C	1:A:236:GLY:H	1.48	1.24
1:A:147:ILE:HD12	1:A:183:UNK:O	1.18	1.24
1:A:327:LEU:CD1	1:A:332:LEU:HB3	1.65	1.24
1:A:105:PRO:O	1:A:109:TRP:HB2	1.13	1.23
1:A:317:ASN:C	1:A:317:ASN:HD22	1.34	1.23
1:A:250:ARG:CD	1:A:256:LEU:H	1.51	1.23
1:A:166:LEU:HD12	1:A:169:ALA:CB	1.58	1.23
1:A:269:SER:OG	1:A:270:PRO:CD	1.85	1.23
1:A:210:PHE:CE2	1:A:370:VAL:CG2	2.14	1.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:355:VAL:O	1:A:359:LEU:HG	1.34	1.22
1:A:140:ALA:CB	1:A:151:ILE:HD13	1.50	1.22
1:A:144:GLU:OE2	1:A:148:LYS:HB2	1.33	1.22
1:A:148:LYS:CE	1:A:186:ASP:HB3	1.69	1.22
1:A:55:GLN:NE2	1:A:239:UNK:CG	2.01	1.22
1:A:329:HIS:HB2	1:A:333:ARG:NH1	1.52	1.22
1:A:289:LEU:CD2	1:A:359:LEU:HD23	1.68	1.21
1:A:114:UNK:O	1:A:117:ALA:CB	1.86	1.21
1:A:64:PHE:CB	1:A:438:UNK:HG2	1.69	1.21
1:A:269:SER:OG	1:A:270:PRO:HD2	1.40	1.21
1:A:75:GLU:HA	1:A:92:SER:OG	1.40	1.21
1:A:16:VAL:CG1	1:A:259:ILE:HD11	1.71	1.21
1:A:58:GLY:CA	1:A:199:TYR:CE2	2.23	1.21
1:A:140:ALA:HB1	1:A:153:UNK:N	1.55	1.20
1:A:103:ALA:O	1:A:104:ILE:CB	1.90	1.20
1:A:192:GLY:CA	1:A:436:ALA:CB	2.19	1.20
1:A:251:LYS:HG2	1:A:275:THR:CG2	1.57	1.20
1:A:250:ARG:NE	1:A:256:LEU:N	1.86	1.20
1:A:175:PHE:O	1:A:179:ASP:HA	1.02	1.19
1:A:419:UNK:C	1:A:422:LYS:HB2	1.71	1.19
1:A:109:TRP:CZ3	1:A:109:TRP:CZ2	2.01	1.19
1:A:114:UNK:O	1:A:117:ALA:HB3	1.05	1.19
1:A:3:ALA:O	1:A:5:UNK:N	1.75	1.19
1:A:221:ASP:OD2	1:A:223:THR:HG23	1.41	1.19
1:A:265:LEU:O	1:A:269:SER:CB	1.91	1.19
1:A:304:UNK:O	1:A:305:UNK:HG2	1.43	1.18
1:A:36:ASP:OD2	1:A:380:LYS:HE2	1.43	1.17
1:A:166:LEU:HD11	1:A:169:ALA:CB	1.73	1.17
1:A:175:PHE:CE1	1:A:183:UNK:CG	2.26	1.17
1:A:109:TRP:CH2	1:A:109:TRP:CE3	2.06	1.17
1:A:419:UNK:O	1:A:422:LYS:HB2	1.44	1.17
1:A:148:LYS:HE2	1:A:186:ASP:HB3	1.24	1.17
1:A:193:ILE:O	1:A:197:VAL:HG13	1.44	1.17
1:A:197:VAL:CG2	1:A:204:ILE:CD1	2.21	1.17
1:A:246:GLN:NE2	1:A:373:UNK:HG1	1.60	1.17
1:A:150:GLN:HB2	1:A:166:LEU:HD23	1.27	1.17
1:A:70:GLY:HA2	1:A:158:PHE:CE2	1.80	1.16
1:A:148:LYS:HE2	1:A:149:GLY:CA	1.75	1.16
1:A:419:UNK:CA	1:A:422:LYS:HD2	1.73	1.16
1:A:192:GLY:HA3	1:A:436:ALA:CB	1.76	1.16
1:A:375:UNK:CD	1:A:411:ILE:HD13	1.75	1.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:79:ILE:HG23	1:A:438:UNK:HG1	1.21	1.15
1:A:108:LEU:HD12	1:A:160:LEU:HD13	1.26	1.15
1:A:317:ASN:ND2	1:A:318:SER:N	1.92	1.15
1:A:42:ALA:O	1:A:43:ALA:CB	1.86	1.15
1:A:77:ILE:CG2	1:A:88:SER:HB2	1.76	1.15
1:A:146:VAL:C	1:A:148:LYS:N	1.91	1.15
1:A:34:ARG:NH2	1:A:45:ILE:H	1.43	1.14
1:A:156:UNK:O	1:A:157:ALA:CB	1.94	1.14
1:A:175:PHE:HE2	1:A:181:UNK:CD	1.59	1.14
1:A:365:TYR:O	1:A:369:LEU:HB2	1.46	1.14
1:A:148:LYS:HE2	1:A:149:GLY:HA3	1.16	1.14
1:A:213:GLY:CA	1:A:277:GLU:OE2	1.96	1.13
1:A:299:UNK:HB2	1:A:301:GLN:NE2	1.62	1.13
1:A:140:ALA:CB	1:A:151:ILE:HD11	1.59	1.13
1:A:367:PHE:HZ	1:A:397:TYR:CE1	1.67	1.13
1:A:89:ILE:O	1:A:89:ILE:HG13	1.40	1.12
1:A:194:LEU:O	1:A:198:ASN:HB2	1.46	1.12
1:A:414:TRP:CZ3	1:A:422:LYS:HG2	1.83	1.12
1:A:414:TRP:HZ3	1:A:422:LYS:CG	1.62	1.12
1:A:251:LYS:HG3	1:A:275:THR:HG21	1.27	1.12
1:A:51:TRP:HE1	1:A:143:LYS:C	1.51	1.12
1:A:56:VAL:CG2	1:A:199:TYR:HD2	1.63	1.11
1:A:142:ALA:CB	1:A:152:THR:OG1	1.97	1.11
1:A:148:LYS:CE	1:A:149:GLY:CA	2.24	1.11
1:A:156:UNK:O	1:A:157:ALA:HB3	1.35	1.11
1:A:259:ILE:HG23	1:A:260:UNK:N	1.65	1.11
1:A:16:VAL:HG13	1:A:259:ILE:HD11	1.17	1.11
1:A:76:VAL:HG23	1:A:119:PHE:HE1	0.97	1.11
1:A:166:LEU:HD11	1:A:169:ALA:HB2	1.24	1.11
1:A:339:PHE:O	1:A:340:UNK:O	1.68	1.11
1:A:436:ALA:O	1:A:440:ILE:CG1	1.97	1.11
1:A:16:VAL:HG13	1:A:259:ILE:HD12	1.21	1.11
1:A:137:PHE:CE2	1:A:139:GLU:HB3	1.85	1.10
1:A:328:PRO:HG2	1:A:334:UNK:CE	1.79	1.10
1:A:94:SER:O	1:A:96:ALA:N	1.83	1.10
1:A:102:THR:HG22	1:A:160:LEU:HA	1.32	1.10
1:A:103:ALA:HB1	1:A:162:UNK:HB2	1.30	1.10
1:A:320:TYR:HD2	1:A:338:LEU:HD21	0.96	1.10
1:A:253:PHE:N	1:A:254:PRO:HD3	1.67	1.10
1:A:450:UNK:CG	1:A:452:UNK:HG2	1.80	1.10
1:A:144:GLU:O	1:A:455:ALA:HB1	1.50	1.10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:250:ARG:CD	1:A:256:LEU:N	2.15	1.10
1:A:320:TYR:CD2	1:A:338:LEU:HD21	1.86	1.09
1:A:150:GLN:CB	1:A:166:LEU:HD23	1.82	1.09
1:A:312:ALA:O	1:A:315:VAL:HG12	1.50	1.09
1:A:326:LYS:HB3	1:A:326:LYS:NZ	1.65	1.09
1:A:143:LYS:HZ1	1:A:191:HIS:CE1	1.53	1.09
1:A:192:GLY:HA2	1:A:436:ALA:HB1	1.25	1.09
1:A:197:VAL:HG21	1:A:204:ILE:CD1	1.82	1.09
1:A:210:PHE:HE2	1:A:370:VAL:HG22	1.15	1.09
1:A:221:ASP:CG	1:A:223:THR:HG23	1.73	1.09
1:A:397:TYR:HE2	1:A:398:SER:O	1.15	1.09
1:A:51:TRP:NE1	1:A:51:TRP:CE2	2.02	1.08
1:A:82:ALA:O	1:A:85:GLN:CG	2.01	1.08
1:A:414:TRP:HZ3	1:A:422:LYS:HG2	0.95	1.08
1:A:54:LYS:H	1:A:54:LYS:HE2	0.98	1.08
1:A:56:VAL:HG21	1:A:199:TYR:CB	1.82	1.08
1:A:108:LEU:HG	1:A:160:LEU:HD22	1.31	1.08
1:A:386:GLY:O	1:A:387:HIS:HD2	1.33	1.08
1:A:397:TYR:CD2	1:A:398:SER:O	2.06	1.08
1:A:303:HIS:N	1:A:351:MET:CE	2.15	1.08
1:A:14:UNK:O	1:A:18:ILE:HB	1.53	1.08
1:A:95:LEU:CD2	1:A:99:MET:HE1	1.82	1.08
1:A:95:LEU:HD23	1:A:99:MET:CE	1.82	1.08
1:A:172:ASN:O	1:A:175:PHE:CB	2.00	1.08
1:A:64:PHE:HB2	1:A:438:UNK:CG	1.81	1.07
1:A:77:ILE:HG22	1:A:88:SER:HB2	1.12	1.07
1:A:84:TYR:HE1	1:A:199:TYR:O	1.37	1.07
1:A:431:ASP:O	1:A:435:ALA:CB	2.01	1.07
1:A:16:VAL:CG1	1:A:259:ILE:CD1	2.29	1.07
1:A:258:GLN:HA	1:A:279:ASN:HD21	1.09	1.07
1:A:317:ASN:HD21	1:A:319:SER:N	1.52	1.07
1:A:68:VAL:CG2	1:A:433:GLU:HG2	1.85	1.07
1:A:102:THR:CG2	1:A:160:LEU:HB3	1.83	1.07
1:A:39:ASP:O	1:A:226:ALA:HB3	1.54	1.07
1:A:130:SER:O	1:A:131:VAL:O	1.71	1.06
1:A:103:ALA:O	1:A:104:ILE:HB	1.30	1.06
1:A:419:UNK:O	1:A:422:LYS:CB	2.04	1.06
1:A:108:LEU:CG	1:A:160:LEU:HD22	1.84	1.06
1:A:149:GLY:O	1:A:168:SER:HB3	1.54	1.06
1:A:166:LEU:HD13	1:A:169:ALA:N	1.69	1.06
1:A:249:PHE:CE2	1:A:250:ARG:CB	2.37	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:61:ALA:HA	1:A:81:LEU:HB2	1.33	1.06
1:A:48:VAL:O	1:A:243:CYS:HB3	1.56	1.05
1:A:148:LYS:NZ	1:A:186:ASP:CB	2.10	1.05
1:A:370:VAL:HG13	1:A:371:VAL:N	1.41	1.05
1:A:76:VAL:O	1:A:90:UNK:CB	2.05	1.05
1:A:146:VAL:HA	1:A:148:LYS:CD	1.87	1.05
1:A:299:UNK:HB2	1:A:301:GLN:HE21	0.91	1.05
1:A:79:ILE:HG13	1:A:80:UNK:N	1.64	1.04
1:A:166:LEU:C	1:A:168:SER:H	1.59	1.04
1:A:250:ARG:O	1:A:250:ARG:HG2	1.49	1.04
1:A:371:VAL:HG11	1:A:404:SER:CB	1.88	1.04
1:A:22:UNK:CG	1:A:23:ILE:CD1	2.19	1.04
1:A:78:LEU:O	1:A:88:SER:HA	1.56	1.04
1:A:108:LEU:CD1	1:A:160:LEU:HD13	1.86	1.04
1:A:113:ALA:O	1:A:116:ASN:N	1.89	1.04
1:A:303:HIS:H	1:A:351:MET:HE1	1.20	1.04
1:A:397:TYR:HD2	1:A:397:TYR:C	1.45	1.04
1:A:56:VAL:CG2	1:A:199:TYR:CD2	2.41	1.04
1:A:68:VAL:HG23	1:A:433:GLU:HG2	1.36	1.04
1:A:143:LYS:NZ	1:A:191:HIS:HE1	1.31	1.04
1:A:42:ALA:O	1:A:43:ALA:HB2	1.22	1.04
1:A:168:SER:O	1:A:170:MET:N	1.89	1.04
1:A:172:ASN:HA	1:A:175:PHE:HD1	0.88	1.04
1:A:233:UNK:O	1:A:233:UNK:HG3	1.50	1.04
1:A:371:VAL:HG11	1:A:404:SER:HA	1.07	1.04
1:A:206:MET:HE3	1:A:377:ILE:HD12	1.37	1.03
1:A:38:UNK:HB2	1:A:43:ALA:CB	1.89	1.03
1:A:108:LEU:HD12	1:A:160:LEU:HD11	1.41	1.03
1:A:150:GLN:HA	1:A:166:LEU:HD22	1.39	1.03
1:A:172:ASN:CA	1:A:175:PHE:HD1	1.69	1.03
1:A:213:GLY:HA2	1:A:277:GLU:OE2	1.55	1.03
1:A:367:PHE:HZ	1:A:397:TYR:CZ	1.76	1.03
1:A:76:VAL:HG23	1:A:119:PHE:CE1	1.87	1.02
1:A:192:GLY:CA	1:A:436:ALA:HB2	1.85	1.02
1:A:250:ARG:NH1	1:A:253:PHE:CD2	2.06	1.02
1:A:371:VAL:HG21	1:A:404:SER:O	1.57	1.02
1:A:419:UNK:CA	1:A:422:LYS:HB2	1.88	1.02
1:A:38:UNK:HB2	1:A:43:ALA:HB3	1.38	1.02
1:A:70:GLY:O	1:A:158:PHE:HZ	1.43	1.02
1:A:146:VAL:CA	1:A:148:LYS:CD	2.36	1.02
1:A:397:TYR:O	1:A:397:TYR:CD2	2.03	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:249:PHE:HE2	1:A:256:LEU:HD22	0.99	1.02
1:A:250:ARG:HD3	1:A:256:LEU:CB	1.84	1.02
1:A:252:ALA:C	1:A:254:PRO:CD	2.26	1.02
1:A:9:LEU:CD2	1:A:296:TYR:OH	2.08	1.02
1:A:55:GLN:HE22	1:A:239:UNK:HG2	1.23	1.02
1:A:253:PHE:N	1:A:254:PRO:CD	2.22	1.01
1:A:129:GLY:O	1:A:130:SER:HB3	1.55	1.01
1:A:133:LEU:O	1:A:184:VAL:HG22	1.57	1.01
1:A:163:LEU:O	1:A:164:UNK:CB	2.08	1.01
1:A:250:ARG:HD2	1:A:256:LEU:N	1.75	1.01
1:A:302:UNK:HB2	1:A:351:MET:SD	1.99	1.01
1:A:371:VAL:CG1	1:A:404:SER:CA	2.28	1.01
1:A:246:GLN:HE22	1:A:373:UNK:CG	1.72	1.01
1:A:286:GLY:HA2	1:A:321:PRO:HG3	1.05	1.01
1:A:146:VAL:C	1:A:148:LYS:H	1.45	1.01
1:A:264:THR:O	1:A:266:ASN:N	1.94	1.01
1:A:299:UNK:CB	1:A:301:GLN:HE21	1.74	1.01
1:A:412:TYR:HB3	1:A:414:TRP:NE1	1.76	1.01
1:A:207:GLY:O	1:A:217:ALA:N	1.92	1.01
1:A:76:VAL:HG21	1:A:119:PHE:CE1	1.93	1.00
1:A:329:HIS:ND1	1:A:333:ARG:CZ	2.24	1.00
1:A:387:HIS:HA	1:A:425:UNK:O	1.58	1.00
1:A:144:GLU:OE2	1:A:148:LYS:CB	2.09	1.00
1:A:148:LYS:NZ	1:A:186:ASP:N	2.08	1.00
1:A:317:ASN:ND2	1:A:319:SER:N	2.09	1.00
1:A:149:GLY:O	1:A:168:SER:CB	2.10	1.00
1:A:163:LEU:O	1:A:164:UNK:HB1	1.58	1.00
1:A:249:PHE:CZ	1:A:250:ARG:HB2	1.95	1.00
1:A:56:VAL:HG23	1:A:199:TYR:CD2	1.96	1.00
1:A:197:VAL:CG2	1:A:204:ILE:HD12	1.87	1.00
1:A:140:ALA:HB3	1:A:151:ILE:HD11	1.14	1.00
1:A:140:ALA:HB2	1:A:153:UNK:C	1.90	1.00
1:A:188:UNK:CD	1:A:190:SER:HB2	1.91	0.99
1:A:148:LYS:NZ	1:A:186:ASP:HB3	1.75	0.99
1:A:58:GLY:HA2	1:A:199:TYR:CD2	1.97	0.99
1:A:193:ILE:CG1	1:A:207:GLY:HA2	1.92	0.99
1:A:84:TYR:CE1	1:A:199:TYR:O	2.16	0.99
1:A:286:GLY:HA2	1:A:321:PRO:CG	1.92	0.99
1:A:67:ILE:CA	1:A:75:GLU:O	2.09	0.99
1:A:180:UNK:O	1:A:180:UNK:CD	2.11	0.99
1:A:164:UNK:CD	1:A:164:UNK:O	2.10	0.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:108:LEU:CD1	1:A:160:LEU:CD1	2.41	0.99
1:A:147:ILE:CD1	1:A:183:UNK:O	2.11	0.99
1:A:50:GLY:HA3	1:A:241:UNK:CD	1.93	0.98
1:A:219:TRP:CZ3	1:A:241:UNK:N	2.31	0.98
1:A:286:GLY:O	1:A:289:LEU:HB2	1.62	0.98
1:A:46:PRO:HG2	1:A:248:SER:OG	1.63	0.98
1:A:192:GLY:HA2	1:A:436:ALA:CB	1.85	0.98
1:A:246:GLN:HE22	1:A:373:UNK:HG1	1.12	0.98
1:A:416:GLN:HE22	1:A:423:PRO:HD2	1.26	0.98
1:A:55:GLN:NE2	1:A:239:UNK:HG1	1.78	0.98
1:A:56:VAL:HG21	1:A:199:TYR:HB2	1.42	0.98
1:A:193:ILE:HG13	1:A:207:GLY:HA2	1.42	0.98
1:A:243:CYS:O	1:A:243:CYS:SG	2.21	0.98
1:A:431:ASP:HB3	1:A:435:ALA:HB2	1.44	0.98
1:A:449:UNK:HG2	1:A:450:UNK:H2	1.28	0.98
1:A:310:PHE:O	1:A:315:VAL:HG11	1.62	0.98
1:A:450:UNK:HG3	1:A:452:UNK:HG2	1.45	0.98
1:A:175:PHE:CB	1:A:176:PRO:CD	2.42	0.98
1:A:48:VAL:O	1:A:243:CYS:N	1.96	0.98
1:A:193:ILE:O	1:A:197:VAL:CG1	2.12	0.97
1:A:167:ILE:HA	1:A:170:MET:HE3	1.43	0.97
1:A:370:VAL:HG12	1:A:371:VAL:HG13	1.46	0.97
1:A:175:PHE:C	1:A:179:ASP:HA	1.85	0.97
1:A:175:PHE:HB3	1:A:176:PRO:HD3	1.46	0.97
1:A:282:ALA:CB	1:A:394:UNK:CD	2.42	0.97
1:A:79:ILE:HD12	1:A:87:SER:H	1.28	0.97
1:A:281:UNK:HG3	1:A:282:ALA:N	1.74	0.97
1:A:249:PHE:CD2	1:A:276:PHE:HB2	1.99	0.97
1:A:109:TRP:HZ2	1:A:167:ILE:O	1.45	0.97
1:A:146:VAL:HA	1:A:148:LYS:HD2	0.98	0.97
1:A:191:HIS:O	1:A:193:ILE:N	1.97	0.97
1:A:70:GLY:HA2	1:A:158:PHE:CZ	2.00	0.97
1:A:9:LEU:CD2	1:A:296:TYR:CZ	2.47	0.96
1:A:166:LEU:O	1:A:168:SER:N	1.99	0.96
1:A:324:ILE:O	1:A:327:LEU:HB2	1.62	0.96
1:A:82:ALA:O	1:A:85:GLN:HG2	1.62	0.96
1:A:329:HIS:HB2	1:A:333:ARG:HH11	1.09	0.96
1:A:329:HIS:CB	1:A:333:ARG:HH11	1.77	0.96
1:A:416:GLN:HE22	1:A:423:PRO:CD	1.64	0.96
1:A:175:PHE:O	1:A:179:ASP:N	1.96	0.96
1:A:289:LEU:CD2	1:A:359:LEU:CD2	2.35	0.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:251:LYS:CG	1:A:275:THR:HG21	1.81	0.96
1:A:166:LEU:HD13	1:A:169:ALA:H	1.24	0.96
1:A:200:THR:HG21	1:A:430:ILE:HG13	1.44	0.96
1:A:371:VAL:CG1	1:A:404:SER:CB	2.44	0.96
1:A:303:HIS:HD2	1:A:308:UNK:CE	1.78	0.96
1:A:143:LYS:HZ2	1:A:191:HIS:CE1	1.80	0.95
1:A:146:VAL:O	1:A:148:LYS:CD	2.14	0.95
1:A:20:PRO:CD	1:A:23:ILE:HG12	1.94	0.95
1:A:193:ILE:HA	1:A:197:VAL:CG1	1.94	0.95
1:A:175:PHE:CB	1:A:176:PRO:HD3	1.97	0.95
1:A:175:PHE:CE2	1:A:181:UNK:CD	2.49	0.95
1:A:102:THR:HG22	1:A:160:LEU:CA	1.96	0.95
1:A:140:ALA:HB2	1:A:151:ILE:HD11	1.46	0.95
1:A:49:PRO:HA	1:A:242:VAL:HA	1.47	0.94
1:A:326:LYS:HB3	1:A:326:LYS:HZ3	1.23	0.94
1:A:102:THR:CG2	1:A:160:LEU:HA	1.97	0.94
1:A:148:LYS:HZ3	1:A:186:ASP:N	1.62	0.94
1:A:69:MET:CE	1:A:108:LEU:CD1	2.45	0.94
1:A:325:GLN:NE2	1:A:359:LEU:O	2.01	0.94
1:A:327:LEU:CD1	1:A:332:LEU:CB	2.45	0.94
1:A:20:PRO:HD2	1:A:23:ILE:HG12	1.46	0.94
1:A:167:ILE:CA	1:A:170:MET:HE3	1.96	0.94
1:A:168:SER:C	1:A:170:MET:H	1.66	0.94
1:A:68:VAL:HG13	1:A:68:VAL:O	1.67	0.94
1:A:108:LEU:CG	1:A:160:LEU:HD13	1.97	0.94
1:A:303:HIS:N	1:A:351:MET:HE3	1.80	0.94
1:A:70:GLY:C	1:A:158:PHE:HZ	1.71	0.94
1:A:192:GLY:CA	1:A:436:ALA:HB1	1.87	0.94
1:A:265:LEU:H	1:A:265:LEU:HD23	1.31	0.94
1:A:365:TYR:HD1	1:A:366:ALA:H	1.14	0.94
1:A:38:UNK:CB	1:A:43:ALA:HB3	1.97	0.94
1:A:46:PRO:CG	1:A:248:SER:OG	2.16	0.94
1:A:213:GLY:HA3	1:A:277:GLU:OE2	1.64	0.94
1:A:108:LEU:HG	1:A:160:LEU:CD2	1.97	0.94
1:A:148:LYS:HZ3	1:A:186:ASP:H	0.96	0.93
1:A:95:LEU:HA	1:A:99:MET:HE3	1.45	0.93
1:A:282:ALA:HB2	1:A:394:UNK:CD	1.98	0.93
1:A:424:ILE:HG22	1:A:424:ILE:O	1.66	0.93
1:A:367:PHE:CZ	1:A:397:TYR:CZ	2.55	0.93
1:A:103:ALA:O	1:A:104:ILE:CG2	2.16	0.93
1:A:414:TRP:CZ3	1:A:422:LYS:CG	2.47	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:69:MET:HE2	1:A:108:LEU:HD11	1.51	0.93
1:A:146:VAL:O	1:A:147:ILE:C	2.04	0.93
1:A:196:UNK:HG1	1:A:435:ALA:HB1	1.50	0.93
1:A:105:PRO:HA	1:A:109:TRP:CB	1.92	0.93
1:A:211:GLY:O	1:A:282:ALA:HB3	1.67	0.93
1:A:320:TYR:HB2	1:A:321:PRO:HD2	1.51	0.93
1:A:77:ILE:HG22	1:A:88:SER:CB	1.99	0.93
1:A:298:UNK:C	1:A:300:GLY:H	1.79	0.93
1:A:329:HIS:NE2	1:A:332:LEU:N	2.17	0.93
1:A:143:LYS:HZ3	1:A:191:HIS:HE1	1.09	0.92
1:A:148:LYS:CE	1:A:186:ASP:O	2.16	0.92
1:A:151:ILE:HG21	1:A:164:UNK:C	1.98	0.92
1:A:220:CYS:SG	1:A:224:UNK:CB	2.56	0.92
1:A:34:ARG:HH21	1:A:45:ILE:H	1.05	0.92
1:A:58:GLY:CA	1:A:199:TYR:HE2	1.76	0.92
1:A:220:CYS:SG	1:A:224:UNK:HB1	2.09	0.92
1:A:50:GLY:HA2	1:A:143:LYS:NZ	1.85	0.92
1:A:302:UNK:O	1:A:303:HIS:HB2	1.68	0.92
1:A:250:ARG:HD2	1:A:256:LEU:HB2	1.51	0.92
1:A:89:ILE:O	1:A:89:ILE:CG1	2.18	0.92
1:A:327:LEU:HD11	1:A:332:LEU:HB3	1.52	0.92
1:A:54:LYS:HE2	1:A:54:LYS:N	1.84	0.92
1:A:192:GLY:HA3	1:A:436:ALA:HB2	1.47	0.92
1:A:89:ILE:HD13	1:A:123:GLU:OE2	1.69	0.91
1:A:191:HIS:HB2	1:A:241:UNK:CE	2.00	0.91
1:A:367:PHE:CZ	1:A:397:TYR:CE1	2.57	0.91
1:A:194:LEU:O	1:A:198:ASN:CB	2.18	0.91
1:A:416:GLN:HE21	1:A:423:PRO:HD3	1.12	0.91
1:A:445:SER:O	1:A:448:UNK:HB2	1.69	0.91
1:A:370:VAL:HG12	1:A:371:VAL:H	0.75	0.91
1:A:56:VAL:HG23	1:A:199:TYR:HD2	1.27	0.91
1:A:79:ILE:CG2	1:A:438:UNK:HG1	2.00	0.91
1:A:102:THR:CG2	1:A:160:LEU:CB	2.48	0.91
1:A:317:ASN:HD22	1:A:318:SER:N	1.62	0.91
1:A:246:GLN:NE2	1:A:373:UNK:CG	2.32	0.90
1:A:273:UNK:O	1:A:278:LYS:HD2	1.70	0.90
1:A:331:ASP:O	1:A:349:THR:HG23	1.72	0.90
1:A:450:UNK:HG2	1:A:452:UNK:HG2	1.52	0.90
1:A:208:ILE:HD11	1:A:390:ALA:HB2	1.51	0.90
1:A:386:GLY:C	1:A:387:HIS:HD2	1.73	0.90
1:A:329:HIS:CB	1:A:333:ARG:NH1	2.34	0.90

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:419:UNK:HA	1:A:422:LYS:HD2	0.93	0.90
1:A:14:UNK:O	1:A:18:ILE:CB	2.20	0.90
1:A:329:HIS:CD2	1:A:332:LEU:H	1.88	0.90
1:A:241:UNK:O	1:A:241:UNK:CG	2.11	0.89
1:A:79:ILE:HD12	1:A:87:SER:N	1.87	0.89
1:A:148:LYS:CE	1:A:186:ASP:CB	2.46	0.89
1:A:148:LYS:HE2	1:A:186:ASP:CB	2.01	0.89
1:A:193:ILE:C	1:A:197:VAL:HG13	1.92	0.89
1:A:355:VAL:O	1:A:359:LEU:CG	2.21	0.89
1:A:448:UNK:O	1:A:449:UNK:O	1.88	0.89
1:A:79:ILE:HG23	1:A:438:UNK:CG	2.02	0.89
1:A:191:HIS:HB3	1:A:241:UNK:CE	2.03	0.89
1:A:414:TRP:CE3	1:A:423:PRO:HD2	2.06	0.89
1:A:68:VAL:HG23	1:A:433:GLU:CG	2.02	0.89
1:A:70:GLY:CA	1:A:158:PHE:CE2	2.56	0.89
1:A:236:GLY:O	1:A:237:ALA:HB2	1.71	0.89
1:A:371:VAL:O	1:A:375:UNK:CD	2.21	0.89
1:A:55:GLN:HE22	1:A:239:UNK:CG	1.78	0.89
1:A:148:LYS:NZ	1:A:186:ASP:H	1.70	0.88
1:A:58:GLY:H	1:A:60:GLN:HE22	1.15	0.88
1:A:105:PRO:CA	1:A:109:TRP:CB	2.13	0.88
1:A:288:SER:O	1:A:292:VAL:HG22	1.73	0.88
1:A:210:PHE:O	1:A:394:UNK:HB2	1.72	0.88
1:A:58:GLY:O	1:A:84:TYR:CA	2.20	0.88
1:A:317:ASN:C	1:A:317:ASN:ND2	2.06	0.88
1:A:303:HIS:H	1:A:351:MET:HE3	1.36	0.88
1:A:197:VAL:HG21	1:A:204:ILE:HD11	1.53	0.87
1:A:250:ARG:HD3	1:A:256:LEU:HB2	0.88	0.87
1:A:23:ILE:CD1	1:A:23:ILE:N	2.37	0.87
1:A:95:LEU:HD23	1:A:99:MET:HE3	1.42	0.87
1:A:75:GLU:HG3	1:A:91:ALA:O	1.75	0.87
1:A:150:GLN:CB	1:A:166:LEU:CD2	2.52	0.87
1:A:326:LYS:HD2	1:A:398:SER:HA	1.57	0.87
1:A:150:GLN:CA	1:A:166:LEU:CD2	2.52	0.87
1:A:320:TYR:HD2	1:A:338:LEU:CD2	1.85	0.87
1:A:371:VAL:CG1	1:A:404:SER:HB3	2.05	0.87
1:A:54:LYS:H	1:A:54:LYS:CE	1.87	0.87
1:A:69:MET:HE2	1:A:108:LEU:CD1	2.02	0.87
1:A:150:GLN:CA	1:A:166:LEU:HD22	2.03	0.87
1:A:249:PHE:HD2	1:A:276:PHE:HB2	1.37	0.87
1:A:365:TYR:CD1	1:A:366:ALA:N	2.43	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:20:PRO:HD2	1:A:23:ILE:CG1	2.05	0.87
1:A:250:ARG:NE	1:A:256:LEU:CB	2.37	0.86
1:A:109:TRP:CZ3	1:A:109:TRP:CH2	0.87	0.86
1:A:402:UNK:HG2	1:A:406:THR:CG2	2.04	0.86
1:A:20:PRO:HD2	1:A:23:ILE:HB	1.58	0.86
1:A:48:VAL:O	1:A:243:CYS:CB	2.23	0.86
1:A:75:GLU:CG	1:A:90:UNK:HB2	2.06	0.86
1:A:219:TRP:CE3	1:A:240:MET:C	2.48	0.86
1:A:317:ASN:CG	1:A:318:SER:N	2.23	0.86
1:A:299:UNK:CB	1:A:301:GLN:NE2	2.35	0.86
1:A:216:ALA:O	1:A:244:CYS:HB2	1.75	0.86
1:A:397:TYR:CD2	1:A:398:SER:N	2.44	0.86
1:A:75:GLU:CA	1:A:92:SER:OG	2.24	0.86
1:A:70:GLY:C	1:A:158:PHE:CZ	2.48	0.86
1:A:186:ASP:C	1:A:186:ASP:OD2	2.15	0.86
1:A:50:GLY:HA2	1:A:143:LYS:CE	2.06	0.85
1:A:197:VAL:CG2	1:A:204:ILE:CG1	2.54	0.85
1:A:39:ASP:O	1:A:226:ALA:CB	2.24	0.85
1:A:140:ALA:HB1	1:A:153:UNK:H	0.71	0.85
1:A:312:ALA:HB3	1:A:315:VAL:CG1	2.06	0.85
1:A:208:ILE:HG12	1:A:388:ILE:HG22	1.59	0.85
1:A:386:GLY:C	1:A:387:HIS:CD2	2.49	0.85
1:A:99:MET:SD	1:A:108:LEU:CD2	2.64	0.85
1:A:208:ILE:HD12	1:A:390:ALA:HA	1.57	0.85
1:A:348:LYS:O	1:A:351:MET:N	2.09	0.85
1:A:386:GLY:O	1:A:387:HIS:CD2	2.26	0.85
1:A:38:UNK:CB	1:A:43:ALA:CB	2.53	0.85
1:A:175:PHE:CE1	1:A:183:UNK:HG2	2.10	0.85
1:A:20:PRO:HG2	1:A:22:UNK:CD	2.07	0.85
1:A:357:ARG:O	1:A:360:PHE:HB2	1.77	0.85
1:A:104:ILE:CG2	1:A:106:SER:HB2	2.06	0.84
1:A:286:GLY:CA	1:A:321:PRO:HG3	1.99	0.84
1:A:221:ASP:OD2	1:A:223:THR:CG2	2.24	0.84
1:A:259:ILE:CG2	1:A:260:UNK:N	2.37	0.84
1:A:250:ARG:HD2	1:A:256:LEU:CA	2.07	0.84
1:A:2:ALA:CB	1:A:350:UNK:HB1	2.07	0.84
1:A:250:ARG:NE	1:A:256:LEU:CA	2.39	0.84
1:A:70:GLY:CA	1:A:158:PHE:CZ	2.60	0.84
1:A:120:SER:O	1:A:123:GLU:N	2.11	0.84
1:A:329:HIS:ND1	1:A:333:ARG:NE	2.24	0.84
1:A:322:ALA:O	1:A:326:LYS:HG2	1.78	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:189:ASP:HB3	1:A:433:GLU:HG3	1.57	0.84
1:A:148:LYS:HZ2	1:A:186:ASP:C	1.55	0.84
1:A:175:PHE:CE1	1:A:183:UNK:HG3	2.11	0.84
1:A:250:ARG:O	1:A:250:ARG:CG	2.26	0.84
1:A:303:HIS:CD2	1:A:308:UNK:CE	2.60	0.84
1:A:365:TYR:HD1	1:A:366:ALA:N	1.75	0.84
1:A:126:SER:OG	1:A:127:UNK:N	2.11	0.83
1:A:197:VAL:HG22	1:A:204:ILE:CD1	2.07	0.83
1:A:250:ARG:CD	1:A:256:LEU:CA	2.55	0.83
1:A:303:HIS:N	1:A:351:MET:HE1	1.85	0.83
1:A:137:PHE:CE2	1:A:139:GLU:CB	2.60	0.83
1:A:70:GLY:HA2	1:A:158:PHE:HE2	1.43	0.83
1:A:197:VAL:HG21	1:A:204:ILE:HD12	1.49	0.83
1:A:221:ASP:OD1	1:A:223:THR:N	2.03	0.83
1:A:20:PRO:O	1:A:23:ILE:HB	1.79	0.83
1:A:140:ALA:HB3	1:A:151:ILE:HD13	0.83	0.83
1:A:251:LYS:C	1:A:253:PHE:H	1.78	0.83
1:A:20:PRO:HD2	1:A:23:ILE:CB	2.08	0.83
1:A:56:VAL:HG21	1:A:199:TYR:CA	2.06	0.83
1:A:178:GLY:O	1:A:179:ASP:OD1	1.97	0.83
1:A:197:VAL:CG2	1:A:204:ILE:HG13	2.08	0.83
1:A:95:LEU:O	1:A:96:ALA:C	2.15	0.83
1:A:105:PRO:O	1:A:109:TRP:CA	2.26	0.83
1:A:230:ASP:OD2	1:A:230:ASP:N	2.10	0.83
1:A:402:UNK:HG2	1:A:406:THR:HG23	1.59	0.83
1:A:30:ILE:HD12	1:A:255:SER:HB2	1.61	0.83
1:A:281:UNK:CG	1:A:282:ALA:N	2.40	0.83
1:A:307:ALA:O	1:A:345:ILE:HD11	1.78	0.83
1:A:449:UNK:HG2	1:A:450:UNK:N	1.94	0.83
1:A:93:ARG:HH22	1:A:118:ALA:HB3	1.44	0.82
1:A:287:GLN:NE2	1:A:314:ASN:ND2	2.26	0.82
1:A:370:VAL:HG12	1:A:371:VAL:N	1.57	0.82
1:A:371:VAL:HG12	1:A:404:SER:HB3	1.60	0.82
1:A:269:SER:OG	1:A:270:PRO:HD3	1.77	0.82
1:A:66:ALA:HB1	1:A:434:GLY:HA2	1.59	0.82
1:A:209:ILE:HA	1:A:391:UNK:O	1.78	0.82
1:A:9:LEU:HD22	1:A:296:TYR:HH	1.42	0.82
1:A:64:PHE:HB2	1:A:438:UNK:HG2	0.86	0.82
1:A:370:VAL:CG1	1:A:371:VAL:CG1	2.58	0.82
1:A:66:ALA:O	1:A:67:ILE:HG23	1.79	0.82
1:A:95:LEU:HD22	1:A:99:MET:HE1	1.50	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:144:GLU:OE2	1:A:145:UNK:CE	2.27	0.82
1:A:298:UNK:O	1:A:300:GLY:N	2.12	0.82
1:A:10:VAL:HA	1:A:13:HIS:CE1	2.15	0.82
1:A:191:HIS:C	1:A:193:ILE:H	1.78	0.82
1:A:371:VAL:HG13	1:A:404:SER:HA	1.62	0.82
1:A:109:TRP:HE1	1:A:163:LEU:HD21	1.45	0.82
1:A:251:LYS:HG3	1:A:275:THR:HG23	1.59	0.82
1:A:76:VAL:O	1:A:90:UNK:CA	2.27	0.82
1:A:95:LEU:HA	1:A:99:MET:CE	2.08	0.82
1:A:146:VAL:C	1:A:148:LYS:HD3	2.00	0.82
1:A:22:UNK:HG2	1:A:23:ILE:HD12	1.56	0.82
1:A:317:ASN:ND2	1:A:319:SER:H	1.76	0.82
1:A:347:UNK:CB	1:A:351:MET:CE	2.06	0.82
1:A:412:TYR:HB3	1:A:414:TRP:CD1	2.15	0.82
1:A:450:UNK:CG	1:A:452:UNK:CG	2.58	0.82
1:A:76:VAL:O	1:A:90:UNK:HB2	1.79	0.81
1:A:146:VAL:C	1:A:148:LYS:CD	2.49	0.81
1:A:252:ALA:O	1:A:254:PRO:HD3	1.80	0.81
1:A:148:LYS:HE3	1:A:149:GLY:HA2	1.62	0.81
1:A:66:ALA:C	1:A:67:ILE:HG23	2.00	0.81
1:A:148:LYS:CE	1:A:149:GLY:HA2	2.11	0.81
1:A:23:ILE:HD13	1:A:23:ILE:N	1.95	0.81
1:A:193:ILE:HA	1:A:197:VAL:HG12	1.62	0.81
1:A:327:LEU:HD13	1:A:332:LEU:HB3	1.61	0.81
1:A:109:TRP:CZ3	1:A:109:TRP:HH2	1.51	0.81
1:A:45:ILE:HG22	1:A:45:ILE:O	1.81	0.81
1:A:53:LEU:HD11	1:A:240:MET:SD	2.19	0.81
1:A:251:LYS:C	1:A:253:PHE:N	2.31	0.81
1:A:448:UNK:O	1:A:449:UNK:C	2.28	0.81
1:A:53:LEU:CD1	1:A:240:MET:SD	2.69	0.80
1:A:79:ILE:HD11	1:A:81:LEU:CD1	2.11	0.80
1:A:233:UNK:HG1	1:A:452:UNK:C	2.11	0.80
1:A:36:ASP:OD2	1:A:380:LYS:CE	2.26	0.80
1:A:22:UNK:HG2	1:A:23:ILE:HD13	0.81	0.80
1:A:30:ILE:HD12	1:A:255:SER:CB	2.11	0.80
1:A:156:UNK:HB1	1:A:158:PHE:HD2	1.46	0.80
1:A:208:ILE:CD1	1:A:390:ALA:HB2	2.11	0.80
1:A:250:ARG:HD2	1:A:256:LEU:CB	2.05	0.80
1:A:144:GLU:O	1:A:455:ALA:CB	2.29	0.80
1:A:197:VAL:HG22	1:A:204:ILE:HD12	1.60	0.80
1:A:320:TYR:HB2	1:A:321:PRO:CD	2.11	0.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:58:GLY:N	1:A:60:GLN:NE2	2.28	0.80
1:A:66:ALA:O	1:A:67:ILE:CG2	2.28	0.80
1:A:46:PRO:CD	1:A:248:SER:OG	2.30	0.80
1:A:186:ASP:O	1:A:186:ASP:OD2	1.98	0.80
1:A:172:ASN:O	1:A:176:PRO:HD2	1.79	0.79
1:A:206:MET:CE	1:A:377:ILE:HD12	2.12	0.79
1:A:412:TYR:CB	1:A:414:TRP:NE1	2.44	0.79
1:A:206:MET:HE3	1:A:377:ILE:CD1	2.12	0.79
1:A:364:ALA:O	1:A:368:ARG:HB2	1.83	0.79
1:A:68:VAL:O	1:A:68:VAL:CG1	2.30	0.79
1:A:312:ALA:O	1:A:315:VAL:CG1	2.30	0.79
1:A:434:GLY:O	1:A:437:UNK:HB1	1.83	0.79
1:A:67:ILE:HD11	1:A:135:PHE:HB2	1.65	0.79
1:A:109:TRP:CH2	1:A:109:TRP:HZ3	1.52	0.79
1:A:250:ARG:NE	1:A:256:LEU:HB2	1.98	0.79
1:A:16:VAL:HG12	1:A:17:PHE:N	1.96	0.79
1:A:320:TYR:CB	1:A:321:PRO:CD	2.61	0.79
1:A:196:UNK:HG1	1:A:435:ALA:CB	2.12	0.78
1:A:20:PRO:HB2	1:A:22:UNK:CD	2.13	0.78
1:A:51:TRP:HE1	1:A:144:GLU:N	1.81	0.78
1:A:175:PHE:HB2	1:A:176:PRO:CD	2.11	0.78
1:A:193:ILE:CA	1:A:197:VAL:CG1	2.62	0.78
1:A:34:ARG:NH2	1:A:45:ILE:N	2.27	0.78
1:A:151:ILE:HD13	1:A:152:THR:H	1.49	0.78
1:A:221:ASP:C	1:A:223:THR:H	1.87	0.78
1:A:397:TYR:CE2	1:A:398:SER:C	2.56	0.78
1:A:312:ALA:HB1	1:A:315:VAL:HB	1.62	0.78
1:A:62:GLY:O	1:A:80:UNK:HA	1.84	0.78
1:A:102:THR:HG21	1:A:160:LEU:HB3	1.66	0.78
1:A:140:ALA:HB1	1:A:151:ILE:HD13	1.63	0.78
1:A:310:PHE:O	1:A:315:VAL:CG1	2.32	0.78
1:A:407:UNK:CG	1:A:407:UNK:O	2.32	0.78
1:A:9:LEU:HD22	1:A:296:TYR:CZ	2.17	0.77
1:A:104:ILE:C	1:A:106:SER:H	1.82	0.77
1:A:48:VAL:O	1:A:243:CYS:CA	2.32	0.77
1:A:105:PRO:O	1:A:109:TRP:HB3	1.83	0.77
1:A:234:UNK:C	1:A:236:GLY:N	2.22	0.77
1:A:147:ILE:HD13	1:A:184:VAL:HA	1.65	0.77
1:A:197:VAL:HG22	1:A:204:ILE:CG1	2.13	0.77
1:A:370:VAL:CG1	1:A:371:VAL:HG13	2.13	0.77
1:A:233:UNK:O	1:A:233:UNK:CG	2.27	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:258:GLN:HA	1:A:279:ASN:ND2	1.94	0.77
1:A:76:VAL:HG21	1:A:119:PHE:CD1	2.20	0.77
1:A:95:LEU:O	1:A:96:ALA:O	2.03	0.77
1:A:140:ALA:CB	1:A:153:UNK:N	2.28	0.77
1:A:140:ALA:HB2	1:A:153:UNK:O	1.85	0.77
1:A:83:GLY:O	1:A:85:GLN:OE1	2.01	0.77
1:A:138:UNK:O	1:A:156:UNK:CD	2.32	0.77
1:A:178:GLY:C	1:A:179:ASP:OD1	2.22	0.77
1:A:58:GLY:H	1:A:60:GLN:NE2	1.81	0.77
1:A:82:ALA:O	1:A:85:GLN:NE2	2.17	0.77
1:A:219:TRP:CZ3	1:A:240:MET:C	2.58	0.77
1:A:289:LEU:HD11	1:A:359:LEU:HD22	1.67	0.77
1:A:54:LYS:HG2	1:A:447:GLN:HG3	1.65	0.76
1:A:167:ILE:N	1:A:170:MET:HE3	1.99	0.76
1:A:419:UNK:HA	1:A:422:LYS:HB2	1.57	0.76
1:A:166:LEU:CD1	1:A:169:ALA:N	2.48	0.76
1:A:208:ILE:CD1	1:A:390:ALA:CB	2.63	0.76
1:A:150:GLN:HA	1:A:166:LEU:CD2	2.12	0.76
1:A:137:PHE:CZ	1:A:167:ILE:HG23	2.19	0.76
1:A:309:ASP:OD1	1:A:309:ASP:O	2.03	0.76
1:A:166:LEU:CD1	1:A:169:ALA:CA	2.63	0.76
1:A:7:UNK:O	1:A:11:GLU:HG3	1.85	0.76
1:A:142:ALA:HB2	1:A:152:THR:CB	2.15	0.76
1:A:208:ILE:HA	1:A:216:ALA:HA	1.68	0.76
1:A:245:UNK:HA	1:A:247:ASP:OD1	1.85	0.76
1:A:78:LEU:HG	1:A:79:ILE:N	2.00	0.76
1:A:327:LEU:CD1	1:A:335:UNK:HG2	2.16	0.76
1:A:167:ILE:HA	1:A:170:MET:CE	2.14	0.76
1:A:296:TYR:CG	1:A:301:GLN:HG3	2.21	0.76
1:A:327:LEU:HD11	1:A:332:LEU:CB	2.13	0.76
1:A:302:UNK:CB	1:A:351:MET:SD	2.72	0.75
1:A:64:PHE:O	1:A:78:LEU:HA	1.86	0.75
1:A:303:HIS:CA	1:A:351:MET:CE	2.64	0.75
1:A:148:LYS:HE3	1:A:149:GLY:CA	2.17	0.75
1:A:164:UNK:O	1:A:164:UNK:CG	2.33	0.75
1:A:176:PRO:HA	1:A:179:ASP:HB3	1.69	0.75
1:A:46:PRO:CD	1:A:248:SER:CB	2.65	0.75
1:A:95:LEU:HD22	1:A:99:MET:HE3	0.89	0.75
1:A:347:UNK:HB2	1:A:351:MET:CB	2.17	0.75
1:A:196:UNK:HB2	1:A:436:ALA:HA	1.69	0.75
1:A:175:PHE:CE2	1:A:181:UNK:CG	2.70	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:371:VAL:HG11	1:A:404:SER:C	2.06	0.74
1:A:69:MET:HE1	1:A:108:LEU:CD1	2.16	0.74
1:A:124:PHE:O	1:A:125:SER:HB2	1.87	0.74
1:A:69:MET:CE	1:A:108:LEU:HD13	2.16	0.74
1:A:294:MET:O	1:A:297:LYS:HB3	1.86	0.74
1:A:330:PHE:C	1:A:332:LEU:H	1.82	0.74
1:A:104:ILE:HG21	1:A:106:SER:HB2	1.69	0.74
1:A:308:UNK:HB1	1:A:311:UNK:HG3	1.68	0.74
1:A:137:PHE:CZ	1:A:167:ILE:CG2	2.71	0.74
1:A:144:GLU:HG2	1:A:145:UNK:HG3	1.69	0.74
1:A:58:GLY:N	1:A:60:GLN:HE22	1.85	0.74
1:A:99:MET:SD	1:A:108:LEU:HD23	2.28	0.74
1:A:375:UNK:CD	1:A:411:ILE:CD1	2.63	0.74
1:A:408:ASN:HA	1:A:411:ILE:HD12	1.68	0.74
1:A:14:UNK:CD	1:A:357:ARG:HH11	2.01	0.74
1:A:172:ASN:O	1:A:175:PHE:N	2.20	0.74
1:A:166:LEU:C	1:A:168:SER:N	2.29	0.74
1:A:287:GLN:CD	1:A:314:ASN:ND2	2.41	0.74
1:A:403:ASN:O	1:A:407:UNK:N	2.20	0.74
1:A:194:LEU:HD13	1:A:206:MET:HA	1.70	0.74
1:A:271:UNK:HG3	1:A:272:ALA:N	2.01	0.73
1:A:389:ALA:HB1	1:A:429:ALA:CA	2.18	0.73
1:A:424:ILE:O	1:A:424:ILE:CG2	2.36	0.73
1:A:159:SER:O	1:A:161:ALA:N	2.21	0.73
1:A:56:VAL:CG2	1:A:199:TYR:HA	2.18	0.73
1:A:148:LYS:CE	1:A:149:GLY:HA3	1.99	0.73
1:A:236:GLY:O	1:A:237:ALA:CB	2.34	0.73
1:A:210:PHE:HB3	1:A:394:UNK:HB1	1.69	0.73
1:A:46:PRO:HB2	1:A:245:UNK:HB1	1.70	0.73
1:A:126:SER:O	1:A:127:UNK:HB1	1.88	0.73
1:A:191:HIS:ND1	1:A:241:UNK:CE	2.51	0.73
1:A:273:UNK:O	1:A:278:LYS:CD	2.35	0.73
1:A:35:UNK:CD	1:A:377:ILE:HG12	2.18	0.73
1:A:81:LEU:HD13	1:A:81:LEU:N	2.03	0.73
1:A:55:GLN:NE2	1:A:239:UNK:HG2	1.84	0.73
1:A:151:ILE:HG21	1:A:164:UNK:O	1.86	0.73
1:A:104:ILE:C	1:A:106:SER:N	2.42	0.72
1:A:249:PHE:HE2	1:A:256:LEU:CD2	1.91	0.72
1:A:289:LEU:HD21	1:A:359:LEU:HD23	0.74	0.72
1:A:188:UNK:CD	1:A:190:SER:CB	2.67	0.72
1:A:76:VAL:C	1:A:77:ILE:HG13	2.09	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:234:UNK:O	1:A:236:GLY:CA	2.36	0.72
1:A:113:ALA:O	1:A:114:UNK:C	2.37	0.72
1:A:164:UNK:O	1:A:164:UNK:HG3	1.87	0.72
1:A:261:TYR:O	1:A:264:THR:HB	1.88	0.72
1:A:304:UNK:O	1:A:305:UNK:CG	2.31	0.72
1:A:448:UNK:O	1:A:451:ALA:N	2.21	0.72
1:A:448:UNK:O	1:A:451:ALA:CA	2.38	0.72
1:A:108:LEU:HG	1:A:160:LEU:CG	2.19	0.72
1:A:108:LEU:CB	1:A:160:LEU:HD13	2.19	0.72
1:A:120:SER:O	1:A:122:UNK:N	2.23	0.72
1:A:193:ILE:CG1	1:A:207:GLY:CA	2.67	0.72
1:A:193:ILE:C	1:A:197:VAL:CG1	2.55	0.72
1:A:221:ASP:OD1	1:A:223:THR:HG23	1.88	0.72
1:A:102:THR:CG2	1:A:160:LEU:CA	2.61	0.71
1:A:381:LYS:HD3	1:A:383:TYR:OH	1.90	0.71
1:A:109:TRP:CZ2	1:A:167:ILE:O	2.38	0.71
1:A:147:ILE:CD1	1:A:184:VAL:HA	2.19	0.71
1:A:419:UNK:HA	1:A:422:LYS:CB	2.20	0.71
1:A:14:UNK:HG3	1:A:361:LEU:HD21	1.72	0.71
1:A:16:VAL:CG2	1:A:259:ILE:HD11	2.20	0.71
1:A:281:UNK:O	1:A:285:UNK:CD	2.38	0.71
1:A:387:HIS:O	1:A:388:ILE:HD13	1.91	0.71
1:A:327:LEU:HD13	1:A:332:LEU:CB	2.18	0.71
1:A:446:SER:OG	1:A:447:GLN:N	2.22	0.71
1:A:192:GLY:O	1:A:432:GLY:HA2	1.89	0.71
1:A:148:LYS:HD3	1:A:148:LYS:N	2.06	0.71
1:A:97:ALA:O	1:A:98:SER:HB3	1.91	0.71
1:A:68:VAL:CG2	1:A:433:GLU:CG	2.64	0.71
1:A:249:PHE:CE2	1:A:256:LEU:CD2	2.60	0.71
1:A:307:ALA:O	1:A:345:ILE:CD1	2.39	0.71
1:A:103:ALA:O	1:A:104:ILE:HG22	1.88	0.70
1:A:194:LEU:HD22	1:A:217:ALA:O	1.90	0.70
1:A:316:GLU:HG3	1:A:320:TYR:CD1	2.26	0.70
1:A:51:TRP:NE1	1:A:143:LYS:C	2.35	0.70
1:A:163:LEU:HD13	1:A:167:ILE:HA	1.73	0.70
1:A:329:HIS:HE2	1:A:332:LEU:N	1.81	0.70
1:A:372:CYS:HA	1:A:375:UNK:CD	2.20	0.70
1:A:209:ILE:CA	1:A:391:UNK:O	2.40	0.70
1:A:282:ALA:CA	1:A:394:UNK:CD	2.69	0.70
1:A:448:UNK:O	1:A:451:ALA:HA	1.90	0.70
1:A:197:VAL:CG2	1:A:204:ILE:HD11	2.10	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:414:TRP:CH2	1:A:424:ILE:N	2.58	0.70
1:A:75:GLU:HG2	1:A:90:UNK:HB2	1.72	0.70
1:A:148:LYS:HE3	1:A:186:ASP:O	1.92	0.70
1:A:175:PHE:HB2	1:A:176:PRO:HD2	1.74	0.70
1:A:264:THR:O	1:A:265:LEU:C	2.30	0.70
1:A:303:HIS:CA	1:A:351:MET:HE3	2.21	0.70
1:A:303:HIS:CE1	1:A:347:UNK:HG1	2.26	0.70
1:A:436:ALA:O	1:A:440:ILE:CB	2.39	0.70
1:A:210:PHE:HB3	1:A:394:UNK:CB	2.21	0.70
1:A:402:UNK:CG	1:A:402:UNK:O	2.40	0.70
1:A:17:PHE:HB3	1:A:361:LEU:HB3	1.72	0.70
1:A:377:ILE:O	1:A:379:GLN:N	2.24	0.70
1:A:197:VAL:HG22	1:A:204:ILE:HG13	1.72	0.70
1:A:56:VAL:HG21	1:A:199:TYR:HA	1.72	0.69
1:A:70:GLY:CA	1:A:158:PHE:HE2	1.98	0.69
1:A:251:LYS:HG2	1:A:275:THR:HG22	0.75	0.69
1:A:271:UNK:CG	1:A:272:ALA:N	2.52	0.69
1:A:211:GLY:C	1:A:282:ALA:HB3	2.12	0.69
1:A:219:TRP:CE3	1:A:241:UNK:N	2.59	0.69
1:A:133:LEU:HB3	1:A:182:UNK:O	1.92	0.69
1:A:374:ILE:O	1:A:378:CYS:SG	2.50	0.69
1:A:55:GLN:CD	1:A:239:UNK:CG	2.60	0.69
1:A:175:PHE:CE1	1:A:183:UNK:HG1	2.22	0.69
1:A:219:TRP:HE3	1:A:240:MET:C	1.94	0.69
1:A:445:SER:HA	1:A:448:UNK:CD	2.22	0.69
1:A:213:GLY:HA2	1:A:277:GLU:CD	2.12	0.69
1:A:223:THR:HG22	1:A:237:ALA:CB	2.22	0.69
1:A:55:GLN:O	1:A:56:VAL:C	2.31	0.69
1:A:77:ILE:HA	1:A:89:ILE:O	1.91	0.69
1:A:219:TRP:HZ3	1:A:241:UNK:N	1.86	0.69
1:A:287:GLN:NE2	1:A:314:ASN:HD22	1.91	0.69
1:A:144:GLU:OE2	1:A:148:LYS:CG	2.40	0.69
1:A:265:LEU:H	1:A:265:LEU:CD2	2.03	0.69
1:A:261:TYR:O	1:A:265:LEU:HD23	1.92	0.69
1:A:327:LEU:HD11	1:A:332:LEU:CA	2.22	0.69
1:A:330:PHE:C	1:A:332:LEU:N	2.46	0.69
1:A:258:GLN:CA	1:A:279:ASN:HD21	1.99	0.69
1:A:282:ALA:HA	1:A:394:UNK:CD	2.23	0.69
1:A:52:VAL:O	1:A:219:TRP:CZ3	2.45	0.69
1:A:70:GLY:O	1:A:158:PHE:CZ	2.35	0.69
1:A:135:PHE:CZ	1:A:171:UNK:HB2	2.28	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:56:VAL:HG21	1:A:199:TYR:CD2	2.24	0.68
1:A:146:VAL:N	1:A:148:LYS:HD2	2.08	0.68
1:A:191:HIS:NE2	1:A:243:CYS:HB2	2.08	0.68
1:A:196:UNK:O	1:A:199:TYR:HB3	1.93	0.68
1:A:430:ILE:HG22	1:A:431:ASP:N	2.08	0.68
1:A:108:LEU:CG	1:A:160:LEU:CD2	2.62	0.68
1:A:440:ILE:CG2	1:A:440:ILE:O	2.42	0.68
1:A:53:LEU:H	1:A:54:LYS:HZ3	1.40	0.68
1:A:327:LEU:HD12	1:A:332:LEU:HB3	1.71	0.68
1:A:95:LEU:HD22	1:A:99:MET:SD	2.34	0.68
1:A:303:HIS:O	1:A:305:UNK:N	2.26	0.68
1:A:289:LEU:O	1:A:292:VAL:HG23	1.94	0.68
1:A:19:VAL:CG2	1:A:365:TYR:HB2	2.24	0.68
1:A:223:THR:CG2	1:A:237:ALA:HB1	2.24	0.68
1:A:19:VAL:HG21	1:A:365:TYR:HB2	1.75	0.68
1:A:308:UNK:CE	1:A:345:ILE:HD12	2.24	0.68
1:A:419:UNK:HA	1:A:422:LYS:CG	2.24	0.68
1:A:20:PRO:CG	1:A:22:UNK:CD	2.71	0.68
1:A:52:VAL:O	1:A:219:TRP:CH2	2.46	0.68
1:A:208:ILE:HD12	1:A:390:ALA:CB	2.24	0.68
1:A:49:PRO:HA	1:A:242:VAL:CA	2.22	0.68
1:A:50:GLY:HA2	1:A:143:LYS:HE3	1.74	0.68
1:A:46:PRO:CD	1:A:248:SER:HB2	2.24	0.67
1:A:261:TYR:HE1	1:A:292:VAL:HA	1.59	0.67
1:A:419:UNK:O	1:A:422:LYS:HB3	1.93	0.67
1:A:76:VAL:O	1:A:90:UNK:HA	1.93	0.67
1:A:245:UNK:C	1:A:247:ASP:OD1	2.42	0.67
1:A:327:LEU:CD1	1:A:332:LEU:HA	2.24	0.67
1:A:356:ARG:HA	1:A:359:LEU:HD12	1.75	0.67
1:A:389:ALA:CB	1:A:429:ALA:CB	2.20	0.67
1:A:2:ALA:HB1	1:A:350:UNK:CG	2.24	0.67
1:A:99:MET:SD	1:A:108:LEU:HD21	2.34	0.67
1:A:219:TRP:CZ3	1:A:240:MET:CA	2.77	0.67
1:A:450:UNK:HG3	1:A:452:UNK:CG	2.24	0.67
1:A:306:UNK:CE	1:A:345:ILE:HA	2.24	0.67
1:A:327:LEU:CD1	1:A:332:LEU:CA	2.72	0.67
1:A:347:UNK:CA	1:A:351:MET:HE2	2.22	0.67
1:A:94:SER:C	1:A:96:ALA:N	2.48	0.67
1:A:265:LEU:O	1:A:269:SER:HB2	1.91	0.67
1:A:32:THR:O	1:A:33:THR:C	2.33	0.67
1:A:133:LEU:HG	1:A:134:GLY:H	1.60	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:261:TYR:N	1:A:261:TYR:CD2	2.63	0.67
1:A:365:TYR:O	1:A:366:ALA:C	2.28	0.67
1:A:14:UNK:CD	1:A:357:ARG:NH1	2.57	0.67
1:A:210:PHE:CE2	1:A:370:VAL:HG22	2.06	0.67
1:A:420:UNK:O	1:A:425:UNK:CD	2.43	0.67
1:A:34:ARG:HH21	1:A:45:ILE:N	1.86	0.67
1:A:38:UNK:CG	1:A:43:ALA:HB3	2.25	0.67
1:A:72:GLY:O	1:A:73:ASP:HB2	1.94	0.67
1:A:251:LYS:CA	1:A:275:THR:HG21	2.25	0.67
1:A:281:UNK:CG	1:A:282:ALA:H	2.07	0.67
1:A:154:GLN:NE2	1:A:164:UNK:HA	2.11	0.66
1:A:23:ILE:HD13	1:A:23:ILE:H	1.60	0.66
1:A:76:VAL:CB	1:A:119:PHE:CE1	2.78	0.66
1:A:151:ILE:HD13	1:A:152:THR:N	2.09	0.66
1:A:173:ALA:O	1:A:177:ALA:HB2	1.95	0.66
1:A:271:UNK:CG	1:A:272:ALA:H	2.08	0.66
1:A:328:PRO:CG	1:A:334:UNK:CE	2.66	0.66
1:A:317:ASN:ND2	1:A:318:SER:C	2.49	0.66
1:A:208:ILE:HG13	1:A:389:ALA:O	1.96	0.66
1:A:407:UNK:O	1:A:410:ASN:HB2	1.95	0.66
1:A:13:HIS:HA	1:A:16:VAL:HB	1.78	0.66
1:A:298:UNK:C	1:A:300:GLY:N	2.45	0.66
1:A:66:ALA:C	1:A:67:ILE:CG2	2.62	0.66
1:A:208:ILE:HD12	1:A:390:ALA:CA	2.25	0.66
1:A:370:VAL:HG13	1:A:371:VAL:CA	2.24	0.66
1:A:181:UNK:HG2	1:A:182:UNK:N	2.10	0.66
1:A:2:ALA:CB	1:A:350:UNK:CB	2.74	0.66
1:A:225:ILE:HG22	1:A:227:ASP:HB3	1.78	0.66
1:A:316:GLU:HB2	1:A:320:TYR:CE1	2.31	0.66
1:A:76:VAL:O	1:A:90:UNK:HB1	1.91	0.66
1:A:90:UNK:HG2	1:A:91:ALA:N	2.11	0.65
1:A:108:LEU:CG	1:A:160:LEU:CD1	2.71	0.65
1:A:322:ALA:O	1:A:326:LYS:CG	2.44	0.65
1:A:75:GLU:HG2	1:A:76:VAL:N	2.12	0.65
1:A:245:UNK:CA	1:A:247:ASP:OD1	2.43	0.65
1:A:133:LEU:HG	1:A:134:GLY:N	2.12	0.65
1:A:197:VAL:HG23	1:A:204:ILE:HG13	1.76	0.65
1:A:261:TYR:CE1	1:A:292:VAL:HG13	2.31	0.65
1:A:102:THR:HG23	1:A:160:LEU:CB	2.26	0.65
1:A:416:GLN:HE21	1:A:422:LYS:HA	1.61	0.65
1:A:68:VAL:CG2	1:A:433:GLU:HB3	2.26	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:175:PHE:CD1	1:A:183:UNK:HG2	2.31	0.65
1:A:414:TRP:CZ3	1:A:423:PRO:HD2	2.31	0.65
1:A:414:TRP:HB3	1:A:416:GLN:OE1	1.96	0.65
1:A:14:UNK:O	1:A:18:ILE:CG1	2.44	0.65
1:A:326:LYS:CD	1:A:398:SER:HA	2.25	0.65
1:A:347:UNK:HB2	1:A:351:MET:CG	2.26	0.65
1:A:397:TYR:HE2	1:A:398:SER:C	1.94	0.65
1:A:67:ILE:HD11	1:A:135:PHE:CB	2.28	0.64
1:A:273:UNK:O	1:A:278:LYS:CE	2.45	0.64
1:A:407:UNK:O	1:A:407:UNK:HG3	1.92	0.64
1:A:104:ILE:HG23	1:A:107:ASP:N	2.12	0.64
1:A:296:TYR:O	1:A:301:GLN:HG2	1.97	0.64
1:A:317:ASN:ND2	1:A:318:SER:CA	2.60	0.64
1:A:16:VAL:CG1	1:A:259:ILE:HD12	2.11	0.64
1:A:16:VAL:CB	1:A:259:ILE:HD11	2.26	0.64
1:A:20:PRO:CB	1:A:22:UNK:CD	2.75	0.64
1:A:303:HIS:CA	1:A:351:MET:HE1	2.25	0.64
1:A:93:ARG:CZ	1:A:115:SER:HA	2.27	0.64
1:A:166:LEU:HD12	1:A:169:ALA:HB3	0.68	0.64
1:A:327:LEU:HD23	1:A:328:PRO:HD2	1.79	0.64
1:A:367:PHE:CD1	1:A:367:PHE:N	2.64	0.64
1:A:9:LEU:HD11	1:A:296:TYR:CD1	2.14	0.64
1:A:14:UNK:O	1:A:18:ILE:HG13	1.98	0.64
1:A:51:TRP:NE1	1:A:144:GLU:N	2.45	0.64
1:A:56:VAL:HG21	1:A:199:TYR:CG	2.32	0.64
1:A:212:SER:HA	1:A:283:LYS:HB2	1.80	0.64
1:A:68:VAL:HG21	1:A:433:GLU:HG2	1.79	0.64
1:A:136:THR:HG21	1:A:433:GLU:O	1.97	0.64
1:A:288:SER:OG	1:A:362:ILE:HD11	1.98	0.64
1:A:356:ARG:HD2	1:A:356:ARG:O	1.97	0.64
1:A:46:PRO:HD2	1:A:248:SER:CB	2.28	0.64
1:A:249:PHE:CE1	1:A:250:ARG:HB2	2.33	0.64
1:A:308:UNK:CE	1:A:345:ILE:CD1	2.76	0.64
1:A:331:ASP:O	1:A:349:THR:CG2	2.44	0.64
1:A:16:VAL:HG12	1:A:17:PHE:H	1.62	0.63
1:A:259:ILE:HG22	1:A:262:UNK:CD	2.28	0.63
1:A:404:SER:HB2	1:A:426:ILE:HD12	1.79	0.63
1:A:79:ILE:HD11	1:A:81:LEU:HD12	1.80	0.63
1:A:220:CYS:SG	1:A:224:UNK:HB2	2.36	0.63
1:A:281:UNK:HG3	1:A:283:LYS:H	1.62	0.63
1:A:175:PHE:CZ	1:A:183:UNK:CG	2.80	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:208:ILE:CD1	1:A:390:ALA:HA	2.27	0.63
1:A:229:ALA:C	1:A:230:ASP:CG	2.54	0.63
1:A:37:ASP:O	1:A:43:ALA:HB2	1.99	0.63
1:A:145:UNK:CD	1:A:146:VAL:H	2.12	0.63
1:A:187:ILE:HD13	1:A:440:ILE:HG21	1.80	0.63
1:A:229:ALA:C	1:A:230:ASP:OD2	2.36	0.63
1:A:109:TRP:HH2	1:A:135:PHE:HE2	1.47	0.63
1:A:206:MET:CE	1:A:216:ALA:HB1	2.29	0.63
1:A:351:MET:O	1:A:355:VAL:HG23	1.97	0.63
1:A:418:ALA:H	1:A:421:SER:HB3	1.63	0.63
1:A:48:VAL:C	1:A:243:CYS:H	2.02	0.63
1:A:46:PRO:HD2	1:A:248:SER:OG	1.97	0.63
1:A:102:THR:HG22	1:A:160:LEU:CB	2.23	0.63
1:A:402:UNK:HG2	1:A:406:THR:HG21	1.80	0.63
1:A:50:GLY:N	1:A:241:UNK:O	2.26	0.62
1:A:81:LEU:O	1:A:82:ALA:HB2	1.99	0.62
1:A:129:GLY:O	1:A:130:SER:CB	2.38	0.62
1:A:95:LEU:CD1	1:A:158:PHE:HE1	2.11	0.62
1:A:375:UNK:HB1	1:A:408:ASN:HD21	1.63	0.62
1:A:211:GLY:O	1:A:281:UNK:CG	2.47	0.62
1:A:54:LYS:CG	1:A:447:GLN:HG3	2.29	0.62
1:A:133:LEU:CG	1:A:134:GLY:N	2.63	0.62
1:A:215:ASN:OD1	1:A:245:UNK:HA	2.00	0.62
1:A:38:UNK:HB2	1:A:43:ALA:HB1	1.79	0.62
1:A:66:ALA:HB1	1:A:434:GLY:CA	2.27	0.62
1:A:347:UNK:HB1	1:A:351:MET:SD	2.38	0.62
1:A:68:VAL:HG23	1:A:433:GLU:CB	2.29	0.62
1:A:77:ILE:HG21	1:A:88:SER:HB2	1.78	0.62
1:A:208:ILE:HG21	1:A:374:ILE:HG12	1.80	0.62
1:A:449:UNK:CG	1:A:450:UNK:N	2.58	0.62
1:A:68:VAL:HG23	1:A:433:GLU:HB3	1.82	0.62
1:A:105:PRO:O	1:A:109:TRP:C	2.38	0.62
1:A:370:VAL:HG12	1:A:371:VAL:CG1	2.17	0.62
1:A:392:GLY:O	1:A:395:ARG:HB2	2.00	0.62
1:A:24:LEU:O	1:A:372:CYS:SG	2.58	0.61
1:A:75:GLU:CG	1:A:90:UNK:CB	2.77	0.61
1:A:175:PHE:CZ	1:A:183:UNK:HG3	2.35	0.61
1:A:397:TYR:O	1:A:398:SER:O	2.18	0.61
1:A:2:ALA:HB1	1:A:350:UNK:HB1	1.82	0.61
1:A:175:PHE:CD1	1:A:183:UNK:CG	2.83	0.61
1:A:446:SER:O	1:A:449:UNK:HG3	2.01	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:46:PRO:CB	1:A:245:UNK:HB1	2.30	0.61
1:A:193:ILE:HG13	1:A:207:GLY:CA	2.26	0.61
1:A:219:TRP:CE3	1:A:240:MET:N	2.69	0.61
1:A:233:UNK:HB1	1:A:453:UNK:HB2	1.81	0.61
1:A:259:ILE:O	1:A:263:UNK:CD	2.48	0.61
1:A:137:PHE:CE2	1:A:167:ILE:CG2	2.83	0.61
1:A:2:ALA:HB1	1:A:350:UNK:HG3	1.82	0.61
1:A:191:HIS:CG	1:A:241:UNK:CD	2.84	0.61
1:A:281:UNK:O	1:A:285:UNK:CG	2.49	0.61
1:A:16:VAL:CG1	1:A:17:PHE:N	2.60	0.61
1:A:370:VAL:CG1	1:A:371:VAL:HG12	2.30	0.61
1:A:64:PHE:CZ	1:A:442:SER:HA	2.36	0.60
1:A:348:LYS:HE2	1:A:349:THR:H	1.66	0.60
1:A:395:ARG:O	1:A:396:ASP:HB3	2.01	0.60
1:A:397:TYR:CE2	1:A:398:SER:HB2	2.36	0.60
1:A:435:ALA:C	1:A:437:UNK:N	2.53	0.60
1:A:2:ALA:HB1	1:A:350:UNK:CB	2.31	0.60
1:A:233:UNK:CB	1:A:452:UNK:O	2.49	0.60
1:A:317:ASN:CG	1:A:318:SER:H	1.99	0.60
1:A:419:UNK:N	1:A:422:LYS:HD2	2.16	0.60
1:A:135:PHE:CZ	1:A:171:UNK:CB	2.84	0.60
1:A:281:UNK:HG3	1:A:282:ALA:H	1.61	0.60
1:A:75:GLU:HA	1:A:92:SER:CB	2.28	0.60
1:A:108:LEU:CD1	1:A:160:LEU:CD2	2.79	0.60
1:A:261:TYR:CE1	1:A:292:VAL:HA	2.36	0.60
1:A:197:VAL:HG22	1:A:204:ILE:HG21	1.82	0.60
1:A:367:PHE:CZ	1:A:397:TYR:CE2	2.90	0.60
1:A:210:PHE:CD2	1:A:370:VAL:HG21	2.26	0.60
1:A:414:TRP:CZ3	1:A:422:LYS:HG3	2.37	0.60
1:A:55:GLN:CD	1:A:239:UNK:HG3	2.21	0.60
1:A:63:SER:OG	1:A:78:LEU:HD11	2.00	0.60
1:A:249:PHE:CE2	1:A:256:LEU:HD13	2.37	0.60
1:A:276:PHE:O	1:A:280:SER:HB3	2.01	0.60
1:A:324:ILE:HA	1:A:335:UNK:HG3	1.83	0.60
1:A:324:ILE:HD13	1:A:359:LEU:CD1	2.32	0.60
1:A:223:THR:CG2	1:A:237:ALA:CB	2.79	0.60
1:A:241:UNK:CD	1:A:241:UNK:O	2.49	0.60
1:A:393:SER:C	1:A:395:ARG:H	2.05	0.60
1:A:189:ASP:OD2	1:A:189:ASP:N	2.29	0.60
1:A:46:PRO:HD2	1:A:248:SER:HB2	1.84	0.59
1:A:72:GLY:O	1:A:73:ASP:CB	2.50	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:377:ILE:HG22	1:A:378:CYS:N	2.18	0.59
1:A:450:UNK:HG2	1:A:452:UNK:CG	2.25	0.59
1:A:49:PRO:CA	1:A:242:VAL:HA	2.26	0.59
1:A:95:LEU:CG	1:A:99:MET:HE3	2.29	0.59
1:A:146:VAL:O	1:A:148:LYS:CA	2.50	0.59
1:A:166:LEU:CD1	1:A:169:ALA:H	2.08	0.59
1:A:166:LEU:C	1:A:170:MET:HE3	2.22	0.59
1:A:206:MET:HE2	1:A:216:ALA:HB1	1.83	0.59
1:A:53:LEU:HD13	1:A:53:LEU:N	2.17	0.59
1:A:210:PHE:CB	1:A:394:UNK:HB1	2.32	0.59
1:A:223:THR:HG21	1:A:237:ALA:HB1	1.84	0.59
1:A:412:TYR:HB3	1:A:414:TRP:HE1	1.65	0.59
1:A:79:ILE:CD1	1:A:87:SER:H	2.09	0.59
1:A:261:TYR:CE1	1:A:292:VAL:CG1	2.85	0.59
1:A:264:THR:C	1:A:266:ASN:N	2.54	0.59
1:A:108:LEU:CD2	1:A:160:LEU:HD22	2.32	0.59
1:A:208:ILE:HD11	1:A:390:ALA:CB	2.26	0.59
1:A:373:UNK:C	1:A:375:UNK:N	2.63	0.59
1:A:95:LEU:HD11	1:A:158:PHE:CE1	2.38	0.59
1:A:219:TRP:HZ3	1:A:240:MET:CA	2.16	0.59
1:A:257:PRO:O	1:A:258:GLN:C	2.41	0.59
1:A:41:ALA:O	1:A:42:ALA:CB	2.50	0.59
1:A:233:UNK:HG1	1:A:452:UNK:CA	2.33	0.59
1:A:326:LYS:HB3	1:A:326:LYS:HZ2	1.66	0.59
1:A:103:ALA:C	1:A:104:ILE:HG22	2.23	0.59
1:A:17:PHE:O	1:A:361:LEU:HB3	2.03	0.58
1:A:194:LEU:HD13	1:A:206:MET:CA	2.34	0.58
1:A:342:ASP:HB2	1:A:343:GLN:HG2	1.84	0.58
1:A:10:VAL:HA	1:A:13:HIS:NE2	2.18	0.58
1:A:63:SER:HA	1:A:79:ILE:O	2.02	0.58
1:A:77:ILE:CG2	1:A:88:SER:CB	2.65	0.58
1:A:320:TYR:CD2	1:A:338:LEU:CD2	2.70	0.58
1:A:104:ILE:HG12	1:A:105:PRO:HD2	1.85	0.58
1:A:109:TRP:CE3	1:A:112:UNK:CE	2.86	0.58
1:A:133:LEU:HD23	1:A:134:GLY:N	2.18	0.58
1:A:150:GLN:HG3	1:A:151:ILE:O	2.04	0.58
1:A:208:ILE:CG1	1:A:388:ILE:HG22	2.33	0.58
1:A:225:ILE:CG2	1:A:227:ASP:HB3	2.33	0.58
1:A:296:TYR:CB	1:A:301:GLN:HG3	2.33	0.58
1:A:8:SER:O	1:A:12:VAL:CG1	2.51	0.58
1:A:102:THR:HG22	1:A:160:LEU:HB3	1.77	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:103:ALA:C	1:A:104:ILE:CG2	2.70	0.58
1:A:261:TYR:HE1	1:A:292:VAL:CA	2.15	0.58
1:A:298:UNK:O	1:A:299:UNK:C	2.45	0.58
1:A:367:PHE:HZ	1:A:397:TYR:CD1	2.20	0.58
1:A:16:VAL:HG22	1:A:259:ILE:HD11	1.85	0.58
1:A:45:ILE:HG12	1:A:249:PHE:HA	1.85	0.58
1:A:68:VAL:CG2	1:A:433:GLU:CB	2.82	0.58
1:A:175:PHE:HB3	1:A:176:PRO:CD	2.14	0.58
1:A:200:THR:HG21	1:A:430:ILE:CG1	2.26	0.58
1:A:402:UNK:O	1:A:402:UNK:CD	2.52	0.58
1:A:440:ILE:O	1:A:440:ILE:HG22	2.03	0.58
1:A:27:VAL:O	1:A:30:ILE:HG22	2.04	0.58
1:A:49:PRO:CA	1:A:243:CYS:H	2.17	0.58
1:A:22:UNK:CD	1:A:23:ILE:HD13	2.32	0.58
1:A:108:LEU:CD1	1:A:160:LEU:HD22	2.32	0.58
1:A:111:ASN:C	1:A:113:ALA:H	2.07	0.58
1:A:303:HIS:ND1	1:A:347:UNK:HG1	2.18	0.58
1:A:348:LYS:CE	1:A:348:LYS:CA	2.31	0.58
1:A:22:UNK:HG2	1:A:23:ILE:N	2.19	0.57
1:A:120:SER:C	1:A:122:UNK:N	2.57	0.57
1:A:193:ILE:HG22	1:A:432:GLY:HA3	1.86	0.57
1:A:251:LYS:HZ1	1:A:274:LYS:H	1.52	0.57
1:A:273:UNK:O	1:A:278:LYS:HE3	2.04	0.57
1:A:49:PRO:O	1:A:143:LYS:HE3	2.04	0.57
1:A:208:ILE:CD1	1:A:390:ALA:CA	2.82	0.57
1:A:114:UNK:C	1:A:117:ALA:HB3	2.20	0.57
1:A:146:VAL:CG1	1:A:148:LYS:HZ3	2.18	0.57
1:A:171:UNK:O	1:A:174:UNK:HB2	2.04	0.57
1:A:58:GLY:C	1:A:199:TYR:CE2	2.78	0.57
1:A:79:ILE:CD1	1:A:81:LEU:CD1	2.81	0.57
1:A:79:ILE:CD1	1:A:86:GLU:CB	2.83	0.57
1:A:108:LEU:HG	1:A:160:LEU:CB	2.35	0.57
1:A:261:TYR:N	1:A:261:TYR:HD2	2.01	0.57
1:A:6:ASP:C	1:A:8:SER:H	2.08	0.57
1:A:55:GLN:NE2	1:A:239:UNK:HG3	2.15	0.57
1:A:193:ILE:HG12	1:A:207:GLY:CA	2.35	0.57
1:A:371:VAL:HB	1:A:374:ILE:HD12	1.87	0.57
1:A:220:CYS:HA	1:A:381:LYS:HE3	1.85	0.57
1:A:19:VAL:HG12	1:A:19:VAL:O	2.04	0.57
1:A:38:UNK:CA	1:A:43:ALA:CB	2.82	0.57
1:A:69:MET:HB2	1:A:74:LEU:CD1	2.34	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:95:LEU:CA	1:A:99:MET:HE3	2.27	0.57
1:A:108:LEU:HB3	1:A:160:LEU:HD13	1.86	0.57
1:A:256:LEU:HD21	1:A:276:PHE:HA	1.86	0.57
1:A:269:SER:CB	1:A:270:PRO:CD	2.83	0.57
1:A:289:LEU:HD21	1:A:359:LEU:HD21	1.72	0.57
1:A:294:MET:CE	1:A:294:MET:HA	2.34	0.57
1:A:13:HIS:O	1:A:17:PHE:HB2	2.05	0.56
1:A:24:LEU:O	1:A:28:VAL:HG23	2.05	0.56
1:A:95:LEU:CD1	1:A:158:PHE:CE1	2.88	0.56
1:A:286:GLY:HA3	1:A:317:ASN:O	2.05	0.56
1:A:49:PRO:HA	1:A:243:CYS:H	1.69	0.56
1:A:329:HIS:ND1	1:A:333:ARG:CD	2.68	0.56
1:A:48:VAL:HG22	1:A:243:CYS:HB3	1.86	0.56
1:A:97:ALA:O	1:A:98:SER:CB	2.53	0.56
1:A:151:ILE:CG2	1:A:164:UNK:C	2.79	0.56
1:A:304:UNK:C	1:A:305:UNK:HG2	2.30	0.56
1:A:327:LEU:CD1	1:A:335:UNK:CG	2.82	0.56
1:A:329:HIS:ND1	1:A:333:ARG:NH1	2.52	0.56
1:A:347:UNK:CB	1:A:351:MET:SD	2.92	0.56
1:A:367:PHE:CD2	1:A:400:PHE:HA	2.40	0.56
1:A:52:VAL:HA	1:A:54:LYS:HZ1	1.70	0.56
1:A:135:PHE:N	1:A:185:ALA:O	2.35	0.56
1:A:249:PHE:CD2	1:A:250:ARG:HB3	2.30	0.56
1:A:327:LEU:HD13	1:A:332:LEU:HA	1.87	0.56
1:A:116:ASN:O	1:A:119:PHE:CB	2.54	0.56
1:A:208:ILE:HG22	1:A:216:ALA:HB2	1.88	0.56
1:A:312:ALA:CB	1:A:315:VAL:CB	2.17	0.56
1:A:367:PHE:O	1:A:370:VAL:HG12	2.06	0.56
1:A:111:ASN:HA	1:A:114:UNK:HG2	1.86	0.56
1:A:113:ALA:O	1:A:115:SER:N	2.38	0.56
1:A:331:ASP:C	1:A:332:LEU:HG	2.25	0.56
1:A:22:UNK:HG2	1:A:23:ILE:HD11	1.66	0.56
1:A:46:PRO:HG2	1:A:248:SER:HG	1.68	0.56
1:A:191:HIS:C	1:A:193:ILE:N	2.42	0.56
1:A:196:UNK:O	1:A:200:THR:HG23	2.06	0.56
1:A:6:ASP:C	1:A:8:SER:N	2.58	0.56
1:A:266:ASN:O	1:A:271:UNK:HA	2.05	0.56
1:A:32:THR:O	1:A:33:THR:O	2.24	0.55
1:A:79:ILE:CG1	1:A:81:LEU:HD13	2.36	0.55
1:A:52:VAL:HG13	1:A:54:LYS:HE3	1.88	0.55
1:A:212:SER:HA	1:A:283:LYS:CB	2.35	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:286:GLY:O	1:A:289:LEU:CB	2.45	0.55
1:A:347:UNK:HB2	1:A:351:MET:HB3	1.87	0.55
1:A:37:ASP:O	1:A:40:SER:OG	2.23	0.55
1:A:58:GLY:C	1:A:199:TYR:HE2	2.08	0.55
1:A:326:LYS:NZ	1:A:326:LYS:CB	2.53	0.55
1:A:208:ILE:HA	1:A:216:ALA:CA	2.37	0.55
1:A:81:LEU:CD1	1:A:81:LEU:N	2.70	0.55
1:A:367:PHE:N	1:A:367:PHE:HD1	2.04	0.55
1:A:9:LEU:HD21	1:A:296:TYR:CZ	2.41	0.55
1:A:219:TRP:CZ3	1:A:240:MET:N	2.75	0.55
1:A:412:TYR:CG	1:A:414:TRP:NE1	2.74	0.55
1:A:283:LYS:O	1:A:283:LYS:HG2	2.06	0.55
1:A:436:ALA:C	1:A:440:ILE:HG13	2.23	0.55
1:A:276:PHE:O	1:A:280:SER:CB	2.54	0.55
1:A:21:PRO:O	1:A:22:UNK:C	2.55	0.55
1:A:327:LEU:HD11	1:A:335:UNK:HG2	1.86	0.55
1:A:420:UNK:C	1:A:420:UNK:CD	2.85	0.55
1:A:249:PHE:CZ	1:A:256:LEU:HD13	2.42	0.54
1:A:253:PHE:CE2	1:A:275:THR:HB	2.42	0.54
1:A:290:ARG:HH21	1:A:311:UNK:C	2.20	0.54
1:A:317:ASN:CG	1:A:319:SER:H	2.10	0.54
1:A:105:PRO:O	1:A:110:GLY:N	2.41	0.54
1:A:175:PHE:HB2	1:A:176:PRO:HD3	1.78	0.54
1:A:50:GLY:HA2	1:A:143:LYS:HZ2	1.67	0.54
1:A:402:UNK:CG	1:A:406:THR:HG21	2.38	0.54
1:A:135:PHE:CG	1:A:135:PHE:O	2.60	0.54
1:A:327:LEU:HB3	1:A:356:ARG:HH12	1.71	0.54
1:A:367:PHE:CD2	1:A:400:PHE:CA	2.90	0.54
1:A:52:VAL:HA	1:A:54:LYS:NZ	2.22	0.54
1:A:290:ARG:HH21	1:A:311:UNK:CA	2.21	0.54
1:A:290:ARG:HH21	1:A:311:UNK:HA	1.71	0.54
1:A:64:PHE:CG	1:A:438:UNK:HG2	2.43	0.54
1:A:19:VAL:CG1	1:A:24:LEU:HD21	2.37	0.54
1:A:196:UNK:HB2	1:A:436:ALA:CA	2.37	0.54
1:A:211:GLY:O	1:A:281:UNK:HG2	2.07	0.54
1:A:351:MET:C	1:A:353:UNK:N	2.61	0.54
1:A:53:LEU:HD11	1:A:240:MET:CE	2.37	0.54
1:A:67:ILE:O	1:A:136:THR:HG23	2.08	0.54
1:A:312:ALA:HB3	1:A:315:VAL:CG2	2.26	0.53
1:A:58:GLY:N	1:A:199:TYR:CE2	2.76	0.53
1:A:137:PHE:CZ	1:A:167:ILE:HG21	2.42	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:251:LYS:CB	1:A:275:THR:HG21	2.36	0.53
1:A:261:TYR:HD2	1:A:261:TYR:H	1.56	0.53
1:A:20:PRO:CG	1:A:23:ILE:HG12	2.37	0.53
1:A:54:LYS:HG2	1:A:447:GLN:CG	2.34	0.53
1:A:329:HIS:CG	1:A:333:ARG:NH1	2.75	0.53
1:A:377:ILE:C	1:A:379:GLN:H	2.11	0.53
1:A:17:PHE:HB3	1:A:361:LEU:CB	2.38	0.53
1:A:156:UNK:HB1	1:A:158:PHE:CD2	2.36	0.53
1:A:302:UNK:HB2	1:A:351:MET:CG	2.38	0.53
1:A:333:ARG:O	1:A:337:ASP:OD2	2.26	0.53
1:A:449:UNK:CG	1:A:450:UNK:H2	1.96	0.53
1:A:3:ALA:O	1:A:6:ASP:N	2.35	0.53
1:A:46:PRO:HG2	1:A:245:UNK:O	2.08	0.53
1:A:113:ALA:C	1:A:115:SER:N	2.54	0.53
1:A:168:SER:C	1:A:170:MET:N	2.40	0.53
1:A:251:LYS:NZ	1:A:274:LYS:H	2.05	0.53
1:A:303:HIS:ND1	1:A:351:MET:HE3	2.23	0.53
1:A:196:UNK:CG	1:A:435:ALA:HB1	2.31	0.53
1:A:69:MET:HG2	1:A:70:GLY:N	2.19	0.53
1:A:130:SER:C	1:A:131:VAL:O	2.48	0.53
1:A:146:VAL:HB	1:A:184:VAL:O	2.09	0.53
1:A:210:PHE:N	1:A:391:UNK:O	2.42	0.53
1:A:296:TYR:HB3	1:A:301:GLN:HB2	1.91	0.53
1:A:133:LEU:H	1:A:184:VAL:HG13	1.74	0.53
1:A:143:LYS:HZ3	1:A:191:HIS:CE1	1.89	0.53
1:A:419:UNK:O	1:A:425:UNK:HG3	2.09	0.53
1:A:56:VAL:HG22	1:A:199:TYR:HA	1.89	0.52
1:A:77:ILE:HG13	1:A:90:UNK:HB1	1.91	0.52
1:A:431:ASP:CB	1:A:435:ALA:HB2	2.28	0.52
1:A:7:UNK:O	1:A:7:UNK:CD	2.57	0.52
1:A:22:UNK:CG	1:A:23:ILE:HD11	2.31	0.52
1:A:144:GLU:HG2	1:A:145:UNK:CG	2.38	0.52
1:A:192:GLY:HA3	1:A:436:ALA:HB3	1.84	0.52
1:A:221:ASP:O	1:A:222:SER:C	2.37	0.52
1:A:30:ILE:O	1:A:33:THR:HB	2.09	0.52
1:A:367:PHE:O	1:A:368:ARG:C	2.48	0.52
1:A:351:MET:O	1:A:353:UNK:N	2.43	0.52
1:A:46:PRO:HD3	1:A:248:SER:HB2	1.91	0.52
1:A:75:GLU:HA	1:A:91:ALA:O	2.02	0.52
1:A:326:LYS:O	1:A:328:PRO:N	2.43	0.52
1:A:327:LEU:HD12	1:A:335:UNK:CG	2.39	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:368:ARG:O	1:A:407:UNK:HG1	2.10	0.52
1:A:416:GLN:NE2	1:A:422:LYS:HA	2.25	0.52
1:A:293:LEU:HD23	1:A:339:PHE:HZ	1.75	0.52
1:A:66:ALA:HB2	1:A:434:GLY:O	2.09	0.52
1:A:105:PRO:HA	1:A:109:TRP:N	2.25	0.52
1:A:212:SER:O	1:A:281:UNK:HG1	2.10	0.52
1:A:266:ASN:O	1:A:267:UNK:C	2.56	0.52
1:A:289:LEU:HD11	1:A:359:LEU:CD2	2.39	0.52
1:A:303:HIS:HA	1:A:351:MET:CE	2.38	0.52
1:A:430:ILE:CG2	1:A:431:ASP:N	2.73	0.52
1:A:95:LEU:HD11	1:A:158:PHE:HE1	1.73	0.51
1:A:117:ALA:C	1:A:119:PHE:H	2.12	0.51
1:A:168:SER:OG	1:A:169:ALA:N	2.42	0.51
1:A:49:PRO:HA	1:A:243:CYS:N	2.25	0.51
1:A:51:TRP:CZ3	1:A:240:MET:CE	2.93	0.51
1:A:76:VAL:HB	1:A:119:PHE:CE1	2.45	0.51
1:A:103:ALA:HA	1:A:161:ALA:O	2.10	0.51
1:A:133:LEU:HD23	1:A:134:GLY:CA	2.40	0.51
1:A:154:GLN:HE22	1:A:164:UNK:HA	1.76	0.51
1:A:393:SER:C	1:A:395:ARG:N	2.63	0.51
1:A:30:ILE:HD12	1:A:255:SER:HB3	1.88	0.51
1:A:34:ARG:CZ	1:A:37:ASP:HB3	2.41	0.51
1:A:172:ASN:O	1:A:175:PHE:CA	2.59	0.51
1:A:390:ALA:HB2	1:A:426:ILE:CG2	2.40	0.51
1:A:130:SER:O	1:A:131:VAL:C	2.47	0.51
1:A:371:VAL:HG12	1:A:404:SER:CB	2.27	0.51
1:A:93:ARG:HD2	1:A:115:SER:OG	2.10	0.51
1:A:207:GLY:O	1:A:216:ALA:HA	2.10	0.51
1:A:264:THR:C	1:A:266:ASN:H	2.13	0.51
1:A:321:PRO:HA	1:A:324:ILE:HD12	1.93	0.51
1:A:132:PRO:HD2	1:A:132:PRO:O	2.11	0.51
1:A:261:TYR:HE1	1:A:291:ASP:C	2.14	0.51
1:A:283:LYS:O	1:A:283:LYS:CG	2.59	0.51
1:A:75:GLU:HG3	1:A:90:UNK:HB2	1.92	0.51
1:A:312:ALA:O	1:A:314:ASN:N	2.44	0.51
1:A:66:ALA:O	1:A:67:ILE:HG22	2.10	0.51
1:A:24:LEU:O	1:A:27:VAL:HB	2.10	0.51
1:A:227:ASP:O	1:A:230:ASP:OD2	2.29	0.51
1:A:58:GLY:CA	1:A:199:TYR:CD2	2.78	0.50
1:A:187:ILE:CD1	1:A:440:ILE:HD12	2.41	0.50
1:A:211:GLY:O	1:A:282:ALA:CB	2.51	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:289:LEU:O	1:A:293:LEU:HB2	2.11	0.50
1:A:23:ILE:N	1:A:23:ILE:HD12	2.24	0.50
1:A:261:TYR:CE1	1:A:292:VAL:CA	2.94	0.50
1:A:327:LEU:HD13	1:A:332:LEU:CA	2.39	0.50
1:A:332:LEU:HD12	1:A:352:LYS:HB2	1.92	0.50
1:A:403:ASN:O	1:A:407:UNK:CB	2.59	0.50
1:A:450:UNK:HG2	1:A:450:UNK:O	2.12	0.50
1:A:153:UNK:O	1:A:154:GLN:C	2.46	0.50
1:A:221:ASP:OD1	1:A:223:THR:CG2	2.59	0.50
1:A:60:GLN:O	1:A:81:LEU:HB3	2.12	0.50
1:A:312:ALA:HB3	1:A:315:VAL:HB	0.52	0.50
1:A:387:HIS:CD2	1:A:387:HIS:N	2.74	0.50
1:A:76:VAL:O	1:A:77:ILE:HG13	2.12	0.50
1:A:109:TRP:CZ3	1:A:112:UNK:CE	2.94	0.50
1:A:137:PHE:CZ	1:A:139:GLU:OE1	2.65	0.50
1:A:151:ILE:O	1:A:151:ILE:HG22	2.11	0.50
1:A:145:UNK:CD	1:A:146:VAL:N	2.75	0.50
1:A:215:ASN:OD1	1:A:245:UNK:CA	2.60	0.50
1:A:287:GLN:O	1:A:290:ARG:HB3	2.11	0.50
1:A:405:ALA:O	1:A:406:THR:C	2.48	0.50
1:A:79:ILE:CG1	1:A:81:LEU:CD1	2.89	0.50
1:A:105:PRO:HA	1:A:109:TRP:H	1.77	0.50
1:A:75:GLU:CG	1:A:76:VAL:N	2.75	0.50
1:A:151:ILE:CD1	1:A:153:UNK:H	2.25	0.50
1:A:12:VAL:HG23	1:A:12:VAL:O	2.12	0.49
1:A:69:MET:HB2	1:A:74:LEU:HD12	1.93	0.49
1:A:84:TYR:HA	1:A:199:TYR:CZ	2.47	0.49
1:A:137:PHE:CD2	1:A:139:GLU:HB3	2.45	0.49
1:A:310:PHE:C	1:A:315:VAL:HG11	2.29	0.49
1:A:367:PHE:CB	1:A:400:PHE:CE2	2.94	0.49
1:A:436:ALA:O	1:A:440:ILE:HB	2.11	0.49
1:A:153:UNK:HG3	1:A:154:GLN:O	2.11	0.49
1:A:326:LYS:HD2	1:A:398:SER:CA	2.35	0.49
1:A:326:LYS:O	1:A:327:LEU:C	2.50	0.49
1:A:6:ASP:O	1:A:8:SER:N	2.46	0.49
1:A:114:UNK:C	1:A:117:ALA:CB	2.82	0.49
1:A:261:TYR:HD1	1:A:291:ASP:CB	2.25	0.49
1:A:140:ALA:HB2	1:A:151:ILE:CD1	2.07	0.49
1:A:142:ALA:HB3	1:A:150:GLN:O	2.12	0.49
1:A:193:ILE:HA	1:A:197:VAL:HG11	1.88	0.49
1:A:10:VAL:O	1:A:11:GLU:C	2.49	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:64:PHE:CB	1:A:438:UNK:CG	2.63	0.49
1:A:116:ASN:O	1:A:119:PHE:HB2	2.13	0.49
1:A:191:HIS:CD2	1:A:241:UNK:CD	2.96	0.49
1:A:8:SER:O	1:A:12:VAL:HG12	2.13	0.49
1:A:58:GLY:O	1:A:84:TYR:HA	2.11	0.49
1:A:75:GLU:HG3	1:A:91:ALA:H	1.77	0.49
1:A:22:UNK:CG	1:A:23:ILE:N	2.76	0.49
1:A:69:MET:HE1	1:A:108:LEU:HD12	1.94	0.49
1:A:90:UNK:CG	1:A:91:ALA:N	2.56	0.49
1:A:150:GLN:HA	1:A:166:LEU:HA	1.94	0.49
1:A:197:VAL:HG11	1:A:429:ALA:HB1	1.94	0.49
1:A:371:VAL:O	1:A:373:UNK:N	2.46	0.49
1:A:59:SER:HA	1:A:83:GLY:HA2	1.95	0.49
1:A:70:GLY:CA	1:A:156:UNK:CD	2.91	0.49
1:A:390:ALA:HB2	1:A:426:ILE:HG23	1.95	0.49
1:A:142:ALA:CA	1:A:152:THR:OG1	2.61	0.48
1:A:187:ILE:HD13	1:A:440:ILE:HD12	1.95	0.48
1:A:258:GLN:O	1:A:259:ILE:O	2.32	0.48
1:A:367:PHE:CE2	1:A:397:TYR:CE2	3.01	0.48
1:A:397:TYR:CE2	1:A:398:SER:CA	2.96	0.48
1:A:75:GLU:CG	1:A:91:ALA:O	2.56	0.48
1:A:137:PHE:CZ	1:A:139:GLU:CB	2.95	0.48
1:A:206:MET:HB2	1:A:388:ILE:HG23	1.94	0.48
1:A:269:SER:CB	1:A:270:PRO:HD3	2.42	0.48
1:A:216:ALA:O	1:A:244:CYS:CB	2.56	0.48
1:A:67:ILE:CD1	1:A:135:PHE:HB2	2.40	0.48
1:A:18:ILE:HG21	1:A:18:ILE:HD12	1.56	0.48
1:A:261:TYR:CD1	1:A:292:VAL:HG13	2.49	0.48
1:A:268:UNK:CG	1:A:269:SER:N	2.76	0.48
1:A:375:UNK:HB1	1:A:408:ASN:ND2	2.27	0.48
1:A:378:CYS:O	1:A:383:TYR:N	2.31	0.48
1:A:388:ILE:HG13	1:A:426:ILE:HG12	1.95	0.48
1:A:403:ASN:O	1:A:407:UNK:HB1	2.13	0.48
1:A:197:VAL:HG21	1:A:389:ALA:HB2	1.96	0.48
1:A:418:ALA:O	1:A:422:LYS:N	2.47	0.48
1:A:328:PRO:HD2	1:A:334:UNK:CD	2.43	0.48
1:A:356:ARG:HA	1:A:359:LEU:CD1	2.43	0.48
1:A:397:TYR:O	1:A:398:SER:C	2.52	0.48
1:A:2:ALA:HB2	1:A:350:UNK:HA	1.96	0.48
1:A:108:LEU:HG	1:A:160:LEU:CD1	2.44	0.48
1:A:109:TRP:CH2	1:A:135:PHE:HE2	2.28	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:193:ILE:HD11	1:A:208:ILE:N	2.28	0.48
1:A:210:PHE:O	1:A:394:UNK:CB	2.54	0.48
1:A:246:GLN:HE22	1:A:373:UNK:HG3	1.71	0.48
1:A:261:TYR:CD1	1:A:291:ASP:HB3	2.49	0.48
1:A:404:SER:HB2	1:A:426:ILE:CD1	2.44	0.48
1:A:431:ASP:C	1:A:435:ALA:HB3	2.23	0.48
1:A:23:ILE:CG2	1:A:257:PRO:HG3	2.43	0.48
1:A:109:TRP:NE1	1:A:163:LEU:HD21	2.23	0.48
1:A:176:PRO:CA	1:A:179:ASP:HB3	2.42	0.48
1:A:377:ILE:O	1:A:380:LYS:N	2.47	0.48
1:A:146:VAL:HB	1:A:147:ILE:H	1.54	0.47
1:A:156:UNK:CD	1:A:158:PHE:CE2	2.97	0.47
1:A:193:ILE:O	1:A:197:VAL:HG11	2.07	0.47
1:A:330:PHE:CD1	1:A:331:ASP:N	2.82	0.47
1:A:182:UNK:HG3	1:A:184:VAL:CG1	2.44	0.47
1:A:296:TYR:CD1	1:A:301:GLN:HG3	2.49	0.47
1:A:348:LYS:C	1:A:350:UNK:N	2.67	0.47
1:A:77:ILE:HG22	1:A:89:ILE:N	2.29	0.47
1:A:208:ILE:HA	1:A:215:ASN:O	2.15	0.47
1:A:446:SER:O	1:A:447:GLN:C	2.53	0.47
1:A:88:SER:C	1:A:89:ILE:CG2	2.82	0.47
1:A:133:LEU:CD2	1:A:134:GLY:N	2.77	0.47
1:A:111:ASN:HA	1:A:114:UNK:CG	2.45	0.47
1:A:255:SER:O	1:A:255:SER:OG	2.30	0.47
1:A:294:MET:CE	1:A:308:UNK:HG1	2.44	0.47
1:A:77:ILE:CG1	1:A:90:UNK:HB1	2.45	0.47
1:A:108:LEU:HG	1:A:160:LEU:HB3	1.97	0.47
1:A:116:ASN:O	1:A:119:PHE:HB3	2.15	0.47
1:A:117:ALA:C	1:A:119:PHE:N	2.68	0.47
1:A:119:PHE:O	1:A:120:SER:C	2.53	0.47
1:A:167:ILE:N	1:A:170:MET:CE	2.75	0.47
1:A:181:UNK:CG	1:A:182:UNK:N	2.68	0.47
1:A:253:PHE:N	1:A:254:PRO:HD2	2.21	0.47
1:A:51:TRP:CZ3	1:A:240:MET:HE3	2.50	0.47
1:A:79:ILE:HG12	1:A:81:LEU:CD1	2.45	0.47
1:A:109:TRP:CE3	1:A:171:UNK:HG2	2.50	0.47
1:A:137:PHE:N	1:A:187:ILE:O	2.39	0.47
1:A:309:ASP:OD1	1:A:309:ASP:C	2.53	0.47
1:A:312:ALA:CB	1:A:315:VAL:CG2	2.90	0.47
1:A:367:PHE:HD2	1:A:400:PHE:HA	1.78	0.47
1:A:394:UNK:O	1:A:397:TYR:HB3	2.15	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:194:LEU:HD12	1:A:194:LEU:HA	1.79	0.47
1:A:245:UNK:C	1:A:247:ASP:H	2.28	0.47
1:A:249:PHE:CE1	1:A:250:ARG:CB	2.86	0.47
1:A:367:PHE:CG	1:A:400:PHE:CD2	2.83	0.47
1:A:45:ILE:O	1:A:45:ILE:CG2	2.49	0.47
1:A:209:ILE:HD11	1:A:391:UNK:CE	2.45	0.47
1:A:281:UNK:HG3	1:A:283:LYS:N	2.29	0.47
1:A:360:PHE:O	1:A:361:LEU:C	2.49	0.47
1:A:105:PRO:HA	1:A:109:TRP:HB2	1.60	0.46
1:A:209:ILE:HG12	1:A:391:UNK:HB1	1.97	0.46
1:A:331:ASP:O	1:A:352:LYS:HE3	2.15	0.46
1:A:137:PHE:CE2	1:A:167:ILE:HG21	2.48	0.46
1:A:146:VAL:HG13	1:A:148:LYS:HZ3	1.80	0.46
1:A:221:ASP:OD1	1:A:223:THR:CA	2.63	0.46
1:A:256:LEU:HD23	1:A:275:THR:OG1	2.15	0.46
1:A:324:ILE:HD13	1:A:359:LEU:HD11	1.97	0.46
1:A:329:HIS:CE1	1:A:333:ARG:NE	2.83	0.46
1:A:51:TRP:NE1	1:A:143:LYS:HB3	2.30	0.46
1:A:349:THR:O	1:A:353:UNK:HB2	2.16	0.46
1:A:390:ALA:CB	1:A:426:ILE:CG2	2.93	0.46
1:A:182:UNK:HG3	1:A:184:VAL:HG12	1.96	0.46
1:A:197:VAL:O	1:A:204:ILE:HG13	2.15	0.46
1:A:256:LEU:HD21	1:A:276:PHE:HD1	1.80	0.46
1:A:326:LYS:HG2	1:A:398:SER:OG	2.15	0.46
1:A:327:LEU:HB3	1:A:356:ARG:NH1	2.30	0.46
1:A:51:TRP:CD1	1:A:145:UNK:O	2.68	0.46
1:A:269:SER:C	1:A:271:UNK:N	2.67	0.46
1:A:397:TYR:HD2	1:A:398:SER:O	1.85	0.46
1:A:450:UNK:O	1:A:451:ALA:C	2.54	0.46
1:A:218:TYR:H	1:A:218:TYR:HD1	1.64	0.46
1:A:367:PHE:CE2	1:A:400:PHE:CA	2.99	0.46
1:A:377:ILE:C	1:A:379:GLN:N	2.67	0.46
1:A:98:SER:O	1:A:100:UNK:N	2.48	0.46
1:A:150:GLN:O	1:A:150:GLN:HG2	2.15	0.46
1:A:265:LEU:CD2	1:A:265:LEU:N	2.71	0.46
1:A:325:GLN:O	1:A:356:ARG:NH2	2.49	0.46
1:A:23:ILE:O	1:A:27:VAL:HG23	2.16	0.46
1:A:101:THR:O	1:A:102:THR:HB	2.16	0.46
1:A:156:UNK:CB	1:A:158:PHE:HD2	2.24	0.46
1:A:233:UNK:HG1	1:A:452:UNK:O	2.14	0.46
1:A:261:TYR:HD1	1:A:291:ASP:HB3	1.80	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:324:ILE:HD13	1:A:359:LEU:CD2	2.45	0.46
1:A:327:LEU:HD12	1:A:335:UNK:HG1	1.97	0.46
1:A:111:ASN:C	1:A:113:ALA:N	2.65	0.46
1:A:150:GLN:HB2	1:A:166:LEU:CD2	2.17	0.46
1:A:182:UNK:CG	1:A:184:VAL:HG12	2.46	0.46
1:A:367:PHE:CZ	1:A:397:TYR:CD1	3.00	0.46
1:A:416:GLN:NE2	1:A:423:PRO:HD2	1.88	0.46
1:A:456:UNK:O	1:A:457:UNK:C	2.63	0.46
1:A:64:PHE:CE1	1:A:442:SER:HA	2.51	0.46
1:A:292:VAL:HG21	1:A:358:UNK:HG1	1.96	0.46
1:A:371:VAL:C	1:A:373:UNK:N	2.69	0.46
1:A:397:TYR:CE2	1:A:398:SER:CB	2.99	0.46
1:A:193:ILE:CA	1:A:197:VAL:HG11	2.44	0.45
1:A:358:UNK:C	1:A:360:PHE:N	2.79	0.45
1:A:34:ARG:NH2	1:A:37:ASP:HB3	2.30	0.45
1:A:249:PHE:CE2	1:A:250:ARG:CD	3.00	0.45
1:A:51:TRP:HD1	1:A:143:LYS:HG2	1.79	0.45
1:A:62:GLY:O	1:A:79:ILE:O	2.34	0.45
1:A:109:TRP:CH2	1:A:135:PHE:CE2	3.04	0.45
1:A:109:TRP:HH2	1:A:135:PHE:CE2	2.30	0.45
1:A:148:LYS:HE2	1:A:186:ASP:CG	2.35	0.45
1:A:166:LEU:CD1	1:A:169:ALA:HB2	1.90	0.45
1:A:11:GLU:O	1:A:14:UNK:HB2	2.16	0.45
1:A:52:VAL:O	1:A:219:TRP:HH2	1.97	0.45
1:A:57:UNK:N	1:A:60:GLN:NE2	2.65	0.45
1:A:189:ASP:CB	1:A:433:GLU:HG3	2.39	0.45
1:A:234:UNK:O	1:A:236:GLY:HA2	2.16	0.45
1:A:447:GLN:O	1:A:452:UNK:HB2	2.16	0.45
1:A:151:ILE:CD1	1:A:153:UNK:N	2.79	0.45
1:A:163:LEU:O	1:A:164:UNK:HB2	2.09	0.45
1:A:197:VAL:CG2	1:A:197:VAL:O	2.62	0.45
1:A:368:ARG:HG2	1:A:407:UNK:HB2	1.98	0.45
1:A:381:LYS:HD3	1:A:383:TYR:CZ	2.51	0.45
1:A:140:ALA:HB1	1:A:151:ILE:CD1	2.18	0.45
1:A:18:ILE:HG12	1:A:361:LEU:HG	1.98	0.45
1:A:66:ALA:CB	1:A:434:GLY:O	2.64	0.45
1:A:81:LEU:O	1:A:82:ALA:CB	2.63	0.45
1:A:81:LEU:HA	1:A:85:GLN:O	2.17	0.45
1:A:218:TYR:CD1	1:A:377:ILE:HD13	2.52	0.45
1:A:264:THR:HB	1:A:265:LEU:HD23	1.98	0.45
1:A:31:ALA:O	1:A:35:UNK:HB2	2.17	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:51:TRP:CE3	1:A:240:MET:HE1	2.52	0.45
1:A:151:ILE:HG13	1:A:154:GLN:HE22	1.81	0.45
1:A:285:UNK:O	1:A:286:GLY:C	2.56	0.45
1:A:365:TYR:CD1	1:A:365:TYR:C	2.91	0.45
1:A:38:UNK:HG2	1:A:42:ALA:O	2.17	0.45
1:A:193:ILE:HD11	1:A:208:ILE:H	1.82	0.45
1:A:355:VAL:HG12	1:A:359:LEU:HD21	1.98	0.45
1:A:374:ILE:HD13	1:A:374:ILE:HG21	1.50	0.45
1:A:35:UNK:CD	1:A:377:ILE:CG1	2.92	0.44
1:A:38:UNK:HG2	1:A:43:ALA:HB3	1.99	0.44
1:A:51:TRP:CE3	1:A:240:MET:CE	3.01	0.44
1:A:105:PRO:C	1:A:109:TRP:CB	2.18	0.44
1:A:136:THR:HA	1:A:187:ILE:O	2.17	0.44
1:A:151:ILE:HB	1:A:165:LYS:O	2.17	0.44
1:A:70:GLY:HA2	1:A:156:UNK:CD	2.48	0.44
1:A:293:LEU:HD21	1:A:355:VAL:HG13	1.99	0.44
1:A:414:TRP:CD1	1:A:414:TRP:N	2.86	0.44
1:A:60:GLN:O	1:A:81:LEU:CB	2.65	0.44
1:A:319:SER:O	1:A:323:LYS:HD3	2.17	0.44
1:A:322:ALA:O	1:A:398:SER:OG	2.35	0.44
1:A:327:LEU:HG	1:A:335:UNK:HG2	1.99	0.44
1:A:79:ILE:CD1	1:A:86:GLU:HB3	2.48	0.44
1:A:144:GLU:OE2	1:A:148:LYS:HG2	2.18	0.44
1:A:159:SER:O	1:A:160:LEU:C	2.56	0.44
1:A:261:TYR:CE1	1:A:291:ASP:C	2.91	0.44
1:A:276:PHE:O	1:A:280:SER:OG	2.34	0.44
1:A:308:UNK:CE	1:A:345:ILE:HD11	2.47	0.44
1:A:347:UNK:HB2	1:A:351:MET:SD	2.57	0.44
1:A:151:ILE:HG21	1:A:164:UNK:CA	2.47	0.44
1:A:205:LYS:HB2	1:A:387:HIS:O	2.18	0.44
1:A:416:GLN:NE2	1:A:423:PRO:CG	2.72	0.44
1:A:446:SER:O	1:A:448:UNK:N	2.50	0.44
1:A:249:PHE:HB3	1:A:276:PHE:HB2	2.00	0.44
1:A:275:THR:OG1	1:A:276:PHE:N	2.49	0.44
1:A:348:LYS:O	1:A:351:MET:CA	2.65	0.44
1:A:132:PRO:O	1:A:132:PRO:CD	2.65	0.44
1:A:219:TRP:HZ3	1:A:240:MET:HA	1.83	0.44
1:A:414:TRP:CE3	1:A:422:LYS:HG3	2.53	0.44
1:A:38:UNK:O	1:A:47:MET:HG3	2.18	0.43
1:A:331:ASP:HB2	1:A:333:ARG:NE	2.33	0.43
1:A:151:ILE:CD1	1:A:152:THR:N	2.80	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:153:UNK:C	1:A:154:GLN:O	2.66	0.43
1:A:394:UNK:O	1:A:394:UNK:HG3	2.18	0.43
1:A:4:SER:HA	1:A:7:UNK:HB1	2.00	0.43
1:A:19:VAL:HA	1:A:20:PRO:HD3	1.83	0.43
1:A:108:LEU:HD11	1:A:160:LEU:CD2	2.49	0.43
1:A:144:GLU:C	1:A:145:UNK:HG3	2.38	0.43
1:A:172:ASN:CA	1:A:175:PHE:CD1	2.58	0.43
1:A:175:PHE:CD2	1:A:181:UNK:CG	3.01	0.43
1:A:193:ILE:HG21	1:A:193:ILE:HD13	1.48	0.43
1:A:197:VAL:HG23	1:A:204:ILE:CG1	2.40	0.43
1:A:282:ALA:HB1	1:A:394:UNK:CD	2.41	0.43
1:A:70:GLY:HA3	1:A:156:UNK:CD	2.48	0.43
1:A:54:LYS:O	1:A:219:TRP:CH2	2.71	0.43
1:A:63:SER:C	1:A:64:PHE:CD2	2.92	0.43
1:A:146:VAL:HA	1:A:148:LYS:NZ	2.32	0.43
1:A:21:PRO:HD3	1:A:368:ARG:HH21	1.84	0.43
1:A:51:TRP:HZ3	1:A:240:MET:CE	2.32	0.43
1:A:337:ASP:O	1:A:338:LEU:C	2.56	0.43
1:A:146:VAL:HG13	1:A:148:LYS:NZ	2.34	0.43
1:A:204:ILE:HD12	1:A:204:ILE:HG21	1.72	0.43
1:A:209:ILE:N	1:A:215:ASN:O	2.48	0.43
1:A:374:ILE:HG23	1:A:388:ILE:HG21	2.00	0.43
1:A:46:PRO:HD3	1:A:248:SER:CB	2.45	0.43
1:A:75:GLU:HG2	1:A:76:VAL:H	1.83	0.43
1:A:93:ARG:NE	1:A:115:SER:HA	2.34	0.43
1:A:134:GLY:HA3	1:A:441:UNK:HG1	2.01	0.43
1:A:191:HIS:O	1:A:194:LEU:N	2.43	0.43
1:A:316:GLU:CB	1:A:320:TYR:CE1	3.00	0.43
1:A:358:UNK:C	1:A:360:PHE:H	2.31	0.43
1:A:211:GLY:CA	1:A:282:ALA:HB3	2.49	0.43
1:A:249:PHE:CE2	1:A:250:ARG:HD3	2.54	0.43
1:A:271:UNK:HG2	1:A:272:ALA:H	1.80	0.43
1:A:367:PHE:CA	1:A:400:PHE:CZ	3.02	0.43
1:A:38:UNK:CA	1:A:43:ALA:HB2	2.49	0.42
1:A:172:ASN:O	1:A:176:PRO:CD	2.59	0.42
1:A:195:UNK:O	1:A:196:UNK:C	2.63	0.42
1:A:79:ILE:CG2	1:A:438:UNK:CG	2.79	0.42
1:A:246:GLN:CD	1:A:373:UNK:HG1	2.32	0.42
1:A:253:PHE:HE2	1:A:275:THR:HB	1.85	0.42
1:A:73:ASP:H	1:A:95:LEU:HG	1.84	0.42
1:A:207:GLY:O	1:A:216:ALA:CA	2.67	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:306:UNK:CE	1:A:345:ILE:HG23	2.49	0.42
1:A:371:VAL:HG11	1:A:404:SER:O	2.20	0.42
1:A:65:LEU:HD23	1:A:131:VAL:HG21	2.00	0.42
1:A:151:ILE:O	1:A:151:ILE:CG2	2.62	0.42
1:A:151:ILE:CG2	1:A:164:UNK:O	2.63	0.42
1:A:160:LEU:C	1:A:161:ALA:O	2.57	0.42
1:A:431:ASP:C	1:A:431:ASP:OD2	2.58	0.42
1:A:58:GLY:N	1:A:199:TYR:HE2	2.17	0.42
1:A:150:GLN:N	1:A:166:LEU:CD2	2.82	0.42
1:A:251:LYS:HA	1:A:275:THR:HG21	1.97	0.42
1:A:348:LYS:O	1:A:351:MET:CB	2.67	0.42
1:A:50:GLY:CA	1:A:143:LYS:HZ2	2.33	0.42
1:A:79:ILE:HG12	1:A:81:LEU:HD11	2.00	0.42
1:A:146:VAL:O	1:A:148:LYS:C	2.57	0.42
1:A:305:UNK:O	1:A:306:UNK:O	2.37	0.42
1:A:317:ASN:H	1:A:320:TYR:HE1	1.66	0.42
1:A:325:GLN:HE22	1:A:363:ALA:CB	2.33	0.42
1:A:327:LEU:HD23	1:A:327:LEU:HA	1.65	0.42
1:A:135:PHE:CZ	1:A:171:UNK:HB1	2.53	0.42
1:A:402:UNK:CG	1:A:406:THR:CG2	2.85	0.42
1:A:37:ASP:O	1:A:42:ALA:O	2.38	0.42
1:A:79:ILE:HD11	1:A:86:GLU:HA	2.02	0.42
1:A:225:ILE:HD13	1:A:242:VAL:HG23	2.02	0.42
1:A:246:GLN:O	1:A:249:PHE:HB3	2.20	0.42
1:A:251:LYS:N	1:A:275:THR:HG21	2.35	0.42
1:A:325:GLN:HE22	1:A:363:ALA:HB2	1.85	0.42
1:A:398:SER:O	1:A:399:GLY:C	2.58	0.42
1:A:119:PHE:HB3	1:A:120:SER:H	0.98	0.42
1:A:133:LEU:HD23	1:A:134:GLY:C	2.39	0.41
1:A:193:ILE:CD1	1:A:389:ALA:O	2.68	0.41
1:A:371:VAL:HA	1:A:374:ILE:HD12	2.02	0.41
1:A:260:UNK:HG3	1:A:261:TYR:CD2	2.55	0.41
1:A:2:ALA:HB2	1:A:350:UNK:CA	2.50	0.41
1:A:51:TRP:CD1	1:A:143:LYS:HG2	2.55	0.41
1:A:101:THR:HA	1:A:159:SER:OG	2.21	0.41
1:A:299:UNK:HB1	1:A:301:GLN:NE2	2.32	0.41
1:A:332:LEU:HB2	1:A:352:LYS:HD2	2.01	0.41
1:A:41:ALA:O	1:A:42:ALA:HB2	2.20	0.41
1:A:53:LEU:HD11	1:A:240:MET:HE1	2.02	0.41
1:A:175:PHE:CB	1:A:176:PRO:HD2	2.35	0.41
1:A:211:GLY:O	1:A:281:UNK:HG3	2.20	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:426:ILE:HG21	1:A:426:ILE:HD13	1.57	0.41
1:A:432:GLY:O	1:A:436:ALA:HB3	2.20	0.41
1:A:441:UNK:C	1:A:443:ILE:N	2.81	0.41
1:A:84:TYR:CD1	1:A:199:TYR:O	2.69	0.41
1:A:140:ALA:HB2	1:A:153:UNK:CA	2.50	0.41
1:A:296:TYR:HA	1:A:301:GLN:HG3	2.01	0.41
1:A:349:THR:HA	1:A:352:LYS:HE2	2.02	0.41
1:A:117:ALA:O	1:A:119:PHE:N	2.54	0.41
1:A:317:ASN:N	1:A:320:TYR:CD1	2.89	0.41
1:A:324:ILE:CD1	1:A:359:LEU:HD13	2.48	0.41
1:A:95:LEU:HD23	1:A:99:MET:HE1	1.71	0.41
1:A:133:LEU:CB	1:A:182:UNK:O	2.66	0.41
1:A:174:UNK:HA	1:A:177:ALA:HB3	2.03	0.41
1:A:209:ILE:HG21	1:A:209:ILE:HD12	1.51	0.41
1:A:256:LEU:HD12	1:A:256:LEU:HA	1.92	0.41
1:A:294:MET:HE2	1:A:308:UNK:HG1	2.01	0.41
1:A:327:LEU:CD2	1:A:334:UNK:HB2	2.51	0.41
1:A:51:TRP:CD1	1:A:143:LYS:CG	3.03	0.41
1:A:58:GLY:N	1:A:60:GLN:HE21	2.16	0.41
1:A:64:PHE:CG	1:A:438:UNK:CG	3.03	0.41
1:A:114:UNK:O	1:A:117:ALA:CA	2.63	0.41
1:A:160:LEU:O	1:A:161:ALA:O	2.38	0.41
1:A:192:GLY:C	1:A:436:ALA:HB2	2.36	0.41
1:A:229:ALA:N	1:A:230:ASP:OD2	2.54	0.41
1:A:238:GLY:O	1:A:239:UNK:O	2.38	0.41
1:A:296:TYR:CA	1:A:301:GLN:HG3	2.51	0.41
1:A:327:LEU:CG	1:A:335:UNK:HG2	2.51	0.41
1:A:356:ARG:NE	1:A:360:PHE:CE1	2.84	0.41
1:A:151:ILE:HD12	1:A:153:UNK:N	2.36	0.41
1:A:153:UNK:O	1:A:154:GLN:O	2.39	0.41
1:A:209:ILE:HG23	1:A:391:UNK:O	2.22	0.41
1:A:303:HIS:CD2	1:A:345:ILE:HG21	2.56	0.41
1:A:303:HIS:O	1:A:304:UNK:C	2.69	0.41
1:A:320:TYR:HB3	1:A:321:PRO:CD	2.46	0.41
1:A:326:LYS:HG2	1:A:398:SER:HG	1.84	0.41
1:A:397:TYR:CD2	1:A:398:SER:C	2.87	0.41
1:A:82:ALA:O	1:A:85:GLN:OE1	2.29	0.40
1:A:150:GLN:N	1:A:166:LEU:HD22	2.34	0.40
1:A:206:MET:CE	1:A:216:ALA:CB	2.99	0.40
1:A:8:SER:O	1:A:12:VAL:HG13	2.21	0.40
1:A:249:PHE:CZ	1:A:250:ARG:HD2	2.55	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:250:ARG:CZ	1:A:253:PHE:HD2	2.17	0.40
1:A:72:GLY:HA2	1:A:95:LEU:HB2	2.03	0.40
1:A:104:ILE:HA	1:A:105:PRO:HD2	1.44	0.40
1:A:148:LYS:N	1:A:148:LYS:CD	2.82	0.40
1:A:197:VAL:HB	1:A:430:ILE:H	1.86	0.40
1:A:277:GLU:HB3	1:A:281:UNK:HB2	2.02	0.40
1:A:377:ILE:CG2	1:A:378:CYS:N	2.83	0.40
1:A:42:ALA:O	1:A:43:ALA:HB3	2.05	0.40
1:A:46:PRO:O	1:A:47:MET:HB2	2.21	0.40
1:A:51:TRP:CD1	1:A:143:LYS:HD2	2.57	0.40
1:A:75:GLU:HG2	1:A:90:UNK:CB	2.46	0.40
1:A:90:UNK:HB2	1:A:91:ALA:H	1.13	0.40
1:A:219:TRP:CE3	1:A:240:MET:CA	3.03	0.40
1:A:259:ILE:HG23	1:A:259:ILE:HD13	1.80	0.40
1:A:367:PHE:O	1:A:370:VAL:CG1	2.68	0.40
1:A:440:ILE:O	1:A:440:ILE:HG23	2.19	0.40
1:A:60:GLN:HE21	1:A:60:GLN:H	1.68	0.40
1:A:329:HIS:CG	1:A:333:ARG:CD	3.04	0.40
1:A:405:ALA:O	1:A:407:UNK:N	2.55	0.40

All (1) 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:106:SER:OG	1:A:223:THR:OG1[3_555]	1.98	0.22

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	372/457 (81%)	214 (58%)	78 (21%)	80 (22%)	0 1

All (80) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	4	SER
1	A	39	ASP
1	A	42	ALA
1	A	43	ALA
1	A	46	PRO
1	A	73	ASP
1	A	91	ALA
1	A	92	SER
1	A	95	LEU
1	A	96	ALA
1	A	99	MET
1	A	104	ILE
1	A	120	SER
1	A	121	SER
1	A	126	SER
1	A	130	SER
1	A	131	VAL
1	A	139	GLU
1	A	146	VAL
1	A	147	ILE
1	A	155	ALA
1	A	161	ALA
1	A	166	LEU
1	A	167	ILE
1	A	169	ALA
1	A	222	SER
1	A	235	GLY
1	A	237	ALA
1	A	253	PHE
1	A	259	ILE
1	A	265	LEU
1	A	272	ALA
1	A	313	ALA
1	A	378	CYS
1	A	396	ASP
1	A	398	SER
1	A	431	ASP
1	A	446	SER
1	A	33	THR
1	A	56	VAL
1	A	71	GLY
1	A	82	ALA

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	98	SER
1	A	103	ALA
1	A	117	ALA
1	A	125	SER
1	A	148	LYS
1	A	160	LEU
1	A	192	GLY
1	A	255	SER
1	A	258	GLN
1	A	330	PHE
1	A	344	GLY
1	A	377	ILE
1	A	399	GLY
1	A	405	ALA
1	A	417	SER
1	A	447	GLN
1	A	451	ALA
1	A	21	PRO
1	A	231	ALA
1	A	244	CYS
1	A	320	TYR
1	A	329	HIS
1	A	338	LEU
1	A	118	ALA
1	A	119	PHE
1	A	132	PRO
1	A	154	GLN
1	A	173	ALA
1	A	342	ASP
1	A	352	LYS
1	A	172	ASN
1	A	269	SER
1	A	327	LEU
1	A	328	PRO
1	A	175	PHE
1	A	382	GLY
1	A	20	PRO
1	A	286	GLY

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	284/284 (100%)	158 (56%)	126 (44%)	0 0

All (126) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	6	ASP
1	A	8	SER
1	A	9	LEU
1	A	12	VAL
1	A	18	ILE
1	A	21	PRO
1	A	23	ILE
1	A	30	ILE
1	A	34	ARG
1	A	39	ASP
1	A	45	ILE
1	A	53	LEU
1	A	54	LYS
1	A	55	GLN
1	A	56	VAL
1	A	60	GLN
1	A	63	SER
1	A	65	LEU
1	A	69	MET
1	A	73	ASP
1	A	74	LEU
1	A	77	ILE
1	A	79	ILE
1	A	81	LEU
1	A	84	TYR
1	A	86	GLU
1	A	87	SER
1	A	89	ILE
1	A	92	SER
1	A	95	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	99	MET
1	A	104	ILE
1	A	106	SER
1	A	108	LEU
1	A	111	ASN
1	A	116	ASN
1	A	130	SER
1	A	136	THR
1	A	139	GLU
1	A	143	LYS
1	A	144	GLU
1	A	148	LYS
1	A	150	GLN
1	A	151	ILE
1	A	154	GLN
1	A	160	LEU
1	A	163	LEU
1	A	166	LEU
1	A	168	SER
1	A	172	ASN
1	A	186	ASP
1	A	187	ILE
1	A	190	SER
1	A	191	HIS
1	A	197	VAL
1	A	205	LYS
1	A	206	MET
1	A	208	ILE
1	A	209	ILE
1	A	220	CYS
1	A	221	ASP
1	A	223	THR
1	A	227	ASP
1	A	230	ASP
1	A	240	MET
1	A	243	CYS
1	A	244	CYS
1	A	248	SER
1	A	249	PHE
1	A	251	LYS
1	A	258	GLN
1	A	259	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	261	TYR
1	A	265	LEU
1	A	275	THR
1	A	283	LYS
1	A	288	SER
1	A	289	LEU
1	A	290	ARG
1	A	292	VAL
1	A	294	MET
1	A	303	HIS
1	A	309	ASP
1	A	314	ASN
1	A	316	GLU
1	A	317	ASN
1	A	323	LYS
1	A	324	ILE
1	A	326	LYS
1	A	327	LEU
1	A	329	HIS
1	A	330	PHE
1	A	331	ASP
1	A	332	LEU
1	A	339	PHE
1	A	343	GLN
1	A	348	LYS
1	A	349	THR
1	A	351	MET
1	A	357	ARG
1	A	361	LEU
1	A	365	TYR
1	A	367	PHE
1	A	368	ARG
1	A	369	LEU
1	A	370	VAL
1	A	371	VAL
1	A	381	LYS
1	A	384	SER
1	A	385	SER
1	A	388	ILE
1	A	393	SER
1	A	396	ASP
1	A	397	TYR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	398	SER
1	A	404	SER
1	A	408	ASN
1	A	416	GLN
1	A	417	SER
1	A	422	LYS
1	A	424	ILE
1	A	427	THR
1	A	440	ILE
1	A	442	SER
1	A	443	ILE
1	A	446	SER

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (16) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	55	GLN
1	A	60	GLN
1	A	150	GLN
1	A	154	GLN
1	A	172	ASN
1	A	191	HIS
1	A	198	ASN
1	A	246	GLN
1	A	279	ASN
1	A	301	GLN
1	A	314	ASN
1	A	317	ASN
1	A	325	GLN
1	A	379	GLN
1	A	387	HIS
1	A	408	ASN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	A	2

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	101:THR	C	102:THR	N	1.20
1	A	38:UNK	C	39:ASP	N	1.15

6 Fit of model and data [i](#)

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

EDS was not executed - this section is therefore empty.

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

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.3 Carbohydrates [i](#)

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.4 Ligands [i](#)

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.5 Other polymers [i](#)

EDS was not executed - this section is therefore empty.