



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

May 16, 2020 – 08:42 pm BST

PDB ID : 5L5M  
Title : Plexin A4 full extracellular region, domains 1 to 7 modeled, data to 8 angstrom, spacegroup P4(3)2(1)2  
Authors : Janssen, B.J.C.; Kong, Y.; Malinauskas, T.; Vangoor, V.R.; Coles, C.H.; Kaufmann, R.; Ni, T.; Gilbert, R.J.C.; Padilla-Parra, S.; Pasterkamp, R.J.; Jones, E.Y.  
Deposited on : 2016-05-28  
Resolution : 8.00 Å(reported)

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

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

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

MolProbity : 4.02b-467  
Xtriage (Phenix) : 1.13  
EDS : 2.11  
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)  
Refmac : 5.8.0158  
CCP4 : 7.0.044 (Gargrove)  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.11

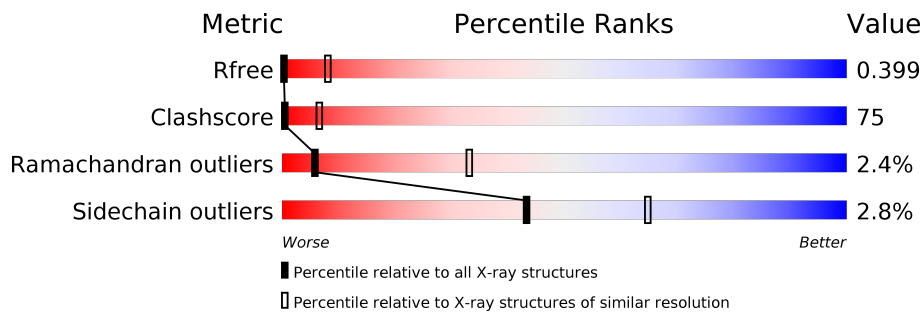
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*X-RAY DIFFRACTION*

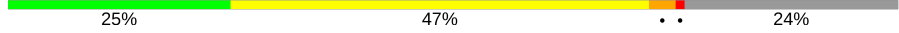
The reported resolution of this entry is 8.00 Å.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	1207	

## 2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 7189 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

In the tables below, the ZeroOcc column contains the number of atoms modelled with zero occupancy, the AltConf column contains the number of residues with at least one atom in alternate conformation and the Trace column contains the number of residues modelled with at most 2 atoms.

- Molecule 1 is a protein called Plexin-A4.

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

There are 13 discrepancies between the modelled and reference sequences:

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





## 4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 43 21 2	Depositor
Cell constants a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	271.48Å 271.48Å 251.25Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	72.13 – 8.00 72.13 – 8.00	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.4 (72.13-8.00) 99.3 (72.13-8.00)	Depositor EDS
$R_{merge}$	0.13	Depositor
$R_{sym}$	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ <sup>1</sup>	1.60 (at 8.39Å)	Xtrriage
Refinement program	PHENIX 1.8.2_1309	Depositor
R, $R_{free}$	0.373 , 0.395 0.383 , 0.399	Depositor DCC
$R_{free}$ test set	495 reflections (4.80%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å <sup>2</sup> )	530.0	Xtrriage
Anisotropy	0.475	Xtrriage
Bulk solvent $k_{sol}$ (e/Å <sup>3</sup> ), $B_{sol}$ (Å <sup>2</sup> )	0.41 , 489.0	EDS
L-test for twinning <sup>2</sup>	$\langle  L  \rangle = 0.39$ , $\langle L^2 \rangle = 0.21$	Xtrriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtrriage
$F_o, F_c$ correlation	0.70	EDS
Total number of atoms	7189	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	250.0	wwPDB-VP

Xtrriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 6.43% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

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

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

## 5 Model quality i

### 5.1 Standard geometry i

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z  >5	RMSZ	# Z  >5
1	A	0.97	4/7346 (0.1%)	1.46	29/9949 (0.3%)

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	7

All (4) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	557	CYS	C-N	17.01	1.73	1.34
1	A	700	CYS	C-N	-13.28	1.09	1.34
1	A	49	GLY	CA-C	6.34	1.61	1.51
1	A	49	GLY	C-N	5.06	1.45	1.34

All (29) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	747	GLN	CG-CD-OE1	-38.83	43.94	121.60
1	A	506	VAL	O-C-N	-35.49	65.92	122.70
1	A	557	CYS	CA-C-N	-34.27	41.81	117.20
1	A	557	CYS	C-N-CA	-32.12	41.40	121.70
1	A	854	CYS	O-C-N	-27.52	78.66	122.70
1	A	700	CYS	C-N-CD	-24.09	67.61	120.60
1	A	854	CYS	C-N-CA	-20.05	71.57	121.70
1	A	700	CYS	O-C-N	-19.07	84.87	121.10
1	A	854	CYS	CA-C-N	-15.52	83.05	117.20
1	A	802	LYS	O-C-N	-15.25	98.31	122.70
1	A	557	CYS	O-C-N	-11.90	103.67	122.70
1	A	747	GLN	CG-CD-NE2	-9.55	93.78	116.70

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	506	VAL	CA-C-N	8.21	135.25	117.20
1	A	479	PRO	N-CA-C	8.15	133.30	112.10
1	A	802	LYS	CA-C-N	8.05	134.90	117.20
1	A	843	ARG	C-N-CA	7.74	141.05	121.70
1	A	478	GLY	CA-C-O	-6.91	108.17	120.60
1	A	747	GLN	OE1-CD-NE2	6.88	137.72	121.90
1	A	473	GLN	C-N-CA	-6.69	104.98	121.70
1	A	892	HIS	CA-CB-CG	6.59	124.80	113.60
1	A	506	VAL	C-N-CA	6.54	138.04	121.70
1	A	802	LYS	C-N-CA	5.82	136.25	121.70
1	A	225	MET	CG-SD-CE	-5.68	91.11	100.20
1	A	409	ASN	C-N-CA	5.67	135.88	121.70
1	A	49	GLY	C-N-CA	5.59	135.68	121.70
1	A	274	VAL	CG1-CB-CG2	5.46	119.64	110.90
1	A	919	GLU	C-N-CA	5.22	134.75	121.70
1	A	676	TYR	CA-CB-CG	-5.11	103.69	113.40
1	A	803	CYS	C-N-CA	5.09	132.99	122.30

There are no chirality outliers.

All (7) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	506	VAL	Mainchain
1	A	700	CYS	Mainchain
1	A	802	LYS	Mainchain,Peptide
1	A	854	CYS	Mainchain
1	A	863	ILE	Peptide
1	A	95	TYR	Peptide

## 5.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	7189	0	7045	1066	16
All	All	7189	0	7045	1066	16

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 75.

All (1066) 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:439:TYR:CD1	1:A:537:ARG:NH1	1.70	1.55
1:A:439:TYR:CE1	1:A:537:ARG:NH1	1.71	1.54
1:A:548:ARG:CG	1:A:584:PRO:HA	1.31	1.52
1:A:556:GLN:HA	1:A:582:ASN:CB	1.40	1.51
1:A:548:ARG:HG3	1:A:584:PRO:CA	1.45	1.40
1:A:555:LYS:NZ	1:A:582:ASN:HD21	0.93	1.40
1:A:555:LYS:HZ2	1:A:582:ASN:ND2	1.26	1.32
1:A:556:GLN:HA	1:A:582:ASN:CG	1.51	1.32
1:A:555:LYS:NZ	1:A:582:ASN:ND2	1.77	1.29
1:A:531:LEU:HD13	1:A:640:GLU:CD	1.53	1.26
1:A:556:GLN:CA	1:A:582:ASN:HB3	1.65	1.25
1:A:556:GLN:CA	1:A:582:ASN:CB	2.18	1.19
1:A:531:LEU:HD13	1:A:640:GLU:OE2	1.40	1.17
1:A:359:LEU:HD12	1:A:362:ILE:HD11	1.24	1.16
1:A:439:TYR:CE1	1:A:537:ARG:CZ	2.08	1.15
1:A:118:LEU:HD12	1:A:172:ILE:HD12	1.17	1.13
1:A:295:VAL:HG12	1:A:414:VAL:HG11	1.27	1.12
1:A:653:TYR:C	1:A:654:ASN:N	2.02	1.12
1:A:556:GLN:HA	1:A:582:ASN:HB3	1.20	1.11
1:A:556:GLN:HG2	1:A:582:ASN:ND2	1.63	1.10
1:A:474:VAL:HG12	1:A:475:VAL:HG23	1.33	1.10
1:A:435:ILE:HG22	1:A:446:PHE:HB2	1.22	1.09
1:A:595:GLU:HB2	1:A:597:LEU:HD23	1.32	1.09
1:A:324:THR:HB	1:A:462:PRO:HB3	1.27	1.09
1:A:806:MET:H	1:A:806:MET:HE3	1.14	1.09
1:A:453:LYS:HG2	1:A:472:VAL:HG22	1.25	1.08
1:A:569:VAL:HG21	1:A:654:ASN:HB2	1.26	1.08
1:A:301:ARG:HD2	1:A:425:THR:HG21	1.37	1.06
1:A:439:TYR:HE1	1:A:537:ARG:CZ	1.43	1.05
1:A:560:LEU:HD23	1:A:648:THR:HG23	1.37	1.05
1:A:46:PRO:HG2	1:A:69:ARG:HG3	1.41	1.03
1:A:494:TYR:HB3	1:A:501:LEU:HD21	1.40	1.01
1:A:620:PRO:HA	1:A:623:ILE:HG13	1.41	1.01
1:A:556:GLN:O	1:A:582:ASN:O	1.80	0.99
1:A:444:LEU:HD12	1:A:446:PHE:CE1	1.98	0.98
1:A:117:LEU:HD11	1:A:126:LEU:HD21	1.45	0.98
1:A:563:HIS:HB3	1:A:564:PRO:HD3	1.44	0.97
1:A:623:ILE:HA	1:A:626:ASN:HD21	1.28	0.96

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:439:TYR:HD1	1:A:537:ARG:NH1	1.60	0.96
1:A:556:GLN:C	1:A:582:ASN:HB3	1.87	0.96
1:A:297:ILE:HG22	1:A:418:VAL:HG12	1.49	0.95
1:A:566:ASN:HA	1:A:651:VAL:HG23	1.49	0.95
1:A:531:LEU:CD1	1:A:640:GLU:OE2	2.14	0.94
1:A:458:ARG:CZ	1:A:524:PRO:HB3	1.95	0.94
1:A:862:ILE:HG22	1:A:877:ILE:HA	1.46	0.94
1:A:810:CYS:SG	1:A:855:THR:HG22	2.06	0.94
1:A:72:LYS:HE3	1:A:80:LEU:HD13	1.49	0.93
1:A:297:ILE:HG22	1:A:418:VAL:CG1	1.97	0.93
1:A:804:GLY:HA2	1:A:806:MET:SD	2.09	0.92
1:A:527:GLY:HA3	1:A:550:PHE:CZ	2.05	0.92
1:A:62:ILE:CG1	1:A:73:LEU:HB2	1.98	0.92
1:A:435:ILE:HD13	1:A:436:ALA:H	1.34	0.92
1:A:271:LYS:HG3	1:A:272:GLU:H	1.34	0.92
1:A:863:ILE:HG22	1:A:876:THR:HB	1.48	0.92
1:A:239:PHE:HA	1:A:260:PRO:HG2	1.51	0.91
1:A:806:MET:SD	1:A:807:ARG:HG3	2.11	0.91
1:A:39:PHE:CE2	1:A:473:GLN:HG3	2.04	0.91
1:A:42:PHE:HE1	1:A:79:VAL:HG22	1.31	0.91
1:A:865:VAL:HG13	1:A:866:THR:HG23	1.50	0.91
1:A:933:VAL:HG23	1:A:934:ALA:H	1.36	0.91
1:A:447:VAL:HG22	1:A:455:LYS:HB2	1.53	0.91
1:A:447:VAL:CG2	1:A:455:LYS:HB2	2.03	0.89
1:A:446:PHE:HD2	1:A:454:LEU:HD21	1.38	0.89
1:A:653:TYR:HE2	1:A:682:HIS:HD1	1.18	0.89
1:A:95:TYR:CD2	1:A:96:PRO:HD3	2.08	0.88
1:A:486:PHE:CD1	1:A:493:LEU:HD13	2.09	0.88
1:A:181:LYS:CD	1:A:202:LYS:HA	2.04	0.88
1:A:359:LEU:CD1	1:A:362:ILE:HD11	2.02	0.88
1:A:863:ILE:HG23	1:A:864:PRO:HD2	1.55	0.88
1:A:555:LYS:HZ1	1:A:582:ASN:HD21	1.16	0.88
1:A:548:ARG:HG2	1:A:584:PRO:HA	1.53	0.88
1:A:453:LYS:CG	1:A:472:VAL:HG22	2.03	0.87
1:A:556:GLN:O	1:A:582:ASN:HB3	1.74	0.87
1:A:603:LEU:HD23	1:A:604:VAL:N	1.90	0.87
1:A:39:PHE:CE1	1:A:505:PRO:HD2	2.11	0.86
1:A:892:HIS:HB2	1:A:932:CYS:O	1.74	0.86
1:A:295:VAL:HA	1:A:414:VAL:CG2	2.05	0.86
1:A:833:LEU:HB2	1:A:836:HIS:HD2	1.39	0.86
1:A:435:ILE:CG2	1:A:446:PHE:HB2	2.06	0.86

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:847:LEU:HD12	1:A:852:SER:HB3	1.58	0.86
1:A:370:LEU:CD1	1:A:399:ILE:HD12	2.05	0.85
1:A:473:GLN:CG	1:A:504:VAL:HG22	2.06	0.85
1:A:133:TYR:CG	1:A:136:ILE:HG12	2.12	0.85
1:A:110:THR:CG2	1:A:132:LEU:HD21	2.05	0.85
1:A:295:VAL:CG1	1:A:414:VAL:HG11	2.07	0.85
1:A:100:VAL:HG12	1:A:101:GLN:HG3	1.58	0.85
1:A:569:VAL:CG2	1:A:654:ASN:HB2	2.06	0.85
1:A:882:LEU:HB2	1:A:910:ALA:HA	1.58	0.85
1:A:256:LEU:HB3	1:A:309:LEU:HD22	1.56	0.85
1:A:847:LEU:HD11	1:A:850:ALA:HA	1.58	0.85
1:A:863:ILE:CG2	1:A:876:THR:HB	2.07	0.85
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:H	1.39	0.84
1:A:556:GLN:HG2	1:A:582:ASN:HD22	1.42	0.84
1:A:118:LEU:HD13	1:A:119:ILE:N	1.91	0.84
1:A:356:ILE:CG2	1:A:421:ILE:HB	2.07	0.84
1:A:42:PHE:CZ	1:A:45:GLU:HB2	2.12	0.84
1:A:50:PHE:HB2	1:A:498:GLU:O	1.78	0.84
1:A:229:PRO:O	1:A:232:THR:HG22	1.79	0.83
1:A:706:VAL:HG22	1:A:707:ASP:H	1.42	0.83
1:A:40:VAL:CG1	1:A:503:ARG:HB3	2.08	0.83
1:A:830:GLN:HG2	1:A:831:CYS:H	1.43	0.83
1:A:118:LEU:HD12	1:A:172:ILE:CD1	2.05	0.83
1:A:555:LYS:HZ3	1:A:582:ASN:HD21	1.23	0.82
1:A:356:ILE:HG22	1:A:421:ILE:HB	1.61	0.82
1:A:295:VAL:HA	1:A:414:VAL:HG22	1.60	0.82
1:A:53:LEU:HD23	1:A:54:VAL:N	1.94	0.82
1:A:44:GLY:HA2	1:A:50:PHE:CE2	2.15	0.82
1:A:42:PHE:CE1	1:A:79:VAL:HG22	2.14	0.82
1:A:133:TYR:CB	1:A:136:ILE:HG12	2.09	0.82
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CE1	2.15	0.82
1:A:474:VAL:HG22	1:A:495:ILE:HG21	1.61	0.82
1:A:397:LEU:HD23	1:A:399:ILE:HD13	1.61	0.82
1:A:336:THR:O	1:A:354:LEU:HD12	1.78	0.81
1:A:44:GLY:HA2	1:A:50:PHE:HE2	1.44	0.81
1:A:785:ASN:HB3	1:A:788:PHE:CD2	2.14	0.81
1:A:397:LEU:HD23	1:A:399:ILE:CD1	2.10	0.81
1:A:533:ASN:HD22	1:A:643:MET:CB	1.94	0.81
1:A:154:LYS:HD3	1:A:210:ASP:OD1	1.81	0.81
1:A:889:ILE:HG23	1:A:892:HIS:CE1	2.16	0.81
1:A:926:ALA:HB1	1:A:947:LEU:HD12	1.63	0.81

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:370:LEU:HD12	1:A:399:ILE:HD12	1.63	0.80
1:A:548:ARG:CG	1:A:584:PRO:CA	2.27	0.80
1:A:358:ILE:HG23	1:A:361:GLN:H	1.44	0.80
1:A:324:THR:HB	1:A:462:PRO:CB	2.10	0.80
1:A:623:ILE:HD12	1:A:624:THR:N	1.97	0.80
1:A:154:LYS:HB2	1:A:157:HIS:CD2	2.16	0.80
1:A:444:LEU:HD13	1:A:445:ALA:N	1.97	0.80
1:A:314:LEU:HD11	1:A:332:ASP:HB3	1.64	0.80
1:A:192:PRO:HB3	1:A:233:PHE:CE1	2.17	0.80
1:A:486:PHE:CE1	1:A:493:LEU:HD13	2.16	0.79
1:A:239:PHE:CE1	1:A:260:PRO:HD2	2.18	0.79
1:A:556:GLN:C	1:A:582:ASN:CB	2.46	0.79
1:A:62:ILE:HG13	1:A:73:LEU:HB2	1.62	0.79
1:A:863:ILE:HG13	1:A:864:PRO:HD3	1.62	0.79
1:A:715:VAL:HG21	1:A:717:LYS:HD2	1.65	0.79
1:A:317:ALA:HB1	1:A:321:LEU:HB3	1.64	0.79
1:A:380:LEU:HD12	1:A:386:LYS:HE3	1.64	0.79
1:A:321:LEU:HD12	1:A:462:PRO:HG2	1.64	0.79
1:A:56:ASP:OD2	1:A:142:LEU:HD11	1.83	0.79
1:A:556:GLN:CA	1:A:582:ASN:CG	2.44	0.79
1:A:847:LEU:CG	1:A:850:ALA:HA	2.13	0.79
1:A:295:VAL:HG12	1:A:414:VAL:CG1	2.09	0.78
1:A:533:ASN:ND2	1:A:643:MET:HB3	1.97	0.78
1:A:244:VAL:HG13	1:A:482:ARG:NH1	1.98	0.78
1:A:785:ASN:HB3	1:A:788:PHE:HD2	1.48	0.78
1:A:231:ASP:O	1:A:234:THR:HG22	1.84	0.78
1:A:548:ARG:O	1:A:584:PRO:HD3	1.82	0.78
1:A:742:ILE:HB	1:A:745:ILE:O	1.84	0.78
1:A:359:LEU:HD12	1:A:362:ILE:CD1	2.10	0.78
1:A:181:LYS:NZ	1:A:216:VAL:HG23	1.98	0.78
1:A:168:VAL:HG23	1:A:185:ALA:O	1.84	0.78
1:A:327:VAL:CG1	1:A:358:ILE:HD11	2.14	0.78
1:A:319:ALA:H	1:A:441:ASN:HD22	1.31	0.78
1:A:620:PRO:HA	1:A:623:ILE:CG1	2.12	0.78
1:A:453:LYS:HE3	1:A:472:VAL:CG2	2.13	0.78
1:A:284:LYS:HD3	1:A:284:LYS:O	1.84	0.77
1:A:444:LEU:HD23	1:A:525:HIS:CE1	2.20	0.77
1:A:591:ASN:OD1	1:A:639:LYS:HE2	1.83	0.77
1:A:204:THR:HG21	1:A:209:ALA:HB3	1.66	0.77
1:A:278:LYS:HE3	1:A:296:PRO:HG3	1.67	0.77
1:A:320:VAL:HG21	1:A:442:HIS:CD2	2.19	0.77

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:547:PRO:O	1:A:548:ARG:HG2	1.84	0.77
1:A:51:ASN:HD21	1:A:67:VAL:HG23	1.49	0.76
1:A:780:LEU:HD12	1:A:780:LEU:O	1.86	0.76
1:A:460:ASP:HB3	1:A:464:GLY:N	2.00	0.76
1:A:533:ASN:ND2	1:A:643:MET:SD	2.58	0.76
1:A:196:PRO:HB3	1:A:225:MET:HE1	1.66	0.76
1:A:327:VAL:HG12	1:A:358:ILE:HD11	1.65	0.76
1:A:567:ILE:H	1:A:567:ILE:HD13	1.50	0.76
1:A:64:LEU:HD12	1:A:496:MET:CE	2.16	0.76
1:A:120:ASP:OD2	1:A:123:GLU:HG3	1.86	0.76
1:A:595:GLU:CB	1:A:597:LEU:HD23	2.14	0.76
1:A:623:ILE:HA	1:A:626:ASN:ND2	2.01	0.75
1:A:847:LEU:HD12	1:A:852:SER:CB	2.16	0.75
1:A:854:CYS:O	1:A:940:PHE:CE1	2.38	0.75
1:A:278:LYS:HG2	1:A:296:PRO:HA	1.69	0.75
1:A:616:ALA:O	1:A:620:PRO:HD2	1.85	0.75
1:A:403:PHE:CE1	1:A:406:LEU:HD23	2.20	0.75
1:A:873:THR:HB	1:A:917:MET:CE	2.17	0.75
1:A:448:GLY:HA3	1:A:480:VAL:HG21	1.68	0.75
1:A:710:LEU:HD12	1:A:710:LEU:O	1.84	0.75
1:A:202:LYS:HD3	1:A:214:ALA:HB3	1.69	0.75
1:A:739:ILE:CD1	1:A:748:ARG:HG2	2.17	0.74
1:A:847:LEU:CD1	1:A:850:ALA:HA	2.16	0.74
1:A:806:MET:HE3	1:A:806:MET:N	1.99	0.74
1:A:446:PHE:HB3	1:A:454:LEU:HD11	1.69	0.74
1:A:473:GLN:CB	1:A:504:VAL:HG22	2.17	0.74
1:A:151:PRO:HB2	1:A:157:HIS:ND1	2.02	0.74
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CZ	2.23	0.74
1:A:869:ARG:O	1:A:920:ALA:HB3	1.86	0.74
1:A:172:ILE:HG12	1:A:182:LEU:HD13	1.68	0.74
1:A:256:LEU:CB	1:A:309:LEU:HD22	2.17	0.74
1:A:323:ARG:HG3	1:A:324:THR:N	2.02	0.74
1:A:39:PHE:CD2	1:A:473:GLN:HG3	2.23	0.74
1:A:531:LEU:HD13	1:A:640:GLU:OE1	1.86	0.74
1:A:683:ASP:O	1:A:686:THR:HG22	1.87	0.74
1:A:704:LEU:HD11	1:A:724:LYS:HE3	1.69	0.74
1:A:784:TRP:HD1	1:A:790:ILE:HD11	1.51	0.74
1:A:42:PHE:HZ	1:A:45:GLU:HB2	1.50	0.73
1:A:806:MET:H	1:A:806:MET:CE	1.97	0.73
1:A:188:VAL:HG22	1:A:191:LYS:H	1.52	0.73
1:A:435:ILE:HD13	1:A:436:ALA:N	2.03	0.73

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:562:VAL:HG22	1:A:578:LEU:CD2	2.18	0.73
1:A:46:PRO:HG2	1:A:69:ARG:CG	2.17	0.73
1:A:822:CYS:HA	1:A:833:LEU:HD23	1.70	0.73
1:A:99:ILE:HD11	1:A:152:PHE:HB2	1.69	0.73
1:A:154:LYS:H	1:A:157:HIS:HD2	1.36	0.73
1:A:567:ILE:HD12	1:A:650:PHE:CZ	2.22	0.73
1:A:814:LEU:HB3	1:A:847:LEU:HB2	1.70	0.73
1:A:704:LEU:HB2	1:A:722:LYS:HG3	1.71	0.73
1:A:225:MET:CE	1:A:227:LYS:HG3	2.18	0.72
1:A:321:LEU:HG	1:A:325:LEU:HD11	1.71	0.72
1:A:321:LEU:CD1	1:A:462:PRO:HG2	2.17	0.72
1:A:556:GLN:O	1:A:582:ASN:CB	2.37	0.72
1:A:555:LYS:HZ2	1:A:582:ASN:HD21	0.76	0.72
1:A:261:GLU:HA	1:A:264:SER:O	1.89	0.72
1:A:324:THR:HG21	1:A:462:PRO:HA	1.70	0.72
1:A:832:THR:CG2	1:A:836:HIS:HB2	2.20	0.72
1:A:184:ILE:HD12	1:A:184:ILE:O	1.89	0.72
1:A:73:LEU:HD22	1:A:79:VAL:HA	1.72	0.72
1:A:115:LYS:HB3	1:A:168:VAL:HG11	1.71	0.72
1:A:847:LEU:CD1	1:A:852:SER:HB3	2.20	0.72
1:A:321:LEU:HG	1:A:325:LEU:CD1	2.20	0.72
1:A:304:VAL:HG11	1:A:351:GLU:OE2	1.91	0.71
1:A:380:LEU:HB2	1:A:386:LYS:CE	2.20	0.71
1:A:533:ASN:ND2	1:A:643:MET:CB	2.53	0.71
1:A:370:LEU:HD21	1:A:374:TYR:HE1	1.55	0.71
1:A:471:THR:HG23	1:A:473:GLN:HE22	1.55	0.71
1:A:515:CYS:O	1:A:519:LEU:HD23	1.91	0.71
1:A:558:VAL:HG11	1:A:646:ALA:HB2	1.71	0.71
1:A:188:VAL:HG13	1:A:190:GLY:H	1.56	0.71
1:A:181:LYS:HZ3	1:A:216:VAL:HG23	1.56	0.71
1:A:575:LEU:HD22	1:A:575:LEU:H	1.56	0.71
1:A:450:LYS:HA	1:A:479:PRO:HB3	1.73	0.71
1:A:519:LEU:HD12	1:A:552:SER:O	1.90	0.71
1:A:444:LEU:HD23	1:A:525:HIS:NE2	2.05	0.71
1:A:446:PHE:HZ	1:A:506:VAL:HG23	1.55	0.71
1:A:653:TYR:CE2	1:A:682:HIS:ND1	2.56	0.71
1:A:93:LYS:HD2	1:A:105:GLU:OE1	1.91	0.71
1:A:225:MET:HE1	1:A:227:LYS:HG3	1.73	0.70
1:A:367:LYS:HE2	1:A:399:ILE:O	1.91	0.70
1:A:551:ALA:HA	1:A:556:GLN:OE1	1.91	0.70
1:A:670:ARG:HA	1:A:670:ARG:HE	1.55	0.70

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:847:LEU:HD21	1:A:850:ALA:HA	1.72	0.70
1:A:854:CYS:O	1:A:940:PHE:HE1	1.72	0.70
1:A:548:ARG:O	1:A:584:PRO:CD	2.39	0.70
1:A:181:LYS:HD2	1:A:202:LYS:HA	1.71	0.70
1:A:595:GLU:HG2	1:A:632:VAL:HG13	1.72	0.70
1:A:563:HIS:HB2	1:A:577:VAL:CG1	2.21	0.70
1:A:72:LYS:HE3	1:A:80:LEU:CD1	2.21	0.70
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:OE1	1.90	0.70
1:A:474:VAL:HG21	1:A:495:ILE:HD13	1.72	0.70
1:A:480:VAL:HB	1:A:484:MET:CE	2.21	0.70
1:A:619:VAL:HB	1:A:620:PRO:HD3	1.72	0.70
1:A:453:LYS:HE3	1:A:472:VAL:HG21	1.73	0.70
1:A:937:ARG:CG	1:A:938:PRO:HD2	2.20	0.70
1:A:281:ARG:HB3	1:A:293:VAL:CG1	2.22	0.70
1:A:809:SER:CB	1:A:881:ASN:HD21	2.04	0.70
1:A:446:PHE:CD2	1:A:454:LEU:HD21	2.24	0.70
1:A:40:VAL:HG12	1:A:503:ARG:HB3	1.73	0.70
1:A:63:TYR:C	1:A:64:LEU:HD22	2.12	0.69
1:A:507:GLU:HG3	1:A:537:ARG:HG3	1.74	0.69
1:A:595:GLU:CG	1:A:632:VAL:HG13	2.22	0.69
1:A:380:LEU:HB2	1:A:386:LYS:HE3	1.74	0.69
1:A:435:ILE:HD12	1:A:486:PHE:CD1	2.27	0.69
1:A:133:TYR:HB2	1:A:136:ILE:HG12	1.75	0.69
1:A:569:VAL:HG21	1:A:654:ASN:CB	2.14	0.69
1:A:474:VAL:CG1	1:A:475:VAL:HG23	2.18	0.69
1:A:560:LEU:CD2	1:A:648:THR:HG23	2.19	0.69
1:A:739:ILE:HB	1:A:781:THR:CG2	2.22	0.69
1:A:473:GLN:OE1	1:A:504:VAL:HG13	1.93	0.69
1:A:689:PHE:CD1	1:A:691:GLU:HG2	2.28	0.69
1:A:809:SER:HB2	1:A:881:ASN:HD21	1.57	0.69
1:A:216:VAL:HG12	1:A:224:SER:OG	1.92	0.69
1:A:73:LEU:CD2	1:A:79:VAL:HA	2.23	0.68
1:A:110:THR:HG22	1:A:132:LEU:HD21	1.74	0.68
1:A:39:PHE:HE1	1:A:505:PRO:HD2	1.56	0.68
1:A:412:LEU:H	1:A:412:LEU:HD13	1.59	0.68
1:A:53:LEU:HB2	1:A:496:MET:HE1	1.76	0.68
1:A:555:LYS:HG3	1:A:556:GLN:N	2.09	0.68
1:A:133:TYR:CD2	1:A:136:ILE:HG12	2.28	0.68
1:A:62:ILE:HD11	1:A:73:LEU:HD12	1.76	0.68
1:A:594:PHE:O	1:A:595:GLU:HG2	1.94	0.67
1:A:830:GLN:HG2	1:A:831:CYS:N	2.09	0.67

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:NE	2.09	0.67
1:A:98:ARG:HH21	1:A:107:LEU:HD12	1.59	0.67
1:A:863:ILE:HG23	1:A:864:PRO:CD	2.23	0.67
1:A:867:GLY:HA3	1:A:948:TYR:OH	1.94	0.67
1:A:98:ARG:HE	1:A:107:LEU:CD1	2.07	0.67
1:A:46:PRO:HG3	1:A:69:ARG:HD2	1.75	0.67
1:A:190:GLY:HA2	1:A:233:PHE:CE2	2.29	0.67
1:A:321:LEU:O	1:A:325:LEU:HG	1.95	0.67
1:A:548:ARG:C	1:A:584:PRO:HB3	2.15	0.67
1:A:239:PHE:CD1	1:A:260:PRO:HD2	2.30	0.67
1:A:474:VAL:HG12	1:A:475:VAL:CG2	2.21	0.67
1:A:137:CYS:HB2	1:A:213:PHE:CZ	2.30	0.67
1:A:62:ILE:HD12	1:A:64:LEU:HD21	1.76	0.67
1:A:703:LEU:HD13	1:A:723:ALA:HB2	1.76	0.67
1:A:548:ARG:HG3	1:A:584:PRO:C	2.14	0.67
1:A:133:TYR:HB2	1:A:136:ILE:H	1.61	0.66
1:A:460:ASP:HB3	1:A:463:LYS:HB3	1.77	0.66
1:A:531:LEU:CD1	1:A:640:GLU:CD	2.48	0.66
1:A:739:ILE:HD12	1:A:748:ARG:HG2	1.76	0.66
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:N	2.10	0.66
1:A:42:PHE:HE1	1:A:79:VAL:CG2	2.05	0.66
1:A:62:ILE:HG13	1:A:62:ILE:O	1.94	0.66
1:A:323:ARG:HG3	1:A:324:THR:H	1.58	0.66
1:A:110:THR:HB	1:A:132:LEU:CD2	2.26	0.66
1:A:556:GLN:CG	1:A:582:ASN:ND2	2.51	0.66
1:A:325:LEU:CD1	1:A:333:LEU:HD11	2.25	0.66
1:A:595:GLU:HG2	1:A:632:VAL:CG1	2.25	0.66
1:A:773:ILE:HD13	1:A:773:ILE:H	1.59	0.66
1:A:432:THR:OG1	1:A:480:VAL:HG23	1.96	0.66
1:A:797:LYS:HD2	1:A:797:LYS:N	2.11	0.66
1:A:98:ARG:HE	1:A:107:LEU:HD11	1.60	0.66
1:A:444:LEU:CD2	1:A:525:HIS:CE1	2.78	0.66
1:A:863:ILE:HG13	1:A:864:PRO:CD	2.25	0.66
1:A:181:LYS:HD3	1:A:202:LYS:HA	1.78	0.66
1:A:548:ARG:CB	1:A:584:PRO:HA	2.24	0.65
1:A:261:GLU:HG2	1:A:264:SER:C	2.17	0.65
1:A:555:LYS:HZ2	1:A:582:ASN:CG	1.99	0.65
1:A:296:PRO:HD2	1:A:414:VAL:CG2	2.27	0.65
1:A:446:PHE:CZ	1:A:486:PHE:HZ	2.14	0.65
1:A:567:ILE:HD13	1:A:651:VAL:O	1.96	0.65
1:A:706:VAL:HG13	1:A:707:ASP:O	1.96	0.65

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:933:VAL:HG23	1:A:934:ALA:N	2.10	0.65
1:A:713:VAL:HG12	1:A:714:GLU:HG3	1.79	0.65
1:A:216:VAL:HG12	1:A:224:SER:CB	2.26	0.65
1:A:675:LYS:HE3	1:A:694:VAL:HG22	1.79	0.65
1:A:926:ALA:HB1	1:A:947:LEU:CD1	2.27	0.65
1:A:265:PRO:HD3	1:A:274:VAL:CG2	2.27	0.64
1:A:782:VAL:HG23	1:A:790:ILE:HB	1.77	0.64
1:A:847:LEU:CD2	1:A:850:ALA:HA	2.27	0.64
1:A:309:LEU:HD11	1:A:311:ALA:O	1.98	0.64
1:A:410:ALA:HB1	1:A:411:PRO:HD2	1.78	0.64
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CD1	2.33	0.64
1:A:620:PRO:CA	1:A:623:ILE:HG13	2.23	0.64
1:A:154:LYS:H	1:A:157:HIS:CD2	2.15	0.64
1:A:368:ASP:O	1:A:371:GLN:HG2	1.97	0.64
1:A:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:C	2.17	0.64
1:A:892:HIS:NE2	1:A:931:ILE:HB	2.11	0.64
1:A:53:LEU:HB2	1:A:496:MET:CE	2.27	0.64
1:A:53:LEU:HG	1:A:64:LEU:CD1	2.27	0.64
1:A:175:TYR:HD2	1:A:179:ASP:HB3	1.63	0.64
1:A:446:PHE:CE1	1:A:486:PHE:HZ	2.16	0.64
1:A:181:LYS:HE2	1:A:202:LYS:HG2	1.80	0.64
1:A:105:GLU:HB3	1:A:106:PRO:HD2	1.80	0.63
1:A:320:VAL:O	1:A:323:ARG:HG2	1.98	0.63
1:A:446:PHE:CZ	1:A:506:VAL:HG23	2.33	0.63
1:A:405:GLY:O	1:A:406:LEU:HD22	1.98	0.63
1:A:806:MET:HG2	1:A:807:ARG:HG3	1.80	0.63
1:A:405:GLY:C	1:A:406:LEU:HD22	2.19	0.63
1:A:460:ASP:CB	1:A:463:LYS:HB3	2.28	0.63
1:A:566:ASN:HA	1:A:651:VAL:CG2	2.25	0.63
1:A:118:LEU:HG	1:A:172:ILE:HG13	1.80	0.63
1:A:186:THR:HG22	1:A:187:ALA:N	2.13	0.63
1:A:548:ARG:HG3	1:A:584:PRO:HA	0.65	0.63
1:A:833:LEU:HB2	1:A:836:HIS:CD2	2.29	0.63
1:A:41:THR:HG22	1:A:502:THR:HA	1.81	0.63
1:A:566:ASN:HB3	1:A:651:VAL:HG21	1.80	0.63
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:CZ	2.29	0.63
1:A:473:GLN:HB2	1:A:504:VAL:HG22	1.80	0.63
1:A:448:GLY:CA	1:A:480:VAL:HG21	2.28	0.63
1:A:575:LEU:HD22	1:A:575:LEU:N	2.14	0.63
1:A:453:LYS:HG2	1:A:472:VAL:CG2	2.16	0.63
1:A:847:LEU:HD11	1:A:850:ALA:CA	2.29	0.63

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:372:SER:O	1:A:375:ARG:HB2	1.99	0.62
1:A:56:ASP:OD1	1:A:119:ILE:HD12	1.98	0.62
1:A:110:THR:HG22	1:A:111:ASN:N	2.14	0.62
1:A:480:VAL:HG11	1:A:495:ILE:HD11	1.81	0.62
1:A:180:ASP:O	1:A:181:LYS:HG2	1.99	0.62
1:A:382:LEU:HD23	1:A:385:LEU:HB3	1.81	0.62
1:A:469:TYR:HE2	1:A:471:THR:HB	1.65	0.62
1:A:473:GLN:HG2	1:A:504:VAL:HG22	1.79	0.62
1:A:741:ASN:O	1:A:778:VAL:HG13	1.98	0.62
1:A:855:THR:HG23	1:A:856:ASN:OD1	1.99	0.62
1:A:296:PRO:HB2	1:A:417:MET:SD	2.39	0.62
1:A:410:ALA:HB1	1:A:411:PRO:CD	2.30	0.62
1:A:197:THR:HG21	1:A:228:ILE:HD11	1.82	0.62
1:A:204:THR:HG22	1:A:212:MET:SD	2.40	0.62
1:A:492:GLN:HG2	1:A:503:ARG:CG	2.29	0.62
1:A:949:TYR:HE2	1:A:951:MET:CE	2.12	0.62
1:A:696:LEU:N	1:A:696:LEU:HD12	2.15	0.61
1:A:894:LYS:HD3	1:A:899:GLU:HA	1.81	0.61
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:CD	2.20	0.61
1:A:806:MET:CG	1:A:807:ARG:HG3	2.29	0.61
1:A:257:THR:C	1:A:258:LEU:HD12	2.21	0.61
1:A:386:LYS:O	1:A:386:LYS:HG3	1.99	0.61
1:A:548:ARG:NE	1:A:583:VAL:O	2.34	0.61
1:A:469:TYR:CE2	1:A:471:THR:HB	2.36	0.61
1:A:474:VAL:CG2	1:A:495:ILE:HD13	2.29	0.61
1:A:41:THR:HG22	1:A:502:THR:HG23	1.83	0.61
1:A:809:SER:HB2	1:A:881:ASN:ND2	2.15	0.61
1:A:175:TYR:CD2	1:A:179:ASP:HB3	2.36	0.61
1:A:46:PRO:HD2	1:A:71:TYR:CE1	2.35	0.61
1:A:333:LEU:CD2	1:A:358:ILE:HG13	2.31	0.61
1:A:474:VAL:HG22	1:A:495:ILE:CG2	2.29	0.61
1:A:715:VAL:CG2	1:A:717:LYS:HD2	2.30	0.61
1:A:665:VAL:HG12	1:A:697:PRO:HG3	1.83	0.61
1:A:72:LYS:CD	1:A:80:LEU:HD12	2.30	0.61
1:A:182:LEU:HG	1:A:184:ILE:HG23	1.82	0.60
1:A:488:LYS:HG3	1:A:489:ASP:N	2.14	0.60
1:A:712:PRO:HG3	1:A:801:TYR:OH	2.01	0.60
1:A:46:PRO:HD2	1:A:71:TYR:CZ	2.36	0.60
1:A:295:VAL:HA	1:A:414:VAL:HG21	1.81	0.60
1:A:313:TYR:CE1	1:A:435:ILE:HG12	2.37	0.60
1:A:949:TYR:HE2	1:A:951:MET:HE2	1.65	0.60

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:403:PHE:CZ	1:A:406:LEU:HD23	2.37	0.60
1:A:530:VAL:HB	1:A:584:PRO:HG3	1.82	0.60
1:A:706:VAL:HG22	1:A:707:ASP:N	2.12	0.60
1:A:119:ILE:HD13	1:A:121:TYR:CZ	2.36	0.60
1:A:548:ARG:O	1:A:584:PRO:HB3	2.02	0.60
1:A:566:ASN:CA	1:A:651:VAL:HG23	2.28	0.60
1:A:95:TYR:CG	1:A:96:PRO:HD3	2.36	0.60
1:A:320:VAL:HG21	1:A:442:HIS:HD2	1.63	0.60
1:A:495:ILE:CG2	1:A:502:THR:HB	2.32	0.60
1:A:271:LYS:HG3	1:A:272:GLU:N	2.13	0.60
1:A:387:VAL:HG13	1:A:388:LYS:HG3	1.83	0.60
1:A:548:ARG:O	1:A:584:PRO:CB	2.50	0.60
1:A:51:ASN:HD21	1:A:67:VAL:CG2	2.15	0.59
1:A:904:VAL:HG13	1:A:905:ASP:N	2.18	0.59
1:A:154:LYS:N	1:A:157:HIS:HD2	2.00	0.59
1:A:773:ILE:HD13	1:A:773:ILE:N	2.17	0.59
1:A:832:THR:HG23	1:A:836:HIS:HB2	1.85	0.59
1:A:243:TYR:CD2	1:A:257:THR:HG22	2.37	0.59
1:A:665:VAL:HG11	1:A:697:PRO:HD3	1.84	0.59
1:A:314:LEU:HD12	1:A:333:LEU:O	2.01	0.59
1:A:62:ILE:HD13	1:A:77:LEU:CD2	2.32	0.59
1:A:323:ARG:HH21	1:A:463:LYS:HD2	1.67	0.59
1:A:349:LEU:N	1:A:349:LEU:HD22	2.18	0.59
1:A:548:ARG:O	1:A:584:PRO:CG	2.51	0.59
1:A:99:ILE:HG13	1:A:100:VAL:N	2.16	0.59
1:A:759:VAL:HG12	1:A:760:GLN:N	2.18	0.59
1:A:171:VAL:O	1:A:182:LEU:HD12	2.02	0.58
1:A:578:LEU:HD13	1:A:636:LEU:HD21	1.85	0.58
1:A:473:GLN:H	1:A:473:GLN:NE2	2.01	0.58
1:A:937:ARG:HG2	1:A:938:PRO:HD2	1.85	0.58
1:A:62:ILE:HD12	1:A:501:LEU:CD1	2.33	0.58
1:A:630:HIS:HD2	1:A:632:VAL:CG2	2.15	0.58
1:A:432:THR:HG1	1:A:480:VAL:HG23	1.67	0.58
1:A:931:ILE:O	1:A:931:ILE:HG13	2.02	0.58
1:A:853:LYS:HB2	1:A:940:PHE:CZ	2.38	0.58
1:A:585:GLU:OE1	1:A:585:GLU:HA	2.04	0.58
1:A:889:ILE:HD12	1:A:907:TYR:CZ	2.38	0.58
1:A:457:ILE:HG12	1:A:467:LEU:HD13	1.84	0.58
1:A:387:VAL:HG13	1:A:388:LYS:N	2.18	0.58
1:A:873:THR:HB	1:A:917:MET:HE2	1.85	0.58
1:A:110:THR:HB	1:A:132:LEU:HD23	1.85	0.57

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:814:LEU:HD22	1:A:847:LEU:N	2.18	0.57
1:A:198:ILE:HB	1:A:226:ILE:CG2	2.34	0.57
1:A:556:GLN:C	1:A:582:ASN:HB2	2.25	0.57
1:A:814:LEU:HD22	1:A:847:LEU:H	1.69	0.57
1:A:263:VAL:O	1:A:263:VAL:HG12	2.04	0.57
1:A:885:GLU:HG3	1:A:887:ARG:H	1.70	0.57
1:A:434:VAL:HG22	1:A:435:ILE:N	2.20	0.57
1:A:324:THR:CG2	1:A:462:PRO:HA	2.34	0.57
1:A:430:ARG:HH21	1:A:432:THR:HG22	1.68	0.57
1:A:433:SER:HB3	1:A:484:MET:SD	2.45	0.57
1:A:531:LEU:HB3	1:A:640:GLU:OE2	2.04	0.57
1:A:188:VAL:HG22	1:A:191:LYS:N	2.18	0.57
1:A:426:GLU:OE1	1:A:426:GLU:HA	2.04	0.57
1:A:40:VAL:HG13	1:A:503:ARG:HB3	1.85	0.57
1:A:350:ASP:HA	1:A:430:ARG:HB2	1.86	0.57
1:A:321:LEU:HD12	1:A:462:PRO:CG	2.35	0.57
1:A:501:LEU:HD23	1:A:502:THR:H	1.70	0.57
1:A:703:LEU:HD21	1:A:782:VAL:HG21	1.86	0.57
1:A:704:LEU:HD11	1:A:724:LYS:CE	2.35	0.57
1:A:196:PRO:HB3	1:A:225:MET:CE	2.33	0.56
1:A:41:THR:CG2	1:A:502:THR:HG23	2.35	0.56
1:A:892:HIS:CE1	1:A:931:ILE:HB	2.40	0.56
1:A:262:MET:O	1:A:262:MET:HG3	2.05	0.56
1:A:468:GLN:HB2	1:A:523:ASP:CG	2.25	0.56
1:A:226:ILE:O	1:A:226:ILE:HG23	2.06	0.56
1:A:305:GLU:O	1:A:340:LYS:HG3	2.06	0.56
1:A:42:PHE:CE2	1:A:50:PHE:HZ	2.23	0.56
1:A:239:PHE:CA	1:A:260:PRO:HG2	2.30	0.56
1:A:474:VAL:CG2	1:A:495:ILE:HG21	2.35	0.56
1:A:710:LEU:HB2	1:A:801:TYR:HE1	1.70	0.56
1:A:45:GLU:HB3	1:A:46:PRO:CD	2.35	0.56
1:A:785:ASN:HD22	1:A:788:PHE:HE2	1.54	0.56
1:A:853:LYS:CG	1:A:940:PHE:HZ	2.19	0.56
1:A:533:ASN:HD22	1:A:643:MET:CG	2.18	0.56
1:A:116:MET:HG3	1:A:117:LEU:N	2.21	0.56
1:A:459:VAL:O	1:A:459:VAL:HG23	2.05	0.56
1:A:456:LYS:O	1:A:468:GLN:HG2	2.04	0.56
1:A:820:PHE:O	1:A:821:GLU:HB3	2.06	0.56
1:A:845:LEU:HD13	1:A:845:LEU:C	2.26	0.56
1:A:446:PHE:CE1	1:A:486:PHE:CZ	2.93	0.56
1:A:42:PHE:HE2	1:A:50:PHE:HZ	1.54	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:665:VAL:CG1	1:A:697:PRO:HD3	2.35	0.56
1:A:713:VAL:HG13	1:A:766:TYR:O	2.06	0.56
1:A:563:HIS:HB3	1:A:564:PRO:CD	2.28	0.56
1:A:785:ASN:ND2	1:A:788:PHE:HE2	2.03	0.56
1:A:882:LEU:HD12	1:A:882:LEU:N	2.21	0.56
1:A:926:ALA:CB	1:A:947:LEU:HD12	2.35	0.56
1:A:175:TYR:HB3	1:A:179:ASP:HB3	1.88	0.56
1:A:254:TYR:CZ	1:A:281:ARG:HD2	2.39	0.56
1:A:53:LEU:HG	1:A:64:LEU:HD13	1.87	0.56
1:A:597:LEU:N	1:A:597:LEU:HD22	2.21	0.56
1:A:46:PRO:CG	1:A:69:ARG:HD2	2.36	0.56
1:A:62:ILE:HG12	1:A:73:LEU:HB2	1.84	0.56
1:A:265:PRO:HD3	1:A:274:VAL:HG21	1.87	0.55
1:A:51:ASN:ND2	1:A:67:VAL:HG23	2.20	0.55
1:A:110:THR:HG22	1:A:111:ASN:H	1.72	0.55
1:A:380:LEU:HB2	1:A:386:LYS:HE2	1.87	0.55
1:A:710:LEU:HB2	1:A:801:TYR:CE1	2.42	0.55
1:A:370:LEU:HD13	1:A:370:LEU:C	2.27	0.55
1:A:619:VAL:CB	1:A:620:PRO:HD3	2.36	0.55
1:A:72:LYS:HD2	1:A:80:LEU:HB2	1.87	0.55
1:A:118:LEU:HB3	1:A:127:ILE:CG2	2.36	0.55
1:A:242:TYR:CD1	1:A:345:LYS:HE2	2.41	0.55
1:A:435:ILE:CG2	1:A:486:PHE:HE1	2.19	0.55
1:A:797:LYS:HD2	1:A:797:LYS:H	1.71	0.55
1:A:804:GLY:HA2	1:A:806:MET:CE	2.36	0.55
1:A:865:VAL:HG13	1:A:866:THR:N	2.21	0.55
1:A:435:ILE:HD12	1:A:486:PHE:HD1	1.71	0.55
1:A:91:ASN:CG	1:A:92:PRO:HD2	2.27	0.55
1:A:509:CYS:HB3	1:A:535:CYS:SG	2.47	0.55
1:A:556:GLN:HA	1:A:582:ASN:ND2	2.19	0.55
1:A:359:LEU:HA	1:A:362:ILE:HG12	1.89	0.55
1:A:412:LEU:N	1:A:412:LEU:HD13	2.22	0.55
1:A:460:ASP:OD2	1:A:463:LYS:HB3	2.06	0.55
1:A:825:CYS:HB3	1:A:828:PRO:HG2	1.89	0.55
1:A:190:GLY:O	1:A:192:PRO:HD3	2.07	0.54
1:A:382:LEU:HD23	1:A:385:LEU:CB	2.36	0.54
1:A:526:CYS:HB3	1:A:535:CYS:SG	2.46	0.54
1:A:709:ILE:O	1:A:799:TYR:HD1	1.90	0.54
1:A:780:LEU:HD12	1:A:780:LEU:C	2.27	0.54
1:A:628:ASP:OD2	1:A:669:TYR:HE1	1.90	0.54
1:A:947:LEU:CD2	1:A:947:LEU:H	2.21	0.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:474:VAL:HG12	1:A:475:VAL:N	2.21	0.54
1:A:168:VAL:HG22	1:A:169:PHE:N	2.22	0.54
1:A:280:VAL:HG12	1:A:281:ARG:N	2.22	0.54
1:A:412:LEU:C	1:A:412:LEU:HD22	2.28	0.54
1:A:370:LEU:HD13	1:A:370:LEU:O	2.07	0.54
1:A:921:LYS:N	1:A:922:PRO:HD2	2.23	0.54
1:A:548:ARG:HB2	1:A:583:VAL:C	2.27	0.54
1:A:370:LEU:HD21	1:A:374:TYR:CE1	2.39	0.54
1:A:63:TYR:CE2	1:A:72:LYS:HG2	2.43	0.54
1:A:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:O	2.07	0.54
1:A:861:GLU:HG3	1:A:862:ILE:N	2.21	0.54
1:A:937:ARG:HG3	1:A:938:PRO:HD2	1.89	0.54
1:A:151:PRO:O	1:A:157:HIS:HB3	2.07	0.54
1:A:72:LYS:HD2	1:A:80:LEU:HD12	1.90	0.54
1:A:472:VAL:O	1:A:472:VAL:HG12	2.09	0.53
1:A:925:HIS:O	1:A:950:PHE:HD2	1.91	0.53
1:A:236:ILE:O	1:A:236:ILE:HG23	2.07	0.53
1:A:429:ASP:OD1	1:A:450:LYS:HB3	2.08	0.53
1:A:501:LEU:HD23	1:A:502:THR:N	2.22	0.53
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:HA	1.91	0.53
1:A:447:VAL:HG23	1:A:447:VAL:O	2.06	0.53
1:A:623:ILE:HD12	1:A:623:ILE:C	2.28	0.53
1:A:64:LEU:N	1:A:64:LEU:HD22	2.24	0.53
1:A:567:ILE:N	1:A:567:ILE:HD13	2.20	0.53
1:A:739:ILE:HB	1:A:781:THR:HG23	1.90	0.53
1:A:154:LYS:HB2	1:A:157:HIS:HD2	1.70	0.53
1:A:471:THR:CG2	1:A:473:GLN:HE22	2.20	0.53
1:A:448:GLY:HA3	1:A:480:VAL:CG2	2.37	0.53
1:A:807:ARG:HD2	1:A:813:CYS:HA	1.90	0.53
1:A:385:LEU:HD13	1:A:385:LEU:C	2.29	0.53
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:NH2	2.24	0.53
1:A:553:GLU:HG3	1:A:554:MET:N	2.24	0.53
1:A:575:LEU:H	1:A:575:LEU:CD2	2.22	0.53
1:A:630:HIS:HD2	1:A:632:VAL:HG23	1.73	0.53
1:A:805:ALA:N	1:A:806:MET:HE3	2.24	0.53
1:A:924:GLN:O	1:A:925:HIS:HB2	2.09	0.53
1:A:239:PHE:HA	1:A:260:PRO:CG	2.32	0.53
1:A:495:ILE:O	1:A:495:ILE:HG23	2.08	0.53
1:A:712:PRO:O	1:A:715:VAL:HG22	2.09	0.53
1:A:806:MET:HG2	1:A:807:ARG:CG	2.39	0.53
1:A:135:GLY:O	1:A:159:LEU:HD13	2.08	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:370:LEU:HD11	1:A:399:ILE:HD12	1.89	0.53
1:A:578:LEU:HB2	1:A:609:ILE:HB	1.91	0.53
1:A:930:GLU:OE2	1:A:941:MET:HG3	2.07	0.53
1:A:281:ARG:O	1:A:282:LEU:HD23	2.09	0.53
1:A:426:GLU:HG2	1:A:429:ASP:O	2.08	0.53
1:A:39:PHE:CD1	1:A:505:PRO:HD2	2.44	0.53
1:A:580:THR:HG21	1:A:583:VAL:HG11	1.91	0.53
1:A:805:ALA:H	1:A:806:MET:CE	2.22	0.53
1:A:947:LEU:O	1:A:947:LEU:HD23	2.09	0.52
1:A:198:ILE:HB	1:A:226:ILE:HG22	1.91	0.52
1:A:321:LEU:CD2	1:A:325:LEU:HD11	2.39	0.52
1:A:827:SER:HB2	1:A:828:PRO:CD	2.39	0.52
1:A:827:SER:HB2	1:A:828:PRO:HD3	1.91	0.52
1:A:882:LEU:HD13	1:A:910:ALA:O	2.09	0.52
1:A:371:GLN:O	1:A:375:ARG:HG3	2.09	0.52
1:A:589:GLY:HA3	1:A:639:LYS:HG3	1.90	0.52
1:A:875:VAL:HG22	1:A:915:CYS:O	2.09	0.52
1:A:308:LEU:O	1:A:338:PHE:HA	2.09	0.52
1:A:42:PHE:HZ	1:A:45:GLU:CB	2.22	0.52
1:A:569:VAL:CG2	1:A:654:ASN:CB	2.81	0.52
1:A:679:VAL:HG12	1:A:680:CYS:N	2.24	0.52
1:A:181:LYS:CE	1:A:202:LYS:HG2	2.38	0.52
1:A:301:ARG:CD	1:A:425:THR:HG21	2.26	0.52
1:A:468:GLN:CB	1:A:523:ASP:HA	2.38	0.52
1:A:53:LEU:HG	1:A:64:LEU:HD11	1.92	0.52
1:A:783:VAL:HG12	1:A:784:TRP:N	2.25	0.52
1:A:396:LEU:C	1:A:396:LEU:HD13	2.30	0.52
1:A:509:CYS:HB2	1:A:536:THR:HA	1.91	0.52
1:A:853:LYS:CG	1:A:940:PHE:CZ	2.93	0.52
1:A:185:ALA:HB3	1:A:243:TYR:CG	2.44	0.52
1:A:356:ILE:HG22	1:A:421:ILE:O	2.09	0.52
1:A:560:LEU:HG	1:A:648:THR:HG21	1.92	0.52
1:A:653:TYR:O	1:A:654:ASN:N	2.43	0.52
1:A:228:ILE:HG22	1:A:233:PHE:CE1	2.45	0.52
1:A:716:ILE:O	1:A:716:ILE:HG23	2.09	0.52
1:A:119:ILE:O	1:A:119:ILE:HG23	2.09	0.52
1:A:716:ILE:HG12	1:A:763:ASN:HB3	1.90	0.52
1:A:261:GLU:HG2	1:A:265:PRO:N	2.25	0.52
1:A:296:PRO:HD2	1:A:414:VAL:HG22	1.92	0.52
1:A:439:TYR:HD1	1:A:537:ARG:HH12	1.38	0.52
1:A:739:ILE:HB	1:A:781:THR:HG22	1.90	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:933:VAL:HG22	1:A:940:PHE:HB3	1.91	0.51
1:A:556:GLN:CB	1:A:582:ASN:HB3	2.35	0.51
1:A:184:ILE:HD12	1:A:184:ILE:C	2.31	0.51
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CG	2.94	0.51
1:A:426:GLU:HG3	1:A:429:ASP:H	1.75	0.51
1:A:567:ILE:CD1	1:A:650:PHE:CE2	2.94	0.51
1:A:127:ILE:O	1:A:127:ILE:HG23	2.09	0.51
1:A:593:THR:HG23	1:A:593:THR:O	2.10	0.51
1:A:716:ILE:CG1	1:A:763:ASN:HB3	2.41	0.51
1:A:790:ILE:HD12	1:A:790:ILE:N	2.25	0.51
1:A:53:LEU:HD23	1:A:53:LEU:C	2.31	0.51
1:A:560:LEU:HD23	1:A:648:THR:CG2	2.25	0.51
1:A:727:PRO:O	1:A:729:PRO:HD3	2.10	0.51
1:A:216:VAL:HG13	1:A:217:PHE:N	2.26	0.51
1:A:930:GLU:HG3	1:A:941:MET:SD	2.51	0.51
1:A:181:LYS:HZ2	1:A:216:VAL:HG23	1.75	0.51
1:A:370:LEU:HD13	1:A:374:TYR:CD1	2.46	0.51
1:A:418:VAL:O	1:A:418:VAL:HG13	2.10	0.51
1:A:473:GLN:CD	1:A:504:VAL:HG13	2.31	0.51
1:A:473:GLN:HB2	1:A:504:VAL:CG2	2.40	0.51
1:A:64:LEU:HD11	1:A:501:LEU:HD12	1.92	0.51
1:A:853:LYS:HD2	1:A:853:LYS:H	1.76	0.51
1:A:93:LYS:HD3	1:A:105:GLU:OE2	2.10	0.51
1:A:171:VAL:HG12	1:A:172:ILE:N	2.26	0.51
1:A:265:PRO:HD3	1:A:274:VAL:HG22	1.92	0.51
1:A:322:GLY:CA	1:A:327:VAL:HG22	2.41	0.51
1:A:370:LEU:HD11	1:A:374:TYR:CE1	2.46	0.51
1:A:433:SER:HB3	1:A:484:MET:HE3	1.93	0.51
1:A:491:GLU:O	1:A:506:VAL:HG12	2.11	0.51
1:A:798:VAL:O	1:A:798:VAL:HG13	2.10	0.51
1:A:712:PRO:HG3	1:A:801:TYR:CZ	2.45	0.51
1:A:278:LYS:HG2	1:A:296:PRO:CA	2.39	0.51
1:A:566:ASN:HB3	1:A:651:VAL:CG2	2.40	0.51
1:A:810:CYS:SG	1:A:855:THR:CG2	2.92	0.51
1:A:823:GLY:HA3	1:A:844:TRP:CZ2	2.46	0.51
1:A:895:VAL:O	1:A:896:ALA:HB3	2.11	0.51
1:A:234:THR:HG23	1:A:235:VAL:N	2.26	0.51
1:A:519:LEU:N	1:A:519:LEU:HD22	2.26	0.51
1:A:541:CYS:SG	1:A:550:PHE:HD2	2.33	0.51
1:A:703:LEU:N	1:A:703:LEU:HD22	2.26	0.51
1:A:807:ARG:HD3	1:A:812:LEU:HB3	1.93	0.51

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:889:ILE:CD1	1:A:907:TYR:CE1	2.94	0.51
1:A:284:LYS:HD3	1:A:284:LYS:C	2.31	0.50
1:A:403:PHE:CE1	1:A:406:LEU:CD2	2.94	0.50
1:A:412:LEU:O	1:A:412:LEU:HD22	2.11	0.50
1:A:59:THR:HB	1:A:61:HIS:CE1	2.45	0.50
1:A:695:LYS:CB	1:A:696:LEU:HD12	2.41	0.50
1:A:119:ILE:CG2	1:A:121:TYR:CE1	2.95	0.50
1:A:400:ASP:HB2	1:A:402:ASN:OD1	2.11	0.50
1:A:805:ALA:H	1:A:806:MET:HE3	1.75	0.50
1:A:204:THR:HG23	1:A:206:ASN:O	2.11	0.50
1:A:358:ILE:CG2	1:A:361:GLN:HB2	2.41	0.50
1:A:689:PHE:CE1	1:A:691:GLU:CG	2.94	0.50
1:A:76:ASP:O	1:A:77:LEU:HB2	2.11	0.50
1:A:81:VAL:HG12	1:A:82:THR:N	2.26	0.50
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CD2	2.94	0.50
1:A:300:GLU:HG2	1:A:305:GLU:HA	1.93	0.50
1:A:54:VAL:HG22	1:A:55:VAL:N	2.25	0.50
1:A:628:ASP:OD2	1:A:669:TYR:CE1	2.64	0.50
1:A:713:VAL:HG13	1:A:767:SER:HA	1.94	0.50
1:A:133:TYR:O	1:A:134:GLN:HB2	2.11	0.50
1:A:228:ILE:CG2	1:A:233:PHE:CE1	2.94	0.50
1:A:673:TRP:HB3	1:A:694:VAL:HB	1.94	0.50
1:A:64:LEU:HB2	1:A:71:TYR:HD2	1.77	0.50
1:A:370:LEU:CD1	1:A:374:TYR:CD1	2.95	0.50
1:A:457:ILE:HG12	1:A:467:LEU:CD1	2.42	0.50
1:A:782:VAL:HG23	1:A:782:VAL:O	2.12	0.50
1:A:444:LEU:HD12	1:A:446:PHE:CZ	2.44	0.50
1:A:507:GLU:HG3	1:A:537:ARG:CG	2.41	0.50
1:A:132:LEU:HD11	1:A:163:ASN:HD22	1.77	0.50
1:A:182:LEU:HD21	1:A:184:ILE:HG21	1.94	0.50
1:A:597:LEU:CD2	1:A:597:LEU:H	2.25	0.49
1:A:676:TYR:CD1	1:A:730:GLN:HG3	2.47	0.49
1:A:185:ALA:HA	1:A:197:THR:O	2.13	0.49
1:A:321:LEU:CG	1:A:325:LEU:HD11	2.40	0.49
1:A:894:LYS:CD	1:A:899:GLU:HA	2.41	0.49
1:A:295:VAL:HG23	1:A:295:VAL:O	2.12	0.49
1:A:312:ALA:HB1	1:A:334:LEU:HD11	1.95	0.49
1:A:473:GLN:HB3	1:A:502:THR:HG21	1.94	0.49
1:A:506:VAL:HG13	1:A:507:GLU:N	2.27	0.49
1:A:892:HIS:HD2	1:A:893:VAL:N	2.10	0.49
1:A:190:GLY:HA2	1:A:233:PHE:HE2	1.73	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:541:CYS:CB	1:A:544:SER:HB3	2.42	0.49
1:A:792:ASN:HD21	1:A:796:ASN:N	2.10	0.49
1:A:133:TYR:HB3	1:A:136:ILE:HG23	1.94	0.49
1:A:380:LEU:CD1	1:A:386:LYS:HE3	2.37	0.49
1:A:623:ILE:HD12	1:A:624:THR:CA	2.42	0.49
1:A:105:GLU:CB	1:A:106:PRO:HD2	2.42	0.49
1:A:110:THR:CB	1:A:132:LEU:HD21	2.42	0.49
1:A:590:VAL:HG12	1:A:591:ASN:N	2.27	0.49
1:A:46:PRO:CG	1:A:69:ARG:HG3	2.27	0.49
1:A:781:THR:O	1:A:781:THR:HG23	2.12	0.49
1:A:841:GLU:HG3	1:A:842:SER:H	1.77	0.49
1:A:847:LEU:HG	1:A:850:ALA:CA	2.42	0.49
1:A:190:GLY:C	1:A:192:PRO:HD3	2.33	0.49
1:A:475:VAL:HG22	1:A:500:GLN:OE1	2.13	0.49
1:A:863:ILE:HG13	1:A:864:PRO:N	2.28	0.49
1:A:856:ASN:N	1:A:857:PRO:HD3	2.27	0.49
1:A:403:PHE:HE1	1:A:406:LEU:HD23	1.76	0.49
1:A:453:LYS:HE3	1:A:472:VAL:HG22	1.94	0.49
1:A:557:CYS:HB3	1:A:558:VAL:HG23	1.95	0.49
1:A:935:VAL:HG12	1:A:936:CYS:N	2.28	0.49
1:A:603:LEU:HD23	1:A:603:LEU:C	2.33	0.49
1:A:40:VAL:HG21	1:A:76:ASP:O	2.12	0.49
1:A:185:ALA:HB1	1:A:243:TYR:CE2	2.47	0.48
1:A:435:ILE:HG21	1:A:486:PHE:CE1	2.48	0.48
1:A:527:GLY:HA3	1:A:550:PHE:CE1	2.45	0.48
1:A:785:ASN:HB3	1:A:788:PHE:CE2	2.46	0.48
1:A:790:ILE:H	1:A:790:ILE:HD12	1.77	0.48
1:A:265:PRO:CD	1:A:274:VAL:HG22	2.42	0.48
1:A:39:PHE:CD2	1:A:473:GLN:CG	2.95	0.48
1:A:59:THR:HB	1:A:61:HIS:ND1	2.27	0.48
1:A:736:TYR:CD2	1:A:784:TRP:HB3	2.47	0.48
1:A:278:LYS:CE	1:A:296:PRO:HG3	2.41	0.48
1:A:320:VAL:HG23	1:A:441:ASN:HB3	1.94	0.48
1:A:258:LEU:HD12	1:A:258:LEU:N	2.29	0.48
1:A:473:GLN:CD	1:A:504:VAL:HG22	2.34	0.48
1:A:557:CYS:CB	1:A:558:VAL:HG23	2.29	0.48
1:A:175:TYR:CG	1:A:176:SER:N	2.82	0.48
1:A:254:TYR:CE2	1:A:281:ARG:HD2	2.48	0.48
1:A:782:VAL:CG2	1:A:790:ILE:HB	2.41	0.48
1:A:239:PHE:CD1	1:A:260:PRO:HG2	2.48	0.48
1:A:265:PRO:HB2	1:A:266:PRO:HD2	1.94	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:681:THR:HG21	1:A:686:THR:HG21	1.95	0.48
1:A:783:VAL:HG13	1:A:788:PHE:O	2.13	0.48
1:A:374:TYR:CE2	1:A:397:LEU:HD22	2.48	0.48
1:A:882:LEU:HD23	1:A:913:ILE:HD11	1.94	0.48
1:A:440:LYS:HG2	1:A:440:LYS:O	2.14	0.48
1:A:862:ILE:HG22	1:A:877:ILE:CA	2.32	0.48
1:A:144:ASP:O	1:A:145:LEU:HB2	2.13	0.48
1:A:430:ARG:HG2	1:A:431:MET:O	2.14	0.48
1:A:77:LEU:HD22	1:A:501:LEU:HD13	1.96	0.48
1:A:567:ILE:HD12	1:A:650:PHE:CE2	2.49	0.48
1:A:710:LEU:HD13	1:A:801:TYR:OH	2.14	0.48
1:A:160:SER:OG	1:A:162:VAL:HG23	2.14	0.48
1:A:541:CYS:SG	1:A:550:PHE:CD2	3.06	0.48
1:A:862:ILE:CG2	1:A:877:ILE:HG23	2.44	0.48
1:A:118:LEU:C	1:A:118:LEU:HD13	2.34	0.47
1:A:597:LEU:HD22	1:A:597:LEU:H	1.78	0.47
1:A:555:LYS:HB2	1:A:559:ARG:NH2	2.28	0.47
1:A:555:LYS:HZ2	1:A:556:GLN:HG2	1.79	0.47
1:A:561:THR:HG22	1:A:562:VAL:N	2.28	0.47
1:A:626:ASN:ND2	1:A:630:HIS:HB2	2.29	0.47
1:A:740:LEU:HD12	1:A:740:LEU:N	2.29	0.47
1:A:889:ILE:O	1:A:892:HIS:HB3	2.13	0.47
1:A:807:ARG:HB3	1:A:812:LEU:HB2	1.96	0.47
1:A:68:ASN:ND2	1:A:87:PRO:HD3	2.30	0.47
1:A:907:TYR:CZ	1:A:909:PRO:HA	2.48	0.47
1:A:262:MET:O	1:A:263:VAL:HB	2.14	0.47
1:A:281:ARG:HB3	1:A:293:VAL:HG11	1.97	0.47
1:A:495:ILE:HG22	1:A:502:THR:HB	1.96	0.47
1:A:702:GLN:O	1:A:723:ALA:HB1	2.14	0.47
1:A:947:LEU:H	1:A:947:LEU:HD23	1.79	0.47
1:A:333:LEU:HD21	1:A:358:ILE:HG13	1.94	0.47
1:A:380:LEU:CB	1:A:386:LYS:HE3	2.43	0.47
1:A:569:VAL:CG1	1:A:620:PRO:HG3	2.45	0.47
1:A:728:GLN:HA	1:A:753:ARG:NH2	2.30	0.47
1:A:82:THR:O	1:A:82:THR:HG23	2.14	0.47
1:A:863:ILE:CG1	1:A:864:PRO:HD3	2.39	0.47
1:A:361:GLN:HE21	1:A:365:ARG:HH21	1.61	0.47
1:A:372:SER:HA	1:A:375:ARG:NE	2.30	0.47
1:A:458:ARG:NH1	1:A:524:PRO:HB3	2.29	0.47
1:A:745:ILE:O	1:A:745:ILE:HG23	2.15	0.47
1:A:716:ILE:HD11	1:A:763:ASN:HB3	1.96	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:124:ASN:OD1	1:A:142:LEU:HB3	2.14	0.47
1:A:790:ILE:HG22	1:A:791:ASP:N	2.28	0.47
1:A:715:VAL:HG23	1:A:715:VAL:O	2.13	0.47
1:A:253:VAL:O	1:A:253:VAL:HG23	2.15	0.47
1:A:244:VAL:HB	1:A:309:LEU:HD23	1.97	0.47
1:A:295:VAL:CA	1:A:414:VAL:HG21	2.45	0.47
1:A:361:GLN:O	1:A:365:ARG:HG2	2.16	0.46
1:A:380:LEU:HD12	1:A:390:ILE:CG2	2.45	0.46
1:A:503:ARG:O	1:A:505:PRO:HD3	2.16	0.46
1:A:556:GLN:CA	1:A:582:ASN:HB2	2.35	0.46
1:A:689:PHE:CE1	1:A:691:GLU:HG2	2.50	0.46
1:A:814:LEU:HD11	1:A:845:LEU:CD1	2.44	0.46
1:A:333:LEU:CD2	1:A:358:ILE:HA	2.45	0.46
1:A:45:GLU:HB3	1:A:46:PRO:HD3	1.97	0.46
1:A:113:VAL:HG11	1:A:165:SER:HB3	1.96	0.46
1:A:265:PRO:CB	1:A:266:PRO:HD2	2.45	0.46
1:A:704:LEU:H	1:A:723:ALA:HA	1.79	0.46
1:A:68:ASN:HB3	1:A:86:GLY:HA3	1.97	0.46
1:A:947:LEU:N	1:A:947:LEU:HD23	2.30	0.46
1:A:252:PHE:CD1	1:A:283:CYS:HA	2.51	0.46
1:A:264:SER:HA	1:A:265:PRO:HA	1.53	0.46
1:A:435:ILE:HG21	1:A:486:PHE:HE1	1.81	0.46
1:A:159:LEU:HG	1:A:201:ARG:HH12	1.81	0.46
1:A:62:ILE:HD11	1:A:73:LEU:CD1	2.45	0.46
1:A:695:LYS:HB2	1:A:696:LEU:HD12	1.96	0.46
1:A:743:GLN:HG2	1:A:744:GLY:N	2.31	0.46
1:A:892:HIS:CD2	1:A:893:VAL:CG2	2.98	0.46
1:A:343:LYS:HG2	1:A:344:ARG:HG2	1.97	0.46
1:A:531:LEU:CB	1:A:640:GLU:OE2	2.64	0.46
1:A:543:ARG:HH11	1:A:549:ARG:HH22	1.62	0.46
1:A:72:LYS:O	1:A:80:LEU:HB2	2.15	0.46
1:A:286:ASP:OD1	1:A:288:ALA:HB3	2.16	0.46
1:A:468:GLN:HB3	1:A:468:GLN:HE21	1.47	0.46
1:A:511:GLN:HG3	1:A:512:TYR:CD2	2.51	0.46
1:A:843:ARG:HB2	1:A:843:ARG:NH1	2.30	0.46
1:A:892:HIS:CD2	1:A:893:VAL:HG22	2.51	0.46
1:A:117:LEU:HD11	1:A:126:LEU:CD2	2.31	0.46
1:A:118:LEU:HB3	1:A:127:ILE:HG22	1.98	0.46
1:A:245:TYR:CD2	1:A:312:ALA:HB3	2.51	0.46
1:A:902:PRO:HA	1:A:915:CYS:HA	1.97	0.46
1:A:226:ILE:HD11	1:A:385:LEU:CD2	2.46	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:44:GLY:CA	1:A:50:PHE:HE2	2.23	0.46
1:A:539:GLU:HG3	1:A:540:ARG:N	2.31	0.46
1:A:192:PRO:HB3	1:A:233:PHE:CZ	2.51	0.45
1:A:288:ALA:O	1:A:289:PHE:HB2	2.17	0.45
1:A:444:LEU:CD2	1:A:525:HIS:NE2	2.76	0.45
1:A:594:PHE:CZ	1:A:614:PRO:HD3	2.51	0.45
1:A:624:THR:O	1:A:624:THR:HG23	2.15	0.45
1:A:91:ASN:OD1	1:A:92:PRO:HD2	2.17	0.45
1:A:949:TYR:CE2	1:A:951:MET:HE2	2.47	0.45
1:A:296:PRO:CD	1:A:414:VAL:HG22	2.45	0.45
1:A:46:PRO:HD2	1:A:71:TYR:OH	2.16	0.45
1:A:492:GLN:HG2	1:A:503:ARG:HD2	1.98	0.45
1:A:830:GLN:CG	1:A:831:CYS:H	2.24	0.45
1:A:873:THR:HG22	1:A:874:LYS:N	2.31	0.45
1:A:110:THR:CB	1:A:132:LEU:CD2	2.94	0.45
1:A:256:LEU:HD22	1:A:256:LEU:N	2.31	0.45
1:A:695:LYS:C	1:A:696:LEU:HD12	2.37	0.45
1:A:358:ILE:CG2	1:A:361:GLN:CB	2.95	0.45
1:A:444:LEU:HD13	1:A:445:ALA:H	1.79	0.45
1:A:563:HIS:CB	1:A:577:VAL:HG12	2.46	0.45
1:A:949:TYR:CE2	1:A:951:MET:CE	2.95	0.45
1:A:99:ILE:HD11	1:A:152:PHE:CB	2.41	0.45
1:A:116:MET:SD	1:A:169:PHE:HA	2.57	0.45
1:A:446:PHE:CB	1:A:454:LEU:HD11	2.43	0.45
1:A:469:TYR:CG	1:A:470:GLU:N	2.84	0.45
1:A:783:VAL:HG11	1:A:786:GLY:O	2.15	0.45
1:A:98:ARG:NH2	1:A:107:LEU:HD12	2.29	0.45
1:A:62:ILE:CD1	1:A:501:LEU:CD1	2.95	0.45
1:A:778:VAL:O	1:A:797:LYS:HB2	2.17	0.45
1:A:62:ILE:CD1	1:A:77:LEU:CD2	2.94	0.45
1:A:828:PRO:HG3	1:A:837:CYS:SG	2.56	0.45
1:A:890:ALA:O	1:A:891:SER:HB2	2.17	0.45
1:A:442:HIS:CD2	1:A:458:ARG:HH21	2.35	0.45
1:A:492:GLN:HG2	1:A:503:ARG:HG2	1.98	0.45
1:A:58:ARG:HG2	1:A:58:ARG:NH1	2.31	0.45
1:A:833:LEU:CB	1:A:836:HIS:HD2	2.22	0.45
1:A:118:LEU:O	1:A:127:ILE:HG22	2.17	0.45
1:A:110:THR:HG21	1:A:132:LEU:HD21	1.97	0.45
1:A:179:ASP:O	1:A:180:ASP:HB3	2.17	0.45
1:A:305:GLU:HG2	1:A:307:ARG:HG2	1.99	0.45
1:A:370:LEU:CD2	1:A:374:TYR:HE1	2.27	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:435:ILE:HG23	1:A:486:PHE:HE1	1.81	0.45
1:A:72:LYS:CE	1:A:80:LEU:CD1	2.95	0.45
1:A:245:TYR:CE2	1:A:247:PHE:HD2	2.34	0.45
1:A:437:TYR:CE2	1:A:439:TYR:HB2	2.51	0.45
1:A:574:VAL:HG22	1:A:613:SER:OG	2.17	0.45
1:A:564:PRO:HB2	1:A:576:LEU:CD2	2.48	0.45
1:A:892:HIS:CD2	1:A:893:VAL:N	2.85	0.45
1:A:162:VAL:HG21	1:A:187:ALA:HB3	1.99	0.44
1:A:306:TYR:HE1	1:A:351:GLU:HG2	1.82	0.44
1:A:62:ILE:CD1	1:A:73:LEU:HD12	2.45	0.44
1:A:247:PHE:CD1	1:A:314:LEU:HD22	2.52	0.44
1:A:435:ILE:CD1	1:A:486:PHE:HD1	2.31	0.44
1:A:541:CYS:HB3	1:A:544:SER:HB3	1.99	0.44
1:A:566:ASN:CB	1:A:651:VAL:CG2	2.95	0.44
1:A:151:PRO:HB2	1:A:157:HIS:CE1	2.52	0.44
1:A:278:LYS:HD3	1:A:294:GLU:HG2	1.98	0.44
1:A:586:LEU:HD13	1:A:590:VAL:HG21	1.99	0.44
1:A:567:ILE:HD11	1:A:652:PHE:CD1	2.53	0.44
1:A:663:SER:O	1:A:667:SER:HB2	2.17	0.44
1:A:884:LEU:HA	1:A:884:LEU:HD23	1.76	0.44
1:A:620:PRO:O	1:A:623:ILE:HG13	2.18	0.44
1:A:671:CYS:HB3	1:A:680:CYS:SG	2.57	0.44
1:A:291:SER:HB3	1:A:404:CYS:O	2.18	0.44
1:A:458:ARG:HG3	1:A:468:GLN:NE2	2.32	0.44
1:A:703:LEU:CD2	1:A:790:ILE:CG2	2.95	0.44
1:A:252:PHE:HD1	1:A:283:CYS:HA	1.82	0.44
1:A:40:VAL:O	1:A:40:VAL:HG13	2.17	0.44
1:A:549:ARG:HA	1:A:584:PRO:HB3	2.00	0.44
1:A:597:LEU:HG	1:A:622:ILE:HG12	1.99	0.44
1:A:42:PHE:CZ	1:A:45:GLU:CB	2.95	0.44
1:A:713:VAL:O	1:A:714:GLU:HB2	2.18	0.44
1:A:889:ILE:HA	1:A:892:HIS:ND1	2.33	0.44
1:A:217:PHE:CE2	1:A:219:ASP:HB2	2.53	0.44
1:A:322:GLY:HA2	1:A:327:VAL:HG22	1.99	0.44
1:A:262:MET:SD	1:A:383:ALA:HB3	2.58	0.44
1:A:464:GLY:O	1:A:465:ASN:HB3	2.17	0.44
1:A:635:GLN:HB3	1:A:644:THR:HB	1.99	0.44
1:A:759:VAL:CG1	1:A:760:GLN:N	2.81	0.44
1:A:832:THR:HG21	1:A:836:HIS:CB	2.47	0.44
1:A:95:TYR:HD1	1:A:95:TYR:HA	1.70	0.44
1:A:324:THR:HG22	1:A:324:THR:O	2.18	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:501:LEU:CD2	1:A:502:THR:N	2.81	0.43
1:A:53:LEU:HD12	1:A:501:LEU:HG	1.99	0.43
1:A:711:VAL:HG21	1:A:798:VAL:CG2	2.48	0.43
1:A:853:LYS:HG3	1:A:940:PHE:CZ	2.53	0.43
1:A:189:ASP:HB3	1:A:191:LYS:HD3	1.99	0.43
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CD1	3.00	0.43
1:A:295:VAL:CB	1:A:414:VAL:HG21	2.47	0.43
1:A:281:ARG:NH1	1:A:366:ILE:HG21	2.33	0.43
1:A:841:GLU:HG3	1:A:842:SER:N	2.32	0.43
1:A:569:VAL:CG2	1:A:654:ASN:CA	2.95	0.43
1:A:743:GLN:CD	1:A:743:GLN:H	2.21	0.43
1:A:764:THR:CG2	1:A:766:TYR:CZ	3.01	0.43
1:A:119:ILE:HG23	1:A:121:TYR:CE1	2.53	0.43
1:A:296:PRO:HB2	1:A:417:MET:CE	2.48	0.43
1:A:528:TRP:HZ2	1:A:533:ASN:OD1	2.01	0.43
1:A:716:ILE:CD1	1:A:763:ASN:HB3	2.49	0.43
1:A:358:ILE:O	1:A:358:ILE:HG23	2.18	0.43
1:A:574:VAL:CG2	1:A:613:SER:HB3	2.48	0.43
1:A:764:THR:HG23	1:A:766:TYR:CZ	2.54	0.43
1:A:662:LEU:HD21	1:A:791:ASP:HB2	1.79	0.43
1:A:98:ARG:HE	1:A:107:LEU:HD12	1.83	0.43
1:A:133:TYR:CG	1:A:136:ILE:CG1	2.94	0.43
1:A:162:VAL:HG12	1:A:164:GLU:H	1.84	0.43
1:A:225:MET:CE	1:A:227:LYS:CG	2.94	0.43
1:A:458:ARG:HB2	1:A:468:GLN:HE22	1.83	0.43
1:A:53:LEU:HD11	1:A:501:LEU:HD11	2.00	0.43
1:A:567:ILE:HD11	1:A:650:PHE:CE2	2.53	0.43
1:A:863:ILE:HG22	1:A:876:THR:CB	2.35	0.43
1:A:333:LEU:HD23	1:A:358:ILE:HA	2.01	0.43
1:A:468:GLN:HB2	1:A:523:ASP:HA	2.00	0.43
1:A:542:GLU:HG2	1:A:543:ARG:HG3	2.01	0.43
1:A:562:VAL:HG22	1:A:578:LEU:HD22	1.98	0.43
1:A:555:LYS:HZ1	1:A:582:ASN:ND2	1.89	0.43
1:A:703:LEU:HD13	1:A:723:ALA:CB	2.47	0.43
1:A:460:ASP:CG	1:A:463:LYS:HB3	2.39	0.43
1:A:173:VAL:O	1:A:173:VAL:HG23	2.18	0.43
1:A:471:THR:HG23	1:A:473:GLN:NE2	2.27	0.43
1:A:617:LYS:HG3	1:A:618:GLU:N	2.34	0.43
1:A:676:TYR:HD1	1:A:730:GLN:HG3	1.84	0.43
1:A:90:ASP:C	1:A:107:LEU:HD22	2.39	0.43
1:A:470:GLU:HG2	1:A:471:THR:N	2.34	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:805:ALA:N	1:A:806:MET:CE	2.82	0.43
1:A:182:LEU:HB2	1:A:203:LEU:HD11	1.99	0.42
1:A:370:LEU:HD12	1:A:399:ILE:HG23	2.01	0.42
1:A:500:GLN:HB3	1:A:500:GLN:HE21	1.59	0.42
1:A:679:VAL:CG1	1:A:680:CYS:N	2.82	0.42
1:A:728:GLN:HG3	1:A:753:ARG:NH2	2.34	0.42
1:A:62:ILE:CD1	1:A:73:LEU:HB2	2.46	0.42
1:A:839:ALA:HB1	1:A:841:GLU:O	2.18	0.42
1:A:889:ILE:HG23	1:A:892:HIS:NE2	2.33	0.42
1:A:123:GLU:HB2	1:A:125:ARG:HG2	2.00	0.42
1:A:133:TYR:CB	1:A:136:ILE:HG23	2.49	0.42
1:A:234:THR:CG2	1:A:235:VAL:N	2.82	0.42
1:A:589:GLY:C	1:A:639:LYS:HG2	2.39	0.42
1:A:100:VAL:HG21	1:A:158:TYR:OH	2.19	0.42
1:A:178:PHE:O	1:A:178:PHE:HD1	2.02	0.42
1:A:185:ALA:CB	1:A:243:TYR:CE2	3.02	0.42
1:A:186:THR:CG2	1:A:187:ALA:N	2.81	0.42
1:A:224:SER:HA	1:A:289:PHE:CD1	2.54	0.42
1:A:590:VAL:CG1	1:A:591:ASN:N	2.82	0.42
1:A:64:LEU:HD12	1:A:496:MET:HE3	1.98	0.42
1:A:885:GLU:HG3	1:A:886:PHE:N	2.34	0.42
1:A:128:ALA:O	1:A:138:LYS:HG2	2.19	0.42
1:A:169:PHE:CD2	1:A:170:GLY:N	2.84	0.42
1:A:256:LEU:HD12	1:A:297:ILE:HD11	2.02	0.42
1:A:327:VAL:HG11	1:A:358:ILE:HD11	1.97	0.42
1:A:789:ASN:HD22	1:A:790:ILE:N	2.17	0.42
1:A:216:VAL:CG1	1:A:217:PHE:N	2.82	0.42
1:A:274:VAL:HG23	1:A:275:TYR:N	2.30	0.42
1:A:40:VAL:HG11	1:A:503:ARG:HE	1.79	0.42
1:A:563:HIS:HB2	1:A:577:VAL:HG13	2.01	0.42
1:A:62:ILE:CD1	1:A:501:LEU:HD13	2.49	0.42
1:A:117:LEU:HG	1:A:126:LEU:HD11	2.01	0.42
1:A:333:LEU:HD23	1:A:358:ILE:HG13	2.00	0.42
1:A:865:VAL:CG1	1:A:866:THR:N	2.82	0.42
1:A:387:VAL:CG1	1:A:388:LYS:N	2.82	0.42
1:A:55:VAL:HG22	1:A:62:ILE:HG22	2.00	0.42
1:A:562:VAL:HG22	1:A:578:LEU:HD23	1.99	0.42
1:A:605:ILE:O	1:A:608:GLN:HG2	2.20	0.42
1:A:711:VAL:HB	1:A:800:LEU:HD23	2.02	0.42
1:A:62:ILE:CD1	1:A:64:LEU:HD21	2.46	0.42
1:A:68:ASN:CB	1:A:86:GLY:HA3	2.50	0.42

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:706:VAL:CG2	1:A:707:ASP:N	2.83	0.42
1:A:332:ASP:O	1:A:333:LEU:HD23	2.18	0.42
1:A:543:ARG:HB2	1:A:549:ARG:NH1	2.34	0.42
1:A:555:LYS:O	1:A:582:ASN:OD1	2.38	0.42
1:A:631:VAL:HG13	1:A:631:VAL:O	2.19	0.42
1:A:783:VAL:CG1	1:A:784:TRP:N	2.83	0.42
1:A:321:LEU:HD23	1:A:333:LEU:CD1	2.50	0.42
1:A:480:VAL:HB	1:A:484:MET:HE2	2.02	0.42
1:A:567:ILE:CD1	1:A:567:ILE:N	2.82	0.42
1:A:597:LEU:CD2	1:A:597:LEU:N	2.83	0.42
1:A:67:VAL:CG1	1:A:111:ASN:HB3	2.50	0.41
1:A:111:ASN:O	1:A:132:LEU:HD13	2.20	0.41
1:A:471:THR:HG21	1:A:473:GLN:OE1	2.19	0.41
1:A:528:TRP:CZ2	1:A:533:ASN:OD1	2.73	0.41
1:A:778:VAL:HG12	1:A:779:GLU:O	2.20	0.41
1:A:889:ILE:CD1	1:A:907:TYR:CZ	3.01	0.41
1:A:119:ILE:HG21	1:A:121:TYR:CE1	2.54	0.41
1:A:403:PHE:CE2	1:A:405:GLY:HA2	2.55	0.41
1:A:527:GLY:HA3	1:A:550:PHE:HZ	1.72	0.41
1:A:53:LEU:CG	1:A:64:LEU:CD1	2.96	0.41
1:A:773:ILE:N	1:A:773:ILE:CD1	2.82	0.41
1:A:862:ILE:HG21	1:A:877:ILE:HG12	2.03	0.41
1:A:904:VAL:CG1	1:A:905:ASP:N	2.82	0.41
1:A:112:ASN:ND2	1:A:133:TYR:HE2	2.17	0.41
1:A:188:VAL:O	1:A:188:VAL:HG22	2.21	0.41
1:A:280:VAL:CG1	1:A:281:ARG:N	2.83	0.41
1:A:926:ALA:HB2	1:A:949:TYR:CD1	2.55	0.41
1:A:137:CYS:SG	1:A:159:LEU:CD1	3.09	0.41
1:A:159:LEU:HG	1:A:201:ARG:NH1	2.35	0.41
1:A:380:LEU:CB	1:A:386:LYS:CE	2.95	0.41
1:A:412:LEU:CD1	1:A:412:LEU:N	2.83	0.41
1:A:541:CYS:HB2	1:A:544:SER:HB3	2.01	0.41
1:A:555:LYS:NZ	1:A:556:GLN:HG2	2.34	0.41
1:A:920:ALA:C	1:A:922:PRO:HD2	2.40	0.41
1:A:177:ASN:O	1:A:178:PHE:CG	2.73	0.41
1:A:44:GLY:O	1:A:47:ALA:HA	2.20	0.41
1:A:72:LYS:CD	1:A:80:LEU:CD1	2.97	0.41
1:A:817:ASP:OD1	1:A:820:PHE:CD2	2.73	0.41
1:A:888:ASP:OD1	1:A:889:ILE:HG13	2.20	0.41
1:A:95:TYR:CG	1:A:96:PRO:CD	3.03	0.41
1:A:307:ARG:HA	1:A:307:ARG:HD3	1.88	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:843:ARG:CZ	1:A:843:ARG:CB	2.99	0.41
1:A:225:MET:HE1	1:A:227:LYS:CG	2.47	0.41
1:A:457:ILE:CG1	1:A:467:LEU:HD13	2.50	0.41
1:A:901:SER:HA	1:A:902:PRO:HD2	1.89	0.41
1:A:242:TYR:CE1	1:A:345:LYS:HE2	2.56	0.41
1:A:453:LYS:CE	1:A:472:VAL:HG22	2.51	0.41
1:A:662:LEU:O	1:A:666:GLU:HB3	2.20	0.41
1:A:747:GLN:HG3	1:A:766:TYR:HD1	1.86	0.41
1:A:943:ARG:CZ	1:A:943:ARG:HB2	2.51	0.41
1:A:137:CYS:O	1:A:150:GLU:HG3	2.20	0.41
1:A:239:PHE:CD1	1:A:260:PRO:CD	3.03	0.41
1:A:480:VAL:HB	1:A:484:MET:HE1	1.97	0.41
1:A:548:ARG:HG3	1:A:584:PRO:N	2.22	0.41
1:A:435:ILE:HD12	1:A:486:PHE:CE1	2.56	0.41
1:A:667:SER:HB3	1:A:668:PRO:CD	2.51	0.41
1:A:845:LEU:HD11	1:A:852:SER:OG	2.20	0.41
1:A:313:TYR:CZ	1:A:435:ILE:CD1	3.04	0.41
1:A:469:TYR:CZ	1:A:470:GLU:O	2.74	0.41
1:A:473:GLN:HE21	1:A:473:GLN:HB2	1.55	0.41
1:A:658:HIS:ND1	1:A:663:SER:HB3	2.36	0.41
1:A:681:THR:OG1	1:A:686:THR:HG21	2.21	0.41
1:A:710:LEU:HD12	1:A:710:LEU:C	2.40	0.41
1:A:236:ILE:CG2	1:A:239:PHE:HB2	2.51	0.40
1:A:256:LEU:CB	1:A:309:LEU:CD2	2.94	0.40
1:A:488:LYS:CG	1:A:489:ASP:N	2.84	0.40
1:A:560:LEU:CG	1:A:648:THR:CG2	2.98	0.40
1:A:62:ILE:HD13	1:A:77:LEU:HD23	2.02	0.40
1:A:630:HIS:CD2	1:A:632:VAL:CG2	3.00	0.40
1:A:560:LEU:HB3	1:A:648:THR:CG2	2.51	0.40
1:A:115:LYS:HB3	1:A:168:VAL:CG1	2.47	0.40
1:A:185:ALA:HB3	1:A:243:TYR:CD2	2.56	0.40
1:A:226:ILE:HD11	1:A:385:LEU:HD23	2.02	0.40
1:A:566:ASN:CA	1:A:651:VAL:CG2	2.95	0.40
1:A:563:HIS:CB	1:A:577:VAL:CG1	2.95	0.40
1:A:897:GLY:H	1:A:924:GLN:HE22	1.69	0.40
1:A:349:LEU:N	1:A:349:LEU:CD2	2.84	0.40
1:A:380:LEU:HD22	1:A:412:LEU:HB3	2.02	0.40
1:A:632:VAL:HG12	1:A:633:GLN:N	2.37	0.40
1:A:252:PHE:HE1	1:A:283:CYS:SG	2.45	0.40
1:A:45:GLU:CB	1:A:46:PRO:CD	3.00	0.40
1:A:492:GLN:CG	1:A:503:ARG:HD2	2.51	0.40

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:875:VAL:HG23	1:A:875:VAL:O	2.22	0.40
1:A:853:LYS:HG2	1:A:940:PHE:HZ	1.87	0.40
1:A:95:TYR:CE2	1:A:194:TYR:CD1	3.09	0.40

All (16) 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:233:PHE:O	1:A:234:THR:OG1[8_665]	1.24	0.96
1:A:285:GLU:OE2	1:A:834:ARG:NH1[6_565]	1.32	0.88
1:A:146:PHE:CD1	1:A:730:GLN:OE1[4_455]	1.46	0.74
1:A:146:PHE:CE1	1:A:730:GLN:CD[4_455]	1.54	0.66
1:A:83:HIS:CE1	1:A:731:SER:OG[4_455]	1.63	0.57
1:A:148:LEU:O	1:A:728:GLN:NE2[4_455]	1.65	0.55
1:A:146:PHE:CE1	1:A:730:GLN:OE1[4_455]	1.79	0.41
1:A:234:THR:CA	1:A:234:THR:CA[8_665]	1.89	0.31
1:A:149:GLY:CA	1:A:728:GLN:OE1[4_455]	1.91	0.29
1:A:155:LYS:NZ	1:A:220:GLU:CB[8_665]	1.94	0.26
1:A:96:PRO:CG	1:A:221:PHE:CE1[8_665]	2.03	0.17
1:A:155:LYS:NZ	1:A:220:GLU:C[8_665]	2.03	0.17
1:A:141:ARG:NH2	1:A:691:GLU:OE2[4_455]	2.05	0.15
1:A:146:PHE:CE1	1:A:730:GLN:NE2[4_455]	2.05	0.15
1:A:146:PHE:CD1	1:A:730:GLN:CD[4_455]	2.16	0.04
1:A:234:THR:O	1:A:234:THR:O[8_665]	2.17	0.03

## 5.3 Torsion angles [i](#)

### 5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	911/1207 (76%)	843 (92%)	46 (5%)	22 (2%)	<b>6</b> 33

All (22) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	96	PRO
1	A	181	LYS
1	A	191	LYS
1	A	410	ALA
1	A	465	ASN
1	A	506	VAL
1	A	557	CYS
1	A	700	CYS
1	A	701	PRO
1	A	803	CYS
1	A	804	GLY
1	A	864	PRO
1	A	87	PRO
1	A	507	GLU
1	A	271	LYS
1	A	474	VAL
1	A	849	GLY
1	A	263	VAL
1	A	344	ARG
1	A	933	VAL
1	A	44	GLY
1	A	921	LYS

### 5.3.2 Protein sidechains [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	812/1067 (76%)	789 (97%)	23 (3%)	43 65

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

Mol	Chain	Res	Type
1	A	69	ARG
1	A	72	LYS
1	A	271	LYS
1	A	386	LYS
1	A	412	LEU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

<b>Mol</b>	<b>Chain</b>	<b>Res</b>	<b>Type</b>
1	A	435	ILE
1	A	468	GLN
1	A	473	GLN
1	A	523	ASP
1	A	529	CYS
1	A	548	ARG
1	A	567	ILE
1	A	575	LEU
1	A	597	LEU
1	A	621	ARG
1	A	670	ARG
1	A	743	GLN
1	A	773	ILE
1	A	797	LYS
1	A	806	MET
1	A	853	LYS
1	A	854	CYS
1	A	892	HIS

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (29) such sidechains are listed below:

<b>Mol</b>	<b>Chain</b>	<b>Res</b>	<b>Type</b>
1	A	51	ASN
1	A	101	GLN
1	A	157	HIS
1	A	163	ASN
1	A	273	GLN
1	A	361	GLN
1	A	409	ASN
1	A	441	ASN
1	A	442	HIS
1	A	473	GLN
1	A	500	GLN
1	A	533	ASN
1	A	582	ASN
1	A	626	ASN
1	A	629	HIS
1	A	630	HIS
1	A	672	HIS
1	A	678	HIS
1	A	685	ASN
1	A	690	GLN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	702	GLN
1	A	728	GLN
1	A	747	GLN
1	A	789	ASN
1	A	792	ASN
1	A	826	GLN
1	A	836	HIS
1	A	881	ASN
1	A	892	HIS

### 5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

### 5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates 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	3

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	653:TYR	C	654:ASN	N	2.02
1	A	557:CYS	C	558:VAL	N	1.73
1	A	700:CYS	C	701:PRO	N	1.09

## 6 Fit of model and data

### 6.1 Protein, DNA and RNA chains

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.

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

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.

### 6.3 Carbohydrates

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.

### 6.4 Ligands

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.

### 6.5 Other polymers

Unable to reproduce the depositors R factor - this section is therefore empty.