



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

May 28, 2020 – 07:55 pm BST

PDB ID : 1LDJ
Title : Structure of the Cul1-Rbx1-Skp1-F boxSkp2 SCF Ubiquitin Ligase Complex
Authors : Zheng, N.; Schulman, B.A.; Song, L.; Miller, J.J.; Jeffrey, P.D.; Wang, P.;
Chu, C.; Koepp, D.M.; Elledge, S.J.; Pagano, M.; Conaway, R.C.; Conaway,
J.W.; Harper, J.W.; Pavletich, N.P.
Deposited on : 2002-04-08
Resolution : 3.00 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

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
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) : 2.11

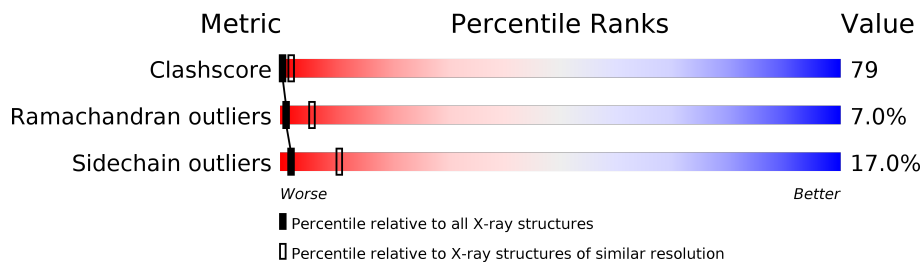
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.00 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))
Clashscore	141614	2416 (3.00-3.00)
Ramachandran outliers	138981	2333 (3.00-3.00)
Sidechain outliers	138945	2336 (3.00-3.00)

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

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	760	
2	B	90	

2 Entry composition [i](#)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 6668 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 Cullin homolog 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
1	A	725	5934	3764	1011	1130	29	0	0	0

- Molecule 2 is a protein called ring-box protein 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S			
2	B	88	731	464	133	125	9	0	0	0

- Molecule 3 is ZINC ION (three-letter code: ZN) (formula: Zn).

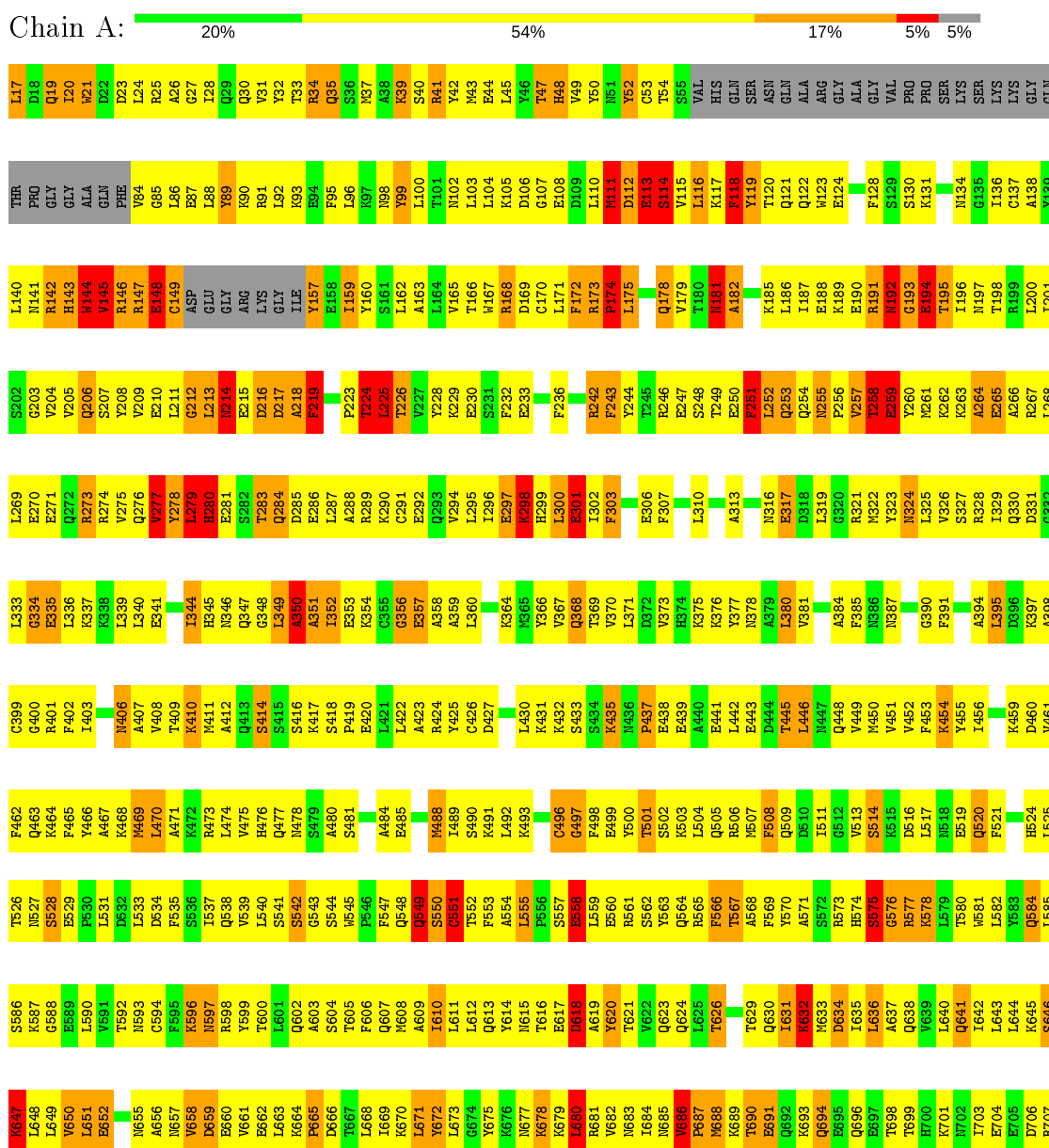
Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	B	3	Total	Zn	0	0
			3	3		

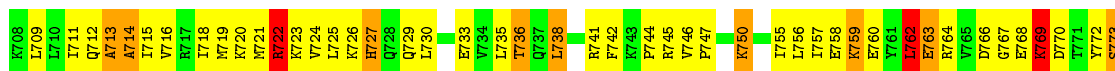
3 Residue-property plots

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

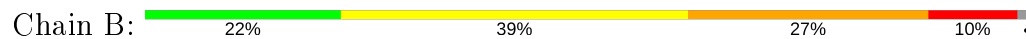
Note EDS was not executed.

- Molecule 1: Cullin homolog 1





- Molecule 2: ring-box protein 1



4 Data and refinement statistics

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

Property	Value	Source
Space group	P 1 21 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	113.97Å 49.97Å 135.88Å 90.00° 107.83° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	15.00 – 3.00	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	(Not available) (15.00-3.00)	Depositor
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
Refinement program	CNS 1.0	Depositor
R, R_{free}	0.247 , 0.288	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtrriage
Total number of atoms	6668	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	95.0	wwPDB-VP

5 Model quality i

5.1 Standard geometry i

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z >5	RMSZ	# Z >5
1	A	1.17	30/6032 (0.5%)	1.58	141/8122 (1.7%)
2	B	1.05	6/752 (0.8%)	1.27	11/1020 (1.1%)
All	All	1.16	36/6784 (0.5%)	1.54	152/9142 (1.7%)

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	1	13
2	B	0	1
All	All	1	14

All (36) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	149	CYS	N-CA	32.71	2.11	1.46
1	A	300	LEU	C-N	-28.41	0.68	1.34
1	A	20	ILE	N-CA	23.27	1.92	1.46
1	A	578	LYS	CB-CG	-22.77	0.91	1.52
1	A	301	GLU	C-N	-22.07	0.83	1.34
1	A	146	ARG	N-CA	21.92	1.90	1.46
1	A	714	ALA	N-CA	16.74	1.79	1.46
1	A	119	TYR	N-CA	15.46	1.77	1.46
2	B	86	ARG	C-N	-14.26	1.01	1.34
2	B	87	TRP	N-CA	13.16	1.72	1.46
1	A	351	ALA	N-CA	12.96	1.72	1.46
1	A	226	THR	CB-OG1	-11.35	1.20	1.43
1	A	182	ALA	N-CA	10.36	1.67	1.46
1	A	214	ASN	C-N	-9.88	1.11	1.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	114	SER	N-CA	8.89	1.64	1.46
1	A	217	ASP	C-N	-8.29	1.15	1.34
1	A	225	LEU	CB-CG	-7.93	1.29	1.52
1	A	279	LEU	N-CA	-7.67	1.31	1.46
2	B	36	ASP	N-CA	-7.53	1.31	1.46
1	A	278	TYR	CB-CG	-7.25	1.40	1.51
1	A	111	MET	N-CA	-6.42	1.33	1.46
1	A	194	GLU	N-CA	-6.38	1.33	1.46
2	B	40	ASP	C-N	-6.23	1.19	1.34
1	A	686	VAL	N-CA	-6.09	1.34	1.46
1	A	496	CYS	N-CA	6.04	1.58	1.46
1	A	278	TYR	N-CA	6.00	1.58	1.46
1	A	19	GLN	N-CA	5.97	1.58	1.46
1	A	224	THR	C-N	-5.95	1.20	1.34
1	A	324	ASN	N-CA	5.88	1.58	1.46
2	B	41	ASN	N-CA	-5.82	1.34	1.46
1	A	277	VAL	C-N	5.77	1.47	1.34
1	A	194	GLU	C-N	-5.54	1.21	1.34
1	A	280	HIS	CA-CB	-5.39	1.42	1.53
1	A	278	TYR	CA-CB	-5.30	1.42	1.53
1	A	278	TYR	C-N	-5.10	1.22	1.34
2	B	40	ASP	CA-C	-5.03	1.39	1.52

All (152) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	217	ASP	O-C-N	-37.41	62.85	122.70
1	A	194	GLU	C-N-CA	-25.82	57.14	121.70
1	A	217	ASP	CA-C-N	25.34	172.95	117.20
1	A	225	LEU	CB-CG-CD2	-16.37	83.17	111.00
1	A	576	GLY	O-C-N	16.17	148.57	122.70
1	A	217	ASP	N-CA-CB	-15.75	82.25	110.60
1	A	216	ASP	CB-CA-C	-15.66	79.07	110.40
1	A	194	GLU	CA-C-N	15.40	151.07	117.20
1	A	316	ASN	CB-CA-C	-14.89	80.61	110.40
1	A	216	ASP	N-CA-C	14.56	150.31	111.00
2	B	87	TRP	N-CA-CB	-14.29	84.88	110.60
1	A	193	GLY	C-N-CA	-14.03	86.63	121.70
1	A	316	ASN	N-CA-C	13.80	148.27	111.00
1	A	647	LYS	N-CA-CB	-13.78	85.81	110.60
1	A	218	ALA	C-N-CA	-13.71	87.43	121.70
1	A	356	GLY	N-CA-C	13.48	146.79	113.10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	672	TYR	CB-CA-C	-13.45	83.51	110.40
1	A	111	MET	C-N-CA	-13.42	88.15	121.70
1	A	19	GLN	C-N-CA	-13.31	88.42	121.70
1	A	646	SER	N-CA-C	-13.25	75.23	111.00
1	A	549	GLN	C-N-CA	-13.21	88.68	121.70
1	A	194	GLU	O-C-N	-12.66	102.45	122.70
1	A	300	LEU	O-C-N	-12.36	102.92	122.70
1	A	213	LEU	CA-C-N	-12.29	90.17	117.20
1	A	651	LEU	N-CA-CB	-12.22	85.95	110.40
1	A	258	THR	CA-C-N	-12.13	90.52	117.20
1	A	113	GLU	C-N-CA	11.98	151.64	121.70
1	A	280	HIS	CA-CB-CG	-11.81	93.52	113.60
1	A	279	LEU	CA-C-N	-11.77	91.30	117.20
1	A	774	TYR	CB-CA-C	-11.43	87.55	110.40
1	A	775	LEU	N-CA-CB	-11.38	87.64	110.40
1	A	146	ARG	N-CA-CB	-11.28	90.29	110.60
1	A	650	VAL	CB-CA-C	-11.28	89.97	111.40
1	A	631	ILE	CB-CA-C	-11.25	89.09	111.60
1	A	576	GLY	CA-C-N	-11.15	92.66	117.20
2	B	87	TRP	N-CA-C	10.89	140.41	111.00
1	A	112	ASP	N-CA-C	10.82	140.21	111.00
2	B	86	ARG	C-N-CA	-10.28	96.00	121.70
1	A	195	THR	N-CA-C	10.21	138.56	111.00
1	A	301	GLU	O-C-N	-10.10	106.54	122.70
1	A	280	HIS	CB-CA-C	9.96	130.31	110.40
1	A	714	ALA	N-CA-C	9.74	137.31	111.00
1	A	357	GLU	N-CA-CB	-9.66	93.22	110.60
1	A	194	GLU	N-CA-C	9.60	136.91	111.00
1	A	145	VAL	C-N-CA	-9.54	97.85	121.70
1	A	713	ALA	C-N-CA	-9.40	98.19	121.70
1	A	300	LEU	CA-C-N	9.36	137.80	117.20
1	A	578	LYS	CB-CG-CD	-9.33	87.33	111.60
1	A	714	ALA	N-CA-CB	-9.22	97.20	110.10
1	A	148	GLU	C-N-CA	-9.16	98.80	121.70
1	A	111	MET	CA-C-N	9.10	137.22	117.20
1	A	279	LEU	O-C-N	9.00	137.10	122.70
1	A	278	TYR	CB-CA-C	-8.91	92.58	110.40
1	A	213	LEU	C-N-CA	8.69	143.42	121.70
1	A	317	GLU	N-CA-CB	-8.62	95.09	110.60
1	A	620	TYR	CB-CG-CD1	8.56	126.14	121.00
1	A	20	ILE	N-CA-CB	-8.55	91.14	110.80
1	A	212	GLY	C-N-CA	-8.11	101.43	121.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	213	LEU	O-C-N	8.09	135.65	122.70
1	A	258	THR	O-C-N	7.99	135.48	122.70
1	A	214	ASN	O-C-N	-7.98	109.94	122.70
1	A	351	ALA	N-CA-C	-7.92	89.62	111.00
1	A	182	ALA	N-CA-C	7.86	132.23	111.00
1	A	119	TYR	N-CA-C	-7.81	89.91	111.00
1	A	144	TRP	CB-CA-C	7.77	125.94	110.40
1	A	146	ARG	N-CA-C	-7.73	90.13	111.00
2	B	40	ASP	C-N-CA	-7.73	102.38	121.70
1	A	225	LEU	CB-CG-CD1	7.71	124.11	111.00
1	A	224	THR	O-C-N	-7.71	110.37	122.70
1	A	279	LEU	C-N-CA	7.67	140.88	121.70
1	A	192	ASN	C-N-CA	-7.61	106.32	122.30
1	A	300	LEU	C-N-CA	7.57	140.63	121.70
1	A	213	LEU	N-CA-C	7.53	131.33	111.00
1	A	620	TYR	CB-CG-CD2	-7.51	116.49	121.00
1	A	182	ALA	N-CA-CB	-7.42	99.71	110.10
1	A	118	PHE	C-N-CA	-7.36	103.31	121.70
1	A	112	ASP	C-N-CA	7.35	140.08	121.70
1	A	722	ARG	N-CA-C	-7.32	91.25	111.00
1	A	549	GLN	CA-C-N	7.23	133.10	117.20
1	A	575	SER	C-N-CA	-7.22	107.14	122.30
1	A	357	GLU	N-CA-C	-7.20	91.55	111.00
1	A	226	THR	OG1-CB-CG2	7.18	126.52	110.00
1	A	317	GLU	N-CA-C	-7.14	91.72	111.00
1	A	112	ASP	CA-C-N	-7.08	101.62	117.20
1	A	251	PHE	CB-CG-CD1	-7.06	115.86	120.80
1	A	550	SER	N-CA-C	7.05	130.04	111.00
1	A	278	TYR	CB-CG-CD2	-6.95	116.83	121.00
2	B	36	ASP	CB-CA-C	6.95	124.29	110.40
1	A	219	PHE	CA-C-N	-6.92	101.97	117.20
1	A	111	MET	O-C-N	-6.86	111.73	122.70
1	A	224	THR	C-N-CA	6.79	138.67	121.70
1	A	145	VAL	CA-C-N	-6.77	102.31	117.20
1	A	195	THR	CA-C-N	-6.72	102.41	117.20
1	A	213	LEU	CA-C-O	6.70	134.17	120.10
1	A	775	LEU	N-CA-C	-6.66	93.03	111.00
1	A	194	GLU	CA-C-O	-6.63	106.17	120.10
1	A	350	ALA	C-N-CA	-6.63	105.13	121.70
1	A	258	THR	CA-C-O	6.57	133.90	120.10
1	A	278	TYR	CA-C-N	-6.55	102.79	117.20
1	A	112	ASP	CA-CB-CG	6.47	127.63	113.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	149	CYS	N-CA-CB	-6.43	99.03	110.60
1	A	618	ASP	N-CA-CB	-6.42	99.04	110.60
1	A	254	GLN	C-N-CA	-6.36	105.80	121.70
1	A	278	TYR	CD1-CG-CD2	6.36	124.89	117.90
1	A	114	SER	N-CA-C	6.19	127.70	111.00
1	A	148	GLU	N-CA-CB	6.18	121.73	110.60
1	A	680	LEU	N-CA-C	-6.14	94.43	111.00
1	A	284	GLN	C-N-CA	-6.11	106.44	121.70
1	A	279	LEU	CB-CA-C	-6.08	98.64	110.20
2	B	36	ASP	N-CA-CB	-6.04	99.73	110.60
1	A	298	LYS	N-CA-C	-5.99	94.83	111.00
2	B	35	TRP	CA-C-N	-5.98	104.04	117.20
1	A	226	THR	CA-CB-OG1	5.93	121.46	109.00
1	A	297	GLU	N-CA-C	5.80	126.65	111.00
1	A	549	GLN	O-C-N	-5.79	113.44	122.70
1	A	143	HIS	CA-CB-CG	-5.78	103.77	113.60
1	A	762	LEU	CA-CB-CG	5.73	128.48	115.30
1	A	576	GLY	C-N-CA	-5.71	107.42	121.70
2	B	35	TRP	N-CA-C	-5.69	95.64	111.00
1	A	618	ASP	N-CA-C	5.68	126.33	111.00
1	A	255	ASN	CB-CA-C	5.66	121.72	110.40
1	A	650	VAL	N-CA-C	-5.64	95.77	111.00
1	A	278	TYR	CA-CB-CG	-5.62	102.71	113.40
1	A	632	LYS	CB-CA-C	-5.58	99.23	110.40
1	A	181	ASN	C-N-CA	-5.48	108.01	121.70
1	A	279	LEU	CA-C-O	5.47	131.59	120.10
2	B	40	ASP	CA-CB-CG	-5.44	101.44	113.40
1	A	264	ALA	N-CA-C	-5.43	96.34	111.00
1	A	148	GLU	N-CA-C	-5.40	96.42	111.00
2	B	38	VAL	CB-CA-C	-5.39	101.15	111.40
2	B	39	VAL	N-CA-CB	-5.39	99.65	111.50
1	A	113	GLU	N-CA-C	-5.37	96.50	111.00
1	A	251	PHE	CB-CA-C	-5.36	99.69	110.40
1	A	774	TYR	N-CA-C	-5.31	96.67	111.00
1	A	174	PRO	C-N-CA	-5.29	108.47	121.70
1	A	257	VAL	C-N-CA	-5.28	108.50	121.70
1	A	175	LEU	CA-CB-CG	-5.28	103.15	115.30
1	A	435	LYS	N-CA-C	-5.26	96.80	111.00
1	A	145	VAL	O-C-N	5.25	131.10	122.70
1	A	736	THR	N-CA-CB	-5.25	100.32	110.30
1	A	278	TYR	CG-CD2-CE2	-5.25	117.10	121.30
1	A	578	LYS	C-N-CA	-5.24	108.60	121.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	566	PHE	N-CA-C	-5.23	96.88	111.00
1	A	112	ASP	O-C-N	5.18	130.99	122.70
1	A	686	VAL	N-CA-C	-5.17	97.03	111.00
1	A	254	GLN	CB-CA-C	5.15	120.71	110.40
1	A	258	THR	C-N-CA	5.14	134.56	121.70
1	A	435	LYS	CB-CA-C	5.14	120.68	110.40
1	A	219	PHE	CB-CG-CD1	-5.12	117.22	120.80
1	A	144	TRP	N-CA-C	-5.10	97.23	111.00
1	A	178	GLN	CB-CA-C	5.10	120.60	110.40
1	A	671	LEU	CA-CB-CG	5.09	127.02	115.30

All (1) chirality outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atom
1	A	226	THR	CB

All (14) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	113	GLU	Peptide
1	A	118	PHE	Peptide
1	A	145	VAL	Peptide
1	A	148	GLU	Peptide
1	A	181	ASN	Peptide
1	A	214	ASN	Mainchain
1	A	217	ASP	Mainchain,Peptide
1	A	224	THR	Mainchain,Peptide
1	A	301	GLU	Mainchain
1	A	350	ALA	Peptide
1	A	599	TYR	Sidechain
2	B	86	ARG	Peptide

5.2 Too-close contacts [\(i\)](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	5934	0	5954	931	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
2	B	731	0	686	154	0
3	B	3	0	0	0	0
All	All	6668	0	6640	1050	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 79.

All (1050) 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:275:VAL:HG12	1:A:279:LEU:CD1	1.28	1.57
1:A:275:VAL:CG1	1:A:279:LEU:CD1	1.77	1.55
1:A:275:VAL:CG1	1:A:279:LEU:HD11	1.26	1.53
1:A:351:ALA:CA	1:A:351:ALA:N	1.72	1.52
2:B:87:TRP:N	2:B:87:TRP:CA	1.72	1.51
1:A:257:VAL:HG21	1:A:306:GLU:CD	1.28	1.45
1:A:714:ALA:N	1:A:714:ALA:CA	1.79	1.44
1:A:119:TYR:CA	1:A:119:TYR:N	1.77	1.44
1:A:259:GLU:OE1	1:A:262:LYS:CD	1.67	1.40
1:A:257:VAL:CG2	1:A:306:GLU:CD	1.90	1.37
1:A:577:ARG:O	1:A:577:ARG:HD3	1.22	1.35
1:A:146:ARG:CA	1:A:146:ARG:N	1.90	1.33
1:A:119:TYR:CD2	1:A:175:LEU:CD1	2.09	1.33
1:A:283:THR:O	1:A:287:LEU:CB	1.76	1.32
1:A:20:ILE:CA	1:A:20:ILE:N	1.92	1.30
1:A:257:VAL:HG21	1:A:306:GLU:CG	1.62	1.28
1:A:189:LYS:CD	1:A:192:ASN:O	1.82	1.27
1:A:301:GLU:O	1:A:302:ILE:N	1.66	1.24
1:A:189:LYS:HD2	1:A:192:ASN:O	1.07	1.23
1:A:283:THR:O	1:A:287:LEU:HB2	1.10	1.22
1:A:275:VAL:HG11	1:A:284:GLN:CG	1.68	1.21
2:B:86:ARG:C	2:B:87:TRP:CA	2.08	1.21
1:A:259:GLU:OE1	1:A:262:LYS:HD3	1.06	1.21
1:A:194:GLU:CB	1:A:195:THR:HB	1.63	1.19
1:A:577:ARG:CD	1:A:577:ARG:O	1.90	1.19
1:A:173:ARG:HB3	1:A:174:PRO:CD	1.71	1.19
1:A:301:GLU:C	1:A:302:ILE:CA	2.11	1.18
1:A:298:LYS:HB3	1:A:298:LYS:HZ3	1.07	1.17
1:A:257:VAL:CG2	1:A:306:GLU:CG	2.22	1.17
1:A:205:VAL:HG11	1:A:280:HIS:CD2	1.80	1.17
1:A:223:PRO:CB	1:A:225:LEU:HD11	1.74	1.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:257:VAL:HG21	1:A:306:GLU:OE1	1.45	1.16
1:A:618:ASP:OD1	2:B:20:LYS:CD	1.76	1.15
1:A:275:VAL:HG13	1:A:279:LEU:HD12	1.17	1.15
1:A:298:LYS:NZ	1:A:298:LYS:HB3	1.61	1.14
1:A:223:PRO:HB2	1:A:225:LEU:CD1	1.78	1.13
1:A:149:CYS:N	1:A:149:CYS:CA	2.11	1.13
1:A:356:GLY:O	1:A:411:MET:SD	2.07	1.13
1:A:119:TYR:CD2	1:A:175:LEU:HD12	1.76	1.12
1:A:297:GLU:HA	1:A:300:LEU:HG	1.21	1.12
1:A:301:GLU:CA	1:A:302:ILE:N	2.11	1.12
2:B:74:VAL:HG21	2:B:102:GLU:HB2	1.26	1.10
2:B:41:ASN:HA	2:B:48:HIS:H	0.96	1.10
1:A:275:VAL:HG11	1:A:284:GLN:HG3	1.33	1.10
1:A:650:VAL:HG23	1:A:650:VAL:O	1.36	1.09
1:A:251:PHE:CE2	1:A:255:ASN:HB2	1.86	1.09
1:A:255:ASN:HB3	1:A:256:PRO:HD2	1.33	1.09
1:A:550:SER:HB2	1:A:584:GLN:NE2	1.68	1.09
1:A:257:VAL:CG2	1:A:306:GLU:HG2	1.79	1.08
1:A:195:THR:OG1	1:A:196:ILE:N	1.78	1.07
1:A:223:PRO:HB2	1:A:225:LEU:HD11	1.29	1.07
1:A:593:ASN:ND2	2:B:21:ARG:HG2	1.68	1.06
1:A:650:VAL:CG2	1:A:650:VAL:O	2.00	1.06
1:A:593:ASN:HD22	2:B:21:ARG:HG2	0.95	1.06
1:A:205:VAL:CG1	1:A:280:HIS:CD2	2.38	1.06
1:A:618:ASP:OD1	2:B:20:LYS:HD2	1.27	1.05
2:B:87:TRP:N	2:B:87:TRP:CB	2.19	1.05
1:A:297:GLU:CG	1:A:297:GLU:O	2.01	1.05
1:A:297:GLU:O	1:A:297:GLU:HG3	1.55	1.05
1:A:570:TYR:CE2	1:A:577:ARG:HG2	1.90	1.05
1:A:450:MET:HG3	1:A:491:LYS:HG2	1.35	1.04
2:B:38:VAL:HG12	2:B:40:ASP:H	1.22	1.04
1:A:375:LYS:HA	1:A:375:LYS:HE2	1.32	1.04
1:A:275:VAL:HG11	1:A:284:GLN:HG2	1.40	1.04
1:A:252:LEU:C	1:A:253:GLN:HE21	1.60	1.03
1:A:111:MET:SD	1:A:112:ASP:N	2.32	1.03
2:B:41:ASN:HA	2:B:48:HIS:N	1.73	1.03
1:A:119:TYR:CD2	1:A:175:LEU:HD13	1.86	1.02
1:A:173:ARG:HB3	1:A:174:PRO:HD2	1.04	1.02
1:A:252:LEU:O	1:A:253:GLN:NE2	1.92	1.02
1:A:229:LYS:HA	1:A:233:GLU:HB3	1.38	1.01
1:A:352:ILE:HD13	1:A:408:VAL:HG23	1.38	1.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:275:VAL:CG1	1:A:279:LEU:HD12	1.71	1.01
2:B:38:VAL:CG1	2:B:40:ASP:H	1.74	1.00
1:A:298:LYS:NZ	1:A:298:LYS:CB	2.25	1.00
1:A:19:GLN:C	1:A:20:ILE:CA	2.31	0.99
1:A:688:MET:N	1:A:688:MET:HE3	1.76	0.99
1:A:255:ASN:CB	1:A:256:PRO:HD2	1.90	0.98
1:A:201:ILE:HB	1:A:278:TYR:CE2	1.97	0.98
1:A:550:SER:CB	1:A:584:GLN:HE22	1.77	0.97
1:A:253:GLN:HA	1:A:253:GLN:HE21	1.29	0.97
1:A:550:SER:CB	1:A:584:GLN:NE2	2.28	0.96
1:A:145:VAL:HG12	1:A:145:VAL:O	1.66	0.96
2:B:39:VAL:O	2:B:41:ASN:N	1.97	0.96
2:B:86:ARG:O	2:B:87:TRP:CA	2.14	0.96
1:A:642:ILE:CD1	1:A:687:PRO:HA	1.96	0.95
1:A:550:SER:HB3	1:A:584:GLN:HE22	1.31	0.95
1:A:119:TYR:CG	1:A:175:LEU:CD1	2.48	0.95
1:A:259:GLU:OE1	1:A:262:LYS:HD2	1.67	0.95
1:A:115:VAL:O	1:A:119:TYR:N	2.00	0.95
1:A:253:GLN:CA	1:A:253:GLN:HE21	1.81	0.94
1:A:529:GLU:HB3	1:A:565:ARG:HH12	1.31	0.94
1:A:171:LEU:HD12	1:A:175:LEU:O	1.68	0.94
1:A:119:TYR:CG	1:A:175:LEU:HD13	2.02	0.94
2:B:74:VAL:CG2	2:B:102:GLU:HB2	1.98	0.94
1:A:471:ALA:O	1:A:475:VAL:HG23	1.68	0.93
2:B:47:ASN:HD22	2:B:52:LEU:HD23	1.31	0.93
1:A:103:LEU:HD21	1:A:122:GLN:NE2	1.84	0.93
1:A:252:LEU:C	1:A:253:GLN:NE2	2.21	0.92
1:A:275:VAL:CG1	1:A:284:GLN:CG	2.47	0.92
1:A:19:GLN:O	1:A:20:ILE:CA	2.19	0.91
1:A:593:ASN:HD22	2:B:21:ARG:CG	1.83	0.91
1:A:560:GLU:HG3	1:A:564:GLN:HE21	1.36	0.90
1:A:577:ARG:C	1:A:577:ARG:HD3	1.88	0.90
1:A:686:VAL:HG23	1:A:686:VAL:O	1.70	0.90
2:B:87:TRP:N	2:B:87:TRP:HB2	1.86	0.90
1:A:713:ALA:C	1:A:714:ALA:CA	2.38	0.90
1:A:173:ARG:CB	1:A:174:PRO:HD2	1.99	0.90
1:A:89:TYR:HE2	1:A:162:LEU:HG	1.37	0.89
1:A:146:ARG:N	1:A:147:ARG:H	1.70	0.89
1:A:301:GLU:C	1:A:302:ILE:N	0.83	0.88
1:A:279:LEU:HG	1:A:280:HIS:O	1.73	0.88
1:A:194:GLU:HB2	1:A:195:THR:HB	0.89	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:146:ARG:N	1:A:147:ARG:N	2.22	0.87
1:A:538:GLN:HB2	2:B:30:VAL:HG22	1.54	0.87
1:A:205:VAL:CG1	1:A:280:HIS:NE2	2.37	0.87
1:A:146:ARG:H	1:A:147:ARG:H	1.20	0.87
1:A:205:VAL:HG11	1:A:280:HIS:NE2	1.88	0.87
1:A:111:MET:CE	1:A:112:ASP:OD1	2.23	0.87
1:A:118:PHE:C	1:A:119:TYR:CA	2.45	0.85
1:A:191:ARG:HH11	1:A:192:ASN:HD21	1.20	0.85
1:A:350:ALA:C	1:A:351:ALA:CA	2.43	0.85
2:B:38:VAL:HG12	2:B:40:ASP:N	1.92	0.85
1:A:201:ILE:HB	1:A:278:TYR:HE2	1.39	0.85
1:A:525:LEU:HD21	1:A:531:LEU:HB2	1.57	0.85
1:A:587:LYS:HB2	2:B:28:ASN:HB2	1.59	0.85
1:A:351:ALA:C	1:A:351:ALA:N	2.29	0.85
1:A:226:THR:O	1:A:230:GLU:HG2	1.77	0.84
1:A:119:TYR:N	1:A:120:THR:N	2.26	0.84
1:A:493:LYS:NZ	1:A:505:GLN:HE22	1.75	0.84
1:A:275:VAL:CG1	1:A:284:GLN:HG2	2.08	0.83
1:A:193:GLY:O	1:A:194:GLU:HB3	1.76	0.83
1:A:275:VAL:CB	1:A:279:LEU:HD11	2.08	0.83
1:A:520:GLN:HG2	1:A:573:ARG:HH22	1.41	0.83
1:A:570:TYR:HE2	1:A:577:ARG:HG2	1.39	0.83
2:B:86:ARG:O	2:B:87:TRP:HA	1.76	0.83
1:A:493:LYS:HZ1	1:A:505:GLN:HE22	1.25	0.83
1:A:244:TYR:CE2	1:A:267:ARG:HD3	2.14	0.83
1:A:223:PRO:HB3	1:A:225:LEU:HD11	1.59	0.82
1:A:540:LEU:HB3	1:A:545:TRP:CD1	2.13	0.82
2:B:84:ILE:O	2:B:88:LEU:HG	1.79	0.82
1:A:574:HIS:HB3	1:A:577:ARG:HB3	1.59	0.82
1:A:678:LYS:O	1:A:679:LYS:HD3	1.79	0.82
1:A:357:GLU:HA	1:A:411:MET:HE1	1.59	0.82
1:A:96:LEU:HB3	1:A:166:THR:HG21	1.59	0.82
1:A:470:LEU:HD22	1:A:474:LEU:HG	1.61	0.82
1:A:253:GLN:HA	1:A:253:GLN:NE2	1.91	0.81
1:A:213:LEU:HD12	1:A:214:ASN:ND2	1.95	0.81
1:A:119:TYR:C	1:A:119:TYR:N	2.33	0.81
1:A:642:ILE:HD11	1:A:688:MET:HE3	1.62	0.81
2:B:37:ILE:O	2:B:37:ILE:CG2	2.28	0.81
1:A:145:VAL:C	1:A:146:ARG:CA	2.47	0.81
1:A:257:VAL:HG23	1:A:306:GLU:CG	2.10	0.81
1:A:426:CYS:SG	1:A:449:VAL:HG11	2.21	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:173:ARG:O	1:A:175:LEU:N	2.13	0.81
1:A:229:LYS:HA	1:A:233:GLU:CB	2.11	0.81
1:A:506:ARG:HH11	2:B:104:GLN:HE22	1.26	0.81
1:A:191:ARG:O	1:A:192:ASN:OD1	1.99	0.80
1:A:257:VAL:HG23	1:A:306:GLU:HG2	1.61	0.80
2:B:47:ASN:ND2	2:B:52:LEU:HB3	1.96	0.80
1:A:191:ARG:C	1:A:192:ASN:CG	2.37	0.80
1:A:688:MET:CE	1:A:688:MET:N	2.45	0.80
1:A:204:VAL:HG12	1:A:208:TYR:HE1	1.44	0.80
1:A:422:LEU:HD22	1:A:449:VAL:HG13	1.63	0.79
1:A:584:GLN:HG2	1:A:585:LEU:HG	1.64	0.79
1:A:174:PRO:O	1:A:175:LEU:HD23	1.82	0.79
1:A:554:ALA:HB2	1:A:630:GLN:HB2	1.65	0.79
1:A:146:ARG:CB	1:A:146:ARG:N	2.45	0.79
1:A:189:LYS:CE	1:A:192:ASN:O	2.30	0.79
1:A:86:LEU:HA	1:A:144:TRP:HE1	1.48	0.79
1:A:257:VAL:HG23	1:A:306:GLU:CD	2.03	0.79
1:A:348:GLY:HA2	1:A:373:VAL:HG21	1.65	0.79
1:A:297:GLU:HA	1:A:300:LEU:CG	2.09	0.79
1:A:528:SER:O	1:A:529:GLU:HG3	1.83	0.78
1:A:617:GLU:O	1:A:620:TYR:HE1	1.63	0.78
2:B:41:ASN:CA	2:B:48:HIS:H	1.87	0.78
1:A:233:GLU:OE1	1:A:283:THR:OG1	1.99	0.78
1:A:213:LEU:HG	1:A:214:ASN:N	1.98	0.78
1:A:719:MET:O	1:A:722:ARG:O	2.00	0.78
2:B:39:VAL:C	2:B:41:ASN:H	1.87	0.78
1:A:212:GLY:HA3	1:A:224:THR:HB	1.66	0.78
1:A:255:ASN:CB	1:A:256:PRO:CD	2.61	0.78
1:A:171:LEU:C	1:A:173:ARG:H	1.85	0.78
1:A:549:GLN:NE2	1:A:550:SER:N	2.31	0.78
2:B:87:TRP:CZ2	2:B:95:PRO:HB3	2.18	0.78
1:A:251:PHE:CE2	1:A:255:ASN:CB	2.67	0.77
1:A:297:GLU:O	1:A:297:GLU:HG2	1.82	0.77
1:A:253:GLN:N	1:A:253:GLN:HE21	1.81	0.77
1:A:298:LYS:CB	1:A:298:LYS:HZ2	1.97	0.77
1:A:353:GLU:HG2	1:A:407:ALA:HB2	1.65	0.77
1:A:276:GLN:HA	1:A:279:LEU:HD22	1.65	0.77
1:A:351:ALA:N	1:A:352:ILE:N	2.32	0.77
1:A:301:GLU:O	1:A:302:ILE:CA	2.25	0.77
1:A:433:SER:O	1:A:435:LYS:O	2.02	0.77
2:B:94:CYS:HB3	2:B:97:ASP:OD2	1.85	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:488:MET:HE1	1:A:492:LEU:HD21	1.67	0.77
2:B:37:ILE:O	2:B:37:ILE:HG22	1.84	0.77
1:A:205:VAL:HG11	1:A:280:HIS:HD2	1.48	0.76
1:A:134:ASN:HD22	1:A:160:TYR:H	1.31	0.76
1:A:586:SER:OG	1:A:605:THR:OG1	1.63	0.76
1:A:119:TYR:HD2	1:A:175:LEU:HD12	1.46	0.76
2:B:99:ARG:HE	2:B:99:ARG:H	1.30	0.76
1:A:205:VAL:O	1:A:209:VAL:HG23	1.85	0.75
1:A:283:THR:O	1:A:287:LEU:HB3	1.83	0.75
2:B:45:CYS:HB2	2:B:54:ILE:HD12	1.68	0.75
1:A:714:ALA:CB	1:A:714:ALA:N	2.48	0.75
2:B:93:VAL:HB	2:B:98:ASN:O	1.86	0.75
1:A:617:GLU:O	1:A:620:TYR:CE1	2.38	0.75
1:A:261:MET:O	1:A:265:GLU:HB2	1.86	0.75
1:A:213:LEU:HD12	1:A:214:ASN:H	1.51	0.75
1:A:271:GLU:HB3	1:A:287:LEU:HD11	1.68	0.75
1:A:577:ARG:HD2	1:A:577:ARG:O	1.86	0.74
1:A:275:VAL:CG1	1:A:284:GLN:HG3	2.15	0.74
1:A:574:HIS:HB2	1:A:577:ARG:HG3	1.68	0.74
1:A:610:ILE:O	1:A:613:GLN:HB2	1.86	0.74
1:A:643:LEU:HB3	1:A:649:LEU:HD23	1.68	0.74
2:B:77:HIS:CE1	2:B:97:ASP:HB3	2.23	0.74
1:A:652:GLU:H	1:A:652:GLU:CD	1.88	0.74
2:B:86:ARG:NH1	2:B:86:ARG:HB2	2.02	0.74
1:A:727:HIS:HB2	1:A:770:ASP:HB3	1.68	0.74
1:A:20:ILE:CB	1:A:20:ILE:N	2.50	0.74
1:A:244:TYR:HE2	1:A:267:ARG:HD3	1.53	0.74
1:A:463:GLN:HB2	1:A:500:TYR:CZ	2.22	0.74
1:A:87:GLU:HA	1:A:90:LYS:HE2	1.68	0.74
1:A:116:LEU:HD23	1:A:117:LYS:N	2.02	0.74
1:A:406:ASN:C	1:A:406:ASN:HD22	1.90	0.74
1:A:549:GLN:O	1:A:550:SER:CB	2.13	0.74
1:A:134:ASN:HD22	1:A:160:TYR:CB	2.01	0.73
1:A:453:PHE:HA	1:A:456:ILE:HG12	1.70	0.73
1:A:549:GLN:O	1:A:550:SER:HB3	1.87	0.73
1:A:145:VAL:O	1:A:145:VAL:CG1	2.35	0.73
1:A:701:LYS:HG3	1:A:704:GLU:OE2	1.88	0.73
1:A:213:LEU:HD12	1:A:214:ASN:CG	2.09	0.73
1:A:397:LYS:O	1:A:401:ARG:HG2	1.89	0.73
1:A:86:LEU:HG	1:A:144:TRP:HZ2	1.53	0.73
2:B:47:ASN:HD22	2:B:52:LEU:CD2	2.01	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:77:HIS:HE1	2:B:97:ASP:HB3	1.53	0.72
1:A:257:VAL:CG2	1:A:306:GLU:OE1	2.19	0.72
1:A:119:TYR:N	1:A:120:THR:H	1.86	0.72
1:A:642:ILE:HD11	1:A:687:PRO:HA	1.69	0.72
1:A:642:ILE:HD13	1:A:687:PRO:HA	1.69	0.72
2:B:56:CYS:SG	2:B:65:SER:HA	2.29	0.72
1:A:134:ASN:ND2	1:A:160:TYR:H	1.86	0.72
1:A:191:ARG:HB2	1:A:192:ASN:ND2	2.04	0.72
1:A:255:ASN:HB3	1:A:256:PRO:CD	2.17	0.72
1:A:146:ARG:N	1:A:146:ARG:C	2.43	0.72
1:A:327:SER:HA	1:A:333:LEU:HD21	1.72	0.72
1:A:213:LEU:CG	1:A:214:ASN:N	2.51	0.72
1:A:340:LEU:O	1:A:344:ILE:HG23	1.90	0.72
1:A:549:GLN:NE2	1:A:550:SER:H	1.87	0.72
1:A:525:LEU:C	1:A:527:ASN:H	1.93	0.71
1:A:171:LEU:O	1:A:173:ARG:O	2.08	0.71
1:A:508:PHE:O	1:A:511:ILE:HG22	1.89	0.71
1:A:194:GLU:HB2	1:A:195:THR:CB	1.83	0.71
1:A:84:VAL:C	1:A:86:LEU:H	1.93	0.71
2:B:93:VAL:HA	2:B:100:GLU:HA	1.73	0.71
1:A:301:GLU:N	1:A:302:ILE:N	2.38	0.71
2:B:47:ASN:HB2	2:B:52:LEU:HD23	1.72	0.71
2:B:44:ILE:HD11	2:B:95:PRO:HB2	1.72	0.70
2:B:87:TRP:O	2:B:90:THR:HG23	1.91	0.70
1:A:271:GLU:O	1:A:275:VAL:HG23	1.91	0.70
1:A:574:HIS:CB	1:A:577:ARG:HB3	2.21	0.70
1:A:407:ALA:O	1:A:411:MET:HG3	1.91	0.70
1:A:89:TYR:CE2	1:A:162:LEU:HG	2.23	0.70
2:B:47:ASN:ND2	2:B:52:LEU:HD23	2.06	0.70
1:A:173:ARG:CB	1:A:174:PRO:CD	2.50	0.70
1:A:763:GLU:HB3	1:A:775:LEU:HD12	1.72	0.70
1:A:549:GLN:HE21	1:A:550:SER:H	1.37	0.70
1:A:715:ILE:HB	1:A:756:LEU:HD12	1.74	0.70
1:A:445:THR:O	1:A:449:VAL:HG23	1.91	0.69
1:A:520:GLN:HB3	1:A:569:PHE:HZ	1.56	0.69
1:A:540:LEU:O	2:B:32:LEU:HA	1.92	0.69
1:A:116:LEU:HD11	1:A:200:LEU:HD13	1.74	0.69
1:A:191:ARG:HB2	1:A:192:ASN:HD21	1.56	0.69
1:A:427:ASP:O	1:A:431:LYS:HG3	1.92	0.69
1:A:549:GLN:HE21	1:A:550:SER:N	1.90	0.69
1:A:167:TRP:C	1:A:169:ASP:H	1.94	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:465:PHE:CE2	1:A:699:THR:HG21	2.27	0.69
1:A:251:PHE:CZ	1:A:255:ASN:HB2	2.28	0.69
1:A:205:VAL:HG12	1:A:280:HIS:NE2	2.07	0.69
1:A:608:MET:HE1	2:B:24:VAL:HG13	1.72	0.69
1:A:337:LYS:O	1:A:341:GLU:HB2	1.92	0.69
1:A:584:GLN:HE21	1:A:584:GLN:H	1.39	0.69
1:A:724:VAL:HG22	1:A:773:SER:OG	1.92	0.69
1:A:594:CYS:HB3	2:B:21:ARG:H	1.58	0.69
2:B:103:PHE:O	2:B:104:GLN:HB3	1.92	0.69
1:A:223:PRO:HB2	1:A:225:LEU:HD12	1.72	0.68
1:A:351:ALA:CB	1:A:351:ALA:N	2.54	0.68
1:A:517:LEU:HD23	1:A:517:LEU:O	1.93	0.68
1:A:541:SER:O	1:A:543:GLY:N	2.27	0.68
1:A:460:ASP:OD2	1:A:707:ARG:HD3	1.93	0.68
1:A:506:ARG:HH11	2:B:104:GLN:NE2	1.91	0.68
2:B:28:ASN:HD22	2:B:28:ASN:N	1.91	0.68
1:A:296:ILE:N	1:A:296:ILE:HD12	2.09	0.68
1:A:107:GLY:HA2	1:A:110:LEU:HD12	1.76	0.68
1:A:600:THR:O	1:A:681:ARG:HA	1.94	0.68
1:A:191:ARG:HH11	1:A:192:ASN:ND2	1.92	0.68
1:A:333:LEU:H	1:A:333:LEU:HD22	1.57	0.68
1:A:204:VAL:HG12	1:A:208:TYR:CE1	2.27	0.68
2:B:47:ASN:HD22	2:B:52:LEU:HB3	1.59	0.68
1:A:496:CYS:HB2	1:A:500:TYR:CB	2.23	0.67
1:A:364:LYS:O	1:A:368:GLN:HB2	1.94	0.67
2:B:49:ILE:CG2	2:B:70:VAL:HG12	2.23	0.67
1:A:276:GLN:HA	1:A:279:LEU:CD2	2.23	0.67
1:A:614:TYR:CD1	1:A:618:ASP:O	2.47	0.67
1:A:636:LEU:HD22	1:A:640:LEU:HG	1.76	0.67
1:A:103:LEU:HD21	1:A:122:GLN:HE21	1.55	0.67
1:A:116:LEU:HD21	1:A:200:LEU:HD22	1.77	0.67
1:A:49:VAL:HG13	1:A:88:LEU:HD21	1.77	0.67
1:A:643:LEU:O	1:A:646:SER:O	2.13	0.67
1:A:602:GLN:HB2	1:A:683:ASN:HA	1.76	0.67
2:B:44:ILE:O	2:B:45:CYS:HB3	1.92	0.67
1:A:596:LYS:HG3	1:A:596:LYS:O	1.94	0.67
1:A:279:LEU:HD11	1:A:284:GLN:HE21	1.59	0.66
1:A:644:LEU:O	1:A:646:SER:O	2.13	0.66
1:A:715:ILE:HB	1:A:756:LEU:CD1	2.25	0.66
1:A:207:SER:O	1:A:211:LEU:HD23	1.96	0.66
2:B:90:THR:OG1	2:B:91:ARG:N	2.26	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:553:PHE:HZ	1:A:609:ALA:HB2	1.60	0.66
1:A:696:GLN:O	1:A:699:THR:HG22	1.94	0.66
1:A:726:LYS:HB2	1:A:729:GLN:NE2	2.11	0.66
1:A:688:MET:N	1:A:688:MET:SD	2.68	0.66
1:A:31:VAL:HG13	1:A:32:TYR:CD1	2.31	0.66
1:A:688:MET:HB2	1:A:690:THR:HG23	1.78	0.66
1:A:190:GLU:HB2	1:A:243:PHE:CE2	2.31	0.66
1:A:24:LEU:HD11	1:A:49:VAL:HG22	1.78	0.66
1:A:298:LYS:HB2	1:A:298:LYS:HZ2	1.60	0.66
1:A:422:LEU:HD22	1:A:449:VAL:CG1	2.25	0.66
1:A:592:THR:HG22	2:B:22:PHE:CD2	2.31	0.66
2:B:38:VAL:HG12	2:B:40:ASP:CB	2.26	0.66
1:A:223:PRO:CB	1:A:225:LEU:CD1	2.51	0.65
1:A:205:VAL:HG11	1:A:279:LEU:O	1.95	0.65
1:A:626:THR:HG23	1:A:636:LEU:HD12	1.77	0.65
1:A:520:GLN:HG2	1:A:573:ARG:NH2	2.11	0.65
1:A:207:SER:O	1:A:211:LEU:CD2	2.44	0.65
1:A:406:ASN:HD21	1:A:408:VAL:HB	1.60	0.65
1:A:638:GLN:O	1:A:641:GLN:HB3	1.97	0.65
1:A:191:ARG:NH1	1:A:192:ASN:HD21	1.94	0.65
1:A:450:MET:SD	1:A:492:LEU:HD23	2.35	0.65
1:A:213:LEU:CD1	1:A:214:ASN:H	2.09	0.65
1:A:475:VAL:CG2	1:A:547:PHE:HZ	2.10	0.65
1:A:191:ARG:C	1:A:192:ASN:OD1	2.35	0.65
1:A:268:LEU:HG	1:A:295:LEU:HD12	1.79	0.65
1:A:506:ARG:HD3	1:A:544:SER:OG	1.97	0.65
1:A:191:ARG:HD3	1:A:192:ASN:ND2	2.12	0.64
1:A:548:GLN:O	1:A:549:GLN:O	2.15	0.64
2:B:38:VAL:O	2:B:38:VAL:HG12	1.97	0.64
1:A:172:PHE:O	1:A:173:ARG:HG2	1.97	0.64
1:A:145:VAL:HG21	1:A:157:TYR:CB	2.27	0.64
2:B:86:ARG:CB	2:B:86:ARG:HH11	2.09	0.64
1:A:137:CYS:HB2	1:A:159:ILE:HG21	1.79	0.64
1:A:275:VAL:HG13	1:A:279:LEU:CD1	1.74	0.64
1:A:146:ARG:HB2	1:A:146:ARG:N	2.12	0.64
1:A:275:VAL:HG12	1:A:284:GLN:HE21	1.62	0.64
1:A:430:LEU:HD21	1:A:446:LEU:HD21	1.79	0.64
1:A:475:VAL:HG21	1:A:547:PHE:CZ	2.33	0.64
1:A:550:SER:O	1:A:551:CYS:SG	2.54	0.64
1:A:578:LYS:C	1:A:578:LYS:HG3	2.14	0.64
1:A:707:ARG:HB3	1:A:742:PHE:CZ	2.33	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:98:ASN:HB3	2:B:99:ARG:HH21	1.62	0.64
1:A:427:ASP:CG	1:A:469:MET:HG2	2.18	0.64
1:A:111:MET:HE2	1:A:112:ASP:OD1	1.97	0.64
1:A:119:TYR:CE2	1:A:175:LEU:CD1	2.79	0.64
1:A:296:ILE:HG22	1:A:329:ILE:HG13	1.80	0.64
1:A:614:TYR:HD1	1:A:618:ASP:O	1.79	0.64
1:A:621:THR:H	1:A:624:GLN:HG3	1.63	0.64
1:A:656:ALA:HB1	1:A:661:VAL:HG21	1.78	0.64
1:A:276:GLN:CA	1:A:279:LEU:HD22	2.27	0.63
1:A:529:GLU:HB3	1:A:565:ARG:NH1	2.09	0.63
1:A:148:GLU:C	1:A:149:CYS:CA	2.66	0.63
1:A:295:LEU:HB2	1:A:296:ILE:HD12	1.78	0.63
1:A:350:ALA:O	1:A:354:LYS:HE2	1.98	0.63
1:A:189:LYS:HD2	1:A:192:ASN:C	2.10	0.63
1:A:642:ILE:HD11	1:A:687:PRO:C	2.19	0.63
2:B:25:LYS:HE3	2:B:25:LYS:HA	1.80	0.63
1:A:113:GLU:OE2	1:A:113:GLU:O	2.17	0.63
1:A:145:VAL:HG21	1:A:157:TYR:N	2.14	0.63
1:A:574:HIS:HB2	1:A:577:ARG:CG	2.28	0.63
1:A:626:THR:HG21	1:A:633:MET:HG2	1.79	0.63
1:A:21:TRP:O	1:A:25:ARG:HG3	1.98	0.63
1:A:563:TYR:O	1:A:567:THR:HB	1.99	0.63
1:A:733:GLU:O	1:A:736:THR:N	2.32	0.63
1:A:119:TYR:CB	1:A:119:TYR:N	2.61	0.63
1:A:213:LEU:CG	1:A:214:ASN:H	2.11	0.63
1:A:111:MET:HE1	1:A:112:ASP:OD1	1.98	0.63
1:A:31:VAL:O	1:A:34:ARG:HG3	1.99	0.63
1:A:422:LEU:CD2	1:A:449:VAL:HG13	2.29	0.63
1:A:608:MET:CE	2:B:24:VAL:HG13	2.29	0.62
1:A:430:LEU:HB2	1:A:473:ARG:NH1	2.14	0.62
1:A:248:SER:O	1:A:252:LEU:N	2.24	0.62
1:A:296:ILE:HD11	1:A:325:LEU:HD22	1.80	0.62
1:A:587:LYS:N	2:B:28:ASN:O	2.31	0.62
1:A:604:SER:OG	1:A:607:GLN:HG3	1.98	0.62
2:B:39:VAL:O	2:B:41:ASN:O	2.18	0.62
1:A:416:SER:HB2	1:A:461:VAL:HG21	1.82	0.62
1:A:735:LEU:O	1:A:736:THR:C	2.37	0.62
1:A:587:LYS:O	2:B:27:TRP:CD1	2.52	0.62
1:A:642:ILE:HD11	1:A:688:MET:CE	2.29	0.62
1:A:100:LEU:HD22	1:A:166:THR:O	2.00	0.62
1:A:616:THR:O	1:A:617:GLU:C	2.32	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:553:PHE:CE1	1:A:631:ILE:HD11	2.34	0.62
1:A:205:VAL:HG12	1:A:280:HIS:CD2	2.34	0.62
1:A:299:HIS:O	1:A:302:ILE:HB	1.99	0.62
1:A:713:ALA:O	1:A:714:ALA:CA	2.47	0.61
1:A:86:LEU:HA	1:A:144:TRP:NE1	2.15	0.61
1:A:333:LEU:HB3	1:A:391:PHE:HE1	1.63	0.61
1:A:520:GLN:HB3	1:A:569:PHE:CZ	2.36	0.61
2:B:86:ARG:HB2	2:B:86:ARG:HH11	1.64	0.61
1:A:550:SER:HB2	1:A:584:GLN:HE21	1.63	0.61
1:A:549:GLN:HG3	1:A:580:THR:HB	1.82	0.61
1:A:212:GLY:O	1:A:214:ASN:ND2	2.33	0.61
1:A:286:GLU:O	1:A:290:LYS:HG2	2.00	0.61
1:A:470:LEU:HD22	1:A:474:LEU:CG	2.30	0.61
2:B:74:VAL:HG21	2:B:102:GLU:CB	2.16	0.61
2:B:101:TRP:O	2:B:102:GLU:HG2	2.01	0.61
1:A:179:VAL:O	1:A:182:ALA:HB3	2.01	0.61
1:A:549:GLN:HA	1:A:582:LEU:CD2	2.31	0.61
1:A:310:LEU:O	1:A:313:ALA:O	2.19	0.61
2:B:38:VAL:O	2:B:40:ASP:N	2.34	0.61
1:A:279:LEU:HG	1:A:280:HIS:C	2.21	0.60
1:A:606:PHE:O	1:A:610:ILE:HG23	2.02	0.60
2:B:94:CYS:N	2:B:99:ARG:O	2.34	0.60
1:A:119:TYR:HB2	1:A:175:LEU:HD11	1.82	0.60
1:A:582:LEU:HB2	2:B:30:VAL:HG12	1.84	0.60
1:A:553:PHE:CZ	1:A:609:ALA:HB2	2.36	0.60
1:A:119:TYR:CE2	1:A:175:LEU:HD13	2.33	0.60
1:A:762:LEU:HD23	1:A:772:TYR:HB3	1.82	0.60
1:A:352:ILE:HD13	1:A:408:VAL:CG2	2.25	0.60
1:A:381:VAL:HA	1:A:385:PHE:HB2	1.83	0.60
1:A:707:ARG:HB3	1:A:742:PHE:CE1	2.37	0.60
1:A:352:ILE:C	1:A:352:ILE:HD12	2.22	0.60
1:A:701:LYS:HA	1:A:704:GLU:OE2	2.02	0.60
1:A:173:ARG:HE	1:A:173:ARG:HA	1.67	0.60
1:A:134:ASN:HD22	1:A:160:TYR:N	2.00	0.59
1:A:182:ALA:O	1:A:186:LEU:HD23	2.02	0.59
1:A:186:LEU:O	1:A:189:LYS:HB2	2.01	0.59
1:A:256:PRO:C	1:A:258:THR:N	2.55	0.59
1:A:380:LEU:CD2	1:A:384:ALA:HB3	2.32	0.59
1:A:527:ASN:O	1:A:529:GLU:N	2.32	0.59
1:A:173:ARG:C	1:A:175:LEU:N	2.55	0.59
1:A:351:ALA:N	1:A:352:ILE:H	1.99	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:89:TYR:OH	1:A:162:LEU:HD23	2.02	0.59
1:A:204:VAL:CG1	1:A:208:TYR:HE1	2.16	0.59
1:A:187:ILE:O	1:A:190:GLU:HG3	2.03	0.59
1:A:252:LEU:HD11	1:A:302:ILE:HG21	1.83	0.59
1:A:652:GLU:N	1:A:652:GLU:CD	2.56	0.59
1:A:733:GLU:O	1:A:736:THR:HB	2.03	0.59
1:A:422:LEU:HD11	1:A:452:VAL:HB	1.83	0.59
1:A:441:GLU:O	1:A:445:THR:HG22	2.03	0.59
1:A:644:LEU:C	1:A:646:SER:O	2.40	0.59
1:A:506:ARG:NH1	2:B:104:GLN:NE2	2.51	0.59
2:B:38:VAL:HG13	2:B:40:ASP:H	1.66	0.59
1:A:417:LYS:O	1:A:420:GLU:HB3	2.03	0.59
1:A:257:VAL:CB	1:A:306:GLU:HG2	2.33	0.58
2:B:74:VAL:HG11	2:B:102:GLU:HB3	1.85	0.58
1:A:37:MET:HG3	1:A:42:TYR:CE1	2.38	0.58
1:A:540:LEU:HD13	1:A:545:TRP:CE2	2.38	0.58
1:A:557:SER:O	1:A:559:LEU:N	2.36	0.58
1:A:578:LYS:O	2:B:33:TRP:HA	2.02	0.58
1:A:251:PHE:CD2	1:A:255:ASN:HB2	2.38	0.58
2:B:87:TRP:CZ3	2:B:95:PRO:HD3	2.39	0.58
1:A:34:ARG:N	1:A:34:ARG:HD2	2.19	0.58
1:A:86:LEU:HG	1:A:144:TRP:CZ2	2.37	0.58
2:B:38:VAL:HG12	2:B:40:ASP:HB2	1.85	0.58
2:B:60:GLN:HG2	2:B:61:ALA:H	1.69	0.58
1:A:470:LEU:O	1:A:474:LEU:HG	2.03	0.58
1:A:475:VAL:CG2	1:A:547:PHE:CZ	2.87	0.58
2:B:49:ILE:HG21	2:B:70:VAL:HG12	1.86	0.58
1:A:242:ARG:HG3	1:A:243:PHE:N	2.19	0.58
1:A:529:GLU:CA	1:A:565:ARG:HH22	2.17	0.58
1:A:142:ARG:HB3	1:A:143:HIS:CD2	2.39	0.58
1:A:181:ASN:HD22	1:A:181:ASN:N	2.01	0.58
1:A:100:LEU:H	1:A:100:LEU:HD12	1.69	0.57
1:A:115:VAL:HB	1:A:179:VAL:HG22	1.86	0.57
1:A:191:ARG:CB	1:A:192:ASN:ND2	2.67	0.57
1:A:713:ALA:O	1:A:714:ALA:HA	2.04	0.57
1:A:688:MET:CA	1:A:688:MET:HE3	2.34	0.57
2:B:42:CYS:O	2:B:43:ALA:HB2	2.03	0.57
1:A:419:PRO:HG2	1:A:461:VAL:CG1	2.33	0.57
1:A:213:LEU:HD12	1:A:214:ASN:CB	2.34	0.57
1:A:366:TYR:O	1:A:370:VAL:HG23	2.05	0.57
1:A:354:LYS:HD3	1:A:354:LYS:N	2.20	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:553:PHE:CD1	1:A:631:ILE:HD11	2.39	0.57
1:A:582:LEU:HD13	1:A:585:LEU:HD12	1.87	0.57
1:A:621:THR:HG22	1:A:668:LEU:HD12	1.86	0.57
1:A:340:LEU:HD22	1:A:385:PHE:CE2	2.39	0.57
1:A:506:ARG:NH1	1:A:544:SER:HB2	2.19	0.57
1:A:584:GLN:NE2	1:A:584:GLN:H	2.01	0.57
1:A:92:LEU:O	1:A:96:LEU:HD22	2.05	0.57
1:A:39:LYS:H	1:A:39:LYS:HE3	1.69	0.57
1:A:725:LEU:HD12	1:A:726:LYS:H	1.70	0.57
1:A:99:TYR:HA	1:A:102:ASN:HD22	1.70	0.57
1:A:148:GLU:O	1:A:149:CYS:O	2.23	0.57
1:A:165:VAL:O	1:A:168:ARG:HG3	2.05	0.57
1:A:767:GLY:O	1:A:768:GLU:HG2	2.04	0.57
1:A:333:LEU:HD22	1:A:333:LEU:N	2.20	0.56
1:A:453:PHE:HA	1:A:456:ILE:CG1	2.34	0.56
1:A:450:MET:CG	1:A:491:LYS:HG2	2.23	0.56
2:B:98:ASN:HB3	2:B:99:ARG:NH2	2.20	0.56
1:A:145:VAL:CG2	1:A:157:TYR:CB	2.83	0.56
1:A:23:ASP:O	1:A:26:ALA:HB3	2.04	0.56
1:A:323:TYR:O	1:A:327:SER:N	2.38	0.56
1:A:33:THR:O	1:A:33:THR:HG22	2.05	0.56
1:A:378:ASN:HA	1:A:395:LEU:HD11	1.88	0.56
1:A:42:TYR:HA	1:A:45:LEU:HD12	1.86	0.56
1:A:537:ILE:HG21	1:A:566:PHE:CE1	2.40	0.56
1:A:168:ARG:HA	1:A:171:LEU:HB3	1.86	0.56
1:A:296:ILE:HD12	1:A:296:ILE:H	1.70	0.56
1:A:317:GLU:O	1:A:321:ARG:HG3	2.06	0.56
1:A:160:TYR:O	1:A:163:ALA:HB3	2.05	0.56
1:A:366:TYR:CD2	1:A:408:VAL:HG21	2.41	0.56
1:A:637:ALA:HA	1:A:663:LEU:HD12	1.87	0.56
2:B:19:LYS:HG2	2:B:20:LYS:HG3	1.87	0.56
1:A:191:ARG:CG	1:A:192:ASN:ND2	2.68	0.56
2:B:41:ASN:HA	2:B:48:HIS:CA	2.36	0.56
1:A:380:LEU:HD23	1:A:384:ALA:HB3	1.87	0.56
1:A:544:SER:HA	2:B:104:GLN:NE2	2.20	0.56
1:A:618:ASP:CB	2:B:20:LYS:HD3	2.35	0.56
1:A:168:ARG:NE	1:A:169:ASP:OD2	2.31	0.56
1:A:610:ILE:HG13	1:A:611:LEU:N	2.19	0.56
1:A:96:LEU:O	1:A:100:LEU:HD13	2.06	0.56
1:A:145:VAL:HG21	1:A:157:TYR:CA	2.36	0.56
1:A:466:TYR:O	1:A:466:TYR:CD1	2.59	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:257:VAL:CG2	1:A:306:GLU:OE2	2.52	0.56
1:A:588:GLY:HA2	2:B:27:TRP:HA	1.88	0.56
2:B:44:ILE:CD1	2:B:95:PRO:HB2	2.34	0.56
1:A:276:GLN:O	1:A:277:VAL:HG13	2.06	0.55
1:A:347:GLN:HG3	1:A:377:TYR:CE1	2.41	0.55
2:B:44:ILE:O	2:B:44:ILE:HG22	2.05	0.55
1:A:203:GLY:O	1:A:206:GLN:HG3	2.06	0.55
1:A:299:HIS:HA	1:A:302:ILE:HD12	1.87	0.55
1:A:438:GLU:O	1:A:441:GLU:HB3	2.07	0.55
1:A:496:CYS:HB2	1:A:500:TYR:CG	2.41	0.55
2:B:53:CYS:O	2:B:54:ILE:HB	2.06	0.55
1:A:159:ILE:O	1:A:162:LEU:HB3	2.06	0.55
1:A:21:TRP:CE3	1:A:21:TRP:HA	2.42	0.55
1:A:307:PHE:HD1	1:A:322:MET:HG2	1.72	0.55
1:A:511:ILE:HD11	1:A:538:GLN:NE2	2.21	0.55
1:A:720:LYS:O	1:A:722:ARG:O	2.24	0.55
1:A:171:LEU:O	1:A:173:ARG:N	2.37	0.55
1:A:21:TRP:CE2	1:A:91:ARG:HB3	2.40	0.55
1:A:266:ALA:O	1:A:269:LEU:HB3	2.06	0.55
1:A:541:SER:HA	2:B:33:TRP:CD1	2.41	0.55
1:A:205:VAL:CG1	1:A:280:HIS:HD2	2.08	0.55
1:A:275:VAL:CB	1:A:284:GLN:HG2	2.37	0.55
1:A:397:LYS:HA	1:A:397:LYS:NZ	2.22	0.55
1:A:53:CYS:SG	1:A:140:LEU:HD23	2.47	0.55
1:A:636:LEU:HD22	1:A:640:LEU:CG	2.36	0.55
1:A:642:ILE:HD13	1:A:686:VAL:O	2.07	0.55
2:B:43:ALA:HB3	2:B:79:PHE:CD2	2.42	0.55
2:B:43:ALA:HB3	2:B:79:PHE:HD2	1.72	0.55
1:A:100:LEU:HD22	1:A:166:THR:HG22	1.88	0.55
1:A:98:ASN:O	1:A:102:ASN:ND2	2.40	0.55
1:A:39:LYS:O	1:A:43:MET:HG3	2.07	0.55
1:A:519:GLU:OE2	1:A:519:GLU:HA	2.07	0.55
1:A:115:VAL:CB	1:A:179:VAL:HG22	2.37	0.55
1:A:419:PRO:HB3	1:A:456:ILE:HG21	1.88	0.55
1:A:419:PRO:HG2	1:A:461:VAL:HG11	1.88	0.54
1:A:511:ILE:HD11	1:A:538:GLN:HE21	1.71	0.54
2:B:88:LEU:HA	2:B:91:ARG:O	2.08	0.54
1:A:111:MET:O	1:A:112:ASP:HB3	2.07	0.54
1:A:28:ILE:O	1:A:31:VAL:HG12	2.07	0.54
1:A:707:ARG:O	1:A:711:ILE:HG13	2.07	0.54
2:B:101:TRP:CE3	2:B:101:TRP:HA	2.41	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:571:ALA:N	1:A:577:ARG:HH21	2.06	0.54
1:A:322:MET:O	1:A:326:VAL:HG23	2.07	0.54
1:A:501:THR:HG22	1:A:504:LEU:HD12	1.89	0.54
1:A:461:VAL:HA	1:A:703:ILE:HD13	1.90	0.54
1:A:712:GLN:HG2	1:A:756:LEU:HG	1.89	0.54
1:A:49:VAL:HG13	1:A:88:LEU:CD2	2.37	0.54
1:A:167:TRP:C	1:A:169:ASP:N	2.61	0.54
1:A:244:TYR:O	1:A:248:SER:N	2.33	0.54
1:A:260:TYR:C	1:A:260:TYR:CD2	2.81	0.54
1:A:493:LYS:NZ	1:A:505:GLN:NE2	2.53	0.54
1:A:758:GLU:C	1:A:760:GLU:H	2.11	0.54
1:A:141:ASN:HD21	1:A:159:ILE:HG22	1.73	0.54
1:A:236:PHE:CE2	1:A:287:LEU:HD23	2.43	0.54
1:A:243:PHE:CD1	1:A:243:PHE:C	2.80	0.54
1:A:344:ILE:HD12	1:A:344:ILE:C	2.28	0.54
1:A:144:TRP:CE3	1:A:144:TRP:HA	2.41	0.54
1:A:406:ASN:C	1:A:406:ASN:ND2	2.61	0.54
1:A:542:SER:HA	2:B:32:LEU:HD22	1.89	0.54
1:A:119:TYR:CG	1:A:175:LEU:HD11	2.38	0.53
1:A:215:GLU:O	1:A:216:ASP:HB2	2.07	0.53
1:A:21:TRP:CE3	1:A:24:LEU:HB3	2.44	0.53
1:A:638:GLN:HB3	1:A:688:MET:HE2	1.90	0.53
1:A:88:LEU:HD23	1:A:140:LEU:HD23	1.90	0.53
1:A:576:GLY:O	2:B:35:TRP:HE3	1.91	0.53
1:A:553:PHE:CD1	1:A:631:ILE:CD1	2.91	0.53
1:A:407:ALA:HA	1:A:410:LYS:NZ	2.23	0.53
1:A:443:GLU:OE1	1:A:491:LYS:NZ	2.41	0.53
1:A:560:GLU:HG3	1:A:564:GLN:NE2	2.15	0.53
1:A:21:TRP:HA	1:A:21:TRP:HE3	1.73	0.53
1:A:406:ASN:ND2	1:A:409:THR:H	2.06	0.53
1:A:478:ASN:OD1	1:A:478:ASN:O	2.26	0.53
1:A:427:ASP:OD2	1:A:431:LYS:HD2	2.07	0.53
1:A:93:LYS:HA	1:A:162:LEU:HD11	1.91	0.53
1:A:577:ARG:HD2	1:A:577:ARG:H	1.73	0.53
1:A:683:ASN:HD21	1:A:685:ASN:HB3	1.73	0.53
1:A:121:GLN:O	1:A:124:GLU:HB3	2.08	0.53
1:A:243:PHE:C	1:A:243:PHE:HD1	2.12	0.53
1:A:553:PHE:HD1	1:A:631:ILE:CD1	2.21	0.53
1:A:687:PRO:C	1:A:688:MET:HE3	2.28	0.53
1:A:746:VAL:HB	1:A:747:PRO:HD3	1.90	0.53
1:A:87:GLU:HA	1:A:90:LYS:CE	2.39	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:287:LEU:O	1:A:290:LYS:HB2	2.08	0.53
1:A:412:ALA:CB	1:A:417:LYS:HD3	2.38	0.53
2:B:97:ASP:OD2	2:B:97:ASP:C	2.47	0.53
1:A:344:ILE:HG13	1:A:345:HIS:N	2.24	0.53
1:A:621:THR:HA	1:A:668:LEU:HA	1.91	0.53
1:A:324:ASN:O	1:A:327:SER:HB2	2.09	0.53
1:A:347:GLN:HG3	1:A:377:TYR:CZ	2.44	0.53
1:A:453:PHE:CA	1:A:456:ILE:HG12	2.38	0.53
1:A:553:PHE:HD1	1:A:631:ILE:HD13	1.74	0.53
1:A:84:VAL:C	1:A:86:LEU:N	2.61	0.53
2:B:74:VAL:HG11	2:B:102:GLU:CB	2.39	0.52
1:A:251:PHE:O	1:A:252:LEU:C	2.47	0.52
1:A:371:LEU:HD13	1:A:448:GLN:HB3	1.92	0.52
1:A:756:LEU:HB3	1:A:762:LEU:HD12	1.91	0.52
1:A:720:LYS:C	1:A:722:ARG:O	2.46	0.52
1:A:19:GLN:O	1:A:20:ILE:C	2.48	0.52
1:A:719:MET:HE3	1:A:725:LEU:HB3	1.90	0.52
1:A:574:HIS:O	1:A:575:SER:C	2.45	0.52
1:A:680:LEU:O	1:A:681:ARG:HB3	2.09	0.52
1:A:115:VAL:HG21	1:A:179:VAL:HA	1.92	0.52
1:A:197:ASN:HB3	1:A:200:LEU:HG	1.92	0.52
1:A:123:TRP:HE1	1:A:206:GLN:NE2	2.08	0.52
1:A:337:LYS:HE2	1:A:390:GLY:O	2.10	0.52
1:A:524:HIS:O	1:A:527:ASN:HB3	2.09	0.52
1:A:719:MET:CE	1:A:725:LEU:HB3	2.40	0.52
1:A:119:TYR:CE2	1:A:175:LEU:HD12	2.39	0.52
1:A:669:ILE:O	1:A:669:ILE:HG22	2.09	0.52
1:A:688:MET:CE	1:A:688:MET:CA	2.85	0.52
1:A:252:LEU:HD23	1:A:253:GLN:HE22	1.74	0.52
1:A:608:MET:O	1:A:612:LEU:HG	2.10	0.52
1:A:357:GLU:HA	1:A:411:MET:CE	2.35	0.52
2:B:94:CYS:O	2:B:96:LEU:N	2.37	0.52
1:A:453:PHE:CZ	1:A:459:LYS:HD3	2.45	0.51
1:A:52:TYR:O	1:A:52:TYR:HD2	1.94	0.51
1:A:134:ASN:HD22	1:A:160:TYR:HB3	1.75	0.51
1:A:442:LEU:O	1:A:445:THR:HG23	2.10	0.51
1:A:352:ILE:HG22	1:A:369:THR:HG22	1.91	0.51
1:A:619:ALA:CB	1:A:670:LYS:HA	2.39	0.51
1:A:341:GLU:HG2	1:A:394:ALA:HA	1.92	0.51
1:A:465:PHE:CZ	1:A:699:THR:CG2	2.94	0.51
1:A:720:LYS:HD2	1:A:774:TYR:OH	2.10	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:21:TRP:NE1	1:A:91:ARG:HD2	2.25	0.51
1:A:267:ARG:NH1	1:A:267:ARG:HG2	2.26	0.51
1:A:375:LYS:CA	1:A:375:LYS:HE2	2.22	0.51
1:A:460:ASP:OD1	1:A:460:ASP:N	2.44	0.51
1:A:547:PHE:N	1:A:547:PHE:CD2	2.77	0.51
2:B:103:PHE:O	2:B:104:GLN:CB	2.58	0.51
1:A:615:ASN:OD1	2:B:21:ARG:HA	2.11	0.51
1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:HD23	2.25	0.51
1:A:204:VAL:O	1:A:207:SER:HB3	2.10	0.51
1:A:360:LEU:HD22	1:A:411:MET:CE	2.41	0.51
1:A:465:PHE:CZ	1:A:699:THR:HG21	2.46	0.51
1:A:345:HIS:CE1	1:A:349:LEU:HD12	2.46	0.51
2:B:38:VAL:HG11	2:B:40:ASP:CG	2.31	0.51
1:A:136:ILE:C	1:A:138:ALA:H	2.15	0.51
1:A:540:LEU:HB3	1:A:545:TRP:NE1	2.25	0.51
1:A:17:LEU:O	1:A:20:ILE:N	2.44	0.50
1:A:252:LEU:HD21	1:A:302:ILE:HG21	1.92	0.50
1:A:333:LEU:O	1:A:335:GLU:N	2.44	0.50
1:A:550:SER:C	1:A:551:CYS:SG	2.89	0.50
1:A:84:VAL:O	1:A:86:LEU:N	2.44	0.50
2:B:101:TRP:HA	2:B:101:TRP:HE3	1.76	0.50
2:B:77:HIS:O	2:B:78:ALA:O	2.29	0.50
1:A:533:LEU:HD12	1:A:534:ASP:C	2.32	0.50
1:A:173:ARG:C	1:A:175:LEU:H	2.15	0.50
1:A:201:ILE:HB	1:A:278:TYR:CD2	2.43	0.50
1:A:212:GLY:O	1:A:214:ASN:CG	2.50	0.50
1:A:463:GLN:HB2	1:A:500:TYR:CE1	2.45	0.50
1:A:352:ILE:HA	1:A:369:THR:HG21	1.93	0.50
1:A:412:ALA:HB1	1:A:417:LYS:HD3	1.93	0.50
1:A:191:ARG:HD3	1:A:192:ASN:HD21	1.76	0.50
1:A:618:ASP:CB	2:B:20:LYS:CD	2.84	0.50
1:A:629:THR:OG1	1:A:631:ILE:HG12	2.12	0.50
1:A:642:ILE:HD11	1:A:687:PRO:CA	2.41	0.50
1:A:712:GLN:HE22	1:A:755:ILE:HG21	1.76	0.50
1:A:204:VAL:O	1:A:208:TYR:HD1	1.94	0.50
1:A:253:GLN:N	1:A:253:GLN:NE2	2.51	0.50
1:A:283:THR:O	1:A:287:LEU:CA	2.54	0.50
1:A:610:ILE:HD13	1:A:640:LEU:HD23	1.94	0.50
1:A:719:MET:HG3	1:A:762:LEU:HG	1.94	0.50
2:B:47:ASN:HD22	2:B:52:LEU:CG	2.25	0.50
1:A:27:GLY:O	1:A:30:GLN:N	2.43	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:44:GLU:O	1:A:48:HIS:HB2	2.12	0.50
1:A:463:GLN:HB2	1:A:500:TYR:OH	2.11	0.50
1:A:540:LEU:HD13	1:A:545:TRP:CD2	2.47	0.50
1:A:279:LEU:CG	1:A:280:HIS:O	2.52	0.49
1:A:187:ILE:C	1:A:189:LYS:H	2.15	0.49
1:A:212:GLY:HA3	1:A:224:THR:CB	2.40	0.49
1:A:291:CYS:O	1:A:295:LEU:HG	2.12	0.49
1:A:134:ASN:HB2	1:A:160:TYR:HB2	1.94	0.49
1:A:270:GLU:O	1:A:273:ARG:HB2	2.12	0.49
1:A:586:SER:HG	1:A:605:THR:HG1	0.67	0.49
1:A:100:LEU:HD12	1:A:100:LEU:N	2.26	0.49
1:A:577:ARG:N	1:A:577:ARG:HD2	2.26	0.49
1:A:610:ILE:HD13	1:A:640:LEU:CD2	2.43	0.49
1:A:287:LEU:HD13	1:A:287:LEU:C	2.33	0.49
1:A:378:ASN:HA	1:A:395:LEU:CD1	2.42	0.49
2:B:27:TRP:C	2:B:28:ASN:HD22	2.16	0.49
2:B:71:ALA:HB2	2:B:81:PHE:HA	1.93	0.49
1:A:218:ALA:O	1:A:219:PHE:CD1	2.65	0.49
1:A:229:LYS:CA	1:A:233:GLU:HB3	2.26	0.49
1:A:465:PHE:C	1:A:467:ALA:N	2.65	0.49
1:A:496:CYS:HB2	1:A:500:TYR:HB2	1.94	0.49
1:A:593:ASN:OD1	1:A:598:ARG:NH1	2.45	0.49
1:A:686:VAL:CG2	1:A:686:VAL:O	2.42	0.49
2:B:38:VAL:CG1	2:B:40:ASP:CG	2.81	0.49
1:A:288:ALA:O	1:A:292:GLU:HG3	2.13	0.49
2:B:47:ASN:HD22	2:B:52:LEU:CB	2.25	0.49
1:A:21:TRP:HZ3	1:A:24:LEU:HD22	1.78	0.49
1:A:352:ILE:CD1	1:A:407:ALA:HB3	2.43	0.49
1:A:657:ASN:O	1:A:659:ASP:N	2.45	0.49
1:A:677:ASN:C	1:A:679:LYS:H	2.16	0.49
1:A:243:PHE:HE1	1:A:247:GLU:OE2	1.95	0.49
1:A:525:LEU:C	1:A:527:ASN:N	2.63	0.49
2:B:86:ARG:NH1	2:B:86:ARG:CB	2.70	0.49
1:A:611:LEU:HD11	1:A:643:LEU:HD11	1.95	0.49
1:A:680:LEU:H	1:A:680:LEU:HD22	1.77	0.49
1:A:21:TRP:HE1	1:A:25:ARG:NH2	2.11	0.48
1:A:399:CYS:O	1:A:403:ILE:HG13	2.12	0.48
1:A:588:GLY:CA	2:B:27:TRP:HA	2.43	0.48
1:A:615:ASN:HA	2:B:20:LYS:O	2.13	0.48
1:A:110:LEU:O	1:A:114:SER:HB3	2.12	0.48
1:A:167:TRP:O	1:A:170:CYS:HB3	2.14	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:187:ILE:C	1:A:189:LYS:N	2.67	0.48
1:A:323:TYR:O	1:A:327:SER:OG	2.26	0.48
1:A:658:VAL:HG23	1:A:659:ASP:N	2.29	0.48
1:A:191:ARG:CD	1:A:192:ASN:ND2	2.76	0.48
1:A:270:GLU:O	1:A:273:ARG:N	2.46	0.48
1:A:357:GLU:OE2	1:A:411:MET:HE3	2.13	0.48
1:A:592:THR:O	1:A:598:ARG:HD2	2.13	0.48
1:A:640:LEU:O	1:A:644:LEU:HG	2.13	0.48
1:A:769:LYS:HG3	1:A:770:ASP:H	1.78	0.48
1:A:99:TYR:CD2	1:A:99:TYR:C	2.86	0.48
1:A:267:ARG:HG2	1:A:267:ARG:HH11	1.77	0.48
1:A:347:GLN:HG3	1:A:377:TYR:OH	2.13	0.48
1:A:657:ASN:O	1:A:660:GLU:N	2.44	0.48
1:A:40:SER:O	1:A:44:GLU:HG3	2.12	0.48
1:A:427:ASP:CB	1:A:469:MET:HG2	2.43	0.48
1:A:677:ASN:HA	1:A:678:LYS:NZ	2.29	0.48
1:A:87:GLU:O	1:A:90:LYS:HB2	2.13	0.48
1:A:336:LEU:HB2	1:A:391:PHE:HZ	1.78	0.48
1:A:521:PHE:HD1	1:A:569:PHE:CG	2.32	0.48
1:A:723:LYS:O	1:A:774:TYR:N	2.45	0.48
1:A:716:VAL:HG23	1:A:756:LEU:HD13	1.96	0.48
2:B:84:ILE:HG21	2:B:101:TRP:HE1	1.79	0.48
1:A:602:GLN:HE21	1:A:683:ASN:HB2	1.77	0.48
1:A:757:ILE:HG12	1:A:762:LEU:O	2.13	0.48
2:B:39:VAL:C	2:B:41:ASN:N	2.47	0.48
1:A:205:VAL:HG13	1:A:228:TYR:CE2	2.48	0.48
1:A:489:ILE:O	1:A:501:THR:HG21	2.13	0.47
1:A:471:ALA:HB1	1:A:547:PHE:HE2	1.78	0.47
1:A:618:ASP:HB3	2:B:20:LYS:HD3	1.96	0.47
1:A:104:LEU:HD12	1:A:104:LEU:O	2.13	0.47
1:A:296:ILE:HG22	1:A:329:ILE:CG1	2.44	0.47
1:A:580:THR:OG1	2:B:32:LEU:HB2	2.14	0.47
1:A:271:GLU:HB3	1:A:287:LEU:CD1	2.43	0.47
2:B:84:ILE:HG21	2:B:101:TRP:NE1	2.28	0.47
1:A:213:LEU:CD1	1:A:214:ASN:HB2	2.44	0.47
1:A:481:SER:O	1:A:484:ALA:HB3	2.14	0.47
1:A:207:SER:O	1:A:211:LEU:HD22	2.13	0.47
1:A:368:GLN:CA	1:A:368:GLN:HE21	2.28	0.47
1:A:430:LEU:CB	1:A:473:ARG:NH1	2.77	0.47
1:A:564:GLN:O	1:A:567:THR:HG22	2.13	0.47
1:A:600:THR:HB	1:A:681:ARG:HA	1.97	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:762:LEU:HD23	1:A:772:TYR:CB	2.45	0.47
2:B:96:LEU:HD23	2:B:96:LEU:O	2.14	0.47
1:A:111:MET:O	1:A:112:ASP:CB	2.38	0.47
1:A:144:TRP:HA	1:A:144:TRP:HE3	1.78	0.47
1:A:260:TYR:CE2	1:A:264:ALA:HB2	2.50	0.47
1:A:691:GLU:HA	1:A:694:GLN:CG	2.44	0.47
1:A:86:LEU:HD22	1:A:90:LYS:HD3	1.97	0.47
1:A:366:TYR:HD2	1:A:408:VAL:HG21	1.80	0.47
1:A:750:LYS:HE3	1:A:750:LYS:HA	1.96	0.47
2:B:28:ASN:N	2:B:28:ASN:ND2	2.61	0.47
1:A:323:TYR:HE1	1:A:333:LEU:HG	1.79	0.47
1:A:529:GLU:CB	1:A:565:ARG:HH22	2.28	0.47
1:A:476:HIS:HB3	1:A:587:LYS:NZ	2.29	0.47
1:A:269:LEU:C	1:A:269:LEU:HD23	2.35	0.47
1:A:330:GLN:HG2	1:A:331:ASP:OD2	2.15	0.47
1:A:473:ARG:NH1	1:A:485:GLU:OE2	2.47	0.47
1:A:52:TYR:CD1	1:A:88:LEU:HD13	2.50	0.47
2:B:73:GLY:C	2:B:74:VAL:HG22	2.36	0.47
1:A:350:ALA:O	1:A:351:ALA:CA	2.63	0.46
1:A:535:PHE:CD1	1:A:562:SER:HB3	2.49	0.46
1:A:563:TYR:CE1	1:A:581:TRP:CE2	3.03	0.46
1:A:539:VAL:HG21	1:A:566:PHE:HZ	1.79	0.46
1:A:638:GLN:O	1:A:642:ILE:HG13	2.15	0.46
1:A:296:ILE:N	1:A:296:ILE:CD1	2.78	0.46
1:A:611:LEU:HD21	1:A:649:LEU:HD21	1.96	0.46
1:A:451:VAL:O	1:A:454:LYS:HB3	2.15	0.46
1:A:470:LEU:HD12	1:A:504:LEU:HD22	1.97	0.46
1:A:662:GLU:CD	1:A:662:GLU:H	2.18	0.46
2:B:42:CYS:O	2:B:43:ALA:CB	2.64	0.46
1:A:117:LYS:HE3	1:A:121:GLN:HE22	1.80	0.46
1:A:212:GLY:CA	1:A:224:THR:HB	2.40	0.46
1:A:30:GLN:HB3	1:A:35:GLN:HE22	1.80	0.46
1:A:574:HIS:O	1:A:575:SER:O	2.32	0.46
2:B:88:LEU:C	2:B:90:THR:N	2.68	0.46
1:A:341:GLU:O	1:A:398:ALA:HB2	2.15	0.46
1:A:712:GLN:O	1:A:715:ILE:N	2.49	0.46
1:A:715:ILE:CB	1:A:756:LEU:HD12	2.45	0.46
1:A:649:LEU:HD22	1:A:649:LEU:N	2.31	0.46
1:A:763:GLU:HG2	1:A:764:ARG:N	2.27	0.46
1:A:344:ILE:CD1	1:A:402:PHE:HE2	2.28	0.46
1:A:493:LYS:HZ1	1:A:505:GLN:NE2	2.04	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:540:LEU:HD12	1:A:547:PHE:CE1	2.51	0.46
1:A:643:LEU:HD12	1:A:649:LEU:CD2	2.46	0.46
1:A:718:ILE:HD13	1:A:733:GLU:HB2	1.97	0.46
2:B:42:CYS:SG	2:B:43:ALA:N	2.89	0.46
1:A:621:THR:N	1:A:624:GLN:HG3	2.31	0.46
1:A:96:LEU:HD23	1:A:162:LEU:CD1	2.46	0.46
1:A:189:LYS:HD3	1:A:189:LYS:HA	1.71	0.46
1:A:252:LEU:HD23	1:A:253:GLN:NE2	2.31	0.46
1:A:513:VAL:O	1:A:516:ASP:HB3	2.15	0.46
1:A:694:GLN:HB3	1:A:694:GLN:HE21	1.53	0.46
1:A:324:ASN:HA	1:A:327:SER:OG	2.16	0.45
1:A:430:LEU:HB3	1:A:485:GLU:OE1	2.16	0.45
1:A:514:SER:OG	1:A:539:VAL:N	2.44	0.45
1:A:549:GLN:HG2	1:A:582:LEU:HD23	1.98	0.45
1:A:636:LEU:HD22	1:A:640:LEU:CD1	2.45	0.45
1:A:716:VAL:HG23	1:A:756:LEU:CD1	2.46	0.45
1:A:108:GLU:O	1:A:110:LEU:HG	2.16	0.45
1:A:621:THR:HG23	1:A:624:GLN:HE21	1.80	0.45
1:A:103:LEU:HD21	1:A:122:GLN:CD	2.36	0.45
1:A:119:TYR:CB	1:A:175:LEU:HD11	2.45	0.45
1:A:677:ASN:ND2	1:A:682:VAL:HG11	2.32	0.45
2:B:102:GLU:O	2:B:103:PHE:HB2	2.15	0.45
2:B:60:GLN:HG2	2:B:61:ALA:N	2.31	0.45
1:A:200:LEU:O	1:A:204:VAL:HG23	2.16	0.45
1:A:618:ASP:HB3	2:B:20:LYS:CD	2.45	0.45
2:B:37:ILE:O	2:B:37:ILE:HG23	2.13	0.45
1:A:21:TRP:HE1	1:A:25:ARG:HH21	1.64	0.45
1:A:292:GLU:O	1:A:296:ILE:O	2.34	0.45
1:A:96:LEU:HD23	1:A:162:LEU:HD12	1.98	0.45
1:A:193:GLY:O	1:A:194:GLU:CB	2.23	0.45
1:A:283:THR:O	1:A:287:LEU:N	2.49	0.45
1:A:430:LEU:HD13	1:A:473:ARG:HH12	1.80	0.45
1:A:21:TRP:NE1	1:A:91:ARG:HB3	2.31	0.45
2:B:100:GLU:OE1	2:B:100:GLU:N	2.50	0.45
2:B:50:MET:C	2:B:52:LEU:H	2.19	0.45
2:B:67:GLU:O	2:B:69:THR:HG23	2.17	0.45
1:A:246:ARG:O	1:A:250:GLU:HB2	2.16	0.45
1:A:198:THR:HG22	1:A:278:TYR:CE1	2.52	0.45
1:A:261:MET:HG2	1:A:303:PHE:CZ	2.52	0.45
1:A:310:LEU:HB2	1:A:319:LEU:HD21	1.98	0.45
1:A:643:LEU:O	1:A:646:SER:OG	2.35	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:664:LYS:O	1:A:666:ASP:N	2.49	0.45
1:A:419:PRO:HB3	1:A:456:ILE:CG2	2.47	0.45
1:A:493:LYS:O	1:A:497:GLY:N	2.50	0.45
1:A:632:LYS:HE2	1:A:632:LYS:HB3	1.40	0.45
1:A:19:GLN:O	1:A:20:ILE:HA	2.13	0.45
1:A:366:TYR:HH	1:A:418:SER:HG	1.64	0.45
1:A:42:TYR:HD1	1:A:42:TYR:H	1.64	0.45
1:A:481:SER:HB3	1:A:484:ALA:HB2	1.99	0.45
1:A:643:LEU:HD13	1:A:648:LEU:HD12	1.99	0.45
1:A:116:LEU:HG	1:A:200:LEU:HB3	1.99	0.45
1:A:248:SER:OG	1:A:249:THR:N	2.49	0.45
1:A:647:LYS:O	1:A:672:TYR:HB2	2.17	0.45
1:A:292:GLU:OE2	1:A:328:ARG:HB3	2.17	0.44
1:A:322:MET:HE2	1:A:322:MET:O	2.17	0.44
1:A:526:THR:O	1:A:526:THR:HG22	2.17	0.44
1:A:644:LEU:HD22	1:A:651:LEU:HG	1.99	0.44
1:A:99:TYR:HD2	1:A:99:TYR:O	2.00	0.44
1:A:352:ILE:HD12	1:A:353:GLU:N	2.33	0.44
1:A:47:THR:HA	1:A:50:TYR:HB3	1.99	0.44
1:A:531:LEU:HD13	1:A:535:PHE:HB3	1.99	0.44
1:A:632:LYS:O	1:A:633:MET:C	2.54	0.44
1:A:623:GLN:HA	1:A:633:MET:HE1	1.98	0.44
1:A:417:LYS:O	1:A:420:GLU:N	2.49	0.44
1:A:540:LEU:HD12	1:A:547:PHE:HE1	1.83	0.44
1:A:116:LEU:HD21	1:A:200:LEU:HD13	1.99	0.44
1:A:188:GLU:HG2	1:A:188:GLU:O	2.18	0.44
1:A:20:ILE:HB	1:A:20:ILE:N	2.32	0.44
1:A:257:VAL:HB	1:A:306:GLU:HG2	2.00	0.44
1:A:41:ARG:O	1:A:45:LEU:HG	2.17	0.44
1:A:764:ARG:NH1	1:A:764:ARG:HG3	2.33	0.44
2:B:57:GLN:O	2:B:60:GLN:HB2	2.17	0.44
1:A:106:ASP:C	1:A:108:GLU:H	2.20	0.44
1:A:294:VAL:O	1:A:299:HIS:CE1	2.71	0.44
1:A:345:HIS:NE2	1:A:349:LEU:HD12	2.33	0.44
1:A:96:LEU:O	1:A:100:LEU:CD1	2.65	0.44
1:A:145:VAL:CG2	1:A:157:TYR:HB2	2.48	0.44
1:A:181:ASN:O	1:A:185:LYS:HG2	2.16	0.44
1:A:251:PHE:O	1:A:255:ASN:N	2.48	0.44
1:A:113:GLU:HA	1:A:116:LEU:HB3	2.00	0.44
1:A:213:LEU:CD1	1:A:214:ASN:ND2	2.76	0.44
1:A:423:ALA:HA	1:A:462:PHE:CE1	2.53	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:476:HIS:C	1:A:478:ASN:N	2.71	0.44
1:A:533:LEU:C	1:A:533:LEU:HD12	2.38	0.44
1:A:677:ASN:HA	1:A:678:LYS:HZ1	1.83	0.44
1:A:678:LYS:HZ3	1:A:678:LYS:H	1.65	0.44
1:A:191:ARG:CD	1:A:192:ASN:HD21	2.29	0.44
1:A:358:ALA:O	1:A:359:ALA:C	2.56	0.44
1:A:371:LEU:CD1	1:A:448:GLN:HB3	2.47	0.44
1:A:460:ASP:OD2	1:A:707:ARG:CD	2.64	0.44
1:A:191:ARG:O	1:A:192:ASN:CG	2.51	0.43
1:A:279:LEU:HG	1:A:280:HIS:H	1.71	0.43
1:A:268:LEU:CG	1:A:295:LEU:HD12	2.45	0.43
2:B:52:LEU:C	2:B:54:ILE:H	2.20	0.43
1:A:111:MET:SD	1:A:111:MET:C	2.94	0.43
1:A:171:LEU:C	1:A:173:ARG:N	2.59	0.43
1:A:189:LYS:NZ	1:A:193:GLY:HA3	2.33	0.43
1:A:301:GLU:O	1:A:302:ILE:HA	2.13	0.43
1:A:427:ASP:HB2	1:A:469:MET:HG2	2.00	0.43
1:A:597:ASN:HA	1:A:597:ASN:HD22	1.58	0.43
1:A:142:ARG:HA	1:A:142:ARG:HD2	1.74	0.43
1:A:333:LEU:H	1:A:333:LEU:CD2	2.28	0.43
1:A:367:VAL:HG11	1:A:425:TYR:CD1	2.52	0.43
1:A:496:CYS:CB	1:A:500:TYR:HB2	2.48	0.43
1:A:685:ASN:C	1:A:687:PRO:HD3	2.39	0.43
2:B:41:ASN:HD22	2:B:46:ARG:C	2.21	0.43
1:A:187:ILE:O	1:A:189:LYS:N	2.51	0.43
1:A:285:ASP:O	1:A:289:ARG:N	2.32	0.43
1:A:28:ILE:HG22	1:A:95:PHE:CE2	2.53	0.43
1:A:360:LEU:HD22	1:A:411:MET:HE2	2.00	0.43
1:A:400:GLY:HA2	1:A:455:TYR:HB3	2.00	0.43
2:B:87:TRP:HZ3	2:B:93:VAL:O	2.02	0.43
1:A:554:ALA:O	1:A:555:LEU:O	2.36	0.43
1:A:558:GLU:HB3	2:B:24:VAL:HG21	2.00	0.43
1:A:586:SER:HB2	2:B:29:ALA:HA	2.01	0.43
1:A:118:PHE:O	1:A:119:TYR:CA	2.64	0.43
1:A:204:VAL:O	1:A:208:TYR:CD1	2.70	0.43
1:A:376:LYS:HG3	1:A:377:TYR:N	2.34	0.43
2:B:47:ASN:CB	2:B:52:LEU:HD23	2.45	0.43
2:B:77:HIS:NE2	2:B:96:LEU:HD22	2.33	0.43
1:A:113:GLU:CD	1:A:113:GLU:O	2.56	0.43
1:A:367:VAL:HG11	1:A:425:TYR:HD1	1.83	0.43
1:A:529:GLU:HA	1:A:565:ARG:HH22	1.83	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:725:LEU:HD11	1:A:729:GLN:CB	2.49	0.43
1:A:764:ARG:HG3	1:A:764:ARG:HH11	1.83	0.43
2:B:38:VAL:HG12	2:B:40:ASP:CA	2.48	0.43
1:A:102:ASN:O	1:A:105:LYS:HB3	2.19	0.43
1:A:205:VAL:HG13	1:A:228:TYR:HE2	1.83	0.43
1:A:461:VAL:HA	1:A:703:ILE:CD1	2.49	0.43
1:A:521:PHE:CE1	1:A:566:PHE:HA	2.53	0.43
1:A:349:LEU:O	1:A:353:GLU:HB2	2.19	0.43
1:A:496:CYS:CB	1:A:500:TYR:CG	3.02	0.43
1:A:548:GLN:O	1:A:584:GLN:OE1	2.37	0.43
1:A:693:LYS:HA	1:A:693:LYS:HD2	1.60	0.43
1:A:128:PHE:O	1:A:131:LYS:HB3	2.19	0.42
1:A:168:ARG:HD2	1:A:168:ARG:O	2.19	0.42
1:A:213:LEU:CD1	1:A:214:ASN:CB	2.97	0.42
1:A:476:HIS:O	1:A:478:ASN:N	2.52	0.42
2:B:38:VAL:HG13	2:B:39:VAL:HB	2.01	0.42
2:B:77:HIS:CD2	2:B:96:LEU:HD13	2.54	0.42
1:A:141:ASN:ND2	1:A:159:ILE:HG22	2.34	0.42
1:A:162:LEU:HD13	1:A:162:LEU:C	2.40	0.42
1:A:466:TYR:OH	1:A:488:MET:HB3	2.19	0.42
1:A:498:PHE:O	1:A:502:SER:N	2.52	0.42
1:A:21:TRP:HB2	1:A:52:TYR:CE1	2.55	0.42
1:A:397:LYS:HA	1:A:397:LYS:HZ3	1.85	0.42
1:A:541:SER:C	1:A:543:GLY:N	2.73	0.42
1:A:175:LEU:HA	1:A:175:LEU:HD23	1.34	0.42
1:A:409:THR:HB	1:A:414:SER:O	2.20	0.42
1:A:514:SER:HG	1:A:539:VAL:H	1.66	0.42
1:A:557:SER:C	1:A:559:LEU:H	2.23	0.42
1:A:224:THR:O	1:A:226:THR:N	2.50	0.42
1:A:504:LEU:HA	1:A:507:MET:HE3	2.02	0.42
1:A:406:ASN:O	1:A:407:ALA:C	2.58	0.42
1:A:476:HIS:O	1:A:477:GLN:C	2.58	0.42
1:A:711:ILE:HD11	1:A:744:PRO:HB3	2.01	0.42
1:A:201:ILE:O	1:A:205:VAL:HG23	2.19	0.42
1:A:263:LYS:C	1:A:265:GLU:N	2.71	0.42
1:A:411:MET:HB3	1:A:411:MET:HE2	1.85	0.42
1:A:636:LEU:HD22	1:A:640:LEU:HD11	2.02	0.42
1:A:252:LEU:HD21	1:A:302:ILE:CG2	2.49	0.42
1:A:346:ASN:O	1:A:347:GLN:C	2.58	0.42
1:A:435:LYS:HD3	1:A:435:LYS:HA	1.90	0.42
1:A:633:MET:O	1:A:634:ASP:C	2.58	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:677:ASN:OD1	1:A:678:LYS:HE2	2.19	0.42
1:A:104:LEU:O	1:A:108:GLU:HB2	2.20	0.41
1:A:168:ARG:HA	1:A:171:LEU:CB	2.50	0.41
1:A:211:LEU:O	1:A:213:LEU:HD13	2.20	0.41
1:A:232:PHE:O	1:A:233:GLU:C	2.58	0.41
1:A:28:ILE:HA	1:A:31:VAL:HG12	2.01	0.41
1:A:537:ILE:HG21	1:A:566:PHE:CZ	2.54	0.41
1:A:145:VAL:CG2	1:A:157:TYR:HB3	2.49	0.41
1:A:173:ARG:O	1:A:174:PRO:C	2.54	0.41
1:A:325:LEU:O	1:A:328:ARG:HB2	2.20	0.41
1:A:420:GLU:O	1:A:424:ARG:HG2	2.20	0.41
1:A:724:VAL:HA	1:A:772:TYR:O	2.20	0.41
1:A:730:LEU:HD12	1:A:730:LEU:O	2.20	0.41
1:A:745:ARG:O	1:A:746:VAL:C	2.59	0.41
1:A:86:LEU:CD2	1:A:90:LYS:HD3	2.50	0.41
2:B:47:ASN:HD21	2:B:53:CYS:N	2.18	0.41
2:B:52:LEU:C	2:B:54:ILE:N	2.73	0.41
2:B:97:ASP:O	2:B:99:ARG:N	2.54	0.41
1:A:149:CYS:N	1:A:149:CYS:CB	2.80	0.41
1:A:333:LEU:HB3	1:A:391:PHE:CE1	2.48	0.41
1:A:645:LYS:HD2	1:A:645:LYS:HA	1.81	0.41
1:A:648:LEU:C	1:A:649:LEU:HD22	2.41	0.41
1:A:191:ARG:CB	1:A:192:ASN:HD21	2.28	0.41
1:A:431:LYS:O	1:A:432:LYS:C	2.59	0.41
1:A:478:ASN:O	1:A:478:ASN:CG	2.59	0.41
1:A:502:SER:OG	1:A:503:LYS:N	2.53	0.41
1:A:725:LEU:HD11	1:A:729:GLN:HB2	2.03	0.41
2:B:35:TRP:HD1	2:B:76:ASN:O	2.03	0.41
1:A:284:GLN:O	1:A:288:ALA:CB	2.68	0.41
1:A:344:ILE:HG13	1:A:398:ALA:CB	2.51	0.41
1:A:333:LEU:O	1:A:334:GLY:C	2.59	0.41
1:A:406:ASN:ND2	1:A:409:THR:HG23	2.36	0.41
1:A:499:GLU:OE1	1:A:741:ARG:NH2	2.54	0.41
1:A:541:SER:O	1:A:542:SER:C	2.58	0.41
1:A:634:ASP:N	1:A:634:ASP:OD2	2.47	0.41
1:A:755:ILE:HG22	1:A:759:LYS:CD	2.51	0.41
2:B:82:HIS:C	2:B:84:ILE:H	2.24	0.41
1:A:756:LEU:HD23	1:A:756:LEU:HA	1.82	0.41
2:B:49:ILE:HG22	2:B:70:VAL:HG12	1.99	0.41
2:B:81:PHE:HE2	2:B:103:PHE:CZ	2.39	0.41
1:A:303:PHE:HB3	1:A:322:MET:HE1	2.02	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:344:ILE:CG1	1:A:345:HIS:N	2.84	0.41
1:A:371:LEU:HG	1:A:452:VAL:CG2	2.50	0.41
2:B:82:HIS:C	2:B:84:ILE:N	2.75	0.41
1:A:147:ARG:HE	1:A:147:ARG:HA	1.86	0.41
1:A:134:ASN:ND2	1:A:160:TYR:CB	2.78	0.41
1:A:191:ARG:HB2	1:A:192:ASN:CG	2.41	0.41
1:A:290:LYS:O	1:A:294:VAL:HG23	2.21	0.41
2:B:60:GLN:CG	2:B:61:ALA:H	2.32	0.41
1:A:275:VAL:HG12	1:A:284:GLN:NE2	2.33	0.40
1:A:590:LEU:HD23	1:A:590:LEU:HA	1.81	0.40
1:A:643:LEU:HB3	1:A:649:LEU:CD2	2.44	0.40
1:A:275:VAL:HG12	1:A:279:LEU:HD11	0.46	0.40
1:A:39:LYS:H	1:A:39:LYS:CE	2.33	0.40
1:A:590:LEU:HG	1:A:608:MET:HE3	2.03	0.40
1:A:633:MET:O	1:A:635:ILE:N	2.54	0.40
1:A:110:LEU:O	1:A:115:VAL:HG13	2.21	0.40
1:A:162:LEU:HD13	1:A:162:LEU:O	2.20	0.40
1:A:279:LEU:CG	1:A:280:HIS:H	1.82	0.40
1:A:471:ALA:HB1	1:A:547:PHE:CE2	2.56	0.40
1:A:565:ARG:O	1:A:568:ALA:HB3	2.21	0.40
1:A:603:ALA:HA	1:A:685:ASN:HB2	2.03	0.40
1:A:735:LEU:O	1:A:738:LEU:N	2.52	0.40
2:B:88:LEU:C	2:B:90:THR:H	2.24	0.40
1:A:134:ASN:ND2	1:A:160:TYR:HB3	2.36	0.40
1:A:21:TRP:HE3	1:A:24:LEU:HB3	1.84	0.40
1:A:465:PHE:C	1:A:467:ALA:H	2.23	0.40
1:A:563:TYR:HE1	1:A:581:TRP:CE2	2.40	0.40
1:A:553:PHE:CE2	1:A:605:THR:HG22	2.57	0.40
1:A:719:MET:CE	1:A:725:LEU:HD23	2.52	0.40
2:B:94:CYS:HA	2:B:95:PRO:HD2	1.94	0.40
1:A:130:SER:HB3	1:A:163:ALA:CB	2.52	0.40
1:A:173:ARG:HA	1:A:173:ARG:NE	2.35	0.40
1:A:570:TYR:CD2	1:A:577:ARG:HG2	2.51	0.40
1:A:709:LEU:HD22	2:B:81:PHE:HE1	1.86	0.40
2:B:49:ILE:HG21	2:B:70:VAL:CG1	2.51	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:655:ASN:OD1	1:A:680:LEU:O[2_755]	2.13	0.07

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	719/760 (95%)	556 (77%)	127 (18%)	36 (5%)	2	12
2	B	86/90 (96%)	44 (51%)	22 (26%)	20 (23%)	0	0
All	All	805/850 (95%)	600 (74%)	149 (18%)	56 (7%)	1	6

All (56) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	259	GLU
1	A	280	HIS
1	A	480	ALA
1	A	542	SER
1	A	549	GLN
1	A	658	VAL
1	A	769	LYS
2	B	38	VAL
2	B	39	VAL
2	B	40	ASP
2	B	41	ASN
2	B	43	ALA
2	B	45	CYS
2	B	46	ARG
2	B	47	ASN
2	B	78	ALA
2	B	104	GLN
1	A	114	SER
1	A	274	ARG
1	A	334	GLY
1	A	387	ASN
1	A	414	SER
1	A	528	SER
1	A	558	GLU
1	A	575	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	675	TYR
1	A	687	PRO
2	B	67	GLU
2	B	73	GLY
2	B	74	VAL
2	B	96	LEU
1	A	111	MET
1	A	116	LEU
1	A	439	GLU
1	A	551	CYS
1	A	632	LYS
1	A	665	PRO
2	B	98	ASN
2	B	102	GLU
1	A	85	GLY
1	A	172	PHE
1	A	174	PRO
1	A	552	THR
1	A	759	LYS
1	A	173	ARG
1	A	555	LEU
1	A	727	HIS
2	B	95	PRO
2	B	99	ARG
1	A	277	VAL
1	A	596	LYS
1	A	684	ILE
2	B	54	ILE
2	B	93	VAL
1	A	437	PRO
1	A	497	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.

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	659/684 (96%)	550 (84%)	109 (16%)	2 11
2	B	78/79 (99%)	62 (80%)	16 (20%)	1 6
All	All	737/763 (97%)	612 (83%)	125 (17%)	2 10

All (125) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	17	LEU
1	A	21	TRP
1	A	34	ARG
1	A	35	GLN
1	A	39	LYS
1	A	41	ARG
1	A	47	THR
1	A	48	HIS
1	A	52	TYR
1	A	54	THR
1	A	89	TYR
1	A	99	TYR
1	A	114	SER
1	A	142	ARG
1	A	144	TRP
1	A	147	ARG
1	A	157	TYR
1	A	159	ILE
1	A	168	ARG
1	A	178	GLN
1	A	181	ASN
1	A	191	ARG
1	A	192	ASN
1	A	194	GLU
1	A	206	GLN
1	A	210	GLU
1	A	219	PHE
1	A	225	LEU
1	A	242	ARG
1	A	243	PHE
1	A	251	PHE
1	A	252	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	253	GLN
1	A	258	THR
1	A	259	GLU
1	A	265	GLU
1	A	273	ARG
1	A	277	VAL
1	A	279	LEU
1	A	281	GLU
1	A	283	THR
1	A	298	LYS
1	A	303	PHE
1	A	335	GLU
1	A	339	LEU
1	A	344	ILE
1	A	349	LEU
1	A	352	ILE
1	A	368	GLN
1	A	380	LEU
1	A	395	LEU
1	A	406	ASN
1	A	410	LYS
1	A	437	PRO
1	A	445	THR
1	A	446	LEU
1	A	454	LYS
1	A	464	LYS
1	A	468	LYS
1	A	469	MET
1	A	470	LEU
1	A	488	MET
1	A	490	SER
1	A	501	THR
1	A	508	PHE
1	A	509	GLN
1	A	514	SER
1	A	520	GLN
1	A	549	GLN
1	A	551	CYS
1	A	558	GLU
1	A	561	ARG
1	A	567	THR
1	A	577	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	584	GLN
1	A	597	ASN
1	A	610	ILE
1	A	618	ASP
1	A	626	THR
1	A	632	LYS
1	A	634	ASP
1	A	636	LEU
1	A	641	GLN
1	A	647	LYS
1	A	652	GLU
1	A	659	ASP
1	A	665	PRO
1	A	671	LEU
1	A	673	LEU
1	A	678	LYS
1	A	680	LEU
1	A	686	VAL
1	A	688	MET
1	A	689	LYS
1	A	690	THR
1	A	691	GLU
1	A	694	GLN
1	A	698	THR
1	A	706	ASP
1	A	721	MET
1	A	722	ARG
1	A	738	LEU
1	A	750	LYS
1	A	762	LEU
1	A	763	GLU
1	A	766	ASP
1	A	769	LYS
1	A	773	SER
1	A	775	LEU
2	B	25	LYS
2	B	28	ASN
2	B	37	ILE
2	B	42	CYS
2	B	53	CYS
2	B	68	CYS
2	B	74	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
2	B	75	CYS
2	B	76	ASN
2	B	84	ILE
2	B	87	TRP
2	B	90	THR
2	B	98	ASN
2	B	99	ARG
2	B	100	GLU
2	B	101	TRP

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (44) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	30	GLN
1	A	35	GLN
1	A	51	ASN
1	A	102	ASN
1	A	121	GLN
1	A	122	GLN
1	A	134	ASN
1	A	143	HIS
1	A	181	ASN
1	A	192	ASN
1	A	214	ASN
1	A	253	GLN
1	A	280	HIS
1	A	284	GLN
1	A	316	ASN
1	A	324	ASN
1	A	330	GLN
1	A	368	GLN
1	A	386	ASN
1	A	406	ASN
1	A	448	GLN
1	A	476	HIS
1	A	477	GLN
1	A	505	GLN
1	A	518	ASN
1	A	538	GLN
1	A	549	GLN
1	A	564	GLN
1	A	584	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	593	ASN
1	A	597	ASN
1	A	602	GLN
1	A	624	GLN
1	A	641	GLN
1	A	683	ASN
1	A	692	GLN
1	A	694	GLN
1	A	696	GLN
1	A	729	GLN
1	A	737	GLN
2	B	28	ASN
2	B	47	ASN
2	B	98	ASN
2	B	104	GLN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 3 ligands modelled in this entry, 3 are monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

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	5
2	B	2

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	224:THR	C	225:LEU	N	1.20
1	B	40:ASP	C	41:ASN	N	1.19
1	A	217:ASP	C	218:ALA	N	1.15
1	A	214:ASN	C	215:GLU	N	1.11
1	B	86:ARG	C	87:TRP	N	1.01
1	A	301:GLU	C	302:ILE	N	0.83
1	A	300:LEU	C	301:GLU	N	0.68

6 Fit of model and data

6.1 Protein, DNA and RNA chains

EDS was not executed - this section is therefore empty.

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

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.3 Carbohydrates

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.4 Ligands

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.5 Other polymers

EDS was not executed - this section is therefore empty.