



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Jun 25, 2025 – 12:48 PM JST

PDB ID : 6L42 / pdb_00006l42
EMDB ID : EMD-0828
Title : Structure of severe fever with thrombocytopenia syndrome virus L protein
Authors : Wang, P.; Lou, Z.
Deposited on : 2019-10-15
Resolution : 3.40 Å(reported)

This is a Full wwPDB EM 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/EMValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

EMDB validation analysis : 0.0.1.dev118
MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0rc1
Percentile statistics : 20231227.v01 (using entries in the PDB archive December 27th 2023)
MapQ : 1.9.13
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.44

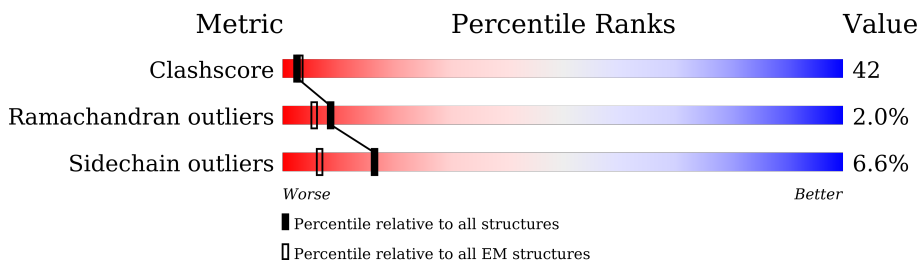
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 3.40 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)	EM structures (#Entries)
Clashscore	210492	15764
Ramachandran outliers	207382	16835
Sidechain outliers	206894	16415

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the map. The red, orange, yellow and green segments of the bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria respectively. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$. The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the EM map (all-atom inclusion $< 40\%$). The numeric value is given above the bar.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	2109	 46% 29% 9% 5% 12%

2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 14827 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

In the tables below, 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 RNA polymerase.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
1	A	1864	Total	C	N	O	S	0	0
			14826	9388	2574	2773	91		

There are 26 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-24	MET	-	initiating methionine	UNP I0DF35
A	-23	SER	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-22	TYR	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-21	TYR	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-20	HIS	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-19	HIS	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-18	HIS	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-17	HIS	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-16	HIS	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-15	HIS	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-14	ASP	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-13	TYR	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-12	ASP	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-11	ILE	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-10	PRO	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-9	THR	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-8	THR	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-7	GLU	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-6	ASN	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-5	LEU	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-4	TYR	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-3	PHE	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-2	GLN	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-1	GLY	-	expression tag	UNP I0DF35
A	0	ALA	-	expression tag	UNP I0DF35
A	1321	GLU	GLN	engineered mutation	UNP I0DF35

- Molecule 2 is MAGNESIUM ION (CCD ID: MG) (formula: Mg).

Mol	Chain	Residues	Atoms		AltConf
2	A	1	Total	Mg	0
			1	1	

R1827	V1828	R1829	G1830	D1831	I1832	L1833	N1834	V1837	G1840	T1842	S1843	T1844	M1845	E1848	V1849	M1845	Y1850	R1853	S1858	A1862	S1866	N1868	R1869	D1870	I1871	F1872	S1873	F1874	E1878	P1879	S1881	C1882	W1883	T1888	ASP	ASN	TRP	ALA	TRP	ALA	SER	HIS	A1897	S1898	V1899	L1900	L1901										
M1729	E1730	D1731	T1732	H1733	V1734	I1735	G1736	D1740	G1742	T1743	S1744	M1745	E1748	E1749	I1750	R1751	L1752	L1758	I1762	R1766	R1767	L1768	C1769	G1773	I1774	R1783	R1789	L1790	S1791	G1792	F1793	K1794	I1795	K1796	P1797	A1798	S1799	R1800	C1804	E1810	R1811	G1812	F1813	R1814	I1815	R1816	E1817	E1823									
T1596	L1597	S1598	G1599	VAL	VAL	ARG	MET	ASN	PHE	PHE	PRO	GLY	PHE	SER	LEU	GLU	ALA	GLY	LYS	S1616	L1617	D1618	N1619	Q1620	E1621	L1622	L1623	E1624	S1625	L1626	L1629	K1630	H1631	L1632	L1633	F1634	M1635	N1638	T1642	E1643	E1644	Y1645	K1646	L1647	E1648	M1649	I1650	I1651	E1652	A1653	F1654	T1655	T1656	L1657	VAL	ILE	
E1536	E1537	V1538	D1539	K1540	L1541	R1542	A1543	S1544	F1545	V1546	W1547	L1548	S1549	T1550	D1551	S1552	S1553	E1554	T1555	L1556	R1557	D1558	G1559	P1560	F1561	L1562	S1563	H1564	L1565	Q1566	F1567	R1568	N1569	F1570	I1571	A1572	H1573	D1574	A1576	K1577	S1578	R1579	S1580	V1581	R1582	L1583	G1585	A1586	P1587	V1588	K1589	L1590	S1591	G1592	G1593	V1594	T1595
T1596	L1597	S1598	G1599	VAL	VAL	ARG	MET	ASN	PHE	PHE	PRO	GLY	PHE	SER	LEU	GLU	ALA	GLY	LYS	S1616	L1617	D1618	N1619	Q1620	E1621	L1622	L1623	E1624	S1625	L1626	L1629	K1630	H1631	L1632	L1633	F1634	M1635	N1638	T1642	E1643	E1644	Y1645	K1646	L1647	E1648	M1649	I1650	I1651	E1652	A1653	F1654	T1655	T1656	L1657	VAL	ILE	
PRO	GLN	PRO	PRO	GLU	VAL	ILE	ARG	LYS	SER	R1670	T1671	M1672	T1673	L1674	L1677	S1678	N1679	TYR	LEU	SER	SER	ARG	ARG	GLY	GLY	S1687	L1688	L1689	E1690	Q1691	I1692	E1693	R1694	A1695	Q1696	S1697	G1698	T1699	L1700	G1701	G1702	F1703	P1706	E1710	R1711	R1712	P1713	G1714	G1715	G1718	Y1719	K1720	L1725	T1726			
M1729	E1730	D1731	T1732	H1733	V1734	I1735	G1736	D1740	G1742	T1743	S1744	M1745	E1748	E1749	I1750	R1751	L1752	L1758	I1762	R1766	R1767	L1768	C1769	G1773	I1774	R1783	R1789	L1790	S1791	G1792	F1793	K1794	I1795	K1796	P1797	A1798	S1799	R1800	C1804	E1810	R1811	G1812	F1813	R1814	I1815	R1816	E1817	E1823									
R1827	V1828	R1829	G1830	D1831	I1832	L1833	N1834	V1837	G1840	T1842	S1843	T1844	M1845	E1848	V1849	M1845	Y1850	R1853	S1858	A1862	S1866	N1868	R1869	D1870	I1871	F1872	S1873	F1874	E1878	P1879	S1881	C1882	W1883	T1888	ASP	ASN	TRP	ALA	TRP	ALA	SER	HIS	A1897	S1898	V1899	L1900	L1901										
E760	S761	T762	R871	S872	W879	R873	L874	L875	D794	S795	P796	H799	F805	R806	R807	S811	R815	Q819	R820	H821	G822	R823	Q824	W825	K826	Q827	E831	R835	I837	G838	T839	N841	I842	L843	D844	M848	K849	A850	T851	N852	R853	F854	L860	Y861	S862	E863	V864	Q865	T866								
K867	H870	R871	S872	K873	W879	R873	L874	L875	D794	S795	P796	H799	F805	R806	R807	S811	R815	Q819	R820	H821	G822	R823	Q824	W825	K826	Q827	E831	R835	I837	G838	T839	N841	I842	L843	D844	M848	K849	A850	T851	N852	R853	F854	L860	Y861	S862	E863	V864	Q865	T866								
H849	E950	T951	V952	A953	K958	T961	P962	L881	H882	G883	K884	G885	R886	M887	W888	S872	L890	D891	A892	V893	G894	Q895	M906	R907	L910	F911	K912	R913	N914	Q915	H916	G917	L919	R920	I921	L922	Y923	V924	M925	D926	A927	N928	A929	Q933	F934	G935	C944	S947	P948								
D1029	L1030	L1033	S1037	SER	LYS	SER	GLU	SER	ARG	ARG	SER	SER	D1046	P1047	F1048	M1052	A1055	F1056	H1057	G1058	N1059	R1060	E1061	F1062	S1063	G1064	M1065	K1066	K1067	G1068	R1069	T1070	Y1071	I1072	K1073	T1074	E1075	T1076	Q1080	G1081	F1005	M1006	P1007	F1010	H1011	R1012	F1013	I1014	F1021	Y1110	R1022	R1023	K1024	D1120	V1121		
T1122	E1123	G1124	S1125	S1128	M1131	T1132	S1133	T1134	R1135	P1136	K1137	S1138	D1139	R1140	D1141	F1142	V1143	R1144	L1153	N1160	P1161	L1162	F1163	G1164	E1169	K1170	V1173	N1174	T1175	V1176	Y1177	C1178	E1180	Y1181	N1182	S1183	F1185	H1186	F1187	H1188	R1189	H1190	L1191	P1194	T1195	L1196	R1197	H1203	Q1204								
L1205	S1206	E1207	T1208	A1210	S1213	R1214	Q1215	S1219	T1223	G1228	F1232	S1233	Y1247	M1248	L1249	C1253	L1254	H1255	P1256	L1257	G1263	M1264	L1265	T1266	S1267	D1268	D1270	L1273	G1274	F1275	F1276	L1277	M1280	P1281	A1282	F1283	R1290	F1291	R1295	A1296	C1297	K1298	T1299	T1300	D1301												
L1302	G1303	R1304	K1305	Y1308	Y1309	T1313	G1321	GLY	LYS	THR	LYS	GLY	ASP	ASP	Y1323	R1324	T1329	T1333	L1334	M1339	L1340	L1342	Y1341	D1344	R1345	Y1348	Q1349	A1350	L1351	L1352	M1355	G1356	L1357	V1362	I1365	H1368	Y1373	K1385	E1388	K1389	V1390	L1391	S1392	P1393	G1394												
V1395	T1396	S1398	L1399	S1400	K1401	G1402	H1403	V1405	P1406	R1407	V1408	V1409	Y1414	L1415	R1418	F1421	ARG	S1423	S1425	S1426	H1428	GLY	ARG	G1431	S1432	T1433	Q1434	K1435	A1436	S1437	L1438	L1441	M1443	M1444	S1445	S1446	I1447	S1448	A1449	M1450	S1455	L1456	N1457	P1458	N1459	Q1460	E1461	R1462									
V1474	C1475	T1476	L1477	L1478	E1479	H1483	LEU	THR	GLY	LYS	PHE	VAL	VAL	ARG	GLU	ASN	ILE	VAL	ARG	SER	ARG	ILE	ASP	LEU	PHE	GLN	GLY	PRO	VAL	ASP	K1512	E1513	D1515	L1516	V1517	S1518	E1519	V1520	W1521	F1522	G1523	E1524	R1525	T1527	K1528	G1530	P1531	L1532	L1533	L1534	K1535						
E1536	E1537	V1538	D1539	K1540	L1541	R1542	A1543	S1544	F1545	V1546	W1547	L1548	S1549	T1550	D1551	S1552	S1553	E1554	T1555	L1556	R1557	D1558	G1559	P1560	F1561	L1562	S1563	H1564	L1565	Q1566	F1567	R1568	N1569	F1570	I1571	A1572	H1573	D1574	A1576	K1577	S1578	R1579	S1580	V1581	R1582	L1583	G1585	A1586	P1587	V1588	K1589	L1590	S1591	G1592	G1593	V1594	T1595
T1596	L1597	S1598	G1599	VAL	VAL	ARG	MET	ASN	PHE	PHE	PRO	GLY	PHE	SER	LEU	GLU	ALA	GLY	LYS	S1616	L1617	D1618	N1619	Q1620	E1621	L1622	L1623	E1624	S1625	L1626	L1629	K1630	H1631	L1632	L1633	F1634	M1635	N1638	T1642	E1643	E1644	Y1645	K1646	L1647	E1648	M1649	I1650	I1651	E1652	A1653	F1654	T1655	T1656	L1657	VAL	ILE	
PRO	GLN	PRO	PRO	GLU	VAL	ILE	ARG	LYS	SER	R1670	T1671	M1672	T1673	L1674	L1677	S1678	N1679	TYR	LEU	SER	SER	ARG	ARG	GLY	GLY	S1687	L1688	L1689	E1690	Q1691	I1692	E1693	R1694	A1695	Q1696	S1697	G1698	T1699	L1700	G1701	G1702	F1703	P1706	E1710	R1711	R1712	P1713	G1714	G1715	G1718	Y1719	K1720	L1725	T1726			
M1729	E1730	D1731	T1732	H1733	V1734	I1735	G1736	D1740	G1742	T1743	S1744	M1745	E1748	E1749	I1750	R1751	L1752	L1758	I1762	R1766	R1767	L1768	C1769	G1773	I1774	R1783	R1789	L1790	S1791	G1792	F1793	K1794	I1795	K1796	P1797	A1798	S1799	R1800	C1804	E1810	R1811	G1812	F1813	R1814	I1815	R1816	E1817	E1823									
R1827	V1828	R1829	G1830	D1831	I1832	L1833	N1834	V1837	G1840	T1842	S1843	T1844	M1845	E1848	V1849	M1845	Y1850	R1853	S1858	A1862	S1866	N1868	R1869	D1870	I1871	F1872	S1873	F1874	E1878	P1879	S1881	C1882	W1883	T1888	ASP	ASN	TRP	ALA	TRP	ALA	SER	HIS	A1897	S1898	V1899	L1900	L1901										

A1902	E1973	M2041
K1906	G1974	E2046
T1907	S1975	R2049
Q1908	L1976	PRO
G1909	D1977	PHE
I1910	F1982	LEU
D1911	A1985	ILE
M1912	L1988	PHE
R1913	W1989	LEU
A1914	S1990	GLN
M1915	ALA	ILE
F1919	GLU	PRO
R1920	VAL	GLU
E1924	VAL	ASP
G1925	GLU	SER
S1926	GLU	ILE
L1927	PHE	SER
R1928	GLY	TRP
K1929	GLU	VAL
Q1930	GLY	SER
R1934	VAL	ASP
S1935	ALA	GLN
K1936	V2003	PHE
L1937	S2004	CYS
T1938	Y2005	ASP
E1939	S2006	SER
M1940	S2007	ARG
V1941	K2008	GLY
E1942	Y2009	LEU
K1943	Y2010	ASP
M1944	H2011	GLU
V1945	L2012	SER
V1946	M2015	THR
P1947	A2019	ILE
L1948	ILE	MET
T1949	THR	CYS
T1950	MET	ILE
Q1951	CYS	ALA
E1952	ALA	ILE
L1953	MET	MET
V1954	GLY	GLY
P1955	K2028	E2029
L1956	E2029	G2030
L1957	G2030	C2031
E1958	C2031	R2032
E1959	R2032	G2033
D1960	G2033	L2034
I1961	L2034	LEU
D1962	LEU	THR
F1963	THR	GLU
S1964	GLU	LYS
D1965	LYS	R2039
V1969	C2040	E1970
E1970		

4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	
Number of particles used	147344	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	PHASE FLIPPING AND AMPLITUDE CORRECTION	Depositor
Microscope	FEI TITAN KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{\AA}^2$)	40, 40	Depositor
Minimum defocus (nm)	Not provided	
Maximum defocus (nm)	Not provided	
Magnification	Not provided	
Image detector	GATAN K2 SUMMIT (4k x 4k), GATAN K2 SUMMIT (4k x 4k)	Depositor
Maximum map value	0.061	Depositor
Minimum map value	-0.028	Depositor
Average map value	0.000	Depositor
Map value standard deviation	0.002	Depositor
Recommended contour level	0.0085	Depositor
Map size (\AA)	237.6, 237.6, 237.6	wwPDB
Map dimensions	220, 220, 220	wwPDB
Map angles ($^\circ$)	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing (\AA)	1.08, 1.08, 1.08	Depositor

5 Model quality ⓘ

5.1 Standard geometry ⓘ

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

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	0.93	105/15117 (0.7%)	2.15	569/20379 (2.8%)

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	94

All (105) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	1520	VAL	CA-C	-23.22	1.17	1.52
1	A	892	ALA	C-N	21.80	1.59	1.34
1	A	348	THR	C-N	19.57	1.60	1.33
1	A	348	THR	CA-C	18.66	1.64	1.53
1	A	1	MET	C-N	17.37	1.58	1.33
1	A	1524	LEU	C-N	17.23	1.57	1.33
1	A	1532	ARG	C-N	16.92	1.58	1.33
1	A	1568	ARG	N-CA	16.71	1.67	1.46
1	A	1139	ASP	C-O	-16.68	1.00	1.23
1	A	1580	SER	C-N	16.57	1.56	1.33
1	A	1581	VAL	C-N	16.48	1.54	1.33
1	A	1139	ASP	N-CA	16.16	1.66	1.46
1	A	348	THR	N-CA	15.56	1.56	1.46
1	A	895	GLN	C-N	14.58	1.54	1.33
1	A	407	THR	N-CA	13.24	1.61	1.45
1	A	207	SER	CA-C	13.06	1.70	1.52
1	A	407	THR	CA-C	12.59	1.69	1.52
1	A	1575	ASP	CB-CG	-12.42	1.21	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	1687	SER	C-N	11.87	1.52	1.33
1	A	411	PHE	C-N	11.76	1.57	1.33
1	A	207	SER	N-CA	11.63	1.61	1.46
1	A	563	HIS	C-N	-11.62	1.21	1.33
1	A	1578	SER	N-CA	11.36	1.60	1.46
1	A	1398	SER	C-N	11.12	1.46	1.33
1	A	1424	SER	CA-C	10.91	1.67	1.52
1	A	1521	TRP	N-CA	10.52	1.60	1.46
1	A	106	SER	C-O	10.15	1.36	1.24
1	A	357	ASP	C-O	-10.07	1.11	1.24
1	A	209	ASP	CA-C	-9.74	1.39	1.52
1	A	347	LYS	C-N	9.62	1.41	1.33
1	A	1520	VAL	C-O	9.50	1.36	1.24
1	A	357	ASP	CA-C	9.41	1.65	1.52
1	A	1589	LYS	CA-C	9.40	1.65	1.52
1	A	1589	LYS	N-CA	9.16	1.58	1.46
1	A	1141	ASP	C-O	-9.08	1.13	1.24
1	A	1393	PRO	N-CD	-8.93	1.35	1.47
1	A	208	MET	CA-C	8.87	1.64	1.52
1	A	88	SER	CA-C	-8.82	1.40	1.52
1	A	1576	ALA	CA-CB	8.77	1.68	1.53
1	A	106	SER	N-CA	-8.69	1.34	1.46
1	A	1526	ARG	CA-C	-8.60	1.41	1.52
1	A	1518	SER	C-N	8.45	1.46	1.33
1	A	208	MET	N-CA	8.44	1.57	1.46
1	A	1579	ARG	N-CA	8.45	1.57	1.46
1	A	1561	PHE	C-N	8.40	1.45	1.33
1	A	1523	GLY	CA-C	-8.38	1.40	1.51
1	A	351	GLY	C-N	-8.28	1.22	1.33
1	A	969	SER	C-N	8.27	1.45	1.33
1	A	975	PRO	N-CD	-8.22	1.36	1.47
1	A	1575	ASP	CG-OD1	-8.19	1.09	1.25
1	A	1655	SER	C-N	8.19	1.44	1.33
1	A	1520	VAL	N-CA	8.10	1.57	1.46
1	A	1811	ARG	C-N	-8.07	1.21	1.33
1	A	108	GLY	N-CA	-8.06	1.33	1.45
1	A	1521	TRP	CA-C	8.05	1.63	1.52
1	A	889	TYR	C-N	8.04	1.44	1.33
1	A	109	MET	C-O	7.95	1.33	1.24
1	A	182	PRO	C-N	-7.82	1.23	1.33
1	A	1568	ARG	C-N	-7.31	1.23	1.33
1	A	1527	THR	CA-C	-7.22	1.43	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	1590	LYS	N-CA	7.17	1.55	1.46
1	A	1574	VAL	C-N	-7.16	1.23	1.33
1	A	1141	ASP	C-N	7.15	1.43	1.33
1	A	1574	VAL	N-CA	7.13	1.55	1.46
1	A	3	LEU	C-N	-7.04	1.23	1.33
1	A	1578	SER	CA-C	6.96	1.62	1.52
1	A	353	GLY	CA-C	-6.94	1.42	1.51
1	A	1678	SER	C-N	-6.89	1.23	1.33
1	A	1596	THR	CA-C	6.84	1.61	1.52
1	A	207	SER	C-N	6.52	1.42	1.33
1	A	1400	SER	C-N	-6.51	1.24	1.33
1	A	790	TRP	CA-C	6.47	1.61	1.52
1	A	1567	PHE	C-N	6.46	1.42	1.33
1	A	1397	SER	C-N	6.34	1.41	1.33
1	A	1579	ARG	CA-C	6.24	1.61	1.52
1	A	352	PHE	C-O	6.23	1.31	1.24
1	A	911	PHE	N-CA	6.21	1.53	1.46
1	A	1575	ASP	CA-C	-6.16	1.44	1.52
1	A	1393	PRO	CA-C	6.08	1.61	1.52
1	A	97	GLU	C-O	5.95	1.31	1.23
1	A	910	LEU	N-CA	5.90	1.53	1.45
1	A	1523	GLY	C-O	5.89	1.31	1.23
1	A	1587	PRO	C-N	5.86	1.41	1.33
1	A	236	PRO	N-CD	5.85	1.55	1.47
1	A	1575	ASP	C-N	-5.82	1.25	1.33
1	A	1426	SER	C-N	5.78	1.39	1.33
1	A	12	VAL	CA-C	5.76	1.60	1.52
1	A	1210	ALA	CA-C	-5.73	1.45	1.53
1	A	1521	TRP	C-N	5.64	1.40	1.33
1	A	1576	ALA	C-O	-5.63	1.16	1.24
1	A	1570	PHE	CA-C	-5.62	1.45	1.52
1	A	353	GLY	N-CA	-5.60	1.37	1.45
1	A	872	SER	C-N	5.59	1.41	1.33
1	A	1393	PRO	C-N	5.57	1.41	1.33
1	A	206	ARG	C-N	5.50	1.41	1.33
1	A	1545	PHE	N-CA	5.43	1.53	1.46
1	A	380	VAL	C-N	-5.34	1.26	1.33
1	A	1576	ALA	CA-C	5.32	1.59	1.52
1	A	1573	HIS	N-CA	-5.26	1.39	1.46
1	A	1573	HIS	CA-C	-5.26	1.46	1.53
1	A	1424	SER	N-CA	5.19	1.52	1.46
1	A	1519	GLU	C-N	5.19	1.39	1.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	353	GLY	C-N	-5.14	1.26	1.33
1	A	1575	ASP	CA-CB	5.07	1.62	1.53
1	A	406	ILE	CA-C	-5.02	1.47	1.52

All (569) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	348	THR	O-C-N	-55.41	79.92	121.47
1	A	1580	SER	O-C-N	-32.21	78.20	122.97
1	A	1584	LEU	O-C-N	-31.75	89.16	123.13
1	A	1581	VAL	O-C-N	30.97	161.28	122.57
1	A	1567	PHE	O-C-N	-30.23	83.09	122.39
1	A	873	LYS	CA-C-N	29.04	167.90	123.47
1	A	873	LYS	C-N-CA	29.04	167.90	123.47
1	A	915	GLN	N-CA-C	-27.77	72.37	108.19
1	A	1559	GLY	CA-C-N	27.43	154.12	119.84
1	A	1559	GLY	C-N-CA	27.43	154.12	119.84
1	A	1582	ARG	O-C-N	-27.26	90.97	122.32
1	A	1	MET	O-C-N	-27.25	79.40	123.00
1	A	104	ASP	CB-CA-C	-26.45	74.26	112.09
1	A	1655	SER	CA-C-N	26.42	161.66	121.76
1	A	1655	SER	C-N-CA	26.42	161.66	121.76
1	A	1574	VAL	O-C-N	-25.73	90.40	122.57
1	A	1687	SER	O-C-N	-24.80	83.31	123.00
1	A	563	HIS	O-C-N	-24.65	94.08	122.92
1	A	1576	ALA	O-C-N	-24.44	90.09	122.59
1	A	104	ASP	N-CA-C	24.20	158.26	107.67
1	A	1551	ASP	CA-C-N	24.08	144.72	119.19
1	A	1551	ASP	C-N-CA	24.08	144.72	119.19
1	A	374	LEU	N-CA-C	23.89	148.11	111.56
1	A	579	LEU	N-CA-C	-23.82	71.82	110.17
1	A	1546	ALA	N-CA-C	-23.42	75.82	110.48
1	A	349	ASP	N-CA-C	-23.02	80.48	112.94
1	A	1398	SER	N-CA-C	-22.94	74.60	109.24
1	A	546	LEU	N-CA-C	-22.30	81.76	110.53
1	A	87	LEU	N-CA-C	22.21	141.99	112.90
1	A	1696	GLN	N-CA-C	22.00	141.74	111.39
1	A	411	PHE	O-C-N	21.95	151.78	122.59
1	A	355	LEU	N-CA-C	-21.92	78.02	110.24
1	A	348	THR	CA-C-N	21.90	156.09	122.37
1	A	348	THR	C-N-CA	21.90	156.09	122.37
1	A	1391	HIS	N-CA-C	21.79	139.54	113.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	974	GLY	CA-C-N	21.33	146.50	119.84
1	A	974	GLY	C-N-CA	21.33	146.50	119.84
1	A	374	LEU	CA-C-N	21.19	162.94	121.41
1	A	374	LEU	C-N-CA	21.19	162.94	121.41
1	A	871	ARG	N-CA-CB	-20.72	77.77	110.92
1	A	1434	GLN	N-CA-C	-20.65	77.13	108.52
1	A	1687	SER	CA-C-N	-20.45	92.01	122.68
1	A	1687	SER	C-N-CA	-20.45	92.01	122.68
1	A	848	MET	N-CA-C	-20.35	72.59	107.80
1	A	1393	PRO	O-C-N	-20.33	95.19	122.64
1	A	1696	GLN	CB-CA-C	-20.27	83.10	111.89
1	A	849	LYS	N-CA-CB	-19.83	80.70	110.84
1	A	1520	VAL	CA-C-N	-19.77	86.54	121.14
1	A	1520	VAL	C-N-CA	-19.77	86.54	121.14
1	A	790	TRP	N-CA-C	19.69	152.74	110.80
1	A	725	GLY	N-CA-C	-19.61	79.52	112.06
1	A	1209	GLU	N-CA-C	19.59	136.49	112.59
1	A	1519	GLU	O-C-N	-19.32	97.11	122.23
1	A	1139	ASP	CA-C-O	-19.32	97.41	119.24
1	A	1141	ASP	CA-C-O	-19.26	99.35	120.92
1	A	1209	GLU	CB-CA-C	-19.24	80.05	111.02
1	A	1433	THR	N-CA-C	-19.18	69.95	110.80
1	A	88	SER	N-CA-C	-19.02	90.18	113.01
1	A	353	GLY	CA-C-N	18.63	154.14	121.92
1	A	353	GLY	C-N-CA	18.63	154.14	121.92
1	A	1519	GLU	N-CA-CB	-18.56	82.54	110.20
1	A	1561	PHE	O-C-N	-18.07	102.25	122.85
1	A	108	GLY	CA-C-O	-18.04	89.18	120.57
1	A	1065	MET	N-CA-C	-18.03	81.01	109.50
1	A	1573	HIS	O-C-N	-17.78	95.94	122.96
1	A	1575	ASP	CA-C-N	17.66	155.26	121.54
1	A	1575	ASP	C-N-CA	17.66	155.26	121.54
1	A	359	GLY	CA-C-N	17.61	155.17	121.54
1	A	359	GLY	C-N-CA	17.61	155.17	121.54
1	A	1868	ASN	N-CA-C	-17.55	70.64	107.67
1	A	1519	GLU	N-CA-C	17.42	133.11	111.69
1	A	1522	PHE	O-C-N	17.40	143.09	123.25
1	A	1655	SER	N-CA-C	-17.22	76.32	108.17
1	A	349	ASP	CA-C-N	-17.16	92.05	120.71
1	A	349	ASP	C-N-CA	-17.16	92.05	120.71
1	A	1866	TRP	CA-C-N	17.15	154.30	121.54
1	A	1866	TRP	C-N-CA	17.15	154.30	121.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1575	ASP	N-CA-C	-17.15	74.27	110.80
1	A	380	VAL	O-C-N	-17.10	100.78	122.32
1	A	359	GLY	N-CA-C	17.09	138.09	115.36
1	A	1574	VAL	CA-C-N	17.07	154.14	121.54
1	A	1574	VAL	C-N-CA	17.07	154.14	121.54
1	A	1811	ARG	O-C-N	-16.96	100.31	122.19
1	A	375	GLY	N-CA-C	16.89	153.20	113.18
1	A	1522	PHE	CA-C-N	-16.80	88.47	121.41
1	A	1522	PHE	C-N-CA	-16.80	88.47	121.41
1	A	347	LYS	CA-C-N	-16.80	104.89	123.04
1	A	347	LYS	C-N-CA	-16.80	104.89	123.04
1	A	1867	SER	CB-CA-C	-16.63	77.33	110.42
1	A	1393	PRO	N-CA-C	16.41	146.28	112.47
1	A	870	HIS	N-CA-C	-16.32	84.07	109.85
1	A	12	VAL	O-C-N	16.30	142.94	122.57
1	A	212	ILE	N-CA-C	-16.29	82.08	108.95
1	A	1524	LEU	N-CA-C	16.21	137.27	107.60
1	A	1518	SER	CA-C-N	-16.20	92.88	120.58
1	A	1518	SER	C-N-CA	-16.20	92.88	120.58
1	A	1654	PHE	O-C-N	16.09	141.99	123.01
1	A	418	SER	CB-CA-C	16.02	142.29	110.42
1	A	102	THR	N-CA-C	15.69	144.22	110.80
1	A	1581	VAL	CA-C-N	-15.59	93.27	121.81
1	A	1581	VAL	C-N-CA	-15.59	93.27	121.81
1	A	1576	ALA	CA-C-O	-15.31	98.61	120.51
1	A	726	ARG	N-CA-CB	-15.26	88.12	110.24
1	A	1575	ASP	N-CA-CB	-15.18	84.83	110.49
1	A	975	PRO	O-C-N	15.08	143.00	122.64
1	A	1546	ALA	CB-CA-C	15.04	137.13	109.46
1	A	96	SER	CB-CA-C	14.54	139.37	110.42
1	A	1139	ASP	CA-CB-CG	-14.48	98.12	112.60
1	A	95	LEU	O-C-N	-14.42	103.41	122.59
1	A	873	LYS	O-C-N	-14.29	103.59	122.59
1	A	1523	GLY	CA-C-N	-14.28	89.07	122.20
1	A	1523	GLY	C-N-CA	-14.28	89.07	122.20
1	A	1532	ARG	CA-C-N	-14.08	96.51	120.58
1	A	1532	ARG	C-N-CA	-14.08	96.51	120.58
1	A	382	SER	CB-CA-C	13.40	128.68	110.06
1	A	407	THR	N-CA-C	13.34	131.09	110.42
1	A	872	SER	N-CA-C	13.28	129.57	111.24
1	A	1432	SER	N-CA-C	13.27	129.59	109.41
1	A	1866	TRP	O-C-N	-13.27	106.50	122.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1568	ARG	O-C-N	-13.22	105.00	122.59
1	A	1140	MET	CA-C-N	13.13	140.51	120.82
1	A	1140	MET	C-N-CA	13.13	140.51	120.82
1	A	1397	SER	CA-C-N	-13.12	100.95	122.21
1	A	1397	SER	C-N-CA	-13.12	100.95	122.21
1	A	1552	PRO	N-CA-C	-13.12	96.39	113.57
1	A	563	HIS	CA-C-N	13.03	141.88	121.95
1	A	563	HIS	C-N-CA	13.03	141.88	121.95
1	A	1580	SER	CA-C-N	12.87	145.14	121.97
1	A	1580	SER	C-N-CA	12.87	145.14	121.97
1	A	1140	MET	N-CA-C	-12.84	95.61	112.68
1	A	1913	ARG	N-CA-CB	-12.81	90.84	110.06
1	A	181	MET	N-CA-C	-12.78	82.56	109.01
1	A	824	GLN	N-CA-C	12.66	131.72	114.12
1	A	1397	SER	O-C-N	-12.57	105.94	122.28
1	A	1434	GLN	N-CA-CB	12.55	131.20	111.24
1	A	1792	GLY	N-CA-C	-12.49	83.57	113.18
1	A	1576	ALA	CA-C-N	12.46	145.33	121.54
1	A	1576	ALA	C-N-CA	12.46	145.33	121.54
1	A	1393	PRO	N-CD-CG	-12.33	84.70	103.20
1	A	109	MET	CB-CA-C	-12.32	85.90	110.42
1	A	1529	LEU	CB-CA-C	12.26	131.35	109.64
1	A	87	LEU	CB-CA-C	-12.23	85.08	109.67
1	A	1023	ARG	N-CA-C	-12.20	86.69	107.80
1	A	1459	ASN	N-CA-C	-12.18	92.38	108.34
1	A	1697	SER	N-CA-C	12.13	127.91	111.90
1	A	102	THR	CB-CA-C	-12.06	86.42	110.42
1	A	1393	PRO	N-CA-CB	-12.05	90.59	103.25
1	A	1575	ASP	CA-CB-CG	12.01	124.61	112.60
1	A	1572	ALA	N-CA-C	11.97	125.63	111.02
1	A	2	ASN	CA-C-N	11.90	144.27	121.54
1	A	2	ASN	C-N-CA	11.90	144.27	121.54
1	A	896	ALA	N-CA-CB	-11.87	90.43	110.49
1	A	1583	LEU	O-C-N	-11.86	106.82	122.59
1	A	975	PRO	CB-CA-C	-11.78	92.12	111.56
1	A	848	MET	CB-CA-C	-11.72	93.51	110.62
1	A	1208	THR	CA-C-N	-11.70	104.07	122.67
1	A	1208	THR	C-N-CA	-11.70	104.07	122.67
1	A	895	GLN	CA-C-N	-11.69	99.21	121.54
1	A	895	GLN	C-N-CA	-11.69	99.21	121.54
1	A	209	ASP	CA-C-N	11.67	136.30	120.54
1	A	209	ASP	C-N-CA	11.67	136.30	120.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1057	HIS	N-CA-C	11.66	124.07	111.36
1	A	1678	SER	N-CA-C	-11.60	93.19	110.24
1	A	95	LEU	CA-C-N	-11.46	99.65	121.54
1	A	95	LEU	C-N-CA	-11.46	99.65	121.54
1	A	977	SER	CA-C-N	11.42	142.53	121.97
1	A	977	SER	C-N-CA	11.42	142.53	121.97
1	A	1461	GLU	N-CA-C	-11.39	100.10	114.56
1	A	974	GLY	O-C-N	11.38	133.15	121.77
1	A	1584	LEU	CA-C-N	-11.34	102.48	120.86
1	A	1584	LEU	C-N-CA	-11.34	102.48	120.86
1	A	896	ALA	CB-CA-C	-11.29	87.95	110.42
1	A	1391	HIS	CB-CA-C	-11.17	87.72	109.95
1	A	355	LEU	CB-CA-C	11.13	126.53	109.84
1	A	352	PHE	N-CA-CB	11.10	129.25	110.49
1	A	1586	ALA	CA-C-N	-11.04	108.72	119.76
1	A	1586	ALA	C-N-CA	-11.04	108.72	119.76
1	A	1793	PHE	N-CA-C	11.02	126.28	111.30
1	A	1587	PRO	N-CA-C	10.98	128.44	111.19
1	A	687	LEU	N-CA-C	10.86	124.42	111.82
1	A	896	ALA	CA-C-N	10.77	141.85	122.46
1	A	896	ALA	C-N-CA	10.77	141.85	122.46
1	A	348	THR	N-CA-C	10.77	117.61	108.78
1	A	1066	ASP	N-CA-CB	-10.77	93.17	110.51
1	A	889	TYR	N-CA-C	-10.55	98.81	113.37
1	A	894	GLY	CA-C-N	-10.53	107.07	121.71
1	A	894	GLY	C-N-CA	-10.53	107.07	121.71
1	A	347	LYS	O-C-N	10.49	135.03	122.75
1	A	384	PRO	O-C-N	-10.47	105.19	122.36
1	A	1526	ARG	CA-C-N	10.40	136.35	122.84
1	A	1526	ARG	C-N-CA	10.40	136.35	122.84
1	A	1442	LEU	N-CA-C	10.37	123.85	111.82
1	A	1798	ALA	N-CA-C	-10.36	88.73	110.80
1	A	109	MET	N-CA-C	10.23	132.60	110.80
1	A	1011	HIS	N-CA-C	10.21	122.36	111.03
1	A	1696	GLN	N-CA-CB	10.15	126.72	111.70
1	A	888	TRP	CB-CA-C	10.15	130.61	110.42
1	A	1141	ASP	N-CA-C	-10.09	94.72	111.37
1	A	1523	GLY	O-C-N	-10.08	109.59	122.70
1	A	1523	GLY	CA-C-O	-10.00	103.17	120.57
1	A	353	GLY	CA-C-O	9.96	137.91	120.57
1	A	1579	ARG	CA-C-N	-9.92	105.29	123.05
1	A	1579	ARG	C-N-CA	-9.92	105.29	123.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	974	GLY	N-CA-C	-9.88	92.18	112.34
1	A	1424	SER	N-CA-C	9.84	131.76	110.80
1	A	1575	ASP	CA-C-O	9.80	134.53	120.51
1	A	1527	THR	N-CA-C	-9.79	91.46	108.20
1	A	1400	SER	CA-C-N	-9.78	100.82	121.64
1	A	1400	SER	C-N-CA	-9.78	100.82	121.64
1	A	1061	GLU	CA-C-N	9.75	137.14	121.34
1	A	1061	GLU	C-N-CA	9.75	137.14	121.34
1	A	1586	ALA	N-CA-C	-9.71	96.92	110.31
1	A	1975	SER	N-CA-C	9.70	124.69	113.15
1	A	353	GLY	O-C-N	9.70	135.31	122.70
1	A	1569	ASN	N-CA-C	9.61	124.56	113.02
1	A	1577	LYS	O-C-N	-9.49	109.97	122.59
1	A	1519	GLU	CB-CA-C	9.47	128.03	110.70
1	A	978	ILE	N-CA-C	-9.47	89.64	109.34
1	A	824	GLN	CA-C-N	9.43	133.86	120.28
1	A	824	GLN	C-N-CA	9.43	133.86	120.28
1	A	209	ASP	N-CA-C	-9.41	90.76	110.80
1	A	871	ARG	CB-CA-C	-9.40	95.88	111.02
1	A	238	ILE	N-CA-C	9.39	125.94	113.07
1	A	1677	LEU	N-CA-C	9.38	124.35	113.19
1	A	1654	PHE	CA-C-N	9.36	138.79	122.32
1	A	1654	PHE	C-N-CA	9.36	138.79	122.32
1	A	2	ASN	CB-CA-C	9.30	128.93	110.42
1	A	406	ILE	CA-C-N	-9.28	105.84	122.74
1	A	406	ILE	C-N-CA	-9.28	105.84	122.74
1	A	110	THR	N-CA-CB	-9.27	93.88	110.37
1	A	893	VAL	O-C-N	9.24	134.54	122.26
1	A	1182	ASN	CA-C-N	9.18	133.78	120.38
1	A	1182	ASN	C-N-CA	9.18	133.78	120.38
1	A	1208	THR	N-CA-C	-9.15	95.33	109.52
1	A	10	ILE	N-CA-C	9.11	120.50	110.21
1	A	204	LYS	N-CA-C	9.10	122.18	111.71
1	A	1446	SER	N-CA-C	9.09	130.16	110.80
1	A	183	LEU	N-CA-C	9.07	121.57	110.41
1	A	209	ASP	O-C-N	8.97	134.53	122.59
1	A	1588	VAL	O-C-N	-8.96	111.38	122.57
1	A	106	SER	CA-C-O	8.92	133.26	120.51
1	A	384	PRO	CA-N-CD	-8.91	99.52	112.00
1	A	182	PRO	CA-N-CD	-8.91	99.53	112.00
1	A	379	GLY	CA-C-N	-8.91	112.79	122.59
1	A	379	GLY	C-N-CA	-8.91	112.79	122.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	81	ASP	N-CA-C	8.87	123.94	113.20
1	A	1350	ALA	N-CA-C	-8.87	102.03	113.12
1	A	1426	SER	O-C-N	-8.84	110.83	122.59
1	A	411	PHE	CA-C-N	-8.84	100.23	121.80
1	A	411	PHE	C-N-CA	-8.84	100.23	121.80
1	A	1390	VAL	CB-CA-C	8.84	123.60	112.02
1	A	1529	LEU	CA-C-N	8.83	135.73	121.87
1	A	1529	LEU	C-N-CA	8.83	135.73	121.87
1	A	95	LEU	N-CA-C	-8.81	92.03	110.80
1	A	627	LEU	N-CA-C	8.79	123.73	112.92
1	A	1573	HIS	N-CA-C	-8.75	90.10	107.69
1	A	976	GLY	N-CA-C	8.69	131.63	111.04
1	A	348	THR	CA-C-O	-8.69	112.90	117.94
1	A	1068	GLY	N-CA-C	8.68	133.75	113.18
1	A	1545	PHE	CA-C-N	8.66	135.76	121.39
1	A	1545	PHE	C-N-CA	8.66	135.76	121.39
1	A	1071	TYR	N-CA-C	8.62	123.10	108.02
1	A	11	ASN	CA-C-N	8.60	137.45	121.97
1	A	11	ASN	C-N-CA	8.60	137.45	121.97
1	A	741	THR	N-CA-C	-8.60	98.12	110.59
1	A	386	LYS	N-CA-C	-8.59	102.00	111.36
1	A	978	ILE	CB-CA-C	8.55	125.31	111.29
1	A	742	ASN	N-CA-C	8.54	120.91	110.41
1	A	672	GLU	N-CA-C	8.53	123.10	112.87
1	A	1774	ILE	N-CA-C	8.51	120.12	108.89
1	A	1570	PHE	CB-CA-C	-8.48	95.29	109.03
1	A	210	ALA	CA-C-N	-8.40	108.45	121.56
1	A	210	ALA	C-N-CA	-8.40	108.45	121.56
1	A	211	ASP	CB-CA-C	8.39	121.37	109.71
1	A	1433	THR	CB-CA-C	-8.36	93.79	110.42
1	A	110	THR	N-CA-C	8.29	128.14	109.81
1	A	1791	SER	N-CA-C	-8.28	97.53	110.36
1	A	1444	MET	N-CA-C	8.27	120.29	111.28
1	A	598	PHE	N-CA-C	8.27	122.83	111.17
1	A	410	ARG	N-CA-C	8.24	121.32	111.02
1	A	874	LEU	N-CA-C	-8.21	103.21	113.23
1	A	1060	ARG	CA-C-N	-8.21	111.03	122.93
1	A	1060	ARG	C-N-CA	-8.21	111.03	122.93
1	A	14	ASN	N-CA-C	8.18	119.42	108.38
1	A	1059	ASN	N-CA-C	8.18	121.14	110.43
1	A	1518	SER	CB-CA-C	8.16	123.87	110.81
1	A	979	ASN	N-CA-CB	8.13	126.64	111.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1552	PRO	CA-C-N	-8.12	107.34	122.60
1	A	1552	PRO	C-N-CA	-8.12	107.34	122.60
1	A	579	LEU	CB-CA-C	-8.09	95.83	109.50
1	A	1576	ALA	N-CA-C	8.03	127.90	110.80
1	A	580	THR	N-CA-C	8.02	121.58	109.63
1	A	1773	GLY	N-CA-C	7.99	126.40	115.30
1	A	1524	LEU	CB-CA-C	-7.98	99.57	111.70
1	A	979	ASN	N-CA-C	-7.98	96.47	108.99
1	A	1141	ASP	CA-C-N	-7.94	110.12	120.44
1	A	1141	ASP	C-N-CA	-7.94	110.12	120.44
1	A	1426	SER	CA-C-N	7.94	133.75	122.72
1	A	1426	SER	C-N-CA	7.94	133.75	122.72
1	A	1520	VAL	N-CA-C	-7.94	100.93	112.04
1	A	1296	ALA	N-CA-C	7.93	122.22	112.23
1	A	1061	GLU	O-C-N	7.92	133.27	123.21
1	A	866	THR	N-CA-C	7.87	122.64	112.41
1	A	3	LEU	CB-CA-C	7.86	126.07	110.42
1	A	1139	ASP	N-CA-C	7.86	123.54	113.88
1	A	1524	LEU	O-C-N	7.83	137.65	122.22
1	A	97	GLU	CA-C-N	-7.83	107.89	121.97
1	A	97	GLU	C-N-CA	-7.83	107.89	121.97
1	A	1574	VAL	N-CA-C	7.80	125.56	109.34
1	A	1273	LEU	N-CA-C	-7.76	97.54	109.65
1	A	952	VAL	CB-CA-C	-7.73	103.36	110.63
1	A	1368	ASN	CB-CA-C	7.73	119.70	109.65
1	A	695	ARG	N-CA-C	7.73	119.39	110.97
1	A	1811	ARG	N-CA-C	-7.66	103.92	112.57
1	A	1424	SER	CA-C-N	7.63	131.91	120.31
1	A	1424	SER	C-N-CA	7.63	131.91	120.31
1	A	323	THR	N-CA-C	7.63	119.50	111.03
1	A	110	THR	CA-C-N	7.59	129.11	120.98
1	A	110	THR	C-N-CA	7.59	129.11	120.98
1	A	382	SER	N-CA-C	-7.58	98.92	110.30
1	A	969	SER	CA-C-N	-7.58	108.80	121.92
1	A	969	SER	C-N-CA	-7.58	108.80	121.92
1	A	109	MET	CA-C-O	7.58	131.34	120.51
1	A	1402	GLY	N-CA-C	7.52	131.00	113.18
1	A	82	PHE	N-CA-C	7.51	119.25	111.14
1	A	873	LYS	N-CA-C	-7.49	94.85	110.80
1	A	961	ILE	CB-CA-C	-7.49	104.47	111.06
1	A	1656	THR	N-CA-C	-7.47	94.61	107.61
1	A	87	LEU	CA-C-N	7.45	135.93	121.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	87	LEU	C-N-CA	7.45	135.93	121.18
1	A	209	ASP	N-CA-CB	-7.42	97.94	110.49
1	A	181	MET	CA-C-N	-7.42	104.02	120.56
1	A	181	MET	C-N-CA	-7.42	104.02	120.56
1	A	1582	ARG	CA-C-N	7.41	135.69	121.54
1	A	1582	ARG	C-N-CA	7.41	135.69	121.54
1	A	1697	SER	N-CA-CB	7.39	123.24	112.08
1	A	872	SER	N-CA-CB	-7.36	100.02	111.65
1	A	1587	PRO	O-C-N	7.34	131.91	123.10
1	A	1589	LYS	N-CA-C	7.29	126.34	110.80
1	A	913	LYS	N-CA-C	-7.29	95.74	108.20
1	A	929	ALA	N-CA-C	-7.22	104.33	113.72
1	A	976	GLY	CA-C-N	7.19	135.28	121.54
1	A	976	GLY	C-N-CA	7.19	135.28	121.54
1	A	106	SER	CA-C-N	-7.17	107.74	122.58
1	A	106	SER	C-N-CA	-7.17	107.74	122.58
1	A	1521	TRP	CB-CA-C	7.17	124.97	109.99
1	A	737	SER	N-CA-C	-7.16	96.84	108.52
1	A	1434	GLN	CB-CA-C	7.13	121.47	109.99
1	A	1655	SER	CB-CA-C	-7.12	99.66	111.41
1	A	1559	GLY	C-N-CD	-7.09	95.92	125.00
1	A	791	GLY	N-CA-C	-7.08	100.57	111.12
1	A	1134	ILE	O-C-N	7.05	131.27	123.09
1	A	1295	ARG	N-CA-C	-7.04	103.53	111.14
1	A	1969	VAL	N-CA-C	7.03	123.97	109.34
1	A	1654	PHE	CB-CA-C	6.97	121.31	109.53
1	A	1138	SER	CA-C-N	6.94	134.30	122.36
1	A	1138	SER	C-N-CA	6.94	134.30	122.36
1	A	212	ILE	N-CA-CB	6.93	124.08	112.44
1	A	1003	CYS	N-CA-C	6.89	121.39	113.19
1	A	514	VAL	CB-CA-C	-6.88	104.16	110.91
1	A	2005	TYR	N-CA-C	6.87	121.52	113.20
1	A	1970	GLU	N-CA-C	6.87	125.42	110.80
1	A	888	TRP	N-CA-C	-6.86	96.18	110.80
1	A	1976	LEU	N-CA-C	6.84	118.73	111.28
1	A	790	TRP	N-CA-CB	-6.84	98.94	110.49
1	A	1462	ARG	N-CA-CB	-6.83	101.18	110.67
1	A	161	GLU	CB-CA-C	-6.82	97.90	112.63
1	A	1552	PRO	CA-C-O	-6.79	109.35	119.34
1	A	1047	PRO	N-CA-C	-6.79	105.69	114.03
1	A	1059	ASN	O-C-N	-6.76	114.83	122.75
1	A	919	LEU	N-CA-C	-6.73	95.24	107.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1520	VAL	CA-C-O	-6.73	111.51	119.85
1	A	1458	PRO	CB-CA-C	-6.69	100.88	112.06
1	A	106	SER	CB-CA-C	6.69	123.72	110.42
1	A	238	ILE	CB-CA-C	-6.68	89.72	110.97
1	A	547	LYS	N-CA-C	6.68	120.34	110.46
1	A	1578	SER	CA-C-O	-6.66	110.98	120.51
1	A	30	ARG	CA-C-N	6.65	128.15	119.84
1	A	30	ARG	C-N-CA	6.65	128.15	119.84
1	A	1528	LYS	CA-C-O	-6.64	111.02	120.51
1	A	11	ASN	O-C-N	-6.64	115.69	123.25
1	A	1066	ASP	N-CA-C	-6.63	100.16	110.17
1	A	1479	GLU	N-CA-C	6.63	121.58	112.04
1	A	206	ARG	O-C-N	-6.58	115.10	122.86
1	A	374	LEU	N-CA-CB	-6.56	99.91	110.14
1	A	376	ASN	N-CA-C	-6.56	105.27	113.20
1	A	1181	TYR	N-CA-C	-6.55	96.85	110.80
1	A	1596	THR	CA-C-N	6.55	133.76	121.97
1	A	1596	THR	C-N-CA	6.55	133.76	121.97
1	A	627	LEU	N-CA-CB	-6.54	101.02	110.56
1	A	1373	TYR	N-CA-C	6.52	121.37	113.41
1	A	1194	PRO	CB-CA-C	6.52	118.66	111.56
1	A	974	GLY	C-N-CD	-6.50	98.33	125.00
1	A	93	ARG	N-CA-C	6.49	118.89	111.11
1	A	893	VAL	CA-C-N	6.48	134.12	121.41
1	A	893	VAL	C-N-CA	6.48	134.12	121.41
1	A	889	TYR	CA-C-N	-6.48	110.31	121.97
1	A	889	TYR	C-N-CA	-6.48	110.31	121.97
1	A	1426	SER	N-CA-C	6.44	124.51	110.80
1	A	1249	LEU	N-CA-C	6.43	121.33	112.90
1	A	1433	THR	CA-C-N	6.43	136.27	121.87
1	A	1433	THR	C-N-CA	6.43	136.27	121.87
1	A	1125	SER	N-CA-C	6.40	119.50	109.96
1	A	1560	PRO	CA-C-N	-6.39	107.90	121.32
1	A	1560	PRO	C-N-CA	-6.39	107.90	121.32
1	A	353	GLY	N-CA-C	-6.39	98.03	113.18
1	A	872	SER	O-C-N	6.36	130.68	122.86
1	A	106	SER	N-CA-C	-6.35	97.28	110.80
1	A	284	SER	N-CA-C	-6.34	104.24	112.23
1	A	1940	MET	N-CA-C	6.34	121.04	113.12
1	A	1462	ARG	N-CA-C	6.33	122.07	113.97
1	A	1138	SER	CA-C-O	6.33	124.74	120.19
1	A	1458	PRO	N-CA-C	-6.33	94.17	113.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	895	GLN	N-CA-C	-6.30	98.35	110.56
1	A	107	ASP	O-C-N	6.29	130.53	122.10
1	A	206	ARG	CA-C-N	6.29	133.56	121.54
1	A	206	ARG	C-N-CA	6.29	133.56	121.54
1	A	1139	ASP	O-C-N	6.28	130.77	122.36
1	A	103	HIS	N-CA-C	6.24	124.09	110.80
1	A	1910	ILE	N-CA-C	6.18	116.28	106.32
1	A	1056	PHE	N-CA-C	-6.18	102.11	111.56
1	A	1970	GLU	N-CA-CB	-6.17	100.06	110.49
1	A	374	LEU	CB-CA-C	-6.16	99.51	111.03
1	A	1460	GLN	N-CA-C	-6.15	101.07	110.30
1	A	349	ASP	N-CA-CB	6.14	121.12	110.98
1	A	1206	SER	N-CA-C	6.12	118.50	108.52
1	A	410	ARG	O-C-N	-6.08	115.59	123.32
1	A	1573	HIS	CA-C-O	-6.07	112.92	120.57
1	A	1575	ASP	O-C-N	6.06	130.65	122.59
1	A	1944	ASN	N-CA-C	-6.06	101.34	110.24
1	A	1555	THR	CA-C-N	6.05	132.89	121.81
1	A	1555	THR	C-N-CA	6.05	132.89	121.81
1	A	1349	GLN	N-CA-C	6.05	122.69	113.61
1	A	1732	THR	N-CA-C	6.04	120.78	113.41
1	A	1447	ILE	N-CA-C	-6.01	103.87	112.35
1	A	107	ASP	N-CA-C	-6.01	105.86	113.43
1	A	418	SER	N-CA-C	-6.01	98.00	110.80
1	A	1059	ASN	CA-C-N	6.01	132.51	121.70
1	A	1059	ASN	C-N-CA	6.01	132.51	121.70
1	A	211	ASP	N-CA-CB	-6.00	100.16	109.34
1	A	210	ALA	CA-C-O	-5.99	114.49	120.90
1	A	1811	ARG	CA-C-N	5.96	133.10	121.41
1	A	1811	ARG	C-N-CA	5.96	133.10	121.41
1	A	896	ALA	N-CA-C	5.95	123.48	110.80
1	A	1547	TRP	CA-C-N	-5.93	113.82	122.65
1	A	1547	TRP	C-N-CA	-5.93	113.82	122.65
1	A	1568	ARG	NE-CZ-NH2	-5.90	113.89	119.20
1	A	1585	GLY	O-C-N	5.89	130.45	123.61
1	A	1173	VAL	N-CA-C	5.89	116.78	108.36
1	A	1569	ASN	N-CA-CB	-5.88	101.94	110.47
1	A	2010	TYR	N-CA-C	-5.86	104.30	112.45
1	A	1297	CYS	N-CA-C	-5.83	104.89	112.23
1	A	951	THR	N-CA-C	-5.82	103.67	111.87
1	A	110	THR	O-C-N	-5.81	114.63	121.32
1	A	164	ARG	N-CA-C	-5.80	97.87	108.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1210	ALA	N-CA-C	-5.79	96.99	107.75
1	A	894	GLY	CA-C-O	-5.76	110.54	120.57
1	A	1070	THR	CA-C-N	-5.76	114.66	123.07
1	A	1070	THR	C-N-CA	-5.76	114.66	123.07
1	A	1390	VAL	N-CA-C	-5.76	105.11	110.53
1	A	104	ASP	CA-C-N	5.75	127.59	120.34
1	A	104	ASP	C-N-CA	5.75	127.59	120.34
1	A	1124	GLY	N-CA-C	-5.75	103.78	112.41
1	A	953	ALA	N-CA-C	-5.74	103.87	111.96
1	A	108	GLY	O-C-N	5.73	130.15	122.70
1	A	1400	SER	CA-C-O	-5.72	112.33	120.51
1	A	1557	ARG	N-CA-C	-5.71	106.02	112.87
1	A	875	LEU	N-CA-C	-5.68	106.39	113.38
1	A	207	SER	CA-C-O	-5.68	112.39	120.51
1	A	1594	VAL	CA-C-N	5.65	131.87	121.70
1	A	1594	VAL	C-N-CA	5.65	131.87	121.70
1	A	1295	ARG	CB-CA-C	5.64	119.81	110.90
1	A	1560	PRO	CB-CA-C	5.63	120.86	111.56
1	A	1562	LEU	CB-CA-C	-5.63	100.24	109.53
1	A	238	ILE	N-CA-CB	-5.60	98.88	111.87
1	A	1796	LYS	N-CA-C	5.60	122.19	109.81
1	A	403	GLU	N-CA-C	5.60	118.10	111.33
1	A	1532	ARG	O-C-N	5.57	129.99	122.59
1	A	983	SER	N-CA-C	-5.56	98.57	108.13
1	A	1299	THR	N-CA-C	5.56	119.79	111.96
1	A	1545	PHE	CA-C-O	5.56	128.46	120.51
1	A	1643	GLU	N-CA-C	-5.54	104.74	112.45
1	A	596	THR	CA-C-N	5.54	130.83	122.68
1	A	596	THR	C-N-CA	5.54	130.83	122.68
1	A	1341	TYR	N-CA-C	5.54	120.69	113.88
1	A	181	MET	C-N-CD	5.53	147.68	125.00
1	A	1066	ASP	CB-CA-C	-5.52	100.56	111.60
1	A	559	LYS	N-CA-C	5.49	119.46	112.87
1	A	1134	ILE	N-CA-C	5.49	115.59	108.35
1	A	1573	HIS	CA-C-N	-5.49	112.09	121.97
1	A	1573	HIS	C-N-CA	-5.49	112.09	121.97
1	A	1393	PRO	CA-C-O	-5.45	110.67	120.60
1	A	1400	SER	O-C-N	5.45	129.84	122.59
1	A	186	ASP	N-CA-C	5.44	116.89	111.07
1	A	873	LYS	CB-CA-C	5.41	121.19	110.42
1	A	1373	TYR	N-CA-CB	-5.41	102.57	110.47
1	A	1911	ASP	N-CA-CB	-5.41	102.82	111.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1023	ARG	CB-CA-C	5.39	118.49	110.62
1	A	2007	SER	N-CA-C	5.39	118.19	111.24
1	A	357	ASP	CB-CA-C	5.39	121.14	110.42
1	A	182	PRO	O-C-N	-5.38	112.28	121.75
1	A	185	GLN	N-CA-C	5.37	118.29	111.69
1	A	1591	SER	CA-C-N	5.37	131.93	121.41
1	A	1591	SER	C-N-CA	5.37	131.93	121.41
1	A	1912	ASN	CB-CA-C	-5.37	102.60	111.51
1	A	1393	PRO	CA-N-CD	5.36	119.51	112.00
1	A	376	ASN	O-C-N	-5.36	114.46	122.39
1	A	205	ALA	N-CA-C	-5.35	106.53	113.16
1	A	351	GLY	CA-C-O	-5.35	111.26	120.57
1	A	962	ILE	N-CA-C	-5.34	105.17	111.00
1	A	1595	THR	CA-C-O	-5.34	111.71	120.80
1	A	1046	ASP	CB-CA-C	-5.33	99.97	110.10
1	A	1830	GLY	N-CA-C	-5.32	100.58	113.18
1	A	727	VAL	CB-CA-C	-5.32	102.57	111.29
1	A	1909	GLY	N-CA-C	-5.31	100.89	111.34
1	A	1362	VAL	N-CA-C	-5.30	105.22	111.00
1	A	1656	THR	CB-CA-C	5.29	118.15	110.79
1	A	1521	TRP	CA-C-O	5.29	125.87	119.31
1	A	412	LYS	N-CA-CB	-5.29	100.96	110.37
1	A	324	SER	CA-C-N	-5.29	111.12	121.06
1	A	324	SER	C-N-CA	-5.29	111.12	121.06
1	A	402	LYS	N-CA-C	5.28	118.27	110.46
1	A	247	ASN	CB-CA-C	-5.24	101.31	110.17
1	A	727	VAL	N-CA-C	5.24	120.25	109.34
1	A	1793	PHE	N-CA-CB	5.24	119.11	111.62
1	A	1357	LEU	CA-C-N	5.23	125.97	120.11
1	A	1357	LEU	C-N-CA	5.23	125.97	120.11
1	A	1530	GLY	O-C-N	-5.23	116.54	121.77
1	A	1274	GLY	N-CA-C	-5.23	100.78	113.18
1	A	1065	MET	CB-CA-C	5.23	120.30	109.38
1	A	406	ILE	CB-CA-C	-5.21	105.01	111.32
1	A	1357	LEU	N-CA-C	5.21	121.34	109.81
1	A	1810	GLU	CA-C-N	-5.21	114.81	122.83
1	A	1810	GLU	C-N-CA	-5.21	114.81	122.83
1	A	1273	LEU	N-CA-CB	5.20	119.39	110.65
1	A	1450	MET	N-CA-C	-5.20	106.62	113.17
1	A	839	THR	N-CA-CB	-5.19	102.89	110.47
1	A	1205	ILE	CB-CA-C	-5.18	103.99	111.34
1	A	1301	ASP	N-CA-C	-5.17	99.78	110.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1561	PHE	CA-C-N	5.17	129.75	122.09
1	A	1561	PHE	C-N-CA	5.17	129.75	122.09
1	A	1551	ASP	C-N-CD	-5.15	103.90	125.00
1	A	2	ASN	N-CA-C	-5.14	99.84	110.80
1	A	1885	CYS	N-CA-C	-5.14	99.39	108.23
1	A	928	ASN	CB-CA-C	-5.13	100.86	109.27
1	A	1523	GLY	N-CA-C	-5.13	101.03	113.18
1	A	1633	LEU	N-CA-C	-5.13	101.77	109.15
1	A	323	THR	CA-C-N	-5.11	115.20	122.41
1	A	323	THR	C-N-CA	-5.11	115.20	122.41
1	A	357	ASP	CA-C-O	-5.11	113.20	120.51
1	A	1595	THR	CB-CA-C	5.10	120.33	109.10
1	A	562	SER	N-CA-C	5.08	119.53	113.23
1	A	1174	ASN	CA-C-N	-5.08	113.50	120.71
1	A	1174	ASN	C-N-CA	-5.08	113.50	120.71
1	A	283	ASP	CB-CA-C	-5.08	100.84	109.38
1	A	350	SER	N-CA-C	5.08	117.59	111.40
1	A	1521	TRP	N-CA-CB	5.08	118.67	110.40
1	A	1590	LYS	CA-C-O	-5.08	113.25	120.51
1	A	911	PHE	N-CA-CB	-5.07	101.96	111.13
1	A	1442	LEU	CB-CA-C	-5.05	100.97	110.67
1	A	387	GLU	CA-C-N	-5.05	113.83	123.32
1	A	387	GLU	C-N-CA	-5.05	113.83	123.32
1	A	97	GLU	CA-C-O	-5.05	116.02	121.87
1	A	1527	THR	CA-C-O	5.05	125.79	120.54
1	A	1556	LEU	O-C-N	-5.04	116.52	122.32
1	A	724	GLU	N-CA-CB	5.04	119.00	110.49
1	A	821	HIS	N-CA-C	5.03	119.28	112.04
1	A	236	PRO	CB-CA-C	-5.01	104.38	110.95
1	A	819	GLN	N-CA-C	-5.00	107.03	113.23

There are no chirality outliers.

All (94) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	1	MET	Mainchain
1	A	1059	ASN	Peptide
1	A	1061	GLU	Mainchain
1	A	107	ASP	Mainchain
1	A	108	GLY	Mainchain
1	A	11	ASN	Mainchain
1	A	1135	ARG	Mainchain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	1182	ASN	Peptide
1	A	1268	ASP	Peptide
1	A	1393	PRO	Mainchain
1	A	1397	SER	Mainchain
1	A	1398	SER	Mainchain,Peptide
1	A	1399	LEU	Mainchain
1	A	1424	SER	Mainchain
1	A	1433	THR	Peptide
1	A	1518	SER	Mainchain
1	A	1519	GLU	Mainchain
1	A	1520	VAL	Mainchain
1	A	1521	TRP	Peptide
1	A	1522	PHE	Mainchain
1	A	1523	GLY	Mainchain
1	A	1524	LEU	Mainchain
1	A	1529	LEU	Peptide
1	A	1530	GLY	Mainchain
1	A	1549	SER	Mainchain
1	A	1559	GLY	Peptide
1	A	1561	PHE	Mainchain,Peptide
1	A	1562	LEU	Mainchain
1	A	1567	PHE	Mainchain
1	A	1569	ASN	Mainchain
1	A	1573	HIS	Mainchain,Peptide
1	A	1574	VAL	Mainchain,Peptide
1	A	1575	ASP	Sidechain
1	A	1576	ALA	Mainchain,Peptide
1	A	1577	LYS	Mainchain
1	A	1578	SER	Mainchain,Peptide
1	A	1580	SER	Mainchain
1	A	1582	ARG	Mainchain,Peptide
1	A	1583	LEU	Mainchain
1	A	1584	LEU	Mainchain
1	A	1594	VAL	Peptide
1	A	1595	THR	Mainchain
1	A	1655	SER	Peptide
1	A	1678	SER	Mainchain,Peptide
1	A	1687	SER	Mainchain,Peptide
1	A	1797	PRO	Peptide
1	A	180	ASN	Mainchain
1	A	1817	GLU	Peptide
1	A	1830	GLY	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	1866	TRP	Peptide
1	A	2	ASN	Mainchain
1	A	208	MET	Peptide
1	A	3	LEU	Mainchain
1	A	348	THR	Mainchain,Peptide
1	A	349	ASP	Mainchain
1	A	350	SER	Mainchain
1	A	351	GLY	Mainchain
1	A	352	PHE	Sidechain
1	A	359	GLY	Peptide
1	A	374	LEU	Peptide
1	A	375	GLY	Peptide
1	A	378	GLU	Mainchain
1	A	380	VAL	Mainchain
1	A	384	PRO	Mainchain
1	A	385	ALA	Mainchain
1	A	405	LYS	Mainchain
1	A	406	ILE	Mainchain
1	A	563	HIS	Mainchain
1	A	677	PRO	Peptide
1	A	822	GLY	Peptide
1	A	824	GLN	Peptide
1	A	873	LYS	Peptide
1	A	887	MET	Mainchain
1	A	893	VAL	Mainchain
1	A	895	GLN	Mainchain
1	A	896	ALA	Peptide
1	A	95	LEU	Mainchain,Peptide
1	A	96	SER	Mainchain
1	A	965	HIS	Peptide
1	A	969	SER	Mainchain
1	A	971	ARG	Mainchain
1	A	975	PRO	Peptide
1	A	976	GLY	Mainchain

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	14826	0	14795	1230	0
2	A	1	0	0	0	0
All	All	14827	0	14795	1230	0

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 42.

All (1230) 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:1556:LEU:HD11	1:A:1564:HIS:CD2	1.27	1.67
1:A:917:GLY:CA	1:A:920:ARG:HD3	1.26	1.65
1:A:1568:ARG:CA	1:A:1568:ARG:N	1.67	1.55
1:A:193:TYR:CE1	1:A:197:ILE:HD11	1.40	1.55
1:A:380:VAL:CG2	1:A:411:PHE:CE1	1.83	1.55
1:A:384:PRO:CG	1:A:405:LYS:HZ1	0.91	1.52
1:A:757:ASN:N	1:A:915:GLN:HE21	1.03	1.52
1:A:365:TRP:NE1	1:A:595:LEU:CD1	1.68	1.51
1:A:380:VAL:HG21	1:A:411:PHE:CE1	0.99	1.50
1:A:1561:PHE:CE2	1:A:1567:PHE:HB2	1.46	1.49
1:A:1542:ARG:NH2	1:A:1549:SER:HA	1.31	1.44
1:A:1646:LYS:NZ	1:A:1650:ILE:HD11	1.24	1.43
1:A:365:TRP:NE1	1:A:595:LEU:HD12	1.09	1.42
1:A:658:LYS:HZ2	1:A:699:GLN:CD	1.29	1.41
1:A:757:ASN:H	1:A:915:GLN:NE2	1.15	1.40
1:A:658:LYS:NZ	1:A:699:GLN:CD	1.79	1.39
1:A:351:GLY:HA3	1:A:369:LEU:CD1	1.50	1.39
1:A:1062:VAL:HG11	1:A:1064:TRP:CE3	1.58	1.39
1:A:1556:LEU:CD1	1:A:1564:HIS:CD2	2.07	1.37
1:A:1556:LEU:HG	1:A:1564:HIS:CE1	1.58	1.37
1:A:380:VAL:CG2	1:A:411:PHE:CZ	2.07	1.36
1:A:237:ASN:O	1:A:241:VAL:CG2	1.74	1.35
1:A:1392:SER:HB2	1:A:1393:PRO:CD	1.58	1.33
1:A:917:GLY:HA2	1:A:920:ARG:CD	1.58	1.33
1:A:384:PRO:HG3	1:A:405:LYS:NZ	1.01	1.33
1:A:365:TRP:CD1	1:A:595:LEU:CD1	2.11	1.32
1:A:1304:ARG:HG2	1:A:1432:SER:OG	1.19	1.31
1:A:351:GLY:CA	1:A:369:LEU:HD11	1.61	1.31
1:A:1392:SER:CB	1:A:1393:PRO:HD3	1.57	1.30
1:A:1561:PHE:CE2	1:A:1567:PHE:CB	2.12	1.30
1:A:658:LYS:CD	1:A:699:GLN:OE1	1.79	1.30
1:A:1304:ARG:CG	1:A:1432:SER:OG	1.79	1.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1474:VAL:CG1	1:A:1585:GLY:O	1.77	1.29
1:A:658:LYS:CE	1:A:699:GLN:OE1	1.77	1.29
1:A:1937:LEU:HD21	1:A:2028:LYS:NZ	1.44	1.29
1:A:1561:PHE:CD2	1:A:1567:PHE:HB2	1.70	1.27
1:A:1302:LEU:HD12	1:A:1303:GLY:N	1.50	1.27
1:A:380:VAL:HG21	1:A:411:PHE:CZ	1.70	1.25
1:A:1542:ARG:HH22	1:A:1549:SER:C	1.44	1.25
1:A:969:SER:O	1:A:973:LEU:CD2	1.84	1.25
1:A:1937:LEU:HD21	1:A:2028:LYS:CE	1.66	1.25
1:A:1531:PRO:O	1:A:1535:LYS:HB3	1.36	1.24
1:A:365:TRP:CD1	1:A:595:LEU:HD11	1.71	1.24
1:A:1646:LYS:O	1:A:1649:MET:HE2	1.38	1.24
1:A:1649:MET:SD	1:A:1649:MET:N	2.11	1.24
1:A:1542:ARG:NH2	1:A:1549:SER:CA	2.01	1.23
1:A:1455:SER:O	1:A:1458:PRO:HG2	1.34	1.23
1:A:1516:LEU:HD12	1:A:1541:LEU:CD2	1.69	1.23
1:A:1551:ASP:O	1:A:1555:THR:HG23	1.37	1.22
1:A:1455:SER:O	1:A:1458:PRO:CG	1.87	1.22
1:A:155:ARG:NH2	1:A:1532:ARG:HG3	1.52	1.21
1:A:1646:LYS:O	1:A:1649:MET:CE	1.87	1.21
1:A:1062:VAL:CG1	1:A:1064:TRP:HE3	1.53	1.21
1:A:1561:PHE:CE2	1:A:1567:PHE:CG	2.28	1.20
1:A:1542:ARG:HH22	1:A:1550:THR:N	1.40	1.19
1:A:757:ASN:O	1:A:915:GLN:NE2	1.73	1.19
1:A:3:LEU:O	1:A:7:CYS:SG	2.00	1.18
1:A:1303:GLY:O	1:A:1432:SER:HB2	1.42	1.18
1:A:155:ARG:HH21	1:A:1532:ARG:CG	1.56	1.18
1:A:170:ILE:HD11	1:A:181:MET:CG	1.72	1.18
1:A:365:TRP:CD1	1:A:595:LEU:HD12	1.77	1.18
1:A:1474:VAL:CB	1:A:1585:GLY:O	1.92	1.18
1:A:1646:LYS:C	1:A:1649:MET:HE1	1.66	1.18
1:A:1403:HIS:O	1:A:1406:PRO:HD2	1.41	1.17
1:A:658:LYS:HD2	1:A:699:GLN:OE1	1.33	1.17
1:A:237:ASN:O	1:A:241:VAL:HG23	1.28	1.17
1:A:883:GLU:HB2	1:A:1355:MET:HE2	1.20	1.16
1:A:917:GLY:CA	1:A:920:ARG:CD	2.18	1.16
1:A:721:ILE:O	1:A:727:VAL:HG23	1.43	1.16
1:A:3:LEU:HD13	1:A:87:LEU:O	1.48	1.14
1:A:1652:GLU:CD	1:A:1653:ALA:H	1.56	1.14
1:A:81:ASP:O	1:A:85:SER:OG	1.64	1.14
1:A:1474:VAL:HB	1:A:1585:GLY:O	1.46	1.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1790:LEU:HD12	1:A:1804:CYS:O	1.46	1.14
1:A:1556:LEU:CD1	1:A:1564:HIS:NE2	2.08	1.13
1:A:335:TRP:NE1	1:A:594:GLU:OE1	1.81	1.12
1:A:658:LYS:NZ	1:A:699:GLN:OE1	1.73	1.12
1:A:236:PRO:HB2	1:A:238:ILE:HD11	1.28	1.12
1:A:193:TYR:CE1	1:A:197:ILE:CD1	2.33	1.12
1:A:236:PRO:HB2	1:A:238:ILE:CD1	1.80	1.11
1:A:969:SER:O	1:A:973:LEU:HD21	1.49	1.10
1:A:1516:LEU:CD1	1:A:1541:LEU:HD23	1.81	1.10
1:A:1518:SER:O	1:A:1522:PHE:HB2	1.52	1.10
1:A:1460:GLN:O	1:A:1460:GLN:NE2	1.84	1.09
1:A:380:VAL:HG22	1:A:411:PHE:CZ	1.85	1.09
1:A:1265:LEU:HD13	1:A:1274:GLY:O	1.52	1.08
1:A:365:TRP:CE2	1:A:595:LEU:CD1	2.35	1.07
1:A:864:VAL:HG13	1:A:867:LYS:HG3	1.32	1.07
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1570:PHE:CD2	2.42	1.07
1:A:1516:LEU:CD1	1:A:1541:LEU:CD2	2.31	1.07
1:A:1135:ARG:HH12	1:A:1137:LYS:HE2	1.18	1.07
1:A:863:GLU:OE1	1:A:864:VAL:HG23	1.56	1.06
1:A:1580:SER:O	1:A:1581:VAL:HG23	1.55	1.06
1:A:1530:GLY:O	1:A:1534:LEU:HB3	1.52	1.06
1:A:1652:GLU:OE1	1:A:1653:ALA:N	1.88	1.06
1:A:726:ARG:HD2	1:A:1189:ARG:HD2	1.34	1.05
1:A:1561:PHE:HZ	1:A:1570:PHE:CD2	1.73	1.05
1:A:1791:SER:O	1:A:1792:GLY:C	2.00	1.05
1:A:86:GLY:O	1:A:89:LYS:HG2	1.56	1.05
1:A:95:LEU:N	1:A:96:SER:HB3	1.72	1.04
1:A:547:LYS:HE2	1:A:1253:CYS:C	1.83	1.04
1:A:1302:LEU:CD1	1:A:1303:GLY:H	1.70	1.04
1:A:1790:LEU:CD1	1:A:1804:CYS:O	2.04	1.04
1:A:1646:LYS:NZ	1:A:1650:ILE:CD1	2.20	1.04
1:A:757:ASN:N	1:A:915:GLN:NE2	1.82	1.03
1:A:193:TYR:OH	1:A:1946:VAL:HG12	1.58	1.02
1:A:1296:ALA:O	1:A:1301:ASP:CG	2.02	1.02
1:A:1561:PHE:HE2	1:A:1567:PHE:CG	1.77	1.02
1:A:94:ARG:C	1:A:96:SER:N	2.05	1.01
1:A:1062:VAL:HG11	1:A:1064:TRP:HE3	0.91	1.01
1:A:1135:ARG:HH12	1:A:1137:LYS:CE	1.73	1.01
1:A:1542:ARG:NH2	1:A:1549:SER:C	2.15	1.01
1:A:1135:ARG:NH1	1:A:1137:LYS:CE	2.23	1.01
1:A:1586:ALA:HB3	1:A:1595:THR:HG21	1.38	1.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:944:CYS:O	1:A:950:GLU:OE2	1.78	1.01
1:A:1095:GLN:HG3	1:A:1123:GLU:CG	1.91	1.01
1:A:1652:GLU:CD	1:A:1653:ALA:N	2.19	1.01
1:A:155:ARG:HH21	1:A:1532:ARG:HG3	0.86	1.00
1:A:1348:TYR:O	1:A:1352:LEU:HB3	1.60	1.00
1:A:1567:PHE:CE1	1:A:1571:ILE:CB	2.33	1.00
1:A:884:LYS:HE3	1:A:895:GLN:HE22	1.21	1.00
1:A:948:PRO:HG2	1:A:949:HIS:CE1	1.96	1.00
1:A:170:ILE:HD11	1:A:181:MET:HG2	1.03	1.00
1:A:1646:LYS:C	1:A:1649:MET:CE	2.32	1.00
1:A:1455:SER:C	1:A:1458:PRO:HD2	1.86	1.00
1:A:1648:GLU:C	1:A:1649:MET:SD	2.44	1.00
1:A:18:LEU:CD1	1:A:146:ILE:HD11	1.90	1.00
1:A:1567:PHE:O	1:A:1567:PHE:CD1	2.14	1.00
1:A:20:GLU:O	1:A:180:ASN:HB3	1.61	0.99
1:A:658:LYS:HE3	1:A:699:GLN:HE22	1.23	0.99
1:A:824:GLN:O	1:A:824:GLN:HG2	1.61	0.99
1:A:1304:ARG:HG2	1:A:1432:SER:CB	1.91	0.99
1:A:1546:ALA:O	1:A:1547:TRP:CD1	2.14	0.99
1:A:1269:PRO:CB	1:A:1275:PHE:CE1	2.45	0.99
1:A:1648:GLU:HB2	1:A:1649:MET:SD	2.02	0.99
1:A:1095:GLN:HG3	1:A:1123:GLU:HG2	1.01	0.99
1:A:658:LYS:CE	1:A:699:GLN:CD	2.29	0.98
1:A:239:GLU:OE1	1:A:240:ARG:N	1.96	0.98
1:A:726:ARG:HD2	1:A:1189:ARG:CD	1.94	0.98
1:A:1445:SER:OG	1:A:1450:MET:HE3	1.64	0.98
1:A:1937:LEU:CD2	1:A:2028:LYS:NZ	2.26	0.98
1:A:1556:LEU:CG	1:A:1564:HIS:CE1	2.46	0.98
1:A:1561:PHE:CD2	1:A:1567:PHE:CB	2.41	0.98
1:A:1646:LYS:HZ1	1:A:1650:ILE:HD11	1.17	0.98
1:A:95:LEU:CA	1:A:96:SER:HB3	1.94	0.97
1:A:971:ARG:HB2	1:A:971:ARG:HH21	1.28	0.97
1:A:1556:LEU:HG	1:A:1564:HIS:NE2	1.79	0.97
1:A:1060:ARG:HH11	1:A:1060:ARG:HB3	1.29	0.97
1:A:384:PRO:CG	1:A:405:LYS:NZ	1.78	0.97
1:A:1542:ARG:HH21	1:A:1549:SER:CA	1.66	0.96
1:A:1556:LEU:HD11	1:A:1564:HIS:HD2	1.29	0.96
1:A:351:GLY:CA	1:A:369:LEU:CD1	2.32	0.96
1:A:1529:LEU:CA	1:A:1534:LEU:HB2	1.95	0.96
1:A:170:ILE:CD1	1:A:181:MET:HG2	1.96	0.96
1:A:1542:ARG:NH2	1:A:1550:THR:N	2.12	0.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:884:LYS:HE3	1:A:895:GLN:NE2	1.82	0.95
1:A:888:TRP:C	1:A:890:ILE:H	1.71	0.95
1:A:658:LYS:HE3	1:A:699:GLN:NE2	1.82	0.95
1:A:969:SER:O	1:A:973:LEU:HD23	1.62	0.95
1:A:1796:LYS:HB2	1:A:1797:PRO:HD2	1.47	0.95
1:A:658:LYS:NZ	1:A:699:GLN:NE2	2.13	0.94
1:A:1512:LYS:HG3	1:A:1513:ALA:H	1.31	0.94
1:A:1474:VAL:HG11	1:A:1585:GLY:O	1.65	0.94
1:A:109:MET:O	1:A:111:PRO:HD3	1.67	0.94
1:A:757:ASN:C	1:A:915:GLN:HE22	1.76	0.94
1:A:1269:PRO:HB3	1:A:1275:PHE:CE1	2.03	0.93
1:A:1937:LEU:CD2	1:A:2028:LYS:HZ1	1.80	0.93
1:A:1095:GLN:CG	1:A:1123:GLU:HG2	1.96	0.93
1:A:1796:LYS:HB2	1:A:1797:PRO:CD	1.97	0.93
1:A:917:GLY:N	1:A:920:ARG:HD3	1.83	0.93
1:A:1791:SER:O	1:A:1793:PHE:N	2.01	0.93
1:A:79:ASN:ND2	1:A:199:ASN:OD1	2.02	0.93
1:A:1455:SER:C	1:A:1458:PRO:CD	2.42	0.93
1:A:1269:PRO:HB2	1:A:1275:PHE:CE1	2.04	0.93
1:A:1530:GLY:C	1:A:1534:LEU:HB3	1.94	0.93
1:A:29:ASP:O	1:A:31:PRO:CD	2.16	0.93
1:A:871:ARG:HH11	1:A:871:ARG:HG3	1.34	0.92
1:A:1590:LYS:C	1:A:1592:GLY:H	1.75	0.92
1:A:358:HIS:CD2	1:A:360:ALA:HB3	2.03	0.92
1:A:1556:LEU:CG	1:A:1564:HIS:NE2	2.31	0.92
1:A:1567:PHE:HE1	1:A:1571:ILE:CB	1.54	0.92
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1567:PHE:HB2	2.04	0.92
1:A:1269:PRO:HB2	1:A:1275:PHE:CZ	2.05	0.92
1:A:15:GLY:O	1:A:165:VAL:HG12	1.70	0.92
1:A:1304:ARG:HG3	1:A:1432:SER:OG	1.70	0.91
1:A:237:ASN:O	1:A:241:VAL:HG21	1.70	0.91
1:A:378:GLU:OE1	1:A:411:PHE:HD2	1.53	0.91
1:A:355:LEU:O	1:A:356:MET:HE2	1.70	0.91
1:A:1302:LEU:HD12	1:A:1303:GLY:H	1.07	0.91
1:A:1520:VAL:HG12	1:A:1520:VAL:O	1.70	0.91
1:A:94:ARG:HB3	1:A:96:SER:HB2	1.52	0.90
1:A:1519:GLU:H	1:A:1519:GLU:CD	1.78	0.90
1:A:94:ARG:NH2	1:A:97:GLU:OE1	2.04	0.90
1:A:864:VAL:CG1	1:A:867:LYS:HG3	1.99	0.90
1:A:1529:LEU:CB	1:A:1534:LEU:HB2	2.02	0.90
1:A:1937:LEU:HD21	1:A:2028:LYS:HZ1	1.19	0.90

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1302:LEU:CD1	1:A:1303:GLY:N	2.33	0.89
1:A:1910:ILE:C	1:A:1911:ASP:OD1	2.16	0.89
1:A:658:LYS:CE	1:A:699:GLN:NE2	2.34	0.89
1:A:193:TYR:CD1	1:A:197:ILE:HD11	2.07	0.89
1:A:1529:LEU:HD23	1:A:1533:LEU:HB2	1.55	0.89
1:A:223:ALA:HB1	1:A:839:THR:HB	1.52	0.89
1:A:384:PRO:HG2	1:A:405:LYS:HZ1	1.31	0.89
1:A:1457:ASN:N	1:A:1458:PRO:HD2	1.88	0.89
1:A:1390:VAL:O	1:A:1395:VAL:CG1	2.21	0.89
1:A:1561:PHE:HZ	1:A:1570:PHE:HD2	1.20	0.89
1:A:917:GLY:N	1:A:920:ARG:CD	2.37	0.88
1:A:1521:TRP:CZ2	1:A:1555:THR:HG21	2.09	0.88
1:A:1296:ALA:O	1:A:1301:ASP:CB	2.22	0.88
1:A:1567:PHE:CE1	1:A:1571:ILE:HB	2.06	0.88
1:A:376:ASN:HD21	1:A:413:PRO:HG2	1.39	0.88
1:A:378:GLU:OE1	1:A:411:PHE:CD2	2.27	0.87
1:A:384:PRO:HG3	1:A:405:LYS:HZ2	1.37	0.87
1:A:757:ASN:C	1:A:915:GLN:NE2	2.31	0.87
1:A:611:ASN:OD1	1:A:611:ASN:O	1.93	0.87
1:A:1296:ALA:O	1:A:1301:ASP:HB2	1.75	0.87
1:A:170:ILE:HD11	1:A:181:MET:CB	2.04	0.86
1:A:193:TYR:HE1	1:A:197:ILE:HD11	1.06	0.86
1:A:1135:ARG:NH1	1:A:1137:LYS:NZ	2.24	0.86
1:A:84:PHE:HB3	1:A:88:SER:CB	2.04	0.86
1:A:208:MET:O	1:A:210:ALA:HB2	1.74	0.86
1:A:1052:MET:CG	1:A:1064:TRP:HH2	1.88	0.86
1:A:1528:LYS:H	1:A:1528:LYS:HD2	1.39	0.86
1:A:1586:ALA:CB	1:A:1595:THR:HG21	2.05	0.86
1:A:29:ASP:O	1:A:31:PRO:HD3	1.74	0.86
1:A:1303:GLY:O	1:A:1432:SER:CB	2.23	0.86
1:A:1687:SER:OG	1:A:1692:ILE:HD11	1.76	0.86
1:A:1138:SER:O	1:A:1982:PHE:CE2	2.28	0.86
1:A:1140:MET:O	1:A:1143:VAL:HG12	1.76	0.86
1:A:1519:GLU:CD	1:A:1519:GLU:N	2.32	0.86
1:A:1365:ILE:O	1:A:1368:ASN:O	1.94	0.85
1:A:887:MET:O	1:A:888:TRP:C	2.20	0.85
1:A:1516:LEU:HD13	1:A:1541:LEU:HD23	1.55	0.85
1:A:1694:ARG:HH12	1:A:1816:ARG:HG2	1.38	0.85
1:A:864:VAL:CG1	1:A:867:LYS:CG	2.54	0.85
1:A:1538:TRP:HE1	1:A:1550:THR:HG22	1.40	0.85
1:A:726:ARG:CD	1:A:1189:ARG:HD2	2.06	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1542:ARG:HH21	1:A:1549:SER:HA	0.75	0.84
1:A:361:TYR:CE2	1:A:597:GLU:HA	2.12	0.84
1:A:1622:ARG:HB2	1:A:1650:ILE:HG21	1.59	0.84
1:A:389:ASP:O	1:A:390:ILE:HD13	1.78	0.84
1:A:742:ASN:OD1	1:A:743:LEU:N	2.10	0.84
1:A:1529:LEU:C	1:A:1534:LEU:HB2	2.03	0.84
1:A:94:ARG:C	1:A:96:SER:H	1.84	0.84
1:A:971:ARG:HH21	1:A:971:ARG:CB	1.90	0.84
1:A:757:ASN:CA	1:A:915:GLN:HE21	1.91	0.83
1:A:365:TRP:CG	1:A:595:LEU:HD11	2.13	0.83
1:A:1810:GLU:OE1	1:A:1814:ARG:NH2	2.11	0.83
1:A:208:MET:C	1:A:210:ALA:H	1.81	0.83
1:A:757:ASN:CA	1:A:915:GLN:NE2	2.40	0.83
1:A:155:ARG:HB2	1:A:155:ARG:CZ	2.07	0.83
1:A:380:VAL:HG23	1:A:411:PHE:CE1	2.11	0.83
1:A:1520:VAL:O	1:A:1520:VAL:CG1	2.27	0.83
1:A:365:TRP:CE2	1:A:595:LEU:HD13	2.13	0.82
1:A:1456:LEU:O	1:A:1459:ASN:HB2	1.79	0.82
1:A:493:MET:HE1	1:A:1296:ALA:HB2	1.59	0.82
1:A:1798:ALA:O	1:A:1800:ARG:N	2.13	0.82
1:A:671:MET:HG2	1:A:1180:GLU:OE1	1.79	0.82
1:A:671:MET:HE3	1:A:1180:GLU:OE1	1.79	0.82
1:A:1455:SER:O	1:A:1458:PRO:CD	2.25	0.82
1:A:1136:PRO:HG2	1:A:1982:PHE:HB2	1.62	0.82
1:A:15:GLY:HA2	1:A:163:PRO:HG2	1.60	0.82
1:A:1562:LEU:HD23	1:A:1563:SER:HB3	1.62	0.82
1:A:1582:ARG:O	1:A:1583:LEU:HB3	1.78	0.82
1:A:348:THR:C	1:A:350:SER:H	1.80	0.81
1:A:155:ARG:NH2	1:A:1532:ARG:CG	2.29	0.81
1:A:1646:LYS:HZ2	1:A:1650:ILE:HD11	1.00	0.81
1:A:1911:ASP:OD1	1:A:1911:ASP:N	2.13	0.81
1:A:1579:ARG:HG2	1:A:1580:SER:H	1.44	0.81
1:A:384:PRO:CG	1:A:405:LYS:CE	2.58	0.81
1:A:1529:LEU:CD2	1:A:1533:LEU:HB2	2.10	0.81
1:A:883:GLU:HB2	1:A:1355:MET:CE	2.07	0.81
1:A:1392:SER:CB	1:A:1393:PRO:CD	2.30	0.81
1:A:29:ASP:O	1:A:31:PRO:HD2	1.81	0.81
1:A:1547:TRP:CE2	1:A:1560:PRO:HD2	2.16	0.81
1:A:239:GLU:CD	1:A:240:ARG:HG2	2.04	0.81
1:A:864:VAL:HG11	1:A:867:LYS:HD2	1.63	0.81
1:A:658:LYS:HZ1	1:A:699:GLN:NE2	1.76	0.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1519:GLU:C	1:A:1522:PHE:H	1.89	0.80
1:A:1531:PRO:O	1:A:1535:LYS:CB	2.26	0.80
1:A:1646:LYS:CE	1:A:1650:ILE:HD11	2.10	0.80
1:A:1791:SER:N	1:A:1796:LYS:HE3	1.94	0.80
1:A:26:GLN:OE1	1:A:30:ARG:HD3	1.81	0.80
1:A:1530:GLY:O	1:A:1534:LEU:N	2.15	0.80
1:A:1400:SER:HB2	1:A:1407:ARG:NH1	1.97	0.80
1:A:380:VAL:HG12	1:A:380:VAL:O	1.80	0.80
1:A:888:TRP:C	1:A:890:ILE:N	2.40	0.80
1:A:658:LYS:CE	1:A:699:GLN:HE22	1.94	0.80
1:A:883:GLU:CB	1:A:1355:MET:HE2	2.07	0.80
1:A:1062:VAL:HG11	1:A:1064:TRP:CZ3	2.16	0.80
1:A:1568:ARG:O	1:A:1572:ALA:HB2	1.80	0.80
1:A:18:LEU:HD11	1:A:146:ILE:HD11	1.62	0.80
1:A:239:GLU:CD	1:A:240:ARG:H	1.90	0.80
1:A:170:ILE:CD1	1:A:181:MET:HB2	2.12	0.79
1:A:944:CYS:CA	1:A:950:GLU:OE2	2.29	0.79
1:A:1062:VAL:CG1	1:A:1064:TRP:CE3	2.40	0.79
1:A:22:GLY:O	1:A:178:LEU:HD12	1.81	0.79
1:A:405:LYS:NZ	1:A:405:LYS:HB2	1.97	0.79
1:A:1474:VAL:HG12	1:A:1585:GLY:O	1.78	0.79
1:A:824:GLN:O	1:A:824:GLN:CG	2.30	0.79
1:A:1555:THR:OG1	1:A:1564:HIS:HE1	1.65	0.79
1:A:561:SER:O	1:A:603:THR:HG21	1.83	0.79
1:A:193:TYR:OH	1:A:1946:VAL:CG1	2.30	0.79
1:A:948:PRO:HG2	1:A:949:HIS:ND1	1.97	0.79
1:A:1556:LEU:HD12	1:A:1564:HIS:NE2	1.97	0.79
1:A:842:ILE:HG13	1:A:888:TRP:CE3	2.17	0.78
1:A:30:ARG:NH2	1:A:820:ARG:O	2.16	0.78
1:A:1970:GLU:CD	1:A:1970:GLU:H	1.91	0.78
1:A:236:PRO:CB	1:A:238:ILE:HD11	2.12	0.78
1:A:1052:MET:HG2	1:A:1064:TRP:CH2	2.18	0.78
1:A:1590:LYS:C	1:A:1592:GLY:N	2.36	0.78
1:A:1731:ASP:OD1	1:A:1731:ASP:O	2.00	0.78
1:A:87:LEU:C	1:A:89:LYS:N	2.40	0.78
1:A:87:LEU:H	1:A:87:LEU:HD12	1.48	0.78
1:A:95:LEU:N	1:A:96:SER:CB	2.46	0.78
1:A:864:VAL:HG13	1:A:867:LYS:CG	2.13	0.78
1:A:1512:LYS:HG3	1:A:1513:ALA:N	1.99	0.78
1:A:944:CYS:HA	1:A:950:GLU:OE2	1.83	0.78
1:A:1433:THR:HB	1:A:1434:GLN:O	1.84	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1561:PHE:HE2	1:A:1567:PHE:CD2	2.01	0.78
1:A:1518:SER:O	1:A:1522:PHE:CB	2.30	0.78
1:A:384:PRO:HG2	1:A:405:LYS:NZ	1.90	0.77
1:A:1534:LEU:HD22	1:A:1534:LEU:O	1.84	0.77
1:A:723:ARG:O	1:A:724:GLU:OE1	2.03	0.77
1:A:1646:LYS:CA	1:A:1649:MET:HE1	2.14	0.77
1:A:161:GLU:O	1:A:162:ASN:C	2.28	0.77
1:A:1530:GLY:O	1:A:1534:LEU:CB	2.32	0.77
1:A:1646:LYS:HZ2	1:A:1650:ILE:CD1	1.89	0.77
1:A:1516:LEU:HD12	1:A:1541:LEU:HD23	1.50	0.76
1:A:676:SER:OG	1:A:1174:ASN:ND2	2.18	0.76
1:A:944:CYS:C	1:A:950:GLU:OE2	2.28	0.76
1:A:1390:VAL:O	1:A:1395:VAL:HG11	1.85	0.76
1:A:756:LYS:HB3	1:A:1204:GLN:HE21	1.50	0.76
1:A:871:ARG:HG3	1:A:871:ARG:NH1	2.00	0.76
1:A:1567:PHE:CD1	1:A:1570:PHE:HB3	2.21	0.76
1:A:1455:SER:C	1:A:1458:PRO:CG	2.57	0.76
1:A:1646:LYS:HZ1	1:A:1650:ILE:CD1	1.89	0.76
1:A:1060:ARG:HB3	1:A:1060:ARG:NH1	2.00	0.76
1:A:208:MET:O	1:A:210:ALA:CB	2.33	0.75
1:A:87:LEU:C	1:A:89:LYS:H	1.87	0.75
1:A:887:MET:O	1:A:888:TRP:O	2.02	0.75
1:A:1061:GLU:OE2	1:A:1061:GLU:N	2.18	0.75
1:A:236:PRO:HB2	1:A:238:ILE:HD12	1.66	0.75
1:A:1519:GLU:N	1:A:1519:GLU:OE1	2.13	0.75
1:A:1514:GLU:HB2	1:A:1571:ILE:HG22	1.68	0.75
1:A:365:TRP:HE1	1:A:595:LEU:HD12	0.94	0.75
1:A:1597:ILE:HG22	1:A:1597:ILE:O	1.87	0.75
1:A:1140:MET:O	1:A:1143:VAL:N	2.20	0.74
1:A:20:GLU:O	1:A:180:ASN:CB	2.35	0.74
1:A:1116:SER:O	1:A:1134:ILE:HG22	1.87	0.74
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1570:PHE:HD2	1.96	0.74
1:A:354:SER:O	1:A:355:LEU:C	2.30	0.74
1:A:1790:LEU:HD12	1:A:1790:LEU:H	1.52	0.74
1:A:87:LEU:HD12	1:A:87:LEU:N	2.01	0.74
1:A:1390:VAL:O	1:A:1395:VAL:HG13	1.86	0.74
1:A:1532:ARG:O	1:A:1536:GLU:HB2	1.87	0.74
1:A:1646:LYS:HE3	1:A:1650:ILE:HG13	1.68	0.74
1:A:1976:LEU:N	1:A:1976:LEU:HD23	2.03	0.74
1:A:474:TYR:O	1:A:480:GLN:NE2	2.20	0.74
1:A:671:MET:SD	1:A:1180:GLU:OE1	2.46	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1694:ARG:NH1	1:A:1816:ARG:HG2	2.02	0.74
1:A:663:ILE:O	1:A:666:THR:OG1	2.04	0.74
1:A:1403:HIS:O	1:A:1406:PRO:CD	2.32	0.74
1:A:358:HIS:NE2	1:A:360:ALA:HB3	2.03	0.74
1:A:658:LYS:HZ1	1:A:699:GLN:CD	1.90	0.74
1:A:888:TRP:O	1:A:891:ASP:OD1	2.04	0.74
1:A:1066:ASP:N	1:A:1066:ASP:OD1	2.21	0.74
1:A:1459:ASN:HB3	1:A:1460:GLN:HE22	1.52	0.74
1:A:723:ARG:O	1:A:724:GLU:CD	2.31	0.74
1:A:1516:LEU:HD12	1:A:1541:LEU:HD22	1.67	0.74
1:A:732:THR:OG1	1:A:746:MET:SD	2.45	0.73
1:A:1455:SER:HA	1:A:1458:PRO:HG3	1.70	0.73
1:A:1537:GLU:OE1	1:A:1537:GLU:HA	1.88	0.73
1:A:1302:LEU:HD12	1:A:1303:GLY:CA	2.17	0.73
1:A:872:SER:O	1:A:873:LYS:C	2.31	0.73
1:A:1136:PRO:HG2	1:A:1982:PHE:CB	2.17	0.73
1:A:1574:VAL:CA	1:A:1575:ASP:HB2	2.16	0.73
1:A:1648:GLU:CB	1:A:1649:MET:SD	2.76	0.73
1:A:843:LEU:O	1:A:844:ASP:HB3	1.88	0.73
1:A:982:SER:HB2	1:A:1153:LEU:HD21	1.70	0.73
1:A:1796:LYS:CB	1:A:1797:PRO:CD	2.66	0.73
1:A:1344:ASP:HB3	1:A:1398:SER:HB3	1.71	0.73
1:A:1302:LEU:CG	1:A:1303:GLY:H	2.02	0.73
1:A:95:LEU:H	1:A:96:SER:HB3	1.52	0.73
1:A:1547:TRP:CZ2	1:A:1560:PRO:HD2	2.24	0.73
1:A:1646:LYS:CA	1:A:1649:MET:CE	2.67	0.73
1:A:239:GLU:OE1	1:A:239:GLU:N	2.22	0.73
1:A:1646:LYS:HA	1:A:1649:MET:CE	2.19	0.73
1:A:1910:ILE:HD12	1:A:1910:ILE:N	2.03	0.72
1:A:905:CYS:HB3	1:A:1023:ARG:O	1.89	0.72
1:A:238:ILE:HD12	1:A:238:ILE:N	2.04	0.72
1:A:421:GLN:NE2	1:A:421:GLN:HA	2.04	0.72
1:A:874:LEU:HG	1:A:874:LEU:O	1.90	0.72
1:A:1137:LYS:HE3	1:A:1137:LYS:HA	1.70	0.72
1:A:1791:SER:HB2	1:A:1796:LYS:HZ2	1.53	0.72
1:A:323:THR:O	1:A:454:LEU:HD23	1.90	0.72
1:A:1645:TYR:O	1:A:1649:MET:HE1	1.89	0.72
1:A:1646:LYS:HE3	1:A:1650:ILE:CG1	2.19	0.72
1:A:30:ARG:NH1	1:A:30:ARG:HG2	2.05	0.72
1:A:978:ILE:HB	1:A:1134:ILE:O	1.90	0.72
1:A:1582:ARG:O	1:A:1583:LEU:CB	2.35	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3:LEU:CD1	1:A:87:LEU:O	2.35	0.72
1:A:1937:LEU:HD21	1:A:2028:LYS:HE2	1.69	0.72
1:A:376:ASN:HD21	1:A:413:PRO:CG	2.03	0.72
1:A:1534:LEU:HD13	1:A:1534:LEU:C	2.14	0.72
1:A:951:THR:HG21	1:A:1181:TYR:OH	1.89	0.71
1:A:369:LEU:O	1:A:369:LEU:HD22	1.90	0.71
1:A:1474:VAL:HG21	1:A:1584:LEU:HG	1.72	0.71
1:A:3:LEU:C	1:A:7:CYS:SG	2.72	0.71
1:A:84:PHE:HB3	1:A:88:SER:HB3	1.72	0.71
1:A:193:TYR:CE2	1:A:1946:VAL:HG11	2.24	0.71
1:A:1457:ASN:N	1:A:1458:PRO:CD	2.52	0.71
1:A:30:ARG:HG2	1:A:30:ARG:HH11	1.56	0.71
1:A:1357:LEU:HG	1:A:1357:LEU:O	1.89	0.71
1:A:1580:SER:O	1:A:1581:VAL:CG2	2.38	0.71
1:A:1650:ILE:N	1:A:1650:ILE:HD13	2.06	0.71
1:A:1790:LEU:HD11	1:A:1804:CYS:O	1.91	0.71
1:A:462:PHE:O	1:A:466:ASN:ND2	2.23	0.71
1:A:217:SER:HB2	1:A:221:LEU:HG	1.72	0.71
1:A:1868:ASN:C	1:A:1870:ASP:H	1.98	0.71
1:A:1567:PHE:HD1	1:A:1570:PHE:HB3	1.54	0.71
1:A:349:ASP:O	1:A:350:SER:C	2.29	0.70
1:A:94:ARG:O	1:A:96:SER:N	2.24	0.70
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1570:PHE:CG	2.79	0.70
1:A:381:VAL:O	1:A:382:SER:C	2.33	0.70
1:A:864:VAL:HG11	1:A:867:LYS:CG	2.21	0.70
1:A:361:TYR:HE2	1:A:597:GLU:HA	1.55	0.70
1:A:1656:THR:O	1:A:1657:LEU:C	2.33	0.70
1:A:864:VAL:HG11	1:A:867:LYS:CD	2.21	0.70
1:A:347:LYS:HD2	1:A:348:THR:O	1.92	0.70
1:A:1574:VAL:N	1:A:1575:ASP:HB2	2.07	0.70
1:A:380:VAL:HG21	1:A:411:PHE:HE1	0.88	0.70
1:A:383:ASP:OD2	1:A:386:LYS:HE3	1.92	0.70
1:A:1459:ASN:HB3	1:A:1460:GLN:NE2	2.07	0.70
1:A:1973:GLU:HB3	1:A:1976:LEU:HD21	1.73	0.70
1:A:1751:ARG:HE	1:A:1783:ARG:HH12	1.40	0.69
1:A:335:TRP:CE2	1:A:594:GLU:OE1	2.45	0.69
1:A:1140:MET:O	1:A:1143:VAL:CG1	2.41	0.69
1:A:170:ILE:CD1	1:A:181:MET:CB	2.70	0.69
1:A:252:MET:HE3	1:A:789:GLY:HA3	1.74	0.69
1:A:671:MET:CG	1:A:1180:GLU:OE1	2.40	0.69
1:A:1474:VAL:CG2	1:A:1584:LEU:HG	2.22	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:726:ARG:HD3	1:A:1189:ARG:HH11	1.56	0.69
1:A:1052:MET:HG3	1:A:1064:TRP:HH2	1.55	0.69
1:A:1459:ASN:O	1:A:1461:GLU:HG3	1.92	0.69
1:A:1516:LEU:CD1	1:A:1541:LEU:HD22	2.18	0.69
1:A:1551:ASP:O	1:A:1555:THR:CG2	2.31	0.69
1:A:1475:CYS:O	1:A:1584:LEU:HD12	1.92	0.69
1:A:1512:LYS:CG	1:A:1513:ALA:H	2.05	0.69
1:A:1529:LEU:C	1:A:1534:LEU:CB	2.66	0.69
1:A:1532:ARG:O	1:A:1536:GLU:CB	2.41	0.69
1:A:1751:ARG:HH11	1:A:1783:ARG:HH22	1.40	0.69
1:A:1758:LEU:O	1:A:1762:ILE:HG12	1.93	0.69
1:A:1937:LEU:CD2	1:A:2028:LYS:CE	2.60	0.69
1:A:94:ARG:HB3	1:A:96:SER:CB	2.23	0.69
1:A:303:GLU:OE2	1:A:684:GLN:NE2	2.26	0.69
1:A:1135:ARG:NH1	1:A:1137:LYS:HZ3	1.91	0.69
1:A:1556:LEU:HD21	1:A:1564:HIS:CG	2.28	0.69
1:A:973:LEU:HD23	1:A:973:LEU:H	1.58	0.68
1:A:1646:LYS:HA	1:A:1649:MET:HE3	1.75	0.68
1:A:1939:GLU:O	1:A:1943:LYS:HD3	1.93	0.68
1:A:1524:LEU:O	1:A:1524:LEU:HD12	1.93	0.68
1:A:1556:LEU:CG	1:A:1564:HIS:CD2	2.72	0.68
1:A:170:ILE:HD11	1:A:181:MET:HB2	1.72	0.68
1:A:1269:PRO:HB3	1:A:1275:PHE:CD1	2.29	0.68
1:A:1528:LYS:H	1:A:1528:LYS:CD	2.00	0.68
1:A:1518:SER:C	1:A:1522:PHE:HB2	2.18	0.68
1:A:921:GLU:OE2	1:A:923:TYR:OH	2.09	0.68
1:A:1774:ILE:HD12	1:A:1774:ILE:H	1.59	0.68
1:A:2:ASN:HB3	1:A:5:VAL:HG22	1.75	0.68
1:A:1694:ARG:HH22	1:A:1816:ARG:CG	2.06	0.68
1:A:1789:ARG:O	1:A:1796:LYS:HG2	1.93	0.68
1:A:1153:LEU:CD2	1:A:1173:VAL:HG13	2.24	0.68
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1570:PHE:CB	2.77	0.68
1:A:1648:GLU:CA	1:A:1649:MET:SD	2.82	0.68
1:A:193:TYR:CE2	1:A:1946:VAL:CG1	2.77	0.67
1:A:622:PHE:HZ	1:A:748:ASN:HD22	1.42	0.67
1:A:734:HIS:CD2	1:A:741:THR:HG21	2.29	0.67
1:A:239:GLU:OE1	1:A:240:ARG:HG2	1.93	0.67
1:A:1477:LEU:HD21	1:A:1590:LYS:NZ	2.09	0.67
1:A:26:GLN:OE1	1:A:30:ARG:HB2	1.93	0.67
1:A:884:LYS:CE	1:A:895:GLN:HE22	2.04	0.67
1:A:297:LEU:HD21	1:A:717:PRO:HD3	1.77	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2028:LYS:HD3	1:A:2032:ARG:NH2	2.08	0.67
1:A:354:SER:C	1:A:355:LEU:O	2.23	0.67
1:A:1269:PRO:CB	1:A:1275:PHE:CD1	2.78	0.67
1:A:1973:GLU:HG3	1:A:1976:LEU:CD2	2.25	0.67
1:A:842:ILE:N	1:A:842:ILE:HD12	2.09	0.67
1:A:193:TYR:HH	1:A:1946:VAL:HG12	1.56	0.67
1:A:389:ASP:OD2	1:A:1344:ASP:OD2	2.13	0.67
1:A:671:MET:CE	1:A:1180:GLU:OE1	2.42	0.67
1:A:884:LYS:CE	1:A:895:GLN:NE2	2.58	0.67
1:A:1458:PRO:HG2	1:A:1458:PRO:O	1.95	0.67
1:A:208:MET:C	1:A:210:ALA:N	2.49	0.66
1:A:726:ARG:CD	1:A:1189:ARG:CD	2.69	0.66
1:A:4:GLU:HA	1:A:7:CYS:SG	2.35	0.66
1:A:387:GLU:HB3	1:A:388:LEU:HD23	1.76	0.66
1:A:1556:LEU:HD21	1:A:1564:HIS:N	2.10	0.66
1:A:2015:MET:HE1	1:A:2041:MET:HB2	1.78	0.66
1:A:676:SER:OG	1:A:1174:ASN:CG	2.39	0.66
1:A:1645:TYR:O	1:A:1649:MET:CE	2.42	0.66
1:A:97:GLU:O	1:A:99:PHE:N	2.29	0.66
1:A:238:ILE:O	1:A:238:ILE:CG2	2.39	0.66
1:A:669:THR:HG21	1:A:706:HIS:HE1	1.60	0.66
1:A:18:LEU:HD13	1:A:146:ILE:HD11	1.78	0.66
1:A:1529:LEU:HB3	1:A:1534:LEU:CA	2.25	0.66
1:A:1567:PHE:O	1:A:1568:ARG:CA	2.44	0.66
1:A:248:SER:OG	1:A:1022:ARG:NH1	2.28	0.66
1:A:973:LEU:C	1:A:974:GLY:O	2.31	0.66
1:A:1052:MET:CG	1:A:1064:TRP:CH2	2.73	0.66
1:A:1649:MET:CE	1:A:1649:MET:H	2.08	0.66
1:A:917:GLY:C	1:A:920:ARG:HD3	2.18	0.65
1:A:1516:LEU:HD12	1:A:1541:LEU:HD21	1.76	0.65
1:A:1652:GLU:OE1	1:A:1653:ALA:CA	2.44	0.65
1:A:1069:ARG:HD2	1:A:1071:TYR:OH	1.95	0.65
1:A:1399:LEU:O	1:A:1399:LEU:HD22	1.97	0.65
1:A:405:LYS:HZ2	1:A:405:LYS:HB2	1.59	0.65
1:A:1547:TRP:HB2	1:A:1558:ASP:HB3	1.77	0.65
1:A:1555:THR:OG1	1:A:1564:HIS:CE1	2.49	0.65
1:A:1561:PHE:HZ	1:A:1570:PHE:CG	2.15	0.65
1:A:1344:ASP:CB	1:A:1398:SER:HB3	2.26	0.65
1:A:1538:TRP:NE1	1:A:1550:THR:HG22	2.11	0.65
1:A:1579:ARG:HG2	1:A:1580:SER:N	2.12	0.65
1:A:1694:ARG:HH22	1:A:1816:ARG:HG2	1.62	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1135:ARG:NH1	1:A:1137:LYS:HE2	1.94	0.65
1:A:1694:ARG:HH22	1:A:1816:ARG:CB	2.10	0.65
1:A:1399:LEU:O	1:A:1399:LEU:HD13	1.97	0.65
1:A:835:ARG:O	1:A:840:LYS:NZ	2.30	0.64
1:A:1455:SER:O	1:A:1458:PRO:HD2	1.90	0.64
1:A:872:SER:O	1:A:874:LEU:N	2.31	0.64
1:A:864:VAL:HG11	1:A:867:LYS:HB2	1.79	0.64
1:A:1567:PHE:HE1	1:A:1571:ILE:CA	2.11	0.64
1:A:1694:ARG:HH12	1:A:1816:ARG:CG	2.08	0.64
1:A:208:MET:O	1:A:210:ALA:N	2.26	0.64
1:A:236:PRO:HG3	1:A:1012:ARG:HB3	1.78	0.64
1:A:864:VAL:CG1	1:A:867:LYS:HB2	2.27	0.64
1:A:371:ASP:HB3	1:A:376:ASN:HD22	1.63	0.64
1:A:381:VAL:O	1:A:381:VAL:HG23	1.97	0.64
1:A:917:GLY:HA2	1:A:920:ARG:HD3	0.66	0.64
1:A:1458:PRO:HA	1:A:1461:GLU:OE2	1.98	0.64
1:A:193:TYR:CD1	1:A:197:ILE:CD1	2.74	0.64
1:A:1137:LYS:NZ	1:A:1137:LYS:HB2	2.13	0.64
1:A:1183:SER:OG	1:A:1197:ARG:NH1	2.31	0.64
1:A:1517:VAL:HG21	1:A:1571:ILE:HD13	1.79	0.64
1:A:18:LEU:CD1	1:A:146:ILE:CD1	2.72	0.63
1:A:23:LEU:HD13	1:A:178:LEU:HB2	1.78	0.63
1:A:380:VAL:CG2	1:A:411:PHE:CD1	2.73	0.63
1:A:1062:VAL:HG12	1:A:1064:TRP:HE3	1.59	0.63
1:A:2028:LYS:HD3	1:A:2032:ARG:HH21	1.63	0.63
1:A:1046:ASP:HB3	1:A:1047:PRO:HD3	1.80	0.63
1:A:1516:LEU:HD13	1:A:1541:LEU:CD2	2.18	0.63
1:A:1635:MET:HG3	1:A:1638:ASN:HB2	1.80	0.63
1:A:493:MET:CE	1:A:1296:ALA:HB2	2.28	0.63
1:A:22:GLY:O	1:A:178:LEU:CD1	2.46	0.63
1:A:202:TYR:OH	1:A:206:ARG:NH2	2.31	0.63
1:A:1024:LYS:HG2	1:A:1074:THR:O	1.99	0.63
1:A:1939:GLU:O	1:A:1943:LYS:HB3	1.98	0.63
1:A:756:LYS:HA	1:A:915:GLN:CG	2.29	0.63
1:A:1521:TRP:CH2	1:A:1555:THR:HG21	2.33	0.63
1:A:1790:LEU:HD13	1:A:1804:CYS:HB3	1.80	0.62
1:A:905:CYS:SG	1:A:1023:ARG:NH1	2.72	0.62
1:A:1790:LEU:HD12	1:A:1790:LEU:N	2.13	0.62
1:A:1929:LYS:HE2	1:A:2005:TYR:O	1.98	0.62
1:A:742:ASN:CG	1:A:743:LEU:N	2.57	0.62
1:A:1275:PHE:HE2	1:A:1277:LEU:HD21	1.65	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:965:HIS:ND1	1:A:1120:ASP:OD2	2.33	0.62
1:A:1457:ASN:O	1:A:1461:GLU:HG2	1.99	0.62
1:A:99:PHE:H	1:A:100:PRO:HD3	1.64	0.62
1:A:193:TYR:CZ	1:A:1946:VAL:CG1	2.82	0.62
1:A:384:PRO:HD3	1:A:405:LYS:HE3	1.81	0.62
1:A:1046:ASP:OD1	1:A:1046:ASP:C	2.43	0.62
1:A:1265:LEU:CD1	1:A:1274:GLY:O	2.38	0.62
1:A:1308:TYR:HD2	1:A:1324:ARG:HH11	1.46	0.62
1:A:84:PHE:CB	1:A:88:SER:OG	2.48	0.62
1:A:1561:PHE:CE1	1:A:1570:PHE:CD2	2.88	0.62
1:A:101:ILE:HG22	1:A:156:ARG:HB3	1.81	0.62
1:A:162:ASN:OD1	1:A:1766:ARG:NH2	2.33	0.62
1:A:1840:GLN:NE2	1:A:1841:GLU:OE2	2.32	0.62
1:A:193:TYR:CZ	1:A:1946:VAL:HG12	2.34	0.62
1:A:1552:PRO:O	1:A:1564:HIS:CE1	2.53	0.62
1:A:860:LEU:HB2	1:A:863:GLU:HB2	1.82	0.61
1:A:1529:LEU:HB3	1:A:1534:LEU:HB2	1.82	0.61
1:A:238:ILE:CD1	1:A:238:ILE:N	2.62	0.61
1:A:238:ILE:O	1:A:238:ILE:HG22	1.88	0.61
1:A:756:LYS:HA	1:A:915:GLN:HG3	1.82	0.61
1:A:849:LYS:HB3	1:A:874:LEU:HD22	1.82	0.61
1:A:1207:GLU:HA	1:A:1207:GLU:OE1	1.99	0.61
1:A:840:LYS:C	1:A:842:ILE:HD12	2.25	0.61
1:A:1538:TRP:HA	1:A:1538:TRP:CE3	2.35	0.61
1:A:1740:GLY:HA3	1:A:1745:ASN:HA	1.81	0.61
1:A:545:LYS:C	1:A:546:LEU:O	2.34	0.61
1:A:1567:PHE:HE1	1:A:1571:ILE:N	1.98	0.61
1:A:30:ARG:HH11	1:A:30:ARG:CG	2.14	0.61
1:A:967:LEU:HD23	1:A:1988:LEU:HD11	1.82	0.61
1:A:355:LEU:O	1:A:356:MET:HB2	2.00	0.61
1:A:1064:TRP:HE1	1:A:1072:ILE:HG12	1.64	0.61
1:A:694:LEU:O	1:A:694:LEU:HD23	1.99	0.61
1:A:1091:HIS:NE2	1:A:1128:SER:OG	2.27	0.61
1:A:87:LEU:HD13	1:A:88:SER:H	1.65	0.61
1:A:239:GLU:CD	1:A:239:GLU:H	2.08	0.61
1:A:916:HIS:O	1:A:920:ARG:NE	2.34	0.61
1:A:1067:LYS:HD2	1:A:1068:GLY:N	2.14	0.61
1:A:1435:LYS:H	1:A:1438:LEU:HD12	1.65	0.61
1:A:1547:TRP:CZ3	1:A:1559:GLY:O	2.54	0.61
1:A:1153:LEU:HD23	1:A:1173:VAL:HG13	1.82	0.60
1:A:1868:ASN:O	1:A:1870:ASP:N	2.34	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:917:GLY:N	1:A:920:ARG:HD2	2.15	0.60
1:A:1670:ARG:HH12	1:A:1853:ARG:H	1.49	0.60
1:A:237:ASN:O	1:A:241:VAL:CB	2.48	0.60
1:A:1574:VAL:HG13	1:A:1575:ASP:N	2.16	0.60
1:A:1688:ILE:HG22	1:A:1690:ASP:H	1.66	0.60
1:A:1180:GLU:CG	1:A:1185:PHE:HD1	2.14	0.60
1:A:721:ILE:C	1:A:727:VAL:HG23	2.24	0.60
1:A:351:GLY:CA	1:A:369:LEU:HD12	2.29	0.60
1:A:916:HIS:C	1:A:920:ARG:CD	2.74	0.60
1:A:1160:ASN:OD1	1:A:1161:PRO:HD3	2.02	0.60
1:A:1400:SER:HB2	1:A:1407:ARG:CZ	2.32	0.60
1:A:1514:GLU:HB2	1:A:1571:ILE:CG2	2.32	0.60
1:A:1973:GLU:CG	1:A:1976:LEU:HD21	2.32	0.60
1:A:353:GLY:HA3	1:A:355:LEU:H	1.66	0.59
1:A:838:GLY:HA3	1:A:890:ILE:HD13	1.83	0.59
1:A:1546:ALA:O	1:A:1547:TRP:CG	2.55	0.59
1:A:1574:VAL:HG22	1:A:1574:VAL:O	2.01	0.59
1:A:96:SER:OG	1:A:99:PHE:CE1	2.56	0.59
1:A:1456:LEU:C	1:A:1458:PRO:HD2	2.27	0.59
1:A:1790:LEU:CD1	1:A:1804:CYS:HB3	2.33	0.59
1:A:947:SER:OG	1:A:950:GLU:OE2	2.19	0.59
1:A:87:LEU:HD13	1:A:88:SER:N	2.17	0.59
1:A:1567:PHE:CE1	1:A:1571:ILE:N	2.70	0.59
1:A:1677:LEU:O	1:A:1678:SER:C	2.44	0.59
1:A:1529:LEU:HB3	1:A:1534:LEU:N	2.18	0.59
1:A:411:PHE:O	1:A:412:LYS:HE2	2.02	0.59
1:A:840:LYS:C	1:A:842:ILE:CD1	2.75	0.59
1:A:1180:GLU:HG3	1:A:1185:PHE:HD1	1.68	0.59
1:A:1556:LEU:C	1:A:1558:ASP:H	2.09	0.59
1:A:1441:LEU:HD21	1:A:1541:LEU:HD13	1.84	0.59
1:A:210:ALA:O	1:A:211:ASP:C	2.43	0.58
1:A:361:TYR:O	1:A:365:TRP:HD1	1.86	0.58
1:A:1010:PHE:O	1:A:1014:ILE:HG13	2.03	0.58
1:A:1457:ASN:O	1:A:1461:GLU:CG	2.50	0.58
1:A:1563:SER:HG	1:A:1566:GLN:H	1.51	0.58
1:A:1622:ARG:HH22	1:A:1674:LEU:HB3	1.68	0.58
1:A:1791:SER:HB2	1:A:1796:LYS:NZ	2.16	0.58
1:A:1927:LEU:HA	1:A:1930:GLN:HB2	1.83	0.58
1:A:973:LEU:O	1:A:974:GLY:C	2.46	0.58
1:A:1478:LEU:O	1:A:1478:LEU:HD12	2.03	0.58
1:A:1527:THR:O	1:A:1527:THR:HG22	2.01	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:864:VAL:CG1	1:A:867:LYS:CB	2.81	0.58
1:A:979:ASN:OD1	1:A:1133:SER:OG	2.19	0.58
1:A:1446:SER:HA	1:A:1450:MET:HB2	1.85	0.58
1:A:658:LYS:HZ1	1:A:696:THR:H	1.51	0.58
1:A:685:LYS:HD2	1:A:1169:GLU:HB3	1.86	0.58
1:A:1138:SER:HB3	1:A:1141:ASP:HB3	1.84	0.58
1:A:1926:SER:OG	1:A:2008:LYS:NZ	2.37	0.58
1:A:1215:GLN:NE2	1:A:1275:PHE:O	2.23	0.58
1:A:1567:PHE:CG	1:A:1567:PHE:O	2.56	0.58
1:A:1519:GLU:HA	1:A:1522:PHE:O	2.02	0.58
1:A:1561:PHE:CE2	1:A:1567:PHE:CD2	2.83	0.58
1:A:1569:ASN:HA	1:A:1572:ALA:HB3	1.86	0.58
1:A:371:ASP:CB	1:A:376:ASN:HD22	2.16	0.58
1:A:1138:SER:O	1:A:1982:PHE:CD2	2.57	0.58
1:A:1553:SER:O	1:A:1556:LEU:HB2	2.04	0.58
1:A:1556:LEU:CD2	1:A:1563:SER:C	2.76	0.58
1:A:244:THR:O	1:A:1023:ARG:NH2	2.35	0.57
1:A:837:ILE:HD11	1:A:935:GLY:HA2	1.86	0.57
1:A:1136:PRO:CG	1:A:1982:PHE:CB	2.81	0.57
1:A:1973:GLU:HG3	1:A:1976:LEU:HD21	1.86	0.57
1:A:102:THR:HG23	1:A:160:MET:SD	2.44	0.57
1:A:238:ILE:CD1	1:A:238:ILE:H	2.18	0.57
1:A:20:GLU:C	1:A:180:ASN:HB3	2.29	0.57
1:A:951:THR:OG1	1:A:958:LYS:HB3	2.04	0.57
1:A:1180:GLU:HG2	1:A:1185:PHE:CD1	2.39	0.57
1:A:835:ARG:O	1:A:839:THR:OG1	2.21	0.57
1:A:1003:CYS:HB3	1:A:1011:HIS:CD2	2.40	0.57
1:A:234:PHE:CZ	1:A:236:PRO:O	2.58	0.57
1:A:402:LYS:O	1:A:405:LYS:HG3	2.03	0.57
1:A:1004:TRP:HD1	1:A:1005:PHE:CD1	2.23	0.57
1:A:1561:PHE:CE1	1:A:1570:PHE:CG	2.93	0.57
1:A:351:GLY:HA3	1:A:369:LEU:HD11	0.66	0.57
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1570:PHE:HB3	2.39	0.57
1:A:354:SER:O	1:A:356:MET:N	2.37	0.57
1:A:1548:LEU:HD22	1:A:1555:THR:HG22	1.86	0.57
1:A:1694:ARG:NH2	1:A:1816:ARG:HG2	2.19	0.57
1:A:1304:ARG:HG2	1:A:1432:SER:HB3	1.84	0.57
1:A:1925:GLY:O	1:A:1928:ARG:NE	2.38	0.57
1:A:235:GLU:H	1:A:236:PRO:HD3	1.69	0.56
1:A:1831:ASP:O	1:A:1832:ILE:HG12	2.05	0.56
1:A:11:ASN:CG	1:A:12:VAL:N	2.62	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:410:ARG:O	1:A:411:PHE:C	2.48	0.56
1:A:411:PHE:CD1	1:A:411:PHE:N	2.73	0.56
1:A:825:TRP:H	1:A:825:TRP:CD1	2.22	0.56
1:A:987:LYS:HG2	1:A:988:LYS:HG3	1.88	0.56
1:A:1920:ARG:HD3	1:A:1924:GLU:HB2	1.87	0.56
1:A:1291:PHE:HD2	1:A:1450:MET:HG2	1.70	0.56
1:A:1791:SER:CB	1:A:1796:LYS:NZ	2.68	0.56
1:A:658:LYS:HZ2	1:A:699:GLN:CG	2.15	0.56
1:A:10:ILE:CG1	1:A:11:ASN:N	2.68	0.56
1:A:1456:LEU:N	1:A:1458:PRO:HD2	2.20	0.56
1:A:1529:LEU:HB3	1:A:1534:LEU:CB	2.36	0.56
1:A:1649:MET:C	1:A:1650:ILE:HD13	2.30	0.56
1:A:1946:VAL:HG23	1:A:1946:VAL:O	2.04	0.56
1:A:25:ASP:N	1:A:25:ASP:OD1	2.36	0.56
1:A:1552:PRO:O	1:A:1564:HIS:NE2	2.39	0.56
1:A:1624:GLU:HG3	1:A:1858:SER:H	1.70	0.56
1:A:389:ASP:O	1:A:390:ILE:CD1	2.52	0.56
1:A:540:GLU:N	1:A:540:GLU:OE1	2.38	0.56
1:A:1720:LYS:NZ	1:A:1742:GLY:O	2.39	0.56
1:A:94:ARG:O	1:A:95:LEU:C	2.48	0.56
1:A:1122:ILE:O	1:A:1122:ILE:HG23	2.06	0.56
1:A:547:LYS:HE2	1:A:1253:CYS:O	2.06	0.56
1:A:851:THR:HG21	1:A:927:ALA:HB2	1.88	0.56
1:A:1290:ARG:HH21	1:A:1576:ALA:HB3	1.70	0.56
1:A:1797:PRO:O	1:A:1798:ALA:O	2.25	0.55
1:A:209:ASP:OD1	1:A:209:ASP:N	2.20	0.55
1:A:864:VAL:HG11	1:A:867:LYS:CB	2.36	0.55
1:A:1091:HIS:HE2	1:A:1128:SER:HG	1.53	0.55
1:A:760:GLU:OE1	1:A:871:ARG:NH2	2.39	0.55
1:A:995:THR:HG21	1:A:1021:PHE:HB2	1.88	0.55
1:A:1649:MET:HE2	1:A:1649:MET:H	1.71	0.55
1:A:952:VAL:O	1:A:952:VAL:HG22	2.05	0.55
1:A:378:GLU:HB2	1:A:411:PHE:HB2	1.88	0.55
1:A:1029:ASP:OD1	1:A:1030:LEU:N	2.40	0.55
1:A:144:THR:OG1	1:A:215:GLN:OE1	2.19	0.55
1:A:742:ASN:CG	1:A:743:LEU:H	2.13	0.55
1:A:1123:GLU:HB3	1:A:1128:SER:HA	1.89	0.55
1:A:1414:TYR:OH	1:A:1418:ARG:NH1	2.38	0.55
1:A:1519:GLU:HA	1:A:1522:PHE:C	2.32	0.55
1:A:10:ILE:HG12	1:A:11:ASN:N	2.22	0.55
1:A:421:GLN:HA	1:A:421:GLN:HE21	1.72	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:659:THR:HG22	1:A:699:GLN:HG2	1.89	0.55
1:A:1516:LEU:HD22	1:A:1537:GLU:HB3	1.88	0.55
1:A:658:LYS:HE3	1:A:699:GLN:CD	2.14	0.55
1:A:1561:PHE:CD2	1:A:1567:PHE:HB3	2.39	0.55
1:A:1939:GLU:O	1:A:1943:LYS:CB	2.54	0.55
1:A:614:CYS:O	1:A:1203:HIS:NE2	2.39	0.55
1:A:1055:ALA:HB2	1:A:1062:VAL:HG21	1.89	0.55
1:A:1545:PHE:CD1	1:A:1545:PHE:N	2.73	0.55
1:A:84:PHE:HB3	1:A:88:SER:OG	2.07	0.54
1:A:98:VAL:HG23	1:A:108:GLY:O	2.07	0.54
1:A:1477:LEU:CD2	1:A:1590:LYS:NZ	2.69	0.54
1:A:2041:MET:SD	1:A:2041:MET:N	2.80	0.54
1:A:347:LYS:CD	1:A:348:THR:O	2.56	0.54
1:A:796:PRO:HG2	1:A:1161:PRO:HB2	1.89	0.54
1:A:1309:TYR:HE1	1:A:1324:ARG:HG2	1.73	0.54
1:A:18:LEU:HD13	1:A:146:ILE:CD1	2.34	0.54
1:A:971:ARG:HH21	1:A:971:ARG:CG	2.18	0.54
1:A:354:SER:O	1:A:357:ASP:N	2.40	0.54
1:A:727:VAL:HG13	1:A:727:VAL:O	2.07	0.54
1:A:1543:ALA:HA	1:A:1797:PRO:HB3	1.88	0.54
1:A:1567:PHE:CD1	1:A:1567:PHE:C	2.85	0.54
1:A:1569:ASN:HA	1:A:1572:ALA:CB	2.38	0.54
1:A:1521:TRP:HB2	1:A:1522:PHE:CE2	2.42	0.54
1:A:369:LEU:HD22	1:A:369:LEU:C	2.32	0.54
1:A:401:PRO:HB2	1:A:405:LYS:HE2	1.89	0.54
1:A:1477:LEU:HD21	1:A:1590:LYS:CE	2.38	0.54
1:A:842:ILE:HG13	1:A:888:TRP:CZ3	2.43	0.54
1:A:1518:SER:O	1:A:1522:PHE:N	2.40	0.54
1:A:1519:GLU:C	1:A:1521:TRP:N	2.57	0.54
1:A:1654:PHE:C	1:A:1656:THR:H	2.15	0.54
1:A:365:TRP:CH2	1:A:554:ILE:HG13	2.43	0.54
1:A:1232:PHE:HB2	1:A:1597:ILE:HG12	1.90	0.53
1:A:510:LEU:O	1:A:516:GLN:NE2	2.41	0.53
1:A:917:GLY:C	1:A:920:ARG:CD	2.80	0.53
1:A:923:TYR:HE2	1:A:1080:GLN:H	1.56	0.53
1:A:193:TYR:CD1	1:A:193:TYR:C	2.86	0.53
1:A:1459:ASN:O	1:A:1460:GLN:C	2.51	0.53
1:A:1973:GLU:CB	1:A:1976:LEU:HD21	2.37	0.53
1:A:842:ILE:HG13	1:A:888:TRP:HE3	1.72	0.53
1:A:864:VAL:CG1	1:A:867:LYS:CD	2.86	0.53
1:A:1064:TRP:CD1	1:A:1064:TRP:C	2.86	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1385:LYS:O	1:A:1388:GLU:HG3	2.09	0.53
1:A:1744:SER:OG	1:A:1745:ASN:N	2.41	0.53
1:A:1970:GLU:CD	1:A:1970:GLU:N	2.63	0.53
1:A:1973:GLU:HG3	1:A:1976:LEU:HD23	1.90	0.53
1:A:656:LYS:O	1:A:659:THR:OG1	2.21	0.53
1:A:323:THR:O	1:A:454:LEU:CD2	2.57	0.53
1:A:1529:LEU:CB	1:A:1534:LEU:CB	2.82	0.53
1:A:405:LYS:HB2	1:A:405:LYS:HZ3	1.74	0.53
1:A:1477:LEU:CD2	1:A:1590:LYS:HZ3	2.22	0.53
1:A:1838:THR:HA	1:A:1844:VAL:HA	1.91	0.53
1:A:1937:LEU:HD21	1:A:2028:LYS:HE3	1.81	0.53
1:A:23:LEU:HD12	1:A:177:VAL:O	2.08	0.53
1:A:671:MET:HE3	1:A:1180:GLU:CD	2.34	0.52
1:A:762:THR:HG23	1:A:762:THR:O	2.07	0.52
1:A:1137:LYS:CE	1:A:1137:LYS:HA	2.34	0.52
1:A:89:LYS:O	1:A:89:LYS:HG3	2.08	0.52
1:A:984:ASN:HB2	1:A:1128:SER:HB2	1.90	0.52
1:A:1066:ASP:OD1	1:A:1066:ASP:O	2.28	0.52
1:A:1313:ILE:HG12	1:A:1547:TRP:HB3	1.91	0.52
1:A:1457:ASN:O	1:A:1461:GLU:OE2	2.27	0.52
1:A:1556:LEU:HD11	1:A:1564:HIS:CG	2.20	0.52
1:A:1703:PHE:CE2	1:A:1706:PRO:HA	2.44	0.52
1:A:843:LEU:O	1:A:844:ASP:CB	2.54	0.52
1:A:1275:PHE:HE2	1:A:1277:LEU:CD2	2.22	0.52
1:A:12:VAL:CG2	1:A:13:GLU:N	2.72	0.52
1:A:1710:PHE:O	1:A:1718:GLY:N	2.39	0.52
1:A:669:THR:HG21	1:A:706:HIS:CE1	2.44	0.52
1:A:1067:LYS:HD2	1:A:1067:LYS:C	2.34	0.52
1:A:380:VAL:O	1:A:380:VAL:CG1	2.52	0.52
1:A:1593:GLY:C	1:A:1595:THR:HG22	2.35	0.52
1:A:831:GLU:OE2	1:A:831:GLU:N	2.39	0.52
1:A:1399:LEU:N	1:A:1399:LEU:CD1	2.73	0.52
1:A:1973:GLU:CG	1:A:1976:LEU:CD2	2.87	0.52
1:A:965:HIS:HB3	1:A:1989:TRP:HZ3	1.74	0.52
1:A:1357:LEU:O	1:A:1357:LEU:CG	2.58	0.52
1:A:1910:ILE:N	1:A:1910:ILE:CD1	2.73	0.52
1:A:235:GLU:N	1:A:236:PRO:HD3	2.25	0.51
1:A:371:ASP:CG	1:A:376:ASN:HD22	2.18	0.51
1:A:990:ASN:ND2	1:A:1080:GLN:OE1	2.43	0.51
1:A:1180:GLU:CG	1:A:1185:PHE:CD1	2.94	0.51
1:A:1687:SER:O	1:A:1688:ILE:HG13	2.09	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:842:ILE:N	1:A:842:ILE:CD1	2.73	0.51
1:A:678:PRO:HD3	1:A:1977:ASP:OD1	2.10	0.51
1:A:790:TRP:H	1:A:790:TRP:CD1	2.29	0.51
1:A:827:GLN:N	1:A:827:GLN:OE1	2.43	0.51
1:A:861:TYR:CZ	1:A:865:GLN:HG3	2.46	0.51
1:A:1299:THR:C	1:A:1300:THR:CG2	2.83	0.51
1:A:90:THR:HG23	1:A:90:THR:O	2.10	0.51
1:A:254:GLU:O	1:A:258:SER:OG	2.26	0.51
1:A:835:ARG:HG2	1:A:840:LYS:HZ1	1.73	0.51
1:A:1561:PHE:HZ	1:A:1570:PHE:HB3	1.76	0.51
1:A:1915:MET:SD	1:A:1915:MET:N	2.84	0.51
1:A:550:PRO:HG2	1:A:574:ASP:OD2	2.11	0.51
1:A:1556:LEU:C	1:A:1558:ASP:N	2.63	0.51
1:A:1654:PHE:O	1:A:1656:THR:O	2.29	0.51
1:A:1590:LYS:O	1:A:1592:GLY:N	2.44	0.51
1:A:121:THR:HG22	1:A:164:ARG:HD3	1.92	0.51
1:A:973:LEU:CD2	1:A:973:LEU:N	2.74	0.51
1:A:359:GLY:HA2	1:A:363:GLU:CB	2.41	0.50
1:A:1136:PRO:CG	1:A:1982:PHE:HB3	2.41	0.50
1:A:1339:MET:HG3	1:A:1415:LEU:HB3	1.93	0.50
1:A:1561:PHE:HZ	1:A:1570:PHE:CB	2.20	0.50
1:A:87:LEU:CD1	1:A:88:SER:H	2.23	0.50
1:A:1299:THR:O	1:A:1300:THR:HG22	2.11	0.50
1:A:595:LEU:N	1:A:595:LEU:CD2	2.74	0.50
1:A:1046:ASP:N	1:A:1047:PRO:CD	2.74	0.50
1:A:235:GLU:N	1:A:236:PRO:CD	2.74	0.50
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1567:PHE:CB	2.81	0.50
1:A:1906:LYS:HD3	1:A:1912:ASN:OD1	2.12	0.50
1:A:95:LEU:CA	1:A:96:SER:CB	2.75	0.50
1:A:720:LEU:HD11	1:A:1176:VAL:HG11	1.93	0.50
1:A:1290:ARG:NH2	1:A:1575:ASP:O	2.45	0.50
1:A:1954:VAL:HG22	1:A:1956:ILE:HD12	1.94	0.50
1:A:12:VAL:HG22	1:A:13:GLU:N	2.26	0.50
1:A:26:GLN:OE1	1:A:30:ARG:CD	2.57	0.50
1:A:84:PHE:C	1:A:87:LEU:CD1	2.85	0.50
1:A:95:LEU:HA	1:A:96:SER:HB3	1.86	0.50
1:A:734:HIS:NE2	1:A:741:THR:HG21	2.26	0.50
1:A:1701:GLY:H	1:A:1845:MET:HE1	1.76	0.50
1:A:733:PHE:HA	1:A:739:ARG:O	2.11	0.50
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1567:PHE:CG	2.95	0.50
1:A:1195:THR:OG1	1:A:1228:GLY:O	2.27	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1811:ARG:O	1:A:1812:GLY:C	2.52	0.50
1:A:111:PRO:HG2	1:A:114:ILE:HD11	1.94	0.49
1:A:1254:LEU:HD11	1:A:1409:VAL:HG11	1.93	0.49
1:A:1833:LEU:HB2	1:A:1850:TYR:HB3	1.94	0.49
1:A:1568:ARG:N	1:A:1568:ARG:C	2.65	0.49
1:A:1652:GLU:OE1	1:A:1653:ALA:C	2.56	0.49
1:A:1283:PHE:O	1:A:1283:PHE:CD2	2.65	0.49
1:A:1519:GLU:HG2	1:A:1526:ARG:HB2	1.94	0.49
1:A:1798:ALA:C	1:A:1800:ARG:H	2.17	0.49
1:A:1976:LEU:HD23	1:A:1976:LEU:H	1.74	0.49
1:A:325:LEU:HD21	1:A:327:ARG:HE	1.77	0.49
1:A:365:TRP:CD2	1:A:595:LEU:HD11	2.46	0.49
1:A:790:TRP:CD1	1:A:790:TRP:N	2.80	0.49
1:A:1694:ARG:CZ	1:A:1816:ARG:HG2	2.42	0.49
1:A:155:ARG:CZ	1:A:155:ARG:CB	2.86	0.49
1:A:364:LEU:C	1:A:364:LEU:CD2	2.86	0.49
1:A:523:CYS:SG	1:A:1253:CYS:HB3	2.52	0.49
1:A:1428:HIS:ND1	1:A:1428:HIS:N	2.60	0.49
1:A:2028:LYS:CD	1:A:2032:ARG:NH2	2.75	0.49
1:A:239:GLU:CG	1:A:240:ARG:N	2.75	0.49
1:A:104:ASP:CG	1:A:104:ASP:O	2.30	0.49
1:A:1521:TRP:HE1	1:A:1538:TRP:HZ2	1.60	0.49
1:A:1529:LEU:CD2	1:A:1533:LEU:CB	2.86	0.49
1:A:292:THR:N	1:A:295:GLU:OE2	2.34	0.49
1:A:973:LEU:HG	1:A:974:GLY:O	2.12	0.49
1:A:1455:SER:CA	1:A:1458:PRO:HG3	2.41	0.49
1:A:1530:GLY:O	1:A:1534:LEU:CA	2.61	0.49
1:A:1908:GLN:NE2	1:A:2046:GLU:OE1	2.44	0.49
1:A:384:PRO:HG3	1:A:405:LYS:HZ1	0.32	0.48
1:A:1929:LYS:HB2	1:A:2012:LEU:HD23	1.95	0.48
1:A:226:ARG:NH2	1:A:839:THR:O	2.46	0.48
1:A:285:HIS:CE1	1:A:680:LEU:H	2.31	0.48
1:A:411:PHE:O	1:A:412:LYS:CE	2.61	0.48
1:A:921:GLU:OE2	1:A:923:TYR:CZ	2.65	0.48
1:A:1719:TYR:OH	1:A:1841:GLU:O	2.27	0.48
1:A:13:GLU:OE1	1:A:1853:ARG:NH2	2.47	0.48
1:A:26:GLN:CD	1:A:30:ARG:HB2	2.38	0.48
1:A:101:ILE:CG2	1:A:156:ARG:HB3	2.43	0.48
1:A:841:ASN:C	1:A:842:ILE:HD12	2.38	0.48
1:A:980:ILE:HD12	1:A:1174:ASN:OD1	2.14	0.48
1:A:1632:VAL:HG22	1:A:1883:TRP:NE1	2.29	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:181:MET:O	1:A:183:LEU:HG	2.14	0.48
1:A:246:PRO:HD2	1:A:1022:ARG:HB3	1.95	0.48
1:A:385:ALA:HA	1:A:388:LEU:H	1.78	0.48
1:A:949:HIS:ND1	1:A:949:HIS:N	2.60	0.48
1:A:1180:GLU:HG2	1:A:1185:PHE:CE1	2.49	0.48
1:A:1392:SER:HB2	1:A:1393:PRO:HD3	0.68	0.48
1:A:973:LEU:CD2	1:A:973:LEU:H	2.24	0.48
1:A:1135:ARG:HH11	1:A:1137:LYS:CE	2.22	0.48
1:A:1561:PHE:CG	1:A:1567:PHE:HB2	2.39	0.48
1:A:1899:VAL:HA	1:A:1902:ALA:HB3	1.95	0.48
1:A:1518:SER:O	1:A:1522:PHE:CA	2.61	0.48
1:A:318:ARG:O	1:A:318:ARG:HG3	2.12	0.48
1:A:1789:ARG:HB2	1:A:1796:LYS:HG3	1.95	0.48
1:A:161:GLU:O	1:A:163:PRO:HD3	2.13	0.48
1:A:349:ASP:O	1:A:349:ASP:OD1	2.31	0.48
1:A:405:LYS:C	1:A:405:LYS:HD3	2.38	0.48
1:A:1734:VAL:HG12	1:A:1752:LEU:HB3	1.96	0.48
1:A:466:ASN:HB3	1:A:468:LEU:HG	1.96	0.48
1:A:547:LYS:O	1:A:548:PHE:HB2	2.13	0.48
1:A:18:LEU:HD22	1:A:167:PHE:HB3	1.95	0.47
1:A:1567:PHE:C	1:A:1568:ARG:CA	2.75	0.47
1:A:1878:GLU:HG3	1:A:1879:PRO:HD2	1.95	0.47
1:A:89:LYS:HB2	1:A:89:LYS:HE3	1.60	0.47
1:A:364:LEU:HD23	1:A:364:LEU:O	2.14	0.47
1:A:887:MET:C	1:A:888:TRP:O	2.55	0.47
1:A:997:LYS:NZ	1:A:1090:LEU:HD21	2.29	0.47
1:A:1766:ARG:HA	1:A:1793:PHE:CZ	2.49	0.47
1:A:141:ALA:HA	1:A:144:THR:HG22	1.95	0.47
1:A:1512:LYS:NZ	1:A:1577:LYS:HE2	2.29	0.47
1:A:1556:LEU:HD21	1:A:1563:SER:C	2.38	0.47
1:A:474:TYR:OH	1:A:576:THR:OG1	2.29	0.47
1:A:734:HIS:CD2	1:A:741:THR:CG2	2.95	0.47
1:A:876:GLU:OE2	1:A:876:GLU:N	2.47	0.47
1:A:726:ARG:HD2	1:A:1189:ARG:HD3	1.89	0.47
1:A:1460:GLN:N	1:A:1460:GLN:CD	2.73	0.47
1:A:1474:VAL:HG23	1:A:1584:LEU:HG	1.97	0.47
1:A:1586:ALA:CB	1:A:1595:THR:CG2	2.87	0.47
1:A:1963:PHE:HE2	1:A:1965:ASP:HB3	1.80	0.47
1:A:408:TYR:HD1	1:A:408:TYR:O	1.98	0.47
1:A:657:SER:HA	1:A:916:HIS:CD2	2.48	0.47
1:A:21:PRO:HA	1:A:180:ASN:HB3	1.97	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:161:GLU:O	1:A:162:ASN:O	2.33	0.47
1:A:535:HIS:CG	1:A:535:HIS:O	2.67	0.47
1:A:594:GLU:C	1:A:595:LEU:HD22	2.40	0.47
1:A:665:LEU:HD12	1:A:690:LEU:HD21	1.96	0.47
1:A:982:SER:OG	1:A:983:SER:N	2.47	0.47
1:A:1648:GLU:H	1:A:1649:MET:HE1	1.79	0.47
1:A:554:ILE:O	1:A:566:TYR:HA	2.14	0.47
1:A:973:LEU:HD23	1:A:973:LEU:N	2.24	0.47
1:A:1135:ARG:NH1	1:A:1137:LYS:HE3	2.26	0.47
1:A:1308:TYR:CE2	1:A:1324:ARG:HB2	2.50	0.47
1:A:1956:ILE:HG23	1:A:1962:ASP:HA	1.97	0.47
1:A:540:GLU:HG3	1:A:556:LYS:HE2	1.97	0.47
1:A:102:THR:O	1:A:102:THR:OG1	2.11	0.47
1:A:365:TRP:CE2	1:A:595:LEU:HD11	2.32	0.47
1:A:1182:ASN:O	1:A:1184:GLU:HG2	2.14	0.47
1:A:1867:SER:HB3	1:A:1869:ARG:HG2	1.97	0.47
1:A:99:PHE:N	1:A:100:PRO:CD	2.78	0.46
1:A:181:MET:O	1:A:183:LEU:N	2.48	0.46
1:A:850:ALA:HA	1:A:873:LYS:HA	1.98	0.46
1:A:1175:THR:HG21	1:A:1178:CYS:HB2	1.96	0.46
1:A:1299:THR:C	1:A:1300:THR:HG23	2.39	0.46
1:A:1550:THR:O	1:A:1552:PRO:HD3	2.14	0.46
1:A:1556:LEU:HD21	1:A:1564:HIS:CA	2.45	0.46
1:A:1699:THR:OG1	1:A:1767:ARG:NH1	2.48	0.46
1:A:408:TYR:CD1	1:A:408:TYR:N	2.83	0.46
1:A:668:TYR:CZ	1:A:1170:LYS:HD2	2.51	0.46
1:A:672:GLU:O	1:A:675:VAL:HG23	2.16	0.46
1:A:1589:LYS:HA	1:A:1589:LYS:HD3	1.55	0.46
1:A:1688:ILE:O	1:A:1692:ILE:HG13	2.15	0.46
1:A:547:LYS:HE2	1:A:1253:CYS:CA	2.42	0.46
1:A:1625:SER:O	1:A:1629:LEU:HB2	2.15	0.46
1:A:1862:ALA:O	1:A:1866:TRP:N	2.44	0.46
1:A:421:GLN:NE2	1:A:421:GLN:CA	2.76	0.46
1:A:756:LYS:HB3	1:A:1204:GLN:NE2	2.23	0.46
1:A:951:THR:CG2	1:A:1181:TYR:OH	2.61	0.46
1:A:1255:HIS:O	1:A:1257:LEU:N	2.42	0.46
1:A:1280:ASN:OD1	1:A:1281:PRO:HD2	2.15	0.46
1:A:1458:PRO:CG	1:A:1458:PRO:O	2.52	0.46
1:A:1519:GLU:OE2	1:A:1526:ARG:CB	2.64	0.46
1:A:1829:ARG:O	1:A:1830:GLY:C	2.58	0.46
1:A:1934:ARG:HG2	1:A:1936:LYS:NZ	2.30	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:18:LEU:O	1:A:180:ASN:ND2	2.49	0.46
1:A:973:LEU:O	1:A:974:GLY:O	2.33	0.46
1:A:1559:GLY:HA3	1:A:1560:PRO:HD3	1.23	0.46
1:A:1:MET:O	1:A:2:ASN:CB	2.64	0.46
1:A:229:SER:O	1:A:233:LEU:HG	2.16	0.46
1:A:81:ASP:C	1:A:85:SER:OG	2.51	0.46
1:A:1181:TYR:CD1	1:A:1182:ASN:N	2.83	0.46
1:A:1619:ASN:OD1	1:A:1620:GLN:N	2.48	0.46
1:A:1945:VAL:O	1:A:1946:VAL:C	2.58	0.46
1:A:239:GLU:CD	1:A:239:GLU:N	2.73	0.46
1:A:117:ARG:NH2	1:A:119:ASP:OD2	2.46	0.46
1:A:180:ASN:N	1:A:180:ASN:OD1	2.49	0.46
1:A:364:LEU:HA	1:A:415:LEU:HD21	1.97	0.46
1:A:1435:LYS:HE2	1:A:1437:SER:HB3	1.97	0.46
1:A:1789:ARG:O	1:A:1796:LYS:CG	2.62	0.46
1:A:206:ARG:HD3	1:A:207:SER:H	1.80	0.45
1:A:913:LYS:HD3	1:A:915:GLN:OE1	2.16	0.45
1:A:1233:SER:HB2	1:A:1597:ILE:HG23	1.98	0.45
1:A:1548:LEU:CD2	1:A:1555:THR:HG22	2.45	0.45
1:A:1634:PHE:HD2	1:A:1638:ASN:HB3	1.81	0.45
1:A:1791:SER:H	1:A:1796:LYS:HE3	1.79	0.45
1:A:365:TRP:CE3	1:A:554:ILE:HD11	2.52	0.45
1:A:411:PHE:C	1:A:412:LYS:HG2	2.41	0.45
1:A:840:LYS:HA	1:A:842:ILE:HD11	1.99	0.45
1:A:1305:LYS:HE2	1:A:1305:LYS:HB3	1.63	0.45
1:A:1545:PHE:O	1:A:1548:LEU:HB2	2.16	0.45
1:A:1567:PHE:HE1	1:A:1571:ILE:HB	1.42	0.45
1:A:347:LYS:HG2	1:A:348:THR:H	1.81	0.45
1:A:572:LYS:HB3	1:A:592:GLU:HG2	1.98	0.45
1:A:1137:LYS:NZ	1:A:1137:LYS:CB	2.73	0.45
1:A:1426:SER:O	1:A:1426:SER:OG	2.27	0.45
1:A:1535:LYS:HA	1:A:1535:LYS:HD2	1.66	0.45
1:A:1748:GLU:O	1:A:1749:GLU:CD	2.59	0.45
1:A:1827:ARG:HB2	1:A:1834:ASN:HB2	1.97	0.45
1:A:96:SER:OG	1:A:99:PHE:HE1	1.96	0.45
1:A:815:ARG:HD2	1:A:1958:GLU:HG2	1.98	0.45
1:A:1270:ASP:O	1:A:1275:PHE:HB3	2.16	0.45
1:A:1345:ARG:O	1:A:1349:GLN:HG2	2.16	0.45
1:A:1878:GLU:CG	1:A:1879:PRO:HD2	2.47	0.45
1:A:218:GLU:HG2	1:A:219:GLU:HG2	1.99	0.45
1:A:1593:GLY:O	1:A:1596:THR:HG22	2.16	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:102:THR:O	1:A:103:HIS:HB2	2.16	0.45
1:A:726:ARG:CD	1:A:1189:ARG:HD3	2.47	0.45
1:A:1275:PHE:CE2	1:A:1277:LEU:CD2	2.98	0.45
1:A:181:MET:HB3	1:A:183:LEU:HD21	1.98	0.45
1:A:324:SER:O	1:A:324:SER:OG	2.24	0.45
1:A:405:LYS:NZ	1:A:405:LYS:O	2.43	0.45
1:A:612:LEU:H	1:A:613:PRO:CD	2.29	0.45
1:A:723:ARG:O	1:A:724:GLU:CG	2.65	0.45
1:A:1028:VAL:HG21	1:A:1033:LEU:HD21	1.98	0.45
1:A:1182:ASN:O	1:A:1184:GLU:N	2.50	0.45
1:A:1646:LYS:CE	1:A:1650:ILE:CG1	2.93	0.45
1:A:193:TYR:HE2	1:A:1946:VAL:HG11	1.79	0.45
1:A:545:LYS:HD2	1:A:546:LEU:O	2.17	0.45
1:A:1726:THR:OG1	1:A:1816:ARG:NH1	2.39	0.45
1:A:1046:ASP:OD1	1:A:1046:ASP:O	2.35	0.45
1:A:411:PHE:N	1:A:411:PHE:HD1	2.14	0.44
1:A:486:LEU:HD13	1:A:1247:TYR:CD2	2.52	0.44
1:A:691:ASP:OD1	1:A:692:GLY:N	2.45	0.44
1:A:1519:GLU:HA	1:A:1522:PHE:H	1.82	0.44
1:A:263:VAL:HG21	1:A:1961:ILE:HD13	1.99	0.44
1:A:1646:LYS:CE	1:A:1650:ILE:CD1	2.84	0.44
1:A:29:ASP:C	1:A:31:PRO:HD3	2.40	0.44
1:A:384:PRO:CD	1:A:405:LYS:HE3	2.45	0.44
1:A:971:ARG:HB2	1:A:971:ARG:NH2	2.12	0.44
1:A:1455:SER:HA	1:A:1458:PRO:CG	2.44	0.44
1:A:1542:ARG:NH2	1:A:1550:THR:H	2.05	0.44
1:A:1622:ARG:HD3	1:A:1650:ILE:HB	2.00	0.44
1:A:1790:LEU:HB3	1:A:1794:LYS:O	2.17	0.44
1:A:1874:PHE:O	1:A:1881:CYS:HB2	2.17	0.44
1:A:11:ASN:OD1	1:A:12:VAL:N	2.49	0.44
1:A:1520:VAL:HG21	1:A:1538:TRP:CD1	2.52	0.44
1:A:1672:MET:SD	1:A:1696:GLN:HB3	2.57	0.44
1:A:734:HIS:CB	1:A:737:SER:O	2.65	0.44
1:A:16:LEU:C	1:A:16:LEU:HD23	2.42	0.44
1:A:916:HIS:C	1:A:920:ARG:HD3	2.41	0.44
1:A:1190:HIS:O	1:A:1190:HIS:CD2	2.71	0.44
1:A:1333:THR:OG1	1:A:1334:LEU:N	2.51	0.44
1:A:221:LEU:HD23	1:A:221:LEU:HA	1.87	0.44
1:A:256:PHE:CE1	1:A:807:ARG:HB2	2.53	0.44
1:A:888:TRP:CD1	1:A:888:TRP:H	2.33	0.44
1:A:1290:ARG:NH1	1:A:1575:ASP:O	2.50	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:265:PHE:HE1	1:A:794:ASP:HB2	1.82	0.44
1:A:378:GLU:OE1	1:A:411:PHE:HB2	2.18	0.44
1:A:1559:GLY:C	1:A:1561:PHE:H	2.26	0.44
1:A:837:ILE:HG23	1:A:838:GLY:H	1.82	0.44
1:A:1062:VAL:C	1:A:1064:TRP:H	2.25	0.44
1:A:1270:ASP:OD2	1:A:1305:LYS:NZ	2.49	0.44
1:A:1632:VAL:HG22	1:A:1883:TRP:CD1	2.53	0.44
1:A:187:GLU:HA	1:A:190:GLU:HB2	1.98	0.43
1:A:359:GLY:HA2	1:A:363:GLU:HB2	1.99	0.43
1:A:384:PRO:CD	1:A:405:LYS:CE	2.96	0.43
1:A:672:GLU:OE1	1:A:685:LYS:NZ	2.43	0.43
1:A:1561:PHE:CE2	1:A:1567:PHE:CD1	3.00	0.43
1:A:4:GLU:CA	1:A:7:CYS:SG	3.04	0.43
1:A:606:LEU:HD23	1:A:606:LEU:HA	1.85	0.43
1:A:887:MET:HB3	1:A:888:TRP:CD1	2.54	0.43
1:A:917:GLY:HA2	1:A:920:ARG:CG	2.41	0.43
1:A:1459:ASN:CG	1:A:1460:GLN:OE1	2.61	0.43
1:A:1618:ASP:OD1	1:A:1618:ASP:N	2.50	0.43
1:A:385:ALA:HB1	1:A:390:ILE:HG13	1.99	0.43
1:A:997:LYS:HZ2	1:A:1164:GLY:HA3	1.83	0.43
1:A:1275:PHE:CE2	1:A:1277:LEU:HD21	2.48	0.43
1:A:1769:CYS:O	1:A:1773:GLY:N	2.51	0.43
1:A:95:LEU:HA	1:A:95:LEU:HD12	1.76	0.43
1:A:1633:LEU:O	1:A:1634:PHE:CD1	2.71	0.43
1:A:881:LEU:HB3	1:A:886:VAL:HG21	2.01	0.43
1:A:974:GLY:HA2	1:A:975:PRO:HD3	1.42	0.43
1:A:1694:ARG:HH22	1:A:1816:ARG:HB3	1.82	0.43
1:A:1712:ARG:HH12	1:A:1720:LYS:HE2	1.82	0.43
1:A:799:HIS:NE2	1:A:1076:THR:HB	2.34	0.43
1:A:1579:ARG:CG	1:A:1580:SER:N	2.75	0.43
1:A:1879:PRO:O	1:A:1883:TRP:N	2.51	0.43
1:A:359:GLY:HA2	1:A:363:GLU:HB3	1.99	0.43
1:A:511:SER:HA	1:A:516:GLN:HE21	1.84	0.43
1:A:707:LEU:HD23	1:A:707:LEU:HA	1.85	0.43
1:A:971:ARG:CG	1:A:971:ARG:NH2	2.76	0.43
1:A:1540:LYS:HA	1:A:1540:LYS:HD3	1.76	0.43
1:A:1541:LEU:HD12	1:A:1541:LEU:O	2.19	0.43
1:A:683:PRO:HB2	1:A:710:MET:HB2	2.01	0.43
1:A:1562:LEU:HD23	1:A:1562:LEU:C	2.44	0.43
1:A:335:TRP:HZ2	1:A:594:GLU:HB3	1.84	0.43
1:A:422:GLU:O	1:A:425:LEU:HG	2.18	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:805:PHE:CE2	1:A:1162:LEU:HD13	2.53	0.43
1:A:997:LYS:HZ2	1:A:1164:GLY:CA	2.32	0.43
1:A:1548:LEU:HD22	1:A:1549:SER:H	1.84	0.43
1:A:94:ARG:NH2	1:A:97:GLU:CD	2.76	0.43
1:A:384:PRO:HG2	1:A:405:LYS:CE	2.41	0.43
1:A:1886:LEU:HD23	1:A:1886:LEU:H	1.83	0.43
1:A:654:GLU:N	1:A:654:GLU:OE1	2.52	0.42
1:A:514:VAL:HG11	1:A:616:MET:HE2	2.00	0.42
1:A:611:ASN:OD1	1:A:611:ASN:C	2.61	0.42
1:A:762:THR:O	1:A:762:THR:CG2	2.67	0.42
1:A:1477:LEU:HD21	1:A:1590:LYS:HZ3	1.76	0.42
1:A:1551:ASP:HA	1:A:1552:PRO:HD2	0.96	0.42
1:A:1642:THR:O	1:A:1646:LYS:HB2	2.19	0.42
1:A:1868:ASN:C	1:A:1870:ASP:N	2.62	0.42
1:A:23:LEU:HD13	1:A:178:LEU:CB	2.45	0.42
1:A:297:LEU:HD12	1:A:680:LEU:HD22	2.01	0.42
1:A:1131:MET:HE3	1:A:1131:MET:HB2	1.94	0.42
1:A:1186:HIS:CE1	1:A:1191:LEU:HD11	2.53	0.42
1:A:1299:THR:O	1:A:1300:THR:CG2	2.67	0.42
1:A:1545:PHE:C	1:A:1546:ALA:O	2.39	0.42
1:A:1703:PHE:CD1	1:A:1725:TRP:HD1	2.37	0.42
1:A:1529:LEU:HD22	1:A:1533:LEU:HB2	1.98	0.42
1:A:1750:ILE:HD12	1:A:1790:LEU:HD21	2.02	0.42
1:A:3:LEU:O	1:A:4:GLU:C	2.62	0.42
1:A:145:LYS:HD2	1:A:145:LYS:HA	1.78	0.42
1:A:239:GLU:CD	1:A:240:ARG:N	2.64	0.42
1:A:378:GLU:OE1	1:A:411:PHE:CB	2.68	0.42
1:A:1002:LEU:HD23	1:A:1002:LEU:HA	1.81	0.42
1:A:1004:TRP:HD1	1:A:1005:PHE:CE1	2.36	0.42
1:A:1672:MET:SD	1:A:1696:GLN:HG2	2.60	0.42
1:A:933:GLN:NE2	1:A:1082:ILE:O	2.52	0.42
1:A:1110:TYR:HE2	1:A:1144:ARG:HG2	1.84	0.42
1:A:1263:GLY:O	1:A:1266:ILE:HG22	2.20	0.42
1:A:1441:LEU:HD12	1:A:1441:LEU:HA	1.96	0.42
1:A:1886:LEU:O	1:A:1886:LEU:HG	2.20	0.42
1:A:181:MET:O	1:A:183:LEU:CD2	2.68	0.42
1:A:356:MET:HE2	1:A:356:MET:HB2	1.64	0.42
1:A:799:HIS:CE1	1:A:1076:THR:HB	2.55	0.42
1:A:997:LYS:HZ2	1:A:1164:GLY:H	1.68	0.42
1:A:1269:PRO:HB2	1:A:1275:PHE:CE2	2.53	0.42
1:A:1460:GLN:NE2	1:A:1460:GLN:C	2.70	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1534:LEU:C	1:A:1534:LEU:CD1	2.85	0.42
1:A:1937:LEU:CD1	1:A:2028:LYS:HZ1	2.33	0.42
1:A:1455:SER:CA	1:A:1458:PRO:CG	2.98	0.42
1:A:1460:GLN:NE2	1:A:1460:GLN:N	2.68	0.42
1:A:1632:VAL:HG12	1:A:1633:LEU:N	2.35	0.42
1:A:1797:PRO:O	1:A:1798:ALA:C	2.52	0.42
1:A:1823:GLU:O	1:A:1837:VAL:HG23	2.19	0.42
1:A:523:CYS:SG	1:A:546:LEU:HB3	2.60	0.42
1:A:811:SER:O	1:A:811:SER:OG	2.37	0.42
1:A:888:TRP:O	1:A:890:ILE:N	2.50	0.42
1:A:1066:ASP:OD1	1:A:1066:ASP:C	2.61	0.42
1:A:1528:LYS:CD	1:A:1528:LYS:N	2.76	0.42
1:A:1912:ASN:ND2	1:A:1919:PHE:CE1	2.82	0.42
1:A:468:LEU:HD22	1:A:514:VAL:HG22	2.02	0.41
1:A:1024:LYS:HB3	1:A:1024:LYS:HE3	1.65	0.41
1:A:1046:ASP:C	1:A:1048:PHE:N	2.78	0.41
1:A:1290:ARG:NH2	1:A:1576:ALA:HB3	2.34	0.41
1:A:1545:PHE:O	1:A:1548:LEU:CB	2.68	0.41
1:A:1589:LYS:O	1:A:1592:GLY:HA3	2.20	0.41
1:A:178:LEU:HD12	1:A:179:SER:N	2.34	0.41
1:A:1524:LEU:HD12	1:A:1526:ARG:CZ	2.50	0.41
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1567:PHE:CD1	3.08	0.41
1:A:1816:ARG:HD3	1:A:1816:ARG:HA	1.89	0.41
1:A:1910:ILE:HG23	1:A:1919:PHE:CZ	2.55	0.41
1:A:87:LEU:CD1	1:A:88:SER:N	2.81	0.41
1:A:997:LYS:HZ3	1:A:1090:LEU:HD21	1.86	0.41
1:A:1055:ALA:CB	1:A:1062:VAL:HG21	2.50	0.41
1:A:86:GLY:O	1:A:89:LYS:CG	2.48	0.41
1:A:250:ILE:O	1:A:250:ILE:HG22	2.21	0.41
1:A:1302:LEU:HD12	1:A:1304:ARG:H	1.85	0.41
1:A:1542:ARG:HD3	1:A:1548:LEU:O	2.21	0.41
1:A:1791:SER:HB3	1:A:1796:LYS:NZ	2.34	0.41
1:A:206:ARG:HD3	1:A:207:SER:N	2.35	0.41
1:A:1067:LYS:CD	1:A:1068:GLY:N	2.81	0.41
1:A:1400:SER:CB	1:A:1407:ARG:CZ	2.97	0.41
1:A:28:TYR:HB2	1:A:189:GLU:OE2	2.20	0.41
1:A:99:PHE:N	1:A:100:PRO:HD3	2.29	0.41
1:A:109:MET:HE3	1:A:109:MET:HB3	1.83	0.41
1:A:470:ALA:O	1:A:513:ASN:HB2	2.21	0.41
1:A:78:ILE:HD12	1:A:78:ILE:H	1.86	0.41
1:A:687:LEU:C	1:A:689:LYS:H	2.29	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1929:LYS:HD2	1:A:2009:TYR:HD1	1.86	0.41
1:A:253:LEU:O	1:A:257:LEU:HG	2.21	0.41
1:A:854:PHE:HD1	1:A:907:ARG:HB3	1.86	0.41
1:A:1136:PRO:CG	1:A:1982:PHE:HB2	2.42	0.41
1:A:1329:THR:OG1	1:A:1569:ASN:O	2.28	0.41
1:A:1522:PHE:C	1:A:1524:LEU:N	2.76	0.41
1:A:1574:VAL:O	1:A:1575:ASP:O	2.38	0.41
1:A:1965:ASP:OD1	1:A:1965:ASP:N	2.52	0.41
1:A:495:ASP:OD1	1:A:500:HIS:NE2	2.54	0.41
1:A:510:LEU:HA	1:A:515:VAL:HG21	2.03	0.41
1:A:696:THR:H	1:A:699:GLN:NE2	2.19	0.41
1:A:718:PHE:CE1	1:A:732:THR:HA	2.56	0.41
1:A:756:LYS:HA	1:A:915:GLN:HG2	2.03	0.41
1:A:852:SER:HB3	1:A:924:VAL:HG21	2.03	0.41
1:A:912:LYS:NZ	1:A:920:ARG:NH2	2.68	0.41
1:A:926:ASP:OD1	1:A:926:ASP:C	2.64	0.41
1:A:1190:HIS:CD2	1:A:1190:HIS:C	2.96	0.41
1:A:1531:PRO:HA	1:A:1534:LEU:HD12	2.01	0.41
1:A:1559:GLY:C	1:A:1561:PHE:N	2.79	0.41
1:A:1626:ILE:O	1:A:1630:LYS:HG2	2.21	0.41
1:A:1731:ASP:OD1	1:A:1731:ASP:C	2.64	0.41
1:A:1988:LEU:O	1:A:1989:TRP:C	2.63	0.41
1:A:146:ILE:O	1:A:150:ARG:HB2	2.20	0.41
1:A:612:LEU:N	1:A:613:PRO:CD	2.84	0.41
1:A:863:GLU:OE1	1:A:864:VAL:CG2	2.46	0.41
1:A:1529:LEU:CB	1:A:1534:LEU:CA	2.97	0.41
1:A:1532:ARG:O	1:A:1536:GLU:HB3	2.16	0.41
1:A:369:LEU:C	1:A:369:LEU:CD2	2.94	0.40
1:A:694:LEU:HD21	1:A:700:VAL:HG22	2.03	0.40
1:A:835:ARG:HG2	1:A:840:LYS:NZ	2.36	0.40
1:A:1541:LEU:HD13	1:A:1541:LEU:HA	1.82	0.40
1:A:547:LYS:HE2	1:A:1253:CYS:HA	2.04	0.40
1:A:1071:TYR:HD1	1:A:1071:TYR:O	2.04	0.40
1:A:1729:MET:HE3	1:A:1729:MET:HB2	1.89	0.40
1:A:2030:GLY:O	1:A:2034:LEU:HG	2.21	0.40
1:A:106:SER:HB3	1:A:156:ARG:HH22	1.85	0.40
1:A:864:VAL:O	1:A:864:VAL:HG12	2.20	0.40
1:A:1062:VAL:C	1:A:1064:TRP:N	2.80	0.40
1:A:724:GLU:HA	1:A:1985:ALA:HB3	2.04	0.40
1:A:1188:HIS:ND1	1:A:1989:TRP:HD1	2.19	0.40
1:A:1302:LEU:HG	1:A:1303:GLY:H	1.85	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1556:LEU:CD2	1:A:1564:HIS:CG	3.02	0.40
1:A:1584:LEU:HB3	1:A:1585:GLY:H	1.36	0.40
1:A:347:LYS:CG	1:A:348:THR:N	2.85	0.40
1:A:371:ASP:O	1:A:376:ASN:HB3	2.20	0.40
1:A:476:ASP:OD1	1:A:476:ASP:N	2.55	0.40
1:A:663:ILE:HD11	1:A:702:LEU:HD13	2.03	0.40
1:A:1210:ALA:HB3	1:A:1213:SER:HB3	2.03	0.40
1:A:1219:SER:O	1:A:1223:THR:HG23	2.22	0.40
1:A:1594:VAL:N	1:A:1595:THR:HG22	2.36	0.40

There are no symmetry-related clashes.

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 PDB entries followed by that with respect to all EM entries.

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	1832/2109 (87%)	1586 (87%)	209 (11%)	37 (2%)	6 25

All (37) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	163	PRO
1	A	356	MET
1	A	978	ILE
1	A	1424	SER
1	A	1426	SER
1	A	1433	THR
1	A	1560	PRO
1	A	1568	ARG
1	A	1575	ASP
1	A	1591	SER
1	A	1799	SER
1	A	2	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	15	GLY
1	A	95	LEU
1	A	411	PHE
1	A	1576	ALA
1	A	1578	SER
1	A	1590	LYS
1	A	352	PHE
1	A	888	TRP
1	A	974	GLY
1	A	1869	ARG
1	A	1402	GLY
1	A	1403	HIS
1	A	1588	VAL
1	A	31	PRO
1	A	103	HIS
1	A	337	PRO
1	A	977	SER
1	A	1581	VAL
1	A	722	PRO
1	A	1007	PRO
1	A	413	PRO
1	A	677	PRO
1	A	1797	PRO
1	A	1392	SER
1	A	1404	VAL

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all EM entries.

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	1635/1848 (88%)	1527 (93%)	108 (7%)	14 39

All (108) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	7	CYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	13	GLU
1	A	14	ASN
1	A	18	LEU
1	A	25	ASP
1	A	27	ILE
1	A	30	ARG
1	A	87	LEU
1	A	89	LYS
1	A	101	ILE
1	A	109	MET
1	A	155	ARG
1	A	161	GLU
1	A	181	MET
1	A	183	LEU
1	A	189	GLU
1	A	212	ILE
1	A	239	GLU
1	A	298	GLU
1	A	318	ARG
1	A	336	LEU
1	A	348	THR
1	A	349	ASP
1	A	356	MET
1	A	363	GLU
1	A	364	LEU
1	A	367	LYS
1	A	369	LEU
1	A	382	SER
1	A	387	GLU
1	A	388	LEU
1	A	405	LYS
1	A	407	THR
1	A	408	TYR
1	A	411	PHE
1	A	421	GLN
1	A	543	ILE
1	A	595	LEU
1	A	699	GLN
1	A	842	ILE
1	A	888	TRP
1	A	913	LYS
1	A	915	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	920	ARG
1	A	921	GLU
1	A	949	HIS
1	A	971	ARG
1	A	972	SER
1	A	973	LEU
1	A	1024	LYS
1	A	1060	ARG
1	A	1061	GLU
1	A	1062	VAL
1	A	1064	TRP
1	A	1067	LYS
1	A	1071	TYR
1	A	1107	LYS
1	A	1134	ILE
1	A	1135	ARG
1	A	1137	LYS
1	A	1140	MET
1	A	1180	GLU
1	A	1190	HIS
1	A	1191	LEU
1	A	1207	GLU
1	A	1399	LEU
1	A	1427	ILE
1	A	1428	HIS
1	A	1433	THR
1	A	1460	GLN
1	A	1477	LEU
1	A	1514	GLU
1	A	1521	TRP
1	A	1526	ARG
1	A	1527	THR
1	A	1528	LYS
1	A	1529	LEU
1	A	1534	LEU
1	A	1535	LYS
1	A	1537	GLU
1	A	1538	TRP
1	A	1539	ASP
1	A	1540	LYS
1	A	1541	LEU
1	A	1542	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1544	SER
1	A	1545	PHE
1	A	1548	LEU
1	A	1565	VAL
1	A	1566	GLN
1	A	1584	LEU
1	A	1588	VAL
1	A	1589	LYS
1	A	1590	LYS
1	A	1595	THR
1	A	1649	MET
1	A	1650	ILE
1	A	1652	GLU
1	A	1657	LEU
1	A	1694	ARG
1	A	1790	LEU
1	A	1791	SER
1	A	1795	ILE
1	A	1796	LYS
1	A	1810	GLU
1	A	1910	ILE
1	A	1911	ASP
1	A	1976	LEU

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (15) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	185	GLN
1	A	237	ASN
1	A	247	ASN
1	A	376	ASN
1	A	421	GLN
1	A	516	GLN
1	A	611	ASN
1	A	618	ASN
1	A	895	GLN
1	A	954	ASN
1	A	1057	HIS
1	A	1204	GLN
1	A	1403	HIS
1	A	1457	ASN
1	A	1564	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 oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 1 ligands modelled in this entry, 1 is 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](#)

There are no chain breaks in this entry.

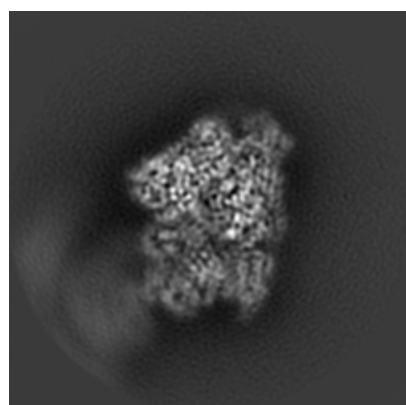
6 Map visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-0828. These allow visual inspection of the internal detail of the map and identification of artifacts.

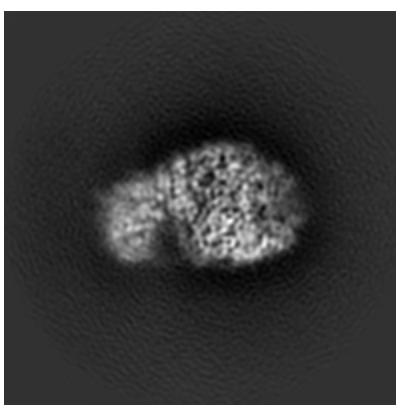
No raw map or half-maps were deposited for this entry and therefore no images, graphs, etc. pertaining to the raw map can be shown.

6.1 Orthogonal projections [i](#)

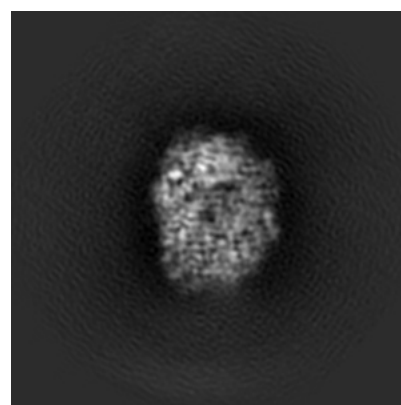
6.1.1 Primary map



X



Y

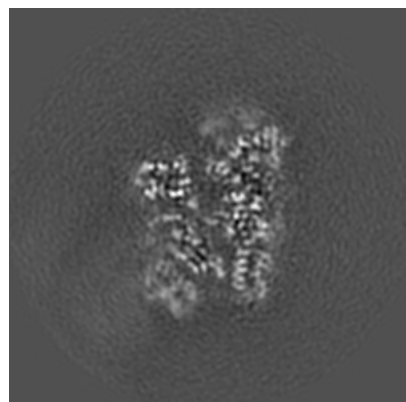


Z

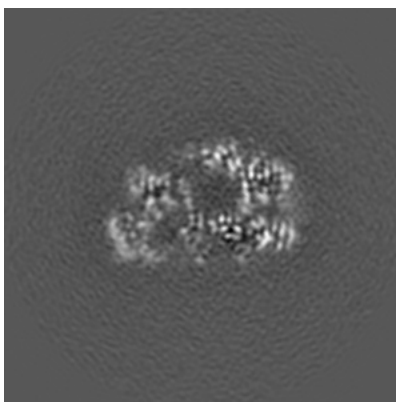
The images above show the map projected in three orthogonal directions.

6.2 Central slices [i](#)

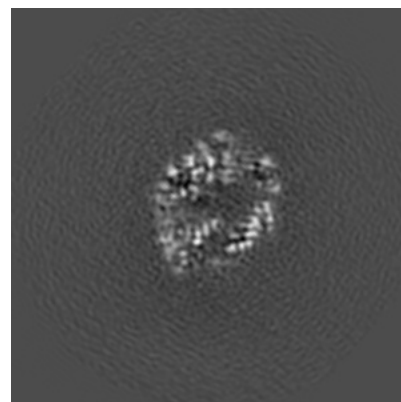
6.2.1 Primary map



X Index: 110



Y Index: 110

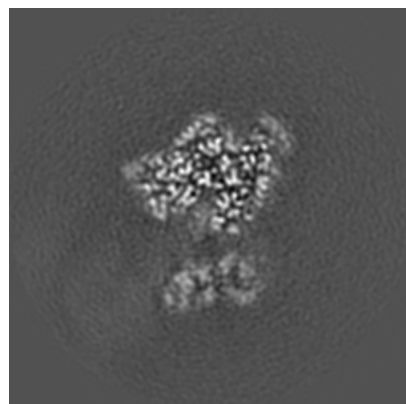


Z Index: 110

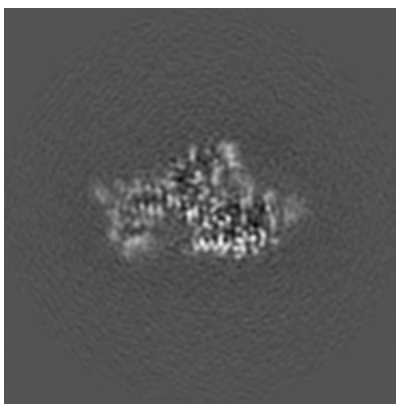
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

6.3 Largest variance slices [i](#)

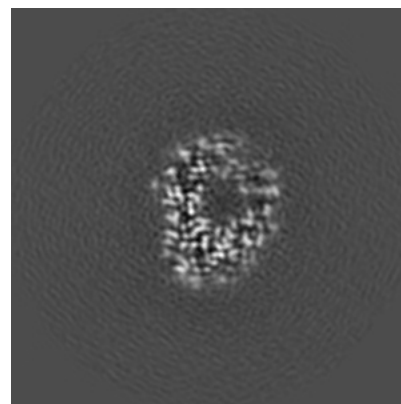
6.3.1 Primary map



X Index: 94



Y Index: 129

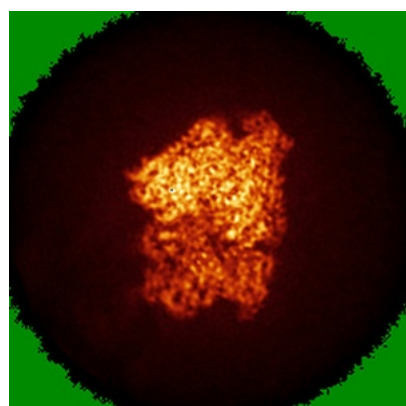


Z Index: 121

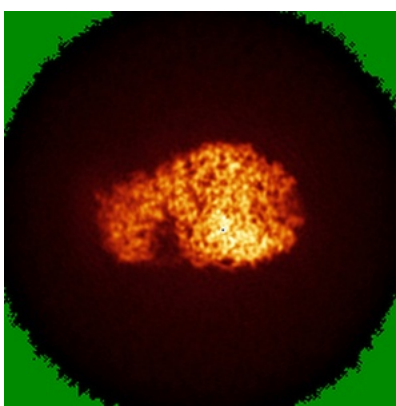
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

6.4 Orthogonal standard-deviation projections (False-color) [i](#)

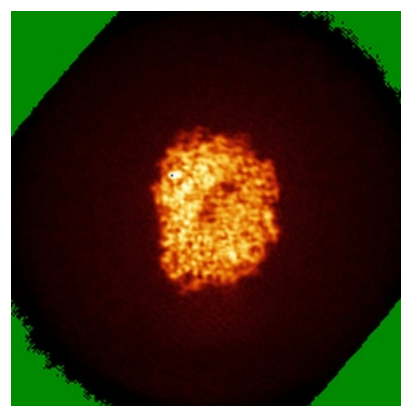
6.4.1 Primary map



X



Y

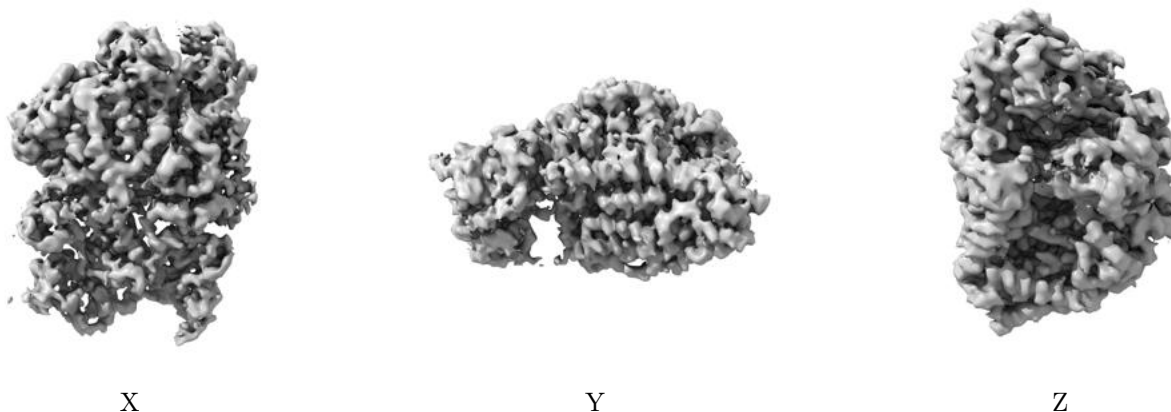


Z

The images above show the map standard deviation projections with false color in three orthogonal directions. Minimum values are shown in green, max in blue, and dark to light orange shades represent small to large values respectively.

6.5 Orthogonal surface views [i](#)

6.5.1 Primary map



The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.0085. These images, in conjunction with the slice images, may facilitate assessment of whether an appropriate contour level has been provided.

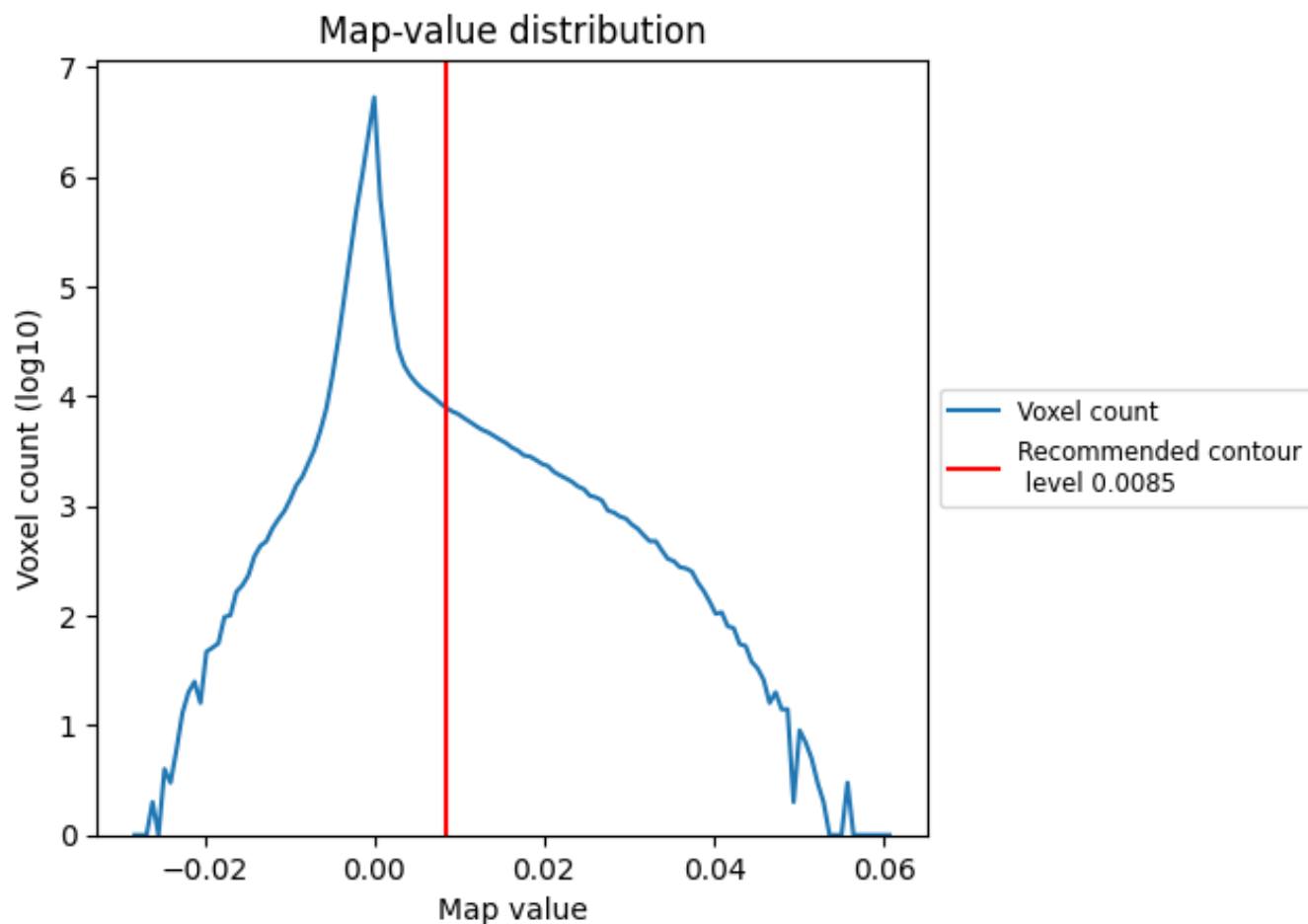
6.6 Mask visualisation [i](#)

This section was not generated. No masks/segmentation were deposited.

7 Map analysis [i](#)

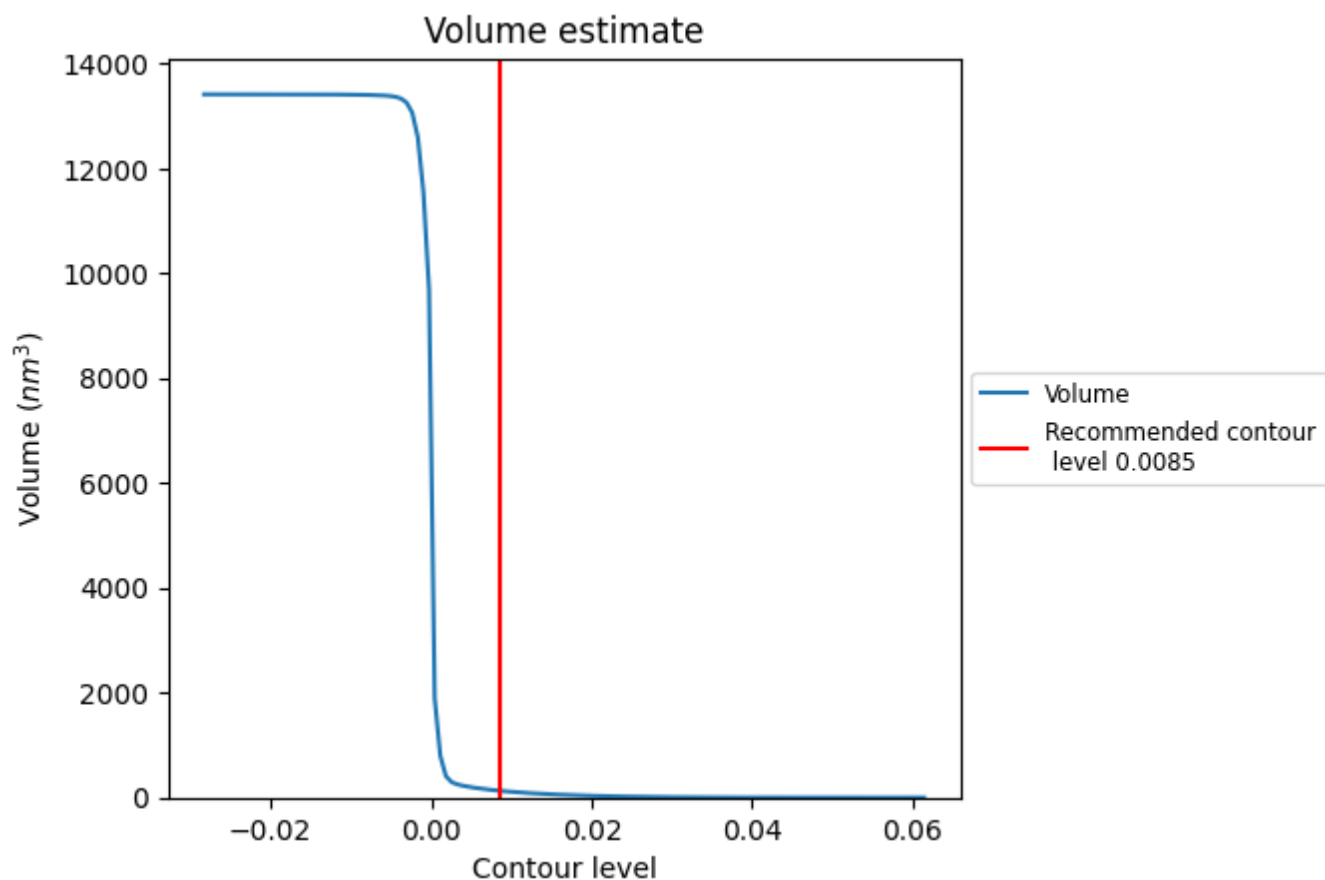
This section contains the results of statistical analysis of the map.

7.1 Map-value distribution [i](#)



The map-value distribution is plotted in 128 intervals along the x-axis. The y-axis is logarithmic. A spike in this graph at zero usually indicates that the volume has been masked.

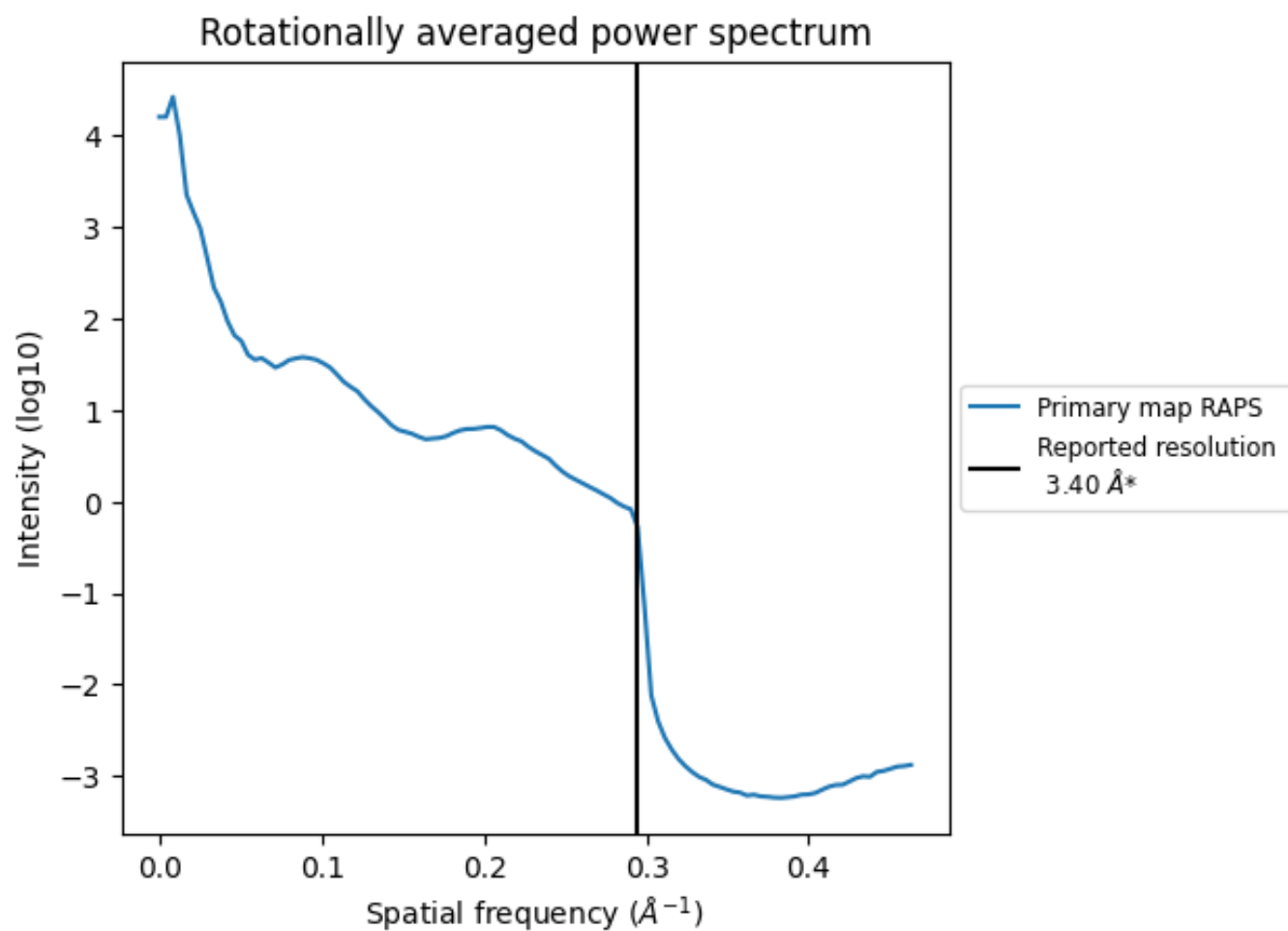
7.2 Volume estimate [i](#)



The volume at the recommended contour level is 130 nm³; this corresponds to an approximate mass of 118 kDa.

The volume estimate graph shows how the enclosed volume varies with the contour level. The recommended contour level is shown as a vertical line and the intersection between the line and the curve gives the volume of the enclosed surface at the given level.

7.3 Rotationally averaged power spectrum ⓘ



*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.294 Å⁻¹

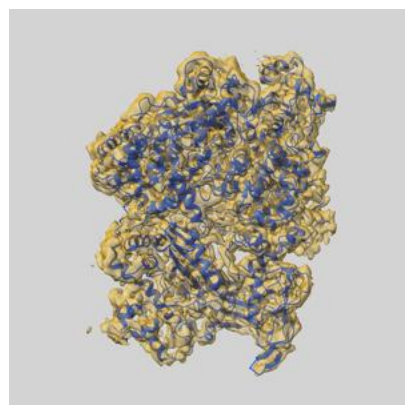
8 Fourier-Shell correlation

This section was not generated. No FSC curve or half-maps provided.

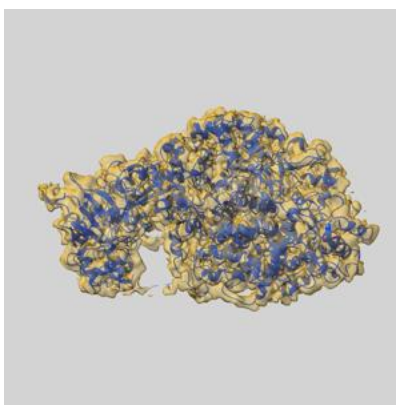
9 Map-model fit [i](#)

This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-0828 and PDB model 6L42. Per-residue inclusion information can be found in section 3 on page 5.

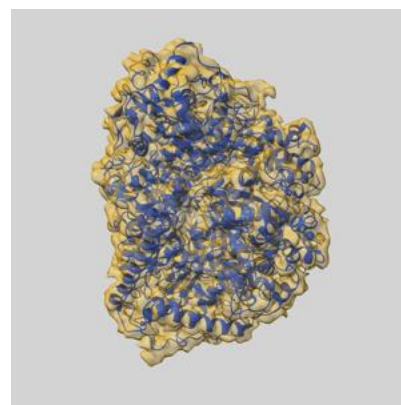
9.1 Map-model overlay [i](#)



X



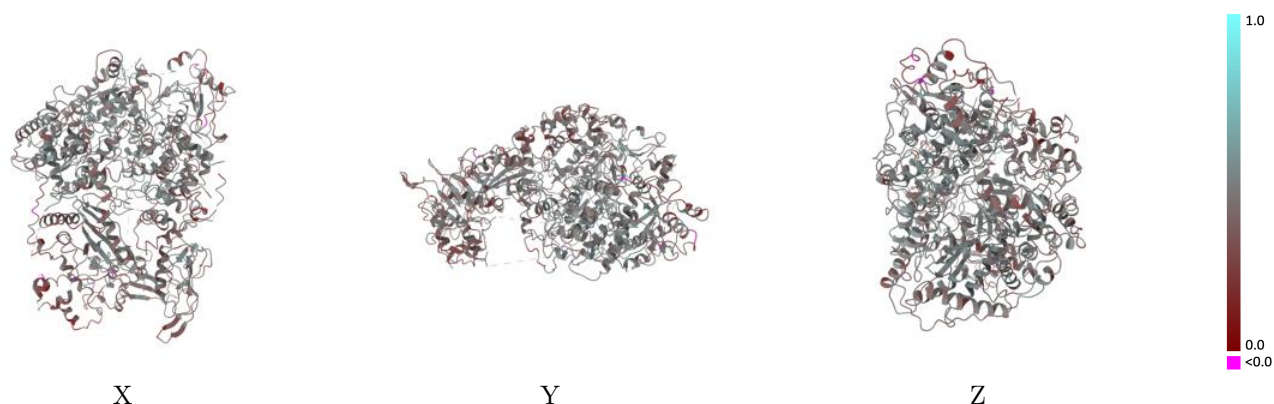
Y



Z

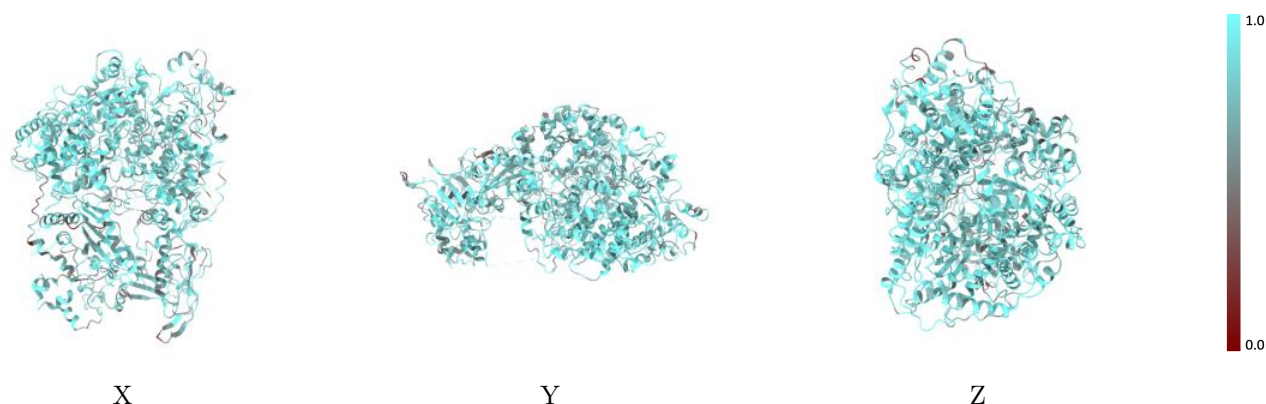
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.0085 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

9.2 Q-score mapped to coordinate model [i](#)



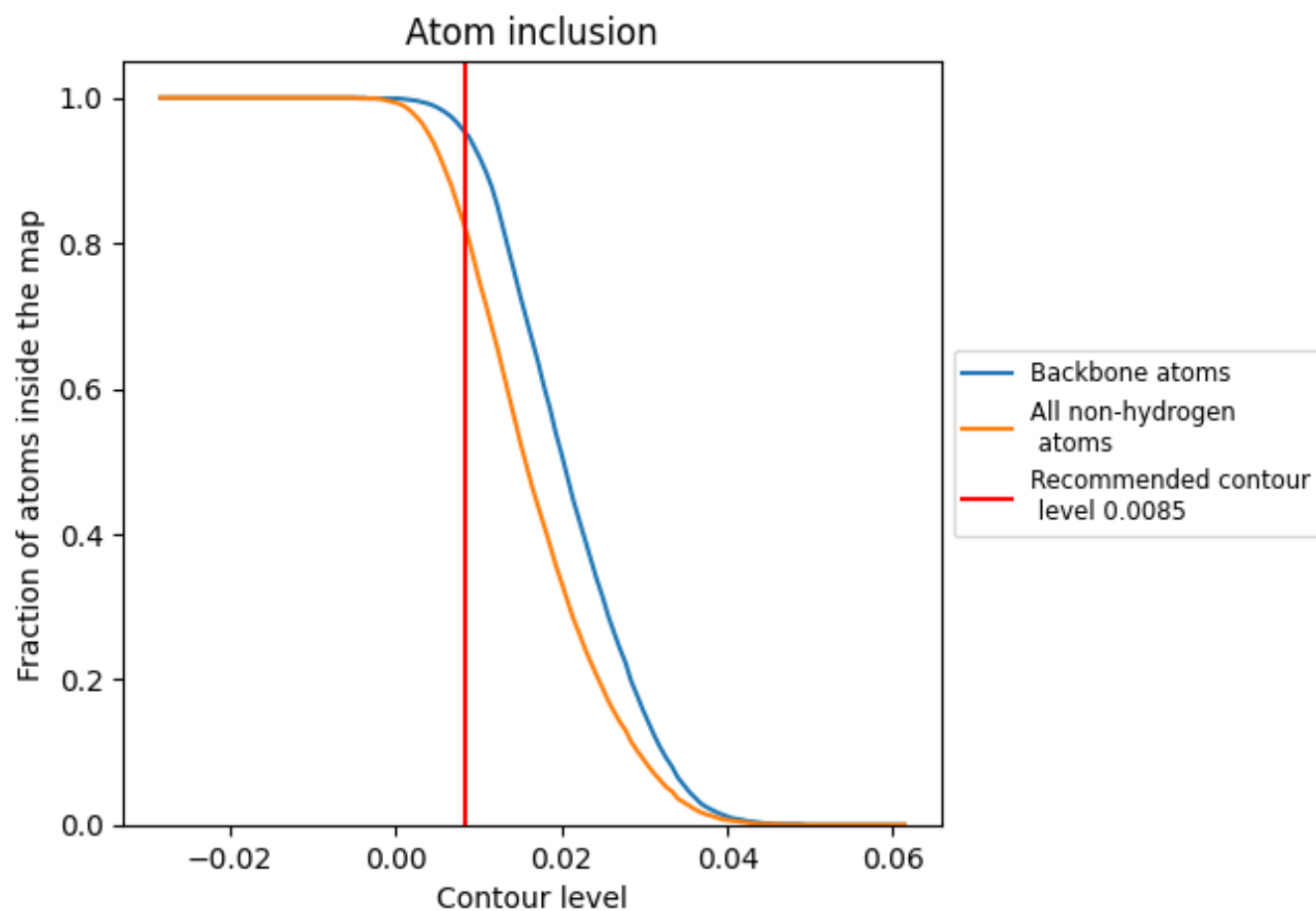
The images above show the model with each residue coloured according to its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions at which atoms can be resolved. Low Q-score values may therefore be expected for many entries.

9.3 Atom inclusion mapped to coordinate model [i](#)



The images above show the model with each residue coloured according to its atom inclusion. This shows to what extent they are inside the map at the recommended contour level (0.0085).

9.4 Atom inclusion [i](#)



At the recommended contour level, 95% of all backbone atoms, 82% of all non-hydrogen atoms, are inside the map.

9.5 Map-model fit summary ⓘ

The table lists the average atom inclusion at the recommended contour level (0.0085) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	<div><div></div>0.8170</div>	<div><div></div>0.4320</div>
A	<div><div></div>0.8170</div>	<div><div></div>0.4320</div>

