



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Feb 1, 2016 – 10:10 AM GMT

PDB ID : 3L5H
Title : Crystal structure of the full ectodomain of human gp130: New insights into the molecular assembly of receptor complexes
Authors : Xu, Y.; Garrett, T.P.J.; Zhang, J.G.
Deposited on : 2009-12-21
Resolution : 3.60 Å(reported)

This is a Full wwPDB X-ray Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.
We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org
A user guide is available at
<http://wwpdb.org/validation/2016/XrayValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

MolProbity : 4.02b-467
Mogul : 1.7 (RC4), CSD as536be (2015)
Xtriage (Phenix) : 1.9-1692
EDS : rb-20026688
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)
Refmac : 5.8.0135
CCP4 : 6.5.0
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : trunk26865

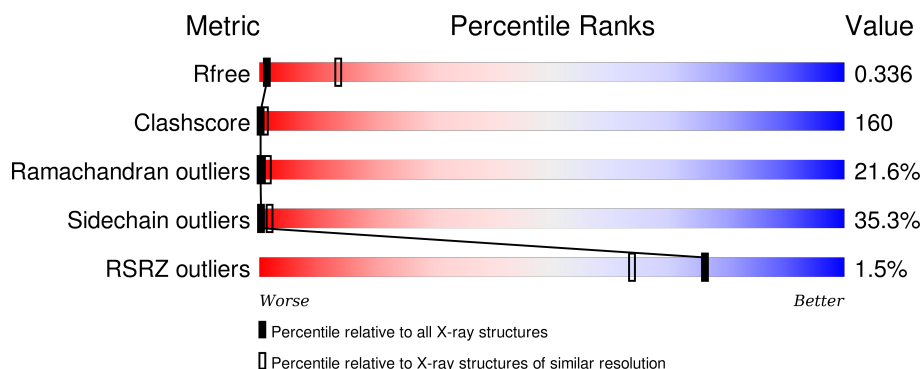
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 3.60 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
R_{free}	91344	1408 (3.80-3.40)
Clashscore	102246	1010 (3.74-3.46)
Ramachandran outliers	100387	1007 (3.76-3.44)
Sidechain outliers	100360	1007 (3.76-3.44)
RSRZ outliers	91569	1003 (3.78-3.42)

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	589	

The following table lists non-polymeric compounds, carbohydrate monomers and non-standard residues in protein, DNA, RNA chains that are outliers for geometric or electron-density-fit criteria:

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
2	SO4	A	592	-	-	-	X

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
3	NAG	A	599	X	-	X	-
3	NAG	A	610	X	-	X	-
3	NAG	A	611	-	-	X	-
4	NAG	A	596	-	-	X	-
4	BMA	A	597	-	-	X	-
5	NAG	A	601	X	-	-	-
5	NAG	A	602	-	-	X	-
7	NAG	A	604	-	-	X	-

2 Entry composition [i](#)

There are 7 unique types of molecules in this entry. The entry contains 4701 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

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

- Molecule 1 is a protein called Interleukin-6 receptor subunit beta.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	585	Total	C	N	O	S	0	0	0
			4439	2815	735	869	20			

- Molecule 2 is SULFATE ION (three-letter code: SO4) (formula: O₄S).



Mol	Chain	Residues	Atoms			ZeroOcc	AltConf
2	A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		
2	A	1	Total	O	S	0	0
			5	4	1		

- Molecule 3 is a polymer of unknown type called SUGAR (2-MER).

Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
3	A	2	Total	C	N	O	0	0
			28	16	2	10		
3	A	2	Total	C	N	O	0	0
			28	16	2	10		
3	A	2	Total	C	N	O	5	0
			28	16	2	10		

- Molecule 4 is a polymer of unknown type called SUGAR (4-MER).

Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
4	A	4	Total	C	N	O	0	0
			50	28	2	20		

- Molecule 5 is a polymer of unknown type called SUGAR (3-MER).

Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
5	A	3	Total	C	N	O	0	0
			39	22	2	15		

- Molecule 6 is a polymer of unknown type called SUGAR (4-MER).

Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
6	A	4	Total	C	N	O	0	0
			50	28	2	20		

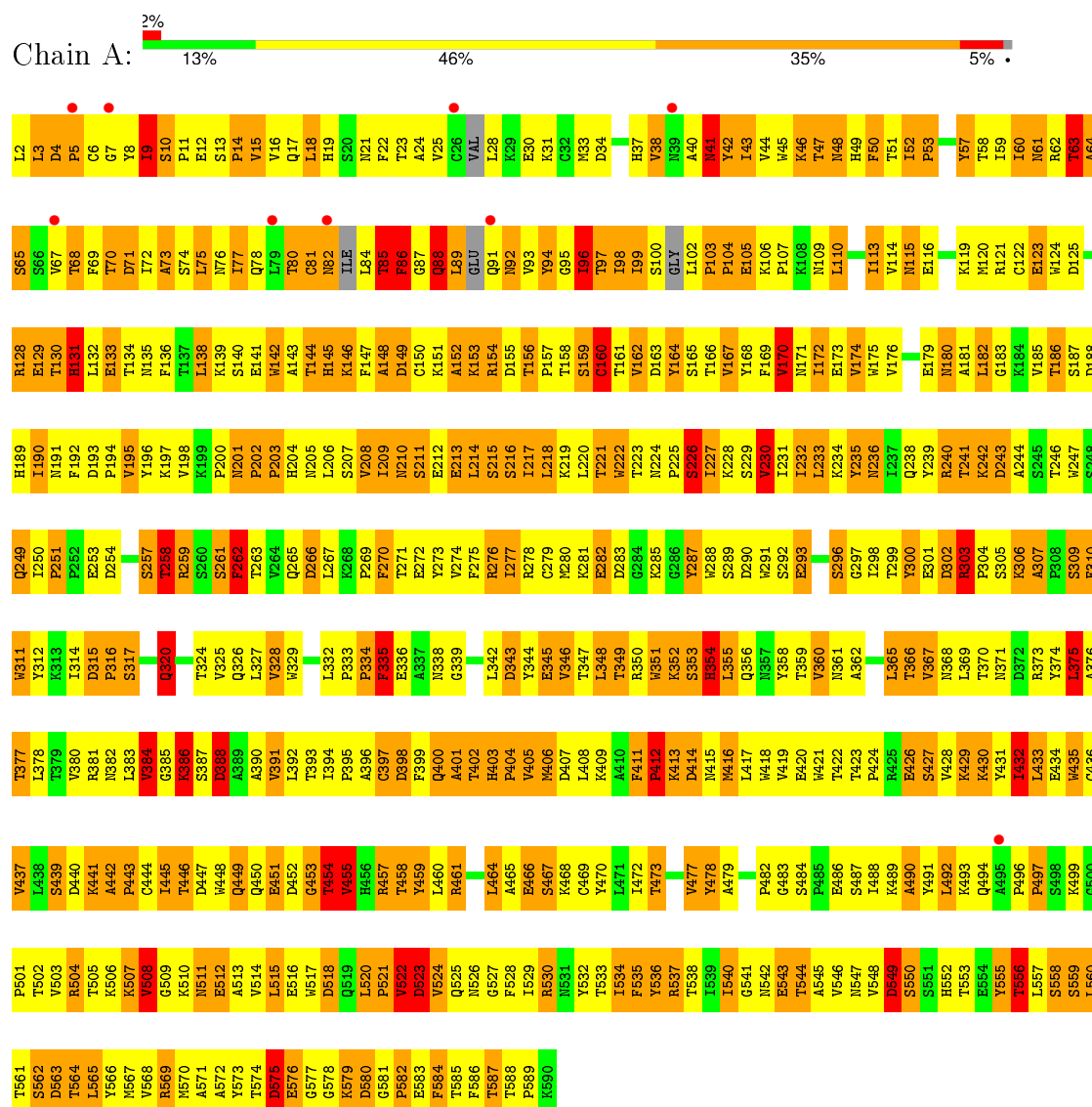
- Molecule 7 is a polymer of unknown type called SUGAR (2-MER).

Mol	Chain	Residues	Atoms				ZeroOcc	AltConf
7	A	2	Total	C	N	O	0	0
			24	14	1	9		

3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA and DNA chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of errors displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry and electron density. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. A red dot above a residue indicates a poor fit to the electron density ($\text{RSRZ} > 2$). Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

- Molecule 1: Interleukin-6 receptor subunit beta



4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 1 21 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	89.00 Å 51.82 Å 167.16 Å 90.00° 102.17° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	44.43 – 3.60 43.76 – 3.60	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.7 (44.43-3.60) 99.7 (43.76-3.60)	Depositor EDS
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	0.15	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	1.70 (at 3.57 Å)	Xtriage
Refinement program	REFMAC 5.5.0066	Depositor
R, R_{free}	0.263 , 0.335 0.255 , 0.336	Depositor DCC
R_{free} test set	905 reflections (5.38%)	DCC
Wilson B-factor (Å ²)	118.0	Xtriage
Anisotropy	0.107	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.29 , 122.6	EDS
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.41$, $\langle L^2 \rangle = 0.24$	Xtriage
Outliers	0 of 17736 reflections	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.87	EDS
Total number of atoms	4701	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	94.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 4.69% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

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

5 Model quality [i](#)

5.1 Standard geometry [i](#)

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: FUC, BMA, SO4, NDG, NAG

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	0.81	2/4552 (0.0%)	0.98	5/6251 (0.1%)

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	3
3	A	2	0
5	A	1	0
All	All	3	3

All (2) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	549	ASP	CB-CG	7.03	1.66	1.51
1	A	131	HIS	ND1-CE1	5.43	1.48	1.34

All (5) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	365	LEU	CA-CB-CG	-7.53	97.98	115.30
1	A	461	ARG	NE-CZ-NH1	-6.47	117.07	120.30
1	A	131	HIS	ND1-CG-CD2	-5.47	98.34	106.00
1	A	549	ASP	CB-CG-OD1	5.24	123.01	118.30
1	A	73	ALA	N-CA-C	5.21	125.06	111.00

All (3) chirality outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atom
3	A	599	NAG	C1
5	A	601	NAG	C1
3	A	610	NAG	C1

All (3) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	211	SER	Peptide
1	A	214	LEU	Peptide
1	A	48	ASN	Peptide

5.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	4439	0	4067	1392	1
2	A	15	0	0	0	1
3	A	84	0	74	30	0
4	A	50	0	43	11	0
5	A	39	0	34	12	0
6	A	50	0	43	9	0
7	A	24	0	22	7	0
All	All	4701	0	4283	1438	1

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 160.

All (1438) 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:491:TYR:CE2	1:A:527:GLY:HA2	1.26	1.69
1:A:63:THR:CG2	3:A:599:NAG:H82	1.27	1.63
1:A:491:TYR:HE2	1:A:527:GLY:CA	1.12	1.60
1:A:15:VAL:HA	1:A:99:ILE:CD1	1.16	1.59
1:A:15:VAL:CA	1:A:99:ILE:HD11	1.17	1.58
1:A:63:THR:CG2	3:A:599:NAG:C8	1.81	1.53
1:A:14:PRO:CG	1:A:98:ILE:HA	1.37	1.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:134:THR:HG22	1:A:180:ASN:CB	1.40	1.51
1:A:469:CYS:HB2	1:A:491:TYR:CE1	1.46	1.47
1:A:63:THR:HG21	3:A:599:NAG:C8	1.41	1.45
1:A:85:THR:HB	1:A:89:LEU:CD1	1.45	1.45
1:A:515:LEU:CD1	1:A:557:LEU:CD1	1.96	1.44
1:A:459:TYR:CZ	1:A:461:ARG:HD3	1.53	1.43
1:A:134:THR:CG2	1:A:180:ASN:HB3	1.49	1.43
1:A:43:ILE:CD1	1:A:44:VAL:N	1.80	1.43
3:A:599:NAG:O6	3:A:599:NAG:C6	1.67	1.41
1:A:102:LEU:CD1	1:A:130:THR:O	1.67	1.41
1:A:9:ILE:CD1	1:A:96:ILE:HG12	1.48	1.39
1:A:521:PRO:HD2	1:A:524:VAL:CG2	1.52	1.39
1:A:515:LEU:CD1	1:A:557:LEU:HD13	1.50	1.39
1:A:9:ILE:HD12	1:A:96:ILE:CG1	1.50	1.38
1:A:416:MET:HA	1:A:416:MET:CE	1.52	1.38
1:A:530:ARG:CG	6:A:606:NAG:H62	1.54	1.37
1:A:530:ARG:HG3	6:A:606:NAG:C6	1.52	1.37
1:A:277:ILE:HD13	1:A:278:ARG:N	1.06	1.37
1:A:504:ARG:HA	1:A:584:PHE:CE1	1.58	1.36
1:A:38:VAL:CG1	1:A:86:PHE:HD2	1.38	1.35
1:A:540:ILE:CD1	1:A:540:ILE:O	1.72	1.35
1:A:51:THR:O	1:A:53:PRO:HD3	1.24	1.35
1:A:536:TYR:HD1	1:A:557:LEU:CD2	1.37	1.35
1:A:459:TYR:CE1	1:A:461:ARG:HD3	1.60	1.35
1:A:222:TRP:CD1	1:A:223:THR:N	1.94	1.33
1:A:535:PHE:HB3	1:A:545:ALA:CB	1.58	1.33
1:A:74:SER:OG	1:A:75:LEU:CD2	1.76	1.33
1:A:16:VAL:CB	1:A:99:ILE:O	1.73	1.32
1:A:507:LYS:O	1:A:508:VAL:HG22	1.27	1.32
1:A:43:ILE:HD12	1:A:43:ILE:C	1.50	1.31
1:A:536:TYR:CD1	1:A:557:LEU:CD2	2.15	1.30
1:A:277:ILE:CD1	1:A:278:ARG:N	1.96	1.29
1:A:277:ILE:HD13	1:A:277:ILE:C	1.33	1.29
1:A:52:ILE:HG22	1:A:57:TYR:CE1	1.67	1.28
1:A:142:TRP:CZ2	1:A:167:VAL:HG21	1.68	1.28
1:A:46:LYS:O	1:A:47:THR:HG23	1.33	1.28
1:A:536:TYR:CD1	1:A:557:LEU:HD23	1.69	1.28
1:A:277:ILE:HD13	1:A:278:ARG:CA	1.62	1.28
1:A:43:ILE:HD11	1:A:44:VAL:O	1.33	1.27
1:A:38:VAL:HG11	1:A:42:TYR:CB	1.63	1.26
1:A:355:LEU:N	1:A:355:LEU:CD1	1.89	1.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:75:LEU:H	1:A:75:LEU:CD2	1.46	1.26
1:A:220:LEU:O	1:A:221:THR:HG22	1.36	1.25
1:A:88:GLN:O	1:A:89:LEU:HG	1.35	1.23
1:A:270:PHE:O	1:A:270:PHE:HD1	1.22	1.23
1:A:38:VAL:HG13	1:A:86:PHE:CD2	1.72	1.23
1:A:371:ASN:HB3	1:A:397:CYS:SG	1.79	1.22
1:A:387:SER:O	1:A:388:ASP:O	1.54	1.22
1:A:311:TRP:CD1	1:A:432:ILE:HD13	1.75	1.22
1:A:80:THR:CG2	1:A:82:ASN:HD21	1.52	1.21
1:A:222:TRP:HD1	1:A:223:THR:N	1.27	1.21
1:A:536:TYR:HE2	1:A:544:THR:OG1	1.21	1.21
1:A:491:TYR:HE2	1:A:527:GLY:N	1.40	1.20
1:A:43:ILE:HD12	1:A:44:VAL:N	0.88	1.20
1:A:134:THR:CG2	1:A:180:ASN:CB	2.10	1.20
1:A:311:TRP:CD1	1:A:432:ILE:CD1	2.23	1.20
1:A:515:LEU:HD12	1:A:557:LEU:CD1	1.67	1.19
1:A:428:VAL:HG11	1:A:431:TYR:CE2	1.76	1.19
1:A:491:TYR:CE2	1:A:527:GLY:CA	1.98	1.19
1:A:543:GLU:O	1:A:544:THR:HG23	1.42	1.19
1:A:208:VAL:HG21	1:A:296:SER:O	1.04	1.19
1:A:14:PRO:HG2	1:A:98:ILE:CA	1.72	1.19
1:A:277:ILE:CD1	1:A:277:ILE:C	2.06	1.19
1:A:535:PHE:CB	1:A:545:ALA:HB2	1.72	1.18
1:A:416:MET:CA	1:A:416:MET:HE3	1.70	1.18
5:A:602:NAG:O3	5:A:603:BMA:H2	1.43	1.18
1:A:218:LEU:HD12	1:A:218:LEU:N	1.43	1.18
1:A:52:ILE:CG2	1:A:57:TYR:CE1	2.27	1.18
1:A:536:TYR:HD2	1:A:536:TYR:O	1.23	1.17
1:A:145:HIS:CD2	1:A:146:LYS:N	2.13	1.17
1:A:132:LEU:O	1:A:133:GLU:O	1.63	1.16
1:A:540:ILE:O	1:A:540:ILE:HD13	1.25	1.16
1:A:345:GLU:OE2	7:A:604:NAG:H82	1.46	1.15
1:A:240:ARG:HG3	1:A:240:ARG:HH11	1.11	1.15
1:A:14:PRO:CG	1:A:98:ILE:CA	2.25	1.15
1:A:355:LEU:HD12	1:A:355:LEU:N	1.13	1.15
1:A:473:THR:HG23	1:A:487:SER:OG	1.46	1.15
1:A:38:VAL:CG1	1:A:86:PHE:CD2	2.26	1.15
1:A:517:TRP:CD2	1:A:570:MET:HE3	1.82	1.14
1:A:218:LEU:CD1	1:A:218:LEU:N	2.09	1.14
1:A:128:ARG:HH11	1:A:128:ARG:CG	1.60	1.14
1:A:128:ARG:HH11	1:A:128:ARG:HG3	1.03	1.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:257:SER:O	1:A:258:THR:O	1.66	1.14
1:A:369:LEU:HD11	1:A:374:TYR:CZ	1.82	1.14
1:A:430:LYS:CD	1:A:450:GLN:HE21	1.58	1.13
1:A:459:TYR:CZ	1:A:461:ARG:CD	2.31	1.13
1:A:102:LEU:HD13	1:A:130:THR:O	0.95	1.13
1:A:536:TYR:CE2	1:A:544:THR:OG1	2.01	1.13
1:A:123:GLU:OE2	1:A:159:SER:HA	1.46	1.12
1:A:146:LYS:HD3	1:A:146:LYS:C	1.69	1.12
1:A:103:PRO:CB	1:A:104:PRO:CD	2.27	1.11
1:A:80:THR:CG2	1:A:82:ASN:ND2	2.13	1.11
1:A:16:VAL:HG12	1:A:18:LEU:CD1	1.80	1.11
1:A:405:VAL:HG22	1:A:406:MET:H	1.12	1.11
3:A:610:NAG:C3	3:A:611:NAG:O5	1.98	1.11
7:A:604:NAG:O4	7:A:605:FUC:H3	1.49	1.11
1:A:267:LEU:HD12	1:A:273:TYR:CE1	1.85	1.10
1:A:80:THR:HG22	1:A:82:ASN:ND2	1.65	1.10
1:A:43:ILE:CD1	1:A:44:VAL:O	1.99	1.10
1:A:159:SER:O	1:A:160:CYS:HB2	1.35	1.10
1:A:442:ALA:O	1:A:443:PRO:O	1.67	1.10
1:A:16:VAL:HB	1:A:99:ILE:C	1.73	1.09
1:A:63:THR:HG21	3:A:599:NAG:H81	1.22	1.09
1:A:208:VAL:CG2	1:A:296:SER:O	1.98	1.09
1:A:469:CYS:CB	1:A:491:TYR:CE1	2.34	1.09
1:A:130:THR:HG23	1:A:131:HIS:H	1.02	1.09
1:A:16:VAL:HB	1:A:99:ILE:O	0.93	1.09
1:A:85:THR:CB	1:A:89:LEU:CD1	2.30	1.09
1:A:51:THR:O	1:A:53:PRO:CD	1.99	1.09
1:A:217:ILE:C	1:A:218:LEU:HD12	1.73	1.08
1:A:530:ARG:O	1:A:550:SER:HB2	1.52	1.08
1:A:574:THR:O	1:A:575:ASP:C	1.84	1.08
1:A:103:PRO:HB3	1:A:104:PRO:HD3	1.16	1.08
1:A:555:TYR:O	1:A:556:THR:HB	1.43	1.08
1:A:521:PRO:HD2	1:A:524:VAL:HG21	1.08	1.08
1:A:314:ILE:O	1:A:314:ILE:HG13	1.48	1.08
1:A:16:VAL:HG12	1:A:18:LEU:HD12	1.29	1.08
3:A:610:NAG:H3	3:A:611:NAG:O5	1.29	1.08
1:A:333:PRO:O	1:A:335:PHE:N	1.86	1.08
1:A:16:VAL:CG1	1:A:18:LEU:HD12	1.84	1.07
1:A:63:THR:CG2	3:A:599:NAG:C7	2.32	1.07
1:A:185:VAL:HG22	1:A:186:THR:N	1.59	1.07
1:A:536:TYR:HD1	1:A:557:LEU:HD21	0.95	1.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:401:ALA:HB1	1:A:484:SER:HB3	1.17	1.07
1:A:565:LEU:HD13	1:A:566:TYR:N	1.68	1.07
1:A:496:PRO:O	1:A:497:PRO:O	1.72	1.07
1:A:238:GLN:OE1	1:A:276:ARG:NE	1.88	1.07
1:A:16:VAL:H	1:A:99:ILE:CD1	1.68	1.07
1:A:451:GLU:HA	1:A:451:GLU:OE1	1.47	1.07
1:A:418:TRP:CZ3	1:A:459:TYR:HB3	1.90	1.07
1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:HD23	1.65	1.07
1:A:18:LEU:O	1:A:19:HIS:ND1	1.85	1.06
5:A:602:NAG:H2	5:A:602:NAG:H62	1.10	1.06
1:A:556:THR:O	1:A:556:THR:HG23	1.54	1.06
1:A:277:ILE:CD1	1:A:278:ARG:CA	2.29	1.06
1:A:63:THR:HG23	3:A:599:NAG:C8	1.55	1.06
1:A:335:PHE:CE2	1:A:336:GLU:HG3	1.89	1.06
1:A:142:TRP:HZ2	1:A:167:VAL:CG2	1.69	1.06
1:A:511:ASN:O	1:A:512:GLU:HB3	1.51	1.05
1:A:103:PRO:CB	1:A:104:PRO:HD3	1.82	1.05
1:A:14:PRO:O	1:A:15:VAL:HG13	1.55	1.05
1:A:515:LEU:HD11	1:A:557:LEU:HD13	1.30	1.05
1:A:348:LEU:CD2	1:A:376:ALA:HA	1.86	1.05
1:A:43:ILE:HD12	1:A:44:VAL:CA	1.85	1.05
1:A:85:THR:HB	1:A:89:LEU:HD12	1.10	1.05
1:A:52:ILE:CG2	1:A:57:TYR:HE1	1.64	1.05
1:A:270:PHE:CD1	1:A:270:PHE:O	2.08	1.05
1:A:185:VAL:HG22	1:A:186:THR:H	0.89	1.05
1:A:345:GLU:OE2	7:A:604:NAG:C8	2.04	1.04
1:A:185:VAL:CG2	1:A:186:THR:H	1.67	1.04
1:A:574:THR:O	1:A:576:GLU:N	1.90	1.04
1:A:432:ILE:CG2	1:A:432:ILE:O	2.00	1.04
1:A:80:THR:HG22	1:A:82:ASN:HD21	0.90	1.04
1:A:445:ILE:H	1:A:445:ILE:HD12	1.22	1.04
1:A:63:THR:HG23	1:A:63:THR:O	1.49	1.04
1:A:15:VAL:CA	1:A:99:ILE:CD1	1.96	1.04
1:A:68:THR:O	1:A:69:PHE:HD1	1.40	1.04
1:A:64:ALA:O	1:A:65:SER:OG	1.73	1.03
1:A:234:LYS:HD3	1:A:282:GLU:O	1.55	1.03
1:A:491:TYR:CE2	1:A:527:GLY:N	2.20	1.03
1:A:536:TYR:CD2	1:A:536:TYR:O	2.11	1.03
1:A:61:ASN:O	1:A:63:THR:N	1.90	1.03
1:A:63:THR:CG2	1:A:63:THR:O	2.04	1.03
1:A:350:ARG:O	1:A:351:TRP:O	1.73	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:14:PRO:HG3	1:A:98:ILE:HA	1.42	1.02
1:A:16:VAL:N	1:A:99:ILE:CD1	2.22	1.02
1:A:536:TYR:CE1	1:A:557:LEU:HD23	1.93	1.02
1:A:536:TYR:CD1	1:A:557:LEU:HD21	1.87	1.02
1:A:74:SER:OG	1:A:75:LEU:HD23	1.59	1.02
1:A:107:PRO:HG2	1:A:187:SER:HB3	1.40	1.02
1:A:122:CYS:HB2	1:A:138:LEU:HD21	1.42	1.02
1:A:63:THR:HG21	3:A:599:NAG:C7	1.89	1.02
1:A:515:LEU:HD12	1:A:557:LEU:HD13	1.26	1.02
1:A:584:PHE:C	1:A:584:PHE:HD2	1.63	1.02
1:A:85:THR:HG22	1:A:85:THR:O	1.56	1.01
1:A:320:GLN:NE2	1:A:320:GLN:O	1.93	1.01
1:A:325:VAL:HG21	1:A:394:ILE:HD11	1.42	1.01
1:A:267:LEU:HD12	1:A:273:TYR:CZ	1.95	1.01
1:A:467:SER:HB3	1:A:526:ASN:HD22	1.23	1.01
1:A:584:PHE:HD2	1:A:585:THR:N	1.59	1.01
1:A:426:GLU:H	1:A:426:GLU:CD	1.64	1.01
1:A:87:GLY:O	1:A:88:GLN:HB2	1.58	1.00
1:A:540:ILE:O	1:A:540:ILE:HD12	1.57	1.00
1:A:568:VAL:O	1:A:583:GLU:HG2	1.58	1.00
1:A:142:TRP:CD1	1:A:172:ILE:HD11	1.96	1.00
1:A:491:TYR:CD2	1:A:527:GLY:HA2	1.96	1.00
1:A:102:LEU:HD13	1:A:131:HIS:HB2	1.43	1.00
1:A:103:PRO:HB3	1:A:104:PRO:CD	1.90	1.00
1:A:75:LEU:HD23	1:A:75:LEU:H	0.85	1.00
5:A:602:NAG:H2	5:A:602:NAG:C6	1.91	1.00
1:A:367:VAL:HG23	1:A:368:ASN:O	1.61	1.00
1:A:432:ILE:HG23	1:A:432:ILE:O	1.24	1.00
1:A:74:SER:OG	1:A:75:LEU:HD22	1.60	1.00
1:A:155:ASP:O	1:A:156:THR:HG22	1.60	1.00
1:A:354:HIS:C	1:A:355:LEU:HD12	1.82	0.99
1:A:335:PHE:CD2	1:A:335:PHE:C	2.33	0.99
3:A:600:NAG:H3	3:A:600:NAG:O7	1.61	0.99
1:A:311:TRP:NE1	1:A:432:ILE:HD13	1.78	0.99
1:A:196:TYR:O	1:A:197:LYS:HD3	1.62	0.99
1:A:359:THR:O	1:A:360:VAL:O	1.79	0.99
1:A:556:THR:O	1:A:556:THR:CG2	2.10	0.99
1:A:38:VAL:HG13	1:A:86:PHE:HD2	0.82	0.98
1:A:469:CYS:CB	1:A:491:TYR:HE1	1.74	0.98
1:A:360:VAL:CG2	1:A:365:LEU:HD13	1.93	0.98
1:A:301:GLU:O	1:A:302:ASP:CB	2.05	0.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:504:ARG:HA	1:A:584:PHE:HE1	1.18	0.98
1:A:47:THR:O	1:A:49:HIS:N	1.95	0.97
1:A:85:THR:CG2	1:A:85:THR:O	2.12	0.97
1:A:107:PRO:HG2	1:A:187:SER:CB	1.92	0.97
1:A:138:LEU:HB3	1:A:150:CYS:HB3	1.46	0.97
1:A:170:VAL:CG1	1:A:170:VAL:O	2.13	0.97
5:A:602:NAG:H62	5:A:602:NAG:C2	1.93	0.97
1:A:515:LEU:HD13	1:A:557:LEU:CD1	1.95	0.97
1:A:278:ARG:NH2	1:A:288:TRP:CD2	2.31	0.97
1:A:218:LEU:HD11	1:A:299:THR:HG22	1.45	0.97
1:A:548:VAL:CG1	1:A:552:HIS:ND1	2.28	0.96
1:A:88:GLN:O	1:A:89:LEU:CG	2.13	0.96
1:A:122:CYS:HB2	1:A:138:LEU:CD2	1.94	0.96
1:A:43:ILE:HD12	1:A:44:VAL:H	1.19	0.96
1:A:418:TRP:CH2	1:A:459:TYR:HB3	2.00	0.96
1:A:174:VAL:HG23	1:A:190:ILE:CD1	1.94	0.96
1:A:335:PHE:HD2	1:A:335:PHE:O	1.47	0.96
1:A:573:TYR:CD2	1:A:578:GLY:HA3	2.00	0.96
1:A:168:TYR:HB3	1:A:195:VAL:HB	1.47	0.96
1:A:521:PRO:CD	1:A:524:VAL:CG2	2.44	0.96
1:A:102:LEU:CD1	1:A:131:HIS:HB2	1.94	0.96
1:A:134:THR:CG2	1:A:180:ASN:HB2	1.94	0.96
1:A:521:PRO:CD	1:A:524:VAL:HG21	1.96	0.96
1:A:97:THR:O	1:A:97:THR:HG23	1.61	0.95
1:A:220:LEU:O	1:A:221:THR:CG2	2.14	0.95
1:A:311:TRP:CG	1:A:432:ILE:CD1	2.49	0.95
1:A:535:PHE:HD1	1:A:535:PHE:H	1.04	0.95
1:A:586:PHE:O	1:A:587:THR:HB	1.63	0.95
1:A:428:VAL:HG11	1:A:431:TYR:CZ	2.01	0.95
1:A:367:VAL:HG23	1:A:368:ASN:N	1.78	0.95
1:A:543:GLU:O	1:A:544:THR:CG2	2.13	0.95
1:A:49:HIS:O	1:A:50:PHE:O	1.85	0.95
1:A:401:ALA:CB	1:A:484:SER:HB3	1.97	0.95
1:A:507:LYS:O	1:A:508:VAL:CG2	2.14	0.95
1:A:16:VAL:H	1:A:99:ILE:HD12	1.33	0.94
1:A:360:VAL:HG22	1:A:365:LEU:HD13	1.49	0.94
1:A:565:LEU:HD13	1:A:566:TYR:H	1.29	0.94
1:A:301:GLU:O	1:A:302:ASP:HB3	1.67	0.94
1:A:16:VAL:N	1:A:99:ILE:HD12	1.82	0.94
1:A:517:TRP:CD2	1:A:570:MET:CE	2.50	0.94
1:A:540:ILE:CD1	1:A:540:ILE:C	2.29	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:335:PHE:HD2	1:A:335:PHE:C	1.71	0.93
1:A:81:CYS:O	1:A:81:CYS:SG	2.26	0.93
1:A:329:TRP:CG	1:A:378:LEU:HD21	2.03	0.93
1:A:411:PHE:CE2	1:A:418:TRP:HB2	2.04	0.93
1:A:170:VAL:O	1:A:170:VAL:HG12	1.69	0.93
1:A:130:THR:HG23	1:A:131:HIS:N	1.83	0.92
1:A:385:GLY:HA2	1:A:386:LYS:HB2	1.50	0.92
1:A:14:PRO:O	1:A:15:VAL:HG22	1.68	0.92
1:A:45:TRP:CD1	1:A:67:VAL:CG2	2.51	0.92
1:A:348:LEU:HD21	1:A:376:ALA:HB2	1.52	0.92
1:A:61:ASN:C	1:A:63:THR:H	1.72	0.92
1:A:240:ARG:CG	1:A:240:ARG:HH11	1.79	0.92
1:A:85:THR:CB	1:A:89:LEU:HD12	1.95	0.92
1:A:14:PRO:HG2	1:A:98:ILE:HA	0.93	0.92
1:A:17:GLN:O	1:A:19:HIS:N	2.03	0.92
1:A:416:MET:CE	1:A:416:MET:CA	2.29	0.91
1:A:41:ASN:O	1:A:43:ILE:N	2.03	0.91
1:A:496:PRO:O	1:A:497:PRO:C	2.05	0.91
1:A:9:ILE:HD11	1:A:95:GLY:C	1.90	0.91
1:A:142:TRP:HZ2	1:A:167:VAL:HG21	0.77	0.91
1:A:145:HIS:CD2	1:A:146:LYS:H	1.88	0.91
1:A:172:ILE:HG23	1:A:173:GLU:H	1.35	0.91
1:A:411:PHE:HB2	1:A:412:PRO:CD	2.00	0.91
1:A:44:VAL:HG23	1:A:46:LYS:H	1.36	0.90
1:A:310:PHE:CD2	1:A:392:LEU:HG	2.05	0.90
1:A:220:LEU:C	1:A:221:THR:CG2	2.38	0.90
1:A:508:VAL:HG12	1:A:513:ALA:HB2	1.53	0.90
1:A:430:LYS:HD3	1:A:450:GLN:HE21	1.33	0.90
1:A:134:THR:HG22	1:A:180:ASN:HB2	1.51	0.90
1:A:507:LYS:C	1:A:508:VAL:HG22	1.89	0.90
1:A:382:ASN:O	1:A:384:VAL:N	2.03	0.89
3:A:610:NAG:N2	3:A:611:NAG:H2	1.87	0.89
1:A:561:THR:HB	1:A:564:THR:OG1	1.71	0.89
1:A:464:LEU:HB2	1:A:470:TYR:OH	1.72	0.89
1:A:103:PRO:HG3	1:A:182:LEU:HD22	1.53	0.89
1:A:38:VAL:CG1	1:A:42:TYR:CB	2.50	0.89
1:A:406:MET:O	1:A:407:ASP:HB2	1.72	0.89
1:A:405:VAL:HG22	1:A:406:MET:N	1.84	0.89
1:A:508:VAL:CG1	1:A:513:ALA:CB	2.51	0.89
1:A:134:THR:HG21	1:A:180:ASN:HB3	1.55	0.88
1:A:515:LEU:CD1	1:A:557:LEU:HD11	2.03	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:224:ASN:OD1	1:A:235:TYR:OH	1.91	0.88
1:A:510:LYS:O	1:A:511:ASN:CG	2.12	0.88
1:A:46:LYS:O	1:A:47:THR:CG2	2.20	0.88
1:A:85:THR:CG2	1:A:89:LEU:HD11	2.03	0.88
1:A:430:LYS:HD2	1:A:450:GLN:HE21	1.34	0.88
1:A:128:ARG:NH1	1:A:128:ARG:HG3	1.75	0.88
1:A:515:LEU:HD12	1:A:557:LEU:HD12	1.53	0.88
1:A:369:LEU:HD11	1:A:374:TYR:CE1	2.08	0.88
1:A:40:ALA:O	1:A:43:ILE:HG23	1.73	0.88
1:A:418:TRP:CZ3	1:A:459:TYR:N	2.42	0.88
1:A:120:MET:HB3	1:A:162:VAL:CG2	2.03	0.88
1:A:196:TYR:C	1:A:197:LYS:HD3	1.93	0.88
1:A:7:GLY:O	1:A:94:TYR:HB2	1.74	0.88
1:A:584:PHE:CD2	1:A:585:THR:N	2.42	0.88
3:A:611:NAG:O7	3:A:611:NAG:H3	1.72	0.87
1:A:309:SER:O	1:A:329:TRP:HB2	1.75	0.87
1:A:16:VAL:CG1	1:A:18:LEU:CD1	2.48	0.87
1:A:348:LEU:CD2	1:A:376:ALA:CA	2.53	0.87
1:A:584:PHE:C	1:A:584:PHE:CD2	2.39	0.87
1:A:16:VAL:N	1:A:99:ILE:O	2.08	0.87
1:A:347:THR:OG1	1:A:377:THR:HG23	1.74	0.87
1:A:16:VAL:CA	1:A:99:ILE:O	2.23	0.87
1:A:586:PHE:HD2	1:A:587:THR:H	1.23	0.87
1:A:231:ILE:HB	1:A:281:LYS:HG3	1.57	0.86
1:A:292:SER:O	1:A:293:GLU:O	1.93	0.86
1:A:355:LEU:HD12	1:A:355:LEU:H	1.04	0.86
1:A:142:TRP:HD1	1:A:172:ILE:HD11	1.40	0.86
1:A:130:THR:O	1:A:131:HIS:HB2	1.75	0.86
1:A:134:THR:HG22	1:A:180:ASN:HB3	0.90	0.86
1:A:163:ASP:C	1:A:163:ASP:OD2	2.12	0.86
1:A:369:LEU:CD1	1:A:374:TYR:CE1	2.59	0.86
1:A:164:TYR:N	1:A:164:TYR:CD1	2.41	0.86
1:A:586:PHE:CD2	1:A:587:THR:N	2.43	0.86
1:A:430:LYS:CD	1:A:450:GLN:NE2	2.39	0.86
1:A:532:TYR:O	1:A:548:VAL:N	2.08	0.85
1:A:271:THR:HG22	1:A:272:GLU:H	1.41	0.85
1:A:548:VAL:HG13	1:A:552:HIS:ND1	1.89	0.85
1:A:9:ILE:CD1	1:A:96:ILE:CG1	2.27	0.85
1:A:174:VAL:HG23	1:A:190:ILE:HD11	1.59	0.85
1:A:85:THR:HB	1:A:89:LEU:HD11	1.52	0.85
1:A:349:THR:HG23	1:A:355:LEU:HD23	1.59	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:15:VAL:C	1:A:99:ILE:CD1	2.44	0.84
1:A:517:TRP:CE3	1:A:570:MET:CE	2.59	0.84
1:A:445:ILE:N	1:A:445:ILE:HD12	1.93	0.84
1:A:574:THR:O	1:A:577:GLY:N	2.09	0.84
1:A:85:THR:CB	1:A:89:LEU:HD11	2.03	0.84
1:A:267:LEU:CD1	1:A:273:TYR:CE1	2.61	0.84
1:A:171:ASN:HA	1:A:192:PHE:O	1.76	0.84
1:A:14:PRO:HG3	1:A:98:ILE:CA	2.01	0.84
1:A:382:ASN:N	1:A:385:GLY:O	2.10	0.84
1:A:123:GLU:OE2	1:A:159:SER:CA	2.26	0.84
1:A:517:TRP:HB3	1:A:570:MET:HE1	1.59	0.84
1:A:162:VAL:HB	1:A:164:TYR:CE1	2.12	0.84
1:A:380:VAL:H	1:A:387:SER:HB3	1.42	0.84
1:A:536:TYR:HE2	1:A:544:THR:HG1	1.15	0.83
1:A:262:PHE:HD2	1:A:262:PHE:C	1.81	0.83
1:A:94:TYR:C	1:A:94:TYR:HD2	1.81	0.83
1:A:16:VAL:H	1:A:99:ILE:HD13	1.42	0.83
1:A:501:PRO:O	1:A:582:PRO:HD3	1.78	0.83
1:A:504:ARG:CA	1:A:584:PHE:CE1	2.53	0.83
1:A:68:THR:O	1:A:69:PHE:CD1	2.31	0.83
1:A:262:PHE:CD2	1:A:263:THR:N	2.46	0.83
1:A:555:TYR:HD1	1:A:556:THR:N	1.76	0.83
1:A:451:GLU:CA	1:A:451:GLU:OE1	2.26	0.83
1:A:69:PHE:O	1:A:70:THR:O	1.94	0.83
1:A:122:CYS:CB	1:A:138:LEU:HD21	2.08	0.83
1:A:385:GLY:CA	1:A:386:LYS:CB	2.56	0.83
1:A:426:GLU:OE2	1:A:427:SER:N	2.10	0.83
1:A:15:VAL:N	1:A:99:ILE:HD11	1.94	0.83
1:A:229:SER:O	1:A:230:VAL:HG22	1.79	0.83
1:A:411:PHE:HE2	1:A:418:TRP:HB2	1.43	0.83
1:A:9:ILE:HD11	1:A:95:GLY:O	1.77	0.83
1:A:466:GLU:C	1:A:468:LYS:H	1.81	0.83
1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CD2	2.29	0.82
4:A:595:NDG:H3	4:A:596:NAG:O5	1.78	0.82
1:A:469:CYS:HB2	1:A:491:TYR:HE1	1.06	0.82
1:A:521:PRO:HD2	1:A:524:VAL:HG22	1.60	0.82
1:A:440:ASP:O	1:A:441:LYS:CB	2.25	0.82
1:A:262:PHE:CE2	1:A:263:THR:O	2.33	0.82
1:A:278:ARG:HG2	1:A:291:TRP:CZ3	2.13	0.82
1:A:508:VAL:HA	1:A:513:ALA:CB	2.09	0.82
1:A:437:VAL:O	1:A:437:VAL:CG1	2.28	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:52:ILE:HG21	1:A:57:TYR:CE1	2.11	0.82
1:A:71:ASP:O	1:A:72:ILE:HD13	1.79	0.82
1:A:277:ILE:HD11	1:A:278:ARG:C	1.99	0.82
1:A:311:TRP:HA	1:A:311:TRP:CE3	2.13	0.82
1:A:130:THR:CG2	1:A:131:HIS:H	1.88	0.82
1:A:107:PRO:CG	1:A:187:SER:HB3	2.10	0.82
1:A:262:PHE:CD2	1:A:262:PHE:C	2.52	0.82
1:A:508:VAL:CG1	1:A:513:ALA:HB2	2.09	0.81
1:A:45:TRP:CZ3	1:A:81:CYS:HB2	2.15	0.81
1:A:535:PHE:N	1:A:535:PHE:HD1	1.76	0.81
1:A:369:LEU:CD1	1:A:374:TYR:CZ	2.62	0.81
1:A:180:ASN:HD22	1:A:180:ASN:C	1.82	0.81
1:A:355:LEU:O	1:A:355:LEU:HD13	1.80	0.81
1:A:311:TRP:CG	1:A:432:ILE:HD11	2.14	0.81
1:A:23:THR:O	1:A:23:THR:HG22	1.81	0.81
1:A:316:PRO:O	1:A:317:SER:O	1.97	0.81
1:A:466:GLU:HB2	1:A:493:LYS:O	1.80	0.81
1:A:429:LYS:O	1:A:430:LYS:HB3	1.81	0.81
1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:O	1.81	0.81
1:A:164:TYR:N	1:A:164:TYR:HD1	1.77	0.80
1:A:411:PHE:O	1:A:417:LEU:HD12	1.82	0.80
1:A:159:SER:O	1:A:160:CYS:CB	2.24	0.80
1:A:103:PRO:HB2	1:A:104:PRO:HD2	1.63	0.80
1:A:52:ILE:HG22	1:A:52:ILE:O	1.79	0.80
1:A:174:VAL:HG23	1:A:190:ILE:HD13	1.60	0.80
1:A:385:GLY:HA2	1:A:386:LYS:CB	2.12	0.80
1:A:454:THR:OG1	1:A:455:VAL:N	2.14	0.80
1:A:418:TRP:CE3	1:A:458:THR:C	2.55	0.80
1:A:332:LEU:HD11	1:A:380:VAL:HG11	1.62	0.80
1:A:262:PHE:HD2	1:A:263:THR:N	1.78	0.80
1:A:23:THR:CG2	1:A:23:THR:O	2.28	0.80
1:A:14:PRO:O	1:A:15:VAL:CG1	2.28	0.80
1:A:261:SER:OG	1:A:262:PHE:N	2.14	0.80
1:A:105:GLU:OE1	1:A:128:ARG:HD3	1.80	0.80
1:A:540:ILE:HD13	1:A:540:ILE:C	1.89	0.80
1:A:311:TRP:NE1	1:A:432:ILE:CD1	2.41	0.80
1:A:236:ASN:HD21	1:A:288:TRP:HH2	1.30	0.79
1:A:146:LYS:O	1:A:146:LYS:HD3	1.82	0.79
1:A:380:VAL:O	1:A:380:VAL:HG13	1.80	0.79
1:A:473:THR:HG23	1:A:487:SER:HG	1.43	0.79
1:A:506:LYS:O	1:A:507:LYS:CB	2.30	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:142:TRP:HD1	1:A:172:ILE:CD1	1.94	0.79
1:A:375:LEU:HD23	1:A:375:LEU:O	1.83	0.79
1:A:80:THR:CB	1:A:82:ASN:ND2	2.46	0.79
1:A:222:TRP:HD1	1:A:223:THR:CA	1.96	0.79
1:A:232:ILE:N	1:A:232:ILE:HD12	1.97	0.79
1:A:311:TRP:CD1	1:A:432:ILE:HD11	2.18	0.79
1:A:311:TRP:CE2	1:A:432:ILE:HD12	2.16	0.79
1:A:97:THR:O	1:A:97:THR:CG2	2.29	0.79
1:A:61:ASN:OD1	1:A:61:ASN:N	2.14	0.79
1:A:348:LEU:HD21	1:A:376:ALA:CB	2.12	0.79
1:A:418:TRP:HE3	1:A:458:THR:O	1.64	0.79
1:A:146:LYS:CD	1:A:146:LYS:C	2.43	0.79
1:A:571:ALA:HA	1:A:580:ASP:HA	1.64	0.79
1:A:113:ILE:C	1:A:113:ILE:HD13	2.03	0.78
1:A:149:ASP:OD2	1:A:149:ASP:N	2.11	0.78
5:A:602:NAG:C6	5:A:602:NAG:C2	2.55	0.78
1:A:278:ARG:HE	1:A:288:TRP:HB3	1.47	0.78
1:A:16:VAL:CG1	1:A:100:SER:HA	2.13	0.78
1:A:517:TRP:CB	1:A:570:MET:HE1	2.14	0.78
1:A:411:PHE:HE2	1:A:418:TRP:CB	1.95	0.78
1:A:182:LEU:N	1:A:182:LEU:HD12	1.96	0.78
1:A:52:ILE:CG2	1:A:57:TYR:CD1	2.67	0.78
1:A:311:TRP:HE3	1:A:311:TRP:HA	1.46	0.78
1:A:464:LEU:HB2	1:A:470:TYR:CZ	2.19	0.78
1:A:163:ASP:O	1:A:163:ASP:OD2	2.00	0.78
4:A:597:BMA:O3	4:A:598:BMA:H62	1.82	0.78
1:A:43:ILE:HD11	1:A:44:VAL:C	2.04	0.78
1:A:303:ARG:NH2	1:A:386:LYS:CD	2.47	0.78
1:A:530:ARG:O	1:A:550:SER:CB	2.29	0.78
1:A:508:VAL:HG13	1:A:513:ALA:CB	2.12	0.78
1:A:104:PRO:O	1:A:105:GLU:CB	2.31	0.78
1:A:309:SER:O	1:A:329:TRP:CB	2.32	0.78
1:A:214:LEU:HD13	1:A:214:LEU:C	2.04	0.78
1:A:561:THR:HG22	1:A:562:SER:N	1.98	0.78
1:A:15:VAL:HA	1:A:99:ILE:HD13	1.60	0.77
1:A:162:VAL:HB	1:A:164:TYR:HE1	1.50	0.77
1:A:45:TRP:HB3	1:A:52:ILE:HG12	1.66	0.77
1:A:145:HIS:CG	1:A:146:LYS:N	2.53	0.77
1:A:367:VAL:CG2	1:A:368:ASN:O	2.32	0.77
1:A:233:LEU:HB3	1:A:235:TYR:CE1	2.18	0.77
1:A:508:VAL:HG12	1:A:513:ALA:CB	2.14	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:81:CYS:O	1:A:93:VAL:HB	1.84	0.77
1:A:64:ALA:O	1:A:65:SER:CB	2.32	0.77
1:A:218:LEU:HD11	1:A:299:THR:CG2	2.15	0.77
6:A:608:BMA:O3	6:A:609:BMA:H62	1.85	0.77
1:A:306:LYS:O	1:A:307:ALA:O	2.01	0.77
1:A:45:TRP:CG	1:A:67:VAL:HG21	2.20	0.77
1:A:421:TRP:HZ2	1:A:431:TYR:CD1	2.03	0.77
1:A:172:ILE:N	1:A:192:PHE:O	2.18	0.77
1:A:128:ARG:CG	1:A:128:ARG:NH1	2.32	0.76
1:A:350:ARG:CB	1:A:374:TYR:CE2	2.68	0.76
1:A:430:LYS:HA	1:A:453:GLY:HA2	1.67	0.76
1:A:311:TRP:CD2	1:A:432:ILE:HD12	2.20	0.76
1:A:283:ASP:OD2	1:A:285:LYS:HG3	1.86	0.76
1:A:517:TRP:CG	1:A:570:MET:CE	2.67	0.76
1:A:499:LYS:HG3	1:A:524:VAL:HG11	1.67	0.76
1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:OD2	2.18	0.76
1:A:89:LEU:C	1:A:89:LEU:HD12	2.06	0.76
1:A:507:LYS:C	1:A:508:VAL:CG2	2.53	0.76
1:A:303:ARG:HG3	1:A:385:GLY:HA3	1.66	0.76
1:A:562:SER:O	1:A:563:ASP:HB3	1.85	0.76
1:A:349:THR:HA	1:A:355:LEU:HB3	1.68	0.76
1:A:205:ASN:OD1	3:A:593:NAG:O5	1.90	0.76
1:A:371:ASN:CB	1:A:397:CYS:SG	2.69	0.76
1:A:467:SER:HB3	1:A:526:ASN:ND2	1.99	0.76
1:A:464:LEU:CB	1:A:470:TYR:OH	2.33	0.76
1:A:87:GLY:O	1:A:88:GLN:CB	2.33	0.76
1:A:305:SER:O	1:A:306:LYS:CB	2.32	0.76
1:A:517:TRP:CE3	1:A:570:MET:HE3	2.20	0.76
1:A:411:PHE:CE2	1:A:418:TRP:CB	2.68	0.76
1:A:45:TRP:CD1	1:A:67:VAL:HG23	2.20	0.75
1:A:206:LEU:HD12	1:A:207:SER:H	1.51	0.75
1:A:241:THR:O	1:A:243:ASP:N	2.19	0.75
1:A:172:ILE:HG23	1:A:173:GLU:N	2.01	0.75
1:A:436:CYS:HB2	1:A:445:ILE:O	1.85	0.75
1:A:508:VAL:HA	1:A:513:ALA:HB2	1.68	0.75
1:A:217:ILE:HG22	1:A:265:GLN:HA	1.66	0.75
1:A:85:THR:O	1:A:87:GLY:N	2.19	0.75
1:A:380:VAL:O	1:A:387:SER:HB2	1.85	0.75
1:A:103:PRO:CB	1:A:104:PRO:HD2	2.15	0.75
1:A:345:GLU:HG2	1:A:358:TYR:O	1.87	0.75
1:A:180:ASN:C	1:A:180:ASN:ND2	2.39	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:43:ILE:CD1	1:A:44:VAL:C	2.54	0.75
1:A:113:ILE:HD11	1:A:115:ASN:CA	2.16	0.75
1:A:555:TYR:CD1	1:A:556:THR:N	2.55	0.75
1:A:515:LEU:HD13	1:A:557:LEU:HD11	1.63	0.75
1:A:80:THR:HB	1:A:82:ASN:ND2	2.02	0.75
1:A:380:VAL:O	1:A:387:SER:CB	2.35	0.75
1:A:537:ARG:HG3	1:A:541:GLY:HA2	1.69	0.75
1:A:492:LEU:O	1:A:492:LEU:HD12	1.87	0.75
1:A:548:VAL:O	1:A:550:SER:N	2.19	0.75
1:A:303:ARG:NH2	1:A:386:LYS:HD3	2.00	0.75
1:A:560:LEU:HB3	1:A:566:TYR:CE2	2.22	0.75
1:A:155:ASP:O	1:A:155:ASP:OD2	2.05	0.75
1:A:209:ILE:HD12	1:A:209:ILE:N	2.02	0.75
1:A:45:TRP:O	1:A:52:ILE:HD13	1.86	0.74
1:A:238:GLN:HG2	1:A:249:GLN:HG2	1.68	0.74
1:A:128:ARG:O	1:A:130:THR:N	2.19	0.74
6:A:606:NAG:O6	6:A:607:NAG:C1	2.35	0.74
1:A:94:TYR:C	1:A:94:TYR:CD2	2.57	0.74
1:A:172:ILE:CG2	1:A:173:GLU:N	2.50	0.74
1:A:299:THR:O	1:A:300:TYR:O	2.05	0.74
1:A:358:TYR:HD2	1:A:365:LEU:HD21	1.51	0.74
1:A:510:LYS:O	1:A:511:ASN:CB	2.33	0.74
1:A:103:PRO:HB2	1:A:104:PRO:CD	2.12	0.74
1:A:277:ILE:HD13	1:A:278:ARG:HA	1.69	0.74
1:A:405:VAL:CG2	1:A:406:MET:H	1.94	0.74
1:A:292:SER:C	1:A:293:GLU:O	2.22	0.74
1:A:418:TRP:CZ3	1:A:459:TYR:CB	2.70	0.74
1:A:301:GLU:O	1:A:302:ASP:HB2	1.87	0.74
1:A:380:VAL:HG12	1:A:387:SER:OG	1.88	0.74
1:A:360:VAL:CG1	1:A:362:ALA:O	2.35	0.74
1:A:134:THR:HG22	1:A:180:ASN:CA	2.17	0.74
1:A:271:THR:HG22	1:A:272:GLU:N	2.03	0.74
1:A:251:PRO:O	1:A:254:ASP:HB2	1.87	0.74
1:A:220:LEU:C	1:A:221:THR:HG23	2.08	0.73
4:A:597:BMA:O4	4:A:598:BMA:C6	2.35	0.73
1:A:52:ILE:HG21	1:A:57:TYR:CD1	2.23	0.73
1:A:459:TYR:O	1:A:459:TYR:CD1	2.42	0.73
1:A:142:TRP:CD1	1:A:172:ILE:CD1	2.69	0.73
1:A:374:TYR:HB2	1:A:394:ILE:CG2	2.18	0.73
5:A:602:NAG:HO3	5:A:603:BMA:H2	1.51	0.73
1:A:537:ARG:HG3	1:A:538:THR:O	1.87	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:89:LEU:HD12	1:A:89:LEU:O	1.87	0.73
1:A:464:LEU:CD1	1:A:492:LEU:HD22	2.19	0.73
1:A:280:MET:HB3	1:A:288:TRP:HA	1.70	0.73
1:A:503:VAL:HG22	1:A:504:ARG:H	1.53	0.73
1:A:45:TRP:CH2	1:A:81:CYS:HB2	2.23	0.73
1:A:60:ILE:CB	1:A:64:ALA:CB	2.67	0.73
1:A:232:ILE:O	1:A:282:GLU:N	2.22	0.73
1:A:437:VAL:O	1:A:437:VAL:HG13	1.87	0.73
1:A:104:PRO:O	1:A:105:GLU:HB2	1.88	0.73
1:A:270:PHE:CD1	1:A:270:PHE:C	2.62	0.73
1:A:45:TRP:CD1	1:A:67:VAL:HG21	2.21	0.73
1:A:543:GLU:HG2	1:A:544:THR:H	1.53	0.72
1:A:220:LEU:C	1:A:221:THR:HG22	2.06	0.72
1:A:464:LEU:CD1	1:A:492:LEU:CD2	2.67	0.72
1:A:287:TYR:N	1:A:287:TYR:CD1	2.57	0.72
1:A:412:PRO:O	1:A:413:LYS:HB2	1.88	0.72
1:A:204:HIS:CE1	1:A:223:THR:HB	2.25	0.72
1:A:359:THR:O	1:A:360:VAL:C	2.28	0.72
1:A:568:VAL:O	1:A:583:GLU:CG	2.35	0.72
1:A:534:ILE:HG22	1:A:570:MET:CB	2.20	0.72
1:A:535:PHE:HB3	1:A:545:ALA:HB2	0.79	0.72
1:A:14:PRO:C	1:A:15:VAL:HG22	2.08	0.72
1:A:235:TYR:C	1:A:236:ASN:HD22	1.92	0.72
1:A:142:TRP:C	1:A:144:THR:H	1.92	0.72
1:A:348:LEU:CD2	1:A:376:ALA:CB	2.67	0.72
1:A:404:PRO:HB3	1:A:484:SER:O	1.90	0.72
1:A:70:THR:HG23	1:A:71:ASP:O	1.90	0.72
1:A:402:THR:O	1:A:403:HIS:O	2.07	0.72
1:A:155:ASP:O	1:A:156:THR:CG2	2.37	0.72
1:A:146:LYS:HD3	1:A:147:PHE:N	2.04	0.71
1:A:348:LEU:O	1:A:355:LEU:HB2	1.90	0.71
1:A:68:THR:C	1:A:69:PHE:HD1	1.94	0.71
1:A:418:TRP:HE3	1:A:458:THR:C	1.94	0.71
1:A:517:TRP:CE3	1:A:570:MET:SD	2.83	0.71
1:A:218:LEU:CD1	1:A:218:LEU:H	1.99	0.71
1:A:135:ASN:N	1:A:179:GLU:O	2.20	0.71
1:A:182:LEU:H	1:A:182:LEU:HD12	1.55	0.71
1:A:416:MET:HA	1:A:416:MET:HE3	0.76	0.71
1:A:277:ILE:CD1	1:A:278:ARG:HA	2.18	0.71
1:A:445:ILE:CD1	1:A:445:ILE:H	1.93	0.71
1:A:270:PHE:C	1:A:270:PHE:HD1	1.94	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:257:SER:O	1:A:258:THR:C	2.28	0.71
1:A:14:PRO:O	1:A:15:VAL:CG2	2.37	0.71
1:A:508:VAL:HG13	1:A:513:ALA:HB1	1.71	0.71
1:A:430:LYS:NZ	1:A:450:GLN:NE2	2.39	0.71
1:A:132:LEU:O	1:A:134:THR:HG23	1.91	0.71
1:A:94:TYR:HD2	1:A:94:TYR:O	1.74	0.71
1:A:411:PHE:HB2	1:A:412:PRO:HD3	1.71	0.71
1:A:561:THR:CG2	1:A:562:SER:N	2.54	0.71
1:A:11:PRO:HD2	1:A:13:SER:O	1.91	0.71
1:A:576:GLU:O	1:A:576:GLU:OE1	2.08	0.70
1:A:454:THR:O	1:A:455:VAL:O	2.08	0.70
1:A:562:SER:O	1:A:563:ASP:CB	2.39	0.70
1:A:459:TYR:CG	1:A:459:TYR:O	2.44	0.70
1:A:380:VAL:O	1:A:380:VAL:CG1	2.40	0.70
1:A:43:ILE:CD1	1:A:44:VAL:H	1.76	0.70
1:A:200:PRO:C	1:A:201:ASN:O	2.27	0.70
1:A:102:LEU:HB2	1:A:130:THR:HA	1.72	0.70
1:A:132:LEU:O	1:A:133:GLU:C	2.28	0.70
1:A:91:GLN:O	1:A:92:ASN:C	2.29	0.70
1:A:120:MET:HB3	1:A:162:VAL:HG21	1.71	0.70
1:A:390:ALA:O	1:A:391:VAL:HG22	1.90	0.70
1:A:278:ARG:NH2	1:A:288:TRP:CE2	2.59	0.70
1:A:85:THR:HG21	1:A:89:LEU:HD11	1.72	0.70
1:A:16:VAL:N	1:A:99:ILE:HD13	1.99	0.70
1:A:121:ARG:HG2	1:A:160:CYS:O	1.91	0.70
1:A:348:LEU:HD23	1:A:376:ALA:HA	1.74	0.70
1:A:348:LEU:HD21	1:A:376:ALA:CA	2.20	0.70
1:A:512:GLU:O	1:A:512:GLU:HG2	1.91	0.70
1:A:45:TRP:NE1	1:A:67:VAL:HG23	2.06	0.70
1:A:218:LEU:CD1	1:A:299:THR:HG22	2.20	0.70
1:A:408:LEU:HD11	1:A:419:VAL:CG1	2.22	0.70
1:A:511:ASN:HB2	1:A:560:LEU:O	1.92	0.70
1:A:435:TRP:CD1	1:A:435:TRP:C	2.64	0.69
1:A:469:CYS:HB2	1:A:491:TYR:CD1	2.20	0.69
5:A:602:NAG:O3	5:A:603:BMA:C2	2.34	0.69
1:A:565:LEU:CD1	1:A:566:TYR:N	2.51	0.69
1:A:156:THR:OG1	1:A:156:THR:O	2.09	0.69
1:A:102:LEU:O	1:A:103:PRO:O	2.10	0.69
1:A:16:VAL:HG12	1:A:18:LEU:HD11	1.73	0.69
1:A:459:TYR:CE1	1:A:461:ARG:CD	2.57	0.69
1:A:145:HIS:CG	1:A:146:LYS:H	2.09	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:202:PRO:HB3	1:A:290:ASP:O	1.91	0.69
1:A:277:ILE:CD1	1:A:278:ARG:C	2.58	0.69
1:A:348:LEU:HD22	1:A:376:ALA:HA	1.73	0.69
1:A:534:ILE:HG22	1:A:570:MET:HB3	1.73	0.69
1:A:374:TYR:HB2	1:A:394:ILE:HG23	1.73	0.69
1:A:587:THR:O	1:A:587:THR:HG23	1.92	0.69
1:A:515:LEU:CD1	1:A:557:LEU:HD12	2.10	0.68
1:A:278:ARG:HG2	1:A:291:TRP:CH2	2.27	0.68
1:A:14:PRO:HG3	1:A:98:ILE:N	2.08	0.68
1:A:544:THR:O	1:A:545:ALA:HB2	1.93	0.68
1:A:277:ILE:HD11	1:A:278:ARG:CA	2.23	0.68
1:A:229:SER:C	1:A:230:VAL:CG2	2.62	0.68
1:A:535:PHE:HB2	1:A:544:THR:O	1.94	0.68
1:A:385:GLY:CA	1:A:386:LYS:HB3	2.23	0.68
1:A:358:TYR:HD2	1:A:365:LEU:CD2	2.06	0.68
1:A:89:LEU:C	1:A:89:LEU:CD1	2.61	0.68
1:A:555:TYR:O	1:A:556:THR:CB	2.30	0.68
1:A:459:TYR:OH	1:A:461:ARG:CD	2.41	0.68
1:A:278:ARG:HE	1:A:288:TRP:CB	2.07	0.68
1:A:104:PRO:HG3	1:A:183:GLY:O	1.94	0.68
1:A:504:ARG:CA	1:A:584:PHE:HE1	1.97	0.68
1:A:235:TYR:CD1	1:A:235:TYR:N	2.62	0.68
1:A:105:GLU:OE1	1:A:128:ARG:CD	2.42	0.67
1:A:426:GLU:CD	1:A:426:GLU:N	2.36	0.67
1:A:134:THR:HG23	1:A:180:ASN:HB2	1.76	0.67
1:A:378:LEU:HB3	1:A:390:ALA:HB3	1.77	0.67
1:A:367:VAL:HG23	1:A:368:ASN:C	2.13	0.67
1:A:521:PRO:O	1:A:524:VAL:HG22	1.94	0.67
1:A:540:ILE:HD12	1:A:540:ILE:C	2.03	0.67
1:A:113:ILE:HD13	1:A:115:ASN:N	2.10	0.67
1:A:124:TRP:CE3	1:A:176:VAL:CG2	2.77	0.67
1:A:418:TRP:CE3	1:A:459:TYR:N	2.62	0.67
1:A:236:ASN:ND2	1:A:288:TRP:CH2	2.62	0.67
1:A:430:LYS:CA	1:A:453:GLY:HA2	2.24	0.67
1:A:374:TYR:CB	1:A:394:ILE:CG2	2.73	0.67
1:A:504:ARG:HA	1:A:584:PHE:CD1	2.25	0.67
1:A:503:VAL:HG11	1:A:568:VAL:CG2	2.25	0.67
1:A:466:GLU:C	1:A:468:LYS:N	2.47	0.66
1:A:99:ILE:HD12	1:A:99:ILE:H	1.60	0.66
1:A:411:PHE:C	1:A:411:PHE:HD2	1.97	0.66
1:A:120:MET:HB3	1:A:162:VAL:HG22	1.75	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:348:LEU:O	1:A:355:LEU:CB	2.44	0.66
1:A:311:TRP:CE2	1:A:432:ILE:CD1	2.75	0.66
1:A:573:TYR:CD2	1:A:578:GLY:CA	2.76	0.66
1:A:225:PRO:O	1:A:227:ILE:N	2.27	0.66
1:A:517:TRP:CG	1:A:570:MET:HE3	2.25	0.66
1:A:124:TRP:CE3	1:A:176:VAL:HG21	2.30	0.66
1:A:9:ILE:HD12	1:A:96:ILE:CD1	2.25	0.66
1:A:517:TRP:CG	1:A:570:MET:HE1	2.28	0.66
1:A:233:LEU:O	1:A:257:SER:HA	1.95	0.66
1:A:102:LEU:HB2	1:A:130:THR:O	1.95	0.66
1:A:3:LEU:HD13	1:A:3:LEU:H	1.60	0.66
1:A:232:ILE:H	1:A:232:ILE:HD12	1.58	0.66
1:A:240:ARG:NH1	1:A:240:ARG:HG3	1.94	0.66
1:A:355:LEU:H	1:A:355:LEU:CD1	1.79	0.66
1:A:360:VAL:HG12	1:A:362:ALA:O	1.96	0.66
3:A:610:NAG:H3	3:A:611:NAG:C2	2.16	0.66
1:A:464:LEU:HD13	1:A:492:LEU:HD23	1.78	0.66
1:A:231:ILE:HD12	1:A:281:LYS:HG3	1.77	0.66
1:A:535:PHE:CB	1:A:544:THR:O	2.44	0.66
1:A:579:LYS:HA	1:A:579:LYS:HE3	1.77	0.66
1:A:385:GLY:HA3	1:A:386:LYS:HB3	1.77	0.66
1:A:310:PHE:CG	1:A:392:LEU:HD11	2.31	0.66
1:A:195:VAL:O	1:A:195:VAL:HG22	1.94	0.66
1:A:356:GLN:CD	1:A:356:GLN:N	2.50	0.66
1:A:45:TRP:HD1	1:A:57:TYR:CD1	2.15	0.65
1:A:303:ARG:HH21	1:A:386:LYS:HD2	1.62	0.65
1:A:217:ILE:HG22	1:A:265:GLN:CA	2.25	0.65
1:A:464:LEU:HD13	1:A:492:LEU:CD2	2.26	0.65
4:A:596:NAG:O7	4:A:596:NAG:H3	1.96	0.65
1:A:305:SER:O	1:A:305:SER:OG	2.12	0.65
1:A:120:MET:O	1:A:161:THR:HG23	1.96	0.65
1:A:387:SER:O	1:A:388:ASP:C	2.31	0.65
1:A:253:GLU:N	1:A:253:GLU:OE2	2.27	0.65
3:A:610:NAG:H3	3:A:611:NAG:H2	1.77	0.65
1:A:236:ASN:ND2	1:A:288:TRP:HH2	1.93	0.65
1:A:329:TRP:CG	1:A:378:LEU:CD2	2.79	0.65
1:A:543:GLU:C	1:A:544:THR:HG23	2.15	0.65
1:A:280:MET:HG2	1:A:288:TRP:CD2	2.32	0.65
1:A:161:THR:HG22	1:A:162:VAL:O	1.97	0.65
1:A:405:VAL:HG21	1:A:421:TRP:CG	2.32	0.65
1:A:202:PRO:HD2	1:A:202:PRO:O	1.97	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:345:GLU:OE2	7:A:604:NAG:H81	1.95	0.65
1:A:221:THR:O	1:A:222:TRP:HB3	1.96	0.65
1:A:232:ILE:HB	1:A:282:GLU:HB2	1.78	0.65
1:A:529:ILE:HD13	1:A:574:THR:CG2	2.27	0.65
1:A:390:ALA:C	1:A:391:VAL:CG2	2.65	0.65
1:A:430:LYS:HZ2	1:A:450:GLN:NE2	1.93	0.65
1:A:537:ARG:HG3	1:A:538:THR:N	2.12	0.65
1:A:400:GLN:OE1	1:A:400:GLN:N	2.29	0.65
1:A:311:TRP:CD2	1:A:432:ILE:CD1	2.79	0.65
1:A:12:GLU:O	1:A:96:ILE:HG22	1.97	0.64
1:A:303:ARG:NH2	1:A:386:LYS:HD2	2.10	0.64
1:A:538:THR:HG22	1:A:566:TYR:CE1	2.31	0.64
1:A:16:VAL:HG12	1:A:100:SER:HA	1.79	0.64
1:A:501:PRO:O	1:A:582:PRO:CD	2.44	0.64
1:A:194:PRO:C	1:A:196:TYR:H	2.01	0.64
1:A:344:TYR:CD2	1:A:380:VAL:HG23	2.32	0.64
1:A:310:PHE:CD2	1:A:392:LEU:CG	2.79	0.64
1:A:511:ASN:CB	1:A:560:LEU:O	2.45	0.64
1:A:373:ARG:HA	1:A:396:ALA:H	1.63	0.64
1:A:528:PHE:HB3	1:A:530:ARG:NH2	2.11	0.64
1:A:356:GLN:N	1:A:356:GLN:OE1	2.29	0.64
1:A:473:THR:CG2	1:A:487:SER:OG	2.36	0.64
1:A:5:PRO:O	1:A:7:GLY:N	2.31	0.64
1:A:15:VAL:CA	1:A:99:ILE:HD12	2.19	0.64
1:A:52:ILE:HG22	1:A:57:TYR:HE1	1.24	0.64
1:A:503:VAL:O	1:A:504:ARG:HB2	1.97	0.64
1:A:203:PRO:HG2	1:A:277:ILE:HD12	1.79	0.64
1:A:9:ILE:O	1:A:10:SER:HB2	1.96	0.64
1:A:278:ARG:CZ	1:A:288:TRP:CE3	2.81	0.64
1:A:241:THR:HG23	1:A:244:ALA:HB2	1.80	0.64
1:A:436:CYS:CB	1:A:445:ILE:O	2.45	0.64
1:A:129:GLU:O	1:A:131:HIS:N	2.31	0.64
1:A:382:ASN:C	1:A:384:VAL:H	2.00	0.64
1:A:428:VAL:CG1	1:A:431:TYR:CZ	2.81	0.64
1:A:232:ILE:HB	1:A:282:GLU:CB	2.29	0.63
1:A:262:PHE:HE2	1:A:263:THR:O	1.81	0.63
1:A:204:HIS:CE1	1:A:223:THR:CG2	2.81	0.63
1:A:147:PHE:CD2	1:A:164:TYR:CE2	2.86	0.63
1:A:8:TYR:HA	1:A:94:TYR:CD1	2.34	0.63
3:A:610:NAG:N2	3:A:610:NAG:C5	2.62	0.63
4:A:597:BMA:O4	4:A:598:BMA:O6	2.15	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:469:CYS:SG	1:A:491:TYR:HE1	2.21	0.63
1:A:521:PRO:O	1:A:522:VAL:C	2.36	0.63
1:A:102:LEU:CG	1:A:130:THR:O	2.44	0.63
1:A:63:THR:HG23	3:A:599:NAG:H82	0.66	0.63
1:A:107:PRO:HG2	1:A:187:SER:HB2	1.79	0.63
1:A:82:ASN:N	1:A:82:ASN:HD22	1.97	0.63
1:A:113:ILE:HD11	1:A:115:ASN:HA	1.80	0.63
1:A:169:PHE:CD1	1:A:195:VAL:HG11	2.33	0.63
1:A:374:TYR:CB	1:A:394:ILE:HG22	2.28	0.63
1:A:430:LYS:HD2	1:A:450:GLN:NE2	2.06	0.63
1:A:418:TRP:CE3	1:A:459:TYR:CA	2.82	0.63
1:A:469:CYS:HA	1:A:491:TYR:CD1	2.34	0.62
1:A:441:LYS:O	1:A:442:ALA:HB2	1.99	0.62
4:A:596:NAG:O3	4:A:597:BMA:C1	2.46	0.62
1:A:136:PHE:HD2	1:A:157:PRO:O	1.82	0.62
1:A:43:ILE:CD1	1:A:44:VAL:CA	2.62	0.62
1:A:168:TYR:CB	1:A:195:VAL:HB	2.24	0.62
1:A:405:VAL:CG2	1:A:421:TRP:CD1	2.83	0.62
1:A:267:LEU:N	1:A:267:LEU:HD22	2.14	0.62
1:A:44:VAL:HG23	1:A:46:LYS:N	2.13	0.62
1:A:459:TYR:CZ	1:A:461:ARG:HD2	2.33	0.62
1:A:424:PRO:HD2	1:A:431:TYR:OH	1.98	0.62
1:A:452:ASP:O	1:A:455:VAL:HG23	1.99	0.62
1:A:418:TRP:CZ3	1:A:458:THR:C	2.72	0.62
1:A:499:LYS:HA	1:A:499:LYS:HE2	1.82	0.62
1:A:499:LYS:O	1:A:579:LYS:HG2	2.00	0.62
1:A:113:ILE:CD1	1:A:115:ASN:N	2.63	0.62
1:A:378:LEU:O	1:A:390:ALA:HB3	2.00	0.62
3:A:610:NAG:C3	3:A:611:NAG:H2	2.28	0.62
1:A:267:LEU:CD2	1:A:267:LEU:N	2.63	0.62
1:A:511:ASN:O	1:A:512:GLU:CB	2.34	0.62
1:A:40:ALA:O	1:A:43:ILE:CG2	2.45	0.62
1:A:113:ILE:CD1	1:A:115:ASN:HB2	2.30	0.62
1:A:312:TYR:HB3	1:A:327:LEU:HD23	1.82	0.62
1:A:121:ARG:C	1:A:121:ARG:HD2	2.20	0.62
1:A:324:THR:HG22	1:A:325:VAL:N	2.15	0.61
1:A:466:GLU:H	1:A:466:GLU:CD	2.04	0.61
1:A:561:THR:HB	1:A:564:THR:HG1	1.63	0.61
1:A:206:LEU:HD12	1:A:207:SER:N	2.12	0.61
1:A:222:TRP:CG	1:A:223:THR:N	2.49	0.61
1:A:214:LEU:HD13	1:A:215:SER:N	2.15	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:426:GLU:O	1:A:427:SER:CB	2.46	0.61
1:A:369:LEU:HG	1:A:374:TYR:CE1	2.35	0.61
1:A:381:ARG:HG2	1:A:382:ASN:N	2.16	0.61
1:A:435:TRP:CH2	1:A:447:ASP:HB3	2.35	0.61
1:A:277:ILE:CG1	1:A:278:ARG:N	2.64	0.61
1:A:94:TYR:O	1:A:94:TYR:CD2	2.54	0.61
1:A:234:LYS:HB3	1:A:282:GLU:HA	1.81	0.61
1:A:431:TYR:HE1	1:A:455:VAL:O	1.83	0.61
1:A:271:THR:O	1:A:298:ILE:HA	2.00	0.61
1:A:347:THR:OG1	1:A:377:THR:CG2	2.49	0.61
1:A:9:ILE:CD1	1:A:95:GLY:O	2.47	0.61
1:A:411:PHE:CD2	1:A:411:PHE:C	2.69	0.61
1:A:530:ARG:CG	6:A:606:NAG:C6	2.40	0.61
1:A:579:LYS:CA	1:A:579:LYS:HE3	2.31	0.61
1:A:204:HIS:ND1	1:A:223:THR:HB	2.15	0.61
1:A:390:ALA:C	1:A:391:VAL:HG22	2.20	0.61
1:A:240:ARG:NH1	1:A:240:ARG:CG	2.46	0.61
1:A:229:SER:O	1:A:230:VAL:CG2	2.49	0.61
1:A:145:HIS:HD2	1:A:146:LYS:N	1.90	0.61
1:A:374:TYR:HB3	1:A:394:ILE:HG22	1.82	0.61
1:A:430:LYS:HD3	1:A:450:GLN:NE2	2.11	0.61
1:A:453:GLY:O	1:A:454:THR:C	2.39	0.61
1:A:310:PHE:CD2	1:A:392:LEU:CD1	2.84	0.61
1:A:276:ARG:HG2	1:A:276:ARG:O	1.99	0.60
1:A:335:PHE:CD2	1:A:335:PHE:O	2.37	0.60
1:A:303:ARG:CG	1:A:385:GLY:HA3	2.31	0.60
1:A:141:GLU:O	1:A:172:ILE:HD13	2.00	0.60
1:A:44:VAL:HG22	1:A:82:ASN:O	2.01	0.60
1:A:568:VAL:HG23	1:A:569:ARG:N	2.17	0.60
1:A:270:PHE:CD2	1:A:339:GLY:HA2	2.36	0.60
1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:ASN:H	1.66	0.60
1:A:138:LEU:HD12	1:A:139:LYS:N	2.16	0.60
1:A:430:LYS:N	1:A:453:GLY:HA2	2.16	0.60
1:A:182:LEU:N	1:A:182:LEU:CD1	2.64	0.60
3:A:610:NAG:H3	3:A:611:NAG:C5	2.30	0.60
1:A:145:HIS:CD2	1:A:145:HIS:C	2.73	0.60
1:A:453:GLY:O	1:A:454:THR:O	2.20	0.60
1:A:194:PRO:O	1:A:196:TYR:N	2.34	0.60
1:A:492:LEU:HD12	1:A:492:LEU:C	2.22	0.60
1:A:153:LYS:HG3	1:A:154:ARG:HH12	1.67	0.60
1:A:128:ARG:HH11	1:A:128:ARG:HG2	1.61	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:235:TYR:HD1	1:A:235:TYR:N	1.99	0.59
1:A:351:TRP:O	1:A:353:SER:N	2.34	0.59
1:A:270:PHE:CE2	1:A:339:GLY:HA2	2.37	0.59
1:A:380:VAL:HG12	1:A:387:SER:CB	2.32	0.59
1:A:523:ASP:N	1:A:523:ASP:OD1	2.35	0.59
1:A:130:THR:O	1:A:131:HIS:CB	2.49	0.59
1:A:430:LYS:HA	1:A:453:GLY:CA	2.33	0.59
1:A:314:ILE:O	1:A:314:ILE:CG1	2.32	0.59
5:A:601:NAG:H5	5:A:601:NAG:N2	2.18	0.59
1:A:568:VAL:O	1:A:569:ARG:HB2	2.01	0.59
1:A:418:TRP:HZ3	1:A:459:TYR:N	1.99	0.59
1:A:514:VAL:CG1	1:A:515:LEU:N	2.65	0.59
1:A:139:LYS:O	1:A:140:SER:HB3	2.03	0.59
1:A:360:VAL:HG21	1:A:365:LEU:HB2	1.85	0.59
1:A:182:LEU:H	1:A:182:LEU:CD1	2.15	0.59
1:A:416:MET:HE2	1:A:416:MET:CA	2.27	0.59
1:A:506:LYS:O	1:A:507:LYS:HB2	2.01	0.59
1:A:140:SER:HA	1:A:173:GLU:O	2.03	0.59
1:A:78:GLN:O	1:A:78:GLN:HG3	2.03	0.59
1:A:280:MET:SD	1:A:288:TRP:NE1	2.76	0.58
1:A:45:TRP:HB2	1:A:52:ILE:CB	2.32	0.58
1:A:497:PRO:HA	1:A:525:GLN:O	2.03	0.58
1:A:14:PRO:HG2	1:A:98:ILE:C	2.23	0.58
1:A:348:LEU:CD2	1:A:376:ALA:HB2	2.25	0.58
1:A:433:LEU:CD1	1:A:449:GLN:HG3	2.33	0.58
1:A:326:GLN:NE2	1:A:366:THR:CG2	2.67	0.58
1:A:469:CYS:CB	1:A:491:TYR:CD1	2.84	0.58
1:A:170:VAL:HG13	1:A:170:VAL:O	2.01	0.58
1:A:239:TYR:HB2	1:A:275:PHE:CD2	2.39	0.58
1:A:14:PRO:O	1:A:15:VAL:CB	2.51	0.58
1:A:139:LYS:O	1:A:140:SER:CB	2.51	0.58
1:A:214:LEU:HD12	1:A:217:ILE:CD1	2.33	0.58
1:A:103:PRO:CG	1:A:182:LEU:HD22	2.29	0.58
1:A:49:HIS:O	1:A:50:PHE:C	2.41	0.58
1:A:556:THR:O	1:A:558:SER:OG	2.17	0.58
1:A:304:PRO:CG	1:A:387:SER:HB2	2.33	0.58
1:A:565:LEU:C	1:A:565:LEU:HD13	2.22	0.58
1:A:45:TRP:HB2	1:A:52:ILE:HB	1.85	0.58
1:A:202:PRO:CD	1:A:202:PRO:O	2.52	0.58
1:A:350:ARG:CB	1:A:374:TYR:CD2	2.87	0.58
1:A:271:THR:H	1:A:299:THR:HG1	1.50	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:280:MET:SD	1:A:288:TRP:CD1	2.97	0.58
1:A:343:ASP:OD2	1:A:381:ARG:NH2	2.37	0.58
1:A:299:THR:C	1:A:300:TYR:O	2.38	0.58
1:A:412:PRO:CD	1:A:412:PRO:O	2.52	0.58
1:A:424:PRO:CD	1:A:431:TYR:OH	2.51	0.58
1:A:217:ILE:HG22	1:A:265:GLN:CB	2.33	0.58
1:A:102:LEU:HD12	1:A:130:THR:O	1.90	0.57
1:A:535:PHE:N	1:A:535:PHE:CD1	2.50	0.57
1:A:534:ILE:HD11	1:A:555:TYR:CD2	2.38	0.57
1:A:515:LEU:HD11	1:A:557:LEU:CD1	2.00	0.57
1:A:435:TRP:CZ2	1:A:447:ASP:HB3	2.39	0.57
1:A:426:GLU:OE2	1:A:426:GLU:N	2.37	0.57
1:A:14:PRO:CB	1:A:98:ILE:HA	2.28	0.57
1:A:499:LYS:CA	1:A:499:LYS:HE2	2.35	0.57
1:A:278:ARG:NE	1:A:288:TRP:CE3	2.72	0.57
1:A:138:LEU:HD12	1:A:139:LYS:H	1.68	0.57
1:A:534:ILE:HG13	1:A:546:VAL:HG22	1.85	0.57
1:A:304:PRO:HG2	1:A:387:SER:HB2	1.86	0.57
1:A:82:ASN:H	1:A:82:ASN:HD22	1.53	0.57
1:A:169:PHE:O	1:A:170:VAL:HB	2.05	0.57
1:A:421:TRP:CZ2	1:A:431:TYR:CD1	2.90	0.57
5:A:602:NAG:C1	5:A:602:NAG:O7	2.53	0.57
1:A:227:ILE:O	1:A:229:SER:N	2.37	0.57
1:A:414:ASP:OD2	1:A:414:ASP:N	2.38	0.57
1:A:47:THR:O	1:A:49:HIS:O	2.22	0.57
1:A:142:TRP:C	1:A:144:THR:N	2.58	0.57
1:A:369:LEU:CG	1:A:374:TYR:CE1	2.88	0.57
1:A:242:LYS:HE2	1:A:272:GLU:OE1	2.03	0.57
1:A:155:ASP:C	1:A:156:THR:CG2	2.71	0.57
1:A:105:GLU:O	1:A:106:LYS:C	2.42	0.57
1:A:120:MET:HG3	1:A:121:ARG:N	2.19	0.57
1:A:353:SER:O	1:A:354:HIS:CB	2.53	0.57
1:A:360:VAL:HG11	1:A:362:ALA:O	2.05	0.57
1:A:529:ILE:HD13	1:A:574:THR:HG22	1.87	0.57
1:A:103:PRO:HG3	1:A:182:LEU:CD2	2.31	0.57
1:A:60:ILE:CB	1:A:64:ALA:HB3	2.35	0.57
1:A:579:LYS:HG3	1:A:579:LYS:O	2.05	0.57
1:A:269:PRO:HG2	1:A:338:ASN:OD1	2.05	0.57
1:A:102:LEU:HD13	1:A:130:THR:C	2.08	0.57
1:A:9:ILE:O	1:A:10:SER:CB	2.53	0.57
1:A:277:ILE:HD13	1:A:277:ILE:O	1.97	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:169:PHE:O	1:A:170:VAL:CB	2.49	0.57
1:A:511:ASN:O	1:A:511:ASN:OD1	2.22	0.57
1:A:573:TYR:HD2	1:A:578:GLY:N	2.02	0.57
1:A:222:TRP:O	1:A:223:THR:OG1	2.22	0.57
1:A:122:CYS:SG	1:A:138:LEU:HD21	2.45	0.57
1:A:354:HIS:CE1	1:A:356:GLN:HE22	2.23	0.57
1:A:380:VAL:O	1:A:387:SER:HB3	2.04	0.57
1:A:433:LEU:HD12	1:A:433:LEU:O	2.05	0.57
1:A:168:TYR:HB3	1:A:195:VAL:CB	2.30	0.56
1:A:373:ARG:HA	1:A:396:ALA:N	2.20	0.56
1:A:436:CYS:HB3	1:A:446:THR:HA	1.86	0.56
1:A:85:THR:CG2	1:A:89:LEU:CD1	2.72	0.56
1:A:45:TRP:CB	1:A:52:ILE:HG12	2.33	0.56
1:A:124:TRP:C	1:A:125:ASP:OD2	2.43	0.56
1:A:292:SER:O	1:A:293:GLU:C	2.44	0.56
1:A:408:LEU:HD11	1:A:419:VAL:HG12	1.87	0.56
1:A:434:GLU:HA	1:A:448:TRP:HA	1.86	0.56
1:A:335:PHE:HE2	1:A:336:GLU:HG3	1.58	0.56
3:A:593:NAG:H3	3:A:594:NAG:H5	1.88	0.56
1:A:3:LEU:HD22	1:A:4:ASP:N	2.20	0.56
1:A:38:VAL:HG12	1:A:86:PHE:CD2	2.37	0.56
1:A:158:THR:O	1:A:159:SER:O	2.24	0.56
1:A:124:TRP:CE3	1:A:176:VAL:HG22	2.40	0.56
1:A:520:LEU:HD11	1:A:572:ALA:CB	2.35	0.56
1:A:142:TRP:O	1:A:144:THR:N	2.36	0.56
1:A:324:THR:CG2	1:A:325:VAL:N	2.69	0.56
1:A:574:THR:O	1:A:576:GLU:CA	2.53	0.56
1:A:61:ASN:C	1:A:63:THR:N	2.42	0.56
1:A:203:PRO:CG	1:A:277:ILE:HD12	2.36	0.56
1:A:270:PHE:HB2	1:A:301:GLU:HA	1.88	0.56
1:A:218:LEU:H	1:A:218:LEU:HD13	1.69	0.56
1:A:241:THR:O	1:A:242:LYS:C	2.44	0.56
1:A:571:ALA:HB2	1:A:580:ASP:HB3	1.87	0.56
1:A:18:LEU:HD11	1:A:100:SER:HA	1.86	0.55
1:A:16:VAL:CG1	1:A:18:LEU:HD11	2.32	0.55
1:A:506:LYS:O	1:A:507:LYS:HB3	2.05	0.55
1:A:329:TRP:CD1	1:A:378:LEU:HD21	2.41	0.55
1:A:510:LYS:C	1:A:511:ASN:CG	2.64	0.55
1:A:367:VAL:HG23	1:A:368:ASN:CA	2.36	0.55
1:A:204:HIS:HE1	1:A:223:THR:CG2	2.18	0.55
7:A:604:NAG:O4	7:A:605:FUC:C3	2.40	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:310:PHE:CE2	1:A:392:LEU:HG	2.40	0.55
1:A:231:ILE:CD1	1:A:281:LYS:HG3	2.36	0.55
1:A:534:ILE:HG13	1:A:546:VAL:CG2	2.36	0.55
1:A:278:ARG:HD2	1:A:289:SER:O	2.07	0.55
1:A:400:GLN:O	1:A:401:ALA:C	2.44	0.55
1:A:333:PRO:HD2	1:A:336:GLU:HB2	1.89	0.55
1:A:538:THR:HG22	1:A:566:TYR:CD1	2.41	0.55
1:A:529:ILE:O	1:A:529:ILE:HG22	2.07	0.55
1:A:3:LEU:CD2	1:A:4:ASP:N	2.69	0.55
1:A:74:SER:CB	1:A:75:LEU:HD23	2.35	0.55
1:A:574:THR:O	1:A:575:ASP:O	2.22	0.55
1:A:204:HIS:CE1	1:A:223:THR:HG21	2.42	0.55
1:A:167:VAL:O	1:A:168:TYR:C	2.45	0.55
1:A:335:PHE:CD2	1:A:336:GLU:N	2.74	0.55
1:A:560:LEU:HB3	1:A:566:TYR:CZ	2.41	0.55
1:A:49:HIS:ND1	1:A:50:PHE:N	2.47	0.55
1:A:45:TRP:HB2	1:A:52:ILE:HG21	1.89	0.55
1:A:353:SER:O	1:A:354:HIS:HB3	2.06	0.55
1:A:270:PHE:HD2	1:A:301:GLU:OE2	1.90	0.55
1:A:428:VAL:HG22	1:A:429:LYS:N	2.22	0.55
1:A:242:LYS:HE2	1:A:272:GLU:CD	2.26	0.55
1:A:505:THR:HG23	1:A:584:PHE:CZ	2.42	0.55
1:A:573:TYR:HD2	1:A:578:GLY:CA	2.20	0.55
1:A:464:LEU:CB	1:A:470:TYR:CZ	2.89	0.55
1:A:361:ASN:OD1	5:A:601:NAG:O5	2.21	0.55
3:A:594:NAG:H3	3:A:594:NAG:O7	2.06	0.55
1:A:171:ASN:CA	1:A:192:PHE:O	2.50	0.55
1:A:195:VAL:O	1:A:195:VAL:CG2	2.55	0.55
1:A:394:ILE:O	1:A:394:ILE:HG23	2.07	0.55
1:A:571:ALA:CA	1:A:580:ASP:HA	2.36	0.55
1:A:14:PRO:CB	1:A:98:ILE:HG22	2.37	0.54
1:A:535:PHE:CB	1:A:545:ALA:CB	2.54	0.54
1:A:418:TRP:CZ3	1:A:459:TYR:CA	2.91	0.54
1:A:74:SER:OG	1:A:75:LEU:HD21	1.93	0.54
1:A:573:TYR:CE2	1:A:578:GLY:HA3	2.42	0.54
1:A:43:ILE:HD13	1:A:44:VAL:H	1.68	0.54
1:A:206:LEU:HD12	1:A:221:THR:O	2.07	0.54
1:A:113:ILE:CD1	1:A:115:ASN:CA	2.85	0.54
1:A:352:LYS:O	1:A:353:SER:CB	2.55	0.54
1:A:303:ARG:HH21	1:A:386:LYS:CD	2.13	0.54
1:A:309:SER:OG	1:A:450:GLN:HB3	2.07	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:439:SER:CA	1:A:523:ASP:OD2	2.55	0.54
1:A:214:LEU:HD12	1:A:217:ILE:HD13	1.90	0.54
1:A:185:VAL:CG2	1:A:186:THR:N	2.34	0.54
1:A:85:THR:HB	1:A:89:LEU:HD13	1.73	0.54
1:A:411:PHE:CD2	1:A:418:TRP:HB2	2.41	0.54
1:A:405:VAL:HG23	1:A:421:TRP:CD1	2.43	0.54
1:A:574:THR:C	1:A:576:GLU:N	2.58	0.54
1:A:113:ILE:HD11	1:A:115:ASN:CB	2.38	0.54
1:A:354:HIS:CA	1:A:355:LEU:HD12	2.38	0.54
1:A:342:LEU:O	1:A:343:ASP:HB3	2.07	0.54
1:A:11:PRO:O	1:A:96:ILE:CG2	2.56	0.54
1:A:18:LEU:HD11	1:A:100:SER:CA	2.38	0.54
1:A:45:TRP:HA	1:A:80:THR:O	2.07	0.54
1:A:234:LYS:CD	1:A:282:GLU:O	2.44	0.54
1:A:142:TRP:CD1	1:A:172:ILE:CG1	2.91	0.54
7:A:604:NAG:HO4	7:A:605:FUC:H3	1.67	0.54
1:A:533:THR:HA	1:A:547:ASN:HA	1.88	0.54
1:A:586:PHE:CG	1:A:587:THR:N	2.76	0.54
1:A:575:ASP:HA	6:A:606:NAG:O6	2.08	0.53
1:A:3:LEU:CD2	1:A:4:ASP:H	2.22	0.53
1:A:517:TRP:CD1	1:A:518:ASP:N	2.77	0.53
1:A:278:ARG:CZ	1:A:288:TRP:CD2	2.90	0.53
1:A:358:TYR:CD2	1:A:365:LEU:HD21	2.38	0.53
1:A:229:SER:C	1:A:230:VAL:HG23	2.28	0.53
1:A:60:ILE:H	1:A:64:ALA:HB3	1.74	0.53
1:A:16:VAL:HG13	1:A:18:LEU:HD12	1.87	0.53
1:A:52:ILE:O	1:A:52:ILE:CG2	2.52	0.53
1:A:267:LEU:CD1	1:A:273:TYR:CZ	2.83	0.53
1:A:401:ALA:HB1	1:A:484:SER:CB	2.11	0.53
1:A:537:ARG:CG	1:A:538:THR:N	2.68	0.53
1:A:564:THR:O	1:A:587:THR:OG1	2.14	0.53
1:A:408:LEU:CD1	1:A:419:VAL:HG12	2.38	0.53
3:A:599:NAG:C6	3:A:599:NAG:HO6	2.10	0.53
1:A:225:PRO:O	1:A:228:LYS:N	2.41	0.53
4:A:595:NDG:O3	4:A:596:NAG:H5	2.09	0.53
1:A:548:VAL:CG1	1:A:549:ASP:N	2.71	0.53
1:A:133:GLU:O	1:A:134:THR:HG23	2.09	0.53
1:A:563:ASP:N	1:A:589:PRO:O	2.41	0.53
1:A:529:ILE:CD1	1:A:574:THR:HG23	2.39	0.53
1:A:227:ILE:C	1:A:229:SER:N	2.62	0.53
1:A:129:GLU:O	1:A:130:THR:C	2.46	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:439:SER:HA	1:A:523:ASP:OD2	2.09	0.52
1:A:60:ILE:CB	1:A:61:ASN:OD1	2.58	0.52
1:A:80:THR:HB	1:A:82:ASN:HD22	1.75	0.52
1:A:168:TYR:CD1	1:A:195:VAL:HB	2.45	0.52
1:A:169:PHE:O	1:A:170:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:231:ILE:HD12	1:A:281:LYS:HA	1.90	0.52
4:A:596:NAG:HO3	4:A:597:BMA:C1	2.22	0.52
1:A:204:HIS:CE1	1:A:223:THR:CB	2.91	0.52
1:A:418:TRP:CE3	1:A:459:TYR:HB3	2.40	0.52
1:A:17:GLN:HA	1:A:182:LEU:HD23	1.92	0.52
1:A:412:PRO:HD2	1:A:412:PRO:O	2.09	0.52
1:A:565:LEU:C	1:A:565:LEU:CD1	2.77	0.52
1:A:536:TYR:CE1	1:A:557:LEU:CD2	2.70	0.52
1:A:311:TRP:HB2	1:A:448:TRP:CZ3	2.44	0.52
1:A:465:ALA:N	1:A:470:TYR:OH	2.34	0.52
1:A:225:PRO:O	1:A:226:SER:C	2.48	0.52
1:A:469:CYS:CA	1:A:491:TYR:CD1	2.93	0.52
1:A:469:CYS:HA	1:A:491:TYR:HD1	1.71	0.52
1:A:113:ILE:CD1	1:A:115:ASN:CB	2.88	0.52
1:A:138:LEU:HB3	1:A:150:CYS:CB	2.29	0.52
1:A:405:VAL:HG21	1:A:421:TRP:CD1	2.44	0.52
1:A:231:ILE:HD12	1:A:281:LYS:CB	2.40	0.52
1:A:227:ILE:C	1:A:229:SER:H	2.12	0.52
1:A:102:LEU:CB	1:A:130:THR:O	2.58	0.52
1:A:412:PRO:O	1:A:413:LYS:CB	2.57	0.51
1:A:204:HIS:O	1:A:205:ASN:C	2.48	0.51
1:A:110:LEU:HD12	1:A:110:LEU:C	2.29	0.51
1:A:555:TYR:C	1:A:555:TYR:CD1	2.84	0.51
1:A:521:PRO:O	1:A:524:VAL:CG2	2.58	0.51
1:A:174:VAL:CG2	1:A:190:ILE:HD11	2.36	0.51
1:A:350:ARG:O	1:A:351:TRP:C	2.46	0.51
1:A:274:VAL:HG22	1:A:296:SER:OG	2.11	0.51
1:A:180:ASN:ND2	1:A:182:LEU:H	2.09	0.51
1:A:382:ASN:OD1	1:A:385:GLY:O	2.27	0.51
1:A:381:ARG:HA	1:A:386:LYS:H	1.76	0.51
1:A:504:ARG:HH22	1:A:516:GLU:HG2	1.75	0.51
1:A:145:HIS:CD2	1:A:146:LYS:CA	2.91	0.51
1:A:510:LYS:O	1:A:511:ASN:HB3	2.09	0.51
5:A:601:NAG:H5	5:A:601:NAG:HN2	1.75	0.51
1:A:534:ILE:HG22	1:A:570:MET:HB2	1.92	0.51
1:A:344:TYR:CE2	1:A:380:VAL:CG2	2.94	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:543:GLU:HG2	1:A:544:THR:N	2.25	0.51
1:A:411:PHE:HB2	1:A:412:PRO:HD2	1.88	0.51
1:A:14:PRO:CD	1:A:97:THR:O	2.59	0.51
1:A:459:TYR:OH	1:A:461:ARG:HD2	2.10	0.51
1:A:9:ILE:CD1	1:A:95:GLY:C	2.73	0.51
1:A:534:ILE:CG1	1:A:546:VAL:CG2	2.89	0.51
1:A:398:ASP:O	1:A:400:GLN:HG3	2.10	0.51
1:A:440:ASP:N	1:A:523:ASP:OD2	2.44	0.51
1:A:283:ASP:OD2	1:A:285:LYS:CG	2.57	0.51
1:A:76:ASN:CG	1:A:77:ILE:N	2.64	0.51
1:A:418:TRP:CE3	1:A:458:THR:O	2.53	0.51
1:A:508:VAL:HA	1:A:513:ALA:HB1	1.92	0.51
1:A:314:ILE:O	1:A:315:ASP:O	2.29	0.51
1:A:408:LEU:HG	1:A:408:LEU:O	2.10	0.51
1:A:543:GLU:CG	1:A:544:THR:H	2.23	0.50
1:A:236:ASN:HB3	1:A:249:GLN:NE2	2.26	0.50
1:A:537:ARG:HD2	1:A:541:GLY:HA3	1.93	0.50
1:A:231:ILE:HD12	1:A:281:LYS:CG	2.39	0.50
1:A:262:PHE:CE2	1:A:263:THR:C	2.84	0.50
1:A:433:LEU:CD1	1:A:433:LEU:O	2.58	0.50
1:A:82:ASN:HA	1:A:93:VAL:H	1.75	0.50
1:A:232:ILE:N	1:A:232:ILE:CD1	2.65	0.50
1:A:227:ILE:O	1:A:228:LYS:C	2.50	0.50
1:A:132:LEU:O	1:A:180:ASN:HB2	2.11	0.50
1:A:568:VAL:O	1:A:569:ARG:CB	2.59	0.50
1:A:560:LEU:HB3	1:A:566:TYR:OH	2.11	0.50
1:A:124:TRP:CD2	1:A:176:VAL:HG21	2.47	0.50
1:A:102:LEU:HB2	1:A:130:THR:CA	2.38	0.50
1:A:45:TRP:HB2	1:A:52:ILE:CG2	2.41	0.50
1:A:91:GLN:O	1:A:93:VAL:N	2.44	0.50
1:A:514:VAL:HG12	1:A:515:LEU:N	2.26	0.50
1:A:380:VAL:N	1:A:387:SER:HB3	2.18	0.50
1:A:15:VAL:N	1:A:99:ILE:CD1	2.64	0.50
1:A:483:GLY:O	1:A:484:SER:C	2.50	0.50
1:A:270:PHE:CD2	1:A:301:GLU:OE2	2.65	0.50
1:A:278:ARG:NH2	1:A:288:TRP:CE3	2.78	0.50
1:A:261:SER:O	1:A:262:PHE:CB	2.59	0.50
1:A:17:GLN:HA	1:A:182:LEU:CD2	2.42	0.50
1:A:9:ILE:HG23	1:A:45:TRP:HH2	1.76	0.50
1:A:310:PHE:CD2	1:A:392:LEU:HD11	2.47	0.50
1:A:64:ALA:C	1:A:65:SER:OG	2.45	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:522:VAL:O	1:A:524:VAL:N	2.45	0.49
1:A:194:PRO:C	1:A:196:TYR:N	2.64	0.49
1:A:428:VAL:HG23	1:A:477:VAL:O	2.12	0.49
1:A:14:PRO:HB2	1:A:98:ILE:HG22	1.94	0.49
1:A:80:THR:HG21	1:A:82:ASN:ND2	2.22	0.49
1:A:14:PRO:HG3	1:A:97:THR:C	2.32	0.49
1:A:236:ASN:HD22	1:A:236:ASN:N	2.09	0.49
1:A:496:PRO:HB3	1:A:577:GLY:O	2.12	0.49
1:A:435:TRP:CZ2	1:A:447:ASP:CB	2.96	0.49
1:A:397:CYS:O	1:A:398:ASP:HB3	2.12	0.49
1:A:51:THR:O	1:A:53:PRO:N	2.45	0.49
1:A:77:ILE:O	1:A:98:ILE:HG13	2.13	0.49
1:A:232:ILE:O	1:A:282:GLU:HB2	2.12	0.49
1:A:280:MET:SD	1:A:288:TRP:CE2	3.05	0.49
1:A:299:THR:O	1:A:300:TYR:C	2.51	0.49
1:A:9:ILE:HD12	1:A:96:ILE:HG12	0.62	0.49
1:A:239:TYR:CG	1:A:239:TYR:O	2.65	0.49
3:A:599:NAG:O3	3:A:600:NAG:H5	2.12	0.49
1:A:312:TYR:CE2	1:A:394:ILE:HG13	2.48	0.49
1:A:394:ILE:CG2	1:A:394:ILE:O	2.60	0.49
1:A:395:PRO:HG2	1:A:399:PHE:HD2	1.78	0.49
1:A:464:LEU:HB2	1:A:470:TYR:CE2	2.48	0.49
3:A:599:NAG:H3	3:A:600:NAG:O6	2.13	0.49
1:A:348:LEU:CD1	1:A:374:TYR:CD2	2.96	0.49
1:A:561:THR:O	1:A:588:THR:HG21	2.13	0.49
1:A:153:LYS:HG3	1:A:154:ARG:NH1	2.27	0.49
1:A:136:PHE:CD2	1:A:157:PRO:O	2.65	0.48
1:A:30:GLU:HA	1:A:33:MET:HE2	1.95	0.48
1:A:374:TYR:HB3	1:A:394:ILE:CG2	2.41	0.48
1:A:344:TYR:CE2	1:A:380:VAL:HG21	2.48	0.48
1:A:406:MET:O	1:A:407:ASP:CB	2.50	0.48
1:A:560:LEU:HB3	1:A:566:TYR:HE2	1.77	0.48
1:A:161:THR:C	1:A:162:VAL:O	2.49	0.48
1:A:303:ARG:N	1:A:384:VAL:HG11	2.28	0.48
1:A:452:ASP:O	1:A:453:GLY:O	2.31	0.48
1:A:430:LYS:O	1:A:477:VAL:HG23	2.13	0.48
1:A:435:TRP:CD1	1:A:436:CYS:N	2.81	0.48
1:A:212:GLU:O	1:A:213:GLU:CB	2.60	0.48
1:A:548:VAL:HG12	1:A:549:ASP:N	2.29	0.48
1:A:45:TRP:CZ3	1:A:81:CYS:CB	2.92	0.48
1:A:503:VAL:HG22	1:A:504:ARG:N	2.26	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:68:THR:C	1:A:69:PHE:CD1	2.80	0.48
1:A:587:THR:O	1:A:587:THR:CG2	2.61	0.48
1:A:400:GLN:O	1:A:401:ALA:O	2.32	0.48
1:A:430:LYS:NZ	1:A:450:GLN:HE22	2.10	0.48
1:A:359:THR:C	1:A:360:VAL:O	2.46	0.48
1:A:538:THR:CG2	1:A:566:TYR:HE1	2.27	0.48
1:A:437:VAL:O	1:A:437:VAL:HG12	2.10	0.48
1:A:45:TRP:NE1	1:A:65:SER:O	2.45	0.48
1:A:94:TYR:CD2	1:A:95:GLY:O	2.66	0.48
1:A:504:ARG:CG	1:A:584:PHE:HE1	2.26	0.48
1:A:193:ASP:OD1	1:A:194:PRO:HD2	2.14	0.48
1:A:309:SER:O	1:A:329:TRP:CA	2.61	0.48
1:A:404:PRO:C	1:A:405:VAL:O	2.45	0.48
1:A:431:TYR:CE1	1:A:455:VAL:O	2.65	0.48
1:A:452:ASP:O	1:A:453:GLY:C	2.52	0.48
1:A:52:ILE:O	1:A:53:PRO:O	2.32	0.48
1:A:9:ILE:HD11	1:A:95:GLY:CA	2.44	0.48
1:A:569:ARG:HB2	1:A:583:GLU:HB2	1.94	0.48
1:A:151:LYS:O	1:A:152:ALA:O	2.32	0.48
1:A:532:TYR:CE1	1:A:572:ALA:HB2	2.49	0.48
1:A:41:ASN:O	1:A:42:TYR:C	2.48	0.48
1:A:172:ILE:O	1:A:191:ASN:HA	2.13	0.47
1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:C	2.34	0.47
1:A:222:TRP:HD1	1:A:223:THR:H	0.69	0.47
5:A:602:NAG:H4	5:A:603:BMA:O2	2.13	0.47
1:A:537:ARG:CG	1:A:541:GLY:HA2	2.40	0.47
1:A:466:GLU:CD	1:A:466:GLU:N	2.67	0.47
1:A:232:ILE:O	1:A:282:GLU:CB	2.62	0.47
1:A:314:ILE:O	1:A:315:ASP:C	2.52	0.47
1:A:146:LYS:NZ	1:A:147:PHE:O	2.45	0.47
1:A:41:ASN:C	1:A:43:ILE:N	2.66	0.47
1:A:354:HIS:CE1	1:A:356:GLN:NE2	2.82	0.47
1:A:332:LEU:CD1	1:A:380:VAL:HG11	2.39	0.47
1:A:466:GLU:O	1:A:468:LYS:N	2.47	0.47
1:A:51:THR:CG2	1:A:52:ILE:N	2.77	0.47
1:A:206:LEU:HD13	1:A:222:TRP:HB3	1.97	0.47
1:A:464:LEU:CD1	1:A:492:LEU:HD23	2.39	0.47
1:A:44:VAL:HG11	1:A:84:LEU:HD12	1.96	0.47
1:A:88:GLN:O	1:A:89:LEU:CD1	2.62	0.47
1:A:546:VAL:HG21	1:A:555:TYR:CE2	2.50	0.47
1:A:496:PRO:C	1:A:497:PRO:O	2.43	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:161:THR:O	1:A:162:VAL:O	2.32	0.47
1:A:348:LEU:HD23	1:A:376:ALA:CB	2.42	0.47
1:A:378:LEU:O	1:A:390:ALA:CB	2.62	0.47
1:A:311:TRP:CH2	1:A:482:PRO:HG3	2.50	0.47
1:A:537:ARG:HD2	1:A:541:GLY:CA	2.45	0.47
1:A:411:PHE:CB	1:A:412:PRO:CD	2.79	0.47
1:A:262:PHE:CD2	1:A:263:THR:C	2.89	0.47
1:A:200:PRO:O	1:A:289:SER:HB3	2.15	0.46
1:A:296:SER:HB3	1:A:297:GLY:H	1.53	0.46
3:A:610:NAG:O3	3:A:611:NAG:O5	2.30	0.46
1:A:512:GLU:H	1:A:560:LEU:HG	1.80	0.46
1:A:536:TYR:CD2	1:A:536:TYR:C	2.75	0.46
1:A:113:ILE:C	1:A:113:ILE:CD1	2.78	0.46
1:A:560:LEU:CB	1:A:566:TYR:CE2	2.97	0.46
1:A:4:ASP:HA	1:A:5:PRO:HD3	1.73	0.46
1:A:411:PHE:CE2	1:A:418:TRP:HB3	2.50	0.46
1:A:222:TRP:HD1	1:A:223:THR:C	2.18	0.46
1:A:163:ASP:CG	1:A:163:ASP:O	2.47	0.46
1:A:175:TRP:HB3	1:A:189:HIS:HA	1.97	0.46
1:A:168:TYR:CG	1:A:195:VAL:HB	2.50	0.46
7:A:604:NAG:H5	7:A:605:FUC:O2	2.16	0.46
1:A:467:SER:O	1:A:526:ASN:HA	2.15	0.46
1:A:180:ASN:ND2	1:A:181:ALA:N	2.64	0.46
1:A:333:PRO:HA	1:A:334:PRO:HD2	1.54	0.46
1:A:231:ILE:HD12	1:A:281:LYS:CA	2.45	0.46
1:A:420:GLU:HB3	1:A:457:ARG:HB3	1.98	0.46
1:A:76:ASN:CG	1:A:77:ILE:H	2.19	0.46
1:A:38:VAL:HG11	1:A:86:PHE:CD2	2.37	0.46
1:A:14:PRO:CG	1:A:97:THR:O	2.63	0.46
1:A:534:ILE:CG2	1:A:570:MET:HB2	2.46	0.46
1:A:132:LEU:C	1:A:133:GLU:O	2.47	0.46
1:A:22:PHE:O	1:A:68:THR:HA	2.16	0.46
1:A:129:GLU:O	1:A:131:HIS:ND1	2.49	0.46
1:A:3:LEU:HD23	1:A:4:ASP:H	1.81	0.46
1:A:63:THR:CG2	3:A:599:NAG:H81	1.96	0.46
1:A:200:PRO:O	1:A:201:ASN:O	2.33	0.46
1:A:423:THR:HA	1:A:424:PRO:HD3	1.62	0.46
1:A:512:GLU:N	1:A:560:LEU:HG	2.31	0.46
1:A:210:ASN:C	1:A:212:GLU:H	2.20	0.46
1:A:239:TYR:HA	1:A:275:PHE:HA	1.98	0.46
1:A:31:LYS:C	1:A:34:ASP:H	2.18	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:102:LEU:HD13	1:A:131:HIS:CB	2.30	0.46
1:A:60:ILE:N	1:A:64:ALA:HB3	2.31	0.46
1:A:96:ILE:HG22	1:A:97:THR:H	1.81	0.45
1:A:503:VAL:HG11	1:A:568:VAL:HG23	1.97	0.45
1:A:270:PHE:CD2	1:A:339:GLY:CA	2.99	0.45
4:A:595:NDG:H3	4:A:596:NAG:C5	2.46	0.45
1:A:104:PRO:O	1:A:105:GLU:HB3	2.14	0.45
1:A:501:PRO:O	1:A:581:GLY:HA3	2.16	0.45
1:A:205:ASN:OD1	3:A:593:NAG:O6	2.15	0.45
1:A:434:GLU:H	1:A:434:GLU:HG2	1.65	0.45
1:A:333:PRO:HB2	1:A:335:PHE:CD1	2.50	0.45
1:A:503:VAL:CG2	1:A:515:LEU:HD22	2.46	0.45
1:A:240:ARG:HG2	1:A:247:TRP:CZ3	2.52	0.45
1:A:560:LEU:CB	1:A:566:TYR:HE2	2.29	0.45
1:A:588:THR:HA	1:A:589:PRO:HD3	1.66	0.45
1:A:52:ILE:O	1:A:57:TYR:CE1	2.70	0.45
1:A:509:GLY:O	1:A:511:ASN:N	2.43	0.45
1:A:206:LEU:CD1	1:A:221:THR:O	2.64	0.45
1:A:142:TRP:CD1	1:A:172:ILE:HG12	2.50	0.45
1:A:68:THR:HG22	1:A:69:PHE:H	1.82	0.45
1:A:508:VAL:CA	1:A:513:ALA:HB2	2.43	0.45
1:A:11:PRO:O	1:A:96:ILE:HG21	2.16	0.45
1:A:304:PRO:HD3	1:A:382:ASN:ND2	2.32	0.45
1:A:433:LEU:HD11	1:A:449:GLN:HG3	1.98	0.45
1:A:38:VAL:CG1	1:A:86:PHE:CE2	2.96	0.45
1:A:459:TYR:CE1	1:A:461:ARG:NH1	2.83	0.45
6:A:608:BMA:C3	6:A:609:BMA:H62	2.47	0.45
1:A:576:GLU:O	6:A:607:NAG:H81	2.16	0.45
1:A:232:ILE:O	1:A:282:GLU:CA	2.64	0.45
4:A:596:NAG:O3	4:A:597:BMA:O5	2.32	0.45
1:A:63:THR:O	3:A:599:NAG:H82	2.08	0.44
1:A:466:GLU:O	1:A:467:SER:HB2	2.17	0.44
1:A:250:ILE:HG23	1:A:251:PRO:HD2	1.99	0.44
1:A:225:PRO:C	1:A:227:ILE:N	2.70	0.44
1:A:10:SER:HA	1:A:11:PRO:HA	1.67	0.44
1:A:232:ILE:HB	1:A:282:GLU:HB3	1.98	0.44
1:A:147:PHE:O	1:A:148:ALA:O	2.35	0.44
1:A:378:LEU:HB3	1:A:390:ALA:CB	2.45	0.44
1:A:509:GLY:C	1:A:511:ASN:H	2.21	0.44
1:A:586:PHE:O	1:A:587:THR:CB	2.42	0.44
1:A:114:VAL:O	1:A:198:VAL:HA	2.17	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:43:ILE:CD1	1:A:43:ILE:C	2.26	0.44
1:A:203:PRO:O	1:A:204:HIS:HB3	2.17	0.44
1:A:113:ILE:HD12	1:A:115:ASN:HB2	1.99	0.44
1:A:325:VAL:O	1:A:325:VAL:HG13	2.16	0.44
1:A:489:LYS:O	1:A:490:ALA:HB2	2.16	0.44
1:A:532:TYR:O	1:A:547:ASN:HA	2.17	0.44
1:A:503:VAL:CG1	1:A:584:PHE:HB3	2.47	0.44
1:A:138:LEU:HB2	1:A:160:CYS:SG	2.58	0.44
1:A:349:THR:HG23	1:A:355:LEU:CD2	2.39	0.44
1:A:218:LEU:N	1:A:218:LEU:HD13	2.18	0.44
1:A:217:ILE:CG2	1:A:265:GLN:CB	2.95	0.44
1:A:478:TYR:O	1:A:479:ALA:C	2.55	0.44
1:A:14:PRO:HD3	1:A:97:THR:O	2.18	0.44
1:A:63:THR:HG22	1:A:63:THR:O	2.06	0.44
1:A:121:ARG:HD2	1:A:122:CYS:N	2.33	0.44
1:A:354:HIS:C	1:A:355:LEU:CD1	2.62	0.44
1:A:509:GLY:C	1:A:511:ASN:N	2.71	0.44
1:A:328:VAL:O	1:A:328:VAL:CG2	2.63	0.44
1:A:129:GLU:HG3	1:A:131:HIS:CE1	2.52	0.44
1:A:501:PRO:HG2	1:A:570:MET:O	2.18	0.44
1:A:73:ALA:O	1:A:74:SER:HB2	2.17	0.44
1:A:507:LYS:O	1:A:508:VAL:CB	2.65	0.44
1:A:12:GLU:O	1:A:96:ILE:CG2	2.66	0.44
1:A:583:GLU:OE2	1:A:583:GLU:C	2.56	0.44
1:A:138:LEU:HD11	1:A:174:VAL:CG1	2.48	0.44
1:A:537:ARG:CG	1:A:538:THR:O	2.60	0.44
1:A:421:TRP:CD1	1:A:422:THR:N	2.87	0.43
1:A:467:SER:HB3	1:A:526:ASN:HB3	2.00	0.43
1:A:428:VAL:CG2	1:A:429:LYS:N	2.81	0.43
1:A:558:SER:O	1:A:559:SER:C	2.57	0.43
1:A:41:ASN:C	1:A:43:ILE:H	2.21	0.43
1:A:418:TRP:CE3	1:A:459:TYR:CB	3.00	0.43
1:A:277:ILE:CD1	1:A:277:ILE:O	2.57	0.43
1:A:170:VAL:O	1:A:171:ASN:C	2.57	0.43
1:A:371:ASN:O	1:A:397:CYS:SG	2.77	0.43
1:A:214:LEU:HD22	1:A:215:SER:H	1.84	0.43
1:A:510:LYS:O	1:A:511:ASN:ND2	2.52	0.43
1:A:351:TRP:O	1:A:352:LYS:C	2.54	0.43
1:A:309:SER:O	1:A:329:TRP:HA	2.18	0.43
1:A:7:GLY:O	1:A:94:TYR:CB	2.56	0.43
1:A:85:THR:O	1:A:85:THR:HG23	2.13	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:222:TRP:C	1:A:223:THR:OG1	2.57	0.43
1:A:370:THR:OG1	1:A:371:ASN:N	2.49	0.43
1:A:505:THR:HG23	1:A:584:PHE:HZ	1.82	0.43
1:A:250:ILE:HA	1:A:251:PRO:HD2	1.64	0.43
1:A:408:LEU:HD12	1:A:409:LYS:N	2.34	0.43
1:A:44:VAL:CG1	1:A:84:LEU:HD12	2.49	0.43
1:A:499:LYS:CG	1:A:524:VAL:HG11	2.42	0.43
1:A:169:PHE:O	1:A:170:VAL:CG2	2.66	0.43
1:A:197:LYS:N	1:A:197:LYS:HD3	2.25	0.43
1:A:329:TRP:CD2	1:A:378:LEU:CD2	3.02	0.43
1:A:333:PRO:C	1:A:335:PHE:N	2.65	0.43
1:A:361:ASN:ND2	1:A:361:ASN:O	2.51	0.43
1:A:310:PHE:HD2	1:A:392:LEU:HG	1.77	0.43
1:A:135:ASN:OD1	4:A:595:NDG:O	2.36	0.43
1:A:133:GLU:C	1:A:134:THR:HG23	2.40	0.42
1:A:201:ASN:HB3	1:A:202:PRO:CD	2.48	0.42
1:A:193:ASP:O	1:A:196:TYR:HD2	2.01	0.42
1:A:358:TYR:C	1:A:359:THR:CG2	2.86	0.42
1:A:560:LEU:HD13	1:A:566:TYR:CE2	2.54	0.42
1:A:119:LYS:HD2	1:A:163:ASP:HA	2.00	0.42
1:A:517:TRP:HD1	1:A:518:ASP:N	2.16	0.42
1:A:258:THR:O	1:A:259:ARG:HB3	2.19	0.42
1:A:113:ILE:N	1:A:121:ARG:O	2.45	0.42
1:A:306:LYS:C	1:A:307:ALA:O	2.57	0.42
1:A:494:GLN:O	1:A:576:GLU:HG2	2.19	0.42
3:A:599:NAG:C5	3:A:599:NAG:O6	2.57	0.42
1:A:102:LEU:HB2	1:A:130:THR:C	2.39	0.42
1:A:369:LEU:HG	1:A:374:TYR:CD1	2.55	0.42
1:A:496:PRO:HB3	1:A:577:GLY:C	2.40	0.42
1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:CD1	2.82	0.42
1:A:269:PRO:O	1:A:270:PHE:C	2.58	0.42
1:A:69:PHE:C	1:A:70:THR:O	2.56	0.42
1:A:209:ILE:HD12	1:A:209:ILE:H	1.82	0.42
1:A:233:LEU:HB3	1:A:235:TYR:HE1	1.79	0.42
1:A:219:LYS:HA	1:A:263:THR:HA	2.00	0.42
1:A:3:LEU:HD13	1:A:3:LEU:N	2.31	0.42
1:A:38:VAL:CB	1:A:42:TYR:CB	2.98	0.42
1:A:74:SER:OG	1:A:75:LEU:N	2.52	0.42
1:A:31:LYS:HA	1:A:34:ASP:HB2	2.01	0.42
1:A:13:SER:OG	1:A:97:THR:HG22	2.20	0.42
1:A:99:ILE:HD12	1:A:99:ILE:N	2.24	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:429:LYS:O	1:A:430:LYS:CB	2.60	0.42
1:A:309:SER:OG	1:A:450:GLN:CB	2.68	0.42
1:A:70:THR:HG23	1:A:71:ASP:N	2.34	0.42
1:A:193:ASP:OD1	1:A:195:VAL:HG12	2.20	0.42
1:A:464:LEU:HG	1:A:464:LEU:H	1.49	0.42
1:A:358:TYR:CD2	1:A:365:LEU:CD2	2.94	0.42
1:A:216:SER:O	1:A:267:LEU:N	2.49	0.42
1:A:439:SER:CB	1:A:523:ASP:OD2	2.68	0.42
1:A:534:ILE:HG12	1:A:534:ILE:H	1.77	0.41
1:A:279:CYS:O	1:A:289:SER:OG	2.34	0.41
1:A:430:LYS:HA	1:A:453:GLY:N	2.35	0.41
1:A:124:TRP:O	1:A:125:ASP:OD2	2.37	0.41
1:A:33:MET:HG2	1:A:33:MET:O	2.19	0.41
1:A:86:PHE:C	1:A:88:GLN:N	2.73	0.41
1:A:234:LYS:NZ	1:A:288:TRP:CZ2	2.85	0.41
1:A:464:LEU:HD12	1:A:464:LEU:C	2.40	0.41
1:A:9:ILE:HD13	1:A:96:ILE:CG1	2.39	0.41
1:A:202:PRO:HA	1:A:203:PRO:HD2	1.55	0.41
1:A:280:MET:HG2	1:A:288:TRP:CE3	2.55	0.41
1:A:168:TYR:CD1	1:A:195:VAL:HA	2.55	0.41
1:A:548:VAL:HG12	1:A:552:HIS:ND1	2.29	0.41
1:A:575:ASP:HA	6:A:606:NAG:C6	2.51	0.41
1:A:381:ARG:HG2	1:A:382:ASN:H	1.86	0.41
1:A:406:MET:HG2	1:A:407:ASP:N	2.29	0.41
1:A:315:ASP:OD2	1:A:316:PRO:HD2	2.20	0.41
1:A:9:ILE:HB	1:A:10:SER:H	1.56	0.41
1:A:13:SER:CB	1:A:14:PRO:HD3	2.48	0.41
1:A:9:ILE:CD1	1:A:96:ILE:HG13	2.37	0.41
1:A:147:PHE:CE2	1:A:164:TYR:CE2	3.09	0.41
1:A:7:GLY:HA3	1:A:28:LEU:N	2.35	0.41
1:A:235:TYR:HA	1:A:279:CYS:HA	2.02	0.41
1:A:123:GLU:OE2	1:A:159:SER:CB	2.67	0.41
1:A:348:LEU:HD22	1:A:348:LEU:HA	1.32	0.41
1:A:435:TRP:HB2	1:A:472:ILE:HG12	2.03	0.41
1:A:125:ASP:N	1:A:125:ASP:OD2	2.53	0.41
1:A:129:GLU:CG	1:A:131:HIS:CE1	3.03	0.41
1:A:302:ASP:C	1:A:384:VAL:HG11	2.40	0.41
1:A:382:ASN:C	1:A:384:VAL:N	2.63	0.41
1:A:219:LYS:HB2	1:A:263:THR:HG22	2.02	0.41
1:A:528:PHE:CB	1:A:530:ARG:NH2	2.84	0.41
1:A:561:THR:CB	1:A:564:THR:OG1	2.56	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:464:LEU:HD11	1:A:492:LEU:HD22	1.98	0.41
1:A:147:PHE:C	1:A:148:ALA:O	2.59	0.41
1:A:538:THR:HG22	1:A:566:TYR:HE1	1.76	0.41
1:A:107:PRO:HG3	1:A:176:VAL:O	2.21	0.41
1:A:561:THR:CG2	1:A:562:SER:H	2.33	0.41
1:A:414:ASP:O	1:A:415:ASN:HB2	2.21	0.41
1:A:469:CYS:SG	1:A:491:TYR:CE1	3.06	0.41
1:A:86:PHE:C	1:A:88:GLN:H	2.23	0.41
1:A:502:THR:HA	1:A:582:PRO:CD	2.51	0.41
1:A:569:ARG:HB2	1:A:583:GLU:CB	2.51	0.41
1:A:113:ILE:HG12	1:A:197:LYS:O	2.20	0.41
1:A:148:ALA:C	1:A:149:ASP:OD2	2.59	0.41
1:A:354:HIS:C	1:A:355:LEU:CG	2.87	0.41
1:A:491:TYR:HD2	1:A:494:GLN:HG2	1.86	0.40
1:A:16:VAL:CB	1:A:100:SER:HA	2.51	0.40
1:A:266:ASP:OD2	1:A:266:ASP:O	2.39	0.40
1:A:283:ASP:OD2	1:A:285:LYS:HB2	2.21	0.40
1:A:52:ILE:N	1:A:52:ILE:HD12	2.37	0.40
1:A:60:ILE:C	1:A:61:ASN:OD1	2.59	0.40
1:A:514:VAL:HA	1:A:556:THR:HA	2.02	0.40
1:A:303:ARG:N	1:A:384:VAL:CG1	2.85	0.40
1:A:266:ASP:O	1:A:266:ASP:CG	2.59	0.40
1:A:239:TYR:CB	1:A:275:PHE:CD2	3.05	0.40
1:A:180:ASN:HD21	1:A:182:LEU:H	1.68	0.40
1:A:534:ILE:HG21	1:A:534:ILE:HD12	1.87	0.40
1:A:139:LYS:HA	1:A:139:LYS:HD2	1.72	0.40
1:A:346:VAL:HA	1:A:377:THR:O	2.22	0.40
1:A:535:PHE:HB3	1:A:544:THR:O	2.16	0.40
1:A:142:TRP:HD1	1:A:172:ILE:CG1	2.32	0.40
1:A:214:LEU:HA	1:A:214:LEU:HD22	1.64	0.40
1:A:265:GLN:O	1:A:266:ASP:HB3	2.21	0.40
1:A:360:VAL:CG1	1:A:362:ALA:C	2.90	0.40
1:A:408:LEU:HD21	1:A:488:ILE:CG2	2.52	0.40
1:A:344:TYR:CD2	1:A:380:VAL:CG2	3.02	0.40
1:A:430:LYS:CE	1:A:450:GLN:NE2	2.85	0.40
1:A:23:THR:O	1:A:23:THR:HG23	2.19	0.40
1:A:486:GLU:HA	1:A:486:GLU:OE1	2.22	0.40

All (1) symmetry-related close contacts are listed below. The label for Atom-2 includes the symmetry operator and encoded unit-cell translations to be applied.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:171:ASN:ND2	2:A:592:SO4:O4[2_646]	2.11	0.09

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	575/589 (98%)	350 (61%)	101 (18%)	124 (22%)	0 1

All (124) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	5	PRO
1	A	6	CYS
1	A	14	PRO
1	A	15	VAL
1	A	18	LEU
1	A	42	TYR
1	A	46	LYS
1	A	47	THR
1	A	48	ASN
1	A	50	PHE
1	A	62	ARG
1	A	65	SER
1	A	70	THR
1	A	86	PHE
1	A	88	GLN
1	A	103	PRO
1	A	104	PRO
1	A	105	GLU
1	A	129	GLU
1	A	130	THR
1	A	133	GLU
1	A	143	ALA
1	A	148	ALA

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	152	ALA
1	A	159	SER
1	A	160	CYS
1	A	162	VAL
1	A	170	VAL
1	A	210	ASN
1	A	222	TRP
1	A	258	THR
1	A	262	PHE
1	A	293	GLU
1	A	300	TYR
1	A	306	LYS
1	A	307	ALA
1	A	317	SER
1	A	320	GLN
1	A	334	PRO
1	A	351	TRP
1	A	352	LYS
1	A	353	SER
1	A	354	HIS
1	A	360	VAL
1	A	383	LEU
1	A	386	LYS
1	A	388	ASP
1	A	398	ASP
1	A	401	ALA
1	A	403	HIS
1	A	412	PRO
1	A	413	LYS
1	A	427	SER
1	A	430	LYS
1	A	441	LYS
1	A	442	ALA
1	A	443	PRO
1	A	454	THR
1	A	455	VAL
1	A	508	VAL
1	A	511	ASN
1	A	522	VAL
1	A	550	SER
1	A	556	THR
1	A	569	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	575	ASP
1	A	587	THR
1	A	41	ASN
1	A	53	PRO
1	A	64	ALA
1	A	77	ILE
1	A	85	THR
1	A	92	ASN
1	A	110	LEU
1	A	131	HIS
1	A	195	VAL
1	A	203	PRO
1	A	211	SER
1	A	213	GLU
1	A	226	SER
1	A	230	VAL
1	A	242	LYS
1	A	302	ASP
1	A	315	ASP
1	A	335	PHE
1	A	384	VAL
1	A	432	ILE
1	A	453	GLY
1	A	504	ARG
1	A	507	LYS
1	A	549	ASP
1	A	555	TYR
1	A	559	SER
1	A	576	GLU
1	A	10	SER
1	A	52	ILE
1	A	251	PRO
1	A	343	ASP
1	A	467	SER
1	A	490	ALA
1	A	530	ARG
1	A	563	ASP
1	A	24	ALA
1	A	201	ASN
1	A	375	LEU
1	A	402	THR
1	A	439	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	497	PRO
1	A	512	GLU
1	A	543	GLU
1	A	582	PRO
1	A	37	HIS
1	A	63	THR
1	A	96	ILE
1	A	202	PRO
1	A	405	VAL
1	A	523	ASP
1	A	544	THR
1	A	303	ARG
1	A	404	PRO
1	A	316	PRO
1	A	9	ILE
1	A	59	ILE
1	A	60	ILE

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 X-ray entries followed by that with respect to entries of similar resolution.

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	468/534 (88%)	303 (65%)	165 (35%)	0 2

All (165) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2	LEU
1	A	3	LEU
1	A	4	ASP
1	A	9	ILE
1	A	21	ASN
1	A	25	VAL
1	A	38	VAL
1	A	41	ASN
1	A	43	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	57	TYR
1	A	58	THR
1	A	61	ASN
1	A	63	THR
1	A	68	THR
1	A	71	ASP
1	A	75	LEU
1	A	80	THR
1	A	81	CYS
1	A	82	ASN
1	A	85	THR
1	A	86	PHE
1	A	88	GLN
1	A	89	LEU
1	A	94	TYR
1	A	96	ILE
1	A	97	THR
1	A	98	ILE
1	A	99	ILE
1	A	109	ASN
1	A	113	ILE
1	A	115	ASN
1	A	116	GLU
1	A	123	GLU
1	A	128	ARG
1	A	138	LEU
1	A	142	TRP
1	A	144	THR
1	A	145	HIS
1	A	146	LYS
1	A	149	ASP
1	A	153	LYS
1	A	154	ARG
1	A	156	THR
1	A	160	CYS
1	A	164	TYR
1	A	165	SER
1	A	166	THR
1	A	167	VAL
1	A	170	VAL
1	A	172	ILE
1	A	174	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	180	ASN
1	A	182	LEU
1	A	186	THR
1	A	188	ASP
1	A	190	ILE
1	A	208	VAL
1	A	209	ILE
1	A	215	SER
1	A	216	SER
1	A	217	ILE
1	A	218	LEU
1	A	221	THR
1	A	226	SER
1	A	227	ILE
1	A	230	VAL
1	A	232	ILE
1	A	233	LEU
1	A	235	TYR
1	A	236	ASN
1	A	240	ARG
1	A	241	THR
1	A	243	ASP
1	A	246	THR
1	A	249	GLN
1	A	257	SER
1	A	258	THR
1	A	259	ARG
1	A	261	SER
1	A	262	PHE
1	A	266	ASP
1	A	270	PHE
1	A	276	ARG
1	A	277	ILE
1	A	282	GLU
1	A	287	TYR
1	A	296	SER
1	A	303	ARG
1	A	309	SER
1	A	310	PHE
1	A	311	TRP
1	A	320	GLN
1	A	328	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	335	PHE
1	A	345	GLU
1	A	346	VAL
1	A	348	LEU
1	A	349	THR
1	A	354	HIS
1	A	355	LEU
1	A	366	THR
1	A	367	VAL
1	A	375	LEU
1	A	377	THR
1	A	384	VAL
1	A	386	LYS
1	A	388	ASP
1	A	391	VAL
1	A	393	THR
1	A	397	CYS
1	A	400	GLN
1	A	406	MET
1	A	411	PHE
1	A	412	PRO
1	A	414	ASP
1	A	416	MET
1	A	426	GLU
1	A	429	LYS
1	A	432	ILE
1	A	433	LEU
1	A	435	TRP
1	A	437	VAL
1	A	444	CYS
1	A	445	ILE
1	A	446	THR
1	A	449	GLN
1	A	451	GLU
1	A	454	THR
1	A	455	VAL
1	A	457	ARG
1	A	458	THR
1	A	459	TYR
1	A	460	LEU
1	A	464	LEU
1	A	466	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	473	THR
1	A	477	VAL
1	A	478	TYR
1	A	492	LEU
1	A	508	VAL
1	A	515	LEU
1	A	518	ASP
1	A	520	LEU
1	A	521	PRO
1	A	522	VAL
1	A	523	ASP
1	A	524	VAL
1	A	534	ILE
1	A	535	PHE
1	A	536	TYR
1	A	537	ARG
1	A	540	ILE
1	A	542	ASN
1	A	553	THR
1	A	556	THR
1	A	558	SER
1	A	560	LEU
1	A	562	SER
1	A	564	THR
1	A	565	LEU
1	A	567	MET
1	A	575	ASP
1	A	579	LYS
1	A	580	ASP
1	A	584	PHE

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (13) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	41	ASN
1	A	78	GLN
1	A	82	ASN
1	A	115	ASN
1	A	145	HIS
1	A	180	ASN
1	A	204	HIS
1	A	236	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	249	GLN
1	A	354	HIS
1	A	450	GLN
1	A	494	GLN
1	A	526	ASN

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

5.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

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

5.5 Carbohydrates ⓘ

19 carbohydrates are modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	$\# Z > 2$	Counts	RMSZ	$\# Z > 2$
3	NAG	A	593	1,3	14,14,15	1.17	1 (7%)	15,19,21	1.35	2 (13%)
3	NAG	A	594	3	14,14,15	1.91	3 (21%)	15,19,21	3.39	6 (40%)
4	NDG	A	595	4	14,14,15	0.82	1 (7%)	15,19,21	1.68	4 (26%)
4	NAG	A	596	4	14,14,15	0.83	1 (7%)	15,19,21	1.82	5 (33%)
4	BMA	A	597	4	11,11,12	0.52	0	14,15,17	2.62	8 (57%)
4	BMA	A	598	4	11,11,12	0.83	0	14,15,17	1.62	4 (28%)
3	NAG	A	599	1,3	14,14,15	1.82	2 (14%)	15,19,21	1.89	4 (26%)
3	NAG	A	600	3	14,14,15	1.07	1 (7%)	15,19,21	3.90	4 (26%)
5	NAG	A	601	1,5	14,14,15	0.75	0	15,19,21	2.16	4 (26%)
5	NAG	A	602	5	14,14,15	0.70	0	15,19,21	2.50	5 (33%)
5	BMA	A	603	5	11,11,12	0.52	0	14,15,17	2.00	5 (35%)

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
7	NAG	A	604	1,7	14,14,15	0.99	1 (7%)	15,19,21	3.13	5 (33%)
7	FUC	A	605	7	10,10,11	0.60	0	14,14,16	1.83	4 (28%)
6	NAG	A	606	1,6	14,14,15	0.67	0	15,19,21	1.93	5 (33%)
6	NAG	A	607	6	14,14,15	0.79	0	15,19,21	1.29	1 (6%)
6	BMA	A	608	6	11,11,12	0.70	0	14,15,17	1.98	3 (21%)
6	BMA	A	609	6	11,11,12	0.44	0	14,15,17	1.59	3 (21%)
3	NAG	A	610	1,3	14,14,15	2.03	2 (14%)	15,19,21	10.85	6 (40%)
3	NAG	A	611	3	14,14,15	0.63	0	15,19,21	2.20	6 (40%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
3	NAG	A	593	1,3	-	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NAG	A	594	3	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NDG	A	595	4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	NAG	A	596	4	-	0/6/23/26	0/1/1/1
4	BMA	A	597	4	-	0/2/19/22	0/1/1/1
4	BMA	A	598	4	-	0/2/19/22	0/1/1/1
3	NAG	A	599	1,3	1/1/5/7	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NAG	A	600	3	-	0/6/23/26	0/1/1/1
5	NAG	A	601	1,5	1/1/5/7	0/6/23/26	0/1/1/1
5	NAG	A	602	5	-	0/6/23/26	0/1/1/1
5	BMA	A	603	5	-	0/2/19/22	0/1/1/1
7	NAG	A	604	1,7	-	0/6/23/26	0/1/1/1
7	FUC	A	605	7	-	0/0/17/20	0/1/1/1
6	NAG	A	606	1,6	-	0/6/23/26	0/1/1/1
6	NAG	A	607	6	-	0/6/23/26	0/1/1/1
6	BMA	A	608	6	-	0/2/19/22	0/1/1/1
6	BMA	A	609	6	-	0/2/19/22	1/1/1/1
3	NAG	A	610	1,3	1/1/5/7	0/6/23/26	0/1/1/1
3	NAG	A	611	3	-	0/6/23/26	0/1/1/1

All (12) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
3	A	600	NAG	O5-C1	-2.24	1.40	1.43
4	A	596	NAG	C1-C2	2.03	1.55	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
4	A	595	NDG	C1-C2	2.08	1.55	1.52
3	A	599	NAG	C1-C2	2.44	1.55	1.52
3	A	610	NAG	C6-C5	2.56	1.61	1.51
3	A	594	NAG	C3-C2	2.65	1.58	1.52
3	A	594	NAG	C4-C3	2.72	1.59	1.52
3	A	593	NAG	C1-C2	2.98	1.56	1.52
7	A	604	NAG	C1-C2	3.05	1.56	1.52
3	A	594	NAG	C1-C2	5.45	1.60	1.52
3	A	599	NAG	O6-C6	5.77	1.67	1.42
3	A	610	NAG	C7-N2	6.93	1.60	1.34

All (84) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
3	A	610	NAG	O5-C5-C6	-21.18	61.50	107.35
3	A	600	NAG	C1-O5-C5	-13.79	94.75	112.25
3	A	594	NAG	C1-O5-C5	-11.00	98.29	112.25
7	A	604	NAG	C2-N2-C7	-8.56	112.05	123.04
3	A	610	NAG	O7-C7-N2	-6.31	108.99	121.86
5	A	602	NAG	C4-C3-C2	-5.94	102.00	111.23
6	A	608	BMA	C1-C2-C3	-4.82	103.84	109.54
7	A	604	NAG	C4-C3-C2	-4.39	104.40	111.23
5	A	601	NAG	C1-O5-C5	-4.30	106.79	112.25
7	A	604	NAG	C3-C4-C5	-4.04	103.15	110.20
5	A	603	BMA	C1-C2-C3	-3.99	104.82	109.54
4	A	597	BMA	C1-O5-C5	-3.98	107.20	112.25
6	A	608	BMA	O5-C1-C2	-3.78	104.73	110.86
4	A	597	BMA	C3-C4-C5	-3.75	103.67	110.20
4	A	597	BMA	C2-C3-C4	-3.66	104.82	111.04
4	A	596	NAG	C2-N2-C7	-3.65	118.35	123.04
7	A	605	FUC	C2-C3-C4	-3.42	105.23	111.04
6	A	607	NAG	C2-N2-C7	-3.14	119.00	123.04
6	A	606	NAG	C6-C5-C4	-3.13	105.29	113.02
4	A	598	BMA	C1-O5-C5	-2.97	108.48	112.25
3	A	600	NAG	C2-N2-C7	-2.93	119.28	123.04
4	A	596	NAG	C3-C2-N2	-2.91	103.58	110.56
4	A	597	BMA	C1-C2-C3	-2.84	106.19	109.54
5	A	603	BMA	O5-C1-C2	-2.80	106.31	110.86
4	A	598	BMA	O5-C1-C2	-2.80	106.31	110.86
5	A	603	BMA	C1-O5-C5	-2.80	108.69	112.25
3	A	594	NAG	O6-C6-C5	-2.75	102.25	111.33
4	A	595	NDG	O7-C7-C8	-2.73	117.05	122.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
5	A	603	BMA	C2-C3-C4	-2.70	106.45	111.04
6	A	609	BMA	C6-C5-C4	-2.56	106.69	113.02
6	A	606	NAG	C3-C2-N2	-2.56	104.44	110.56
3	A	611	NAG	C2-N2-C7	-2.55	119.76	123.04
5	A	602	NAG	C3-C4-C5	-2.54	105.77	110.20
3	A	599	NAG	O3-C3-C2	-2.40	104.37	109.11
3	A	611	NAG	C3-C2-N2	-2.09	105.55	110.56
3	A	593	NAG	C1-O5-C5	2.03	114.82	112.25
3	A	599	NAG	O3-C3-C4	2.04	114.92	110.34
5	A	602	NAG	O4-C4-C3	2.04	114.93	110.34
6	A	606	NAG	C2-N2-C7	2.08	125.71	123.04
3	A	611	NAG	O3-C3-C4	2.16	115.21	110.34
4	A	596	NAG	O3-C3-C4	2.19	115.26	110.34
6	A	609	BMA	O4-C4-C3	2.23	115.36	110.34
3	A	594	NAG	C3-C2-N2	2.30	116.06	110.56
3	A	594	NAG	C2-N2-C7	2.33	126.03	123.04
5	A	603	BMA	O5-C5-C6	2.33	112.39	107.35
3	A	600	NAG	O5-C5-C6	2.40	112.54	107.35
4	A	595	NDG	O7-C7-N2	2.44	126.85	121.86
5	A	601	NAG	O7-C7-N2	2.49	126.93	121.86
4	A	596	NAG	C3-C4-C5	2.49	114.54	110.20
4	A	595	NDG	C2-N2-C7	2.52	126.28	123.04
3	A	610	NAG	C1-O5-C5	2.54	115.48	112.25
4	A	598	BMA	C2-C3-C4	2.58	115.42	111.04
3	A	594	NAG	C3-C4-C5	2.59	114.71	110.20
3	A	600	NAG	C6-C5-C4	2.64	119.54	113.02
7	A	605	FUC	O5-C5-C6	2.65	110.51	106.13
4	A	595	NDG	O4-C4-C5	2.66	116.28	109.24
7	A	605	FUC	O2-C2-C1	2.71	114.64	109.21
4	A	596	NAG	O4-C4-C5	2.72	116.44	109.24
4	A	598	BMA	C3-C4-C5	2.79	115.06	110.20
6	A	608	BMA	O5-C5-C6	2.80	113.40	107.35
4	A	597	BMA	C6-C5-C4	2.86	120.06	113.02
4	A	597	BMA	O4-C4-C5	2.90	116.94	109.24
4	A	597	BMA	O5-C1-C2	2.97	115.67	110.86
5	A	601	NAG	O5-C5-C6	2.99	113.82	107.35
6	A	606	NAG	C1-O5-C5	3.11	116.20	112.25
3	A	593	NAG	O4-C4-C5	3.12	117.51	109.24
3	A	611	NAG	C4-C3-C2	3.16	116.15	111.23
5	A	602	NAG	C3-C2-N2	3.29	118.44	110.56
4	A	597	BMA	O5-C5-C6	3.32	114.53	107.35
6	A	606	NAG	C4-C3-C2	3.34	116.43	111.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
3	A	594	NAG	C6-C5-C4	3.36	121.31	113.02
7	A	604	NAG	O5-C5-C6	3.45	114.81	107.35
3	A	599	NAG	O4-C4-C3	3.49	118.19	110.34
6	A	609	BMA	O5-C5-C6	3.56	115.06	107.35
7	A	605	FUC	C1-O5-C5	3.65	118.01	112.38
3	A	611	NAG	C1-O5-C5	3.80	117.07	112.25
7	A	604	NAG	C1-O5-C5	4.32	117.72	112.25
3	A	599	NAG	C1-O5-C5	4.51	117.97	112.25
5	A	602	NAG	O3-C3-C2	4.62	118.27	109.11
3	A	611	NAG	C3-C4-C5	4.78	118.53	110.20
5	A	601	NAG	C2-N2-C7	4.80	129.20	123.04
3	A	610	NAG	O6-C6-C5	6.28	132.10	111.33
3	A	610	NAG	C8-C7-N2	7.63	130.71	116.11
3	A	610	NAG	C2-N2-C7	34.12	166.88	123.04

All (3) chirality outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atom
5	A	601	NAG	C1
3	A	610	NAG	C1
3	A	599	NAG	C1

There are no torsion outliers.

All (1) ring outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
6	A	609	BMA	C1-C2-C3-C4-C5-O5

19 monomers are involved in 69 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
3	A	593	NAG	3	0
3	A	594	NAG	2	0
4	A	595	NDG	4	0
4	A	596	NAG	7	0
4	A	597	BMA	6	0
4	A	598	BMA	3	0
3	A	599	NAG	15	0
3	A	600	NAG	3	0
5	A	601	NAG	3	0
5	A	602	NAG	9	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
5	A	603	BMA	4	0
7	A	604	NAG	7	0
7	A	605	FUC	4	0
6	A	606	NAG	6	0
6	A	607	NAG	2	0
6	A	608	BMA	2	0
6	A	609	BMA	2	0
3	A	610	NAG	9	0
3	A	611	NAG	9	0

5.6 Ligand geometry

3 ligands are modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	$\# Z > 2$	Counts	RMSZ	$\# Z > 2$
2	SO4	A	1	-	4,4,4	0.16	0	6,6,6	0.38	0
2	SO4	A	591	-	4,4,4	0.15	0	6,6,6	0.15	0
2	SO4	A	592	-	4,4,4	0.08	0	6,6,6	0.42	0

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	SO4	A	1	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	A	591	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0
2	SO4	A	592	-	-	0/0/0/0	0/0/0/0

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.

1 monomer is involved in 1 short contact:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
2	A	592	SO4	0	1

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

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

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

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

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	A	585/589 (99%)	-0.32	9 (1%) 76 64	77, 92, 104, 109	1 (0%)

All (9) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	5	PRO	3.6
1	A	79	LEU	3.5
1	A	26	CYS	3.2
1	A	67	VAL	3.0
1	A	82	ASN	2.3
1	A	91	GLN	2.2
1	A	39	ASN	2.2
1	A	7	GLY	2.0
1	A	495	ALA	2.0

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

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

6.3 Carbohydrates [i](#)

In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. LLDF column lists the quality of electron density of the group with respect to its neighbouring residues in protein, DNA or RNA chains. The B-factors column lists the minimum, median, 95th percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled ‘Q< 0.9’ lists the number of atoms with occupancy less than 0.9.

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	LLDF	B-factors(Å ²)	Q<0.9
6	NAG	A	606	14/15	0.91	0.23	0.44	98,103,111,112	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	LLDF	B-factors(\AA^2)	Q<0.9
6	NAG	A	607	14/15	0.87	0.25	0.05	96,98,100,100	14
5	NAG	A	601	14/15	0.91	0.15	-	108,116,118,118	0
4	NDG	A	595	14/15	0.91	0.48	-	125,131,136,136	0
4	BMA	A	598	11/12	0.33	0.52	-	130,131,132,132	11
7	FUC	A	605	10/11	0.87	0.14	-	125,126,128,128	10
3	NAG	A	611	14/15	0.56	0.36	-	147,151,152,152	5
3	NAG	A	593	14/15	0.86	0.23	-	101,108,113,119	0
5	NAG	A	602	14/15	0.86	0.29	-	119,126,134,135	0
3	NAG	A	600	14/15	0.92	0.18	-	129,131,136,136	0
3	NAG	A	594	14/15	0.78	0.18	-	114,118,121,121	0
7	NAG	A	604	14/15	0.84	0.15	-	126,130,131,132	0
3	NAG	A	610	14/15	0.71	0.43	-	20,152,154,154	6
5	BMA	A	603	11/12	0.86	0.22	-	104,111,113,114	11
6	BMA	A	609	11/12	0.74	0.26	-	103,105,106,106	11
4	BMA	A	597	11/12	0.65	0.34	-	133,135,135,136	11
6	BMA	A	608	11/12	0.79	0.24	-	98,100,101,103	11
4	NAG	A	596	14/15	0.90	0.41	-	134,138,140,140	0
3	NAG	A	599	14/15	0.94	0.29	-	119,121,123,126	6

6.4 Ligands ⓘ

In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. LLDF column lists the quality of electron density of the group with respect to its neighbouring residues in protein, DNA or RNA chains. The B-factors column lists the minimum, median, 95th percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled 'Q< 0.9' lists the number of atoms with occupancy less than 0.9.

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	LLDF	B-factors(\AA^2)	Q<0.9
2	SO4	A	592	5/5	0.96	0.53	9.89	59,59,60,60	5
2	SO4	A	591	5/5	0.91	0.41	-	137,137,138,138	5
2	SO4	A	1	5/5	0.93	0.36	-	111,112,112,112	5

6.5 Other polymers ⓘ

There are no such residues in this entry.