



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Jan 31, 2016 – 09:58 PM GMT

PDB ID : 1RHD
Title : STRUCTURE OF BOVINE LIVER RHODANESE. I. STRUCTURE DETERMINATION AT 2.5 ANGSTROMS RESOLUTION AND A COMPARISON OF THE CONFORMATION AND SEQUENCE OF ITS TWO DOMAINS
Authors : Hol, W.G.J.; Ploegman, J.H.; Kalk, K.H.; Drent, G.
Deposited on : 1977-11-23
Resolution : 2.50 Å(reported)

This is a Full wwPDB X-ray Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.
We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org
A user guide is available at
<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) : **NOT EXECUTED**
EDS : **NOT EXECUTED**
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : trunk26865

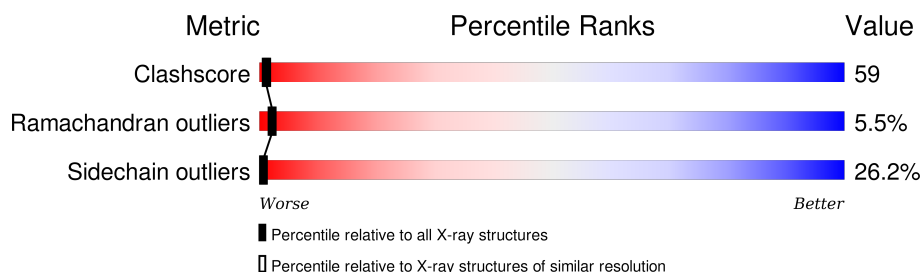
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 2.50 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	102246	4242 (2.50-2.50)
Ramachandran outliers	100387	4156 (2.50-2.50)
Sidechain outliers	100360	4158 (2.50-2.50)

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.

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	293	

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
1	CSS	A	247	-	-	X	-

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2326 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 RHODANESE.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	293	Total	C	N	O	S	0	0	0
			2326	1486	406	424	10			

There are 3 discrepancies between the modelled and reference sequences:

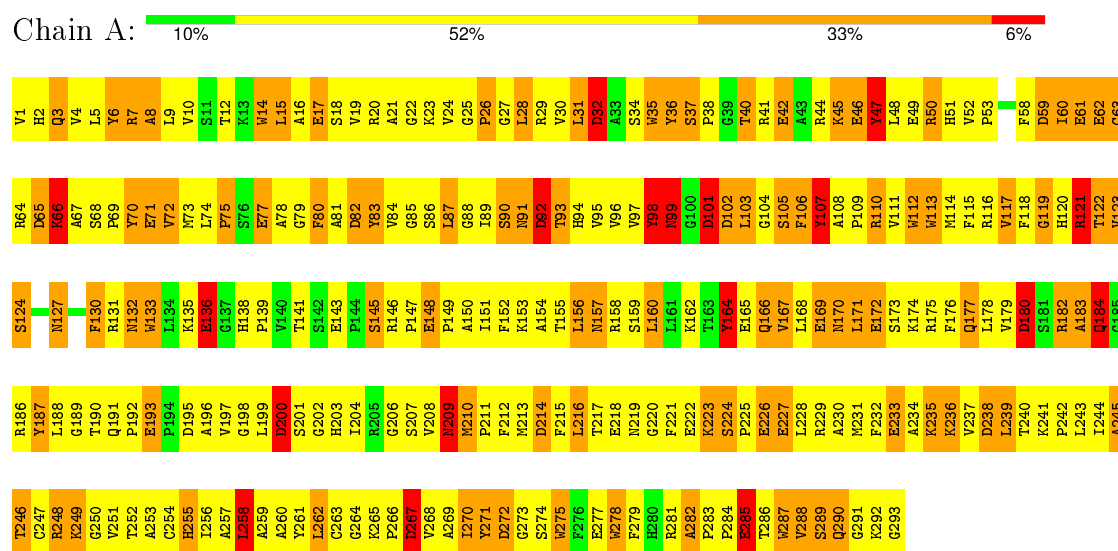
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	99	ASN	ASP	CONFLICT	UNP P00586
A	214	ASP	ASN	CONFLICT	UNP P00586
A	219	ASN	ASP	CONFLICT	UNP P00586

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 ($RSRZ > 2$). 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.

Note EDS was not executed.

• Molecule 1: RHODANESE



4 Data and refinement statistics

Xtriage (Phenix) and EDS were not executed - this section will therefore be incomplete.

Property	Value	Source
Space group	C 1 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	156.10 Å 49.00 Å 42.20 Å 90.00° 98.60° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	(Not available) – 2.50	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	(Not available) ((Not available)-2.50)	Depositor
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
Refinement program	unknown	Depositor
R, R_{free}	(Not available) , (Not available)	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	2326	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	0.0	wwPDB-VP

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	1.36	38/2385 (1.6%)	1.62	80/3235 (2.5%)

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

All (38) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	275	TRP	NE1-CE2	-7.37	1.27	1.37
1	A	112	TRP	NE1-CE2	-7.37	1.27	1.37
1	A	35	TRP	NE1-CE2	-7.37	1.27	1.37
1	A	278	TRP	NE1-CE2	-7.36	1.27	1.37
1	A	14	TRP	NE1-CE2	-7.34	1.28	1.37
1	A	287	TRP	NE1-CE2	-7.33	1.28	1.37
1	A	133	TRP	NE1-CE2	-7.29	1.28	1.37
1	A	113	TRP	NE1-CE2	-7.29	1.28	1.37
1	A	127	ASN	CG-OD1	7.03	1.39	1.24
1	A	157	ASN	CG-OD1	7.03	1.39	1.24
1	A	170	ASN	CG-OD1	7.03	1.39	1.24
1	A	99	ASN	CG-OD1	7.02	1.39	1.24
1	A	132	ASN	CG-OD1	7.01	1.39	1.24
1	A	91	ASN	CG-OD1	7.00	1.39	1.24
1	A	219	ASN	CG-OD1	6.99	1.39	1.24
1	A	209	ASN	CG-OD1	6.98	1.39	1.24
1	A	233	GLU	CD-OE1	-5.28	1.19	1.25
1	A	285	GLU	CD-OE1	-5.27	1.19	1.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	42	GLU	CD-OE1	-5.26	1.19	1.25
1	A	165	GLU	CD-OE1	-5.26	1.19	1.25
1	A	172	GLU	CD-OE1	-5.26	1.19	1.25
1	A	193	GLU	CD-OE1	-5.25	1.19	1.25
1	A	143	GLU	CD-OE1	-5.25	1.19	1.25
1	A	218	GLU	CD-OE1	-5.25	1.19	1.25
1	A	169	GLU	CD-OE1	-5.25	1.19	1.25
1	A	222	GLU	CD-OE1	-5.24	1.19	1.25
1	A	61	GLU	CD-OE1	-5.22	1.20	1.25
1	A	148	GLU	CD-OE1	-5.22	1.20	1.25
1	A	277	GLU	CD-OE1	-5.22	1.20	1.25
1	A	17	GLU	CD-OE1	-5.21	1.20	1.25
1	A	49	GLU	CD-OE1	-5.21	1.20	1.25
1	A	46	GLU	CD-OE1	-5.21	1.20	1.25
1	A	136	GLU	CD-OE1	-5.21	1.20	1.25
1	A	62	GLU	CD-OE1	-5.19	1.20	1.25
1	A	71	GLU	CD-OE1	-5.19	1.20	1.25
1	A	226	GLU	CD-OE1	-5.16	1.20	1.25
1	A	227	GLU	CD-OE1	-5.14	1.20	1.25
1	A	77	GLU	CD-OE1	-5.13	1.20	1.25

All (80) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	282	ALA	N-CA-CB	-8.65	97.98	110.10
1	A	195	ASP	CB-CG-OD1	7.39	124.95	118.30
1	A	238	ASP	CB-CG-OD1	7.36	124.93	118.30
1	A	102	ASP	CB-CG-OD1	7.35	124.91	118.30
1	A	214	ASP	CB-CG-OD1	7.34	124.91	118.30
1	A	92	ASP	CB-CG-OD1	7.34	124.91	118.30
1	A	65	ASP	CB-CG-OD1	7.33	124.90	118.30
1	A	272	ASP	CB-CG-OD1	7.32	124.89	118.30
1	A	180	ASP	CB-CG-OD1	7.32	124.89	118.30
1	A	267	ASP	CB-CG-OD1	7.29	124.86	118.30
1	A	200	ASP	CB-CG-OD1	7.28	124.85	118.30
1	A	59	ASP	CB-CG-OD1	7.28	124.85	118.30
1	A	101	ASP	CB-CG-OD1	7.26	124.84	118.30
1	A	32	ASP	CB-CG-OD1	7.25	124.82	118.30
1	A	82	ASP	CB-CG-OD1	7.24	124.82	118.30
1	A	258	LEU	N-CA-C	-7.21	91.54	111.00
1	A	282	ALA	N-CA-C	6.95	129.77	111.00
1	A	70	TYR	N-CA-C	5.96	127.09	111.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	267	ASP	N-CA-C	5.87	126.86	111.00
1	A	46	GLU	OE1-CD-OE2	5.83	130.29	123.30
1	A	136	GLU	OE1-CD-OE2	5.83	130.29	123.30
1	A	172	GLU	OE1-CD-OE2	5.82	130.28	123.30
1	A	169	GLU	OE1-CD-OE2	5.81	130.28	123.30
1	A	222	GLU	OE1-CD-OE2	5.80	130.26	123.30
1	A	148	GLU	OE1-CD-OE2	5.80	130.26	123.30
1	A	143	GLU	OE1-CD-OE2	5.79	130.25	123.30
1	A	71	GLU	OE1-CD-OE2	5.79	130.25	123.30
1	A	165	GLU	OE1-CD-OE2	5.79	130.25	123.30
1	A	193	GLU	OE1-CD-OE2	5.79	130.25	123.30
1	A	226	GLU	OE1-CD-OE2	5.79	130.24	123.30
1	A	233	GLU	OE1-CD-OE2	5.78	130.23	123.30
1	A	277	GLU	OE1-CD-OE2	5.78	130.23	123.30
1	A	42	GLU	OE1-CD-OE2	5.78	130.23	123.30
1	A	77	GLU	OE1-CD-OE2	5.77	130.23	123.30
1	A	49	GLU	OE1-CD-OE2	5.76	130.22	123.30
1	A	61	GLU	OE1-CD-OE2	5.76	130.21	123.30
1	A	285	GLU	OE1-CD-OE2	5.76	130.21	123.30
1	A	227	GLU	OE1-CD-OE2	5.75	130.21	123.30
1	A	218	GLU	OE1-CD-OE2	5.75	130.20	123.30
1	A	62	GLU	OE1-CD-OE2	5.75	130.20	123.30
1	A	17	GLU	OE1-CD-OE2	5.74	130.19	123.30
1	A	8	ALA	N-CA-CB	-5.67	102.17	110.10
1	A	184	GLN	N-CA-C	5.56	126.01	111.00
1	A	245	ALA	N-CA-CB	-5.40	102.54	110.10
1	A	63	CYS	N-CA-C	-5.32	96.65	111.00
1	A	172	GLU	CG-CD-OE2	-5.20	107.91	118.30
1	A	143	GLU	CG-CD-OE2	-5.17	107.95	118.30
1	A	169	GLU	CG-CD-OE2	-5.17	107.95	118.30
1	A	165	GLU	CG-CD-OE2	-5.17	107.96	118.30
1	A	222	GLU	CG-CD-OE2	-5.17	107.96	118.30
1	A	136	GLU	CG-CD-OE2	-5.17	107.96	118.30
1	A	46	GLU	CG-CD-OE2	-5.17	107.97	118.30
1	A	193	GLU	CG-CD-OE2	-5.17	107.97	118.30
1	A	42	GLU	CG-CD-OE2	-5.16	107.98	118.30
1	A	148	GLU	CG-CD-OE2	-5.16	107.98	118.30
1	A	71	GLU	CG-CD-OE2	-5.16	107.99	118.30
1	A	218	GLU	CG-CD-OE2	-5.16	107.99	118.30
1	A	233	GLU	CG-CD-OE2	-5.15	107.99	118.30
1	A	226	GLU	CG-CD-OE2	-5.15	108.00	118.30
1	A	285	GLU	CG-CD-OE2	-5.15	107.99	118.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	277	GLU	CG-CD-OE2	-5.15	108.00	118.30
1	A	61	GLU	CG-CD-OE2	-5.15	108.01	118.30
1	A	49	GLU	CG-CD-OE2	-5.14	108.01	118.30
1	A	62	GLU	CG-CD-OE2	-5.14	108.02	118.30
1	A	17	GLU	CG-CD-OE2	-5.13	108.03	118.30
1	A	77	GLU	CG-CD-OE2	-5.13	108.04	118.30
1	A	271	TYR	N-CA-C	-5.12	97.17	111.00
1	A	227	GLU	CG-CD-OE2	-5.12	108.06	118.30
1	A	107	TYR	CB-CG-CD2	-5.10	117.94	121.00
1	A	47	TYR	CB-CG-CD2	-5.09	117.94	121.00
1	A	187	TYR	CB-CG-CD2	-5.07	117.96	121.00
1	A	70	TYR	CB-CG-CD2	-5.06	117.96	121.00
1	A	164	TYR	CB-CG-CD2	-5.06	117.96	121.00
1	A	271	TYR	CB-CG-CD2	-5.06	117.96	121.00
1	A	83	TYR	CB-CG-CD2	-5.05	117.97	121.00
1	A	36	TYR	CB-CG-CD2	-5.03	117.98	121.00
1	A	6	TYR	CB-CG-CD2	-5.03	117.98	121.00
1	A	98	TYR	CB-CG-CD2	-5.02	117.99	121.00
1	A	145	SER	N-CA-C	-5.01	97.47	111.00
1	A	37	SER	N-CA-C	5.01	124.52	111.00

There are no chirality outliers.

All (3) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	121	ARG	Sidechain
1	A	131	ARG	Sidechain
1	A	50	ARG	Sidechain

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	2326	0	2263	273	1073
All	All	2326	0	2263	273	1073

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 59.

All (273) 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:258:LEU:O	1:A:262:LEU:HG	1.19	1.28
1:A:257:ALA:O	1:A:261:TYR:HB2	1.54	1.07
1:A:37:SER:HB3	1:A:38:PRO:HD2	1.36	1.06
1:A:40:THR:HG22	1:A:41:ARG:HG3	1.36	1.04
1:A:258:LEU:O	1:A:262:LEU:CG	2.06	1.02
1:A:176:PHE:CD1	1:A:244:ILE:HG13	1.95	1.01
1:A:65:ASP:OD1	1:A:67:ALA:HB3	1.60	1.00
1:A:247:CSS:O	1:A:274:SER:HB3	1.61	0.99
1:A:257:ALA:O	1:A:261:TYR:CB	2.10	0.98
1:A:6:TYR:CE2	1:A:122:THR:HA	1.98	0.97
1:A:113:TRP:O	1:A:116:ARG:N	2.02	0.93
1:A:12:THR:HG21	1:A:136:GLU:OE1	1.70	0.92
1:A:159:SER:O	1:A:269:ALA:HB2	1.69	0.92
1:A:258:LEU:HD22	1:A:262:LEU:HD21	1.53	0.91
1:A:200:ASP:HB2	1:A:279:PHE:CE1	2.07	0.90
1:A:224:SER:HB2	1:A:225:PRO:HD2	1.54	0.89
1:A:224:SER:CB	1:A:225:PRO:HD2	2.03	0.88
1:A:209:ASN:O	1:A:235:LYS:HE2	1.74	0.88
1:A:110:ARG:HB2	1:A:251:VAL:HG13	1.56	0.87
1:A:176:PHE:HD1	1:A:244:ILE:HG13	1.39	0.87
1:A:108:ALA:N	1:A:109:PRO:HD2	1.92	0.85
1:A:30:VAL:HG22	1:A:96:VAL:HB	1.58	0.84
1:A:167:VAL:HG12	1:A:278:TRP:CZ3	2.13	0.83
1:A:241:LYS:HB3	1:A:242:PRO:HD2	1.61	0.82
1:A:81:ALA:HB1	1:A:152:PHE:O	1.79	0.82
1:A:186:ARG:NH2	1:A:193:GLU:OE1	2.13	0.81
1:A:113:TRP:HE1	1:A:160:LEU:HB3	1.44	0.81
1:A:52:VAL:HG13	1:A:53:PRO:HD2	1.61	0.81
1:A:110:ARG:C	1:A:110:ARG:HD3	2.00	0.81
1:A:184:GLN:HA	1:A:209:ASN:OD1	1.81	0.80
1:A:132:ASN:O	1:A:136:GLU:HB2	1.83	0.79
1:A:176:PHE:CD1	1:A:244:ILE:CG1	2.67	0.78
1:A:82:ASP:O	1:A:86:SER:HB2	1.84	0.77
1:A:257:ALA:O	1:A:261:TYR:N	2.17	0.77
1:A:151:ILE:CG2	1:A:151:ILE:O	2.33	0.77
1:A:193:GLU:HB3	1:A:248:ARG:HH11	1.48	0.77
1:A:138:HIS:HB3	1:A:139:PRO:HD2	1.64	0.77
1:A:217:THR:HG23	1:A:221:PHE:O	1.84	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:94:HIS:NE2	1:A:124:SER:OG	2.14	0.76
1:A:184:GLN:O	1:A:188:LEU:HB2	1.86	0.76
1:A:99:ASN:HD21	1:A:105:SER:HA	1.51	0.76
1:A:186:ARG:HG3	1:A:186:ARG:NH1	2.00	0.76
1:A:164:TYR:HE2	1:A:282:ALA:HB2	1.51	0.75
1:A:186:ARG:HG3	1:A:186:ARG:HH11	1.50	0.75
1:A:32:ASP:HB2	1:A:98:TYR:CE1	2.22	0.75
1:A:80:PHE:CD1	1:A:118:PHE:CE2	2.75	0.75
1:A:177:GLN:NE2	1:A:238:ASP:O	2.20	0.75
1:A:34:SER:HB3	1:A:99:ASN:HA	1.69	0.74
1:A:170:ASN:HA	1:A:173:SER:HB2	1.69	0.74
1:A:105:SER:HB3	1:A:255:HIS:NE2	2.02	0.74
1:A:241:LYS:CB	1:A:242:PRO:HD2	2.17	0.74
1:A:196:ALA:HB1	1:A:199:LEU:HB3	1.70	0.73
1:A:173:SER:O	1:A:174:LYS:HB2	1.89	0.73
1:A:211:PRO:HG2	1:A:214:ASP:OD2	1.90	0.71
1:A:164:TYR:CG	1:A:164:TYR:O	2.44	0.71
1:A:101:ASP:OD1	1:A:103:LEU:HB2	1.90	0.70
1:A:182:ARG:NH2	1:A:275:TRP:CE3	2.59	0.70
1:A:19:VAL:O	1:A:22:GLY:N	2.23	0.70
1:A:200:ASP:HB2	1:A:279:PHE:CZ	2.27	0.70
1:A:5:LEU:HD21	1:A:266:PRO:HD3	1.73	0.69
1:A:41:ARG:NH1	1:A:46:GLU:OE1	2.25	0.69
1:A:110:ARG:HG2	1:A:251:VAL:HG22	1.74	0.69
1:A:110:ARG:NH2	1:A:272:ASP:OD1	2.24	0.69
1:A:229:ARG:HG2	1:A:229:ARG:O	1.93	0.69
1:A:121:ARG:NH2	1:A:121:ARG:HG3	2.07	0.69
1:A:37:SER:CB	1:A:38:PRO:HD2	2.15	0.69
1:A:170:ASN:OD1	1:A:176:PHE:HB2	1.93	0.68
1:A:83:TYR:O	1:A:86:SER:HB3	1.94	0.68
1:A:164:TYR:CD1	1:A:164:TYR:O	2.45	0.68
1:A:109:PRO:HG3	1:A:255:HIS:ND1	2.08	0.68
1:A:35:TRP:HE3	1:A:107:TYR:CE2	2.12	0.68
1:A:284:PRO:HA	1:A:287:TRP:NE1	2.08	0.68
1:A:113:TRP:O	1:A:116:ARG:HB2	1.94	0.68
1:A:37:SER:HB3	1:A:38:PRO:CD	2.20	0.67
1:A:182:ARG:O	1:A:183:ALA:HB3	1.93	0.67
1:A:250:GLY:N	1:A:274:SER:OG	2.28	0.67
1:A:107:TYR:O	1:A:110:ARG:HB3	1.95	0.67
1:A:151:ILE:O	1:A:151:ILE:HG22	1.92	0.67
1:A:114:MET:O	1:A:117:VAL:HG23	1.94	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:27:GLY:O	1:A:93:THR:HA	1.95	0.67
1:A:265:LYS:HG2	1:A:267:ASP:HB2	1.75	0.67
1:A:184:GLN:O	1:A:188:LEU:CB	2.43	0.67
1:A:111:VAL:O	1:A:114:MET:HB2	1.95	0.67
1:A:199:LEU:HD12	1:A:200:ASP:N	2.11	0.66
1:A:136:GLU:HB3	1:A:138:HIS:CE1	2.30	0.66
1:A:108:ALA:HB3	1:A:109:PRO:HD3	1.78	0.66
1:A:65:ASP:OD1	1:A:67:ALA:CB	2.42	0.66
1:A:270:ILE:HG22	1:A:270:ILE:O	1.90	0.66
1:A:167:VAL:CG1	1:A:278:TRP:CZ3	2.79	0.65
1:A:270:ILE:HG23	1:A:271:TYR:N	2.12	0.65
1:A:182:ARG:NH2	1:A:275:TRP:CD2	2.65	0.65
1:A:164:TYR:C	1:A:164:TYR:CD1	2.70	0.64
1:A:8:ALA:HA	1:A:124:SER:HB3	1.80	0.63
1:A:224:SER:CB	1:A:225:PRO:CD	2.77	0.62
1:A:176:PHE:CD1	1:A:244:ILE:CD1	2.82	0.62
1:A:247:CSS:SG	1:A:250:GLY:HA2	2.38	0.62
1:A:252:THR:O	1:A:255:HIS:HB2	2.00	0.62
1:A:98:TYR:C	1:A:98:TYR:CD1	2.73	0.62
1:A:168:LEU:HD12	1:A:278:TRP:CH2	2.35	0.62
1:A:256:ILE:O	1:A:259:ALA:HB3	1.99	0.62
1:A:98:TYR:C	1:A:98:TYR:HD1	2.03	0.61
1:A:230:ALA:O	1:A:234:ALA:HB2	2.01	0.61
1:A:7:ARG:O	1:A:124:SER:HB3	2.00	0.61
1:A:37:SER:O	1:A:40:THR:HB	2.00	0.61
1:A:109:PRO:HG3	1:A:255:HIS:CE1	2.36	0.61
1:A:25:GLY:C	1:A:27:GLY:H	2.04	0.61
1:A:235:LYS:O	1:A:237:VAL:HG23	2.02	0.60
1:A:65:ASP:C	1:A:67:ALA:H	2.04	0.60
1:A:31:LEU:HD12	1:A:97:VAL:HB	1.84	0.60
1:A:35:TRP:CE3	1:A:107:TYR:CE2	2.90	0.60
1:A:204:ILE:HG12	1:A:278:TRP:CD1	2.37	0.59
1:A:36:TYR:HE1	1:A:101:ASP:CB	2.15	0.59
1:A:287:TRP:O	1:A:287:TRP:CE3	2.56	0.58
1:A:256:ILE:O	1:A:256:ILE:HG23	2.03	0.58
1:A:105:SER:HB3	1:A:255:HIS:CE1	2.38	0.58
1:A:130:PHE:CE1	1:A:133:TRP:CD1	2.92	0.58
1:A:10:VAL:HG23	1:A:124:SER:HB2	1.84	0.58
1:A:110:ARG:O	1:A:110:ARG:HD3	2.03	0.57
1:A:197:VAL:HG12	1:A:197:VAL:O	2.02	0.57
1:A:52:VAL:CG1	1:A:53:PRO:HD2	2.33	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:25:GLY:HA2	1:A:29:ARG:NH1	2.19	0.57
1:A:186:ARG:HH11	1:A:186:ARG:CG	2.17	0.57
1:A:132:ASN:HA	1:A:135:LYS:HB3	1.86	0.57
1:A:108:ALA:N	1:A:109:PRO:CD	2.65	0.57
1:A:108:ALA:HB3	1:A:109:PRO:CD	2.35	0.57
1:A:273:GLY:O	1:A:274:SER:HB2	2.03	0.57
1:A:71:GLU:OE2	1:A:248:ARG:NH2	2.37	0.57
1:A:113:TRP:O	1:A:114:MET:C	2.42	0.57
1:A:41:ARG:HH11	1:A:46:GLU:CD	2.07	0.56
1:A:184:GLN:O	1:A:188:LEU:HG	2.05	0.56
1:A:196:ALA:HB1	1:A:199:LEU:CB	2.35	0.56
1:A:232:PHE:O	1:A:237:VAL:HB	2.05	0.56
1:A:287:TRP:C	1:A:287:TRP:CE3	2.78	0.56
1:A:47:TYR:O	1:A:51:HIS:HD2	1.88	0.56
1:A:40:THR:CG2	1:A:41:ARG:HG3	2.25	0.55
1:A:25:GLY:C	1:A:27:GLY:N	2.58	0.55
1:A:32:ASP:HB2	1:A:98:TYR:HE1	1.69	0.55
1:A:90:SER:H	1:A:93:THR:CG2	2.18	0.55
1:A:256:ILE:O	1:A:256:ILE:CG2	2.47	0.55
1:A:284:PRO:O	1:A:286:THR:N	2.40	0.54
1:A:74:LEU:O	1:A:75:PRO:O	2.25	0.54
1:A:224:SER:HB2	1:A:225:PRO:CD	2.32	0.54
1:A:60:ILE:HD13	1:A:107:TYR:HE1	1.72	0.54
1:A:157:ASN:C	1:A:157:ASN:OD1	2.46	0.54
1:A:44:ARG:O	1:A:48:LEU:HD23	2.07	0.54
1:A:69:PRO:HG2	1:A:70:TYR:CE2	2.43	0.54
1:A:247:CSS:C	1:A:274:SER:HB3	2.36	0.54
1:A:130:PHE:CE1	1:A:133:TRP:HD1	2.26	0.54
1:A:31:LEU:HD21	1:A:89:ILE:HD11	1.90	0.54
1:A:160:LEU:C	1:A:269:ALA:HB1	2.28	0.54
1:A:12:THR:HB	1:A:138:HIS:CE1	2.43	0.54
1:A:228:LEU:HD13	1:A:262:LEU:HD12	1.89	0.53
1:A:84:VAL:O	1:A:87:LEU:HG	2.09	0.53
1:A:83:TYR:O	1:A:86:SER:CB	2.55	0.53
1:A:182:ARG:HD2	1:A:186:ARG:HB3	1.91	0.53
1:A:246:THR:CG2	1:A:271:TYR:HD2	2.21	0.53
1:A:224:SER:O	1:A:228:LEU:HG	2.08	0.53
1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:ARG:N	2.23	0.53
1:A:246:THR:O	1:A:247:CSS:HB2	2.08	0.53
1:A:247:CSS:SG	1:A:250:GLY:N	2.81	0.52
1:A:16:ALA:O	1:A:19:VAL:HB	2.09	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:25:GLY:O	1:A:27:GLY:N	2.41	0.52
1:A:247:CSS:SG	1:A:250:GLY:CA	2.97	0.52
1:A:176:PHE:CD1	1:A:244:ILE:HD11	2.45	0.52
1:A:71:GLU:OE1	1:A:249:LYS:HG2	2.10	0.52
1:A:113:TRP:O	1:A:116:ARG:CB	2.58	0.52
1:A:200:ASP:CB	1:A:279:PHE:CE1	2.86	0.52
1:A:40:THR:HG22	1:A:41:ARG:N	2.25	0.52
1:A:182:ARG:O	1:A:183:ALA:CB	2.58	0.52
1:A:99:ASN:HD21	1:A:105:SER:CA	2.20	0.51
1:A:47:TYR:O	1:A:51:HIS:CD2	2.63	0.51
1:A:19:VAL:HG21	1:A:53:PRO:HG2	1.91	0.51
1:A:214:ASP:O	1:A:223:LYS:NZ	2.38	0.51
1:A:60:ILE:HD13	1:A:107:TYR:CE1	2.46	0.51
1:A:47:TYR:CD2	1:A:48:LEU:N	2.78	0.51
1:A:248:ARG:HB3	1:A:249:LYS:HG3	1.93	0.51
1:A:113:TRP:O	1:A:116:ARG:CA	2.58	0.51
1:A:99:ASN:OD1	1:A:108:ALA:HB2	2.11	0.51
1:A:258:LEU:O	1:A:262:LEU:CD2	2.59	0.50
1:A:196:ALA:HB2	1:A:199:LEU:HD23	1.94	0.50
1:A:84:VAL:HG13	1:A:89:ILE:HG21	1.93	0.50
1:A:121:ARG:NH2	1:A:121:ARG:CG	2.74	0.50
1:A:84:VAL:O	1:A:89:ILE:HB	2.11	0.50
1:A:180:ASP:OD1	1:A:247:CSS:HA	2.12	0.49
1:A:6:TYR:CD2	1:A:122:THR:HA	2.45	0.49
1:A:109:PRO:HB2	1:A:254:CYS:HB2	1.93	0.49
1:A:90:SER:H	1:A:93:THR:HG21	1.76	0.49
1:A:113:TRP:NE1	1:A:160:LEU:HB3	2.20	0.49
1:A:151:ILE:O	1:A:151:ILE:HG23	2.06	0.49
1:A:130:PHE:HA	1:A:133:TRP:HB3	1.94	0.49
1:A:182:ARG:HH12	1:A:202:GLY:H	1.59	0.49
1:A:253:ALA:C	1:A:255:HIS:H	2.14	0.49
1:A:99:ASN:ND2	1:A:104:GLY:O	2.46	0.49
1:A:81:ALA:CB	1:A:152:PHE:O	2.56	0.49
1:A:257:ALA:O	1:A:261:TYR:CA	2.61	0.49
1:A:97:VAL:HG22	1:A:98:TYR:N	2.28	0.49
1:A:91:ASN:ND2	1:A:153:LYS:O	2.44	0.48
1:A:167:VAL:HG12	1:A:278:TRP:HZ3	1.76	0.48
1:A:199:LEU:HD12	1:A:200:ASP:H	1.76	0.48
1:A:15:LEU:HD21	1:A:30:VAL:CG2	2.44	0.47
1:A:212:PHE:CD1	1:A:212:PHE:C	2.87	0.47
1:A:256:ILE:C	1:A:259:ALA:HB3	2.35	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:45:LYS:HG3	1:A:45:LYS:O	2.14	0.47
1:A:87:LEU:HD12	1:A:87:LEU:O	2.14	0.47
1:A:162:LYS:HA	1:A:166:GLN:OE1	2.14	0.47
1:A:5:LEU:HD21	1:A:266:PRO:CD	2.42	0.47
1:A:289:SER:OG	1:A:290:GLN:N	2.47	0.47
1:A:187:TYR:HE2	1:A:207:SER:HB3	1.78	0.47
1:A:170:ASN:O	1:A:174:LYS:N	2.45	0.46
1:A:167:VAL:HG12	1:A:278:TRP:CH2	2.48	0.46
1:A:97:VAL:HG21	1:A:111:VAL:HG11	1.97	0.46
1:A:35:TRP:CE3	1:A:35:TRP:O	2.69	0.46
1:A:74:LEU:HD22	1:A:118:PHE:CZ	2.51	0.46
1:A:184:GLN:O	1:A:188:LEU:CG	2.63	0.46
1:A:191:GLN:HA	1:A:192:PRO:HD3	1.81	0.46
1:A:27:GLY:O	1:A:93:THR:HB	2.15	0.46
1:A:121:ARG:O	1:A:123:VAL:HG12	2.15	0.46
1:A:246:THR:CG2	1:A:271:TYR:CD2	2.99	0.46
1:A:196:ALA:CB	1:A:199:LEU:HD23	2.46	0.45
1:A:87:LEU:HD11	1:A:89:ILE:CD1	2.46	0.45
1:A:184:GLN:O	1:A:188:LEU:N	2.42	0.45
1:A:199:LEU:HD23	1:A:248:ARG:NH1	2.31	0.45
1:A:105:SER:HB2	1:A:216:LEU:HD11	1.96	0.45
1:A:182:ARG:NH1	1:A:202:GLY:H	2.14	0.45
1:A:265:LYS:HD3	1:A:268:VAL:HG23	1.97	0.45
1:A:109:PRO:O	1:A:110:ARG:C	2.55	0.45
1:A:36:TYR:HE1	1:A:101:ASP:HB2	1.81	0.44
1:A:110:ARG:C	1:A:110:ARG:CD	2.79	0.44
1:A:248:ARG:O	1:A:274:SER:HB2	2.18	0.44
1:A:83:TYR:O	1:A:86:SER:N	2.51	0.44
1:A:36:TYR:CG	1:A:41:ARG:HD3	2.53	0.43
1:A:229:ARG:CG	1:A:229:ARG:O	2.64	0.43
1:A:162:LYS:O	1:A:271:TYR:HA	2.17	0.43
1:A:84:VAL:HG13	1:A:89:ILE:CG2	2.48	0.43
1:A:284:PRO:HA	1:A:287:TRP:CD1	2.54	0.43
1:A:27:GLY:O	1:A:93:THR:CA	2.66	0.43
1:A:113:TRP:CE2	1:A:117:VAL:HG22	2.54	0.43
1:A:35:TRP:CE3	1:A:107:TYR:CZ	3.06	0.43
1:A:244:ILE:HG22	1:A:245:ALA:N	2.34	0.43
1:A:196:ALA:CB	1:A:199:LEU:HB3	2.46	0.43
1:A:25:GLY:CA	1:A:29:ARG:NH1	2.82	0.43
1:A:160:LEU:O	1:A:270:ILE:N	2.50	0.42
1:A:204:ILE:HG12	1:A:278:TRP:NE1	2.33	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:203:HIS:NE2	1:A:288:VAL:HG22	2.34	0.42
1:A:99:ASN:OD1	1:A:108:ALA:CB	2.66	0.42
1:A:275:TRP:CZ3	1:A:287:TRP:HB2	2.54	0.42
1:A:15:LEU:HD11	1:A:30:VAL:HG21	2.01	0.42
1:A:246:THR:HG22	1:A:274:SER:HA	2.01	0.42
1:A:123:VAL:HG13	1:A:123:VAL:O	2.20	0.42
1:A:4:VAL:HG12	1:A:4:VAL:O	2.19	0.42
1:A:138:HIS:CB	1:A:139:PRO:HD2	2.35	0.42
1:A:253:ALA:C	1:A:255:HIS:N	2.72	0.42
1:A:35:TRP:HE3	1:A:35:TRP:O	2.03	0.42
1:A:12:THR:HG21	1:A:136:GLU:CD	2.36	0.42
1:A:241:LYS:CB	1:A:242:PRO:CD	2.91	0.42
1:A:103:LEU:O	1:A:220:GLY:HA2	2.20	0.41
1:A:275:TRP:CG	1:A:275:TRP:O	2.73	0.41
1:A:284:PRO:C	1:A:286:THR:H	2.23	0.41
1:A:87:LEU:HD11	1:A:89:ILE:HD11	2.02	0.41
1:A:101:ASP:OD1	1:A:101:ASP:O	2.38	0.41
1:A:9:LEU:HG	1:A:127:ASN:HB2	2.02	0.41
1:A:170:ASN:CG	1:A:176:PHE:HB2	2.40	0.41
1:A:121:ARG:HD2	1:A:121:ARG:HA	1.69	0.41
1:A:106:PHE:N	1:A:255:HIS:HE1	2.19	0.41
1:A:113:TRP:HA	1:A:116:ARG:CG	2.50	0.41
1:A:74:LEU:HD22	1:A:118:PHE:CE2	2.56	0.41
1:A:197:VAL:CG1	1:A:197:VAL:O	2.69	0.41
1:A:288:VAL:HG23	1:A:289:SER:N	2.36	0.41
1:A:265:LYS:HA	1:A:266:PRO:HD2	1.76	0.41
1:A:90:SER:H	1:A:93:THR:HG23	1.85	0.41
1:A:282:ALA:HB1	1:A:283:PRO:HD2	2.02	0.40
1:A:97:VAL:CG2	1:A:98:TYR:N	2.83	0.40
1:A:65:ASP:C	1:A:67:ALA:N	2.72	0.40

All (1073) 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:97:VAL:CA	1:A:241:LYS:NZ[4_557]	0.31	1.89
1:A:2:HIS:NE2	1:A:86:SER:OG[4_547]	0.33	1.87
1:A:93:THR:N	1:A:244:ILE:O[4_557]	0.35	1.85
1:A:58:PHE:CZ	1:A:240:THR:OG1[4_557]	0.39	1.81
1:A:26:PRO:CB	1:A:162:LYS:CG[4_557]	0.41	1.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:70:TYR:O	1:A:290:GLN:N[4_556]	0.43	1.77
1:A:23:LYS:CB	1:A:169:GLU:C[4_557]	0.43	1.77
1:A:86:SER:C	1:A:267:ASP:OD1[4_557]	0.45	1.75
1:A:85:GLY:O	1:A:267:ASP:CA[4_557]	0.45	1.75
1:A:80:PHE:N	1:A:263:CYS:C[4_557]	0.46	1.74
1:A:112:TRP:CE2	1:A:236:LYS:CG[4_557]	0.46	1.74
1:A:79:GLY:O	1:A:264:GLY:CA[4_557]	0.48	1.72
1:A:116:ARG:O	1:A:231:MET:O[4_557]	0.49	1.71
1:A:31:LEU:CD1	1:A:241:LYS:CG[4_557]	0.52	1.68
1:A:68:SER:CA	1:A:189:GLY:CA[4_556]	0.52	1.68
1:A:67:ALA:N	1:A:201:SER:C[4_556]	0.55	1.65
1:A:115:PHE:CD2	1:A:238:ASP:C[4_557]	0.55	1.65
1:A:113:TRP:O	1:A:233:GLU:CA[4_557]	0.55	1.65
1:A:69:PRO:CB	1:A:188:LEU:CB[4_556]	0.58	1.62
1:A:93:THR:CG2	1:A:244:ILE:CA[4_557]	0.58	1.62
1:A:156:LEU:CD1	1:A:226:GLU:O[4_557]	0.59	1.61
1:A:94:HIS:O	1:A:177:GLN:N[4_557]	0.59	1.61
1:A:29:ARG:N	1:A:176:PHE:CA[4_557]	0.61	1.59
1:A:81:ALA:CB	1:A:260:ALA:C[4_557]	0.61	1.59
1:A:119:GLY:C	1:A:210:MET:CE[4_557]	0.64	1.56
1:A:67:ALA:O	1:A:186:ARG:O[4_556]	0.65	1.55
1:A:58:PHE:CG	1:A:240:THR:CG2[4_557]	0.69	1.51
1:A:28:LEU:C	1:A:176:PHE:CB[4_557]	0.70	1.50
1:A:93:THR:C	1:A:177:GLN:O[4_557]	0.70	1.50
1:A:92:ASP:OD2	1:A:246:THR:CA[4_557]	0.70	1.50
1:A:69:PRO:N	1:A:188:LEU:C[4_556]	0.70	1.50
1:A:91:ASN:ND2	1:A:256:ILE:CG2[4_557]	0.70	1.50
1:A:92:ASP:CB	1:A:245:ALA:C[4_557]	0.71	1.49
1:A:80:PHE:CE1	1:A:239:LEU:CD2[4_557]	0.71	1.49
1:A:73:MET:SD	1:A:291:GLY:N[4_556]	0.72	1.48
1:A:18:SER:CB	1:A:173:SER:N[4_557]	0.72	1.48
1:A:94:HIS:C	1:A:177:GLN:CA[4_557]	0.73	1.47
1:A:112:TRP:CZ2	1:A:236:LYS:CD[4_557]	0.73	1.47
1:A:116:ARG:CG	1:A:236:LYS:N[4_557]	0.74	1.46
1:A:156:LEU:CB	1:A:227:GLU:C[4_557]	0.74	1.46
1:A:6:TYR:CZ	1:A:206:GLY:O[4_557]	0.75	1.45
1:A:87:LEU:N	1:A:267:ASP:CG[4_557]	0.77	1.43
1:A:29:ARG:C	1:A:175:ARG:O[4_557]	0.77	1.43
1:A:117:VAL:O	1:A:231:MET:N[4_557]	0.80	1.40
1:A:81:ALA:CA	1:A:260:ALA:O[4_557]	0.80	1.40
1:A:31:LEU:CG	1:A:241:LYS:CB[4_557]	0.80	1.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:68:SER:C	1:A:189:GLY:N[4_556]	0.80	1.40
1:A:84:VAL:CA	1:A:265:LYS:CD[4_557]	0.81	1.39
1:A:80:PHE:N	1:A:263:CYS:O[4_557]	0.82	1.38
1:A:229:ARG:NE	1:A:292:LYS:CD[1_556]	0.82	1.38
1:A:73:MET:CA	1:A:291:GLY:C[4_556]	0.84	1.36
1:A:90:SER:CB	1:A:269:ALA:O[4_557]	0.84	1.36
1:A:28:LEU:CB	1:A:170:ASN:CG[4_557]	0.84	1.36
1:A:92:ASP:CG	1:A:246:THR:N[4_557]	0.84	1.36
1:A:58:PHE:CE2	1:A:240:THR:CB[4_557]	0.85	1.35
1:A:229:ARG:CZ	1:A:292:LYS:CD[1_556]	0.85	1.35
1:A:6:TYR:OH	1:A:206:GLY:O[4_557]	0.85	1.35
1:A:115:PHE:CE2	1:A:238:ASP:O[4_557]	0.86	1.34
1:A:116:ARG:CA	1:A:232:PHE:O[4_557]	0.86	1.34
1:A:89:ILE:O	1:A:268:VAL:CA[4_557]	0.86	1.34
1:A:72:VAL:C	1:A:292:LYS:O[4_556]	0.87	1.33
1:A:65:ASP:O	1:A:201:SER:O[4_556]	0.88	1.32
1:A:156:LEU:CG	1:A:227:GLU:CA[4_557]	0.88	1.32
1:A:115:PHE:CE2	1:A:238:ASP:C[4_557]	0.88	1.32
1:A:18:SER:CB	1:A:172:GLU:C[4_557]	0.88	1.32
1:A:92:ASP:OD2	1:A:246:THR:N[4_557]	0.89	1.31
1:A:90:SER:O	1:A:243:LEU:CD2[4_557]	0.89	1.31
1:A:154:ALA:N	1:A:259:ALA:CA[4_557]	0.89	1.31
1:A:117:VAL:CG1	1:A:230:ALA:CA[4_557]	0.90	1.30
1:A:160:LEU:CD2	1:A:234:ALA:CB[4_557]	0.90	1.30
1:A:30:VAL:N	1:A:175:ARG:O[4_557]	0.90	1.30
1:A:148:GLU:CA	1:A:159:SER:OG[4_557]	0.91	1.29
1:A:89:ILE:O	1:A:268:VAL:CB[4_557]	0.91	1.29
1:A:121:ARG:CG	1:A:209:ASN:N[4_557]	0.91	1.29
1:A:58:PHE:CD2	1:A:240:THR:CG2[4_557]	0.92	1.28
1:A:150:ALA:CA	1:A:160:LEU:CD1[4_557]	0.92	1.28
1:A:156:LEU:CB	1:A:228:LEU:N[4_557]	0.93	1.27
1:A:150:ALA:O	1:A:266:PRO:O[4_557]	0.93	1.27
1:A:85:GLY:C	1:A:267:ASP:CA[4_557]	0.93	1.27
1:A:68:SER:CB	1:A:189:GLY:O[4_556]	0.93	1.27
1:A:69:PRO:CA	1:A:188:LEU:CA[4_556]	0.93	1.27
1:A:93:THR:N	1:A:244:ILE:C[4_557]	0.95	1.25
1:A:68:SER:CB	1:A:189:GLY:C[4_556]	0.95	1.25
1:A:29:ARG:NE	1:A:176:PHE:CZ[4_557]	0.96	1.24
1:A:115:PHE:CB	1:A:237:VAL:O[4_557]	0.97	1.23
1:A:5:LEU:CD1	1:A:82:ASP:OD2[4_547]	0.97	1.23
1:A:26:PRO:N	1:A:162:LYS:CD[4_557]	0.98	1.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:95:VAL:CB	1:A:177:GLN:CD[4_557]	0.98	1.22
1:A:31:LEU:CD2	1:A:241:LYS:CA[4_557]	0.99	1.21
1:A:86:SER:O	1:A:267:ASP:OD1[4_557]	0.99	1.21
1:A:85:GLY:C	1:A:267:ASP:N[4_557]	0.99	1.21
1:A:92:ASP:CA	1:A:245:ALA:CA[4_557]	1.00	1.20
1:A:86:SER:C	1:A:267:ASP:CG[4_557]	1.00	1.20
1:A:94:HIS:O	1:A:176:PHE:C[4_557]	1.00	1.20
1:A:115:PHE:CB	1:A:237:VAL:C[4_557]	1.00	1.20
1:A:74:LEU:CD2	1:A:292:LYS:NZ[4_556]	1.01	1.19
1:A:92:ASP:N	1:A:245:ALA:CB[4_557]	1.01	1.19
1:A:112:TRP:NE1	1:A:236:LYS:CG[4_557]	1.02	1.18
1:A:14:TRP:CE3	1:A:174:LYS:CG[4_557]	1.02	1.18
1:A:119:GLY:CA	1:A:210:MET:CE[4_557]	1.03	1.17
1:A:73:MET:CA	1:A:291:GLY:O[4_556]	1.03	1.17
1:A:31:LEU:CD1	1:A:241:LYS:CB[4_557]	1.03	1.17
1:A:67:ALA:N	1:A:202:GLY:N[4_556]	1.03	1.17
1:A:72:VAL:CG1	1:A:293:GLY:CA[4_556]	1.03	1.17
1:A:92:ASP:CG	1:A:245:ALA:C[4_557]	1.04	1.16
1:A:148:GLU:C	1:A:159:SER:CB[4_557]	1.05	1.15
1:A:82:ASP:O	1:A:266:PRO:CD[4_557]	1.05	1.15
1:A:94:HIS:N	1:A:177:GLN:C[4_557]	1.05	1.15
1:A:62:GLU:OE2	1:A:279:PHE:O[4_556]	1.05	1.15
1:A:94:HIS:CA	1:A:178:LEU:N[4_557]	1.05	1.15
1:A:69:PRO:N	1:A:189:GLY:N[4_556]	1.06	1.14
1:A:81:ALA:CB	1:A:261:TYR:N[4_557]	1.07	1.13
1:A:18:SER:OG	1:A:172:GLU:C[4_557]	1.07	1.13
1:A:112:TRP:CE2	1:A:236:LYS:CD[4_557]	1.07	1.13
1:A:26:PRO:CD	1:A:162:LYS:CD[4_557]	1.08	1.12
1:A:61:GLU:O	1:A:287:TRP:CE2[4_556]	1.08	1.12
1:A:64:ARG:C	1:A:200:ASP:OD1[4_556]	1.09	1.11
1:A:93:THR:CB	1:A:244:ILE:N[4_557]	1.09	1.11
1:A:28:LEU:CB	1:A:170:ASN:OD1[4_557]	1.09	1.11
1:A:91:ASN:ND2	1:A:256:ILE:CB[4_557]	1.09	1.11
1:A:73:MET:N	1:A:292:LYS:O[4_556]	1.09	1.11
1:A:113:TRP:CE2	1:A:233:GLU:OE2[4_557]	1.10	1.10
1:A:115:PHE:CD2	1:A:238:ASP:CA[4_557]	1.10	1.10
1:A:154:ALA:N	1:A:259:ALA:CB[4_557]	1.11	1.09
1:A:68:SER:C	1:A:189:GLY:CA[4_556]	1.11	1.09
1:A:156:LEU:CD2	1:A:227:GLU:CA[4_557]	1.11	1.09
1:A:80:PHE:CE1	1:A:239:LEU:CG[4_557]	1.11	1.09
1:A:118:PHE:CB	1:A:232:PHE:CD2[4_557]	1.11	1.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:91:ASN:CG	1:A:256:ILE:CG2[4_557]	1.12	1.08
1:A:81:ALA:N	1:A:260:ALA:O[4_557]	1.12	1.08
1:A:91:ASN:CG	1:A:256:ILE:CB[4_557]	1.12	1.08
1:A:92:ASP:CB	1:A:245:ALA:CA[4_557]	1.12	1.08
1:A:111:VAL:CG1	1:A:238:ASP:OD2[4_557]	1.12	1.08
1:A:152:PHE:CD2	1:A:260:ALA:CB[4_557]	1.13	1.07
1:A:118:PHE:CZ	1:A:229:ARG:CB[4_557]	1.13	1.07
1:A:112:TRP:CZ3	1:A:236:LYS:CE[4_557]	1.14	1.06
1:A:73:MET:CB	1:A:291:GLY:O[4_556]	1.14	1.06
1:A:66:LYS:C	1:A:202:GLY:N[4_556]	1.14	1.06
1:A:3:GLN:NE2	1:A:184:GLN:OE1[4_557]	1.14	1.06
1:A:77:GLU:OE2	1:A:228:LEU:CG[4_557]	1.15	1.05
1:A:66:LYS:CB	1:A:275:TRP:CZ2[4_556]	1.15	1.05
1:A:28:LEU:O	1:A:176:PHE:CD2[4_557]	1.16	1.04
1:A:122:THR:CG2	1:A:178:LEU:O[4_557]	1.16	1.04
1:A:153:LYS:N	1:A:257:ALA:N[4_557]	1.16	1.04
1:A:3:GLN:CD	1:A:184:GLN:OE1[4_557]	1.16	1.04
1:A:116:ARG:N	1:A:232:PHE:O[4_557]	1.16	1.04
1:A:23:LYS:CB	1:A:169:GLU:O[4_557]	1.16	1.04
1:A:122:THR:CB	1:A:178:LEU:O[4_557]	1.17	1.03
1:A:115:PHE:CA	1:A:237:VAL:O[4_557]	1.17	1.03
1:A:79:GLY:C	1:A:264:GLY:N[4_557]	1.17	1.03
1:A:24:VAL:CG1	1:A:175:ARG:NH1[4_557]	1.17	1.03
1:A:84:VAL:C	1:A:265:LYS:CD[4_557]	1.17	1.03
1:A:5:LEU:CG	1:A:82:ASP:OD2[4_547]	1.18	1.02
1:A:84:VAL:N	1:A:265:LYS:CG[4_557]	1.18	1.02
1:A:89:ILE:CG2	1:A:243:LEU:CB[4_557]	1.18	1.02
1:A:229:ARG:CG	1:A:292:LYS:NZ[1_556]	1.18	1.02
1:A:81:ALA:CA	1:A:260:ALA:C[4_557]	1.18	1.02
1:A:64:ARG:NE	1:A:287:TRP:CZ3[4_556]	1.18	1.02
1:A:68:SER:CA	1:A:189:GLY:C[4_556]	1.18	1.02
1:A:23:LYS:CA	1:A:169:GLU:C[4_557]	1.19	1.01
1:A:26:PRO:CG	1:A:162:LYS:CB[4_557]	1.19	1.01
1:A:229:ARG:NH2	1:A:292:LYS:CG[1_556]	1.19	1.01
1:A:120:HIS:O	1:A:237:VAL:CG2[4_557]	1.19	1.01
1:A:28:LEU:CB	1:A:170:ASN:ND2[4_557]	1.19	1.01
1:A:97:VAL:N	1:A:241:LYS:NZ[4_557]	1.19	1.01
1:A:156:LEU:CA	1:A:227:GLU:C[4_557]	1.20	1.00
1:A:113:TRP:CZ2	1:A:233:GLU:OE2[4_557]	1.20	1.00
1:A:64:ARG:C	1:A:200:ASP:CG[4_556]	1.20	1.00
1:A:59:ASP:OD2	1:A:284:PRO:CD[4_556]	1.21	0.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:23:LYS:CB	1:A:170:ASN:N[4_557]	1.21	0.99
1:A:73:MET:CB	1:A:291:GLY:C[4_556]	1.21	0.99
1:A:72:VAL:CG1	1:A:293:GLY:N[4_556]	1.21	0.99
1:A:119:GLY:O	1:A:210:MET:SD[4_557]	1.21	0.99
1:A:3:GLN:NE2	1:A:184:GLN:CD[4_557]	1.21	0.99
1:A:92:ASP:C	1:A:244:ILE:O[4_557]	1.21	0.99
1:A:58:PHE:CE2	1:A:240:THR:OG1[4_557]	1.21	0.99
1:A:29:ARG:CG	1:A:176:PHE:CD1[4_557]	1.22	0.98
1:A:119:GLY:C	1:A:210:MET:SD[4_557]	1.22	0.98
1:A:112:TRP:CH2	1:A:236:LYS:CE[4_557]	1.22	0.98
1:A:2:HIS:CD2	1:A:86:SER:OG[4_547]	1.22	0.98
1:A:156:LEU:CD2	1:A:227:GLU:N[4_557]	1.22	0.98
1:A:79:GLY:C	1:A:263:CYS:C[4_557]	1.23	0.97
1:A:58:PHE:CE2	1:A:240:THR:CA[4_557]	1.23	0.97
1:A:2:HIS:CE1	1:A:86:SER:OG[4_547]	1.23	0.97
1:A:64:ARG:NH2	1:A:287:TRP:CE3[4_556]	1.23	0.97
1:A:93:THR:OG1	1:A:244:ILE:N[4_557]	1.24	0.96
1:A:94:HIS:N	1:A:178:LEU:N[4_557]	1.24	0.96
1:A:26:PRO:CB	1:A:162:LYS:CB[4_557]	1.24	0.96
1:A:29:ARG:NE	1:A:176:PHE:CE1[4_557]	1.24	0.96
1:A:69:PRO:CA	1:A:188:LEU:C[4_556]	1.24	0.96
1:A:78:ALA:CA	1:A:262:LEU:O[4_557]	1.24	0.96
1:A:93:THR:C	1:A:177:GLN:C[4_557]	1.24	0.96
1:A:26:PRO:CA	1:A:162:LYS:CG[4_557]	1.24	0.96
1:A:6:TYR:OH	1:A:206:GLY:C[4_557]	1.25	0.95
1:A:93:THR:CG2	1:A:244:ILE:N[4_557]	1.25	0.95
1:A:84:VAL:CA	1:A:265:LYS:CG[4_557]	1.25	0.95
1:A:3:GLN:CG	1:A:184:GLN:NE2[4_557]	1.25	0.95
1:A:66:LYS:CD	1:A:279:PHE:CD1[4_556]	1.26	0.94
1:A:153:LYS:N	1:A:257:ALA:CA[4_557]	1.26	0.94
1:A:113:TRP:CZ3	1:A:233:GLU:OE1[4_557]	1.26	0.94
1:A:120:HIS:CE1	1:A:179:VAL:CG2[4_557]	1.26	0.94
1:A:156:LEU:CD1	1:A:226:GLU:C[4_557]	1.26	0.94
1:A:29:ARG:CD	1:A:176:PHE:CZ[4_557]	1.27	0.93
1:A:153:LYS:NZ	1:A:255:HIS:CD2[4_557]	1.27	0.93
1:A:90:SER:OG	1:A:269:ALA:O[4_557]	1.27	0.93
1:A:116:ARG:CD	1:A:236:LYS:N[4_557]	1.27	0.93
1:A:67:ALA:CB	1:A:201:SER:CB[4_556]	1.27	0.93
1:A:80:PHE:CD1	1:A:239:LEU:CD1[4_557]	1.28	0.92
1:A:58:PHE:CD2	1:A:240:THR:CB[4_557]	1.29	0.91
1:A:153:LYS:CG	1:A:255:HIS:O[4_557]	1.29	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:97:VAL:CA	1:A:241:LYS:CE[4_557]	1.29	0.91
1:A:61:GLU:CB	1:A:284:PRO:C[4_556]	1.29	0.91
1:A:112:TRP:CD2	1:A:236:LYS:CG[4_557]	1.29	0.91
1:A:65:ASP:OD1	1:A:201:SER:CB[4_556]	1.30	0.90
1:A:64:ARG:O	1:A:200:ASP:CB[4_556]	1.30	0.90
1:A:117:VAL:C	1:A:231:MET:N[4_557]	1.30	0.90
1:A:78:ALA:C	1:A:262:LEU:O[4_557]	1.30	0.90
1:A:73:MET:CG	1:A:291:GLY:N[4_556]	1.30	0.90
1:A:74:LEU:CD2	1:A:292:LYS:CE[4_556]	1.30	0.90
1:A:155:THR:OG1	1:A:215:PHE:CD1[4_557]	1.31	0.89
1:A:81:ALA:O	1:A:265:LYS:O[4_557]	1.31	0.89
1:A:64:ARG:CZ	1:A:287:TRP:CE3[4_556]	1.32	0.88
1:A:81:ALA:O	1:A:265:LYS:C[4_557]	1.32	0.88
1:A:79:GLY:CA	1:A:198:GLY:CA[4_556]	1.33	0.87
1:A:116:ARG:CZ	1:A:234:ALA:O[4_557]	1.33	0.87
1:A:156:LEU:CA	1:A:227:GLU:O[4_557]	1.33	0.87
1:A:78:ALA:CA	1:A:262:LEU:C[4_557]	1.33	0.87
1:A:80:PHE:CB	1:A:263:CYS:CB[4_557]	1.33	0.87
1:A:29:ARG:N	1:A:176:PHE:CB[4_557]	1.34	0.86
1:A:153:LYS:C	1:A:259:ALA:CB[4_557]	1.34	0.86
1:A:73:MET:SD	1:A:291:GLY:CA[4_556]	1.34	0.86
1:A:73:MET:CA	1:A:292:LYS:N[4_556]	1.34	0.86
1:A:89:ILE:CG1	1:A:243:LEU:N[4_557]	1.34	0.86
1:A:5:LEU:CD1	1:A:82:ASP:CG[4_547]	1.34	0.86
1:A:89:ILE:CD1	1:A:241:LYS:O[4_557]	1.34	0.86
1:A:81:ALA:CB	1:A:260:ALA:O[4_557]	1.35	0.85
1:A:117:VAL:N	1:A:233:GLU:N[4_557]	1.35	0.85
1:A:29:ARG:CZ	1:A:176:PHE:CZ[4_557]	1.35	0.85
1:A:87:LEU:N	1:A:267:ASP:OD1[4_557]	1.35	0.85
1:A:229:ARG:NE	1:A:292:LYS:CE[1_556]	1.35	0.85
1:A:116:ARG:O	1:A:231:MET:C[4_557]	1.35	0.85
1:A:80:PHE:CZ	1:A:239:LEU:CD2[4_557]	1.35	0.85
1:A:59:ASP:CG	1:A:284:PRO:CD[4_556]	1.35	0.85
1:A:61:GLU:O	1:A:287:TRP:CZ2[4_556]	1.36	0.84
1:A:118:PHE:N	1:A:232:PHE:N[4_557]	1.36	0.84
1:A:78:ALA:N	1:A:262:LEU:O[4_557]	1.36	0.84
1:A:95:VAL:N	1:A:177:GLN:CA[4_557]	1.36	0.84
1:A:71:GLU:CA	1:A:289:SER:O[4_556]	1.37	0.83
1:A:115:PHE:CZ	1:A:238:ASP:O[4_557]	1.37	0.83
1:A:64:ARG:O	1:A:200:ASP:CG[4_556]	1.37	0.83
1:A:152:PHE:C	1:A:257:ALA:CA[4_557]	1.37	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:72:VAL:CA	1:A:292:LYS:O[4_556]	1.37	0.83
1:A:80:PHE:CZ	1:A:239:LEU:CG[4_557]	1.37	0.83
1:A:29:ARG:CD	1:A:176:PHE:CE1[4_557]	1.37	0.83
1:A:84:VAL:CB	1:A:265:LYS:CD[4_557]	1.37	0.83
1:A:111:VAL:CG1	1:A:238:ASP:CG[4_557]	1.37	0.83
1:A:92:ASP:N	1:A:245:ALA:CA[4_557]	1.38	0.82
1:A:154:ALA:CB	1:A:259:ALA:O[4_557]	1.38	0.82
1:A:27:GLY:N	1:A:244:ILE:CD1[4_557]	1.38	0.82
1:A:24:VAL:CG1	1:A:175:ARG:CZ[4_557]	1.38	0.82
1:A:26:PRO:C	1:A:244:ILE:CD1[4_557]	1.39	0.81
1:A:72:VAL:CG1	1:A:293:GLY:C[4_556]	1.39	0.81
1:A:73:MET:C	1:A:292:LYS:CB[4_556]	1.39	0.81
1:A:156:LEU:N	1:A:228:LEU:CA[4_557]	1.39	0.81
1:A:90:SER:CA	1:A:268:VAL:CG1[4_557]	1.39	0.81
1:A:84:VAL:C	1:A:265:LYS:CG[4_557]	1.39	0.81
1:A:113:TRP:CH2	1:A:233:GLU:OE2[4_557]	1.39	0.81
1:A:69:PRO:C	1:A:188:LEU:O[4_556]	1.39	0.81
1:A:64:ARG:CZ	1:A:287:TRP:CZ3[4_556]	1.39	0.81
1:A:68:SER:C	1:A:188:LEU:C[4_556]	1.39	0.81
1:A:78:ALA:C	1:A:262:LEU:C[4_557]	1.39	0.81
1:A:3:GLN:CD	1:A:184:GLN:CD[4_557]	1.40	0.80
1:A:112:TRP:NE1	1:A:236:LYS:CB[4_557]	1.40	0.80
1:A:79:GLY:O	1:A:264:GLY:N[4_557]	1.40	0.80
1:A:64:ARG:CA	1:A:200:ASP:OD1[4_556]	1.40	0.80
1:A:70:TYR:N	1:A:188:LEU:O[4_556]	1.40	0.80
1:A:72:VAL:C	1:A:292:LYS:C[4_556]	1.40	0.80
1:A:116:ARG:N	1:A:232:PHE:C[4_557]	1.40	0.80
1:A:82:ASP:N	1:A:265:LYS:N[4_557]	1.40	0.80
1:A:18:SER:CA	1:A:172:GLU:C[4_557]	1.40	0.80
1:A:113:TRP:CZ3	1:A:233:GLU:CD[4_557]	1.41	0.79
1:A:70:TYR:O	1:A:289:SER:C[4_556]	1.41	0.79
1:A:93:THR:O	1:A:177:GLN:O[4_557]	1.41	0.79
1:A:64:ARG:NH2	1:A:287:TRP:O[4_556]	1.41	0.79
1:A:156:LEU:CA	1:A:228:LEU:N[4_557]	1.41	0.79
1:A:148:GLU:CG	1:A:159:SER:N[4_557]	1.41	0.79
1:A:59:ASP:CG	1:A:284:PRO:CG[4_556]	1.41	0.79
1:A:120:HIS:N	1:A:210:MET:SD[4_557]	1.41	0.79
1:A:117:VAL:CA	1:A:230:ALA:C[4_557]	1.41	0.79
1:A:153:LYS:N	1:A:256:ILE:C[4_557]	1.41	0.79
1:A:67:ALA:N	1:A:201:SER:CA[4_556]	1.42	0.78
1:A:18:SER:OG	1:A:172:GLU:CA[4_557]	1.42	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:79:GLY:N	1:A:262:LEU:O[4_557]	1.42	0.78
1:A:156:LEU:CG	1:A:227:GLU:C[4_557]	1.43	0.77
1:A:153:LYS:CB	1:A:255:HIS:O[4_557]	1.43	0.77
1:A:80:PHE:CZ	1:A:239:LEU:CB[4_557]	1.43	0.77
1:A:118:PHE:CD1	1:A:229:ARG:N[4_557]	1.43	0.77
1:A:122:THR:OG1	1:A:178:LEU:O[4_557]	1.43	0.77
1:A:115:PHE:O	1:A:232:PHE:CA[4_557]	1.43	0.77
1:A:65:ASP:C	1:A:201:SER:O[4_556]	1.43	0.77
1:A:113:TRP:CE3	1:A:233:GLU:CD[4_557]	1.44	0.76
1:A:83:TYR:N	1:A:264:GLY:O[4_557]	1.44	0.76
1:A:152:PHE:O	1:A:257:ALA:O[4_557]	1.44	0.76
1:A:116:ARG:CA	1:A:232:PHE:C[4_557]	1.44	0.76
1:A:154:ALA:N	1:A:259:ALA:C[4_557]	1.44	0.76
1:A:119:GLY:O	1:A:210:MET:CE[4_557]	1.44	0.76
1:A:28:LEU:O	1:A:176:PHE:CG[4_557]	1.44	0.76
1:A:94:HIS:CA	1:A:177:GLN:C[4_557]	1.45	0.75
1:A:59:ASP:OD1	1:A:284:PRO:CG[4_556]	1.45	0.75
1:A:66:LYS:CB	1:A:275:TRP:CH2[4_556]	1.45	0.75
1:A:229:ARG:NH2	1:A:292:LYS:CB[1_556]	1.46	0.74
1:A:87:LEU:N	1:A:267:ASP:OD2[4_557]	1.46	0.74
1:A:121:ARG:CB	1:A:208:VAL:C[4_557]	1.46	0.74
1:A:69:PRO:CG	1:A:188:LEU:CB[4_556]	1.46	0.74
1:A:69:PRO:CB	1:A:188:LEU:CG[4_556]	1.46	0.74
1:A:2:HIS:NE2	1:A:86:SER:CB[4_547]	1.46	0.74
1:A:113:TRP:CD2	1:A:233:GLU:OE2[4_557]	1.46	0.74
1:A:22:GLY:O	1:A:169:GLU:OE1[4_557]	1.47	0.73
1:A:118:PHE:CA	1:A:228:LEU:O[4_557]	1.47	0.73
1:A:84:VAL:CG2	1:A:239:LEU:O[4_557]	1.47	0.73
1:A:28:LEU:CG	1:A:170:ASN:OD1[4_557]	1.47	0.73
1:A:156:LEU:CB	1:A:227:GLU:CA[4_557]	1.47	0.73
1:A:31:LEU:CD2	1:A:241:LYS:C[4_557]	1.48	0.72
1:A:95:VAL:CG2	1:A:177:GLN:CB[4_557]	1.48	0.72
1:A:95:VAL:CB	1:A:177:GLN:CG[4_557]	1.48	0.72
1:A:117:VAL:O	1:A:231:MET:CA[4_557]	1.48	0.72
1:A:83:TYR:N	1:A:265:LYS:CA[4_557]	1.48	0.72
1:A:84:VAL:O	1:A:265:LYS:CE[4_557]	1.49	0.71
1:A:94:HIS:O	1:A:177:GLN:CA[4_557]	1.49	0.71
1:A:28:LEU:CA	1:A:176:PHE:CB[4_557]	1.49	0.71
1:A:229:ARG:NH2	1:A:292:LYS:CD[1_556]	1.49	0.71
1:A:29:ARG:N	1:A:176:PHE:N[4_557]	1.49	0.71
1:A:73:MET:CG	1:A:291:GLY:CA[4_556]	1.49	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:148:GLU:CB	1:A:159:SER:N[4_557]	1.49	0.71
1:A:85:GLY:C	1:A:267:ASP:CB[4_557]	1.49	0.71
1:A:121:ARG:CG	1:A:208:VAL:C[4_557]	1.49	0.71
1:A:65:ASP:N	1:A:200:ASP:OD2[4_556]	1.49	0.71
1:A:116:ARG:NH1	1:A:151:ILE:CD1[4_547]	1.50	0.70
1:A:83:TYR:N	1:A:265:LYS:N[4_557]	1.50	0.70
1:A:80:PHE:CG	1:A:239:LEU:CD1[4_557]	1.51	0.69
1:A:74:LEU:CA	1:A:229:ARG:CZ[4_557]	1.51	0.69
1:A:83:TYR:N	1:A:264:GLY:C[4_557]	1.51	0.69
1:A:70:TYR:C	1:A:290:GLN:N[4_556]	1.51	0.69
1:A:95:VAL:CB	1:A:177:GLN:NE2[4_557]	1.51	0.69
1:A:84:VAL:N	1:A:265:LYS:CB[4_557]	1.51	0.69
1:A:122:THR:OG1	1:A:178:LEU:C[4_557]	1.51	0.69
1:A:94:HIS:C	1:A:177:GLN:N[4_557]	1.51	0.69
1:A:77:GLU:O	1:A:263:CYS:N[4_557]	1.52	0.68
1:A:23:LYS:CE	1:A:168:LEU:O[4_557]	1.52	0.68
1:A:116:ARG:C	1:A:232:PHE:C[4_557]	1.52	0.68
1:A:78:ALA:CA	1:A:262:LEU:CA[4_557]	1.52	0.68
1:A:66:LYS:C	1:A:201:SER:C[4_556]	1.52	0.68
1:A:93:THR:CB	1:A:244:ILE:CA[4_557]	1.52	0.68
1:A:153:LYS:O	1:A:256:ILE:O[4_557]	1.52	0.68
1:A:115:PHE:O	1:A:232:PHE:CB[4_557]	1.53	0.67
1:A:23:LYS:CG	1:A:169:GLU:C[4_557]	1.53	0.67
1:A:148:GLU:CB	1:A:159:SER:CA[4_557]	1.53	0.67
1:A:117:VAL:CG2	1:A:233:GLU:CG[4_557]	1.53	0.67
1:A:92:ASP:CB	1:A:246:THR:N[4_557]	1.54	0.66
1:A:121:ARG:C	1:A:208:VAL:CB[4_557]	1.54	0.66
1:A:155:THR:CB	1:A:215:PHE:CD1[4_557]	1.54	0.66
1:A:118:PHE:CE1	1:A:229:ARG:CB[4_557]	1.54	0.66
1:A:70:TYR:CB	1:A:290:GLN:CB[4_556]	1.54	0.66
1:A:118:PHE:CE1	1:A:229:ARG:CA[4_557]	1.54	0.66
1:A:115:PHE:CD2	1:A:239:LEU:N[4_557]	1.54	0.66
1:A:117:VAL:CA	1:A:230:ALA:O[4_557]	1.55	0.65
1:A:65:ASP:OD1	1:A:201:SER:OG[4_556]	1.55	0.65
1:A:74:LEU:CD2	1:A:229:ARG:CG[4_557]	1.55	0.65
1:A:156:LEU:CG	1:A:227:GLU:N[4_557]	1.55	0.65
1:A:18:SER:N	1:A:172:GLU:O[4_557]	1.55	0.65
1:A:26:PRO:CG	1:A:162:LYS:CG[4_557]	1.56	0.64
1:A:148:GLU:C	1:A:159:SER:OG[4_557]	1.56	0.64
1:A:6:TYR:CD1	1:A:207:SER:O[4_557]	1.56	0.64
1:A:64:ARG:CG	1:A:287:TRP:CH2[4_556]	1.57	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:80:PHE:CA	1:A:263:CYS:O[4_557]	1.57	0.63
1:A:91:ASN:O	1:A:179:VAL:CB[4_557]	1.57	0.63
1:A:31:LEU:CD2	1:A:241:LYS:CB[4_557]	1.57	0.63
1:A:24:VAL:CG1	1:A:175:ARG:NE[4_557]	1.57	0.63
1:A:112:TRP:CH2	1:A:236:LYS:CD[4_557]	1.57	0.63
1:A:117:VAL:CB	1:A:230:ALA:CA[4_557]	1.57	0.63
1:A:17:GLU:CG	1:A:172:GLU:OE1[4_557]	1.57	0.63
1:A:94:HIS:N	1:A:177:GLN:O[4_557]	1.58	0.62
1:A:115:PHE:C	1:A:232:PHE:C[4_557]	1.58	0.62
1:A:93:THR:CA	1:A:244:ILE:O[4_557]	1.58	0.62
1:A:67:ALA:CA	1:A:202:GLY:N[4_556]	1.58	0.62
1:A:15:LEU:CD2	1:A:174:LYS:O[4_557]	1.58	0.62
1:A:156:LEU:C	1:A:227:GLU:O[4_557]	1.58	0.62
1:A:90:SER:OG	1:A:269:ALA:C[4_557]	1.58	0.62
1:A:97:VAL:C	1:A:241:LYS:NZ[4_557]	1.58	0.62
1:A:97:VAL:CB	1:A:241:LYS:NZ[4_557]	1.59	0.61
1:A:157:ASN:CB	1:A:231:MET:CG[4_557]	1.59	0.61
1:A:68:SER:N	1:A:189:GLY:CA[4_556]	1.59	0.61
1:A:65:ASP:OD1	1:A:201:SER:CA[4_556]	1.59	0.61
1:A:58:PHE:CD1	1:A:240:THR:CG2[4_557]	1.59	0.61
1:A:116:ARG:CG	1:A:235:LYS:C[4_557]	1.59	0.61
1:A:61:GLU:CG	1:A:285:GLU:N[4_556]	1.59	0.61
1:A:115:PHE:CE2	1:A:239:LEU:N[4_557]	1.59	0.61
1:A:153:LYS:CD	1:A:255:HIS:O[4_557]	1.60	0.60
1:A:62:GLU:OE2	1:A:279:PHE:C[4_556]	1.60	0.60
1:A:79:GLY:C	1:A:263:CYS:O[4_557]	1.60	0.60
1:A:80:PHE:CA	1:A:263:CYS:C[4_557]	1.60	0.60
1:A:73:MET:N	1:A:291:GLY:O[4_556]	1.60	0.60
1:A:18:SER:CB	1:A:173:SER:CA[4_557]	1.60	0.60
1:A:64:ARG:O	1:A:200:ASP:OD1[4_556]	1.60	0.60
1:A:66:LYS:O	1:A:202:GLY:N[4_556]	1.60	0.60
1:A:73:MET:CB	1:A:291:GLY:CA[4_556]	1.60	0.60
1:A:73:MET:SD	1:A:290:GLN:C[4_556]	1.60	0.60
1:A:148:GLU:CA	1:A:159:SER:CB[4_557]	1.60	0.60
1:A:3:GLN:CD	1:A:184:GLN:NE2[4_557]	1.61	0.59
1:A:113:TRP:CZ3	1:A:233:GLU:OE2[4_557]	1.61	0.59
1:A:157:ASN:N	1:A:231:MET:CG[4_557]	1.61	0.59
1:A:18:SER:CB	1:A:172:GLU:O[4_557]	1.61	0.59
1:A:77:GLU:CD	1:A:228:LEU:CG[4_557]	1.61	0.59
1:A:95:VAL:CG2	1:A:177:GLN:NE2[4_557]	1.61	0.59
1:A:117:VAL:CG1	1:A:230:ALA:CB[4_557]	1.61	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:85:GLY:O	1:A:267:ASP:N[4_557]	1.62	0.58
1:A:58:PHE:CE1	1:A:240:THR:OG1[4_557]	1.62	0.58
1:A:86:SER:N	1:A:267:ASP:N[4_557]	1.62	0.58
1:A:117:VAL:C	1:A:232:PHE:N[4_557]	1.62	0.58
1:A:85:GLY:N	1:A:265:LYS:CG[4_557]	1.62	0.58
1:A:153:LYS:CD	1:A:255:HIS:CA[4_557]	1.62	0.58
1:A:93:THR:CA	1:A:177:GLN:O[4_557]	1.62	0.58
1:A:115:PHE:CD2	1:A:238:ASP:O[4_557]	1.62	0.58
1:A:14:TRP:CZ3	1:A:174:LYS:CG[4_557]	1.62	0.58
1:A:82:ASP:C	1:A:266:PRO:CD[4_557]	1.63	0.57
1:A:73:MET:CE	1:A:291:GLY:CA[4_556]	1.63	0.57
1:A:95:VAL:N	1:A:177:GLN:CB[4_557]	1.63	0.57
1:A:118:PHE:CD1	1:A:229:ARG:CA[4_557]	1.63	0.57
1:A:79:GLY:C	1:A:264:GLY:CA[4_557]	1.63	0.57
1:A:93:THR:O	1:A:177:GLN:C[4_557]	1.63	0.57
1:A:64:ARG:NE	1:A:287:TRP:CH2[4_556]	1.63	0.57
1:A:26:PRO:O	1:A:244:ILE:CG2[4_557]	1.63	0.57
1:A:28:LEU:C	1:A:176:PHE:CG[4_557]	1.63	0.57
1:A:116:ARG:CZ	1:A:151:ILE:CD1[4_547]	1.63	0.57
1:A:116:ARG:CB	1:A:233:GLU:C[4_557]	1.63	0.57
1:A:68:SER:CB	1:A:189:GLY:CA[4_556]	1.64	0.56
1:A:69:PRO:CB	1:A:188:LEU:CA[4_556]	1.64	0.56
1:A:82:ASP:C	1:A:265:LYS:CA[4_557]	1.64	0.56
1:A:58:PHE:CZ	1:A:240:THR:CB[4_557]	1.64	0.56
1:A:111:VAL:CG1	1:A:238:ASP:OD1[4_557]	1.64	0.56
1:A:91:ASN:C	1:A:245:ALA:CB[4_557]	1.64	0.56
1:A:3:GLN:OE1	1:A:184:GLN:OE1[4_557]	1.64	0.56
1:A:77:GLU:CD	1:A:228:LEU:CD1[4_557]	1.64	0.56
1:A:121:ARG:C	1:A:208:VAL:CG1[4_557]	1.64	0.56
1:A:64:ARG:NH2	1:A:287:TRP:C[4_556]	1.64	0.56
1:A:73:MET:N	1:A:292:LYS:C[4_556]	1.64	0.56
1:A:113:TRP:CD2	1:A:233:GLU:CD[4_557]	1.65	0.55
1:A:153:LYS:N	1:A:256:ILE:O[4_557]	1.65	0.55
1:A:153:LYS:CB	1:A:255:HIS:C[4_557]	1.65	0.55
1:A:75:PRO:N	1:A:229:ARG:NH1[4_557]	1.65	0.55
1:A:18:SER:CA	1:A:173:SER:N[4_557]	1.65	0.55
1:A:89:ILE:C	1:A:268:VAL:CA[4_557]	1.65	0.55
1:A:74:LEU:CA	1:A:229:ARG:NH1[4_557]	1.65	0.55
1:A:149:PRO:N	1:A:159:SER:CB[4_557]	1.65	0.55
1:A:157:ASN:N	1:A:227:GLU:O[4_557]	1.66	0.54
1:A:116:ARG:CB	1:A:235:LYS:N[4_557]	1.66	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:95:VAL:CG1	1:A:177:GLN:NE2[4_557]	1.66	0.54
1:A:28:LEU:C	1:A:176:PHE:CA[4_557]	1.66	0.54
1:A:153:LYS:C	1:A:256:ILE:O[4_557]	1.66	0.54
1:A:23:LYS:N	1:A:169:GLU:CB[4_557]	1.66	0.54
1:A:23:LYS:CA	1:A:169:GLU:CA[4_557]	1.66	0.54
1:A:29:ARG:CG	1:A:176:PHE:CE1[4_557]	1.67	0.53
1:A:95:VAL:N	1:A:177:GLN:CG[4_557]	1.67	0.53
1:A:26:PRO:CA	1:A:162:LYS:CD[4_557]	1.67	0.53
1:A:26:PRO:O	1:A:244:ILE:CG1[4_557]	1.67	0.53
1:A:65:ASP:N	1:A:200:ASP:CG[4_556]	1.67	0.53
1:A:84:VAL:C	1:A:265:LYS:CE[4_557]	1.67	0.53
1:A:61:GLU:CG	1:A:285:GLU:CA[4_556]	1.67	0.53
1:A:157:ASN:CA	1:A:231:MET:CG[4_557]	1.67	0.53
1:A:78:ALA:N	1:A:262:LEU:C[4_557]	1.67	0.53
1:A:15:LEU:CD2	1:A:174:LYS:C[4_557]	1.68	0.52
1:A:113:TRP:C	1:A:233:GLU:CA[4_557]	1.68	0.52
1:A:69:PRO:CA	1:A:188:LEU:CB[4_556]	1.68	0.52
1:A:120:HIS:CA	1:A:210:MET:SD[4_557]	1.68	0.52
1:A:112:TRP:CE2	1:A:236:LYS:CB[4_557]	1.68	0.52
1:A:67:ALA:CB	1:A:201:SER:CA[4_556]	1.68	0.52
1:A:70:TYR:O	1:A:290:GLN:CA[4_556]	1.68	0.52
1:A:80:PHE:CE2	1:A:239:LEU:CB[4_557]	1.68	0.52
1:A:122:THR:N	1:A:208:VAL:CB[4_557]	1.69	0.51
1:A:116:ARG:C	1:A:231:MET:O[4_557]	1.69	0.51
1:A:68:SER:CA	1:A:189:GLY:N[4_556]	1.69	0.51
1:A:77:GLU:CG	1:A:224:SER:O[4_557]	1.69	0.51
1:A:117:VAL:CB	1:A:230:ALA:C[4_557]	1.69	0.51
1:A:14:TRP:CE3	1:A:174:LYS:CD[4_557]	1.69	0.51
1:A:18:SER:OG	1:A:173:SER:N[4_557]	1.69	0.51
1:A:69:PRO:N	1:A:188:LEU:O[4_556]	1.69	0.51
1:A:84:VAL:CA	1:A:265:LYS:CE[4_557]	1.70	0.50
1:A:93:THR:OG1	1:A:243:LEU:C[4_557]	1.70	0.50
1:A:65:ASP:OD1	1:A:201:SER:N[4_556]	1.70	0.50
1:A:115:PHE:N	1:A:237:VAL:O[4_557]	1.70	0.50
1:A:3:GLN:NE2	1:A:184:GLN:NE2[4_557]	1.70	0.50
1:A:113:TRP:O	1:A:233:GLU:C[4_557]	1.70	0.50
1:A:72:VAL:CG1	1:A:293:GLY:O[4_556]	1.70	0.50
1:A:80:PHE:N	1:A:264:GLY:N[4_557]	1.70	0.50
1:A:77:GLU:CG	1:A:228:LEU:CD1[4_557]	1.70	0.50
1:A:86:SER:CA	1:A:267:ASP:CG[4_557]	1.70	0.50
1:A:92:ASP:OD2	1:A:246:THR:C[4_557]	1.70	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:5:LEU:CD1	1:A:82:ASP:CB[4_547]	1.70	0.50
1:A:74:LEU:CA	1:A:229:ARG:NE[4_557]	1.70	0.50
1:A:229:ARG:CD	1:A:292:LYS:NZ[1_556]	1.70	0.50
1:A:6:TYR:CE1	1:A:206:GLY:O[4_557]	1.70	0.50
1:A:77:GLU:CB	1:A:228:LEU:CD1[4_557]	1.70	0.50
1:A:61:GLU:O	1:A:287:TRP:NE1[4_556]	1.70	0.50
1:A:6:TYR:CZ	1:A:206:GLY:C[4_557]	1.71	0.49
1:A:73:MET:N	1:A:291:GLY:C[4_556]	1.71	0.49
1:A:28:LEU:O	1:A:176:PHE:CB[4_557]	1.71	0.49
1:A:68:SER:OG	1:A:189:GLY:C[4_556]	1.71	0.49
1:A:83:TYR:C	1:A:265:LYS:CG[4_557]	1.71	0.49
1:A:154:ALA:CA	1:A:259:ALA:CB[4_557]	1.71	0.49
1:A:115:PHE:CG	1:A:238:ASP:C[4_557]	1.71	0.49
1:A:23:LYS:NZ	1:A:171:LEU:CB[4_557]	1.71	0.49
1:A:15:LEU:CA	1:A:173:SER:O[4_557]	1.71	0.49
1:A:116:ARG:NH1	1:A:234:ALA:O[4_557]	1.71	0.49
1:A:80:PHE:N	1:A:263:CYS:CA[4_557]	1.71	0.49
1:A:69:PRO:CA	1:A:188:LEU:O[4_556]	1.71	0.49
1:A:23:LYS:CG	1:A:169:GLU:CA[4_557]	1.71	0.49
1:A:115:PHE:O	1:A:232:PHE:C[4_557]	1.72	0.48
1:A:118:PHE:O	1:A:232:PHE:CD1[4_557]	1.72	0.48
1:A:29:ARG:CD	1:A:176:PHE:CE2[4_557]	1.72	0.48
1:A:85:GLY:O	1:A:267:ASP:C[4_557]	1.72	0.48
1:A:5:LEU:CD2	1:A:82:ASP:CG[4_547]	1.72	0.48
1:A:113:TRP:O	1:A:233:GLU:CB[4_557]	1.72	0.48
1:A:29:ARG:NH1	1:A:176:PHE:CZ[4_557]	1.73	0.47
1:A:93:THR:CG2	1:A:244:ILE:CB[4_557]	1.73	0.47
1:A:113:TRP:CE3	1:A:233:GLU:OE2[4_557]	1.73	0.47
1:A:64:ARG:CD	1:A:287:TRP:CH2[4_556]	1.73	0.47
1:A:117:VAL:CG1	1:A:230:ALA:C[4_557]	1.73	0.47
1:A:154:ALA:CB	1:A:259:ALA:C[4_557]	1.73	0.47
1:A:58:PHE:CD2	1:A:240:THR:CA[4_557]	1.73	0.47
1:A:153:LYS:CD	1:A:255:HIS:C[4_557]	1.74	0.46
1:A:86:SER:C	1:A:267:ASP:OD2[4_557]	1.74	0.46
1:A:118:PHE:CD1	1:A:228:LEU:C[4_557]	1.74	0.46
1:A:116:ARG:CB	1:A:233:GLU:O[4_557]	1.74	0.46
1:A:66:LYS:CE	1:A:279:PHE:CB[4_556]	1.74	0.46
1:A:31:LEU:CD2	1:A:242:PRO:N[4_557]	1.75	0.45
1:A:94:HIS:O	1:A:176:PHE:O[4_557]	1.75	0.45
1:A:22:GLY:C	1:A:169:GLU:CB[4_557]	1.75	0.45
1:A:17:GLU:OE1	1:A:172:GLU:OE2[4_557]	1.75	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:153:LYS:CA	1:A:256:ILE:C[4_557]	1.75	0.45
1:A:92:ASP:C	1:A:244:ILE:C[4_557]	1.75	0.45
1:A:67:ALA:O	1:A:186:ARG:C[4_556]	1.75	0.45
1:A:22:GLY:C	1:A:169:GLU:CG[4_557]	1.75	0.45
1:A:229:ARG:CZ	1:A:292:LYS:CG[1_556]	1.75	0.45
1:A:115:PHE:CB	1:A:238:ASP:N[4_557]	1.75	0.45
1:A:85:GLY:O	1:A:267:ASP:CB[4_557]	1.75	0.45
1:A:26:PRO:CG	1:A:162:LYS:CA[4_557]	1.75	0.45
1:A:61:GLU:CB	1:A:285:GLU:N[4_556]	1.76	0.44
1:A:28:LEU:CA	1:A:170:ASN:ND2[4_557]	1.76	0.44
1:A:69:PRO:N	1:A:188:LEU:CA[4_556]	1.76	0.44
1:A:148:GLU:O	1:A:159:SER:C[4_557]	1.76	0.44
1:A:113:TRP:CH2	1:A:233:GLU:CD[4_557]	1.76	0.44
1:A:118:PHE:CB	1:A:232:PHE:CG[4_557]	1.76	0.44
1:A:121:ARG:NH2	1:A:208:VAL:CA[4_557]	1.76	0.44
1:A:88:GLY:CA	1:A:267:ASP:O[4_557]	1.76	0.44
1:A:121:ARG:CG	1:A:209:ASN:CA[4_557]	1.76	0.44
1:A:118:PHE:CE1	1:A:229:ARG:N[4_557]	1.76	0.44
1:A:74:LEU:C	1:A:229:ARG:NH1[4_557]	1.77	0.43
1:A:66:LYS:O	1:A:202:GLY:CA[4_556]	1.77	0.43
1:A:71:GLU:O	1:A:290:GLN:O[4_556]	1.77	0.43
1:A:6:TYR:CE1	1:A:207:SER:O[4_557]	1.77	0.43
1:A:62:GLU:CD	1:A:279:PHE:O[4_556]	1.77	0.43
1:A:97:VAL:CB	1:A:241:LYS:CE[4_557]	1.77	0.43
1:A:31:LEU:CD2	1:A:242:PRO:CD[4_557]	1.77	0.43
1:A:5:LEU:CG	1:A:82:ASP:CG[4_547]	1.77	0.43
1:A:92:ASP:CB	1:A:245:ALA:O[4_557]	1.77	0.43
1:A:112:TRP:CD1	1:A:236:LYS:CG[4_557]	1.77	0.43
1:A:95:VAL:CG1	1:A:177:GLN:CD[4_557]	1.77	0.43
1:A:152:PHE:O	1:A:261:TYR:N[4_557]	1.78	0.42
1:A:112:TRP:CE3	1:A:236:LYS:CE[4_557]	1.78	0.42
1:A:80:PHE:CE1	1:A:239:LEU:CD1[4_557]	1.78	0.42
1:A:91:ASN:ND2	1:A:256:ILE:CA[4_557]	1.78	0.42
1:A:121:ARG:O	1:A:208:VAL:CG1[4_557]	1.78	0.42
1:A:154:ALA:O	1:A:228:LEU:CD2[4_557]	1.78	0.42
1:A:83:TYR:O	1:A:267:ASP:OD2[4_557]	1.78	0.42
1:A:83:TYR:CA	1:A:264:GLY:O[4_557]	1.78	0.42
1:A:74:LEU:CA	1:A:292:LYS:CD[4_556]	1.78	0.42
1:A:121:ARG:CB	1:A:208:VAL:O[4_557]	1.78	0.42
1:A:29:ARG:O	1:A:175:ARG:O[4_557]	1.78	0.42
1:A:24:VAL:CG2	1:A:175:ARG:NE[4_557]	1.78	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:86:SER:CA	1:A:267:ASP:OD2[4_557]	1.79	0.41
1:A:65:ASP:CA	1:A:200:ASP:OD2[4_556]	1.79	0.41
1:A:121:ARG:CA	1:A:208:VAL:CG1[4_557]	1.79	0.41
1:A:87:LEU:N	1:A:267:ASP:CB[4_557]	1.79	0.41
1:A:89:ILE:O	1:A:268:VAL:CG2[4_557]	1.79	0.41
1:A:89:ILE:CD1	1:A:265:LYS:NZ[4_557]	1.79	0.41
1:A:67:ALA:N	1:A:201:SER:O[4_556]	1.79	0.41
1:A:89:ILE:CG1	1:A:242:PRO:C[4_557]	1.79	0.41
1:A:73:MET:O	1:A:292:LYS:CB[4_556]	1.79	0.41
1:A:31:LEU:CG	1:A:241:LYS:CA[4_557]	1.79	0.41
1:A:23:LYS:CA	1:A:170:ASN:N[4_557]	1.79	0.41
1:A:74:LEU:CD2	1:A:229:ARG:NE[4_557]	1.80	0.40
1:A:118:PHE:CZ	1:A:229:ARG:CG[4_557]	1.80	0.40
1:A:152:PHE:CG	1:A:260:ALA:CB[4_557]	1.80	0.40
1:A:116:ARG:N	1:A:233:GLU:N[4_557]	1.80	0.40
1:A:113:TRP:C	1:A:233:GLU:CB[4_557]	1.80	0.40
1:A:95:VAL:CA	1:A:177:GLN:CG[4_557]	1.80	0.40
1:A:26:PRO:CG	1:A:162:LYS:CD[4_557]	1.80	0.40
1:A:75:PRO:CD	1:A:229:ARG:NH1[4_557]	1.80	0.40
1:A:23:LYS:CD	1:A:168:LEU:O[4_557]	1.81	0.39
1:A:83:TYR:CB	1:A:264:GLY:O[4_557]	1.81	0.39
1:A:94:HIS:CA	1:A:177:GLN:CA[4_557]	1.81	0.39
1:A:18:SER:CA	1:A:172:GLU:O[4_557]	1.81	0.39
1:A:29:ARG:C	1:A:175:ARG:C[4_557]	1.81	0.39
1:A:23:LYS:CA	1:A:169:GLU:CB[4_557]	1.81	0.39
1:A:14:TRP:CG	1:A:174:LYS:CE[4_557]	1.81	0.39
1:A:62:GLU:OE1	1:A:282:ALA:O[4_556]	1.81	0.39
1:A:113:TRP:CE3	1:A:233:GLU:OE1[4_557]	1.81	0.39
1:A:5:LEU:CB	1:A:82:ASP:OD2[4_547]	1.81	0.39
1:A:14:TRP:CD2	1:A:174:LYS:CE[4_557]	1.81	0.39
1:A:31:LEU:CD1	1:A:241:LYS:CD[4_557]	1.81	0.39
1:A:81:ALA:O	1:A:265:LYS:CA[4_557]	1.81	0.39
1:A:14:TRP:O	1:A:172:GLU:O[4_557]	1.81	0.39
1:A:93:THR:CB	1:A:244:ILE:CB[4_557]	1.81	0.39
1:A:29:ARG:NH1	1:A:176:PHE:CE2[4_557]	1.81	0.39
1:A:156:LEU:CA	1:A:228:LEU:CA[4_557]	1.81	0.39
1:A:26:PRO:O	1:A:244:ILE:CB[4_557]	1.82	0.38
1:A:117:VAL:CG2	1:A:233:GLU:CB[4_557]	1.82	0.38
1:A:66:LYS:O	1:A:202:GLY:C[4_556]	1.82	0.38
1:A:61:GLU:OE1	1:A:285:GLU:C[4_556]	1.82	0.38
1:A:23:LYS:CG	1:A:168:LEU:O[4_557]	1.82	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:17:GLU:OE1	1:A:172:GLU:OE1[4_557]	1.82	0.38
1:A:85:GLY:N	1:A:265:LYS:O[4_557]	1.82	0.38
1:A:94:HIS:C	1:A:177:GLN:C[4_557]	1.82	0.38
1:A:77:GLU:OE1	1:A:223:LYS:O[4_557]	1.83	0.37
1:A:67:ALA:C	1:A:186:ARG:O[4_556]	1.83	0.37
1:A:115:PHE:C	1:A:232:PHE:O[4_557]	1.83	0.37
1:A:24:VAL:CB	1:A:175:ARG:NE[4_557]	1.83	0.37
1:A:64:ARG:N	1:A:200:ASP:OD1[4_556]	1.83	0.37
1:A:148:GLU:O	1:A:159:SER:CA[4_557]	1.83	0.37
1:A:6:TYR:CD2	1:A:208:VAL:CG2[4_557]	1.83	0.37
1:A:6:TYR:CE1	1:A:206:GLY:C[4_557]	1.83	0.37
1:A:79:GLY:O	1:A:264:GLY:C[4_557]	1.83	0.37
1:A:160:LEU:CG	1:A:234:ALA:CB[4_557]	1.83	0.37
1:A:64:ARG:CD	1:A:287:TRP:CZ3[4_556]	1.83	0.37
1:A:82:ASP:CA	1:A:265:LYS:N[4_557]	1.83	0.37
1:A:152:PHE:C	1:A:257:ALA:C[4_557]	1.83	0.37
1:A:148:GLU:O	1:A:159:SER:CB[4_557]	1.84	0.36
1:A:155:THR:OG1	1:A:215:PHE:CG[4_557]	1.84	0.36
1:A:29:ARG:CA	1:A:175:ARG:O[4_557]	1.84	0.36
1:A:112:TRP:CZ2	1:A:236:LYS:CG[4_557]	1.84	0.36
1:A:113:TRP:CD2	1:A:233:GLU:CG[4_557]	1.84	0.36
1:A:229:ARG:NE	1:A:292:LYS:NZ[1_556]	1.84	0.36
1:A:85:GLY:CA	1:A:267:ASP:N[4_557]	1.85	0.35
1:A:67:ALA:CA	1:A:201:SER:C[4_556]	1.85	0.35
1:A:68:SER:OG	1:A:189:GLY:O[4_556]	1.85	0.35
1:A:236:LYS:NZ	1:A:258:LEU:CB[4_547]	1.85	0.35
1:A:148:GLU:O	1:A:159:SER:O[4_557]	1.85	0.35
1:A:156:LEU:N	1:A:228:LEU:N[4_557]	1.85	0.35
1:A:93:THR:C	1:A:178:LEU:N[4_557]	1.85	0.35
1:A:74:LEU:N	1:A:292:LYS:CB[4_556]	1.85	0.35
1:A:120:HIS:N	1:A:210:MET:CE[4_557]	1.86	0.34
1:A:18:SER:OG	1:A:172:GLU:N[4_557]	1.86	0.34
1:A:236:LYS:NZ	1:A:258:LEU:CA[4_547]	1.86	0.34
1:A:113:TRP:O	1:A:233:GLU:N[4_557]	1.86	0.34
1:A:152:PHE:O	1:A:257:ALA:C[4_557]	1.86	0.34
1:A:112:TRP:CZ2	1:A:236:LYS:CE[4_557]	1.86	0.34
1:A:73:MET:C	1:A:291:GLY:O[4_556]	1.86	0.34
1:A:113:TRP:CE2	1:A:233:GLU:CD[4_557]	1.87	0.33
1:A:150:ALA:C	1:A:266:PRO:O[4_557]	1.87	0.33
1:A:155:THR:CA	1:A:228:LEU:CD2[4_557]	1.87	0.33
1:A:77:GLU:N	1:A:225:PRO:CA[4_557]	1.87	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:68:SER:O	1:A:189:GLY:N[4_556]	1.87	0.33
1:A:29:ARG:CA	1:A:176:PHE:CA[4_557]	1.87	0.33
1:A:66:LYS:C	1:A:202:GLY:CA[4_556]	1.87	0.33
1:A:28:LEU:CA	1:A:170:ASN:CG[4_557]	1.87	0.33
1:A:67:ALA:CA	1:A:201:SER:CA[4_556]	1.87	0.33
1:A:118:PHE:O	1:A:232:PHE:CE1[4_557]	1.87	0.33
1:A:72:VAL:O	1:A:292:LYS:N[4_556]	1.88	0.32
1:A:74:LEU:CG	1:A:229:ARG:NE[4_557]	1.88	0.32
1:A:31:LEU:CG	1:A:241:LYS:CG[4_557]	1.88	0.32
1:A:155:THR:CG2	1:A:215:PHE:CA[4_557]	1.88	0.32
1:A:149:PRO:CD	1:A:159:SER:OG[4_557]	1.88	0.32
1:A:81:ALA:C	1:A:265:LYS:N[4_557]	1.88	0.32
1:A:17:GLU:CD	1:A:172:GLU:OE1[4_557]	1.88	0.32
1:A:118:PHE:CB	1:A:228:LEU:O[4_557]	1.88	0.32
1:A:65:ASP:CG	1:A:201:SER:OG[4_556]	1.88	0.32
1:A:77:GLU:CD	1:A:224:SER:O[4_557]	1.88	0.32
1:A:26:PRO:CB	1:A:162:LYS:CD[4_557]	1.88	0.32
1:A:15:LEU:CD2	1:A:174:LYS:CB[4_557]	1.88	0.32
1:A:150:ALA:CB	1:A:268:VAL:O[4_557]	1.88	0.32
1:A:70:TYR:C	1:A:290:GLN:CA[4_556]	1.88	0.32
1:A:92:ASP:N	1:A:245:ALA:N[4_557]	1.89	0.31
1:A:73:MET:CG	1:A:291:GLY:C[4_556]	1.89	0.31
1:A:149:PRO:N	1:A:159:SER:OG[4_557]	1.89	0.31
1:A:92:ASP:OD2	1:A:245:ALA:C[4_557]	1.89	0.31
1:A:77:GLU:O	1:A:262:LEU:C[4_557]	1.89	0.31
1:A:17:GLU:OE1	1:A:172:GLU:CD[4_557]	1.89	0.31
1:A:93:THR:OG1	1:A:243:LEU:CA[4_557]	1.89	0.31
1:A:74:LEU:CB	1:A:229:ARG:NE[4_557]	1.89	0.31
1:A:92:ASP:CG	1:A:246:THR:CA[4_557]	1.89	0.31
1:A:18:SER:O	1:A:173:SER:OG[4_557]	1.89	0.31
1:A:153:LYS:CA	1:A:257:ALA:N[4_557]	1.89	0.31
1:A:153:LYS:CA	1:A:259:ALA:N[4_557]	1.89	0.31
1:A:22:GLY:O	1:A:169:GLU:CB[4_557]	1.90	0.30
1:A:91:ASN:OD1	1:A:257:ALA:N[4_557]	1.90	0.30
1:A:30:VAL:CG2	1:A:175:ARG:CA[4_557]	1.90	0.30
1:A:82:ASP:C	1:A:265:LYS:N[4_557]	1.90	0.30
1:A:116:ARG:CG	1:A:236:LYS:CA[4_557]	1.90	0.30
1:A:85:GLY:CA	1:A:268:VAL:N[4_557]	1.90	0.30
1:A:58:PHE:CE2	1:A:240:THR:CG2[4_557]	1.90	0.30
1:A:68:SER:C	1:A:188:LEU:O[4_556]	1.90	0.30
1:A:153:LYS:O	1:A:259:ALA:CB[4_557]	1.90	0.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:95:VAL:CG2	1:A:177:GLN:CG[4_557]	1.90	0.30
1:A:77:GLU:N	1:A:225:PRO:CB[4_557]	1.90	0.30
1:A:23:LYS:CB	1:A:169:GLU:CA[4_557]	1.91	0.29
1:A:25:GLY:O	1:A:244:ILE:CD1[4_557]	1.91	0.29
1:A:78:ALA:O	1:A:261:TYR:O[4_557]	1.91	0.29
1:A:151:ILE:N	1:A:268:VAL:O[4_557]	1.91	0.29
1:A:118:PHE:CZ	1:A:229:ARG:CA[4_557]	1.91	0.29
1:A:68:SER:O	1:A:189:GLY:CA[4_556]	1.91	0.29
1:A:80:PHE:O	1:A:265:LYS:N[4_557]	1.91	0.29
1:A:151:ILE:C	1:A:257:ALA:CB[4_557]	1.91	0.29
1:A:23:LYS:CA	1:A:169:GLU:O[4_557]	1.91	0.29
1:A:116:ARG:C	1:A:233:GLU:N[4_557]	1.91	0.29
1:A:95:VAL:CB	1:A:177:GLN:OE1[4_557]	1.91	0.29
1:A:74:LEU:CD2	1:A:229:ARG:CD[4_557]	1.91	0.29
1:A:117:VAL:C	1:A:230:ALA:C[4_557]	1.91	0.29
1:A:150:ALA:C	1:A:160:LEU:CD1[4_557]	1.91	0.29
1:A:64:ARG:NH2	1:A:287:TRP:CD2[4_556]	1.91	0.29
1:A:74:LEU:CG	1:A:292:LYS:CE[4_556]	1.92	0.28
1:A:69:PRO:CD	1:A:189:GLY:N[4_556]	1.92	0.28
1:A:68:SER:O	1:A:188:LEU:C[4_556]	1.92	0.28
1:A:115:PHE:CG	1:A:238:ASP:N[4_557]	1.92	0.28
1:A:73:MET:N	1:A:292:LYS:N[4_556]	1.92	0.28
1:A:22:GLY:O	1:A:169:GLU:CD[4_557]	1.92	0.28
1:A:2:HIS:ND1	1:A:86:SER:OG[4_547]	1.92	0.28
1:A:148:GLU:C	1:A:159:SER:CA[4_557]	1.92	0.28
1:A:29:ARG:CD	1:A:176:PHE:CD1[4_557]	1.92	0.28
1:A:112:TRP:CG	1:A:236:LYS:CG[4_557]	1.92	0.28
1:A:77:GLU:C	1:A:262:LEU:C[4_557]	1.92	0.28
1:A:73:MET:O	1:A:229:ARG:NH1[4_557]	1.92	0.28
1:A:21:ALA:O	1:A:169:GLU:CG[4_557]	1.92	0.28
1:A:93:THR:OG1	1:A:177:GLN:O[4_557]	1.92	0.28
1:A:92:ASP:CA	1:A:245:ALA:N[4_557]	1.92	0.28
1:A:117:VAL:CA	1:A:231:MET:N[4_557]	1.92	0.28
1:A:71:GLU:C	1:A:289:SER:O[4_556]	1.92	0.28
1:A:92:ASP:CG	1:A:245:ALA:O[4_557]	1.92	0.28
1:A:6:TYR:CE2	1:A:206:GLY:O[4_557]	1.92	0.28
1:A:156:LEU:CD2	1:A:227:GLU:CB[4_557]	1.93	0.27
1:A:117:VAL:N	1:A:232:PHE:C[4_557]	1.93	0.27
1:A:153:LYS:NZ	1:A:255:HIS:NE2[4_557]	1.93	0.27
1:A:97:VAL:CB	1:A:241:LYS:CD[4_557]	1.93	0.27
1:A:61:GLU:CB	1:A:284:PRO:CA[4_556]	1.93	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:90:SER:C	1:A:268:VAL:CG1[4_557]	1.94	0.26
1:A:61:GLU:CB	1:A:284:PRO:O[4_556]	1.94	0.26
1:A:154:ALA:CA	1:A:259:ALA:CA[4_557]	1.94	0.26
1:A:86:SER:CB	1:A:267:ASP:OD2[4_557]	1.94	0.26
1:A:2:HIS:CG	1:A:86:SER:OG[4_547]	1.94	0.26
1:A:3:GLN:CG	1:A:184:GLN:CD[4_557]	1.94	0.26
1:A:59:ASP:OD1	1:A:284:PRO:CD[4_556]	1.94	0.26
1:A:62:GLU:N	1:A:284:PRO:CB[4_556]	1.94	0.26
1:A:79:GLY:N	1:A:198:GLY:CA[4_556]	1.94	0.26
1:A:89:ILE:C	1:A:268:VAL:CB[4_557]	1.94	0.26
1:A:86:SER:N	1:A:267:ASP:CG[4_557]	1.94	0.26
1:A:72:VAL:O	1:A:290:GLN:O[4_556]	1.94	0.26
1:A:154:ALA:CA	1:A:259:ALA:C[4_557]	1.94	0.26
1:A:116:ARG:NH2	1:A:234:ALA:O[4_557]	1.94	0.26
1:A:86:SER:CA	1:A:267:ASP:OD1[4_557]	1.94	0.26
1:A:92:ASP:OD1	1:A:245:ALA:C[4_557]	1.94	0.26
1:A:115:PHE:CZ	1:A:238:ASP:C[4_557]	1.95	0.25
1:A:117:VAL:C	1:A:231:MET:C[4_557]	1.95	0.25
1:A:18:SER:OG	1:A:172:GLU:O[4_557]	1.95	0.25
1:A:68:SER:O	1:A:188:LEU:O[4_556]	1.95	0.25
1:A:73:MET:CA	1:A:292:LYS:CA[4_556]	1.95	0.25
1:A:95:VAL:CG2	1:A:177:GLN:CD[4_557]	1.95	0.25
1:A:91:ASN:CB	1:A:256:ILE:CB[4_557]	1.95	0.25
1:A:153:LYS:C	1:A:259:ALA:CA[4_557]	1.95	0.25
1:A:23:LYS:O	1:A:166:GLN:O[4_557]	1.95	0.25
1:A:85:GLY:CA	1:A:265:LYS:O[4_557]	1.95	0.25
1:A:115:PHE:CG	1:A:238:ASP:CA[4_557]	1.95	0.25
1:A:153:LYS:O	1:A:256:ILE:C[4_557]	1.95	0.25
1:A:156:LEU:CD1	1:A:227:GLU:N[4_557]	1.95	0.25
1:A:160:LEU:CD2	1:A:234:ALA:CA[4_557]	1.95	0.25
1:A:121:ARG:CD	1:A:209:ASN:N[4_557]	1.95	0.25
1:A:74:LEU:CB	1:A:229:ARG:CD[4_557]	1.95	0.25
1:A:86:SER:N	1:A:267:ASP:CB[4_557]	1.96	0.24
1:A:70:TYR:C	1:A:289:SER:C[4_556]	1.96	0.24
1:A:84:VAL:CG1	1:A:265:LYS:CD[4_557]	1.96	0.24
1:A:5:LEU:CD2	1:A:82:ASP:OD2[4_547]	1.96	0.24
1:A:95:VAL:CB	1:A:177:GLN:CB[4_557]	1.96	0.24
1:A:119:GLY:N	1:A:232:PHE:N[4_557]	1.96	0.24
1:A:68:SER:N	1:A:201:SER:OG[4_556]	1.96	0.24
1:A:30:VAL:N	1:A:175:ARG:C[4_557]	1.96	0.24
1:A:117:VAL:C	1:A:231:MET:CA[4_557]	1.96	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:64:ARG:C	1:A:200:ASP:OD2[4_556]	1.96	0.24
1:A:114:MET:N	1:A:233:GLU:CB[4_557]	1.96	0.24
1:A:66:LYS:O	1:A:202:GLY:O[4_556]	1.97	0.23
1:A:89:ILE:CD1	1:A:242:PRO:C[4_557]	1.97	0.23
1:A:5:LEU:CD2	1:A:82:ASP:OD1[4_547]	1.97	0.23
1:A:153:LYS:NZ	1:A:255:HIS:CG[4_557]	1.97	0.23
1:A:6:TYR:OH	1:A:206:GLY:CA[4_557]	1.97	0.23
1:A:120:HIS:ND1	1:A:179:VAL:CG2[4_557]	1.97	0.23
1:A:121:ARG:NH1	1:A:187:TYR:CE1[4_557]	1.97	0.23
1:A:66:LYS:N	1:A:201:SER:O[4_556]	1.97	0.23
1:A:84:VAL:CG2	1:A:239:LEU:C[4_557]	1.97	0.23
1:A:26:PRO:O	1:A:244:ILE:CD1[4_557]	1.97	0.23
1:A:77:GLU:CG	1:A:224:SER:C[4_557]	1.97	0.23
1:A:116:ARG:NE	1:A:151:ILE:CD1[4_547]	1.98	0.22
1:A:156:LEU:CB	1:A:227:GLU:O[4_557]	1.98	0.22
1:A:115:PHE:CZ	1:A:239:LEU:CA[4_557]	1.98	0.22
1:A:154:ALA:N	1:A:260:ALA:N[4_557]	1.98	0.22
1:A:90:SER:N	1:A:268:VAL:CG1[4_557]	1.98	0.22
1:A:81:ALA:C	1:A:260:ALA:O[4_557]	1.98	0.22
1:A:89:ILE:O	1:A:268:VAL:N[4_557]	1.98	0.22
1:A:93:THR:CG2	1:A:243:LEU:C[4_557]	1.98	0.22
1:A:116:ARG:NE	1:A:234:ALA:O[4_557]	1.98	0.22
1:A:61:GLU:OE1	1:A:286:THR:N[4_556]	1.98	0.22
1:A:95:VAL:CA	1:A:177:GLN:CB[4_557]	1.98	0.22
1:A:94:HIS:N	1:A:178:LEU:CA[4_557]	1.98	0.22
1:A:150:ALA:CB	1:A:268:VAL:C[4_557]	1.98	0.22
1:A:70:TYR:C	1:A:290:GLN:CB[4_556]	1.99	0.21
1:A:85:GLY:CA	1:A:267:ASP:CA[4_557]	1.99	0.21
1:A:77:GLU:OE2	1:A:228:LEU:CD2[4_557]	1.99	0.21
1:A:156:LEU:O	1:A:231:MET:SD[4_557]	1.99	0.21
1:A:72:VAL:N	1:A:289:SER:O[4_556]	1.99	0.21
1:A:92:ASP:OD1	1:A:246:THR:N[4_557]	1.99	0.21
1:A:115:PHE:CD2	1:A:238:ASP:N[4_557]	1.99	0.21
1:A:90:SER:N	1:A:243:LEU:O[4_557]	1.99	0.21
1:A:65:ASP:OD2	1:A:201:SER:OG[4_556]	1.99	0.21
1:A:26:PRO:N	1:A:162:LYS:CG[4_557]	2.00	0.20
1:A:95:VAL:CG1	1:A:177:GLN:OE1[4_557]	2.00	0.20
1:A:80:PHE:CD1	1:A:239:LEU:CG[4_557]	2.00	0.20
1:A:155:THR:O	1:A:231:MET:SD[4_557]	2.00	0.20
1:A:153:LYS:CG	1:A:255:HIS:C[4_557]	2.00	0.20
1:A:23:LYS:CG	1:A:169:GLU:N[4_557]	2.00	0.20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:151:ILE:O	1:A:257:ALA:CB[4_557]	2.00	0.20
1:A:59:ASP:CB	1:A:284:PRO:CG[4_556]	2.00	0.20
1:A:122:THR:CA	1:A:208:VAL:CG2[4_557]	2.00	0.20
1:A:117:VAL:CB	1:A:230:ALA:O[4_557]	2.00	0.20
1:A:64:ARG:NE	1:A:287:TRP:CE3[4_556]	2.00	0.20
1:A:152:PHE:CA	1:A:257:ALA:CA[4_557]	2.00	0.20
1:A:66:LYS:CG	1:A:275:TRP:CZ2[4_556]	2.00	0.20
1:A:58:PHE:CD2	1:A:240:THR:C[4_557]	2.00	0.20
1:A:117:VAL:O	1:A:231:MET:CB[4_557]	2.00	0.20
1:A:118:PHE:CE2	1:A:229:ARG:CG[4_557]	2.00	0.20
1:A:156:LEU:C	1:A:227:GLU:C[4_557]	2.00	0.20
1:A:89:ILE:O	1:A:268:VAL:CG1[4_557]	2.01	0.19
1:A:29:ARG:CG	1:A:176:PHE:CG[4_557]	2.01	0.19
1:A:116:ARG:C	1:A:232:PHE:O[4_557]	2.01	0.19
1:A:28:LEU:CD2	1:A:170:ASN:OD1[4_557]	2.01	0.19
1:A:148:GLU:CA	1:A:159:SER:CA[4_557]	2.01	0.19
1:A:81:ALA:CB	1:A:261:TYR:CA[4_557]	2.01	0.19
1:A:58:PHE:CB	1:A:240:THR:CG2[4_557]	2.01	0.19
1:A:89:ILE:CA	1:A:243:LEU:O[4_557]	2.01	0.19
1:A:150:ALA:O	1:A:266:PRO:C[4_557]	2.01	0.19
1:A:62:GLU:OE2	1:A:279:PHE:CA[4_556]	2.01	0.19
1:A:81:ALA:CB	1:A:260:ALA:CA[4_557]	2.01	0.19
1:A:113:TRP:CZ2	1:A:233:GLU:CD[4_557]	2.01	0.19
1:A:89:ILE:CD1	1:A:241:LYS:C[4_557]	2.02	0.18
1:A:153:LYS:N	1:A:257:ALA:C[4_557]	2.02	0.18
1:A:154:ALA:N	1:A:259:ALA:N[4_557]	2.02	0.18
1:A:23:LYS:CD	1:A:171:LEU:N[4_557]	2.02	0.18
1:A:28:LEU:CA	1:A:170:ASN:OD1[4_557]	2.02	0.18
1:A:117:VAL:N	1:A:234:ALA:N[4_557]	2.02	0.18
1:A:72:VAL:CB	1:A:293:GLY:CA[4_556]	2.02	0.18
1:A:72:VAL:O	1:A:292:LYS:C[4_556]	2.02	0.18
1:A:120:HIS:NE2	1:A:179:VAL:CG2[4_557]	2.02	0.18
1:A:91:ASN:ND2	1:A:256:ILE:C[4_557]	2.02	0.18
1:A:156:LEU:CG	1:A:226:GLU:C[4_557]	2.03	0.17
1:A:153:LYS:CA	1:A:256:ILE:O[4_557]	2.03	0.17
1:A:73:MET:CG	1:A:291:GLY:O[4_556]	2.03	0.17
1:A:14:TRP:CD2	1:A:174:LYS:CD[4_557]	2.03	0.17
1:A:66:LYS:CG	1:A:279:PHE:CD1[4_556]	2.03	0.17
1:A:120:HIS:CD2	1:A:237:VAL:CG1[4_557]	2.03	0.17
1:A:92:ASP:CA	1:A:245:ALA:CB[4_557]	2.03	0.17
1:A:69:PRO:CD	1:A:190:THR:N[4_556]	2.03	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:24:VAL:CG2	1:A:175:ARG:CG[4_557]	2.03	0.17
1:A:65:ASP:O	1:A:201:SER:C[4_556]	2.04	0.16
1:A:68:SER:CA	1:A:190:THR:N[4_556]	2.04	0.16
1:A:85:GLY:N	1:A:265:LYS:CD[4_557]	2.04	0.16
1:A:150:ALA:CB	1:A:160:LEU:CD1[4_557]	2.04	0.16
1:A:150:ALA:N	1:A:160:LEU:CD1[4_557]	2.04	0.16
1:A:61:GLU:CD	1:A:285:GLU:CA[4_556]	2.04	0.16
1:A:113:TRP:CA	1:A:233:GLU:O[4_557]	2.04	0.16
1:A:80:PHE:CD2	1:A:239:LEU:CD1[4_557]	2.04	0.16
1:A:113:TRP:CH2	1:A:233:GLU:OE1[4_557]	2.04	0.16
1:A:15:LEU:CD1	1:A:173:SER:O[4_557]	2.04	0.16
1:A:89:ILE:CG1	1:A:242:PRO:CA[4_557]	2.04	0.16
1:A:26:PRO:C	1:A:244:ILE:CG1[4_557]	2.04	0.16
1:A:23:LYS:CG	1:A:168:LEU:C[4_557]	2.04	0.16
1:A:18:SER:O	1:A:169:GLU:O[4_557]	2.04	0.16
1:A:148:GLU:CG	1:A:157:ASN:OD1[4_557]	2.05	0.15
1:A:148:GLU:CG	1:A:158:ARG:C[4_557]	2.05	0.15
1:A:90:SER:CB	1:A:269:ALA:C[4_557]	2.05	0.15
1:A:93:THR:CA	1:A:244:ILE:C[4_557]	2.05	0.15
1:A:123:VAL:CG1	1:A:236:LYS:O[4_557]	2.05	0.15
1:A:64:ARG:NH1	1:A:289:SER:N[4_556]	2.06	0.14
1:A:90:SER:C	1:A:243:LEU:CD2[4_557]	2.06	0.14
1:A:116:ARG:C	1:A:231:MET:C[4_557]	2.06	0.14
1:A:153:LYS:CB	1:A:256:ILE:N[4_557]	2.06	0.14
1:A:118:PHE:CG	1:A:229:ARG:CA[4_557]	2.06	0.14
1:A:115:PHE:C	1:A:237:VAL:O[4_557]	2.06	0.14
1:A:116:ARG:NE	1:A:235:LYS:CA[4_557]	2.06	0.14
1:A:112:TRP:CH2	1:A:151:ILE:CG1[4_547]	2.06	0.14
1:A:93:THR:CG2	1:A:244:ILE:C[4_557]	2.06	0.14
1:A:153:LYS:CB	1:A:257:ALA:N[4_557]	2.07	0.13
1:A:118:PHE:O	1:A:232:PHE:CG[4_557]	2.07	0.13
1:A:80:PHE:CD1	1:A:239:LEU:CD2[4_557]	2.07	0.13
1:A:86:SER:N	1:A:267:ASP:OD2[4_557]	2.07	0.13
1:A:82:ASP:CA	1:A:266:PRO:CD[4_557]	2.07	0.13
1:A:80:PHE:O	1:A:264:GLY:C[4_557]	2.07	0.13
1:A:112:TRP:CD2	1:A:236:LYS:CD[4_557]	2.07	0.13
1:A:84:VAL:O	1:A:265:LYS:CD[4_557]	2.07	0.13
1:A:114:MET:O	1:A:233:GLU:N[4_557]	2.07	0.13
1:A:23:LYS:CG	1:A:170:ASN:N[4_557]	2.07	0.13
1:A:153:LYS:C	1:A:256:ILE:C[4_557]	2.07	0.13
1:A:117:VAL:O	1:A:230:ALA:C[4_557]	2.07	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:156:LEU:C	1:A:231:MET:SD[4_557]	2.07	0.13
1:A:92:ASP:OD2	1:A:246:THR:CB[4_557]	2.08	0.12
1:A:22:GLY:C	1:A:169:GLU:CD[4_557]	2.08	0.12
1:A:81:ALA:C	1:A:265:LYS:CA[4_557]	2.08	0.12
1:A:89:ILE:N	1:A:267:ASP:O[4_557]	2.08	0.12
1:A:121:ARG:CB	1:A:208:VAL:CA[4_557]	2.08	0.12
1:A:69:PRO:C	1:A:188:LEU:C[4_556]	2.08	0.12
1:A:113:TRP:CE2	1:A:233:GLU:CG[4_557]	2.08	0.12
1:A:116:ARG:N	1:A:233:GLU:CA[4_557]	2.08	0.12
1:A:156:LEU:CG	1:A:226:GLU:O[4_557]	2.09	0.11
1:A:93:THR:N	1:A:244:ILE:CA[4_557]	2.09	0.11
1:A:93:THR:N	1:A:245:ALA:N[4_557]	2.09	0.11
1:A:72:VAL:O	1:A:292:LYS:O[4_556]	2.09	0.11
1:A:122:THR:N	1:A:208:VAL:CG2[4_557]	2.09	0.11
1:A:118:PHE:CD1	1:A:228:LEU:O[4_557]	2.09	0.11
1:A:26:PRO:N	1:A:162:LYS:CE[4_557]	2.10	0.10
1:A:31:LEU:CD1	1:A:241:LYS:CA[4_557]	2.10	0.10
1:A:67:ALA:CA	1:A:201:SER:CB[4_556]	2.10	0.10
1:A:61:GLU:CG	1:A:284:PRO:C[4_556]	2.10	0.10
1:A:30:VAL:CA	1:A:175:ARG:O[4_557]	2.10	0.10
1:A:69:PRO:CD	1:A:188:LEU:C[4_556]	2.10	0.10
1:A:73:MET:N	1:A:292:LYS:CA[4_556]	2.10	0.10
1:A:115:PHE:CG	1:A:239:LEU:N[4_557]	2.11	0.09
1:A:65:ASP:N	1:A:200:ASP:OD1[4_556]	2.11	0.09
1:A:72:VAL:C	1:A:292:LYS:N[4_556]	2.11	0.09
1:A:91:ASN:OD1	1:A:256:ILE:C[4_557]	2.11	0.09
1:A:81:ALA:O	1:A:265:LYS:CB[4_557]	2.11	0.09
1:A:29:ARG:N	1:A:176:PHE:CG[4_557]	2.11	0.09
1:A:89:ILE:CB	1:A:265:LYS:NZ[4_557]	2.11	0.09
1:A:27:GLY:CA	1:A:244:ILE:CD1[4_557]	2.11	0.09
1:A:116:ARG:CA	1:A:233:GLU:N[4_557]	2.11	0.09
1:A:94:HIS:C	1:A:177:GLN:CB[4_557]	2.11	0.09
1:A:84:VAL:CG2	1:A:239:LEU:CA[4_557]	2.12	0.08
1:A:89:ILE:CD1	1:A:242:PRO:CA[4_557]	2.12	0.08
1:A:118:PHE:N	1:A:232:PHE:CA[4_557]	2.12	0.08
1:A:71:GLU:N	1:A:289:SER:O[4_556]	2.12	0.08
1:A:6:TYR:CE1	1:A:207:SER:C[4_557]	2.12	0.08
1:A:23:LYS:N	1:A:169:GLU:O[4_557]	2.12	0.08
1:A:89:ILE:CB	1:A:243:LEU:N[4_557]	2.12	0.08
1:A:121:ARG:CG	1:A:209:ASN:C[4_557]	2.12	0.08
1:A:116:ARG:CB	1:A:234:ALA:N[4_557]	2.12	0.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:83:TYR:O	1:A:265:LYS:CG[4_557]	2.12	0.08
1:A:64:ARG:NH1	1:A:287:TRP:CZ3[4_556]	2.12	0.08
1:A:22:GLY:CA	1:A:169:GLU:CD[4_557]	2.12	0.08
1:A:148:GLU:N	1:A:159:SER:OG[4_557]	2.12	0.08
1:A:121:ARG:NH2	1:A:208:VAL:C[4_557]	2.12	0.08
1:A:94:HIS:CB	1:A:178:LEU:N[4_557]	2.12	0.08
1:A:152:PHE:C	1:A:257:ALA:O[4_557]	2.12	0.08
1:A:24:VAL:CG2	1:A:175:ARG:CD[4_557]	2.12	0.08
1:A:28:LEU:C	1:A:176:PHE:N[4_557]	2.12	0.08
1:A:78:ALA:O	1:A:262:LEU:C[4_557]	2.13	0.07
1:A:116:ARG:O	1:A:232:PHE:N[4_557]	2.13	0.07
1:A:29:ARG:N	1:A:176:PHE:C[4_557]	2.13	0.07
1:A:86:SER:N	1:A:267:ASP:CA[4_557]	2.13	0.07
1:A:91:ASN:CG	1:A:256:ILE:CA[4_557]	2.13	0.07
1:A:236:LYS:NZ	1:A:258:LEU:CG[4_547]	2.13	0.07
1:A:118:PHE:CG	1:A:228:LEU:O[4_557]	2.13	0.07
1:A:148:GLU:CB	1:A:158:ARG:C[4_557]	2.13	0.07
1:A:114:MET:CA	1:A:233:GLU:CB[4_557]	2.13	0.07
1:A:92:ASP:CA	1:A:245:ALA:C[4_557]	2.13	0.07
1:A:155:THR:OG1	1:A:215:PHE:CB[4_557]	2.13	0.07
1:A:152:PHE:N	1:A:257:ALA:CB[4_557]	2.13	0.07
1:A:18:SER:CB	1:A:173:SER:C[4_557]	2.13	0.07
1:A:64:ARG:NH1	1:A:288:VAL:C[4_556]	2.13	0.07
1:A:92:ASP:CG	1:A:245:ALA:CA[4_557]	2.13	0.07
1:A:112:TRP:NE1	1:A:236:LYS:CD[4_557]	2.13	0.07
1:A:118:PHE:CE2	1:A:229:ARG:CB[4_557]	2.13	0.07
1:A:28:LEU:CD2	1:A:174:LYS:N[4_557]	2.13	0.07
1:A:15:LEU:CD2	1:A:174:LYS:CA[4_557]	2.13	0.07
1:A:151:ILE:CG2	1:A:257:ALA:CB[4_557]	2.13	0.07
1:A:121:ARG:CB	1:A:209:ASN:N[4_557]	2.13	0.07
1:A:122:THR:CB	1:A:178:LEU:C[4_557]	2.13	0.07
1:A:18:SER:N	1:A:172:GLU:C[4_557]	2.13	0.07
1:A:84:VAL:N	1:A:265:LYS:CD[4_557]	2.14	0.06
1:A:72:VAL:O	1:A:292:LYS:CA[4_556]	2.14	0.06
1:A:61:GLU:CB	1:A:284:PRO:CB[4_556]	2.14	0.06
1:A:121:ARG:NH2	1:A:209:ASN:N[4_557]	2.14	0.06
1:A:118:PHE:C	1:A:232:PHE:CG[4_557]	2.14	0.06
1:A:78:ALA:CA	1:A:262:LEU:CB[4_557]	2.14	0.06
1:A:89:ILE:O	1:A:268:VAL:C[4_557]	2.14	0.06
1:A:92:ASP:C	1:A:245:ALA:N[4_557]	2.14	0.06
1:A:23:LYS:N	1:A:169:GLU:C[4_557]	2.14	0.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:61:GLU:CA	1:A:284:PRO:CB[4_556]	2.14	0.06
1:A:117:VAL:CG1	1:A:230:ALA:O[4_557]	2.14	0.06
1:A:94:HIS:C	1:A:176:PHE:C[4_557]	2.14	0.06
1:A:93:THR:CB	1:A:243:LEU:C[4_557]	2.14	0.06
1:A:97:VAL:N	1:A:241:LYS:CE[4_557]	2.15	0.05
1:A:229:ARG:NH1	1:A:292:LYS:CD[1_556]	2.15	0.05
1:A:152:PHE:CB	1:A:260:ALA:CB[4_557]	2.15	0.05
1:A:153:LYS:O	1:A:256:ILE:CA[4_557]	2.15	0.05
1:A:156:LEU:CB	1:A:227:GLU:N[4_557]	2.15	0.05
1:A:68:SER:CA	1:A:189:GLY:O[4_556]	2.15	0.05
1:A:61:GLU:C	1:A:287:TRP:CZ2[4_556]	2.15	0.05
1:A:89:ILE:CG2	1:A:243:LEU:CA[4_557]	2.15	0.05
1:A:17:GLU:CB	1:A:172:GLU:OE1[4_557]	2.15	0.05
1:A:121:ARG:CB	1:A:208:VAL:CB[4_557]	2.15	0.05
1:A:77:GLU:C	1:A:263:CYS:N[4_557]	2.15	0.05
1:A:61:GLU:O	1:A:287:TRP:CD2[4_556]	2.15	0.05
1:A:91:ASN:OD1	1:A:256:ILE:CG2[4_557]	2.15	0.05
1:A:79:GLY:O	1:A:263:CYS:C[4_557]	2.15	0.05
1:A:229:ARG:CZ	1:A:292:LYS:CB[1_556]	2.15	0.05
1:A:79:GLY:N	1:A:262:LEU:C[4_557]	2.15	0.05
1:A:82:ASP:O	1:A:266:PRO:N[4_557]	2.15	0.05
1:A:69:PRO:CB	1:A:188:LEU:CD2[4_556]	2.15	0.05
1:A:123:VAL:CG1	1:A:237:VAL:CG2[4_557]	2.15	0.05
1:A:25:GLY:O	1:A:176:PHE:CD2[4_557]	2.15	0.05
1:A:116:ARG:NH1	1:A:151:ILE:CG1[4_547]	2.15	0.05
1:A:112:TRP:CH2	1:A:236:LYS:NZ[4_557]	2.15	0.05
1:A:150:ALA:CB	1:A:269:ALA:N[4_557]	2.16	0.04
1:A:115:PHE:CE1	1:A:238:ASP:O[4_557]	2.16	0.04
1:A:77:GLU:CG	1:A:228:LEU:CG[4_557]	2.16	0.04
1:A:153:LYS:CA	1:A:258:LEU:N[4_557]	2.16	0.04
1:A:115:PHE:CG	1:A:237:VAL:C[4_557]	2.16	0.04
1:A:23:LYS:CB	1:A:170:ASN:CA[4_557]	2.16	0.04
1:A:66:LYS:CD	1:A:279:PHE:CG[4_556]	2.16	0.04
1:A:148:GLU:CB	1:A:159:SER:OG[4_557]	2.16	0.04
1:A:58:PHE:CG	1:A:240:THR:CB[4_557]	2.16	0.04
1:A:22:GLY:O	1:A:169:GLU:CG[4_557]	2.16	0.04
1:A:152:PHE:CB	1:A:268:VAL:CG2[4_557]	2.16	0.04
1:A:64:ARG:C	1:A:200:ASP:CB[4_556]	2.16	0.04
1:A:92:ASP:O	1:A:244:ILE:O[4_557]	2.16	0.04
1:A:26:PRO:CD	1:A:162:LYS:CG[4_557]	2.16	0.04
1:A:95:VAL:O	1:A:177:GLN:OE1[4_557]	2.17	0.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:91:ASN:O	1:A:179:VAL:CG1[4_557]	2.17	0.03
1:A:29:ARG:CD	1:A:176:PHE:CD2[4_557]	2.17	0.03
1:A:153:LYS:CB	1:A:256:ILE:C[4_557]	2.17	0.03
1:A:112:TRP:CE2	1:A:236:LYS:CE[4_557]	2.17	0.03
1:A:115:PHE:O	1:A:232:PHE:O[4_557]	2.17	0.03
1:A:81:ALA:N	1:A:260:ALA:C[4_557]	2.17	0.03
1:A:69:PRO:CD	1:A:188:LEU:CB[4_556]	2.17	0.03
1:A:6:TYR:CE2	1:A:208:VAL:CG2[4_557]	2.17	0.03
1:A:61:GLU:OE1	1:A:284:PRO:O[4_556]	2.17	0.03
1:A:74:LEU:CA	1:A:229:ARG:CD[4_557]	2.17	0.03
1:A:2:HIS:CE1	1:A:86:SER:CB[4_547]	2.17	0.03
1:A:116:ARG:NH1	1:A:151:ILE:CB[4_547]	2.18	0.02
1:A:115:PHE:C	1:A:233:GLU:N[4_557]	2.18	0.02
1:A:72:VAL:CA	1:A:292:LYS:C[4_556]	2.18	0.02
1:A:118:PHE:N	1:A:232:PHE:CB[4_557]	2.18	0.02
1:A:15:LEU:O	1:A:173:SER:O[4_557]	2.18	0.02
1:A:84:VAL:CG2	1:A:239:LEU:CB[4_557]	2.18	0.02
1:A:156:LEU:CG	1:A:227:GLU:O[4_557]	2.18	0.02
1:A:23:LYS:N	1:A:169:GLU:CA[4_557]	2.18	0.02
1:A:123:VAL:CG1	1:A:237:VAL:CA[4_557]	2.18	0.02
1:A:149:PRO:O	1:A:160:LEU:N[4_557]	2.18	0.02
1:A:77:GLU:OE2	1:A:224:SER:O[4_557]	2.18	0.02
1:A:74:LEU:N	1:A:292:LYS:CG[4_556]	2.18	0.02
1:A:93:THR:CA	1:A:244:ILE:CA[4_557]	2.18	0.02
1:A:92:ASP:CB	1:A:245:ALA:N[4_557]	2.18	0.02
1:A:93:THR:C	1:A:178:LEU:CA[4_557]	2.18	0.02
1:A:115:PHE:CZ	1:A:239:LEU:N[4_557]	2.18	0.02
1:A:93:THR:CB	1:A:177:GLN:O[4_557]	2.19	0.01
1:A:88:GLY:C	1:A:267:ASP:O[4_557]	2.19	0.01
1:A:112:TRP:CD2	1:A:236:LYS:CE[4_557]	2.19	0.01
1:A:83:TYR:C	1:A:265:LYS:CB[4_557]	2.19	0.01
1:A:77:GLU:OE1	1:A:223:LYS:C[4_557]	2.19	0.01
1:A:89:ILE:CG1	1:A:265:LYS:NZ[4_557]	2.19	0.01
1:A:148:GLU:CB	1:A:159:SER:CB[4_557]	2.19	0.01
1:A:116:ARG:CD	1:A:235:LYS:C[4_557]	2.19	0.01
1:A:160:LEU:CG	1:A:234:ALA:CA[4_557]	2.19	0.01
1:A:82:ASP:O	1:A:266:PRO:CG[4_557]	2.19	0.01
1:A:92:ASP:C	1:A:245:ALA:CA[4_557]	2.19	0.01
1:A:122:THR:OG1	1:A:179:VAL:N[4_557]	2.19	0.01
1:A:86:SER:O	1:A:267:ASP:CG[4_557]	2.19	0.01
1:A:91:ASN:CB	1:A:256:ILE:CG2[4_557]	2.19	0.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:66:LYS:CE	1:A:279:PHE:CG[4_556]	2.19	0.01
1:A:91:ASN:ND2	1:A:256:ILE:CG1[4_557]	2.19	0.01

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	290/293 (99%)	228 (79%)	46 (16%)	16 (6%)	2 2

All (16) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	40	THR
1	A	72	VAL
1	A	75	PRO
1	A	285	GLU
1	A	102	ASP
1	A	106	PHE
1	A	121	ARG
1	A	122	THR
1	A	267	ASP
1	A	66	LYS
1	A	80	PHE
1	A	123	VAL
1	A	183	ALA
1	A	26	PRO
1	A	119	GLY
1	A	147	PRO

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	244/244 (100%)	180 (74%)	64 (26%)	0 1

All (64) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1	VAL
1	A	3	GLN
1	A	7	ARG
1	A	15	LEU
1	A	28	LEU
1	A	31	LEU
1	A	32	ASP
1	A	42	GLU
1	A	45	LYS
1	A	47	TYR
1	A	50	ARG
1	A	60	ILE
1	A	63	CYS
1	A	66	LYS
1	A	87	LEU
1	A	90	SER
1	A	92	ASP
1	A	93	THR
1	A	98	TYR
1	A	99	ASN
1	A	101	ASP
1	A	103	LEU
1	A	105	SER
1	A	107	TYR
1	A	110	ARG
1	A	117	VAL
1	A	121	ARG
1	A	124	SER
1	A	130	PHE
1	A	136	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	141	THR
1	A	145	SER
1	A	146	ARG
1	A	156	LEU
1	A	160	LEU
1	A	164	TYR
1	A	166	GLN
1	A	167	VAL
1	A	171	LEU
1	A	177	GLN
1	A	180	ASP
1	A	182	ARG
1	A	184	GLN
1	A	200	ASP
1	A	209	ASN
1	A	210	MET
1	A	213	MET
1	A	216	LEU
1	A	223	LYS
1	A	224	SER
1	A	235	LYS
1	A	236	LYS
1	A	239	LEU
1	A	246	THR
1	A	248	ARG
1	A	249	LYS
1	A	255	HIS
1	A	258	LEU
1	A	262	LEU
1	A	270	ILE
1	A	281	ARG
1	A	288	VAL
1	A	289	SER
1	A	290	GLN

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (2) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	51	HIS
1	A	138	HIS

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

1 non-standard protein/DNA/RNA residue is 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	$\# Z > 2$
1	CSS	A	247	1	4,6,7	1.10	0	3,6,8	1.07	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
1	CSS	A	247	1	-	0/1/5/7	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 7 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
1	A	247	CSS	7	0

5.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

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

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

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

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

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

6.3 Carbohydrates [i](#)

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

6.4 Ligands [i](#)

EDS was not executed - this section will therefore be empty.

6.5 Other polymers [i](#)

EDS was not executed - this section will therefore be empty.