



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Jan 30, 2017 – 07:11 PM EST

PDB ID : 5WTK
Title : Crystal structure of RNP complex
Authors : Liu, L.; Wang, Y.
Deposited on : 2016-12-13
Resolution : 2.65 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	:	unknown
Xtriage (Phenix)	:	1.9-1692
EDS	:	rb-20028442
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)	:	rb-20028442

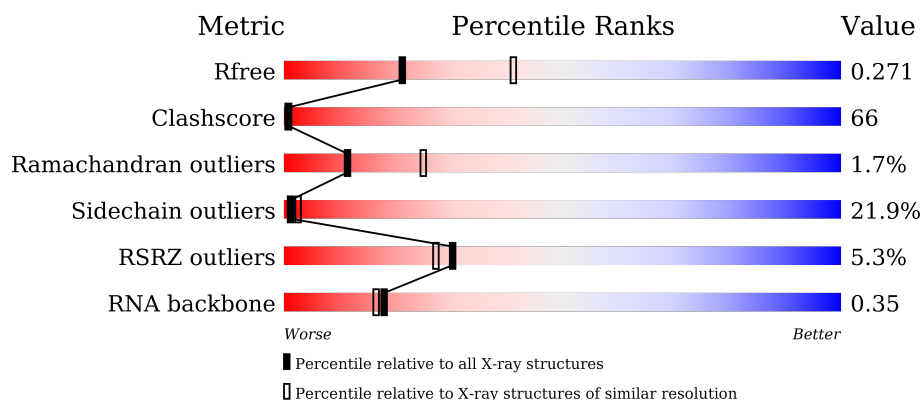
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 2.65 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	3152 (2.70-2.62)
Clashscore	102246	3524 (2.70-2.62)
Ramachandran outliers	100387	3469 (2.70-2.62)
Sidechain outliers	100360	3469 (2.70-2.62)
RSRZ outliers	91569	3161 (2.70-2.62)
RNA backbone	2183	1001 (3.08-2.24)

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	1397	
2	B	58	

2 Entry composition

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 10671 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 CRISPR-associated endoribonuclease C2c2.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	1215	Total	C	N	O	S	0	0	0
			9757	6260	1633	1846	18			

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

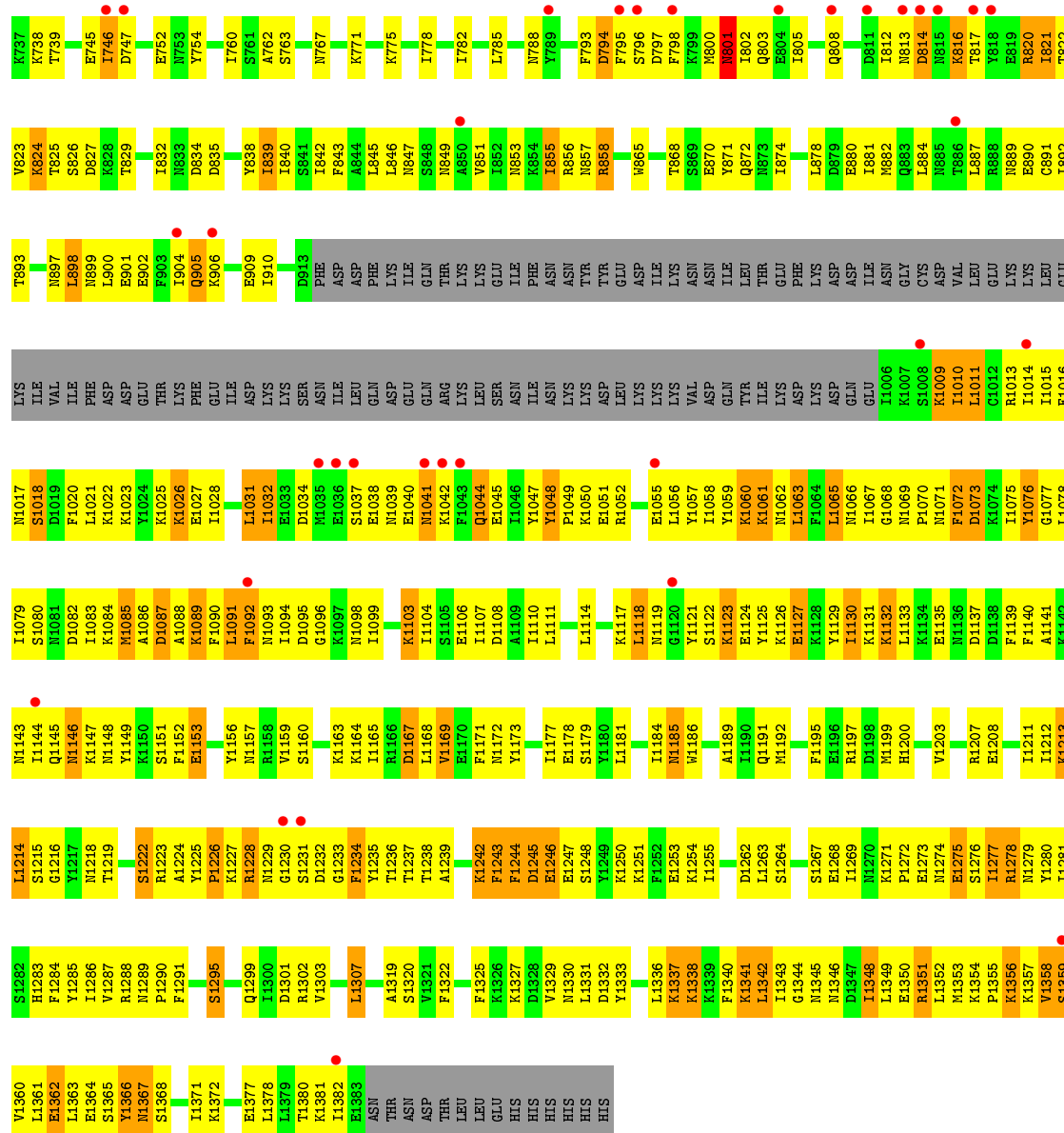
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1390	LEU	-	expression tag	UNP P0DOC6
A	1391	GLU	-	expression tag	UNP P0DOC6
A	1392	HIS	-	expression tag	UNP P0DOC6
A	1393	HIS	-	expression tag	UNP P0DOC6
A	1394	HIS	-	expression tag	UNP P0DOC6
A	1395	HIS	-	expression tag	UNP P0DOC6
A	1396	HIS	-	expression tag	UNP P0DOC6
A	1397	HIS	-	expression tag	UNP P0DOC6

- Molecule 2 is a RNA chain called RNA (58-MER).

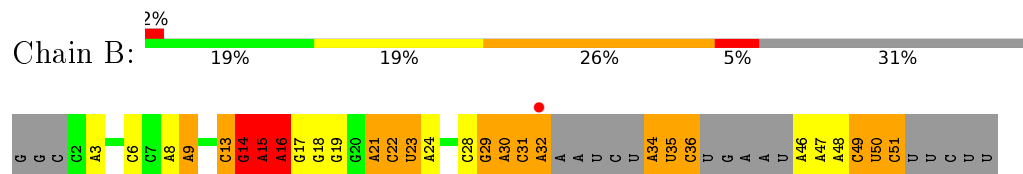
Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
2	B	40	Total	C	N	O	P	0	0	0
			849	383	161	266	39			

- Molecule 3 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	A	60	Total	O	0	0
			60	60		
3	B	5	Total	O	0	0
			5	5		



• Molecule 2: RNA (58-MER)



4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	P 21 21 21	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	86.59Å 137.05Å 153.88Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	40.41 – 2.65 40.41 – 2.65	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	98.5 (40.41-2.65) 98.5 (40.41-2.65)	Depositor EDS
R_{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	1.44 (at 2.65Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX (1.10.1 _2155: ???)	Depositor
R, R_{free}	0.259 , 0.272 0.257 , 0.271	Depositor DCC
R_{free} test set	2620 reflections (4.94%)	DCC
Wilson B-factor (Å ²)	56.2	Xtriage
Anisotropy	0.112	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.25 , 44.8	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.47$, $\langle L^2 \rangle = 0.30$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.91	EDS
Total number of atoms	10671	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	69.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 3.19% 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, 0.333 respectively for untwinned datasets, and 0.375, 0.2 for perfectly twinned datasets.

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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	0.59	0/9906	0.74	14/13336 (0.1%)
2	B	0.90	4/949 (0.4%)	0.83	1/1471 (0.1%)
All	All	0.63	4/10855 (0.0%)	0.75	15/14807 (0.1%)

All (4) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	B	16	A	O3'-P	-8.13	1.51	1.61
2	B	15	A	O3'-P	-6.30	1.53	1.61
2	B	14	G	O3'-P	-6.15	1.53	1.61
2	B	13	C	O3'-P	-5.82	1.54	1.61

All (15) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	B	24	A	O5'-P-OP1	-7.24	99.19	105.70
1	A	219	ARG	NE-CZ-NH2	-6.76	116.92	120.30
1	A	4	LEU	CA-CB-CG	6.00	129.10	115.30
1	A	1358	VAL	CB-CA-C	-5.88	100.23	111.40
1	A	1289	ASN	C-N-CD	5.85	140.68	128.40
1	A	698	THR	N-CA-C	5.40	125.58	111.00
1	A	1307	LEU	CA-CB-CG	5.35	127.61	115.30
1	A	1169	VAL	CB-CA-C	-5.21	101.50	111.40
1	A	1108	ASP	CB-CG-OD2	5.20	122.98	118.30
1	A	722	ASP	CB-CG-OD2	5.19	122.97	118.30
1	A	232	ASP	CB-CG-OD2	5.18	122.97	118.30
1	A	814	ASP	CB-CG-OD2	5.18	122.96	118.30
1	A	219	ARG	NE-CZ-NH1	5.09	122.85	120.30
1	A	1364	GLU	CB-CA-C	-5.06	100.28	110.40
1	A	1103	LYS	N-CA-C	5.03	124.58	111.00

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

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	9757	0	9502	1294	0
2	B	849	0	438	78	0
3	A	60	0	0	66	0
3	B	5	0	0	5	0
All	All	10671	0	9940	1347	0

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 66.

All (1347) 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:25:VAL:HG11	1:A:40:ILE:CD1	1.36	1.52
1:A:898:LEU:HD13	1:A:1059:TYR:CD2	1.56	1.37
1:A:604:ILE:HA	1:A:605:SER:CB	1.55	1.34
1:A:633:GLU:CB	1:A:825:THR:HG21	1.58	1.31
1:A:906:LYS:NZ	1:A:1022:LYS:HA	1.49	1.28
1:A:83:LYS:HG2	1:A:85:LYS:CE	1.65	1.26
1:A:899:ASN:CB	1:A:905:GLN:HG3	1.64	1.25
1:A:246:ARG:HB2	3:A:1411:HOH:O	1.34	1.23
1:A:407:HIS:CE1	3:A:1401:HOH:O	1.90	1.21
1:A:1011:LEU:O	1:A:1014:ILE:HG13	1.40	1.20
1:A:76:HIS:CE1	1:A:79:ASN:HB3	1.78	1.18
1:A:214:LYS:HA	3:A:1406:HOH:O	1.42	1.17
1:A:1271:LYS:HG2	3:A:1405:HOH:O	1.44	1.16
1:A:1078:LEU:HD22	1:A:1377:GLU:HG2	1.21	1.15
1:A:287:VAL:HG21	1:A:1125:TYR:OH	1.47	1.15
1:A:84:LEU:HD11	1:A:194:LYS:HA	1.29	1.14
1:A:1340:PHE:CE2	1:A:1342:LEU:HD11	1.83	1.14
1:A:59:ILE:CG2	1:A:314:VAL:HG21	1.77	1.13
1:A:906:LYS:CE	1:A:1022:LYS:HA	1.78	1.13
1:A:1227:LYS:H	1:A:1238:THR:HG21	0.97	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:80:ILE:HD11	1:A:200:LEU:HG	1.22	1.13
1:A:591:LYS:HE3	1:A:591:LYS:HA	1.14	1.13
1:A:83:LYS:HG2	1:A:85:LYS:HE2	1.14	1.13
1:A:59:ILE:HG23	1:A:314:VAL:CG2	1.78	1.12
1:A:76:HIS:CD2	1:A:79:ASN:HD22	1.67	1.12
1:A:400:ILE:HD13	1:A:442:ILE:HD11	1.23	1.12
1:A:1028:ILE:HA	1:A:1031:LEU:HD12	1.16	1.11
1:A:548:GLY:N	1:A:594:THR:HG22	1.63	1.11
1:A:1133:LEU:HD23	1:A:1139:PHE:CE2	1.86	1.11
1:A:548:GLY:H	1:A:594:THR:CG2	1.64	1.10
1:A:1271:LYS:CG	3:A:1405:HOH:O	1.98	1.10
1:A:1340:PHE:HE2	1:A:1342:LEU:HD11	0.98	1.10
1:A:1342:LEU:HA	1:A:1349:LEU:HD23	1.21	1.09
1:A:25:VAL:CG1	1:A:40:ILE:HD11	1.81	1.09
1:A:611:GLN:N	1:A:612:GLY:CA	2.16	1.09
1:A:1254:LYS:NZ	3:A:1402:HOH:O	1.83	1.09
1:A:641:ASP:N	3:A:1403:HOH:O	1.85	1.09
1:A:1350:GLU:HA	1:A:1352:LEU:H	1.04	1.07
1:A:87:LYS:CB	1:A:90:ILE:HG12	1.84	1.07
1:A:1083:ILE:HD13	1:A:1171:PHE:CE1	1.88	1.07
1:A:25:VAL:CG1	1:A:40:ILE:CD1	2.32	1.07
1:A:407:HIS:NE2	3:A:1401:HOH:O	1.81	1.06
1:A:80:ILE:CD1	1:A:200:LEU:HG	1.84	1.06
1:A:724:GLU:N	1:A:724:GLU:OE1	1.88	1.05
1:A:611:GLN:N	1:A:612:GLY:HA3	1.67	1.05
1:A:548:GLY:H	1:A:594:THR:HG22	0.91	1.05
1:A:638:LEU:HD13	1:A:638:LEU:H	1.22	1.05
1:A:525:THR:HG22	1:A:847:ASN:ND2	1.69	1.05
1:A:1348:ILE:HB	1:A:1351:ARG:HH21	1.18	1.04
1:A:821:ILE:H	1:A:821:ILE:HD13	1.20	1.04
1:A:1327:LYS:O	1:A:1356:LYS:HE3	1.56	1.04
1:A:1066:ASN:OD1	1:A:1067:ILE:N	1.89	1.04
1:A:1086:ALA:HB1	1:A:1165:ILE:CG2	1.88	1.04
1:A:1348:ILE:HD12	1:A:1348:ILE:H	1.20	1.04
1:A:640:LEU:CD1	1:A:808:GLN:OE1	2.05	1.04
2:B:14:G:P	3:B:102:HOH:O	2.14	1.04
1:A:84:LEU:HD11	1:A:194:LYS:CA	1.88	1.03
1:A:640:LEU:HD11	1:A:808:GLN:OE1	1.58	1.03
1:A:1083:ILE:HD13	1:A:1171:PHE:HE1	1.17	1.03
1:A:1230:GLY:HA2	1:A:1234:PHE:HB3	1.40	1.03
1:A:1360:VAL:HG23	2:B:35:U:O2	1.58	1.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:604:ILE:CA	1:A:605:SER:CB	2.37	1.02
1:A:1359:SER:OG	1:A:1363:LEU:HG	1.59	1.02
1:A:438:ARG:NH2	3:A:1404:HOH:O	1.90	1.02
1:A:1271:LYS:N	3:A:1405:HOH:O	1.91	1.02
1:A:191:GLU:HG2	1:A:194:LYS:HE2	1.39	1.02
1:A:1234:PHE:CD1	1:A:1235:TYR:N	2.26	1.02
1:A:25:VAL:HG11	1:A:40:ILE:HD11	1.06	1.02
2:B:31:C:H2'	2:B:32:A:C4'	1.90	1.02
1:A:243:MET:HA	3:A:1411:HOH:O	1.57	1.02
1:A:1227:LYS:N	1:A:1238:THR:HG21	1.74	1.01
1:A:1086:ALA:HB1	1:A:1165:ILE:HG23	1.02	1.01
1:A:1089:LYS:HA	1:A:1092:PHE:CB	1.91	1.01
1:A:1060:LYS:NZ	1:A:1060:LYS:HA	1.76	1.00
1:A:1086:ALA:CB	1:A:1165:ILE:HG23	1.90	1.00
1:A:362:ILE:HG13	1:A:367:ILE:CD1	1.90	1.00
1:A:1192:MET:HE2	1:A:1278:ARG:HA	1.44	0.99
1:A:1350:GLU:HA	1:A:1352:LEU:N	1.77	0.99
1:A:898:LEU:CD1	1:A:1059:TYR:HD2	1.74	0.99
1:A:399:GLU:N	3:A:1409:HOH:O	1.93	0.99
1:A:610:LEU:C	1:A:612:GLY:HA3	1.82	0.99
1:A:326:ARG:NH1	1:A:327:ASN:OD1	1.95	0.99
1:A:562:LEU:O	1:A:563:ASN:HB3	1.61	0.98
1:A:801:ASN:ND2	1:A:802:ILE:HA	1.77	0.98
1:A:25:VAL:HG11	1:A:40:ILE:HD12	1.44	0.98
1:A:398:THR:C	3:A:1409:HOH:O	2.02	0.98
1:A:633:GLU:CB	1:A:825:THR:CG2	2.41	0.98
2:B:18:G:O6	3:B:101:HOH:O	1.82	0.97
1:A:1340:PHE:CE2	1:A:1342:LEU:CD1	2.46	0.97
1:A:1133:LEU:CD2	1:A:1139:PHE:CE2	2.47	0.97
1:A:1068:GLY:N	1:A:1069:ASN:HB2	1.80	0.97
1:A:1028:ILE:HA	1:A:1031:LEU:CD1	1.93	0.97
1:A:94:GLU:CB	1:A:198:MET:CE	2.42	0.96
1:A:581:ILE:HD13	1:A:582:THR:N	1.80	0.96
1:A:1133:LEU:HD23	1:A:1139:PHE:CD2	1.99	0.96
1:A:344:LYS:HE2	1:A:500:VAL:O	1.64	0.96
2:B:34:A:O2'	2:B:35:U:OP1	1.84	0.95
1:A:76:HIS:CG	1:A:79:ASN:HD22	1.83	0.95
1:A:636:LYS:HE3	1:A:887:LEU:HD23	1.48	0.95
1:A:1359:SER:N	3:A:1408:HOH:O	1.92	0.95
1:A:561:ILE:CD1	1:A:563:ASN:H	1.79	0.95
1:A:1279:ASN:HD22	1:A:1283:HIS:HE1	1.02	0.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:906:LYS:HZ1	1:A:1022:LYS:HA	1.30	0.95
1:A:697:GLU:OE1	1:A:697:GLU:N	1.99	0.95
1:A:390:GLU:HB2	1:A:403:ILE:HD11	1.47	0.94
1:A:251:SER:OG	1:A:252:ASN:OD1	1.85	0.94
1:A:1359:SER:CA	3:A:1408:HOH:O	2.16	0.94
1:A:80:ILE:HD11	1:A:200:LEU:CG	1.97	0.94
1:A:694:ASP:CB	1:A:800:MET:CB	2.45	0.94
1:A:203:ILE:O	1:A:207:ILE:HD12	1.66	0.93
1:A:641:ASP:CA	3:A:1403:HOH:O	2.13	0.93
1:A:695:THR:O	1:A:696:ILE:HG23	1.67	0.93
1:A:246:ARG:CB	3:A:1411:HOH:O	2.01	0.93
1:A:243:MET:SD	1:A:246:ARG:NH1	2.42	0.93
1:A:561:ILE:HD13	1:A:563:ASN:N	1.83	0.92
1:A:898:LEU:HD13	1:A:1059:TYR:HD2	0.79	0.92
1:A:525:THR:HG22	1:A:847:ASN:HD22	1.29	0.92
1:A:906:LYS:HE2	1:A:1022:LYS:HA	1.49	0.92
1:A:449:VAL:CG1	1:A:456:LYS:H	1.82	0.92
1:A:1228:ARG:HG2	1:A:1228:ARG:HH11	1.35	0.92
1:A:1348:ILE:HB	1:A:1351:ARG:NH2	1.83	0.92
1:A:1279:ASN:HD22	1:A:1283:HIS:CE1	1.86	0.92
1:A:808:GLN:O	1:A:812:ILE:HG13	1.70	0.92
1:A:906:LYS:HE2	1:A:1022:LYS:CA	1.99	0.92
1:A:1365:SER:OG	1:A:1368:SER:HB3	1.71	0.91
1:A:1028:ILE:CA	1:A:1031:LEU:HD12	2.00	0.91
1:A:1192:MET:CE	1:A:1278:ARG:HA	2.00	0.91
1:A:686:ASN:HA	3:A:1423:HOH:O	1.68	0.91
1:A:1342:LEU:HA	1:A:1349:LEU:CD2	2.00	0.91
1:A:25:VAL:HG11	1:A:40:ILE:CG1	1.99	0.91
1:A:380:ILE:HD12	1:A:380:ILE:H	1.33	0.91
1:A:73:ARG:HH21	1:A:73:ARG:HG3	1.35	0.91
1:A:1359:SER:C	1:A:1361:LEU:HB2	1.91	0.91
1:A:76:HIS:NE2	1:A:79:ASN:HB3	1.84	0.91
1:A:400:ILE:CD1	1:A:442:ILE:HD11	2.01	0.90
1:A:1278:ARG:HH21	1:A:1278:ARG:HG2	1.36	0.90
1:A:272:SER:HB2	3:A:1421:HOH:O	1.72	0.90
1:A:681:LEU:HD21	1:A:707:ILE:HD11	1.52	0.90
1:A:690:ASN:OD1	1:A:795:PHE:HB2	1.72	0.90
1:A:243:MET:CE	1:A:246:ARG:HH11	1.84	0.90
1:A:362:ILE:HA	1:A:367:ILE:HD12	1.52	0.89
2:B:34:A:H8	2:B:34:A:H5"	1.37	0.89
1:A:362:ILE:CG1	1:A:367:ILE:CD1	2.51	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1268:GLU:O	1:A:1276:SER:HA	1.73	0.89
1:A:20:LYS:NZ	1:A:20:LYS:O	2.06	0.89
2:B:14:G:OP2	3:B:102:HOH:O	1.91	0.88
1:A:191:GLU:HG2	1:A:194:LYS:CE	2.02	0.88
1:A:681:LEU:CD2	1:A:707:ILE:HD11	2.03	0.88
1:A:1226:PRO:HA	1:A:1238:THR:CG2	2.03	0.88
1:A:1234:PHE:HD1	1:A:1235:TYR:H	1.13	0.88
1:A:677:LEU:HD11	1:A:707:ILE:HD12	1.53	0.88
1:A:696:ILE:CG2	1:A:699:GLU:HB3	2.04	0.88
1:A:1360:VAL:CG2	2:B:35:U:H1'	2.04	0.87
1:A:199:SER:O	1:A:203:ILE:HG13	1.75	0.87
1:A:897:ASN:CB	1:A:1016:PHE:CZ	2.57	0.87
1:A:213:GLU:O	3:A:1406:HOH:O	1.91	0.87
1:A:816:LYS:HD3	1:A:816:LYS:H	1.38	0.87
1:A:898:LEU:CD1	1:A:1059:TYR:CD2	2.52	0.87
1:A:528:GLU:HG3	1:A:847:ASN:HB3	1.57	0.87
1:A:1275:GLU:N	3:A:1413:HOH:O	2.08	0.87
1:A:407:HIS:CE1	1:A:411:ASN:HD22	1.92	0.87
1:A:767:ASN:O	3:A:1407:HOH:O	1.92	0.86
1:A:720:GLU:O	1:A:731:ILE:HD11	1.75	0.86
1:A:696:ILE:HG21	1:A:699:GLU:HB3	1.57	0.86
1:A:87:LYS:CB	1:A:90:ILE:CG1	2.54	0.86
1:A:83:LYS:HG2	1:A:85:LYS:HE3	1.56	0.86
1:A:900:LEU:O	1:A:1056:LEU:HA	1.76	0.86
1:A:1197:ARG:HB3	1:A:1197:ARG:HH11	1.41	0.86
1:A:83:LYS:CG	1:A:85:LYS:HE2	2.05	0.85
1:A:397:ASP:OD1	1:A:398:THR:N	2.09	0.85
3:A:1409:HOH:O	2:B:16:A:C2	2.29	0.85
1:A:705:ALA:O	1:A:709:VAL:HG23	1.77	0.85
1:A:1349:LEU:O	1:A:1351:ARG:HB3	1.77	0.85
1:A:1078:LEU:HD22	1:A:1377:GLU:CG	2.07	0.85
1:A:1227:LYS:O	1:A:1234:PHE:HD2	1.60	0.85
1:A:314:VAL:N	3:A:1415:HOH:O	2.09	0.84
1:A:384:ILE:HG12	1:A:463:LEU:HD12	1.59	0.84
1:A:528:GLU:O	3:A:1410:HOH:O	1.94	0.84
1:A:561:ILE:CD1	1:A:563:ASN:N	2.39	0.84
1:A:760:ILE:O	1:A:763:SER:HB3	1.77	0.84
1:A:357:PHE:CD2	1:A:423:GLU:HG2	2.13	0.84
2:B:31:C:H2'	2:B:32:A:C5'	2.08	0.84
1:A:1047:TYR:O	1:A:1058:ILE:HG12	1.78	0.83
1:A:1227:LYS:O	1:A:1234:PHE:CD2	2.31	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1085:MET:N	1:A:1085:MET:SD	2.52	0.83
1:A:1060:LYS:HA	1:A:1060:LYS:CE	2.08	0.83
1:A:245:ILE:O	1:A:249:ILE:HG22	1.78	0.83
1:A:537:ASN:ND2	1:A:540:ASN:H	1.76	0.83
1:A:591:LYS:HE3	1:A:591:LYS:CA	2.03	0.83
1:A:192:ILE:HG22	1:A:245:ILE:HD11	1.61	0.82
1:A:379:LYS:O	3:A:1401:HOH:O	1.95	0.82
1:A:362:ILE:HG13	1:A:367:ILE:HD11	1.62	0.82
2:B:15:A:O2'	2:B:16:A:OP2	1.96	0.82
1:A:1050:LYS:N	1:A:1051:GLU:HA	1.94	0.82
1:A:902:GLU:HG2	1:A:1057:TYR:CD1	2.14	0.82
1:A:358:PHE:HB3	1:A:480:THR:HG21	1.62	0.81
1:A:532:ILE:HD11	1:A:533:PHE:CE2	2.15	0.81
1:A:591:LYS:CE	1:A:591:LYS:HA	2.04	0.81
1:A:84:LEU:HD23	1:A:84:LEU:H	1.43	0.81
1:A:1047:TYR:C	1:A:1058:ILE:HG13	2.00	0.81
1:A:1041:ASN:HD22	1:A:1042:LYS:H	1.26	0.81
1:A:20:LYS:HA	1:A:20:LYS:HZ3	1.45	0.81
1:A:588:LYS:O	1:A:592:ILE:HD12	1.81	0.81
1:A:630:SER:HB2	1:A:884:LEU:HD22	1.62	0.81
1:A:76:HIS:CD2	1:A:79:ASN:ND2	2.47	0.81
1:A:1244:PHE:HB3	1:A:1245:ASP:OD1	1.80	0.81
1:A:399:GLU:CA	3:A:1409:HOH:O	2.26	0.81
1:A:525:THR:CG2	1:A:847:ASN:ND2	2.44	0.81
1:A:1088:ALA:O	1:A:1092:PHE:CB	2.28	0.81
1:A:449:VAL:HG12	1:A:455:GLU:HA	1.61	0.80
1:A:315:LYS:HG3	1:A:316:LYS:HE2	1.64	0.80
1:A:248:LYS:C	1:A:256:LEU:HD12	2.01	0.80
1:A:1047:TYR:C	1:A:1058:ILE:CG1	2.50	0.80
1:A:1059:TYR:HE1	1:A:1061:LYS:CB	1.94	0.80
1:A:1226:PRO:HA	1:A:1238:THR:HG22	1.63	0.80
1:A:1360:VAL:N	1:A:1362:GLU:H	1.79	0.80
1:A:270:LYS:HA	1:A:270:LYS:CE	2.09	0.80
1:A:906:LYS:HE2	1:A:1022:LYS:N	1.96	0.80
1:A:906:LYS:NZ	1:A:1022:LYS:CA	2.40	0.80
1:A:1340:PHE:CD2	1:A:1342:LEU:CD1	2.65	0.79
1:A:404:PHE:CG	1:A:439:ILE:CD1	2.65	0.79
1:A:1075:ILE:HG23	1:A:1177:ILE:HG21	1.64	0.79
1:A:1103:LYS:HA	1:A:1106:GLU:HB2	1.62	0.79
1:A:532:ILE:HD11	1:A:533:PHE:CD2	2.17	0.79
1:A:1127:GLU:O	1:A:1130:ILE:HG22	1.80	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1147:LYS:N	3:A:1416:HOH:O	2.14	0.79
1:A:270:LYS:HA	1:A:270:LYS:HE3	1.62	0.79
1:A:315:LYS:HG3	1:A:316:LYS:CE	2.11	0.79
1:A:358:PHE:CB	1:A:480:THR:HG21	2.12	0.79
1:A:1359:SER:C	3:A:1408:HOH:O	2.20	0.79
1:A:212:THR:N	1:A:213:GLU:HA	1.97	0.78
1:A:614:GLN:CB	1:A:835:ASP:OD1	2.31	0.78
1:A:532:ILE:O	1:A:557:LEU:CD1	2.30	0.78
1:A:906:LYS:CE	1:A:1022:LYS:CA	2.58	0.78
1:A:1133:LEU:CD2	1:A:1139:PHE:CD2	2.67	0.78
1:A:616:ASP:O	1:A:620:VAL:HG22	1.83	0.78
1:A:891:CYS:SG	1:A:892:ILE:N	2.55	0.78
2:B:31:C:H2'	2:B:32:A:H4'	1.64	0.78
1:A:557:LEU:HD12	1:A:558:ASP:N	1.98	0.78
1:A:1118:LEU:HD13	1:A:1126:LYS:HG2	1.65	0.78
1:A:102:THR:O	3:A:1412:HOH:O	2.02	0.78
1:A:1278:ARG:NH2	1:A:1278:ARG:HG2	1.98	0.77
1:A:505:PHE:HD2	2:B:22:C:O2'	1.66	0.77
2:B:50:U:H5'	2:B:50:U:H6	1.48	0.77
1:A:316:LYS:H	1:A:316:LYS:CD	1.96	0.77
1:A:1359:SER:O	1:A:1361:LEU:HB2	1.84	0.77
1:A:314:VAL:CA	3:A:1415:HOH:O	2.33	0.77
1:A:362:ILE:CA	1:A:367:ILE:HD12	2.15	0.77
1:A:696:ILE:HA	1:A:697:GLU:C	2.04	0.77
1:A:404:PHE:CD1	1:A:439:ILE:HD11	2.19	0.77
1:A:898:LEU:HD13	1:A:1059:TYR:CE2	2.20	0.77
1:A:263:LEU:O	1:A:264:ASN:ND2	2.18	0.76
1:A:391:LEU:HD12	1:A:459:ILE:HD11	1.65	0.76
1:A:1059:TYR:CE1	1:A:1061:LYS:CB	2.68	0.76
1:A:74:LYS:HD3	1:A:74:LYS:N	1.99	0.76
1:A:413:ASP:HA	1:A:414:SER:HB3	1.67	0.76
1:A:1044:GLN:HA	1:A:1048:TYR:CE1	2.21	0.76
1:A:399:GLU:HA	3:A:1409:HOH:O	1.83	0.76
1:A:816:LYS:CD	1:A:816:LYS:H	1.97	0.76
1:A:68:LEU:HD23	1:A:208:ILE:CG2	2.15	0.76
1:A:1360:VAL:H	1:A:1362:GLU:H	1.33	0.76
1:A:490:LEU:HD21	1:A:500:VAL:HG11	1.68	0.76
1:A:570:ARG:HA	1:A:575:ILE:HG22	1.67	0.76
1:A:1340:PHE:CD2	1:A:1342:LEU:HD12	2.21	0.75
1:A:291:VAL:O	1:A:294:ILE:HG22	1.85	0.75
1:A:1360:VAL:HB	2:B:35:U:O4'	1.86	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1011:LEU:O	1:A:1014:ILE:CG1	2.31	0.75
1:A:1049:PRO:HA	1:A:1050:LYS:CB	2.17	0.75
1:A:1146:ASN:N	3:A:1418:HOH:O	2.20	0.75
1:A:248:LYS:HB3	1:A:256:LEU:CD1	2.16	0.75
1:A:1227:LYS:H	1:A:1238:THR:CG2	1.90	0.75
1:A:235:ILE:HD13	1:A:291:VAL:HG22	1.67	0.75
1:A:1093:ASN:HB2	1:A:1096:GLY:H	1.52	0.74
1:A:1382:ILE:O	1:A:1382:ILE:HG13	1.87	0.74
1:A:1060:LYS:HZ2	1:A:1060:LYS:HA	1.50	0.74
1:A:695:THR:HG23	1:A:696:ILE:N	2.01	0.74
1:A:893:THR:O	1:A:897:ASN:O	2.05	0.74
1:A:853:ASN:ND2	2:B:30:A:N7	2.34	0.74
1:A:94:GLU:CB	1:A:198:MET:HE1	2.16	0.74
1:A:638:LEU:HD13	1:A:638:LEU:N	1.99	0.74
1:A:1118:LEU:HD12	1:A:1126:LYS:CD	2.17	0.74
1:A:390:GLU:CB	1:A:403:ILE:HD11	2.18	0.74
1:A:561:ILE:HD13	1:A:563:ASN:H	1.43	0.74
1:A:640:LEU:O	1:A:643:VAL:HG23	1.88	0.74
1:A:1041:ASN:O	1:A:1044:GLN:HB3	1.87	0.74
1:A:561:ILE:HD11	1:A:563:ASN:H	1.50	0.74
1:A:1168:LEU:HD12	1:A:1168:LEU:H	1.52	0.74
1:A:84:LEU:CD1	1:A:194:LYS:CA	2.65	0.74
1:A:374:ILE:HD13	1:A:428:TYR:CE1	2.22	0.73
1:A:1028:ILE:O	1:A:1032:ILE:HG13	1.87	0.73
1:A:84:LEU:CD1	1:A:194:LYS:N	2.51	0.73
1:A:1068:GLY:H	1:A:1069:ASN:HB2	1.52	0.73
2:B:35:U:N3	3:B:103:HOH:O	2.10	0.73
1:A:1348:ILE:O	1:A:1351:ARG:HB2	1.87	0.73
1:A:404:PHE:CG	1:A:439:ILE:HD11	2.23	0.73
1:A:78:GLY:O	1:A:85:LYS:HG2	1.89	0.73
1:A:1207:ARG:HD3	1:A:1214:LEU:HD22	1.71	0.73
1:A:359:VAL:HG12	1:A:1255:ILE:HD12	1.69	0.73
1:A:1360:VAL:HG21	2:B:35:U:H1'	1.70	0.73
1:A:248:LYS:HB3	1:A:256:LEU:HD11	1.69	0.73
1:A:32:ASP:HA	3:A:1417:HOH:O	1.88	0.73
1:A:617:TYR:HA	1:A:620:VAL:CG2	2.19	0.73
1:A:357:PHE:HD2	1:A:423:GLU:HG2	1.53	0.73
1:A:83:LYS:O	1:A:83:LYS:HD3	1.88	0.72
1:A:1360:VAL:HB	2:B:35:U:C1'	2.19	0.72
1:A:567:LYS:HB3	1:A:567:LYS:HZ3	1.54	0.72
1:A:84:LEU:H	1:A:84:LEU:CD2	2.01	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:617:TYR:HA	1:A:620:VAL:HG22	1.71	0.72
1:A:449:VAL:HG11	1:A:456:LYS:H	1.51	0.72
1:A:557:LEU:HD12	1:A:558:ASP:H	1.54	0.72
1:A:249:ILE:HG13	1:A:257:GLY:HA2	1.72	0.72
1:A:290:THR:HG22	1:A:292:GLU:H	1.54	0.72
1:A:68:LEU:HD23	1:A:208:ILE:HG21	1.70	0.72
1:A:436:LYS:HA	1:A:439:ILE:HD12	1.71	0.72
1:A:639:ASN:H	1:A:639:ASN:HD22	1.37	0.72
1:A:332:LYS:O	1:A:337:LEU:CD2	2.37	0.72
1:A:1130:ILE:CD1	1:A:1361:LEU:H	2.02	0.72
1:A:562:LEU:O	1:A:563:ASN:CB	2.38	0.72
1:A:640:LEU:HD13	1:A:808:GLN:HB3	1.71	0.72
1:A:1359:SER:OG	1:A:1363:LEU:CG	2.35	0.71
1:A:213:GLU:N	1:A:213:GLU:OE1	2.23	0.71
1:A:357:PHE:CD2	1:A:423:GLU:CB	2.73	0.71
1:A:853:ASN:ND2	2:B:30:A:C8	2.58	0.71
1:A:1076:TYR:CE1	1:A:1080:SER:HA	2.25	0.71
1:A:362:ILE:N	1:A:367:ILE:HD11	2.05	0.71
1:A:626:ASN:OD1	1:A:845:LEU:HD21	1.88	0.71
1:A:345:ILE:HG13	1:A:346:GLU:N	2.05	0.71
1:A:1341:LYS:HZ2	1:A:1344:GLY:HA3	1.54	0.71
1:A:309:LYS:HD2	1:A:310:ARG:O	1.90	0.71
1:A:599:ARG:NH2	1:A:608:ARG:HB2	2.05	0.71
1:A:871:TYR:OH	3:A:1414:HOH:O	2.06	0.71
1:A:1044:GLN:O	1:A:1045:GLU:CB	2.38	0.71
1:A:243:MET:CE	1:A:246:ARG:NH1	2.54	0.71
1:A:32:ASP:C	3:A:1417:HOH:O	2.28	0.71
1:A:390:GLU:HB2	1:A:403:ILE:CD1	2.19	0.71
1:A:361:ASN:HB3	1:A:367:ILE:CG1	2.20	0.71
1:A:442:ILE:HD12	1:A:443:LEU:N	2.06	0.71
1:A:567:LYS:HB3	1:A:567:LYS:NZ	2.04	0.71
1:A:696:ILE:HG22	1:A:697:GLU:O	1.90	0.71
2:B:22:C:H5'	2:B:23:U:H2'	1.72	0.71
1:A:272:SER:CB	3:A:1421:HOH:O	2.34	0.71
1:A:899:ASN:CB	1:A:905:GLN:CG	2.58	0.71
1:A:454:MET:HB3	1:A:455:GLU:HA	1.72	0.70
1:A:449:VAL:HG12	1:A:456:LYS:H	1.54	0.70
1:A:505:PHE:CD2	2:B:22:C:O2'	2.44	0.70
1:A:1063:LEU:HD23	1:A:1171:PHE:CE2	2.26	0.70
2:B:34:A:HO2'	2:B:35:U:P	2.14	0.70
1:A:1118:LEU:HD12	1:A:1126:LYS:HD2	1.72	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:636:LYS:HE3	1:A:887:LEU:CD2	2.20	0.70
1:A:641:ASP:HB2	1:A:821:ILE:CG1	2.21	0.70
1:A:1235:TYR:CE1	1:A:1236:THR:HG23	2.27	0.70
1:A:182:GLU:OE1	1:A:184:GLU:HB2	1.91	0.70
1:A:214:LYS:CA	3:A:1406:HOH:O	2.13	0.70
1:A:636:LYS:CE	1:A:887:LEU:HD23	2.21	0.70
1:A:1110:ILE:HG12	1:A:1144:ILE:CB	2.22	0.70
1:A:374:ILE:HD13	1:A:428:TYR:CZ	2.26	0.70
1:A:1236:THR:HB	1:A:1242:LYS:CG	2.21	0.70
1:A:1236:THR:HB	1:A:1242:LYS:HG3	1.74	0.69
1:A:1245:ASP:OD1	1:A:1245:ASP:N	2.24	0.69
1:A:823:VAL:O	1:A:825:THR:HG23	1.92	0.69
1:A:1228:ARG:HG2	1:A:1228:ARG:NH1	2.07	0.69
1:A:82:PHE:HB2	1:A:84:LEU:HD22	1.74	0.69
1:A:400:ILE:HD12	1:A:443:LEU:HD13	1.74	0.69
1:A:801:ASN:CG	1:A:802:ILE:HA	2.13	0.69
2:B:15:A:C8	2:B:15:A:H5"	2.28	0.69
1:A:547:PHE:HA	1:A:594:THR:HG22	1.75	0.69
1:A:357:PHE:CD2	1:A:423:GLU:CG	2.75	0.69
1:A:200:LEU:HD12	1:A:200:LEU:O	1.91	0.69
1:A:417:PHE:HD1	1:A:418:SER:HB3	1.58	0.69
2:B:34:A:C8	2:B:34:A:H5"	2.24	0.69
1:A:1342:LEU:HD12	1:A:1349:LEU:HD21	1.75	0.69
1:A:435:LEU:CD2	1:A:468:LEU:CD1	2.71	0.69
1:A:1075:ILE:HD11	1:A:1290:PRO:HG2	1.74	0.68
1:A:286:ASN:HD22	1:A:286:ASN:H	1.41	0.68
1:A:357:PHE:CE1	1:A:361:ASN:ND2	2.62	0.68
1:A:94:GLU:CB	1:A:198:MET:HE2	2.23	0.68
2:B:13:C:O3'	3:B:102:HOH:O	2.08	0.68
1:A:1118:LEU:CD1	1:A:1126:LYS:CD	2.72	0.68
1:A:80:ILE:HG21	1:A:201:TYR:HB2	1.74	0.68
1:A:626:ASN:O	1:A:629:ILE:HG13	1.94	0.68
1:A:1268:GLU:O	1:A:1276:SER:CA	2.41	0.68
1:A:1044:GLN:HB2	1:A:1048:TYR:HE1	1.59	0.68
1:A:82:PHE:CB	1:A:84:LEU:HD22	2.24	0.68
1:A:210:ASN:HB3	3:A:1431:HOH:O	1.94	0.68
1:A:404:PHE:CD2	1:A:439:ILE:CD1	2.77	0.68
1:A:821:ILE:N	1:A:821:ILE:HD13	2.03	0.68
1:A:51:ASN:HB3	1:A:331:ILE:HD13	1.75	0.68
1:A:683:LEU:C	1:A:683:LEU:HD12	2.14	0.68
1:A:73:ARG:NH2	1:A:73:ARG:HG3	1.99	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1340:PHE:HD2	1:A:1342:LEU:HD12	1.59	0.68
1:A:662:GLU:HB3	3:A:1422:HOH:O	1.94	0.68
1:A:641:ASP:HB2	1:A:821:ILE:HD11	1.76	0.68
1:A:1041:ASN:HD22	1:A:1042:LYS:N	1.92	0.67
1:A:1047:TYR:HE1	1:A:1060:LYS:HG3	1.60	0.67
1:A:186:LYS:O	1:A:189:ILE:HG13	1.93	0.67
1:A:413:ASP:HA	1:A:414:SER:CB	2.23	0.67
1:A:289:LEU:HD23	1:A:290:THR:N	2.09	0.67
1:A:1235:TYR:CD1	1:A:1236:THR:HG23	2.29	0.67
1:A:1216:GLY:HA3	1:A:1242:LYS:HE3	1.74	0.67
1:A:659:ILE:HD12	1:A:659:ILE:O	1.93	0.67
1:A:1226:PRO:CB	1:A:1238:THR:HB	2.24	0.67
1:A:1230:GLY:HA2	1:A:1234:PHE:CB	2.23	0.67
1:A:646:ASP:HB3	1:A:647:LYS:CB	2.25	0.67
1:A:1365:SER:OG	1:A:1368:SER:CB	2.41	0.67
1:A:249:ILE:N	1:A:256:LEU:HD12	2.10	0.67
1:A:337:LEU:H	1:A:337:LEU:HD23	1.59	0.67
1:A:735:GLU:O	1:A:739:THR:HG23	1.95	0.67
1:A:683:LEU:HD12	1:A:684:TYR:N	2.10	0.67
2:B:22:C:H4'	2:B:23:U:OP2	1.95	0.67
1:A:314:VAL:HG12	1:A:315:LYS:N	2.10	0.67
1:A:897:ASN:CB	1:A:898:LEU:HA	2.25	0.67
1:A:906:LYS:O	1:A:910:ILE:HG13	1.96	0.67
1:A:316:LYS:H	1:A:316:LYS:HE2	1.59	0.66
1:A:80:ILE:HD11	1:A:200:LEU:HB3	1.76	0.66
1:A:899:ASN:O	1:A:900:LEU:HB2	1.93	0.66
1:A:316:LYS:H	1:A:316:LYS:CE	2.06	0.66
1:A:94:GLU:CB	1:A:198:MET:SD	2.83	0.66
1:A:1047:TYR:C	1:A:1058:ILE:HG12	2.16	0.66
1:A:249:ILE:C	1:A:249:ILE:HD13	2.16	0.66
1:A:608:ARG:HA	1:A:609:ASP:CB	2.25	0.66
1:A:80:ILE:HD11	1:A:200:LEU:CB	2.25	0.66
1:A:1087:ASP:N	1:A:1087:ASP:OD1	2.22	0.66
1:A:1149:TYR:CE1	1:A:1153:GLU:HG3	2.31	0.66
1:A:1348:ILE:HD12	1:A:1348:ILE:N	2.03	0.66
1:A:442:ILE:C	1:A:442:ILE:HD12	2.15	0.66
1:A:610:LEU:CA	1:A:612:GLY:HA3	2.25	0.66
1:A:1228:ARG:HA	1:A:1234:PHE:CD2	2.30	0.66
1:A:1360:VAL:N	3:A:1408:HOH:O	2.28	0.66
1:A:314:VAL:HB	3:A:1415:HOH:O	1.96	0.66
1:A:536:GLU:OE2	1:A:556:VAL:HG21	1.95	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1117:LYS:HE2	1:A:1129:TYR:OH	1.96	0.66
1:A:404:PHE:CG	1:A:439:ILE:HD13	2.30	0.66
1:A:578:LYS:O	1:A:579:ASN:HB2	1.95	0.66
1:A:1272:PRO:HG2	1:A:1275:GLU:OE1	1.96	0.66
1:A:261:PHE:CB	1:A:283:LEU:CD1	2.74	0.66
1:A:662:GLU:OE1	1:A:662:GLU:HA	1.95	0.66
1:A:395:ASN:HB3	1:A:399:GLU:OE2	1.96	0.65
1:A:561:ILE:HD13	1:A:561:ILE:C	2.15	0.65
1:A:900:LEU:HD23	1:A:1057:TYR:O	1.95	0.65
1:A:315:LYS:CG	1:A:316:LYS:HE2	2.26	0.65
1:A:362:ILE:CG1	1:A:367:ILE:HD12	2.24	0.65
1:A:906:LYS:HZ3	1:A:1022:LYS:HA	1.58	0.65
1:A:1040:GLU:HB3	1:A:1042:LYS:HG2	1.78	0.65
1:A:1090:PHE:H	1:A:1091:LEU:CB	2.09	0.65
1:A:359:VAL:CG1	1:A:1255:ILE:HD12	2.25	0.65
1:A:210:ASN:C	1:A:211:GLU:HG2	2.17	0.65
1:A:592:ILE:HG22	1:A:839:ILE:HG21	1.78	0.65
1:A:1301:ASP:OD2	1:A:1343:ILE:CB	2.44	0.65
1:A:1360:VAL:HG23	2:B:35:U:C2	2.31	0.65
1:A:1269:ILE:O	1:A:1276:SER:HB3	1.96	0.65
1:A:332:LYS:O	1:A:337:LEU:HD23	1.96	0.65
1:A:449:VAL:HG12	1:A:454:MET:HB3	1.79	0.65
1:A:532:ILE:C	1:A:532:ILE:HD12	2.17	0.65
1:A:268:ASP:CB	2:B:51:C:C2	2.80	0.65
2:B:35:U:H2'	2:B:36:C:C6	2.32	0.65
1:A:263:LEU:C	1:A:264:ASN:HD22	1.99	0.65
1:A:617:TYR:CA	1:A:620:VAL:HG22	2.26	0.65
1:A:361:ASN:HB3	1:A:367:ILE:HG13	1.77	0.65
1:A:1044:GLN:O	1:A:1045:GLU:HB2	1.96	0.65
1:A:362:ILE:N	1:A:367:ILE:CD1	2.60	0.64
1:A:448:LYS:O	1:A:454:MET:HB2	1.97	0.64
1:A:261:PHE:HA	1:A:283:LEU:HD21	1.79	0.64
1:A:391:LEU:CD1	1:A:459:ILE:HD11	2.27	0.64
1:A:435:LEU:HD21	1:A:468:LEU:CD1	2.27	0.64
1:A:464:ASN:HD22	1:A:467:ILE:HD12	1.61	0.64
1:A:464:ASN:HB3	1:A:467:ILE:HB	1.78	0.64
1:A:76:HIS:H	1:A:79:ASN:ND2	1.96	0.64
1:A:32:ASP:O	3:A:1417:HOH:O	2.14	0.64
1:A:1130:ILE:HD12	1:A:1361:LEU:H	1.62	0.64
1:A:20:LYS:NZ	1:A:20:LYS:HA	2.13	0.64
1:A:314:VAL:O	3:A:1415:HOH:O	2.15	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:698:THR:O	1:A:702:VAL:N	2.31	0.64
1:A:1359:SER:O	1:A:1360:VAL:HG12	1.97	0.64
1:A:5:PHE:HA	1:A:27:VAL:O	1.98	0.64
1:A:524:SER:O	1:A:527:MET:HG3	1.98	0.64
1:A:338:ASP:OD1	1:A:341:GLU:HG2	1.97	0.63
1:A:537:ASN:HD21	1:A:540:ASN:H	1.45	0.63
1:A:387:LEU:HD23	1:A:403:ILE:CG2	2.29	0.63
1:A:581:ILE:C	1:A:581:ILE:HD13	2.18	0.63
1:A:76:HIS:CE1	1:A:79:ASN:CB	2.68	0.63
1:A:1066:ASN:CG	1:A:1067:ILE:H	1.94	0.63
1:A:659:ILE:C	1:A:659:ILE:HD12	2.19	0.63
1:A:695:THR:O	1:A:696:ILE:CG2	2.45	0.63
1:A:726:ASN:H	1:A:726:ASN:ND2	1.97	0.63
1:A:1067:ILE:HG12	1:A:1072:PHE:CD2	2.34	0.63
1:A:78:GLY:CA	1:A:197:ASN:OD1	2.47	0.63
1:A:1246:GLU:HB3	1:A:1250:LYS:HE2	1.80	0.63
1:A:400:ILE:HD13	1:A:442:ILE:CD1	2.16	0.63
1:A:449:VAL:CG1	1:A:456:LYS:N	2.58	0.63
1:A:683:LEU:HD11	1:A:793:PHE:CG	2.33	0.63
1:A:192:ILE:HG21	1:A:245:ILE:CG1	2.29	0.63
2:B:30:A:C2'	2:B:31:C:O5'	2.47	0.63
1:A:1090:PHE:HB2	1:A:1091:LEU:CB	2.29	0.63
1:A:1332:ASP:HB2	1:A:1354:LYS:HE2	1.81	0.63
1:A:248:LYS:CB	1:A:256:LEU:HD11	2.27	0.63
1:A:1034:ASP:HB3	1:A:1039:ASN:HA	1.80	0.62
1:A:1059:TYR:CE1	1:A:1061:LYS:HB3	2.34	0.62
1:A:1279:ASN:ND2	1:A:1283:HIS:HE1	1.85	0.62
1:A:316:LYS:H	1:A:316:LYS:HD3	1.62	0.62
1:A:1234:PHE:CE1	1:A:1235:TYR:HB3	2.35	0.62
1:A:1063:LEU:O	1:A:1063:LEU:HD12	1.98	0.62
1:A:1359:SER:O	1:A:1361:LEU:HD13	1.98	0.62
1:A:1359:SER:OG	1:A:1361:LEU:HB3	1.98	0.62
1:A:371:ILE:HG21	1:A:472:ILE:HG22	1.80	0.62
1:A:547:PHE:O	1:A:597:ARG:NH2	2.33	0.62
1:A:1083:ILE:HD13	1:A:1171:PHE:CD1	2.34	0.62
1:A:1279:ASN:O	1:A:1283:HIS:ND1	2.33	0.62
1:A:351:LYS:O	1:A:355:VAL:HG23	1.99	0.62
1:A:463:LEU:O	1:A:468:LEU:HG	1.99	0.62
1:A:339:LYS:HG3	2:B:6:C:H4'	1.81	0.62
1:A:1197:ARG:CB	1:A:1197:ARG:HH11	2.12	0.62
1:A:1273:GLU:O	1:A:1274:ASN:HB2	2.00	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1269:ILE:O	1:A:1276:SER:CB	2.47	0.62
1:A:687:ASN:CG	1:A:688:PRO:HD2	2.20	0.62
1:A:821:ILE:H	1:A:821:ILE:CD1	1.96	0.62
1:A:82:PHE:HD1	1:A:263:LEU:O	1.83	0.62
1:A:1133:LEU:HD21	1:A:1139:PHE:CE2	2.33	0.62
1:A:435:LEU:CD2	1:A:468:LEU:HD11	2.30	0.62
1:A:76:HIS:NE2	2:B:48:A:OP1	2.30	0.62
1:A:246:ARG:HA	1:A:249:ILE:CG2	2.29	0.62
1:A:316:LYS:HE2	1:A:316:LYS:N	2.14	0.62
1:A:738:LYS:HA	1:A:746:ILE:HG12	1.81	0.62
1:A:1075:ILE:CD1	1:A:1181:LEU:HD11	2.30	0.62
1:A:1230:GLY:CA	1:A:1234:PHE:HB3	2.22	0.61
1:A:1341:LYS:NZ	1:A:1344:GLY:HA3	2.16	0.61
1:A:248:LYS:CB	1:A:256:LEU:CD1	2.78	0.61
1:A:261:PHE:CB	1:A:283:LEU:HD11	2.30	0.61
1:A:286:ASN:OD1	1:A:1139:PHE:CD1	2.53	0.61
1:A:44:ASN:C	1:A:44:ASN:HD22	2.04	0.61
1:A:1067:ILE:HG12	1:A:1072:PHE:CE2	2.34	0.61
1:A:418:SER:OG	1:A:420:LYS:HD2	2.00	0.61
1:A:59:ILE:HG23	1:A:314:VAL:HG21	0.83	0.61
1:A:525:THR:CG2	1:A:847:ASN:HD21	2.12	0.61
1:A:1049:PRO:C	1:A:1051:GLU:HA	2.20	0.61
1:A:1127:GLU:HA	1:A:1127:GLU:OE2	1.99	0.61
1:A:1075:ILE:HD11	1:A:1181:LEU:HD11	1.81	0.61
1:A:183:LEU:HD22	1:A:253:LEU:CD1	2.30	0.61
1:A:197:ASN:HD22	1:A:198:MET:N	1.98	0.61
1:A:1346:ASN:O	1:A:1349:LEU:HB2	2.01	0.61
1:A:287:VAL:HG21	1:A:1125:TYR:CZ	2.35	0.61
1:A:374:ILE:CD1	1:A:428:TYR:CE1	2.84	0.61
1:A:726:ASN:H	1:A:726:ASN:HD22	1.48	0.61
2:B:15:A:H8	2:B:15:A:H5"	1.66	0.61
1:A:1067:ILE:O	1:A:1067:ILE:HG22	2.00	0.61
1:A:1059:TYR:HE1	1:A:1061:LYS:HB3	1.64	0.61
1:A:1083:ILE:CD1	1:A:1171:PHE:CE1	2.77	0.61
1:A:1200:HIS:CE1	1:A:1224:ALA:HB2	2.36	0.61
1:A:446:GLU:HA	1:A:449:VAL:HG22	1.83	0.61
1:A:357:PHE:HE1	1:A:361:ASN:ND2	1.98	0.61
2:B:9:A:C4	2:B:13:C:N4	2.68	0.61
1:A:417:PHE:CD1	1:A:418:SER:HB3	2.35	0.61
1:A:1040:GLU:HA	1:A:1040:GLU:OE2	2.01	0.60
1:A:1130:ILE:HD11	1:A:1361:LEU:HD12	1.82	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:246:ARG:CG	3:A:1411:HOH:O	2.43	0.60
1:A:286:ASN:O	1:A:1132:LYS:HG3	2.01	0.60
1:A:802:ILE:HG23	1:A:805:ILE:HB	1.81	0.60
1:A:454:MET:HE2	1:A:455:GLU:N	2.16	0.60
1:A:490:LEU:HD21	1:A:500:VAL:CG1	2.30	0.60
1:A:405:LYS:NZ	2:B:16:A:N7	2.43	0.60
1:A:801:ASN:HA	1:A:803:GLN:N	2.16	0.60
1:A:83:LYS:HB2	1:A:265:VAL:HG22	1.82	0.60
1:A:1076:TYR:CE1	1:A:1080:SER:CA	2.83	0.60
1:A:1107:ILE:HD13	1:A:1156:TYR:HA	1.83	0.60
1:A:638:LEU:HD22	1:A:639:ASN:HD22	1.65	0.60
1:A:1047:TYR:CA	1:A:1058:ILE:HG13	2.31	0.60
1:A:1047:TYR:CE1	1:A:1060:LYS:HG3	2.35	0.60
1:A:1268:GLU:O	1:A:1276:SER:CB	2.50	0.60
1:A:501:ASN:OD1	1:A:503:ASP:HB2	2.02	0.60
1:A:56:ARG:HH21	1:A:56:ARG:CG	2.14	0.60
1:A:731:ILE:HG22	1:A:734:GLN:HG3	1.82	0.60
1:A:1118:LEU:HD13	1:A:1126:LYS:CG	2.31	0.60
1:A:252:ASN:N	1:A:252:ASN:OD1	2.35	0.60
1:A:449:VAL:CG1	1:A:454:MET:HB3	2.30	0.60
1:A:576:ASP:HB3	1:A:580:ASN:O	2.02	0.60
1:A:84:LEU:HD23	1:A:84:LEU:N	2.13	0.60
1:A:183:LEU:CD1	1:A:255:ILE:HG21	2.31	0.60
1:A:638:LEU:HD22	1:A:639:ASN:N	2.16	0.60
1:A:695:THR:OG1	1:A:696:ILE:N	2.35	0.60
2:B:35:U:C4	2:B:36:C:N4	2.69	0.60
1:A:1076:TYR:CE1	1:A:1080:SER:CB	2.85	0.60
1:A:638:LEU:HD22	1:A:639:ASN:ND2	2.17	0.60
1:A:76:HIS:CE1	1:A:79:ASN:N	2.70	0.60
1:A:78:GLY:HA2	1:A:197:ASN:OD1	2.02	0.59
1:A:1185:ASN:O	1:A:1185:ASN:ND2	2.35	0.59
1:A:235:ILE:CD1	1:A:291:VAL:HG22	2.29	0.59
1:A:802:ILE:O	1:A:805:ILE:N	2.34	0.59
1:A:1278:ARG:CG	1:A:1278:ARG:HH21	2.11	0.59
1:A:698:THR:O	1:A:702:VAL:HG23	2.02	0.59
1:A:314:VAL:CB	3:A:1415:HOH:O	2.50	0.59
1:A:1076:TYR:HE1	1:A:1080:SER:HA	1.66	0.59
1:A:1164:LYS:O	1:A:1168:LEU:HD12	2.02	0.59
1:A:1207:ARG:CD	1:A:1214:LEU:HD22	2.31	0.59
1:A:558:ASP:OD1	1:A:559:LYS:N	2.35	0.59
1:A:84:LEU:HD13	1:A:193:PHE:HB3	1.85	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1118:LEU:CD1	1:A:1126:LYS:CG	2.81	0.59
1:A:387:LEU:HD23	1:A:403:ILE:HG21	1.85	0.59
1:A:738:LYS:HA	1:A:746:ILE:CG1	2.33	0.59
1:A:1218:ASN:ND2	1:A:1236:THR:O	2.36	0.59
1:A:1226:PRO:HA	1:A:1238:THR:HG21	1.84	0.59
1:A:1359:SER:CB	1:A:1363:LEU:HD12	2.33	0.59
1:A:700:LYS:O	1:A:704:ASN:ND2	2.36	0.59
1:A:76:HIS:CG	1:A:79:ASN:ND2	2.63	0.59
1:A:1044:GLN:O	1:A:1044:GLN:HG3	2.01	0.59
1:A:371:ILE:HG21	1:A:472:ILE:CG2	2.33	0.59
1:A:693:PHE:O	1:A:694:ASP:O	2.21	0.59
1:A:1059:TYR:CE1	1:A:1061:LYS:HA	2.38	0.58
1:A:1349:LEU:C	1:A:1351:ARG:HB3	2.24	0.58
1:A:314:VAL:C	3:A:1415:HOH:O	2.41	0.58
1:A:608:ARG:CG	1:A:608:ARG:HH11	2.16	0.58
1:A:677:LEU:CD1	1:A:707:ILE:HD12	2.30	0.58
1:A:1360:VAL:HG13	1:A:1360:VAL:O	2.02	0.58
1:A:1164:LYS:CG	1:A:1366:TYR:O	2.52	0.58
1:A:1267:SER:O	1:A:1268:GLU:HB2	2.03	0.58
1:A:191:GLU:O	1:A:194:LYS:HG3	2.03	0.58
1:A:375:LEU:O	1:A:378:PHE:HB2	2.03	0.58
1:A:647:LYS:O	1:A:650:ILE:HD12	2.03	0.58
1:A:691:GLU:CB	1:A:692:PRO:HD2	2.33	0.58
1:A:1104:ILE:HG12	1:A:1159:VAL:HG13	1.84	0.58
1:A:565:LYS:O	1:A:569:ILE:HG12	2.03	0.58
1:A:814:ASP:HB3	1:A:817:THR:OG1	2.02	0.58
1:A:84:LEU:HD11	1:A:194:LYS:N	2.16	0.58
1:A:359:VAL:HG13	1:A:1255:ILE:HG23	1.85	0.58
1:A:384:ILE:HG12	1:A:463:LEU:CD1	2.34	0.58
1:A:446:GLU:HA	1:A:446:GLU:OE2	2.03	0.58
1:A:449:VAL:HG11	1:A:456:LYS:N	2.17	0.58
1:A:801:ASN:HA	1:A:803:GLN:H	1.67	0.58
1:A:824:LYS:C	1:A:825:THR:HG23	2.23	0.58
1:A:1059:TYR:HE1	1:A:1061:LYS:HB2	1.65	0.58
1:A:1141:ALA:HA	1:A:1147:LYS:CB	2.34	0.58
1:A:1367:ASN:O	1:A:1367:ASN:ND2	2.35	0.58
1:A:640:LEU:HD13	1:A:808:GLN:CB	2.33	0.58
1:A:1271:LYS:CB	1:A:1275:GLU:HB3	2.34	0.58
1:A:355:VAL:O	1:A:359:VAL:HG23	2.04	0.58
1:A:547:PHE:CA	1:A:594:THR:HG22	2.33	0.58
1:A:348:GLU:O	1:A:349:ASN:HB2	2.03	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:239:LEU:O	1:A:243:MET:HG2	2.04	0.58
1:A:362:ILE:CA	1:A:367:ILE:CD1	2.82	0.58
1:A:1034:ASP:HB3	1:A:1038:GLU:O	2.03	0.57
1:A:390:GLU:OE2	1:A:403:ILE:HD11	2.04	0.57
1:A:654:ILE:O	1:A:716:LYS:HE2	2.04	0.57
1:A:676:VAL:HG12	1:A:778:ILE:HD13	1.85	0.57
1:A:81:LEU:C	1:A:81:LEU:HD23	2.24	0.57
1:A:186:LYS:HA	1:A:189:ILE:HG13	1.85	0.57
1:A:310:ARG:HD2	1:A:312:GLU:HB3	1.86	0.57
1:A:547:PHE:HA	1:A:594:THR:CG2	2.34	0.57
1:A:1226:PRO:HB3	1:A:1238:THR:HB	1.87	0.57
1:A:246:ARG:O	1:A:249:ILE:HG23	2.04	0.57
1:A:246:ARG:HD2	1:A:285:ILE:HG22	1.86	0.57
1:A:665:ASN:O	1:A:668:LYS:HD2	2.04	0.57
1:A:1354:LYS:HB3	1:A:1355:PRO:HD2	1.87	0.57
1:A:210:ASN:O	1:A:211:GLU:HG2	2.03	0.57
1:A:235:ILE:O	1:A:238:ILE:HB	2.04	0.57
1:A:853:ASN:ND2	2:B:29:G:O2'	2.38	0.57
1:A:1192:MET:HE1	1:A:1278:ARG:HA	1.85	0.57
1:A:246:ARG:O	1:A:250:LYS:N	2.36	0.57
1:A:362:ILE:HG12	1:A:367:ILE:CD1	2.35	0.57
1:A:572:LEU:O	1:A:573:ASP:HB3	2.04	0.57
1:A:1107:ILE:CD1	1:A:1156:TYR:HA	2.35	0.57
1:A:416:LYS:O	1:A:418:SER:HA	2.05	0.57
1:A:390:GLU:O	1:A:393:LYS:N	2.38	0.57
1:A:561:ILE:HD11	1:A:566:ILE:HG13	1.87	0.56
1:A:83:LYS:HA	1:A:85:LYS:HE2	1.87	0.56
1:A:1049:PRO:O	1:A:1052:ARG:HA	2.05	0.56
1:A:1342:LEU:H	1:A:1342:LEU:HD13	1.69	0.56
1:A:332:LYS:HA	1:A:336:LEU:HB2	1.86	0.56
1:A:697:GLU:HA	1:A:701:ILE:HD13	1.86	0.56
1:A:641:ASP:HB2	1:A:821:ILE:CD1	2.33	0.56
1:A:1247:GLU:HA	1:A:1250:LYS:HE3	1.86	0.56
1:A:681:LEU:HD23	1:A:707:ILE:HD11	1.83	0.56
2:B:30:A:H2'	2:B:31:C:O5'	2.04	0.56
2:B:31:C:H6	2:B:31:C:O5'	1.88	0.56
1:A:1165:ILE:O	1:A:1169:VAL:HG13	2.05	0.56
1:A:183:LEU:HD11	1:A:255:ILE:HD13	1.86	0.56
1:A:1041:ASN:H	1:A:1041:ASN:ND2	2.02	0.56
1:A:1327:LYS:O	1:A:1356:LYS:CE	2.43	0.56
1:A:1360:VAL:CG2	2:B:35:U:O2	2.43	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:530:ASN:HD21	1:A:543:ASN:HA	1.71	0.56
1:A:532:ILE:O	1:A:557:LEU:HD13	2.04	0.56
1:A:1061:LYS:HG3	1:A:1062:ASN:N	2.21	0.56
1:A:449:VAL:HG12	1:A:456:LYS:N	2.20	0.56
1:A:636:LYS:NZ	1:A:887:LEU:HG	2.21	0.56
1:A:698:THR:OG1	1:A:699:GLU:N	2.38	0.56
1:A:59:ILE:HD11	1:A:330:TYR:CD2	2.41	0.56
1:A:390:GLU:CB	1:A:403:ILE:CD1	2.81	0.56
1:A:76:HIS:N	1:A:79:ASN:ND2	2.53	0.56
1:A:1360:VAL:CB	2:B:35:U:H1'	2.36	0.56
1:A:1269:ILE:C	1:A:1276:SER:HB3	2.26	0.56
1:A:358:PHE:HB2	1:A:480:THR:HG21	1.86	0.56
1:A:1068:GLY:CA	1:A:1069:ASN:HB2	2.36	0.56
1:A:1336:LEU:HG	1:A:1352:LEU:HD22	1.88	0.56
1:A:435:LEU:HD21	1:A:468:LEU:HD13	1.88	0.56
1:A:589:PHE:CE1	1:A:842:ILE:HG21	2.40	0.56
1:A:317:VAL:HG11	1:A:323:GLU:HB2	1.87	0.55
1:A:731:ILE:HG22	1:A:734:GLN:CG	2.35	0.55
1:A:517:GLU:HG3	1:A:858:ARG:HD2	1.88	0.55
1:A:1218:ASN:ND2	1:A:1242:LYS:HD3	2.21	0.55
1:A:1342:LEU:CA	1:A:1349:LEU:HD23	2.15	0.55
1:A:377:GLU:HG2	1:A:412:PHE:CE2	2.41	0.55
1:A:561:ILE:HD13	1:A:562:LEU:N	2.21	0.55
1:A:616:ASP:O	1:A:620:VAL:N	2.36	0.55
1:A:87:LYS:HA	1:A:97:ASP:O	2.05	0.55
1:A:1359:SER:OG	1:A:1361:LEU:CB	2.54	0.55
1:A:696:ILE:HA	1:A:697:GLU:O	2.06	0.55
1:A:1213:LYS:C	1:A:1214:LEU:HD12	2.27	0.55
1:A:514:LEU:HD23	1:A:858:ARG:CG	2.36	0.55
1:A:1083:ILE:CD1	1:A:1171:PHE:CD1	2.90	0.55
1:A:248:LYS:HB3	1:A:256:LEU:HD12	1.88	0.55
1:A:805:ILE:O	1:A:808:GLN:HG2	2.07	0.55
1:A:357:PHE:HE1	1:A:361:ASN:HD22	1.52	0.55
1:A:639:ASN:HD22	1:A:639:ASN:N	2.05	0.55
1:A:682:ASN:O	1:A:686:ASN:HB2	2.06	0.55
1:A:1059:TYR:CE1	1:A:1061:LYS:CA	2.89	0.55
1:A:1146:ASN:HD21	1:A:1152:PHE:N	2.05	0.55
1:A:1262:ASP:CG	1:A:1267:SER:HB2	2.27	0.55
1:A:514:LEU:HD23	1:A:858:ARG:HG3	1.89	0.55
1:A:1090:PHE:H	1:A:1092:PHE:H	1.54	0.55
1:A:1285:TYR:HA	1:A:1288:ARG:HG2	1.89	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:357:PHE:CE2	1:A:423:GLU:HB2	2.41	0.55
1:A:1044:GLN:HB2	1:A:1048:TYR:CE1	2.41	0.55
1:A:1223:ARG:HD3	1:A:1225:TYR:CZ	2.42	0.55
1:A:1245:ASP:O	1:A:1246:GLU:C	2.37	0.55
1:A:1130:ILE:HD11	1:A:1361:LEU:CD1	2.36	0.55
1:A:344:LYS:CE	1:A:500:VAL:O	2.49	0.55
1:A:382:GLU:O	1:A:386:LYS:N	2.32	0.55
1:A:670:LEU:HD12	1:A:718:ILE:HD13	1.88	0.55
1:A:687:ASN:ND2	1:A:689:LYS:H	2.05	0.54
1:A:731:ILE:CG2	1:A:734:GLN:CG	2.85	0.54
2:B:14:G:C6	2:B:16:A:C6	2.94	0.54
1:A:663:ASN:O	1:A:665:ASN:N	2.35	0.54
1:A:1009:LYS:CB	1:A:1010:ILE:CB	2.85	0.54
1:A:1277:ILE:HG13	1:A:1302:ARG:HB3	1.88	0.54
1:A:286:ASN:H	1:A:286:ASN:ND2	2.05	0.54
1:A:561:ILE:CD1	1:A:566:ILE:HG13	2.37	0.54
1:A:608:ARG:CA	1:A:609:ASP:CB	2.84	0.54
1:A:1065:LEU:O	1:A:1066:ASN:CG	2.45	0.54
1:A:1164:LYS:O	1:A:1168:LEU:CD1	2.55	0.54
1:A:319:ASN:OD1	1:A:322:LEU:HD12	2.07	0.54
1:A:358:PHE:HB2	1:A:480:THR:CG2	2.37	0.54
1:A:454:MET:H	1:A:455:GLU:CB	2.21	0.54
1:A:262:TYR:C	1:A:264:ASN:H	2.08	0.54
1:A:646:ASP:CB	1:A:647:LYS:CB	2.85	0.54
1:A:1164:LYS:HG2	1:A:1366:TYR:O	2.07	0.54
1:A:1280:TYR:CD2	1:A:1299:GLN:NE2	2.71	0.54
1:A:1333:TYR:O	1:A:1337:LYS:HG2	2.08	0.54
1:A:243:MET:HE1	1:A:246:ARG:NH1	2.21	0.54
1:A:287:VAL:HG21	1:A:1125:TYR:HH	1.64	0.54
1:A:26:LYS:HG3	1:A:41:ASN:O	2.08	0.54
1:A:608:ARG:O	1:A:608:ARG:HD2	2.07	0.54
1:A:686:ASN:CG	3:A:1423:HOH:O	2.46	0.54
1:A:1077:GLY:O	1:A:1078:LEU:HB3	2.06	0.54
1:A:1078:LEU:O	1:A:1078:LEU:HG	2.08	0.54
1:A:1329:VAL:HG23	1:A:1331:LEU:HD13	1.90	0.54
1:A:249:ILE:N	1:A:256:LEU:CD1	2.70	0.54
1:A:25:VAL:HG11	1:A:40:ILE:HG13	1.85	0.54
1:A:413:ASP:CA	1:A:414:SER:CB	2.85	0.54
1:A:235:ILE:HD11	1:A:294:ILE:CG2	2.38	0.54
2:B:29:G:H4'	2:B:30:A:OP1	2.08	0.54
1:A:213:GLU:HG3	1:A:216:PHE:HD2	1.73	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:25:VAL:HG13	1:A:42:GLU:HG2	1.90	0.53
1:A:261:PHE:CB	1:A:283:LEU:CD2	2.87	0.53
1:A:763:SER:OG	2:B:21:A:H5''	2.07	0.53
1:A:183:LEU:HD22	1:A:253:LEU:HD13	1.90	0.53
1:A:200:LEU:HD12	1:A:200:LEU:C	2.28	0.53
1:A:640:LEU:HD13	1:A:808:GLN:OE1	2.07	0.53
1:A:185:THR:O	1:A:188:SER:HB3	2.07	0.53
1:A:767:ASN:C	3:A:1407:HOH:O	2.39	0.53
1:A:537:ASN:C	1:A:537:ASN:HD22	2.12	0.53
1:A:584:ASN:ND2	1:A:588:LYS:CB	2.72	0.53
1:A:1360:VAL:HB	2:B:35:U:H1'	1.91	0.53
1:A:1367:ASN:O	1:A:1371:ILE:HG22	2.08	0.53
1:A:78:GLY:N	1:A:197:ASN:OD1	2.41	0.53
1:A:270:LYS:HD3	1:A:271:LYS:H	1.74	0.53
1:A:358:PHE:CB	1:A:480:THR:CG2	2.85	0.53
1:A:608:ARG:NH1	1:A:608:ARG:HG3	2.23	0.53
1:A:1090:PHE:CA	1:A:1091:LEU:CB	2.86	0.53
1:A:205:GLU:O	1:A:209:GLU:HB2	2.08	0.53
1:A:442:ILE:O	1:A:446:GLU:HG2	2.09	0.53
2:B:15:A:HO2'	2:B:16:A:P	2.26	0.53
1:A:1017:ASN:HB3	1:A:1020:PHE:CD2	2.43	0.53
1:A:1192:MET:CE	1:A:1278:ARG:CA	2.83	0.53
1:A:25:VAL:CG1	1:A:40:ILE:HG13	2.38	0.53
1:A:536:GLU:OE2	1:A:556:VAL:CG2	2.56	0.53
1:A:84:LEU:HD13	1:A:193:PHE:CB	2.38	0.53
1:A:364:ASN:O	1:A:365:ASN:HB2	2.08	0.53
1:A:703:LEU:O	1:A:707:ILE:HG12	2.09	0.53
1:A:1236:THR:HG22	1:A:1243:PHE:O	2.09	0.53
1:A:1271:LYS:HB3	1:A:1275:GLU:HB3	1.90	0.53
1:A:84:LEU:HD12	1:A:194:LYS:HB3	1.90	0.53
1:A:235:ILE:HG23	1:A:236:ASP:N	2.24	0.53
1:A:400:ILE:HG22	1:A:439:ILE:HG23	1.89	0.53
1:A:520:THR:HG23	1:A:1189:ALA:HB1	1.89	0.52
1:A:77:ALA:HB2	1:A:201:TYR:CD2	2.45	0.52
1:A:1243:PHE:N	1:A:1243:PHE:CD1	2.75	0.52
1:A:599:ARG:HA	1:A:604:ILE:HB	1.90	0.52
1:A:1069:ASN:O	1:A:1070:PRO:C	2.47	0.52
1:A:362:ILE:HG13	1:A:367:ILE:HD13	1.87	0.52
1:A:853:ASN:HB2	1:A:882:MET:CE	2.39	0.52
2:B:50:U:C5'	2:B:50:U:H6	2.20	0.52
1:A:1009:LYS:N	1:A:1010:ILE:CB	2.72	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1246:GLU:O	1:A:1247:GLU:C	2.45	0.52
1:A:289:LEU:HD23	1:A:290:THR:O	2.08	0.52
1:A:1028:ILE:HG22	1:A:1032:ILE:HD11	1.92	0.52
1:A:1359:SER:HB3	1:A:1363:LEU:HD12	1.92	0.52
1:A:290:THR:HG22	1:A:291:VAL:N	2.25	0.52
1:A:767:ASN:N	1:A:767:ASN:OD1	2.38	0.52
1:A:78:GLY:O	1:A:85:LYS:HD3	2.09	0.52
1:A:1060:LYS:CA	1:A:1060:LYS:CE	2.85	0.52
1:A:354:ILE:O	1:A:357:PHE:HB3	2.08	0.52
1:A:404:PHE:CD2	1:A:439:ILE:HD13	2.43	0.52
1:A:454:MET:N	1:A:455:GLU:CA	2.73	0.52
1:A:454:MET:N	1:A:455:GLU:CB	2.73	0.52
1:A:372:GLU:HG3	1:A:469:SER:OG	2.10	0.52
2:B:49:C:H2'	2:B:50:U:H5'	1.91	0.52
1:A:1009:LYS:CB	1:A:1010:ILE:CA	2.88	0.52
1:A:1146:ASN:HB3	3:A:1418:HOH:O	2.09	0.52
1:A:32:ASP:CA	3:A:1417:HOH:O	2.49	0.52
1:A:610:LEU:C	1:A:612:GLY:CA	2.64	0.52
1:A:611:GLN:H	1:A:612:GLY:CA	2.17	0.52
1:A:829:THR:OG1	1:A:829:THR:O	2.27	0.52
1:A:1040:GLU:OE1	1:A:1042:LYS:HD3	2.10	0.52
1:A:359:VAL:CG1	1:A:1255:ILE:HG23	2.40	0.52
1:A:1277:ILE:HG13	1:A:1302:ARG:CB	2.40	0.52
1:A:251:SER:OG	1:A:252:ASN:N	2.41	0.52
1:A:1090:PHE:N	1:A:1091:LEU:CB	2.72	0.52
1:A:1226:PRO:CA	1:A:1238:THR:CG2	2.84	0.52
1:A:261:PHE:CA	1:A:283:LEU:HD21	2.39	0.52
1:A:337:LEU:N	1:A:337:LEU:CD2	2.73	0.52
1:A:726:ASN:HD22	1:A:726:ASN:N	2.08	0.52
1:A:881:ILE:HG22	1:A:881:ILE:O	2.09	0.52
1:A:71:PHE:HA	1:A:307:ILE:HD13	1.92	0.52
1:A:1200:HIS:ND1	1:A:1224:ALA:HB2	2.25	0.51
1:A:261:PHE:CB	1:A:283:LEU:HD21	2.41	0.51
1:A:292:GLU:OE2	1:A:292:GLU:N	2.44	0.51
1:A:25:VAL:CG1	1:A:40:ILE:CG1	2.80	0.51
1:A:547:PHE:C	1:A:594:THR:HG22	2.29	0.51
1:A:638:LEU:CD2	1:A:639:ASN:ND2	2.73	0.51
1:A:1059:TYR:N	3:A:1427:HOH:O	2.42	0.51
1:A:1118:LEU:CD1	1:A:1126:LYS:HG2	2.36	0.51
1:A:608:ARG:CG	1:A:608:ARG:NH1	2.73	0.51
1:A:669:TYR:CE2	1:A:752:GLU:HB2	2.45	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:235:ILE:HD11	1:A:294:ILE:HG23	1.91	0.51
1:A:679:GLU:HB3	1:A:782:ILE:HD11	1.92	0.51
1:A:80:ILE:CD1	1:A:200:LEU:CG	2.70	0.51
1:A:1278:ARG:HH22	1:A:1279:ASN:ND2	2.08	0.51
1:A:1090:PHE:H	1:A:1092:PHE:N	2.08	0.51
1:A:1214:LEU:CD1	1:A:1214:LEU:N	2.73	0.51
1:A:1130:ILE:HD11	1:A:1361:LEU:HG	1.91	0.51
1:A:192:ILE:CG2	1:A:245:ILE:CG1	2.89	0.51
1:A:272:SER:HB3	1:A:304:PHE:CE2	2.46	0.51
1:A:662:GLU:O	1:A:663:ASN:HB2	2.10	0.51
1:A:1146:ASN:ND2	1:A:1151:SER:OG	2.33	0.51
1:A:314:VAL:HG12	1:A:315:LYS:H	1.74	0.51
1:A:677:LEU:HD13	1:A:707:ILE:HG23	1.93	0.51
1:A:378:PHE:HA	1:A:412:PHE:HE1	1.75	0.51
1:A:417:PHE:HA	1:A:418:SER:CB	2.40	0.51
1:A:449:VAL:HG12	1:A:455:GLU:CA	2.39	0.51
1:A:1234:PHE:HE1	1:A:1235:TYR:HD2	1.57	0.51
1:A:1342:LEU:N	1:A:1342:LEU:CD1	2.73	0.51
1:A:192:ILE:HG22	1:A:245:ILE:CD1	2.39	0.51
1:A:641:ASP:HA	3:A:1403:HOH:O	1.93	0.51
1:A:802:ILE:O	1:A:802:ILE:HG22	2.10	0.51
1:A:1026:LYS:HG3	1:A:1027:GLU:N	2.26	0.50
1:A:1063:LEU:HD12	1:A:1067:ILE:HD11	1.93	0.50
1:A:1228:ARG:HA	1:A:1234:PHE:CE2	2.47	0.50
1:A:906:LYS:HZ3	1:A:1022:LYS:CB	2.24	0.50
1:A:1228:ARG:CG	1:A:1228:ARG:NH1	2.73	0.50
1:A:213:GLU:CG	1:A:216:PHE:HD2	2.24	0.50
1:A:683:LEU:HD11	1:A:793:PHE:CD2	2.46	0.50
1:A:767:ASN:HA	3:A:1407:HOH:O	2.11	0.50
2:B:14:G:C2	2:B:16:A:C4	2.99	0.50
1:A:361:ASN:HB3	1:A:367:ILE:HG12	1.92	0.50
1:A:584:ASN:HD21	1:A:588:LYS:CB	2.25	0.50
1:A:701:ILE:O	1:A:701:ILE:CG2	2.60	0.50
1:A:192:ILE:CG2	1:A:245:ILE:HD11	2.37	0.50
1:A:315:LYS:CG	1:A:316:LYS:CE	2.86	0.50
1:A:1366:TYR:CD1	1:A:1367:ASN:N	2.79	0.50
1:A:501:ASN:OD1	1:A:503:ASP:N	2.43	0.50
1:A:871:TYR:O	1:A:874:ILE:HG22	2.12	0.50
1:A:1234:PHE:HA	1:A:1237:THR:OG1	2.12	0.50
1:A:197:ASN:ND2	1:A:198:MET:N	2.60	0.50
1:A:315:LYS:HG3	1:A:316:LYS:NZ	2.27	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1130:ILE:HD11	1:A:1361:LEU:CG	2.41	0.50
1:A:1322:PHE:O	1:A:1331:LEU:HD21	2.11	0.50
1:A:664:ASN:O	1:A:665:ASN:ND2	2.44	0.50
1:A:1072:PHE:CD1	1:A:1072:PHE:C	2.85	0.50
1:A:1167:ASP:HA	1:A:1172:ASN:OD1	2.11	0.50
1:A:1290:PRO:O	1:A:1291:PHE:HB2	2.12	0.50
1:A:262:TYR:O	1:A:264:ASN:N	2.37	0.50
1:A:696:ILE:CG2	1:A:699:GLU:CB	2.86	0.50
1:A:70:GLU:OE2	1:A:70:GLU:HA	2.12	0.50
1:A:901:GLU:O	1:A:904:ILE:HB	2.12	0.50
1:A:183:LEU:HD11	1:A:255:ILE:CD1	2.41	0.49
1:A:636:LYS:HE3	1:A:887:LEU:CG	2.42	0.49
1:A:357:PHE:CD1	1:A:357:PHE:C	2.85	0.49
1:A:695:THR:HG23	1:A:696:ILE:H	1.75	0.49
1:A:675:LYS:O	1:A:678:PRO:HD2	2.12	0.49
1:A:686:ASN:CA	3:A:1423:HOH:O	2.41	0.49
1:A:1356:LYS:HG3	1:A:1357:LYS:N	2.27	0.49
1:A:270:LYS:CA	1:A:270:LYS:HE3	2.30	0.49
1:A:407:HIS:CE1	1:A:411:ASN:ND2	2.73	0.49
1:A:377:GLU:HB3	1:A:412:PHE:HZ	1.78	0.49
1:A:56:ARG:NH2	1:A:56:ARG:CG	2.73	0.49
1:A:1124:GLU:HA	1:A:1124:GLU:OE2	2.12	0.49
1:A:1253:GLU:OE1	1:A:1264:SER:HB3	2.12	0.49
1:A:237:VAL:O	1:A:240:THR:HB	2.13	0.49
1:A:249:ILE:HG13	1:A:257:GLY:CA	2.41	0.49
1:A:357:PHE:CD2	1:A:423:GLU:HB3	2.46	0.49
1:A:631:ASP:OD2	1:A:891:CYS:SG	2.70	0.49
1:A:87:LYS:CA	1:A:97:ASP:O	2.61	0.49
2:B:15:A:H4'	2:B:15:A:OP2	2.13	0.49
1:A:1090:PHE:N	1:A:1092:PHE:N	2.60	0.49
1:A:1146:ASN:HD21	1:A:1152:PHE:CA	2.25	0.49
1:A:597:ARG:NH1	1:A:1222:SER:OG	2.46	0.49
1:A:263:LEU:C	1:A:264:ASN:ND2	2.63	0.49
1:A:561:ILE:HD11	1:A:563:ASN:N	2.19	0.49
2:B:31:C:H2'	2:B:32:A:O4'	2.12	0.49
1:A:1063:LEU:C	1:A:1063:LEU:HD12	2.33	0.49
1:A:1069:ASN:O	1:A:1071:ASN:N	2.46	0.49
1:A:1079:ILE:HD13	1:A:1173:TYR:HB2	1.95	0.49
1:A:56:ARG:HH21	1:A:56:ARG:HG3	1.76	0.49
1:A:1122:SER:O	1:A:1126:LYS:HG3	2.13	0.49
1:A:192:ILE:HG21	1:A:245:ILE:HG13	1.95	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:289:LEU:HD23	1:A:289:LEU:C	2.33	0.49
1:A:1366:TYR:CE1	1:A:1367:ASN:CG	2.86	0.49
1:A:207:ILE:O	1:A:210:ASN:HB2	2.13	0.49
1:A:192:ILE:HG21	1:A:245:ILE:HG12	1.94	0.49
1:A:400:ILE:HD12	1:A:443:LEU:CD1	2.41	0.49
1:A:1168:LEU:HD12	1:A:1168:LEU:N	2.26	0.49
1:A:4:LEU:HD12	1:A:54:PHE:HZ	1.78	0.49
1:A:1009:LYS:CA	1:A:1010:ILE:CB	2.91	0.48
1:A:352:ASP:OD1	1:A:352:ASP:N	2.46	0.48
1:A:611:GLN:N	1:A:612:GLY:HA2	2.17	0.48
1:A:684:TYR:OH	1:A:693:PHE:CZ	2.63	0.48
1:A:1049:PRO:CA	1:A:1050:LYS:CB	2.90	0.48
1:A:1227:LYS:CB	1:A:1229:ASN:ND2	2.75	0.48
1:A:631:ASP:OD2	1:A:891:CYS:HB3	2.12	0.48
1:A:390:GLU:O	1:A:393:LYS:CB	2.62	0.48
1:A:534:SER:O	1:A:556:VAL:O	2.32	0.48
1:A:1366:TYR:CD1	1:A:1366:TYR:C	2.85	0.48
1:A:288:ASP:OD1	1:A:289:LEU:N	2.47	0.48
2:B:31:C:H6	2:B:31:C:P	2.36	0.48
1:A:1026:LYS:HE2	1:A:1026:LYS:HB2	1.63	0.48
1:A:1079:ILE:HG22	1:A:1083:ILE:HD11	1.94	0.48
1:A:1094:ILE:O	1:A:1098:ASN:HB2	2.12	0.48
1:A:183:LEU:HD22	1:A:253:LEU:HD11	1.95	0.48
1:A:641:ASP:CB	1:A:821:ILE:HG12	2.44	0.48
1:A:731:ILE:CG2	1:A:734:GLN:HG2	2.43	0.48
2:B:46:A:H2'	2:B:47:A:O4'	2.13	0.48
1:A:270:LYS:HD3	1:A:271:LYS:N	2.29	0.48
1:A:316:LYS:CE	1:A:316:LYS:N	2.73	0.48
1:A:532:ILE:HD12	1:A:532:ILE:O	2.13	0.48
1:A:58:TYR:O	1:A:62:LYS:HG3	2.13	0.48
1:A:608:ARG:CB	1:A:608:ARG:HH11	2.26	0.48
1:A:808:GLN:O	1:A:812:ILE:CG1	2.51	0.48
1:A:84:LEU:HG	1:A:84:LEU:O	2.13	0.48
1:A:1095:ASP:O	1:A:1099:ILE:HG13	2.13	0.48
1:A:1163:LYS:HD3	1:A:1366:TYR:CD2	2.49	0.48
1:A:19:PHE:CD1	1:A:19:PHE:N	2.82	0.48
1:A:362:ILE:HG12	1:A:367:ILE:HD12	1.93	0.48
1:A:377:GLU:OE2	1:A:417:PHE:HZ	1.97	0.48
1:A:25:VAL:HG13	1:A:42:GLU:CG	2.44	0.48
1:A:495:ILE:HD11	1:A:508:LEU:CD1	2.44	0.48
1:A:1041:ASN:N	1:A:1041:ASN:ND2	2.60	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:337:LEU:N	1:A:337:LEU:HD23	2.24	0.48
1:A:346:GLU:HB2	1:A:347:ARG:CB	2.43	0.48
1:A:641:ASP:HB2	1:A:821:ILE:HG12	1.96	0.48
1:A:84:LEU:CD1	1:A:194:LYS:HB3	2.43	0.48
2:B:14:G:C2	2:B:16:A:C2	3.02	0.48
1:A:893:THR:CB	1:A:1059:TYR:OH	2.62	0.48
1:A:1090:PHE:CB	1:A:1091:LEU:CB	2.92	0.48
1:A:1130:ILE:CD1	1:A:1361:LEU:N	2.74	0.48
1:A:1069:ASN:ND2	1:A:1178:GLU:OE2	2.47	0.48
1:A:1346:ASN:HB3	1:A:1349:LEU:HB2	1.94	0.48
1:A:668:LYS:HG2	1:A:669:TYR:N	2.29	0.48
1:A:517:GLU:HG3	1:A:858:ARG:CD	2.44	0.48
2:B:31:C:H2'	2:B:32:A:O5'	2.13	0.48
1:A:1049:PRO:HD3	1:A:1058:ILE:CD1	2.44	0.47
1:A:1234:PHE:C	1:A:1234:PHE:CD1	2.85	0.47
1:A:362:ILE:CG1	1:A:367:ILE:HD13	2.41	0.47
1:A:639:ASN:ND2	1:A:639:ASN:N	2.60	0.47
1:A:1073:ASP:OD1	1:A:1073:ASP:N	2.47	0.47
1:A:249:ILE:CG1	1:A:257:GLY:CA	2.92	0.47
1:A:213:GLU:CB	3:A:1431:HOH:O	2.61	0.47
1:A:583:ASN:N	1:A:583:ASN:OD1	2.48	0.47
1:A:622:ASN:HD21	1:A:842:ILE:HG13	1.79	0.47
1:A:668:LYS:HD3	1:A:669:TYR:CZ	2.49	0.47
1:A:664:ASN:OD1	1:A:719:LEU:HD23	2.15	0.47
1:A:610:LEU:CB	1:A:612:GLY:HA3	2.44	0.47
1:A:90:ILE:HD11	1:A:97:ASP:H	1.79	0.47
1:A:1069:ASN:O	1:A:1072:PHE:N	2.36	0.47
1:A:181:ASP:HA	1:A:182:GLU:HA	1.63	0.47
1:A:402:GLY:O	1:A:403:ILE:C	2.51	0.47
1:A:454:MET:H	1:A:455:GLU:CA	2.28	0.47
1:A:630:SER:HB2	1:A:884:LEU:CD2	2.41	0.47
1:A:785:LEU:HA	1:A:785:LEU:HD23	1.77	0.47
1:A:855:ILE:HG13	1:A:856:ARG:N	2.27	0.47
1:A:1140:PHE:C	1:A:1140:PHE:CD1	2.87	0.47
1:A:1358:VAL:O	1:A:1363:LEU:N	2.48	0.47
1:A:1367:ASN:H	1:A:1367:ASN:HD22	1.63	0.47
1:A:193:PHE:HE2	1:A:263:LEU:HD23	1.79	0.47
1:A:454:MET:CB	1:A:455:GLU:HA	2.39	0.47
1:A:53:LYS:O	1:A:57:LYS:HG2	2.14	0.47
1:A:546:PHE:O	1:A:590:THR:HG23	2.15	0.47
1:A:794:ASP:O	1:A:795:PHE:HD1	1.98	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1047:TYR:O	1:A:1058:ILE:CG1	2.52	0.47
1:A:1044:GLN:CB	1:A:1048:TYR:CE1	2.97	0.47
1:A:893:THR:CB	1:A:1059:TYR:CZ	2.98	0.47
1:A:397:ASP:CG	1:A:398:THR:H	2.04	0.47
1:A:1075:ILE:HG23	1:A:1177:ILE:CG2	2.41	0.47
1:A:1211:ILE:HG22	1:A:1211:ILE:O	2.15	0.47
1:A:1233:GLY:O	1:A:1237:THR:HG23	2.15	0.47
1:A:1341:LYS:HG3	1:A:1341:LYS:O	2.14	0.47
1:A:80:ILE:HD12	1:A:200:LEU:HG	1.89	0.47
1:A:249:ILE:CG1	1:A:257:GLY:HA2	2.44	0.47
1:A:402:GLY:O	1:A:405:LYS:N	2.48	0.47
1:A:687:ASN:ND2	1:A:689:LYS:N	2.62	0.47
1:A:90:ILE:O	1:A:90:ILE:HG13	2.14	0.47
1:A:1295:SER:N	1:A:1382:ILE:HD12	2.30	0.47
1:A:1367:ASN:C	1:A:1367:ASN:HD22	2.17	0.47
1:A:191:GLU:CG	1:A:194:LYS:HE2	2.28	0.47
1:A:19:PHE:HD1	1:A:19:PHE:H	1.62	0.47
1:A:695:THR:CG2	1:A:696:ILE:H	2.27	0.47
2:B:14:G:C5	2:B:16:A:C6	3.03	0.47
1:A:4:LEU:O	2:B:19:G:OP1	2.33	0.47
1:A:287:VAL:HG11	1:A:1129:TYR:HD2	1.79	0.46
1:A:1228:ARG:HA	1:A:1234:PHE:HD2	1.77	0.46
1:A:184:GLU:OE1	1:A:184:GLU:HA	2.15	0.46
1:A:664:ASN:OD1	1:A:719:LEU:CD2	2.64	0.46
1:A:824:LYS:O	1:A:825:THR:OG1	2.19	0.46
1:A:1157:ASN:HA	1:A:1160:SER:HB3	1.98	0.46
1:A:213:GLU:HB3	3:A:1431:HOH:O	2.14	0.46
1:A:314:VAL:CG1	1:A:315:LYS:N	2.76	0.46
1:A:26:LYS:CG	1:A:41:ASN:O	2.62	0.46
1:A:592:ILE:HG22	1:A:839:ILE:CG2	2.44	0.46
1:A:808:GLN:O	1:A:812:ILE:N	2.46	0.46
1:A:82:PHE:HB3	1:A:84:LEU:HD22	1.94	0.46
1:A:1041:ASN:O	1:A:1042:LYS:C	2.53	0.46
1:A:1060:LYS:HZ3	1:A:1060:LYS:HA	1.75	0.46
1:A:84:LEU:HD21	1:A:197:ASN:CG	2.36	0.46
1:A:585:PHE:C	1:A:585:PHE:CD1	2.89	0.46
1:A:638:LEU:HD22	1:A:639:ASN:H	1.78	0.46
1:A:677:LEU:HB3	1:A:678:PRO:HD3	1.98	0.46
1:A:693:PHE:C	1:A:694:ASP:O	2.51	0.46
1:A:874:ILE:O	1:A:878:LEU:HG	2.16	0.46
1:A:1184:ILE:HD11	1:A:1325:PHE:CZ	2.51	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1340:PHE:HD2	1:A:1349:LEU:HD21	1.80	0.46
1:A:1348:ILE:H	1:A:1348:ILE:CD1	1.94	0.46
1:A:1346:ASN:HB3	1:A:1349:LEU:HD22	1.96	0.46
1:A:355:VAL:HG21	1:A:483:HIS:CD2	2.51	0.46
1:A:377:GLU:HB3	1:A:412:PHE:CZ	2.50	0.46
1:A:532:ILE:CD1	1:A:533:PHE:CD2	2.95	0.46
1:A:505:PHE:HB3	2:B:22:C:H1'	1.96	0.46
1:A:369:GLU:HA	1:A:372:GLU:HB2	1.98	0.46
1:A:638:LEU:CD1	1:A:638:LEU:H	2.03	0.46
1:A:510:ALA:HB2	1:A:865:TRP:CE2	2.51	0.46
1:A:1063:LEU:CD2	1:A:1171:PHE:CE2	2.98	0.46
1:A:1235:TYR:CD1	1:A:1236:THR:CG2	2.99	0.46
1:A:1195:PHE:CZ	1:A:1269:ILE:HD11	2.51	0.46
1:A:378:PHE:O	3:A:1401:HOH:O	2.21	0.46
1:A:576:ASP:N	1:A:580:ASN:O	2.47	0.46
1:A:632:GLU:O	1:A:635:SER:HB3	2.16	0.46
1:A:695:THR:C	1:A:696:ILE:CG1	2.82	0.46
1:A:96:ASN:HA	1:A:97:ASP:HA	1.73	0.46
1:A:1011:LEU:C	1:A:1013:ARG:N	2.70	0.46
1:A:1015:ILE:HD12	1:A:1015:ILE:HA	1.71	0.46
1:A:317:VAL:HG21	1:A:323:GLU:N	2.31	0.46
1:A:83:LYS:CG	1:A:85:LYS:HE3	2.38	0.45
3:A:1409:HOH:O	2:B:16:A:N3	2.42	0.45
1:A:1197:ARG:CG	1:A:1197:ARG:HH11	2.28	0.45
1:A:1340:PHE:CD2	1:A:1349:LEU:HD21	2.51	0.45
1:A:442:ILE:CD1	1:A:443:LEU:N	2.79	0.45
1:A:1299:GLN:OE1	1:A:1302:ARG:HD3	2.17	0.45
1:A:574:PHE:O	1:A:582:THR:CB	2.65	0.45
1:A:631:ASP:OD2	1:A:891:CYS:CB	2.65	0.45
1:A:897:ASN:CB	1:A:1016:PHE:HZ	2.24	0.45
1:A:906:LYS:HE2	1:A:1021:LEU:C	2.37	0.45
1:A:1380:THR:O	1:A:1381:LYS:C	2.55	0.45
1:A:397:ASP:HA	1:A:443:LEU:HD11	1.98	0.45
1:A:893:THR:O	1:A:897:ASN:C	2.55	0.45
2:B:14:G:N1	2:B:16:A:C2	2.84	0.45
1:A:1050:LYS:N	1:A:1051:GLU:CA	2.72	0.45
1:A:1059:TYR:CE1	1:A:1061:LYS:HB2	2.46	0.45
1:A:1106:GLU:O	1:A:1110:ILE:HG13	2.15	0.45
1:A:1349:LEU:O	1:A:1349:LEU:HD12	2.15	0.45
1:A:345:ILE:CG1	1:A:346:GLU:N	2.78	0.45
1:A:1264:SER:O	1:A:1267:SER:HB3	2.17	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1325:PHE:O	1:A:1329:VAL:HG22	2.16	0.45
1:A:286:ASN:N	1:A:286:ASN:ND2	2.65	0.45
1:A:368:LYS:HB2	1:A:368:LYS:HE3	1.65	0.45
1:A:662:GLU:O	1:A:663:ASN:CB	2.65	0.45
1:A:897:ASN:CB	1:A:898:LEU:CA	2.94	0.45
1:A:1039:ASN:O	1:A:1040:GLU:HG2	2.17	0.45
1:A:201:TYR:CE2	1:A:205:GLU:OE2	2.70	0.45
1:A:235:ILE:CG2	1:A:236:ASP:N	2.80	0.45
1:A:284:ASN:OD1	1:A:287:VAL:N	2.44	0.45
1:A:454:MET:H	1:A:455:GLU:HA	1.82	0.45
1:A:575:ILE:HG12	1:A:579:ASN:HA	1.99	0.45
1:A:76:HIS:ND1	1:A:76:HIS:C	2.70	0.45
1:A:1076:TYR:CD1	1:A:1076:TYR:O	2.70	0.45
1:A:1291:PHE:HE1	1:A:1378:LEU:O	2.00	0.45
1:A:262:TYR:CD1	1:A:262:TYR:O	2.70	0.45
1:A:82:PHE:CD1	1:A:263:LEU:O	2.68	0.45
1:A:445:ASN:O	1:A:449:VAL:N	2.49	0.45
1:A:454:MET:CE	1:A:454:MET:C	2.86	0.45
1:A:636:LYS:HG2	1:A:636:LYS:O	2.17	0.45
1:A:1185:ASN:OD1	1:A:1284:PHE:HA	2.17	0.44
1:A:249:ILE:HA	1:A:256:LEU:HB3	1.99	0.44
1:A:491:ARG:O	1:A:494:ASP:N	2.49	0.44
1:A:851:VAL:HG13	1:A:1186:TRP:CZ3	2.53	0.44
1:A:194:LYS:HG3	1:A:195:ASN:N	2.32	0.44
1:A:259:VAL:HG23	1:A:260:LYS:N	2.33	0.44
2:B:31:C:C2'	2:B:32:A:C5'	2.88	0.44
1:A:1118:LEU:O	1:A:1121:TYR:CD1	2.70	0.44
1:A:1278:ARG:HH22	1:A:1279:ASN:HD21	1.65	0.44
1:A:380:ILE:N	1:A:380:ILE:HD12	2.16	0.44
1:A:644:PHE:O	1:A:646:ASP:N	2.46	0.44
1:A:81:LEU:C	1:A:81:LEU:CD2	2.86	0.44
1:A:613:THR:O	1:A:835:ASP:OD2	2.36	0.44
1:A:636:LYS:CE	1:A:887:LEU:CD2	2.90	0.44
1:A:96:ASN:CB	1:A:97:ASP:HA	2.45	0.44
2:B:31:C:C6	2:B:31:C:OP2	2.70	0.44
1:A:898:LEU:CD1	1:A:1059:TYR:CE2	2.94	0.44
1:A:1140:PHE:CD1	1:A:1140:PHE:O	2.70	0.44
1:A:1226:PRO:CA	1:A:1238:THR:HG21	2.46	0.44
1:A:1271:LYS:HB2	1:A:1275:GLU:HB3	1.99	0.44
1:A:1281:ILE:HD13	1:A:1303:VAL:HG11	1.99	0.44
1:A:1342:LEU:CD1	1:A:1342:LEU:H	2.31	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1048:TYR:CD1	1:A:1048:TYR:O	2.71	0.44
1:A:1049:PRO:HB3	1:A:1050:LYS:C	2.37	0.44
1:A:1236:THR:CB	1:A:1242:LYS:HG3	2.45	0.44
1:A:1271:LYS:HG3	3:A:1405:HOH:O	1.92	0.44
1:A:1354:LYS:HE3	1:A:1354:LYS:HB2	1.58	0.44
1:A:31:TYR:CE2	1:A:33:GLY:O	2.70	0.44
1:A:573:ASP:O	1:A:582:THR:CB	2.65	0.44
1:A:623:ILE:O	1:A:627:LEU:HG	2.18	0.44
1:A:638:LEU:CD2	1:A:638:LEU:C	2.85	0.44
1:A:639:ASN:H	1:A:639:ASN:ND2	2.10	0.44
1:A:729:LYS:HE3	1:A:788:ASN:OD1	2.18	0.44
1:A:839:ILE:HG13	1:A:840:ILE:N	2.32	0.44
1:A:625:GLN:HG2	1:A:845:LEU:CD1	2.47	0.44
1:A:1044:GLN:CA	1:A:1048:TYR:CE1	2.97	0.44
1:A:1111:LEU:HD22	1:A:1359:SER:CB	2.48	0.44
1:A:193:PHE:HZ	1:A:260:LYS:HA	1.82	0.44
1:A:193:PHE:O	1:A:196:ILE:HB	2.17	0.44
1:A:547:PHE:CZ	1:A:843:PHE:CZ	3.05	0.44
1:A:785:LEU:HD13	1:A:793:PHE:HZ	1.81	0.44
2:B:32:A:O5'	2:B:32:A:C8	2.70	0.44
1:A:1042:LYS:NZ	1:A:1084:LYS:O	2.40	0.44
1:A:210:ASN:ND2	1:A:228:LYS:NZ	2.66	0.44
1:A:290:THR:CG2	1:A:291:VAL:N	2.80	0.44
2:B:31:C:C6	2:B:31:C:O5'	2.70	0.44
2:B:51:C:H3'	2:B:51:C:H6	1.83	0.44
1:A:1118:LEU:CD1	1:A:1126:LYS:HD3	2.48	0.44
1:A:1338:LYS:HB2	1:A:1338:LYS:HE2	1.60	0.44
1:A:1358:VAL:O	1:A:1358:VAL:HG23	2.18	0.44
1:A:567:LYS:NZ	1:A:567:LYS:CB	2.73	0.44
1:A:268:ASP:CB	2:B:51:C:O2	2.65	0.44
1:A:1017:ASN:OD1	1:A:1018:SER:N	2.51	0.43
1:A:1118:LEU:HD13	1:A:1126:LYS:CD	2.47	0.43
1:A:1357:LYS:HB3	1:A:1362:GLU:HA	2.00	0.43
2:B:35:U:C6	2:B:35:U:C3'	3.01	0.43
1:A:1063:LEU:HB2	1:A:1171:PHE:CD2	2.53	0.43
1:A:1143:ASN:HA	1:A:1144:ILE:HA	1.59	0.43
1:A:261:PHE:CB	1:A:283:LEU:HD13	2.46	0.43
1:A:357:PHE:CE2	1:A:423:GLU:CB	3.00	0.43
1:A:371:ILE:CG2	1:A:472:ILE:HG21	2.48	0.43
1:A:581:ILE:CD1	1:A:581:ILE:C	2.87	0.43
1:A:59:ILE:HD11	1:A:330:TYR:HD2	1.82	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:641:ASP:CB	1:A:821:ILE:HD11	2.47	0.43
1:A:1076:TYR:CE1	1:A:1080:SER:HB3	2.54	0.43
1:A:1346:ASN:CG	1:A:1349:LEU:HD22	2.38	0.43
1:A:265:VAL:HA	1:A:266:GLY:HA3	1.79	0.43
1:A:1069:ASN:C	1:A:1071:ASN:N	2.69	0.43
1:A:1146:ASN:HD21	1:A:1152:PHE:HA	1.82	0.43
1:A:435:LEU:CD2	1:A:468:LEU:HD13	2.46	0.43
1:A:532:ILE:HD11	1:A:533:PHE:CZ	2.51	0.43
1:A:832:ILE:HG21	1:A:838:TYR:HB2	2.01	0.43
1:A:1126:LYS:O	1:A:1130:ILE:HB	2.18	0.43
1:A:442:ILE:HD12	1:A:443:LEU:CA	2.48	0.43
1:A:641:ASP:CB	3:A:1403:HOH:O	2.60	0.43
1:A:802:ILE:CG2	1:A:805:ILE:HB	2.47	0.43
1:A:294:ILE:O	1:A:298:VAL:HG23	2.18	0.43
1:A:400:ILE:CG2	1:A:439:ILE:HG23	2.49	0.43
1:A:69:LYS:O	1:A:73:ARG:HB2	2.18	0.43
2:B:35:U:C6	2:B:35:U:H3'	2.53	0.43
1:A:1093:ASN:O	1:A:1096:GLY:N	2.52	0.43
1:A:1250:LYS:HE3	1:A:1250:LYS:HB2	1.80	0.43
1:A:182:GLU:CD	1:A:184:GLU:HB2	2.38	0.43
1:A:436:LYS:NZ	2:B:15:A:O2'	2.35	0.43
1:A:255:ILE:O	1:A:259:VAL:HG22	2.18	0.43
1:A:278:LEU:O	1:A:282:ILE:HG13	2.18	0.43
1:A:397:ASP:O	1:A:400:ILE:HG13	2.19	0.43
1:A:429:LYS:O	1:A:433:ARG:HG3	2.19	0.43
1:A:1137:ASP:OD1	1:A:1148:ASN:CB	2.67	0.43
1:A:1243:PHE:N	1:A:1243:PHE:HD1	2.17	0.43
1:A:1251:LYS:O	1:A:1255:ILE:HG12	2.17	0.43
1:A:495:ILE:HD11	1:A:508:LEU:HD12	2.01	0.43
1:A:80:ILE:HG13	1:A:81:LEU:N	2.34	0.43
1:A:522:PHE:CD2	1:A:843:PHE:HE2	2.36	0.43
1:A:95:ASN:C	1:A:95:ASN:ND2	2.73	0.43
1:A:1276:SER:N	3:A:1413:HOH:O	2.02	0.43
1:A:1359:SER:CB	1:A:1361:LEU:HB2	2.49	0.43
1:A:222:GLU:HG2	1:A:223:GLU:N	2.33	0.43
1:A:301:GLU:OE2	1:A:301:GLU:HA	2.19	0.43
1:A:820:ARG:O	1:A:822:THR:HG23	2.19	0.43
1:A:880:GLU:O	1:A:884:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:222:GLU:H	1:A:222:GLU:CD	2.23	0.42
1:A:680:ILE:HD13	1:A:710:ASN:HB3	2.01	0.42
1:A:1090:PHE:N	1:A:1091:LEU:C	2.73	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:189:ILE:HG22	1:A:192:ILE:HD12	2.01	0.42
1:A:197:ASN:C	1:A:197:ASN:ND2	2.73	0.42
1:A:219:ARG:NH2	1:A:220:TYR:OH	2.48	0.42
1:A:683:LEU:C	1:A:683:LEU:CD1	2.85	0.42
1:A:723:LEU:HA	1:A:723:LEU:HD12	1.89	0.42
1:A:625:GLN:HG2	1:A:845:LEU:HD13	2.02	0.42
1:A:1199:MET:O	1:A:1203:VAL:HG23	2.18	0.42
1:A:1227:LYS:CB	1:A:1229:ASN:CG	2.88	0.42
1:A:20:LYS:NZ	1:A:20:LYS:CA	2.81	0.42
1:A:279:VAL:O	1:A:282:ILE:N	2.52	0.42
1:A:46:LYS:HE2	1:A:46:LYS:HA	2.00	0.42
1:A:687:ASN:C	1:A:687:ASN:ND2	2.73	0.42
1:A:695:THR:O	1:A:696:ILE:CB	2.64	0.42
1:A:1123:LYS:HD3	1:A:1123:LYS:HA	1.80	0.42
1:A:1133:LEU:HD23	1:A:1139:PHE:HE2	1.70	0.42
1:A:1208:GLU:HA	1:A:1208:GLU:OE1	2.19	0.42
1:A:191:GLU:HG2	1:A:194:LYS:HE3	1.94	0.42
1:A:25:VAL:HG21	1:A:40:ILE:HD11	2.00	0.42
1:A:640:LEU:O	1:A:643:VAL:CG2	2.64	0.42
1:A:665:ASN:ND2	1:A:665:ASN:C	2.73	0.42
1:A:691:GLU:CB	1:A:692:PRO:CD	2.97	0.42
1:A:812:ILE:O	1:A:813:ASN:CB	2.67	0.42
1:A:95:ASN:C	1:A:95:ASN:HD22	2.23	0.42
1:A:183:LEU:HD23	1:A:183:LEU:HA	1.87	0.42
1:A:250:LYS:CB	1:A:285:ILE:HG21	2.49	0.42
1:A:315:LYS:CA	1:A:316:LYS:HE2	2.49	0.42
1:A:25:VAL:CG2	1:A:40:ILE:HD11	2.49	0.42
1:A:78:GLY:O	1:A:85:LYS:CG	2.62	0.42
1:A:84:LEU:HD11	1:A:194:LYS:CB	2.48	0.42
1:A:87:LYS:CB	1:A:90:ILE:HG13	2.46	0.42
2:B:49:C:H2'	2:B:50:U:C5'	2.49	0.42
1:A:1011:LEU:C	1:A:1013:ARG:H	2.23	0.42
1:A:1049:PRO:HD3	1:A:1058:ILE:HD11	2.01	0.42
1:A:374:ILE:CD1	1:A:428:TYR:CZ	3.00	0.42
1:A:448:LYS:C	1:A:454:MET:HB2	2.39	0.42
1:A:1090:PHE:N	1:A:1091:LEU:CA	2.83	0.42
1:A:211:GLU:HG3	1:A:212:THR:H	1.85	0.42
1:A:337:LEU:H	1:A:337:LEU:CD2	2.25	0.42
1:A:1048:TYR:HD1	1:A:1048:TYR:O	2.02	0.42
1:A:236:ASP:N	1:A:236:ASP:OD1	2.53	0.42
1:A:467:ILE:O	1:A:470:GLU:HG3	2.19	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:640:LEU:C	1:A:642:VAL:N	2.72	0.42
1:A:1340:PHE:HD2	1:A:1342:LEU:CD1	2.22	0.42
1:A:1346:ASN:CB	1:A:1349:LEU:HD22	2.50	0.42
1:A:186:LYS:HA	1:A:189:ILE:CG1	2.48	0.42
1:A:4:LEU:HA	1:A:10:TRP:HE1	1.84	0.42
1:A:726:ASN:N	1:A:726:ASN:ND2	2.60	0.42
1:A:846:LEU:HA	1:A:846:LEU:HD23	1.80	0.42
1:A:1013:ARG:O	1:A:1016:PHE:HB2	2.19	0.42
1:A:1111:LEU:HD22	1:A:1359:SER:HA	2.02	0.42
1:A:204:ILE:O	1:A:208:ILE:HG13	2.19	0.42
1:A:641:ASP:HB3	3:A:1403:HOH:O	2.18	0.42
1:A:1235:TYR:CE1	1:A:1236:THR:CG2	2.98	0.41
1:A:407:HIS:ND1	1:A:407:HIS:C	2.73	0.41
1:A:514:LEU:HD23	1:A:858:ARG:HG2	2.02	0.41
1:A:1345:ASN:O	1:A:1346:ASN:C	2.58	0.41
1:A:327:ASN:N	1:A:327:ASN:OD1	2.53	0.41
1:A:383:LEU:HA	1:A:386:LYS:HB2	2.02	0.41
1:A:40:ILE:HG13	1:A:41:ASN:N	2.35	0.41
1:A:539:ASN:OD1	1:A:539:ASN:N	2.51	0.41
1:A:823:VAL:HG12	1:A:824:LYS:H	1.85	0.41
1:A:1277:ILE:HG12	1:A:1302:ARG:CZ	2.50	0.41
1:A:1070:PRO:HB2	1:A:1288:ARG:O	2.20	0.41
1:A:771:LYS:HE3	2:B:28:C:OP1	2.20	0.41
1:A:638:LEU:N	1:A:638:LEU:CD1	2.73	0.41
1:A:1342:LEU:HD12	1:A:1349:LEU:CD2	2.47	0.41
1:A:253:LEU:HB2	1:A:256:LEU:HB2	2.02	0.41
1:A:427:LEU:HD23	1:A:427:LEU:HA	1.79	0.41
1:A:464:ASN:O	1:A:467:ILE:N	2.53	0.41
1:A:76:HIS:ND1	1:A:77:ALA:O	2.54	0.41
1:A:853:ASN:HB2	1:A:882:MET:HE3	2.03	0.41
1:A:527:MET:HE2	1:A:1287:VAL:CG2	2.50	0.41
1:A:1336:LEU:HG	1:A:1352:LEU:CD2	2.50	0.41
1:A:191:GLU:HA	1:A:194:LYS:HG2	2.02	0.41
1:A:84:LEU:CD1	1:A:194:LYS:CB	2.99	0.41
2:B:15:A:C5'	2:B:15:A:C8	3.03	0.41
1:A:1093:ASN:HB2	1:A:1096:GLY:N	2.29	0.41
1:A:1286:ILE:O	1:A:1290:PRO:HG3	2.21	0.41
1:A:527:MET:CE	1:A:1287:VAL:CG2	2.99	0.41
1:A:194:LYS:HG3	1:A:195:ASN:H	1.85	0.41
1:A:262:TYR:C	1:A:264:ASN:N	2.73	0.41
1:A:371:ILE:CG2	1:A:472:ILE:CG2	2.97	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:801:ASN:ND2	1:A:805:ILE:CG1	2.84	0.41
1:A:636:LYS:CD	1:A:887:LEU:HD23	2.49	0.41
2:B:14:G:N1	2:B:16:A:N1	2.68	0.41
1:A:1069:ASN:HA	1:A:1070:PRO:HD2	1.83	0.41
1:A:1118:LEU:HD22	1:A:1118:LEU:HA	1.96	0.41
1:A:241:ASN:O	1:A:245:ILE:HG13	2.20	0.41
1:A:407:HIS:HE1	1:A:411:ASN:HD22	1.58	0.41
1:A:454:MET:C	1:A:454:MET:HE3	2.41	0.41
1:A:529:LEU:HD23	1:A:529:LEU:HA	1.95	0.41
2:B:14:G:C4	2:B:16:A:C5	3.09	0.41
1:A:1076:TYR:HD1	1:A:1076:TYR:O	2.04	0.41
1:A:1145:GLN:C	3:A:1416:HOH:O	2.58	0.41
1:A:1226:PRO:HD3	1:A:1239:ALA:HB2	2.03	0.41
1:A:1360:VAL:HG22	1:A:1360:VAL:O	2.21	0.41
1:A:436:LYS:HZ1	2:B:15:A:HO2'	1.59	0.41
1:A:532:ILE:HD11	1:A:533:PHE:CG	2.55	0.41
1:A:49:ILE:CG2	1:A:54:PHE:HB2	2.50	0.41
1:A:801:ASN:ND2	1:A:805:ILE:HG13	2.36	0.41
1:A:1089:LYS:HA	1:A:1092:PHE:CA	2.48	0.41
1:A:1191:GLN:HG2	1:A:1307:LEU:HD21	2.03	0.41
1:A:1234:PHE:HD1	1:A:1235:TYR:N	1.83	0.41
1:A:256:LEU:O	1:A:259:VAL:HG22	2.20	0.41
1:A:100:LEU:O	1:A:102:THR:HG23	2.21	0.41
1:A:1147:LYS:CB	3:A:1416:HOH:O	2.69	0.41
1:A:399:GLU:HG3	1:A:399:GLU:H	1.54	0.41
1:A:44:ASN:C	1:A:44:ASN:ND2	2.73	0.41
1:A:1039:ASN:C	1:A:1040:GLU:HG2	2.41	0.40
1:A:1063:LEU:CD1	1:A:1067:ILE:HD11	2.51	0.40
1:A:361:ASN:C	1:A:367:ILE:HG13	2.41	0.40
1:A:416:LYS:CB	3:A:1424:HOH:O	2.68	0.40
1:A:441:LYS:HD2	1:A:441:LYS:HA	1.84	0.40
1:A:454:MET:CE	1:A:455:GLU:N	2.82	0.40
2:B:16:A:H4'	2:B:17:G:OP2	2.21	0.40
1:A:1319:ALA:O	1:A:1320:SER:C	2.59	0.40
1:A:20:LYS:NZ	1:A:20:LYS:C	2.73	0.40
1:A:357:PHE:HD1	1:A:357:PHE:C	2.25	0.40
1:A:557:LEU:CD1	1:A:558:ASP:H	2.27	0.40
2:B:15:A:C4'	2:B:15:A:OP2	2.70	0.40
1:A:1192:MET:HE1	1:A:1278:ARG:CA	2.49	0.40
1:A:1213:LYS:C	1:A:1214:LEU:CD1	2.89	0.40
1:A:528:GLU:HA	1:A:528:GLU:OE1	2.20	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:596:GLU:HA	1:A:599:ARG:HG3	2.03	0.40
1:A:868:THR:OG1	1:A:870:GLU:HG3	2.21	0.40
1:A:1079:ILE:HG22	1:A:1083:ILE:CD1	2.51	0.40
1:A:210:ASN:O	1:A:211:GLU:CB	2.69	0.40
1:A:574:PHE:CD1	1:A:574:PHE:N	2.88	0.40
1:A:588:LYS:O	1:A:592:ILE:CD1	2.61	0.40
1:A:627:LEU:N	1:A:627:LEU:HD23	2.37	0.40
1:A:902:GLU:HG2	1:A:1057:TYR:CG	2.54	0.40
1:A:183:LEU:HD11	1:A:255:ILE:HG21	2.03	0.40
1:A:296:ASP:OD1	1:A:300:LYS:NZ	2.50	0.40
1:A:314:VAL:CG1	1:A:315:LYS:H	2.34	0.40
1:A:400:ILE:CD1	1:A:442:ILE:CD1	2.88	0.40
1:A:577:ASN:O	1:A:578:LYS:CB	2.68	0.40
1:A:617:TYR:C	1:A:620:VAL:HG22	2.42	0.40
1:A:93:ILE:CB	1:A:96:ASN:O	2.70	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all 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	1207/1397 (86%)	1100 (91%)	86 (7%)	21 (2%)	11 25

All (21) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	211	GLU
1	A	268	ASP
1	A	269	LYS
1	A	694	ASP
1	A	695	THR
1	A	696	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	697	GLU
1	A	698	THR
1	A	1009	LYS
1	A	1010	ILE
1	A	1011	LEU
1	A	464	ASN
1	A	605	SER
1	A	609	ASP
1	A	614	GLN
1	A	1359	SER
1	A	762	ALA
1	A	1091	LEU
1	A	1092	PHE
1	A	801	ASN
1	A	1226	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	1024/1332 (77%)	800 (78%)	224 (22%)	1 2

All (224) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	4	LEU
1	A	12	GLU
1	A	22	LYS
1	A	24	LYS
1	A	32	ASP
1	A	40	ILE
1	A	44	ASN
1	A	56	ARG
1	A	63	LYS
1	A	65	ASP
1	A	68	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	70	GLU
1	A	73	ARG
1	A	79	ASN
1	A	80	ILE
1	A	84	LEU
1	A	85	LYS
1	A	95	ASN
1	A	182	GLU
1	A	184	GLU
1	A	187	LYS
1	A	194	LYS
1	A	197	ASN
1	A	200	LEU
1	A	202	LYS
1	A	213	GLU
1	A	226	ARG
1	A	229	LEU
1	A	230	LEU
1	A	231	LYS
1	A	233	ASP
1	A	236	ASP
1	A	239	LEU
1	A	248	LYS
1	A	249	ILE
1	A	252	ASN
1	A	256	LEU
1	A	263	LEU
1	A	265	VAL
1	A	270	LYS
1	A	286	ASN
1	A	292	GLU
1	A	294	ILE
1	A	302	LEU
1	A	309	LYS
1	A	310	ARG
1	A	316	LYS
1	A	337	LEU
1	A	346	GLU
1	A	352	ASP
1	A	357	PHE
1	A	363	LYS
1	A	366	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	377	GLU
1	A	380	ILE
1	A	386	LYS
1	A	388	GLU
1	A	393	LYS
1	A	395	ASN
1	A	399	GLU
1	A	409	LYS
1	A	414	SER
1	A	418	SER
1	A	419	LYS
1	A	420	LYS
1	A	441	LYS
1	A	448	LYS
1	A	450	ARG
1	A	451	LEU
1	A	454	MET
1	A	458	GLU
1	A	468	LEU
1	A	469	SER
1	A	471	LYS
1	A	480	THR
1	A	485	MET
1	A	500	VAL
1	A	505	PHE
1	A	514	LEU
1	A	520	THR
1	A	526	ASN
1	A	527	MET
1	A	532	ILE
1	A	535	ARG
1	A	537	ASN
1	A	539	ASN
1	A	557	LEU
1	A	561	ILE
1	A	567	LYS
1	A	575	ILE
1	A	581	ILE
1	A	583	ASN
1	A	591	LYS
1	A	595	ASN
1	A	608	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	613	THR
1	A	616	ASP
1	A	622	ASN
1	A	624	ILE
1	A	625	GLN
1	A	629	ILE
1	A	630	SER
1	A	638	LEU
1	A	639	ASN
1	A	646	ASP
1	A	649	ASN
1	A	650	ILE
1	A	651	ILE
1	A	658	LYS
1	A	660	SER
1	A	662	GLU
1	A	665	ASN
1	A	668	LYS
1	A	672	SER
1	A	676	VAL
1	A	683	LEU
1	A	685	ARG
1	A	687	ASN
1	A	696	ILE
1	A	697	GLU
1	A	698	THR
1	A	723	LEU
1	A	726	ASN
1	A	730	ASN
1	A	733	LEU
1	A	736	LEU
1	A	745	GLU
1	A	746	ILE
1	A	747	ASP
1	A	754	TYR
1	A	775	LYS
1	A	794	ASP
1	A	796	SER
1	A	797	ASP
1	A	798	PHE
1	A	801	ASN
1	A	816	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	820	ARG
1	A	821	ILE
1	A	824	LYS
1	A	826	SER
1	A	827	ASP
1	A	834	ASP
1	A	839	ILE
1	A	849	ASN
1	A	855	ILE
1	A	857	ASN
1	A	858	ARG
1	A	872	GLN
1	A	889	ASN
1	A	890	GLU
1	A	898	LEU
1	A	905	GLN
1	A	909	GLU
1	A	1018	SER
1	A	1023	LYS
1	A	1025	LYS
1	A	1026	LYS
1	A	1031	LEU
1	A	1032	ILE
1	A	1037	SER
1	A	1041	ASN
1	A	1044	GLN
1	A	1048	TYR
1	A	1055	GLU
1	A	1060	LYS
1	A	1061	LYS
1	A	1063	LEU
1	A	1065	LEU
1	A	1072	PHE
1	A	1073	ASP
1	A	1076	TYR
1	A	1082	ASP
1	A	1085	MET
1	A	1087	ASP
1	A	1089	LYS
1	A	1114	LEU
1	A	1118	LEU
1	A	1119	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1123	LYS
1	A	1127	GLU
1	A	1130	ILE
1	A	1131	LYS
1	A	1132	LYS
1	A	1135	GLU
1	A	1146	ASN
1	A	1153	GLU
1	A	1167	ASP
1	A	1179	SER
1	A	1185	ASN
1	A	1212	ILE
1	A	1213	LYS
1	A	1214	LEU
1	A	1215	SER
1	A	1219	THR
1	A	1222	SER
1	A	1228	ARG
1	A	1231	SER
1	A	1232	ASP
1	A	1234	PHE
1	A	1242	LYS
1	A	1243	PHE
1	A	1244	PHE
1	A	1245	ASP
1	A	1246	GLU
1	A	1248	SER
1	A	1263	LEU
1	A	1275	GLU
1	A	1277	ILE
1	A	1278	ARG
1	A	1295	SER
1	A	1330	ASN
1	A	1337	LYS
1	A	1338	LYS
1	A	1341	LYS
1	A	1342	LEU
1	A	1348	ILE
1	A	1351	ARG
1	A	1353	MET
1	A	1356	LYS
1	A	1362	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1366	TYR
1	A	1367	ASN
1	A	1372	LYS

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (34) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	39	ASN
1	A	44	ASN
1	A	79	ASN
1	A	95	ASN
1	A	210	ASN
1	A	264	ASN
1	A	286	ASN
1	A	365	ASN
1	A	407	HIS
1	A	464	ASN
1	A	483	HIS
1	A	537	ASN
1	A	625	GLN
1	A	639	ASN
1	A	649	ASN
1	A	665	ASN
1	A	687	ASN
1	A	726	ASN
1	A	730	ASN
1	A	734	GLN
1	A	801	ASN
1	A	803	GLN
1	A	847	ASN
1	A	853	ASN
1	A	857	ASN
1	A	1041	ASN
1	A	1069	ASN
1	A	1119	ASN
1	A	1146	ASN
1	A	1157	ASN
1	A	1218	ASN
1	A	1279	ASN
1	A	1283	HIS
1	A	1367	ASN

5.3.3 RNA ⓘ

Mol	Chain	Analysed	Backbone Outliers	Pucker Outliers
2	B	38/58 (65%)	18 (47%)	6 (15%)

All (18) RNA backbone outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
2	B	3	A
2	B	8	A
2	B	9	A
2	B	14	G
2	B	15	A
2	B	16	A
2	B	21	A
2	B	22	C
2	B	23	U
2	B	29	G
2	B	30	A
2	B	31	C
2	B	32	A
2	B	35	U
2	B	36	C
2	B	49	C
2	B	50	U
2	B	51	C

All (6) RNA pucker outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
2	B	15	A
2	B	21	A
2	B	22	C
2	B	29	G
2	B	34	A
2	B	35	U

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 [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data

6.1 Protein, DNA and RNA chains

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	1215/1397 (86%)	0.16	65 (5%) 30 27	28, 69, 112, 156	0
2	B	40/58 (68%)	-0.38	1 (2%) 61 59	32, 55, 111, 123	0
All	All	1255/1455 (86%)	0.14	66 (5%) 30 27	28, 68, 112, 156	0

All (66) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	804	GLU	8.0
1	A	177	ILE	7.6
1	A	1037	SER	7.5
1	A	181	ASP	6.1
1	A	540	ASN	5.2
1	A	818	TYR	4.9
1	A	212	THR	4.7
1	A	1043	PHE	4.1
1	A	255	ILE	3.9
1	A	1359	SER	3.8
1	A	541	ASP	3.7
1	A	178	ILE	3.7
1	A	1382	ILE	3.5
1	A	796	SER	3.5
1	A	1036	GLU	3.4
1	A	1042	LYS	3.4
1	A	1055	GLU	3.2
1	A	20	LYS	3.2
1	A	1035	MET	3.2
1	A	814	ASP	3.1
1	A	1144	ILE	3.1
1	A	90	ILE	3.1
1	A	1014	ILE	3.0
1	A	1231	SER	3.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	89	GLY	3.0
1	A	179	GLU	2.9
1	A	539	ASN	2.9
1	A	850	ALA	2.9
1	A	259	VAL	2.9
1	A	579	ASN	2.9
1	A	414	SER	2.9
1	A	1092	PHE	2.9
1	A	746	ILE	2.8
1	A	555	TYR	2.8
1	A	817	THR	2.8
1	A	723	LEU	2.8
1	A	886	THR	2.7
1	A	904	ILE	2.6
1	A	1230	GLY	2.5
1	A	454	MET	2.5
1	A	91	ILE	2.5
1	A	811	ASP	2.5
1	A	906	LYS	2.5
1	A	533	PHE	2.5
1	A	232	ASP	2.5
2	B	32	A	2.5
1	A	808	GLN	2.4
1	A	581	ILE	2.4
1	A	413	ASP	2.4
1	A	1120	GLY	2.3
1	A	795	PHE	2.3
1	A	251	SER	2.2
1	A	798	PHE	2.2
1	A	631	ASP	2.2
1	A	242	PHE	2.2
1	A	813	ASN	2.2
1	A	1041	ASN	2.2
1	A	747	ASP	2.1
1	A	450	ARG	2.1
1	A	317	VAL	2.1
1	A	14	ARG	2.1
1	A	1008	SER	2.1
1	A	211	GLU	2.0
1	A	815	ASN	2.0
1	A	789	TYR	2.0
1	A	268	ASP	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](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.