



## Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Mar 20, 2024 – 02:05 AM JST

PDB ID : 6L54  
EMDB ID : EMD-0837  
Title : Structure of SMG189  
Authors : Xu, Y.; Qi, Y.  
Deposited on : 2019-10-22  
Resolution : 3.43 Å(reported)

This is a Full wwPDB EM Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/EMValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

---

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

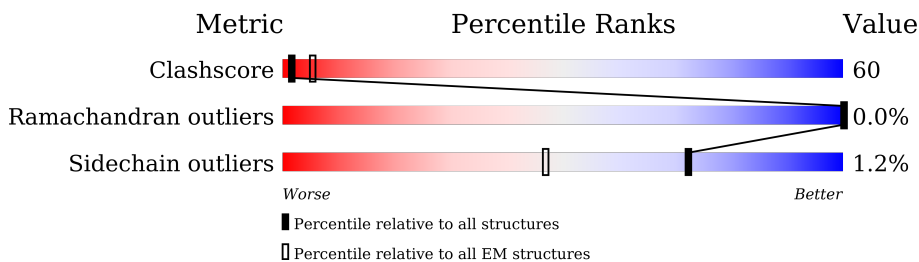
EMDB validation analysis : 0.0.1.dev70  
Mogul : 1.8.5 (274361), CSD as541be (2020)  
MolProbity : 4.02b-467  
buster-report : 1.1.7 (2018)  
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)  
MapQ : 1.9.13  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.36

# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:  
*ELECTRON MICROSCOPY*

The reported resolution of this entry is 3.43 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	EM structures (#Entries)
Clashscore	158937	4297
Ramachandran outliers	154571	4023
Sidechain outliers	154315	3826

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	3661	 5% 19% 33% 48%
2	B	991	 13% 26% 61%
3	C	520	 19% 39% 41%

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
4	GTP	C	601	-	-	X	-

## 2 Entry composition [i](#)

There are 5 unique types of molecules in this entry. The entry contains 20387 atoms, of which 857 are hydrogens and 0 are deuteriums.

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

- Molecule 1 is a protein called Serine/threonine-protein kinase SMG1.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S		
1	A	1911	13859	8742	2364	2681	72	0	0

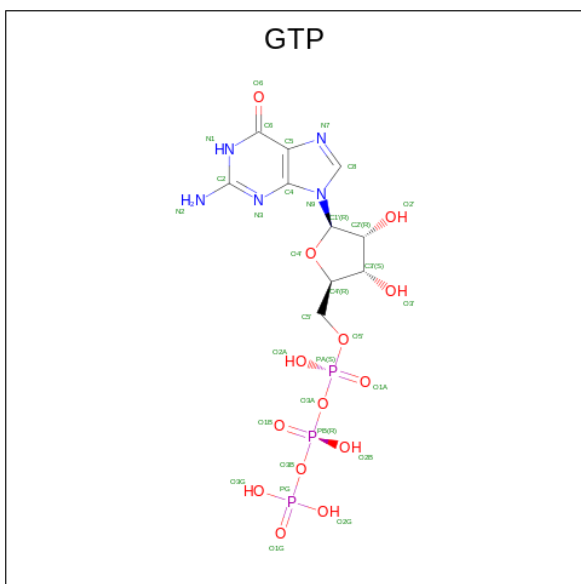
- Molecule 2 is a protein called Protein SMG8.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace	
			Total	C	H	N	O			S
2	B	389	3551	2036	393	548	554	20	0	0

- Molecule 3 is a protein called Protein SMG9.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace	
			Total	C	H	N	O			S
3	C	308	2944	1591	464	423	449	17	0	0

- Molecule 4 is GUANOSINE-5'-TRIPHOSPHATE (three-letter code: GTP) (formula:  $C_{10}H_{16}N_5O_{14}P_3$ ) (labeled as "Ligand of Interest" by depositor).



Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf
			Total	C	N	O	P	
4	C	1	32	10	5	14	3	0

- Molecule 5 is MAGNESIUM ION (three-letter code: MG) (formula: Mg) (labeled as "Ligand of Interest" by depositor).

Mol	Chain	Residues	Atoms		AltConf
			Total	Mg	
5	C	1	1	1	0

### 3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry and atom inclusion in map 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 diamond above a residue indicates a poor fit to the EM map for this residue (all-atom inclusion < 40%). Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

- Molecule 1: Serine/threonine-protein kinase SMG1





A2297	K2298	E2299	L2300	W2301	S2302	S2303	C2304	T2305	T2306	E2309	W2310	W2311	W2312	W2313	T2314	Q2315	Q2316	W2317	A2318	R2319	S2320	W2321	A2322	W2323	M2324	S2325	W2326	W2327	L2330	L2331	G2332	L2333	G2334	D2335	H2337	L2338	D2339	W2340	V2341	L2342	L2343	D2344	M2345	A2346	G2347	E2348	W2349	V2350	V2351	H2352	L2353	D2354	Y2355	M2356	W2357	L2296	C2358		
ASP	SER	TYR	GLN	THR	PRO	GLN	ASN	PRO	GLY	I2245	V2246	P2247	R2248	P2249	S2250	E2251	Y2252	Y2253	S2254	R2255	K2256	I2257	A2260	LEU	LYS	THR	VAL	GLY	LEU	SER	GLU	LEU	ASP	VAL	SER	R2272	R2273	D2274	W2275	L2276	H2278	W2279	M2280	K2281	A2282	V2283	L2284	E2285	L2287	M2288	E2289	P2292	Y2293	M2294	L2295	L2296	GLN		
T2103	N2104	T2105	E2106	T2107	A2108	L2109	V2113	SER	ALA	ALA	ARG	ASP	THR	V2119	T2120	T2121	H2122	S2123	V2124	G2125	G2126	T2127	T2128	T2129	L2130	L2131	P2132	T2133	K2134	T2135	K2136	P2137	K2138	K2139	L2140	L2141	G2144	S2145	ASP	LYS	S2149	P2151	Y2152	L2153	F2154	K2155	E2158	D2159	L2160	H2161	L2162	D2163	E2164	R2165	T2166				
THR	PRO	HIS	E2037	K2038	W2039	F2040	Q2041	D2042	N2043	Y2044	G2045	D2046	A2047	I2048	E2053	K2054	L2055	T2056	P2058	L2059	ASN	PRO	ALA	LYS	LYS	PRO	GLY	SER	S2067	W2068	I2069	P2070	F2071	K2072	E2073	L2076	S2077	L2078	K2084	R2085	A2086	S2087	I2089	L2092	E2093	E2094	S2095	P2097	W2098	L2099	A2100	M2102							
L1955	V1958	T1959	V1960	L1961	E1964	L1971	Q1972	Q1973	H1974	M1975	V1976	V1977	L1978	I1981	Q1982	L1983	L1984	E1985	D1986	E1987	V1988	L1989	R1990	V1991	GLN	ASN	ASN	ASN	THR	ARG	LYS	GLU	LYS	ILE	ALA	MET	ARG	A2020	L2021	E2022	H2023	W2024	R2025	S2026	I2027	A2030	PRO	ALA	GLU										
I1823	P1824	Q1825	L1826	F1827	H1832	P1833	E1834	V1835	Y1836	V1837	R1838	I1841	C1842	L1843	L1844	L1845	V1848	A1849	L1855	I1856	Y1858	P1859	A1860	L1861	V1862	G1863	T1864	I1865	S1866	SER	SER	GLU	GLN	ALA	GLY	ASN	LYS	PHE	THR	THR	ILE	ALA	ALA	PRO	THR	LEU	GLY	ASN	ILE	GLN									
GLU	GLU	LEU	LEU	VAL	SER	CYS	GLU	GLY	GLY	SER	PRO	ALA	ALA	GLN	ASP	SER	ASN	LYS	ASP	GLY	LEU	ASN	GLU	GLU	GLN	ALA	ALA	MET	M1926	Q1927	D1928	C1929	Y1930	I1933	V1934	D1935	S1938	S1939	P1942	T1943	M1944	V1945	L1946	Q1947	V1948	Q1949	M1950	L1951	W1952	A1953	E1954								
K1756	L1757	G1760	GLN	ILE	PRO	LEU	ASP	GLU	ASP	PRO	ARG	LEU	M1703	H1704	V1705	V1706	W1707	W1708	R1709	Q1710	K1711	I1712	S1713	S1714	C1715	PRO	TRP	L1756	P1757	L1758	L1759	ASP	GLU	ALA	T1726	E1727	G1728	V1729	L1730	K1731	V1732	V1736	V1737	D1738	F1741	L1746	S1749	A1750	P1751	F1752	T1753	F1754	L1755						
S1824	W1825	A1826	Y1827	R1828	W1829	G1830	R1831	K1832	V1833	Y1834	W1835	D1836	N1837	A1838	Q1839	G1840	L1845	R1848	E1849	V1852	V1853	Q1854	M1855	L1856	P1857	L1858	P1859	D1859	K1860	L1861	L1862	G1863	T1864	I1865	S1866	T1862	E1863	E1864	E1865	K1866	E1867	R1868	I1869	I1872	L1873	G1874	Q1875	A1876	V1877	CYS	ARG	PRO	ALA	GLY	ILE	GLN	ASP	ASP	ILE
T1488	K1489	T1493	H1499	A1500	M1501	E1502	M1503	L1504	A1508	I1509	S1510	F1511	C1512	K1513	S1514	V1515	E1518	Y1519	A1520	V1521	A1522	K1523	S1524	L1525	L1526	T1527	L1528	A1529	K1530	W1531	I1532	Q1533	A1534	E1535	W1536	E1537	E1538	I1539	SER	GLY	LEU	GLN	LYS	VAL	VAL	TTR	ARG	ALA	GLN	HIS	GLY	GLN	ASN	PHE	THR				









## 4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	
Number of particles used	420000	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	PHASE FLIPPING AND AMPLITUDE CORRECTION	Depositor
Microscope	FEI TITAN KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ( $e^-/\text{\AA}^2$ )	50	Depositor
Minimum defocus (nm)	Not provided	
Maximum defocus (nm)	Not provided	
Magnification	Not provided	
Image detector	GATAN K2 SUMMIT (4k x 4k)	Depositor
Maximum map value	48.493	Depositor
Minimum map value	-23.751	Depositor
Average map value	-0.000	Depositor
Map value standard deviation	1.000	Depositor
Recommended contour level	6.5	Depositor
Map size ( $\text{\AA}$ )	332.8, 332.8, 332.8	wwPDB
Map dimensions	320, 320, 320	wwPDB
Map angles ( $^\circ$ )	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing ( $\text{\AA}$ )	1.04, 1.04, 1.04	Depositor

## 5 Model quality [i](#)

### 5.1 Standard geometry [i](#)

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z  >5	RMSZ	# Z  >5
1	A	0.23	0/14051	0.39	1/19153 (0.0%)
2	B	0.23	0/3231	0.38	0/4367
3	C	0.24	0/2539	0.41	2/3440 (0.1%)
All	All	0.23	0/19821	0.39	3/26960 (0.0%)

There are no bond length outliers.

All (3) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed( $^{\circ}$ )	Ideal( $^{\circ}$ )
1	A	3627	PRO	N-CA-CB	5.64	110.06	103.30
3	C	325	PHE	C-N-CA	5.33	135.04	121.70
3	C	399	HIS	C-N-CA	5.19	134.67	121.70

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

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

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	13859	0	13122	1769	0
2	B	3158	393	3174	331	0
3	C	2480	464	2469	302	0
4	C	32	0	11	9	0
5	C	1	0	0	0	0

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
All	All	19530	857	18776	2308	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 60.

All (2308) 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:1502:GLU:HA	1:A:1503:MET:HB2	1.30	1.09
2:B:198:LEU:HD11	2:B:483:LYS:HE2	1.36	1.06
1:A:649:VAL:HG11	1:A:667:THR:HB	1.40	1.04
1:A:820:LEU:HD22	1:A:886:LEU:HB2	1.35	1.03
3:C:406:LEU:HB2	3:C:422:LEU:HA	1.40	1.03
1:A:276:VAL:HG11	1:A:280:LEU:HG	1.40	1.03
1:A:1419:SER:HA	1:A:1422:MET:HE2	1.38	1.03
1:A:557:ASN:HB3	1:A:612:ILE:HG21	1.41	1.02
3:C:345:PRO:HG3	3:C:486:SER:HB2	1.38	1.02
1:A:811:THR:HA	1:A:814:ARG:HG2	1.39	1.02
1:A:163:ASP:HA	1:A:170:LYS:HE3	1.42	1.01
1:A:131:LYS:HE2	1:A:174:GLU:HG2	1.43	1.01
1:A:1525:ILE:HG13	1:A:1526:LEU:HD12	1.44	1.00
1:A:108:LEU:HD13	1:A:110:VAL:HG13	1.39	1.00
1:A:1410:ILE:HD13	1:A:1424:LEU:HD23	1.41	0.99
1:A:2390:GLY:H	1:A:2394:LEU:HD13	1.25	0.99
2:B:482:ILE:HG23	2:B:485:LEU:HD12	1.40	0.99
1:A:2277:LEU:H	1:A:2278:HIS:HB3	1.27	0.98
1:A:1086:PRO:HB2	1:A:1092:ILE:HG12	1.45	0.98
1:A:2069:ILE:HG13	1:A:2070:PRO:HD3	1.44	0.98
3:C:313:THR:HG22	3:C:341:LYS:HE2	1.43	0.97
1:A:215:ALA:HA	1:A:218:LEU:HD13	1.47	0.97
1:A:1786:VAL:HG13	1:A:1823:ILE:HD11	1.47	0.97
1:A:751:LEU:HD22	3:C:174:PRO:HG3	1.43	0.97
1:A:433:LEU:HD21	1:A:471:MET:HG2	1.46	0.96
1:A:2037:GLU:HG3	1:A:2094:GLU:HA	1.47	0.96
1:A:114:THR:HG22	1:A:134:ARG:HG2	1.47	0.96
1:A:1753:THR:HG23	1:A:1788:ALA:HB1	1.49	0.94
1:A:1786:VAL:HG11	1:A:2172:ILE:HD12	1.48	0.94
1:A:2296:LEU:HD22	1:A:2383:LEU:HD13	1.48	0.94
1:A:675:HIS:HB2	1:A:676:ASP:HB2	1.50	0.94
1:A:1336:ARG:HB3	1:A:1337:LEU:HA	1.50	0.93
1:A:866:ILE:HD12	1:A:1185:TYR:H	1.32	0.92

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:408:PHE:HB3	2:B:412:GLU:HB2	1.49	0.92
2:B:139:GLN:HE21	2:B:152:LEU:HD11	1.34	0.92
3:C:183:LEU:HD11	3:C:258:PHE:HB2	1.47	0.92
2:B:528:LEU:HD21	2:B:551:LEU:HD22	1.48	0.92
1:A:1306:PRO:HG2	1:A:2306:THR:HB	1.53	0.91
3:C:295:LEU:HD12	3:C:296:PRO:HD2	1.51	0.91
1:A:2195:VAL:HA	1:A:2205:ILE:HG22	1.53	0.91
1:A:2160:LEU:HD22	1:A:2203:GLY:HA3	1.49	0.91
1:A:2254:TYR:HA	1:A:2257:ILE:HG22	1.52	0.91
1:A:1338:SER:HB3	1:A:1401:MET:HE2	1.51	0.91
1:A:1038:GLY:HA3	1:A:1102:LYS:HE3	1.53	0.91
2:B:303:ALA:HB1	3:C:248:ARG:HA	1.53	0.89
1:A:1478:LYS:HE3	1:A:1532:ILE:HG12	1.53	0.89
2:B:156:ILE:HG13	2:B:192:GLN:HB3	1.53	0.89
1:A:147:SER:H	1:A:149:LEU:HD23	1.37	0.88
1:A:769:LEU:HD13	3:C:265:ILE:HD11	1.55	0.88
1:A:2089:ILE:HG21	1:A:2129:THR:HA	1.56	0.88
1:A:1131:ALA:HB1	1:A:1206:TRP:HE1	1.38	0.88
1:A:983:LEU:HD23	1:A:992:LYS:HE2	1.54	0.87
3:C:406:LEU:HD12	3:C:422:LEU:HB3	1.55	0.87
1:A:2330:ILE:HD12	1:A:2404:ARG:HH11	1.39	0.87
1:A:1472:GLN:HG2	1:A:1525:ILE:HG23	1.57	0.86
1:A:2276:PRO:HB2	1:A:2279:VAL:H	1.39	0.86
1:A:1502:GLU:HB3	1:A:1504:LEU:HB2	1.58	0.86
3:C:209:VAL:HG12	3:C:319:ILE:HB	1.57	0.86
1:A:738:ALA:HB3	1:A:830:LEU:HD21	1.57	0.86
1:A:740:VAL:HA	1:A:751:LEU:HD12	1.57	0.86
1:A:1656:LEU:HB3	1:A:1657:LEU:HA	1.57	0.86
1:A:1521:VAL:HG22	1:A:1522:ALA:HA	1.57	0.86
1:A:1509:ILE:HD13	1:A:1598:ASP:HA	1.59	0.85
1:A:249:LYS:HE3	1:A:297:VAL:HG22	1.57	0.85
2:B:337:TYR:HE1	2:B:410:LEU:HD11	1.40	0.85
1:A:409:VAL:HG13	1:A:453:LEU:HD22	1.59	0.84
1:A:2277:LEU:N	1:A:2278:HIS:HB3	1.92	0.84
1:A:365:LEU:HD13	1:A:401:LEU:HD11	1.60	0.84
1:A:1325:LYS:HE2	1:A:1325:LYS:HA	1.60	0.84
1:A:80:ILE:HG21	1:A:106:GLN:HE22	1.43	0.84
1:A:2152:TYR:HA	1:A:2206:GLN:HA	1.60	0.84
2:B:504:LEU:HD13	2:B:550:GLN:HG2	1.59	0.83
1:A:2273:ARG:HB3	1:A:2274:ASP:HA	1.61	0.83
1:A:1938:SER:HA	1:A:1945:VAL:HG11	1.61	0.83

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:335:LEU:HB3	1:A:336:THR:HB	1.59	0.82
1:A:1856:ILE:HB	1:A:1859:PRO:HG3	1.61	0.82
1:A:618:LEU:HD11	1:A:648:ILE:HG23	1.61	0.82
1:A:2128:ILE:HG22	1:A:2140:LEU:HB3	1.57	0.82
1:A:379:ALA:HB3	1:A:382:GLU:HG2	1.61	0.82
1:A:863:SER:HB3	1:A:869:ILE:HG12	1.60	0.82
3:C:244:GLU:HA	3:C:247:GLU:HG2	1.62	0.82
1:A:2365:LEU:HA	1:A:2366:ARG:HB3	1.60	0.82
2:B:56:THR:OG1	2:B:158:ASP:OD1	1.98	0.81
1:A:199:VAL:HG23	1:A:200:LEU:HD12	1.60	0.81
1:A:736:LEU:HD11	3:C:199:LEU:HD12	1.60	0.81
1:A:98:THR:O	1:A:102:LYS:HG3	1.80	0.81
1:A:275:LEU:HB2	1:A:276:VAL:HA	1.62	0.80
1:A:895:LYS:HB3	1:A:2224:ARG:HD2	1.63	0.80
2:B:236:LYS:HD3	2:B:485:LEU:HD13	1.63	0.80
1:A:1475:VAL:HG23	1:A:1528:LEU:HD12	1.62	0.80
1:A:1818:PRO:HB2	1:A:1848:VAL:HG12	1.62	0.80
1:A:390:PRO:HB2	1:A:391:PRO:HD3	1.61	0.80
1:A:2247:PRO:CD	1:A:2248:ARG:HA	2.12	0.80
1:A:1090:GLN:NE2	1:A:1422:MET:SD	2.55	0.80
1:A:891:GLN:HE22	1:A:2298:LYS:HD2	1.46	0.80
1:A:1521:VAL:HG13	1:A:1522:ALA:HB2	1.62	0.80
1:A:638:VAL:HB	1:A:639:PHE:HA	1.64	0.80
1:A:976:ASN:HD21	1:A:1074:MET:HG2	1.47	0.79
1:A:1508:ALA:HB1	1:A:1600:ILE:HG13	1.65	0.79
1:A:1673:LEU:HD21	1:A:1708:TRP:HD1	1.47	0.79
1:A:2223:GLN:HG2	1:A:2245:ILE:HD12	1.62	0.79
1:A:1022:THR:HB	1:A:1415:VAL:H	1.46	0.79
1:A:2247:PRO:HD2	1:A:2248:ARG:HA	1.65	0.79
1:A:435:ARG:HG3	1:A:436:VAL:H	1.48	0.79
1:A:2153:LEU:HD13	1:A:2155:LYS:HE2	1.64	0.79
1:A:2391:VAL:HG12	1:A:2392:PHE:H	1.47	0.79
2:B:44:GLU:HA	2:B:444:THR:HB	1.64	0.79
1:A:141:MET:HE1	1:A:146:GLU:H	1.48	0.79
1:A:1413:GLN:H	1:A:1415:VAL:HA	1.45	0.79
1:A:651:SER:HA	1:A:1304:LEU:HD22	1.64	0.78
1:A:1071:VAL:HG11	1:A:1074:MET:HG3	1.64	0.78
1:A:2407:ARG:HB3	1:A:2410:LEU:HD13	1.65	0.78
2:B:505:PRO:O	2:B:509:SER:OG	2.00	0.78
1:A:322:LEU:H	1:A:322:LEU:HD12	1.47	0.78
1:A:1085:CYS:HB3	1:A:1086:PRO:HD2	1.63	0.78

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1090:GLN:O	1:A:1120:LYS:NZ	2.13	0.78
1:A:231:LYS:HG3	1:A:232:ILE:HD12	1.66	0.78
1:A:1103:ASN:HD22	1:A:1109:SER:HB2	1.49	0.78
1:A:2038:LYS:HG3	1:A:2095:ILE:HD12	1.64	0.78
2:B:434:ASN:O	2:B:436:GLN:NE2	2.16	0.78
1:A:1324:LEU:HD11	1:A:1339:THR:HG22	1.66	0.78
1:A:656:HIS:H	1:A:660:ILE:HD11	1.48	0.77
1:A:733:THR:OG1	1:A:822:LYS:HB2	1.83	0.77
1:A:2295:LEU:HD12	1:A:2379:ILE:HD13	1.67	0.77
1:A:2336:ARG:HH21	1:A:2340:ASN:HB3	1.48	0.77
1:A:995:TYR:HA	1:A:998:TYR:HB3	1.66	0.77
1:A:2277:LEU:HB2	1:A:2278:HIS:CB	2.14	0.77
1:A:2276:PRO:N	1:A:2277:LEU:HA	1.99	0.77
3:C:376:ARG:HG3	3:C:462:GLY:HA3	1.67	0.77
1:A:1184:ASN:ND2	1:A:1288:SER:OG	2.18	0.77
1:A:1320:VAL:O	1:A:1324:LEU:HG	1.85	0.77
1:A:361:LEU:HA	1:A:401:LEU:HD13	1.65	0.77
1:A:1502:GLU:HG3	1:A:1504:LEU:HD23	1.65	0.76
1:A:1303:ALA:O	1:A:1308:GLU:HB2	1.85	0.76
1:A:1424:LEU:HD22	1:A:1458:THR:HG22	1.68	0.76
1:A:2069:ILE:CG1	1:A:2070:PRO:HD3	2.15	0.76
3:C:417:LEU:HB2	3:C:418:PRO:HD3	1.66	0.76
3:C:410:GLN:HB2	3:C:472:LYS:HE2	1.67	0.76
1:A:1207:GLN:NE2	1:A:1288:SER:OG	2.18	0.76
3:C:485:LEU:HB3	3:C:490:LEU:HD12	1.67	0.76
1:A:115:SER:HA	1:A:155:ARG:HH12	1.51	0.76
1:A:675:HIS:HB2	1:A:676:ASP:CB	2.16	0.76
1:A:851:LYS:NZ	1:A:861:ASP:OD2	2.19	0.76
1:A:364:PHE:HD2	1:A:365:LEU:HD12	1.50	0.76
1:A:1048:VAL:HG13	1:A:1052:PHE:HE2	1.51	0.76
1:A:2191:ARG:HG3	1:A:2351:VAL:HG12	1.66	0.75
3:C:325:PHE:HE1	3:C:391:ILE:HD11	1.47	0.75
1:A:166:LEU:HG	1:A:167:ALA:H	1.52	0.75
1:A:730:LEU:HD23	1:A:730:LEU:H	1.50	0.75
1:A:1282:PRO:O	1:A:1286:GLN:NE2	2.19	0.75
1:A:675:HIS:CB	1:A:676:ASP:HB2	2.16	0.75
1:A:1960:VAL:N	1:A:1961:LEU:HA	2.02	0.75
1:A:1324:LEU:HD21	1:A:1339:THR:HB	1.67	0.75
2:B:295:SER:HB2	2:B:296:PRO:HD3	1.67	0.75
1:A:1832:HIS:O	1:A:1838:ARG:NH2	2.20	0.75
3:C:183:LEU:CD1	3:C:258:PHE:HB2	2.16	0.75

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:104:LEU:HD13	1:A:136:SER:HB2	1.69	0.74
1:A:1081:CYS:O	1:A:1085:CYS:N	2.18	0.74
1:A:1477:GLU:O	1:A:1481:PRO:HD3	1.86	0.74
2:B:512:GLN:HB2	2:B:557:LYS:HE3	1.68	0.74
1:A:72:ASP:HA	1:A:106:GLN:HG2	1.69	0.74
1:A:618:LEU:HD13	1:A:648:ILE:HD12	1.69	0.74
1:A:2037:GLU:N	1:A:2093:GLU:O	2.21	0.74
1:A:2300:LEU:HD21	1:A:2343:ILE:HD11	1.69	0.74
1:A:2247:PRO:N	1:A:2248:ARG:HA	2.01	0.74
1:A:502:ASN:O	1:A:506:LEU:HG	1.87	0.74
1:A:111:ASN:O	1:A:115:SER:OG	2.04	0.74
2:B:49:VAL:HG22	2:B:149:LEU:HB3	1.69	0.74
1:A:820:LEU:CD2	1:A:886:LEU:HB2	2.17	0.74
1:A:637:THR:N	1:A:638:VAL:HA	2.03	0.74
1:A:2164:GLU:OE1	1:A:2165:ARG:NH1	2.21	0.74
3:C:254:SER:O	3:C:271:GLN:NE2	2.20	0.74
2:B:527:GLN:HE22	2:B:554:ASP:HB3	1.52	0.74
1:A:895:LYS:HE3	1:A:2228:LEU:HD12	1.70	0.74
1:A:1346:LEU:HD13	1:A:1349:LEU:HD11	1.70	0.74
1:A:1842:CYS:HA	1:A:1933:ILE:HD11	1.70	0.74
1:A:237:PHE:HA	1:A:240:PHE:HB2	1.68	0.73
1:A:411:SER:OG	1:A:435:ARG:N	2.19	0.73
1:A:1086:PRO:HA	1:A:1090:GLN:HB3	1.69	0.73
3:C:216:GLY:HA3	4:C:601:GTP:HN22	1.53	0.73
1:A:1586:SER:CB	1:A:1590:VAL:HB	2.18	0.73
2:B:63:GLU:O	2:B:67:LEU:HG	1.88	0.73
2:B:312:PHE:HB3	2:B:318:LEU:HG	1.70	0.73
1:A:2207:TRP:CD1	1:A:2208:VAL:HG12	2.23	0.73
2:B:190:LYS:HG2	2:B:194:LYS:HE3	1.71	0.73
3:C:229:PRO:HG2	3:C:467:GLN:HG3	1.71	0.73
1:A:770:VAL:O	1:A:771:GLU:HG3	1.87	0.73
1:A:1343:SER:HA	1:A:1344:GLN:CB	2.17	0.73
1:A:1462:LEU:O	1:A:1466:PHE:N	2.22	0.73
1:A:987:LEU:HG	1:A:988:GLU:H	1.53	0.73
1:A:1586:SER:HB2	1:A:1590:VAL:HB	1.71	0.73
1:A:1790:LEU:HD21	1:A:1823:ILE:HD12	1.70	0.73
1:A:432:VAL:HG13	1:A:433:LEU:HD12	1.71	0.73
3:C:211:GLY:HA3	3:C:215:THR:HG21	1.71	0.73
1:A:1650:LYS:HE3	1:A:1654:GLN:HE21	1.54	0.72
1:A:300:ILE:HG23	1:A:302:LEU:HG	1.71	0.72
1:A:432:VAL:HG13	1:A:433:LEU:CD1	2.20	0.72

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:893:LEU:HA	1:A:911:VAL:HG22	1.71	0.72
1:A:2245:ILE:N	1:A:2246:VAL:HA	2.04	0.72
2:B:301:GLN:HG2	2:B:336:VAL:HG23	1.71	0.72
2:B:64:LYS:NZ	2:B:153:LEU:O	2.20	0.72
1:A:192:ILE:O	1:A:196:VAL:HG23	1.89	0.72
1:A:1818:PRO:CB	1:A:1848:VAL:HG12	2.19	0.72
1:A:100:GLY:HA2	1:A:133:MET:CE	2.20	0.72
1:A:2332:GLY:HA3	1:A:2360:GLU:H	1.54	0.72
2:B:136:SER:HB2	2:B:153:LEU:HD11	1.71	0.72
1:A:2185:THR:HB	1:A:2186:PRO:HD3	1.71	0.72
1:A:1412:GLU:O	1:A:1416:PRO:HD2	1.89	0.72
3:C:403:LYS:HB3	3:C:421:PHE:HB2	1.72	0.72
1:A:649:VAL:O	1:A:653:LEU:HG	1.90	0.71
1:A:1346:LEU:HB2	1:A:1349:LEU:HD13	1.71	0.71
1:A:858:HIS:HB2	1:A:859:PRO:HD2	1.73	0.71
1:A:1410:ILE:HD13	1:A:1424:LEU:CD2	2.17	0.71
1:A:346:LEU:HA	1:A:349:PHE:HD1	1.55	0.71
1:A:1407:LEU:HD11	1:A:1427:THR:HG21	1.72	0.71
1:A:432:VAL:HG11	1:A:479:ILE:HD11	1.70	0.71
1:A:503:LEU:O	1:A:507:ILE:HG12	1.91	0.71
1:A:1502:GLU:OE1	1:A:1502:GLU:N	2.23	0.71
1:A:1352:LEU:HD12	1:A:1353:GLN:HA	1.72	0.71
1:A:1657:LEU:HD12	1:A:1658:PRO:N	2.06	0.71
2:B:63:GLU:OE1	2:B:63:GLU:N	2.23	0.71
1:A:552:VAL:HG22	1:A:556:LYS:HE2	1.71	0.71
1:A:769:LEU:HD22	3:C:263:GLU:HB3	1.72	0.71
1:A:1502:GLU:HB3	1:A:1504:LEU:N	2.06	0.71
1:A:2276:PRO:CD	1:A:2277:LEU:HA	2.20	0.71
3:C:362:GLU:OE1	3:C:364:TYR:OH	2.06	0.71
1:A:174:GLU:OE1	1:A:174:GLU:N	2.24	0.71
1:A:346:LEU:HD21	1:A:375:LEU:HD12	1.73	0.71
2:B:267:PHE:HD2	2:B:308:ILE:HD13	1.55	0.71
1:A:1030:ILE:O	1:A:1034:ILE:HG13	1.90	0.71
2:B:162:LEU:HD22	3:C:390:MET:HE3	1.72	0.71
2:B:307:GLN:HE22	3:C:249:GLY:HA3	1.55	0.71
3:C:257:ASP:HB2	3:C:269:ASP:OD1	1.89	0.71
1:A:380:SER:HA	2:B:350:MET:HE1	1.72	0.70
1:A:858:HIS:HD2	1:A:860:GLN:HB2	1.57	0.70
1:A:2247:PRO:HD2	1:A:2249:PRO:HD3	1.71	0.70
3:C:213:GLN:OE1	3:C:251:ASN:N	2.24	0.70
2:B:184:GLU:OE1	2:B:184:GLU:N	2.25	0.70

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:281:GLN:OE1	1:A:281:GLN:N	2.24	0.70
1:A:504:LEU:HD22	2:B:359:CYS:SG	2.32	0.70
1:A:2365:LEU:HA	1:A:2366:ARG:CB	2.21	0.70
2:B:211:LEU:HD23	2:B:266:LEU:HB2	1.73	0.70
1:A:154:ARG:O	1:A:157:THR:OG1	2.05	0.70
1:A:675:HIS:H	1:A:676:ASP:HB2	1.56	0.70
1:A:897:ASP:OD1	1:A:2224:ARG:NH2	2.25	0.70
1:A:1816:THR:OG1	1:A:1817:ALA:HA	1.92	0.70
1:A:2223:GLN:HG2	1:A:2245:ILE:HG23	1.74	0.70
1:A:1511:PHE:O	1:A:1514:SER:OG	2.02	0.70
1:A:254:CYS:O	1:A:258:LYS:HG2	1.92	0.70
1:A:731:LEU:HD23	1:A:731:LEU:H	1.55	0.70
1:A:990:LEU:H	1:A:990:LEU:HD12	1.57	0.70
1:A:1324:LEU:CD2	1:A:1339:THR:HB	2.21	0.70
1:A:1338:SER:H	1:A:1339:THR:HA	1.53	0.70
1:A:557:ASN:HB3	1:A:612:ILE:CG2	2.20	0.70
1:A:1293:LEU:HD13	1:A:1322:LYS:HD2	1.72	0.70
1:A:1410:ILE:HG21	1:A:1424:LEU:HD21	1.73	0.70
2:B:234:ARG:HH12	2:B:238:LEU:HD13	1.56	0.70
2:B:267:PHE:CD2	2:B:308:ILE:HD13	2.27	0.70
1:A:571:GLU:HG2	3:C:457:LEU:HD21	1.73	0.69
1:A:2186:PRO:O	1:A:2319:ARG:HG2	1.90	0.69
2:B:49:VAL:HG21	2:B:448:TRP:CE2	2.26	0.69
2:B:155:SER:HB2	2:B:196:GLN:HG3	1.72	0.69
1:A:454:THR:HB	1:A:501:LEU:CD1	2.23	0.69
1:A:742:MET:O	1:A:746:GLU:HG3	1.93	0.69
2:B:137:LEU:N	2:B:154:THR:OG1	2.25	0.69
3:C:240:ALA:O	3:C:252:GLN:NE2	2.24	0.69
1:A:510:GLN:HG2	1:A:579:LEU:HD12	1.74	0.69
3:C:391:ILE:HD12	3:C:421:PHE:HZ	1.56	0.69
1:A:768:THR:O	3:C:479:SER:OG	2.11	0.69
1:A:2388:VAL:HA	1:A:2393:ARG:HD3	1.74	0.69
1:A:104:LEU:HD13	1:A:136:SER:CB	2.22	0.69
1:A:976:ASN:HD22	1:A:1077:VAL:HG21	1.58	0.69
1:A:1413:GLN:N	1:A:1415:VAL:HA	2.07	0.69
1:A:2342:LEU:HB2	1:A:2351:VAL:CG2	2.23	0.69
1:A:1334:PRO:O	1:A:1396:ALA:N	2.25	0.69
1:A:1650:LYS:O	1:A:1654:GLN:HG3	1.92	0.69
1:A:2274:ASP:O	1:A:2276:PRO:HD3	1.93	0.69
1:A:84:GLU:OE1	1:A:84:GLU:N	2.24	0.69
1:A:199:VAL:HG11	1:A:263:VAL:HG22	1.74	0.69

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:248:VAL:O	1:A:253:LEU:HD12	1.93	0.69
1:A:1591:HIS:HB2	1:A:1599:PHE:CZ	2.27	0.69
3:C:241:GLN:HB3	3:C:245:MET:HG3	1.75	0.69
3:C:241:GLN:NE2	4:C:601:GTP:O1G	2.26	0.69
1:A:990:LEU:HD23	1:A:2395:SER:HB2	1.73	0.69
1:A:2365:LEU:CA	1:A:2366:ARG:HB3	2.23	0.69
2:B:245:ILE:O	2:B:255:LYS:NZ	2.26	0.69
1:A:1637:ALA:HB1	1:A:1675:GLN:CB	2.24	0.68
1:A:346:LEU:HB2	1:A:385:ASP:OD2	1.94	0.68
1:A:559:PRO:O	1:A:561:LEU:HG	1.94	0.68
2:B:495:PHE:O	2:B:499:ARG:HG2	1.93	0.68
3:C:229:PRO:CG	3:C:467:GLN:HG3	2.23	0.68
1:A:350:TRP:CE3	1:A:392:SER:HB3	2.28	0.68
1:A:1942:PRO:HA	1:A:1945:VAL:HG22	1.75	0.68
1:A:2153:LEU:HD23	1:A:2207:TRP:HA	1.75	0.68
3:C:202:THR:HB	3:C:489:ILE:HD11	1.73	0.68
1:A:1665:GLU:HG3	1:A:1668:ARG:HH21	1.57	0.68
2:B:337:TYR:CE1	2:B:410:LEU:HD11	2.28	0.68
1:A:458:GLU:HG2	1:A:501:LEU:HD22	1.75	0.68
1:A:2171:SER:HA	1:A:2192:HIS:HE1	1.57	0.68
1:A:2335:ASP:O	1:A:2340:ASN:ND2	2.22	0.68
1:A:295:LYS:HD2	1:A:297:VAL:HG21	1.76	0.68
1:A:820:LEU:HD11	1:A:882:TRP:HA	1.74	0.68
1:A:1032:LEU:HA	1:A:1035:MET:HE2	1.75	0.68
1:A:1538:GLU:OE1	1:A:1538:GLU:N	2.27	0.68
1:A:305:ARG:HG2	1:A:332:LYS:HD3	1.76	0.68
1:A:722:ASN:HB2	1:A:2305:THR:HG21	1.74	0.68
1:A:2276:PRO:HD2	1:A:2277:LEU:HA	1.76	0.68
1:A:183:LEU:HD23	1:A:183:LEU:H	1.59	0.68
1:A:1074:MET:O	1:A:1078:GLU:HG2	1.93	0.68
1:A:1124:GLU:OE1	1:A:1124:GLU:N	2.27	0.68
1:A:2277:LEU:HB2	1:A:2278:HIS:HB2	1.75	0.68
1:A:259:ALA:O	1:A:263:VAL:HG23	1.93	0.67
1:A:983:LEU:CD2	1:A:992:LYS:HE2	2.24	0.67
1:A:1938:SER:HB2	1:A:1945:VAL:HG21	1.76	0.67
3:C:485:LEU:HD22	3:C:490:LEU:HB2	1.76	0.67
1:A:648:ILE:HD13	1:A:714:LEU:HG	1.75	0.67
1:A:1017:TYR:HB3	1:A:1026:TRP:CB	2.23	0.67
1:A:2326:MET:SD	1:A:2401:HIS:NE2	2.67	0.67
2:B:210:LEU:HB2	2:B:265:LEU:HD23	1.77	0.67
1:A:740:VAL:HG21	1:A:752:PHE:CE2	2.29	0.67

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:135:LYS:HZ3	1:A:177:GLN:HB2	1.59	0.67
1:A:869:ILE:HB	1:A:1295:ARG:HH12	1.59	0.67
1:A:1844:LEU:O	1:A:1848:VAL:HG13	1.93	0.67
1:A:511:ILE:HD11	1:A:576:LEU:HD11	1.77	0.67
3:C:307:ILE:O	3:C:311:LEU:HD23	1.94	0.67
1:A:2245:ILE:HB	1:A:2246:VAL:C	2.15	0.67
1:A:2254:TYR:HA	1:A:2257:ILE:CG2	2.24	0.67
2:B:212:LEU:HD12	2:B:267:PHE:CE1	2.30	0.67
3:C:184:VAL:CG1	3:C:188:MET:HA	2.24	0.67
3:C:268:LEU:HD12	3:C:315:CYS:SG	2.35	0.67
1:A:637:THR:HB	1:A:638:VAL:O	1.95	0.67
1:A:1085:CYS:HB3	1:A:1086:PRO:CD	2.25	0.67
1:A:100:GLY:HA2	1:A:133:MET:HE3	1.76	0.67
1:A:421:GLY:O	1:A:425:THR:N	2.26	0.67
1:A:767:ASN:ND2	1:A:806:LEU:HD22	2.10	0.67
2:B:203:LEU:O	2:B:207:CYS:HB2	1.95	0.67
1:A:645:ASN:HB3	1:A:666:TYR:HE2	1.60	0.67
1:A:1018:THR:HG21	1:A:1084:HIS:NE2	2.10	0.67
1:A:1100:VAL:O	1:A:1104:LEU:HG	1.95	0.67
1:A:1703:MET:O	1:A:1707:ILE:HG13	1.95	0.67
1:A:2092:LEU:HB2	1:A:2100:ALA:HB2	1.76	0.67
3:C:260:ILE:HG12	3:C:266:VAL:HG22	1.75	0.67
1:A:239:LYS:NZ	1:A:256:THR:OG1	2.28	0.66
1:A:356:PHE:CD2	1:A:360:LEU:HG	2.30	0.66
1:A:1086:PRO:HB2	1:A:1092:ILE:CG1	2.24	0.66
3:C:256:ILE:HG12	3:C:270:THR:HG22	1.76	0.66
1:A:2139:LYS:HA	1:A:2152:TYR:O	1.95	0.66
1:A:2277:LEU:HB2	1:A:2278:HIS:HB3	1.75	0.66
2:B:52:ILE:HG22	2:B:64:LYS:HG2	1.76	0.66
1:A:992:LYS:HB2	1:A:1016:PHE:CB	2.26	0.66
2:B:329:VAL:HB	2:B:330:PRO:HD3	1.78	0.66
1:A:131:LYS:HE2	1:A:174:GLU:CG	2.24	0.66
1:A:651:SER:HA	1:A:1304:LEU:CD2	2.24	0.66
1:A:2299:GLU:HG3	1:A:2345:MET:CE	2.25	0.66
3:C:311:LEU:HD13	3:C:315:CYS:SG	2.35	0.66
3:C:485:LEU:CB	3:C:490:LEU:HD12	2.25	0.66
1:A:376:SER:HB3	1:A:448:PHE:CE1	2.31	0.66
1:A:403:ARG:HH11	1:A:470:SER:HA	1.60	0.66
1:A:419:ILE:HG21	1:A:442:ALA:H	1.61	0.66
1:A:1412:GLU:HA	1:A:1413:GLN:C	2.16	0.66
1:A:636:PRO:CB	1:A:638:VAL:HG22	2.26	0.66

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2169:PHE:HA	1:A:2414:LEU:HD21	1.78	0.66
2:B:303:ALA:O	2:B:307:GLN:HG3	1.95	0.66
2:B:491:ILE:HD13	3:C:519:LEU:HD23	1.76	0.66
1:A:454:THR:HB	1:A:501:LEU:HD11	1.78	0.66
1:A:503:LEU:HD13	1:A:572:MET:HG3	1.77	0.66
1:A:1757:LEU:HB3	1:A:1816:THR:CG2	2.26	0.66
2:B:237:VAL:HG13	2:B:479:LEU:HG	1.78	0.66
1:A:320:ASP:HB3	1:A:322:LEU:CD1	2.26	0.66
1:A:497:ILE:HG13	2:B:355:LEU:HD11	1.77	0.66
1:A:581:HIS:NE2	1:A:636:PRO:HA	2.10	0.66
1:A:858:HIS:CD2	1:A:860:GLN:HB2	2.31	0.66
1:A:1086:PRO:CA	1:A:1090:GLN:HB3	2.24	0.66
1:A:114:THR:O	1:A:134:ARG:NH2	2.16	0.66
1:A:131:LYS:CE	1:A:174:GLU:HG2	2.25	0.66
1:A:384:VAL:O	1:A:388:VAL:HG23	1.96	0.66
1:A:488:ASN:O	1:A:492:CYS:N	2.19	0.66
1:A:1459:ALA:O	1:A:1463:VAL:HG23	1.96	0.66
1:A:2045:GLY:HA2	1:A:2078:LEU:HD11	1.76	0.66
1:A:39:PRO:O	1:A:43:LYS:HG3	1.96	0.66
1:A:386:GLU:C	1:A:389:PRO:HD2	2.16	0.66
1:A:668:LEU:HD21	1:A:1319:ASN:ND2	2.11	0.66
1:A:1502:GLU:CA	1:A:1503:MET:HB2	2.17	0.66
1:A:826:LEU:HD22	1:A:909:ASP:OD2	1.96	0.65
3:C:406:LEU:HG	3:C:422:LEU:HD22	1.77	0.65
1:A:108:LEU:HD12	1:A:109:ARG:N	2.12	0.65
1:A:1124:GLU:HG2	1:A:1212:ASP:HB3	1.78	0.65
3:C:213:GLN:NE2	3:C:275:SER:HB2	2.12	0.65
1:A:1757:LEU:HB3	1:A:1816:THR:HG22	1.77	0.65
1:A:2340:ASN:HA	1:A:2353:ILE:CG1	2.25	0.65
1:A:738:ALA:HB1	1:A:830:LEU:HD11	1.78	0.65
1:A:820:LEU:O	1:A:824:ILE:HG12	1.96	0.65
1:A:1139:ILE:HD13	1:A:1207:GLN:HE21	1.61	0.65
2:B:420:LEU:HD23	2:B:425:LYS:HD2	1.77	0.65
2:B:507:ALA:HB1	2:B:534:VAL:HG13	1.79	0.65
3:C:263:GLU:OE1	3:C:263:GLU:N	2.30	0.65
1:A:471:MET:HA	1:A:471:MET:HE3	1.78	0.65
1:A:1115:GLU:OE1	1:A:1115:GLU:N	2.30	0.65
1:A:2188:PHE:CE1	1:A:2319:ARG:HD2	2.31	0.65
2:B:43:ARG:O	2:B:445:TYR:HB3	1.96	0.65
2:B:55:LYS:HG2	2:B:157:CYS:HB3	1.79	0.65
1:A:415:ARG:O	1:A:419:ILE:HG13	1.96	0.65

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:673:THR:HG21	1:A:1342:VAL:O	1.97	0.65
1:A:2380:GLU:HA	1:A:2383:LEU:HG	1.77	0.65
2:B:303:ALA:CB	3:C:248:ARG:HA	2.26	0.65
1:A:104:LEU:HD21	1:A:133:MET:HA	1.79	0.65
1:A:2246:VAL:HB	1:A:2247:PRO:C	2.17	0.65
1:A:2332:GLY:HA3	1:A:2360:GLU:N	2.12	0.65
1:A:463:LEU:HG	1:A:508:VAL:HB	1.77	0.65
1:A:552:VAL:HG22	1:A:556:LYS:CE	2.26	0.65
1:A:813:ILE:HD12	1:A:1306:PRO:HB2	1.77	0.65
1:A:1289:ILE:HG21	1:A:1326:GLN:HB3	1.78	0.65
1:A:1521:VAL:CG2	1:A:1522:ALA:HA	2.27	0.65
1:A:2183:GLN:HA	1:A:2184:GLU:C	2.18	0.65
3:C:325:PHE:CE2	3:C:387:MET:HG2	2.32	0.65
1:A:247:GLU:H	1:A:253:LEU:HD11	1.60	0.65
1:A:1403:GLN:O	1:A:1407:LEU:HD13	1.97	0.65
1:A:2300:LEU:HD23	1:A:2345:MET:CE	2.26	0.65
2:B:508:HIS:NE2	2:B:550:GLN:OE1	2.29	0.65
1:A:653:LEU:HD22	1:A:664:VAL:HG22	1.78	0.65
1:A:2342:LEU:HD11	1:A:2353:ILE:HD11	1.79	0.65
3:C:295:LEU:CD1	3:C:296:PRO:HD2	2.27	0.65
1:A:1346:LEU:HD22	1:A:1349:LEU:HD11	1.79	0.64
1:A:2196:THR:OG1	1:A:2204:LEU:O	2.06	0.64
2:B:159:ASN:ND2	3:C:325:PHE:O	2.30	0.64
3:C:205:LEU:HB2	3:C:482:ARG:HH12	1.62	0.64
1:A:636:PRO:HB2	1:A:638:VAL:HG22	1.79	0.64
1:A:736:LEU:HD11	3:C:199:LEU:CD1	2.25	0.64
1:A:1586:SER:OG	1:A:1590:VAL:HB	1.97	0.64
1:A:2299:GLU:HG3	1:A:2345:MET:HE1	1.78	0.64
2:B:211:LEU:CD2	2:B:266:LEU:HB2	2.28	0.64
1:A:174:GLU:O	1:A:178:GLN:NE2	2.30	0.64
1:A:746:GLU:OE1	1:A:747:THR:HG23	1.97	0.64
1:A:1027:LEU:HD13	1:A:1084:HIS:HB2	1.80	0.64
1:A:472:THR:O	1:A:475:CYS:N	2.28	0.64
1:A:2295:LEU:HD12	1:A:2379:ILE:CD1	2.27	0.64
2:B:347:PRO:HB3	3:C:377:GLU:OE2	1.97	0.64
3:C:228:THR:HB	3:C:229:PRO:HD2	1.78	0.64
1:A:506:LEU:HB3	1:A:510:GLN:OE1	1.97	0.64
1:A:1022:THR:HB	1:A:1415:VAL:N	2.11	0.64
1:A:1114:ALA:HA	1:A:1117:ARG:HE	1.62	0.64
1:A:2128:ILE:HA	1:A:2139:LYS:O	1.97	0.64
1:A:2131:LEU:HD21	1:A:2139:LYS:H	1.63	0.64

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:167:ALA:O	1:A:168:THR:OG1	2.12	0.64
1:A:1592:ILE:HB	1:A:1599:PHE:HE2	1.62	0.64
1:A:2367:VAL:HG13	1:A:2368:PRO:HD2	1.79	0.64
3:C:323:ASP:OD1	3:C:373:LYS:HD2	1.98	0.64
1:A:1930:TYR:O	1:A:1934:VAL:HG23	1.98	0.64
2:B:519:TYR:CE2	2:B:521:MET:HB2	2.33	0.64
2:B:500:CYS:HB3	2:B:546:LYS:HG3	1.79	0.64
3:C:327:ASP:OD1	3:C:329:SER:OG	2.07	0.64
1:A:1289:ILE:CG2	1:A:1326:GLN:HB3	2.27	0.64
1:A:990:LEU:HB2	1:A:2392:PHE:CD1	2.33	0.64
2:B:139:GLN:NE2	2:B:152:LEU:HD11	2.08	0.64
2:B:504:LEU:HB2	2:B:550:GLN:NE2	2.12	0.64
1:A:734:TRP:O	1:A:737:GLU:N	2.31	0.63
1:A:736:LEU:HD23	1:A:736:LEU:O	1.98	0.63
1:A:980:LEU:O	1:A:984:LEU:HD13	1.98	0.63
1:A:1054:LEU:HD13	1:A:1415:VAL:HG22	1.80	0.63
1:A:504:LEU:HD13	2:B:359:CYS:HB3	1.79	0.63
1:A:732:MET:O	1:A:733:THR:HG22	1.98	0.63
1:A:1086:PRO:HB3	1:A:1090:GLN:HB3	1.80	0.63
1:A:1673:LEU:HD23	1:A:1705:ASP:HA	1.79	0.63
1:A:153:LEU:CD1	1:A:156:ILE:HD12	2.29	0.63
1:A:822:LYS:O	1:A:825:PRO:HD2	1.97	0.63
2:B:220:ASP:OD2	2:B:222:THR:HB	1.97	0.63
3:C:421:PHE:CZ	3:C:423:ASP:HB2	2.33	0.63
1:A:42:LEU:HB3	1:A:64:ALA:HB1	1.81	0.63
1:A:893:LEU:HD22	1:A:914:GLN:OE1	1.99	0.63
1:A:1753:THR:CG2	1:A:1788:ALA:HB1	2.25	0.63
1:A:1095:TRP:NE1	1:A:1099:ILE:HD11	2.14	0.63
2:B:238:LEU:CG	2:B:242:LYS:HE3	2.28	0.63
3:C:181:ILE:O	3:C:258:PHE:N	2.31	0.63
1:A:1038:GLY:HA3	1:A:1102:LYS:CE	2.26	0.63
1:A:1361:GLU:N	1:A:1361:GLU:OE1	2.31	0.63
3:C:208:GLY:HA3	3:C:311:LEU:HD12	1.80	0.63
1:A:766:ALA:O	1:A:770:VAL:HG23	1.98	0.63
1:A:1207:GLN:HB3	1:A:1289:ILE:HD11	1.81	0.63
1:A:1306:PRO:HG2	1:A:2306:THR:CB	2.26	0.63
1:A:2217:LEU:HD12	1:A:2218:TYR:N	2.14	0.63
1:A:1338:SER:N	1:A:1339:THR:HA	2.11	0.63
1:A:1475:VAL:HG23	1:A:1528:LEU:CD1	2.27	0.63
1:A:2215:PHE:HB3	1:A:2339:ASP:OD1	1.99	0.63
2:B:217:CYS:SG	2:B:271:LEU:HD23	2.38	0.63

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:458:VAL:O	2:B:479:LEU:HD22	1.98	0.63
1:A:249:LYS:HD3	1:A:297:VAL:HG13	1.81	0.63
1:A:447:PHE:CE1	1:A:491:THR:HG23	2.34	0.63
1:A:650:HIS:O	1:A:1304:LEU:HD22	1.99	0.63
1:A:740:VAL:HB	1:A:751:LEU:HB2	1.80	0.63
1:A:1521:VAL:HG22	1:A:1522:ALA:CA	2.28	0.63
1:A:1673:LEU:CD2	1:A:1705:ASP:HA	2.29	0.63
2:B:58:LEU:HD11	3:C:390:MET:SD	2.38	0.63
1:A:294:CYS:O	1:A:295:LYS:HD3	1.98	0.62
1:A:1186:LEU:HD13	1:A:1199:ASP:HB3	1.80	0.62
1:A:1669:ILE:O	1:A:1673:LEU:HD13	1.98	0.62
1:A:771:GLU:OE1	1:A:773:VAL:HG13	1.99	0.62
1:A:1816:THR:CB	1:A:1817:ALA:HA	2.29	0.62
1:A:2038:LYS:HG3	1:A:2095:ILE:CD1	2.29	0.62
3:C:201:GLN:OE1	3:C:264:ARG:HG3	1.99	0.62
1:A:345:SER:C	1:A:348:PRO:HD2	2.20	0.62
1:A:1073:ILE:O	1:A:1077:VAL:HG23	1.99	0.62
1:A:2040:PHE:O	1:A:2044:TYR:N	2.28	0.62
1:A:2191:ARG:CG	1:A:2351:VAL:HG12	2.29	0.62
1:A:2246:VAL:N	1:A:2247:PRO:HA	2.14	0.62
1:A:85:LYS:HD2	1:A:116:PRO:HG2	1.79	0.62
1:A:274:GLN:CB	1:A:275:LEU:HD23	2.29	0.62
1:A:280:LEU:HD23	1:A:283:ILE:HD12	1.81	0.62
1:A:769:LEU:HD22	3:C:263:GLU:CG	2.30	0.62
2:B:262:PRO:HB2	2:B:326:LEU:HD11	1.81	0.62
3:C:340:VAL:HG11	3:C:512:LEU:HD21	1.81	0.62
3:C:367:LEU:HD11	3:C:400:LEU:CD2	2.29	0.62
1:A:239:LYS:HE2	1:A:243:SER:HB3	1.82	0.62
1:A:566:LYS:HD2	1:A:625:LYS:NZ	2.14	0.62
1:A:675:HIS:N	1:A:676:ASP:HB2	2.13	0.62
1:A:1815:PRO:HB2	1:A:1819:TRP:CZ3	2.35	0.62
1:A:2020:ALA:O	1:A:2024:VAL:HG13	1.98	0.62
1:A:2037:GLU:HG3	1:A:2094:GLU:CA	2.25	0.62
1:A:2296:LEU:O	1:A:2296:LEU:HD23	1.99	0.62
2:B:162:LEU:HD22	3:C:390:MET:CE	2.29	0.62
2:B:238:LEU:HD11	2:B:242:LYS:HE3	1.82	0.62
3:C:208:GLY:HA3	3:C:311:LEU:CD1	2.29	0.62
1:A:190:ASP:HA	1:A:193:LEU:HG	1.80	0.62
1:A:893:LEU:HB3	1:A:910:ALA:O	2.00	0.62
1:A:999:GLU:OE1	1:A:999:GLU:N	2.32	0.62
1:A:1336:ARG:HB3	1:A:1337:LEU:HD23	1.81	0.62

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2304:CYS:SG	1:A:2310:TRP:HA	2.39	0.62
3:C:205:LEU:HB2	3:C:482:ARG:HH22	1.64	0.62
1:A:295:LYS:HA	1:A:296:CYS:HB3	1.79	0.62
1:A:803:ARG:NH2	1:A:805:GLN:HB3	2.14	0.62
1:A:895:LYS:CD	1:A:907:LYS:HE2	2.30	0.62
1:A:2365:LEU:HB3	1:A:2366:ARG:C	2.20	0.62
1:A:2388:VAL:HG12	1:A:2393:ARG:HD3	1.82	0.62
1:A:813:ILE:HG13	1:A:881:ASN:HD21	1.65	0.62
1:A:920:ALA:HA	1:A:923:PHE:CE2	2.35	0.62
1:A:985:GLN:OE1	1:A:985:GLN:N	2.32	0.62
1:A:1786:VAL:HG11	1:A:2172:ILE:CD1	2.26	0.62
1:A:1841:ILE:O	1:A:1845:LEU:HD23	2.00	0.62
2:B:42:TRP:HB2	2:B:45:ASP:OD2	2.00	0.62
2:B:541:GLY:HA3	3:C:339:MET:HE3	1.81	0.62
1:A:223:ALA:HB3	1:A:270:SER:HB3	1.82	0.62
1:A:388:VAL:O	1:A:391:PRO:HD2	1.99	0.62
1:A:467:LEU:O	1:A:467:LEU:HD12	2.00	0.62
1:A:553:LEU:O	1:A:557:ASN:HB2	2.00	0.62
1:A:1027:LEU:HD11	1:A:1085:CYS:SG	2.39	0.62
1:A:1192:GLU:O	1:A:1195:ILE:HG22	2.00	0.62
1:A:1300:LEU:HD21	1:A:1316:ILE:HG13	1.82	0.62
1:A:1406:LEU:O	1:A:1410:ILE:HG13	2.00	0.62
1:A:1485:ILE:HG22	1:A:1488:THR:HG22	1.80	0.62
2:B:504:LEU:HD13	2:B:550:GLN:CG	2.29	0.62
1:A:261:GLU:OE1	1:A:303:VAL:HG13	2.00	0.62
1:A:558:ILE:N	1:A:559:PRO:HD3	2.15	0.62
3:C:408:MET:HE2	3:C:408:MET:HA	1.82	0.62
3:C:410:GLN:HB2	3:C:472:LYS:CD	2.30	0.62
3:C:505:GLY:O	3:C:509:SER:HB2	2.00	0.62
1:A:337:GLN:HB2	1:A:338:GLN:CD	2.20	0.61
1:A:379:ALA:HB3	1:A:382:GLU:CG	2.30	0.61
1:A:473:ILE:HA	1:A:476:ASP:HB3	1.82	0.61
1:A:2311:TRP:O	1:A:2315:GLN:HG2	2.00	0.61
1:A:2340:ASN:HA	1:A:2353:ILE:HG12	1.82	0.61
2:B:238:LEU:HG	2:B:242:LYS:HE3	1.82	0.61
3:C:410:GLN:HB2	3:C:472:LYS:CE	2.30	0.61
1:A:135:LYS:NZ	1:A:173:LYS:O	2.32	0.61
1:A:412:ILE:HG22	1:A:453:LEU:HD11	1.82	0.61
1:A:176:ILE:HG23	1:A:177:GLN:OE1	2.01	0.61
1:A:490:GLN:HA	3:C:381:PRO:HG2	1.81	0.61
1:A:891:GLN:HB3	1:A:894:ASP:HB3	1.82	0.61

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:221:ILE:HD13	3:C:279:LEU:HD22	1.82	0.61
3:C:312:PHE:HE1	3:C:318:VAL:HG11	1.65	0.61
1:A:360:LEU:HD13	1:A:361:LEU:N	2.16	0.61
1:A:554:SER:OG	1:A:608:LYS:HG2	1.99	0.61
1:A:571:GLU:OE2	3:C:453:LEU:HB3	2.01	0.61
1:A:920:ALA:HA	1:A:923:PHE:CD2	2.36	0.61
1:A:994:MET:HA	1:A:2390:GLY:O	2.00	0.61
1:A:646:LEU:HG	1:A:674:ARG:O	2.00	0.61
1:A:852:ALA:HB3	1:A:853:PRO:HD3	1.81	0.61
1:A:898:GLN:NE2	1:A:2212:THR:OG1	2.32	0.61
1:A:1336:ARG:CB	1:A:1337:LEU:HA	2.21	0.61
1:A:2099:LEU:HD13	1:A:2102:MET:SD	2.40	0.61
2:B:419:GLU:O	2:B:423:SER:OG	2.12	0.61
1:A:131:LYS:NZ	1:A:159:GLU:HB3	2.15	0.61
1:A:618:LEU:CD1	1:A:648:ILE:HD12	2.30	0.61
1:A:720:LYS:HE3	1:A:2346:THR:HG21	1.81	0.61
1:A:897:ASP:HB2	1:A:2299:GLU:OE1	2.00	0.61
2:B:309:TYR:O	2:B:313:ARG:HG2	2.00	0.61
3:C:498:TYR:CZ	3:C:502:ILE:HD11	2.35	0.61
1:A:113:VAL:O	1:A:117:GLU:HG3	2.01	0.61
1:A:171:GLN:HG2	1:A:175:PHE:CE1	2.36	0.61
1:A:387:ASP:C	1:A:390:PRO:HD2	2.20	0.61
1:A:1086:PRO:CB	1:A:1090:GLN:HB3	2.31	0.61
1:A:1335:LEU:HD23	1:A:1335:LEU:H	1.64	0.61
1:A:1350:SER:O	1:A:1354:LEU:HB2	2.00	0.61
2:B:268:LEU:HD22	2:B:335:PHE:HB3	1.82	0.61
1:A:115:SER:HA	1:A:155:ARG:NH1	2.14	0.61
1:A:295:LYS:CA	1:A:296:CYS:HB3	2.31	0.61
1:A:2170:LEU:HD11	1:A:2355:TYR:HE2	1.65	0.61
2:B:456:TYR:O	2:B:460:ILE:N	2.31	0.61
1:A:411:SER:CB	1:A:435:ARG:H	2.13	0.61
1:A:769:LEU:CD1	3:C:265:ILE:HD11	2.30	0.61
1:A:803:ARG:HG2	1:A:804:VAL:H	1.66	0.61
1:A:1629:TRP:O	1:A:1633:VAL:HG23	2.00	0.61
1:A:1938:SER:CA	1:A:1945:VAL:HG11	2.29	0.61
1:A:2092:LEU:CB	1:A:2100:ALA:HB2	2.31	0.61
2:B:63:GLU:HG3	2:B:270:GLN:NE2	2.16	0.61
3:C:403:LYS:CB	3:C:421:PHE:HB2	2.31	0.61
1:A:275:LEU:HB2	1:A:276:VAL:CA	2.30	0.60
1:A:866:ILE:HA	1:A:1295:ARG:HH21	1.64	0.60
1:A:1071:VAL:O	1:A:1072:THR:OG1	2.16	0.60

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2055:LEU:HD13	1:A:2070:PRO:CD	2.31	0.60
2:B:497:GLU:O	2:B:501:GLN:HG2	2.01	0.60
1:A:91:ASN:OD1	1:A:92:GLY:N	2.30	0.60
1:A:251:LEU:HD23	1:A:251:LEU:H	1.65	0.60
1:A:294:CYS:O	1:A:296:CYS:HB3	2.01	0.60
1:A:1070:GLU:OE1	1:A:1070:GLU:N	2.33	0.60
1:A:2245:ILE:HB	1:A:2246:VAL:O	2.01	0.60
1:A:497:ILE:HG13	2:B:355:LEU:CD1	2.31	0.60
1:A:1468:LYS:O	1:A:1472:GLN:HG3	2.00	0.60
1:A:1502:GLU:CG	1:A:1504:LEU:HD23	2.29	0.60
1:A:1526:LEU:O	1:A:1530:LYS:HG2	2.01	0.60
1:A:1711:LEU:HD22	1:A:1712:ILE:HD12	1.83	0.60
1:A:1597:PRO:HG3	1:A:1629:TRP:CG	2.36	0.60
1:A:2125:GLY:HA3	1:A:2141:LEU:O	2.02	0.60
1:A:38:ASP:O	1:A:42:LEU:HD13	2.01	0.60
1:A:185:LEU:HD12	1:A:185:LEU:O	2.01	0.60
1:A:455:ALA:HB2	2:B:355:LEU:HD21	1.82	0.60
1:A:1589:THR:HA	1:A:1593:GLY:HA3	1.83	0.60
1:A:2280:MET:HA	1:A:2283:VAL:HG12	1.83	0.60
1:A:269:PHE:HE1	1:A:310:ILE:HG12	1.66	0.60
1:A:326:HIS:O	1:A:330:THR:N	2.29	0.60
1:A:2323:VAL:HA	1:A:2400:LEU:CD2	2.31	0.60
1:A:571:GLU:HG2	3:C:457:LEU:CD2	2.32	0.60
1:A:739:ALA:N	1:A:830:LEU:HD22	2.16	0.60
1:A:740:VAL:HG11	1:A:752:PHE:CE1	2.36	0.60
1:A:820:LEU:HD22	1:A:886:LEU:CB	2.21	0.60
2:B:202:TYR:OH	2:B:452:ALA:HB1	2.01	0.60
3:C:389:LEU:O	3:C:393:GLN:HG2	2.00	0.60
1:A:573:THR:HB	1:A:613:PHE:CZ	2.36	0.60
1:A:637:THR:HB	1:A:638:VAL:C	2.22	0.60
1:A:751:LEU:HD22	3:C:174:PRO:CG	2.27	0.60
3:C:212:LEU:HD11	3:C:327:ASP:OD2	2.02	0.60
1:A:1025:ASP:OD1	1:A:1026:TRP:N	2.35	0.60
1:A:1338:SER:HB3	1:A:1401:MET:CE	2.29	0.60
1:A:2296:LEU:HD13	1:A:2383:LEU:HD11	1.84	0.60
2:B:49:VAL:HG21	2:B:448:TRP:NE1	2.16	0.60
2:B:220:ASP:HB3	2:B:223:TYR:HD2	1.66	0.60
2:B:441:GLU:O	2:B:443:PRO:HD3	2.02	0.60
3:C:328:LEU:O	3:C:328:LEU:HD23	2.01	0.60
1:A:1816:THR:H	1:A:1817:ALA:HB2	1.67	0.59
1:A:2069:ILE:HG13	1:A:2070:PRO:CD	2.28	0.59

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:181:PRO:HG2	2:B:184:GLU:OE1	2.02	0.59
2:B:238:LEU:CD1	2:B:242:LYS:HE3	2.32	0.59
1:A:2043:ASN:O	1:A:2047:ALA:HB2	2.01	0.59
1:A:2092:LEU:O	1:A:2097:PRO:HA	2.03	0.59
1:A:2181:ASN:C	1:A:2182:ARG:HD2	2.22	0.59
1:A:2325:SER:CB	1:A:2374:ARG:HG3	2.32	0.59
3:C:216:GLY:HA2	4:C:601:GTP:PA	2.42	0.59
1:A:131:LYS:HE3	1:A:159:GLU:OE1	2.02	0.59
1:A:618:LEU:CD1	1:A:648:ILE:HG23	2.30	0.59
1:A:1074:MET:HA	1:A:1077:VAL:HB	1.83	0.59
1:A:2102:MET:HE3	1:A:2105:THR:HG21	1.84	0.59
1:A:2325:SER:OG	1:A:2374:ARG:HG3	2.02	0.59
2:B:301:GLN:O	2:B:305:GLU:HG3	2.01	0.59
2:B:503:ALA:HB2	2:B:538:HIS:CD2	2.37	0.59
1:A:241:SER:O	1:A:245:LYS:HG2	2.03	0.59
1:A:1502:GLU:HB3	1:A:1504:LEU:H	1.67	0.59
1:A:2167:MET:CE	1:A:2193:TYR:HB3	2.32	0.59
1:A:2169:PHE:O	1:A:2173:VAL:HG23	2.02	0.59
2:B:134:ASP:HB3	2:B:165:ALA:HA	1.83	0.59
2:B:220:ASP:HB3	2:B:223:TYR:CD2	2.37	0.59
2:B:546:LYS:O	2:B:550:GLN:HG3	2.01	0.59
3:C:183:LEU:O	3:C:191:CYS:N	2.34	0.59
3:C:345:PRO:CG	3:C:486:SER:HB2	2.21	0.59
1:A:112:ASN:OD1	1:A:113:VAL:N	2.35	0.59
1:A:261:GLU:HB3	1:A:303:VAL:HG22	1.85	0.59
1:A:269:PHE:CE1	1:A:310:ILE:HG12	2.38	0.59
2:B:512:GLN:CB	2:B:557:LYS:HE3	2.32	0.59
1:A:1942:PRO:O	1:A:1946:LEU:HD23	2.02	0.59
1:A:1945:VAL:O	1:A:1949:GLN:HG3	2.02	0.59
1:A:2195:VAL:CA	1:A:2205:ILE:HG22	2.31	0.59
2:B:155:SER:HB2	2:B:196:GLN:CG	2.32	0.59
3:C:410:GLN:NE2	3:C:464:PRO:HB3	2.17	0.59
1:A:511:ILE:CD1	1:A:576:LEU:HD11	2.33	0.59
1:A:1313:TRP:CB	1:A:1354:LEU:HD11	2.32	0.59
1:A:1648:ARG:HB2	1:A:1667:GLU:OE1	2.02	0.59
1:A:2420:ASP:N	1:A:2421:PRO:HD3	2.18	0.59
1:A:2421:PRO:HG2	1:A:2424:ASP:HB3	1.85	0.59
1:A:602:PHE:CB	1:A:603:ASN:HA	2.32	0.59
1:A:2089:ILE:CG1	1:A:2128:ILE:HG13	2.33	0.59
2:B:234:ARG:NH1	2:B:238:LEU:HD13	2.17	0.59
2:B:503:ALA:HB2	2:B:538:HIS:HD2	1.67	0.59

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:193:LEU:HD12	1:A:194:ALA:N	2.18	0.59
1:A:715:GLY:O	1:A:719:LYS:HG3	2.03	0.59
1:A:838:ILE:HG23	1:A:918:TRP:CE2	2.38	0.59
1:A:893:LEU:HD12	1:A:894:ASP:N	2.17	0.59
1:A:207:LEU:CB	1:A:209:GLU:HG2	2.33	0.59
1:A:772:ASP:OD2	3:C:482:ARG:HG2	2.02	0.59
1:A:939:THR:HG23	1:A:2301:TRP:HE1	1.67	0.59
1:A:2285:GLU:O	1:A:2289:GLU:HG2	2.03	0.59
1:A:2390:GLY:N	1:A:2394:LEU:HD13	2.09	0.59
1:A:207:LEU:HA	1:A:208:GLN:C	2.23	0.58
1:A:382:GLU:OE2	2:B:75:GLN:NE2	2.35	0.58
1:A:737:GLU:O	1:A:740:VAL:HG22	2.02	0.58
1:A:358:THR:O	1:A:398:LEU:HD22	2.02	0.58
1:A:360:LEU:O	1:A:401:LEU:HD22	2.04	0.58
1:A:496:TYR:CE2	3:C:460:TYR:HB2	2.37	0.58
1:A:656:HIS:N	1:A:660:ILE:HD11	2.16	0.58
1:A:719:LYS:HG2	1:A:1307:ILE:HG21	1.83	0.58
2:B:250:VAL:HB	2:B:254:TRP:CE3	2.38	0.58
2:B:296:PRO:HB3	3:C:246:LYS:HD2	1.84	0.58
1:A:720:LYS:HE3	1:A:2346:THR:CG2	2.33	0.58
1:A:1947:GLN:O	1:A:1951:LEU:HG	2.03	0.58
1:A:2276:PRO:CG	1:A:2280:MET:HG3	2.33	0.58
2:B:42:TRP:HB2	2:B:45:ASP:CG	2.24	0.58
2:B:333:GLN:N	2:B:333:GLN:OE1	2.37	0.58
3:C:408:MET:HA	3:C:408:MET:CE	2.32	0.58
1:A:148:ARG:C	1:A:153:LEU:HD22	2.23	0.58
1:A:153:LEU:HD23	1:A:187:LYS:NZ	2.17	0.58
1:A:163:ASP:HA	1:A:170:LYS:CE	2.27	0.58
1:A:275:LEU:HD13	1:A:277:MET:HG2	1.85	0.58
1:A:811:THR:CA	1:A:814:ARG:HG2	2.26	0.58
1:A:1656:LEU:C	1:A:1658:PRO:HD2	2.24	0.58
1:A:1787:MET:CB	1:A:2410:LEU:HG	2.34	0.58
3:C:298:THR:O	3:C:302:MET:HG2	2.03	0.58
3:C:407:SER:O	3:C:408:MET:HE3	2.02	0.58
3:C:476:GLN:O	3:C:480:MET:HG2	2.03	0.58
1:A:43:LYS:O	1:A:99:TYR:OH	2.13	0.58
1:A:1021:GLN:NE2	1:A:1054:LEU:HB2	2.18	0.58
2:B:157:CYS:SG	2:B:196:GLN:NE2	2.73	0.58
3:C:312:PHE:HA	3:C:365:PRO:HG3	1.83	0.58
3:C:486:SER:HB3	3:C:498:TYR:OH	2.04	0.58
1:A:82:ASN:HA	1:A:85:LYS:HE2	1.86	0.58

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:131:LYS:HE3	1:A:159:GLU:HB3	1.85	0.58
1:A:634:LEU:HD23	1:A:634:LEU:O	2.02	0.58
1:A:1514:SER:OG	1:A:1530:LYS:HE3	2.03	0.58
1:A:2042:ASP:HA	1:A:2046:ASP:HB3	1.85	0.58
1:A:2342:LEU:HB2	1:A:2351:VAL:HG22	1.85	0.58
2:B:233:LEU:HD11	2:B:486:GLU:OE2	2.02	0.58
2:B:494:LYS:HD2	3:C:518:LEU:HD22	1.86	0.58
1:A:870:LEU:CB	1:A:1298:VAL:HG11	2.33	0.58
1:A:1292:GLN:HB3	1:A:1322:LYS:HD3	1.86	0.58
1:A:1753:THR:HB	1:A:1792:LEU:HD21	1.84	0.58
1:A:1324:LEU:HD11	1:A:1339:THR:CG2	2.33	0.58
1:A:2129:THR:O	1:A:2138:LYS:HA	2.04	0.58
1:A:2366:ARG:O	1:A:2367:VAL:HG23	2.03	0.58
2:B:59:ARG:HH12	3:C:375:ARG:HG3	1.68	0.58
1:A:769:LEU:HD22	3:C:263:GLU:CB	2.33	0.58
1:A:841:ILE:HD13	1:A:882:TRP:HZ3	1.69	0.58
1:A:1509:ILE:HB	1:A:1598:ASP:CG	2.24	0.58
1:A:2168:GLN:O	1:A:2172:ILE:HG12	2.02	0.58
1:A:2216:GLY:O	1:A:2220:ARG:HG2	2.04	0.58
2:B:547:TYR:O	2:B:551:LEU:HG	2.04	0.58
1:A:406:SER:HB3	1:A:410:ARG:CZ	2.34	0.58
1:A:675:HIS:H	1:A:676:ASP:CB	2.17	0.58
1:A:736:LEU:HD12	3:C:201:GLN:HB2	1.86	0.58
1:A:1323:TYR:O	1:A:1326:GLN:HG2	2.04	0.58
1:A:2248:ARG:CB	1:A:2251:GLU:HG2	2.34	0.58
1:A:2387:GLY:C	1:A:2391:VAL:HG21	2.25	0.58
2:B:540:ARG:NH1	3:C:364:TYR:OH	2.37	0.58
3:C:325:PHE:CE1	3:C:391:ILE:HD11	2.35	0.58
1:A:544:VAL:O	1:A:548:VAL:HG23	2.04	0.57
1:A:1856:ILE:HB	1:A:1859:PRO:CG	2.33	0.57
1:A:2128:ILE:HG22	1:A:2140:LEU:CB	2.32	0.57
1:A:2166:ILE:HG21	1:A:2355:TYR:HD2	1.68	0.57
1:A:2169:PHE:CE1	1:A:2411:LEU:HD22	2.39	0.57
2:B:491:ILE:HG23	3:C:518:LEU:HB3	1.86	0.57
1:A:805:GLN:HG3	1:A:806:LEU:H	1.69	0.57
1:A:2138:LYS:O	1:A:2153:LEU:HA	2.04	0.57
1:A:2365:LEU:HB3	1:A:2367:VAL:N	2.19	0.57
1:A:328:ASP:O	1:A:332:LYS:HG3	2.05	0.57
1:A:402:LEU:O	1:A:402:LEU:HD23	2.04	0.57
1:A:569:LEU:O	1:A:573:THR:HG23	2.05	0.57
1:A:1289:ILE:HG22	1:A:1293:LEU:CD2	2.35	0.57

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1368:LEU:HD12	1:A:1368:LEU:O	2.05	0.57
1:A:1619:TRP:HB2	1:A:1756:LYS:HB2	1.84	0.57
1:A:1648:ARG:O	1:A:1652:GLU:HG3	2.04	0.57
1:A:2323:VAL:O	1:A:2327:VAL:HG23	2.04	0.57
2:B:48:CYS:SG	2:B:148:VAL:HG22	2.45	0.57
2:B:221:ILE:CG2	3:C:274:LEU:HB3	2.34	0.57
3:C:318:VAL:HB	3:C:367:LEU:HD23	1.86	0.57
1:A:69:GLN:HG3	1:A:102:LYS:HG2	1.86	0.57
1:A:675:HIS:CA	1:A:676:ASP:HB2	2.34	0.57
1:A:727:THR:HG22	1:A:899:SER:O	2.05	0.57
1:A:885:ARG:HA	1:A:888:TYR:CD2	2.39	0.57
3:C:312:PHE:CD1	3:C:318:VAL:HG21	2.39	0.57
1:A:141:MET:HE1	1:A:146:GLU:N	2.19	0.57
1:A:746:GLU:CD	1:A:747:THR:HG23	2.25	0.57
1:A:1307:ILE:HB	1:A:2306:THR:HG21	1.86	0.57
1:A:1346:LEU:HD22	1:A:1349:LEU:CD1	2.34	0.57
1:A:1845:LEU:O	1:A:1848:VAL:HG22	2.05	0.57
3:C:383:LYS:O	3:C:387:MET:HG3	2.05	0.57
1:A:190:ASP:HA	1:A:193:LEU:CD2	2.35	0.57
1:A:660:ILE:O	1:A:664:VAL:HG23	2.04	0.57
1:A:2023:HIS:O	1:A:2027:ILE:HG12	2.04	0.57
1:A:2042:ASP:HA	1:A:2046:ASP:CB	2.35	0.57
3:C:244:GLU:HA	3:C:247:GLU:CG	2.33	0.57
3:C:427:ASN:OD1	3:C:469:LEU:HD12	2.04	0.57
1:A:295:LYS:HD2	1:A:297:VAL:CG2	2.34	0.57
1:A:309:HIS:O	1:A:313:THR:OG1	2.17	0.57
1:A:419:ILE:HD13	1:A:441:THR:H	1.70	0.57
1:A:449:SER:O	1:A:453:LEU:HG	2.05	0.57
1:A:978:LEU:O	1:A:982:LEU:HG	2.05	0.57
1:A:194:ALA:HA	1:A:197:HIS:CE1	2.40	0.57
1:A:220:LEU:HD23	1:A:270:SER:OG	2.05	0.57
1:A:290:PRO:HA	1:A:294:CYS:SG	2.44	0.57
1:A:566:LYS:NZ	1:A:620:THR:HG23	2.20	0.57
1:A:1827:PHE:CZ	1:A:1859:PRO:HB2	2.40	0.57
1:A:110:VAL:O	1:A:146:GLU:HG3	2.04	0.57
1:A:244:ALA:HB1	1:A:290:PRO:HB2	1.86	0.57
1:A:1296:SER:HB2	1:A:1322:LYS:HE3	1.87	0.57
1:A:1410:ILE:HG21	1:A:1424:LEU:CD2	2.33	0.57
1:A:1502:GLU:CB	1:A:1504:LEU:HB2	2.33	0.57
1:A:1751:TYR:O	1:A:1755:LEU:HG	2.04	0.57
1:A:2129:THR:HG22	1:A:2131:LEU:H	1.69	0.57

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2277:LEU:CA	1:A:2278:HIS:HB3	2.34	0.57
1:A:2330:ILE:HD12	1:A:2404:ARG:NH1	2.16	0.57
2:B:546:LYS:O	2:B:550:GLN:N	2.37	0.57
3:C:244:GLU:HG3	3:C:248:ARG:HH22	1.70	0.57
3:C:386:GLN:O	3:C:390:MET:HG3	2.05	0.57
1:A:336:THR:HA	1:A:342:TRP:HZ2	1.69	0.57
1:A:1071:VAL:HG11	1:A:1074:MET:CG	2.31	0.57
1:A:1422:MET:O	1:A:1426:LEU:HG	2.05	0.57
1:A:1666:LYS:HZ1	1:A:1713:SER:H	1.52	0.57
1:A:1981:ILE:HG12	1:A:2067:SER:HA	1.87	0.57
1:A:2317:TYR:OH	1:A:2383:LEU:HD12	2.05	0.57
3:C:220:VAL:HG11	3:C:370:LEU:CD1	2.35	0.57
1:A:237:PHE:HA	1:A:240:PHE:CB	2.33	0.56
1:A:842:SER:HB2	1:A:918:TRP:HE1	1.70	0.56
1:A:1402:TYR:O	1:A:1406:LEU:HD13	2.05	0.56
1:A:2342:LEU:O	1:A:2350:VAL:HG13	2.05	0.56
2:B:67:LEU:O	2:B:71:VAL:HG23	2.05	0.56
2:B:208:HIS:O	2:B:263:PRO:HA	2.05	0.56
3:C:364:TYR:O	3:C:401:ARG:NH1	2.38	0.56
1:A:336:THR:HA	1:A:342:TRP:CZ2	2.41	0.56
1:A:494:THR:HA	1:A:497:ILE:HG22	1.87	0.56
1:A:496:TYR:O	1:A:500:VAL:HG23	2.06	0.56
1:A:645:ASN:HB3	1:A:666:TYR:CE2	2.41	0.56
1:A:1820:ARG:CB	1:A:1848:VAL:HB	2.34	0.56
1:A:1978:LEU:O	1:A:1982:GLN:HG3	2.05	0.56
2:B:311:ILE:HG12	3:C:279:LEU:HD23	1.87	0.56
1:A:131:LYS:CE	1:A:159:GLU:HB3	2.36	0.56
1:A:300:ILE:CG2	1:A:302:LEU:HG	2.35	0.56
1:A:412:ILE:CG2	1:A:453:LEU:HD11	2.35	0.56
1:A:817:PHE:CE2	1:A:821:LEU:HD11	2.40	0.56
1:A:982:LEU:HD12	1:A:992:LYS:HG2	1.87	0.56
1:A:989:ASN:OD1	1:A:990:LEU:HD12	2.04	0.56
1:A:1186:LEU:HD13	1:A:1199:ASP:CB	2.35	0.56
1:A:1673:LEU:HD21	1:A:1708:TRP:CD1	2.35	0.56
1:A:2408:GLU:O	1:A:2412:THR:HG23	2.04	0.56
2:B:254:TRP:CZ2	2:B:260:PRO:HG3	2.39	0.56
3:C:409:LEU:HD21	3:C:476:GLN:NE2	2.20	0.56
2:B:41:PRO:HB2	2:B:42:TRP:CE3	2.40	0.56
1:A:136:SER:HA	1:A:139:ARG:HG2	1.88	0.56
1:A:188:GLN:HG3	1:A:226:SER:HB2	1.86	0.56
1:A:851:LYS:HE3	1:A:856:THR:H	1.70	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:4:PRO:HA	2:B:140:ALA:O	2.05	0.56
1:A:1478:LYS:O	1:A:1481:PRO:HD2	2.05	0.56
1:A:100:GLY:HA2	1:A:133:MET:HE2	1.88	0.56
1:A:417:SER:O	1:A:420:ARG:HG2	2.06	0.56
1:A:1349:LEU:HD23	1:A:1355:TYR:CE1	2.40	0.56
1:A:1349:LEU:HB3	1:A:1355:TYR:HE1	1.70	0.56
1:A:2301:TRP:HA	1:A:2310:TRP:CD1	2.40	0.56
1:A:2366:ARG:HA	1:A:2366:ARG:NE	2.21	0.56
2:B:271:LEU:HG	2:B:336:VAL:HG12	1.87	0.56
2:B:445:TYR:CZ	2:B:449:ILE:HD11	2.41	0.56
1:A:104:LEU:HD21	1:A:133:MET:CA	2.35	0.56
1:A:420:ARG:O	1:A:423:PRO:HG2	2.06	0.56
1:A:435:ARG:HG3	1:A:436:VAL:N	2.18	0.56
1:A:642:LEU:O	1:A:646:LEU:HD23	2.06	0.56
2:B:134:ASP:O	2:B:192:GLN:NE2	2.38	0.56
2:B:547:TYR:CZ	2:B:551:LEU:HD11	2.40	0.56
3:C:367:LEU:HD11	3:C:400:LEU:HD23	1.86	0.56
1:A:104:LEU:HD21	1:A:133:MET:CB	2.36	0.56
1:A:419:ILE:O	1:A:422:PRO:HD2	2.05	0.56
1:A:488:ASN:CB	1:A:495:ASP:HB2	2.36	0.56
1:A:772:ASP:O	1:A:774:ASN:HA	2.06	0.56
1:A:905:LEU:HD12	1:A:906:LEU:N	2.21	0.56
1:A:1026:TRP:O	1:A:1030:ILE:HG13	2.05	0.56
1:A:1086:PRO:CB	1:A:1092:ILE:HG12	2.29	0.56
1:A:1832:HIS:CD2	1:A:1837:VAL:HG21	2.40	0.56
1:A:2053:GLU:OE1	1:A:2057:THR:OG1	2.14	0.56
1:A:2320:SER:O	1:A:2323:VAL:HG22	2.05	0.56
2:B:139:GLN:HG3	2:B:152:LEU:HG	1.88	0.56
2:B:311:ILE:HG23	3:C:297:HIS:HE1	1.71	0.56
2:B:315:SER:HB2	3:C:297:HIS:NE2	2.20	0.56
3:C:380:CYS:O	3:C:384:LEU:HD23	2.06	0.56
1:A:388:VAL:C	1:A:391:PRO:HD2	2.25	0.56
1:A:404:VAL:O	1:A:408:VAL:HG23	2.06	0.56
1:A:433:LEU:CD2	1:A:471:MET:HG2	2.26	0.56
1:A:992:LYS:HD2	1:A:1016:PHE:CB	2.35	0.56
1:A:1054:LEU:HD13	1:A:1415:VAL:CG2	2.35	0.56
1:A:2073:GLU:OE1	1:A:2073:GLU:N	2.35	0.56
1:A:2176:MET:HE3	1:A:2407:ARG:HB2	1.88	0.56
1:A:2277:LEU:CB	1:A:2278:HIS:HB3	2.36	0.56
2:B:248:CYS:HB2	2:B:255:LYS:HZ3	1.71	0.56
3:C:278:ILE:O	3:C:282:LEU:HG	2.06	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:380:SER:CA	2:B:350:MET:HE1	2.36	0.55
1:A:730:LEU:CD1	1:A:771:GLU:HB3	2.35	0.55
1:A:1655:ASN:HB2	1:A:1663:GLU:OE2	2.06	0.55
2:B:267:PHE:O	2:B:268:LEU:HD23	2.06	0.55
1:A:262:THR:N	1:A:303:VAL:HG21	2.20	0.55
1:A:506:LEU:HD22	1:A:549:TYR:CZ	2.41	0.55
1:A:1412:GLU:HA	1:A:1413:GLN:O	2.06	0.55
3:C:332:ARG:O	3:C:336:THR:HG23	2.07	0.55
1:A:230:GLU:O	1:A:234:LYS:HG3	2.06	0.55
1:A:346:LEU:HA	1:A:349:PHE:CD1	2.40	0.55
1:A:937:GLN:O	1:A:941:GLN:N	2.31	0.55
1:A:1090:GLN:HG3	1:A:1091:GLY:H	1.71	0.55
3:C:302:MET:O	3:C:306:GLN:HG3	2.06	0.55
1:A:88:TYR:O	1:A:96:GLU:HG2	2.07	0.55
1:A:508:VAL:HG23	1:A:509:GLU:CD	2.27	0.55
1:A:573:THR:HB	1:A:613:PHE:HZ	1.72	0.55
1:A:822:LYS:HZ3	1:A:829:VAL:N	2.04	0.55
1:A:1082:GLU:O	1:A:1087:GLU:HB2	2.06	0.55
1:A:1532:ILE:HG13	1:A:1607:LEU:CD2	2.36	0.55
1:A:2323:VAL:HA	1:A:2400:LEU:HD22	1.86	0.55
1:A:2365:LEU:CA	1:A:2366:ARG:CB	2.84	0.55
2:B:247:ASP:O	2:B:454:LYS:NZ	2.39	0.55
3:C:212:LEU:CD2	3:C:330:LEU:HD21	2.36	0.55
1:A:386:GLU:O	1:A:389:PRO:HD2	2.06	0.55
1:A:2387:GLY:H	1:A:2391:VAL:HG11	1.71	0.55
2:B:311:ILE:HG23	3:C:297:HIS:CE1	2.41	0.55
3:C:378:ASP:HA	3:C:387:MET:HE3	1.88	0.55
1:A:85:LYS:NZ	1:A:113:VAL:HG13	2.22	0.55
1:A:199:VAL:CG1	1:A:263:VAL:HG22	2.36	0.55
1:A:213:GLU:OE1	1:A:213:GLU:N	2.35	0.55
1:A:294:CYS:C	1:A:296:CYS:HB3	2.27	0.55
1:A:390:PRO:HB3	1:A:456:ALA:HB1	1.89	0.55
1:A:645:ASN:O	1:A:649:VAL:HG23	2.06	0.55
1:A:1032:LEU:HA	1:A:1035:MET:CE	2.36	0.55
1:A:1704:VAL:HA	1:A:1707:ILE:HD12	1.88	0.55
1:A:2320:SER:O	1:A:2324:MET:HG2	2.06	0.55
2:B:161:GLN:OE1	2:B:164:ARG:NH2	2.33	0.55
1:A:159:GLU:HA	1:A:162:ARG:HG2	1.89	0.55
1:A:350:TRP:NE1	1:A:354:LEU:HD11	2.22	0.55
1:A:365:LEU:CD2	1:A:401:LEU:HG	2.36	0.55
1:A:1521:VAL:HG13	1:A:1522:ALA:CB	2.35	0.55

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1600:ILE:O	1:A:1604:LEU:HG	2.07	0.55
1:A:2163:ASP:O	1:A:2167:MET:HG2	2.07	0.55
1:A:2165:ARG:HG3	1:A:2418:VAL:HG13	1.89	0.55
1:A:2409:THR:HA	1:A:2412:THR:OG1	2.07	0.55
2:B:72:CYS:HB2	2:B:74:ARG:NH1	2.22	0.55
1:A:350:TRP:HE3	1:A:392:SER:HB3	1.70	0.55
1:A:1018:THR:HG21	1:A:1084:HIS:CE1	2.42	0.55
1:A:648:ILE:HD13	1:A:714:LEU:CG	2.36	0.55
1:A:675:HIS:HB2	1:A:676:ASP:CG	2.28	0.55
1:A:1645:LEU:O	1:A:1648:ARG:HG2	2.07	0.55
1:A:1746:LEU:HD13	1:A:1795:LEU:CD1	2.37	0.55
3:C:209:VAL:HG22	3:C:269:ASP:HA	1.89	0.55
1:A:489:CYS:HA	3:C:412:ASN:HD22	1.72	0.54
1:A:497:ILE:O	1:A:501:LEU:HG	2.07	0.54
1:A:2292:PRO:HG2	1:A:2295:LEU:HD21	1.88	0.54
1:A:2398:GLN:O	1:A:2402:ILE:HG13	2.07	0.54
2:B:259:ARG:HE	2:B:262:PRO:HA	1.71	0.54
3:C:188:MET:HB2	3:C:507:ARG:HH12	1.71	0.54
1:A:137:GLN:O	1:A:141:MET:HG3	2.07	0.54
1:A:389:PRO:HA	1:A:392:SER:OG	2.08	0.54
1:A:748:TYR:HA	1:A:875:HIS:HE1	1.72	0.54
1:A:1334:PRO:HG2	1:A:1335:LEU:HD23	1.88	0.54
1:A:2053:GLU:HB2	1:A:2057:THR:OG1	2.07	0.54
1:A:2141:LEU:HD13	1:A:2151:PRO:CA	2.38	0.54
1:A:2330:ILE:CD1	1:A:2404:ARG:HD2	2.37	0.54
2:B:72:CYS:SG	2:B:74:ARG:HG2	2.47	0.54
2:B:508:HIS:CE1	2:B:550:GLN:HB3	2.43	0.54
1:A:410:ARG:HH12	1:A:471:MET:H	1.54	0.54
1:A:476:ASP:HA	1:A:479:ILE:HG22	1.88	0.54
1:A:730:LEU:H	1:A:730:LEU:CD2	2.20	0.54
1:A:1184:ASN:N	1:A:1292:GLN:OE1	2.39	0.54
2:B:414:LEU:O	2:B:418:VAL:HG23	2.07	0.54
3:C:231:GLU:HG2	3:C:235:THR:OG1	2.07	0.54
3:C:313:THR:CG2	3:C:341:LYS:HG2	2.37	0.54
1:A:117:GLU:CD	1:A:134:ARG:HG3	2.27	0.54
1:A:190:ASP:HA	1:A:193:LEU:CG	2.37	0.54
1:A:2414:LEU:O	1:A:2418:VAL:HG23	2.07	0.54
2:B:59:ARG:HA	3:C:377:GLU:OE1	2.06	0.54
2:B:552:HIS:HB3	2:B:556:TYR:CE2	2.43	0.54
3:C:212:LEU:HD21	3:C:330:LEU:HD21	1.90	0.54
3:C:473:LEU:O	3:C:477:VAL:HG23	2.07	0.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:117:GLU:OE1	1:A:134:ARG:HG3	2.07	0.54
1:A:216:CYS:O	1:A:220:LEU:HG	2.08	0.54
1:A:994:MET:CB	1:A:2391:VAL:HA	2.38	0.54
3:C:218:SER:N	4:C:601:GTP:O1B	2.40	0.54
1:A:188:GLN:HE22	1:A:192:ILE:HD11	1.72	0.54
1:A:424:ILE:O	1:A:425:THR:OG1	2.21	0.54
1:A:869:ILE:HB	1:A:1295:ARG:NH1	2.23	0.54
1:A:1022:THR:HG23	1:A:1025:ASP:H	1.72	0.54
1:A:1103:ASN:ND2	1:A:1109:SER:HB2	2.20	0.54
1:A:1207:GLN:HG2	1:A:1289:ILE:CG1	2.37	0.54
1:A:1650:LYS:HG3	1:A:1654:GLN:NE2	2.22	0.54
1:A:1845:LEU:HA	1:A:1848:VAL:HG22	1.89	0.54
1:A:1983:GLN:O	1:A:1987:GLU:HG3	2.07	0.54
2:B:491:ILE:CD1	3:C:519:LEU:HD23	2.38	0.54
1:A:1927:GLN:OE1	1:A:1927:GLN:N	2.33	0.54
1:A:2038:LYS:O	1:A:2041:GLN:HG3	2.07	0.54
1:A:69:GLN:HB2	1:A:102:LYS:NZ	2.23	0.54
1:A:117:GLU:HG2	1:A:130:THR:OG1	2.08	0.54
1:A:164:ARG:O	1:A:201:ASN:ND2	2.41	0.54
1:A:1753:THR:O	1:A:1757:LEU:HG	2.08	0.54
1:A:1824:PRO:HD2	1:A:2168:GLN:NE2	2.22	0.54
2:B:547:TYR:CE2	2:B:551:LEU:HD11	2.43	0.54
1:A:773:VAL:HG23	3:C:479:SER:HB3	1.89	0.54
1:A:1350:SER:OG	1:A:1354:LEU:HD23	2.08	0.54
1:A:1415:VAL:N	1:A:1416:PRO:HD3	2.22	0.54
1:A:2296:LEU:HD13	1:A:2383:LEU:CD1	2.38	0.54
2:B:244:ALA:CB	2:B:458:VAL:HG21	2.38	0.54
2:B:458:VAL:HG12	2:B:479:LEU:CD2	2.38	0.54
1:A:1984:LEU:O	1:A:1988:VAL:HG23	2.07	0.54
1:A:2099:LEU:HA	1:A:2102:MET:HG2	1.90	0.54
1:A:2228:LEU:O	1:A:2228:LEU:HD23	2.07	0.54
1:A:2292:PRO:HG2	1:A:2295:LEU:CD2	2.37	0.54
2:B:416:GLN:HG3	2:B:417:HIS:CD2	2.44	0.54
1:A:342:TRP:O	1:A:346:LEU:HG	2.08	0.53
1:A:550:GLN:HB2	1:A:605:ASP:HB3	1.90	0.53
1:A:1091:GLY:HA2	1:A:1120:LYS:NZ	2.22	0.53
1:A:1605:TYR:HB3	1:A:1622:LEU:HB2	1.88	0.53
1:A:1973:GLN:O	1:A:1977:VAL:HG12	2.07	0.53
1:A:2092:LEU:HD12	1:A:2099:LEU:CB	2.38	0.53
1:A:2214:LEU:HG	1:A:2341:VAL:O	2.07	0.53
2:B:149:LEU:HG	2:B:151:LEU:HD21	1.89	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:190:LYS:HG3	2:B:490:ASP:OD1	2.07	0.53
3:C:221:MET:HE1	3:C:319:ILE:HD12	1.89	0.53
1:A:36:SER:HA	1:A:77:HIS:NE2	2.23	0.53
1:A:280:LEU:HB2	1:A:315:PHE:CE2	2.43	0.53
1:A:305:ARG:NH1	1:A:345:SER:HB2	2.23	0.53
1:A:982:LEU:HB2	1:A:992:LYS:HE3	1.88	0.53
1:A:1318:GLU:HA	1:A:1321:VAL:HG12	1.91	0.53
1:A:1862:VAL:HG11	1:A:2197:PRO:O	2.08	0.53
2:B:56:THR:HB	2:B:63:GLU:OE1	2.08	0.53
3:C:221:MET:HB3	3:C:238:PHE:HE2	1.74	0.53
3:C:381:PRO:HG3	3:C:414:PHE:CZ	2.44	0.53
1:A:283:ILE:O	1:A:287:VAL:HG23	2.08	0.53
1:A:904:ASN:HB3	1:A:906:LEU:HG	1.90	0.53
1:A:1096:SER:O	1:A:1100:VAL:HG23	2.08	0.53
1:A:1414:THR:OG1	1:A:1415:VAL:HB	2.08	0.53
1:A:1471:THR:O	1:A:1475:VAL:HG22	2.08	0.53
1:A:1929:CYS:O	1:A:1933:ILE:HG12	2.07	0.53
2:B:194:LYS:O	2:B:198:LEU:HG	2.07	0.53
1:A:239:LYS:O	1:A:239:LYS:HD3	2.09	0.53
1:A:365:LEU:HD23	1:A:405:PHE:CB	2.39	0.53
1:A:1281:ASP:HB2	1:A:1282:PRO:HD3	1.89	0.53
1:A:1338:SER:HB2	1:A:1339:THR:C	2.28	0.53
1:A:2326:MET:SD	1:A:2397:GLU:HB3	2.48	0.53
1:A:2326:MET:HE2	1:A:2326:MET:HA	1.90	0.53
1:A:2353:ILE:HG22	1:A:2354:ASP:N	2.24	0.53
3:C:515:TYR:CE2	3:C:519:LEU:HD21	2.43	0.53
1:A:220:LEU:HA	1:A:270:SER:OG	2.08	0.53
1:A:279:SER:O	1:A:283:ILE:HG13	2.07	0.53
1:A:1027:LEU:HD21	1:A:1085:CYS:HA	1.91	0.53
1:A:1353:GLN:O	1:A:1357:SER:HB3	2.08	0.53
1:A:1463:VAL:CG2	1:A:1470:SER:HB2	2.38	0.53
1:A:1636:ASN:O	1:A:1640:GLY:N	2.34	0.53
1:A:2045:GLY:CA	1:A:2078:LEU:HD11	2.38	0.53
2:B:190:LYS:CG	2:B:194:LYS:HE3	2.38	0.53
2:B:453:SER:O	2:B:457:GLU:HG3	2.09	0.53
2:B:523:VAL:HA	2:B:526:ASN:OD1	2.08	0.53
3:C:194:ALA:HB3	3:C:496:PHE:CE1	2.43	0.53
3:C:409:LEU:HD21	3:C:476:GLN:CG	2.38	0.53
1:A:379:ALA:CB	1:A:382:GLU:HG2	2.35	0.53
1:A:625:LYS:O	1:A:629:ILE:HG12	2.07	0.53
1:A:1117:ARG:O	1:A:1120:LYS:HG2	2.09	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2309:GLU:O	1:A:2313:VAL:HG23	2.08	0.53
1:A:2388:VAL:HG23	1:A:2389:GLU:H	1.72	0.53
3:C:177:MET:HE3	3:C:197:TYR:CB	2.38	0.53
3:C:261:THR:HG22	3:C:262:GLN:N	2.24	0.53
1:A:365:LEU:CD1	1:A:401:LEU:HD21	2.39	0.53
1:A:424:ILE:HG22	1:A:426:GLU:HG2	1.90	0.53
1:A:503:LEU:HG	3:C:454:PHE:CD1	2.44	0.53
1:A:716:ILE:HG23	1:A:720:LYS:NZ	2.24	0.53
1:A:845:LEU:HD11	1:A:883:LEU:HD11	1.90	0.53
1:A:974:GLY:O	1:A:978:LEU:HD13	2.08	0.53
1:A:1786:VAL:CG1	1:A:1823:ILE:HD11	2.30	0.53
1:A:1819:TRP:CZ2	1:A:1844:LEU:HD11	2.44	0.53
1:A:1981:ILE:CD1	1:A:2067:SER:HA	2.39	0.53
1:A:2391:VAL:HG12	1:A:2392:PHE:N	2.20	0.53
2:B:159:ASN:ND2	3:C:326:THR:HB	2.24	0.53
2:B:509:SER:HA	2:B:512:GLN:NE2	2.24	0.53
2:B:544:PHE:O	2:B:547:TYR:HB3	2.08	0.53
1:A:353:ASP:HB2	1:A:392:SER:HB2	1.90	0.53
1:A:378:VAL:N	2:B:79:LEU:HD21	2.24	0.53
1:A:566:LYS:HB2	1:A:625:LYS:HE2	1.90	0.53
1:A:633:ALA:C	1:A:636:PRO:HD2	2.29	0.53
1:A:653:LEU:HD22	1:A:664:VAL:CG2	2.39	0.53
1:A:770:VAL:HG12	1:A:771:GLU:N	2.24	0.53
1:A:1028:THR:O	1:A:1032:LEU:HG	2.08	0.53
1:A:1035:MET:HB3	1:A:1036:ARG:HA	1.91	0.53
1:A:1346:LEU:N	1:A:1347:PRO:HA	2.24	0.53
1:A:1478:LYS:CE	1:A:1532:ILE:HG12	2.34	0.53
1:A:1738:ASP:HA	1:A:1741:PHE:CE2	2.44	0.53
1:A:1988:VAL:HA	1:A:1991:VAL:HG22	1.89	0.53
1:A:2215:PHE:N	1:A:2338:LEU:HB3	2.24	0.53
2:B:478:ILE:O	2:B:482:ILE:HG12	2.09	0.53
3:C:211:GLY:O	3:C:273:ILE:HG12	2.09	0.53
3:C:270:THR:HG21	3:C:311:LEU:HD21	1.90	0.53
3:C:279:LEU:HD21	3:C:297:HIS:CE1	2.44	0.53
1:A:605:ASP:O	1:A:609:PHE:N	2.34	0.53
1:A:1463:VAL:HG11	1:A:1499:HIS:CE1	2.44	0.53
3:C:313:THR:HG22	3:C:341:LYS:CE	2.29	0.53
1:A:183:LEU:HG	1:A:184:VAL:HG13	1.91	0.53
1:A:292:LEU:HD11	1:A:327:ILE:HG13	1.91	0.53
1:A:416:PHE:HA	1:A:419:ILE:HD12	1.90	0.53
1:A:839:GLN:O	1:A:843:LEU:HG	2.09	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1138:CYS:SG	1:A:1139:ILE:N	2.82	0.53
1:A:2169:PHE:CD2	1:A:2331:ILE:HD11	2.43	0.53
1:A:2326:MET:HB2	1:A:2400:LEU:HD23	1.90	0.53
1:A:2365:LEU:CB	1:A:2366:ARG:HB3	2.39	0.53
1:A:2389:GLU:O	1:A:2391:VAL:HG23	2.09	0.53
2:B:44:GLU:OE1	2:B:44:GLU:N	2.42	0.53
2:B:504:LEU:CD1	2:B:550:GLN:HG2	2.36	0.53
3:C:466:PHE:O	3:C:470:VAL:HG23	2.09	0.53
1:A:1837:VAL:O	1:A:1841:ILE:HG13	2.09	0.52
1:A:2153:LEU:N	1:A:2205:ILE:O	2.42	0.52
1:A:2221:TRP:HA	1:A:2224:ARG:CZ	2.39	0.52
2:B:162:LEU:O	2:B:162:LEU:HD23	2.08	0.52
2:B:268:LEU:CD2	2:B:335:PHE:HB3	2.39	0.52
1:A:81:GLN:O	1:A:85:LYS:NZ	2.25	0.52
1:A:280:LEU:O	1:A:284:LEU:HD23	2.09	0.52
1:A:302:LEU:HD22	1:A:341:GLY:HA2	1.91	0.52
1:A:990:LEU:HD23	1:A:2395:SER:CB	2.38	0.52
1:A:1321:VAL:O	1:A:1325:LYS:HG2	2.09	0.52
1:A:1825:GLN:HE22	1:A:2165:ARG:HD2	1.73	0.52
2:B:155:SER:CB	2:B:196:GLN:HG3	2.37	0.52
2:B:297:LYS:HD2	2:B:336:VAL:HB	1.91	0.52
3:C:209:VAL:HG21	3:C:217:LYS:O	2.09	0.52
1:A:239:LYS:CE	1:A:243:SER:HB3	2.39	0.52
1:A:414:GLU:OE1	1:A:433:LEU:HB2	2.09	0.52
1:A:471:MET:HG3	1:A:471:MET:O	2.09	0.52
1:A:556:LYS:HA	1:A:559:PRO:HG3	1.90	0.52
1:A:805:GLN:O	1:A:807:VAL:HG22	2.10	0.52
1:A:857:PHE:CE2	1:A:1190:ALA:HB2	2.44	0.52
1:A:1035:MET:CB	1:A:1036:ARG:HA	2.38	0.52
1:A:1424:LEU:HD22	1:A:1458:THR:CG2	2.36	0.52
1:A:1856:ILE:O	1:A:1859:PRO:HD3	2.09	0.52
1:A:2335:ASP:OD1	1:A:2337:HIS:NE2	2.43	0.52
1:A:337:GLN:HB2	1:A:338:GLN:NE2	2.24	0.52
1:A:772:ASP:OD1	3:C:481:ALA:HA	2.09	0.52
1:A:941:GLN:CB	1:A:978:LEU:HG	2.40	0.52
1:A:2342:LEU:HB2	1:A:2351:VAL:HG23	1.92	0.52
2:B:190:LYS:O	2:B:194:LYS:HG3	2.10	0.52
2:B:319:THR:HG22	2:B:320:ASN:H	1.74	0.52
2:B:540:ARG:HB3	3:C:339:MET:HA	1.91	0.52
1:A:377:HIS:HA	2:B:79:LEU:HD11	1.91	0.52
1:A:647:MET:CB	1:A:714:LEU:HD23	2.40	0.52

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2169:PHE:HA	1:A:2414:LEU:CD2	2.38	0.52
1:A:2385:VAL:HG13	1:A:2386:THR:H	1.73	0.52
2:B:44:GLU:CA	2:B:444:THR:HB	2.37	0.52
2:B:237:VAL:CG1	2:B:479:LEU:HG	2.38	0.52
2:B:493:THR:O	2:B:497:GLU:HG3	2.09	0.52
1:A:289:THR:OG1	1:A:290:PRO:HD3	2.10	0.52
1:A:483:LEU:O	1:A:487:GLU:HG3	2.09	0.52
1:A:752:PHE:HB3	1:A:762:LYS:HB2	1.91	0.52
1:A:895:LYS:HD2	1:A:907:LYS:HE2	1.92	0.52
1:A:1753:THR:HG21	1:A:1792:LEU:HG	1.91	0.52
1:A:1835:VAL:HG22	1:A:1836:TYR:H	1.74	0.52
1:A:2276:PRO:O	1:A:2279:VAL:HB	2.09	0.52
1:A:244:ALA:CB	1:A:290:PRO:HB2	2.38	0.52
1:A:356:PHE:CG	1:A:360:LEU:HG	2.44	0.52
1:A:1211:HIS:CE1	1:A:1285:LEU:HD13	2.45	0.52
1:A:1293:LEU:CD1	1:A:1322:LYS:HB3	2.40	0.52
1:A:2379:ILE:HG22	1:A:2379:ILE:O	2.09	0.52
1:A:2381:THR:HG22	1:A:2388:VAL:CG1	2.39	0.52
3:C:219:MET:O	3:C:223:LEU:HG	2.10	0.52
1:A:143:TYR:CE2	1:A:145:ASP:HB2	2.45	0.52
1:A:173:LYS:HA	1:A:176:ILE:HG22	1.90	0.52
1:A:240:PHE:CZ	1:A:257:TYR:HE1	2.28	0.52
1:A:332:LYS:N	1:A:333:PRO:HD2	2.25	0.52
1:A:547:ALA:HB1	1:A:605:ASP:OD2	2.10	0.52
1:A:740:VAL:HG12	1:A:751:LEU:HD12	1.92	0.52
1:A:1091:GLY:HA2	1:A:1120:LYS:HZ1	1.74	0.52
1:A:1463:VAL:HG23	1:A:1470:SER:HB2	1.91	0.52
1:A:1668:ARG:O	1:A:1672:ILE:HG13	2.10	0.52
1:A:345:SER:O	1:A:348:PRO:HD2	2.09	0.52
1:A:820:LEU:HD21	1:A:882:TRP:CD2	2.45	0.52
1:A:866:ILE:HA	1:A:1295:ARG:NH2	2.25	0.52
1:A:1349:LEU:HD23	1:A:1355:TYR:OH	2.10	0.52
1:A:1412:GLU:N	1:A:1413:GLN:HB2	2.25	0.52
1:A:2021:LEU:O	1:A:2024:VAL:HG22	2.10	0.52
1:A:2219:LYS:O	1:A:2223:GLN:HG3	2.10	0.52
1:A:2223:GLN:CG	1:A:2245:ILE:HD12	2.38	0.52
3:C:265:ILE:CD1	3:C:478:MET:HG2	2.39	0.52
3:C:340:VAL:HG11	3:C:512:LEU:CD2	2.40	0.52
1:A:635:SER:HB2	1:A:636:PRO:HD3	1.92	0.52
1:A:1290:GLU:O	1:A:1294:LEU:HG	2.10	0.52
1:A:1332:ILE:HG22	1:A:1332:ILE:O	2.10	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1529:ALA:O	1:A:1533:GLN:HG3	2.10	0.52
1:A:1623:ALA:HB2	1:A:1752:PHE:CB	2.40	0.52
3:C:183:LEU:H	3:C:183:LEU:HD12	1.74	0.52
1:A:153:LEU:HD12	1:A:156:ILE:HD12	1.92	0.51
1:A:232:ILE:O	1:A:236:ILE:HG12	2.10	0.51
1:A:335:LEU:HA	1:A:342:TRP:CH2	2.44	0.51
1:A:1082:GLU:OE1	1:A:1112:GLN:HG2	2.10	0.51
1:A:1627:TYR:CG	1:A:1791:ARG:HD3	2.45	0.51
1:A:1860:ALA:O	1:A:1864:THR:HG23	2.10	0.51
1:A:2320:SER:HA	1:A:2323:VAL:HG22	1.91	0.51
2:B:166:CYS:HB3	3:C:393:GLN:HG3	1.92	0.51
3:C:232:ASP:OD1	3:C:233:GLN:N	2.42	0.51
3:C:244:GLU:CA	3:C:247:GLU:HG2	2.36	0.51
3:C:385:ARG:O	3:C:389:LEU:HG	2.10	0.51
1:A:81:GLN:HG3	1:A:112:ASN:ND2	2.25	0.51
1:A:258:LYS:O	1:A:262:THR:HG23	2.10	0.51
1:A:1412:GLU:CA	1:A:1413:GLN:HB2	2.40	0.51
1:A:1977:VAL:O	1:A:1981:ILE:HG13	2.10	0.51
1:A:2153:LEU:CD1	1:A:2155:LYS:HE2	2.39	0.51
1:A:2247:PRO:HD2	1:A:2249:PRO:CD	2.40	0.51
1:A:2358:CYS:O	1:A:2361:LYS:HG3	2.11	0.51
3:C:216:GLY:HA2	4:C:601:GTP:O2A	2.10	0.51
1:A:463:LEU:HB3	1:A:464:LEU:HA	1.93	0.51
1:A:1040:LEU:HD23	1:A:1040:LEU:H	1.75	0.51
1:A:1054:LEU:HD22	1:A:1415:VAL:HG21	1.92	0.51
1:A:1090:GLN:HG3	1:A:1091:GLY:N	2.25	0.51
1:A:2246:VAL:H	1:A:2247:PRO:HA	1.75	0.51
2:B:159:ASN:CG	3:C:326:THR:HB	2.31	0.51
2:B:272:ASN:OD1	2:B:273:GLY:N	2.43	0.51
1:A:147:SER:N	1:A:149:LEU:HD23	2.18	0.51
1:A:1858:TYR:CE1	1:A:1948:VAL:HB	2.45	0.51
1:A:2276:PRO:HD2	1:A:2277:LEU:O	2.10	0.51
3:C:313:THR:OG1	3:C:502:ILE:HG21	2.11	0.51
3:C:409:LEU:HD21	3:C:476:GLN:CD	2.30	0.51
1:A:186:VAL:HB	1:A:225:LEU:HD22	1.92	0.51
1:A:578:ASN:O	1:A:582:SER:HB2	2.10	0.51
1:A:1286:GLN:HG2	1:A:1330:ILE:HG12	1.93	0.51
1:A:1414:THR:CA	1:A:1415:VAL:HB	2.41	0.51
1:A:2120:THR:HB	1:A:2144:GLY:HA3	1.92	0.51
1:A:335:LEU:HA	1:A:342:TRP:HH2	1.75	0.51
1:A:672:CYS:HA	1:A:675:HIS:HE2	1.74	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:725:GLN:NE2	1:A:730:LEU:HD21	2.26	0.51
1:A:769:LEU:CD2	3:C:263:GLU:HB3	2.38	0.51
1:A:1293:LEU:HD12	1:A:1319:ASN:OD1	2.10	0.51
1:A:1311:GLN:CB	1:A:1312:LYS:HA	2.40	0.51
1:A:2296:LEU:HD21	1:A:2343:ILE:CD1	2.41	0.51
1:A:2300:LEU:HD21	1:A:2343:ILE:CD1	2.39	0.51
2:B:423:SER:OG	2:B:425:LYS:HG3	2.10	0.51
3:C:326:THR:HG21	3:C:390:MET:CE	2.41	0.51
1:A:278:THR:O	1:A:278:THR:HG22	2.11	0.51
1:A:1114:ALA:HB2	1:A:1117:ARG:HH21	1.75	0.51
1:A:1293:LEU:HD11	1:A:1322:LYS:HB3	1.93	0.51
1:A:1346:LEU:HB2	1:A:1349:LEU:CD1	2.38	0.51
1:A:2171:SER:O	1:A:2175:THR:HG23	2.11	0.51
1:A:2215:PHE:HB2	1:A:2338:LEU:CB	2.41	0.51
1:A:2254:TYR:CA	1:A:2257:ILE:HG22	2.34	0.51
2:B:499:ARG:HA	2:B:502:LYS:HZ3	1.75	0.51
2:B:507:ALA:HB1	2:B:534:VAL:CG1	2.40	0.51
3:C:199:LEU:O	3:C:493:LYS:HG2	2.10	0.51
1:A:109:ARG:HA	1:A:112:ASN:OD1	2.11	0.51
1:A:249:LYS:CE	1:A:297:VAL:HG22	2.36	0.51
1:A:310:ILE:H	1:A:310:ILE:HD12	1.75	0.51
1:A:719:LYS:HE2	1:A:1307:ILE:CG2	2.41	0.51
2:B:359:CYS:HB3	3:C:454:PHE:CZ	2.46	0.51
1:A:305:ARG:HG2	1:A:332:LYS:CD	2.41	0.51
1:A:390:PRO:HB2	1:A:391:PRO:CD	2.39	0.51
1:A:630:GLY:O	1:A:634:LEU:HB2	2.10	0.51
1:A:837:GLU:O	1:A:841:ILE:HG13	2.10	0.51
1:A:939:THR:CG2	1:A:2301:TRP:HE1	2.23	0.51
1:A:1657:LEU:N	1:A:1658:PRO:HD2	2.26	0.51
1:A:2276:PRO:C	1:A:2279:VAL:HB	2.31	0.51
2:B:209:ILE:N	2:B:209:ILE:HD12	2.26	0.51
3:C:270:THR:HB	3:C:307:ILE:HG21	1.93	0.51
1:A:290:PRO:O	1:A:294:CYS:HB2	2.10	0.51
1:A:558:ILE:HG23	1:A:612:ILE:HG23	1.93	0.51
1:A:674:ARG:HA	1:A:677:HIS:HB3	1.92	0.51
1:A:734:TRP:CE2	1:A:769:LEU:HG	2.46	0.51
1:A:1414:THR:HA	1:A:1415:VAL:HB	1.92	0.51
1:A:1419:SER:HA	1:A:1422:MET:CE	2.26	0.51
1:A:2072:LYS:O	1:A:2076:LEU:HD23	2.11	0.51
2:B:206:VAL:HB	2:B:455:LEU:CD1	2.41	0.51
2:B:262:PRO:CB	2:B:326:LEU:HD21	2.41	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1293:LEU:CD2	1:A:1322:LYS:HG2	2.41	0.50
2:B:45:ASP:HB3	2:B:142:TYR:OH	2.11	0.50
2:B:225:ARG:HD3	2:B:488:PHE:O	2.11	0.50
2:B:244:ALA:O	2:B:454:LYS:HD3	2.11	0.50
2:B:515:LEU:HB3	2:B:517:HIS:CD2	2.46	0.50
1:A:40:ASP:OD2	1:A:80:ILE:HG12	2.11	0.50
1:A:353:ASP:CB	1:A:392:SER:HB2	2.41	0.50
1:A:652:ASP:O	1:A:655:VAL:HG23	2.10	0.50
1:A:886:LEU:O	1:A:890:CYS:N	2.40	0.50
1:A:1085:CYS:O	1:A:1087:GLU:N	2.44	0.50
1:A:1948:VAL:O	1:A:1952:VAL:HG23	2.10	0.50
2:B:259:ARG:HD2	2:B:263:PRO:HD3	1.92	0.50
2:B:540:ARG:HD2	3:C:339:MET:HA	1.94	0.50
3:C:180:SER:HB3	3:C:238:PHE:CD1	2.46	0.50
1:A:87:GLY:HA2	1:A:90:VAL:HG12	1.94	0.50
1:A:252:TYR:O	1:A:256:THR:HG22	2.11	0.50
1:A:664:VAL:O	1:A:668:LEU:HG	2.11	0.50
1:A:1086:PRO:HG2	1:A:1091:GLY:O	2.11	0.50
1:A:1418:ARG:O	1:A:1422:MET:HG3	2.11	0.50
1:A:1455:LYS:N	1:A:1455:LYS:HD2	2.27	0.50
1:A:1479:TRP:NE1	1:A:1535:GLU:OE2	2.44	0.50
1:A:1729:VAL:O	1:A:1732:VAL:HG22	2.11	0.50
1:A:2055:LEU:HD22	1:A:2068:TRP:HA	1.93	0.50
2:B:269:PHE:HD2	2:B:304:LEU:HD13	1.77	0.50
3:C:241:GLN:OE1	3:C:245:MET:HG2	2.12	0.50
1:A:249:LYS:CD	1:A:297:VAL:HG13	2.41	0.50
1:A:1401:MET:O	1:A:1405:GLN:HG2	2.11	0.50
1:A:2102:MET:CE	1:A:2105:THR:HG21	2.41	0.50
1:A:2172:ILE:O	1:A:2176:MET:HG3	2.11	0.50
1:A:2283:VAL:O	1:A:2287:LEU:HG	2.12	0.50
3:C:210:LEU:HD23	3:C:270:THR:OG1	2.11	0.50
1:A:148:ARG:O	1:A:185:LEU:HD21	2.12	0.50
1:A:227:TYR:HA	1:A:273:MET:CE	2.41	0.50
1:A:471:MET:HA	1:A:471:MET:CE	2.42	0.50
1:A:549:TYR:O	1:A:552:VAL:HG12	2.11	0.50
1:A:731:LEU:H	1:A:731:LEU:CD2	2.24	0.50
1:A:1502:GLU:HA	1:A:1503:MET:CB	2.10	0.50
1:A:1606:HIS:HA	1:A:1622:LEU:HD22	1.94	0.50
1:A:2176:MET:CE	1:A:2407:ARG:HB2	2.40	0.50
2:B:55:LYS:HB3	3:C:324:TRP:CH2	2.47	0.50
3:C:271:GLN:HB2	3:C:272:PRO:HD2	1.94	0.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:503:LEU:HD13	1:A:572:MET:CG	2.41	0.50
1:A:1081:CYS:HB3	1:A:1085:CYS:SG	2.52	0.50
1:A:1121:ALA:O	1:A:1122:SER:OG	2.18	0.50
1:A:1533:GLN:HE22	1:A:1600:ILE:HA	1.76	0.50
1:A:2037:GLU:N	1:A:2094:GLU:HA	2.27	0.50
1:A:2421:PRO:CG	1:A:2424:ASP:HB3	2.41	0.50
2:B:265:LEU:O	2:B:333:GLN:HB2	2.12	0.50
3:C:306:GLN:HG2	3:C:512:LEU:CD1	2.41	0.50
1:A:414:GLU:CD	1:A:433:LEU:HB2	2.31	0.50
1:A:447:PHE:CZ	1:A:491:THR:HG23	2.46	0.50
1:A:638:VAL:CB	1:A:639:PHE:HA	2.30	0.50
1:A:673:THR:HB	1:A:1344:GLN:CB	2.41	0.50
1:A:1463:VAL:HG21	1:A:1499:HIS:NE2	2.27	0.50
1:A:1666:LYS:O	1:A:1669:ILE:HG22	2.11	0.50
1:A:2195:VAL:HG12	1:A:2205:ILE:HG21	1.94	0.50
1:A:2301:TRP:HA	1:A:2310:TRP:HD1	1.76	0.50
1:A:2310:TRP:O	1:A:2314:THR:HG23	2.12	0.50
1:A:2326:MET:CB	1:A:2400:LEU:HD23	2.42	0.50
1:A:2379:ILE:O	1:A:2383:LEU:HD21	2.11	0.50
2:B:212:LEU:HB2	2:B:267:PHE:CD1	2.47	0.50
3:C:403:LYS:HA	3:C:422:LEU:H	1.76	0.50
1:A:68:ARG:HA	1:A:71:HIS:HD2	1.77	0.50
1:A:121:VAL:HG12	1:A:162:ARG:HH11	1.77	0.50
1:A:441:THR:OG1	1:A:446:VAL:HG22	2.11	0.50
1:A:549:TYR:O	1:A:553:LEU:HG	2.12	0.50
1:A:657:PHE:CB	1:A:658:PRO:HD2	2.41	0.50
1:A:2122:HIS:H	1:A:2144:GLY:HA2	1.77	0.50
2:B:254:TRP:CH2	2:B:260:PRO:HG3	2.47	0.50
3:C:199:LEU:O	3:C:492:GLU:HB2	2.11	0.50
3:C:279:LEU:O	3:C:283:ILE:HG13	2.12	0.50
1:A:108:LEU:HD13	1:A:110:VAL:CG1	2.27	0.50
1:A:301:LEU:O	1:A:305:ARG:HG3	2.12	0.50
1:A:558:ILE:N	1:A:559:PRO:CD	2.74	0.50
1:A:1666:LYS:HZ1	1:A:1712:ILE:HB	1.77	0.50
1:A:2098:TRP:O	1:A:2102:MET:N	2.42	0.50
1:A:2191:ARG:HG3	1:A:2351:VAL:CG1	2.39	0.50
1:A:2388:VAL:HG23	1:A:2389:GLU:N	2.27	0.50
3:C:239:ARG:HB3	3:C:252:GLN:OE1	2.12	0.50
3:C:244:GLU:HG3	3:C:248:ARG:NH2	2.27	0.50
3:C:251:ASN:ND2	3:C:251:ASN:O	2.45	0.50
1:A:150:SER:O	1:A:153:LEU:N	2.37	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:207:LEU:N	1:A:208:GLN:CB	2.75	0.49
1:A:343:LEU:O	1:A:347:GLU:HG3	2.12	0.49
1:A:551:ALA:HB2	1:A:605:ASP:OD1	2.12	0.49
1:A:770:VAL:C	1:A:771:GLU:HG3	2.32	0.49
1:A:1662:THR:O	1:A:1666:LYS:HG2	2.12	0.49
1:A:1861:ILE:O	1:A:1865:ILE:HG12	2.11	0.49
1:A:2276:PRO:HG2	1:A:2280:MET:HG3	1.94	0.49
1:A:280:LEU:HB2	1:A:315:PHE:CZ	2.47	0.49
1:A:305:ARG:HG2	1:A:332:LYS:CE	2.42	0.49
1:A:671:HIS:O	1:A:675:HIS:NE2	2.42	0.49
1:A:813:ILE:HG13	1:A:881:ASN:ND2	2.27	0.49
1:A:1521:VAL:HG22	1:A:1522:ALA:CB	2.42	0.49
1:A:2319:ARG:O	1:A:2323:VAL:HG13	2.12	0.49
2:B:42:TRP:HB2	2:B:45:ASP:OD1	2.12	0.49
2:B:212:LEU:HD21	2:B:223:TYR:CE1	2.48	0.49
2:B:319:THR:HG22	2:B:320:ASN:N	2.27	0.49
3:C:251:ASN:HB3	3:C:277:SER:HB3	1.94	0.49
1:A:207:LEU:HG	1:A:209:GLU:OE2	2.12	0.49
1:A:320:ASP:HB3	1:A:322:LEU:HD12	1.92	0.49
1:A:365:LEU:HD22	1:A:401:LEU:HG	1.93	0.49
1:A:2055:LEU:HD23	1:A:2055:LEU:O	2.13	0.49
1:A:2092:LEU:HD12	1:A:2099:LEU:HB2	1.93	0.49
1:A:2214:LEU:O	1:A:2217:LEU:HG	2.12	0.49
2:B:47:ILE:HG22	2:B:142:TYR:HE1	1.77	0.49
2:B:204:PHE:HB3	2:B:324:ASN:OD1	2.11	0.49
1:A:822:LYS:C	1:A:825:PRO:HD2	2.32	0.49
1:A:1399:TYR:O	1:A:1403:GLN:HG3	2.12	0.49
1:A:1415:VAL:HG13	1:A:1415:VAL:O	2.12	0.49
1:A:1463:VAL:HG21	1:A:1499:HIS:CD2	2.47	0.49
2:B:262:PRO:HB2	2:B:326:LEU:HD21	1.95	0.49
2:B:451:ALA:O	2:B:455:LEU:HG	2.12	0.49
1:A:553:LEU:HD21	1:A:572:MET:SD	2.53	0.49
1:A:1627:TYR:HB2	1:A:1749:SER:HB3	1.94	0.49
1:A:1732:VAL:O	1:A:1736:VAL:HG13	2.13	0.49
1:A:1958:VAL:O	1:A:2138:LYS:NZ	2.45	0.49
1:A:2057:THR:HB	1:A:2058:PRO:HD3	1.93	0.49
1:A:2131:LEU:HD21	1:A:2139:LYS:N	2.27	0.49
1:A:2194:SER:HB3	1:A:2206:GLN:HG2	1.94	0.49
1:A:2215:PHE:N	1:A:2338:LEU:O	2.32	0.49
2:B:250:VAL:HB	2:B:254:TRP:CD2	2.47	0.49
3:C:377:GLU:O	3:C:383:LYS:HG3	2.11	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:81:GLN:NE2	1:A:107:GLU:HB2	2.27	0.49
1:A:168:THR:HG21	1:A:211:ARG:HD3	1.95	0.49
1:A:215:ALA:CA	1:A:218:LEU:HD13	2.30	0.49
1:A:305:ARG:HG2	1:A:332:LYS:NZ	2.28	0.49
1:A:503:LEU:HB2	1:A:572:MET:CE	2.43	0.49
1:A:1459:ALA:HB1	1:A:1474:GLN:CG	2.42	0.49
1:A:1478:LYS:HD2	1:A:1493:THR:HG22	1.93	0.49
3:C:212:LEU:O	3:C:217:LYS:NZ	2.41	0.49
1:A:127:ALA:O	1:A:130:THR:HG22	2.13	0.49
1:A:196:VAL:O	1:A:200:LEU:HD13	2.13	0.49
1:A:305:ARG:HA	1:A:332:LYS:HZ3	1.77	0.49
1:A:720:LYS:HE3	1:A:2346:THR:CB	2.43	0.49
1:A:720:LYS:HE3	1:A:2346:THR:HB	1.95	0.49
1:A:1075:MET:CE	1:A:1075:MET:HA	2.43	0.49
1:A:1125:TYR:CE2	1:A:1129:LEU:HD11	2.47	0.49
1:A:1323:TYR:HA	1:A:1326:GLN:HG2	1.95	0.49
1:A:1503:MET:O	1:A:1504:LEU:HD22	2.12	0.49
1:A:1627:TYR:HB3	1:A:1791:ARG:HD3	1.94	0.49
1:A:1631:ARG:O	1:A:1634:VAL:HG22	2.13	0.49
1:A:1656:LEU:CB	1:A:1657:LEU:HA	2.33	0.49
1:A:1659:ASP:OD1	1:A:1660:THR:N	2.45	0.49
1:A:2297:ALA:N	1:A:2383:LEU:HD22	2.28	0.49
1:A:2393:ARG:O	1:A:2397:GLU:HG3	2.13	0.49
2:B:509:SER:HA	2:B:512:GLN:HG2	1.95	0.49
3:C:248:ARG:HD3	3:C:248:ARG:N	2.28	0.49
3:C:406:LEU:HD12	3:C:422:LEU:CB	2.35	0.49
1:A:207:LEU:HB3	1:A:209:GLU:HG2	1.95	0.49
1:A:223:ALA:HB3	1:A:270:SER:CB	2.41	0.49
1:A:310:ILE:HD12	1:A:310:ILE:N	2.28	0.49
1:A:346:LEU:HD21	1:A:375:LEU:CD1	2.42	0.49
1:A:407:THR:OG1	1:A:435:ARG:NH2	2.46	0.49
1:A:982:LEU:CB	1:A:992:LYS:HE3	2.42	0.49
1:A:1054:LEU:HD13	1:A:1415:VAL:HG13	1.94	0.49
1:A:1292:GLN:CB	1:A:1322:LYS:HD3	2.43	0.49
1:A:1338:SER:HB2	1:A:1339:THR:CA	2.42	0.49
1:A:346:LEU:O	1:A:349:PHE:HB2	2.13	0.49
1:A:542:VAL:CG2	1:A:545:ALA:HB2	2.43	0.49
1:A:608:LYS:O	1:A:612:ILE:HG12	2.13	0.49
1:A:654:ALA:O	1:A:808:HIS:HB3	2.13	0.49
1:A:1285:LEU:O	1:A:1289:ILE:HG13	2.12	0.49
1:A:1304:LEU:O	1:A:1304:LEU:HG	2.12	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1832:HIS:HB3	1:A:1837:VAL:HG21	1.95	0.49
2:B:134:ASP:HB3	2:B:165:ALA:CA	2.42	0.49
2:B:318:LEU:CD2	2:B:325:CYS:HB2	2.43	0.49
3:C:202:THR:HB	3:C:489:ILE:CD1	2.41	0.49
3:C:409:LEU:HD21	3:C:476:GLN:HG2	1.94	0.49
1:A:62:ASN:O	1:A:66:VAL:HG23	2.12	0.49
1:A:328:ASP:O	1:A:332:LYS:HE3	2.13	0.49
1:A:391:PRO:HG3	1:A:459:CYS:SG	2.52	0.49
1:A:1292:GLN:HG3	1:A:1322:LYS:CE	2.42	0.49
1:A:1597:PRO:HG3	1:A:1629:TRP:CD1	2.48	0.49
1:A:1938:SER:CB	1:A:1945:VAL:HG11	2.43	0.49
3:C:372:ASN:OD1	4:C:601:GTP:N1	2.41	0.49
3:C:391:ILE:HD12	3:C:421:PHE:CZ	2.43	0.49
1:A:113:VAL:HG12	1:A:117:GLU:OE2	2.12	0.48
1:A:458:GLU:O	1:A:462:VAL:HG13	2.13	0.48
1:A:845:LEU:HD13	1:A:925:VAL:HG22	1.93	0.48
1:A:1960:VAL:N	1:A:1961:LEU:CA	2.75	0.48
1:A:2256:LYS:HD2	1:A:2287:LEU:CD2	2.42	0.48
2:B:142:TYR:HE2	2:B:144:GLN:HG2	1.77	0.48
2:B:155:SER:HB2	2:B:196:GLN:CD	2.34	0.48
2:B:307:GLN:O	2:B:311:ILE:HG13	2.13	0.48
2:B:415:TRP:O	2:B:419:GLU:HG3	2.11	0.48
2:B:496:SER:OG	2:B:543:ALA:HB2	2.13	0.48
3:C:502:ILE:O	3:C:506:VAL:HG12	2.13	0.48
1:A:1341:THR:HG22	1:A:1341:THR:O	2.14	0.48
1:A:1502:GLU:HB3	1:A:1504:LEU:CB	2.35	0.48
2:B:154:THR:CB	2:B:161:GLN:HE21	2.26	0.48
2:B:245:ILE:O	2:B:245:ILE:HG12	2.13	0.48
1:A:190:ASP:HA	1:A:193:LEU:HD21	1.95	0.48
1:A:738:ALA:CB	1:A:830:LEU:HD11	2.43	0.48
1:A:1018:THR:HA	1:A:1022:THR:O	2.12	0.48
1:A:2365:LEU:HD13	1:A:2367:VAL:CG2	2.44	0.48
2:B:511:TYR:HD2	2:B:531:ALA:HA	1.78	0.48
3:C:258:PHE:CE2	3:C:260:ILE:HG13	2.48	0.48
3:C:312:PHE:CE1	3:C:318:VAL:HG21	2.48	0.48
1:A:297:VAL:O	1:A:297:VAL:HG12	2.12	0.48
1:A:322:LEU:HD21	1:A:355:ALA:HB1	1.95	0.48
1:A:407:THR:CB	1:A:435:ARG:HH21	2.26	0.48
1:A:495:ASP:HB3	1:A:565:TYR:CE1	2.48	0.48
1:A:804:VAL:O	1:A:804:VAL:HG12	2.14	0.48
1:A:943:ILE:O	1:A:947:ILE:HG22	2.13	0.48

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1512:CYS:O	1:A:1515:VAL:HG23	2.13	0.48
1:A:1662:THR:HA	1:A:1665:GLU:OE1	2.12	0.48
1:A:2322:ALA:O	1:A:2326:MET:HG2	2.13	0.48
1:A:2380:GLU:HA	1:A:2383:LEU:CD1	2.43	0.48
2:B:58:LEU:HB3	3:C:383:LYS:HE3	1.95	0.48
2:B:248:CYS:SG	2:B:454:LYS:HD2	2.53	0.48
1:A:202:GLU:HA	1:A:205:LYS:HB2	1.94	0.48
1:A:721:ASP:OD1	1:A:802:CYS:HA	2.13	0.48
1:A:1125:TYR:O	1:A:1129:LEU:HG	2.14	0.48
1:A:1211:HIS:HE1	1:A:1285:LEU:HD13	1.77	0.48
1:A:1756:LYS:NZ	1:A:1785:ILE:HG22	2.28	0.48
1:A:1842:CYS:CA	1:A:1933:ILE:HD11	2.43	0.48
1:A:2169:PHE:CZ	1:A:2411:LEU:HD13	2.49	0.48
1:A:2388:VAL:HA	1:A:2393:ARG:CD	2.42	0.48
1:A:2388:VAL:CA	1:A:2393:ARG:HD3	2.42	0.48
2:B:411:ARG:HB3	2:B:411:ARG:NH1	2.28	0.48
3:C:219:MET:CE	4:C:601:GTP:H2'	2.43	0.48
1:A:395:LEU:HB3	1:A:396:PRO:HD3	1.96	0.48
2:B:318:LEU:HB3	2:B:327:PHE:CE2	2.49	0.48
3:C:248:ARG:O	3:C:248:ARG:HG2	2.13	0.48
3:C:330:LEU:O	3:C:334:LEU:HG	2.14	0.48
1:A:40:ASP:CG	1:A:80:ILE:HG12	2.33	0.48
1:A:167:ALA:HB1	1:A:211:ARG:NH2	2.29	0.48
1:A:227:TYR:HA	1:A:273:MET:HE3	1.96	0.48
1:A:489:CYS:CA	3:C:412:ASN:HD22	2.26	0.48
1:A:507:ILE:HG13	3:C:454:PHE:CG	2.49	0.48
1:A:1022:THR:CB	1:A:1415:VAL:H	2.21	0.48
1:A:1203:VAL:HG12	1:A:1207:GLN:OE1	2.14	0.48
1:A:1407:LEU:CD1	1:A:1427:THR:HG21	2.43	0.48
1:A:1655:ASN:ND2	1:A:1663:GLU:OE2	2.45	0.48
1:A:2191:ARG:HD3	1:A:2349:GLU:OE1	2.14	0.48
2:B:269:PHE:CD2	2:B:304:LEU:HD13	2.48	0.48
3:C:485:LEU:HD22	3:C:490:LEU:CB	2.42	0.48
1:A:306:CYS:O	1:A:309:HIS:HB3	2.13	0.48
1:A:545:ALA:HB1	1:A:549:TYR:CZ	2.48	0.48
1:A:1324:LEU:HD13	1:A:1339:THR:N	2.28	0.48
1:A:1586:SER:HB3	1:A:1591:HIS:HD2	1.79	0.48
1:A:1605:TYR:HB2	1:A:1622:LEU:HD13	1.96	0.48
1:A:1657:LEU:N	1:A:1658:PRO:CD	2.77	0.48
1:A:2160:LEU:HD13	1:A:2202:SER:O	2.14	0.48
1:A:2183:GLN:HA	1:A:2185:THR:N	2.29	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:237:VAL:O	2:B:241:LEU:HG	2.13	0.48
1:A:36:SER:HA	1:A:77:HIS:CD2	2.49	0.48
1:A:40:ASP:HB3	1:A:83:ASP:OD2	2.14	0.48
1:A:634:LEU:HA	1:A:666:TYR:CD1	2.49	0.48
1:A:1300:LEU:HD11	1:A:1316:ILE:HA	1.96	0.48
1:A:1802:GLU:HA	1:A:1803:LEU:HA	1.51	0.48
1:A:2276:PRO:CB	1:A:2279:VAL:HB	2.43	0.48
1:A:2276:PRO:CA	1:A:2279:VAL:HB	2.44	0.48
2:B:186:HIS:CD2	2:B:542:PRO:HG3	2.49	0.48
2:B:454:LYS:O	2:B:458:VAL:HG23	2.14	0.48
3:C:170:LYS:N	3:C:170:LYS:HD2	2.28	0.48
1:A:138:GLU:HB3	1:A:147:SER:OG	2.13	0.48
1:A:494:THR:O	1:A:498:ILE:HG13	2.14	0.48
1:A:646:LEU:HD11	1:A:675:HIS:CE1	2.49	0.48
1:A:852:ALA:HB3	1:A:853:PRO:CD	2.44	0.48
1:A:942:THR:O	1:A:946:ILE:HD12	2.14	0.48
1:A:1453:LEU:HD22	1:A:1453:LEU:H	1.79	0.48
1:A:2300:LEU:HD23	1:A:2345:MET:HE3	1.96	0.48
1:A:2381:THR:HG22	1:A:2388:VAL:HG11	1.96	0.48
3:C:271:GLN:HG2	3:C:307:ILE:CD1	2.44	0.48
3:C:407:SER:HB3	3:C:420:ASP:OD1	2.14	0.48
1:A:108:LEU:HD12	1:A:109:ARG:H	1.78	0.47
1:A:320:ASP:HB3	1:A:322:LEU:HD11	1.95	0.47
1:A:728:ARG:NH1	1:A:801:VAL:HG22	2.29	0.47
1:A:770:VAL:O	1:A:771:GLU:CG	2.59	0.47
1:A:1107:ILE:HG12	1:A:1108:ASN:N	2.29	0.47
1:A:1849:ALA:HB2	1:A:1856:ILE:HD11	1.96	0.47
1:A:2380:GLU:CA	1:A:2383:LEU:HG	2.44	0.47
2:B:237:VAL:O	2:B:237:VAL:HG12	2.14	0.47
3:C:194:ALA:O	3:C:198:LEU:HG	2.14	0.47
3:C:219:MET:HE1	4:C:601:GTP:H2'	1.96	0.47
1:A:195:ALA:O	1:A:199:VAL:HG22	2.14	0.47
1:A:350:TRP:CE2	1:A:354:LEU:HD11	2.50	0.47
1:A:422:PRO:N	1:A:423:PRO:HD2	2.29	0.47
1:A:1530:LYS:NZ	1:A:1600:ILE:HD11	2.28	0.47
1:A:1627:TYR:CB	1:A:1791:ARG:HD3	2.44	0.47
1:A:1786:VAL:HG13	1:A:1823:ILE:CD1	2.30	0.47
1:A:2407:ARG:CB	1:A:2410:LEU:HD13	2.41	0.47
1:A:2419:TYR:CG	1:A:3609:ALA:HB1	2.49	0.47
2:B:43:ARG:HB3	2:B:44:GLU:OE1	2.13	0.47
2:B:315:SER:HB2	3:C:297:HIS:CE1	2.49	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:532:LEU:HD13	2:B:547:TYR:HE1	1.79	0.47
3:C:224:LEU:HD23	3:C:477:VAL:HG21	1.96	0.47
1:A:107:GLU:O	1:A:137:GLN:NE2	2.47	0.47
1:A:134:ARG:NH1	1:A:159:GLU:OE2	2.48	0.47
1:A:275:LEU:CD1	1:A:277:MET:HG2	2.44	0.47
1:A:329:HIS:CE1	1:A:348:PRO:HB3	2.49	0.47
1:A:638:VAL:HB	1:A:639:PHE:CA	2.41	0.47
1:A:740:VAL:CA	1:A:751:LEU:HD12	2.36	0.47
1:A:771:GLU:OE2	1:A:773:VAL:HG22	2.14	0.47
1:A:1021:GLN:HG2	1:A:1022:THR:HG22	1.96	0.47
1:A:2160:LEU:HD22	1:A:2203:GLY:CA	2.32	0.47
1:A:2374:ARG:HH11	1:A:2393:ARG:HH12	1.60	0.47
1:A:2385:VAL:HG13	1:A:2386:THR:N	2.29	0.47
3:C:171:LEU:C	3:C:172:LEU:HD12	2.34	0.47
3:C:172:LEU:HD12	3:C:172:LEU:N	2.30	0.47
3:C:313:THR:HG23	3:C:341:LYS:HG2	1.97	0.47
3:C:367:LEU:HD21	3:C:400:LEU:HD23	1.95	0.47
1:A:69:GLN:HB2	1:A:102:LYS:HZ2	1.78	0.47
1:A:121:VAL:HG12	1:A:162:ARG:NH1	2.29	0.47
1:A:265:GLU:HG2	1:A:310:ILE:HD13	1.95	0.47
1:A:295:LYS:HB3	1:A:297:VAL:HG23	1.97	0.47
1:A:602:PHE:H	1:A:603:ASN:HA	1.79	0.47
1:A:674:ARG:CA	1:A:677:HIS:HB3	2.45	0.47
1:A:822:LYS:HZ2	1:A:830:LEU:HG	1.79	0.47
1:A:1790:LEU:CD2	1:A:1823:ILE:HD12	2.43	0.47
2:B:64:LYS:O	2:B:68:VAL:HG23	2.13	0.47
1:A:153:LEU:HD23	1:A:187:LYS:HZ2	1.79	0.47
1:A:389:PRO:O	1:A:393:VAL:HG23	2.15	0.47
1:A:865:VAL:HG13	1:A:868:PHE:CB	2.44	0.47
1:A:2394:LEU:O	1:A:2394:LEU:HD23	2.15	0.47
1:A:38:ASP:N	1:A:39:PRO:HD2	2.29	0.47
1:A:246:ASP:HA	1:A:247:GLU:HA	1.58	0.47
1:A:247:GLU:HG2	1:A:248:VAL:HG13	1.96	0.47
1:A:337:GLN:HA	1:A:338:GLN:HA	1.60	0.47
1:A:403:ARG:O	1:A:407:THR:HG23	2.15	0.47
1:A:500:VAL:HG22	1:A:568:ILE:HD12	1.96	0.47
1:A:1627:TYR:HE2	1:A:1795:LEU:HB2	1.79	0.47
1:A:1753:THR:HG22	1:A:1792:LEU:HD11	1.96	0.47
1:A:1964:GLU:OE1	1:A:2078:LEU:HB3	2.15	0.47
1:A:2195:VAL:HG12	1:A:2205:ILE:CG2	2.45	0.47
2:B:206:VAL:HG13	2:B:206:VAL:O	2.15	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:312:PHE:HD2	2:B:318:LEU:HD11	1.79	0.47
2:B:500:CYS:SG	2:B:543:ALA:HB1	2.55	0.47
3:C:251:ASN:CB	3:C:277:SER:HB3	2.44	0.47
3:C:282:LEU:HD13	3:C:299:TYR:HD2	1.80	0.47
1:A:122:GLN:HG2	1:A:123:HIS:N	2.30	0.47
1:A:131:LYS:HD2	1:A:162:ARG:HH21	1.80	0.47
1:A:233:PHE:CZ	1:A:267:LYS:HG3	2.50	0.47
1:A:509:GLU:O	1:A:509:GLU:HG2	2.15	0.47
1:A:937:GLN:CB	1:A:981:VAL:HG21	2.44	0.47
1:A:1089:ILE:O	1:A:1422:MET:HE1	2.14	0.47
1:A:1195:ILE:O	1:A:1195:ILE:HG12	2.15	0.47
1:A:1351:THR:HG21	1:A:1416:PRO:HG2	1.95	0.47
1:A:1523:LYS:HB3	1:A:1526:LEU:HD13	1.97	0.47
1:A:1816:THR:H	1:A:1817:ALA:CB	2.27	0.47
1:A:2099:LEU:O	1:A:2124:VAL:HG21	2.14	0.47
1:A:2181:ASN:OD1	1:A:2188:PHE:HB2	2.14	0.47
1:A:2191:ARG:CB	1:A:2351:VAL:HG12	2.45	0.47
1:A:2393:ARG:HA	1:A:2396:CYS:SG	2.55	0.47
1:A:2407:ARG:N	1:A:2407:ARG:HD2	2.29	0.47
2:B:268:LEU:HB3	2:B:337:TYR:CE2	2.50	0.47
2:B:307:GLN:HG2	3:C:280:ASP:OD2	2.15	0.47
2:B:552:HIS:O	2:B:556:TYR:N	2.48	0.47
3:C:198:LEU:CD1	3:C:496:PHE:HB2	2.45	0.47
3:C:205:LEU:HB2	3:C:482:ARG:NH1	2.30	0.47
3:C:382:ARG:O	3:C:386:GLN:HG3	2.13	0.47
1:A:156:ILE:O	1:A:159:GLU:HB2	2.15	0.47
1:A:422:PRO:HD3	1:A:428:TYR:HE1	1.80	0.47
1:A:1324:LEU:HD22	1:A:1337:LEU:CB	2.45	0.47
1:A:1343:SER:CA	1:A:1344:GLN:CB	2.91	0.47
1:A:1532:ILE:HG13	1:A:1607:LEU:HD23	1.96	0.47
1:A:1657:LEU:HD12	1:A:1658:PRO:CA	2.44	0.47
1:A:2193:TYR:CE1	1:A:2205:ILE:HD12	2.49	0.47
2:B:188:PHE:O	2:B:192:GLN:HG2	2.14	0.47
2:B:359:CYS:HB3	3:C:454:PHE:CE2	2.49	0.47
3:C:184:VAL:HG13	3:C:188:MET:HA	1.96	0.47
3:C:198:LEU:O	3:C:493:LYS:HE3	2.15	0.47
3:C:244:GLU:OE1	3:C:252:GLN:HB2	2.14	0.47
3:C:467:GLN:OE1	3:C:467:GLN:N	2.43	0.47
1:A:136:SER:HA	1:A:139:ARG:CG	2.44	0.47
1:A:468:ASP:N	1:A:469:PRO:HD3	2.30	0.47
1:A:740:VAL:HG21	1:A:752:PHE:CZ	2.49	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1360:LEU:HB3	1:A:1361:GLU:OE1	2.15	0.47
1:A:1645:LEU:O	1:A:1649:GLU:HG3	2.14	0.47
1:A:1655:ASN:OD1	1:A:1727:GLU:HG3	2.15	0.47
1:A:1712:ILE:HD12	1:A:1712:ILE:N	2.30	0.47
1:A:1951:LEU:HD21	1:A:2102:MET:CE	2.45	0.47
2:B:313:ARG:HD3	2:B:327:PHE:HE2	1.78	0.47
3:C:187:GLN:HG2	3:C:187:GLN:O	2.15	0.47
3:C:229:PRO:HG3	3:C:467:GLN:HA	1.97	0.47
1:A:606:ASN:O	1:A:610:VAL:HG22	2.15	0.47
1:A:2336:ARG:NE	1:A:2336:ARG:HA	2.30	0.47
2:B:140:ALA:HB2	2:B:151:LEU:HD22	1.97	0.47
2:B:243:THR:O	2:B:246:LYS:NZ	2.48	0.47
2:B:479:LEU:H	2:B:479:LEU:HD12	1.79	0.47
1:A:232:ILE:HD12	1:A:232:ILE:N	2.30	0.46
1:A:492:CYS:HA	1:A:565:TYR:OH	2.16	0.46
1:A:672:CYS:HA	1:A:675:HIS:NE2	2.29	0.46
1:A:1945:VAL:HG23	1:A:1946:LEU:HD22	1.96	0.46
1:A:2303:SER:OG	1:A:2345:MET:HB3	2.15	0.46
1:A:2370:LYS:HB2	1:A:2372:PRO:HD3	1.97	0.46
1:A:85:LYS:HZ1	1:A:113:VAL:HG13	1.78	0.46
1:A:131:LYS:HE3	1:A:159:GLU:CD	2.35	0.46
1:A:262:THR:HA	1:A:265:GLU:OE1	2.15	0.46
1:A:622:GLY:O	1:A:623:ASN:HB3	2.15	0.46
1:A:735:ALA:HB1	1:A:822:LYS:HE3	1.97	0.46
1:A:1293:LEU:HD22	1:A:1322:LYS:HG2	1.97	0.46
1:A:1407:LEU:HD23	1:A:1453:LEU:HB2	1.96	0.46
1:A:1413:GLN:N	1:A:1414:THR:HA	2.27	0.46
1:A:2131:LEU:HD23	1:A:2137:PRO:C	2.35	0.46
2:B:314:LYS:O	3:C:295:LEU:HD11	2.16	0.46
1:A:120:SER:O	1:A:127:ALA:HB2	2.15	0.46
1:A:127:ALA:HA	1:A:130:THR:HG22	1.97	0.46
1:A:134:ARG:O	1:A:138:GLU:HG3	2.16	0.46
1:A:192:ILE:N	1:A:192:ILE:HD12	2.30	0.46
1:A:335:LEU:HG	1:A:342:TRP:CH2	2.50	0.46
1:A:419:ILE:HG21	1:A:441:THR:OG1	2.14	0.46
1:A:450:GLU:OE2	1:A:454:THR:HG21	2.15	0.46
1:A:508:VAL:HG23	1:A:509:GLU:OE1	2.14	0.46
1:A:846:ARG:NH2	1:A:921:ALA:O	2.48	0.46
1:A:1207:GLN:HG2	1:A:1289:ILE:HG13	1.98	0.46
1:A:1961:LEU:N	1:A:1961:LEU:HD12	2.30	0.46
3:C:319:ILE:HG23	3:C:370:LEU:HG	1.97	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:491:THR:HG22	1:A:493:GLY:H	1.81	0.46
1:A:1289:ILE:O	1:A:1293:LEU:N	2.44	0.46
1:A:1306:PRO:HG2	1:A:2306:THR:CG2	2.45	0.46
1:A:1307:ILE:HB	1:A:2306:THR:CG2	2.45	0.46
1:A:1793:LEU:HG	1:A:2417:PHE:CE2	2.51	0.46
1:A:2098:TRP:O	1:A:2102:MET:HG2	2.15	0.46
1:A:2131:LEU:CD2	1:A:2139:LYS:H	2.28	0.46
1:A:2160:LEU:O	1:A:2197:PRO:HB3	2.15	0.46
1:A:2214:LEU:HD22	1:A:2296:LEU:HD12	1.97	0.46
2:B:318:LEU:HD23	2:B:325:CYS:HB2	1.97	0.46
3:C:248:ARG:HD3	3:C:248:ARG:H	1.81	0.46
1:A:190:ASP:O	1:A:193:LEU:HG	2.16	0.46
1:A:420:ARG:O	1:A:424:ILE:HG13	2.15	0.46
1:A:656:HIS:HA	1:A:660:ILE:HD11	1.97	0.46
1:A:805:GLN:HG3	1:A:806:LEU:N	2.30	0.46
1:A:1209:ALA:O	1:A:1213:LEU:HG	2.15	0.46
1:A:1673:LEU:O	1:A:1677:VAL:HG22	2.15	0.46
1:A:1981:ILE:O	1:A:1985:GLU:HG3	2.15	0.46
1:A:2276:PRO:HB2	1:A:2279:VAL:N	2.18	0.46
2:B:191:HIS:O	2:B:195:LEU:HG	2.15	0.46
2:B:420:LEU:HA	2:B:425:LYS:HB2	1.97	0.46
1:A:1131:ALA:HB1	1:A:1206:TRP:NE1	2.18	0.46
1:A:1199:ASP:O	1:A:1203:VAL:HG23	2.16	0.46
1:A:1664:GLU:HB3	1:A:1668:ARG:HH12	1.80	0.46
1:A:2376:THR:HG23	1:A:2388:VAL:HG11	1.98	0.46
2:B:523:VAL:O	2:B:523:VAL:HG12	2.14	0.46
3:C:472:LYS:O	3:C:476:GLN:HG2	2.15	0.46
1:A:611:VAL:O	1:A:615:LEU:HD23	2.15	0.46
1:A:931:THR:HB	1:A:932:PRO:HD3	1.97	0.46
1:A:1286:GLN:NE2	1:A:1286:GLN:H	2.14	0.46
1:A:1597:PRO:HG3	1:A:1629:TRP:CD2	2.51	0.46
1:A:1666:LYS:NZ	1:A:1713:SER:H	2.12	0.46
1:A:2087:SER:OG	1:A:2132:PRO:HG3	2.15	0.46
1:A:2103:THR:O	1:A:2103:THR:HG22	2.16	0.46
1:A:2332:GLY:O	1:A:2358:CYS:HA	2.16	0.46
2:B:265:LEU:HD11	2:B:325:CYS:SG	2.55	0.46
2:B:309:TYR:OH	2:B:313:ARG:NH1	2.49	0.46
3:C:390:MET:O	3:C:394:LEU:HG	2.16	0.46
1:A:80:ILE:HB	1:A:106:GLN:OE1	2.15	0.46
1:A:742:MET:HA	1:A:742:MET:CE	2.45	0.46
1:A:1027:LEU:CD2	1:A:1085:CYS:HA	2.45	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1521:VAL:CG1	1:A:1522:ALA:HB2	2.41	0.46
2:B:154:THR:O	2:B:161:GLN:HG3	2.16	0.46
2:B:504:LEU:HD22	2:B:550:GLN:HG2	1.98	0.46
1:A:173:LYS:HA	1:A:176:ILE:CG2	2.46	0.46
1:A:415:ARG:C	1:A:418:PRO:HD2	2.36	0.46
1:A:1793:LEU:HG	1:A:2417:PHE:CZ	2.51	0.46
2:B:226:VAL:O	2:B:230:LEU:HG	2.16	0.46
1:A:436:VAL:HG23	1:A:436:VAL:O	2.16	0.46
1:A:624:ALA:O	1:A:628:LEU:HG	2.16	0.46
1:A:636:PRO:HB3	1:A:638:VAL:HG22	1.98	0.46
1:A:1809:HIS:O	1:A:1813:THR:OG1	2.26	0.46
1:A:2089:ILE:HG13	1:A:2128:ILE:HG13	1.97	0.46
1:A:2167:MET:HE3	1:A:2193:TYR:HB3	1.98	0.46
1:A:2380:GLU:HA	1:A:2383:LEU:CG	2.44	0.46
2:B:5:VAL:O	2:B:9:ASP:HB2	2.15	0.46
2:B:151:LEU:HD11	2:B:448:TRP:CZ2	2.49	0.46
2:B:326:LEU:CD1	2:B:427:PHE:HB3	2.46	0.46
3:C:185:ASP:HB2	3:C:189:ASN:HB2	1.98	0.46
1:A:114:THR:HG22	1:A:134:ARG:CG	2.34	0.45
1:A:424:ILE:O	1:A:424:ILE:HG22	2.16	0.45
1:A:558:ILE:HG23	1:A:612:ILE:CG2	2.46	0.45
1:A:566:LYS:HD2	1:A:625:LYS:HZ3	1.79	0.45
1:A:730:LEU:HG	1:A:730:LEU:O	2.17	0.45
1:A:1206:TRP:O	1:A:1210:ILE:HG13	2.16	0.45
1:A:1597:PRO:HG2	1:A:1625:TRP:CZ2	2.51	0.45
1:A:2055:LEU:HD23	1:A:2059:LEU:HB2	1.98	0.45
1:A:2365:LEU:CD1	1:A:2367:VAL:HB	2.45	0.45
2:B:45:ASP:O	2:B:147:LYS:HD3	2.16	0.45
2:B:47:ILE:HD13	2:B:445:TYR:HA	1.98	0.45
3:C:205:LEU:HD23	3:C:265:ILE:HG23	1.98	0.45
1:A:165:ARG:NE	1:A:165:ARG:HA	2.32	0.45
1:A:256:THR:O	1:A:260:LEU:HG	2.16	0.45
1:A:313:THR:O	1:A:313:THR:HG22	2.16	0.45
1:A:460:VAL:HB	1:A:473:ILE:HD13	1.97	0.45
1:A:633:ALA:O	1:A:636:PRO:HD2	2.16	0.45
1:A:748:TYR:O	1:A:750:PRO:HD3	2.16	0.45
1:A:1281:ASP:HB2	1:A:1282:PRO:CD	2.46	0.45
1:A:1349:LEU:HB3	1:A:1355:TYR:CE1	2.50	0.45
1:A:2099:LEU:O	1:A:2102:MET:HG2	2.16	0.45
1:A:2213:PRO:HG3	1:A:2342:LEU:HD22	1.97	0.45
1:A:2215:PHE:CA	1:A:2338:LEU:HB3	2.45	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2276:PRO:HG2	1:A:2280:MET:CE	2.46	0.45
1:A:2369:GLU:HG3	1:A:2369:GLU:O	2.16	0.45
3:C:417:LEU:HB2	3:C:418:PRO:CD	2.43	0.45
1:A:170:LYS:O	1:A:174:GLU:HB2	2.16	0.45
1:A:249:LYS:O	1:A:250:LEU:HD23	2.16	0.45
1:A:251:LEU:H	1:A:251:LEU:CD2	2.28	0.45
1:A:335:LEU:HA	1:A:336:THR:HA	1.61	0.45
1:A:504:LEU:HD13	2:B:359:CYS:CB	2.46	0.45
1:A:1411:LYS:C	1:A:1413:GLN:HB2	2.37	0.45
1:A:1596:GLU:CB	1:A:1597:PRO:HD2	2.47	0.45
1:A:1605:TYR:CB	1:A:1622:LEU:HD13	2.47	0.45
1:A:1664:GLU:HB3	1:A:1668:ARG:NH1	2.31	0.45
1:A:2388:VAL:HG12	1:A:2393:ARG:CD	2.46	0.45
2:B:47:ILE:HG22	2:B:142:TYR:CE1	2.51	0.45
1:A:150:SER:O	1:A:152:LEU:N	2.50	0.45
1:A:199:VAL:CB	1:A:263:VAL:HG22	2.46	0.45
1:A:247:GLU:H	1:A:253:LEU:CD1	2.27	0.45
1:A:249:LYS:HG2	1:A:297:VAL:CG2	2.46	0.45
1:A:408:VAL:O	1:A:412:ILE:HG12	2.17	0.45
1:A:458:GLU:CG	1:A:501:LEU:HD22	2.45	0.45
1:A:653:LEU:HD23	1:A:663:ALA:HB3	1.98	0.45
1:A:1034:ILE:HG22	1:A:1102:LYS:NZ	2.31	0.45
1:A:1197:ILE:HG23	1:A:1318:GLU:OE2	2.16	0.45
1:A:1858:TYR:HB3	1:A:1862:VAL:HG23	1.97	0.45
1:A:1954:GLU:O	1:A:1958:VAL:HG13	2.17	0.45
1:A:2155:LYS:HB3	1:A:2158:GLU:OE1	2.17	0.45
1:A:2171:SER:HA	1:A:2192:HIS:CE1	2.45	0.45
1:A:2183:GLN:CA	1:A:2184:GLU:C	2.85	0.45
1:A:2353:ILE:HG22	1:A:2354:ASP:H	1.79	0.45
2:B:137:LEU:N	2:B:154:THR:HG1	2.13	0.45
2:B:169:LEU:CD1	2:B:180:LEU:HD12	2.46	0.45
3:C:326:THR:HG22	3:C:326:THR:O	2.16	0.45
3:C:391:ILE:HG21	3:C:421:PHE:CE1	2.52	0.45
1:A:148:ARG:HA	1:A:153:LEU:HD22	1.99	0.45
1:A:484:ASP:OD2	1:A:498:ILE:HD11	2.17	0.45
1:A:716:ILE:HG23	1:A:720:LYS:HZ3	1.81	0.45
1:A:934:GLY:O	1:A:981:VAL:HG13	2.17	0.45
1:A:1184:ASN:ND2	1:A:1288:SER:HG	2.15	0.45
1:A:1307:ILE:CB	1:A:2306:THR:HG21	2.46	0.45
1:A:1486:GLU:OE1	1:A:1611:GLN:HB2	2.16	0.45
1:A:1711:LEU:HD22	1:A:1712:ILE:CD1	2.46	0.45

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2141:LEU:HD13	1:A:2151:PRO:HA	1.99	0.45
2:B:310:ARG:NH1	3:C:284:ASN:HD21	2.15	0.45
3:C:490:LEU:HD13	3:C:498:TYR:CG	2.52	0.45
1:A:207:LEU:N	1:A:207:LEU:HD12	2.31	0.45
1:A:903:ARG:N	1:A:903:ARG:HD2	2.31	0.45
1:A:1710:GLN:HA	1:A:1714:SER:HA	1.99	0.45
1:A:1796:LEU:HB2	1:A:1807:LEU:HD23	1.98	0.45
1:A:2325:SER:HB3	1:A:2374:ARG:HG3	1.98	0.45
1:A:2326:MET:HG3	1:A:2400:LEU:HD23	1.99	0.45
1:A:2410:LEU:H	1:A:2410:LEU:HD12	1.82	0.45
2:B:458:VAL:HG12	2:B:479:LEU:HD21	1.99	0.45
3:C:326:THR:HG21	3:C:390:MET:HE2	1.97	0.45
1:A:148:ARG:CA	1:A:153:LEU:HD22	2.47	0.45
1:A:148:ARG:CB	1:A:182:LYS:HG2	2.47	0.45
1:A:199:VAL:HG12	1:A:212:GLN:HE22	1.81	0.45
1:A:295:LYS:HB3	1:A:297:VAL:CG2	2.47	0.45
1:A:857:PHE:CZ	1:A:1190:ALA:HB2	2.52	0.45
1:A:1413:GLN:HE22	1:A:1460:GLN:HB2	1.82	0.45
1:A:1414:THR:CB	1:A:1415:VAL:HB	2.46	0.45
1:A:1462:LEU:CB	1:A:1470:SER:HB3	2.47	0.45
1:A:2023:HIS:HA	1:A:2026:SER:OG	2.17	0.45
2:B:225:ARG:HH22	3:C:519:LEU:HB3	1.80	0.45
2:B:237:VAL:CG2	2:B:482:ILE:HG21	2.47	0.45
2:B:521:MET:O	2:B:523:VAL:HG23	2.16	0.45
3:C:421:PHE:CE2	3:C:423:ASP:HB2	2.52	0.45
1:A:129:ALA:O	1:A:132:ASP:HB2	2.17	0.45
1:A:135:LYS:O	1:A:139:ARG:HG2	2.17	0.45
1:A:596:ALA:HA	1:A:597:PHE:HA	1.77	0.45
1:A:740:VAL:HG12	1:A:751:LEU:CD1	2.47	0.45
1:A:1352:LEU:HD12	1:A:1353:GLN:CA	2.43	0.45
1:A:2295:LEU:HB2	1:A:2379:ILE:HG21	1.99	0.45
3:C:335:GLN:NE2	3:C:394:LEU:O	2.50	0.45
1:A:274:GLN:CB	1:A:275:LEU:HA	2.47	0.45
1:A:275:LEU:H	1:A:276:VAL:HA	1.81	0.45
1:A:562:GLU:HG2	1:A:563:THR:N	2.32	0.45
1:A:809:SER:O	1:A:813:ILE:HG22	2.17	0.45
1:A:983:LEU:HD12	1:A:1015:PHE:CE1	2.50	0.45
1:A:1816:THR:HG23	1:A:1819:TRP:HE3	1.82	0.45
1:A:1835:VAL:HG22	1:A:1836:TYR:N	2.31	0.45
1:A:2089:ILE:HD11	1:A:2128:ILE:CD1	2.46	0.45
1:A:2137:PRO:HA	1:A:2154:PHE:O	2.16	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2162:LEU:O	1:A:2166:ILE:HG13	2.17	0.45
1:A:2317:TYR:HA	1:A:2348:GLY:O	2.17	0.45
2:B:315:SER:HB2	3:C:297:HIS:CD2	2.52	0.45
3:C:258:PHE:HZ	3:C:260:ILE:HD11	1.82	0.45
1:A:275:LEU:N	1:A:276:VAL:HA	2.32	0.45
1:A:294:CYS:C	1:A:295:LYS:HD3	2.37	0.45
1:A:481:TYR:O	1:A:485:GLN:HB2	2.17	0.45
1:A:556:LYS:O	1:A:569:LEU:HD13	2.16	0.45
1:A:1048:VAL:HG13	1:A:1052:PHE:CE2	2.42	0.45
1:A:1467:LYS:O	1:A:1471:THR:HG23	2.17	0.45
1:A:1610:VAL:HA	1:A:1611:GLN:HA	1.47	0.45
1:A:2169:PHE:CD1	1:A:2414:LEU:HD23	2.53	0.45
2:B:312:PHE:CB	2:B:318:LEU:HG	2.45	0.45
3:C:260:ILE:CG2	3:C:264:ARG:HA	2.46	0.45
1:A:134:ARG:HH22	1:A:155:ARG:HD3	1.82	0.44
1:A:365:LEU:HD22	1:A:401:LEU:CD1	2.47	0.44
1:A:1530:LYS:HZ1	1:A:1600:ILE:HD11	1.83	0.44
1:A:1645:LEU:HA	1:A:1648:ARG:HG2	1.99	0.44
1:A:2025:ARG:NH1	1:A:2053:GLU:HG2	2.32	0.44
3:C:311:LEU:O	3:C:315:CYS:HB2	2.17	0.44
1:A:471:MET:O	1:A:472:THR:OG1	2.30	0.44
1:A:656:HIS:CA	1:A:660:ILE:HD11	2.48	0.44
1:A:742:MET:HA	1:A:742:MET:HE2	2.00	0.44
1:A:820:LEU:HD13	1:A:885:ARG:CB	2.47	0.44
1:A:1054:LEU:HD13	1:A:1415:VAL:CG1	2.46	0.44
1:A:1077:VAL:O	1:A:1080:LEU:HD23	2.17	0.44
1:A:1334:PRO:HG2	1:A:1335:LEU:CD2	2.46	0.44
1:A:1856:ILE:O	1:A:1856:ILE:HG13	2.17	0.44
1:A:1958:VAL:O	1:A:1961:LEU:HD12	2.17	0.44
1:A:2276:PRO:HG2	1:A:2280:MET:HE2	2.00	0.44
2:B:152:LEU:HD12	2:B:152:LEU:O	2.17	0.44
2:B:205:SER:O	2:B:259:ARG:HA	2.17	0.44
2:B:296:PRO:HB3	3:C:246:LYS:CD	2.46	0.44
3:C:205:LEU:HB2	3:C:482:ARG:NH2	2.31	0.44
1:A:575:ALA:HA	3:C:453:LEU:HD12	1.99	0.44
1:A:638:VAL:H	1:A:639:PHE:HA	1.82	0.44
1:A:675:HIS:H	1:A:676:ASP:C	2.20	0.44
1:A:987:LEU:HG	1:A:988:GLU:N	2.27	0.44
1:A:1054:LEU:HB3	1:A:1415:VAL:HG11	1.98	0.44
1:A:1346:LEU:CD1	1:A:1349:LEU:HD11	2.45	0.44
1:A:1955:LEU:O	1:A:1958:VAL:HG22	2.18	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:48:CYS:SG	2:B:418:VAL:HG13	2.57	0.44
2:B:323:ILE:HG13	2:B:324:ASN:N	2.32	0.44
3:C:221:MET:HB3	3:C:238:PHE:CE2	2.52	0.44
3:C:413:VAL:HG12	3:C:413:VAL:O	2.17	0.44
1:A:276:VAL:CG1	1:A:280:LEU:HG	2.29	0.44
1:A:1318:GLU:O	1:A:1321:VAL:HG12	2.18	0.44
1:A:2212:THR:O	1:A:2343:ILE:HG22	2.16	0.44
1:A:2371:VAL:N	1:A:2372:PRO:CD	2.80	0.44
2:B:66:SER:O	2:B:70:THR:HG23	2.16	0.44
1:A:602:PHE:N	1:A:603:ASN:HA	2.32	0.44
1:A:770:VAL:HG11	1:A:814:ARG:HH12	1.82	0.44
1:A:822:LYS:HZ3	1:A:829:VAL:H	1.63	0.44
1:A:1521:VAL:HG13	1:A:1522:ALA:N	2.31	0.44
3:C:224:LEU:CD2	3:C:477:VAL:HG21	2.47	0.44
1:A:287:VAL:C	1:A:290:PRO:HD2	2.38	0.44
1:A:451:ALA:HB3	2:B:351:LEU:CD1	2.47	0.44
1:A:716:ILE:O	1:A:720:LYS:HG2	2.17	0.44
1:A:2055:LEU:HD13	1:A:2070:PRO:CG	2.48	0.44
1:A:2334:GLY:N	1:A:2357:VAL:O	2.47	0.44
1:A:2366:ARG:HA	1:A:2366:ARG:HE	1.81	0.44
2:B:49:VAL:HG22	2:B:149:LEU:HD23	2.00	0.44
2:B:541:GLY:N	3:C:339:MET:HG2	2.32	0.44
1:A:302:LEU:CD2	1:A:341:GLY:HA2	2.48	0.44
1:A:619:THR:HA	1:A:620:THR:HA	1.61	0.44
1:A:1664:GLU:O	1:A:1667:GLU:HG2	2.17	0.44
1:A:2423:VAL:HG22	1:A:2423:VAL:O	2.16	0.44
2:B:162:LEU:HD13	3:C:326:THR:CG2	2.47	0.44
3:C:241:GLN:O	4:C:601:GTP:O3'	2.30	0.44
3:C:301:GLU:O	3:C:305:LEU:HG	2.17	0.44
1:A:285:GLU:O	1:A:289:THR:HG23	2.18	0.44
1:A:1341:THR:HB	1:A:1405:GLN:HE22	1.83	0.44
1:A:1727:GLU:OE1	1:A:1731:LYS:N	2.51	0.44
1:A:1827:PHE:CE2	1:A:1859:PRO:HB2	2.52	0.44
2:B:264:ARG:CG	2:B:326:LEU:HD12	2.47	0.44
2:B:348:VAL:HG13	3:C:376:ARG:HH22	1.82	0.44
3:C:215:THR:HA	3:C:323:ASP:HB2	2.00	0.44
1:A:336:THR:HG23	1:A:336:THR:O	2.18	0.44
1:A:419:ILE:CG2	1:A:442:ALA:H	2.29	0.44
1:A:455:ALA:O	1:A:458:GLU:HG3	2.17	0.44
1:A:607:ALA:O	1:A:611:VAL:HG23	2.17	0.44
1:A:638:VAL:N	1:A:639:PHE:HA	2.33	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:671:HIS:CD2	1:A:672:CYS:H	2.35	0.44
1:A:734:TRP:HE3	3:C:201:GLN:HE22	1.64	0.44
1:A:866:ILE:CD1	1:A:1291:VAL:HG12	2.48	0.44
1:A:1207:GLN:HG2	1:A:1289:ILE:HG12	2.00	0.44
1:A:1610:VAL:HG23	1:A:1610:VAL:O	2.18	0.44
1:A:2170:LEU:HD11	1:A:2355:TYR:CE2	2.51	0.44
1:A:2376:THR:CG2	1:A:2388:VAL:HG11	2.48	0.44
2:B:7:LEU:O	2:B:11:LEU:HG	2.18	0.44
1:A:420:ARG:HA	1:A:423:PRO:CG	2.48	0.43
1:A:713:LEU:N	1:A:713:LEU:HD12	2.33	0.43
1:A:1292:GLN:CG	1:A:1322:LYS:HD3	2.48	0.43
1:A:1612:ALA:O	1:A:1619:TRP:NE1	2.44	0.43
1:A:1627:TYR:HD1	1:A:1791:ARG:HH11	1.66	0.43
1:A:2140:LEU:N	1:A:2140:LEU:HD23	2.33	0.43
2:B:63:GLU:HG3	2:B:270:GLN:HE22	1.83	0.43
2:B:260:PRO:O	2:B:441:GLU:HB3	2.18	0.43
1:A:729:LYS:CB	1:A:901:ILE:HD11	2.49	0.43
1:A:1092:ILE:H	1:A:1120:LYS:HZ3	1.65	0.43
1:A:1204:GLN:NE2	1:A:1322:LYS:HB2	2.32	0.43
1:A:1335:LEU:HG	1:A:1336:ARG:N	2.33	0.43
1:A:1793:LEU:O	1:A:1797:VAL:HG22	2.17	0.43
1:A:1844:LEU:HD23	1:A:1848:VAL:HG13	2.01	0.43
1:A:2023:HIS:CD2	1:A:2027:ILE:HG23	2.53	0.43
2:B:305:GLU:HG3	2:B:334:ALA:HB3	1.99	0.43
2:B:323:ILE:HG13	2:B:324:ASN:H	1.83	0.43
2:B:348:VAL:HG13	2:B:348:VAL:O	2.19	0.43
1:A:575:ALA:CA	3:C:453:LEU:HD12	2.48	0.43
1:A:649:VAL:HG11	1:A:667:THR:CB	2.29	0.43
1:A:895:LYS:HD3	1:A:907:LYS:HE2	2.00	0.43
1:A:1015:PHE:CZ	1:A:1080:LEU:HG	2.53	0.43
3:C:322:GLN:HG2	3:C:330:LEU:CD1	2.48	0.43
1:A:104:LEU:HD21	1:A:133:MET:HB3	1.99	0.43
1:A:262:THR:CG2	1:A:303:VAL:HG21	2.49	0.43
1:A:1521:VAL:HA	1:A:1522:ALA:HA	1.85	0.43
1:A:1713:SER:O	1:A:1714:SER:OG	2.27	0.43
1:A:1757:LEU:HB3	1:A:1816:THR:HG23	1.99	0.43
1:A:1816:THR:N	1:A:1817:ALA:HB2	2.32	0.43
1:A:1832:HIS:CD2	1:A:1834:GLU:H	2.36	0.43
1:A:1935:ASP:HA	1:A:1938:SER:HG	1.82	0.43
1:A:2055:LEU:CB	1:A:2070:PRO:HG2	2.48	0.43
1:A:2281:LYS:O	1:A:2285:GLU:HG2	2.18	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2388:VAL:CB	1:A:2393:ARG:HD3	2.47	0.43
1:A:2393:ARG:NH2	1:A:2397:GLU:OE2	2.51	0.43
1:A:295:LYS:HA	1:A:296:CYS:C	2.38	0.43
1:A:637:THR:HB	1:A:638:VAL:CA	2.49	0.43
1:A:1454:GLY:O	1:A:1458:THR:HG23	2.17	0.43
1:A:1827:PHE:HZ	1:A:1859:PRO:HB2	1.84	0.43
1:A:1838:ARG:HD3	1:A:1929:CYS:SG	2.58	0.43
1:A:2058:PRO:HG2	1:A:2059:LEU:CD1	2.49	0.43
1:A:2059:LEU:N	1:A:2059:LEU:HD12	2.33	0.43
1:A:2284:LEU:HD11	1:A:2288:MET:CE	2.47	0.43
2:B:57:ALA:HA	2:B:159:ASN:HD22	1.84	0.43
2:B:267:PHE:CE2	2:B:308:ILE:HG21	2.54	0.43
2:B:352:LEU:HD13	3:C:460:TYR:CD2	2.53	0.43
3:C:221:MET:HE2	3:C:221:MET:HA	2.01	0.43
3:C:295:LEU:HG	3:C:297:HIS:H	1.83	0.43
1:A:89:SER:O	1:A:126:ARG:NE	2.51	0.43
1:A:130:THR:O	1:A:133:MET:HB2	2.18	0.43
1:A:317:ASP:OD1	1:A:357:SER:HB2	2.18	0.43
1:A:365:LEU:HD11	1:A:401:LEU:HD21	1.99	0.43
1:A:420:ARG:NH2	1:A:446:VAL:HG12	2.33	0.43
1:A:489:CYS:CB	3:C:412:ASN:HD22	2.32	0.43
1:A:613:PHE:CD1	1:A:629:ILE:HD12	2.53	0.43
1:A:1027:LEU:HD22	1:A:1084:HIS:O	2.18	0.43
1:A:1305:ASN:HA	1:A:1306:PRO:HA	1.74	0.43
1:A:2067:SER:OG	1:A:2069:ILE:HG23	2.19	0.43
2:B:351:LEU:O	2:B:355:LEU:HG	2.19	0.43
3:C:213:GLN:HB2	3:C:276:PRO:HD2	2.00	0.43
1:A:379:ALA:HB3	1:A:382:GLU:CD	2.39	0.43
1:A:892:ARG:N	1:A:903:ARG:HE	2.16	0.43
1:A:1501:MET:O	1:A:1503:MET:HB2	2.19	0.43
1:A:1935:ASP:O	1:A:1939:SER:N	2.51	0.43
1:A:1959:THR:HA	1:A:1960:VAL:C	2.39	0.43
2:B:186:HIS:CD2	2:B:493:THR:HG22	2.53	0.43
2:B:328:THR:O	2:B:328:THR:HG22	2.19	0.43
3:C:207:VAL:HG21	3:C:477:VAL:HG13	2.01	0.43
1:A:81:GLN:HB3	1:A:113:VAL:HG22	2.01	0.43
1:A:285:GLU:OE1	1:A:285:GLU:N	2.51	0.43
1:A:463:LEU:HD21	1:A:509:GLU:OE1	2.19	0.43
1:A:554:SER:OG	1:A:608:LYS:HE3	2.17	0.43
1:A:1306:PRO:HB2	1:A:2306:THR:HG22	2.00	0.43
1:A:2166:ILE:O	1:A:2170:LEU:HG	2.18	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2273:ARG:H	1:A:2274:ASP:HB3	1.82	0.43
1:A:2342:LEU:CD1	1:A:2353:ILE:HD11	2.47	0.43
1:A:2385:VAL:HG22	1:A:2386:THR:HG23	2.00	0.43
2:B:46:GLU:HB3	2:B:442:LEU:HD21	2.00	0.43
2:B:154:THR:HB	2:B:161:GLN:HE21	1.82	0.43
2:B:240:LEU:HD11	2:B:478:ILE:HG22	2.00	0.43
2:B:271:LEU:HG	2:B:336:VAL:CG1	2.49	0.43
2:B:441:GLU:O	2:B:441:GLU:HG3	2.18	0.43
1:A:552:VAL:HG22	1:A:556:LYS:CD	2.49	0.43
1:A:739:ALA:CA	3:C:172:LEU:HD23	2.48	0.43
1:A:932:PRO:O	1:A:933:LEU:HD23	2.19	0.43
1:A:1523:LYS:HG3	1:A:1524:SER:N	2.33	0.43
1:A:1955:LEU:HA	1:A:1958:VAL:HG22	2.01	0.43
1:A:2055:LEU:HD13	1:A:2070:PRO:HG2	2.01	0.43
2:B:509:SER:HA	2:B:512:GLN:CD	2.39	0.43
3:C:456:LEU:HD12	3:C:456:LEU:N	2.34	0.43
1:A:206:LEU:HD12	1:A:206:LEU:N	2.34	0.43
1:A:429:VAL:O	1:A:430:THR:OG1	2.32	0.43
1:A:767:ASN:HD22	1:A:806:LEU:HD22	1.81	0.43
1:A:866:ILE:HD13	1:A:1291:VAL:CG1	2.49	0.43
1:A:881:ASN:HD22	1:A:1306:PRO:HB3	1.84	0.43
1:A:903:ARG:HD2	1:A:903:ARG:H	1.83	0.43
1:A:1478:LYS:NZ	1:A:1532:ILE:HG21	2.33	0.43
1:A:1981:ILE:CG1	1:A:2067:SER:HA	2.49	0.43
1:A:2388:VAL:CG1	1:A:2393:ARG:HD3	2.48	0.43
2:B:48:CYS:SG	2:B:422:LEU:HD21	2.59	0.43
3:C:205:LEU:CB	3:C:482:ARG:HH22	2.32	0.43
3:C:454:PHE:O	3:C:457:LEU:HG	2.19	0.43
1:A:122:GLN:HG2	1:A:126:ARG:HD2	2.00	0.42
1:A:1037:VAL:O	1:A:1037:VAL:HG12	2.19	0.42
1:A:1040:LEU:H	1:A:1040:LEU:CD2	2.32	0.42
1:A:1526:LEU:HD12	1:A:1526:LEU:N	2.34	0.42
1:A:1834:GLU:O	1:A:1837:VAL:HG22	2.18	0.42
1:A:2069:ILE:N	1:A:2070:PRO:CD	2.82	0.42
1:A:2215:PHE:HB2	1:A:2338:LEU:HB2	2.01	0.42
2:B:6:SER:HB3	2:B:138:LEU:O	2.19	0.42
2:B:238:LEU:CD1	2:B:258:CYS:HB2	2.49	0.42
1:A:389:PRO:N	1:A:390:PRO:CD	2.83	0.42
1:A:718:LEU:HD12	1:A:718:LEU:N	2.33	0.42
1:A:863:SER:HB3	1:A:869:ILE:CG1	2.41	0.42
1:A:1349:LEU:HD23	1:A:1355:TYR:CZ	2.54	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1483:LEU:HD23	1:A:1484:ASP:N	2.33	0.42
1:A:807:VAL:HA	1:A:808:HIS:HA	1.55	0.42
1:A:1086:PRO:HB3	1:A:1090:GLN:CB	2.49	0.42
1:A:1414:THR:HA	1:A:1415:VAL:CB	2.48	0.42
1:A:1844:LEU:O	1:A:1844:LEU:HD23	2.18	0.42
1:A:2120:THR:C	1:A:2144:GLY:HA3	2.40	0.42
1:A:2141:LEU:HD13	1:A:2151:PRO:HB3	2.01	0.42
1:A:2207:TRP:NE1	1:A:2208:VAL:HG12	2.34	0.42
1:A:2410:LEU:HD12	1:A:2410:LEU:N	2.34	0.42
2:B:49:VAL:HG13	2:B:149:LEU:O	2.19	0.42
3:C:178:LYS:O	3:C:179:HIS:ND1	2.49	0.42
3:C:204:VAL:O	3:C:204:VAL:HG13	2.20	0.42
3:C:213:GLN:HE21	3:C:276:PRO:HD2	1.84	0.42
1:A:332:LYS:N	1:A:333:PRO:CD	2.82	0.42
1:A:388:VAL:N	1:A:389:PRO:CD	2.82	0.42
1:A:422:PRO:HG3	1:A:428:TYR:OH	2.19	0.42
1:A:552:VAL:O	1:A:556:LYS:HG3	2.20	0.42
1:A:881:ASN:ND2	1:A:1306:PRO:HB3	2.35	0.42
1:A:1417:ILE:O	1:A:1421:LEU:HG	2.18	0.42
1:A:1650:LYS:O	1:A:1653:VAL:HG12	2.19	0.42
1:A:2055:LEU:CD2	1:A:2059:LEU:HB2	2.50	0.42
1:A:2153:LEU:C	1:A:2153:LEU:HD12	2.40	0.42
2:B:233:LEU:O	2:B:237:VAL:HB	2.18	0.42
2:B:479:LEU:HD12	2:B:479:LEU:N	2.33	0.42
1:A:202:GLU:HA	1:A:205:LYS:HE3	2.00	0.42
1:A:295:LYS:CA	1:A:296:CYS:CB	2.95	0.42
1:A:365:LEU:HD13	1:A:401:LEU:HD21	2.01	0.42
1:A:621:ILE:HG23	1:A:621:ILE:O	2.20	0.42
1:A:762:LYS:HD2	1:A:763:GLY:N	2.34	0.42
1:A:931:THR:HB	1:A:932:PRO:CD	2.49	0.42
1:A:1316:ILE:O	1:A:1320:VAL:HG23	2.20	0.42
1:A:1415:VAL:HG22	1:A:1415:VAL:O	2.18	0.42
1:A:1483:LEU:HD23	1:A:1485:ILE:HG13	2.01	0.42
1:A:1586:SER:HB3	1:A:1591:HIS:CD2	2.55	0.42
1:A:1807:LEU:N	1:A:1807:LEU:HD12	2.34	0.42
1:A:1832:HIS:CG	1:A:1837:VAL:HG21	2.54	0.42
1:A:2169:PHE:HZ	1:A:2411:LEU:HD13	1.84	0.42
1:A:2177:PHE:CZ	1:A:2400:LEU:HD11	2.54	0.42
1:A:2194:SER:H	1:A:2206:GLN:HE21	1.67	0.42
1:A:2277:LEU:CB	1:A:2278:HIS:CB	2.92	0.42
1:A:2284:LEU:HD11	1:A:2288:MET:HE2	2.01	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:272:ASN:O	3:C:428:LEU:HD11	2.19	0.42
2:B:482:ILE:HG22	2:B:482:ILE:O	2.19	0.42
3:C:188:MET:HB2	3:C:507:ARG:NH1	2.33	0.42
3:C:198:LEU:HD23	3:C:260:ILE:CD1	2.50	0.42
1:A:347:GLU:HB2	1:A:348:PRO:HD3	2.01	0.42
1:A:566:LYS:HZ1	1:A:620:THR:HG23	1.83	0.42
1:A:1293:LEU:HD22	1:A:1322:LYS:CD	2.50	0.42
1:A:1638:SER:HA	1:A:1676:ALA:HA	2.01	0.42
1:A:2167:MET:HG3	1:A:2193:TYR:O	2.19	0.42
1:A:2341:VAL:CG2	1:A:2375:MET:HE3	2.49	0.42
3:C:341:LYS:HE3	3:C:363:TYR:O	2.19	0.42
1:A:80:ILE:HG21	1:A:106:GLN:NE2	2.21	0.42
1:A:131:LYS:HE3	1:A:159:GLU:CB	2.50	0.42
1:A:410:ARG:NH1	1:A:471:MET:H	2.16	0.42
1:A:503:LEU:HD13	1:A:572:MET:CE	2.50	0.42
1:A:554:SER:CB	1:A:608:LYS:HE3	2.50	0.42
1:A:1832:HIS:CB	1:A:1837:VAL:HG21	2.49	0.42
1:A:2166:ILE:HD11	1:A:2358:CYS:SG	2.60	0.42
1:A:2177:PHE:O	1:A:2181:ASN:N	2.53	0.42
1:A:2356:ASN:OD1	1:A:2357:VAL:N	2.53	0.42
1:A:118:PHE:CE1	1:A:158:ARG:HG2	2.54	0.42
1:A:163:ASP:HB3	1:A:171:GLN:HG3	2.02	0.42
1:A:473:ILE:HA	1:A:476:ASP:CB	2.47	0.42
1:A:812:ARG:HA	1:A:812:ARG:HE	1.84	0.42
1:A:1324:LEU:HD22	1:A:1337:LEU:HB2	2.01	0.42
1:A:1489:LYS:O	1:A:1493:THR:HG23	2.20	0.42
1:A:1816:THR:HG1	1:A:1819:TRP:HE3	1.65	0.42
1:A:2099:LEU:HA	1:A:2102:MET:SD	2.59	0.42
1:A:2212:THR:HG22	1:A:2345:MET:HG2	2.00	0.42
2:B:268:LEU:HB3	2:B:337:TYR:CZ	2.53	0.42
2:B:520:THR:HG22	2:B:558:PHE:CD2	2.54	0.42
3:C:379:PHE:CD2	3:C:463:HIS:HB3	2.54	0.42
1:A:190:ASP:CA	1:A:193:LEU:HG	2.48	0.42
1:A:364:PHE:CD2	1:A:365:LEU:HD12	2.41	0.42
1:A:1462:LEU:HB2	1:A:1470:SER:HB3	2.02	0.42
1:A:1756:LYS:HZ2	1:A:1785:ILE:HG22	1.84	0.42
1:A:1961:LEU:HD12	1:A:1961:LEU:H	1.85	0.42
1:A:2340:ASN:O	1:A:2352:HIS:HA	2.19	0.42
3:C:270:THR:CG2	3:C:311:LEU:HD21	2.49	0.42
3:C:477:VAL:HA	3:C:480:MET:HG2	2.02	0.42
1:A:138:GLU:HG2	1:A:147:SER:HA	2.01	0.42

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:305:ARG:HA	1:A:332:LYS:NZ	2.33	0.42
1:A:329:HIS:NE2	1:A:348:PRO:HB3	2.35	0.42
1:A:386:GLU:O	1:A:390:PRO:HD3	2.20	0.42
1:A:387:ASP:O	1:A:390:PRO:HD2	2.20	0.42
1:A:1139:ILE:HD13	1:A:1207:GLN:NE2	2.32	0.42
1:A:1514:SER:O	1:A:1519:TYR:HB3	2.19	0.42
1:A:1750:ALA:O	1:A:1754:PHE:HD2	2.03	0.42
1:A:1816:THR:CG2	1:A:1819:TRP:HE3	2.33	0.42
1:A:2053:GLU:HB2	1:A:2057:THR:HG1	1.85	0.42
1:A:2153:LEU:CD1	1:A:2205:ILE:HG12	2.50	0.42
1:A:2195:VAL:HA	1:A:2205:ILE:CG2	2.36	0.42
1:A:2256:LYS:HD2	1:A:2287:LEU:HD21	2.00	0.42
1:A:2273:ARG:H	1:A:2274:ASP:HA	1.83	0.42
2:B:216:THR:O	2:B:217:CYS:HB2	2.19	0.42
3:C:220:VAL:O	3:C:224:LEU:HD13	2.20	0.42
3:C:427:ASN:HD21	3:C:466:PHE:HB2	1.85	0.42
3:C:464:PRO:HB2	3:C:469:LEU:HD21	2.01	0.42
1:A:153:LEU:HD23	1:A:187:LYS:HZ1	1.83	0.41
1:A:573:THR:HB	1:A:609:PHE:HZ	1.84	0.41
1:A:714:LEU:N	1:A:714:LEU:HD22	2.35	0.41
1:A:1021:GLN:NE2	1:A:1025:ASP:OD2	2.53	0.41
1:A:1934:VAL:O	1:A:1938:SER:OG	2.34	0.41
1:A:2089:ILE:HD11	1:A:2128:ILE:HD12	2.02	0.41
1:A:2180:ILE:HG21	1:A:2403:MET:HE2	2.02	0.41
1:A:2376:THR:O	1:A:2376:THR:HG22	2.20	0.41
2:B:496:SER:HG	2:B:543:ALA:HB2	1.85	0.41
2:B:524:HIS:O	2:B:527:GLN:HG3	2.19	0.41
1:A:292:LEU:HD11	1:A:327:ILE:CG1	2.50	0.41
1:A:542:VAL:O	1:A:542:VAL:HG13	2.19	0.41
1:A:566:LYS:HB2	1:A:625:LYS:CE	2.49	0.41
1:A:1083:LEU:HD12	1:A:1083:LEU:N	2.36	0.41
1:A:1339:THR:OG1	1:A:1340:LEU:N	2.53	0.41
1:A:1352:LEU:HA	1:A:1353:GLN:HA	1.50	0.41
1:A:2296:LEU:HD21	1:A:2343:ILE:HD12	2.02	0.41
2:B:313:ARG:HD3	2:B:327:PHE:CE2	2.55	0.41
1:A:409:VAL:HG13	1:A:453:LEU:CD2	2.40	0.41
1:A:712:ASN:O	1:A:716:ILE:HG13	2.19	0.41
1:A:893:LEU:HD23	1:A:910:ALA:O	2.20	0.41
1:A:1942:PRO:HA	1:A:1945:VAL:CG2	2.47	0.41
1:A:1989:LYS:HD2	1:A:1989:LYS:C	2.41	0.41
1:A:115:SER:HB2	1:A:116:PRO:HD3	2.02	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:338:GLN:NE2	2:B:145:GLU:OE2	2.54	0.41
1:A:376:SER:OG	1:A:386:GLU:OE1	2.24	0.41
1:A:389:PRO:HB2	1:A:390:PRO:HD3	2.03	0.41
1:A:492:CYS:O	3:C:460:TYR:OH	2.28	0.41
1:A:503:LEU:CD1	1:A:572:MET:HG3	2.48	0.41
1:A:866:ILE:HD13	1:A:1291:VAL:HG12	2.01	0.41
1:A:1133:THR:O	1:A:1133:THR:HG22	2.20	0.41
1:A:1459:ALA:HB1	1:A:1474:GLN:HG2	2.02	0.41
1:A:1943:THR:HG23	1:A:1944:MET:N	2.35	0.41
1:A:2055:LEU:HD23	1:A:2055:LEU:C	2.41	0.41
1:A:2057:THR:HB	1:A:2058:PRO:CD	2.51	0.41
1:A:2135:THR:HA	1:A:2136:LYS:HA	1.68	0.41
1:A:2330:ILE:HD12	1:A:2404:ARG:HD2	2.02	0.41
1:A:2365:LEU:HB3	1:A:2366:ARG:HB3	2.02	0.41
1:A:2371:VAL:N	1:A:2372:PRO:HD3	2.35	0.41
1:A:2374:ARG:NH1	1:A:3641:ILE:HA	2.35	0.41
2:B:170:GLN:OE1	3:C:389:LEU:HD22	2.20	0.41
2:B:350:MET:O	2:B:354:GLN:HG3	2.20	0.41
3:C:322:GLN:HG2	3:C:330:LEU:HD13	2.01	0.41
3:C:340:VAL:O	3:C:340:VAL:HG12	2.20	0.41
1:A:295:LYS:HB3	1:A:297:VAL:HB	2.02	0.41
1:A:771:GLU:OE1	1:A:773:VAL:HG22	2.21	0.41
1:A:822:LYS:NZ	1:A:830:LEU:HG	2.35	0.41
1:A:976:ASN:ND2	1:A:1077:VAL:HG11	2.36	0.41
1:A:1078:GLU:OE1	1:A:1078:GLU:HA	2.20	0.41
1:A:2365:LEU:CB	1:A:2367:VAL:HB	2.50	0.41
2:B:214:HIS:CE1	2:B:216:THR:HB	2.56	0.41
2:B:356:ARG:O	2:B:360:THR:HG23	2.21	0.41
3:C:405:THR:O	3:C:406:LEU:HG	2.20	0.41
1:A:130:THR:HG23	1:A:131:LYS:N	2.34	0.41
1:A:136:SER:HA	1:A:139:ARG:HD3	2.02	0.41
1:A:189:LEU:N	1:A:189:LEU:HD23	2.36	0.41
1:A:253:LEU:O	1:A:256:THR:HG22	2.21	0.41
1:A:1011:VAL:HG21	1:A:1074:MET:HE2	2.03	0.41
1:A:1453:LEU:HD22	1:A:1453:LEU:N	2.35	0.41
2:B:221:ILE:CD1	3:C:279:LEU:HD22	2.50	0.41
3:C:205:LEU:CA	3:C:482:ARG:HH22	2.33	0.41
3:C:279:LEU:HD21	3:C:297:HIS:ND1	2.35	0.41
1:A:85:LYS:CD	1:A:116:PRO:HG2	2.47	0.41
1:A:171:GLN:HA	1:A:175:PHE:HD1	1.86	0.41
1:A:275:LEU:HB2	1:A:277:MET:N	2.36	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:494:THR:O	1:A:497:ILE:HG22	2.21	0.41
1:A:510:GLN:OE1	1:A:510:GLN:HA	2.20	0.41
1:A:1040:LEU:HD23	1:A:1040:LEU:N	2.35	0.41
1:A:1341:THR:HB	1:A:1405:GLN:NE2	2.36	0.41
1:A:1511:PHE:CB	1:A:1526:LEU:HD23	2.51	0.41
2:B:183:ALA:O	2:B:187:GLU:HG3	2.21	0.41
2:B:539:ALA:O	2:B:540:ARG:HD3	2.21	0.41
1:A:203:SER:HB2	1:A:259:ALA:HB2	2.03	0.41
1:A:237:PHE:O	1:A:240:PHE:HB3	2.21	0.41
1:A:350:TRP:O	1:A:354:LEU:HG	2.20	0.41
1:A:566:LYS:HZ2	1:A:620:THR:HG23	1.84	0.41
1:A:1204:GLN:HE21	1:A:1322:LYS:HB2	1.86	0.41
1:A:1609:SER:HB2	1:A:1619:TRP:CH2	2.55	0.41
2:B:208:HIS:CB	2:B:209:ILE:HD12	2.50	0.41
2:B:305:GLU:CG	2:B:334:ALA:HB3	2.51	0.41
1:A:40:ASP:OD1	1:A:80:ILE:HG12	2.21	0.41
1:A:122:GLN:HG3	1:A:126:ARG:HH11	1.85	0.41
1:A:472:THR:OG1	1:A:475:CYS:HB2	2.20	0.41
1:A:510:GLN:NE2	1:A:576:LEU:HD13	2.35	0.41
1:A:559:PRO:O	1:A:560:VAL:C	2.59	0.41
1:A:826:LEU:HD22	1:A:909:ASP:CG	2.40	0.41
1:A:926:LEU:HD21	1:A:941:GLN:N	2.36	0.41
1:A:978:LEU:HD12	1:A:978:LEU:N	2.36	0.41
1:A:982:LEU:CD1	1:A:992:LYS:HG2	2.50	0.41
1:A:990:LEU:HB2	1:A:2392:PHE:HD1	1.81	0.41
1:A:1071:VAL:CG1	1:A:1074:MET:H	2.34	0.41
1:A:1529:ALA:HA	1:A:1532:ILE:HG22	2.03	0.41
1:A:1657:LEU:HD12	1:A:1658:PRO:HA	2.03	0.41
1:A:2275:TRP:CB	1:A:2277:LEU:HD23	2.51	0.41
1:A:2341:VAL:HG21	1:A:2375:MET:HE3	2.02	0.41
2:B:68:VAL:HG11	2:B:77:PHE:HE2	1.84	0.41
3:C:182:LYS:HA	3:C:257:ASP:HA	2.02	0.41
1:A:178:GLN:N	1:A:179:PRO:HD2	2.36	0.41
1:A:215:ALA:HA	1:A:218:LEU:CD1	2.34	0.41
1:A:343:LEU:HD12	1:A:343:LEU:N	2.36	0.41
1:A:361:LEU:CA	1:A:401:LEU:HD13	2.43	0.41
1:A:1526:LEU:HD12	1:A:1526:LEU:H	1.85	0.41
1:A:1529:ALA:O	1:A:1532:ILE:HG22	2.20	0.41
1:A:1945:VAL:HA	1:A:1948:VAL:HG22	2.03	0.41
1:A:2178:ALA:HA	1:A:2181:ASN:HB2	2.03	0.41
1:A:2273:ARG:H	1:A:2274:ASP:CA	2.34	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2294:ASN:HB2	1:A:2298:LYS:HG2	2.02	0.41
2:B:200:LEU:HG	2:B:204:PHE:CE2	2.56	0.41
1:A:184:VAL:HG23	1:A:185:LEU:N	2.37	0.40
1:A:338:GLN:OE1	2:B:74:ARG:NE	2.41	0.40
1:A:468:ASP:N	1:A:469:PRO:CD	2.84	0.40
1:A:495:ASP:HB3	1:A:565:TYR:HE1	1.85	0.40
1:A:888:TYR:HE1	1:A:2301:TRP:CE2	2.39	0.40
1:A:1818:PRO:HB3	1:A:1848:VAL:HG12	1.99	0.40
1:A:2042:ASP:HA	1:A:2046:ASP:HB2	2.02	0.40
1:A:262:THR:HG23	1:A:303:VAL:HG21	2.03	0.40
1:A:387:ASP:O	1:A:391:PRO:CD	2.70	0.40
1:A:510:GLN:HG2	1:A:579:LEU:CD1	2.48	0.40
1:A:770:VAL:HG11	1:A:814:ARG:NH1	2.36	0.40
1:A:978:LEU:HD23	1:A:995:TYR:OH	2.21	0.40
1:A:1071:VAL:HG12	1:A:1073:ILE:H	1.85	0.40
1:A:1086:PRO:HB3	1:A:1090:GLN:C	2.42	0.40
1:A:1794:ARG:HA	1:A:1797:VAL:HG22	2.03	0.40
1:A:2141:LEU:HD22	1:A:2141:LEU:N	2.35	0.40
1:A:2153:LEU:CD2	1:A:2207:TRP:HE3	2.34	0.40
1:A:2248:ARG:H	1:A:2251:GLU:CG	2.34	0.40
2:B:304:LEU:O	2:B:308:ILE:HG13	2.21	0.40
2:B:306:ASP:O	2:B:310:ARG:HG3	2.21	0.40
1:A:204:SER:O	1:A:206:LEU:HD12	2.21	0.40
1:A:275:LEU:CB	1:A:276:VAL:HA	2.31	0.40
1:A:378:VAL:H	2:B:79:LEU:HD21	1.85	0.40
1:A:1348:VAL:O	1:A:1349:LEU:C	2.60	0.40
1:A:1986:ASP:O	1:A:1990:ARG:HG3	2.20	0.40
1:A:2169:PHE:HE1	1:A:2411:LEU:HB3	1.85	0.40
1:A:2191:ARG:HB3	1:A:2351:VAL:HG12	2.04	0.40
1:A:2221:TRP:HA	1:A:2224:ARG:NH2	2.37	0.40
1:A:2376:THR:HG22	1:A:2381:THR:CG2	2.51	0.40
2:B:270:GLN:HA	2:B:337:TYR:HB2	2.02	0.40
2:B:511:TYR:CE2	2:B:530:GLN:HG3	2.56	0.40
2:B:540:ARG:HB3	3:C:339:MET:CB	2.52	0.40
1:A:200:LEU:HD12	1:A:200:LEU:N	2.35	0.40
1:A:295:LYS:N	1:A:296:CYS:HB3	2.37	0.40
1:A:554:SER:HB3	1:A:608:LYS:HE3	2.03	0.40
1:A:734:TRP:CB	1:A:737:GLU:HB3	2.51	0.40
1:A:739:ALA:HA	3:C:172:LEU:HD23	2.03	0.40
1:A:1114:ALA:CB	1:A:1117:ARG:HH21	2.34	0.40
1:A:1324:LEU:HD13	1:A:1339:THR:H	1.87	0.40

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1325:LYS:HE2	1:A:1325:LYS:CA	2.40	0.40
2:B:234:ARG:HH21	2:B:259:ARG:NH1	2.19	0.40
2:B:268:LEU:HD13	2:B:337:TYR:OH	2.22	0.40
3:C:192:ASP:OD1	3:C:195:ILE:HD13	2.22	0.40
1:A:189:LEU:HD23	1:A:189:LEU:H	1.86	0.40
1:A:361:LEU:HA	1:A:401:LEU:CD1	2.43	0.40
1:A:405:PHE:O	1:A:409:VAL:HG23	2.21	0.40
1:A:441:THR:HG1	1:A:446:VAL:HG22	1.87	0.40
1:A:576:LEU:O	1:A:580:LEU:HG	2.21	0.40
1:A:832:ASN:CB	1:A:836:THR:HG21	2.52	0.40
1:A:1027:LEU:O	1:A:1031:ARG:HG3	2.21	0.40
1:A:1655:ASN:HD22	1:A:1663:GLU:CD	2.24	0.40
1:A:1861:ILE:CD1	1:A:1948:VAL:HG23	2.51	0.40
1:A:2247:PRO:HB2	1:A:2248:ARG:C	2.42	0.40
1:A:2295:LEU:HB2	1:A:2379:ILE:CG2	2.52	0.40
2:B:158:ASP:OD2	2:B:160:SER:HB3	2.20	0.40
2:B:264:ARG:HG3	2:B:326:LEU:HD12	2.03	0.40
2:B:297:LYS:HD2	2:B:336:VAL:O	2.21	0.40
2:B:348:VAL:O	3:C:376:ARG:NH2	2.55	0.40
2:B:434:ASN:HB3	2:B:435:PRO:CD	2.52	0.40

There are no symmetry-related clashes.

## 5.3 Torsion angles [i](#)

### 5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	1853/3661 (51%)	1684 (91%)	168 (9%)	1 (0%)	51	83
2	B	373/991 (38%)	345 (92%)	28 (8%)	0	100	100
3	C	300/520 (58%)	274 (91%)	26 (9%)	0	100	100
All	All	2526/5172 (49%)	2303 (91%)	222 (9%)	1 (0%)	100	100

All (1) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1086	PRO

### 5.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	1398/3224 (43%)	1379 (99%)	19 (1%)	67	85
2	B	351/847 (41%)	348 (99%)	3 (1%)	78	90
3	C	279/450 (62%)	277 (99%)	2 (1%)	84	93
All	All	2028/4521 (45%)	2004 (99%)	24 (1%)	72	87

All (24) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	149	LEU
1	A	257	TYR
1	A	266	LYS
1	A	285	GLU
1	A	613	PHE
1	A	762	LYS
1	A	773	VAL
1	A	985	GLN
1	A	1464	GLN
1	A	1521	VAL
1	A	1727	GLU
1	A	1756	LYS
1	A	1816	THR
1	A	1964	GLU
1	A	1989	LYS
1	A	2193	TYR
1	A	2253	TYR
1	A	2279	VAL
1	A	2374	ARG
2	B	212	LEU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
2	B	234	ARG
2	B	408	PHE
3	C	234	ARG
3	C	248	ARG

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (56) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	71	HIS
1	A	171	GLN
1	A	197	HIS
1	A	212	GLN
1	A	314	ASN
1	A	600	HIS
1	A	645	ASN
1	A	671	HIS
1	A	677	HIS
1	A	767	ASN
1	A	858	HIS
1	A	881	ASN
1	A	891	GLN
1	A	898	GLN
1	A	976	ASN
1	A	1090	GLN
1	A	1103	ASN
1	A	1113	GLN
1	A	1184	ASN
1	A	1204	GLN
1	A	1211	HIS
1	A	1362	ASN
1	A	1405	GLN
1	A	1474	GLN
1	A	1499	HIS
1	A	1533	GLN
1	A	1591	HIS
1	A	1654	GLN
1	A	1825	GLN
1	A	1832	HIS
1	A	2168	GLN
1	A	2189	HIS
1	A	2192	HIS
1	A	2206	GLN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2229	GLN
2	B	139	GLN
2	B	159	ASN
2	B	192	GLN
2	B	196	GLN
2	B	257	ASN
2	B	307	GLN
2	B	321	GLN
2	B	354	GLN
2	B	436	GLN
2	B	527	GLN
2	B	530	GLN
2	B	538	HIS
3	C	271	GLN
3	C	281	HIS
3	C	284	ASN
3	C	303	GLN
3	C	322	GLN
3	C	371	GLN
3	C	393	GLN
3	C	412	ASN
3	C	463	HIS

### 5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

### 5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

### 5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 2 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 1 for Mogul analysis.

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
4	GTP	C	601	5	26,34,34	1.13	2 (7%)	32,54,54	1.65	7 (21%)

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
4	GTP	C	601	5	-	5/18/38/38	0/3/3/3

All (2) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
4	C	601	GTP	C5-C6	-4.01	1.39	1.47
4	C	601	GTP	C2-N3	2.21	1.38	1.33

All (7) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
4	C	601	GTP	PA-O3A-PB	-4.26	118.21	132.83
4	C	601	GTP	PB-O3B-PG	-3.54	120.67	132.83
4	C	601	GTP	C5-C6-N1	3.18	119.58	113.95
4	C	601	GTP	C8-N7-C5	2.98	108.66	102.99
4	C	601	GTP	C3'-C2'-C1'	2.86	105.29	100.98
4	C	601	GTP	C2-N1-C6	-2.80	119.94	125.10
4	C	601	GTP	O6-C6-C5	-2.13	120.21	124.37

There are no chirality outliers.

All (5) torsion outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
4	C	601	GTP	C5'-O5'-PA-O3A
4	C	601	GTP	C3'-C4'-C5'-O5'
4	C	601	GTP	O4'-C4'-C5'-O5'
4	C	601	GTP	C5'-O5'-PA-O1A

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

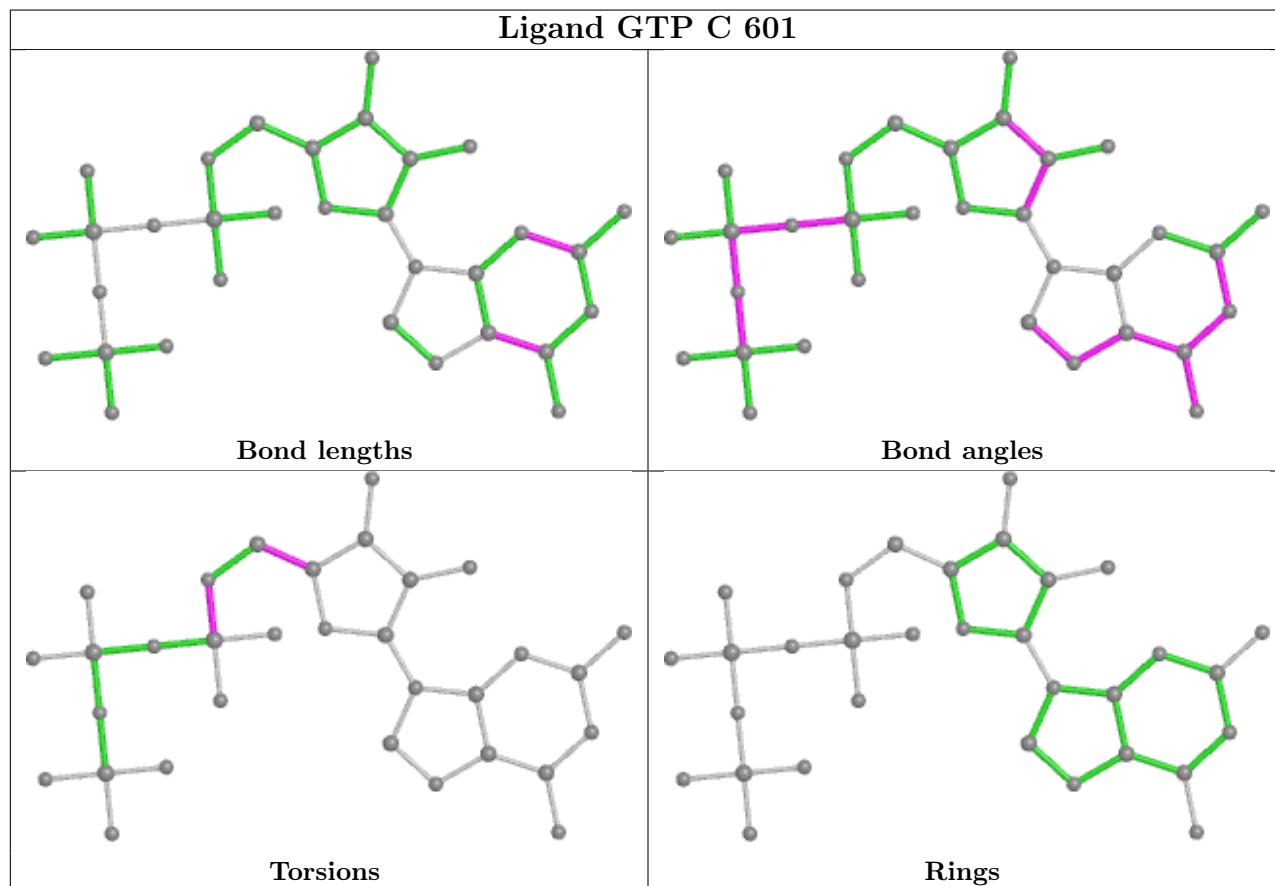
Mol	Chain	Res	Type	Atoms
4	C	601	GTP	C5'-O5'-PA-O2A

There are no ring outliers.

1 monomer is involved in 9 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
4	C	601	GTP	9	0

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less than 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient equivalents in the CSD to analyse the geometry.



## 5.7 Other polymers

There are no such residues in this entry.

## 5.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.

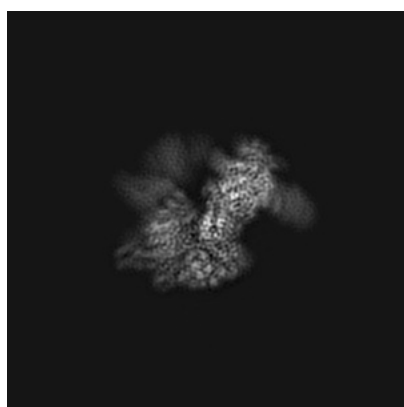
## 6 Map visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-0837. These allow visual inspection of the internal detail of the map and identification of artifacts.

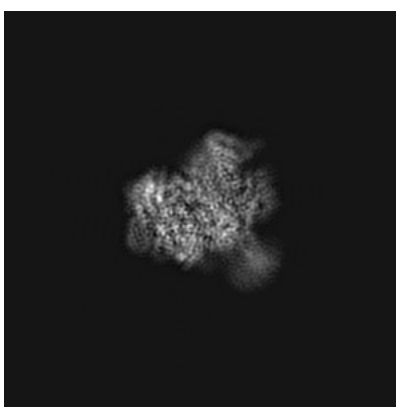
No raw map or half-maps were deposited for this entry and therefore no images, graphs, etc. pertaining to the raw map can be shown.

### 6.1 Orthogonal projections [i](#)

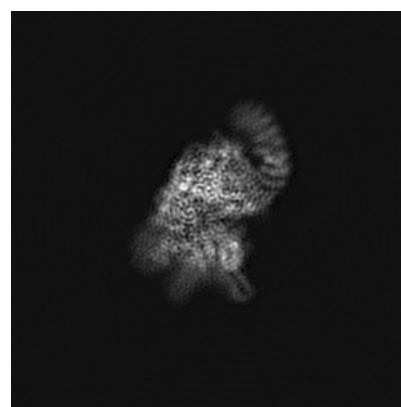
#### 6.1.1 Primary map



X



Y

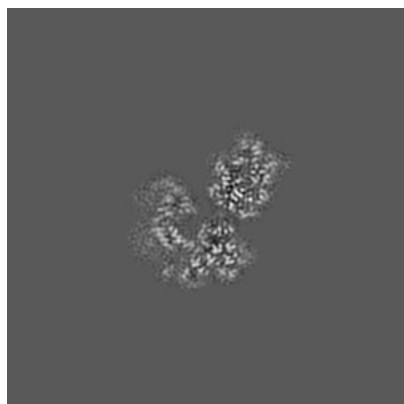


Z

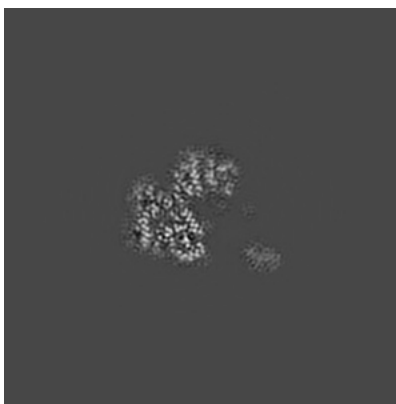
The images above show the map projected in three orthogonal directions.

### 6.2 Central slices [i](#)

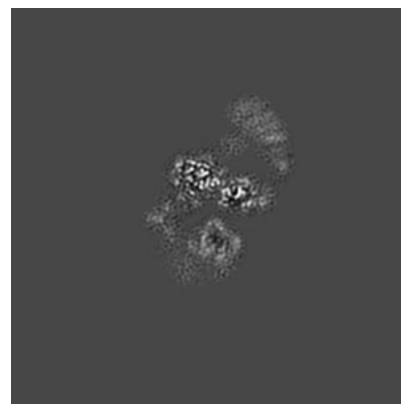
#### 6.2.1 Primary map



X Index: 160



Y Index: 160

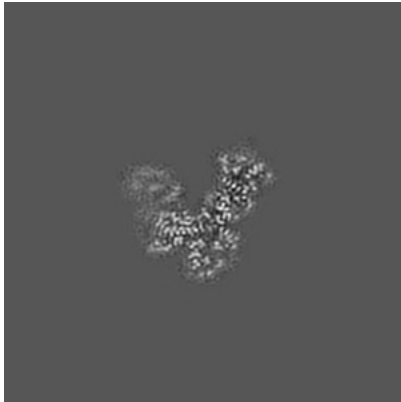


Z Index: 160

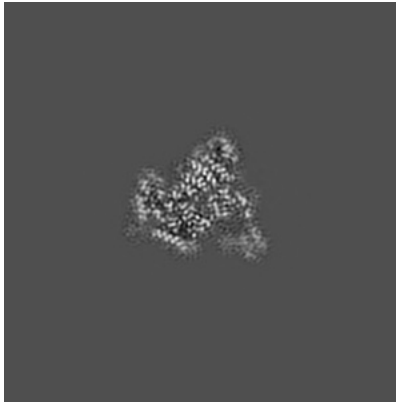
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

## 6.3 Largest variance slices [i](#)

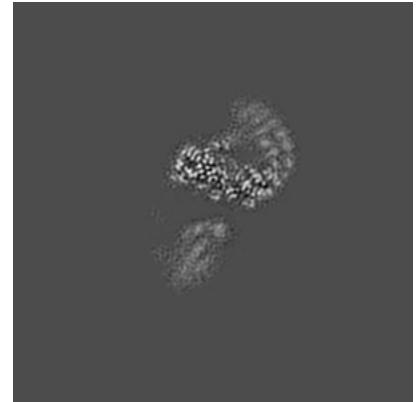
### 6.3.1 Primary map



X Index: 147



Y Index: 172

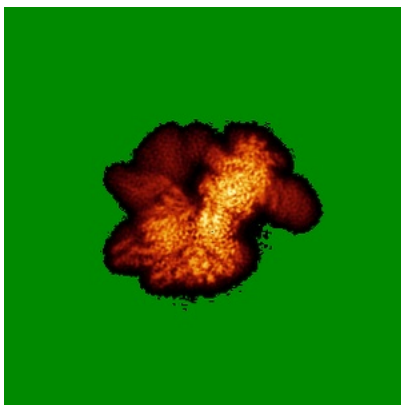


Z Index: 171

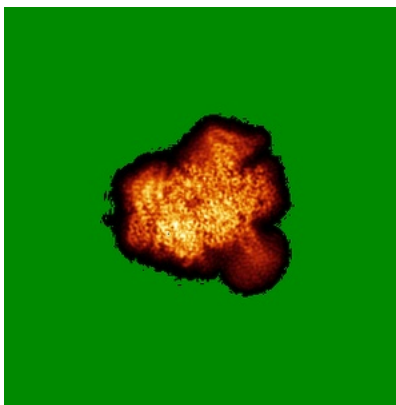
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

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

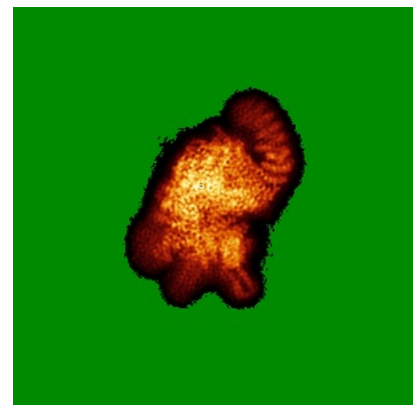
### 6.4.1 Primary map



X



Y



Z

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

## 6.5 Orthogonal surface views [i](#)

### 6.5.1 Primary map



The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 6.5. These images, in conjunction with the slice images, may facilitate assessment of whether an appropriate contour level has been provided.

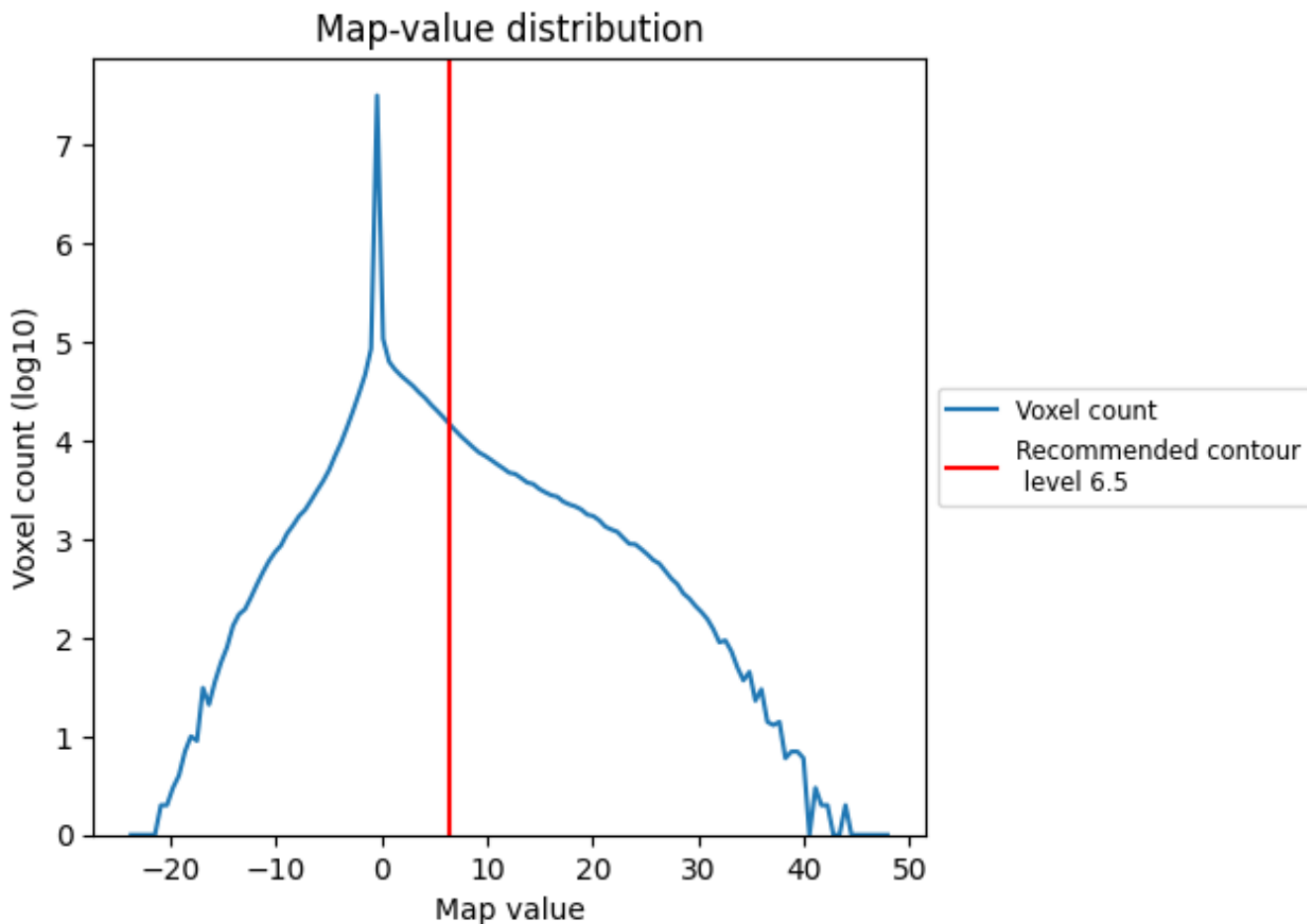
## 6.6 Mask visualisation [i](#)

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

## 7 Map analysis [i](#)

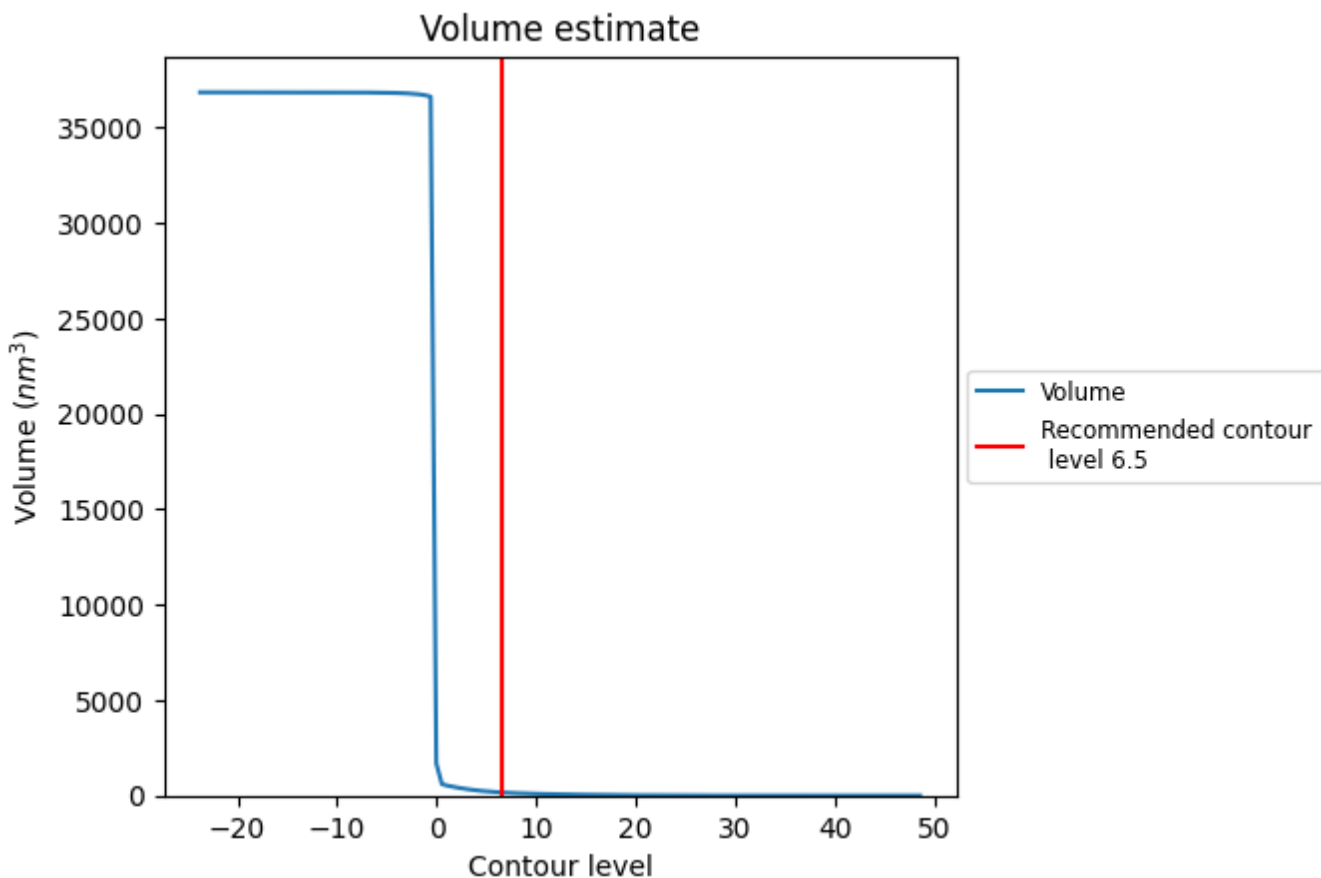
This section contains the results of statistical analysis of the map.

### 7.1 Map-value distribution [i](#)



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

## 7.2 Volume estimate [i](#)

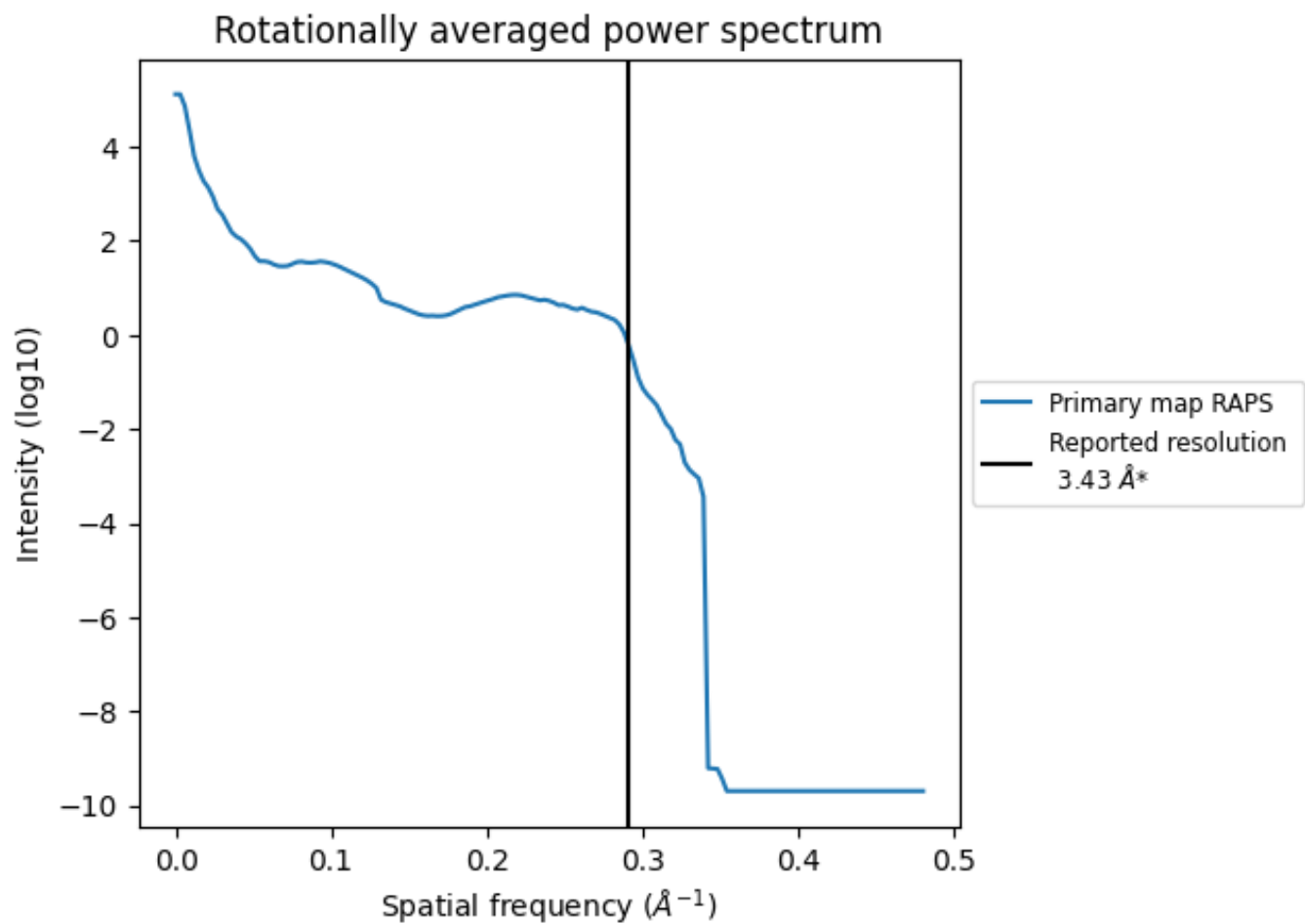


The volume at the recommended contour level is 163 nm<sup>3</sup>; this corresponds to an approximate mass of 148 kDa.

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



### 7.3 Rotationally averaged power spectrum [\(i\)](#)



\*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.292 Å<sup>-1</sup>

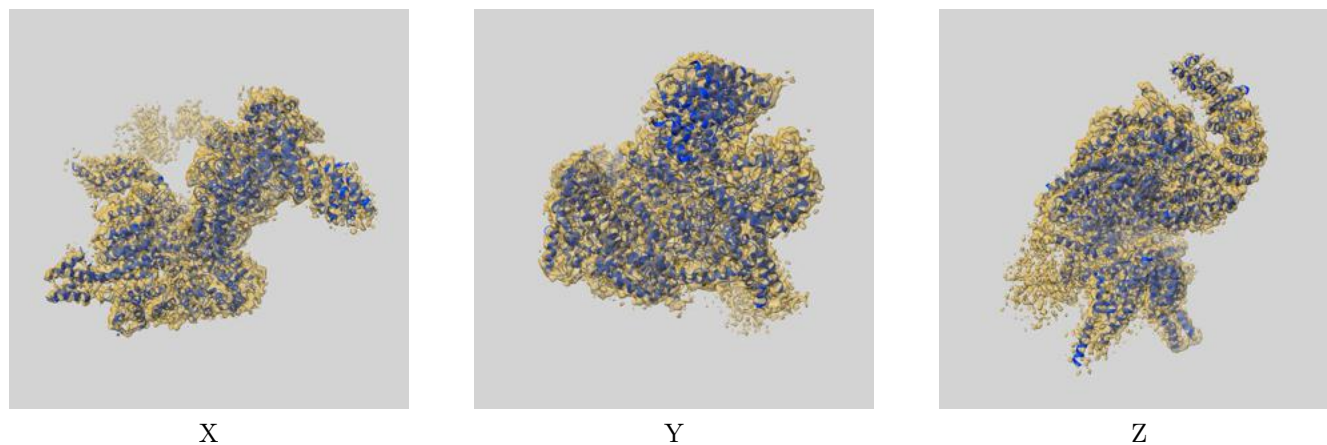
## 8 Fourier-Shell correlation

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

## 9 Map-model fit [i](#)

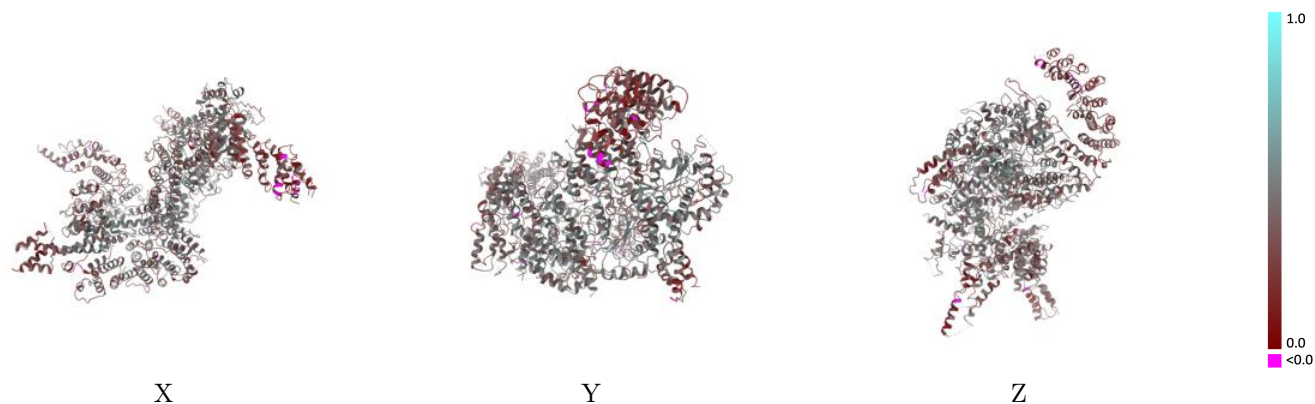
This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-0837 and PDB model 6L54. Per-residue inclusion information can be found in section 3 on page 5.

### 9.1 Map-model overlay [i](#)



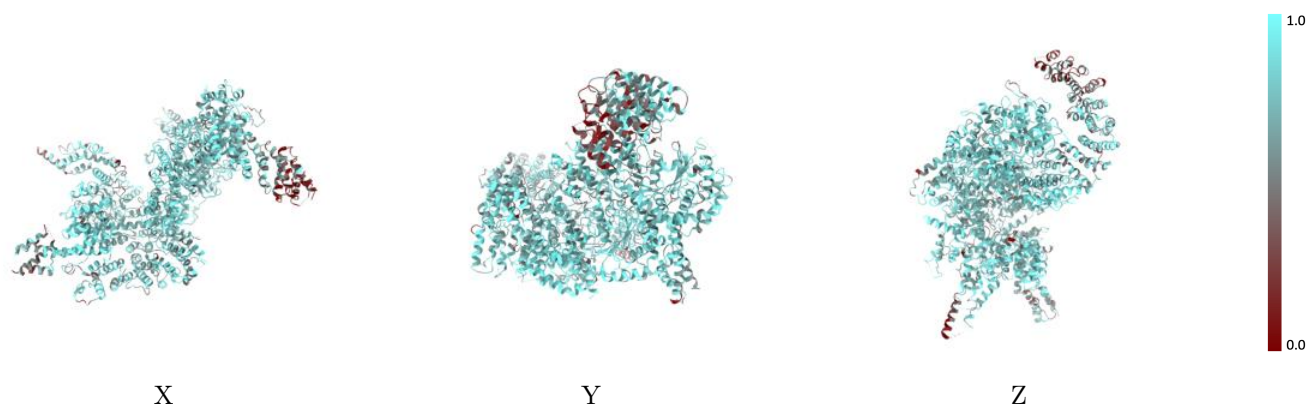
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 6.5 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

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



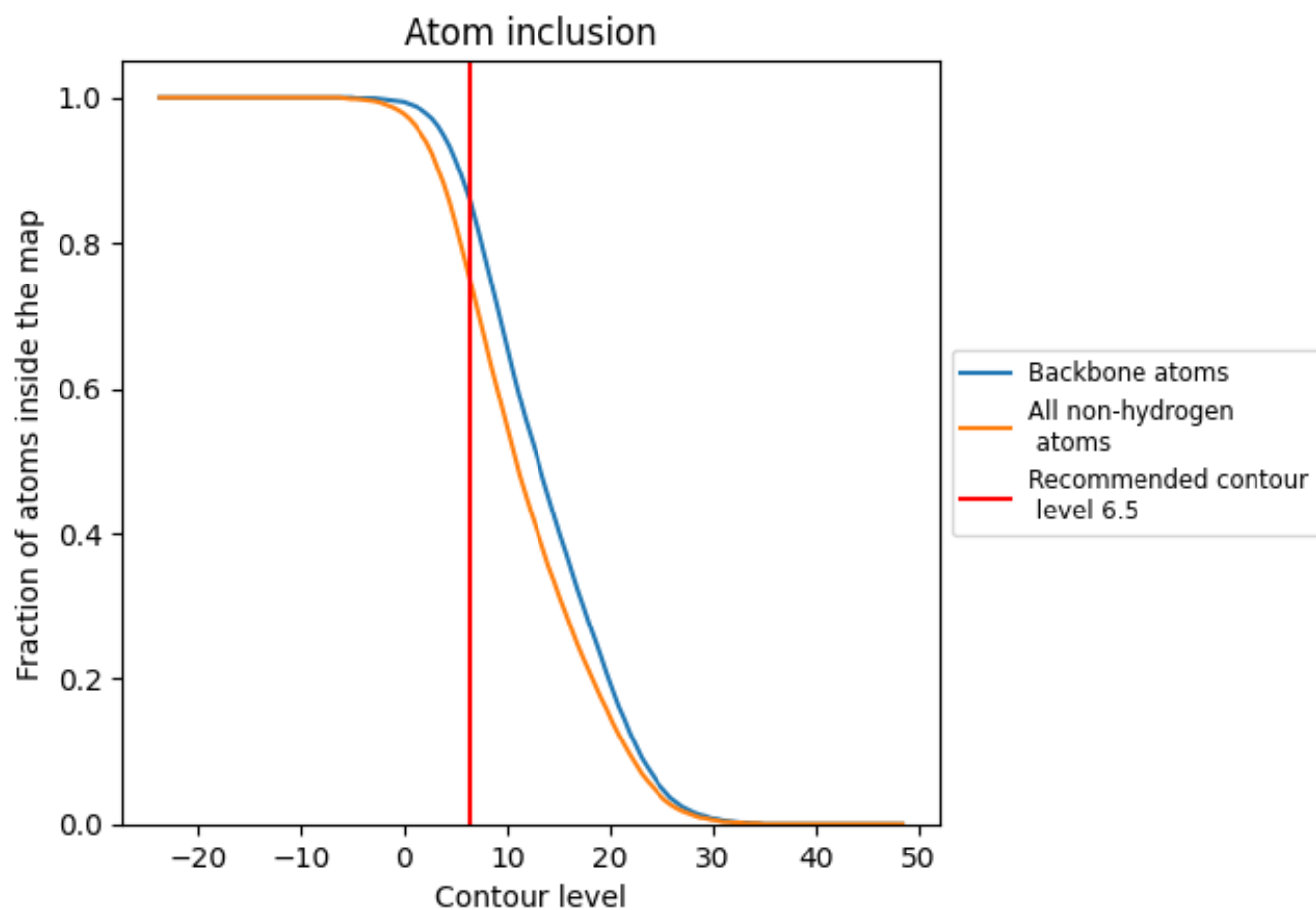
The images above show the model with each residue coloured according to its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions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

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



The images above show the model with each residue coloured according to its atom inclusion. This shows to what extent they are inside the map at the recommended contour level (6.5).









## 9.4 Atom inclusion [i](#)



At the recommended contour level, 86% of all backbone atoms, 75% of all non-hydrogen atoms, are inside the map.

## 9.5 Map-model fit summary [i](#)

The table lists the average atom inclusion at the recommended contour level (6.5) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	 0.7470	 0.3840
A	 0.7330	 0.3640
B	 0.7740	 0.4080
C	 0.8350	 0.4640

