



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Nov 19, 2022 – 03:56 pm GMT

PDB ID : 5ND1
EMDB ID : EMD-3619
Title : Viral evolution results in multiple, surface-allocated enzymatic activities in a fungal double-stranded RNA virus
Authors : Mata, C.P.; Luque, D.; Gomez Blanco, J.; Rodriguez, J.M.; Suzuki, N.; Ghabrial, S.A.; Carrascosa, J.L.; Trus, B.L.; Caston, J.R.
Deposited on : 2017-03-07
Resolution : 3.70 Å(reported)

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

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

EMDB validation analysis : 0.0.1.dev43
MolProbity : 4.02b-467
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
MapQ : 1.9.9
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.31.2

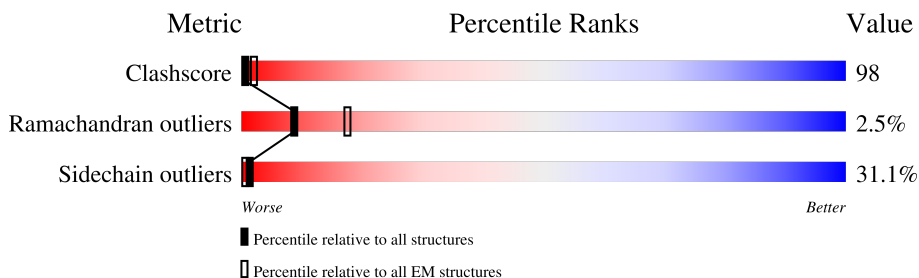
1 Overall quality at a glance i

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 3.70 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 ≥ 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	1357	
2	B	1059	

2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 14963 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

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

- Molecule 1 is a protein called Capsid protein.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S		
1	A	972	7371	4561	1355	1400	55	0	0

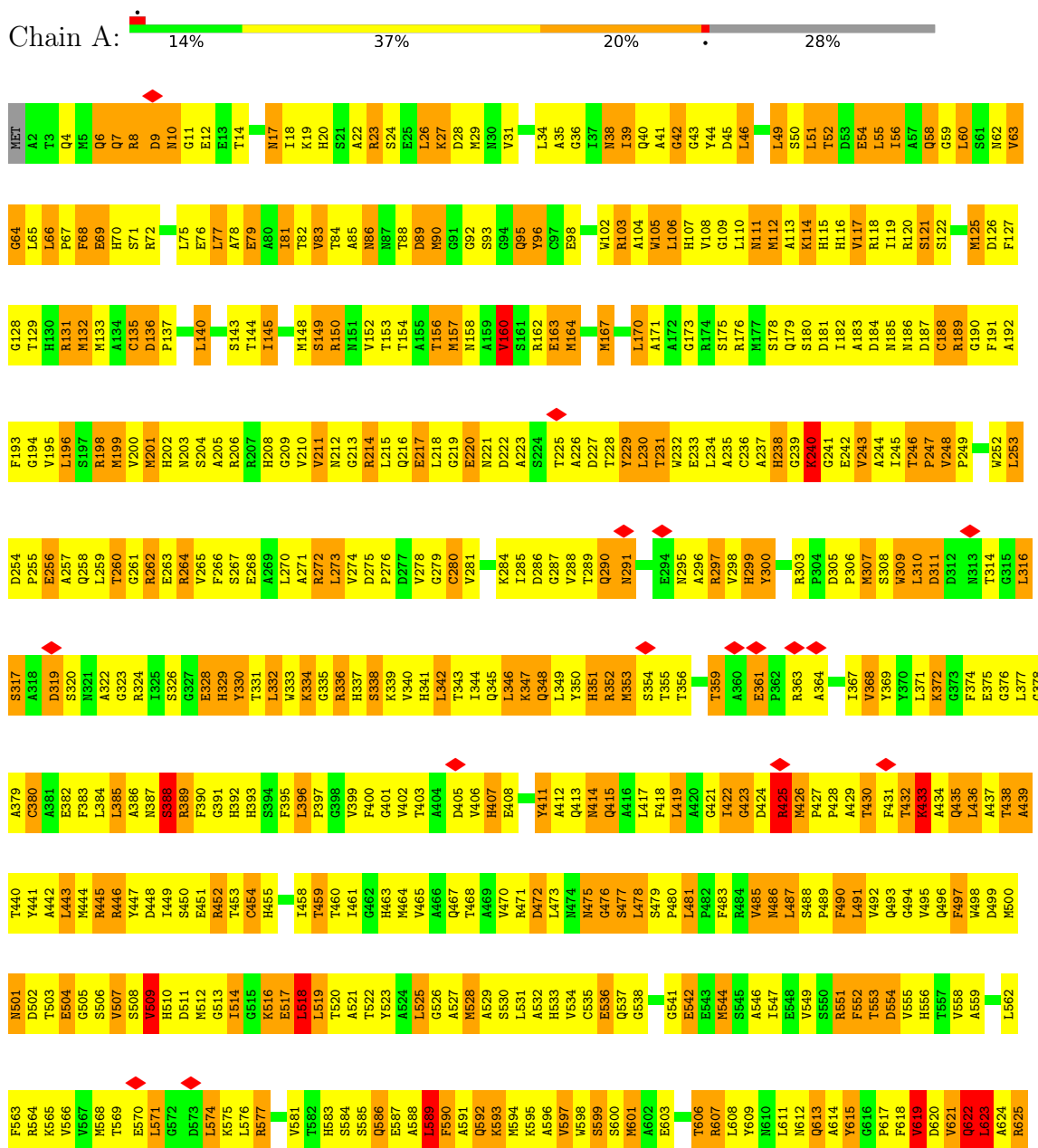
- Molecule 2 is a protein called Capsid protein.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S		
2	B	1005	7592	4717	1347	1480	48	0	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: Capsid protein



4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	
Number of particles used	37531	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	PHASE FLIPPING ONLY	Depositor
Microscope	FEI TITAN KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{\AA}^2$)	1.7	Depositor
Minimum defocus (nm)	700	Depositor
Maximum defocus (nm)	3500	Depositor
Magnification	Not provided	
Image detector	FEI FALCON II (4k x 4k)	Depositor
Maximum map value	1.371	Depositor
Minimum map value	-0.852	Depositor
Average map value	0.001	Depositor
Map value standard deviation	0.090	Depositor
Recommended contour level	0.18	Depositor
Map size (\AA)	536.0, 536.0, 536.0	wwPDB
Map dimensions	400, 400, 400	wwPDB
Map angles ($^\circ$)	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing (\AA)	1.34, 1.34, 1.34	Depositor

5 Model quality i

5.1 Standard geometry i

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	0.94	2/7511 (0.0%)	1.12	52/10188 (0.5%)
2	B	0.67	3/7739 (0.0%)	0.88	27/10515 (0.3%)
All	All	0.82	5/15250 (0.0%)	1.00	79/20703 (0.4%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	11
2	B	0	6
All	All	0	17

All (5) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	235	ALA	C-N	11.72	1.60	1.34
2	B	600	TYR	CE1-CZ	-5.35	1.31	1.38
2	B	506	PRO	N-CD	5.14	1.55	1.47
2	B	197	PRO	N-CD	5.11	1.55	1.47
1	A	96	TYR	CE2-CZ	-5.04	1.32	1.38

All (79) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	423	GLY	N-CA-C	-8.26	92.46	113.10
1	A	229	TYR	N-CA-C	-7.99	89.43	111.00
1	A	519	LEU	CB-CG-CD2	-7.95	97.49	111.00
1	A	720	GLY	N-CA-C	7.69	132.32	113.10
2	B	706	SER	N-CA-C	-7.52	90.70	111.00
1	A	476	GLY	N-CA-C	7.47	131.77	113.10
1	A	229	TYR	CB-CA-C	7.43	125.26	110.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	B	808	GLY	N-CA-C	7.37	131.53	113.10
1	A	42	GLY	N-CA-C	-7.09	95.37	113.10
2	B	381	THR	C-N-CD	-6.88	105.46	120.60
1	A	64	GLY	N-CA-C	6.85	130.22	113.10
2	B	1003	TYR	C-N-CA	6.81	138.72	121.70
1	A	589	LEU	CA-CB-CG	6.73	130.78	115.30
1	A	336	ARG	N-CA-C	-6.56	93.29	111.00
1	A	621	VAL	N-CA-C	6.54	128.65	111.00
1	A	414	ASN	N-CA-C	6.51	128.58	111.00
2	B	588	PHE	N-CA-C	6.51	128.58	111.00
1	A	433	LYS	N-CA-C	-6.50	93.45	111.00
1	A	364	ALA	CB-CA-C	6.50	119.85	110.10
2	B	548	ASN	N-CA-C	-6.47	93.53	111.00
2	B	187	GLY	N-CA-C	-6.46	96.96	113.10
2	B	466	LEU	N-CA-C	-6.40	93.72	111.00
1	A	92	GLY	N-CA-C	6.36	128.99	113.10
2	B	571	GLY	C-N-CD	6.32	141.67	128.40
1	A	905	GLY	N-CA-C	-6.25	97.47	113.10
2	B	679	CYS	CB-CA-C	6.21	122.82	110.40
1	A	623	LEU	N-CA-C	6.21	127.76	111.00
1	A	747	ILE	CB-CA-C	-6.15	99.30	111.60
1	A	660	ASN	N-CA-C	6.13	127.55	111.00
1	A	307	MET	N-CA-C	6.09	127.45	111.00
2	B	564	SER	N-CA-C	6.07	127.40	111.00
1	A	235	ALA	O-C-N	5.94	132.20	122.70
2	B	718	LEU	CA-CB-CG	5.91	128.90	115.30
1	A	241	GLY	N-CA-C	-5.83	98.53	113.10
1	A	848	SER	N-CA-CB	-5.80	101.79	110.50
2	B	551	VAL	N-CA-C	-5.79	95.37	111.00
2	B	574	CYS	N-CA-CB	5.79	121.01	110.60
2	B	389	GLY	N-CA-C	-5.78	98.65	113.10
2	B	196	ALA	C-N-CD	5.75	140.48	128.40
1	A	671	LEU	N-CA-C	5.75	126.52	111.00
2	B	374	GLY	N-CA-C	-5.69	98.88	113.10
1	A	425	ARG	N-CA-CB	-5.68	100.38	110.60
1	A	507	VAL	N-CA-C	-5.66	95.72	111.00
1	A	235	ALA	N-CA-C	-5.64	95.77	111.00
2	B	505	GLY	C-N-CD	5.62	140.21	128.40
1	A	676	THR	N-CA-C	5.60	126.12	111.00
1	A	883	LEU	N-CA-C	-5.54	96.03	111.00
1	A	888	TYR	N-CA-C	5.47	125.78	111.00
1	A	685	ILE	N-CA-C	-5.43	96.34	111.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	628	SER	N-CA-C	-5.39	96.43	111.00
2	B	370	GLY	N-CA-C	-5.36	99.70	113.10
2	B	355	ALA	N-CA-C	-5.33	96.60	111.00
2	B	599	VAL	CB-CA-C	-5.32	101.30	111.40
1	A	606	THR	N-CA-C	-5.31	96.65	111.00
1	A	697	ASN	N-CA-C	-5.31	96.66	111.00
2	B	664	ASN	CB-CA-C	-5.31	99.78	110.40
1	A	59	GLY	N-CA-C	5.31	126.37	113.10
1	A	973	GLY	N-CA-C	-5.30	99.84	113.10
1	A	240	LYS	N-CA-C	-5.24	96.85	111.00
1	A	235	ALA	CA-C-N	-5.24	105.67	117.20
1	A	683	PRO	N-CA-C	5.21	125.65	112.10
1	A	586	GLN	CB-CA-C	5.21	120.81	110.40
1	A	319	ASP	N-CA-C	-5.20	96.97	111.00
2	B	680	LYS	N-CA-C	5.19	125.02	111.00
1	A	622	GLN	N-CA-C	5.19	125.02	111.00
2	B	121	GLY	N-CA-C	-5.19	100.13	113.10
1	A	439	ALA	N-CA-C	5.18	124.97	111.00
1	A	485	VAL	CB-CA-C	-5.18	101.57	111.40
2	B	652	HIS	N-CA-C	-5.17	97.06	111.00
2	B	752	HIS	C-N-CD	-5.15	109.27	120.60
1	A	925	VAL	N-CA-C	-5.14	97.13	111.00
1	A	687	THR	O-C-N	-5.13	114.49	122.70
1	A	432	THR	N-CA-C	5.10	124.77	111.00
1	A	601	MET	N-CA-C	5.10	124.77	111.00
2	B	314	GLY	N-CA-C	-5.09	100.37	113.10
1	A	160	VAL	CG1-CB-CG2	-5.08	102.78	110.90
1	A	478	LEU	CA-CB-CG	-5.06	103.65	115.30
1	A	518	LEU	CB-CG-CD2	5.05	119.59	111.00
1	A	432	THR	CB-CA-C	-5.04	97.99	111.60

There are no chirality outliers.

All (17) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	173	GLY	Mainchain
1	A	334	LYS	Peptide
1	A	388	SER	Peptide
1	A	648	LYS	Peptide
1	A	649	HIS	Peptide
1	A	662	SER	Peptide
1	A	701	SER	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	817	ASP	Peptide
1	A	830	ARG	Peptide
1	A	953	THR	Peptide
1	A	967	GLN	Mainchain
2	B	190	SER	Peptide
2	B	241	SER	Peptide
2	B	348	GLY	Peptide
2	B	354	GLY	Peptide
2	B	424	ARG	Peptide
2	B	666	LEU	Peptide

5.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	7371	0	7232	1879	0
2	B	7592	0	7407	1221	0
All	All	14963	0	14639	2903	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 98.

All (2903) 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:961:LEU:HD11	2:B:284:MET:SD	1.29	1.67
1:A:894:ARG:CA	1:A:902:MET:HE3	1.30	1.59
2:B:327:TYR:CE1	2:B:448:MET:HE1	1.09	1.58
2:B:264:THR:HG22	2:B:265:PRO:CD	1.18	1.58
1:A:105:TRP:CD1	1:A:471:ARG:NH1	1.73	1.57
1:A:249:PRO:HG3	1:A:252:TRP:CE2	1.39	1.53
1:A:588:ALA:CB	1:A:592:GLN:HE22	1.18	1.52
2:B:264:THR:CG2	2:B:265:PRO:HD3	1.36	1.51
1:A:884:ALA:CB	2:B:506:PRO:HB3	1.41	1.50
1:A:127:PHE:CD2	1:A:189:ARG:CD	1.94	1.50
1:A:371:LEU:HA	1:A:500:MET:CE	1.37	1.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:673:TRP:CE3	2:B:755:MET:CE	1.92	1.49
2:B:673:TRP:CE3	2:B:755:MET:HE1	1.47	1.48
1:A:893:VAL:HG23	2:B:503:LEU:CD1	1.41	1.48
2:B:729:ARG:CB	2:B:754:TYR:HE1	1.23	1.48
1:A:55:LEU:CG	1:A:528:MET:CE	1.91	1.47
1:A:713:LEU:CD2	1:A:714:ASN:H	1.27	1.47
2:B:673:TRP:CZ3	2:B:755:MET:CE	1.97	1.46
1:A:208:HIS:HD2	1:A:309:TRP:CH2	1.33	1.46
1:A:380:CYS:SG	1:A:435:GLN:HA	1.54	1.46
1:A:894:ARG:CA	1:A:902:MET:CE	1.92	1.45
1:A:79:GLU:CA	1:A:856:THR:HG22	1.45	1.45
1:A:262:ARG:NH2	1:A:401:GLY:CA	1.78	1.44
1:A:79:GLU:CB	1:A:856:THR:CG2	1.94	1.44
1:A:713:LEU:HD23	1:A:714:ASN:N	1.14	1.43
1:A:671:LEU:HG	1:A:685:ILE:CG2	1.49	1.42
1:A:290:GLN:CB	1:A:413:GLN:HE22	1.29	1.42
1:A:290:GLN:HB2	1:A:413:GLN:NE2	1.10	1.42
2:B:327:TYR:CE1	2:B:448:MET:CE	2.03	1.41
1:A:961:LEU:CD1	2:B:284:MET:SD	2.05	1.41
1:A:876:VAL:CG2	2:B:523:HIS:HD2	1.31	1.40
1:A:253:LEU:CD2	1:A:628:SER:HB3	1.48	1.40
1:A:588:ALA:HB1	1:A:592:GLN:NE2	1.08	1.40
1:A:588:ALA:CA	1:A:592:GLN:HE22	1.33	1.39
2:B:256:ASP:HB3	2:B:300:VAL:CG1	1.52	1.39
1:A:532:ALA:HA	1:A:535:CYS:SG	1.61	1.38
1:A:884:ALA:HB2	2:B:506:PRO:CB	1.52	1.38
1:A:79:GLU:CA	1:A:856:THR:CG2	1.98	1.38
1:A:238:HIS:ND1	1:A:334:LYS:HD2	1.27	1.38
1:A:650:ALA:HB3	1:A:796:SER:CB	1.53	1.38
2:B:434:MET:CE	2:B:502:VAL:HG21	1.54	1.38
1:A:472:ASP:OD2	1:A:739:ALA:CB	1.68	1.38
1:A:876:VAL:CG2	2:B:523:HIS:CD2	2.05	1.37
1:A:231:THR:CG2	1:A:343:THR:OG1	1.71	1.37
1:A:262:ARG:NH2	1:A:401:GLY:HA3	1.31	1.37
2:B:43:THR:CG2	2:B:55:LYS:HD3	1.54	1.36
1:A:367:ILE:CD1	1:A:415:GLN:CD	1.94	1.36
1:A:931:LEU:CD2	2:B:615:MET:SD	2.13	1.36
2:B:576:TYR:CD1	2:B:578:PHE:HE1	1.45	1.34
1:A:127:PHE:HE2	1:A:189:ARG:NE	1.24	1.34
1:A:692:ALA:CB	1:A:722:HIS:O	1.73	1.34
1:A:776:VAL:HG11	1:A:807:MET:CE	1.57	1.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:523:HIS:CE1	2:B:527:GLN:HE22	1.43	1.34
1:A:105:TRP:HD1	1:A:471:ARG:CZ	1.38	1.33
1:A:79:GLU:HB3	1:A:856:THR:CG2	1.55	1.33
2:B:839:LEU:CD2	2:B:866:LEU:HD23	1.55	1.32
1:A:371:LEU:CA	1:A:500:MET:CE	2.07	1.30
2:B:38:LYS:CD	2:B:65:GLU:OE2	1.77	1.30
1:A:314:THR:O	1:A:347:LYS:NZ	1.64	1.29
1:A:657:TRP:CZ2	1:A:662:SER:O	1.84	1.29
1:A:208:HIS:CD2	1:A:309:TRP:HH2	1.50	1.29
1:A:529:ALA:HA	1:A:594:MET:CE	1.63	1.29
1:A:894:ARG:HA	1:A:902:MET:CE	1.51	1.29
1:A:588:ALA:CB	1:A:592:GLN:NE2	1.82	1.28
1:A:894:ARG:CG	1:A:902:MET:HE1	1.63	1.28
1:A:247:PRO:HB3	1:A:477:SER:OG	1.15	1.28
2:B:729:ARG:CB	2:B:754:TYR:CE1	2.15	1.28
1:A:472:ASP:OD2	1:A:739:ALA:N	1.65	1.28
2:B:838:ARG:NH2	2:B:932:SER:OG	1.64	1.27
1:A:79:GLU:HA	1:A:856:THR:CG2	1.62	1.27
1:A:316:LEU:HD21	1:A:350:TYR:CZ	1.69	1.27
2:B:502:VAL:CG1	2:B:901:LEU:HD11	1.64	1.27
1:A:249:PRO:HG2	1:A:252:TRP:CG	1.70	1.26
1:A:623:LEU:O	1:A:626:ILE:HG22	1.24	1.26
1:A:55:LEU:CD1	1:A:528:MET:SD	2.22	1.26
1:A:127:PHE:CE2	1:A:189:ARG:NE	2.01	1.26
2:B:589:TYR:CE1	2:B:808:GLY:HA3	1.70	1.26
1:A:127:PHE:HD2	1:A:189:ARG:CD	1.36	1.26
1:A:275:ASP:OD1	1:A:276:PRO:HD2	1.13	1.26
2:B:332:PRO:HG3	2:B:399:PHE:CZ	1.70	1.26
2:B:332:PRO:CG	2:B:399:PHE:CE2	2.18	1.25
2:B:502:VAL:HG12	2:B:901:LEU:CD1	1.64	1.25
1:A:320:SER:OG	1:A:351:HIS:NE2	1.65	1.25
1:A:529:ALA:CB	1:A:594:MET:CE	2.13	1.25
1:A:316:LEU:CD2	1:A:350:TYR:CE1	2.20	1.25
1:A:887:PRO:O	1:A:893:VAL:HG11	1.29	1.25
1:A:86:ASN:HB2	1:A:849:ASP:O	1.36	1.24
1:A:68:PHE:CE1	1:A:71:SER:HB2	1.72	1.24
1:A:262:ARG:NH2	1:A:401:GLY:C	1.91	1.24
1:A:588:ALA:HB1	1:A:592:GLN:CD	1.55	1.24
1:A:598:TRP:O	1:A:600:SER:N	1.70	1.24
1:A:249:PRO:HG3	1:A:252:TRP:CD2	1.72	1.24
1:A:309:TRP:CE3	1:A:343:THR:HG21	1.72	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:671:LEU:CD1	1:A:671:LEU:O	1.85	1.24
2:B:38:LYS:HD2	2:B:65:GLU:OE2	1.12	1.24
1:A:894:ARG:HG3	1:A:902:MET:CE	1.66	1.24
2:B:165:THR:HA	2:B:546:MET:CE	1.68	1.24
2:B:98:PHE:CZ	2:B:496:MET:SD	2.31	1.23
1:A:199:MET:HG3	1:A:440:THR:OG1	1.36	1.23
1:A:29:MET:HE1	1:A:135:CYS:SG	0.69	1.22
1:A:652:ASN:ND2	1:A:800:HIS:CE1	2.06	1.22
1:A:931:LEU:HD22	2:B:615:MET:SD	1.74	1.22
2:B:729:ARG:HB3	2:B:754:TYR:CE1	1.73	1.22
1:A:372:LYS:N	1:A:500:MET:HE3	1.54	1.22
1:A:253:LEU:HD22	1:A:628:SER:CB	1.69	1.22
1:A:208:HIS:CD2	1:A:309:TRP:CH2	2.24	1.21
1:A:529:ALA:CA	1:A:594:MET:CE	2.17	1.21
2:B:343:LEU:HD21	2:B:373:THR:CG2	1.68	1.21
2:B:659:ILE:HD11	2:B:788:LEU:CD2	1.70	1.21
1:A:243:VAL:HG21	1:A:473:LEU:O	1.38	1.21
1:A:132:MET:CE	1:A:493:GLN:OE1	1.89	1.21
1:A:231:THR:HG21	1:A:333:TRP:NE1	1.53	1.21
1:A:876:VAL:HG22	2:B:523:HIS:CD2	1.72	1.21
1:A:650:ALA:CB	1:A:796:SER:HB2	1.71	1.20
1:A:428:PRO:O	1:A:430:THR:HG22	1.37	1.20
2:B:597:LEU:HD12	2:B:644:ASP:CG	1.60	1.20
1:A:893:VAL:CG2	2:B:503:LEU:HD12	1.70	1.20
1:A:127:PHE:CD2	1:A:189:ARG:HD2	1.61	1.20
1:A:435:GLN:O	1:A:439:ALA:HB3	1.42	1.20
2:B:247:ARG:CZ	2:B:347:TRP:HE1	1.55	1.20
2:B:597:LEU:HD12	2:B:644:ASP:OD1	1.36	1.20
1:A:426:MET:N	1:A:426:MET:SD	2.15	1.19
1:A:756:ARG:HH12	1:A:851:HIS:CE1	1.60	1.19
1:A:307:MET:O	1:A:309:TRP:CD1	1.94	1.19
2:B:542:ALA:HA	2:B:572:PRO:O	1.04	1.19
2:B:327:TYR:CZ	2:B:448:MET:HE1	1.77	1.19
1:A:131:ARG:NH2	1:A:499:ASP:O	1.76	1.19
2:B:550:MET:N	2:B:550:MET:SD	2.15	1.19
1:A:892:CYS:SG	2:B:902:GLN:HG2	1.82	1.18
2:B:332:PRO:HG2	2:B:399:PHE:CE2	1.77	1.18
2:B:673:TRP:CE3	2:B:755:MET:HE2	1.73	1.18
2:B:794:GLN:OE1	2:B:805:HIS:CE1	1.95	1.18
1:A:135:CYS:SG	1:A:148:MET:HE2	1.84	1.18
1:A:887:PRO:O	1:A:893:VAL:CG1	1.91	1.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:492:VAL:CB	1:A:495:VAL:HG22	1.74	1.18
1:A:231:THR:CG2	1:A:333:TRP:HE1	1.57	1.18
1:A:529:ALA:CA	1:A:594:MET:HE2	1.71	1.18
2:B:38:LYS:NZ	2:B:65:GLU:OE2	1.76	1.18
2:B:659:ILE:CD1	2:B:788:LEU:CD2	2.22	1.18
1:A:29:MET:CE	1:A:135:CYS:SG	1.18	1.17
1:A:492:VAL:HB	1:A:495:VAL:CG2	1.72	1.17
1:A:671:LEU:O	1:A:671:LEU:HD13	1.03	1.17
1:A:964:VAL:HG11	2:B:788:LEU:CD1	1.75	1.17
1:A:973:GLY:O	2:B:791:ILE:HD11	1.42	1.17
2:B:523:HIS:CE1	2:B:527:GLN:NE2	2.11	1.17
1:A:671:LEU:CG	1:A:685:ILE:HG22	1.74	1.17
2:B:502:VAL:CG1	2:B:901:LEU:CD1	2.21	1.17
1:A:372:LYS:H	1:A:500:MET:CE	1.56	1.17
1:A:127:PHE:CE2	1:A:189:ARG:CD	2.27	1.16
2:B:493:GLY:CA	2:B:562:LEU:HD23	1.75	1.16
1:A:934:PRO:CB	2:B:613:LEU:HD12	1.75	1.16
1:A:39:ILE:HG23	1:A:507:VAL:CG1	1.74	1.16
1:A:39:ILE:HG23	1:A:507:VAL:HG12	1.23	1.16
1:A:316:LEU:CD2	1:A:350:TYR:CZ	2.29	1.16
2:B:261:GLY:O	2:B:299:MET:CG	1.93	1.16
1:A:472:ASP:OD2	1:A:739:ALA:CA	1.93	1.15
1:A:249:PRO:CG	1:A:252:TRP:CD2	2.27	1.15
1:A:238:HIS:ND1	1:A:334:LYS:CD	2.09	1.15
2:B:261:GLY:O	2:B:299:MET:HG3	0.98	1.15
1:A:275:ASP:OD1	1:A:276:PRO:CD	1.96	1.14
1:A:934:PRO:HB2	2:B:613:LEU:HD12	1.22	1.14
2:B:123:ASN:ND2	2:B:149:GLN:HB3	1.62	1.14
2:B:734:LEU:HD22	2:B:735:HIS:H	1.12	1.14
1:A:574:LEU:CD2	1:A:577:ARG:CD	2.25	1.14
1:A:85:ALA:CB	1:A:910:LEU:HD21	1.78	1.14
2:B:576:TYR:CE1	2:B:578:PHE:CE1	2.35	1.14
1:A:243:VAL:CG2	1:A:473:LEU:O	1.96	1.14
1:A:652:ASN:HD21	1:A:800:HIS:CE1	1.65	1.14
2:B:434:MET:CE	2:B:502:VAL:CG2	2.25	1.14
2:B:673:TRP:CZ3	2:B:755:MET:HE1	1.66	1.14
1:A:664:CYS:CB	1:A:737:GLY:HA3	1.78	1.13
1:A:807:MET:O	1:A:810:MET:HB3	1.49	1.13
1:A:868:TYR:OH	2:B:772:PHE:CD2	2.01	1.13
1:A:692:ALA:HB1	1:A:722:HIS:O	1.36	1.13
2:B:32:LYS:HE2	2:B:69:GLU:OE1	1.46	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:371:LEU:CA	1:A:500:MET:HE2	1.70	1.12
1:A:525:LEU:CD2	1:A:608:LEU:HD12	1.79	1.13
1:A:529:ALA:HB2	1:A:594:MET:HE1	1.15	1.12
1:A:79:GLU:CB	1:A:856:THR:HG23	1.65	1.12
1:A:367:ILE:CG1	1:A:415:GLN:NE2	2.12	1.12
2:B:659:ILE:HD11	2:B:788:LEU:HD23	1.20	1.12
1:A:68:PHE:CD1	1:A:71:SER:HB2	1.83	1.12
2:B:576:TYR:CD1	2:B:578:PHE:CE1	2.37	1.12
1:A:542:GLU:OE1	1:A:625:ARG:NH2	1.81	1.12
1:A:127:PHE:CD2	1:A:189:ARG:HD3	1.71	1.12
1:A:231:THR:HG23	1:A:343:THR:OG1	1.40	1.11
1:A:249:PRO:CG	1:A:252:TRP:CG	2.33	1.11
2:B:747:ALA:CB	2:B:749:THR:HG23	1.80	1.11
1:A:491:LEU:HD12	1:A:496:GLN:HG2	1.28	1.11
1:A:635:GLY:HA2	1:A:640:MET:HE1	1.28	1.11
1:A:111:ASN:OD1	1:A:467:GLN:HG3	1.49	1.11
1:A:664:CYS:HB2	1:A:737:GLY:HA3	1.14	1.11
1:A:247:PRO:CB	1:A:477:SER:OG	1.99	1.11
1:A:268:GLU:OE2	1:A:693:THR:HG21	1.50	1.11
1:A:472:ASP:OD2	1:A:739:ALA:HB2	1.36	1.11
1:A:81:ILE:HD13	1:A:81:ILE:O	1.50	1.10
1:A:232:TRP:HZ3	1:A:344:ILE:HG21	1.16	1.10
1:A:635:GLY:HA2	1:A:640:MET:CE	1.80	1.10
2:B:332:PRO:CG	2:B:399:PHE:CZ	2.33	1.10
1:A:249:PRO:CG	1:A:252:TRP:CE2	2.33	1.10
1:A:372:LYS:N	1:A:500:MET:CE	2.10	1.10
2:B:263:LEU:HD12	2:B:293:ALA:HB2	1.13	1.10
2:B:729:ARG:HB2	2:B:754:TYR:HE1	1.02	1.10
1:A:671:LEU:HG	1:A:685:ILE:HG22	1.11	1.09
1:A:671:LEU:CG	1:A:685:ILE:CG2	2.30	1.09
1:A:894:ARG:O	1:A:902:MET:HE1	1.51	1.09
1:A:46:LEU:HD21	1:A:458:ILE:CD1	1.82	1.09
1:A:132:MET:HE3	1:A:493:GLN:OE1	1.48	1.09
1:A:893:VAL:HG23	2:B:503:LEU:HD12	1.17	1.09
2:B:327:TYR:CD1	2:B:448:MET:HE1	1.86	1.09
2:B:737:TYR:HE1	2:B:750:GLU:OE1	1.34	1.09
1:A:893:VAL:CG2	2:B:503:LEU:CD1	2.29	1.09
2:B:502:VAL:HG11	2:B:901:LEU:HD11	1.15	1.09
2:B:623:ILE:HG21	2:B:893:ILE:CD1	1.82	1.09
1:A:54:GLU:CD	1:A:600:SER:HG	1.55	1.09
1:A:894:ARG:CG	1:A:902:MET:CE	2.28	1.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:542:ALA:CA	2:B:572:PRO:O	2.00	1.09
1:A:54:GLU:OE2	1:A:600:SER:OG	1.72	1.08
1:A:205:ALA:HB2	1:A:232:TRP:NE1	1.68	1.08
1:A:380:CYS:SG	1:A:435:GLN:CA	2.40	1.08
2:B:269:SER:CB	2:B:430:ALA:O	2.01	1.08
1:A:109:GLY:HA3	1:A:233:GLU:O	1.51	1.08
1:A:794:VAL:HG23	1:A:794:VAL:O	1.51	1.08
1:A:55:LEU:HD11	1:A:528:MET:SD	1.91	1.08
1:A:367:ILE:HD11	1:A:415:GLN:CD	1.62	1.08
1:A:433:LYS:CD	1:A:437:ALA:HB2	1.82	1.08
2:B:838:ARG:HH22	2:B:932:SER:CB	1.67	1.08
1:A:58:GLN:CG	1:A:860:ILE:HD12	1.82	1.08
2:B:493:GLY:HA2	2:B:562:LEU:HD23	1.17	1.08
2:B:729:ARG:HB3	2:B:754:TYR:HE1	1.09	1.08
1:A:574:LEU:HD21	1:A:577:ARG:HD2	1.27	1.08
1:A:634:ILE:HB	1:A:688:GLU:HG2	1.29	1.08
1:A:54:GLU:CD	1:A:600:SER:OG	1.93	1.07
1:A:894:ARG:O	1:A:902:MET:CE	2.00	1.07
2:B:839:LEU:HD23	2:B:866:LEU:CD2	1.82	1.07
1:A:254:ASP:CA	1:A:556:HIS:NE2	1.97	1.07
1:A:776:VAL:HG11	1:A:807:MET:HE1	1.13	1.07
1:A:894:ARG:CB	1:A:902:MET:CE	2.30	1.07
2:B:332:PRO:HG2	2:B:399:PHE:CD2	1.90	1.07
2:B:722:GLU:HG2	2:B:729:ARG:HH21	1.16	1.07
1:A:79:GLU:HA	1:A:856:THR:HG22	1.10	1.07
1:A:85:ALA:HB2	1:A:910:LEU:CD2	1.84	1.07
1:A:355:THR:O	1:A:418:PHE:HD1	1.38	1.07
1:A:650:ALA:HB3	1:A:796:SER:HB2	1.12	1.07
2:B:194:ILE:HG21	2:B:200:GLN:HA	1.34	1.07
1:A:756:ARG:NH1	1:A:851:HIS:CE1	2.22	1.06
2:B:256:ASP:HB3	2:B:300:VAL:HG11	1.12	1.06
1:A:372:LYS:H	1:A:500:MET:HE3	0.90	1.06
1:A:438:THR:O	1:A:442:ALA:HB3	1.55	1.06
1:A:627:ARG:NH1	1:A:738:CYS:SG	2.27	1.06
1:A:868:TYR:CZ	2:B:772:PHE:CE2	2.42	1.06
2:B:7:GLN:HG2	2:B:29:VAL:HG11	1.36	1.06
2:B:673:TRP:CZ3	2:B:755:MET:HE3	1.84	1.06
1:A:664:CYS:HB2	1:A:737:GLY:CA	1.85	1.06
2:B:576:TYR:CE1	2:B:578:PHE:HE1	1.72	1.06
1:A:876:VAL:HG23	2:B:523:HIS:CD2	1.84	1.06
2:B:197:PRO:O	2:B:198:MET:HB2	1.26	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:84:THR:HG21	2:B:545:ARG:HH11	1.21	1.06
2:B:549:LYS:C	2:B:550:MET:CE	2.23	1.06
1:A:384:LEU:C	1:A:385:LEU:HD13	1.75	1.05
1:A:650:ALA:CB	1:A:796:SER:CB	2.27	1.05
1:A:29:MET:HE2	1:A:135:CYS:SG	1.90	1.05
1:A:476:GLY:O	1:A:477:SER:HB3	1.53	1.05
1:A:558:VAL:O	1:A:562:LEU:HD23	1.54	1.05
1:A:574:LEU:HD23	1:A:577:ARG:CG	1.86	1.05
1:A:607:ARG:HH11	2:B:4:PRO:HD3	1.21	1.05
1:A:966:ALA:O	1:A:969:GLU:HB3	1.55	1.05
1:A:249:PRO:HG3	1:A:252:TRP:NE1	1.70	1.05
1:A:433:LYS:CG	1:A:437:ALA:HB2	1.86	1.05
1:A:660:ASN:ND2	1:A:661:GLU:OE2	1.88	1.05
2:B:729:ARG:HB2	2:B:754:TYR:CE1	1.84	1.05
1:A:750:GLU:OE2	1:A:751:HIS:N	1.87	1.04
1:A:893:VAL:HG23	2:B:503:LEU:HD11	1.27	1.04
2:B:32:LYS:CE	2:B:69:GLU:OE1	2.05	1.04
2:B:43:THR:HG22	2:B:55:LYS:HD3	1.04	1.04
2:B:498:ILE:HD12	2:B:820:PHE:CE2	1.91	1.04
1:A:367:ILE:CG1	1:A:415:GLN:HE21	1.67	1.04
1:A:957:PHE:O	1:A:958:THR:OG1	1.74	1.04
1:A:973:GLY:O	2:B:791:ILE:CD1	2.04	1.04
1:A:39:ILE:HA	1:A:506:SER:OG	1.56	1.04
1:A:88:THR:HG22	1:A:90:MET:H	1.21	1.04
1:A:272:ARG:HH21	1:A:272:ARG:HB2	1.15	1.04
2:B:747:ALA:HB1	2:B:749:THR:HG23	1.35	1.04
1:A:273:LEU:HD23	1:A:281:VAL:HG23	1.37	1.04
1:A:529:ALA:HB2	1:A:594:MET:CE	1.78	1.04
1:A:957:PHE:CD2	2:B:279:TYR:HE1	1.74	1.04
1:A:249:PRO:CG	1:A:252:TRP:CD1	2.41	1.04
1:A:657:TRP:CE2	1:A:662:SER:O	2.09	1.04
2:B:597:LEU:CG	2:B:644:ASP:OD2	2.05	1.04
1:A:554:ASP:OD1	1:A:672:PRO:HB3	1.57	1.03
1:A:316:LEU:HD22	1:A:350:TYR:CE1	1.92	1.03
1:A:472:ASP:CG	1:A:739:ALA:HB2	1.78	1.03
1:A:889:GLU:OE1	1:A:889:GLU:N	1.91	1.03
1:A:105:TRP:CD1	1:A:471:ARG:CZ	2.26	1.03
1:A:231:THR:HG21	1:A:333:TRP:HE1	1.03	1.03
1:A:290:GLN:CB	1:A:413:GLN:NE2	1.99	1.03
1:A:298:VAL:O	1:A:700:GLY:O	1.76	1.03
1:A:894:ARG:C	1:A:902:MET:HE3	1.78	1.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:433:TRP:NE1	2:B:518:GLN:HG2	1.73	1.03
1:A:85:ALA:CB	1:A:910:LEU:CD2	2.37	1.03
1:A:671:LEU:CB	1:A:685:ILE:HG22	1.88	1.03
1:A:55:LEU:CG	1:A:528:MET:HE3	1.69	1.03
2:B:679:CYS:O	2:B:741:ILE:O	1.76	1.03
1:A:81:ILE:HD11	1:A:98:GLU:HB2	1.39	1.02
1:A:433:LYS:HG2	1:A:437:ALA:HB2	1.37	1.02
2:B:549:LYS:HA	2:B:550:MET:HE1	1.41	1.02
2:B:597:LEU:HD12	2:B:644:ASP:OD2	1.57	1.02
1:A:314:THR:O	1:A:347:LYS:CE	2.07	1.02
1:A:449:ILE:HG13	1:A:453:THR:HG21	1.41	1.02
2:B:330:ALA:N	2:B:450:GLU:OE2	1.91	1.02
1:A:972:GLU:CB	1:A:973:GLY:HA3	1.89	1.02
2:B:36:GLU:OE1	2:B:65:GLU:OE1	1.78	1.02
2:B:163:GLY:HA3	2:B:548:ASN:HB3	1.38	1.02
2:B:618:LEU:HD13	2:B:623:ILE:HD11	1.42	1.02
2:B:794:GLN:CG	2:B:796:ASP:O	2.08	1.02
1:A:79:GLU:N	1:A:856:THR:HG22	1.75	1.02
1:A:85:ALA:HB2	1:A:910:LEU:HD21	1.06	1.02
1:A:231:THR:HG22	1:A:343:THR:OG1	1.55	1.02
1:A:894:ARG:C	1:A:902:MET:CE	2.26	1.02
1:A:898:THR:HG23	2:B:860:MET:CE	1.89	1.02
1:A:898:THR:HG23	2:B:860:MET:HE3	1.38	1.02
2:B:623:ILE:HG21	2:B:893:ILE:HD11	1.05	1.02
1:A:671:LEU:HG	1:A:685:ILE:HG21	1.39	1.02
1:A:29:MET:CE	1:A:135:CYS:HG	0.75	1.01
1:A:532:ALA:CA	1:A:535:CYS:SG	2.48	1.01
1:A:815:ILE:HG22	1:A:816:THR:H	1.19	1.01
2:B:722:GLU:CG	2:B:729:ARG:HH21	1.73	1.01
2:B:343:LEU:HD21	2:B:373:THR:HG21	1.38	1.01
2:B:498:ILE:HD12	2:B:820:PHE:HE2	1.23	1.01
1:A:529:ALA:CB	1:A:594:MET:HE1	1.85	1.01
1:A:650:ALA:HB3	1:A:796:SER:CA	1.89	1.01
2:B:433:TRP:HE1	2:B:518:GLN:HG2	1.26	1.01
1:A:221:ASN:OD1	1:A:431:PHE:CZ	2.14	1.01
1:A:767:ARG:NH2	1:A:821:ASP:OD1	1.92	1.01
2:B:163:GLY:O	2:B:442:PRO:HA	1.58	1.01
2:B:43:THR:CG2	2:B:55:LYS:CD	2.38	1.00
2:B:549:LYS:C	2:B:550:MET:HE3	1.80	1.00
1:A:127:PHE:HD2	1:A:189:ARG:HD3	0.86	1.00
1:A:316:LEU:HD21	1:A:350:TYR:OH	1.59	1.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:241:SER:HB3	2:B:390:ARG:HG2	1.40	1.00
2:B:498:ILE:O	2:B:502:VAL:HG23	1.61	1.00
1:A:29:MET:HE1	1:A:135:CYS:CB	1.92	1.00
1:A:432:THR:O	1:A:435:GLN:CB	2.10	1.00
1:A:876:VAL:HA	2:B:520:ASP:OD1	1.61	1.00
2:B:343:LEU:HD21	2:B:373:THR:HG23	1.38	1.00
1:A:931:LEU:HD21	2:B:615:MET:SD	1.99	1.00
2:B:747:ALA:HB1	2:B:749:THR:CG2	1.92	1.00
1:A:516:LYS:O	1:A:520:THR:HG22	1.62	1.00
2:B:377:GLY:HA3	2:B:451:PRO:HB3	1.42	1.00
2:B:597:LEU:CD1	2:B:644:ASP:OD2	2.08	1.00
2:B:120:LEU:CD1	2:B:152:VAL:HB	1.92	1.00
1:A:79:GLU:HB3	1:A:856:THR:HG21	1.00	0.99
1:A:232:TRP:HZ3	1:A:344:ILE:CG2	1.73	0.99
1:A:790:PRO:HG3	1:A:819:ASP:HB3	1.43	0.99
2:B:43:THR:HG22	2:B:55:LYS:CD	1.93	0.99
1:A:135:CYS:SG	1:A:148:MET:CE	2.49	0.99
1:A:217:GLU:C	1:A:218:LEU:HD23	1.81	0.99
2:B:434:MET:HE1	2:B:502:VAL:CG2	1.86	0.99
1:A:588:ALA:CA	1:A:592:GLN:NE2	2.16	0.99
2:B:7:GLN:HG2	2:B:29:VAL:CG1	1.92	0.99
1:A:574:LEU:CD2	1:A:577:ARG:HD2	1.87	0.99
1:A:776:VAL:CG1	1:A:807:MET:HE1	1.92	0.99
2:B:450:GLU:HB3	2:B:451:PRO:HD3	1.45	0.99
1:A:122:SER:OG	1:A:187:ASP:OD2	1.81	0.98
1:A:361:GLU:N	1:A:361:GLU:OE2	1.96	0.98
2:B:66:ARG:NH1	2:B:173:ASP:OD2	1.96	0.98
1:A:309:TRP:H	1:A:309:TRP:HD1	1.06	0.98
1:A:574:LEU:HD23	1:A:577:ARG:HG3	1.45	0.98
1:A:477:SER:C	1:A:478:LEU:HD12	1.83	0.98
2:B:327:TYR:CD1	2:B:448:MET:CE	2.42	0.98
1:A:529:ALA:CB	1:A:594:MET:HE3	1.88	0.98
2:B:373:THR:OG1	2:B:381:THR:HA	1.64	0.98
2:B:623:ILE:CG2	2:B:893:ILE:HD11	1.92	0.98
1:A:29:MET:SD	1:A:135:CYS:SG	2.61	0.98
1:A:352:ARG:HA	1:A:382:GLU:OE1	1.62	0.98
1:A:828:ARG:HB3	1:A:828:ARG:HH11	1.29	0.97
1:A:64:GLY:O	1:A:65:LEU:HG	1.62	0.97
1:A:621:VAL:O	1:A:621:VAL:HG12	1.64	0.97
2:B:165:THR:HA	2:B:546:MET:HE1	1.46	0.97
1:A:668:PHE:HD2	1:A:686:GLY:HA3	1.27	0.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:19:LYS:HA	1:A:140:LEU:HD21	1.45	0.97
1:A:119:ILE:HG23	1:A:487:LEU:O	1.65	0.97
2:B:509:ILE:O	2:B:632:THR:HA	1.63	0.97
1:A:229:TYR:OH	1:A:311:ASP:OD1	1.81	0.97
1:A:815:ILE:HG22	1:A:816:THR:N	1.74	0.97
1:A:901:SER:OG	2:B:500:GLN:OE1	1.82	0.97
2:B:247:ARG:CZ	2:B:347:TRP:NE1	2.28	0.97
2:B:256:ASP:CB	2:B:300:VAL:HG11	1.93	0.97
2:B:493:GLY:HA2	2:B:562:LEU:CD2	1.94	0.97
2:B:673:TRP:HE3	2:B:755:MET:HE2	1.15	0.97
1:A:79:GLU:HB2	1:A:856:THR:HG23	1.44	0.97
1:A:607:ARG:NH1	2:B:4:PRO:HD3	1.78	0.97
1:A:876:VAL:HG22	2:B:523:HIS:HD2	0.80	0.97
2:B:227:VAL:HG22	2:B:364:MET:SD	2.05	0.97
1:A:372:LYS:NZ	1:A:499:ASP:OD2	1.98	0.97
2:B:576:TYR:HD1	2:B:578:PHE:HE1	1.10	0.97
1:A:204:SER:OG	1:A:523:TYR:CE1	2.18	0.96
2:B:38:LYS:CE	2:B:65:GLU:OE2	2.12	0.96
2:B:839:LEU:HD23	2:B:866:LEU:HD23	0.98	0.96
1:A:554:ASP:O	1:A:558:VAL:HG23	1.64	0.96
2:B:189:ALA:O	2:B:190:SER:HB3	1.64	0.96
1:A:156:THR:HG23	1:A:157:MET:H	1.27	0.96
2:B:442:PRO:O	2:B:576:TYR:OH	1.81	0.96
2:B:121:GLY:HA2	2:B:150:CYS:O	1.64	0.96
2:B:263:LEU:CD1	2:B:293:ALA:HB2	1.96	0.96
1:A:247:PRO:HB3	1:A:477:SER:HG	1.21	0.96
1:A:253:LEU:CD2	1:A:628:SER:CB	2.35	0.96
1:A:756:ARG:NH1	1:A:851:HIS:ND1	2.14	0.96
2:B:676:TRP:CD1	2:B:754:TYR:HB2	2.00	0.96
1:A:232:TRP:CZ3	1:A:344:ILE:HG21	2.00	0.96
1:A:892:CYS:SG	2:B:902:GLN:CG	2.54	0.96
1:A:950:MET:HE1	2:B:112:THR:HG22	1.48	0.96
1:A:127:PHE:HE1	1:A:452:ARG:NE	1.62	0.96
1:A:432:THR:HG23	1:A:433:LYS:N	1.80	0.96
1:A:442:ALA:HA	1:A:509:VAL:CG1	1.95	0.96
2:B:117:ARG:NE	2:B:155:GLU:OE2	1.99	0.96
1:A:549:VAL:HG13	1:A:553:THR:HG21	1.46	0.95
1:A:921:ASP:HB2	2:B:626:ALA:HB1	1.46	0.95
2:B:12:ARG:HH12	2:B:991:ASP:CG	1.70	0.95
2:B:433:TRP:HE1	2:B:518:GLN:CG	1.79	0.95
1:A:634:ILE:HB	1:A:688:GLU:CG	1.95	0.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:868:TYR:CZ	2:B:772:PHE:CD2	2.54	0.95
1:A:288:VAL:O	1:A:324:ARG:HD3	1.67	0.95
1:A:35:ALA:O	1:A:42:GLY:HA2	1.65	0.95
1:A:964:VAL:HG11	2:B:788:LEU:HD12	1.48	0.95
2:B:197:PRO:O	2:B:198:MET:CB	2.09	0.95
2:B:589:TYR:CD1	2:B:808:GLY:HA3	2.01	0.95
1:A:623:LEU:O	1:A:626:ILE:CG2	2.14	0.95
1:A:6:GLN:HA	1:A:6:GLN:HE21	1.28	0.94
2:B:98:PHE:HZ	2:B:496:MET:SD	1.86	0.94
2:B:165:THR:HG22	2:B:219:GLN:HE22	1.31	0.94
1:A:621:VAL:O	1:A:621:VAL:CG1	2.13	0.94
1:A:776:VAL:HG11	1:A:807:MET:HE3	1.47	0.94
1:A:776:VAL:CG1	1:A:807:MET:CE	2.44	0.94
1:A:756:ARG:NH1	1:A:851:HIS:CG	2.34	0.94
2:B:269:SER:HB3	2:B:430:ALA:O	1.64	0.94
1:A:352:ARG:NE	1:A:382:GLU:OE2	1.85	0.94
1:A:58:GLN:HA	1:A:58:GLN:HE21	1.30	0.94
1:A:211:VAL:HG22	1:A:216:GLN:HB2	1.50	0.94
1:A:964:VAL:HG11	2:B:788:LEU:HD13	1.47	0.94
1:A:232:TRP:CZ3	1:A:344:ILE:CG2	2.50	0.94
2:B:114:ASN:OD1	2:B:115:ALA:N	1.99	0.94
2:B:428:CYS:SG	2:B:818:HIS:CB	2.54	0.94
1:A:634:ILE:H	1:A:634:ILE:HD13	1.32	0.94
2:B:7:GLN:HE22	2:B:76:ASP:HB2	1.29	0.94
1:A:26:LEU:HD11	1:A:144:THR:HG22	1.49	0.94
1:A:68:PHE:CD2	2:B:214:ARG:HD2	2.03	0.94
1:A:180:SER:OG	1:A:181:ASP:OD1	1.85	0.94
1:A:68:PHE:CE1	1:A:71:SER:CB	2.52	0.93
2:B:839:LEU:CD2	2:B:866:LEU:CD2	2.39	0.93
2:B:123:ASN:HD22	2:B:149:GLN:HB3	1.30	0.93
1:A:103:ARG:HG3	1:A:103:ARG:HH21	1.31	0.93
1:A:634:ILE:HD11	1:A:718:ARG:NH2	1.83	0.93
1:A:671:LEU:HD13	1:A:671:LEU:C	1.89	0.93
2:B:434:MET:HE1	2:B:502:VAL:HG21	0.94	0.93
2:B:434:MET:HE2	2:B:502:VAL:CG2	1.95	0.93
1:A:932:ARG:NH2	1:A:932:ARG:HB3	1.84	0.93
2:B:722:GLU:CG	2:B:729:ARG:NH2	2.31	0.93
1:A:262:ARG:HH22	1:A:401:GLY:CA	1.61	0.93
1:A:234:LEU:O	1:A:236:CYS:N	2.01	0.92
1:A:238:HIS:HE2	1:A:338:SER:HA	1.34	0.92
2:B:165:THR:CG2	2:B:219:GLN:HE22	1.80	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:433:LYS:CD	1:A:437:ALA:CB	2.46	0.92
2:B:12:ARG:NH1	2:B:991:ASP:OD2	2.01	0.92
2:B:247:ARG:NH2	2:B:347:TRP:HE1	1.66	0.92
1:A:84:THR:HA	1:A:95:GLN:HB3	1.49	0.92
1:A:352:ARG:HG2	1:A:352:ARG:HH11	1.34	0.92
1:A:78:ALA:C	1:A:856:THR:HG22	1.87	0.92
1:A:132:MET:HE1	1:A:493:GLN:HB3	1.47	0.92
1:A:704:ILE:HA	1:A:707:ILE:CD1	1.99	0.92
1:A:46:LEU:HD21	1:A:458:ILE:HD12	1.49	0.92
1:A:132:MET:CE	1:A:493:GLN:HB3	1.99	0.92
1:A:574:LEU:HD21	1:A:577:ARG:CD	1.93	0.92
2:B:433:TRP:CG	2:B:434:MET:N	2.36	0.92
1:A:525:LEU:HD23	1:A:608:LEU:CD1	2.00	0.92
2:B:264:THR:HG22	2:B:265:PRO:HD2	1.49	0.91
1:A:58:GLN:HG2	1:A:860:ILE:CD1	2.00	0.91
1:A:692:ALA:CA	1:A:722:HIS:O	2.17	0.91
2:B:589:TYR:HE1	2:B:808:GLY:HA3	1.34	0.91
1:A:532:ALA:HB1	1:A:597:VAL:HG21	1.52	0.91
1:A:627:ARG:HG3	1:A:730:THR:O	1.70	0.91
1:A:652:ASN:HD21	1:A:800:HIS:HE1	0.94	0.91
1:A:788:ILE:HD11	1:A:823:VAL:CG2	2.00	0.91
1:A:238:HIS:CE1	1:A:334:LYS:CG	2.54	0.91
1:A:932:ARG:HB3	1:A:932:ARG:CZ	1.99	0.91
2:B:363:VAL:HG13	2:B:441:MET:CE	2.00	0.91
1:A:532:ALA:O	1:A:536:GLU:N	2.04	0.91
2:B:428:CYS:SG	2:B:818:HIS:HB3	2.11	0.91
2:B:7:GLN:CG	2:B:29:VAL:HG11	2.00	0.91
1:A:253:LEU:HD22	1:A:628:SER:HB3	0.92	0.91
1:A:634:ILE:CB	1:A:688:GLU:HG2	2.00	0.91
2:B:198:MET:HE2	2:B:458:ASN:O	1.69	0.91
1:A:238:HIS:NE2	1:A:338:SER:HA	1.86	0.91
2:B:111:MET:SD	2:B:118:PHE:HD2	1.93	0.91
2:B:499:TYR:HE1	2:B:901:LEU:HD22	1.35	0.90
1:A:885:LEU:HD22	1:A:885:LEU:H	1.35	0.90
2:B:32:LYS:CD	2:B:69:GLU:OE1	2.20	0.90
2:B:45:ILE:C	2:B:53:ILE:HD11	1.89	0.90
2:B:450:GLU:CB	2:B:451:PRO:HD3	1.95	0.90
1:A:574:LEU:CD2	1:A:577:ARG:CG	2.49	0.90
1:A:908:PRO:HG3	2:B:528:TYR:HE1	1.34	0.90
1:A:262:ARG:HH21	1:A:401:GLY:CA	1.69	0.90
2:B:467:GLN:NE2	2:B:467:GLN:O	2.03	0.90

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:262:ARG:HH22	1:A:401:GLY:C	1.59	0.90
1:A:68:PHE:HD2	2:B:214:ARG:HD2	1.33	0.90
1:A:431:PHE:O	1:A:434:ALA:HB3	1.70	0.90
2:B:84:THR:CG2	2:B:545:ARG:HD3	2.01	0.90
2:B:737:TYR:CE1	2:B:750:GLU:OE1	2.25	0.90
1:A:199:MET:HG3	1:A:440:THR:HG1	1.32	0.90
1:A:201:MET:CE	1:A:465:VAL:HG11	2.02	0.90
1:A:432:THR:O	1:A:435:GLN:HB2	1.68	0.90
2:B:264:THR:CG2	2:B:265:PRO:CD	2.13	0.90
1:A:481:LEU:HD22	1:A:481:LEU:H	1.35	0.89
1:A:571:LEU:CD2	1:A:592:GLN:HG3	2.02	0.89
1:A:713:LEU:CD2	1:A:714:ASN:N	2.02	0.89
1:A:371:LEU:C	1:A:500:MET:CE	2.39	0.89
1:A:244:ALA:CB	1:A:274:VAL:CG2	2.49	0.89
1:A:316:LEU:CD2	1:A:350:TYR:OH	2.19	0.89
1:A:642:ASP:O	1:A:644:SER:N	2.04	0.89
2:B:78:LEU:HD22	2:B:180:LEU:HD21	1.53	0.89
1:A:525:LEU:CD2	1:A:608:LEU:CD1	2.49	0.89
2:B:327:TYR:HE1	2:B:448:MET:HE1	1.34	0.89
1:A:777:LEU:HD22	1:A:834:MET:HE2	1.53	0.89
2:B:331:LEU:HD12	2:B:373:THR:HG22	1.54	0.89
2:B:334:CYS:O	2:B:379:ARG:NH1	2.05	0.89
1:A:499:ASP:OD1	1:A:500:MET:N	2.06	0.89
1:A:532:ALA:HB1	1:A:597:VAL:CG2	2.03	0.89
1:A:387:ASN:HD22	1:A:391:GLY:CA	1.86	0.89
1:A:788:ILE:HD11	1:A:823:VAL:HG21	1.55	0.89
2:B:57:GLY:O	2:B:478:HIS:HB2	1.72	0.89
2:B:89:ASP:HA	2:B:410:GLN:NE2	1.88	0.89
1:A:214:ARG:HD3	1:A:214:ARG:H	1.37	0.89
1:A:307:MET:O	1:A:309:TRP:HD1	1.43	0.89
1:A:309:TRP:CE3	1:A:343:THR:CG2	2.55	0.89
2:B:263:LEU:HD12	2:B:293:ALA:CB	2.01	0.89
1:A:830:ARG:NH1	1:A:830:ARG:O	2.06	0.88
1:A:529:ALA:HA	1:A:594:MET:HE2	0.89	0.88
1:A:932:ARG:HB2	1:A:933:PRO:HD2	1.54	0.88
2:B:247:ARG:NE	2:B:347:TRP:NE1	2.21	0.88
1:A:843:ARG:HB3	1:A:843:ARG:HH11	1.35	0.88
2:B:110:GLN:HA	2:B:110:GLN:HE21	1.37	0.88
1:A:79:GLU:N	1:A:79:GLU:OE1	2.07	0.88
2:B:597:LEU:HG	2:B:644:ASP:OD2	1.70	0.88
2:B:673:TRP:HZ3	2:B:755:MET:HE3	1.31	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:638:ARG:HH21	1:A:638:ARG:HG3	1.36	0.88
1:A:39:ILE:CA	1:A:506:SER:OG	2.21	0.88
1:A:309:TRP:HE3	1:A:343:THR:HG21	1.20	0.88
1:A:664:CYS:SG	1:A:737:GLY:HA3	2.14	0.88
1:A:29:MET:CE	1:A:135:CYS:CB	2.49	0.88
1:A:525:LEU:HD23	1:A:608:LEU:HD12	1.56	0.88
2:B:165:THR:HG21	2:B:219:GLN:NE2	1.89	0.88
1:A:525:LEU:HD21	1:A:608:LEU:HD12	1.56	0.88
1:A:244:ALA:CB	1:A:274:VAL:HG23	2.03	0.87
1:A:68:PHE:HE1	1:A:71:SER:HB2	1.30	0.87
1:A:78:ALA:O	1:A:856:THR:HG22	1.73	0.87
1:A:371:LEU:CA	1:A:500:MET:HE1	2.04	0.87
2:B:89:ASP:CG	2:B:410:GLN:OE1	2.13	0.87
2:B:734:LEU:CD2	2:B:735:HIS:H	1.86	0.87
1:A:29:MET:HE3	1:A:135:CYS:SG	1.30	0.87
1:A:380:CYS:SG	1:A:434:ALA:O	2.31	0.87
1:A:127:PHE:CE1	1:A:452:ARG:NE	2.42	0.87
1:A:588:ALA:C	1:A:592:GLN:NE2	2.27	0.87
1:A:205:ALA:HB2	1:A:232:TRP:CE2	2.09	0.87
1:A:117:VAL:CG2	1:A:485:VAL:HG23	2.04	0.87
1:A:476:GLY:O	1:A:477:SER:CB	2.22	0.87
1:A:117:VAL:HG22	1:A:485:VAL:HG23	1.56	0.87
1:A:231:THR:HG21	1:A:333:TRP:CE2	2.10	0.87
1:A:478:LEU:HD13	1:A:534:VAL:HG13	1.56	0.87
2:B:549:LYS:CA	2:B:550:MET:HE1	2.04	0.86
2:B:165:THR:CG2	2:B:219:GLN:NE2	2.38	0.86
2:B:434:MET:HE3	2:B:502:VAL:HG11	1.56	0.86
1:A:756:ARG:HH11	1:A:851:HIS:CG	1.94	0.86
2:B:66:ARG:HH11	2:B:66:ARG:HG3	1.40	0.86
1:A:868:TYR:CE1	2:B:772:PHE:CE2	2.63	0.86
2:B:334:CYS:SG	2:B:468:MET:CE	2.63	0.86
1:A:957:PHE:HD2	2:B:279:TYR:HE1	1.21	0.86
2:B:549:LYS:CA	2:B:550:MET:CE	2.53	0.86
2:B:839:LEU:HD22	2:B:866:LEU:HD23	1.57	0.86
1:A:52:THR:HG21	1:A:601:MET:CE	2.06	0.86
1:A:248:VAL:HB	1:A:249:PRO:HD2	1.56	0.86
2:B:26:GLN:O	2:B:27:THR:OG1	1.92	0.86
1:A:55:LEU:HD13	1:A:528:MET:SD	2.05	0.86
1:A:320:SER:OG	1:A:351:HIS:CD2	2.29	0.86
1:A:807:MET:O	1:A:810:MET:CB	2.23	0.86
1:A:957:PHE:CD2	2:B:279:TYR:CE1	2.63	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:433:TRP:NE1	2:B:518:GLN:CG	2.36	0.86
2:B:611:SER:O	2:B:615:MET:HG2	1.76	0.86
1:A:208:HIS:CD2	1:A:309:TRP:CZ2	2.64	0.86
1:A:588:ALA:C	1:A:592:GLN:HE22	1.79	0.86
1:A:260:THR:HG22	1:A:263:GLU:OE1	1.75	0.86
1:A:961:LEU:HD12	2:B:284:MET:SD	2.16	0.86
2:B:84:THR:HG21	2:B:545:ARG:HD3	1.56	0.86
1:A:794:VAL:O	1:A:794:VAL:CG2	2.24	0.85
1:A:966:ALA:O	1:A:969:GLU:CB	2.24	0.85
2:B:117:ARG:CZ	2:B:155:GLU:OE2	2.23	0.85
2:B:120:LEU:HD11	2:B:152:VAL:HB	1.56	0.85
2:B:257:PHE:CD1	2:B:357:HIS:NE2	2.44	0.85
2:B:327:TYR:CZ	2:B:448:MET:CE	2.44	0.85
2:B:240:ASP:O	2:B:241:SER:OG	1.94	0.85
2:B:256:ASP:HB3	2:B:300:VAL:HG13	1.53	0.85
2:B:549:LYS:C	2:B:550:MET:SD	2.53	0.85
1:A:106:LEU:CD1	1:A:470:VAL:HG12	2.05	0.85
1:A:455:HIS:O	1:A:459:THR:HG22	1.74	0.85
1:A:828:ARG:HH11	1:A:828:ARG:CB	1.88	0.85
1:A:320:SER:HA	1:A:351:HIS:HD2	1.41	0.85
1:A:894:ARG:HG3	1:A:902:MET:HE1	0.87	0.85
1:A:127:PHE:CE2	1:A:189:ARG:HD2	2.04	0.85
1:A:492:VAL:HB	1:A:495:VAL:HG22	0.90	0.85
2:B:198:MET:O	2:B:204:GLN:HB3	1.74	0.85
1:A:438:THR:O	1:A:442:ALA:CB	2.23	0.85
2:B:427:ALA:HA	2:B:432:GLU:OE1	1.76	0.85
1:A:499:ASP:HB2	2:B:1001:SER:OG	1.76	0.85
1:A:940:PRO:HG3	2:B:915:SER:HB3	1.59	0.85
1:A:972:GLU:CB	1:A:973:GLY:CA	2.54	0.85
1:A:531:LEU:CD2	1:A:747:ILE:HD11	2.06	0.85
1:A:964:VAL:CG1	2:B:788:LEU:HD13	2.07	0.85
1:A:170:LEU:HD13	1:A:171:ALA:N	1.92	0.84
1:A:861:ARG:NH2	2:B:547:ALA:HB2	1.91	0.84
1:A:957:PHE:HD2	2:B:279:TYR:CE1	1.95	0.84
1:A:344:ILE:CD1	1:A:396:LEU:HD11	2.06	0.84
1:A:367:ILE:HD13	1:A:415:GLN:HE21	0.69	0.84
1:A:379:ALA:HB2	1:A:427:PRO:O	1.77	0.84
1:A:843:ARG:HH11	1:A:843:ARG:CB	1.90	0.84
1:A:876:VAL:HG21	1:A:909:LEU:HD11	1.59	0.84
2:B:686:HIS:CD2	2:B:786:ALA:CB	2.60	0.84
1:A:531:LEU:HD21	1:A:747:ILE:HD11	1.57	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:754:VAL:HG12	1:A:855:ALA:HB2	1.58	0.84
1:A:972:GLU:HB2	1:A:973:GLY:HA3	1.56	0.84
2:B:98:PHE:CE1	2:B:496:MET:SD	2.71	0.84
1:A:14:THR:O	1:A:18:ILE:HG12	1.76	0.84
2:B:83:PHE:CE1	2:B:169:GLN:HG3	2.13	0.84
2:B:524:HIS:O	2:B:528:TYR:HD1	1.59	0.84
2:B:799:ARG:HH11	2:B:799:ARG:HG3	1.40	0.84
1:A:574:LEU:CD2	1:A:577:ARG:HG3	2.07	0.84
1:A:892:CYS:HG	2:B:902:GLN:CD	1.80	0.84
2:B:680:LYS:NZ	2:B:737:TYR:OH	2.10	0.84
2:B:838:ARG:NH2	2:B:932:SER:CB	2.33	0.84
2:B:7:GLN:NE2	2:B:76:ASP:OD2	2.11	0.84
2:B:117:ARG:NH2	2:B:155:GLU:OE2	2.11	0.84
1:A:421:GLY:O	1:A:422:ILE:HD12	1.77	0.84
1:A:463:HIS:CD2	1:A:617:PRO:HG2	2.12	0.84
1:A:79:GLU:HA	1:A:856:THR:HG23	1.55	0.84
1:A:442:ALA:HA	1:A:509:VAL:HG11	1.58	0.84
2:B:332:PRO:HG3	2:B:399:PHE:CE2	1.99	0.84
1:A:290:GLN:HB2	1:A:413:GLN:HE21	1.40	0.83
1:A:584:SER:O	1:A:585:SER:OG	1.96	0.83
1:A:877:SER:O	1:A:881:SER:OG	1.96	0.83
2:B:523:HIS:HE1	2:B:527:GLN:HE22	0.86	0.83
2:B:729:ARG:HB3	2:B:754:TYR:CD1	2.13	0.83
1:A:156:THR:HG23	1:A:157:MET:N	1.92	0.83
1:A:380:CYS:HG	1:A:435:GLN:HA	1.44	0.83
1:A:690:TRP:HZ3	1:A:721:VAL:CG2	1.91	0.83
1:A:553:THR:HG22	1:A:558:VAL:HG22	1.60	0.83
1:A:973:GLY:H	2:B:791:ILE:HD12	1.41	0.83
1:A:231:THR:CG2	1:A:333:TRP:NE1	2.29	0.83
1:A:316:LEU:HD22	1:A:350:TYR:HE1	1.38	0.83
1:A:788:ILE:O	1:A:820:CYS:HB2	1.77	0.83
2:B:363:VAL:HG13	2:B:441:MET:HE2	1.59	0.83
2:B:499:TYR:CE1	2:B:901:LEU:HD22	2.13	0.83
1:A:372:LYS:N	1:A:500:MET:HE1	1.92	0.83
1:A:900:HIS:O	1:A:903:LEU:N	2.11	0.83
1:A:273:LEU:HD23	1:A:281:VAL:CG2	2.07	0.83
1:A:622:GLN:HB2	1:A:623:LEU:HD22	1.57	0.83
2:B:5:SER:HB3	2:B:76:ASP:O	1.78	0.83
2:B:446:ARG:HH11	2:B:446:ARG:HG3	1.43	0.83
2:B:1003:TYR:CE2	2:B:1005:LYS:NZ	2.47	0.83
1:A:230:LEU:HD12	1:A:232:TRP:CH2	2.14	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:249:PRO:HG2	1:A:252:TRP:CD1	2.09	0.83
1:A:690:TRP:CZ3	1:A:721:VAL:HG21	2.14	0.83
2:B:198:MET:HA	2:B:204:GLN:HE21	1.44	0.83
2:B:606:HIS:CG	2:B:606:HIS:O	2.32	0.83
2:B:623:ILE:HB	2:B:893:ILE:HG13	1.61	0.83
1:A:231:THR:HA	1:A:342:LEU:O	1.77	0.82
1:A:444:MET:O	1:A:449:ILE:HG22	1.78	0.82
1:A:463:HIS:ND1	1:A:463:HIS:O	2.09	0.82
1:A:249:PRO:HG3	1:A:252:TRP:CD1	2.12	0.82
1:A:934:PRO:HB3	2:B:613:LEU:HD12	1.61	0.82
1:A:58:GLN:CG	1:A:860:ILE:CD1	2.57	0.82
1:A:68:PHE:HE1	1:A:71:SER:CB	1.88	0.82
1:A:494:GLY:O	1:A:498:TRP:HB2	1.78	0.82
2:B:497:ALA:CB	2:B:557:LEU:CD2	2.58	0.82
1:A:652:ASN:HD22	1:A:800:HIS:CE1	1.93	0.82
1:A:873:ILE:HD13	1:A:873:ILE:H	1.42	0.82
2:B:214:ARG:HB3	2:B:214:ARG:CZ	2.07	0.82
2:B:673:TRP:CH2	2:B:759:TYR:HD2	1.96	0.82
1:A:368:VAL:HG22	1:A:418:PHE:HB2	1.60	0.82
1:A:783:ASP:OD2	1:A:838:PRO:HB3	1.79	0.82
1:A:972:GLU:O	2:B:797:GLY:CA	2.27	0.82
1:A:428:PRO:O	1:A:430:THR:CG2	2.25	0.82
2:B:606:HIS:O	2:B:606:HIS:ND1	2.12	0.82
1:A:192:ALA:O	1:A:196:LEU:HB2	1.80	0.81
1:A:244:ALA:HB3	1:A:274:VAL:CG2	2.09	0.81
1:A:272:ARG:HH21	1:A:272:ARG:CB	1.93	0.81
2:B:794:GLN:HG3	2:B:796:ASP:O	1.79	0.81
1:A:105:TRP:HD1	1:A:471:ARG:NH2	1.78	0.81
1:A:529:ALA:HB1	1:A:594:MET:HE3	1.61	0.81
1:A:892:CYS:SG	2:B:902:GLN:OE1	2.37	0.81
1:A:921:ASP:CB	2:B:626:ALA:HB1	2.10	0.81
2:B:257:PHE:CE1	2:B:357:HIS:NE2	2.48	0.81
2:B:433:TRP:CD1	2:B:518:GLN:CG	2.64	0.81
2:B:502:VAL:HG12	2:B:901:LEU:HD12	1.60	0.81
2:B:549:LYS:HA	2:B:550:MET:CE	2.08	0.81
2:B:576:TYR:HE1	2:B:578:PHE:CE1	1.89	0.81
1:A:39:ILE:CG2	1:A:507:VAL:CG1	2.56	0.81
1:A:36:GLY:O	1:A:505:GLY:HA3	1.80	0.81
1:A:677:ILE:HG13	1:A:678:THR:H	1.44	0.81
1:A:972:GLU:HB3	1:A:973:GLY:HA3	1.61	0.81
1:A:221:ASN:OD1	1:A:431:PHE:HZ	1.62	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:298:VAL:C	1:A:299:HIS:CD2	2.53	0.81
2:B:198:MET:CA	2:B:204:GLN:HE21	1.93	0.81
2:B:231:ILE:HD12	2:B:397:LEU:HD12	1.60	0.81
2:B:343:LEU:CD2	2:B:373:THR:CG2	2.57	0.81
2:B:120:LEU:HD12	2:B:152:VAL:HB	1.61	0.81
2:B:622:LEU:H	2:B:622:LEU:HD12	1.46	0.81
1:A:58:GLN:HG3	1:A:860:ILE:HD12	1.63	0.81
1:A:894:ARG:HA	1:A:902:MET:HE3	0.82	0.81
2:B:224:LEU:HD21	2:B:401:LEU:HD23	1.63	0.81
2:B:549:LYS:O	2:B:550:MET:HE3	1.79	0.81
2:B:729:ARG:HG2	2:B:729:ARG:HH11	1.45	0.81
2:B:734:LEU:HD22	2:B:735:HIS:N	1.94	0.81
1:A:433:LYS:HD2	1:A:437:ALA:CB	2.11	0.81
1:A:39:ILE:HD11	2:B:988:VAL:O	1.81	0.80
2:B:114:ASN:HB3	2:B:119:TYR:CE2	2.16	0.80
1:A:882:GLY:C	1:A:883:LEU:HD23	2.01	0.80
2:B:546:MET:CE	2:B:546:MET:HA	2.11	0.80
2:B:623:ILE:CD1	2:B:893:ILE:HD11	2.11	0.80
2:B:659:ILE:CD1	2:B:788:LEU:HD22	2.11	0.80
1:A:650:ALA:HB3	1:A:796:SER:HA	1.63	0.80
1:A:728:ARG:HD3	1:A:730:THR:HG22	1.61	0.80
2:B:198:MET:HG3	2:B:204:GLN:HE22	1.45	0.80
1:A:355:THR:O	1:A:418:PHE:CD1	2.30	0.80
2:B:12:ARG:NH1	2:B:991:ASP:OD1	2.15	0.80
2:B:673:TRP:N	2:B:754:TYR:HE2	1.79	0.80
2:B:7:GLN:HE22	2:B:76:ASP:CB	1.95	0.80
2:B:89:ASP:CB	2:B:410:GLN:OE1	2.29	0.80
2:B:117:ARG:HE	2:B:155:GLU:CD	1.83	0.80
2:B:202:VAL:O	2:B:205:GLU:N	2.15	0.80
2:B:265:PRO:HD2	2:B:266:HIS:H	1.47	0.80
1:A:634:ILE:HD11	1:A:718:ARG:HH21	1.46	0.80
1:A:777:LEU:HD22	1:A:834:MET:CE	2.10	0.80
1:A:697:ASN:HB2	1:A:701:SER:HB2	1.63	0.80
1:A:865:ARG:HH11	2:B:447:PRO:CG	1.94	0.80
1:A:932:ARG:HB2	1:A:933:PRO:CD	2.11	0.80
1:A:314:THR:O	1:A:347:LYS:HE3	1.80	0.79
1:A:598:TRP:C	1:A:600:SER:H	1.84	0.79
1:A:972:GLU:O	2:B:798:GLY:N	2.15	0.79
2:B:647:LEU:H	2:B:647:LEU:HD12	1.46	0.79
1:A:88:THR:HG22	1:A:90:MET:N	1.97	0.79
1:A:894:ARG:C	1:A:902:MET:HE1	1.97	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:509:ILE:CG2	2:B:512:GLY:HA2	2.12	0.79
1:A:185:ASN:OD1	1:A:187:ASP:N	2.15	0.79
1:A:220:GLU:HG3	2:B:186:TRP:CZ2	2.17	0.79
1:A:238:HIS:CE1	1:A:334:LYS:HG2	2.18	0.79
1:A:894:ARG:CB	1:A:902:MET:HE2	2.12	0.79
2:B:330:ALA:H	2:B:450:GLU:CD	1.82	0.79
1:A:455:HIS:HA	1:A:458:ILE:CG2	2.12	0.79
1:A:538:GLY:O	1:A:735:PRO:HG2	1.82	0.79
1:A:713:LEU:CG	1:A:714:ASN:H	1.95	0.79
1:A:961:LEU:HD11	2:B:284:MET:CG	2.12	0.79
1:A:371:LEU:HA	1:A:500:MET:HE2	0.81	0.79
2:B:658:THR:CG2	2:B:695:VAL:HG21	2.12	0.79
1:A:244:ALA:HB3	1:A:274:VAL:HG23	1.63	0.79
1:A:508:SER:O	1:A:510:HIS:N	2.15	0.79
1:A:532:ALA:CB	1:A:597:VAL:HG21	2.12	0.79
1:A:652:ASN:ND2	1:A:800:HIS:HE1	1.58	0.79
2:B:260:LYS:HD2	2:B:260:LYS:O	1.82	0.79
1:A:58:GLN:HA	1:A:58:GLN:NE2	1.96	0.79
2:B:318:THR:HG22	2:B:319:THR:OG1	1.83	0.79
1:A:286:ASP:OD1	1:A:287:GLY:N	2.16	0.79
1:A:65:LEU:HD12	1:A:65:LEU:O	1.83	0.78
1:A:790:PRO:HG3	1:A:819:ASP:CB	2.14	0.78
2:B:708:GLU:OE1	2:B:770:ASP:OD1	2.00	0.78
1:A:55:LEU:O	1:A:55:LEU:HD23	1.82	0.78
1:A:217:GLU:O	1:A:218:LEU:HD23	1.83	0.78
2:B:7:GLN:NE2	2:B:76:ASP:CB	2.46	0.78
2:B:400:ALA:O	2:B:404:MET:HB2	1.82	0.78
2:B:645:GLY:N	2:B:809:GLU:O	2.14	0.78
2:B:729:ARG:O	2:B:730:ARG:HG2	1.83	0.78
1:A:690:TRP:HZ3	1:A:721:VAL:HG21	1.45	0.78
2:B:434:MET:HE2	2:B:502:VAL:HG22	1.63	0.78
1:A:81:ILE:CD1	1:A:98:GLU:HB2	2.12	0.78
1:A:371:LEU:HA	1:A:500:MET:HE3	1.60	0.78
1:A:950:MET:HE1	2:B:112:THR:CG2	2.13	0.78
2:B:186:TRP:HH2	2:B:212:VAL:O	1.66	0.78
1:A:316:LEU:HD23	1:A:350:TYR:CE1	2.19	0.78
1:A:702:LYS:HZ1	1:A:707:ILE:HG12	1.49	0.78
1:A:815:ILE:O	1:A:816:THR:OG1	2.00	0.78
2:B:163:GLY:O	2:B:442:PRO:CA	2.31	0.78
2:B:467:GLN:HE21	2:B:467:GLN:C	1.87	0.78
2:B:648:VAL:HG11	2:B:653:VAL:HG21	1.64	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:353:MET:HG3	1:A:354:SER:N	1.97	0.78
1:A:807:MET:HE2	1:A:807:MET:HA	1.64	0.78
1:A:906:ALA:O	1:A:907:VAL:HG13	1.84	0.78
2:B:241:SER:CB	2:B:390:ARG:HG2	2.14	0.78
1:A:52:THR:HG21	1:A:601:MET:HE2	1.65	0.78
1:A:238:HIS:ND1	1:A:334:LYS:CG	2.46	0.78
1:A:353:MET:O	1:A:355:THR:HG23	1.83	0.78
1:A:546:ALA:HB1	1:A:681:ALA:O	1.83	0.78
1:A:752:LYS:CE	1:A:857:ASP:OD2	2.32	0.78
2:B:990:HIS:HB3	2:B:992:TYR:CE1	2.19	0.78
1:A:756:ARG:NH1	1:A:851:HIS:CD2	2.52	0.78
1:A:802:ARG:HG3	1:A:802:ARG:HH21	1.49	0.78
2:B:189:ALA:O	2:B:190:SER:CB	2.31	0.78
2:B:257:PHE:HE1	2:B:357:HIS:CE1	2.02	0.78
2:B:263:LEU:O	2:B:263:LEU:HD13	1.84	0.78
2:B:558:ALA:O	2:B:562:LEU:HB2	1.84	0.78
1:A:692:ALA:HB2	1:A:722:HIS:O	1.80	0.77
1:A:713:LEU:HD23	1:A:714:ASN:CA	2.13	0.77
1:A:802:ARG:HG2	1:A:803:GLY:N	1.99	0.77
2:B:523:HIS:HE1	2:B:527:GLN:NE2	1.62	0.77
1:A:106:LEU:HD12	1:A:470:VAL:HG12	1.65	0.77
1:A:344:ILE:HD11	1:A:396:LEU:HD11	1.66	0.77
1:A:455:HIS:O	1:A:458:ILE:HG22	1.85	0.77
1:A:807:MET:O	1:A:810:MET:N	2.17	0.77
1:A:449:ILE:HG23	1:A:449:ILE:O	1.85	0.77
2:B:263:LEU:HD22	2:B:264:THR:N	1.98	0.77
2:B:673:TRP:HZ3	2:B:755:MET:CE	1.82	0.77
1:A:127:PHE:HE1	1:A:452:ARG:HE	1.32	0.77
1:A:253:LEU:HD21	1:A:628:SER:HB3	1.63	0.77
2:B:722:GLU:HG3	2:B:729:ARG:NH2	1.99	0.77
1:A:75:LEU:CD1	1:A:106:LEU:HD22	2.15	0.77
1:A:248:VAL:HG11	1:A:630:PHE:CE1	2.20	0.77
1:A:463:HIS:CD2	1:A:617:PRO:CG	2.68	0.77
1:A:507:VAL:HG21	1:A:512:MET:HE3	1.64	0.77
2:B:618:LEU:CD1	2:B:623:ILE:HD11	2.14	0.77
2:B:753:PRO:HG2	2:B:756:ARG:HH12	1.49	0.77
1:A:154:THR:O	1:A:158:ASN:N	2.11	0.76
1:A:309:TRP:CD1	1:A:309:TRP:N	2.53	0.76
1:A:704:ILE:O	1:A:707:ILE:HD12	1.84	0.76
1:A:964:VAL:CG1	2:B:788:LEU:CD1	2.59	0.76
2:B:500:GLN:HG3	2:B:560:TRP:CZ2	2.20	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:333:TRP:HE1	1:A:343:THR:HG1	1.27	0.76
1:A:455:HIS:HA	1:A:458:ILE:HG22	1.65	0.76
1:A:692:ALA:HA	1:A:722:HIS:O	1.84	0.76
2:B:497:ALA:HB1	2:B:557:LEU:CD2	2.15	0.76
2:B:48:ALA:O	2:B:49:THR:OG1	2.03	0.76
2:B:533:TYR:O	2:B:534:ALA:HB3	1.85	0.76
1:A:368:VAL:CG2	1:A:418:PHE:HB2	2.14	0.76
1:A:558:VAL:O	1:A:562:LEU:CD2	2.32	0.76
1:A:844:GLY:O	1:A:849:ASP:OD1	2.02	0.76
2:B:454:ARG:HD3	2:B:466:LEU:HD11	1.67	0.76
1:A:234:LEU:HD21	1:A:266:PHE:HZ	1.50	0.76
1:A:268:GLU:OE2	1:A:693:THR:CG2	2.31	0.76
1:A:387:ASN:HD22	1:A:391:GLY:HA2	1.49	0.76
1:A:512:MET:C	2:B:188:GLY:HA3	2.06	0.76
2:B:165:THR:HA	2:B:546:MET:HE3	1.67	0.76
2:B:838:ARG:HH11	2:B:838:ARG:HG3	1.50	0.76
1:A:254:ASP:HA	1:A:556:HIS:NE2	1.53	0.76
1:A:201:MET:HE3	1:A:465:VAL:HG11	1.66	0.76
1:A:384:LEU:C	1:A:385:LEU:CD1	2.53	0.76
1:A:589:LEU:CD1	1:A:589:LEU:H	1.98	0.76
1:A:262:ARG:CZ	1:A:401:GLY:HA3	2.16	0.76
1:A:477:SER:O	1:A:478:LEU:HD12	1.85	0.76
2:B:51:LEU:HD22	2:B:52:PRO:HD2	1.68	0.76
2:B:165:THR:CA	2:B:546:MET:HE1	2.15	0.76
2:B:194:ILE:HG21	2:B:200:GLN:CA	2.13	0.76
2:B:293:ALA:CB	2:B:298:ARG:O	2.33	0.76
1:A:801:LEU:HD21	1:A:813:LEU:CD2	2.17	0.76
1:A:352:ARG:HG2	1:A:352:ARG:NH1	1.95	0.75
1:A:788:ILE:CD1	1:A:823:VAL:HG21	2.15	0.75
2:B:433:TRP:CD1	2:B:518:GLN:HG2	2.20	0.75
1:A:507:VAL:CG2	1:A:512:MET:HE3	2.15	0.75
1:A:934:PRO:HB2	2:B:613:LEU:CD1	2.10	0.75
2:B:224:LEU:HD23	2:B:404:MET:SD	2.27	0.75
1:A:367:ILE:CD1	1:A:415:GLN:HE21	0.31	0.75
1:A:660:ASN:HD22	1:A:661:GLU:N	1.84	0.75
2:B:327:TYR:CD1	2:B:448:MET:HE3	2.20	0.75
1:A:109:GLY:CA	1:A:233:GLU:O	2.32	0.75
1:A:669:ILE:O	1:A:670:ALA:C	2.25	0.75
1:A:740:GLU:OE1	1:A:740:GLU:N	2.19	0.75
1:A:836:THR:O	1:A:837:SER:OG	2.04	0.75
2:B:658:THR:HG22	2:B:695:VAL:HG21	1.68	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:222:ASP:OD1	1:A:223:ALA:N	2.20	0.75
1:A:555:VAL:HG12	1:A:687:THR:CG2	2.17	0.75
1:A:668:PHE:CD2	1:A:686:GLY:HA3	2.17	0.75
2:B:458:ASN:ND2	2:B:463:SER:O	2.20	0.75
2:B:764:LEU:O	2:B:769:ASN:ND2	2.20	0.75
2:B:832:HIS:O	2:B:937:VAL:HB	1.87	0.75
1:A:555:VAL:H	1:A:687:THR:HG21	1.51	0.75
2:B:211:ARG:O	2:B:323:ASN:OD1	2.04	0.75
1:A:19:LYS:HG2	1:A:140:LEU:HD23	1.67	0.75
2:B:846:THR:HB	2:B:847:PRO:HD2	1.69	0.75
1:A:55:LEU:CD2	1:A:528:MET:CE	2.64	0.75
1:A:472:ASP:OD2	1:A:739:ALA:HB3	1.85	0.75
1:A:948:PHE:HB3	2:B:149:GLN:HE22	1.49	0.75
2:B:7:GLN:NE2	2:B:76:ASP:HB2	2.00	0.75
1:A:39:ILE:CD1	2:B:988:VAL:O	2.35	0.74
1:A:598:TRP:C	1:A:600:SER:N	2.39	0.74
1:A:943:ARG:HH11	1:A:943:ARG:HG3	1.49	0.74
2:B:550:MET:O	2:B:551:VAL:C	2.23	0.74
2:B:794:GLN:HG2	2:B:796:ASP:O	1.85	0.74
1:A:81:ILE:HD11	1:A:98:GLU:CB	2.17	0.74
1:A:853:ASP:N	1:A:853:ASP:OD1	2.19	0.74
2:B:493:GLY:CA	2:B:562:LEU:CD2	2.60	0.74
2:B:293:ALA:HB1	2:B:298:ARG:O	1.88	0.74
2:B:597:LEU:CD1	2:B:644:ASP:OD1	2.28	0.74
1:A:248:VAL:HG23	1:A:628:SER:HB2	1.70	0.74
1:A:367:ILE:HD13	1:A:415:GLN:NE2	1.39	0.74
2:B:551:VAL:HG13	2:B:579:GLY:HA3	1.68	0.74
1:A:367:ILE:CD1	1:A:415:GLN:NE2	0.72	0.74
1:A:444:MET:HB3	1:A:449:ILE:HG21	1.67	0.74
2:B:198:MET:CE	2:B:458:ASN:O	2.34	0.74
2:B:216:SER:HB3	2:B:447:PRO:O	1.86	0.74
2:B:618:LEU:HD13	2:B:623:ILE:CD1	2.16	0.74
1:A:508:SER:CB	2:B:992:TYR:CE2	2.70	0.74
1:A:704:ILE:O	1:A:707:ILE:CD1	2.36	0.74
2:B:354:GLY:O	2:B:687:ALA:HB1	1.88	0.74
2:B:647:LEU:HD12	2:B:647:LEU:N	2.02	0.74
1:A:290:GLN:HB3	1:A:413:GLN:HE22	1.49	0.74
2:B:659:ILE:CD1	2:B:788:LEU:HD23	2.00	0.74
1:A:117:VAL:HG23	1:A:485:VAL:CG2	2.18	0.74
1:A:934:PRO:HG3	2:B:610:ASP:HB3	1.70	0.74
1:A:968:MET:HE3	2:B:659:ILE:HD13	1.70	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:8:ARG:O	1:A:11:GLY:N	2.18	0.74
1:A:55:LEU:CG	1:A:528:MET:HE2	1.87	0.74
1:A:82:THR:HG23	1:A:82:THR:O	1.87	0.74
1:A:111:ASN:HB2	1:A:467:GLN:HB2	1.69	0.74
1:A:740:GLU:O	1:A:741:ALA:C	2.23	0.74
2:B:794:GLN:OE1	2:B:805:HIS:ND1	2.20	0.74
2:B:673:TRP:CH2	2:B:677:HIS:HE1	2.06	0.73
1:A:635:GLY:HA2	1:A:640:MET:HE3	1.70	0.73
1:A:639:GLN:CA	1:A:639:GLN:HE21	2.01	0.73
1:A:788:ILE:CD1	1:A:823:VAL:CG2	2.64	0.73
1:A:885:LEU:HD22	1:A:885:LEU:N	2.02	0.73
2:B:78:LEU:HD22	2:B:180:LEU:CD2	2.17	0.73
2:B:329:LEU:HD12	2:B:450:GLU:HG2	1.68	0.73
2:B:331:LEU:CD1	2:B:373:THR:HG22	2.17	0.73
1:A:111:ASN:CG	1:A:467:GLN:HG3	2.09	0.73
1:A:202:HIS:ND1	1:A:202:HIS:O	2.21	0.73
1:A:262:ARG:HH21	1:A:401:GLY:C	1.73	0.73
1:A:519:LEU:C	1:A:519:LEU:HD23	2.08	0.73
2:B:32:LYS:HG2	2:B:69:GLU:OE1	1.88	0.73
1:A:72:ARG:O	1:A:863:VAL:HG12	1.87	0.73
1:A:125:MET:HE1	1:A:132:MET:HG3	1.70	0.73
1:A:249:PRO:HG2	1:A:252:TRP:CD2	2.11	0.73
1:A:202:HIS:HD2	1:A:346:LEU:HD21	1.51	0.73
1:A:541:GLY:HA3	1:A:733:SER:O	1.88	0.73
1:A:671:LEU:O	1:A:671:LEU:CG	2.34	0.73
1:A:51:LEU:HD21	1:A:62:ASN:HB2	1.69	0.73
1:A:214:ARG:HD3	1:A:214:ARG:N	1.97	0.73
1:A:577:ARG:NE	1:A:614:ALA:O	2.21	0.73
1:A:807:MET:SD	1:A:810:MET:HE1	2.28	0.73
2:B:293:ALA:HA	2:B:298:ARG:O	1.87	0.73
2:B:310:LEU:O	2:B:310:LEU:HD23	1.88	0.73
1:A:868:TYR:OH	2:B:772:PHE:HD2	1.68	0.73
2:B:708:GLU:HA	2:B:708:GLU:OE2	1.87	0.73
1:A:833:ARG:HH11	1:A:833:ARG:HG3	1.51	0.73
2:B:84:THR:HG21	2:B:545:ARG:NH1	2.03	0.73
1:A:19:LYS:HA	1:A:140:LEU:CD2	2.17	0.73
1:A:39:ILE:HG12	1:A:506:SER:OG	1.89	0.73
1:A:211:VAL:CG2	1:A:216:GLN:HG3	2.18	0.73
2:B:500:GLN:HA	2:B:500:GLN:NE2	2.02	0.73
1:A:948:PHE:CB	2:B:149:GLN:HE22	2.01	0.73
2:B:198:MET:O	2:B:204:GLN:CB	2.36	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:309:TRP:HE3	1:A:343:THR:CG2	1.98	0.72
1:A:425:ARG:C	1:A:426:MET:SD	2.67	0.72
1:A:435:GLN:HE21	1:A:435:GLN:C	1.93	0.72
2:B:499:TYR:CE2	2:B:860:MET:HG2	2.23	0.72
2:B:524:HIS:O	2:B:528:TYR:CD1	2.42	0.72
1:A:342:LEU:HD23	1:A:343:THR:N	2.04	0.72
1:A:477:SER:O	1:A:478:LEU:CD1	2.37	0.72
1:A:668:PHE:CZ	1:A:728:ARG:NH1	2.57	0.72
1:A:704:ILE:C	1:A:707:ILE:HD12	2.10	0.72
1:A:854:ILE:H	1:A:854:ILE:HD12	1.53	0.72
2:B:141:TYR:HB2	2:B:922:GLY:HA3	1.70	0.72
2:B:293:ALA:CA	2:B:298:ARG:O	2.37	0.72
2:B:307:LYS:HG2	2:B:311:ARG:NH2	2.04	0.72
1:A:455:HIS:CA	1:A:458:ILE:HG22	2.20	0.72
1:A:740:GLU:O	1:A:743:ALA:N	2.22	0.72
1:A:702:LYS:NZ	1:A:707:ILE:HG12	2.05	0.72
1:A:238:HIS:CD2	1:A:338:SER:HA	2.24	0.72
1:A:702:LYS:NZ	1:A:707:ILE:CG1	2.53	0.72
2:B:515:THR:HG21	2:B:656:TYR:HE2	1.55	0.72
2:B:659:ILE:HD12	2:B:788:LEU:HD22	1.72	0.72
1:A:107:HIS:HD2	1:A:236:CYS:O	1.71	0.72
1:A:254:ASP:N	1:A:556:HIS:NE2	2.36	0.72
1:A:574:LEU:CD2	1:A:577:ARG:HD3	2.20	0.72
1:A:634:ILE:HB	1:A:688:GLU:CB	2.19	0.72
1:A:352:ARG:CA	1:A:382:GLU:OE1	2.36	0.72
1:A:444:MET:HB3	1:A:449:ILE:CG2	2.18	0.72
1:A:634:ILE:CG2	1:A:688:GLU:CG	2.68	0.72
1:A:23:ARG:HH11	1:A:23:ARG:HG3	1.54	0.71
2:B:493:GLY:HA3	2:B:562:LEU:HD23	1.72	0.71
2:B:797:GLY:O	2:B:799:ARG:N	2.23	0.71
1:A:606:THR:HG23	1:A:609:TYR:H	1.54	0.71
2:B:89:ASP:OD1	2:B:89:ASP:N	2.22	0.71
2:B:114:ASN:HB3	2:B:119:TYR:CD2	2.25	0.71
1:A:280:CYS:HA	1:A:332:LEU:O	1.90	0.71
1:A:802:ARG:HG3	1:A:802:ARG:NH2	2.04	0.71
2:B:121:GLY:CA	2:B:150:CYS:O	2.38	0.71
2:B:747:ALA:HB3	2:B:749:THR:HG23	1.71	0.71
1:A:934:PRO:CB	2:B:613:LEU:CD1	2.64	0.71
1:A:23:ARG:HG3	1:A:23:ARG:NH1	2.04	0.71
1:A:776:VAL:CG1	1:A:807:MET:HE3	2.16	0.71
2:B:327:TYR:HB2	2:B:368:GLY:O	1.89	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:726:SER:HB2	2:B:727:PRO:HD3	1.71	0.71
2:B:355:ALA:HB3	2:B:358:ALA:HB2	1.72	0.71
1:A:380:CYS:SG	1:A:439:ALA:HB2	2.30	0.71
1:A:490:PHE:O	1:A:492:VAL:HG23	1.90	0.71
1:A:646:LEU:HD12	1:A:681:ALA:HB2	1.72	0.71
2:B:735:HIS:ND1	2:B:735:HIS:O	2.24	0.71
1:A:6:GLN:HE21	1:A:6:GLN:CA	2.00	0.71
1:A:231:THR:CG2	1:A:343:THR:HG1	1.99	0.71
2:B:329:LEU:HG	2:B:450:GLU:OE2	1.90	0.71
1:A:280:CYS:HB3	1:A:333:TRP:HB3	1.72	0.71
1:A:273:LEU:O	1:A:273:LEU:HD13	1.90	0.71
1:A:371:LEU:CD1	1:A:419:LEU:HD13	2.21	0.71
2:B:84:THR:CG2	2:B:545:ARG:HH11	2.02	0.71
2:B:330:ALA:N	2:B:450:GLU:CD	2.41	0.71
2:B:497:ALA:HB1	2:B:557:LEU:HD21	1.72	0.71
1:A:117:VAL:CG2	1:A:485:VAL:CG2	2.69	0.70
1:A:380:CYS:SG	1:A:434:ALA:C	2.70	0.70
2:B:322:GLU:HA	2:B:328:LEU:HD11	1.73	0.70
2:B:332:PRO:HG2	2:B:399:PHE:CZ	2.15	0.70
2:B:555:ASN:ND2	2:B:569:PHE:HB3	2.05	0.70
1:A:367:ILE:CD1	1:A:415:GLN:CG	2.69	0.70
2:B:104:CYS:HB3	2:B:830:THR:HB	1.73	0.70
2:B:445:SER:O	2:B:447:PRO:HD3	1.91	0.70
1:A:81:ILE:CD1	1:A:98:GLU:CB	2.69	0.70
1:A:193:PHE:HZ	1:A:464:MET:CE	2.04	0.70
1:A:435:GLN:C	1:A:439:ALA:HB3	2.11	0.70
2:B:713:ARG:O	2:B:716:ALA:O	2.08	0.70
1:A:35:ALA:O	1:A:42:GLY:CA	2.40	0.70
1:A:481:LEU:HD22	1:A:481:LEU:N	2.03	0.70
1:A:898:THR:HG22	2:B:858:PRO:HB3	1.74	0.70
1:A:367:ILE:HD13	1:A:415:GLN:CG	2.20	0.70
1:A:690:TRP:NE1	1:A:712:GLY:C	2.44	0.70
2:B:559:ALA:O	2:B:564:SER:HA	1.90	0.70
2:B:708:GLU:OE2	2:B:711:ARG:NH1	2.24	0.70
2:B:749:THR:O	2:B:750:GLU:C	2.29	0.70
1:A:81:ILE:HD13	1:A:81:ILE:C	2.12	0.70
1:A:518:LEU:O	1:A:518:LEU:HD23	1.91	0.70
1:A:576:LEU:HB2	1:A:614:ALA:HB1	1.72	0.70
1:A:646:LEU:HB2	1:A:669:ILE:HD13	1.73	0.70
1:A:833:ARG:HG2	1:A:833:ARG:O	1.90	0.70
1:A:892:CYS:HG	2:B:902:GLN:CG	2.03	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:257:PHE:HD1	2:B:357:HIS:NE2	1.88	0.70
2:B:343:LEU:CD2	2:B:373:THR:HG23	2.16	0.70
2:B:354:GLY:O	2:B:687:ALA:CB	2.39	0.70
2:B:673:TRP:CH2	2:B:759:TYR:CD2	2.79	0.70
1:A:328:GLU:HB3	1:A:390:PHE:CE2	2.26	0.70
1:A:507:VAL:HG21	1:A:512:MET:CE	2.22	0.70
1:A:650:ALA:CB	1:A:796:SER:OG	2.40	0.70
2:B:623:ILE:HD13	2:B:893:ILE:HD11	1.72	0.70
2:B:794:GLN:NE2	2:B:796:ASP:O	2.24	0.70
1:A:623:LEU:HD22	1:A:623:LEU:N	2.07	0.70
2:B:659:ILE:CD1	2:B:788:LEU:HD21	2.20	0.70
2:B:510:THR:HG22	2:B:632:THR:CG2	2.22	0.70
1:A:111:ASN:OD1	1:A:467:GLN:CG	2.34	0.69
1:A:211:VAL:HG22	1:A:216:GLN:CB	2.22	0.69
1:A:742:MET:HA	1:A:742:MET:CE	2.21	0.69
2:B:442:PRO:O	2:B:576:TYR:CZ	2.45	0.69
1:A:298:VAL:C	1:A:299:HIS:HD2	1.91	0.69
1:A:432:THR:CG2	1:A:433:LYS:N	2.52	0.69
1:A:690:TRP:HE1	1:A:712:GLY:C	1.95	0.69
1:A:892:CYS:HB2	2:B:905:PRO:HG3	1.73	0.69
2:B:32:LYS:CG	2:B:69:GLU:OE1	2.40	0.69
2:B:83:PHE:HE1	2:B:169:GLN:HG3	1.57	0.69
1:A:752:LYS:NZ	1:A:857:ASP:OD2	2.24	0.69
1:A:868:TYR:HH	2:B:772:PHE:HD2	1.28	0.69
1:A:894:ARG:CG	1:A:902:MET:HE2	2.19	0.69
2:B:36:GLU:O	2:B:65:GLU:HG2	1.91	0.69
2:B:216:SER:C	2:B:448:MET:HB3	2.11	0.69
1:A:639:GLN:HE21	1:A:639:GLN:H	1.41	0.69
1:A:201:MET:CE	1:A:465:VAL:CG1	2.71	0.69
1:A:887:PRO:C	1:A:893:VAL:HG11	2.11	0.69
2:B:163:GLY:CA	2:B:548:ASN:HB3	2.18	0.69
1:A:442:ALA:CA	1:A:509:VAL:CG1	2.70	0.69
2:B:7:GLN:CG	2:B:29:VAL:CG1	2.67	0.69
2:B:66:ARG:NH1	2:B:66:ARG:HG3	2.03	0.69
1:A:894:ARG:HA	1:A:902:MET:HE2	1.67	0.69
2:B:3:ALA:O	2:B:79:ARG:HG3	1.92	0.69
2:B:219:GLN:O	2:B:327:TYR:OH	2.11	0.69
1:A:232:TRP:CZ3	1:A:344:ILE:HG22	2.27	0.69
1:A:240:LYS:HD3	1:A:240:LYS:N	2.08	0.69
1:A:260:THR:CG2	1:A:263:GLU:OE1	2.41	0.69
1:A:320:SER:HA	1:A:351:HIS:CD2	2.27	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:371:LEU:HD12	1:A:419:LEU:HD13	1.75	0.69
1:A:380:CYS:SG	1:A:435:GLN:N	2.65	0.69
1:A:486:ASN:OD1	1:A:486:ASN:N	2.22	0.69
1:A:873:ILE:HD13	1:A:873:ILE:N	2.07	0.69
2:B:12:ARG:NH1	2:B:991:ASP:CG	2.38	0.69
2:B:34:THR:HG23	2:B:980:ASN:OD1	1.91	0.69
1:A:549:VAL:CG1	1:A:553:THR:HG21	2.20	0.69
1:A:555:VAL:HG12	1:A:687:THR:HG21	1.75	0.69
1:A:690:TRP:HE1	1:A:713:LEU:N	1.91	0.69
1:A:244:ALA:HB1	1:A:274:VAL:HG23	1.74	0.69
1:A:888:TYR:O	1:A:894:ARG:CZ	2.40	0.69
2:B:161:LEU:O	2:B:161:LEU:HD13	1.93	0.69
2:B:198:MET:HA	2:B:204:GLN:NE2	2.07	0.69
2:B:428:CYS:SG	2:B:818:HIS:CD2	2.86	0.69
1:A:634:ILE:HG22	1:A:688:GLU:HG3	1.73	0.68
2:B:112:THR:O	2:B:119:TYR:HB2	1.93	0.68
2:B:263:LEU:HD22	2:B:263:LEU:C	2.14	0.68
1:A:957:PHE:CE2	2:B:279:TYR:HE1	2.11	0.68
2:B:673:TRP:CH2	2:B:677:HIS:CE1	2.81	0.68
2:B:999:LEU:O	2:B:1000:ALA:HB2	1.92	0.68
1:A:309:TRP:CZ3	1:A:343:THR:HG21	2.28	0.68
1:A:449:ILE:CG1	1:A:453:THR:HG21	2.22	0.68
1:A:639:GLN:HE21	1:A:639:GLN:N	1.91	0.68
2:B:502:VAL:HG12	2:B:901:LEU:HD13	1.68	0.68
2:B:576:TYR:HD1	2:B:578:PHE:CE1	1.92	0.68
2:B:600:TYR:CE2	2:B:618:LEU:HD11	2.28	0.68
1:A:329:HIS:CD2	1:A:348:GLN:NE2	2.61	0.68
1:A:79:GLU:CA	1:A:856:THR:HG23	1.92	0.68
1:A:598:TRP:O	1:A:599:SER:C	2.32	0.68
2:B:442:PRO:HD2	2:B:576:TYR:CE1	2.29	0.68
2:B:589:TYR:CE1	2:B:808:GLY:CA	2.64	0.68
1:A:170:LEU:HD13	1:A:170:LEU:C	2.12	0.68
1:A:655:TYR:CE1	1:A:666:VAL:HG12	2.29	0.68
1:A:925:VAL:HG12	1:A:926:THR:N	2.08	0.68
1:A:42:GLY:CA	1:A:445:ARG:HH22	2.06	0.68
1:A:371:LEU:C	1:A:500:MET:HE1	2.07	0.68
1:A:399:VAL:O	1:A:403:THR:HG23	1.92	0.68
1:A:650:ALA:O	1:A:796:SER:OG	2.09	0.68
2:B:89:ASP:HB3	2:B:410:GLN:OE1	1.94	0.68
2:B:726:SER:CB	2:B:727:PRO:HD3	2.24	0.68
2:B:838:ARG:HH22	2:B:932:SER:HG	1.39	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:865:ARG:NH1	2:B:447:PRO:CG	2.56	0.68
1:A:27:LYS:CG	1:A:28:ASP:OD1	2.42	0.68
1:A:307:MET:O	1:A:309:TRP:NE1	2.26	0.68
1:A:533:HIS:O	1:A:537:GLN:HG2	1.93	0.68
1:A:619:VAL:HG23	1:A:620:ASP:N	2.09	0.68
2:B:199:LEU:HG	2:B:456:VAL:CG2	2.24	0.68
1:A:22:ALA:HB1	1:A:137:PRO:HB3	1.74	0.67
1:A:258:GLN:HG2	1:A:258:GLN:O	1.94	0.67
1:A:671:LEU:HB2	1:A:685:ILE:HG22	1.75	0.67
2:B:434:MET:CE	2:B:502:VAL:HG11	2.24	0.67
2:B:510:THR:O	2:B:511:ASP:HB2	1.92	0.67
1:A:273:LEU:CD2	1:A:281:VAL:HG23	2.20	0.67
1:A:452:ARG:NH2	1:A:452:ARG:HG3	2.07	0.67
1:A:481:LEU:CD1	1:A:624:ALA:HB2	2.24	0.67
1:A:588:ALA:HB1	1:A:592:GLN:OE1	1.94	0.67
1:A:135:CYS:SG	1:A:148:MET:HE1	2.35	0.67
1:A:355:THR:OG1	1:A:417:LEU:O	2.12	0.67
1:A:861:ARG:HH21	2:B:547:ALA:HB2	1.59	0.67
1:A:562:LEU:HD22	1:A:562:LEU:N	2.09	0.67
1:A:634:ILE:CB	1:A:688:GLU:CG	2.65	0.67
2:B:118:PHE:HE2	2:B:950:LEU:HD22	1.58	0.67
2:B:201:THR:OG1	2:B:204:GLN:HG3	1.94	0.67
2:B:256:ASP:CB	2:B:300:VAL:CG1	2.49	0.67
2:B:257:PHE:CE1	2:B:357:HIS:CE1	2.82	0.67
2:B:729:ARG:HG2	2:B:729:ARG:NH1	2.05	0.67
1:A:26:LEU:CD1	1:A:144:THR:HG22	2.24	0.67
1:A:452:ARG:HG3	1:A:452:ARG:HH21	1.58	0.67
1:A:627:ARG:HH12	1:A:738:CYS:HG	1.41	0.67
1:A:892:CYS:SG	2:B:902:GLN:CD	2.70	0.67
2:B:842:ASN:O	2:B:844:THR:O	2.12	0.67
1:A:105:TRP:CD1	1:A:471:ARG:NH2	2.57	0.67
1:A:248:VAL:HG23	1:A:628:SER:CB	2.24	0.67
1:A:352:ARG:NH2	1:A:426:MET:O	2.28	0.67
1:A:664:CYS:HB2	1:A:737:GLY:O	1.94	0.67
2:B:263:LEU:CD1	2:B:293:ALA:CB	2.66	0.67
2:B:434:MET:HE3	2:B:502:VAL:CG1	2.24	0.67
2:B:546:MET:HA	2:B:546:MET:HE2	1.76	0.67
2:B:648:VAL:HG11	2:B:653:VAL:CG2	2.25	0.67
1:A:249:PRO:CG	1:A:252:TRP:NE1	2.43	0.67
1:A:388:SER:O	1:A:391:GLY:N	2.28	0.67
1:A:512:MET:HA	2:B:188:GLY:HA3	1.77	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:623:ILE:HB	2:B:893:ILE:CG1	2.25	0.67
1:A:201:MET:HE1	1:A:465:VAL:HG11	1.76	0.67
1:A:553:THR:CG2	1:A:558:VAL:HG22	2.24	0.67
1:A:646:LEU:HD23	1:A:646:LEU:C	2.15	0.67
2:B:78:LEU:HD11	2:B:81:GLU:OE2	1.94	0.67
2:B:194:ILE:HG23	2:B:199:LEU:O	1.95	0.67
1:A:760:ILE:HG23	1:A:810:MET:HG2	1.78	0.66
2:B:332:PRO:CD	2:B:399:PHE:CE2	2.78	0.66
2:B:450:GLU:OE1	2:B:450:GLU:HA	1.95	0.66
1:A:435:GLN:O	1:A:439:ALA:CB	2.35	0.66
1:A:455:HIS:HB2	1:A:615:TYR:HE2	1.59	0.66
1:A:788:ILE:O	1:A:820:CYS:CB	2.43	0.66
2:B:43:THR:HG23	2:B:55:LYS:HD3	1.69	0.66
2:B:162:SER:OG	2:B:440:LEU:HD11	1.94	0.66
2:B:194:ILE:CG2	2:B:199:LEU:O	2.43	0.66
1:A:690:TRP:CZ3	1:A:721:VAL:CG2	2.75	0.66
1:A:68:PHE:HD1	1:A:71:SER:HB2	1.54	0.66
1:A:664:CYS:HB2	1:A:737:GLY:C	2.15	0.66
2:B:428:CYS:SG	2:B:818:HIS:HB2	2.36	0.66
1:A:253:LEU:HD11	1:A:630:PHE:HE1	1.61	0.66
1:A:514:ILE:HG13	1:A:514:ILE:O	1.94	0.66
1:A:943:ARG:NH1	2:B:616:ALA:O	2.28	0.66
1:A:103:ARG:HG3	1:A:103:ARG:NH2	2.04	0.66
1:A:876:VAL:HG21	1:A:909:LEU:CD1	2.25	0.66
2:B:130:ALA:O	2:B:140:GLU:HA	1.96	0.66
2:B:214:ARG:HB3	2:B:214:ARG:NH1	2.10	0.66
2:B:442:PRO:HG2	2:B:576:TYR:CZ	2.30	0.66
1:A:68:PHE:CD1	1:A:71:SER:CB	2.71	0.66
1:A:330:TYR:CE2	1:A:397:PRO:HG3	2.30	0.66
1:A:429:ALA:O	1:A:430:THR:HG23	1.95	0.66
2:B:57:GLY:O	2:B:478:HIS:CB	2.42	0.66
2:B:78:LEU:CD1	2:B:81:GLU:OE2	2.44	0.66
1:A:127:PHE:HE2	1:A:189:ARG:HE	0.68	0.66
1:A:205:ALA:HB2	1:A:232:TRP:HE1	1.57	0.66
1:A:525:LEU:HD23	1:A:608:LEU:HD11	1.78	0.66
1:A:908:PRO:HG3	2:B:528:TYR:CE1	2.25	0.66
1:A:921:ASP:OD1	2:B:638:GLU:OE1	2.13	0.66
2:B:343:LEU:CD2	2:B:373:THR:HG21	2.23	0.66
1:A:39:ILE:CG2	1:A:507:VAL:HG12	2.15	0.66
1:A:79:GLU:CB	1:A:856:THR:HG21	1.82	0.66
1:A:310:LEU:HG	1:A:311:ASP:H	1.59	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:455:HIS:C	1:A:458:ILE:HG22	2.16	0.66
1:A:635:GLY:CA	1:A:640:MET:CE	2.68	0.66
1:A:838:PRO:O	1:A:841:HIS:HB3	1.96	0.66
2:B:562:LEU:O	2:B:564:SER:N	2.29	0.66
1:A:464:MET:HB3	1:A:483:PHE:CZ	2.31	0.65
1:A:639:GLN:NE2	1:A:639:GLN:O	2.28	0.65
1:A:901:SER:OG	2:B:500:GLN:CD	2.34	0.65
2:B:111:MET:SD	2:B:118:PHE:CD2	2.84	0.65
2:B:499:TYR:HE1	2:B:901:LEU:CD2	2.07	0.65
1:A:88:THR:HG22	1:A:89:ASP:N	2.11	0.65
1:A:209:GLY:HA3	1:A:218:LEU:HD11	1.77	0.65
1:A:607:ARG:HH11	2:B:4:PRO:CD	2.03	0.65
1:A:639:GLN:HE21	1:A:639:GLN:C	2.00	0.65
1:A:865:ARG:NH1	2:B:447:PRO:HG2	2.11	0.65
2:B:288:THR:OG1	2:B:683:ASP:OD1	2.14	0.65
2:B:622:LEU:HD12	2:B:622:LEU:N	2.10	0.65
1:A:595:LYS:O	1:A:599:SER:HA	1.96	0.65
2:B:117:ARG:NH2	2:B:299:MET:O	2.27	0.65
1:A:214:ARG:H	1:A:214:ARG:CD	2.06	0.65
1:A:607:ARG:NH1	2:B:4:PRO:CD	2.57	0.65
1:A:648:LYS:O	1:A:649:HIS:HB3	1.96	0.65
1:A:756:ARG:HH11	1:A:851:HIS:CD2	2.12	0.65
1:A:883:LEU:HD23	1:A:883:LEU:N	2.12	0.65
1:A:164:MET:HG2	1:A:184:ASP:HB2	1.77	0.65
1:A:478:LEU:HD12	1:A:478:LEU:N	2.12	0.65
1:A:613:GLN:OE1	1:A:614:ALA:N	2.29	0.65
1:A:815:ILE:CG2	1:A:816:THR:H	1.88	0.65
1:A:704:ILE:CA	1:A:707:ILE:CD1	2.74	0.65
1:A:272:ARG:HB2	1:A:272:ARG:NH2	2.01	0.65
1:A:310:LEU:HG	1:A:311:ASP:N	2.11	0.65
2:B:110:GLN:NE2	2:B:951:TYR:CE1	2.64	0.65
2:B:587:CYS:N	2:B:588:PHE:HD1	1.95	0.65
2:B:673:TRP:HH2	2:B:759:TYR:CD2	2.15	0.65
2:B:838:ARG:HA	2:B:934:SER:HA	1.77	0.65
1:A:309:TRP:CZ3	1:A:343:THR:CG2	2.78	0.65
1:A:344:ILE:CD1	1:A:396:LEU:CD1	2.74	0.65
1:A:940:PRO:HG3	2:B:915:SER:CB	2.25	0.65
1:A:117:VAL:HA	1:A:485:VAL:O	1.96	0.65
1:A:507:VAL:CG2	1:A:512:MET:CE	2.75	0.65
1:A:639:GLN:H	1:A:639:GLN:NE2	1.95	0.65
1:A:26:LEU:HD11	1:A:144:THR:CG2	2.24	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:55:LEU:CD2	1:A:528:MET:HE3	2.24	0.65
1:A:525:LEU:HA	1:A:608:LEU:HD11	1.78	0.65
1:A:968:MET:HG3	2:B:734:LEU:HD13	1.79	0.65
1:A:968:MET:CE	2:B:659:ILE:HG21	2.27	0.65
2:B:340:ALA:HB2	2:B:386:THR:HB	1.78	0.65
1:A:153:THR:HB	2:B:1001:SER:O	1.96	0.64
1:A:280:CYS:SG	1:A:308:SER:O	2.53	0.64
1:A:433:LYS:HD3	1:A:437:ALA:CB	2.25	0.64
1:A:638:ARG:HG3	1:A:638:ARG:NH2	2.04	0.64
1:A:677:ILE:HG13	1:A:678:THR:N	2.12	0.64
2:B:334:CYS:CB	2:B:468:MET:HE3	2.26	0.64
2:B:676:TRP:CZ3	2:B:680:LYS:HE2	2.31	0.64
2:B:990:HIS:CB	2:B:992:TYR:HE1	2.10	0.64
1:A:649:HIS:O	1:A:651:GLN:N	2.29	0.64
2:B:600:TYR:HE2	2:B:618:LEU:HD11	1.62	0.64
2:B:799:ARG:HG3	2:B:799:ARG:NH1	2.08	0.64
2:B:498:ILE:HD12	2:B:820:PHE:CZ	2.32	0.64
2:B:767:ALA:C	2:B:768:ARG:HG3	2.17	0.64
1:A:105:TRP:HA	1:A:105:TRP:CE3	2.31	0.64
1:A:239:GLY:C	1:A:240:LYS:HD3	2.18	0.64
1:A:432:THR:O	1:A:435:GLN:CA	2.46	0.64
2:B:405:ALA:O	2:B:406:ASP:C	2.34	0.64
1:A:307:MET:C	1:A:309:TRP:CD1	2.71	0.64
2:B:110:GLN:HA	2:B:110:GLN:NE2	2.09	0.64
2:B:199:LEU:HG	2:B:456:VAL:HG21	1.79	0.64
1:A:55:LEU:CD2	1:A:528:MET:HE1	2.28	0.64
1:A:807:MET:SD	1:A:810:MET:CE	2.85	0.64
1:A:865:ARG:HD3	2:B:447:PRO:HG3	1.79	0.64
1:A:201:MET:HE1	1:A:465:VAL:CG1	2.27	0.64
1:A:298:VAL:O	1:A:299:HIS:CD2	2.51	0.64
1:A:317:SER:HB3	1:A:323:GLY:HA2	1.80	0.64
1:A:385:LEU:HD13	1:A:385:LEU:N	2.11	0.64
1:A:623:LEU:HD22	1:A:623:LEU:H	1.63	0.64
1:A:704:ILE:HA	1:A:707:ILE:HD11	1.79	0.64
1:A:140:LEU:HD12	1:A:140:LEU:O	1.98	0.64
1:A:972:GLU:HB3	1:A:973:GLY:CA	2.23	0.64
1:A:837:SER:OG	1:A:837:SER:O	2.14	0.64
1:A:967:GLN:O	1:A:968:MET:C	2.36	0.64
2:B:38:LYS:O	2:B:38:LYS:HG3	1.97	0.64
2:B:81:GLU:OE2	2:B:179:ALA:HB1	1.97	0.64
1:A:190:GLY:HA3	1:A:488:SER:O	1.98	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:588:ALA:CB	1:A:592:GLN:CD	2.44	0.64
1:A:921:ASP:HB2	2:B:626:ALA:CB	2.26	0.64
2:B:665:GLY:C	2:B:667:GLN:H	2.00	0.64
1:A:72:ARG:O	1:A:863:VAL:CG1	2.46	0.63
1:A:152:VAL:HG12	1:A:156:THR:HG21	1.80	0.63
1:A:898:THR:HG23	2:B:860:MET:HE1	1.80	0.63
1:A:958:THR:HG22	1:A:959:LYS:N	2.13	0.63
1:A:218:LEU:HD23	1:A:218:LEU:N	2.12	0.63
1:A:221:ASN:HB2	2:B:209:ARG:HD2	1.79	0.63
1:A:319:ASP:N	1:A:319:ASP:OD1	2.29	0.63
1:A:519:LEU:O	1:A:522:THR:HG22	1.96	0.63
1:A:865:ARG:HH11	2:B:447:PRO:HG3	1.62	0.63
1:A:650:ALA:O	1:A:796:SER:CA	2.46	0.63
1:A:650:ALA:O	1:A:796:SER:HA	1.98	0.63
2:B:769:ASN:H	2:B:769:ASN:HD22	1.47	0.63
1:A:60:LEU:HD12	1:A:860:ILE:CG2	2.27	0.63
1:A:618:PHE:O	1:A:619:VAL:HG22	1.99	0.63
1:A:643:ALA:HA	1:A:669:ILE:HG23	1.80	0.63
1:A:689:ARG:HH11	1:A:689:ARG:HG3	1.63	0.63
2:B:549:LYS:HD2	2:B:549:LYS:N	2.13	0.63
1:A:83:VAL:O	1:A:95:GLN:HA	1.98	0.63
1:A:125:MET:CE	1:A:186:ASN:HD22	2.12	0.63
1:A:188:CYS:SG	1:A:492:VAL:HG11	2.37	0.63
1:A:433:LYS:HD2	1:A:437:ALA:HB2	1.75	0.63
1:A:618:PHE:C	1:A:619:VAL:HG13	2.19	0.63
2:B:162:SER:OG	2:B:163:GLY:N	2.31	0.63
1:A:495:VAL:HG23	1:A:496:GLN:N	2.13	0.63
1:A:571:LEU:CD2	1:A:592:GLN:CG	2.76	0.63
2:B:597:LEU:CB	2:B:644:ASP:OD2	2.47	0.63
2:B:599:VAL:HG13	2:B:624:ALA:O	1.97	0.63
1:A:58:GLN:HG2	1:A:860:ILE:HD11	1.80	0.63
1:A:193:PHE:CZ	1:A:464:MET:CE	2.81	0.63
1:A:512:MET:CA	2:B:188:GLY:HA3	2.29	0.63
1:A:795:ALA:O	1:A:796:SER:HB3	1.97	0.63
1:A:807:MET:CE	1:A:810:MET:CE	2.77	0.63
1:A:634:ILE:CG2	1:A:688:GLU:HG3	2.28	0.62
1:A:940:PRO:HB2	1:A:944:MET:HE2	1.81	0.62
2:B:45:ILE:C	2:B:53:ILE:CD1	2.67	0.62
2:B:335:ASP:N	2:B:335:ASP:OD1	2.29	0.62
1:A:756:ARG:NH1	1:A:851:HIS:NE2	2.44	0.62
1:A:932:ARG:CB	1:A:933:PRO:CD	2.74	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:973:GLY:N	2:B:791:ILE:HD12	2.12	0.62
1:A:314:THR:C	1:A:347:LYS:HZ1	1.91	0.62
1:A:432:THR:O	1:A:435:GLN:N	2.32	0.62
1:A:481:LEU:HD11	1:A:624:ALA:HB2	1.81	0.62
1:A:525:LEU:HG	1:A:608:LEU:CD1	2.28	0.62
1:A:552:PHE:HE1	1:A:674:PRO:HB3	1.64	0.62
1:A:650:ALA:HB1	1:A:796:SER:OG	1.98	0.62
1:A:843:ARG:HB3	1:A:843:ARG:NH1	2.11	0.62
2:B:198:MET:CA	2:B:204:GLN:NE2	2.61	0.62
2:B:442:PRO:HG2	2:B:576:TYR:CE1	2.34	0.62
1:A:551:ARG:HG2	1:A:551:ARG:HH11	1.65	0.62
1:A:650:ALA:HB1	1:A:796:SER:CB	2.26	0.62
2:B:214:ARG:CG	2:B:214:ARG:HH11	2.13	0.62
2:B:734:LEU:O	2:B:735:HIS:CD2	2.52	0.62
1:A:55:LEU:CG	1:A:528:MET:HE1	1.94	0.62
1:A:238:HIS:CE1	1:A:334:LYS:HG3	2.33	0.62
1:A:380:CYS:SG	1:A:439:ALA:CB	2.87	0.62
1:A:801:LEU:HD21	1:A:813:LEU:HD21	1.80	0.62
1:A:841:HIS:O	1:A:844:GLY:N	2.32	0.62
1:A:899:LEU:O	1:A:900:HIS:C	2.33	0.62
1:A:78:ALA:O	1:A:856:THR:CG2	2.47	0.62
1:A:508:SER:CB	2:B:992:TYR:CD2	2.83	0.62
1:A:508:SER:OG	2:B:992:TYR:CD2	2.53	0.62
1:A:563:PHE:HA	1:A:566:VAL:HG23	1.81	0.62
2:B:134:ALA:O	2:B:135:ASP:C	2.33	0.62
1:A:39:ILE:HG12	1:A:506:SER:HG	1.64	0.62
1:A:906:ALA:O	1:A:907:VAL:CG1	2.47	0.62
1:A:532:ALA:O	1:A:536:GLU:HB2	2.00	0.62
1:A:943:ARG:HG3	1:A:943:ARG:NH1	2.11	0.62
1:A:952:THR:HG21	2:B:256:ASP:OD2	2.00	0.62
2:B:549:LYS:CA	2:B:550:MET:SD	2.88	0.62
1:A:8:ARG:O	1:A:9:ASP:C	2.36	0.62
1:A:752:LYS:HE3	1:A:857:ASP:OD2	1.98	0.62
2:B:214:ARG:HH11	2:B:214:ARG:HG2	1.65	0.62
2:B:434:MET:CE	2:B:502:VAL:CG1	2.78	0.62
2:B:623:ILE:HD12	2:B:893:ILE:CD1	2.30	0.62
2:B:666:LEU:O	2:B:666:LEU:HD22	2.00	0.62
1:A:265:VAL:HG22	1:A:265:VAL:O	2.00	0.61
1:A:273:LEU:HD11	1:A:334:LYS:HB2	1.81	0.61
1:A:492:VAL:CB	1:A:495:VAL:CG2	2.53	0.61
1:A:713:LEU:CG	1:A:714:ASN:N	2.55	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:498:ILE:CD1	2:B:820:PHE:CE2	2.76	0.61
2:B:589:TYR:HE1	2:B:808:GLY:CA	2.09	0.61
1:A:105:TRP:HA	1:A:105:TRP:HE3	1.65	0.61
1:A:163:GLU:HA	1:A:163:GLU:OE2	2.00	0.61
1:A:551:ARG:HG2	1:A:551:ARG:NH1	2.14	0.61
1:A:551:ARG:O	1:A:553:THR:OG1	2.17	0.61
1:A:750:GLU:O	1:A:751:HIS:ND1	2.23	0.61
2:B:1:MET:SD	2:B:2:SER:N	2.72	0.61
2:B:264:THR:O	2:B:265:PRO:C	2.32	0.61
2:B:349:LYS:H	2:B:349:LYS:HD3	1.64	0.61
2:B:428:CYS:SG	2:B:818:HIS:CG	2.93	0.61
2:B:442:PRO:HG2	2:B:576:TYR:CE2	2.36	0.61
1:A:58:GLN:CB	1:A:860:ILE:HD12	2.30	0.61
1:A:77:LEU:HD22	1:A:742:MET:CE	2.30	0.61
1:A:152:VAL:CG1	1:A:156:THR:HG21	2.31	0.61
1:A:191:PHE:O	1:A:192:ALA:C	2.37	0.61
1:A:350:TYR:CD2	1:A:383:PHE:HD1	2.19	0.61
1:A:455:HIS:O	1:A:458:ILE:CG2	2.48	0.61
1:A:472:ASP:CG	1:A:739:ALA:CB	2.49	0.61
2:B:170:ASP:OD1	2:B:171:ASN:N	2.33	0.61
2:B:294:ASP:O	2:B:295:TYR:O	2.18	0.61
2:B:334:CYS:HB3	2:B:468:MET:HE3	1.81	0.61
2:B:383:HIS:O	2:B:384:ALA:C	2.39	0.61
1:A:435:GLN:O	1:A:435:GLN:NE2	2.33	0.61
1:A:449:ILE:O	1:A:449:ILE:CG2	2.48	0.61
1:A:468:THR:HG23	1:A:468:THR:O	2.01	0.61
2:B:197:PRO:CG	2:B:457:TRP:HA	2.30	0.61
2:B:230:THR:HG21	2:B:364:MET:HB2	1.82	0.61
2:B:327:TYR:CD1	2:B:329:LEU:HD13	2.35	0.61
2:B:659:ILE:HD11	2:B:788:LEU:HD21	1.78	0.61
2:B:509:ILE:HG21	2:B:512:GLY:HA2	1.81	0.61
1:A:52:THR:HG21	1:A:601:MET:HE1	1.82	0.61
1:A:437:ALA:O	1:A:509:VAL:O	2.18	0.61
1:A:676:THR:HG22	1:A:676:THR:O	2.00	0.61
2:B:38:LYS:NZ	2:B:65:GLU:CD	2.52	0.61
2:B:161:LEU:CD1	2:B:161:LEU:H	2.14	0.61
1:A:51:LEU:HD21	1:A:62:ASN:CB	2.30	0.61
1:A:558:VAL:O	1:A:558:VAL:HG12	2.00	0.61
1:A:742:MET:O	1:A:746:VAL:HG23	2.01	0.61
1:A:790:PRO:CD	1:A:819:ASP:HB2	2.30	0.61
2:B:227:VAL:CG2	2:B:364:MET:SD	2.86	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:672:ASN:HB2	2:B:754:TYR:CZ	2.35	0.61
1:A:72:ARG:HB2	1:A:863:VAL:CG1	2.31	0.61
1:A:385:LEU:HD21	1:A:443:LEU:HD11	1.82	0.61
1:A:777:LEU:CD2	1:A:834:MET:HE2	2.29	0.61
1:A:880:VAL:O	1:A:880:VAL:HG22	2.01	0.61
2:B:165:THR:HA	2:B:546:MET:HE2	1.79	0.61
2:B:421:SER:HB2	2:B:554:VAL:HG23	1.82	0.61
2:B:684:SER:OG	2:B:785:ARG:HD3	2.00	0.61
1:A:50:SER:C	1:A:51:LEU:HD13	2.19	0.60
1:A:471:ARG:O	1:A:471:ARG:HG2	1.99	0.60
1:A:645:ALA:O	1:A:649:HIS:HA	2.01	0.60
1:A:925:VAL:O	1:A:926:THR:HG22	2.01	0.60
2:B:120:LEU:O	2:B:151:VAL:HA	2.01	0.60
2:B:241:SER:CB	2:B:390:ARG:CG	2.79	0.60
2:B:666:LEU:O	2:B:666:LEU:HD13	2.01	0.60
1:A:589:LEU:H	1:A:589:LEU:HD12	1.67	0.60
1:A:788:ILE:HD11	1:A:823:VAL:HG23	1.83	0.60
1:A:972:GLU:O	2:B:797:GLY:C	2.39	0.60
2:B:259:VAL:HG13	2:B:260:LYS:H	1.66	0.60
1:A:452:ARG:HH21	1:A:452:ARG:CG	2.13	0.60
1:A:475:ASN:OD1	1:A:475:ASN:N	2.33	0.60
1:A:801:LEU:CD2	1:A:813:LEU:HD21	2.31	0.60
1:A:839:GLU:O	1:A:840:ALA:C	2.38	0.60
1:A:919:LEU:O	1:A:919:LEU:HD23	2.01	0.60
1:A:125:MET:CE	1:A:132:MET:HG3	2.31	0.60
1:A:193:PHE:HZ	1:A:464:MET:HE2	1.65	0.60
1:A:335:GLY:HA2	1:A:341:HIS:HD2	1.66	0.60
1:A:696:LEU:HA	1:A:701:SER:O	2.00	0.60
2:B:186:TRP:CH2	2:B:212:VAL:O	2.52	0.60
2:B:647:LEU:H	2:B:647:LEU:CD1	2.14	0.60
1:A:132:MET:HE2	1:A:493:GLN:HB3	1.81	0.60
1:A:238:HIS:CG	1:A:334:LYS:HD2	2.27	0.60
1:A:51:LEU:O	2:B:1:MET:HA	2.02	0.60
1:A:127:PHE:CD1	1:A:452:ARG:HD2	2.37	0.60
1:A:201:MET:HG3	1:A:400:PHE:CE1	2.37	0.60
1:A:329:HIS:HD2	1:A:348:GLN:NE2	1.99	0.60
1:A:618:PHE:O	1:A:619:VAL:HG13	2.00	0.60
1:A:702:LYS:NZ	1:A:707:ILE:HG13	2.16	0.60
2:B:38:LYS:HZ3	2:B:65:GLU:CD	2.05	0.60
2:B:208:PHE:CE2	2:B:452:ALA:HB1	2.36	0.60
2:B:648:VAL:CG1	2:B:653:VAL:HG21	2.30	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:113:ALA:HB2	1:A:480:PRO:O	2.00	0.60
1:A:702:LYS:HZ1	1:A:707:ILE:CG1	2.13	0.60
1:A:943:ARG:O	1:A:943:ARG:HD3	2.02	0.60
2:B:734:LEU:O	2:B:735:HIS:CG	2.55	0.60
1:A:477:SER:OG	1:A:478:LEU:N	2.34	0.60
1:A:656:ASP:OD2	1:A:802:ARG:HD2	2.02	0.60
1:A:788:ILE:CD1	1:A:823:VAL:HG23	2.31	0.60
2:B:56:ARG:HH22	2:B:485:GLN:HE22	1.48	0.60
2:B:265:PRO:CD	2:B:266:HIS:H	2.13	0.60
2:B:446:ARG:HG3	2:B:446:ARG:NH1	2.14	0.60
2:B:623:ILE:CG2	2:B:893:ILE:CG1	2.79	0.60
2:B:990:HIS:CB	2:B:992:TYR:CE1	2.85	0.60
2:B:212:VAL:HG22	2:B:449:ASN:HB2	1.84	0.60
2:B:221:HIS:CD2	2:B:411:VAL:HG21	2.37	0.60
2:B:224:LEU:HB2	2:B:404:MET:HG2	1.82	0.60
2:B:374:GLY:O	2:B:375:VAL:HG22	2.01	0.60
2:B:553:PRO:HA	2:B:579:GLY:HA2	1.84	0.60
2:B:623:ILE:CG2	2:B:893:ILE:CD1	2.64	0.60
2:B:707:VAL:O	2:B:707:VAL:HG12	2.02	0.60
2:B:733:ARG:O	2:B:736:HIS:ND1	2.27	0.60
1:A:49:LEU:HG	1:A:607:ARG:HG3	1.84	0.60
1:A:262:ARG:HH22	1:A:401:GLY:HA3	1.23	0.60
1:A:819:ASP:OD1	1:A:819:ASP:N	2.35	0.60
1:A:42:GLY:CA	1:A:445:ARG:NH2	2.65	0.59
1:A:238:HIS:CD2	1:A:338:SER:CA	2.85	0.59
1:A:305:ASP:OD1	1:A:306:PRO:HD2	2.02	0.59
1:A:750:GLU:C	1:A:751:HIS:HD1	2.06	0.59
2:B:245:ARG:C	2:B:387:VAL:HG12	2.22	0.59
2:B:794:GLN:HG3	2:B:796:ASP:H	1.66	0.59
1:A:380:CYS:HG	1:A:434:ALA:C	2.03	0.59
1:A:923:THR:CG2	2:B:627:THR:OG1	2.49	0.59
1:A:951:GLY:H	2:B:114:ASN:HD21	1.50	0.59
2:B:170:ASP:HB2	2:B:545:ARG:HH22	1.67	0.59
2:B:431:HIS:O	2:B:812:ALA:HB3	2.02	0.59
2:B:559:ALA:HB2	2:B:569:PHE:CD2	2.36	0.59
2:B:640:ALA:HB1	2:B:887:THR:HG21	1.85	0.59
2:B:695:VAL:HG22	2:B:780:ILE:HG23	1.84	0.59
2:B:751:ARG:O	2:B:752:HIS:HB2	2.02	0.59
1:A:60:LEU:HD12	1:A:860:ILE:HG21	1.84	0.59
1:A:433:LYS:O	1:A:437:ALA:N	2.26	0.59
2:B:25:VAL:HG12	2:B:25:VAL:O	2.01	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:95:GLN:HA	2:B:95:GLN:HE21	1.67	0.59
2:B:195:VAL:HG22	2:B:984:ILE:CG2	2.31	0.59
2:B:241:SER:HB3	2:B:390:ARG:CG	2.26	0.59
1:A:125:MET:HG2	1:A:136:ASP:OD2	2.02	0.59
1:A:353:MET:CE	1:A:385:LEU:HB2	2.31	0.59
1:A:421:GLY:C	1:A:422:ILE:CD1	2.71	0.59
1:A:450:SER:O	1:A:453:THR:HG22	2.01	0.59
1:A:654:THR:OG1	1:A:667:GLN:NE2	2.36	0.59
2:B:238:VAL:O	2:B:238:VAL:HG23	2.02	0.59
2:B:329:LEU:HD12	2:B:450:GLU:CG	2.32	0.59
2:B:500:GLN:HG3	2:B:560:TRP:CH2	2.37	0.59
2:B:761:PRO:HG3	2:B:778:TRP:CD1	2.38	0.59
1:A:200:VAL:O	1:A:200:VAL:HG12	2.03	0.59
2:B:113:VAL:O	2:B:113:VAL:HG12	2.00	0.59
1:A:132:MET:HE1	1:A:493:GLN:OE1	1.98	0.59
1:A:828:ARG:HH11	1:A:828:ARG:CG	2.15	0.59
1:A:970:LEU:N	1:A:970:LEU:HD12	2.17	0.59
2:B:332:PRO:HG2	2:B:399:PHE:CG	2.36	0.59
2:B:373:THR:OG1	2:B:381:THR:CA	2.46	0.59
2:B:433:TRP:CH2	2:B:521:LEU:HD23	2.37	0.59
2:B:830:THR:HA	2:B:939:MET:SD	2.43	0.59
1:A:156:THR:CG2	1:A:157:MET:H	2.09	0.59
1:A:185:ASN:OD1	1:A:186:ASN:N	2.35	0.59
1:A:195:VAL:HG23	1:A:384:LEU:HB3	1.84	0.59
1:A:367:ILE:HD12	1:A:415:GLN:NE2	0.93	0.59
1:A:589:LEU:N	1:A:592:GLN:NE2	2.50	0.59
2:B:197:PRO:O	2:B:456:VAL:O	2.20	0.59
2:B:563:GLY:C	2:B:564:SER:OG	2.38	0.59
2:B:761:PRO:HG3	2:B:778:TRP:NE1	2.17	0.59
1:A:31:VAL:HG12	1:A:31:VAL:O	2.03	0.59
1:A:132:MET:HE2	1:A:493:GLN:CB	2.33	0.59
1:A:320:SER:CA	1:A:351:HIS:CD2	2.86	0.59
1:A:387:ASN:ND2	1:A:391:GLY:CA	2.64	0.59
1:A:950:MET:CE	2:B:112:THR:CG2	2.81	0.59
2:B:57:GLY:O	2:B:478:HIS:CG	2.55	0.59
2:B:484:ALA:HB2	2:B:950:LEU:HD23	1.84	0.59
1:A:243:VAL:HG23	1:A:473:LEU:O	1.98	0.59
1:A:446:ARG:HG2	1:A:446:ARG:HH11	1.67	0.59
1:A:833:ARG:HH11	1:A:833:ARG:CG	2.13	0.59
1:A:925:VAL:HG12	1:A:926:THR:H	1.67	0.59
2:B:311:ARG:O	2:B:312:SER:OG	2.19	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:587:CYS:N	2:B:588:PHE:CD1	2.71	0.59
2:B:623:ILE:CD1	2:B:893:ILE:CD1	2.80	0.59
2:B:672:ASN:CB	2:B:754:TYR:CE2	2.86	0.59
1:A:107:HIS:CD2	1:A:236:CYS:O	2.55	0.59
1:A:201:MET:HE3	1:A:465:VAL:CG1	2.31	0.59
1:A:407:HIS:HE1	1:A:490:PHE:CE2	2.20	0.59
1:A:632:ARG:O	1:A:726:TYR:CE1	2.56	0.59
2:B:327:TYR:CD1	2:B:329:LEU:CD1	2.86	0.59
2:B:514:THR:HG21	2:B:587:CYS:HB2	1.85	0.59
2:B:658:THR:CG2	2:B:695:VAL:CG2	2.81	0.59
2:B:658:THR:HG21	2:B:695:VAL:HG21	1.84	0.59
1:A:27:LYS:HG3	1:A:28:ASP:OD1	2.03	0.58
1:A:38:ASN:C	1:A:38:ASN:HD22	2.06	0.58
1:A:264:ARG:HG2	1:A:707:ILE:CG2	2.32	0.58
1:A:898:THR:HG22	2:B:858:PRO:HG3	1.85	0.58
1:A:950:MET:HG3	2:B:114:ASN:HD22	1.67	0.58
2:B:26:GLN:C	2:B:27:THR:HG23	2.21	0.58
2:B:832:HIS:CE1	2:B:837:ALA:HB1	2.37	0.58
1:A:23:ARG:HH11	1:A:23:ARG:CG	2.15	0.58
1:A:429:ALA:C	1:A:430:THR:CG2	2.70	0.58
1:A:481:LEU:N	1:A:481:LEU:HD13	2.18	0.58
1:A:894:ARG:HE	1:A:902:MET:HE2	1.68	0.58
2:B:257:PHE:HB3	2:B:355:ALA:HB1	1.85	0.58
2:B:375:VAL:HG23	2:B:375:VAL:O	2.01	0.58
2:B:433:TRP:HD1	2:B:518:GLN:HE21	1.49	0.58
2:B:442:PRO:HD2	2:B:576:TYR:CZ	2.38	0.58
1:A:203:ASN:HB3	1:A:519:LEU:CD1	2.32	0.58
1:A:262:ARG:NH2	1:A:401:GLY:O	2.32	0.58
1:A:611:LEU:O	1:A:611:LEU:HD22	2.03	0.58
1:A:961:LEU:CD1	2:B:284:MET:CG	2.79	0.58
2:B:269:SER:HB2	2:B:430:ALA:O	2.01	0.58
2:B:440:LEU:O	2:B:578:PHE:HB3	2.03	0.58
1:A:85:ALA:HB1	1:A:910:LEU:CD2	2.28	0.58
1:A:131:ARG:CG	1:A:131:ARG:HH11	2.16	0.58
1:A:432:THR:HG23	1:A:433:LYS:H	1.63	0.58
1:A:852:VAL:O	1:A:852:VAL:HG13	2.03	0.58
1:A:264:ARG:HG2	1:A:707:ILE:HG21	1.86	0.58
1:A:367:ILE:HD12	1:A:415:GLN:CD	1.90	0.58
1:A:436:LEU:O	1:A:436:LEU:HD13	2.03	0.58
1:A:455:HIS:HB3	1:A:611:LEU:HD21	1.86	0.58
1:A:886:ARG:CZ	1:A:889:GLU:HG2	2.34	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:497:ALA:CB	2:B:557:LEU:HD22	2.33	0.58
2:B:546:MET:HA	2:B:546:MET:HE3	1.84	0.58
1:A:189:ARG:HG3	1:A:189:ARG:NH2	2.18	0.58
1:A:199:MET:SD	1:A:203:ASN:OD1	2.62	0.58
1:A:359:THR:HB	2:B:999:LEU:O	2.03	0.58
1:A:570:GLU:O	1:A:570:GLU:HG3	2.02	0.58
1:A:667:GLN:O	1:A:684:ALA:HB3	2.02	0.58
1:A:843:ARG:HH11	1:A:843:ARG:CG	2.17	0.58
1:A:950:MET:CE	2:B:112:THR:HG22	2.27	0.58
2:B:195:VAL:HG22	2:B:984:ILE:HG22	1.85	0.58
2:B:525:LEU:HD13	2:B:557:LEU:HD11	1.86	0.58
1:A:39:ILE:N	1:A:506:SER:OG	2.35	0.58
1:A:211:VAL:HG23	1:A:216:GLN:HG3	1.85	0.58
1:A:525:LEU:CG	1:A:608:LEU:CD1	2.81	0.58
1:A:532:ALA:O	1:A:535:CYS:SG	2.60	0.58
1:A:503:THR:C	1:A:504:GLU:OE1	2.42	0.58
1:A:967:GLN:O	1:A:969:GLU:N	2.37	0.58
2:B:307:LYS:CG	2:B:311:ARG:NH2	2.67	0.58
2:B:433:TRP:CD1	2:B:518:GLN:HG3	2.38	0.58
2:B:576:TYR:HE1	2:B:578:PHE:CZ	2.22	0.58
2:B:597:LEU:HB2	2:B:644:ASP:OD2	2.04	0.58
1:A:10:ASN:O	1:A:10:ASN:ND2	2.36	0.58
1:A:65:LEU:O	1:A:65:LEU:CD1	2.51	0.58
1:A:145:ILE:HD11	1:A:157:MET:CE	2.34	0.58
1:A:757:HIS:CD2	1:A:758:THR:N	2.72	0.58
1:A:958:THR:O	1:A:959:LYS:HD2	2.04	0.58
1:A:556:HIS:CE1	1:A:626:ILE:CD1	2.87	0.57
2:B:101:ILE:HD11	2:B:857:VAL:HA	1.86	0.57
2:B:433:TRP:HD1	2:B:518:GLN:NE2	2.01	0.57
2:B:597:LEU:HD22	2:B:622:LEU:HB3	1.86	0.57
2:B:607:THR:HG21	2:B:909:ASN:ND2	2.19	0.57
2:B:747:ALA:HB1	2:B:749:THR:HG22	1.83	0.57
1:A:584:SER:C	1:A:585:SER:HG	2.03	0.57
2:B:247:ARG:NE	2:B:347:TRP:CD1	2.71	0.57
1:A:248:VAL:CB	1:A:249:PRO:HD2	2.28	0.57
1:A:305:ASP:OD1	1:A:306:PRO:N	2.37	0.57
1:A:421:GLY:C	1:A:422:ILE:HD12	2.24	0.57
1:A:478:LEU:O	1:A:480:PRO:HD3	2.04	0.57
1:A:615:TYR:CD1	1:A:615:TYR:N	2.72	0.57
1:A:790:PRO:CG	1:A:819:ASP:CB	2.82	0.57
2:B:405:ALA:O	2:B:407:ALA:N	2.36	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:653:VAL:O	2:B:653:VAL:HG12	2.04	0.57
2:B:837:ALA:O	2:B:839:LEU:HD12	2.04	0.57
1:A:131:ARG:NH1	1:A:131:ARG:HG3	2.19	0.57
1:A:225:THR:O	1:A:226:ALA:C	2.41	0.57
1:A:783:ASP:OD2	1:A:838:PRO:CB	2.51	0.57
2:B:748:ASP:N	2:B:748:ASP:OD1	2.37	0.57
2:B:838:ARG:NH1	2:B:841:SER:OG	2.38	0.57
1:A:446:ARG:HH11	1:A:446:ARG:CG	2.17	0.57
1:A:556:HIS:O	1:A:559:ALA:HB3	2.05	0.57
1:A:597:VAL:CG1	1:A:748:ALA:HB2	2.34	0.57
2:B:648:VAL:CG1	2:B:653:VAL:CG2	2.82	0.57
2:B:673:TRP:N	2:B:754:TYR:CE2	2.69	0.57
1:A:153:THR:O	1:A:156:THR:HG22	2.05	0.57
1:A:189:ARG:HH21	1:A:189:ARG:CG	2.17	0.57
1:A:696:LEU:C	1:A:697:ASN:O	2.40	0.57
2:B:45:ILE:O	2:B:53:ILE:HD11	2.04	0.57
1:A:945:PRO:HB3	2:B:896:ASP:OD1	2.05	0.57
1:A:961:LEU:CD2	2:B:286:THR:HG21	2.34	0.57
2:B:89:ASP:HA	2:B:410:GLN:HE22	1.69	0.57
2:B:509:ILE:HG23	2:B:512:GLY:HA2	1.85	0.57
2:B:510:THR:HG22	2:B:632:THR:HG22	1.87	0.57
2:B:769:ASN:ND2	2:B:769:ASN:H	2.01	0.57
2:B:807:PHE:CD1	2:B:807:PHE:N	2.73	0.57
1:A:117:VAL:HG23	1:A:485:VAL:HG23	1.79	0.57
1:A:350:TYR:CE2	1:A:383:PHE:HD1	2.23	0.57
1:A:411:TYR:N	1:A:411:TYR:CD1	2.72	0.57
1:A:728:ARG:HD3	1:A:730:THR:CG2	2.33	0.57
1:A:894:ARG:NE	1:A:902:MET:HE2	2.19	0.57
2:B:77:LEU:HD23	2:B:192:VAL:HG13	1.85	0.57
2:B:334:CYS:SG	2:B:468:MET:HE1	2.43	0.57
2:B:839:LEU:HD22	2:B:935:VAL:HG21	1.87	0.57
1:A:691:PHE:N	1:A:691:PHE:CD1	2.73	0.57
1:A:742:MET:HA	1:A:742:MET:HE3	1.84	0.57
1:A:757:HIS:CD2	1:A:758:THR:HG23	2.40	0.57
1:A:789:ARG:HA	1:A:820:CYS:HB3	1.85	0.57
2:B:26:GLN:O	2:B:27:THR:CB	2.51	0.57
2:B:769:ASN:O	2:B:770:ASP:C	2.42	0.57
2:B:790:LEU:O	2:B:794:GLN:HB3	2.05	0.57
1:A:243:VAL:HA	1:A:631:VAL:HG12	1.87	0.57
1:A:305:ASP:OD1	1:A:306:PRO:CD	2.52	0.57
1:A:342:LEU:HD23	1:A:343:THR:H	1.70	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:508:SER:HB3	2:B:992:TYR:CE2	2.39	0.57
2:B:383:HIS:HD2	2:B:385:ASP:OD1	1.87	0.57
1:A:792:THR:O	1:A:793:SER:HB2	2.04	0.56
2:B:74:MET:HE2	2:B:984:ILE:HD13	1.87	0.56
2:B:737:TYR:CD1	2:B:738:ASP:N	2.72	0.56
1:A:64:GLY:C	1:A:65:LEU:HG	2.25	0.56
1:A:384:LEU:O	1:A:385:LEU:CD1	2.52	0.56
1:A:635:GLY:CA	1:A:640:MET:HE3	2.35	0.56
1:A:893:VAL:C	1:A:895:ASP:N	2.54	0.56
1:A:83:VAL:O	1:A:95:GLN:CA	2.54	0.56
1:A:132:MET:HE2	1:A:493:GLN:OE1	1.98	0.56
1:A:299:HIS:CD2	1:A:299:HIS:N	2.73	0.56
1:A:634:ILE:HG22	1:A:688:GLU:CG	2.35	0.56
1:A:634:ILE:HD12	1:A:726:TYR:CD2	2.40	0.56
1:A:968:MET:HE1	2:B:659:ILE:HG21	1.86	0.56
2:B:165:THR:HG22	2:B:219:GLN:NE2	2.08	0.56
2:B:433:TRP:NE1	2:B:518:GLN:HG3	2.17	0.56
2:B:510:THR:O	2:B:511:ASP:CB	2.51	0.56
2:B:588:PHE:CD1	2:B:588:PHE:N	2.73	0.56
1:A:367:ILE:CD1	1:A:415:GLN:HE22	1.22	0.56
1:A:549:VAL:HG13	1:A:553:THR:CG2	2.29	0.56
1:A:690:TRP:CD1	1:A:690:TRP:N	2.73	0.56
1:A:923:THR:HG23	2:B:627:THR:OG1	2.05	0.56
2:B:269:SER:OG	2:B:430:ALA:O	2.23	0.56
2:B:838:ARG:NH1	2:B:932:SER:HB2	2.21	0.56
1:A:39:ILE:CG2	1:A:507:VAL:HG11	2.36	0.56
1:A:231:THR:HG21	1:A:333:TRP:CZ2	2.41	0.56
1:A:231:THR:CA	1:A:342:LEU:O	2.52	0.56
1:A:940:PRO:HB3	2:B:914:LEU:HD22	1.87	0.56
2:B:331:LEU:H	2:B:378:THR:CG2	2.18	0.56
2:B:672:ASN:C	2:B:754:TYR:CE2	2.79	0.56
2:B:673:TRP:HH2	2:B:759:TYR:HD2	1.44	0.56
2:B:739:GLY:HA3	2:B:750:GLU:OE2	2.05	0.56
1:A:199:MET:CG	1:A:440:THR:OG1	2.30	0.56
1:A:697:ASN:CB	1:A:701:SER:HB2	2.34	0.56
1:A:69:GLU:CD	1:A:217:GLU:OE1	2.43	0.56
1:A:238:HIS:CD2	1:A:338:SER:CB	2.88	0.56
1:A:690:TRP:CZ2	1:A:712:GLY:HA3	2.41	0.56
2:B:128:ILE:O	2:B:129:ILE:HD13	2.05	0.56
2:B:135:ASP:N	2:B:135:ASP:OD1	2.37	0.56
2:B:141:TYR:CD1	2:B:141:TYR:N	2.73	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:838:ARG:HG3	2:B:838:ARG:NH1	2.19	0.56
1:A:132:MET:CE	1:A:493:GLN:CB	2.80	0.56
1:A:433:LYS:HD3	1:A:437:ALA:HB2	1.77	0.56
1:A:542:GLU:HB2	1:A:733:SER:CB	2.36	0.56
1:A:807:MET:CE	1:A:810:MET:HE1	2.34	0.56
1:A:915:GLU:O	1:A:915:GLU:HG2	2.06	0.56
1:A:968:MET:O	1:A:971:ARG:HA	2.06	0.56
2:B:427:ALA:CA	2:B:432:GLU:OE1	2.53	0.56
2:B:992:TYR:N	2:B:992:TYR:CD1	2.72	0.56
1:A:68:PHE:CD1	1:A:68:PHE:N	2.73	0.56
1:A:571:LEU:HD22	1:A:592:GLN:HG3	1.82	0.56
2:B:153:ALA:HB3	2:B:426:ALA:HB3	1.86	0.56
2:B:230:THR:CG2	2:B:364:MET:HB2	2.36	0.56
2:B:992:TYR:N	2:B:992:TYR:HD1	2.04	0.56
1:A:201:MET:CG	1:A:400:PHE:CE1	2.89	0.56
1:A:211:VAL:CG2	1:A:216:GLN:CB	2.84	0.56
1:A:367:ILE:HD12	1:A:367:ILE:N	2.20	0.56
1:A:481:LEU:H	1:A:481:LEU:CD2	2.04	0.56
1:A:555:VAL:CG1	1:A:687:THR:HG23	2.36	0.56
1:A:637:SER:O	1:A:638:ARG:C	2.44	0.56
1:A:948:PHE:CZ	1:A:950:MET:HE2	2.41	0.56
1:A:967:GLN:C	1:A:969:GLU:N	2.58	0.56
2:B:586:GLY:HA3	2:B:588:PHE:CE1	2.41	0.56
1:A:153:THR:O	1:A:156:THR:CG2	2.54	0.55
1:A:153:THR:CB	2:B:1001:SER:O	2.54	0.55
1:A:195:VAL:CG2	1:A:384:LEU:HD13	2.36	0.55
1:A:198:ARG:HG2	1:A:198:ARG:NH1	2.21	0.55
1:A:879:ARG:NH2	1:A:915:GLU:OE1	2.38	0.55
2:B:664:ASN:O	2:B:668:ARG:HG3	2.06	0.55
1:A:90:MET:HG3	1:A:90:MET:O	2.07	0.55
1:A:125:MET:CE	1:A:186:ASN:ND2	2.68	0.55
1:A:900:HIS:O	1:A:901:SER:C	2.44	0.55
1:A:268:GLU:OE1	1:A:702:LYS:HE2	2.07	0.55
1:A:356:THR:OG1	1:A:424:ASP:O	2.23	0.55
1:A:785:MET:SD	1:A:824:VAL:HG22	2.47	0.55
1:A:801:LEU:CD2	1:A:813:LEU:CD2	2.84	0.55
1:A:807:MET:CE	1:A:810:MET:HE2	2.36	0.55
2:B:43:THR:CG2	2:B:55:LYS:CG	2.85	0.55
2:B:688:ASP:O	2:B:689:ILE:C	2.44	0.55
1:A:27:LYS:HG2	1:A:28:ASP:OD1	2.06	0.55
1:A:188:CYS:HB3	1:A:449:ILE:HD11	1.89	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:634:ILE:HB	1:A:688:GLU:HB3	1.87	0.55
1:A:673:VAL:HG13	1:A:673:VAL:O	2.06	0.55
2:B:118:PHE:CE2	2:B:950:LEU:HD22	2.42	0.55
2:B:548:ASN:O	2:B:550:MET:HE1	2.06	0.55
2:B:797:GLY:C	2:B:799:ARG:H	2.07	0.55
1:A:112:MET:HG2	1:A:266:PHE:HE2	1.70	0.55
1:A:455:HIS:HA	1:A:458:ILE:HG21	1.89	0.55
1:A:940:PRO:CG	2:B:915:SER:HB3	2.35	0.55
2:B:247:ARG:HD2	2:B:347:TRP:CD1	2.41	0.55
1:A:284:LYS:HA	1:A:329:HIS:HB3	1.87	0.55
1:A:289:THR:HG22	1:A:290:GLN:H	1.72	0.55
1:A:329:HIS:CD2	1:A:329:HIS:H	2.25	0.55
1:A:929:GLN:HG3	2:B:600:TYR:CE1	2.42	0.55
2:B:146:ILE:HD11	2:B:921:HIS:CE1	2.41	0.55
2:B:555:ASN:HD22	2:B:569:PHE:HB3	1.72	0.55
1:A:19:LYS:HB3	1:A:23:ARG:HH12	1.72	0.55
1:A:352:ARG:HH11	1:A:352:ARG:CG	2.14	0.55
1:A:483:PHE:HB2	1:A:617:PRO:HB2	1.89	0.55
1:A:893:VAL:C	1:A:895:ASP:H	2.08	0.55
1:A:898:THR:HG22	2:B:858:PRO:CB	2.37	0.55
1:A:121:SER:HB2	1:A:183:ALA:O	2.07	0.55
1:A:477:SER:O	1:A:478:LEU:CG	2.55	0.55
1:A:671:LEU:CD2	1:A:685:ILE:CG2	2.85	0.55
1:A:782:GLY:O	1:A:802:ARG:NH2	2.40	0.55
1:A:963:ASP:OD1	1:A:963:ASP:N	2.39	0.55
2:B:161:LEU:H	2:B:161:LEU:HD12	1.72	0.55
2:B:363:VAL:HG13	2:B:441:MET:SD	2.47	0.55
1:A:210:VAL:O	1:A:210:VAL:HG22	2.07	0.55
1:A:464:MET:SD	1:A:483:PHE:CZ	3.00	0.55
1:A:786:THR:OG1	1:A:823:VAL:O	2.18	0.55
1:A:952:THR:CG2	2:B:115:ALA:CB	2.85	0.55
2:B:198:MET:N	2:B:198:MET:SD	2.79	0.55
2:B:563:GLY:O	2:B:564:SER:OG	2.22	0.55
1:A:245:ILE:HD12	1:A:274:VAL:HG23	1.88	0.55
1:A:459:THR:HB	1:A:611:LEU:HD11	1.88	0.55
1:A:879:ARG:HD3	2:B:510:THR:HG21	1.88	0.55
2:B:794:GLN:OE1	2:B:805:HIS:HE1	1.78	0.55
1:A:590:PHE:C	1:A:592:GLN:N	2.60	0.54
2:B:114:ASN:CB	2:B:119:TYR:CE2	2.88	0.54
1:A:574:LEU:HD23	1:A:577:ARG:CD	2.15	0.54
1:A:688:GLU:OE1	1:A:688:GLU:N	2.40	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:861:ARG:CZ	2:B:547:ALA:HB2	2.36	0.54
2:B:122:CYS:HB2	2:B:939:MET:HE3	1.89	0.54
2:B:129:ILE:O	2:B:933:VAL:HA	2.08	0.54
2:B:170:ASP:HB2	2:B:545:ARG:NH2	2.21	0.54
2:B:1003:TYR:HE2	2:B:1005:LYS:NZ	1.99	0.54
1:A:260:THR:OG1	1:A:261:GLY:N	2.40	0.54
1:A:442:ALA:CA	1:A:509:VAL:HG11	2.33	0.54
1:A:607:ARG:HG3	1:A:607:ARG:HH21	1.72	0.54
1:A:646:LEU:HD23	1:A:647:ILE:N	2.22	0.54
1:A:849:ASP:OD1	1:A:849:ASP:N	2.34	0.54
1:A:888:TYR:C	1:A:889:GLU:OE1	2.43	0.54
1:A:958:THR:C	1:A:959:LYS:HG2	2.27	0.54
1:A:972:GLU:O	2:B:797:GLY:HA3	2.06	0.54
2:B:168:THR:OG1	2:B:545:ARG:CD	2.55	0.54
2:B:514:THR:HG21	2:B:587:CYS:SG	2.48	0.54
2:B:1003:TYR:O	2:B:1004:ASP:O	2.25	0.54
1:A:297:ARG:HG2	1:A:297:ARG:NH1	2.21	0.54
1:A:371:LEU:CB	1:A:500:MET:CE	2.83	0.54
1:A:556:HIS:HD1	1:A:626:ILE:HD12	1.73	0.54
1:A:884:ALA:CB	2:B:506:PRO:CB	2.38	0.54
2:B:43:THR:HG21	2:B:55:LYS:CD	2.35	0.54
2:B:66:ARG:CZ	2:B:173:ASP:OD2	2.54	0.54
2:B:653:VAL:O	2:B:657:THR:HG23	2.07	0.54
2:B:846:THR:HB	2:B:847:PRO:CD	2.37	0.54
1:A:268:GLU:OE1	1:A:702:LYS:CE	2.56	0.54
1:A:650:ALA:O	1:A:797:SER:N	2.41	0.54
1:A:931:LEU:HD23	2:B:615:MET:SD	2.39	0.54
1:A:502:ASP:OD1	1:A:502:ASP:O	2.25	0.54
1:A:657:TRP:CE3	1:A:664:CYS:SG	3.01	0.54
1:A:779:ALA:O	1:A:803:GLY:O	2.26	0.54
1:A:815:ILE:O	1:A:816:THR:HG23	2.07	0.54
1:A:898:THR:HG22	2:B:858:PRO:CG	2.37	0.54
1:A:939:ASN:HD22	1:A:939:ASN:N	2.05	0.54
2:B:450:GLU:CB	2:B:451:PRO:CD	2.78	0.54
1:A:193:PHE:CZ	1:A:464:MET:HE2	2.42	0.54
1:A:431:PHE:CD1	1:A:432:THR:N	2.76	0.54
1:A:546:ALA:CB	1:A:681:ALA:O	2.56	0.54
1:A:588:ALA:CB	1:A:592:GLN:OE1	2.53	0.54
1:A:634:ILE:HD13	1:A:634:ILE:N	2.09	0.54
2:B:611:SER:O	2:B:615:MET:CG	2.53	0.54
2:B:633:ILE:HD13	2:B:643:VAL:HG11	1.89	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:672:ASN:HB3	2:B:754:TYR:CE2	2.42	0.54
1:A:298:VAL:HG12	1:A:299:HIS:N	2.23	0.54
1:A:350:TYR:CD2	1:A:383:PHE:CD1	2.96	0.54
1:A:387:ASN:ND2	1:A:391:GLY:HA2	2.21	0.54
2:B:502:VAL:CG1	2:B:901:LEU:HD12	2.28	0.54
2:B:576:TYR:CE1	2:B:578:PHE:CZ	2.94	0.54
2:B:607:THR:HG22	2:B:612:TYR:OH	2.08	0.54
1:A:231:THR:HG22	1:A:343:THR:HG1	1.68	0.54
1:A:353:MET:HE3	1:A:385:LEU:HB2	1.89	0.54
2:B:26:GLN:HG3	2:B:27:THR:HG23	1.90	0.54
1:A:72:ARG:HH22	1:A:863:VAL:CG2	2.20	0.53
1:A:211:VAL:CG2	1:A:216:GLN:CG	2.86	0.53
1:A:279:GLY:O	1:A:333:TRP:HA	2.08	0.53
1:A:833:ARG:HH12	1:A:874:PRO:HG2	1.74	0.53
1:A:950:MET:HG3	2:B:114:ASN:ND2	2.22	0.53
2:B:442:PRO:HG2	2:B:576:TYR:CD1	2.43	0.53
2:B:498:ILE:CD1	2:B:820:PHE:CZ	2.91	0.53
1:A:442:ALA:HA	1:A:509:VAL:HG13	1.87	0.53
1:A:554:ASP:OD1	1:A:672:PRO:CB	2.45	0.53
1:A:619:VAL:HG23	1:A:620:ASP:H	1.72	0.53
1:A:822:LEU:C	1:A:822:LEU:HD12	2.28	0.53
2:B:56:ARG:HH22	2:B:485:GLN:NE2	2.07	0.53
2:B:114:ASN:CB	2:B:119:TYR:CD2	2.91	0.53
2:B:585:ASP:OD2	2:B:689:ILE:HD13	2.08	0.53
1:A:349:LEU:HD21	1:A:400:PHE:CE1	2.42	0.53
2:B:130:ALA:HB2	2:B:922:GLY:O	2.08	0.53
2:B:223:ALA:HB2	2:B:327:TYR:CE2	2.42	0.53
1:A:52:THR:HG23	1:A:606:THR:OG1	2.09	0.53
1:A:68:PHE:HE1	1:A:71:SER:OG	1.91	0.53
1:A:83:VAL:O	1:A:95:GLN:CB	2.56	0.53
1:A:240:LYS:HA	1:A:632:ARG:HH12	1.73	0.53
2:B:56:ARG:O	2:B:481:ARG:NH2	2.41	0.53
2:B:347:TRP:O	2:B:348:GLY:C	2.46	0.53
2:B:433:TRP:CD2	2:B:434:MET:N	2.68	0.53
2:B:752:HIS:N	2:B:753:PRO:HD2	2.23	0.53
1:A:66:LEU:HD13	1:A:519:LEU:HD22	1.90	0.53
2:B:34:THR:HG22	2:B:980:ASN:HA	1.89	0.53
1:A:204:SER:OG	1:A:523:TYR:CZ	2.50	0.53
1:A:376:GLY:C	1:A:377:LEU:HD23	2.28	0.53
1:A:481:LEU:H	1:A:481:LEU:HD13	1.73	0.53
1:A:736:LEU:HD23	1:A:737:GLY:N	2.23	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:789:ARG:NH2	1:A:799:VAL:HG23	2.24	0.53
1:A:833:ARG:NH1	1:A:874:PRO:HG2	2.23	0.53
2:B:129:ILE:HB	2:B:934:SER:OG	2.09	0.53
2:B:411:VAL:O	2:B:415:VAL:HG23	2.07	0.53
2:B:442:PRO:HG2	2:B:576:TYR:CD2	2.44	0.53
2:B:510:THR:HG22	2:B:632:THR:HB	1.90	0.53
2:B:593:THR:O	2:B:595:ARG:HB2	2.08	0.53
1:A:446:ARG:O	1:A:501:ASN:HB3	2.08	0.53
2:B:533:TYR:O	2:B:534:ALA:CB	2.52	0.53
1:A:78:ALA:C	1:A:856:THR:CG2	2.72	0.53
1:A:671:LEU:O	1:A:671:LEU:CD2	2.57	0.53
2:B:340:ALA:CB	2:B:386:THR:HB	2.39	0.53
1:A:149:SER:O	1:A:150:ARG:C	2.45	0.53
1:A:275:ASP:CG	1:A:276:PRO:CD	2.75	0.53
1:A:336:ARG:O	1:A:337:HIS:HB2	2.06	0.53
1:A:767:ARG:HH21	1:A:771:ILE:HD11	1.74	0.53
2:B:295:TYR:CE2	2:B:296:ALA:HB2	2.44	0.53
2:B:732:TRP:HE3	2:B:732:TRP:O	1.91	0.53
2:B:838:ARG:HH11	2:B:838:ARG:CG	2.18	0.53
1:A:255:PRO:HD3	1:A:556:HIS:HD2	1.74	0.53
1:A:492:VAL:CG1	1:A:495:VAL:HG22	2.37	0.53
1:A:555:VAL:HG12	1:A:687:THR:HG23	1.88	0.53
1:A:634:ILE:CB	1:A:688:GLU:HB3	2.39	0.53
1:A:948:PHE:HZ	1:A:950:MET:HE2	1.74	0.53
2:B:373:THR:O	2:B:381:THR:HB	2.09	0.53
1:A:384:LEU:CD1	1:A:439:ALA:O	2.57	0.52
1:A:948:PHE:HB3	2:B:149:GLN:NE2	2.22	0.52
2:B:38:LYS:HD2	2:B:65:GLU:CD	2.15	0.52
2:B:128:ILE:O	2:B:142:SER:HB3	2.09	0.52
2:B:349:LYS:H	2:B:349:LYS:CD	2.22	0.52
2:B:729:ARG:HD3	2:B:754:TYR:CE1	2.44	0.52
2:B:734:LEU:CD2	2:B:735:HIS:N	2.65	0.52
1:A:238:HIS:HA	1:A:244:ALA:O	2.10	0.52
1:A:589:LEU:H	1:A:589:LEU:HD13	1.70	0.52
1:A:621:VAL:O	1:A:621:VAL:HG13	2.08	0.52
1:A:924:PRO:C	1:A:925:VAL:O	2.39	0.52
2:B:640:ALA:CB	2:B:887:THR:HG21	2.40	0.52
2:B:838:ARG:CZ	2:B:932:SER:CB	2.87	0.52
1:A:590:PHE:C	1:A:592:GLN:H	2.11	0.52
1:A:899:LEU:O	1:A:899:LEU:HD12	2.09	0.52
2:B:735:HIS:ND1	2:B:735:HIS:C	2.63	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:44:TYR:HE2	1:A:444:MET:HE3	1.74	0.52
1:A:88:THR:CG2	1:A:89:ASP:N	2.73	0.52
1:A:288:VAL:HG22	1:A:296:ALA:HB2	1.90	0.52
1:A:531:LEU:CD2	1:A:747:ILE:CD1	2.82	0.52
1:A:920:GLY:O	1:A:922:ASN:N	2.41	0.52
2:B:227:VAL:O	2:B:231:ILE:HG22	2.09	0.52
2:B:662:GLN:HG3	2:B:662:GLN:O	2.09	0.52
1:A:49:LEU:HD21	1:A:608:LEU:HA	1.92	0.52
1:A:233:GLU:CG	1:A:339:LYS:HB3	2.39	0.52
1:A:249:PRO:CB	1:A:252:TRP:CD1	2.92	0.52
1:A:452:ARG:NH2	1:A:452:ARG:CG	2.73	0.52
1:A:532:ALA:C	1:A:535:CYS:HG	2.11	0.52
1:A:887:PRO:HG2	2:B:504:ALA:O	2.09	0.52
1:A:943:ARG:HD3	1:A:943:ARG:C	2.30	0.52
1:A:958:THR:CG2	1:A:959:LYS:N	2.73	0.52
2:B:198:MET:HE2	2:B:459:VAL:HA	1.92	0.52
2:B:589:TYR:CD1	2:B:589:TYR:N	2.76	0.52
2:B:672:ASN:CB	2:B:754:TYR:CZ	2.92	0.52
1:A:6:GLN:HA	1:A:6:GLN:NE2	2.11	0.52
1:A:591:ALA:HB3	1:A:613:GLN:HB2	1.91	0.52
1:A:754:VAL:HG23	1:A:754:VAL:O	2.09	0.52
1:A:805:ILE:HG23	1:A:806:PRO:HD2	1.91	0.52
1:A:884:ALA:HB2	2:B:506:PRO:HB3	0.59	0.52
2:B:528:TYR:HD2	2:B:560:TRP:CZ2	2.28	0.52
2:B:686:HIS:HD2	2:B:786:ALA:CB	2.19	0.52
1:A:44:TYR:O	1:A:45:ASP:HB3	2.10	0.52
1:A:189:ARG:NH2	1:A:189:ARG:CG	2.72	0.52
1:A:347:LYS:NZ	1:A:347:LYS:CB	2.73	0.52
1:A:690:TRP:CE2	1:A:712:GLY:HA3	2.45	0.52
1:A:883:LEU:N	1:A:883:LEU:CD2	2.72	0.52
2:B:161:LEU:O	2:B:161:LEU:HD22	2.09	0.52
2:B:257:PHE:N	2:B:301:VAL:O	2.37	0.52
2:B:264:THR:CB	2:B:265:PRO:CD	2.84	0.52
2:B:615:MET:O	2:B:618:LEU:HB2	2.10	0.52
1:A:244:ALA:HB1	1:A:274:VAL:CG2	2.30	0.52
1:A:627:ARG:O	1:A:729:SER:HA	2.10	0.52
1:A:970:LEU:N	1:A:970:LEU:CD1	2.73	0.52
2:B:64:LEU:N	2:B:64:LEU:CD1	2.73	0.52
2:B:102:VAL:O	2:B:106:LYS:HG3	2.10	0.52
2:B:268:ALA:O	2:B:589:TYR:HB2	2.10	0.52
2:B:607:THR:HG21	2:B:909:ASN:CG	2.30	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:253:LEU:HD22	1:A:628:SER:OG	2.09	0.52
1:A:671:LEU:O	1:A:671:LEU:HD22	2.10	0.52
1:A:704:ILE:C	1:A:707:ILE:CD1	2.77	0.52
2:B:348:GLY:O	2:B:349:LYS:C	2.47	0.52
1:A:127:PHE:CE1	1:A:452:ARG:CD	2.93	0.52
1:A:200:VAL:HG11	1:A:522:THR:HG21	1.92	0.52
1:A:297:ARG:NE	1:A:701:SER:OG	2.39	0.52
1:A:407:HIS:CE1	1:A:490:PHE:CE2	2.98	0.52
1:A:562:LEU:CD2	1:A:562:LEU:N	2.73	0.52
1:A:676:THR:O	1:A:676:THR:CG2	2.58	0.52
1:A:952:THR:HG21	2:B:115:ALA:CB	2.40	0.52
2:B:1:MET:CG	2:B:2:SER:H	2.22	0.52
1:A:253:LEU:N	1:A:253:LEU:CD1	2.73	0.51
1:A:329:HIS:CD2	1:A:348:GLN:HE22	2.28	0.51
2:B:257:PHE:HD1	2:B:357:HIS:CD2	2.28	0.51
2:B:467:GLN:HE21	2:B:467:GLN:CA	2.17	0.51
1:A:55:LEU:CB	1:A:528:MET:CE	2.82	0.51
1:A:77:LEU:HD22	1:A:742:MET:HE2	1.92	0.51
1:A:380:CYS:HG	1:A:435:GLN:CA	2.11	0.51
1:A:815:ILE:O	1:A:816:THR:CB	2.58	0.51
1:A:865:ARG:NH1	2:B:447:PRO:HG3	2.22	0.51
2:B:7:GLN:NE2	2:B:76:ASP:CG	2.63	0.51
2:B:214:ARG:NH1	2:B:214:ARG:CB	2.73	0.51
2:B:230:THR:HG21	2:B:364:MET:CB	2.40	0.51
2:B:234:TRP:O	2:B:237:HIS:O	2.29	0.51
2:B:349:LYS:CD	2:B:349:LYS:N	2.73	0.51
1:A:198:ARG:HH11	1:A:198:ARG:CG	2.22	0.51
2:B:251:LEU:CD2	2:B:305:LEU:HD12	2.40	0.51
2:B:259:VAL:CG1	2:B:260:LYS:N	2.73	0.51
2:B:373:THR:OG1	2:B:373:THR:O	2.24	0.51
2:B:549:LYS:N	2:B:549:LYS:CD	2.73	0.51
1:A:203:ASN:ND2	1:A:432:THR:OG1	2.43	0.51
1:A:208:HIS:HE1	1:A:217:GLU:OE1	1.94	0.51
1:A:455:HIS:HB3	1:A:611:LEU:CD2	2.40	0.51
1:A:674:PRO:C	1:A:675:SER:OG	2.48	0.51
2:B:162:SER:OG	2:B:440:LEU:CD1	2.57	0.51
1:A:297:ARG:HG2	1:A:297:ARG:HH11	1.75	0.51
1:A:298:VAL:CG1	1:A:300:TYR:CE1	2.94	0.51
1:A:422:ILE:CD1	1:A:422:ILE:N	2.74	0.51
1:A:455:HIS:CB	1:A:615:TYR:HE2	2.22	0.51
1:A:690:TRP:CH2	1:A:721:VAL:HG21	2.46	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:216:SER:CB	2:B:447:PRO:O	2.55	0.51
2:B:262:MET:SD	2:B:263:LEU:N	2.83	0.51
2:B:359:ASN:O	2:B:363:VAL:HG23	2.09	0.51
2:B:618:LEU:CD1	2:B:623:ILE:CD1	2.82	0.51
2:B:652:HIS:O	2:B:653:VAL:HB	2.11	0.51
1:A:185:ASN:ND2	1:A:488:SER:OG	2.42	0.51
1:A:412:ALA:O	1:A:413:GLN:C	2.48	0.51
1:A:925:VAL:CG1	1:A:926:THR:N	2.73	0.51
1:A:928:ARG:HB3	2:B:601:ALA:HB2	1.92	0.51
2:B:102:VAL:HG12	2:B:106:LYS:HD2	1.93	0.51
2:B:747:ALA:CB	2:B:749:THR:CG2	2.63	0.51
1:A:477:SER:O	1:A:478:LEU:HG	2.11	0.51
1:A:502:ASP:HB2	2:B:994:LEU:HB2	1.91	0.51
1:A:868:TYR:CE1	2:B:772:PHE:HE2	2.26	0.51
2:B:224:LEU:HG	2:B:404:MET:HB3	1.93	0.51
2:B:334:CYS:SG	2:B:468:MET:HE3	2.49	0.51
2:B:559:ALA:O	2:B:564:SER:CA	2.59	0.51
1:A:290:GLN:CG	1:A:413:GLN:NE2	2.70	0.51
1:A:479:SER:O	1:A:481:LEU:HD13	2.10	0.51
1:A:607:ARG:NH2	1:A:607:ARG:CG	2.73	0.51
1:A:917:MET:O	1:A:918:LYS:C	2.48	0.51
2:B:168:THR:OG1	2:B:545:ARG:HD2	2.11	0.51
2:B:585:ASP:HA	2:B:656:TYR:OH	2.11	0.51
2:B:797:GLY:C	2:B:799:ARG:N	2.60	0.51
2:B:838:ARG:HH12	2:B:932:SER:CB	2.24	0.51
1:A:384:LEU:CB	1:A:385:LEU:HD13	2.39	0.51
1:A:446:ARG:CG	1:A:446:ARG:NH1	2.73	0.51
1:A:607:ARG:HH21	1:A:607:ARG:CG	2.23	0.51
1:A:704:ILE:O	1:A:707:ILE:HD13	2.10	0.51
1:A:839:GLU:O	1:A:842:ARG:N	2.44	0.51
1:A:921:ASP:CB	2:B:626:ALA:CB	2.86	0.51
1:A:238:HIS:CD2	1:A:338:SER:HB3	2.45	0.51
1:A:574:LEU:HD22	1:A:577:ARG:HD3	1.93	0.51
1:A:655:TYR:OH	1:A:683:PRO:HG3	2.10	0.51
1:A:672:PRO:HG3	1:A:713:LEU:CD1	2.40	0.51
1:A:783:ASP:OD1	1:A:783:ASP:N	2.44	0.51
2:B:117:ARG:NH2	2:B:259:VAL:O	2.44	0.51
2:B:197:PRO:HD2	2:B:457:TRP:CE3	2.46	0.51
2:B:253:HIS:C	2:B:253:HIS:CD2	2.85	0.51
2:B:509:ILE:CD1	2:B:813:ILE:HD11	2.41	0.51
1:A:833:ARG:NH2	2:B:527:GLN:OE1	2.44	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:198:MET:CB	2:B:204:GLN:NE2	2.74	0.50
2:B:549:LYS:HA	2:B:550:MET:SD	2.51	0.50
1:A:271:ALA:O	1:A:274:VAL:HG12	2.11	0.50
1:A:477:SER:C	1:A:478:LEU:CD1	2.69	0.50
1:A:948:PHE:CZ	1:A:950:MET:CE	2.94	0.50
2:B:96:GLN:OE1	2:B:96:GLN:HA	2.10	0.50
2:B:480:LEU:HD23	2:B:950:LEU:O	2.11	0.50
2:B:673:TRP:CZ3	2:B:677:HIS:CE1	2.99	0.50
1:A:562:LEU:HD22	1:A:562:LEU:H	1.76	0.50
1:A:736:LEU:HD23	1:A:737:GLY:H	1.76	0.50
1:A:843:ARG:NH1	1:A:843:ARG:CG	2.73	0.50
2:B:383:HIS:CD2	2:B:384:ALA:H	2.29	0.50
2:B:680:LYS:HG3	2:B:758:LEU:HD11	1.94	0.50
1:A:46:LEU:HD21	1:A:458:ILE:HD13	1.82	0.50
1:A:508:SER:CB	2:B:992:TYR:CZ	2.95	0.50
1:A:535:CYS:HG	1:A:536:GLU:N	2.10	0.50
1:A:648:LYS:O	1:A:649:HIS:CB	2.58	0.50
1:A:833:ARG:CG	1:A:833:ARG:NH1	2.73	0.50
2:B:43:THR:HG21	2:B:55:LYS:HG2	1.94	0.50
2:B:122:CYS:CB	2:B:939:MET:CE	2.88	0.50
2:B:265:PRO:CD	2:B:266:HIS:N	2.74	0.50
2:B:838:ARG:CZ	2:B:932:SER:HB2	2.42	0.50
1:A:316:LEU:HD22	1:A:350:TYR:OH	2.07	0.50
1:A:344:ILE:HG13	1:A:345:GLN:H	1.77	0.50
1:A:961:LEU:HD11	2:B:284:MET:CB	2.41	0.50
2:B:216:SER:HB2	2:B:448:MET:HA	1.94	0.50
2:B:589:TYR:N	2:B:589:TYR:HD1	2.09	0.50
2:B:623:ILE:CG2	2:B:893:ILE:HG12	2.41	0.50
2:B:676:TRP:CD1	2:B:754:TYR:CB	2.87	0.50
2:B:801:GLN:HG3	2:B:801:GLN:O	2.10	0.50
2:B:832:HIS:CE1	2:B:837:ALA:CB	2.95	0.50
1:A:215:LEU:N	1:A:215:LEU:CD1	2.75	0.50
1:A:305:ASP:HA	2:B:710:HIS:CD2	2.46	0.50
1:A:542:GLU:HB2	1:A:733:SER:HB3	1.93	0.50
1:A:634:ILE:H	1:A:634:ILE:CD1	2.14	0.50
2:B:409:GLU:HA	2:B:409:GLU:OE2	2.11	0.50
1:A:478:LEU:HD11	1:A:740:GLU:OE2	2.11	0.50
1:A:492:VAL:CG2	1:A:495:VAL:CG2	2.89	0.50
1:A:513:GLY:N	2:B:188:GLY:HA3	2.27	0.50
1:A:690:TRP:HZ3	1:A:721:VAL:HG23	1.74	0.50
1:A:704:ILE:CA	1:A:707:ILE:HD12	2.42	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:789:ARG:HH21	1:A:799:VAL:HG23	1.76	0.50
1:A:830:ARG:O	1:A:836:THR:CG2	2.60	0.50
2:B:198:MET:CG	2:B:204:GLN:HE22	2.20	0.50
2:B:355:ALA:HB3	2:B:358:ALA:CB	2.41	0.50
1:A:238:HIS:HD2	1:A:338:SER:CB	2.24	0.50
1:A:285:ILE:CD1	1:A:395:PHE:HB3	2.42	0.50
1:A:29:MET:CE	1:A:135:CYS:CA	2.90	0.50
1:A:511:ASP:O	2:B:189:ALA:O	2.30	0.50
1:A:619:VAL:CG2	1:A:620:ASP:N	2.73	0.50
1:A:655:TYR:HE1	1:A:666:VAL:HG12	1.77	0.50
2:B:717:GLY:O	2:B:722:GLU:OE2	2.30	0.50
2:B:752:HIS:N	2:B:753:PRO:CD	2.74	0.50
1:A:54:GLU:OE2	1:A:600:SER:CB	2.60	0.49
1:A:76:GLU:HB3	1:A:103:ARG:HG3	1.92	0.49
1:A:492:VAL:CG2	1:A:495:VAL:HG21	2.42	0.49
2:B:409:GLU:HG3	2:B:409:GLU:O	2.12	0.49
2:B:1002:THR:HG23	2:B:1004:ASP:OD2	2.12	0.49
1:A:44:TYR:CE2	1:A:444:MET:HE3	2.47	0.49
1:A:75:LEU:HD11	1:A:106:LEU:HD22	1.94	0.49
1:A:886:ARG:NH1	1:A:889:GLU:HG2	2.27	0.49
2:B:216:SER:HA	2:B:447:PRO:O	2.12	0.49
2:B:330:ALA:HA	2:B:378:THR:CG2	2.42	0.49
2:B:378:THR:HG23	2:B:451:PRO:HG3	1.94	0.49
2:B:633:ILE:O	2:B:633:ILE:HG22	2.12	0.49
1:A:160:VAL:HG23	1:A:497:PHE:HB2	1.94	0.49
1:A:350:TYR:CD1	1:A:350:TYR:C	2.85	0.49
2:B:84:THR:HG21	2:B:545:ARG:CD	2.36	0.49
2:B:194:ILE:CG2	2:B:199:LEU:C	2.81	0.49
2:B:219:GLN:OE1	2:B:444:VAL:HG13	2.13	0.49
2:B:604:VAL:HG13	2:B:880:VAL:CG1	2.42	0.49
2:B:671:TYR:CE2	2:B:675:LEU:HD11	2.46	0.49
1:A:131:ARG:HH11	1:A:131:ARG:HG3	1.77	0.49
1:A:145:ILE:HD11	1:A:157:MET:SD	2.52	0.49
1:A:212:ASN:OD1	1:A:213:GLY:N	2.45	0.49
1:A:244:ALA:CB	1:A:632:ARG:NH2	2.75	0.49
1:A:392:HIS:O	1:A:408:GLU:HG3	2.12	0.49
1:A:939:ASN:O	1:A:939:ASN:ND2	2.45	0.49
2:B:130:ALA:HB3	2:B:141:TYR:HD1	1.77	0.49
2:B:219:GLN:C	2:B:327:TYR:OH	2.51	0.49
1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:NE2	2.73	0.49
1:A:20:HIS:CD2	1:A:20:HIS:C	2.86	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:917:MET:CE	2:B:511:ASP:OD1	2.60	0.49
2:B:7:GLN:HG2	2:B:29:VAL:HG13	1.88	0.49
2:B:32:LYS:HD2	2:B:69:GLU:OE1	2.10	0.49
2:B:543:ASN:O	2:B:545:ARG:N	2.46	0.49
2:B:633:ILE:HD13	2:B:643:VAL:CG1	2.42	0.49
2:B:647:LEU:HA	2:B:807:PHE:O	2.12	0.49
2:B:676:TRP:HE1	2:B:754:TYR:H	1.59	0.49
2:B:839:LEU:HD22	2:B:866:LEU:CD2	2.27	0.49
1:A:19:LYS:HG2	1:A:140:LEU:CD2	2.39	0.49
1:A:52:THR:CG2	1:A:601:MET:CE	2.87	0.49
1:A:472:ASP:O	1:A:475:ASN:O	2.30	0.49
1:A:508:SER:HB2	2:B:992:TYR:CD2	2.48	0.49
1:A:532:ALA:C	1:A:535:CYS:SG	2.90	0.49
1:A:555:VAL:H	1:A:687:THR:CG2	2.23	0.49
1:A:650:ALA:CB	1:A:796:SER:HA	2.39	0.49
1:A:961:LEU:CD1	2:B:284:MET:HB3	2.42	0.49
1:A:971:ARG:HH11	2:B:735:HIS:CD2	2.31	0.49
2:B:224:LEU:HB2	2:B:404:MET:CG	2.42	0.49
2:B:231:ILE:C	2:B:231:ILE:HD13	2.33	0.49
2:B:399:PHE:HZ	2:B:466:LEU:HD22	1.76	0.49
2:B:799:ARG:NH1	2:B:799:ARG:CG	2.73	0.49
1:A:371:LEU:C	1:A:500:MET:HE3	2.13	0.49
1:A:551:ARG:HH11	1:A:551:ARG:CG	2.26	0.49
1:A:828:ARG:CG	1:A:828:ARG:NH1	2.74	0.49
1:A:973:GLY:O	2:B:791:ILE:HD12	2.05	0.49
2:B:66:ARG:HH11	2:B:66:ARG:CG	2.15	0.49
2:B:78:LEU:CD2	2:B:180:LEU:CD2	2.89	0.49
2:B:619:GLU:HB2	2:B:622:LEU:HD11	1.95	0.49
1:A:232:TRP:N	1:A:342:LEU:O	2.41	0.49
1:A:371:LEU:HD11	1:A:419:LEU:HD13	1.95	0.49
1:A:589:LEU:CD1	1:A:589:LEU:N	2.73	0.49
1:A:644:SER:O	1:A:647:ILE:N	2.46	0.49
1:A:925:VAL:CG1	1:A:926:THR:H	2.25	0.49
2:B:74:MET:HE2	2:B:984:ILE:CD1	2.43	0.49
2:B:214:ARG:NH1	2:B:214:ARG:CG	2.73	0.49
2:B:806:TYR:CD1	2:B:806:TYR:C	2.86	0.49
1:A:247:PRO:HB3	1:A:477:SER:CB	2.29	0.49
1:A:534:VAL:HG12	1:A:740:GLU:HG3	1.94	0.49
2:B:114:ASN:O	2:B:116:GLY:N	2.45	0.49
2:B:387:VAL:HG23	2:B:387:VAL:O	2.13	0.49
2:B:672:ASN:HB2	2:B:754:TYR:OH	2.13	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:681:THR:O	2:B:785:ARG:NE	2.46	0.49
1:A:72:ARG:HH22	1:A:863:VAL:HG21	1.77	0.49
1:A:152:VAL:HG12	1:A:156:THR:CG2	2.43	0.49
1:A:230:LEU:O	1:A:343:THR:HA	2.13	0.49
1:A:289:THR:HG22	1:A:290:GLN:N	2.28	0.49
1:A:385:LEU:CD1	1:A:385:LEU:N	2.73	0.49
1:A:454:CYS:O	1:A:458:ILE:HG22	2.13	0.49
1:A:508:SER:HB2	2:B:992:TYR:CD1	2.48	0.49
1:A:544:MET:O	1:A:544:MET:HG2	2.12	0.49
1:A:646:LEU:CB	1:A:669:ILE:HD13	2.42	0.49
1:A:807:MET:HE2	1:A:810:MET:HE2	1.94	0.49
1:A:938:ARG:O	1:A:938:ARG:HG3	2.13	0.49
2:B:626:ALA:O	2:B:643:VAL:HA	2.13	0.49
2:B:846:THR:CB	2:B:847:PRO:HD2	2.40	0.49
1:A:75:LEU:HB2	1:A:104:ALA:HB3	1.94	0.48
2:B:48:ALA:O	2:B:49:THR:CB	2.61	0.48
2:B:254:GLN:O	2:B:254:GLN:HG2	2.13	0.48
2:B:331:LEU:HB2	2:B:378:THR:HB	1.94	0.48
2:B:751:ARG:C	2:B:753:PRO:HD2	2.33	0.48
1:A:58:GLN:HB3	1:A:860:ILE:HD12	1.94	0.48
1:A:335:GLY:HA2	1:A:341:HIS:CD2	2.46	0.48
1:A:339:LYS:O	1:A:341:HIS:CD2	2.66	0.48
1:A:464:MET:SD	1:A:483:PHE:HZ	2.36	0.48
1:A:492:VAL:HG21	1:A:495:VAL:HG21	1.95	0.48
2:B:110:GLN:NE2	2:B:110:GLN:CA	2.73	0.48
2:B:117:ARG:HG2	2:B:155:GLU:HG3	1.95	0.48
2:B:265:PRO:HD2	2:B:266:HIS:N	2.24	0.48
2:B:509:ILE:HD11	2:B:811:ALA:HB3	1.95	0.48
2:B:510:THR:HG22	2:B:632:THR:CB	2.42	0.48
2:B:551:VAL:CG1	2:B:579:GLY:HA3	2.40	0.48
2:B:577:TYR:CD1	2:B:577:TYR:C	2.85	0.48
2:B:659:ILE:HD12	2:B:788:LEU:CD2	2.22	0.48
1:A:129:THR:HG21	1:A:447:TYR:O	2.12	0.48
1:A:238:HIS:CE1	1:A:334:LYS:CD	2.85	0.48
1:A:317:SER:CB	1:A:323:GLY:HA2	2.42	0.48
1:A:330:TYR:HE2	1:A:397:PRO:HG3	1.77	0.48
1:A:374:PHE:CZ	1:A:442:ALA:HB3	2.49	0.48
1:A:522:THR:HG23	1:A:523:TYR:N	2.28	0.48
1:A:553:THR:HG22	1:A:558:VAL:CG2	2.36	0.48
1:A:634:ILE:N	1:A:634:ILE:CD1	2.74	0.48
1:A:634:ILE:HG23	1:A:726:TYR:HB3	1.95	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:672:PRO:HG3	1:A:713:LEU:HD11	1.95	0.48
1:A:838:PRO:O	1:A:841:HIS:CB	2.61	0.48
2:B:156:PRO:HG2	2:B:356:GLY:O	2.14	0.48
2:B:327:TYR:CZ	2:B:448:MET:HE2	2.42	0.48
2:B:686:HIS:ND1	2:B:686:HIS:N	2.60	0.48
2:B:734:LEU:O	2:B:735:HIS:CB	2.61	0.48
2:B:838:ARG:NH1	2:B:932:SER:CB	2.77	0.48
1:A:248:VAL:HG11	1:A:630:PHE:CD1	2.47	0.48
1:A:299:HIS:HA	1:A:700:GLY:O	2.13	0.48
1:A:703:VAL:O	1:A:707:ILE:HD12	2.13	0.48
1:A:757:HIS:HD2	1:A:758:THR:H	1.61	0.48
1:A:936:TYR:OH	2:B:610:ASP:OD1	2.32	0.48
2:B:161:LEU:CD1	2:B:161:LEU:N	2.75	0.48
1:A:229:TYR:HB3	1:A:343:THR:CG2	2.43	0.48
1:A:244:ALA:CB	1:A:274:VAL:HG22	2.38	0.48
1:A:244:ALA:HB2	1:A:632:ARG:NH2	2.29	0.48
1:A:639:GLN:CA	1:A:639:GLN:NE2	2.74	0.48
1:A:968:MET:HE3	2:B:659:ILE:HG21	1.93	0.48
2:B:307:LYS:HG2	2:B:311:ARG:HH21	1.76	0.48
2:B:322:GLU:OE2	2:B:375:VAL:HG21	2.13	0.48
2:B:559:ALA:O	2:B:562:LEU:O	2.31	0.48
1:A:275:ASP:CG	1:A:276:PRO:HD2	2.14	0.48
1:A:495:VAL:CG2	1:A:496:GLN:N	2.75	0.48
1:A:507:VAL:HG23	1:A:512:MET:CE	2.44	0.48
1:A:644:SER:O	1:A:647:ILE:HB	2.13	0.48
2:B:254:GLN:CD	2:B:254:GLN:H	2.16	0.48
2:B:311:ARG:HD2	2:B:782:MET:SD	2.54	0.48
1:A:458:ILE:HG23	1:A:459:THR:N	2.29	0.48
1:A:504:GLU:OE1	1:A:504:GLU:N	2.46	0.48
1:A:562:LEU:O	1:A:563:PHE:C	2.51	0.48
1:A:815:ILE:CG2	1:A:816:THR:N	2.46	0.48
2:B:930:ASN:N	2:B:930:ASN:OD1	2.47	0.48
1:A:264:ARG:O	1:A:268:GLU:HG3	2.14	0.48
1:A:326:SER:HB2	1:A:389:ARG:NH2	2.29	0.48
1:A:692:ALA:HB3	1:A:721:VAL:HB	1.95	0.48
1:A:885:LEU:CD2	2:B:636:ASN:ND2	2.77	0.48
2:B:36:GLU:HG2	2:B:65:GLU:CG	2.44	0.48
2:B:219:GLN:C	2:B:327:TYR:HH	2.12	0.48
2:B:267:ILE:HG13	2:B:268:ALA:N	2.28	0.48
2:B:648:VAL:HG22	2:B:809:GLU:CD	2.33	0.48
1:A:262:ARG:HH22	1:A:402:VAL:N	2.07	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:367:ILE:HD11	1:A:415:GLN:NE2	0.72	0.48
1:A:508:SER:HB2	2:B:992:TYR:CG	2.48	0.48
1:A:892:CYS:O	2:B:902:GLN:OE1	2.32	0.48
2:B:586:GLY:CA	2:B:588:PHE:CE1	2.97	0.48
1:A:317:SER:OG	1:A:389:ARG:HD2	2.14	0.48
1:A:517:GLU:O	1:A:521:ALA:HB2	2.13	0.48
1:A:556:HIS:HD1	1:A:626:ILE:CD1	2.27	0.48
1:A:562:LEU:CD2	1:A:562:LEU:H	2.26	0.48
2:B:262:MET:SD	2:B:262:MET:C	2.92	0.48
2:B:294:ASP:O	2:B:295:TYR:C	2.52	0.48
2:B:722:GLU:HG3	2:B:729:ARG:HH22	1.78	0.48
2:B:926:ILE:HD13	2:B:933:VAL:HG22	1.95	0.48
1:A:54:GLU:OE1	1:A:600:SER:OG	2.27	0.47
1:A:81:ILE:HD12	1:A:98:GLU:HB3	1.95	0.47
1:A:288:VAL:O	1:A:324:ARG:CD	2.50	0.47
1:A:432:THR:O	1:A:435:GLN:HB3	2.07	0.47
1:A:490:PHE:O	1:A:491:LEU:C	2.49	0.47
1:A:692:ALA:HB1	1:A:722:HIS:N	2.29	0.47
1:A:829:THR:HG23	1:A:829:THR:O	2.12	0.47
2:B:195:VAL:HG13	2:B:195:VAL:O	2.13	0.47
1:A:201:MET:HG3	1:A:400:PHE:CZ	2.49	0.47
1:A:387:ASN:HD22	1:A:391:GLY:HA3	1.74	0.47
1:A:828:ARG:HB3	1:A:828:ARG:NH1	2.12	0.47
1:A:894:ARG:CB	1:A:902:MET:HE1	2.11	0.47
1:A:940:PRO:HB2	1:A:944:MET:CE	2.43	0.47
2:B:432:GLU:HG2	2:B:817:GLY:HA3	1.96	0.47
2:B:442:PRO:HG2	2:B:576:TYR:CG	2.49	0.47
1:A:211:VAL:CG2	1:A:216:GLN:HB2	2.32	0.47
1:A:246:THR:HG23	1:A:246:THR:O	2.14	0.47
1:A:690:TRP:NE1	1:A:712:GLY:CA	2.77	0.47
1:A:696:LEU:HD12	1:A:696:LEU:N	2.29	0.47
1:A:762:ARG:NE	1:A:815:ILE:HD13	2.30	0.47
2:B:173:ASP:O	2:B:177:LEU:HD12	2.13	0.47
2:B:753:PRO:HG2	2:B:756:ARG:NH1	2.24	0.47
1:A:111:ASN:HB2	1:A:467:GLN:CB	2.41	0.47
1:A:257:ALA:HB1	1:A:259:LEU:HG	1.96	0.47
2:B:672:ASN:C	2:B:754:TYR:HE2	2.17	0.47
2:B:877:CYS:SG	2:B:911:ILE:HD12	2.55	0.47
1:A:42:GLY:HA3	1:A:445:ARG:NH2	2.29	0.47
1:A:298:VAL:HG12	1:A:300:TYR:CE1	2.50	0.47
1:A:384:LEU:O	1:A:385:LEU:HD12	2.13	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:657:TRP:NE1	1:A:661:GLU:O	2.36	0.47
1:A:849:ASP:OD2	1:A:911:TYR:OH	2.33	0.47
2:B:131:GLY:O	2:B:931:GLY:HA3	2.14	0.47
2:B:197:PRO:HG2	2:B:457:TRP:HA	1.96	0.47
2:B:260:LYS:NZ	2:B:272:ASP:OD1	2.43	0.47
1:A:380:CYS:HG	1:A:439:ALA:HB2	1.78	0.47
1:A:650:ALA:HB1	1:A:796:SER:HB2	1.82	0.47
1:A:923:THR:HG21	2:B:627:THR:OG1	2.14	0.47
2:B:43:THR:HG21	2:B:55:LYS:CG	2.44	0.47
2:B:329:LEU:HG	2:B:450:GLU:CD	2.35	0.47
2:B:374:GLY:C	2:B:375:VAL:HG22	2.34	0.47
2:B:492:THR:HG22	2:B:823:LEU:HD21	1.95	0.47
2:B:499:TYR:CE2	2:B:860:MET:CG	2.95	0.47
2:B:836:GLU:HG2	2:B:936:LYS:HG2	1.97	0.47
2:B:867:SER:O	2:B:890:GLY:HA2	2.14	0.47
1:A:55:LEU:CD1	1:A:528:MET:CE	0.48	0.47
1:A:72:ARG:HG3	1:A:72:ARG:HH21	1.80	0.47
1:A:82:THR:O	1:A:82:THR:CG2	2.59	0.47
1:A:106:LEU:HD11	1:A:470:VAL:HG12	1.92	0.47
1:A:110:LEU:HD22	1:A:465:VAL:HG12	1.97	0.47
1:A:115:HIS:ND1	1:A:483:PHE:CZ	2.82	0.47
1:A:131:ARG:CG	1:A:131:ARG:NH1	2.74	0.47
1:A:153:THR:HG22	1:A:154:THR:N	2.29	0.47
1:A:345:GLN:O	1:A:346:LEU:C	2.50	0.47
1:A:371:LEU:HB3	1:A:500:MET:HE1	1.96	0.47
1:A:377:LEU:HD23	1:A:377:LEU:N	2.30	0.47
1:A:754:VAL:HA	1:A:854:ILE:O	2.14	0.47
1:A:844:GLY:O	1:A:849:ASP:CG	2.53	0.47
1:A:934:PRO:HG3	2:B:610:ASP:CB	2.44	0.47
1:A:958:THR:CG2	1:A:959:LYS:H	2.28	0.47
1:A:961:LEU:CG	2:B:284:MET:SD	2.95	0.47
1:A:967:GLN:O	1:A:970:LEU:N	2.48	0.47
1:A:969:GLU:C	1:A:971:ARG:H	2.17	0.47
2:B:89:ASP:HA	2:B:410:GLN:CD	2.34	0.47
2:B:207:THR:O	2:B:211:ARG:HG3	2.14	0.47
2:B:327:TYR:HD1	2:B:329:LEU:CD1	2.28	0.47
2:B:355:ALA:H	2:B:358:ALA:HB3	1.79	0.47
2:B:514:THR:HG21	2:B:587:CYS:CB	2.43	0.47
2:B:623:ILE:CB	2:B:893:ILE:CG1	2.92	0.47
2:B:729:ARG:CG	2:B:754:TYR:CE1	2.94	0.47
2:B:794:GLN:CD	2:B:796:ASP:O	2.51	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:81:ILE:CD1	1:A:98:GLU:HB3	2.42	0.47
1:A:214:ARG:NH1	1:A:216:GLN:NE2	2.63	0.47
1:A:472:ASP:CB	1:A:739:ALA:HB2	2.43	0.47
1:A:532:ALA:HB1	1:A:597:VAL:HG23	1.93	0.47
1:A:702:LYS:NZ	1:A:702:LYS:CB	2.78	0.47
2:B:122:CYS:SG	2:B:826:TYR:HA	2.54	0.47
2:B:164:SER:HA	2:B:443:LYS:O	2.15	0.47
2:B:676:TRP:CZ3	2:B:680:LYS:HG3	2.50	0.47
1:A:26:LEU:O	1:A:27:LYS:C	2.54	0.47
1:A:64:GLY:O	1:A:65:LEU:CG	2.50	0.47
1:A:464:MET:HB3	1:A:483:PHE:HZ	1.77	0.47
1:A:792:THR:O	1:A:792:THR:HG23	2.14	0.47
1:A:931:LEU:H	1:A:931:LEU:HD12	1.78	0.47
2:B:48:ALA:C	2:B:49:THR:HG23	2.36	0.47
2:B:139:ILE:C	2:B:140:GLU:HG2	2.35	0.47
1:A:103:ARG:NH2	1:A:103:ARG:CG	2.73	0.47
1:A:125:MET:CG	1:A:136:ASP:OD2	2.63	0.47
1:A:215:LEU:CD1	1:A:215:LEU:H	2.28	0.47
1:A:371:LEU:CB	1:A:500:MET:HE1	2.43	0.47
1:A:529:ALA:HB2	1:A:612:ASN:ND2	2.29	0.47
1:A:714:ASN:O	1:A:714:ASN:ND2	2.48	0.47
1:A:830:ARG:HG2	1:A:831:PRO:HD2	1.97	0.47
1:A:888:TYR:O	1:A:894:ARG:NH2	2.46	0.47
2:B:77:LEU:CD2	2:B:192:VAL:HG13	2.45	0.47
2:B:247:ARG:CD	2:B:347:TRP:CD1	2.99	0.47
1:A:6:GLN:HB2	1:A:7:GLN:HG2	1.97	0.46
1:A:242:GLU:O	1:A:631:VAL:HA	2.15	0.46
1:A:388:SER:O	1:A:391:GLY:CA	2.62	0.46
1:A:542:GLU:HB2	1:A:733:SER:HB2	1.96	0.46
1:A:822:LEU:HD12	1:A:822:LEU:O	2.15	0.46
1:A:830:ARG:CG	1:A:831:PRO:HD2	2.45	0.46
1:A:886:ARG:N	1:A:887:PRO:HD3	2.30	0.46
1:A:936:TYR:OH	2:B:610:ASP:CG	2.53	0.46
1:A:372:LYS:HD2	2:B:999:LEU:HD11	1.95	0.46
1:A:508:SER:HB3	2:B:992:TYR:CZ	2.50	0.46
1:A:784:MET:O	1:A:785:MET:HG2	2.16	0.46
1:A:876:VAL:HG23	2:B:523:HIS:NE2	2.28	0.46
1:A:876:VAL:HG13	2:B:520:ASP:OD1	2.15	0.46
2:B:191:THR:O	2:B:192:VAL:CG2	2.63	0.46
2:B:418:GLN:OE1	2:B:418:GLN:N	2.48	0.46
1:A:39:ILE:CG1	1:A:506:SER:OG	2.62	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:450:SER:O	1:A:451:GLU:C	2.52	0.46
1:A:499:ASP:CB	2:B:1001:SER:OG	2.57	0.46
2:B:307:LYS:HG2	2:B:311:ARG:HH22	1.79	0.46
1:A:66:LEU:O	1:A:67:PRO:C	2.53	0.46
1:A:198:ARG:NH1	1:A:198:ARG:CG	2.73	0.46
1:A:240:LYS:HE2	1:A:240:LYS:HB2	1.71	0.46
1:A:367:ILE:HD11	1:A:415:GLN:HE22	0.96	0.46
1:A:649:HIS:CD2	1:A:651:GLN:OE1	2.68	0.46
1:A:751:HIS:CD2	1:A:858:GLY:H	2.33	0.46
2:B:117:ARG:NE	2:B:155:GLU:CD	2.56	0.46
2:B:197:PRO:HD2	2:B:457:TRP:HA	1.96	0.46
2:B:243:ALA:HB1	2:B:250:TRP:CZ2	2.50	0.46
2:B:346:THR:CG2	2:B:364:MET:HG2	2.45	0.46
2:B:433:TRP:CD1	2:B:518:GLN:NE2	2.78	0.46
2:B:436:VAL:HG12	2:B:584:ALA:CB	2.46	0.46
1:A:353:MET:HE1	1:A:385:LEU:HB2	1.96	0.46
1:A:777:LEU:HD22	1:A:834:MET:HE1	1.95	0.46
1:A:961:LEU:HD22	2:B:286:THR:HG21	1.96	0.46
2:B:219:GLN:OE1	2:B:444:VAL:CG1	2.64	0.46
1:A:219:GLY:O	1:A:220:GLU:C	2.51	0.46
1:A:268:GLU:CD	1:A:693:THR:HG21	2.31	0.46
1:A:353:MET:CE	1:A:385:LEU:CB	2.94	0.46
1:A:368:VAL:HG23	1:A:418:PHE:HB2	1.96	0.46
1:A:371:LEU:CB	1:A:500:MET:HE2	2.40	0.46
1:A:571:LEU:HD23	1:A:592:GLN:HG3	1.95	0.46
2:B:589:TYR:HD1	2:B:589:TYR:H	1.64	0.46
1:A:52:THR:CG2	1:A:601:MET:HE1	2.44	0.46
1:A:68:PHE:CE1	1:A:862:HIS:HE1	2.33	0.46
1:A:377:LEU:O	1:A:378:GLY:C	2.53	0.46
1:A:485:VAL:CG1	1:A:617:PRO:HB3	2.45	0.46
1:A:518:LEU:CD2	1:A:518:LEU:C	2.84	0.46
1:A:677:ILE:CG1	1:A:678:THR:N	2.77	0.46
2:B:340:ALA:HB2	2:B:386:THR:CB	2.46	0.46
2:B:633:ILE:CG2	2:B:638:GLU:HB3	2.45	0.46
2:B:655:LEU:O	2:B:656:TYR:CG	2.69	0.46
2:B:833:GLY:O	2:B:937:VAL:O	2.34	0.46
1:A:77:LEU:HD22	1:A:742:MET:HE1	1.97	0.46
1:A:230:LEU:HD12	1:A:232:TRP:CZ2	2.50	0.46
1:A:255:PRO:HD2	1:A:256:GLU:H	1.80	0.46
1:A:260:THR:CG2	1:A:263:GLU:CD	2.84	0.46
1:A:300:TYR:N	1:A:300:TYR:CD1	2.84	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:331:THR:HG23	1:A:343:THR:HB	1.97	0.46
1:A:563:PHE:HA	1:A:566:VAL:CG2	2.45	0.46
1:A:682:THR:HA	1:A:683:PRO:HA	1.56	0.46
1:A:885:LEU:O	1:A:886:ARG:HG3	2.15	0.46
1:A:892:CYS:HG	2:B:902:GLN:HG2	1.60	0.46
2:B:266:HIS:CE1	2:B:619:GLU:HG2	2.51	0.46
1:A:55:LEU:CD2	1:A:60:LEU:HB2	2.45	0.46
1:A:330:TYR:CE2	1:A:397:PRO:CG	2.99	0.46
1:A:356:THR:HA	1:A:419:LEU:O	2.16	0.46
1:A:463:HIS:HD2	1:A:617:PRO:CG	2.24	0.46
1:A:519:LEU:HD23	1:A:519:LEU:O	2.16	0.46
1:A:556:HIS:ND1	1:A:626:ILE:CD1	2.79	0.46
1:A:762:ARG:HE	1:A:815:ILE:HD13	1.81	0.46
1:A:807:MET:HE1	1:A:810:MET:HE1	1.98	0.46
1:A:934:PRO:HB3	2:B:613:LEU:CD1	2.36	0.46
2:B:264:THR:HG22	2:B:265:PRO:HD3	0.49	0.46
2:B:273:TRP:HZ2	2:B:653:VAL:CG1	2.29	0.46
2:B:331:LEU:H	2:B:378:THR:HG22	1.81	0.46
1:A:220:GLU:OE2	2:B:214:ARG:NH2	2.49	0.46
1:A:247:PRO:CG	1:A:477:SER:OG	2.60	0.46
1:A:421:GLY:C	1:A:422:ILE:HD13	2.37	0.46
1:A:453:THR:HG23	1:A:454:CYS:N	2.31	0.46
1:A:535:CYS:SG	1:A:597:VAL:HG21	2.56	0.46
1:A:879:ARG:CD	2:B:510:THR:HG21	2.46	0.46
1:A:943:ARG:NH1	1:A:943:ARG:CG	2.73	0.46
2:B:13:SER:HA	2:B:14:PRO:C	2.36	0.46
2:B:197:PRO:CD	2:B:457:TRP:CE3	2.99	0.46
2:B:383:HIS:CD2	2:B:385:ASP:OD1	2.67	0.46
2:B:515:THR:HG21	2:B:656:TYR:CE2	2.44	0.46
2:B:526:PHE:O	2:B:526:PHE:HD1	1.99	0.46
1:A:507:VAL:HG23	1:A:512:MET:HE3	1.96	0.45
2:B:548:ASN:O	2:B:550:MET:CE	2.63	0.45
2:B:586:GLY:CA	2:B:588:PHE:HE1	2.28	0.45
2:B:796:ASP:OD1	2:B:797:GLY:N	2.49	0.45
1:A:193:PHE:HE2	1:A:460:THR:HG22	1.80	0.45
1:A:433:LYS:HD2	1:A:437:ALA:HB3	1.94	0.45
1:A:531:LEU:HD23	1:A:747:ILE:HD11	1.95	0.45
1:A:574:LEU:HD22	1:A:577:ARG:CD	2.34	0.45
1:A:690:TRP:NE1	1:A:712:GLY:HA3	2.30	0.45
2:B:26:GLN:O	2:B:27:THR:HG23	2.16	0.45
2:B:383:HIS:CD2	2:B:384:ALA:N	2.84	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:758:LEU:HA	2:B:758:LEU:HD23	1.74	0.45
1:A:68:PHE:O	1:A:69:GLU:C	2.54	0.45
1:A:96:TYR:CD2	1:A:96:TYR:O	2.69	0.45
1:A:104:ALA:O	1:A:105:TRP:CE3	2.69	0.45
1:A:188:CYS:SG	1:A:495:VAL:HG11	2.57	0.45
1:A:246:THR:HB	1:A:629:SER:HB3	1.99	0.45
1:A:290:GLN:OE1	1:A:291:ASN:OD1	2.34	0.45
1:A:885:LEU:C	1:A:886:ARG:CG	2.85	0.45
1:A:894:ARG:HG3	1:A:894:ARG:O	2.15	0.45
2:B:122:CYS:CB	2:B:939:MET:HE3	2.46	0.45
2:B:442:PRO:O	2:B:576:TYR:CE2	2.69	0.45
2:B:468:MET:HE2	2:B:468:MET:HB2	1.74	0.45
2:B:695:VAL:HG22	2:B:780:ILE:CG2	2.46	0.45
2:B:832:HIS:CD2	2:B:837:ALA:HB2	2.51	0.45
1:A:36:GLY:O	1:A:505:GLY:CA	2.59	0.45
1:A:231:THR:HB	1:A:341:HIS:HB3	1.98	0.45
1:A:531:LEU:O	1:A:535:CYS:HB3	2.16	0.45
1:A:553:THR:HB	1:A:554:ASP:H	1.55	0.45
1:A:893:VAL:HG13	1:A:894:ARG:N	2.32	0.45
2:B:329:LEU:HD21	2:B:404:MET:HE2	1.98	0.45
2:B:623:ILE:HD12	2:B:893:ILE:HD12	1.99	0.45
2:B:702:LEU:HD11	2:B:777:ILE:HG12	1.98	0.45
1:A:202:HIS:O	1:A:202:HIS:CG	2.69	0.45
1:A:319:ASP:OD1	1:A:322:ALA:HB3	2.17	0.45
1:A:690:TRP:O	1:A:690:TRP:CD2	2.70	0.45
1:A:886:ARG:O	1:A:888:TYR:N	2.49	0.45
2:B:117:ARG:NH1	2:B:299:MET:O	2.50	0.45
2:B:123:ASN:O	2:B:939:MET:HA	2.16	0.45
2:B:807:PHE:H	2:B:807:PHE:HD1	1.57	0.45
1:A:309:TRP:HB2	1:A:331:THR:HG21	1.99	0.45
1:A:330:TYR:CG	1:A:330:TYR:O	2.69	0.45
1:A:928:ARG:CB	2:B:601:ALA:HB2	2.46	0.45
1:A:958:THR:HG22	1:A:959:LYS:H	1.78	0.45
2:B:128:ILE:C	2:B:129:ILE:HD13	2.36	0.45
2:B:347:TRP:O	2:B:348:GLY:O	2.33	0.45
2:B:796:ASP:HB3	2:B:797:GLY:O	2.17	0.45
2:B:870:LEU:HB3	2:B:875:ALA:HB3	1.98	0.45
1:A:129:THR:CG2	1:A:447:TYR:O	2.65	0.45
1:A:204:SER:OG	1:A:523:TYR:HE1	1.90	0.45
1:A:215:LEU:H	1:A:215:LEU:HD13	1.82	0.45
1:A:220:GLU:HG3	2:B:186:TRP:HZ2	1.75	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:342:LEU:C	1:A:342:LEU:CD2	2.85	0.45
2:B:329:LEU:HD12	2:B:450:GLU:CD	2.37	0.45
1:A:55:LEU:HD12	1:A:528:MET:CG	2.47	0.45
1:A:81:ILE:O	1:A:81:ILE:CD1	2.41	0.45
1:A:334:LYS:HG2	1:A:334:LYS:O	2.16	0.45
1:A:481:LEU:HD12	1:A:624:ALA:HB2	1.99	0.45
1:A:634:ILE:CB	1:A:688:GLU:CB	2.93	0.45
1:A:910:LEU:O	1:A:911:TYR:CG	2.70	0.45
2:B:251:LEU:HD23	2:B:305:LEU:HD12	1.98	0.45
2:B:449:ASN:HB3	2:B:452:ALA:HB2	1.98	0.45
2:B:648:VAL:O	2:B:805:HIS:HB2	2.17	0.45
2:B:658:THR:HG21	2:B:695:VAL:CG2	2.44	0.45
2:B:737:TYR:HD1	2:B:738:ASP:H	1.64	0.45
1:A:22:ALA:CB	1:A:140:LEU:HD11	2.47	0.45
1:A:108:VAL:HG12	1:A:468:THR:HB	1.99	0.45
1:A:208:HIS:CE1	1:A:217:GLU:OE1	2.69	0.45
1:A:461:ILE:HG22	1:A:465:VAL:HG22	1.97	0.45
1:A:910:LEU:O	1:A:911:TYR:CD1	2.70	0.45
2:B:39:GLY:H	2:B:62:VAL:HG23	1.82	0.45
2:B:346:THR:HG22	2:B:364:MET:HG2	1.97	0.45
2:B:526:PHE:O	2:B:526:PHE:CD1	2.70	0.45
1:A:55:LEU:HD22	1:A:528:MET:HE1	1.99	0.45
1:A:105:TRP:CG	1:A:471:ARG:NH1	2.63	0.45
1:A:526:GLY:O	1:A:530:SER:HB3	2.17	0.45
1:A:623:LEU:N	1:A:623:LEU:CD2	2.77	0.45
1:A:805:ILE:CG2	1:A:806:PRO:N	2.80	0.45
1:A:961:LEU:HD21	2:B:286:THR:HG21	1.99	0.45
2:B:195:VAL:HG22	2:B:984:ILE:HG21	1.98	0.45
2:B:349:LYS:HA	2:B:350:PRO:HD3	1.77	0.45
2:B:518:GLN:HB3	2:B:584:ALA:HB1	1.98	0.45
2:B:844:THR:HG22	2:B:908:VAL:O	2.16	0.45
1:A:52:THR:OG1	1:A:601:MET:HE1	2.17	0.44
1:A:576:LEU:HB2	1:A:614:ALA:CB	2.42	0.44
2:B:122:CYS:HB2	2:B:939:MET:CE	2.47	0.44
2:B:547:ALA:C	2:B:548:ASN:O	2.52	0.44
2:B:602:VAL:HG11	2:B:615:MET:CE	2.47	0.44
2:B:729:ARG:CD	2:B:754:TYR:CE1	2.99	0.44
1:A:102:TRP:CZ2	1:A:804:TYR:CE2	3.05	0.44
1:A:170:LEU:CD1	1:A:171:ALA:N	2.73	0.44
1:A:297:ARG:HH11	1:A:297:ARG:CG	2.31	0.44
1:A:371:LEU:HD11	1:A:419:LEU:CD1	2.47	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:689:ARG:HG3	1:A:689:ARG:NH1	2.32	0.44
1:A:944:MET:HG2	1:A:945:PRO:HD2	1.99	0.44
2:B:112:THR:N	2:B:119:TYR:O	2.50	0.44
2:B:253:HIS:CD2	2:B:253:HIS:O	2.70	0.44
2:B:436:VAL:HG12	2:B:584:ALA:HB2	1.98	0.44
2:B:741:ILE:O	2:B:741:ILE:HG22	2.17	0.44
2:B:769:ASN:ND2	2:B:769:ASN:N	2.65	0.44
1:A:78:ALA:O	1:A:856:THR:CB	2.65	0.44
1:A:310:LEU:HD22	1:A:329:HIS:HB2	1.99	0.44
1:A:432:THR:CG2	1:A:433:LYS:H	2.24	0.44
1:A:645:ALA:O	1:A:649:HIS:CA	2.66	0.44
1:A:762:ARG:HG3	1:A:762:ARG:NH1	2.31	0.44
1:A:788:ILE:HG22	1:A:798:ALA:HB2	1.98	0.44
1:A:965:ARG:HD2	1:A:965:ARG:C	2.38	0.44
2:B:78:LEU:CD2	2:B:180:LEU:HD21	2.34	0.44
2:B:263:LEU:HA	2:B:268:ALA:HA	1.99	0.44
2:B:319:THR:CG2	2:B:343:LEU:HD13	2.47	0.44
1:A:189:ARG:HG3	1:A:189:ARG:HH21	1.82	0.44
1:A:237:ALA:O	1:A:245:ILE:HA	2.17	0.44
1:A:422:ILE:HG22	1:A:423:GLY:N	2.32	0.44
2:B:240:ASP:C	2:B:241:SER:HG	2.00	0.44
2:B:284:MET:O	2:B:285:GLU:HG3	2.17	0.44
2:B:292:ARG:O	2:B:300:VAL:N	2.50	0.44
2:B:442:PRO:CD	2:B:576:TYR:CE1	2.98	0.44
1:A:20:HIS:CD2	1:A:20:HIS:O	2.70	0.44
1:A:433:LYS:CG	1:A:513:GLY:O	2.65	0.44
1:A:795:ALA:O	1:A:796:SER:CB	2.62	0.44
1:A:843:ARG:HD2	1:A:843:ARG:HA	1.75	0.44
1:A:876:VAL:CG2	2:B:523:HIS:NE2	2.73	0.44
1:A:957:PHE:CD1	1:A:958:THR:N	2.85	0.44
2:B:506:PRO:HG2	2:B:506:PRO:O	2.17	0.44
2:B:669:GLU:HG3	2:B:730:ARG:HE	1.83	0.44
2:B:838:ARG:NH1	2:B:838:ARG:CG	2.73	0.44
1:A:77:LEU:HA	1:A:858:GLY:HA2	1.98	0.44
1:A:79:GLU:N	1:A:856:THR:CG2	2.54	0.44
1:A:110:LEU:CD2	1:A:465:VAL:HG12	2.48	0.44
1:A:119:ILE:HD13	1:A:406:VAL:HG22	1.98	0.44
1:A:492:VAL:HG11	1:A:495:VAL:HG13	2.00	0.44
1:A:508:SER:HB2	2:B:992:TYR:CE1	2.53	0.44
1:A:635:GLY:CA	1:A:640:MET:HE1	2.20	0.44
1:A:660:ASN:ND2	1:A:661:GLU:N	2.60	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:221:HIS:CE1	2:B:405:ALA:HA	2.53	0.44
2:B:732:TRP:O	2:B:732:TRP:CE3	2.70	0.44
2:B:990:HIS:HB2	2:B:992:TYR:HE1	1.80	0.44
1:A:298:VAL:HG11	1:A:300:TYR:CE1	2.53	0.44
1:A:367:ILE:CG1	1:A:415:GLN:HE22	2.05	0.44
1:A:367:ILE:HD13	1:A:415:GLN:HG2	1.97	0.44
1:A:968:MET:CE	2:B:659:ILE:HD13	2.42	0.44
2:B:751:ARG:C	2:B:753:PRO:CD	2.86	0.44
1:A:411:TYR:CE2	1:A:417:LEU:HD11	2.53	0.44
1:A:481:LEU:H	1:A:481:LEU:CD1	2.30	0.44
1:A:525:LEU:CG	1:A:608:LEU:HD12	2.42	0.44
1:A:634:ILE:HD11	1:A:718:ARG:HH22	1.73	0.44
2:B:623:ILE:CB	2:B:893:ILE:HD11	2.47	0.44
1:A:125:MET:HE2	1:A:186:ASN:HD22	1.80	0.44
1:A:240:LYS:N	1:A:240:LYS:CD	2.73	0.44
1:A:367:ILE:HG21	1:A:496:GLN:HE21	1.82	0.44
1:A:535:CYS:SG	1:A:536:GLU:N	2.91	0.44
1:A:593:LYS:O	1:A:596:ALA:HB3	2.16	0.44
1:A:637:SER:O	1:A:639:GLN:N	2.51	0.44
1:A:762:ARG:HH11	1:A:762:ARG:CG	2.31	0.44
1:A:878:GLU:O	1:A:914:GLY:O	2.36	0.44
1:A:957:PHE:CE2	2:B:279:TYR:CE1	3.00	0.44
2:B:577:TYR:CD1	2:B:577:TYR:O	2.70	0.44
1:A:432:THR:C	1:A:435:GLN:HB2	2.36	0.43
1:A:668:PHE:HD1	1:A:668:PHE:H	1.66	0.43
1:A:690:TRP:O	1:A:690:TRP:CG	2.70	0.43
2:B:706:SER:O	2:B:710:HIS:HB2	2.18	0.43
2:B:875:ALA:HB1	2:B:911:ILE:HD11	2.00	0.43
1:A:88:THR:CG2	1:A:90:MET:H	2.09	0.43
1:A:248:VAL:HB	1:A:249:PRO:CD	2.35	0.43
1:A:556:HIS:CE1	1:A:626:ILE:HD11	2.53	0.43
1:A:888:TYR:OH	2:B:504:ALA:CB	2.66	0.43
1:A:972:GLU:C	2:B:798:GLY:H	2.20	0.43
2:B:102:VAL:HG13	2:B:489:VAL:HG22	2.00	0.43
2:B:588:PHE:HA	2:B:808:GLY:O	2.18	0.43
1:A:51:LEU:HD13	1:A:51:LEU:N	2.32	0.43
1:A:429:ALA:O	1:A:430:THR:C	2.55	0.43
1:A:532:ALA:CB	1:A:597:VAL:CG2	2.81	0.43
1:A:806:PRO:O	1:A:809:ALA:HB3	2.17	0.43
1:A:943:ARG:HH21	2:B:895:GLY:HA2	1.83	0.43
2:B:120:LEU:HD12	2:B:152:VAL:CB	2.42	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:197:PRO:HG2	2:B:456:VAL:O	2.18	0.43
2:B:197:PRO:CD	2:B:457:TRP:HA	2.48	0.43
2:B:198:MET:CE	2:B:459:VAL:HA	2.48	0.43
2:B:446:ARG:NH1	2:B:446:ARG:CG	2.73	0.43
2:B:515:THR:OG1	2:B:516:ARG:N	2.50	0.43
2:B:576:TYR:CD1	2:B:576:TYR:O	2.71	0.43
2:B:712:PHE:CE2	2:B:777:ILE:HD13	2.53	0.43
1:A:72:ARG:CZ	1:A:863:VAL:HG11	2.47	0.43
1:A:203:ASN:HB3	1:A:519:LEU:HD12	2.00	0.43
1:A:238:HIS:HE1	1:A:334:LYS:HG2	1.78	0.43
1:A:558:VAL:HG12	1:A:562:LEU:HD21	2.00	0.43
1:A:876:VAL:HG12	1:A:877:SER:N	2.32	0.43
1:A:968:MET:O	1:A:971:ARG:CA	2.67	0.43
2:B:281:ALA:HB1	2:B:287:THR:OG1	2.19	0.43
2:B:397:LEU:HD23	2:B:397:LEU:C	2.38	0.43
2:B:497:ALA:HB3	2:B:557:LEU:HD22	2.01	0.43
1:A:125:MET:HE1	1:A:186:ASN:ND2	2.33	0.43
1:A:274:VAL:HG22	1:A:274:VAL:O	2.18	0.43
1:A:286:ASP:CG	1:A:287:GLY:N	2.71	0.43
1:A:353:MET:O	1:A:354:SER:C	2.56	0.43
1:A:551:ARG:HB3	1:A:552:PHE:H	1.59	0.43
1:A:587:GLU:HB3	1:A:618:PHE:HB3	2.01	0.43
1:A:608:LEU:HG	1:A:608:LEU:O	2.19	0.43
1:A:639:GLN:N	1:A:639:GLN:NE2	2.60	0.43
2:B:351:LYS:HD2	2:B:366:GLU:OE1	2.18	0.43
2:B:500:GLN:HA	2:B:500:GLN:HE21	1.78	0.43
2:B:578:PHE:CD1	2:B:578:PHE:N	2.85	0.43
2:B:597:LEU:HD22	2:B:622:LEU:CB	2.47	0.43
2:B:702:LEU:HD22	2:B:712:PHE:CE1	2.54	0.43
1:A:56:ILE:HD13	1:A:56:ILE:HA	1.64	0.43
1:A:290:GLN:OE1	1:A:291:ASN:N	2.52	0.43
1:A:305:ASP:HB2	2:B:710:HIS:NE2	2.33	0.43
1:A:429:ALA:O	1:A:430:THR:CG2	2.65	0.43
1:A:520:THR:HG23	1:A:521:ALA:N	2.34	0.43
1:A:704:ILE:HA	1:A:707:ILE:HD13	1.93	0.43
1:A:832:GLY:O	1:A:875:THR:HB	2.18	0.43
1:A:969:GLU:C	1:A:971:ARG:N	2.71	0.43
2:B:332:PRO:CG	2:B:399:PHE:CE1	2.97	0.43
2:B:526:PHE:O	2:B:530:THR:HG23	2.18	0.43
2:B:622:LEU:O	2:B:623:ILE:HG13	2.19	0.43
1:A:167:MET:C	1:A:167:MET:SD	2.97	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:236:CYS:HB2	1:A:340:VAL:CG2	2.49	0.43
1:A:268:GLU:OE1	1:A:702:LYS:HE3	2.19	0.43
1:A:351:HIS:ND1	1:A:351:HIS:C	2.72	0.43
1:A:583:HIS:CE1	1:A:618:PHE:HE2	2.37	0.43
2:B:74:MET:CE	2:B:984:ILE:CD1	2.97	0.43
2:B:428:CYS:SG	2:B:818:HIS:HD2	2.39	0.43
1:A:39:ILE:HA	1:A:507:VAL:HG13	2.00	0.43
1:A:96:TYR:CE2	1:A:834:MET:HB2	2.53	0.43
1:A:342:LEU:CD2	1:A:343:THR:N	2.76	0.43
1:A:444:MET:CB	1:A:449:ILE:HG21	2.43	0.43
1:A:518:LEU:HD23	1:A:518:LEU:C	2.39	0.43
1:A:638:ARG:NH2	1:A:638:ARG:CG	2.73	0.43
1:A:671:LEU:N	1:A:672:PRO:CD	2.82	0.43
1:A:906:ALA:C	1:A:907:VAL:HG13	2.39	0.43
1:A:926:THR:O	1:A:926:THR:HG23	2.19	0.43
2:B:123:ASN:HD21	2:B:149:GLN:HB3	1.67	0.43
1:A:38:ASN:C	1:A:38:ASN:ND2	2.72	0.43
1:A:217:GLU:O	1:A:218:LEU:CD2	2.63	0.43
1:A:351:HIS:C	1:A:351:HIS:HD1	2.22	0.43
1:A:440:THR:O	1:A:440:THR:HG22	2.18	0.43
1:A:664:CYS:N	1:A:737:GLY:O	2.49	0.43
1:A:757:HIS:CD2	1:A:758:THR:H	2.35	0.43
1:A:883:LEU:HD12	2:B:634:THR:OG1	2.19	0.43
2:B:32:LYS:HG3	2:B:32:LYS:O	2.19	0.43
2:B:122:CYS:CB	2:B:939:MET:HE2	2.49	0.43
2:B:129:ILE:HB	2:B:934:SER:O	2.19	0.43
2:B:198:MET:HG3	2:B:204:GLN:NE2	2.25	0.43
2:B:375:VAL:O	2:B:376:ASN:HB2	2.18	0.43
2:B:726:SER:CB	2:B:727:PRO:CD	2.96	0.43
1:A:35:ALA:O	1:A:41:ALA:O	2.37	0.43
1:A:58:GLN:NE2	1:A:58:GLN:CA	2.72	0.43
1:A:191:PHE:O	1:A:194:GLY:N	2.52	0.43
1:A:211:VAL:HG23	1:A:212:ASN:N	2.34	0.43
1:A:442:ALA:CB	1:A:509:VAL:HG11	2.49	0.43
1:A:481:LEU:HD11	1:A:624:ALA:CB	2.46	0.43
1:A:490:PHE:O	1:A:491:LEU:O	2.37	0.43
1:A:511:ASP:O	1:A:512:MET:HG3	2.19	0.43
1:A:669:ILE:O	1:A:669:ILE:HG22	2.19	0.43
1:A:738:CYS:O	1:A:739:ALA:C	2.56	0.43
1:A:948:PHE:HB2	2:B:149:GLN:HE22	1.80	0.43
2:B:329:LEU:CG	2:B:450:GLU:CD	2.88	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:838:ARG:NH2	2:B:932:SER:HB2	2.28	0.43
1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:HD22	2.33	0.42
1:A:209:GLY:HA3	1:A:218:LEU:HD21	2.00	0.42
1:A:262:ARG:HH21	1:A:401:GLY:HA2	1.73	0.42
1:A:445:ARG:NH1	1:A:445:ARG:HG3	2.34	0.42
1:A:587:GLU:HG2	1:A:619:VAL:O	2.18	0.42
1:A:607:ARG:H	1:A:607:ARG:HG2	1.55	0.42
2:B:620:PRO:O	2:B:893:ILE:O	2.37	0.42
1:A:69:GLU:OE2	1:A:206:ARG:HG3	2.19	0.42
1:A:467:GLN:HA	1:A:467:GLN:NE2	2.34	0.42
1:A:576:LEU:HA	1:A:576:LEU:HD23	1.83	0.42
1:A:627:ARG:CZ	1:A:738:CYS:SG	3.03	0.42
1:A:687:THR:O	1:A:728:ARG:HA	2.19	0.42
1:A:847:ALA:O	1:A:848:SER:HB2	2.18	0.42
1:A:929:GLN:H	1:A:929:GLN:HG2	1.50	0.42
1:A:970:LEU:O	1:A:971:ARG:CB	2.66	0.42
2:B:245:ARG:O	2:B:387:VAL:HG12	2.19	0.42
2:B:266:HIS:NE2	2:B:619:GLU:HG2	2.34	0.42
2:B:383:HIS:O	2:B:385:ASP:N	2.51	0.42
2:B:442:PRO:CG	2:B:576:TYR:CZ	3.00	0.42
2:B:514:THR:O	2:B:517:LEU:HB3	2.19	0.42
1:A:42:GLY:HA2	1:A:445:ARG:NH2	2.35	0.42
1:A:42:GLY:HA3	1:A:445:ARG:HH22	1.81	0.42
1:A:66:LEU:HD13	1:A:519:LEU:CD2	2.49	0.42
1:A:68:PHE:CZ	1:A:862:HIS:CE1	3.08	0.42
1:A:368:VAL:HG22	1:A:418:PHE:CB	2.38	0.42
1:A:432:THR:C	1:A:435:GLN:H	2.22	0.42
1:A:508:SER:HB2	2:B:992:TYR:CE2	2.53	0.42
1:A:590:PHE:CE2	1:A:619:VAL:HG11	2.55	0.42
1:A:810:MET:HE2	1:A:810:MET:HB2	1.65	0.42
1:A:961:LEU:HD13	2:B:284:MET:HB3	2.00	0.42
1:A:96:TYR:CZ	1:A:834:MET:HB2	2.55	0.42
1:A:202:HIS:ND1	1:A:202:HIS:C	2.72	0.42
1:A:234:LEU:HD21	1:A:266:PHE:CZ	2.42	0.42
1:A:421:GLY:O	1:A:422:ILE:CD1	2.57	0.42
1:A:671:LEU:N	1:A:686:GLY:O	2.48	0.42
2:B:433:TRP:CZ2	2:B:517:LEU:HD22	2.54	0.42
2:B:676:TRP:CH2	2:B:680:LYS:HE2	2.54	0.42
2:B:828:ALA:HB1	2:B:865:GLN:HE21	1.84	0.42
1:A:42:GLY:O	1:A:43:GLY:C	2.57	0.42
1:A:199:MET:HG2	1:A:435:GLN:NE2	2.34	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:307:MET:C	1:A:309:TRP:HD1	2.14	0.42
1:A:447:TYR:O	1:A:448:ASP:HB2	2.19	0.42
2:B:56:ARG:NH2	2:B:485:GLN:NE2	2.68	0.42
2:B:172:SER:H	2:B:175:ALA:HB3	1.85	0.42
1:A:55:LEU:CD1	1:A:528:MET:CG	2.97	0.42
1:A:206:ARG:NH1	1:A:217:GLU:OE1	2.53	0.42
1:A:488:SER:HB2	1:A:489:PRO:HD2	2.02	0.42
1:A:752:LYS:O	1:A:753:VAL:CG1	2.68	0.42
2:B:307:LYS:CG	2:B:311:ARG:HH22	2.32	0.42
2:B:312:SER:HB3	2:B:778:TRP:CD1	2.55	0.42
2:B:320:GLU:HG2	2:B:370:GLY:HA3	2.00	0.42
2:B:346:THR:O	2:B:346:THR:OG1	2.35	0.42
1:A:43:GLY:N	1:A:445:ARG:HH22	2.17	0.42
1:A:422:ILE:C	1:A:423:GLY:O	2.54	0.42
1:A:432:THR:HA	1:A:435:GLN:HB2	2.02	0.42
1:A:508:SER:HB2	2:B:992:TYR:CZ	2.55	0.42
1:A:597:VAL:HG12	1:A:748:ALA:HB2	2.01	0.42
1:A:861:ARG:CZ	2:B:547:ALA:CB	2.97	0.42
1:A:972:GLU:H	1:A:972:GLU:HG3	1.49	0.42
2:B:217:GLY:N	2:B:448:MET:HB3	2.34	0.42
2:B:855:ASP:O	2:B:856:LEU:HB2	2.19	0.42
1:A:555:VAL:HG22	1:A:555:VAL:O	2.19	0.42
1:A:581:VAL:O	1:A:581:VAL:HG22	2.19	0.42
1:A:668:PHE:N	1:A:668:PHE:CD1	2.88	0.42
1:A:757:HIS:HD2	1:A:758:THR:HG23	1.84	0.42
1:A:789:ARG:HH12	1:A:816:THR:HG22	1.85	0.42
2:B:89:ASP:CA	2:B:410:GLN:NE2	2.71	0.42
2:B:253:HIS:O	2:B:253:HIS:HD2	2.03	0.42
2:B:347:TRP:O	2:B:350:PRO:HD3	2.19	0.42
1:A:18:ILE:HG12	1:A:18:ILE:H	1.65	0.42
1:A:77:LEU:CD2	1:A:742:MET:HE1	2.50	0.42
1:A:111:ASN:HB2	1:A:467:GLN:CG	2.50	0.42
1:A:218:LEU:N	1:A:218:LEU:CD2	2.81	0.42
1:A:219:GLY:O	1:A:221:ASN:N	2.53	0.42
1:A:375:GLU:O	1:A:377:LEU:HD23	2.20	0.42
1:A:453:THR:CG2	1:A:454:CYS:N	2.83	0.42
1:A:589:LEU:N	1:A:592:GLN:HE21	2.17	0.42
2:B:94:LEU:HD13	2:B:102:VAL:HG21	2.01	0.42
1:A:96:TYR:O	1:A:96:TYR:CG	2.70	0.42
1:A:128:GLY:HA2	1:A:188:CYS:HB2	2.02	0.42
1:A:201:MET:HG2	1:A:400:PHE:CE1	2.55	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:20:HIS:O	1:A:20:HIS:HD2	2.03	0.41
1:A:63:VAL:CG2	1:A:68:PHE:HE2	2.33	0.41
1:A:68:PHE:CZ	1:A:862:HIS:HE1	2.38	0.41
1:A:285:ILE:HG21	1:A:395:PHE:CD2	2.55	0.41
1:A:481:LEU:HD21	1:A:533:HIS:CE1	2.55	0.41
1:A:589:LEU:O	1:A:592:GLN:HB2	2.20	0.41
1:A:601:MET:HB3	1:A:609:TYR:HB2	2.01	0.41
1:A:607:ARG:O	1:A:608:LEU:C	2.57	0.41
1:A:671:LEU:HB2	1:A:685:ILE:CG2	2.46	0.41
1:A:692:ALA:CB	1:A:721:VAL:HB	2.50	0.41
1:A:806:PRO:HG2	1:A:809:ALA:HB2	2.02	0.41
2:B:89:ASP:OD2	2:B:410:GLN:OE1	2.34	0.41
2:B:191:THR:O	2:B:192:VAL:HG23	2.19	0.41
2:B:294:ASP:CG	2:B:295:TYR:H	2.22	0.41
2:B:509:ILE:CG2	2:B:512:GLY:CA	2.90	0.41
2:B:857:VAL:O	2:B:858:PRO:O	2.38	0.41
1:A:225:THR:O	1:A:227:ASP:N	2.53	0.41
1:A:815:ILE:O	1:A:816:THR:CG2	2.68	0.41
1:A:883:LEU:O	1:A:884:ALA:HB3	2.20	0.41
1:A:890:ARG:NH1	2:B:903:THR:O	2.51	0.41
2:B:77:LEU:N	2:B:77:LEU:CD1	2.82	0.41
2:B:156:PRO:HG2	2:B:356:GLY:C	2.40	0.41
2:B:231:ILE:HG12	2:B:393:LEU:CD2	2.50	0.41
2:B:329:LEU:HD23	2:B:404:MET:HE1	2.02	0.41
2:B:509:ILE:HD12	2:B:813:ILE:HD11	2.02	0.41
2:B:576:TYR:HD1	2:B:576:TYR:O	2.04	0.41
2:B:596:THR:HG22	2:B:647:LEU:CD1	2.50	0.41
1:A:14:THR:O	1:A:18:ILE:CG1	2.59	0.41
1:A:69:GLU:OE2	1:A:206:ARG:CD	2.68	0.41
1:A:211:VAL:O	1:A:212:ASN:HB2	2.20	0.41
1:A:445:ARG:CG	1:A:445:ARG:HH11	2.33	0.41
1:A:908:PRO:HB3	2:B:524:HIS:ND1	2.35	0.41
1:A:952:THR:HG21	2:B:115:ALA:HB1	2.01	0.41
2:B:89:ASP:HB3	2:B:410:GLN:HE22	1.85	0.41
2:B:334:CYS:SG	2:B:468:MET:HE2	2.54	0.41
2:B:638:GLU:HA	2:B:885:ASN:HD21	1.85	0.41
1:A:128:GLY:O	1:A:449:ILE:HD12	2.20	0.41
1:A:445:ARG:NH1	1:A:445:ARG:CG	2.79	0.41
2:B:262:MET:HG2	2:B:430:ALA:HA	2.02	0.41
2:B:672:ASN:HB2	2:B:754:TYR:CE2	2.55	0.41
1:A:10:ASN:ND2	1:A:10:ASN:C	2.73	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:17:ASN:ND2	1:A:17:ASN:C	2.72	0.41
1:A:40:GLN:HG2	1:A:45:ASP:HA	2.02	0.41
1:A:121:SER:HB3	1:A:185:ASN:HB2	2.02	0.41
1:A:125:MET:HE2	1:A:186:ASN:ND2	2.34	0.41
1:A:284:LYS:HD2	1:A:329:HIS:HD1	1.85	0.41
1:A:402:VAL:O	1:A:406:VAL:HG23	2.21	0.41
1:A:455:HIS:CB	1:A:615:TYR:CE2	3.04	0.41
1:A:664:CYS:SG	1:A:737:GLY:CA	2.97	0.41
1:A:807:MET:HE2	1:A:807:MET:CA	2.43	0.41
1:A:882:GLY:O	1:A:883:LEU:HD23	2.17	0.41
1:A:917:MET:HB2	2:B:632:THR:CG2	2.50	0.41
2:B:165:THR:CA	2:B:546:MET:CE	2.61	0.41
2:B:247:ARG:NH2	2:B:347:TRP:NE1	2.48	0.41
1:A:119:ILE:HD13	1:A:406:VAL:HA	2.02	0.41
1:A:392:HIS:HB3	1:A:393:HIS:H	1.69	0.41
1:A:762:ARG:CD	1:A:815:ILE:HD13	2.50	0.41
1:A:807:MET:O	1:A:810:MET:CA	2.69	0.41
1:A:873:ILE:H	1:A:873:ILE:CD1	2.15	0.41
2:B:294:ASP:CG	2:B:295:TYR:N	2.74	0.41
2:B:566:MET:O	2:B:566:MET:SD	2.79	0.41
1:A:68:PHE:HZ	1:A:862:HIS:CE1	2.39	0.41
1:A:208:HIS:CE1	1:A:217:GLU:OE2	2.74	0.41
1:A:309:TRP:CZ3	1:A:343:THR:HG23	2.55	0.41
1:A:353:MET:HE1	1:A:385:LEU:CB	2.50	0.41
1:A:386:ALA:O	1:A:407:HIS:CD2	2.74	0.41
1:A:472:ASP:CB	1:A:739:ALA:CB	2.99	0.41
1:A:598:TRP:O	1:A:600:SER:CA	2.62	0.41
2:B:155:GLU:CG	2:B:156:PRO:HD2	2.50	0.41
2:B:263:LEU:C	2:B:263:LEU:CD2	2.85	0.41
2:B:336:ALA:O	2:B:337:GLY:C	2.58	0.41
2:B:385:ASP:OD1	2:B:385:ASP:N	2.53	0.41
2:B:648:VAL:HG22	2:B:809:GLU:CG	2.51	0.41
2:B:648:VAL:HG22	2:B:809:GLU:HG3	2.02	0.41
1:A:43:GLY:H	1:A:445:ARG:HH12	1.68	0.41
1:A:527:ALA:O	1:A:531:LEU:HB2	2.20	0.41
1:A:820:CYS:O	1:A:820:CYS:SG	2.78	0.41
2:B:198:MET:C	2:B:204:GLN:HE21	2.24	0.41
2:B:397:LEU:HD13	2:B:480:LEU:CD1	2.50	0.41
1:A:29:MET:HE2	1:A:29:MET:HB3	1.78	0.41
1:A:114:LYS:HE3	1:A:116:HIS:CE1	2.55	0.41
1:A:231:THR:HG23	1:A:309:TRP:HZ3	1.85	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:353:MET:O	1:A:355:THR:N	2.53	0.41
1:A:384:LEU:HD12	1:A:439:ALA:O	2.20	0.41
1:A:452:ARG:O	1:A:452:ARG:HD3	2.21	0.41
1:A:750:GLU:C	1:A:751:HIS:ND1	2.73	0.41
1:A:771:ILE:HG23	1:A:822:LEU:HB3	2.03	0.41
1:A:830:ARG:O	1:A:836:THR:HG23	2.21	0.41
1:A:880:VAL:HG21	2:B:508:GLY:HA3	2.01	0.41
1:A:917:MET:HE1	2:B:511:ASP:OD1	2.20	0.41
1:A:951:GLY:O	1:A:952:THR:HG22	2.21	0.41
2:B:129:ILE:O	2:B:933:VAL:HG13	2.19	0.41
2:B:247:ARG:HD2	2:B:344:ALA:HA	2.03	0.41
2:B:314:GLY:HA2	2:B:762:SER:OG	2.21	0.41
2:B:615:MET:HG2	2:B:615:MET:H	1.59	0.41
2:B:648:VAL:CG1	2:B:653:VAL:HG23	2.51	0.41
1:A:632:ARG:O	1:A:726:TYR:HE1	2.04	0.41
2:B:7:GLN:OE1	2:B:77:LEU:HD11	2.21	0.41
2:B:999:LEU:O	2:B:1000:ALA:CB	2.59	0.41
1:A:334:LYS:CG	1:A:334:LYS:O	2.69	0.40
1:A:369:TYR:HE1	1:A:417:LEU:HD23	1.86	0.40
1:A:430:THR:O	1:A:430:THR:OG1	2.21	0.40
1:A:789:ARG:NH1	1:A:816:THR:HG22	2.36	0.40
2:B:155:GLU:HG2	2:B:156:PRO:HD2	2.04	0.40
2:B:815:VAL:HG11	2:B:894:LEU:HD21	2.03	0.40
1:A:347:LYS:NZ	1:A:347:LYS:HB2	2.37	0.40
1:A:562:LEU:HD13	1:A:562:LEU:HA	1.88	0.40
1:A:723:VAL:HG12	1:A:724:PHE:N	2.37	0.40
1:A:885:LEU:HD22	2:B:636:ASN:ND2	2.36	0.40
2:B:194:ILE:HG21	2:B:200:GLN:N	2.36	0.40
1:A:49:LEU:HD23	1:A:608:LEU:HD13	2.03	0.40
1:A:56:ILE:HG23	1:A:56:ILE:HD12	1.83	0.40
1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:OE1	2.69	0.40
1:A:106:LEU:HD12	1:A:106:LEU:HA	1.85	0.40
1:A:119:ILE:CD1	1:A:406:VAL:HG22	2.52	0.40
1:A:153:THR:OG1	2:B:1001:SER:O	2.40	0.40
1:A:249:PRO:HG2	1:A:252:TRP:CB	2.38	0.40
1:A:372:LYS:NZ	1:A:499:ASP:CG	2.73	0.40
1:A:702:LYS:NZ	1:A:702:LYS:HB3	2.35	0.40
1:A:921:ASP:HB3	2:B:626:ALA:HB1	1.97	0.40
1:A:925:VAL:O	1:A:926:THR:CB	2.69	0.40
2:B:254:GLN:H	2:B:254:GLN:NE2	2.18	0.40
2:B:355:ALA:CB	2:B:358:ALA:HB2	2.47	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:512:GLY:O	2:B:809:GLU:OE1	2.39	0.40
1:A:43:GLY:H	1:A:445:ARG:HH22	1.67	0.40
1:A:201:MET:CG	1:A:400:PHE:HE1	2.33	0.40
1:A:433:LYS:HG3	1:A:513:GLY:O	2.21	0.40
1:A:464:MET:SD	1:A:483:PHE:CE2	3.15	0.40
1:A:553:THR:O	1:A:554:ASP:CB	2.70	0.40
1:A:807:MET:C	1:A:810:MET:H	2.17	0.40
2:B:320:GLU:HG2	2:B:326:ARG:HG2	1.78	0.40
2:B:528:TYR:CD2	2:B:560:TRP:CZ2	3.08	0.40
2:B:676:TRP:HD1	2:B:754:TYR:HB2	1.73	0.40
2:B:701:TRP:CZ2	2:B:773:VAL:HG22	2.57	0.40
1:A:10:ASN:ND2	1:A:14:THR:OG1	2.53	0.40
1:A:127:PHE:CD1	1:A:452:ARG:CD	3.03	0.40
1:A:182:ILE:HG22	1:A:183:ALA:N	2.37	0.40
1:A:209:GLY:CA	1:A:218:LEU:HD21	2.51	0.40
1:A:577:ARG:CD	1:A:614:ALA:O	2.69	0.40
1:A:889:GLU:N	1:A:889:GLU:CD	2.72	0.40
2:B:165:THR:HG22	2:B:166:SER:O	2.21	0.40
2:B:216:SER:CB	2:B:448:MET:HA	2.52	0.40
2:B:287:THR:O	2:B:290:ARG:NH2	2.54	0.40
2:B:506:PRO:O	2:B:506:PRO:CG	2.70	0.40
2:B:563:GLY:O	2:B:564:SER:CB	2.69	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	970/1357 (72%)	894 (92%)	60 (6%)	16 (2%)	9	43
2	B	1001/1059 (94%)	874 (87%)	94 (9%)	33 (3%)	4	31
All	All	1971/2416 (82%)	1768 (90%)	154 (8%)	49 (2%)	9	35

All (49) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	477	SER
1	A	509	VAL
1	A	554	ASP
1	A	599	SER
1	A	619	VAL
1	A	649	HIS
1	A	793	SER
1	A	816	THR
2	B	109	PRO
2	B	115	ALA
2	B	750	GLU
2	B	752	HIS
2	B	853	ALA
2	B	858	PRO
2	B	859	PRO
2	B	918	GLY
2	B	973	LEU
2	B	984	ILE
2	B	988	VAL
2	B	1000	ALA
2	B	1004	ASP
1	A	971	ARG
2	B	190	SER
2	B	656	TYR
2	B	882	MET
2	B	963	GLN
2	B	60	PRO
2	B	727	PRO
2	B	883	GLY
1	A	501	ASN
1	A	643	ALA
1	A	815	ILE
1	A	883	LEU
2	B	382	PRO
2	B	447	PRO
2	B	884	GLY
2	B	982	ASN
2	B	544	THR
2	B	730	ARG
2	B	749	THR
2	B	954	ASN
2	B	983	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	814	PRO
2	B	350	PRO
1	A	671	LEU
2	B	620	PRO
1	A	247	PRO
2	B	653	VAL
2	B	689	ILE

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	774/1083 (72%)	486 (63%)	288 (37%)	0 0
2	B	800/833 (96%)	599 (75%)	201 (25%)	0 4
All	All	1574/1916 (82%)	1085 (69%)	489 (31%)	1 2

All (489) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	4	GLN
1	A	6	GLN
1	A	7	GLN
1	A	8	ARG
1	A	9	ASP
1	A	10	ASN
1	A	12	GLU
1	A	17	ASN
1	A	23	ARG
1	A	24	SER
1	A	26	LEU
1	A	27	LYS
1	A	34	LEU
1	A	38	ASN
1	A	39	ILE
1	A	46	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	49	LEU
1	A	51	LEU
1	A	52	THR
1	A	54	GLU
1	A	55	LEU
1	A	56	ILE
1	A	58	GLN
1	A	60	LEU
1	A	63	VAL
1	A	66	LEU
1	A	68	PHE
1	A	69	GLU
1	A	70	HIS
1	A	77	LEU
1	A	79	GLU
1	A	81	ILE
1	A	83	VAL
1	A	86	ASN
1	A	89	ASP
1	A	90	MET
1	A	93	SER
1	A	95	GLN
1	A	103	ARG
1	A	105	TRP
1	A	106	LEU
1	A	111	ASN
1	A	112	MET
1	A	114	LYS
1	A	117	VAL
1	A	118	ARG
1	A	120	ARG
1	A	121	SER
1	A	125	MET
1	A	126	ASP
1	A	131	ARG
1	A	132	MET
1	A	133	MET
1	A	135	CYS
1	A	136	ASP
1	A	140	LEU
1	A	143	SER
1	A	145	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	149	SER
1	A	150	ARG
1	A	156	THR
1	A	157	MET
1	A	160	VAL
1	A	162	ARG
1	A	163	GLU
1	A	164	MET
1	A	167	MET
1	A	170	LEU
1	A	175	SER
1	A	176	ARG
1	A	178	SER
1	A	179	GLN
1	A	188	CYS
1	A	189	ARG
1	A	196	LEU
1	A	198	ARG
1	A	199	MET
1	A	201	MET
1	A	211	VAL
1	A	214	ARG
1	A	217	GLU
1	A	220	GLU
1	A	228	THR
1	A	230	LEU
1	A	231	THR
1	A	238	HIS
1	A	240	LYS
1	A	243	VAL
1	A	246	THR
1	A	248	VAL
1	A	253	LEU
1	A	256	GLU
1	A	260	THR
1	A	262	ARG
1	A	264	ARG
1	A	267	SER
1	A	270	LEU
1	A	272	ARG
1	A	273	LEU
1	A	278	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	280	CYS
1	A	290	GLN
1	A	291	ASN
1	A	295	ASN
1	A	297	ARG
1	A	299	HIS
1	A	300	TYR
1	A	303	ARG
1	A	309	TRP
1	A	310	LEU
1	A	311	ASP
1	A	316	LEU
1	A	317	SER
1	A	328	GLU
1	A	329	HIS
1	A	330	TYR
1	A	332	LEU
1	A	338	SER
1	A	342	LEU
1	A	346	LEU
1	A	347	LYS
1	A	348	GLN
1	A	351	HIS
1	A	352	ARG
1	A	353	MET
1	A	359	THR
1	A	361	GLU
1	A	363	ARG
1	A	368	VAL
1	A	372	LYS
1	A	380	CYS
1	A	385	LEU
1	A	388	SER
1	A	389	ARG
1	A	396	LEU
1	A	405	ASP
1	A	407	HIS
1	A	411	TYR
1	A	414	ASN
1	A	415	GLN
1	A	419	LEU
1	A	422	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	425	ARG
1	A	426	MET
1	A	430	THR
1	A	433	LYS
1	A	435	GLN
1	A	436	LEU
1	A	438	THR
1	A	441	TYR
1	A	443	LEU
1	A	445	ARG
1	A	446	ARG
1	A	452	ARG
1	A	454	CYS
1	A	459	THR
1	A	472	ASP
1	A	475	ASN
1	A	481	LEU
1	A	486	ASN
1	A	487	LEU
1	A	490	PHE
1	A	491	LEU
1	A	497	PHE
1	A	504	GLU
1	A	509	VAL
1	A	514	ILE
1	A	516	LYS
1	A	517	GLU
1	A	518	LEU
1	A	525	LEU
1	A	528	MET
1	A	536	GLU
1	A	542	GLU
1	A	544	MET
1	A	547	ILE
1	A	551	ARG
1	A	552	PHE
1	A	553	THR
1	A	564	ARG
1	A	565	LYS
1	A	568	MET
1	A	569	THR
1	A	571	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	574	LEU
1	A	575	LYS
1	A	577	ARG
1	A	586	GLN
1	A	589	LEU
1	A	590	PHE
1	A	592	GLN
1	A	593	LYS
1	A	597	VAL
1	A	603	GLU
1	A	607	ARG
1	A	613	GLN
1	A	615	TYR
1	A	619	VAL
1	A	622	GLN
1	A	623	LEU
1	A	625	ARG
1	A	627	ARG
1	A	632	ARG
1	A	633	ASP
1	A	634	ILE
1	A	638	ARG
1	A	639	GLN
1	A	641	MET
1	A	642	ASP
1	A	646	LEU
1	A	648	LYS
1	A	649	HIS
1	A	651	GLN
1	A	660	ASN
1	A	662	SER
1	A	667	GLN
1	A	668	PHE
1	A	675	SER
1	A	677	ILE
1	A	688	GLU
1	A	689	ARG
1	A	691	PHE
1	A	702	LYS
1	A	706	GLU
1	A	708	ARG
1	A	710	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	715	SER
1	A	718	ARG
1	A	728	ARG
1	A	729	SER
1	A	730	THR
1	A	740	GLU
1	A	742	MET
1	A	745	MET
1	A	757	HIS
1	A	762	ARG
1	A	764	GLN
1	A	765	SER
1	A	768	THR
1	A	776	VAL
1	A	781	ASN
1	A	784	MET
1	A	788	ILE
1	A	800	HIS
1	A	801	LEU
1	A	802	ARG
1	A	810	MET
1	A	812	MET
1	A	819	ASP
1	A	828	ARG
1	A	830	ARG
1	A	834	MET
1	A	836	THR
1	A	842	ARG
1	A	843	ARG
1	A	849	ASP
1	A	853	ASP
1	A	856	THR
1	A	865	ARG
1	A	866	GLU
1	A	869	THR
1	A	873	ILE
1	A	878	GLU
1	A	879	ARG
1	A	881	SER
1	A	883	LEU
1	A	885	LEU
1	A	886	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	901	SER
1	A	902	MET
1	A	903	LEU
1	A	918	LYS
1	A	919	LEU
1	A	923	THR
1	A	926	THR
1	A	927	ASN
1	A	928	ARG
1	A	929	GLN
1	A	931	LEU
1	A	932	ARG
1	A	938	ARG
1	A	939	ASN
1	A	943	ARG
1	A	950	MET
1	A	955	CYS
1	A	965	ARG
1	A	968	MET
1	A	972	GLU
2	B	2	SER
2	B	5	SER
2	B	6	ASP
2	B	10	GLU
2	B	11	THR
2	B	15	THR
2	B	16	SER
2	B	29	VAL
2	B	32	LYS
2	B	34	THR
2	B	37	LEU
2	B	38	LYS
2	B	43	THR
2	B	47	GLU
2	B	51	LEU
2	B	55	LYS
2	B	56	ARG
2	B	58	GLU
2	B	59	VAL
2	B	64	LEU
2	B	66	ARG
2	B	74	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
2	B	75	MET
2	B	78	LEU
2	B	79	ARG
2	B	81	GLU
2	B	82	LYS
2	B	89	ASP
2	B	92	LEU
2	B	93	MET
2	B	95	GLN
2	B	110	GLN
2	B	111	MET
2	B	120	LEU
2	B	123	ASN
2	B	135	ASP
2	B	141	TYR
2	B	149	GLN
2	B	161	LEU
2	B	167	SER
2	B	169	GLN
2	B	172	SER
2	B	173	ASP
2	B	177	LEU
2	B	184	GLN
2	B	186	TRP
2	B	191	THR
2	B	195	VAL
2	B	198	MET
2	B	201	THR
2	B	204	GLN
2	B	214	ARG
2	B	216	SER
2	B	218	PHE
2	B	221	HIS
2	B	231	ILE
2	B	237	HIS
2	B	240	ASP
2	B	246	SER
2	B	248	ASP
2	B	253	HIS
2	B	255	THR
2	B	262	MET
2	B	263	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
2	B	267	ILE
2	B	273	TRP
2	B	278	THR
2	B	285	GLU
2	B	288	THR
2	B	310	LEU
2	B	313	ARG
2	B	315	THR
2	B	319	THR
2	B	326	ARG
2	B	327	TYR
2	B	328	LEU
2	B	334	CYS
2	B	343	LEU
2	B	347	TRP
2	B	349	LYS
2	B	364	MET
2	B	365	SER
2	B	366	GLU
2	B	373	THR
2	B	381	THR
2	B	390	ARG
2	B	391	GLU
2	B	393	LEU
2	B	403	HIS
2	B	404	MET
2	B	406	ASP
2	B	428	CYS
2	B	432	GLU
2	B	434	MET
2	B	435	ASN
2	B	443	LYS
2	B	446	ARG
2	B	448	MET
2	B	450	GLU
2	B	454	ARG
2	B	455	GLU
2	B	456	VAL
2	B	464	SER
2	B	467	GLN
2	B	468	MET
2	B	469	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
2	B	475	ASN
2	B	496	MET
2	B	500	GLN
2	B	503	LEU
2	B	511	ASP
2	B	513	ASP
2	B	514	THR
2	B	517	LEU
2	B	520	ASP
2	B	521	LEU
2	B	527	GLN
2	B	535	ASP
2	B	549	LYS
2	B	550	MET
2	B	551	VAL
2	B	554	VAL
2	B	557	LEU
2	B	560	TRP
2	B	564	SER
2	B	566	MET
2	B	568	SER
2	B	570	THR
2	B	588	PHE
2	B	589	TYR
2	B	591	THR
2	B	593	THR
2	B	595	ARG
2	B	603	ASP
2	B	606	HIS
2	B	622	LEU
2	B	627	THR
2	B	631	SER
2	B	632	THR
2	B	644	ASP
2	B	655	LEU
2	B	658	THR
2	B	666	LEU
2	B	676	TRP
2	B	681	THR
2	B	684	SER
2	B	686	HIS
2	B	688	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
2	B	694	GLU
2	B	706	SER
2	B	708	GLU
2	B	710	HIS
2	B	722	GLU
2	B	729	ARG
2	B	734	LEU
2	B	735	HIS
2	B	748	ASP
2	B	749	THR
2	B	754	TYR
2	B	760	THR
2	B	762	SER
2	B	763	GLU
2	B	765	ARG
2	B	770	ASP
2	B	776	ARG
2	B	779	LYS
2	B	787	GLN
2	B	788	LEU
2	B	794	GLN
2	B	795	GLU
2	B	799	ARG
2	B	801	GLN
2	B	806	TYR
2	B	807	PHE
2	B	813	ILE
2	B	815	VAL
2	B	818	HIS
2	B	835	ARG
2	B	838	ARG
2	B	843	CYS
2	B	844	THR
2	B	846	THR
2	B	852	GLU
2	B	856	LEU
2	B	860	MET
2	B	866	LEU
2	B	891	LEU
2	B	914	LEU
2	B	921	HIS
2	B	924	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
2	B	926	ILE
2	B	929	THR
2	B	930	ASN
2	B	943	GLU
2	B	948	PHE
2	B	963	GLN
2	B	970	TYR
2	B	979	LYS
2	B	992	TYR
2	B	999	LEU
2	B	1005	LYS

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (77) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	4	GLN
1	A	6	GLN
1	A	7	GLN
1	A	10	ASN
1	A	17	ASN
1	A	20	HIS
1	A	38	ASN
1	A	58	GLN
1	A	107	HIS
1	A	116	HIS
1	A	179	GLN
1	A	186	ASN
1	A	203	ASN
1	A	208	HIS
1	A	216	GLN
1	A	299	HIS
1	A	337	HIS
1	A	341	HIS
1	A	348	GLN
1	A	387	ASN
1	A	407	HIS
1	A	413	GLN
1	A	435	GLN
1	A	455	HIS
1	A	467	GLN
1	A	592	GLN
1	A	639	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	649	HIS
1	A	652	ASN
1	A	660	ASN
1	A	667	GLN
1	A	714	ASN
1	A	757	HIS
1	A	800	HIS
1	A	851	HIS
1	A	862	HIS
1	A	939	ASN
2	B	7	GLN
2	B	19	ASN
2	B	26	GLN
2	B	95	GLN
2	B	110	GLN
2	B	123	ASN
2	B	149	GLN
2	B	184	GLN
2	B	204	GLN
2	B	219	GLN
2	B	220	HIS
2	B	221	HIS
2	B	253	HIS
2	B	302	HIS
2	B	383	HIS
2	B	431	HIS
2	B	437	HIS
2	B	449	ASN
2	B	467	GLN
2	B	475	ASN
2	B	485	GLN
2	B	523	HIS
2	B	527	GLN
2	B	538	GLN
2	B	543	ASN
2	B	555	ASN
2	B	636	ASN
2	B	677	HIS
2	B	705	ASN
2	B	744	ASN
2	B	769	ASN
2	B	801	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
2	B	805	HIS
2	B	818	HIS
2	B	832	HIS
2	B	842	ASN
2	B	865	GLN
2	B	881	ASN
2	B	885	ASN
2	B	963	GLN

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](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	A	1

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	235:ALA	C	236:CYS	N	1.61

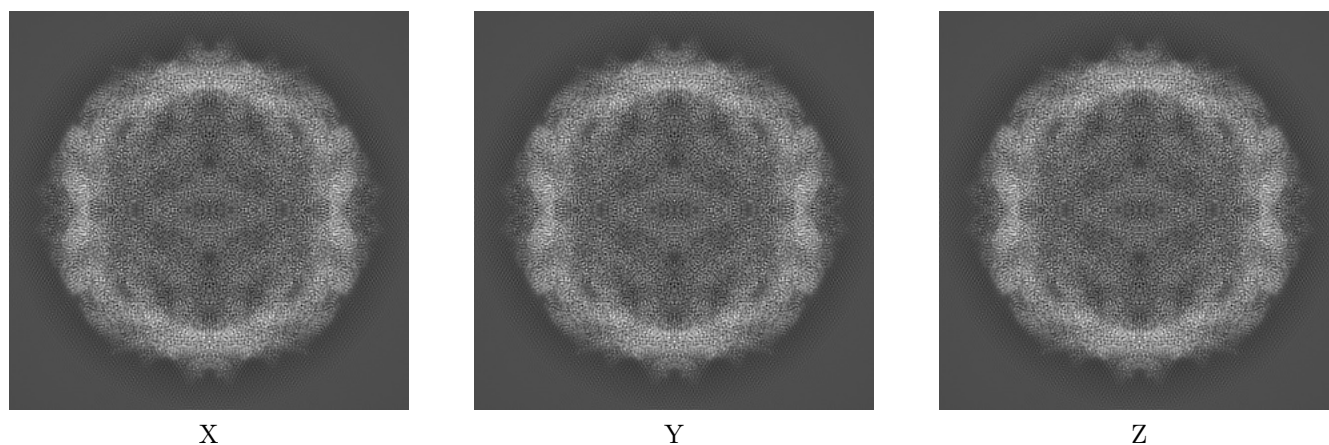
6 Map visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-3619. 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](#)

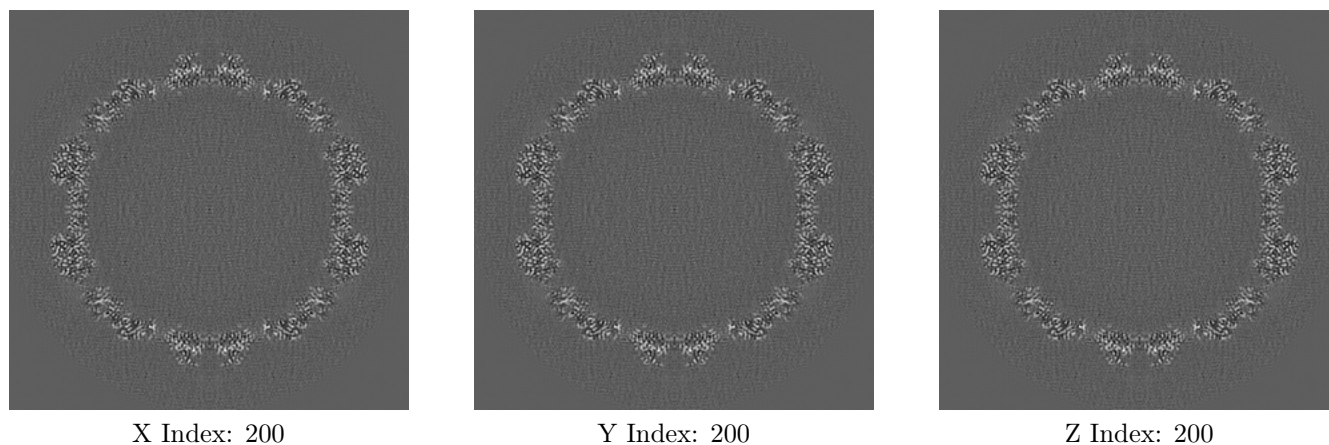
6.1.1 Primary map



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

6.2 Central slices [i](#)

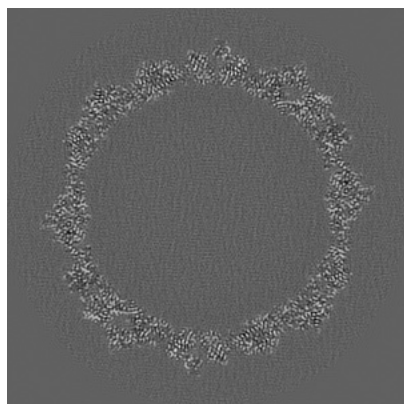
6.2.1 Primary map



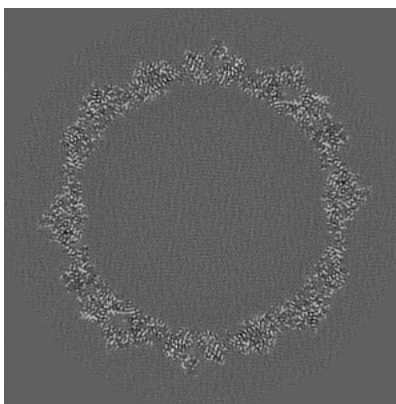
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

6.3 Largest variance slices [i](#)

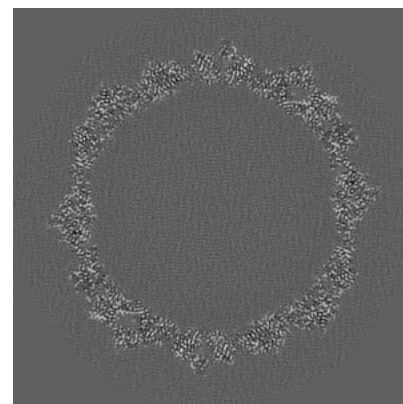
6.3.1 Primary map



X Index: 226



Y Index: 226

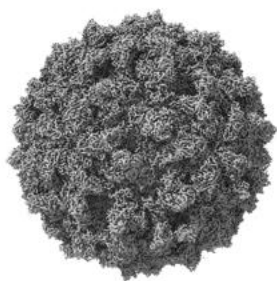


Z Index: 226

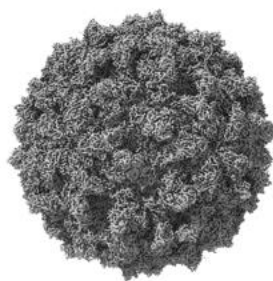
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

6.4 Orthogonal surface views [i](#)

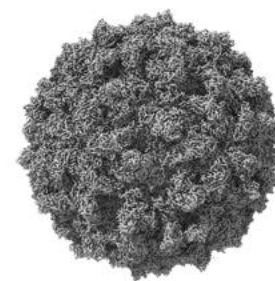
6.4.1 Primary map



X



Y



Z

The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.18. These images, in conjunction with the slice images, may facilitate assessment of whether an appropriate contour level has been provided.

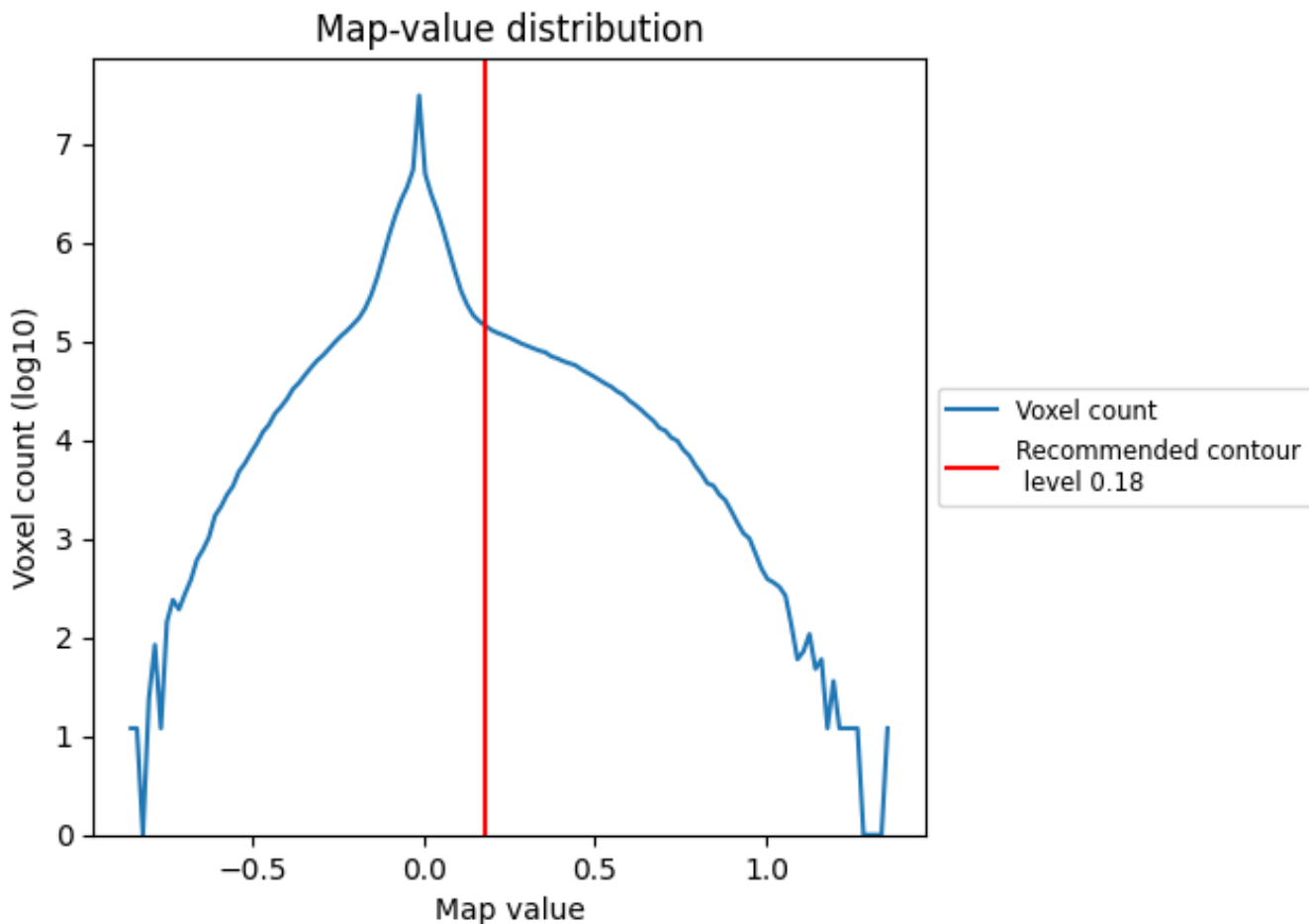
6.5 Mask visualisation

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

7 Map analysis [i](#)

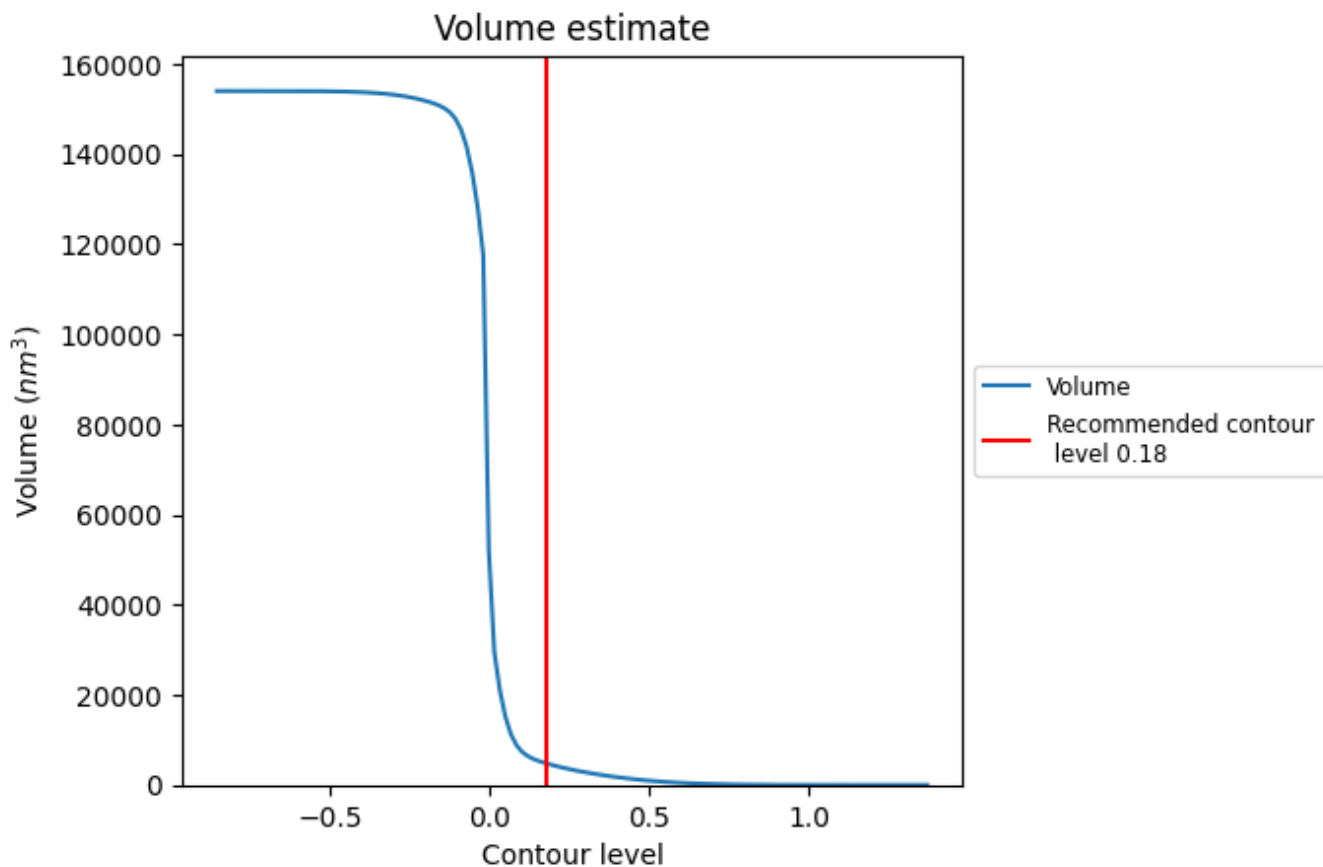
This section contains the results of statistical analysis of the map.

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.

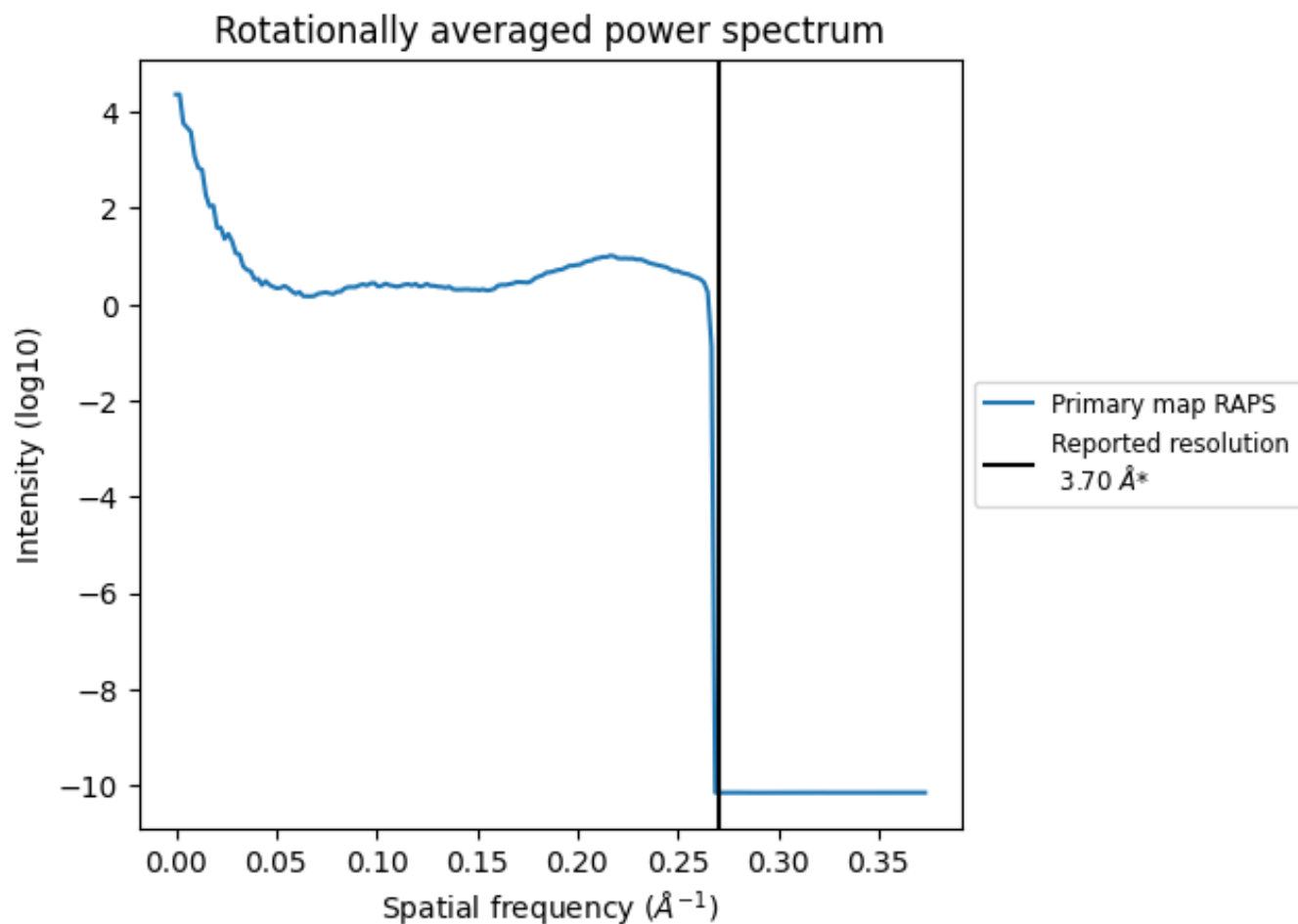
7.2 Volume estimate [i](#)



The volume at the recommended contour level is 4755 nm³; this corresponds to an approximate mass of 4296 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 0.270\AA^{-1}

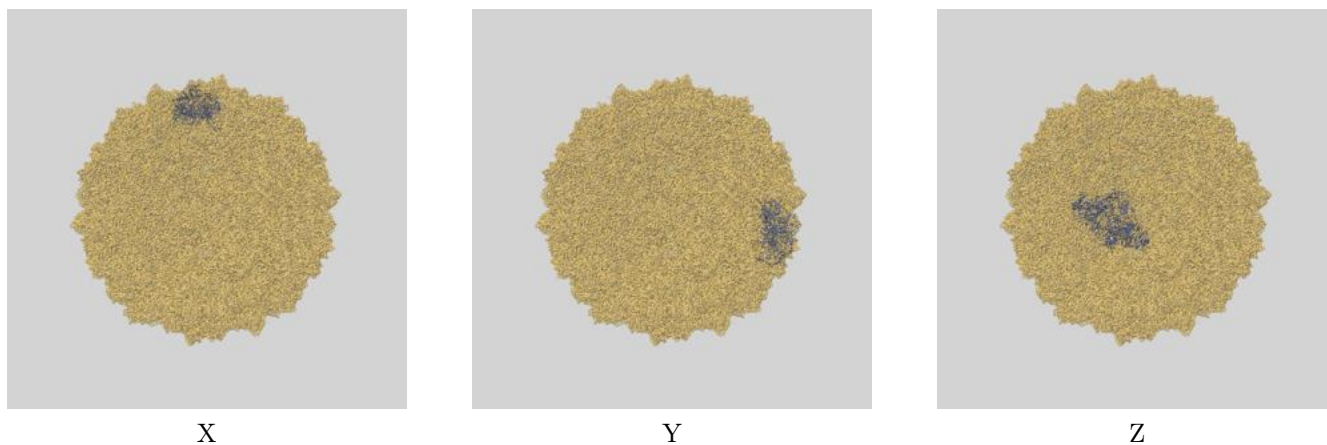
8 Fourier-Shell correlation

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

9 Map-model fit [i](#)

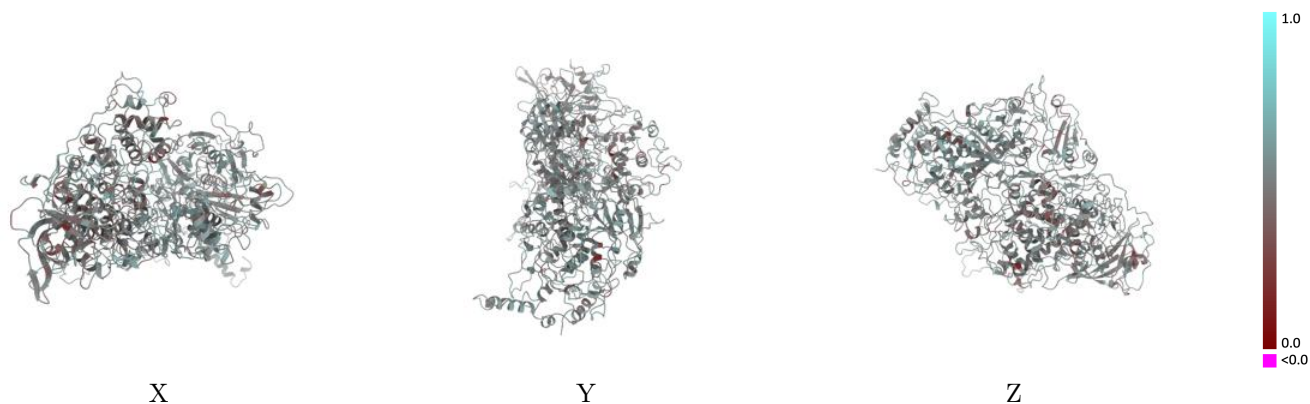
This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-3619 and PDB model 5ND1. Per-residue inclusion information can be found in section 3 on page 4.

9.1 Map-model overlay [i](#)



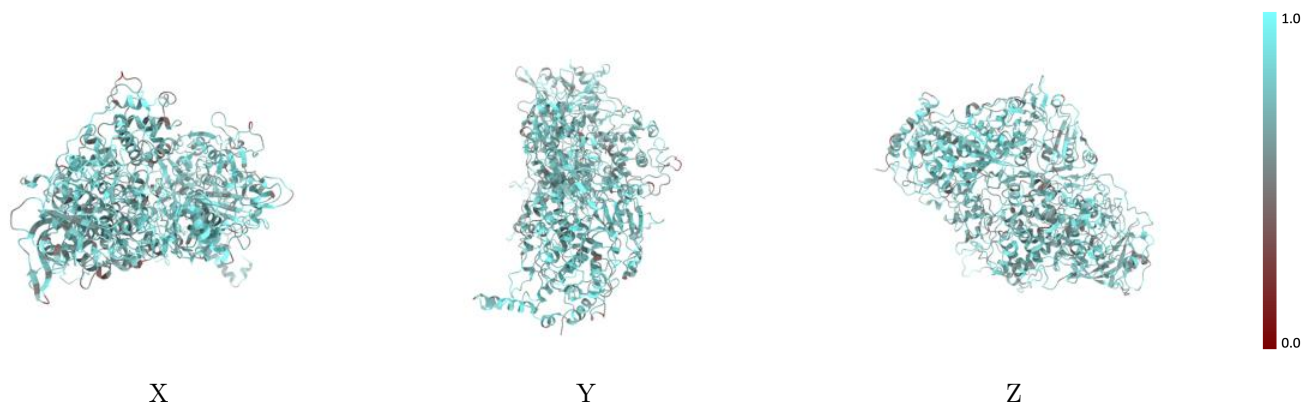
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.18 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

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



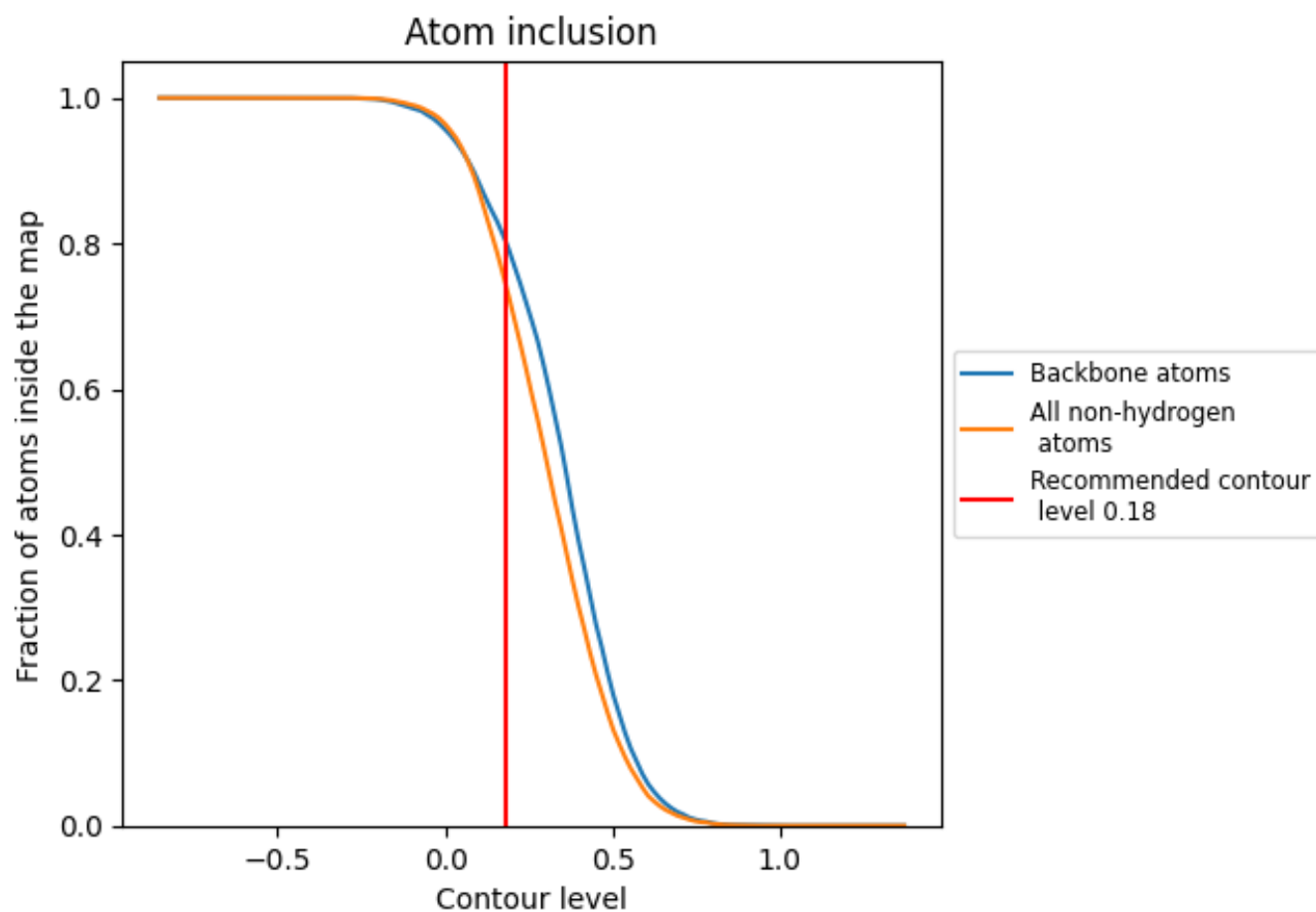
The images above show the model with each residue coloured according to its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions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

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



The images above show the model with each residue coloured according to its atom inclusion. This shows to what extent they are inside the map at the recommended contour level (0.18).







9.4 Atom inclusion [i](#)



At the recommended contour level, 80% of all backbone atoms, 74% of all non-hydrogen atoms, are inside the map.

9.5 Map-model fit summary

The table lists the average atom inclusion at the recommended contour level (0.18) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	 0.7447	 0.5060
A	 0.7628	 0.5210
B	 0.7272	 0.4910

