



Full wwPDB EM Validation Report (i)

Dec 10, 2022 – 03:03 pm GMT

PDB ID : 4UX2
EMDB ID : EMD-2760
Title : Cryo-EM structure of antagonist-bound E2P gastric H,K-ATPase (SCH.E2.
MgF)
Authors : Abe, K.; Tani, K.; Fujiyoshi, Y.
Deposited on : 2014-08-18
Resolution : 7.00 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 (i) 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 \(i\)](#)) were used in the production of this report:

EMDB validation analysis : 0.0.1.dev43
MolProbit : 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) : 2.31.3

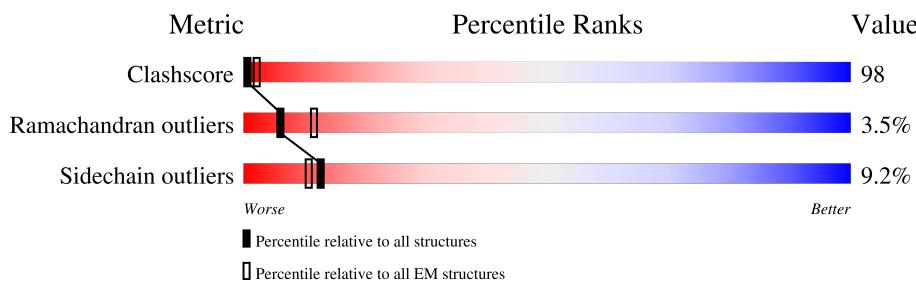
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON CRYSTALLOGRAPHY

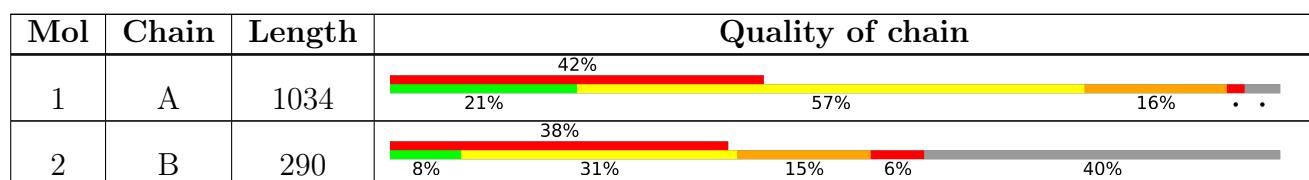
The reported resolution of this entry is 7.00 Å.

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 <=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.



2 Entry composition [\(i\)](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 9161 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 POTASSIUM-TRANSPORTING ATPASE ALPHA CHAIN 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
1	A	993	Total	C	N	O	S	0	0
			7718	4927	1304	1434	53		

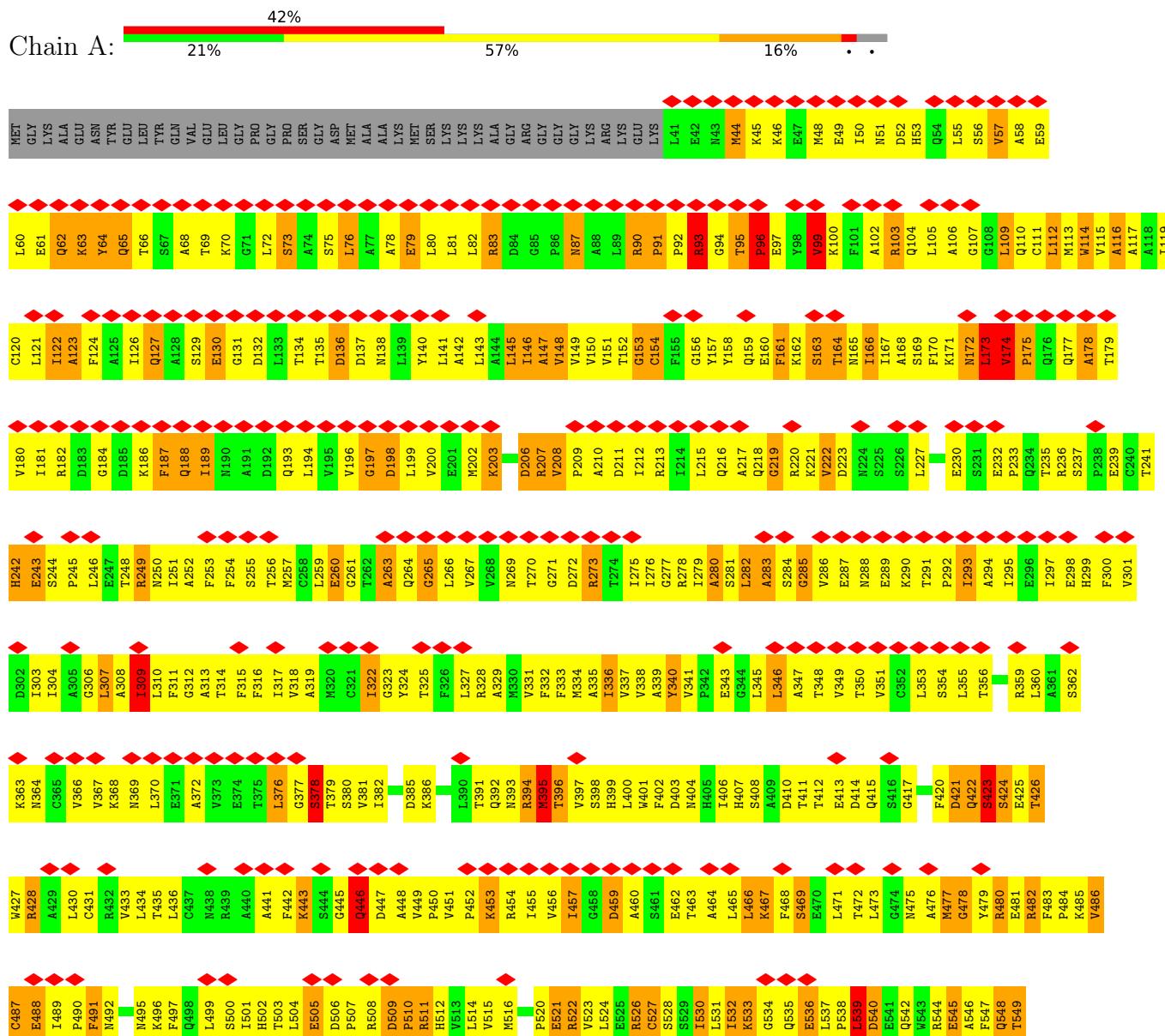
- Molecule 2 is a protein called POTASSIUM-TRANSPORTING ATPASE SUBUNIT BETA.

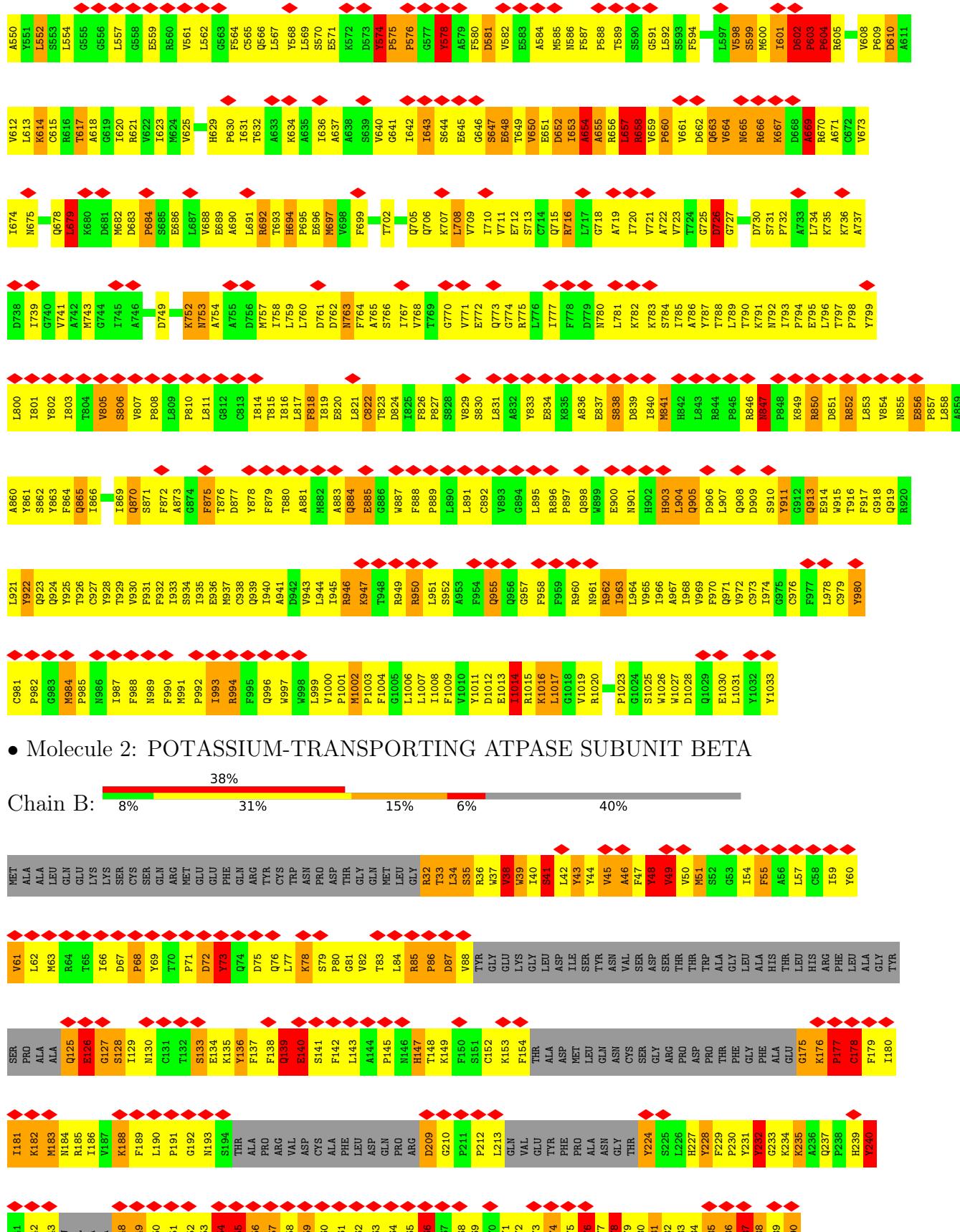
Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
2	B	175	Total	C	N	O	S	0	0
			1443	949	237	249	8		

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: POTASSIUM-TRANSPORTING ATPASE ALPHA CHAIN 1





4 Experimental information (i)

Property	Value	Source
EM reconstruction method	CRYSTALLOGRAPHY	Depositor
Imposed symmetry	2D CRYSTAL, a =Not provided Å, b =Not provided Å, c =Not provided Å, γ =Not provided°, space group=Not provided	Depositor
Number of images used	Not provided	
Resolution determination method	DIFFRACTION PATTERN/LAYERLINES	Depositor
CTF correction method	Not provided	
Microscope	JEOL KYOTO-3000SFF	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{\AA}^2$)	20	Depositor
Minimum defocus (nm)	825	Depositor
Maximum defocus (nm)	3070	Depositor
Magnification	40000	Depositor
Image detector	KODAK SO-163 FILM	Depositor
Maximum map value	6.185	Depositor
Minimum map value	-5.140	Depositor
Average map value	-0.004	Depositor
Map value standard deviation	0.993	Depositor
Recommended contour level	1.75	Depositor
Map size (Å)	142.56, 111.8, 322.31	wwPDB
Map dimensions	65, 81, 193	wwPDB
Map angles (°)	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing (Å)	1.76, 1.72, 1.67	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	1.15	3/7876 (0.0%)	1.39	37/10694 (0.3%)
2	B	1.13	1/1486 (0.1%)	1.42	11/2008 (0.5%)
All	All	1.14	4/9362 (0.0%)	1.40	48/12702 (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	160
2	B	0	52
All	All	0	212

All (4) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	B	254	ARG	CZ-NH2	5.23	1.39	1.33
1	A	950	ARG	CZ-NH1	5.07	1.39	1.33
1	A	511	ARG	NE-CZ	5.06	1.39	1.33
1	A	273	ARG	NE-CZ	5.03	1.39	1.33

All (48) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	140	TYR	CB-CG-CD1	10.11	127.07	121.00
2	B	68	PRO	CA-N-CD	-9.05	98.84	111.50
1	A	960	ARG	NE-CZ-NH1	7.32	123.96	120.30
1	A	950	ARG	NE-CZ-NH2	7.29	123.95	120.30
1	A	692	ARG	NE-CZ-NH1	-7.25	116.67	120.30
1	A	64	TYR	CA-CB-CG	-7.24	99.64	113.40
1	A	522	ARG	NE-CZ-NH1	-7.24	116.68	120.30
1	A	716	ARG	NE-CZ-NH1	-7.14	116.73	120.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	B	278	TYR	CB-CG-CD1	-6.78	116.93	121.00
1	A	726	ASP	CB-CA-C	-6.67	97.06	110.40
1	A	51	ASN	C-N-CA	6.48	137.90	121.70
1	A	574	TYR	CA-CB-CG	-6.41	101.22	113.40
1	A	946	ARG	NE-CZ-NH1	6.22	123.41	120.30
1	A	658	ARG	NE-CZ-NH1	6.15	123.37	120.30
1	A	340	TYR	CA-CB-CG	-6.04	101.91	113.40
1	A	852	ARG	NE-CZ-NH1	5.89	123.25	120.30
2	B	136	TYR	CB-CG-CD1	5.85	124.51	121.00
1	A	95	THR	C-N-CD	-5.83	107.78	120.60
1	A	875	PHE	CB-CG-CD2	-5.78	116.75	120.80
1	A	207	ARG	NE-CZ-NH1	-5.76	117.42	120.30
1	A	669	ALA	N-CA-CB	5.67	118.03	110.10
1	A	140	TYR	CB-CG-CD2	-5.63	117.62	121.00
2	B	73	TYR	O-C-N	-5.60	113.74	122.70
1	A	522	ARG	CD-NE-CZ	-5.59	115.78	123.60
1	A	850	ARG	NE-CZ-NH1	-5.58	117.51	120.30
1	A	428	ARG	NE-CZ-NH1	-5.56	117.52	120.30
2	B	140	GLU	N-CA-CB	5.55	120.59	110.60
1	A	818	PHE	CA-CB-CG	-5.52	100.64	113.90
1	A	222	VAL	CB-CA-C	-5.50	100.96	111.40
2	B	232	TYR	CA-CB-CG	-5.49	102.97	113.40
1	A	957	GLY	N-CA-C	-5.41	99.56	113.10
1	A	692	ARG	CD-NE-CZ	-5.35	116.10	123.60
1	A	207	ARG	CD-NE-CZ	-5.34	116.12	123.60
1	A	114	TRP	CB-CG-CD1	5.31	133.90	127.00
1	A	249	ARG	CD-NE-CZ	-5.29	116.19	123.60
1	A	114	TRP	CG-CD2-CE3	-5.28	129.15	133.90
2	B	256	ARG	NE-CZ-NH1	-5.25	117.67	120.30
1	A	850	ARG	CD-NE-CZ	-5.21	116.30	123.60
2	B	48	TYR	CB-CG-CD1	-5.16	117.91	121.00
1	A	911	TYR	CA-CB-CG	-5.12	103.67	113.40
1	A	206	ASP	CB-CA-C	-5.12	100.16	110.40
2	B	133	SER	N-CA-CB	5.12	118.17	110.50
2	B	274	PRO	N-CA-CB	5.10	109.42	103.30
1	A	198	ASP	CB-CA-C	-5.06	100.29	110.40
1	A	852	ARG	NE-CZ-NH2	-5.05	117.77	120.30
1	A	905	GLN	C-N-CA	5.05	134.32	121.70
1	A	962	ARG	NE-CZ-NH2	-5.03	117.78	120.30
2	B	249	LEU	C-N-CA	5.02	134.25	121.70

There are no chirality outliers.

All (212) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	1002	MET	Mainchain
1	A	1014	ILE	Mainchain
1	A	1016	LYS	Mainchain
1	A	1017	LEU	Mainchain
1	A	102	ALA	Mainchain
1	A	1023	PRO	Mainchain
1	A	1025	SER	Mainchain
1	A	103	ARG	Mainchain
1	A	111	CYS	Mainchain
1	A	112	LEU	Mainchain
1	A	116	ALA	Mainchain
1	A	123	ALA	Mainchain
1	A	127	GLN	Mainchain
1	A	130	GLU	Mainchain
1	A	131	GLY	Mainchain
1	A	136	ASP	Mainchain
1	A	145	LEU	Mainchain
1	A	147	ALA	Mainchain
1	A	148	VAL	Mainchain
1	A	153	GLY	Mainchain
1	A	154	CYS	Mainchain
1	A	156	GLY	Mainchain
1	A	173	LEU	Peptide
1	A	174	VAL	Mainchain,Peptide
1	A	177	GLN	Mainchain
1	A	178	ALA	Mainchain
1	A	187	PHE	Mainchain
1	A	188	GLN	Mainchain
1	A	189	ILE	Mainchain
1	A	197	GLY	Mainchain
1	A	203	LYS	Mainchain
1	A	206	ASP	Mainchain
1	A	217	ALA	Mainchain
1	A	218	GLN	Mainchain
1	A	219	GLY	Mainchain
1	A	242	HIS	Mainchain
1	A	243	GLU	Mainchain
1	A	260	GLU	Mainchain
1	A	263	ALA	Mainchain
1	A	265	GLY	Mainchain
1	A	278	ARG	Mainchain
1	A	279	ILE	Mainchain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	280	ALA	Mainchain
1	A	282	LEU	Mainchain
1	A	287	GLU	Mainchain
1	A	288	ASN	Mainchain
1	A	289	GLU	Mainchain
1	A	290	LYS	Mainchain
1	A	299	HIS	Mainchain
1	A	306	GLY	Mainchain
1	A	309	ILE	Mainchain
1	A	317	ILE	Mainchain
1	A	322	ILE	Mainchain
1	A	323	GLY	Mainchain
1	A	336	ILE	Mainchain
1	A	394	ARG	Mainchain
1	A	395	MET	Mainchain
1	A	396	THR	Mainchain
1	A	417	GLY	Mainchain
1	A	422	GLN	Mainchain
1	A	423	SER	Mainchain
1	A	426	THR	Mainchain
1	A	44	MET	Mainchain
1	A	445	GLY	Mainchain,Peptide
1	A	446	GLN	Mainchain
1	A	457	ILE	Mainchain
1	A	459	ASP	Mainchain
1	A	469	SER	Mainchain
1	A	477	MET	Mainchain
1	A	482	ARG	Mainchain
1	A	486	VAL	Mainchain
1	A	487	CYS	Mainchain
1	A	488	GLU	Mainchain
1	A	491	PHE	Mainchain
1	A	505	GLU	Mainchain
1	A	508	ARG	Mainchain
1	A	509	ASP	Mainchain,Peptide
1	A	521	GLU	Mainchain
1	A	526	ARG	Mainchain
1	A	527	CYS	Mainchain
1	A	530	ILE	Mainchain
1	A	536	GLU	Mainchain
1	A	539	LEU	Mainchain
1	A	540	ASP	Mainchain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	545	GLU	Mainchain
1	A	548	GLN	Mainchain
1	A	549	THR	Mainchain
1	A	566	GLN	Mainchain
1	A	571	GLU	Mainchain
1	A	574	TYR	Mainchain
1	A	575	PRO	Mainchain
1	A	576	PRO	Mainchain
1	A	578	TYR	Mainchain
1	A	581	ASP	Mainchain
1	A	585	MET	Mainchain
1	A	586	ASN	Mainchain
1	A	589	THR	Mainchain
1	A	598	VAL	Mainchain
1	A	602	ASP	Mainchain
1	A	603	PRO	Mainchain
1	A	604	PRO	Mainchain
1	A	610	ASP	Mainchain
1	A	614	LYS	Mainchain
1	A	62	GLN	Mainchain
1	A	63	LYS	Mainchain
1	A	641	GLY	Mainchain
1	A	643	ILE	Mainchain
1	A	644	SER	Mainchain
1	A	645	GLU	Mainchain
1	A	646	GLY	Mainchain
1	A	647	SER	Mainchain
1	A	648	GLU	Mainchain
1	A	652	ASP	Mainchain
1	A	653	ILE	Peptide
1	A	654	ALA	Mainchain,Peptide
1	A	655	ALA	Mainchain
1	A	656	ARG	Mainchain
1	A	657	LEU	Mainchain
1	A	658	ARG	Mainchain
1	A	660	PRO	Mainchain
1	A	663	GLN	Mainchain
1	A	664	VAL	Mainchain
1	A	666	ARG	Mainchain
1	A	669	ALA	Mainchain
1	A	679	LEU	Mainchain
1	A	684	PRO	Mainchain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	694	HIS	Mainchain
1	A	715	GLN	Mainchain
1	A	718	GLY	Mainchain
1	A	73	SER	Mainchain
1	A	75	SER	Mainchain
1	A	752	LYS	Mainchain
1	A	753	ASN	Mainchain
1	A	76	LEU	Mainchain
1	A	79	GLU	Mainchain
1	A	806	SER	Mainchain
1	A	82	LEU	Mainchain
1	A	822	CYS	Mainchain
1	A	83	ARG	Mainchain
1	A	838	SER	Mainchain
1	A	839	ASP	Mainchain
1	A	847	ASN	Mainchain
1	A	852	ARG	Mainchain
1	A	865	GLN	Mainchain
1	A	870	GLN	Mainchain
1	A	90	ARG	Sidechain
1	A	909	ASP	Mainchain
1	A	944	LEU	Mainchain
1	A	947	LYS	Mainchain
1	A	949	ARG	Mainchain
1	A	952	SER	Mainchain
1	A	955	GLN	Mainchain
1	A	96	PRO	Mainchain
1	A	980	TYR	Mainchain
1	A	99	VAL	Mainchain
1	A	994	ARG	Mainchain
2	B	125	GLN	Mainchain,Peptide
2	B	126	GLU	Mainchain,Peptide
2	B	127	GLY	Mainchain
2	B	128	SER	Mainchain
2	B	133	SER	Mainchain
2	B	138	PHE	Mainchain
2	B	139	GLN	Mainchain
2	B	147	HIS	Mainchain
2	B	175	GLY	Mainchain
2	B	176	LYS	Mainchain
2	B	177	PRO	Mainchain
2	B	178	CYS	Mainchain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
2	B	181	ILE	Mainchain
2	B	183	MET	Mainchain
2	B	191	PRO	Mainchain
2	B	209	ASP	Mainchain
2	B	210	GLY	Mainchain,Peptide
2	B	212	PRO	Mainchain
2	B	224	TYR	Mainchain
2	B	228	TYR	Mainchain
2	B	232	TYR	Mainchain
2	B	239	HIS	Mainchain
2	B	240	TYR	Sidechain
2	B	248	LYS	Mainchain
2	B	250	LEU	Mainchain
2	B	254	ARG	Mainchain
2	B	255	ASN	Mainchain
2	B	256	ARG	Mainchain
2	B	257	ASP	Mainchain
2	B	258	VAL	Mainchain
2	B	259	VAL	Mainchain
2	B	266	ALA	Mainchain
2	B	278	TYR	Mainchain
2	B	285	LYS	Mainchain
2	B	286	LEU	Mainchain
2	B	287	LYS	Mainchain
2	B	34	LEU	Mainchain
2	B	35	SER	Mainchain,Peptide
2	B	38	VAL	Mainchain
2	B	39	TRP	Mainchain
2	B	41	SER	Mainchain
2	B	46	ALA	Mainchain
2	B	51	MET	Mainchain
2	B	55	PHE	Mainchain
2	B	59	ILE	Mainchain
2	B	62	LEU	Mainchain
2	B	63	MET	Mainchain
2	B	73	TYR	Mainchain

5.2 Too-close contacts

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in the chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbit. 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	7718	0	7746	1572	0
2	B	1443	0	1430	358	0
All	All	9161	0	9176	1793	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 (1793) 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:901:ASN:HB3	1:A:904:LEU:CD1	1.26	1.65
1:A:398:SER:CB	1:A:600:MET:CA	1.78	1.56
1:A:994:ARG:NH1	2:B:73:TYR:CG	1.70	1.55
1:A:913:GLN:NE2	2:B:77:LEU:HD22	1.25	1.48
1:A:398:SER:HB2	1:A:600:MET:CA	0.96	1.42
1:A:398:SER:HB2	1:A:600:MET:C	1.41	1.38
1:A:901:ASN:CB	1:A:904:LEU:HD11	1.54	1.37
1:A:398:SER:CB	1:A:600:MET:N	1.89	1.34
1:A:398:SER:HB3	1:A:600:MET:N	1.41	1.33
1:A:286:VAL:HB	1:A:735:LYS:CE	1.58	1.32
1:A:1011:TYR:CE1	2:B:47:PHE:HE1	1.48	1.32
1:A:923:GLN:CG	2:B:76:GLN:HG2	1.59	1.32
1:A:65:GLN:NE2	1:A:65:GLN:N	1.78	1.30
1:A:398:SER:CB	1:A:600:MET:HA	1.43	1.30
1:A:548:GLN:O	1:A:552:LEU:HD23	1.27	1.28
1:A:775:ARG:HD2	1:A:840:ILE:CG2	1.63	1.28
1:A:913:GLN:HB3	2:B:185:ARG:O	1.17	1.28
1:A:651:GLU:O	1:A:654:ALA:HB3	1.22	1.28
1:A:775:ARG:NH1	1:A:840:ILE:O	1.66	1.26
1:A:398:SER:HB3	1:A:599:SER:C	1.53	1.25
1:A:906:ASP:OD1	2:B:83:THR:HB	1.07	1.23
1:A:548:GLN:O	1:A:552:LEU:CD2	1.85	1.23
1:A:906:ASP:OD1	2:B:83:THR:CB	1.88	1.22
2:B:240:TYR:CD1	2:B:240:TYR:O	1.92	1.21
1:A:1011:TYR:CE1	2:B:47:PHE:CE1	2.27	1.21
1:A:207:ARG:HG2	1:A:257:MET:HG3	1.23	1.20
1:A:45:LYS:NZ	1:A:281:SER:HB2	1.56	1.20
1:A:363:LYS:HE3	1:A:773:GLN:NE2	1.56	1.20
1:A:994:ARG:NH1	2:B:73:TYR:CD2	2.10	1.20
1:A:169:SER:HB3	1:A:753:ASN:ND2	1.57	1.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:399:HIS:C	1:A:400:LEU:HD12	1.64	1.18
1:A:207:ARG:HG2	1:A:257:MET:CG	1.74	1.17
1:A:394:ARG:NH1	1:A:452:PRO:HB2	1.57	1.17
1:A:72:LEU:HD13	1:A:198:ASP:HA	1.17	1.16
1:A:913:GLN:NE2	2:B:77:LEU:CD2	2.09	1.16
1:A:169:SER:CB	1:A:753:ASN:ND2	2.09	1.16
1:A:286:VAL:HB	1:A:735:LYS:HE2	1.25	1.16
1:A:901:ASN:CB	1:A:904:LEU:CD1	2.16	1.15
1:A:170:PHE:O	1:A:173:LEU:CD1	1.95	1.15
1:A:905:GLN:CG	2:B:278:TYR:HD2	1.59	1.14
1:A:119:ILE:HG23	1:A:334:MET:CE	1.77	1.14
1:A:559:GLU:HG2	1:A:600:MET:O	1.45	1.14
1:A:905:GLN:CG	2:B:83:THR:HG22	1.77	1.13
1:A:166:ILE:HD12	1:A:753:ASN:HB2	1.30	1.13
1:A:163:SER:OG	1:A:368:LYS:HD3	1.48	1.13
1:A:884:GLN:HG2	2:B:73:TYR:CD2	1.85	1.12
1:A:169:SER:OG	1:A:749:ASP:HB3	1.47	1.11
1:A:170:PHE:O	1:A:173:LEU:HD11	1.46	1.11
1:A:396:THR:HG22	1:A:397:VAL:N	1.61	1.11
1:A:775:ARG:HD2	1:A:840:ILE:HG22	1.16	1.11
1:A:46:LYS:NZ	1:A:712:GLU:OE2	1.83	1.11
1:A:922:TYR:CE2	1:A:991:MET:SD	2.44	1.11
1:A:552:LEU:HD23	1:A:552:LEU:H	1.08	1.10
1:A:905:GLN:HG2	2:B:83:THR:HG22	1.18	1.10
2:B:288:ILE:O	2:B:288:ILE:HG22	1.46	1.10
1:A:914:GLU:O	2:B:184:ASN:HB3	1.52	1.10
1:A:679:LEU:HD23	1:A:679:LEU:O	1.51	1.10
1:A:901:ASN:HB3	1:A:904:LEU:HD12	1.12	1.09
1:A:146:ILE:O	1:A:146:ILE:HD13	1.53	1.09
1:A:786:ALA:HB2	1:A:858:LEU:HD21	1.33	1.09
1:A:97:GLU:HB3	1:A:99:VAL:HG22	1.33	1.08
1:A:903:HIS:HB2	2:B:88:VAL:O	1.53	1.08
1:A:1007:LEU:HD21	2:B:54:ILE:HG21	1.22	1.08
1:A:775:ARG:CD	1:A:840:ILE:CG2	2.32	1.07
1:A:905:GLN:HG3	2:B:278:TYR:CD2	1.89	1.07
1:A:978:LEU:HD21	1:A:990:PHE:CE2	1.88	1.07
1:A:189:ILE:HD11	1:A:194:LEU:HD23	1.34	1.07
1:A:994:ARG:NH1	2:B:73:TYR:CB	2.17	1.07
1:A:443:LYS:HG3	1:A:455:ILE:HG23	1.26	1.07
2:B:287:LYS:HE2	2:B:289:GLN:HE21	1.05	1.07
1:A:994:ARG:NH2	2:B:75:ASP:HB2	1.70	1.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:394:ARG:HH12	1:A:452:PRO:HB2	1.03	1.06
1:A:286:VAL:HB	1:A:735:LYS:HE3	1.31	1.06
1:A:396:THR:CG2	1:A:397:VAL:H	1.66	1.06
1:A:601:ILE:HG13	1:A:602:ASP:H	0.94	1.06
1:A:363:LYS:HE3	1:A:773:GLN:HE21	0.95	1.06
1:A:922:TYR:CD2	1:A:991:MET:HE3	1.88	1.06
1:A:283:ALA:O	1:A:286:VAL:HG23	1.55	1.06
1:A:723:VAL:HG23	1:A:737:ALA:HB2	1.38	1.06
1:A:884:GLN:HG2	2:B:73:TYR:HD2	1.15	1.06
1:A:114:TRP:CZ3	1:A:146:ILE:HG12	1.91	1.06
1:A:446:GLN:HB2	1:A:449:VAL:HG22	1.37	1.06
1:A:567:LEU:HD12	1:A:592:LEU:CD2	1.85	1.05
1:A:601:ILE:HG13	1:A:602:ASP:N	1.63	1.05
1:A:651:GLU:O	1:A:654:ALA:CB	2.04	1.05
1:A:386:LYS:HD2	1:A:636:ILE:HD12	1.37	1.05
1:A:752:LYS:HG3	1:A:758:ILE:CD1	1.86	1.05
1:A:923:GLN:HG2	2:B:76:GLN:HG2	1.09	1.05
1:A:905:GLN:O	2:B:83:THR:HG21	1.53	1.05
1:A:994:ARG:HD3	2:B:73:TYR:CE1	1.92	1.05
1:A:923:GLN:HG2	2:B:76:GLN:CG	1.85	1.04
1:A:601:ILE:CG1	1:A:602:ASP:H	1.67	1.04
1:A:905:GLN:CG	2:B:278:TYR:CD2	2.40	1.04
1:A:360:LEU:HD13	1:A:363:LYS:HD2	1.35	1.04
1:A:360:LEU:HD11	1:A:773:GLN:HG3	1.08	1.03
1:A:483:PHE:HE2	1:A:504:LEU:HD12	1.16	1.03
1:A:913:GLN:CB	2:B:185:ARG:O	2.06	1.03
2:B:126:GLU:HG3	2:B:127:GLY:H	1.19	1.02
2:B:254:ARG:HD3	2:B:255:ASN:HD22	1.22	1.02
1:A:397:VAL:CG1	1:A:398:SER:H	1.72	1.02
1:A:377:GLY:HA3	1:A:774:GLY:O	1.59	1.02
1:A:511:ARG:NH1	1:A:511:ARG:HB3	1.74	1.01
1:A:887:TRP:HH2	1:A:907:LEU:HG	1.22	1.01
1:A:922:TYR:CD2	1:A:991:MET:CE	2.44	1.01
1:A:119:ILE:HG23	1:A:334:MET:HE1	1.42	1.01
1:A:339:ALA:HB1	1:A:796:LEU:HD12	1.39	1.00
1:A:360:LEU:HD11	1:A:773:GLN:CG	1.91	1.00
1:A:903:HIS:HD2	1:A:904:LEU:N	1.58	1.00
1:A:315:PHE:CE2	1:A:800:LEU:HD22	1.96	1.00
1:A:896:ARG:O	1:A:900:GLU:HG2	1.61	1.00
1:A:915:TRP:CZ2	2:B:77:LEU:HB2	1.96	1.00
1:A:922:TYR:OH	2:B:275:HIS:HE1	1.43	1.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:690:ALA:O	1:A:693:THR:HG22	1.60	1.00
1:A:1011:TYR:CZ	2:B:47:PHE:CE1	2.48	0.99
1:A:923:GLN:CG	2:B:76:GLN:CG	2.39	0.99
1:A:657:LEU:O	1:A:658:ARG:HG3	1.60	0.99
1:A:901:ASN:HB3	1:A:904:LEU:HD11	1.00	0.99
1:A:903:HIS:HB2	2:B:88:VAL:C	1.80	0.99
1:A:564:PHE:HE1	1:A:598:VAL:HG12	1.26	0.99
1:A:602:ASP:OD2	1:A:636:ILE:HD11	1.63	0.99
1:A:693:THR:HG23	1:A:694:HIS:ND1	1.75	0.99
1:A:537:LEU:HD12	1:A:538:PRO:HD2	1.44	0.98
1:A:905:GLN:HG2	2:B:83:THR:CG2	1.94	0.98
1:A:905:GLN:O	2:B:83:THR:CG2	2.11	0.98
1:A:254:PHE:CE2	1:A:276:ILE:HD11	1.98	0.98
1:A:567:LEU:HD12	1:A:592:LEU:HD23	1.45	0.98
1:A:752:LYS:HG3	1:A:758:ILE:HD11	1.45	0.97
1:A:994:ARG:HD3	2:B:73:TYR:CZ	2.00	0.97
1:A:391:THR:HA	1:A:604:PRO:HA	1.43	0.97
1:A:994:ARG:CZ	2:B:73:TYR:CD1	2.47	0.97
1:A:399:HIS:HB3	1:A:407:HIS:O	1.64	0.96
1:A:69:THR:HG23	1:A:70:LYS:N	1.80	0.96
1:A:1007:LEU:CD2	2:B:54:ILE:HG21	1.96	0.96
1:A:994:ARG:CZ	2:B:73:TYR:CG	2.48	0.96
1:A:93:ARG:HH21	1:A:285:GLY:HA3	1.27	0.96
1:A:483:PHE:CE2	1:A:504:LEU:HD12	2.00	0.96
1:A:398:SER:CA	1:A:600:MET:HA	1.96	0.95
1:A:552:LEU:CD2	1:A:552:LEU:H	1.78	0.95
1:A:905:GLN:C	2:B:83:THR:HG21	1.84	0.95
1:A:487:CYS:SG	1:A:580:PHE:HB2	2.06	0.95
1:A:786:ALA:HB3	1:A:946:ARG:HD2	1.46	0.95
1:A:363:LYS:CE	1:A:773:GLN:NE2	2.29	0.95
1:A:286:VAL:CB	1:A:735:LYS:HE3	1.97	0.95
1:A:479:TYR:HA	1:A:482:ARG:HD3	1.49	0.95
1:A:57:VAL:CG2	1:A:215:LEU:HD23	1.95	0.94
1:A:479:TYR:HA	1:A:482:ARG:CD	1.97	0.94
1:A:924:GLN:HG2	1:A:928:TYR:CE2	2.02	0.94
1:A:45:LYS:NZ	1:A:281:SER:CB	2.30	0.94
1:A:109:LEU:HG	1:A:346:LEU:HD22	1.50	0.94
2:B:287:LYS:CE	2:B:289:GLN:HE21	1.79	0.94
1:A:1016:LYS:O	1:A:1019:VAL:HG22	1.66	0.94
1:A:905:GLN:C	2:B:83:THR:CG2	2.37	0.94
1:A:397:VAL:HG12	1:A:398:SER:N	1.81	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:903:HIS:CD2	1:A:904:LEU:N	2.36	0.93
2:B:240:TYR:O	2:B:240:TYR:HD1	1.40	0.93
1:A:360:LEU:CD1	1:A:773:GLN:HG3	1.98	0.93
1:A:814:ILE:HD11	1:A:988:PHE:CD1	2.03	0.93
1:A:376:LEU:HD22	1:A:770:GLY:C	1.89	0.93
2:B:249:LEU:HD12	2:B:286:LEU:HD12	1.49	0.92
1:A:667:LYS:HZ3	1:A:667:LYS:HA	1.30	0.92
1:A:57:VAL:HG21	1:A:215:LEU:CD2	1.98	0.92
1:A:72:LEU:CD1	1:A:198:ASP:HA	1.99	0.92
1:A:397:VAL:CG1	1:A:398:SER:N	2.28	0.92
1:A:775:ARG:CD	1:A:840:ILE:HG22	1.99	0.92
1:A:914:GLU:O	2:B:184:ASN:CB	2.18	0.92
1:A:939:GLN:O	1:A:943:VAL:HG23	1.69	0.92
1:A:394:ARG:HH12	1:A:452:PRO:CB	1.83	0.92
1:A:679:LEU:O	1:A:679:LEU:CD2	2.17	0.92
1:A:339:ALA:HB1	1:A:796:LEU:CD1	1.98	0.92
1:A:925:TYR:HA	1:A:928:TYR:HD2	1.34	0.92
2:B:154:PHE:HD1	2:B:228:TYR:HH	1.08	0.91
1:A:363:LYS:CE	1:A:773:GLN:HE21	1.81	0.91
1:A:166:ILE:HD12	1:A:753:ASN:CB	2.01	0.91
1:A:381:VAL:CG1	1:A:721:VAL:HG12	2.00	0.91
1:A:433:VAL:HG23	1:A:515:VAL:HB	1.53	0.91
1:A:309:ILE:HG23	1:A:310:LEU:N	1.85	0.91
1:A:913:GLN:HE22	2:B:77:LEU:CD2	1.77	0.91
1:A:397:VAL:HG13	1:A:398:SER:H	1.36	0.90
1:A:864:PHE:HD1	1:A:865:GLN:HG3	1.35	0.90
1:A:189:ILE:HD11	1:A:194:LEU:CD2	2.01	0.90
1:A:994:ARG:HH21	2:B:75:ASP:HB2	1.36	0.90
1:A:922:TYR:CE2	1:A:991:MET:CE	2.55	0.90
1:A:903:HIS:CD2	1:A:903:HIS:C	2.45	0.90
1:A:79:GLU:O	1:A:79:GLU:CD	2.09	0.89
1:A:254:PHE:CD2	1:A:276:ILE:HD11	2.07	0.89
1:A:286:VAL:CB	1:A:735:LYS:CE	2.47	0.89
1:A:618:ALA:HB3	1:A:620:ILE:HD12	1.54	0.89
1:A:814:ILE:HD11	1:A:988:PHE:HD1	1.37	0.89
1:A:169:SER:CB	1:A:753:ASN:HD21	1.77	0.89
1:A:171:LYS:O	1:A:173:LEU:N	2.03	0.89
1:A:398:SER:HB2	1:A:600:MET:HA	0.94	0.89
1:A:858:LEU:O	1:A:858:LEU:HD13	1.71	0.89
1:A:913:GLN:HE21	2:B:77:LEU:HD22	1.36	0.89
2:B:126:GLU:HG3	2:B:127:GLY:N	1.79	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:166:ILE:CD1	1:A:753:ASN:HB2	2.02	0.89
2:B:45:VAL:O	2:B:49:VAL:HB	1.71	0.89
1:A:166:ILE:HA	1:A:753:ASN:ND2	1.88	0.89
2:B:287:LYS:HE2	2:B:289:GLN:NE2	1.88	0.89
1:A:120:CYS:HB2	1:A:142:ALA:HB2	1.54	0.88
1:A:65:GLN:N	1:A:65:GLN:HE21	1.67	0.88
1:A:396:THR:CG2	1:A:397:VAL:N	2.24	0.88
1:A:994:ARG:NH1	2:B:73:TYR:CD1	2.40	0.88
1:A:905:GLN:HB2	2:B:278:TYR:CD2	2.08	0.88
2:B:88:VAL:HG21	2:B:284:PHE:CD1	2.09	0.88
1:A:905:GLN:CB	2:B:83:THR:HG22	2.03	0.88
1:A:324:TYR:CD1	1:A:328:ARG:HG2	2.07	0.88
1:A:169:SER:HB2	1:A:753:ASN:ND2	1.88	0.88
1:A:587:PHE:HB2	1:A:588:PRO:HD2	1.53	0.88
1:A:65:GLN:NE2	1:A:65:GLN:H	1.60	0.88
1:A:869:ILE:HG12	2:B:51:MET:HE2	1.56	0.88
1:A:166:ILE:HA	1:A:753:ASN:CB	2.04	0.88
1:A:230:GLU:OE1	1:A:230:GLU:HA	1.74	0.88
1:A:1015:ARG:O	1:A:1019:VAL:HG13	1.73	0.88
1:A:169:SER:OG	1:A:749:ASP:CB	2.21	0.87
1:A:216:GLN:HG2	1:A:264:GLN:HB2	1.54	0.87
2:B:288:ILE:O	2:B:288:ILE:CG2	2.21	0.87
1:A:857:PRO:HB3	1:A:1030:GLU:O	1.74	0.87
1:A:286:VAL:CG1	1:A:735:LYS:HE3	2.05	0.87
1:A:791:LYS:HD2	1:A:819:ILE:CG2	2.04	0.87
1:A:905:GLN:CB	2:B:278:TYR:CD2	2.57	0.87
1:A:57:VAL:HG22	1:A:215:LEU:HD23	1.57	0.87
1:A:349:VAL:O	1:A:353:LEU:HD13	1.74	0.87
1:A:442:PHE:CD1	1:A:454:ARG:HD2	2.10	0.87
1:A:396:THR:HG22	1:A:397:VAL:H	1.20	0.86
1:A:943:VAL:CG1	1:A:964:LEU:HD11	2.04	0.86
1:A:574:TYR:HD1	1:A:578:TYR:CE2	1.93	0.86
1:A:146:ILE:O	1:A:149:VAL:HG22	1.76	0.86
1:A:212:ILE:CG2	1:A:252:ALA:HB3	2.05	0.86
1:A:72:LEU:HD13	1:A:198:ASP:CA	2.04	0.86
1:A:784:SER:HA	1:A:831:LEU:HD22	1.58	0.86
2:B:68:PRO:HD2	2:B:69:TYR:H	1.40	0.86
1:A:705:GLN:O	1:A:709:VAL:HG23	1.74	0.86
1:A:489:ILE:HG12	1:A:582:VAL:HG13	1.55	0.85
1:A:903:HIS:HD2	1:A:904:LEU:CA	1.88	0.85
1:A:332:PHE:O	1:A:336:ILE:HG13	1.77	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:435:THR:HG23	1:A:436:LEU:CD1	2.07	0.85
1:A:282:LEU:HG	1:A:282:LEU:O	1.75	0.85
1:A:856:GLU:HG2	1:A:857:PRO:HD3	1.59	0.85
1:A:1019:VAL:HB	1:A:1028:ASP:OD1	1.77	0.85
1:A:421:ASP:C	1:A:421:ASP:OD1	2.15	0.85
1:A:112:LEU:HD21	1:A:341:VAL:HG12	1.56	0.85
1:A:446:GLN:CB	1:A:449:VAL:HG22	2.06	0.85
1:A:682:MET:SD	1:A:686:GLU:HG2	2.17	0.85
1:A:114:TRP:HZ3	1:A:146:ILE:HG12	1.38	0.84
1:A:169:SER:HB2	1:A:753:ASN:HD21	1.40	0.84
1:A:841:MET:CE	1:A:841:MET:HA	2.06	0.84
2:B:84:LEU:HB3	2:B:86:PRO:HD2	1.58	0.84
1:A:765:ALA:O	1:A:768:VAL:HG12	1.77	0.84
1:A:315:PHE:CD2	1:A:800:LEU:HD22	2.11	0.84
2:B:186:ILE:HG23	2:B:189:PHE:HB3	1.59	0.84
1:A:574:TYR:HD1	1:A:578:TYR:CD2	1.96	0.84
1:A:752:LYS:HG3	1:A:758:ILE:HD12	1.60	0.84
1:A:212:ILE:HG22	1:A:252:ALA:HB3	1.58	0.84
1:A:1011:TYR:O	1:A:1014:ILE:HG22	1.76	0.84
1:A:552:LEU:HD23	1:A:552:LEU:N	1.91	0.84
1:A:117:ALA:HA	1:A:145:LEU:HD12	1.59	0.83
1:A:291:THR:O	1:A:295:ILE:HG13	1.76	0.83
1:A:463:THR:OG1	1:A:467:LYS:HE3	1.77	0.83
1:A:212:ILE:HD11	1:A:265:GLY:C	1.98	0.83
1:A:446:GLN:HB2	1:A:449:VAL:CG2	2.07	0.83
1:A:965:VAL:O	1:A:968:ILE:HG22	1.79	0.83
1:A:670:ARG:HE	1:A:695:PRO:HG2	1.44	0.83
1:A:723:VAL:CG2	1:A:737:ALA:HB2	2.08	0.83
1:A:207:ARG:CG	1:A:257:MET:HG3	2.07	0.83
1:A:398:SER:CB	1:A:600:MET:C	2.27	0.83
1:A:947:LYS:HD2	1:A:964:LEU:HD22	1.59	0.83
1:A:693:THR:CG2	1:A:694:HIS:ND1	2.41	0.83
2:B:249:LEU:HD12	2:B:286:LEU:CD1	2.08	0.83
1:A:124:PHE:HA	1:A:127:GLN:HG2	1.60	0.83
2:B:77:LEU:HG	2:B:186:ILE:HD12	1.58	0.83
1:A:739:ILE:HD11	1:A:757:MET:SD	2.19	0.83
1:A:760:LEU:HD22	1:A:760:LEU:H	1.43	0.83
1:A:169:SER:HB3	1:A:753:ASN:HD22	1.40	0.82
1:A:386:LYS:HD2	1:A:636:ILE:CD1	2.09	0.82
1:A:915:TRP:CH2	2:B:77:LEU:HB2	2.13	0.82
1:A:1002:MET:HB3	1:A:1003:PRO:HD3	1.61	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:32:ARG:HH11	2:B:32:ARG:CG	1.89	0.82
1:A:1015:ARG:HD2	1:A:1031:LEU:CD2	2.08	0.82
1:A:648:GLU:HB3	1:A:652:ASP:OD1	1.79	0.82
1:A:564:PHE:HE1	1:A:598:VAL:CG1	1.92	0.82
1:A:90:ARG:NH1	1:A:272:ASP:OD2	2.12	0.81
1:A:795:GLU:HB3	1:A:816:ILE:HD12	1.61	0.81
1:A:913:GLN:HE22	2:B:77:LEU:HD22	0.91	0.81
1:A:170:PHE:O	1:A:173:LEU:HD12	1.76	0.81
1:A:166:ILE:CD1	1:A:753:ASN:CB	2.59	0.81
1:A:548:GLN:O	1:A:552:LEU:HD21	1.77	0.81
1:A:922:TYR:OH	2:B:275:HIS:CE1	2.33	0.81
1:A:495:ASN:HB3	1:A:497:PHE:CE2	2.14	0.81
1:A:97:GLU:HB3	1:A:99:VAL:CG2	2.10	0.81
1:A:661:VAL:CG2	1:A:662:ASP:N	2.43	0.81
1:A:905:GLN:HG3	2:B:278:TYR:HB3	1.61	0.81
1:A:79:GLU:OE1	1:A:79:GLU:HA	1.79	0.81
1:A:181:ILE:HG13	1:A:199:LEU:HD23	1.61	0.81
1:A:315:PHE:HA	1:A:318:VAL:HG22	1.62	0.81
1:A:905:GLN:CB	2:B:278:TYR:HD2	1.93	0.81
2:B:282:VAL:HG13	2:B:284:PHE:CE2	2.17	0.80
1:A:119:ILE:CG2	1:A:334:MET:HB3	2.11	0.80
1:A:166:ILE:HA	1:A:753:ASN:CG	2.00	0.80
1:A:623:ILE:HG12	1:A:697:MET:SD	2.20	0.80
1:A:53:HIS:HB3	1:A:251:ILE:HD11	1.63	0.80
1:A:381:VAL:HG23	1:A:621:ARG:O	1.82	0.80
1:A:610:ASP:OD1	1:A:614:LYS:HE3	1.80	0.80
1:A:759:LEU:CD1	1:A:766:SER:HB2	2.11	0.80
1:A:791:LYS:HD2	1:A:819:ILE:HG21	1.62	0.80
2:B:68:PRO:HG2	2:B:69:TYR:CZ	2.16	0.80
1:A:442:PHE:CZ	1:A:466:LEU:HD13	2.16	0.80
1:A:922:TYR:CG	1:A:991:MET:HE3	2.17	0.80
1:A:943:VAL:HG13	1:A:964:LEU:HD11	1.63	0.80
1:A:92:PRO:HD3	1:A:171:LYS:HE3	1.62	0.80
1:A:731:SER:HB2	1:A:732:PRO:HD3	1.64	0.80
1:A:398:SER:N	1:A:600:MET:HA	1.96	0.80
2:B:82:VAL:HG13	2:B:280:GLY:HA2	1.62	0.80
2:B:82:VAL:HG22	2:B:281:LYS:N	1.97	0.80
1:A:574:TYR:CD1	1:A:578:TYR:CE2	2.70	0.79
1:A:901:ASN:HB2	1:A:904:LEU:HD11	1.64	0.79
1:A:322:ILE:O	1:A:322:ILE:HG13	1.81	0.79
2:B:85:ARG:HB3	2:B:180:ILE:HG13	1.63	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:48:MET:HE3	1:A:246:LEU:HG	1.61	0.79
1:A:905:GLN:HB2	2:B:278:TYR:CE2	2.18	0.79
2:B:240:TYR:CD1	2:B:240:TYR:C	2.55	0.79
1:A:994:ARG:CD	2:B:73:TYR:CE1	2.66	0.79
1:A:491:PHE:HZ	1:A:496:LYS:HE2	1.48	0.79
1:A:826:PHE:HB2	1:A:827:PRO:HD3	1.64	0.79
1:A:255:SER:HB2	1:A:276:ILE:HG12	1.65	0.79
1:A:761:ASP:OD1	1:A:763:ASN:HB2	1.83	0.79
1:A:917:PHE:HB3	2:B:278:TYR:CE1	2.18	0.79
1:A:807:VAL:HG22	1:A:808:PRO:HD2	1.64	0.79
1:A:947:LYS:HD2	1:A:964:LEU:CD2	2.11	0.79
1:A:57:VAL:CG2	1:A:215:LEU:CD2	2.58	0.78
1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLN:HE21	1.85	0.78
1:A:674:ILE:HG23	1:A:674:ILE:O	1.83	0.78
1:A:877:ASP:O	1:A:880:THR:HG22	1.84	0.78
1:A:991:MET:HG3	1:A:992:PRO:HD2	1.65	0.78
1:A:598:VAL:O	1:A:598:VAL:HG13	1.83	0.78
1:A:173:LEU:N	1:A:173:LEU:HD12	1.98	0.78
2:B:68:PRO:HG2	2:B:69:TYR:CE2	2.18	0.78
1:A:915:TRP:HZ3	2:B:76:GLN:HG3	1.49	0.78
1:A:441:ALA:O	1:A:456:VAL:HG13	1.84	0.78
1:A:511:ARG:HB3	1:A:511:ARG:HH11	1.47	0.78
1:A:479:TYR:O	1:A:482:ARG:HG2	1.83	0.78
1:A:266:LEU:HD23	1:A:267:VAL:N	1.99	0.78
1:A:860:ALA:O	1:A:864:PHE:HB3	1.84	0.78
2:B:83:THR:C	2:B:84:LEU:HD12	2.03	0.78
1:A:481:GLU:O	1:A:484:PRO:HD3	1.84	0.78
1:A:887:TRP:CH2	1:A:907:LEU:HG	2.14	0.78
1:A:690:ALA:C	1:A:693:THR:HG22	2.04	0.78
1:A:994:ARG:HH21	2:B:75:ASP:CB	1.95	0.78
1:A:45:LYS:HZ2	1:A:281:SER:HB2	1.44	0.77
1:A:667:LYS:HA	1:A:667:LYS:NZ	1.98	0.77
1:A:962:ARG:O	1:A:965:VAL:HG12	1.84	0.77
2:B:77:LEU:HD23	2:B:186:ILE:HG13	1.66	0.77
1:A:657:LEU:O	1:A:658:ARG:CG	2.32	0.77
1:A:399:HIS:CD2	1:A:408:SER:HA	2.19	0.77
1:A:511:ARG:HG2	1:A:512:HIS:H	1.49	0.77
1:A:918:GLY:HA3	2:B:276:ASP:HB3	1.66	0.77
1:A:45:LYS:HZ3	1:A:281:SER:HB2	1.46	0.77
1:A:891:LEU:O	1:A:895:LEU:CD2	2.32	0.77
1:A:903:HIS:HD2	1:A:904:LEU:HA	1.49	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:891:LEU:HG	1:A:910:SER:OG	1.85	0.77
1:A:891:LEU:O	1:A:895:LEU:HD23	1.85	0.77
1:A:303:ILE:O	1:A:307:LEU:HD23	1.84	0.76
1:A:443:LYS:HE2	1:A:457:ILE:CG1	2.15	0.76
1:A:791:LYS:HG3	1:A:935:ILE:HG21	1.65	0.76
2:B:32:ARG:HH11	2:B:32:ARG:HG3	1.49	0.76
1:A:146:ILE:O	1:A:149:VAL:CG2	2.34	0.76
1:A:847:ASN:HD22	1:A:849:LYS:H	1.33	0.76
2:B:136:TYR:CE1	2:B:190:LEU:HB3	2.20	0.76
1:A:615:CYS:O	1:A:618:ALA:HB3	1.84	0.76
2:B:259:VAL:HG23	2:B:259:VAL:O	1.86	0.76
1:A:97:GLU:CB	1:A:99:VAL:HG22	2.14	0.76
1:A:934:SER:HA	1:A:1001:PRO:HG3	1.66	0.76
1:A:392:GLN:OE1	1:A:413:GLU:HB3	1.86	0.76
1:A:411:THR:HG21	1:A:601:ILE:CG2	2.16	0.76
1:A:625:VAL:HG11	1:A:707:LYS:HG3	1.66	0.76
1:A:786:ALA:HB1	1:A:946:ARG:NH1	2.01	0.76
1:A:978:LEU:HD21	1:A:990:PHE:CD2	2.20	0.76
1:A:574:TYR:OH	1:A:588:PRO:HD3	1.85	0.76
1:A:650:VAL:CG1	1:A:651:GLU:N	2.48	0.76
1:A:905:GLN:HG3	2:B:278:TYR:CG	2.20	0.76
2:B:213:LEU:HD23	2:B:213:LEU:O	1.85	0.76
1:A:173:LEU:O	1:A:173:LEU:HD13	1.86	0.76
1:A:564:PHE:CE1	1:A:598:VAL:HG12	2.17	0.76
1:A:223:ASP:O	1:A:256:THR:HG23	1.86	0.76
1:A:397:VAL:HG21	1:A:468:PHE:HB2	1.66	0.76
1:A:380:SER:O	1:A:620:ILE:HG23	1.85	0.76
2:B:126:GLU:HA	2:B:153:LYS:HZ1	1.50	0.76
1:A:166:ILE:HA	1:A:753:ASN:HB3	1.67	0.76
2:B:189:PHE:HZ	2:B:268:HIS:HB3	1.48	0.76
1:A:56:SER:CB	1:A:59:GLU:OE2	2.35	0.75
1:A:524:LEU:O	1:A:524:LEU:HD13	1.85	0.75
1:A:916:THR:HG22	1:A:919:GLN:HG3	1.67	0.75
1:A:242:HIS:HD2	1:A:244:SER:H	1.33	0.75
1:A:377:GLY:O	1:A:378:SER:OG	2.03	0.75
1:A:427:TRP:HH2	1:A:468:PHE:HE2	1.35	0.75
1:A:503:THR:HG23	1:A:503:THR:O	1.86	0.75
2:B:148:THR:HG23	2:B:148:THR:O	1.84	0.75
1:A:430:LEU:O	1:A:433:VAL:HG12	1.86	0.75
1:A:286:VAL:CB	1:A:735:LYS:HE2	2.13	0.75
1:A:345:LEU:O	1:A:348:THR:HG22	1.85	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:443:LYS:HE2	1:A:457:ILE:HD11	1.67	0.75
1:A:916:THR:HG22	1:A:919:GLN:CG	2.17	0.75
1:A:481:GLU:HA	1:A:481:GLU:OE1	1.86	0.75
1:A:322:ILE:HG23	1:A:324:TYR:CD2	2.21	0.75
1:A:410:ASP:HB3	1:A:415:GLN:OE1	1.85	0.75
1:A:917:PHE:CZ	1:A:921:LEU:HD11	2.21	0.75
1:A:1015:ARG:HD2	1:A:1031:LEU:HD23	1.69	0.75
1:A:254:PHE:HE2	1:A:276:ILE:HD11	1.52	0.74
1:A:1012:ASP:OD2	1:A:1016:LYS:HE3	1.87	0.74
2:B:272:ASP:HB3	2:B:276:ASP:OD1	1.86	0.74
1:A:793:ILE:HB	1:A:794:PRO:HD3	1.69	0.74
1:A:947:LYS:CD	1:A:964:LEU:HD22	2.16	0.74
1:A:994:ARG:CD	2:B:73:TYR:CZ	2.71	0.74
2:B:143:LEU:HB3	2:B:145:PRO:HD2	1.69	0.74
1:A:181:ILE:CD1	1:A:186:LYS:HB3	2.17	0.74
1:A:70:LYS:HD3	1:A:184:GLY:CA	2.17	0.74
1:A:93:ARG:NH2	1:A:285:GLY:HA3	2.02	0.74
1:A:495:ASN:HB3	1:A:497:PHE:CD2	2.22	0.74
1:A:535:GLN:HG2	1:A:536:GLU:O	1.87	0.74
1:A:309:ILE:HG23	1:A:310:LEU:H	1.52	0.74
1:A:381:VAL:HG13	1:A:721:VAL:HG12	1.70	0.74
1:A:791:LYS:HE3	1:A:939:GLN:NE2	2.01	0.74
1:A:940:ILE:HD13	1:A:968:ILE:HG13	1.70	0.74
1:A:69:THR:CG2	1:A:70:LYS:N	2.50	0.74
1:A:820:GLU:HG3	1:A:821:LEU:CD1	2.18	0.74
1:A:917:PHE:CE2	1:A:921:LEU:HD11	2.22	0.74
1:A:993:ILE:HD13	1:A:993:ILE:H	1.51	0.74
1:A:311:PHE:O	1:A:314:THR:HG22	1.86	0.74
1:A:552:LEU:CD2	1:A:552:LEU:N	2.44	0.74
1:A:887:TRP:HH2	1:A:907:LEU:CG	1.98	0.73
2:B:68:PRO:HD2	2:B:69:TYR:CD2	2.24	0.73
1:A:435:THR:HG23	1:A:436:LEU:HD12	1.69	0.73
1:A:53:HIS:H	1:A:53:HIS:CD2	2.07	0.73
1:A:356:THR:HG21	1:A:777:ILE:HD12	1.69	0.73
1:A:618:ALA:CB	1:A:620:ILE:HD12	2.18	0.73
1:A:978:LEU:HD21	1:A:990:PHE:CZ	2.23	0.73
1:A:446:GLN:OE1	1:A:454:ARG:HB2	1.89	0.73
1:A:864:PHE:CD1	1:A:865:GLN:HG3	2.21	0.73
1:A:537:LEU:CD1	1:A:538:PRO:HD2	2.19	0.73
1:A:501:ILE:HD13	1:A:580:PHE:CD2	2.23	0.73
1:A:674:ILE:HG13	1:A:678:GLN:CD	2.09	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:708:LEU:O	1:A:708:LEU:HD13	1.88	0.73
1:A:898:GLN:O	1:A:904:LEU:HD13	1.89	0.73
1:A:915:TRP:CH2	1:A:923:GLN:NE2	2.56	0.73
1:A:916:THR:HG23	1:A:919:GLN:H	1.53	0.73
2:B:261:VAL:HG22	2:B:283:GLU:OE1	1.89	0.72
1:A:567:LEU:HB2	1:A:592:LEU:HD22	1.71	0.72
1:A:994:ARG:NH1	2:B:73:TYR:HB3	2.04	0.72
2:B:139:GLN:HB2	2:B:232:TYR:CZ	2.24	0.72
1:A:820:GLU:HG3	1:A:821:LEU:HD12	1.70	0.72
2:B:85:ARG:CB	2:B:180:ILE:HG13	2.19	0.72
1:A:147:ALA:O	1:A:150:VAL:HG12	1.87	0.72
1:A:394:ARG:NH1	1:A:452:PRO:CB	2.44	0.72
1:A:564:PHE:CE1	1:A:598:VAL:CG1	2.71	0.72
2:B:68:PRO:HD2	2:B:69:TYR:N	2.03	0.72
2:B:77:LEU:HD23	2:B:186:ILE:CG1	2.19	0.72
1:A:827:PRO:HG2	1:A:971:GLN:NE2	2.04	0.72
1:A:933:ILE:HD11	1:A:979:CYS:SG	2.29	0.72
1:A:316:PHE:CD1	1:A:329:ALA:HB1	2.24	0.72
1:A:442:PHE:CE2	1:A:466:LEU:HD11	2.25	0.72
1:A:818:PHE:O	1:A:822:CYS:HB2	1.89	0.72
1:A:994:ARG:NH2	2:B:75:ASP:CB	2.51	0.72
1:A:119:ILE:HG23	1:A:334:MET:HE2	1.67	0.72
1:A:434:LEU:HD23	1:A:564:PHE:CE2	2.24	0.72
1:A:855:ASN:HD22	1:A:857:PRO:CD	2.02	0.72
1:A:905:GLN:O	1:A:916:THR:HA	1.89	0.72
1:A:927:CYS:O	1:A:930:VAL:HG22	1.88	0.72
1:A:69:THR:HG23	1:A:70:LYS:H	1.54	0.72
1:A:175:PRO:HA	1:A:207:ARG:HH21	1.54	0.72
1:A:760:LEU:HD22	1:A:760:LEU:N	2.05	0.71
1:A:815:THR:CG2	1:A:932:PHE:HB2	2.19	0.71
1:A:807:VAL:O	1:A:896:ARG:HG2	1.90	0.71
1:A:53:HIS:NE2	1:A:245:PRO:HG3	2.04	0.71
1:A:359:ARG:O	1:A:362:SER:HB2	1.91	0.71
1:A:486:VAL:HG22	1:A:501:ILE:O	1.90	0.71
1:A:652:ASP:O	1:A:655:ALA:N	2.18	0.71
1:A:743:MET:HE3	1:A:762:ASP:HA	1.73	0.71
1:A:175:PRO:HA	1:A:207:ARG:NH2	2.05	0.71
1:A:65:GLN:NE2	1:A:65:GLN:CA	2.53	0.71
1:A:112:LEU:O	1:A:115:VAL:HG12	1.91	0.71
1:A:520:PRO:O	1:A:523:VAL:HG12	1.90	0.71
1:A:869:ILE:HG12	2:B:51:MET:CE	2.20	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:933:ILE:O	1:A:936:GLU:HG2	1.91	0.71
1:A:165:ASN:O	1:A:753:ASN:CG	2.29	0.70
1:A:250:ASN:C	1:A:251:ILE:HD12	2.11	0.70
1:A:693:THR:HG23	1:A:694:HIS:CG	2.25	0.70
1:A:806:SER:HA	1:A:896:ARG:HD3	1.72	0.70
1:A:888:PHE:HB3	1:A:889:PRO:HD2	1.73	0.70
1:A:768:VAL:O	1:A:771:VAL:HG22	1.90	0.70
1:A:775:ARG:CD	1:A:840:ILE:HG23	2.19	0.70
1:A:916:THR:CG2	1:A:919:GLN:HG3	2.20	0.70
2:B:57:LEU:O	2:B:61:VAL:HG13	1.91	0.70
1:A:399:HIS:O	1:A:400:LEU:HD12	1.90	0.70
1:A:759:LEU:HD12	1:A:763:ASN:O	1.91	0.70
1:A:915:TRP:CZ3	2:B:76:GLN:HG3	2.27	0.70
1:A:97:GLU:CB	1:A:99:VAL:CG2	2.69	0.70
1:A:347:ALA:O	1:A:350:THR:HG22	1.91	0.70
1:A:905:GLN:HG3	2:B:278:TYR:CB	2.20	0.70
1:A:463:THR:O	1:A:467:LYS:HD3	1.91	0.70
2:B:41:SER:O	2:B:45:VAL:HG23	1.91	0.70
1:A:396:THR:HG23	1:A:397:VAL:H	1.55	0.70
1:A:315:PHE:HB2	1:A:336:ILE:CD1	2.21	0.70
1:A:1026:TRP:HE1	2:B:40:ILE:HD12	1.56	0.70
1:A:426:THR:HA	1:A:531:LEU:HD23	1.72	0.69
1:A:575:PRO:HB3	1:A:576:PRO:HD2	1.74	0.69
1:A:759:LEU:HD11	1:A:766:SER:HB2	1.74	0.69
1:A:791:LYS:CD	1:A:819:ILE:HG21	2.21	0.69
1:A:905:GLN:CD	2:B:278:TYR:HD2	1.95	0.69
1:A:999:LEU:H	1:A:999:LEU:HD12	1.57	0.69
1:A:846:ARG:HB2	1:A:851:ASP:OD1	1.92	0.69
1:A:76:LEU:O	1:A:80:LEU:HD13	1.92	0.69
1:A:328:ARG:HG3	1:A:332:PHE:CE2	2.26	0.69
2:B:180:ILE:HD12	2:B:180:ILE:O	1.90	0.69
1:A:651:GLU:HA	1:A:654:ALA:HB2	1.74	0.69
1:A:817:LEU:HD23	1:A:820:GLU:OE2	1.91	0.69
1:A:435:THR:HG23	1:A:436:LEU:HD13	1.73	0.69
1:A:903:HIS:HE1	2:B:87:ASP:HB2	1.58	0.69
2:B:32:ARG:CG	2:B:32:ARG:NH1	2.51	0.69
1:A:167:ILE:O	1:A:171:LYS:HG2	1.92	0.69
1:A:614:LYS:O	1:A:617:THR:HG22	1.91	0.69
1:A:806:SER:HA	1:A:896:ARG:CD	2.23	0.69
1:A:216:GLN:CG	1:A:264:GLN:HB2	2.21	0.69
1:A:702:THR:HA	1:A:706:GLN:NE2	2.08	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:905:GLN:C	2:B:83:THR:HG22	2.13	0.69
1:A:917:PHE:O	1:A:921:LEU:HG	1.93	0.69
1:A:940:ILE:HG12	1:A:968:ILE:HD12	1.74	0.69
1:A:109:LEU:CG	1:A:346:LEU:HD22	2.22	0.69
1:A:72:LEU:HD22	1:A:198:ASP:OD1	1.93	0.69
1:A:690:ALA:O	1:A:693:THR:CG2	2.38	0.69
1:A:903:HIS:HD2	1:A:903:HIS:C	1.90	0.69
1:A:937:MET:O	1:A:940:ILE:HG22	1.92	0.69
2:B:229:PHE:HB3	2:B:230:PRO:HA	1.74	0.69
1:A:309:ILE:O	1:A:309:ILE:HG12	1.93	0.69
1:A:442:PHE:CZ	1:A:466:LEU:CD1	2.76	0.69
1:A:811:LEU:HD23	1:A:816:ILE:HD11	1.73	0.69
1:A:443:LYS:HE2	1:A:457:ILE:CD1	2.23	0.68
1:A:460:ALA:O	1:A:463:THR:HG22	1.93	0.68
1:A:119:ILE:O	1:A:122:ILE:HG22	1.92	0.68
1:A:605:ARG:HB2	1:A:608:VAL:HG23	1.75	0.68
1:A:146:ILE:HD13	1:A:146:ILE:C	2.14	0.68
1:A:761:ASP:O	1:A:762:ASP:HB2	1.93	0.68
1:A:791:LYS:CG	1:A:935:ILE:HG21	2.22	0.68
2:B:49:VAL:HG12	2:B:50:VAL:N	2.09	0.68
1:A:847:ASN:ND2	1:A:849:LYS:H	1.91	0.68
2:B:189:PHE:CZ	2:B:268:HIS:HB3	2.28	0.68
1:A:507:PRO:C	1:A:510:PRO:HD3	2.14	0.68
1:A:970:PHE:O	1:A:974:ILE:HG12	1.94	0.68
1:A:366:VAL:HG12	1:A:760:LEU:HD21	1.74	0.68
1:A:925:TYR:HA	1:A:928:TYR:CD2	2.25	0.68
1:A:253:PHE:CD1	1:A:275:ILE:HD13	2.28	0.68
1:A:833:TYR:CD1	1:A:963:ILE:HG21	2.29	0.68
1:A:122:ILE:HD13	1:A:126:ILE:HG12	1.75	0.68
1:A:315:PHE:HA	1:A:318:VAL:CG2	2.24	0.68
1:A:427:TRP:HH2	1:A:468:PHE:CE2	2.12	0.68
2:B:249:LEU:CD1	2:B:286:LEU:HD12	2.24	0.68
1:A:178:ALA:CB	1:A:194:LEU:HD11	2.24	0.67
1:A:723:VAL:HG23	1:A:737:ALA:CB	2.21	0.67
1:A:786:ALA:HB3	1:A:946:ARG:CD	2.23	0.67
1:A:309:ILE:CG2	1:A:310:LEU:N	2.55	0.67
1:A:915:TRP:CZ3	1:A:923:GLN:NE2	2.63	0.67
1:A:1003:PRO:O	1:A:1007:LEU:HD13	1.93	0.67
2:B:149:LYS:CD	2:B:232:TYR:CD2	2.78	0.67
1:A:53:HIS:HB3	1:A:251:ILE:CD1	2.25	0.67
2:B:139:GLN:HG2	2:B:149:LYS:HB3	1.75	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:87:ASN:ND2	1:A:271:GLY:H	1.91	0.67
1:A:661:VAL:HG23	1:A:662:ASP:N	2.08	0.67
1:A:923:GLN:NE2	2:B:76:GLN:HG2	2.08	0.67
1:A:531:LEU:HD11	1:A:534:GLY:O	1.93	0.67
1:A:693:THR:CG2	1:A:694:HIS:CE1	2.77	0.67
1:A:916:THR:CG2	1:A:919:GLN:H	2.08	0.67
1:A:294:ALA:O	1:A:297:ILE:HG12	1.93	0.67
1:A:487:CYS:SG	1:A:580:PHE:CB	2.81	0.67
1:A:793:ILE:H	1:A:793:ILE:HD12	1.59	0.67
1:A:887:TRP:CH2	1:A:907:LEU:CD2	2.78	0.67
1:A:896:ARG:HB2	1:A:897:PRO:HD3	1.76	0.67
1:A:994:ARG:NH2	2:B:73:TYR:HB3	2.09	0.67
2:B:149:LYS:HD3	2:B:232:TYR:CD2	2.30	0.67
2:B:176:LYS:HB3	2:B:249:LEU:O	1.94	0.67
2:B:178:CYS:SG	2:B:248:LYS:HE3	2.34	0.67
1:A:171:LYS:C	1:A:173:LEU:H	1.98	0.67
1:A:412:THR:HG22	1:A:413:GLU:N	2.10	0.67
1:A:903:HIS:CB	2:B:88:VAL:O	2.39	0.67
2:B:49:VAL:HG12	2:B:50:VAL:H	1.59	0.67
1:A:56:SER:HB3	1:A:59:GLU:OE2	1.95	0.67
1:A:115:VAL:O	1:A:119:ILE:HG13	1.95	0.67
1:A:160:GLU:C	1:A:162:LYS:H	1.99	0.67
1:A:167:ILE:HG23	1:A:168:ALA:N	2.10	0.67
1:A:649:THR:HG23	1:A:652:ASP:H	1.59	0.67
2:B:283:GLU:O	2:B:284:PHE:CD1	2.47	0.67
1:A:48:MET:CE	1:A:246:LEU:HG	2.25	0.66
1:A:324:TYR:HD1	1:A:328:ARG:HG2	1.56	0.66
1:A:693:THR:HG21	1:A:694:HIS:CE1	2.31	0.66
1:A:877:ASP:OD1	1:A:930:VAL:HG23	1.95	0.66
1:A:81:LEU:HD23	1:A:81:LEU:O	1.93	0.66
1:A:785:ILE:O	1:A:788:THR:HG22	1.95	0.66
1:A:811:LEU:HD11	1:A:815:THR:HG21	1.78	0.66
1:A:901:ASN:CB	1:A:904:LEU:HD12	2.06	0.66
1:A:923:GLN:CD	2:B:76:GLN:HG2	2.14	0.66
1:A:315:PHE:HB2	1:A:336:ILE:HD13	1.77	0.66
1:A:855:ASN:HD22	1:A:857:PRO:HD2	1.58	0.66
1:A:880:THR:HG23	1:A:997:TRP:CZ3	2.30	0.66
1:A:947:LYS:CE	1:A:964:LEU:HD22	2.24	0.66
1:A:443:LYS:HG3	1:A:455:ILE:CG2	2.16	0.66
1:A:657:LEU:O	1:A:658:ARG:CB	2.43	0.66
1:A:922:TYR:CZ	2:B:275:HIS:CE1	2.84	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:78:LYS:HG2	2:B:79:SER:N	2.09	0.66
1:A:726:ASP:OD1	1:A:743:MET:HG3	1.96	0.66
2:B:78:LYS:HD3	2:B:78:LYS:N	2.11	0.66
1:A:79:GLU:OE1	1:A:79:GLU:CA	2.37	0.66
1:A:399:HIS:CD2	1:A:408:SER:HB3	2.30	0.66
1:A:427:TRP:CH2	1:A:468:PHE:HE2	2.13	0.66
1:A:459:ASP:OD1	1:A:462:GLU:HB2	1.94	0.66
1:A:712:GLU:O	1:A:716:ARG:HG3	1.95	0.66
2:B:261:VAL:HG13	2:B:282:VAL:O	1.96	0.66
1:A:212:ILE:HD11	1:A:265:GLY:O	1.96	0.66
1:A:442:PHE:CE1	1:A:466:LEU:HD13	2.31	0.66
2:B:77:LEU:HD21	2:B:186:ILE:HB	1.78	0.66
1:A:291:THR:HG22	1:A:292:PRO:N	2.11	0.65
1:A:315:PHE:CZ	1:A:800:LEU:HD13	2.31	0.65
1:A:316:PHE:CE1	1:A:329:ALA:HB3	2.31	0.65
1:A:623:ILE:HG12	1:A:697:MET:CG	2.26	0.65
1:A:786:ALA:HB1	1:A:946:ARG:CZ	2.27	0.65
1:A:791:LYS:CD	1:A:819:ILE:CG2	2.74	0.65
1:A:442:PHE:CE2	1:A:466:LEU:CD1	2.80	0.65
1:A:524:LEU:HD22	1:A:527:CYS:SG	2.36	0.65
1:A:360:LEU:HD13	1:A:363:LYS:CD	2.19	0.65
1:A:966:ILE:HG23	1:A:970:PHE:CE2	2.32	0.65
1:A:1014:ILE:HG23	1:A:1015:ARG:N	2.12	0.65
1:A:452:PRO:HG2	1:A:453:LYS:HD2	1.76	0.65
1:A:794:PRO:HG3	1:A:870:GLN:HB2	1.76	0.65
1:A:903:HIS:CD2	1:A:904:LEU:HA	2.32	0.65
1:A:522:ARG:O	1:A:526:ARG:HG3	1.96	0.65
1:A:752:LYS:NZ	1:A:758:ILE:HD12	2.10	0.65
1:A:491:PHE:CZ	1:A:496:LYS:HE2	2.30	0.65
1:A:1030:GLU:HB2	1:A:1031:LEU:HD12	1.78	0.65
1:A:122:ILE:HD13	1:A:122:ILE:O	1.96	0.65
1:A:200:VAL:HG12	1:A:202:MET:SD	2.36	0.65
1:A:775:ARG:HH11	1:A:840:ILE:C	1.96	0.65
1:A:45:LYS:HZ2	1:A:281:SER:CB	2.01	0.65
1:A:181:ILE:CG1	1:A:199:LEU:HD23	2.26	0.65
1:A:791:LYS:CD	1:A:935:ILE:HG21	2.27	0.65
1:A:876:THR:HG21	1:A:1004:PHE:CZ	2.32	0.65
1:A:87:ASN:HA	1:A:270:THR:CG2	2.26	0.65
1:A:557:LEU:HD22	1:A:559:GLU:OE2	1.96	0.65
1:A:923:GLN:HG3	2:B:76:GLN:CG	2.24	0.65
1:A:1014:ILE:CG2	1:A:1015:ARG:N	2.59	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:443:LYS:CG	1:A:455:ILE:HG23	2.16	0.64
1:A:489:ILE:CG1	1:A:582:VAL:HG13	2.26	0.64
1:A:539:LEU:CD2	1:A:544:ARG:HG3	2.27	0.64
1:A:885:GLU:HG3	1:A:923:GLN:NE2	2.12	0.64
1:A:286:VAL:HG21	1:A:735:LYS:HG2	1.77	0.64
1:A:841:MET:HA	1:A:841:MET:HE1	1.79	0.64
1:A:207:ARG:HG2	1:A:257:MET:HG2	1.72	0.64
1:A:338:VAL:HG23	1:A:343:GLU:OE2	1.98	0.64
2:B:213:LEU:HD21	2:B:249:LEU:HD22	1.80	0.64
1:A:116:ALA:HB3	1:A:145:LEU:HD13	1.79	0.64
1:A:124:PHE:CA	1:A:127:GLN:HG2	2.26	0.64
1:A:775:ARG:HD3	1:A:840:ILE:HG23	1.77	0.64
1:A:903:HIS:CE1	2:B:87:ASP:HB2	2.33	0.64
1:A:227:LEU:HD21	1:A:275:ILE:HD11	1.78	0.64
1:A:923:GLN:HE21	2:B:76:GLN:HG2	1.62	0.64
2:B:181:ILE:HG22	2:B:224:TYR:OH	1.97	0.64
1:A:284:SER:O	1:A:286:VAL:N	2.25	0.64
1:A:212:ILE:HD11	1:A:265:GLY:CA	2.27	0.64
1:A:381:VAL:HG22	1:A:382:ILE:N	2.10	0.64
1:A:559:GLU:CG	1:A:600:MET:O	2.34	0.64
2:B:54:ILE:O	2:B:57:LEU:HB3	1.97	0.64
1:A:801:ILE:O	1:A:805:VAL:HG12	1.98	0.64
2:B:77:LEU:CG	2:B:186:ILE:HD12	2.26	0.64
1:A:308:ALA:HA	1:A:340:TYR:CD2	2.32	0.64
1:A:312:GLY:C	1:A:333:PHE:HD1	2.02	0.64
2:B:271:PHE:HB3	2:B:281:LYS:HE3	1.79	0.64
1:A:179:THR:HG23	1:A:179:THR:O	1.98	0.63
1:A:903:HIS:CD2	1:A:904:LEU:CA	2.78	0.63
2:B:130:ASN:OD1	2:B:153:LYS:HD2	1.97	0.63
1:A:442:PHE:CZ	1:A:466:LEU:HD22	2.34	0.63
1:A:994:ARG:HH22	2:B:73:TYR:HB3	1.62	0.63
1:A:286:VAL:HG21	1:A:735:LYS:CG	2.28	0.63
1:A:322:ILE:HG23	1:A:324:TYR:CE2	2.33	0.63
1:A:316:PHE:CE1	1:A:329:ALA:CB	2.82	0.63
1:A:483:PHE:CZ	1:A:505:GLU:HG2	2.34	0.63
1:A:791:LYS:HD2	1:A:819:ILE:HG23	1.80	0.63
2:B:85:ARG:HB2	2:B:180:ILE:HD11	1.81	0.63
2:B:148:THR:O	2:B:148:THR:CG2	2.46	0.63
1:A:346:LEU:HD23	1:A:346:LEU:H	1.62	0.63
1:A:473:LEU:HG	1:A:479:TYR:CE1	2.34	0.63
1:A:120:CYS:CB	1:A:142:ALA:HB2	2.29	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:786:ALA:CB	1:A:858:LEU:HD21	2.21	0.63
2:B:129:ILE:HG13	2:B:130:ASN:N	2.13	0.63
1:A:275:ILE:HG13	1:A:276:ILE:N	2.13	0.63
1:A:503:THR:O	1:A:503:THR:CG2	2.47	0.63
2:B:137:PHE:HD1	2:B:139:GLN:NE2	1.97	0.63
2:B:49:VAL:CG1	2:B:50:VAL:N	2.61	0.63
1:A:134:THR:OG1	1:A:138:ASN:HB2	1.98	0.62
1:A:232:GLU:HB2	1:A:233:PRO:HD2	1.80	0.62
1:A:300:PHE:CD1	1:A:854:VAL:HG21	2.34	0.62
1:A:328:ARG:O	1:A:331:VAL:HG22	1.99	0.62
2:B:69:TYR:HE1	2:B:235:LYS:HZ2	1.46	0.62
2:B:84:LEU:HD11	2:B:282:VAL:HG21	1.79	0.62
2:B:137:PHE:HD1	2:B:139:GLN:HE21	1.46	0.62
1:A:354:SER:N	1:A:370:LEU:HD11	2.14	0.62
1:A:991:MET:CG	1:A:992:PRO:HD2	2.29	0.62
1:A:298:GLU:O	1:A:301:VAL:HG22	2.00	0.62
1:A:650:VAL:HG13	1:A:651:GLU:N	2.13	0.62
1:A:787:TYR:CE1	1:A:943:VAL:HG22	2.35	0.62
1:A:830:SER:HB3	1:A:963:ILE:HG23	1.81	0.62
1:A:961:ASN:OD1	1:A:963:ILE:HG22	2.00	0.62
1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLN:NE2	2.45	0.62
1:A:400:LEU:HD12	1:A:400:LEU:N	2.15	0.62
1:A:1015:ARG:CD	1:A:1031:LEU:CD2	2.78	0.62
1:A:66:THR:OG1	1:A:72:LEU:HD12	2.00	0.62
1:A:106:ALA:O	1:A:110:GLN:HB2	1.99	0.62
1:A:399:HIS:CD2	1:A:408:SER:CB	2.83	0.62
1:A:791:LYS:HG3	1:A:935:ILE:CG2	2.28	0.62
1:A:69:THR:CG2	1:A:70:LYS:H	2.11	0.62
1:A:398:SER:HB3	1:A:599:SER:O	1.98	0.62
1:A:743:MET:CE	1:A:762:ASP:HA	2.29	0.62
1:A:801:ILE:HG21	1:A:875:PHE:HE2	1.63	0.62
1:A:56:SER:HB2	1:A:59:GLU:OE2	1.99	0.62
1:A:360:LEU:O	1:A:363:LYS:HB2	2.00	0.62
1:A:392:GLN:HG3	1:A:604:PRO:O	2.00	0.62
1:A:49:GLU:HG2	1:A:50:ILE:N	2.15	0.62
1:A:70:LYS:O	1:A:181:ILE:HG22	2.00	0.62
1:A:807:VAL:CG2	1:A:808:PRO:HD2	2.30	0.62
1:A:815:THR:HG23	1:A:932:PHE:HB2	1.81	0.62
1:A:858:LEU:HD23	1:A:1033:TYR:CD2	2.35	0.62
1:A:914:GLU:HB2	2:B:184:ASN:HA	1.82	0.62
1:A:162:LYS:O	1:A:163:SER:HB2	1.99	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:309:ILE:CG2	1:A:310:LEU:H	2.13	0.61
1:A:775:ARG:HD2	1:A:840:ILE:HG21	1.75	0.61
1:A:807:VAL:HG22	1:A:808:PRO:CD	2.30	0.61
1:A:880:THR:HG21	1:A:1000:VAL:HG21	1.81	0.61
1:A:885:GLU:OE2	2:B:76:GLN:HB2	2.00	0.61
2:B:84:LEU:CD1	2:B:282:VAL:HG21	2.29	0.61
1:A:1015:ARG:HE	1:A:1031:LEU:HB3	1.64	0.61
1:A:254:PHE:O	1:A:255:SER:HB3	2.00	0.61
1:A:901:ASN:O	1:A:904:LEU:HD12	2.01	0.61
2:B:213:LEU:O	2:B:213:LEU:CD2	2.48	0.61
1:A:87:ASN:HA	1:A:270:THR:HG22	1.82	0.61
1:A:537:LEU:HD12	1:A:538:PRO:CD	2.25	0.61
1:A:873:ALA:HB2	1:A:1004:PHE:CB	2.29	0.61
2:B:81:GLY:HA2	2:B:280:GLY:H	1.65	0.61
1:A:353:LEU:C	1:A:370:LEU:HD11	2.20	0.61
1:A:345:LEU:HD13	1:A:788:THR:HG21	1.80	0.61
2:B:142:PHE:HE2	2:B:232:TYR:HA	1.65	0.61
1:A:411:THR:HG21	1:A:601:ILE:HG21	1.82	0.61
1:A:546:ALA:O	1:A:549:THR:OG1	2.15	0.61
1:A:79:GLU:O	1:A:79:GLU:OE2	2.19	0.61
1:A:312:GLY:C	1:A:333:PHE:CD1	2.74	0.61
1:A:346:LEU:HD23	1:A:346:LEU:N	2.16	0.61
1:A:400:LEU:HD22	1:A:427:TRP:HZ3	1.65	0.61
1:A:532:ILE:HG23	1:A:532:ILE:O	1.99	0.61
1:A:908:GLN:HA	1:A:913:GLN:O	2.00	0.61
2:B:85:ARG:O	2:B:86:PRO:O	2.19	0.61
2:B:177:PRO:HD3	2:B:288:ILE:HG13	1.82	0.61
1:A:775:ARG:HB3	1:A:840:ILE:HG21	1.82	0.61
1:A:872:PHE:O	1:A:876:THR:HG23	2.01	0.61
1:A:939:GLN:OE1	1:A:939:GLN:HA	1.99	0.61
1:A:674:ILE:HG21	1:A:699:PHE:CD2	2.36	0.60
1:A:163:SER:CB	1:A:368:LYS:HD3	2.31	0.60
1:A:505:GLU:HG3	1:A:506:ASP:N	2.14	0.60
1:A:567:LEU:HD12	1:A:592:LEU:HD22	1.83	0.60
1:A:827:PRO:CG	1:A:967:ALA:HB1	2.31	0.60
1:A:500:SER:O	1:A:514:LEU:HD12	2.01	0.60
1:A:511:ARG:HB3	1:A:511:ARG:CZ	2.30	0.60
1:A:782:LYS:HG2	1:A:853:LEU:O	2.01	0.60
1:A:801:ILE:HG21	1:A:875:PHE:CE2	2.36	0.60
1:A:166:ILE:CD1	1:A:753:ASN:HB3	2.31	0.60
1:A:794:PRO:HG3	1:A:870:GLN:CB	2.32	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:178:ALA:HB2	1:A:194:LEU:HD11	1.82	0.60
1:A:760:LEU:H	1:A:760:LEU:CD2	2.13	0.60
1:A:905:GLN:HG3	1:A:916:THR:OG1	2.02	0.60
1:A:1011:TYR:HE1	2:B:47:PHE:CE1	2.13	0.60
2:B:88:VAL:HG21	2:B:284:PHE:CE1	2.35	0.60
1:A:166:ILE:CA	1:A:753:ASN:ND2	2.64	0.60
1:A:324:TYR:HB3	1:A:328:ARG:HB3	1.82	0.60
1:A:539:LEU:HD22	1:A:544:ARG:HG3	1.84	0.60
1:A:811:LEU:HD13	1:A:931:PHE:HB3	1.84	0.60
1:A:208:VAL:HG21	1:A:253:PHE:O	2.01	0.60
1:A:313:ALA:O	1:A:316:PHE:HB3	2.02	0.60
1:A:442:PHE:CD1	1:A:456:VAL:HG22	2.37	0.60
1:A:446:GLN:NE2	1:A:455:ILE:HG22	2.17	0.60
1:A:608:VAL:HB	1:A:609:PRO:HD3	1.84	0.60
1:A:311:PHE:HA	1:A:314:THR:HG22	1.83	0.60
1:A:394:ARG:HH21	1:A:413:GLU:HB3	1.66	0.60
1:A:399:HIS:CB	1:A:407:HIS:O	2.46	0.60
1:A:994:ARG:CZ	2:B:73:TYR:HB3	2.32	0.60
1:A:70:LYS:HD3	1:A:184:GLY:HA3	1.82	0.60
1:A:72:LEU:HD11	1:A:197:GLY:C	2.23	0.60
1:A:307:LEU:HD22	1:A:307:LEU:N	2.16	0.60
1:A:336:ILE:CG2	1:A:340:TYR:CE1	2.84	0.60
1:A:545:GLU:HA	1:A:548:GLN:HB2	1.84	0.60
1:A:711:VAL:HG13	1:A:721:VAL:HG21	1.84	0.60
2:B:179:PHE:HE1	2:B:249:LEU:HG	1.67	0.60
1:A:163:SER:HB2	1:A:368:LYS:HB3	1.84	0.59
1:A:293:ILE:O	1:A:293:ILE:HD13	2.02	0.59
1:A:351:VAL:O	1:A:355:LEU:HG	2.01	0.59
1:A:922:TYR:CZ	1:A:991:MET:HE1	2.36	0.59
2:B:68:PRO:CD	2:B:69:TYR:H	2.13	0.59
2:B:252:VAL:HB	2:B:253:PRO:HD3	1.81	0.59
1:A:254:PHE:CD2	1:A:276:ILE:CD1	2.84	0.59
1:A:653:ILE:O	1:A:654:ALA:C	2.40	0.59
1:A:1030:GLU:CD	2:B:40:ILE:HD11	2.22	0.59
1:A:45:LYS:HZ1	1:A:281:SER:CB	2.12	0.59
1:A:528:SER:OG	1:A:591:GLY:HA2	2.02	0.59
1:A:640:VAL:HG23	1:A:642:ILE:HG13	1.84	0.59
2:B:83:THR:OG1	2:B:182:LYS:HD3	2.01	0.59
1:A:166:ILE:CA	1:A:753:ASN:HB3	2.32	0.59
1:A:212:ILE:CD1	1:A:265:GLY:C	2.69	0.59
1:A:255:SER:HB3	1:A:276:ILE:HG21	1.84	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:706:GLN:O	1:A:710:ILE:HG12	2.01	0.59
1:A:923:GLN:HE21	2:B:76:GLN:CG	2.16	0.59
1:A:117:ALA:CA	1:A:145:LEU:HD12	2.30	0.59
1:A:314:THR:HG23	1:A:315:PHE:CD1	2.37	0.59
1:A:827:PRO:HG3	1:A:967:ALA:HB1	1.84	0.59
1:A:511:ARG:HD2	1:A:569:LEU:O	2.02	0.59
1:A:764:PHE:CE1	1:A:767:ILE:HD12	2.37	0.59
2:B:32:ARG:NH1	2:B:32:ARG:HG2	2.18	0.59
1:A:127:GLN:HB2	1:A:132:ASP:OD2	2.01	0.59
1:A:165:ASN:O	1:A:753:ASN:CB	2.51	0.59
1:A:160:GLU:O	1:A:162:LYS:N	2.36	0.59
1:A:197:GLY:HA2	1:A:266:LEU:HD21	1.85	0.59
1:A:353:LEU:HB3	1:A:370:LEU:CD1	2.32	0.59
1:A:53:HIS:HB2	1:A:250:ASN:HD21	1.68	0.59
1:A:147:ALA:O	1:A:150:VAL:CG1	2.51	0.59
1:A:427:TRP:CE2	1:A:431:CYS:SG	2.96	0.59
1:A:451:VAL:CG1	1:A:471:LEU:HD13	2.33	0.59
1:A:60:LEU:HD22	1:A:213:ARG:HG2	1.85	0.59
1:A:114:TRP:CZ2	1:A:149:VAL:HG21	2.38	0.59
1:A:242:HIS:O	1:A:248:THR:HG22	2.02	0.59
1:A:340:TYR:CZ	1:A:796:LEU:CD2	2.85	0.59
1:A:684:PRO:O	1:A:688:VAL:HG23	2.02	0.59
1:A:858:LEU:HD13	1:A:858:LEU:C	2.24	0.59
1:A:906:ASP:HA	2:B:83:THR:HG21	1.85	0.59
2:B:38:VAL:HG23	2:B:39:TRP:CD1	2.37	0.59
2:B:282:VAL:CG1	2:B:284:PHE:CE2	2.86	0.59
1:A:114:TRP:CH2	1:A:149:VAL:HG21	2.38	0.58
1:A:332:PHE:O	1:A:335:ALA:HB3	2.03	0.58
1:A:443:LYS:HE2	1:A:457:ILE:HG13	1.85	0.58
1:A:661:VAL:HG22	1:A:662:ASP:N	2.18	0.58
1:A:752:LYS:HZ2	1:A:758:ILE:HD12	1.68	0.58
1:A:124:PHE:CD1	1:A:134:THR:HG21	2.37	0.58
1:A:353:LEU:HB3	1:A:370:LEU:HG	1.83	0.58
1:A:423:SER:O	1:A:424:SER:O	2.22	0.58
1:A:477:MET:HG3	1:A:478:GLY:H	1.67	0.58
2:B:273:ASN:HB3	2:B:274:PRO:HD3	1.84	0.58
1:A:121:LEU:HD23	1:A:121:LEU:O	2.03	0.58
1:A:174:VAL:O	1:A:175:PRO:O	2.21	0.58
1:A:220:ARG:HA	1:A:261:GLY:HA3	1.84	0.58
1:A:793:ILE:HD12	1:A:793:ILE:N	2.18	0.58
1:A:64:TYR:CE1	1:A:196:VAL:CG2	2.87	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:87:ASN:CG	1:A:270:THR:HG23	2.23	0.58
1:A:227:LEU:HD21	1:A:275:ILE:CD1	2.33	0.58
1:A:244:SER:O	1:A:248:THR:HG23	2.04	0.58
1:A:864:PHE:HD1	1:A:865:GLN:CG	2.13	0.58
1:A:884:GLN:O	2:B:71:PRO:HB2	2.04	0.58
2:B:84:LEU:CG	2:B:181:ILE:HG12	2.33	0.58
2:B:209:ASP:OD1	2:B:209:ASP:O	2.20	0.58
1:A:60:LEU:HD23	1:A:266:LEU:HD13	1.85	0.58
1:A:664:VAL:HG12	1:A:665:ASN:O	2.02	0.58
1:A:906:ASP:OD1	2:B:83:THR:OG1	2.21	0.58
1:A:994:ARG:HH22	2:B:75:ASP:HB2	1.64	0.58
1:A:227:LEU:HD12	1:A:227:LEU:N	2.18	0.58
1:A:524:LEU:HD21	1:A:539:LEU:HD11	1.84	0.58
1:A:922:TYR:HB3	2:B:76:GLN:HE22	1.69	0.58
2:B:78:LYS:HG2	2:B:79:SER:H	1.67	0.58
1:A:567:LEU:HD23	1:A:568:TYR:N	2.19	0.58
1:A:826:PHE:CB	1:A:827:PRO:HD3	2.31	0.58
1:A:911:TYR:CE2	2:B:71:PRO:HD3	2.39	0.58
2:B:68:PRO:CD	2:B:69:TYR:N	2.66	0.58
2:B:257:ASP:OD1	2:B:285:LYS:HB3	2.04	0.58
1:A:149:VAL:HG23	1:A:150:VAL:N	2.19	0.58
1:A:181:ILE:HB	1:A:199:LEU:HB3	1.85	0.58
1:A:968:ILE:HG23	1:A:969:VAL:N	2.19	0.58
1:A:994:ARG:HH21	2:B:75:ASP:CG	2.06	0.58
1:A:791:LYS:HE2	1:A:935:ILE:HG22	1.84	0.58
2:B:186:ILE:HG23	2:B:189:PHE:CB	2.32	0.58
1:A:1015:ARG:HD2	1:A:1031:LEU:HD22	1.85	0.57
2:B:264:ILE:HG12	2:B:265:LEU:N	2.18	0.57
1:A:164:THR:O	1:A:165:ASN:HB2	2.04	0.57
1:A:253:PHE:O	1:A:256:THR:HB	2.04	0.57
1:A:707:LYS:NZ	1:A:730:ASP:HB3	2.18	0.57
1:A:807:VAL:HG23	1:A:892:CYS:HB3	1.85	0.57
1:A:950:ARG:NH2	1:A:1020:ARG:HG3	2.19	0.57
2:B:77:LEU:HG	2:B:77:LEU:O	2.04	0.57
1:A:109:LEU:HD13	1:A:301:VAL:HG12	1.85	0.57
1:A:212:ILE:CG1	1:A:265:GLY:C	2.72	0.57
1:A:499:LEU:HB3	1:A:516:MET:HB3	1.87	0.57
1:A:922:TYR:HE2	1:A:991:MET:SD	2.18	0.57
1:A:482:ARG:HG3	1:A:483:PHE:CD1	2.39	0.57
1:A:721:VAL:HG23	1:A:721:VAL:O	2.03	0.57
1:A:827:PRO:HG2	1:A:971:GLN:HE21	1.70	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:394:ARG:HD2	1:A:452:PRO:O	2.04	0.57
1:A:575:PRO:CB	1:A:576:PRO:HD2	2.34	0.57
1:A:741:VAL:CG1	1:A:759:LEU:HD23	2.35	0.57
1:A:772:GLU:O	1:A:772:GLU:HG2	2.04	0.57
1:A:237:SER:H	1:A:249:ARG:HB3	1.69	0.57
1:A:791:LYS:HE3	1:A:824:ASP:OD2	2.04	0.57
1:A:276:ILE:HD12	1:A:277:GLY:N	2.20	0.57
1:A:940:ILE:CD1	1:A:968:ILE:HD12	2.35	0.57
1:A:969:VAL:O	1:A:972:VAL:HG12	2.05	0.57
1:A:221:LYS:HB2	1:A:260:GLU:HG2	1.86	0.57
1:A:356:THR:O	1:A:360:LEU:HD23	2.04	0.57
1:A:723:VAL:CG1	1:A:734:LEU:HD23	2.34	0.57
1:A:966:ILE:HG23	1:A:970:PHE:CD2	2.40	0.57
1:A:293:ILE:HG23	1:A:294:ALA:N	2.19	0.57
1:A:915:TRP:CH2	2:B:77:LEU:CB	2.88	0.57
1:A:918:GLY:CA	2:B:276:ASP:HB3	2.35	0.57
2:B:213:LEU:HD23	2:B:213:LEU:C	2.25	0.57
1:A:483:PHE:HE2	1:A:504:LEU:CD1	2.04	0.56
1:A:929:THR:HG23	1:A:990:PHE:HD1	1.70	0.56
1:A:113:MET:SD	1:A:346:LEU:HD11	2.45	0.56
1:A:129:SER:O	1:A:130:GLU:HG3	2.04	0.56
2:B:259:VAL:O	2:B:259:VAL:CG2	2.51	0.56
1:A:434:LEU:HD22	1:A:465:LEU:HD22	1.87	0.56
1:A:821:LEU:HD12	1:A:821:LEU:N	2.20	0.56
1:A:922:TYR:CG	1:A:991:MET:CE	2.81	0.56
2:B:276:ASP:OD1	2:B:276:ASP:N	2.36	0.56
1:A:87:ASN:CB	1:A:270:THR:HG23	2.36	0.56
1:A:235:THR:HG22	1:A:236:ARG:N	2.20	0.56
1:A:242:HIS:CD2	1:A:244:SER:H	2.19	0.56
1:A:336:ILE:HG22	1:A:340:TYR:CE1	2.41	0.56
1:A:376:LEU:HD22	1:A:770:GLY:CA	2.35	0.56
1:A:784:SER:CA	1:A:831:LEU:HD22	2.33	0.56
1:A:322:ILE:HG23	1:A:324:TYR:HD2	1.69	0.56
1:A:466:LEU:CD2	1:A:466:LEU:O	2.54	0.56
1:A:511:ARG:HH11	1:A:511:ARG:CB	2.18	0.56
1:A:613:LEU:O	1:A:613:LEU:HD13	2.05	0.56
1:A:792:ASN:O	1:A:796:LEU:HD13	2.05	0.56
1:A:805:VAL:CG1	1:A:807:VAL:HB	2.36	0.56
1:A:923:GLN:HG2	2:B:76:GLN:CD	2.26	0.56
1:A:113:MET:HE2	1:A:145:LEU:O	2.05	0.56
1:A:511:ARG:HG2	1:A:512:HIS:N	2.17	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:811:LEU:HD11	1:A:815:THR:CG2	2.35	0.56
1:A:836:ALA:HB1	1:A:838:SER:O	2.05	0.56
1:A:891:LEU:O	1:A:895:LEU:HD21	2.05	0.56
1:A:351:VAL:HG11	1:A:829:VAL:HG22	1.87	0.56
1:A:885:GLU:CG	1:A:923:GLN:NE2	2.68	0.56
1:A:113:MET:CE	1:A:148:VAL:HB	2.35	0.56
1:A:795:GLU:OE1	1:A:816:ILE:HG23	2.05	0.56
1:A:798:PRO:O	1:A:801:ILE:HG22	2.06	0.56
1:A:922:TYR:CE2	1:A:991:MET:HE1	2.40	0.56
1:A:90:ARG:HG3	1:A:272:ASP:OD2	2.05	0.56
1:A:311:PHE:O	1:A:315:PHE:HD1	1.88	0.56
1:A:399:HIS:CD2	1:A:408:SER:CA	2.88	0.56
1:A:442:PHE:CG	1:A:454:ARG:HD2	2.40	0.56
1:A:376:LEU:HB3	1:A:771:VAL:HA	1.88	0.56
1:A:557:LEU:HB2	1:A:559:GLU:CD	2.25	0.56
1:A:872:PHE:HB3	2:B:55:PHE:CD1	2.41	0.56
1:A:945:ILE:HB	1:A:1012:ASP:OD2	2.05	0.56
1:A:631:ILE:HG23	1:A:632:THR:N	2.21	0.55
1:A:690:ALA:CA	1:A:693:THR:HG22	2.36	0.55
1:A:911:TYR:CZ	2:B:71:PRO:HD3	2.41	0.55
1:A:922:TYR:CE1	2:B:275:HIS:CE1	2.94	0.55
1:A:189:ILE:HD12	1:A:193:GLN:HB2	1.87	0.55
1:A:599:SER:OG	1:A:600:MET:N	2.38	0.55
1:A:903:HIS:CE1	2:B:87:ASP:HA	2.41	0.55
1:A:940:ILE:HD13	1:A:968:ILE:CG1	2.35	0.55
1:A:947:LYS:HE3	1:A:958:PHE:O	2.06	0.55
1:A:124:PHE:HA	1:A:127:GLN:CG	2.35	0.55
1:A:207:ARG:HA	1:A:257:MET:HG3	1.89	0.55
1:A:442:PHE:CD2	1:A:466:LEU:HD11	2.42	0.55
1:A:708:LEU:CD1	1:A:712:GLU:HG3	2.37	0.55
1:A:925:TYR:HD1	1:A:989:ASN:HD21	1.53	0.55
2:B:77:LEU:CD2	2:B:186:ILE:HD12	2.37	0.55
1:A:57:VAL:HG12	1:A:58:ALA:N	2.20	0.55
1:A:63:LYS:C	1:A:65:GLN:NE2	2.60	0.55
1:A:254:PHE:HD2	1:A:276:ILE:HD11	1.69	0.55
1:A:280:ALA:O	1:A:281:SER:C	2.45	0.55
1:A:442:PHE:CE2	1:A:466:LEU:HD21	2.41	0.55
1:A:530:ILE:HD11	1:A:539:LEU:HG	1.88	0.55
2:B:84:LEU:HD11	2:B:181:ILE:HG12	1.87	0.55
1:A:78:ALA:O	1:A:79:GLU:C	2.45	0.55
1:A:169:SER:O	1:A:172:ASN:HB2	2.06	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:442:PHE:CE2	1:A:466:LEU:CD2	2.90	0.55
1:A:557:LEU:CD2	1:A:559:GLU:OE2	2.54	0.55
1:A:708:LEU:HD13	1:A:708:LEU:C	2.26	0.55
2:B:282:VAL:HG12	2:B:283:GLU:N	2.22	0.55
1:A:341:VAL:HG23	1:A:341:VAL:O	2.07	0.55
1:A:708:LEU:HD13	1:A:712:GLU:HG3	1.89	0.55
1:A:861:TYR:CE2	1:A:866:ILE:HG13	2.41	0.55
1:A:905:GLN:OE1	2:B:278:TYR:CD2	2.60	0.55
1:A:379:THR:O	1:A:620:ILE:HG12	2.07	0.55
1:A:790:THR:HA	1:A:862:SER:OG	2.06	0.55
1:A:661:VAL:HG22	1:A:662:ASP:H	1.72	0.54
2:B:87:ASP:CG	2:B:87:ASP:O	2.44	0.54
2:B:227:HIS:NE2	2:B:228:TYR:CE1	2.76	0.54
1:A:220:ARG:HH11	1:A:263:ALA:HB3	1.72	0.54
1:A:636:ILE:O	1:A:640:VAL:HG22	2.08	0.54
1:A:806:SER:O	1:A:896:ARG:HG3	2.07	0.54
1:A:109:LEU:CD2	1:A:346:LEU:HD22	2.37	0.54
1:A:143:LEU:O	1:A:146:ILE:HG22	2.07	0.54
1:A:623:ILE:HG12	1:A:697:MET:HG2	1.87	0.54
1:A:251:ILE:HD12	1:A:251:ILE:N	2.21	0.54
1:A:885:GLU:HG3	1:A:923:GLN:HE21	1.72	0.54
1:A:1015:ARG:CD	1:A:1031:LEU:HD22	2.37	0.54
1:A:119:ILE:HG22	1:A:334:MET:HB3	1.89	0.54
1:A:165:ASN:O	1:A:753:ASN:OD1	2.25	0.54
1:A:401:TRP:CZ2	1:A:404:ASN:HA	2.42	0.54
1:A:473:LEU:HD11	1:A:479:TYR:OH	2.08	0.54
1:A:784:SER:HA	1:A:831:LEU:CD2	2.35	0.54
2:B:47:PHE:O	2:B:51:MET:HG2	2.07	0.54
2:B:85:ARG:HE	2:B:86:PRO:N	2.05	0.54
2:B:134:GLU:HG2	2:B:135:LYS:H	1.73	0.54
1:A:446:GLN:O	1:A:448:ALA:N	2.40	0.54
1:A:637:ALA:HB1	1:A:643:ILE:HG12	1.89	0.54
1:A:1015:ARG:CD	1:A:1031:LEU:HD23	2.35	0.54
1:A:366:VAL:CG1	1:A:760:LEU:HD21	2.37	0.54
1:A:806:SER:HA	1:A:896:ARG:NE	2.23	0.54
1:A:856:GLU:H	1:A:856:GLU:CD	2.11	0.54
1:A:887:TRP:CH2	1:A:907:LEU:HD21	2.43	0.54
1:A:112:LEU:CD2	1:A:341:VAL:HG12	2.35	0.54
1:A:166:ILE:HG23	1:A:167:ILE:N	2.22	0.54
1:A:587:PHE:HB2	1:A:588:PRO:CD	2.33	0.54
1:A:991:MET:HG3	1:A:992:PRO:CD	2.34	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:254:ARG:CD	2:B:255:ASN:HD22	2.08	0.54
1:A:788:THR:HG23	1:A:789:LEU:N	2.22	0.54
1:A:1013:GLU:O	1:A:1017:LEU:HD13	2.08	0.54
1:A:48:MET:HE3	1:A:246:LEU:CG	2.34	0.54
1:A:146:ILE:C	1:A:146:ILE:CD1	2.76	0.54
1:A:340:TYR:CZ	1:A:796:LEU:HD21	2.43	0.54
1:A:693:THR:HG23	1:A:694:HIS:CE1	2.40	0.54
1:A:999:LEU:HD12	1:A:999:LEU:N	2.23	0.54
1:A:44:MET:O	1:A:44:MET:HG2	2.08	0.53
1:A:113:MET:HB2	1:A:149:VAL:CG1	2.38	0.53
1:A:147:ALA:HA	1:A:150:VAL:HG12	1.89	0.53
1:A:660:PRO:O	1:A:663:GLN:HB2	2.08	0.53
1:A:119:ILE:CG2	1:A:334:MET:HE1	2.28	0.53
1:A:282:LEU:O	1:A:282:LEU:CG	2.52	0.53
1:A:334:MET:O	1:A:337:VAL:HG23	2.08	0.53
1:A:925:TYR:CD1	1:A:989:ASN:ND2	2.75	0.53
1:A:940:ILE:CG1	1:A:968:ILE:HD12	2.36	0.53
1:A:180:VAL:CG1	1:A:194:LEU:CD2	2.86	0.53
1:A:332:PHE:HE1	1:A:799:TYR:HH	1.49	0.53
1:A:398:SER:OG	1:A:600:MET:O	2.27	0.53
1:A:412:THR:HG22	1:A:414:ASP:H	1.73	0.53
1:A:674:ILE:HG13	1:A:678:GLN:OE1	2.07	0.53
1:A:707:LYS:HZ3	1:A:730:ASP:HB3	1.73	0.53
2:B:85:ARG:HB2	2:B:180:ILE:CG1	2.38	0.53
1:A:391:THR:HA	1:A:604:PRO:CA	2.28	0.53
1:A:786:ALA:HA	1:A:858:LEU:HD11	1.91	0.53
1:A:864:PHE:CD1	1:A:864:PHE:C	2.82	0.53
1:A:905:GLN:HB3	2:B:83:THR:HG22	1.90	0.53
1:A:325:THR:OG1	1:A:327:LEU:HB2	2.08	0.53
1:A:450:PRO:HB2	1:A:453:LYS:HD3	1.88	0.53
1:A:554:LEU:HA	1:A:557:LEU:HD13	1.91	0.53
1:A:679:LEU:CD2	1:A:679:LEU:C	2.77	0.53
1:A:805:VAL:HG13	1:A:807:VAL:N	2.24	0.53
1:A:856:GLU:CG	1:A:857:PRO:HD3	2.35	0.53
2:B:231:TYR:CE2	2:B:233:GLY:HA2	2.43	0.53
1:A:208:VAL:HG22	1:A:256:THR:O	2.08	0.53
1:A:837:GLU:HB3	1:A:951:LEU:HG	1.90	0.53
1:A:1011:TYR:CZ	2:B:47:PHE:CZ	2.97	0.53
1:A:1015:ARG:HE	1:A:1031:LEU:CB	2.21	0.53
1:A:275:ILE:HG13	1:A:276:ILE:HG23	1.90	0.53
1:A:739:ILE:HG23	1:A:739:ILE:O	2.09	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:126:GLU:CG	2:B:127:GLY:N	2.61	0.53
1:A:187:PHE:CD2	1:A:188:GLN:O	2.62	0.53
1:A:469:SER:O	1:A:473:LEU:HB3	2.09	0.53
1:A:674:ILE:O	1:A:674:ILE:CG2	2.53	0.53
1:A:783:LYS:O	1:A:946:ARG:HG2	2.09	0.53
1:A:791:LYS:HD3	1:A:935:ILE:HG21	1.90	0.53
1:A:400:LEU:CD2	1:A:427:TRP:HZ3	2.21	0.53
1:A:922:TYR:CD2	1:A:991:MET:SD	2.94	0.53
2:B:84:LEU:CD1	2:B:282:VAL:CG2	2.86	0.53
1:A:64:TYR:CE1	1:A:196:VAL:HG22	2.44	0.53
1:A:79:GLU:O	1:A:79:GLU:CG	2.57	0.53
1:A:150:VAL:HG13	1:A:151:VAL:N	2.24	0.53
1:A:350:THR:HG23	1:A:351:VAL:N	2.24	0.53
1:A:617:THR:CG2	1:A:618:ALA:N	2.72	0.53
1:A:850:ARG:O	1:A:850:ARG:HG2	2.08	0.53
1:A:877:ASP:OD2	1:A:934:SER:HB3	2.08	0.53
1:A:327:LEU:O	1:A:331:VAL:HG13	2.08	0.52
1:A:402:PHE:CZ	1:A:407:HIS:CE1	2.97	0.52
1:A:781:LEU:HD23	1:A:781:LEU:O	2.09	0.52
2:B:237:GLN:OE1	2:B:240:TYR:CD2	2.63	0.52
1:A:415:GLN:HE21	1:A:415:GLN:HA	1.75	0.52
1:A:482:ARG:C	1:A:484:PRO:HD3	2.28	0.52
1:A:482:ARG:O	1:A:484:PRO:HD3	2.08	0.52
1:A:650:VAL:HG12	1:A:651:GLU:N	2.21	0.52
1:A:173:LEU:HD12	1:A:173:LEU:H	1.72	0.52
1:A:340:TYR:CZ	1:A:796:LEU:HD23	2.45	0.52
1:A:377:GLY:C	1:A:378:SER:OG	2.47	0.52
1:A:381:VAL:CG2	1:A:382:ILE:N	2.73	0.52
1:A:623:ILE:HG23	1:A:697:MET:HG2	1.91	0.52
1:A:814:ILE:HG23	1:A:815:THR:N	2.24	0.52
1:A:847:ASN:HD22	1:A:849:LYS:N	2.05	0.52
1:A:180:VAL:HG11	1:A:194:LEU:CD2	2.39	0.52
1:A:280:ALA:O	1:A:282:LEU:N	2.41	0.52
1:A:476:ALA:HB1	1:A:480:ARG:HH21	1.74	0.52
1:A:690:ALA:HA	1:A:693:THR:CG2	2.39	0.52
1:A:442:PHE:CZ	1:A:466:LEU:CD2	2.93	0.52
1:A:482:ARG:O	1:A:484:PRO:CD	2.58	0.52
1:A:491:PHE:HZ	1:A:496:LYS:CE	2.21	0.52
1:A:840:ILE:O	1:A:840:ILE:HG22	2.09	0.52
1:A:1030:GLU:CB	1:A:1031:LEU:HD12	2.39	0.52
2:B:84:LEU:HD23	2:B:179:PHE:CD2	2.44	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:264:ILE:HG12	2:B:265:LEU:H	1.75	0.52
1:A:127:GLN:HG3	1:A:134:THR:HG21	1.91	0.52
1:A:915:TRP:CH2	2:B:77:LEU:CA	2.93	0.52
1:A:115:VAL:CG1	1:A:116:ALA:N	2.71	0.52
1:A:160:GLU:C	1:A:162:LYS:N	2.62	0.52
1:A:166:ILE:HD13	1:A:753:ASN:CB	2.38	0.52
1:A:189:ILE:HB	1:A:193:GLN:OE1	2.10	0.52
1:A:605:ARG:HB2	1:A:608:VAL:CG2	2.39	0.52
1:A:141:LEU:HD23	1:A:141:LEU:O	2.10	0.52
1:A:699:PHE:CE2	1:A:710:ILE:HD12	2.45	0.52
1:A:984:MET:N	1:A:985:PRO:HD2	2.25	0.52
1:A:65:GLN:H	1:A:65:GLN:HE22	1.51	0.52
1:A:158:TYR:O	1:A:160:GLU:N	2.42	0.52
1:A:527:CYS:SG	1:A:594:PHE:HB2	2.50	0.52
2:B:213:LEU:CD1	2:B:260:ILE:CD1	2.88	0.52
2:B:271:PHE:HB3	2:B:281:LYS:CE	2.40	0.52
2:B:287:LYS:CE	2:B:289:GLN:NE2	2.61	0.52
1:A:166:ILE:HA	1:A:753:ASN:HD22	1.70	0.52
1:A:254:PHE:HD2	1:A:276:ILE:CG1	2.23	0.52
1:A:255:SER:CB	1:A:276:ILE:HG12	2.37	0.52
1:A:791:LYS:CE	1:A:935:ILE:HG22	2.40	0.52
1:A:808:PRO:O	1:A:810:PRO:HD3	2.10	0.52
2:B:84:LEU:HD23	2:B:179:PHE:HD2	1.74	0.52
2:B:85:ARG:HB2	2:B:180:ILE:CD1	2.39	0.52
1:A:486:VAL:HG23	1:A:487:CYS:N	2.25	0.51
1:A:648:GLU:HA	1:A:652:ASP:OD2	2.10	0.51
1:A:675:ASN:O	1:A:678:GLN:HG2	2.10	0.51
1:A:723:VAL:HG12	1:A:734:LEU:HD23	1.92	0.51
1:A:914:GLU:C	2:B:184:ASN:HB3	2.28	0.51
2:B:142:PHE:CE2	2:B:232:TYR:HA	2.44	0.51
1:A:166:ILE:HD13	1:A:754:ALA:N	2.25	0.51
1:A:167:ILE:CG2	1:A:168:ALA:N	2.72	0.51
1:A:215:LEU:C	1:A:215:LEU:HD13	2.31	0.51
1:A:485:LYS:HA	1:A:502:HIS:ND1	2.25	0.51
1:A:487:CYS:SG	1:A:501:ILE:HD12	2.50	0.51
1:A:905:GLN:CG	2:B:278:TYR:HB3	2.35	0.51
1:A:1000:VAL:HB	1:A:1001:PRO:HD3	1.91	0.51
1:A:53:HIS:CD2	1:A:245:PRO:HG3	2.45	0.51
1:A:90:ARG:O	1:A:91:PRO:C	2.47	0.51
1:A:353:LEU:CB	1:A:370:LEU:HG	2.41	0.51
1:A:435:THR:HG23	1:A:436:LEU:N	2.25	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:905:GLN:O	2:B:83:THR:HG22	2.04	0.51
2:B:126:GLU:HA	2:B:153:LYS:NZ	2.24	0.51
1:A:212:ILE:CD1	1:A:265:GLY:CA	2.89	0.51
1:A:212:ILE:HG21	1:A:252:ALA:HB3	1.91	0.51
1:A:780:ASN:ND2	1:A:834:GLU:O	2.42	0.51
2:B:77:LEU:HD23	2:B:186:ILE:CD1	2.40	0.51
2:B:175:GLY:O	2:B:176:LYS:O	2.27	0.51
1:A:124:PHE:HD1	1:A:134:THR:HG21	1.74	0.51
1:A:222:VAL:O	1:A:233:PRO:HA	2.10	0.51
1:A:523:VAL:HG13	1:A:524:LEU:N	2.25	0.51
1:A:708:LEU:CD1	1:A:708:LEU:C	2.79	0.51
1:A:987:ILE:HG22	1:A:988:PHE:CE2	2.45	0.51
1:A:1016:LYS:C	1:A:1019:VAL:HG22	2.29	0.51
1:A:181:ILE:HD13	1:A:186:LYS:HB3	1.90	0.51
1:A:348:THR:O	1:A:351:VAL:HG12	2.11	0.51
1:A:351:VAL:HG11	1:A:829:VAL:CG2	2.40	0.51
1:A:601:ILE:CG1	1:A:602:ASP:N	2.40	0.51
1:A:818:PHE:CE1	1:A:988:PHE:CD1	2.99	0.51
1:A:864:PHE:CD1	1:A:865:GLN:CG	2.92	0.51
1:A:434:LEU:CD2	1:A:564:PHE:CE2	2.94	0.51
1:A:443:LYS:CE	1:A:457:ILE:CG1	2.87	0.51
1:A:466:LEU:CD2	1:A:466:LEU:C	2.79	0.51
1:A:545:GLU:O	1:A:549:THR:N	2.44	0.51
1:A:797:THR:N	1:A:798:PRO:HD2	2.26	0.51
1:A:367:VAL:CG1	1:A:372:ALA:HB3	2.41	0.51
1:A:466:LEU:HD22	1:A:466:LEU:O	2.11	0.51
1:A:978:LEU:CD2	1:A:990:PHE:CZ	2.92	0.51
2:B:227:HIS:CE1	2:B:228:TYR:CE1	3.00	0.51
1:A:97:GLU:HB2	1:A:99:VAL:CG2	2.40	0.50
1:A:181:ILE:HD13	1:A:186:LYS:CB	2.41	0.50
1:A:674:ILE:HG13	1:A:678:GLN:CG	2.41	0.50
2:B:185:ARG:NH1	2:B:231:TYR:CZ	2.78	0.50
1:A:353:LEU:HB3	1:A:370:LEU:CG	2.41	0.50
1:A:425:GLU:HG2	1:A:534:GLY:HA2	1.93	0.50
1:A:901:ASN:CG	1:A:904:LEU:HD11	2.26	0.50
1:A:917:PHE:CB	2:B:278:TYR:CE1	2.91	0.50
1:A:1009:PHE:CD1	1:A:1009:PHE:C	2.84	0.50
2:B:136:TYR:CG	2:B:190:LEU:HD23	2.46	0.50
1:A:64:TYR:HB3	1:A:197:GLY:HA2	1.92	0.50
1:A:394:ARG:NH2	1:A:413:GLU:HB3	2.25	0.50
1:A:422:GLN:HG3	1:A:423:SER:N	2.25	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:477:MET:HG3	1:A:478:GLY:N	2.26	0.50
1:A:598:VAL:CG1	1:A:598:VAL:O	2.55	0.50
1:A:314:THR:O	1:A:318:VAL:HG13	2.12	0.50
1:A:398:SER:CB	1:A:600:MET:O	2.57	0.50
1:A:674:ILE:CG1	1:A:678:GLN:HG3	2.42	0.50
1:A:122:ILE:O	1:A:126:ILE:HG12	2.11	0.50
1:A:674:ILE:CG2	1:A:699:PHE:CD2	2.95	0.50
1:A:799:TYR:O	1:A:802:TYR:HB3	2.11	0.50
1:A:924:GLN:HG2	1:A:928:TYR:HE2	1.65	0.50
2:B:84:LEU:HD13	2:B:282:VAL:CG2	2.42	0.50
2:B:84:LEU:HG	2:B:181:ILE:HG12	1.94	0.50
1:A:64:TYR:CE1	1:A:196:VAL:HG21	2.47	0.50
1:A:116:ALA:CB	1:A:145:LEU:HD13	2.42	0.50
1:A:316:PHE:CD1	1:A:329:ALA:CB	2.92	0.50
2:B:83:THR:O	2:B:84:LEU:HD12	2.11	0.50
1:A:202:MET:HE2	1:A:220:ARG:HH12	1.76	0.50
1:A:276:ILE:HD12	1:A:276:ILE:C	2.32	0.50
1:A:463:THR:CG2	1:A:464:ALA:N	2.75	0.50
1:A:521:GLU:OE2	1:A:548:GLN:NE2	2.45	0.50
1:A:581:ASP:O	1:A:587:PHE:HE1	1.95	0.50
1:A:906:ASP:N	2:B:83:THR:HG21	2.25	0.50
1:A:914:GLU:O	2:B:184:ASN:CG	2.49	0.50
1:A:157:TYR:CD2	1:A:157:TYR:O	2.65	0.50
1:A:741:VAL:HG13	1:A:759:LEU:HD23	1.93	0.50
1:A:743:MET:HE3	1:A:762:ASP:CA	2.41	0.50
1:A:905:GLN:OE1	2:B:278:TYR:HD2	1.91	0.50
1:A:1011:TYR:OH	2:B:47:PHE:CE1	2.63	0.50
1:A:114:TRP:CH2	1:A:146:ILE:HG12	2.42	0.50
1:A:914:GLU:O	2:B:184:ASN:ND2	2.45	0.50
1:A:916:THR:HG22	1:A:919:GLN:CB	2.42	0.50
1:A:976:CYS:O	1:A:980:TYR:HD2	1.95	0.50
2:B:68:PRO:CG	2:B:69:TYR:CE2	2.94	0.50
2:B:84:LEU:CD1	2:B:181:ILE:HG12	2.42	0.50
2:B:88:VAL:HG21	2:B:284:PHE:CG	2.47	0.50
1:A:119:ILE:CG2	1:A:334:MET:CE	2.71	0.49
1:A:158:TYR:C	1:A:160:GLU:H	2.16	0.49
1:A:208:VAL:CG2	1:A:253:PHE:O	2.59	0.49
1:A:602:ASP:OD1	1:A:603:PRO:N	2.45	0.49
1:A:811:LEU:HD23	1:A:816:ILE:CD1	2.39	0.49
2:B:68:PRO:CD	2:B:69:TYR:CD2	2.94	0.49
1:A:70:LYS:HD3	1:A:184:GLY:HA2	1.93	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:415:GLN:HA	1:A:415:GLN:NE2	2.27	0.49
1:A:507:PRO:O	1:A:510:PRO:HD3	2.12	0.49
1:A:45:LYS:HZ1	1:A:281:SER:HB2	1.64	0.49
1:A:105:LEU:O	1:A:110:GLN:HB3	2.12	0.49
1:A:300:PHE:HD1	1:A:854:VAL:HG21	1.77	0.49
1:A:353:LEU:CB	1:A:370:LEU:HD11	2.42	0.49
1:A:564:PHE:CE1	1:A:598:VAL:HG11	2.47	0.49
1:A:629:HIS:HB3	1:A:630:PRO:HD2	1.94	0.49
1:A:786:ALA:CB	1:A:946:ARG:CZ	2.90	0.49
1:A:979:CYS:SG	1:A:993:ILE:HD12	2.53	0.49
1:A:146:ILE:C	1:A:149:VAL:HG22	2.32	0.49
1:A:489:ILE:HG12	1:A:582:VAL:CG1	2.36	0.49
1:A:940:ILE:HG12	1:A:968:ILE:CD1	2.41	0.49
2:B:277:PRO:O	2:B:281:LYS:HG3	2.13	0.49
1:A:60:LEU:CD2	1:A:266:LEU:HD13	2.43	0.49
1:A:266:LEU:HD23	1:A:266:LEU:C	2.33	0.49
1:A:870:GLN:HG2	1:A:938:CYS:HB3	1.95	0.49
1:A:923:GLN:CG	2:B:76:GLN:CD	2.81	0.49
1:A:1000:VAL:HB	1:A:1001:PRO:CD	2.43	0.49
2:B:46:ALA:HA	2:B:49:VAL:CG1	2.42	0.49
2:B:78:LYS:CG	2:B:79:SER:N	2.76	0.49
1:A:208:VAL:CG2	1:A:256:THR:HB	2.43	0.49
1:A:215:LEU:HD13	1:A:215:LEU:O	2.13	0.49
1:A:283:ALA:O	1:A:284:SER:C	2.50	0.49
1:A:659:VAL:HG12	1:A:660:PRO:O	2.13	0.49
1:A:90:ARG:O	1:A:91:PRO:O	2.30	0.49
1:A:463:THR:HG1	1:A:467:LYS:HE3	1.76	0.49
1:A:699:PHE:CE2	1:A:710:ILE:CD1	2.96	0.49
1:A:805:VAL:HG13	1:A:807:VAL:HB	1.95	0.49
1:A:63:LYS:C	1:A:65:GLN:HE22	2.16	0.49
1:A:243:GLU:O	1:A:245:PRO:HD3	2.13	0.49
2:B:85:ARG:CB	2:B:180:ILE:CG1	2.90	0.49
1:A:841:MET:CE	1:A:841:MET:CA	2.84	0.49
1:A:918:GLY:HA3	2:B:276:ASP:CB	2.39	0.49
1:A:940:ILE:HG23	1:A:941:ALA:N	2.25	0.49
1:A:158:TYR:C	1:A:160:GLU:N	2.66	0.49
1:A:994:ARG:NE	2:B:73:TYR:CD1	2.81	0.49
1:A:785:ILE:HD13	1:A:854:VAL:CG2	2.43	0.48
1:A:787:TYR:OH	1:A:827:PRO:HB2	2.13	0.48
1:A:795:GLU:HB3	1:A:816:ILE:CD1	2.39	0.48
1:A:987:ILE:HG22	1:A:988:PHE:CD2	2.48	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:380:SER:HB2	1:A:719:ALA:HB1	1.95	0.48
1:A:382:ILE:HG12	1:A:722:ALA:HB3	1.94	0.48
1:A:399:HIS:C	1:A:400:LEU:CD1	2.58	0.48
1:A:451:VAL:N	1:A:452:PRO:HD2	2.28	0.48
1:A:997:TRP:HA	1:A:997:TRP:CE3	2.48	0.48
2:B:266:ALA:N	2:B:269:VAL:HG22	2.28	0.48
1:A:253:PHE:CD1	1:A:275:ILE:CD1	2.96	0.48
1:A:412:THR:CG2	1:A:413:GLU:N	2.75	0.48
1:A:61:GLU:OE2	1:A:68:ALA:HB2	2.13	0.48
1:A:207:ARG:O	1:A:209:PRO:HD3	2.13	0.48
1:A:303:ILE:O	1:A:307:LEU:CD2	2.59	0.48
1:A:752:LYS:CG	1:A:758:ILE:HD11	2.32	0.48
2:B:37:TRP:O	2:B:38:VAL:C	2.50	0.48
1:A:62:GLN:OE1	1:A:62:GLN:HA	2.12	0.48
1:A:220:ARG:HD2	1:A:263:ALA:HB2	1.95	0.48
1:A:481:GLU:O	1:A:484:PRO:CD	2.59	0.48
1:A:105:LEU:O	1:A:110:GLN:CB	2.62	0.48
1:A:109:LEU:HG	1:A:346:LEU:CD2	2.33	0.48
1:A:259:LEU:O	1:A:259:LEU:HD22	2.13	0.48
1:A:328:ARG:HG3	1:A:332:PHE:CZ	2.47	0.48
1:A:336:ILE:HG23	1:A:340:TYR:CE1	2.48	0.48
1:A:497:PHE:CD1	1:A:497:PHE:C	2.86	0.48
2:B:139:GLN:HB2	2:B:232:TYR:CE1	2.48	0.48
2:B:142:PHE:O	2:B:143:LEU:HD23	2.14	0.48
1:A:340:TYR:N	1:A:340:TYR:CD1	2.82	0.48
1:A:442:PHE:HZ	1:A:466:LEU:HD22	1.77	0.48
1:A:477:MET:CG	1:A:478:GLY:H	2.26	0.48
1:A:524:LEU:HD13	1:A:524:LEU:C	2.33	0.48
1:A:818:PHE:CE1	1:A:988:PHE:CE1	3.01	0.48
1:A:823:THR:HG21	1:A:932:PHE:CZ	2.48	0.48
1:A:94:GLY:O	1:A:95:THR:CG2	2.62	0.48
1:A:197:GLY:CA	1:A:266:LEU:HD21	2.44	0.48
1:A:336:ILE:O	1:A:340:TYR:CD1	2.67	0.48
1:A:394:ARG:HH22	1:A:413:GLU:HA	1.77	0.48
1:A:662:ASP:OD1	1:A:662:ASP:O	2.31	0.48
1:A:861:TYR:CE2	1:A:866:ILE:CG1	2.97	0.48
1:A:922:TYR:HA	1:A:925:TYR:HD2	1.79	0.48
1:A:49:GLU:CG	1:A:50:ILE:N	2.76	0.48
1:A:787:TYR:CE1	1:A:939:GLN:HG3	2.49	0.48
1:A:922:TYR:CE1	1:A:991:MET:HE1	2.49	0.48
1:A:241:THR:OG1	1:A:249:ARG:HG3	2.14	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:492:ASN:HB2	1:A:495:ASN:OD1	2.14	0.48
1:A:791:LYS:CD	1:A:819:ILE:HG23	2.43	0.48
1:A:827:PRO:CD	1:A:967:ALA:HB1	2.43	0.48
1:A:981:CYS:HB3	1:A:984:MET:SD	2.54	0.48
1:A:90:ARG:NH1	1:A:272:ASP:CG	2.66	0.47
1:A:316:PHE:CE1	1:A:329:ALA:HB1	2.48	0.47
1:A:360:LEU:HA	1:A:363:LYS:HD2	1.96	0.47
1:A:567:LEU:CD1	1:A:592:LEU:CD2	2.75	0.47
1:A:787:TYR:CZ	1:A:827:PRO:HB2	2.49	0.47
1:A:963:ILE:O	1:A:963:ILE:HD13	2.14	0.47
1:A:1027:TRP:O	1:A:1031:LEU:HB2	2.14	0.47
1:A:113:MET:HE1	1:A:148:VAL:HB	1.96	0.47
1:A:135:THR:HG23	1:A:136:ASP:N	2.29	0.47
1:A:208:VAL:HG21	1:A:256:THR:HB	1.96	0.47
1:A:427:TRP:CZ2	1:A:431:CYS:SG	3.07	0.47
1:A:649:THR:CG2	1:A:651:GLU:HG2	2.44	0.47
1:A:824:ASP:OD1	1:A:939:GLN:HG2	2.14	0.47
2:B:129:ILE:HG23	2:B:152:CYS:HA	1.96	0.47
1:A:110:GLN:NE2	1:A:110:GLN:H	2.11	0.47
1:A:270:THR:HB	1:A:273:ARG:HH21	1.79	0.47
1:A:827:PRO:O	1:A:831:LEU:HD13	2.14	0.47
2:B:186:ILE:CG2	2:B:189:PHE:HB3	2.39	0.47
2:B:261:VAL:HG22	2:B:283:GLU:CD	2.34	0.47
1:A:90:ARG:CZ	1:A:272:ASP:OD2	2.63	0.47
1:A:148:VAL:HA	1:A:151:VAL:HG12	1.96	0.47
1:A:157:TYR:O	1:A:157:TYR:CG	2.67	0.47
1:A:367:VAL:HG12	1:A:369:ASN:O	2.14	0.47
1:A:399:HIS:HD2	1:A:408:SER:HB3	1.75	0.47
1:A:463:THR:HG23	1:A:464:ALA:N	2.29	0.47
1:A:587:PHE:CB	1:A:588:PRO:CD	2.91	0.47
2:B:228:TYR:CD2	2:B:243:PRO:HD3	2.49	0.47
1:A:73:SER:CB	1:A:76:LEU:HD12	2.45	0.47
1:A:670:ARG:O	1:A:694:HIS:HB3	2.14	0.47
1:A:767:ILE:O	1:A:771:VAL:HG13	2.14	0.47
1:A:115:VAL:HG13	1:A:116:ALA:N	2.29	0.47
1:A:307:LEU:N	1:A:307:LEU:CD2	2.76	0.47
1:A:311:PHE:C	1:A:314:THR:HG22	2.35	0.47
1:A:348:THR:HG23	1:A:349:VAL:N	2.30	0.47
1:A:363:LYS:O	1:A:364:ASN:HB2	2.15	0.47
1:A:451:VAL:N	1:A:452:PRO:CD	2.78	0.47
1:A:483:PHE:HD2	1:A:504:LEU:HA	1.79	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:581:ASP:O	1:A:587:PHE:CE1	2.67	0.47
1:A:806:SER:HA	1:A:896:ARG:HE	1.80	0.47
1:A:823:THR:HG21	1:A:932:PHE:HZ	1.80	0.47
1:A:913:GLN:HA	2:B:185:ARG:HB2	1.97	0.47
1:A:930:VAL:HG23	1:A:931:PHE:N	2.28	0.47
1:A:965:VAL:O	1:A:968:ILE:CG2	2.57	0.47
2:B:213:LEU:HD11	2:B:260:ILE:HD13	1.96	0.47
1:A:450:PRO:C	1:A:452:PRO:HD2	2.35	0.47
1:A:501:ILE:HD13	1:A:580:PHE:CG	2.49	0.47
1:A:548:GLN:C	1:A:552:LEU:HD21	2.32	0.47
1:A:612:VAL:O	1:A:612:VAL:HG12	2.15	0.47
1:A:625:VAL:CG1	1:A:707:LYS:HG3	2.39	0.47
1:A:643:ILE:HD13	1:A:696:GLU:HB3	1.97	0.47
1:A:879:PHE:CD1	1:A:889:PRO:HB3	2.50	0.47
1:A:887:TRP:CH2	1:A:907:LEU:CG	2.85	0.47
1:A:915:TRP:CH2	2:B:77:LEU:N	2.82	0.47
1:A:165:ASN:O	1:A:753:ASN:HB3	2.14	0.47
1:A:254:PHE:CD2	1:A:276:ILE:CG1	2.98	0.47
1:A:580:PHE:HD2	1:A:587:PHE:CD1	2.33	0.47
2:B:147:HIS:CG	2:B:148:THR:H	2.33	0.47
1:A:124:PHE:O	1:A:127:GLN:HG2	2.14	0.47
1:A:179:THR:O	1:A:179:THR:CG2	2.62	0.47
1:A:194:LEU:CD1	1:A:209:PRO:HB2	2.45	0.47
1:A:401:TRP:CD1	1:A:406:ILE:HD13	2.50	0.47
1:A:814:ILE:CD1	1:A:988:PHE:HD1	2.19	0.47
2:B:136:TYR:CD2	2:B:190:LEU:HD23	2.50	0.47
1:A:119:ILE:CG2	1:A:334:MET:HE2	2.42	0.46
1:A:524:LEU:CD2	1:A:539:LEU:HD11	2.44	0.46
2:B:77:LEU:CD2	2:B:186:ILE:HB	2.43	0.46
2:B:85:ARG:HB2	2:B:180:ILE:HG13	1.96	0.46
1:A:239:GLU:HG3	1:A:239:GLU:O	2.13	0.46
1:A:381:VAL:HG12	1:A:721:VAL:HG12	1.93	0.46
1:A:394:ARG:NH1	1:A:452:PRO:O	2.46	0.46
1:A:640:VAL:CG2	1:A:642:ILE:HG13	2.45	0.46
1:A:788:THR:CG2	1:A:789:LEU:N	2.78	0.46
1:A:794:PRO:CG	1:A:870:GLN:HB2	2.44	0.46
1:A:985:PRO:O	1:A:989:ASN:HA	2.14	0.46
2:B:83:THR:O	2:B:182:LYS:HD2	2.15	0.46
1:A:212:ILE:HG12	1:A:265:GLY:HA3	1.98	0.46
1:A:570:SER:O	1:A:574:TYR:HD2	1.98	0.46
1:A:793:ILE:H	1:A:793:ILE:CD1	2.26	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:77:LEU:HD23	2:B:186:ILE:HD12	1.98	0.46
1:A:120:CYS:HB2	1:A:142:ALA:CB	2.34	0.46
1:A:962:ARG:O	1:A:966:ILE:HG13	2.15	0.46
2:B:188:LYS:HA	2:B:230:PRO:HB2	1.98	0.46
1:A:117:ALA:HB2	1:A:145:LEU:HB2	1.98	0.46
1:A:215:LEU:HD12	1:A:216:GLN:HE21	1.81	0.46
1:A:340:TYR:CE1	1:A:796:LEU:CD2	2.99	0.46
1:A:415:GLN:HE21	1:A:415:GLN:CA	2.29	0.46
1:A:561:VAL:HG12	1:A:562:LEU:N	2.31	0.46
1:A:689:GLU:O	1:A:690:ALA:C	2.51	0.46
1:A:731:SER:HB2	1:A:732:PRO:CD	2.43	0.46
2:B:80:PRO:HB2	2:B:183:MET:SD	2.55	0.46
2:B:182:LYS:HD2	2:B:182:LYS:H	1.80	0.46
1:A:319:ALA:HA	1:A:322:ILE:HG22	1.98	0.46
2:B:141:SER:OG	2:B:142:PHE:N	2.49	0.46
1:A:540:ASP:OD2	1:A:542:GLN:HB3	2.16	0.46
1:A:914:GLU:HB2	2:B:184:ASN:CB	2.46	0.46
2:B:254:ARG:HD3	2:B:255:ASN:ND2	2.07	0.46
1:A:166:ILE:CB	1:A:753:ASN:HB3	2.46	0.46
1:A:400:LEU:HD22	1:A:427:TRP:CZ3	2.49	0.46
1:A:496:LYS:HE2	1:A:496:LYS:HA	1.97	0.46
1:A:978:LEU:HG	1:A:990:PHE:CG	2.50	0.46
2:B:82:VAL:HG23	2:B:82:VAL:O	2.16	0.46
2:B:84:LEU:HG	2:B:181:ILE:CG1	2.46	0.46
2:B:265:LEU:O	2:B:266:ALA:HB2	2.16	0.46
1:A:311:PHE:CA	1:A:314:THR:HG22	2.44	0.46
1:A:336:ILE:HG22	1:A:336:ILE:O	2.15	0.46
1:A:410:ASP:HB3	1:A:415:GLN:CD	2.36	0.46
1:A:412:THR:HG22	1:A:414:ASP:N	2.31	0.46
1:A:981:CYS:SG	1:A:982:PRO:HD2	2.56	0.46
1:A:993:ILE:HD13	1:A:993:ILE:N	2.23	0.46
2:B:260:ILE:HG22	2:B:261:VAL:N	2.30	0.46
1:A:127:GLN:OE1	1:A:138:ASN:HB2	2.16	0.46
1:A:524:LEU:HA	1:A:527:CYS:SG	2.56	0.46
1:A:712:GLU:HG2	1:A:736:LYS:HE3	1.98	0.46
1:A:752:LYS:HZ3	1:A:758:ILE:HD12	1.81	0.46
2:B:176:LYS:HE3	2:B:251:ASN:O	2.16	0.46
1:A:66:THR:HG21	1:A:266:LEU:HD11	1.98	0.45
1:A:291:THR:CG2	1:A:292:PRO:N	2.78	0.45
1:A:376:LEU:HD22	1:A:770:GLY:HA3	1.98	0.45
1:A:401:TRP:HD1	1:A:406:ILE:HD13	1.81	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:679:LEU:O	1:A:679:LEU:HD22	2.14	0.45
1:A:805:VAL:CG1	1:A:807:VAL:HG12	2.46	0.45
1:A:951:LEU:HD22	1:A:955:GLN:OE1	2.16	0.45
1:A:674:ILE:HA	1:A:678:GLN:OE1	2.17	0.45
1:A:690:ALA:HA	1:A:693:THR:HG21	1.99	0.45
1:A:898:GLN:O	1:A:904:LEU:CD1	2.63	0.45
1:A:46:LYS:NZ	1:A:712:GLU:CD	2.66	0.45
1:A:363:LYS:HE2	1:A:773:GLN:NE2	2.24	0.45
1:A:376:LEU:HD22	1:A:771:VAL:N	2.31	0.45
1:A:869:ILE:HG21	1:A:1008:ILE:HG13	1.98	0.45
2:B:176:LYS:O	2:B:177:PRO:O	2.34	0.45
1:A:48:MET:CE	1:A:246:LEU:CD1	2.94	0.45
1:A:180:VAL:CG1	1:A:194:LEU:HD22	2.47	0.45
1:A:286:VAL:HG11	1:A:735:LYS:HE3	1.96	0.45
1:A:602:ASP:HA	1:A:603:PRO:HD3	1.69	0.45
1:A:657:LEU:O	1:A:658:ARG:HB2	2.17	0.45
1:A:880:THR:HG23	1:A:881:ALA:N	2.32	0.45
1:A:922:TYR:CE1	2:B:275:HIS:ND1	2.84	0.45
1:A:926:THR:O	1:A:930:VAL:HG13	2.17	0.45
1:A:92:PRO:C	1:A:94:GLY:H	2.20	0.45
1:A:151:VAL:HG13	1:A:152:THR:N	2.32	0.45
1:A:293:ILE:CG2	1:A:294:ALA:N	2.79	0.45
1:A:451:VAL:CG1	1:A:452:PRO:HD3	2.46	0.45
1:A:649:THR:HG23	1:A:651:GLU:HG2	1.97	0.45
1:A:741:VAL:CG1	1:A:759:LEU:CD2	2.94	0.45
1:A:811:LEU:CD1	1:A:815:THR:HG21	2.46	0.45
1:A:94:GLY:C	1:A:95:THR:HG23	2.37	0.45
1:A:235:THR:CG2	1:A:236:ARG:N	2.80	0.45
1:A:456:VAL:HG21	1:A:467:LYS:HE3	1.98	0.45
1:A:653:ILE:C	1:A:655:ALA:N	2.69	0.45
1:A:807:VAL:C	1:A:896:ARG:HG2	2.36	0.45
1:A:965:VAL:HG13	1:A:966:ILE:N	2.32	0.45
2:B:140:GLU:HA	2:B:140:GLU:OE1	2.17	0.45
1:A:100:LYS:HD3	1:A:103:ARG:HG3	1.99	0.45
1:A:219:GLY:O	1:A:261:GLY:HA3	2.16	0.45
1:A:236:ARG:NH1	1:A:251:ILE:O	2.49	0.45
1:A:544:ARG:O	1:A:548:GLN:HG2	2.16	0.45
1:A:791:LYS:O	1:A:795:GLU:HG3	2.17	0.45
1:A:872:PHE:HD2	2:B:55:PHE:CE1	2.34	0.45
1:A:917:PHE:HB3	2:B:278:TYR:CD1	2.51	0.45
2:B:38:VAL:HG23	2:B:39:TRP:H	1.82	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:82:VAL:CG2	2:B:281:LYS:N	2.74	0.45
1:A:162:LYS:HE2	1:A:162:LYS:HB2	1.73	0.45
1:A:173:LEU:CD1	1:A:173:LEU:O	2.61	0.45
1:A:350:THR:CG2	1:A:351:VAL:N	2.79	0.45
1:A:392:GLN:O	1:A:393:ASN:HB3	2.17	0.45
1:A:407:HIS:HB3	1:A:420:PHE:CD2	2.52	0.45
1:A:594:PHE:CD1	1:A:594:PHE:C	2.90	0.45
1:A:727:GLY:H	1:A:730:ASP:CG	2.18	0.45
1:A:881:ALA:HA	1:A:997:TRP:CH2	2.52	0.45
1:A:73:SER:HB3	1:A:76:LEU:HD12	1.98	0.45
1:A:318:VAL:HG23	1:A:319:ALA:N	2.31	0.45
1:A:763:ASN:ND2	1:A:765:ALA:H	2.15	0.45
1:A:913:GLN:HE21	2:B:77:LEU:CD2	2.07	0.45
1:A:924:GLN:HG2	1:A:928:TYR:CZ	2.51	0.45
1:A:251:ILE:CG2	1:A:252:ALA:N	2.80	0.45
1:A:346:LEU:H	1:A:346:LEU:CD2	2.26	0.45
1:A:483:PHE:CD2	1:A:504:LEU:HA	2.52	0.45
1:A:786:ALA:CB	1:A:946:ARG:NH1	2.76	0.45
1:A:791:LYS:HD2	1:A:824:ASP:OD2	2.17	0.45
1:A:818:PHE:CZ	1:A:988:PHE:CE1	3.04	0.45
1:A:914:GLU:OE1	2:B:182:LYS:HD3	2.17	0.45
1:A:916:THR:HG21	2:B:278:TYR:HB2	1.93	0.45
2:B:84:LEU:HD13	2:B:282:VAL:HG22	1.98	0.45
1:A:92:PRO:CD	1:A:171:LYS:HE3	2.42	0.44
1:A:196:VAL:HG23	1:A:267:VAL:O	2.17	0.44
1:A:353:LEU:HB3	1:A:370:LEU:HD11	1.99	0.44
1:A:456:VAL:CG2	1:A:467:LYS:HE3	2.47	0.44
1:A:473:LEU:HG	1:A:479:TYR:CZ	2.51	0.44
1:A:823:THR:HB	1:A:971:GLN:HG3	1.99	0.44
1:A:423:SER:O	1:A:424:SER:C	2.54	0.44
1:A:764:PHE:CZ	1:A:767:ILE:HD12	2.53	0.44
1:A:830:SER:HB3	1:A:964:LEU:HA	1.98	0.44
1:A:915:TRP:HH2	2:B:76:GLN:HB3	1.83	0.44
1:A:915:TRP:CE2	2:B:77:LEU:HD13	2.52	0.44
1:A:947:LYS:HD2	1:A:964:LEU:HD21	1.98	0.44
1:A:124:PHE:CE1	1:A:134:THR:CG2	3.00	0.44
1:A:147:ALA:CA	1:A:150:VAL:HG12	2.47	0.44
1:A:473:LEU:CD1	1:A:479:TYR:OH	2.65	0.44
1:A:480:ARG:HE	1:A:480:ARG:HB2	1.63	0.44
1:A:790:THR:HG21	1:A:866:ILE:HG22	1.99	0.44
1:A:891:LEU:HD22	1:A:891:LEU:N	2.32	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:78:LYS:HD3	2:B:78:LYS:H	1.79	0.44
2:B:179:PHE:HE1	2:B:249:LEU:CG	2.30	0.44
1:A:161:PHE:CG	1:A:161:PHE:O	2.71	0.44
1:A:220:ARG:HD2	1:A:263:ALA:CB	2.46	0.44
1:A:339:ALA:O	1:A:796:LEU:HD11	2.18	0.44
1:A:442:PHE:HE2	1:A:466:LEU:HD21	1.82	0.44
1:A:466:LEU:O	1:A:466:LEU:HD23	2.18	0.44
1:A:643:ILE:HA	1:A:696:GLU:OE1	2.18	0.44
1:A:794:PRO:CG	1:A:870:GLN:CB	2.96	0.44
2:B:136:TYR:CD1	2:B:190:LEU:HD23	2.53	0.44
1:A:805:VAL:HG11	1:A:807:VAL:HB	1.99	0.44
1:A:940:ILE:CG2	1:A:941:ALA:N	2.80	0.44
1:A:300:PHE:CZ	1:A:304:ILE:HG13	2.52	0.44
1:A:381:VAL:O	1:A:721:VAL:HA	2.18	0.44
1:A:385:ASP:HB2	1:A:707:LYS:HZ3	1.81	0.44
1:A:411:THR:HG21	1:A:601:ILE:HG23	1.99	0.44
1:A:446:GLN:O	1:A:449:VAL:HG22	2.17	0.44
1:A:549:THR:O	1:A:550:ALA:C	2.55	0.44
1:A:775:ARG:HH11	1:A:840:ILE:HG22	1.82	0.44
1:A:1015:ARG:NE	1:A:1031:LEU:CD2	2.81	0.44
2:B:78:LYS:CG	2:B:79:SER:H	2.31	0.44
1:A:248:THR:HG1	1:A:251:ILE:HD13	1.83	0.44
1:A:466:LEU:HD22	1:A:466:LEU:C	2.38	0.44
1:A:532:ILE:O	1:A:532:ILE:CG2	2.64	0.44
1:A:743:MET:CE	1:A:762:ASP:CA	2.94	0.44
1:A:760:LEU:N	1:A:760:LEU:CD2	2.77	0.44
1:A:807:VAL:CG2	1:A:808:PRO:CD	2.95	0.44
1:A:811:LEU:HA	1:A:928:TYR:HD1	1.83	0.44
1:A:858:LEU:C	1:A:858:LEU:CD1	2.86	0.44
2:B:242:ASN:CG	2:B:243:PRO:HD2	2.38	0.44
2:B:290:LYS:O	2:B:290:LYS:HG2	2.17	0.44
1:A:433:VAL:HG11	1:A:564:PHE:HB3	1.99	0.44
1:A:443:LYS:HD2	1:A:455:ILE:HD13	2.00	0.44
1:A:531:LEU:HG	1:A:533:LYS:O	2.18	0.44
1:A:545:GLU:O	1:A:549:THR:HG23	2.18	0.44
1:A:806:SER:C	1:A:896:ARG:HG3	2.38	0.44
1:A:864:PHE:CZ	2:B:44:TYR:CD1	3.05	0.44
1:A:940:ILE:HD11	1:A:968:ILE:HB	1.99	0.44
1:A:1002:MET:O	1:A:1003:PRO:C	2.56	0.44
1:A:929:THR:O	1:A:932:PHE:HB3	2.18	0.44
2:B:84:LEU:HD11	2:B:282:VAL:CG2	2.45	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:472:THR:HG23	1:A:473:LEU:N	2.33	0.43
1:A:651:GLU:C	1:A:654:ALA:CB	2.84	0.43
1:A:652:ASP:OD1	1:A:653:ILE:HG13	2.18	0.43
1:A:669:ALA:O	1:A:694:HIS:HD2	2.01	0.43
1:A:819:ILE:HG22	1:A:820:GLU:N	2.28	0.43
1:A:978:LEU:CD2	1:A:990:PHE:CD2	2.96	0.43
2:B:57:LEU:HD23	2:B:57:LEU:C	2.38	0.43
2:B:82:VAL:CG2	2:B:281:LYS:CA	2.96	0.43
2:B:185:ARG:NH1	2:B:231:TYR:OH	2.51	0.43
1:A:146:ILE:O	1:A:149:VAL:HG23	2.16	0.43
1:A:322:ILE:CG2	1:A:324:TYR:CE2	3.02	0.43
1:A:565:CYS:HB3	1:A:594:PHE:HA	2.00	0.43
1:A:693:THR:HG23	1:A:694:HIS:N	2.32	0.43
2:B:182:LYS:HD2	2:B:182:LYS:N	2.33	0.43
1:A:64:TYR:CD1	1:A:196:VAL:HG22	2.53	0.43
1:A:248:THR:OG1	1:A:251:ILE:HD13	2.19	0.43
1:A:254:PHE:O	1:A:255:SER:CB	2.63	0.43
1:A:315:PHE:CB	1:A:336:ILE:CD1	2.94	0.43
2:B:81:GLY:O	2:B:184:ASN:CG	2.56	0.43
1:A:94:GLY:O	1:A:95:THR:HG23	2.18	0.43
1:A:96:PRO:HB2	1:A:100:LYS:HG3	2.00	0.43
1:A:250:ASN:OD1	1:A:251:ILE:CD1	2.66	0.43
1:A:634:LYS:HD2	1:A:673:VAL:HG21	2.00	0.43
1:A:640:VAL:HG23	1:A:642:ILE:H	1.84	0.43
1:A:791:LYS:CD	1:A:935:ILE:CG2	2.96	0.43
1:A:827:PRO:HA	1:A:967:ALA:CB	2.48	0.43
1:A:922:TYR:HA	1:A:925:TYR:CD2	2.54	0.43
1:A:378:SER:O	1:A:720:ILE:HB	2.19	0.43
1:A:846:ARG:HB2	1:A:851:ASP:CG	2.39	0.43
2:B:149:LYS:HD3	2:B:232:TYR:CE2	2.53	0.43
2:B:282:VAL:HG13	2:B:284:PHE:CZ	2.53	0.43
1:A:48:MET:HG3	1:A:49:GLU:N	2.34	0.43
1:A:52:ASP:HB2	1:A:55:LEU:HD12	2.01	0.43
1:A:790:THR:CA	1:A:862:SER:OG	2.67	0.43
2:B:185:ARG:HB3	2:B:231:TYR:CD2	2.53	0.43
1:A:178:ALA:O	1:A:188:GLN:HA	2.18	0.43
1:A:222:VAL:O	1:A:222:VAL:HG23	2.18	0.43
1:A:783:LYS:O	1:A:946:ARG:CG	2.66	0.43
1:A:45:LYS:HZ2	1:A:281:SER:HB3	1.83	0.43
1:A:69:THR:HG23	1:A:70:LYS:HG2	2.00	0.43
1:A:254:PHE:CE2	1:A:276:ILE:CD1	2.87	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:475:ASN:HB3	1:A:477:MET:HG2	2.00	0.43
2:B:237:GLN:HB3	2:B:240:TYR:HB2	2.00	0.43
2:B:251:ASN:ND2	2:B:253:PRO:O	2.52	0.43
1:A:66:THR:OG1	1:A:72:LEU:CD1	2.64	0.43
1:A:398:SER:OG	1:A:599:SER:OG	2.36	0.43
1:A:693:THR:CG2	1:A:694:HIS:HD1	2.29	0.43
1:A:783:LYS:C	1:A:831:LEU:HD23	2.38	0.43
1:A:1002:MET:HB3	1:A:1003:PRO:CD	2.43	0.43
2:B:180:ILE:HD12	2:B:180:ILE:C	2.39	0.43
1:A:230:GLU:OE1	1:A:230:GLU:CA	2.48	0.43
1:A:339:ALA:CB	1:A:796:LEU:CD1	2.85	0.43
1:A:451:VAL:HG11	1:A:471:LEU:HD13	2.00	0.43
1:A:582:VAL:O	1:A:582:VAL:HG12	2.18	0.43
1:A:699:PHE:CZ	1:A:710:ILE:HD12	2.53	0.43
1:A:60:LEU:CD2	1:A:266:LEU:HB3	2.48	0.42
1:A:87:ASN:HD22	1:A:271:GLY:H	1.64	0.42
1:A:188:GLN:HE21	1:A:188:GLN:HB3	1.58	0.42
1:A:391:THR:HG21	1:A:636:ILE:HD13	2.01	0.42
1:A:391:THR:CA	1:A:604:PRO:HA	2.32	0.42
1:A:402:PHE:O	1:A:403:ASP:HB2	2.19	0.42
1:A:434:LEU:CD2	1:A:564:PHE:CZ	3.02	0.42
1:A:764:PHE:CE1	1:A:767:ILE:CD1	3.02	0.42
1:A:925:TYR:CG	1:A:989:ASN:OD1	2.72	0.42
1:A:972:VAL:HG13	1:A:973:CYS:N	2.33	0.42
2:B:48:TYR:HD1	2:B:48:TYR:HA	1.61	0.42
2:B:185:ARG:HH11	2:B:185:ARG:HD2	1.74	0.42
1:A:122:ILE:CG2	1:A:123:ALA:N	2.82	0.42
1:A:163:SER:OG	1:A:164:THR:N	2.52	0.42
1:A:311:PHE:HA	1:A:314:THR:CG2	2.47	0.42
1:A:726:ASP:OD1	1:A:743:MET:CG	2.65	0.42
1:A:799:TYR:CE2	1:A:803:ILE:HD11	2.54	0.42
1:A:861:TYR:CD1	1:A:865:GLN:NE2	2.87	0.42
2:B:66:ILE:HG22	2:B:67:ASP:O	2.19	0.42
1:A:446:GLN:CB	1:A:449:VAL:CG2	2.83	0.42
1:A:811:LEU:CA	1:A:928:TYR:HD1	2.32	0.42
1:A:984:MET:N	1:A:985:PRO:CD	2.82	0.42
2:B:84:LEU:HG	2:B:181:ILE:HA	2.01	0.42
1:A:213:ARG:NH1	1:A:250:ASN:HB2	2.33	0.42
1:A:631:ILE:CG2	1:A:632:THR:N	2.82	0.42
1:A:651:GLU:CA	1:A:654:ALA:HB2	2.46	0.42
1:A:699:PHE:CD2	1:A:710:ILE:CD1	3.02	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:816:ILE:HG22	1:A:820:GLU:OE2	2.18	0.42
1:A:1007:LEU:HD21	2:B:54:ILE:HD13	2.01	0.42
2:B:82:VAL:HG13	2:B:280:GLY:CA	2.42	0.42
1:A:124:PHE:HE1	1:A:134:THR:HG23	1.83	0.42
1:A:135:THR:CG2	1:A:136:ASP:N	2.81	0.42
1:A:163:SER:C	1:A:164:THR:OG1	2.58	0.42
1:A:422:GLN:CG	1:A:423:SER:N	2.82	0.42
1:A:587:PHE:CB	1:A:588:PRO:HD2	2.30	0.42
1:A:787:TYR:HB2	1:A:946:ARG:HG2	2.02	0.42
1:A:805:VAL:O	1:A:806:SER:HB2	2.19	0.42
1:A:811:LEU:CD2	1:A:816:ILE:CD1	2.97	0.42
1:A:872:PHE:HD2	2:B:55:PHE:CZ	2.37	0.42
1:A:875:PHE:O	1:A:878:TYR:HB3	2.19	0.42
2:B:75:ASP:O	2:B:78:LYS:HB3	2.20	0.42
1:A:488:GLU:HB2	1:A:499:LEU:O	2.20	0.42
1:A:535:GLN:HG2	1:A:536:GLU:N	2.33	0.42
1:A:702:THR:HA	1:A:706:GLN:HE22	1.80	0.42
1:A:793:ILE:HG22	1:A:871:SER:OG	2.20	0.42
2:B:181:ILE:HG22	2:B:182:LYS:N	2.35	0.42
1:A:46:LYS:O	1:A:705:GLN:HB3	2.20	0.42
1:A:182:ARG:NH2	1:A:189:ILE:HD13	2.35	0.42
1:A:307:LEU:CD2	1:A:307:LEU:H	2.33	0.42
1:A:523:VAL:CG1	1:A:524:LEU:N	2.81	0.42
1:A:850:ARG:O	1:A:850:ARG:CG	2.67	0.42
1:A:994:ARG:H	1:A:997:TRP:HD1	1.65	0.42
1:A:286:VAL:HG21	1:A:735:LYS:HG3	2.01	0.42
1:A:421:ASP:OD1	1:A:421:ASP:O	2.37	0.42
1:A:504:LEU:HD23	1:A:509:ASP:HB2	2.02	0.42
1:A:921:LEU:HB3	1:A:925:TYR:CE2	2.55	0.42
2:B:40:ILE:HG22	2:B:41:SER:N	2.34	0.42
2:B:82:VAL:HG22	2:B:281:LYS:CA	2.49	0.42
2:B:272:ASP:OD2	2:B:275:HIS:HB2	2.20	0.42
1:A:166:ILE:O	1:A:170:PHE:HD2	2.03	0.42
1:A:811:LEU:HD21	1:A:816:ILE:HD13	2.01	0.42
1:A:489:ILE:HA	1:A:490:PRO:HD3	1.88	0.42
1:A:532:ILE:O	1:A:533:LYS:CB	2.67	0.42
2:B:192:GLY:N	2:B:268:HIS:HD2	2.18	0.42
2:B:290:LYS:O	2:B:290:LYS:CG	2.68	0.42
1:A:196:VAL:O	1:A:196:VAL:HG13	2.19	0.41
1:A:380:SER:C	1:A:620:ILE:HG23	2.41	0.41
1:A:801:ILE:HG23	1:A:802:TYR:N	2.35	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:823:THR:CG2	1:A:932:PHE:HZ	2.33	0.41
1:A:921:LEU:HB3	1:A:925:TYR:CZ	2.55	0.41
1:A:921:LEU:O	1:A:925:TYR:CD2	2.73	0.41
2:B:33:THR:O	2:B:34:LEU:HD23	2.20	0.41
1:A:122:ILE:HG23	1:A:123:ALA:N	2.35	0.41
1:A:821:LEU:CD1	1:A:821:LEU:N	2.83	0.41
1:A:916:THR:HG21	2:B:276:ASP:HB2	2.02	0.41
2:B:75:ASP:O	2:B:78:LYS:HD2	2.20	0.41
2:B:213:LEU:HD12	2:B:260:ILE:CD1	2.50	0.41
1:A:314:THR:CG2	1:A:315:PHE:CD1	3.01	0.41
1:A:574:TYR:OH	1:A:588:PRO:CD	2.61	0.41
1:A:880:THR:CG2	1:A:997:TRP:CZ3	3.01	0.41
1:A:922:TYR:HB3	2:B:76:GLN:NE2	2.33	0.41
1:A:966:ILE:CG2	1:A:970:PHE:CD2	3.02	0.41
2:B:85:ARG:HB3	2:B:86:PRO:HD3	2.01	0.41
1:A:110:GLN:H	1:A:110:GLN:CD	2.22	0.41
1:A:124:PHE:CE1	1:A:134:THR:HG23	2.56	0.41
1:A:124:PHE:C	1:A:127:GLN:HG2	2.41	0.41
1:A:207:ARG:CB	1:A:257:MET:HG3	2.49	0.41
1:A:406:ILE:HD11	1:A:550:ALA:HB1	2.02	0.41
1:A:651:GLU:O	1:A:652:ASP:O	2.38	0.41
2:B:36:ARG:O	2:B:39:TRP:N	2.50	0.41
2:B:154:PHE:HD1	2:B:228:TYR:OH	1.86	0.41
2:B:263:LYS:HD2	2:B:271:PHE:CZ	2.55	0.41
1:A:669:ALA:O	1:A:694:HIS:CD2	2.74	0.41
1:A:684:PRO:HB2	1:A:716:ARG:HH12	1.85	0.41
1:A:798:PRO:HA	1:A:875:PHE:HZ	1.85	0.41
1:A:927:CYS:HA	1:A:930:VAL:HG22	2.03	0.41
2:B:54:ILE:C	2:B:57:LEU:HB3	2.41	0.41
1:A:210:ALA:HB1	1:A:269:ASN:O	2.19	0.41
1:A:211:ASP:HB2	1:A:269:ASN:HB2	2.03	0.41
1:A:574:TYR:CE1	1:A:578:TYR:CE2	3.07	0.41
1:A:657:LEU:C	1:A:658:ARG:HG3	2.33	0.41
1:A:791:LYS:HE2	1:A:935:ILE:CG2	2.50	0.41
1:A:793:ILE:HD11	1:A:863:TYR:HA	2.01	0.41
1:A:967:ALA:O	1:A:971:GLN:HB2	2.21	0.41
1:A:1019:VAL:HG23	1:A:1020:ARG:N	2.36	0.41
2:B:213:LEU:CD1	2:B:260:ILE:HD13	2.50	0.41
2:B:272:ASP:CG	2:B:275:HIS:HB2	2.41	0.41
2:B:282:VAL:CG1	2:B:283:GLU:N	2.83	0.41
1:A:220:ARG:HH21	1:A:222:VAL:HG12	1.85	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:227:LEU:N	1:A:227:LEU:CD1	2.82	0.41
1:A:251:ILE:CD1	1:A:251:ILE:N	2.83	0.41
1:A:353:LEU:CB	1:A:370:LEU:CD1	2.99	0.41
1:A:353:LEU:HB2	1:A:370:LEU:HD21	2.02	0.41
1:A:446:GLN:C	1:A:448:ALA:N	2.74	0.41
1:A:581:ASP:HB3	1:A:584:ALA:O	2.21	0.41
1:A:814:ILE:HD13	1:A:988:PHE:HA	2.01	0.41
1:A:885:GLU:HG3	2:B:76:GLN:HB3	2.03	0.41
1:A:940:ILE:CD1	1:A:968:ILE:CG1	2.97	0.41
1:A:1015:ARG:NE	1:A:1031:LEU:HB3	2.32	0.41
2:B:34:LEU:O	2:B:36:ARG:HG3	2.20	0.41
1:A:104:GLN:HA	1:A:104:GLN:OE1	2.21	0.41
1:A:315:PHE:CA	1:A:318:VAL:HG22	2.44	0.41
1:A:341:VAL:HG23	1:A:343:GLU:OE2	2.20	0.41
1:A:351:VAL:CG1	1:A:829:VAL:HG22	2.49	0.41
1:A:479:TYR:HA	1:A:482:ARG:CG	2.48	0.41
1:A:479:TYR:HA	1:A:482:ARG:HD2	1.95	0.41
1:A:905:GLN:CD	2:B:278:TYR:CD2	2.83	0.41
2:B:254:ARG:HD3	2:B:254:ARG:C	2.41	0.41
2:B:275:HIS:O	2:B:277:PRO:HD3	2.20	0.41
1:A:64:TYR:O	1:A:65:GLN:HB2	2.21	0.41
1:A:171:LYS:C	1:A:173:LEU:N	2.61	0.41
1:A:200:VAL:CG1	1:A:202:MET:SD	3.06	0.41
1:A:208:VAL:HG11	1:A:220:ARG:HH22	1.84	0.41
1:A:353:LEU:CB	1:A:370:LEU:CG	2.98	0.41
1:A:393:ASN:OD1	1:A:393:ASN:O	2.38	0.41
1:A:446:GLN:OE1	1:A:454:ARG:CB	2.63	0.41
1:A:653:ILE:O	1:A:655:ALA:N	2.54	0.41
1:A:692:ARG:HH11	1:A:692:ARG:HD2	1.54	0.41
1:A:814:ILE:CD1	1:A:988:PHE:HA	2.51	0.41
1:A:965:VAL:CG1	1:A:966:ILE:N	2.84	0.41
2:B:190:LEU:N	2:B:190:LEU:HD12	2.36	0.41
1:A:60:LEU:HG	1:A:64:TYR:CD2	2.56	0.41
1:A:117:ALA:N	1:A:145:LEU:HD12	2.36	0.41
1:A:315:PHE:CB	1:A:336:ILE:HD11	2.51	0.41
1:A:356:THR:HG22	1:A:359:ARG:HH21	1.86	0.41
1:A:385:ASP:HB3	1:A:725:GLY:HA2	2.03	0.41
1:A:527:CYS:HB2	1:A:592:LEU:O	2.20	0.41
1:A:691:LEU:HD11	1:A:713:SER:HB2	2.03	0.41
1:A:787:TYR:CZ	1:A:939:GLN:HG3	2.56	0.41
1:A:915:TRP:CZ3	2:B:76:GLN:CG	3.02	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:916:THR:HG22	1:A:919:GLN:HB2	2.02	0.41
1:A:1016:LYS:HA	1:A:1019:VAL:HG22	2.02	0.41
1:A:72:LEU:HD13	1:A:198:ASP:N	2.36	0.40
1:A:254:PHE:HD2	1:A:276:ILE:CD1	2.29	0.40
1:A:527:CYS:CB	1:A:592:LEU:O	2.69	0.40
1:A:647:SER:OG	1:A:671:ALA:HB2	2.20	0.40
1:A:699:PHE:CD2	1:A:710:ILE:HD11	2.56	0.40
1:A:814:ILE:CG2	1:A:815:THR:N	2.83	0.40
1:A:817:LEU:HA	1:A:820:GLU:HG2	2.02	0.40
1:A:861:TYR:OH	1:A:866:ILE:HD11	2.20	0.40
2:B:85:ARG:N	2:B:86:PRO:CD	2.85	0.40
1:A:291:THR:CG2	1:A:292:PRO:HD2	2.52	0.40
1:A:339:ALA:C	1:A:796:LEU:HD11	2.41	0.40
1:A:377:GLY:HA3	1:A:774:GLY:C	2.34	0.40
1:A:473:LEU:HG	1:A:473:LEU:O	2.22	0.40
1:A:629:HIS:CB	1:A:630:PRO:HD2	2.51	0.40
1:A:691:LEU:HD12	1:A:713:SER:HB3	2.02	0.40
1:A:783:LYS:HB3	1:A:831:LEU:HD23	2.03	0.40
1:A:855:ASN:HD22	1:A:857:PRO:CG	2.32	0.40
1:A:1026:TRP:HH2	2:B:43:TYR:CD2	2.39	0.40
2:B:229:PHE:CD1	2:B:229:PHE:N	2.89	0.40
1:A:171:LYS:O	1:A:174:VAL:HB	2.20	0.40
1:A:322:ILE:CG2	1:A:324:TYR:CD2	2.99	0.40
1:A:340:TYR:CE1	1:A:796:LEU:HD21	2.57	0.40
1:A:428:ARG:HH11	1:A:428:ARG:HD3	1.70	0.40
1:A:741:VAL:HG13	1:A:759:LEU:CD2	2.51	0.40
1:A:877:ASP:HA	1:A:1000:VAL:HG11	2.02	0.40
1:A:883:ALA:HA	1:A:887:TRP:O	2.22	0.40
1:A:511:ARG:CZ	1:A:568:TYR:CE2	3.04	0.40
1:A:547:PHE:CD1	1:A:547:PHE:C	2.95	0.40
1:A:787:TYR:HE1	1:A:943:VAL:CG2	2.35	0.40
1:A:834:GLU:OE2	1:A:947:LYS:HE2	2.22	0.40
1:A:884:GLN:HG3	2:B:72:ASP:HB3	2.04	0.40
1:A:947:LYS:HB3	1:A:947:LYS:NZ	2.37	0.40
1:A:996:GLN:HA	1:A:999:LEU:HD13	2.04	0.40
2:B:271:PHE:CD1	2:B:281:LYS:HE2	2.57	0.40
1:A:307:LEU:HD12	1:A:311:PHE:HE1	1.87	0.40
1:A:322:ILE:O	1:A:322:ILE:CG1	2.60	0.40
1:A:790:THR:N	1:A:862:SER:OG	2.55	0.40
1:A:856:GLU:N	1:A:857:PRO:CD	2.85	0.40
2:B:213:LEU:HD12	2:B:260:ILE:HD11	2.02	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	991/1034 (96%)	904 (91%)	60 (6%)	27 (3%)	5 31
2	B	163/290 (56%)	133 (82%)	17 (10%)	13 (8%)	1 12
All	All	1154/1324 (87%)	1037 (90%)	77 (7%)	40 (4%)	6 25

All (40) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	163	SER
1	A	172	ASN
1	A	175	PRO
1	A	283	ALA
1	A	378	SER
1	A	395	MET
1	A	423	SER
1	A	510	PRO
1	A	578	TYR
1	A	601	ILE
1	A	603	PRO
1	A	604	PRO
1	A	654	ALA
2	B	86	PRO
2	B	140	GLU
2	B	177	PRO
1	A	91	PRO
1	A	107	GLY
1	A	161	PHE
1	A	285	GLY
1	A	478	GLY
1	A	658	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
2	B	128	SER
2	B	255	ASN
2	B	279	GLU
1	A	159	GLN
1	A	424	SER
2	B	193	ASN
2	B	266	ALA
1	A	137	ASP
1	A	447	ASP
2	B	38	VAL
2	B	45	VAL
1	A	93	ARG
1	A	166	ILE
2	B	43	TYR
2	B	49	VAL
2	B	276	ASP
1	A	96	PRO
1	A	153	GLY

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	840/869 (97%)	778 (93%)	62 (7%)	13 38
2	B	162/254 (64%)	132 (82%)	30 (18%)	1 9
All	All	1002/1123 (89%)	910 (91%)	92 (9%)	13 29

All (92) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	57	VAL
1	A	65	GLN
1	A	83	ARG
1	A	87	ASN
1	A	93	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	99	VAL
1	A	109	LEU
1	A	122	ILE
1	A	146	ILE
1	A	154	CYS
1	A	164	THR
1	A	173	LEU
1	A	174	VAL
1	A	203	LYS
1	A	208	VAL
1	A	293	ILE
1	A	307	LEU
1	A	309	ILE
1	A	346	LEU
1	A	376	LEU
1	A	378	SER
1	A	395	MET
1	A	421	ASP
1	A	443	LYS
1	A	446	GLN
1	A	453	LYS
1	A	466	LEU
1	A	467	LYS
1	A	480	ARG
1	A	532	ILE
1	A	533	LYS
1	A	539	LEU
1	A	552	LEU
1	A	599	SER
1	A	602	ASP
1	A	617	THR
1	A	650	VAL
1	A	657	LEU
1	A	665	ASN
1	A	666	ARG
1	A	667	LYS
1	A	679	LEU
1	A	683	ASP
1	A	697	MET
1	A	708	LEU
1	A	726	ASP
1	A	763	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	805	VAL
1	A	841	MET
1	A	847	ASN
1	A	856	GLU
1	A	884	GLN
1	A	885	GLU
1	A	903	HIS
1	A	904	LEU
1	A	913	GLN
1	A	922	TYR
1	A	963	ILE
1	A	984	MET
1	A	993	ILE
1	A	1006	LEU
1	A	1014	ILE
2	B	32	ARG
2	B	33	THR
2	B	35	SER
2	B	38	VAL
2	B	41	SER
2	B	42	LEU
2	B	48	TYR
2	B	49	VAL
2	B	60	TYR
2	B	61	VAL
2	B	72	ASP
2	B	78	LYS
2	B	85	ARG
2	B	87	ASP
2	B	125	GLN
2	B	126	GLU
2	B	139	GLN
2	B	178	CYS
2	B	182	LYS
2	B	188	LYS
2	B	234	LYS
2	B	235	LYS
2	B	240	TYR
2	B	254	ARG
2	B	262	CYS
2	B	276	ASP
2	B	281	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
2	B	287	LYS
2	B	288	ILE
2	B	290	LYS

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (31) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	51	ASN
1	A	65	GLN
1	A	87	ASN
1	A	110	GLN
1	A	188	GLN
1	A	218	GLN
1	A	242	HIS
1	A	404	ASN
1	A	415	GLN
1	A	663	GLN
1	A	694	HIS
1	A	706	GLN
1	A	753	ASN
1	A	763	ASN
1	A	773	GLN
1	A	847	ASN
1	A	855	ASN
1	A	884	GLN
1	A	903	HIS
1	A	913	GLN
1	A	923	GLN
1	A	924	GLN
1	A	971	GLN
1	A	989	ASN
1	A	996	GLN
2	B	76	GLN
2	B	125	GLN
2	B	255	ASN
2	B	268	HIS
2	B	275	HIS
2	B	289	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 [\(i\)](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Map visualisation (i)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-2760. These allow visual inspection of the internal detail of the map and identification of artifacts.

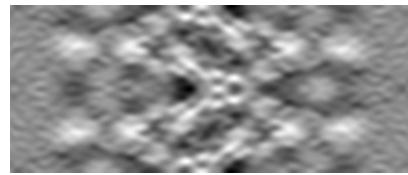
No raw map or half-maps were deposited for this entry and therefore no images, graphs, etc. pertaining to the raw map can be shown.

6.1 Orthogonal projections (i)

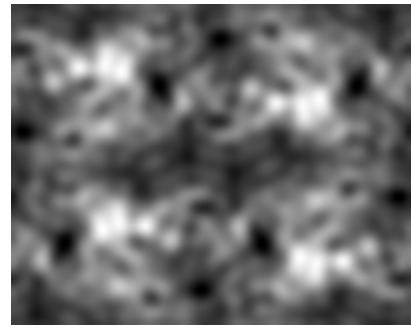
6.1.1 Primary map



X



Y



Z

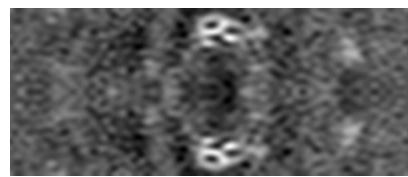
The images above show the map projected in three orthogonal directions.

6.2 Central slices (i)

6.2.1 Primary map



X Index: 40



Y Index: 32

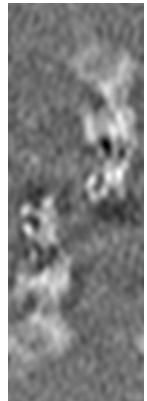


Z Index: 96

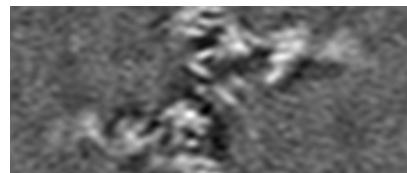
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

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

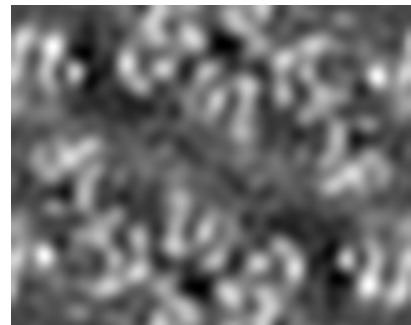
6.3.1 Primary map



X Index: 19



Y Index: 12



Z Index: 92

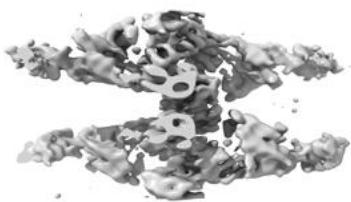
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

6.4 Orthogonal surface views [\(i\)](#)

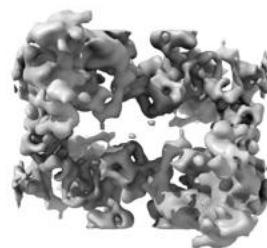
6.4.1 Primary map



X



Y



Z

The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 1.75. These images, in conjunction with the slice images, may facilitate assessment of whether an appropriate contour level has been provided.

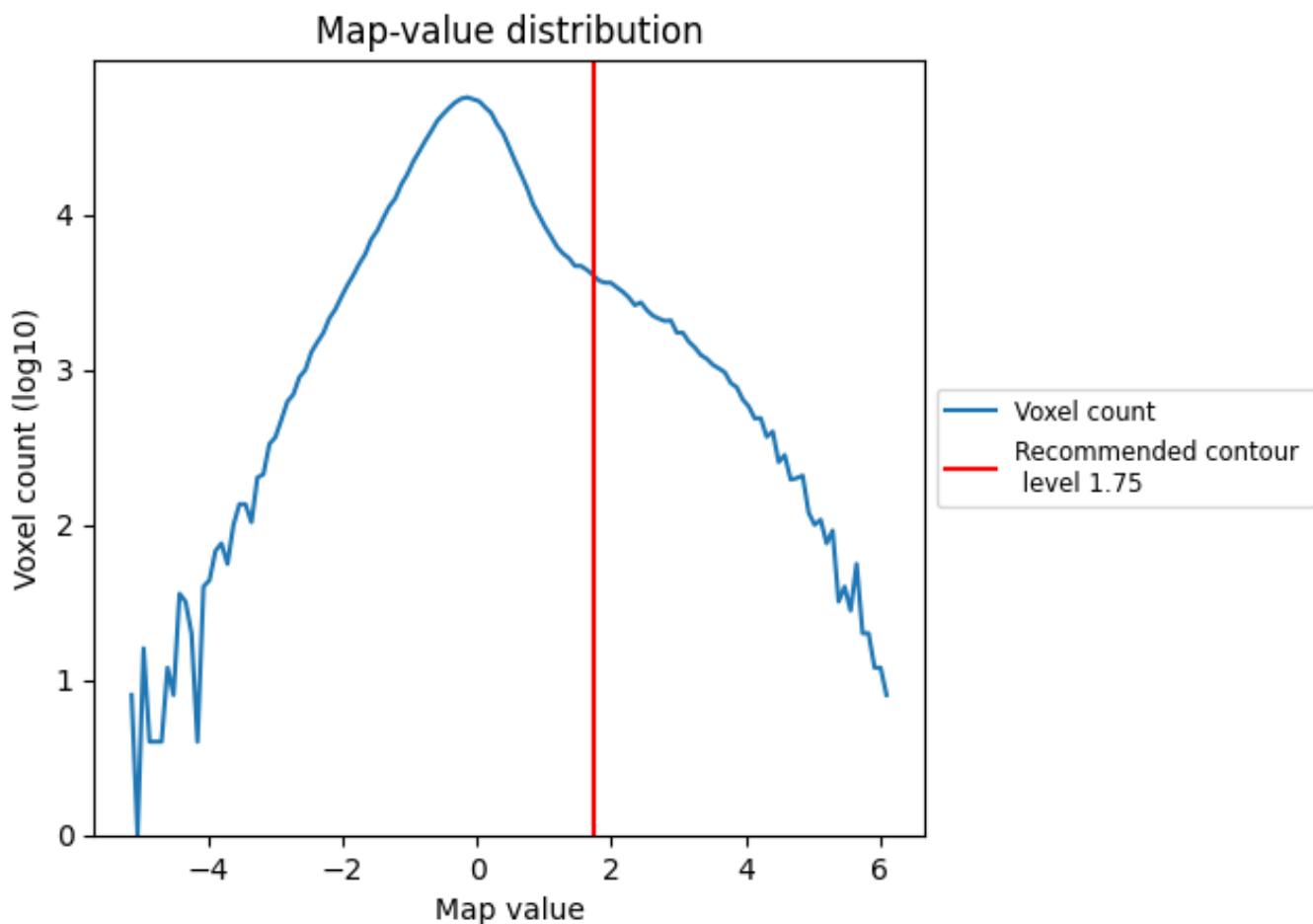
6.5 Mask visualisation

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

7 Map analysis (i)

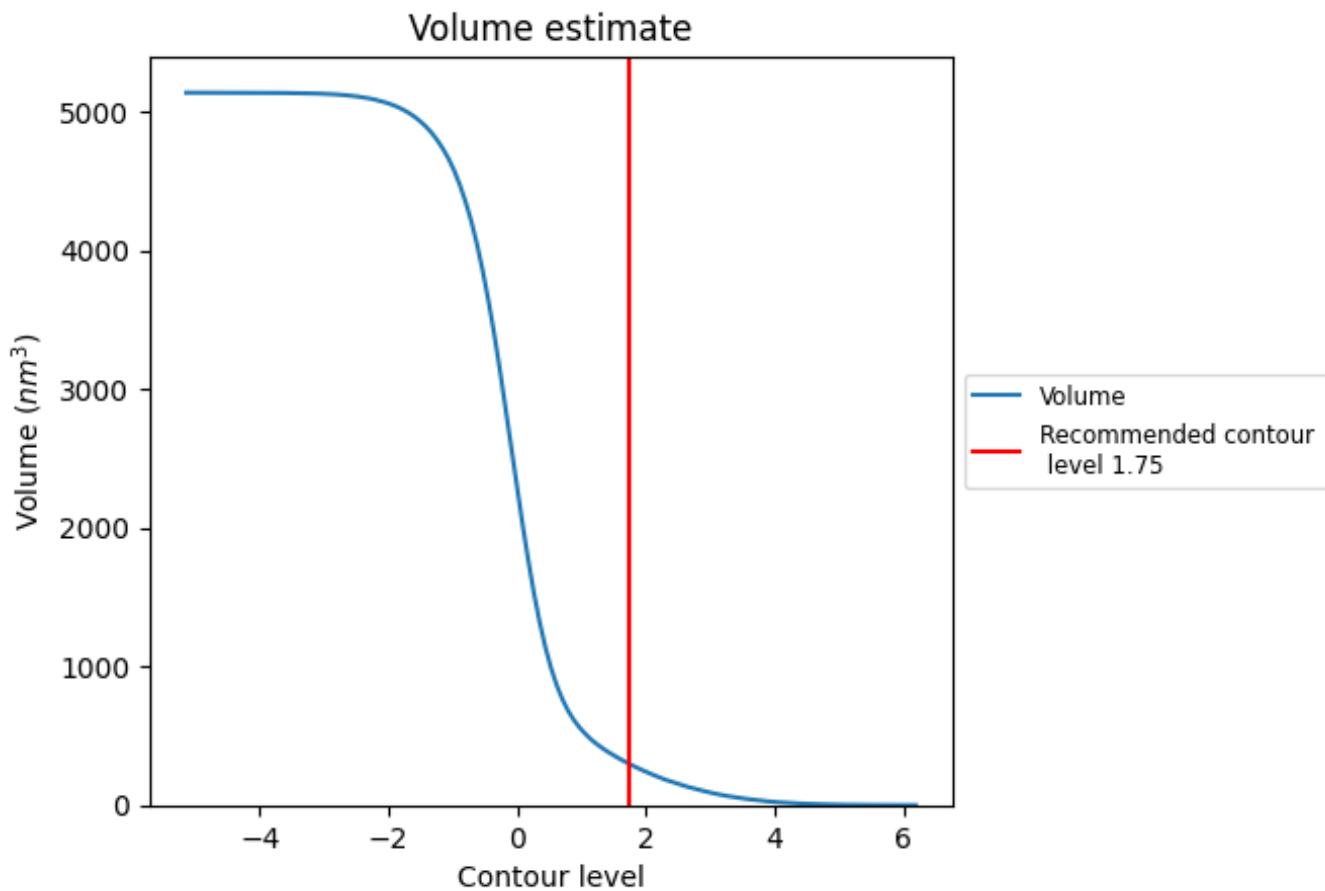
This section contains the results of statistical analysis of the map.

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 294 nm³; this corresponds to an approximate mass of 266 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 [\(i\)](#)

This section was not generated. The rotationally averaged power spectrum is only generated for cubic maps.

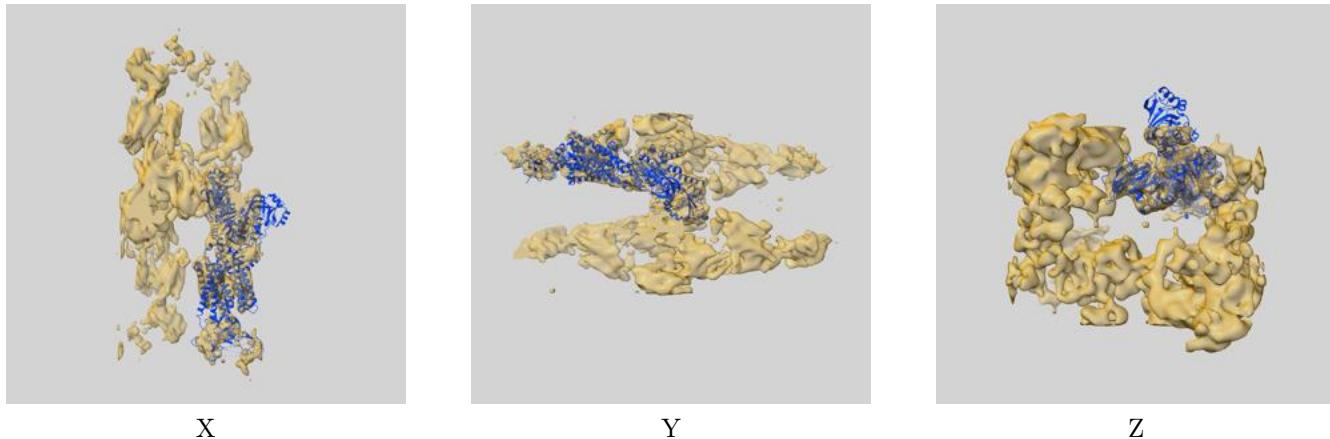
8 Fourier-Shell correlation

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

9 Map-model fit (i)

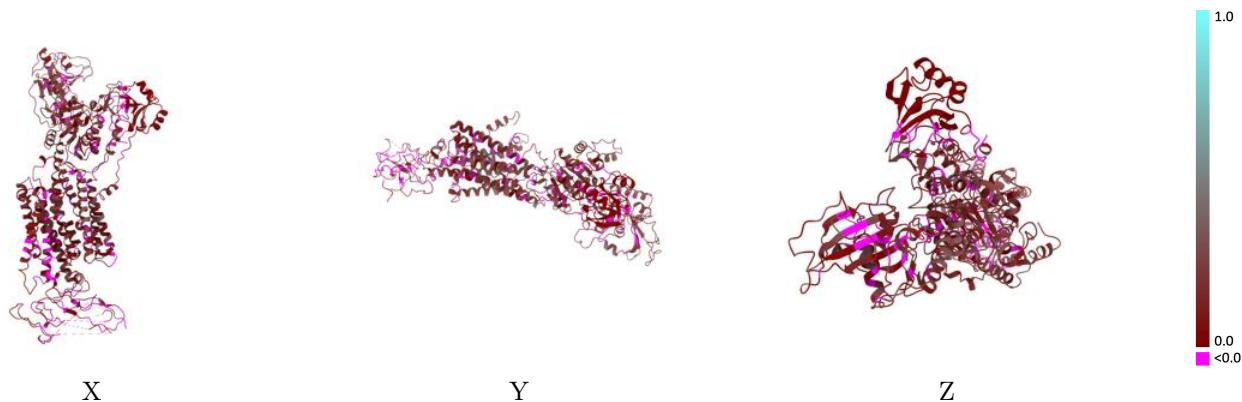
This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-2760 and PDB model 4UX2. Per-residue inclusion information can be found in section 3 on page 4.

9.1 Map-model overlay (i)



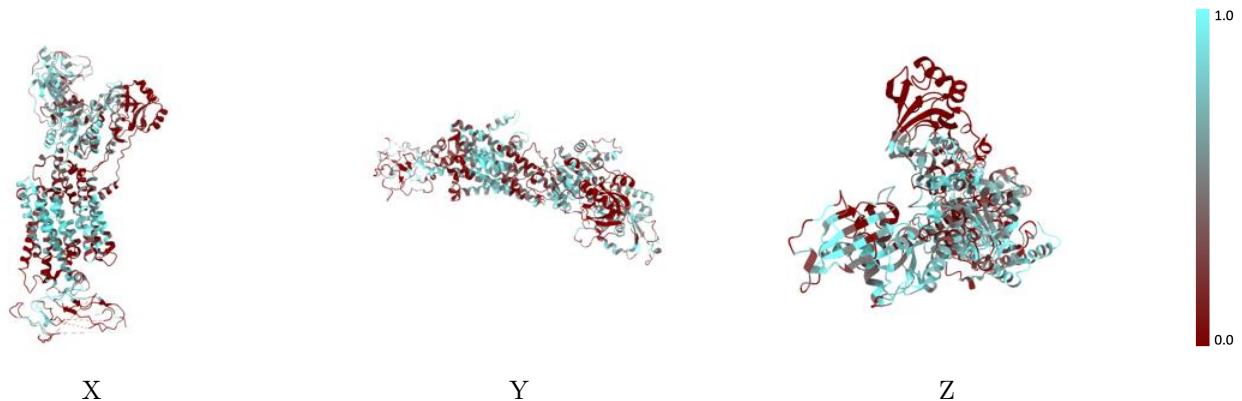
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 1.75 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

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



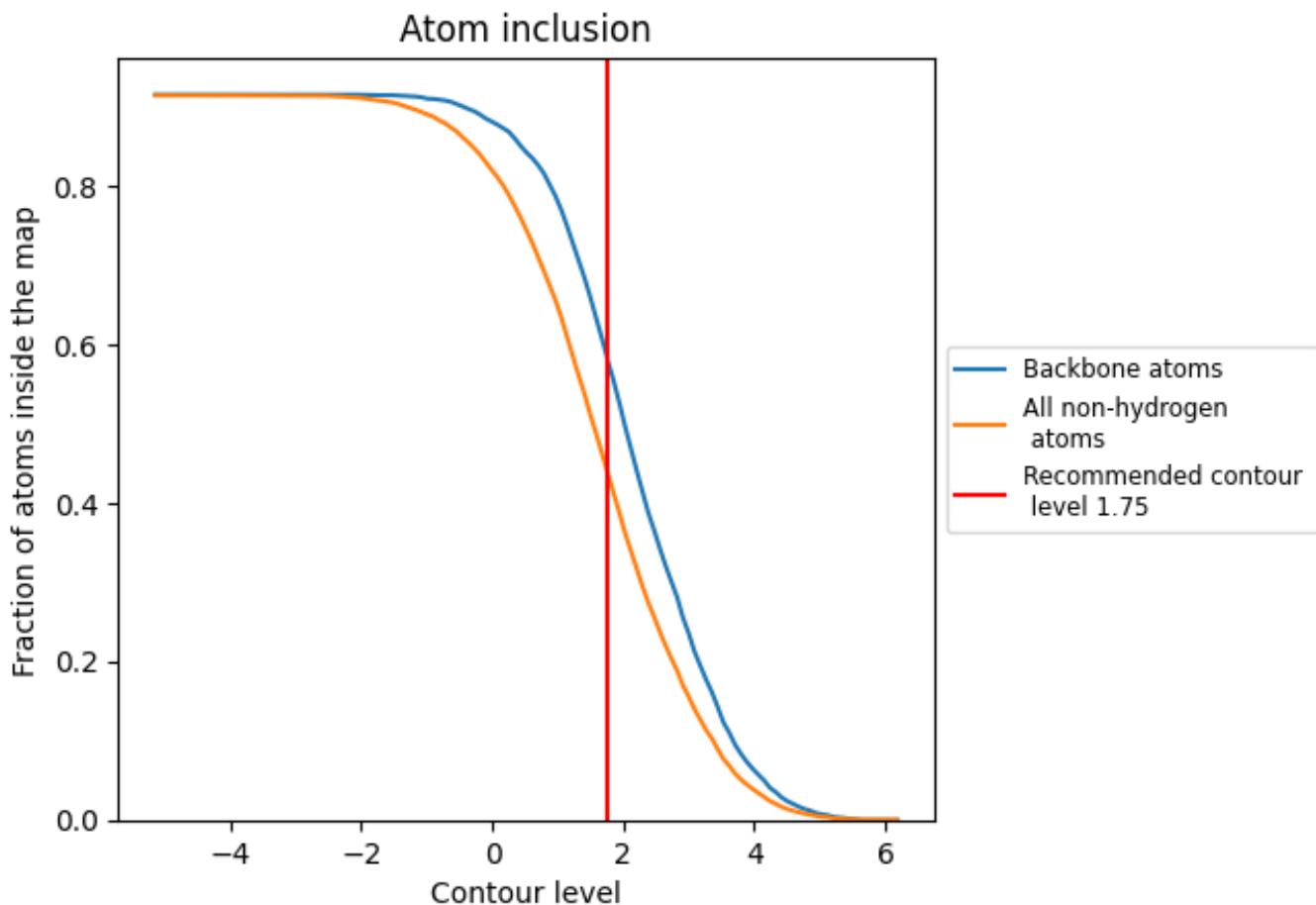
The images above show the model with each residue coloured according its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions 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 (1.75).

9.4 Atom inclusion [\(i\)](#)



At the recommended contour level, 59% of all backbone atoms, 44% of all non-hydrogen atoms, are inside the map.

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

The table lists the average atom inclusion at the recommended contour level (1.75) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	0.4417	0.1110
A	0.4589	0.1190
B	0.3494	0.0700

