



## Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Nov 5, 2022 – 03:59 PM EDT

PDB ID : 5W1R  
EMDB ID : EMD-8751  
Title : Cryo-EM structure of DNAPKcs  
Authors : Sharif, H.; Li, Y.; Wu, H.  
Deposited on : 2017-06-04  
Resolution : 4.40 Å (reported)

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

---

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

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

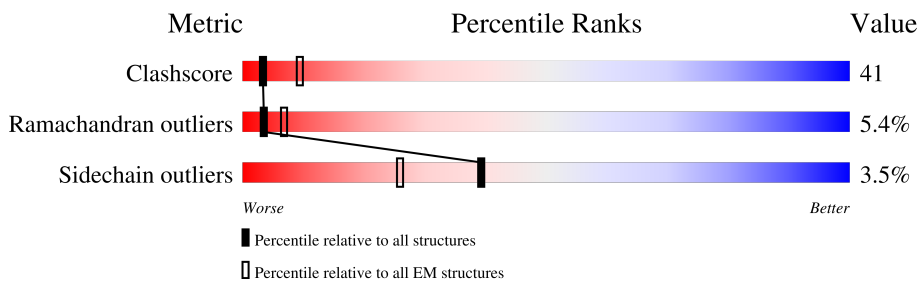
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*ELECTRON MICROSCOPY*

The reported resolution of this entry is 4.40 Å.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	4128	

## 2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 25559 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 DNA-dependent protein kinase catalytic subunit.

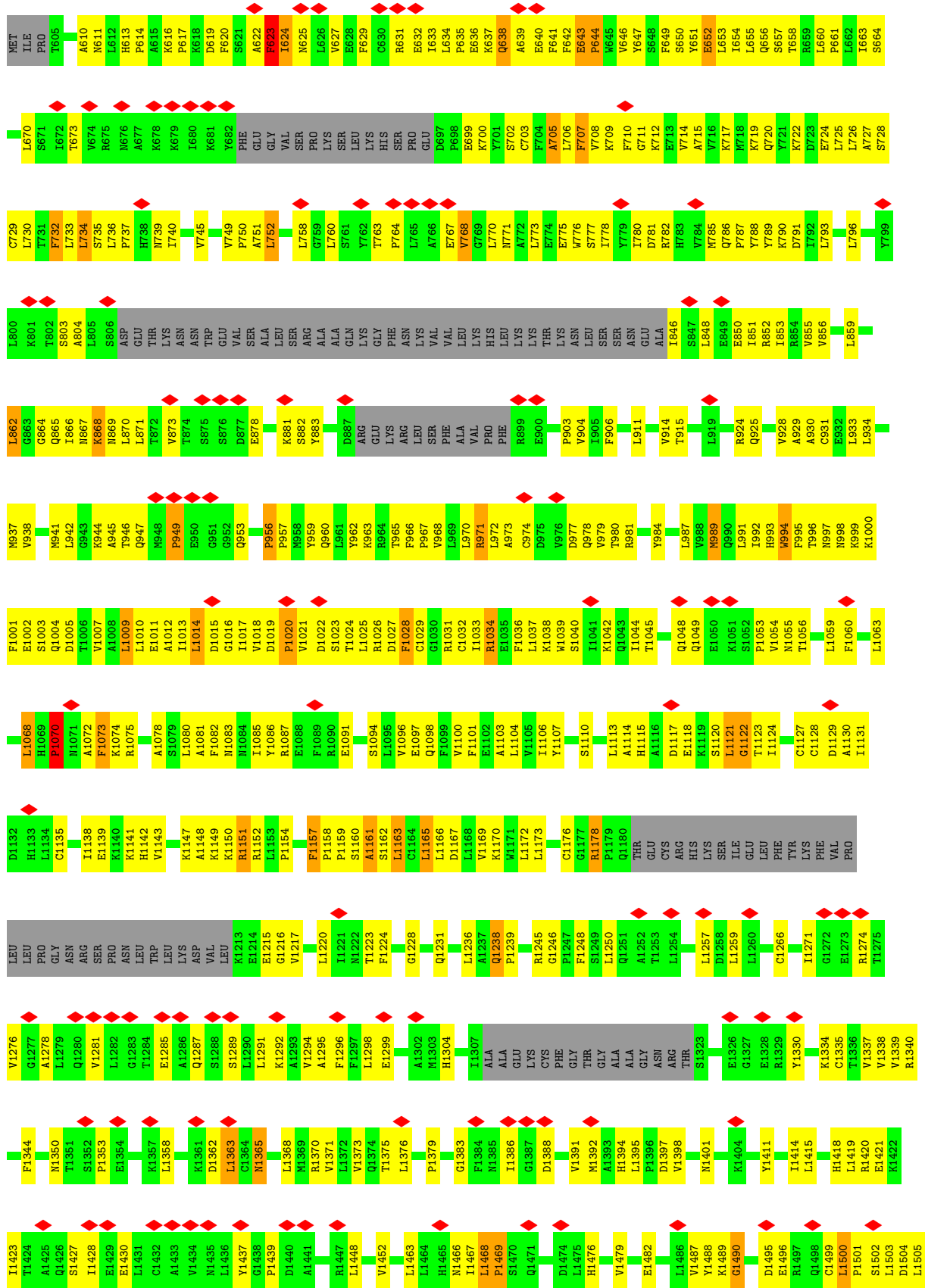
Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S		
1	A	3563	25559	16187	4350	4889	133	0	0

### 3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry and atom inclusion in map density. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. A red diamond above a residue indicates a poor fit to the EM map for this residue (all-atom inclusion < 40%). Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

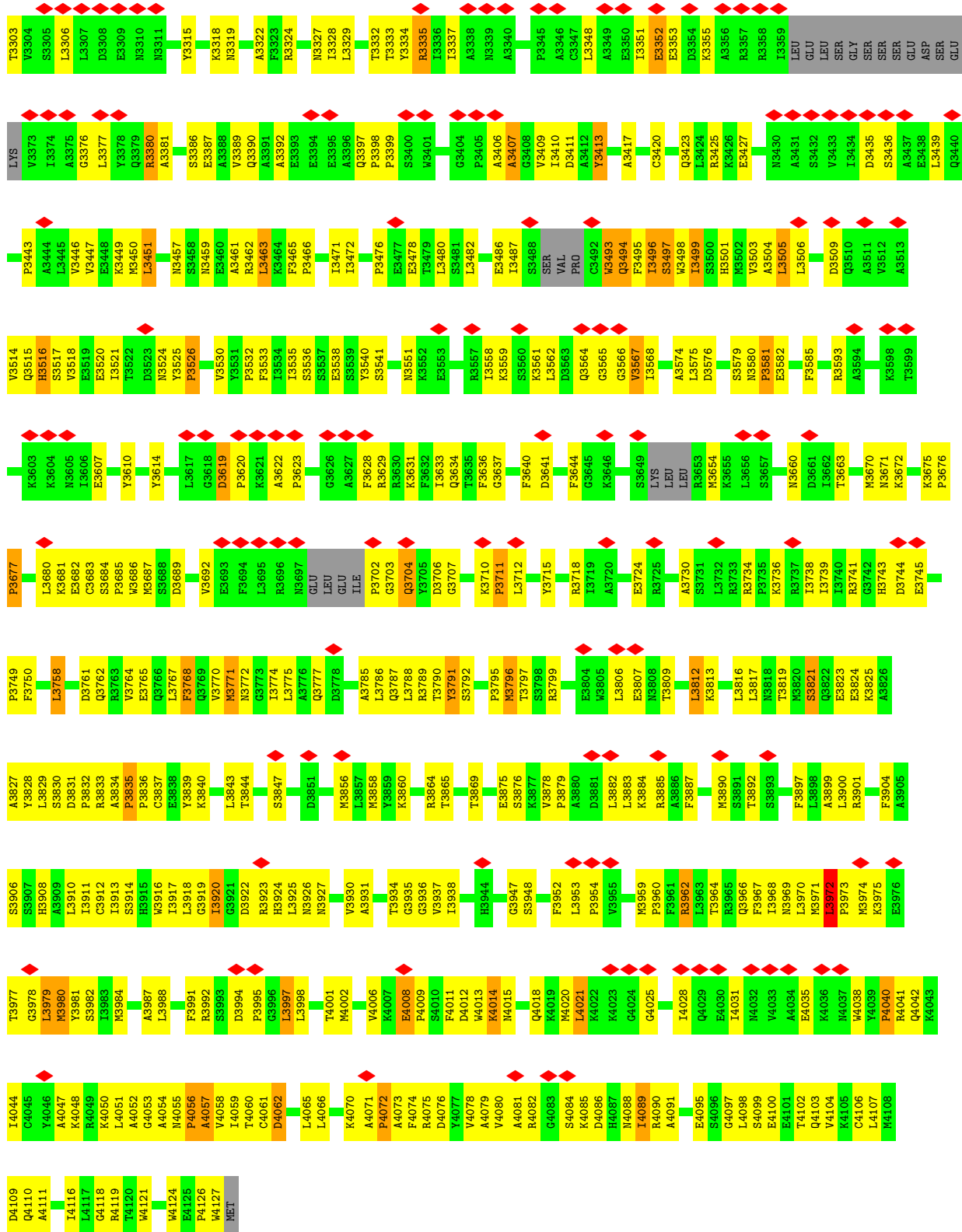
- Molecule 1: DNA-dependent protein kinase catalytic subunit













## 4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	
Number of particles used	289798	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	NONE	Depositor
Microscope	FEI TECNAI ARCTICA	Depositor
Voltage (kV)	200	Depositor
Electron dose ( $e^-/\text{\AA}^2$ )	40	Depositor
Minimum defocus (nm)	Not provided	
Maximum defocus (nm)	Not provided	
Magnification	Not provided	
Image detector	GATAN K2 SUMMIT (4k x 4k)	Depositor
Maximum map value	0.069	Depositor
Minimum map value	-0.039	Depositor
Average map value	0.000	Depositor
Map value standard deviation	0.005	Depositor
Recommended contour level	0.016	Depositor
Map size ( $\text{\AA}$ )	241.6, 241.6, 241.6	wwPDB
Map dimensions	160, 160, 160	wwPDB
Map angles ( $^\circ$ )	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing ( $\text{\AA}$ )	1.51, 1.51, 1.51	Depositor

## 5 Model quality [i](#)

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z  >5	RMSZ	# Z  >5
1	A	0.33	0/25994	0.59	18/35463 (0.1%)

There are no bond length outliers.

All (18) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	643	GLU	C-N-CD	8.55	146.35	128.40
1	A	1070	PRO	CA-N-CD	-7.38	101.16	111.50
1	A	560	LEU	CA-CB-CG	7.38	132.27	115.30
1	A	644	PRO	CA-N-CD	-6.82	101.95	111.50
1	A	1812	LEU	CA-CB-CG	6.69	130.68	115.30
1	A	758	LEU	CA-CB-CG	6.54	130.35	115.30
1	A	752	LEU	CA-CB-CG	6.19	129.53	115.30
1	A	3119	VAL	N-CA-C	-6.12	94.47	111.00
1	A	564	LEU	CA-CB-CG	6.03	129.16	115.30
1	A	734	LEU	CB-CG-CD2	-5.85	101.05	111.00
1	A	2921	LEU	CA-CB-CG	5.74	128.50	115.30
1	A	3972	LEU	C-N-CD	5.59	140.13	128.40
1	A	3051	LEU	CA-CB-CG	5.57	128.12	115.30
1	A	1591	LYS	N-CA-C	-5.49	96.18	111.00
1	A	3567	VAL	O-C-N	-5.47	113.94	122.70
1	A	3155	VAL	C-N-CD	5.40	139.73	128.40
1	A	2286	PRO	C-N-CD	5.22	139.36	128.40
1	A	3580	ASN	N-CA-C	5.22	125.09	111.00

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

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

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in the chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen

atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes within the asymmetric unit, whereas Symm-Clashes lists symmetry-related clashes.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	25559	0	23509	2005	0
All	All	25559	0	23509	2005	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 41.

All (2005) 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:2546:TYR:CD1	1:A:2554:PHE:CE1	1.81	1.66
1:A:995:PHE:CZ	1:A:1003:SER:N	1.69	1.57
1:A:660:LEU:HD11	1:A:733:LEU:CD2	1.34	1.54
1:A:488:ILE:HG23	1:A:616:LYS:CE	1.36	1.53
1:A:708:VAL:HG22	1:A:712:LYS:CE	1.33	1.52
1:A:993:HIS:CD2	1:A:1038:LYS:HG2	1.48	1.49
1:A:995:PHE:CE2	1:A:1003:SER:HB3	1.46	1.46
1:A:995:PHE:CE2	1:A:1003:SER:CB	1.99	1.44
1:A:488:ILE:CG2	1:A:616:LYS:HE3	0.99	1.44
1:A:995:PHE:CE2	1:A:1003:SER:CA	1.99	1.43
1:A:708:VAL:CG2	1:A:712:LYS:HE2	1.49	1.42
1:A:2552:VAL:HG13	1:A:2553:HIS:ND1	1.35	1.41
1:A:1874:TYR:OH	1:A:1885:PRO:CG	1.70	1.40
1:A:1984:LEU:CD1	1:A:1985:LYS:HG2	1.50	1.39
1:A:993:HIS:HD2	1:A:1038:LYS:CG	1.33	1.39
1:A:1871:MET:SD	1:A:1874:TYR:CD1	2.17	1.37
1:A:995:PHE:CE2	1:A:1003:SER:N	1.93	1.36
1:A:488:ILE:CG2	1:A:616:LYS:CE	1.93	1.36
1:A:4081:ALA:O	1:A:4110:GLN:NE2	1.57	1.34
1:A:418:ALA:CB	1:A:463:LYS:HB3	1.59	1.33
1:A:660:LEU:CD1	1:A:733:LEU:HD21	1.56	1.33
1:A:3978:GLY:O	1:A:3980:MET:N	1.61	1.32
1:A:651:TYR:O	1:A:652:GLU:HG2	1.17	1.30
1:A:882:SER:CB	1:A:3892:THR:OG1	1.79	1.30
1:A:3287:ARG:HA	1:A:3293:CYS:CB	1.59	1.30
1:A:3501:HIS:O	1:A:3505:LEU:CD1	1.79	1.30
1:A:639:ALA:HA	1:A:703:CYS:SG	1.72	1.29
1:A:2068:ARG:O	1:A:2069:ARG:CG	1.81	1.28
1:A:995:PHE:CZ	1:A:1002:GLU:C	2.07	1.28
1:A:658:THR:O	1:A:661:PRO:HD2	1.10	1.27

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2068:ARG:O	1:A:2069:ARG:HG3	1.16	1.26
1:A:531:PHE:O	1:A:534:LEU:HD13	1.20	1.26
1:A:3509:ASP:O	1:A:3514:VAL:CB	1.82	1.26
1:A:1974:ASN:CB	1:A:1984:LEU:CD2	2.14	1.26
1:A:3501:HIS:O	1:A:3505:LEU:HD13	1.32	1.25
1:A:2561:PHE:O	1:A:2565:MET:HE2	1.34	1.24
1:A:995:PHE:CD2	1:A:1003:SER:HB3	1.72	1.23
1:A:610:ALA:O	1:A:614:PRO:HD3	1.09	1.22
1:A:3461:ALA:O	1:A:3465:PHE:CD2	1.92	1.22
1:A:2546:TYR:CE1	1:A:2554:PHE:CE1	2.27	1.21
1:A:3832:PRO:O	1:A:3835:PRO:HD2	1.05	1.21
1:A:531:PHE:HA	1:A:534:LEU:CD1	1.70	1.21
1:A:3515:GLN:NE2	1:A:3551:ASN:HB3	1.53	1.21
1:A:2126:MET:HE3	1:A:2159:PRO:CB	1.71	1.20
1:A:1874:TYR:OH	1:A:1885:PRO:HG2	1.04	1.20
1:A:2554:PHE:HA	1:A:2557:LEU:CD1	1.69	1.20
1:A:1520:ALA:O	1:A:1524:LEU:CD1	1.90	1.19
1:A:1874:TYR:CZ	1:A:1885:PRO:HG2	1.74	1.19
1:A:653:LEU:HD12	1:A:656:GLN:HG3	1.20	1.19
1:A:995:PHE:HZ	1:A:1002:GLU:C	1.41	1.19
1:A:1871:MET:SD	1:A:1874:TYR:CE1	2.34	1.18
1:A:711:GLY:O	1:A:714:VAL:HG12	1.43	1.18
1:A:3506:LEU:CD1	1:A:3514:VAL:O	1.91	1.18
1:A:1501:PRO:CA	1:A:1505:LEU:HB3	1.72	1.18
1:A:1875:LYS:CB	1:A:1907:GLU:HG2	1.72	1.18
1:A:1974:ASN:CB	1:A:1984:LEU:HD21	1.70	1.18
1:A:3832:PRO:O	1:A:3835:PRO:CD	1.90	1.18
1:A:2554:PHE:CA	1:A:2557:LEU:HD13	1.74	1.17
1:A:3172:LYS:CB	1:A:3179:TRP:CD1	2.27	1.17
1:A:3236:PHE:HZ	1:A:3271:ASP:HB2	1.10	1.17
1:A:2808:LEU:O	1:A:2812:LEU:HD13	1.46	1.16
1:A:882:SER:HB3	1:A:3892:THR:OG1	0.99	1.15
1:A:2546:TYR:CE1	1:A:2554:PHE:HE1	1.61	1.15
1:A:3141:PHE:O	1:A:3145:ILE:HG12	1.44	1.15
1:A:2561:PHE:O	1:A:2565:MET:CE	1.95	1.15
1:A:1984:LEU:HD12	1:A:1985:LYS:N	1.60	1.14
1:A:3236:PHE:CZ	1:A:3271:ASP:HB2	1.82	1.14
1:A:2126:MET:HE3	1:A:2159:PRO:HB3	1.18	1.14
1:A:995:PHE:HE2	1:A:1003:SER:CB	1.44	1.13
1:A:3461:ALA:O	1:A:3465:PHE:HD2	1.23	1.13
1:A:610:ALA:O	1:A:614:PRO:CD	1.96	1.13

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:708:VAL:O	1:A:712:LYS:HG2	1.49	1.11
1:A:531:PHE:HA	1:A:534:LEU:HD11	1.22	1.11
1:A:2546:TYR:HD1	1:A:2554:PHE:CE1	1.35	1.10
1:A:2562:LEU:HA	1:A:2565:MET:CE	1.81	1.10
1:A:651:TYR:O	1:A:652:GLU:CG	1.98	1.10
1:A:1521:PHE:HA	1:A:1524:LEU:HD13	1.26	1.10
1:A:488:ILE:HG21	1:A:616:LYS:HE3	1.15	1.10
1:A:3515:GLN:NE2	1:A:3551:ASN:CB	2.13	1.10
1:A:1083:ASN:HA	1:A:1086:TYR:CE1	1.85	1.09
1:A:3917:ILE:HD12	1:A:3991:PHE:CZ	1.87	1.09
1:A:3119:VAL:HG22	1:A:3899:ALA:HB2	1.12	1.09
1:A:2098:THR:HG22	1:A:2146:LEU:CD1	1.83	1.09
1:A:2562:LEU:HD23	1:A:2565:MET:HE1	1.21	1.08
1:A:1501:PRO:HB3	1:A:1505:LEU:HD23	1.23	1.08
1:A:1984:LEU:HD11	1:A:1985:LYS:HG2	1.12	1.08
1:A:1733:THR:HG23	1:A:1877:LEU:CB	1.83	1.07
1:A:531:PHE:CA	1:A:534:LEU:CD1	2.31	1.06
1:A:1874:TYR:OH	1:A:1885:PRO:CB	2.01	1.06
1:A:531:PHE:C	1:A:534:LEU:HD13	1.75	1.06
1:A:2552:VAL:HG13	1:A:2553:HIS:CE1	1.89	1.06
1:A:3178:ILE:HA	1:A:3181:ASP:HB2	1.36	1.05
1:A:1452:VAL:HG21	1:A:1502:SER:CB	1.87	1.05
1:A:714:VAL:HG13	1:A:715:ALA:H	1.22	1.04
1:A:882:SER:CB	1:A:3892:THR:HG1	1.61	1.04
1:A:1871:MET:CE	1:A:1874:TYR:CE1	2.40	1.04
1:A:2098:THR:HG22	1:A:2146:LEU:HD13	1.06	1.04
1:A:3832:PRO:C	1:A:3835:PRO:HD2	1.78	1.04
1:A:717:LYS:HE2	1:A:717:LYS:HA	1.38	1.04
1:A:1501:PRO:HA	1:A:1505:LEU:HB3	1.30	1.04
1:A:385:TYR:CZ	1:A:389:ILE:HD11	1.93	1.03
1:A:418:ALA:CB	1:A:463:LYS:CB	2.35	1.03
1:A:706:LEU:O	1:A:710:PHE:CB	2.06	1.03
1:A:3119:VAL:HG22	1:A:3899:ALA:CB	1.88	1.03
1:A:653:LEU:CD1	1:A:656:GLN:HG3	1.88	1.03
1:A:658:THR:O	1:A:661:PRO:CD	2.05	1.03
1:A:3574:ALA:HB1	1:A:3628:PHE:CB	1.87	1.03
1:A:653:LEU:HD12	1:A:656:GLN:CG	1.88	1.03
1:A:2549:LYS:NZ	1:A:2554:PHE:HB2	1.74	1.03
1:A:3160:LEU:O	1:A:3163:THR:HG22	1.57	1.03
1:A:3506:LEU:HD13	1:A:3514:VAL:O	1.58	1.03
1:A:657:SER:O	1:A:660:LEU:HG	1.58	1.02

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1501:PRO:CB	1:A:1505:LEU:HB3	1.89	1.02
1:A:4066:LEU:O	1:A:4066:LEU:HD12	1.59	1.02
1:A:1501:PRO:HB3	1:A:1505:LEU:CD2	1.89	1.02
1:A:418:ALA:HB1	1:A:463:LYS:HB3	1.02	1.02
1:A:3977:THR:HG22	1:A:3978:GLY:H	1.25	1.01
1:A:654:ILE:CD1	1:A:726:LEU:CB	2.38	1.01
1:A:3119:VAL:CG2	1:A:3899:ALA:HB2	1.88	1.01
1:A:4070:LYS:CB	1:A:4074:PHE:CB	2.38	1.01
1:A:2546:TYR:CD1	1:A:2554:PHE:CD1	2.49	1.01
1:A:3235:LYS:O	1:A:3239:LYS:HB2	1.60	1.01
1:A:658:THR:C	1:A:661:PRO:HD2	1.80	1.01
1:A:708:VAL:CG2	1:A:712:LYS:CE	2.23	1.00
1:A:3283:LEU:CD2	1:A:3296:GLN:CB	2.39	1.00
1:A:3506:LEU:HD12	1:A:3514:VAL:O	1.58	1.00
1:A:3506:LEU:HD21	1:A:3518:VAL:CA	1.92	1.00
1:A:2552:VAL:CG1	1:A:2553:HIS:ND1	2.24	1.00
1:A:1501:PRO:O	1:A:1506:SER:N	1.96	0.99
1:A:654:ILE:CG2	1:A:729:CYS:HB2	1.92	0.99
1:A:3236:PHE:CZ	1:A:3268:THR:OG1	2.15	0.99
1:A:2098:THR:CG2	1:A:2146:LEU:HD13	1.93	0.99
1:A:1984:LEU:CD1	1:A:1985:LYS:CG	2.41	0.98
1:A:995:PHE:CE1	1:A:1002:GLU:HB3	1.99	0.98
1:A:1984:LEU:HD12	1:A:1985:LYS:HG2	1.45	0.97
1:A:480:SER:HA	1:A:483:VAL:HG22	1.43	0.97
1:A:993:HIS:CD2	1:A:1038:LYS:CG	2.24	0.97
1:A:2562:LEU:HD23	1:A:2565:MET:CE	1.93	0.97
1:A:992:ILE:HD12	1:A:993:HIS:H	1.28	0.97
1:A:1070:PRO:HG3	1:A:3741:ARG:HB3	1.46	0.97
1:A:611:ASN:O	1:A:614:PRO:HD2	1.65	0.97
1:A:1520:ALA:O	1:A:1524:LEU:HD13	1.62	0.97
1:A:657:SER:O	1:A:661:PRO:HD3	1.64	0.96
1:A:707:PHE:O	1:A:711:GLY:N	1.98	0.96
1:A:3172:LYS:CB	1:A:3179:TRP:NE1	2.28	0.96
1:A:706:LEU:O	1:A:710:PHE:N	1.97	0.96
1:A:2100:LEU:HD21	1:A:2104:MET:CG	1.94	0.96
1:A:531:PHE:CA	1:A:534:LEU:HD11	1.94	0.96
1:A:380:ASP:O	1:A:383:PHE:HE2	1.49	0.95
1:A:654:ILE:HD11	1:A:726:LEU:CB	1.95	0.95
1:A:531:PHE:O	1:A:534:LEU:CD1	2.13	0.95
1:A:3287:ARG:CA	1:A:3293:CYS:CB	2.44	0.95
1:A:654:ILE:CG2	1:A:729:CYS:CB	2.45	0.95

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:715:ALA:HB2	1:A:734:LEU:HD13	1.45	0.95
1:A:4014:LYS:H	1:A:4038:TRP:HZ3	1.05	0.95
1:A:660:LEU:HD12	1:A:661:PRO:N	1.82	0.94
1:A:4082:ARG:O	1:A:4086:ASP:CB	2.15	0.94
1:A:653:LEU:CD1	1:A:656:GLN:H	1.81	0.94
1:A:1501:PRO:HA	1:A:1505:LEU:CB	1.98	0.94
1:A:455:LEU:HD12	1:A:456:VAL:N	1.83	0.94
1:A:3506:LEU:HD21	1:A:3518:VAL:HA	1.51	0.93
1:A:3917:ILE:HD12	1:A:3991:PHE:CE1	2.02	0.93
1:A:2869:LEU:CB	1:A:2892:LEU:HD12	1.98	0.93
1:A:1081:ALA:O	1:A:1085:ILE:HG12	1.68	0.93
1:A:534:LEU:O	1:A:538:ASP:N	2.02	0.93
1:A:4085:LYS:O	1:A:4089:ILE:N	2.01	0.93
1:A:2552:VAL:CG1	1:A:2553:HIS:CE1	2.51	0.93
1:A:1083:ASN:HD22	1:A:1107:TYR:HE2	1.13	0.92
1:A:639:ALA:CA	1:A:703:CYS:SG	2.57	0.92
1:A:3190:LEU:HD21	1:A:3235:LYS:HE2	1.51	0.92
1:A:706:LEU:O	1:A:710:PHE:HB2	1.69	0.92
1:A:385:TYR:CZ	1:A:389:ILE:CD1	2.52	0.92
1:A:995:PHE:CE2	1:A:1003:SER:HA	2.02	0.92
1:A:3178:ILE:HA	1:A:3181:ASP:CB	2.00	0.92
1:A:3515:GLN:HE22	1:A:3551:ASN:HB3	1.17	0.92
1:A:611:ASN:C	1:A:614:PRO:HD2	1.89	0.91
1:A:661:PRO:HG3	1:A:733:LEU:HD23	1.52	0.91
1:A:1501:PRO:HB3	1:A:1505:LEU:HB3	1.50	0.91
1:A:3505:LEU:HD12	1:A:3505:LEU:H	1.34	0.91
1:A:357:LYS:HB3	1:A:360:SER:HB2	1.52	0.91
1:A:1521:PHE:CA	1:A:1524:LEU:HD13	2.00	0.91
1:A:2546:TYR:HD1	1:A:2554:PHE:CD1	1.86	0.91
1:A:2510:LEU:HD21	1:A:2522:ARG:HE	1.34	0.91
1:A:2097:LEU:CD2	1:A:2143:ARG:HG2	1.99	0.91
1:A:2147:ALA:O	1:A:2151:ILE:HG12	1.69	0.91
1:A:2163:HIS:O	1:A:2167:PRO:HD3	1.70	0.91
1:A:2163:HIS:O	1:A:2167:PRO:CD	2.19	0.91
1:A:2562:LEU:HA	1:A:2565:MET:HE2	1.50	0.90
1:A:633:ILE:O	1:A:637:LYS:CB	2.20	0.90
1:A:385:TYR:HE1	1:A:421:LEU:HD11	1.35	0.89
1:A:2126:MET:CE	1:A:2159:PRO:CB	2.49	0.89
1:A:995:PHE:HZ	1:A:1002:GLU:CA	1.84	0.89
1:A:2312:TYR:CZ	1:A:2316:TYR:HA	2.08	0.89
1:A:642:PHE:CB	1:A:703:CYS:SG	2.61	0.89

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1045:THR:HB	1:A:1048:GLN:HB3	1.53	0.89
1:A:3236:PHE:CE1	1:A:3268:THR:OG1	2.26	0.89
1:A:640:GLU:O	1:A:644:PRO:HD3	1.71	0.89
1:A:2100:LEU:HD21	1:A:2104:MET:HG2	1.54	0.89
1:A:2223:VAL:HG11	1:A:2238:ILE:HD11	1.54	0.89
1:A:2549:LYS:HZ3	1:A:2554:PHE:HB2	1.35	0.89
1:A:1501:PRO:CB	1:A:1505:LEU:HD23	2.03	0.88
1:A:637:LYS:O	1:A:641:PHE:HB3	1.73	0.88
1:A:1520:ALA:O	1:A:1524:LEU:HD12	1.70	0.88
1:A:3576:ASP:O	1:A:3579:SER:OG	1.90	0.88
1:A:352:VAL:HG23	1:A:357:LYS:H	1.38	0.88
1:A:1452:VAL:CG2	1:A:1502:SER:CB	2.51	0.88
1:A:1552:HIS:O	1:A:1555:HIS:ND1	2.04	0.88
1:A:2546:TYR:CD1	1:A:2554:PHE:HE1	1.50	0.88
1:A:715:ALA:HB2	1:A:734:LEU:CD1	2.04	0.87
1:A:2312:TYR:OH	1:A:2316:TYR:HA	1.74	0.87
1:A:3164:TRP:HB3	1:A:3168:TYR:HE2	1.40	0.87
1:A:660:LEU:HD11	1:A:733:LEU:HD23	1.56	0.87
1:A:660:LEU:CD1	1:A:733:LEU:CD2	2.29	0.87
1:A:1874:TYR:HH	1:A:1885:PRO:HG2	1.06	0.87
1:A:1083:ASN:HA	1:A:1086:TYR:HE1	1.35	0.87
1:A:2068:ARG:O	1:A:2069:ARG:CB	2.23	0.86
1:A:422:LEU:HD21	1:A:466:LEU:HG	1.57	0.86
1:A:418:ALA:HB1	1:A:463:LYS:CB	1.97	0.86
1:A:3130:GLN:OE1	1:A:3178:ILE:CD1	2.24	0.86
1:A:528:VAL:CG1	1:A:619:ASP:OD1	2.24	0.86
1:A:1083:ASN:ND2	1:A:1107:TYR:HE2	1.73	0.86
1:A:1245:ARG:O	1:A:1250:LEU:CD1	2.23	0.86
1:A:2546:TYR:CD1	1:A:2554:PHE:CZ	2.64	0.86
1:A:1871:MET:HA	1:A:1874:TYR:HB2	1.57	0.86
1:A:459:ARG:O	1:A:462:VAL:HG12	1.75	0.85
1:A:661:PRO:HA	1:A:664:SER:OG	1.76	0.85
1:A:2152:ASN:OD1	1:A:2153:THR:N	2.09	0.85
1:A:2564:GLU:OE1	1:A:2571:ASP:OD2	1.94	0.85
1:A:2566:THR:O	1:A:2567:SER:OG	1.94	0.85
1:A:995:PHE:CZ	1:A:1003:SER:CA	2.43	0.85
1:A:711:GLY:O	1:A:714:VAL:CG1	2.24	0.85
1:A:715:ALA:O	1:A:719:LYS:N	2.09	0.84
1:A:1562:LEU:HD23	1:A:1562:LEU:H	1.42	0.84
1:A:3977:THR:HG22	1:A:3978:GLY:N	1.89	0.84
1:A:992:ILE:HD12	1:A:993:HIS:N	1.92	0.84

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:488:ILE:HG23	1:A:616:LYS:HE2	1.56	0.84
1:A:3247:ARG:HB2	1:A:3278:GLN:HE22	1.43	0.84
1:A:649:PHE:O	1:A:650:SER:OG	1.94	0.84
1:A:2068:ARG:C	1:A:2069:ARG:HG3	1.97	0.83
1:A:3291:GLN:O	1:A:3295:GLU:HG2	1.79	0.83
1:A:385:TYR:HE1	1:A:421:LEU:CD1	1.92	0.83
1:A:3174:ASP:N	1:A:3175:PRO:HD2	1.93	0.83
1:A:3178:ILE:H	1:A:3178:ILE:HD12	1.43	0.83
1:A:3505:LEU:HA	1:A:3509:ASP:CB	2.09	0.83
1:A:3574:ALA:CB	1:A:3628:PHE:CB	2.55	0.83
1:A:661:PRO:HG3	1:A:733:LEU:CD2	2.09	0.83
1:A:2555:LEU:HD23	1:A:2555:LEU:H	1.42	0.83
1:A:1073:PHE:O	1:A:1075:ARG:N	2.12	0.83
1:A:369:PHE:CB	1:A:416:SER:HB3	2.08	0.83
1:A:385:TYR:CE2	1:A:389:ILE:HD12	2.14	0.83
1:A:3247:ARG:HH21	1:A:3278:GLN:HA	1.44	0.83
1:A:717:LYS:HA	1:A:717:LYS:CE	2.08	0.83
1:A:1730:PRO:HG3	1:A:1869:LYS:HB3	1.59	0.82
1:A:3917:ILE:CD1	1:A:3991:PHE:CE1	2.60	0.82
1:A:1939:LEU:HD12	1:A:1986:ARG:HH22	1.44	0.82
1:A:3978:GLY:C	1:A:3980:MET:N	2.32	0.82
1:A:2546:TYR:CE1	1:A:2554:PHE:CD1	2.66	0.82
1:A:262:LEU:HD13	1:A:306:VAL:HG11	1.59	0.82
1:A:560:LEU:HD12	1:A:561:ASN:HD22	1.44	0.82
1:A:1500:LEU:O	1:A:1504:ASP:N	2.13	0.82
1:A:654:ILE:HG21	1:A:729:CYS:HB2	1.62	0.82
1:A:1294:VAL:O	1:A:1298:LEU:N	2.12	0.82
1:A:1083:ASN:ND2	1:A:1107:TYR:CE2	2.48	0.81
1:A:531:PHE:C	1:A:534:LEU:CD1	2.47	0.81
1:A:3582:GLU:HA	1:A:3585:PHE:HD2	1.43	0.81
1:A:654:ILE:HD12	1:A:726:LEU:CB	2.11	0.81
1:A:3190:LEU:HD11	1:A:3235:LYS:HG2	1.61	0.81
1:A:308:LEU:HB3	1:A:311:ALA:HB3	1.62	0.81
1:A:531:PHE:CA	1:A:534:LEU:HD13	2.06	0.81
1:A:1871:MET:CE	1:A:1874:TYR:HE1	1.90	0.81
1:A:3506:LEU:HD11	1:A:3515:GLN:HA	1.62	0.81
1:A:2231:PHE:O	1:A:2234:ASN:ND2	2.13	0.80
1:A:1070:PRO:HG2	1:A:3741:ARG:HH21	1.44	0.80
1:A:2153:THR:HG23	1:A:2154:GLU:H	1.43	0.80
1:A:634:LEU:O	1:A:638:GLN:CB	2.29	0.80
1:A:639:ALA:O	1:A:643:GLU:HG3	1.80	0.80

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2046:SER:OG	1:A:2096:PRO:HG3	1.79	0.80
1:A:1963:GLN:HA	1:A:1966:LEU:HB2	1.64	0.80
1:A:4076:ASP:O	1:A:4080:VAL:HG23	1.81	0.80
1:A:2100:LEU:CD2	1:A:2104:MET:CG	2.59	0.80
1:A:1169:VAL:HA	1:A:1172:LEU:HD12	1.63	0.80
1:A:368:LEU:HD13	1:A:388:LEU:HD22	1.62	0.80
1:A:994:TRP:CZ2	1:A:2775:TYR:O	2.35	0.80
1:A:3978:GLY:C	1:A:3980:MET:H	1.84	0.80
1:A:1019:ASP:O	1:A:1021:VAL:N	2.14	0.79
1:A:3283:LEU:HG	1:A:3300:VAL:HG21	1.64	0.79
1:A:1974:ASN:CB	1:A:1984:LEU:HD23	2.11	0.79
1:A:995:PHE:CD2	1:A:1003:SER:CB	2.49	0.79
1:A:380:ASP:O	1:A:383:PHE:CE2	2.36	0.79
1:A:3283:LEU:HD21	1:A:3296:GLN:CB	2.12	0.79
1:A:3461:ALA:O	1:A:3465:PHE:CE2	2.36	0.79
1:A:3830:SER:HA	1:A:3833:ARG:HB3	1.64	0.79
1:A:3992:ARG:HH22	1:A:4100:GLU:HA	1.48	0.79
1:A:461:ILE:O	1:A:464:VAL:HG22	1.83	0.79
1:A:390:GLN:HG3	1:A:393:LYS:HE3	1.65	0.79
1:A:2528:GLU:HG3	1:A:2529:THR:HG23	1.64	0.78
1:A:4079:ALA:O	1:A:4084:SER:N	2.16	0.78
1:A:864:GLY:O	1:A:868:LYS:NZ	2.14	0.78
1:A:1521:PHE:HA	1:A:1524:LEU:CD1	2.13	0.78
1:A:2280:VAL:HG23	1:A:2281:MET:HG3	1.65	0.78
1:A:708:VAL:CG2	1:A:712:LYS:NZ	2.46	0.78
1:A:2400:VAL:O	1:A:2403:CYS:SG	2.40	0.78
1:A:3152:SER:O	1:A:3156:PRO:HD2	1.82	0.78
1:A:3501:HIS:O	1:A:3505:LEU:HD11	1.80	0.78
1:A:995:PHE:HE1	1:A:1002:GLU:HB3	1.45	0.78
1:A:245:SER:HA	1:A:249:PHE:HD2	1.49	0.78
1:A:2806:LYS:HA	1:A:2809:PHE:CE2	2.19	0.78
1:A:714:VAL:CG2	1:A:734:LEU:HD21	2.14	0.77
1:A:2100:LEU:HD21	1:A:2104:MET:HG3	1.65	0.77
1:A:870:LEU:HA	1:A:873:VAL:HB	1.66	0.77
1:A:557:SER:O	1:A:561:ASN:HB2	1.85	0.77
1:A:2868:LEU:HD13	1:A:2868:LEU:O	1.84	0.77
1:A:3284:SER:HA	1:A:3287:ARG:HE	1.48	0.77
1:A:488:ILE:HG21	1:A:616:LYS:CE	1.85	0.77
1:A:2097:LEU:HD23	1:A:2143:ARG:HG2	1.65	0.76
1:A:3315:TYR:CB	1:A:3318:LYS:H	1.99	0.76
1:A:461:ILE:O	1:A:465:PHE:HD2	1.68	0.76

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3348:LEU:CB	1:A:3352:GLU:OE2	2.33	0.76
1:A:3515:GLN:HE22	1:A:3551:ASN:CB	1.89	0.76
1:A:651:TYR:C	1:A:652:GLU:HG2	2.06	0.76
1:A:3236:PHE:HZ	1:A:3271:ASP:CB	1.94	0.76
1:A:3457:ASN:HB2	1:A:3459:ASN:OD1	1.84	0.76
1:A:3809:THR:HA	1:A:3931:ALA:HA	1.68	0.76
1:A:1045:THR:OG1	1:A:1049:GLN:NE2	2.19	0.76
1:A:3348:LEU:CA	1:A:3352:GLU:OE2	2.34	0.76
1:A:654:ILE:HG23	1:A:729:CYS:HB2	1.68	0.76
1:A:1939:LEU:CD1	1:A:1986:ARG:HH12	1.98	0.76
1:A:1982:ILE:O	1:A:1986:ARG:HG3	1.86	0.76
1:A:3568:ILE:HD12	1:A:3568:ILE:N	2.01	0.75
1:A:1295:ALA:O	1:A:1299:GLU:CB	2.35	0.75
1:A:1501:PRO:HB3	1:A:1505:LEU:CB	2.15	0.75
1:A:2510:LEU:HD23	1:A:2522:ARG:HG2	1.67	0.75
1:A:3164:TRP:O	1:A:3168:TYR:CD2	2.40	0.75
1:A:2779:ASP:O	1:A:2783:ILE:HG12	1.86	0.75
1:A:3141:PHE:O	1:A:3145:ILE:CG1	2.32	0.75
1:A:422:LEU:HG	1:A:467:ALA:HB2	1.66	0.75
1:A:3832:PRO:O	1:A:3836:PRO:HD3	1.87	0.75
1:A:3283:LEU:HD12	1:A:3328:ILE:HD13	1.69	0.75
1:A:2156:VAL:HG12	1:A:2159:PRO:CD	2.17	0.74
1:A:3144:PHE:O	1:A:3149:GLY:N	2.20	0.74
1:A:3420:CYS:HA	1:A:3423:GLN:HB3	1.68	0.74
1:A:658:THR:C	1:A:661:PRO:CD	2.53	0.74
1:A:332:GLU:OE2	1:A:335:LYS:NZ	2.17	0.74
1:A:449:TYR:CB	1:A:453:MET:SD	2.75	0.74
1:A:641:PHE:O	1:A:644:PRO:HD2	1.87	0.74
1:A:2477:LEU:HA	1:A:2480:ILE:HG22	1.69	0.74
1:A:2510:LEU:CD2	1:A:2522:ARG:HE	2.01	0.74
1:A:993:HIS:HD2	1:A:1038:LYS:HG2	0.59	0.74
1:A:2569:SER:N	1:A:2570:PRO:HD2	2.03	0.74
1:A:3505:LEU:HD12	1:A:3505:LEU:N	2.02	0.74
1:A:4002:MET:SD	1:A:4048:LYS:NZ	2.58	0.74
1:A:484:HIS:O	1:A:487:LEU:N	2.21	0.74
1:A:3235:LYS:O	1:A:3239:LYS:CB	2.34	0.74
1:A:3515:GLN:O	1:A:3518:VAL:N	2.17	0.74
1:A:2125:TRP:O	1:A:2127:LYS:N	2.21	0.73
1:A:2510:LEU:CD2	1:A:2522:ARG:HG2	2.17	0.73
1:A:3144:PHE:O	1:A:3148:GLN:CB	2.36	0.73
1:A:2565:MET:O	1:A:2566:THR:HG22	1.88	0.73

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3917:ILE:CD1	1:A:3991:PHE:CD1	2.72	0.73
1:A:488:ILE:CG2	1:A:616:LYS:CD	2.66	0.73
1:A:708:VAL:HG22	1:A:712:LYS:NZ	2.03	0.73
1:A:2549:LYS:HZ2	1:A:2554:PHE:HB2	1.51	0.73
1:A:663:ILE:HD12	1:A:663:ILE:N	2.02	0.73
1:A:763:THR:O	1:A:767:GLU:N	2.21	0.73
1:A:3107:ILE:HG12	1:A:3135:LEU:HD13	1.70	0.73
1:A:3910:LEU:O	1:A:3914:SER:OG	2.04	0.73
1:A:2033:ASP:O	1:A:2037:SER:OG	2.06	0.73
1:A:3506:LEU:CD1	1:A:3515:GLN:HA	2.17	0.73
1:A:993:HIS:CE1	1:A:997:ASN:HD22	2.07	0.73
1:A:2153:THR:HG23	1:A:2154:GLU:N	2.04	0.73
1:A:3582:GLU:HA	1:A:3585:PHE:CD2	2.24	0.73
1:A:995:PHE:CZ	1:A:1002:GLU:HB3	2.24	0.73
1:A:1984:LEU:HD11	1:A:1985:LYS:CG	2.06	0.73
1:A:3164:TRP:HB3	1:A:3168:TYR:CE2	2.24	0.73
1:A:3768:PHE:CZ	1:A:3918:LEU:HD11	2.23	0.72
1:A:455:LEU:HD12	1:A:456:VAL:H	1.54	0.72
1:A:654:ILE:HG21	1:A:729:CYS:CB	2.16	0.72
1:A:3183:ILE:HD12	1:A:3242:MET:HG3	1.71	0.72
1:A:714:VAL:CG1	1:A:734:LEU:HD21	2.18	0.72
1:A:1468:LEU:HD12	1:A:1510:LEU:HD13	1.71	0.72
1:A:2562:LEU:HA	1:A:2565:MET:HE3	1.71	0.72
1:A:2562:LEU:CD2	1:A:2565:MET:HE1	2.13	0.72
1:A:169:THR:O	1:A:173:LYS:NZ	2.22	0.72
1:A:1562:LEU:HD23	1:A:1562:LEU:N	2.05	0.72
1:A:1870:LYS:O	1:A:1874:TYR:HD1	1.73	0.72
1:A:3130:GLN:OE1	1:A:3178:ILE:HG12	1.89	0.72
1:A:3743:HIS:O	1:A:3745:GLU:N	2.18	0.72
1:A:2840:PHE:HA	1:A:2843:PHE:HD1	1.55	0.72
1:A:3917:ILE:HD13	1:A:3991:PHE:CD1	2.24	0.72
1:A:3178:ILE:HD12	1:A:3178:ILE:N	2.04	0.72
1:A:1245:ARG:C	1:A:1250:LEU:CD1	2.58	0.71
1:A:1501:PRO:HA	1:A:1505:LEU:H	1.54	0.71
1:A:3496:ILE:HG21	1:A:3707:GLY:HA2	1.70	0.71
1:A:2163:HIS:O	1:A:2167:PRO:HD2	1.90	0.71
1:A:2190:VAL:HA	1:A:2193:ILE:HG22	1.70	0.71
1:A:3739:ILE:HD13	1:A:3749:PRO:HB3	1.73	0.71
1:A:1564:SER:O	1:A:1567:ILE:HG22	1.89	0.71
1:A:1871:MET:HE1	1:A:1874:TYR:HE1	1.56	0.71
1:A:3348:LEU:O	1:A:3352:GLU:HB2	1.90	0.71

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:534:LEU:H	1:A:534:LEU:HD12	1.56	0.71
1:A:613:HIS:CE1	1:A:656:GLN:CG	2.74	0.71
1:A:1871:MET:HE1	1:A:1874:TYR:CE1	2.25	0.71
1:A:2869:LEU:CB	1:A:2892:LEU:CD1	2.68	0.71
1:A:3227:ILE:O	1:A:3231:ILE:HG13	1.90	0.71
1:A:3231:ILE:HG22	1:A:3235:LYS:HE3	1.71	0.71
1:A:2095:ALA:O	1:A:2098:THR:OG1	2.07	0.71
1:A:995:PHE:HZ	1:A:1003:SER:N	1.34	0.71
1:A:2555:LEU:H	1:A:2555:LEU:CD2	2.04	0.71
1:A:651:TYR:O	1:A:652:GLU:CB	2.38	0.70
1:A:655:LEU:HD22	1:A:655:LEU:N	2.05	0.70
1:A:3506:LEU:HD13	1:A:3517:SER:HB2	1.73	0.70
1:A:3525:TYR:OH	1:A:3561:LYS:O	2.09	0.70
1:A:3917:ILE:CD1	1:A:3991:PHE:CZ	2.69	0.70
1:A:3978:GLY:O	1:A:3980:MET:CA	2.38	0.70
1:A:2144:LEU:HB3	1:A:2148:LYS:HE3	1.71	0.70
1:A:3506:LEU:HD12	1:A:3514:VAL:C	2.10	0.70
1:A:655:LEU:HD22	1:A:655:LEU:H	1.55	0.70
1:A:3495:PHE:HA	1:A:3498:TRP:CZ2	2.26	0.70
1:A:610:ALA:C	1:A:614:PRO:HD3	2.07	0.70
1:A:660:LEU:HD12	1:A:661:PRO:CD	2.21	0.70
1:A:3506:LEU:HD21	1:A:3518:VAL:N	2.06	0.70
1:A:3633:ILE:O	1:A:3637:GLY:N	2.25	0.70
1:A:258:PRO:HB2	1:A:261:ASP:HB2	1.73	0.70
1:A:266:ALA:HB2	1:A:308:LEU:HG	1.73	0.70
1:A:2156:VAL:HG12	1:A:2159:PRO:HD3	1.73	0.70
1:A:3251:ASN:OD1	1:A:3252:PHE:N	2.23	0.70
1:A:3506:LEU:HD22	1:A:3517:SER:C	2.11	0.70
1:A:263:LYS:HG3	1:A:308:LEU:HD21	1.74	0.70
1:A:3178:ILE:HA	1:A:3181:ASP:CG	2.11	0.70
1:A:1501:PRO:O	1:A:1505:LEU:N	2.25	0.70
1:A:1984:LEU:HD12	1:A:1985:LYS:CG	2.16	0.70
1:A:488:ILE:HD13	1:A:616:LYS:NZ	2.07	0.70
1:A:660:LEU:HD11	1:A:733:LEU:HD21	0.70	0.70
1:A:3108:GLN:HA	1:A:3111:MET:HG3	1.74	0.70
1:A:3765:GLU:HA	1:A:3768:PHE:HB2	1.74	0.69
1:A:3830:SER:CA	1:A:3833:ARG:HB3	2.20	0.69
1:A:556:SER:O	1:A:559:SER:OG	2.04	0.69
1:A:2564:GLU:CD	1:A:2571:ASP:OD2	2.29	0.69
1:A:3153:SER:CB	1:A:3197:LEU:HD12	2.22	0.69
1:A:3978:GLY:O	1:A:3979:LEU:C	2.30	0.69

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4055:ASN:ND2	1:A:4097:GLY:O	2.24	0.69
1:A:452:LYS:O	1:A:455:LEU:HG	1.92	0.69
1:A:1157:PHE:H	1:A:1158:PRO:HD2	1.57	0.69
1:A:1914:THR:O	1:A:1916:ILE:N	2.26	0.69
1:A:2126:MET:HE3	1:A:2159:PRO:CG	2.21	0.69
1:A:714:VAL:HG22	1:A:734:LEU:HD21	1.74	0.69
1:A:2555:LEU:O	1:A:2559:THR:HG23	1.91	0.69
1:A:3237:SER:O	1:A:3240:MET:N	2.24	0.69
1:A:3768:PHE:CZ	1:A:3918:LEU:CD1	2.76	0.69
1:A:2126:MET:CE	1:A:2159:PRO:HG3	2.23	0.69
1:A:3077:ILE:HD13	1:A:3080:LEU:HD12	1.72	0.69
1:A:1564:SER:O	1:A:1567:ILE:CG2	2.41	0.69
1:A:479:ILE:O	1:A:483:VAL:HG13	1.92	0.69
1:A:534:LEU:HD12	1:A:534:LEU:N	2.07	0.69
1:A:613:HIS:CE1	1:A:656:GLN:HG3	2.27	0.69
1:A:2869:LEU:N	1:A:2892:LEU:HD11	2.07	0.69
1:A:3072:GLU:HA	1:A:3076:ALA:HB3	1.75	0.69
1:A:3137:GLU:OE1	1:A:3186:ARG:NH2	2.25	0.69
1:A:3505:LEU:CD1	1:A:3505:LEU:H	2.04	0.69
1:A:640:GLU:O	1:A:643:GLU:HB2	1.91	0.69
1:A:1559:PHE:O	1:A:1563:PHE:CE2	2.46	0.69
1:A:1958:GLU:HA	1:A:1961:PHE:CZ	2.28	0.69
1:A:653:LEU:HD13	1:A:653:LEU:C	2.14	0.68
1:A:881:LYS:O	1:A:882:SER:OG	2.11	0.68
1:A:1933:LEU:HD13	1:A:1938:ARG:HH21	1.57	0.68
1:A:646:VAL:HG11	1:A:706:LEU:HD13	1.76	0.68
1:A:1070:PRO:CG	1:A:3741:ARG:HD3	2.23	0.68
1:A:1562:LEU:H	1:A:1562:LEU:CD2	2.06	0.68
1:A:1733:THR:CG2	1:A:1877:LEU:CB	2.68	0.68
1:A:1938:ARG:HA	1:A:1941:HIS:HB2	1.76	0.68
1:A:3972:LEU:CB	1:A:3973:PRO:HD3	2.23	0.68
1:A:2555:LEU:HD23	1:A:2555:LEU:N	2.06	0.68
1:A:4050:LYS:HA	1:A:4054:ALA:HB3	1.75	0.68
1:A:4082:ARG:O	1:A:4086:ASP:N	2.26	0.68
1:A:1501:PRO:HB3	1:A:1505:LEU:CG	2.24	0.68
1:A:2534:ASN:HB3	1:A:2537:ASP:HB2	1.75	0.68
1:A:418:ALA:HB2	1:A:463:LYS:CB	2.24	0.68
1:A:3884:LYS:HA	1:A:3887:PHE:HB2	1.75	0.68
1:A:1120:SER:O	1:A:1122:GLY:N	2.25	0.68
1:A:2100:LEU:HD23	1:A:2100:LEU:O	1.93	0.68
1:A:714:VAL:HG13	1:A:715:ALA:N	2.03	0.68

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1681:ASP:OD1	1:A:1682:THR:N	2.27	0.68
1:A:1939:LEU:HD13	1:A:1986:ARG:HH12	1.59	0.68
1:A:1874:TYR:OH	1:A:1885:PRO:HB2	1.94	0.67
1:A:3178:ILE:CD1	1:A:3178:ILE:H	2.07	0.67
1:A:2871:LEU:HB3	1:A:2873:PRO:HD3	1.75	0.67
1:A:3968:ILE:HD11	1:A:3975:LYS:HA	1.76	0.67
1:A:85:ILE:HA	1:A:88:PHE:CE1	2.30	0.67
1:A:1430:GLU:HB2	1:A:1448:LEU:HD21	1.76	0.67
1:A:2539:LEU:HD13	1:A:2542:LEU:HD21	1.75	0.67
1:A:3977:THR:HG21	1:A:3981:TYR:N	2.10	0.67
1:A:275:PHE:O	1:A:279:ALA:N	2.20	0.67
1:A:1582:LEU:HA	1:A:1585:SER:HB3	1.76	0.67
1:A:1939:LEU:HD12	1:A:1986:ARG:NH2	2.08	0.67
1:A:2144:LEU:HA	1:A:2147:ALA:HB3	1.76	0.67
1:A:3167:ARG:HH11	1:A:3186:ARG:NH1	1.92	0.67
1:A:3900:LEU:HD21	1:A:3934:THR:HA	1.75	0.67
1:A:1520:ALA:C	1:A:1524:LEU:HD13	2.15	0.67
1:A:2437:ASP:HA	1:A:2472:GLN:HG2	1.76	0.67
1:A:3293:CYS:O	1:A:3297:VAL:HG23	1.95	0.67
1:A:3515:GLN:HE21	1:A:3551:ASN:CB	2.01	0.67
1:A:528:VAL:HG11	1:A:619:ASP:OD1	1.94	0.66
1:A:1871:MET:CA	1:A:1874:TYR:HB2	2.25	0.66
1:A:3174:ASP:N	1:A:3175:PRO:CD	2.59	0.66
1:A:3758:LEU:O	1:A:3795:PRO:HB3	1.95	0.66
1:A:3797:THR:O	1:A:3799:ARG:N	2.27	0.66
1:A:3879:PRO:HA	1:A:3882:LEU:HB2	1.77	0.66
1:A:528:VAL:HG13	1:A:619:ASP:OD1	1.93	0.66
1:A:993:HIS:CD2	1:A:1038:LYS:CD	2.77	0.66
1:A:2561:PHE:C	1:A:2565:MET:HE2	2.14	0.66
1:A:3283:LEU:HD23	1:A:3296:GLN:CB	2.25	0.66
1:A:642:PHE:O	1:A:646:VAL:HG23	1.96	0.66
1:A:3291:GLN:HG3	1:A:3295:GLU:OE2	1.95	0.66
1:A:2139:PRO:O	1:A:2141:ASN:N	2.29	0.66
1:A:1000:LYS:O	1:A:1002:GLU:N	2.26	0.66
1:A:2517:LEU:HA	1:A:2520:ILE:HG22	1.78	0.66
1:A:2887:PRO:O	1:A:2890:ILE:HG12	1.96	0.66
1:A:3977:THR:CG2	1:A:3978:GLY:H	1.96	0.66
1:A:1070:PRO:CD	1:A:3741:ARG:HD3	2.26	0.66
1:A:2561:PHE:C	1:A:2565:MET:CE	2.64	0.66
1:A:654:ILE:CG2	1:A:729:CYS:HB3	2.26	0.66
1:A:2312:TYR:CE1	1:A:2316:TYR:HA	2.31	0.66

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2562:LEU:CA	1:A:2565:MET:HE2	2.25	0.66
1:A:3787:GLN:HG3	1:A:3788:LEU:H	1.59	0.66
1:A:3924:HIS:HB2	1:A:3927:ASN:HD22	1.61	0.66
1:A:290:TYR:HB3	1:A:293:LEU:HB3	1.75	0.66
1:A:455:LEU:HD12	1:A:456:VAL:HG23	1.78	0.66
1:A:613:HIS:NE2	1:A:656:GLN:HG2	2.11	0.66
1:A:2402:LEU:O	1:A:2405:VAL:HG22	1.95	0.66
1:A:2562:LEU:CD2	1:A:2565:MET:CE	2.72	0.66
1:A:1148:ALA:HA	1:A:1151:ARG:HH21	1.61	0.66
1:A:105:VAL:HG22	1:A:108:LYS:HZ3	1.61	0.65
1:A:2046:SER:CB	1:A:2096:PRO:HG3	2.25	0.65
1:A:2553:HIS:HA	1:A:2555:LEU:CD2	2.24	0.65
1:A:2126:MET:HE2	1:A:2159:PRO:HG3	1.78	0.65
1:A:3913:ILE:HG21	1:A:3987:ALA:HB1	1.79	0.65
1:A:2312:TYR:H	1:A:2312:TYR:HD2	1.45	0.65
1:A:2998:SER:HA	1:A:3001:CYS:HB2	1.78	0.65
1:A:3324:ARG:O	1:A:3327:ASN:HB2	1.95	0.65
1:A:706:LEU:O	1:A:710:PHE:CA	2.44	0.65
1:A:1874:TYR:HH	1:A:1885:PRO:CG	1.80	0.65
1:A:3130:GLN:OE1	1:A:3178:ILE:CG1	2.45	0.65
1:A:3825:LYS:O	1:A:3829:LEU:N	2.29	0.65
1:A:3829:LEU:C	1:A:3829:LEU:HD13	2.17	0.65
1:A:3164:TRP:HZ3	1:A:3238:MET:HB2	1.61	0.65
1:A:1097:GLU:HA	1:A:1100:VAL:HG12	1.78	0.65
1:A:331:ALA:HB3	1:A:333:MET:HG2	1.79	0.65
1:A:385:TYR:CZ	1:A:389:ILE:HD12	2.30	0.65
1:A:2317:ALA:O	1:A:2320:ALA:N	2.29	0.65
1:A:3164:TRP:O	1:A:3168:TYR:HD2	1.79	0.65
1:A:3812:LEU:HD23	1:A:3812:LEU:H	1.62	0.65
1:A:3930:VAL:HG12	1:A:3937:VAL:HG22	1.79	0.65
1:A:238:MET:O	1:A:239:GLU:HG2	1.96	0.65
1:A:1166:LEU:HA	1:A:1169:VAL:HB	1.77	0.65
1:A:1711:ARG:HH12	1:A:1743:MET:HB3	1.62	0.65
1:A:633:ILE:O	1:A:637:LYS:N	2.27	0.64
1:A:2126:MET:CE	1:A:2159:PRO:CG	2.75	0.64
1:A:334:HIS:O	1:A:336:ASN:N	2.23	0.64
1:A:2152:ASN:O	1:A:2153:THR:HG22	1.96	0.64
1:A:1362:ASP:HB2	1:A:1365:ASN:HB2	1.79	0.64
1:A:3138:ILE:HD13	1:A:3189:PHE:HZ	1.62	0.64
1:A:4044:ILE:O	1:A:4048:LYS:HB2	1.98	0.64
1:A:385:TYR:OH	1:A:389:ILE:HD11	1.97	0.64

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:763:THR:HA	1:A:768:VAL:HG23	1.80	0.64
1:A:3966:GLN:HA	1:A:3969:ASN:HB2	1.79	0.64
1:A:989:MET:O	1:A:992:ILE:HD11	1.97	0.64
1:A:1427:SER:HB2	1:A:1428:ILE:HD12	1.78	0.64
1:A:3517:SER:HA	1:A:3520:GLU:HB2	1.80	0.64
1:A:1984:LEU:HD12	1:A:1984:LEU:C	2.18	0.64
1:A:620:PHE:O	1:A:623:PHE:O	2.15	0.64
1:A:646:VAL:HG21	1:A:706:LEU:HD13	1.79	0.64
1:A:928:VAL:HG23	1:A:929:ALA:H	1.63	0.64
1:A:2492:ASP:HB3	1:A:2495:SER:HB3	1.79	0.64
1:A:3471:ILE:HG23	1:A:3472:ILE:HG13	1.78	0.64
1:A:2405:VAL:HG11	1:A:2438:ILE:HG12	1.79	0.64
1:A:714:VAL:HG13	1:A:734:LEU:HD21	1.80	0.64
1:A:3071:GLY:O	1:A:3076:ALA:N	2.31	0.64
1:A:488:ILE:HG23	1:A:616:LYS:HE3	0.63	0.63
1:A:629:PHE:CB	1:A:633:ILE:HD12	2.28	0.63
1:A:1157:PHE:HE2	1:A:1165:LEU:HD22	1.63	0.63
1:A:4047:ALA:O	1:A:4051:LEU:HD13	1.98	0.63
1:A:1500:LEU:HA	1:A:1503:LEU:HB2	1.80	0.63
1:A:2569:SER:N	1:A:2570:PRO:CD	2.62	0.63
1:A:162:LEU:HD11	1:A:196:LEU:HD21	1.79	0.63
1:A:1871:MET:SD	1:A:1874:TYR:CG	2.90	0.63
1:A:1939:LEU:CD1	1:A:1986:ARG:NH1	2.61	0.63
1:A:1969:GLU:O	1:A:1972:GLU:OE2	2.16	0.63
1:A:3177:ASN:O	1:A:3180:ASP:HB3	1.98	0.63
1:A:752:LEU:HD21	1:A:776:TRP:HE1	1.63	0.63
1:A:1874:TYR:CE1	1:A:1885:PRO:CG	2.81	0.63
1:A:1874:TYR:CE1	1:A:1885:PRO:HG2	2.32	0.63
1:A:2100:LEU:CD2	1:A:2104:MET:HG3	2.27	0.63
1:A:3290:SER:O	1:A:3335:ARG:NH1	2.31	0.63
1:A:1295:ALA:HA	1:A:1298:LEU:HB3	1.80	0.63
1:A:3829:LEU:CD1	1:A:3833:ARG:HH21	2.12	0.63
1:A:534:LEU:CD1	1:A:534:LEU:H	2.11	0.63
1:A:3636:PHE:O	1:A:3640:PHE:N	2.32	0.63
1:A:4080:VAL:HG11	1:A:4116:ILE:CB	2.28	0.63
1:A:1737:ASN:O	1:A:1739:TYR:N	2.32	0.63
1:A:3506:LEU:CD2	1:A:3518:VAL:HA	2.27	0.63
1:A:636:GLU:O	1:A:641:PHE:HB2	1.99	0.63
1:A:924:ARG:O	1:A:928:VAL:N	2.28	0.63
1:A:1217:VAL:HG22	1:A:1271:ILE:HA	1.80	0.63
1:A:1879:VAL:CG2	1:A:1920:TYR:HA	2.28	0.63

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:371:GLY:N	1:A:372:PRO:HD3	2.13	0.63
1:A:614:PRO:O	1:A:617:PRO:HD2	1.99	0.63
1:A:1028:PHE:O	1:A:1031:ARG:HG2	1.98	0.63
1:A:2024:TYR:O	1:A:2045:PHE:CE1	2.52	0.63
1:A:272:LEU:HD23	1:A:275:PHE:HD2	1.64	0.62
1:A:968:VAL:HA	1:A:971:ARG:HG2	1.80	0.62
1:A:2100:LEU:CD2	1:A:2104:MET:HG2	2.27	0.62
1:A:2506:LEU:O	1:A:2510:LEU:CD2	2.47	0.62
1:A:3515:GLN:NE2	1:A:3551:ASN:HB2	2.12	0.62
1:A:3919:GLY:O	1:A:3920:ILE:HG22	1.99	0.62
1:A:79:ARG:O	1:A:83:GLU:N	2.28	0.62
1:A:1082:PHE:O	1:A:1086:TYR:CD1	2.52	0.62
1:A:1419:LEU:O	1:A:1421:GLU:N	2.31	0.62
1:A:3005:LEU:HD21	1:A:3046:ARG:HH11	1.65	0.62
1:A:706:LEU:O	1:A:710:PHE:HB3	1.97	0.62
1:A:2147:ALA:O	1:A:2151:ILE:CG1	2.46	0.62
1:A:1984:LEU:HD12	1:A:1985:LYS:CA	2.30	0.62
1:A:385:TYR:CE1	1:A:421:LEU:CD1	2.79	0.62
1:A:729:CYS:HA	1:A:732:PHE:CZ	2.34	0.62
1:A:1890:HIS:O	1:A:1892:LYS:N	2.33	0.62
1:A:989:MET:O	1:A:992:ILE:CD1	2.47	0.62
1:A:2100:LEU:HD23	1:A:2100:LEU:C	2.19	0.62
1:A:2552:VAL:O	1:A:2553:HIS:HB2	1.99	0.62
1:A:3030:ILE:O	1:A:3034:PRO:HD3	1.99	0.62
1:A:3450:MET:HG2	1:A:3451:LEU:HD13	1.82	0.62
1:A:3832:PRO:O	1:A:3835:PRO:CG	2.46	0.62
1:A:291:VAL:HA	1:A:294:PHE:CE1	2.35	0.62
1:A:745:VAL:HG13	1:A:749:VAL:HG13	1.80	0.62
1:A:3496:ILE:O	1:A:3498:TRP:N	2.32	0.62
1:A:646:VAL:HG21	1:A:706:LEU:CD1	2.29	0.62
1:A:3329:LEU:O	1:A:3332:THR:OG1	2.15	0.62
1:A:3738:ILE:O	1:A:3750:PHE:N	2.21	0.62
1:A:3883:LEU:HD22	1:A:3970:LEU:HD13	1.81	0.62
1:A:613:HIS:CE1	1:A:656:GLN:HG2	2.35	0.61
1:A:660:LEU:HG	1:A:661:PRO:HD3	1.82	0.61
1:A:2564:GLU:OE2	1:A:2571:ASP:OD2	2.17	0.61
1:A:3177:ASN:O	1:A:3181:ASP:N	2.32	0.61
1:A:3178:ILE:CA	1:A:3181:ASP:HB2	2.20	0.61
1:A:131:LEU:HD11	1:A:173:LYS:HZ1	1.64	0.61
1:A:1070:PRO:HG2	1:A:3741:ARG:NH2	2.15	0.61
1:A:2958:LEU:C	1:A:2960:GLU:H	2.02	0.61

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:670:LEU:O	1:A:673:THR:N	2.34	0.61
1:A:1082:PHE:O	1:A:1086:TYR:HD1	1.83	0.61
1:A:2987:THR:O	1:A:2991:LYS:N	2.33	0.61
1:A:527:TYR:CG	1:A:528:VAL:N	2.68	0.61
1:A:1128:CYS:HA	1:A:1131:ILE:HD12	1.81	0.61
1:A:2352:HIS:HB3	1:A:2360:PHE:CE2	2.36	0.61
1:A:3739:ILE:HA	1:A:3749:PRO:HA	1.83	0.61
1:A:978:GLN:HG3	1:A:981:ARG:HH21	1.65	0.61
1:A:2401:VAL:HG12	1:A:2438:ILE:HD13	1.82	0.61
1:A:3164:TRP:CZ3	1:A:3238:MET:HB2	2.35	0.61
1:A:862:LEU:HB3	1:A:865:GLN:HB2	1.82	0.61
1:A:1106:ILE:O	1:A:1110:SER:OG	2.16	0.61
1:A:2920:VAL:HA	1:A:2923:TRP:HB3	1.82	0.61
1:A:3125:ARG:O	1:A:3129:LEU:HB2	2.00	0.61
1:A:3829:LEU:HD13	1:A:3829:LEU:O	2.00	0.61
1:A:1985:LYS:HA	1:A:1988:TYR:HB3	1.81	0.61
1:A:382:ASP:O	1:A:385:TYR:HB3	2.00	0.61
1:A:3007:GLU:HB3	1:A:3050:LYS:HG2	1.82	0.61
1:A:725:LEU:O	1:A:728:SER:HB2	2.01	0.61
1:A:1147:LYS:O	1:A:1151:ARG:NE	2.34	0.61
1:A:1476:HIS:HB3	1:A:1507:CYS:HB2	1.83	0.61
1:A:1874:TYR:CZ	1:A:1885:PRO:CG	2.56	0.61
1:A:429:GLU:O	1:A:431:TYR:N	2.27	0.61
1:A:850:GLU:HG3	1:A:853:ILE:HD12	1.81	0.61
1:A:970:LEU:HD11	1:A:1031:ARG:NH2	2.16	0.61
1:A:3351:ILE:HG23	1:A:3355:LYS:HD2	1.83	0.61
1:A:775:GLU:HA	1:A:778:ILE:HG22	1.83	0.60
1:A:3923:ARG:O	1:A:3962:ARG:NH2	2.31	0.60
1:A:1373:VAL:C	1:A:1375:THR:H	2.05	0.60
1:A:1933:LEU:HD23	1:A:1937:ARG:HG2	1.83	0.60
1:A:2151:ILE:O	1:A:2151:ILE:HG22	2.01	0.60
1:A:3194:GLU:OE1	1:A:3231:ILE:HG21	2.01	0.60
1:A:4056:PRO:HD3	1:A:4098:LEU:HA	1.83	0.60
1:A:714:VAL:CG2	1:A:734:LEU:CD2	2.79	0.60
1:A:3036:TYR:O	1:A:3038:GLU:N	2.27	0.60
1:A:3670:MET:N	1:A:3670:MET:SD	2.74	0.60
1:A:495:VAL:HG12	1:A:495:VAL:O	2.02	0.60
1:A:611:ASN:C	1:A:614:PRO:CD	2.68	0.60
1:A:1930:GLU:OE2	1:A:1987:ARG:NH1	2.34	0.60
1:A:2433:LYS:HE2	1:A:2461:PHE:HE1	1.66	0.60
1:A:2554:PHE:HA	1:A:2557:LEU:HD13	0.78	0.60

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3042:PRO:O	1:A:3045:ILE:HG12	2.01	0.60
1:A:306:VAL:C	1:A:308:LEU:H	2.04	0.60
1:A:1236:LEU:HD22	1:A:1257:LEU:HD13	1.83	0.60
1:A:1686:LEU:HD21	1:A:1727:ARG:HH22	1.67	0.60
1:A:786:GLN:HB2	1:A:787:PRO:HD3	1.84	0.60
1:A:2806:LYS:HG3	1:A:2859:GLN:HB2	1.83	0.60
1:A:3476:PRO:O	1:A:3480:LEU:N	2.34	0.60
1:A:284:THR:OG1	1:A:326:MET:SD	2.58	0.60
1:A:655:LEU:H	1:A:655:LEU:CD2	2.14	0.60
1:A:1999:GLU:O	1:A:2001:LYS:N	2.33	0.60
1:A:2352:HIS:HB3	1:A:2360:PHE:CD2	2.37	0.60
1:A:1083:ASN:CA	1:A:1086:TYR:CE1	2.76	0.60
1:A:2871:LEU:HD22	1:A:2873:PRO:HB3	1.84	0.60
1:A:370:ALA:C	1:A:372:PRO:HD3	2.22	0.60
1:A:267:VAL:HG23	1:A:268:PRO:HD3	1.83	0.60
1:A:453:MET:O	1:A:457:CYS:SG	2.59	0.60
1:A:2833:THR:HA	1:A:2836:LEU:HG	1.84	0.60
1:A:3506:LEU:CD2	1:A:3518:VAL:N	2.64	0.59
1:A:19:LEU:HD13	1:A:34:LEU:HD11	1.82	0.59
1:A:931:CYS:HB2	1:A:984:TYR:OH	2.02	0.59
1:A:1294:VAL:HG12	1:A:1298:LEU:HB2	1.83	0.59
1:A:2032:ALA:O	1:A:2034:SER:N	2.32	0.59
1:A:3821:SER:O	1:A:3825:LYS:N	2.35	0.59
1:A:2435:CYS:HA	1:A:2438:ILE:HD12	1.83	0.59
1:A:104:SER:HA	1:A:107:ILE:HD12	1.85	0.59
1:A:1245:ARG:C	1:A:1250:LEU:HD13	2.23	0.59
1:A:484:HIS:CE1	1:A:619:ASP:OD2	2.55	0.59
1:A:942:LEU:HD13	1:A:2783:ILE:HD13	1.85	0.59
1:A:974:CYS:HA	1:A:981:ARG:HD3	1.84	0.59
1:A:1142:HIS:CG	1:A:1143:VAL:H	2.19	0.59
1:A:2440:TYR:HD2	1:A:2443:MET:HG3	1.66	0.59
1:A:2546:TYR:HD1	1:A:2554:PHE:CZ	2.06	0.59
1:A:995:PHE:CZ	1:A:1003:SER:HA	2.31	0.59
1:A:1028:PHE:O	1:A:1031:ARG:N	2.28	0.59
1:A:3353:GLU:HB2	1:A:3377:LEU:HD11	1.83	0.59
1:A:989:MET:HA	1:A:992:ILE:HG13	1.82	0.59
1:A:2028:LEU:HD12	1:A:2028:LEU:N	2.18	0.59
1:A:3236:PHE:CZ	1:A:3271:ASP:CB	2.73	0.59
1:A:3924:HIS:N	1:A:3927:ASN:HB2	2.18	0.59
1:A:965:THR:HG23	1:A:965:THR:O	2.01	0.59
1:A:1245:ARG:O	1:A:1250:LEU:HD13	2.02	0.59

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3048:LYS:O	1:A:3052:LEU:N	2.35	0.59
1:A:3829:LEU:HD12	1:A:3833:ARG:NH2	2.18	0.59
1:A:249:PHE:O	1:A:253:LEU:HG	2.02	0.59
1:A:934:LEU:HD23	1:A:937:MET:HE3	1.85	0.59
1:A:1578:ALA:HB1	1:A:1582:LEU:HD11	1.84	0.59
1:A:1597:LEU:O	1:A:1600:MET:N	2.32	0.59
1:A:2910:VAL:HG13	1:A:2915:ARG:NH1	2.17	0.59
1:A:382:ASP:OD1	1:A:382:ASP:N	2.35	0.59
1:A:462:VAL:O	1:A:466:LEU:N	2.30	0.59
1:A:2097:LEU:HD22	1:A:2143:ARG:HG2	1.83	0.59
1:A:2315:VAL:O	1:A:2315:VAL:HG12	2.03	0.59
1:A:4040:PRO:O	1:A:4042:GLN:N	2.34	0.59
1:A:1292:LYS:NZ	1:A:1362:ASP:HA	2.17	0.58
1:A:1548:GLY:O	1:A:1552:HIS:ND1	2.36	0.58
1:A:2348:GLN:O	1:A:2352:HIS:ND1	2.36	0.58
1:A:3637:GLY:HA2	1:A:3640:PHE:HB2	1.84	0.58
1:A:998:ASN:HB3	1:A:999:LYS:HZ2	1.68	0.58
1:A:1941:HIS:O	1:A:1945:TYR:HB2	2.03	0.58
1:A:2510:LEU:CD2	1:A:2522:ARG:CG	2.81	0.58
1:A:272:LEU:HA	1:A:275:PHE:HB2	1.86	0.58
1:A:341:PHE:CD2	1:A:342:MET:HG3	2.38	0.58
1:A:488:ILE:HG21	1:A:616:LYS:CG	2.34	0.58
1:A:995:PHE:CZ	1:A:1002:GLU:CA	2.71	0.58
1:A:1002:GLU:HA	1:A:1004:GLN:HE22	1.68	0.58
1:A:1010:LEU:HB2	1:A:1028:PHE:CE1	2.38	0.58
1:A:1044:ILE:O	1:A:1049:GLN:NE2	2.35	0.58
1:A:2853:PRO:O	1:A:2855:VAL:N	2.31	0.58
1:A:4085:LYS:O	1:A:4088:ASN:C	2.41	0.58
1:A:437:HIS:HA	1:A:440:VAL:HG12	1.84	0.58
1:A:632:GLU:O	1:A:635:PRO:HD2	2.04	0.58
1:A:653:LEU:HD21	1:A:655:LEU:HD23	1.85	0.58
1:A:653:LEU:HD11	1:A:656:GLN:H	1.63	0.58
1:A:995:PHE:CZ	1:A:1002:GLU:CB	2.86	0.58
1:A:1115:HIS:O	1:A:1118:GLU:N	2.25	0.58
1:A:1559:PHE:O	1:A:1563:PHE:HE2	1.86	0.58
1:A:1871:MET:HE3	1:A:1874:TYR:CE1	2.37	0.58
1:A:534:LEU:HA	1:A:537:SER:OG	2.03	0.58
1:A:2312:TYR:CE1	1:A:2316:TYR:CA	2.86	0.58
1:A:2319:ALA:O	1:A:2322:VAL:HG22	2.03	0.58
1:A:3178:ILE:HA	1:A:3181:ASP:OD2	2.03	0.58
1:A:4082:ARG:HA	1:A:4091:ALA:CB	2.32	0.58

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3505:LEU:CA	1:A:3509:ASP:CB	2.81	0.58
1:A:4050:LYS:HB2	1:A:4055:ASN:OD1	2.04	0.58
1:A:410:MET:C	1:A:442:GLN:HE22	2.06	0.58
1:A:2093:CYS:O	1:A:2096:PRO:HD2	2.02	0.58
1:A:2922:ARG:HA	1:A:2930:TYR:HD1	1.69	0.58
1:A:574:LYS:O	1:A:578:LYS:N	2.35	0.58
1:A:1292:LYS:HZ3	1:A:1362:ASP:HA	1.68	0.58
1:A:3005:LEU:HD21	1:A:3046:ARG:NH1	2.18	0.58
1:A:3173:MET:C	1:A:3175:PRO:HD2	2.23	0.58
1:A:3297:VAL:HA	1:A:3300:VAL:HG22	1.86	0.58
1:A:488:ILE:HG21	1:A:616:LYS:HG2	1.85	0.57
1:A:2375:ALA:HB2	1:A:2407:GLY:HA3	1.86	0.57
1:A:3788:LEU:HD22	1:A:3910:LEU:HB3	1.86	0.57
1:A:172:GLU:HG3	1:A:173:LYS:HD3	1.86	0.57
1:A:534:LEU:HD22	1:A:623:PHE:HE1	1.67	0.57
1:A:947:GLN:C	1:A:949:PRO:HD3	2.24	0.57
1:A:995:PHE:CE1	1:A:1002:GLU:CB	2.81	0.57
1:A:1007:VAL:HA	1:A:1010:LEU:HG	1.86	0.57
1:A:1500:LEU:HD12	1:A:1503:LEU:HB2	1.85	0.57
1:A:1911:LEU:HD13	1:A:1916:ILE:HG21	1.86	0.57
1:A:2027:SER:O	1:A:2028:LEU:HB2	2.03	0.57
1:A:2543:ASN:HA	1:A:2546:TYR:HD2	1.67	0.57
1:A:3117:ILE:HG13	1:A:3117:ILE:O	2.02	0.57
1:A:3351:ILE:HG12	1:A:3355:LYS:HE3	1.86	0.57
1:A:944:LYS:C	1:A:946:THR:H	2.07	0.57
1:A:1017:ILE:N	1:A:1025:LEU:HD11	2.19	0.57
1:A:2312:TYR:HD1	1:A:2314:GLU:O	1.87	0.57
1:A:3003:ASN:ND2	1:A:3011:LEU:HB2	2.19	0.57
1:A:3173:MET:CB	1:A:3175:PRO:HD2	2.35	0.57
1:A:3493:TRP:CD2	1:A:3711:PRO:HA	2.40	0.57
1:A:132:ILE:HA	1:A:135:LEU:HD12	1.85	0.57
1:A:304:THR:O	1:A:306:VAL:HG22	2.04	0.57
1:A:437:HIS:HB2	1:A:1812:LEU:HD21	1.87	0.57
1:A:637:LYS:HA	1:A:641:PHE:CB	2.34	0.57
1:A:959:TYR:CZ	1:A:963:LYS:HB2	2.39	0.57
1:A:1556:GLY:HA2	1:A:1559:PHE:HB3	1.86	0.57
1:A:2952:ILE:O	1:A:2955:SER:OG	2.15	0.57
1:A:335:LYS:HZ3	1:A:378:ALA:HB2	1.69	0.57
1:A:1245:ARG:C	1:A:1250:LEU:HD12	2.23	0.57
1:A:488:ILE:HD13	1:A:616:LYS:HZ2	1.66	0.57
1:A:610:ALA:O	1:A:614:PRO:CG	2.53	0.57

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1879:VAL:HG23	1:A:1920:TYR:HA	1.85	0.57
1:A:1883:ARG:HB2	1:A:1923:PHE:HZ	1.70	0.57
1:A:3348:LEU:O	1:A:3352:GLU:OE2	2.23	0.57
1:A:717:LYS:HE2	1:A:717:LYS:CA	2.20	0.57
1:A:2361:ILE:HA	1:A:2364:LEU:HB2	1.86	0.57
1:A:2991:LYS:HG2	1:A:2995:GLU:HG2	1.87	0.57
1:A:3156:PRO:HG2	1:A:3159:ARG:CB	2.35	0.57
1:A:3768:PHE:O	1:A:3771:MET:HB2	2.04	0.57
1:A:2470:ARG:HD2	1:A:2513:GLU:OE2	2.05	0.57
1:A:3917:ILE:HD12	1:A:3991:PHE:CE2	2.37	0.57
1:A:531:PHE:CB	1:A:534:LEU:HD11	2.34	0.57
1:A:1874:TYR:CD2	1:A:1875:LYS:N	2.73	0.57
1:A:3992:ARG:NE	1:A:4053:GLY:O	2.35	0.57
1:A:1743:MET:SD	1:A:1744:LYS:N	2.77	0.57
1:A:3283:LEU:HD11	1:A:3297:VAL:HG22	1.86	0.57
1:A:3439:LEU:O	1:A:3443:PRO:HD3	2.05	0.57
1:A:1335:CYS:SG	1:A:1391:VAL:HG11	2.45	0.56
1:A:2318:ALA:O	1:A:2322:VAL:HG13	2.04	0.56
1:A:2542:LEU:HD13	1:A:2546:TYR:HE2	1.70	0.56
1:A:3830:SER:O	1:A:3833:ARG:HB3	2.03	0.56
1:A:1984:LEU:HD12	1:A:1985:LYS:H	1.64	0.56
1:A:3620:PRO:O	1:A:3629:ARG:NH1	2.38	0.56
1:A:105:VAL:HA	1:A:108:LYS:HD3	1.88	0.56
1:A:207:GLN:OE1	1:A:219:VAL:HG11	2.04	0.56
1:A:455:LEU:CD1	1:A:456:VAL:HG23	2.35	0.56
1:A:1045:THR:HG1	1:A:1049:GLN:NE2	2.01	0.56
1:A:1165:LEU:O	1:A:1167:ASP:N	2.36	0.56
1:A:2312:TYR:CE1	1:A:2316:TYR:N	2.73	0.56
1:A:2790:LEU:O	1:A:2793:PRO:HD2	2.05	0.56
1:A:3161:LEU:HA	1:A:3164:TRP:HD1	1.69	0.56
1:A:3397:GLN:N	1:A:3398:PRO:HD2	2.20	0.56
1:A:3521:ILE:O	1:A:3525:TYR:N	2.35	0.56
1:A:4013:TRP:C	1:A:4015:ASN:H	2.08	0.56
1:A:4070:LYS:CB	1:A:4074:PHE:H	2.18	0.56
1:A:994:TRP:HZ2	1:A:2775:TYR:O	1.85	0.56
1:A:1501:PRO:HA	1:A:1505:LEU:N	2.21	0.56
1:A:230:LEU:HG	1:A:231:LEU:N	2.20	0.56
1:A:1984:LEU:CD1	1:A:1985:LYS:N	2.53	0.56
1:A:3772:ASN:HB2	1:A:3787:GLN:CD	2.25	0.56
1:A:1871:MET:HA	1:A:1874:TYR:CB	2.32	0.56
1:A:2507:ILE:HA	1:A:2510:LEU:HG	1.87	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4014:LYS:N	1:A:4038:TRP:HZ3	1.89	0.56
1:A:729:CYS:HA	1:A:732:PHE:CE1	2.41	0.56
1:A:1452:VAL:HG11	1:A:1502:SER:CB	2.36	0.56
1:A:2359:LYS:O	1:A:2362:VAL:HG22	2.05	0.56
1:A:3064:PHE:CE1	1:A:3067:LYS:HE2	2.40	0.56
1:A:3506:LEU:CD1	1:A:3515:GLN:CA	2.84	0.56
1:A:3568:ILE:HD12	1:A:3568:ILE:H	1.70	0.56
1:A:3610:TYR:O	1:A:3614:TYR:N	2.39	0.56
1:A:1563:PHE:O	1:A:1566:THR:O	2.23	0.56
1:A:3882:LEU:HD23	1:A:3885:ARG:HH21	1.71	0.56
1:A:352:VAL:HG11	1:A:364:ARG:NH2	2.21	0.56
1:A:971:ARG:HG3	1:A:972:LEU:N	2.20	0.56
1:A:2454:LEU:O	1:A:2457:PRO:HD2	2.06	0.56
1:A:3241:LYS:HD2	1:A:3242:MET:SD	2.46	0.56
1:A:4124:TRP:HE3	1:A:4126:PRO:HB3	1.70	0.56
1:A:474:VAL:HG22	1:A:1560:TYR:HH	1.71	0.56
1:A:1905:ILE:HG23	1:A:1951:VAL:HG21	1.88	0.56
1:A:2562:LEU:CA	1:A:2565:MET:CE	2.70	0.56
1:A:2841:ASN:HA	1:A:2844:LEU:HD22	1.88	0.56
1:A:3671:ASN:O	1:A:3675:LYS:HG2	2.06	0.56
1:A:562:HIS:ND1	1:A:562:HIS:O	2.39	0.55
1:A:763:THR:HG21	1:A:770:LEU:H	1.71	0.55
1:A:1010:LEU:HD12	1:A:1011:GLU:N	2.20	0.55
1:A:1423:ILE:O	1:A:1427:SER:OG	2.18	0.55
1:A:2542:LEU:HD12	1:A:2543:ASN:N	2.21	0.55
1:A:3833:ARG:O	1:A:3837:CYS:HB2	2.06	0.55
1:A:661:PRO:CG	1:A:733:LEU:HD23	2.32	0.55
1:A:2801:ASP:HB3	1:A:2802:PRO:HD3	1.87	0.55
1:A:2917:PRO:HA	1:A:2920:VAL:HG12	1.88	0.55
1:A:3462:ARG:O	1:A:3465:PHE:HB2	2.06	0.55
1:A:3825:LYS:HA	1:A:3828:TYR:HB3	1.87	0.55
1:A:4124:TRP:CE3	1:A:4126:PRO:HB3	2.41	0.55
1:A:622:ALA:O	1:A:623:PHE:HB2	2.06	0.55
1:A:3159:ARG:O	1:A:3162:ASN:HB3	2.07	0.55
1:A:3447:VAL:HG21	1:A:3478:GLU:HB3	1.89	0.55
1:A:385:TYR:CE1	1:A:389:ILE:HD11	2.39	0.55
1:A:652:GLU:OE1	1:A:652:GLU:HA	2.06	0.55
1:A:1694:THR:HG23	1:A:1695:LEU:HD13	1.89	0.55
1:A:1905:ILE:HG12	1:A:1951:VAL:HG11	1.87	0.55
1:A:1979:GLU:O	1:A:1983:ASP:OD1	2.23	0.55
1:A:2459:VAL:HG13	1:A:2505:VAL:HG22	1.88	0.55

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2858:ILE:HD13	1:A:2861:ILE:HD11	1.88	0.55
1:A:3835:PRO:HG3	1:A:4127:TRP:CH2	2.42	0.55
1:A:4021:LEU:HD23	1:A:4028:ILE:HD12	1.88	0.55
1:A:4056:PRO:O	1:A:4058:VAL:N	2.39	0.55
1:A:287:LEU:HD21	1:A:319:PHE:HZ	1.71	0.55
1:A:653:LEU:HD12	1:A:656:GLN:CB	2.36	0.55
1:A:2358:ASP:OD1	1:A:2359:LYS:N	2.38	0.55
1:A:2922:ARG:O	1:A:2930:TYR:HB3	2.06	0.55
1:A:3003:ASN:HD21	1:A:3011:LEU:HB2	1.70	0.55
1:A:3406:ALA:O	1:A:3407:ALA:HB2	2.07	0.55
1:A:1430:GLU:HB2	1:A:1448:LEU:CD2	2.36	0.55
1:A:2156:VAL:HB	1:A:2159:PRO:HG3	1.88	0.55
1:A:3506:LEU:HD11	1:A:3515:GLN:CA	2.33	0.55
1:A:3706:ASP:CB	1:A:3715:TYR:CD2	2.90	0.55
1:A:1287:GLN:O	1:A:1291:LEU:HG	2.07	0.55
1:A:1553:PHE:O	1:A:1557:GLU:N	2.40	0.55
1:A:1558:TYR:C	1:A:1562:LEU:HD22	2.27	0.55
1:A:1866:GLN:HE22	1:A:1870:LYS:HD2	1.72	0.55
1:A:1996:VAL:HG11	1:A:2047:THR:HB	1.88	0.55
1:A:3130:GLN:OE1	1:A:3178:ILE:HD13	2.07	0.55
1:A:3281:CYS:O	1:A:3284:SER:OG	2.18	0.55
1:A:3407:ALA:O	1:A:3410:ILE:HG22	2.06	0.55
1:A:3538:GLU:HB2	1:A:3797:THR:HA	1.87	0.55
1:A:398:THR:O	1:A:401:ASP:N	2.40	0.55
1:A:1338:VAL:HG13	1:A:1339:VAL:HG13	1.88	0.55
1:A:2317:ALA:O	1:A:2318:ALA:C	2.45	0.55
1:A:3977:THR:CG2	1:A:3978:GLY:N	2.59	0.55
1:A:4082:ARG:HA	1:A:4091:ALA:HB3	1.89	0.55
1:A:387:GLU:O	1:A:391:ARG:N	2.36	0.55
1:A:1124:ILE:HG22	1:A:1128:CYS:SG	2.46	0.55
1:A:1166:LEU:O	1:A:1170:LYS:N	2.31	0.55
1:A:1296:PHE:HE1	1:A:1368:LEU:HD23	1.72	0.55
1:A:2204:GLY:HA2	1:A:2208:ASP:CB	2.37	0.55
1:A:3730:ALA:HB1	1:A:3734:ARG:HH11	1.72	0.55
1:A:3917:ILE:CD1	1:A:3991:PHE:CE2	2.90	0.55
1:A:3964:THR:HG21	1:A:3966:GLN:HE21	1.72	0.55
1:A:632:GLU:C	1:A:635:PRO:HD2	2.27	0.54
1:A:1686:LEU:HD21	1:A:1727:ARG:NH2	2.22	0.54
1:A:2156:VAL:CG1	1:A:2159:PRO:CD	2.85	0.54
1:A:3247:ARG:HB2	1:A:3278:GLN:NE2	2.18	0.54
1:A:3348:LEU:HA	1:A:3352:GLU:OE2	2.08	0.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:418:ALA:CB	1:A:463:LYS:HB2	2.33	0.54
1:A:777:SER:O	1:A:781:ASP:N	2.40	0.54
1:A:1026:ARG:HA	1:A:1029:CYS:SG	2.46	0.54
1:A:2278:GLY:O	1:A:2281:MET:N	2.40	0.54
1:A:3828:TYR:HA	1:A:3831:ASP:HB2	1.87	0.54
1:A:3972:LEU:CB	1:A:3973:PRO:CD	2.84	0.54
1:A:531:PHE:C	1:A:533:HIS:H	2.11	0.54
1:A:867:ASN:C	1:A:869:ASN:H	2.11	0.54
1:A:2222:HIS:C	1:A:2224:PHE:H	2.10	0.54
1:A:3506:LEU:CD2	1:A:3517:SER:C	2.75	0.54
1:A:3790:THR:HG22	1:A:3791:TYR:H	1.72	0.54
1:A:1129:ASP:C	1:A:1131:ILE:H	2.10	0.54
1:A:2869:LEU:N	1:A:2892:LEU:CD1	2.70	0.54
1:A:1059:LEU:O	1:A:1063:LEU:HG	2.08	0.54
1:A:1394:HIS:O	1:A:1398:VAL:HG23	2.08	0.54
1:A:3506:LEU:HD21	1:A:3518:VAL:CB	2.37	0.54
1:A:3926:ASN:OD1	1:A:3927:ASN:ND2	2.40	0.54
1:A:1593:VAL:O	1:A:1596:VAL:HG12	2.08	0.54
1:A:3637:GLY:O	1:A:3641:ASP:N	2.39	0.54
1:A:3703:GLY:O	1:A:3704:GLN:CB	2.55	0.54
1:A:3829:LEU:CD1	1:A:3833:ARG:NH2	2.71	0.54
1:A:306:VAL:O	1:A:308:LEU:N	2.40	0.54
1:A:1154:PRO:HB2	1:A:1173:LEU:HD21	1.88	0.54
1:A:1733:THR:N	1:A:1734:PRO:HD3	2.23	0.54
1:A:3283:LEU:HD21	1:A:3296:GLN:C	2.28	0.54
1:A:3911:ILE:HG13	1:A:3912:CYS:N	2.23	0.54
1:A:4088:ASN:O	1:A:4090:ARG:N	2.41	0.54
1:A:172:GLU:HA	1:A:222:GLY:HA3	1.89	0.54
1:A:178:LEU:HD21	1:A:196:LEU:HG	1.90	0.54
1:A:851:ILE:O	1:A:855:VAL:HG23	2.08	0.54
1:A:994:TRP:CD1	1:A:994:TRP:N	2.75	0.54
1:A:2185:MET:O	1:A:2188:GLU:N	2.41	0.54
1:A:2265:PRO:C	1:A:2267:SER:H	2.11	0.54
1:A:3130:GLN:OE1	1:A:3178:ILE:HD11	2.04	0.54
1:A:3291:GLN:HA	1:A:3291:GLN:NE2	2.22	0.54
1:A:3376:GLY:H	1:A:3380:ARG:HH21	1.54	0.54
1:A:257:ARG:HG2	1:A:258:PRO:HD3	1.88	0.54
1:A:760:LEU:HD21	1:A:773:LEU:HD11	1.90	0.54
1:A:882:SER:HB2	1:A:3892:THR:OG1	1.96	0.54
1:A:2506:LEU:O	1:A:2510:LEU:HD21	2.08	0.54
1:A:4057:ALA:O	1:A:4059:ILE:N	2.41	0.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:181:LEU:O	1:A:186:PRO:HD3	2.08	0.53
1:A:1737:ASN:HA	1:A:1740:VAL:HG23	1.90	0.53
1:A:1982:ILE:HG22	1:A:1986:ARG:CD	2.38	0.53
1:A:3157:LEU:HD13	1:A:3227:ILE:HA	1.90	0.53
1:A:641:PHE:HA	1:A:644:PRO:CD	2.38	0.53
1:A:673:THR:HG22	1:A:700:LYS:HE2	1.91	0.53
1:A:1018:VAL:HG23	1:A:1019:ASP:H	1.73	0.53
1:A:1559:PHE:O	1:A:1563:PHE:CD2	2.62	0.53
1:A:970:LEU:HD21	1:A:1031:ARG:NH1	2.23	0.53
1:A:1103:ALA:HA	1:A:1106:ILE:HB	1.90	0.53
1:A:1958:GLU:HA	1:A:1961:PHE:CE1	2.43	0.53
1:A:288:ASP:OD1	1:A:288:ASP:N	2.38	0.53
1:A:413:PHE:O	1:A:416:SER:OG	2.20	0.53
1:A:702:SER:O	1:A:705:ALA:HB3	2.09	0.53
1:A:953:GLN:O	1:A:956:PRO:HD2	2.08	0.53
1:A:1045:THR:O	1:A:1049:GLN:N	2.42	0.53
1:A:1157:PHE:H	1:A:1158:PRO:CD	2.20	0.53
1:A:1259:LEU:HD22	1:A:1340:ARG:HG3	1.89	0.53
1:A:1467:ILE:HG13	1:A:1468:LEU:HG	1.89	0.53
1:A:1711:ARG:NH1	1:A:1743:MET:HB3	2.23	0.53
1:A:1977:ILE:CB	1:A:1980:ASN:CB	2.85	0.53
1:A:2097:LEU:HD23	1:A:2143:ARG:CG	2.35	0.53
1:A:316:LEU:HD21	1:A:363:ILE:HG12	1.91	0.53
1:A:1883:ARG:HB2	1:A:1923:PHE:CZ	2.44	0.53
1:A:2059:PRO:O	1:A:2063:THR:HG23	2.08	0.53
1:A:2312:TYR:CZ	1:A:2316:TYR:CA	2.88	0.53
1:A:2510:LEU:HD22	1:A:2522:ARG:CG	2.39	0.53
1:A:2873:PRO:O	1:A:2876:VAL:HB	2.08	0.53
1:A:240:GLU:O	1:A:244:THR:HG23	2.08	0.53
1:A:1113:LEU:HA	1:A:1165:LEU:HD11	1.91	0.53
1:A:1122:GLY:O	1:A:1123:THR:OG1	2.27	0.53
1:A:1463:LEU:HD22	1:A:1466:ASN:HB2	1.90	0.53
1:A:2268:LYS:O	1:A:2271:SER:OG	2.25	0.53
1:A:3593:ARG:HG3	1:A:3660:ASN:HB3	1.90	0.53
1:A:3830:SER:HA	1:A:3833:ARG:CB	2.37	0.53
1:A:4008:GLU:HB3	1:A:4009:PRO:HD3	1.90	0.53
1:A:2139:PRO:C	1:A:2141:ASN:H	2.12	0.53
1:A:2313:LYS:O	1:A:2316:TYR:HE2	1.91	0.53
1:A:2440:TYR:CD2	1:A:2443:MET:HG3	2.42	0.53
1:A:3461:ALA:HB1	1:A:3465:PHE:HE2	1.73	0.53
1:A:3619:ASP:HA	1:A:3622:ALA:HB3	1.90	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:414:LEU:O	1:A:417:VAL:HB	2.09	0.53
1:A:418:ALA:HB2	1:A:463:LYS:HB2	1.89	0.53
1:A:750:PRO:O	1:A:752:LEU:N	2.41	0.53
1:A:1037:LEU:O	1:A:1040:SER:N	2.41	0.53
1:A:170:VAL:HA	1:A:173:LYS:HE2	1.90	0.53
1:A:637:LYS:C	1:A:641:PHE:HB3	2.28	0.53
1:A:776:TRP:CZ2	1:A:780:ILE:HD12	2.44	0.53
1:A:1863:PHE:O	1:A:1867:ILE:HG12	2.09	0.53
1:A:1982:ILE:CG2	1:A:1986:ARG:HE	2.22	0.53
1:A:2352:HIS:O	1:A:2354:ASN:N	2.32	0.53
1:A:3680:LEU:O	1:A:3682:GLU:N	2.42	0.53
1:A:3830:SER:C	1:A:3833:ARG:HB3	2.30	0.53
1:A:157:TYR:CD1	1:A:160:LEU:HD21	2.43	0.53
1:A:654:ILE:HG22	1:A:729:CYS:HB3	1.91	0.53
1:A:956:PRO:HB2	1:A:957:PRO:HD3	1.91	0.53
1:A:995:PHE:HD2	1:A:1003:SER:HB3	1.59	0.53
1:A:1042:LYS:C	1:A:1044:ILE:H	2.12	0.53
1:A:1330:TYR:O	1:A:1334:LYS:HG2	2.09	0.53
1:A:2365:ASN:OD1	1:A:2366:LYS:N	2.42	0.53
1:A:3535:ILE:O	1:A:3538:GLU:N	2.42	0.53
1:A:74:ASN:OD1	1:A:75:SER:N	2.43	0.52
1:A:484:HIS:ND1	1:A:616:LYS:HE2	2.23	0.52
1:A:660:LEU:HD12	1:A:660:LEU:C	2.29	0.52
1:A:715:ALA:CB	1:A:734:LEU:HD13	2.30	0.52
1:A:1157:PHE:CE2	1:A:1165:LEU:HD13	2.44	0.52
1:A:1679:LEU:HB3	1:A:1683:LYS:HZ3	1.72	0.52
1:A:1939:LEU:CD1	1:A:1986:ARG:HH22	2.20	0.52
1:A:2546:TYR:HE1	1:A:2554:PHE:CD1	2.22	0.52
1:A:724:GLU:O	1:A:728:SER:OG	2.14	0.52
1:A:2362:VAL:O	1:A:2365:ASN:ND2	2.42	0.52
1:A:3280:TYR:HB3	1:A:3328:ILE:HD11	1.91	0.52
1:A:992:ILE:O	1:A:996:THR:HG23	2.09	0.52
1:A:1521:PHE:O	1:A:1524:LEU:HB2	2.09	0.52
1:A:2086:ASP:O	1:A:2089:ASN:N	2.41	0.52
1:A:3774:ILE:HD11	1:A:3997:LEU:HD22	1.90	0.52
1:A:1870:LYS:O	1:A:1874:TYR:CD1	2.60	0.52
1:A:3520:GLU:O	1:A:3524:ASN:ND2	2.34	0.52
1:A:3772:ASN:HB2	1:A:3787:GLN:OE1	2.10	0.52
1:A:534:LEU:HD22	1:A:623:PHE:CE1	2.44	0.52
1:A:970:LEU:HD11	1:A:1031:ARG:HH22	1.73	0.52
1:A:2126:MET:CE	1:A:2159:PRO:HB2	2.39	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3828:TYR:O	1:A:3832:PRO:HD2	2.10	0.52
1:A:19:LEU:HB3	1:A:34:LEU:HD21	1.92	0.52
1:A:493:LYS:N	1:A:494:PRO:CD	2.73	0.52
1:A:1915:LEU:HD12	1:A:1916:ILE:H	1.75	0.52
1:A:2922:ARG:HD3	1:A:2933:ILE:HG13	1.92	0.52
1:A:2939:LEU:C	1:A:2941:GLY:H	2.13	0.52
1:A:2995:GLU:O	1:A:2999:LEU:N	2.41	0.52
1:A:3686:TRP:O	1:A:3689:ASP:N	2.40	0.52
1:A:3761:ASP:HA	1:A:3764:VAL:HB	1.92	0.52
1:A:231:LEU:HD22	1:A:234:PHE:HB3	1.92	0.52
1:A:714:VAL:HG21	1:A:734:LEU:CD2	2.40	0.52
1:A:1723:PRO:C	1:A:1725:GLN:H	2.12	0.52
1:A:2314:GLU:OE1	1:A:2314:GLU:HA	2.09	0.52
1:A:3436:SER:HA	1:A:3439:LEU:HB3	1.92	0.52
1:A:3835:PRO:HB3	1:A:4127:TRP:HH2	1.73	0.52
1:A:1974:ASN:CB	1:A:1984:LEU:HD22	2.32	0.52
1:A:2093:CYS:C	1:A:2096:PRO:HD2	2.30	0.52
1:A:2382:VAL:HA	1:A:2400:VAL:HG11	1.92	0.52
1:A:3831:ASP:O	1:A:3835:PRO:HD3	2.10	0.52
1:A:4062:ASP:N	1:A:4062:ASP:OD1	2.42	0.52
1:A:234:PHE:CZ	1:A:240:GLU:OE1	2.62	0.52
1:A:3100:LYS:O	1:A:3103:ILE:HG22	2.10	0.52
1:A:3816:LEU:O	1:A:3819:THR:HG22	2.10	0.52
1:A:4050:LYS:O	1:A:4055:ASN:N	2.43	0.52
1:A:1411:TYR:HA	1:A:1414:ILE:HD12	1.92	0.52
1:A:1679:LEU:O	1:A:1682:THR:HG22	2.09	0.52
1:A:2464:HIS:HE1	1:A:2466:SER:OG	1.92	0.52
1:A:2945:SER:O	1:A:2947:ILE:N	2.41	0.52
1:A:3005:LEU:HD11	1:A:3181:ASP:OD1	2.10	0.52
1:A:4051:LEU:O	1:A:4053:GLY:N	2.43	0.52
1:A:4075:ARG:O	1:A:4078:VAL:HG22	2.10	0.52
1:A:978:GLN:HA	1:A:981:ARG:HE	1.75	0.51
1:A:1101:PHE:O	1:A:1104:LEU:HB2	2.09	0.51
1:A:3003:ASN:HB2	1:A:3005:LEU:O	2.10	0.51
1:A:3138:ILE:HD13	1:A:3189:PHE:CZ	2.45	0.51
1:A:3335:ARG:O	1:A:3337:ILE:HG13	2.10	0.51
1:A:1248:PHE:C	1:A:1250:LEU:H	2.14	0.51
1:A:1865:THR:O	1:A:1869:LYS:HG2	2.10	0.51
1:A:283:SER:HB3	1:A:287:LEU:HD22	1.92	0.51
1:A:1563:PHE:HA	1:A:1566:THR:OG1	2.09	0.51
1:A:1654:GLN:HA	1:A:1677:SER:CB	2.41	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3134:ALA:O	1:A:3138:ILE:HG12	2.10	0.51
1:A:3167:ARG:HB3	1:A:3186:ARG:NH1	2.24	0.51
1:A:3297:VAL:HG11	1:A:3332:THR:HG22	1.91	0.51
1:A:3675:LYS:N	1:A:3676:PRO:HD2	2.26	0.51
1:A:227:LEU:HA	1:A:230:LEU:HD22	1.93	0.51
1:A:1049:GLN:O	1:A:1055:ASN:ND2	2.40	0.51
1:A:1588:ASP:OD1	1:A:1588:ASP:N	2.42	0.51
1:A:2524:PHE:O	1:A:2527:HIS:HB3	2.10	0.51
1:A:2561:PHE:O	1:A:2565:MET:HE1	2.02	0.51
1:A:3890:MET:HE3	1:A:3900:LEU:HB3	1.93	0.51
1:A:3924:HIS:HD2	1:A:4124:TRP:HA	1.76	0.51
1:A:253:LEU:HA	1:A:265:TYR:HE1	1.75	0.51
1:A:733:LEU:O	1:A:737:PRO:HD3	2.10	0.51
1:A:763:THR:HB	1:A:768:VAL:N	2.24	0.51
1:A:3125:ARG:HG3	1:A:3129:LEU:HD12	1.93	0.51
1:A:3962:ARG:CZ	1:A:3962:ARG:HB2	2.40	0.51
1:A:882:SER:HB3	1:A:3892:THR:HG1	0.69	0.51
1:A:2034:SER:HA	1:A:2038:GLU:HB2	1.92	0.51
1:A:2552:VAL:HG22	1:A:2553:HIS:H	1.76	0.51
1:A:2851:PHE:N	1:A:2852:PRO:HD3	2.26	0.51
1:A:2870:SER:O	1:A:2871:LEU:C	2.48	0.51
1:A:3348:LEU:C	1:A:3352:GLU:OE2	2.49	0.51
1:A:3631:LYS:HG3	1:A:3684:SER:HB2	1.92	0.51
1:A:531:PHE:CB	1:A:534:LEU:CD1	2.89	0.51
1:A:2068:ARG:O	1:A:2069:ARG:CD	2.54	0.51
1:A:2136:PRO:O	1:A:2139:PRO:HD2	2.10	0.51
1:A:3917:ILE:CD1	1:A:3991:PHE:CG	2.94	0.51
1:A:4038:TRP:O	1:A:4040:PRO:HD3	2.11	0.51
1:A:275:PHE:O	1:A:278:HIS:N	2.44	0.51
1:A:763:THR:N	1:A:764:PRO:HD2	2.25	0.51
1:A:994:TRP:HZ3	1:A:2780:LEU:HB2	1.76	0.51
1:A:1448:LEU:O	1:A:1452:VAL:HG23	2.10	0.51
1:A:2361:ILE:HD12	1:A:2364:LEU:HB2	1.91	0.51
1:A:3351:ILE:HA	1:A:3355:LYS:HG3	1.93	0.51
1:A:439:VAL:HG11	1:A:479:ILE:HD13	1.93	0.51
1:A:591:GLN:OE1	1:A:1034:ARG:NH1	2.37	0.51
1:A:663:ILE:O	1:A:663:ILE:HG22	2.10	0.51
1:A:1044:ILE:C	1:A:1045:THR:HG1	2.13	0.51
1:A:1383:GLY:HA3	1:A:1386:ILE:HG12	1.93	0.51
1:A:237:SER:O	1:A:238:MET:HB2	2.10	0.51
1:A:2890:ILE:HG22	1:A:2918:PRO:HG3	1.93	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3270:ASP:HA	1:A:3273:LEU:HD13	1.92	0.51
1:A:3295:GLU:OE1	1:A:3295:GLU:HA	2.10	0.51
1:A:3672:LYS:HA	1:A:3675:LYS:HE3	1.92	0.51
1:A:3840:LYS:HA	1:A:3843:LEU:HG	1.93	0.51
1:A:977:ASP:O	1:A:979:VAL:N	2.40	0.50
1:A:2345:VAL:HA	1:A:2348:GLN:HE21	1.75	0.50
1:A:3916:TRP:CH2	1:A:4051:LEU:HG	2.46	0.50
1:A:534:LEU:O	1:A:537:SER:OG	2.16	0.50
1:A:1683:LYS:H	1:A:1683:LYS:HD2	1.77	0.50
1:A:2913:LYS:O	1:A:2915:ARG:N	2.44	0.50
1:A:2943:PHE:O	1:A:2944:THR:OG1	2.28	0.50
1:A:995:PHE:O	1:A:999:LYS:O	2.29	0.50
1:A:1106:ILE:O	1:A:1110:SER:CB	2.60	0.50
1:A:1350:ASN:O	1:A:1353:PRO:HD2	2.11	0.50
1:A:2400:VAL:HA	1:A:2403:CYS:SG	2.51	0.50
1:A:3296:GLN:O	1:A:3300:VAL:HG22	2.12	0.50
1:A:3497:SER:C	1:A:3499:ILE:H	2.15	0.50
1:A:4081:ALA:C	1:A:4110:GLN:NE2	2.54	0.50
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:ARG:HD3	1.92	0.50
1:A:58:VAL:O	1:A:62:ASP:N	2.40	0.50
1:A:411:PRO:HA	1:A:414:LEU:HB3	1.92	0.50
1:A:928:VAL:HG23	1:A:929:ALA:N	2.26	0.50
1:A:1278:ALA:HA	1:A:1281:VAL:HG22	1.92	0.50
1:A:2186:VAL:HA	1:A:2189:ILE:HG12	1.92	0.50
1:A:3231:ILE:CG2	1:A:3235:LYS:HE3	2.41	0.50
1:A:3283:LEU:O	1:A:3287:ARG:HG3	2.11	0.50
1:A:3487:ILE:HD11	1:A:3495:PHE:CE1	2.47	0.50
1:A:270:ALA:HA	1:A:273:ARG:HG2	1.94	0.50
1:A:660:LEU:HD12	1:A:661:PRO:CG	2.42	0.50
1:A:1392:MET:HA	1:A:1395:LEU:HB2	1.93	0.50
1:A:1499:CYS:O	1:A:1503:LEU:HD12	2.12	0.50
1:A:1917:LYS:HG2	1:A:1952:ILE:HD11	1.92	0.50
1:A:2185:MET:O	1:A:2189:ILE:HG23	2.11	0.50
1:A:3532:PRO:HA	1:A:3535:ILE:CG1	2.41	0.50
1:A:4015:ASN:HA	1:A:4018:GLN:OE1	2.11	0.50
1:A:340:TYR:O	1:A:344:GLN:HG3	2.11	0.50
1:A:560:LEU:HD12	1:A:561:ASN:ND2	2.19	0.50
1:A:993:HIS:CD2	1:A:1038:LYS:HD2	2.46	0.50
1:A:1070:PRO:CG	1:A:3741:ARG:HB3	2.32	0.50
1:A:1118:GLU:C	1:A:1120:SER:H	2.15	0.50
1:A:1160:SER:O	1:A:1162:SER:OG	2.17	0.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1452:VAL:CG1	1:A:1502:SER:CB	2.89	0.50
1:A:2553:HIS:HA	1:A:2555:LEU:HD22	1.92	0.50
1:A:3878:VAL:HB	1:A:3879:PRO:HD3	1.93	0.50
1:A:4059:ILE:CB	1:A:4081:ALA:HB1	2.42	0.50
1:A:752:LEU:HD11	1:A:776:TRP:CD1	2.46	0.50
1:A:790:LYS:HG3	1:A:791:ASP:H	1.75	0.50
1:A:1157:PHE:CE2	1:A:1165:LEU:HD22	2.47	0.50
1:A:1688:LEU:HA	1:A:1691:GLN:OE1	2.11	0.50
1:A:2022:PRO:O	1:A:2023:SER:HB2	2.11	0.50
1:A:3287:ARG:NH2	1:A:3328:ILE:HG12	2.26	0.50
1:A:3772:ASN:HA	1:A:3775:LEU:HG	1.93	0.50
1:A:257:ARG:HD3	1:A:257:ARG:H	1.77	0.50
1:A:357:LYS:O	1:A:359:LEU:N	2.45	0.50
1:A:437:HIS:HE1	1:A:1810:PRO:HG2	1.76	0.50
1:A:957:PRO:O	1:A:960:GLN:HB3	2.12	0.50
1:A:1121:LEU:C	1:A:1123:THR:H	2.15	0.50
1:A:2194:LEU:HD11	1:A:2244:CYS:HB2	1.93	0.50
1:A:3476:PRO:HA	1:A:3516:HIS:NE2	2.27	0.50
1:A:528:VAL:HG11	1:A:619:ASP:HA	1.93	0.50
1:A:624:ILE:HG23	1:A:625:ASN:N	2.27	0.50
1:A:1072:ALA:HB2	1:A:1114:ALA:HB1	1.93	0.50
1:A:2037:SER:O	1:A:2041:SER:N	2.44	0.50
1:A:3243:ILE:HD13	1:A:3262:LEU:HB2	1.94	0.50
1:A:3263:HIS:O	1:A:3272:TRP:NE1	2.45	0.50
1:A:3992:ARG:HH12	1:A:4100:GLU:CB	2.25	0.50
1:A:722:LYS:CB	1:A:727:ALA:HB2	2.42	0.49
1:A:967:PRO:HB3	1:A:1031:ARG:HH12	1.77	0.49
1:A:1500:LEU:H	1:A:1501:PRO:CD	2.25	0.49
1:A:1939:LEU:HD11	1:A:1986:ARG:NH1	2.27	0.49
1:A:2561:PHE:C	1:A:2565:MET:HE1	2.32	0.49
1:A:2892:LEU:HB3	1:A:2897:LEU:HB2	1.94	0.49
1:A:2949:THR:OG1	1:A:2950:LYS:N	2.45	0.49
1:A:439:VAL:O	1:A:443:ILE:HG12	2.11	0.49
1:A:2566:THR:CG2	1:A:2567:SER:N	2.74	0.49
1:A:3190:LEU:CD2	1:A:3235:LYS:HE2	2.32	0.49
1:A:3730:ALA:HB1	1:A:3734:ARG:NH1	2.27	0.49
1:A:2383:PHE:CZ	1:A:2415:LEU:HD11	2.47	0.49
1:A:3518:VAL:HA	1:A:3521:ILE:HG22	1.92	0.49
1:A:272:LEU:HD23	1:A:275:PHE:CD2	2.46	0.49
1:A:1572:LEU:HG	1:A:1575:LEU:HD12	1.94	0.49
1:A:3167:ARG:HB3	1:A:3186:ARG:HH12	1.78	0.49

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:362:ALA:HA	1:A:413:PHE:CE1	2.46	0.49
1:A:488:ILE:CG2	1:A:616:LYS:HG2	2.42	0.49
1:A:1874:TYR:CE1	1:A:1885:PRO:HG3	2.47	0.49
1:A:1963:GLN:O	1:A:1967:PHE:N	2.43	0.49
1:A:1995:GLU:O	1:A:1999:GLU:N	2.44	0.49
1:A:2312:TYR:CD2	1:A:2312:TYR:N	2.81	0.49
1:A:2430:GLU:HA	1:A:2433:LYS:HB2	1.93	0.49
1:A:3085:GLU:OE1	1:A:3085:GLU:N	2.39	0.49
1:A:3177:ASN:OD1	1:A:3177:ASN:N	2.45	0.49
1:A:987:LEU:O	1:A:991:LEU:HD13	2.13	0.49
1:A:1266:CYS:HA	1:A:1344:PHE:CE1	2.48	0.49
1:A:1866:GLN:O	1:A:1870:LYS:N	2.40	0.49
1:A:3568:ILE:HG22	1:A:3568:ILE:O	2.12	0.49
1:A:429:GLU:O	1:A:431:TYR:HD1	1.96	0.49
1:A:613:HIS:NE2	1:A:656:GLN:CG	2.75	0.49
1:A:2018:ASP:O	1:A:2022:PRO:HG2	2.12	0.49
1:A:3048:LYS:HA	1:A:3051:LEU:HD23	1.94	0.49
1:A:993:HIS:CE1	1:A:997:ASN:ND2	2.79	0.49
1:A:1882:SER:O	1:A:1886:LYS:HG2	2.12	0.49
1:A:2045:PHE:O	1:A:2049:VAL:HG23	2.13	0.49
1:A:2156:VAL:CG1	1:A:2159:PRO:HD3	2.40	0.49
1:A:2525:TRP:C	1:A:2527:HIS:H	2.16	0.49
1:A:4078:VAL:HG23	1:A:4079:ALA:N	2.28	0.49
1:A:4091:ALA:HB2	1:A:4110:GLN:NE2	2.28	0.49
1:A:4099:SER:HB2	1:A:4102:THR:HB	1.93	0.49
1:A:326:MET:HA	1:A:329:LYS:HB3	1.93	0.49
1:A:560:LEU:HA	1:A:563:LEU:HB2	1.94	0.49
1:A:934:LEU:O	1:A:937:MET:HB3	2.12	0.49
1:A:1682:THR:HA	1:A:1685:ASP:OD2	2.13	0.49
1:A:2926:LEU:C	1:A:3126:LEU:HD21	2.32	0.49
1:A:149:ILE:O	1:A:152:LEU:HG	2.13	0.49
1:A:613:HIS:HE1	1:A:656:GLN:HG3	1.74	0.49
1:A:1274:ARG:O	1:A:1278:ALA:HB3	2.13	0.49
1:A:2405:VAL:HG12	1:A:2438:ILE:HG23	1.95	0.49
1:A:3076:ALA:O	1:A:3080:LEU:HG	2.12	0.49
1:A:3819:THR:HG23	1:A:3882:LEU:HD22	1.94	0.49
1:A:660:LEU:CD1	1:A:661:PRO:CD	2.91	0.48
1:A:715:ALA:CB	1:A:734:LEU:CD1	2.87	0.48
1:A:730:LEU:O	1:A:734:LEU:HD12	2.12	0.48
1:A:1873:TYR:O	1:A:1876:ILE:HG22	2.13	0.48
1:A:1918:LEU:HD12	1:A:1958:GLU:HB3	1.95	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2287:PRO:C	1:A:2289:ASP:H	2.16	0.48
1:A:3386:SER:HA	1:A:3389:VAL:HG12	1.94	0.48
1:A:3558:ILE:HD13	1:A:3561:LYS:HD2	1.95	0.48
1:A:745:VAL:HG13	1:A:749:VAL:CG1	2.43	0.48
1:A:789:TYR:HD1	1:A:789:TYR:H	1.59	0.48
1:A:871:LEU:HD23	1:A:3121:LEU:HD21	1.93	0.48
1:A:995:PHE:CD2	1:A:1003:SER:CA	2.83	0.48
1:A:2564:GLU:OE1	1:A:2564:GLU:HA	2.13	0.48
1:A:2877:SER:O	1:A:2880:CYS:HB2	2.13	0.48
1:A:3082:TYR:HB3	1:A:3085:GLU:OE2	2.14	0.48
1:A:3515:GLN:O	1:A:3517:SER:N	2.46	0.48
1:A:3813:LYS:HB2	1:A:3925:LEU:HG	1.95	0.48
1:A:220:LEU:O	1:A:224:LEU:HB2	2.12	0.48
1:A:385:TYR:CE1	1:A:421:LEU:HD11	2.28	0.48
1:A:461:ILE:CG2	1:A:465:PHE:CE2	2.96	0.48
1:A:663:ILE:HD12	1:A:663:ILE:H	1.75	0.48
1:A:2166:SER:O	1:A:2168:LEU:N	2.41	0.48
1:A:2554:PHE:CD1	1:A:2554:PHE:C	2.85	0.48
1:A:3917:ILE:HD11	1:A:3991:PHE:CD2	2.47	0.48
1:A:663:ILE:N	1:A:663:ILE:CD1	2.73	0.48
1:A:862:LEU:CB	1:A:865:GLN:HB2	2.42	0.48
1:A:870:LEU:HA	1:A:873:VAL:CB	2.40	0.48
1:A:3817:LEU:HD23	1:A:3828:TYR:CE2	2.47	0.48
1:A:763:THR:HB	1:A:768:VAL:H	1.78	0.48
1:A:1149:LYS:O	1:A:1151:ARG:N	2.46	0.48
1:A:2095:ALA:O	1:A:2099:ALA:N	2.41	0.48
1:A:2949:THR:O	1:A:2953:THR:OG1	2.25	0.48
1:A:3377:LEU:O	1:A:3381:ALA:N	2.40	0.48
1:A:537:SER:HG	1:A:538:ASP:N	2.12	0.48
1:A:714:VAL:CG1	1:A:715:ALA:H	2.04	0.48
1:A:938:VAL:HA	1:A:941:MET:HG3	1.94	0.48
1:A:1103:ALA:O	1:A:1107:TYR:HB2	2.14	0.48
1:A:2225:HIS:HB3	1:A:2228:ARG:HD3	1.95	0.48
1:A:2314:GLU:O	1:A:2315:VAL:HB	2.13	0.48
1:A:3770:VAL:HG21	1:A:4001:THR:HG21	1.94	0.48
1:A:3828:TYR:HA	1:A:3831:ASP:CB	2.43	0.48
1:A:293:LEU:O	1:A:296:VAL:HG12	2.14	0.48
1:A:326:MET:SD	1:A:329:LYS:HD3	2.53	0.48
1:A:435:LEU:HA	1:A:438:LEU:HB3	1.95	0.48
1:A:654:ILE:HG21	1:A:729:CYS:SG	2.54	0.48
1:A:970:LEU:HD21	1:A:1031:ARG:HH12	1.78	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1087:ARG:O	1:A:1091:GLU:HG3	2.13	0.48
1:A:1158:PRO:HB2	1:A:1159:PRO:HD3	1.94	0.48
1:A:2095:ALA:HA	1:A:2098:THR:OG1	2.13	0.48
1:A:3376:GLY:N	1:A:3380:ARG:HH21	2.11	0.48
1:A:3883:LEU:HD22	1:A:3970:LEU:HB2	1.96	0.48
1:A:776:TRP:CE2	1:A:780:ILE:HD12	2.49	0.48
1:A:959:TYR:O	1:A:963:LYS:N	2.31	0.48
1:A:1900:PHE:O	1:A:1904:CYS:N	2.38	0.48
1:A:2809:PHE:O	1:A:2813:PHE:HD2	1.96	0.48
1:A:3287:ARG:HG2	1:A:3293:CYS:CB	2.43	0.48
1:A:3493:TRP:HA	1:A:3495:PHE:CE2	2.48	0.48
1:A:3692:VAL:O	1:A:3692:VAL:HG23	2.14	0.48
1:A:3988:LEU:HD11	1:A:3992:ARG:NE	2.29	0.48
1:A:4075:ARG:HA	1:A:4078:VAL:HG22	1.96	0.48
1:A:530:LEU:O	1:A:533:HIS:CB	2.62	0.48
1:A:970:LEU:O	1:A:981:ARG:HB3	2.14	0.48
1:A:2098:THR:HA	1:A:2146:LEU:CD1	2.43	0.48
1:A:2146:LEU:HD23	1:A:2146:LEU:H	1.78	0.48
1:A:3047:SER:O	1:A:3050:LYS:HG3	2.14	0.48
1:A:3185:ASN:HB3	1:A:3189:PHE:CZ	2.48	0.48
1:A:3297:VAL:HG11	1:A:3332:THR:CG2	2.44	0.48
1:A:3702:PRO:CB	1:A:3718:ARG:HA	2.44	0.48
1:A:1038:LYS:O	1:A:1042:LYS:HB2	2.13	0.47
1:A:1128:CYS:O	1:A:1131:ILE:HB	2.14	0.47
1:A:3992:ARG:HG2	1:A:4053:GLY:HA3	1.96	0.47
1:A:2535:THR:O	1:A:2538:ARG:N	2.47	0.47
1:A:2545:LEU:O	1:A:2548:PRO:HD2	2.13	0.47
1:A:708:VAL:HG22	1:A:712:LYS:HE2	0.53	0.47
1:A:867:ASN:O	1:A:869:ASN:N	2.46	0.47
1:A:1024:THR:HA	1:A:1027:ASP:HB2	1.95	0.47
1:A:1415:LEU:O	1:A:1419:LEU:HG	2.14	0.47
1:A:2154:GLU:O	1:A:2155:GLU:C	2.52	0.47
1:A:2552:VAL:O	1:A:2553:HIS:CB	2.59	0.47
1:A:3771:MET:CE	1:A:3914:SER:HB3	2.44	0.47
1:A:473:PRO:O	1:A:475:LEU:N	2.48	0.47
1:A:767:GLU:O	1:A:771:ASN:HB2	2.15	0.47
1:A:1015:ASP:O	1:A:1017:ILE:N	2.47	0.47
1:A:1246:GLY:CA	1:A:1250:LEU:HD12	2.44	0.47
1:A:2492:ASP:O	1:A:2496:GLN:HG2	2.14	0.47
1:A:2806:LYS:HA	1:A:2809:PHE:HE2	1.74	0.47
1:A:2875:ALA:O	1:A:2879:GLY:HA3	2.14	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3291:GLN:O	1:A:3294:SER:OG	2.27	0.47
1:A:400:THR:HG21	1:A:1869:LYS:NZ	2.29	0.47
1:A:476:ARG:O	1:A:479:ILE:HB	2.15	0.47
1:A:614:PRO:C	1:A:617:PRO:HD2	2.35	0.47
1:A:971:ARG:NH2	1:A:1023:SER:HB2	2.29	0.47
1:A:2306:ASN:O	1:A:2306:ASN:ND2	2.45	0.47
1:A:2470:ARG:NH1	1:A:2513:GLU:CD	2.68	0.47
1:A:2542:LEU:HD12	1:A:2543:ASN:H	1.79	0.47
1:A:3060:SER:O	1:A:3064:PHE:N	2.47	0.47
1:A:3496:ILE:HG22	1:A:3497:SER:N	2.28	0.47
1:A:3836:PRO:O	1:A:3840:LYS:HB2	2.14	0.47
1:A:1504:ASP:HA	1:A:1507:CYS:SG	2.55	0.47
1:A:2357:GLU:HA	1:A:2360:PHE:HB2	1.97	0.47
1:A:2395:THR:O	1:A:2399:GLU:HG3	2.14	0.47
1:A:2425:ARG:HE	1:A:2457:PRO:HG3	1.80	0.47
1:A:3496:ILE:O	1:A:3499:ILE:N	2.48	0.47
1:A:3865:THR:O	1:A:3869:THR:OG1	2.18	0.47
1:A:3984:MET:CB	1:A:4104:VAL:HG11	2.44	0.47
1:A:4070:LYS:CB	1:A:4074:PHE:N	2.78	0.47
1:A:4109:ASP:O	1:A:4111:ALA:N	2.37	0.47
1:A:173:LYS:O	1:A:177:LEU:HD22	2.14	0.47
1:A:356:ASN:CB	1:A:1858:LEU:HB2	2.44	0.47
1:A:461:ILE:HG23	1:A:465:PHE:HE2	1.79	0.47
1:A:491:CYS:O	1:A:494:PRO:HB3	2.14	0.47
1:A:633:ILE:CG2	1:A:637:LYS:CB	2.93	0.47
1:A:732:PHE:HD2	1:A:733:LEU:N	2.12	0.47
1:A:763:THR:HG21	1:A:770:LEU:N	2.29	0.47
1:A:789:TYR:N	1:A:789:TYR:CD1	2.82	0.47
1:A:994:TRP:H	1:A:994:TRP:HD1	1.60	0.47
1:A:1874:TYR:HD2	1:A:1875:LYS:N	2.13	0.47
1:A:2327:LEU:HA	1:A:2330:VAL:HG12	1.95	0.47
1:A:3068:ALA:HA	1:A:3076:ALA:HB2	1.95	0.47
1:A:3234:CYS:O	1:A:3238:MET:N	2.48	0.47
1:A:3296:GLN:O	1:A:3300:VAL:HG13	2.14	0.47
1:A:3427:GLU:OE2	1:A:3435:ASP:HB3	2.14	0.47
1:A:3917:ILE:HG21	1:A:3998:LEU:HD11	1.96	0.47
1:A:3931:ALA:HB3	1:A:3935:GLY:O	2.15	0.47
1:A:1248:PHE:O	1:A:1250:LEU:N	2.38	0.47
1:A:1559:PHE:C	1:A:1562:LEU:HD21	2.35	0.47
1:A:2059:PRO:HB2	1:A:2062:ALA:HB3	1.97	0.47
1:A:2226:PRO:HB3	1:A:2234:ASN:OD1	2.14	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2283:ASN:N	1:A:2283:ASN:OD1	2.47	0.47
1:A:3237:SER:O	1:A:3238:MET:C	2.54	0.47
1:A:3835:PRO:O	1:A:3839:TYR:HB3	2.15	0.47
1:A:410:MET:O	1:A:442:GLN:NE2	2.39	0.47
1:A:2100:LEU:HD23	1:A:2104:MET:HB2	1.97	0.47
1:A:2287:PRO:O	1:A:2289:ASP:N	2.40	0.47
1:A:2788:SER:O	1:A:2792:THR:OG1	2.30	0.47
1:A:4071:ALA:HB3	1:A:4072:PRO:HD3	1.97	0.47
1:A:457:CYS:O	1:A:461:ILE:HG13	2.14	0.47
1:A:1707:LEU:O	1:A:1708:GLU:HG2	2.15	0.47
1:A:2028:LEU:N	1:A:2028:LEU:CD1	2.77	0.47
1:A:3303:THR:HA	1:A:3306:LEU:CB	2.45	0.47
1:A:3451:LEU:HD23	1:A:3482:LEU:HG	1.97	0.47
1:A:3593:ARG:HD3	1:A:3660:ASN:O	2.14	0.47
1:A:324:SER:HB3	1:A:370:ALA:HB1	1.96	0.46
1:A:2361:ILE:HG21	1:A:2385:LEU:HD22	1.97	0.46
1:A:2934:GLY:O	1:A:2938:VAL:HG23	2.14	0.46
1:A:660:LEU:CD1	1:A:661:PRO:HG3	2.45	0.46
1:A:867:ASN:OD1	1:A:868:LYS:N	2.49	0.46
1:A:2144:LEU:HA	1:A:2147:ALA:CB	2.42	0.46
1:A:2865:HIS:CG	1:A:2866:ALA:N	2.84	0.46
1:A:3564:GLN:C	1:A:3566:GLY:H	2.18	0.46
1:A:564:LEU:C	1:A:566:ASP:H	2.18	0.46
1:A:2216:LEU:HD23	1:A:2219:LEU:HD12	1.97	0.46
1:A:2559:THR:OG1	1:A:2560:ASN:N	2.49	0.46
1:A:3908:HIS:O	1:A:3911:ILE:HG12	2.15	0.46
1:A:566:ASP:C	1:A:568:PHE:N	2.68	0.46
1:A:631:ARG:O	1:A:635:PRO:HD3	2.15	0.46
1:A:660:LEU:N	1:A:661:PRO:CD	2.79	0.46
1:A:1000:LYS:C	1:A:1002:GLU:H	2.17	0.46
1:A:1909:ASN:O	1:A:1912:THR:HG23	2.14	0.46
1:A:1945:TYR:O	1:A:1949:ILE:HG22	2.16	0.46
1:A:2138:VAL:HB	1:A:2139:PRO:HD3	1.98	0.46
1:A:2503:LYS:O	1:A:2507:ILE:HG12	2.15	0.46
1:A:2797:VAL:C	1:A:2799:GLN:H	2.17	0.46
1:A:2808:LEU:O	1:A:2812:LEU:N	2.49	0.46
1:A:2916:LEU:O	1:A:2919:ASP:HB3	2.15	0.46
1:A:3177:ASN:HB3	1:A:3178:ILE:HD12	1.97	0.46
1:A:3236:PHE:HZ	1:A:3268:THR:OG1	1.92	0.46
1:A:3540:TYR:CG	1:A:3541:SER:N	2.82	0.46
1:A:3977:THR:HG21	1:A:3981:TYR:H	1.78	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:89:LEU:O	1:A:93:LEU:HG	2.16	0.46
1:A:360:SER:HA	1:A:363:ILE:HG13	1.98	0.46
1:A:479:ILE:O	1:A:482:VAL:HG22	2.16	0.46
1:A:488:ILE:CG2	1:A:616:LYS:CG	2.93	0.46
1:A:598:PRO:HD2	1:A:1022:ASP:O	2.16	0.46
1:A:623:PHE:O	1:A:624:ILE:HG22	2.15	0.46
1:A:973:ALA:HB1	1:A:977:ASP:HB2	1.97	0.46
1:A:1004:GLN:HG2	1:A:1005:ASP:N	2.31	0.46
1:A:1802:TYR:O	1:A:1805:PHE:N	2.40	0.46
1:A:2557:LEU:H	1:A:2557:LEU:HD12	1.80	0.46
1:A:3806:LEU:HD12	1:A:3807:GLU:H	1.80	0.46
1:A:4044:ILE:O	1:A:4048:LYS:N	2.49	0.46
1:A:192:ASN:O	1:A:196:LEU:HD23	2.16	0.46
1:A:453:MET:SD	1:A:453:MET:C	2.94	0.46
1:A:633:ILE:HG22	1:A:637:LYS:CB	2.46	0.46
1:A:1036:PHE:CE1	1:A:1039:TRP:HD1	2.33	0.46
1:A:2511:ILE:HG22	1:A:2519:LEU:CD1	2.46	0.46
1:A:2870:SER:C	1:A:2872:ASP:N	2.68	0.46
1:A:3257:LYS:HG3	1:A:3258:LEU:HD23	1.98	0.46
1:A:3824:GLU:HA	1:A:3827:ALA:HB3	1.97	0.46
1:A:4009:PRO:HG2	1:A:4012:ASP:HB2	1.98	0.46
1:A:352:VAL:HA	1:A:355:ASN:O	2.15	0.46
1:A:461:ILE:HG22	1:A:465:PHE:CD2	2.51	0.46
1:A:804:ALA:HB1	1:A:852:ARG:CZ	2.46	0.46
1:A:1879:VAL:HG13	1:A:1880:MET:N	2.31	0.46
1:A:2368:THR:HG21	1:A:2403:CYS:HA	1.96	0.46
1:A:2378:PHE:O	1:A:2382:VAL:HG13	2.15	0.46
1:A:3020:ASP:OD1	1:A:3021:SER:N	2.49	0.46
1:A:3241:LYS:HB3	1:A:3242:MET:SD	2.56	0.46
1:A:3503:VAL:HG11	1:A:3535:ILE:HD12	1.98	0.46
1:A:3787:GLN:HG3	1:A:3788:LEU:N	2.30	0.46
1:A:641:PHE:C	1:A:644:PRO:HD2	2.35	0.46
1:A:1499:CYS:SG	1:A:1503:LEU:HG	2.55	0.46
1:A:1500:LEU:HA	1:A:1503:LEU:HD12	1.98	0.46
1:A:1938:ARG:HB2	1:A:1986:ARG:NH2	2.31	0.46
1:A:1983:ASP:OD1	1:A:1983:ASP:N	2.47	0.46
1:A:2220:MET:H	1:A:2220:MET:HG3	1.57	0.46
1:A:2281:MET:HA	1:A:2287:PRO:CG	2.46	0.46
1:A:3152:SER:HA	1:A:3156:PRO:HD2	1.98	0.46
1:A:323:VAL:O	1:A:327:VAL:HG23	2.16	0.46
1:A:2156:VAL:HG12	1:A:2159:PRO:HD2	1.95	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3138:ILE:O	1:A:3142:ILE:HG13	2.15	0.46
1:A:3167:ARG:CG	1:A:3186:ARG:HH12	2.29	0.46
1:A:3303:THR:HG22	1:A:3306:LEU:CD2	2.46	0.46
1:A:3530:VAL:O	1:A:3533:PHE:HB2	2.16	0.46
1:A:4072:PRO:HD2	1:A:4073:ALA:H	1.81	0.46
1:A:637:LYS:HA	1:A:641:PHE:HB2	1.98	0.46
1:A:653:LEU:HD12	1:A:656:GLN:H	1.76	0.46
1:A:1952:ILE:HG12	1:A:1953:CYS:H	1.80	0.46
1:A:2403:CYS:SG	1:A:2404:ARG:N	2.88	0.46
1:A:2869:LEU:H	1:A:2892:LEU:HD11	1.79	0.46
1:A:3575:LEU:CB	1:A:3687:MET:CB	2.94	0.46
1:A:3682:GLU:O	1:A:3685:PRO:HD2	2.16	0.46
1:A:1115:HIS:C	1:A:1117:ASP:N	2.68	0.45
1:A:138:PHE:O	1:A:141:SER:OG	2.16	0.45
1:A:253:LEU:HA	1:A:265:TYR:CE1	2.52	0.45
1:A:345:PHE:O	1:A:349:ILE:HG13	2.16	0.45
1:A:657:SER:O	1:A:660:LEU:CG	2.47	0.45
1:A:767:GLU:OE2	1:A:846:ILE:N	2.50	0.45
1:A:804:ALA:HB1	1:A:852:ARG:NH1	2.30	0.45
1:A:911:LEU:O	1:A:915:THR:HG23	2.16	0.45
1:A:930:ALA:O	1:A:933:LEU:HB3	2.16	0.45
1:A:1871:MET:C	1:A:1874:TYR:HB2	2.37	0.45
1:A:2156:VAL:HB	1:A:2159:PRO:CG	2.46	0.45
1:A:2396:LEU:HA	1:A:2399:GLU:OE1	2.16	0.45
1:A:101:ALA:O	1:A:104:SER:OG	2.24	0.45
1:A:150:GLY:HA2	1:A:153:PHE:CZ	2.51	0.45
1:A:238:MET:HB2	1:A:240:GLU:HG3	1.98	0.45
1:A:398:THR:O	1:A:400:THR:N	2.50	0.45
1:A:925:GLN:HA	1:A:928:VAL:HG22	1.99	0.45
1:A:1142:HIS:CG	1:A:1143:VAL:N	2.85	0.45
1:A:1582:LEU:O	1:A:1586:SER:N	2.37	0.45
1:A:2542:LEU:HB2	1:A:2546:TYR:CE2	2.51	0.45
1:A:3506:LEU:HD22	1:A:3517:SER:O	2.15	0.45
1:A:3762:GLN:CD	1:A:3795:PRO:HG3	2.37	0.45
1:A:101:ALA:HB3	1:A:102:PRO:HD3	1.98	0.45
1:A:848:LEU:O	1:A:851:ILE:HB	2.17	0.45
1:A:1002:GLU:HA	1:A:1004:GLN:NE2	2.30	0.45
1:A:1982:ILE:HG22	1:A:1986:ARG:NE	2.32	0.45
1:A:2144:LEU:HD23	1:A:2147:ALA:HB3	1.97	0.45
1:A:2553:HIS:O	1:A:2554:PHE:CD2	2.70	0.45
1:A:3348:LEU:O	1:A:3352:GLU:CB	2.62	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:131:LEU:HD21	1:A:173:LYS:HZ1	1.82	0.45
1:A:391:ARG:O	1:A:394:GLN:HG3	2.16	0.45
1:A:1996:VAL:HA	1:A:1999:GLU:CB	2.47	0.45
1:A:2325:LEU:HD12	1:A:2325:LEU:HA	1.83	0.45
1:A:2334:LYS:O	1:A:2336:ILE:HG13	2.16	0.45
1:A:2958:LEU:C	1:A:2960:GLU:N	2.70	0.45
1:A:3348:LEU:O	1:A:3352:GLU:CD	2.55	0.45
1:A:3887:PHE:O	1:A:3890:MET:HG2	2.16	0.45
1:A:3948:SER:O	1:A:3952:PHE:HB2	2.17	0.45
1:A:4074:PHE:O	1:A:4078:VAL:HG13	2.16	0.45
1:A:475:LEU:HD12	1:A:475:LEU:HA	1.77	0.45
1:A:491:CYS:O	1:A:494:PRO:HD3	2.17	0.45
1:A:789:TYR:O	1:A:793:LEU:N	2.49	0.45
1:A:959:TYR:HA	1:A:962:TYR:CB	2.47	0.45
1:A:1173:LEU:N	1:A:1173:LEU:HD23	2.32	0.45
1:A:2379:MET:O	1:A:2382:VAL:HG22	2.15	0.45
1:A:3287:ARG:HH12	1:A:3328:ILE:HA	1.81	0.45
1:A:3631:LYS:O	1:A:3631:LYS:HD3	2.17	0.45
1:A:139:ARG:C	1:A:141:SER:H	2.20	0.45
1:A:262:LEU:HB3	1:A:306:VAL:HG21	1.99	0.45
1:A:708:VAL:O	1:A:712:LYS:CG	2.41	0.45
1:A:862:LEU:O	1:A:866:ILE:HD11	2.17	0.45
1:A:1014:LEU:HD21	1:A:1028:PHE:HE2	1.82	0.45
1:A:1285:GLU:C	1:A:1287:GLN:H	2.20	0.45
1:A:2554:PHE:CD1	1:A:2554:PHE:O	2.70	0.45
1:A:3682:GLU:C	1:A:3685:PRO:HD2	2.37	0.45
1:A:3706:ASP:H	1:A:3715:TYR:HE2	1.63	0.45
1:A:3789:ARG:HB3	1:A:3938:ILE:CG2	2.47	0.45
1:A:4066:LEU:O	1:A:4066:LEU:CD1	2.49	0.45
1:A:294:PHE:HA	1:A:297:LEU:HD21	1.99	0.45
1:A:325:ASN:O	1:A:329:LYS:N	2.42	0.45
1:A:488:ILE:HG21	1:A:616:LYS:CD	2.44	0.45
1:A:2027:SER:C	1:A:2028:LEU:CD1	2.86	0.45
1:A:2169:LEU:HD12	1:A:2170:GLN:O	2.16	0.45
1:A:2357:GLU:HA	1:A:2360:PHE:CG	2.52	0.45
1:A:2475:ASN:O	1:A:2478:MET:HB2	2.17	0.45
1:A:2549:LYS:HZ2	1:A:2554:PHE:CB	2.24	0.45
1:A:3048:LYS:HE2	1:A:3048:LYS:HB3	1.70	0.45
1:A:3297:VAL:HA	1:A:3300:VAL:CG2	2.47	0.45
1:A:3971:MET:HB2	1:A:3974:MET:CB	2.47	0.45
1:A:251:PHE:CD1	1:A:254:LYS:HD2	2.52	0.45

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:291:VAL:HA	1:A:294:PHE:HE1	1.80	0.45
1:A:534:LEU:CD1	1:A:534:LEU:N	2.73	0.45
1:A:714:VAL:HG22	1:A:734:LEU:CD2	2.43	0.45
1:A:1296:PHE:CE1	1:A:1368:LEU:HD23	2.52	0.45
1:A:1982:ILE:O	1:A:1986:ARG:CG	2.62	0.45
1:A:2281:MET:HA	1:A:2287:PRO:HG3	1.99	0.45
1:A:3830:SER:O	1:A:3834:ALA:N	2.48	0.45
1:A:641:PHE:HA	1:A:644:PRO:HD3	1.99	0.45
1:A:714:VAL:HG22	1:A:715:ALA:N	2.32	0.45
1:A:1014:LEU:HB3	1:A:1078:ALA:HB1	1.98	0.45
1:A:1029:CYS:HB3	1:A:1085:ILE:HG13	1.98	0.45
1:A:1080:LEU:CB	1:A:1127:CYS:HB3	2.47	0.45
1:A:1376:LEU:HD23	1:A:1376:LEU:H	1.82	0.45
1:A:1889:VAL:HG11	1:A:1944:ALA:HB2	1.99	0.45
1:A:2024:TYR:O	1:A:2045:PHE:HE1	1.96	0.45
1:A:3064:PHE:HE1	1:A:3067:LYS:HE2	1.82	0.45
1:A:3183:ILE:HA	1:A:3183:ILE:HD13	1.65	0.45
1:A:3471:ILE:CG2	1:A:3472:ILE:HG13	2.47	0.45
1:A:3789:ARG:HB3	1:A:3938:ILE:HG22	1.98	0.45
1:A:3791:TYR:HB2	1:A:3792:SER:H	1.52	0.45
1:A:855:VAL:O	1:A:859:LEU:HG	2.17	0.44
1:A:2259:LYS:O	1:A:2261:SER:N	2.48	0.44
1:A:2312:TYR:HE1	1:A:2315:VAL:C	2.20	0.44
1:A:2378:PHE:HB3	1:A:2381:ALA:HB3	1.99	0.44
1:A:2836:LEU:HB3	1:A:2840:PHE:HE2	1.82	0.44
1:A:2958:LEU:O	1:A:2960:GLU:N	2.50	0.44
1:A:3243:ILE:O	1:A:3246:ALA:HB3	2.17	0.44
1:A:3581:PRO:O	1:A:3585:PHE:CE2	2.70	0.44
1:A:3593:ARG:HA	1:A:3660:ASN:OD1	2.16	0.44
1:A:3900:LEU:HA	1:A:3900:LEU:HD12	1.71	0.44
1:A:3917:ILE:HD13	1:A:3991:PHE:CE1	2.44	0.44
1:A:28:ALA:C	1:A:30:ALA:H	2.20	0.44
1:A:116:THR:HG23	1:A:119:ARG:HH21	1.83	0.44
1:A:446:PHE:CE1	1:A:457:CYS:HB2	2.53	0.44
1:A:653:LEU:CD1	1:A:653:LEU:C	2.85	0.44
1:A:1391:VAL:HG12	1:A:1395:LEU:HD22	1.98	0.44
1:A:1651:LYS:HG3	1:A:1684:LEU:HD11	1.98	0.44
1:A:2511:ILE:HG22	1:A:2519:LEU:HD12	1.99	0.44
1:A:3413:TYR:CD1	1:A:3449:LYS:HA	2.52	0.44
1:A:3493:TRP:C	1:A:3495:PHE:H	2.21	0.44
1:A:3515:GLN:O	1:A:3516:HIS:C	2.55	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:992:ILE:CD1	1:A:993:HIS:N	2.73	0.44
1:A:1070:PRO:HD2	1:A:3741:ARG:HD3	2.00	0.44
1:A:3992:ARG:NH2	1:A:4100:GLU:HA	2.25	0.44
1:A:4006:VAL:C	1:A:4008:GLU:H	2.20	0.44
1:A:345:PHE:HA	1:A:348:ILE:HD12	2.00	0.44
1:A:750:PRO:C	1:A:752:LEU:H	2.20	0.44
1:A:1501:PRO:CA	1:A:1505:LEU:H	2.28	0.44
1:A:1939:LEU:CD1	1:A:1986:ARG:NH2	2.78	0.44
1:A:3417:ALA:O	1:A:3420:CYS:N	2.38	0.44
1:A:3486:GLU:HG3	1:A:3487:ILE:N	2.32	0.44
1:A:241:ASP:O	1:A:245:SER:OG	2.26	0.44
1:A:430:VAL:O	1:A:433:PRO:HD2	2.18	0.44
1:A:643:GLU:O	1:A:647:TYR:CD1	2.71	0.44
1:A:776:TRP:CH2	1:A:780:ILE:HD12	2.53	0.44
1:A:1238:GLN:H	1:A:1239:PRO:HD3	1.82	0.44
1:A:1915:LEU:HD12	1:A:1916:ILE:N	2.31	0.44
1:A:1965:PHE:O	1:A:1968:SER:OG	2.27	0.44
1:A:2549:LYS:NZ	1:A:2554:PHE:CB	2.63	0.44
1:A:3303:THR:HA	1:A:3306:LEU:HB2	1.98	0.44
1:A:3459:ASN:O	1:A:3463:LEU:HD12	2.16	0.44
1:A:3761:ASP:O	1:A:3764:VAL:HB	2.18	0.44
1:A:3829:LEU:C	1:A:3829:LEU:CD1	2.86	0.44
1:A:3947:GLY:HA3	1:A:4065:LEU:HD21	1.98	0.44
1:A:368:LEU:HD23	1:A:368:LEU:O	2.17	0.44
1:A:714:VAL:CG1	1:A:734:LEU:CD2	2.94	0.44
1:A:796:LEU:HD23	1:A:796:LEU:HA	1.80	0.44
1:A:1215:GLU:O	1:A:1217:VAL:N	2.51	0.44
1:A:1238:GLN:H	1:A:1239:PRO:CD	2.30	0.44
1:A:2126:MET:HA	1:A:2129:LEU:HD12	1.99	0.44
1:A:3145:ILE:O	1:A:3149:GLY:HA3	2.18	0.44
1:A:3504:ALA:HB3	1:A:3505:LEU:HD12	1.99	0.44
1:A:3879:PRO:O	1:A:3883:LEU:HB2	2.18	0.44
1:A:4082:ARG:O	1:A:4086:ASP:CA	2.65	0.44
1:A:634:LEU:O	1:A:638:GLN:N	2.45	0.44
1:A:715:ALA:O	1:A:719:LYS:CB	2.65	0.44
1:A:1161:ALA:C	1:A:1163:LEU:H	2.21	0.44
1:A:1801:VAL:O	1:A:1804:MET:HB2	2.18	0.44
1:A:3052:LEU:HG	1:A:3188:PHE:HE2	1.82	0.44
1:A:3581:PRO:O	1:A:3585:PHE:CD2	2.70	0.44
1:A:3828:TYR:O	1:A:3832:PRO:CD	2.66	0.44
1:A:4056:PRO:HA	1:A:4103:GLN:OE1	2.18	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4072:PRO:CD	1:A:4073:ALA:H	2.31	0.44
1:A:385:TYR:CE1	1:A:421:LEU:HD12	2.51	0.44
1:A:786:GLN:O	1:A:788:TYR:N	2.41	0.44
1:A:1021:VAL:HB	1:A:1024:THR:HG22	2.00	0.44
1:A:1479:VAL:O	1:A:1482:GLU:HB2	2.18	0.44
1:A:1715:GLU:O	1:A:1717:LEU:N	2.51	0.44
1:A:1743:MET:O	1:A:1747:LEU:HB2	2.18	0.44
1:A:1982:ILE:O	1:A:1986:ARG:N	2.44	0.44
1:A:1984:LEU:HD12	1:A:1985:LYS:CB	2.48	0.44
1:A:2400:VAL:C	1:A:2403:CYS:HG	2.11	0.44
1:A:3629:ARG:NH2	1:A:3634:GLN:OE1	2.50	0.44
1:A:3706:ASP:CB	1:A:3715:TYR:HD2	2.31	0.44
1:A:3832:PRO:O	1:A:3836:PRO:CD	2.60	0.44
1:A:3887:PHE:HB3	1:A:3897:PHE:HE1	1.81	0.44
1:A:3901:ARG:O	1:A:3904:PHE:HB3	2.17	0.44
1:A:3917:ILE:CD1	1:A:3991:PHE:CD2	3.01	0.44
1:A:3988:LEU:HD21	1:A:3992:ARG:NH1	2.33	0.44
1:A:4081:ALA:O	1:A:4091:ALA:CB	2.66	0.44
1:A:3991:PHE:HD1	1:A:3998:LEU:HD12	1.83	0.44
1:A:131:LEU:HD21	1:A:173:LYS:NZ	2.34	0.43
1:A:224:LEU:HD21	1:A:252:VAL:HG21	2.00	0.43
1:A:224:LEU:HD23	1:A:268:PRO:HG3	1.99	0.43
1:A:430:VAL:HG11	1:A:1683:LYS:HG3	1.99	0.43
1:A:484:HIS:NE2	1:A:619:ASP:OD2	2.50	0.43
1:A:653:LEU:HD22	1:A:654:ILE:N	2.32	0.43
1:A:911:LEU:H	1:A:911:LEU:HG	1.35	0.43
1:A:991:LEU:HA	1:A:994:TRP:CD1	2.52	0.43
1:A:1028:PHE:HZ	1:A:1032:CYS:HG	1.60	0.43
1:A:3045:ILE:O	1:A:3048:LYS:HB3	2.17	0.43
1:A:3607:GLU:O	1:A:3610:TYR:HB2	2.17	0.43
1:A:3795:PRO:C	1:A:3796:MET:HG3	2.38	0.43
1:A:236:LYS:HE2	1:A:236:LYS:HB3	1.58	0.43
1:A:409:GLN:HG2	1:A:412:SER:HB2	2.00	0.43
1:A:1073:PHE:C	1:A:1075:ARG:N	2.72	0.43
1:A:1559:PHE:CA	1:A:1562:LEU:HD21	2.48	0.43
1:A:1995:GLU:OE2	1:A:2051:SER:HB3	2.18	0.43
1:A:2381:ALA:HA	1:A:2384:PHE:CE1	2.53	0.43
1:A:2569:SER:HB3	1:A:2570:PRO:HD3	2.00	0.43
1:A:3039:THR:O	1:A:3042:PRO:HD2	2.19	0.43
1:A:3164:TRP:HZ3	1:A:3238:MET:CB	2.29	0.43
1:A:3828:TYR:CE1	1:A:3831:ASP:OD2	2.71	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4091:ALA:HB2	1:A:4110:GLN:HE21	1.82	0.43
1:A:1747:LEU:HA	1:A:1747:LEU:HD23	1.79	0.43
1:A:2485:ARG:HH11	1:A:2530:ARG:NH1	2.16	0.43
1:A:3425:ARG:HE	1:A:3425:ARG:HB2	1.56	0.43
1:A:3825:LYS:C	1:A:3828:TYR:H	2.22	0.43
1:A:62:ASP:O	1:A:67:VAL:HG23	2.19	0.43
1:A:108:LYS:HE2	1:A:108:LYS:HB2	1.68	0.43
1:A:575:ILE:O	1:A:579:LEU:HD13	2.18	0.43
1:A:785:MET:CE	1:A:788:TYR:HB3	2.48	0.43
1:A:971:ARG:HG3	1:A:972:LEU:H	1.82	0.43
1:A:1149:LYS:O	1:A:1152:ARG:N	2.51	0.43
1:A:1373:VAL:C	1:A:1375:THR:N	2.71	0.43
1:A:1521:PHE:N	1:A:1524:LEU:HD13	2.32	0.43
1:A:2166:SER:C	1:A:2168:LEU:H	2.21	0.43
1:A:3005:LEU:HB3	1:A:3006:ALA:H	1.58	0.43
1:A:3118:ASP:C	1:A:3120:LEU:N	2.69	0.43
1:A:3141:PHE:CE1	1:A:3145:ILE:HD11	2.53	0.43
1:A:3660:ASN:O	1:A:3663:THR:HG22	2.19	0.43
1:A:204:LEU:HD21	1:A:223:CYS:SG	2.58	0.43
1:A:286:LEU:HD12	1:A:286:LEU:O	2.19	0.43
1:A:653:LEU:HD13	1:A:653:LEU:O	2.18	0.43
1:A:790:LYS:HG3	1:A:791:ASP:N	2.33	0.43
1:A:1763:THR:OG1	1:A:1857:LYS:HA	2.19	0.43
1:A:1865:THR:O	1:A:1868:THR:HB	2.18	0.43
1:A:2100:LEU:CD2	1:A:2100:LEU:C	2.85	0.43
1:A:2316:TYR:O	1:A:2319:ALA:HB3	2.19	0.43
1:A:3027:LEU:HA	1:A:3030:ILE:HB	2.01	0.43
1:A:3858:MET:CB	1:A:3864:ARG:HH21	2.31	0.43
1:A:287:LEU:HD11	1:A:294:PHE:HB3	2.01	0.43
1:A:464:VAL:HG23	1:A:465:PHE:N	2.33	0.43
1:A:1055:ASN:O	1:A:1059:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:1489:LYS:O	1:A:1490:GLY:C	2.57	0.43
1:A:2060:ARG:HA	1:A:2063:THR:OG1	2.19	0.43
1:A:2097:LEU:CD2	1:A:2143:ARG:CG	2.85	0.43
1:A:2858:ILE:HD11	1:A:2884:LEU:CB	2.48	0.43
1:A:2870:SER:O	1:A:2872:ASP:N	2.52	0.43
1:A:2930:TYR:O	1:A:2934:GLY:N	2.40	0.43
1:A:3177:ASN:CB	1:A:3178:ILE:HD12	2.47	0.43
1:A:3506:LEU:HD13	1:A:3517:SER:CB	2.46	0.43
1:A:3676:PRO:HG2	1:A:3677:PRO:HD3	2.00	0.43
1:A:4025:GLY:O	1:A:4028:ILE:HG22	2.19	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4056:PRO:HG2	1:A:4095:GLU:O	2.19	0.43
1:A:37:GLY:O	1:A:41:GLU:HG3	2.18	0.43
1:A:291:VAL:HA	1:A:294:PHE:CD1	2.54	0.43
1:A:871:LEU:CD2	1:A:3121:LEU:HD21	2.48	0.43
1:A:1010:LEU:O	1:A:1014:LEU:HD22	2.19	0.43
1:A:1021:VAL:O	1:A:1024:THR:HG22	2.19	0.43
1:A:2874:ALA:O	1:A:2878:ALA:HB3	2.18	0.43
1:A:335:LYS:NZ	1:A:378:ALA:HB2	2.34	0.43
1:A:535:LEU:HD22	1:A:627:VAL:CG2	2.49	0.43
1:A:563:LEU:HD12	1:A:616:LYS:HZ3	1.82	0.43
1:A:632:GLU:O	1:A:635:PRO:HG2	2.19	0.43
1:A:862:LEU:H	1:A:862:LEU:HD12	1.84	0.43
1:A:1394:HIS:O	1:A:1397:ASP:HB2	2.19	0.43
1:A:2282:ALA:H	1:A:2287:PRO:HD3	1.84	0.43
1:A:2566:THR:HG23	1:A:2567:SER:N	2.34	0.43
1:A:2880:CYS:SG	1:A:2924:VAL:HG11	2.59	0.43
1:A:2929:LEU:O	1:A:2930:TYR:HB2	2.19	0.43
1:A:3446:VAL:HG23	1:A:3465:PHE:HE1	1.83	0.43
1:A:560:LEU:CD1	1:A:561:ASN:HD22	2.25	0.43
1:A:1115:HIS:O	1:A:1117:ASP:N	2.52	0.43
1:A:1220:LEU:O	1:A:1223:THR:OG1	2.29	0.43
1:A:1373:VAL:HG11	1:A:1418:HIS:NE2	2.34	0.43
1:A:2047:THR:O	1:A:2050:GLN:HB2	2.19	0.43
1:A:2517:LEU:HD23	1:A:2517:LEU:H	1.84	0.43
1:A:3247:ARG:HD3	1:A:3281:CYS:SG	2.59	0.43
1:A:3506:LEU:HD11	1:A:3515:GLN:O	2.19	0.43
1:A:408:TYR:O	1:A:410:MET:N	2.51	0.43
1:A:911:LEU:O	1:A:914:VAL:HB	2.19	0.43
1:A:1068:LEU:C	1:A:1068:LEU:HD12	2.39	0.43
1:A:1176:CYS:C	1:A:1178:ARG:H	2.23	0.43
1:A:1358:LEU:HD23	1:A:1358:LEU:O	2.18	0.43
1:A:1874:TYR:HE1	1:A:1885:PRO:HG3	1.84	0.43
1:A:2425:ARG:HH21	1:A:2457:PRO:HD3	1.82	0.43
1:A:3515:GLN:C	1:A:3517:SER:N	2.72	0.43
1:A:3829:LEU:HD11	1:A:3833:ARG:HH21	1.82	0.43
1:A:473:PRO:HD2	1:A:1560:TYR:OH	2.19	0.42
1:A:1463:LEU:O	1:A:1463:LEU:HD13	2.19	0.42
1:A:1982:ILE:HG22	1:A:1986:ARG:HE	1.83	0.42
1:A:3103:ILE:HG21	1:A:3139:GLN:OE1	2.19	0.42
1:A:3967:PHE:HE1	1:A:3971:MET:HE2	1.83	0.42
1:A:4121:TRP:CE3	1:A:4121:TRP:HA	2.54	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:307:GLU:HB2	1:A:308:LEU:HD22	1.99	0.42
1:A:1295:ALA:O	1:A:1299:GLU:N	2.50	0.42
1:A:2046:SER:O	1:A:2049:VAL:HB	2.19	0.42
1:A:2094:MET:O	1:A:2098:THR:HG23	2.20	0.42
1:A:2312:TYR:CD1	1:A:2314:GLU:O	2.70	0.42
1:A:3786:LEU:O	1:A:3910:LEU:HD21	2.19	0.42
1:A:3967:PHE:CE1	1:A:3971:MET:HE2	2.54	0.42
1:A:984:TYR:HD2	1:A:984:TYR:HA	1.62	0.42
1:A:1594:SER:O	1:A:1597:LEU:HB3	2.19	0.42
1:A:2926:LEU:O	1:A:2931:ARG:NH2	2.45	0.42
1:A:3098:ARG:O	1:A:3102:TYR:HD2	2.03	0.42
1:A:3736:LYS:HE3	1:A:3736:LYS:HB2	1.65	0.42
1:A:4048:LYS:O	1:A:4051:LEU:HB2	2.19	0.42
1:A:13:LEU:HA	1:A:16:GLN:NE2	2.34	0.42
1:A:169:THR:HB	1:A:218:PRO:HG3	2.00	0.42
1:A:655:LEU:N	1:A:655:LEU:CD2	2.73	0.42
1:A:995:PHE:CD2	1:A:1003:SER:HA	2.51	0.42
1:A:1871:MET:HA	1:A:1874:TYR:CD1	2.54	0.42
1:A:2164:TRP:O	1:A:2167:PRO:HD2	2.19	0.42
1:A:2439:ILE:H	1:A:2439:ILE:HG13	1.48	0.42
1:A:2552:VAL:HG11	1:A:2553:HIS:CE1	2.48	0.42
1:A:4011:PHE:HA	1:A:4015:ASN:HB2	2.01	0.42
1:A:535:LEU:HD22	1:A:627:VAL:HG21	2.01	0.42
1:A:699:GLU:OE1	1:A:699:GLU:N	2.52	0.42
1:A:1014:LEU:HD21	1:A:1028:PHE:CE2	2.54	0.42
1:A:1015:ASP:O	1:A:1018:VAL:N	2.50	0.42
1:A:1495:ASP:OD1	1:A:1496:GLU:N	2.52	0.42
1:A:1688:LEU:HA	1:A:1688:LEU:HD22	1.89	0.42
1:A:1984:LEU:CD1	1:A:1984:LEU:C	2.85	0.42
1:A:2096:PRO:HA	1:A:2099:ALA:HB3	2.01	0.42
1:A:3319:ASN:O	1:A:3322:ALA:HB3	2.19	0.42
1:A:3876:SER:HA	1:A:3879:PRO:HD2	2.01	0.42
1:A:852:ARG:O	1:A:856:VAL:HG23	2.20	0.42
1:A:3398:PRO:HG2	1:A:3399:PRO:HD3	2.02	0.42
1:A:3640:PHE:HB3	1:A:3644:PHE:CE2	2.54	0.42
1:A:3767:LEU:O	1:A:3771:MET:HG2	2.20	0.42
1:A:414:LEU:HD22	1:A:442:GLN:HG3	2.01	0.42
1:A:416:SER:HA	1:A:419:SER:HB2	2.02	0.42
1:A:560:LEU:CD1	1:A:561:ASN:ND2	2.83	0.42
1:A:883:TYR:CD2	1:A:911:LEU:HD21	2.55	0.42
1:A:1248:PHE:C	1:A:1250:LEU:N	2.73	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1373:VAL:O	1:A:1375:THR:HG22	2.20	0.42
1:A:1557:GLU:C	1:A:1559:PHE:H	2.22	0.42
1:A:1640:GLU:O	1:A:1644:ALA:HB2	2.20	0.42
1:A:2477:LEU:O	1:A:2481:HIS:N	2.53	0.42
1:A:3622:ALA:HB1	1:A:3623:PRO:HD2	2.00	0.42
1:A:3988:LEU:HD11	1:A:3992:ARG:CZ	2.50	0.42
1:A:1042:LYS:HD2	1:A:1042:LYS:HA	1.83	0.42
1:A:2313:LYS:O	1:A:2316:TYR:CE2	2.70	0.42
1:A:2552:VAL:HG22	1:A:2553:HIS:N	2.35	0.42
1:A:3065:ILE:HD12	1:A:3065:ILE:HA	1.82	0.42
1:A:3462:ARG:O	1:A:3466:PRO:HD2	2.20	0.42
1:A:3964:THR:HG23	1:A:4127:TRP:C	2.39	0.42
1:A:132:ILE:O	1:A:135:LEU:HB2	2.20	0.42
1:A:1009:LEU:HA	1:A:1012:ALA:HB3	2.01	0.42
1:A:1590:THR:HG23	1:A:1591:LYS:N	2.34	0.42
1:A:1981:LEU:O	1:A:1984:LEU:HG	2.20	0.42
1:A:1992:VAL:HG23	1:A:2044:ASP:OD2	2.19	0.42
1:A:2135:ASN:O	1:A:2137:ILE:N	2.48	0.42
1:A:2137:ILE:HG23	1:A:2140:LEU:HD12	2.01	0.42
1:A:2220:MET:HA	1:A:2223:VAL:HG22	2.02	0.42
1:A:2869:LEU:CA	1:A:2892:LEU:HD12	2.50	0.42
1:A:2915:ARG:C	1:A:2918:PRO:HD2	2.39	0.42
1:A:3118:ASP:O	1:A:3120:LEU:N	2.49	0.42
1:A:3231:ILE:O	1:A:3235:LYS:HG3	2.19	0.42
1:A:3259:LEU:HD13	1:A:3279:SER:HB2	2.01	0.42
1:A:3493:TRP:HB3	1:A:3494:GLN:H	1.62	0.42
1:A:4080:VAL:CG1	1:A:4116:ILE:CB	2.98	0.42
1:A:348:ILE:H	1:A:348:ILE:HG13	1.68	0.42
1:A:385:TYR:OH	1:A:435:LEU:HD23	2.20	0.42
1:A:474:VAL:HG13	1:A:1560:TYR:OH	2.20	0.42
1:A:573:LEU:O	1:A:576:VAL:HB	2.19	0.42
1:A:1157:PHE:N	1:A:1158:PRO:HD2	2.31	0.42
1:A:1468:LEU:HB2	1:A:1469:PRO:HD3	2.01	0.42
1:A:1710:LEU:HD23	1:A:1710:LEU:HA	1.75	0.42
1:A:2344:LEU:O	1:A:2348:GLN:HG3	2.19	0.42
1:A:2822:LYS:HG3	1:A:2823:PHE:HD2	1.85	0.42
1:A:3052:LEU:HG	1:A:3188:PHE:CE2	2.55	0.42
1:A:3141:PHE:CE1	1:A:3145:ILE:HG13	2.55	0.42
1:A:3240:MET:SD	1:A:3262:LEU:HD21	2.60	0.42
1:A:3287:ARG:CB	1:A:3293:CYS:CB	2.97	0.42
1:A:3758:LEU:HD22	1:A:3761:ASP:OD2	2.19	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4104:VAL:HA	1:A:4107:LEU:HB2	2.01	0.42
1:A:265:TYR:CE1	1:A:300:TRP:HZ3	2.38	0.41
1:A:273:ARG:HG3	1:A:274:LEU:N	2.35	0.41
1:A:376:ILE:CB	1:A:423:TYR:HE2	2.33	0.41
1:A:559:SER:O	1:A:563:LEU:HG	2.20	0.41
1:A:636:GLU:OE1	1:A:636:GLU:HA	2.20	0.41
1:A:641:PHE:CA	1:A:644:PRO:HD3	2.49	0.41
1:A:989:MET:HA	1:A:992:ILE:CG1	2.48	0.41
1:A:1362:ASP:OD1	1:A:1362:ASP:N	2.52	0.41
1:A:1676:ILE:O	1:A:1678:LEU:N	2.41	0.41
1:A:1911:LEU:HD23	1:A:1911:LEU:HA	1.91	0.41
1:A:2068:ARG:O	1:A:2069:ARG:HB2	2.16	0.41
1:A:2510:LEU:HD22	1:A:2522:ARG:HG3	2.02	0.41
1:A:2871:LEU:HD22	1:A:2873:PRO:CB	2.49	0.41
1:A:2911:ARG:C	1:A:2913:LYS:H	2.24	0.41
1:A:2953:THR:H	1:A:2953:THR:HG1	1.62	0.41
1:A:3619:ASP:N	1:A:3620:PRO:CD	2.83	0.41
1:A:4013:TRP:O	1:A:4015:ASN:N	2.48	0.41
1:A:173:LYS:O	1:A:176:GLU:N	2.53	0.41
1:A:966:PHE:N	1:A:967:PRO:CD	2.83	0.41
1:A:1033:ILE:HD13	1:A:1034:ARG:NH1	2.34	0.41
1:A:1121:LEU:C	1:A:1123:THR:N	2.72	0.41
1:A:2187:VAL:O	1:A:2190:VAL:HG22	2.20	0.41
1:A:2287:PRO:C	1:A:2289:ASP:N	2.72	0.41
1:A:2460:GLU:O	1:A:2462:VAL:N	2.54	0.41
1:A:3283:LEU:HG	1:A:3300:VAL:CG2	2.44	0.41
1:A:3856:MET:CB	1:A:4072:PRO:HG2	2.50	0.41
1:A:3883:LEU:HD13	1:A:3970:LEU:HB2	2.02	0.41
1:A:3954:PRO:HG2	1:A:4031:ILE:HD11	2.02	0.41
1:A:204:LEU:HD11	1:A:223:CYS:HB3	2.02	0.41
1:A:557:SER:O	1:A:561:ASN:CB	2.63	0.41
1:A:1068:LEU:C	1:A:1068:LEU:CD1	2.88	0.41
1:A:1487:VAL:HG13	1:A:1488:TYR:N	2.35	0.41
1:A:1966:LEU:HD13	1:A:1991:PRO:HB3	2.02	0.41
1:A:2320:ALA:HA	1:A:2323:LEU:HD12	2.01	0.41
1:A:2789:SER:O	1:A:2793:PRO:HD3	2.20	0.41
1:A:3525:TYR:N	1:A:3526:PRO:HD2	2.35	0.41
1:A:3631:LYS:O	1:A:3634:GLN:HB3	2.20	0.41
1:A:4057:ALA:HB1	1:A:4060:THR:HB	2.02	0.41
1:A:344:GLN:O	1:A:348:ILE:HG13	2.20	0.41
1:A:573:LEU:HD23	1:A:573:LEU:HA	1.93	0.41

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:660:LEU:HD12	1:A:661:PRO:HG3	2.03	0.41
1:A:715:ALA:HB2	1:A:734:LEU:CD2	2.51	0.41
1:A:1060:PHE:HA	1:A:1063:LEU:HG	2.03	0.41
1:A:1224:PHE:CD1	1:A:1228:GLY:HA3	2.56	0.41
1:A:2472:GLN:HG3	1:A:2476:ILE:HG23	2.02	0.41
1:A:2485:ARG:CD	1:A:2530:ARG:HH12	2.34	0.41
1:A:2922:ARG:HA	1:A:2930:TYR:CD1	2.52	0.41
1:A:3389:VAL:HA	1:A:3392:ALA:HB3	2.02	0.41
1:A:3906:SER:O	1:A:3910:LEU:HD13	2.20	0.41
1:A:3980:MET:C	1:A:3982:SER:H	2.23	0.41
1:A:4031:ILE:O	1:A:4035:GLU:N	2.52	0.41
1:A:310:LYS:HE3	1:A:310:LYS:HB2	1.85	0.41
1:A:349:ILE:HG12	1:A:364:ARG:HD2	2.03	0.41
1:A:464:VAL:CG2	1:A:465:PHE:N	2.84	0.41
1:A:1070:PRO:CG	1:A:3741:ARG:HH21	2.24	0.41
1:A:2190:VAL:HA	1:A:2193:ILE:CG2	2.46	0.41
1:A:2259:LYS:CE	1:A:2261:SER:HB3	2.51	0.41
1:A:2285:LEU:O	1:A:2286:PRO:C	2.58	0.41
1:A:2557:LEU:HD12	1:A:2557:LEU:N	2.34	0.41
1:A:2822:LYS:HG3	1:A:2823:PHE:CD2	2.56	0.41
1:A:3048:LYS:HE3	1:A:3049:LEU:HD23	2.02	0.41
1:A:3297:VAL:HG13	1:A:3328:ILE:HG22	2.03	0.41
1:A:3966:GLN:HA	1:A:3969:ASN:OD1	2.19	0.41
1:A:267:VAL:CG2	1:A:268:PRO:HD3	2.49	0.41
1:A:348:ILE:HG23	1:A:357:LYS:HE3	2.01	0.41
1:A:613:HIS:O	1:A:617:PRO:HD2	2.21	0.41
1:A:1476:HIS:O	1:A:1479:VAL:HB	2.20	0.41
1:A:1867:ILE:O	1:A:1871:MET:N	2.53	0.41
1:A:2317:ALA:O	1:A:2319:ALA:N	2.54	0.41
1:A:2398:LEU:HD22	1:A:2432:GLN:HA	2.02	0.41
1:A:3333:THR:HG21	1:A:3386:SER:HB3	2.02	0.41
1:A:3409:VAL:HG23	1:A:3410:ILE:N	2.36	0.41
1:A:3738:ILE:N	1:A:3750:PHE:O	2.47	0.41
1:A:3994:ASP:OD1	1:A:3994:ASP:N	2.54	0.41
1:A:804:ALA:HB2	1:A:855:VAL:HG11	2.02	0.41
1:A:1746:PHE:O	1:A:1750:LEU:HG	2.21	0.41
1:A:2046:SER:HB2	1:A:2096:PRO:HG3	2.02	0.41
1:A:2276:LEU:O	1:A:2280:VAL:HG22	2.21	0.41
1:A:3291:GLN:HA	1:A:3291:GLN:HE21	1.85	0.41
1:A:157:TYR:HD1	1:A:160:LEU:HD21	1.83	0.41
1:A:390:GLN:O	1:A:393:LYS:HG2	2.20	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:473:PRO:C	1:A:475:LEU:H	2.23	0.41
1:A:480:SER:HA	1:A:483:VAL:CG2	2.32	0.41
1:A:1713:VAL:HA	1:A:1716:GLN:OE1	2.21	0.41
1:A:1989:ASN:O	1:A:1993:GLU:HB2	2.21	0.41
1:A:2260:PHE:C	1:A:2262:GLY:H	2.24	0.41
1:A:3283:LEU:HD22	1:A:3296:GLN:CB	2.40	0.41
1:A:3303:THR:HG22	1:A:3306:LEU:HD22	2.01	0.41
1:A:3387:GLU:HA	1:A:3390:GLN:HB3	2.03	0.41
1:A:3980:MET:C	1:A:3982:SER:N	2.74	0.41
1:A:3997:LEU:H	1:A:3997:LEU:HD12	1.85	0.41
1:A:461:ILE:HG23	1:A:465:PHE:CE2	2.55	0.41
1:A:481:THR:HG23	1:A:558:GLU:OE1	2.21	0.41
1:A:720:GLN:O	1:A:1020:PRO:HB2	2.21	0.41
1:A:1009:LEU:O	1:A:1013:ILE:HG12	2.20	0.41
1:A:1096:VAL:C	1:A:1098:GLN:H	2.24	0.41
1:A:1148:ALA:HA	1:A:1151:ARG:NH2	2.32	0.41
1:A:1388:ASP:HA	1:A:1392:MET:CB	2.50	0.41
1:A:1571:LEU:HD22	1:A:1600:MET:N	2.36	0.41
1:A:1647:ALA:O	1:A:1651:LYS:HG2	2.21	0.41
1:A:1941:HIS:HB3	1:A:1990:PHE:HZ	1.85	0.41
1:A:2232:ARG:H	1:A:2232:ARG:HG3	1.52	0.41
1:A:3128:LYS:O	1:A:3130:GLN:N	2.53	0.41
1:A:3239:LYS:HD2	1:A:3239:LYS:HA	1.87	0.41
1:A:3334:TYR:CG	1:A:3335:ARG:N	2.88	0.41
1:A:3559:LYS:O	1:A:3562:LEU:HG	2.21	0.41
1:A:3568:ILE:N	1:A:3568:ILE:CD1	2.73	0.41
1:A:3683:CYS:SG	1:A:3724:GLU:HG2	2.61	0.41
1:A:3828:TYR:CD1	1:A:3831:ASP:OD2	2.73	0.41
1:A:3875:GLU:O	1:A:3879:PRO:HD3	2.21	0.41
1:A:3964:THR:HG22	1:A:3966:GLN:HG3	2.01	0.41
1:A:234:PHE:CD2	1:A:278:HIS:HE1	2.39	0.41
1:A:398:THR:HB	1:A:401:ASP:OD2	2.21	0.41
1:A:562:HIS:O	1:A:562:HIS:CG	2.74	0.41
1:A:967:PRO:HB3	1:A:1031:ARG:NH1	2.35	0.41
1:A:3167:ARG:HH11	1:A:3186:ARG:HH12	1.67	0.41
1:A:3535:ILE:HG13	1:A:3536:SER:N	2.35	0.41
1:A:234:PHE:HD2	1:A:278:HIS:HE1	1.68	0.40
1:A:436:GLU:O	1:A:439:VAL:N	2.49	0.40
1:A:613:HIS:O	1:A:617:PRO:CD	2.70	0.40
1:A:706:LEU:HA	1:A:709:LYS:HB3	2.02	0.40
1:A:732:PHE:CD2	1:A:733:LEU:N	2.89	0.40

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:963:LYS:HD3	1:A:963:LYS:HA	1.75	0.40
1:A:973:ALA:HB1	1:A:980:THR:HB	2.03	0.40
1:A:1938:ARG:HB2	1:A:1986:ARG:HH21	1.85	0.40
1:A:1991:PRO:O	1:A:1994:VAL:HG12	2.21	0.40
1:A:2918:PRO:HA	1:A:2921:LEU:CD2	2.51	0.40
1:A:3284:SER:O	1:A:3287:ARG:HB2	2.21	0.40
1:A:1009:LEU:HD23	1:A:1010:LEU:H	1.86	0.40
1:A:1056:THR:HA	1:A:1059:LEU:HG	2.02	0.40
1:A:1363:LEU:HA	1:A:1363:LEU:HD23	1.87	0.40
1:A:1809:ASP:N	1:A:1810:PRO:HD2	2.36	0.40
1:A:1959:LEU:HD22	1:A:1959:LEU:HA	1.79	0.40
1:A:2086:ASP:O	1:A:2089:ASN:CB	2.69	0.40
1:A:2089:ASN:O	1:A:2090:ARG:CB	2.69	0.40
1:A:2816:ILE:O	1:A:2820:MET:HG3	2.21	0.40
1:A:2990:GLU:HB3	1:A:2994:TRP:NE1	2.37	0.40
1:A:3844:THR:HA	1:A:3847:SER:O	2.21	0.40
1:A:3934:THR:O	1:A:3934:THR:OG1	2.38	0.40
1:A:208:MET:O	1:A:209:THR:HG23	2.22	0.40
1:A:441:MET:O	1:A:445:SER:N	2.54	0.40
1:A:447:PRO:HG3	1:A:530:LEU:CB	2.52	0.40
1:A:633:ILE:O	1:A:637:LYS:CA	2.68	0.40
1:A:1036:PHE:O	1:A:1039:TRP:HB3	2.21	0.40
1:A:1730:PRO:N	1:A:1731:PRO:HD2	2.36	0.40
1:A:2469:CYS:O	1:A:2473:MET:N	2.38	0.40
1:A:2539:LEU:HD13	1:A:2539:LEU:HA	1.84	0.40
1:A:2871:LEU:HD23	1:A:2871:LEU:O	2.21	0.40
1:A:2911:ARG:O	1:A:2913:LYS:N	2.54	0.40
1:A:35:ILE:O	1:A:39:GLY:N	2.53	0.40
1:A:471:LYS:HA	1:A:1553:PHE:CZ	2.56	0.40
1:A:639:ALA:O	1:A:703:CYS:SG	2.79	0.40
1:A:785:MET:HE3	1:A:788:TYR:HB3	2.02	0.40
1:A:787:PRO:HA	1:A:789:TYR:HE1	1.86	0.40
1:A:956:PRO:HB2	1:A:957:PRO:CD	2.51	0.40
1:A:1097:GLU:HA	1:A:1100:VAL:CG1	2.50	0.40
1:A:1292:LYS:NZ	1:A:1358:LEU:HD21	2.36	0.40
1:A:1573:LYS:NZ	1:A:1577:LEU:HD21	2.37	0.40
1:A:2141:ASN:O	1:A:2144:LEU:N	2.55	0.40
1:A:2182:ILE:O	1:A:2186:VAL:HG12	2.22	0.40
1:A:2226:PRO:HB3	1:A:2234:ASN:CG	2.41	0.40
1:A:2451:LEU:HD11	1:A:2480:ILE:HD11	2.04	0.40
1:A:2562:LEU:CD2	1:A:2565:MET:HE3	2.50	0.40

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1135:CYS:HA	1:A:1138:ILE:CD1	2.51	0.40
1:A:1259:LEU:HD21	1:A:1337:VAL:HA	2.03	0.40
1:A:1558:TYR:O	1:A:1562:LEU:HD22	2.22	0.40
1:A:1911:LEU:HD13	1:A:1916:ILE:CG2	2.49	0.40
1:A:2439:ILE:O	1:A:2442:MET:N	2.50	0.40
1:A:2814:SER:C	1:A:2816:ILE:N	2.74	0.40
1:A:3465:PHE:N	1:A:3466:PRO:HD2	2.37	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	3511/4128 (85%)	2776 (79%)	547 (16%)	188 (5%)	<b>2</b> <b>22</b>

All (188) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	209	THR
1	A	565	TYR
1	A	623	PHE
1	A	624	ILE
1	A	638	GLN
1	A	652	GLU
1	A	768	VAL
1	A	868	LYS
1	A	1001	PHE
1	A	1070	PRO
1	A	1074	LYS
1	A	1163	LEU
1	A	1216	GLY
1	A	1420	ARG

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

<b>Mol</b>	<b>Chain</b>	<b>Res</b>	<b>Type</b>
1	A	1500	LEU
1	A	1567	ILE
1	A	1731	PRO
1	A	1891	ALA
1	A	1915	LEU
1	A	2069	ARG
1	A	2126	MET
1	A	2140	LEU
1	A	2315	VAL
1	A	2371	PHE
1	A	2372	PRO
1	A	2567	SER
1	A	3146	SER
1	A	3407	ALA
1	A	3499	ILE
1	A	3581	PRO
1	A	3920	ILE
1	A	3972	LEU
1	A	3979	LEU
1	A	4056	PRO
1	A	4072	PRO
1	A	333	MET
1	A	335	LYS
1	A	358	GLU
1	A	474	VAL
1	A	559	SER
1	A	707	PHE
1	A	740	ILE
1	A	782	ARG
1	A	904	VAL
1	A	956	PRO
1	A	1016	GLY
1	A	1073	PHE
1	A	1094	SER
1	A	1121	LEU
1	A	1165	LEU
1	A	1760	GLU
1	A	2000	ARG
1	A	2090	ARG
1	A	2124	SER
1	A	2356	MET
1	A	2412	TYR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

<b>Mol</b>	<b>Chain</b>	<b>Res</b>	<b>Type</b>
1	A	2795	GLN
1	A	2802	PRO
1	A	2946	GLU
1	A	3024	PRO
1	A	3118	ASP
1	A	3335	ARG
1	A	3497	SER
1	A	3677	PRO
1	A	3681	LYS
1	A	3744	ASP
1	A	3758	LEU
1	A	3777	GLN
1	A	3835	PRO
1	A	3922	ASP
1	A	3960	PRO
1	A	3980	MET
1	A	4040	PRO
1	A	4057	ALA
1	A	4089	ILE
1	A	28	ALA
1	A	98	GLN
1	A	162	LEU
1	A	307	GLU
1	A	334	HIS
1	A	430	VAL
1	A	751	ALA
1	A	878	GLU
1	A	903	PRO
1	A	945	ALA
1	A	1139	GLU
1	A	1141	LYS
1	A	1150	LYS
1	A	1161	ALA
1	A	1231	GLN
1	A	1238	GLN
1	A	1304	HIS
1	A	1437	TYR
1	A	1439	PRO
1	A	1729	PHE
1	A	1914	THR
1	A	2021	GLY
1	A	2123	PRO

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

<b>Mol</b>	<b>Chain</b>	<b>Res</b>	<b>Type</b>
1	A	2266	ASN
1	A	2284	ASP
1	A	2445	LYS
1	A	3034	PRO
1	A	3156	PRO
1	A	3494	GLN
1	A	3565	GLY
1	A	3704	GLN
1	A	3711	PRO
1	A	3771	MET
1	A	3785	ALA
1	A	3821	SER
1	A	3823	GLU
1	A	3936	GLY
1	A	3997	LEU
1	A	4021	LEU
1	A	140	SER
1	A	399	GLN
1	A	567	GLU
1	A	1130	ALA
1	A	1157	PHE
1	A	1370	ARG
1	A	1490	GLY
1	A	2067	ARG
1	A	2183	HIS
1	A	2319	ALA
1	A	2512	ASP
1	A	2914	ALA
1	A	2959	ALA
1	A	3516	HIS
1	A	3654	MET
1	A	3860	LYS
1	A	4014	LYS
1	A	4020	MET
1	A	4052	ALA
1	A	4119	ARG
1	A	705	ALA
1	A	739	ASN
1	A	949	PRO
1	A	1053	PRO
1	A	1178	ARG
1	A	1365	ASN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

<b>Mol</b>	<b>Chain</b>	<b>Res</b>	<b>Type</b>
1	A	1468	LEU
1	A	1469	PRO
1	A	1698	PHE
1	A	1708	GLU
1	A	2031	LEU
1	A	2135	ASN
1	A	2139	PRO
1	A	2185	MET
1	A	2223	VAL
1	A	2289	ASP
1	A	2353	GLN
1	A	2393	LEU
1	A	2553	HIS
1	A	3155	VAL
1	A	3567	VAL
1	A	3959	MET
1	A	3995	PRO
1	A	4041	ARG
1	A	4118	GLY
1	A	1020	PRO
1	A	2131	GLY
1	A	2205	VAL
1	A	2248	CYS
1	A	2261	SER
1	A	3019	ILE
1	A	495	VAL
1	A	1054	VAL
1	A	1122	GLY
1	A	2912	GLY
1	A	3496	ILE
1	A	1379	PRO
1	A	2022	PRO
1	A	2938	VAL
1	A	3619	ASP
1	A	3710	LYS
1	A	167	PRO
1	A	372	PRO
1	A	3526	PRO
1	A	4008	GLU
1	A	585	ILE
1	A	1276	VAL
1	A	1371	VAL

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1952	ILE
1	A	1955	VAL
1	A	2201	THR
1	A	2448	PRO
1	A	2778	GLY
1	A	3712	LEU

### 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	2460/3671 (67%)	2374 (96%)	86 (4%)	36 60

All (86) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	156	PHE
1	A	251	PHE
1	A	257	ARG
1	A	295	GLU
1	A	392	CYS
1	A	393	LYS
1	A	394	GLN
1	A	405	ASP
1	A	446	PHE
1	A	564	LEU
1	A	595	ASP
1	A	623	PHE
1	A	732	PHE
1	A	735	SER
1	A	736	LEU
1	A	803	SER
1	A	862	LEU
1	A	906	PHE
1	A	971	ARG
1	A	989	MET

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

<b>Mol</b>	<b>Chain</b>	<b>Res</b>	<b>Type</b>
1	A	994	TRP
1	A	1009	LEU
1	A	1014	LEU
1	A	1028	PHE
1	A	1034	ARG
1	A	1068	LEU
1	A	1070	PRO
1	A	1151	ARG
1	A	1289	SER
1	A	1363	LEU
1	A	1401	ASN
1	A	1553	PHE
1	A	1562	LEU
1	A	1588	ASP
1	A	1637	SER
1	A	1743	MET
1	A	1759	LEU
1	A	1880	MET
1	A	1900	PHE
1	A	1945	TYR
1	A	1953	CYS
1	A	1959	LEU
1	A	1983	ASP
1	A	2041	SER
1	A	2146	LEU
1	A	2156	VAL
1	A	2248	CYS
1	A	2306	ASN
1	A	2312	TYR
1	A	2472	GLN
1	A	2486	ASP
1	A	2499	PHE
1	A	2504	ASP
1	A	2514	ASN
1	A	2517	LEU
1	A	2519	LEU
1	A	2544	SER
1	A	2554	PHE
1	A	2555	LEU
1	A	2566	THR
1	A	2844	LEU
1	A	2931	ARG

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

<b>Mol</b>	<b>Chain</b>	<b>Res</b>	<b>Type</b>
1	A	2937	ASP
1	A	3050	LYS
1	A	3110	PHE
1	A	3114	TYR
1	A	3177	ASN
1	A	3271	ASP
1	A	3282	ARG
1	A	3352	GLU
1	A	3380	ARG
1	A	3411	ASP
1	A	3413	TYR
1	A	3451	LEU
1	A	3463	LEU
1	A	3493	TRP
1	A	3505	LEU
1	A	3768	PHE
1	A	3791	TYR
1	A	3796	MET
1	A	3812	LEU
1	A	3953	LEU
1	A	3962	ARG
1	A	4061	CYS
1	A	4062	ASP
1	A	4106	CYS

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (11) such sidechains are listed below:

<b>Mol</b>	<b>Chain</b>	<b>Res</b>	<b>Type</b>
1	A	16	GLN
1	A	442	GLN
1	A	561	ASN
1	A	869	ASN
1	A	993	HIS
1	A	1049	GLN
1	A	1055	ASN
1	A	3278	GLN
1	A	3291	GLN
1	A	3515	GLN
1	A	3927	ASN

### 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.

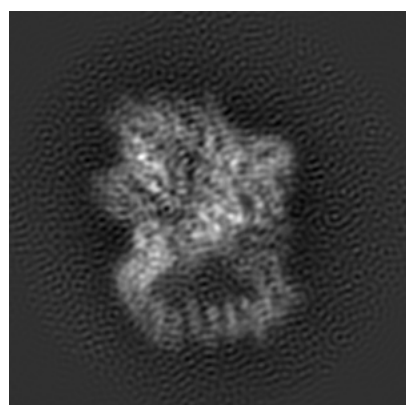
## 6 Map visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-8751. These allow visual inspection of the internal detail of the map and identification of artifacts.

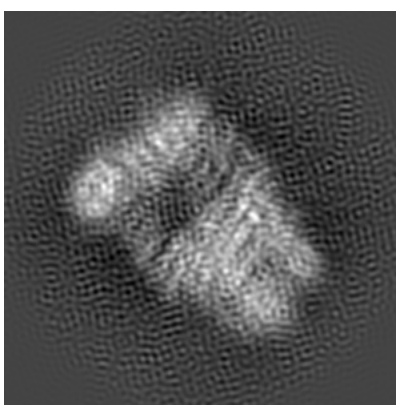
No raw map or half-maps were deposited for this entry and therefore no images, graphs, etc. pertaining to the raw map can be shown.

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

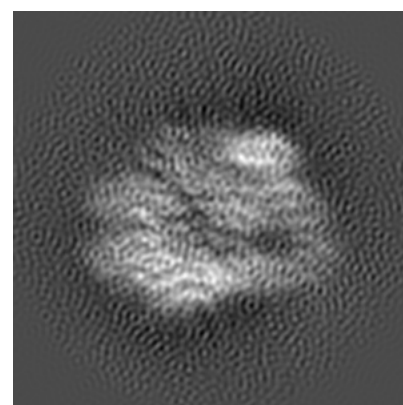
#### 6.1.1 Primary map



X



Y

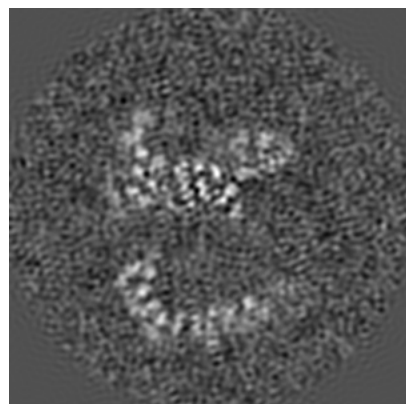


Z

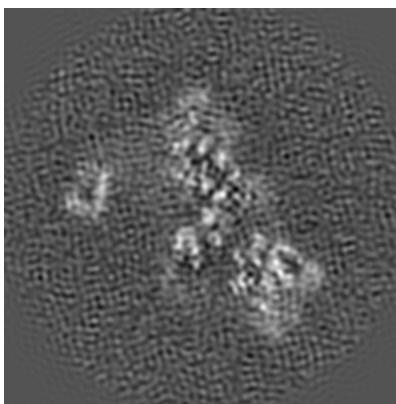
The images above show the map projected in three orthogonal directions.

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

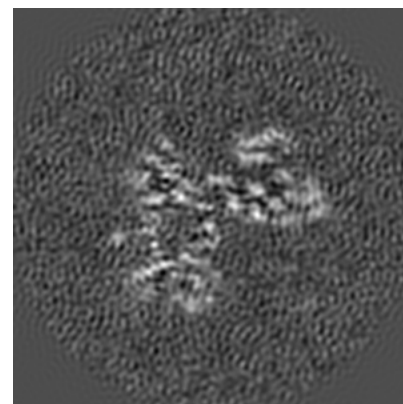
#### 6.2.1 Primary map



X Index: 80



Y Index: 80

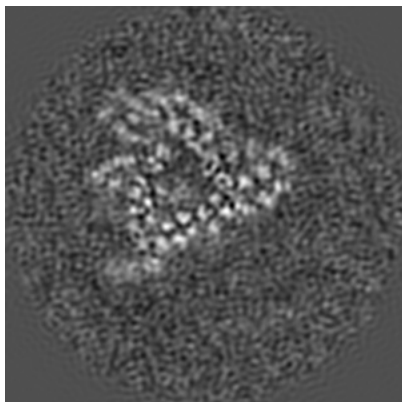


Z Index: 80

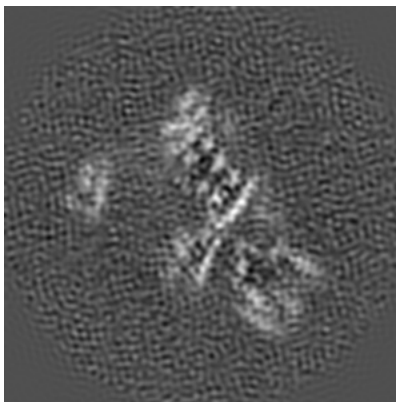
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

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

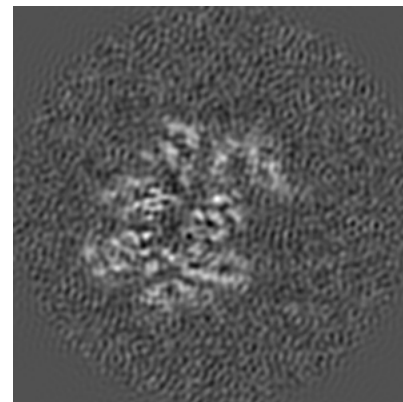
### 6.3.1 Primary map



X Index: 61



Y Index: 82

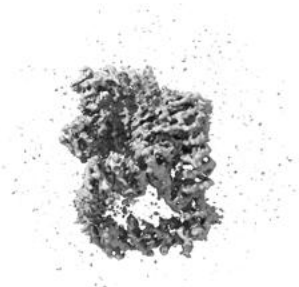


Z Index: 95

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

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

### 6.4.1 Primary map



X



Y



Z

The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.016. These images, in conjunction with the slice images, may facilitate assessment of whether an appropriate contour level has been provided.

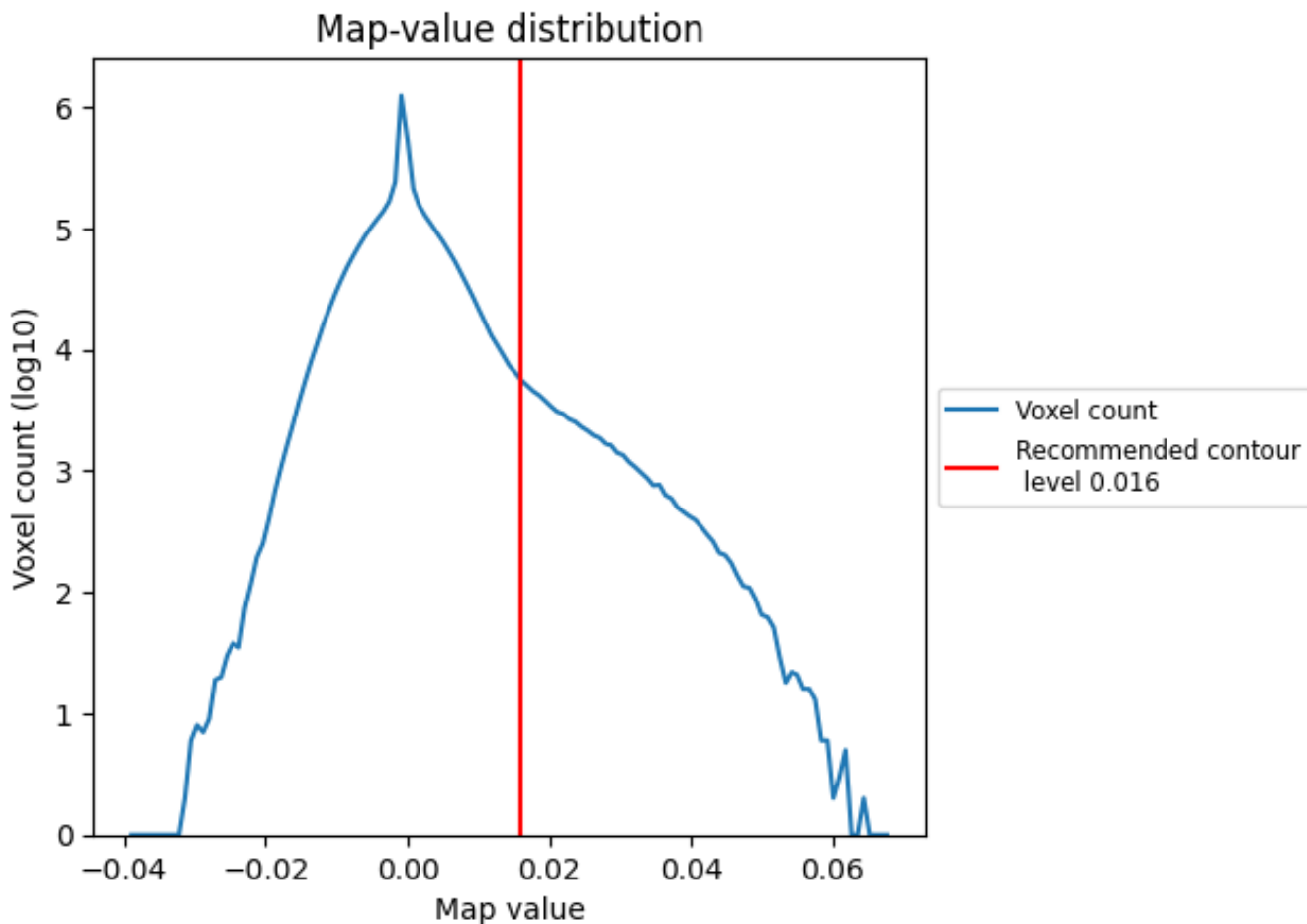
## 6.5 Mask visualisation

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.

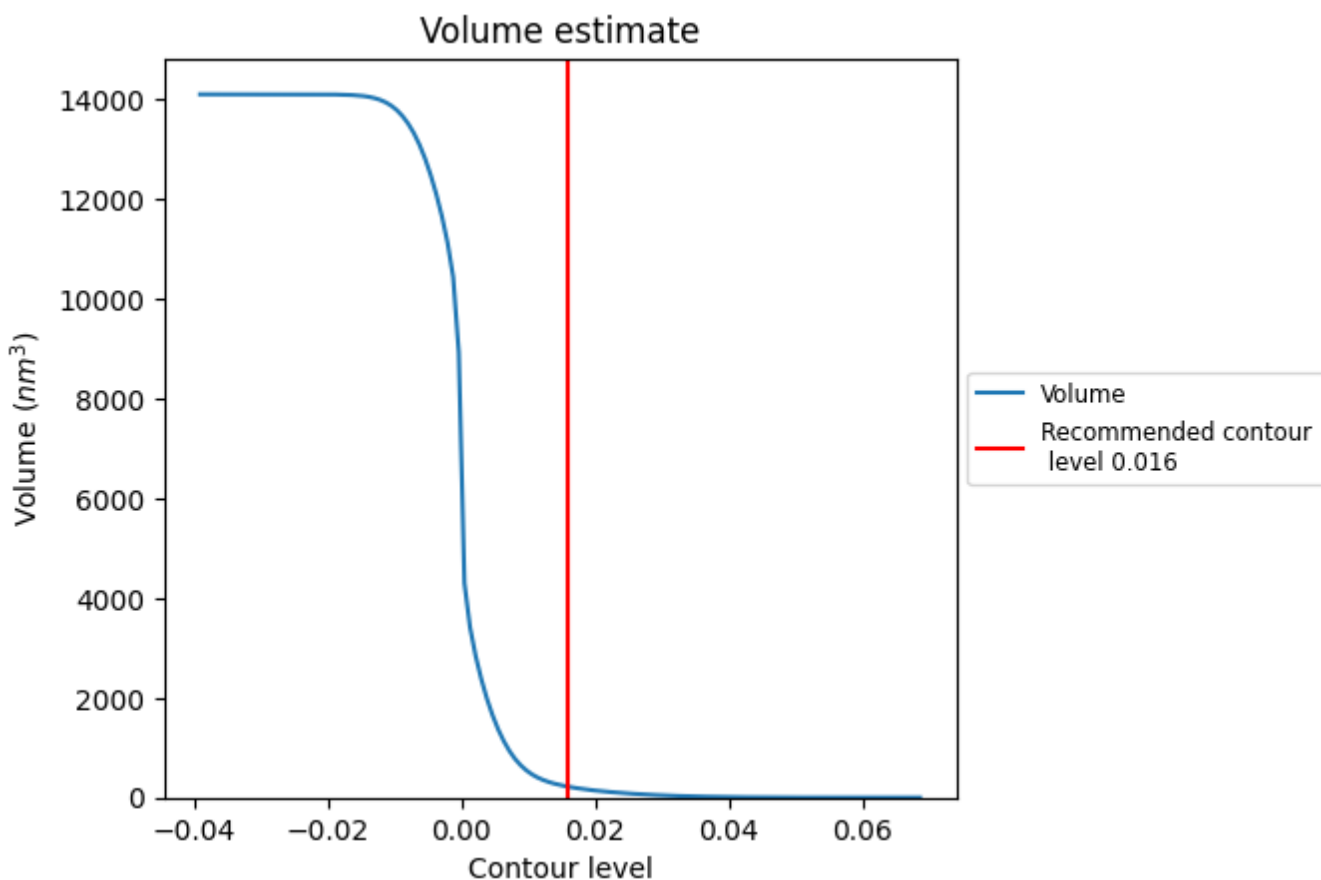
### 7.1 Map-value distribution [i](#)



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.



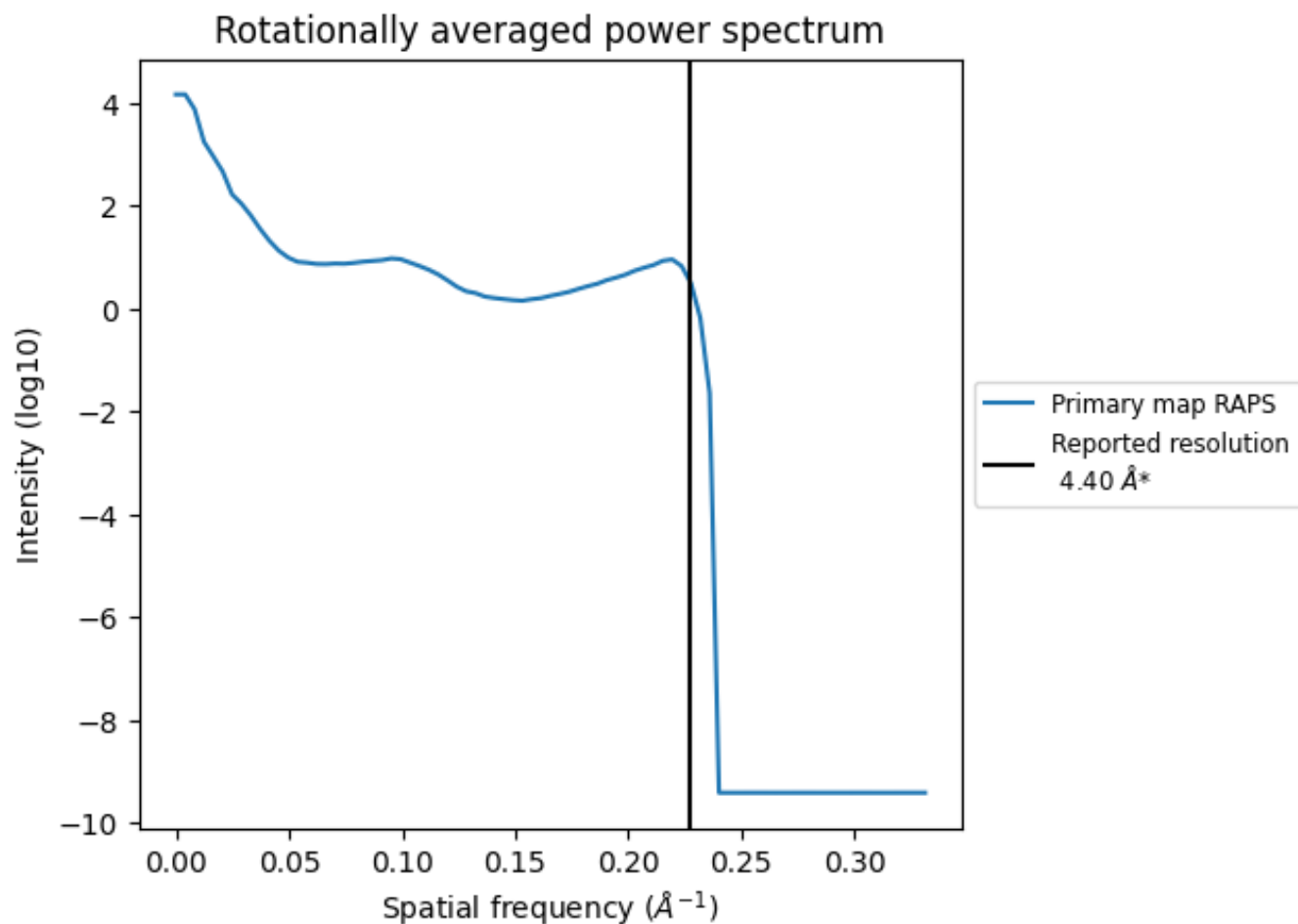
## 7.2 Volume estimate [i](#)



The volume at the recommended contour level is 219 nm<sup>3</sup>; this corresponds to an approximate mass of 197 kDa.

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

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



\*Reported resolution corresponds to spatial frequency of  $0.227 \text{\AA}^{-1}$

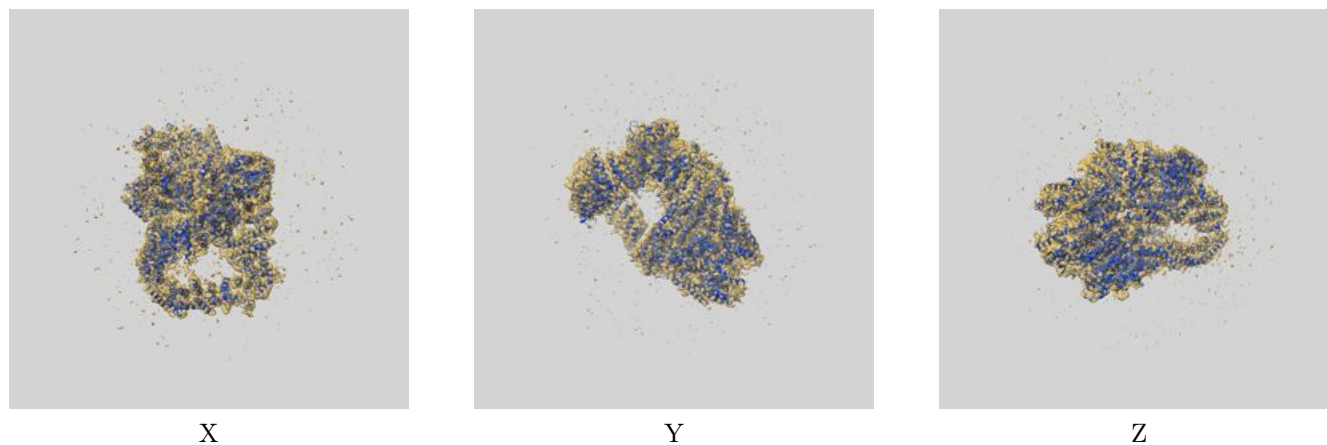
## 8 Fourier-Shell correlation

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

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

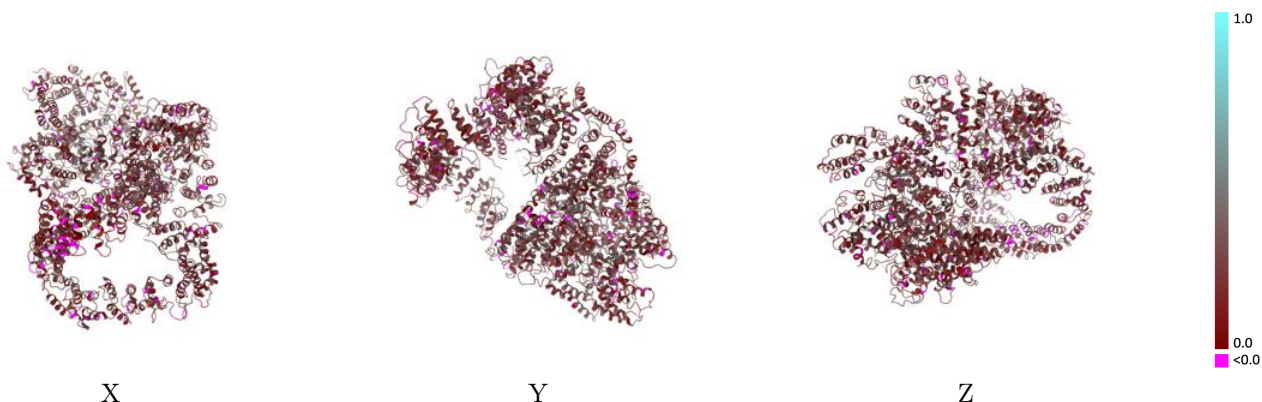
This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-8751 and PDB model 5W1R. Per-residue inclusion information can be found in section [3](#) on page [4](#).

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



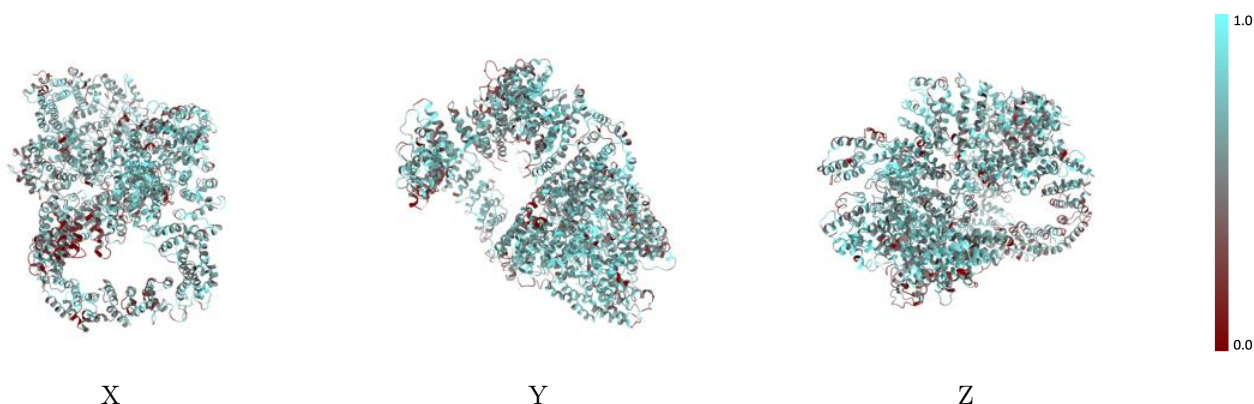
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.016 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

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



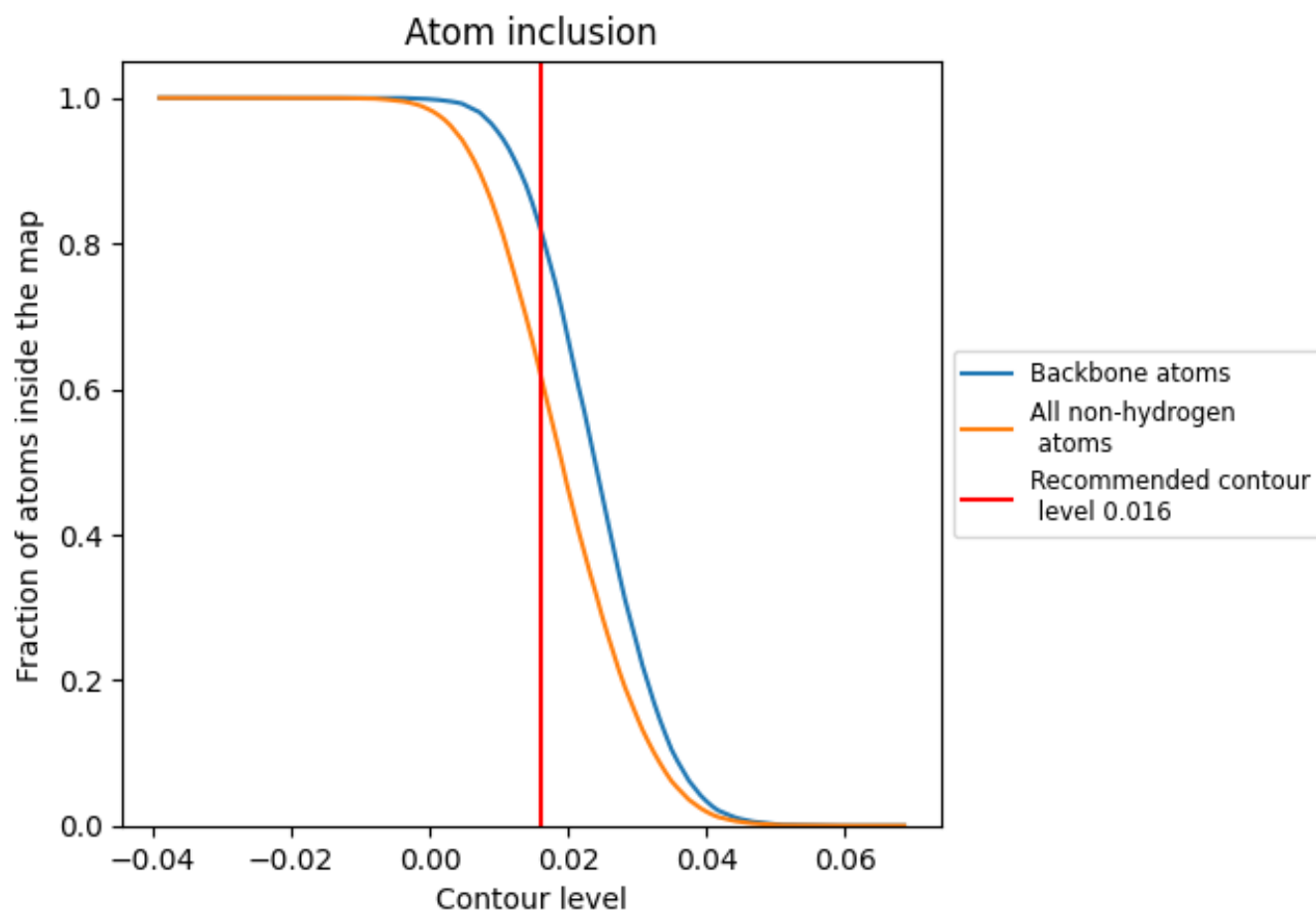
The images above show the model with each residue coloured according to its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions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

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



The images above show the model with each residue coloured according to its atom inclusion. This shows to what extent they are inside the map at the recommended contour level (0.016).





## 9.4 Atom inclusion [i](#)



At the recommended contour level, 82% of all backbone atoms, 62% 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 (0.016) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	 0.6212	 0.2350
A	 0.6212	 0.2350

