

Integrative Structure Validation Report

July 22, 2024 - 05:41 PM PDT

The following software was used in the production of this report:

Python-IHM Version 1.3

MolProbity Version 4.5.2

Integrative Modeling Validation Version 1.2

PDB ID	9A8C
PDB-Dev ID	PDBDEV_00000377
Structure Title	Escherichia coli sigma70 in apo form
Structure Authors	Joron, K.; Zamel, J.; Kalisman, N.; Lerner, E.

This is a PDB-Dev IM Structure Validation Report for a publicly released PDB-Dev entry.

We welcome your comments at pdb-dev@mail.wwpdb.org

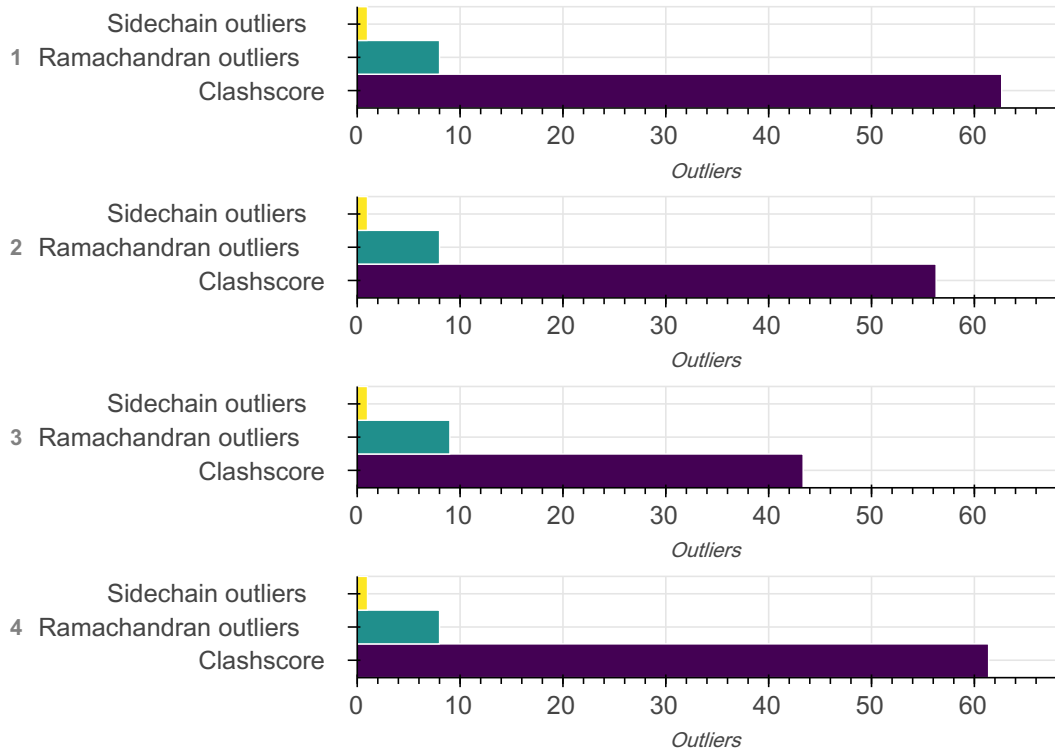
A user guide is available at https://pdb-dev.wwpdb.org/validation_help.html with specific help available everywhere you see the  symbol.

List of references used to build this report is available [here](#).

Overall quality

This validation report contains model quality assessments for all structures, data quality assessment for SAS datasets and fit to model assessments for SAS datasets. Data quality and fit to model assessments for other datasets and model uncertainty are under development. Number of plots is limited to 256.

Model Quality: MolProbity Analysis



Ensemble information ?

This entry consists of 0 distinct ensemble(s).

Summary ?

This entry consists of 4 unique models, with 1 subunits in each model. A total of 2 datasets or restraints were used to build this entry. Each model is represented by 0 rigid bodies and 1 flexible or non-rigid units.

Entry composition ?

There are 4 unique types of models in this entry. These models are titled None, None, None, None respectively.

Model ID	Subunit number	Subunit ID	Subunit name	Chain ID	Chain ID [auth]	Total residues
1	1	1	RNA polymerase sigma factor RpoD	A	A	536
2	1	1	RNA polymerase sigma factor RpoD	A	A	536

Model ID	Subunit number	Subunit ID	Subunit name	Chain ID	Chain ID [auth]	Total residues
3	1	1	RNA polymerase sigma factor RpoD	A	A	536
4	1	1	RNA polymerase sigma factor RpoD	A	A	536

Datasets used for modeling ?

There are 2 unique datasets used to build the models in this entry.

ID	Dataset type	Database name	Data access code
1	Crosslinking-MS data	PRIDE	PXD037183
2	Experimental model	PDB	6P1K

Representation ?

This entry has only one representation and includes 0 rigid bodies and 1 flexible units

Chain ID	Rigid bodies	Non-rigid segments
A	-	1-536

Methodology and software ?

This entry is a result of 1 distinct protocol(s).

Step number	Protocol ID	Method name	Method type	Method description	Number of computed models	Multi state modeling	Multi scale modeling
1	1	None	Docking	None	None	False	False
2	1	None	Docking	None	None	False	False
3	1	None	Docking	None	None	False	False

There are 2 software packages reported in this entry.

ID	Software name	Software version	Software classification	Software location
1	PatchDock	1.3	Docking	https://bioinfo3d.cs.tau.ac.il/PatchDock/patchdock.html
2	ChimeraX	1.2.5	Structure visualization and analysis	https://www.cgl.ucsf.edu/chimerax/

Data quality ?

Crosslinking-MS

Validation for this section is under development.

Model quality ?

For models with atomic structures, molprobtity analysis is performed. For models with coarse-grained or multi-scale structures, excluded volume analysis is performed.

Standard geometry: bond outliers ?

Bond length outliers can not be evaluated for this model

Standard geometry: angle outliers ?

There are 103 angle outliers in this entry. A summary is provided below, and a detailed list of outliers can be found [here](#).

Angle type	Observed angle (°)	Ideal angle (°)	Number of outliers
CA-C-N	116.20	13.66	1
CA-C-N	116.20	25.42	4
CA-C-N	116.90	52.47	1
O-C-N	123.00	68.92	1
C-N-CA	121.70	62.59	1
C-N-CD	125.00	21.30	1
C-N-CA	121.70	80.08	4
O-C-N	123.00	107.57	4

Angle type	Observed angle (°)	Ideal angle (°)	Number of outliers
O-C-N	123.00	110.52	1
CA-CB-CG	112.60	119.27	1
CA-CB-CG	112.60	119.24	1
CA-CB-CG	112.60	119.23	1
CA-CB-CG	112.60	119.21	1
CA-CB-CG	112.60	118.74	2
CA-CB-CG	112.60	118.71	2
N-CA-CB	111.50	102.27	4
CA-C-N	116.90	124.96	4
CA-CB-CG	112.60	117.95	4
CG-SD-CE	100.90	89.15	1
CG-SD-CE	100.90	89.16	1
CG-SD-CE	100.90	89.17	1
CG-SD-CE	100.90	89.19	1
ND1-CG-CD2	106.10	110.90	2
CA-CB-CG	112.60	117.37	2
ND1-CG-CD2	106.10	110.86	1
ND1-CG-CD2	106.10	110.85	1
CA-CB-CG	112.60	117.34	1
CA-CB-CG	112.60	117.30	1
C-N-CA	122.60	99.24	1
CA-C-N	116.90	123.81	4
ND1-CG-CD2	106.10	110.58	4

Angle type	Observed angle (°)	Ideal angle (°)	Number of outliers
C-N-CA	121.70	129.74	2
C-N-CA	121.70	129.72	2
ND1-CG-CD2	106.10	110.55	4
CA-CB-CG	112.60	117.05	1
CA-CB-CG	112.60	117.04	1
CA-CB-CG	112.60	108.18	4
CA-CB-CG	112.60	117.01	1
CA-CB-CG	112.60	116.98	1
ND1-CG-CD2	106.10	110.39	4
CA-C-N	116.90	123.32	4
ND1-CG-CD2	106.10	110.36	4
CA-CB-CG1	110.40	117.56	4
C-N-CA	121.70	129.19	2
C-N-CA	121.70	129.17	1
C-N-CA	121.70	129.16	1
CA-C-N	116.90	123.07	4
ND1-CG-CD2	106.10	110.14	4

Too-close contacts

The following all-atom clashscore is based on a MolProbity analysis. All-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The table below contains clashscores for all the models in this entry.

Model ID	Clash score	Number of clashes
1	62.61	538
2	56.24	483

Model ID	Clash score	Number of clashes
3	43.32	372
4	61.34	527

All 1920 close contacts within the same asymmetric unit are listed below, sorted by their clash magnitude.

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:423:ILE:HA	A:526:ARG:CD	1.620
1	A:208:ARG:HH21	A:501:LYS:CD	1.605
1	A:423:ILE:HA	A:526:ARG:CG	1.604
1	A:56:SER:CB	A:196:MET:HE1	1.599
1	A:187:LYS:CE	A:412:MET:HG2	1.570
1	A:56:SER:HA	A:196:MET:CE	1.529
1	A:56:SER:CA	A:196:MET:HE1	1.500
1	A:31:VAL:CG2	A:353:TYR:N	1.489
1	A:30:THR:CG2	A:355:THR:HG21	1.485
1	A:451:LEU:CD1	A:455:LEU:HD23	1.482
1	A:378:HIS:CE1	A:516:LYS:CE	1.474
1	A:296:ARG:HH22	A:507:ARG:CG	1.469
1	A:416:LYS:CE	A:477:ARG:NH2	1.467
1	A:378:HIS:CE1	A:516:LYS:HE3	1.462
1	A:300:LYS:CE	A:508:GLU:CG	1.446
1	A:422:LYS:CG	A:526:ARG:HH11	1.426
1	A:185:VAL:HG21	A:411:LEU:CB	1.421
1	A:57:VAL:CG2	A:179:PHE:CE2	1.420
1	A:423:ILE:CA	A:526:ARG:HD2	1.418

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:300:LYS:CE	A:508:GLU:HG3	1.414
1	A:300:LYS:HE2	A:508:GLU:CG	1.408
1	A:208:ARG:NH2	A:501:LYS:CD	1.404
1	A:185:VAL:CG2	A:411:LEU:HD22	1.397
1	A:451:LEU:HD13	A:455:LEU:CD2	1.385
1	A:30:THR:N	A:352:THR:CG2	1.378
1	A:32:GLU:CB	A:351:SER:OG	1.373
1	A:56:SER:O	A:63:ALA:HB2	1.371
1	A:185:VAL:HG22	A:411:LEU:CD2	1.368
1	A:31:VAL:CG2	A:352:THR:C	1.366
1	A:31:VAL:HG22	A:353:TYR:CA	1.365
1	A:56:SER:CB	A:196:MET:CE	1.358
1	A:204:ARG:CD	A:501:LYS:HG2	1.358
1	A:372:THR:OG1	A:524:PRO:CB	1.349
1	A:56:SER:CA	A:196:MET:CE	1.346
1	A:187:LYS:HE2	A:412:MET:CG	1.344
1	A:300:LYS:NZ	A:508:GLU:HG3	1.344
1	A:30:THR:HB	A:355:THR:CB	1.342
1	A:361:ALA:CB	A:377:VAL:HG11	1.336
1	A:57:VAL:HG22	A:179:PHE:CE2	1.334
1	A:422:LYS:CE	A:473:GLY:HA3	1.333
1	A:423:ILE:N	A:526:ARG:HD2	1.330
1	A:416:LYS:NZ	A:477:ARG:HH22	1.330

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:296:ARG:NH2	A:507:ARG:HG2	1.329
1	A:28:MET:O	A:352:THR:HG21	1.314
1	A:57:VAL:HG21	A:179:PHE:CD2	1.299
1	A:296:ARG:NH2	A:507:ARG:CG	1.272
1	A:296:ARG:NH1	A:507:ARG:HG3	1.270
1	A:422:LYS:O	A:526:ARG:NE	1.257
1	A:201:ASP:OD1	A:502:GLN:O	1.254
1	A:450:THR:O	A:456:ASP:CA	1.246
1	A:187:LYS:HB3	A:413:PRO:CD	1.245
1	A:185:VAL:CG2	A:411:LEU:CD2	1.239
1	A:30:THR:CB	A:355:THR:HG21	1.234
1	A:208:ARG:NH2	A:501:LYS:HD3	1.229
1	A:423:ILE:CA	A:526:ARG:CD	1.221
1	A:423:ILE:CA	A:526:ARG:CG	1.220
1	A:30:THR:N	A:352:THR:HG23	1.219
1	A:452:GLU:C	A:455:LEU:N	1.212
1	A:30:THR:CB	A:355:THR:CB	1.206
1	A:450:THR:C	A:456:ASP:HA	1.197
1	A:187:LYS:CE	A:412:MET:CG	1.193
1	A:422:LYS:O	A:526:ARG:CZ	1.193
1	A:30:THR:HB	A:355:THR:OG1	1.192
1	A:31:VAL:HG22	A:352:THR:C	1.189
1	A:185:VAL:HG21	A:411:LEU:CG	1.188

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:57:VAL:HG21	A:179:PHE:CE2	1.187
1	A:204:ARG:HD3	A:501:LYS:CG	1.187
1	A:185:VAL:CG2	A:411:LEU:CG	1.184
1	A:422:LYS:CG	A:526:ARG:NH1	1.184
1	A:187:LYS:CB	A:413:PRO:HD3	1.183
1	A:422:LYS:CE	A:473:GLY:CA	1.164
1	A:378:HIS:NE2	A:516:LYS:NZ	1.161
1	A:28:MET:O	A:352:THR:CG2	1.152
1	A:416:LYS:HE2	A:477:ARG:HH21	1.152
1	A:208:ARG:NH2	A:501:LYS:HD2	1.152
1	A:30:THR:CB	A:355:THR:CG2	1.151
1	A:30:THR:HG21	A:355:THR:CG2	1.148
1	A:31:VAL:HG22	A:353:TYR:N	1.141
1	A:422:LYS:HG2	A:526:ARG:NH1	1.140
1	A:450:THR:O	A:456:ASP:HA	1.140
1	A:56:SER:O	A:63:ALA:CB	1.138
1	A:56:SER:OG	A:196:MET:HE1	1.137
1	A:373:ILE:HG23	A:524:PRO:CB	1.134
1	A:422:LYS:HE2	A:473:GLY:CA	1.134
1	A:422:LYS:HE2	A:473:GLY:HA3	1.132
1	A:30:THR:OG1	A:355:THR:HB	1.122
1	A:333:ILE:HD13	A:376:PRO:HB3	1.119
1	A:57:VAL:HG13	A:64:ILE:HD11	1.113

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:378:HIS:NE2	A:516:LYS:CE	1.111
1	A:296:ARG:HH22	A:507:ARG:CB	1.111
1	A:422:LYS:C	A:526:ARG:HD2	1.107
1	A:373:ILE:HB	A:522:ARG:O	1.106
1	A:30:THR:CA	A:352:THR:HG23	1.103
1	A:423:ILE:HA	A:526:ARG:HG3	1.100
1	A:28:MET:C	A:352:THR:CG2	1.097
1	A:31:VAL:HG23	A:352:THR:C	1.095
1	A:416:LYS:HE3	A:477:ARG:NH2	1.092
1	A:369:GLN:HB3	A:371:ARG:H	1.090
1	A:372:THR:OG1	A:524:PRO:HB2	1.081
1	A:54:GLN:NE2	A:180:LYS:HD2	1.075
1	A:300:LYS:NZ	A:508:GLU:CG	1.075
1	A:333:ILE:CD1	A:376:PRO:HB3	1.073
1	A:29:GLY:C	A:352:THR:HG23	1.072
1	A:422:LYS:CD	A:473:GLY:HA3	1.072
1	A:45:ARG:NH1	A:302:MET:CE	1.068
1	A:422:LYS:NZ	A:473:GLY:HA2	1.067
1	A:28:MET:C	A:352:THR:HG21	1.066
1	A:45:ARG:HH22	A:339:VAL:HG13	1.066
1	A:373:ILE:HG23	A:524:PRO:HB3	1.066
1	A:52:GLN:HE22	A:292:GLU:HA	1.060
1	A:373:ILE:HG12	A:524:PRO:C	1.059

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:373:ILE:CG2	A:524:PRO:CB	1.056
1	A:30:THR:CG2	A:355:THR:CG2	1.053
1	A:53:VAL:HG12	A:189:PHE:CE1	1.053
1	A:187:LYS:HB3	A:413:PRO:HD3	1.052
1	A:416:LYS:NZ	A:477:ARG:NH2	1.042
1	A:185:VAL:HG21	A:411:LEU:HB2	1.035
1	A:296:ARG:HH12	A:507:ARG:HG3	1.034
1	A:369:GLN:CB	A:371:ARG:N	1.023
1	A:369:GLN:CB	A:371:ARG:H	1.022
1	A:187:LYS:HB3	A:413:PRO:CG	1.018
1	A:208:ARG:HH21	A:501:LYS:HD3	1.018
1	A:419:LYS:HD2	A:475:THR:HG23	1.016
1	A:373:ILE:HG12	A:524:PRO:O	1.011
1	A:32:GLU:HB3	A:351:SER:CB	1.010
1	A:56:SER:HB3	A:196:MET:CE	1.009
1	A:422:LYS:HG3	A:526:ARG:NH1	1.008
1	A:300:LYS:HE3	A:508:GLU:HG3	1.006
1	A:32:GLU:HB3	A:351:SER:OG	1.005
1	A:185:VAL:HG22	A:411:LEU:HD22	1.005
1	A:361:ALA:HB1	A:377:VAL:CG1	1.004
1	A:48:ASP:OD2	A:295:ALA:HB2	0.995
1	A:32:GLU:N	A:351:SER:HB2	0.990
1	A:57:VAL:CG2	A:179:PHE:HE2	0.986

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:185:VAL:CG2	A:411:LEU:CB	0.984
1	A:416:LYS:CE	A:477:ARG:HH21	0.984
1	A:29:GLY:C	A:352:THR:CG2	0.979
1	A:296:ARG:NH2	A:507:ARG:CB	0.976
1	A:185:VAL:CG2	A:411:LEU:HB2	0.975
1	A:296:ARG:NH1	A:508:GLU:H	0.971
1	A:330:GLU:OE1	A:377:VAL:HG23	0.970
1	A:83:ASP:O	A:411:LEU:CB	0.970
1	A:423:ILE:HD13	A:526:ARG:CD	0.968
1	A:56:SER:HB3	A:196:MET:HE1	0.966
1	A:296:ARG:HH22	A:507:ARG:HG2	0.966
1	A:296:ARG:HH12	A:507:ARG:CG	0.965
1	A:378:HIS:HE1	A:516:LYS:CE	0.964
1	A:31:VAL:HG12	A:349:LYS:HB3	0.962
1	A:330:GLU:OE1	A:377:VAL:CG2	0.962
1	A:45:ARG:NH1	A:302:MET:HE1	0.961
1	A:187:LYS:CG	A:413:PRO:HD3	0.955
1	A:361:ALA:HB1	A:377:VAL:HG11	0.955
1	A:57:VAL:CG2	A:179:PHE:CD2	0.954
1	A:54:GLN:CD	A:180:LYS:HD2	0.952
1	A:378:HIS:CE1	A:516:LYS:NZ	0.951
1	A:333:ILE:HD13	A:376:PRO:CB	0.949
1	A:57:VAL:CG1	A:64:ILE:HD11	0.948

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:426:GLU:CA	A:525:SER:HB3	0.946
1	A:187:LYS:HD2	A:413:PRO:HD3	0.944
1	A:378:HIS:CE1	A:516:LYS:HE2	0.942
1	A:296:ARG:HH12	A:508:GLU:H	0.939
1	A:31:VAL:HG22	A:353:TYR:H	0.937
1	A:423:ILE:CA	A:526:ARG:HG3	0.935
1	A:426:GLU:HA	A:525:SER:HB3	0.935
1	A:45:ARG:HH12	A:302:MET:CE	0.932
1	A:372:THR:HG1	A:524:PRO:HB2	0.932
1	A:296:ARG:NH1	A:508:GLU:N	0.926
1	A:187:LYS:CD	A:413:PRO:HD3	0.925
1	A:422:LYS:HG2	A:526:ARG:HH11	0.925
1	A:208:ARG:HH22	A:501:LYS:HD2	0.923
1	A:56:SER:HA	A:196:MET:HE2	0.920
1	A:296:ARG:NH2	A:507:ARG:HB3	0.918
1	A:449:THR:HB	A:462:SER:HB3	0.912
1	A:422:LYS:C	A:526:ARG:CD	0.911
1	A:45:ARG:NH2	A:339:VAL:HG13	0.910
1	A:30:THR:OG1	A:355:THR:CB	0.909
1	A:296:ARG:CZ	A:507:ARG:CG	0.908
1	A:33:LEU:HG	A:349:LYS:CD	0.907
1	A:208:ARG:HH21	A:501:LYS:CE	0.907
1	A:52:GLN:NE2	A:292:GLU:HA	0.903

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:30:THR:CB	A:355:THR:HB	0.896
1	A:378:HIS:HE1	A:516:LYS:HE3	0.896
1	A:30:THR:HG21	A:355:THR:HG21	0.893
1	A:296:ARG:NH1	A:507:ARG:CG	0.892
1	A:416:LYS:HZ1	A:477:ARG:HH22	0.888
1	A:83:ASP:O	A:411:LEU:HB3	0.885
1	A:300:LYS:HE2	A:508:GLU:HG3	0.884
1	A:204:ARG:CD	A:501:LYS:CG	0.882
1	A:80:ARG:H	A:408:GLU:HB2	0.882
1	A:423:ILE:HD13	A:526:ARG:HD3	0.882
1	A:55:CYS:SG	A:287:ARG:NH2	0.874
1	A:53:VAL:HG12	A:189:PHE:CD1	0.872
1	A:187:LYS:HZ3	A:412:MET:HG3	0.872
1	A:371:ARG:NH2	A:525:SER:OG	0.870
1	A:187:LYS:HB3	A:413:PRO:HG3	0.869
1	A:57:VAL:HG21	A:179:PHE:HD2	0.866
1	A:187:LYS:NZ	A:412:MET:CG	0.865
1	A:33:LEU:HG	A:349:LYS:NZ	0.863
1	A:33:LEU:CG	A:349:LYS:HD2	0.861
1	A:423:ILE:CB	A:526:ARG:HG3	0.859
1	A:31:VAL:O	A:352:THR:OG1	0.859
1	A:59:GLU:HA	A:61:PRO:CD	0.857
1	A:32:GLU:H	A:351:SER:CA	0.857

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:187:LYS:CD	A:412:MET:HG2	0.857
1	A:300:LYS:HZ3	A:508:GLU:CG	0.857
1	A:32:GLU:CB	A:351:SER:CB	0.856
1	A:30:THR:O	A:351:SER:O	0.856
1	A:296:ARG:CZ	A:507:ARG:HG3	0.853
1	A:52:GLN:HE21	A:291:GLY:C	0.849
1	A:187:LYS:HZ3	A:412:MET:CG	0.842
1	A:423:ILE:HA	A:526:ARG:HG2	0.835
1	A:52:GLN:NE2	A:292:GLU:N	0.835
1	A:28:MET:C	A:352:THR:HG22	0.834
1	A:30:THR:O	A:351:SER:C	0.830
1	A:449:THR:OG1	A:533:PHE:HE1	0.829
1	A:422:LYS:O	A:526:ARG:CD	0.825
1	A:30:THR:HB	A:355:THR:CG2	0.824
1	A:31:VAL:CB	A:353:TYR:N	0.823
1	A:57:VAL:HG13	A:64:ILE:CD1	0.823
1	A:419:LYS:CD	A:475:THR:HG23	0.818
1	A:451:LEU:HD13	A:455:LEU:HD23	0.818
1	A:30:THR:H	A:352:THR:HG23	0.817
1	A:201:ASP:CG	A:502:GLN:O	0.816
1	A:423:ILE:HG23	A:526:ARG:HG3	0.816
1	A:300:LYS:HE2	A:508:GLU:CD	0.812
1	A:453:LEU:HG	A:454:PRO:O	0.811

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:423:ILE:HD13	A:526:ARG:CG	0.810
1	A:187:LYS:HD2	A:412:MET:HA	0.809
1	A:52:GLN:NE2	A:292:GLU:CA	0.808
1	A:33:LEU:HG	A:349:LYS:HZ3	0.806
1	A:204:ARG:HD3	A:501:LYS:HG2	0.803
1	A:378:HIS:HE2	A:516:LYS:NZ	0.802
1	A:378:HIS:NE2	A:516:LYS:HE2	0.800
1	A:56:SER:CA	A:196:MET:HE2	0.797
1	A:296:ARG:HH11	A:508:GLU:HB2	0.797
1	A:52:GLN:NE2	A:291:GLY:C	0.796
1	A:449:THR:CB	A:462:SER:HB3	0.791
1	A:373:ILE:CG2	A:524:PRO:HB3	0.791
1	A:33:LEU:CB	A:349:LYS:HD2	0.789
1	A:452:GLU:O	A:455:LEU:N	0.787
1	A:300:LYS:NZ	A:508:GLU:CB	0.785
1	A:187:LYS:HD2	A:412:MET:CA	0.784
1	A:31:VAL:HG12	A:349:LYS:CB	0.782
1	A:56:SER:HG	A:196:MET:CE	0.781
1	A:56:SER:O	A:60:TYR:HB3	0.780
1	A:32:GLU:N	A:351:SER:CB	0.780
1	A:422:LYS:HZ1	A:473:GLY:HA2	0.779
1	A:204:ARG:NE	A:501:LYS:CG	0.778
1	A:452:GLU:CA	A:455:LEU:N	0.775

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:194:ASN:HD21	A:477:ARG:HD3	0.775
1	A:29:GLY:CA	A:352:THR:HG21	0.774
1	A:204:ARG:NE	A:501:LYS:HG2	0.774
1	A:187:LYS:NZ	A:412:MET:HG2	0.773
1	A:187:LYS:HD2	A:413:PRO:CD	0.772
1	A:56:SER:HB3	A:196:MET:HE3	0.771
1	A:32:GLU:H	A:351:SER:CB	0.770
1	A:378:HIS:CD2	A:516:LYS:HZ1	0.761
1	A:185:VAL:HG11	A:411:LEU:O	0.760
1	A:423:ILE:CG2	A:526:ARG:HG3	0.760
1	A:423:ILE:CD1	A:526:ARG:HG3	0.757
1	A:32:GLU:HG2	A:350:PHE:N	0.752
1	A:422:LYS:NZ	A:473:GLY:CA	0.745
1	A:58:ALA:O	A:61:PRO:CD	0.744
1	A:378:HIS:HE2	A:516:LYS:CE	0.744
1	A:32:GLU:CB	A:351:SER:HG	0.744
1	A:452:GLU:H	A:456:ASP:CG	0.741
1	A:449:THR:HG21	A:462:SER:OG	0.738
1	A:361:ALA:CB	A:377:VAL:CG1	0.733
1	A:83:ASP:O	A:411:LEU:HB2	0.731
1	A:296:ARG:HH12	A:508:GLU:N	0.730
1	A:57:VAL:O	A:60:TYR:O	0.730
1	A:423:ILE:CD1	A:526:ARG:CG	0.729

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:452:GLU:HB3	A:456:ASP:HB2	0.728
1	A:33:LEU:CG	A:349:LYS:CD	0.727
1	A:422:LYS:HZ3	A:473:GLY:HA2	0.727
1	A:29:GLY:C	A:352:THR:HG21	0.724
1	A:449:THR:OG1	A:533:PHE:CE1	0.721
1	A:33:LEU:CB	A:349:LYS:CD	0.720
1	A:378:HIS:CE1	A:516:LYS:HZ1	0.719
1	A:422:LYS:HD2	A:473:GLY:HA3	0.717
1	A:187:LYS:HD2	A:412:MET:CB	0.716
1	A:56:SER:OG	A:196:MET:CE	0.715
1	A:33:LEU:HG	A:349:LYS:HD2	0.714
1	A:373:ILE:CG1	A:524:PRO:O	0.714
1	A:330:GLU:OE1	A:377:VAL:HG22	0.711
1	A:201:ASP:OD1	A:502:GLN:C	0.711
1	A:451:LEU:CG	A:455:LEU:HD23	0.710
1	A:32:GLU:CG	A:351:SER:OG	0.706
1	A:364:ARG:CZ	A:380:ILE:CG2	0.704
1	A:208:ARG:CZ	A:501:LYS:HD3	0.701
1	A:45:ARG:HH11	A:302:MET:CE	0.700
1	A:185:VAL:HG23	A:411:LEU:HD22	0.700
1	A:45:ARG:HH11	A:302:MET:HE1	0.698
1	A:32:GLU:H	A:351:SER:N	0.697
1	A:104:VAL:HG13	A:108:LEU:HB2	0.696

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:451:LEU:CD1	A:455:LEU:CD2	0.696
1	A:31:VAL:CG2	A:353:TYR:CA	0.695
1	A:451:LEU:H	A:459:THR:CG2	0.695
1	A:369:GLN:HB2	A:371:ARG:N	0.691
1	A:43:ALA:HB2	A:344:TYR:CE1	0.685
1	A:300:LYS:CE	A:508:GLU:CD	0.680
1	A:45:ARG:NH2	A:339:VAL:CG1	0.680
1	A:449:THR:HG1	A:533:PHE:HE1	0.679
1	A:372:THR:CB	A:524:PRO:CB	0.677
1	A:190:ASP:HB3	A:477:ARG:NH1	0.675
1	A:45:ARG:HH22	A:339:VAL:CG1	0.674
1	A:29:GLY:N	A:352:THR:HG21	0.673
1	A:30:THR:H	A:352:THR:CG2	0.672
1	A:32:GLU:OE2	A:350:PHE:CD2	0.671
1	A:80:ARG:N	A:408:GLU:HB2	0.671
1	A:52:GLN:HE22	A:292:GLU:CA	0.666
1	A:450:THR:O	A:456:ASP:OD1	0.664
1	A:59:GLU:C	A:61:PRO:N	0.662
1	A:190:ASP:CG	A:477:ARG:HH12	0.660
1	A:42:ILE:CD1	A:344:TYR:HB3	0.659
1	A:59:GLU:HA	A:61:PRO:HD3	0.659
1	A:59:GLU:OE2	A:284:ILE:HG22	0.659
1	A:187:LYS:NZ	A:412:MET:HG3	0.659

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:30:THR:OG1	A:355:THR:CG2	0.658
1	A:373:ILE:C	A:523:HIS:HA	0.656
1	A:42:ILE:HB	A:344:TYR:CD1	0.654
1	A:187:LYS:HE2	A:412:MET:HG2	0.653
1	A:333:ILE:CD1	A:519:ARG:CZ	0.652
1	A:31:VAL:HG23	A:352:THR:HG22	0.651
1	A:55:CYS:O	A:60:TYR:HB2	0.648
1	A:378:HIS:HE2	A:516:LYS:HE2	0.647
1	A:42:ILE:CG2	A:344:TYR:HD1	0.645
1	A:57:VAL:HG11	A:179:PHE:CD2	0.644
1	A:187:LYS:CD	A:412:MET:HA	0.643
1	A:29:GLY:N	A:352:THR:CG2	0.642
1	A:53:VAL:HA	A:189:PHE:HE1	0.640
1	A:451:LEU:N	A:459:THR:CG2	0.639
1	A:372:THR:OG1	A:524:PRO:CG	0.638
1	A:449:THR:CG2	A:462:SER:CB	0.636
1	A:45:ARG:NH1	A:302:MET:HE3	0.635
1	A:31:VAL:HG22	A:353:TYR:HA	0.633
1	A:422:LYS:HG3	A:526:ARG:HH12	0.632
1	A:333:ILE:CD1	A:519:ARG:NH2	0.630
1	A:369:GLN:HB3	A:371:ARG:N	0.630
1	A:373:ILE:CD1	A:524:PRO:C	0.626
1	A:204:ARG:NE	A:501:LYS:HG3	0.626

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:415:ASP:OD2	A:475:THR:HB	0.625
1	A:451:LEU:N	A:459:THR:HG23	0.623
1	A:42:ILE:HD13	A:342:PHE:HE2	0.621
1	A:452:GLU:N	A:456:ASP:CG	0.620
1	A:300:LYS:HZ1	A:508:GLU:CB	0.620
1	A:369:GLN:CD	A:374:ARG:HG3	0.616
1	A:187:LYS:CB	A:413:PRO:HG3	0.614
1	A:451:LEU:HA	A:456:ASP:OD1	0.614
1	A:32:GLU:CA	A:351:SER:HB2	0.612
1	A:422:LYS:HE2	A:473:GLY:N	0.611
1	A:32:GLU:OE2	A:350:PHE:HD2	0.611
1	A:83:ASP:C	A:411:LEU:HB3	0.609
1	A:416:LYS:HG2	A:475:THR:HG21	0.609
1	A:373:ILE:CD1	A:526:ARG:H	0.608
1	A:369:GLN:OE1	A:374:ARG:HG3	0.602
1	A:451:LEU:H	A:459:THR:HG23	0.602
1	A:197:ARG:NH1	A:503:PHE:O	0.602
1	A:28:MET:O	A:352:THR:HG22	0.602
1	A:450:THR:O	A:456:ASP:CB	0.601
1	A:361:ALA:HB2	A:377:VAL:HG11	0.599
1	A:187:LYS:CB	A:413:PRO:CG	0.597
1	A:30:THR:HG1	A:355:THR:HB	0.593
1	A:187:LYS:NZ	A:412:MET:HA	0.593

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:32:GLU:HB3	A:351:SER:HG	0.591
1	A:48:ASP:OD2	A:295:ALA:CB	0.590
1	A:42:ILE:HD13	A:344:TYR:HB3	0.585
1	A:185:VAL:HG21	A:411:LEU:CD2	0.583
1	A:361:ALA:CA	A:377:VAL:HG11	0.583
1	A:58:ALA:O	A:61:PRO:HD3	0.581
1	A:426:GLU:CA	A:525:SER:CB	0.581
1	A:507:ARG:HG3	A:508:GLU:H	0.581
1	A:57:VAL:HA	A:63:ALA:CB	0.580
1	A:373:ILE:CG1	A:524:PRO:C	0.578
1	A:422:LYS:HD2	A:473:GLY:CA	0.578
1	A:449:THR:CG2	A:462:SER:HB3	0.577
1	A:333:ILE:HD11	A:519:ARG:NE	0.573
1	A:419:LYS:HD2	A:475:THR:CG2	0.572
1	A:300:LYS:HE2	A:508:GLU:HG2	0.571
1	A:31:VAL:CB	A:353:TYR:H	0.569
1	A:43:ALA:HB2	A:344:TYR:CZ	0.565
1	A:187:LYS:O	A:413:PRO:HG3	0.565
1	A:33:LEU:HG	A:349:LYS:CE	0.564
1	A:104:VAL:HG21	A:110:GLN:HB3	0.563
1	A:59:GLU:CA	A:61:PRO:CD	0.561
1	A:59:GLU:O	A:62:GLU:N	0.561
1	A:449:THR:HG21	A:462:SER:CB	0.560

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:57:VAL:CG1	A:179:PHE:CD2	0.559
1	A:42:ILE:HG22	A:344:TYR:HD1	0.557
1	A:201:ASP:OD1	A:502:GLN:HA	0.557
1	A:376:PRO:CG	A:519:ARG:HG2	0.556
1	A:376:PRO:HG3	A:519:ARG:HG2	0.556
1	A:296:ARG:CZ	A:507:ARG:HB3	0.555
1	A:43:ALA:HB2	A:344:TYR:OH	0.554
1	A:204:ARG:HD3	A:501:LYS:CD	0.553
1	A:187:LYS:HZ3	A:412:MET:CA	0.551
1	A:104:VAL:HG13	A:108:LEU:CB	0.550
1	A:369:GLN:NE2	A:374:ARG:HG3	0.547
1	A:29:GLY:CA	A:352:THR:CG2	0.545
1	A:187:LYS:NZ	A:412:MET:CA	0.545
1	A:31:VAL:CG2	A:353:TYR:HA	0.544
1	A:32:GLU:CA	A:351:SER:CB	0.539
1	A:32:GLU:OE2	A:350:PHE:CB	0.539
1	A:423:ILE:O	A:526:ARG:HG2	0.539
1	A:31:VAL:HG13	A:353:TYR:H	0.538
1	A:31:VAL:HG23	A:352:THR:O	0.536
1	A:57:VAL:HA	A:63:ALA:HB3	0.535
1	A:296:ARG:HH11	A:508:GLU:CB	0.535
1	A:32:GLU:OE2	A:350:PHE:HB3	0.529
1	A:373:ILE:HD11	A:526:ARG:H	0.529

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:204:ARG:HH11	A:502:GLN:HA	0.529
1	A:373:ILE:HG13	A:523:HIS:HB3	0.528
1	A:204:ARG:NH1	A:502:GLN:HA	0.528
1	A:300:LYS:NZ	A:508:GLU:HB2	0.528
1	A:426:GLU:C	A:525:SER:CB	0.527
1	A:48:ASP:OD2	A:291:GLY:O	0.526
1	A:42:ILE:HD13	A:342:PHE:CE2	0.524
1	A:333:ILE:HD11	A:519:ARG:CZ	0.520
1	A:300:LYS:HE3	A:508:GLU:CG	0.520
1	A:228:LEU:HB3	A:238:TRP:HB2	0.519
1	A:201:ASP:OD1	A:502:GLN:CA	0.517
1	A:452:GLU:N	A:455:LEU:HB2	0.515
1	A:296:ARG:NH1	A:508:GLU:HB2	0.514
1	A:187:LYS:CD	A:413:PRO:CD	0.512
1	A:31:VAL:CG1	A:353:TYR:H	0.512
1	A:204:ARG:HE	A:501:LYS:HG3	0.508
1	A:296:ARG:CZ	A:507:ARG:CB	0.505
1	A:364:ARG:NH2	A:380:ILE:HG23	0.503
1	A:45:ARG:NH1	A:302:MET:SD	0.503
1	A:42:ILE:CD1	A:342:PHE:HE2	0.502
1	A:373:ILE:HB	A:522:ARG:C	0.502
1	A:416:LYS:HZ1	A:477:ARG:NH2	0.502
1	A:333:ILE:HD13	A:519:ARG:NH2	0.497

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:364:ARG:HG3	A:380:ILE:HG21	0.497
1	A:31:VAL:O	A:349:LYS:HD3	0.495
1	A:194:ASN:ND2	A:477:ARG:HD3	0.495
1	A:68:LEU:HD22	A:148:ARG:HE	0.493
1	A:53:VAL:CG1	A:189:PHE:CE1	0.493
1	A:33:LEU:HG	A:349:LYS:HD3	0.491
1	A:53:VAL:HA	A:189:PHE:CE1	0.491
1	A:423:ILE:C	A:526:ARG:HG2	0.489
1	A:422:LYS:O	A:526:ARG:NH1	0.487
1	A:80:ARG:HB3	A:408:GLU:O	0.486
1	A:59:GLU:OE1	A:196:MET:HG2	0.486
1	A:187:LYS:HZ3	A:412:MET:N	0.486
1	A:56:SER:C	A:60:TYR:HB3	0.484
1	A:451:LEU:H	A:459:THR:HG21	0.484
1	A:57:VAL:CA	A:63:ALA:HB3	0.481
1	A:33:LEU:CB	A:349:LYS:HD3	0.480
1	A:450:THR:C	A:456:ASP:CA	0.480
1	A:59:GLU:C	A:62:GLU:H	0.479
1	A:32:GLU:HA	A:349:LYS:HE2	0.478
1	A:373:ILE:HD13	A:527:SER:H	0.476
1	A:204:ARG:NH1	A:502:GLN:CA	0.476
1	A:423:ILE:CD1	A:526:ARG:CD	0.475
1	A:31:VAL:CG2	A:353:TYR:H	0.472

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:267:LEU:HG	A:278:ILE:HG13	0.472
1	A:83:ASP:OD1	A:409:ARG:HA	0.472
1	A:451:LEU:N	A:459:THR:HG21	0.471
1	A:449:THR:CG2	A:462:SER:OG	0.468
1	A:451:LEU:HD12	A:455:LEU:HD23	0.467
1	A:185:VAL:HG11	A:411:LEU:C	0.466
1	A:423:ILE:C	A:526:ARG:CG	0.466
1	A:451:LEU:N	A:455:LEU:O	0.465
1	A:187:LYS:HD2	A:412:MET:HB3	0.464
1	A:42:ILE:HD12	A:344:TYR:HB3	0.464
1	A:59:GLU:C	A:62:GLU:N	0.462
1	A:306:ASN:HB2	A:335:LEU:HD21	0.462
1	A:190:ASP:CB	A:477:ARG:HH12	0.461
1	A:167:THR:HG22	A:170:GLU:HB2	0.460
1	A:452:GLU:O	A:455:LEU:CD1	0.460
1	A:452:GLU:O	A:455:LEU:HB2	0.460
1	A:187:LYS:C	A:413:PRO:HG3	0.458
1	A:43:ALA:CA	A:344:TYR:HE1	0.457
1	A:376:PRO:HD3	A:519:ARG:HG2	0.457
1	A:467:THR:HG22	A:530:LEU:HD11	0.454
1	A:31:VAL:HG23	A:352:THR:CG2	0.453
1	A:300:LYS:HZ3	A:508:GLU:CB	0.452
1	A:416:LYS:CE	A:477:ARG:HH22	0.450

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:373:ILE:CB	A:522:ARG:O	0.450
1	A:43:ALA:HB2	A:344:TYR:HE1	0.449
1	A:119:GLU:HB3	A:122:GLU:HB3	0.448
1	A:34:LEU:H	A:349:LYS:HG3	0.448
1	A:452:GLU:O	A:455:LEU:HD13	0.448
1	A:119:GLU:HB3	A:122:GLU:CB	0.447
1	A:42:ILE:CB	A:344:TYR:CD1	0.447
1	A:423:ILE:CG1	A:526:ARG:HG3	0.447
1	A:42:ILE:CB	A:344:TYR:HD1	0.445
1	A:422:LYS:HD2	A:473:GLY:O	0.445
1	A:197:ARG:HH12	A:505:VAL:CG1	0.445
1	A:33:LEU:HD12	A:34:LEU:HD12	0.441
1	A:187:LYS:CD	A:412:MET:CB	0.441
1	A:423:ILE:CA	A:526:ARG:HG2	0.440
1	A:416:LYS:CG	A:475:THR:HG21	0.439
1	A:83:ASP:OD2	A:409:ARG:HA	0.436
1	A:63:ALA:HA	A:192:LEU:HD22	0.434
1	A:83:ASP:HB3	A:408:GLU:HA	0.431
1	A:31:VAL:CG1	A:349:LYS:N	0.431
1	A:57:VAL:O	A:63:ALA:HB3	0.430
1	A:393:MET:HE1	A:405:GLU:HB3	0.429
1	A:31:VAL:HG11	A:349:LYS:N	0.427
1	A:373:ILE:HD13	A:526:ARG:H	0.427

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:364:ARG:CZ	A:380:ILE:HG23	0.425
1	A:83:ASP:CA	A:411:LEU:HB3	0.425
1	A:33:LEU:CG	A:349:LYS:HD3	0.424
1	A:74:VAL:HG22	A:79:ALA:HB3	0.424
1	A:452:GLU:C	A:455:LEU:CA	0.423
1	A:187:LYS:CG	A:413:PRO:CD	0.422
1	A:75:GLU:OE2	A:141:ARG:HD2	0.420
1	A:32:GLU:HG2	A:350:PHE:H	0.419
1	A:422:LYS:HG2	A:526:ARG:HD3	0.419
1	A:300:LYS:HZ3	A:508:GLU:HB2	0.419
1	A:426:GLU:C	A:525:SER:HB3	0.418
1	A:423:ILE:HD12	A:526:ARG:HG3	0.418
1	A:296:ARG:NH1	A:508:GLU:CA	0.418
1	A:59:GLU:O	A:60:TYR:CE2	0.415
1	A:83:ASP:HA	A:411:LEU:HB3	0.415
1	A:187:LYS:CA	A:413:PRO:HG3	0.414
1	A:361:ALA:CA	A:377:VAL:CG1	0.413
1	A:56:SER:OG	A:196:MET:SD	0.412
1	A:82:SER:HB3	A:133:ASN:HB3	0.411
1	A:171:GLU:HA	A:174:LYS:HZ2	0.411
1	A:419:LYS:CB	A:474:LEU:HA	0.411
1	A:449:THR:HB	A:459:THR:HA	0.410
1	A:296:ARG:NH1	A:508:GLU:CB	0.410

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
1	A:333:ILE:HD11	A:376:PRO:HB3	0.409
1	A:137:PRO:O	A:141:ARG:HG3	0.409
1	A:89:VAL:HG12	A:91:PRO:HD3	0.408
1	A:373:ILE:HG13	A:523:HIS:CB	0.408
1	A:47:GLU:HA	A:50:ILE:HG13	0.407
1	A:364:ARG:CZ	A:380:ILE:HG22	0.406
1	A:56:SER:O	A:63:ALA:HB3	0.406
1	A:422:LYS:C	A:526:ARG:CZ	0.405
1	A:190:ASP:CB	A:477:ARG:NH1	0.405
1	A:416:LYS:HE3	A:477:ARG:CZ	0.404
1	A:373:ILE:HD11	A:526:ARG:N	0.402
1	A:376:PRO:HD3	A:523:HIS:HE1	0.402
1	A:450:THR:HG23	A:459:THR:HB	0.401
2	A:57:VAL:HG22	A:179:PHE:CD2	1.658
2	A:208:ARG:CD	A:501:LYS:HG2	1.641
2	A:208:ARG:HD3	A:501:LYS:CG	1.615
2	A:57:VAL:HG22	A:179:PHE:CE2	1.604
2	A:187:LYS:CE	A:412:MET:HG2	1.570
2	A:200:MET:CE	A:504:ASP:HB2	1.565
2	A:193:VAL:CG1	A:477:ARG:NH1	1.455
2	A:31:VAL:CG2	A:352:THR:HB	1.455
2	A:57:VAL:CG2	A:179:PHE:CD2	1.441
2	A:185:VAL:HG21	A:411:LEU:CB	1.421

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
2	A:208:ARG:HE	A:501:LYS:C	1.414
2	A:44:LYS:HD2	A:294:LYS:CE	1.413
2	A:185:VAL:CG2	A:411:LEU:HD22	1.397
2	A:200:MET:CE	A:504:ASP:CB	1.389
2	A:33:LEU:HG	A:349:LYS:NZ	1.380
2	A:185:VAL:HG22	A:411:LEU:CD2	1.368
2	A:57:VAL:CG2	A:179:PHE:HD2	1.351
2	A:187:LYS:HE2	A:412:MET:CG	1.344
2	A:293:ALA:CB	A:512:GLN:HE22	1.338
2	A:361:ALA:CB	A:377:VAL:HG11	1.336
2	A:200:MET:HE1	A:504:ASP:CB	1.322
2	A:208:ARG:NE	A:501:LYS:CB	1.318
2	A:293:ALA:HB2	A:512:GLN:NE2	1.312
2	A:31:VAL:HG23	A:352:THR:CB	1.295
2	A:423:ILE:CB	A:526:ARG:HH22	1.293
2	A:31:VAL:O	A:349:LYS:HD3	1.292
2	A:45:ARG:NH2	A:339:VAL:HG13	1.288
2	A:293:ALA:CB	A:512:GLN:NE2	1.279
2	A:208:ARG:CD	A:501:LYS:CG	1.275
2	A:31:VAL:CA	A:352:THR:H	1.269
2	A:31:VAL:CG1	A:349:LYS:O	1.254
2	A:59:GLU:OE1	A:196:MET:SD	1.250
2	A:187:LYS:HB3	A:413:PRO:CD	1.245

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
2	A:33:LEU:CG	A:349:LYS:NZ	1.243
2	A:448:ASP:OD1	A:455:LEU:CA	1.243
2	A:31:VAL:HA	A:352:THR:N	1.240
2	A:185:VAL:CG2	A:411:LEU:CD2	1.239
2	A:194:ASN:OD1	A:475:THR:HB	1.239
2	A:208:ARG:NH2	A:502:GLN:H	1.236
2	A:197:ARG:CB	A:477:ARG:HB3	1.214
2	A:31:VAL:CG2	A:352:THR:CB	1.203
2	A:292:GLU:OE1	A:509:ARG:NH2	1.202
2	A:44:LYS:CD	A:294:LYS:HE2	1.197
2	A:187:LYS:CE	A:412:MET:CG	1.193
2	A:423:ILE:CB	A:526:ARG:NH2	1.190
2	A:185:VAL:HG21	A:411:LEU:CG	1.188
2	A:194:ASN:CG	A:475:THR:HB	1.188
2	A:185:VAL:CG2	A:411:LEU:CG	1.184
2	A:187:LYS:CB	A:413:PRO:HD3	1.183
2	A:450:THR:HA	A:457:SER:N	1.166
2	A:57:VAL:HG13	A:179:PHE:CD2	1.163
2	A:33:LEU:CG	A:349:LYS:HZ2	1.161
2	A:374:ARG:NH2	A:524:PRO:HG3	1.161
2	A:208:ARG:NE	A:501:LYS:HB3	1.160
2	A:44:LYS:NZ	A:294:LYS:HZ3	1.154
2	A:208:ARG:NE	A:501:LYS:C	1.147

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
2	A:376:PRO:HD2	A:525:SER:OG	1.146
2	A:30:THR:O	A:352:THR:HA	1.145
2	A:378:HIS:HE1	A:523:HIS:CD2	1.144
2	A:193:VAL:HG12	A:477:ARG:NH1	1.142
2	A:208:ARG:CZ	A:501:LYS:HB3	1.141
2	A:30:THR:OG1	A:352:THR:HG23	1.140
2	A:57:VAL:CG1	A:179:PHE:CD2	1.127
2	A:449:THR:C	A:458:ALA:H	1.127
2	A:451:LEU:HG	A:455:LEU:CD1	1.127
2	A:423:ILE:HB	A:526:ARG:HH22	1.125
2	A:200:MET:HE2	A:504:ASP:CB	1.121
2	A:32:GLU:H	A:351:SER:HB2	1.121
2	A:333:ILE:HD13	A:376:PRO:HB3	1.119
2	A:32:GLU:H	A:351:SER:CB	1.118
2	A:44:LYS:CE	A:294:LYS:HZ3	1.110
2	A:449:THR:CG2	A:458:ALA:HB1	1.105
2	A:194:ASN:OD1	A:475:THR:CB	1.099
2	A:369:GLN:HB3	A:371:ARG:H	1.090
2	A:373:ILE:HB	A:528:GLU:HB3	1.084
2	A:451:LEU:O	A:454:PRO:HB3	1.082
2	A:32:GLU:N	A:351:SER:HB2	1.081
2	A:379:MET:CB	A:525:SER:OG	1.081
2	A:423:ILE:CG2	A:526:ARG:NH2	1.078

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
2	A:57:VAL:CG2	A:179:PHE:CE2	1.076
2	A:208:ARG:HD3	A:501:LYS:CD	1.073
2	A:333:ILE:CD1	A:376:PRO:HB3	1.073
2	A:44:LYS:HZ2	A:294:LYS:NZ	1.072
2	A:451:LEU:O	A:454:PRO:CB	1.066
2	A:30:THR:O	A:352:THR:CA	1.064
2	A:423:ILE:HG21	A:526:ARG:NH2	1.060
2	A:449:THR:CA	A:458:ALA:HB2	1.056
2	A:44:LYS:NZ	A:294:LYS:NZ	1.056
2	A:379:MET:HE2	A:526:ARG:CZ	1.053
2	A:187:LYS:HB3	A:413:PRO:HD3	1.052
2	A:44:LYS:CD	A:294:LYS:HZ3	1.050
2	A:374:ARG:CZ	A:524:PRO:HG3	1.049
2	A:208:ARG:HE	A:501:LYS:CA	1.049
2	A:193:VAL:HG11	A:477:ARG:NH1	1.047
2	A:450:THR:CA	A:457:SER:H	1.041
2	A:185:VAL:HG21	A:411:LEU:HB2	1.035
2	A:197:ARG:HB3	A:477:ARG:CB	1.035
2	A:193:VAL:HG11	A:477:ARG:HH12	1.034
2	A:376:PRO:CG	A:523:HIS:HB3	1.030
2	A:208:ARG:CZ	A:502:GLN:N	1.028
2	A:44:LYS:HD2	A:294:LYS:NZ	1.023
2	A:369:GLN:CB	A:371:ARG:N	1.023

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
2	A:369:GLN:CB	A:371:ARG:H	1.022
2	A:451:LEU:HG	A:455:LEU:HD12	1.019
2	A:187:LYS:HB3	A:413:PRO:CG	1.018
2	A:282:LYS:HG2	A:504:ASP:OD2	1.017
2	A:44:LYS:CD	A:294:LYS:CE	1.016
2	A:208:ARG:NE	A:501:LYS:HG2	1.014
2	A:373:ILE:CB	A:528:GLU:HB3	1.006
2	A:185:VAL:HG22	A:411:LEU:HD22	1.005
2	A:361:ALA:HB1	A:377:VAL:CG1	1.004
2	A:208:ARG:NH1	A:502:GLN:HG2	1.002
2	A:378:HIS:CE1	A:523:HIS:CD2	0.999
2	A:59:GLU:C	A:63:ALA:H	0.998
2	A:376:PRO:HG2	A:523:HIS:HB3	0.998
2	A:200:MET:HE2	A:504:ASP:HB2	0.996
2	A:208:ARG:NH2	A:502:GLN:N	0.996
2	A:373:ILE:HB	A:528:GLU:CB	0.995
2	A:450:THR:CA	A:457:SER:N	0.988
2	A:185:VAL:CG2	A:411:LEU:CB	0.984
2	A:208:ARG:CD	A:501:LYS:CD	0.982
2	A:423:ILE:HG21	A:526:ARG:HH21	0.981
2	A:46:ILE:HD12	A:344:TYR:CE1	0.980
2	A:197:ARG:HB3	A:477:ARG:HB3	0.979
2	A:46:ILE:HD12	A:344:TYR:HE1	0.978

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
2	A:185:VAL:CG2	A:411:LEU:HB2	0.975
2	A:193:VAL:CG1	A:477:ARG:HH12	0.974
2	A:194:ASN:HD21	A:475:THR:CG2	0.974
2	A:33:LEU:CG	A:349:LYS:HZ1	0.973
2	A:330:GLU:OE1	A:377:VAL:HG23	0.970
2	A:83:ASP:O	A:411:LEU:CB	0.970
2	A:31:VAL:CA	A:352:THR:N	0.969
2	A:208:ARG:CZ	A:502:GLN:H	0.968
2	A:208:ARG:NE	A:502:GLN:N	0.966
2	A:376:PRO:HG2	A:523:HIS:CB	0.965
2	A:193:VAL:CG1	A:477:ARG:CZ	0.964
2	A:330:GLU:OE1	A:377:VAL:CG2	0.962
2	A:30:THR:CA	A:352:THR:HG23	0.958
2	A:187:LYS:CG	A:413:PRO:HD3	0.955
2	A:361:ALA:HB1	A:377:VAL:HG11	0.955
2	A:44:LYS:HD2	A:294:LYS:HE2	0.953
2	A:56:SER:HA	A:196:MET:HE1	0.953
2	A:57:VAL:HG22	A:179:PHE:HE2	0.949
2	A:333:ILE:HD13	A:376:PRO:CB	0.949
2	A:56:SER:O	A:63:ALA:CB	0.948
2	A:193:VAL:HG12	A:477:ARG:CZ	0.948
2	A:187:LYS:HD2	A:413:PRO:HD3	0.944
2	A:28:MET:C	A:352:THR:HG21	0.941

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
2	A:31:VAL:O	A:349:LYS:CD	0.939
2	A:449:THR:C	A:458:ALA:CB	0.937
2	A:59:GLU:O	A:62:GLU:N	0.937
2	A:451:LEU:CG	A:455:LEU:CD1	0.936
2	A:52:GLN:NE2	A:292:GLU:HA	0.933
2	A:44:LYS:CD	A:294:LYS:NZ	0.932
2	A:194:ASN:HD21	A:475:THR:HG22	0.930
2	A:46:ILE:CD1	A:344:TYR:CE1	0.928
2	A:379:MET:HB3	A:525:SER:OG	0.928
2	A:448:ASP:OD1	A:455:LEU:HA	0.926
2	A:187:LYS:CD	A:413:PRO:HD3	0.925
2	A:423:ILE:HB	A:526:ARG:NH2	0.925
2	A:208:ARG:NE	A:501:LYS:CG	0.923
2	A:59:GLU:OE1	A:196:MET:CE	0.922
2	A:212:LYS:HD2	A:501:LYS:HD2	0.921
2	A:293:ALA:HB1	A:512:GLN:NE2	0.917
2	A:31:VAL:HG23	A:352:THR:CG2	0.916
2	A:31:VAL:C	A:349:LYS:HD3	0.916
2	A:44:LYS:CE	A:294:LYS:NZ	0.911
2	A:59:GLU:OE1	A:196:MET:CG	0.908
2	A:208:ARG:HH21	A:501:LYS:N	0.906
2	A:379:MET:HE2	A:526:ARG:NH2	0.905
2	A:30:THR:CB	A:352:THR:HG23	0.904

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
2	A:45:ARG:NH2	A:339:VAL:CG1	0.902
2	A:57:VAL:HG21	A:179:PHE:HD2	0.901
2	A:57:VAL:CB	A:179:PHE:CD2	0.900
2	A:45:ARG:HH22	A:339:VAL:HG13	0.900
2	A:450:THR:HA	A:457:SER:H	0.900
2	A:451:LEU:HG	A:455:LEU:HD13	0.899
2	A:58:ALA:O	A:60:TYR:C	0.894
2	A:212:LYS:HG3	A:501:LYS:HD3	0.894
2	A:31:VAL:HG13	A:349:LYS:O	0.892
2	A:449:THR:C	A:458:ALA:N	0.891
2	A:449:THR:O	A:458:ALA:N	0.888
2	A:83:ASP:O	A:411:LEU:HB3	0.885
2	A:200:MET:HE2	A:503:PHE:O	0.884
2	A:450:THR:CG2	A:459:THR:H	0.883
2	A:80:ARG:H	A:408:GLU:HB2	0.882
2	A:379:MET:CE	A:526:ARG:CZ	0.881
2	A:33:LEU:HG	A:349:LYS:HZ2	0.880
2	A:57:VAL:HG13	A:179:PHE:CG	0.880
2	A:423:ILE:CG2	A:526:ARG:HH21	0.876
2	A:44:LYS:HZ2	A:294:LYS:HZ3	0.875
2	A:450:THR:HG23	A:459:THR:H	0.874
2	A:449:THR:HG21	A:458:ALA:HB1	0.874
2	A:423:ILE:CG1	A:526:ARG:NH2	0.873

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
2	A:423:ILE:CG1	A:526:ARG:HH22	0.873
2	A:187:LYS:HZ3	A:412:MET:HG3	0.872
2	A:187:LYS:HB3	A:413:PRO:HG3	0.869
2	A:59:GLU:OE1	A:196:MET:HE2	0.869
2	A:293:ALA:HB2	A:512:GLN:HE22	0.869
2	A:200:MET:HE2	A:503:PHE:C	0.865
2	A:187:LYS:NZ	A:412:MET:CG	0.865
2	A:193:VAL:HG13	A:477:ARG:NH1	0.862
2	A:212:LYS:CG	A:501:LYS:HE2	0.860
2	A:187:LYS:CD	A:412:MET:HG2	0.857
2	A:208:ARG:HH21	A:502:GLN:H	0.857
2	A:30:THR:OG1	A:352:THR:CG2	0.856
2	A:57:VAL:CG1	A:179:PHE:HD2	0.855
2	A:449:THR:CA	A:458:ALA:CB	0.855
2	A:208:ARG:CZ	A:502:GLN:HG2	0.852
2	A:376:PRO:CD	A:525:SER:OG	0.848
2	A:31:VAL:HG23	A:352:THR:HB	0.847
2	A:378:HIS:HE1	A:523:HIS:HD2	0.847
2	A:451:LEU:CG	A:455:LEU:HD13	0.843
2	A:30:THR:N	A:352:THR:HG23	0.842
2	A:187:LYS:HZ3	A:412:MET:CG	0.842
2	A:30:THR:N	A:352:THR:CG2	0.841
2	A:31:VAL:HG22	A:353:TYR:N	0.840

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
2	A:57:VAL:CB	A:179:PHE:HD2	0.836
2	A:376:PRO:HD2	A:525:SER:HG	0.832
2	A:212:LYS:HG2	A:501:LYS:HE2	0.830
2	A:30:THR:H	A:352:THR:CG2	0.829
2	A:31:VAL:HG22	A:352:THR:HB	0.829
2	A:292:GLU:CD	A:509:ARG:HH12	0.826
2	A:423:ILE:HG13	A:526:ARG:CZ	0.826
2	A:423:ILE:HG13	A:526:ARG:NH2	0.826
2	A:379:MET:HE2	A:526:ARG:NE	0.825
2	A:59:GLU:OE1	A:196:MET:HG2	0.824
2	A:292:GLU:OE1	A:509:ARG:CZ	0.824
2	A:57:VAL:HG21	A:179:PHE:CD2	0.823
2	A:451:LEU:CG	A:455:LEU:HD12	0.820
2	A:200:MET:HE2	A:504:ASP:HB3	0.818
2	A:451:LEU:CD1	A:455:LEU:CD1	0.817
2	A:187:LYS:HD2	A:412:MET:HA	0.809
2	A:212:LYS:HD2	A:501:LYS:CD	0.800
2	A:376:PRO:CD	A:525:SER:CB	0.800
2	A:212:LYS:HG3	A:501:LYS:CD	0.790
2	A:56:SER:HA	A:196:MET:CE	0.789
2	A:208:ARG:HE	A:502:GLN:N	0.788
2	A:59:GLU:HB2	A:196:MET:HE2	0.787
2	A:208:ARG:NE	A:501:LYS:CA	0.785

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
2	A:187:LYS:HD2	A:412:MET:CA	0.784
2	A:200:MET:CE	A:503:PHE:C	0.782
2	A:59:GLU:O	A:60:TYR:CD2	0.777
2	A:187:LYS:NZ	A:412:MET:HG2	0.773
2	A:450:THR:HA	A:457:SER:CA	0.773
2	A:187:LYS:HD2	A:413:PRO:CD	0.772
2	A:30:THR:H	A:352:THR:HG23	0.771
2	A:59:GLU:O	A:63:ALA:N	0.771
2	A:33:LEU:CB	A:349:LYS:NZ	0.769
2	A:46:ILE:CD1	A:344:TYR:CD1	0.761
2	A:185:VAL:HG11	A:411:LEU:O	0.760
2	A:208:ARG:HE	A:501:LYS:CB	0.756
2	A:30:THR:O	A:352:THR:N	0.753
2	A:212:LYS:HG3	A:501:LYS:CE	0.752
2	A:212:LYS:CG	A:501:LYS:HD3	0.751
2	A:59:GLU:C	A:60:TYR:CD2	0.740
2	A:193:VAL:HG11	A:477:ARG:CZ	0.738
2	A:208:ARG:HG3	A:502:GLN:OE1	0.738
2	A:194:ASN:CG	A:475:THR:CB	0.737
2	A:361:ALA:CB	A:377:VAL:CG1	0.733
2	A:31:VAL:C	A:349:LYS:CD	0.731
2	A:212:LYS:CG	A:501:LYS:CD	0.731
2	A:83:ASP:O	A:411:LEU:HB2	0.731

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
2	A:194:ASN:ND2	A:475:THR:CG2	0.726
2	A:292:GLU:OE1	A:509:ARG:NH1	0.726
2	A:46:ILE:HD11	A:344:TYR:CD1	0.724
2	A:44:LYS:CG	A:294:LYS:HE2	0.720
2	A:57:VAL:HG11	A:179:PHE:HB3	0.720
2	A:211:MET:HE2	A:501:LYS:HE3	0.719
2	A:187:LYS:HD2	A:412:MET:CB	0.716
2	A:378:HIS:CE1	A:523:HIS:HD2	0.716
2	A:449:THR:C	A:458:ALA:HB2	0.714
2	A:208:ARG:HD2	A:501:LYS:CD	0.713
2	A:32:GLU:N	A:351:SER:CB	0.712
2	A:330:GLU:OE1	A:377:VAL:HG22	0.711
2	A:374:ARG:CZ	A:524:PRO:CG	0.710
2	A:374:ARG:N	A:528:GLU:CG	0.710
2	A:212:LYS:CD	A:501:LYS:CD	0.708
2	A:376:PRO:HD2	A:525:SER:CB	0.708
2	A:194:ASN:ND2	A:475:THR:HB	0.708
2	A:364:ARG:CZ	A:380:ILE:CG2	0.704
2	A:379:MET:HB2	A:525:SER:OG	0.702
2	A:212:LYS:CG	A:501:LYS:CE	0.700
2	A:185:VAL:HG23	A:411:LEU:HD22	0.700
2	A:104:VAL:HG13	A:108:LEU:HB2	0.696
2	A:379:MET:CE	A:526:ARG:NE	0.696

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
2	A:379:MET:CG	A:525:SER:OG	0.695
2	A:369:GLN:HB2	A:371:ARG:N	0.691
2	A:212:LYS:CD	A:501:LYS:HD3	0.688
2	A:376:PRO:HG3	A:524:PRO:N	0.688
2	A:33:LEU:CB	A:349:LYS:HZ2	0.682
2	A:208:ARG:HD3	A:501:LYS:HD3	0.680
2	A:376:PRO:N	A:525:SER:CB	0.679
2	A:450:THR:HG21	A:459:THR:OG1	0.673
2	A:449:THR:CA	A:458:ALA:HB3	0.672
2	A:374:ARG:O	A:524:PRO:CA	0.672
2	A:80:ARG:N	A:408:GLU:HB2	0.671
2	A:375:ILE:HG23	A:528:GLU:OE1	0.669
2	A:204:ARG:HG3	A:501:LYS:O	0.662
2	A:187:LYS:NZ	A:412:MET:HG3	0.659
2	A:56:SER:HG	A:189:PHE:HE1	0.658
2	A:450:THR:N	A:458:ALA:H	0.657
2	A:187:LYS:HE2	A:412:MET:HG2	0.653
2	A:208:ARG:HH21	A:502:GLN:N	0.651
2	A:31:VAL:HG22	A:352:THR:C	0.650
2	A:374:ARG:O	A:524:PRO:HA	0.648
2	A:187:LYS:CD	A:412:MET:HA	0.643
2	A:56:SER:CA	A:196:MET:HE1	0.642
2	A:33:LEU:HG	A:349:LYS:HZ1	0.640

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
2	A:52:GLN:HE22	A:292:GLU:HA	0.639
2	A:56:SER:OG	A:189:PHE:HE1	0.638
2	A:292:GLU:CD	A:509:ARG:NH1	0.637
2	A:30:THR:HG1	A:352:THR:HG23	0.637
2	A:289:SER:HB3	A:509:ARG:HD3	0.636
2	A:379:MET:HG2	A:525:SER:OG	0.636
2	A:59:GLU:O	A:60:TYR:CG	0.634
2	A:194:ASN:ND2	A:475:THR:CB	0.631
2	A:369:GLN:HB3	A:371:ARG:N	0.630
2	A:200:MET:HE1	A:504:ASP:HB2	0.629
2	A:374:ARG:HH22	A:524:PRO:HG3	0.628
2	A:451:LEU:HD11	A:455:LEU:CD1	0.626
2	A:56:SER:OG	A:189:PHE:CE1	0.623
2	A:374:ARG:N	A:528:GLU:HG2	0.622
2	A:31:VAL:HG22	A:353:TYR:H	0.621
2	A:423:ILE:HG13	A:526:ARG:NH1	0.621
2	A:31:VAL:CG2	A:352:THR:CA	0.618
2	A:369:GLN:CD	A:374:ARG:HG3	0.616
2	A:187:LYS:CB	A:413:PRO:HG3	0.614
2	A:83:ASP:C	A:411:LEU:HB3	0.609
2	A:449:THR:N	A:458:ALA:HB3	0.608
2	A:212:LYS:HG3	A:501:LYS:HE2	0.604
2	A:374:ARG:NH1	A:524:PRO:HG3	0.603

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
2	A:369:GLN:OE1	A:374:ARG:HG3	0.602
2	A:450:THR:HG22	A:456:ASP:O	0.601
2	A:376:PRO:HG3	A:523:HIS:C	0.599
2	A:361:ALA:HB2	A:377:VAL:HG11	0.599
2	A:30:THR:H	A:352:THR:HG21	0.597
2	A:187:LYS:CB	A:413:PRO:CG	0.597
2	A:208:ARG:HH21	A:501:LYS:CA	0.597
2	A:193:VAL:HG11	A:477:ARG:NH2	0.595
2	A:187:LYS:NZ	A:412:MET:HA	0.593
2	A:374:ARG:O	A:525:SER:N	0.592
2	A:205:THR:HA	A:502:GLN:OE1	0.591
2	A:374:ARG:O	A:524:PRO:CB	0.591
2	A:451:LEU:CD1	A:455:LEU:HD12	0.589
2	A:197:ARG:CB	A:477:ARG:CB	0.587
2	A:185:VAL:HG21	A:411:LEU:CD2	0.583
2	A:361:ALA:CA	A:377:VAL:HG11	0.583
2	A:208:ARG:HD3	A:501:LYS:HG2	0.581
2	A:373:ILE:HG13	A:528:GLU:OE1	0.580
2	A:375:ILE:HG22	A:525:SER:C	0.577
2	A:507:ARG:HG3	A:508:GLU:H	0.577
2	A:56:SER:O	A:63:ALA:HB1	0.575
2	A:44:LYS:NZ	A:294:LYS:HZ1	0.572
2	A:194:ASN:OD1	A:475:THR:OG1	0.568

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
2	A:187:LYS:O	A:413:PRO:HG3	0.565
2	A:208:ARG:NH2	A:501:LYS:HB3	0.564
2	A:104:VAL:HG21	A:110:GLN:HB3	0.563
2	A:33:LEU:CD2	A:349:LYS:HZ2	0.561
2	A:208:ARG:CD	A:501:LYS:HD3	0.559
2	A:48:ASP:OD1	A:291:GLY:O	0.558
2	A:200:MET:HE3	A:503:PHE:C	0.555
2	A:208:ARG:NH2	A:501:LYS:N	0.554
2	A:187:LYS:HZ3	A:412:MET:CA	0.551
2	A:104:VAL:HG13	A:108:LEU:CB	0.550
2	A:369:GLN:NE2	A:374:ARG:HG3	0.547
2	A:187:LYS:NZ	A:412:MET:CA	0.545
2	A:56:SER:O	A:63:ALA:HB2	0.543
2	A:211:MET:CE	A:501:LYS:HE3	0.539
2	A:449:THR:O	A:457:SER:HB3	0.535
2	A:208:ARG:CZ	A:501:LYS:CB	0.533
2	A:31:VAL:HG22	A:352:THR:CA	0.530
2	A:419:LYS:HE2	A:526:ARG:HH11	0.529
2	A:57:VAL:CG1	A:179:PHE:CG	0.525
2	A:57:VAL:CG1	A:179:PHE:HB3	0.524
2	A:450:THR:CG2	A:459:THR:N	0.522
2	A:374:ARG:HG2	A:524:PRO:HB2	0.520
2	A:419:LYS:HD2	A:473:GLY:HA2	0.520

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
2	A:228:LEU:HB3	A:238:TRP:HB2	0.519
2	A:59:GLU:C	A:63:ALA:N	0.518
2	A:450:THR:C	A:457:SER:H	0.517
2	A:193:VAL:HG13	A:477:ARG:HH12	0.517
2	A:42:ILE:HG21	A:344:TYR:HB3	0.515
2	A:187:LYS:CD	A:413:PRO:CD	0.512
2	A:376:PRO:CG	A:523:HIS:CB	0.512
2	A:379:MET:HE1	A:526:ARG:CZ	0.512
2	A:373:ILE:CA	A:528:GLU:HB3	0.510
2	A:374:ARG:NH1	A:524:PRO:CG	0.510
2	A:205:THR:OG1	A:502:GLN:NE2	0.505
2	A:364:ARG:NH2	A:380:ILE:HG23	0.503
2	A:292:GLU:CG	A:509:ARG:HH12	0.502
2	A:44:LYS:CE	A:294:LYS:CE	0.500
2	A:56:SER:O	A:63:ALA:HB3	0.499
2	A:364:ARG:HG3	A:380:ILE:HG21	0.497
2	A:31:VAL:C	A:349:LYS:CG	0.495
2	A:68:LEU:HD22	A:148:ARG:HE	0.493
2	A:28:MET:CA	A:352:THR:HG21	0.492
2	A:200:MET:CE	A:504:ASP:CA	0.491
2	A:208:ARG:NH2	A:501:LYS:CA	0.490
2	A:80:ARG:HB3	A:408:GLU:O	0.486
2	A:187:LYS:HZ3	A:412:MET:N	0.486

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
2	A:200:MET:CE	A:504:ASP:N	0.484
2	A:450:THR:CG2	A:456:ASP:O	0.484
2	A:449:THR:C	A:458:ALA:HB3	0.479
2	A:293:ALA:HB2	A:512:GLN:CD	0.477
2	A:282:LYS:CG	A:504:ASP:OD2	0.477
2	A:59:GLU:CG	A:60:TYR:CA	0.475
2	A:451:LEU:CD2	A:455:LEU:HD13	0.474
2	A:267:LEU:HG	A:278:ILE:HG13	0.472
2	A:379:MET:HB3	A:525:SER:CB	0.472
2	A:83:ASP:OD1	A:409:ARG:HA	0.472
2	A:208:ARG:HH21	A:501:LYS:H	0.469
2	A:293:ALA:HB1	A:512:GLN:HE21	0.468
2	A:185:VAL:HG11	A:411:LEU:C	0.466
2	A:59:GLU:CB	A:196:MET:HE2	0.465
2	A:30:THR:HG1	A:352:THR:CG2	0.465
2	A:187:LYS:HD2	A:412:MET:HB3	0.464
2	A:46:ILE:CD1	A:344:TYR:HE1	0.464
2	A:306:ASN:HB2	A:335:LEU:HD21	0.462
2	A:30:THR:N	A:352:THR:HG21	0.461
2	A:167:THR:HG22	A:170:GLU:HB2	0.460
2	A:376:PRO:CG	A:523:HIS:C	0.460
2	A:450:THR:CA	A:458:ALA:H	0.459
2	A:187:LYS:C	A:413:PRO:HG3	0.458

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
2	A:379:MET:HG2	A:525:SER:HG	0.458
2	A:204:ARG:HD2	A:503:PHE:CD1	0.457
2	A:379:MET:CE	A:526:ARG:NH2	0.456
2	A:46:ILE:HD11	A:344:TYR:HD1	0.452
2	A:59:GLU:HG2	A:60:TYR:HD1	0.452
2	A:200:MET:HE2	A:504:ASP:CA	0.450
2	A:467:THR:HG22	A:530:LEU:HD11	0.450
2	A:119:GLU:HB3	A:122:GLU:HB3	0.448
2	A:119:GLU:HB3	A:122:GLU:CB	0.447
2	A:46:ILE:HD12	A:344:TYR:CD1	0.446
2	A:449:THR:H	A:458:ALA:HB3	0.446
2	A:208:ARG:CZ	A:501:LYS:CA	0.446
2	A:57:VAL:CG1	A:179:PHE:CB	0.444
2	A:449:THR:C	A:458:ALA:CA	0.444
2	A:451:LEU:HD11	A:455:LEU:HD11	0.444
2	A:450:THR:HA	A:457:SER:CB	0.443
2	A:187:LYS:CD	A:412:MET:CB	0.441
2	A:208:ARG:CG	A:502:GLN:OE1	0.441
2	A:33:LEU:HD12	A:34:LEU:HD12	0.437
2	A:379:MET:HG2	A:525:SER:CB	0.437
2	A:282:LYS:HE3	A:504:ASP:OD1	0.436
2	A:83:ASP:OD2	A:409:ARG:HA	0.436
2	A:204:ARG:HB2	A:503:PHE:HA	0.435

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
2	A:57:VAL:CG2	A:179:PHE:HE2	0.435
2	A:63:ALA:HA	A:192:LEU:HD22	0.434
2	A:419:LYS:CE	A:473:GLY:HA3	0.434
2	A:83:ASP:HB3	A:408:GLU:HA	0.431
2	A:52:GLN:NE2	A:292:GLU:CA	0.430
2	A:200:MET:HE2	A:504:ASP:N	0.429
2	A:393:MET:HE1	A:405:GLU:HB3	0.429
2	A:59:GLU:O	A:61:PRO:C	0.429
2	A:204:ARG:CG	A:501:LYS:O	0.429
2	A:193:VAL:HG11	A:477:ARG:HH22	0.427
2	A:333:ILE:CD1	A:376:PRO:CB	0.427
2	A:423:ILE:HG21	A:525:SER:O	0.427
2	A:450:THR:HA	A:458:ALA:H	0.426
2	A:364:ARG:CZ	A:380:ILE:HG23	0.425
2	A:83:ASP:CA	A:411:LEU:HB3	0.425
2	A:296:ARG:NH1	A:512:GLN:CB	0.425
2	A:74:VAL:HG22	A:79:ALA:HB3	0.424
2	A:187:LYS:CG	A:413:PRO:CD	0.422
2	A:373:ILE:C	A:528:GLU:HB3	0.422
2	A:75:GLU:OE2	A:141:ARG:HD2	0.420
2	A:200:MET:HE1	A:504:ASP:CG	0.419
2	A:31:VAL:HG11	A:349:LYS:H	0.419
2	A:83:ASP:HA	A:411:LEU:HB3	0.415

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
2	A:187:LYS:CA	A:413:PRO:HG3	0.414
2	A:361:ALA:CA	A:377:VAL:CG1	0.413
2	A:30:THR:O	A:351:SER:C	0.413
2	A:82:SER:HB3	A:133:ASN:HB3	0.411
2	A:171:GLU:HA	A:174:LYS:HZ2	0.411
2	A:47:GLU:HA	A:50:ILE:HG13	0.409
2	A:333:ILE:HD11	A:376:PRO:HB3	0.409
2	A:137:PRO:O	A:141:ARG:HG3	0.409
2	A:89:VAL:HG12	A:91:PRO:HD3	0.408
2	A:364:ARG:CZ	A:380:ILE:HG22	0.406
2	A:419:LYS:HE3	A:473:GLY:HA3	0.406
2	A:57:VAL:HG13	A:179:PHE:CB	0.400
2	A:200:MET:CE	A:503:PHE:O	0.400
3	A:57:VAL:CG1	A:179:PHE:HB3	1.577
3	A:373:ILE:HB	A:524:PRO:CG	1.575
3	A:187:LYS:CE	A:412:MET:HG2	1.570
3	A:27:GLU:CB	A:359:ARG:NH2	1.523
3	A:57:VAL:CG1	A:179:PHE:CB	1.497
3	A:423:ILE:CD1	A:526:ARG:HG2	1.479
3	A:423:ILE:HD11	A:526:ARG:CG	1.477
3	A:296:ARG:NH1	A:512:GLN:NE2	1.465
3	A:185:VAL:HG21	A:411:LEU:CB	1.421
3	A:200:MET:HE2	A:504:ASP:CB	1.415

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
3	A:27:GLU:HB2	A:359:ARG:NH2	1.405
3	A:185:VAL:CG2	A:411:LEU:HD22	1.397
3	A:34:LEU:HD12	A:349:LYS:NZ	1.374
3	A:185:VAL:HG22	A:411:LEU:CD2	1.368
3	A:42:ILE:HD13	A:342:PHE:CE2	1.367
3	A:27:GLU:CG	A:359:ARG:NH2	1.358
3	A:57:VAL:HG13	A:179:PHE:CG	1.354
3	A:42:ILE:HG21	A:342:PHE:CE2	1.344
3	A:187:LYS:HE2	A:412:MET:CG	1.344
3	A:45:ARG:NH2	A:339:VAL:HG13	1.341
3	A:45:ARG:NH2	A:339:VAL:CG1	1.340
3	A:361:ALA:CB	A:377:VAL:HG11	1.336
3	A:296:ARG:CZ	A:512:GLN:HE22	1.326
3	A:33:LEU:CA	A:349:LYS:HD3	1.319
3	A:296:ARG:CZ	A:512:GLN:NE2	1.296
3	A:373:ILE:CB	A:524:PRO:CG	1.294
3	A:32:GLU:N	A:351:SER:C	1.267
3	A:57:VAL:HG13	A:179:PHE:CB	1.265
3	A:423:ILE:HA	A:525:SER:OG	1.249
3	A:187:LYS:HB3	A:413:PRO:CD	1.245
3	A:42:ILE:HD13	A:342:PHE:CZ	1.240
3	A:185:VAL:CG2	A:411:LEU:CD2	1.239
3	A:296:ARG:NE	A:512:GLN:HE22	1.229

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
3	A:34:LEU:CD1	A:349:LYS:NZ	1.225
3	A:200:MET:CE	A:504:ASP:HB2	1.200
3	A:32:GLU:O	A:349:LYS:HG2	1.198
3	A:187:LYS:CE	A:412:MET:CG	1.193
3	A:185:VAL:HG21	A:411:LEU:CG	1.188
3	A:185:VAL:CG2	A:411:LEU:CG	1.184
3	A:27:GLU:HG2	A:356:TRP:CD1	1.183
3	A:187:LYS:CB	A:413:PRO:HD3	1.183
3	A:208:ARG:HG3	A:502:GLN:OE1	1.174
3	A:373:ILE:CB	A:524:PRO:HG2	1.173
3	A:419:LYS:NZ	A:520:LYS:HE2	1.171
3	A:57:VAL:HG11	A:179:PHE:CB	1.167
3	A:42:ILE:CG2	A:342:PHE:CE2	1.163
3	A:33:LEU:HA	A:349:LYS:HD3	1.153
3	A:34:LEU:C	A:349:LYS:HG3	1.146
3	A:208:ARG:CZ	A:502:GLN:HG2	1.143
3	A:32:GLU:N	A:352:THR:N	1.142
3	A:208:ARG:NH1	A:502:GLN:HG2	1.127
3	A:45:ARG:HH22	A:339:VAL:CG1	1.121
3	A:333:ILE:HD13	A:376:PRO:HB3	1.119
3	A:373:ILE:HD13	A:524:PRO:HB2	1.116
3	A:373:ILE:CD1	A:524:PRO:C	1.094
3	A:204:ARG:HG3	A:501:LYS:O	1.093

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
3	A:373:ILE:CD1	A:524:PRO:CB	1.093
3	A:42:ILE:CD1	A:342:PHE:CE2	1.092
3	A:369:GLN:HB3	A:371:ARG:H	1.090
3	A:208:ARG:NH2	A:502:GLN:H	1.087
3	A:373:ILE:HG21	A:524:PRO:HB2	1.084
3	A:34:LEU:CD1	A:349:LYS:HZ2	1.082
3	A:373:ILE:CD1	A:524:PRO:HB2	1.081
3	A:333:ILE:CD1	A:376:PRO:HB3	1.073
3	A:373:ILE:HB	A:524:PRO:HG3	1.065
3	A:208:ARG:NH2	A:501:LYS:HB3	1.064
3	A:373:ILE:HG21	A:524:PRO:CB	1.057
3	A:208:ARG:NH2	A:502:GLN:N	1.057
3	A:187:LYS:HB3	A:413:PRO:HD3	1.052
3	A:59:GLU:OE2	A:284:ILE:CG2	1.041
3	A:373:ILE:HB	A:524:PRO:HG2	1.041
3	A:185:VAL:HG21	A:411:LEU:HB2	1.035
3	A:32:GLU:OE1	A:309:LEU:CD2	1.033
3	A:27:GLU:HG2	A:356:TRP:HD1	1.032
3	A:369:GLN:CB	A:371:ARG:N	1.023
3	A:197:ARG:HD2	A:477:ARG:HH11	1.022
3	A:369:GLN:CB	A:371:ARG:H	1.022
3	A:187:LYS:HB3	A:413:PRO:CG	1.018
3	A:34:LEU:CD1	A:349:LYS:HZ1	1.011

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
3	A:373:ILE:CG1	A:524:PRO:HG2	1.011
3	A:32:GLU:OE1	A:309:LEU:HD22	1.006
3	A:208:ARG:HE	A:501:LYS:HG2	1.006
3	A:185:VAL:HG22	A:411:LEU:HD22	1.005
3	A:361:ALA:HB1	A:377:VAL:CG1	1.004
3	A:208:ARG:CG	A:502:GLN:OE1	1.003
3	A:419:LYS:NZ	A:520:LYS:CE	1.002
3	A:27:GLU:HG3	A:359:ARG:NH2	1.001
3	A:57:VAL:CG1	A:179:PHE:CG	0.996
3	A:185:VAL:CG2	A:411:LEU:CB	0.984
3	A:28:MET:O	A:352:THR:CG2	0.978
3	A:373:ILE:HD13	A:524:PRO:CB	0.975
3	A:185:VAL:CG2	A:411:LEU:HB2	0.975
3	A:33:LEU:N	A:349:LYS:HD3	0.970
3	A:330:GLU:OE1	A:377:VAL:HG23	0.970
3	A:83:ASP:O	A:411:LEU:CB	0.970
3	A:330:GLU:OE1	A:377:VAL:CG2	0.962
3	A:42:ILE:CD1	A:342:PHE:HE2	0.960
3	A:208:ARG:NE	A:501:LYS:HG2	0.958
3	A:34:LEU:HD13	A:349:LYS:HZ1	0.956
3	A:187:LYS:CG	A:413:PRO:HD3	0.955
3	A:361:ALA:HB1	A:377:VAL:HG11	0.955
3	A:373:ILE:HD12	A:524:PRO:C	0.953

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
3	A:31:VAL:HA	A:351:SER:O	0.952
3	A:333:ILE:HD13	A:376:PRO:CB	0.949
3	A:187:LYS:HD2	A:413:PRO:HD3	0.944
3	A:27:GLU:CG	A:356:TRP:CD1	0.941
3	A:208:ARG:HH21	A:501:LYS:CA	0.940
3	A:42:ILE:CG1	A:342:PHE:HE2	0.935
3	A:373:ILE:CB	A:524:PRO:HG3	0.931
3	A:200:MET:HE2	A:504:ASP:HB2	0.930
3	A:27:GLU:CG	A:356:TRP:HD1	0.928
3	A:296:ARG:CD	A:512:GLN:HE22	0.928
3	A:187:LYS:CD	A:413:PRO:HD3	0.925
3	A:419:LYS:HZ1	A:520:LYS:HE2	0.917
3	A:42:ILE:HD13	A:342:PHE:HE2	0.915
3	A:42:ILE:CG2	A:342:PHE:HE2	0.912
3	A:48:ASP:OD2	A:295:ALA:HB2	0.900
3	A:373:ILE:HD12	A:524:PRO:CG	0.899
3	A:43:ALA:N	A:344:TYR:CD1	0.897
3	A:296:ARG:CD	A:512:GLN:NE2	0.895
3	A:373:ILE:CD1	A:524:PRO:HG2	0.885
3	A:83:ASP:O	A:411:LEU:HB3	0.885
3	A:373:ILE:HD12	A:524:PRO:CA	0.883
3	A:296:ARG:HD2	A:512:GLN:NE2	0.882
3	A:80:ARG:H	A:408:GLU:HB2	0.882

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
3	A:27:GLU:HB2	A:359:ARG:HH22	0.874
3	A:419:LYS:HZ2	A:520:LYS:CE	0.874
3	A:187:LYS:HZ3	A:412:MET:HG3	0.872
3	A:187:LYS:HB3	A:413:PRO:HG3	0.869
3	A:373:ILE:HD12	A:524:PRO:CB	0.868
3	A:373:ILE:CD1	A:524:PRO:CG	0.867
3	A:208:ARG:HH21	A:501:LYS:CB	0.867
3	A:208:ARG:HH21	A:502:GLN:N	0.867
3	A:187:LYS:NZ	A:412:MET:CG	0.865
3	A:42:ILE:CG2	A:342:PHE:CD2	0.862
3	A:34:LEU:HD12	A:349:LYS:HZ2	0.858
3	A:449:THR:O	A:459:THR:HG22	0.858
3	A:187:LYS:CD	A:412:MET:HG2	0.857
3	A:42:ILE:HG23	A:342:PHE:CD2	0.852
3	A:197:ARG:CD	A:477:ARG:HH11	0.848
3	A:423:ILE:HD11	A:526:ARG:HG3	0.845
3	A:423:ILE:CA	A:525:SER:OG	0.845
3	A:28:MET:O	A:352:THR:HG23	0.843
3	A:204:ARG:CG	A:501:LYS:O	0.843
3	A:187:LYS:HZ3	A:412:MET:CG	0.842
3	A:373:ILE:CG2	A:524:PRO:CB	0.841
3	A:200:MET:HE2	A:504:ASP:CG	0.833
3	A:419:LYS:HZ2	A:520:LYS:CD	0.832

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
3	A:27:GLU:OE2	A:356:TRP:NE1	0.830
3	A:27:GLU:CD	A:356:TRP:CD1	0.825
3	A:57:VAL:HG12	A:179:PHE:HB3	0.815
3	A:32:GLU:O	A:349:LYS:CG	0.815
3	A:46:ILE:HD11	A:343:GLU:HA	0.813
3	A:42:ILE:HG21	A:342:PHE:HE2	0.810
3	A:32:GLU:OE1	A:309:LEU:HD21	0.810
3	A:187:LYS:HD2	A:412:MET:HA	0.809
3	A:32:GLU:OE1	A:351:SER:O	0.801
3	A:27:GLU:CD	A:359:ARG:NH2	0.800
3	A:208:ARG:HH21	A:501:LYS:HB3	0.800
3	A:373:ILE:HD12	A:524:PRO:HG2	0.796
3	A:373:ILE:CG2	A:524:PRO:HB2	0.793
3	A:419:LYS:HZ2	A:520:LYS:HD3	0.789
3	A:57:VAL:HG11	A:179:PHE:HB3	0.786
3	A:187:LYS:HD2	A:412:MET:CA	0.784
3	A:423:ILE:HD13	A:526:ARG:HG2	0.783
3	A:208:ARG:CZ	A:501:LYS:HB3	0.779
3	A:208:ARG:HH21	A:501:LYS:C	0.774
3	A:187:LYS:NZ	A:412:MET:HG2	0.773
3	A:208:ARG:NE	A:501:LYS:CG	0.773
3	A:187:LYS:HD2	A:413:PRO:CD	0.772
3	A:46:ILE:HD11	A:343:GLU:CA	0.770

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
3	A:59:GLU:OE2	A:284:ILE:HG23	0.768
3	A:45:ARG:HH21	A:339:VAL:CG1	0.767
3	A:208:ARG:NH2	A:501:LYS:CB	0.762
3	A:185:VAL:HG11	A:411:LEU:O	0.760
3	A:45:ARG:CZ	A:339:VAL:HG13	0.760
3	A:27:GLU:HG3	A:359:ARG:CZ	0.755
3	A:373:ILE:CD1	A:524:PRO:CA	0.754
3	A:27:GLU:CD	A:356:TRP:NE1	0.752
3	A:57:VAL:HA	A:179:PHE:CE2	0.749
3	A:292:GLU:OE2	A:509:ARG:NH1	0.747
3	A:208:ARG:NH1	A:502:GLN:CG	0.739
3	A:361:ALA:CB	A:377:VAL:CG1	0.733
3	A:33:LEU:N	A:349:LYS:CD	0.731
3	A:83:ASP:O	A:411:LEU:HB2	0.731
3	A:373:ILE:CG2	A:524:PRO:CG	0.725
3	A:42:ILE:CG1	A:342:PHE:CE2	0.724
3	A:59:GLU:OE2	A:284:ILE:HG22	0.723
3	A:32:GLU:CD	A:309:LEU:HD22	0.718
3	A:197:ARG:HD2	A:477:ARG:CD	0.717
3	A:187:LYS:HD2	A:412:MET:CB	0.716
3	A:208:ARG:HE	A:501:LYS:CG	0.716
3	A:46:ILE:HD11	A:344:TYR:H	0.715
3	A:43:ALA:N	A:344:TYR:HD1	0.714

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
3	A:330:GLU:OE1	A:377:VAL:HG22	0.711
3	A:201:ASP:CB	A:503:PHE:CE1	0.708
3	A:364:ARG:CZ	A:380:ILE:CG2	0.704
3	A:42:ILE:HB	A:344:TYR:HB3	0.703
3	A:185:VAL:HG23	A:411:LEU:HD22	0.700
3	A:285:ASN:OD1	A:504:ASP:OD2	0.698
3	A:104:VAL:HG13	A:108:LEU:HB2	0.696
3	A:423:ILE:HD11	A:526:ARG:HG2	0.696
3	A:373:ILE:HD12	A:524:PRO:O	0.694
3	A:35:THR:HG23	A:349:LYS:HA	0.691
3	A:369:GLN:HB2	A:371:ARG:N	0.691
3	A:197:ARG:HD2	A:477:ARG:NH1	0.687
3	A:200:MET:CE	A:504:ASP:CB	0.686
3	A:373:ILE:CB	A:524:PRO:CB	0.678
3	A:34:LEU:O	A:349:LYS:HG3	0.677
3	A:373:ILE:CD1	A:524:PRO:O	0.676
3	A:80:ARG:N	A:408:GLU:HB2	0.671
3	A:201:ASP:HB3	A:503:PHE:HE1	0.670
3	A:27:GLU:HA	A:359:ARG:HE	0.664
3	A:42:ILE:HD13	A:342:PHE:HZ	0.664
3	A:419:LYS:NZ	A:520:LYS:CD	0.662
3	A:187:LYS:NZ	A:412:MET:HG3	0.659
3	A:27:GLU:CA	A:359:ARG:NH2	0.658

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
3	A:423:ILE:HD13	A:525:SER:OG	0.655
3	A:187:LYS:HE2	A:412:MET:HG2	0.653
3	A:187:LYS:CD	A:412:MET:HA	0.643
3	A:452:GLU:HB3	A:456:ASP:OD1	0.641
3	A:27:GLU:CD	A:356:TRP:HE1	0.640
3	A:46:ILE:HD11	A:344:TYR:N	0.640
3	A:42:ILE:CB	A:342:PHE:HE2	0.639
3	A:59:GLU:CD	A:284:ILE:CG2	0.635
3	A:369:GLN:HB3	A:371:ARG:N	0.630
3	A:204:ARG:HH11	A:503:PHE:HD1	0.630
3	A:33:LEU:N	A:349:LYS:CE	0.628
3	A:376:PRO:HG2	A:519:ARG:HH22	0.628
3	A:45:ARG:NH2	A:339:VAL:HG12	0.620
3	A:42:ILE:HG23	A:342:PHE:HD2	0.618
3	A:46:ILE:HD12	A:344:TYR:CD1	0.618
3	A:369:GLN:CD	A:374:ARG:HG3	0.616
3	A:187:LYS:CB	A:413:PRO:HG3	0.614
3	A:33:LEU:CA	A:349:LYS:CD	0.613
3	A:83:ASP:C	A:411:LEU:HB3	0.609
3	A:42:ILE:HG21	A:342:PHE:CD2	0.602
3	A:369:GLN:OE1	A:374:ARG:HG3	0.602
3	A:211:MET:HE1	A:501:LYS:HE3	0.601
3	A:34:LEU:CA	A:349:LYS:CG	0.600

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
3	A:361:ALA:HB2	A:377:VAL:HG11	0.599
3	A:201:ASP:CB	A:503:PHE:HE1	0.599
3	A:197:ARG:NE	A:477:ARG:NH1	0.598
3	A:187:LYS:CB	A:413:PRO:CG	0.597
3	A:33:LEU:HD12	A:349:LYS:NZ	0.596
3	A:200:MET:CE	A:504:ASP:CG	0.595
3	A:373:ILE:CG1	A:524:PRO:CG	0.595
3	A:208:ARG:HG2	A:502:GLN:OE1	0.594
3	A:187:LYS:NZ	A:412:MET:HA	0.593
3	A:507:ARG:HG3	A:508:GLU:H	0.592
3	A:197:ARG:HE	A:477:ARG:NH1	0.592
3	A:200:MET:HE2	A:504:ASP:CA	0.584
3	A:185:VAL:HG21	A:411:LEU:CD2	0.583
3	A:197:ARG:CD	A:477:ARG:NH1	0.583
3	A:361:ALA:CA	A:377:VAL:HG11	0.583
3	A:46:ILE:CD1	A:344:TYR:H	0.578
3	A:208:ARG:CZ	A:502:GLN:N	0.574
3	A:42:ILE:CD1	A:342:PHE:CZ	0.573
3	A:33:LEU:CA	A:349:LYS:CG	0.572
3	A:57:VAL:CA	A:179:PHE:CE2	0.571
3	A:200:MET:SD	A:504:ASP:HB2	0.571
3	A:197:ARG:CD	A:477:ARG:HD2	0.569
3	A:32:GLU:C	A:352:THR:H	0.567

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
3	A:187:LYS:O	A:413:PRO:HG3	0.565
3	A:104:VAL:HG21	A:110:GLN:HB3	0.563
3	A:34:LEU:CA	A:349:LYS:HG3	0.563
3	A:453:LEU:HG	A:455:LEU:HA	0.563
3	A:296:ARG:NE	A:512:GLN:NE2	0.563
3	A:423:ILE:CD1	A:525:SER:OG	0.562
3	A:373:ILE:CG2	A:524:PRO:HG3	0.555
3	A:197:ARG:HD2	A:477:ARG:HD3	0.554
3	A:211:MET:CE	A:501:LYS:HE3	0.554
3	A:187:LYS:HZ3	A:412:MET:CA	0.551
3	A:104:VAL:HG13	A:108:LEU:CB	0.550
3	A:369:GLN:NE2	A:374:ARG:HG3	0.547
3	A:45:ARG:HH22	A:339:VAL:HG13	0.545
3	A:373:ILE:HD13	A:524:PRO:C	0.545
3	A:187:LYS:NZ	A:412:MET:CA	0.545
3	A:201:ASP:OD2	A:503:PHE:CZ	0.544
3	A:33:LEU:O	A:349:LYS:HD2	0.539
3	A:33:LEU:N	A:349:LYS:HE2	0.536
3	A:204:ARG:NH1	A:503:PHE:CD1	0.536
3	A:31:VAL:CA	A:351:SER:O	0.532
3	A:27:GLU:HA	A:359:ARG:NE	0.531
3	A:45:ARG:HH21	A:339:VAL:HG12	0.528
3	A:228:LEU:HB3	A:238:TRP:HB2	0.519

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
3	A:419:LYS:HZ3	A:520:LYS:HE2	0.518
3	A:373:ILE:HD11	A:524:PRO:C	0.518
3	A:376:PRO:HG2	A:519:ARG:NH2	0.515
3	A:32:GLU:CA	A:352:THR:N	0.513
3	A:187:LYS:CD	A:413:PRO:CD	0.512
3	A:31:VAL:H	A:352:THR:HG23	0.509
3	A:364:ARG:NH2	A:380:ILE:HG23	0.503
3	A:28:MET:O	A:352:THR:HG22	0.500
3	A:364:ARG:HG3	A:380:ILE:HG21	0.497
3	A:27:GLU:OE2	A:356:TRP:CD1	0.496
3	A:59:GLU:CD	A:284:ILE:HG21	0.493
3	A:68:LEU:HD22	A:148:ARG:HE	0.493
3	A:208:ARG:HD2	A:498:GLU:OE2	0.491
3	A:197:ARG:NE	A:477:ARG:HH11	0.490
3	A:449:THR:O	A:459:THR:CG2	0.488
3	A:80:ARG:HB3	A:408:GLU:O	0.486
3	A:187:LYS:HZ3	A:412:MET:N	0.486
3	A:58:ALA:HB2	A:176:SER:OG	0.485
3	A:373:ILE:HG21	A:524:PRO:HB3	0.485
3	A:376:PRO:CG	A:519:ARG:NH2	0.483
3	A:197:ARG:HD2	A:477:ARG:HD2	0.478
3	A:197:ARG:HD3	A:477:ARG:HD2	0.478
3	A:376:PRO:CG	A:519:ARG:HH22	0.476

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
3	A:208:ARG:NH2	A:501:LYS:C	0.475
3	A:208:ARG:HH21	A:501:LYS:N	0.475
3	A:451:LEU:C	A:455:LEU:HD23	0.474
3	A:211:MET:CE	A:501:LYS:CE	0.472
3	A:267:LEU:HG	A:278:ILE:HG13	0.472
3	A:83:ASP:OD1	A:409:ARG:HA	0.472
3	A:27:GLU:HG3	A:359:ARG:NE	0.470
3	A:42:ILE:CB	A:344:TYR:HB3	0.470
3	A:208:ARG:NE	A:501:LYS:CB	0.470
3	A:452:GLU:HA	A:455:LEU:HB3	0.469
3	A:42:ILE:HG12	A:342:PHE:CE2	0.466
3	A:185:VAL:HG11	A:411:LEU:C	0.466
3	A:32:GLU:C	A:349:LYS:HG2	0.466
3	A:187:LYS:HD2	A:412:MET:HB3	0.464
3	A:306:ASN:HB2	A:335:LEU:HD21	0.462
3	A:167:THR:HG22	A:170:GLU:HB2	0.460
3	A:55:CYS:SG	A:287:ARG:NH2	0.460
3	A:33:LEU:HA	A:349:LYS:HB3	0.458
3	A:187:LYS:C	A:413:PRO:HG3	0.458
3	A:467:THR:HG22	A:530:LEU:HD11	0.454
3	A:33:LEU:HD12	A:349:LYS:HZ3	0.452
3	A:208:ARG:CZ	A:501:LYS:CB	0.452
3	A:45:ARG:HH22	A:339:VAL:CB	0.449

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
3	A:119:GLU:HB3	A:122:GLU:HB3	0.448
3	A:119:GLU:HB3	A:122:GLU:CB	0.447
3	A:208:ARG:CD	A:501:LYS:HG2	0.446
3	A:208:ARG:HD3	A:501:LYS:HD3	0.445
3	A:59:GLU:OE1	A:60:TYR:HB2	0.443
3	A:187:LYS:CD	A:412:MET:CB	0.441
3	A:83:ASP:OD2	A:409:ARG:HA	0.436
3	A:33:LEU:HD12	A:34:LEU:HD12	0.434
3	A:63:ALA:HA	A:192:LEU:HD22	0.434
3	A:31:VAL:HG22	A:353:TYR:C	0.432
3	A:197:ARG:CD	A:477:ARG:CD	0.432
3	A:83:ASP:HB3	A:408:GLU:HA	0.431
3	A:393:MET:HE1	A:405:GLU:HB3	0.429
3	A:333:ILE:CD1	A:376:PRO:CB	0.427
3	A:33:LEU:HB3	A:352:THR:OG1	0.426
3	A:364:ARG:CZ	A:380:ILE:HG23	0.425
3	A:83:ASP:CA	A:411:LEU:HB3	0.425
3	A:74:VAL:HG22	A:79:ALA:HB3	0.424
3	A:187:LYS:CG	A:413:PRO:CD	0.422
3	A:453:LEU:HG	A:455:LEU:CA	0.421
3	A:33:LEU:HD12	A:349:LYS:H22	0.420
3	A:75:GLU:OE2	A:141:ARG:HD2	0.420
3	A:451:LEU:O	A:455:LEU:HD23	0.418

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
3	A:83:ASP:HA	A:411:LEU:HB3	0.415
3	A:187:LYS:CA	A:413:PRO:HG3	0.414
3	A:361:ALA:CA	A:377:VAL:CG1	0.413
3	A:82:SER:HB3	A:133:ASN:HB3	0.411
3	A:171:GLU:HA	A:174:LYS:HZ2	0.411
3	A:46:ILE:HD11	A:343:GLU:C	0.410
3	A:333:ILE:HD11	A:376:PRO:HB3	0.409
3	A:137:PRO:O	A:141:ARG:HG3	0.409
3	A:47:GLU:HA	A:50:ILE:HG13	0.408
3	A:57:VAL:HG11	A:179:PHE:CA	0.408
3	A:89:VAL:HG12	A:91:PRO:HD3	0.408
3	A:364:ARG:CZ	A:380:ILE:HG22	0.406
3	A:32:GLU:C	A:352:THR:N	0.406
3	A:451:LEU:O	A:455:LEU:HB3	0.405
3	A:30:THR:OG1	A:355:THR:C	0.405
3	A:208:ARG:NE	A:501:LYS:HB3	0.404
3	A:423:ILE:CD1	A:525:SER:HG	0.402
4	A:46:ILE:CG2	A:183:ARG:HA	1.662
4	A:46:ILE:HG21	A:183:ARG:CA	1.649
4	A:32:GLU:HG3	A:353:TYR:CE1	1.628
4	A:24:TYR:HB3	A:388:ARG:CZ	1.571
4	A:187:LYS:CE	A:412:MET:HG2	1.570
4	A:50:ILE:HD13	A:179:PHE:CD2	1.517

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:24:TYR:CB	A:388:ARG:CZ	1.473
4	A:41:ASP:OD1	A:345:ARG:CD	1.449
4	A:41:ASP:OD2	A:345:ARG:CG	1.430
4	A:185:VAL:HG21	A:411:LEU:CB	1.421
4	A:51:ASN:HD21	A:180:LYS:CG	1.417
4	A:41:ASP:CG	A:345:ARG:CD	1.413
4	A:36:ARG:C	A:93:ALA:HA	1.411
4	A:36:ARG:O	A:93:ALA:CA	1.402
4	A:24:TYR:HB3	A:388:ARG:NE	1.399
4	A:32:GLU:HG3	A:353:TYR:CZ	1.399
4	A:185:VAL:CG2	A:411:LEU:HD22	1.397
4	A:59:GLU:CG	A:280:GLN:O	1.391
4	A:51:ASN:ND2	A:180:LYS:HG2	1.390
4	A:378:HIS:HE1	A:496:LEU:CD1	1.388
4	A:36:ARG:HG3	A:93:ALA:C	1.385
4	A:185:VAL:HG22	A:411:LEU:CD2	1.368
4	A:36:ARG:CG	A:93:ALA:C	1.359
4	A:194:ASN:HB3	A:516:LYS:NZ	1.346
4	A:187:LYS:HE2	A:412:MET:CG	1.344
4	A:361:ALA:CB	A:377:VAL:HG11	1.336
4	A:57:VAL:C	A:61:PRO:HD3	1.321
4	A:53:VAL:O	A:60:TYR:CB	1.301
4	A:41:ASP:CG	A:345:ARG:HG3	1.292

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:337:LYS:CG	A:507:ARG:HH12	1.291
4	A:194:ASN:CB	A:516:LYS:NZ	1.287
4	A:41:ASP:CG	A:345:ARG:CG	1.286
4	A:40:ILE:C	A:345:ARG:NH1	1.281
4	A:57:VAL:C	A:61:PRO:CD	1.262
4	A:55:CYS:O	A:284:ILE:HD13	1.259
4	A:59:GLU:CB	A:280:GLN:O	1.256
4	A:340:ASP:OD2	A:507:ARG:CD	1.256
4	A:42:ILE:HG13	A:343:GLU:CD	1.255
4	A:24:TYR:HB3	A:388:ARG:NH2	1.253
4	A:187:LYS:HB3	A:413:PRO:CD	1.245
4	A:185:VAL:CG2	A:411:LEU:CD2	1.239
4	A:36:ARG:HB3	A:93:ALA:O	1.232
4	A:337:LYS:HG2	A:507:ARG:NH1	1.232
4	A:32:GLU:CG	A:353:TYR:CE1	1.223
4	A:41:ASP:OD2	A:345:ARG:HG3	1.223
4	A:27:GLU:OE1	A:384:ASN:ND2	1.222
4	A:449:THR:O	A:456:ASP:O	1.217
4	A:24:TYR:CD2	A:388:ARG:HG3	1.216
4	A:41:ASP:OD1	A:345:ARG:HD2	1.213
4	A:46:ILE:HG21	A:183:ARG:CB	1.206
4	A:187:LYS:CE	A:412:MET:CG	1.193
4	A:378:HIS:CE1	A:496:LEU:CD1	1.190

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:185:VAL:HG21	A:411:LEU:CG	1.188
4	A:185:VAL:CG2	A:411:LEU:CG	1.184
4	A:187:LYS:CB	A:413:PRO:HD3	1.183
4	A:55:CYS:O	A:284:ILE:CD1	1.173
4	A:59:GLU:HB3	A:281:VAL:CA	1.172
4	A:42:ILE:CG1	A:343:GLU:OE2	1.169
4	A:24:TYR:CG	A:388:ARG:HG3	1.166
4	A:453:LEU:CD2	A:455:LEU:HD12	1.166
4	A:50:ILE:HB	A:179:PHE:HE2	1.165
4	A:20:PRO:O	A:388:ARG:NH1	1.165
4	A:36:ARG:N	A:346:ARG:HE	1.161
4	A:194:ASN:CB	A:516:LYS:HZ3	1.161
4	A:59:GLU:N	A:284:ILE:HD12	1.160
4	A:340:ASP:OD2	A:507:ARG:HD3	1.134
4	A:452:GLU:C	A:454:PRO:HA	1.131
4	A:37:GLU:HA	A:92:ASN:N	1.128
4	A:36:ARG:C	A:93:ALA:CA	1.125
4	A:36:ARG:CG	A:94:GLU:N	1.125
4	A:59:GLU:N	A:284:ILE:CD1	1.124
4	A:39:GLU:HB2	A:91:PRO:HA	1.119
4	A:333:ILE:HD13	A:376:PRO:HB3	1.119
4	A:32:GLU:CG	A:353:TYR:CZ	1.117
4	A:40:ILE:C	A:345:ARG:HH11	1.115

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:453:LEU:N	A:454:PRO:HA	1.113
4	A:36:ARG:CB	A:93:ALA:O	1.112
4	A:453:LEU:HD23	A:454:PRO:N	1.111
4	A:59:GLU:HG2	A:280:GLN:O	1.110
4	A:41:ASP:CG	A:345:ARG:HD3	1.108
4	A:378:HIS:HE1	A:496:LEU:HD13	1.099
4	A:59:GLU:HB3	A:280:GLN:O	1.097
4	A:36:ARG:H	A:346:ARG:NE	1.095
4	A:449:THR:HA	A:456:ASP:HB3	1.094
4	A:369:GLN:HB3	A:371:ARG:H	1.090
4	A:57:VAL:HA	A:60:TYR:CD1	1.089
4	A:37:GLU:CB	A:93:ALA:H	1.085
4	A:59:GLU:C	A:281:VAL:HA	1.085
4	A:36:ARG:HG3	A:94:GLU:N	1.082
4	A:46:ILE:HG22	A:183:ARG:HA	1.082
4	A:27:GLU:HB2	A:364:ARG:CD	1.078
4	A:57:VAL:O	A:61:PRO:CD	1.076
4	A:24:TYR:CG	A:388:ARG:CG	1.074
4	A:59:GLU:CB	A:281:VAL:HA	1.074
4	A:333:ILE:CD1	A:376:PRO:HB3	1.073
4	A:453:LEU:HD22	A:455:LEU:HD12	1.066
4	A:53:VAL:O	A:60:TYR:HB2	1.064
4	A:50:ILE:HD13	A:179:PHE:CE2	1.062

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:453:LEU:CD2	A:454:PRO:HG2	1.054
4	A:187:LYS:HB3	A:413:PRO:HD3	1.052
4	A:37:GLU:HB3	A:93:ALA:H	1.049
4	A:27:GLU:HB2	A:364:ARG:NE	1.047
4	A:450:THR:HG22	A:460:THR:HG21	1.047
4	A:42:ILE:HG22	A:183:ARG:HH11	1.046
4	A:59:GLU:HB3	A:280:GLN:C	1.041
4	A:50:ILE:CD1	A:179:PHE:CD2	1.039
4	A:185:VAL:HG21	A:411:LEU:HB2	1.035
4	A:42:ILE:HG13	A:343:GLU:OE2	1.030
4	A:369:GLN:CB	A:371:ARG:N	1.023
4	A:369:GLN:CB	A:371:ARG:H	1.022
4	A:27:GLU:HB2	A:364:ARG:HD3	1.019
4	A:187:LYS:HB3	A:413:PRO:CG	1.018
4	A:453:LEU:HD23	A:454:PRO:CD	1.018
4	A:50:ILE:HB	A:179:PHE:CE2	1.015
4	A:333:ILE:HD11	A:497:GLU:OE2	1.015
4	A:59:GLU:HB3	A:281:VAL:HA	1.010
4	A:453:LEU:HD11	A:455:LEU:HA	1.009
4	A:185:VAL:HG22	A:411:LEU:HD22	1.005
4	A:453:LEU:N	A:454:PRO:CA	1.005
4	A:36:ARG:HB2	A:96:ASP:H	1.004
4	A:361:ALA:HB1	A:377:VAL:CG1	1.004

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:453:LEU:HD23	A:454:PRO:CG	1.003
4	A:36:ARG:N	A:346:ARG:NE	1.002
4	A:27:GLU:HG3	A:364:ARG:HG2	1.001
4	A:37:GLU:CA	A:92:ASN:N	0.997
4	A:24:TYR:CB	A:388:ARG:NE	0.994
4	A:378:HIS:CE1	A:496:LEU:HD13	0.987
4	A:41:ASP:OD2	A:345:ARG:CB	0.986
4	A:329:GLN:OE1	A:497:GLU:HG2	0.985
4	A:185:VAL:CG2	A:411:LEU:CB	0.984
4	A:59:GLU:CA	A:284:ILE:HD12	0.983
4	A:24:TYR:H	A:388:ARG:NH2	0.983
4	A:36:ARG:HB2	A:96:ASP:CB	0.982
4	A:24:TYR:HB2	A:388:ARG:CZ	0.979
4	A:185:VAL:CG2	A:411:LEU:HB2	0.975
4	A:27:GLU:CD	A:380:ILE:HG22	0.973
4	A:330:GLU:OE1	A:377:VAL:HG23	0.970
4	A:83:ASP:O	A:411:LEU:CB	0.970
4	A:50:ILE:CB	A:179:PHE:HE2	0.970
4	A:59:GLU:CB	A:280:GLN:C	0.969
4	A:453:LEU:CD2	A:454:PRO:CG	0.969
4	A:24:TYR:N	A:388:ARG:NH2	0.967
4	A:36:ARG:CB	A:96:ASP:H	0.966
4	A:51:ASN:ND2	A:180:LYS:CG	0.963

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:59:GLU:C	A:281:VAL:CA	0.962
4	A:330:GLU:OE1	A:377:VAL:CG2	0.962
4	A:57:VAL:CA	A:60:TYR:CD1	0.961
4	A:59:GLU:H	A:284:ILE:CD1	0.960
4	A:14:ILE:HD12	A:320:ARG:HD2	0.957
4	A:42:ILE:HG22	A:183:ARG:NH1	0.956
4	A:37:GLU:CA	A:92:ASN:H	0.955
4	A:187:LYS:CG	A:413:PRO:HD3	0.955
4	A:361:ALA:HB1	A:377:VAL:HG11	0.955
4	A:50:ILE:HD13	A:179:PHE:HD2	0.952
4	A:24:TYR:CB	A:388:ARG:NH2	0.949
4	A:333:ILE:HD13	A:376:PRO:CB	0.949
4	A:42:ILE:CG2	A:183:ARG:NH1	0.948
4	A:29:GLY:C	A:356:TRP:HZ2	0.946
4	A:36:ARG:CG	A:93:ALA:O	0.946
4	A:187:LYS:HD2	A:413:PRO:HD3	0.944
4	A:32:GLU:OE2	A:353:TYR:CZ	0.942
4	A:27:GLU:CB	A:364:ARG:HD3	0.940
4	A:37:GLU:HA	A:92:ASN:H	0.934
4	A:43:ALA:CB	A:89:VAL:HG22	0.931
4	A:29:GLY:O	A:356:TRP:CZ2	0.931
4	A:453:LEU:HD22	A:454:PRO:HG2	0.929
4	A:41:ASP:N	A:345:ARG:HD3	0.927

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:36:ARG:HB2	A:96:ASP:N	0.926
4	A:187:LYS:CD	A:413:PRO:HD3	0.925
4	A:29:GLY:C	A:356:TRP:CZ2	0.920
4	A:340:ASP:OD2	A:507:ARG:CG	0.912
4	A:36:ARG:HB2	A:96:ASP:HB2	0.911
4	A:449:THR:CA	A:456:ASP:HB3	0.911
4	A:419:LYS:CD	A:515:ALA:HB2	0.909
4	A:24:TYR:H	A:388:ARG:HH22	0.903
4	A:32:GLU:HG3	A:353:TYR:HE1	0.902
4	A:27:GLU:HG2	A:381:GLU:HG2	0.897
4	A:32:GLU:CG	A:353:TYR:OH	0.897
4	A:57:VAL:N	A:60:TYR:HD1	0.896
4	A:27:GLU:O	A:360:GLN:OE1	0.896
4	A:24:TYR:CD2	A:388:ARG:CG	0.894
4	A:34:LEU:CD2	A:96:ASP:C	0.892
4	A:194:ASN:HB3	A:516:LYS:HZ2	0.892
4	A:46:ILE:CG2	A:183:ARG:CA	0.891
4	A:59:GLU:HB3	A:281:VAL:N	0.890
4	A:57:VAL:N	A:60:TYR:CD1	0.890
4	A:37:GLU:CD	A:94:GLU:OE2	0.889
4	A:34:LEU:CD2	A:96:ASP:O	0.888
4	A:378:HIS:HE1	A:496:LEU:HD11	0.886
4	A:378:HIS:CE1	A:496:LEU:HD11	0.885

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:83:ASP:O	A:411:LEU:HB3	0.885
4	A:32:GLU:OE2	A:353:TYR:OH	0.883
4	A:80:ARG:H	A:408:GLU:HB2	0.882
4	A:51:ASN:CG	A:180:LYS:HG2	0.881
4	A:187:LYS:HZ3	A:412:MET:HG3	0.872
4	A:32:GLU:CD	A:353:TYR:CZ	0.870
4	A:333:ILE:CD1	A:497:GLU:OE2	0.870
4	A:187:LYS:HB3	A:413:PRO:HG3	0.869
4	A:36:ARG:O	A:93:ALA:HA	0.867
4	A:27:GLU:HB2	A:364:ARG:HE	0.866
4	A:187:LYS:NZ	A:412:MET:CG	0.865
4	A:36:ARG:CB	A:93:ALA:C	0.862
4	A:39:GLU:HB2	A:91:PRO:CA	0.861
4	A:187:LYS:CD	A:412:MET:HG2	0.857
4	A:58:ALA:N	A:61:PRO:HD3	0.856
4	A:299:LYS:HZ1	A:507:ARG:HG2	0.856
4	A:59:GLU:O	A:281:VAL:N	0.854
4	A:419:LYS:HD2	A:515:ALA:HB2	0.849
4	A:57:VAL:N	A:60:TYR:CB	0.848
4	A:453:LEU:CD2	A:455:LEU:CD1	0.845
4	A:36:ARG:HG2	A:93:ALA:C	0.842
4	A:194:ASN:CB	A:516:LYS:HZ2	0.842
4	A:187:LYS:HZ3	A:412:MET:CG	0.842

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:337:LYS:HG2	A:507:ARG:HH12	0.842
4	A:36:ARG:CG	A:96:ASP:H	0.841
4	A:340:ASP:OD2	A:507:ARG:HG2	0.840
4	A:453:LEU:HD11	A:455:LEU:CA	0.837
4	A:24:TYR:CE2	A:388:ARG:HG3	0.832
4	A:56:SER:C	A:60:TYR:HD1	0.830
4	A:24:TYR:CD2	A:388:ARG:NE	0.829
4	A:27:GLU:CB	A:364:ARG:CD	0.827
4	A:41:ASP:OD1	A:345:ARG:CG	0.826
4	A:42:ILE:CG2	A:183:ARG:HH11	0.821
4	A:27:GLU:OE2	A:380:ILE:HG22	0.812
4	A:187:LYS:HD2	A:412:MET:HA	0.809
4	A:32:GLU:HG3	A:353:TYR:OH	0.803
4	A:448:ASP:O	A:456:ASP:CB	0.803
4	A:37:GLU:CB	A:93:ALA:N	0.802
4	A:57:VAL:H	A:60:TYR:CB	0.798
4	A:14:ILE:CD1	A:320:ARG:HD2	0.794
4	A:299:LYS:NZ	A:507:ARG:HG2	0.790
4	A:57:VAL:O	A:61:PRO:HD3	0.788
4	A:453:LEU:HD22	A:455:LEU:CD1	0.786
4	A:27:GLU:OE1	A:364:ARG:NE	0.786
4	A:187:LYS:HD2	A:412:MET:CA	0.784
4	A:57:VAL:H	A:60:TYR:HB2	0.783

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:24:TYR:CA	A:388:ARG:NH2	0.782
4	A:43:ALA:HB1	A:89:VAL:HG22	0.782
4	A:449:THR:O	A:456:ASP:C	0.781
4	A:41:ASP:N	A:345:ARG:HH11	0.778
4	A:24:TYR:CG	A:388:ARG:NE	0.773
4	A:187:LYS:NZ	A:412:MET:HG2	0.773
4	A:187:LYS:HD2	A:413:PRO:CD	0.772
4	A:36:ARG:H	A:346:ARG:HE	0.771
4	A:37:GLU:HA	A:91:PRO:C	0.770
4	A:59:GLU:H	A:284:ILE:HD13	0.770
4	A:34:LEU:HD21	A:96:ASP:O	0.769
4	A:453:LEU:HD21	A:455:LEU:HD12	0.768
4	A:59:GLU:CA	A:281:VAL:HA	0.767
4	A:24:TYR:CD1	A:388:ARG:HG3	0.763
4	A:36:ARG:HG3	A:93:ALA:CA	0.763
4	A:185:VAL:HG11	A:411:LEU:O	0.760
4	A:337:LYS:CG	A:507:ARG:NH1	0.759
4	A:340:ASP:CG	A:507:ARG:HD3	0.757
4	A:41:ASP:HB2	A:343:GLU:HB3	0.755
4	A:57:VAL:C	A:61:PRO:HD2	0.755
4	A:50:ILE:CD1	A:179:PHE:CE2	0.752
4	A:27:GLU:CB	A:364:ARG:HE	0.749
4	A:59:GLU:CB	A:281:VAL:CA	0.749

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:55:CYS:O	A:284:ILE:CG1	0.749
4	A:51:ASN:CG	A:180:LYS:CG	0.744
4	A:449:THR:O	A:460:THR:OG1	0.744
4	A:21:VAL:HA	A:388:ARG:CZ	0.743
4	A:14:ILE:HD12	A:320:ARG:CD	0.739
4	A:41:ASP:HB2	A:343:GLU:CD	0.738
4	A:40:ILE:O	A:345:ARG:NH1	0.736
4	A:14:ILE:HD13	A:366:ILE:CG2	0.735
4	A:29:GLY:O	A:356:TRP:HZ2	0.734
4	A:361:ALA:CB	A:377:VAL:CG1	0.733
4	A:27:GLU:CA	A:364:ARG:HD3	0.732
4	A:83:ASP:O	A:411:LEU:HB2	0.731
4	A:57:VAL:O	A:61:PRO:HD2	0.717
4	A:30:THR:N	A:356:TRP:CZ2	0.717
4	A:14:ILE:HD12	A:320:ARG:HB3	0.716
4	A:187:LYS:HD2	A:412:MET:CB	0.716
4	A:27:GLU:CG	A:364:ARG:HG2	0.715
4	A:59:GLU:CD	A:280:GLN:O	0.715
4	A:41:ASP:HB2	A:343:GLU:CG	0.712
4	A:51:ASN:ND2	A:180:LYS:CD	0.712
4	A:330:GLU:OE1	A:377:VAL:HG22	0.711
4	A:453:LEU:HD21	A:455:LEU:CD1	0.711
4	A:36:ARG:NH2	A:94:GLU:HG2	0.708

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:40:ILE:N	A:91:PRO:HB3	0.706
4	A:43:ALA:HB3	A:89:VAL:HG22	0.704
4	A:59:GLU:HG2	A:280:GLN:C	0.704
4	A:364:ARG:CZ	A:380:ILE:CG2	0.704
4	A:185:VAL:HG23	A:411:LEU:HD22	0.700
4	A:453:LEU:CD1	A:455:LEU:HA	0.699
4	A:41:ASP:CB	A:345:ARG:HD3	0.698
4	A:41:ASP:CA	A:345:ARG:HD3	0.697
4	A:46:ILE:HG21	A:183:ARG:C	0.696
4	A:104:VAL:HG13	A:108:LEU:HB2	0.696
4	A:50:ILE:CB	A:179:PHE:CE2	0.694
4	A:369:GLN:HB2	A:371:ARG:N	0.691
4	A:24:TYR:HB2	A:388:ARG:NH1	0.687
4	A:27:GLU:CB	A:364:ARG:NE	0.687
4	A:419:LYS:HD3	A:515:ALA:HB2	0.684
4	A:36:ARG:HH11	A:92:ASN:CA	0.682
4	A:36:ARG:CA	A:346:ARG:HE	0.679
4	A:419:LYS:HD2	A:515:ALA:CB	0.678
4	A:32:GLU:OE2	A:353:TYR:CE2	0.674
4	A:24:TYR:HB3	A:388:ARG:HE	0.671
4	A:80:ARG:N	A:408:GLU:HB2	0.671
4	A:35:THR:O	A:92:ASN:OD1	0.670
4	A:36:ARG:HG2	A:93:ALA:O	0.668

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:24:TYR:CD2	A:388:ARG:CD	0.667
4	A:41:ASP:H	A:345:ARG:HD3	0.667
4	A:24:TYR:CG	A:388:ARG:HG2	0.662
4	A:27:GLU:CD	A:364:ARG:NE	0.659
4	A:187:LYS:NZ	A:412:MET:HG3	0.659
4	A:32:GLU:CD	A:353:TYR:OH	0.659
4	A:51:ASN:OD1	A:180:LYS:CG	0.655
4	A:37:GLU:HB3	A:93:ALA:N	0.653
4	A:187:LYS:HE2	A:412:MET:HG2	0.653
4	A:329:GLN:OE1	A:497:GLU:CG	0.653
4	A:43:ALA:HB1	A:89:VAL:CG2	0.649
4	A:24:TYR:N	A:388:ARG:HH22	0.649
4	A:57:VAL:HA	A:60:TYR:HD1	0.644
4	A:187:LYS:CD	A:412:MET:HA	0.643
4	A:41:ASP:HB2	A:343:GLU:CB	0.641
4	A:50:ILE:CG1	A:179:PHE:CE2	0.641
4	A:29:GLY:O	A:356:TRP:CE2	0.638
4	A:14:ILE:HD13	A:366:ILE:HG22	0.636
4	A:51:ASN:HD21	A:180:LYS:HG2	0.633
4	A:369:GLN:HB3	A:371:ARG:N	0.630
4	A:59:GLU:HB3	A:281:VAL:C	0.629
4	A:450:THR:HG22	A:460:THR:CG2	0.627
4	A:24:TYR:HD2	A:388:ARG:HE	0.623

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:24:TYR:CD1	A:388:ARG:CG	0.618
4	A:194:ASN:HB3	A:516:LYS:HZ1	0.617
4	A:27:GLU:HG3	A:364:ARG:CG	0.616
4	A:369:GLN:CD	A:374:ARG:HG3	0.616
4	A:187:LYS:CB	A:413:PRO:HG3	0.614
4	A:41:ASP:N	A:345:ARG:NH1	0.614
4	A:34:LEU:HD21	A:96:ASP:C	0.612
4	A:36:ARG:CG	A:96:ASP:N	0.612
4	A:50:ILE:CD1	A:179:PHE:HD2	0.612
4	A:42:ILE:HG13	A:343:GLU:CG	0.611
4	A:20:PRO:O	A:388:ARG:CZ	0.610
4	A:83:ASP:C	A:411:LEU:HB3	0.609
4	A:448:ASP:O	A:456:ASP:HB3	0.608
4	A:37:GLU:OE2	A:94:GLU:OE2	0.606
4	A:32:GLU:CB	A:353:TYR:CE1	0.605
4	A:300:LYS:HZ2	A:504:ASP:C	0.604
4	A:452:GLU:C	A:454:PRO:CA	0.603
4	A:41:ASP:OD2	A:345:ARG:HB2	0.602
4	A:369:GLN:OE1	A:374:ARG:HG3	0.602
4	A:448:ASP:O	A:456:ASP:CG	0.602
4	A:36:ARG:HD2	A:92:ASN:O	0.600
4	A:361:ALA:HB2	A:377:VAL:HG11	0.599
4	A:34:LEU:HD22	A:96:ASP:O	0.598

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:40:ILE:H	A:91:PRO:HB3	0.598
4	A:190:ASP:CG	A:512:GLN:HG2	0.597
4	A:187:LYS:CB	A:413:PRO:CG	0.597
4	A:36:ARG:HH11	A:92:ASN:C	0.596
4	A:59:GLU:H	A:284:ILE:HD12	0.595
4	A:187:LYS:NZ	A:412:MET:HA	0.593
4	A:41:ASP:HB2	A:343:GLU:OE1	0.592
4	A:36:ARG:NH1	A:95:GLU:HB2	0.592
4	A:36:ARG:CD	A:92:ASN:O	0.587
4	A:36:ARG:NH1	A:92:ASN:HA	0.587
4	A:27:GLU:CD	A:364:ARG:HE	0.586
4	A:27:GLU:O	A:360:GLN:CD	0.585
4	A:57:VAL:N	A:60:TYR:CG	0.585
4	A:36:ARG:HG3	A:92:ASN:C	0.584
4	A:507:ARG:HG3	A:508:GLU:H	0.584
4	A:37:GLU:OE1	A:94:GLU:OE2	0.584
4	A:185:VAL:HG21	A:411:LEU:CD2	0.583
4	A:361:ALA:CA	A:377:VAL:HG11	0.583
4	A:56:SER:C	A:60:TYR:CD1	0.582
4	A:30:THR:O	A:356:TRP:CE3	0.582
4	A:448:ASP:O	A:456:ASP:OD2	0.575
4	A:190:ASP:CG	A:512:GLN:CG	0.574
4	A:57:VAL:CA	A:60:TYR:HD1	0.572

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:24:TYR:CE1	A:385:LYS:HA	0.570
4	A:333:ILE:HD11	A:496:LEU:HD21	0.570
4	A:450:THR:C	A:457:SER:HA	0.568
4	A:27:GLU:CG	A:381:GLU:HG2	0.565
4	A:187:LYS:O	A:413:PRO:HG3	0.565
4	A:51:ASN:ND2	A:180:LYS:HE3	0.564
4	A:104:VAL:HG21	A:110:GLN:HB3	0.563
4	A:21:VAL:HA	A:388:ARG:NH1	0.562
4	A:36:ARG:CB	A:96:ASP:CB	0.557
4	A:194:ASN:HB3	A:516:LYS:HZ3	0.554
4	A:21:VAL:CA	A:388:ARG:CZ	0.553
4	A:36:ARG:HB2	A:96:ASP:CA	0.552
4	A:187:LYS:HZ3	A:412:MET:CA	0.551
4	A:104:VAL:HG13	A:108:LEU:CB	0.550
4	A:419:LYS:NZ	A:514:GLU:HB3	0.549
4	A:369:GLN:NE2	A:374:ARG:HG3	0.547
4	A:20:PRO:C	A:388:ARG:HH12	0.547
4	A:187:LYS:NZ	A:412:MET:CA	0.545
4	A:194:ASN:HB2	A:516:LYS:HZ2	0.542
4	A:39:GLU:HB2	A:90:ASP:C	0.538
4	A:14:ILE:HD12	A:320:ARG:CB	0.536
4	A:59:GLU:CA	A:281:VAL:N	0.535
4	A:194:ASN:CG	A:516:LYS:HZ3	0.534

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:31:VAL:O	A:356:TRP:CZ2	0.532
4	A:41:ASP:OD1	A:345:ARG:HG3	0.530
4	A:57:VAL:O	A:61:PRO:CG	0.530
4	A:36:ARG:HG3	A:93:ALA:N	0.527
4	A:20:PRO:C	A:388:ARG:NH1	0.526
4	A:51:ASN:ND2	A:180:LYS:CE	0.521
4	A:46:ILE:CG2	A:183:ARG:CB	0.520
4	A:228:LEU:HB3	A:238:TRP:HB2	0.519
4	A:340:ASP:OD2	A:507:ARG:HD2	0.519
4	A:59:GLU:CA	A:281:VAL:CA	0.517
4	A:59:GLU:CA	A:284:ILE:CD1	0.516
4	A:41:ASP:OD2	A:345:ARG:N	0.515
4	A:187:LYS:CD	A:413:PRO:CD	0.512
4	A:333:ILE:CD1	A:496:LEU:HD21	0.511
4	A:27:GLU:OE1	A:364:ARG:CZ	0.511
4	A:27:GLU:C	A:360:GLN:OE1	0.511
4	A:59:GLU:CA	A:280:GLN:C	0.510
4	A:59:GLU:CB	A:281:VAL:N	0.509
4	A:53:VAL:C	A:60:TYR:CB	0.508
4	A:36:ARG:CB	A:96:ASP:N	0.505
4	A:51:ASN:CG	A:180:LYS:CD	0.504
4	A:190:ASP:HB3	A:512:GLN:HG2	0.504
4	A:364:ARG:NH2	A:380:ILE:HG23	0.503

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:29:GLY:O	A:356:TRP:NE1	0.502
4	A:57:VAL:CA	A:60:TYR:CG	0.500
4	A:38:GLY:HA2	A:345:ARG:HB2	0.498
4	A:364:ARG:HG3	A:380:ILE:HG21	0.497
4	A:41:ASP:CB	A:343:GLU:CG	0.496
4	A:68:LEU:HD22	A:148:ARG:HE	0.493
4	A:24:TYR:CZ	A:388:ARG:HG3	0.491
4	A:453:LEU:CD1	A:455:LEU:HD12	0.491
4	A:41:ASP:CB	A:343:GLU:HB3	0.490
4	A:453:LEU:N	A:454:PRO:C	0.490
4	A:449:THR:C	A:460:THR:HG1	0.489
4	A:27:GLU:HA	A:360:GLN:OE1	0.488
4	A:80:ARG:HB3	A:408:GLU:O	0.486
4	A:187:LYS:HZ3	A:412:MET:N	0.486
4	A:300:LYS:HE3	A:504:ASP:HA	0.484
4	A:36:ARG:HB2	A:96:ASP:HB3	0.483
4	A:34:LEU:HB2	A:348:TYR:OH	0.482
4	A:17:THR:OG1	A:367:ALA:HB1	0.482
4	A:30:THR:HA	A:356:TRP:CE2	0.481
4	A:337:LYS:HE2	A:507:ARG:HH22	0.480
4	A:299:LYS:HZ1	A:340:ASP:CG	0.476
4	A:452:GLU:HA	A:457:SER:HB3	0.476
4	A:36:ARG:CZ	A:94:GLU:HG2	0.475

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:36:ARG:CB	A:96:ASP:HB2	0.474
4	A:267:LEU:HG	A:278:ILE:HG13	0.472
4	A:83:ASP:OD1	A:409:ARG:HA	0.472
4	A:27:GLU:OE1	A:384:ASN:HB2	0.471
4	A:27:GLU:CG	A:364:ARG:CD	0.470
4	A:333:ILE:CG1	A:497:GLU:OE2	0.468
4	A:53:VAL:O	A:60:TYR:HB3	0.467
4	A:185:VAL:HG11	A:411:LEU:C	0.466
4	A:27:GLU:OE1	A:364:ARG:NH2	0.466
4	A:27:GLU:CG	A:364:ARG:NE	0.464
4	A:187:LYS:HD2	A:412:MET:HB3	0.464
4	A:306:ASN:HB2	A:335:LEU:HD21	0.462
4	A:42:ILE:HG21	A:183:ARG:NH1	0.461
4	A:167:THR:HG22	A:170:GLU:HB2	0.460
4	A:187:LYS:C	A:413:PRO:HG3	0.458
4	A:51:ASN:OD1	A:180:LYS:HD2	0.455
4	A:14:ILE:CD1	A:366:ILE:CG2	0.455
4	A:24:TYR:HA	A:384:ASN:HB3	0.454
4	A:190:ASP:CB	A:512:GLN:HG2	0.454
4	A:37:GLU:HA	A:91:PRO:CA	0.450
4	A:42:ILE:CB	A:183:ARG:NH1	0.449
4	A:57:VAL:N	A:60:TYR:HB2	0.449
4	A:51:ASN:OD1	A:180:LYS:HG3	0.449

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:37:GLU:CB	A:92:ASN:N	0.449
4	A:119:GLU:HB3	A:122:GLU:HB3	0.448
4	A:30:THR:O	A:357:TRP:HA	0.448
4	A:40:ILE:CA	A:91:PRO:HB3	0.447
4	A:119:GLU:HB3	A:122:GLU:CB	0.447
4	A:24:TYR:CE1	A:388:ARG:HG3	0.447
4	A:51:ASN:CG	A:180:LYS:HD2	0.446
4	A:43:ALA:HA	A:183:ARG:HD3	0.443
4	A:14:ILE:CD1	A:320:ARG:HB3	0.443
4	A:416:LYS:HD3	A:511:ARG:HH21	0.443
4	A:14:ILE:HB	A:320:ARG:O	0.442
4	A:59:GLU:C	A:281:VAL:N	0.442
4	A:187:LYS:CD	A:412:MET:CB	0.441
4	A:14:ILE:CG2	A:320:ARG:O	0.438
4	A:467:THR:HG22	A:530:LEU:HD11	0.438
4	A:43:ALA:CB	A:89:VAL:CG2	0.437
4	A:449:THR:C	A:460:THR:OG1	0.436
4	A:83:ASP:OD2	A:409:ARG:HA	0.436
4	A:63:ALA:HA	A:192:LEU:HD22	0.434
4	A:300:LYS:NZ	A:504:ASP:C	0.432
4	A:36:ARG:C	A:93:ALA:C	0.431
4	A:83:ASP:HB3	A:408:GLU:HA	0.431
4	A:450:THR:O	A:457:SER:OG	0.431

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:27:GLU:HA	A:364:ARG:HD3	0.430
4	A:25:MET:H	A:388:ARG:NH2	0.430
4	A:393:MET:HE1	A:405:GLU:HB3	0.429
4	A:452:GLU:O	A:454:PRO:HB3	0.429
4	A:59:GLU:HB2	A:284:ILE:HB	0.427
4	A:333:ILE:CD1	A:376:PRO:CB	0.427
4	A:39:GLU:OE2	A:92:ASN:ND2	0.427
4	A:364:ARG:CZ	A:380:ILE:HG23	0.425
4	A:83:ASP:CA	A:411:LEU:HB3	0.425
4	A:337:LYS:HG3	A:507:ARG:NH1	0.425
4	A:74:VAL:HG22	A:79:ALA:HB3	0.424
4	A:33:LEU:HD12	A:34:LEU:HD12	0.423
4	A:187:LYS:CG	A:413:PRO:CD	0.422
4	A:75:GLU:OE2	A:141:ARG:HD2	0.420
4	A:24:TYR:CB	A:388:ARG:CG	0.419
4	A:27:GLU:OE1	A:380:ILE:O	0.418
4	A:416:LYS:HD3	A:511:ARG:NH2	0.416
4	A:83:ASP:HA	A:411:LEU:HB3	0.415
4	A:41:ASP:CB	A:343:GLU:CD	0.415
4	A:187:LYS:CA	A:413:PRO:HG3	0.414
4	A:59:GLU:N	A:284:ILE:HD13	0.414
4	A:36:ARG:NH1	A:92:ASN:CA	0.413
4	A:337:LYS:HA	A:507:ARG:HH11	0.413

Model ID	Atom-1	Atom-2	Clash overlap (Å)
4	A:361:ALA:CA	A:377:VAL:CG1	0.413
4	A:329:GLN:OE1	A:497:GLU:CB	0.413
4	A:34:LEU:HD21	A:96:ASP:HA	0.411
4	A:47:GLU:HA	A:50:ILE:HG13	0.411
4	A:59:GLU:CG	A:280:GLN:C	0.411
4	A:82:SER:HB3	A:133:ASN:HB3	0.411
4	A:171:GLU:HA	A:174:LYS:HZ2	0.411
4	A:35:THR:HG22	A:346:ARG:HH12	0.410
4	A:137:PRO:O	A:141:ARG:HG3	0.409
4	A:89:VAL:HG12	A:91:PRO:HD3	0.408
4	A:20:PRO:O	A:388:ARG:NH2	0.408
4	A:14:ILE:CD1	A:366:ILE:HG21	0.406
4	A:364:ARG:CZ	A:380:ILE:HG22	0.406
4	A:27:GLU:HG2	A:381:GLU:CG	0.401
4	A:448:ASP:O	A:456:ASP:HB2	0.401

Torsion angles: Protein backbone ?

In the following table, Ramachandran outliers are listed. The Analysed column shows the number of residues for which the backbone conformation was analysed.

Model ID	Analysed	Favored	Allowed	Outliers
1	531	481	42	8
2	530	480	42	8
3	531	479	43	9
4	530	480	42	8

Detailed list of outliers are tabulated below.

Torsion angles: Protein sidechains ?

In the following table, sidechain outliers are listed. The Analysed column shows the number of residues for which the sidechain conformation was analysed.

Model ID	Analyzed	Favored	Allowed	Outliers
1	473	455	17	1
2	473	455	17	1
3	473	455	17	1
4	473	455	17	1

Detailed list of outliers are tabulated below.

Model ID	Chain	Residue ID	Residue type
1	A	422	LYS
2	A	422	LYS
3	A	422	LYS
4	A	422	LYS

Fit of model to data used for modeling ?

Crosslinking-MS

Validation for this section is under development.

Fit of model to data used for validation ?

Validation for this section is under development.

Acknowledgements

Development of integrative model validation metrics, implementation of a model validation pipeline, and creation of a validation report for integrative structures, are funded by NSF ABI awards (DBI-1756248, DBI-2112966, DBI-2112967, DBI-2112968, and DBI-1756250). The [PDB-Dev team](#) and members of [Sali lab](#) contributed model validation metrics and software packages.

Implementation of validation methods for SAS data and SAS-based models are funded by [RCSB PDB](#) (grant number

DBI-1832184). Dr. Stephen Burley, Dr. John Westbrook, and Dr. Jasmine Young from [RCSB PDB](#), Dr. Jill Trehwella, Dr. Dina Schneidman, and members of the [SASBDB](#) repository are acknowledged for their advice and support in implementing SAS validation methods.

Members of the [wwPDB Integrative/Hybrid Methods Task Force](#) provided recommendations and community support for the project.