



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

May 19, 2024 – 09:02 PM JST

PDB ID : 6L42
EMDB ID : EMD-0828
Title : Structure of severe fever with thrombocytopenia syndrome virus L protein
Authors : Wang, P.; Lou, Z.
Deposited on : 2019-10-15
Resolution : 3.40 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

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.dev92
MolProbity : 4.02b-467
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
MapQ : 1.9.13
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.36.2

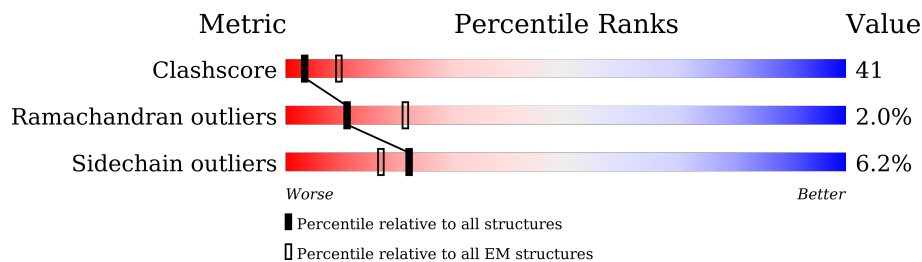
1 Overall quality at a glance i

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 3.40 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 ≥ 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	2109	

2 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 14827 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 RNA polymerase.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S		
1	A	1864	14826	9388	2574	2773	91	0	0

There are 26 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-24	MET	-	initiating methionine	UNP I0DF35
A	-23	SER	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-22	TYR	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-21	TYR	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-20	HIS	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-19	HIS	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-18	HIS	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-17	HIS	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-16	HIS	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-15	HIS	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-14	ASP	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-13	TYR	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-12	ASP	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-11	ILE	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-10	PRO	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-9	THR	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-8	THR	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-7	GLU	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-6	ASN	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-5	LEU	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-4	TYR	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-3	PHE	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-2	GLN	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-1	GLY	-	expression tag	UNP I0DF35
A	0	ALA	-	expression tag	UNP I0DF35
A	1321	GLU	GLN	engineered mutation	UNP I0DF35

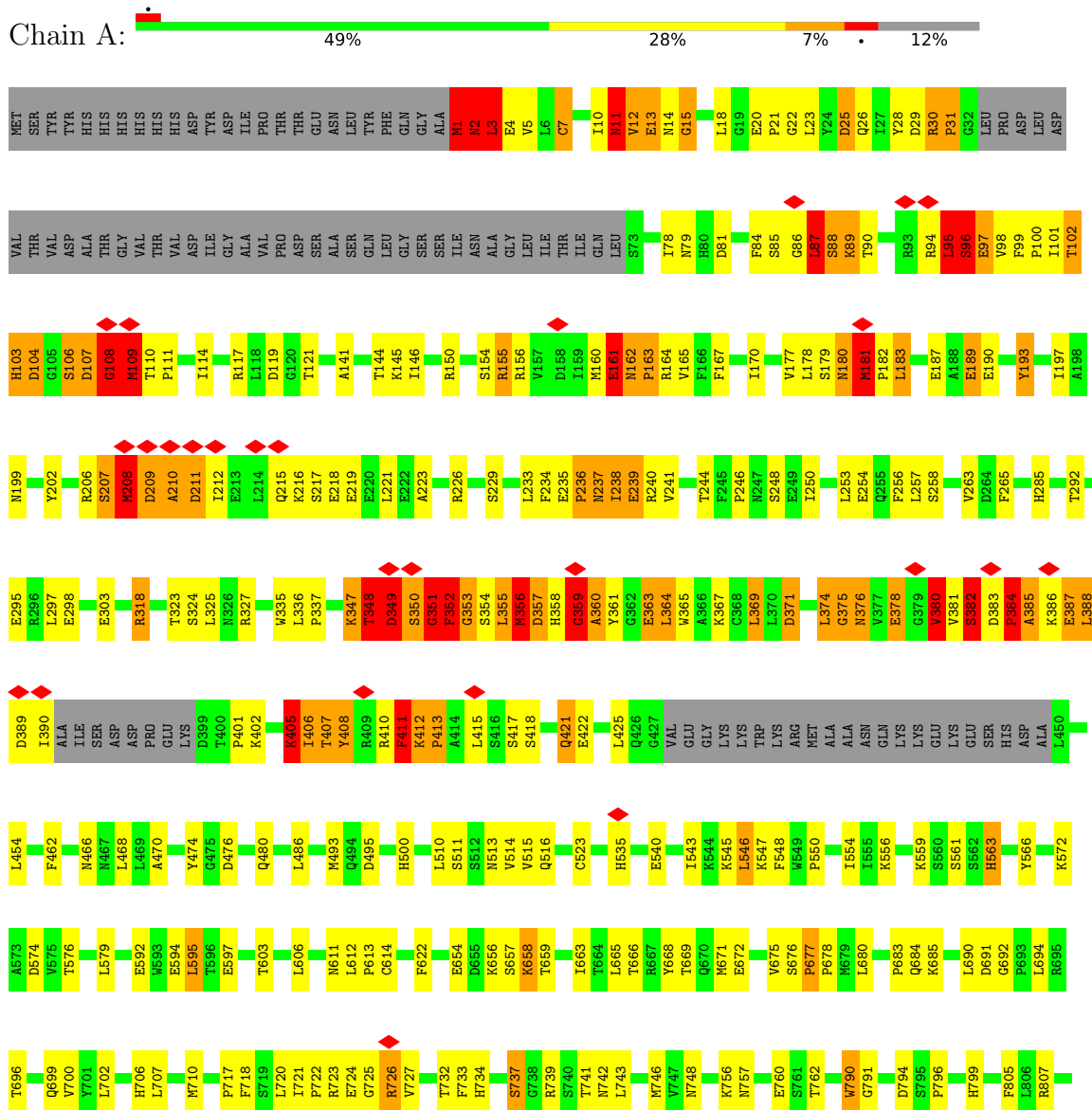
- Molecule 2 is MAGNESIUM ION (three-letter code: MG) (formula: Mg).

Mol	Chain	Residues	Atoms		AltConf
2	A	1	Total	Mg	0
			1	1	

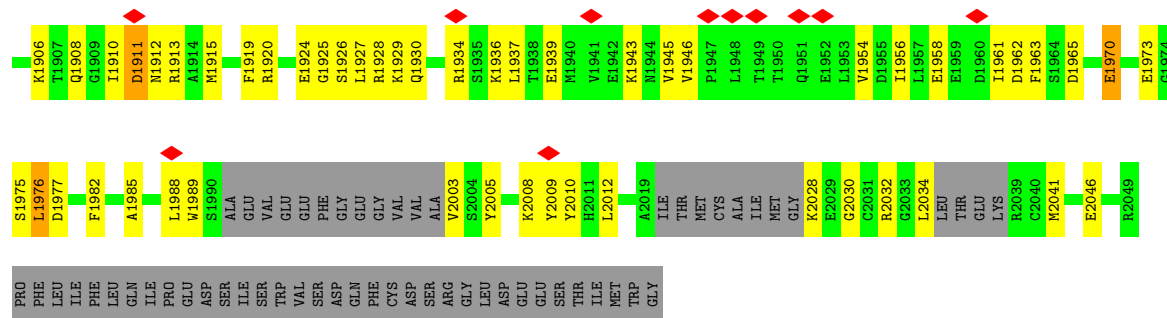
3 Residue-property plots i

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: RNA polymerase



S811	D891	K981	M1066	V1176	F1275	K1385	L1456	L1529	K1589	F1654	W1725	R1827
R815	A892	S982	D1066	Y1177	F1276	E1388	M1457	G1550	K1590	S1655	T1726	V1828
R820	V893	S983	K1067	C1178	L1277	K1390	N1458	P1531	S1591	L1656	D1731	G1830
G822	G894	N984	G1068	V1179	N1280	E1388	N1459	R1532	G1592	L1657	V1734	I1832
R823	R895	N985	M1069	E1180	M1281	K1390	Q1460	L1533	C1593	I1658	G1731	L1833
Q824	A896	K987	Q1070	Y1181	P1281	Y1390	E1461	L1534	V1594	VAL	PRO	M1834
C905	R897	K988	Y1071	M1182	A1282	H1391	R1462	K1535	T1595	GLN	GLN	V1837
M906	R907	N989	I1072	S1183	F1283	P1392	Y1474	E1536	T1596	VAL	GLN	T1838
R907	K912	G990	K1073	E1184	R1290	S1393	C1475	W1539	I1597	VAL	PRO	L1839
Q827	K913	N990	E1075	F1185	F1291	V1395	T1476	D1539	T1598	VAL	GLN	I1840
E831	K914	G991	E1076	F1186	A1296	T1396	L1477	K1540	GLN	VAL	VAL	I1841
R835	K915	H1002	Q1080	H1188	A1296	S1397	L1478	R1542	VAL	ARG	ARG	E1844
E836	R916	L1002	Q1081	R1189	H1299	S1398	H1483	A1543	ASN	ASN	LEU	V1844
I837	H916	C1003	I1082	H1190	T1300	L1401	LEU	S1544	LEU	THR	THR	I1844
G838	G917	W1004	L1082	H1191	D1301	K1401	GLY	F1546	P1546	P1546	P1546	I1844
T839	G918	F1005	L1090	T1195	L1302	G1402	LYS	W1547	P1547	P1547	P1547	Y1850
K840	R920	M1006	H1091	L1196	G1303	H1403	PHE	L1548	L1548	L1548	L1548	Y1853
N841	R921	P1007	Q1095	R1197	R1304	V1404	VAL	S1549	S1549	S1549	S1549	Y1853
I842	E921	F1010	Y1110	H1203	K1308	Y1405	VAL	T1550	D1551	D1551	D1551	S1858
L843	Y922	H1011	Y1110	Q1204	Y1308	P1406	VAL	D1551	P1552	P1552	P1552	A1862
D844	V924	R1012	Y1110	Q1204	Y1309	R1407	GLU	P1552	P1552	P1552	P1552	W1866
M848	A927	F1013	S1116	E1207	I1313	V1408	ASN	S1553	E1554	E1554	E1554	W1866
K849	Q933	I1014	D1120	T1208	I1313	Y1414	I1E	T1555	L1556	L1556	L1556	R1867
T851	Q933	F1021	D1120	T1208	GLY	L1415	VAL	L1556	L1556	L1556	L1556	R1867
S852	R934	R1022	I1122	A1210	LYS	L1415	VAL	L1556	L1556	L1556	L1556	R1867
R853	G935	R1023	E1123	A1210	THR	R1418	ARG	R1557	R1557	R1557	R1557	R1867
F854	G944	K1024	S1128	Q1215	LYS	R1418	ARG	G1559	P1560	P1560	P1560	R1867
L860	S947	Y1028	S1133	Q1215	ASP	F1421	ASP	F1561	F1561	F1561	F1561	R1867
Y861	P948	D1029	I1134	S1219	GLU	F1423	PHE	F1423	S1662	S1662	S1662	R1867
E862	H949	L1030	R1135	T1223	ASP	S1424	LEU	L1562	L1562	L1562	L1562	R1867
V864	E950	L1033	P1136	T1223	Y1323	S1425	GLN	H1564	H1564	H1564	H1564	R1867
Q865	T951	L1037	K1137	G1228	R1324	I1427	GLU	V1565	V1565	V1565	V1565	R1867
K867	V952	S1037	S1138	G1228	R1324	I1427	PRO	Q1566	Q1566	Q1566	Q1566	R1867
H870	R956	SER	D1139	F1232	T1329	H1428	VAL	F1567	F1567	F1567	F1567	R1867
S872	L957	LYS	M1140	S1233	T1333	GLY	ASP	R1568	R1568	R1568	R1568	R1867
K873	K958	SER	D1141	S1233	L1334	ARG	ARG	N1569	F1570	F1570	F1570	R1867
L875	H965	ARG	E1142	Y1247	M1339	G1431	CYS	I1571	I1571	I1571	I1571	R1867
E876	G966	SER	R1144	C1253	M1339	S1432	K1512	A1572	A1572	A1572	A1572	R1867
R871	L967	SER	L1153	L1254	D1344	K1434	E1514	D1574	D1574	D1574	D1574	R1867
S872	L967	SER	L1153	H1255	R1345	K1435	D1515	A1575	A1575	A1575	A1575	R1867
K873	K968	SER	L1153	P1256	R1345	S1437	L1516	A1576	A1576	A1576	A1576	R1867
L875	S969	D1046	M1160	L1257	Y1348	L1438	V1517	K1577	K1577	K1577	K1577	R1867
E876	A970	P1047	P1161	L1257	Q1349	L1441	S1518	S1578	S1578	S1578	S1578	R1867
L881	R971	M1052	L1162	G1283	Q1349	L1441	E1519	R1579	R1579	R1579	R1579	R1867
I882	S972	M1052	L1162	M1284	L1352	L1441	E1519	R1579	R1579	R1579	R1579	R1867
E883	L973	A1055	F1169	L1284	L1352	S1445	V1520	S1680	S1680	S1680	S1680	R1867
K884	G974	G1164	G1164	L1265	L1352	S1445	V1520	V1581	V1581	V1581	V1581	R1867
G885	G974	A1055	G1164	L1265	L1352	S1445	V1520	V1581	V1581	V1581	V1581	R1867
V886	P975	M1059	E1169	I1266	M1355	I1447	G1523	R1582	R1582	R1582	R1582	R1867
M887	G976	M1060	K1170	S1267	G1356	I1447	G1523	R1582	R1582	R1582	R1582	R1867
W888	S977	R1060	E1173	P1269	L1357	S1448	L1594	K1525	K1525	K1525	K1525	R1867
Y889	R978	E1061	M1173	P1269	L1357	S1448	L1594	K1525	K1525	K1525	K1525	R1867
W889	R979	V1062	M1174	D1270	I1365	M1450	S1526	R1586	R1586	R1586	R1586	R1867
I960	I960	S1063	T1175	G1274	M1368	S1455	K1528	P1587	P1587	P1587	P1587	R1867



4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	
Number of particles used	147344	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	PHASE FLIPPING AND AMPLITUDE CORRECTION	Depositor
Microscope	FEI TITAN KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{\AA}^2$)	40, 40	Depositor
Minimum defocus (nm)	Not provided	
Maximum defocus (nm)	Not provided	
Magnification	Not provided	
Image detector	GATAN K2 SUMMIT (4k x 4k), GATAN K2 SUMMIT (4k x 4k)	Depositor
Maximum map value	0.061	Depositor
Minimum map value	-0.028	Depositor
Average map value	0.000	Depositor
Map value standard deviation	0.002	Depositor
Recommended contour level	0.0085	Depositor
Map size (\AA)	237.6, 237.6, 237.6	wwPDB
Map dimensions	220, 220, 220	wwPDB
Map angles ($^\circ$)	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing (\AA)	1.08, 1.08, 1.08	Depositor

5 Model quality i

5.1 Standard geometry i

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z >5	RMSZ	# Z >5
1	A	0.63	50/15117 (0.3%)	1.58	342/20379 (1.7%)

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

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	94

All (50) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	1575	ASP	CB-CG	-14.65	1.21	1.51
1	A	1520	VAL	CA-C	-13.50	1.17	1.52
1	A	1139	ASP	C-O	-11.93	1.00	1.23
1	A	348	THR	C-N	11.29	1.60	1.34
1	A	892	ALA	C-N	11.11	1.59	1.34
1	A	1568	ARG	N-CA	10.70	1.67	1.46
1	A	1532	ARG	C-N	10.45	1.58	1.34
1	A	1	MET	C-N	10.42	1.58	1.34
1	A	411	PHE	C-N	10.36	1.57	1.34
1	A	1524	LEU	C-N	10.33	1.57	1.34
1	A	1139	ASP	N-CA	10.21	1.66	1.46
1	A	1580	SER	C-N	9.62	1.56	1.34
1	A	1393	PRO	N-CD	-9.00	1.35	1.47
1	A	1581	VAL	C-N	8.88	1.54	1.34
1	A	895	GLN	C-N	8.72	1.54	1.34
1	A	975	PRO	N-CD	-8.29	1.36	1.47
1	A	108	GLY	N-CA	-8.24	1.33	1.46
1	A	1687	SER	C-N	7.83	1.52	1.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	1576	ALA	CA-CB	7.54	1.68	1.52
1	A	207	SER	N-CA	7.42	1.61	1.46
1	A	407	THR	N-CA	7.38	1.61	1.46
1	A	1523	GLY	CA-C	-7.37	1.40	1.51
1	A	1578	SER	N-CA	7.25	1.60	1.46
1	A	1520	VAL	C-O	7.14	1.36	1.23
1	A	106	SER	C-O	7.06	1.36	1.23
1	A	1521	TRP	N-CA	6.89	1.60	1.46
1	A	1575	ASP	CG-OD1	-6.77	1.09	1.25
1	A	207	SER	CA-C	6.66	1.70	1.52
1	A	357	ASP	C-O	-6.34	1.11	1.23
1	A	407	THR	CA-C	6.32	1.69	1.52
1	A	1811	ARG	C-N	-6.30	1.21	1.33
1	A	353	GLY	CA-C	-6.10	1.42	1.51
1	A	353	GLY	N-CA	-5.87	1.37	1.46
1	A	1589	LYS	N-CA	5.83	1.58	1.46
1	A	236	PRO	N-CD	5.78	1.55	1.47
1	A	106	SER	N-CA	-5.68	1.34	1.46
1	A	1520	VAL	N-CA	5.64	1.57	1.46
1	A	109	MET	C-O	5.60	1.33	1.23
1	A	563	HIS	C-N	-5.57	1.21	1.34
1	A	1424	SER	CA-C	5.55	1.67	1.52
1	A	208	MET	N-CA	5.37	1.57	1.46
1	A	1579	ARG	N-CA	5.37	1.57	1.46
1	A	1398	SER	C-N	5.35	1.46	1.34
1	A	1141	ASP	C-O	-5.29	1.13	1.23
1	A	351	GLY	C-N	-5.19	1.22	1.34
1	A	1518	SER	C-N	5.18	1.46	1.34
1	A	1523	GLY	C-O	5.14	1.31	1.23
1	A	209	ASP	CA-C	-5.09	1.39	1.52
1	A	1561	PHE	C-N	5.04	1.45	1.34
1	A	969	SER	C-N	5.03	1.45	1.34

All (342) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1580	SER	O-C-N	-27.81	78.20	122.70
1	A	1	MET	O-C-N	-27.06	79.40	122.70
1	A	348	THR	O-C-N	-26.74	79.92	122.70
1	A	1567	PHE	O-C-N	-24.76	83.09	122.70
1	A	1687	SER	O-C-N	-24.62	83.31	122.70
1	A	1581	VAL	O-C-N	24.11	161.28	122.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1393	PRO	CA-C-N	-21.60	73.00	116.20
1	A	1522	PHE	CA-C-N	-21.51	73.19	116.20
1	A	1576	ALA	O-C-N	-20.38	90.09	122.70
1	A	1574	VAL	O-C-N	-20.19	90.40	122.70
1	A	1584	LEU	O-C-N	-20.02	89.16	123.20
1	A	1582	ARG	O-C-N	-19.83	90.97	122.70
1	A	374	LEU	C-N-CA	19.35	162.94	122.30
1	A	1	MET	CA-C-N	19.02	159.03	117.20
1	A	1580	SER	CA-C-N	18.59	158.09	117.20
1	A	873	LYS	C-N-CA	18.48	167.90	121.70
1	A	348	THR	CA-C-N	18.30	157.47	117.20
1	A	871	ARG	N-CA-CB	-18.24	77.77	110.60
1	A	411	PHE	O-C-N	18.18	151.78	122.70
1	A	104	ASP	CB-CA-C	-18.07	74.26	110.40
1	A	1581	VAL	CA-C-N	-18.04	77.50	117.20
1	A	1546	ALA	CB-CA-C	18.02	137.13	110.10
1	A	563	HIS	O-C-N	-17.89	94.08	122.70
1	A	104	ASP	N-CA-C	17.50	158.26	111.00
1	A	108	GLY	CA-C-O	-17.45	89.18	120.60
1	A	1867	SER	CB-CA-C	-17.25	77.33	110.10
1	A	418	SER	CB-CA-C	16.94	142.29	110.10
1	A	1567	PHE	CA-C-N	16.79	154.14	117.20
1	A	1573	HIS	O-C-N	-16.73	95.94	122.70
1	A	849	LYS	N-CA-CB	-16.61	80.70	110.60
1	A	1393	PRO	O-C-N	-16.48	95.19	123.20
1	A	1522	PHE	C-N-CA	-16.11	88.47	122.30
1	A	375	GLY	N-CA-C	16.04	153.20	113.10
1	A	1519	GLU	O-C-N	-15.99	97.11	122.70
1	A	1655	SER	C-N-CA	15.98	161.66	121.70
1	A	1519	GLU	N-CA-CB	-15.59	82.54	110.60
1	A	790	TRP	N-CA-C	15.46	152.74	111.00
1	A	96	SER	CB-CA-C	15.40	139.37	110.10
1	A	1433	THR	N-CA-C	-15.20	69.95	111.00
1	A	1209	GLU	CB-CA-C	-15.18	80.05	110.40
1	A	1868	ASN	N-CA-C	-14.95	70.64	111.00
1	A	896	ALA	CB-CA-C	-14.76	87.95	110.10
1	A	411	PHE	CA-C-N	-14.59	85.11	117.20
1	A	579	LEU	N-CA-C	-14.51	71.82	111.00
1	A	1575	ASP	N-CA-CB	-14.31	84.83	110.60
1	A	915	GLN	N-CA-C	-14.31	72.37	111.00
1	A	353	GLY	CA-C-N	-14.26	85.83	117.20
1	A	848	MET	N-CA-C	-14.23	72.59	111.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1520	VAL	C-N-CA	-14.06	86.54	121.70
1	A	896	ALA	N-CA-CB	-14.05	90.43	110.10
1	A	348	THR	C-N-CA	13.76	156.09	121.70
1	A	374	LEU	N-CA-C	13.75	148.11	111.00
1	A	380	VAL	O-C-N	-13.70	100.78	122.70
1	A	1696	GLN	CB-CA-C	-13.65	83.10	110.40
1	A	1575	ASP	N-CA-C	-13.60	74.27	111.00
1	A	1398	SER	N-CA-C	-13.48	74.60	111.00
1	A	1811	ARG	O-C-N	-13.46	100.31	123.20
1	A	725	GLY	N-CA-C	-13.43	79.52	113.10
1	A	1575	ASP	C-N-CA	13.43	155.26	121.70
1	A	359	GLY	C-N-CA	13.39	155.17	121.70
1	A	87	LEU	CB-CA-C	-13.22	85.08	110.20
1	A	1393	PRO	N-CA-C	13.14	146.28	112.10
1	A	1523	GLY	C-N-CA	-13.05	89.07	121.70
1	A	1524	LEU	CA-C-N	-13.05	88.49	117.20
1	A	1866	TRP	C-N-CA	13.04	154.30	121.70
1	A	1546	ALA	N-CA-C	-13.03	75.82	111.00
1	A	353	GLY	C-N-CA	12.98	154.14	121.70
1	A	1574	VAL	C-N-CA	12.98	154.14	121.70
1	A	1655	SER	N-CA-C	-12.84	76.32	111.00
1	A	1568	ARG	NE-CZ-NH2	-12.81	113.89	120.30
1	A	1561	PHE	O-C-N	-12.78	102.25	122.70
1	A	12	VAL	O-C-N	12.65	142.94	122.70
1	A	1434	GLN	N-CA-C	-12.55	77.13	111.00
1	A	726	ARG	N-CA-CB	-12.49	88.12	110.60
1	A	1576	ALA	CA-C-N	12.49	144.67	117.20
1	A	1393	PRO	N-CD-CG	-12.33	84.70	103.20
1	A	975	PRO	CA-C-N	-12.32	91.55	116.20
1	A	102	THR	N-CA-C	12.30	144.22	111.00
1	A	109	MET	CB-CA-C	-12.25	85.90	110.40
1	A	355	LEU	N-CA-C	-12.22	78.02	111.00
1	A	95	LEU	O-C-N	-12.06	103.41	122.70
1	A	1654	PHE	O-C-N	12.06	141.99	122.70
1	A	873	LYS	O-C-N	-11.94	103.59	122.70
1	A	1687	SER	C-N-CA	-11.88	92.01	121.70
1	A	349	ASP	C-N-CA	-11.86	92.05	121.70
1	A	1792	GLY	N-CA-C	-11.81	83.57	113.10
1	A	1522	PHE	O-C-N	11.70	143.09	123.20
1	A	975	PRO	O-C-N	11.64	143.00	123.20
1	A	1518	SER	C-N-CA	-11.53	92.88	121.70
1	A	87	LEU	N-CA-C	11.48	141.99	111.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1434	GLN	N-CA-CB	11.45	131.20	110.60
1	A	1696	GLN	N-CA-C	11.39	141.74	111.00
1	A	1581	VAL	C-N-CA	-11.37	93.27	121.70
1	A	1391	HIS	CB-CA-C	-11.34	87.72	110.40
1	A	349	ASP	N-CA-C	-11.30	80.48	111.00
1	A	1559	GLY	C-N-CD	-11.22	95.92	120.60
1	A	1529	LEU	CB-CA-C	11.13	131.35	110.20
1	A	1065	MET	N-CA-C	-11.11	81.01	111.00
1	A	1568	ARG	O-C-N	-11.06	105.00	122.70
1	A	1575	ASP	CB-CG-OD2	-11.05	108.35	118.30
1	A	1913	ARG	N-CA-CB	-10.98	90.84	110.60
1	A	384	PRO	O-C-N	-10.94	105.19	122.70
1	A	238	ILE	CB-CA-C	-10.94	89.72	111.60
1	A	1811	ARG	CA-C-N	10.88	137.97	116.20
1	A	976	GLY	CA-C-N	-10.86	93.32	117.20
1	A	546	LEU	N-CA-C	-10.83	81.76	111.00
1	A	1139	ASP	CA-C-O	-10.80	97.41	120.10
1	A	212	ILE	N-CA-C	-10.71	82.08	111.00
1	A	12	VAL	CA-C-N	-10.69	93.68	117.20
1	A	563	HIS	CA-C-N	10.67	140.68	117.20
1	A	1393	PRO	N-CA-CB	-10.59	90.59	103.30
1	A	1391	HIS	N-CA-C	10.57	139.54	111.00
1	A	181	MET	N-CA-C	-10.53	82.56	111.00
1	A	1397	SER	O-C-N	-10.48	105.94	122.70
1	A	352	PHE	N-CA-CB	10.36	129.25	110.60
1	A	1582	ARG	CA-C-N	10.27	139.79	117.20
1	A	1576	ALA	CA-C-O	-10.23	98.61	120.10
1	A	1575	ASP	CA-C-N	-10.21	94.73	117.20
1	A	1866	TRP	O-C-N	-10.13	106.50	122.70
1	A	974	GLY	C-N-CD	-10.12	98.33	120.60
1	A	888	TRP	CB-CA-C	10.11	130.61	110.40
1	A	1532	ARG	C-N-CA	-10.08	96.51	121.70
1	A	359	GLY	N-CA-C	10.00	138.09	113.10
1	A	870	HIS	N-CA-C	-9.97	84.07	111.00
1	A	1583	LEU	O-C-N	-9.93	106.82	122.70
1	A	1141	ASP	CA-C-O	-9.88	99.35	120.10
1	A	382	SER	CB-CA-C	9.78	128.68	110.10
1	A	1524	LEU	N-CA-C	9.73	137.27	111.00
1	A	1066	ASP	N-CA-CB	-9.68	93.17	110.60
1	A	1523	GLY	CA-C-O	-9.68	103.17	120.60
1	A	353	GLY	CA-C-O	9.62	137.91	120.60
1	A	1576	ALA	C-N-CA	9.45	145.33	121.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1209	GLU	N-CA-C	9.44	136.49	111.00
1	A	1584	LEU	C-N-CA	-9.44	102.48	122.30
1	A	1580	SER	C-N-CA	9.38	145.14	121.70
1	A	1524	LEU	O-C-N	9.35	137.65	122.70
1	A	102	THR	CB-CA-C	-9.33	86.42	111.60
1	A	1654	PHE	CA-C-N	-9.30	96.73	117.20
1	A	2	ASN	CB-CA-C	9.27	128.93	110.40
1	A	107	ASP	CA-C-N	-9.19	97.83	116.20
1	A	181	MET	C-N-CD	9.18	147.68	128.40
1	A	1584	LEU	CA-C-N	-9.10	98.00	116.20
1	A	209	ASP	CA-C-N	-9.04	97.31	117.20
1	A	2	ASN	C-N-CA	9.03	144.27	121.70
1	A	1023	ARG	N-CA-C	-9.01	86.69	111.00
1	A	895	GLN	C-N-CA	-8.99	99.21	121.70
1	A	1696	GLN	N-CA-CB	8.96	126.72	110.60
1	A	979	ASN	N-CA-CB	8.91	126.64	110.60
1	A	1399	LEU	CA-C-N	-8.86	97.71	117.20
1	A	95	LEU	C-N-CA	-8.82	99.65	121.70
1	A	1519	GLU	CB-CA-C	8.81	128.03	110.40
1	A	1575	ASP	CB-CG-OD1	-8.78	110.39	118.30
1	A	110	THR	N-CA-CB	-8.64	93.88	110.30
1	A	355	LEU	CB-CA-C	8.60	126.53	110.20
1	A	411	PHE	C-N-CA	-8.59	100.23	121.70
1	A	384	PRO	CA-N-CD	-8.55	99.52	111.50
1	A	182	PRO	CA-N-CD	-8.55	99.53	111.50
1	A	1697	SER	N-CA-CB	8.49	123.24	110.50
1	A	848	MET	CB-CA-C	-8.45	93.51	110.40
1	A	893	VAL	CA-C-N	-8.44	99.33	116.20
1	A	974	GLY	N-CA-C	-8.37	92.18	113.10
1	A	3	LEU	CB-CA-C	8.35	126.07	110.20
1	A	1400	SER	C-N-CA	-8.35	100.82	121.70
1	A	977	SER	C-N-CA	8.33	142.53	121.70
1	A	1397	SER	C-N-CA	-8.30	100.95	121.70
1	A	873	LYS	CA-C-N	8.30	135.45	117.20
1	A	1068	GLY	N-CA-C	8.26	133.75	113.10
1	A	1798	ALA	N-CA-C	-8.25	88.73	111.00
1	A	1523	GLY	O-C-N	-8.19	109.59	122.70
1	A	1519	GLU	N-CA-C	8.19	133.11	111.00
1	A	1141	ASP	CA-C-N	8.18	135.19	117.20
1	A	2	ASN	CA-C-N	-8.15	99.27	117.20
1	A	563	HIS	C-N-CA	8.07	141.88	121.70
1	A	896	ALA	C-N-CA	8.06	141.85	121.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	109	MET	N-CA-C	8.00	132.60	111.00
1	A	1523	GLY	CA-C-N	8.00	134.79	117.20
1	A	1577	LYS	O-C-N	-7.96	109.97	122.70
1	A	975	PRO	CB-CA-C	-7.95	92.12	112.00
1	A	978	ILE	N-CA-C	-7.91	89.64	111.00
1	A	353	GLY	O-C-N	7.88	135.31	122.70
1	A	1573	HIS	N-CA-C	-7.74	90.10	111.00
1	A	88	SER	N-CA-C	-7.71	90.18	111.00
1	A	347	LYS	O-C-N	7.70	135.03	122.70
1	A	347	LYS	CA-C-N	-7.69	100.28	117.20
1	A	1424	SER	N-CA-C	7.69	131.76	111.00
1	A	106	SER	CA-C-N	-7.68	100.30	117.20
1	A	824	GLN	N-CA-C	7.67	131.72	111.00
1	A	1559	GLY	C-N-CA	7.65	154.12	122.00
1	A	1551	ASP	C-N-CD	-7.59	103.90	120.60
1	A	579	LEU	CB-CA-C	-7.57	95.83	110.20
1	A	1570	PHE	CB-CA-C	-7.56	95.29	110.40
1	A	1140	MET	C-N-CA	7.53	140.51	121.70
1	A	1061	GLU	CA-C-N	-7.52	100.65	117.20
1	A	209	ASP	N-CA-C	-7.50	90.76	111.00
1	A	407	THR	N-CA-C	7.44	131.09	111.00
1	A	1426	SER	O-C-N	-7.42	110.83	122.70
1	A	976	GLY	N-CA-C	7.41	131.63	113.10
1	A	209	ASP	O-C-N	7.39	134.53	122.70
1	A	1521	TRP	CB-CA-C	7.29	124.97	110.40
1	A	871	ARG	CB-CA-C	-7.26	95.88	110.40
1	A	1518	SER	CB-CA-C	7.25	123.87	110.10
1	A	1527	THR	N-CA-C	-7.24	91.46	111.00
1	A	1568	ARG	CA-C-N	7.22	133.09	117.20
1	A	380	VAL	CA-C-N	7.20	133.04	117.20
1	A	1561	PHE	CA-C-N	7.18	132.99	117.20
1	A	106	SER	CB-CA-C	7.17	123.72	110.10
1	A	1402	GLY	N-CA-C	7.16	131.00	113.10
1	A	1573	HIS	CA-C-N	7.12	132.86	117.20
1	A	1446	SER	N-CA-C	7.09	130.16	111.00
1	A	1588	VAL	O-C-N	-7.08	111.38	122.70
1	A	1208	THR	C-N-CA	-7.05	104.07	121.70
1	A	209	ASP	N-CA-CB	-7.03	97.94	110.60
1	A	95	LEU	N-CA-C	-7.03	92.03	111.00
1	A	872	SER	N-CA-CB	-6.99	100.02	110.50
1	A	1139	ASP	CA-CB-CG	-6.95	98.12	113.40
1	A	1458	PRO	N-CA-C	-6.90	94.17	112.10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1459	ASN	N-CA-C	-6.90	92.38	111.00
1	A	1432	SER	N-CA-C	6.88	129.59	111.00
1	A	872	SER	N-CA-C	6.88	129.57	111.00
1	A	1575	ASP	CA-C-O	6.87	134.53	120.10
1	A	978	ILE	CB-CA-C	6.85	125.31	111.60
1	A	1654	PHE	C-N-CA	6.84	138.79	121.70
1	A	1545	PHE	CA-C-N	-6.81	102.22	117.20
1	A	1866	TRP	CA-C-N	6.80	132.15	117.20
1	A	347	LYS	C-N-CA	-6.72	104.89	121.70
1	A	893	VAL	O-C-N	6.67	134.54	123.20
1	A	1139	ASP	CA-C-N	6.64	131.81	117.20
1	A	1061	GLU	O-C-N	6.61	133.27	122.70
1	A	1433	THR	CB-CA-C	-6.60	93.79	111.60
1	A	1678	SER	N-CA-C	-6.60	93.19	111.00
1	A	1579	ARG	C-N-CA	-6.57	105.29	121.70
1	A	182	PRO	O-C-N	-6.51	112.28	122.70
1	A	790	TRP	N-CA-CB	-6.48	98.94	110.60
1	A	1390	VAL	CB-CA-C	6.42	123.60	111.40
1	A	1529	LEU	C-N-CA	6.39	135.73	122.30
1	A	110	THR	N-CA-C	6.35	128.14	111.00
1	A	974	GLY	O-C-N	6.34	133.15	121.10
1	A	406	ILE	C-N-CA	-6.34	105.84	121.70
1	A	108	GLY	CA-C-N	6.32	131.11	117.20
1	A	11	ASN	C-N-CA	6.30	137.45	121.70
1	A	1587	PRO	N-CA-C	6.28	128.44	112.10
1	A	106	SER	CA-C-O	6.27	133.26	120.10
1	A	1697	SER	N-CA-C	6.26	127.91	111.00
1	A	1576	ALA	N-CA-C	6.26	127.90	111.00
1	A	161	GLU	CB-CA-C	-6.25	97.90	110.40
1	A	1061	GLU	C-N-CA	6.17	137.14	121.70
1	A	384	PRO	CA-C-N	6.15	130.73	117.20
1	A	1656	THR	N-CA-C	-6.07	94.61	111.00
1	A	1552	PRO	N-CA-C	-6.04	96.39	112.10
1	A	1141	ASP	N-CA-C	-6.03	94.72	111.00
1	A	353	GLY	N-CA-C	-6.03	98.03	113.10
1	A	873	LYS	N-CA-C	-5.98	94.85	111.00
1	A	1526	ARG	C-N-CA	5.86	136.35	121.70
1	A	1970	GLU	N-CA-CB	-5.86	100.06	110.60
1	A	894	GLY	C-N-CA	-5.85	107.07	121.70
1	A	349	ASP	N-CA-CB	5.84	121.12	110.60
1	A	209	ASP	C-N-CA	5.84	136.30	121.70
1	A	919	LEU	N-CA-C	-5.84	95.24	111.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	888	TRP	C-N-CA	5.84	136.29	121.70
1	A	974	GLY	C-N-CA	5.83	146.50	122.00
1	A	1433	THR	C-N-CA	5.83	136.27	121.70
1	A	1518	SER	CA-C-N	-5.83	104.38	117.20
1	A	1519	GLU	CA-C-N	5.82	130.00	117.20
1	A	895	GLN	CA-C-N	-5.81	104.42	117.20
1	A	1208	THR	N-CA-C	-5.80	95.33	111.00
1	A	211	ASP	N-CA-CB	-5.80	100.16	110.60
1	A	212	ILE	N-CA-CB	5.77	124.08	110.80
1	A	1587	PRO	O-C-N	5.76	131.91	122.70
1	A	1587	PRO	CA-C-N	-5.75	104.54	117.20
1	A	1552	PRO	C-N-CA	-5.75	107.34	121.70
1	A	1140	MET	N-CA-C	-5.70	95.61	111.00
1	A	87	LEU	C-N-CA	5.69	135.93	121.70
1	A	1589	LYS	N-CA-C	5.68	126.34	111.00
1	A	1793	PHE	N-CA-C	5.66	126.28	111.00
1	A	913	LYS	N-CA-C	-5.65	95.74	111.00
1	A	893	VAL	C-N-CA	5.63	134.12	122.30
1	A	374	LEU	CB-CA-C	-5.62	99.51	110.20
1	A	1545	PHE	C-N-CA	5.62	135.76	121.70
1	A	1524	LEU	CB-CA-C	-5.60	99.57	110.20
1	A	1582	ARG	C-N-CA	5.59	135.69	121.70
1	A	894	GLY	CA-C-O	-5.59	110.54	120.60
1	A	106	SER	C-N-CA	-5.58	107.74	121.70
1	A	1393	PRO	CA-N-CD	5.58	119.51	111.70
1	A	238	ILE	N-CA-C	5.53	125.94	111.00
1	A	1434	GLN	CB-CA-C	5.53	121.47	110.40
1	A	97	GLU	C-N-CA	-5.53	107.89	121.70
1	A	1687	SER	CA-C-N	-5.52	105.05	117.20
1	A	1560	PRO	C-N-CA	-5.52	107.90	121.70
1	A	360	ALA	CB-CA-C	5.50	118.36	110.10
1	A	1655	SER	CB-CA-C	-5.50	99.66	110.10
1	A	888	TRP	N-CA-C	-5.49	96.18	111.00
1	A	211	ASP	CB-CA-C	5.48	121.37	110.40
1	A	1134	ILE	CA-C-N	-5.47	105.17	117.20
1	A	162	ASN	C-N-CD	-5.47	108.57	120.60
1	A	1654	PHE	CB-CA-C	5.46	121.31	110.40
1	A	207	SER	CA-C-N	5.43	129.15	117.20
1	A	976	GLY	C-N-CA	5.43	135.28	121.70
1	A	1572	ALA	N-CA-C	5.42	125.63	111.00
1	A	1551	ASP	C-N-CA	5.41	144.72	122.00
1	A	873	LYS	CB-CA-C	5.40	121.19	110.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1574	VAL	N-CA-C	5.39	125.56	111.00
1	A	979	ASN	N-CA-C	-5.38	96.47	111.00
1	A	357	ASP	CB-CA-C	5.37	121.14	110.40
1	A	1134	ILE	O-C-N	5.36	131.27	122.70
1	A	412	LYS	N-CA-CB	-5.36	100.96	110.60
1	A	109	MET	CA-C-O	5.35	131.34	120.10
1	A	1970	GLU	N-CA-C	5.34	125.42	111.00
1	A	1585	GLY	C-N-CA	5.33	135.01	121.70
1	A	1773	GLY	N-CA-C	5.32	126.40	113.10
1	A	210	ALA	C-N-CA	-5.30	108.45	121.70
1	A	1397	SER	CA-C-N	5.28	128.80	117.20
1	A	374	LEU	N-CA-CB	-5.24	99.91	110.40
1	A	737	SER	N-CA-C	-5.24	96.84	111.00
1	A	1181	TYR	N-CA-C	-5.24	96.85	111.00
1	A	1562	LEU	CB-CA-C	-5.24	100.24	110.20
1	A	1462	ARG	N-CA-CB	-5.24	101.18	110.60
1	A	974	GLY	CA-C-N	-5.22	102.50	117.10
1	A	1586	ALA	N-CA-C	-5.22	96.92	111.00
1	A	559	LYS	CB-CA-C	5.21	120.83	110.40
1	A	1046	ASP	CB-CA-C	-5.21	99.97	110.40
1	A	1558	ASP	CB-CG-OD2	5.21	122.99	118.30
1	A	371	ASP	CB-CG-OD2	5.20	122.98	118.30
1	A	1210	ALA	N-CA-C	-5.19	96.99	111.00
1	A	351	GLY	CA-C-O	-5.19	111.26	120.60
1	A	238	ILE	N-CA-CB	-5.18	98.88	110.80
1	A	1515	ASP	CB-CG-OD2	5.17	122.95	118.30
1	A	88	SER	N-CA-CB	5.16	118.24	110.50
1	A	969	SER	C-N-CA	-5.16	108.80	121.70
1	A	376	ASN	O-C-N	-5.15	114.46	122.70
1	A	88	SER	CB-CA-C	5.14	119.87	110.10
1	A	1811	ARG	C-N-CA	5.14	133.10	122.30
1	A	1588	VAL	CA-C-N	5.11	128.45	117.20
1	A	1575	ASP	CA-CB-CG	5.09	124.61	113.40
1	A	1426	SER	CA-C-N	5.09	128.40	117.20
1	A	106	SER	N-CA-C	-5.08	97.28	111.00
1	A	1975	SER	N-CA-C	5.07	124.69	111.00
1	A	1139	ASP	O-C-N	5.05	130.77	122.70
1	A	1138	SER	C-N-CA	5.04	134.30	121.70
1	A	1569	ASN	N-CA-C	5.02	124.56	111.00
1	A	791	GLY	N-CA-C	-5.01	100.57	113.10
1	A	1830	GLY	N-CA-C	-5.01	100.58	113.10
1	A	1426	SER	N-CA-C	5.00	124.51	111.00

There are no chirality outliers.

All (94) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	1	MET	Mainchain
1	A	1059	ASN	Peptide
1	A	1061	GLU	Mainchain
1	A	107	ASP	Mainchain
1	A	108	GLY	Mainchain
1	A	11	ASN	Mainchain
1	A	1135	ARG	Mainchain
1	A	1182	ASN	Peptide
1	A	1268	ASP	Peptide
1	A	1393	PRO	Mainchain
1	A	1397	SER	Mainchain
1	A	1398	SER	Mainchain,Peptide
1	A	1399	LEU	Mainchain
1	A	1424	SER	Mainchain
1	A	1433	THR	Peptide
1	A	1518	SER	Mainchain
1	A	1519	GLU	Mainchain
1	A	1520	VAL	Mainchain
1	A	1521	TRP	Peptide
1	A	1522	PHE	Mainchain
1	A	1523	GLY	Mainchain
1	A	1524	LEU	Mainchain
1	A	1529	LEU	Peptide
1	A	1530	GLY	Mainchain
1	A	1549	SER	Mainchain
1	A	1559	GLY	Peptide
1	A	1561	PHE	Mainchain,Peptide
1	A	1562	LEU	Mainchain
1	A	1567	PHE	Mainchain
1	A	1569	ASN	Mainchain
1	A	1573	HIS	Mainchain,Peptide
1	A	1574	VAL	Mainchain,Peptide
1	A	1575	ASP	Sidechain
1	A	1576	ALA	Mainchain,Peptide
1	A	1577	LYS	Mainchain
1	A	1578	SER	Mainchain,Peptide
1	A	1580	SER	Mainchain
1	A	1582	ARG	Mainchain,Peptide
1	A	1583	LEU	Mainchain
1	A	1584	LEU	Mainchain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	1594	VAL	Peptide
1	A	1595	THR	Mainchain
1	A	1655	SER	Peptide
1	A	1678	SER	Mainchain,Peptide
1	A	1687	SER	Mainchain,Peptide
1	A	1797	PRO	Peptide
1	A	180	ASN	Mainchain
1	A	1817	GLU	Peptide
1	A	1830	GLY	Peptide
1	A	1866	TRP	Peptide
1	A	2	ASN	Mainchain
1	A	208	MET	Peptide
1	A	3	LEU	Mainchain
1	A	348	THR	Mainchain,Peptide
1	A	349	ASP	Mainchain
1	A	350	SER	Mainchain
1	A	351	GLY	Mainchain
1	A	352	PHE	Sidechain
1	A	359	GLY	Peptide
1	A	374	LEU	Peptide
1	A	375	GLY	Peptide
1	A	378	GLU	Mainchain
1	A	380	VAL	Mainchain
1	A	384	PRO	Mainchain
1	A	385	ALA	Mainchain
1	A	405	LYS	Mainchain
1	A	406	ILE	Mainchain
1	A	563	HIS	Mainchain
1	A	677	PRO	Peptide
1	A	822	GLY	Peptide
1	A	824	GLN	Peptide
1	A	873	LYS	Peptide
1	A	887	MET	Mainchain
1	A	893	VAL	Mainchain
1	A	895	GLN	Mainchain
1	A	896	ALA	Peptide
1	A	95	LEU	Mainchain,Peptide
1	A	96	SER	Mainchain
1	A	965	HIS	Peptide
1	A	969	SER	Mainchain
1	A	971	ARG	Mainchain
1	A	975	PRO	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	976	GLY	Mainchain

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	14826	0	14790	1202	0
2	A	1	0	0	0	0
All	All	14827	0	14790	1202	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 (1202) 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:1556:LEU:HD11	1:A:1564:HIS:CD2	1.27	1.67
1:A:917:GLY:CA	1:A:920:ARG:HD3	1.26	1.65
1:A:1568:ARG:CA	1:A:1568:ARG:N	1.67	1.55
1:A:193:TYR:CE1	1:A:197:ILE:HD11	1.40	1.55
1:A:380:VAL:CG2	1:A:411:PHE:CE1	1.83	1.55
1:A:384:PRO:CG	1:A:405:LYS:HZ1	1.15	1.53
1:A:757:ASN:N	1:A:915:GLN:HE21	1.03	1.52
1:A:365:TRP:NE1	1:A:595:LEU:CD1	1.68	1.51
1:A:380:VAL:HG21	1:A:411:PHE:CE1	0.99	1.50
1:A:1561:PHE:CE2	1:A:1567:PHE:HB2	1.46	1.49
1:A:1542:ARG:NH2	1:A:1549:SER:HA	1.31	1.44
1:A:1646:LYS:NZ	1:A:1650:ILE:HD11	1.24	1.43
1:A:365:TRP:NE1	1:A:595:LEU:HD12	1.09	1.42
1:A:757:ASN:H	1:A:915:GLN:NE2	1.15	1.40
1:A:351:GLY:HA3	1:A:369:LEU:CD1	1.50	1.39
1:A:1062:VAL:HG11	1:A:1064:TRP:CE3	1.58	1.39
1:A:1556:LEU:CD1	1:A:1564:HIS:CD2	2.07	1.37
1:A:1556:LEU:HG	1:A:1564:HIS:CE1	1.58	1.37
1:A:380:VAL:CG2	1:A:411:PHE:CZ	2.07	1.36
1:A:237:ASN:O	1:A:241:VAL:CG2	1.74	1.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:658:LYS:NZ	1:A:699:GLN:CD	1.79	1.35
1:A:1392:SER:HB2	1:A:1393:PRO:CD	1.58	1.33
1:A:917:GLY:HA2	1:A:920:ARG:CD	1.58	1.33
1:A:384:PRO:CG	1:A:405:LYS:NZ	1.78	1.33
1:A:384:PRO:HG3	1:A:405:LYS:NZ	1.01	1.33
1:A:365:TRP:CD1	1:A:595:LEU:CD1	2.11	1.32
1:A:1304:ARG:HG2	1:A:1432:SER:OG	1.19	1.31
1:A:351:GLY:CA	1:A:369:LEU:HD11	1.61	1.31
1:A:1392:SER:CB	1:A:1393:PRO:HD3	1.57	1.30
1:A:1561:PHE:CE2	1:A:1567:PHE:CB	2.12	1.30
1:A:658:LYS:CD	1:A:699:GLN:OE1	1.79	1.30
1:A:1304:ARG:CG	1:A:1432:SER:OG	1.79	1.29
1:A:1474:VAL:CG1	1:A:1585:GLY:O	1.77	1.29
1:A:658:LYS:CE	1:A:699:GLN:OE1	1.77	1.29
1:A:1937:LEU:HD21	1:A:2028:LYS:NZ	1.44	1.29
1:A:1561:PHE:CD2	1:A:1567:PHE:HB2	1.70	1.27
1:A:1302:LEU:HD12	1:A:1303:GLY:N	1.50	1.27
1:A:380:VAL:HG21	1:A:411:PHE:CZ	1.70	1.25
1:A:969:SER:O	1:A:973:LEU:CD2	1.84	1.25
1:A:1937:LEU:HD21	1:A:2028:LYS:CE	1.66	1.25
1:A:1531:PRO:O	1:A:1535:LYS:HB3	1.36	1.24
1:A:365:TRP:CD1	1:A:595:LEU:HD11	1.71	1.24
1:A:1649:MET:SD	1:A:1649:MET:N	2.11	1.24
1:A:1542:ARG:NH2	1:A:1549:SER:CA	2.01	1.23
1:A:1455:SER:O	1:A:1458:PRO:HG2	1.34	1.23
1:A:1516:LEU:HD12	1:A:1541:LEU:CD2	1.69	1.23
1:A:1551:ASP:O	1:A:1555:THR:HG23	1.37	1.22
1:A:1455:SER:O	1:A:1458:PRO:CG	1.87	1.22
1:A:155:ARG:NH2	1:A:1532:ARG:HG3	1.52	1.21
1:A:1646:LYS:O	1:A:1649:MET:CE	1.87	1.21
1:A:1062:VAL:CG1	1:A:1064:TRP:HE3	1.53	1.21
1:A:1646:LYS:C	1:A:1649:MET:HE1	1.61	1.21
1:A:1542:ARG:HH22	1:A:1549:SER:C	1.44	1.20
1:A:658:LYS:NZ	1:A:699:GLN:OE1	1.73	1.20
1:A:1561:PHE:CE2	1:A:1567:PHE:CG	2.28	1.20
1:A:1542:ARG:HH22	1:A:1550:THR:N	1.40	1.19
1:A:757:ASN:O	1:A:915:GLN:NE2	1.73	1.19
1:A:3:LEU:O	1:A:7:CYS:SG	2.00	1.18
1:A:1303:GLY:O	1:A:1432:SER:HB2	1.42	1.18
1:A:155:ARG:HH21	1:A:1532:ARG:CG	1.56	1.18
1:A:170:ILE:HD11	1:A:181:MET:CG	1.72	1.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:365:TRP:CD1	1:A:595:LEU:HD12	1.77	1.18
1:A:1474:VAL:CB	1:A:1585:GLY:O	1.92	1.18
1:A:1403:HIS:O	1:A:1406:PRO:HD2	1.41	1.17
1:A:658:LYS:HD2	1:A:699:GLN:OE1	1.33	1.17
1:A:237:ASN:O	1:A:241:VAL:HG23	1.28	1.17
1:A:917:GLY:CA	1:A:920:ARG:CD	2.18	1.16
1:A:721:ILE:O	1:A:727:VAL:HG23	1.43	1.16
1:A:3:LEU:HD13	1:A:87:LEU:O	1.48	1.14
1:A:81:ASP:O	1:A:85:SER:OG	1.64	1.14
1:A:1474:VAL:HB	1:A:1585:GLY:O	1.46	1.14
1:A:1790:LEU:HD12	1:A:1804:CYS:O	1.46	1.14
1:A:1556:LEU:CD1	1:A:1564:HIS:NE2	2.08	1.13
1:A:335:TRP:NE1	1:A:594:GLU:OE1	1.81	1.12
1:A:236:PRO:HB2	1:A:238:ILE:HD11	1.28	1.12
1:A:193:TYR:CE1	1:A:197:ILE:CD1	2.33	1.12
1:A:236:PRO:HB2	1:A:238:ILE:CD1	1.80	1.11
1:A:969:SER:O	1:A:973:LEU:HD21	1.49	1.10
1:A:1516:LEU:CD1	1:A:1541:LEU:HD23	1.81	1.10
1:A:1518:SER:O	1:A:1522:PHE:HB2	1.52	1.10
1:A:1460:GLN:O	1:A:1460:GLN:NE2	1.84	1.09
1:A:1652:GLU:CD	1:A:1653:ALA:H	1.56	1.09
1:A:380:VAL:HG22	1:A:411:PHE:CZ	1.85	1.09
1:A:1265:LEU:HD13	1:A:1274:GLY:O	1.52	1.08
1:A:365:TRP:CE2	1:A:595:LEU:CD1	2.35	1.07
1:A:864:VAL:HG13	1:A:867:LYS:HG3	1.32	1.07
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1570:PHE:CD2	2.42	1.07
1:A:1516:LEU:CD1	1:A:1541:LEU:CD2	2.31	1.07
1:A:1135:ARG:HH12	1:A:1137:LYS:HE2	1.18	1.07
1:A:1646:LYS:O	1:A:1649:MET:HE2	1.49	1.06
1:A:863:GLU:OE1	1:A:864:VAL:HG23	1.56	1.06
1:A:1580:SER:O	1:A:1581:VAL:HG23	1.55	1.06
1:A:1530:GLY:O	1:A:1534:LEU:HB3	1.52	1.06
1:A:1652:GLU:OE1	1:A:1653:ALA:N	1.88	1.06
1:A:726:ARG:HD2	1:A:1189:ARG:HD2	1.34	1.05
1:A:1561:PHE:HZ	1:A:1570:PHE:CD2	1.73	1.05
1:A:86:GLY:O	1:A:89:LYS:HG2	1.56	1.05
1:A:95:LEU:N	1:A:96:SER:HB3	1.72	1.04
1:A:1302:LEU:CD1	1:A:1303:GLY:H	1.70	1.04
1:A:1790:LEU:CD1	1:A:1804:CYS:O	2.04	1.04
1:A:1646:LYS:NZ	1:A:1650:ILE:CD1	2.20	1.04
1:A:757:ASN:N	1:A:915:GLN:NE2	1.82	1.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:94:ARG:C	1:A:96:SER:N	2.05	1.03
1:A:405:LYS:HB2	1:A:405:LYS:HZ2	1.23	1.03
1:A:193:TYR:OH	1:A:1946:VAL:HG12	1.58	1.02
1:A:1561:PHE:HE2	1:A:1567:PHE:CG	1.77	1.02
1:A:658:LYS:HZ1	1:A:699:GLN:NE2	1.56	1.02
1:A:1062:VAL:HG11	1:A:1064:TRP:HE3	0.91	1.01
1:A:1135:ARG:HH12	1:A:1137:LYS:CE	1.73	1.01
1:A:1135:ARG:NH1	1:A:1137:LYS:CE	2.23	1.01
1:A:1586:ALA:HB3	1:A:1595:THR:HG21	1.38	1.01
1:A:944:CYS:O	1:A:950:GLU:OE2	1.78	1.01
1:A:1095:GLN:HG3	1:A:1123:GLU:CG	1.91	1.01
1:A:155:ARG:HH21	1:A:1532:ARG:HG3	0.86	1.00
1:A:1348:TYR:O	1:A:1352:LEU:HB3	1.60	1.00
1:A:1567:PHE:CE1	1:A:1571:ILE:CB	2.33	1.00
1:A:1791:SER:O	1:A:1792:GLY:C	2.00	1.00
1:A:884:LYS:HE3	1:A:895:GLN:HE22	1.21	1.00
1:A:948:PRO:HG2	1:A:949:HIS:CE1	1.96	1.00
1:A:170:ILE:HD11	1:A:181:MET:HG2	1.03	1.00
1:A:18:LEU:CD1	1:A:146:ILE:HD11	1.90	1.00
1:A:1567:PHE:O	1:A:1567:PHE:CD1	2.14	1.00
1:A:547:LYS:HE2	1:A:1253:CYS:C	1.83	0.99
1:A:20:GLU:O	1:A:180:ASN:HB3	1.61	0.99
1:A:658:LYS:HE3	1:A:699:GLN:HE22	1.23	0.99
1:A:824:GLN:O	1:A:824:GLN:HG2	1.61	0.99
1:A:1304:ARG:HG2	1:A:1432:SER:CB	1.91	0.99
1:A:1546:ALA:O	1:A:1547:TRP:CD1	2.14	0.99
1:A:1269:PRO:CB	1:A:1275:PHE:CE1	2.45	0.99
1:A:1648:GLU:HB2	1:A:1649:MET:SD	2.02	0.99
1:A:1095:GLN:HG3	1:A:1123:GLU:HG2	1.01	0.99
1:A:239:GLU:OE1	1:A:240:ARG:N	1.96	0.98
1:A:726:ARG:HD2	1:A:1189:ARG:CD	1.94	0.98
1:A:1937:LEU:CD2	1:A:2028:LYS:NZ	2.26	0.98
1:A:1556:LEU:CG	1:A:1564:HIS:CE1	2.46	0.98
1:A:1561:PHE:CD2	1:A:1567:PHE:CB	2.41	0.98
1:A:1646:LYS:HZ1	1:A:1650:ILE:HD11	1.17	0.98
1:A:95:LEU:CA	1:A:96:SER:HB3	1.94	0.97
1:A:971:ARG:HB2	1:A:971:ARG:HH21	1.28	0.97
1:A:1296:ALA:O	1:A:1301:ASP:CG	2.02	0.97
1:A:1556:LEU:HG	1:A:1564:HIS:NE2	1.79	0.97
1:A:1060:ARG:HH11	1:A:1060:ARG:HB3	1.29	0.97
1:A:1542:ARG:HH21	1:A:1549:SER:CA	1.66	0.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1556:LEU:HD11	1:A:1564:HIS:HD2	1.29	0.96
1:A:351:GLY:CA	1:A:369:LEU:CD1	2.32	0.96
1:A:1529:LEU:CA	1:A:1534:LEU:HB2	1.95	0.96
1:A:1652:GLU:CD	1:A:1653:ALA:N	2.19	0.96
1:A:170:ILE:CD1	1:A:181:MET:HG2	1.96	0.96
1:A:1542:ARG:NH2	1:A:1550:THR:N	2.12	0.95
1:A:1646:LYS:C	1:A:1649:MET:CE	2.32	0.95
1:A:884:LYS:HE3	1:A:895:GLN:NE2	1.82	0.95
1:A:1455:SER:C	1:A:1458:PRO:HD2	1.86	0.95
1:A:1648:GLU:C	1:A:1649:MET:SD	2.44	0.95
1:A:658:LYS:HE3	1:A:699:GLN:NE2	1.82	0.95
1:A:969:SER:O	1:A:973:LEU:HD23	1.62	0.95
1:A:1796:LYS:HB2	1:A:1797:PRO:HD2	1.47	0.95
1:A:658:LYS:NZ	1:A:699:GLN:NE2	2.13	0.94
1:A:1512:LYS:HG3	1:A:1513:ALA:H	1.31	0.94
1:A:1474:VAL:HG11	1:A:1585:GLY:O	1.65	0.94
1:A:1646:LYS:O	1:A:1649:MET:HE1	1.59	0.94
1:A:109:MET:O	1:A:111:PRO:HD3	1.67	0.94
1:A:658:LYS:CE	1:A:699:GLN:CD	2.29	0.94
1:A:1269:PRO:HB3	1:A:1275:PHE:CE1	2.03	0.93
1:A:1095:GLN:CG	1:A:1123:GLU:HG2	1.96	0.93
1:A:1796:LYS:HB2	1:A:1797:PRO:CD	1.97	0.93
1:A:917:GLY:N	1:A:920:ARG:HD3	1.83	0.93
1:A:1791:SER:O	1:A:1793:PHE:N	2.01	0.93
1:A:79:ASN:ND2	1:A:199:ASN:OD1	2.02	0.93
1:A:1269:PRO:HB2	1:A:1275:PHE:CE1	2.04	0.93
1:A:29:ASP:O	1:A:31:PRO:CD	2.16	0.93
1:A:871:ARG:HH11	1:A:871:ARG:HG3	1.34	0.92
1:A:358:HIS:CD2	1:A:360:ALA:HB3	2.03	0.92
1:A:658:LYS:HZ1	1:A:699:GLN:CD	1.63	0.92
1:A:1556:LEU:CG	1:A:1564:HIS:NE2	2.31	0.92
1:A:1567:PHE:HE1	1:A:1571:ILE:CB	1.54	0.92
1:A:888:TRP:C	1:A:890:ILE:H	1.71	0.92
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1567:PHE:HB2	2.04	0.92
1:A:1269:PRO:HB2	1:A:1275:PHE:CZ	2.05	0.92
1:A:15:GLY:O	1:A:165:VAL:HG12	1.70	0.92
1:A:658:LYS:HZ2	1:A:699:GLN:CD	1.54	0.91
1:A:1304:ARG:HG3	1:A:1432:SER:OG	1.70	0.91
1:A:237:ASN:O	1:A:241:VAL:HG21	1.70	0.91
1:A:378:GLU:OE1	1:A:411:PHE:HD2	1.53	0.91
1:A:1302:LEU:HD12	1:A:1303:GLY:H	1.07	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1520:VAL:HG12	1:A:1520:VAL:O	1.70	0.91
1:A:94:ARG:HB3	1:A:96:SER:HB2	1.52	0.90
1:A:94:ARG:NH2	1:A:97:GLU:OE1	2.04	0.90
1:A:864:VAL:CG1	1:A:867:LYS:HG3	1.99	0.90
1:A:1529:LEU:CB	1:A:1534:LEU:HB2	2.02	0.90
1:A:1302:LEU:CD1	1:A:1303:GLY:N	2.33	0.89
1:A:658:LYS:CE	1:A:699:GLN:NE2	2.34	0.89
1:A:757:ASN:C	1:A:915:GLN:HE22	1.76	0.89
1:A:193:TYR:CD1	1:A:197:ILE:HD11	2.07	0.89
1:A:1529:LEU:HD23	1:A:1533:LEU:HB2	1.55	0.89
1:A:1542:ARG:NH2	1:A:1549:SER:C	2.15	0.89
1:A:223:ALA:HB1	1:A:839:THR:HB	1.52	0.89
1:A:1457:ASN:N	1:A:1458:PRO:HD2	1.88	0.89
1:A:1390:VAL:O	1:A:1395:VAL:CG1	2.21	0.89
1:A:1561:PHE:HZ	1:A:1570:PHE:HD2	1.20	0.89
1:A:1590:LYS:C	1:A:1592:GLY:H	1.75	0.88
1:A:1530:GLY:C	1:A:1534:LEU:HB3	1.94	0.88
1:A:917:GLY:N	1:A:920:ARG:CD	2.37	0.88
1:A:1521:TRP:CZ2	1:A:1555:THR:HG21	2.09	0.88
1:A:1296:ALA:O	1:A:1301:ASP:CB	2.22	0.88
1:A:1455:SER:C	1:A:1458:PRO:CD	2.42	0.88
1:A:1567:PHE:CE1	1:A:1571:ILE:HB	2.06	0.88
1:A:376:ASN:HD21	1:A:413:PRO:HG2	1.39	0.88
1:A:378:GLU:OE1	1:A:411:PHE:CD2	2.27	0.87
1:A:611:ASN:OD1	1:A:611:ASN:O	1.93	0.87
1:A:1296:ALA:O	1:A:1301:ASP:HB2	1.75	0.87
1:A:1937:LEU:HD21	1:A:2028:LYS:HZ3	1.38	0.87
1:A:170:ILE:HD11	1:A:181:MET:CB	2.04	0.86
1:A:193:TYR:HE1	1:A:197:ILE:HD11	1.06	0.86
1:A:1135:ARG:NH1	1:A:1137:LYS:NZ	2.24	0.86
1:A:84:PHE:HB3	1:A:88:SER:CB	2.04	0.86
1:A:883:GLU:HB2	1:A:1355:MET:HE2	1.57	0.86
1:A:208:MET:O	1:A:210:ALA:HB2	1.74	0.86
1:A:1052:MET:CG	1:A:1064:TRP:HH2	1.88	0.86
1:A:1528:LYS:H	1:A:1528:LYS:HD2	1.39	0.86
1:A:1586:ALA:CB	1:A:1595:THR:HG21	2.05	0.86
1:A:29:ASP:O	1:A:31:PRO:HD3	1.74	0.86
1:A:1303:GLY:O	1:A:1432:SER:CB	2.23	0.86
1:A:1687:SER:OG	1:A:1692:ILE:HD11	1.76	0.86
1:A:1138:SER:O	1:A:1982:PHE:CE2	2.28	0.86
1:A:1140:MET:O	1:A:1143:VAL:HG12	1.76	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1519:GLU:H	1:A:1519:GLU:CD	1.78	0.85
1:A:1365:ILE:O	1:A:1368:ASN:O	1.94	0.85
1:A:384:PRO:HG3	1:A:405:LYS:HZ3	1.40	0.85
1:A:384:PRO:HG2	1:A:405:LYS:NZ	1.90	0.85
1:A:1516:LEU:HD13	1:A:1541:LEU:HD23	1.55	0.85
1:A:1694:ARG:HH12	1:A:1816:ARG:HG2	1.38	0.85
1:A:864:VAL:CG1	1:A:867:LYS:CG	2.54	0.85
1:A:1538:TRP:HE1	1:A:1550:THR:HG22	1.40	0.85
1:A:726:ARG:CD	1:A:1189:ARG:HD2	2.06	0.85
1:A:384:PRO:CG	1:A:405:LYS:HZ3	1.87	0.85
1:A:883:GLU:HB2	1:A:1355:MET:CE	2.07	0.84
1:A:1542:ARG:HH21	1:A:1549:SER:HA	0.75	0.84
1:A:1910:ILE:C	1:A:1911:ASP:OD1	2.16	0.84
1:A:361:TYR:CE2	1:A:597:GLU:HA	2.12	0.84
1:A:1622:ARG:HB2	1:A:1650:ILE:HG21	1.59	0.84
1:A:389:ASP:O	1:A:390:ILE:HD13	1.78	0.84
1:A:742:ASN:OD1	1:A:743:LEU:N	2.10	0.84
1:A:971:ARG:HH21	1:A:971:ARG:CB	1.90	0.84
1:A:757:ASN:CA	1:A:915:GLN:HE21	1.91	0.83
1:A:365:TRP:CG	1:A:595:LEU:HD11	2.13	0.83
1:A:1455:SER:O	1:A:1458:PRO:CD	2.25	0.83
1:A:1810:GLU:OE1	1:A:1814:ARG:NH2	2.11	0.83
1:A:757:ASN:CA	1:A:915:GLN:NE2	2.40	0.83
1:A:155:ARG:HB2	1:A:155:ARG:CZ	2.07	0.83
1:A:380:VAL:HG23	1:A:411:PHE:CE1	2.11	0.83
1:A:1520:VAL:O	1:A:1520:VAL:CG1	2.27	0.83
1:A:365:TRP:CE2	1:A:595:LEU:HD13	2.13	0.82
1:A:1456:LEU:O	1:A:1459:ASN:HB2	1.79	0.82
1:A:1798:ALA:O	1:A:1800:ARG:N	2.13	0.82
1:A:757:ASN:C	1:A:915:GLN:NE2	2.31	0.82
1:A:671:MET:HG2	1:A:1180:GLU:OE1	1.79	0.82
1:A:1136:PRO:HG2	1:A:1982:PHE:HB2	1.62	0.82
1:A:15:GLY:HA2	1:A:163:PRO:HG2	1.60	0.82
1:A:1562:LEU:HD23	1:A:1563:SER:HB3	1.62	0.82
1:A:1582:ARG:O	1:A:1583:LEU:HB3	1.78	0.82
1:A:155:ARG:NH2	1:A:1532:ARG:CG	2.29	0.81
1:A:1646:LYS:HZ2	1:A:1650:ILE:HD11	1.00	0.81
1:A:1911:ASP:OD1	1:A:1911:ASP:N	2.13	0.81
1:A:1579:ARG:HG2	1:A:1580:SER:H	1.44	0.81
1:A:384:PRO:CG	1:A:405:LYS:CE	2.58	0.81
1:A:1529:LEU:CD2	1:A:1533:LEU:HB2	2.10	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1392:SER:CB	1:A:1393:PRO:CD	2.30	0.81
1:A:1519:GLU:CD	1:A:1519:GLU:N	2.32	0.81
1:A:29:ASP:O	1:A:31:PRO:HD2	1.81	0.81
1:A:1547:TRP:CE2	1:A:1560:PRO:HD2	2.16	0.81
1:A:864:VAL:HG11	1:A:867:LYS:HD2	1.63	0.81
1:A:887:MET:O	1:A:888:TRP:C	2.20	0.80
1:A:1531:PRO:O	1:A:1535:LYS:CB	2.26	0.80
1:A:1646:LYS:CE	1:A:1650:ILE:HD11	2.10	0.80
1:A:1791:SER:N	1:A:1796:LYS:HE3	1.94	0.80
1:A:26:GLN:OE1	1:A:30:ARG:HD3	1.81	0.80
1:A:1530:GLY:O	1:A:1534:LEU:N	2.15	0.80
1:A:1400:SER:HB2	1:A:1407:ARG:NH1	1.97	0.80
1:A:380:VAL:HG12	1:A:380:VAL:O	1.80	0.80
1:A:658:LYS:CE	1:A:699:GLN:HE22	1.94	0.80
1:A:1062:VAL:HG11	1:A:1064:TRP:CZ3	2.16	0.80
1:A:1568:ARG:O	1:A:1572:ALA:HB2	1.80	0.80
1:A:18:LEU:HD11	1:A:146:ILE:HD11	1.62	0.80
1:A:94:ARG:C	1:A:96:SER:H	1.84	0.80
1:A:170:ILE:CD1	1:A:181:MET:HB2	2.12	0.79
1:A:944:CYS:CA	1:A:950:GLU:OE2	2.29	0.79
1:A:1062:VAL:CG1	1:A:1064:TRP:CE3	2.40	0.79
1:A:22:GLY:O	1:A:178:LEU:HD12	1.81	0.79
1:A:405:LYS:NZ	1:A:405:LYS:HB2	1.97	0.79
1:A:1474:VAL:HG12	1:A:1585:GLY:O	1.78	0.79
1:A:824:GLN:O	1:A:824:GLN:CG	2.30	0.79
1:A:1555:THR:OG1	1:A:1564:HIS:HE1	1.65	0.79
1:A:561:SER:O	1:A:603:THR:HG21	1.83	0.79
1:A:193:TYR:OH	1:A:1946:VAL:CG1	2.30	0.79
1:A:948:PRO:HG2	1:A:949:HIS:ND1	1.97	0.79
1:A:1556:LEU:HD12	1:A:1564:HIS:NE2	1.97	0.79
1:A:842:ILE:HG13	1:A:888:TRP:CE3	2.17	0.78
1:A:30:ARG:NH2	1:A:820:ARG:O	2.16	0.78
1:A:236:PRO:CB	1:A:238:ILE:HD11	2.12	0.78
1:A:1052:MET:HG2	1:A:1064:TRP:CH2	2.18	0.78
1:A:1529:LEU:C	1:A:1534:LEU:HB2	2.03	0.78
1:A:1731:ASP:OD1	1:A:1731:ASP:O	2.00	0.78
1:A:493:MET:HE1	1:A:1296:ALA:HB2	1.65	0.78
1:A:87:LEU:H	1:A:87:LEU:HD12	1.48	0.78
1:A:95:LEU:N	1:A:96:SER:CB	2.46	0.78
1:A:864:VAL:HG13	1:A:867:LYS:CG	2.13	0.78
1:A:1512:LYS:HG3	1:A:1513:ALA:N	1.99	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1519:GLU:N	1:A:1519:GLU:OE1	2.13	0.78
1:A:944:CYS:HA	1:A:950:GLU:OE2	1.83	0.78
1:A:1433:THR:HB	1:A:1434:GLN:O	1.84	0.78
1:A:1561:PHE:HE2	1:A:1567:PHE:CD2	2.01	0.78
1:A:1518:SER:O	1:A:1522:PHE:CB	2.30	0.78
1:A:239:GLU:CD	1:A:240:ARG:HG2	2.04	0.77
1:A:1534:LEU:HD22	1:A:1534:LEU:O	1.84	0.77
1:A:723:ARG:O	1:A:724:GLU:OE1	2.03	0.77
1:A:1590:LYS:C	1:A:1592:GLY:N	2.36	0.77
1:A:1530:GLY:O	1:A:1534:LEU:CB	2.32	0.77
1:A:1646:LYS:HZ2	1:A:1650:ILE:CD1	1.89	0.77
1:A:1516:LEU:HD12	1:A:1541:LEU:HD23	1.50	0.76
1:A:676:SER:OG	1:A:1174:ASN:ND2	2.18	0.76
1:A:1390:VAL:O	1:A:1395:VAL:HG11	1.85	0.76
1:A:756:LYS:HB3	1:A:1204:GLN:HE21	1.50	0.76
1:A:871:ARG:HG3	1:A:871:ARG:NH1	2.00	0.76
1:A:1567:PHE:CD1	1:A:1570:PHE:HB3	2.21	0.76
1:A:348:THR:C	1:A:350:SER:H	1.80	0.76
1:A:1519:GLU:C	1:A:1522:PHE:H	1.89	0.76
1:A:1646:LYS:HZ1	1:A:1650:ILE:CD1	1.89	0.76
1:A:208:MET:C	1:A:210:ALA:H	1.81	0.76
1:A:1060:ARG:HB3	1:A:1060:ARG:NH1	2.00	0.76
1:A:208:MET:O	1:A:210:ALA:CB	2.33	0.75
1:A:887:MET:O	1:A:888:TRP:O	2.02	0.75
1:A:888:TRP:C	1:A:890:ILE:N	2.40	0.75
1:A:1061:GLU:OE2	1:A:1061:GLU:N	2.18	0.75
1:A:236:PRO:HB2	1:A:238:ILE:HD12	1.66	0.75
1:A:1514:GLU:HB2	1:A:1571:ILE:HG22	1.68	0.75
1:A:1937:LEU:HD21	1:A:2028:LYS:HZ1	1.47	0.75
1:A:365:TRP:HE1	1:A:595:LEU:HD12	0.94	0.75
1:A:239:GLU:CD	1:A:240:ARG:H	1.90	0.75
1:A:1597:ILE:HG22	1:A:1597:ILE:O	1.87	0.75
1:A:1140:MET:O	1:A:1143:VAL:N	2.20	0.74
1:A:1646:LYS:HA	1:A:1649:MET:HE3	1.69	0.74
1:A:20:GLU:O	1:A:180:ASN:CB	2.35	0.74
1:A:1116:SER:O	1:A:1134:ILE:HG22	1.87	0.74
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1570:PHE:HD2	1.96	0.74
1:A:1790:LEU:HD12	1:A:1790:LEU:H	1.52	0.74
1:A:87:LEU:HD12	1:A:87:LEU:N	2.01	0.74
1:A:1390:VAL:O	1:A:1395:VAL:HG13	1.86	0.74
1:A:1532:ARG:O	1:A:1536:GLU:HB2	1.87	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1646:LYS:HE3	1:A:1650:ILE:HG13	1.68	0.74
1:A:1976:LEU:N	1:A:1976:LEU:HD23	2.03	0.74
1:A:474:TYR:O	1:A:480:GLN:NE2	2.20	0.74
1:A:671:MET:SD	1:A:1180:GLU:OE1	2.46	0.74
1:A:1694:ARG:NH1	1:A:1816:ARG:HG2	2.02	0.74
1:A:663:ILE:O	1:A:666:THR:OG1	2.04	0.74
1:A:1403:HIS:O	1:A:1406:PRO:CD	2.32	0.74
1:A:358:HIS:NE2	1:A:360:ALA:HB3	2.03	0.74
1:A:888:TRP:O	1:A:891:ASP:OD1	2.04	0.74
1:A:1066:ASP:N	1:A:1066:ASP:OD1	2.21	0.74
1:A:1459:ASN:HB3	1:A:1460:GLN:HE22	1.52	0.74
1:A:1516:LEU:HD12	1:A:1541:LEU:HD22	1.67	0.74
1:A:732:THR:OG1	1:A:746:MET:SD	2.45	0.73
1:A:843:LEU:O	1:A:844:ASP:HB3	1.88	0.73
1:A:1455:SER:HA	1:A:1458:PRO:HG3	1.70	0.73
1:A:1537:GLU:OE1	1:A:1537:GLU:HA	1.88	0.73
1:A:1302:LEU:HD12	1:A:1303:GLY:CA	2.17	0.73
1:A:1136:PRO:HG2	1:A:1982:PHE:CB	2.17	0.73
1:A:1574:VAL:CA	1:A:1575:ASP:HB2	2.16	0.73
1:A:1648:GLU:CB	1:A:1649:MET:SD	2.76	0.73
1:A:1970:GLU:CD	1:A:1970:GLU:H	1.91	0.73
1:A:982:SER:HB2	1:A:1153:LEU:HD21	1.70	0.73
1:A:1796:LYS:CB	1:A:1797:PRO:CD	2.66	0.73
1:A:1344:ASP:HB3	1:A:1398:SER:HB3	1.71	0.73
1:A:1302:LEU:CG	1:A:1303:GLY:H	2.02	0.73
1:A:95:LEU:H	1:A:96:SER:HB3	1.52	0.73
1:A:1547:TRP:CZ2	1:A:1560:PRO:HD2	2.24	0.73
1:A:1646:LYS:CA	1:A:1649:MET:CE	2.67	0.73
1:A:239:GLU:OE1	1:A:239:GLU:N	2.22	0.73
1:A:1646:LYS:HA	1:A:1649:MET:CE	2.19	0.73
1:A:1910:ILE:HD12	1:A:1910:ILE:N	2.03	0.72
1:A:905:CYS:HB3	1:A:1023:ARG:O	1.89	0.72
1:A:238:ILE:HD12	1:A:238:ILE:N	2.04	0.72
1:A:421:GLN:NE2	1:A:421:GLN:HA	2.04	0.72
1:A:874:LEU:HG	1:A:874:LEU:O	1.90	0.72
1:A:1137:LYS:HE3	1:A:1137:LYS:HA	1.70	0.72
1:A:161:GLU:O	1:A:162:ASN:C	2.28	0.72
1:A:323:THR:O	1:A:454:LEU:HD23	1.90	0.72
1:A:1296:ALA:O	1:A:1301:ASP:OD2	2.03	0.72
1:A:1646:LYS:HE3	1:A:1650:ILE:CG1	2.19	0.72
1:A:30:ARG:NH1	1:A:30:ARG:HG2	2.05	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:978:ILE:HB	1:A:1134:ILE:O	1.90	0.72
1:A:1582:ARG:O	1:A:1583:LEU:CB	2.35	0.72
1:A:355:LEU:O	1:A:356:MET:HE2	1.88	0.72
1:A:883:GLU:OE1	1:A:1355:MET:HE1	1.90	0.72
1:A:3:LEU:CD1	1:A:87:LEU:O	2.35	0.72
1:A:1357:LEU:HG	1:A:1357:LEU:O	1.89	0.72
1:A:1937:LEU:HD21	1:A:2028:LYS:HE2	1.69	0.72
1:A:376:ASN:HD21	1:A:413:PRO:CG	2.03	0.72
1:A:951:THR:HG21	1:A:1181:TYR:OH	1.89	0.71
1:A:369:LEU:O	1:A:369:LEU:HD22	1.90	0.71
1:A:944:CYS:C	1:A:950:GLU:OE2	2.28	0.71
1:A:1474:VAL:HG21	1:A:1584:LEU:HG	1.72	0.71
1:A:87:LEU:C	1:A:89:LYS:H	1.87	0.71
1:A:84:PHE:HB3	1:A:88:SER:HB3	1.72	0.71
1:A:193:TYR:CE2	1:A:1946:VAL:HG11	2.24	0.71
1:A:238:ILE:O	1:A:238:ILE:HG22	1.88	0.71
1:A:1457:ASN:N	1:A:1458:PRO:CD	2.52	0.71
1:A:1455:SER:C	1:A:1458:PRO:CG	2.57	0.71
1:A:30:ARG:HG2	1:A:30:ARG:HH11	1.56	0.71
1:A:1580:SER:O	1:A:1581:VAL:CG2	2.38	0.71
1:A:1650:ILE:N	1:A:1650:ILE:HD13	2.06	0.71
1:A:1790:LEU:HD11	1:A:1804:CYS:O	1.91	0.71
1:A:462:PHE:O	1:A:466:ASN:ND2	2.23	0.71
1:A:217:SER:HB2	1:A:221:LEU:HG	1.72	0.71
1:A:1567:PHE:HD1	1:A:1570:PHE:HB3	1.54	0.71
1:A:1646:LYS:CA	1:A:1649:MET:HE1	2.20	0.71
1:A:94:ARG:O	1:A:96:SER:N	2.24	0.70
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1570:PHE:CG	2.79	0.70
1:A:864:VAL:HG11	1:A:867:LYS:CG	2.21	0.70
1:A:361:TYR:HE2	1:A:597:GLU:HA	1.55	0.70
1:A:864:VAL:HG11	1:A:867:LYS:CD	2.21	0.70
1:A:347:LYS:HD2	1:A:348:THR:O	1.92	0.70
1:A:1574:VAL:N	1:A:1575:ASP:HB2	2.07	0.70
1:A:380:VAL:HG21	1:A:411:PHE:HE1	0.88	0.70
1:A:383:ASP:OD2	1:A:386:LYS:HE3	1.92	0.70
1:A:1459:ASN:HB3	1:A:1460:GLN:NE2	2.07	0.70
1:A:1973:GLU:HB3	1:A:1976:LEU:HD21	1.73	0.70
1:A:354:SER:O	1:A:355:LEU:C	2.30	0.69
1:A:1751:ARG:HE	1:A:1783:ARG:HH12	1.40	0.69
1:A:335:TRP:CE2	1:A:594:GLU:OE1	2.45	0.69
1:A:1140:MET:O	1:A:1143:VAL:CG1	2.41	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:405:LYS:HZ2	1:A:405:LYS:CB	2.04	0.69
1:A:170:ILE:CD1	1:A:181:MET:CB	2.70	0.69
1:A:671:MET:CG	1:A:1180:GLU:OE1	2.40	0.69
1:A:1474:VAL:CG2	1:A:1584:LEU:HG	2.22	0.69
1:A:726:ARG:HD3	1:A:1189:ARG:HH11	1.56	0.69
1:A:1052:MET:HG3	1:A:1064:TRP:HH2	1.55	0.69
1:A:1459:ASN:O	1:A:1461:GLU:HG3	1.92	0.69
1:A:1516:LEU:CD1	1:A:1541:LEU:HD22	2.18	0.69
1:A:1551:ASP:O	1:A:1555:THR:CG2	2.31	0.69
1:A:723:ARG:O	1:A:724:GLU:CD	2.31	0.69
1:A:1475:CYS:O	1:A:1584:LEU:HD12	1.92	0.69
1:A:1512:LYS:CG	1:A:1513:ALA:H	2.05	0.69
1:A:1532:ARG:O	1:A:1536:GLU:CB	2.41	0.69
1:A:1751:ARG:HH11	1:A:1783:ARG:HH22	1.40	0.69
1:A:1758:LEU:O	1:A:1762:ILE:HG12	1.93	0.69
1:A:1937:LEU:CD2	1:A:2028:LYS:CE	2.60	0.69
1:A:94:ARG:HB3	1:A:96:SER:CB	2.23	0.69
1:A:303:GLU:OE2	1:A:684:GLN:NE2	2.26	0.69
1:A:872:SER:O	1:A:873:LYS:C	2.31	0.69
1:A:1135:ARG:NH1	1:A:1137:LYS:HZ3	1.91	0.69
1:A:1556:LEU:HD21	1:A:1564:HIS:CG	2.28	0.69
1:A:973:LEU:HD23	1:A:973:LEU:H	1.58	0.68
1:A:1939:GLU:O	1:A:1943:LYS:HD3	1.93	0.68
1:A:1524:LEU:O	1:A:1524:LEU:HD12	1.93	0.68
1:A:1556:LEU:CG	1:A:1564:HIS:CD2	2.72	0.68
1:A:239:GLU:OE1	1:A:240:ARG:HG2	1.93	0.68
1:A:170:ILE:HD11	1:A:181:MET:HB2	1.72	0.68
1:A:1269:PRO:HB3	1:A:1275:PHE:CD1	2.29	0.68
1:A:1528:LYS:H	1:A:1528:LYS:CD	2.00	0.68
1:A:238:ILE:O	1:A:238:ILE:CG2	2.39	0.68
1:A:921:GLU:OE2	1:A:923:TYR:OH	2.09	0.68
1:A:1774:ILE:HD12	1:A:1774:ILE:H	1.59	0.68
1:A:2:ASN:HB3	1:A:5:VAL:HG22	1.75	0.68
1:A:1694:ARG:HH22	1:A:1816:ARG:CG	2.06	0.68
1:A:1789:ARG:O	1:A:1796:LYS:HG2	1.93	0.68
1:A:1153:LEU:CD2	1:A:1173:VAL:HG13	2.24	0.68
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1570:PHE:CB	2.77	0.68
1:A:1648:GLU:CA	1:A:1649:MET:SD	2.82	0.68
1:A:193:TYR:CE2	1:A:1946:VAL:CG1	2.77	0.67
1:A:622:PHE:HZ	1:A:748:ASN:HD22	1.42	0.67
1:A:734:HIS:CD2	1:A:741:THR:HG21	2.29	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1477:LEU:HD21	1:A:1590:LYS:NZ	2.09	0.67
1:A:26:GLN:OE1	1:A:30:ARG:HB2	1.93	0.67
1:A:884:LYS:CE	1:A:895:GLN:HE22	2.04	0.67
1:A:297:LEU:HD21	1:A:717:PRO:HD3	1.77	0.67
1:A:2028:LYS:HD3	1:A:2032:ARG:NH2	2.08	0.67
1:A:1534:LEU:HD13	1:A:1534:LEU:C	2.14	0.67
1:A:354:SER:C	1:A:355:LEU:O	2.23	0.67
1:A:1269:PRO:CB	1:A:1275:PHE:CD1	2.78	0.67
1:A:1973:GLU:HG3	1:A:1976:LEU:CD2	2.25	0.67
1:A:842:ILE:N	1:A:842:ILE:HD12	2.09	0.67
1:A:389:ASP:OD2	1:A:1344:ASP:OD2	2.13	0.67
1:A:671:MET:CE	1:A:1180:GLU:OE1	2.42	0.67
1:A:884:LYS:CE	1:A:895:GLN:NE2	2.58	0.67
1:A:1458:PRO:HG2	1:A:1458:PRO:O	1.95	0.67
1:A:3:LEU:C	1:A:7:CYS:SG	2.72	0.67
1:A:726:ARG:CD	1:A:1189:ARG:CD	2.69	0.66
1:A:4:GLU:HA	1:A:7:CYS:SG	2.35	0.66
1:A:387:GLU:HB3	1:A:388:LEU:HD23	1.76	0.66
1:A:1556:LEU:HD21	1:A:1564:HIS:N	2.10	0.66
1:A:1645:TYR:O	1:A:1649:MET:CE	2.42	0.66
1:A:97:GLU:O	1:A:99:PHE:N	2.29	0.66
1:A:669:THR:HG21	1:A:706:HIS:HE1	1.60	0.66
1:A:18:LEU:HD13	1:A:146:ILE:HD11	1.78	0.66
1:A:1529:LEU:HB3	1:A:1534:LEU:CA	2.25	0.66
1:A:1567:PHE:O	1:A:1568:ARG:CA	2.44	0.66
1:A:349:ASP:O	1:A:350:SER:C	2.29	0.66
1:A:248:SER:OG	1:A:1022:ARG:NH1	2.28	0.66
1:A:381:VAL:O	1:A:382:SER:C	2.33	0.66
1:A:1052:MET:CG	1:A:1064:TRP:CH2	2.73	0.66
1:A:1649:MET:CE	1:A:1649:MET:H	2.08	0.66
1:A:1656:THR:O	1:A:1657:LEU:C	2.33	0.65
1:A:1516:LEU:HD12	1:A:1541:LEU:HD21	1.76	0.65
1:A:1652:GLU:OE1	1:A:1653:ALA:CA	2.44	0.65
1:A:1069:ARG:HD2	1:A:1071:TYR:OH	1.95	0.65
1:A:1399:LEU:O	1:A:1399:LEU:HD22	1.97	0.65
1:A:1547:TRP:HB2	1:A:1558:ASP:HB3	1.77	0.65
1:A:1555:THR:OG1	1:A:1564:HIS:CE1	2.49	0.65
1:A:1561:PHE:HZ	1:A:1570:PHE:CG	2.15	0.65
1:A:1344:ASP:CB	1:A:1398:SER:HB3	2.26	0.65
1:A:1868:ASN:C	1:A:1870:ASP:H	1.98	0.65
1:A:1937:LEU:CD2	1:A:2028:LYS:HZ1	2.05	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1538:TRP:NE1	1:A:1550:THR:HG22	2.11	0.65
1:A:1579:ARG:HG2	1:A:1580:SER:N	2.12	0.65
1:A:1694:ARG:HH22	1:A:1816:ARG:HG2	1.62	0.65
1:A:1135:ARG:NH1	1:A:1137:LYS:HE2	1.94	0.65
1:A:1694:ARG:HH22	1:A:1816:ARG:CB	2.10	0.65
1:A:1399:LEU:O	1:A:1399:LEU:HD13	1.97	0.65
1:A:381:VAL:O	1:A:381:VAL:HG23	1.97	0.64
1:A:835:ARG:O	1:A:840:LYS:NZ	2.30	0.64
1:A:1455:SER:O	1:A:1458:PRO:HD2	1.90	0.64
1:A:872:SER:O	1:A:874:LEU:N	2.31	0.64
1:A:864:VAL:HG11	1:A:867:LYS:HB2	1.79	0.64
1:A:1567:PHE:HE1	1:A:1571:ILE:CA	2.11	0.64
1:A:87:LEU:C	1:A:89:LYS:N	2.40	0.64
1:A:1529:LEU:C	1:A:1534:LEU:CB	2.66	0.64
1:A:1694:ARG:HH12	1:A:1816:ARG:CG	2.08	0.64
1:A:208:MET:O	1:A:210:ALA:N	2.26	0.64
1:A:236:PRO:HG3	1:A:1012:ARG:HB3	1.78	0.64
1:A:864:VAL:CG1	1:A:867:LYS:HB2	2.27	0.64
1:A:371:ASP:HB3	1:A:376:ASN:HD22	1.63	0.64
1:A:917:GLY:HA2	1:A:920:ARG:HD3	0.66	0.64
1:A:1458:PRO:HA	1:A:1461:GLU:OE2	1.98	0.64
1:A:193:TYR:CD1	1:A:197:ILE:CD1	2.74	0.64
1:A:1137:LYS:NZ	1:A:1137:LYS:HB2	2.13	0.64
1:A:1183:SER:OG	1:A:1197:ARG:NH1	2.31	0.64
1:A:1517:VAL:HG21	1:A:1571:ILE:HD13	1.79	0.64
1:A:18:LEU:CD1	1:A:146:ILE:CD1	2.72	0.63
1:A:23:LEU:HD13	1:A:178:LEU:HB2	1.78	0.63
1:A:380:VAL:CG2	1:A:411:PHE:CD1	2.73	0.63
1:A:1062:VAL:HG12	1:A:1064:TRP:HE3	1.59	0.63
1:A:2028:LYS:HD3	1:A:2032:ARG:HH21	1.63	0.63
1:A:1046:ASP:HB3	1:A:1047:PRO:HD3	1.80	0.63
1:A:1516:LEU:HD13	1:A:1541:LEU:CD2	2.18	0.63
1:A:1518:SER:C	1:A:1522:PHE:HB2	2.18	0.63
1:A:1635:MET:HG3	1:A:1638:ASN:HB2	1.80	0.63
1:A:493:MET:CE	1:A:1296:ALA:HB2	2.28	0.63
1:A:22:GLY:O	1:A:178:LEU:CD1	2.46	0.63
1:A:202:TYR:OH	1:A:206:ARG:NH2	2.31	0.63
1:A:1024:LYS:HG2	1:A:1074:THR:O	1.99	0.63
1:A:1939:GLU:O	1:A:1943:LYS:HB3	1.98	0.63
1:A:756:LYS:HA	1:A:915:GLN:CG	2.29	0.63
1:A:1521:TRP:CH2	1:A:1555:THR:HG21	2.33	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1790:LEU:HD13	1:A:1804:CYS:HB3	1.80	0.62
1:A:905:CYS:SG	1:A:1023:ARG:NH1	2.72	0.62
1:A:1790:LEU:HD12	1:A:1790:LEU:N	2.13	0.62
1:A:1929:LYS:HE2	1:A:2005:TYR:O	1.98	0.62
1:A:384:PRO:CD	1:A:405:LYS:HZ1	2.05	0.62
1:A:1275:PHE:HE2	1:A:1277:LEU:HD21	1.65	0.62
1:A:965:HIS:ND1	1:A:1120:ASP:OD2	2.33	0.62
1:A:1457:ASN:O	1:A:1461:GLU:HG2	1.99	0.62
1:A:99:PHE:H	1:A:100:PRO:HD3	1.64	0.62
1:A:193:TYR:CZ	1:A:1946:VAL:CG1	2.82	0.62
1:A:384:PRO:HD3	1:A:405:LYS:HE3	1.81	0.62
1:A:1265:LEU:CD1	1:A:1274:GLY:O	2.38	0.62
1:A:1308:TYR:HD2	1:A:1324:ARG:HH11	1.46	0.62
1:A:84:PHE:CB	1:A:88:SER:OG	2.48	0.62
1:A:1561:PHE:CE1	1:A:1570:PHE:CD2	2.88	0.62
1:A:101:ILE:HG22	1:A:156:ARG:HB3	1.81	0.62
1:A:162:ASN:OD1	1:A:1766:ARG:NH2	2.33	0.62
1:A:1840:GLN:NE2	1:A:1841:GLU:OE2	2.32	0.62
1:A:193:TYR:CZ	1:A:1946:VAL:HG12	2.34	0.62
1:A:1552:PRO:O	1:A:1564:HIS:CE1	2.53	0.62
1:A:860:LEU:HB2	1:A:863:GLU:HB2	1.82	0.61
1:A:1529:LEU:HB3	1:A:1534:LEU:HB2	1.82	0.61
1:A:238:ILE:CD1	1:A:238:ILE:N	2.62	0.61
1:A:756:LYS:HA	1:A:915:GLN:HG3	1.82	0.61
1:A:849:LYS:HB3	1:A:874:LEU:HD22	1.82	0.61
1:A:1207:GLU:HA	1:A:1207:GLU:OE1	1.99	0.61
1:A:1538:TRP:HA	1:A:1538:TRP:CE3	2.35	0.61
1:A:1740:GLY:HA3	1:A:1745:ASN:HA	1.81	0.61
1:A:1567:PHE:HE1	1:A:1571:ILE:N	1.98	0.61
1:A:30:ARG:HH11	1:A:30:ARG:CG	2.14	0.61
1:A:967:LEU:HD23	1:A:1988:LEU:HD11	1.82	0.61
1:A:355:LEU:O	1:A:356:MET:HB2	2.00	0.61
1:A:676:SER:OG	1:A:1174:ASN:CG	2.39	0.61
1:A:973:LEU:C	1:A:974:GLY:O	2.31	0.61
1:A:1064:TRP:HE1	1:A:1072:ILE:HG12	1.64	0.61
1:A:694:LEU:O	1:A:694:LEU:HD23	1.99	0.61
1:A:1091:HIS:NE2	1:A:1128:SER:OG	2.27	0.61
1:A:87:LEU:HD13	1:A:88:SER:H	1.65	0.61
1:A:916:HIS:O	1:A:920:ARG:NE	2.34	0.61
1:A:1067:LYS:HD2	1:A:1068:GLY:N	2.14	0.61
1:A:1435:LYS:H	1:A:1438:LEU:HD12	1.65	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1547:TRP:CZ3	1:A:1559:GLY:O	2.54	0.61
1:A:1153:LEU:HD23	1:A:1173:VAL:HG13	1.82	0.60
1:A:1868:ASN:O	1:A:1870:ASP:N	2.34	0.60
1:A:917:GLY:N	1:A:920:ARG:HD2	2.15	0.60
1:A:1670:ARG:HH12	1:A:1853:ARG:H	1.49	0.60
1:A:237:ASN:O	1:A:241:VAL:CB	2.48	0.60
1:A:1574:VAL:HG13	1:A:1575:ASP:N	2.16	0.60
1:A:1688:ILE:HG22	1:A:1690:ASP:H	1.66	0.60
1:A:1937:LEU:CD2	1:A:2028:LYS:HZ3	2.02	0.60
1:A:1180:GLU:CG	1:A:1185:PHE:HD1	2.14	0.60
1:A:351:GLY:CA	1:A:369:LEU:HD12	2.29	0.60
1:A:658:LYS:HZ1	1:A:696:THR:HG22	1.59	0.60
1:A:1160:ASN:OD1	1:A:1161:PRO:HD3	2.02	0.60
1:A:1400:SER:HB2	1:A:1407:ARG:CZ	2.32	0.60
1:A:1514:GLU:HB2	1:A:1571:ILE:CG2	2.32	0.60
1:A:1973:GLU:CG	1:A:1976:LEU:HD21	2.32	0.60
1:A:353:GLY:HA3	1:A:355:LEU:H	1.66	0.59
1:A:838:GLY:HA3	1:A:890:ILE:HD13	1.83	0.59
1:A:1546:ALA:O	1:A:1547:TRP:CG	2.55	0.59
1:A:1574:VAL:HG22	1:A:1574:VAL:O	2.01	0.59
1:A:96:SER:OG	1:A:99:PHE:CE1	2.56	0.59
1:A:1790:LEU:CD1	1:A:1804:CYS:HB3	2.33	0.59
1:A:1791:SER:HB2	1:A:1796:LYS:NZ	2.16	0.59
1:A:947:SER:OG	1:A:950:GLU:OE2	2.19	0.59
1:A:87:LEU:HD13	1:A:88:SER:N	2.17	0.59
1:A:1567:PHE:CE1	1:A:1571:ILE:N	2.70	0.59
1:A:1529:LEU:HB3	1:A:1534:LEU:N	2.18	0.59
1:A:411:PHE:O	1:A:412:LYS:HE2	2.02	0.59
1:A:1180:GLU:HG3	1:A:1185:PHE:HD1	1.68	0.59
1:A:1441:LEU:HD21	1:A:1541:LEU:HD13	1.84	0.59
1:A:1645:TYR:O	1:A:1649:MET:HE1	2.01	0.59
1:A:361:TYR:O	1:A:365:TRP:HD1	1.86	0.58
1:A:1010:PHE:O	1:A:1014:ILE:HG13	2.03	0.58
1:A:1457:ASN:O	1:A:1461:GLU:CG	2.50	0.58
1:A:1622:ARG:HH22	1:A:1674:LEU:HB3	1.68	0.58
1:A:1927:LEU:HA	1:A:1930:GLN:HB2	1.83	0.58
1:A:1478:LEU:O	1:A:1478:LEU:HD12	2.03	0.58
1:A:1527:THR:O	1:A:1527:THR:HG22	2.01	0.58
1:A:864:VAL:CG1	1:A:867:LYS:CB	2.81	0.58
1:A:979:ASN:OD1	1:A:1133:SER:OG	2.19	0.58
1:A:1446:SER:HA	1:A:1450:MET:HB2	1.85	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:685:LYS:HD2	1:A:1169:GLU:HB3	1.86	0.58
1:A:1138:SER:HB3	1:A:1141:ASP:HB3	1.84	0.58
1:A:1926:SER:OG	1:A:2008:LYS:NZ	2.37	0.58
1:A:1215:GLN:NE2	1:A:1275:PHE:O	2.23	0.58
1:A:1567:PHE:CG	1:A:1567:PHE:O	2.56	0.58
1:A:1519:GLU:HA	1:A:1522:PHE:O	2.02	0.58
1:A:1561:PHE:CE2	1:A:1567:PHE:CD2	2.83	0.58
1:A:1569:ASN:HA	1:A:1572:ALA:HB3	1.86	0.58
1:A:371:ASP:CB	1:A:376:ASN:HD22	2.16	0.58
1:A:1138:SER:O	1:A:1982:PHE:CD2	2.57	0.58
1:A:1553:SER:O	1:A:1556:LEU:HB2	2.04	0.58
1:A:244:THR:O	1:A:1023:ARG:NH2	2.35	0.57
1:A:837:ILE:HD11	1:A:935:GLY:HA2	1.86	0.57
1:A:1136:PRO:CG	1:A:1982:PHE:CB	2.81	0.57
1:A:1973:GLU:HG3	1:A:1976:LEU:HD21	1.86	0.57
1:A:102:THR:HG23	1:A:160:MET:SD	2.44	0.57
1:A:238:ILE:CD1	1:A:238:ILE:H	2.18	0.57
1:A:742:ASN:CG	1:A:743:LEU:N	2.57	0.57
1:A:951:THR:OG1	1:A:958:LYS:HB3	2.04	0.57
1:A:1180:GLU:HG2	1:A:1185:PHE:CD1	2.39	0.57
1:A:835:ARG:O	1:A:839:THR:OG1	2.21	0.57
1:A:1003:CYS:HB3	1:A:1011:HIS:CD2	2.40	0.57
1:A:1046:ASP:OD1	1:A:1046:ASP:C	2.43	0.57
1:A:193:TYR:HH	1:A:1946:VAL:HG12	1.65	0.57
1:A:234:PHE:CZ	1:A:236:PRO:O	2.58	0.57
1:A:402:LYS:O	1:A:405:LYS:HG3	2.03	0.57
1:A:1004:TRP:HD1	1:A:1005:PHE:CD1	2.23	0.57
1:A:1561:PHE:CE1	1:A:1570:PHE:CG	2.93	0.57
1:A:351:GLY:HA3	1:A:369:LEU:HD11	0.66	0.57
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1570:PHE:HB3	2.39	0.57
1:A:354:SER:O	1:A:356:MET:N	2.37	0.57
1:A:840:LYS:C	1:A:842:ILE:HD12	2.25	0.57
1:A:1548:LEU:HD22	1:A:1555:THR:HG22	1.86	0.57
1:A:1694:ARG:NH2	1:A:1816:ARG:HG2	2.19	0.57
1:A:1304:ARG:HG2	1:A:1432:SER:HB3	1.84	0.57
1:A:1925:GLY:O	1:A:1928:ARG:NE	2.38	0.57
1:A:235:GLU:H	1:A:236:PRO:HD3	1.69	0.56
1:A:1831:ASP:O	1:A:1832:ILE:HG12	2.05	0.56
1:A:411:PHE:CD1	1:A:411:PHE:N	2.73	0.56
1:A:987:LYS:HG2	1:A:988:LYS:HG3	1.88	0.56
1:A:1920:ARG:HD3	1:A:1924:GLU:HB2	1.87	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1291:PHE:HD2	1:A:1450:MET:HG2	1.70	0.56
1:A:1791:SER:CB	1:A:1796:LYS:NZ	2.68	0.56
1:A:10:ILE:CG1	1:A:11:ASN:N	2.68	0.56
1:A:239:GLU:CD	1:A:239:GLU:H	2.08	0.56
1:A:1456:LEU:N	1:A:1458:PRO:HD2	2.20	0.56
1:A:1529:LEU:HB3	1:A:1534:LEU:CB	2.36	0.56
1:A:1946:VAL:HG23	1:A:1946:VAL:O	2.04	0.56
1:A:25:ASP:N	1:A:25:ASP:OD1	2.36	0.56
1:A:1552:PRO:O	1:A:1564:HIS:NE2	2.39	0.56
1:A:1624:GLU:HG3	1:A:1858:SER:H	1.70	0.56
1:A:389:ASP:O	1:A:390:ILE:CD1	2.52	0.56
1:A:540:GLU:N	1:A:540:GLU:OE1	2.38	0.56
1:A:1720:LYS:NZ	1:A:1742:GLY:O	2.39	0.56
1:A:1122:ILE:O	1:A:1122:ILE:HG23	2.06	0.56
1:A:547:LYS:HE2	1:A:1253:CYS:O	2.06	0.56
1:A:851:THR:HG21	1:A:927:ALA:HB2	1.88	0.56
1:A:1290:ARG:HH21	1:A:1576:ALA:HB3	1.70	0.56
1:A:658:LYS:HE3	1:A:699:GLN:OE1	1.97	0.55
1:A:1797:PRO:O	1:A:1798:ALA:O	2.25	0.55
1:A:209:ASP:OD1	1:A:209:ASP:N	2.20	0.55
1:A:721:ILE:C	1:A:727:VAL:HG23	2.24	0.55
1:A:864:VAL:HG11	1:A:867:LYS:CB	2.36	0.55
1:A:916:HIS:C	1:A:920:ARG:CD	2.74	0.55
1:A:760:GLU:OE1	1:A:871:ARG:NH2	2.39	0.55
1:A:995:THR:HG21	1:A:1021:PHE:HB2	1.88	0.55
1:A:952:VAL:O	1:A:952:VAL:HG22	2.05	0.55
1:A:378:GLU:HB2	1:A:411:PHE:HB2	1.88	0.55
1:A:671:MET:HE3	1:A:1180:GLU:OE1	2.06	0.55
1:A:1029:ASP:OD1	1:A:1030:LEU:N	2.40	0.55
1:A:144:THR:OG1	1:A:215:GLN:OE1	2.19	0.55
1:A:835:ARG:HG2	1:A:840:LYS:HZ1	1.69	0.55
1:A:1123:GLU:HB3	1:A:1128:SER:HA	1.89	0.55
1:A:1414:TYR:OH	1:A:1418:ARG:NH1	2.38	0.55
1:A:2003:VAL:N	1:A:2005:TYR:HH	2.05	0.55
1:A:10:ILE:HG12	1:A:11:ASN:N	2.22	0.55
1:A:421:GLN:HA	1:A:421:GLN:HE21	1.72	0.55
1:A:659:THR:HG22	1:A:699:GLN:HG2	1.89	0.55
1:A:1456:LEU:C	1:A:1458:PRO:HD2	2.27	0.55
1:A:1516:LEU:HD22	1:A:1537:GLU:HB3	1.88	0.55
1:A:1091:HIS:HE2	1:A:1128:SER:HG	1.54	0.55
1:A:1561:PHE:CD2	1:A:1567:PHE:HB3	2.39	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1939:GLU:O	1:A:1943:LYS:CB	2.54	0.55
1:A:614:CYS:O	1:A:1203:HIS:NE2	2.39	0.55
1:A:1055:ALA:HB2	1:A:1062:VAL:HG21	1.89	0.55
1:A:1545:PHE:CD1	1:A:1545:PHE:N	2.73	0.55
1:A:1556:LEU:C	1:A:1558:ASP:H	2.09	0.55
1:A:1677:LEU:O	1:A:1678:SER:C	2.44	0.55
1:A:84:PHE:HB3	1:A:88:SER:OG	2.07	0.54
1:A:98:VAL:HG23	1:A:108:GLY:O	2.07	0.54
1:A:1477:LEU:CD2	1:A:1590:LYS:NZ	2.69	0.54
1:A:2041:MET:SD	1:A:2041:MET:N	2.80	0.54
1:A:347:LYS:CD	1:A:348:THR:O	2.56	0.54
1:A:796:PRO:HG2	1:A:1161:PRO:HB2	1.89	0.54
1:A:840:LYS:C	1:A:842:ILE:CD1	2.75	0.54
1:A:1309:TYR:HE1	1:A:1324:ARG:HG2	1.73	0.54
1:A:18:LEU:HD13	1:A:146:ILE:CD1	2.34	0.54
1:A:971:ARG:HH21	1:A:971:ARG:CG	2.18	0.54
1:A:354:SER:O	1:A:357:ASP:N	2.40	0.54
1:A:727:VAL:HG13	1:A:727:VAL:O	2.07	0.54
1:A:1543:ALA:HA	1:A:1797:PRO:HB3	1.88	0.54
1:A:1569:ASN:HA	1:A:1572:ALA:CB	2.38	0.54
1:A:883:GLU:HB2	1:A:1355:MET:HE1	1.85	0.54
1:A:1521:TRP:HB2	1:A:1522:PHE:CE2	2.42	0.54
1:A:210:ALA:O	1:A:211:ASP:C	2.43	0.54
1:A:401:PRO:HB2	1:A:405:LYS:HE2	1.89	0.54
1:A:1477:LEU:HD21	1:A:1590:LYS:CE	2.38	0.54
1:A:842:ILE:HG13	1:A:888:TRP:CZ3	2.43	0.54
1:A:973:LEU:O	1:A:974:GLY:C	2.46	0.54
1:A:1518:SER:O	1:A:1522:PHE:N	2.40	0.54
1:A:365:TRP:CH2	1:A:554:ILE:HG13	2.43	0.54
1:A:1232:PHE:HB2	1:A:1597:ILE:HG12	1.90	0.53
1:A:510:LEU:O	1:A:516:GLN:NE2	2.41	0.53
1:A:923:TYR:HE2	1:A:1080:GLN:H	1.56	0.53
1:A:1973:GLU:CB	1:A:1976:LEU:HD21	2.37	0.53
1:A:842:ILE:HG13	1:A:888:TRP:HE3	1.72	0.53
1:A:864:VAL:CG1	1:A:867:LYS:CD	2.86	0.53
1:A:1385:LYS:O	1:A:1388:GLU:HG3	2.09	0.53
1:A:1556:LEU:CD2	1:A:1563:SER:C	2.76	0.53
1:A:1744:SER:OG	1:A:1745:ASN:N	2.41	0.53
1:A:1791:SER:HB2	1:A:1796:LYS:HZ2	1.73	0.53
1:A:1973:GLU:HG3	1:A:1976:LEU:HD23	1.90	0.53
1:A:656:LYS:O	1:A:659:THR:OG1	2.21	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:323:THR:O	1:A:454:LEU:CD2	2.57	0.53
1:A:1529:LEU:CB	1:A:1534:LEU:CB	2.82	0.53
1:A:1868:ASN:C	1:A:1870:ASP:N	2.62	0.53
1:A:20:GLU:C	1:A:180:ASN:HB3	2.29	0.53
1:A:1838:THR:HA	1:A:1844:VAL:HA	1.91	0.53
1:A:1937:LEU:HD21	1:A:2028:LYS:HE3	1.81	0.53
1:A:23:LEU:HD12	1:A:177:VAL:O	2.08	0.53
1:A:545:LYS:C	1:A:546:LEU:O	2.34	0.53
1:A:762:THR:HG23	1:A:762:THR:O	2.07	0.52
1:A:1137:LYS:CE	1:A:1137:LYS:HA	2.34	0.52
1:A:89:LYS:O	1:A:89:LYS:HG3	2.08	0.52
1:A:984:ASN:HB2	1:A:1128:SER:HB2	1.90	0.52
1:A:1066:ASP:OD1	1:A:1066:ASP:O	2.28	0.52
1:A:1313:ILE:HG12	1:A:1547:TRP:HB3	1.91	0.52
1:A:1457:ASN:O	1:A:1461:GLU:OE2	2.27	0.52
1:A:1556:LEU:HD11	1:A:1564:HIS:CG	2.20	0.52
1:A:1648:GLU:H	1:A:1649:MET:HE1	1.75	0.52
1:A:1703:PHE:CE2	1:A:1706:PRO:HA	2.44	0.52
1:A:843:LEU:O	1:A:844:ASP:CB	2.54	0.52
1:A:1275:PHE:HE2	1:A:1277:LEU:CD2	2.22	0.52
1:A:12:VAL:CG2	1:A:13:GLU:N	2.72	0.52
1:A:1563:SER:HG	1:A:1566:GLN:H	1.58	0.52
1:A:1710:PHE:O	1:A:1718:GLY:N	2.39	0.52
1:A:669:THR:HG21	1:A:706:HIS:CE1	2.44	0.52
1:A:380:VAL:O	1:A:380:VAL:CG1	2.52	0.52
1:A:11:ASN:CG	1:A:12:VAL:N	2.62	0.52
1:A:410:ARG:O	1:A:411:PHE:C	2.48	0.52
1:A:831:GLU:OE2	1:A:831:GLU:N	2.39	0.52
1:A:1399:LEU:N	1:A:1399:LEU:CD1	2.73	0.52
1:A:1973:GLU:CG	1:A:1976:LEU:CD2	2.87	0.52
1:A:658:LYS:HE3	1:A:699:GLN:CD	2.14	0.52
1:A:965:HIS:HB3	1:A:1989:TRP:HZ3	1.74	0.52
1:A:405:LYS:NZ	1:A:405:LYS:O	2.43	0.52
1:A:1357:LEU:O	1:A:1357:LEU:CG	2.58	0.52
1:A:1910:ILE:N	1:A:1910:ILE:CD1	2.73	0.52
1:A:235:GLU:N	1:A:236:PRO:HD3	2.25	0.51
1:A:990:ASN:ND2	1:A:1080:GLN:OE1	2.43	0.51
1:A:1180:GLU:CG	1:A:1185:PHE:CD1	2.94	0.51
1:A:1687:SER:O	1:A:1688:ILE:HG13	2.09	0.51
1:A:842:ILE:N	1:A:842:ILE:CD1	2.73	0.51
1:A:1649:MET:C	1:A:1650:ILE:HD13	2.30	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:678:PRO:HD3	1:A:1977:ASP:OD1	2.10	0.51
1:A:827:GLN:N	1:A:827:GLN:OE1	2.43	0.51
1:A:1556:LEU:C	1:A:1558:ASP:N	2.63	0.51
1:A:861:TYR:CZ	1:A:865:GLN:HG3	2.46	0.51
1:A:90:THR:HG23	1:A:90:THR:O	2.10	0.51
1:A:254:GLU:O	1:A:258:SER:OG	2.26	0.51
1:A:94:ARG:O	1:A:95:LEU:C	2.48	0.51
1:A:1561:PHE:HZ	1:A:1570:PHE:HB3	1.76	0.51
1:A:1915:MET:SD	1:A:1915:MET:N	2.84	0.51
1:A:550:PRO:HG2	1:A:574:ASP:OD2	2.11	0.51
1:A:1654:PHE:O	1:A:1656:THR:O	2.29	0.51
1:A:1590:LYS:O	1:A:1592:GLY:N	2.44	0.51
1:A:121:THR:HG22	1:A:164:ARG:HD3	1.92	0.51
1:A:973:LEU:CD2	1:A:973:LEU:N	2.74	0.51
1:A:359:GLY:HA2	1:A:363:GLU:CB	2.41	0.50
1:A:1136:PRO:CG	1:A:1982:PHE:HB3	2.41	0.50
1:A:1339:MET:HG3	1:A:1415:LEU:HB3	1.93	0.50
1:A:1561:PHE:HZ	1:A:1570:PHE:CB	2.20	0.50
1:A:87:LEU:CD1	1:A:88:SER:H	2.23	0.50
1:A:1299:THR:O	1:A:1300:THR:HG22	2.11	0.50
1:A:595:LEU:N	1:A:595:LEU:CD2	2.74	0.50
1:A:917:GLY:C	1:A:920:ARG:HD3	2.18	0.50
1:A:1046:ASP:N	1:A:1047:PRO:CD	2.74	0.50
1:A:235:GLU:N	1:A:236:PRO:CD	2.74	0.50
1:A:742:ASN:CG	1:A:743:LEU:H	2.13	0.50
1:A:1519:GLU:HA	1:A:1522:PHE:C	2.32	0.50
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1567:PHE:CB	2.81	0.50
1:A:1906:LYS:HD3	1:A:1912:ASN:OD1	2.12	0.50
1:A:95:LEU:CA	1:A:96:SER:CB	2.75	0.50
1:A:547:LYS:HE2	1:A:1253:CYS:CA	2.42	0.50
1:A:720:LEU:HD11	1:A:1176:VAL:HG11	1.93	0.50
1:A:1290:ARG:NH2	1:A:1575:ASP:O	2.45	0.50
1:A:1954:VAL:HG22	1:A:1956:ILE:HD12	1.94	0.50
1:A:12:VAL:HG22	1:A:13:GLU:N	2.26	0.50
1:A:1519:GLU:C	1:A:1521:TRP:N	2.57	0.50
1:A:26:GLN:OE1	1:A:30:ARG:CD	2.57	0.50
1:A:95:LEU:HA	1:A:96:SER:HB3	1.86	0.50
1:A:734:HIS:NE2	1:A:741:THR:HG21	2.26	0.50
1:A:1445:SER:OG	1:A:1450:MET:CE	2.60	0.50
1:A:1512:LYS:CG	1:A:1513:ALA:N	2.68	0.50
1:A:733:PHE:HA	1:A:739:ARG:O	2.11	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1567:PHE:CG	2.95	0.50
1:A:1195:THR:OG1	1:A:1228:GLY:O	2.27	0.50
1:A:111:PRO:HG2	1:A:114:ILE:HD11	1.94	0.49
1:A:1254:LEU:HD11	1:A:1409:VAL:HG11	1.93	0.49
1:A:1833:LEU:HB2	1:A:1850:TYR:HB3	1.94	0.49
1:A:384:PRO:HG2	1:A:405:LYS:HZ3	1.65	0.49
1:A:1283:PHE:O	1:A:1283:PHE:CD2	2.65	0.49
1:A:1519:GLU:HG2	1:A:1526:ARG:HB2	1.94	0.49
1:A:1791:SER:HB3	1:A:1796:LYS:HZ1	1.77	0.49
1:A:1976:LEU:HD23	1:A:1976:LEU:H	1.74	0.49
1:A:325:LEU:HD21	1:A:327:ARG:HE	1.77	0.49
1:A:365:TRP:CD2	1:A:595:LEU:HD11	2.46	0.49
1:A:790:TRP:CD1	1:A:790:TRP:N	2.80	0.49
1:A:1567:PHE:CD1	1:A:1567:PHE:C	2.85	0.49
1:A:1694:ARG:CZ	1:A:1816:ARG:HG2	2.42	0.49
1:A:155:ARG:CZ	1:A:155:ARG:CB	2.86	0.49
1:A:523:CYS:SG	1:A:1253:CYS:HB3	2.52	0.49
1:A:1428:HIS:ND1	1:A:1428:HIS:N	2.60	0.49
1:A:369:LEU:HD22	1:A:369:LEU:C	2.32	0.49
1:A:1654:PHE:C	1:A:1656:THR:H	2.15	0.49
1:A:2028:LYS:CD	1:A:2032:ARG:NH2	2.75	0.49
1:A:239:GLU:CG	1:A:240:ARG:N	2.75	0.49
1:A:1521:TRP:HE1	1:A:1538:TRP:HZ2	1.60	0.49
1:A:1529:LEU:CD2	1:A:1533:LEU:CB	2.86	0.49
1:A:292:THR:N	1:A:295:GLU:OE2	2.34	0.49
1:A:917:GLY:C	1:A:920:ARG:CD	2.80	0.49
1:A:973:LEU:HG	1:A:974:GLY:O	2.12	0.49
1:A:1455:SER:CA	1:A:1458:PRO:HG3	2.41	0.49
1:A:1530:GLY:O	1:A:1534:LEU:CA	2.61	0.49
1:A:1908:GLN:NE2	1:A:2046:GLU:OE1	2.44	0.49
1:A:193:TYR:CD1	1:A:193:TYR:C	2.86	0.48
1:A:658:LYS:HZ1	1:A:696:THR:H	1.61	0.48
1:A:1459:ASN:O	1:A:1460:GLN:C	2.51	0.48
1:A:1929:LYS:HB2	1:A:2012:LEU:HD23	1.95	0.48
1:A:226:ARG:NH2	1:A:839:THR:O	2.46	0.48
1:A:285:HIS:CE1	1:A:680:LEU:H	2.31	0.48
1:A:411:PHE:O	1:A:412:LYS:CE	2.61	0.48
1:A:921:GLU:OE2	1:A:923:TYR:CZ	2.65	0.48
1:A:1064:TRP:CD1	1:A:1064:TRP:C	2.86	0.48
1:A:1719:TYR:OH	1:A:1841:GLU:O	2.27	0.48
1:A:13:GLU:OE1	1:A:1853:ARG:NH2	2.47	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:101:ILE:CG2	1:A:156:ARG:HB3	2.43	0.48
1:A:980:ILE:HD12	1:A:1174:ASN:OD1	2.14	0.48
1:A:1632:VAL:HG22	1:A:1883:TRP:NE1	2.29	0.48
1:A:1970:GLU:CD	1:A:1970:GLU:N	2.63	0.48
1:A:181:MET:O	1:A:183:LEU:HG	2.14	0.48
1:A:246:PRO:HD2	1:A:1022:ARG:HB3	1.95	0.48
1:A:385:ALA:HA	1:A:388:LEU:H	1.78	0.48
1:A:949:HIS:ND1	1:A:949:HIS:N	2.60	0.48
1:A:1180:GLU:HG2	1:A:1185:PHE:CE1	2.49	0.48
1:A:1392:SER:HB2	1:A:1393:PRO:HD3	0.68	0.48
1:A:973:LEU:CD2	1:A:973:LEU:H	2.24	0.48
1:A:1135:ARG:HH11	1:A:1137:LYS:CE	2.22	0.48
1:A:1561:PHE:CG	1:A:1567:PHE:HB2	2.39	0.48
1:A:1899:VAL:HA	1:A:1902:ALA:HB3	1.95	0.48
1:A:1518:SER:O	1:A:1522:PHE:CA	2.61	0.48
1:A:318:ARG:O	1:A:318:ARG:HG3	2.12	0.48
1:A:1789:ARG:HB2	1:A:1796:LYS:HG3	1.95	0.48
1:A:161:GLU:O	1:A:163:PRO:HD3	2.13	0.48
1:A:349:ASP:O	1:A:349:ASP:OD1	2.31	0.48
1:A:1734:VAL:HG12	1:A:1752:LEU:HB3	1.96	0.48
1:A:466:ASN:HB3	1:A:468:LEU:HG	1.96	0.48
1:A:547:LYS:O	1:A:548:PHE:HB2	2.13	0.48
1:A:1811:ARG:O	1:A:1812:GLY:C	2.52	0.48
1:A:18:LEU:HD22	1:A:167:PHE:HB3	1.95	0.47
1:A:1878:GLU:HG3	1:A:1879:PRO:HD2	1.95	0.47
1:A:89:LYS:HB2	1:A:89:LYS:HE3	1.60	0.47
1:A:364:LEU:HD23	1:A:364:LEU:O	2.14	0.47
1:A:997:LYS:NZ	1:A:1090:LEU:HD21	2.29	0.47
1:A:1766:ARG:HA	1:A:1793:PHE:CZ	2.49	0.47
1:A:141:ALA:HA	1:A:144:THR:HG22	1.95	0.47
1:A:1512:LYS:NZ	1:A:1577:LYS:HE2	2.29	0.47
1:A:734:HIS:CD2	1:A:741:THR:CG2	2.95	0.47
1:A:876:GLU:OE2	1:A:876:GLU:N	2.47	0.47
1:A:726:ARG:HD2	1:A:1189:ARG:HD3	1.89	0.47
1:A:1067:LYS:HD2	1:A:1067:LYS:C	2.34	0.47
1:A:1474:VAL:HG23	1:A:1584:LEU:HG	1.97	0.47
1:A:1586:ALA:CB	1:A:1595:THR:CG2	2.87	0.47
1:A:1593:GLY:C	1:A:1595:THR:HG22	2.35	0.47
1:A:1963:PHE:HE2	1:A:1965:ASP:HB3	1.80	0.47
1:A:408:TYR:HD1	1:A:408:TYR:O	1.98	0.47
1:A:657:SER:HA	1:A:916:HIS:CD2	2.48	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:21:PRO:HA	1:A:180:ASN:HB3	1.97	0.47
1:A:161:GLU:O	1:A:162:ASN:O	2.33	0.47
1:A:535:HIS:CG	1:A:535:HIS:O	2.67	0.47
1:A:665:LEU:HD12	1:A:690:LEU:HD21	1.96	0.47
1:A:982:SER:OG	1:A:983:SER:N	2.47	0.47
1:A:1445:SER:OG	1:A:1450:MET:HE3	2.15	0.47
1:A:554:ILE:O	1:A:566:TYR:HA	2.14	0.47
1:A:973:LEU:HD23	1:A:973:LEU:N	2.24	0.47
1:A:1135:ARG:NH1	1:A:1137:LYS:HE3	2.26	0.47
1:A:1308:TYR:CE2	1:A:1324:ARG:HB2	2.50	0.47
1:A:1956:ILE:HG23	1:A:1962:ASP:HA	1.97	0.47
1:A:371:ASP:CG	1:A:376:ASN:HD22	2.18	0.47
1:A:540:GLU:HG3	1:A:556:LYS:HE2	1.97	0.47
1:A:102:THR:O	1:A:102:THR:OG1	2.11	0.47
1:A:181:MET:O	1:A:183:LEU:N	2.48	0.47
1:A:365:TRP:CE2	1:A:595:LEU:HD11	2.32	0.47
1:A:1182:ASN:O	1:A:1184:GLU:HG2	2.14	0.47
1:A:1867:SER:HB3	1:A:1869:ARG:HG2	1.97	0.47
1:A:99:PHE:N	1:A:100:PRO:CD	2.78	0.46
1:A:850:ALA:HA	1:A:873:LYS:HA	1.98	0.46
1:A:1175:THR:HG21	1:A:1178:CYS:HB2	1.96	0.46
1:A:1550:THR:O	1:A:1552:PRO:HD3	2.14	0.46
1:A:1556:LEU:HD21	1:A:1564:HIS:CA	2.45	0.46
1:A:1699:THR:OG1	1:A:1767:ARG:NH1	2.48	0.46
1:A:408:TYR:CD1	1:A:408:TYR:N	2.83	0.46
1:A:668:TYR:CZ	1:A:1170:LYS:HD2	2.51	0.46
1:A:672:GLU:O	1:A:675:VAL:HG23	2.16	0.46
1:A:1299:THR:C	1:A:1300:THR:CG2	2.83	0.46
1:A:1589:LYS:HA	1:A:1589:LYS:HD3	1.55	0.46
1:A:1688:ILE:O	1:A:1692:ILE:HG13	2.15	0.46
1:A:1625:SER:O	1:A:1629:LEU:HB2	2.15	0.46
1:A:1862:ALA:O	1:A:1866:TRP:N	2.44	0.46
1:A:421:GLN:NE2	1:A:421:GLN:CA	2.76	0.46
1:A:756:LYS:HB3	1:A:1204:GLN:NE2	2.23	0.46
1:A:951:THR:CG2	1:A:1181:TYR:OH	2.61	0.46
1:A:1255:HIS:O	1:A:1257:LEU:N	2.42	0.46
1:A:1280:ASN:OD1	1:A:1281:PRO:HD2	2.15	0.46
1:A:1458:PRO:CG	1:A:1458:PRO:O	2.52	0.46
1:A:1519:GLU:OE2	1:A:1526:ARG:CB	2.64	0.46
1:A:1579:ARG:CG	1:A:1580:SER:N	2.75	0.46
1:A:1934:ARG:HG2	1:A:1936:LYS:NZ	2.30	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1937:LEU:HD11	1:A:2028:LYS:HZ3	1.81	0.46
1:A:18:LEU:O	1:A:180:ASN:ND2	2.49	0.46
1:A:104:ASP:CG	1:A:104:ASP:O	2.30	0.46
1:A:973:LEU:O	1:A:974:GLY:O	2.33	0.46
1:A:1559:GLY:HA3	1:A:1560:PRO:HD3	1.23	0.46
1:A:1:MET:O	1:A:2:ASN:CB	2.64	0.46
1:A:229:SER:O	1:A:233:LEU:HG	2.16	0.46
1:A:1477:LEU:CD2	1:A:1590:LYS:HZ3	2.29	0.46
1:A:1181:TYR:CD1	1:A:1182:ASN:N	2.83	0.46
1:A:1619:ASN:OD1	1:A:1620:GLN:N	2.48	0.46
1:A:117:ARG:NH2	1:A:119:ASP:OD2	2.46	0.46
1:A:180:ASN:N	1:A:180:ASN:OD1	2.49	0.46
1:A:364:LEU:HA	1:A:415:LEU:HD21	1.97	0.46
1:A:1435:LYS:HE2	1:A:1437:SER:HB3	1.97	0.46
1:A:1789:ARG:O	1:A:1796:LYS:CG	2.62	0.46
1:A:206:ARG:HD3	1:A:207:SER:H	1.80	0.45
1:A:913:LYS:HD3	1:A:915:GLN:OE1	2.16	0.45
1:A:1233:SER:HB2	1:A:1597:ILE:HG23	1.98	0.45
1:A:1548:LEU:CD2	1:A:1555:THR:HG22	2.45	0.45
1:A:1634:PHE:HD2	1:A:1638:ASN:HB3	1.81	0.45
1:A:1791:SER:CB	1:A:1796:LYS:HZ1	2.29	0.45
1:A:1791:SER:H	1:A:1796:LYS:HE3	1.79	0.45
1:A:365:TRP:CE3	1:A:554:ILE:HD11	2.52	0.45
1:A:840:LYS:HA	1:A:842:ILE:HD11	1.99	0.45
1:A:1305:LYS:HE2	1:A:1305:LYS:HB3	1.63	0.45
1:A:1545:PHE:O	1:A:1548:LEU:HB2	2.16	0.45
1:A:1567:PHE:HE1	1:A:1571:ILE:HB	1.42	0.45
1:A:347:LYS:HG2	1:A:348:THR:H	1.81	0.45
1:A:572:LYS:HB3	1:A:592:GLU:HG2	1.98	0.45
1:A:887:MET:C	1:A:888:TRP:O	2.55	0.45
1:A:1137:LYS:NZ	1:A:1137:LYS:CB	2.73	0.45
1:A:1426:SER:OG	1:A:1426:SER:O	2.27	0.45
1:A:1535:LYS:HA	1:A:1535:LYS:HD2	1.66	0.45
1:A:1797:PRO:O	1:A:1798:ALA:C	2.52	0.45
1:A:1827:ARG:HB2	1:A:1834:ASN:HB2	1.97	0.45
1:A:84:PHE:C	1:A:87:LEU:CD1	2.85	0.45
1:A:96:SER:OG	1:A:99:PHE:HE1	1.96	0.45
1:A:815:ARG:HD2	1:A:1958:GLU:HG2	1.98	0.45
1:A:1270:ASP:O	1:A:1275:PHE:HB3	2.16	0.45
1:A:1345:ARG:O	1:A:1349:GLN:HG2	2.16	0.45
1:A:1878:GLU:CG	1:A:1879:PRO:HD2	2.47	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:150:ARG:O	1:A:154:SER:OG	2.28	0.45
1:A:218:GLU:HG2	1:A:219:GLU:HG2	1.99	0.45
1:A:1046:ASP:OD1	1:A:1046:ASP:O	2.35	0.45
1:A:1593:GLY:O	1:A:1596:THR:HG22	2.16	0.45
1:A:102:THR:O	1:A:103:HIS:HB2	2.16	0.45
1:A:726:ARG:CD	1:A:1189:ARG:HD3	2.47	0.45
1:A:1275:PHE:CE2	1:A:1277:LEU:CD2	2.98	0.45
1:A:181:MET:HB3	1:A:183:LEU:HD21	1.98	0.45
1:A:324:SER:O	1:A:324:SER:OG	2.24	0.45
1:A:612:LEU:H	1:A:613:PRO:CD	2.29	0.45
1:A:723:ARG:O	1:A:724:GLU:CG	2.65	0.45
1:A:1028:VAL:HG21	1:A:1033:LEU:HD21	1.98	0.45
1:A:1182:ASN:O	1:A:1184:GLU:N	2.50	0.45
1:A:1646:LYS:CE	1:A:1650:ILE:CG1	2.93	0.45
1:A:1652:GLU:OE1	1:A:1653:ALA:C	2.56	0.45
1:A:193:TYR:HE2	1:A:1946:VAL:HG11	1.79	0.45
1:A:545:LYS:HD2	1:A:546:LEU:O	2.17	0.45
1:A:1726:THR:OG1	1:A:1816:ARG:NH1	2.39	0.45
1:A:364:LEU:C	1:A:364:LEU:CD2	2.86	0.45
1:A:411:PHE:N	1:A:411:PHE:HD1	2.14	0.44
1:A:486:LEU:HD13	1:A:1247:TYR:CD2	2.52	0.44
1:A:691:ASP:OD1	1:A:692:GLY:N	2.45	0.44
1:A:1519:GLU:HA	1:A:1522:PHE:H	1.82	0.44
1:A:263:VAL:HG21	1:A:1961:ILE:HD13	1.99	0.44
1:A:1646:LYS:CE	1:A:1650:ILE:CD1	2.84	0.44
1:A:384:PRO:CD	1:A:405:LYS:HE3	2.45	0.44
1:A:971:ARG:HB2	1:A:971:ARG:NH2	2.12	0.44
1:A:1455:SER:HA	1:A:1458:PRO:CG	2.44	0.44
1:A:1542:ARG:NH2	1:A:1550:THR:H	2.05	0.44
1:A:1622:ARG:HD3	1:A:1650:ILE:HB	2.00	0.44
1:A:1790:LEU:HB3	1:A:1794:LYS:O	2.17	0.44
1:A:1874:PHE:O	1:A:1881:CYS:HB2	2.17	0.44
1:A:11:ASN:OD1	1:A:12:VAL:N	2.49	0.44
1:A:1520:VAL:HG21	1:A:1538:TRP:CD1	2.52	0.44
1:A:1672:MET:SD	1:A:1696:GLN:HB3	2.57	0.44
1:A:734:HIS:CB	1:A:737:SER:O	2.65	0.44
1:A:1190:HIS:O	1:A:1190:HIS:CD2	2.71	0.44
1:A:1333:THR:OG1	1:A:1334:LEU:N	2.51	0.44
1:A:221:LEU:HD23	1:A:221:LEU:HA	1.87	0.44
1:A:256:PHE:CE1	1:A:807:ARG:HB2	2.53	0.44
1:A:1290:ARG:NH1	1:A:1575:ASP:O	2.50	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:265:PHE:HE1	1:A:794:ASP:HB2	1.82	0.44
1:A:378:GLU:OE1	1:A:411:PHE:HB2	2.18	0.44
1:A:837:ILE:HG23	1:A:838:GLY:H	1.82	0.44
1:A:1270:ASP:OD2	1:A:1305:LYS:NZ	2.49	0.44
1:A:1632:VAL:HG22	1:A:1883:TRP:CD1	2.53	0.44
1:A:26:GLN:CD	1:A:30:ARG:HB2	2.38	0.43
1:A:187:GLU:HA	1:A:190:GLU:HB2	1.98	0.43
1:A:359:GLY:HA2	1:A:363:GLU:HB2	1.99	0.43
1:A:384:PRO:CD	1:A:405:LYS:CE	2.96	0.43
1:A:841:ASN:C	1:A:842:ILE:HD12	2.38	0.43
1:A:1561:PHE:CE2	1:A:1567:PHE:CD1	3.00	0.43
1:A:4:GLU:CA	1:A:7:CYS:SG	3.04	0.43
1:A:606:LEU:HD23	1:A:606:LEU:HA	1.85	0.43
1:A:887:MET:HB3	1:A:888:TRP:CD1	2.54	0.43
1:A:917:GLY:HA2	1:A:920:ARG:CG	2.41	0.43
1:A:1618:ASP:OD1	1:A:1618:ASP:N	2.50	0.43
1:A:385:ALA:HB1	1:A:390:ILE:HG13	1.99	0.43
1:A:1275:PHE:CE2	1:A:1277:LEU:HD21	2.48	0.43
1:A:1769:CYS:O	1:A:1773:GLY:N	2.51	0.43
1:A:95:LEU:HA	1:A:95:LEU:HD12	1.76	0.43
1:A:1633:LEU:O	1:A:1634:PHE:CD1	2.71	0.43
1:A:1649:MET:HE2	1:A:1649:MET:H	1.80	0.43
1:A:474:TYR:HH	1:A:576:THR:HG1	1.62	0.43
1:A:881:LEU:HB3	1:A:886:VAL:HG21	2.01	0.43
1:A:974:GLY:HA2	1:A:975:PRO:HD3	1.42	0.43
1:A:997:LYS:HZ2	1:A:1164:GLY:H	1.66	0.43
1:A:1694:ARG:HH22	1:A:1816:ARG:HB3	1.82	0.43
1:A:1712:ARG:HH12	1:A:1720:LYS:HE2	1.82	0.43
1:A:405:LYS:C	1:A:405:LYS:HD3	2.38	0.43
1:A:799:HIS:NE2	1:A:1076:THR:HB	2.34	0.43
1:A:997:LYS:HZ2	1:A:1164:GLY:CA	2.32	0.43
1:A:1879:PRO:O	1:A:1883:TRP:N	2.51	0.43
1:A:359:GLY:HA2	1:A:363:GLU:HB3	1.99	0.43
1:A:511:SER:HA	1:A:516:GLN:HE21	1.84	0.43
1:A:707:LEU:HD23	1:A:707:LEU:HA	1.85	0.43
1:A:971:ARG:CG	1:A:971:ARG:NH2	2.76	0.43
1:A:1540:LYS:HA	1:A:1540:LYS:HD3	1.76	0.43
1:A:1541:LEU:HD12	1:A:1541:LEU:O	2.19	0.43
1:A:683:PRO:HB2	1:A:710:MET:HB2	2.01	0.43
1:A:997:LYS:HZ2	1:A:1164:GLY:HA3	1.83	0.43
1:A:335:TRP:HZ2	1:A:594:GLU:HB3	1.84	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:422:GLU:O	1:A:425:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:805:PHE:CE2	1:A:1162:LEU:HD13	2.53	0.43
1:A:1548:LEU:HD22	1:A:1549:SER:H	1.84	0.43
1:A:384:PRO:HG2	1:A:405:LYS:CE	2.41	0.43
1:A:1556:LEU:HD21	1:A:1563:SER:C	2.38	0.43
1:A:1886:LEU:HD23	1:A:1886:LEU:H	1.83	0.43
1:A:654:GLU:N	1:A:654:GLU:OE1	2.52	0.42
1:A:762:THR:O	1:A:762:THR:CG2	2.67	0.42
1:A:1551:ASP:HA	1:A:1552:PRO:HD2	0.96	0.42
1:A:1642:THR:O	1:A:1646:LYS:HB2	2.19	0.42
1:A:23:LEU:HD13	1:A:178:LEU:CB	2.45	0.42
1:A:297:LEU:HD12	1:A:680:LEU:HD22	2.01	0.42
1:A:1186:HIS:CE1	1:A:1191:LEU:HD11	2.53	0.42
1:A:1299:THR:O	1:A:1300:THR:CG2	2.67	0.42
1:A:1703:PHE:CD1	1:A:1725:TRP:HD1	2.37	0.42
1:A:594:GLU:C	1:A:595:LEU:HD22	2.40	0.42
1:A:1529:LEU:HD22	1:A:1533:LEU:HB2	1.98	0.42
1:A:1750:ILE:HD12	1:A:1790:LEU:HD21	2.02	0.42
1:A:145:LYS:HD2	1:A:145:LYS:HA	1.78	0.42
1:A:378:GLU:OE1	1:A:411:PHE:CB	2.68	0.42
1:A:1002:LEU:HD23	1:A:1002:LEU:HA	1.81	0.42
1:A:1004:TRP:HD1	1:A:1005:PHE:CE1	2.36	0.42
1:A:1460:GLN:N	1:A:1460:GLN:CD	2.73	0.42
1:A:1672:MET:SD	1:A:1696:GLN:HG2	2.60	0.42
1:A:933:GLN:NE2	1:A:1082:ILE:O	2.52	0.42
1:A:1110:TYR:HE2	1:A:1144:ARG:HG2	1.84	0.42
1:A:1263:GLY:O	1:A:1266:ILE:HG22	2.20	0.42
1:A:1441:LEU:HD12	1:A:1441:LEU:HA	1.96	0.42
1:A:1597:ILE:O	1:A:1597:ILE:CG2	2.58	0.42
1:A:1886:LEU:O	1:A:1886:LEU:HG	2.20	0.42
1:A:181:MET:O	1:A:183:LEU:CD2	2.68	0.42
1:A:799:HIS:CE1	1:A:1076:THR:HB	2.55	0.42
1:A:1269:PRO:HB2	1:A:1275:PHE:CE2	2.53	0.42
1:A:1299:THR:C	1:A:1300:THR:HG23	2.39	0.42
1:A:1455:SER:CA	1:A:1458:PRO:CG	2.98	0.42
1:A:1460:GLN:NE2	1:A:1460:GLN:N	2.68	0.42
1:A:1632:VAL:HG12	1:A:1633:LEU:N	2.35	0.42
1:A:1823:GLU:O	1:A:1837:VAL:HG23	2.19	0.42
1:A:523:CYS:SG	1:A:546:LEU:HB3	2.60	0.42
1:A:811:SER:O	1:A:811:SER:OG	2.37	0.42
1:A:888:TRP:O	1:A:890:ILE:N	2.50	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1528:LYS:CD	1:A:1528:LYS:N	2.76	0.42
1:A:1912:ASN:ND2	1:A:1919:PHE:CE1	2.82	0.42
1:A:468:LEU:HD22	1:A:514:VAL:HG22	2.02	0.41
1:A:1024:LYS:HB3	1:A:1024:LYS:HE3	1.65	0.41
1:A:1290:ARG:NH2	1:A:1576:ALA:HB3	2.34	0.41
1:A:1545:PHE:O	1:A:1548:LEU:CB	2.68	0.41
1:A:1589:LYS:O	1:A:1592:GLY:HA3	2.20	0.41
1:A:178:LEU:HD12	1:A:179:SER:N	2.34	0.41
1:A:1524:LEU:HD12	1:A:1526:ARG:CZ	2.50	0.41
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1567:PHE:CD1	3.08	0.41
1:A:1816:ARG:HD3	1:A:1816:ARG:HA	1.89	0.41
1:A:1829:ARG:O	1:A:1830:GLY:C	2.58	0.41
1:A:1910:ILE:HG23	1:A:1919:PHE:CZ	2.55	0.41
1:A:87:LEU:CD1	1:A:88:SER:N	2.81	0.41
1:A:1055:ALA:CB	1:A:1062:VAL:HG21	2.50	0.41
1:A:86:GLY:O	1:A:89:LYS:CG	2.48	0.41
1:A:250:ILE:O	1:A:250:ILE:HG22	2.21	0.41
1:A:411:PHE:C	1:A:412:LYS:HG2	2.41	0.41
1:A:1302:LEU:HD12	1:A:1304:ARG:H	1.85	0.41
1:A:1542:ARG:HD3	1:A:1548:LEU:O	2.21	0.41
1:A:1791:SER:HB3	1:A:1796:LYS:NZ	2.34	0.41
1:A:206:ARG:HD3	1:A:207:SER:N	2.35	0.41
1:A:1067:LYS:CD	1:A:1068:GLY:N	2.81	0.41
1:A:1400:SER:CB	1:A:1407:ARG:CZ	2.97	0.41
1:A:28:TYR:HB2	1:A:189:GLU:OE2	2.20	0.41
1:A:99:PHE:N	1:A:100:PRO:HD3	2.29	0.41
1:A:470:ALA:O	1:A:513:ASN:HB2	2.21	0.41
1:A:1945:VAL:O	1:A:1946:VAL:C	2.58	0.41
1:A:78:ILE:HD12	1:A:78:ILE:H	1.86	0.41
1:A:239:GLU:CD	1:A:239:GLU:N	2.73	0.41
1:A:1929:LYS:HD2	1:A:2009:TYR:HD1	1.86	0.41
1:A:253:LEU:O	1:A:257:LEU:HG	2.21	0.41
1:A:854:PHE:HD1	1:A:907:ARG:HB3	1.86	0.41
1:A:1136:PRO:CG	1:A:1982:PHE:HB2	2.42	0.41
1:A:1329:THR:OG1	1:A:1569:ASN:O	2.28	0.41
1:A:1574:VAL:O	1:A:1575:ASP:O	2.38	0.41
1:A:1965:ASP:OD1	1:A:1965:ASP:N	2.52	0.41
1:A:495:ASP:OD1	1:A:500:HIS:NE2	2.54	0.41
1:A:510:LEU:HA	1:A:515:VAL:HG21	2.03	0.41
1:A:696:THR:H	1:A:699:GLN:NE2	2.19	0.41
1:A:718:PHE:CE1	1:A:732:THR:HA	2.56	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:756:LYS:HA	1:A:915:GLN:HG2	2.03	0.41
1:A:852:SER:HB3	1:A:924:VAL:HG21	2.03	0.41
1:A:912:LYS:NZ	1:A:920:ARG:NH2	2.68	0.41
1:A:1531:PRO:HA	1:A:1534:LEU:HD12	2.01	0.41
1:A:1626:ILE:O	1:A:1630:LYS:HG2	2.21	0.41
1:A:81:ASP:C	1:A:85:SER:OG	2.51	0.41
1:A:146:ILE:O	1:A:150:ARG:HB2	2.20	0.41
1:A:612:LEU:N	1:A:613:PRO:CD	2.84	0.41
1:A:863:GLU:OE1	1:A:864:VAL:CG2	2.46	0.41
1:A:1529:LEU:CB	1:A:1534:LEU:CA	2.97	0.41
1:A:1532:ARG:O	1:A:1536:GLU:HB3	2.16	0.41
1:A:1748:GLU:O	1:A:1749:GLU:CD	2.59	0.41
1:A:694:LEU:HD21	1:A:700:VAL:HG22	2.03	0.40
1:A:835:ARG:HG2	1:A:840:LYS:NZ	2.36	0.40
1:A:1541:LEU:HD13	1:A:1541:LEU:HA	1.82	0.40
1:A:547:LYS:HE2	1:A:1253:CYS:HA	2.04	0.40
1:A:1071:TYR:HD1	1:A:1071:TYR:O	2.04	0.40
1:A:2030:GLY:O	1:A:2034:LEU:HG	2.21	0.40
1:A:106:SER:HB3	1:A:156:ARG:HH22	1.85	0.40
1:A:356:MET:HB2	1:A:356:MET:HE3	1.71	0.40
1:A:864:VAL:O	1:A:864:VAL:HG12	2.20	0.40
1:A:724:GLU:HA	1:A:1985:ALA:HB3	2.04	0.40
1:A:1188:HIS:ND1	1:A:1989:TRP:HD1	2.19	0.40
1:A:1302:LEU:HG	1:A:1303:GLY:H	1.85	0.40
1:A:1556:LEU:CD2	1:A:1564:HIS:CG	3.02	0.40
1:A:1584:LEU:HB3	1:A:1585:GLY:H	1.36	0.40
1:A:347:LYS:CG	1:A:348:THR:N	2.85	0.40
1:A:371:ASP:O	1:A:376:ASN:HB3	2.20	0.40
1:A:476:ASP:OD1	1:A:476:ASP:N	2.55	0.40
1:A:663:ILE:HD11	1:A:702:LEU:HD13	2.03	0.40
1:A:1210:ALA:HB3	1:A:1213:SER:HB3	2.03	0.40
1:A:1219:SER:O	1:A:1223:THR:HG23	2.22	0.40
1:A:1545:PHE:C	1:A:1546:ALA:O	2.39	0.40
1:A:1594:VAL:N	1:A:1595:THR:HG22	2.36	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	1832/2109 (87%)	1586 (87%)	209 (11%)	37 (2%)	7 30

All (37) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	163	PRO
1	A	356	MET
1	A	978	ILE
1	A	1424	SER
1	A	1426	SER
1	A	1433	THR
1	A	1560	PRO
1	A	1568	ARG
1	A	1575	ASP
1	A	1591	SER
1	A	1799	SER
1	A	2	ASN
1	A	15	GLY
1	A	95	LEU
1	A	411	PHE
1	A	1576	ALA
1	A	1578	SER
1	A	1590	LYS
1	A	352	PHE
1	A	888	TRP
1	A	974	GLY
1	A	1869	ARG
1	A	1402	GLY
1	A	1403	HIS
1	A	1588	VAL
1	A	31	PRO
1	A	103	HIS
1	A	337	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	977	SER
1	A	1581	VAL
1	A	722	PRO
1	A	1007	PRO
1	A	413	PRO
1	A	677	PRO
1	A	1797	PRO
1	A	1392	SER
1	A	1404	VAL

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	1635/1848 (88%)	1533 (94%)	102 (6%)	18 48

All (102) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	7	CYS
1	A	13	GLU
1	A	14	ASN
1	A	25	ASP
1	A	30	ARG
1	A	87	LEU
1	A	89	LYS
1	A	109	MET
1	A	155	ARG
1	A	161	GLU
1	A	181	MET
1	A	183	LEU
1	A	189	GLU
1	A	193	TYR
1	A	216	LYS
1	A	237	ASN
1	A	239	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	298	GLU
1	A	318	ARG
1	A	336	LEU
1	A	348	THR
1	A	349	ASP
1	A	356	MET
1	A	363	GLU
1	A	364	LEU
1	A	367	LYS
1	A	369	LEU
1	A	382	SER
1	A	387	GLU
1	A	388	LEU
1	A	405	LYS
1	A	407	THR
1	A	408	TYR
1	A	417	SER
1	A	421	GLN
1	A	543	ILE
1	A	595	LEU
1	A	658	LYS
1	A	888	TRP
1	A	913	LYS
1	A	915	GLN
1	A	921	GLU
1	A	949	HIS
1	A	956	ARG
1	A	971	ARG
1	A	972	SER
1	A	973	LEU
1	A	1022	ARG
1	A	1024	LYS
1	A	1060	ARG
1	A	1061	GLU
1	A	1062	VAL
1	A	1064	TRP
1	A	1067	LYS
1	A	1071	TYR
1	A	1135	ARG
1	A	1137	LYS
1	A	1177	TYR
1	A	1180	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1181	TYR
1	A	1190	HIS
1	A	1207	GLU
1	A	1399	LEU
1	A	1427	ILE
1	A	1428	HIS
1	A	1433	THR
1	A	1460	GLN
1	A	1514	GLU
1	A	1521	TRP
1	A	1526	ARG
1	A	1527	THR
1	A	1528	LYS
1	A	1529	LEU
1	A	1534	LEU
1	A	1535	LYS
1	A	1537	GLU
1	A	1538	TRP
1	A	1539	ASP
1	A	1540	LYS
1	A	1541	LEU
1	A	1542	ARG
1	A	1544	SER
1	A	1545	PHE
1	A	1548	LEU
1	A	1565	VAL
1	A	1566	GLN
1	A	1567	PHE
1	A	1584	LEU
1	A	1589	LYS
1	A	1590	LYS
1	A	1595	THR
1	A	1649	MET
1	A	1652	GLU
1	A	1694	ARG
1	A	1790	LEU
1	A	1791	SER
1	A	1795	ILE
1	A	1796	LYS
1	A	1810	GLU
1	A	1911	ASP
1	A	1976	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2010	TYR

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (13) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	185	GLN
1	A	247	ASN
1	A	376	ASN
1	A	421	GLN
1	A	611	ASN
1	A	706	HIS
1	A	841	ASN
1	A	895	GLN
1	A	915	GLN
1	A	1057	HIS
1	A	1204	GLN
1	A	1403	HIS
1	A	1564	HIS

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 1 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

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.

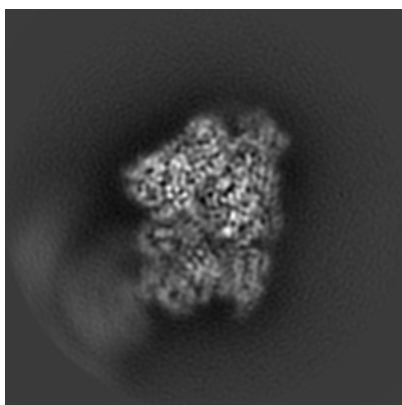
6 Map visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-0828. These allow visual inspection of the internal detail of the map and identification of artifacts.

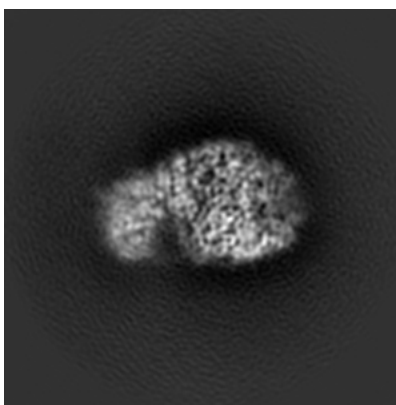
No raw map or half-maps were deposited for this entry and therefore no images, graphs, etc. pertaining to the raw map can be shown.

6.1 Orthogonal projections [i](#)

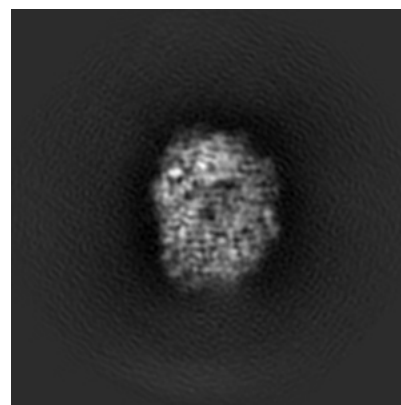
6.1.1 Primary map



X



Y

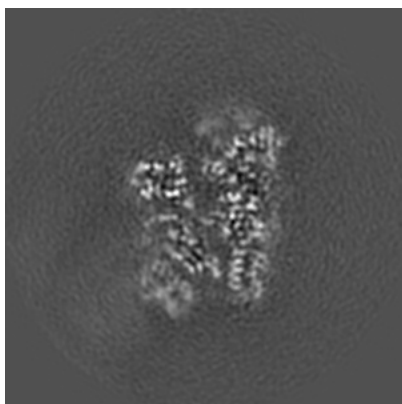


Z

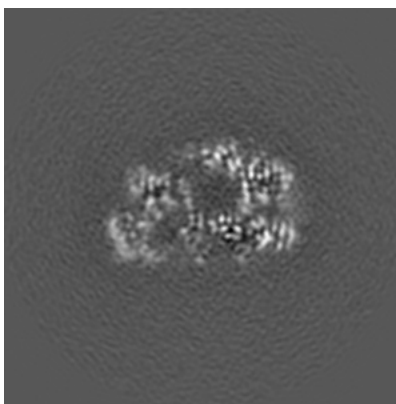
The images above show the map projected in three orthogonal directions.

6.2 Central slices [i](#)

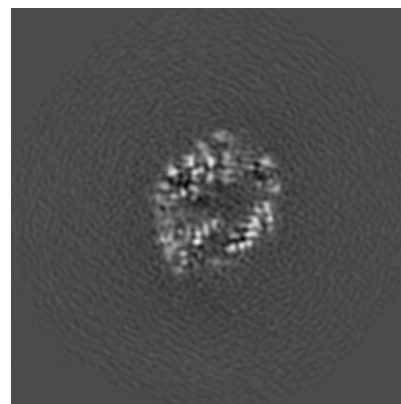
6.2.1 Primary map



X Index: 110



Y Index: 110

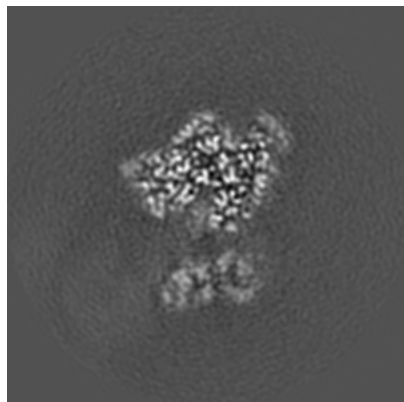


Z Index: 110

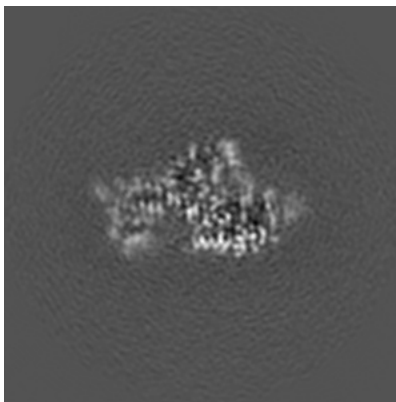
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

6.3 Largest variance slices [i](#)

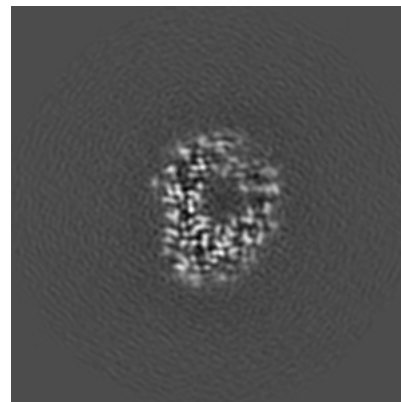
6.3.1 Primary map



X Index: 94



Y Index: 129

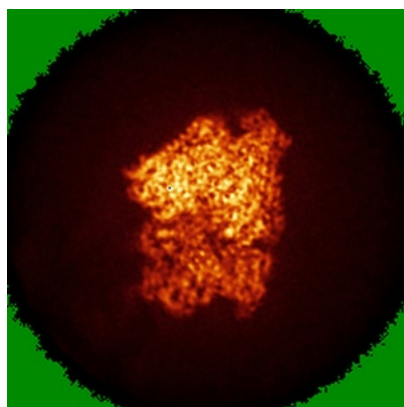


Z Index: 121

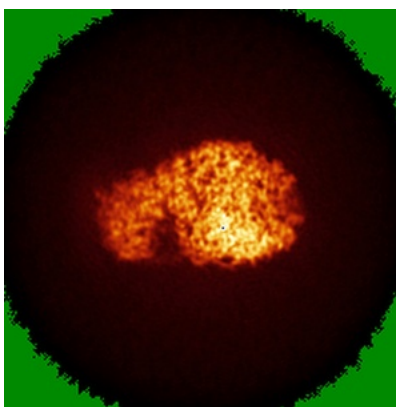
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

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

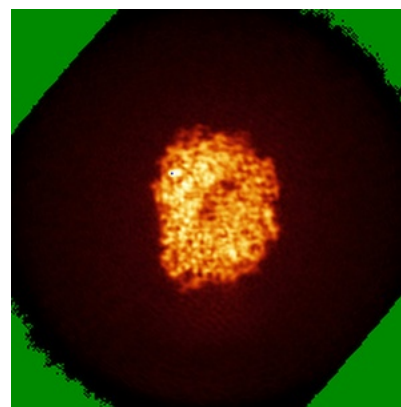
6.4.1 Primary map



X



Y

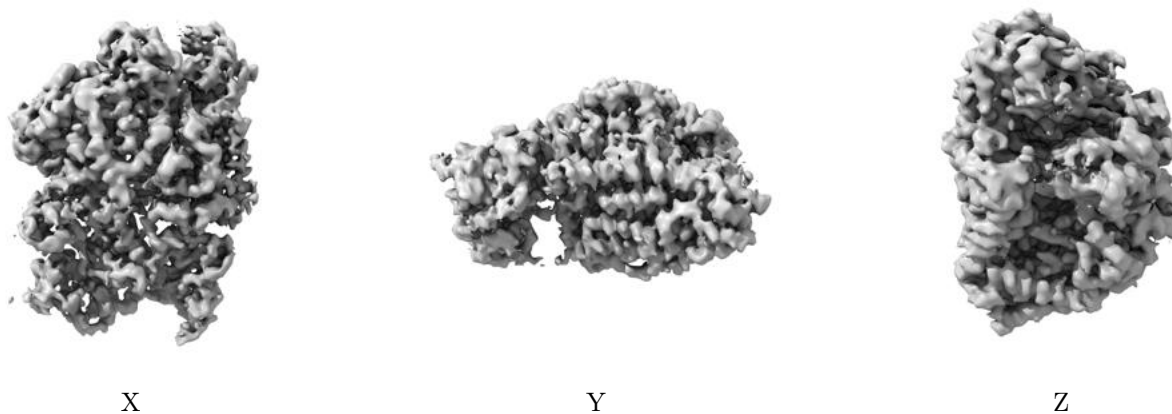


Z

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

6.5 Orthogonal surface views [i](#)

6.5.1 Primary map



The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.0085. These images, in conjunction with the slice images, may facilitate assessment of whether an appropriate contour level has been provided.

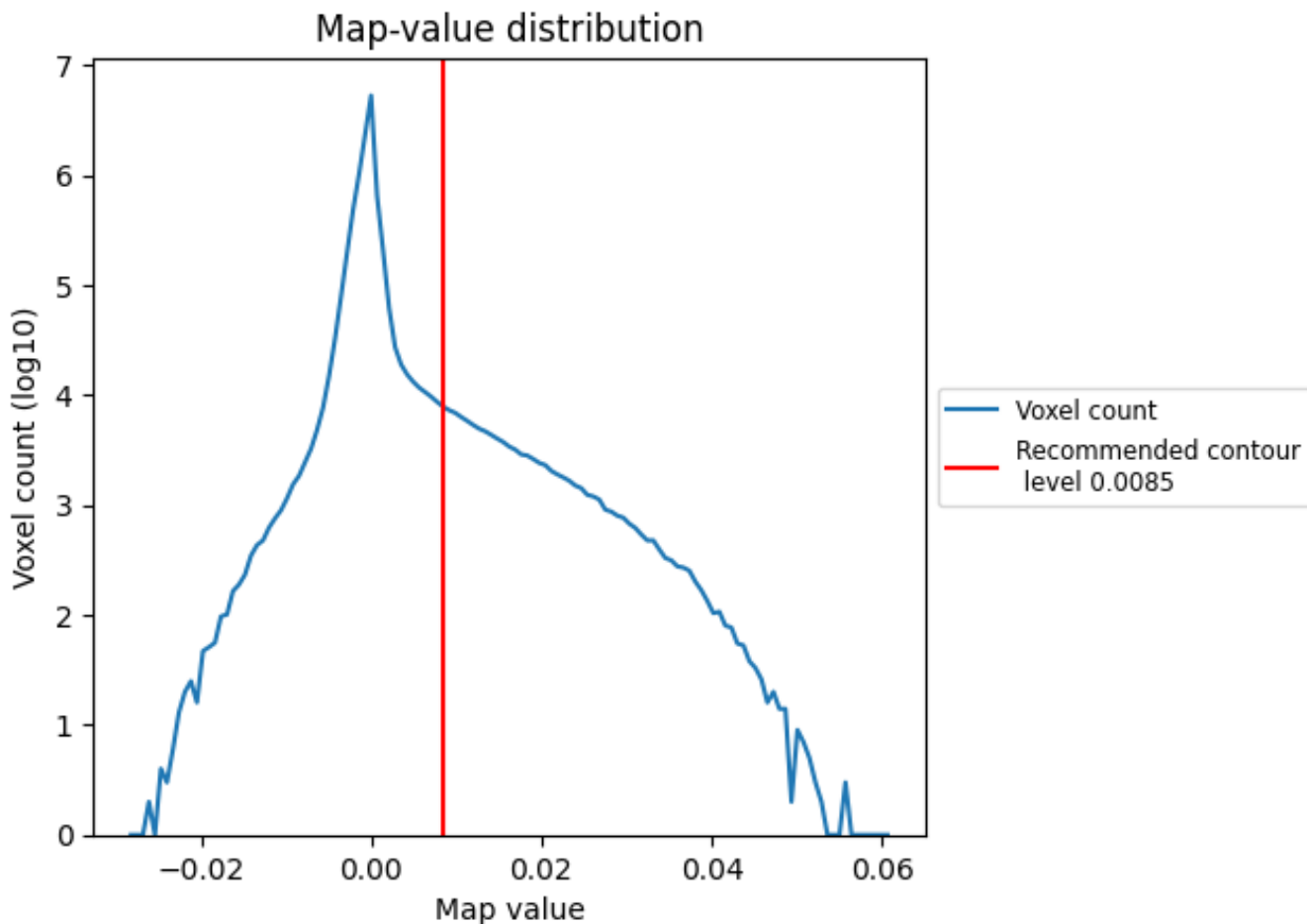
6.6 Mask visualisation [i](#)

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

7 Map analysis [i](#)

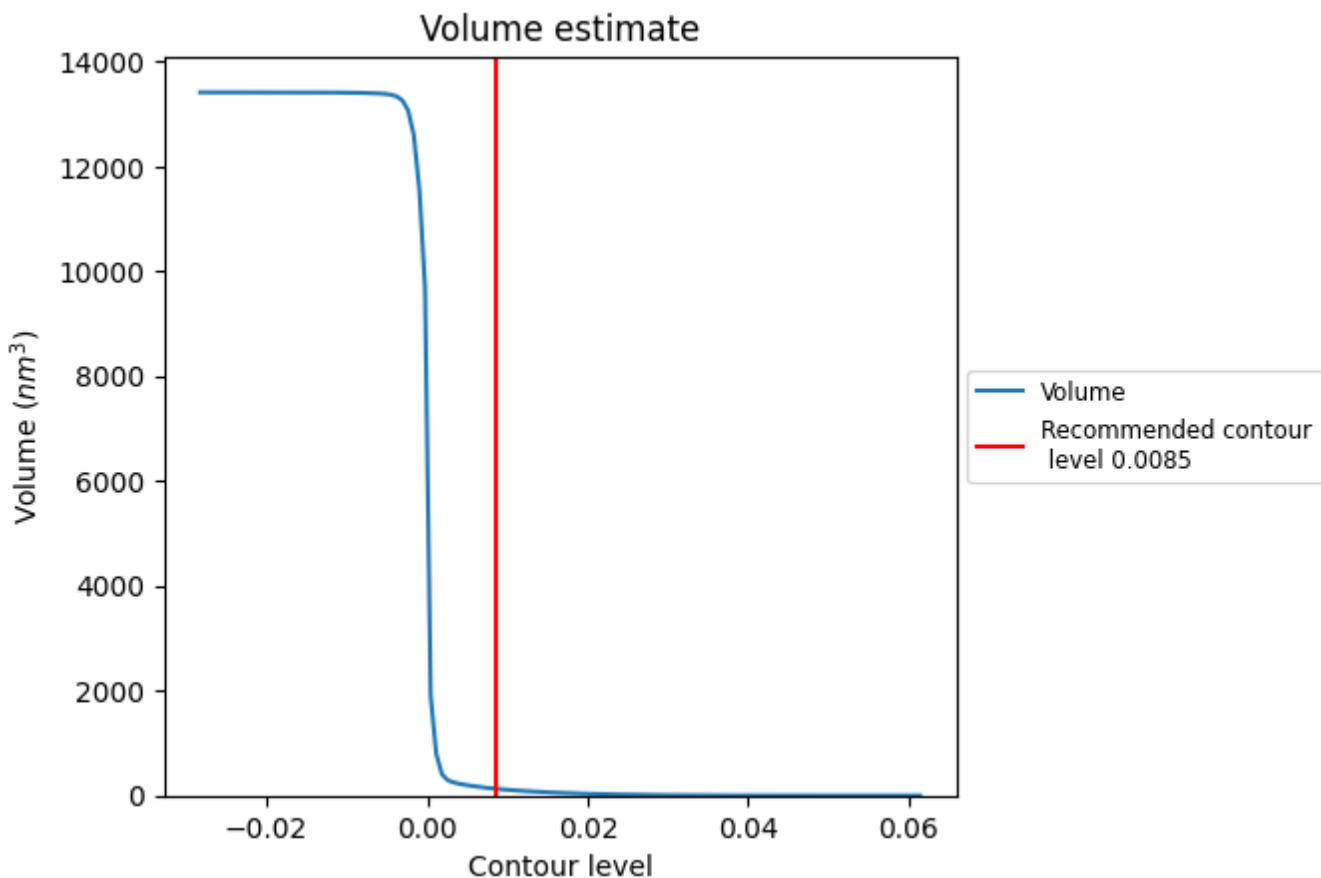
This section contains the results of statistical analysis of the map.

7.1 Map-value distribution [i](#)



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

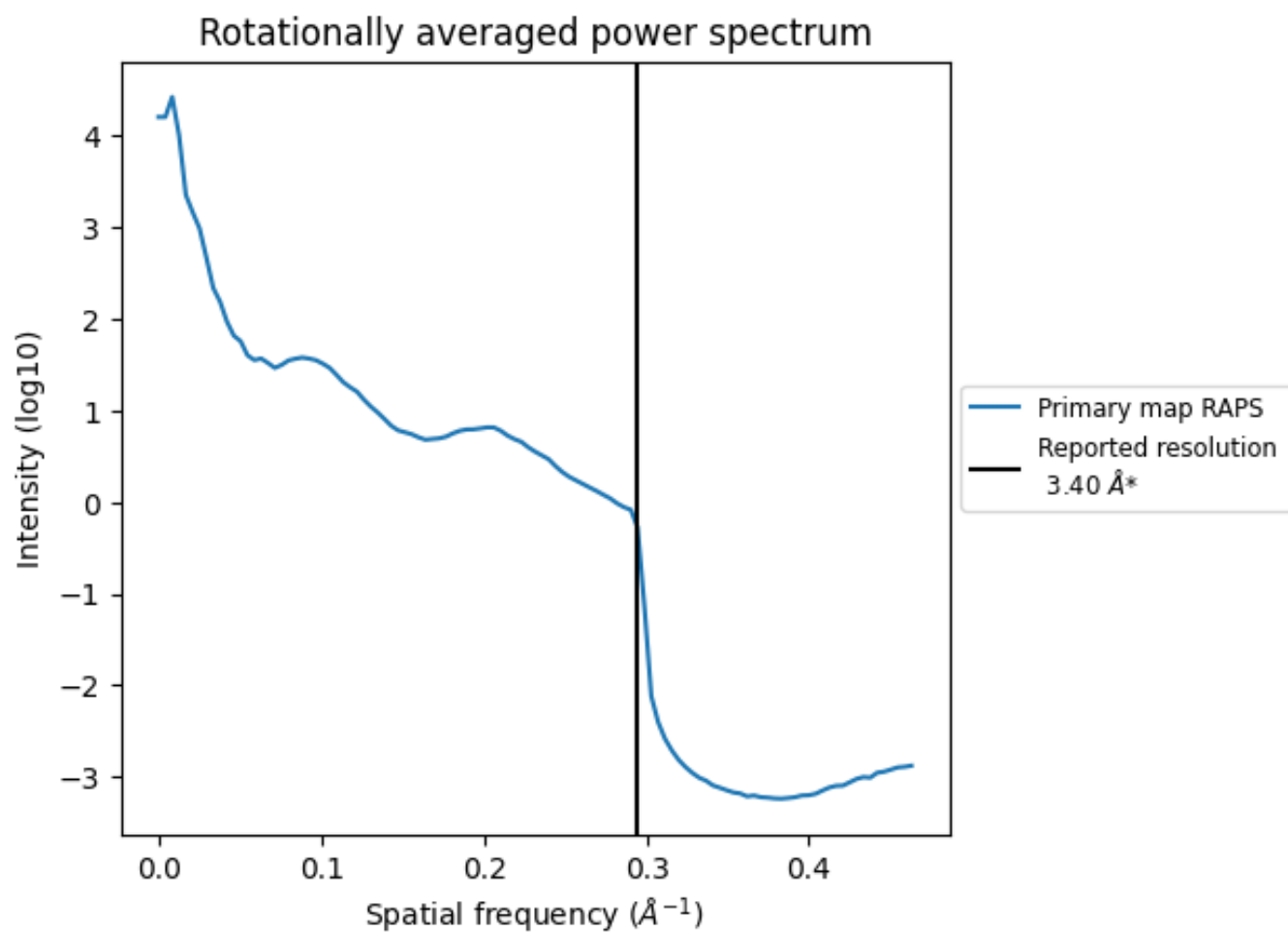
7.2 Volume estimate [\(i\)](#)



The volume at the recommended contour level is 130 nm³; this corresponds to an approximate mass of 118 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 0.294 Å⁻¹

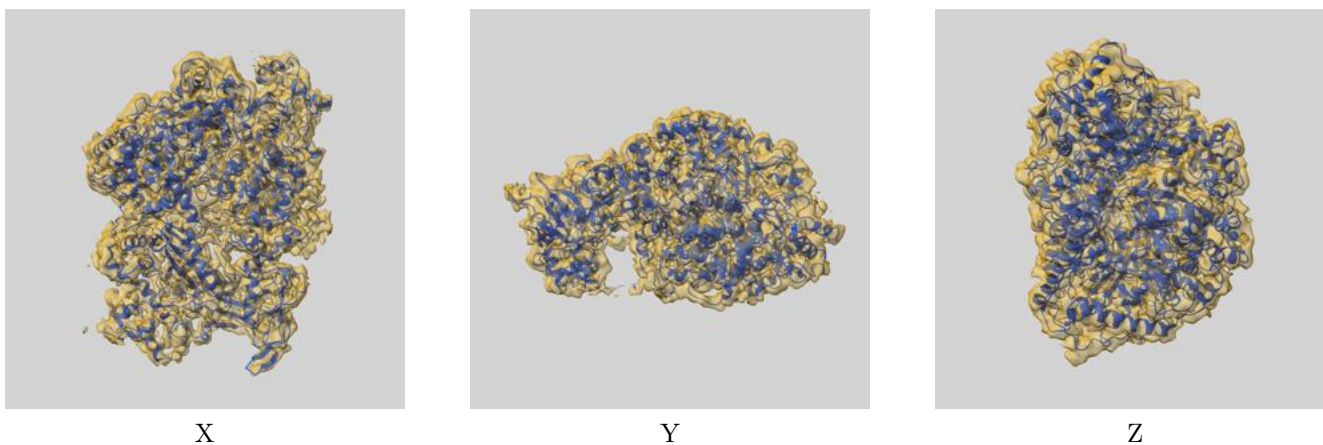
8 Fourier-Shell correlation

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

9 Map-model fit [i](#)

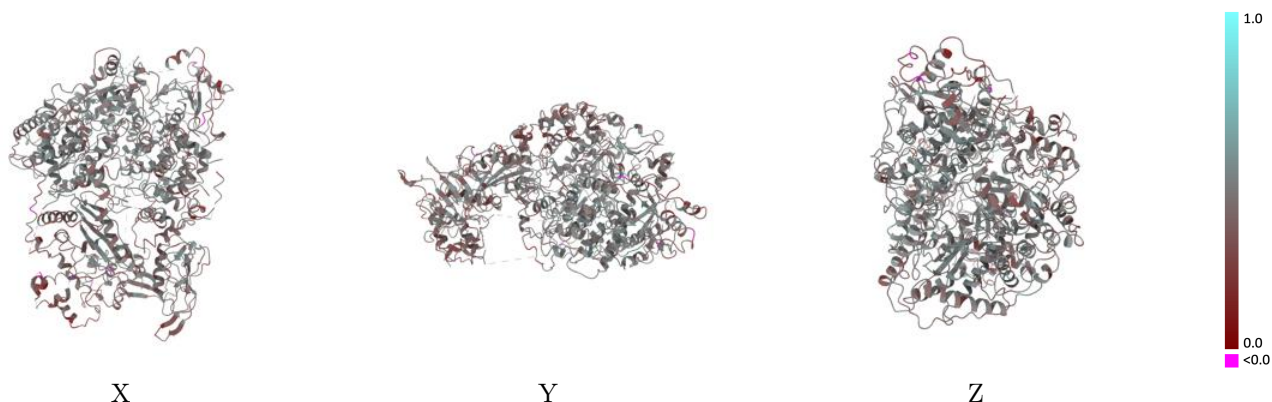
This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-0828 and PDB model 6L42. Per-residue inclusion information can be found in section 3 on page 5.

9.1 Map-model overlay [i](#)



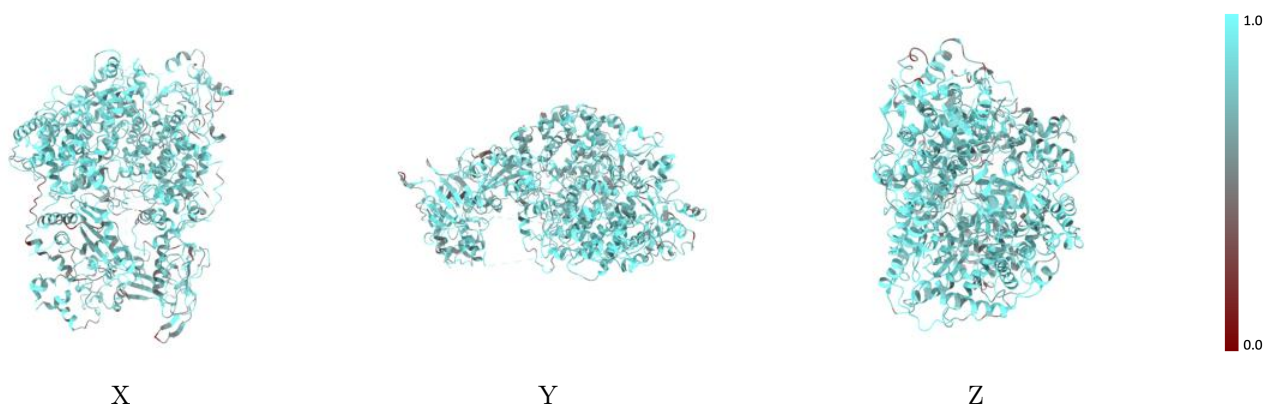
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.0085 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

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



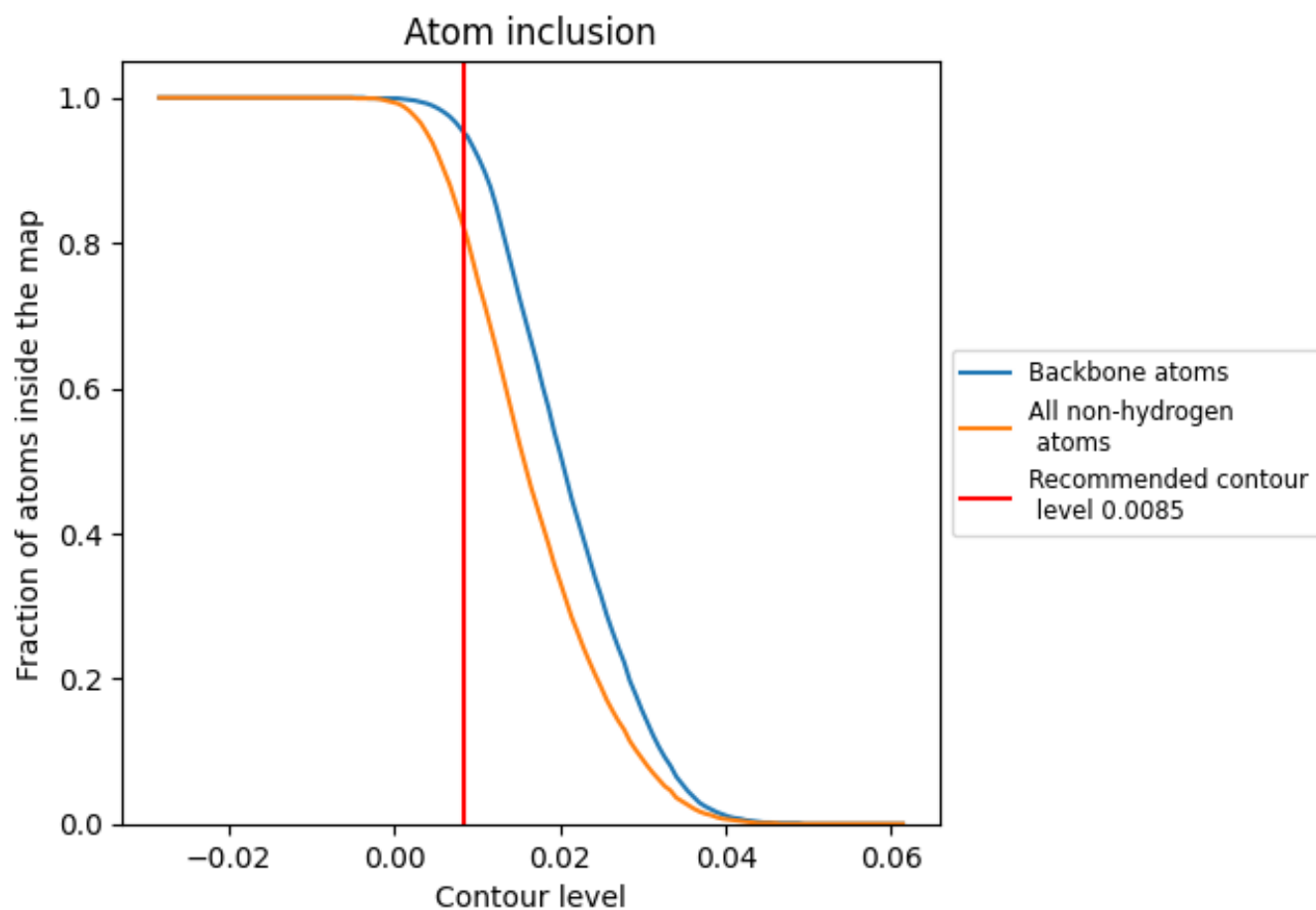
The images above show the model with each residue coloured according to its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions 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 (0.0085).





9.4 Atom inclusion [i](#)



At the recommended contour level, 95% of all backbone atoms, 82% 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 (0.0085) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	 0.8170	 0.4320
A	 0.8170	 0.4320

