



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Dec 10, 2022 – 02:04 pm GMT

PDB ID : 4UX1
EMDB ID : EMD-2759
Title : Cryo-EM structure of antagonist-bound E2P gastric H,K-ATPase (SCH.E2.AIF)
Authors : Abe, K.; Tani, K.; Fujiyoshi, Y.
Deposited on : 2014-08-18
Resolution : 8.00 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

EMDB validation analysis : 0.0.1.dev43
MolProbity : 4.02b-467
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
MapQ : 1.9.9
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.31.3

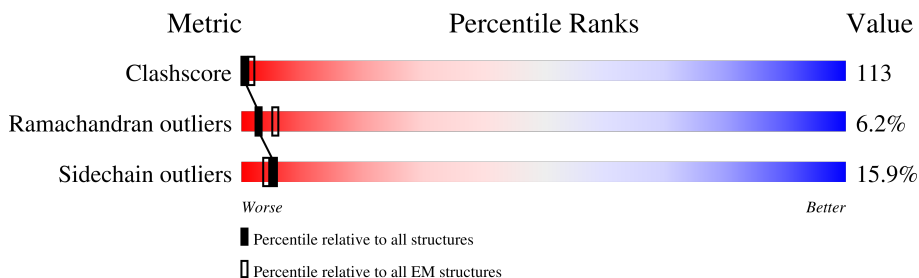
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON CRYSTALLOGRAPHY

The reported resolution of this entry is 8.00 Å.

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



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

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the map. The red, orange, yellow and green segments of the bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria respectively. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$. 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	1034	
2	B	290	

2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 9161 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

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

- Molecule 1 is a protein called POTASSIUM-TRANSPORTING ATPASE ALPHA CHAIN 1.

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

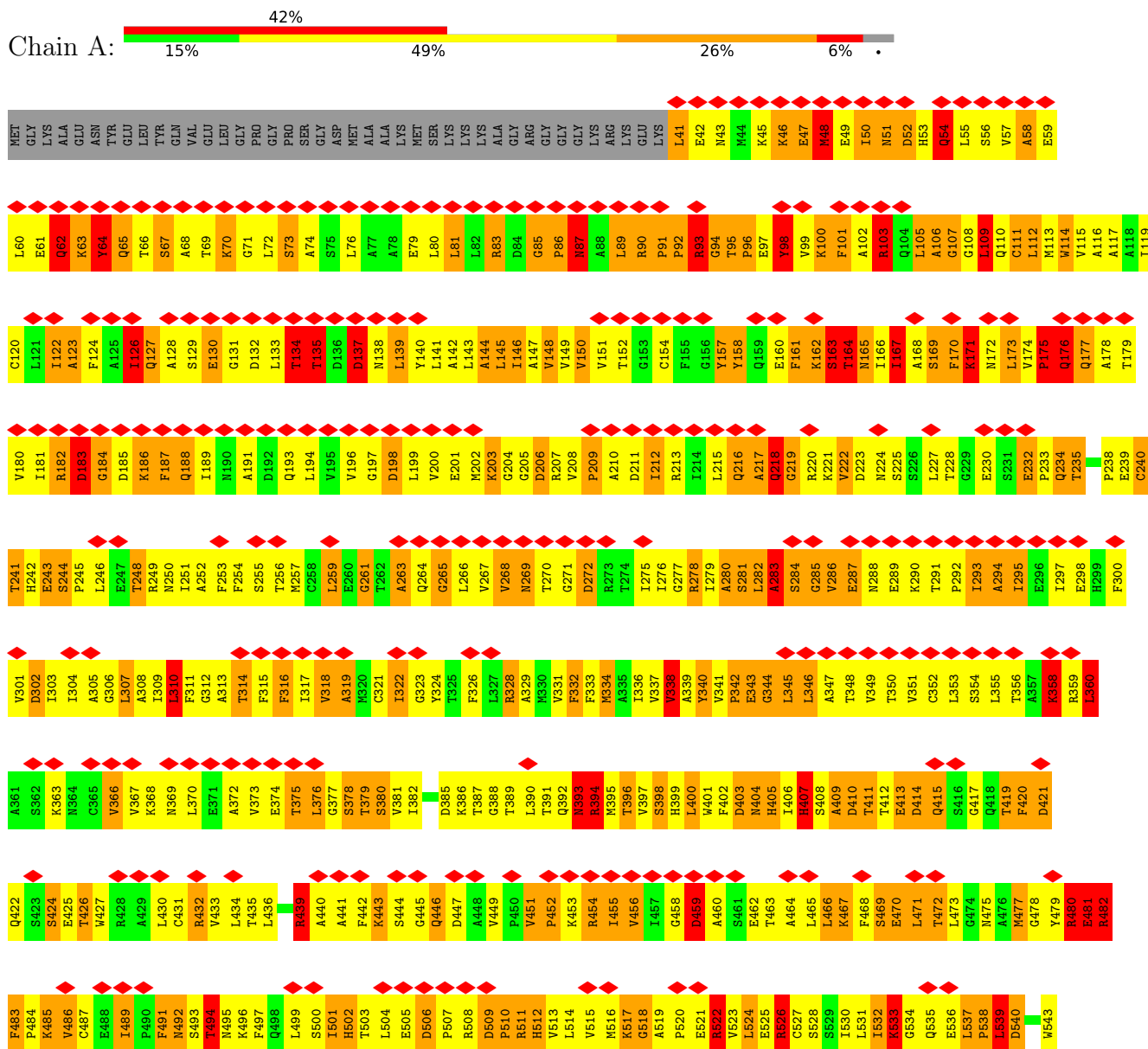
- Molecule 2 is a protein called POTASSIUM-TRANSPORTING ATPASE SUBUNIT BETA.

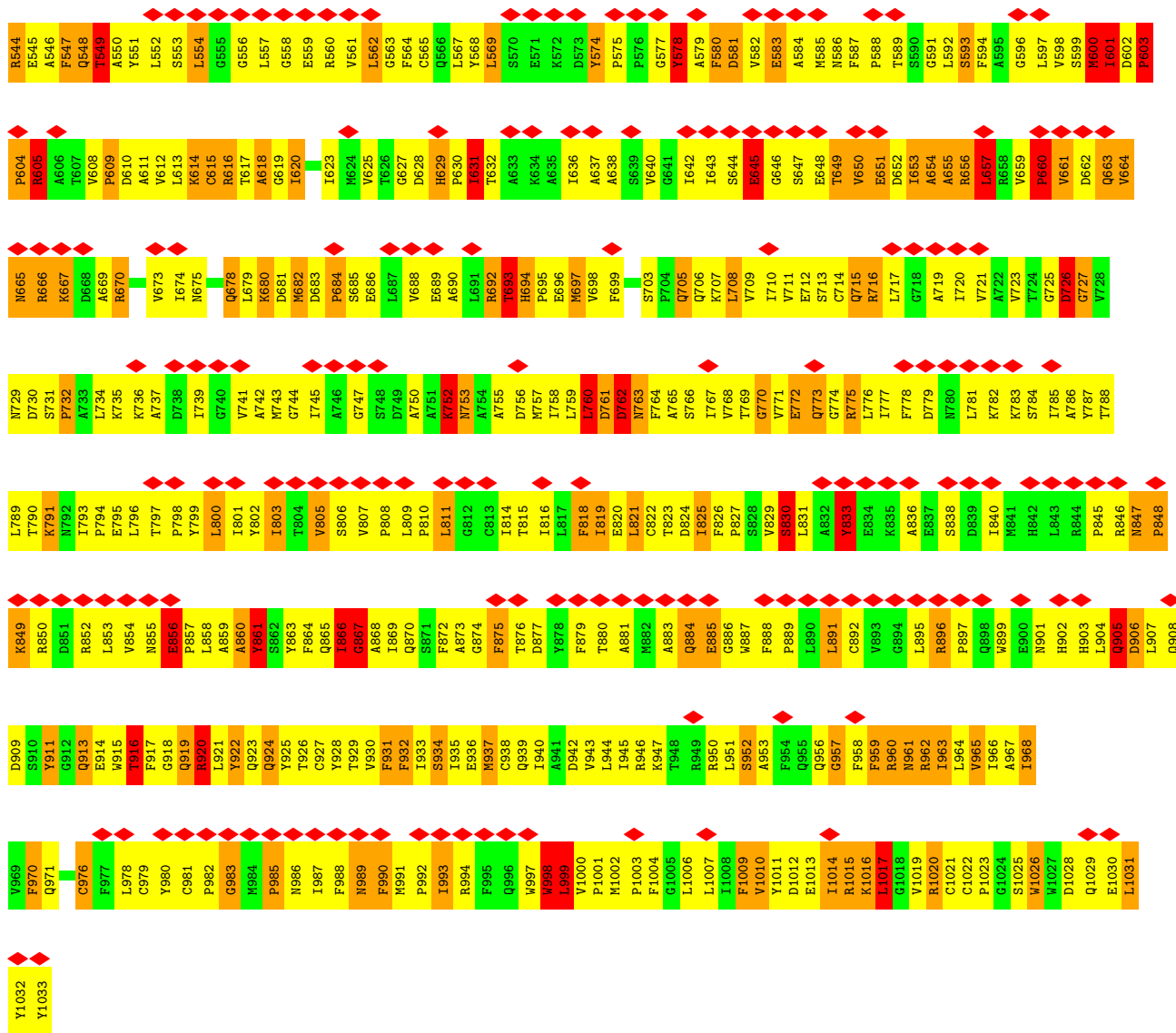
Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S		
2	B	175	1443	949	237	249	8	0	0

3 Residue-property plots

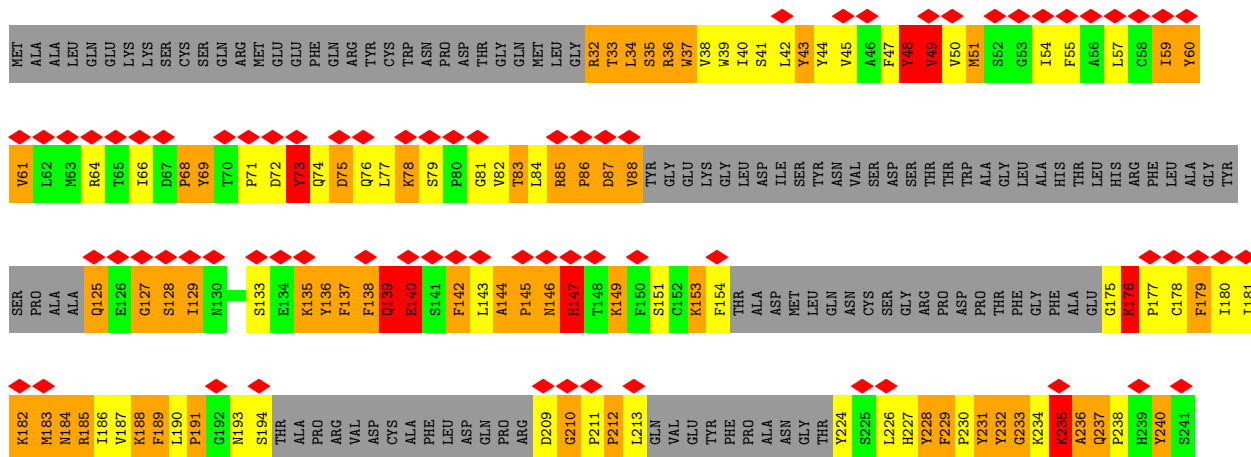
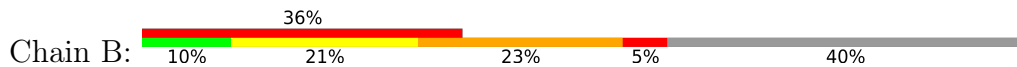
These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry and atom inclusion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

• Molecule 1: POTASSIUM-TRANSPORTING ATPASE ALPHA CHAIN 1





● Molecule 2: POTASSIUM-TRANSPORTING ATPASE SUBUNIT BETA



N242	P243	LEU	VAL	ALA	ALA	K248	L249	L250	V251	V252	P253	R254	N255	R256	D257	V258	V259	I260	V261	C262	K263	I264	L265	A266	E267	H268	V269	S270	F271	D272	N273	P274	H275	D276	P277	Y278	E279	G280	K281	V282	E283	F284	K285	L286	K287	I288	Q289	K290
------	------	-----	-----	-----	-----	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------

4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	CRYSTALLOGRAPHY	Depositor
Imposed symmetry	2D CRYSTAL, a =Not provided Å, b =Not provided Å, c =Not provided Å, γ =Not provided°, space group=Not provided	Depositor
Number of images used	Not provided	
Resolution determination method	DIFFRACTION PATTERN/LAYERLINES	Depositor
CTF correction method	Not provided	
Microscope	JEOL KYOTO-3000SFF	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{Å}^2$)	20	Depositor
Minimum defocus (nm)	808	Depositor
Maximum defocus (nm)	2997	Depositor
Magnification	40000	Depositor
Image detector	KODAK SO-163 FILM	Depositor
Maximum map value	6.195	Depositor
Minimum map value	-4.354	Depositor
Average map value	-0.003	Depositor
Map value standard deviation	0.993	Depositor
Recommended contour level	1.6	Depositor
Map size (Å)	143.08, 113.46, 322.0	wwPDB
Map dimensions	61, 73, 161	wwPDB
Map angles (°)	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing (Å)	1.96, 1.86, 2.0	Depositor

5 Model quality i

5.1 Standard geometry i

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z >5	RMSZ	# Z >5
1	A	1.18	3/7876 (0.0%)	1.45	53/10694 (0.5%)
2	B	1.11	1/1486 (0.1%)	1.51	13/2008 (0.6%)
All	All	1.17	4/9362 (0.0%)	1.46	66/12702 (0.5%)

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	287
2	B	0	58
All	All	0	345

All (4) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	522	ARG	CZ-NH2	5.22	1.39	1.33
2	B	254	ARG	CZ-NH2	5.22	1.39	1.33
1	A	439	ARG	NE-CZ	5.08	1.39	1.33
1	A	846	ARG	NE-CZ	5.04	1.39	1.33

All (66) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	140	TYR	CB-CG-CD1	11.10	127.66	121.00
2	B	254	ARG	NE-CZ-NH1	9.32	124.96	120.30
2	B	232	TYR	CB-CG-CD1	-8.99	115.61	121.00
2	B	68	PRO	CA-N-CD	-8.70	99.32	111.50
1	A	716	ARG	NE-CZ-NH1	-8.13	116.23	120.30
1	A	911	TYR	CB-CG-CD1	-7.79	116.32	121.00
1	A	605	ARG	NE-CZ-NH1	-7.77	116.42	120.30
1	A	962	ARG	NE-CZ-NH1	7.66	124.13	120.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	432	ARG	NE-CZ-NH1	7.36	123.98	120.30
1	A	64	TYR	CA-CB-CG	-7.25	99.62	113.40
2	B	232	TYR	CA-CB-CG	-7.08	99.94	113.40
1	A	726	ASP	CB-CG-OD2	-7.05	111.95	118.30
1	A	182	ARG	NE-CZ-NH1	-7.04	116.78	120.30
1	A	222	VAL	CB-CA-C	-6.82	98.44	111.40
1	A	522	ARG	NE-CZ-NH1	6.75	123.67	120.30
1	A	850	ARG	NE-CZ-NH1	6.68	123.64	120.30
1	A	140	TYR	CB-CG-CD2	-6.66	117.01	121.00
1	A	480	ARG	NE-CZ-NH1	-6.53	117.03	120.30
2	B	231	TYR	CB-CG-CD1	-6.53	117.08	121.00
1	A	726	ASP	CB-CA-C	-6.42	97.56	110.40
1	A	716	ARG	CD-NE-CZ	-6.41	114.63	123.60
2	B	228	TYR	CB-CG-CD1	-6.29	117.23	121.00
1	A	340	TYR	CA-CB-CG	-6.22	101.58	113.40
1	A	692	ARG	NE-CZ-NH1	-6.17	117.21	120.30
1	A	998	TRP	CG-CD2-CE3	-6.15	128.37	133.90
1	A	760	LEU	C-N-CA	6.06	136.85	121.70
1	A	432	ARG	NE-CZ-NH2	-5.99	117.30	120.30
1	A	896	ARG	CB-CA-C	-5.98	98.44	110.40
2	B	185	ARG	CB-CA-C	5.97	122.34	110.40
2	B	228	TYR	CA-CB-CG	-5.84	102.31	113.40
1	A	818	PHE	CA-CB-CG	-5.81	99.95	113.90
1	A	861	TYR	CA-CB-CG	-5.67	102.64	113.40
1	A	48	MET	CG-SD-CE	-5.66	91.15	100.20
1	A	852	ARG	NE-CZ-NH1	5.65	123.12	120.30
2	B	136	TYR	CB-CG-CD1	-5.61	117.64	121.00
1	A	439	ARG	CD-NE-CZ	-5.59	115.77	123.60
1	A	51	ASN	C-N-CA	5.56	135.60	121.70
1	A	861	TYR	CB-CG-CD1	-5.56	117.67	121.00
1	A	525	GLU	C-N-CA	5.56	135.59	121.70
1	A	574	TYR	CA-CB-CG	-5.54	102.87	113.40
1	A	905	GLN	C-N-CA	5.51	135.48	121.70
1	A	103	ARG	NE-CZ-NH2	-5.50	117.55	120.30
2	B	136	TYR	CB-CG-CD2	5.47	124.28	121.00
1	A	647	SER	N-CA-CB	5.43	118.65	110.50
1	A	920	ARG	CD-NE-CZ	-5.43	115.99	123.60
1	A	830	SER	CB-CA-C	-5.42	99.80	110.10
1	A	957	GLY	N-CA-C	-5.38	99.66	113.10
2	B	73	TYR	O-C-N	-5.37	114.10	122.70
1	A	911	TYR	CA-CB-CG	-5.35	103.23	113.40
1	A	959	PHE	CB-CA-C	-5.31	99.78	110.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1032	TYR	C-N-CA	5.28	134.91	121.70
1	A	439	ARG	NE-CZ-NH1	-5.26	117.67	120.30
1	A	522	ARG	NE-CZ-NH2	-5.17	117.72	120.30
1	A	183	ASP	N-CA-CB	5.16	119.88	110.60
1	A	549	THR	CA-CB-CG2	-5.16	105.18	112.40
1	A	52	ASP	N-CA-C	5.14	124.89	111.00
1	A	693	THR	CA-CB-CG2	-5.13	105.21	112.40
1	A	509	ASP	C-N-CD	-5.12	109.32	120.60
1	A	198	ASP	CB-CA-C	-5.10	100.19	110.40
2	B	43	TYR	CB-CG-CD2	-5.09	117.94	121.00
2	B	254	ARG	NE-CZ-NH2	-5.04	117.78	120.30
1	A	726	ASP	C-N-CA	-5.03	111.74	122.30
1	A	833	TYR	CB-CG-CD2	-5.02	117.99	121.00
1	A	683	ASP	CB-CG-OD1	5.02	122.82	118.30
1	A	334	MET	CG-SD-CE	-5.01	92.18	100.20
1	A	137	ASP	N-CA-C	5.01	124.53	111.00

There are no chirality outliers.

All (345) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	1009	PHE	Mainchain
1	A	1010	VAL	Mainchain
1	A	1016	LYS	Mainchain
1	A	1017	LEU	Mainchain
1	A	1020	ARG	Mainchain
1	A	1021	CYS	Mainchain,Peptide
1	A	1023	PRO	Mainchain
1	A	1025	SER	Mainchain
1	A	1026	TRP	Mainchain
1	A	103	ARG	Mainchain
1	A	105	LEU	Mainchain
1	A	106	ALA	Mainchain
1	A	107	GLY	Mainchain
1	A	109	LEU	Mainchain
1	A	112	LEU	Mainchain
1	A	114	TRP	Mainchain
1	A	123	ALA	Mainchain
1	A	126	ILE	Mainchain
1	A	130	GLU	Peptide
1	A	131	GLY	Mainchain,Peptide
1	A	132	ASP	Mainchain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	134	THR	Mainchain
1	A	135	THR	Mainchain
1	A	137	ASP	Mainchain
1	A	139	LEU	Mainchain
1	A	144	ALA	Mainchain
1	A	145	LEU	Mainchain
1	A	148	VAL	Mainchain
1	A	150	VAL	Mainchain
1	A	157	TYR	Mainchain
1	A	171	LYS	Mainchain,Peptide
1	A	175	PRO	Mainchain
1	A	176	GLN	Mainchain
1	A	177	GLN	Mainchain
1	A	179	THR	Mainchain
1	A	183	ASP	Mainchain
1	A	184	GLY	Mainchain
1	A	188	GLN	Mainchain
1	A	204	GLY	Mainchain
1	A	205	GLY	Mainchain
1	A	206	ASP	Mainchain
1	A	209	PRO	Mainchain
1	A	212	ILE	Mainchain
1	A	216	GLN	Mainchain
1	A	217	ALA	Mainchain,Peptide
1	A	218	GLN	Peptide
1	A	232	GLU	Mainchain
1	A	234	GLN	Mainchain
1	A	238	PRO	Mainchain
1	A	241	THR	Mainchain
1	A	244	SER	Mainchain
1	A	261	GLY	Mainchain
1	A	263	ALA	Mainchain
1	A	265	GLY	Mainchain
1	A	268	VAL	Mainchain
1	A	269	ASN	Mainchain
1	A	272	ASP	Mainchain
1	A	278	ARG	Mainchain
1	A	280	ALA	Mainchain
1	A	281	SER	Mainchain
1	A	282	LEU	Mainchain
1	A	283	ALA	Mainchain
1	A	285	GLY	Mainchain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	286	VAL	Mainchain
1	A	287	GLU	Mainchain
1	A	290	LYS	Mainchain
1	A	294	ALA	Mainchain
1	A	295	ILE	Mainchain
1	A	305	ALA	Mainchain
1	A	306	GLY	Mainchain
1	A	310	LEU	Mainchain
1	A	316	PHE	Mainchain
1	A	317	ILE	Mainchain
1	A	318	VAL	Mainchain
1	A	319	ALA	Mainchain
1	A	321	CYS	Mainchain
1	A	322	ILE	Mainchain
1	A	323	GLY	Mainchain
1	A	332	PHE	Mainchain
1	A	337	VAL	Mainchain
1	A	338	VAL	Mainchain
1	A	342	PRO	Mainchain
1	A	343	GLU	Mainchain,Peptide
1	A	344	GLY	Peptide
1	A	347	ALA	Mainchain
1	A	358	LYS	Mainchain
1	A	360	LEU	Mainchain
1	A	378	SER	Mainchain
1	A	379	THR	Mainchain
1	A	393	ASN	Mainchain
1	A	394	ARG	Mainchain
1	A	396	THR	Mainchain
1	A	403	ASP	Mainchain
1	A	404	ASN	Mainchain
1	A	405	HIS	Mainchain
1	A	407	HIS	Mainchain,Sidechain
1	A	409	ALA	Mainchain
1	A	41	LEU	Mainchain
1	A	411	THR	Mainchain
1	A	415	GLN	Mainchain
1	A	419	THR	Mainchain
1	A	420	PHE	Mainchain
1	A	421	ASP	Mainchain
1	A	422	GLN	Mainchain
1	A	424	SER	Mainchain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	426	THR	Mainchain
1	A	43	ASN	Mainchain
1	A	439	ARG	Mainchain
1	A	440	ALA	Mainchain
1	A	443	LYS	Peptide
1	A	444	SER	Mainchain
1	A	445	GLY	Peptide
1	A	447	ASP	Mainchain
1	A	449	VAL	Mainchain
1	A	451	VAL	Mainchain
1	A	452	PRO	Mainchain
1	A	454	ARG	Mainchain
1	A	456	VAL	Mainchain
1	A	458	GLY	Mainchain
1	A	459	ASP	Mainchain
1	A	46	LYS	Mainchain
1	A	469	SER	Mainchain
1	A	47	GLU	Mainchain
1	A	470	GLU	Mainchain
1	A	471	LEU	Mainchain
1	A	472	THR	Mainchain
1	A	477	MET	Mainchain
1	A	48	MET	Mainchain
1	A	480	ARG	Mainchain,Peptide
1	A	481	GLU	Mainchain
1	A	482	ARG	Mainchain
1	A	485	LYS	Mainchain
1	A	486	VAL	Mainchain
1	A	489	ILE	Mainchain
1	A	491	PHE	Mainchain
1	A	492	ASN	Mainchain
1	A	494	THR	Mainchain
1	A	501	ILE	Mainchain
1	A	502	HIS	Mainchain
1	A	509	ASP	Peptide
1	A	511	ARG	Mainchain
1	A	512	HIS	Mainchain
1	A	517	LYS	Mainchain
1	A	518	GLY	Mainchain
1	A	521	GLU	Mainchain
1	A	522	ARG	Mainchain
1	A	524	LEU	Mainchain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	528	SER	Mainchain
1	A	537	LEU	Peptide
1	A	538	PRO	Mainchain
1	A	539	LEU	Mainchain
1	A	54	GLN	Mainchain,Peptide
1	A	543	TRP	Mainchain
1	A	544	ARG	Mainchain
1	A	548	GLN	Mainchain
1	A	554	LEU	Mainchain
1	A	562	LEU	Mainchain
1	A	569	LEU	Mainchain
1	A	575	PRO	Mainchain
1	A	577	GLY	Mainchain
1	A	578	TYR	Mainchain
1	A	58	ALA	Mainchain
1	A	580	PHE	Mainchain
1	A	581	ASP	Mainchain
1	A	583	GLU	Mainchain
1	A	584	ALA	Mainchain
1	A	591	GLY	Mainchain
1	A	593	SER	Mainchain
1	A	596	GLY	Mainchain
1	A	600	MET	Mainchain
1	A	603	PRO	Mainchain
1	A	611	ALA	Mainchain
1	A	614	LYS	Mainchain
1	A	615	CYS	Mainchain
1	A	616	ARG	Mainchain
1	A	618	ALA	Mainchain
1	A	62	GLN	Mainchain
1	A	620	ILE	Mainchain
1	A	629	HIS	Mainchain
1	A	63	LYS	Mainchain
1	A	631	ILE	Mainchain
1	A	638	ALA	Mainchain
1	A	64	TYR	Mainchain
1	A	645	GLU	Mainchain
1	A	646	GLY	Mainchain,Peptide
1	A	649	THR	Mainchain
1	A	65	GLN	Mainchain
1	A	650	VAL	Mainchain
1	A	651	GLU	Mainchain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	653	ILE	Mainchain
1	A	654	ALA	Mainchain
1	A	656	ARG	Mainchain
1	A	657	LEU	Mainchain
1	A	660	PRO	Mainchain
1	A	661	VAL	Mainchain
1	A	663	GLN	Peptide
1	A	664	VAL	Mainchain
1	A	67	SER	Mainchain
1	A	670	ARG	Mainchain
1	A	675	ASN	Mainchain
1	A	680	LYS	Mainchain
1	A	684	PRO	Mainchain
1	A	685	SER	Mainchain
1	A	693	THR	Mainchain
1	A	694	HIS	Mainchain
1	A	705	GLN	Mainchain
1	A	71	GLY	Mainchain
1	A	715	GLN	Mainchain
1	A	719	ALA	Mainchain
1	A	720	ILE	Mainchain
1	A	727	GLY	Mainchain
1	A	729	ASN	Mainchain
1	A	73	SER	Mainchain
1	A	732	PRO	Mainchain
1	A	74	ALA	Mainchain
1	A	744	GLY	Mainchain
1	A	745	ILE	Mainchain
1	A	747	GLY	Mainchain
1	A	752	LYS	Mainchain
1	A	753	ASN	Mainchain
1	A	755	ALA	Mainchain
1	A	761	ASP	Mainchain
1	A	762	ASP	Mainchain
1	A	770	GLY	Mainchain
1	A	772	GLU	Mainchain
1	A	775	ARG	Mainchain
1	A	791	LYS	Mainchain
1	A	800	LEU	Mainchain
1	A	803	ILE	Mainchain
1	A	81	LEU	Mainchain
1	A	811	LEU	Mainchain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	819	ILE	Mainchain
1	A	825	ILE	Mainchain
1	A	833	TYR	Mainchain
1	A	848	PRO	Mainchain
1	A	849	LYS	Mainchain
1	A	85	GLY	Mainchain,Peptide
1	A	856	GLU	Mainchain
1	A	859	ALA	Mainchain
1	A	860	ALA	Mainchain
1	A	861	TYR	Mainchain
1	A	866	ILE	Mainchain
1	A	867	GLY	Peptide
1	A	87	ASN	Mainchain
1	A	875	PHE	Mainchain
1	A	891	LEU	Mainchain
1	A	905	GLN	Mainchain
1	A	908	GLN	Mainchain
1	A	909	ASP	Mainchain
1	A	916	THR	Mainchain
1	A	919	GLN	Mainchain
1	A	920	ARG	Mainchain
1	A	923	GLN	Mainchain
1	A	924	GLN	Mainchain
1	A	931	PHE	Mainchain
1	A	932	PHE	Mainchain
1	A	934	SER	Mainchain
1	A	944	LEU	Mainchain
1	A	951	LEU	Mainchain
1	A	952	SER	Mainchain
1	A	953	ALA	Mainchain
1	A	957	GLY	Mainchain
1	A	959	PHE	Mainchain
1	A	960	ARG	Mainchain
1	A	961	ASN	Mainchain
1	A	965	VAL	Mainchain
1	A	970	PHE	Mainchain
1	A	976	CYS	Mainchain
1	A	981	CYS	Mainchain
1	A	982	PRO	Mainchain
1	A	983	GLY	Mainchain
1	A	985	PRO	Mainchain
1	A	986	ASN	Mainchain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	989	ASN	Mainchain
1	A	990	PHE	Mainchain
1	A	998	TRP	Mainchain
1	A	999	LEU	Mainchain
2	B	125	GLN	Mainchain,Peptide
2	B	127	GLY	Peptide
2	B	128	SER	Mainchain
2	B	129	ILE	Mainchain
2	B	133	SER	Mainchain
2	B	135	LYS	Mainchain
2	B	137	PHE	Mainchain
2	B	138	PHE	Mainchain
2	B	139	GLN	Mainchain
2	B	140	GLU	Mainchain
2	B	142	PHE	Mainchain
2	B	144	ALA	Mainchain
2	B	145	PRO	Peptide
2	B	146	ASN	Mainchain
2	B	147	HIS	Mainchain
2	B	149	LYS	Mainchain
2	B	153	LYS	Mainchain
2	B	176	LYS	Mainchain
2	B	178	CYS	Mainchain
2	B	179	PHE	Mainchain
2	B	183	MET	Mainchain
2	B	189	PHE	Mainchain
2	B	191	PRO	Mainchain
2	B	210	GLY	Mainchain
2	B	212	PRO	Mainchain
2	B	229	PHE	Mainchain
2	B	233	GLY	Mainchain
2	B	235	LYS	Mainchain
2	B	236	ALA	Mainchain
2	B	237	GLN	Mainchain
2	B	240	TYR	Mainchain
2	B	242	ASN	Mainchain
2	B	248	LYS	Mainchain
2	B	249	LEU	Mainchain
2	B	251	ASN	Mainchain
2	B	252	VAL	Mainchain
2	B	254	ARG	Mainchain
2	B	255	ASN	Mainchain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
2	B	258	VAL	Mainchain
2	B	260	ILE	Mainchain
2	B	263	LYS	Mainchain
2	B	268	HIS	Mainchain
2	B	269	VAL	Mainchain
2	B	270	SER	Mainchain
2	B	272	ASP	Mainchain
2	B	284	PHE	Mainchain
2	B	288	ILE	Mainchain
2	B	35	SER	Peptide
2	B	36	ARG	Mainchain,Peptide
2	B	48	TYR	Mainchain,Peptide
2	B	51	MET	Mainchain
2	B	59	ILE	Mainchain
2	B	66	ILE	Mainchain
2	B	73	TYR	Mainchain
2	B	75	ASP	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	7718	0	7752	1797	0
2	B	1443	0	1431	394	0
All	All	9161	0	9183	2079	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 113.

All (2079) 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:399:HIS:CD2	1:A:408:SER:HA	1.31	1.59
2:B:32:ARG:CZ	2:B:34:LEU:HD11	1.31	1.55
1:A:940:ILE:CD1	1:A:968:ILE:HG13	1.17	1.54
1:A:360:LEU:CD1	1:A:773:GLN:HG3	1.07	1.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:537:LEU:HG	1:A:538:PRO:CD	1.40	1.51
1:A:114:TRP:CZ3	1:A:146:ILE:HG12	1.44	1.50
1:A:940:ILE:HD13	1:A:968:ILE:CG1	1.40	1.49
1:A:455:ILE:HD12	1:A:456:VAL:N	1.21	1.47
1:A:994:ARG:NH1	2:B:73:TYR:CG	1.81	1.46
2:B:248:LYS:NZ	2:B:250:LEU:HD21	1.26	1.44
1:A:360:LEU:HD11	1:A:773:GLN:CG	0.94	1.41
1:A:399:HIS:HD2	1:A:408:SER:CA	1.32	1.40
1:A:1011:TYR:CE1	2:B:47:PHE:HE2	1.40	1.40
1:A:917:PHE:HB3	2:B:278:TYR:CE2	1.57	1.38
1:A:212:ILE:CD1	1:A:265:GLY:O	1.72	1.36
1:A:399:HIS:CD2	1:A:408:SER:CA	2.08	1.33
1:A:175:PRO:CD	1:A:207:ARG:HD2	1.60	1.32
2:B:32:ARG:CD	2:B:34:LEU:HD21	1.57	1.31
1:A:1016:LYS:O	1:A:1019:VAL:HG22	1.26	1.31
1:A:69:THR:CG2	1:A:70:LYS:HD3	1.60	1.31
1:A:87:ASN:ND2	1:A:271:GLY:H	1.24	1.31
2:B:175:GLY:O	2:B:176:LYS:HG2	1.25	1.31
2:B:32:ARG:CZ	2:B:34:LEU:CD1	2.07	1.30
1:A:363:LYS:HE3	1:A:773:GLN:NE2	1.45	1.30
2:B:85:ARG:CB	2:B:180:ILE:HD11	1.59	1.30
1:A:916:THR:CB	2:B:278:TYR:HB2	1.62	1.30
1:A:399:HIS:HB3	1:A:407:HIS:O	1.11	1.29
1:A:46:LYS:HD3	1:A:712:GLU:OE1	1.29	1.29
1:A:601:ILE:CG1	1:A:602:ASP:H	1.39	1.28
1:A:177:GLN:OE1	1:A:188:GLN:HB2	1.18	1.27
1:A:1011:TYR:CE1	2:B:47:PHE:CE2	2.21	1.27
1:A:940:ILE:CD1	1:A:968:ILE:CG1	2.01	1.27
1:A:479:TYR:HA	1:A:482:ARG:CD	1.62	1.27
1:A:177:GLN:CD	1:A:188:GLN:OE1	1.74	1.27
1:A:814:ILE:HD11	1:A:988:PHE:CD1	1.70	1.26
2:B:32:ARG:NH2	2:B:34:LEU:CD1	2.00	1.25
1:A:394:ARG:O	1:A:602:ASP:OD1	1.54	1.25
1:A:455:ILE:CD1	1:A:456:VAL:N	1.99	1.24
1:A:380:SER:O	1:A:620:ILE:HG23	1.26	1.24
2:B:84:LEU:C	2:B:86:PRO:HD2	1.56	1.24
1:A:90:ARG:NH2	1:A:281:SER:HA	1.53	1.23
1:A:286:VAL:HB	1:A:735:LYS:CE	1.67	1.22
1:A:827:PRO:O	1:A:830:SER:OG	1.55	1.21
1:A:324:TYR:CD2	1:A:328:ARG:HG2	1.76	1.21
1:A:360:LEU:HD11	1:A:773:GLN:CD	1.60	1.20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:139:GLN:HB2	2:B:232:TYR:CE2	1.77	1.20
1:A:913:GLN:HB3	2:B:185:ARG:O	1.40	1.20
1:A:146:ILE:O	1:A:149:VAL:HG22	1.40	1.20
1:A:682:MET:HA	1:A:682:MET:CE	1.70	1.20
2:B:213:LEU:HD21	2:B:249:LEU:CD2	1.69	1.20
1:A:455:ILE:CD1	1:A:456:VAL:H	1.54	1.20
1:A:328:ARG:O	1:A:331:VAL:HG22	1.42	1.20
1:A:400:LEU:N	1:A:400:LEU:HD12	1.56	1.19
1:A:212:ILE:HD11	1:A:265:GLY:O	1.24	1.18
1:A:601:ILE:CD1	1:A:602:ASP:H	1.55	1.18
1:A:581:ASP:OD1	1:A:583:GLU:HB2	1.40	1.18
1:A:46:LYS:CD	1:A:712:GLU:OE1	1.91	1.17
1:A:114:TRP:CZ3	1:A:146:ILE:CG1	2.25	1.17
2:B:142:PHE:CE2	2:B:232:TYR:CD1	2.31	1.17
1:A:209:PRO:O	1:A:254:PHE:CD1	1.97	1.17
1:A:451:VAL:CG1	1:A:471:LEU:HD13	1.72	1.17
1:A:399:HIS:CB	1:A:407:HIS:O	1.93	1.16
1:A:905:GLN:OE1	2:B:278:TYR:HD1	1.25	1.16
1:A:212:ILE:CG1	1:A:265:GLY:O	1.93	1.16
1:A:916:THR:HB	2:B:278:TYR:CB	1.75	1.16
2:B:32:ARG:HD2	2:B:34:LEU:HD21	1.19	1.16
1:A:175:PRO:HD3	1:A:207:ARG:CD	1.75	1.16
1:A:537:LEU:CG	1:A:538:PRO:CD	2.22	1.16
1:A:601:ILE:HG13	1:A:602:ASP:N	1.31	1.16
1:A:752:LYS:HB2	1:A:752:LYS:NZ	1.53	1.15
1:A:52:ASP:HB2	1:A:55:LEU:HD12	1.25	1.15
1:A:72:LEU:HD13	1:A:198:ASP:HA	1.21	1.14
1:A:175:PRO:HG3	1:A:207:ARG:HB3	1.28	1.14
1:A:601:ILE:CG1	1:A:602:ASP:N	1.98	1.14
1:A:181:ILE:HG13	1:A:199:LEU:HD23	1.17	1.13
1:A:479:TYR:O	1:A:482:ARG:HG2	1.47	1.13
1:A:791:LYS:HD3	1:A:935:ILE:HG21	1.20	1.13
1:A:905:GLN:CD	2:B:278:TYR:HD1	1.49	1.13
1:A:177:GLN:OE1	1:A:188:GLN:CB	1.95	1.13
1:A:286:VAL:CB	1:A:735:LYS:HE2	1.79	1.13
1:A:947:LYS:HD2	1:A:964:LEU:CD2	1.78	1.13
1:A:916:THR:OG1	2:B:278:TYR:HB2	1.48	1.13
2:B:282:VAL:HG13	2:B:284:PHE:CE2	1.82	1.13
1:A:181:ILE:HD13	1:A:186:LYS:HB3	1.25	1.12
1:A:884:GLN:HG2	2:B:73:TYR:CD2	1.81	1.12
1:A:994:ARG:NH1	2:B:73:TYR:CD2	2.17	1.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:446:GLN:HG3	1:A:454:ARG:CB	1.80	1.11
1:A:456:VAL:CG2	1:A:467:LYS:HE2	1.80	1.11
1:A:827:PRO:HA	1:A:830:SER:OG	1.49	1.11
1:A:994:ARG:HH12	2:B:73:TYR:CB	1.64	1.11
2:B:77:LEU:HG	2:B:186:ILE:HD12	1.29	1.11
1:A:884:GLN:HG2	2:B:73:TYR:HD2	1.00	1.11
1:A:69:THR:HG21	1:A:70:LYS:HD3	1.26	1.11
1:A:53:HIS:NE2	1:A:245:PRO:HG3	1.65	1.10
1:A:786:ALA:HB3	1:A:946:ARG:HD2	1.33	1.10
1:A:947:LYS:HD2	1:A:964:LEU:HD22	1.32	1.10
1:A:1011:TYR:CZ	2:B:47:PHE:CE2	2.38	1.10
2:B:213:LEU:HD11	2:B:260:ILE:HD13	1.19	1.10
1:A:916:THR:CB	2:B:278:TYR:CB	2.28	1.10
2:B:85:ARG:N	2:B:86:PRO:HD2	1.60	1.10
2:B:275:HIS:CD2	2:B:276:ASP:OD1	2.05	1.10
2:B:85:ARG:HB2	2:B:180:ILE:HD11	1.15	1.10
1:A:69:THR:HG23	1:A:70:LYS:CD	1.81	1.10
1:A:90:ARG:O	1:A:90:ARG:HD3	1.50	1.10
1:A:119:ILE:HG23	1:A:334:MET:HE1	1.33	1.10
1:A:127:GLN:O	1:A:129:SER:N	1.82	1.10
1:A:162:LYS:O	1:A:163:SER:OG	1.66	1.10
1:A:399:HIS:CD2	1:A:408:SER:CB	2.33	1.10
1:A:175:PRO:HG3	1:A:207:ARG:CB	1.80	1.09
1:A:487:CYS:SG	1:A:501:ILE:HD12	1.93	1.09
1:A:885:GLU:OE1	1:A:885:GLU:HA	1.43	1.09
1:A:163:SER:HB3	1:A:368:LYS:HD3	1.35	1.09
1:A:360:LEU:HD12	1:A:773:GLN:HG3	1.31	1.08
1:A:760:LEU:H	1:A:760:LEU:CD2	1.66	1.08
2:B:175:GLY:O	2:B:176:LYS:CG	2.00	1.08
1:A:92:PRO:CB	1:A:167:ILE:HD12	1.82	1.08
1:A:752:LYS:HB2	1:A:752:LYS:HZ2	1.02	1.08
2:B:213:LEU:HD11	2:B:260:ILE:CD1	1.82	1.08
1:A:392:GLN:NE2	1:A:413:GLU:CD	2.07	1.08
1:A:386:LYS:HD2	1:A:636:ILE:HD12	1.29	1.08
1:A:896:ARG:HB2	1:A:897:PRO:HD3	1.33	1.07
2:B:185:ARG:HE	2:B:242:ASN:HB2	1.12	1.07
1:A:803:ILE:O	1:A:803:ILE:HG22	1.48	1.07
1:A:456:VAL:HG21	1:A:467:LYS:HE2	1.07	1.07
1:A:1007:LEU:HD21	2:B:54:ILE:HG21	1.17	1.07
2:B:32:ARG:NE	2:B:34:LEU:HD21	1.69	1.07
1:A:69:THR:HG23	1:A:70:LYS:HD3	1.37	1.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:53:HIS:O	1:A:250:ASN:ND2	1.88	1.06
1:A:146:ILE:O	1:A:149:VAL:CG2	2.03	1.06
1:A:916:THR:OG1	2:B:278:TYR:CD2	2.06	1.06
1:A:177:GLN:OE1	1:A:188:GLN:CD	1.94	1.06
1:A:827:PRO:C	1:A:830:SER:OG	1.92	1.06
1:A:994:ARG:HD3	2:B:73:TYR:CZ	1.91	1.06
1:A:537:LEU:CD1	1:A:538:PRO:HD3	1.85	1.06
1:A:991:MET:HG3	1:A:992:PRO:HD2	1.29	1.06
1:A:166:ILE:CA	1:A:753:ASN:HB2	1.86	1.05
1:A:46:LYS:NZ	1:A:712:GLU:OE2	1.90	1.05
1:A:479:TYR:CA	1:A:482:ARG:HD3	1.85	1.05
1:A:885:GLU:OE1	1:A:885:GLU:CA	2.00	1.05
1:A:120:CYS:HB2	1:A:142:ALA:HB2	1.07	1.05
2:B:248:LYS:NZ	2:B:250:LEU:CD2	2.19	1.05
1:A:505:GLU:HG3	1:A:506:ASP:H	1.20	1.04
1:A:119:ILE:CG2	1:A:334:MET:HB3	1.86	1.04
1:A:166:ILE:HA	1:A:753:ASN:CB	1.87	1.04
1:A:410:ASP:OD2	1:A:417:GLY:HA3	1.55	1.04
1:A:120:CYS:CB	1:A:142:ALA:HB2	1.86	1.04
1:A:228:THR:O	1:A:627:GLY:HA3	1.57	1.04
1:A:905:GLN:OE1	2:B:278:TYR:CD1	2.10	1.04
1:A:87:ASN:HD22	1:A:271:GLY:N	1.56	1.03
1:A:46:LYS:CE	1:A:712:GLU:OE1	2.07	1.03
1:A:537:LEU:HG	1:A:538:PRO:HD2	1.04	1.03
1:A:760:LEU:H	1:A:760:LEU:HD22	0.89	1.03
1:A:763:ASN:HD22	1:A:764:PHE:N	1.55	1.03
1:A:791:LYS:HD2	1:A:819:ILE:CG2	1.88	1.03
1:A:914:GLU:O	2:B:184:ASN:HB3	1.59	1.03
2:B:175:GLY:C	2:B:176:LYS:HG2	1.79	1.03
1:A:505:GLU:HG3	1:A:506:ASP:N	1.70	1.03
1:A:760:LEU:HD22	1:A:760:LEU:N	1.74	1.03
2:B:32:ARG:NE	2:B:34:LEU:CG	2.21	1.03
2:B:213:LEU:CD2	2:B:249:LEU:HD22	1.88	1.03
1:A:398:SER:HB2	1:A:601:ILE:CG2	1.89	1.02
1:A:537:LEU:CG	1:A:538:PRO:HD2	1.89	1.02
1:A:92:PRO:HB3	1:A:167:ILE:HD12	1.04	1.02
1:A:339:ALA:HB1	1:A:796:LEU:CD1	1.88	1.02
2:B:180:ILE:HD12	2:B:180:ILE:O	1.60	1.02
1:A:119:ILE:HG23	1:A:334:MET:CE	1.90	1.02
1:A:545:GLU:HA	1:A:548:GLN:HB2	1.38	1.02
1:A:857:PRO:HB3	1:A:1030:GLU:O	1.56	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:248:THR:OG1	1:A:250:ASN:OD1	1.77	1.01
1:A:360:LEU:CD1	1:A:773:GLN:CG	1.88	1.01
2:B:32:ARG:NH1	2:B:34:LEU:HD11	1.76	1.01
1:A:650:VAL:HG23	1:A:664:VAL:HG11	1.38	1.01
1:A:742:ALA:HB3	1:A:758:ILE:HD13	1.43	1.01
1:A:916:THR:OG1	2:B:278:TYR:CB	2.07	1.01
1:A:92:PRO:HB3	1:A:167:ILE:CD1	1.90	1.01
1:A:613:LEU:O	1:A:613:LEU:HD13	1.59	1.01
1:A:682:MET:HA	1:A:682:MET:HE2	1.42	1.01
1:A:978:LEU:HD21	1:A:990:PHE:CZ	1.96	1.01
2:B:85:ARG:HB3	2:B:180:ILE:CD1	1.91	1.01
2:B:213:LEU:HD21	2:B:249:LEU:HD22	1.02	1.01
1:A:887:TRP:HH2	1:A:907:LEU:HG	1.22	1.00
1:A:1013:GLU:O	1:A:1017:LEU:HD13	1.60	1.00
1:A:399:HIS:C	1:A:400:LEU:HD12	1.80	1.00
1:A:791:LYS:HD3	1:A:935:ILE:CG2	1.89	1.00
2:B:85:ARG:CB	2:B:180:ILE:CD1	2.39	1.00
1:A:87:ASN:ND2	1:A:270:THR:HG23	1.75	1.00
1:A:53:HIS:CD2	1:A:245:PRO:HG3	1.96	1.00
1:A:87:ASN:CG	1:A:270:THR:HG23	1.82	1.00
1:A:87:ASN:ND2	1:A:271:GLY:N	2.08	1.00
1:A:943:VAL:CG1	1:A:964:LEU:HD11	1.92	1.00
1:A:446:GLN:HG3	1:A:454:ARG:HB2	1.02	1.00
1:A:682:MET:HA	1:A:682:MET:HE3	1.37	1.00
1:A:481:GLU:HA	1:A:481:GLU:OE1	1.61	0.99
1:A:994:ARG:NH1	2:B:73:TYR:CB	2.22	0.99
1:A:885:GLU:HG3	2:B:76:GLN:HG3	1.40	0.99
1:A:916:THR:HB	2:B:278:TYR:HB3	1.43	0.99
1:A:446:GLN:CG	1:A:454:ARG:HB2	1.91	0.99
2:B:32:ARG:NE	2:B:34:LEU:CD2	2.24	0.99
2:B:185:ARG:NE	2:B:242:ASN:HB2	1.77	0.99
1:A:567:LEU:HD12	1:A:592:LEU:CD2	1.93	0.99
1:A:114:TRP:HZ3	1:A:146:ILE:CG1	1.73	0.99
1:A:763:ASN:HD22	1:A:763:ASN:C	1.64	0.99
1:A:322:ILE:O	1:A:322:ILE:HG13	1.61	0.99
1:A:70:LYS:HB3	1:A:183:ASP:O	1.62	0.98
1:A:166:ILE:HG13	1:A:167:ILE:H	1.26	0.98
1:A:940:ILE:HD11	1:A:968:ILE:HG13	1.43	0.98
1:A:791:LYS:HD2	1:A:819:ILE:HG21	1.42	0.98
1:A:410:ASP:OD2	1:A:417:GLY:CA	2.11	0.98
1:A:731:SER:HB2	1:A:732:PRO:HD3	1.44	0.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:546:ALA:C	1:A:549:THR:HG1	1.67	0.97
1:A:905:GLN:CD	2:B:278:TYR:CD1	2.38	0.97
1:A:978:LEU:HD21	1:A:990:PHE:CE1	1.99	0.97
1:A:69:THR:CG2	1:A:70:LYS:CD	2.38	0.97
2:B:77:LEU:CG	2:B:186:ILE:HD12	1.93	0.97
1:A:400:LEU:HD22	1:A:427:TRP:HZ3	1.27	0.97
1:A:940:ILE:HD11	1:A:968:ILE:CG1	1.92	0.97
2:B:32:ARG:NH2	2:B:34:LEU:HD11	1.69	0.97
2:B:269:VAL:HG23	2:B:269:VAL:O	1.59	0.97
1:A:827:PRO:CA	1:A:830:SER:OG	2.10	0.97
2:B:32:ARG:NH2	2:B:34:LEU:HD12	1.79	0.97
1:A:146:ILE:O	1:A:146:ILE:HD13	1.65	0.97
1:A:177:GLN:NE2	1:A:188:GLN:OE1	1.96	0.96
1:A:279:ILE:HG23	1:A:732:PRO:HG2	1.47	0.96
1:A:427:TRP:HH2	1:A:468:PHE:HE2	1.07	0.96
1:A:177:GLN:OE1	1:A:188:GLN:OE1	1.83	0.96
2:B:272:ASP:OD2	2:B:275:HIS:HB3	1.65	0.96
1:A:522:ARG:O	1:A:526:ARG:HG3	1.64	0.95
1:A:614:LYS:O	1:A:617:THR:HG22	1.63	0.95
1:A:114:TRP:HZ3	1:A:146:ILE:HG12	1.25	0.95
1:A:545:GLU:O	1:A:549:THR:N	1.98	0.95
1:A:690:ALA:O	1:A:693:THR:HG22	1.65	0.95
1:A:120:CYS:HB2	1:A:142:ALA:CB	1.96	0.95
1:A:761:ASP:OD1	1:A:763:ASN:HB2	1.66	0.95
1:A:791:LYS:CD	1:A:935:ILE:HG21	1.95	0.95
1:A:601:ILE:HD11	1:A:602:ASP:O	1.67	0.95
1:A:392:GLN:NE2	1:A:413:GLU:OE2	2.00	0.95
1:A:451:VAL:HG11	1:A:471:LEU:HD13	1.49	0.95
1:A:814:ILE:HD11	1:A:988:PHE:HD1	1.09	0.95
1:A:786:ALA:HB2	1:A:858:LEU:HD21	1.46	0.94
2:B:32:ARG:HD2	2:B:34:LEU:CD2	1.96	0.94
1:A:537:LEU:CG	1:A:538:PRO:HD3	1.91	0.94
1:A:1016:LYS:O	1:A:1019:VAL:CG2	2.15	0.94
1:A:399:HIS:HD2	1:A:408:SER:CB	1.72	0.94
1:A:65:GLN:HE21	1:A:65:GLN:HA	1.31	0.94
1:A:934:SER:HA	1:A:1001:PRO:HG3	1.47	0.94
1:A:451:VAL:CG1	1:A:471:LEU:CD1	2.45	0.94
1:A:181:ILE:CG1	1:A:199:LEU:HD23	1.96	0.94
1:A:546:ALA:HA	1:A:549:THR:OG1	1.68	0.94
1:A:913:GLN:OE1	2:B:77:LEU:HD22	1.66	0.94
1:A:212:ILE:CG1	1:A:265:GLY:C	2.36	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:85:ARG:N	2:B:86:PRO:CD	2.30	0.94
1:A:502:HIS:O	1:A:513:VAL:HG12	1.68	0.93
1:A:905:GLN:CG	2:B:278:TYR:HB3	1.98	0.93
2:B:32:ARG:HE	2:B:34:LEU:HG	1.33	0.93
1:A:682:MET:HE3	1:A:682:MET:CA	1.98	0.93
1:A:537:LEU:HD12	1:A:538:PRO:HD3	1.46	0.93
1:A:223:ASP:O	1:A:256:THR:HG23	1.67	0.93
1:A:336:ILE:HG23	1:A:340:TYR:CE1	2.04	0.93
1:A:451:VAL:HG13	1:A:452:PRO:HD3	1.48	0.93
1:A:546:ALA:CA	1:A:549:THR:OG1	2.15	0.93
2:B:282:VAL:CG1	2:B:284:PHE:CE2	2.51	0.93
1:A:387:THR:HG22	1:A:393:ASN:OD1	1.69	0.93
1:A:947:LYS:CD	1:A:964:LEU:HD22	1.99	0.93
1:A:650:VAL:HG23	1:A:664:VAL:CG1	1.98	0.93
1:A:315:PHE:CE1	1:A:800:LEU:HD22	2.02	0.93
1:A:791:LYS:O	1:A:795:GLU:HG3	1.69	0.93
1:A:659:VAL:CG1	1:A:660:PRO:HD2	1.99	0.93
1:A:917:PHE:CB	2:B:278:TYR:CE2	2.50	0.92
2:B:83:THR:C	2:B:84:LEU:HD12	1.90	0.92
2:B:32:ARG:CD	2:B:34:LEU:CD2	2.47	0.92
2:B:248:LYS:HZ2	2:B:250:LEU:CD2	1.78	0.92
1:A:114:TRP:CH2	1:A:146:ILE:HG12	2.03	0.92
1:A:512:HIS:O	1:A:569:LEU:CD1	2.17	0.92
1:A:613:LEU:HD13	1:A:613:LEU:C	1.90	0.92
1:A:925:TYR:HA	1:A:928:TYR:HD2	1.34	0.92
1:A:166:ILE:HD12	1:A:167:ILE:N	1.83	0.92
1:A:212:ILE:HG13	1:A:265:GLY:O	1.69	0.92
1:A:400:LEU:N	1:A:400:LEU:CD1	2.30	0.92
1:A:433:VAL:HG23	1:A:515:VAL:HB	1.49	0.92
1:A:283:ALA:O	1:A:286:VAL:HG23	1.68	0.92
1:A:600:MET:C	1:A:601:ILE:HG22	1.89	0.92
2:B:77:LEU:HD23	2:B:186:ILE:HG13	1.48	0.92
1:A:339:ALA:HB1	1:A:796:LEU:HD12	1.52	0.91
1:A:786:ALA:HB1	1:A:946:ARG:NH1	1.84	0.91
1:A:46:LYS:NZ	1:A:712:GLU:CD	2.24	0.91
1:A:92:PRO:HG3	1:A:167:ILE:HG21	1.52	0.91
1:A:175:PRO:CG	1:A:207:ARG:HB3	2.00	0.91
1:A:693:THR:HG23	1:A:694:HIS:ND1	1.85	0.91
2:B:248:LYS:HZ1	2:B:250:LEU:HD21	1.23	0.91
1:A:743:MET:HE3	1:A:762:ASP:HA	1.52	0.91
1:A:455:ILE:HD12	1:A:455:ILE:C	1.91	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1007:LEU:CD2	2:B:54:ILE:HG21	1.99	0.91
1:A:69:THR:HG23	1:A:70:LYS:N	1.84	0.91
1:A:929:THR:HG23	1:A:990:PHE:HD2	1.37	0.90
2:B:142:PHE:CE2	2:B:232:TYR:CE1	2.59	0.90
1:A:90:ARG:HH21	1:A:281:SER:HA	1.33	0.90
2:B:142:PHE:CE2	2:B:232:TYR:HD1	1.81	0.90
1:A:703:SER:H	1:A:706:GLN:NE2	1.70	0.90
1:A:793:ILE:H	1:A:793:ILE:HD12	1.36	0.90
1:A:315:PHE:HB2	1:A:336:ILE:HD13	1.53	0.90
1:A:392:GLN:HE22	1:A:413:GLU:CD	1.67	0.90
1:A:887:TRP:CH2	1:A:907:LEU:CD2	2.55	0.90
1:A:544:ARG:O	1:A:548:GLN:HG2	1.72	0.90
1:A:1019:VAL:HB	1:A:1028:ASP:OD1	1.70	0.90
2:B:85:ARG:HB3	2:B:180:ILE:HD11	1.48	0.90
2:B:248:LYS:HZ2	2:B:250:LEU:HD21	1.11	0.90
1:A:363:LYS:HE3	1:A:773:GLN:HE21	1.35	0.89
1:A:451:VAL:HG13	1:A:452:PRO:CD	2.03	0.89
1:A:479:TYR:HA	1:A:482:ARG:HD3	0.89	0.89
1:A:940:ILE:CD1	1:A:968:ILE:CD1	2.50	0.89
1:A:532:ILE:HD13	1:A:532:ILE:C	1.92	0.89
1:A:189:ILE:HD11	1:A:194:LEU:HD23	1.55	0.89
1:A:939:GLN:O	1:A:943:VAL:HG23	1.72	0.89
1:A:53:HIS:HE2	1:A:245:PRO:HG3	1.30	0.89
1:A:218:GLN:HG2	1:A:219:GLY:H	1.35	0.89
1:A:855:ASN:HD22	1:A:857:PRO:HD2	1.33	0.89
2:B:263:LYS:HD2	2:B:271:PHE:CZ	2.07	0.89
1:A:451:VAL:HG11	1:A:471:LEU:CD1	2.02	0.89
1:A:166:ILE:HD11	1:A:284:SER:OG	1.73	0.89
1:A:993:ILE:HD13	1:A:993:ILE:H	1.38	0.89
1:A:218:GLN:OE1	1:A:219:GLY:N	2.06	0.89
1:A:917:PHE:CZ	1:A:921:LEU:HD11	2.07	0.89
1:A:723:VAL:HG23	1:A:737:ALA:HB2	1.52	0.88
2:B:33:THR:O	2:B:37:TRP:CD1	2.25	0.88
1:A:380:SER:O	1:A:620:ILE:CG2	2.18	0.88
1:A:814:ILE:CD1	1:A:988:PHE:HD1	1.85	0.88
1:A:994:ARG:NH2	2:B:75:ASP:HB2	1.88	0.88
1:A:360:LEU:HD13	1:A:363:LYS:HD2	1.55	0.88
1:A:446:GLN:OE1	1:A:446:GLN:HA	1.70	0.88
1:A:479:TYR:C	1:A:482:ARG:HG2	1.93	0.88
1:A:869:ILE:HG12	2:B:51:MET:HE2	1.55	0.88
1:A:887:TRP:HH2	1:A:907:LEU:CG	1.87	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:54:ILE:O	2:B:57:LEU:HB3	1.71	0.88
1:A:803:ILE:O	1:A:803:ILE:CG2	2.21	0.88
1:A:991:MET:CG	1:A:992:PRO:HD2	2.01	0.88
2:B:32:ARG:CZ	2:B:34:LEU:CG	2.50	0.88
2:B:32:ARG:NE	2:B:34:LEU:HG	1.87	0.88
1:A:869:ILE:HG12	2:B:51:MET:CE	2.04	0.88
1:A:994:ARG:CZ	2:B:73:TYR:CG	2.57	0.88
1:A:360:LEU:HD21	1:A:773:GLN:OE1	1.73	0.88
1:A:885:GLU:CG	2:B:76:GLN:HG3	2.02	0.88
1:A:994:ARG:NH2	2:B:75:ASP:OD2	2.06	0.87
1:A:511:ARG:HG2	1:A:512:HIS:H	1.39	0.87
1:A:578:TYR:OH	1:A:586:ASN:ND2	2.06	0.87
1:A:172:ASN:C	1:A:173:LEU:HD12	1.94	0.87
1:A:743:MET:HE3	1:A:762:ASP:CA	2.04	0.87
1:A:917:PHE:CE2	1:A:921:LEU:HD11	2.09	0.87
1:A:166:ILE:CG1	1:A:167:ILE:H	1.87	0.87
2:B:82:VAL:HG13	2:B:280:GLY:HA2	1.54	0.87
1:A:212:ILE:HD11	1:A:265:GLY:C	1.94	0.87
1:A:209:PRO:O	1:A:254:PHE:HD1	1.55	0.87
2:B:212:PRO:HB2	2:B:253:PRO:HG3	1.57	0.86
1:A:442:PHE:CZ	1:A:466:LEU:HD22	2.10	0.86
2:B:265:LEU:H	2:B:265:LEU:HD12	1.39	0.86
1:A:994:ARG:CZ	2:B:73:TYR:CD1	2.57	0.86
1:A:1019:VAL:HG23	1:A:1020:ARG:N	1.87	0.86
2:B:84:LEU:HD11	2:B:282:VAL:HG21	1.54	0.86
1:A:109:LEU:O	1:A:109:LEU:HD12	1.75	0.86
2:B:275:HIS:CG	2:B:276:ASP:H	1.92	0.86
1:A:87:ASN:HD22	1:A:271:GLY:H	0.91	0.86
1:A:610:ASP:OD1	1:A:614:LYS:HE3	1.75	0.86
1:A:752:LYS:NZ	1:A:752:LYS:CB	2.38	0.86
1:A:48:MET:CE	1:A:246:LEU:HG	2.06	0.86
1:A:212:ILE:O	1:A:212:ILE:HG23	1.76	0.86
1:A:455:ILE:HD13	1:A:456:VAL:H	1.40	0.86
1:A:564:PHE:HE1	1:A:598:VAL:HG12	1.40	0.86
1:A:916:THR:OG1	2:B:278:TYR:CG	2.18	0.86
2:B:34:LEU:N	2:B:34:LEU:HD23	1.91	0.86
1:A:479:TYR:O	1:A:482:ARG:CG	2.23	0.86
1:A:601:ILE:HD12	1:A:602:ASP:H	1.40	0.86
1:A:218:GLN:HG2	1:A:219:GLY:N	1.90	0.85
1:A:218:GLN:CG	1:A:219:GLY:N	2.39	0.85
1:A:446:GLN:HE21	1:A:455:ILE:HG22	1.40	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:119:ILE:HG21	1:A:334:MET:HB3	1.55	0.85
1:A:983:GLY:O	1:A:987:ILE:HG13	1.75	0.85
1:A:164:THR:O	1:A:165:ASN:HB2	1.76	0.85
1:A:924:GLN:HG2	1:A:928:TYR:CE2	2.10	0.85
1:A:1011:TYR:O	1:A:1014:ILE:HG22	1.76	0.85
1:A:332:PHE:O	1:A:336:ILE:HD12	1.76	0.85
1:A:599:SER:C	1:A:600:MET:HG2	1.93	0.85
1:A:855:ASN:HD22	1:A:857:PRO:CD	1.90	0.85
1:A:72:LEU:HD22	1:A:198:ASP:OD1	1.75	0.85
1:A:994:ARG:HD3	2:B:73:TYR:CE1	2.11	0.85
1:A:349:VAL:O	1:A:353:LEU:HD13	1.76	0.85
1:A:339:ALA:HB1	1:A:796:LEU:CG	2.06	0.85
1:A:391:THR:HA	1:A:604:PRO:HA	1.59	0.85
1:A:943:VAL:HG13	1:A:964:LEU:HD11	1.55	0.85
2:B:136:TYR:CD2	2:B:190:LEU:HD23	2.12	0.85
1:A:546:ALA:C	1:A:549:THR:OG1	2.14	0.85
2:B:185:ARG:HE	2:B:242:ASN:CB	1.90	0.85
1:A:768:VAL:O	1:A:771:VAL:HG22	1.75	0.84
2:B:273:ASN:HB3	2:B:274:PRO:HD3	1.59	0.84
1:A:315:PHE:CD1	1:A:800:LEU:HD22	2.11	0.84
1:A:427:TRP:CH2	1:A:468:PHE:HE2	1.95	0.84
1:A:759:LEU:CD1	1:A:766:SER:HB2	2.07	0.84
1:A:795:GLU:HB3	1:A:816:ILE:HD12	1.60	0.84
1:A:392:GLN:NE2	1:A:413:GLU:OE1	2.09	0.84
1:A:994:ARG:HH12	2:B:73:TYR:HB3	1.43	0.84
1:A:218:GLN:CG	1:A:219:GLY:H	1.88	0.84
2:B:77:LEU:HD23	2:B:186:ILE:CG1	2.06	0.84
1:A:339:ALA:HB1	1:A:796:LEU:HG	1.59	0.84
1:A:482:ARG:C	1:A:484:PRO:HD3	1.97	0.84
1:A:581:ASP:OD1	1:A:583:GLU:CB	2.23	0.84
1:A:363:LYS:CE	1:A:773:GLN:NE2	2.36	0.84
1:A:363:LYS:HE3	1:A:773:GLN:HE22	1.34	0.84
1:A:708:LEU:O	1:A:708:LEU:HD13	1.78	0.84
1:A:905:GLN:HG3	2:B:278:TYR:HB3	1.59	0.84
1:A:81:LEU:HD23	1:A:81:LEU:O	1.77	0.84
1:A:166:ILE:CG1	1:A:167:ILE:N	2.41	0.84
1:A:166:ILE:CD1	1:A:167:ILE:N	2.41	0.84
1:A:46:LYS:NZ	1:A:712:GLU:OE1	2.10	0.83
1:A:175:PRO:HD3	1:A:207:ARG:HD2	0.85	0.83
1:A:340:TYR:CZ	1:A:796:LEU:HD23	2.13	0.83
1:A:218:GLN:OE1	1:A:218:GLN:C	2.16	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:786:ALA:HB3	1:A:946:ARG:CD	2.09	0.83
1:A:631:ILE:O	1:A:631:ILE:HD13	1.78	0.83
1:A:659:VAL:HG12	1:A:660:PRO:HD2	1.59	0.83
1:A:991:MET:HG3	1:A:992:PRO:CD	2.09	0.83
1:A:286:VAL:HG21	1:A:735:LYS:HG3	1.61	0.83
1:A:887:TRP:CH2	1:A:907:LEU:HG	2.13	0.83
2:B:213:LEU:CD1	2:B:260:ILE:HD13	2.07	0.83
1:A:887:TRP:CH2	1:A:907:LEU:HD21	2.14	0.83
2:B:209:ASP:OD1	2:B:209:ASP:O	1.97	0.83
1:A:53:HIS:HB3	1:A:251:ILE:CD1	2.08	0.83
1:A:601:ILE:CD1	1:A:602:ASP:O	2.27	0.83
2:B:177:PRO:HG2	2:B:286:LEU:HD22	1.61	0.83
1:A:903:HIS:CB	2:B:88:VAL:HB	2.08	0.83
1:A:48:MET:HG3	1:A:49:GLU:H	1.43	0.82
1:A:60:LEU:HD22	1:A:213:ARG:HG2	1.60	0.82
1:A:784:SER:HA	1:A:831:LEU:HD22	1.58	0.82
1:A:386:LYS:HD2	1:A:636:ILE:CD1	2.08	0.82
1:A:72:LEU:HD13	1:A:198:ASP:CA	2.08	0.82
1:A:181:ILE:CD1	1:A:186:LYS:HB3	2.08	0.82
1:A:253:PHE:CD2	1:A:275:ILE:HD13	2.13	0.82
1:A:149:VAL:HG23	1:A:150:VAL:N	1.95	0.82
2:B:68:PRO:HD2	2:B:69:TYR:H	1.41	0.82
1:A:952:SER:OG	1:A:1013:GLU:OE2	1.97	0.82
1:A:242:HIS:HD2	1:A:244:SER:H	1.27	0.82
1:A:482:ARG:O	1:A:484:PRO:CD	2.28	0.82
1:A:537:LEU:CD1	1:A:538:PRO:CD	2.57	0.82
1:A:284:SER:C	1:A:286:VAL:H	1.81	0.82
1:A:48:MET:HE3	1:A:246:LEU:HG	1.59	0.81
1:A:112:LEU:HD21	1:A:341:VAL:HG12	1.62	0.81
1:A:600:MET:C	1:A:601:ILE:CG2	2.48	0.81
1:A:117:ALA:HA	1:A:145:LEU:HD12	1.62	0.81
1:A:328:ARG:HG3	1:A:332:PHE:CE2	2.14	0.81
1:A:400:LEU:CD2	1:A:427:TRP:HZ3	1.92	0.81
1:A:750:ALA:HA	1:A:753:ASN:ND2	1.95	0.81
1:A:1015:ARG:HD2	1:A:1031:LEU:CD2	2.09	0.81
1:A:917:PHE:HB3	2:B:278:TYR:CZ	2.14	0.81
1:A:495:ASN:HB3	1:A:497:PHE:CE2	2.16	0.81
1:A:532:ILE:C	1:A:532:ILE:CD1	2.49	0.81
1:A:211:ASP:HB2	1:A:269:ASN:HB2	1.62	0.81
1:A:811:LEU:HD11	1:A:815:THR:HG21	1.63	0.81
1:A:925:TYR:HD1	1:A:989:ASN:HD21	1.27	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:142:PHE:CD2	2:B:232:TYR:HD1	1.98	0.81
1:A:65:GLN:HA	1:A:65:GLN:NE2	1.95	0.81
1:A:166:ILE:HA	1:A:753:ASN:HB2	0.92	0.81
2:B:77:LEU:HD21	2:B:186:ILE:HB	1.63	0.81
1:A:896:ARG:HB2	1:A:897:PRO:CD	2.11	0.81
1:A:914:GLU:O	2:B:184:ASN:CB	2.29	0.81
1:A:324:TYR:HD2	1:A:328:ARG:HG2	1.43	0.81
1:A:178:ALA:O	1:A:188:GLN:HA	1.80	0.80
1:A:279:ILE:HG23	1:A:732:PRO:CG	2.12	0.80
1:A:1015:ARG:HD2	1:A:1031:LEU:HD22	1.62	0.80
1:A:410:ASP:OD2	1:A:417:GLY:N	2.13	0.80
1:A:443:LYS:HG3	1:A:455:ILE:HG23	1.63	0.80
1:A:659:VAL:HG12	1:A:660:PRO:CD	2.12	0.80
1:A:377:GLY:HA3	1:A:774:GLY:O	1.82	0.80
1:A:443:LYS:HG3	1:A:455:ILE:CG2	2.12	0.80
1:A:693:THR:CG2	1:A:694:HIS:ND1	2.44	0.80
1:A:56:SER:HB3	1:A:59:GLU:HG3	1.64	0.80
1:A:427:TRP:HH2	1:A:468:PHE:CE2	1.96	0.80
2:B:139:GLN:HB2	2:B:232:TYR:HE2	1.45	0.80
1:A:376:LEU:HB3	1:A:771:VAL:HA	1.64	0.80
1:A:880:THR:HG23	1:A:997:TRP:CZ3	2.16	0.80
1:A:786:ALA:HB1	1:A:946:ARG:CZ	2.11	0.80
1:A:146:ILE:C	1:A:149:VAL:HG22	2.02	0.80
1:A:222:VAL:HG22	1:A:234:GLN:O	1.79	0.80
1:A:546:ALA:O	1:A:549:THR:OG1	1.98	0.80
1:A:340:TYR:CZ	1:A:796:LEU:CD2	2.65	0.79
1:A:927:CYS:O	1:A:930:VAL:HG22	1.82	0.79
1:A:455:ILE:CD1	1:A:456:VAL:O	2.31	0.79
1:A:947:LYS:HD2	1:A:964:LEU:HD21	1.62	0.79
1:A:46:LYS:HZ2	1:A:712:GLU:CD	1.83	0.79
1:A:623:ILE:HG23	1:A:697:MET:HG2	1.63	0.79
1:A:339:ALA:CB	1:A:796:LEU:HG	2.12	0.79
1:A:512:HIS:O	1:A:569:LEU:HD13	1.80	0.79
1:A:763:ASN:C	1:A:763:ASN:ND2	2.30	0.79
2:B:68:PRO:HD2	2:B:69:TYR:N	1.95	0.79
1:A:302:ASP:OD1	1:A:303:ILE:HD13	1.83	0.79
1:A:1031:LEU:HD12	1:A:1031:LEU:N	1.97	0.79
1:A:356:THR:HG21	1:A:777:ILE:HD12	1.62	0.79
1:A:164:THR:O	1:A:165:ASN:CB	2.31	0.79
1:A:203:LYS:HE2	1:A:206:ASP:OD1	1.83	0.79
1:A:284:SER:O	1:A:286:VAL:N	2.16	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:435:THR:HG23	1:A:436:LEU:CD1	2.13	0.79
1:A:512:HIS:O	1:A:569:LEU:HD12	1.81	0.79
2:B:236:ALA:O	2:B:237:GLN:HG3	1.82	0.78
1:A:141:LEU:HD11	1:A:338:VAL:HG21	1.65	0.78
1:A:442:PHE:CD2	1:A:454:ARG:HD2	2.17	0.78
1:A:950:ARG:NH2	1:A:1020:ARG:HG3	1.98	0.78
1:A:368:LYS:HD2	1:A:756:ASP:O	1.83	0.78
1:A:667:LYS:HA	1:A:667:LYS:NZ	1.98	0.78
1:A:473:LEU:HG	1:A:473:LEU:O	1.82	0.78
2:B:49:VAL:HG12	2:B:50:VAL:N	1.98	0.78
1:A:674:ILE:HG13	1:A:678:GLN:OE1	1.82	0.78
2:B:249:LEU:HD12	2:B:286:LEU:CD1	2.14	0.78
1:A:203:LYS:H	1:A:203:LYS:HD3	1.47	0.78
1:A:87:ASN:ND2	1:A:270:THR:CG2	2.47	0.78
1:A:799:TYR:CE2	1:A:803:ILE:HD11	2.18	0.78
2:B:84:LEU:CD1	2:B:282:VAL:HG21	2.13	0.78
1:A:631:ILE:O	1:A:631:ILE:CD1	2.32	0.77
1:A:794:PRO:HG3	1:A:870:GLN:HB2	1.65	0.77
1:A:1011:TYR:CZ	2:B:47:PHE:HE2	1.90	0.77
1:A:87:ASN:HD21	1:A:271:GLY:H	1.30	0.77
1:A:397:VAL:HG12	1:A:398:SER:N	2.00	0.77
1:A:545:GLU:CA	1:A:548:GLN:HB2	2.14	0.77
1:A:925:TYR:CD1	1:A:989:ASN:ND2	2.51	0.77
1:A:885:GLU:OE1	1:A:885:GLU:N	2.18	0.77
1:A:90:ARG:O	1:A:90:ARG:CD	2.32	0.77
2:B:251:ASN:HB2	2:B:253:PRO:HD2	1.66	0.77
1:A:113:MET:CE	1:A:148:VAL:HB	2.15	0.77
1:A:113:MET:SD	1:A:346:LEU:HD11	2.25	0.77
1:A:867:GLY:O	1:A:870:GLN:N	2.16	0.77
1:A:922:TYR:CD2	1:A:991:MET:HE3	2.19	0.77
1:A:1002:MET:HB3	1:A:1003:PRO:HD3	1.67	0.77
1:A:69:THR:HG23	1:A:70:LYS:H	1.45	0.77
1:A:166:ILE:HG13	1:A:167:ILE:HG12	1.67	0.77
1:A:181:ILE:HG13	1:A:199:LEU:CD2	2.09	0.77
1:A:392:GLN:CD	1:A:413:GLU:OE2	2.23	0.77
2:B:146:ASN:O	2:B:147:HIS:O	2.03	0.77
1:A:52:ASP:CB	1:A:55:LEU:HD12	2.12	0.76
1:A:48:MET:HG3	1:A:49:GLU:N	2.00	0.76
1:A:127:GLN:C	1:A:129:SER:H	1.88	0.76
1:A:72:LEU:CD1	1:A:198:ASP:HA	2.11	0.76
1:A:100:LYS:O	1:A:102:ALA:N	2.18	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:315:PHE:CZ	1:A:800:LEU:HD13	2.19	0.76
1:A:905:GLN:CG	2:B:278:TYR:CD1	2.69	0.76
1:A:293:ILE:O	1:A:293:ILE:HD13	1.85	0.76
1:A:670:ARG:HE	1:A:695:PRO:CG	1.97	0.76
1:A:451:VAL:HG22	1:A:451:VAL:O	1.85	0.76
2:B:33:THR:C	2:B:34:LEU:HD23	2.06	0.76
2:B:137:PHE:CD1	2:B:138:PHE:O	2.39	0.76
1:A:399:HIS:CD2	1:A:408:SER:HB3	2.21	0.76
2:B:136:TYR:CE2	2:B:190:LEU:HB3	2.20	0.76
1:A:61:GLU:OE2	1:A:68:ALA:HB2	1.85	0.76
2:B:84:LEU:HB3	2:B:86:PRO:CD	2.16	0.76
1:A:177:GLN:CD	1:A:188:GLN:CD	2.41	0.76
1:A:360:LEU:CD1	1:A:773:GLN:CD	2.36	0.76
1:A:1019:VAL:CG2	1:A:1020:ARG:N	2.48	0.76
1:A:315:PHE:HB2	1:A:336:ILE:CD1	2.16	0.76
1:A:827:PRO:HG2	1:A:971:GLN:NE2	2.00	0.76
1:A:446:GLN:NE2	1:A:455:ILE:HG22	2.00	0.75
1:A:682:MET:SD	1:A:686:GLU:HG2	2.26	0.75
1:A:617:THR:CG2	1:A:618:ALA:N	2.49	0.75
1:A:905:GLN:HG3	2:B:278:TYR:CD1	2.21	0.75
1:A:947:LYS:NZ	1:A:947:LYS:HB3	2.00	0.75
1:A:999:LEU:H	1:A:999:LEU:HD12	1.51	0.75
2:B:263:LYS:CD	2:B:271:PHE:CE2	2.69	0.75
1:A:166:ILE:HG13	1:A:167:ILE:N	2.00	0.75
1:A:538:PRO:O	1:A:540:ASP:N	2.18	0.75
1:A:905:GLN:HB3	2:B:83:THR:HB	1.68	0.75
2:B:265:LEU:HD12	2:B:265:LEU:N	2.00	0.75
1:A:818:PHE:O	1:A:822:CYS:HB2	1.86	0.75
1:A:451:VAL:CG1	1:A:452:PRO:CD	2.65	0.75
1:A:690:ALA:C	1:A:693:THR:HG22	2.05	0.75
2:B:176:LYS:HA	2:B:288:ILE:CD1	2.17	0.75
1:A:399:HIS:CG	1:A:408:SER:HA	2.13	0.75
1:A:283:ALA:O	1:A:284:SER:C	2.25	0.75
1:A:615:CYS:O	1:A:618:ALA:HB3	1.85	0.75
1:A:1016:LYS:C	1:A:1019:VAL:HG22	2.06	0.75
2:B:74:GLN:OE1	2:B:187:VAL:HG13	1.86	0.75
2:B:194:SER:O	2:B:194:SER:OG	2.03	0.75
2:B:242:ASN:CG	2:B:243:PRO:HD2	2.07	0.75
1:A:53:HIS:CE1	1:A:54:GLN:HE22	2.05	0.75
1:A:360:LEU:HD21	1:A:773:GLN:CD	2.07	0.75
1:A:442:PHE:CE1	1:A:466:LEU:CD2	2.70	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:455:ILE:HD12	1:A:456:VAL:CA	2.17	0.75
1:A:994:ARG:NH1	2:B:73:TYR:CD1	2.53	0.75
1:A:41:LEU:HD22	1:A:42:GLU:HG2	1.69	0.74
1:A:53:HIS:HB3	1:A:251:ILE:HD11	1.66	0.74
1:A:381:VAL:CG1	1:A:721:VAL:HG12	2.17	0.74
1:A:481:GLU:O	1:A:484:PRO:HD3	1.87	0.74
1:A:567:LEU:HD12	1:A:592:LEU:HD23	1.68	0.74
1:A:585:MET:SD	1:A:589:THR:HG21	2.27	0.74
1:A:684:PRO:O	1:A:688:VAL:HG23	1.87	0.74
1:A:707:LYS:NZ	1:A:730:ASP:HB3	2.03	0.74
1:A:819:ILE:HG12	1:A:932:PHE:CE1	2.22	0.74
2:B:213:LEU:CD1	2:B:260:ILE:CD1	2.63	0.74
1:A:679:LEU:HD23	1:A:679:LEU:O	1.88	0.74
1:A:173:LEU:HD12	1:A:173:LEU:N	2.02	0.74
1:A:873:ALA:HB2	1:A:1004:PHE:CB	2.16	0.74
1:A:877:ASP:O	1:A:880:THR:HG22	1.88	0.74
2:B:142:PHE:CZ	2:B:232:TYR:CE1	2.74	0.74
1:A:189:ILE:HD11	1:A:194:LEU:CD2	2.18	0.74
1:A:336:ILE:HG23	1:A:340:TYR:HE1	1.53	0.74
1:A:482:ARG:O	1:A:484:PRO:HD2	1.86	0.74
1:A:605:ARG:HG2	1:A:605:ARG:HH11	1.53	0.74
1:A:703:SER:H	1:A:706:GLN:HE21	1.33	0.74
1:A:787:TYR:CE1	1:A:943:VAL:HG22	2.23	0.74
1:A:807:VAL:HG22	1:A:808:PRO:HD2	1.69	0.74
1:A:994:ARG:NH1	2:B:73:TYR:HB3	2.00	0.74
2:B:275:HIS:CG	2:B:276:ASP:OD1	2.39	0.74
1:A:654:ALA:HB1	1:A:660:PRO:O	1.86	0.74
1:A:1030:GLU:CD	2:B:40:ILE:HD11	2.08	0.74
1:A:286:VAL:HB	1:A:735:LYS:HE2	0.82	0.73
2:B:129:ILE:HG22	2:B:151:SER:O	1.88	0.73
1:A:163:SER:HB3	1:A:368:LYS:CD	2.15	0.73
1:A:212:ILE:HG12	1:A:265:GLY:HA3	1.69	0.73
1:A:97:GLU:HB3	1:A:99:VAL:HG12	1.70	0.73
1:A:351:VAL:O	1:A:355:LEU:HG	1.89	0.73
1:A:426:THR:HA	1:A:531:LEU:HD23	1.70	0.73
1:A:432:ARG:NH1	1:A:504:LEU:HD11	2.02	0.73
1:A:613:LEU:C	1:A:613:LEU:CD1	2.56	0.73
1:A:765:ALA:O	1:A:768:VAL:HG12	1.86	0.73
1:A:791:LYS:HD2	1:A:819:ILE:HG23	1.67	0.73
1:A:567:LEU:HD23	1:A:568:TYR:N	2.04	0.73
1:A:114:TRP:HZ3	1:A:146:ILE:HG13	1.53	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:826:PHE:HB2	1:A:827:PRO:HD3	1.69	0.73
1:A:479:TYR:CA	1:A:482:ARG:CD	2.56	0.73
1:A:482:ARG:HG3	1:A:483:PHE:CD1	2.23	0.73
1:A:856:GLU:HG2	1:A:857:PRO:HD3	1.68	0.73
1:A:57:VAL:HG21	1:A:215:LEU:CD2	2.19	0.73
1:A:455:ILE:HD11	1:A:456:VAL:O	1.89	0.73
1:A:345:LEU:O	1:A:348:THR:HG22	1.88	0.73
1:A:208:VAL:HG21	1:A:253:PHE:O	1.89	0.72
1:A:547:PHE:CD2	1:A:548:GLN:N	2.56	0.72
1:A:601:ILE:CD1	1:A:602:ASP:N	2.41	0.72
1:A:937:MET:O	1:A:940:ILE:HG22	1.88	0.72
1:A:113:MET:HE2	1:A:145:LEU:O	1.89	0.72
1:A:913:GLN:CB	2:B:185:ARG:O	2.31	0.72
1:A:376:LEU:H	1:A:376:LEU:HD22	1.54	0.72
1:A:917:PHE:HB3	2:B:278:TYR:HE2	1.51	0.72
2:B:242:ASN:OD1	2:B:243:PRO:HD2	1.88	0.72
1:A:466:LEU:HD23	1:A:466:LEU:O	1.88	0.72
1:A:914:GLU:OE1	2:B:182:LYS:HD3	1.90	0.72
1:A:254:PHE:CD2	1:A:276:ILE:HD11	2.25	0.72
1:A:466:LEU:CD2	1:A:466:LEU:O	2.38	0.72
1:A:999:LEU:HD12	1:A:999:LEU:N	2.04	0.72
1:A:212:ILE:CD1	1:A:265:GLY:C	2.53	0.72
1:A:328:ARG:O	1:A:331:VAL:CG2	2.31	0.72
1:A:922:TYR:CG	1:A:991:MET:HE3	2.24	0.72
1:A:395:MET:O	1:A:396:THR:OG1	2.06	0.71
1:A:721:VAL:HG23	1:A:721:VAL:O	1.90	0.71
1:A:750:ALA:O	1:A:753:ASN:ND2	2.23	0.71
2:B:189:PHE:HZ	2:B:268:HIS:HB3	1.55	0.71
1:A:197:GLY:HA2	1:A:266:LEU:HD21	1.72	0.71
1:A:398:SER:OG	1:A:559:GLU:OE2	2.05	0.71
1:A:435:THR:HG23	1:A:436:LEU:HD13	1.71	0.71
1:A:772:GLU:O	1:A:772:GLU:HG2	1.88	0.71
1:A:451:VAL:HG12	1:A:471:LEU:HD13	1.70	0.71
1:A:520:PRO:HG2	1:A:551:TYR:CE1	2.24	0.71
2:B:45:VAL:O	2:B:49:VAL:HB	1.90	0.71
2:B:139:GLN:HG2	2:B:149:LYS:HB3	1.73	0.71
1:A:162:LYS:C	1:A:163:SER:OG	2.28	0.71
1:A:360:LEU:CG	1:A:773:GLN:HG3	2.16	0.71
1:A:442:PHE:CE1	1:A:466:LEU:HD21	2.25	0.71
1:A:801:ILE:O	1:A:805:VAL:HG12	1.90	0.71
1:A:479:TYR:HA	1:A:482:ARG:CG	2.21	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:855:ASN:ND2	1:A:857:PRO:HD2	2.05	0.71
2:B:84:LEU:HD11	2:B:282:VAL:CG2	2.20	0.71
1:A:52:ASP:HB2	1:A:55:LEU:CD1	2.14	0.71
1:A:90:ARG:HD2	1:A:90:ARG:N	2.06	0.71
1:A:243:GLU:O	1:A:245:PRO:HD3	1.89	0.71
1:A:750:ALA:HA	1:A:753:ASN:HD21	1.55	0.71
2:B:77:LEU:CD2	2:B:186:ILE:HD12	2.20	0.71
2:B:263:LYS:HD3	2:B:271:PHE:CE2	2.25	0.71
1:A:207:ARG:HA	1:A:257:MET:HG3	1.71	0.71
1:A:276:ILE:HD12	1:A:277:GLY:N	2.04	0.71
1:A:682:MET:CE	1:A:682:MET:CA	2.47	0.71
1:A:933:ILE:HD11	1:A:979:CYS:SG	2.31	0.71
1:A:950:ARG:CZ	1:A:1020:ARG:HG3	2.20	0.70
1:A:966:ILE:CG2	1:A:970:PHE:HD2	2.04	0.70
1:A:120:CYS:SG	1:A:141:LEU:HD22	2.30	0.70
1:A:811:LEU:HD11	1:A:815:THR:CG2	2.19	0.70
1:A:398:SER:HB3	1:A:600:MET:CA	2.22	0.70
1:A:443:LYS:CG	1:A:455:ILE:HG23	2.21	0.70
1:A:532:ILE:HG23	1:A:532:ILE:O	1.90	0.70
1:A:705:GLN:OE1	1:A:705:GLN:N	2.23	0.70
1:A:434:LEU:HD23	1:A:564:PHE:CE2	2.26	0.70
1:A:655:ALA:O	1:A:656:ARG:C	2.26	0.70
2:B:81:GLY:HA2	2:B:280:GLY:H	1.56	0.70
2:B:277:PRO:HD2	2:B:278:TYR:CD2	2.25	0.70
1:A:574:TYR:HD1	1:A:578:TYR:CE2	2.10	0.70
1:A:929:THR:HG23	1:A:990:PHE:CD2	2.23	0.70
2:B:85:ARG:H	2:B:180:ILE:HD12	1.55	0.70
1:A:100:LYS:O	1:A:101:PHE:C	2.30	0.70
1:A:580:PHE:HD1	1:A:587:PHE:CD2	2.09	0.70
1:A:580:PHE:HD1	1:A:587:PHE:HD2	1.39	0.70
1:A:659:VAL:HG12	1:A:660:PRO:N	2.07	0.70
1:A:833:TYR:CD1	1:A:963:ILE:HG21	2.26	0.70
1:A:346:LEU:HD23	1:A:346:LEU:H	1.57	0.70
1:A:363:LYS:CE	1:A:773:GLN:HE21	2.03	0.70
1:A:400:LEU:HD22	1:A:427:TRP:CZ3	2.18	0.70
1:A:623:ILE:HG12	1:A:697:MET:SD	2.32	0.70
1:A:759:LEU:HD12	1:A:763:ASN:O	1.91	0.70
1:A:905:GLN:NE2	2:B:82:VAL:O	2.24	0.70
1:A:482:ARG:O	1:A:484:PRO:HD3	1.91	0.70
1:A:790:THR:HG23	1:A:867:GLY:N	2.06	0.70
1:A:174:VAL:O	1:A:175:PRO:O	2.09	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:175:PRO:CG	1:A:207:ARG:HD2	2.20	0.70
1:A:177:GLN:OE1	1:A:188:GLN:CG	2.39	0.70
1:A:255:SER:HB3	1:A:276:ILE:HG21	1.72	0.70
1:A:477:MET:HG3	1:A:478:GLY:N	2.06	0.70
1:A:92:PRO:CG	1:A:167:ILE:HG21	2.23	0.69
1:A:114:TRP:CH2	1:A:149:VAL:HG21	2.27	0.69
1:A:659:VAL:CG1	1:A:660:PRO:CD	2.70	0.69
1:A:659:VAL:HG13	1:A:660:PRO:HD2	1.71	0.69
1:A:798:PRO:O	1:A:801:ILE:HG22	1.92	0.69
1:A:947:LYS:CE	1:A:964:LEU:HD22	2.22	0.69
1:A:124:PHE:HA	1:A:127:GLN:CG	2.20	0.69
1:A:166:ILE:CD1	1:A:284:SER:OG	2.39	0.69
2:B:33:THR:HG21	2:B:36:ARG:HB2	1.72	0.69
1:A:705:GLN:O	1:A:709:VAL:HG23	1.91	0.69
1:A:994:ARG:H	1:A:997:TRP:HD1	1.40	0.69
2:B:33:THR:O	2:B:37:TRP:NE1	2.25	0.69
2:B:142:PHE:CD2	2:B:232:TYR:CD1	2.75	0.69
2:B:189:PHE:CZ	2:B:268:HIS:HB3	2.27	0.69
1:A:80:LEU:HG	1:A:83:ARG:HH11	1.56	0.69
2:B:176:LYS:HA	2:B:288:ILE:HD11	1.75	0.69
2:B:282:VAL:HG12	2:B:283:GLU:N	2.06	0.69
1:A:242:HIS:CD2	1:A:244:SER:H	2.10	0.69
1:A:903:HIS:HB3	2:B:88:VAL:HB	1.74	0.69
1:A:1030:GLU:OE2	2:B:40:ILE:HD11	1.92	0.69
1:A:112:LEU:O	1:A:115:VAL:HG12	1.90	0.69
1:A:925:TYR:HA	1:A:928:TYR:CD2	2.22	0.69
1:A:114:TRP:CH2	1:A:146:ILE:CG1	2.70	0.69
1:A:203:LYS:HD3	1:A:203:LYS:N	2.08	0.69
1:A:212:ILE:CG2	1:A:252:ALA:HB3	2.22	0.69
1:A:375:THR:O	1:A:377:GLY:N	2.26	0.69
1:A:388:GLY:CA	1:A:393:ASN:OD1	2.41	0.69
1:A:472:THR:HG23	1:A:473:LEU:N	2.08	0.69
1:A:605:ARG:HH11	1:A:605:ARG:CG	2.05	0.69
1:A:739:ILE:HD11	1:A:757:MET:SD	2.33	0.69
1:A:876:THR:HG21	1:A:1004:PHE:CZ	2.27	0.69
2:B:84:LEU:HD12	2:B:84:LEU:N	2.08	0.69
1:A:57:VAL:HG21	1:A:215:LEU:HD23	1.74	0.69
1:A:823:THR:HB	1:A:971:GLN:HG3	1.75	0.69
1:A:631:ILE:HG23	1:A:632:THR:H	1.58	0.69
1:A:916:THR:OG1	2:B:278:TYR:HD2	1.75	0.69
1:A:693:THR:HG23	1:A:694:HIS:CG	2.26	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:249:LEU:CD1	2:B:286:LEU:HD12	2.23	0.68
1:A:442:PHE:HE1	1:A:466:LEU:HD21	1.57	0.68
1:A:662:ASP:O	1:A:664:VAL:N	2.26	0.68
1:A:53:HIS:HE2	1:A:245:PRO:CG	2.05	0.68
1:A:625:VAL:HG11	1:A:707:LYS:HG3	1.75	0.68
1:A:940:ILE:HG12	1:A:968:ILE:HD11	1.74	0.68
1:A:134:THR:HG1	1:A:138:ASN:HB2	1.59	0.68
1:A:791:LYS:HE3	1:A:824:ASP:OD2	1.93	0.68
1:A:1011:TYR:HE1	2:B:47:PHE:CE2	2.10	0.68
1:A:114:TRP:HH2	1:A:146:ILE:HD11	1.57	0.68
1:A:212:ILE:HG22	1:A:252:ALA:HB3	1.74	0.68
2:B:183:MET:CE	2:B:264:ILE:HD13	2.24	0.68
2:B:213:LEU:HD12	2:B:258:VAL:HG11	1.76	0.68
1:A:617:THR:HG23	1:A:618:ALA:N	2.08	0.68
1:A:865:GLN:HE22	1:A:1031:LEU:CD2	2.07	0.68
1:A:574:TYR:HD1	1:A:578:TYR:CD2	2.10	0.68
2:B:68:PRO:CD	2:B:69:TYR:H	2.07	0.68
1:A:200:VAL:HG12	1:A:202:MET:SD	2.34	0.68
1:A:397:VAL:CG1	1:A:398:SER:N	2.57	0.68
1:A:397:VAL:HA	1:A:600:MET:HB3	1.75	0.68
1:A:827:PRO:O	1:A:831:LEU:HD13	1.94	0.68
2:B:263:LYS:HD2	2:B:271:PHE:CE2	2.26	0.68
2:B:282:VAL:CG1	2:B:284:PHE:CD2	2.76	0.67
1:A:57:VAL:CG2	1:A:215:LEU:HD23	2.25	0.67
1:A:398:SER:HB3	1:A:600:MET:HA	1.75	0.67
1:A:784:SER:CA	1:A:831:LEU:HD22	2.24	0.67
1:A:885:GLU:CD	2:B:76:GLN:HG3	2.15	0.67
2:B:269:VAL:O	2:B:269:VAL:CG2	2.35	0.67
1:A:222:VAL:O	1:A:222:VAL:HG23	1.94	0.67
1:A:376:LEU:HG	1:A:770:GLY:O	1.93	0.67
1:A:478:GLY:O	1:A:481:GLU:HB2	1.94	0.67
1:A:539:LEU:HD22	1:A:544:ARG:HG3	1.77	0.67
1:A:48:MET:CE	1:A:246:LEU:CD1	2.73	0.67
1:A:57:VAL:HG11	1:A:215:LEU:HD23	1.76	0.67
1:A:401:TRP:HD1	1:A:406:ILE:HD13	1.59	0.67
1:A:481:GLU:OE1	1:A:481:GLU:CA	2.40	0.67
1:A:670:ARG:HE	1:A:695:PRO:HG2	1.58	0.67
1:A:451:VAL:HG12	1:A:471:LEU:CD1	2.23	0.67
1:A:574:TYR:CD1	1:A:578:TYR:CE2	2.81	0.67
1:A:764:PHE:CE1	1:A:767:ILE:HD12	2.30	0.67
1:A:793:ILE:HB	1:A:794:PRO:HD3	1.77	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:100:LYS:CD	1:A:103:ARG:HG3	2.23	0.67
1:A:324:TYR:HB3	1:A:328:ARG:HB3	1.77	0.67
2:B:32:ARG:NH2	2:B:34:LEU:CG	2.58	0.67
1:A:793:ILE:HD12	1:A:793:ILE:N	2.10	0.67
1:A:940:ILE:HG12	1:A:968:ILE:CD1	2.24	0.67
2:B:84:LEU:CD1	2:B:282:VAL:CG2	2.72	0.67
1:A:57:VAL:CG1	1:A:215:LEU:HD23	2.26	0.66
1:A:401:TRP:CD1	1:A:406:ILE:HD13	2.30	0.66
1:A:693:THR:HG21	1:A:694:HIS:CE1	2.30	0.66
2:B:82:VAL:HG22	2:B:281:LYS:N	2.10	0.66
1:A:212:ILE:HG12	1:A:265:GLY:CA	2.25	0.66
1:A:820:GLU:HG3	1:A:821:LEU:CD1	2.26	0.66
1:A:486:VAL:HG23	1:A:487:CYS:N	2.09	0.66
1:A:539:LEU:HD22	1:A:540:ASP:O	1.94	0.66
1:A:90:ARG:HD2	1:A:90:ARG:H	1.60	0.66
1:A:336:ILE:CG2	1:A:340:TYR:CE1	2.76	0.66
1:A:69:THR:CG2	1:A:70:LYS:N	2.57	0.66
1:A:212:ILE:O	1:A:212:ILE:CG2	2.44	0.66
1:A:351:VAL:HG11	1:A:829:VAL:HG22	1.78	0.66
1:A:888:PHE:HB3	1:A:889:PRO:HD2	1.76	0.66
1:A:48:MET:HE3	1:A:246:LEU:CG	2.25	0.66
1:A:87:ASN:HA	1:A:270:THR:HG22	1.78	0.66
1:A:356:THR:HG22	1:A:359:ARG:HH21	1.58	0.66
1:A:767:ILE:O	1:A:771:VAL:HG13	1.95	0.66
1:A:905:GLN:HG3	2:B:278:TYR:CB	2.24	0.66
1:A:442:PHE:HZ	1:A:466:LEU:HD22	1.61	0.66
2:B:248:LYS:HZ3	2:B:250:LEU:HD21	1.50	0.66
1:A:266:LEU:HD23	1:A:267:VAL:N	2.10	0.66
1:A:451:VAL:CG1	1:A:452:PRO:HD3	2.25	0.66
1:A:227:LEU:HD21	1:A:275:ILE:CD1	2.26	0.66
1:A:398:SER:N	1:A:600:MET:HA	2.10	0.66
1:A:759:LEU:HD11	1:A:766:SER:HB2	1.77	0.66
1:A:42:GLU:OE1	1:A:282:LEU:HD12	1.94	0.66
1:A:482:ARG:C	1:A:484:PRO:CD	2.65	0.66
1:A:790:THR:HG23	1:A:867:GLY:H	1.59	0.66
2:B:77:LEU:CD2	2:B:186:ILE:CG1	2.74	0.66
1:A:723:VAL:CG2	1:A:737:ALA:HB2	2.26	0.65
1:A:1015:ARG:O	1:A:1019:VAL:HG13	1.97	0.65
1:A:53:HIS:HB3	1:A:251:ILE:HD13	1.77	0.65
1:A:483:PHE:CZ	1:A:505:GLU:HG2	2.31	0.65
1:A:707:LYS:HZ3	1:A:730:ASP:HB3	1.59	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:811:LEU:HD13	1:A:931:PHE:HB3	1.78	0.65
1:A:858:LEU:O	1:A:858:LEU:HD13	1.96	0.65
2:B:49:VAL:HG12	2:B:50:VAL:H	1.60	0.65
2:B:84:LEU:CB	2:B:86:PRO:CD	2.74	0.65
1:A:609:PRO:HB3	1:A:640:VAL:HA	1.78	0.65
1:A:917:PHE:CB	2:B:278:TYR:CZ	2.78	0.65
1:A:212:ILE:HG12	1:A:265:GLY:C	2.14	0.65
2:B:282:VAL:HG13	2:B:284:PHE:CZ	2.31	0.65
1:A:48:MET:HG2	1:A:680:LYS:HD3	1.79	0.65
1:A:667:LYS:HA	1:A:667:LYS:CE	2.26	0.65
1:A:881:ALA:HA	1:A:997:TRP:CH2	2.31	0.65
1:A:978:LEU:HD21	1:A:990:PHE:CE2	2.31	0.65
2:B:68:PRO:HD2	2:B:69:TYR:CD2	2.31	0.65
1:A:731:SER:HB2	1:A:732:PRO:CD	2.23	0.65
1:A:864:PHE:CD1	1:A:864:PHE:C	2.68	0.65
2:B:85:ARG:O	2:B:87:ASP:N	2.30	0.65
1:A:916:THR:HG23	1:A:919:GLN:CG	2.27	0.65
1:A:916:THR:HG23	1:A:919:GLN:HG3	1.79	0.65
2:B:229:PHE:HB3	2:B:230:PRO:HA	1.78	0.65
1:A:545:GLU:O	1:A:548:GLN:HB2	1.97	0.65
1:A:567:LEU:HB2	1:A:592:LEU:HD22	1.78	0.65
1:A:994:ARG:NH2	2:B:75:ASP:CB	2.59	0.65
1:A:763:ASN:HD21	1:A:765:ALA:HB3	1.61	0.64
2:B:277:PRO:HD2	2:B:278:TYR:CE2	2.32	0.64
2:B:187:VAL:O	2:B:188:LYS:HG3	1.97	0.64
1:A:210:ALA:HB1	1:A:269:ASN:O	1.97	0.64
1:A:451:VAL:O	1:A:451:VAL:CG2	2.45	0.64
1:A:564:PHE:CE1	1:A:598:VAL:HG12	2.29	0.64
1:A:856:GLU:CG	1:A:857:PRO:HD3	2.27	0.64
1:A:860:ALA:O	1:A:864:PHE:HB3	1.97	0.64
1:A:887:TRP:HH2	1:A:907:LEU:CD2	2.02	0.64
1:A:166:ILE:CG1	1:A:167:ILE:HG12	2.27	0.64
1:A:398:SER:HB2	1:A:601:ILE:HG23	1.79	0.64
1:A:460:ALA:O	1:A:463:THR:HG22	1.97	0.64
1:A:411:THR:O	1:A:603:PRO:HG3	1.97	0.64
1:A:667:LYS:HA	1:A:667:LYS:HZ3	1.60	0.64
1:A:1030:GLU:HB2	1:A:1031:LEU:HD12	1.78	0.64
2:B:273:ASN:CB	2:B:274:PRO:HD3	2.27	0.64
1:A:117:ALA:O	1:A:142:ALA:HB1	1.97	0.64
1:A:442:PHE:CZ	1:A:466:LEU:CD2	2.81	0.64
1:A:827:PRO:CD	1:A:967:ALA:HB1	2.26	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:49:VAL:CG1	2:B:50:VAL:N	2.61	0.64
1:A:49:GLU:HG2	1:A:50:ILE:N	2.12	0.64
1:A:495:ASN:HB3	1:A:497:PHE:CD2	2.32	0.64
1:A:791:LYS:HE3	1:A:939:GLN:NE2	2.13	0.64
1:A:801:ILE:HG21	1:A:875:PHE:HE2	1.63	0.64
1:A:114:TRP:CZ2	1:A:149:VAL:HG21	2.33	0.64
1:A:295:ILE:O	1:A:295:ILE:HG22	1.98	0.64
1:A:649:THR:HG21	1:A:651:GLU:OE2	1.98	0.64
1:A:742:ALA:HB3	1:A:758:ILE:CD1	2.24	0.64
1:A:966:ILE:CG2	1:A:970:PHE:CD2	2.81	0.64
1:A:1015:ARG:HE	1:A:1031:LEU:HB2	1.63	0.64
1:A:399:HIS:NE2	1:A:408:SER:HB2	2.13	0.64
1:A:427:TRP:CE2	1:A:431:CYS:SG	2.91	0.64
1:A:523:VAL:O	1:A:526:ARG:HB2	1.98	0.64
1:A:811:LEU:CD1	1:A:815:THR:HG21	2.28	0.64
1:A:1026:TRP:CH2	2:B:43:TYR:CD1	2.85	0.64
1:A:820:GLU:HG3	1:A:821:LEU:HD12	1.80	0.63
2:B:249:LEU:HD12	2:B:286:LEU:HD12	1.79	0.63
1:A:580:PHE:CD1	1:A:587:PHE:CD2	2.86	0.63
1:A:693:THR:CG2	1:A:694:HIS:CE1	2.81	0.63
1:A:791:LYS:CD	1:A:935:ILE:CG2	2.65	0.63
1:A:100:LYS:HD2	1:A:103:ARG:HG3	1.80	0.63
1:A:241:THR:OG1	1:A:249:ARG:HD2	1.98	0.63
1:A:681:ASP:OD1	1:A:682:MET:HE3	1.97	0.63
1:A:690:ALA:O	1:A:693:THR:CG2	2.43	0.63
1:A:815:THR:CG2	1:A:932:PHE:HB2	2.28	0.63
1:A:866:ILE:O	1:A:867:GLY:C	2.36	0.63
1:A:903:HIS:HB2	2:B:88:VAL:HB	1.80	0.63
1:A:999:LEU:H	1:A:999:LEU:CD1	2.11	0.63
1:A:958:PHE:C	1:A:958:PHE:CD1	2.71	0.63
1:A:1015:ARG:CD	1:A:1031:LEU:HD22	2.28	0.63
1:A:201:GLU:HG3	1:A:264:GLN:HG2	1.80	0.63
1:A:353:LEU:C	1:A:370:LEU:HD11	2.19	0.63
1:A:69:THR:HG23	1:A:70:LYS:CG	2.29	0.63
1:A:114:TRP:CH2	1:A:146:ILE:HD11	2.33	0.63
1:A:477:MET:HG3	1:A:478:GLY:H	1.64	0.63
1:A:629:HIS:HB3	1:A:630:PRO:HD2	1.81	0.63
1:A:884:GLN:CG	2:B:73:TYR:CD2	2.71	0.63
1:A:1011:TYR:OH	2:B:47:PHE:CE2	2.51	0.63
2:B:183:MET:HE1	2:B:264:ILE:CD1	2.29	0.63
2:B:257:ASP:C	2:B:257:ASP:OD1	2.34	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:91:PRO:O	1:A:93:ARG:N	2.31	0.63
1:A:212:ILE:HD11	1:A:265:GLY:CA	2.29	0.63
1:A:254:PHE:CE2	1:A:276:ILE:HD11	2.34	0.63
1:A:398:SER:HB2	1:A:601:ILE:HG21	1.80	0.63
1:A:443:LYS:HB2	1:A:455:ILE:HG23	1.80	0.63
1:A:905:GLN:HG3	2:B:278:TYR:CG	2.33	0.63
1:A:166:ILE:CD1	1:A:167:ILE:HG12	2.29	0.62
1:A:356:THR:O	1:A:360:LEU:HD23	1.99	0.62
1:A:53:HIS:NE2	1:A:245:PRO:CG	2.54	0.62
1:A:114:TRP:CH2	1:A:146:ILE:CD1	2.81	0.62
1:A:332:PHE:O	1:A:336:ILE:CD1	2.46	0.62
2:B:68:PRO:CD	2:B:69:TYR:N	2.61	0.62
1:A:763:ASN:ND2	1:A:765:ALA:N	2.46	0.62
1:A:90:ARG:HH22	1:A:281:SER:HA	1.60	0.62
1:A:218:GLN:CD	1:A:219:GLY:H	2.01	0.62
1:A:392:GLN:O	1:A:393:ASN:HB2	1.98	0.62
1:A:511:ARG:HG2	1:A:512:HIS:N	2.14	0.62
1:A:791:LYS:CD	1:A:819:ILE:HG21	2.26	0.62
1:A:250:ASN:C	1:A:251:ILE:HD12	2.19	0.62
1:A:891:LEU:O	1:A:895:LEU:CD2	2.46	0.62
1:A:270:THR:HG22	1:A:271:GLY:N	2.13	0.62
1:A:432:ARG:HH12	1:A:504:LEU:HD11	1.65	0.62
1:A:497:PHE:CD1	1:A:497:PHE:C	2.72	0.62
1:A:821:LEU:HD12	1:A:821:LEU:N	2.13	0.62
1:A:903:HIS:HB3	2:B:88:VAL:CB	2.30	0.62
1:A:284:SER:C	1:A:286:VAL:N	2.51	0.62
2:B:143:LEU:HB3	2:B:145:PRO:HD2	1.82	0.62
1:A:57:VAL:HG11	1:A:215:LEU:CD2	2.30	0.62
1:A:119:ILE:O	1:A:122:ILE:HG22	2.00	0.62
1:A:545:GLU:HA	1:A:548:GLN:CB	2.22	0.62
2:B:142:PHE:HE2	2:B:232:TYR:CD1	2.13	0.62
1:A:166:ILE:HG22	1:A:753:ASN:O	2.00	0.62
1:A:219:GLY:O	1:A:261:GLY:HA3	2.00	0.62
1:A:343:GLU:OE1	1:A:820:GLU:OE2	2.17	0.62
1:A:631:ILE:CD1	1:A:631:ILE:C	2.69	0.62
1:A:786:ALA:CB	1:A:946:ARG:NH1	2.59	0.62
1:A:208:VAL:CG2	1:A:253:PHE:O	2.48	0.62
1:A:311:PHE:HA	1:A:314:THR:HG22	1.82	0.62
1:A:793:ILE:H	1:A:793:ILE:CD1	2.11	0.61
2:B:254:ARG:HD2	2:B:254:ARG:O	2.00	0.61
1:A:65:GLN:NE2	1:A:65:GLN:CA	2.61	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:221:LYS:HB3	1:A:233:PRO:HB2	1.82	0.61
1:A:340:TYR:CZ	1:A:796:LEU:HD21	2.35	0.61
1:A:342:PRO:HB2	1:A:345:LEU:HB2	1.81	0.61
1:A:947:LYS:HB3	1:A:947:LYS:HZ2	1.65	0.61
2:B:139:GLN:CB	2:B:232:TYR:CE2	2.69	0.61
1:A:187:PHE:CD1	1:A:188:GLN:O	2.53	0.61
1:A:708:LEU:CD1	1:A:712:GLU:HG3	2.30	0.61
2:B:177:PRO:HG2	2:B:286:LEU:CD2	2.29	0.61
2:B:227:HIS:CE1	2:B:228:TYR:CZ	2.89	0.61
1:A:53:HIS:ND1	1:A:54:GLN:NE2	2.47	0.61
1:A:291:THR:O	1:A:295:ILE:HG13	2.01	0.61
1:A:372:ALA:O	1:A:376:LEU:CD2	2.48	0.61
2:B:136:TYR:CG	2:B:190:LEU:HD23	2.34	0.61
2:B:175:GLY:O	2:B:176:LYS:CB	2.48	0.61
1:A:177:GLN:NE2	1:A:188:GLN:CD	2.53	0.61
1:A:354:SER:N	1:A:370:LEU:HD11	2.16	0.61
1:A:560:ARG:O	1:A:599:SER:HA	2.00	0.61
1:A:53:HIS:HB2	1:A:250:ASN:HD21	1.66	0.61
1:A:332:PHE:HE1	1:A:799:TYR:HH	1.47	0.61
2:B:250:LEU:O	2:B:251:ASN:O	2.19	0.61
1:A:434:LEU:HD22	1:A:465:LEU:HD22	1.82	0.61
2:B:84:LEU:HB3	2:B:86:PRO:HD3	1.82	0.61
2:B:84:LEU:CB	2:B:86:PRO:HD2	2.30	0.61
1:A:87:ASN:HA	1:A:270:THR:CG2	2.31	0.61
1:A:291:THR:HG22	1:A:292:PRO:N	2.15	0.61
1:A:332:PHE:HD1	1:A:799:TYR:HH	1.39	0.61
1:A:539:LEU:C	1:A:540:ASP:O	2.36	0.61
1:A:761:ASP:O	1:A:762:ASP:HB2	2.00	0.61
1:A:805:VAL:CG1	1:A:807:VAL:HB	2.31	0.61
2:B:213:LEU:HD23	2:B:213:LEU:C	2.21	0.61
2:B:282:VAL:O	2:B:283:GLU:HG2	2.01	0.61
1:A:308:ALA:HA	1:A:340:TYR:CD2	2.35	0.61
1:A:374:GLU:O	1:A:375:THR:C	2.39	0.61
1:A:494:THR:OG1	1:A:495:ASN:N	2.34	0.61
1:A:559:GLU:HG2	1:A:600:MET:O	2.01	0.61
1:A:827:PRO:O	1:A:831:LEU:CD1	2.48	0.61
1:A:180:VAL:CG1	1:A:194:LEU:CD2	2.78	0.61
1:A:670:ARG:HE	1:A:695:PRO:HG3	1.66	0.61
1:A:48:MET:HE1	1:A:246:LEU:CD1	2.31	0.60
1:A:398:SER:CB	1:A:601:ILE:CG2	2.75	0.60
1:A:472:THR:CG2	1:A:473:LEU:N	2.64	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:978:LEU:CD2	1:A:990:PHE:CE2	2.84	0.60
2:B:68:PRO:HG2	2:B:69:TYR:CZ	2.36	0.60
1:A:53:HIS:C	1:A:250:ASN:HD21	2.04	0.60
1:A:378:SER:O	1:A:379:THR:O	2.18	0.60
1:A:430:LEU:O	1:A:433:VAL:HG12	2.01	0.60
1:A:473:LEU:HD21	1:A:479:TYR:CZ	2.35	0.60
1:A:940:ILE:CG1	1:A:968:ILE:CD1	2.79	0.60
1:A:93:ARG:O	1:A:95:THR:N	2.35	0.60
1:A:113:MET:HE2	1:A:148:VAL:HB	1.83	0.60
1:A:167:ILE:HD13	1:A:284:SER:HB3	1.82	0.60
1:A:636:ILE:O	1:A:640:VAL:HG22	2.01	0.60
1:A:684:PRO:HB2	1:A:716:ARG:HH12	1.66	0.60
1:A:706:GLN:O	1:A:710:ILE:HG12	2.01	0.60
1:A:763:ASN:HD21	1:A:765:ALA:CB	2.13	0.60
1:A:815:THR:HG23	1:A:932:PHE:HB2	1.83	0.60
1:A:58:ALA:O	1:A:62:GLN:HG2	2.01	0.60
1:A:324:TYR:CD2	1:A:328:ARG:CG	2.70	0.60
1:A:554:LEU:HA	1:A:557:LEU:HD13	1.82	0.60
1:A:961:ASN:OD1	1:A:963:ILE:HG22	2.01	0.60
1:A:1031:LEU:N	1:A:1031:LEU:CD1	2.64	0.60
1:A:149:VAL:CG2	1:A:150:VAL:N	2.64	0.60
1:A:149:VAL:HG23	1:A:150:VAL:H	1.66	0.60
1:A:239:GLU:HG3	1:A:239:GLU:O	2.01	0.60
1:A:399:HIS:CD2	1:A:408:SER:HB2	2.32	0.60
1:A:486:VAL:HG23	1:A:487:CYS:H	1.66	0.60
1:A:218:GLN:CD	1:A:219:GLY:N	2.55	0.60
1:A:456:VAL:CG2	1:A:467:LYS:CE	2.69	0.60
1:A:505:GLU:CG	1:A:506:ASP:N	2.54	0.60
1:A:659:VAL:O	1:A:660:PRO:O	2.20	0.60
2:B:276:ASP:OD2	2:B:279:GLU:HB2	2.01	0.60
1:A:51:ASN:HB2	1:A:245:PRO:CG	2.32	0.60
1:A:133:LEU:O	1:A:135:THR:N	2.35	0.60
1:A:360:LEU:CD1	1:A:773:GLN:NE2	2.65	0.60
1:A:97:GLU:O	1:A:99:VAL:N	2.35	0.59
1:A:486:VAL:HG22	1:A:501:ILE:O	2.02	0.59
1:A:786:ALA:CB	1:A:946:ARG:CZ	2.80	0.59
1:A:966:ILE:HG23	1:A:970:PHE:CD2	2.36	0.59
1:A:197:GLY:CA	1:A:266:LEU:HD21	2.32	0.59
1:A:763:ASN:HD21	1:A:765:ALA:N	2.00	0.59
1:A:998:TRP:HB2	1:A:999:LEU:HD12	1.83	0.59
2:B:32:ARG:HE	2:B:34:LEU:CG	1.96	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:183:MET:CE	2:B:264:ILE:CD1	2.80	0.59
1:A:381:VAL:HG13	1:A:721:VAL:HG12	1.84	0.59
1:A:399:HIS:NE2	1:A:408:SER:CB	2.65	0.59
1:A:922:TYR:CD2	1:A:991:MET:CE	2.85	0.59
2:B:235:LYS:HG3	2:B:235:LYS:O	2.01	0.59
1:A:662:ASP:O	1:A:664:VAL:O	2.20	0.59
1:A:546:ALA:CA	1:A:549:THR:HG1	2.09	0.59
1:A:940:ILE:HD11	1:A:968:ILE:CD1	2.26	0.59
2:B:68:PRO:HG2	2:B:69:TYR:CE2	2.38	0.59
2:B:77:LEU:HD23	2:B:186:ILE:CD1	2.32	0.59
1:A:391:THR:HG22	1:A:604:PRO:HB3	1.84	0.59
1:A:578:TYR:CZ	1:A:586:ASN:ND2	2.68	0.59
1:A:610:ASP:O	1:A:613:LEU:N	2.32	0.59
1:A:665:ASN:HD22	1:A:666:ARG:N	1.99	0.59
1:A:847:ASN:ND2	1:A:848:PRO:HD2	2.17	0.59
1:A:864:PHE:CD1	1:A:864:PHE:O	2.56	0.59
1:A:966:ILE:HG22	1:A:970:PHE:HD2	1.67	0.59
2:B:36:ARG:O	2:B:39:TRP:N	2.34	0.59
1:A:169:SER:HA	1:A:172:ASN:ND2	2.18	0.59
1:A:175:PRO:CG	1:A:207:ARG:CB	2.66	0.59
1:A:631:ILE:HG23	1:A:632:THR:N	2.17	0.59
1:A:649:THR:OG1	1:A:650:VAL:N	2.35	0.59
1:A:873:ALA:HB2	1:A:1004:PHE:HB3	1.84	0.59
1:A:1017:LEU:HD12	1:A:1017:LEU:H	1.67	0.59
1:A:1026:TRP:CH2	2:B:43:TYR:CG	2.91	0.59
1:A:395:MET:HG3	1:A:396:THR:N	2.17	0.59
1:A:402:PHE:O	1:A:403:ASP:HB2	2.03	0.59
1:A:435:THR:HG23	1:A:436:LEU:HD12	1.85	0.59
1:A:581:ASP:C	1:A:583:GLU:N	2.55	0.59
1:A:587:PHE:HB2	1:A:588:PRO:HD2	1.82	0.59
2:B:176:LYS:HA	2:B:288:ILE:HD13	1.85	0.59
2:B:276:ASP:OD1	2:B:276:ASP:N	2.34	0.59
1:A:48:MET:HE1	1:A:246:LEU:HD12	1.83	0.59
1:A:150:VAL:HG13	1:A:151:VAL:N	2.18	0.59
1:A:336:ILE:O	1:A:336:ILE:HG22	2.02	0.59
1:A:348:THR:O	1:A:351:VAL:HG12	2.02	0.59
1:A:643:ILE:HD13	1:A:696:GLU:HB3	1.84	0.59
1:A:721:VAL:O	1:A:721:VAL:CG2	2.51	0.59
1:A:915:TRP:CH2	2:B:77:LEU:HB2	2.37	0.59
1:A:1015:ARG:HD2	1:A:1031:LEU:HD23	1.84	0.59
2:B:77:LEU:CD2	2:B:186:ILE:HB	2.32	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:126:ILE:O	1:A:127:GLN:C	2.37	0.59
1:A:353:LEU:HB3	1:A:370:LEU:CD1	2.33	0.59
1:A:353:LEU:HB3	1:A:370:LEU:HG	1.84	0.59
1:A:814:ILE:CD1	1:A:988:PHE:CD1	2.62	0.59
1:A:887:TRP:CH2	1:A:907:LEU:CG	2.76	0.59
1:A:978:LEU:HD21	1:A:990:PHE:CD1	2.38	0.59
2:B:47:PHE:O	2:B:51:MET:HG2	2.03	0.59
1:A:79:GLU:HG3	1:A:79:GLU:O	2.03	0.58
1:A:311:PHE:O	1:A:315:PHE:HD2	1.85	0.58
1:A:328:ARG:NH1	1:A:328:ARG:HB2	2.18	0.58
1:A:399:HIS:CG	1:A:407:HIS:O	2.55	0.58
1:A:806:SER:C	1:A:896:ARG:HG3	2.23	0.58
1:A:905:GLN:NE2	2:B:281:LYS:O	2.36	0.58
1:A:929:THR:O	1:A:932:PHE:HB3	2.03	0.58
1:A:69:THR:CG2	1:A:70:LYS:H	2.14	0.58
1:A:1012:ASP:OD2	1:A:1016:LYS:HE3	2.04	0.58
2:B:57:LEU:O	2:B:61:VAL:HG13	2.02	0.58
1:A:313:ALA:O	1:A:316:PHE:HB3	2.03	0.58
1:A:574:TYR:OH	1:A:588:PRO:HD3	2.03	0.58
1:A:276:ILE:HD12	1:A:277:GLY:CA	2.32	0.58
1:A:501:ILE:HD13	1:A:580:PHE:CG	2.38	0.58
1:A:786:ALA:HB2	1:A:858:LEU:CD2	2.27	0.58
1:A:807:VAL:HG22	1:A:808:PRO:CD	2.34	0.58
1:A:101:PHE:HZ	1:A:154:CYS:SG	2.26	0.58
1:A:375:THR:O	1:A:376:LEU:C	2.41	0.58
1:A:877:ASP:OD1	1:A:930:VAL:HG23	2.03	0.58
2:B:193:ASN:O	2:B:194:SER:HB3	2.03	0.58
1:A:160:GLU:O	1:A:162:LYS:N	2.30	0.58
1:A:378:SER:O	1:A:379:THR:C	2.42	0.58
1:A:397:VAL:CG1	1:A:398:SER:H	2.16	0.58
1:A:466:LEU:CD2	1:A:466:LEU:C	2.72	0.58
1:A:523:VAL:HG23	1:A:565:CYS:SG	2.43	0.58
1:A:693:THR:HG23	1:A:694:HIS:N	2.18	0.58
1:A:788:THR:HG23	1:A:789:LEU:N	2.18	0.58
1:A:391:THR:HG21	1:A:636:ILE:HD13	1.85	0.58
1:A:580:PHE:HB3	1:A:587:PHE:CE2	2.39	0.58
1:A:674:ILE:CG2	1:A:699:PHE:CD2	2.86	0.58
1:A:752:LYS:HB2	1:A:752:LYS:HZ3	1.61	0.58
1:A:821:LEU:O	1:A:825:ILE:CG1	2.52	0.58
1:A:927:CYS:HA	1:A:930:VAL:HG22	1.86	0.58
1:A:213:ARG:CZ	1:A:250:ASN:HD22	2.16	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:307:LEU:HD22	1:A:307:LEU:N	2.18	0.58
1:A:310:LEU:O	1:A:314:THR:HB	2.03	0.58
1:A:507:PRO:C	1:A:510:PRO:HD3	2.24	0.58
1:A:532:ILE:HD13	1:A:533:LYS:N	2.19	0.58
1:A:650:VAL:CG2	1:A:664:VAL:HB	2.33	0.58
1:A:763:ASN:ND2	1:A:764:PHE:N	2.39	0.58
2:B:32:ARG:O	2:B:32:ARG:HG3	2.03	0.58
2:B:36:ARG:C	2:B:38:VAL:N	2.57	0.58
1:A:141:LEU:HD11	1:A:338:VAL:CG2	2.33	0.58
1:A:212:ILE:CD1	1:A:265:GLY:CA	2.82	0.58
2:B:37:TRP:O	2:B:41:SER:N	2.37	0.58
2:B:137:PHE:CE1	2:B:138:PHE:O	2.57	0.58
1:A:253:PHE:CD2	1:A:275:ILE:CD1	2.87	0.57
1:A:381:VAL:HG22	1:A:382:ILE:N	2.19	0.57
1:A:547:PHE:O	1:A:550:ALA:N	2.37	0.57
1:A:605:ARG:NH2	1:A:762:ASP:OD2	2.37	0.57
1:A:786:ALA:HA	1:A:858:LEU:HD11	1.85	0.57
1:A:994:ARG:HH21	2:B:75:ASP:CG	2.04	0.57
1:A:53:HIS:CE1	1:A:54:GLN:NE2	2.71	0.57
1:A:163:SER:O	1:A:164:THR:O	2.22	0.57
1:A:166:ILE:HD12	1:A:167:ILE:CA	2.33	0.57
1:A:177:GLN:HE22	1:A:188:GLN:NE2	2.01	0.57
1:A:216:GLN:HG2	1:A:264:GLN:HB2	1.86	0.57
1:A:300:PHE:CZ	1:A:304:ILE:HG13	2.39	0.57
1:A:493:SER:O	1:A:496:LYS:HG2	2.04	0.57
2:B:44:TYR:O	2:B:48:TYR:HB2	2.04	0.57
2:B:282:VAL:CG1	2:B:283:GLU:N	2.67	0.57
1:A:133:LEU:C	1:A:135:THR:H	2.06	0.57
1:A:599:SER:O	1:A:600:MET:HG2	2.04	0.57
1:A:827:PRO:CG	1:A:967:ALA:HB1	2.34	0.57
1:A:489:ILE:HG12	1:A:582:VAL:HG13	1.85	0.57
1:A:637:ALA:HB1	1:A:643:ILE:HG12	1.87	0.57
1:A:682:MET:HE3	1:A:682:MET:N	2.19	0.57
1:A:87:ASN:CB	1:A:270:THR:HG23	2.34	0.57
1:A:346:LEU:HD23	1:A:346:LEU:N	2.19	0.57
1:A:791:LYS:CG	1:A:935:ILE:HG21	2.33	0.57
1:A:877:ASP:OD2	1:A:934:SER:HB3	2.04	0.57
1:A:916:THR:CG2	1:A:919:GLN:HG3	2.35	0.57
1:A:965:VAL:O	1:A:968:ILE:HG22	2.05	0.57
2:B:77:LEU:CD2	2:B:186:ILE:CD1	2.83	0.57
1:A:175:PRO:HG3	1:A:207:ARG:CG	2.33	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:356:THR:OG1	1:A:373:VAL:HG11	2.05	0.57
1:A:442:PHE:CE1	1:A:466:LEU:CD1	2.87	0.57
1:A:254:PHE:HD2	1:A:276:ILE:HD11	1.69	0.57
1:A:451:VAL:HG11	1:A:471:LEU:HD12	1.86	0.57
1:A:801:ILE:HG21	1:A:875:PHE:CE2	2.39	0.57
1:A:917:PHE:CE2	1:A:921:LEU:CD1	2.85	0.57
1:A:914:GLU:OE1	2:B:182:LYS:CD	2.53	0.57
1:A:175:PRO:CG	1:A:207:ARG:CD	2.83	0.57
1:A:124:PHE:HA	1:A:127:GLN:HG2	1.85	0.56
1:A:712:GLU:HG2	1:A:736:LYS:HE3	1.87	0.56
1:A:731:SER:CB	1:A:732:PRO:HD3	2.28	0.56
1:A:760:LEU:CD2	1:A:760:LEU:N	2.46	0.56
1:A:821:LEU:O	1:A:825:ILE:HG13	2.04	0.56
1:A:865:GLN:HE22	1:A:1031:LEU:HD23	1.70	0.56
2:B:32:ARG:CZ	2:B:34:LEU:HG	2.28	0.56
2:B:34:LEU:CD2	2:B:34:LEU:N	2.63	0.56
1:A:48:MET:CE	1:A:246:LEU:CG	2.79	0.56
1:A:360:LEU:CD2	1:A:773:GLN:CD	2.72	0.56
1:A:123:ALA:O	1:A:127:GLN:HG2	2.06	0.56
1:A:241:THR:OG1	1:A:249:ARG:CD	2.54	0.56
1:A:315:PHE:CB	1:A:336:ILE:CD1	2.82	0.56
1:A:356:THR:CG2	1:A:777:ILE:HD12	2.33	0.56
1:A:605:ARG:CG	1:A:605:ARG:NH1	2.65	0.56
1:A:610:ASP:OD1	1:A:614:LYS:CE	2.52	0.56
1:A:654:ALA:CB	1:A:660:PRO:O	2.51	0.56
1:A:872:PHE:O	1:A:876:THR:HG23	2.05	0.56
1:A:874:GLY:HA2	1:A:934:SER:OG	2.05	0.56
2:B:137:PHE:HD1	2:B:139:GLN:HE21	1.54	0.56
2:B:175:GLY:C	2:B:176:LYS:CG	2.59	0.56
2:B:180:ILE:O	2:B:180:ILE:CD1	2.44	0.56
1:A:286:VAL:CB	1:A:735:LYS:CE	2.58	0.56
1:A:768:VAL:HG13	1:A:769:THR:N	2.20	0.56
1:A:978:LEU:CD2	1:A:990:PHE:CZ	2.79	0.56
1:A:994:ARG:HH21	2:B:75:ASP:HB2	1.69	0.56
1:A:146:ILE:O	1:A:149:VAL:HG23	1.97	0.56
1:A:312:GLY:O	1:A:333:PHE:HA	2.06	0.56
1:A:505:GLU:CG	1:A:506:ASP:H	2.06	0.56
2:B:266:ALA:O	2:B:269:VAL:HG22	2.05	0.56
1:A:69:THR:HG23	1:A:70:LYS:HD2	1.83	0.56
1:A:479:TYR:CA	1:A:482:ARG:HG2	2.36	0.56
1:A:649:THR:HG23	1:A:652:ASP:H	1.68	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:714:CYS:O	1:A:717:LEU:HB3	2.06	0.56
1:A:91:PRO:O	1:A:92:PRO:C	2.44	0.56
1:A:161:PHE:O	1:A:162:LYS:HG3	2.06	0.56
1:A:426:THR:HG1	1:A:533:LYS:H	1.53	0.56
1:A:182:ARG:NH2	1:A:198:ASP:OD2	2.38	0.56
1:A:212:ILE:HG13	1:A:265:GLY:C	2.19	0.56
1:A:455:ILE:HD12	1:A:456:VAL:O	2.00	0.56
1:A:855:ASN:HB2	1:A:857:PRO:HD2	1.88	0.56
1:A:1026:TRP:HH2	2:B:43:TYR:CG	2.24	0.56
1:A:520:PRO:CG	1:A:551:TYR:CE1	2.89	0.56
1:A:806:SER:HA	1:A:896:ARG:CD	2.36	0.56
1:A:826:PHE:CB	1:A:827:PRO:HD3	2.34	0.56
1:A:902:HIS:CE1	2:B:278:TYR:OH	2.59	0.56
1:A:1003:PRO:O	1:A:1007:LEU:HD13	2.05	0.56
1:A:1011:TYR:CZ	2:B:47:PHE:CZ	2.91	0.56
2:B:85:ARG:HB3	2:B:180:ILE:CG1	2.36	0.56
2:B:229:PHE:HA	2:B:230:PRO:C	2.26	0.56
1:A:100:LYS:HD3	1:A:103:ARG:HG3	1.87	0.56
1:A:117:ALA:CA	1:A:145:LEU:HD12	2.34	0.56
1:A:286:VAL:CG2	1:A:735:LYS:HG3	2.33	0.56
1:A:425:GLU:HB3	1:A:534:GLY:HA2	1.87	0.56
1:A:492:ASN:ND2	1:A:495:ASN:OD1	2.38	0.56
1:A:861:TYR:CE2	1:A:866:ILE:CG1	2.88	0.56
1:A:134:THR:OG1	1:A:138:ASN:HB2	2.06	0.55
1:A:412:THR:HG22	1:A:413:GLU:N	2.20	0.55
1:A:451:VAL:N	1:A:452:PRO:HD2	2.21	0.55
1:A:491:PHE:CD2	1:A:492:ASN:O	2.59	0.55
1:A:994:ARG:HH21	2:B:75:ASP:CB	2.17	0.55
1:A:48:MET:HE3	1:A:246:LEU:CD1	2.36	0.55
1:A:861:TYR:OH	1:A:866:ILE:HD11	2.06	0.55
1:A:124:PHE:CD1	1:A:134:THR:HG21	2.41	0.55
1:A:124:PHE:HD1	1:A:134:THR:HG21	1.71	0.55
1:A:240:CYS:SG	1:A:242:HIS:O	2.64	0.55
1:A:604:PRO:O	1:A:605:ARG:O	2.23	0.55
1:A:708:LEU:CD1	1:A:708:LEU:C	2.75	0.55
1:A:856:GLU:N	1:A:857:PRO:CD	2.70	0.55
2:B:33:THR:HG22	2:B:36:ARG:HD2	1.87	0.55
1:A:100:LYS:O	1:A:103:ARG:N	2.28	0.55
1:A:242:HIS:O	1:A:248:THR:HG22	2.06	0.55
1:A:473:LEU:HD21	1:A:479:TYR:CE2	2.42	0.55
1:A:916:THR:CG2	1:A:919:GLN:CD	2.75	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:978:LEU:HG	1:A:990:PHE:CG	2.41	0.55
2:B:78:LYS:HD3	2:B:78:LYS:N	2.21	0.55
2:B:258:VAL:HG12	2:B:259:VAL:N	2.20	0.55
1:A:146:ILE:CA	1:A:149:VAL:HG22	2.36	0.55
1:A:400:LEU:O	1:A:407:HIS:N	2.39	0.55
1:A:905:GLN:NE2	2:B:278:TYR:HA	2.22	0.55
2:B:77:LEU:HD21	2:B:186:ILE:CB	2.34	0.55
1:A:279:ILE:CG2	1:A:732:PRO:CG	2.83	0.55
1:A:787:TYR:HB2	1:A:946:ARG:HG2	1.88	0.55
1:A:922:TYR:CG	1:A:991:MET:CE	2.89	0.55
1:A:473:LEU:O	1:A:473:LEU:CG	2.54	0.55
1:A:581:ASP:C	1:A:583:GLU:H	2.09	0.55
1:A:750:ALA:CA	1:A:753:ASN:ND2	2.69	0.55
1:A:856:GLU:H	1:A:856:GLU:CD	2.10	0.55
1:A:858:LEU:HD23	1:A:1033:TYR:CD2	2.42	0.55
1:A:993:ILE:HD13	1:A:993:ILE:N	2.15	0.55
1:A:1000:VAL:HB	1:A:1001:PRO:CD	2.37	0.55
1:A:340:TYR:OH	1:A:796:LEU:HD23	2.06	0.55
1:A:538:PRO:C	1:A:540:ASP:N	2.60	0.55
1:A:146:ILE:HD13	1:A:146:ILE:C	2.27	0.55
1:A:870:GLN:HG2	1:A:938:CYS:HB3	1.88	0.55
1:A:1026:TRP:CG	1:A:1026:TRP:O	2.59	0.55
1:A:212:ILE:HD11	1:A:265:GLY:N	2.22	0.55
1:A:312:GLY:C	1:A:333:PHE:HD1	2.11	0.55
1:A:723:VAL:CG1	1:A:734:LEU:HD23	2.37	0.55
2:B:84:LEU:CD1	2:B:84:LEU:N	2.69	0.55
1:A:227:LEU:HD12	1:A:227:LEU:N	2.22	0.54
1:A:293:ILE:HD13	1:A:293:ILE:C	2.26	0.54
1:A:332:PHE:CD1	1:A:799:TYR:OH	2.52	0.54
1:A:443:LYS:CB	1:A:455:ILE:HG23	2.37	0.54
1:A:808:PRO:O	1:A:810:PRO:HD3	2.08	0.54
1:A:880:THR:CG2	1:A:997:TRP:CZ3	2.89	0.54
1:A:166:ILE:C	1:A:168:ALA:H	2.09	0.54
1:A:539:LEU:CD2	1:A:544:ARG:HG3	2.37	0.54
1:A:66:THR:HG21	1:A:266:LEU:HD11	1.88	0.54
1:A:166:ILE:HB	1:A:753:ASN:OD1	2.06	0.54
1:A:175:PRO:CD	1:A:207:ARG:CD	2.53	0.54
1:A:300:PHE:CD1	1:A:854:VAL:HG21	2.43	0.54
1:A:351:VAL:HG11	1:A:829:VAL:CG2	2.37	0.54
1:A:916:THR:HB	2:B:278:TYR:HB2	1.42	0.54
1:A:916:THR:HG1	2:B:278:TYR:CB	1.96	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:933:ILE:O	1:A:936:GLU:HG2	2.06	0.54
1:A:994:ARG:HH22	2:B:75:ASP:HB2	1.67	0.54
2:B:33:THR:CG2	2:B:36:ARG:HB2	2.36	0.54
1:A:288:ASN:O	1:A:289:GLU:HB2	2.08	0.54
1:A:343:GLU:OE1	1:A:820:GLU:CD	2.45	0.54
2:B:32:ARG:NH2	2:B:34:LEU:HG	2.22	0.54
2:B:183:MET:HE3	2:B:264:ILE:HD13	1.89	0.54
1:A:585:MET:SD	1:A:589:THR:CG2	2.96	0.54
1:A:924:GLN:HG2	1:A:928:TYR:CZ	2.42	0.54
2:B:82:VAL:HG22	2:B:281:LYS:CA	2.37	0.54
1:A:100:LYS:C	1:A:102:ALA:N	2.59	0.54
1:A:227:LEU:HD21	1:A:275:ILE:HD11	1.88	0.54
1:A:869:ILE:HG12	2:B:51:MET:HE1	1.85	0.54
1:A:116:ALA:CB	1:A:145:LEU:HD13	2.37	0.54
1:A:147:ALA:O	1:A:150:VAL:HG12	2.08	0.54
1:A:251:ILE:HD12	1:A:251:ILE:N	2.23	0.54
1:A:397:VAL:O	1:A:411:THR:HG22	2.08	0.54
1:A:917:PHE:O	1:A:921:LEU:HG	2.07	0.54
2:B:184:ASN:N	2:B:184:ASN:OD1	2.39	0.54
1:A:185:ASP:OD1	1:A:186:LYS:O	2.25	0.54
1:A:442:PHE:CE1	1:A:466:LEU:HD11	2.43	0.54
1:A:963:ILE:O	1:A:963:ILE:HD13	2.08	0.54
1:A:966:ILE:HG23	1:A:970:PHE:HD2	1.73	0.54
1:A:170:PHE:HZ	1:A:731:SER:HG	1.54	0.54
1:A:253:PHE:O	1:A:256:THR:HB	2.08	0.54
1:A:819:ILE:HG12	1:A:932:PHE:HE1	1.72	0.54
1:A:905:GLN:CG	2:B:278:TYR:CB	2.80	0.54
1:A:148:VAL:HA	1:A:151:VAL:HG12	1.90	0.54
1:A:196:VAL:HG23	1:A:268:VAL:O	2.07	0.54
1:A:212:ILE:HD11	1:A:265:GLY:H	1.73	0.54
1:A:279:ILE:CG2	1:A:732:PRO:HG2	2.28	0.54
1:A:479:TYR:CA	1:A:482:ARG:CG	2.85	0.54
1:A:711:VAL:O	1:A:715:GLN:HG3	2.08	0.54
1:A:858:LEU:HD13	1:A:858:LEU:C	2.28	0.54
2:B:185:ARG:HB3	2:B:231:TYR:CD2	2.43	0.54
1:A:45:LYS:HZ2	1:A:281:SER:HB2	1.74	0.53
1:A:209:PRO:O	1:A:254:PHE:CE1	2.59	0.53
1:A:328:ARG:HB2	1:A:328:ARG:CZ	2.38	0.53
1:A:400:LEU:CD2	1:A:427:TRP:CZ3	2.82	0.53
1:A:487:CYS:HB2	1:A:582:VAL:HG23	1.89	0.53
1:A:674:ILE:HG21	1:A:699:PHE:CD2	2.43	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:791:LYS:HG3	1:A:935:ILE:HG21	1.90	0.53
2:B:183:MET:HE1	2:B:264:ILE:HD12	1.90	0.53
1:A:303:ILE:O	1:A:307:LEU:HD23	2.07	0.53
1:A:978:LEU:HD11	1:A:990:PHE:CD1	2.43	0.53
1:A:367:VAL:HG12	1:A:369:ASN:O	2.08	0.53
1:A:81:LEU:HD23	1:A:81:LEU:C	2.28	0.53
1:A:350:THR:HG23	1:A:351:VAL:N	2.24	0.53
1:A:392:GLN:O	1:A:393:ASN:CB	2.57	0.53
1:A:420:PHE:HZ	1:A:427:TRP:CZ3	2.26	0.53
1:A:806:SER:HA	1:A:896:ARG:NE	2.22	0.53
2:B:234:LYS:O	2:B:238:PRO:HD3	2.08	0.53
1:A:311:PHE:O	1:A:314:THR:HG22	2.07	0.53
1:A:545:GLU:C	1:A:548:GLN:HB2	2.28	0.53
1:A:741:VAL:CG1	1:A:759:LEU:CD2	2.86	0.53
2:B:84:LEU:HD23	2:B:179:PHE:CD1	2.44	0.53
1:A:116:ALA:HB3	1:A:145:LEU:HD13	1.90	0.53
1:A:328:ARG:HA	1:A:328:ARG:HH11	1.73	0.53
1:A:943:VAL:CG1	1:A:964:LEU:CD1	2.79	0.53
2:B:69:TYR:HE1	2:B:235:LYS:HZ2	1.56	0.53
2:B:84:LEU:HD23	2:B:179:PHE:HD1	1.73	0.53
2:B:190:LEU:C	2:B:191:PRO:O	2.42	0.53
1:A:222:VAL:O	1:A:233:PRO:HA	2.09	0.53
1:A:470:GLU:OE2	1:A:475:ASN:HA	2.09	0.53
1:A:819:ILE:HG12	1:A:932:PHE:CD1	2.43	0.53
1:A:921:LEU:O	1:A:925:TYR:CD2	2.62	0.53
2:B:137:PHE:HD1	2:B:139:GLN:NE2	2.07	0.53
2:B:146:ASN:C	2:B:147:HIS:O	2.46	0.53
1:A:294:ALA:O	1:A:298:GLU:HG3	2.09	0.53
1:A:318:VAL:HG23	1:A:319:ALA:N	2.24	0.53
1:A:523:VAL:CG2	1:A:565:CYS:SG	2.96	0.53
1:A:527:CYS:SG	1:A:594:PHE:HB2	2.49	0.53
1:A:879:PHE:CD1	1:A:889:PRO:HB3	2.43	0.53
1:A:49:GLU:HG2	1:A:50:ILE:H	1.74	0.53
1:A:270:THR:CG2	1:A:271:GLY:N	2.71	0.53
1:A:291:THR:HG22	1:A:292:PRO:CD	2.39	0.53
1:A:567:LEU:HD12	1:A:592:LEU:HD22	1.86	0.53
1:A:625:VAL:CG1	1:A:707:LYS:HG3	2.39	0.53
1:A:708:LEU:HD13	1:A:708:LEU:C	2.27	0.53
1:A:1026:TRP:HE1	2:B:40:ILE:HD12	1.73	0.53
2:B:45:VAL:O	2:B:49:VAL:CG2	2.57	0.53
1:A:113:MET:HB2	1:A:149:VAL:CG1	2.39	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:340:TYR:N	1:A:340:TYR:CD1	2.75	0.53
1:A:791:LYS:C	1:A:794:PRO:HD2	2.28	0.53
2:B:85:ARG:O	2:B:86:PRO:C	2.46	0.53
1:A:53:HIS:CB	1:A:251:ILE:HD11	2.37	0.52
1:A:424:SER:OG	1:A:426:THR:N	2.38	0.52
1:A:711:VAL:HG13	1:A:721:VAL:HG21	1.89	0.52
1:A:795:GLU:HB3	1:A:816:ILE:CD1	2.37	0.52
2:B:74:GLN:OE1	2:B:187:VAL:CG1	2.57	0.52
2:B:78:LYS:HG2	2:B:79:SER:N	2.24	0.52
1:A:212:ILE:CG1	1:A:265:GLY:CA	2.85	0.52
1:A:601:ILE:HD12	1:A:602:ASP:N	2.15	0.52
1:A:947:LYS:HB3	1:A:947:LYS:HZ3	1.75	0.52
1:A:170:PHE:HZ	1:A:731:SER:HB3	1.75	0.52
1:A:216:GLN:O	1:A:216:GLN:HG3	2.10	0.52
1:A:332:PHE:CE1	1:A:799:TYR:OH	2.56	0.52
1:A:387:THR:O	1:A:726:ASP:OD2	2.27	0.52
2:B:236:ALA:O	2:B:237:GLN:CG	2.55	0.52
1:A:353:LEU:CB	1:A:370:LEU:HD11	2.39	0.52
1:A:1009:PHE:CD1	1:A:1009:PHE:O	2.61	0.52
1:A:202:MET:HG2	1:A:208:VAL:HG12	1.90	0.52
1:A:446:GLN:OE1	1:A:446:GLN:CA	2.50	0.52
1:A:517:LYS:HA	1:A:563:GLY:O	2.09	0.52
1:A:617:THR:HG22	1:A:618:ALA:H	1.75	0.52
1:A:670:ARG:O	1:A:694:HIS:HB3	2.10	0.52
1:A:805:VAL:HG13	1:A:807:VAL:N	2.25	0.52
1:A:947:LYS:HE3	1:A:958:PHE:O	2.10	0.52
1:A:1000:VAL:HB	1:A:1001:PRO:HD3	1.90	0.52
1:A:147:ALA:HA	1:A:150:VAL:HG12	1.90	0.52
1:A:582:VAL:O	1:A:582:VAL:HG12	2.09	0.52
1:A:741:VAL:CG1	1:A:759:LEU:HD23	2.40	0.52
1:A:777:ILE:HG23	1:A:778:PHE:N	2.24	0.52
1:A:861:TYR:CZ	1:A:866:ILE:HD11	2.45	0.52
2:B:187:VAL:HG13	2:B:187:VAL:O	2.07	0.52
1:A:768:VAL:CG1	1:A:769:THR:N	2.73	0.52
1:A:170:PHE:HZ	1:A:731:SER:CB	2.23	0.52
1:A:302:ASP:OD1	1:A:302:ASP:C	2.48	0.52
1:A:394:ARG:NH1	1:A:452:PRO:O	2.43	0.52
1:A:649:THR:HA	1:A:669:ALA:HB1	1.92	0.52
1:A:1026:TRP:HH2	2:B:43:TYR:CD1	2.27	0.52
1:A:141:LEU:HD23	1:A:145:LEU:HG	1.92	0.52
1:A:629:HIS:HB3	1:A:630:PRO:CD	2.40	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:947:LYS:HZ2	1:A:947:LYS:CB	2.22	0.52
1:A:53:HIS:CD2	1:A:245:PRO:CG	2.83	0.52
1:A:151:VAL:HG13	1:A:152:THR:N	2.25	0.52
2:B:82:VAL:HG21	2:B:281:LYS:HA	1.92	0.52
1:A:324:TYR:HD2	1:A:328:ARG:CG	2.20	0.51
1:A:442:PHE:HE2	1:A:467:LYS:HZ3	1.57	0.51
1:A:533:LYS:CG	1:A:534:GLY:H	2.22	0.51
1:A:708:LEU:O	1:A:708:LEU:CD1	2.53	0.51
1:A:814:ILE:HG23	1:A:815:THR:N	2.26	0.51
1:A:940:ILE:HD13	1:A:968:ILE:CD1	2.24	0.51
1:A:940:ILE:HD11	1:A:968:ILE:HD12	1.92	0.51
2:B:84:LEU:HD13	2:B:282:VAL:CG2	2.40	0.51
1:A:916:THR:CG2	2:B:278:TYR:HB2	2.37	0.51
2:B:32:ARG:O	2:B:32:ARG:CG	2.59	0.51
1:A:92:PRO:HG3	1:A:167:ILE:CG2	2.33	0.51
1:A:805:VAL:HG13	1:A:807:VAL:HB	1.93	0.51
1:A:891:LEU:O	1:A:895:LEU:HD23	2.10	0.51
1:A:911:TYR:HB2	1:A:913:GLN:NE2	2.25	0.51
1:A:891:LEU:O	1:A:895:LEU:HD21	2.10	0.51
1:A:163:SER:OG	1:A:368:LYS:HB3	2.11	0.51
1:A:178:ALA:O	1:A:189:ILE:N	2.39	0.51
1:A:295:ILE:O	1:A:295:ILE:CG2	2.59	0.51
1:A:441:ALA:O	1:A:456:VAL:HG13	2.11	0.51
1:A:539:LEU:HD22	1:A:539:LEU:C	2.31	0.51
1:A:631:ILE:O	1:A:631:ILE:HD12	2.10	0.51
1:A:783:LYS:O	1:A:946:ARG:CG	2.58	0.51
1:A:940:ILE:HD13	1:A:968:ILE:HG13	0.52	0.51
1:A:943:VAL:HG12	1:A:964:LEU:HD11	1.86	0.51
1:A:524:LEU:HD11	1:A:539:LEU:HD11	1.92	0.51
2:B:265:LEU:O	2:B:266:ALA:HB2	2.10	0.51
1:A:93:ARG:O	1:A:94:GLY:C	2.48	0.51
1:A:340:TYR:CE1	1:A:796:LEU:CD2	2.93	0.51
1:A:388:GLY:N	1:A:393:ASN:OD1	2.43	0.51
1:A:402:PHE:HB2	1:A:426:THR:HG21	1.93	0.51
1:A:821:LEU:CD1	1:A:821:LEU:N	2.73	0.51
1:A:916:THR:CG2	1:A:919:GLN:CG	2.88	0.51
1:A:1014:ILE:HG23	1:A:1015:ARG:N	2.26	0.51
2:B:77:LEU:HG	2:B:77:LEU:O	2.09	0.51
2:B:183:MET:HE1	2:B:264:ILE:HD13	1.90	0.51
1:A:46:LYS:HZ1	1:A:712:GLU:CD	2.03	0.51
1:A:376:LEU:HG	1:A:770:GLY:C	2.31	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:403:ASP:OD1	1:A:426:THR:OG1	2.14	0.51
1:A:524:LEU:HD22	1:A:527:CYS:SG	2.51	0.51
1:A:783:LYS:O	1:A:946:ARG:HG2	2.11	0.51
1:A:818:PHE:CD2	1:A:822:CYS:SG	3.02	0.51
1:A:927:CYS:O	1:A:930:VAL:CG2	2.56	0.51
1:A:1006:LEU:O	1:A:1010:VAL:HG23	2.10	0.51
1:A:124:PHE:CA	1:A:127:GLN:HG2	2.40	0.51
1:A:256:THR:HG22	1:A:257:MET:N	2.26	0.51
1:A:787:TYR:OH	1:A:827:PRO:HB2	2.11	0.51
1:A:87:ASN:CB	1:A:270:THR:CG2	2.89	0.51
1:A:92:PRO:O	1:A:93:ARG:C	2.49	0.51
1:A:650:VAL:HG23	1:A:664:VAL:CB	2.42	0.51
1:A:994:ARG:CZ	2:B:73:TYR:HB3	2.41	0.51
1:A:173:LEU:N	1:A:173:LEU:CD1	2.73	0.50
1:A:275:ILE:HG13	1:A:276:ILE:HG23	1.93	0.50
1:A:318:VAL:HG23	1:A:319:ALA:H	1.76	0.50
1:A:604:PRO:C	1:A:605:ARG:O	2.49	0.50
1:A:616:ARG:C	1:A:619:GLY:H	2.15	0.50
1:A:836:ALA:HB1	1:A:838:SER:O	2.12	0.50
1:A:940:ILE:HD11	1:A:968:ILE:CB	2.41	0.50
1:A:48:MET:HB2	1:A:680:LYS:HG3	1.92	0.50
1:A:127:GLN:C	1:A:129:SER:N	2.48	0.50
1:A:366:VAL:O	1:A:366:VAL:CG1	2.59	0.50
1:A:547:PHE:O	1:A:548:GLN:C	2.48	0.50
1:A:723:VAL:HG12	1:A:734:LEU:HD23	1.93	0.50
1:A:880:THR:HG21	1:A:1000:VAL:HG21	1.93	0.50
1:A:338:VAL:O	1:A:339:ALA:C	2.50	0.50
1:A:911:TYR:CB	1:A:913:GLN:HE21	2.24	0.50
1:A:962:ARG:O	1:A:966:ILE:HG13	2.12	0.50
1:A:175:PRO:CG	1:A:207:ARG:CG	2.89	0.50
1:A:805:VAL:HG11	1:A:807:VAL:HB	1.93	0.50
1:A:806:SER:HA	1:A:896:ARG:HD3	1.92	0.50
1:A:904:LEU:HB3	1:A:906:ASP:OD1	2.10	0.50
2:B:275:HIS:HD2	2:B:276:ASP:OD1	1.87	0.50
1:A:101:PHE:CZ	1:A:154:CYS:SG	3.02	0.50
1:A:147:ALA:O	1:A:151:VAL:HG12	2.11	0.50
1:A:248:THR:CB	1:A:250:ASN:OD1	2.59	0.50
1:A:353:LEU:HB3	1:A:370:LEU:CG	2.42	0.50
1:A:779:ASP:HA	1:A:782:LYS:HE3	1.92	0.50
1:A:336:ILE:O	1:A:340:TYR:CD1	2.65	0.50
1:A:463:THR:O	1:A:467:LYS:CD	2.60	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:477:MET:CG	1:A:478:GLY:N	2.74	0.50
1:A:580:PHE:HB3	1:A:587:PHE:HE2	1.74	0.50
1:A:396:THR:HG22	1:A:397:VAL:N	2.26	0.50
1:A:511:ARG:HD2	1:A:569:LEU:O	2.11	0.50
1:A:787:TYR:CZ	1:A:827:PRO:HB2	2.47	0.50
1:A:911:TYR:HB2	1:A:913:GLN:HE21	1.76	0.50
1:A:49:GLU:CG	1:A:50:ILE:N	2.74	0.50
1:A:133:LEU:C	1:A:135:THR:N	2.66	0.50
1:A:830:SER:HB2	1:A:964:LEU:HD12	1.93	0.50
1:A:872:PHE:HB3	2:B:55:PHE:CD1	2.47	0.50
1:A:915:TRP:CZ2	2:B:77:LEU:HB2	2.46	0.50
2:B:33:THR:O	2:B:37:TRP:HD1	1.86	0.50
1:A:166:ILE:O	1:A:168:ALA:N	2.45	0.49
1:A:507:PRO:O	1:A:510:PRO:HD3	2.12	0.49
1:A:772:GLU:C	1:A:774:GLY:N	2.65	0.49
1:A:781:LEU:HD23	1:A:781:LEU:O	2.12	0.49
1:A:823:THR:HG21	1:A:932:PHE:CZ	2.46	0.49
1:A:1013:GLU:O	1:A:1017:LEU:CD1	2.48	0.49
1:A:113:MET:HE1	1:A:148:VAL:HB	1.94	0.49
1:A:353:LEU:CB	1:A:370:LEU:HG	2.42	0.49
1:A:433:VAL:HG11	1:A:564:PHE:HB3	1.93	0.49
1:A:434:LEU:CD2	1:A:564:PHE:CE2	2.95	0.49
1:A:491:PHE:CE2	1:A:492:ASN:O	2.65	0.49
1:A:674:ILE:HG23	1:A:674:ILE:O	2.12	0.49
1:A:868:ALA:O	1:A:872:PHE:HD1	1.94	0.49
1:A:194:LEU:HD12	1:A:209:PRO:HB2	1.94	0.49
1:A:388:GLY:C	1:A:726:ASP:OD1	2.50	0.49
1:A:540:ASP:N	1:A:540:ASP:OD1	2.45	0.49
1:A:662:ASP:O	1:A:664:VAL:C	2.51	0.49
1:A:816:ILE:O	1:A:820:GLU:HG2	2.12	0.49
2:B:82:VAL:CG2	2:B:281:LYS:CA	2.90	0.49
2:B:149:LYS:NZ	2:B:236:ALA:HB1	2.28	0.49
2:B:232:TYR:HB2	2:B:237:GLN:CD	2.32	0.49
1:A:487:CYS:HB2	1:A:582:VAL:CG2	2.41	0.49
1:A:608:VAL:HB	1:A:609:PRO:HD3	1.93	0.49
1:A:750:ALA:CA	1:A:753:ASN:HD21	2.23	0.49
1:A:788:THR:CG2	1:A:789:LEU:N	2.75	0.49
2:B:229:PHE:CB	2:B:230:PRO:HA	2.40	0.49
1:A:524:LEU:O	1:A:524:LEU:HD13	2.12	0.49
1:A:623:ILE:HG23	1:A:697:MET:CG	2.38	0.49
1:A:759:LEU:CD2	1:A:759:LEU:N	2.75	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:787:TYR:CE1	1:A:939:GLN:HG3	2.47	0.49
1:A:886:GLY:HA2	1:A:911:TYR:CE2	2.47	0.49
1:A:999:LEU:N	1:A:999:LEU:CD1	2.71	0.49
2:B:186:ILE:HG23	2:B:189:PHE:HB3	1.94	0.49
1:A:166:ILE:C	1:A:168:ALA:N	2.66	0.49
1:A:328:ARG:C	1:A:331:VAL:HG22	2.25	0.49
1:A:617:THR:C	1:A:619:GLY:N	2.65	0.49
1:A:820:GLU:O	1:A:825:ILE:HD11	2.12	0.49
2:B:81:GLY:O	2:B:184:ASN:OD1	2.29	0.49
1:A:210:ALA:HA	1:A:254:PHE:HB2	1.95	0.49
1:A:459:ASP:OD1	1:A:462:GLU:HG3	2.13	0.49
1:A:601:ILE:HD12	1:A:602:ASP:O	2.12	0.49
1:A:736:LYS:HG3	1:A:736:LYS:O	2.13	0.49
1:A:743:MET:HE3	1:A:762:ASP:C	2.32	0.49
1:A:291:THR:CG2	1:A:292:PRO:HD2	2.43	0.49
1:A:500:SER:O	1:A:514:LEU:HD12	2.13	0.49
1:A:794:PRO:HG3	1:A:870:GLN:CB	2.40	0.49
1:A:49:GLU:CG	1:A:50:ILE:H	2.26	0.49
1:A:466:LEU:HD22	1:A:466:LEU:O	2.10	0.49
1:A:581:ASP:OD1	1:A:583:GLU:CG	2.61	0.49
1:A:146:ILE:HA	1:A:149:VAL:HG22	1.95	0.49
1:A:486:VAL:CG2	1:A:487:CYS:N	2.76	0.49
1:A:166:ILE:CD1	1:A:167:ILE:H	2.13	0.48
1:A:222:VAL:HG21	1:A:224:ASN:HD21	1.77	0.48
1:A:533:LYS:HG2	1:A:534:GLY:H	1.77	0.48
1:A:873:ALA:CB	1:A:938:CYS:SG	3.01	0.48
1:A:939:GLN:OE1	1:A:939:GLN:HA	2.12	0.48
1:A:994:ARG:HH22	2:B:73:TYR:HB3	1.78	0.48
2:B:142:PHE:CZ	2:B:232:TYR:HE1	2.27	0.48
1:A:312:GLY:C	1:A:333:PHE:CD1	2.86	0.48
1:A:443:LYS:HB2	1:A:455:ILE:CG2	2.43	0.48
1:A:532:ILE:O	1:A:533:LYS:HB3	2.13	0.48
1:A:581:ASP:CG	1:A:583:GLU:HB2	2.26	0.48
1:A:708:LEU:CD2	1:A:736:LYS:HB2	2.43	0.48
1:A:797:THR:N	1:A:798:PRO:HD2	2.28	0.48
1:A:827:PRO:HD3	1:A:967:ALA:HB1	1.93	0.48
1:A:950:ARG:NH2	1:A:1020:ARG:CG	2.74	0.48
1:A:993:ILE:H	1:A:993:ILE:CD1	2.19	0.48
1:A:994:ARG:NH2	2:B:73:TYR:HB3	2.28	0.48
1:A:85:GLY:O	1:A:86:PRO:O	2.30	0.48
1:A:225:SER:HA	1:A:230:GLU:H	1.78	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:235:THR:HG21	1:A:249:ARG:NH1	2.28	0.48
1:A:322:ILE:HG23	1:A:324:TYR:CD1	2.48	0.48
1:A:381:VAL:CG2	1:A:382:ILE:N	2.75	0.48
1:A:387:THR:CG2	1:A:393:ASN:OD1	2.54	0.48
1:A:398:SER:HB2	1:A:601:ILE:HG22	1.84	0.48
1:A:407:HIS:HB3	1:A:420:PHE:CD2	2.48	0.48
1:A:473:LEU:HD11	1:A:479:TYR:OH	2.13	0.48
1:A:682:MET:HE2	1:A:682:MET:CA	2.27	0.48
1:A:994:ARG:NH2	2:B:75:ASP:CG	2.62	0.48
2:B:259:VAL:O	2:B:259:VAL:CG2	2.60	0.48
2:B:264:ILE:HG12	2:B:265:LEU:N	2.27	0.48
1:A:64:TYR:CE1	1:A:196:VAL:HG22	2.49	0.48
1:A:117:ALA:O	1:A:142:ALA:CB	2.62	0.48
1:A:455:ILE:HD12	1:A:456:VAL:C	2.32	0.48
1:A:869:ILE:CG1	2:B:51:MET:HE2	2.37	0.48
1:A:505:GLU:O	1:A:506:ASP:C	2.52	0.48
1:A:420:PHE:HZ	1:A:427:TRP:CH2	2.31	0.48
1:A:516:MET:CG	1:A:565:CYS:SG	3.01	0.48
1:A:887:TRP:CE2	1:A:899:TRP:HZ3	2.31	0.48
1:A:905:GLN:HG2	2:B:278:TYR:HB3	1.92	0.48
1:A:906:ASP:HA	2:B:83:THR:HG21	1.94	0.48
1:A:940:ILE:CD1	1:A:968:ILE:HD12	2.42	0.48
2:B:227:HIS:CE1	2:B:228:TYR:CE2	3.02	0.48
1:A:167:ILE:H	1:A:167:ILE:HG12	1.36	0.48
1:A:578:TYR:CE2	1:A:579:ALA:O	2.67	0.48
1:A:752:LYS:CB	1:A:752:LYS:HZ3	2.21	0.48
1:A:880:THR:HG23	1:A:997:TRP:HZ3	1.75	0.48
1:A:148:VAL:O	1:A:149:VAL:C	2.50	0.48
1:A:220:ARG:HH11	1:A:263:ALA:HB3	1.79	0.48
1:A:540:ASP:O	1:A:544:ARG:HG3	2.14	0.48
1:A:54:GLN:NE2	1:A:54:GLN:H	2.12	0.48
1:A:283:ALA:O	1:A:286:VAL:N	2.46	0.48
1:A:286:VAL:CG1	1:A:287:GLU:N	2.77	0.48
1:A:340:TYR:CE2	1:A:796:LEU:HD21	2.49	0.48
1:A:360:LEU:HD13	1:A:773:GLN:NE2	2.29	0.48
1:A:433:VAL:CG1	1:A:564:PHE:CD2	2.96	0.48
1:A:451:VAL:HG13	1:A:471:LEU:HD13	1.83	0.48
1:A:565:CYS:HB2	1:A:593:SER:O	2.14	0.48
1:A:904:LEU:CB	1:A:906:ASP:OD1	2.62	0.48
2:B:68:PRO:CD	2:B:69:TYR:CD2	2.97	0.48
1:A:70:LYS:O	1:A:181:ILE:HG22	2.13	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:166:ILE:HD11	1:A:167:ILE:HG12	1.94	0.48
1:A:167:ILE:HD13	1:A:284:SER:CB	2.44	0.48
1:A:390:LEU:O	1:A:608:VAL:HG21	2.14	0.48
1:A:799:TYR:O	1:A:802:TYR:HB3	2.14	0.48
1:A:823:THR:HG21	1:A:932:PHE:HZ	1.79	0.48
1:A:907:LEU:HD23	1:A:920:ARG:HD3	1.95	0.48
1:A:942:ASP:HA	1:A:945:ILE:HG12	1.96	0.48
2:B:127:GLY:O	2:B:128:SER:O	2.32	0.48
1:A:174:VAL:C	1:A:175:PRO:O	2.51	0.47
1:A:189:ILE:HB	1:A:193:GLN:OE1	2.14	0.47
1:A:388:GLY:HA3	1:A:393:ASN:OD1	2.12	0.47
1:A:443:LYS:HG3	1:A:455:ILE:HG21	1.91	0.47
1:A:564:PHE:HE1	1:A:598:VAL:CG1	2.20	0.47
1:A:806:SER:HA	1:A:896:ARG:HE	1.78	0.47
1:A:994:ARG:CD	2:B:73:TYR:CE1	2.91	0.47
2:B:77:LEU:CD2	2:B:186:ILE:CB	2.92	0.47
1:A:171:LYS:HE2	1:A:171:LYS:HB3	1.74	0.47
1:A:200:VAL:HG12	1:A:201:GLU:N	2.28	0.47
1:A:353:LEU:HB3	1:A:370:LEU:HD11	1.96	0.47
1:A:434:LEU:CD2	1:A:564:PHE:CZ	2.98	0.47
1:A:886:GLY:HA2	1:A:911:TYR:HE2	1.79	0.47
1:A:888:PHE:HZ	1:A:911:TYR:HH	1.59	0.47
1:A:918:GLY:HA3	2:B:276:ASP:HB3	1.96	0.47
1:A:90:ARG:CD	1:A:90:ARG:N	2.77	0.47
1:A:108:GLY:O	1:A:111:CYS:HB2	2.15	0.47
1:A:297:ILE:O	1:A:300:PHE:HB3	2.14	0.47
1:A:427:TRP:CZ2	1:A:431:CYS:SG	3.07	0.47
1:A:545:GLU:O	1:A:549:THR:OG1	2.32	0.47
1:A:644:SER:O	1:A:645:GLU:C	2.52	0.47
1:A:97:GLU:O	1:A:98:TYR:C	2.52	0.47
1:A:163:SER:O	1:A:164:THR:C	2.52	0.47
1:A:435:THR:HG23	1:A:436:LEU:N	2.30	0.47
1:A:565:CYS:HB3	1:A:594:PHE:HA	1.96	0.47
1:A:764:PHE:CE1	1:A:767:ILE:CD1	2.97	0.47
1:A:880:THR:CG2	1:A:997:TRP:HZ3	2.28	0.47
1:A:1017:LEU:H	1:A:1017:LEU:CD1	2.28	0.47
1:A:72:LEU:HD11	1:A:197:GLY:C	2.34	0.47
1:A:48:MET:HG2	1:A:680:LYS:CD	2.44	0.47
1:A:106:ALA:O	1:A:107:GLY:C	2.52	0.47
1:A:109:LEU:C	1:A:111:CYS:N	2.67	0.47
1:A:115:VAL:O	1:A:119:ILE:HG13	2.15	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:144:ALA:O	1:A:148:VAL:HG23	2.15	0.47
1:A:217:ALA:O	1:A:218:GLN:CB	2.63	0.47
1:A:232:GLU:HB2	1:A:233:PRO:HD2	1.96	0.47
1:A:268:VAL:HG23	1:A:269:ASN:OD1	2.15	0.47
1:A:442:PHE:CG	1:A:454:ARG:HD2	2.50	0.47
1:A:567:LEU:HD23	1:A:568:TYR:H	1.77	0.47
1:A:821:LEU:O	1:A:825:ILE:HG12	2.15	0.47
1:A:861:TYR:CE2	1:A:866:ILE:HG13	2.48	0.47
1:A:887:TRP:CZ2	1:A:907:LEU:HD23	2.49	0.47
1:A:946:ARG:NH1	1:A:1033:TYR:OH	2.47	0.47
1:A:1002:MET:HB3	1:A:1003:PRO:CD	2.43	0.47
1:A:1016:LYS:CA	1:A:1019:VAL:HG22	2.44	0.47
2:B:213:LEU:CD2	2:B:213:LEU:C	2.82	0.47
1:A:64:TYR:HB2	1:A:66:THR:HG22	1.97	0.47
1:A:203:LYS:HE2	1:A:206:ASP:CG	2.35	0.47
1:A:408:SER:O	1:A:420:PHE:HB3	2.14	0.47
1:A:657:LEU:C	1:A:659:VAL:HG23	2.35	0.47
1:A:706:GLN:HE21	1:A:706:GLN:HB2	1.38	0.47
1:A:772:GLU:C	1:A:774:GLY:H	2.18	0.47
1:A:827:PRO:HG3	1:A:967:ALA:HB1	1.95	0.47
1:A:905:GLN:O	1:A:916:THR:HA	2.14	0.47
1:A:175:PRO:HG3	1:A:207:ARG:CD	2.45	0.47
1:A:391:THR:HA	1:A:604:PRO:CA	2.38	0.47
1:A:413:GLU:HG2	1:A:414:ASP:OD1	2.15	0.47
1:A:486:VAL:HG23	1:A:487:CYS:SG	2.55	0.47
1:A:487:CYS:SG	1:A:580:PHE:HB2	2.55	0.47
1:A:463:THR:O	1:A:467:LYS:HD3	2.14	0.47
1:A:100:LYS:HD3	1:A:100:LYS:HA	1.50	0.46
1:A:177:GLN:HE22	1:A:188:GLN:HE22	1.62	0.46
1:A:339:ALA:CB	1:A:796:LEU:CD1	2.78	0.46
1:A:425:GLU:CB	1:A:534:GLY:HA2	2.44	0.46
1:A:708:LEU:HD13	1:A:712:GLU:HG3	1.96	0.46
1:A:806:SER:CB	1:A:896:ARG:HE	2.27	0.46
1:A:858:LEU:CD2	1:A:1033:TYR:CD2	2.98	0.46
1:A:858:LEU:C	1:A:858:LEU:CD1	2.83	0.46
1:A:336:ILE:CG2	1:A:336:ILE:O	2.64	0.46
1:A:356:THR:O	1:A:360:LEU:CD2	2.63	0.46
1:A:400:LEU:HD23	1:A:430:LEU:HD21	1.98	0.46
1:A:433:VAL:HG11	1:A:564:PHE:CD2	2.51	0.46
1:A:501:ILE:HD11	1:A:587:PHE:CE2	2.50	0.46
1:A:532:ILE:O	1:A:532:ILE:CG2	2.60	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:608:VAL:O	1:A:612:VAL:HG23	2.16	0.46
1:A:763:ASN:ND2	1:A:765:ALA:HB3	2.30	0.46
1:A:501:ILE:HD13	1:A:580:PHE:CD1	2.50	0.46
1:A:787:TYR:HE1	1:A:943:VAL:HG22	1.78	0.46
1:A:1019:VAL:HG23	1:A:1020:ARG:CA	2.45	0.46
2:B:213:LEU:HA	2:B:251:ASN:HB3	1.98	0.46
1:A:124:PHE:CD1	1:A:134:THR:CG2	2.98	0.46
1:A:794:PRO:CG	1:A:870:GLN:HB2	2.40	0.46
1:A:927:CYS:C	1:A:930:VAL:HG22	2.34	0.46
2:B:57:LEU:HD23	2:B:57:LEU:C	2.35	0.46
2:B:82:VAL:CG2	2:B:281:LYS:HA	2.45	0.46
2:B:177:PRO:HD3	2:B:288:ILE:CD1	2.46	0.46
1:A:215:LEU:C	1:A:215:LEU:HD13	2.36	0.46
1:A:358:LYS:O	1:A:358:LYS:HG3	2.13	0.46
1:A:761:ASP:OD1	1:A:763:ASN:CB	2.50	0.46
1:A:785:ILE:O	1:A:788:THR:HG22	2.15	0.46
1:A:940:ILE:HD11	1:A:968:ILE:HB	1.98	0.46
1:A:1011:TYR:CE1	2:B:47:PHE:CD2	2.97	0.46
2:B:32:ARG:HH21	2:B:34:LEU:HG	1.80	0.46
2:B:278:TYR:HA	2:B:281:LYS:O	2.16	0.46
1:A:339:ALA:O	1:A:796:LEU:HD11	2.15	0.46
1:A:451:VAL:CG1	1:A:452:PRO:HD2	2.43	0.46
1:A:539:LEU:C	1:A:539:LEU:CD2	2.84	0.46
1:A:787:TYR:HE1	1:A:943:VAL:CG2	2.29	0.46
1:A:821:LEU:CD1	1:A:821:LEU:H	2.28	0.46
1:A:1015:ARG:HE	1:A:1031:LEU:CB	2.27	0.46
1:A:113:MET:HB2	1:A:149:VAL:HG12	1.96	0.46
1:A:311:PHE:HA	1:A:314:THR:CG2	2.46	0.46
1:A:699:PHE:CE2	1:A:710:ILE:HD12	2.50	0.46
1:A:119:ILE:HG23	1:A:334:MET:HE2	1.87	0.46
1:A:328:ARG:NH1	1:A:328:ARG:CB	2.79	0.46
1:A:349:VAL:HG12	1:A:353:LEU:HD13	1.98	0.46
2:B:231:TYR:CE2	2:B:233:GLY:HA2	2.51	0.46
1:A:180:VAL:O	1:A:180:VAL:HG23	2.14	0.46
1:A:530:ILE:O	1:A:536:GLU:HA	2.16	0.46
1:A:547:PHE:HE1	1:A:597:LEU:HD21	1.80	0.46
1:A:547:PHE:C	1:A:549:THR:N	2.69	0.46
1:A:598:VAL:O	1:A:598:VAL:HG13	2.15	0.46
2:B:212:PRO:O	2:B:253:PRO:HG2	2.16	0.46
1:A:41:LEU:CD2	1:A:42:GLU:HG2	2.44	0.45
1:A:400:LEU:HD12	1:A:400:LEU:H	1.67	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:670:ARG:NE	1:A:695:PRO:HG2	2.29	0.45
1:A:876:THR:HG21	1:A:1004:PHE:CE1	2.51	0.45
1:A:914:GLU:C	2:B:184:ASN:HB3	2.32	0.45
2:B:84:LEU:HG	2:B:181:ILE:HA	1.98	0.45
2:B:213:LEU:HD11	2:B:260:ILE:HD11	1.86	0.45
1:A:147:ALA:O	1:A:150:VAL:CG1	2.64	0.45
1:A:194:LEU:CD1	1:A:209:PRO:HB2	2.45	0.45
1:A:489:ILE:HD12	1:A:499:LEU:HD21	1.98	0.45
1:A:559:GLU:HB3	1:A:599:SER:HB2	1.97	0.45
1:A:670:ARG:O	1:A:695:PRO:HD2	2.16	0.45
2:B:60:TYR:O	2:B:64:ARG:HG3	2.15	0.45
2:B:83:THR:O	2:B:84:LEU:HD12	2.15	0.45
1:A:141:LEU:HD23	1:A:141:LEU:O	2.16	0.45
1:A:282:LEU:HG	1:A:282:LEU:O	2.17	0.45
1:A:353:LEU:HB2	1:A:370:LEU:HD21	1.98	0.45
1:A:388:GLY:O	1:A:726:ASP:OD1	2.34	0.45
1:A:477:MET:O	1:A:481:GLU:HG2	2.15	0.45
1:A:904:LEU:HD12	1:A:904:LEU:N	2.31	0.45
2:B:45:VAL:O	2:B:49:VAL:CB	2.62	0.45
2:B:149:LYS:HZ2	2:B:236:ALA:HB1	1.81	0.45
1:A:158:TYR:O	1:A:161:PHE:N	2.50	0.45
1:A:316:PHE:CD2	1:A:329:ALA:HB1	2.52	0.45
1:A:674:ILE:HG21	1:A:699:PHE:CE2	2.51	0.45
1:A:783:LYS:C	1:A:831:LEU:HD23	2.37	0.45
1:A:253:PHE:CE2	1:A:275:ILE:HD13	2.49	0.45
1:A:315:PHE:CZ	1:A:800:LEU:HD22	2.46	0.45
1:A:398:SER:HG	1:A:559:GLU:CD	2.14	0.45
1:A:855:ASN:HD22	1:A:857:PRO:N	2.15	0.45
1:A:1000:VAL:N	1:A:1001:PRO:HD2	2.32	0.45
2:B:84:LEU:HB2	2:B:86:PRO:CG	2.45	0.45
2:B:140:GLU:HA	2:B:140:GLU:OE1	2.16	0.45
1:A:97:GLU:C	1:A:99:VAL:N	2.70	0.45
1:A:182:ARG:CZ	1:A:198:ASP:OD2	2.64	0.45
1:A:739:ILE:HG23	1:A:739:ILE:O	2.16	0.45
1:A:322:ILE:O	1:A:322:ILE:CG1	2.46	0.45
1:A:350:THR:CG2	1:A:351:VAL:N	2.79	0.45
1:A:790:THR:O	1:A:793:ILE:HD13	2.17	0.45
1:A:833:TYR:CG	1:A:963:ILE:HG21	2.51	0.45
2:B:282:VAL:HG11	2:B:284:PHE:CE2	2.48	0.45
1:A:110:GLN:H	1:A:110:GLN:CD	2.20	0.45
1:A:180:VAL:CG1	1:A:194:LEU:HD22	2.46	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:339:ALA:HB3	1:A:796:LEU:HG	1.96	0.45
1:A:578:TYR:OH	1:A:586:ASN:CG	2.55	0.45
1:A:657:LEU:HD12	1:A:657:LEU:HA	1.81	0.45
1:A:699:PHE:CE2	1:A:710:ILE:CD1	3.00	0.45
1:A:743:MET:HB3	1:A:762:ASP:OD1	2.17	0.45
1:A:795:GLU:OE1	1:A:816:ILE:HG23	2.16	0.45
1:A:1030:GLU:CB	1:A:1031:LEU:HD12	2.45	0.45
1:A:241:THR:HG1	1:A:249:ARG:HD2	1.81	0.45
1:A:456:VAL:HG23	1:A:467:LYS:HE2	1.88	0.45
1:A:823:THR:CG2	1:A:932:PHE:HZ	2.29	0.45
1:A:940:ILE:HD12	1:A:940:ILE:HA	1.81	0.45
2:B:69:TYR:HE1	2:B:235:LYS:NZ	2.14	0.45
2:B:125:GLN:NE2	2:B:153:LYS:HG2	2.31	0.45
2:B:258:VAL:CG1	2:B:259:VAL:N	2.79	0.45
1:A:70:LYS:CB	1:A:183:ASP:O	2.51	0.45
1:A:650:VAL:CG2	1:A:664:VAL:CB	2.95	0.45
1:A:775:ARG:O	1:A:776:LEU:C	2.54	0.45
1:A:903:HIS:HB3	2:B:88:VAL:CG2	2.47	0.45
1:A:905:GLN:CG	2:B:278:TYR:HD1	2.08	0.45
1:A:1016:LYS:O	1:A:1017:LEU:C	2.54	0.45
2:B:139:GLN:HB2	2:B:232:TYR:CZ	2.42	0.45
1:A:122:ILE:O	1:A:126:ILE:HG13	2.17	0.44
1:A:511:ARG:CG	1:A:512:HIS:H	2.20	0.44
1:A:791:LYS:CE	1:A:935:ILE:HG22	2.47	0.44
1:A:840:ILE:O	1:A:840:ILE:HG22	2.16	0.44
1:A:887:TRP:CZ2	1:A:907:LEU:CD2	2.99	0.44
1:A:913:GLN:OE1	2:B:77:LEU:CD2	2.52	0.44
2:B:273:ASN:CB	2:B:274:PRO:CD	2.95	0.44
1:A:48:MET:CB	1:A:680:LYS:HG3	2.46	0.44
1:A:282:LEU:HD21	1:A:708:LEU:HG	1.98	0.44
1:A:399:HIS:CA	1:A:400:LEU:HD12	2.47	0.44
1:A:665:ASN:HD22	1:A:665:ASN:C	2.21	0.44
1:A:674:ILE:HG13	1:A:678:GLN:CD	2.38	0.44
2:B:84:LEU:CA	2:B:86:PRO:HD2	2.39	0.44
2:B:275:HIS:CG	2:B:276:ASP:N	2.64	0.44
1:A:53:HIS:CB	1:A:251:ILE:CD1	2.90	0.44
1:A:360:LEU:HD11	1:A:773:GLN:NE2	2.23	0.44
1:A:367:VAL:CG1	1:A:369:ASN:O	2.64	0.44
1:A:385:ASP:HB3	1:A:725:GLY:HA2	1.98	0.44
1:A:385:ASP:O	1:A:389:THR:HB	2.18	0.44
1:A:574:TYR:CD1	1:A:578:TYR:CD2	2.99	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:608:VAL:HB	1:A:609:PRO:CD	2.48	0.44
1:A:826:PHE:O	1:A:830:SER:OG	2.35	0.44
1:A:213:ARG:O	1:A:265:GLY:CA	2.65	0.44
1:A:275:ILE:HG13	1:A:276:ILE:N	2.31	0.44
1:A:283:ALA:HB1	1:A:735:LYS:HG2	1.99	0.44
1:A:400:LEU:HD23	1:A:430:LEU:CD2	2.47	0.44
1:A:400:LEU:HB2	1:A:402:PHE:CE2	2.52	0.44
1:A:673:VAL:HA	1:A:698:VAL:O	2.18	0.44
1:A:242:HIS:CG	1:A:243:GLU:N	2.86	0.44
1:A:282:LEU:O	1:A:283:ALA:HB2	2.17	0.44
1:A:497:PHE:HA	1:A:518:GLY:HA3	1.99	0.44
1:A:561:VAL:O	1:A:562:LEU:HD23	2.18	0.44
1:A:693:THR:CG2	1:A:694:HIS:N	2.81	0.44
1:A:921:LEU:HB3	1:A:925:TYR:CE2	2.52	0.44
1:A:1030:GLU:HB2	1:A:1031:LEU:CD1	2.47	0.44
1:A:60:LEU:HD22	1:A:213:ARG:CG	2.40	0.44
1:A:124:PHE:HD1	1:A:134:THR:CG2	2.29	0.44
1:A:230:GLU:OE2	1:A:628:ASP:HB2	2.18	0.44
1:A:312:GLY:O	1:A:333:PHE:HD1	2.01	0.44
1:A:693:THR:HG23	1:A:694:HIS:CE1	2.47	0.44
1:A:703:SER:N	1:A:706:GLN:HE21	2.10	0.44
1:A:741:VAL:CG1	1:A:759:LEU:HD21	2.47	0.44
2:B:74:GLN:HE21	2:B:74:GLN:HB3	1.43	0.44
2:B:84:LEU:HD13	2:B:282:VAL:HG22	1.98	0.44
2:B:149:LYS:O	2:B:237:GLN:HG2	2.18	0.44
1:A:92:PRO:O	1:A:93:ARG:O	2.35	0.44
1:A:469:SER:O	1:A:473:LEU:HB3	2.18	0.44
1:A:741:VAL:HG13	1:A:759:LEU:CD2	2.47	0.44
1:A:858:LEU:HD23	1:A:1033:TYR:HD2	1.81	0.44
1:A:185:ASP:OD1	1:A:186:LYS:N	2.51	0.44
1:A:818:PHE:CE1	1:A:988:PHE:CE1	3.06	0.44
1:A:933:ILE:O	1:A:934:SER:C	2.55	0.44
1:A:945:ILE:HB	1:A:1012:ASP:OD2	2.18	0.44
1:A:1012:ASP:CG	1:A:1016:LYS:HE3	2.38	0.44
1:A:1031:LEU:CD1	1:A:1031:LEU:H	2.30	0.44
2:B:85:ARG:HB3	2:B:180:ILE:HG13	2.00	0.44
2:B:266:ALA:HB3	2:B:269:VAL:HG22	1.99	0.44
1:A:149:VAL:CG2	1:A:150:VAL:H	2.29	0.44
1:A:811:LEU:HA	1:A:928:TYR:HD1	1.83	0.44
2:B:78:LYS:HG2	2:B:79:SER:H	1.83	0.44
2:B:85:ARG:H	2:B:180:ILE:CD1	2.26	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:283:ALA:C	1:A:735:LYS:HG2	2.39	0.43
1:A:446:GLN:HE21	1:A:455:ILE:CG2	2.22	0.43
1:A:519:ALA:HA	1:A:520:PRO:HD2	1.78	0.43
1:A:791:LYS:HG2	1:A:795:GLU:OE2	2.17	0.43
1:A:814:ILE:CD1	1:A:988:PHE:HA	2.48	0.43
1:A:966:ILE:HG23	1:A:970:PHE:CE2	2.53	0.43
1:A:307:LEU:N	1:A:307:LEU:CD2	2.81	0.43
1:A:315:PHE:HA	1:A:318:VAL:HG22	1.99	0.43
1:A:604:PRO:O	1:A:605:ARG:C	2.55	0.43
1:A:776:LEU:O	1:A:777:ILE:C	2.57	0.43
1:A:914:GLU:HB2	2:B:184:ASN:HA	2.00	0.43
1:A:994:ARG:CD	2:B:73:TYR:CZ	2.82	0.43
1:A:89:LEU:HD11	1:A:280:ALA:CB	2.48	0.43
1:A:180:VAL:HG11	1:A:194:LEU:CD2	2.48	0.43
1:A:328:ARG:CG	1:A:332:PHE:CE2	2.96	0.43
1:A:345:LEU:HD12	1:A:348:THR:CG2	2.48	0.43
1:A:501:ILE:CD1	1:A:580:PHE:CG	3.01	0.43
2:B:263:LYS:HB2	2:B:271:PHE:HE2	1.82	0.43
1:A:81:LEU:O	1:A:85:GLY:N	2.46	0.43
1:A:483:PHE:HD2	1:A:504:LEU:HA	1.83	0.43
1:A:533:LYS:HE3	1:A:533:LYS:HB2	1.62	0.43
1:A:640:VAL:HG23	1:A:642:ILE:H	1.83	0.43
1:A:251:ILE:CD1	1:A:251:ILE:N	2.82	0.43
1:A:276:ILE:HD12	1:A:276:ILE:C	2.38	0.43
1:A:399:HIS:CD2	1:A:407:HIS:O	2.71	0.43
1:A:451:VAL:HG21	1:A:470:GLU:HB3	1.99	0.43
1:A:483:PHE:CD2	1:A:504:LEU:HA	2.54	0.43
1:A:897:PRO:O	1:A:901:ASN:HB2	2.17	0.43
2:B:69:TYR:OH	2:B:144:ALA:HB2	2.18	0.43
2:B:227:HIS:NE2	2:B:228:TYR:CE2	2.87	0.43
1:A:54:GLN:NE2	1:A:54:GLN:N	2.66	0.43
1:A:164:THR:O	1:A:165:ASN:CG	2.56	0.43
1:A:180:VAL:HG13	1:A:194:LEU:HD21	2.00	0.43
1:A:283:ALA:C	1:A:286:VAL:HG23	2.38	0.43
1:A:807:VAL:CG2	1:A:808:PRO:HD2	2.43	0.43
2:B:48:TYR:HD1	2:B:48:TYR:HA	1.70	0.43
2:B:82:VAL:O	2:B:82:VAL:HG23	2.19	0.43
1:A:93:ARG:H	1:A:93:ARG:HG3	1.51	0.43
1:A:674:ILE:CG1	1:A:678:GLN:OE1	2.63	0.43
1:A:759:LEU:HD12	1:A:766:SER:HB2	1.97	0.43
1:A:1014:ILE:CG2	1:A:1015:ARG:N	2.82	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1026:TRP:O	1:A:1026:TRP:CD2	2.72	0.43
1:A:1031:LEU:HD12	1:A:1031:LEU:H	1.77	0.43
2:B:144:ALA:HB3	2:B:145:PRO:HD3	2.00	0.43
1:A:51:ASN:HD22	1:A:51:ASN:HA	1.62	0.43
1:A:215:LEU:HD12	1:A:216:GLN:HE21	1.84	0.43
1:A:332:PHE:HD1	1:A:799:TYR:OH	1.97	0.43
1:A:502:HIS:N	1:A:513:VAL:O	2.48	0.43
1:A:574:TYR:CE1	1:A:578:TYR:CE2	3.06	0.43
1:A:907:LEU:CD2	1:A:920:ARG:HD3	2.49	0.43
1:A:1017:LEU:HD12	1:A:1017:LEU:N	2.33	0.43
1:A:213:ARG:NH1	1:A:250:ASN:HB2	2.34	0.43
1:A:442:PHE:CD1	1:A:466:LEU:HD11	2.53	0.43
1:A:547:PHE:CG	1:A:548:GLN:N	2.86	0.43
1:A:750:ALA:C	1:A:753:ASN:ND2	2.72	0.43
1:A:1019:VAL:O	1:A:1020:ARG:C	2.58	0.43
1:A:53:HIS:CG	1:A:248:THR:HG21	2.54	0.43
1:A:60:LEU:HD11	1:A:64:TYR:HE2	1.83	0.43
1:A:119:ILE:HG22	1:A:334:MET:HB3	1.91	0.43
1:A:398:SER:HB3	1:A:600:MET:N	2.33	0.43
1:A:436:LEU:HD12	1:A:436:LEU:N	2.34	0.43
1:A:782:LYS:HG2	1:A:853:LEU:O	2.18	0.43
1:A:927:CYS:CA	1:A:930:VAL:HG22	2.47	0.43
1:A:202:MET:HE2	1:A:220:ARG:HH12	1.84	0.42
1:A:328:ARG:HD2	1:A:332:PHE:CZ	2.54	0.42
1:A:386:LYS:CD	1:A:636:ILE:HD12	2.22	0.42
1:A:600:MET:O	1:A:601:ILE:HG22	2.16	0.42
1:A:833:TYR:CD1	1:A:833:TYR:N	2.86	0.42
1:A:861:TYR:CE2	1:A:866:ILE:HG12	2.52	0.42
1:A:863:TYR:N	1:A:863:TYR:CD1	2.86	0.42
1:A:87:ASN:HD22	1:A:271:GLY:CA	2.28	0.42
1:A:147:ALA:CA	1:A:150:VAL:HG12	2.49	0.42
1:A:250:ASN:OD1	1:A:250:ASN:N	2.52	0.42
1:A:286:VAL:HG12	1:A:287:GLU:N	2.33	0.42
1:A:328:ARG:HH11	1:A:328:ARG:CA	2.32	0.42
1:A:398:SER:CB	1:A:559:GLU:OE2	2.66	0.42
1:A:442:PHE:CD2	1:A:456:VAL:HG22	2.54	0.42
1:A:455:ILE:CD1	1:A:455:ILE:C	2.53	0.42
1:A:708:LEU:CD1	1:A:712:GLU:CG	2.97	0.42
2:B:255:ASN:C	2:B:256:ARG:HG2	2.39	0.42
2:B:273:ASN:HB3	2:B:274:PRO:CD	2.41	0.42
1:A:341:VAL:HG23	1:A:341:VAL:O	2.19	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:726:ASP:OD1	1:A:743:MET:HG3	2.19	0.42
1:A:913:GLN:H	1:A:913:GLN:HG3	1.65	0.42
1:A:937:MET:HE2	1:A:937:MET:HB3	1.76	0.42
1:A:512:HIS:C	1:A:569:LEU:HD13	2.39	0.42
1:A:556:GLY:C	1:A:558:GLY:N	2.73	0.42
2:B:59:ILE:O	2:B:59:ILE:CG2	2.66	0.42
2:B:142:PHE:HE2	2:B:232:TYR:HA	1.84	0.42
1:A:60:LEU:CD1	1:A:64:TYR:HE2	2.33	0.42
1:A:315:PHE:CB	1:A:336:ILE:HD11	2.49	0.42
1:A:215:LEU:O	1:A:215:LEU:HD22	2.18	0.42
1:A:298:GLU:O	1:A:301:VAL:HG22	2.20	0.42
1:A:425:GLU:HG2	1:A:534:GLY:HA2	2.00	0.42
1:A:741:VAL:HG13	1:A:759:LEU:HD23	2.01	0.42
1:A:798:PRO:O	1:A:801:ILE:CG2	2.65	0.42
1:A:824:ASP:OD1	1:A:939:GLN:HG2	2.20	0.42
1:A:991:MET:SD	1:A:992:PRO:HD2	2.59	0.42
2:B:213:LEU:CG	2:B:249:LEU:HD22	2.47	0.42
1:A:105:LEU:O	1:A:110:GLN:HB3	2.19	0.42
1:A:157:TYR:O	1:A:157:TYR:CG	2.72	0.42
1:A:266:LEU:CD2	1:A:267:VAL:O	2.68	0.42
1:A:275:ILE:HA	1:A:278:ARG:HH11	1.83	0.42
1:A:564:PHE:CE1	1:A:598:VAL:CG1	2.98	0.42
1:A:783:LYS:HB3	1:A:831:LEU:HD23	2.02	0.42
1:A:787:TYR:CE1	1:A:943:VAL:CG2	2.98	0.42
1:A:922:TYR:HA	1:A:925:TYR:HD2	1.84	0.42
1:A:947:LYS:HE2	1:A:964:LEU:HD22	1.98	0.42
1:A:956:GLN:OE1	1:A:956:GLN:HA	2.20	0.42
1:A:985:PRO:HA	1:A:990:PHE:O	2.19	0.42
2:B:271:PHE:N	2:B:271:PHE:CD1	2.87	0.42
1:A:395:MET:SD	1:A:601:ILE:O	2.78	0.42
1:A:473:LEU:CD2	1:A:479:TYR:CZ	3.03	0.42
1:A:163:SER:HB3	1:A:368:LYS:CG	2.50	0.42
1:A:548:GLN:O	1:A:552:LEU:HG	2.19	0.42
1:A:574:TYR:OH	1:A:588:PRO:CD	2.67	0.42
2:B:186:ILE:HG23	2:B:189:PHE:CB	2.50	0.42
1:A:420:PHE:CG	1:A:421:ASP:N	2.88	0.42
1:A:884:GLN:O	2:B:71:PRO:HB2	2.20	0.42
1:A:141:LEU:HD23	1:A:141:LEU:C	2.40	0.41
1:A:727:GLY:H	1:A:730:ASP:CG	2.20	0.41
1:A:914:GLU:OE2	2:B:182:LYS:HE3	2.20	0.41
2:B:47:PHE:CD1	2:B:47:PHE:C	2.93	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:87:ASP:O	2:B:87:ASP:CG	2.57	0.41
1:A:60:LEU:HG	1:A:266:LEU:HD13	2.02	0.41
1:A:162:LYS:HB2	1:A:162:LYS:HE2	1.61	0.41
1:A:433:VAL:HG13	1:A:564:PHE:CD2	2.55	0.41
1:A:463:THR:O	1:A:467:LYS:HD2	2.21	0.41
1:A:582:VAL:O	1:A:582:VAL:CG1	2.67	0.41
1:A:818:PHE:HE1	1:A:988:PHE:CE1	2.39	0.41
2:B:185:ARG:HD3	2:B:240:TYR:CE1	2.54	0.41
2:B:265:LEU:N	2:B:265:LEU:CD1	2.72	0.41
1:A:218:GLN:C	1:A:218:GLN:CD	2.66	0.41
1:A:763:ASN:HD21	1:A:765:ALA:CA	2.32	0.41
1:A:783:LYS:CB	1:A:831:LEU:HD23	2.50	0.41
2:B:69:TYR:HD1	2:B:235:LYS:HG2	1.85	0.41
2:B:181:ILE:HG22	2:B:182:LYS:N	2.35	0.41
1:A:127:GLN:OE1	1:A:134:THR:HB	2.21	0.41
1:A:177:GLN:HE22	1:A:188:GLN:CD	2.23	0.41
1:A:216:GLN:O	1:A:216:GLN:CG	2.68	0.41
1:A:293:ILE:C	1:A:293:ILE:CD1	2.88	0.41
1:A:667:LYS:HA	1:A:667:LYS:HE2	2.02	0.41
1:A:809:LEU:O	1:A:928:TYR:CE1	2.73	0.41
1:A:943:VAL:O	1:A:947:LYS:HG3	2.21	0.41
1:A:95:THR:O	1:A:96:PRO:C	2.57	0.41
1:A:376:LEU:CB	1:A:770:GLY:O	2.69	0.41
1:A:463:THR:HG23	1:A:464:ALA:N	2.36	0.41
1:A:485:LYS:HE3	1:A:485:LYS:HB2	1.92	0.41
1:A:535:GLN:HG2	1:A:536:GLU:H	1.85	0.41
1:A:802:TYR:CZ	1:A:896:ARG:HD2	2.56	0.41
1:A:313:ALA:N	1:A:333:PHE:CD1	2.89	0.41
1:A:482:ARG:HG3	1:A:483:PHE:HD1	1.80	0.41
1:A:512:HIS:CD2	1:A:580:PHE:HE2	2.38	0.41
1:A:520:PRO:HG2	1:A:551:TYR:HE1	1.81	0.41
1:A:761:ASP:C	1:A:763:ASN:N	2.72	0.41
1:A:764:PHE:CD1	1:A:767:ILE:HD12	2.55	0.41
1:A:926:THR:O	1:A:930:VAL:HG13	2.20	0.41
1:A:73:SER:HB3	1:A:76:LEU:HG	2.01	0.41
1:A:180:VAL:CG1	1:A:194:LEU:HD21	2.50	0.41
1:A:246:LEU:HD23	1:A:246:LEU:HA	1.80	0.41
1:A:401:TRP:CD1	1:A:406:ILE:CD1	3.01	0.41
1:A:479:TYR:CG	1:A:482:ARG:HD3	2.56	0.41
1:A:708:LEU:HD21	1:A:736:LYS:HB2	2.01	0.41
1:A:883:ALA:HA	1:A:887:TRP:O	2.21	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:966:ILE:HG22	1:A:970:PHE:CD2	2.51	0.41
2:B:176:LYS:CA	2:B:288:ILE:HD13	2.51	0.41
1:A:48:MET:CG	1:A:49:GLU:N	2.77	0.41
1:A:81:LEU:O	1:A:81:LEU:CD2	2.60	0.41
1:A:259:LEU:O	1:A:259:LEU:HD13	2.21	0.41
1:A:360:LEU:HD13	1:A:363:LYS:CD	2.38	0.41
1:A:436:LEU:CD1	1:A:436:LEU:N	2.84	0.41
1:A:442:PHE:CZ	1:A:466:LEU:HD13	2.56	0.41
1:A:784:SER:HA	1:A:831:LEU:CD2	2.39	0.41
1:A:918:GLY:O	2:B:275:HIS:CE1	2.74	0.41
1:A:157:TYR:O	1:A:157:TYR:CD2	2.74	0.41
1:A:199:LEU:HD21	1:A:264:GLN:OE1	2.21	0.41
1:A:227:LEU:CD2	1:A:275:ILE:CD1	2.97	0.41
1:A:322:ILE:HG23	1:A:324:TYR:HD1	1.85	0.41
1:A:401:TRP:CZ2	1:A:404:ASN:HA	2.56	0.41
1:A:520:PRO:O	1:A:523:VAL:HG12	2.21	0.41
1:A:653:ILE:CG2	1:A:657:LEU:HD22	2.51	0.41
1:A:713:SER:HA	1:A:716:ARG:HG3	2.02	0.41
1:A:791:LYS:CE	1:A:939:GLN:NE2	2.82	0.41
1:A:831:LEU:N	1:A:831:LEU:HD12	2.36	0.41
1:A:1026:TRP:HH2	2:B:43:TYR:CD2	2.38	0.41
2:B:266:ALA:N	2:B:269:VAL:CG2	2.84	0.41
1:A:45:LYS:NZ	1:A:281:SER:HB2	2.35	0.41
1:A:48:MET:HE3	1:A:246:LEU:HD11	2.02	0.41
1:A:207:ARG:HE	1:A:207:ARG:HB2	1.60	0.41
1:A:412:THR:CG2	1:A:413:GLU:N	2.84	0.41
1:A:427:TRP:O	1:A:430:LEU:HB3	2.20	0.41
1:A:482:ARG:HG3	1:A:483:PHE:CE1	2.55	0.41
1:A:648:GLU:HB3	1:A:652:ASP:OD1	2.21	0.41
1:A:681:ASP:OD1	1:A:682:MET:CE	2.67	0.41
1:A:814:ILE:CG1	1:A:988:PHE:HD1	2.33	0.41
1:A:119:ILE:HG23	1:A:334:MET:HB3	1.92	0.40
1:A:208:VAL:HG22	1:A:256:THR:O	2.21	0.40
1:A:215:LEU:HD13	1:A:215:LEU:O	2.21	0.40
1:A:351:VAL:HG13	1:A:352:CYS:N	2.35	0.40
1:A:503:THR:O	1:A:503:THR:HG23	2.21	0.40
1:A:679:LEU:O	1:A:679:LEU:CD2	2.64	0.40
1:A:679:LEU:HD13	1:A:706:GLN:HG2	2.02	0.40
1:A:933:ILE:HA	1:A:936:GLU:HG2	2.02	0.40
1:A:146:ILE:C	1:A:146:ILE:CD1	2.90	0.40
1:A:181:ILE:HB	1:A:199:LEU:HB3	2.03	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:348:THR:HG23	1:A:349:VAL:N	2.37	0.40
1:A:791:LYS:HE2	1:A:935:ILE:HG22	2.02	0.40
1:A:806:SER:O	1:A:896:ARG:HG3	2.21	0.40
1:A:997:TRP:HA	1:A:997:TRP:CE3	2.57	0.40
2:B:125:GLN:HE22	2:B:153:LYS:HG2	1.86	0.40
1:A:72:LEU:CD2	1:A:198:ASP:OD1	2.59	0.40
1:A:244:SER:O	1:A:248:THR:HG23	2.22	0.40
1:A:401:TRP:HA	1:A:405:HIS:O	2.21	0.40
1:A:905:GLN:O	2:B:83:THR:CG2	2.69	0.40
2:B:210:GLY:O	2:B:211:PRO:C	2.59	0.40
1:A:66:THR:OG1	1:A:67:SER:N	2.55	0.40
1:A:87:ASN:CA	1:A:270:THR:CG2	2.99	0.40
1:A:219:GLY:O	1:A:261:GLY:CA	2.69	0.40
1:A:351:VAL:CG1	1:A:829:VAL:HG22	2.48	0.40
1:A:360:LEU:CG	1:A:773:GLN:CG	2.87	0.40
1:A:531:LEU:HD11	1:A:534:GLY:O	2.22	0.40
1:A:741:VAL:HG11	1:A:759:LEU:HD21	2.03	0.40
1:A:783:LYS:HB3	1:A:946:ARG:HG3	2.02	0.40
1:A:911:TYR:O	2:B:234:LYS:HB2	2.21	0.40
1:A:976:CYS:O	1:A:980:TYR:HD1	2.04	0.40
2:B:181:ILE:HG22	2:B:224:TYR:OH	2.21	0.40
2:B:212:PRO:HB2	2:B:253:PRO:CG	2.39	0.40
1:A:64:TYR:CE1	1:A:196:VAL:CG2	3.04	0.40
1:A:255:SER:HB2	1:A:276:ILE:HG12	2.03	0.40
1:A:831:LEU:CD1	1:A:831:LEU:N	2.84	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all EM entries.

The Analysed column shows the number of residues for which the backbone conformation was analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	991/1034 (96%)	840 (85%)	95 (10%)	56 (6%)	1 18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
2	B	163/290 (56%)	132 (81%)	16 (10%)	15 (9%)	1	11
All	All	1154/1324 (87%)	972 (84%)	111 (10%)	71 (6%)	3	17

All (71) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	86	PRO
1	A	92	PRO
1	A	93	ARG
1	A	94	GLY
1	A	128	ALA
1	A	163	SER
1	A	164	THR
1	A	165	ASN
1	A	175	PRO
1	A	219	GLY
1	A	283	ALA
1	A	344	GLY
1	A	375	THR
1	A	376	LEU
1	A	481	GLU
1	A	510	PRO
1	A	539	LEU
1	A	540	ASP
1	A	578	TYR
1	A	601	ILE
1	A	605	ARG
1	A	645	GLU
2	B	37	TRP
2	B	49	VAL
2	B	86	PRO
2	B	140	GLU
2	B	147	HIS
2	B	251	ASN
1	A	47	GLU
1	A	98	TYR
1	A	101	PHE
1	A	134	THR
1	A	161	PHE
1	A	284	SER
1	A	285	GLY
1	A	533	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	603	PRO
1	A	660	PRO
1	A	773	GLN
1	A	867	GLY
2	B	286	LEU
1	A	176	GLN
1	A	187	PHE
1	A	409	ALA
1	A	413	GLU
1	A	663	GLN
2	B	266	ALA
1	A	130	GLU
1	A	167	ILE
1	A	482	ARG
1	A	483	PHE
1	A	494	THR
1	A	547	PHE
1	A	1017	LEU
2	B	176	LYS
2	B	279	GLU
1	A	91	PRO
1	A	96	PRO
1	A	137	ASP
1	A	191	ALA
1	A	655	ALA
1	A	866	ILE
2	B	287	LYS
1	A	158	TYR
1	A	526	ARG
2	B	35	SER
2	B	252	VAL
2	B	276	ASP
1	A	184	GLY
1	A	604	PRO
2	B	253	PRO

5.3.2 Protein sidechains

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all EM entries.

The Analysed column shows the number of residues for which the sidechain conformation was

analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	840/869 (97%)	714 (85%)	126 (15%)	3	15
2	B	162/254 (64%)	129 (80%)	33 (20%)	1	7
All	All	1002/1123 (89%)	843 (84%)	159 (16%)	5	13

All (159) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	50	ILE
1	A	54	GLN
1	A	62	GLN
1	A	63	LYS
1	A	70	LYS
1	A	83	ARG
1	A	87	ASN
1	A	89	LEU
1	A	90	ARG
1	A	93	ARG
1	A	95	THR
1	A	98	TYR
1	A	100	LYS
1	A	109	LEU
1	A	111	CYS
1	A	122	ILE
1	A	126	ILE
1	A	127	GLN
1	A	135	THR
1	A	139	LEU
1	A	143	LEU
1	A	146	ILE
1	A	162	LYS
1	A	163	SER
1	A	164	THR
1	A	167	ILE
1	A	169	SER
1	A	170	PHE
1	A	171	LYS
1	A	173	LEU
1	A	176	GLN
1	A	183	ASP
1	A	186	LYS
1	A	203	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	218	GLN
1	A	235	THR
1	A	240	CYS
1	A	243	GLU
1	A	248	THR
1	A	259	LEU
1	A	272	ASP
1	A	293	ILE
1	A	302	ASP
1	A	307	LEU
1	A	309	ILE
1	A	310	LEU
1	A	314	THR
1	A	326	PHE
1	A	328	ARG
1	A	338	VAL
1	A	345	LEU
1	A	346	LEU
1	A	358	LYS
1	A	360	LEU
1	A	366	VAL
1	A	380	SER
1	A	393	ASN
1	A	394	ARG
1	A	398	SER
1	A	400	LEU
1	A	407	HIS
1	A	410	ASP
1	A	414	ASP
1	A	415	GLN
1	A	419	THR
1	A	439	ARG
1	A	446	GLN
1	A	453	LYS
1	A	455	ILE
1	A	459	ASP
1	A	466	LEU
1	A	467	LYS
1	A	480	ARG
1	A	506	ASP
1	A	508	ARG
1	A	526	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	532	ILE
1	A	533	LYS
1	A	539	LEU
1	A	549	THR
1	A	553	SER
1	A	600	MET
1	A	601	ILE
1	A	609	PRO
1	A	631	ILE
1	A	657	LEU
1	A	661	VAL
1	A	665	ASN
1	A	666	ARG
1	A	667	LYS
1	A	678	GLN
1	A	682	MET
1	A	689	GLU
1	A	692	ARG
1	A	697	MET
1	A	708	LEU
1	A	726	ASP
1	A	752	LYS
1	A	760	LEU
1	A	762	ASP
1	A	763	ASN
1	A	805	VAL
1	A	821	LEU
1	A	830	SER
1	A	845	PRO
1	A	847	ASN
1	A	849	LYS
1	A	856	GLU
1	A	884	GLN
1	A	885	GLU
1	A	892	CYS
1	A	906	ASP
1	A	913	GLN
1	A	916	THR
1	A	922	TYR
1	A	937	MET
1	A	960	ARG
1	A	963	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	968	ILE
1	A	993	ILE
1	A	999	LEU
1	A	1014	ILE
1	A	1015	ARG
1	A	1022	CYS
1	A	1029	GLN
1	A	1031	LEU
2	B	32	ARG
2	B	33	THR
2	B	34	LEU
2	B	42	LEU
2	B	48	TYR
2	B	49	VAL
2	B	60	TYR
2	B	61	VAL
2	B	69	TYR
2	B	72	ASP
2	B	78	LYS
2	B	83	THR
2	B	85	ARG
2	B	87	ASP
2	B	88	VAL
2	B	135	LYS
2	B	139	GLN
2	B	154	PHE
2	B	176	LYS
2	B	182	LYS
2	B	184	ASN
2	B	188	LYS
2	B	226	LEU
2	B	235	LYS
2	B	248	LYS
2	B	251	ASN
2	B	252	VAL
2	B	256	ARG
2	B	260	ILE
2	B	265	LEU
2	B	276	ASP
2	B	281	LYS
2	B	288	ILE

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (24)

such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	51	ASN
1	A	54	GLN
1	A	65	GLN
1	A	87	ASN
1	A	127	GLN
1	A	172	ASN
1	A	224	ASN
1	A	242	HIS
1	A	415	GLN
1	A	586	ASN
1	A	665	ASN
1	A	706	GLN
1	A	763	ASN
1	A	773	GLN
1	A	847	ASN
1	A	855	ASN
1	A	884	GLN
1	A	919	GLN
1	A	924	GLN
1	A	971	GLN
1	A	996	GLN
2	B	74	GLN
2	B	125	GLN
2	B	275	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](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

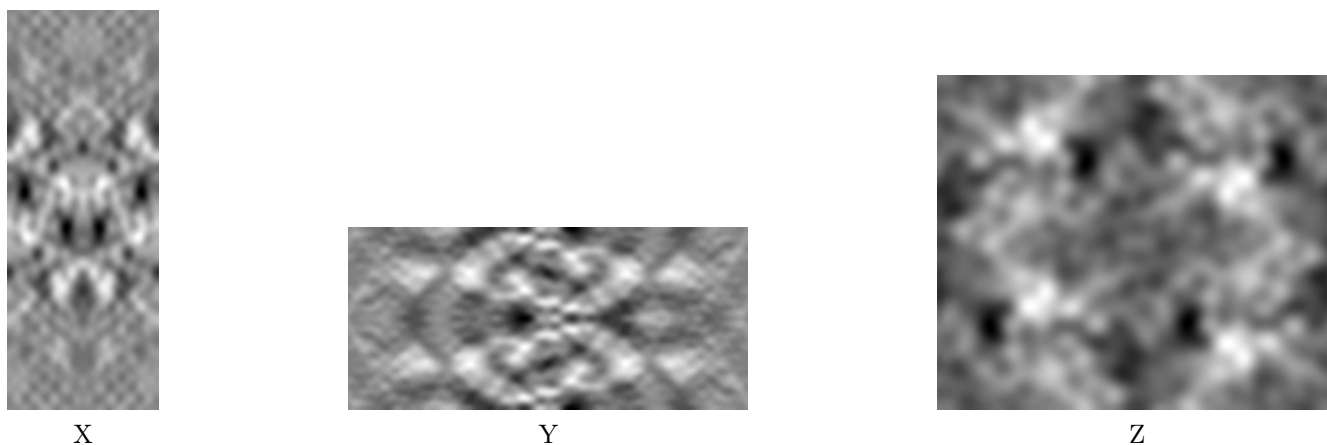
6 Map visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-2759. These allow visual inspection of the internal detail of the map and identification of artifacts.

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

6.1 Orthogonal projections [i](#)

6.1.1 Primary map



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

6.2 Central slices [i](#)

6.2.1 Primary map



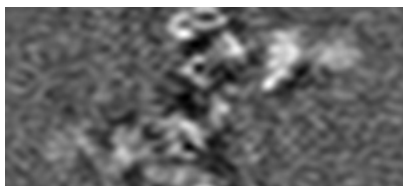
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

6.3 Largest variance slices [i](#)

6.3.1 Primary map



X Index: 54



Y Index: 10



Z Index: 77

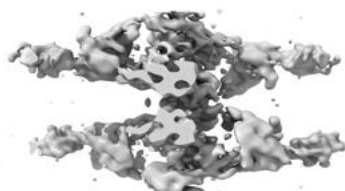
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

6.4 Orthogonal surface views [i](#)

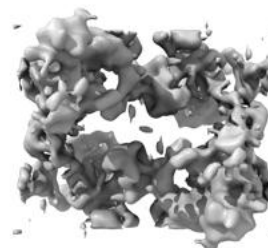
6.4.1 Primary map



X



Y



Z

The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 1.6. These images, in conjunction with the slice images, may facilitate assessment of whether an appropriate contour level has been provided.

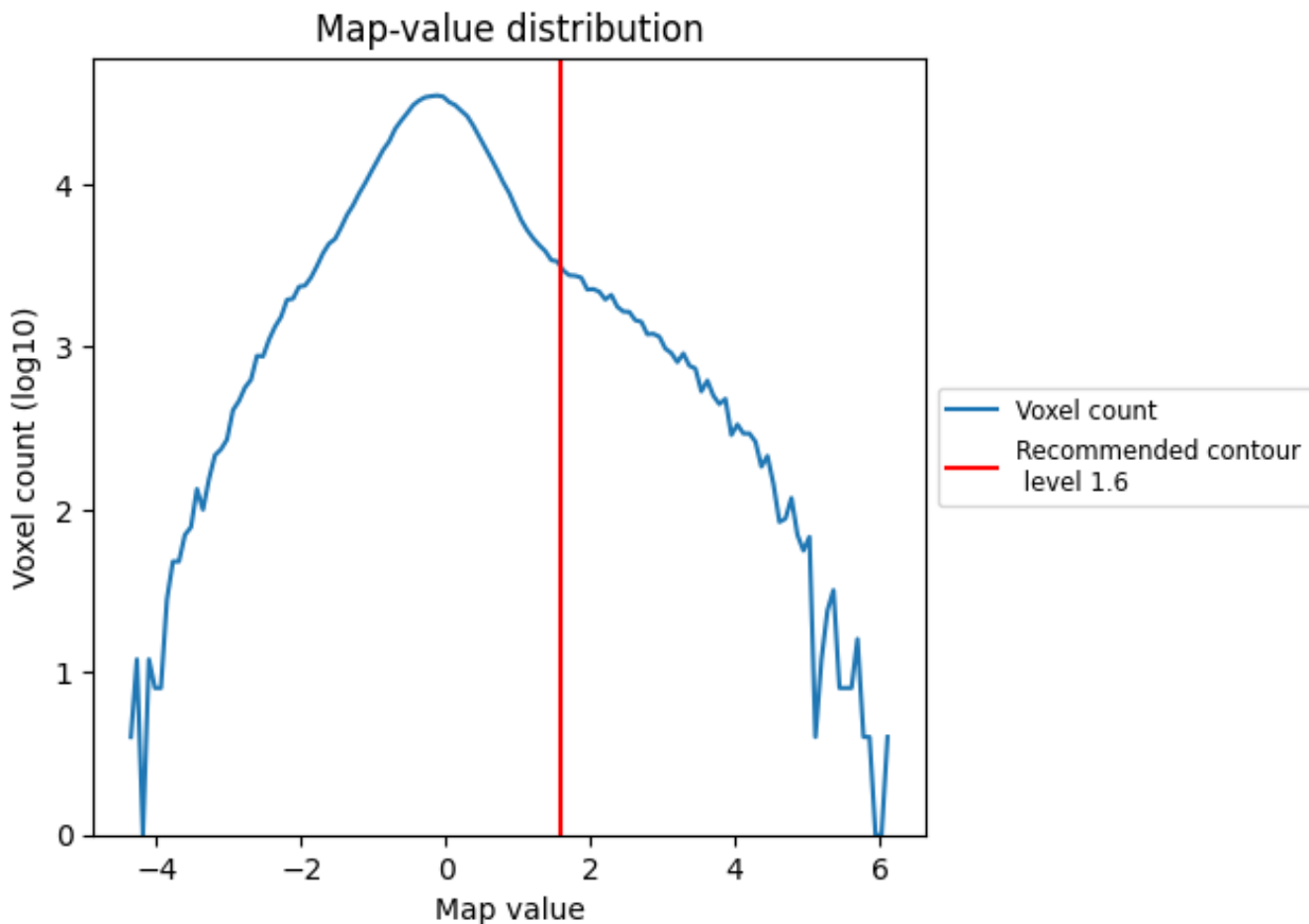
6.5 Mask visualisation

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

7 Map analysis [i](#)

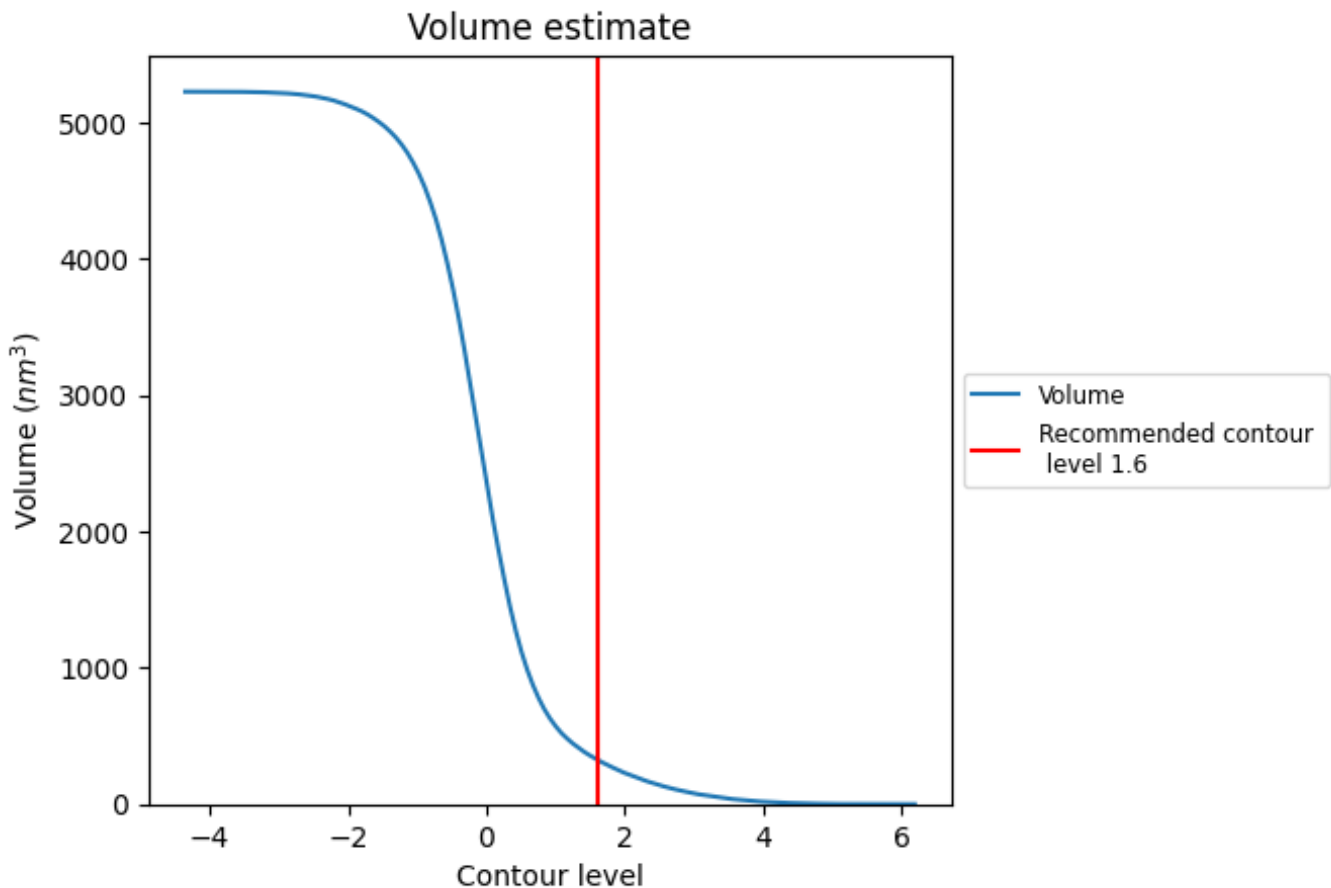
This section contains the results of statistical analysis of the map.

7.1 Map-value distribution [i](#)



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

7.2 Volume estimate [i](#)



The volume at the recommended contour level is 328 nm³; this corresponds to an approximate mass of 296 kDa.

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

7.3 Rotationally averaged power spectrum [i](#)

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

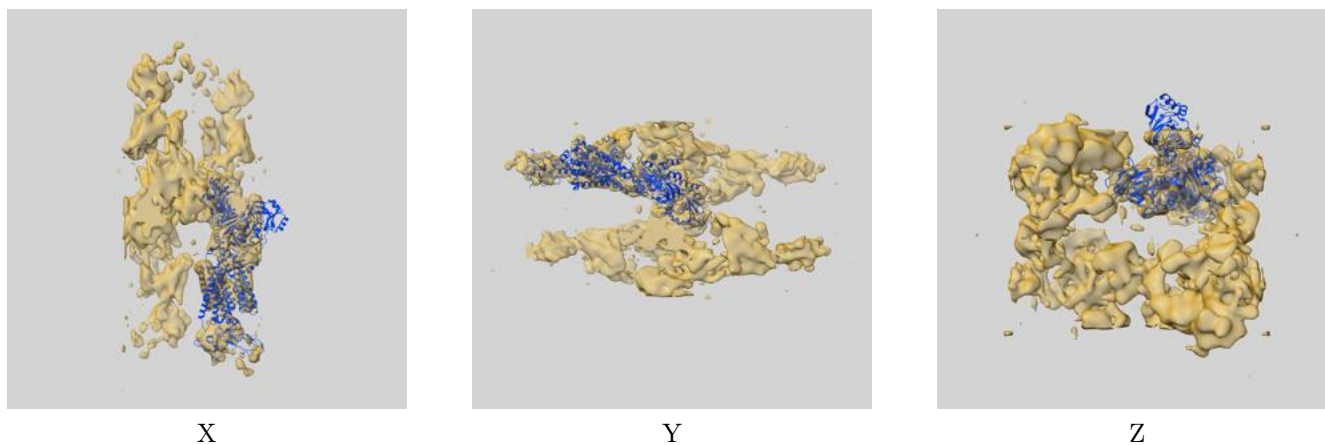
8 Fourier-Shell correlation

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

9 Map-model fit [i](#)

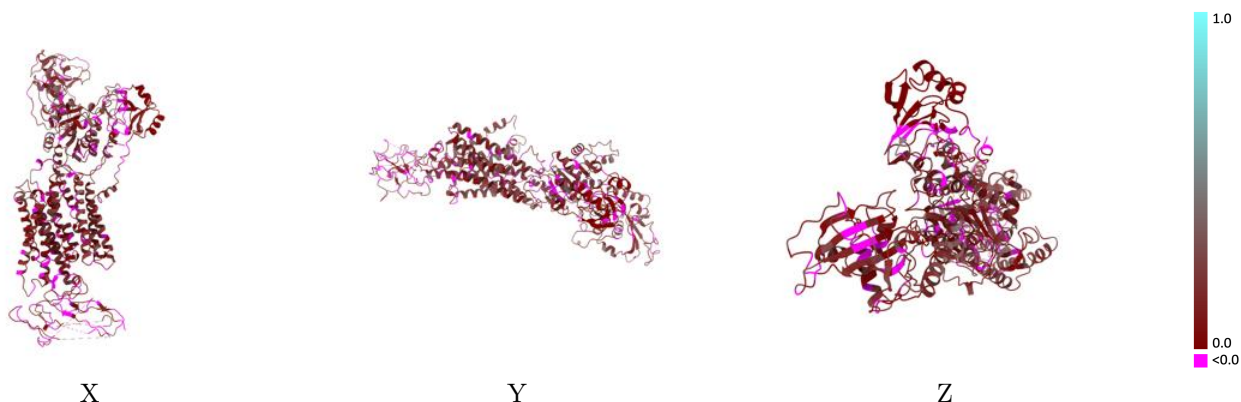
This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-2759 and PDB model 4UX1. Per-residue inclusion information can be found in section 3 on page 4.

9.1 Map-model overlay [i](#)



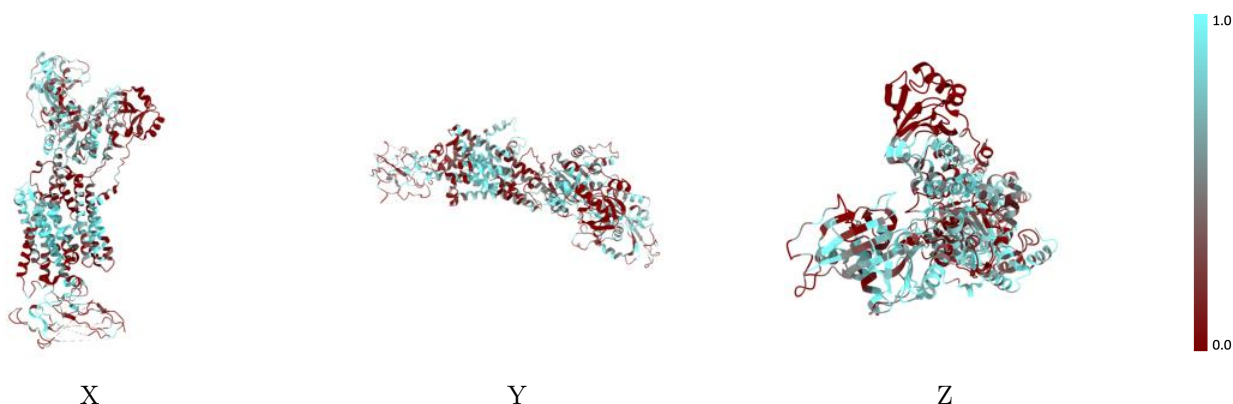
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 1.6 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

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



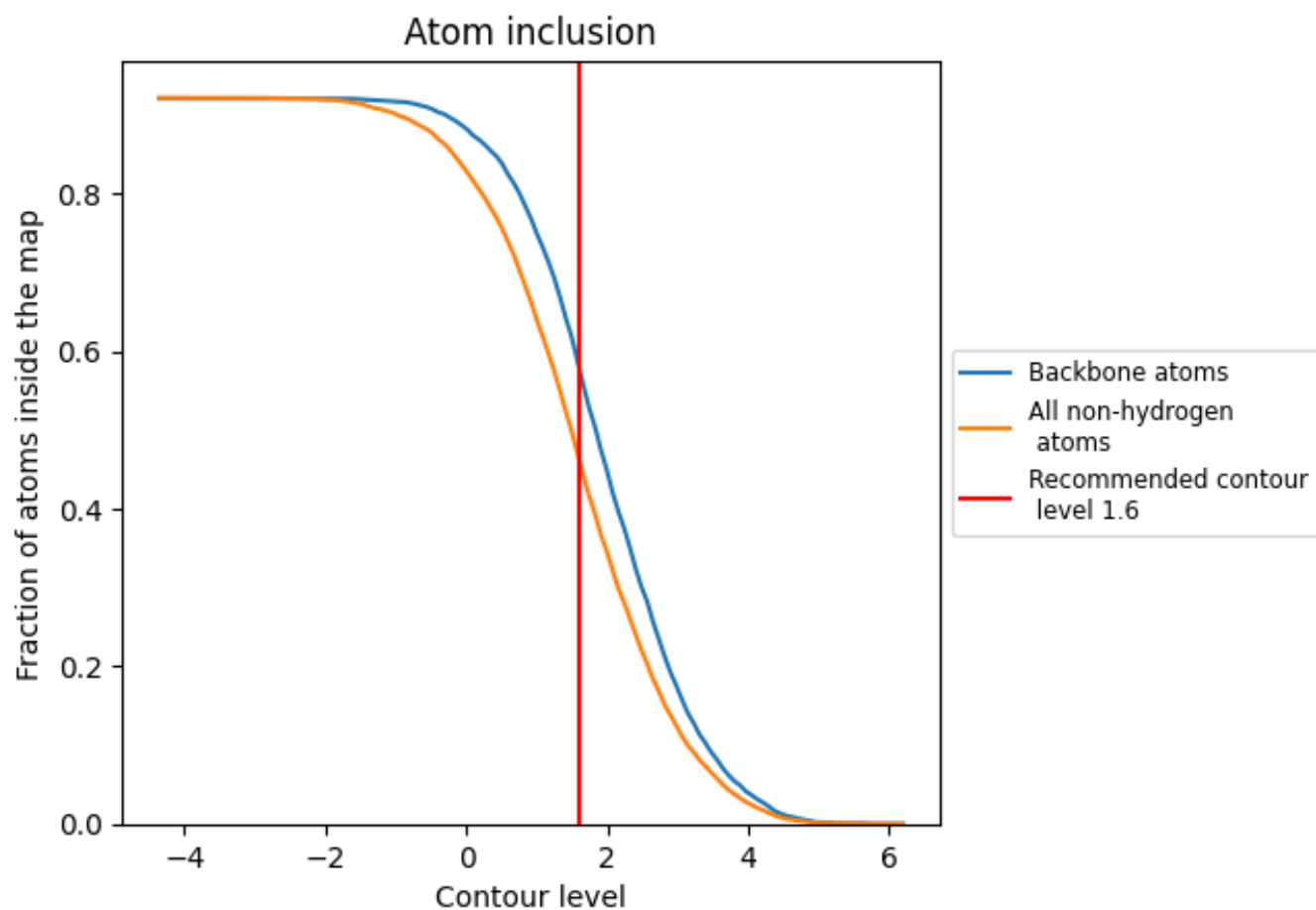
The images above show the model with each residue coloured according to its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions 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 (1.6).

9.4 Atom inclusion [i](#)



At the recommended contour level, 58% of all backbone atoms, 46% of all non-hydrogen atoms, are inside the map.

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

The table lists the average atom inclusion at the recommended contour level (1.6) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	■ 0.4625	■ 0.1060
A	■ 0.4777	■ 0.1110
B	■ 0.3812	■ 0.0770

