

Nov 23, 2022 – 07:40 AM JST

PDB ID	:	7V1N
EMDB ID	:	EMD-31628
Title	:	Structure of the Clade 2 C. difficile TcdB in complex with its receptor TFPI
Authors	:	Luo, J.; Yang, Q.; Zhang, X.; Zhang, Y.; Wan, L.; Li, Y.; Tao, L.
Deposited on	:	2021-08-05
Resolution	:	3.20 Å(reported)

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

We welcome your comments at *validation@mail.wwpdb.org* A user guide is available at https://www.wwpdb.org/validation/2017/EMValidationReportHelp with specific help available everywhere you see the (i) symbol.

The types of validation reports are described at http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types.

The following versions of software and data (see references (1)) were used in the production of this report:

EMDB validation analysis	:	0.0.1. dev 43
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 (i)

The following experimental techniques were used to determine the structure: $ELECTRON\ MICROSCOPY$

The reported resolution of this entry is 3.20 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.



wiethic	$(\# { m Entries})$	$(\# { m Entries})$
Clashscore	158937	4297
Ramachandran outliers	154571	4023
Sidechain outliers	154315	3826

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

Mol	Chain	Length		Quality of chain	
			29%		
1	А	2375	47%	44%	7% •
2	K	251	11% 14% 8% •	76%	



2 Entry composition (i)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 19156 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.

Mol	Chain	Residues		At	oms			AltConf	Trace
1	А	2344	Total 18665	C 11903	N 2935	0 3784	$\begin{array}{c} \mathrm{S} \\ 43 \end{array}$	0	0

• Molecule 1 is a protein called Toxin B.

There are 19	discrepancies	between	the	modelled	and	reference	sequences:
	1						1

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
А	366	ASP	GLY	conflict	UNP Q9EXR0
А	385	ASN	ASP	conflict	UNP Q9EXR0
А	680	ILE	LEU	conflict	UNP Q9EXR0
А	1211	LYS	GLU	conflict	UNP Q9EXR0
А	1528	LEU	ILE	conflict	UNP Q9EXR0
А	1618	SER	PHE	conflict	UNP Q9EXR0
А	1693	ILE	VAL	conflict	UNP Q9EXR0
А	1697	ASN	GLY	conflict	UNP Q9EXR0
А	1874	ALA	PRO	conflict	UNP Q9EXR0
А	2016	LYS	ARG	conflict	UNP Q9EXR0
А	2229	THR	ALA	conflict	UNP Q9EXR0
А	2368	HIS	-	expression tag	UNP Q9EXR0
A	2369	HIS	-	expression tag	UNP Q9EXR0
А	2370	HIS	-	expression tag	UNP Q9EXR0
А	2371	HIS	-	expression tag	UNP Q9EXR0
A	2372	HIS	-	expression tag	UNP Q9EXR0
A	2373	HIS	-	expression tag	UNP Q9EXR0
А	2374	HIS	-	expression tag	UNP Q9EXR0
А	2375	HIS	-	expression tag	UNP Q9EXR0

• Molecule 2 is a protein called Isoform Beta of Tissue factor pathway inhibitor.

Mol	Chain	Residues		Ato	\mathbf{ms}			AltConf	Trace
2	K	59	Total 491	C 306	N 81	O 97	S 7	1	0



3 Residue-property plots (i)

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



• Molecule 1: Toxin B





Рa	ıg€	e 6													F	⁷ u]	11	w	w]	PI	DI	З	E	М	V	/al	id	at	io	n İ	R	ep	or	t						E	2N	ID)-3	81(62	8,	7	V1	IN
11719 V1720		47/17	K1729	11732	N1733	D1736	L1737	S1738 11739	R1740	Y1741	N 1 / 47	N1745	D1746 G1747	S1748		11751 1.1752	M1753	S1754	11/56 D1756	E1757	E1758	N1759 K1760	V1761	S1762	Q1763	11766	R1767	F172	K1773	T1776	11777	K1780		F1/83	D1787	00 / T V	11791	N1794		S1798	F1800								
T1801 P1802		V1805	E1807	G1808	L1809	L1810	Y1812	D1813 1 1814	FIOL	11817	S1818	F1824	Y1825 T1826	11020 N1827	N1828	L1829	M1832	V1833	S1834	L1836	V1837	Y1838	11839 N1840	D1841	S1842	L1843 Y1844	Y1845	r 1846 K1847	P1848	P1849 I1850	K1851	N1852	F1857	T1858 T1859	I1860	G1861	D1863	K1864	F1867	N1868	12011	018/1 01872							
G1873 A1874	A1875	518/6	E1 <mark>879</mark>	11882	D1883	G1884 V1986	N1886	Y1887 V1666	11888 F1889	<mark>S1890</mark>	G1893	V1894	L1895	u1896 #1.667	11897	F1900	S1901	E1002	E1903		K1907	Y1908	F1909 A1910	P1911	A1912	D1913	T1914		E1917	N1918		E1920	E1922	A1923 11924	D1925	F1926	T1927 G1928	K1929	L1930	I1931	I1932	D1933 E4 03 4	E1934	OCETN	V1937				
Y1938	G1940	D1941	N1942 Y1943	R1944	A1945 A1946	11947	E1948	W1949	T1951	L1952	D1953	D1954	E1955	V1956	Y1957	Y1958 F1959	S1960	T1961	D1962	T1963	G1964	R1965	A1966	F1967	K1968	G1969	N1971	q1972	11973	G1974	D1975	D1976	K1977 F1978	Y1979	F1980	N1981	D1983	G1984	11985	M1986	Q1987	K1988	G 1989	F1990	V1991	11003	N1994	D1995	K1996
F1998	Y1999		D2002	s2003	G2004	V 2005 M 2006	K2007	<mark>\$2008</mark>	G2009	Y2010	T2011	E2012	I 2013	D'2014	62015	N2016			F2020		FDDD	NDD3	G2024	E2025	M2026	Q2027	12028	G2029	V2030	F2031	TOOS	A 2034	D2035	<mark>G2036</mark>	F2037	K2038	1.2039 F2040	A 204 1	H2042	H2043	D2044	E2045	D2046	L2047	G2048	N2049	E2050	E2051	









•	••		•	•	••		•	•	•	••			••	•	•	••		••	•	••	••	• •			•	•	• •		•	•	••	••	•4	•	•	••	•4	••	•	•	•	•	•	••	••			••	•	٠
N2298	T2299	P2300	G2302	F2303	K2304	Y2305 57306	A2307	H2308	Q 2309	N2310	T2311	L2312 D2313	E2314	N2315	F2316	E2317	G2318 F7310	52320 S2320	12321	N2322	Y2323	T2324	G2325 110000	W2326 1.2327	D2328	L2329	D2330	E2331	R2333	Y2334	Y 2335	F2336	T2337	E2339	Y2340	12341	A2342	T2344	G2345	S2346	V2347	I 2348	12349	D2350	G2351	E2352	E2353 V7364	1 2004 Y 2355	r 2000 F2356	D2357



• Molecule 2: Isoform Beta of Tissue factor pathway inhibitor



T1997





ASP SER ILE CYS CYS CYS CYS



4 Experimental information (i)

Property	Value	Source
EM reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	
Number of particles used	227825	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	NONE	Depositor
Microscope	FEI TITAN KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose $(e^-/\text{\AA}^2)$	50	Depositor
Minimum defocus (nm)	Not provided	
Maximum defocus (nm)	Not provided	
Magnification	Not provided	
Image detector	GATAN K3 $(6k \ge 4k)$	Depositor
Maximum map value	0.190	Depositor
Minimum map value	-0.108	Depositor
Average map value	0.000	Depositor
Map value standard deviation	0.004	Depositor
Recommended contour level	0.02	Depositor
Map size (Å)	347.84, 347.84, 347.84	wwPDB
Map dimensions	320, 320, 320	wwPDB
Map angles $(^{\circ})$	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing (Å)	1.087, 1.087, 1.087	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	Bo	nd lengths	Bond	angles
	Ullalli	RMSZ	# Z > 5	RMSZ	# Z > 5
1	А	0.63	1/19027~(0.0%)	0.62	0/25754
2	Κ	0.43	0/504	0.63	0/674
All	All	0.63	1/19531~(0.0%)	0.62	0/26428

All (1) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	$\mathrm{Ideal}(\mathrm{\AA})$
1	А	1198	GLU	C-N	8.49	1.50	1.34

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts (i)

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in the chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes within the asymmetric unit, whereas Symm-Clashes lists symmetry-related clashes.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	А	18665	0	17845	1015	0
2	K	491	0	443	19	0
All	All	19156	0	18288	1032	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 28.

All (1032) close contacts within the same asymmetric unit are listed below, sorted by their clash magnitude.



Atom 1	Atom 2	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (Å)	overlap (Å)
1:A:1541:LEU:CD1	1:A:1556:VAL:HA	1.55	1.36
1:A:1619:ILE:HG21	1:A:1641:THR:CG2	1.63	1.27
1:A:1541:LEU:CG	1:A:1556:VAL:HA	1.74	1.16
1:A:1031:PRO:HG2	1:A:1542:SER:HB2	1.14	1.13
1:A:1541:LEU:HD12	1:A:1556:VAL:HA	1.35	1.09
1:A:1541:LEU:CD1	1:A:1556:VAL:CA	2.33	1.07
1:A:1139:LEU:HD11	1:A:1218:LYS:NZ	1.70	1.05
1:A:1541:LEU:HG	1:A:1556:VAL:HA	1.37	1.05
1:A:1619:ILE:HG21	1:A:1641:THR:HG22	1.36	1.05
1:A:1541:LEU:HB3	1:A:1555:GLY:O	1.57	1.04
1:A:1541:LEU:HD12	1:A:1556:VAL:CA	1.87	1.03
1:A:1527:ILE:HG22	1:A:1542:SER:HB3	1.34	1.03
1:A:1031:PRO:HG2	1:A:1542:SER:CB	1.90	1.00
1:A:1619:ILE:HG21	1:A:1641:THR:HG23	1.41	0.98
1:A:1415:ALA:HA	1:A:1430:ILE:HA	1.46	0.97
1:A:1541:LEU:CB	1:A:1555:GLY:O	2.13	0.97
1:A:960:LEU:HD21	1:A:1651:GLY:HA2	1.45	0.95
1:A:708:VAL:O	1:A:711:THR:HG22	1.69	0.92
1:A:1376:LEU:HD13	1:A:1385:LEU:HB3	1.49	0.92
1:A:2098:ALA:O	1:A:2100:ILE:HG12	1.68	0.92
1:A:1061:ILE:CG1	1:A:1522:LYS:HE3	2.01	0.90
1:A:960:LEU:CD2	1:A:1651:GLY:HA2	2.00	0.90
1:A:1031:PRO:HB2	1:A:1527:ILE:HG21	1.52	0.90
1:A:1619:ILE:CG2	1:A:1641:THR:HG22	2.02	0.89
1:A:1197:ARG:HH21	1:A:1197:ARG:HG2	1.34	0.89
1:A:1527:ILE:CG2	1:A:1542:SER:HB3	2.05	0.86
1:A:1139:LEU:HD11	1:A:1218:LYS:CE	2.05	0.86
2:K:169:GLU:HA	2:K:172:LYS:HD3	1.58	0.85
1:A:1414:ASN:O	1:A:1431:SER:N	2.08	0.85
1:A:1619:ILE:CG2	1:A:1641:THR:CG2	2.53	0.85
1:A:278:LYS:NZ	1:A:398:ASP:OD1	2.09	0.85
1:A:2102:ILE:HD11	1:A:2110:TYR:O	1.75	0.85
1:A:902:ILE:HG22	1:A:903:ASP:H	1.41	0.84
1:A:1030:LEU:HD21	1:A:1612:ILE:HG12	1.60	0.84
1:A:1061:ILE:HG13	1:A:1522:LYS:HE3	1.59	0.83
1:A:1545:ILE:HG22	1:A:1551:ILE:HG13	1.60	0.83
1:A:2181:ASN:HD22	1:A:2187:VAL:HG11	1.44	0.83
1:A:1541:LEU:HD12	1:A:1556:VAL:C	1.98	0.83
1:A:1541:LEU:HD11	1:A:1557:TYR:N	1.93	0.83
1:A:1031:PRO:CG	1:A:1542:SER:HB2	2.05	0.82
1:A:881:GLU:HG2	1:A:905:GLU:HB3	1.60	0.82
1:A:1430:ILE:HG12	1:A:1463:TYR:CG	2.14	0.82



		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:40:ASN:ND2	1:A:44:GLU:OE1	2.10	0.82
1:A:935:ASP:O	1:A:938:PHE:CE2	2.32	0.82
1:A:1541:LEU:CD1	1:A:1557:TYR:N	2.42	0.82
1:A:1171:TRP:CD2	1:A:1195:THR:HG22	2.15	0.81
1:A:547:ASP:OD2	1:A:654:HIS:ND1	2.13	0.81
1:A:1738:SER:O	1:A:1738:SER:OG	1.97	0.81
1:A:106:GLN:HA	1:A:228:SER:OG	1.81	0.80
1:A:1484:LEU:HD11	1:A:1545:ILE:HD11	1.63	0.80
1:A:2033:THR:HG22	1:A:2035:ASP:H	1.45	0.80
1:A:969:LEU:HD23	1:A:986:MET:HG3	1.62	0.80
1:A:1354:ARG:NH2	1:A:1409:ILE:O	2.13	0.80
1:A:2102:ILE:CD1	1:A:2110:TYR:O	2.29	0.80
1:A:628:GLU:OE2	1:A:630:GLN:NE2	2.16	0.80
1:A:324:TYR:HB2	1:A:351:LEU:HD13	1.64	0.79
1:A:2344:THR:HB	1:A:2358:PRO:HA	1.64	0.79
1:A:1139:LEU:HD11	1:A:1218:LYS:HZ3	1.44	0.79
1:A:218:ILE:O	1:A:222:ASN:ND2	2.16	0.79
1:A:1449:ASP:OD2	1:A:1481:LYS:NZ	2.16	0.79
1:A:1115:ARG:HD2	1:A:1120:ASN:HB3	1.65	0.78
1:A:786:ASN:OD1	1:A:787:LYS:N	2.15	0.78
1:A:1663:ASN:HA	1:A:1671:SER:HB2	1.66	0.78
1:A:2049:ASN:HB2	1:A:2053:GLU:HB3	1.66	0.78
1:A:1354:ARG:NH1	1:A:1366:GLY:O	2.17	0.77
1:A:1185:ILE:HG23	1:A:1266:ARG:HG2	1.67	0.77
1:A:2130:PHE:HA	1:A:2158:VAL:HG23	1.65	0.77
1:A:1094:LEU:O	1:A:1362:LYS:NZ	2.18	0.77
1:A:1520:ILE:CG1	1:A:1527:ILE:H	1.98	0.77
1:A:1988:LYS:HA	1:A:2000:PHE:HB2	1.65	0.77
1:A:1134:GLU:OE1	1:A:1148:GLN:NE2	2.18	0.77
1:A:1227:PRO:HG3	1:A:1309:ILE:HG12	1.67	0.77
1:A:1408:SER:HA	1:A:1414:ASN:HA	1.65	0.77
1:A:973:ASN:OD1	1:A:977:GLU:N	2.18	0.76
1:A:1170:ILE:HG22	1:A:1201:LEU:HB2	1.65	0.76
1:A:623:ASN:ND2	1:A:630:GLN:OE1	2.14	0.76
1:A:1171:TRP:CG	1:A:1195:THR:HG22	2.19	0.76
1:A:1473:ASN:HB3	1:A:1518:LYS:HA	1.67	0.76
1:A:1104:ILE:HG13	1:A:1105:PRO:HD2	1.69	0.75
1:A:1523:ASP:C	1:A:1525:VAL:H	1.88	0.75
1:A:1030:LEU:HB2	1:A:1037:ILE:HA	1.67	0.75
1:A:1328:LEU:HD21	1:A:1390:ILE:HD11	1.66	0.75
1:A:1867:PHE:O	1:A:1873:GLY:HA2	1.87	0.75



		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:1541:LEU:N	1:A:1541:LEU:HD22	2.00	0.75
1:A:2049:ASN:HD22	1:A:2055:LEU:HD11	1.52	0.75
1:A:1094:LEU:HD22	1:A:1363:ILE:HB	1.69	0.74
1:A:948:LYS:HE3	1:A:949:VAL:H	1.53	0.74
2:K:153:PHE:HZ	2:K:164:ASN:HD22	1.35	0.74
1:A:303:LYS:NZ	1:A:307:VAL:O	2.20	0.74
1:A:250:GLU:OE2	1:A:405:GLN:NE2	2.21	0.73
1:A:1061:ILE:HG13	1:A:1522:LYS:CE	2.18	0.73
1:A:1523:ASP:O	1:A:1525:VAL:N	2.21	0.73
1:A:1155:GLU:HG2	1:A:1289:ARG:HB3	1.70	0.73
1:A:1197:ARG:HG2	1:A:1197:ARG:NH2	2.04	0.73
1:A:938:PHE:H	1:A:948:LYS:HG2	1.54	0.73
1:A:1538:LYS:NZ	1:A:1540:SER:HB3	2.04	0.73
1:A:134:ASN:HD21	1:A:241:ARG:HG3	1.54	0.72
1:A:534:GLU:O	1:A:538:ASN:ND2	2.22	0.72
1:A:922:TYR:CZ	1:A:926:ILE:HG13	2.25	0.72
1:A:1359:GLU:HB2	1:A:1364:LYS:HD3	1.71	0.72
1:A:1520:ILE:HG23	1:A:1526:ILE:HG23	1.72	0.72
1:A:1407:PHE:O	1:A:1415:ALA:N	2.16	0.72
1:A:218:ILE:HA	1:A:221:LEU:HD12	1.72	0.72
1:A:1002:ILE:HG21	1:A:1007:LYS:O	1.90	0.72
1:A:1475:PHE:CZ	1:A:1521:THR:HB	2.25	0.72
1:A:960:LEU:HD21	1:A:1651:GLY:CA	2.19	0.72
1:A:1061:ILE:HG12	1:A:1522:LYS:HE3	1.71	0.72
1:A:1171:TRP:CE2	1:A:1195:THR:CG2	2.73	0.72
1:A:2049:ASN:HB3	1:A:2055:LEU:HD21	1.71	0.71
1:A:1902:THR:HG22	1:A:1903:GLU:H	1.54	0.71
1:A:1677:PHE:HD2	1:A:1705:ILE:HG22	1.56	0.71
1:A:1466:MET:HA	1:A:1471:LYS:HG2	1.73	0.70
1:A:126:ASN:OD1	1:A:127:VAL:N	2.23	0.70
1:A:1857:PHE:HE1	1:A:1864:LYS:HB3	1.57	0.70
1:A:1287:ASN:OD1	1:A:1288:ILE:N	2.23	0.70
1:A:514:GLU:O	1:A:518:ASN:ND2	2.24	0.70
1:A:1430:ILE:H	1:A:1463:TYR:HB3	1.57	0.70
1:A:1130:LEU:HG	1:A:1134:GLU:HG3	1.73	0.70
1:A:95:GLU:N	1:A:95:GLU:OE1	2.25	0.69
1:A:1048:GLU:OE2	1:A:1052:THR:OG1	2.09	0.69
1:A:1520:ILE:HG13	1:A:1527:ILE:H	1.55	0.69
1:A:2299:THR:HG21	1:A:2304:LYS:HE2	1.73	0.69
1:A:1932:ILE:HG13	1:A:1935:ASN:HB2	1.75	0.69
1:A:424:ASP:OD1	1:A:424:ASP:N	2.25	0.69



		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:1464:SER:OG	1:A:1473:ASN:ND2	2.25	0.69
1:A:712:TYR:HB3	1:A:713:PRO:HD3	1.74	0.69
1:A:1620:GLY:HA3	1:A:1639:PHE:HA	1.74	0.69
1:A:1663:ASN:CG	1:A:1670:ILE:O	2.31	0.69
1:A:782:ASN:HB3	1:A:786:ASN:HB3	1.75	0.69
1:A:973:ASN:O	1:A:987:LYS:NZ	2.25	0.69
1:A:1725:TYR:O	1:A:1780:LYS:NZ	2.25	0.69
1:A:239:ASP:OD1	1:A:240:VAL:N	2.25	0.69
1:A:364:LEU:HD22	1:A:367:ILE:HD11	1.75	0.69
1:A:1541:LEU:HG	1:A:1556:VAL:CA	2.18	0.69
1:A:340:ASP:OD2	1:A:340:ASP:N	2.26	0.68
1:A:1000:ASN:OD1	1:A:1000:ASN:N	2.17	0.68
1:A:1686:ASP:O	1:A:1714:THR:OG1	2.10	0.68
1:A:1656:MET:O	1:A:1693:ILE:N	2.25	0.68
1:A:1799:THR:O	1:A:1800:PHE:HD1	1.77	0.68
1:A:1802:PRO:O	1:A:1828:ASN:ND2	2.25	0.68
1:A:65:LYS:O	1:A:1669:ASP:HA	1.93	0.68
1:A:168:HIS:NE2	1:A:525:GLU:OE1	2.23	0.68
1:A:708:VAL:O	1:A:711:THR:CG2	2.41	0.68
1:A:1061:ILE:CG1	1:A:1522:LYS:CE	2.72	0.68
1:A:1718:VAL:HB	1:A:1766:ILE:HG23	1.75	0.68
1:A:232:VAL:O	1:A:237:GLY:N	2.27	0.67
1:A:950:THR:OG1	1:A:951:LEU:N	2.25	0.67
1:A:1520:ILE:HD12	1:A:1520:ILE:C	2.14	0.67
1:A:1591:ILE:HA	1:A:1594:ILE:HD11	1.75	0.67
1:A:1612:ILE:HG22	1:A:1625:ILE:HG22	1.74	0.67
1:A:2102:ILE:HD11	1:A:2110:TYR:C	2.14	0.67
1:A:2315:ASN:ND2	1:A:2316:PHE:O	2.27	0.67
1:A:1062:GLU:O	1:A:1064:LYS:N	2.28	0.67
1:A:580:HIS:HE2	1:A:650:THR:HG1	1.41	0.67
1:A:1538:LYS:HZ1	1:A:1540:SER:HB3	1.57	0.67
1:A:1597:LYS:N	1:A:1601:SER:O	2.19	0.67
1:A:890:ILE:HD12	1:A:899:ILE:HG22	1.77	0.67
1:A:1171:TRP:CE2	1:A:1195:THR:HG21	2.30	0.67
1:A:580:HIS:NE2	1:A:650:THR:OG1	2.25	0.67
1:A:1900:PHE:HB2	1:A:1909:PHE:HE2	1.60	0.67
1:A:903:ASP:HB3	1:A:907:GLY:HA2	1.76	0.67
1:A:1958:TYR:HB3	1:A:1980:PHE:HE2	1.60	0.67
1:A:1301:VAL:HG21	1:A:1328:LEU:HA	1.75	0.67
1:A:1488:GLU:HB2	1:A:1493:VAL:HG23	1.74	0.67
1:A:1580:ASP:O	1:A:1584:SER:OG	2.13	0.67



		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:1794:ASN:O	1:A:1798:SER:OG	2.11	0.67
1:A:396:CYS:O	1:A:400:LEU:HB2	1.95	0.67
1:A:1111:GLU:HG3	1:A:1280:LYS:HD2	1.76	0.67
1:A:1656:MET:HB3	1:A:1692:VAL:HG22	1.76	0.66
1:A:1061:ILE:O	1:A:1522:LYS:HE3	1.94	0.66
1:A:1541:LEU:CD1	1:A:1556:VAL:C	2.61	0.66
1:A:1283:TYR:HB2	1:A:1308:TYR:HE2	1.60	0.66
1:A:1511:SER:OG	1:A:1514:LEU:HB2	1.96	0.66
1:A:1860:ILE:O	1:A:1863:ASP:N	2.28	0.66
1:A:1904:ASP:O	1:A:1944:ARG:NH1	2.29	0.66
1:A:1935:ASN:HD22	1:A:1965:ARG:HD3	1.59	0.66
1:A:770:ILE:HD13	1:A:801:LEU:HD22	1.77	0.66
1:A:89:SER:OG	1:A:90:ASN:ND2	2.29	0.66
1:A:1625:ILE:O	1:A:1633:GLN:N	2.24	0.66
1:A:1171:TRP:CD2	1:A:1195:THR:CG2	2.79	0.66
1:A:1405:LEU:O	1:A:1417:ILE:N	2.28	0.66
1:A:1571:ASN:ND2	1:A:1711:ALA:O	2.29	0.66
1:A:1697:ASN:OD1	1:A:1699:TYR:N	2.27	0.66
1:A:1330:GLN:O	1:A:1388:HIS:NE2	2.28	0.66
1:A:207:LYS:HG3	1:A:221:LEU:HD13	1.78	0.66
1:A:356:ASP:OD1	1:A:357:LYS:N	2.23	0.65
1:A:1590:ASN:OD1	1:A:1593:SER:OG	2.11	0.65
1:A:2223:TYR:HB3	1:A:2252:MET:H	1.61	0.65
1:A:856:ILE:HG23	1:A:965:PHE:HZ	1.61	0.65
1:A:283:VAL:HG22	1:A:389:ILE:HG12	1.78	0.65
1:A:614:GLU:OE1	1:A:614:GLU:N	2.24	0.65
1:A:1513:ASP:OD1	1:A:1513:ASP:N	2.29	0.65
1:A:978:SER:HB3	1:A:983:SER:HA	1.79	0.65
1:A:1343:ASP:HB2	1:A:1345:TRP:HE1	1.61	0.65
1:A:1670:ILE:HD13	1:A:1699:TYR:CD1	2.32	0.65
1:A:278:LYS:HB3	1:A:397:SER:HB2	1.77	0.64
1:A:1050:SER:HB2	1:A:1402:PHE:HE2	1.62	0.64
1:A:578:TYR:HD1	1:A:644:ARG:HH21	1.42	0.64
1:A:1171:TRP:CE2	1:A:1195:THR:HG22	2.32	0.64
1:A:1955:GLU:HG2	1:A:1985:ILE:HG23	1.79	0.64
1:A:1349:VAL:HG23	1:A:1407:PHE:HD1	1.63	0.64
1:A:1592:LYS:NZ	1:A:1603:ALA:O	2.20	0.64
1:A:514:GLU:HG2	1:A:518:ASN:HD21	1.61	0.64
1:A:722:ASP:O	1:A:725:SER:OG	2.16	0.64
1:A:1223:LEU:HD11	1:A:1299:PHE:HD2	1.61	0.64
1:A:1566:ILE:HD13	1:A:1613:ILE:HD12	1.80	0.64



Atom_1	Atom_2	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (Å)	overlap (Å)
1:A:1859:THR:HG22	1:A:1864:LYS:HE3	1.80	0.64
1:A:2016:LYS:HE3	1:A:2017:TYR:H	1.63	0.64
2:K:141:TYR:N	2:K:165:PHE:O	2.30	0.64
2:K:141:TYR:O	2:K:165:PHE:N	2.30	0.64
1:A:102:TRP:NE1	1:A:106:GLN:O	2.31	0.63
1:A:1541:LEU:HD11	1:A:1557:TYR:H	1.59	0.63
1:A:1543:PHE:HB3	1:A:1553:LEU:HA	1.78	0.63
1:A:467:ILE:HG23	1:A:472:PRO:HD2	1.79	0.63
1:A:964:PHE:CZ	1:A:1657:ILE:HG12	2.33	0.63
1:A:1016:LEU:C	1:A:1016:LEU:HD23	2.18	0.63
1:A:562:TYR:HA	1:A:566:LYS:HE2	1.81	0.63
1:A:705:SER:O	1:A:705:SER:OG	2.15	0.63
1:A:1486:VAL:HG12	1:A:1495:ILE:HG23	1.79	0.63
1:A:1758:GLU:OE1	1:A:1818:SER:OG	2.16	0.63
1:A:1864:LYS:HB2	1:A:1895:LEU:HB3	1.80	0.63
1:A:1184:ASP:OD2	1:A:1266:ARG:NH2	2.32	0.63
1:A:1330:GLN:OE1	1:A:1351:ASN:ND2	2.31	0.63
1:A:1637:ILE:HD13	1:A:1685:ILE:HD13	1.81	0.63
1:A:1714:THR:HA	1:A:1761:VAL:O	1.99	0.63
1:A:737:ILE:HD12	1:A:778:TYR:HB3	1.81	0.62
1:A:492:THR:O	1:A:492:THR:OG1	2.13	0.62
1:A:601:LYS:NZ	1:A:745:VAL:O	2.25	0.62
1:A:2279:ILE:HG21	1:A:2284:PHE:HE2	1.64	0.62
1:A:2333:ARG:HB2	1:A:2363:LEU:HD13	1.80	0.62
2:K:144:ASN:HB2	2:K:147:THR:HG22	1.81	0.62
1:A:1914:THR:HB	1:A:1918:ASN:HD21	1.62	0.62
1:A:625:THR:HB	1:A:628:GLU:HG3	1.80	0.62
1:A:1520:ILE:HG12	1:A:1527:ILE:H	1.65	0.62
1:A:562:TYR:OH	1:A:593:GLU:OE1	2.18	0.62
1:A:1330:GLN:HB3	1:A:1351:ASN:OD1	2.00	0.62
1:A:160:ASN:OD1	1:A:160:ASN:N	2.32	0.61
1:A:1145:MET:HE1	1:A:1216:LEU:HD12	1.82	0.61
1:A:1514:LEU:HD23	1:A:1532:TYR:HB3	1.81	0.61
1:A:417:PRO:O	1:A:421:GLN:NE2	2.26	0.61
1:A:1220:LEU:HD12	1:A:1220:LEU:H	1.65	0.61
1:A:1523:ASP:C	1:A:1525:VAL:N	2.53	0.61
1:A:1613:ILE:HG23	1:A:1624:PHE:HB2	1.83	0.61
1:A:1638:LYS:O	1:A:1638:LYS:HG2	1.99	0.61
1:A:1897:THR:OG1	1:A:1909:PHE:O	2.18	0.61
1:A:114:TYR:CE2	1:A:290:LEU:HG	2.36	0.61
1:A:269:SER:O	1:A:269:SER:OG	2.18	0.61



		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:747:ILE:HD13	1:A:1829:LEU:HD13	1.82	0.61
1:A:113:ASN:HB3	1:A:328:ILE:HG23	1.82	0.61
1:A:1565:GLU:O	1:A:1568:LYS:N	2.29	0.61
1:A:1100:ILE:HD12	1:A:1100:ILE:H	1.66	0.61
1:A:534:GLU:HG2	1:A:538:ASN:HD21	1.66	0.61
1:A:826:GLU:O	1:A:830:ILE:HG13	1.99	0.61
1:A:2181:ASN:OD1	1:A:2181:ASN:N	2.32	0.61
1:A:1472:GLU:HA	1:A:1487:SER:HA	1.83	0.60
1:A:1552:LYS:HG2	1:A:1606:ILE:HD11	1.82	0.60
1:A:2092:ASP:OD2	1:A:2099:SER:HB2	2.01	0.60
1:A:1453:LEU:HD13	1:A:1461:ILE:HD11	1.83	0.60
1:A:1541:LEU:HD11	1:A:1556:VAL:HA	1.75	0.60
1:A:1646:TYR:OH	1:A:1677:PHE:HA	2.01	0.60
1:A:1405:LEU:N	1:A:1417:ILE:O	2.35	0.60
1:A:1541:LEU:HD11	1:A:1556:VAL:CA	2.30	0.60
1:A:1559:ASP:CG	1:A:1560:GLU:H	2.05	0.60
1:A:1972:GLN:HA	1:A:1977:LYS:HA	1.81	0.60
1:A:2152:ILE:HG13	1:A:2158:VAL:HA	1.84	0.60
1:A:886:SER:HB3	1:A:902:ILE:HG13	1.83	0.60
1:A:890:ILE:HG23	1:A:899:ILE:HG22	1.83	0.60
1:A:1008:VAL:HG12	1:A:1008:VAL:O	2.01	0.60
1:A:1677:PHE:CD2	1:A:1705:ILE:HG22	2.35	0.60
1:A:1107:LEU:HB3	1:A:1112:LEU:HD23	1.83	0.60
1:A:1326:LEU:HD12	1:A:1327:SER:H	1.66	0.60
1:A:2013:ILE:N	1:A:2016:LYS:O	2.30	0.60
1:A:667:LEU:HD12	1:A:672:LEU:HD22	1.82	0.59
1:A:900:ARG:HH21	1:A:909:SER:HB3	1.67	0.59
1:A:1868:ASN:ND2	1:A:1876:SER:OG	2.35	0.59
1:A:1354:ARG:NE	1:A:1408:SER:O	2.34	0.59
1:A:2104:ILE:HG22	1:A:2104:ILE:O	2.02	0.59
1:A:1462:PRO:HB3	1:A:1475:PHE:CZ	2.38	0.59
1:A:1520:ILE:HG23	1:A:1526:ILE:CG2	2.31	0.59
1:A:1114:LEU:O	1:A:1115:ARG:HD3	2.02	0.59
1:A:251:VAL:HG21	1:A:401:ILE:CD1	2.33	0.59
1:A:881:GLU:OE2	1:A:904:LYS:N	2.35	0.59
1:A:1121:VAL:HG22	1:A:1279:LEU:HD13	1.85	0.59
1:A:1319:GLY:HA3	1:A:1343:ASP:OD1	2.02	0.59
1:A:77:GLU:O	1:A:81:THR:HG23	2.02	0.58
1:A:106:GLN:HE21	1:A:231:LYS:HD2	1.67	0.58
1:A:1171:TRP:CD1	1:A:1195:THR:HG22	2.37	0.58
1:A:1500:MET:O	1:A:1503:SER:OG	2.20	0.58



	A t arra 0	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:1586:LEU:HB3	1:A:1591:ILE:HG21	1.85	0.58
1:A:1983:ASP:OD1	1:A:1985:ILE:HG13	2.03	0.58
1:A:1252:LEU:HD21	1:A:1265:TRP:CD1	2.38	0.58
1:A:60:ILE:HD13	1:A:69:ASN:ND2	2.18	0.58
1:A:219:ASP:HA	1:A:222:ASN:HD22	1.69	0.58
1:A:1475:PHE:CE2	1:A:1521:THR:HB	2.38	0.58
1:A:1552:LYS:CG	1:A:1606:ILE:HD11	2.33	0.58
1:A:1537:ILE:HD13	1:A:1562:GLY:HA2	1.85	0.58
1:A:468:THR:HA	1:A:473:THR:OG1	2.03	0.58
1:A:210:LEU:HD22	1:A:216:LYS:HD2	1.85	0.58
1:A:939:ASP:N	1:A:948:LYS:HD3	2.18	0.58
1:A:1355:ASP:N	1:A:1367:ASP:O	2.27	0.58
1:A:815:GLU:HB2	1:A:818:GLU:OE1	2.03	0.58
1:A:960:LEU:CD2	1:A:1651:GLY:CA	2.77	0.58
1:A:1265:TRP:CE2	1:A:1266:ARG:HB2	2.39	0.57
1:A:1709:HIS:HB3	1:A:1712:ASN:HD21	1.68	0.57
1:A:1245:GLU:OE2	1:A:1266:ARG:NH2	2.37	0.57
1:A:1548:LYS:O	1:A:1550:THR:N	2.33	0.57
1:A:1639:PHE:N	1:A:1639:PHE:CD2	2.73	0.57
1:A:3:LEU:HD11	1:A:79:LEU:HD23	1.86	0.57
1:A:1444:VAL:O	1:A:1448:ILE:HG23	2.04	0.57
1:A:1694:ILE:HB	1:A:1720:VAL:HG22	1.86	0.57
1:A:1358:ILE:HG13	1:A:1358:ILE:O	2.03	0.57
1:A:1486:VAL:HG11	1:A:1528:LEU:HD13	1.87	0.57
1:A:168:HIS:HE2	1:A:525:GLU:CD	2.07	0.57
1:A:1410:LEU:HB2	1:A:1413:ILE:HD12	1.86	0.57
1:A:313:TRP:O	1:A:317:GLN:HG3	2.04	0.57
1:A:1347:ILE:O	1:A:1406:THR:HG22	2.05	0.57
1:A:1480:THR:OG1	1:A:1482:GLU:OE2	2.22	0.57
1:A:2033:THR:HG21	1:A:2038:LYS:HE2	1.86	0.57
1:A:2105:ILE:HG22	1:A:2106:ASN:H	1.69	0.57
1:A:932:LYS:NZ	1:A:959:THR:HG21	2.19	0.57
1:A:1252:LEU:HD21	1:A:1265:TRP:CG	2.39	0.57
1:A:1484:LEU:HD11	1:A:1545:ILE:CD1	2.35	0.57
1:A:1526:ILE:O	1:A:1544:THR:OG1	2.17	0.57
1:A:534:GLU:HA	1:A:537:LYS:HD3	1.86	0.57
1:A:1265:TRP:O	1:A:1275:VAL:HA	2.05	0.57
1:A:1634:PRO:HB3	1:A:1637:ILE:HD12	1.87	0.57
1:A:2103:SER:O	1:A:2103:SER:OG	2.22	0.57
1:A:1234:GLU:HG2	1:A:1278:LYS:HB2	1.87	0.57
1:A:2092:ASP:N	1:A:2097:GLU:O	2.30	0.57



		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:244:GLU:HG3	1:A:247:LYS:HD2	1.87	0.56
1:A:863:ILE:HA	1:A:866:ILE:HD11	1.87	0.56
1:A:1517:VAL:HG12	1:A:1529:THR:O	2.05	0.56
1:A:180:TYR:HE1	1:A:455:LEU:HD13	1.70	0.56
1:A:1004:ASP:HB2	1:A:1007:LYS:HB2	1.88	0.56
1:A:1488:GLU:HG3	1:A:1493:VAL:HB	1.88	0.56
1:A:1981:ASN:OD1	1:A:1982:SER:N	2.39	0.56
1:A:1115:ARG:HG2	1:A:1124:TYR:HD1	1.70	0.56
1:A:1117:GLU:O	1:A:1121:VAL:HG23	2.04	0.56
1:A:1409:ILE:HD11	1:A:1430:ILE:HD12	1.86	0.56
1:A:1514:LEU:CD2	1:A:1532:TYR:HB3	2.36	0.56
1:A:1660:PRO:HD3	1:A:1675:ILE:HD11	1.88	0.56
1:A:258:GLU:OE2	1:A:408:TYR:OH	2.23	0.56
1:A:997:THR:HB	1:A:1001:THR:HG21	1.88	0.56
1:A:1349:VAL:HG22	1:A:1406:THR:H	1.70	0.56
1:A:903:ASP:CB	1:A:907:GLY:HA2	2.36	0.56
1:A:1031:PRO:HB3	1:A:1554:ASN:HB2	1.88	0.56
1:A:2236:ILE:HG23	1:A:2245:TYR:HD2	1.70	0.56
1:A:49:LEU:HD22	1:A:79:LEU:HD22	1.87	0.56
1:A:856:ILE:HD11	1:A:1652:ASN:HB3	1.88	0.56
1:A:850:SER:HB3	1:A:853:ILE:HB	1.87	0.56
1:A:1245:GLU:HB2	1:A:1249:THR:OG1	2.05	0.56
1:A:1494:LEU:HD13	2:K:157:GLY:HA3	1.88	0.56
1:A:1757:GLU:HG3	1:A:1763:GLN:HB3	1.87	0.56
1:A:2102:ILE:HD13	1:A:2110:TYR:O	2.06	0.56
1:A:425:PHE:O	1:A:429:MET:HB2	2.05	0.56
1:A:521:TRP:CH2	1:A:707:ASN:HB2	2.41	0.56
1:A:1837:VAL:HG12	1:A:1839:ILE:HG13	1.87	0.56
1:A:647:ILE:HD11	1:A:687:ILE:HD13	1.87	0.56
1:A:917:ALA:O	1:A:920:SER:OG	2.21	0.56
1:A:1673:THR:OG1	1:A:1701:ASP:OD1	2.22	0.56
1:A:1754:SER:OG	1:A:1755:THR:N	2.39	0.56
1:A:2016:LYS:HE2	1:A:2053:GLU:HG2	1.88	0.56
1:A:1140:LEU:HB2	1:A:1146:MET:SD	2.46	0.55
1:A:1415:ALA:HA	1:A:1430:ILE:CA	2.30	0.55
1:A:1951:THR:HG22	1:A:1956:VAL:HA	1.88	0.55
1:A:882:SER:HA	1:A:902:ILE:O	2.06	0.55
1:A:1423:SER:O	1:A:1423:SER:OG	2.23	0.55
1:A:1788:LYS:HD2	1:A:1841:ASP:O	2.06	0.55
1:A:301:ILE:HG21	1:A:347:PHE:CE1	2.40	0.55
1:A:1612:ILE:HD12	1:A:1623:GLU:CD	2.26	0.55



Atom 1	Atom 2	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:1268:PHE:HA	1:A:1273:ASP:HA	1.89	0.55
1:A:3:LEU:HB2	1:A:82:GLU:HG3	1.89	0.55
1:A:1745:ASN:HB2	1:A:1772:PHE:HE2	1.70	0.55
1:A:1224:PRO:O	1:A:1315:TYR:OH	2.23	0.55
1:A:1636:PHE:CZ	1:A:1638:LYS:HD2	2.41	0.55
1:A:94:VAL:HG22	1:A:369:VAL:HG22	1.88	0.55
1:A:1841:ASP:O	1:A:1842:SER:OG	2.18	0.55
1:A:1967:PHE:O	1:A:1980:PHE:HB2	2.07	0.55
1:A:1447:LYS:O	1:A:1450:TYR:N	2.40	0.55
1:A:179:ILE:HD13	1:A:459:PHE:CD1	2.42	0.55
1:A:172:PHE:O	1:A:460:TYR:CE1	2.59	0.54
1:A:674:SER:O	1:A:678:THR:HG23	2.07	0.54
1:A:1562:GLY:O	1:A:1565:GLU:HB2	2.06	0.54
1:A:1871:ASN:OD1	1:A:1871:ASN:N	2.40	0.54
1:A:1173:MET:HB3	1:A:1262:GLN:HA	1.89	0.54
1:A:1552:LYS:HG2	1:A:1606:ILE:CD1	2.37	0.54
1:A:70:LYS:O	1:A:70:LYS:NZ	2.27	0.54
1:A:1140:LEU:HB2	1:A:1146:MET:CE	2.38	0.54
1:A:1885:LYS:NZ	1:A:1922:GLU:OE2	2.30	0.54
1:A:1579:SER:OG	1:A:1580:ASP:OD1	2.25	0.54
1:A:1172:ARG:HD2	1:A:1199:PRO:O	2.08	0.54
1:A:1429:LEU:HD12	1:A:1462:PRO:HG2	1.90	0.54
1:A:1846:PHE:HA	1:A:1852:ASN:O	2.08	0.54
1:A:2239:ILE:HD12	1:A:2244:TYR:HB2	1.88	0.54
1:A:1369:ILE:O	1:A:1372:ILE:HG13	2.07	0.54
1:A:1847:LYS:O	1:A:1851:LYS:HA	2.08	0.54
1:A:1868:ASN:HB3	1:A:1871:ASN:OD1	2.07	0.54
1:A:74:LYS:NZ	1:A:77:GLU:OE1	2.39	0.53
1:A:1703:ILE:HB	1:A:1732:ILE:HD13	1.90	0.53
1:A:2296:VAL:HG22	1:A:2303:PHE:HB3	1.90	0.53
1:A:623:ASN:O	1:A:625:THR:N	2.36	0.53
1:A:937:ILE:HA	1:A:948:LYS:HG2	1.90	0.53
1:A:1038:ASP:O	1:A:1062:GLU:HB3	2.07	0.53
1:A:1663:ASN:HA	1:A:1670:ILE:O	2.08	0.53
1:A:117:GLN:OE1	1:A:357:LYS:NZ	2.41	0.53
1:A:1367:ASP:OD1	1:A:1367:ASP:N	2.41	0.53
1:A:1550:THR:HA	1:A:1604:LYS:O	2.08	0.53
1:A:1440:ASN:HB3	1:A:1443:SER:OG	2.09	0.53
1:A:1689:VAL:O	1:A:1689:VAL:HG12	2.08	0.53
1:A:1494:LEU:HB2	1:A:1496:ILE:HD11	1.90	0.53
1:A:153:THR:O	1:A:153:THR:OG1	2.26	0.53



Atom_1	Atom_2	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (Å)	overlap (Å)
1:A:231:LYS:O	1:A:235:ASN:ND2	2.42	0.53
1:A:1169:GLU:HB3	1:A:1200:TYR:HB3	1.90	0.53
1:A:1337:ILE:HD13	1:A:1390:ILE:HG23	1.91	0.53
1:A:1751:ILE:HD11	1:A:1767:ARG:NH1	2.24	0.53
1:A:2057:TYR:CZ	1:A:2061:LEU:HD13	2.43	0.53
1:A:1315:TYR:HB3	1:A:1317:PHE:CE2	2.43	0.53
1:A:2273:GLN:HG3	1:A:2274:TYR:H	1.73	0.53
1:A:176:MET:SD	1:A:456:ARG:HG2	2.49	0.53
1:A:520:LEU:O	1:A:706:VAL:HG21	2.08	0.53
1:A:1701:ASP:OD1	1:A:1701:ASP:N	2.39	0.53
1:A:21:GLU:OE1	1:A:21:GLU:N	2.38	0.53
1:A:1514:LEU:HA	1:A:1531:TYR:O	2.09	0.53
1:A:1541:LEU:CG	1:A:1555:GLY:O	2.56	0.53
1:A:1647:THR:O	1:A:1656:MET:HA	2.08	0.53
1:A:970:ILE:HG13	1:A:971:GLY:H	1.73	0.53
1:A:1469:GLU:O	1:A:1490:SER:N	2.42	0.53
1:A:2033:THR:HB	1:A:2036:GLY:O	2.08	0.53
1:A:695:ASN:OD1	1:A:696:LEU:N	2.42	0.52
1:A:977:GLU:O	1:A:979:LEU:HD22	2.08	0.52
1:A:1413:ILE:HA	1:A:1432:GLY:HA3	1.89	0.52
1:A:2030:VAL:HB	1:A:2039:TYR:HB2	1.91	0.52
1:A:2059:GLY:O	1:A:2070:PHE:N	2.36	0.52
1:A:868:ASP:OD1	1:A:868:ASP:N	2.42	0.52
1:A:1709:HIS:HB3	1:A:1712:ASN:ND2	2.24	0.52
1:A:305:ASP:O	1:A:306:SER:OG	2.16	0.52
1:A:521:TRP:HA	1:A:521:TRP:CE3	2.44	0.52
1:A:741:ASN:HD21	1:A:776:LYS:NZ	2.07	0.52
1:A:855:TYR:HE1	1:A:962:ALA:HB2	1.73	0.52
1:A:1353:VAL:HG21	1:A:1407:PHE:CD2	2.45	0.52
1:A:1520:ILE:HG12	1:A:1527:ILE:O	2.10	0.52
1:A:578:TYR:HD1	1:A:644:ARG:NH2	2.07	0.52
1:A:642:SER:O	1:A:642:SER:OG	2.22	0.52
1:A:770:ILE:CD1	1:A:801:LEU:HD22	2.40	0.52
1:A:866:ILE:O	1:A:870:LEU:HG	2.09	0.52
1:A:902:ILE:HG22	1:A:903:ASP:N	2.18	0.52
1:A:1288:ILE:HG22	1:A:1290:ILE:HD11	1.91	0.52
1:A:1327:SER:HA	1:A:1348:ASP:HB2	1.91	0.52
1:A:882:SER:O	1:A:884:PHE:N	2.43	0.52
1:A:1372:ILE:O	1:A:1374:SER:N	2.42	0.52
1:A:717:LEU:O	1:A:721:LYS:HB2	2.09	0.52
1:A:1173:MET:HG2	1:A:1174:GLU:H	1.73	0.52



		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:1642:LEU:O	1:A:1676:ASN:ND2	2.42	0.52
1:A:935:ASP:O	1:A:938:PHE:CZ	2.63	0.52
1:A:938:PHE:H	1:A:948:LYS:CG	2.22	0.52
1:A:1002:ILE:HD13	1:A:1007:LYS:O	2.08	0.52
1:A:1030:LEU:N	1:A:1031:PRO:HD3	2.24	0.52
1:A:1256:ARG:HG3	1:A:1263:PHE:O	2.10	0.52
1:A:1356:VAL:HA	1:A:1364:LYS:O	2.10	0.52
1:A:1534:LYS:HD2	1:A:1537:ILE:HB	1.91	0.52
1:A:2113:ASN:OD1	1:A:2119:GLN:NE2	2.42	0.52
1:A:621:TYR:HD1	1:A:621:TYR:H	1.58	0.52
1:A:881:GLU:OE2	1:A:905:GLU:N	2.27	0.52
1:A:1936:VAL:O	1:A:1965:ARG:HA	2.10	0.52
1:A:938:PHE:H	1:A:948:LYS:HD3	1.74	0.52
1:A:1061:ILE:HG12	1:A:1522:LYS:CE	2.39	0.52
1:A:1843:LEU:HB3	1:A:1875:ALA:HB3	1.92	0.52
1:A:304:PRO:HG2	1:A:307:VAL:HG22	1.91	0.52
1:A:881:GLU:CD	1:A:906:THR:H	2.13	0.52
1:A:1139:LEU:HD11	1:A:1218:LYS:HE2	1.89	0.52
1:A:1613:ILE:CG2	1:A:1624:PHE:HB2	2.40	0.52
1:A:113:ASN:O	1:A:117:GLN:NE2	2.43	0.51
1:A:265:LEU:O	1:A:269:SER:HB3	2.10	0.51
1:A:1055:PRO:HB2	1:A:1057:LEU:HD13	1.91	0.51
1:A:1636:PHE:O	1:A:1637:ILE:HG13	2.10	0.51
1:A:1918:ASN:HD22	1:A:1924:ILE:HG21	1.75	0.51
1:A:816:LEU:HA	1:A:819:LYS:HD2	1.91	0.51
1:A:1315:TYR:HB3	1:A:1317:PHE:HE2	1.75	0.51
1:A:1689:VAL:HG11	1:A:1716:PRO:HG3	1.92	0.51
1:A:1748:SER:HA	1:A:1772:PHE:HB2	1.92	0.51
1:A:1494:LEU:HD22	2:K:158:CYS:SG	2.50	0.51
1:A:633:ASP:OD1	1:A:633:ASP:N	2.36	0.51
1:A:856:ILE:HG23	1:A:965:PHE:CZ	2.42	0.51
1:A:1223:LEU:HD11	1:A:1299:PHE:CD2	2.44	0.51
1:A:1636:PHE:CE2	1:A:1638:LYS:HD2	2.45	0.51
1:A:2258:THR:HA	1:A:2263:HIS:HA	1.91	0.51
1:A:212:ASN:OD1	1:A:213:GLU:HG2	2.10	0.51
1:A:1541:LEU:HD12	1:A:1557:TYR:N	2.19	0.51
1:A:2145:ILE:HB	1:A:2150:PHE:HE1	1.74	0.51
1:A:970:ILE:HG21	1:A:990:VAL:HG21	1.93	0.51
1:A:1353:VAL:HG21	1:A:1407:PHE:CG	2.45	0.51
1:A:2245:TYR:H	1:A:2266:PHE:HE2	1.57	0.51
2:K:167:THR:OG1	2:K:168:LEU:N	2.43	0.51



		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:1171:TRP:HB2	1:A:1233:TRP:CD1	2.46	0.51
1:A:1495:ILE:C	1:A:1496:ILE:HD13	2.31	0.51
1:A:1651:GLY:C	1:A:1653:ARG:H	2.14	0.51
1:A:251:VAL:CG2	1:A:401:ILE:CD1	2.89	0.51
1:A:1293:ASP:O	1:A:1324:TYR:OH	2.27	0.51
1:A:1658:VAL:N	1:A:1693:ILE:O	2.41	0.51
1:A:1879:GLU:HB2	1:A:1888:TYR:HD1	1.75	0.51
1:A:2060:ILE:HG22	1:A:2069:TYR:HD1	1.76	0.51
1:A:1168:CYS:O	1:A:1203:ILE:N	2.43	0.51
1:A:1242:ARG:NE	1:A:1266:ARG:HD2	2.25	0.51
1:A:893:THR:HG23	1:A:896:GLY:O	2.11	0.51
1:A:967:GLN:NE2	1:A:1021:ASP:OD1	2.44	0.51
1:A:1028:GLU:OE1	1:A:1044:ALA:N	2.41	0.51
1:A:1407:PHE:CE2	1:A:1415:ALA:HB3	2.46	0.51
1:A:2019:TYR:CZ	1:A:2031:PHE:HB2	2.46	0.51
1:A:656:LYS:O	1:A:661:THR:OG1	2.28	0.50
1:A:1196:TYR:N	1:A:1196:TYR:CD2	2.77	0.50
1:A:1533:LEU:HD13	1:A:1533:LEU:C	2.31	0.50
1:A:1739:ILE:HD12	1:A:1844:TYR:CE2	2.46	0.50
1:A:719:ARG:O	1:A:723:LYS:HE3	2.11	0.50
1:A:637:ILE:HB	1:A:686:ASP:HB3	1.93	0.50
1:A:1354:ARG:HG2	1:A:1368:LEU:HD23	1.92	0.50
1:A:1982:SER:O	1:A:1982:SER:OG	2.26	0.50
2:K:124:PHE:HD1	2:K:124:PHE:H	1.59	0.50
1:A:294:HIS:HB2	1:A:360:ILE:O	2.11	0.50
1:A:866:ILE:HD13	1:A:982:LEU:HD11	1.94	0.50
1:A:1168:CYS:O	1:A:1203:ILE:HG13	2.11	0.50
1:A:1513:ASP:O	1:A:1532:TYR:HB2	2.11	0.50
1:A:1024:PRO:HG2	1:A:1636:PHE:CG	2.47	0.50
1:A:964:PHE:HB2	1:A:1023:LEU:HD21	1.94	0.50
1:A:1002:ILE:CG2	1:A:1007:LYS:O	2.59	0.50
1:A:1310:ARG:HH21	1:A:1332:ASN:H	1.58	0.50
1:A:1867:PHE:O	1:A:1873:GLY:CA	2.59	0.50
1:A:2038:LYS:HE3	1:A:2040:PHE:HE1	1.77	0.50
1:A:418:ILE:HA	1:A:421:GLN:NE2	2.26	0.50
1:A:1549:ASN:HD22	1:A:1597:LYS:NZ	2.10	0.50
2:K:161:ASN:OD1	2:K:163:ASN:N	2.31	0.50
1:A:1900:PHE:HB2	1:A:1909:PHE:CE2	2.43	0.49
1:A:970:ILE:HG13	1:A:971:GLY:N	2.26	0.49
1:A:1127:HIS:O	1:A:1131:ALA:N	2.44	0.49
1:A:881:GLU:OE1	1:A:907:GLY:N	2.46	0.49



Atom 1	Atom 2	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (Å)	overlap (Å)
1:A:1148:GLN:HB2	1:A:1151:LEU:HG	1.94	0.49
1:A:711:THR:HG23	1:A:714:GLY:H	1.78	0.49
1:A:1322:GLY:O	1:A:1343:ASP:HA	2.13	0.49
1:A:1541:LEU:HD22	1:A:1541:LEU:H	1.76	0.49
1:A:2008:SER:HA	1:A:2020:PHE:HB2	1.95	0.49
1:A:2018:PHE:HB3	1:A:2026:MET:SD	2.53	0.49
1:A:2213:ILE:HB	1:A:2224:TYR:HB2	1.94	0.49
1:A:1566:ILE:HD13	1:A:1613:ILE:CD1	2.42	0.49
1:A:2259:PHE:N	1:A:2262:ASN:O	2.42	0.49
1:A:2283:MET:SD	1:A:2304:LYS:NZ	2.86	0.49
2:K:124:PHE:HZ	2:K:174:ILE:HG12	1.78	0.49
1:A:333:SER:OG	1:A:336:PHE:HB3	2.12	0.49
1:A:396:CYS:SG	1:A:482:LEU:HD22	2.53	0.49
1:A:807:ASN:OD1	1:A:1838:TYR:HB2	2.11	0.49
1:A:1441:SER:HA	1:A:1444:VAL:HB	1.93	0.49
1:A:1484:LEU:O	1:A:1486:VAL:HG13	2.13	0.49
1:A:1697:ASN:OD1	1:A:1698:ILE:N	2.46	0.49
1:A:2181:ASN:ND2	1:A:2187:VAL:HG11	2.22	0.49
1:A:708:VAL:HG11	1:A:788:ILE:HG21	1.93	0.49
1:A:1139:LEU:CD1	1:A:1218:LYS:HE2	2.43	0.49
1:A:1430:ILE:HG12	1:A:1463:TYR:CD2	2.47	0.49
1:A:2039:TYR:CZ	1:A:2041:ALA:HA	2.47	0.49
1:A:329:PRO:O	1:A:330:GLU:HB2	2.13	0.49
1:A:1350:ASP:OD1	1:A:1351:ASN:N	2.45	0.49
1:A:2366:SER:OG	1:A:2367:GLU:N	2.45	0.49
1:A:717:LEU:HD22	1:A:779:ILE:HG13	1.94	0.49
1:A:1125:PHE:HE2	1:A:1279:LEU:HD21	1.78	0.49
1:A:1955:GLU:HG2	1:A:1985:ILE:HA	1.94	0.49
1:A:118:TRP:O	1:A:122:ASN:ND2	2.45	0.48
1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:ARG:NH1	2.28	0.48
1:A:1304:ILE:N	1:A:1331:TYR:HD2	2.11	0.48
1:A:1310:ARG:NH2	1:A:1332:ASN:H	2.11	0.48
1:A:2265:TYR:CE1	1:A:2279:ILE:HD12	2.48	0.48
1:A:547:ASP:HB3	1:A:758:HIS:CE1	2.47	0.48
1:A:947:LYS:O	1:A:948:LYS:HB2	2.12	0.48
1:A:1335:ILE:HG22	1:A:1337:ILE:HD11	1.96	0.48
2:K:154:LYS:N	2:K:154:LYS:HD2	2.29	0.48
1:A:1231:PHE:CD1	1:A:1281:PRO:HB3	2.48	0.48
1:A:1115:ARG:HB2	1:A:1279:LEU:HB2	1.95	0.48
1:A:1172:ARG:HH21	1:A:1201:LEU:HD21	1.77	0.48
1:A:1385:LEU:O	1:A:1388:HIS:N	2.42	0.48



Atom-1	Atom-2	Interatomic	Clash
		distance (Å)	overlap (Å)
1:A:153:THR:HG23	1:A:171:PHE:CE1	2.49	0.48
1:A:248:THR:O	1:A:248:THR:OG1	2.32	0.48
1:A:961:ASN:HD22	1:A:1653:ARG:HH12	1.61	0.48
1:A:1317:PHE:HB2	1:A:1337:ILE:HA	1.95	0.48
1:A:1676:ASN:HA	1:A:1704:ASN:HB2	1.93	0.48
1:A:2233:TYR:HB2	1:A:2246:PHE:CE2	2.48	0.48
1:A:190:TYR:HD1	1:A:205:ILE:HG21	1.79	0.48
1:A:831:SER:O	1:A:835:THR:HG23	2.14	0.48
1:A:869:ALA:O	1:A:873:LEU:HD13	2.12	0.48
1:A:1168:CYS:SG	1:A:1229:ARG:HD2	2.53	0.48
1:A:1172:ARG:HD3	1:A:1198:GLU:HB2	1.96	0.48
1:A:1886:ASN:HB2	1:A:1923:ALA:HB3	1.94	0.48
1:A:2236:ILE:HG23	1:A:2245:TYR:CD2	2.48	0.48
1:A:2329:LEU:HB3	1:A:2334:TYR:CE2	2.48	0.48
1:A:128:ASN:HB3	1:A:238:ASN:HB2	1.94	0.48
1:A:148:SER:O	1:A:148:SER:OG	2.31	0.48
1:A:1030:LEU:HG	1:A:1612:ILE:HD11	1.95	0.48
1:A:1113:ILE:HA	1:A:1280:LYS:HD3	1.96	0.48
1:A:1302:PRO:HB2	1:A:1304:ILE:HG13	1.96	0.48
1:A:1541:LEU:HG	1:A:1555:GLY:O	2.13	0.48
1:A:1592:LYS:HG3	1:A:1602:ASN:HD22	1.78	0.48
1:A:1925:ASP:HB2	1:A:1943:TYR:CD1	2.49	0.48
1:A:2060:ILE:HA	1:A:2069:TYR:HA	1.95	0.48
1:A:127:VAL:HG12	1:A:236:SER:OG	2.13	0.48
1:A:1441:SER:OG	1:A:1499:TYR:O	2.31	0.48
1:A:1619:ILE:CG2	1:A:1641:THR:HG23	2.26	0.48
1:A:1783:PHE:N	1:A:1791:ILE:O	2.38	0.48
1:A:1928:GLY:O	1:A:1939:PHE:N	2.45	0.48
1:A:1990:PHE:HA	1:A:1998:PHE:O	2.13	0.48
1:A:961:ASN:ND2	1:A:1653:ARG:HH12	2.11	0.48
1:A:1220:LEU:HA	1:A:1298:SER:O	2.14	0.48
1:A:2016:LYS:NZ	1:A:2054:ALA:HB3	2.28	0.48
1:A:2025:GLU:OE2	1:A:2025:GLU:N	2.46	0.48
1:A:2063:PHE:O	1:A:2066:LYS:HD2	2.13	0.48
1:A:2329:LEU:HB3	1:A:2334:TYR:HE2	1.78	0.48
1:A:122:ASN:OD1	1:A:364:LEU:HB2	2.13	0.47
1:A:1691:LYS:HG3	1:A:1717:GLU:O	2.13	0.47
1:A:2047:LEU:HD12	1:A:2055:LEU:HD13	1.95	0.47
1:A:404:ILE:O	1:A:408:TYR:HD1	1.97	0.47
1:A:1569:PHE:CD2	1:A:1585:PHE:HB2	2.48	0.47
1:A:2288:GLU:N	1:A:2288:GLU:OE1	2.46	0.47



		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:817:GLU:O	1:A:820:VAL:HG13	2.14	0.47
1:A:1004:ASP:CB	1:A:1007:LYS:HB2	2.44	0.47
1:A:1252:LEU:HD23	1:A:1253:ASP:N	2.28	0.47
1:A:1379:GLU:HB2	1:A:1382:LYS:O	2.14	0.47
1:A:1857:PHE:CE1	1:A:1864:LYS:HE2	2.49	0.47
1:A:2150:PHE:HA	1:A:2184:GLY:O	2.14	0.47
1:A:194:LYS:HD2	1:A:194:LYS:HA	1.75	0.47
1:A:1125:PHE:HB3	1:A:1248:GLY:HA3	1.97	0.47
1:A:1509:TYR:OH	1:A:1548:LYS:O	2.32	0.47
1:A:2227:PRO:HG3	1:A:2233:TYR:CE1	2.50	0.47
1:A:174:LYS:HD3	1:A:177:GLN:NE2	2.29	0.47
1:A:1909:PHE:HA	1:A:1922:GLU:O	2.15	0.47
1:A:2347:VAL:HG22	1:A:2354:TYR:HB2	1.95	0.47
1:A:186:PHE:HB2	1:A:209:TYR:CE2	2.49	0.47
1:A:547:ASP:HB3	1:A:758:HIS:ND1	2.30	0.47
1:A:319:GLU:HG2	1:A:333:SER:HA	1.97	0.47
1:A:1139:LEU:HD11	1:A:1218:LYS:HZ1	1.70	0.47
1:A:1322:GLY:H	1:A:1324:TYR:HE2	1.63	0.47
1:A:1477:ASN:OD1	1:A:1478:CYS:N	2.46	0.47
1:A:1876:SER:O	1:A:1893:GLY:HA2	2.15	0.47
1:A:1968:LYS:HE2	1:A:1983:ASP:HA	1.97	0.47
1:A:2070:PHE:HA	1:A:2075:THR:O	2.14	0.47
1:A:889:ASP:OD1	1:A:889:ASP:N	2.48	0.47
1:A:1343:ASP:OD2	1:A:1343:ASP:N	2.40	0.47
1:A:1614:SER:OG	1:A:1615:GLY:N	2.47	0.47
1:A:1847:LYS:HG3	1:A:1849:PRO:HD2	1.97	0.47
1:A:1968:LYS:HD2	1:A:1982:SER:C	2.35	0.47
1:A:415:LEU:HG	1:A:419:ILE:HD11	1.95	0.47
1:A:560:LYS:O	1:A:564:LEU:HB2	2.14	0.47
1:A:881:GLU:HG2	1:A:905:GLU:CB	2.39	0.47
1:A:1140:LEU:C	1:A:1142:ASP:H	2.18	0.47
1:A:1297:ARG:HB2	1:A:1324:TYR:HA	1.97	0.47
1:A:2193:VAL:HG12	1:A:2195:VAL:HG22	1.97	0.47
1:A:180:TYR:CE1	1:A:455:LEU:HD13	2.50	0.47
1:A:251:VAL:HG22	1:A:401:ILE:HD12	1.97	0.47
1:A:608:LEU:HD12	1:A:609:PHE:N	2.30	0.47
1:A:1811:ASN:OD1	1:A:1812:TYR:N	2.48	0.47
1:A:1287:ASN:OD1	1:A:1316:SER:HB2	2.15	0.46
1:A:1600:LYS:HD2	1:A:1600:LYS:HA	1.65	0.46
1:A:1996:LYS:HG2	1:A:2025:GLU:HB2	1.96	0.46
1:A:1227:PRO:HG2	1:A:1283:TYR:CG	2.50	0.46



		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:1549:ASN:HB3	1:A:1597:LYS:NZ	2.30	0.46
1:A:2043:HIS:HB2	1:A:2051:GLU:HG2	1.97	0.46
1:A:6:ARG:NH1	1:A:28:LEU:O	2.47	0.46
1:A:149:ALA:O	1:A:153:THR:HG22	2.15	0.46
1:A:218:ILE:O	1:A:218:ILE:HG22	2.15	0.46
1:A:465:THR:HG22	1:A:469:LEU:HD22	1.96	0.46
1:A:1566:ILE:HG13	1:A:1566:ILE:O	2.15	0.46
1:A:1882:ILE:HB	1:A:1887:TYR:HE2	1.80	0.46
1:A:114:TYR:CD2	1:A:290:LEU:HG	2.50	0.46
1:A:286:ASP:O	1:A:288:ASP:N	2.48	0.46
1:A:948:LYS:HD2	1:A:948:LYS:HA	1.46	0.46
1:A:1514:LEU:HD23	1:A:1532:TYR:CB	2.45	0.46
1:A:1229:ARG:HD3	1:A:1231:PHE:CE1	2.51	0.46
1:A:1587:GLU:HA	1:A:1591:ILE:HG22	1.98	0.46
1:A:183:GLN:NE2	1:A:261:GLU:O	2.44	0.46
1:A:553:SER:O	1:A:555:ASN:N	2.49	0.46
1:A:703:SER:O	1:A:703:SER:OG	2.30	0.46
1:A:721:LYS:HE3	1:A:721:LYS:HB3	1.55	0.46
1:A:1139:LEU:CD1	1:A:1218:LYS:CE	2.85	0.46
1:A:1908:TYR:CZ	1:A:1910:ALA:HB2	2.51	0.46
1:A:1979:TYR:HD2	1:A:1987:GLN:HB2	1.81	0.46
1:A:40:ASN:OD1	1:A:41:THR:N	2.47	0.46
1:A:270:ASP:OD2	1:A:385:ASN:ND2	2.49	0.46
1:A:608:LEU:HD12	1:A:609:PHE:H	1.80	0.46
1:A:668:ASP:OD2	1:A:668:ASP:N	2.45	0.46
1:A:1390:ILE:HG22	1:A:1392:PHE:CE2	2.51	0.46
1:A:2213:ILE:HD13	1:A:2213:ILE:HA	1.79	0.46
1:A:939:ASP:HB3	1:A:948:LYS:HD2	1.98	0.46
1:A:1496:ILE:HG22	1:A:1497:LYS:H	1.80	0.46
1:A:1686:ASP:OD1	1:A:1712:ASN:HB3	2.16	0.46
2:K:153:PHE:HZ	2:K:164:ASN:ND2	2.08	0.46
1:A:991:TYR:O	1:A:1011:LEU:HD11	2.15	0.46
1:A:1197:ARG:NH2	1:A:1197:ARG:CG	2.73	0.46
1:A:1625:ILE:N	1:A:1633:GLN:O	2.45	0.46
1:A:1825:TYR:O	1:A:1833:VAL:HG23	2.16	0.46
1:A:1930:LEU:N	1:A:1937:TYR:O	2.46	0.46
1:A:1981:ASN:N	1:A:1985:ILE:O	2.44	0.46
1:A:1045:SER:O	1:A:1047:LYS:N	2.44	0.46
1:A:1321:GLY:HA3	1:A:1341:GLU:CD	2.36	0.46
1:A:1341:GLU:HG2	1:A:1342:ASN:H	1.81	0.46
1:A:1930:LEU:HB2	1:A:1939:PHE:HE2	1.80	0.46



Atom 1	Atom 2	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:2245:TYR:HE1	1:A:2257:ILE:HG12	1.81	0.46
1:A:576:ARG:HG3	1:A:578:TYR:CZ	2.51	0.45
1:A:597:ASN:ND2	1:A:762:TRP:HH2	2.14	0.45
1:A:1152:VAL:HG22	1:A:1226:ALA:HB1	1.97	0.45
1:A:1162:SER:HA	1:A:1212:GLU:HG3	1.98	0.45
1:A:1171:TRP:CZ2	1:A:1195:THR:HG21	2.51	0.45
1:A:4:VAL:HB	1:A:8:GLN:HB3	1.97	0.45
1:A:1532:TYR:O	1:A:1532:TYR:CG	2.69	0.45
1:A:1885:LYS:HB3	1:A:1922:GLU:HG3	1.98	0.45
1:A:436:LEU:HD22	1:A:448:ILE:HG23	1.98	0.45
1:A:1955:GLU:OE1	1:A:1956:VAL:N	2.49	0.45
1:A:2030:VAL:HG11	1:A:2068:TYR:CE1	2.52	0.45
1:A:2308:HIS:CG	1:A:2309:GLN:N	2.85	0.45
1:A:2321:ILE:HB	1:A:2323:TYR:CZ	2.50	0.45
1:A:63:TYR:N	1:A:63:TYR:CD1	2.84	0.45
1:A:106:GLN:NE2	1:A:227:GLU:O	2.49	0.45
1:A:410:ILE:HD12	1:A:490:ILE:HD13	1.97	0.45
1:A:634:LYS:HE3	1:A:634:LYS:HB2	1.58	0.45
1:A:1532:TYR:O	1:A:1532:TYR:CD2	2.70	0.45
1:A:1667:SER:O	1:A:1667:SER:OG	2.26	0.45
1:A:1712:ASN:O	1:A:1760:LYS:HE3	2.16	0.45
1:A:2049:ASN:ND2	1:A:2055:LEU:HD11	2.26	0.45
1:A:6:ARG:HA	1:A:31:LEU:HD23	1.99	0.45
1:A:400:LEU:HD12	1:A:478:ALA:CB	2.47	0.45
1:A:521:TRP:HA	1:A:521:TRP:HE3	1.81	0.45
1:A:1096:PRO:HB2	1:A:1100:ILE:HG12	1.99	0.45
1:A:1228:ASP:O	1:A:1284:GLU:N	2.40	0.45
1:A:1289:ARG:HH21	1:A:1318:TYR:HD1	1.64	0.45
1:A:1380:ASP:O	1:A:1381:ASN:ND2	2.49	0.45
1:A:1381:ASN:O	1:A:1391:ASN:HA	2.17	0.45
1:A:1382:LYS:HE3	1:A:1382:LYS:HB3	1.57	0.45
1:A:1545:ILE:HG12	1:A:1545:ILE:O	2.16	0.45
1:A:132:ASP:HB3	1:A:135:ALA:HB3	1.98	0.45
1:A:138:ILE:HG21	1:A:265:LEU:HD21	1.99	0.45
1:A:217:ASP:OD1	1:A:218:ILE:N	2.50	0.45
1:A:311:VAL:HG12	1:A:311:VAL:O	2.17	0.45
1:A:612:ASN:OD1	1:A:612:ASN:N	2.29	0.45
1:A:870:LEU:N	1:A:870:LEU:HD23	2.31	0.45
1:A:2067:ILE:HD12	1:A:2114:ASP:O	2.15	0.45
1:A:2130:PHE:HB3	1:A:2157:LEU:HA	1.98	0.45
1:A:278:LYS:HE3	1:A:278:LYS:HB2	1.55	0.45



A + a 1		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:338:THR:O	1:A:338:THR:OG1	2.27	0.45
1:A:746:ARG:HG2	1:A:762:TRP:CE3	2.52	0.45
1:A:1131:ALA:HA	1:A:1148:GLN:NE2	2.32	0.45
1:A:1483:GLY:HA3	1:A:1498:VAL:HG12	1.99	0.45
1:A:2037:PHE:CG	1:A:2096:ALA:HB2	2.52	0.45
1:A:166:PHE:CG	1:A:166:PHE:O	2.70	0.45
1:A:800:THR:O	1:A:804:GLU:HG3	2.17	0.45
1:A:1434:LEU:HD22	1:A:1487:SER:HB2	1.98	0.45
1:A:251:VAL:CG2	1:A:401:ILE:HD12	2.47	0.45
1:A:1121:VAL:HG13	1:A:1279:LEU:HD21	1.99	0.45
1:A:1132:GLU:HG2	1:A:1207:LEU:HD11	1.98	0.45
1:A:1375:LYS:O	1:A:1385:LEU:HA	2.17	0.45
1:A:226:GLU:O	1:A:228:SER:N	2.49	0.45
1:A:559:ASP:OD1	1:A:560:LYS:N	2.50	0.45
1:A:1548:LYS:HD3	1:A:1548:LYS:HA	1.63	0.45
1:A:1689:VAL:CG1	1:A:1716:PRO:HG3	2.46	0.45
1:A:1738:SER:HB3	1:A:1787:ASP:OD2	2.17	0.45
1:A:2182:ILE:HB	1:A:2185:GLN:HB2	1.99	0.45
2:K:169:GLU:OE1	2:K:169:GLU:N	2.45	0.45
1:A:247:LYS:HB3	1:A:247:LYS:HE3	1.47	0.44
1:A:264:ASN:HD21	1:A:466:THR:HG21	1.81	0.44
1:A:623:ASN:OD1	1:A:624:PRO:HD2	2.17	0.44
1:A:881:GLU:O	1:A:903:ASP:HA	2.17	0.44
1:A:1012:VAL:C	1:A:1014:THR:H	2.19	0.44
1:A:1092:ILE:H	1:A:1092:ILE:HG13	1.52	0.44
1:A:1227:PRO:HG2	1:A:1283:TYR:CD1	2.52	0.44
1:A:1507:PHE:CD1	1:A:1507:PHE:N	2.84	0.44
1:A:1994:ASN:N	1:A:1994:ASN:OD1	2.50	0.44
1:A:470:SER:HA	1:A:474:ILE:HG21	1.99	0.44
1:A:959:THR:HG22	1:A:959:THR:O	2.18	0.44
1:A:1179:HIS:HD1	1:A:1188:PHE:HD1	1.64	0.44
1:A:1401:GLY:HA2	1:A:1421:LEU:HD12	1.99	0.44
1:A:1495:ILE:O	1:A:1496:ILE:HD13	2.17	0.44
1:A:1962:ASP:OD1	1:A:1963:THR:N	2.50	0.44
1:A:2044:ASP:HB3	1:A:2046:ASP:OD2	2.16	0.44
1:A:220:GLU:H	1:A:220:GLU:HG2	1.25	0.44
1:A:288:ASP:HB2	1:A:516:GLU:HG2	1.98	0.44
1:A:1736:ASP:OD2	1:A:1740:ARG:NH1	2.50	0.44
1:A:1980:PHE:CD1	1:A:1986:MET:HA	2.53	0.44
1:A:2275:GLY:N	1:A:2286:PHE:O	2.28	0.44
1:A:830:ILE:O	1:A:833:ILE:HG22	2.18	0.44



Atom 1	Atom 2	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:1231:PHE:CE1	1:A:1281:PRO:HB3	2.52	0.44
1:A:2098:ALA:O	1:A:2100:ILE:CG1	2.54	0.44
2:K:141:TYR:CE1	2:K:152:ARG:HB3	2.52	0.44
1:A:923:ALA:O	1:A:927:THR:OG1	2.18	0.44
1:A:1317:PHE:HD1	1:A:1345:TRP:CZ3	2.35	0.44
1:A:1486:VAL:O	1:A:1486:VAL:HG23	2.18	0.44
1:A:2037:PHE:CD2	1:A:2096:ALA:HB2	2.52	0.44
1:A:95:GLU:HB3	1:A:97:ASN:HD21	1.82	0.44
1:A:236:SER:OG	1:A:236:SER:O	2.25	0.44
1:A:958:ASN:C	1:A:960:LEU:H	2.21	0.44
1:A:1011:LEU:O	1:A:1015:ALA:CB	2.66	0.44
1:A:1102:ALA:HB1	1:A:1124:TYR:CE2	2.51	0.44
1:A:1291:SER:HA	1:A:1318:TYR:CD2	2.53	0.44
1:A:1929:LYS:HD3	1:A:1952:LEU:HD21	2.00	0.44
1:A:273:ARG:HE	1:A:273:ARG:HB3	1.57	0.44
1:A:378:PHE:HZ	1:A:499:LEU:O	2.00	0.44
1:A:495:LEU:HD23	1:A:495:LEU:H	1.82	0.44
1:A:870:LEU:HD22	1:A:885:ILE:HD11	1.99	0.44
1:A:1289:ARG:NH1	1:A:1316:SER:HB3	2.32	0.44
1:A:1908:TYR:O	1:A:1923:ALA:HA	2.18	0.44
1:A:841:ARG:O	1:A:842:ILE:HD13	2.17	0.44
1:A:941:VAL:HG13	1:A:941:VAL:O	2.18	0.44
1:A:1289:ARG:HH11	1:A:1316:SER:HB3	1.83	0.44
1:A:1606:ILE:O	1:A:1607:LEU:HD13	2.18	0.44
1:A:48:LYS:O	1:A:52:ILE:HG13	2.18	0.44
1:A:101:ILE:HD12	1:A:284:TYR:CE1	2.52	0.44
1:A:166:PHE:O	1:A:166:PHE:CD2	2.70	0.44
1:A:415:LEU:O	1:A:419:ILE:HG13	2.18	0.44
1:A:578:TYR:HB3	1:A:644:ARG:CB	2.48	0.44
1:A:1242:ARG:HE	1:A:1266:ARG:HH11	1.66	0.44
1:A:1440:ASN:O	1:A:1443:SER:OG	2.28	0.44
1:A:1523:ASP:O	1:A:1525:VAL:HG23	2.18	0.44
1:A:1652:ASN:ND2	1:A:1657:ILE:CD1	2.81	0.44
1:A:1930:LEU:O	1:A:1936:VAL:HA	2.18	0.44
1:A:1930:LEU:HD21	1:A:1932:ILE:HG23	2.00	0.44
1:A:2235:GLY:HA2	1:A:2245:TYR:CE2	2.53	0.44
1:A:2306:PHE:CD1	1:A:2320:SER:HB2	2.53	0.44
1:A:548:ASP:OD2	1:A:549:ASN:N	2.50	0.43
1:A:900:ARG:HG2	1:A:911:PHE:HA	2.00	0.43
1:A:1458:GLN:HG3	1:A:1461:ILE:HG12	2.00	0.43
1:A:1950:GLN:O	1:A:1957:TYR:N	2.49	0.43



Atom 1	Atom 2	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:2092:ASP:CG	1:A:2099:SER:HB2	2.39	0.43
1:A:222:ASN:HA	1:A:225:ILE:HD12	2.00	0.43
1:A:317:GLN:O	1:A:321:ILE:HG13	2.18	0.43
1:A:680:ILE:HG22	1:A:727:LEU:HD23	1.99	0.43
1:A:986:MET:HE3	1:A:990:VAL:HG23	2.00	0.43
1:A:1493:VAL:HG12	1:A:1511:SER:HG	1.83	0.43
1:A:1652:ASN:OD1	1:A:1652:ASN:N	2.51	0.43
1:A:1683:TYR:HE1	1:A:1711:ALA:HB1	1.83	0.43
1:A:1206:VAL:O	1:A:1254:ARG:NH2	2.52	0.43
1:A:1541:LEU:CD1	1:A:1557:TYR:CB	2.96	0.43
1:A:1541:LEU:HD13	1:A:1557:TYR:HB3	1.99	0.43
1:A:2102:ILE:CD1	1:A:2110:TYR:C	2.83	0.43
1:A:806:ARG:O	1:A:809:SER:N	2.50	0.43
1:A:1543:PHE:HA	1:A:1554:ASN:OD1	2.18	0.43
1:A:2102:ILE:HD11	1:A:2109:LYS:O	2.18	0.43
1:A:2169:TYR:CE1	1:A:2230:LYS:HE2	2.53	0.43
1:A:2216:SER:HB2	1:A:2220:SER:HA	2.01	0.43
1:A:2225:PHE:CE1	1:A:2227:PRO:HB3	2.52	0.43
1:A:384:ILE:HG12	1:A:386:GLN:HG3	2.00	0.43
1:A:617:GLU:OE1	1:A:634:LYS:HA	2.19	0.43
1:A:705:SER:HB2	1:A:790:VAL:HG11	1.99	0.43
1:A:1172:ARG:HE	1:A:1201:LEU:HG	1.83	0.43
1:A:1484:LEU:CD2	1:A:1528:LEU:HD21	2.49	0.43
1:A:1788:LYS:HB3	1:A:1791:ILE:HD11	2.00	0.43
1:A:2265:TYR:HE1	1:A:2279:ILE:HD12	1.82	0.43
1:A:138:ILE:HD13	1:A:138:ILE:HA	1.79	0.43
1:A:385:ASN:OD1	1:A:385:ASN:N	2.41	0.43
1:A:1289:ARG:HA	1:A:1289:ARG:HD2	1.76	0.43
1:A:2013:ILE:HD12	1:A:2018:PHE:HD2	1.83	0.43
1:A:313:TRP:HA	1:A:313:TRP:CE3	2.54	0.43
1:A:648:LYS:HG3	1:A:649:LEU:N	2.33	0.43
1:A:848:LEU:HD21	1:A:1807:GLU:HB3	1.99	0.43
1:A:929:GLU:OE1	1:A:962:ALA:HB3	2.18	0.43
1:A:1094:LEU:HB2	1:A:1362:LYS:NZ	2.33	0.43
1:A:1187:HIS:HA	1:A:1267:PHE:HB2	2.00	0.43
1:A:1416:VAL:HB	1:A:1429:LEU:HD23	2.00	0.43
1:A:1470:GLY:HA3	1:A:1489:LEU:HA	1.99	0.43
1:A:1646:TYR:O	1:A:1647:THR:OG1	2.32	0.43
1:A:1806:VAL:C	1:A:1808:GLY:H	2.21	0.43
1:A:1810:LEU:O	1:A:1810:LEU:HG	2.19	0.43
1:A:1879:GLU:OE1	1:A:1909:PHE:HE1	2.01	0.43



		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:1913:ASP:HA	1:A:1917:GLU:HA	1.99	0.43
1:A:56:THR:CG2	1:A:72:LEU:HB3	2.49	0.43
1:A:2000:PHE:HA	1:A:2005:VAL:O	2.19	0.43
1:A:558:THR:HG21	1:A:620:TYR:CE1	2.53	0.43
1:A:922:TYR:O	1:A:926:ILE:HB	2.19	0.43
1:A:1061:ILE:O	1:A:1522:LYS:CE	2.64	0.43
1:A:1115:ARG:HG2	1:A:1124:TYR:CD1	2.50	0.43
1:A:1807:GLU:H	1:A:1807:GLU:HG3	1.48	0.43
1:A:2169:TYR:CZ	1:A:2230:LYS:HE2	2.54	0.43
1:A:527:ARG:O	1:A:527:ARG:HD3	2.19	0.43
1:A:832:ASN:O	1:A:836:GLN:HG2	2.19	0.43
1:A:1025:THR:HA	1:A:1621:GLN:HE22	1.84	0.43
1:A:1158:PHE:HB2	1:A:1292:LEU:HA	2.00	0.43
1:A:1237:TRP:CD1	1:A:1272:ALA:HB3	2.53	0.43
1:A:1383:ILE:HD11	1:A:1421:LEU:HD21	2.00	0.43
1:A:1457:LEU:HD22	1:A:1457:LEU:HA	1.80	0.43
1:A:1533:LEU:HD13	1:A:1534:LYS:N	2.34	0.43
1:A:1582:LEU:HA	1:A:1632:ILE:HD11	2.01	0.43
1:A:2011:THR:O	1:A:2017:TYR:HA	2.19	0.43
1:A:2273:GLN:HG3	1:A:2274:TYR:N	2.34	0.43
1:A:161:LEU:HD23	1:A:161:LEU:O	2.18	0.42
1:A:217:ASP:HB3	1:A:220:GLU:CG	2.49	0.42
1:A:457:VAL:HG22	1:A:463:ALA:O	2.19	0.42
1:A:979:LEU:HD23	1:A:1662:TYR:CE2	2.54	0.42
1:A:1029:GLY:C	1:A:1031:PRO:HD3	2.40	0.42
1:A:1505:PRO:HA	1:A:1506:PRO:HD3	1.86	0.42
1:A:1996:LYS:HE2	1:A:2025:GLU:O	2.19	0.42
1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HD2	1.75	0.42
1:A:1163:ILE:HD11	1:A:1211:LYS:O	2.18	0.42
1:A:1594:ILE:H	1:A:1594:ILE:HG13	1.57	0.42
1:A:1729:LYS:HD3	1:A:1729:LYS:HA	1.83	0.42
1:A:1882:ILE:HB	1:A:1887:TYR:CE2	2.54	0.42
1:A:654:HIS:CE1	1:A:758:HIS:CE1	3.07	0.42
1:A:784:LYS:HE2	1:A:784:LYS:HB2	1.76	0.42
1:A:1001:THR:HG23	1:A:1002:ILE:N	2.34	0.42
1:A:1857:PHE:HZ	1:A:1895:LEU:HD22	1.84	0.42
1:A:926:ILE:O	1:A:930:ILE:HG13	2.19	0.42
1:A:1089:GLY:C	1:A:1091:SER:H	2.23	0.42
1:A:1054:ASP:N	1:A:1055:PRO:HD2	2.34	0.42
1:A:1273:ASP:OD2	1:A:1275:VAL:HG13	2.20	0.42
1:A:1752:LEU:HD23	1:A:1752:LEU:HA	1.89	0.42



		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:1168:CYS:SG	1:A:1203:ILE:HB	2.59	0.42
1:A:1826:ILE:HG22	1:A:1832:MET:HA	2.01	0.42
1:A:1648:LEU:HB2	1:A:1656:MET:SD	2.59	0.42
1:A:2040:PHE:HB3	1:A:2052:GLY:O	2.19	0.42
1:A:2094:ASN:OD1	1:A:2094:ASN:N	2.52	0.42
1:A:2328:ASP:HA	1:A:2332:LYS:O	2.20	0.42
2:K:167:THR:HG23	2:K:170:GLU:HG2	2.01	0.42
1:A:121:VAL:HG11	1:A:362:LEU:O	2.20	0.42
1:A:925:HIS:O	1:A:929:GLU:HG2	2.19	0.42
1:A:1567:LEU:HD23	1:A:1683:TYR:HD2	1.85	0.42
1:A:1645:LYS:O	1:A:1658:VAL:HA	2.20	0.42
1:A:1946:ALA:HB3	1:A:1950:GLN:NE2	2.35	0.42
1:A:1973:ILE:HD11	1:A:1978:PHE:HB2	2.02	0.42
1:A:2102:ILE:HD13	1:A:2102:ILE:HA	1.67	0.42
1:A:781:PHE:HE2	1:A:783:PRO:HA	1.85	0.42
1:A:1317:PHE:CD1	1:A:1345:TRP:HZ3	2.38	0.42
1:A:1520:ILE:CG2	1:A:1526:ILE:CG2	2.97	0.42
1:A:1579:SER:OG	1:A:1580:ASP:N	2.53	0.42
1:A:1625:ILE:HG13	1:A:1633:GLN:HB3	2.01	0.42
1:A:2092:ASP:OD2	1:A:2099:SER:N	2.38	0.42
1:A:2125:ILE:HG22	1:A:2126:ASN:H	1.85	0.42
1:A:301:ILE:HG21	1:A:347:PHE:HE1	1.83	0.42
1:A:1233:TRP:CD1	1:A:1233:TRP:N	2.88	0.42
1:A:1459:LYS:O	1:A:1460:ASN:ND2	2.52	0.42
1:A:2276:TYR:CE1	1:A:2300:PRO:HD2	2.55	0.42
1:A:15:VAL:HG12	1:A:16:ARG:O	2.20	0.41
1:A:251:VAL:HG23	1:A:251:VAL:O	2.20	0.41
1:A:481:ASP:N	1:A:481:ASP:OD1	2.53	0.41
1:A:809:SER:O	1:A:814:ILE:HD13	2.20	0.41
1:A:1016:LEU:HD23	1:A:1017:ASP:N	2.35	0.41
1:A:1139:LEU:HD22	1:A:1139:LEU:HA	1.88	0.41
1:A:1170:ILE:HB	1:A:1203:ILE:HD11	2.02	0.41
1:A:1256:ARG:NH2	1:A:1264:TYR:HE1	2.17	0.41
1:A:1705:ILE:HG12	1:A:1733:ASN:O	2.20	0.41
1:A:1776:THR:OG1	1:A:1777:ILE:N	2.53	0.41
1:A:18:ARG:NH1	1:A:1668:GLY:O	2.53	0.41
1:A:292:GLY:O	1:A:361:PHE:HD1	2.03	0.41
1:A:867:SER:OG	1:A:982:LEU:HD12	2.20	0.41
1:A:1430:ILE:HG12	1:A:1463:TYR:CB	2.50	0.41
1:A:1810:LEU:HA	1:A:1812:TYR:CE2	2.55	0.41
1:A:1837:VAL:CG1	1:A:1839:ILE:HG13	2.49	0.41



		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:2005:VAL:HG22	1:A:2006:MET:H	1.85	0.41
1:A:1494:LEU:HD12	1:A:1496:ILE:HD11	2.02	0.41
1:A:1531:TYR:CD1	1:A:1531:TYR:C	2.94	0.41
1:A:2057:TYR:O	1:A:2074:PHE:HD1	2.02	0.41
1:A:5:ASN:O	1:A:8:GLN:N	2.44	0.41
1:A:89:SER:OG	1:A:90:ASN:N	2.53	0.41
1:A:1223:LEU:HB3	1:A:1224:PRO:HD2	2.03	0.41
1:A:1559:ASP:CG	1:A:1560:GLU:N	2.72	0.41
1:A:1597:LYS:HB2	1:A:1597:LYS:HE3	1.58	0.41
1:A:1697:ASN:OD1	1:A:1697:ASN:C	2.58	0.41
1:A:101:ILE:HD12	1:A:284:TYR:HE1	1.85	0.41
1:A:325:LYS:HG2	1:A:351:LEU:HD22	2.03	0.41
1:A:627:SER:C	1:A:628:GLU:HG2	2.41	0.41
1:A:1104:ILE:HG13	1:A:1105:PRO:CD	2.44	0.41
1:A:1143:LYS:HA	1:A:1143:LYS:HD3	1.72	0.41
1:A:1458:GLN:NE2	1:A:1458:GLN:HA	2.36	0.41
1:A:1918:ASN:HD22	1:A:1924:ILE:HD13	1.86	0.41
1:A:2304:LYS:HE3	1:A:2320:SER:OG	2.20	0.41
1:A:991:TYR:CB	1:A:1015:ALA:HB1	2.51	0.41
1:A:1059:GLN:HG3	1:A:1060:GLU:H	1.86	0.41
1:A:1288:ILE:HG22	1:A:1290:ILE:CD1	2.50	0.41
1:A:1492:VAL:HG23	1:A:1512:ASN:HA	2.03	0.41
1:A:1558:LEU:HG	1:A:1562:GLY:O	2.20	0.41
1:A:1663:ASN:CA	1:A:1671:SER:HB2	2.45	0.41
1:A:1971:ASN:O	1:A:1978:PHE:N	2.36	0.41
1:A:2105:ILE:HG22	1:A:2106:ASN:N	2.35	0.41
1:A:2148:ASN:HB3	1:A:2185:GLN:HG3	2.03	0.41
1:A:2227:PRO:HD3	1:A:2232:ALA:HA	2.02	0.41
2:K:124:PHE:HD1	2:K:124:PHE:N	2.19	0.41
1:A:5:ASN:OD1	1:A:5:ASN:N	2.52	0.41
1:A:95:GLU:HB3	1:A:97:ASN:ND2	2.36	0.41
1:A:1307:GLU:HA	1:A:1310:ARG:HD3	2.01	0.41
1:A:1549:ASN:HD22	1:A:1597:LYS:HZ2	1.67	0.41
1:A:1563:VAL:HA	1:A:1566:ILE:HG22	2.02	0.41
1:A:1586:LEU:HB3	1:A:1591:ILE:CG2	2.50	0.41
1:A:1845:TYR:HB2	1:A:1867:PHE:CZ	2.56	0.41
1:A:2049:ASN:HA	1:A:2053:GLU:OE1	2.19	0.41
2:K:149:GLN:HG2	2:K:150:CYS:N	2.34	0.41
1:A:441:ASN:OD1	1:A:443:GLU:N	2.44	0.41
1:A:517:LYS:HE3	1:A:517:LYS:HB2	1.73	0.41
1:A:1321:GLY:CA	1:A:1341:GLU:HB3	2.51	0.41



Atom-1	Atom-2	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (Å)	overlap (Å)
1:A:1981:ASN:HB3	1:A:1983:ASP:OD1	2.20	0.41
1:A:226:GLU:O	1:A:229:LEU:N	2.47	0.41
1:A:875:GLN:OE1	1:A:876:GLN:HG2	2.21	0.41
1:A:1343:ASP:HB2	1:A:1345:TRP:NE1	2.33	0.41
1:A:1817:ILE:HG12	1:A:1824:PHE:O	2.21	0.41
1:A:1907:LYS:HE2	1:A:1907:LYS:HB3	1.88	0.41
1:A:1928:GLY:H	1:A:1939:PHE:HB2	1.86	0.41
2:K:146[A]:GLN:HE21	2:K:146[A]:GLN:HB3	1.70	0.41
1:A:1198:GLU:HA	1:A:1199:PRO:HD3	1.64	0.41
1:A:1462:PRO:HB3	1:A:1475:PHE:CE1	2.56	0.41
1:A:1604:LYS:HB2	1:A:1604:LYS:HE3	1.71	0.41
1:A:788:ILE:H	1:A:788:ILE:HG12	1.61	0.40
1:A:1170:ILE:HD13	1:A:1263:PHE:CZ	2.56	0.40
1:A:1464:SER:HB2	1:A:1473:ASN:OD1	2.21	0.40
1:A:1484:LEU:HD23	1:A:1528:LEU:HD21	2.03	0.40
1:A:1558:LEU:HG	1:A:1562:GLY:C	2.42	0.40
1:A:1739:ILE:O	1:A:1739:ILE:HG12	2.21	0.40
1:A:1938:TYR:CG	1:A:1939:PHE:N	2.89	0.40
1:A:18:ARG:NH2	1:A:66:SER:HB3	2.36	0.40
1:A:257:GLN:HE21	1:A:257:GLN:HB2	1.71	0.40
1:A:383:ILE:HD13	1:A:383:ILE:HG21	1.78	0.40
1:A:682:LEU:HD23	1:A:682:LEU:HA	1.93	0.40
1:A:710:GLU:HA	1:A:715:LYS:HE3	2.01	0.40
1:A:1096:PRO:HB2	1:A:1100:ILE:CD1	2.51	0.40
1:A:1134:GLU:HB3	1:A:1138:THR:HG22	2.03	0.40
1:A:1509:TYR:CD2	1:A:1509:TYR:N	2.89	0.40
1:A:1678:SER:HA	1:A:1706:THR:HG23	2.03	0.40
1:A:890:ILE:HG22	1:A:890:ILE:O	2.21	0.40
1:A:1016:LEU:HG	1:A:1016:LEU:O	2.21	0.40
1:A:1492:VAL:HA	1:A:1512:ASN:HA	2.03	0.40
1:A:1624:PHE:CD2	1:A:1624:PHE:N	2.89	0.40
1:A:1949:TRP:HA	1:A:1957:TYR:O	2.22	0.40
1:A:1980:PHE:HB3	1:A:1984:GLY:HA2	2.02	0.40
1:A:2019:TYR:CE1	1:A:2031:PHE:HB2	2.57	0.40
1:A:741:ASN:HD21	1:A:776:LYS:HZ2	1.70	0.40
1:A:1098:ALA:HA	1:A:1225:ASN:ND2	2.37	0.40
1:A:1293:ASP:OD1	1:A:1293:ASP:N	2.46	0.40
1:A:1314:SER:O	1:A:1316:SER:N	2.55	0.40
1:A:1683:TYR:CE1	1:A:1711:ALA:HB1	2.56	0.40
1:A:2016:LYS:HE2	1:A:2053:GLU:CG	2.52	0.40
1:A:68:ARG:O	1:A:72:LEU:HG	2.22	0.40



Atom-1	Atom-2	Interatomic	Clash
	1100111 2	distance $(Å)$	overlap (Å)
1:A:379:ALA:O	1:A:381:GLY:N	2.51	0.40
1:A:444:ASN:O	1:A:448:ILE:HG12	2.22	0.40
1:A:1290:ILE:HG22	1:A:1292:LEU:HD21	2.04	0.40
1:A:1354:ARG:O	1:A:1356:VAL:HG23	2.21	0.40
1:A:1471:LYS:HE3	1:A:1471:LYS:HB2	1.77	0.40
1:A:1637:ILE:HD13	1:A:1685:ILE:HG21	2.03	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	Perce	entiles
1	А	2340/2375~(98%)	1845 (79%)	471 (20%)	24 (1%)	15	54
2	K	58/251~(23%)	47 (81%)	11 (19%)	0	100	100
All	All	2398/2626~(91%)	1892 (79%)	482 (20%)	24 (1%)	20	54

All (24) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	А	1197	ARG
1	А	1524	ASP
1	А	1670	ILE
1	А	1520	ILE
1	А	1640	ASN
1	А	1810	LEU
1	А	1531	TYR
1	А	1549	ASN
1	А	1652	ASN
1	А	1671	SER
1	А	2099	SER
1	А	940	THR



Mol	Chain	Res	Type
1	А	1143	LYS
1	А	1672	SER
1	А	1872	GLY
1	А	1009	VAL
1	А	1534	LYS
1	А	2102	ILE
1	А	1521	THR
1	А	941	VAL
1	А	1046	ILE
1	А	579	VAL
1	А	1012	VAL
1	А	1037	ILE

5.3.2 Protein sidechains (i)

In the following table, the Percentiles column shows the percent side chain 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	А	2054/2140~(96%)	1764 (86%)	290 (14%)	3 16
2	Κ	54/222~(24%)	46 (85%)	8 (15%)	3 14
All	All	2108/2362~(89%)	1810 (86%)	298 (14%)	6 16

All (298) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	А	17	PHE
1	А	20	GLN
1	А	39	GLU
1	А	60	ILE
1	А	61	ASP
1	А	63	TYR
1	А	70	LYS
1	А	76	LYS
1	А	81	THR
1	А	83	ILE
1	А	97	ASN



Mol	Chain	Res	Type
1	А	103	ILE
1	А	122	ASN
1	А	132	ASP
1	А	134	ASN
1	А	139	ASN
1	А	147	GLU
1	А	148	SER
1	А	153	THR
1	А	159	GLU
1	А	160	ASN
1	А	161	LEU
1	А	165	GLU
1	А	166	PHE
1	А	169	THR
1	А	173	ARG
1	А	185	ASN
1	А	194	LYS
1	А	203	ASP
1	А	220	GLU
1	А	242	ASN
1	А	243	PHE
1	А	247	LYS
1	А	248	THR
1	А	253	ASN
1	А	269	SER
1	А	272	LEU
1	А	273	ARG
1	А	274	VAL
1	А	277	LEU
1	А	286	ASP
1	А	288	ASP
1	А	289	MET
1	А	294	HIS
1	А	318	LEU
1	А	319	GLU
1	A	323	LYS
1	A	340	ASP
1	A	343	VAL
1	А	348	GLU
1	A	353	SER
1	A	367	ILE
1	А	383	ILE



Mol	Chain	Res	Type
1	А	396	CYS
1	А	400	LEU
1	А	401	ILE
1	А	411	LEU
1	А	414	THR
1	А	429	MET
1	А	464	ASN
1	А	466	THR
1	А	469	LEU
1	А	470	SER
1	А	474	ILE
1	А	490	ILE
1	А	492	THR
1	А	497	SER
1	А	501	ASN
1	А	513	THR
1	А	517	LYS
1	А	520	LEU
1	А	521	TRP
1	А	522	GLN
1	А	536	LYS
1	А	538	ASN
1	А	554	GLN
1	А	558	THR
1	А	563	LEU
1	А	585	LEU
1	А	615	ASP
1	А	618	VAL
1	А	621	TYR
1	А	640	ARG
1	А	650	THR
1	А	661	THR
1	А	672	LEU
1	A	703	SER
1	A	705	SER
1	A	709	GLU
1	A	730	SER
1	A	737	ILE
1	A	738	VAL
1	A	739	SER
1	A	746	ARG
1	А	772	ASP



Mol	Chain	Res	Type
1	А	782	ASN
1	А	784	LYS
1	А	819	LYS
1	А	820	VAL
1	А	824	GLU
1	А	828	ASN
1	А	839	GLU
1	А	846	LYS
1	А	852	SER
1	А	858	ASN
1	А	860	PHE
1	А	862	LEU
1	А	866	ILE
1	А	868	ASP
1	А	874	LYS
1	А	881	GLU
1	А	883	HIS
1	А	897	PHE
1	А	906	THR
1	А	908	GLU
1	А	911	PHE
1	А	926	ILE
1	А	939	ASP
1	А	942	ASN
1	А	947	LYS
1	А	948	LYS
1	А	951	LEU
1	А	955	HIS
1	А	958	ASN
1	А	960	LEU
1	А	964	PHE
1	А	968	SER
1	A	979	LEU
1	A	982	LEU
1	A	983	SER
1	A	984	VAL
1	А	997	THR
1	A	1000	ASN
1	А	1011	LEU
1	A	1014	THR
1	А	1016	LEU
1	А	1017	ASP



Mol	Chain	Res	Type
1	А	1018	GLU
1	А	1025	THR
1	А	1026	LEU
1	А	1030	LEU
1	А	1054	ASP
1	А	1092	ILE
1	А	1093	LEU
1	А	1094	LEU
1	А	1097	LEU
1	А	1124	TYR
1	А	1138	THR
1	А	1139	LEU
1	А	1142	ASP
1	А	1143	LYS
1	А	1158	PHE
1	А	1188	PHE
1	А	1194	THR
1	А	1196	TYR
1	А	1197	ARG
1	А	1198	GLU
1	А	1221	MET
1	А	1233	TRP
1	А	1252	LEU
1	А	1263	PHE
1	А	1265	TRP
1	А	1268	PHE
1	А	1275	VAL
1	А	1276	ILE
1	А	1277	THR
1	А	1323	THR
1	А	1339	LEU
1	А	1344	THR
1	А	1348	ASP
1	А	1349	VAL
1	А	1352	VAL
1	A	1361	ASP
1	А	1367	ASP
1	A	1409	ILE
1	А	1410	LEU
1	A	1411	GLU
1	А	1426	TYR
1	А	1430	ILE



Mol	Chain	Res	Type
1	А	1448	ILE
1	А	1457	LEU
1	А	1458	GLN
1	А	1460	ASN
1	А	1463	TYR
1	А	1467	ASP
1	А	1473	ASN
1	А	1480	THR
1	А	1497	LYS
1	А	1498	VAL
1	А	1500	MET
1	А	1507	PHE
1	А	1509	TYR
1	А	1513	ASP
1	А	1516	ASP
1	А	1520	ILE
1	А	1521	THR
1	А	1522	LYS
1	А	1531	TYR
1	А	1532	TYR
1	А	1534	LYS
1	А	1535	ASP
1	А	1540	SER
1	А	1541	LEU
1	А	1543	PHE
1	А	1545	ILE
1	А	1546	GLN
1	А	1549	ASN
1	А	1550	THR
1	А	1553	LEU
1	А	1557	TYR
1	A	1558	LEU
1	A	1560	GLU
1	A	1563	VAL
1	A	1566	ILE
1	A	1568	LYS
1	A	1580	ASP
1	А	1596	ILE
1	A	1598	SER
1	A	1611	PHE
1	A	1613	ILE
1	А	1616	THR



Mol	Chain	Res	Type
1	А	1617	THR
1	А	1624	PHE
1	А	1638	LYS
1	А	1639	PHE
1	А	1640	ASN
1	А	1643	GLU
1	А	1652	ASN
1	А	1662	TYR
1	А	1665	ASP
1	А	1672	SER
1	А	1678	SER
1	А	1691	LYS
1	А	1705	ILE
1	А	1706	THR
1	А	1712	ASN
1	А	1738	SER
1	А	1742	VAL
1	А	1745	ASN
1	А	1746	ASP
1	А	1753	MET
1	А	1773	LYS
1	А	1780	LYS
1	А	1798	SER
1	А	1800	PHE
1	А	1805	TYR
1	А	1807	GLU
1	А	1809	LEU
1	А	1812	TYR
1	А	1814	LEU
1	А	1817	ILE
1	А	1824	PHE
1	А	1834	SER
1	А	1836	LEU
1	A	1838	TYR
1	A	1852	ASN
1	A	1857	PHE
1	А	1871	ASN
1	A	1876	SER
1	A	1883	ASP
1	A	1890	SER
1	A	1916	ASP
1	А	1944	ARG



Mol	Chain	Res	Type
1	А	1959	PHE
1	А	1960	SER
1	А	1975	ASP
1	А	2051	GLU
1	А	2087	SER
1	А	2100	ILE
1	А	2102	ILE
1	А	2104	ILE
1	А	2111	TYR
1	А	2122	PHE
1	А	2130	PHE
1	А	2143	GLN
1	А	2154	GLU
1	А	2165	THR
1	А	2181	ASN
1	А	2202	PHE
1	А	2205	SER
1	А	2212	TRP
1	А	2214	TYR
1	А	2221	ASP
1	А	2231	LYS
1	А	2247	ASP
1	А	2254	THR
1	А	2259	PHE
1	А	2263	HIS
1	А	2337	THR
1	А	2363	LEU
2	K	121	LYS
2	K	124	PHE
2	K	142	PHE
2	K	146[A]	GLN
2	K	146[B]	GLN
2	K	164	ASN
2	K	167	THR
2	K	176	GLU

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (45) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	А	36	ASN
1	А	53	ASN
1	А	90	ASN



Mol	Chain	Res	Type
1	А	97	ASN
1	А	106	GLN
1	А	134	ASN
1	А	139	ASN
1	А	162	ASN
1	А	167	ASN
1	А	222	ASN
1	А	257	GLN
1	А	344	GLN
1	А	386	GLN
1	А	412	ASN
1	А	426	ASN
1	А	464	ASN
1	А	518	ASN
1	А	538	ASN
1	А	597	ASN
1	А	741	ASN
1	А	758	HIS
1	А	782	ASN
1	А	803	GLN
1	А	925	HIS
1	А	958	ASN
1	А	961	ASN
1	А	993	GLN
1	А	1127	HIS
1	А	1381	ASN
1	А	1400	ASN
1	А	1446	GLN
1	А	1473	ASN
1	А	1502	ASN
1	А	1549	ASN
1	А	1621	GLN
1	A	1709	HIS
1	A	1712	ASN
1	A	1828	ASN
1	A	1868	ASN
1	А	1886	ASN
1	А	1935	ASN
1	A	2148	ASN
1	A	2176	ASN
1	А	2298	ASN
1	А	2310	ASN



5.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates (i)

There are no monosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry (i)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers (i)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.



6 Map visualisation (i)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-31628. 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



X Index: 160

Y Index: 160





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: 136

Y Index: 184

Z Index: 164

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



The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.02. These images, in conjunction with the slice images, may facilitate assessment of whether an appropriate contour level has been provided.



6.5 Mask visualisation (i)

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



7 Map analysis (i)

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

7.1 Map-value distribution (i)



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



7.2 Volume estimate (i)



The volume at the recommended contour level is 111 nm^3 ; this corresponds to an approximate mass of 101 kDa.

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



7.3 Rotationally averaged power spectrum (i)



*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.312 ${\rm \AA^{-1}}$



8 Fourier-Shell correlation (i)

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-31628 and PDB model 7V1N. Per-residue inclusion information can be found in section 3 on page 4.

9.1 Map-model overlay (i)



The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.02 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.



9.2 Q-score mapped to coordinate model (i)



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

9.3 Atom inclusion mapped to coordinate model (i)



The images above show the model with each residue coloured according to its atom inclusion. This shows to what extent they are inside the map at the recommended contour level (0.02).



9.4 Atom inclusion (i)



At the recommended contour level, 66% of all backbone atoms, 63% of all non-hydrogen atoms, are inside the map.



9.5 Map-model fit summary (i)

The table lists the average atom inclusion at the recommended contour level (0.02) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	0.6310	0.4410
А	0.6361	0.4430
K	0.4316	0.3700



