



# Full wwPDB/EMDatabank EM Map/Model Validation Report ⓘ

Nov 20, 2017 – 07:58 PM EST

PDB ID : 5ND1  
EMDB ID: : EMD-3619  
Title : Viral evolution results in multiple, surface-allocated enzymatic activities in a fungal double-stranded RNA virus  
Authors : Mata, C.P.; Luque, D.; Gomez Blanco, J.; Rodriguez, J.M.; Suzuki, N.; Ghabrial, S.A.; Carrascosa, J.L.; Trus, B.L.; Caston, J.R.  
Deposited on : unknown  
Resolution : 3.70 Å(reported)

This is a Full wwPDB/EMDatabank EM Map/Model Validation Report  
for a publicly released PDB/EMDB entry.

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)  
A user guide is available at  
<http://wwpdb.org/validation/2016/EMValidationReportHelp>  
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

MolProbity : 4.02b-467  
Percentile statistics : 20161228.v01 (using entries in the PDB archive December 28th 2016)  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et. al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20030345

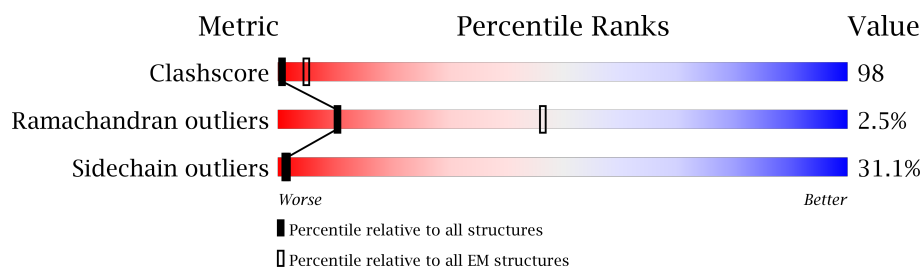
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*ELECTRON MICROSCOPY*

The reported resolution of this entry is 3.70 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	125131	1336
Ramachandran outliers	121729	1120
Sidechain outliers	121581	1026

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains. The red, orange, yellow and green segments on the bar indicate the fraction of residues that contain outliers for  $\geq 3$ , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. 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  $\leq 5\%$ .

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	1357	
2	B	1059	

## 2 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 14963 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 Capsid protein.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
1	A	972	Total	C	N	O	S	0	0
			7371	4561	1355	1400	55		

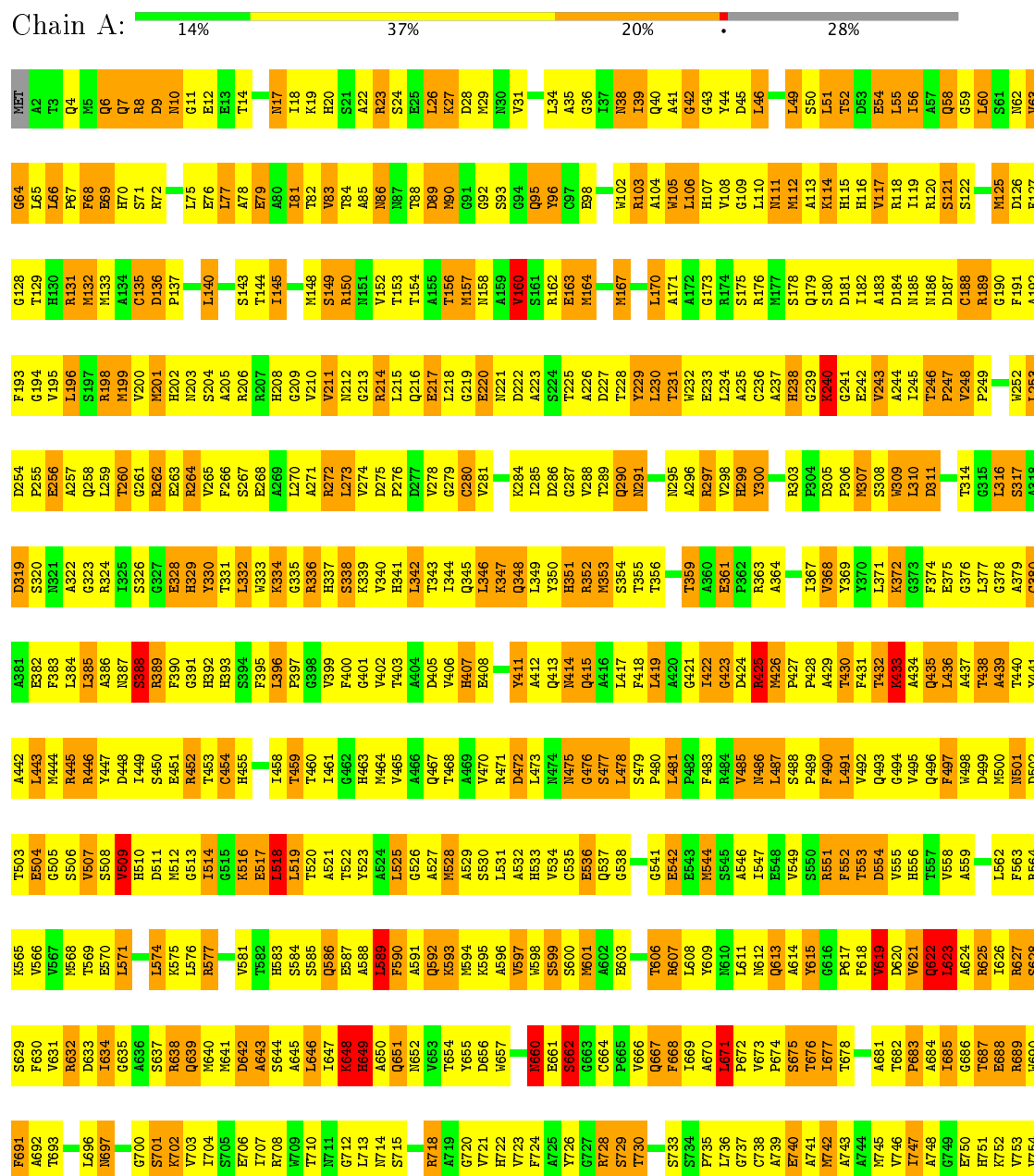
- Molecule 2 is a protein called Capsid protein.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
2	B	1005	Total	C	N	O	S	0	0
			7592	4717	1347	1480	48		

### 3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA and DNA 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. 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. 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: Capsid protein






GLY	S915	P838	L774	T627	G563	A497	R424
ARG	G918	L339	F772	S631	S564	I498	P425
LYS	G918	T840	V773	T632	S566	Y499	A426
THR	G921	S841	R776	I633	S567	Q500	A427
LEU	G922	N842	T707	T634	S568	V502	Q428
THR	G923	C543	T708	T635	S569	L503	S429
LEU	E924	T844	A709	T636	T570	A504	A430
GLU	A925	D845	K779	N636	G571	G505	H431
ASP	P926	T846	T781	E638	P572	P506	E432
LEU	T929	P847	T782	A639	H573	T507	H433
GLN	T930	E852	R785	A640	C574	G508	H434
LYS	N930	A853	R786	V643	A575	I509	I435
VAL	G931	N854	A786	D644	T576	T510	V436
GLY	S932	D855	Q787	G645	F577	D511	G437
GLY	V933	L856	L788	G646	F578	G512	L440
ILE	S934	V857	T789	L647	G579	D513	H441
THR	V935	P858	L790	V648	A584	T514	P442
GLY	K936	P859	I791	T648	D585	T515	H443
GLY	V937	H860	T792	H652	D586	R516	V444
GLN	R938	Q865	Q794	T652	G587	L517	S445
GLY	N939	L866	E795	V653	C587	Q518	R446
MET	G943	S867	D796	S654	F588	K519	P447
THR	G943	S867	G797	L655	Y589	D520	H448
GLY	F943	L870	G798	Y656	S590	L521	H449
ARG	C949	A875	R799	T657	T591	Y622	E450
GLY	L950	H876	H800	T658	T692	H523	P451
GLY	Y951	C577	Q801	L659	T593	H524	A452
SER	N954	C577	H805	H735	G594	L525	F453
SER	G963	V880	H806	H736	R595	F526	R454
ARG	Y970	H881	F807	N664	T596	Q527	E455
GLY	Y970	G882	G808	Q665	L597	Y528	V456
GLY	L973	G883	A810	L666	S599	A529	H457
ARG	L973	G884	A811	Q740	Y600	T530	H458
GLY	K979	N885	A812	T741	A601	Y533	E459
ARG	N980	S886	A813	A747	V602	A534	S463
GLY	A981	T887	G814	D748	V603	D535	S464
GLY	N982	G890	V815	E749	V604	A542	D465
SER	T983	L891	M816	R751	H605	N543	L466
SER	T984	S892	G817	H752	H606	T544	Q467
THR	V988	L893	H818	P753	L674	R545	H468
GLY	A989	L894	G819	L675	T607	R546	L469
ALA	E990	D896	F820	H676	D610	M546	N475
THR	D991	L901	L823	H677	S611	A547	N475
ILE	Y992	Q902	Y826	C679	Y612	N548	H478
GLY	K993	T903	C827	K680	L613	K549	F479
ASP	L994	Y904	A828	T681	H614	M550	L480
GLU	L999	V908	H832	D683	A616	F552	R481
	S1000	N909	T830	D684	L617	P553	A484
	T1002	E910	T831	S685	L618	V554	Q485
	Y1003	T911	G833	H686	E619	N555	Q485
	D1004	L914	G834	A687	P620	A556	Y489
	K1005		E835	D688	G621	L557	A558
			R769	L689	L622	A558	T492
			H769	T695	T623	M560	G493
			A837	V695	A624	G561	T496

## 4 Experimental information

Property	Value	Source
Reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	Depositor
Number of particles used	37531	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	PHASE FLIPPING ONLY	Depositor
Microscope	FEI TITAN KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ( $e^-/\text{\AA}^2$ )	1.7	Depositor
Minimum defocus (nm)	700	Depositor
Maximum defocus (nm)	3500	Depositor
Magnification	Not provided	Depositor
Image detector	FEI FALCON II (4k x 4k)	Depositor

## 5 Model quality

### 5.1 Standard geometry

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  >2	RMSZ	# Z  >2
1	A	0.94	2/7511 (0.0%)	1.12	52/10188 (0.5%)
2	B	0.67	3/7739 (0.0%)	0.88	27/10515 (0.3%)
All	All	0.82	5/15250 (0.0%)	1.00	79/20703 (0.4%)

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	11
2	B	0	6
All	All	0	17

All (5) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	235	ALA	C-N	11.72	1.60	1.34
2	B	600	TYR	CE1-CZ	-5.35	1.31	1.38
2	B	506	PRO	N-CD	5.14	1.55	1.47
2	B	197	PRO	N-CD	5.11	1.55	1.47
1	A	96	TYR	CE2-CZ	-5.04	1.32	1.38

All (79) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	423	GLY	N-CA-C	-8.26	92.46	113.10
1	A	229	TYR	N-CA-C	-7.99	89.43	111.00
1	A	519	LEU	CB-CG-CD2	-7.95	97.49	111.00
1	A	720	GLY	N-CA-C	7.69	132.32	113.10
2	B	706	SER	N-CA-C	-7.52	90.70	111.00
1	A	476	GLY	N-CA-C	7.47	131.77	113.10
1	A	229	TYR	CB-CA-C	7.43	125.26	110.40

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	B	808	GLY	N-CA-C	7.37	131.53	113.10
1	A	42	GLY	N-CA-C	-7.09	95.37	113.10
2	B	381	THR	C-N-CD	-6.88	105.46	120.60
1	A	64	GLY	N-CA-C	6.85	130.22	113.10
2	B	1003	TYR	C-N-CA	6.81	138.72	121.70
1	A	589	LEU	CA-CB-CG	6.73	130.78	115.30
1	A	336	ARG	N-CA-C	-6.56	93.29	111.00
1	A	621	VAL	N-CA-C	6.54	128.65	111.00
1	A	414	ASN	N-CA-C	6.51	128.58	111.00
2	B	588	PHE	N-CA-C	6.51	128.58	111.00
1	A	433	LYS	N-CA-C	-6.50	93.45	111.00
1	A	364	ALA	CB-CA-C	6.50	119.85	110.10
2	B	548	ASN	N-CA-C	-6.47	93.53	111.00
2	B	187	GLY	N-CA-C	-6.46	96.96	113.10
2	B	466	LEU	N-CA-C	-6.40	93.72	111.00
1	A	92	GLY	N-CA-C	6.36	128.99	113.10
2	B	571	GLY	C-N-CD	6.32	141.67	128.40
1	A	905	GLY	N-CA-C	-6.25	97.47	113.10
2	B	679	CYS	CB-CA-C	6.21	122.82	110.40
1	A	623	LEU	N-CA-C	6.21	127.76	111.00
1	A	747	ILE	CB-CA-C	-6.15	99.30	111.60
1	A	660	ASN	N-CA-C	6.13	127.55	111.00
1	A	307	MET	N-CA-C	6.09	127.45	111.00
2	B	564	SER	N-CA-C	6.07	127.40	111.00
1	A	235	ALA	O-C-N	5.94	132.20	122.70
2	B	718	LEU	CA-CB-CG	5.91	128.90	115.30
1	A	241	GLY	N-CA-C	-5.83	98.53	113.10
1	A	848	SER	N-CA-CB	-5.80	101.79	110.50
2	B	551	VAL	N-CA-C	-5.79	95.37	111.00
2	B	574	CYS	N-CA-CB	5.79	121.01	110.60
2	B	389	GLY	N-CA-C	-5.78	98.65	113.10
2	B	196	ALA	C-N-CD	5.75	140.48	128.40
1	A	671	LEU	N-CA-C	5.75	126.52	111.00
2	B	374	GLY	N-CA-C	-5.69	98.88	113.10
1	A	425	ARG	N-CA-CB	-5.68	100.38	110.60
1	A	507	VAL	N-CA-C	-5.66	95.72	111.00
1	A	235	ALA	N-CA-C	-5.64	95.77	111.00
2	B	505	GLY	C-N-CD	5.62	140.21	128.40
1	A	676	THR	N-CA-C	5.60	126.12	111.00
1	A	883	LEU	N-CA-C	-5.54	96.03	111.00
1	A	888	TYR	N-CA-C	5.47	125.78	111.00
1	A	685	ILE	N-CA-C	-5.43	96.34	111.00

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	628	SER	N-CA-C	-5.39	96.43	111.00
2	B	370	GLY	N-CA-C	-5.36	99.70	113.10
2	B	355	ALA	N-CA-C	-5.33	96.60	111.00
2	B	599	VAL	CB-CA-C	-5.32	101.30	111.40
1	A	606	THR	N-CA-C	-5.31	96.65	111.00
1	A	697	ASN	N-CA-C	-5.31	96.66	111.00
2	B	664	ASN	CB-CA-C	-5.31	99.78	110.40
1	A	59	GLY	N-CA-C	5.31	126.37	113.10
1	A	973	GLY	N-CA-C	-5.30	99.84	113.10
1	A	240	LYS	N-CA-C	-5.24	96.85	111.00
1	A	235	ALA	CA-C-N	-5.24	105.67	117.20
1	A	683	PRO	N-CA-C	5.21	125.65	112.10
1	A	586	GLN	CB-CA-C	5.21	120.81	110.40
1	A	319	ASP	N-CA-C	-5.20	96.97	111.00
2	B	680	LYS	N-CA-C	5.19	125.02	111.00
1	A	622	GLN	N-CA-C	5.19	125.02	111.00
2	B	121	GLY	N-CA-C	-5.19	100.13	113.10
1	A	439	ALA	N-CA-C	5.18	124.97	111.00
1	A	485	VAL	CB-CA-C	-5.18	101.57	111.40
2	B	652	HIS	N-CA-C	-5.17	97.06	111.00
2	B	752	HIS	C-N-CD	-5.15	109.27	120.60
1	A	925	VAL	N-CA-C	-5.14	97.13	111.00
1	A	687	THR	O-C-N	-5.13	114.49	122.70
1	A	432	THR	N-CA-C	5.10	124.77	111.00
1	A	601	MET	N-CA-C	5.10	124.77	111.00
2	B	314	GLY	N-CA-C	-5.09	100.37	113.10
1	A	160	VAL	CG1-CB-CG2	-5.08	102.78	110.90
1	A	478	LEU	CA-CB-CG	-5.06	103.65	115.30
1	A	518	LEU	CB-CG-CD2	5.05	119.59	111.00
1	A	432	THR	CB-CA-C	-5.04	97.99	111.60

There are no chirality outliers.

All (17) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	173	GLY	Mainchain
1	A	334	LYS	Peptide
1	A	388	SER	Peptide
1	A	648	LYS	Peptide
1	A	649	HIS	Peptide
1	A	662	SER	Peptide
1	A	701	SER	Peptide

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	817	ASP	Peptide
1	A	830	ARG	Peptide
1	A	953	THR	Peptide
1	A	967	GLN	Mainchain
2	B	190	SER	Peptide
2	B	241	SER	Peptide
2	B	348	GLY	Peptide
2	B	354	GLY	Peptide
2	B	424	ARG	Peptide
2	B	666	LEU	Peptide

## 5.2 Too-close contacts ⓘ

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	7371	0	7232	1879	0
2	B	7592	0	7407	1221	0
All	All	14963	0	14639	2903	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 98.

All (2903) 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:961:LEU:HD11	2:B:284:MET:SD	1.29	1.67
1:A:894:ARG:CA	1:A:902:MET:HE3	1.30	1.59
2:B:327:TYR:CE1	2:B:448:MET:HE1	1.09	1.58
2:B:264:THR:HG22	2:B:265:PRO:CD	1.18	1.58
1:A:105:TRP:CD1	1:A:471:ARG:NH1	1.73	1.57
1:A:249:PRO:HG3	1:A:252:TRP:CE2	1.39	1.53
1:A:588:ALA:CB	1:A:592:GLN:HE22	1.18	1.52
2:B:264:THR:CG2	2:B:265:PRO:HD3	1.36	1.51
1:A:884:ALA:CB	2:B:506:PRO:HB3	1.41	1.50
1:A:127:PHE:CD2	1:A:189:ARG:CD	1.94	1.50
1:A:371:LEU:HA	1:A:500:MET:CE	1.37	1.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:673:TRP:CE3	2:B:755:MET:CE	1.92	1.49
2:B:673:TRP:CE3	2:B:755:MET:HE1	1.47	1.48
1:A:893:VAL:HG23	2:B:503:LEU:CD1	1.41	1.48
2:B:729:ARG:CB	2:B:754:TYR:HE1	1.23	1.48
1:A:55:LEU:CG	1:A:528:MET:CE	1.91	1.47
1:A:713:LEU:CD2	1:A:714:ASN:H	1.27	1.47
2:B:673:TRP:CZ3	2:B:755:MET:CE	1.97	1.46
1:A:208:HIS:HD2	1:A:309:TRP:CH2	1.33	1.46
1:A:380:CYS:SG	1:A:435:GLN:HA	1.54	1.46
1:A:894:ARG:CA	1:A:902:MET:CE	1.92	1.45
1:A:79:GLU:CA	1:A:856:THR:HG22	1.45	1.45
1:A:262:ARG:NH2	1:A:401:GLY:CA	1.78	1.44
1:A:79:GLU:CB	1:A:856:THR:CG2	1.94	1.44
1:A:713:LEU:HD23	1:A:714:ASN:N	1.14	1.43
1:A:671:LEU:HG	1:A:685:ILE:CG2	1.49	1.42
1:A:290:GLN:CB	1:A:413:GLN:HE22	1.29	1.42
1:A:290:GLN:HB2	1:A:413:GLN:NE2	1.10	1.42
2:B:327:TYR:CE1	2:B:448:MET:CE	2.03	1.41
1:A:961:LEU:CD1	2:B:284:MET:SD	2.05	1.41
1:A:876:VAL:CG2	2:B:523:HIS:HD2	1.31	1.40
1:A:253:LEU:CD2	1:A:628:SER:HB3	1.48	1.40
1:A:588:ALA:HB1	1:A:592:GLN:NE2	1.08	1.40
1:A:588:ALA:CA	1:A:592:GLN:HE22	1.33	1.39
2:B:256:ASP:HB3	2:B:300:VAL:CG1	1.52	1.39
1:A:532:ALA:HA	1:A:535:CYS:SG	1.61	1.38
1:A:884:ALA:HB2	2:B:506:PRO:CB	1.52	1.38
1:A:238:HIS:ND1	1:A:334:LYS:HD2	1.27	1.38
1:A:650:ALA:HB3	1:A:796:SER:CB	1.53	1.38
1:A:79:GLU:CA	1:A:856:THR:CG2	1.98	1.38
2:B:434:MET:CE	2:B:502:VAL:HG21	1.54	1.38
1:A:472:ASP:OD2	1:A:739:ALA:CB	1.68	1.38
1:A:876:VAL:CG2	2:B:523:HIS:CD2	2.05	1.37
1:A:262:ARG:NH2	1:A:401:GLY:HA3	1.31	1.37
1:A:231:THR:CG2	1:A:343:THR:OG1	1.71	1.37
2:B:43:THR:CG2	2:B:55:LYS:HD3	1.54	1.36
1:A:367:ILE:CD1	1:A:415:GLN:CD	1.94	1.36
1:A:931:LEU:CD2	2:B:615:MET:SD	2.13	1.36
2:B:576:TYR:CD1	2:B:578:PHE:HE1	1.45	1.34
1:A:127:PHE:HE2	1:A:189:ARG:NE	1.24	1.34
1:A:692:ALA:CB	1:A:722:HIS:O	1.73	1.34
2:B:523:HIS:CE1	2:B:527:GLN:HE22	1.43	1.34

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:776:VAL:HG11	1:A:807:MET:CE	1.57	1.34
1:A:105:TRP:HD1	1:A:471:ARG:CZ	1.38	1.33
1:A:79:GLU:HB3	1:A:856:THR:CG2	1.55	1.33
2:B:839:LEU:CD2	2:B:866:LEU:HD23	1.55	1.32
1:A:371:LEU:CA	1:A:500:MET:CE	2.07	1.30
2:B:38:LYS:CD	2:B:65:GLU:OE2	1.77	1.30
1:A:314:THR:O	1:A:347:LYS:NZ	1.64	1.29
1:A:657:TRP:CZ2	1:A:662:SER:O	1.84	1.29
1:A:208:HIS:CD2	1:A:309:TRP:HH2	1.50	1.29
1:A:529:ALA:HA	1:A:594:MET:CE	1.63	1.29
1:A:894:ARG:HA	1:A:902:MET:CE	1.51	1.29
1:A:588:ALA:CB	1:A:592:GLN:NE2	1.82	1.28
1:A:894:ARG:CG	1:A:902:MET:HE1	1.63	1.28
1:A:247:PRO:HB3	1:A:477:SER:OG	1.15	1.28
2:B:729:ARG:CB	2:B:754:TYR:CE1	2.15	1.28
1:A:472:ASP:OD2	1:A:739:ALA:N	1.65	1.28
2:B:838:ARG:NH2	2:B:932:SER:OG	1.64	1.27
1:A:79:GLU:HA	1:A:856:THR:CG2	1.62	1.27
2:B:502:VAL:CG1	2:B:901:LEU:HD11	1.64	1.27
1:A:316:LEU:HD21	1:A:350:TYR:CZ	1.69	1.27
1:A:249:PRO:HG2	1:A:252:TRP:CG	1.70	1.26
1:A:623:LEU:O	1:A:626:ILE:HG22	1.24	1.26
1:A:55:LEU:CD1	1:A:528:MET:SD	2.22	1.26
1:A:127:PHE:CE2	1:A:189:ARG:NE	2.01	1.26
2:B:589:TYR:CE1	2:B:808:GLY:HA3	1.70	1.26
1:A:127:PHE:HD2	1:A:189:ARG:CD	1.36	1.26
1:A:275:ASP:OD1	1:A:276:PRO:HD2	1.13	1.26
2:B:332:PRO:HG3	2:B:399:PHE:CZ	1.70	1.26
2:B:332:PRO:CG	2:B:399:PHE:CE2	2.18	1.25
2:B:502:VAL:HG12	2:B:901:LEU:CD1	1.64	1.25
1:A:529:ALA:CB	1:A:594:MET:CE	2.13	1.25
1:A:320:SER:OG	1:A:351:HIS:NE2	1.65	1.25
1:A:316:LEU:CD2	1:A:350:TYR:CE1	2.20	1.25
1:A:887:PRO:O	1:A:893:VAL:HG11	1.29	1.25
1:A:86:ASN:HB2	1:A:849:ASP:O	1.36	1.24
1:A:262:ARG:NH2	1:A:401:GLY:C	1.91	1.24
1:A:598:TRP:O	1:A:600:SER:N	1.70	1.24
1:A:68:PHE:CE1	1:A:71:SER:HB2	1.72	1.24
1:A:588:ALA:HB1	1:A:592:GLN:CD	1.55	1.24
1:A:309:TRP:CE3	1:A:343:THR:HG21	1.72	1.24
1:A:671:LEU:O	1:A:671:LEU:CD1	1.85	1.24

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:38:LYS:HD2	2:B:65:GLU:OE2	1.12	1.24
1:A:249:PRO:HG3	1:A:252:TRP:CD2	1.72	1.24
1:A:894:ARG:HG3	1:A:902:MET:CE	1.66	1.24
2:B:165:THR:HA	2:B:546:MET:CE	1.68	1.24
2:B:98:PHE:CZ	2:B:496:MET:SD	2.31	1.23
1:A:199:MET:HG3	1:A:440:THR:OG1	1.36	1.23
1:A:652:ASN:ND2	1:A:800:HIS:CE1	2.06	1.22
1:A:29:MET:HE1	1:A:135:CYS:SG	0.69	1.22
1:A:931:LEU:HD22	2:B:615:MET:SD	1.74	1.22
2:B:729:ARG:HB3	2:B:754:TYR:CE1	1.73	1.22
1:A:372:LYS:N	1:A:500:MET:HE3	1.54	1.22
1:A:253:LEU:HD22	1:A:628:SER:CB	1.69	1.22
1:A:208:HIS:CD2	1:A:309:TRP:CH2	2.24	1.21
1:A:529:ALA:CA	1:A:594:MET:CE	2.17	1.21
2:B:343:LEU:HD21	2:B:373:THR:CG2	1.68	1.21
2:B:659:ILE:HD11	2:B:788:LEU:CD2	1.70	1.21
1:A:243:VAL:HG21	1:A:473:LEU:O	1.38	1.21
1:A:231:THR:HG21	1:A:333:TRP:NE1	1.53	1.21
1:A:876:VAL:HG22	2:B:523:HIS:CD2	1.72	1.21
1:A:132:MET:CE	1:A:493:GLN:OE1	1.89	1.21
1:A:650:ALA:CB	1:A:796:SER:HB2	1.71	1.20
1:A:428:PRO:O	1:A:430:THR:HG22	1.37	1.20
2:B:597:LEU:HD12	2:B:644:ASP:CG	1.60	1.20
1:A:893:VAL:CG2	2:B:503:LEU:HD12	1.70	1.20
1:A:127:PHE:CD2	1:A:189:ARG:HD2	1.61	1.20
2:B:597:LEU:HD12	2:B:644:ASP:OD1	1.36	1.20
1:A:435:GLN:O	1:A:439:ALA:HB3	1.42	1.20
2:B:247:ARG:CZ	2:B:347:TRP:HE1	1.55	1.20
1:A:426:MET:N	1:A:426:MET:SD	2.15	1.19
1:A:756:ARG:HH12	1:A:851:HIS:CE1	1.60	1.19
1:A:307:MET:O	1:A:309:TRP:CD1	1.94	1.19
2:B:542:ALA:HA	2:B:572:PRO:O	1.04	1.19
2:B:327:TYR:CZ	2:B:448:MET:HE1	1.77	1.19
1:A:131:ARG:NH2	1:A:499:ASP:O	1.76	1.19
2:B:550:MET:SD	2:B:550:MET:N	2.15	1.19
2:B:794:GLN:OE1	2:B:805:HIS:CE1	1.95	1.18
1:A:892:CYS:SG	2:B:902:GLN:HG2	1.82	1.18
2:B:332:PRO:HG2	2:B:399:PHE:CE2	1.77	1.18
2:B:673:TRP:CE3	2:B:755:MET:HE2	1.73	1.18
1:A:135:CYS:SG	1:A:148:MET:HE2	1.84	1.18
1:A:887:PRO:O	1:A:893:VAL:CG1	1.91	1.18

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:492:VAL:CB	1:A:495:VAL:HG22	1.74	1.18
1:A:231:THR:CG2	1:A:333:TRP:HE1	1.57	1.18
1:A:529:ALA:CA	1:A:594:MET:HE2	1.71	1.18
2:B:38:LYS:NZ	2:B:65:GLU:OE2	1.76	1.18
2:B:659:ILE:CD1	2:B:788:LEU:CD2	2.22	1.18
1:A:671:LEU:O	1:A:671:LEU:HD13	1.03	1.17
2:B:523:HIS:CE1	2:B:527:GLN:NE2	2.11	1.17
1:A:29:MET:CE	1:A:135:CYS:SG	1.18	1.17
1:A:492:VAL:HB	1:A:495:VAL:CG2	1.72	1.17
1:A:964:VAL:HG11	2:B:788:LEU:CD1	1.75	1.17
1:A:973:GLY:O	2:B:791:ILE:HD11	1.42	1.17
1:A:671:LEU:CG	1:A:685:ILE:HG22	1.74	1.17
2:B:502:VAL:CG1	2:B:901:LEU:CD1	2.21	1.17
1:A:372:LYS:H	1:A:500:MET:CE	1.56	1.17
1:A:127:PHE:CE2	1:A:189:ARG:CD	2.27	1.16
2:B:493:GLY:CA	2:B:562:LEU:HD23	1.75	1.16
1:A:934:PRO:CB	2:B:613:LEU:HD12	1.75	1.16
1:A:39:ILE:HG23	1:A:507:VAL:CG1	1.74	1.16
1:A:39:ILE:HG23	1:A:507:VAL:HG12	1.23	1.16
1:A:316:LEU:CD2	1:A:350:TYR:CZ	2.29	1.16
2:B:261:GLY:O	2:B:299:MET:CG	1.93	1.16
1:A:472:ASP:OD2	1:A:739:ALA:CA	1.93	1.15
1:A:249:PRO:CG	1:A:252:TRP:CD2	2.27	1.15
1:A:238:HIS:ND1	1:A:334:LYS:CD	2.09	1.15
2:B:261:GLY:O	2:B:299:MET:HG3	0.98	1.15
1:A:934:PRO:HB2	2:B:613:LEU:HD12	1.22	1.14
1:A:275:ASP:OD1	1:A:276:PRO:CD	1.96	1.14
2:B:123:ASN:ND2	2:B:149:GLN:HB3	1.62	1.14
2:B:734:LEU:HD22	2:B:735:HIS:H	1.12	1.14
1:A:574:LEU:CD2	1:A:577:ARG:CD	2.25	1.14
1:A:85:ALA:CB	1:A:910:LEU:HD21	1.78	1.14
2:B:576:TYR:CE1	2:B:578:PHE:CE1	2.35	1.14
1:A:652:ASN:HD21	1:A:800:HIS:CE1	1.65	1.14
2:B:434:MET:CE	2:B:502:VAL:CG2	2.25	1.14
2:B:673:TRP:CZ3	2:B:755:MET:HE1	1.66	1.14
1:A:243:VAL:CG2	1:A:473:LEU:O	1.96	1.14
1:A:664:CYS:CB	1:A:737:GLY:HA3	1.78	1.13
1:A:807:MET:O	1:A:810:MET:HB3	1.49	1.13
1:A:868:TYR:OH	2:B:772:PHE:CD2	2.01	1.13
1:A:692:ALA:HB1	1:A:722:HIS:O	1.36	1.13
2:B:32:LYS:HE2	2:B:69:GLU:OE1	1.46	1.13

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:525:LEU:CD2	1:A:608:LEU:HD12	1.79	1.13
1:A:371:LEU:CA	1:A:500:MET:HE2	1.70	1.12
1:A:529:ALA:HB2	1:A:594:MET:HE1	1.15	1.12
1:A:367:ILE:CG1	1:A:415:GLN:NE2	2.12	1.12
1:A:79:GLU:CB	1:A:856:THR:HG23	1.65	1.12
2:B:659:ILE:HD11	2:B:788:LEU:HD23	1.20	1.12
1:A:68:PHE:CD1	1:A:71:SER:HB2	1.83	1.12
2:B:576:TYR:CD1	2:B:578:PHE:CE1	2.37	1.12
1:A:542:GLU:OE1	1:A:625:ARG:NH2	1.81	1.12
1:A:127:PHE:CD2	1:A:189:ARG:HD3	1.71	1.12
1:A:231:THR:HG23	1:A:343:THR:OG1	1.40	1.11
2:B:747:ALA:CB	2:B:749:THR:HG23	1.80	1.11
1:A:249:PRO:CG	1:A:252:TRP:CG	2.33	1.11
1:A:491:LEU:HD12	1:A:496:GLN:HG2	1.28	1.11
1:A:635:GLY:HA2	1:A:640:MET:HE1	1.28	1.11
1:A:111:ASN:OD1	1:A:467:GLN:HG3	1.49	1.11
1:A:664:CYS:HB2	1:A:737:GLY:HA3	1.14	1.11
1:A:472:ASP:OD2	1:A:739:ALA:HB2	1.36	1.11
1:A:247:PRO:CB	1:A:477:SER:OG	1.99	1.11
1:A:268:GLU:OE2	1:A:693:THR:HG21	1.50	1.11
1:A:81:ILE:HD13	1:A:81:ILE:O	1.50	1.10
1:A:635:GLY:HA2	1:A:640:MET:CE	1.80	1.10
2:B:332:PRO:CG	2:B:399:PHE:CZ	2.33	1.10
1:A:232:TRP:HZ3	1:A:344:ILE:HG21	1.16	1.10
1:A:249:PRO:CG	1:A:252:TRP:CE2	2.33	1.10
1:A:372:LYS:N	1:A:500:MET:CE	2.10	1.10
2:B:263:LEU:HD12	2:B:293:ALA:HB2	1.13	1.10
2:B:729:ARG:HB2	2:B:754:TYR:HE1	1.02	1.10
1:A:671:LEU:HG	1:A:685:ILE:HG22	1.11	1.09
1:A:894:ARG:O	1:A:902:MET:HE1	1.51	1.09
1:A:671:LEU:CG	1:A:685:ILE:CG2	2.30	1.09
1:A:132:MET:HE3	1:A:493:GLN:OE1	1.48	1.09
1:A:46:LEU:HD21	1:A:458:ILE:CD1	1.82	1.09
1:A:893:VAL:HG23	2:B:503:LEU:HD12	1.17	1.09
2:B:327:TYR:CD1	2:B:448:MET:HE1	1.86	1.09
2:B:737:TYR:HE1	2:B:750:GLU:OE1	1.34	1.09
1:A:893:VAL:CG2	2:B:503:LEU:CD1	2.29	1.09
2:B:502:VAL:HG11	2:B:901:LEU:HD11	1.15	1.09
2:B:623:ILE:HG21	2:B:893:ILE:CD1	1.82	1.09
1:A:54:GLU:CD	1:A:600:SER:HG	1.55	1.09
1:A:894:ARG:CG	1:A:902:MET:CE	2.28	1.09

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:542:ALA:CA	2:B:572:PRO:O	2.00	1.09
1:A:380:CYS:SG	1:A:435:GLN:CA	2.40	1.08
1:A:205:ALA:HB2	1:A:232:TRP:NE1	1.68	1.08
1:A:54:GLU:OE2	1:A:600:SER:OG	1.72	1.08
2:B:269:SER:CB	2:B:430:ALA:O	2.01	1.08
1:A:109:GLY:HA3	1:A:233:GLU:O	1.51	1.08
1:A:794:VAL:O	1:A:794:VAL:HG23	1.51	1.08
1:A:367:ILE:HD11	1:A:415:GLN:CD	1.62	1.08
1:A:433:LYS:CD	1:A:437:ALA:HB2	1.82	1.08
1:A:55:LEU:HD11	1:A:528:MET:SD	1.91	1.08
2:B:838:ARG:HH22	2:B:932:SER:CB	1.67	1.08
2:B:729:ARG:HB3	2:B:754:TYR:HE1	1.09	1.08
1:A:58:GLN:CG	1:A:860:ILE:HD12	1.82	1.08
2:B:493:GLY:HA2	2:B:562:LEU:HD23	1.17	1.08
1:A:574:LEU:HD21	1:A:577:ARG:HD2	1.27	1.08
1:A:634:ILE:HB	1:A:688:GLU:HG2	1.29	1.08
1:A:54:GLU:CD	1:A:600:SER:OG	1.93	1.07
1:A:894:ARG:O	1:A:902:MET:CE	2.00	1.07
2:B:839:LEU:HD23	2:B:866:LEU:CD2	1.82	1.07
1:A:254:ASP:CA	1:A:556:HIS:NE2	1.97	1.07
1:A:894:ARG:CB	1:A:902:MET:CE	2.30	1.07
1:A:776:VAL:HG11	1:A:807:MET:HE1	1.13	1.07
2:B:332:PRO:HG2	2:B:399:PHE:CD2	1.90	1.07
2:B:722:GLU:HG2	2:B:729:ARG:HH21	1.16	1.07
1:A:355:THR:O	1:A:418:PHE:HD1	1.38	1.07
1:A:650:ALA:HB3	1:A:796:SER:HB2	1.12	1.07
1:A:79:GLU:HA	1:A:856:THR:HG22	1.10	1.07
1:A:85:ALA:HB2	1:A:910:LEU:CD2	1.84	1.07
2:B:194:ILE:HG21	2:B:200:GLN:HA	1.34	1.07
1:A:756:ARG:NH1	1:A:851:HIS:CE1	2.22	1.06
2:B:256:ASP:HB3	2:B:300:VAL:HG11	1.12	1.06
1:A:438:THR:O	1:A:442:ALA:HB3	1.55	1.06
1:A:627:ARG:NH1	1:A:738:CYS:SG	2.27	1.06
1:A:372:LYS:H	1:A:500:MET:HE3	0.90	1.06
2:B:673:TRP:CZ3	2:B:755:MET:HE3	1.84	1.06
1:A:868:TYR:CZ	2:B:772:PHE:CE2	2.42	1.06
2:B:7:GLN:HG2	2:B:29:VAL:HG11	1.36	1.06
2:B:576:TYR:CE1	2:B:578:PHE:HE1	1.72	1.06
1:A:664:CYS:HB2	1:A:737:GLY:CA	1.85	1.06
2:B:197:PRO:O	2:B:198:MET:HB2	1.26	1.06
1:A:876:VAL:HG23	2:B:523:HIS:CD2	1.84	1.06

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:84:THR:HG21	2:B:545:ARG:HH11	1.21	1.06
2:B:549:LYS:C	2:B:550:MET:CE	2.23	1.06
1:A:384:LEU:C	1:A:385:LEU:HD13	1.75	1.05
1:A:650:ALA:CB	1:A:796:SER:CB	2.27	1.05
1:A:29:MET:HE2	1:A:135:CYS:SG	1.90	1.05
1:A:558:VAL:O	1:A:562:LEU:HD23	1.54	1.05
1:A:607:ARG:HH11	2:B:4:PRO:HD3	1.21	1.05
1:A:476:GLY:O	1:A:477:SER:HB3	1.53	1.05
1:A:574:LEU:HD23	1:A:577:ARG:CG	1.86	1.05
1:A:966:ALA:O	1:A:969:GLU:HB3	1.55	1.05
1:A:249:PRO:HG3	1:A:252:TRP:NE1	1.70	1.05
1:A:660:ASN:ND2	1:A:661:GLU:OE2	1.88	1.05
2:B:729:ARG:HB2	2:B:754:TYR:CE1	1.84	1.05
1:A:433:LYS:CG	1:A:437:ALA:HB2	1.86	1.05
2:B:498:ILE:HD12	2:B:820:PHE:CE2	1.91	1.04
1:A:893:VAL:HG23	2:B:503:LEU:HD11	1.27	1.04
1:A:750:GLU:OE2	1:A:751:HIS:N	1.87	1.04
2:B:43:THR:HG22	2:B:55:LYS:HD3	1.04	1.04
2:B:32:LYS:CE	2:B:69:GLU:OE1	2.05	1.04
1:A:957:PHE:O	1:A:958:THR:OG1	1.74	1.04
1:A:973:GLY:O	2:B:791:ILE:CD1	2.04	1.04
1:A:367:ILE:CG1	1:A:415:GLN:HE21	1.67	1.04
1:A:272:ARG:HH21	1:A:272:ARG:HB2	1.15	1.04
1:A:39:ILE:HA	1:A:506:SER:OG	1.56	1.04
1:A:88:THR:HG22	1:A:90:MET:H	1.21	1.04
2:B:747:ALA:HB1	2:B:749:THR:HG23	1.35	1.04
1:A:529:ALA:HB2	1:A:594:MET:CE	1.78	1.04
1:A:273:LEU:HD23	1:A:281:VAL:HG23	1.37	1.04
1:A:957:PHE:CD2	2:B:279:TYR:HE1	1.74	1.04
1:A:657:TRP:CE2	1:A:662:SER:O	2.09	1.04
2:B:597:LEU:CG	2:B:644:ASP:OD2	2.05	1.04
1:A:249:PRO:CG	1:A:252:TRP:CD1	2.41	1.04
1:A:554:ASP:OD1	1:A:672:PRO:HB3	1.57	1.03
1:A:316:LEU:HD22	1:A:350:TYR:CE1	1.92	1.03
1:A:472:ASP:CG	1:A:739:ALA:HB2	1.78	1.03
1:A:889:GLU:OE1	1:A:889:GLU:N	1.91	1.03
1:A:290:GLN:CB	1:A:413:GLN:NE2	1.99	1.03
2:B:433:TRP:NE1	2:B:518:GLN:HG2	1.73	1.03
1:A:105:TRP:CD1	1:A:471:ARG:CZ	2.26	1.03
1:A:231:THR:HG21	1:A:333:TRP:HE1	1.03	1.03
1:A:298:VAL:O	1:A:700:GLY:O	1.76	1.03

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:894:ARG:C	1:A:902:MET:HE3	1.78	1.03
1:A:671:LEU:CB	1:A:685:ILE:HG22	1.88	1.03
1:A:85:ALA:CB	1:A:910:LEU:CD2	2.37	1.03
2:B:679:CYS:O	2:B:741:ILE:O	1.76	1.03
1:A:55:LEU:CG	1:A:528:MET:HE3	1.69	1.03
1:A:433:LYS:HG2	1:A:437:ALA:HB2	1.37	1.02
1:A:81:ILE:HD11	1:A:98:GLU:HB2	1.39	1.02
2:B:549:LYS:HA	2:B:550:MET:HE1	1.41	1.02
2:B:597:LEU:HD12	2:B:644:ASP:OD2	1.57	1.02
1:A:314:THR:O	1:A:347:LYS:CE	2.07	1.02
1:A:449:ILE:HG13	1:A:453:THR:HG21	1.41	1.02
2:B:330:ALA:N	2:B:450:GLU:OE2	1.91	1.02
1:A:972:GLU:CB	1:A:973:GLY:HA3	1.89	1.02
2:B:36:GLU:OE1	2:B:65:GLU:OE1	1.78	1.02
2:B:163:GLY:HA3	2:B:548:ASN:HB3	1.38	1.02
2:B:618:LEU:HD13	2:B:623:ILE:HD11	1.42	1.02
2:B:794:GLN:CG	2:B:796:ASP:O	2.08	1.02
1:A:231:THR:HG22	1:A:343:THR:OG1	1.55	1.02
1:A:79:GLU:N	1:A:856:THR:HG22	1.75	1.02
1:A:85:ALA:HB2	1:A:910:LEU:HD21	1.06	1.02
1:A:898:THR:HG23	2:B:860:MET:CE	1.89	1.02
1:A:894:ARG:C	1:A:902:MET:CE	2.26	1.02
1:A:898:THR:HG23	2:B:860:MET:HE3	1.38	1.02
2:B:623:ILE:HG21	2:B:893:ILE:HD11	1.05	1.02
1:A:671:LEU:HG	1:A:685:ILE:HG21	1.39	1.02
1:A:29:MET:CE	1:A:135:CYS:HG	0.75	1.01
1:A:532:ALA:CA	1:A:535:CYS:SG	2.48	1.01
1:A:815:ILE:HG22	1:A:816:THR:H	1.19	1.01
2:B:722:GLU:CG	2:B:729:ARG:HH21	1.73	1.01
2:B:343:LEU:HD21	2:B:373:THR:HG21	1.38	1.01
2:B:498:ILE:HD12	2:B:820:PHE:HE2	1.23	1.01
1:A:529:ALA:CB	1:A:594:MET:HE1	1.85	1.01
2:B:433:TRP:HE1	2:B:518:GLN:HG2	1.26	1.01
1:A:650:ALA:HB3	1:A:796:SER:CA	1.89	1.01
1:A:221:ASN:OD1	1:A:431:PHE:CZ	2.14	1.01
1:A:767:ARG:NH2	1:A:821:ASP:OD1	1.92	1.01
2:B:163:GLY:O	2:B:442:PRO:HA	1.58	1.01
2:B:43:THR:CG2	2:B:55:LYS:CD	2.38	1.00
2:B:549:LYS:C	2:B:550:MET:HE3	1.80	1.00
1:A:127:PHE:HD2	1:A:189:ARG:HD3	0.86	1.00
1:A:316:LEU:HD21	1:A:350:TYR:OH	1.59	1.00

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:241:SER:HB3	2:B:390:ARG:HG2	1.40	1.00
2:B:498:ILE:O	2:B:502:VAL:HG23	1.61	1.00
1:A:29:MET:HE1	1:A:135:CYS:CB	1.92	1.00
1:A:432:THR:O	1:A:435:GLN:CB	2.10	1.00
1:A:876:VAL:HA	2:B:520:ASP:OD1	1.61	1.00
2:B:343:LEU:HD21	2:B:373:THR:HG23	1.38	1.00
1:A:931:LEU:HD21	2:B:615:MET:SD	1.99	1.00
2:B:747:ALA:HB1	2:B:749:THR:CG2	1.92	1.00
1:A:516:LYS:O	1:A:520:THR:HG22	1.62	1.00
2:B:377:GLY:HA3	2:B:451:PRO:HB3	1.42	1.00
2:B:597:LEU:CD1	2:B:644:ASP:OD2	2.08	1.00
2:B:120:LEU:CD1	2:B:152:VAL:HB	1.92	1.00
1:A:79:GLU:HB3	1:A:856:THR:HG21	1.00	0.99
1:A:232:TRP:HZ3	1:A:344:ILE:CG2	1.73	0.99
1:A:790:PRO:HG3	1:A:819:ASP:HB3	1.43	0.99
2:B:43:THR:HG22	2:B:55:LYS:CD	1.93	0.99
1:A:135:CYS:SG	1:A:148:MET:CE	2.49	0.99
1:A:217:GLU:C	1:A:218:LEU:HD23	1.81	0.99
2:B:434:MET:HE1	2:B:502:VAL:CG2	1.86	0.99
1:A:588:ALA:CA	1:A:592:GLN:NE2	2.16	0.99
2:B:7:GLN:HG2	2:B:29:VAL:CG1	1.92	0.99
1:A:574:LEU:CD2	1:A:577:ARG:HD2	1.87	0.99
1:A:776:VAL:CG1	1:A:807:MET:HE1	1.92	0.99
2:B:450:GLU:HB3	2:B:451:PRO:HD3	1.45	0.99
1:A:122:SER:OG	1:A:187:ASP:OD2	1.81	0.98
1:A:361:GLU:N	1:A:361:GLU:OE2	1.96	0.98
2:B:66:ARG:NH1	2:B:173:ASP:OD2	1.96	0.98
1:A:309:TRP:H	1:A:309:TRP:HD1	1.06	0.98
1:A:574:LEU:HD23	1:A:577:ARG:HG3	1.45	0.98
1:A:477:SER:C	1:A:478:LEU:HD12	1.83	0.98
2:B:327:TYR:CD1	2:B:448:MET:CE	2.42	0.98
1:A:529:ALA:CB	1:A:594:MET:HE3	1.88	0.98
2:B:373:THR:OG1	2:B:381:THR:HA	1.64	0.98
2:B:623:ILE:CG2	2:B:893:ILE:HD11	1.92	0.98
1:A:29:MET:SD	1:A:135:CYS:SG	2.61	0.98
1:A:352:ARG:HA	1:A:382:GLU:OE1	1.62	0.98
1:A:828:ARG:HB3	1:A:828:ARG:HH11	1.29	0.97
1:A:621:VAL:HG12	1:A:621:VAL:O	1.64	0.97
1:A:64:GLY:O	1:A:65:LEU:HG	1.62	0.97
2:B:165:THR:HA	2:B:546:MET:HE1	1.46	0.97
1:A:668:PHE:HD2	1:A:686:GLY:HA3	1.27	0.97

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:19:LYS:HA	1:A:140:LEU:HD21	1.45	0.97
1:A:119:ILE:HG23	1:A:487:LEU:O	1.65	0.97
2:B:509:ILE:O	2:B:632:THR:HA	1.63	0.97
1:A:229:TYR:OH	1:A:311:ASP:OD1	1.81	0.97
1:A:815:ILE:HG22	1:A:816:THR:N	1.74	0.97
2:B:247:ARG:CZ	2:B:347:TRP:NE1	2.28	0.97
1:A:901:SER:OG	2:B:500:GLN:OE1	1.82	0.97
2:B:256:ASP:CB	2:B:300:VAL:HG11	1.93	0.97
2:B:493:GLY:HA2	2:B:562:LEU:CD2	1.94	0.97
2:B:673:TRP:HE3	2:B:755:MET:HE2	1.15	0.97
1:A:607:ARG:NH1	2:B:4:PRO:HD3	1.78	0.97
1:A:79:GLU:HB2	1:A:856:THR:HG23	1.44	0.97
2:B:227:VAL:HG22	2:B:364:MET:SD	2.05	0.97
1:A:876:VAL:HG22	2:B:523:HIS:HD2	0.80	0.97
1:A:372:LYS:NZ	1:A:499:ASP:OD2	1.98	0.97
2:B:576:TYR:HD1	2:B:578:PHE:HE1	1.10	0.97
1:A:204:SER:OG	1:A:523:TYR:CE1	2.18	0.96
2:B:38:LYS:CE	2:B:65:GLU:OE2	2.12	0.96
2:B:839:LEU:HD23	2:B:866:LEU:HD23	0.98	0.96
1:A:554:ASP:O	1:A:558:VAL:HG23	1.64	0.96
2:B:189:ALA:O	2:B:190:SER:HB3	1.64	0.96
1:A:156:THR:HG23	1:A:157:MET:H	1.27	0.96
2:B:442:PRO:O	2:B:576:TYR:OH	1.81	0.96
2:B:121:GLY:HA2	2:B:150:CYS:O	1.64	0.96
2:B:263:LEU:CD1	2:B:293:ALA:HB2	1.96	0.96
1:A:253:LEU:CD2	1:A:628:SER:CB	2.35	0.96
1:A:247:PRO:HB3	1:A:477:SER:HG	1.21	0.96
1:A:756:ARG:NH1	1:A:851:HIS:ND1	2.14	0.96
2:B:676:TRP:CD1	2:B:754:TYR:HB2	2.00	0.96
1:A:232:TRP:CZ3	1:A:344:ILE:HG21	2.00	0.96
1:A:950:MET:HE1	2:B:112:THR:HG22	1.48	0.96
1:A:892:CYS:SG	2:B:902:GLN:CG	2.54	0.96
1:A:127:PHE:HE1	1:A:452:ARG:NE	1.62	0.96
1:A:432:THR:HG23	1:A:433:LYS:N	1.80	0.96
1:A:442:ALA:HA	1:A:509:VAL:CG1	1.95	0.96
2:B:117:ARG:NE	2:B:155:GLU:OE2	1.99	0.96
1:A:549:VAL:HG13	1:A:553:THR:HG21	1.46	0.95
2:B:433:TRP:HE1	2:B:518:GLN:CG	1.79	0.95
1:A:921:ASP:HB2	2:B:626:ALA:HB1	1.46	0.95
2:B:12:ARG:HH12	2:B:991:ASP:CG	1.70	0.95
1:A:634:ILE:HB	1:A:688:GLU:CG	1.95	0.95

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:868:TYR:CZ	2:B:772:PHE:CD2	2.54	0.95
1:A:288:VAL:O	1:A:324:ARG:HD3	1.67	0.95
1:A:35:ALA:O	1:A:42:GLY:HA2	1.65	0.95
2:B:197:PRO:O	2:B:198:MET:CB	2.09	0.95
1:A:964:VAL:HG11	2:B:788:LEU:HD12	1.48	0.95
2:B:589:TYR:CD1	2:B:808:GLY:HA3	2.01	0.95
1:A:623:LEU:O	1:A:626:ILE:CG2	2.14	0.95
1:A:6:GLN:HE21	1:A:6:GLN:HA	1.28	0.94
2:B:165:THR:HG22	2:B:219:GLN:HE22	1.31	0.94
2:B:98:PHE:HZ	2:B:496:MET:SD	1.86	0.94
1:A:621:VAL:O	1:A:621:VAL:CG1	2.13	0.94
1:A:776:VAL:CG1	1:A:807:MET:CE	2.44	0.94
1:A:776:VAL:HG11	1:A:807:MET:HE3	1.47	0.94
1:A:756:ARG:NH1	1:A:851:HIS:CG	2.34	0.94
2:B:269:SER:HB3	2:B:430:ALA:O	1.64	0.94
1:A:352:ARG:NE	1:A:382:GLU:OE2	1.85	0.94
1:A:211:VAL:HG22	1:A:216:GLN:HB2	1.50	0.94
1:A:58:GLN:HE21	1:A:58:GLN:HA	1.30	0.94
1:A:964:VAL:HG11	2:B:788:LEU:HD13	1.47	0.94
1:A:232:TRP:CZ3	1:A:344:ILE:CG2	2.50	0.94
2:B:114:ASN:OD1	2:B:115:ALA:N	1.99	0.94
2:B:428:CYS:SG	2:B:818:HIS:CB	2.54	0.94
1:A:634:ILE:HD13	1:A:634:ILE:H	1.32	0.94
2:B:7:GLN:HE22	2:B:76:ASP:HB2	1.29	0.94
1:A:180:SER:OG	1:A:181:ASP:OD1	1.85	0.94
1:A:26:LEU:HD11	1:A:144:THR:HG22	1.49	0.94
1:A:68:PHE:CD2	2:B:214:ARG:HD2	2.03	0.94
1:A:68:PHE:CE1	1:A:71:SER:CB	2.52	0.93
2:B:839:LEU:CD2	2:B:866:LEU:CD2	2.39	0.93
2:B:123:ASN:HD22	2:B:149:GLN:HB3	1.30	0.93
1:A:103:ARG:HG3	1:A:103:ARG:HH21	1.31	0.93
1:A:671:LEU:C	1:A:671:LEU:HD13	1.89	0.93
1:A:634:ILE:HD11	1:A:718:ARG:NH2	1.83	0.93
2:B:434:MET:HE1	2:B:502:VAL:HG21	0.94	0.93
2:B:434:MET:HE2	2:B:502:VAL:CG2	1.95	0.93
1:A:932:ARG:HB3	1:A:932:ARG:NH2	1.84	0.93
2:B:722:GLU:CG	2:B:729:ARG:NH2	2.31	0.93
1:A:262:ARG:HH22	1:A:401:GLY:CA	1.61	0.93
1:A:234:LEU:O	1:A:236:CYS:N	2.01	0.92
1:A:238:HIS:HE2	1:A:338:SER:HA	1.34	0.92
2:B:165:THR:CG2	2:B:219:GLN:HE22	1.80	0.92

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:433:LYS:CD	1:A:437:ALA:CB	2.46	0.92
2:B:247:ARG:NH2	2:B:347:TRP:HE1	1.66	0.92
2:B:12:ARG:NH1	2:B:991:ASP:OD2	2.01	0.92
1:A:84:THR:HA	1:A:95:GLN:HB3	1.49	0.92
1:A:352:ARG:HG2	1:A:352:ARG:HH11	1.34	0.92
1:A:132:MET:HE1	1:A:493:GLN:HB3	1.47	0.92
1:A:78:ALA:C	1:A:856:THR:HG22	1.87	0.92
1:A:704:ILE:HA	1:A:707:ILE:CD1	1.99	0.92
1:A:46:LEU:HD21	1:A:458:ILE:HD12	1.49	0.92
1:A:132:MET:CE	1:A:493:GLN:HB3	1.99	0.92
1:A:574:LEU:HD21	1:A:577:ARG:CD	1.93	0.92
2:B:433:TRP:CG	2:B:434:MET:N	2.36	0.92
1:A:525:LEU:HD23	1:A:608:LEU:CD1	2.00	0.92
2:B:264:THR:HG22	2:B:265:PRO:HD2	1.49	0.91
1:A:58:GLN:HG2	1:A:860:ILE:CD1	2.00	0.91
1:A:692:ALA:CA	1:A:722:HIS:O	2.17	0.91
2:B:589:TYR:HE1	2:B:808:GLY:HA3	1.34	0.91
1:A:532:ALA:HB1	1:A:597:VAL:HG21	1.52	0.91
1:A:627:ARG:HG3	1:A:730:THR:O	1.70	0.91
1:A:788:ILE:HD11	1:A:823:VAL:CG2	2.00	0.91
1:A:652:ASN:HD21	1:A:800:HIS:HE1	0.94	0.91
1:A:238:HIS:CE1	1:A:334:LYS:CG	2.54	0.91
1:A:932:ARG:CZ	1:A:932:ARG:HB3	1.99	0.91
2:B:363:VAL:HG13	2:B:441:MET:CE	2.00	0.91
1:A:532:ALA:O	1:A:536:GLU:N	2.04	0.91
2:B:428:CYS:SG	2:B:818:HIS:HB3	2.11	0.91
2:B:7:GLN:CG	2:B:29:VAL:HG11	2.00	0.91
1:A:253:LEU:HD22	1:A:628:SER:HB3	0.92	0.91
1:A:634:ILE:CB	1:A:688:GLU:HG2	2.00	0.91
2:B:198:MET:HE2	2:B:458:ASN:O	1.69	0.91
1:A:238:HIS:NE2	1:A:338:SER:HA	1.86	0.91
2:B:111:MET:SD	2:B:118:PHE:HD2	1.93	0.91
2:B:499:TYR:HE1	2:B:901:LEU:HD22	1.35	0.90
1:A:885:LEU:HD22	1:A:885:LEU:H	1.35	0.90
2:B:32:LYS:CD	2:B:69:GLU:OE1	2.20	0.90
2:B:450:GLU:CB	2:B:451:PRO:HD3	1.95	0.90
2:B:45:ILE:C	2:B:53:ILE:HD11	1.89	0.90
1:A:574:LEU:CD2	1:A:577:ARG:CG	2.49	0.90
1:A:908:PRO:HG3	2:B:528:TYR:HE1	1.34	0.90
1:A:262:ARG:HH21	1:A:401:GLY:CA	1.69	0.90
2:B:467:GLN:NE2	2:B:467:GLN:O	2.03	0.90

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:262:ARG:HH22	1:A:401:GLY:C	1.59	0.90
1:A:431:PHE:O	1:A:434:ALA:HB3	1.70	0.90
1:A:68:PHE:HD2	2:B:214:ARG:HD2	1.33	0.90
2:B:84:THR:CG2	2:B:545:ARG:HD3	2.01	0.90
2:B:737:TYR:CE1	2:B:750:GLU:OE1	2.25	0.90
1:A:199:MET:HG3	1:A:440:THR:HG1	1.32	0.90
1:A:432:THR:O	1:A:435:GLN:HB2	1.68	0.90
1:A:201:MET:CE	1:A:465:VAL:HG11	2.02	0.90
2:B:264:THR:CG2	2:B:265:PRO:CD	2.13	0.90
1:A:481:LEU:H	1:A:481:LEU:HD22	1.35	0.89
1:A:571:LEU:CD2	1:A:592:GLN:HG3	2.02	0.89
1:A:713:LEU:CD2	1:A:714:ASN:N	2.02	0.89
1:A:371:LEU:C	1:A:500:MET:CE	2.39	0.89
1:A:244:ALA:CB	1:A:274:VAL:CG2	2.49	0.89
1:A:316:LEU:CD2	1:A:350:TYR:OH	2.19	0.89
1:A:642:ASP:O	1:A:644:SER:N	2.04	0.89
2:B:78:LEU:HD22	2:B:180:LEU:HD21	1.53	0.89
1:A:525:LEU:CD2	1:A:608:LEU:CD1	2.49	0.89
2:B:327:TYR:HE1	2:B:448:MET:HE1	1.34	0.89
1:A:777:LEU:HD22	1:A:834:MET:HE2	1.53	0.89
2:B:331:LEU:HD12	2:B:373:THR:HG22	1.54	0.89
2:B:334:CYS:O	2:B:379:ARG:NH1	2.05	0.89
1:A:499:ASP:OD1	1:A:500:MET:N	2.06	0.89
1:A:532:ALA:HB1	1:A:597:VAL:CG2	2.03	0.89
1:A:387:ASN:HD22	1:A:391:GLY:CA	1.86	0.89
1:A:788:ILE:HD11	1:A:823:VAL:HG21	1.55	0.89
2:B:89:ASP:HA	2:B:410:GLN:NE2	1.88	0.89
2:B:57:GLY:O	2:B:478:HIS:HB2	1.72	0.89
1:A:214:ARG:HD3	1:A:214:ARG:H	1.37	0.89
1:A:309:TRP:CE3	1:A:343:THR:CG2	2.55	0.89
1:A:307:MET:O	1:A:309:TRP:HD1	1.43	0.89
2:B:263:LEU:HD12	2:B:293:ALA:CB	2.01	0.89
1:A:830:ARG:NH1	1:A:830:ARG:O	2.06	0.88
1:A:529:ALA:HA	1:A:594:MET:HE2	0.89	0.88
1:A:932:ARG:HB2	1:A:933:PRO:HD2	1.54	0.88
2:B:247:ARG:NE	2:B:347:TRP:NE1	2.21	0.88
1:A:843:ARG:HH11	1:A:843:ARG:HB3	1.35	0.88
2:B:110:GLN:HA	2:B:110:GLN:HE21	1.37	0.88
1:A:79:GLU:OE1	1:A:79:GLU:N	2.07	0.88
2:B:597:LEU:HG	2:B:644:ASP:OD2	1.70	0.88
2:B:673:TRP:HZ3	2:B:755:MET:HE3	1.31	0.88

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:638:ARG:HG3	1:A:638:ARG:HH21	1.36	0.88
1:A:309:TRP:HE3	1:A:343:THR:HG21	1.20	0.88
1:A:39:ILE:CA	1:A:506:SER:OG	2.21	0.88
1:A:664:CYS:SG	1:A:737:GLY:HA3	2.14	0.88
1:A:29:MET:CE	1:A:135:CYS:CB	2.49	0.88
1:A:525:LEU:HD23	1:A:608:LEU:HD12	1.56	0.88
2:B:165:THR:HG21	2:B:219:GLN:NE2	1.89	0.88
1:A:525:LEU:HD21	1:A:608:LEU:HD12	1.56	0.88
1:A:244:ALA:CB	1:A:274:VAL:HG23	2.03	0.87
1:A:371:LEU:CA	1:A:500:MET:HE1	2.04	0.87
1:A:68:PHE:HE1	1:A:71:SER:HB2	1.30	0.87
1:A:78:ALA:O	1:A:856:THR:HG22	1.73	0.87
2:B:89:ASP:CG	2:B:410:GLN:OE1	2.13	0.87
2:B:734:LEU:CD2	2:B:735:HIS:H	1.86	0.87
1:A:29:MET:HE3	1:A:135:CYS:SG	1.30	0.87
1:A:380:CYS:SG	1:A:434:ALA:O	2.31	0.87
1:A:127:PHE:CE1	1:A:452:ARG:NE	2.42	0.87
1:A:588:ALA:C	1:A:592:GLN:NE2	2.27	0.87
1:A:205:ALA:HB2	1:A:232:TRP:CE2	2.09	0.87
1:A:117:VAL:CG2	1:A:485:VAL:HG23	2.04	0.87
1:A:476:GLY:O	1:A:477:SER:CB	2.22	0.87
1:A:117:VAL:HG22	1:A:485:VAL:HG23	1.56	0.87
1:A:231:THR:HG21	1:A:333:TRP:CE2	2.10	0.87
1:A:478:LEU:HD13	1:A:534:VAL:HG13	1.56	0.87
2:B:549:LYS:CA	2:B:550:MET:HE1	2.04	0.86
2:B:165:THR:CG2	2:B:219:GLN:NE2	2.38	0.86
2:B:434:MET:HE3	2:B:502:VAL:HG11	1.56	0.86
1:A:756:ARG:HH11	1:A:851:HIS:CG	1.94	0.86
2:B:66:ARG:HH11	2:B:66:ARG:HG3	1.40	0.86
1:A:868:TYR:CE1	2:B:772:PHE:CE2	2.63	0.86
2:B:334:CYS:SG	2:B:468:MET:CE	2.63	0.86
1:A:957:PHE:HD2	2:B:279:TYR:HE1	1.21	0.86
2:B:549:LYS:CA	2:B:550:MET:CE	2.53	0.86
2:B:839:LEU:HD22	2:B:866:LEU:HD23	1.57	0.86
1:A:52:THR:HG21	1:A:601:MET:CE	2.06	0.86
1:A:248:VAL:HB	1:A:249:PRO:HD2	1.56	0.86
2:B:26:GLN:O	2:B:27:THR:OG1	1.92	0.86
1:A:320:SER:OG	1:A:351:HIS:CD2	2.29	0.86
1:A:55:LEU:HD13	1:A:528:MET:SD	2.05	0.86
1:A:807:MET:O	1:A:810:MET:CB	2.23	0.86
1:A:957:PHE:CD2	2:B:279:TYR:CE1	2.63	0.86

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:433:TRP:NE1	2:B:518:GLN:CG	2.36	0.86
2:B:611:SER:O	2:B:615:MET:HG2	1.76	0.86
1:A:208:HIS:CD2	1:A:309:TRP:CZ2	2.64	0.86
1:A:588:ALA:C	1:A:592:GLN:HE22	1.79	0.86
1:A:260:THR:HG22	1:A:263:GLU:OE1	1.75	0.86
1:A:961:LEU:HD12	2:B:284:MET:SD	2.16	0.86
2:B:84:THR:HG21	2:B:545:ARG:HD3	1.56	0.86
1:A:794:VAL:CG2	1:A:794:VAL:O	2.24	0.85
1:A:966:ALA:O	1:A:969:GLU:CB	2.24	0.85
2:B:120:LEU:HD11	2:B:152:VAL:HB	1.56	0.85
2:B:117:ARG:CZ	2:B:155:GLU:OE2	2.23	0.85
2:B:327:TYR:CZ	2:B:448:MET:CE	2.44	0.85
2:B:257:PHE:CD1	2:B:357:HIS:NE2	2.44	0.85
2:B:240:ASP:O	2:B:241:SER:OG	1.94	0.85
2:B:256:ASP:HB3	2:B:300:VAL:HG13	1.53	0.85
2:B:549:LYS:C	2:B:550:MET:SD	2.53	0.85
1:A:455:HIS:O	1:A:459:THR:HG22	1.74	0.85
1:A:106:LEU:CD1	1:A:470:VAL:HG12	2.05	0.85
1:A:828:ARG:CB	1:A:828:ARG:HH11	1.88	0.85
1:A:320:SER:HA	1:A:351:HIS:HD2	1.41	0.85
1:A:894:ARG:HG3	1:A:902:MET:HE1	0.87	0.85
1:A:127:PHE:CE2	1:A:189:ARG:HD2	2.04	0.85
1:A:492:VAL:HB	1:A:495:VAL:HG22	0.90	0.85
2:B:198:MET:O	2:B:204:GLN:HB3	1.74	0.85
1:A:438:THR:O	1:A:442:ALA:CB	2.23	0.85
2:B:427:ALA:HA	2:B:432:GLU:OE1	1.76	0.85
1:A:972:GLU:CB	1:A:973:GLY:CA	2.54	0.85
1:A:499:ASP:HB2	2:B:1001:SER:OG	1.76	0.85
1:A:940:PRO:HG3	2:B:915:SER:HB3	1.59	0.85
1:A:531:LEU:CD2	1:A:747:ILE:HD11	2.06	0.85
1:A:964:VAL:CG1	2:B:788:LEU:HD13	2.07	0.85
1:A:170:LEU:HD13	1:A:171:ALA:N	1.92	0.84
1:A:861:ARG:NH2	2:B:547:ALA:HB2	1.91	0.84
1:A:957:PHE:HD2	2:B:279:TYR:CE1	1.95	0.84
1:A:379:ALA:HB2	1:A:427:PRO:O	1.77	0.84
1:A:344:ILE:CD1	1:A:396:LEU:HD11	2.06	0.84
1:A:367:ILE:HD13	1:A:415:GLN:HE21	0.69	0.84
1:A:843:ARG:CB	1:A:843:ARG:HH11	1.90	0.84
1:A:876:VAL:HG21	1:A:909:LEU:HD11	1.59	0.84
2:B:686:HIS:CD2	2:B:786:ALA:CB	2.60	0.84
1:A:531:LEU:HD21	1:A:747:ILE:HD11	1.57	0.84

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:754:VAL:HG12	1:A:855:ALA:HB2	1.58	0.84
1:A:972:GLU:HB2	1:A:973:GLY:HA3	1.56	0.84
2:B:98:PHE:CE1	2:B:496:MET:SD	2.71	0.84
1:A:14:THR:O	1:A:18:ILE:HG12	1.76	0.84
2:B:83:PHE:CE1	2:B:169:GLN:HG3	2.13	0.84
2:B:524:HIS:O	2:B:528:TYR:HD1	1.59	0.84
2:B:799:ARG:HH11	2:B:799:ARG:HG3	1.40	0.84
1:A:574:LEU:CD2	1:A:577:ARG:HG3	2.07	0.84
1:A:892:CYS:HG	2:B:902:GLN:CD	1.80	0.84
2:B:680:LYS:NZ	2:B:737:TYR:OH	2.10	0.84
2:B:838:ARG:NH2	2:B:932:SER:CB	2.33	0.84
2:B:117:ARG:NH2	2:B:155:GLU:OE2	2.11	0.84
2:B:7:GLN:NE2	2:B:76:ASP:OD2	2.11	0.84
1:A:421:GLY:O	1:A:422:ILE:HD12	1.77	0.84
1:A:463:HIS:CD2	1:A:617:PRO:HG2	2.12	0.84
1:A:442:ALA:HA	1:A:509:VAL:HG11	1.58	0.84
1:A:79:GLU:HA	1:A:856:THR:HG23	1.55	0.84
2:B:332:PRO:HG3	2:B:399:PHE:CE2	1.99	0.84
1:A:290:GLN:HB2	1:A:413:GLN:HE21	1.40	0.83
1:A:584:SER:O	1:A:585:SER:OG	1.96	0.83
1:A:877:SER:O	1:A:881:SER:OG	1.96	0.83
2:B:523:HIS:HE1	2:B:527:GLN:HE22	0.86	0.83
2:B:729:ARG:HB3	2:B:754:TYR:CD1	2.13	0.83
1:A:156:THR:HG23	1:A:157:MET:N	1.92	0.83
1:A:380:CYS:HG	1:A:435:GLN:HA	1.44	0.83
1:A:690:TRP:HZ3	1:A:721:VAL:CG2	1.91	0.83
1:A:553:THR:HG22	1:A:558:VAL:HG22	1.60	0.83
1:A:973:GLY:H	2:B:791:ILE:HD12	1.41	0.83
1:A:231:THR:CG2	1:A:333:TRP:NE1	2.29	0.83
1:A:316:LEU:HD22	1:A:350:TYR:HE1	1.38	0.83
1:A:788:ILE:O	1:A:820:CYS:HB2	1.77	0.83
2:B:363:VAL:HG13	2:B:441:MET:HE2	1.59	0.83
2:B:499:TYR:CE1	2:B:901:LEU:HD22	2.13	0.83
1:A:372:LYS:N	1:A:500:MET:HE1	1.92	0.83
1:A:900:HIS:O	1:A:903:LEU:N	2.11	0.83
1:A:273:LEU:HD23	1:A:281:VAL:CG2	2.07	0.83
1:A:622:GLN:HB2	1:A:623:LEU:HD22	1.57	0.83
2:B:1003:TYR:CE2	2:B:1005:LYS:NZ	2.47	0.83
2:B:446:ARG:HH11	2:B:446:ARG:HG3	1.43	0.83
2:B:5:SER:HB3	2:B:76:ASP:O	1.78	0.83
1:A:230:LEU:HD12	1:A:232:TRP:CH2	2.14	0.83

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:249:PRO:HG2	1:A:252:TRP:CD1	2.09	0.83
1:A:690:TRP:CZ3	1:A:721:VAL:HG21	2.14	0.83
2:B:198:MET:HA	2:B:204:GLN:HE21	1.44	0.83
2:B:606:HIS:CG	2:B:606:HIS:O	2.32	0.83
2:B:623:ILE:HB	2:B:893:ILE:HG13	1.61	0.83
1:A:231:THR:HA	1:A:342:LEU:O	1.77	0.82
1:A:444:MET:O	1:A:449:ILE:HG22	1.78	0.82
1:A:463:HIS:ND1	1:A:463:HIS:O	2.09	0.82
1:A:249:PRO:HG3	1:A:252:TRP:CD1	2.12	0.82
1:A:934:PRO:HB3	2:B:613:LEU:HD12	1.61	0.82
1:A:494:GLY:O	1:A:498:TRP:HB2	1.78	0.82
1:A:68:PHE:HE1	1:A:71:SER:CB	1.88	0.82
1:A:58:GLN:CG	1:A:860:ILE:CD1	2.57	0.82
2:B:497:ALA:CB	2:B:557:LEU:CD2	2.58	0.82
1:A:652:ASN:HD22	1:A:800:HIS:CE1	1.93	0.82
1:A:873:ILE:HD13	1:A:873:ILE:H	1.42	0.82
2:B:214:ARG:CZ	2:B:214:ARG:HB3	2.07	0.82
2:B:673:TRP:CH2	2:B:759:TYR:HD2	1.96	0.82
1:A:368:VAL:HG22	1:A:418:PHE:HB2	1.60	0.82
1:A:783:ASP:OD2	1:A:838:PRO:HB3	1.79	0.82
1:A:972:GLU:O	2:B:797:GLY:CA	2.27	0.82
1:A:428:PRO:O	1:A:430:THR:CG2	2.25	0.82
2:B:606:HIS:O	2:B:606:HIS:ND1	2.12	0.82
1:A:192:ALA:O	1:A:196:LEU:HB2	1.80	0.81
1:A:272:ARG:HH21	1:A:272:ARG:CB	1.93	0.81
1:A:244:ALA:HB3	1:A:274:VAL:CG2	2.09	0.81
2:B:794:GLN:HG3	2:B:796:ASP:O	1.79	0.81
1:A:529:ALA:HB1	1:A:594:MET:HE3	1.61	0.81
2:B:433:TRP:CD1	2:B:518:GLN:CG	2.64	0.81
2:B:549:LYS:HA	2:B:550:MET:CE	2.08	0.81
2:B:576:TYR:HE1	2:B:578:PHE:CE1	1.89	0.81
1:A:921:ASP:CB	2:B:626:ALA:HB1	2.10	0.81
2:B:502:VAL:HG12	2:B:901:LEU:HD12	1.60	0.81
1:A:892:CYS:SG	2:B:902:GLN:OE1	2.37	0.81
1:A:105:TRP:HD1	1:A:471:ARG:NH2	1.78	0.81
2:B:257:PHE:CE1	2:B:357:HIS:NE2	2.48	0.81
1:A:39:ILE:CG2	1:A:507:VAL:CG1	2.56	0.81
1:A:36:GLY:O	1:A:505:GLY:HA3	1.80	0.81
1:A:677:ILE:HG13	1:A:678:THR:H	1.44	0.81
1:A:972:GLU:HB3	1:A:973:GLY:HA3	1.61	0.81
1:A:221:ASN:OD1	1:A:431:PHE:HZ	1.62	0.81

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:298:VAL:C	1:A:299:HIS:CD2	2.53	0.81
2:B:198:MET:CA	2:B:204:GLN:HE21	1.93	0.81
2:B:231:ILE:HD12	2:B:397:LEU:HD12	1.60	0.81
2:B:343:LEU:CD2	2:B:373:THR:CG2	2.57	0.81
2:B:120:LEU:HD12	2:B:152:VAL:HB	1.61	0.81
2:B:622:LEU:HD12	2:B:622:LEU:H	1.46	0.81
1:A:58:GLN:HG3	1:A:860:ILE:HD12	1.63	0.81
1:A:894:ARG:HA	1:A:902:MET:HE3	0.82	0.81
2:B:224:LEU:HD21	2:B:401:LEU:HD23	1.63	0.81
2:B:549:LYS:O	2:B:550:MET:HE3	1.79	0.81
2:B:729:ARG:HG2	2:B:729:ARG:HH11	1.45	0.81
2:B:734:LEU:HD22	2:B:735:HIS:N	1.94	0.81
1:A:433:LYS:HD2	1:A:437:ALA:CB	2.11	0.81
1:A:39:ILE:HD11	2:B:988:VAL:O	1.81	0.80
2:B:114:ASN:HB3	2:B:119:TYR:CE2	2.16	0.80
1:A:882:GLY:C	1:A:883:LEU:HD23	2.01	0.80
2:B:546:MET:CE	2:B:546:MET:HA	2.11	0.80
2:B:623:ILE:CD1	2:B:893:ILE:HD11	2.11	0.80
2:B:659:ILE:CD1	2:B:788:LEU:HD22	2.11	0.80
1:A:650:ALA:HB3	1:A:796:SER:HA	1.63	0.80
1:A:728:ARG:HD3	1:A:730:THR:HG22	1.61	0.80
2:B:198:MET:HG3	2:B:204:GLN:HE22	1.45	0.80
1:A:355:THR:O	1:A:418:PHE:CD1	2.30	0.80
2:B:673:TRP:N	2:B:754:TYR:HE2	1.79	0.80
2:B:12:ARG:NH1	2:B:991:ASP:OD1	2.15	0.80
2:B:117:ARG:HE	2:B:155:GLU:CD	1.83	0.80
2:B:202:VAL:O	2:B:205:GLU:N	2.15	0.80
2:B:265:PRO:HD2	2:B:266:HIS:H	1.47	0.80
2:B:7:GLN:HE22	2:B:76:ASP:CB	1.95	0.80
2:B:89:ASP:CB	2:B:410:GLN:OE1	2.29	0.80
1:A:634:ILE:HD11	1:A:718:ARG:HH21	1.46	0.80
1:A:777:LEU:HD22	1:A:834:MET:CE	2.10	0.80
1:A:697:ASN:HB2	1:A:701:SER:HB2	1.63	0.80
1:A:865:ARG:HH11	2:B:447:PRO:CG	1.94	0.80
1:A:932:ARG:HB2	1:A:933:PRO:CD	2.11	0.80
1:A:314:THR:O	1:A:347:LYS:HE3	1.80	0.79
1:A:598:TRP:C	1:A:600:SER:H	1.84	0.79
1:A:972:GLU:O	2:B:798:GLY:N	2.15	0.79
2:B:647:LEU:H	2:B:647:LEU:HD12	1.46	0.79
1:A:88:THR:HG22	1:A:90:MET:N	1.97	0.79
1:A:894:ARG:C	1:A:902:MET:HE1	1.97	0.79

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:509:ILE:CG2	2:B:512:GLY:HA2	2.12	0.79
1:A:185:ASN:OD1	1:A:187:ASP:N	2.15	0.79
1:A:238:HIS:CE1	1:A:334:LYS:HG2	2.18	0.79
1:A:894:ARG:CB	1:A:902:MET:HE2	2.12	0.79
1:A:220:GLU:HG3	2:B:186:TRP:CZ2	2.17	0.79
2:B:330:ALA:H	2:B:450:GLU:CD	1.82	0.79
1:A:455:HIS:HA	1:A:458:ILE:CG2	2.12	0.79
1:A:538:GLY:O	1:A:735:PRO:HG2	1.82	0.79
1:A:713:LEU:CG	1:A:714:ASN:H	1.95	0.79
1:A:961:LEU:HD11	2:B:284:MET:CG	2.12	0.79
1:A:371:LEU:HA	1:A:500:MET:HE2	0.81	0.79
2:B:658:THR:CG2	2:B:695:VAL:HG21	2.12	0.79
1:A:244:ALA:HB3	1:A:274:VAL:HG23	1.63	0.79
1:A:508:SER:O	1:A:510:HIS:N	2.15	0.79
1:A:532:ALA:CB	1:A:597:VAL:HG21	2.12	0.79
1:A:652:ASN:ND2	1:A:800:HIS:HE1	1.58	0.79
2:B:260:LYS:HD2	2:B:260:LYS:O	1.82	0.79
1:A:58:GLN:NE2	1:A:58:GLN:HA	1.96	0.79
2:B:318:THR:HG22	2:B:319:THR:OG1	1.83	0.79
1:A:286:ASP:OD1	1:A:287:GLY:N	2.16	0.79
1:A:65:LEU:HD12	1:A:65:LEU:O	1.83	0.78
1:A:790:PRO:HG3	1:A:819:ASP:CB	2.14	0.78
2:B:708:GLU:OE1	2:B:770:ASP:OD1	2.00	0.78
1:A:217:GLU:O	1:A:218:LEU:HD23	1.83	0.78
1:A:55:LEU:HD23	1:A:55:LEU:O	1.82	0.78
2:B:400:ALA:O	2:B:404:MET:HB2	1.82	0.78
2:B:729:ARG:O	2:B:730:ARG:HG2	1.83	0.78
2:B:7:GLN:NE2	2:B:76:ASP:CB	2.46	0.78
2:B:645:GLY:N	2:B:809:GLU:O	2.14	0.78
1:A:690:TRP:HZ3	1:A:721:VAL:HG21	1.45	0.78
2:B:434:MET:HE2	2:B:502:VAL:HG22	1.63	0.78
1:A:371:LEU:HA	1:A:500:MET:HE3	1.60	0.78
1:A:81:ILE:CD1	1:A:98:GLU:HB2	2.12	0.78
1:A:950:MET:HE1	2:B:112:THR:CG2	2.13	0.78
2:B:186:TRP:HH2	2:B:212:VAL:O	1.66	0.78
1:A:316:LEU:HD23	1:A:350:TYR:CE1	2.19	0.78
1:A:702:LYS:HZ1	1:A:707:ILE:HG12	1.49	0.78
1:A:815:ILE:O	1:A:816:THR:OG1	2.00	0.78
2:B:163:GLY:O	2:B:442:PRO:CA	2.31	0.78
2:B:467:GLN:HE21	2:B:467:GLN:C	1.87	0.78
2:B:648:VAL:HG11	2:B:653:VAL:HG21	1.64	0.78

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:353:MET:HG3	1:A:354:SER:N	1.97	0.78
1:A:807:MET:HE2	1:A:807:MET:HA	1.64	0.78
1:A:906:ALA:O	1:A:907:VAL:HG13	1.84	0.78
2:B:241:SER:CB	2:B:390:ARG:HG2	2.14	0.78
1:A:238:HIS:ND1	1:A:334:LYS:CG	2.46	0.78
1:A:353:MET:O	1:A:355:THR:HG23	1.83	0.78
1:A:52:THR:HG21	1:A:601:MET:HE2	1.65	0.78
1:A:546:ALA:HB1	1:A:681:ALA:O	1.83	0.78
1:A:752:LYS:CE	1:A:857:ASP:OD2	2.32	0.78
2:B:990:HIS:HB3	2:B:992:TYR:CE1	2.19	0.78
1:A:802:ARG:HG3	1:A:802:ARG:HH21	1.49	0.78
1:A:756:ARG:NH1	1:A:851:HIS:CD2	2.52	0.78
2:B:189:ALA:O	2:B:190:SER:CB	2.31	0.78
2:B:263:LEU:HD13	2:B:263:LEU:O	1.84	0.78
2:B:257:PHE:HE1	2:B:357:HIS:CE1	2.02	0.78
2:B:558:ALA:O	2:B:562:LEU:HB2	1.84	0.78
1:A:713:LEU:HD23	1:A:714:ASN:CA	2.13	0.77
1:A:692:ALA:HB2	1:A:722:HIS:O	1.80	0.77
1:A:802:ARG:HG2	1:A:803:GLY:N	1.99	0.77
2:B:523:HIS:HE1	2:B:527:GLN:NE2	1.62	0.77
1:A:106:LEU:HD12	1:A:470:VAL:HG12	1.65	0.77
1:A:344:ILE:HD11	1:A:396:LEU:HD11	1.66	0.77
1:A:455:HIS:O	1:A:458:ILE:HG22	1.85	0.77
1:A:807:MET:O	1:A:810:MET:N	2.17	0.77
1:A:449:ILE:HG23	1:A:449:ILE:O	1.85	0.77
2:B:263:LEU:HD22	2:B:264:THR:N	1.98	0.77
2:B:673:TRP:HZ3	2:B:755:MET:CE	1.82	0.77
1:A:127:PHE:HE1	1:A:452:ARG:HE	1.32	0.77
1:A:253:LEU:HD21	1:A:628:SER:HB3	1.63	0.77
2:B:722:GLU:HG3	2:B:729:ARG:NH2	1.99	0.77
1:A:248:VAL:HG11	1:A:630:PHE:CE1	2.20	0.77
1:A:75:LEU:CD1	1:A:106:LEU:HD22	2.15	0.77
1:A:463:HIS:CD2	1:A:617:PRO:CG	2.68	0.77
1:A:507:VAL:HG21	1:A:512:MET:HE3	1.64	0.77
2:B:618:LEU:CD1	2:B:623:ILE:HD11	2.14	0.77
2:B:753:PRO:HG2	2:B:756:ARG:HH12	1.49	0.77
1:A:154:THR:O	1:A:158:ASN:N	2.11	0.76
1:A:309:TRP:N	1:A:309:TRP:CD1	2.53	0.76
1:A:704:ILE:O	1:A:707:ILE:HD12	1.84	0.76
2:B:500:GLN:HG3	2:B:560:TRP:CZ2	2.20	0.76
1:A:964:VAL:CG1	2:B:788:LEU:CD1	2.59	0.76

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:333:TRP:HE1	1:A:343:THR:HG1	1.27	0.76
1:A:455:HIS:HA	1:A:458:ILE:HG22	1.65	0.76
1:A:692:ALA:HA	1:A:722:HIS:O	1.84	0.76
2:B:497:ALA:HB1	2:B:557:LEU:CD2	2.15	0.76
2:B:48:ALA:O	2:B:49:THR:OG1	2.03	0.76
2:B:533:TYR:O	2:B:534:ALA:HB3	1.85	0.76
1:A:368:VAL:CG2	1:A:418:PHE:HB2	2.14	0.76
1:A:558:VAL:O	1:A:562:LEU:CD2	2.32	0.76
1:A:844:GLY:O	1:A:849:ASP:OD1	2.02	0.76
2:B:454:ARG:HD3	2:B:466:LEU:HD11	1.67	0.76
1:A:234:LEU:HD21	1:A:266:PHE:HZ	1.50	0.76
1:A:387:ASN:HD22	1:A:391:GLY:HA2	1.49	0.76
1:A:512:MET:C	2:B:188:GLY:HA3	2.06	0.76
1:A:268:GLU:OE2	1:A:693:THR:CG2	2.31	0.76
2:B:165:THR:HA	2:B:546:MET:HE3	1.67	0.76
2:B:838:ARG:HH11	2:B:838:ARG:HG3	1.50	0.76
1:A:254:ASP:HA	1:A:556:HIS:NE2	1.53	0.76
1:A:201:MET:HE3	1:A:465:VAL:HG11	1.66	0.76
1:A:384:LEU:C	1:A:385:LEU:CD1	2.53	0.76
1:A:589:LEU:H	1:A:589:LEU:CD1	1.98	0.76
1:A:262:ARG:CZ	1:A:401:GLY:HA3	2.16	0.76
1:A:477:SER:O	1:A:478:LEU:HD12	1.85	0.76
2:B:165:THR:CA	2:B:546:MET:HE1	2.15	0.76
2:B:194:ILE:HG21	2:B:200:GLN:CA	2.13	0.76
2:B:293:ALA:CB	2:B:298:ARG:O	2.33	0.76
2:B:51:LEU:HD22	2:B:52:PRO:HD2	1.68	0.76
1:A:801:LEU:HD21	1:A:813:LEU:CD2	2.17	0.76
1:A:352:ARG:HG2	1:A:352:ARG:NH1	1.95	0.75
1:A:788:ILE:CD1	1:A:823:VAL:HG21	2.15	0.75
2:B:433:TRP:CD1	2:B:518:GLN:HG2	2.20	0.75
1:A:507:VAL:CG2	1:A:512:MET:HE3	2.15	0.75
1:A:934:PRO:HB2	2:B:613:LEU:CD1	2.10	0.75
2:B:224:LEU:HD23	2:B:404:MET:SD	2.27	0.75
1:A:367:ILE:CD1	1:A:415:GLN:HE21	0.31	0.75
1:A:660:ASN:HD22	1:A:661:GLU:N	1.84	0.75
2:B:327:TYR:CD1	2:B:448:MET:HE3	2.20	0.75
1:A:109:GLY:CA	1:A:233:GLU:O	2.32	0.75
1:A:669:ILE:O	1:A:670:ALA:C	2.25	0.75
1:A:740:GLU:OE1	1:A:740:GLU:N	2.19	0.75
1:A:836:THR:O	1:A:837:SER:OG	2.04	0.75
2:B:658:THR:HG22	2:B:695:VAL:HG21	1.68	0.75

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:222:ASP:OD1	1:A:223:ALA:N	2.20	0.75
1:A:555:VAL:HG12	1:A:687:THR:CG2	2.17	0.75
1:A:668:PHE:CD2	1:A:686:GLY:HA3	2.17	0.75
2:B:458:ASN:ND2	2:B:463:SER:O	2.20	0.75
2:B:764:LEU:O	2:B:769:ASN:ND2	2.20	0.75
2:B:832:HIS:O	2:B:937:VAL:HB	1.87	0.75
1:A:555:VAL:H	1:A:687:THR:HG21	1.51	0.75
2:B:211:ARG:O	2:B:323:ASN:OD1	2.04	0.75
1:A:19:LYS:HG2	1:A:140:LEU:HD23	1.67	0.75
2:B:846:THR:HB	2:B:847:PRO:HD2	1.69	0.75
1:A:472:ASP:OD2	1:A:739:ALA:HB3	1.85	0.75
1:A:55:LEU:CD2	1:A:528:MET:CE	2.64	0.75
1:A:948:PHE:HB3	2:B:149:GLN:HE22	1.49	0.75
2:B:7:GLN:NE2	2:B:76:ASP:HB2	2.00	0.75
1:A:39:ILE:CD1	2:B:988:VAL:O	2.35	0.74
1:A:598:TRP:C	1:A:600:SER:N	2.39	0.74
1:A:943:ARG:HH11	1:A:943:ARG:HG3	1.49	0.74
2:B:550:MET:O	2:B:551:VAL:C	2.23	0.74
2:B:794:GLN:HG2	2:B:796:ASP:O	1.85	0.74
1:A:81:ILE:HD11	1:A:98:GLU:CB	2.17	0.74
1:A:853:ASP:N	1:A:853:ASP:OD1	2.19	0.74
2:B:493:GLY:CA	2:B:562:LEU:CD2	2.60	0.74
2:B:293:ALA:HB1	2:B:298:ARG:O	1.88	0.74
2:B:597:LEU:CD1	2:B:644:ASP:OD1	2.28	0.74
1:A:367:ILE:HD13	1:A:415:GLN:NE2	1.39	0.74
1:A:248:VAL:HG23	1:A:628:SER:HB2	1.70	0.74
2:B:551:VAL:HG13	2:B:579:GLY:HA3	1.68	0.74
1:A:367:ILE:CD1	1:A:415:GLN:NE2	0.72	0.74
1:A:444:MET:HB3	1:A:449:ILE:HG21	1.67	0.74
2:B:198:MET:CE	2:B:458:ASN:O	2.34	0.74
2:B:216:SER:HB3	2:B:447:PRO:O	1.86	0.74
2:B:618:LEU:HD13	2:B:623:ILE:CD1	2.16	0.74
1:A:508:SER:CB	2:B:992:TYR:CE2	2.70	0.74
1:A:704:ILE:O	1:A:707:ILE:CD1	2.36	0.74
2:B:354:GLY:O	2:B:687:ALA:HB1	1.88	0.74
2:B:647:LEU:N	2:B:647:LEU:HD12	2.02	0.74
1:A:290:GLN:HB3	1:A:413:GLN:HE22	1.49	0.74
2:B:659:ILE:CD1	2:B:788:LEU:HD23	2.00	0.74
1:A:117:VAL:HG23	1:A:485:VAL:CG2	2.18	0.74
1:A:968:MET:HE3	2:B:659:ILE:HD13	1.70	0.74
1:A:934:PRO:HG3	2:B:610:ASP:HB3	1.70	0.74

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:111:ASN:HB2	1:A:467:GLN:HB2	1.69	0.74
1:A:55:LEU:CG	1:A:528:MET:HE2	1.87	0.74
1:A:740:GLU:O	1:A:741:ALA:C	2.23	0.74
1:A:82:THR:O	1:A:82:THR:HG23	1.87	0.74
1:A:8:ARG:O	1:A:11:GLY:N	2.18	0.74
2:B:794:GLN:OE1	2:B:805:HIS:ND1	2.20	0.74
2:B:673:TRP:CH2	2:B:677:HIS:HE1	2.06	0.73
1:A:635:GLY:HA2	1:A:640:MET:HE3	1.70	0.73
1:A:639:GLN:CA	1:A:639:GLN:HE21	2.01	0.73
1:A:788:ILE:CD1	1:A:823:VAL:CG2	2.64	0.73
1:A:885:LEU:N	1:A:885:LEU:HD22	2.02	0.73
2:B:329:LEU:HD12	2:B:450:GLU:HG2	1.68	0.73
2:B:331:LEU:CD1	2:B:373:THR:HG22	2.17	0.73
2:B:78:LEU:HD22	2:B:180:LEU:CD2	2.17	0.73
1:A:202:HIS:O	1:A:202:HIS:ND1	2.21	0.73
1:A:262:ARG:HH21	1:A:401:GLY:C	1.73	0.73
1:A:111:ASN:CG	1:A:467:GLN:HG3	2.09	0.73
1:A:519:LEU:HD23	1:A:519:LEU:C	2.08	0.73
2:B:32:LYS:HG2	2:B:69:GLU:OE1	1.88	0.73
1:A:125:MET:HE1	1:A:132:MET:HG3	1.70	0.73
1:A:249:PRO:HG2	1:A:252:TRP:CD2	2.11	0.73
1:A:72:ARG:O	1:A:863:VAL:HG12	1.87	0.73
1:A:202:HIS:HD2	1:A:346:LEU:HD21	1.51	0.73
1:A:541:GLY:HA3	1:A:733:SER:O	1.88	0.73
1:A:671:LEU:O	1:A:671:LEU:CG	2.34	0.73
1:A:214:ARG:N	1:A:214:ARG:HD3	1.97	0.73
1:A:51:LEU:HD21	1:A:62:ASN:HB2	1.69	0.73
1:A:577:ARG:NE	1:A:614:ALA:O	2.21	0.73
1:A:807:MET:SD	1:A:810:MET:HE1	2.28	0.73
2:B:293:ALA:HA	2:B:298:ARG:O	1.87	0.73
2:B:310:LEU:O	2:B:310:LEU:HD23	1.88	0.73
1:A:868:TYR:OH	2:B:772:PHE:HD2	1.68	0.73
2:B:708:GLU:HA	2:B:708:GLU:OE2	1.87	0.73
1:A:833:ARG:HH11	1:A:833:ARG:HG3	1.51	0.73
2:B:84:THR:HG21	2:B:545:ARG:NH1	2.03	0.73
1:A:19:LYS:HA	1:A:140:LEU:CD2	2.17	0.73
1:A:211:VAL:CG2	1:A:216:GLN:HG3	2.18	0.73
1:A:39:ILE:HG12	1:A:506:SER:OG	1.89	0.73
2:B:500:GLN:NE2	2:B:500:GLN:HA	2.02	0.73
1:A:948:PHE:CB	2:B:149:GLN:HE22	2.01	0.73
2:B:198:MET:O	2:B:204:GLN:CB	2.36	0.73

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:309:TRP:HE3	1:A:343:THR:CG2	1.98	0.72
1:A:425:ARG:C	1:A:426:MET:SD	2.67	0.72
1:A:435:GLN:HE21	1:A:435:GLN:C	1.93	0.72
2:B:524:HIS:O	2:B:528:TYR:CD1	2.42	0.72
2:B:499:TYR:CE2	2:B:860:MET:HG2	2.23	0.72
1:A:342:LEU:HD23	1:A:343:THR:N	2.04	0.72
1:A:477:SER:O	1:A:478:LEU:CD1	2.37	0.72
1:A:704:ILE:C	1:A:707:ILE:HD12	2.10	0.72
1:A:668:PHE:CZ	1:A:728:ARG:NH1	2.57	0.72
1:A:854:ILE:HD12	1:A:854:ILE:H	1.53	0.72
2:B:293:ALA:CA	2:B:298:ARG:O	2.37	0.72
2:B:307:LYS:HG2	2:B:311:ARG:NH2	2.04	0.72
2:B:141:TYR:HB2	2:B:922:GLY:HA3	1.70	0.72
1:A:455:HIS:CA	1:A:458:ILE:HG22	2.20	0.72
1:A:740:GLU:O	1:A:743:ALA:N	2.22	0.72
1:A:702:LYS:NZ	1:A:707:ILE:HG12	2.05	0.72
1:A:238:HIS:CD2	1:A:338:SER:HA	2.24	0.72
1:A:702:LYS:NZ	1:A:707:ILE:CG1	2.53	0.72
2:B:515:THR:HG21	2:B:656:TYR:HE2	1.55	0.72
2:B:659:ILE:HD12	2:B:788:LEU:HD22	1.72	0.72
1:A:107:HIS:HD2	1:A:236:CYS:O	1.71	0.72
1:A:254:ASP:N	1:A:556:HIS:NE2	2.36	0.72
1:A:574:LEU:CD2	1:A:577:ARG:HD3	2.20	0.72
1:A:634:ILE:HB	1:A:688:GLU:CB	2.19	0.72
1:A:352:ARG:CA	1:A:382:GLU:OE1	2.36	0.72
1:A:444:MET:HB3	1:A:449:ILE:CG2	2.18	0.72
1:A:634:ILE:CG2	1:A:688:GLU:CG	2.68	0.72
1:A:23:ARG:HG3	1:A:23:ARG:HH11	1.54	0.71
2:B:493:GLY:HA3	2:B:562:LEU:HD23	1.72	0.71
2:B:797:GLY:O	2:B:799:ARG:N	2.23	0.71
1:A:606:THR:HG23	1:A:609:TYR:H	1.54	0.71
2:B:114:ASN:HB3	2:B:119:TYR:CD2	2.25	0.71
2:B:89:ASP:OD1	2:B:89:ASP:N	2.22	0.71
1:A:280:CYS:HA	1:A:332:LEU:O	1.90	0.71
1:A:802:ARG:HG3	1:A:802:ARG:NH2	2.04	0.71
2:B:121:GLY:CA	2:B:150:CYS:O	2.38	0.71
2:B:747:ALA:HB3	2:B:749:THR:HG23	1.71	0.71
1:A:934:PRO:CB	2:B:613:LEU:CD1	2.64	0.71
1:A:23:ARG:HG3	1:A:23:ARG:NH1	2.04	0.71
1:A:776:VAL:CG1	1:A:807:MET:HE3	2.16	0.71
2:B:327:TYR:HB2	2:B:368:GLY:O	1.89	0.71

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:726:SER:HB2	2:B:727:PRO:HD3	1.71	0.71
2:B:355:ALA:HB3	2:B:358:ALA:HB2	1.72	0.71
1:A:380:CYS:SG	1:A:439:ALA:HB2	2.30	0.71
1:A:490:PHE:O	1:A:492:VAL:HG23	1.90	0.71
1:A:646:LEU:HD12	1:A:681:ALA:HB2	1.72	0.71
2:B:735:HIS:ND1	2:B:735:HIS:O	2.24	0.71
1:A:231:THR:CG2	1:A:343:THR:HG1	1.99	0.71
1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:HE21	2.00	0.71
2:B:329:LEU:HG	2:B:450:GLU:OE2	1.90	0.71
1:A:280:CYS:HB3	1:A:333:TRP:HB3	1.72	0.71
1:A:273:LEU:O	1:A:273:LEU:HD13	1.90	0.71
1:A:371:LEU:CD1	1:A:419:LEU:HD13	2.21	0.71
2:B:330:ALA:N	2:B:450:GLU:CD	2.41	0.71
2:B:497:ALA:HB1	2:B:557:LEU:HD21	1.72	0.71
2:B:84:THR:CG2	2:B:545:ARG:HH11	2.02	0.71
1:A:117:VAL:CG2	1:A:485:VAL:CG2	2.69	0.70
1:A:380:CYS:SG	1:A:434:ALA:C	2.70	0.70
2:B:322:GLU:HA	2:B:328:LEU:HD11	1.73	0.70
2:B:332:PRO:HG2	2:B:399:PHE:CZ	2.15	0.70
2:B:555:ASN:ND2	2:B:569:PHE:HB3	2.05	0.70
1:A:367:ILE:CD1	1:A:415:GLN:CG	2.69	0.70
2:B:104:CYS:HB3	2:B:830:THR:HB	1.73	0.70
2:B:445:SER:O	2:B:447:PRO:HD3	1.91	0.70
1:A:435:GLN:C	1:A:439:ALA:HB3	2.11	0.70
1:A:193:PHE:HZ	1:A:464:MET:CE	2.04	0.70
1:A:81:ILE:CD1	1:A:98:GLU:CB	2.69	0.70
2:B:713:ARG:O	2:B:716:ALA:O	2.08	0.70
1:A:35:ALA:O	1:A:42:GLY:CA	2.40	0.70
1:A:481:LEU:N	1:A:481:LEU:HD22	2.03	0.70
1:A:898:THR:HG22	2:B:858:PRO:HB3	1.74	0.70
1:A:367:ILE:HD13	1:A:415:GLN:CG	2.20	0.70
1:A:690:TRP:NE1	1:A:712:GLY:C	2.44	0.70
2:B:559:ALA:O	2:B:564:SER:HA	1.90	0.70
2:B:708:GLU:OE2	2:B:711:ARG:NH1	2.24	0.70
2:B:749:THR:O	2:B:750:GLU:C	2.29	0.70
1:A:518:LEU:O	1:A:518:LEU:HD23	1.91	0.70
1:A:576:LEU:HB2	1:A:614:ALA:HB1	1.72	0.70
1:A:646:LEU:HB2	1:A:669:ILE:HD13	1.73	0.70
1:A:81:ILE:HD13	1:A:81:ILE:C	2.12	0.70
1:A:833:ARG:HG2	1:A:833:ARG:O	1.90	0.70
2:B:257:PHE:HD1	2:B:357:HIS:NE2	1.88	0.70

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:343:LEU:CD2	2:B:373:THR:HG23	2.16	0.70
2:B:354:GLY:O	2:B:687:ALA:CB	2.39	0.70
2:B:673:TRP:CH2	2:B:759:TYR:CD2	2.79	0.70
1:A:892:CYS:HG	2:B:902:GLN:CG	2.03	0.70
1:A:328:GLU:HB3	1:A:390:PHE:CE2	2.26	0.70
1:A:507:VAL:HG21	1:A:512:MET:CE	2.22	0.70
1:A:650:ALA:CB	1:A:796:SER:OG	2.40	0.70
2:B:623:ILE:HD13	2:B:893:ILE:HD11	1.72	0.70
2:B:794:GLN:NE2	2:B:796:ASP:O	2.24	0.70
1:A:623:LEU:HD22	1:A:623:LEU:N	2.07	0.70
2:B:659:ILE:CD1	2:B:788:LEU:HD21	2.20	0.70
2:B:510:THR:HG22	2:B:632:THR:CG2	2.22	0.70
1:A:111:ASN:OD1	1:A:467:GLN:CG	2.34	0.69
1:A:211:VAL:HG22	1:A:216:GLN:CB	2.22	0.69
1:A:742:MET:HA	1:A:742:MET:CE	2.21	0.69
2:B:442:PRO:O	2:B:576:TYR:CZ	2.45	0.69
1:A:298:VAL:C	1:A:299:HIS:HD2	1.91	0.69
1:A:432:THR:CG2	1:A:433:LYS:N	2.52	0.69
1:A:690:TRP:HE1	1:A:712:GLY:C	1.95	0.69
1:A:892:CYS:HB2	2:B:905:PRO:HG3	1.73	0.69
2:B:32:LYS:CG	2:B:69:GLU:OE1	2.40	0.69
2:B:83:PHE:HE1	2:B:169:GLN:HG3	1.57	0.69
1:A:752:LYS:NZ	1:A:857:ASP:OD2	2.24	0.69
1:A:868:TYR:HH	2:B:772:PHE:HD2	1.28	0.69
1:A:894:ARG:CG	1:A:902:MET:HE2	2.19	0.69
2:B:36:GLU:O	2:B:65:GLU:HG2	1.91	0.69
2:B:216:SER:C	2:B:448:MET:HB3	2.11	0.69
1:A:639:GLN:HE21	1:A:639:GLN:H	1.41	0.69
1:A:201:MET:CE	1:A:465:VAL:CG1	2.71	0.69
1:A:887:PRO:C	1:A:893:VAL:HG11	2.11	0.69
2:B:163:GLY:CA	2:B:548:ASN:HB3	2.18	0.69
1:A:442:ALA:CA	1:A:509:VAL:CG1	2.70	0.69
2:B:7:GLN:CG	2:B:29:VAL:CG1	2.67	0.69
2:B:66:ARG:HG3	2:B:66:ARG:NH1	2.03	0.69
1:A:894:ARG:HA	1:A:902:MET:HE2	1.67	0.69
2:B:219:GLN:O	2:B:327:TYR:OH	2.11	0.69
2:B:3:ALA:O	2:B:79:ARG:HG3	1.92	0.69
1:A:232:TRP:CZ3	1:A:344:ILE:HG22	2.27	0.69
1:A:240:LYS:N	1:A:240:LYS:HD3	2.08	0.69
1:A:320:SER:HA	1:A:351:HIS:CD2	2.27	0.69
1:A:371:LEU:HD12	1:A:419:LEU:HD13	1.75	0.69

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:873:ILE:HD13	1:A:873:ILE:N	2.07	0.69
1:A:260:THR:CG2	1:A:263:GLU:OE1	2.41	0.69
1:A:380:CYS:SG	1:A:435:GLN:N	2.65	0.69
1:A:486:ASN:N	1:A:486:ASN:OD1	2.22	0.69
2:B:12:ARG:NH1	2:B:991:ASP:CG	2.38	0.69
2:B:34:THR:HG23	2:B:980:ASN:OD1	1.91	0.69
1:A:549:VAL:CG1	1:A:553:THR:HG21	2.20	0.69
1:A:555:VAL:HG12	1:A:687:THR:HG21	1.75	0.69
1:A:690:TRP:HE1	1:A:713:LEU:N	1.91	0.69
1:A:244:ALA:HB1	1:A:274:VAL:HG23	1.74	0.69
1:A:888:TYR:O	1:A:894:ARG:CZ	2.40	0.69
2:B:161:LEU:HD13	2:B:161:LEU:O	1.93	0.69
2:B:198:MET:HA	2:B:204:GLN:NE2	2.07	0.69
2:B:428:CYS:SG	2:B:818:HIS:CD2	2.86	0.69
1:A:634:ILE:HG22	1:A:688:GLU:HG3	1.73	0.68
2:B:112:THR:O	2:B:119:TYR:HB2	1.93	0.68
2:B:263:LEU:C	2:B:263:LEU:HD22	2.14	0.68
1:A:957:PHE:CE2	2:B:279:TYR:HE1	2.11	0.68
2:B:673:TRP:CH2	2:B:677:HIS:CE1	2.81	0.68
2:B:999:LEU:O	2:B:1000:ALA:HB2	1.92	0.68
1:A:309:TRP:CZ3	1:A:343:THR:HG21	2.28	0.68
1:A:449:ILE:CG1	1:A:453:THR:HG21	2.22	0.68
1:A:639:GLN:HE21	1:A:639:GLN:N	1.91	0.68
2:B:502:VAL:HG12	2:B:901:LEU:HD13	1.68	0.68
2:B:576:TYR:HD1	2:B:578:PHE:CE1	1.92	0.68
2:B:600:TYR:CE2	2:B:618:LEU:HD11	2.28	0.68
1:A:329:HIS:CD2	1:A:348:GLN:NE2	2.61	0.68
1:A:598:TRP:O	1:A:599:SER:C	2.32	0.68
1:A:79:GLU:CA	1:A:856:THR:HG23	1.92	0.68
2:B:442:PRO:HD2	2:B:576:TYR:CE1	2.29	0.68
2:B:589:TYR:CE1	2:B:808:GLY:CA	2.64	0.68
1:A:170:LEU:HD13	1:A:170:LEU:C	2.12	0.68
1:A:655:TYR:CE1	1:A:666:VAL:HG12	2.29	0.68
1:A:925:VAL:HG12	1:A:926:THR:N	2.08	0.68
1:A:399:VAL:O	1:A:403:THR:HG23	1.92	0.68
1:A:42:GLY:CA	1:A:445:ARG:HH22	2.06	0.68
1:A:371:LEU:C	1:A:500:MET:HE1	2.07	0.68
1:A:650:ALA:O	1:A:796:SER:OG	2.09	0.68
2:B:89:ASP:HB3	2:B:410:GLN:OE1	1.94	0.68
2:B:726:SER:CB	2:B:727:PRO:HD3	2.24	0.68
2:B:838:ARG:HH22	2:B:932:SER:HG	1.39	0.68

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:865:ARG:NH1	2:B:447:PRO:CG	2.56	0.68
1:A:27:LYS:CG	1:A:28:ASP:OD1	2.42	0.68
1:A:307:MET:O	1:A:309:TRP:NE1	2.26	0.68
1:A:533:HIS:O	1:A:537:GLN:HG2	1.93	0.68
1:A:619:VAL:HG23	1:A:620:ASP:N	2.09	0.68
2:B:199:LEU:HG	2:B:456:VAL:CG2	2.24	0.68
1:A:22:ALA:HB1	1:A:137:PRO:HB3	1.74	0.67
1:A:258:GLN:O	1:A:258:GLN:HG2	1.94	0.67
1:A:671:LEU:HB2	1:A:685:ILE:HG22	1.75	0.67
2:B:434:MET:CE	2:B:502:VAL:HG11	2.24	0.67
2:B:510:THR:O	2:B:511:ASP:HB2	1.92	0.67
1:A:273:LEU:CD2	1:A:281:VAL:HG23	2.20	0.67
1:A:452:ARG:HG3	1:A:452:ARG:NH2	2.07	0.67
1:A:481:LEU:CD1	1:A:624:ALA:HB2	2.24	0.67
1:A:588:ALA:HB1	1:A:592:GLN:OE1	1.94	0.67
1:A:135:CYS:SG	1:A:148:MET:HE1	2.35	0.67
1:A:355:THR:OG1	1:A:417:LEU:O	2.12	0.67
1:A:861:ARG:HH21	2:B:547:ALA:HB2	1.59	0.67
1:A:562:LEU:HD22	1:A:562:LEU:N	2.09	0.67
1:A:634:ILE:CB	1:A:688:GLU:CG	2.65	0.67
2:B:201:THR:OG1	2:B:204:GLN:HG3	1.94	0.67
2:B:256:ASP:CB	2:B:300:VAL:CG1	2.49	0.67
2:B:257:PHE:CE1	2:B:357:HIS:CE1	2.82	0.67
2:B:729:ARG:NH1	2:B:729:ARG:HG2	2.05	0.67
2:B:118:PHE:HE2	2:B:950:LEU:HD22	1.58	0.67
1:A:26:LEU:CD1	1:A:144:THR:HG22	2.24	0.67
1:A:452:ARG:HG3	1:A:452:ARG:HH21	1.58	0.67
1:A:627:ARG:HH12	1:A:738:CYS:HG	1.41	0.67
2:B:842:ASN:O	2:B:844:THR:O	2.12	0.67
1:A:892:CYS:SG	2:B:902:GLN:CD	2.70	0.67
1:A:248:VAL:HG23	1:A:628:SER:CB	2.24	0.67
1:A:105:TRP:CD1	1:A:471:ARG:NH2	2.57	0.67
1:A:352:ARG:NH2	1:A:426:MET:O	2.28	0.67
1:A:664:CYS:HB2	1:A:737:GLY:O	1.94	0.67
2:B:263:LEU:CD1	2:B:293:ALA:CB	2.66	0.67
2:B:434:MET:HE3	2:B:502:VAL:CG1	2.24	0.67
2:B:546:MET:HE2	2:B:546:MET:HA	1.76	0.67
2:B:648:VAL:HG11	2:B:653:VAL:CG2	2.25	0.67
1:A:249:PRO:CG	1:A:252:TRP:NE1	2.43	0.67
1:A:388:SER:O	1:A:391:GLY:N	2.28	0.67
1:A:512:MET:HA	2:B:188:GLY:HA3	1.77	0.67

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:623:ILE:HB	2:B:893:ILE:CG1	2.25	0.67
1:A:201:MET:HE1	1:A:465:VAL:HG11	1.76	0.67
1:A:553:THR:CG2	1:A:558:VAL:HG22	2.24	0.67
1:A:646:LEU:HD23	1:A:646:LEU:C	2.15	0.67
2:B:194:ILE:HG23	2:B:199:LEU:O	1.95	0.67
2:B:78:LEU:HD11	2:B:81:GLU:OE2	1.94	0.67
1:A:760:ILE:HG23	1:A:810:MET:HG2	1.78	0.66
2:B:332:PRO:CD	2:B:399:PHE:CE2	2.78	0.66
2:B:450:GLU:OE1	2:B:450:GLU:HA	1.95	0.66
1:A:435:GLN:O	1:A:439:ALA:CB	2.35	0.66
1:A:455:HIS:HB2	1:A:615:TYR:HE2	1.59	0.66
1:A:788:ILE:O	1:A:820:CYS:CB	2.43	0.66
2:B:194:ILE:CG2	2:B:199:LEU:O	2.43	0.66
2:B:162:SER:OG	2:B:440:LEU:HD11	1.94	0.66
2:B:43:THR:HG23	2:B:55:LYS:HD3	1.69	0.66
1:A:690:TRP:CZ3	1:A:721:VAL:CG2	2.75	0.66
1:A:68:PHE:HD1	1:A:71:SER:HB2	1.54	0.66
1:A:664:CYS:HB2	1:A:737:GLY:C	2.15	0.66
2:B:428:CYS:SG	2:B:818:HIS:HB2	2.36	0.66
1:A:514:ILE:O	1:A:514:ILE:HG13	1.94	0.66
1:A:253:LEU:HD11	1:A:630:PHE:HE1	1.61	0.66
1:A:943:ARG:NH1	2:B:616:ALA:O	2.28	0.66
1:A:103:ARG:HG3	1:A:103:ARG:NH2	2.04	0.66
1:A:876:VAL:HG21	1:A:909:LEU:CD1	2.25	0.66
2:B:130:ALA:O	2:B:140:GLU:HA	1.96	0.66
2:B:214:ARG:NH1	2:B:214:ARG:HB3	2.10	0.66
2:B:442:PRO:HG2	2:B:576:TYR:CZ	2.30	0.66
1:A:330:TYR:CE2	1:A:397:PRO:HG3	2.30	0.66
1:A:429:ALA:O	1:A:430:THR:HG23	1.95	0.66
1:A:68:PHE:CD1	1:A:71:SER:CB	2.71	0.66
2:B:57:GLY:O	2:B:478:HIS:CB	2.42	0.66
2:B:78:LEU:CD1	2:B:81:GLU:OE2	2.44	0.66
1:A:127:PHE:HE2	1:A:189:ARG:HE	0.68	0.66
1:A:205:ALA:HB2	1:A:232:TRP:HE1	1.57	0.66
1:A:525:LEU:HD23	1:A:608:LEU:HD11	1.78	0.66
1:A:908:PRO:HG3	2:B:528:TYR:CE1	2.25	0.66
2:B:343:LEU:CD2	2:B:373:THR:HG21	2.23	0.66
1:A:921:ASP:OD1	2:B:638:GLU:OE1	2.13	0.66
1:A:310:LEU:HG	1:A:311:ASP:H	1.59	0.66
1:A:455:HIS:C	1:A:458:ILE:HG22	2.16	0.66
1:A:39:ILE:CG2	1:A:507:VAL:HG12	2.15	0.66

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:635:GLY:CA	1:A:640:MET:CE	2.68	0.66
1:A:838:PRO:O	1:A:841:HIS:HB3	1.96	0.66
1:A:79:GLU:CB	1:A:856:THR:HG21	1.82	0.66
2:B:562:LEU:O	2:B:564:SER:N	2.29	0.66
1:A:464:MET:HB3	1:A:483:PHE:CZ	2.31	0.65
1:A:639:GLN:O	1:A:639:GLN:NE2	2.28	0.65
2:B:111:MET:SD	2:B:118:PHE:CD2	2.84	0.65
2:B:499:TYR:HE1	2:B:901:LEU:CD2	2.07	0.65
1:A:901:SER:OG	2:B:500:GLN:CD	2.34	0.65
1:A:209:GLY:HA3	1:A:218:LEU:HD11	1.77	0.65
1:A:607:ARG:HH11	2:B:4:PRO:CD	2.03	0.65
1:A:639:GLN:C	1:A:639:GLN:HE21	2.00	0.65
1:A:88:THR:HG22	1:A:89:ASP:N	2.11	0.65
1:A:865:ARG:NH1	2:B:447:PRO:HG2	2.11	0.65
2:B:622:LEU:HD12	2:B:622:LEU:N	2.10	0.65
2:B:288:THR:OG1	2:B:683:ASP:OD1	2.14	0.65
1:A:595:LYS:O	1:A:599:SER:HA	1.96	0.65
2:B:117:ARG:NH2	2:B:299:MET:O	2.27	0.65
1:A:214:ARG:CD	1:A:214:ARG:H	2.06	0.65
1:A:648:LYS:O	1:A:649:HIS:HB3	1.96	0.65
1:A:756:ARG:HH11	1:A:851:HIS:CD2	2.12	0.65
1:A:883:LEU:N	1:A:883:LEU:HD23	2.12	0.65
1:A:607:ARG:NH1	2:B:4:PRO:CD	2.57	0.65
1:A:164:MET:HG2	1:A:184:ASP:HB2	1.77	0.65
1:A:478:LEU:HD12	1:A:478:LEU:N	2.12	0.65
1:A:613:GLN:OE1	1:A:614:ALA:N	2.29	0.65
1:A:815:ILE:CG2	1:A:816:THR:H	1.88	0.65
1:A:704:ILE:CA	1:A:707:ILE:CD1	2.74	0.65
1:A:272:ARG:NH2	1:A:272:ARG:HB2	2.01	0.65
1:A:310:LEU:HG	1:A:311:ASP:N	2.11	0.65
2:B:110:GLN:NE2	2:B:951:TYR:CE1	2.64	0.65
2:B:587:CYS:N	2:B:588:PHE:HD1	1.95	0.65
2:B:673:TRP:HH2	2:B:759:TYR:CD2	2.15	0.65
2:B:838:ARG:HA	2:B:934:SER:HA	1.77	0.65
1:A:309:TRP:CZ3	1:A:343:THR:CG2	2.78	0.65
1:A:344:ILE:CD1	1:A:396:LEU:CD1	2.74	0.65
1:A:940:PRO:HG3	2:B:915:SER:CB	2.25	0.65
1:A:117:VAL:HA	1:A:485:VAL:O	1.96	0.65
1:A:507:VAL:CG2	1:A:512:MET:CE	2.75	0.65
1:A:639:GLN:NE2	1:A:639:GLN:H	1.95	0.65
1:A:26:LEU:HD11	1:A:144:THR:CG2	2.24	0.65

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:55:LEU:CD2	1:A:528:MET:HE3	2.24	0.65
1:A:525:LEU:HA	1:A:608:LEU:HD11	1.78	0.65
1:A:968:MET:HG3	2:B:734:LEU:HD13	1.79	0.65
2:B:340:ALA:HB2	2:B:386:THR:HB	1.78	0.65
1:A:968:MET:CE	2:B:659:ILE:HG21	2.27	0.65
1:A:280:CYS:SG	1:A:308:SER:O	2.53	0.64
1:A:433:LYS:HD3	1:A:437:ALA:CB	2.25	0.64
1:A:638:ARG:HG3	1:A:638:ARG:NH2	2.04	0.64
1:A:677:ILE:HG13	1:A:678:THR:N	2.12	0.64
1:A:153:THR:HB	2:B:1001:SER:O	1.96	0.64
2:B:334:CYS:CB	2:B:468:MET:HE3	2.26	0.64
2:B:676:TRP:CZ3	2:B:680:LYS:HE2	2.31	0.64
2:B:990:HIS:CB	2:B:992:TYR:HE1	2.10	0.64
1:A:649:HIS:O	1:A:651:GLN:N	2.29	0.64
2:B:600:TYR:HE2	2:B:618:LEU:HD11	1.62	0.64
2:B:799:ARG:NH1	2:B:799:ARG:HG3	2.08	0.64
2:B:498:ILE:HD12	2:B:820:PHE:CZ	2.32	0.64
2:B:767:ALA:C	2:B:768:ARG:HG3	2.17	0.64
1:A:105:TRP:HA	1:A:105:TRP:CE3	2.31	0.64
1:A:239:GLY:C	1:A:240:LYS:HD3	2.18	0.64
1:A:432:THR:O	1:A:435:GLN:CA	2.46	0.64
2:B:405:ALA:O	2:B:406:ASP:C	2.34	0.64
1:A:307:MET:C	1:A:309:TRP:CD1	2.71	0.64
2:B:110:GLN:HA	2:B:110:GLN:NE2	2.09	0.64
2:B:199:LEU:HG	2:B:456:VAL:HG21	1.79	0.64
1:A:55:LEU:CD2	1:A:528:MET:HE1	2.28	0.64
1:A:807:MET:SD	1:A:810:MET:CE	2.85	0.64
1:A:865:ARG:HD3	2:B:447:PRO:HG3	1.79	0.64
1:A:298:VAL:O	1:A:299:HIS:CD2	2.51	0.64
1:A:317:SER:HB3	1:A:323:GLY:HA2	1.80	0.64
1:A:385:LEU:HD13	1:A:385:LEU:N	2.11	0.64
1:A:201:MET:HE1	1:A:465:VAL:CG1	2.27	0.64
1:A:623:LEU:H	1:A:623:LEU:HD22	1.63	0.64
1:A:704:ILE:HA	1:A:707:ILE:HD11	1.79	0.64
1:A:140:LEU:O	1:A:140:LEU:HD12	1.98	0.64
1:A:972:GLU:HB3	1:A:973:GLY:CA	2.23	0.64
1:A:837:SER:O	1:A:837:SER:OG	2.14	0.64
1:A:967:GLN:O	1:A:968:MET:C	2.36	0.64
2:B:38:LYS:HG3	2:B:38:LYS:O	1.97	0.64
2:B:81:GLU:OE2	2:B:179:ALA:HB1	1.97	0.64
1:A:190:GLY:HA3	1:A:488:SER:O	1.98	0.64

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:588:ALA:CB	1:A:592:GLN:CD	2.44	0.64
1:A:921:ASP:HB2	2:B:626:ALA:CB	2.26	0.64
2:B:665:GLY:C	2:B:667:GLN:H	2.00	0.64
1:A:152:VAL:HG12	1:A:156:THR:HG21	1.80	0.63
1:A:72:ARG:O	1:A:863:VAL:CG1	2.46	0.63
1:A:898:THR:HG23	2:B:860:MET:HE1	1.80	0.63
1:A:958:THR:HG22	1:A:959:LYS:N	2.13	0.63
1:A:218:LEU:HD23	1:A:218:LEU:N	2.12	0.63
1:A:319:ASP:OD1	1:A:319:ASP:N	2.29	0.63
1:A:519:LEU:O	1:A:522:THR:HG22	1.96	0.63
1:A:221:ASN:HB2	2:B:209:ARG:HD2	1.79	0.63
1:A:865:ARG:HH11	2:B:447:PRO:HG3	1.62	0.63
1:A:650:ALA:O	1:A:796:SER:HA	1.98	0.63
1:A:650:ALA:O	1:A:796:SER:CA	2.46	0.63
2:B:769:ASN:HD22	2:B:769:ASN:H	1.47	0.63
1:A:618:PHE:O	1:A:619:VAL:HG22	1.99	0.63
1:A:643:ALA:HA	1:A:669:ILE:HG23	1.80	0.63
1:A:689:ARG:HG3	1:A:689:ARG:HH11	1.63	0.63
1:A:60:LEU:HD12	1:A:860:ILE:CG2	2.27	0.63
2:B:549:LYS:HD2	2:B:549:LYS:N	2.13	0.63
1:A:125:MET:CE	1:A:186:ASN:HD22	2.12	0.63
1:A:433:LYS:HD2	1:A:437:ALA:HB2	1.75	0.63
1:A:188:CYS:SG	1:A:492:VAL:HG11	2.37	0.63
1:A:618:PHE:C	1:A:619:VAL:HG13	2.19	0.63
1:A:83:VAL:O	1:A:95:GLN:HA	1.98	0.63
2:B:162:SER:OG	2:B:163:GLY:N	2.31	0.63
1:A:495:VAL:HG23	1:A:496:GLN:N	2.13	0.63
1:A:571:LEU:CD2	1:A:592:GLN:CG	2.76	0.63
2:B:597:LEU:CB	2:B:644:ASP:OD2	2.47	0.63
2:B:599:VAL:HG13	2:B:624:ALA:O	1.97	0.63
1:A:193:PHE:CZ	1:A:464:MET:CE	2.81	0.63
1:A:512:MET:CA	2:B:188:GLY:HA3	2.29	0.63
1:A:58:GLN:HG2	1:A:860:ILE:HD11	1.80	0.63
1:A:795:ALA:O	1:A:796:SER:HB3	1.97	0.63
1:A:807:MET:CE	1:A:810:MET:CE	2.77	0.63
1:A:634:ILE:CG2	1:A:688:GLU:HG3	2.28	0.62
1:A:940:PRO:HB2	1:A:944:MET:HE2	1.81	0.62
2:B:335:ASP:N	2:B:335:ASP:OD1	2.29	0.62
2:B:45:ILE:C	2:B:53:ILE:CD1	2.67	0.62
1:A:756:ARG:NH1	1:A:851:HIS:NE2	2.44	0.62
1:A:932:ARG:CB	1:A:933:PRO:CD	2.74	0.62

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:973:GLY:N	2:B:791:ILE:HD12	2.12	0.62
1:A:314:THR:C	1:A:347:LYS:HZ1	1.91	0.62
1:A:432:THR:O	1:A:435:GLN:N	2.32	0.62
1:A:525:LEU:HG	1:A:608:LEU:CD1	2.28	0.62
1:A:481:LEU:HD11	1:A:624:ALA:HB2	1.81	0.62
1:A:552:PHE:HE1	1:A:674:PRO:HB3	1.64	0.62
1:A:650:ALA:HB1	1:A:796:SER:OG	1.98	0.62
1:A:843:ARG:NH1	1:A:843:ARG:HB3	2.11	0.62
2:B:198:MET:CA	2:B:204:GLN:NE2	2.61	0.62
2:B:442:PRO:HG2	2:B:576:TYR:CE1	2.34	0.62
1:A:551:ARG:HH11	1:A:551:ARG:HG2	1.65	0.62
1:A:650:ALA:HB1	1:A:796:SER:CB	2.26	0.62
2:B:214:ARG:HH11	2:B:214:ARG:CG	2.13	0.62
2:B:734:LEU:O	2:B:735:HIS:CD2	2.52	0.62
1:A:238:HIS:CE1	1:A:334:LYS:HG3	2.33	0.62
1:A:380:CYS:SG	1:A:439:ALA:CB	2.87	0.62
1:A:55:LEU:CG	1:A:528:MET:HE1	1.94	0.62
1:A:801:LEU:HD21	1:A:813:LEU:HD21	1.80	0.62
1:A:841:HIS:O	1:A:844:GLY:N	2.32	0.62
1:A:899:LEU:O	1:A:900:HIS:C	2.33	0.62
1:A:563:PHE:HA	1:A:566:VAL:HG23	1.81	0.62
1:A:78:ALA:O	1:A:856:THR:CG2	2.47	0.62
2:B:134:ALA:O	2:B:135:ASP:C	2.33	0.62
1:A:508:SER:CB	2:B:992:TYR:CD2	2.83	0.62
1:A:508:SER:OG	2:B:992:TYR:CD2	2.53	0.62
1:A:39:ILE:HG12	1:A:506:SER:HG	1.64	0.62
1:A:906:ALA:O	1:A:907:VAL:CG1	2.47	0.62
1:A:532:ALA:O	1:A:536:GLU:HB2	2.00	0.62
1:A:943:ARG:NH1	1:A:943:ARG:HG3	2.11	0.62
1:A:952:THR:HG21	2:B:256:ASP:OD2	2.00	0.62
2:B:549:LYS:CA	2:B:550:MET:SD	2.88	0.62
1:A:752:LYS:HE3	1:A:857:ASP:OD2	1.98	0.62
1:A:8:ARG:O	1:A:9:ASP:C	2.36	0.62
2:B:214:ARG:HG2	2:B:214:ARG:HH11	1.65	0.62
2:B:434:MET:CE	2:B:502:VAL:CG1	2.78	0.62
2:B:623:ILE:HD12	2:B:893:ILE:CD1	2.30	0.62
2:B:666:LEU:HD22	2:B:666:LEU:O	2.00	0.62
1:A:265:VAL:HG22	1:A:265:VAL:O	2.00	0.61
1:A:273:LEU:HD11	1:A:334:LYS:HB2	1.81	0.61
1:A:492:VAL:CB	1:A:495:VAL:CG2	2.53	0.61
1:A:713:LEU:CG	1:A:714:ASN:N	2.55	0.61

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:589:TYR:HE1	2:B:808:GLY:CA	2.09	0.61
2:B:498:ILE:CD1	2:B:820:PHE:CE2	2.76	0.61
1:A:105:TRP:HE3	1:A:105:TRP:HA	1.65	0.61
1:A:163:GLU:HA	1:A:163:GLU:OE2	2.00	0.61
1:A:551:ARG:NH1	1:A:551:ARG:HG2	2.14	0.61
1:A:551:ARG:O	1:A:553:THR:OG1	2.17	0.61
1:A:750:GLU:O	1:A:751:HIS:ND1	2.23	0.61
2:B:264:THR:O	2:B:265:PRO:C	2.32	0.61
2:B:1:MET:SD	2:B:2:SER:N	2.72	0.61
2:B:349:LYS:HD3	2:B:349:LYS:H	1.64	0.61
2:B:428:CYS:SG	2:B:818:HIS:CG	2.93	0.61
2:B:442:PRO:HG2	2:B:576:TYR:CE2	2.36	0.61
1:A:152:VAL:CG1	1:A:156:THR:HG21	2.31	0.61
1:A:191:PHE:O	1:A:192:ALA:C	2.37	0.61
1:A:350:TYR:CD2	1:A:383:PHE:HD1	2.19	0.61
1:A:455:HIS:O	1:A:458:ILE:CG2	2.48	0.61
1:A:472:ASP:CG	1:A:739:ALA:CB	2.49	0.61
1:A:58:GLN:CB	1:A:860:ILE:HD12	2.30	0.61
1:A:77:LEU:HD22	1:A:742:MET:CE	2.30	0.61
2:B:170:ASP:OD1	2:B:171:ASN:N	2.33	0.61
2:B:294:ASP:O	2:B:295:TYR:O	2.18	0.61
2:B:383:HIS:O	2:B:384:ALA:C	2.39	0.61
2:B:334:CYS:HB3	2:B:468:MET:HE3	1.81	0.61
1:A:435:GLN:O	1:A:435:GLN:NE2	2.33	0.61
1:A:449:ILE:CG2	1:A:449:ILE:O	2.48	0.61
1:A:468:THR:HG23	1:A:468:THR:O	2.01	0.61
2:B:327:TYR:CD1	2:B:329:LEU:HD13	2.35	0.61
2:B:230:THR:HG21	2:B:364:MET:HB2	1.82	0.61
2:B:197:PRO:CG	2:B:457:TRP:HA	2.30	0.61
2:B:659:ILE:HD11	2:B:788:LEU:HD21	1.78	0.61
2:B:509:ILE:HG21	2:B:512:GLY:HA2	1.81	0.61
1:A:437:ALA:O	1:A:509:VAL:O	2.18	0.61
1:A:52:THR:HG21	1:A:601:MET:HE1	1.82	0.61
1:A:676:THR:O	1:A:676:THR:HG22	2.00	0.61
2:B:161:LEU:CD1	2:B:161:LEU:H	2.14	0.61
2:B:38:LYS:NZ	2:B:65:GLU:CD	2.52	0.61
1:A:51:LEU:HD21	1:A:62:ASN:CB	2.30	0.61
1:A:558:VAL:HG12	1:A:558:VAL:O	2.00	0.61
1:A:742:MET:O	1:A:746:VAL:HG23	2.01	0.61
1:A:790:PRO:CD	1:A:819:ASP:HB2	2.30	0.61
2:B:227:VAL:CG2	2:B:364:MET:SD	2.86	0.61

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:672:ASN:HB2	2:B:754:TYR:CZ	2.35	0.61
1:A:385:LEU:HD21	1:A:443:LEU:HD11	1.82	0.61
1:A:72:ARG:HB2	1:A:863:VAL:CG1	2.31	0.61
1:A:777:LEU:CD2	1:A:834:MET:HE2	2.29	0.61
1:A:880:VAL:HG22	1:A:880:VAL:O	2.01	0.61
2:B:165:THR:HA	2:B:546:MET:HE2	1.79	0.61
2:B:421:SER:HB2	2:B:554:VAL:HG23	1.82	0.61
2:B:684:SER:OG	2:B:785:ARG:HD3	2.00	0.61
1:A:471:ARG:O	1:A:471:ARG:HG2	1.99	0.60
1:A:50:SER:C	1:A:51:LEU:HD13	2.19	0.60
1:A:645:ALA:O	1:A:649:HIS:HA	2.01	0.60
1:A:925:VAL:O	1:A:926:THR:HG22	2.01	0.60
2:B:120:LEU:O	2:B:151:VAL:HA	2.01	0.60
2:B:241:SER:CB	2:B:390:ARG:CG	2.79	0.60
2:B:666:LEU:HD13	2:B:666:LEU:O	2.01	0.60
1:A:589:LEU:H	1:A:589:LEU:HD12	1.67	0.60
1:A:788:ILE:HD11	1:A:823:VAL:HG23	1.83	0.60
2:B:259:VAL:HG13	2:B:260:LYS:H	1.66	0.60
1:A:972:GLU:O	2:B:797:GLY:C	2.39	0.60
1:A:452:ARG:CG	1:A:452:ARG:HH21	2.13	0.60
1:A:475:ASN:OD1	1:A:475:ASN:N	2.33	0.60
1:A:801:LEU:CD2	1:A:813:LEU:HD21	2.31	0.60
1:A:839:GLU:O	1:A:840:ALA:C	2.38	0.60
1:A:919:LEU:O	1:A:919:LEU:HD23	2.01	0.60
1:A:125:MET:CE	1:A:132:MET:HG3	2.31	0.60
1:A:193:PHE:HZ	1:A:464:MET:HE2	1.65	0.60
1:A:335:GLY:HA2	1:A:341:HIS:HD2	1.66	0.60
1:A:696:LEU:HA	1:A:701:SER:O	2.00	0.60
2:B:186:TRP:CH2	2:B:212:VAL:O	2.52	0.60
2:B:647:LEU:H	2:B:647:LEU:CD1	2.14	0.60
1:A:238:HIS:CG	1:A:334:LYS:HD2	2.27	0.60
1:A:132:MET:HE2	1:A:493:GLN:HB3	1.81	0.60
1:A:201:MET:HG3	1:A:400:PHE:CE1	2.37	0.60
1:A:329:HIS:HD2	1:A:348:GLN:NE2	1.99	0.60
1:A:127:PHE:CD1	1:A:452:ARG:HD2	2.37	0.60
1:A:618:PHE:O	1:A:619:VAL:HG13	2.00	0.60
1:A:702:LYS:NZ	1:A:707:ILE:HG13	2.16	0.60
1:A:51:LEU:O	2:B:1:MET:HA	2.02	0.60
2:B:38:LYS:HZ3	2:B:65:GLU:CD	2.05	0.60
2:B:208:PHE:CE2	2:B:452:ALA:HB1	2.36	0.60
2:B:648:VAL:CG1	2:B:653:VAL:HG21	2.30	0.60

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:113:ALA:HB2	1:A:480:PRO:O	2.00	0.60
1:A:702:LYS:HZ1	1:A:707:ILE:CG1	2.13	0.60
1:A:943:ARG:O	1:A:943:ARG:HD3	2.02	0.60
2:B:734:LEU:O	2:B:735:HIS:CG	2.55	0.60
1:A:477:SER:OG	1:A:478:LEU:N	2.34	0.60
1:A:656:ASP:OD2	1:A:802:ARG:HD2	2.02	0.60
1:A:788:ILE:CD1	1:A:823:VAL:HG23	2.31	0.60
2:B:265:PRO:CD	2:B:266:HIS:H	2.13	0.60
2:B:446:ARG:NH1	2:B:446:ARG:HG3	2.14	0.60
2:B:56:ARG:HH22	2:B:485:GLN:HE22	1.48	0.60
2:B:623:ILE:CG2	2:B:893:ILE:CG1	2.79	0.60
2:B:990:HIS:CB	2:B:992:TYR:CE1	2.85	0.60
2:B:212:VAL:HG22	2:B:449:ASN:HB2	1.84	0.60
2:B:224:LEU:HB2	2:B:404:MET:HG2	1.82	0.60
2:B:374:GLY:O	2:B:375:VAL:HG22	2.01	0.60
2:B:221:HIS:CD2	2:B:411:VAL:HG21	2.37	0.60
2:B:553:PRO:HA	2:B:579:GLY:HA2	1.84	0.60
2:B:707:VAL:HG12	2:B:707:VAL:O	2.02	0.60
2:B:733:ARG:O	2:B:736:HIS:ND1	2.27	0.60
2:B:623:ILE:CG2	2:B:893:ILE:CD1	2.64	0.60
1:A:262:ARG:HH22	1:A:401:GLY:HA3	1.23	0.60
1:A:49:LEU:HG	1:A:607:ARG:HG3	1.84	0.60
1:A:819:ASP:OD1	1:A:819:ASP:N	2.35	0.60
1:A:238:HIS:CD2	1:A:338:SER:CA	2.85	0.59
1:A:305:ASP:OD1	1:A:306:PRO:HD2	2.02	0.59
1:A:42:GLY:CA	1:A:445:ARG:NH2	2.65	0.59
1:A:750:GLU:C	1:A:751:HIS:HD1	2.06	0.59
2:B:245:ARG:C	2:B:387:VAL:HG12	2.22	0.59
2:B:794:GLN:HG3	2:B:796:ASP:H	1.66	0.59
1:A:380:CYS:HG	1:A:434:ALA:C	2.03	0.59
1:A:951:GLY:H	2:B:114:ASN:HD21	1.50	0.59
2:B:170:ASP:HB2	2:B:545:ARG:HH22	1.67	0.59
2:B:559:ALA:HB2	2:B:569:PHE:CD2	2.36	0.59
1:A:923:THR:CG2	2:B:627:THR:OG1	2.49	0.59
2:B:640:ALA:HB1	2:B:887:THR:HG21	1.85	0.59
2:B:751:ARG:O	2:B:752:HIS:HB2	2.02	0.59
2:B:695:VAL:HG22	2:B:780:ILE:HG23	1.84	0.59
2:B:431:HIS:O	2:B:812:ALA:HB3	2.02	0.59
1:A:433:LYS:O	1:A:437:ALA:N	2.26	0.59
1:A:60:LEU:HD12	1:A:860:ILE:HG21	1.84	0.59
2:B:241:SER:HB3	2:B:390:ARG:CG	2.26	0.59

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:25:VAL:O	2:B:25:VAL:HG12	2.01	0.59
2:B:95:GLN:HE21	2:B:95:GLN:HA	1.67	0.59
2:B:195:VAL:HG22	2:B:984:ILE:CG2	2.31	0.59
1:A:125:MET:HG2	1:A:136:ASP:OD2	2.02	0.59
1:A:353:MET:CE	1:A:385:LEU:HB2	2.31	0.59
1:A:421:GLY:C	1:A:422:ILE:CD1	2.71	0.59
1:A:450:SER:O	1:A:453:THR:HG22	2.01	0.59
1:A:654:THR:OG1	1:A:667:GLN:NE2	2.36	0.59
2:B:238:VAL:HG23	2:B:238:VAL:O	2.02	0.59
2:B:329:LEU:HD12	2:B:450:GLU:CG	2.32	0.59
2:B:500:GLN:HG3	2:B:560:TRP:CH2	2.37	0.59
2:B:761:PRO:HG3	2:B:778:TRP:CD1	2.38	0.59
1:A:200:VAL:HG12	1:A:200:VAL:O	2.03	0.59
2:B:113:VAL:O	2:B:113:VAL:HG12	2.00	0.59
1:A:132:MET:HE1	1:A:493:GLN:OE1	1.98	0.59
1:A:828:ARG:CG	1:A:828:ARG:HH11	2.15	0.59
1:A:970:LEU:HD12	1:A:970:LEU:N	2.17	0.59
2:B:332:PRO:HG2	2:B:399:PHE:CG	2.36	0.59
2:B:373:THR:OG1	2:B:381:THR:CA	2.46	0.59
2:B:433:TRP:CH2	2:B:521:LEU:HD23	2.37	0.59
2:B:830:THR:HA	2:B:939:MET:SD	2.43	0.59
1:A:156:THR:CG2	1:A:157:MET:H	2.09	0.59
1:A:185:ASN:OD1	1:A:186:ASN:N	2.35	0.59
1:A:195:VAL:HG23	1:A:384:LEU:HB3	1.84	0.59
1:A:367:ILE:HD12	1:A:415:GLN:NE2	0.93	0.59
1:A:589:LEU:N	1:A:592:GLN:NE2	2.50	0.59
2:B:197:PRO:O	2:B:456:VAL:O	2.20	0.59
2:B:563:GLY:C	2:B:564:SER:OG	2.38	0.59
2:B:761:PRO:HG3	2:B:778:TRP:NE1	2.17	0.59
1:A:132:MET:HE2	1:A:493:GLN:CB	2.33	0.59
1:A:31:VAL:HG12	1:A:31:VAL:O	2.03	0.59
1:A:320:SER:CA	1:A:351:HIS:CD2	2.86	0.59
1:A:387:ASN:ND2	1:A:391:GLY:CA	2.64	0.59
1:A:950:MET:CE	2:B:112:THR:CG2	2.81	0.59
2:B:484:ALA:HB2	2:B:950:LEU:HD23	1.84	0.59
2:B:57:GLY:O	2:B:478:HIS:CG	2.55	0.59
1:A:446:ARG:HH11	1:A:446:ARG:HG2	1.67	0.59
1:A:243:VAL:HG23	1:A:473:LEU:O	1.98	0.59
1:A:833:ARG:HH11	1:A:833:ARG:CG	2.13	0.59
1:A:925:VAL:HG12	1:A:926:THR:H	1.67	0.59
2:B:311:ARG:O	2:B:312:SER:OG	2.19	0.59

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:587:CYS:N	2:B:588:PHE:CD1	2.71	0.59
2:B:672:ASN:CB	2:B:754:TYR:CE2	2.86	0.59
2:B:623:ILE:CD1	2:B:893:ILE:CD1	2.80	0.59
1:A:107:HIS:CD2	1:A:236:CYS:O	2.55	0.59
1:A:201:MET:HE3	1:A:465:VAL:CG1	2.31	0.59
1:A:407:HIS:HE1	1:A:490:PHE:CE2	2.20	0.59
1:A:632:ARG:O	1:A:726:TYR:CE1	2.56	0.59
2:B:327:TYR:CD1	2:B:329:LEU:CD1	2.86	0.59
2:B:514:THR:HG21	2:B:587:CYS:HB2	1.85	0.59
2:B:658:THR:CG2	2:B:695:VAL:CG2	2.81	0.59
2:B:658:THR:HG21	2:B:695:VAL:HG21	1.84	0.59
1:A:27:LYS:HG3	1:A:28:ASP:OD1	2.03	0.58
1:A:38:ASN:HD22	1:A:38:ASN:C	2.06	0.58
1:A:264:ARG:HG2	1:A:707:ILE:CG2	2.32	0.58
1:A:898:THR:HG22	2:B:858:PRO:HG3	1.85	0.58
1:A:950:MET:HG3	2:B:114:ASN:HD22	1.67	0.58
2:B:26:GLN:C	2:B:27:THR:HG23	2.21	0.58
2:B:832:HIS:CE1	2:B:837:ALA:HB1	2.37	0.58
1:A:23:ARG:HH11	1:A:23:ARG:CG	2.15	0.58
1:A:429:ALA:C	1:A:430:THR:CG2	2.70	0.58
1:A:481:LEU:N	1:A:481:LEU:HD13	2.18	0.58
1:A:894:ARG:HE	1:A:902:MET:HE2	1.68	0.58
2:B:257:PHE:HB3	2:B:355:ALA:HB1	1.85	0.58
2:B:375:VAL:HG23	2:B:375:VAL:O	2.01	0.58
2:B:433:TRP:HD1	2:B:518:GLN:HE21	1.49	0.58
2:B:442:PRO:HD2	2:B:576:TYR:CZ	2.38	0.58
1:A:262:ARG:NH2	1:A:401:GLY:O	2.32	0.58
1:A:203:ASN:HB3	1:A:519:LEU:CD1	2.32	0.58
1:A:611:LEU:HD22	1:A:611:LEU:O	2.03	0.58
1:A:961:LEU:CD1	2:B:284:MET:CG	2.79	0.58
2:B:269:SER:HB2	2:B:430:ALA:O	2.01	0.58
2:B:440:LEU:O	2:B:578:PHE:HB3	2.03	0.58
1:A:131:ARG:HH11	1:A:131:ARG:CG	2.16	0.58
1:A:432:THR:HG23	1:A:433:LYS:H	1.63	0.58
1:A:852:VAL:O	1:A:852:VAL:HG13	2.03	0.58
1:A:85:ALA:HB1	1:A:910:LEU:CD2	2.28	0.58
1:A:367:ILE:HD12	1:A:415:GLN:CD	1.90	0.58
1:A:436:LEU:O	1:A:436:LEU:HD13	2.03	0.58
1:A:455:HIS:HB3	1:A:611:LEU:HD21	1.86	0.58
1:A:264:ARG:HG2	1:A:707:ILE:HG21	1.86	0.58
1:A:886:ARG:CZ	1:A:889:GLU:HG2	2.34	0.58

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:497:ALA:CB	2:B:557:LEU:HD22	2.33	0.58
2:B:546:MET:HE3	2:B:546:MET:HA	1.84	0.58
1:A:189:ARG:HG3	1:A:189:ARG:NH2	2.18	0.58
1:A:199:MET:SD	1:A:203:ASN:OD1	2.62	0.58
1:A:359:THR:HB	2:B:999:LEU:O	2.03	0.58
1:A:570:GLU:O	1:A:570:GLU:HG3	2.02	0.58
1:A:667:GLN:O	1:A:684:ALA:HB3	2.02	0.58
1:A:843:ARG:CG	1:A:843:ARG:HH11	2.17	0.58
1:A:950:MET:CE	2:B:112:THR:HG22	2.27	0.58
2:B:195:VAL:HG22	2:B:984:ILE:HG22	1.85	0.58
2:B:525:LEU:HD13	2:B:557:LEU:HD11	1.86	0.58
1:A:211:VAL:HG23	1:A:216:GLN:HG3	1.85	0.58
1:A:39:ILE:N	1:A:506:SER:OG	2.35	0.58
1:A:525:LEU:CG	1:A:608:LEU:CD1	2.81	0.58
1:A:532:ALA:O	1:A:535:CYS:SG	2.60	0.58
1:A:503:THR:C	1:A:504:GLU:OE1	2.42	0.58
1:A:967:GLN:O	1:A:969:GLU:N	2.37	0.58
2:B:307:LYS:CG	2:B:311:ARG:NH2	2.67	0.58
2:B:433:TRP:CD1	2:B:518:GLN:HG3	2.38	0.58
2:B:576:TYR:HE1	2:B:578:PHE:CZ	2.22	0.58
2:B:597:LEU:HB2	2:B:644:ASP:OD2	2.04	0.58
1:A:10:ASN:ND2	1:A:10:ASN:O	2.36	0.58
1:A:145:ILE:HD11	1:A:157:MET:CE	2.34	0.58
1:A:65:LEU:CD1	1:A:65:LEU:O	2.51	0.58
1:A:757:HIS:CD2	1:A:758:THR:N	2.72	0.58
1:A:958:THR:O	1:A:959:LYS:HD2	2.04	0.58
1:A:556:HIS:CE1	1:A:626:ILE:CD1	2.87	0.57
2:B:101:ILE:HD11	2:B:857:VAL:HA	1.86	0.57
2:B:433:TRP:HD1	2:B:518:GLN:NE2	2.01	0.57
2:B:607:THR:HG21	2:B:909:ASN:ND2	2.19	0.57
2:B:597:LEU:HD22	2:B:622:LEU:HB3	1.86	0.57
2:B:747:ALA:HB1	2:B:749:THR:HG22	1.83	0.57
1:A:584:SER:C	1:A:585:SER:HG	2.03	0.57
2:B:247:ARG:NE	2:B:347:TRP:CD1	2.71	0.57
1:A:248:VAL:CB	1:A:249:PRO:HD2	2.28	0.57
1:A:305:ASP:OD1	1:A:306:PRO:N	2.37	0.57
1:A:421:GLY:C	1:A:422:ILE:HD12	2.24	0.57
1:A:478:LEU:O	1:A:480:PRO:HD3	2.04	0.57
1:A:615:TYR:CD1	1:A:615:TYR:N	2.72	0.57
1:A:790:PRO:CG	1:A:819:ASP:CB	2.82	0.57
2:B:405:ALA:O	2:B:407:ALA:N	2.36	0.57

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:653:VAL:O	2:B:653:VAL:HG12	2.04	0.57
2:B:837:ALA:O	2:B:839:LEU:HD12	2.04	0.57
1:A:131:ARG:NH1	1:A:131:ARG:HG3	2.19	0.57
1:A:225:THR:O	1:A:226:ALA:C	2.41	0.57
1:A:783:ASP:OD2	1:A:838:PRO:CB	2.51	0.57
2:B:748:ASP:N	2:B:748:ASP:OD1	2.37	0.57
2:B:838:ARG:NH1	2:B:841:SER:OG	2.38	0.57
1:A:446:ARG:HH11	1:A:446:ARG:CG	2.17	0.57
1:A:556:HIS:O	1:A:559:ALA:HB3	2.05	0.57
1:A:597:VAL:CG1	1:A:748:ALA:HB2	2.34	0.57
2:B:648:VAL:CG1	2:B:653:VAL:CG2	2.82	0.57
2:B:673:TRP:N	2:B:754:TYR:CE2	2.69	0.57
1:A:153:THR:O	1:A:156:THR:HG22	2.05	0.57
1:A:189:ARG:HH21	1:A:189:ARG:CG	2.17	0.57
1:A:696:LEU:C	1:A:697:ASN:O	2.40	0.57
2:B:45:ILE:O	2:B:53:ILE:HD11	2.04	0.57
1:A:945:PRO:HB3	2:B:896:ASP:OD1	2.05	0.57
1:A:961:LEU:CD2	2:B:286:THR:HG21	2.34	0.57
2:B:509:ILE:HG23	2:B:512:GLY:HA2	1.85	0.57
2:B:510:THR:HG22	2:B:632:THR:HG22	1.87	0.57
2:B:769:ASN:H	2:B:769:ASN:ND2	2.01	0.57
2:B:807:PHE:N	2:B:807:PHE:CD1	2.73	0.57
2:B:89:ASP:HA	2:B:410:GLN:HE22	1.69	0.57
1:A:117:VAL:HG23	1:A:485:VAL:HG23	1.79	0.57
1:A:350:TYR:CE2	1:A:383:PHE:HD1	2.23	0.57
1:A:411:TYR:N	1:A:411:TYR:CD1	2.72	0.57
1:A:728:ARG:HD3	1:A:730:THR:CG2	2.33	0.57
1:A:894:ARG:NE	1:A:902:MET:HE2	2.19	0.57
2:B:334:CYS:SG	2:B:468:MET:HE1	2.43	0.57
2:B:77:LEU:HD23	2:B:192:VAL:HG13	1.85	0.57
2:B:839:LEU:HD22	2:B:935:VAL:HG21	1.87	0.57
1:A:691:PHE:N	1:A:691:PHE:CD1	2.73	0.57
1:A:742:MET:HE3	1:A:742:MET:HA	1.84	0.57
1:A:757:HIS:CD2	1:A:758:THR:HG23	2.40	0.57
1:A:789:ARG:HA	1:A:820:CYS:HB3	1.85	0.57
2:B:26:GLN:O	2:B:27:THR:CB	2.51	0.57
2:B:769:ASN:O	2:B:770:ASP:C	2.42	0.57
2:B:790:LEU:O	2:B:794:GLN:HB3	2.05	0.57
1:A:305:ASP:OD1	1:A:306:PRO:CD	2.52	0.57
1:A:342:LEU:HD23	1:A:343:THR:H	1.70	0.57
1:A:243:VAL:HA	1:A:631:VAL:HG12	1.87	0.57

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:383:HIS:HD2	2:B:385:ASP:OD1	1.87	0.57
1:A:508:SER:HB3	2:B:992:TYR:CE2	2.39	0.57
1:A:792:THR:O	1:A:793:SER:HB2	2.04	0.56
2:B:737:TYR:CD1	2:B:738:ASP:N	2.72	0.56
2:B:74:MET:HE2	2:B:984:ILE:HD13	1.87	0.56
1:A:384:LEU:O	1:A:385:LEU:CD1	2.52	0.56
1:A:635:GLY:CA	1:A:640:MET:HE3	2.35	0.56
1:A:64:GLY:C	1:A:65:LEU:HG	2.25	0.56
1:A:893:VAL:C	1:A:895:ASP:N	2.54	0.56
1:A:299:HIS:N	1:A:299:HIS:CD2	2.73	0.56
1:A:132:MET:HE2	1:A:493:GLN:OE1	1.98	0.56
1:A:634:ILE:HD12	1:A:726:TYR:CD2	2.40	0.56
1:A:968:MET:HE1	2:B:659:ILE:HG21	1.86	0.56
2:B:433:TRP:NE1	2:B:518:GLN:HG3	2.17	0.56
2:B:510:THR:O	2:B:511:ASP:CB	2.51	0.56
1:A:634:ILE:HG22	1:A:688:GLU:CG	2.35	0.56
1:A:83:VAL:O	1:A:95:GLN:CA	2.54	0.56
2:B:165:THR:HG22	2:B:219:GLN:NE2	2.08	0.56
2:B:588:PHE:CD1	2:B:588:PHE:N	2.73	0.56
1:A:367:ILE:CD1	1:A:415:GLN:HE22	1.22	0.56
1:A:549:VAL:HG13	1:A:553:THR:CG2	2.29	0.56
1:A:690:TRP:CD1	1:A:690:TRP:N	2.73	0.56
2:B:269:SER:OG	2:B:430:ALA:O	2.23	0.56
1:A:923:THR:HG23	2:B:627:THR:OG1	2.05	0.56
2:B:838:ARG:NH1	2:B:932:SER:HB2	2.21	0.56
1:A:231:THR:CA	1:A:342:LEU:O	2.52	0.56
1:A:231:THR:HG21	1:A:333:TRP:CZ2	2.41	0.56
1:A:39:ILE:CG2	1:A:507:VAL:HG11	2.36	0.56
1:A:940:PRO:HB3	2:B:914:LEU:HD22	1.87	0.56
2:B:331:LEU:H	2:B:378:THR:CG2	2.18	0.56
2:B:672:ASN:C	2:B:754:TYR:CE2	2.79	0.56
2:B:739:GLY:HA3	2:B:750:GLU:OE2	2.05	0.56
2:B:673:TRP:HH2	2:B:759:TYR:HD2	1.44	0.56
1:A:199:MET:CG	1:A:440:THR:OG1	2.30	0.56
1:A:697:ASN:CB	1:A:701:SER:HB2	2.34	0.56
1:A:238:HIS:CD2	1:A:338:SER:CB	2.88	0.56
1:A:690:TRP:CZ2	1:A:712:GLY:HA3	2.41	0.56
1:A:69:GLU:CD	1:A:217:GLU:OE1	2.43	0.56
2:B:128:ILE:O	2:B:129:ILE:HD13	2.05	0.56
2:B:135:ASP:OD1	2:B:135:ASP:N	2.37	0.56
2:B:141:TYR:N	2:B:141:TYR:CD1	2.73	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:838:ARG:NH1	2:B:838:ARG:HG3	2.19	0.56
1:A:132:MET:CE	1:A:493:GLN:CB	2.80	0.56
1:A:433:LYS:HD3	1:A:437:ALA:HB2	1.77	0.56
1:A:542:GLU:HB2	1:A:733:SER:CB	2.36	0.56
1:A:807:MET:CE	1:A:810:MET:HE1	2.34	0.56
1:A:915:GLU:O	1:A:915:GLU:HG2	2.06	0.56
1:A:968:MET:O	1:A:971:ARG:HA	2.06	0.56
2:B:427:ALA:CA	2:B:432:GLU:OE1	2.53	0.56
2:B:992:TYR:N	2:B:992:TYR:CD1	2.72	0.56
1:A:571:LEU:HD22	1:A:592:GLN:HG3	1.82	0.56
1:A:68:PHE:N	1:A:68:PHE:CD1	2.73	0.56
2:B:230:THR:CG2	2:B:364:MET:HB2	2.36	0.56
2:B:153:ALA:HB3	2:B:426:ALA:HB3	1.86	0.56
2:B:992:TYR:HD1	2:B:992:TYR:N	2.04	0.56
1:A:201:MET:CG	1:A:400:PHE:CE1	2.89	0.56
1:A:211:VAL:CG2	1:A:216:GLN:CB	2.84	0.56
1:A:367:ILE:HD12	1:A:367:ILE:N	2.20	0.56
1:A:481:LEU:H	1:A:481:LEU:CD2	2.04	0.56
1:A:637:SER:O	1:A:638:ARG:C	2.44	0.56
1:A:555:VAL:CG1	1:A:687:THR:HG23	2.36	0.56
1:A:948:PHE:CZ	1:A:950:MET:HE2	2.41	0.56
1:A:967:GLN:C	1:A:969:GLU:N	2.58	0.56
2:B:586:GLY:HA3	2:B:588:PHE:CE1	2.41	0.56
1:A:153:THR:CB	2:B:1001:SER:O	2.54	0.55
1:A:153:THR:O	1:A:156:THR:CG2	2.54	0.55
1:A:198:ARG:HG2	1:A:198:ARG:NH1	2.21	0.55
1:A:195:VAL:CG2	1:A:384:LEU:HD13	2.36	0.55
1:A:879:ARG:NH2	1:A:915:GLU:OE1	2.38	0.55
2:B:664:ASN:O	2:B:668:ARG:HG3	2.06	0.55
1:A:125:MET:CE	1:A:186:ASN:ND2	2.68	0.55
1:A:900:HIS:O	1:A:901:SER:C	2.44	0.55
1:A:90:MET:O	1:A:90:MET:HG3	2.07	0.55
1:A:268:GLU:OE1	1:A:702:LYS:HE2	2.07	0.55
1:A:356:THR:OG1	1:A:424:ASP:O	2.23	0.55
1:A:801:LEU:CD2	1:A:813:LEU:CD2	2.84	0.55
1:A:807:MET:CE	1:A:810:MET:HE2	2.36	0.55
1:A:785:MET:SD	1:A:824:VAL:HG22	2.47	0.55
2:B:43:THR:CG2	2:B:55:LYS:CG	2.85	0.55
2:B:688:ASP:O	2:B:689:ILE:C	2.44	0.55
1:A:188:CYS:HB3	1:A:449:ILE:HD11	1.89	0.55
1:A:27:LYS:HG2	1:A:28:ASP:OD1	2.06	0.55

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:673:VAL:HG13	1:A:673:VAL:O	2.06	0.55
1:A:634:ILE:HB	1:A:688:GLU:HB3	1.87	0.55
2:B:118:PHE:CE2	2:B:950:LEU:HD22	2.42	0.55
2:B:548:ASN:O	2:B:550:MET:HE1	2.06	0.55
2:B:797:GLY:C	2:B:799:ARG:H	2.07	0.55
1:A:112:MET:HG2	1:A:266:PHE:HE2	1.70	0.55
1:A:455:HIS:HA	1:A:458:ILE:HG21	1.89	0.55
2:B:247:ARG:HD2	2:B:347:TRP:CD1	2.41	0.55
1:A:940:PRO:CG	2:B:915:SER:HB3	2.35	0.55
1:A:289:THR:HG22	1:A:290:GLN:H	1.72	0.55
1:A:329:HIS:CD2	1:A:329:HIS:H	2.25	0.55
1:A:284:LYS:HA	1:A:329:HIS:HB3	1.87	0.55
2:B:146:ILE:HD11	2:B:921:HIS:CE1	2.41	0.55
2:B:555:ASN:HD22	2:B:569:PHE:HB3	1.72	0.55
1:A:929:GLN:HG3	2:B:600:TYR:CE1	2.42	0.55
1:A:19:LYS:HB3	1:A:23:ARG:HH12	1.72	0.55
1:A:352:ARG:HH11	1:A:352:ARG:CG	2.14	0.55
1:A:483:PHE:HB2	1:A:617:PRO:HB2	1.89	0.55
1:A:893:VAL:C	1:A:895:ASP:H	2.08	0.55
1:A:898:THR:HG22	2:B:858:PRO:CB	2.37	0.55
1:A:121:SER:HB2	1:A:183:ALA:O	2.07	0.55
1:A:477:SER:O	1:A:478:LEU:CG	2.55	0.55
1:A:671:LEU:CD2	1:A:685:ILE:CG2	2.85	0.55
1:A:782:GLY:O	1:A:802:ARG:NH2	2.40	0.55
1:A:963:ASP:N	1:A:963:ASP:OD1	2.39	0.55
2:B:161:LEU:HD12	2:B:161:LEU:H	1.72	0.55
2:B:363:VAL:HG13	2:B:441:MET:SD	2.47	0.55
1:A:210:VAL:HG22	1:A:210:VAL:O	2.07	0.55
1:A:464:MET:SD	1:A:483:PHE:CZ	3.00	0.55
1:A:786:THR:OG1	1:A:823:VAL:O	2.18	0.55
1:A:952:THR:CG2	2:B:115:ALA:CB	2.85	0.55
2:B:198:MET:SD	2:B:198:MET:N	2.79	0.55
2:B:563:GLY:O	2:B:564:SER:OG	2.22	0.55
1:A:245:ILE:HD12	1:A:274:VAL:HG23	1.88	0.55
1:A:459:THR:HB	1:A:611:LEU:HD11	1.88	0.55
1:A:879:ARG:HD3	2:B:510:THR:HG21	1.88	0.55
2:B:794:GLN:OE1	2:B:805:HIS:HE1	1.78	0.55
1:A:590:PHE:C	1:A:592:GLN:N	2.60	0.54
2:B:114:ASN:CB	2:B:119:TYR:CE2	2.88	0.54
1:A:574:LEU:HD23	1:A:577:ARG:CD	2.15	0.54
1:A:688:GLU:N	1:A:688:GLU:OE1	2.40	0.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:861:ARG:CZ	2:B:547:ALA:HB2	2.36	0.54
2:B:1003:TYR:HE2	2:B:1005:LYS:NZ	1.99	0.54
2:B:122:CYS:HB2	2:B:939:MET:HE3	1.89	0.54
2:B:170:ASP:HB2	2:B:545:ARG:NH2	2.21	0.54
2:B:129:ILE:O	2:B:933:VAL:HA	2.08	0.54
1:A:260:THR:OG1	1:A:261:GLY:N	2.40	0.54
1:A:442:ALA:CA	1:A:509:VAL:HG11	2.33	0.54
1:A:607:ARG:HG3	1:A:607:ARG:HH21	1.72	0.54
1:A:646:LEU:HD23	1:A:647:ILE:N	2.22	0.54
1:A:849:ASP:OD1	1:A:849:ASP:N	2.34	0.54
1:A:888:TYR:C	1:A:889:GLU:OE1	2.43	0.54
1:A:958:THR:C	1:A:959:LYS:HG2	2.27	0.54
2:B:1003:TYR:O	2:B:1004:ASP:O	2.25	0.54
2:B:514:THR:HG21	2:B:587:CYS:SG	2.48	0.54
2:B:168:THR:OG1	2:B:545:ARG:CD	2.55	0.54
1:A:972:GLU:O	2:B:797:GLY:HA3	2.06	0.54
1:A:297:ARG:HG2	1:A:297:ARG:NH1	2.21	0.54
1:A:371:LEU:CB	1:A:500:MET:CE	2.83	0.54
1:A:556:HIS:HD1	1:A:626:ILE:HD12	1.73	0.54
1:A:884:ALA:CB	2:B:506:PRO:CB	2.38	0.54
2:B:43:THR:HG21	2:B:55:LYS:CD	2.35	0.54
2:B:653:VAL:O	2:B:657:THR:HG23	2.07	0.54
2:B:66:ARG:CZ	2:B:173:ASP:OD2	2.54	0.54
2:B:846:THR:HB	2:B:847:PRO:CD	2.37	0.54
1:A:268:GLU:OE1	1:A:702:LYS:CE	2.56	0.54
1:A:650:ALA:O	1:A:797:SER:N	2.41	0.54
1:A:931:LEU:HD23	2:B:615:MET:SD	2.39	0.54
1:A:502:ASP:OD1	1:A:502:ASP:O	2.25	0.54
1:A:657:TRP:CE3	1:A:664:CYS:SG	3.01	0.54
1:A:779:ALA:O	1:A:803:GLY:O	2.26	0.54
1:A:815:ILE:O	1:A:816:THR:HG23	2.07	0.54
1:A:939:ASN:HD22	1:A:939:ASN:N	2.05	0.54
2:B:450:GLU:CB	2:B:451:PRO:CD	2.78	0.54
1:A:898:THR:HG22	2:B:858:PRO:CG	2.37	0.54
1:A:431:PHE:CD1	1:A:432:THR:N	2.76	0.54
1:A:193:PHE:CZ	1:A:464:MET:HE2	2.42	0.54
1:A:588:ALA:CB	1:A:592:GLN:OE1	2.53	0.54
1:A:634:ILE:HD13	1:A:634:ILE:N	2.09	0.54
1:A:546:ALA:CB	1:A:681:ALA:O	2.56	0.54
2:B:611:SER:O	2:B:615:MET:CG	2.53	0.54
2:B:633:ILE:HD13	2:B:643:VAL:HG11	1.89	0.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:672:ASN:HB3	2:B:754:TYR:CE2	2.42	0.54
1:A:298:VAL:HG12	1:A:299:HIS:N	2.23	0.54
1:A:350:TYR:CD2	1:A:383:PHE:CD1	2.96	0.54
1:A:387:ASN:ND2	1:A:391:GLY:HA2	2.21	0.54
2:B:502:VAL:CG1	2:B:901:LEU:HD12	2.28	0.54
2:B:576:TYR:CE1	2:B:578:PHE:CZ	2.94	0.54
2:B:607:THR:HG22	2:B:612:TYR:OH	2.08	0.54
1:A:231:THR:HG22	1:A:343:THR:HG1	1.68	0.54
1:A:353:MET:HE3	1:A:385:LEU:HB2	1.89	0.54
2:B:26:GLN:HG3	2:B:27:THR:HG23	1.90	0.54
1:A:211:VAL:CG2	1:A:216:GLN:CG	2.86	0.53
1:A:279:GLY:O	1:A:333:TRP:HA	2.08	0.53
1:A:72:ARG:HH22	1:A:863:VAL:CG2	2.20	0.53
1:A:833:ARG:HH12	1:A:874:PRO:HG2	1.74	0.53
1:A:950:MET:HG3	2:B:114:ASN:ND2	2.22	0.53
2:B:442:PRO:HG2	2:B:576:TYR:CD1	2.43	0.53
2:B:498:ILE:CD1	2:B:820:PHE:CZ	2.91	0.53
1:A:442:ALA:HA	1:A:509:VAL:HG13	1.87	0.53
1:A:554:ASP:OD1	1:A:672:PRO:CB	2.45	0.53
1:A:619:VAL:HG23	1:A:620:ASP:H	1.72	0.53
1:A:822:LEU:C	1:A:822:LEU:HD12	2.28	0.53
2:B:114:ASN:CB	2:B:119:TYR:CD2	2.91	0.53
2:B:56:ARG:HH22	2:B:485:GLN:NE2	2.07	0.53
2:B:585:ASP:OD2	2:B:689:ILE:HD13	2.08	0.53
1:A:349:LEU:HD21	1:A:400:PHE:CE1	2.42	0.53
2:B:130:ALA:HB2	2:B:922:GLY:O	2.08	0.53
2:B:223:ALA:HB2	2:B:327:TYR:CE2	2.42	0.53
1:A:52:THR:HG23	1:A:606:THR:OG1	2.09	0.53
1:A:240:LYS:HA	1:A:632:ARG:HH12	1.73	0.53
1:A:68:PHE:HE1	1:A:71:SER:OG	1.91	0.53
1:A:83:VAL:O	1:A:95:GLN:CB	2.56	0.53
2:B:347:TRP:O	2:B:348:GLY:C	2.46	0.53
2:B:433:TRP:CD2	2:B:434:MET:N	2.68	0.53
2:B:56:ARG:O	2:B:481:ARG:NH2	2.41	0.53
2:B:752:HIS:N	2:B:753:PRO:HD2	2.23	0.53
1:A:66:LEU:HD13	1:A:519:LEU:HD22	1.90	0.53
2:B:34:THR:HG22	2:B:980:ASN:HA	1.89	0.53
1:A:376:GLY:C	1:A:377:LEU:HD23	2.28	0.53
1:A:481:LEU:H	1:A:481:LEU:HD13	1.73	0.53
1:A:204:SER:OG	1:A:523:TYR:CZ	2.50	0.53
1:A:736:LEU:HD23	1:A:737:GLY:N	2.23	0.53

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:789:ARG:NH2	1:A:799:VAL:HG23	2.24	0.53
1:A:833:ARG:NH1	1:A:874:PRO:HG2	2.23	0.53
2:B:129:ILE:HB	2:B:934:SER:OG	2.09	0.53
2:B:411:VAL:O	2:B:415:VAL:HG23	2.07	0.53
2:B:442:PRO:HG2	2:B:576:TYR:CD2	2.44	0.53
2:B:593:THR:O	2:B:595:ARG:HB2	2.08	0.53
2:B:510:THR:HG22	2:B:632:THR:HB	1.90	0.53
1:A:446:ARG:O	1:A:501:ASN:HB3	2.08	0.53
2:B:533:TYR:O	2:B:534:ALA:CB	2.52	0.53
1:A:671:LEU:O	1:A:671:LEU:CD2	2.57	0.53
1:A:78:ALA:C	1:A:856:THR:CG2	2.72	0.53
2:B:340:ALA:CB	2:B:386:THR:HB	2.39	0.53
1:A:149:SER:O	1:A:150:ARG:C	2.45	0.53
1:A:275:ASP:CG	1:A:276:PRO:CD	2.75	0.53
1:A:336:ARG:O	1:A:337:HIS:HB2	2.06	0.53
1:A:767:ARG:HH21	1:A:771:ILE:HD11	1.74	0.53
2:B:295:TYR:CE2	2:B:296:ALA:HB2	2.44	0.53
2:B:732:TRP:O	2:B:732:TRP:HE3	1.91	0.53
2:B:838:ARG:HH11	2:B:838:ARG:CG	2.18	0.53
1:A:255:PRO:HD3	1:A:556:HIS:HD2	1.74	0.53
1:A:492:VAL:CG1	1:A:495:VAL:HG22	2.37	0.53
1:A:555:VAL:HG12	1:A:687:THR:HG23	1.88	0.53
1:A:634:ILE:CB	1:A:688:GLU:HB3	2.39	0.53
1:A:948:PHE:HZ	1:A:950:MET:HE2	1.74	0.53
2:B:373:THR:O	2:B:381:THR:HB	2.09	0.53
1:A:384:LEU:CD1	1:A:439:ALA:O	2.57	0.52
1:A:948:PHE:HB3	2:B:149:GLN:NE2	2.22	0.52
2:B:128:ILE:O	2:B:142:SER:HB3	2.09	0.52
2:B:349:LYS:H	2:B:349:LYS:CD	2.22	0.52
2:B:38:LYS:HD2	2:B:65:GLU:CD	2.15	0.52
2:B:729:ARG:HD3	2:B:754:TYR:CE1	2.44	0.52
2:B:734:LEU:CD2	2:B:735:HIS:N	2.65	0.52
1:A:238:HIS:HA	1:A:244:ALA:O	2.10	0.52
1:A:589:LEU:H	1:A:589:LEU:HD13	1.70	0.52
1:A:621:VAL:HG13	1:A:621:VAL:O	2.08	0.52
1:A:924:PRO:C	1:A:925:VAL:O	2.39	0.52
2:B:640:ALA:CB	2:B:887:THR:HG21	2.40	0.52
2:B:838:ARG:CZ	2:B:932:SER:CB	2.87	0.52
1:A:590:PHE:C	1:A:592:GLN:H	2.11	0.52
1:A:899:LEU:O	1:A:899:LEU:HD12	2.09	0.52
2:B:735:HIS:C	2:B:735:HIS:ND1	2.63	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:288:VAL:HG22	1:A:296:ALA:HB2	1.90	0.52
1:A:44:TYR:HE2	1:A:444:MET:HE3	1.74	0.52
1:A:531:LEU:CD2	1:A:747:ILE:CD1	2.82	0.52
1:A:88:THR:CG2	1:A:89:ASP:N	2.73	0.52
1:A:920:GLY:O	1:A:922:ASN:N	2.41	0.52
2:B:227:VAL:O	2:B:231:ILE:HG22	2.09	0.52
2:B:662:GLN:HG3	2:B:662:GLN:O	2.09	0.52
1:A:249:PRO:CB	1:A:252:TRP:CD1	2.92	0.52
1:A:233:GLU:CG	1:A:339:LYS:HB3	2.39	0.52
1:A:452:ARG:CG	1:A:452:ARG:NH2	2.73	0.52
1:A:49:LEU:HD21	1:A:608:LEU:HA	1.92	0.52
1:A:532:ALA:C	1:A:535:CYS:HG	2.11	0.52
1:A:887:PRO:HG2	2:B:504:ALA:O	2.09	0.52
1:A:943:ARG:C	1:A:943:ARG:HD3	2.30	0.52
1:A:958:THR:CG2	1:A:959:LYS:N	2.73	0.52
2:B:198:MET:HE2	2:B:459:VAL:HA	1.92	0.52
2:B:589:TYR:CD1	2:B:589:TYR:N	2.76	0.52
2:B:672:ASN:CB	2:B:754:TYR:CZ	2.92	0.52
1:A:591:ALA:HB3	1:A:613:GLN:HB2	1.91	0.52
1:A:6:GLN:NE2	1:A:6:GLN:HA	2.11	0.52
1:A:754:VAL:O	1:A:754:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:805:ILE:HG23	1:A:806:PRO:HD2	1.91	0.52
1:A:884:ALA:HB2	2:B:506:PRO:HB3	0.59	0.52
2:B:528:TYR:HD2	2:B:560:TRP:CZ2	2.28	0.52
2:B:686:HIS:HD2	2:B:786:ALA:CB	2.19	0.52
1:A:189:ARG:NH2	1:A:189:ARG:CG	2.72	0.52
1:A:347:LYS:CB	1:A:347:LYS:NZ	2.73	0.52
1:A:44:TYR:O	1:A:45:ASP:HB3	2.10	0.52
1:A:690:TRP:CE2	1:A:712:GLY:HA3	2.45	0.52
1:A:883:LEU:CD2	1:A:883:LEU:N	2.72	0.52
2:B:161:LEU:HD22	2:B:161:LEU:O	2.09	0.52
2:B:264:THR:CB	2:B:265:PRO:CD	2.84	0.52
2:B:257:PHE:N	2:B:301:VAL:O	2.37	0.52
2:B:615:MET:O	2:B:618:LEU:HB2	2.10	0.52
1:A:244:ALA:HB1	1:A:274:VAL:CG2	2.30	0.52
1:A:627:ARG:O	1:A:729:SER:HA	2.10	0.52
1:A:970:LEU:CD1	1:A:970:LEU:N	2.73	0.52
2:B:102:VAL:O	2:B:106:LYS:HG3	2.10	0.52
2:B:268:ALA:O	2:B:589:TYR:HB2	2.10	0.52
2:B:607:THR:HG21	2:B:909:ASN:CG	2.30	0.52
2:B:64:LEU:CD1	2:B:64:LEU:N	2.73	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:253:LEU:HD22	1:A:628:SER:OG	2.09	0.52
1:A:671:LEU:O	1:A:671:LEU:HD22	2.10	0.52
1:A:704:ILE:C	1:A:707:ILE:CD1	2.77	0.52
2:B:348:GLY:O	2:B:349:LYS:C	2.47	0.52
1:A:127:PHE:CE1	1:A:452:ARG:CD	2.93	0.52
1:A:407:HIS:CE1	1:A:490:PHE:CE2	2.98	0.52
1:A:200:VAL:HG11	1:A:522:THR:HG21	1.92	0.52
1:A:562:LEU:N	1:A:562:LEU:CD2	2.73	0.52
1:A:676:THR:O	1:A:676:THR:CG2	2.58	0.52
1:A:297:ARG:NE	1:A:701:SER:OG	2.39	0.52
1:A:952:THR:HG21	2:B:115:ALA:CB	2.40	0.52
2:B:1:MET:CG	2:B:2:SER:H	2.22	0.52
1:A:253:LEU:N	1:A:253:LEU:CD1	2.73	0.51
1:A:329:HIS:CD2	1:A:348:GLN:HE22	2.28	0.51
2:B:257:PHE:HD1	2:B:357:HIS:CD2	2.28	0.51
2:B:467:GLN:CA	2:B:467:GLN:HE21	2.17	0.51
1:A:380:CYS:HG	1:A:435:GLN:CA	2.11	0.51
1:A:55:LEU:CB	1:A:528:MET:CE	2.82	0.51
1:A:77:LEU:HD22	1:A:742:MET:HE2	1.92	0.51
1:A:815:ILE:O	1:A:816:THR:CB	2.58	0.51
2:B:214:ARG:NH1	2:B:214:ARG:CB	2.73	0.51
2:B:230:THR:HG21	2:B:364:MET:CB	2.40	0.51
2:B:234:TRP:O	2:B:237:HIS:O	2.29	0.51
2:B:349:LYS:N	2:B:349:LYS:CD	2.73	0.51
1:A:865:ARG:NH1	2:B:447:PRO:HG3	2.22	0.51
2:B:7:GLN:NE2	2:B:76:ASP:CG	2.63	0.51
1:A:198:ARG:HH11	1:A:198:ARG:CG	2.22	0.51
2:B:251:LEU:CD2	2:B:305:LEU:HD12	2.40	0.51
2:B:259:VAL:CG1	2:B:260:LYS:N	2.73	0.51
2:B:373:THR:OG1	2:B:373:THR:O	2.24	0.51
2:B:549:LYS:CD	2:B:549:LYS:N	2.73	0.51
1:A:203:ASN:ND2	1:A:432:THR:OG1	2.43	0.51
1:A:208:HIS:HE1	1:A:217:GLU:OE1	1.94	0.51
1:A:455:HIS:HB3	1:A:611:LEU:CD2	2.40	0.51
1:A:674:PRO:C	1:A:675:SER:OG	2.48	0.51
2:B:162:SER:OG	2:B:440:LEU:CD1	2.57	0.51
1:A:297:ARG:HH11	1:A:297:ARG:HG2	1.75	0.51
1:A:298:VAL:CG1	1:A:300:TYR:CE1	2.94	0.51
1:A:422:ILE:N	1:A:422:ILE:CD1	2.74	0.51
1:A:455:HIS:CB	1:A:615:TYR:HE2	2.22	0.51
1:A:690:TRP:CH2	1:A:721:VAL:HG21	2.46	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:216:SER:CB	2:B:447:PRO:O	2.55	0.51
2:B:262:MET:SD	2:B:263:LEU:N	2.83	0.51
2:B:359:ASN:O	2:B:363:VAL:HG23	2.09	0.51
2:B:618:LEU:CD1	2:B:623:ILE:CD1	2.82	0.51
2:B:652:HIS:O	2:B:653:VAL:HB	2.11	0.51
1:A:412:ALA:O	1:A:413:GLN:C	2.48	0.51
1:A:185:ASN:ND2	1:A:488:SER:OG	2.42	0.51
1:A:925:VAL:CG1	1:A:926:THR:N	2.73	0.51
1:A:928:ARG:HB3	2:B:601:ALA:HB2	1.92	0.51
2:B:102:VAL:HG12	2:B:106:LYS:HD2	1.93	0.51
2:B:747:ALA:CB	2:B:749:THR:CG2	2.63	0.51
1:A:477:SER:O	1:A:478:LEU:HG	2.11	0.51
1:A:502:ASP:HB2	2:B:994:LEU:HB2	1.91	0.51
1:A:868:TYR:CE1	2:B:772:PHE:HE2	2.26	0.51
2:B:224:LEU:HG	2:B:404:MET:HB3	1.93	0.51
2:B:334:CYS:SG	2:B:468:MET:HE3	2.49	0.51
2:B:559:ALA:O	2:B:564:SER:CA	2.59	0.51
1:A:290:GLN:CG	1:A:413:GLN:NE2	2.70	0.51
1:A:479:SER:O	1:A:481:LEU:HD13	2.10	0.51
1:A:607:ARG:CG	1:A:607:ARG:NH2	2.73	0.51
1:A:917:MET:O	1:A:918:LYS:C	2.48	0.51
2:B:168:THR:OG1	2:B:545:ARG:HD2	2.11	0.51
2:B:585:ASP:HA	2:B:656:TYR:OH	2.11	0.51
2:B:797:GLY:C	2:B:799:ARG:N	2.60	0.51
2:B:838:ARG:HH12	2:B:932:SER:CB	2.24	0.51
1:A:384:LEU:CB	1:A:385:LEU:HD13	2.39	0.51
1:A:446:ARG:CG	1:A:446:ARG:NH1	2.73	0.51
1:A:607:ARG:CG	1:A:607:ARG:HH21	2.23	0.51
1:A:704:ILE:O	1:A:707:ILE:HD13	2.10	0.51
1:A:839:GLU:O	1:A:842:ARG:N	2.44	0.51
1:A:921:ASP:CB	2:B:626:ALA:CB	2.86	0.51
1:A:238:HIS:CD2	1:A:338:SER:HB3	2.45	0.51
1:A:574:LEU:HD22	1:A:577:ARG:HD3	1.93	0.51
1:A:655:TYR:OH	1:A:683:PRO:HG3	2.10	0.51
1:A:672:PRO:HG3	1:A:713:LEU:CD1	2.40	0.51
1:A:783:ASP:N	1:A:783:ASP:OD1	2.44	0.51
2:B:117:ARG:NH2	2:B:259:VAL:O	2.44	0.51
2:B:197:PRO:HD2	2:B:457:TRP:CE3	2.46	0.51
2:B:253:HIS:C	2:B:253:HIS:CD2	2.85	0.51
2:B:509:ILE:CD1	2:B:813:ILE:HD11	2.41	0.51
1:A:833:ARG:NH2	2:B:527:GLN:OE1	2.44	0.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:198:MET:CB	2:B:204:GLN:NE2	2.74	0.50
2:B:549:LYS:HA	2:B:550:MET:SD	2.51	0.50
1:A:271:ALA:O	1:A:274:VAL:HG12	2.11	0.50
1:A:477:SER:C	1:A:478:LEU:CD1	2.69	0.50
1:A:948:PHE:CZ	1:A:950:MET:CE	2.94	0.50
2:B:480:LEU:HD23	2:B:950:LEU:O	2.11	0.50
2:B:673:TRP:CZ3	2:B:677:HIS:CE1	2.99	0.50
2:B:96:GLN:HA	2:B:96:GLN:OE1	2.10	0.50
1:A:562:LEU:HD22	1:A:562:LEU:H	1.76	0.50
1:A:736:LEU:HD23	1:A:737:GLY:H	1.76	0.50
1:A:843:ARG:NH1	1:A:843:ARG:CG	2.73	0.50
2:B:383:HIS:CD2	2:B:384:ALA:H	2.29	0.50
2:B:680:LYS:HG3	2:B:758:LEU:HD11	1.94	0.50
1:A:46:LEU:HD21	1:A:458:ILE:HD13	1.82	0.50
1:A:508:SER:CB	2:B:992:TYR:CZ	2.95	0.50
1:A:535:CYS:HG	1:A:536:GLU:N	2.10	0.50
1:A:648:LYS:O	1:A:649:HIS:CB	2.58	0.50
1:A:833:ARG:NH1	1:A:833:ARG:CG	2.73	0.50
2:B:265:PRO:CD	2:B:266:HIS:N	2.74	0.50
2:B:43:THR:HG21	2:B:55:LYS:HG2	1.94	0.50
2:B:838:ARG:CZ	2:B:932:SER:HB2	2.42	0.50
2:B:122:CYS:CB	2:B:939:MET:CE	2.88	0.50
1:A:344:ILE:HG13	1:A:345:GLN:H	1.77	0.50
1:A:316:LEU:HD22	1:A:350:TYR:OH	2.07	0.50
1:A:961:LEU:HD11	2:B:284:MET:CB	2.41	0.50
2:B:216:SER:HB2	2:B:448:MET:HA	1.94	0.50
2:B:589:TYR:HD1	2:B:589:TYR:N	2.09	0.50
2:B:623:ILE:CG2	2:B:893:ILE:HG12	2.41	0.50
2:B:676:TRP:CD1	2:B:754:TYR:CB	2.87	0.50
2:B:801:GLN:HG3	2:B:801:GLN:O	2.10	0.50
2:B:832:HIS:CE1	2:B:837:ALA:CB	2.95	0.50
1:A:215:LEU:N	1:A:215:LEU:CD1	2.75	0.50
1:A:542:GLU:HB2	1:A:733:SER:HB3	1.93	0.50
1:A:634:ILE:CD1	1:A:634:ILE:H	2.14	0.50
2:B:409:GLU:OE2	2:B:409:GLU:HA	2.11	0.50
1:A:305:ASP:HA	2:B:710:HIS:CD2	2.46	0.50
1:A:492:VAL:CG2	1:A:495:VAL:CG2	2.89	0.50
1:A:513:GLY:N	2:B:188:GLY:HA3	2.27	0.50
1:A:690:TRP:HZ3	1:A:721:VAL:HG23	1.74	0.50
1:A:704:ILE:CA	1:A:707:ILE:HD12	2.42	0.50
1:A:478:LEU:HD11	1:A:740:GLU:OE2	2.11	0.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:789:ARG:HH21	1:A:799:VAL:HG23	1.76	0.50
1:A:830:ARG:O	1:A:836:THR:CG2	2.60	0.50
2:B:198:MET:CG	2:B:204:GLN:HE22	2.20	0.50
2:B:355:ALA:HB3	2:B:358:ALA:CB	2.41	0.50
1:A:238:HIS:HD2	1:A:338:SER:CB	2.24	0.50
1:A:285:ILE:CD1	1:A:395:PHE:HB3	2.42	0.50
1:A:29:MET:CE	1:A:135:CYS:CA	2.90	0.50
1:A:511:ASP:O	2:B:189:ALA:O	2.30	0.50
1:A:619:VAL:CG2	1:A:620:ASP:N	2.73	0.50
1:A:655:TYR:HE1	1:A:666:VAL:HG12	1.77	0.50
2:B:717:GLY:O	2:B:722:GLU:OE2	2.30	0.50
2:B:752:HIS:N	2:B:753:PRO:CD	2.74	0.50
1:A:492:VAL:CG2	1:A:495:VAL:HG21	2.42	0.49
1:A:54:GLU:OE2	1:A:600:SER:CB	2.60	0.49
1:A:76:GLU:HB3	1:A:103:ARG:HG3	1.92	0.49
2:B:1002:THR:HG23	2:B:1004:ASP:OD2	2.12	0.49
2:B:409:GLU:HG3	2:B:409:GLU:O	2.12	0.49
1:A:75:LEU:HD11	1:A:106:LEU:HD22	1.94	0.49
1:A:44:TYR:CE2	1:A:444:MET:HE3	2.47	0.49
1:A:886:ARG:NH1	1:A:889:GLU:HG2	2.27	0.49
2:B:330:ALA:HA	2:B:378:THR:CG2	2.42	0.49
2:B:216:SER:HA	2:B:447:PRO:O	2.12	0.49
2:B:378:THR:HG23	2:B:451:PRO:HG3	1.94	0.49
2:B:633:ILE:O	2:B:633:ILE:HG22	2.12	0.49
1:A:160:VAL:HG23	1:A:497:PHE:HB2	1.94	0.49
1:A:350:TYR:C	1:A:350:TYR:CD1	2.85	0.49
2:B:194:ILE:CG2	2:B:199:LEU:C	2.81	0.49
2:B:219:GLN:OE1	2:B:444:VAL:HG13	2.13	0.49
2:B:604:VAL:HG13	2:B:880:VAL:CG1	2.42	0.49
2:B:671:TYR:CE2	2:B:675:LEU:HD11	2.46	0.49
2:B:84:THR:HG21	2:B:545:ARG:CD	2.36	0.49
1:A:131:ARG:HG3	1:A:131:ARG:HH11	1.77	0.49
1:A:145:ILE:HD11	1:A:157:MET:SD	2.52	0.49
1:A:212:ASN:OD1	1:A:213:GLY:N	2.45	0.49
1:A:244:ALA:CB	1:A:632:ARG:NH2	2.75	0.49
1:A:392:HIS:O	1:A:408:GLU:HG3	2.12	0.49
1:A:939:ASN:ND2	1:A:939:ASN:O	2.45	0.49
2:B:130:ALA:HB3	2:B:141:TYR:HD1	1.77	0.49
2:B:219:GLN:C	2:B:327:TYR:OH	2.51	0.49
1:A:20:HIS:C	1:A:20:HIS:CD2	2.86	0.49
1:A:6:GLN:CA	1:A:6:GLN:NE2	2.73	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:917:MET:CE	2:B:511:ASP:OD1	2.60	0.49
2:B:543:ASN:O	2:B:545:ARG:N	2.46	0.49
2:B:633:ILE:HD13	2:B:643:VAL:CG1	2.42	0.49
2:B:647:LEU:HA	2:B:807:PHE:O	2.12	0.49
2:B:676:TRP:HE1	2:B:754:TYR:H	1.59	0.49
2:B:32:LYS:HD2	2:B:69:GLU:OE1	2.10	0.49
2:B:7:GLN:HG2	2:B:29:VAL:HG13	1.88	0.49
2:B:839:LEU:HD22	2:B:866:LEU:CD2	2.27	0.49
1:A:19:LYS:HG2	1:A:140:LEU:CD2	2.39	0.49
1:A:472:ASP:O	1:A:475:ASN:O	2.30	0.49
1:A:532:ALA:C	1:A:535:CYS:SG	2.90	0.49
1:A:555:VAL:H	1:A:687:THR:CG2	2.23	0.49
1:A:52:THR:CG2	1:A:601:MET:CE	2.87	0.49
1:A:650:ALA:CB	1:A:796:SER:HA	2.39	0.49
2:B:231:ILE:C	2:B:231:ILE:HD13	2.33	0.49
1:A:961:LEU:CD1	2:B:284:MET:HB3	2.42	0.49
2:B:224:LEU:HB2	2:B:404:MET:CG	2.42	0.49
2:B:399:PHE:HZ	2:B:466:LEU:HD22	1.76	0.49
1:A:971:ARG:HH11	2:B:735:HIS:CD2	2.31	0.49
2:B:799:ARG:NH1	2:B:799:ARG:CG	2.73	0.49
1:A:508:SER:HB2	2:B:992:TYR:CD2	2.48	0.49
1:A:371:LEU:C	1:A:500:MET:HE3	2.13	0.49
1:A:551:ARG:HH11	1:A:551:ARG:CG	2.26	0.49
1:A:828:ARG:NH1	1:A:828:ARG:CG	2.74	0.49
1:A:973:GLY:O	2:B:791:ILE:HD12	2.05	0.49
2:B:78:LEU:CD2	2:B:180:LEU:CD2	2.89	0.49
2:B:619:GLU:HB2	2:B:622:LEU:HD11	1.95	0.49
2:B:66:ARG:HH11	2:B:66:ARG:CG	2.15	0.49
1:A:232:TRP:N	1:A:342:LEU:O	2.41	0.49
1:A:371:LEU:HD11	1:A:419:LEU:HD13	1.95	0.49
1:A:589:LEU:N	1:A:589:LEU:CD1	2.73	0.49
1:A:644:SER:O	1:A:647:ILE:N	2.46	0.49
1:A:925:VAL:CG1	1:A:926:THR:H	2.25	0.49
2:B:214:ARG:NH1	2:B:214:ARG:CG	2.73	0.49
2:B:806:TYR:CD1	2:B:806:TYR:C	2.86	0.49
2:B:74:MET:HE2	2:B:984:ILE:CD1	2.43	0.49
1:A:247:PRO:HB3	1:A:477:SER:CB	2.29	0.49
1:A:534:VAL:HG12	1:A:740:GLU:HG3	1.94	0.49
2:B:114:ASN:O	2:B:116:GLY:N	2.45	0.49
2:B:387:VAL:O	2:B:387:VAL:HG23	2.13	0.49
2:B:672:ASN:HB2	2:B:754:TYR:OH	2.13	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:681:THR:O	2:B:785:ARG:NE	2.46	0.49
1:A:152:VAL:HG12	1:A:156:THR:CG2	2.43	0.49
1:A:230:LEU:O	1:A:343:THR:HA	2.13	0.49
1:A:289:THR:HG22	1:A:290:GLN:N	2.28	0.49
1:A:385:LEU:CD1	1:A:385:LEU:N	2.73	0.49
1:A:454:CYS:O	1:A:458:ILE:HG22	2.13	0.49
1:A:508:SER:HB2	2:B:992:TYR:CD1	2.48	0.49
1:A:544:MET:O	1:A:544:MET:HG2	2.12	0.49
1:A:646:LEU:CB	1:A:669:ILE:HD13	2.42	0.49
1:A:72:ARG:HH22	1:A:863:VAL:HG21	1.77	0.49
1:A:807:MET:HE2	1:A:810:MET:HE2	1.94	0.49
1:A:938:ARG:HG3	1:A:938:ARG:O	2.13	0.49
2:B:626:ALA:O	2:B:643:VAL:HA	2.13	0.49
2:B:846:THR:CB	2:B:847:PRO:HD2	2.40	0.49
1:A:75:LEU:HB2	1:A:104:ALA:HB3	1.94	0.48
2:B:254:GLN:HG2	2:B:254:GLN:O	2.13	0.48
2:B:331:LEU:HB2	2:B:378:THR:HB	1.94	0.48
2:B:48:ALA:O	2:B:49:THR:CB	2.61	0.48
2:B:751:ARG:C	2:B:753:PRO:HD2	2.33	0.48
1:A:335:GLY:HA2	1:A:341:HIS:CD2	2.46	0.48
1:A:339:LYS:O	1:A:341:HIS:CD2	2.66	0.48
1:A:464:MET:SD	1:A:483:PHE:HZ	2.36	0.48
1:A:492:VAL:HG21	1:A:495:VAL:HG21	1.95	0.48
1:A:58:GLN:HB3	1:A:860:ILE:HD12	1.94	0.48
2:B:110:GLN:CA	2:B:110:GLN:NE2	2.73	0.48
2:B:117:ARG:HG2	2:B:155:GLU:HG3	1.95	0.48
2:B:265:PRO:HD2	2:B:266:HIS:N	2.24	0.48
2:B:509:ILE:HD11	2:B:811:ALA:HB3	1.95	0.48
2:B:577:TYR:CD1	2:B:577:TYR:C	2.85	0.48
2:B:551:VAL:CG1	2:B:579:GLY:HA3	2.40	0.48
2:B:510:THR:HG22	2:B:632:THR:CB	2.42	0.48
2:B:659:ILE:HD12	2:B:788:LEU:CD2	2.22	0.48
1:A:129:THR:HG21	1:A:447:TYR:O	2.12	0.48
1:A:317:SER:CB	1:A:323:GLY:HA2	2.42	0.48
1:A:238:HIS:CE1	1:A:334:LYS:CD	2.85	0.48
1:A:330:TYR:HE2	1:A:397:PRO:HG3	1.77	0.48
1:A:374:PHE:CZ	1:A:442:ALA:HB3	2.49	0.48
1:A:522:THR:HG23	1:A:523:TYR:N	2.28	0.48
1:A:553:THR:HG22	1:A:558:VAL:CG2	2.36	0.48
1:A:634:ILE:CD1	1:A:634:ILE:N	2.74	0.48
1:A:634:ILE:HG23	1:A:726:TYR:HB3	1.95	0.48

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:672:PRO:HG3	1:A:713:LEU:HD11	1.95	0.48
1:A:838:PRO:O	1:A:841:HIS:CB	2.61	0.48
2:B:156:PRO:HG2	2:B:356:GLY:O	2.14	0.48
2:B:327:TYR:CZ	2:B:448:MET:HE2	2.42	0.48
2:B:686:HIS:N	2:B:686:HIS:ND1	2.60	0.48
2:B:734:LEU:O	2:B:735:HIS:CB	2.61	0.48
2:B:838:ARG:NH1	2:B:932:SER:CB	2.77	0.48
1:A:248:VAL:HG11	1:A:630:PHE:CD1	2.47	0.48
1:A:299:HIS:HA	1:A:700:GLY:O	2.13	0.48
1:A:703:VAL:O	1:A:707:ILE:HD12	2.13	0.48
1:A:757:HIS:HD2	1:A:758:THR:H	1.61	0.48
1:A:936:TYR:OH	2:B:610:ASP:OD1	2.32	0.48
2:B:161:LEU:CD1	2:B:161:LEU:N	2.75	0.48
1:A:244:ALA:CB	1:A:274:VAL:HG22	2.38	0.48
1:A:229:TYR:HB3	1:A:343:THR:CG2	2.43	0.48
1:A:244:ALA:HB2	1:A:632:ARG:NH2	2.29	0.48
1:A:639:GLN:CA	1:A:639:GLN:NE2	2.74	0.48
2:B:307:LYS:HG2	2:B:311:ARG:HH21	1.76	0.48
2:B:322:GLU:OE2	2:B:375:VAL:HG21	2.13	0.48
2:B:559:ALA:O	2:B:562:LEU:O	2.31	0.48
1:A:968:MET:HE3	2:B:659:ILE:HG21	1.93	0.48
1:A:275:ASP:CG	1:A:276:PRO:HD2	2.14	0.48
1:A:495:VAL:CG2	1:A:496:GLN:N	2.75	0.48
1:A:507:VAL:HG23	1:A:512:MET:CE	2.44	0.48
1:A:644:SER:O	1:A:647:ILE:HB	2.13	0.48
2:B:254:GLN:CD	2:B:254:GLN:H	2.16	0.48
2:B:311:ARG:HD2	2:B:782:MET:SD	2.54	0.48
1:A:458:ILE:HG23	1:A:459:THR:N	2.29	0.48
1:A:504:GLU:OE1	1:A:504:GLU:N	2.46	0.48
1:A:562:LEU:O	1:A:563:PHE:C	2.51	0.48
1:A:815:ILE:CG2	1:A:816:THR:N	2.46	0.48
2:B:930:ASN:OD1	2:B:930:ASN:N	2.47	0.48
1:A:264:ARG:O	1:A:268:GLU:HG3	2.14	0.48
1:A:326:SER:HB2	1:A:389:ARG:NH2	2.29	0.48
1:A:692:ALA:HB3	1:A:721:VAL:HB	1.95	0.48
1:A:885:LEU:CD2	2:B:636:ASN:ND2	2.77	0.48
2:B:267:ILE:HG13	2:B:268:ALA:N	2.28	0.48
2:B:219:GLN:C	2:B:327:TYR:HH	2.12	0.48
2:B:648:VAL:HG22	2:B:809:GLU:CD	2.33	0.48
2:B:36:GLU:HG2	2:B:65:GLU:CG	2.44	0.48
1:A:262:ARG:HH22	1:A:402:VAL:N	2.07	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:367:ILE:HD11	1:A:415:GLN:NE2	0.72	0.48
1:A:508:SER:HB2	2:B:992:TYR:CG	2.48	0.48
2:B:586:GLY:CA	2:B:588:PHE:CE1	2.97	0.48
1:A:892:CYS:O	2:B:902:GLN:OE1	2.32	0.48
1:A:317:SER:OG	1:A:389:ARG:HD2	2.14	0.48
1:A:517:GLU:O	1:A:521:ALA:HB2	2.13	0.48
1:A:556:HIS:HD1	1:A:626:ILE:CD1	2.27	0.48
1:A:562:LEU:H	1:A:562:LEU:CD2	2.26	0.48
2:B:262:MET:SD	2:B:262:MET:C	2.92	0.48
2:B:294:ASP:O	2:B:295:TYR:C	2.52	0.48
2:B:722:GLU:HG3	2:B:729:ARG:HH22	1.78	0.48
2:B:926:ILE:HD13	2:B:933:VAL:HG22	1.95	0.48
1:A:288:VAL:O	1:A:324:ARG:CD	2.50	0.47
1:A:432:THR:O	1:A:435:GLN:HB3	2.07	0.47
1:A:490:PHE:O	1:A:491:LEU:C	2.49	0.47
1:A:54:GLU:OE1	1:A:600:SER:OG	2.27	0.47
1:A:692:ALA:HB1	1:A:722:HIS:N	2.29	0.47
1:A:829:THR:HG23	1:A:829:THR:O	2.12	0.47
1:A:81:ILE:HD12	1:A:98:GLU:HB3	1.95	0.47
2:B:195:VAL:O	2:B:195:VAL:HG13	2.13	0.47
1:A:201:MET:HG3	1:A:400:PHE:CZ	2.49	0.47
1:A:387:ASN:HD22	1:A:391:GLY:HA3	1.74	0.47
1:A:828:ARG:HB3	1:A:828:ARG:NH1	2.12	0.47
1:A:894:ARG:CB	1:A:902:MET:HE1	2.11	0.47
1:A:940:PRO:HB2	1:A:944:MET:CE	2.43	0.47
2:B:442:PRO:HG2	2:B:576:TYR:CG	2.49	0.47
2:B:432:GLU:HG2	2:B:817:GLY:HA3	1.96	0.47
1:A:211:VAL:CG2	1:A:216:GLN:HB2	2.32	0.47
1:A:246:THR:HG23	1:A:246:THR:O	2.14	0.47
1:A:690:TRP:NE1	1:A:712:GLY:CA	2.77	0.47
1:A:696:LEU:N	1:A:696:LEU:HD12	2.29	0.47
1:A:762:ARG:NE	1:A:815:ILE:HD13	2.30	0.47
2:B:173:ASP:O	2:B:177:LEU:HD12	2.13	0.47
2:B:753:PRO:HG2	2:B:756:ARG:NH1	2.24	0.47
1:A:111:ASN:HB2	1:A:467:GLN:CB	2.41	0.47
1:A:257:ALA:HB1	1:A:259:LEU:HG	1.96	0.47
2:B:672:ASN:C	2:B:754:TYR:HE2	2.17	0.47
2:B:877:CYS:SG	2:B:911:ILE:HD12	2.55	0.47
1:A:298:VAL:HG12	1:A:300:TYR:CE1	2.50	0.47
1:A:384:LEU:O	1:A:385:LEU:HD12	2.13	0.47
1:A:42:GLY:HA3	1:A:445:ARG:NH2	2.29	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:657:TRP:NE1	1:A:661:GLU:O	2.36	0.47
1:A:849:ASP:OD2	1:A:911:TYR:OH	2.33	0.47
2:B:260:LYS:NZ	2:B:272:ASP:OD1	2.43	0.47
2:B:197:PRO:HG2	2:B:457:TRP:HA	1.96	0.47
2:B:131:GLY:O	2:B:931:GLY:HA3	2.14	0.47
1:A:380:CYS:HG	1:A:439:ALA:HB2	1.78	0.47
1:A:650:ALA:HB1	1:A:796:SER:HB2	1.82	0.47
2:B:329:LEU:HG	2:B:450:GLU:CD	2.35	0.47
2:B:374:GLY:C	2:B:375:VAL:HG22	2.34	0.47
2:B:499:TYR:CE2	2:B:860:MET:CG	2.95	0.47
2:B:43:THR:HG21	2:B:55:LYS:CG	2.44	0.47
1:A:923:THR:HG21	2:B:627:THR:OG1	2.14	0.47
2:B:492:THR:HG22	2:B:823:LEU:HD21	1.95	0.47
2:B:867:SER:O	2:B:890:GLY:HA2	2.14	0.47
2:B:836:GLU:HG2	2:B:936:LYS:HG2	1.97	0.47
1:A:153:THR:HG22	1:A:154:THR:N	2.29	0.47
1:A:345:GLN:O	1:A:346:LEU:C	2.50	0.47
1:A:371:LEU:HB3	1:A:500:MET:HE1	1.96	0.47
1:A:377:LEU:N	1:A:377:LEU:HD23	2.30	0.47
1:A:106:LEU:HD11	1:A:470:VAL:HG12	1.92	0.47
1:A:82:THR:CG2	1:A:82:THR:O	2.59	0.47
1:A:844:GLY:O	1:A:849:ASP:CG	2.53	0.47
1:A:934:PRO:HG3	2:B:610:ASP:CB	2.44	0.47
1:A:967:GLN:O	1:A:970:LEU:N	2.48	0.47
1:A:969:GLU:C	1:A:971:ARG:H	2.17	0.47
2:B:207:THR:O	2:B:211:ARG:HG3	2.14	0.47
2:B:794:GLN:CD	2:B:796:ASP:O	2.51	0.47
2:B:623:ILE:CB	2:B:893:ILE:CG1	2.92	0.47
2:B:89:ASP:HA	2:B:410:GLN:CD	2.34	0.47
1:A:131:ARG:NH1	1:A:131:ARG:CG	2.74	0.47
1:A:110:LEU:HD22	1:A:465:VAL:HG12	1.97	0.47
1:A:115:HIS:ND1	1:A:483:PHE:CZ	2.82	0.47
1:A:55:LEU:CD1	1:A:528:MET:CE	0.48	0.47
1:A:72:ARG:HH21	1:A:72:ARG:HG3	1.80	0.47
1:A:754:VAL:HA	1:A:854:ILE:O	2.14	0.47
1:A:958:THR:CG2	1:A:959:LYS:H	2.28	0.47
1:A:961:LEU:CG	2:B:284:MET:SD	2.95	0.47
2:B:327:TYR:HD1	2:B:329:LEU:CD1	2.28	0.47
2:B:355:ALA:H	2:B:358:ALA:HB3	1.79	0.47
2:B:514:THR:HG21	2:B:587:CYS:CB	2.43	0.47
2:B:729:ARG:CG	2:B:754:TYR:CE1	2.94	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:214:ARG:NH1	1:A:216:GLN:NE2	2.63	0.47
1:A:532:ALA:HB1	1:A:597:VAL:HG23	1.93	0.47
1:A:702:LYS:CB	1:A:702:LYS:NZ	2.78	0.47
1:A:472:ASP:CB	1:A:739:ALA:HB2	2.43	0.47
1:A:81:ILE:CD1	1:A:98:GLU:HB3	2.42	0.47
2:B:164:SER:HA	2:B:443:LYS:O	2.15	0.47
2:B:676:TRP:CZ3	2:B:680:LYS:HG3	2.50	0.47
2:B:122:CYS:SG	2:B:826:TYR:HA	2.54	0.47
1:A:26:LEU:O	1:A:27:LYS:C	2.54	0.47
1:A:464:MET:HB3	1:A:483:PHE:HZ	1.77	0.47
1:A:64:GLY:O	1:A:65:LEU:CG	2.50	0.47
1:A:792:THR:O	1:A:792:THR:HG23	2.14	0.47
1:A:931:LEU:HD12	1:A:931:LEU:H	1.78	0.47
2:B:139:ILE:C	2:B:140:GLU:HG2	2.35	0.47
2:B:48:ALA:C	2:B:49:THR:HG23	2.36	0.47
1:A:103:ARG:CG	1:A:103:ARG:NH2	2.73	0.47
1:A:125:MET:CG	1:A:136:ASP:OD2	2.63	0.47
1:A:215:LEU:H	1:A:215:LEU:CD1	2.28	0.47
1:A:371:LEU:CB	1:A:500:MET:HE1	2.43	0.47
1:A:529:ALA:HB2	1:A:612:ASN:ND2	2.29	0.47
1:A:714:ASN:ND2	1:A:714:ASN:O	2.48	0.47
1:A:830:ARG:HG2	1:A:831:PRO:HD2	1.97	0.47
1:A:888:TYR:O	1:A:894:ARG:NH2	2.46	0.47
2:B:77:LEU:CD2	2:B:192:VAL:HG13	2.45	0.47
2:B:247:ARG:CD	2:B:347:TRP:CD1	2.99	0.47
1:A:388:SER:O	1:A:391:GLY:CA	2.62	0.46
1:A:542:GLU:HB2	1:A:733:SER:HB2	1.96	0.46
1:A:242:GLU:O	1:A:631:VAL:HA	2.15	0.46
1:A:6:GLN:HB2	1:A:7:GLN:HG2	1.97	0.46
1:A:822:LEU:HD12	1:A:822:LEU:O	2.15	0.46
1:A:830:ARG:CG	1:A:831:PRO:HD2	2.45	0.46
1:A:886:ARG:N	1:A:887:PRO:HD3	2.30	0.46
1:A:936:TYR:OH	2:B:610:ASP:CG	2.53	0.46
1:A:372:LYS:HD2	2:B:999:LEU:HD11	1.95	0.46
1:A:784:MET:O	1:A:785:MET:HG2	2.16	0.46
1:A:876:VAL:HG23	2:B:523:HIS:NE2	2.28	0.46
2:B:191:THR:O	2:B:192:VAL:CG2	2.63	0.46
2:B:418:GLN:OE1	2:B:418:GLN:N	2.48	0.46
1:A:876:VAL:HG13	2:B:520:ASP:OD1	2.15	0.46
1:A:508:SER:HB3	2:B:992:TYR:CZ	2.50	0.46
1:A:450:SER:O	1:A:451:GLU:C	2.52	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:39:ILE:CG1	1:A:506:SER:OG	2.62	0.46
1:A:499:ASP:CB	2:B:1001:SER:OG	2.57	0.46
2:B:307:LYS:HG2	2:B:311:ARG:HH22	1.79	0.46
1:A:198:ARG:NH1	1:A:198:ARG:CG	2.73	0.46
1:A:240:LYS:HE2	1:A:240:LYS:HB2	1.71	0.46
1:A:367:ILE:HD11	1:A:415:GLN:HE22	0.96	0.46
1:A:649:HIS:CD2	1:A:651:GLN:OE1	2.68	0.46
1:A:66:LEU:O	1:A:67:PRO:C	2.53	0.46
1:A:751:HIS:CD2	1:A:858:GLY:H	2.33	0.46
2:B:117:ARG:NE	2:B:155:GLU:CD	2.56	0.46
2:B:243:ALA:HB1	2:B:250:TRP:CZ2	2.50	0.46
2:B:346:THR:CG2	2:B:364:MET:HG2	2.45	0.46
2:B:436:VAL:HG12	2:B:584:ALA:CB	2.46	0.46
2:B:197:PRO:HD2	2:B:457:TRP:HA	1.96	0.46
2:B:433:TRP:CD1	2:B:518:GLN:NE2	2.78	0.46
1:A:353:MET:HE1	1:A:385:LEU:HB2	1.96	0.46
1:A:777:LEU:HD22	1:A:834:MET:HE1	1.95	0.46
1:A:961:LEU:HD22	2:B:286:THR:HG21	1.96	0.46
2:B:219:GLN:OE1	2:B:444:VAL:CG1	2.64	0.46
1:A:219:GLY:O	1:A:220:GLU:C	2.51	0.46
1:A:353:MET:CE	1:A:385:LEU:CB	2.94	0.46
1:A:368:VAL:HG23	1:A:418:PHE:HB2	1.96	0.46
1:A:371:LEU:CB	1:A:500:MET:HE2	2.40	0.46
1:A:571:LEU:HD23	1:A:592:GLN:HG3	1.95	0.46
1:A:268:GLU:CD	1:A:693:THR:HG21	2.31	0.46
2:B:589:TYR:HD1	2:B:589:TYR:H	1.64	0.46
1:A:377:LEU:O	1:A:378:GLY:C	2.53	0.46
1:A:485:VAL:CG1	1:A:617:PRO:HB3	2.45	0.46
1:A:518:LEU:CD2	1:A:518:LEU:C	2.84	0.46
1:A:52:THR:CG2	1:A:601:MET:HE1	2.44	0.46
1:A:677:ILE:CG1	1:A:678:THR:N	2.77	0.46
1:A:68:PHE:CE1	1:A:862:HIS:HE1	2.33	0.46
2:B:340:ALA:HB2	2:B:386:THR:CB	2.46	0.46
2:B:633:ILE:CG2	2:B:638:GLU:HB3	2.45	0.46
2:B:655:LEU:O	2:B:656:TYR:CG	2.69	0.46
2:B:833:GLY:O	2:B:937:VAL:O	2.34	0.46
1:A:230:LEU:HD12	1:A:232:TRP:CZ2	2.50	0.46
1:A:255:PRO:HD2	1:A:256:GLU:H	1.80	0.46
1:A:260:THR:CG2	1:A:263:GLU:CD	2.84	0.46
1:A:300:TYR:CD1	1:A:300:TYR:N	2.84	0.46
1:A:331:THR:HG23	1:A:343:THR:HB	1.97	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:563:PHE:HA	1:A:566:VAL:CG2	2.45	0.46
1:A:682:THR:HA	1:A:683:PRO:HA	1.56	0.46
1:A:77:LEU:HD22	1:A:742:MET:HE1	1.97	0.46
1:A:885:LEU:O	1:A:886:ARG:HG3	2.15	0.46
2:B:266:HIS:CE1	2:B:619:GLU:HG2	2.51	0.46
1:A:892:CYS:HG	2:B:902:GLN:HG2	1.60	0.46
1:A:330:TYR:CE2	1:A:397:PRO:CG	2.99	0.46
1:A:356:THR:HA	1:A:419:LEU:O	2.16	0.46
1:A:519:LEU:O	1:A:519:LEU:HD23	2.16	0.46
1:A:556:HIS:ND1	1:A:626:ILE:CD1	2.79	0.46
1:A:55:LEU:CD2	1:A:60:LEU:HB2	2.45	0.46
1:A:463:HIS:HD2	1:A:617:PRO:CG	2.24	0.46
1:A:762:ARG:HE	1:A:815:ILE:HD13	1.81	0.46
1:A:807:MET:HE1	1:A:810:MET:HE1	1.98	0.46
1:A:934:PRO:HB3	2:B:613:LEU:CD1	2.36	0.46
2:B:264:THR:HG22	2:B:265:PRO:HD3	0.49	0.46
2:B:273:TRP:HZ2	2:B:653:VAL:CG1	2.29	0.46
2:B:331:LEU:H	2:B:378:THR:HG22	1.81	0.46
1:A:421:GLY:C	1:A:422:ILE:HD13	2.37	0.46
1:A:453:THR:HG23	1:A:454:CYS:N	2.31	0.46
1:A:247:PRO:CG	1:A:477:SER:OG	2.60	0.46
1:A:535:CYS:SG	1:A:597:VAL:HG21	2.56	0.46
1:A:879:ARG:CD	2:B:510:THR:HG21	2.46	0.46
1:A:943:ARG:CG	1:A:943:ARG:NH1	2.73	0.46
2:B:13:SER:HA	2:B:14:PRO:C	2.36	0.46
1:A:220:GLU:OE2	2:B:214:ARG:NH2	2.49	0.46
2:B:383:HIS:CD2	2:B:385:ASP:OD1	2.67	0.46
2:B:197:PRO:CD	2:B:457:TRP:CE3	2.99	0.46
2:B:515:THR:HG21	2:B:656:TYR:CE2	2.44	0.46
2:B:526:PHE:HD1	2:B:526:PHE:O	1.99	0.46
1:A:507:VAL:HG23	1:A:512:MET:HE3	1.96	0.45
2:B:548:ASN:O	2:B:550:MET:CE	2.63	0.45
2:B:586:GLY:CA	2:B:588:PHE:HE1	2.28	0.45
2:B:796:ASP:OD1	2:B:797:GLY:N	2.49	0.45
1:A:193:PHE:HE2	1:A:460:THR:HG22	1.80	0.45
1:A:433:LYS:HD2	1:A:437:ALA:HB3	1.94	0.45
1:A:574:LEU:HD22	1:A:577:ARG:CD	2.34	0.45
1:A:690:TRP:NE1	1:A:712:GLY:HA3	2.30	0.45
1:A:531:LEU:HD23	1:A:747:ILE:HD11	1.95	0.45
2:B:26:GLN:O	2:B:27:THR:HG23	2.16	0.45
2:B:383:HIS:CD2	2:B:384:ALA:N	2.84	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:758:LEU:HD23	2:B:758:LEU:HA	1.74	0.45
1:A:104:ALA:O	1:A:105:TRP:CE3	2.69	0.45
1:A:188:CYS:SG	1:A:495:VAL:HG11	2.57	0.45
1:A:290:GLN:OE1	1:A:291:ASN:OD1	2.34	0.45
1:A:246:THR:HB	1:A:629:SER:HB3	1.99	0.45
1:A:68:PHE:O	1:A:69:GLU:C	2.54	0.45
1:A:885:LEU:C	1:A:886:ARG:CG	2.85	0.45
1:A:894:ARG:O	1:A:894:ARG:HG3	2.15	0.45
1:A:96:TYR:O	1:A:96:TYR:CD2	2.69	0.45
2:B:468:MET:HE2	2:B:468:MET:HB2	1.74	0.45
2:B:442:PRO:O	2:B:576:TYR:CE2	2.69	0.45
2:B:695:VAL:HG22	2:B:780:ILE:CG2	2.46	0.45
2:B:832:HIS:CD2	2:B:837:ALA:HB2	2.51	0.45
2:B:122:CYS:CB	2:B:939:MET:HE3	2.46	0.45
1:A:231:THR:HB	1:A:341:HIS:HB3	1.98	0.45
1:A:36:GLY:O	1:A:505:GLY:CA	2.59	0.45
1:A:531:LEU:O	1:A:535:CYS:HB3	2.16	0.45
1:A:553:THR:HB	1:A:554:ASP:H	1.55	0.45
1:A:893:VAL:HG13	1:A:894:ARG:N	2.32	0.45
2:B:329:LEU:HD21	2:B:404:MET:HE2	1.98	0.45
2:B:623:ILE:HD12	2:B:893:ILE:HD12	1.99	0.45
2:B:702:LEU:HD11	2:B:777:ILE:HG12	1.98	0.45
1:A:202:HIS:CG	1:A:202:HIS:O	2.69	0.45
1:A:319:ASP:OD1	1:A:322:ALA:HB3	2.17	0.45
1:A:690:TRP:O	1:A:690:TRP:CD2	2.70	0.45
1:A:886:ARG:O	1:A:888:TYR:N	2.49	0.45
2:B:123:ASN:O	2:B:939:MET:HA	2.16	0.45
2:B:117:ARG:NH1	2:B:299:MET:O	2.50	0.45
2:B:807:PHE:HD1	2:B:807:PHE:H	1.57	0.45
1:A:309:TRP:HB2	1:A:331:THR:HG21	1.99	0.45
1:A:330:TYR:CG	1:A:330:TYR:O	2.69	0.45
1:A:928:ARG:CB	2:B:601:ALA:HB2	2.46	0.45
1:A:958:THR:HG22	1:A:959:LYS:H	1.78	0.45
2:B:128:ILE:C	2:B:129:ILE:HD13	2.36	0.45
2:B:347:TRP:O	2:B:348:GLY:O	2.33	0.45
2:B:796:ASP:HB3	2:B:797:GLY:O	2.17	0.45
2:B:870:LEU:HB3	2:B:875:ALA:HB3	1.98	0.45
1:A:129:THR:CG2	1:A:447:TYR:O	2.65	0.45
1:A:204:SER:OG	1:A:523:TYR:HE1	1.90	0.45
1:A:215:LEU:HD13	1:A:215:LEU:H	1.82	0.45
1:A:220:GLU:HG3	2:B:186:TRP:HZ2	1.75	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:342:LEU:CD2	1:A:342:LEU:C	2.85	0.45
2:B:329:LEU:HD12	2:B:450:GLU:CD	2.37	0.45
1:A:334:LYS:HG2	1:A:334:LYS:O	2.16	0.45
1:A:55:LEU:HD12	1:A:528:MET:CG	2.47	0.45
1:A:481:LEU:HD12	1:A:624:ALA:HB2	1.99	0.45
1:A:634:ILE:CB	1:A:688:GLU:CB	2.93	0.45
1:A:81:ILE:CD1	1:A:81:ILE:O	2.41	0.45
1:A:910:LEU:O	1:A:911:TYR:CG	2.70	0.45
2:B:251:LEU:HD23	2:B:305:LEU:HD12	1.98	0.45
2:B:449:ASN:HB3	2:B:452:ALA:HB2	1.98	0.45
2:B:648:VAL:O	2:B:805:HIS:HB2	2.17	0.45
2:B:658:THR:HG21	2:B:695:VAL:CG2	2.44	0.45
2:B:737:TYR:HD1	2:B:738:ASP:H	1.64	0.45
1:A:108:VAL:HG12	1:A:468:THR:HB	1.99	0.45
1:A:208:HIS:CE1	1:A:217:GLU:OE1	2.69	0.45
1:A:22:ALA:CB	1:A:140:LEU:HD11	2.47	0.45
1:A:461:ILE:HG22	1:A:465:VAL:HG22	1.97	0.45
1:A:910:LEU:O	1:A:911:TYR:CD1	2.70	0.45
2:B:346:THR:HG22	2:B:364:MET:HG2	1.97	0.45
2:B:526:PHE:CD1	2:B:526:PHE:O	2.70	0.45
2:B:39:GLY:H	2:B:62:VAL:HG23	1.82	0.45
1:A:105:TRP:CG	1:A:471:ARG:NH1	2.63	0.45
1:A:526:GLY:O	1:A:530:SER:HB3	2.17	0.45
1:A:55:LEU:HD22	1:A:528:MET:HE1	1.99	0.45
1:A:623:LEU:N	1:A:623:LEU:CD2	2.77	0.45
1:A:805:ILE:CG2	1:A:806:PRO:N	2.80	0.45
2:B:195:VAL:HG22	2:B:984:ILE:HG21	1.98	0.45
1:A:961:LEU:HD21	2:B:286:THR:HG21	1.99	0.45
2:B:349:LYS:HA	2:B:350:PRO:HD3	1.77	0.45
2:B:518:GLN:HB3	2:B:584:ALA:HB1	1.98	0.45
2:B:844:THR:HG22	2:B:908:VAL:O	2.16	0.45
1:A:576:LEU:HB2	1:A:614:ALA:CB	2.42	0.44
1:A:52:THR:OG1	1:A:601:MET:HE1	2.17	0.44
2:B:122:CYS:HB2	2:B:939:MET:CE	2.47	0.44
2:B:547:ALA:C	2:B:548:ASN:O	2.52	0.44
2:B:602:VAL:HG11	2:B:615:MET:CE	2.47	0.44
2:B:729:ARG:CD	2:B:754:TYR:CE1	2.99	0.44
1:A:102:TRP:CZ2	1:A:804:TYR:CE2	3.05	0.44
1:A:170:LEU:CD1	1:A:171:ALA:N	2.73	0.44
1:A:297:ARG:HH11	1:A:297:ARG:CG	2.31	0.44
1:A:371:LEU:HD11	1:A:419:LEU:CD1	2.47	0.44

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:689:ARG:HG3	1:A:689:ARG:NH1	2.32	0.44
1:A:944:MET:HG2	1:A:945:PRO:HD2	1.99	0.44
2:B:112:THR:N	2:B:119:TYR:O	2.50	0.44
2:B:253:HIS:O	2:B:253:HIS:CD2	2.70	0.44
2:B:436:VAL:HG12	2:B:584:ALA:HB2	1.98	0.44
2:B:741:ILE:O	2:B:741:ILE:HG22	2.17	0.44
2:B:769:ASN:N	2:B:769:ASN:ND2	2.65	0.44
1:A:310:LEU:HD22	1:A:329:HIS:HB2	1.99	0.44
1:A:432:THR:CG2	1:A:433:LYS:H	2.24	0.44
1:A:645:ALA:O	1:A:649:HIS:CA	2.66	0.44
1:A:762:ARG:NH1	1:A:762:ARG:HG3	2.31	0.44
1:A:78:ALA:O	1:A:856:THR:CB	2.65	0.44
1:A:788:ILE:HG22	1:A:798:ALA:HB2	1.98	0.44
1:A:965:ARG:C	1:A:965:ARG:HD2	2.38	0.44
2:B:78:LEU:CD2	2:B:180:LEU:HD21	2.34	0.44
2:B:263:LEU:HA	2:B:268:ALA:HA	1.99	0.44
2:B:319:THR:CG2	2:B:343:LEU:HD13	2.47	0.44
1:A:189:ARG:HH21	1:A:189:ARG:HG3	1.82	0.44
1:A:237:ALA:O	1:A:245:ILE:HA	2.17	0.44
1:A:422:ILE:HG22	1:A:423:GLY:N	2.32	0.44
2:B:240:ASP:C	2:B:241:SER:HG	2.00	0.44
2:B:284:MET:O	2:B:285:GLU:HG3	2.17	0.44
2:B:292:ARG:O	2:B:300:VAL:N	2.50	0.44
2:B:442:PRO:CD	2:B:576:TYR:CE1	2.98	0.44
1:A:20:HIS:CD2	1:A:20:HIS:O	2.70	0.44
1:A:433:LYS:CG	1:A:513:GLY:O	2.65	0.44
1:A:795:ALA:O	1:A:796:SER:CB	2.62	0.44
1:A:843:ARG:HD2	1:A:843:ARG:HA	1.75	0.44
1:A:876:VAL:CG2	2:B:523:HIS:NE2	2.73	0.44
1:A:957:PHE:CD1	1:A:958:THR:N	2.85	0.44
2:B:506:PRO:O	2:B:506:PRO:HG2	2.17	0.44
2:B:669:GLU:HG3	2:B:730:ARG:HE	1.83	0.44
2:B:838:ARG:CG	2:B:838:ARG:NH1	2.73	0.44
1:A:119:ILE:HD13	1:A:406:VAL:HG22	1.98	0.44
1:A:110:LEU:CD2	1:A:465:VAL:HG12	2.48	0.44
1:A:492:VAL:HG11	1:A:495:VAL:HG13	2.00	0.44
1:A:508:SER:HB2	2:B:992:TYR:CE1	2.53	0.44
1:A:635:GLY:CA	1:A:640:MET:HE1	2.20	0.44
1:A:660:ASN:ND2	1:A:661:GLU:N	2.60	0.44
1:A:79:GLU:N	1:A:856:THR:CG2	2.54	0.44
1:A:77:LEU:HA	1:A:858:GLY:HA2	1.98	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:221:HIS:CE1	2:B:405:ALA:HA	2.53	0.44
2:B:732:TRP:CE3	2:B:732:TRP:O	2.70	0.44
2:B:990:HIS:HB2	2:B:992:TYR:HE1	1.80	0.44
1:A:298:VAL:HG11	1:A:300:TYR:CE1	2.53	0.44
1:A:367:ILE:HD13	1:A:415:GLN:HG2	1.97	0.44
1:A:367:ILE:CG1	1:A:415:GLN:HE22	2.05	0.44
1:A:968:MET:CE	2:B:659:ILE:HD13	2.42	0.44
2:B:751:ARG:C	2:B:753:PRO:CD	2.86	0.44
1:A:411:TYR:CE2	1:A:417:LEU:HD11	2.53	0.44
1:A:481:LEU:H	1:A:481:LEU:CD1	2.30	0.44
1:A:525:LEU:CG	1:A:608:LEU:HD12	2.42	0.44
1:A:634:ILE:HD11	1:A:718:ARG:HH22	1.73	0.44
2:B:623:ILE:CB	2:B:893:ILE:HD11	2.47	0.44
1:A:125:MET:HE2	1:A:186:ASN:HD22	1.80	0.44
1:A:240:LYS:CD	1:A:240:LYS:N	2.73	0.44
1:A:367:ILE:HG21	1:A:496:GLN:HE21	1.82	0.44
1:A:535:CYS:SG	1:A:536:GLU:N	2.91	0.44
1:A:593:LYS:O	1:A:596:ALA:HB3	2.16	0.44
1:A:637:SER:O	1:A:639:GLN:N	2.51	0.44
1:A:762:ARG:CG	1:A:762:ARG:HH11	2.31	0.44
1:A:878:GLU:O	1:A:914:GLY:O	2.36	0.44
1:A:957:PHE:CE2	2:B:279:TYR:CE1	3.00	0.44
2:B:577:TYR:CD1	2:B:577:TYR:O	2.70	0.44
1:A:432:THR:C	1:A:435:GLN:HB2	2.36	0.43
1:A:668:PHE:H	1:A:668:PHE:HD1	1.66	0.43
1:A:690:TRP:CG	1:A:690:TRP:O	2.70	0.43
2:B:706:SER:O	2:B:710:HIS:HB2	2.18	0.43
2:B:875:ALA:HB1	2:B:911:ILE:HD11	2.00	0.43
1:A:248:VAL:HB	1:A:249:PRO:CD	2.35	0.43
1:A:556:HIS:CE1	1:A:626:ILE:HD11	2.53	0.43
1:A:88:THR:CG2	1:A:90:MET:H	2.09	0.43
2:B:102:VAL:HG13	2:B:489:VAL:HG22	2.00	0.43
1:A:888:TYR:OH	2:B:504:ALA:CB	2.66	0.43
1:A:972:GLU:C	2:B:798:GLY:H	2.20	0.43
2:B:588:PHE:HA	2:B:808:GLY:O	2.18	0.43
1:A:429:ALA:O	1:A:430:THR:C	2.55	0.43
1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:HD13	2.32	0.43
1:A:532:ALA:CB	1:A:597:VAL:CG2	2.81	0.43
1:A:806:PRO:O	1:A:809:ALA:HB3	2.17	0.43
2:B:120:LEU:HD12	2:B:152:VAL:CB	2.42	0.43
2:B:197:PRO:HG2	2:B:456:VAL:O	2.18	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:198:MET:CE	2:B:459:VAL:HA	2.48	0.43
2:B:446:ARG:NH1	2:B:446:ARG:CG	2.73	0.43
2:B:197:PRO:CD	2:B:457:TRP:HA	2.48	0.43
2:B:515:THR:OG1	2:B:516:ARG:N	2.50	0.43
2:B:576:TYR:CD1	2:B:576:TYR:O	2.71	0.43
2:B:712:PHE:CE2	2:B:777:ILE:HD13	2.53	0.43
1:A:943:ARG:HH21	2:B:895:GLY:HA2	1.83	0.43
1:A:203:ASN:HB3	1:A:519:LEU:HD12	2.00	0.43
1:A:238:HIS:HE1	1:A:334:LYS:HG2	1.78	0.43
1:A:558:VAL:HG12	1:A:562:LEU:HD21	2.00	0.43
1:A:72:ARG:CZ	1:A:863:VAL:HG11	2.47	0.43
1:A:876:VAL:HG12	1:A:877:SER:N	2.32	0.43
1:A:968:MET:O	1:A:971:ARG:CA	2.67	0.43
2:B:281:ALA:HB1	2:B:287:THR:OG1	2.19	0.43
2:B:397:LEU:HD23	2:B:397:LEU:C	2.38	0.43
2:B:497:ALA:HB3	2:B:557:LEU:HD22	2.01	0.43
1:A:125:MET:HE1	1:A:186:ASN:ND2	2.33	0.43
1:A:274:VAL:HG22	1:A:274:VAL:O	2.18	0.43
1:A:286:ASP:CG	1:A:287:GLY:N	2.71	0.43
1:A:353:MET:O	1:A:354:SER:C	2.56	0.43
1:A:551:ARG:HB3	1:A:552:PHE:H	1.59	0.43
1:A:608:LEU:O	1:A:608:LEU:HG	2.19	0.43
1:A:587:GLU:HB3	1:A:618:PHE:HB3	2.01	0.43
1:A:639:GLN:NE2	1:A:639:GLN:N	2.60	0.43
2:B:351:LYS:HD2	2:B:366:GLU:OE1	2.18	0.43
2:B:500:GLN:HE21	2:B:500:GLN:HA	1.78	0.43
2:B:578:PHE:N	2:B:578:PHE:CD1	2.85	0.43
2:B:597:LEU:HD22	2:B:622:LEU:CB	2.47	0.43
2:B:702:LEU:HD22	2:B:712:PHE:CE1	2.54	0.43
1:A:290:GLN:OE1	1:A:291:ASN:N	2.52	0.43
1:A:305:ASP:HB2	2:B:710:HIS:NE2	2.33	0.43
1:A:429:ALA:O	1:A:430:THR:CG2	2.65	0.43
1:A:520:THR:HG23	1:A:521:ALA:N	2.34	0.43
1:A:56:ILE:HA	1:A:56:ILE:HD13	1.64	0.43
1:A:704:ILE:HA	1:A:707:ILE:HD13	1.93	0.43
1:A:832:GLY:O	1:A:875:THR:HB	2.18	0.43
1:A:969:GLU:C	1:A:971:ARG:N	2.71	0.43
2:B:332:PRO:CG	2:B:399:PHE:CE1	2.97	0.43
2:B:526:PHE:O	2:B:530:THR:HG23	2.18	0.43
2:B:622:LEU:O	2:B:623:ILE:HG13	2.19	0.43
1:A:167:MET:SD	1:A:167:MET:C	2.97	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:236:CYS:HB2	1:A:340:VAL:CG2	2.49	0.43
1:A:268:GLU:OE1	1:A:702:LYS:HE3	2.19	0.43
1:A:351:HIS:ND1	1:A:351:HIS:C	2.72	0.43
1:A:583:HIS:CE1	1:A:618:PHE:HE2	2.37	0.43
2:B:428:CYS:SG	2:B:818:HIS:HD2	2.39	0.43
2:B:74:MET:CE	2:B:984:ILE:CD1	2.97	0.43
1:A:342:LEU:CD2	1:A:343:THR:N	2.76	0.43
1:A:39:ILE:HA	1:A:507:VAL:HG13	2.00	0.43
1:A:444:MET:CB	1:A:449:ILE:HG21	2.43	0.43
1:A:518:LEU:HD23	1:A:518:LEU:C	2.39	0.43
1:A:638:ARG:NH2	1:A:638:ARG:CG	2.73	0.43
1:A:671:LEU:N	1:A:672:PRO:CD	2.82	0.43
1:A:906:ALA:C	1:A:907:VAL:HG13	2.39	0.43
1:A:926:THR:O	1:A:926:THR:HG23	2.19	0.43
1:A:96:TYR:CE2	1:A:834:MET:HB2	2.53	0.43
2:B:123:ASN:HD21	2:B:149:GLN:HB3	1.67	0.43
1:A:217:GLU:O	1:A:218:LEU:CD2	2.63	0.43
1:A:351:HIS:C	1:A:351:HIS:HD1	2.22	0.43
1:A:38:ASN:ND2	1:A:38:ASN:C	2.72	0.43
1:A:440:THR:O	1:A:440:THR:HG22	2.18	0.43
1:A:664:CYS:N	1:A:737:GLY:O	2.49	0.43
1:A:757:HIS:CD2	1:A:758:THR:H	2.35	0.43
1:A:883:LEU:HD12	2:B:634:THR:OG1	2.19	0.43
2:B:129:ILE:HB	2:B:934:SER:O	2.19	0.43
2:B:198:MET:HG3	2:B:204:GLN:NE2	2.25	0.43
2:B:32:LYS:O	2:B:32:LYS:HG3	2.19	0.43
2:B:375:VAL:O	2:B:376:ASN:HB2	2.18	0.43
2:B:726:SER:CB	2:B:727:PRO:CD	2.96	0.43
2:B:122:CYS:CB	2:B:939:MET:HE2	2.49	0.43
1:A:191:PHE:O	1:A:194:GLY:N	2.52	0.43
1:A:211:VAL:HG23	1:A:212:ASN:N	2.34	0.43
1:A:35:ALA:O	1:A:41:ALA:O	2.37	0.43
1:A:442:ALA:CB	1:A:509:VAL:HG11	2.49	0.43
1:A:481:LEU:HD11	1:A:624:ALA:CB	2.46	0.43
1:A:490:PHE:O	1:A:491:LEU:O	2.37	0.43
1:A:511:ASP:O	1:A:512:MET:HG3	2.19	0.43
1:A:58:GLN:NE2	1:A:58:GLN:CA	2.72	0.43
1:A:669:ILE:O	1:A:669:ILE:HG22	2.19	0.43
1:A:738:CYS:O	1:A:739:ALA:C	2.56	0.43
1:A:948:PHE:HB2	2:B:149:GLN:HE22	1.80	0.43
2:B:329:LEU:CG	2:B:450:GLU:CD	2.88	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:838:ARG:NH2	2:B:932:SER:HB2	2.28	0.43
1:A:209:GLY:HA3	1:A:218:LEU:HD21	2.00	0.42
1:A:262:ARG:HH21	1:A:401:GLY:HA2	1.73	0.42
1:A:445:ARG:NH1	1:A:445:ARG:HG3	2.34	0.42
1:A:51:LEU:HD22	1:A:51:LEU:N	2.33	0.42
1:A:587:GLU:HG2	1:A:619:VAL:O	2.18	0.42
1:A:607:ARG:H	1:A:607:ARG:HG2	1.55	0.42
2:B:620:PRO:O	2:B:893:ILE:O	2.37	0.42
1:A:467:GLN:NE2	1:A:467:GLN:HA	2.34	0.42
1:A:576:LEU:HA	1:A:576:LEU:HD23	1.83	0.42
1:A:69:GLU:OE2	1:A:206:ARG:HG3	2.19	0.42
1:A:687:THR:O	1:A:728:ARG:HA	2.19	0.42
1:A:627:ARG:CZ	1:A:738:CYS:SG	3.03	0.42
1:A:847:ALA:O	1:A:848:SER:HB2	2.18	0.42
1:A:929:GLN:HG2	1:A:929:GLN:H	1.50	0.42
1:A:970:LEU:O	1:A:971:ARG:CB	2.66	0.42
2:B:245:ARG:O	2:B:387:VAL:HG12	2.19	0.42
2:B:266:HIS:NE2	2:B:619:GLU:HG2	2.34	0.42
2:B:383:HIS:O	2:B:385:ASP:N	2.51	0.42
2:B:514:THR:O	2:B:517:LEU:HB3	2.19	0.42
2:B:442:PRO:CG	2:B:576:TYR:CZ	3.00	0.42
1:A:368:VAL:HG22	1:A:418:PHE:CB	2.38	0.42
1:A:432:THR:C	1:A:435:GLN:H	2.22	0.42
1:A:42:GLY:HA3	1:A:445:ARG:HH22	1.81	0.42
1:A:42:GLY:HA2	1:A:445:ARG:NH2	2.35	0.42
1:A:590:PHE:CE2	1:A:619:VAL:HG11	2.55	0.42
1:A:66:LEU:HD13	1:A:519:LEU:CD2	2.49	0.42
1:A:68:PHE:CZ	1:A:862:HIS:CE1	3.08	0.42
1:A:810:MET:HE2	1:A:810:MET:HB2	1.65	0.42
1:A:961:LEU:HD13	2:B:284:MET:HB3	2.00	0.42
1:A:508:SER:HB2	2:B:992:TYR:CE2	2.53	0.42
1:A:202:HIS:C	1:A:202:HIS:ND1	2.72	0.42
1:A:234:LEU:HD21	1:A:266:PHE:CZ	2.42	0.42
1:A:421:GLY:O	1:A:422:ILE:CD1	2.57	0.42
1:A:671:LEU:N	1:A:686:GLY:O	2.48	0.42
1:A:96:TYR:CZ	1:A:834:MET:HB2	2.55	0.42
2:B:433:TRP:CZ2	2:B:517:LEU:HD22	2.54	0.42
2:B:676:TRP:CH2	2:B:680:LYS:HE2	2.54	0.42
2:B:828:ALA:HB1	2:B:865:GLN:HE21	1.84	0.42
1:A:199:MET:HG2	1:A:435:GLN:NE2	2.34	0.42
1:A:307:MET:C	1:A:309:TRP:HD1	2.14	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:42:GLY:O	1:A:43:GLY:C	2.57	0.42
1:A:447:TYR:O	1:A:448:ASP:HB2	2.19	0.42
2:B:172:SER:H	2:B:175:ALA:HB3	1.85	0.42
2:B:56:ARG:NH2	2:B:485:GLN:NE2	2.68	0.42
1:A:206:ARG:NH1	1:A:217:GLU:OE1	2.53	0.42
1:A:488:SER:HB2	1:A:489:PRO:HD2	2.02	0.42
1:A:55:LEU:CD1	1:A:528:MET:CG	2.97	0.42
1:A:752:LYS:O	1:A:753:VAL:CG1	2.68	0.42
2:B:307:LYS:CG	2:B:311:ARG:HH22	2.32	0.42
2:B:346:THR:OG1	2:B:346:THR:O	2.35	0.42
2:B:320:GLU:HG2	2:B:370:GLY:HA3	2.00	0.42
2:B:312:SER:HB3	2:B:778:TRP:CD1	2.55	0.42
1:A:422:ILE:C	1:A:423:GLY:O	2.54	0.42
1:A:432:THR:HA	1:A:435:GLN:HB2	2.02	0.42
1:A:43:GLY:N	1:A:445:ARG:HH22	2.17	0.42
1:A:597:VAL:HG12	1:A:748:ALA:HB2	2.01	0.42
1:A:861:ARG:CZ	2:B:547:ALA:CB	2.97	0.42
1:A:972:GLU:H	1:A:972:GLU:HG3	1.49	0.42
2:B:217:GLY:N	2:B:448:MET:HB3	2.34	0.42
2:B:855:ASP:O	2:B:856:LEU:HB2	2.19	0.42
1:A:508:SER:HB2	2:B:992:TYR:CZ	2.55	0.42
1:A:555:VAL:HG22	1:A:555:VAL:O	2.19	0.42
1:A:581:VAL:HG22	1:A:581:VAL:O	2.19	0.42
1:A:668:PHE:CD1	1:A:668:PHE:N	2.88	0.42
1:A:757:HIS:HD2	1:A:758:THR:HG23	1.84	0.42
1:A:789:ARG:HH12	1:A:816:THR:HG22	1.85	0.42
2:B:253:HIS:O	2:B:253:HIS:HD2	2.03	0.42
2:B:347:TRP:O	2:B:350:PRO:HD3	2.19	0.42
2:B:89:ASP:CA	2:B:410:GLN:NE2	2.71	0.42
1:A:18:ILE:H	1:A:18:ILE:HG12	1.65	0.42
1:A:218:LEU:N	1:A:218:LEU:CD2	2.81	0.42
1:A:219:GLY:O	1:A:221:ASN:N	2.53	0.42
1:A:375:GLU:O	1:A:377:LEU:HD23	2.20	0.42
1:A:453:THR:CG2	1:A:454:CYS:N	2.83	0.42
1:A:111:ASN:HB2	1:A:467:GLN:CG	2.50	0.42
1:A:589:LEU:N	1:A:592:GLN:HE21	2.17	0.42
1:A:77:LEU:CD2	1:A:742:MET:HE1	2.50	0.42
2:B:94:LEU:HD13	2:B:102:VAL:HG21	2.01	0.42
1:A:128:GLY:HA2	1:A:188:CYS:HB2	2.02	0.42
1:A:201:MET:HG2	1:A:400:PHE:CE1	2.55	0.42
1:A:96:TYR:O	1:A:96:TYR:CG	2.70	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:20:HIS:HD2	1:A:20:HIS:O	2.03	0.41
1:A:285:ILE:HG21	1:A:395:PHE:CD2	2.55	0.41
1:A:481:LEU:HD21	1:A:533:HIS:CE1	2.55	0.41
1:A:589:LEU:O	1:A:592:GLN:HB2	2.20	0.41
1:A:607:ARG:O	1:A:608:LEU:C	2.57	0.41
1:A:601:MET:HB3	1:A:609:TYR:HB2	2.01	0.41
1:A:63:VAL:CG2	1:A:68:PHE:HE2	2.33	0.41
1:A:671:LEU:HB2	1:A:685:ILE:CG2	2.46	0.41
1:A:692:ALA:CB	1:A:721:VAL:HB	2.50	0.41
1:A:806:PRO:HG2	1:A:809:ALA:HB2	2.02	0.41
1:A:68:PHE:CZ	1:A:862:HIS:HE1	2.38	0.41
2:B:191:THR:O	2:B:192:VAL:HG23	2.19	0.41
2:B:294:ASP:CG	2:B:295:TYR:H	2.22	0.41
2:B:89:ASP:OD2	2:B:410:GLN:OE1	2.34	0.41
2:B:509:ILE:CG2	2:B:512:GLY:CA	2.90	0.41
2:B:857:VAL:O	2:B:858:PRO:O	2.38	0.41
1:A:225:THR:O	1:A:227:ASP:N	2.53	0.41
1:A:815:ILE:O	1:A:816:THR:CG2	2.68	0.41
1:A:883:LEU:O	1:A:884:ALA:HB3	2.20	0.41
2:B:156:PRO:HG2	2:B:356:GLY:C	2.40	0.41
2:B:231:ILE:HG12	2:B:393:LEU:CD2	2.50	0.41
2:B:329:LEU:HD23	2:B:404:MET:HE1	2.02	0.41
2:B:509:ILE:HD12	2:B:813:ILE:HD11	2.02	0.41
2:B:576:TYR:HD1	2:B:576:TYR:O	2.04	0.41
2:B:596:THR:HG22	2:B:647:LEU:CD1	2.50	0.41
2:B:77:LEU:CD1	2:B:77:LEU:N	2.82	0.41
1:A:890:ARG:NH1	2:B:903:THR:O	2.51	0.41
1:A:14:THR:O	1:A:18:ILE:CG1	2.59	0.41
1:A:69:GLU:OE2	1:A:206:ARG:CD	2.68	0.41
1:A:211:VAL:O	1:A:212:ASN:HB2	2.20	0.41
1:A:445:ARG:HH11	1:A:445:ARG:CG	2.33	0.41
1:A:908:PRO:HB3	2:B:524:HIS:ND1	2.35	0.41
1:A:952:THR:HG21	2:B:115:ALA:HB1	2.01	0.41
2:B:334:CYS:SG	2:B:468:MET:HE2	2.54	0.41
2:B:89:ASP:HB3	2:B:410:GLN:HE22	1.85	0.41
2:B:638:GLU:HA	2:B:885:ASN:HD21	1.85	0.41
1:A:445:ARG:NH1	1:A:445:ARG:CG	2.79	0.41
1:A:128:GLY:O	1:A:449:ILE:HD12	2.20	0.41
2:B:262:MET:HG2	2:B:430:ALA:HA	2.02	0.41
2:B:672:ASN:HB2	2:B:754:TYR:CE2	2.55	0.41
1:A:10:ASN:ND2	1:A:10:ASN:C	2.73	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:125:MET:HE2	1:A:186:ASN:ND2	2.34	0.41
1:A:17:ASN:ND2	1:A:17:ASN:C	2.72	0.41
1:A:121:SER:HB3	1:A:185:ASN:HB2	2.02	0.41
1:A:284:LYS:HD2	1:A:329:HIS:HD1	1.85	0.41
1:A:402:VAL:O	1:A:406:VAL:HG23	2.21	0.41
1:A:40:GLN:HG2	1:A:45:ASP:HA	2.02	0.41
1:A:455:HIS:CB	1:A:615:TYR:CE2	3.04	0.41
1:A:664:CYS:SG	1:A:737:GLY:CA	2.97	0.41
1:A:807:MET:HE2	1:A:807:MET:CA	2.43	0.41
1:A:882:GLY:O	1:A:883:LEU:HD23	2.17	0.41
2:B:247:ARG:NH2	2:B:347:TRP:NE1	2.48	0.41
2:B:165:THR:CA	2:B:546:MET:CE	2.61	0.41
1:A:917:MET:HB2	2:B:632:THR:CG2	2.50	0.41
1:A:119:ILE:HD13	1:A:406:VAL:HA	2.02	0.41
1:A:392:HIS:HB3	1:A:393:HIS:H	1.69	0.41
1:A:762:ARG:CD	1:A:815:ILE:HD13	2.50	0.41
1:A:807:MET:O	1:A:810:MET:CA	2.69	0.41
1:A:873:ILE:CD1	1:A:873:ILE:H	2.15	0.41
2:B:294:ASP:CG	2:B:295:TYR:N	2.74	0.41
2:B:566:MET:O	2:B:566:MET:SD	2.79	0.41
1:A:208:HIS:CE1	1:A:217:GLU:OE2	2.74	0.41
1:A:309:TRP:CZ3	1:A:343:THR:HG23	2.55	0.41
1:A:353:MET:HE1	1:A:385:LEU:CB	2.50	0.41
1:A:386:ALA:O	1:A:407:HIS:CD2	2.74	0.41
1:A:598:TRP:O	1:A:600:SER:CA	2.62	0.41
1:A:68:PHE:HZ	1:A:862:HIS:CE1	2.39	0.41
1:A:472:ASP:CB	1:A:739:ALA:CB	2.99	0.41
2:B:155:GLU:CG	2:B:156:PRO:HD2	2.50	0.41
2:B:263:LEU:CD2	2:B:263:LEU:C	2.85	0.41
2:B:336:ALA:O	2:B:337:GLY:C	2.58	0.41
2:B:385:ASP:N	2:B:385:ASP:OD1	2.53	0.41
2:B:648:VAL:HG22	2:B:809:GLU:CG	2.51	0.41
2:B:648:VAL:HG22	2:B:809:GLU:HG3	2.02	0.41
1:A:43:GLY:H	1:A:445:ARG:HH12	1.68	0.41
1:A:527:ALA:O	1:A:531:LEU:HB2	2.20	0.41
1:A:820:CYS:O	1:A:820:CYS:SG	2.78	0.41
2:B:198:MET:C	2:B:204:GLN:HE21	2.24	0.41
2:B:397:LEU:HD13	2:B:480:LEU:CD1	2.50	0.41
1:A:29:MET:HE2	1:A:29:MET:HB3	1.78	0.41
1:A:353:MET:O	1:A:355:THR:N	2.53	0.41
1:A:384:LEU:HD12	1:A:439:ALA:O	2.20	0.41

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:452:ARG:O	1:A:452:ARG:HD3	2.21	0.41
1:A:750:GLU:C	1:A:751:HIS:ND1	2.73	0.41
1:A:771:ILE:HG23	1:A:822:LEU:HB3	2.03	0.41
1:A:880:VAL:HG21	2:B:508:GLY:HA3	2.01	0.41
1:A:951:GLY:O	1:A:952:THR:HG22	2.21	0.41
2:B:247:ARG:HD2	2:B:344:ALA:HA	2.03	0.41
2:B:648:VAL:CG1	2:B:653:VAL:HG23	2.51	0.41
2:B:314:GLY:HA2	2:B:762:SER:OG	2.21	0.41
2:B:129:ILE:O	2:B:933:VAL:HG13	2.19	0.41
1:A:114:LYS:HE3	1:A:116:HIS:CE1	2.55	0.41
1:A:231:THR:HG23	1:A:309:TRP:HZ3	1.85	0.41
1:A:830:ARG:O	1:A:836:THR:HG23	2.21	0.41
1:A:917:MET:HE1	2:B:511:ASP:OD1	2.20	0.41
2:B:615:MET:HG2	2:B:615:MET:H	1.59	0.41
1:A:632:ARG:O	1:A:726:TYR:HE1	2.04	0.41
2:B:7:GLN:OE1	2:B:77:LEU:HD11	2.21	0.41
2:B:999:LEU:O	2:B:1000:ALA:CB	2.59	0.41
1:A:334:LYS:CG	1:A:334:LYS:O	2.69	0.40
1:A:369:TYR:HE1	1:A:417:LEU:HD23	1.86	0.40
1:A:430:THR:OG1	1:A:430:THR:O	2.21	0.40
1:A:789:ARG:NH1	1:A:816:THR:HG22	2.36	0.40
2:B:155:GLU:HG2	2:B:156:PRO:HD2	2.04	0.40
2:B:815:VAL:HG11	2:B:894:LEU:HD21	2.03	0.40
1:A:347:LYS:HB2	1:A:347:LYS:NZ	2.37	0.40
1:A:562:LEU:HD13	1:A:562:LEU:HA	1.88	0.40
1:A:723:VAL:HG12	1:A:724:PHE:N	2.37	0.40
2:B:194:ILE:HG21	2:B:200:GLN:N	2.36	0.40
1:A:885:LEU:HD22	2:B:636:ASN:ND2	2.36	0.40
1:A:106:LEU:HD12	1:A:106:LEU:HA	1.85	0.40
1:A:153:THR:OG1	2:B:1001:SER:O	2.40	0.40
1:A:249:PRO:HG2	1:A:252:TRP:CB	2.38	0.40
1:A:372:LYS:NZ	1:A:499:ASP:CG	2.73	0.40
1:A:119:ILE:CD1	1:A:406:VAL:HG22	2.52	0.40
1:A:49:LEU:HD23	1:A:608:LEU:HD13	2.03	0.40
1:A:56:ILE:HG23	1:A:56:ILE:HD12	1.83	0.40
1:A:702:LYS:HB3	1:A:702:LYS:NZ	2.35	0.40
1:A:79:GLU:CA	1:A:79:GLU:OE1	2.69	0.40
1:A:925:VAL:O	1:A:926:THR:CB	2.69	0.40
2:B:254:GLN:NE2	2:B:254:GLN:H	2.18	0.40
2:B:355:ALA:CB	2:B:358:ALA:HB2	2.47	0.40
2:B:512:GLY:O	2:B:809:GLU:OE1	2.39	0.40

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:921:ASP:HB3	2:B:626:ALA:HB1	1.97	0.40
1:A:201:MET:CG	1:A:400:PHE:HE1	2.33	0.40
1:A:43:GLY:H	1:A:445:ARG:HH22	1.67	0.40
1:A:464:MET:SD	1:A:483:PHE:CE2	3.15	0.40
1:A:433:LYS:HG3	1:A:513:GLY:O	2.21	0.40
1:A:553:THR:O	1:A:554:ASP:CB	2.70	0.40
1:A:807:MET:C	1:A:810:MET:H	2.17	0.40
2:B:320:GLU:HG2	2:B:326:ARG:HG2	1.78	0.40
2:B:528:TYR:CD2	2:B:560:TRP:CZ2	3.08	0.40
2:B:701:TRP:CZ2	2:B:773:VAL:HG22	2.57	0.40
2:B:676:TRP:HD1	2:B:754:TYR:HB2	1.73	0.40
1:A:127:PHE:CD1	1:A:452:ARG:CD	3.03	0.40
1:A:10:ASN:ND2	1:A:14:THR:OG1	2.53	0.40
1:A:182:ILE:HG22	1:A:183:ALA:N	2.37	0.40
1:A:209:GLY:CA	1:A:218:LEU:HD21	2.51	0.40
1:A:577:ARG:CD	1:A:614:ALA:O	2.69	0.40
1:A:889:GLU:CD	1:A:889:GLU:N	2.72	0.40
2:B:165:THR:HG22	2:B:166:SER:O	2.21	0.40
2:B:287:THR:O	2:B:290:ARG:NH2	2.54	0.40
2:B:216:SER:CB	2:B:448:MET:HA	2.52	0.40
2:B:506:PRO:O	2:B:506:PRO:CG	2.70	0.40
2:B:563:GLY:O	2:B:564:SER:CB	2.69	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	970/1357 (72%)	894 (92%)	60 (6%)	16 (2%)	11	54
2	B	1001/1059 (94%)	874 (87%)	94 (9%)	33 (3%)	4	39
All	All	1971/2416 (82%)	1768 (90%)	154 (8%)	49 (2%)	10	45

All (49) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	477	SER
1	A	509	VAL
1	A	554	ASP
1	A	599	SER
1	A	619	VAL
1	A	649	HIS
1	A	793	SER
1	A	816	THR
2	B	109	PRO
2	B	115	ALA
2	B	750	GLU
2	B	752	HIS
2	B	853	ALA
2	B	858	PRO
2	B	859	PRO
2	B	918	GLY
2	B	973	LEU
2	B	984	ILE
2	B	988	VAL
2	B	1000	ALA
2	B	1004	ASP
1	A	971	ARG
2	B	190	SER
2	B	656	TYR
2	B	882	MET
2	B	963	GLN
2	B	60	PRO
2	B	727	PRO
2	B	883	GLY
1	A	501	ASN
1	A	643	ALA
1	A	815	ILE
1	A	883	LEU
2	B	382	PRO
2	B	447	PRO
2	B	884	GLY
2	B	982	ASN
2	B	544	THR
2	B	730	ARG
2	B	749	THR
2	B	954	ASN
2	B	983	THR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	814	PRO
2	B	350	PRO
1	A	671	LEU
2	B	620	PRO
1	A	247	PRO
2	B	653	VAL
2	B	689	ILE

### 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	774/1083 (72%)	486 (63%)	288 (37%)	0	1
2	B	800/833 (96%)	599 (75%)	201 (25%)	0	5
All	All	1574/1916 (82%)	1085 (69%)	489 (31%)	1	3

All (489) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	4	GLN
1	A	6	GLN
1	A	7	GLN
1	A	8	ARG
1	A	9	ASP
1	A	10	ASN
1	A	12	GLU
1	A	17	ASN
1	A	23	ARG
1	A	24	SER
1	A	26	LEU
1	A	27	LYS
1	A	34	LEU
1	A	38	ASN
1	A	39	ILE
1	A	46	LEU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	49	LEU
1	A	51	LEU
1	A	52	THR
1	A	54	GLU
1	A	55	LEU
1	A	56	ILE
1	A	58	GLN
1	A	60	LEU
1	A	63	VAL
1	A	66	LEU
1	A	68	PHE
1	A	69	GLU
1	A	70	HIS
1	A	77	LEU
1	A	79	GLU
1	A	81	ILE
1	A	83	VAL
1	A	86	ASN
1	A	89	ASP
1	A	90	MET
1	A	93	SER
1	A	95	GLN
1	A	103	ARG
1	A	105	TRP
1	A	106	LEU
1	A	111	ASN
1	A	112	MET
1	A	114	LYS
1	A	117	VAL
1	A	118	ARG
1	A	120	ARG
1	A	121	SER
1	A	125	MET
1	A	126	ASP
1	A	131	ARG
1	A	132	MET
1	A	133	MET
1	A	135	CYS
1	A	136	ASP
1	A	140	LEU
1	A	143	SER
1	A	145	ILE

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	149	SER
1	A	150	ARG
1	A	156	THR
1	A	157	MET
1	A	160	VAL
1	A	162	ARG
1	A	163	GLU
1	A	164	MET
1	A	167	MET
1	A	170	LEU
1	A	175	SER
1	A	176	ARG
1	A	178	SER
1	A	179	GLN
1	A	188	CYS
1	A	189	ARG
1	A	196	LEU
1	A	198	ARG
1	A	199	MET
1	A	201	MET
1	A	211	VAL
1	A	214	ARG
1	A	217	GLU
1	A	220	GLU
1	A	228	THR
1	A	230	LEU
1	A	231	THR
1	A	238	HIS
1	A	240	LYS
1	A	243	VAL
1	A	246	THR
1	A	248	VAL
1	A	253	LEU
1	A	256	GLU
1	A	260	THR
1	A	262	ARG
1	A	264	ARG
1	A	267	SER
1	A	270	LEU
1	A	272	ARG
1	A	273	LEU
1	A	278	VAL

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	280	CYS
1	A	290	GLN
1	A	291	ASN
1	A	295	ASN
1	A	297	ARG
1	A	299	HIS
1	A	300	TYR
1	A	303	ARG
1	A	309	TRP
1	A	310	LEU
1	A	311	ASP
1	A	316	LEU
1	A	317	SER
1	A	328	GLU
1	A	329	HIS
1	A	330	TYR
1	A	332	LEU
1	A	338	SER
1	A	342	LEU
1	A	346	LEU
1	A	347	LYS
1	A	348	GLN
1	A	351	HIS
1	A	352	ARG
1	A	353	MET
1	A	359	THR
1	A	361	GLU
1	A	363	ARG
1	A	368	VAL
1	A	372	LYS
1	A	380	CYS
1	A	385	LEU
1	A	388	SER
1	A	389	ARG
1	A	396	LEU
1	A	405	ASP
1	A	407	HIS
1	A	411	TYR
1	A	414	ASN
1	A	415	GLN
1	A	419	LEU
1	A	422	ILE

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	425	ARG
1	A	426	MET
1	A	430	THR
1	A	433	LYS
1	A	435	GLN
1	A	436	LEU
1	A	438	THR
1	A	441	TYR
1	A	443	LEU
1	A	445	ARG
1	A	446	ARG
1	A	452	ARG
1	A	454	CYS
1	A	459	THR
1	A	472	ASP
1	A	475	ASN
1	A	481	LEU
1	A	486	ASN
1	A	487	LEU
1	A	490	PHE
1	A	491	LEU
1	A	497	PHE
1	A	504	GLU
1	A	509	VAL
1	A	514	ILE
1	A	516	LYS
1	A	517	GLU
1	A	518	LEU
1	A	525	LEU
1	A	528	MET
1	A	536	GLU
1	A	542	GLU
1	A	544	MET
1	A	547	ILE
1	A	551	ARG
1	A	552	PHE
1	A	553	THR
1	A	564	ARG
1	A	565	LYS
1	A	568	MET
1	A	569	THR
1	A	571	LEU

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	574	LEU
1	A	575	LYS
1	A	577	ARG
1	A	586	GLN
1	A	589	LEU
1	A	590	PHE
1	A	592	GLN
1	A	593	LYS
1	A	597	VAL
1	A	603	GLU
1	A	607	ARG
1	A	613	GLN
1	A	615	TYR
1	A	619	VAL
1	A	622	GLN
1	A	623	LEU
1	A	625	ARG
1	A	627	ARG
1	A	632	ARG
1	A	633	ASP
1	A	634	ILE
1	A	638	ARG
1	A	639	GLN
1	A	641	MET
1	A	642	ASP
1	A	646	LEU
1	A	648	LYS
1	A	649	HIS
1	A	651	GLN
1	A	660	ASN
1	A	662	SER
1	A	667	GLN
1	A	668	PHE
1	A	675	SER
1	A	677	ILE
1	A	688	GLU
1	A	689	ARG
1	A	691	PHE
1	A	702	LYS
1	A	706	GLU
1	A	708	ARG
1	A	710	THR

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	715	SER
1	A	718	ARG
1	A	728	ARG
1	A	729	SER
1	A	730	THR
1	A	740	GLU
1	A	742	MET
1	A	745	MET
1	A	757	HIS
1	A	762	ARG
1	A	764	GLN
1	A	765	SER
1	A	768	THR
1	A	776	VAL
1	A	781	ASN
1	A	784	MET
1	A	788	ILE
1	A	800	HIS
1	A	801	LEU
1	A	802	ARG
1	A	810	MET
1	A	812	MET
1	A	819	ASP
1	A	828	ARG
1	A	830	ARG
1	A	834	MET
1	A	836	THR
1	A	842	ARG
1	A	843	ARG
1	A	849	ASP
1	A	853	ASP
1	A	856	THR
1	A	865	ARG
1	A	866	GLU
1	A	869	THR
1	A	873	ILE
1	A	878	GLU
1	A	879	ARG
1	A	881	SER
1	A	883	LEU
1	A	885	LEU
1	A	886	ARG

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	901	SER
1	A	902	MET
1	A	903	LEU
1	A	918	LYS
1	A	919	LEU
1	A	923	THR
1	A	926	THR
1	A	927	ASN
1	A	928	ARG
1	A	929	GLN
1	A	931	LEU
1	A	932	ARG
1	A	938	ARG
1	A	939	ASN
1	A	943	ARG
1	A	950	MET
1	A	955	CYS
1	A	965	ARG
1	A	968	MET
1	A	972	GLU
2	B	2	SER
2	B	5	SER
2	B	6	ASP
2	B	10	GLU
2	B	11	THR
2	B	15	THR
2	B	16	SER
2	B	29	VAL
2	B	32	LYS
2	B	34	THR
2	B	37	LEU
2	B	38	LYS
2	B	43	THR
2	B	47	GLU
2	B	51	LEU
2	B	55	LYS
2	B	56	ARG
2	B	58	GLU
2	B	59	VAL
2	B	64	LEU
2	B	66	ARG
2	B	74	MET

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
2	B	75	MET
2	B	78	LEU
2	B	79	ARG
2	B	81	GLU
2	B	82	LYS
2	B	89	ASP
2	B	92	LEU
2	B	93	MET
2	B	95	GLN
2	B	110	GLN
2	B	111	MET
2	B	120	LEU
2	B	123	ASN
2	B	135	ASP
2	B	141	TYR
2	B	149	GLN
2	B	161	LEU
2	B	167	SER
2	B	169	GLN
2	B	172	SER
2	B	173	ASP
2	B	177	LEU
2	B	184	GLN
2	B	186	TRP
2	B	191	THR
2	B	195	VAL
2	B	198	MET
2	B	201	THR
2	B	204	GLN
2	B	214	ARG
2	B	216	SER
2	B	218	PHE
2	B	221	HIS
2	B	231	ILE
2	B	237	HIS
2	B	240	ASP
2	B	246	SER
2	B	248	ASP
2	B	253	HIS
2	B	255	THR
2	B	262	MET
2	B	263	LEU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
2	B	267	ILE
2	B	273	TRP
2	B	278	THR
2	B	285	GLU
2	B	288	THR
2	B	310	LEU
2	B	313	ARG
2	B	315	THR
2	B	319	THR
2	B	326	ARG
2	B	327	TYR
2	B	328	LEU
2	B	334	CYS
2	B	343	LEU
2	B	347	TRP
2	B	349	LYS
2	B	364	MET
2	B	365	SER
2	B	366	GLU
2	B	373	THR
2	B	381	THR
2	B	390	ARG
2	B	391	GLU
2	B	393	LEU
2	B	403	HIS
2	B	404	MET
2	B	406	ASP
2	B	428	CYS
2	B	432	GLU
2	B	434	MET
2	B	435	ASN
2	B	443	LYS
2	B	446	ARG
2	B	448	MET
2	B	450	GLU
2	B	454	ARG
2	B	455	GLU
2	B	456	VAL
2	B	464	SER
2	B	467	GLN
2	B	468	MET
2	B	469	ILE

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
2	B	475	ASN
2	B	496	MET
2	B	500	GLN
2	B	503	LEU
2	B	511	ASP
2	B	513	ASP
2	B	514	THR
2	B	517	LEU
2	B	520	ASP
2	B	521	LEU
2	B	527	GLN
2	B	535	ASP
2	B	549	LYS
2	B	550	MET
2	B	551	VAL
2	B	554	VAL
2	B	557	LEU
2	B	560	TRP
2	B	564	SER
2	B	566	MET
2	B	568	SER
2	B	570	THR
2	B	588	PHE
2	B	589	TYR
2	B	591	THR
2	B	593	THR
2	B	595	ARG
2	B	603	ASP
2	B	606	HIS
2	B	622	LEU
2	B	627	THR
2	B	631	SER
2	B	632	THR
2	B	644	ASP
2	B	655	LEU
2	B	658	THR
2	B	666	LEU
2	B	676	TRP
2	B	681	THR
2	B	684	SER
2	B	686	HIS
2	B	688	ASP

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
2	B	694	GLU
2	B	706	SER
2	B	708	GLU
2	B	710	HIS
2	B	722	GLU
2	B	729	ARG
2	B	734	LEU
2	B	735	HIS
2	B	748	ASP
2	B	749	THR
2	B	754	TYR
2	B	760	THR
2	B	762	SER
2	B	763	GLU
2	B	765	ARG
2	B	770	ASP
2	B	776	ARG
2	B	779	LYS
2	B	787	GLN
2	B	788	LEU
2	B	794	GLN
2	B	795	GLU
2	B	799	ARG
2	B	801	GLN
2	B	806	TYR
2	B	807	PHE
2	B	813	ILE
2	B	815	VAL
2	B	818	HIS
2	B	835	ARG
2	B	838	ARG
2	B	843	CYS
2	B	844	THR
2	B	846	THR
2	B	852	GLU
2	B	856	LEU
2	B	860	MET
2	B	866	LEU
2	B	891	LEU
2	B	914	LEU
2	B	921	HIS
2	B	924	GLU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
2	B	926	ILE
2	B	929	THR
2	B	930	ASN
2	B	943	GLU
2	B	948	PHE
2	B	963	GLN
2	B	970	TYR
2	B	979	LYS
2	B	992	TYR
2	B	999	LEU
2	B	1005	LYS

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (77) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	4	GLN
1	A	6	GLN
1	A	7	GLN
1	A	10	ASN
1	A	17	ASN
1	A	20	HIS
1	A	38	ASN
1	A	58	GLN
1	A	107	HIS
1	A	116	HIS
1	A	179	GLN
1	A	186	ASN
1	A	203	ASN
1	A	208	HIS
1	A	216	GLN
1	A	299	HIS
1	A	337	HIS
1	A	341	HIS
1	A	348	GLN
1	A	387	ASN
1	A	407	HIS
1	A	413	GLN
1	A	435	GLN
1	A	455	HIS
1	A	467	GLN
1	A	592	GLN
1	A	639	GLN

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	649	HIS
1	A	652	ASN
1	A	660	ASN
1	A	667	GLN
1	A	714	ASN
1	A	757	HIS
1	A	800	HIS
1	A	851	HIS
1	A	862	HIS
1	A	939	ASN
2	B	7	GLN
2	B	19	ASN
2	B	26	GLN
2	B	95	GLN
2	B	110	GLN
2	B	123	ASN
2	B	149	GLN
2	B	184	GLN
2	B	204	GLN
2	B	219	GLN
2	B	220	HIS
2	B	221	HIS
2	B	253	HIS
2	B	302	HIS
2	B	383	HIS
2	B	431	HIS
2	B	437	HIS
2	B	449	ASN
2	B	467	GLN
2	B	475	ASN
2	B	485	GLN
2	B	523	HIS
2	B	527	GLN
2	B	538	GLN
2	B	543	ASN
2	B	555	ASN
2	B	636	ASN
2	B	677	HIS
2	B	705	ASN
2	B	744	ASN
2	B	769	ASN
2	B	801	GLN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
2	B	805	HIS
2	B	818	HIS
2	B	832	HIS
2	B	842	ASN
2	B	865	GLN
2	B	881	ASN
2	B	885	ASN
2	B	963	GLN

### 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 carbohydrates 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](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	A	1

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	235:ALA	C	236:CYS	N	1.61