



## Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Nov 15, 2022 – 12:51 PM JST

PDB ID : 6L54  
EMDB ID : EMD-0837  
Title : Structure of SMG189  
Authors : Xu, Y.; Qi, Y.  
Deposited on : 2019-10-22  
Resolution : 3.43 Å(reported)

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

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

---

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

EMDB validation analysis : 0.0.1.dev43  
Mogul : 1.8.5 (274361), CSD as541be (2020)  
MolProbity : 4.02b-467  
buster-report : 1.1.7 (2018)  
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)  
MapQ : 1.9.9  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.31.2

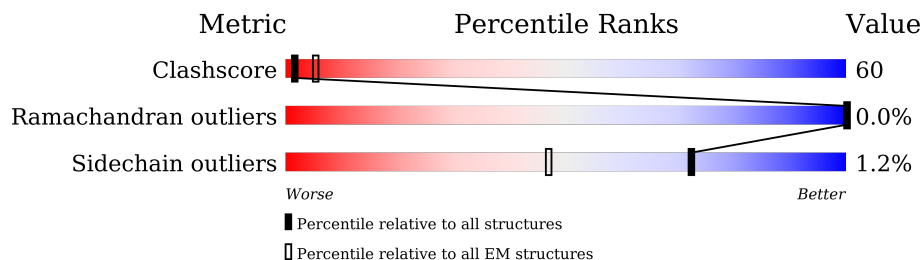
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*ELECTRON MICROSCOPY*

The reported resolution of this entry is 3.43 Å.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	3661	<div> <div>5%</div> <div>19%</div> <div>33%</div> <div>48%</div> </div>
2	B	991	<div> <div>13%</div> <div>26%</div> <div>61%</div> </div>
3	C	520	<div> <div>19%</div> <div>39%</div> <div>41%</div> </div>

The following table lists non-polymeric compounds, carbohydrate monomers and non-standard residues in protein, DNA, RNA chains that are outliers for geometric or electron-density-fit criteria:

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
4	GTP	C	601	-	-	X	-

## 2 Entry composition [i](#)

There are 5 unique types of molecules in this entry. The entry contains 20387 atoms, of which 857 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 Serine/threonine-protein kinase SMG1.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
1	A	1911	Total	C	N	O	S	0	0
			13859	8742	2364	2681	72		

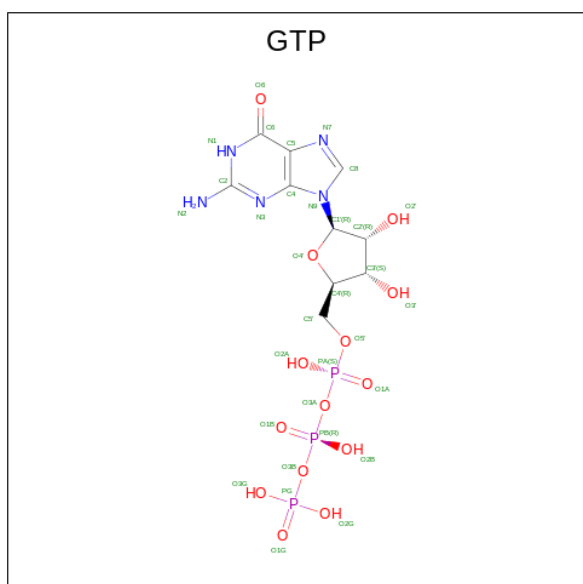
- Molecule 2 is a protein called Protein SMG8.

Mol	Chain	Residues	Atoms						AltConf	Trace
2	B	389	Total	C	H	N	O	S	0	0
			3551	2036	393	548	554	20		

- Molecule 3 is a protein called Protein SMG9.

Mol	Chain	Residues	Atoms						AltConf	Trace
3	C	308	Total	C	H	N	O	S	0	0
			2944	1591	464	423	449	17		

- Molecule 4 is GUANOSINE-5'-TRIPHOSPHATE (three-letter code: GTP) (formula:  $C_{10}H_{16}N_5O_{14}P_3$ ) (labeled as "Ligand of Interest" by depositor).



Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf
4	C	1	Total	C	N	O	P	0
			32	10	5	14	3	

- Molecule 5 is MAGNESIUM ION (three-letter code: MG) (formula: Mg) (labeled as "Ligand of Interest" by depositor).

Mol	Chain	Residues	Atoms		AltConf
5	C	1	Total	Mg	0
			1	1	

### 3 Residue-property plots

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

#### • Molecule 1: Serine/threonine-protein kinase SMG1



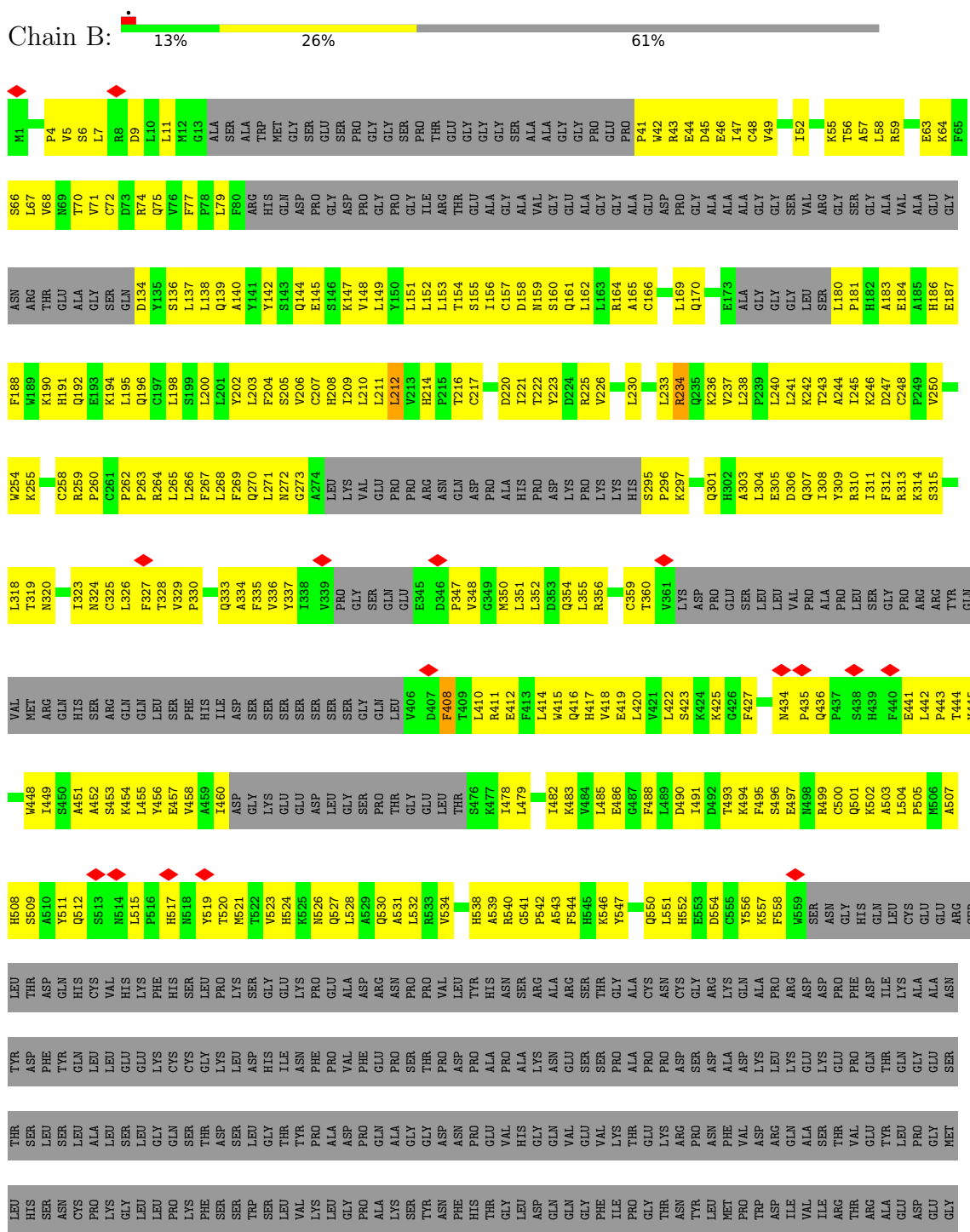
T1427	L1360	L1294	SER	G1101	M1035	ASP	T900	L826	G763	THR	P636	G570
A1428	E1361	R1295	LEU	K1102	R1036	ASN	I901	V829	A766	THR	T637	E571
ALA	L1368	S1296	SER	M1103	V1037	D970	P902	L830	N767	ALA	M572	M573
PHE	L1369	S1297	LEU	L1104	G1038	G974	N904	S831	T768	THR	F639	T573
ALA	T1370	V1298	GLU	I1107	L1039	N975	N905	N832	L769	LYS	L642	C574
ARG	L1300	C1299	SER	M1108	L1040	N976	N906	N832	V770	HIS	L576	A575
LYS	A1303	A1300	GLY	S1109	P1044	G977	K907	T836	E771	PHE	N845	N577
CYS	L1304	PRO	THR	Q1112	A1045	R978	T908	E837	D772	SER	N578	N578
GLY	L1305	SER	PHE	Q1113	A1045	R979	D909	I838	N773	ILE	L646	L579
VAL	N1306	SER	VAL	A1114	V1048	R980	N910	Q839	N774	ILE	M647	L580
PRO	P1306	PRO	GLU	E1115	R1049	N981	V911	Q839	ILE	LEU	I648	H581
GLU	I1307	VAL	VAL	G1116	F1052	L982	Q914	E840	THR	LEU	V649	S582
THR	E1308	ILE	GLU	R1117	P1053	L983	Q914	I841	CYS	LEU	H650	LEU
GLN	M1184	GLN	GLN	K1120	L1054	Q985	N918	S842	CYS	LEU	S651	GLN
LEU	Y1185	LEU	LEU	S1122	L1054	L987	E919	L843	LEU	GLN	D652	LEU
LEU	L1186	LEU	LEU	W1123	LEU	L987	A920	L844	ALA	PRO	L653	LEU
PRO	K1189	LEU	LEU	Y1125	THR	E988	A921	L845	CYS	GLU	A654	ALA
GLY	C1191	GLY	GLY	E1124	THR	N989	Q922	R946	SER	ALA	V655	GLU
GLU	E1192	GLY	GLY	Y1125	THR	E991	T924	K851	HIS	THR	H656	CYS
ASN	I1195	ASN	ASN	L1129	THR	K992	V925	P853	ALA	LEU	P657	SER
ASN	S1196	ASN	ILE	C1136	THR	L993	L926	T856	SER	LEU	A659	ILE
VAL	I1197	VAL	ILE	A1131	LEU	M994	T931	F857	SER	LEU	A663	LYS
ARG	T1197	LEU	ASN	Y995	LEU	Y995	P932	H858	SER	GLU	V664	HIS
LEU	A1198	SER	LEU	Y998	GLY	Y998	L933	P859	LEU	GLU	L665	GLU
ALA	D1199	GLY	GLY	E999	GLY	E999	G934	Q860	ASP	GLU	Y666	ASP
GLY	V1203	GLY	GLY	C1138	ASN	A1002	Q937	D861	ASP	LEU	T667	F602
SER	Q1204	SER	SER	I1139	GLU	ASN	D938	F862	LEU	LEU	L668	N603
LYS	E1205	LYS	LYS	S1140	E1070	ALA	T939	S863	LEU	LEU	H671	N604
GLU	W1206	GLU	GLU	P1141	E1070	LEU	Q941	D864	GLN	GLN	C672	D605
ILE	Q1207	ILE	ILE	ASP	T1072	THR	F940	V865	ARG	THR	T673	N606
ASP	N1208	ASP	ASP	LYS	T1072	SER	Q941	T866	CYS	VAL	A607	K608
MET	A1209	MET	MET	SER	T1073	PRO	T942	S867	VAL	ASP	H675	F609
LYS	I1210	LYS	LYS	VAL	M1074	LEU	I943	F868	ASP	THR	D676	V610
LYS	H1211	LYS	LYS	THR	M1075	PRO	I943	L869	ASP	THR	H677	V611
LEU	D1212	LEU	LEU	THR	V1076	GLU	T946	L870	THR	THR	PHE	I612
LEU	L1213	LEU	LEU	LEU	V1077	V1011	T947	H875	THR	THR	ILE	I613
PRO	K1214	PRO	PRO	ALA	E1078	F1015	R948	N881	VAL	THR	SER	D614
ASN	X1215	ASN	ASN	ALA	E1079	F1016	S949	W882	GLU	THR	SER	L615
THR	SER	THR	THR	ALA	L1080	Y1017	LEU	L883	LEU	THR	LEU	L618
THR	SER	THR	THR	GLY	C1081	T1018	ALA	L883	H808	SER	SER	T619
SER	SER	SER	SER	ARG	E1082	N1019	HIS	E884	S809	SER	SER	T620
SER	SER	SER	SER	ASN	L1083	M1019	THR	R885	G810	SER	SER	I621
THR	H1084	THR	THR	ASN	H1084	Q1021	LEU	L886	T811	PRO	SER	G622
SER	C1085	SER	SER	ALA	C1085	T1022	ASN	F887	R812	LEU	SER	N623
LEU	P1086	LEU	LEU	SER	P1086	D1025	PRO	S889	R814	THR	THR	A624
ASN	A1088	ASN	ASN	PRO	A1088	W1026	ASP	C890	F817	THR	THR	K625
LYS	L1088	LYS	LYS	LYS	E1088	L1026	GLN	Q891	THR	THR	THR	L628
LYS	L1089	LYS	LYS	HIS	I1089	L1027	ASP	R892	VAL	GLY	GLY	I629
ALA	Q1090	ALA	ALA	SER	Q1090	T1028	VAL	L893	THR	ALA	ALA	G630
ASP	G1091	ASP	ASP	LEU	G1091	R1029	SER	D894	THR	THR	THR	I629
PHE	I1092	PHE	PHE	ASN	I1092	I1030	GLN	K896	THR	THR	THR	G630
ASN	L1092	ASN	ASN	GLY	L1092	I1031	TRP	R896	THR	THR	THR	A633
ASN	L1092	ASN	ASN	GLY	L1092	I1032	THR	D897	THR	THR	THR	L634
TYR	Y1095	TYR	TYR	GLU	Y1095	S1033	THR	Q898	THR	THR	THR	S635
ILE	S1096	ILE	ILE	SER	S1096	I1034	ALA	S899	THR	THR	THR	S635
LYS	I1099	LYS	LYS	ARG	I1099	I1034	ALA	S899	THR	THR	THR	S635
LYS	V1100	LYS	LYS	ARG	V1100	I1034	ALA	S899	THR	THR	THR	S635





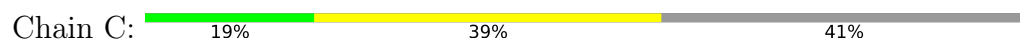


- Molecule 2: Protein SMG8



[illegible]

- Molecule 3: Protein SMG9



MET	SER	GLU	GLY	HIS	SER	PRO	LEU	TYP	ARG	ARG	ARG	TRP	LYS	PRO	GLY	ASN	LEU	SER	GLY	GLY	PRO	GLN	ASP	THR	VAL
MET	GLN	LYS	THR	PRO	ILE	ILE	LEU	SER	PRO	LEU	SER	GLY	LYS	PRO	ALA	ALA	PRO	ARG	GLU	VAL	LEU	GLY	THR	SER	THR

[illegible]

K182	L183	L184	L185	L186	L187	L188	L189	L190	L191	L192	L193	L194	L195	L196	L197	L198	L199	D200	D201	D202	D203	D204	L205	D206	D207	D208	D209	L210	D211	L212	D213	D214	D215	D216	D217	S218	D219	D220	D221	D222	L223	L224		T228	D229	D230	D231	D232	D233	D234	D235		F238	D239	A240	D241		D244	D245
------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	--	------	------	------	------	------	------	------	------	--	------	------	------	------	--	------	------

K246	E247	R248	G249	G250	N251	L256	D257	F258	F259	L260	T261	G262	E263	K264	L265	V266	F267	L268	D269	L270	Q271	P272	L273	L274	S275	P276	S277	L278	L279	T280	D281	L282	L283	N284	N285	ASP	ARG	LYS	LEU	PRD	P291	L295	P296	H297	H298	Y299	X300	E301	M302	L305	Q306	L307
------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	-----	-----	-----	-----	-----	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------

L311	F312	T313	V314	C315		V318	L319	Q322	D323	K324	F325	T326	D327	L328	S329	L330	V331	R332	F333	L334	Q335	T336	M339	V340	K341	P345	SER	PRU	HIS	HTS	GLU	SER	SER	SER	SER	SER	GLY	GLY	SER	ASP	GLU	GLU	GLY	T361	E362	Y363	Y364	P365	H366	L367	L370	Q371	N372	K373	A374	A375	R376	P377
------	------	------	------	------	--	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------

E377	D378	F379	C380	C381	R382	K383	L384	R385	Q386	K387	<b>K388</b>	L389	M390	I391	<b>R392</b>	Q393	L394	<b>L395</b>	H396	H397	H398	H399	A400	R401	<b>Y402</b>	K403	G404	T405	A406	S407	M408	L409	<b>Q410</b>	<b>Q411</b>	N412	V413	<b>F414</b>	<b>L417</b>	<b>L418</b>	<b>P419</b>	D420	F421	L422	D423	<b>L427</b>	L428	PHB	LEU	VAL	PRO	PHB	PHB	MET	ASP	SER	GLU	ALA	GLU	SER	GLU	ASN
------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	-------------	------	------	------	-------------	------	------	-------------	------	------	------	------	------	------	-------------	------	------	------	------	------	------	------	-------------	-------------	------	------	-------------	-------------	-------------	-------------	------	------	------	------	-------------	------	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----

[illegible]

L512 Y515 L518 L519 ALA

## 4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	
Number of particles used	420000	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	PHASE FLIPPING AND AMPLITUDE CORRECTION	Depositor
Microscope	FEI TITAN KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ( $e^-/\text{\AA}^2$ )	50	Depositor
Minimum defocus (nm)	Not provided	
Maximum defocus (nm)	Not provided	
Magnification	Not provided	
Image detector	GATAN K2 SUMMIT (4k x 4k)	Depositor
Maximum map value	48.493	Depositor
Minimum map value	-23.751	Depositor
Average map value	-0.000	Depositor
Map value standard deviation	1.000	Depositor
Recommended contour level	6.5	Depositor
Map size (Å)	332.8, 332.8, 332.8	wwPDB
Map dimensions	320, 320, 320	wwPDB
Map angles (°)	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing (Å)	1.04, 1.04, 1.04	Depositor

## 5 Model quality [i](#)

### 5.1 Standard geometry [i](#)

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z  >5	RMSZ	# Z  >5
1	A	0.23	0/14051	0.39	1/19153 (0.0%)
2	B	0.23	0/3231	0.38	0/4367
3	C	0.24	0/2539	0.41	2/3440 (0.1%)
All	All	0.23	0/19821	0.39	3/26960 (0.0%)

There are no bond length outliers.

All (3) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	3627	PRO	N-CA-CB	5.64	110.06	103.30
3	C	325	PHE	C-N-CA	5.33	135.04	121.70
3	C	399	HIS	C-N-CA	5.19	134.67	121.70

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

### 5.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	13859	0	13122	1769	0
2	B	3158	393	3174	331	0
3	C	2480	464	2469	302	0
4	C	32	0	11	9	0
5	C	1	0	0	0	0

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
All	All	19530	857	18776	2308	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 60.

All (2308) 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:1502:GLU:HA	1:A:1503:MET:HB2	1.30	1.09
2:B:198:LEU:HD11	2:B:483:LYS:HE2	1.36	1.06
1:A:649:VAL:HG11	1:A:667:THR:HB	1.40	1.04
1:A:820:LEU:HD22	1:A:886:LEU:HB2	1.35	1.03
3:C:406:LEU:HB2	3:C:422:LEU:HA	1.40	1.03
1:A:276:VAL:HG11	1:A:280:LEU:HG	1.40	1.03
1:A:1419:SER:HA	1:A:1422:MET:HE2	1.38	1.03
1:A:557:ASN:HB3	1:A:612:ILE:HG21	1.41	1.02
3:C:345:PRO:HG3	3:C:486:SER:HB2	1.38	1.02
1:A:811:THR:HA	1:A:814:ARG:HG2	1.39	1.02
1:A:163:ASP:HA	1:A:170:LYS:HE3	1.42	1.01
1:A:131:LYS:HE2	1:A:174:GLU:HG2	1.43	1.01
1:A:1525:ILE:HG13	1:A:1526:LEU:HD12	1.44	1.00
1:A:108:LEU:HD13	1:A:110:VAL:HG13	1.39	1.00
1:A:1410:ILE:HD13	1:A:1424:LEU:HD23	1.41	0.99
1:A:2390:GLY:H	1:A:2394:LEU:HD13	1.25	0.99
2:B:482:ILE:HG23	2:B:485:LEU:HD12	1.40	0.99
1:A:2277:LEU:H	1:A:2278:HIS:HB3	1.27	0.98
1:A:1086:PRO:HB2	1:A:1092:ILE:HG12	1.45	0.98
1:A:2069:ILE:HG13	1:A:2070:PRO:HD3	1.44	0.98
3:C:313:THR:HG22	3:C:341:LYS:HE2	1.43	0.97
1:A:215:ALA:HA	1:A:218:LEU:HD13	1.47	0.97
1:A:1786:VAL:HG13	1:A:1823:ILE:HD11	1.47	0.97
1:A:751:LEU:HD22	3:C:174:PRO:HG3	1.43	0.97
1:A:433:LEU:HD21	1:A:471:MET:HG2	1.46	0.96
1:A:2037:GLU:HG3	1:A:2094:GLU:HA	1.47	0.96
1:A:114:THR:HG22	1:A:134:ARG:HG2	1.47	0.96
1:A:1753:THR:HG23	1:A:1788:ALA:HB1	1.49	0.94
1:A:1786:VAL:HG11	1:A:2172:ILE:HD12	1.48	0.94
1:A:2296:LEU:HD22	1:A:2383:LEU:HD13	1.48	0.94
1:A:675:HIS:HB2	1:A:676:ASP:HB2	1.50	0.94
1:A:1336:ARG:HB3	1:A:1337:LEU:HA	1.50	0.93
1:A:866:ILE:HD12	1:A:1185:TYR:H	1.32	0.92

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:408:PHE:HB3	2:B:412:GLU:HB2	1.49	0.92
2:B:139:GLN:HE21	2:B:152:LEU:HD11	1.34	0.92
3:C:183:LEU:HD11	3:C:258:PHE:HB2	1.47	0.92
2:B:528:LEU:HD21	2:B:551:LEU:HD22	1.48	0.92
1:A:1306:PRO:HG2	1:A:2306:THR:HB	1.53	0.91
3:C:295:LEU:HD12	3:C:296:PRO:HD2	1.51	0.91
1:A:2195:VAL:HA	1:A:2205:ILE:HG22	1.53	0.91
1:A:2160:LEU:HD22	1:A:2203:GLY:HA3	1.49	0.91
1:A:2254:TYR:HA	1:A:2257:ILE:HG22	1.52	0.91
1:A:1338:SER:HB3	1:A:1401:MET:HE2	1.51	0.91
1:A:1038:GLY:HA3	1:A:1102:LYS:HE3	1.53	0.91
2:B:303:ALA:HB1	3:C:248:ARG:HA	1.53	0.89
1:A:1478:LYS:HE3	1:A:1532:ILE:HG12	1.53	0.89
2:B:156:ILE:HG13	2:B:192:GLN:HB3	1.53	0.89
1:A:147:SER:H	1:A:149:LEU:HD23	1.37	0.88
1:A:769:LEU:HD13	3:C:265:ILE:HD11	1.55	0.88
1:A:2089:ILE:HG21	1:A:2129:THR:HA	1.56	0.88
1:A:1131:ALA:HB1	1:A:1206:TRP:HE1	1.38	0.88
1:A:983:LEU:HD23	1:A:992:LYS:HE2	1.54	0.87
3:C:406:LEU:HD12	3:C:422:LEU:HB3	1.55	0.87
1:A:2330:ILE:HD12	1:A:2404:ARG:HH11	1.39	0.87
1:A:1472:GLN:HG2	1:A:1525:ILE:HG23	1.57	0.86
1:A:2276:PRO:HB2	1:A:2279:VAL:H	1.39	0.86
1:A:1502:GLU:HB3	1:A:1504:LEU:HB2	1.58	0.86
3:C:209:VAL:HG12	3:C:319:ILE:HB	1.57	0.86
1:A:738:ALA:HB3	1:A:830:LEU:HD21	1.57	0.86
1:A:740:VAL:HA	1:A:751:LEU:HD12	1.57	0.86
1:A:1656:LEU:HB3	1:A:1657:LEU:HA	1.57	0.86
1:A:1521:VAL:HG22	1:A:1522:ALA:HA	1.57	0.86
1:A:1509:ILE:HD13	1:A:1598:ASP:HA	1.59	0.85
1:A:249:LYS:HE3	1:A:297:VAL:HG22	1.57	0.85
2:B:337:TYR:HE1	2:B:410:LEU:HD11	1.40	0.85
1:A:409:VAL:HG13	1:A:453:LEU:HD22	1.59	0.84
1:A:2277:LEU:N	1:A:2278:HIS:HB3	1.92	0.84
1:A:365:LEU:HD13	1:A:401:LEU:HD11	1.60	0.84
1:A:1325:LYS:HE2	1:A:1325:LYS:HA	1.60	0.84
1:A:80:ILE:HG21	1:A:106:GLN:HE22	1.43	0.84
1:A:2152:TYR:HA	1:A:2206:GLN:HA	1.60	0.84
2:B:504:LEU:HD13	2:B:550:GLN:HG2	1.59	0.83
1:A:2273:ARG:HB3	1:A:2274:ASP:HA	1.61	0.83
1:A:1938:SER:HA	1:A:1945:VAL:HG11	1.61	0.83

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:335:LEU:HB3	1:A:336:THR:HB	1.59	0.82
1:A:1856:ILE:HB	1:A:1859:PRO:HG3	1.61	0.82
1:A:618:LEU:HD11	1:A:648:ILE:HG23	1.61	0.82
1:A:2128:ILE:HG22	1:A:2140:LEU:HB3	1.57	0.82
1:A:379:ALA:HB3	1:A:382:GLU:HG2	1.61	0.82
1:A:863:SER:HB3	1:A:869:ILE:HG12	1.60	0.82
3:C:244:GLU:HA	3:C:247:GLU:HG2	1.62	0.82
1:A:2365:LEU:HA	1:A:2366:ARG:HB3	1.60	0.82
2:B:56:THR:OG1	2:B:158:ASP:OD1	1.98	0.81
1:A:199:VAL:HG23	1:A:200:LEU:HD12	1.60	0.81
1:A:736:LEU:HD11	3:C:199:LEU:HD12	1.60	0.81
1:A:98:THR:O	1:A:102:LYS:HG3	1.80	0.81
1:A:275:LEU:HB2	1:A:276:VAL:HA	1.62	0.80
1:A:895:LYS:HB3	1:A:2224:ARG:HD2	1.63	0.80
2:B:236:LYS:HD3	2:B:485:LEU:HD13	1.63	0.80
1:A:1475:VAL:HG23	1:A:1528:LEU:HD12	1.62	0.80
1:A:1818:PRO:HB2	1:A:1848:VAL:HG12	1.62	0.80
1:A:390:PRO:HB2	1:A:391:PRO:HD3	1.61	0.80
1:A:2247:PRO:CD	1:A:2248:ARG:HA	2.12	0.80
1:A:1090:GLN:NE2	1:A:1422:MET:SD	2.55	0.80
1:A:891:GLN:HE22	1:A:2298:LYS:HD2	1.46	0.80
1:A:1521:VAL:HG13	1:A:1522:ALA:HB2	1.62	0.80
1:A:638:VAL:HB	1:A:639:PHE:HA	1.64	0.80
1:A:976:ASN:HD21	1:A:1074:MET:HG2	1.47	0.79
1:A:1508:ALA:HB1	1:A:1600:ILE:HG13	1.65	0.79
1:A:1673:LEU:HD21	1:A:1708:TRP:HD1	1.47	0.79
1:A:2223:GLN:HG2	1:A:2245:ILE:HD12	1.62	0.79
1:A:1022:THR:HB	1:A:1415:VAL:H	1.46	0.79
1:A:2247:PRO:HD2	1:A:2248:ARG:HA	1.65	0.79
1:A:435:ARG:HG3	1:A:436:VAL:H	1.48	0.79
1:A:2153:LEU:HD13	1:A:2155:LYS:HE2	1.64	0.79
1:A:2391:VAL:HG12	1:A:2392:PHE:H	1.47	0.79
2:B:44:GLU:HA	2:B:444:THR:HB	1.64	0.79
1:A:141:MET:HE1	1:A:146:GLU:H	1.48	0.79
1:A:1413:GLN:H	1:A:1415:VAL:HA	1.45	0.79
1:A:651:SER:HA	1:A:1304:LEU:HD22	1.64	0.78
1:A:1071:VAL:HG11	1:A:1074:MET:HG3	1.64	0.78
1:A:2407:ARG:HB3	1:A:2410:LEU:HD13	1.65	0.78
2:B:505:PRO:O	2:B:509:SER:OG	2.00	0.78
1:A:322:LEU:H	1:A:322:LEU:HD12	1.47	0.78
1:A:1085:CYS:HB3	1:A:1086:PRO:HD2	1.63	0.78

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1090:GLN:O	1:A:1120:LYS:NZ	2.13	0.78
1:A:231:LYS:HG3	1:A:232:ILE:HD12	1.66	0.78
1:A:1103:ASN:HD22	1:A:1109:SER:HB2	1.49	0.78
1:A:2038:LYS:HG3	1:A:2095:ILE:HD12	1.64	0.78
2:B:434:ASN:O	2:B:436:GLN:NE2	2.16	0.78
1:A:1324:LEU:HD11	1:A:1339:THR:HG22	1.66	0.78
1:A:656:HIS:H	1:A:660:ILE:HD11	1.48	0.77
1:A:733:THR:OG1	1:A:822:LYS:HB2	1.83	0.77
1:A:2295:LEU:HD12	1:A:2379:ILE:HD13	1.67	0.77
1:A:2336:ARG:HH21	1:A:2340:ASN:HB3	1.48	0.77
1:A:995:TYR:HA	1:A:998:TYR:HB3	1.66	0.77
1:A:2277:LEU:HB2	1:A:2278:HIS:CB	2.14	0.77
1:A:2276:PRO:N	1:A:2277:LEU:HA	1.99	0.77
3:C:376:ARG:HG3	3:C:462:GLY:HA3	1.67	0.77
1:A:1184:ASN:ND2	1:A:1288:SER:OG	2.18	0.77
1:A:1320:VAL:O	1:A:1324:LEU:HG	1.85	0.77
1:A:361:LEU:HA	1:A:401:LEU:HD13	1.65	0.77
1:A:1502:GLU:HG3	1:A:1504:LEU:HD23	1.65	0.76
1:A:1303:ALA:O	1:A:1308:GLU:HB2	1.85	0.76
1:A:1424:LEU:HD22	1:A:1458:THR:HG22	1.68	0.76
1:A:2069:ILE:CG1	1:A:2070:PRO:HD3	2.15	0.76
3:C:417:LEU:HB2	3:C:418:PRO:HD3	1.66	0.76
3:C:410:GLN:HB2	3:C:472:LYS:HE2	1.67	0.76
1:A:1207:GLN:NE2	1:A:1288:SER:OG	2.18	0.76
3:C:485:LEU:HB3	3:C:490:LEU:HD12	1.67	0.76
1:A:115:SER:HA	1:A:155:ARG:HH12	1.51	0.76
1:A:675:HIS:HB2	1:A:676:ASP:CB	2.16	0.76
1:A:851:LYS:NZ	1:A:861:ASP:OD2	2.19	0.76
1:A:364:PHE:HD2	1:A:365:LEU:HD12	1.50	0.76
1:A:1048:VAL:HG13	1:A:1052:PHE:HE2	1.51	0.76
1:A:2191:ARG:HG3	1:A:2351:VAL:HG12	1.66	0.75
3:C:325:PHE:HE1	3:C:391:ILE:HD11	1.47	0.75
1:A:166:LEU:HG	1:A:167:ALA:H	1.52	0.75
1:A:730:LEU:HD23	1:A:730:LEU:H	1.50	0.75
1:A:1282:PRO:O	1:A:1286:GLN:NE2	2.19	0.75
1:A:675:HIS:CB	1:A:676:ASP:HB2	2.16	0.75
1:A:1960:VAL:N	1:A:1961:LEU:HA	2.02	0.75
1:A:1324:LEU:HD21	1:A:1339:THR:HB	1.67	0.75
2:B:295:SER:HB2	2:B:296:PRO:HD3	1.67	0.75
1:A:1832:HIS:O	1:A:1838:ARG:NH2	2.20	0.75
3:C:183:LEU:CD1	3:C:258:PHE:HB2	2.16	0.75

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:104:LEU:HD13	1:A:136:SER:HB2	1.69	0.74
1:A:1081:CYS:O	1:A:1085:CYS:N	2.18	0.74
1:A:1477:GLU:O	1:A:1481:PRO:HD3	1.86	0.74
2:B:512:GLN:HB2	2:B:557:LYS:HE3	1.68	0.74
1:A:72:ASP:HA	1:A:106:GLN:HG2	1.69	0.74
1:A:618:LEU:HD13	1:A:648:ILE:HD12	1.69	0.74
1:A:2037:GLU:N	1:A:2093:GLU:O	2.21	0.74
1:A:2300:LEU:HD21	1:A:2343:ILE:HD11	1.69	0.74
1:A:2247:PRO:N	1:A:2248:ARG:HA	2.01	0.74
1:A:502:ASN:O	1:A:506:LEU:HG	1.87	0.74
1:A:111:ASN:O	1:A:115:SER:OG	2.04	0.74
2:B:49:VAL:HG22	2:B:149:LEU:HB3	1.69	0.74
1:A:820:LEU:CD2	1:A:886:LEU:HB2	2.17	0.74
1:A:637:THR:N	1:A:638:VAL:HA	2.03	0.74
1:A:2164:GLU:OE1	1:A:2165:ARG:NH1	2.21	0.74
3:C:254:SER:O	3:C:271:GLN:NE2	2.20	0.74
2:B:527:GLN:HE22	2:B:554:ASP:HB3	1.52	0.74
1:A:895:LYS:HE3	1:A:2228:LEU:HD12	1.70	0.74
1:A:1346:LEU:HD13	1:A:1349:LEU:HD11	1.70	0.74
1:A:1842:CYS:HA	1:A:1933:ILE:HD11	1.70	0.74
1:A:237:PHE:HA	1:A:240:PHE:HB2	1.68	0.73
1:A:411:SER:OG	1:A:435:ARG:N	2.19	0.73
1:A:1086:PRO:HA	1:A:1090:GLN:HB3	1.69	0.73
3:C:216:GLY:HA3	4:C:601:GTP:HN22	1.53	0.73
1:A:1586:SER:CB	1:A:1590:VAL:HB	2.18	0.73
2:B:63:GLU:O	2:B:67:LEU:HG	1.88	0.73
2:B:312:PHE:HB3	2:B:318:LEU:HG	1.70	0.73
1:A:2207:TRP:CD1	1:A:2208:VAL:HG12	2.23	0.73
2:B:190:LYS:HG2	2:B:194:LYS:HE3	1.71	0.73
3:C:229:PRO:HG2	3:C:467:GLN:HG3	1.71	0.73
1:A:770:VAL:O	1:A:771:GLU:HG3	1.87	0.73
1:A:1343:SER:HA	1:A:1344:GLN:CB	2.17	0.73
1:A:1462:LEU:O	1:A:1466:PHE:N	2.22	0.73
1:A:987:LEU:HG	1:A:988:GLU:H	1.53	0.73
1:A:1586:SER:HB2	1:A:1590:VAL:HB	1.71	0.73
1:A:1790:LEU:HD21	1:A:1823:ILE:HD12	1.70	0.73
1:A:432:VAL:HG13	1:A:433:LEU:HD12	1.71	0.73
3:C:211:GLY:HA3	3:C:215:THR:HG21	1.71	0.73
1:A:1650:LYS:HE3	1:A:1654:GLN:HE21	1.54	0.72
1:A:300:ILE:HG23	1:A:302:LEU:HG	1.71	0.72
1:A:432:VAL:HG13	1:A:433:LEU:CD1	2.20	0.72

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:893:LEU:HA	1:A:911:VAL:HG22	1.71	0.72
1:A:2245:ILE:N	1:A:2246:VAL:HA	2.04	0.72
2:B:301:GLN:HG2	2:B:336:VAL:HG23	1.71	0.72
2:B:64:LYS:NZ	2:B:153:LEU:O	2.20	0.72
1:A:192:ILE:O	1:A:196:VAL:HG23	1.89	0.72
1:A:1818:PRO:CB	1:A:1848:VAL:HG12	2.19	0.72
1:A:100:GLY:HA2	1:A:133:MET:CE	2.20	0.72
1:A:2332:GLY:HA3	1:A:2360:GLU:H	1.54	0.72
2:B:136:SER:HB2	2:B:153:LEU:HD11	1.71	0.72
1:A:2185:THR:HB	1:A:2186:PRO:HD3	1.71	0.72
1:A:1412:GLU:O	1:A:1416:PRO:HD2	1.89	0.72
3:C:403:LYS:HB3	3:C:421:PHE:HB2	1.72	0.72
1:A:649:VAL:O	1:A:653:LEU:HG	1.90	0.71
1:A:1346:LEU:HB2	1:A:1349:LEU:HD13	1.71	0.71
1:A:858:HIS:HB2	1:A:859:PRO:HD2	1.73	0.71
1:A:1410:ILE:HD13	1:A:1424:LEU:CD2	2.17	0.71
1:A:346:LEU:HA	1:A:349:PHE:HD1	1.55	0.71
1:A:1407:LEU:HD11	1:A:1427:THR:HG21	1.72	0.71
1:A:432:VAL:HG11	1:A:479:ILE:HD11	1.70	0.71
1:A:503:LEU:O	1:A:507:ILE:HG12	1.91	0.71
1:A:1502:GLU:OE1	1:A:1502:GLU:N	2.23	0.71
1:A:1352:LEU:HD12	1:A:1353:GLN:HA	1.72	0.71
1:A:1657:LEU:HD12	1:A:1658:PRO:N	2.06	0.71
2:B:63:GLU:OE1	2:B:63:GLU:N	2.23	0.71
1:A:552:VAL:HG22	1:A:556:LYS:HE2	1.71	0.71
1:A:769:LEU:HD22	3:C:263:GLU:HB3	1.72	0.71
1:A:1502:GLU:HB3	1:A:1504:LEU:N	2.06	0.71
1:A:2276:PRO:CD	1:A:2277:LEU:HA	2.20	0.71
3:C:362:GLU:OE1	3:C:364:TYR:OH	2.06	0.71
1:A:174:GLU:OE1	1:A:174:GLU:N	2.24	0.71
1:A:346:LEU:HD21	1:A:375:LEU:HD12	1.73	0.71
2:B:267:PHE:HD2	2:B:308:ILE:HD13	1.55	0.71
1:A:1030:ILE:O	1:A:1034:ILE:HG13	1.90	0.71
2:B:162:LEU:HD22	3:C:390:MET:HE3	1.72	0.71
2:B:307:GLN:HE22	3:C:249:GLY:HA3	1.55	0.71
3:C:257:ASP:HB2	3:C:269:ASP:OD1	1.89	0.71
1:A:380:SER:HA	2:B:350:MET:HE1	1.72	0.70
1:A:858:HIS:HD2	1:A:860:GLN:HB2	1.57	0.70
1:A:2247:PRO:HD2	1:A:2249:PRO:HD3	1.71	0.70
3:C:213:GLN:OE1	3:C:251:ASN:N	2.24	0.70
2:B:184:GLU:OE1	2:B:184:GLU:N	2.25	0.70

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:281:GLN:OE1	1:A:281:GLN:N	2.24	0.70
1:A:504:LEU:HD22	2:B:359:CYS:SG	2.32	0.70
1:A:2365:LEU:HA	1:A:2366:ARG:CB	2.21	0.70
2:B:211:LEU:HD23	2:B:266:LEU:HB2	1.73	0.70
1:A:154:ARG:O	1:A:157:THR:OG1	2.05	0.70
1:A:675:HIS:H	1:A:676:ASP:HB2	1.56	0.70
1:A:897:ASP:OD1	1:A:2224:ARG:NH2	2.25	0.70
1:A:1816:THR:OG1	1:A:1817:ALA:HA	1.92	0.70
1:A:2223:GLN:HG2	1:A:2245:ILE:HG23	1.74	0.70
1:A:1511:PHE:O	1:A:1514:SER:OG	2.02	0.70
1:A:254:CYS:O	1:A:258:LYS:HG2	1.92	0.70
1:A:731:LEU:HD23	1:A:731:LEU:H	1.55	0.70
1:A:990:LEU:H	1:A:990:LEU:HD12	1.57	0.70
1:A:1324:LEU:CD2	1:A:1339:THR:HB	2.21	0.70
1:A:1338:SER:H	1:A:1339:THR:HA	1.53	0.70
1:A:557:ASN:HB3	1:A:612:ILE:CG2	2.20	0.70
1:A:1293:LEU:HD13	1:A:1322:LYS:HD2	1.72	0.70
1:A:1410:ILE:HG21	1:A:1424:LEU:HD21	1.73	0.70
2:B:234:ARG:HH12	2:B:238:LEU:HD13	1.56	0.70
2:B:267:PHE:CD2	2:B:308:ILE:HD13	2.27	0.70
1:A:571:GLU:HG2	3:C:457:LEU:HD21	1.73	0.69
1:A:2186:PRO:O	1:A:2319:ARG:HG2	1.90	0.69
2:B:49:VAL:HG21	2:B:448:TRP:CE2	2.26	0.69
2:B:155:SER:HB2	2:B:196:GLN:HG3	1.72	0.69
1:A:454:THR:HB	1:A:501:LEU:CD1	2.23	0.69
1:A:742:MET:O	1:A:746:GLU:HG3	1.93	0.69
2:B:137:LEU:N	2:B:154:THR:OG1	2.25	0.69
3:C:240:ALA:O	3:C:252:GLN:NE2	2.24	0.69
1:A:510:GLN:HG2	1:A:579:LEU:HD12	1.74	0.69
3:C:391:ILE:HD12	3:C:421:PHE:HZ	1.56	0.69
1:A:768:THR:O	3:C:479:SER:OG	2.11	0.69
1:A:2388:VAL:HA	1:A:2393:ARG:HD3	1.74	0.69
1:A:104:LEU:HD13	1:A:136:SER:CB	2.22	0.69
1:A:976:ASN:HD22	1:A:1077:VAL:HG21	1.58	0.69
1:A:1413:GLN:N	1:A:1415:VAL:HA	2.07	0.69
1:A:2342:LEU:HB2	1:A:2351:VAL:CG2	2.23	0.69
1:A:1334:PRO:O	1:A:1396:ALA:N	2.25	0.69
1:A:1650:LYS:O	1:A:1654:GLN:HG3	1.92	0.69
1:A:2274:ASP:O	1:A:2276:PRO:HD3	1.93	0.69
1:A:84:GLU:OE1	1:A:84:GLU:N	2.24	0.69
1:A:199:VAL:HG11	1:A:263:VAL:HG22	1.74	0.69

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:248:VAL:O	1:A:253:LEU:HD12	1.93	0.69
1:A:1591:HIS:HB2	1:A:1599:PHE:CZ	2.27	0.69
3:C:241:GLN:HB3	3:C:245:MET:HG3	1.75	0.69
3:C:241:GLN:NE2	4:C:601:GTP:O1G	2.26	0.69
1:A:990:LEU:HD23	1:A:2395:SER:HB2	1.73	0.69
1:A:2365:LEU:CA	1:A:2366:ARG:HB3	2.23	0.69
2:B:245:ILE:O	2:B:255:LYS:NZ	2.26	0.69
1:A:1637:ALA:HB1	1:A:1675:GLN:CB	2.24	0.68
1:A:346:LEU:HB2	1:A:385:ASP:OD2	1.94	0.68
1:A:559:PRO:O	1:A:561:LEU:HG	1.94	0.68
2:B:495:PHE:O	2:B:499:ARG:HG2	1.93	0.68
3:C:229:PRO:CG	3:C:467:GLN:HG3	2.23	0.68
1:A:350:TRP:CE3	1:A:392:SER:HB3	2.28	0.68
1:A:1942:PRO:HA	1:A:1945:VAL:HG22	1.75	0.68
1:A:2153:LEU:HD23	1:A:2207:TRP:HA	1.75	0.68
3:C:202:THR:HB	3:C:489:ILE:HD11	1.73	0.68
1:A:1665:GLU:HG3	1:A:1668:ARG:HH21	1.57	0.68
2:B:337:TYR:CE1	2:B:410:LEU:HD11	2.28	0.68
1:A:458:GLU:HG2	1:A:501:LEU:HD22	1.75	0.68
1:A:2171:SER:HA	1:A:2192:HIS:HE1	1.57	0.68
1:A:2335:ASP:O	1:A:2340:ASN:ND2	2.22	0.68
1:A:295:LYS:HD2	1:A:297:VAL:HG21	1.76	0.68
1:A:820:LEU:HD11	1:A:882:TRP:HA	1.74	0.68
1:A:1032:LEU:HA	1:A:1035:MET:HE2	1.75	0.68
1:A:1538:GLU:OE1	1:A:1538:GLU:N	2.27	0.68
1:A:305:ARG:HG2	1:A:332:LYS:HD3	1.76	0.68
1:A:722:ASN:HB2	1:A:2305:THR:HG21	1.74	0.68
1:A:2276:PRO:HD2	1:A:2277:LEU:HA	1.76	0.68
1:A:183:LEU:HD23	1:A:183:LEU:H	1.59	0.68
1:A:1074:MET:O	1:A:1078:GLU:HG2	1.93	0.68
1:A:1124:GLU:OE1	1:A:1124:GLU:N	2.27	0.68
1:A:2277:LEU:HB2	1:A:2278:HIS:HB2	1.75	0.68
1:A:259:ALA:O	1:A:263:VAL:HG23	1.93	0.67
1:A:983:LEU:CD2	1:A:992:LYS:HE2	2.24	0.67
1:A:1938:SER:HB2	1:A:1945:VAL:HG21	1.76	0.67
3:C:485:LEU:HD22	3:C:490:LEU:HB2	1.76	0.67
1:A:648:ILE:HD13	1:A:714:LEU:HG	1.75	0.67
1:A:1017:TYR:HB3	1:A:1026:TRP:CB	2.23	0.67
1:A:2326:MET:SD	1:A:2401:HIS:NE2	2.67	0.67
2:B:210:LEU:HB2	2:B:265:LEU:HD23	1.77	0.67
1:A:740:VAL:HG21	1:A:752:PHE:CE2	2.29	0.67

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:135:LYS:HZ3	1:A:177:GLN:HB2	1.59	0.67
1:A:869:ILE:HB	1:A:1295:ARG:HH12	1.59	0.67
1:A:1844:LEU:O	1:A:1848:VAL:HG13	1.93	0.67
1:A:511:ILE:HD11	1:A:576:LEU:HD11	1.77	0.67
3:C:307:ILE:O	3:C:311:LEU:HD23	1.94	0.67
1:A:2245:ILE:HB	1:A:2246:VAL:C	2.15	0.67
1:A:2254:TYR:HA	1:A:2257:ILE:CG2	2.24	0.67
2:B:212:LEU:HD12	2:B:267:PHE:CE1	2.30	0.67
3:C:184:VAL:CG1	3:C:188:MET:HA	2.24	0.67
3:C:268:LEU:HD12	3:C:315:CYS:SG	2.35	0.67
1:A:637:THR:HB	1:A:638:VAL:O	1.95	0.67
1:A:1085:CYS:HB3	1:A:1086:PRO:CD	2.25	0.67
1:A:100:GLY:HA2	1:A:133:MET:HE3	1.76	0.67
1:A:421:GLY:O	1:A:425:THR:N	2.26	0.67
1:A:767:ASN:ND2	1:A:806:LEU:HD22	2.10	0.67
2:B:203:LEU:O	2:B:207:CYS:HB2	1.95	0.67
1:A:645:ASN:HB3	1:A:666:TYR:HE2	1.60	0.67
1:A:1018:THR:HG21	1:A:1084:HIS:NE2	2.10	0.67
1:A:1100:VAL:O	1:A:1104:LEU:HG	1.95	0.67
1:A:1703:MET:O	1:A:1707:ILE:HG13	1.95	0.67
1:A:2092:LEU:HB2	1:A:2100:ALA:HB2	1.76	0.67
3:C:260:ILE:HG12	3:C:266:VAL:HG22	1.75	0.67
1:A:239:LYS:NZ	1:A:256:THR:OG1	2.28	0.66
1:A:356:PHE:CD2	1:A:360:LEU:HG	2.30	0.66
1:A:1086:PRO:HB2	1:A:1092:ILE:CG1	2.24	0.66
3:C:256:ILE:HG12	3:C:270:THR:HG22	1.76	0.66
1:A:2139:LYS:HA	1:A:2152:TYR:O	1.95	0.66
1:A:2277:LEU:HB2	1:A:2278:HIS:HB3	1.75	0.66
2:B:52:ILE:HG22	2:B:64:LYS:HG2	1.76	0.66
1:A:992:LYS:HB2	1:A:1016:PHE:CB	2.26	0.66
2:B:329:VAL:HB	2:B:330:PRO:HD3	1.78	0.66
1:A:131:LYS:HE2	1:A:174:GLU:CG	2.24	0.66
1:A:651:SER:HA	1:A:1304:LEU:CD2	2.24	0.66
1:A:2299:GLU:HG3	1:A:2345:MET:CE	2.25	0.66
3:C:311:LEU:HD13	3:C:315:CYS:SG	2.35	0.66
3:C:485:LEU:CB	3:C:490:LEU:HD12	2.25	0.66
1:A:376:SER:HB3	1:A:448:PHE:CE1	2.31	0.66
1:A:403:ARG:HH11	1:A:470:SER:HA	1.60	0.66
1:A:419:ILE:HG21	1:A:442:ALA:H	1.61	0.66
1:A:1412:GLU:HA	1:A:1413:GLN:C	2.16	0.66
1:A:636:PRO:CB	1:A:638:VAL:HG22	2.26	0.66

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2169:PHE:HA	1:A:2414:LEU:HD21	1.78	0.66
2:B:303:ALA:O	2:B:307:GLN:HG3	1.95	0.66
2:B:491:ILE:HD13	3:C:519:LEU:HD23	1.76	0.66
1:A:454:THR:HB	1:A:501:LEU:HD11	1.78	0.66
1:A:503:LEU:HD13	1:A:572:MET:HG3	1.77	0.66
1:A:1757:LEU:HB3	1:A:1816:THR:CG2	2.26	0.66
2:B:237:VAL:HG13	2:B:479:LEU:HG	1.78	0.66
1:A:320:ASP:HB3	1:A:322:LEU:CD1	2.26	0.66
1:A:497:ILE:HG13	2:B:355:LEU:HD11	1.77	0.66
1:A:581:HIS:NE2	1:A:636:PRO:HA	2.10	0.66
1:A:858:HIS:CD2	1:A:860:GLN:HB2	2.31	0.66
1:A:1086:PRO:CA	1:A:1090:GLN:HB3	2.24	0.66
1:A:114:THR:O	1:A:134:ARG:NH2	2.16	0.66
1:A:131:LYS:CE	1:A:174:GLU:HG2	2.25	0.66
1:A:384:VAL:O	1:A:388:VAL:HG23	1.96	0.66
1:A:488:ASN:O	1:A:492:CYS:N	2.19	0.66
1:A:1459:ALA:O	1:A:1463:VAL:HG23	1.96	0.66
1:A:2045:GLY:HA2	1:A:2078:LEU:HD11	1.76	0.66
1:A:39:PRO:O	1:A:43:LYS:HG3	1.96	0.66
1:A:386:GLU:C	1:A:389:PRO:HD2	2.16	0.66
1:A:668:LEU:HD21	1:A:1319:ASN:ND2	2.11	0.66
1:A:1502:GLU:CA	1:A:1503:MET:HB2	2.17	0.66
1:A:826:LEU:HD22	1:A:909:ASP:OD2	1.96	0.65
3:C:406:LEU:HG	3:C:422:LEU:HD22	1.77	0.65
1:A:108:LEU:HD12	1:A:109:ARG:N	2.12	0.65
1:A:1124:GLU:HG2	1:A:1212:ASP:HB3	1.78	0.65
3:C:213:GLN:NE2	3:C:275:SER:HB2	2.12	0.65
1:A:1757:LEU:HB3	1:A:1816:THR:HG22	1.77	0.65
1:A:2340:ASN:HA	1:A:2353:ILE:CG1	2.25	0.65
1:A:738:ALA:HB1	1:A:830:LEU:HD11	1.78	0.65
1:A:820:LEU:O	1:A:824:ILE:HG12	1.96	0.65
1:A:1139:ILE:HD13	1:A:1207:GLN:HE21	1.61	0.65
2:B:420:LEU:HD23	2:B:425:LYS:HD2	1.77	0.65
2:B:507:ALA:HB1	2:B:534:VAL:HG13	1.79	0.65
3:C:263:GLU:OE1	3:C:263:GLU:N	2.30	0.65
1:A:471:MET:HA	1:A:471:MET:HE3	1.78	0.65
1:A:1115:GLU:OE1	1:A:1115:GLU:N	2.30	0.65
1:A:2188:PHE:CE1	1:A:2319:ARG:HD2	2.31	0.65
2:B:43:ARG:O	2:B:445:TYR:HB3	1.96	0.65
2:B:55:LYS:HG2	2:B:157:CYS:HB3	1.79	0.65
1:A:415:ARG:O	1:A:419:ILE:HG13	1.96	0.65

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:673:THR:HG21	1:A:1342:VAL:O	1.97	0.65
1:A:2380:GLU:HA	1:A:2383:LEU:HG	1.77	0.65
2:B:303:ALA:CB	3:C:248:ARG:HA	2.26	0.65
1:A:104:LEU:HD21	1:A:133:MET:HA	1.79	0.65
1:A:2246:VAL:HB	1:A:2247:PRO:C	2.17	0.65
1:A:2332:GLY:HA3	1:A:2360:GLU:N	2.12	0.65
1:A:463:LEU:HG	1:A:508:VAL:HB	1.77	0.65
1:A:552:VAL:HG22	1:A:556:LYS:CE	2.26	0.65
1:A:813:ILE:HD12	1:A:1306:PRO:HB2	1.77	0.65
1:A:1289:ILE:HG21	1:A:1326:GLN:HB3	1.78	0.65
1:A:1521:VAL:CG2	1:A:1522:ALA:HA	2.27	0.65
1:A:2183:GLN:HA	1:A:2184:GLU:C	2.18	0.65
3:C:325:PHE:CE2	3:C:387:MET:HG2	2.32	0.65
1:A:247:GLU:H	1:A:253:LEU:HD11	1.60	0.65
1:A:1403:GLN:O	1:A:1407:LEU:HD13	1.97	0.65
1:A:2300:LEU:HD23	1:A:2345:MET:CE	2.26	0.65
2:B:508:HIS:NE2	2:B:550:GLN:OE1	2.29	0.65
1:A:653:LEU:HD22	1:A:664:VAL:HG22	1.78	0.65
1:A:2342:LEU:HD11	1:A:2353:ILE:HD11	1.79	0.65
3:C:295:LEU:CD1	3:C:296:PRO:HD2	2.27	0.65
1:A:1346:LEU:HD22	1:A:1349:LEU:HD11	1.79	0.64
1:A:2196:THR:OG1	1:A:2204:LEU:O	2.06	0.64
2:B:159:ASN:ND2	3:C:325:PHE:O	2.30	0.64
3:C:205:LEU:HB2	3:C:482:ARG:HH12	1.62	0.64
1:A:636:PRO:HB2	1:A:638:VAL:HG22	1.79	0.64
1:A:736:LEU:HD11	3:C:199:LEU:CD1	2.25	0.64
1:A:1586:SER:OG	1:A:1590:VAL:HB	1.97	0.64
1:A:2299:GLU:HG3	1:A:2345:MET:HE1	1.78	0.64
2:B:211:LEU:CD2	2:B:266:LEU:HB2	2.28	0.64
1:A:174:GLU:O	1:A:178:GLN:NE2	2.30	0.64
1:A:746:GLU:OE1	1:A:747:THR:HG23	1.97	0.64
1:A:1027:LEU:HD13	1:A:1084:HIS:HB2	1.80	0.64
1:A:472:THR:O	1:A:475:CYS:N	2.28	0.64
1:A:2295:LEU:HD12	1:A:2379:ILE:CD1	2.27	0.64
2:B:347:PRO:HB3	3:C:377:GLU:OE2	1.97	0.64
3:C:228:THR:HB	3:C:229:PRO:HD2	1.78	0.64
1:A:506:LEU:HB3	1:A:510:GLN:OE1	1.97	0.64
1:A:1022:THR:HB	1:A:1415:VAL:N	2.11	0.64
1:A:1114:ALA:HA	1:A:1117:ARG:HE	1.62	0.64
1:A:2128:ILE:HA	1:A:2139:LYS:O	1.97	0.64
1:A:2131:LEU:HD21	1:A:2139:LYS:H	1.63	0.64

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:167:ALA:O	1:A:168:THR:OG1	2.12	0.64
1:A:1592:ILE:HB	1:A:1599:PHE:HE2	1.62	0.64
1:A:2367:VAL:HG13	1:A:2368:PRO:HD2	1.79	0.64
3:C:323:ASP:OD1	3:C:373:LYS:HD2	1.98	0.64
1:A:1930:TYR:O	1:A:1934:VAL:HG23	1.98	0.64
2:B:519:TYR:CE2	2:B:521:MET:HB2	2.33	0.64
2:B:500:CYS:HB3	2:B:546:LYS:HG3	1.79	0.64
3:C:327:ASP:OD1	3:C:329:SER:OG	2.07	0.64
1:A:1289:ILE:CG2	1:A:1326:GLN:HB3	2.27	0.64
1:A:990:LEU:HB2	1:A:2392:PHE:CD1	2.33	0.64
2:B:139:GLN:NE2	2:B:152:LEU:HD11	2.08	0.64
2:B:504:LEU:HB2	2:B:550:GLN:NE2	2.12	0.64
1:A:734:TRP:O	1:A:737:GLU:N	2.31	0.63
1:A:736:LEU:HD23	1:A:736:LEU:O	1.98	0.63
1:A:980:LEU:O	1:A:984:LEU:HD13	1.98	0.63
1:A:1054:LEU:HD13	1:A:1415:VAL:HG22	1.80	0.63
1:A:504:LEU:HD13	2:B:359:CYS:HB3	1.79	0.63
1:A:732:MET:O	1:A:733:THR:HG22	1.98	0.63
1:A:1086:PRO:HB3	1:A:1090:GLN:HB3	1.80	0.63
1:A:1673:LEU:HD23	1:A:1705:ASP:HA	1.79	0.63
1:A:153:LEU:CD1	1:A:156:ILE:HD12	2.29	0.63
1:A:822:LYS:O	1:A:825:PRO:HD2	1.97	0.63
2:B:220:ASP:OD2	2:B:222:THR:HB	1.97	0.63
3:C:421:PHE:CZ	3:C:423:ASP:HB2	2.33	0.63
1:A:42:LEU:HB3	1:A:64:ALA:HB1	1.81	0.63
1:A:893:LEU:HD22	1:A:914:GLN:OE1	1.99	0.63
1:A:1753:THR:CG2	1:A:1788:ALA:HB1	2.25	0.63
1:A:1095:TRP:NE1	1:A:1099:ILE:HD11	2.14	0.63
2:B:238:LEU:CG	2:B:242:LYS:HE3	2.28	0.63
3:C:181:ILE:O	3:C:258:PHE:N	2.31	0.63
1:A:1038:GLY:HA3	1:A:1102:LYS:CE	2.26	0.63
1:A:1361:GLU:N	1:A:1361:GLU:OE1	2.31	0.63
3:C:208:GLY:HA3	3:C:311:LEU:HD12	1.80	0.63
1:A:766:ALA:O	1:A:770:VAL:HG23	1.98	0.63
1:A:1207:GLN:HB3	1:A:1289:ILE:HD11	1.81	0.63
1:A:1306:PRO:HG2	1:A:2306:THR:CB	2.26	0.63
1:A:2217:LEU:HD12	1:A:2218:TYR:N	2.14	0.63
1:A:1338:SER:N	1:A:1339:THR:HA	2.11	0.63
1:A:1475:VAL:HG23	1:A:1528:LEU:CD1	2.27	0.63
1:A:2215:PHE:HB3	1:A:2339:ASP:OD1	1.99	0.63
2:B:217:CYS:SG	2:B:271:LEU:HD23	2.38	0.63

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:458:VAL:O	2:B:479:LEU:HD22	1.98	0.63
1:A:249:LYS:HD3	1:A:297:VAL:HG13	1.81	0.63
1:A:447:PHE:CE1	1:A:491:THR:HG23	2.34	0.63
1:A:650:HIS:O	1:A:1304:LEU:HD22	1.99	0.63
1:A:740:VAL:HB	1:A:751:LEU:HB2	1.80	0.63
1:A:1521:VAL:HG22	1:A:1522:ALA:CA	2.28	0.63
1:A:1673:LEU:CD2	1:A:1705:ASP:HA	2.29	0.63
2:B:58:LEU:HD11	3:C:390:MET:SD	2.38	0.63
1:A:294:CYS:O	1:A:295:LYS:HD3	1.98	0.62
1:A:1186:LEU:HD13	1:A:1199:ASP:HB3	1.80	0.62
1:A:1669:ILE:O	1:A:1673:LEU:HD13	1.98	0.62
1:A:771:GLU:OE1	1:A:773:VAL:HG13	1.99	0.62
1:A:1816:THR:CB	1:A:1817:ALA:HA	2.29	0.62
1:A:2038:LYS:HG3	1:A:2095:ILE:CD1	2.29	0.62
3:C:201:GLN:OE1	3:C:264:ARG:HG3	1.99	0.62
1:A:345:SER:C	1:A:348:PRO:HD2	2.20	0.62
1:A:1073:ILE:O	1:A:1077:VAL:HG23	1.99	0.62
1:A:2040:PHE:O	1:A:2044:TYR:N	2.28	0.62
1:A:2191:ARG:CG	1:A:2351:VAL:HG12	2.29	0.62
1:A:2246:VAL:N	1:A:2247:PRO:HA	2.14	0.62
1:A:85:LYS:HD2	1:A:116:PRO:HG2	1.79	0.62
1:A:274:GLN:CB	1:A:275:LEU:HD23	2.29	0.62
1:A:280:LEU:HD23	1:A:283:ILE:HD12	1.81	0.62
1:A:769:LEU:HD22	3:C:263:GLU:CG	2.30	0.62
2:B:262:PRO:HB2	2:B:326:LEU:HD11	1.81	0.62
3:C:340:VAL:HG11	3:C:512:LEU:HD21	1.81	0.62
3:C:367:LEU:HD11	3:C:400:LEU:CD2	2.29	0.62
1:A:239:LYS:HE2	1:A:243:SER:HB3	1.82	0.62
1:A:566:LYS:HD2	1:A:625:LYS:NZ	2.14	0.62
1:A:675:HIS:N	1:A:676:ASP:HB2	2.13	0.62
1:A:1815:PRO:HB2	1:A:1819:TRP:CZ3	2.35	0.62
1:A:2020:ALA:O	1:A:2024:VAL:HG13	1.98	0.62
1:A:2037:GLU:HG3	1:A:2094:GLU:CA	2.25	0.62
1:A:2296:LEU:O	1:A:2296:LEU:HD23	1.99	0.62
2:B:162:LEU:HD22	3:C:390:MET:CE	2.29	0.62
2:B:238:LEU:HD11	2:B:242:LYS:HE3	1.82	0.62
3:C:208:GLY:HA3	3:C:311:LEU:CD1	2.29	0.62
1:A:190:ASP:HA	1:A:193:LEU:HG	1.80	0.62
1:A:893:LEU:HB3	1:A:910:ALA:O	2.00	0.62
1:A:999:GLU:OE1	1:A:999:GLU:N	2.32	0.62
1:A:1336:ARG:HB3	1:A:1337:LEU:HD23	1.81	0.62

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2304:CYS:SG	1:A:2310:TRP:HA	2.39	0.62
3:C:205:LEU:HB2	3:C:482:ARG:HH22	1.64	0.62
1:A:295:LYS:HA	1:A:296:CYS:HB3	1.79	0.62
1:A:803:ARG:NH2	1:A:805:GLN:HB3	2.14	0.62
1:A:895:LYS:CD	1:A:907:LYS:HE2	2.30	0.62
1:A:2365:LEU:HB3	1:A:2366:ARG:C	2.20	0.62
1:A:2388:VAL:HG12	1:A:2393:ARG:HD3	1.82	0.62
1:A:813:ILE:HG13	1:A:881:ASN:HD21	1.65	0.62
1:A:920:ALA:HA	1:A:923:PHE:CE2	2.35	0.62
1:A:985:GLN:OE1	1:A:985:GLN:N	2.32	0.62
1:A:1786:VAL:HG11	1:A:2172:ILE:CD1	2.26	0.62
1:A:1841:ILE:O	1:A:1845:LEU:HD23	2.00	0.62
2:B:42:TRP:HB2	2:B:45:ASP:OD2	2.00	0.62
2:B:541:GLY:HA3	3:C:339:MET:HE3	1.81	0.62
1:A:223:ALA:HB3	1:A:270:SER:HB3	1.82	0.62
1:A:388:VAL:O	1:A:391:PRO:HD2	1.99	0.62
1:A:467:LEU:O	1:A:467:LEU:HD12	2.00	0.62
1:A:553:LEU:O	1:A:557:ASN:HB2	2.00	0.62
1:A:1027:LEU:HD11	1:A:1085:CYS:SG	2.39	0.62
1:A:1192:GLU:O	1:A:1195:ILE:HG22	2.00	0.62
1:A:1300:LEU:HD21	1:A:1316:ILE:HG13	1.82	0.62
1:A:1406:LEU:O	1:A:1410:ILE:HG13	2.00	0.62
1:A:1485:ILE:HG22	1:A:1488:THR:HG22	1.80	0.62
2:B:504:LEU:HD13	2:B:550:GLN:CG	2.29	0.62
1:A:261:GLU:OE1	1:A:303:VAL:HG13	2.00	0.62
1:A:558:ILE:N	1:A:559:PRO:HD3	2.15	0.62
3:C:408:MET:HE2	3:C:408:MET:HA	1.82	0.62
3:C:410:GLN:HB2	3:C:472:LYS:CD	2.30	0.62
3:C:505:GLY:O	3:C:509:SER:HB2	2.00	0.62
1:A:337:GLN:HB2	1:A:338:GLN:CD	2.20	0.61
1:A:379:ALA:HB3	1:A:382:GLU:CG	2.30	0.61
1:A:473:ILE:HA	1:A:476:ASP:HB3	1.82	0.61
1:A:2311:TRP:O	1:A:2315:GLN:HG2	2.00	0.61
1:A:2340:ASN:HA	1:A:2353:ILE:HG12	1.82	0.61
2:B:238:LEU:HG	2:B:242:LYS:HE3	1.82	0.61
3:C:410:GLN:HB2	3:C:472:LYS:CE	2.30	0.61
1:A:135:LYS:NZ	1:A:173:LYS:O	2.32	0.61
1:A:412:ILE:HG22	1:A:453:LEU:HD11	1.82	0.61
1:A:176:ILE:HG23	1:A:177:GLN:OE1	2.01	0.61
1:A:490:GLN:HA	3:C:381:PRO:HG2	1.81	0.61
1:A:891:GLN:HB3	1:A:894:ASP:HB3	1.82	0.61

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:221:ILE:HD13	3:C:279:LEU:HD22	1.82	0.61
3:C:312:PHE:HE1	3:C:318:VAL:HG11	1.65	0.61
1:A:360:LEU:HD13	1:A:361:LEU:N	2.16	0.61
1:A:554:SER:OG	1:A:608:LYS:HG2	1.99	0.61
1:A:571:GLU:OE2	3:C:453:LEU:HB3	2.01	0.61
1:A:920:ALA:HA	1:A:923:PHE:CD2	2.36	0.61
1:A:994:MET:HA	1:A:2390:GLY:O	2.00	0.61
1:A:646:LEU:HG	1:A:674:ARG:O	2.00	0.61
1:A:852:ALA:HB3	1:A:853:PRO:HD3	1.81	0.61
1:A:898:GLN:NE2	1:A:2212:THR:OG1	2.32	0.61
1:A:1336:ARG:CB	1:A:1337:LEU:HA	2.21	0.61
1:A:2099:LEU:HD13	1:A:2102:MET:SD	2.40	0.61
2:B:419:GLU:O	2:B:423:SER:OG	2.12	0.61
1:A:131:LYS:NZ	1:A:159:GLU:HB3	2.15	0.61
1:A:618:LEU:CD1	1:A:648:ILE:HD12	2.30	0.61
1:A:720:LYS:HE3	1:A:2346:THR:HG21	1.81	0.61
1:A:897:ASP:HB2	1:A:2299:GLU:OE1	2.00	0.61
2:B:309:TYR:O	2:B:313:ARG:HG2	2.00	0.61
3:C:498:TYR:CZ	3:C:502:ILE:HD11	2.35	0.61
1:A:113:VAL:O	1:A:117:GLU:HG3	2.01	0.61
1:A:171:GLN:HG2	1:A:175:PHE:CE1	2.36	0.61
1:A:387:ASP:C	1:A:390:PRO:HD2	2.20	0.61
1:A:1086:PRO:CB	1:A:1090:GLN:HB3	2.31	0.61
1:A:1335:LEU:HD23	1:A:1335:LEU:H	1.64	0.61
1:A:1350:SER:O	1:A:1354:LEU:HB2	2.00	0.61
2:B:268:LEU:HD22	2:B:335:PHE:HB3	1.82	0.61
1:A:115:SER:HA	1:A:155:ARG:NH1	2.14	0.61
1:A:295:LYS:CA	1:A:296:CYS:HB3	2.31	0.61
1:A:2170:LEU:HD11	1:A:2355:TYR:HE2	1.65	0.61
2:B:456:TYR:O	2:B:460:ILE:N	2.31	0.61
1:A:411:SER:CB	1:A:435:ARG:H	2.13	0.61
1:A:769:LEU:CD1	3:C:265:ILE:HD11	2.30	0.61
1:A:803:ARG:HG2	1:A:804:VAL:H	1.66	0.61
1:A:1629:TRP:O	1:A:1633:VAL:HG23	2.00	0.61
1:A:1938:SER:CA	1:A:1945:VAL:HG11	2.29	0.61
1:A:2092:LEU:CB	1:A:2100:ALA:HB2	2.31	0.61
2:B:63:GLU:HG3	2:B:270:GLN:NE2	2.16	0.61
3:C:403:LYS:CB	3:C:421:PHE:HB2	2.31	0.61
1:A:275:LEU:HB2	1:A:276:VAL:CA	2.30	0.60
1:A:866:ILE:HA	1:A:1295:ARG:HH21	1.64	0.60
1:A:1071:VAL:O	1:A:1072:THR:OG1	2.16	0.60

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2055:LEU:HD13	1:A:2070:PRO:CD	2.31	0.60
2:B:497:GLU:O	2:B:501:GLN:HG2	2.01	0.60
1:A:91:ASN:OD1	1:A:92:GLY:N	2.30	0.60
1:A:251:LEU:HD23	1:A:251:LEU:H	1.65	0.60
1:A:294:CYS:O	1:A:296:CYS:HB3	2.01	0.60
1:A:1070:GLU:OE1	1:A:1070:GLU:N	2.33	0.60
1:A:2245:ILE:HB	1:A:2246:VAL:O	2.01	0.60
1:A:497:ILE:HG13	2:B:355:LEU:CD1	2.31	0.60
1:A:1468:LYS:O	1:A:1472:GLN:HG3	2.00	0.60
1:A:1502:GLU:CG	1:A:1504:LEU:HD23	2.29	0.60
1:A:1526:LEU:O	1:A:1530:LYS:HG2	2.01	0.60
1:A:1711:LEU:HD22	1:A:1712:ILE:HD12	1.83	0.60
1:A:1597:PRO:HG3	1:A:1629:TRP:CG	2.36	0.60
1:A:2125:GLY:HA3	1:A:2141:LEU:O	2.02	0.60
1:A:38:ASP:O	1:A:42:LEU:HD13	2.01	0.60
1:A:185:LEU:HD12	1:A:185:LEU:O	2.01	0.60
1:A:455:ALA:HB2	2:B:355:LEU:HD21	1.82	0.60
1:A:1589:THR:HA	1:A:1593:GLY:HA3	1.83	0.60
1:A:2280:MET:HA	1:A:2283:VAL:HG12	1.83	0.60
1:A:269:PHE:HE1	1:A:310:ILE:HG12	1.66	0.60
1:A:326:HIS:O	1:A:330:THR:N	2.29	0.60
1:A:2323:VAL:HA	1:A:2400:LEU:CD2	2.31	0.60
1:A:571:GLU:HG2	3:C:457:LEU:CD2	2.32	0.60
1:A:739:ALA:N	1:A:830:LEU:HD22	2.16	0.60
1:A:740:VAL:HG11	1:A:752:PHE:CE1	2.36	0.60
1:A:820:LEU:HD22	1:A:886:LEU:CB	2.21	0.60
2:B:202:TYR:OH	2:B:452:ALA:HB1	2.01	0.60
3:C:389:LEU:O	3:C:393:GLN:HG2	2.00	0.60
1:A:573:THR:HB	1:A:613:PHE:CZ	2.36	0.60
1:A:637:THR:HB	1:A:638:VAL:C	2.22	0.60
1:A:751:LEU:HD22	3:C:174:PRO:CG	2.27	0.60
3:C:212:LEU:HD11	3:C:327:ASP:OD2	2.02	0.60
1:A:1025:ASP:OD1	1:A:1026:TRP:N	2.35	0.60
1:A:1338:SER:HB3	1:A:1401:MET:CE	2.29	0.60
1:A:2296:LEU:HD13	1:A:2383:LEU:HD11	1.84	0.60
2:B:49:VAL:HG21	2:B:448:TRP:NE1	2.16	0.60
2:B:220:ASP:HB3	2:B:223:TYR:HD2	1.66	0.60
2:B:441:GLU:O	2:B:443:PRO:HD3	2.02	0.60
3:C:328:LEU:O	3:C:328:LEU:HD23	2.01	0.60
1:A:1816:THR:H	1:A:1817:ALA:HB2	1.67	0.59
1:A:2069:ILE:HG13	1:A:2070:PRO:CD	2.28	0.59

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:181:PRO:HG2	2:B:184:GLU:OE1	2.02	0.59
2:B:238:LEU:CD1	2:B:242:LYS:HE3	2.32	0.59
1:A:2043:ASN:O	1:A:2047:ALA:HB2	2.01	0.59
1:A:2092:LEU:O	1:A:2097:PRO:HA	2.03	0.59
1:A:2181:ASN:C	1:A:2182:ARG:HD2	2.22	0.59
1:A:2325:SER:CB	1:A:2374:ARG:HG3	2.32	0.59
3:C:216:GLY:HA2	4:C:601:GTP:PA	2.42	0.59
1:A:131:LYS:HE3	1:A:159:GLU:OE1	2.02	0.59
1:A:618:LEU:CD1	1:A:648:ILE:HG23	2.30	0.59
1:A:1074:MET:HA	1:A:1077:VAL:HB	1.83	0.59
1:A:2102:MET:HE3	1:A:2105:THR:HG21	1.84	0.59
1:A:2325:SER:OG	1:A:2374:ARG:HG3	2.02	0.59
2:B:301:GLN:O	2:B:305:GLU:HG3	2.01	0.59
2:B:503:ALA:HB2	2:B:538:HIS:CD2	2.37	0.59
1:A:241:SER:O	1:A:245:LYS:HG2	2.03	0.59
1:A:1502:GLU:HB3	1:A:1504:LEU:H	1.67	0.59
1:A:2167:MET:CE	1:A:2193:TYR:HB3	2.32	0.59
1:A:2169:PHE:O	1:A:2173:VAL:HG23	2.02	0.59
2:B:134:ASP:HB3	2:B:165:ALA:HA	1.83	0.59
2:B:220:ASP:HB3	2:B:223:TYR:CD2	2.37	0.59
2:B:546:LYS:O	2:B:550:GLN:HG3	2.01	0.59
3:C:183:LEU:O	3:C:191:CYS:N	2.34	0.59
3:C:345:PRO:CG	3:C:486:SER:HB2	2.21	0.59
1:A:112:ASN:OD1	1:A:113:VAL:N	2.35	0.59
1:A:261:GLU:HB3	1:A:303:VAL:HG22	1.85	0.59
1:A:269:PHE:CE1	1:A:310:ILE:HG12	2.38	0.59
2:B:512:GLN:CB	2:B:557:LYS:HE3	2.32	0.59
1:A:1942:PRO:O	1:A:1946:LEU:HD23	2.02	0.59
1:A:1945:VAL:O	1:A:1949:GLN:HG3	2.02	0.59
1:A:2195:VAL:CA	1:A:2205:ILE:HG22	2.31	0.59
2:B:155:SER:HB2	2:B:196:GLN:CG	2.32	0.59
3:C:410:GLN:NE2	3:C:464:PRO:HB3	2.17	0.59
1:A:511:ILE:CD1	1:A:576:LEU:HD11	2.33	0.59
1:A:1313:TRP:CB	1:A:1354:LEU:HD11	2.32	0.59
1:A:1648:ARG:HB2	1:A:1667:GLU:OE1	2.02	0.59
1:A:2420:ASP:N	1:A:2421:PRO:HD3	2.18	0.59
1:A:2421:PRO:HG2	1:A:2424:ASP:HB3	1.85	0.59
1:A:602:PHE:CB	1:A:603:ASN:HA	2.32	0.59
1:A:2089:ILE:CG1	1:A:2128:ILE:HG13	2.33	0.59
2:B:234:ARG:NH1	2:B:238:LEU:HD13	2.17	0.59
2:B:503:ALA:HB2	2:B:538:HIS:HD2	1.67	0.59

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:193:LEU:HD12	1:A:194:ALA:N	2.18	0.59
1:A:715:GLY:O	1:A:719:LYS:HG3	2.03	0.59
1:A:838:ILE:HG23	1:A:918:TRP:CE2	2.38	0.59
1:A:893:LEU:HD12	1:A:894:ASP:N	2.17	0.59
1:A:207:LEU:CB	1:A:209:GLU:HG2	2.33	0.59
1:A:772:ASP:OD2	3:C:482:ARG:HG2	2.02	0.59
1:A:939:THR:HG23	1:A:2301:TRP:HE1	1.67	0.59
1:A:2285:GLU:O	1:A:2289:GLU:HG2	2.03	0.59
1:A:2390:GLY:N	1:A:2394:LEU:HD13	2.09	0.59
1:A:207:LEU:HA	1:A:208:GLN:C	2.23	0.58
1:A:382:GLU:OE2	2:B:75:GLN:NE2	2.35	0.58
1:A:737:GLU:O	1:A:740:VAL:HG22	2.02	0.58
1:A:358:THR:O	1:A:398:LEU:HD22	2.02	0.58
1:A:360:LEU:O	1:A:401:LEU:HD22	2.04	0.58
1:A:496:TYR:CE2	3:C:460:TYR:HB2	2.37	0.58
1:A:656:HIS:N	1:A:660:ILE:HD11	2.16	0.58
1:A:719:LYS:HG2	1:A:1307:ILE:HG21	1.83	0.58
2:B:250:VAL:HB	2:B:254:TRP:CE3	2.38	0.58
2:B:296:PRO:HB3	3:C:246:LYS:HD2	1.84	0.58
1:A:720:LYS:HE3	1:A:2346:THR:CG2	2.33	0.58
1:A:1947:GLN:O	1:A:1951:LEU:HG	2.03	0.58
1:A:2276:PRO:CG	1:A:2280:MET:HG3	2.33	0.58
2:B:42:TRP:HB2	2:B:45:ASP:CG	2.24	0.58
2:B:333:GLN:N	2:B:333:GLN:OE1	2.37	0.58
3:C:408:MET:HA	3:C:408:MET:CE	2.32	0.58
1:A:148:ARG:C	1:A:153:LEU:HD22	2.23	0.58
1:A:153:LEU:HD23	1:A:187:LYS:NZ	2.17	0.58
1:A:163:ASP:HA	1:A:170:LYS:CE	2.27	0.58
1:A:275:LEU:HD13	1:A:277:MET:HG2	1.85	0.58
1:A:811:THR:CA	1:A:814:ARG:HG2	2.26	0.58
1:A:1656:LEU:C	1:A:1658:PRO:HD2	2.24	0.58
1:A:1787:MET:CB	1:A:2410:LEU:HG	2.34	0.58
3:C:298:THR:O	3:C:302:MET:HG2	2.03	0.58
3:C:407:SER:O	3:C:408:MET:HE3	2.02	0.58
3:C:476:GLN:O	3:C:480:MET:HG2	2.03	0.58
1:A:43:LYS:O	1:A:99:TYR:OH	2.13	0.58
1:A:1021:GLN:NE2	1:A:1054:LEU:HB2	2.18	0.58
2:B:157:CYS:SG	2:B:196:GLN:NE2	2.73	0.58
3:C:312:PHE:HA	3:C:365:PRO:HG3	1.83	0.58
3:C:486:SER:HB3	3:C:498:TYR:OH	2.04	0.58
1:A:82:ASN:HA	1:A:85:LYS:HE2	1.86	0.58

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:131:LYS:HE3	1:A:159:GLU:HB3	1.85	0.58
1:A:634:LEU:HD23	1:A:634:LEU:O	2.02	0.58
1:A:1514:SER:OG	1:A:1530:LYS:HE3	2.03	0.58
1:A:2042:ASP:HA	1:A:2046:ASP:HB3	1.85	0.58
1:A:2342:LEU:HB2	1:A:2351:VAL:HG22	1.85	0.58
2:B:233:LEU:HD11	2:B:486:GLU:OE2	2.02	0.58
2:B:494:LYS:HD2	3:C:518:LEU:HD22	1.86	0.58
1:A:870:LEU:CB	1:A:1298:VAL:HG11	2.33	0.58
1:A:1292:GLN:HB3	1:A:1322:LYS:HD3	1.86	0.58
1:A:1753:THR:HB	1:A:1792:LEU:HD21	1.84	0.58
1:A:1324:LEU:HD11	1:A:1339:THR:CG2	2.33	0.58
1:A:2129:THR:O	1:A:2138:LYS:HA	2.04	0.58
1:A:2366:ARG:O	1:A:2367:VAL:HG23	2.03	0.58
2:B:59:ARG:HH12	3:C:375:ARG:HG3	1.68	0.58
1:A:769:LEU:HD22	3:C:263:GLU:CB	2.33	0.58
1:A:841:ILE:HD13	1:A:882:TRP:HZ3	1.69	0.58
1:A:1509:ILE:HB	1:A:1598:ASP:CG	2.24	0.58
1:A:2168:GLN:O	1:A:2172:ILE:HG12	2.02	0.58
1:A:2216:GLY:O	1:A:2220:ARG:HG2	2.04	0.58
2:B:547:TYR:O	2:B:551:LEU:HG	2.04	0.58
1:A:406:SER:HB3	1:A:410:ARG:CZ	2.34	0.58
1:A:675:HIS:H	1:A:676:ASP:CB	2.17	0.58
1:A:736:LEU:HD12	3:C:201:GLN:HB2	1.86	0.58
1:A:1323:TYR:O	1:A:1326:GLN:HG2	2.04	0.58
1:A:2248:ARG:CB	1:A:2251:GLU:HG2	2.34	0.58
1:A:2387:GLY:C	1:A:2391:VAL:HG21	2.25	0.58
2:B:540:ARG:NH1	3:C:364:TYR:OH	2.37	0.58
3:C:325:PHE:CE1	3:C:391:ILE:HD11	2.35	0.58
1:A:544:VAL:O	1:A:548:VAL:HG23	2.04	0.57
1:A:1856:ILE:HB	1:A:1859:PRO:CG	2.33	0.57
1:A:2128:ILE:HG22	1:A:2140:LEU:CB	2.32	0.57
1:A:2166:ILE:HG21	1:A:2355:TYR:HD2	1.68	0.57
1:A:2169:PHE:CE1	1:A:2411:LEU:HD22	2.39	0.57
2:B:491:ILE:HG23	3:C:518:LEU:HB3	1.86	0.57
1:A:805:GLN:HG3	1:A:806:LEU:H	1.69	0.57
1:A:2138:LYS:O	1:A:2153:LEU:HA	2.04	0.57
1:A:2365:LEU:HB3	1:A:2367:VAL:N	2.19	0.57
1:A:328:ASP:O	1:A:332:LYS:HG3	2.05	0.57
1:A:402:LEU:O	1:A:402:LEU:HD23	2.04	0.57
1:A:569:LEU:O	1:A:573:THR:HG23	2.05	0.57
1:A:1289:ILE:HG22	1:A:1293:LEU:CD2	2.35	0.57

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1368:LEU:HD12	1:A:1368:LEU:O	2.05	0.57
1:A:1619:TRP:HB2	1:A:1756:LYS:HB2	1.84	0.57
1:A:1648:ARG:O	1:A:1652:GLU:HG3	2.04	0.57
1:A:2323:VAL:O	1:A:2327:VAL:HG23	2.04	0.57
2:B:48:CYS:SG	2:B:148:VAL:HG22	2.45	0.57
2:B:221:ILE:CG2	3:C:274:LEU:HB3	2.34	0.57
3:C:318:VAL:HB	3:C:367:LEU:HD23	1.86	0.57
1:A:69:GLN:HG3	1:A:102:LYS:HG2	1.86	0.57
1:A:675:HIS:CA	1:A:676:ASP:HB2	2.34	0.57
1:A:727:THR:HG22	1:A:899:SER:O	2.05	0.57
1:A:885:ARG:HA	1:A:888:TYR:CD2	2.39	0.57
3:C:312:PHE:CD1	3:C:318:VAL:HG21	2.39	0.57
1:A:141:MET:HE1	1:A:146:GLU:N	2.19	0.57
1:A:746:GLU:CD	1:A:747:THR:HG23	2.25	0.57
1:A:1307:ILE:HB	1:A:2306:THR:HG21	1.86	0.57
1:A:1346:LEU:HD22	1:A:1349:LEU:CD1	2.34	0.57
1:A:1845:LEU:O	1:A:1848:VAL:HG22	2.05	0.57
3:C:383:LYS:O	3:C:387:MET:HG3	2.05	0.57
1:A:190:ASP:HA	1:A:193:LEU:CD2	2.35	0.57
1:A:660:ILE:O	1:A:664:VAL:HG23	2.04	0.57
1:A:2023:HIS:O	1:A:2027:ILE:HG12	2.04	0.57
1:A:2042:ASP:HA	1:A:2046:ASP:CB	2.35	0.57
3:C:244:GLU:HA	3:C:247:GLU:CG	2.33	0.57
3:C:427:ASN:OD1	3:C:469:LEU:HD12	2.04	0.57
1:A:295:LYS:HD2	1:A:297:VAL:CG2	2.34	0.57
1:A:309:HIS:O	1:A:313:THR:OG1	2.17	0.57
1:A:419:ILE:HD13	1:A:441:THR:H	1.70	0.57
1:A:449:SER:O	1:A:453:LEU:HG	2.05	0.57
1:A:978:LEU:O	1:A:982:LEU:HG	2.05	0.57
1:A:194:ALA:HA	1:A:197:HIS:CE1	2.40	0.57
1:A:220:LEU:HD23	1:A:270:SER:OG	2.05	0.57
1:A:290:PRO:HA	1:A:294:CYS:SG	2.44	0.57
1:A:566:LYS:NZ	1:A:620:THR:HG23	2.20	0.57
1:A:1827:PHE:CZ	1:A:1859:PRO:HB2	2.40	0.57
1:A:110:VAL:O	1:A:146:GLU:HG3	2.04	0.57
1:A:244:ALA:HB1	1:A:290:PRO:HB2	1.86	0.57
1:A:1296:SER:HB2	1:A:1322:LYS:HE3	1.87	0.57
1:A:1410:ILE:HG21	1:A:1424:LEU:CD2	2.33	0.57
1:A:1502:GLU:CB	1:A:1504:LEU:HB2	2.33	0.57
1:A:1751:TYR:O	1:A:1755:LEU:HG	2.04	0.57
1:A:2129:THR:HG22	1:A:2131:LEU:H	1.69	0.57

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2277:LEU:CA	1:A:2278:HIS:HB3	2.34	0.57
1:A:2330:ILE:HD12	1:A:2404:ARG:NH1	2.16	0.57
2:B:546:LYS:O	2:B:550:GLN:N	2.37	0.57
3:C:244:GLU:HG3	3:C:248:ARG:HH22	1.70	0.57
3:C:386:GLN:O	3:C:390:MET:HG3	2.05	0.57
1:A:336:THR:HA	1:A:342:TRP:HZ2	1.69	0.57
1:A:1071:VAL:HG11	1:A:1074:MET:CG	2.31	0.57
1:A:1422:MET:O	1:A:1426:LEU:HG	2.05	0.57
1:A:1666:LYS:HZ1	1:A:1713:SER:H	1.52	0.57
1:A:1981:ILE:HG12	1:A:2067:SER:HA	1.87	0.57
1:A:2317:TYR:OH	1:A:2383:LEU:HD12	2.05	0.57
3:C:220:VAL:HG11	3:C:370:LEU:CD1	2.35	0.57
1:A:237:PHE:HA	1:A:240:PHE:CB	2.33	0.56
1:A:842:SER:HB2	1:A:918:TRP:HE1	1.70	0.56
1:A:1402:TYR:O	1:A:1406:LEU:HD13	2.05	0.56
1:A:2342:LEU:O	1:A:2350:VAL:HG13	2.05	0.56
2:B:67:LEU:O	2:B:71:VAL:HG23	2.05	0.56
2:B:208:HIS:O	2:B:263:PRO:HA	2.05	0.56
3:C:364:TYR:O	3:C:401:ARG:NH1	2.38	0.56
1:A:336:THR:HA	1:A:342:TRP:CZ2	2.41	0.56
1:A:494:THR:HA	1:A:497:ILE:HG22	1.87	0.56
1:A:496:TYR:O	1:A:500:VAL:HG23	2.06	0.56
1:A:645:ASN:HB3	1:A:666:TYR:CE2	2.41	0.56
1:A:1820:ARG:CB	1:A:1848:VAL:HB	2.34	0.56
1:A:1978:LEU:O	1:A:1982:GLN:HG3	2.05	0.56
2:B:311:ILE:HG12	3:C:279:LEU:HD23	1.87	0.56
1:A:131:LYS:CE	1:A:159:GLU:HB3	2.36	0.56
1:A:300:ILE:CG2	1:A:302:LEU:HG	2.35	0.56
1:A:412:ILE:CG2	1:A:453:LEU:HD11	2.35	0.56
1:A:817:PHE:CE2	1:A:821:LEU:HD11	2.40	0.56
1:A:982:LEU:HD12	1:A:992:LYS:HG2	1.87	0.56
1:A:989:ASN:OD1	1:A:990:LEU:HD12	2.04	0.56
1:A:1186:LEU:HD13	1:A:1199:ASP:CB	2.35	0.56
1:A:1673:LEU:HD21	1:A:1708:TRP:CD1	2.35	0.56
1:A:2408:GLU:O	1:A:2412:THR:HG23	2.04	0.56
2:B:254:TRP:CZ2	2:B:260:PRO:HG3	2.39	0.56
3:C:409:LEU:HD21	3:C:476:GLN:NE2	2.20	0.56
2:B:41:PRO:HB2	2:B:42:TRP:CE3	2.40	0.56
1:A:136:SER:HA	1:A:139:ARG:HG2	1.88	0.56
1:A:188:GLN:HG3	1:A:226:SER:HB2	1.86	0.56
1:A:851:LYS:HE3	1:A:856:THR:H	1.70	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:4:PRO:HA	2:B:140:ALA:O	2.05	0.56
1:A:1478:LYS:O	1:A:1481:PRO:HD2	2.05	0.56
1:A:100:GLY:HA2	1:A:133:MET:HE2	1.88	0.56
1:A:417:SER:O	1:A:420:ARG:HG2	2.06	0.56
1:A:1349:LEU:HD23	1:A:1355:TYR:CE1	2.40	0.56
1:A:1349:LEU:HB3	1:A:1355:TYR:HE1	1.70	0.56
1:A:2301:TRP:HA	1:A:2310:TRP:CD1	2.40	0.56
1:A:2366:ARG:HA	1:A:2366:ARG:NE	2.21	0.56
2:B:271:LEU:HG	2:B:336:VAL:HG12	1.87	0.56
2:B:445:TYR:CZ	2:B:449:ILE:HD11	2.41	0.56
1:A:104:LEU:HD21	1:A:133:MET:CA	2.35	0.56
1:A:420:ARG:O	1:A:423:PRO:HG2	2.06	0.56
1:A:435:ARG:HG3	1:A:436:VAL:N	2.18	0.56
1:A:642:LEU:O	1:A:646:LEU:HD23	2.06	0.56
2:B:134:ASP:O	2:B:192:GLN:NE2	2.38	0.56
2:B:547:TYR:CZ	2:B:551:LEU:HD11	2.40	0.56
3:C:367:LEU:HD11	3:C:400:LEU:HD23	1.86	0.56
1:A:104:LEU:HD21	1:A:133:MET:CB	2.36	0.56
1:A:419:ILE:O	1:A:422:PRO:HD2	2.05	0.56
1:A:488:ASN:CB	1:A:495:ASP:HB2	2.36	0.56
1:A:772:ASP:O	1:A:774:ASN:HA	2.06	0.56
1:A:905:LEU:HD12	1:A:906:LEU:N	2.21	0.56
1:A:1026:TRP:O	1:A:1030:ILE:HG13	2.05	0.56
1:A:1086:PRO:CB	1:A:1092:ILE:HG12	2.29	0.56
1:A:1832:HIS:CD2	1:A:1837:VAL:HG21	2.40	0.56
1:A:2053:GLU:OE1	1:A:2057:THR:OG1	2.14	0.56
1:A:2320:SER:O	1:A:2323:VAL:HG22	2.05	0.56
2:B:139:GLN:HG3	2:B:152:LEU:HG	1.88	0.56
2:B:311:ILE:HG23	3:C:297:HIS:HE1	1.71	0.56
2:B:315:SER:HB2	3:C:297:HIS:NE2	2.20	0.56
3:C:380:CYS:O	3:C:384:LEU:HD23	2.06	0.56
1:A:388:VAL:C	1:A:391:PRO:HD2	2.25	0.56
1:A:404:VAL:O	1:A:408:VAL:HG23	2.06	0.56
1:A:433:LEU:CD2	1:A:471:MET:HG2	2.26	0.56
1:A:992:LYS:HD2	1:A:1016:PHE:CB	2.35	0.56
1:A:1054:LEU:HD13	1:A:1415:VAL:CG2	2.35	0.56
1:A:2073:GLU:OE1	1:A:2073:GLU:N	2.35	0.56
1:A:2176:MET:HE3	1:A:2407:ARG:HB2	1.88	0.56
1:A:2277:LEU:CB	1:A:2278:HIS:HB3	2.36	0.56
2:B:248:CYS:HB2	2:B:255:LYS:HZ3	1.71	0.56
3:C:278:ILE:O	3:C:282:LEU:HG	2.06	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:380:SER:CA	2:B:350:MET:HE1	2.36	0.55
1:A:730:LEU:CD1	1:A:771:GLU:HB3	2.35	0.55
1:A:1655:ASN:HB2	1:A:1663:GLU:OE2	2.06	0.55
2:B:267:PHE:O	2:B:268:LEU:HD23	2.06	0.55
1:A:262:THR:N	1:A:303:VAL:HG21	2.20	0.55
1:A:506:LEU:HD22	1:A:549:TYR:CZ	2.41	0.55
1:A:1412:GLU:HA	1:A:1413:GLN:O	2.06	0.55
3:C:332:ARG:O	3:C:336:THR:HG23	2.07	0.55
1:A:230:GLU:O	1:A:234:LYS:HG3	2.06	0.55
1:A:346:LEU:HA	1:A:349:PHE:CD1	2.40	0.55
1:A:937:GLN:O	1:A:941:GLN:N	2.31	0.55
1:A:1090:GLN:HG3	1:A:1091:GLY:H	1.71	0.55
3:C:302:MET:O	3:C:306:GLN:HG3	2.06	0.55
1:A:88:TYR:O	1:A:96:GLU:HG2	2.07	0.55
1:A:508:VAL:HG23	1:A:509:GLU:CD	2.27	0.55
1:A:573:THR:HB	1:A:613:PHE:HZ	1.72	0.55
1:A:822:LYS:HZ3	1:A:829:VAL:N	2.04	0.55
1:A:1082:GLU:O	1:A:1087:GLU:HB2	2.06	0.55
1:A:1532:ILE:HG13	1:A:1607:LEU:CD2	2.36	0.55
1:A:2323:VAL:HA	1:A:2400:LEU:HD22	1.86	0.55
1:A:2365:LEU:CA	1:A:2366:ARG:CB	2.84	0.55
2:B:247:ASP:O	2:B:454:LYS:NZ	2.39	0.55
3:C:212:LEU:CD2	3:C:330:LEU:HD21	2.36	0.55
1:A:386:GLU:O	1:A:389:PRO:HD2	2.06	0.55
1:A:2387:GLY:H	1:A:2391:VAL:HG11	1.71	0.55
2:B:311:ILE:HG23	3:C:297:HIS:CE1	2.41	0.55
3:C:378:ASP:HA	3:C:387:MET:HE3	1.88	0.55
1:A:85:LYS:NZ	1:A:113:VAL:HG13	2.22	0.55
1:A:199:VAL:CG1	1:A:263:VAL:HG22	2.36	0.55
1:A:213:GLU:OE1	1:A:213:GLU:N	2.35	0.55
1:A:294:CYS:C	1:A:296:CYS:HB3	2.27	0.55
1:A:390:PRO:HB3	1:A:456:ALA:HB1	1.89	0.55
1:A:645:ASN:O	1:A:649:VAL:HG23	2.06	0.55
1:A:1032:LEU:HA	1:A:1035:MET:CE	2.36	0.55
1:A:1704:VAL:HA	1:A:1707:ILE:HD12	1.88	0.55
1:A:2320:SER:O	1:A:2324:MET:HG2	2.06	0.55
2:B:161:GLN:OE1	2:B:164:ARG:NH2	2.33	0.55
1:A:159:GLU:HA	1:A:162:ARG:HG2	1.89	0.55
1:A:350:TRP:NE1	1:A:354:LEU:HD11	2.22	0.55
1:A:365:LEU:CD2	1:A:401:LEU:HG	2.36	0.55
1:A:1521:VAL:HG13	1:A:1522:ALA:CB	2.35	0.55

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1600:ILE:O	1:A:1604:LEU:HG	2.07	0.55
1:A:2163:ASP:O	1:A:2167:MET:HG2	2.07	0.55
1:A:2165:ARG:HG3	1:A:2418:VAL:HG13	1.89	0.55
1:A:2409:THR:HA	1:A:2412:THR:OG1	2.07	0.55
2:B:72:CYS:HB2	2:B:74:ARG:NH1	2.22	0.55
1:A:350:TRP:HE3	1:A:392:SER:HB3	1.70	0.55
1:A:1018:THR:HG21	1:A:1084:HIS:CE1	2.42	0.55
1:A:648:ILE:HD13	1:A:714:LEU:CG	2.36	0.55
1:A:675:HIS:HB2	1:A:676:ASP:CG	2.28	0.55
1:A:1645:LEU:O	1:A:1648:ARG:HG2	2.07	0.55
1:A:1746:LEU:HD13	1:A:1795:LEU:CD1	2.37	0.55
3:C:209:VAL:HG22	3:C:269:ASP:HA	1.89	0.55
1:A:489:CYS:HA	3:C:412:ASN:HD22	1.72	0.54
1:A:497:ILE:O	1:A:501:LEU:HG	2.07	0.54
1:A:2292:PRO:HG2	1:A:2295:LEU:HD21	1.88	0.54
1:A:2398:GLN:O	1:A:2402:ILE:HG13	2.07	0.54
2:B:259:ARG:HE	2:B:262:PRO:HA	1.71	0.54
3:C:188:MET:HB2	3:C:507:ARG:HH12	1.71	0.54
1:A:137:GLN:O	1:A:141:MET:HG3	2.07	0.54
1:A:389:PRO:HA	1:A:392:SER:OG	2.08	0.54
1:A:748:TYR:HA	1:A:875:HIS:HE1	1.72	0.54
1:A:1334:PRO:HG2	1:A:1335:LEU:HD23	1.88	0.54
1:A:2053:GLU:HB2	1:A:2057:THR:OG1	2.07	0.54
1:A:2141:LEU:HD13	1:A:2151:PRO:CA	2.38	0.54
1:A:2330:ILE:CD1	1:A:2404:ARG:HD2	2.37	0.54
2:B:72:CYS:SG	2:B:74:ARG:HG2	2.47	0.54
2:B:508:HIS:CE1	2:B:550:GLN:HB3	2.43	0.54
1:A:410:ARG:HH12	1:A:471:MET:H	1.54	0.54
1:A:476:ASP:HA	1:A:479:ILE:HG22	1.88	0.54
1:A:730:LEU:H	1:A:730:LEU:CD2	2.20	0.54
1:A:1184:ASN:N	1:A:1292:GLN:OE1	2.39	0.54
2:B:414:LEU:O	2:B:418:VAL:HG23	2.07	0.54
3:C:231:GLU:HG2	3:C:235:THR:OG1	2.07	0.54
3:C:313:THR:CG2	3:C:341:LYS:HG2	2.37	0.54
1:A:117:GLU:CD	1:A:134:ARG:HG3	2.27	0.54
1:A:190:ASP:HA	1:A:193:LEU:CG	2.37	0.54
1:A:2414:LEU:O	1:A:2418:VAL:HG23	2.07	0.54
2:B:59:ARG:HA	3:C:377:GLU:OE1	2.06	0.54
2:B:552:HIS:HB3	2:B:556:TYR:CE2	2.43	0.54
3:C:212:LEU:HD21	3:C:330:LEU:HD21	1.90	0.54
3:C:473:LEU:O	3:C:477:VAL:HG23	2.07	0.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:117:GLU:OE1	1:A:134:ARG:HG3	2.07	0.54
1:A:216:CYS:O	1:A:220:LEU:HG	2.08	0.54
1:A:994:MET:CB	1:A:2391:VAL:HA	2.38	0.54
3:C:218:SER:N	4:C:601:GTP:O1B	2.40	0.54
1:A:188:GLN:HE22	1:A:192:ILE:HD11	1.72	0.54
1:A:424:ILE:O	1:A:425:THR:OG1	2.21	0.54
1:A:869:ILE:HB	1:A:1295:ARG:NH1	2.23	0.54
1:A:1022:THR:HG23	1:A:1025:ASP:H	1.72	0.54
1:A:1103:ASN:ND2	1:A:1109:SER:HB2	2.20	0.54
1:A:1207:GLN:HG2	1:A:1289:ILE:CG1	2.37	0.54
1:A:1650:LYS:HG3	1:A:1654:GLN:NE2	2.22	0.54
1:A:1845:LEU:HA	1:A:1848:VAL:HG22	1.89	0.54
1:A:1983:GLN:O	1:A:1987:GLU:HG3	2.07	0.54
2:B:491:ILE:CD1	3:C:519:LEU:HD23	2.38	0.54
1:A:1927:GLN:OE1	1:A:1927:GLN:N	2.33	0.54
1:A:2038:LYS:O	1:A:2041:GLN:HG3	2.07	0.54
1:A:69:GLN:HB2	1:A:102:LYS:NZ	2.23	0.54
1:A:117:GLU:HG2	1:A:130:THR:OG1	2.08	0.54
1:A:164:ARG:O	1:A:201:ASN:ND2	2.41	0.54
1:A:1753:THR:O	1:A:1757:LEU:HG	2.08	0.54
1:A:1824:PRO:HD2	1:A:2168:GLN:NE2	2.22	0.54
2:B:547:TYR:CE2	2:B:551:LEU:HD11	2.43	0.54
1:A:773:VAL:HG23	3:C:479:SER:HB3	1.89	0.54
1:A:1350:SER:OG	1:A:1354:LEU:HD23	2.08	0.54
1:A:1415:VAL:N	1:A:1416:PRO:HD3	2.22	0.54
1:A:2296:LEU:HD13	1:A:2383:LEU:CD1	2.38	0.54
2:B:244:ALA:CB	2:B:458:VAL:HG21	2.38	0.54
2:B:458:VAL:HG12	2:B:479:LEU:CD2	2.38	0.54
1:A:1984:LEU:O	1:A:1988:VAL:HG23	2.07	0.54
1:A:2099:LEU:HA	1:A:2102:MET:HG2	1.90	0.54
1:A:2228:LEU:O	1:A:2228:LEU:HD23	2.07	0.54
1:A:2292:PRO:HG2	1:A:2295:LEU:CD2	2.37	0.54
2:B:416:GLN:HG3	2:B:417:HIS:CD2	2.44	0.54
1:A:342:TRP:O	1:A:346:LEU:HG	2.08	0.53
1:A:550:GLN:HB2	1:A:605:ASP:HB3	1.90	0.53
1:A:1091:GLY:HA2	1:A:1120:LYS:NZ	2.22	0.53
1:A:1605:TYR:HB3	1:A:1622:LEU:HB2	1.88	0.53
1:A:1973:GLN:O	1:A:1977:VAL:HG12	2.07	0.53
1:A:2092:LEU:HD12	1:A:2099:LEU:CB	2.38	0.53
1:A:2214:LEU:HG	1:A:2341:VAL:O	2.07	0.53
2:B:149:LEU:HG	2:B:151:LEU:HD21	1.89	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:190:LYS:HG3	2:B:490:ASP:OD1	2.07	0.53
3:C:221:MET:HE1	3:C:319:ILE:HD12	1.89	0.53
1:A:36:SER:HA	1:A:77:HIS:NE2	2.23	0.53
1:A:280:LEU:HB2	1:A:315:PHE:CE2	2.43	0.53
1:A:305:ARG:NH1	1:A:345:SER:HB2	2.23	0.53
1:A:982:LEU:HB2	1:A:992:LYS:HE3	1.88	0.53
1:A:1318:GLU:HA	1:A:1321:VAL:HG12	1.91	0.53
1:A:1862:VAL:HG11	1:A:2197:PRO:O	2.08	0.53
2:B:56:THR:HB	2:B:63:GLU:OE1	2.08	0.53
3:C:221:MET:HB3	3:C:238:PHE:HE2	1.74	0.53
3:C:381:PRO:HG3	3:C:414:PHE:CZ	2.44	0.53
1:A:283:ILE:O	1:A:287:VAL:HG23	2.08	0.53
1:A:904:ASN:HB3	1:A:906:LEU:HG	1.90	0.53
1:A:1096:SER:O	1:A:1100:VAL:HG23	2.08	0.53
1:A:1414:THR:OG1	1:A:1415:VAL:HB	2.08	0.53
1:A:1471:THR:O	1:A:1475:VAL:HG22	2.08	0.53
1:A:1929:CYS:O	1:A:1933:ILE:HG12	2.07	0.53
2:B:194:LYS:O	2:B:198:LEU:HG	2.07	0.53
1:A:239:LYS:O	1:A:239:LYS:HD3	2.09	0.53
1:A:365:LEU:HD23	1:A:405:PHE:CB	2.39	0.53
1:A:1281:ASP:HB2	1:A:1282:PRO:HD3	1.89	0.53
1:A:1338:SER:HB2	1:A:1339:THR:C	2.28	0.53
1:A:2326:MET:SD	1:A:2397:GLU:HB3	2.48	0.53
1:A:2326:MET:HE2	1:A:2326:MET:HA	1.90	0.53
1:A:2353:ILE:HG22	1:A:2354:ASP:N	2.24	0.53
3:C:515:TYR:CE2	3:C:519:LEU:HD21	2.43	0.53
1:A:220:LEU:HA	1:A:270:SER:OG	2.08	0.53
1:A:279:SER:O	1:A:283:ILE:HG13	2.07	0.53
1:A:1027:LEU:HD21	1:A:1085:CYS:HA	1.91	0.53
1:A:1353:GLN:O	1:A:1357:SER:HB3	2.08	0.53
1:A:1463:VAL:CG2	1:A:1470:SER:HB2	2.38	0.53
1:A:1636:ASN:O	1:A:1640:GLY:N	2.34	0.53
1:A:2045:GLY:CA	1:A:2078:LEU:HD11	2.38	0.53
2:B:190:LYS:CG	2:B:194:LYS:HE3	2.38	0.53
2:B:453:SER:O	2:B:457:GLU:HG3	2.09	0.53
2:B:523:VAL:HA	2:B:526:ASN:OD1	2.08	0.53
3:C:194:ALA:HB3	3:C:496:PHE:CE1	2.43	0.53
3:C:409:LEU:HD21	3:C:476:GLN:CG	2.38	0.53
1:A:379:ALA:CB	1:A:382:GLU:HG2	2.35	0.53
1:A:625:LYS:O	1:A:629:ILE:HG12	2.07	0.53
1:A:1117:ARG:O	1:A:1120:LYS:HG2	2.09	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2309:GLU:O	1:A:2313:VAL:HG23	2.08	0.53
1:A:2388:VAL:HG23	1:A:2389:GLU:H	1.72	0.53
3:C:177:MET:HE3	3:C:197:TYR:CB	2.38	0.53
3:C:261:THR:HG22	3:C:262:GLN:N	2.24	0.53
1:A:365:LEU:CD1	1:A:401:LEU:HD21	2.39	0.53
1:A:424:ILE:HG22	1:A:426:GLU:HG2	1.90	0.53
1:A:503:LEU:HG	3:C:454:PHE:CD1	2.44	0.53
1:A:716:ILE:HG23	1:A:720:LYS:NZ	2.24	0.53
1:A:845:LEU:HD11	1:A:883:LEU:HD11	1.90	0.53
1:A:974:GLY:O	1:A:978:LEU:HD13	2.08	0.53
1:A:1786:VAL:CG1	1:A:1823:ILE:HD11	2.30	0.53
1:A:1819:TRP:CZ2	1:A:1844:LEU:HD11	2.44	0.53
1:A:1981:ILE:CD1	1:A:2067:SER:HA	2.39	0.53
1:A:2391:VAL:HG12	1:A:2392:PHE:N	2.20	0.53
2:B:159:ASN:ND2	3:C:326:THR:HB	2.24	0.53
2:B:509:SER:HA	2:B:512:GLN:NE2	2.24	0.53
2:B:544:PHE:O	2:B:547:TYR:HB3	2.08	0.53
1:A:353:ASP:HB2	1:A:392:SER:HB2	1.90	0.53
1:A:378:VAL:N	2:B:79:LEU:HD21	2.24	0.53
1:A:566:LYS:HB2	1:A:625:LYS:HE2	1.90	0.53
1:A:633:ALA:C	1:A:636:PRO:HD2	2.29	0.53
1:A:653:LEU:HD22	1:A:664:VAL:CG2	2.39	0.53
1:A:770:VAL:HG12	1:A:771:GLU:N	2.24	0.53
1:A:1028:THR:O	1:A:1032:LEU:HG	2.08	0.53
1:A:1035:MET:HB3	1:A:1036:ARG:HA	1.91	0.53
1:A:1346:LEU:N	1:A:1347:PRO:HA	2.24	0.53
1:A:1478:LYS:CE	1:A:1532:ILE:HG12	2.34	0.53
1:A:1738:ASP:HA	1:A:1741:PHE:CE2	2.44	0.53
1:A:1988:VAL:HA	1:A:1991:VAL:HG22	1.89	0.53
1:A:2215:PHE:N	1:A:2338:LEU:HB3	2.24	0.53
2:B:478:ILE:O	2:B:482:ILE:HG12	2.09	0.53
3:C:211:GLY:O	3:C:273:ILE:HG12	2.09	0.53
3:C:270:THR:HG21	3:C:311:LEU:HD21	1.90	0.53
3:C:279:LEU:HD21	3:C:297:HIS:CE1	2.44	0.53
1:A:605:ASP:O	1:A:609:PHE:N	2.34	0.53
1:A:1463:VAL:HG11	1:A:1499:HIS:CE1	2.44	0.53
3:C:313:THR:HG22	3:C:341:LYS:CE	2.29	0.53
1:A:183:LEU:HG	1:A:184:VAL:HG13	1.91	0.53
1:A:292:LEU:HD11	1:A:327:ILE:HG13	1.91	0.53
1:A:416:PHE:HA	1:A:419:ILE:HD12	1.90	0.53
1:A:839:GLN:O	1:A:843:LEU:HG	2.09	0.53

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1138:CYS:SG	1:A:1139:ILE:N	2.82	0.53
1:A:2169:PHE:CD2	1:A:2331:ILE:HD11	2.43	0.53
1:A:2326:MET:HB2	1:A:2400:LEU:HD23	1.90	0.53
1:A:2365:LEU:CB	1:A:2366:ARG:HB3	2.39	0.53
1:A:2389:GLU:O	1:A:2391:VAL:HG23	2.09	0.53
2:B:44:GLU:OE1	2:B:44:GLU:N	2.42	0.53
2:B:504:LEU:CD1	2:B:550:GLN:HG2	2.36	0.53
3:C:466:PHE:O	3:C:470:VAL:HG23	2.09	0.53
1:A:1837:VAL:O	1:A:1841:ILE:HG13	2.09	0.52
1:A:2153:LEU:N	1:A:2205:ILE:O	2.42	0.52
1:A:2221:TRP:HA	1:A:2224:ARG:CZ	2.39	0.52
2:B:162:LEU:O	2:B:162:LEU:HD23	2.08	0.52
2:B:268:LEU:CD2	2:B:335:PHE:HB3	2.39	0.52
1:A:81:GLN:O	1:A:85:LYS:NZ	2.25	0.52
1:A:280:LEU:O	1:A:284:LEU:HD23	2.09	0.52
1:A:302:LEU:HD22	1:A:341:GLY:HA2	1.91	0.52
1:A:990:LEU:HD23	1:A:2395:SER:CB	2.38	0.52
1:A:1321:VAL:O	1:A:1325:LYS:HG2	2.09	0.52
1:A:1825:GLN:HE22	1:A:2165:ARG:HD2	1.73	0.52
2:B:155:SER:CB	2:B:196:GLN:HG3	2.37	0.52
2:B:297:LYS:HD2	2:B:336:VAL:HB	1.91	0.52
3:C:209:VAL:HG21	3:C:217:LYS:O	2.09	0.52
1:A:239:LYS:CE	1:A:243:SER:HB3	2.39	0.52
1:A:414:GLU:OE1	1:A:433:LEU:HB2	2.09	0.52
1:A:471:MET:HG3	1:A:471:MET:O	2.09	0.52
1:A:556:LYS:HA	1:A:559:PRO:HG3	1.90	0.52
1:A:805:GLN:O	1:A:807:VAL:HG22	2.10	0.52
1:A:857:PHE:CE2	1:A:1190:ALA:HB2	2.44	0.52
1:A:1035:MET:CB	1:A:1036:ARG:HA	2.38	0.52
1:A:1424:LEU:HD22	1:A:1458:THR:CG2	2.36	0.52
1:A:1856:ILE:O	1:A:1859:PRO:HD3	2.09	0.52
1:A:2335:ASP:OD1	1:A:2337:HIS:NE2	2.43	0.52
1:A:337:GLN:HB2	1:A:338:GLN:NE2	2.24	0.52
1:A:772:ASP:OD1	3:C:481:ALA:HA	2.09	0.52
1:A:941:GLN:CB	1:A:978:LEU:HG	2.40	0.52
1:A:2342:LEU:HB2	1:A:2351:VAL:HG23	1.92	0.52
2:B:190:LYS:O	2:B:194:LYS:HG3	2.10	0.52
2:B:319:THR:HG22	2:B:320:ASN:H	1.74	0.52
2:B:540:ARG:HB3	3:C:339:MET:HA	1.91	0.52
1:A:377:HIS:HA	2:B:79:LEU:HD11	1.91	0.52
1:A:647:MET:CB	1:A:714:LEU:HD23	2.40	0.52

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2169:PHE:HA	1:A:2414:LEU:CD2	2.38	0.52
1:A:2385:VAL:HG13	1:A:2386:THR:H	1.73	0.52
2:B:44:GLU:CA	2:B:444:THR:HB	2.37	0.52
2:B:237:VAL:CG1	2:B:479:LEU:HG	2.38	0.52
2:B:493:THR:O	2:B:497:GLU:HG3	2.09	0.52
1:A:289:THR:OG1	1:A:290:PRO:HD3	2.10	0.52
1:A:483:LEU:O	1:A:487:GLU:HG3	2.09	0.52
1:A:752:PHE:HB3	1:A:762:LYS:HB2	1.91	0.52
1:A:895:LYS:HD2	1:A:907:LYS:HE2	1.92	0.52
1:A:1753:THR:HG21	1:A:1792:LEU:HG	1.91	0.52
1:A:1835:VAL:HG22	1:A:1836:TYR:H	1.74	0.52
1:A:2276:PRO:O	1:A:2279:VAL:HB	2.09	0.52
1:A:244:ALA:CB	1:A:290:PRO:HB2	2.38	0.52
1:A:356:PHE:CG	1:A:360:LEU:HG	2.44	0.52
1:A:1211:HIS:CE1	1:A:1285:LEU:HD13	2.45	0.52
1:A:1293:LEU:CD1	1:A:1322:LYS:HB3	2.40	0.52
1:A:2379:ILE:HG22	1:A:2379:ILE:O	2.09	0.52
1:A:2381:THR:HG22	1:A:2388:VAL:CG1	2.39	0.52
3:C:219:MET:O	3:C:223:LEU:HG	2.10	0.52
1:A:143:TYR:CE2	1:A:145:ASP:HB2	2.45	0.52
1:A:173:LYS:HA	1:A:176:ILE:HG22	1.90	0.52
1:A:240:PHE:CZ	1:A:257:TYR:HE1	2.28	0.52
1:A:332:LYS:N	1:A:333:PRO:HD2	2.25	0.52
1:A:547:ALA:HB1	1:A:605:ASP:OD2	2.10	0.52
1:A:740:VAL:HG12	1:A:751:LEU:HD12	1.92	0.52
1:A:1091:GLY:HA2	1:A:1120:LYS:HZ1	1.74	0.52
1:A:1463:VAL:HG23	1:A:1470:SER:HB2	1.91	0.52
1:A:1668:ARG:O	1:A:1672:ILE:HG13	2.10	0.52
1:A:345:SER:O	1:A:348:PRO:HD2	2.09	0.52
1:A:820:LEU:HD21	1:A:882:TRP:CD2	2.45	0.52
1:A:866:ILE:HA	1:A:1295:ARG:NH2	2.25	0.52
1:A:1349:LEU:HD23	1:A:1355:TYR:OH	2.10	0.52
1:A:1412:GLU:N	1:A:1413:GLN:HB2	2.25	0.52
1:A:2021:LEU:O	1:A:2024:VAL:HG22	2.10	0.52
1:A:2219:LYS:O	1:A:2223:GLN:HG3	2.10	0.52
1:A:2223:GLN:CG	1:A:2245:ILE:HD12	2.38	0.52
3:C:265:ILE:CD1	3:C:478:MET:HG2	2.39	0.52
3:C:340:VAL:HG11	3:C:512:LEU:CD2	2.40	0.52
1:A:635:SER:HB2	1:A:636:PRO:HD3	1.92	0.52
1:A:1290:GLU:O	1:A:1294:LEU:HG	2.10	0.52
1:A:1332:ILE:HG22	1:A:1332:ILE:O	2.10	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1529:ALA:O	1:A:1533:GLN:HG3	2.10	0.52
1:A:1623:ALA:HB2	1:A:1752:PHE:CB	2.40	0.52
3:C:183:LEU:H	3:C:183:LEU:HD12	1.74	0.52
1:A:153:LEU:HD12	1:A:156:ILE:HD12	1.92	0.51
1:A:232:ILE:O	1:A:236:ILE:HG12	2.10	0.51
1:A:335:LEU:HA	1:A:342:TRP:CH2	2.44	0.51
1:A:1082:GLU:OE1	1:A:1112:GLN:HG2	2.10	0.51
1:A:1627:TYR:CG	1:A:1791:ARG:HD3	2.45	0.51
1:A:1860:ALA:O	1:A:1864:THR:HG23	2.10	0.51
1:A:2320:SER:HA	1:A:2323:VAL:HG22	1.91	0.51
2:B:166:CYS:HB3	3:C:393:GLN:HG3	1.92	0.51
3:C:232:ASP:OD1	3:C:233:GLN:N	2.42	0.51
3:C:244:GLU:CA	3:C:247:GLU:HG2	2.36	0.51
3:C:385:ARG:O	3:C:389:LEU:HG	2.10	0.51
1:A:81:GLN:HG3	1:A:112:ASN:ND2	2.25	0.51
1:A:258:LYS:O	1:A:262:THR:HG23	2.10	0.51
1:A:1412:GLU:CA	1:A:1413:GLN:HB2	2.40	0.51
1:A:1977:VAL:O	1:A:1981:ILE:HG13	2.10	0.51
1:A:2153:LEU:CD1	1:A:2155:LYS:HE2	2.39	0.51
1:A:2247:PRO:HD2	1:A:2249:PRO:CD	2.40	0.51
1:A:2358:CYS:O	1:A:2361:LYS:HG3	2.11	0.51
3:C:216:GLY:HA2	4:C:601:GTP:O2A	2.10	0.51
1:A:463:LEU:HB3	1:A:464:LEU:HA	1.93	0.51
1:A:1040:LEU:HD23	1:A:1040:LEU:H	1.75	0.51
1:A:1054:LEU:HD22	1:A:1415:VAL:HG21	1.92	0.51
1:A:1090:GLN:HG3	1:A:1091:GLY:N	2.25	0.51
1:A:2246:VAL:H	1:A:2247:PRO:HA	1.75	0.51
2:B:159:ASN:CG	3:C:326:THR:HB	2.31	0.51
2:B:272:ASN:OD1	2:B:273:GLY:N	2.43	0.51
1:A:147:SER:N	1:A:149:LEU:HD23	2.18	0.51
1:A:1858:TYR:CE1	1:A:1948:VAL:HB	2.45	0.51
1:A:2276:PRO:HD2	1:A:2277:LEU:O	2.10	0.51
3:C:313:THR:OG1	3:C:502:ILE:HG21	2.11	0.51
3:C:409:LEU:HD21	3:C:476:GLN:CD	2.30	0.51
1:A:186:VAL:HB	1:A:225:LEU:HD22	1.92	0.51
1:A:578:ASN:O	1:A:582:SER:HB2	2.10	0.51
1:A:1286:GLN:HG2	1:A:1330:ILE:HG12	1.93	0.51
1:A:1414:THR:CA	1:A:1415:VAL:HB	2.41	0.51
1:A:2120:THR:HB	1:A:2144:GLY:HA3	1.92	0.51
1:A:335:LEU:HA	1:A:342:TRP:HH2	1.75	0.51
1:A:672:CYS:HA	1:A:675:HIS:HE2	1.74	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:725:GLN:NE2	1:A:730:LEU:HD21	2.26	0.51
1:A:769:LEU:CD2	3:C:263:GLU:HB3	2.38	0.51
1:A:1293:LEU:HD12	1:A:1319:ASN:OD1	2.10	0.51
1:A:1311:GLN:CB	1:A:1312:LYS:HA	2.40	0.51
1:A:2296:LEU:HD21	1:A:2343:ILE:CD1	2.41	0.51
1:A:2300:LEU:HD21	1:A:2343:ILE:CD1	2.39	0.51
2:B:423:SER:OG	2:B:425:LYS:HG3	2.10	0.51
3:C:326:THR:HG21	3:C:390:MET:CE	2.41	0.51
1:A:278:THR:O	1:A:278:THR:HG22	2.11	0.51
1:A:1114:ALA:HB2	1:A:1117:ARG:HH21	1.75	0.51
1:A:1293:LEU:HD11	1:A:1322:LYS:HB3	1.93	0.51
1:A:1346:LEU:HB2	1:A:1349:LEU:CD1	2.38	0.51
1:A:2171:SER:O	1:A:2175:THR:HG23	2.11	0.51
1:A:2215:PHE:HB2	1:A:2338:LEU:CB	2.41	0.51
1:A:2254:TYR:CA	1:A:2257:ILE:HG22	2.34	0.51
2:B:499:ARG:HA	2:B:502:LYS:HZ3	1.75	0.51
2:B:507:ALA:HB1	2:B:534:VAL:CG1	2.40	0.51
3:C:199:LEU:O	3:C:493:LYS:HG2	2.10	0.51
1:A:109:ARG:HA	1:A:112:ASN:OD1	2.11	0.51
1:A:249:LYS:CE	1:A:297:VAL:HG22	2.36	0.51
1:A:310:ILE:H	1:A:310:ILE:HD12	1.75	0.51
1:A:719:LYS:HE2	1:A:1307:ILE:CG2	2.41	0.51
2:B:359:CYS:HB3	3:C:454:PHE:CZ	2.46	0.51
1:A:305:ARG:HG2	1:A:332:LYS:CD	2.41	0.51
1:A:390:PRO:HB2	1:A:391:PRO:CD	2.39	0.51
1:A:630:GLY:O	1:A:634:LEU:HB2	2.10	0.51
1:A:837:GLU:O	1:A:841:ILE:HG13	2.10	0.51
1:A:939:THR:CG2	1:A:2301:TRP:HE1	2.23	0.51
1:A:1657:LEU:N	1:A:1658:PRO:HD2	2.26	0.51
1:A:2276:PRO:C	1:A:2279:VAL:HB	2.31	0.51
2:B:209:ILE:N	2:B:209:ILE:HD12	2.26	0.51
3:C:270:THR:HB	3:C:307:ILE:HG21	1.93	0.51
1:A:290:PRO:O	1:A:294:CYS:HB2	2.10	0.51
1:A:558:ILE:HG23	1:A:612:ILE:HG23	1.93	0.51
1:A:674:ARG:HA	1:A:677:HIS:HB3	1.92	0.51
1:A:734:TRP:CE2	1:A:769:LEU:HG	2.46	0.51
1:A:1414:THR:HA	1:A:1415:VAL:HB	1.92	0.51
1:A:1419:SER:HA	1:A:1422:MET:CE	2.26	0.51
1:A:2072:LYS:O	1:A:2076:LEU:HD23	2.11	0.51
2:B:206:VAL:HB	2:B:455:LEU:CD1	2.41	0.51
2:B:262:PRO:CB	2:B:326:LEU:HD21	2.41	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1293:LEU:CD2	1:A:1322:LYS:HG2	2.41	0.50
2:B:45:ASP:HB3	2:B:142:TYR:OH	2.11	0.50
2:B:225:ARG:HD3	2:B:488:PHE:O	2.11	0.50
2:B:244:ALA:O	2:B:454:LYS:HD3	2.11	0.50
2:B:515:LEU:HB3	2:B:517:HIS:CD2	2.46	0.50
1:A:40:ASP:OD2	1:A:80:ILE:HG12	2.11	0.50
1:A:353:ASP:CB	1:A:392:SER:HB2	2.41	0.50
1:A:652:ASP:O	1:A:655:VAL:HG23	2.10	0.50
1:A:886:LEU:O	1:A:890:CYS:N	2.40	0.50
1:A:1085:CYS:O	1:A:1087:GLU:N	2.44	0.50
1:A:1948:VAL:O	1:A:1952:VAL:HG23	2.10	0.50
2:B:259:ARG:HD2	2:B:263:PRO:HD3	1.92	0.50
2:B:540:ARG:HD2	3:C:339:MET:HA	1.94	0.50
3:C:180:SER:HB3	3:C:238:PHE:CD1	2.46	0.50
1:A:87:GLY:HA2	1:A:90:VAL:HG12	1.94	0.50
1:A:252:TYR:O	1:A:256:THR:HG22	2.11	0.50
1:A:664:VAL:O	1:A:668:LEU:HG	2.11	0.50
1:A:1086:PRO:HG2	1:A:1091:GLY:O	2.11	0.50
1:A:1418:ARG:O	1:A:1422:MET:HG3	2.11	0.50
1:A:1455:LYS:N	1:A:1455:LYS:HD2	2.27	0.50
1:A:1479:TRP:NE1	1:A:1535:GLU:OE2	2.44	0.50
1:A:1729:VAL:O	1:A:1732:VAL:HG22	2.11	0.50
1:A:2055:LEU:HD22	1:A:2068:TRP:HA	1.93	0.50
2:B:269:PHE:HD2	2:B:304:LEU:HD13	1.77	0.50
3:C:241:GLN:OE1	3:C:245:MET:HG2	2.12	0.50
1:A:249:LYS:CD	1:A:297:VAL:HG13	2.41	0.50
1:A:1401:MET:O	1:A:1405:GLN:HG2	2.11	0.50
1:A:2102:MET:CE	1:A:2105:THR:HG21	2.41	0.50
1:A:2172:ILE:O	1:A:2176:MET:HG3	2.11	0.50
1:A:2283:VAL:O	1:A:2287:LEU:HG	2.12	0.50
3:C:210:LEU:HD23	3:C:270:THR:OG1	2.11	0.50
1:A:148:ARG:O	1:A:185:LEU:HD21	2.12	0.50
1:A:227:TYR:HA	1:A:273:MET:CE	2.41	0.50
1:A:471:MET:HA	1:A:471:MET:CE	2.42	0.50
1:A:549:TYR:O	1:A:552:VAL:HG12	2.11	0.50
1:A:731:LEU:H	1:A:731:LEU:CD2	2.24	0.50
1:A:1502:GLU:HA	1:A:1503:MET:CB	2.10	0.50
1:A:1606:HIS:HA	1:A:1622:LEU:HD22	1.94	0.50
1:A:2176:MET:CE	1:A:2407:ARG:HB2	2.40	0.50
2:B:55:LYS:HB3	3:C:324:TRP:CH2	2.47	0.50
3:C:271:GLN:HB2	3:C:272:PRO:HD2	1.94	0.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:503:LEU:HD13	1:A:572:MET:CG	2.41	0.50
1:A:1081:CYS:HB3	1:A:1085:CYS:SG	2.52	0.50
1:A:1121:ALA:O	1:A:1122:SER:OG	2.18	0.50
1:A:1533:GLN:HE22	1:A:1600:ILE:HA	1.76	0.50
1:A:2037:GLU:N	1:A:2094:GLU:HA	2.27	0.50
1:A:2421:PRO:CG	1:A:2424:ASP:HB3	2.41	0.50
2:B:265:LEU:O	2:B:333:GLN:HB2	2.12	0.50
3:C:306:GLN:HG2	3:C:512:LEU:CD1	2.41	0.50
1:A:414:GLU:CD	1:A:433:LEU:HB2	2.31	0.50
1:A:447:PHE:CZ	1:A:491:THR:HG23	2.46	0.50
1:A:638:VAL:CB	1:A:639:PHE:HA	2.30	0.50
1:A:673:THR:HB	1:A:1344:GLN:CB	2.41	0.50
1:A:1463:VAL:HG21	1:A:1499:HIS:NE2	2.27	0.50
1:A:1666:LYS:O	1:A:1669:ILE:HG22	2.11	0.50
1:A:2195:VAL:HG12	1:A:2205:ILE:HG21	1.94	0.50
1:A:2301:TRP:HA	1:A:2310:TRP:HD1	1.76	0.50
1:A:2310:TRP:O	1:A:2314:THR:HG23	2.12	0.50
1:A:2326:MET:CB	1:A:2400:LEU:HD23	2.42	0.50
1:A:2379:ILE:O	1:A:2383:LEU:HD21	2.11	0.50
2:B:212:LEU:HB2	2:B:267:PHE:CD1	2.47	0.50
3:C:403:LYS:HA	3:C:422:LEU:H	1.76	0.50
1:A:68:ARG:HA	1:A:71:HIS:HD2	1.77	0.50
1:A:121:VAL:HG12	1:A:162:ARG:HH11	1.77	0.50
1:A:441:THR:OG1	1:A:446:VAL:HG22	2.11	0.50
1:A:549:TYR:O	1:A:553:LEU:HG	2.12	0.50
1:A:657:PHE:CB	1:A:658:PRO:HD2	2.41	0.50
1:A:2122:HIS:H	1:A:2144:GLY:HA2	1.77	0.50
2:B:254:TRP:CH2	2:B:260:PRO:HG3	2.47	0.50
3:C:199:LEU:O	3:C:492:GLU:HB2	2.11	0.50
3:C:279:LEU:O	3:C:283:ILE:HG13	2.12	0.50
1:A:108:LEU:HD13	1:A:110:VAL:CG1	2.27	0.50
1:A:301:LEU:O	1:A:305:ARG:HG3	2.12	0.50
1:A:558:ILE:N	1:A:559:PRO:CD	2.74	0.50
1:A:1666:LYS:HZ1	1:A:1712:ILE:HB	1.77	0.50
1:A:2098:TRP:O	1:A:2102:MET:N	2.42	0.50
1:A:2191:ARG:HG3	1:A:2351:VAL:CG1	2.39	0.50
1:A:2388:VAL:HG23	1:A:2389:GLU:N	2.27	0.50
3:C:239:ARG:HB3	3:C:252:GLN:OE1	2.12	0.50
3:C:244:GLU:HG3	3:C:248:ARG:NH2	2.27	0.50
3:C:251:ASN:ND2	3:C:251:ASN:O	2.45	0.50
1:A:150:SER:O	1:A:153:LEU:N	2.37	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:207:LEU:N	1:A:208:GLN:CB	2.75	0.49
1:A:343:LEU:O	1:A:347:GLU:HG3	2.12	0.49
1:A:551:ALA:HB2	1:A:605:ASP:OD1	2.12	0.49
1:A:770:VAL:C	1:A:771:GLU:HG3	2.32	0.49
1:A:1662:THR:O	1:A:1666:LYS:HG2	2.12	0.49
1:A:1861:ILE:O	1:A:1865:ILE:HG12	2.11	0.49
1:A:2276:PRO:HG2	1:A:2280:MET:HG3	1.94	0.49
1:A:280:LEU:HB2	1:A:315:PHE:CZ	2.47	0.49
1:A:305:ARG:HG2	1:A:332:LYS:CE	2.42	0.49
1:A:671:HIS:O	1:A:675:HIS:NE2	2.42	0.49
1:A:813:ILE:HG13	1:A:881:ASN:ND2	2.27	0.49
1:A:1521:VAL:HG22	1:A:1522:ALA:CB	2.42	0.49
1:A:2319:ARG:O	1:A:2323:VAL:HG13	2.12	0.49
2:B:42:TRP:HB2	2:B:45:ASP:OD1	2.12	0.49
2:B:212:LEU:HD21	2:B:223:TYR:CE1	2.48	0.49
2:B:319:THR:HG22	2:B:320:ASN:N	2.27	0.49
3:C:251:ASN:HB3	3:C:277:SER:HB3	1.94	0.49
1:A:207:LEU:HG	1:A:209:GLU:OE2	2.12	0.49
1:A:320:ASP:HB3	1:A:322:LEU:HD12	1.92	0.49
1:A:365:LEU:HD22	1:A:401:LEU:HG	1.93	0.49
1:A:2055:LEU:HD23	1:A:2055:LEU:O	2.13	0.49
1:A:2092:LEU:HD12	1:A:2099:LEU:HB2	1.93	0.49
1:A:2214:LEU:O	1:A:2217:LEU:HG	2.12	0.49
2:B:47:ILE:HG22	2:B:142:TYR:HE1	1.77	0.49
2:B:204:PHE:HB3	2:B:324:ASN:OD1	2.11	0.49
1:A:822:LYS:C	1:A:825:PRO:HD2	2.32	0.49
1:A:1399:TYR:O	1:A:1403:GLN:HG3	2.12	0.49
1:A:1415:VAL:HG13	1:A:1415:VAL:O	2.12	0.49
1:A:1463:VAL:HG21	1:A:1499:HIS:CD2	2.47	0.49
2:B:262:PRO:HB2	2:B:326:LEU:HD21	1.95	0.49
2:B:451:ALA:O	2:B:455:LEU:HG	2.12	0.49
1:A:553:LEU:HD21	1:A:572:MET:SD	2.53	0.49
1:A:1627:TYR:HB2	1:A:1749:SER:HB3	1.94	0.49
1:A:1732:VAL:O	1:A:1736:VAL:HG13	2.13	0.49
1:A:1958:VAL:O	1:A:2138:LYS:NZ	2.45	0.49
1:A:2057:THR:HB	1:A:2058:PRO:HD3	1.93	0.49
1:A:2131:LEU:HD21	1:A:2139:LYS:N	2.27	0.49
1:A:2194:SER:HB3	1:A:2206:GLN:HG2	1.94	0.49
1:A:2215:PHE:N	1:A:2338:LEU:O	2.32	0.49
2:B:250:VAL:HB	2:B:254:TRP:CD2	2.47	0.49
3:C:377:GLU:O	3:C:383:LYS:HG3	2.11	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:81:GLN:NE2	1:A:107:GLU:HB2	2.27	0.49
1:A:168:THR:HG21	1:A:211:ARG:HD3	1.95	0.49
1:A:215:ALA:CA	1:A:218:LEU:HD13	2.30	0.49
1:A:305:ARG:HG2	1:A:332:LYS:NZ	2.28	0.49
1:A:503:LEU:HB2	1:A:572:MET:CE	2.43	0.49
1:A:1459:ALA:HB1	1:A:1474:GLN:CG	2.42	0.49
1:A:1478:LYS:HD2	1:A:1493:THR:HG22	1.93	0.49
3:C:212:LEU:O	3:C:217:LYS:NZ	2.41	0.49
1:A:127:ALA:O	1:A:130:THR:HG22	2.13	0.49
1:A:196:VAL:O	1:A:200:LEU:HD13	2.13	0.49
1:A:305:ARG:HA	1:A:332:LYS:HZ3	1.77	0.49
1:A:720:LYS:HE3	1:A:2346:THR:CB	2.43	0.49
1:A:720:LYS:HE3	1:A:2346:THR:HB	1.95	0.49
1:A:1075:MET:CE	1:A:1075:MET:HA	2.43	0.49
1:A:1125:TYR:CE2	1:A:1129:LEU:HD11	2.47	0.49
1:A:1323:TYR:HA	1:A:1326:GLN:HG2	1.95	0.49
1:A:1503:MET:O	1:A:1504:LEU:HD22	2.12	0.49
1:A:1627:TYR:HB3	1:A:1791:ARG:HD3	1.94	0.49
1:A:1631:ARG:O	1:A:1634:VAL:HG22	2.13	0.49
1:A:1656:LEU:CB	1:A:1657:LEU:HA	2.33	0.49
1:A:1659:ASP:OD1	1:A:1660:THR:N	2.45	0.49
1:A:2297:ALA:N	1:A:2383:LEU:HD22	2.28	0.49
1:A:2393:ARG:O	1:A:2397:GLU:HG3	2.13	0.49
2:B:509:SER:HA	2:B:512:GLN:HG2	1.95	0.49
3:C:248:ARG:HD3	3:C:248:ARG:N	2.28	0.49
3:C:406:LEU:HD12	3:C:422:LEU:CB	2.35	0.49
1:A:207:LEU:HB3	1:A:209:GLU:HG2	1.95	0.49
1:A:223:ALA:HB3	1:A:270:SER:CB	2.41	0.49
1:A:310:ILE:HD12	1:A:310:ILE:N	2.28	0.49
1:A:346:LEU:HD21	1:A:375:LEU:CD1	2.42	0.49
1:A:407:THR:OG1	1:A:435:ARG:NH2	2.46	0.49
1:A:982:LEU:CB	1:A:992:LYS:HE3	2.42	0.49
1:A:1054:LEU:HD13	1:A:1415:VAL:HG13	1.94	0.49
1:A:1292:GLN:CB	1:A:1322:LYS:HD3	2.43	0.49
1:A:1338:SER:HB2	1:A:1339:THR:CA	2.42	0.49
1:A:346:LEU:O	1:A:349:PHE:HB2	2.13	0.49
1:A:542:VAL:CG2	1:A:545:ALA:HB2	2.43	0.49
1:A:608:LYS:O	1:A:612:ILE:HG12	2.13	0.49
1:A:654:ALA:O	1:A:808:HIS:HB3	2.13	0.49
1:A:1285:LEU:O	1:A:1289:ILE:HG13	2.12	0.49
1:A:1304:LEU:O	1:A:1304:LEU:HG	2.12	0.49

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1832:HIS:HB3	1:A:1837:VAL:HG21	1.95	0.49
2:B:134:ASP:HB3	2:B:165:ALA:CA	2.42	0.49
2:B:318:LEU:CD2	2:B:325:CYS:HB2	2.43	0.49
3:C:202:THR:HB	3:C:489:ILE:CD1	2.41	0.49
3:C:409:LEU:HD21	3:C:476:GLN:HG2	1.94	0.49
1:A:62:ASN:O	1:A:66:VAL:HG23	2.12	0.49
1:A:328:ASP:O	1:A:332:LYS:HE3	2.13	0.49
1:A:391:PRO:HG3	1:A:459:CYS:SG	2.52	0.49
1:A:1292:GLN:HG3	1:A:1322:LYS:CE	2.42	0.49
1:A:1597:PRO:HG3	1:A:1629:TRP:CD1	2.48	0.49
1:A:1938:SER:CB	1:A:1945:VAL:HG11	2.43	0.49
3:C:372:ASN:OD1	4:C:601:GTP:N1	2.41	0.49
3:C:391:ILE:HD12	3:C:421:PHE:CZ	2.43	0.49
1:A:113:VAL:HG12	1:A:117:GLU:OE2	2.12	0.48
1:A:458:GLU:O	1:A:462:VAL:HG13	2.13	0.48
1:A:845:LEU:HD13	1:A:925:VAL:HG22	1.93	0.48
1:A:1960:VAL:N	1:A:1961:LEU:CA	2.75	0.48
1:A:2256:LYS:HD2	1:A:2287:LEU:CD2	2.42	0.48
2:B:142:TYR:HE2	2:B:144:GLN:HG2	1.77	0.48
2:B:155:SER:HB2	2:B:196:GLN:CD	2.34	0.48
2:B:307:GLN:O	2:B:311:ILE:HG13	2.13	0.48
2:B:415:TRP:O	2:B:419:GLU:HG3	2.11	0.48
2:B:496:SER:OG	2:B:543:ALA:HB2	2.13	0.48
3:C:502:ILE:O	3:C:506:VAL:HG12	2.13	0.48
1:A:1341:THR:HG22	1:A:1341:THR:O	2.14	0.48
1:A:1502:GLU:HB3	1:A:1504:LEU:CB	2.35	0.48
2:B:154:THR:CB	2:B:161:GLN:HE21	2.26	0.48
2:B:245:ILE:O	2:B:245:ILE:HG12	2.13	0.48
1:A:190:ASP:HA	1:A:193:LEU:HD21	1.95	0.48
1:A:738:ALA:CB	1:A:830:LEU:HD11	2.43	0.48
1:A:1018:THR:HA	1:A:1022:THR:O	2.12	0.48
1:A:2365:LEU:HD13	1:A:2367:VAL:CG2	2.44	0.48
2:B:511:TYR:HD2	2:B:531:ALA:HA	1.78	0.48
3:C:258:PHE:CE2	3:C:260:ILE:HG13	2.48	0.48
3:C:312:PHE:CE1	3:C:318:VAL:HG21	2.48	0.48
1:A:297:VAL:O	1:A:297:VAL:HG12	2.12	0.48
1:A:322:LEU:HD21	1:A:355:ALA:HB1	1.95	0.48
1:A:407:THR:CB	1:A:435:ARG:HH21	2.26	0.48
1:A:495:ASP:HB3	1:A:565:TYR:CE1	2.48	0.48
1:A:804:VAL:O	1:A:804:VAL:HG12	2.14	0.48
1:A:943:ILE:O	1:A:947:ILE:HG22	2.13	0.48

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1512:CYS:O	1:A:1515:VAL:HG23	2.13	0.48
1:A:1662:THR:HA	1:A:1665:GLU:OE1	2.12	0.48
1:A:2322:ALA:O	1:A:2326:MET:HG2	2.13	0.48
1:A:2380:GLU:HA	1:A:2383:LEU:CD1	2.43	0.48
2:B:58:LEU:HB3	3:C:383:LYS:HE3	1.95	0.48
2:B:248:CYS:SG	2:B:454:LYS:HD2	2.53	0.48
1:A:202:GLU:HA	1:A:205:LYS:HB2	1.94	0.48
1:A:721:ASP:OD1	1:A:802:CYS:HA	2.13	0.48
1:A:1125:TYR:O	1:A:1129:LEU:HG	2.14	0.48
1:A:1211:HIS:HE1	1:A:1285:LEU:HD13	1.77	0.48
1:A:1756:LYS:NZ	1:A:1785:ILE:HG22	2.28	0.48
1:A:1842:CYS:CA	1:A:1933:ILE:HD11	2.43	0.48
1:A:2169:PHE:CZ	1:A:2411:LEU:HD13	2.49	0.48
1:A:2388:VAL:HA	1:A:2393:ARG:CD	2.42	0.48
1:A:2388:VAL:CA	1:A:2393:ARG:HD3	2.42	0.48
2:B:411:ARG:HB3	2:B:411:ARG:NH1	2.28	0.48
3:C:219:MET:CE	4:C:601:GTP:H2'	2.43	0.48
1:A:395:LEU:HB3	1:A:396:PRO:HD3	1.96	0.48
2:B:318:LEU:HB3	2:B:327:PHE:CE2	2.49	0.48
3:C:248:ARG:O	3:C:248:ARG:HG2	2.13	0.48
3:C:330:LEU:O	3:C:334:LEU:HG	2.14	0.48
1:A:40:ASP:CG	1:A:80:ILE:HG12	2.33	0.48
1:A:167:ALA:HB1	1:A:211:ARG:NH2	2.29	0.48
1:A:227:TYR:HA	1:A:273:MET:HE3	1.96	0.48
1:A:489:CYS:CA	3:C:412:ASN:HD22	2.26	0.48
1:A:507:ILE:HG13	3:C:454:PHE:CG	2.49	0.48
1:A:1022:THR:CB	1:A:1415:VAL:H	2.21	0.48
1:A:1203:VAL:HG12	1:A:1207:GLN:OE1	2.14	0.48
1:A:1407:LEU:CD1	1:A:1427:THR:HG21	2.43	0.48
1:A:1655:ASN:ND2	1:A:1663:GLU:OE2	2.45	0.48
1:A:2191:ARG:HD3	1:A:2349:GLU:OE1	2.14	0.48
2:B:269:PHE:CD2	2:B:304:LEU:HD13	2.48	0.48
3:C:485:LEU:HD22	3:C:490:LEU:CB	2.42	0.48
1:A:306:CYS:O	1:A:309:HIS:HB3	2.13	0.48
1:A:545:ALA:HB1	1:A:549:TYR:CZ	2.48	0.48
1:A:1324:LEU:HD13	1:A:1339:THR:N	2.28	0.48
1:A:1586:SER:HB3	1:A:1591:HIS:HD2	1.79	0.48
1:A:1605:TYR:HB2	1:A:1622:LEU:HD13	1.96	0.48
1:A:1657:LEU:N	1:A:1658:PRO:CD	2.77	0.48
1:A:2160:LEU:HD13	1:A:2202:SER:O	2.14	0.48
1:A:2183:GLN:HA	1:A:2185:THR:N	2.29	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:237:VAL:O	2:B:241:LEU:HG	2.13	0.48
1:A:36:SER:HA	1:A:77:HIS:CD2	2.49	0.48
1:A:40:ASP:HB3	1:A:83:ASP:OD2	2.14	0.48
1:A:634:LEU:HA	1:A:666:TYR:CD1	2.49	0.48
1:A:1300:LEU:HD11	1:A:1316:ILE:HA	1.96	0.48
1:A:1802:GLU:HA	1:A:1803:LEU:HA	1.51	0.48
1:A:2276:PRO:CB	1:A:2279:VAL:HB	2.43	0.48
1:A:2276:PRO:CA	1:A:2279:VAL:HB	2.44	0.48
2:B:186:HIS:CD2	2:B:542:PRO:HG3	2.49	0.48
2:B:454:LYS:O	2:B:458:VAL:HG23	2.14	0.48
3:C:170:LYS:N	3:C:170:LYS:HD2	2.28	0.48
1:A:138:GLU:HB3	1:A:147:SER:OG	2.13	0.48
1:A:494:THR:O	1:A:498:ILE:HG13	2.14	0.48
1:A:646:LEU:HD11	1:A:675:HIS:CE1	2.49	0.48
1:A:852:ALA:HB3	1:A:853:PRO:CD	2.44	0.48
1:A:942:THR:O	1:A:946:ILE:HD12	2.14	0.48
1:A:1453:LEU:HD22	1:A:1453:LEU:H	1.79	0.48
1:A:2300:LEU:HD23	1:A:2345:MET:HE3	1.96	0.48
1:A:2381:THR:HG22	1:A:2388:VAL:HG11	1.96	0.48
3:C:271:GLN:HG2	3:C:307:ILE:CD1	2.44	0.48
3:C:407:SER:HB3	3:C:420:ASP:OD1	2.14	0.48
1:A:108:LEU:HD12	1:A:109:ARG:H	1.78	0.47
1:A:320:ASP:HB3	1:A:322:LEU:HD11	1.95	0.47
1:A:728:ARG:NH1	1:A:801:VAL:HG22	2.29	0.47
1:A:770:VAL:O	1:A:771:GLU:CG	2.59	0.47
1:A:1107:ILE:HG12	1:A:1108:ASN:N	2.29	0.47
1:A:1849:ALA:HB2	1:A:1856:ILE:HD11	1.96	0.47
1:A:2380:GLU:CA	1:A:2383:LEU:HG	2.44	0.47
2:B:237:VAL:O	2:B:237:VAL:HG12	2.14	0.47
3:C:194:ALA:O	3:C:198:LEU:HG	2.14	0.47
3:C:219:MET:HE1	4:C:601:GTP:H2'	1.96	0.47
1:A:195:ALA:O	1:A:199:VAL:HG22	2.14	0.47
1:A:350:TRP:CE2	1:A:354:LEU:HD11	2.50	0.47
1:A:422:PRO:N	1:A:423:PRO:HD2	2.29	0.47
1:A:1530:LYS:NZ	1:A:1600:ILE:HD11	2.28	0.47
1:A:1627:TYR:CB	1:A:1791:ARG:HD3	2.44	0.47
1:A:1786:VAL:HG13	1:A:1823:ILE:CD1	2.30	0.47
1:A:2407:ARG:CB	1:A:2410:LEU:HD13	2.41	0.47
1:A:2419:TYR:CG	1:A:3609:ALA:HB1	2.49	0.47
2:B:43:ARG:HB3	2:B:44:GLU:OE1	2.13	0.47
2:B:315:SER:HB2	3:C:297:HIS:CE1	2.49	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:532:LEU:HD13	2:B:547:TYR:HE1	1.79	0.47
3:C:224:LEU:HD23	3:C:477:VAL:HG21	1.96	0.47
1:A:107:GLU:O	1:A:137:GLN:NE2	2.47	0.47
1:A:134:ARG:NH1	1:A:159:GLU:OE2	2.48	0.47
1:A:275:LEU:CD1	1:A:277:MET:HG2	2.44	0.47
1:A:329:HIS:CE1	1:A:348:PRO:HB3	2.49	0.47
1:A:638:VAL:HB	1:A:639:PHE:CA	2.41	0.47
1:A:740:VAL:CA	1:A:751:LEU:HD12	2.36	0.47
1:A:771:GLU:OE2	1:A:773:VAL:HG22	2.14	0.47
1:A:1021:GLN:HG2	1:A:1022:THR:HG22	1.96	0.47
1:A:2160:LEU:HD22	1:A:2203:GLY:CA	2.32	0.47
1:A:2374:ARG:HH11	1:A:2393:ARG:HH12	1.60	0.47
1:A:2385:VAL:HG13	1:A:2386:THR:N	2.29	0.47
3:C:171:LEU:C	3:C:172:LEU:HD12	2.34	0.47
3:C:172:LEU:HD12	3:C:172:LEU:N	2.30	0.47
3:C:313:THR:HG23	3:C:341:LYS:HG2	1.97	0.47
3:C:367:LEU:HD21	3:C:400:LEU:HD23	1.95	0.47
1:A:69:GLN:HB2	1:A:102:LYS:HZ2	1.78	0.47
1:A:121:VAL:HG12	1:A:162:ARG:NH1	2.29	0.47
1:A:265:GLU:HG2	1:A:310:ILE:HD13	1.95	0.47
1:A:295:LYS:HB3	1:A:297:VAL:HG23	1.97	0.47
1:A:602:PHE:H	1:A:603:ASN:HA	1.79	0.47
1:A:674:ARG:CA	1:A:677:HIS:HB3	2.45	0.47
1:A:822:LYS:HZ2	1:A:830:LEU:HG	1.79	0.47
1:A:1790:LEU:CD2	1:A:1823:ILE:HD12	2.43	0.47
2:B:64:LYS:O	2:B:68:VAL:HG23	2.13	0.47
1:A:153:LEU:HD23	1:A:187:LYS:HZ2	1.79	0.47
1:A:389:PRO:O	1:A:393:VAL:HG23	2.15	0.47
1:A:865:VAL:HG13	1:A:868:PHE:CB	2.44	0.47
1:A:2394:LEU:O	1:A:2394:LEU:HD23	2.15	0.47
1:A:38:ASP:N	1:A:39:PRO:HD2	2.29	0.47
1:A:246:ASP:HA	1:A:247:GLU:HA	1.58	0.47
1:A:247:GLU:HG2	1:A:248:VAL:HG13	1.96	0.47
1:A:337:GLN:HA	1:A:338:GLN:HA	1.60	0.47
1:A:403:ARG:O	1:A:407:THR:HG23	2.15	0.47
1:A:500:VAL:HG22	1:A:568:ILE:HD12	1.96	0.47
1:A:1627:TYR:HE2	1:A:1795:LEU:HB2	1.79	0.47
1:A:1753:THR:HG22	1:A:1792:LEU:HD11	1.96	0.47
1:A:1964:GLU:OE1	1:A:2078:LEU:HB3	2.15	0.47
1:A:2195:VAL:HG12	1:A:2205:ILE:CG2	2.45	0.47
2:B:206:VAL:HG13	2:B:206:VAL:O	2.15	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:312:PHE:HD2	2:B:318:LEU:HD11	1.79	0.47
2:B:500:CYS:SG	2:B:543:ALA:HB1	2.55	0.47
3:C:251:ASN:CB	3:C:277:SER:HB3	2.44	0.47
3:C:282:LEU:HD13	3:C:299:TYR:HD2	1.80	0.47
1:A:122:GLN:HG2	1:A:123:HIS:N	2.30	0.47
1:A:131:LYS:HD2	1:A:162:ARG:HH21	1.80	0.47
1:A:233:PHE:CZ	1:A:267:LYS:HG3	2.50	0.47
1:A:509:GLU:O	1:A:509:GLU:HG2	2.15	0.47
1:A:937:GLN:CB	1:A:981:VAL:HG21	2.44	0.47
1:A:1089:ILE:O	1:A:1422:MET:HE1	2.14	0.47
1:A:1195:ILE:O	1:A:1195:ILE:HG12	2.15	0.47
1:A:1351:THR:HG21	1:A:1416:PRO:HG2	1.95	0.47
1:A:1523:LYS:HB3	1:A:1526:LEU:HD13	1.97	0.47
1:A:1816:THR:H	1:A:1817:ALA:CB	2.27	0.47
1:A:2099:LEU:O	1:A:2124:VAL:HG21	2.14	0.47
1:A:2181:ASN:OD1	1:A:2188:PHE:HB2	2.14	0.47
1:A:2191:ARG:CB	1:A:2351:VAL:HG12	2.45	0.47
1:A:2393:ARG:HA	1:A:2396:CYS:SG	2.55	0.47
1:A:2407:ARG:N	1:A:2407:ARG:HD2	2.29	0.47
2:B:268:LEU:HB3	2:B:337:TYR:CE2	2.50	0.47
2:B:307:GLN:HG2	3:C:280:ASP:OD2	2.15	0.47
2:B:552:HIS:O	2:B:556:TYR:N	2.48	0.47
3:C:198:LEU:CD1	3:C:496:PHE:HB2	2.45	0.47
3:C:205:LEU:HB2	3:C:482:ARG:NH1	2.30	0.47
3:C:382:ARG:O	3:C:386:GLN:HG3	2.13	0.47
1:A:156:ILE:O	1:A:159:GLU:HB2	2.15	0.47
1:A:422:PRO:HD3	1:A:428:TYR:HE1	1.80	0.47
1:A:1324:LEU:HD22	1:A:1337:LEU:CB	2.45	0.47
1:A:1343:SER:CA	1:A:1344:GLN:CB	2.91	0.47
1:A:1532:ILE:HG13	1:A:1607:LEU:HD23	1.96	0.47
1:A:1657:LEU:HD12	1:A:1658:PRO:CA	2.44	0.47
1:A:2193:TYR:CE1	1:A:2205:ILE:HD12	2.49	0.47
2:B:188:PHE:O	2:B:192:GLN:HG2	2.14	0.47
2:B:359:CYS:HB3	3:C:454:PHE:CE2	2.49	0.47
3:C:184:VAL:HG13	3:C:188:MET:HA	1.96	0.47
3:C:198:LEU:O	3:C:493:LYS:HE3	2.15	0.47
3:C:244:GLU:OE1	3:C:252:GLN:HB2	2.14	0.47
3:C:467:GLN:OE1	3:C:467:GLN:N	2.43	0.47
1:A:136:SER:HA	1:A:139:ARG:CG	2.44	0.47
1:A:468:ASP:N	1:A:469:PRO:HD3	2.30	0.47
1:A:740:VAL:HG21	1:A:752:PHE:CZ	2.49	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1360:LEU:HB3	1:A:1361:GLU:OE1	2.15	0.47
1:A:1645:LEU:O	1:A:1649:GLU:HG3	2.14	0.47
1:A:1655:ASN:OD1	1:A:1727:GLU:HG3	2.15	0.47
1:A:1712:ILE:HD12	1:A:1712:ILE:N	2.30	0.47
1:A:1951:LEU:HD21	1:A:2102:MET:CE	2.45	0.47
2:B:313:ARG:HD3	2:B:327:PHE:HE2	1.78	0.47
3:C:187:GLN:HG2	3:C:187:GLN:O	2.15	0.47
3:C:229:PRO:HG3	3:C:467:GLN:HA	1.97	0.47
1:A:606:ASN:O	1:A:610:VAL:HG22	2.15	0.47
1:A:2336:ARG:NE	1:A:2336:ARG:HA	2.30	0.47
2:B:140:ALA:HB2	2:B:151:LEU:HD22	1.97	0.47
2:B:243:THR:O	2:B:246:LYS:NZ	2.48	0.47
2:B:479:LEU:H	2:B:479:LEU:HD12	1.79	0.47
1:A:232:ILE:HD12	1:A:232:ILE:N	2.30	0.46
1:A:492:CYS:HA	1:A:565:TYR:OH	2.16	0.46
1:A:672:CYS:HA	1:A:675:HIS:NE2	2.29	0.46
1:A:1945:VAL:HG23	1:A:1946:LEU:HD22	1.96	0.46
1:A:2303:SER:OG	1:A:2345:MET:HB3	2.15	0.46
1:A:2370:LYS:HB2	1:A:2372:PRO:HD3	1.97	0.46
1:A:85:LYS:HZ1	1:A:113:VAL:HG13	1.78	0.46
1:A:131:LYS:HE3	1:A:159:GLU:CD	2.35	0.46
1:A:262:THR:HA	1:A:265:GLU:OE1	2.15	0.46
1:A:622:GLY:O	1:A:623:ASN:HB3	2.15	0.46
1:A:735:ALA:HB1	1:A:822:LYS:HE3	1.97	0.46
1:A:1293:LEU:HD22	1:A:1322:LYS:HG2	1.97	0.46
1:A:1407:LEU:HD23	1:A:1453:LEU:HB2	1.96	0.46
1:A:1413:GLN:N	1:A:1414:THR:HA	2.27	0.46
1:A:2131:LEU:HD23	1:A:2137:PRO:C	2.35	0.46
2:B:314:LYS:O	3:C:295:LEU:HD11	2.16	0.46
1:A:120:SER:O	1:A:127:ALA:HB2	2.15	0.46
1:A:127:ALA:HA	1:A:130:THR:HG22	1.97	0.46
1:A:134:ARG:O	1:A:138:GLU:HG3	2.16	0.46
1:A:192:ILE:N	1:A:192:ILE:HD12	2.30	0.46
1:A:335:LEU:HG	1:A:342:TRP:CH2	2.50	0.46
1:A:419:ILE:HG21	1:A:441:THR:OG1	2.14	0.46
1:A:450:GLU:OE2	1:A:454:THR:HG21	2.15	0.46
1:A:508:VAL:HG23	1:A:509:GLU:OE1	2.14	0.46
1:A:846:ARG:NH2	1:A:921:ALA:O	2.48	0.46
1:A:1207:GLN:HG2	1:A:1289:ILE:HG13	1.98	0.46
1:A:1961:LEU:N	1:A:1961:LEU:HD12	2.30	0.46
3:C:319:ILE:HG23	3:C:370:LEU:HG	1.97	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:491:THR:HG22	1:A:493:GLY:H	1.81	0.46
1:A:1289:ILE:O	1:A:1293:LEU:N	2.44	0.46
1:A:1306:PRO:HG2	1:A:2306:THR:CG2	2.45	0.46
1:A:1307:ILE:HB	1:A:2306:THR:CG2	2.45	0.46
1:A:1793:LEU:HG	1:A:2417:PHE:CE2	2.51	0.46
1:A:2098:TRP:O	1:A:2102:MET:HG2	2.15	0.46
1:A:2131:LEU:CD2	1:A:2139:LYS:H	2.28	0.46
1:A:2160:LEU:O	1:A:2197:PRO:HB3	2.15	0.46
1:A:2214:LEU:HD22	1:A:2296:LEU:HD12	1.97	0.46
2:B:318:LEU:HD23	2:B:325:CYS:HB2	1.97	0.46
3:C:248:ARG:HD3	3:C:248:ARG:H	1.81	0.46
1:A:190:ASP:O	1:A:193:LEU:HG	2.16	0.46
1:A:420:ARG:O	1:A:424:ILE:HG13	2.15	0.46
1:A:656:HIS:HA	1:A:660:ILE:HD11	1.97	0.46
1:A:805:GLN:HG3	1:A:806:LEU:N	2.30	0.46
1:A:1209:ALA:O	1:A:1213:LEU:HG	2.15	0.46
1:A:1673:LEU:O	1:A:1677:VAL:HG22	2.15	0.46
1:A:1981:ILE:O	1:A:1985:GLU:HG3	2.15	0.46
1:A:2276:PRO:HB2	1:A:2279:VAL:N	2.18	0.46
2:B:191:HIS:O	2:B:195:LEU:HG	2.15	0.46
2:B:420:LEU:HA	2:B:425:LYS:HB2	1.97	0.46
1:A:1131:ALA:HB1	1:A:1206:TRP:NE1	2.18	0.46
1:A:1199:ASP:O	1:A:1203:VAL:HG23	2.16	0.46
1:A:1664:GLU:HB3	1:A:1668:ARG:HH12	1.80	0.46
1:A:2376:THR:HG23	1:A:2388:VAL:HG11	1.98	0.46
2:B:523:VAL:O	2:B:523:VAL:HG12	2.14	0.46
3:C:472:LYS:O	3:C:476:GLN:HG2	2.15	0.46
1:A:611:VAL:O	1:A:615:LEU:HD23	2.15	0.46
1:A:931:THR:HB	1:A:932:PRO:HD3	1.97	0.46
1:A:1286:GLN:NE2	1:A:1286:GLN:H	2.14	0.46
1:A:1597:PRO:HG3	1:A:1629:TRP:CD2	2.51	0.46
1:A:1666:LYS:NZ	1:A:1713:SER:H	2.12	0.46
1:A:2087:SER:OG	1:A:2132:PRO:HG3	2.15	0.46
1:A:2103:THR:O	1:A:2103:THR:HG22	2.16	0.46
1:A:2332:GLY:O	1:A:2358:CYS:HA	2.16	0.46
2:B:265:LEU:HD11	2:B:325:CYS:SG	2.55	0.46
2:B:309:TYR:OH	2:B:313:ARG:NH1	2.49	0.46
3:C:390:MET:O	3:C:394:LEU:HG	2.16	0.46
1:A:80:ILE:HB	1:A:106:GLN:OE1	2.15	0.46
1:A:742:MET:HA	1:A:742:MET:CE	2.45	0.46
1:A:1027:LEU:CD2	1:A:1085:CYS:HA	2.45	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1521:VAL:CG1	1:A:1522:ALA:HB2	2.41	0.46
2:B:154:THR:O	2:B:161:GLN:HG3	2.16	0.46
2:B:504:LEU:HD22	2:B:550:GLN:HG2	1.98	0.46
1:A:173:LYS:HA	1:A:176:ILE:CG2	2.46	0.46
1:A:415:ARG:C	1:A:418:PRO:HD2	2.36	0.46
1:A:1793:LEU:HG	1:A:2417:PHE:CZ	2.51	0.46
2:B:226:VAL:O	2:B:230:LEU:HG	2.16	0.46
1:A:436:VAL:HG23	1:A:436:VAL:O	2.16	0.46
1:A:624:ALA:O	1:A:628:LEU:HG	2.16	0.46
1:A:636:PRO:HB3	1:A:638:VAL:HG22	1.98	0.46
1:A:1809:HIS:O	1:A:1813:THR:OG1	2.26	0.46
1:A:2089:ILE:HG13	1:A:2128:ILE:HG13	1.97	0.46
1:A:2167:MET:HE3	1:A:2193:TYR:HB3	1.98	0.46
1:A:2380:GLU:HA	1:A:2383:LEU:CG	2.44	0.46
2:B:5:VAL:O	2:B:9:ASP:HB2	2.15	0.46
2:B:151:LEU:HD11	2:B:448:TRP:CZ2	2.49	0.46
2:B:326:LEU:CD1	2:B:427:PHE:HB3	2.46	0.46
3:C:185:ASP:HB2	3:C:189:ASN:HB2	1.98	0.46
1:A:114:THR:HG22	1:A:134:ARG:CG	2.34	0.45
1:A:424:ILE:O	1:A:424:ILE:HG22	2.16	0.45
1:A:558:ILE:HG23	1:A:612:ILE:CG2	2.46	0.45
1:A:566:LYS:HD2	1:A:625:LYS:HZ3	1.79	0.45
1:A:730:LEU:HG	1:A:730:LEU:O	2.17	0.45
1:A:1206:TRP:O	1:A:1210:ILE:HG13	2.16	0.45
1:A:1597:PRO:HG2	1:A:1625:TRP:CZ2	2.51	0.45
1:A:2055:LEU:HD23	1:A:2059:LEU:HB2	1.98	0.45
1:A:2365:LEU:CD1	1:A:2367:VAL:HB	2.45	0.45
2:B:45:ASP:O	2:B:147:LYS:HD3	2.16	0.45
2:B:47:ILE:HD13	2:B:445:TYR:HA	1.98	0.45
3:C:205:LEU:HD23	3:C:265:ILE:HG23	1.98	0.45
1:A:165:ARG:NE	1:A:165:ARG:HA	2.32	0.45
1:A:256:THR:O	1:A:260:LEU:HG	2.16	0.45
1:A:313:THR:O	1:A:313:THR:HG22	2.16	0.45
1:A:460:VAL:HB	1:A:473:ILE:HD13	1.97	0.45
1:A:633:ALA:O	1:A:636:PRO:HD2	2.16	0.45
1:A:748:TYR:O	1:A:750:PRO:HD3	2.16	0.45
1:A:1281:ASP:HB2	1:A:1282:PRO:CD	2.46	0.45
1:A:1349:LEU:HB3	1:A:1355:TYR:CE1	2.50	0.45
1:A:2099:LEU:O	1:A:2102:MET:HG2	2.16	0.45
1:A:2213:PRO:HG3	1:A:2342:LEU:HD22	1.97	0.45
1:A:2215:PHE:CA	1:A:2338:LEU:HB3	2.45	0.45

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2276:PRO:HG2	1:A:2280:MET:CE	2.46	0.45
1:A:2369:GLU:HG3	1:A:2369:GLU:O	2.16	0.45
3:C:417:LEU:HB2	3:C:418:PRO:CD	2.43	0.45
1:A:170:LYS:O	1:A:174:GLU:HB2	2.16	0.45
1:A:249:LYS:O	1:A:250:LEU:HD23	2.16	0.45
1:A:251:LEU:H	1:A:251:LEU:CD2	2.28	0.45
1:A:335:LEU:HA	1:A:336:THR:HA	1.61	0.45
1:A:504:LEU:HD13	2:B:359:CYS:CB	2.46	0.45
1:A:1411:LYS:C	1:A:1413:GLN:HB2	2.37	0.45
1:A:1596:GLU:CB	1:A:1597:PRO:HD2	2.47	0.45
1:A:1605:TYR:CB	1:A:1622:LEU:HD13	2.47	0.45
1:A:1664:GLU:HB3	1:A:1668:ARG:NH1	2.31	0.45
1:A:2388:VAL:HG12	1:A:2393:ARG:CD	2.46	0.45
2:B:47:ILE:HG22	2:B:142:TYR:CE1	2.51	0.45
1:A:150:SER:O	1:A:152:LEU:N	2.50	0.45
1:A:199:VAL:CB	1:A:263:VAL:HG22	2.46	0.45
1:A:247:GLU:H	1:A:253:LEU:CD1	2.27	0.45
1:A:249:LYS:HG2	1:A:297:VAL:CG2	2.46	0.45
1:A:408:VAL:O	1:A:412:ILE:HG12	2.17	0.45
1:A:458:GLU:CG	1:A:501:LEU:HD22	2.45	0.45
1:A:653:LEU:HD23	1:A:663:ALA:HB3	1.98	0.45
1:A:1034:ILE:HG22	1:A:1102:LYS:NZ	2.31	0.45
1:A:1197:ILE:HG23	1:A:1318:GLU:OE2	2.16	0.45
1:A:1858:TYR:HB3	1:A:1862:VAL:HG23	1.97	0.45
1:A:1954:GLU:O	1:A:1958:VAL:HG13	2.17	0.45
1:A:2155:LYS:HB3	1:A:2158:GLU:OE1	2.17	0.45
1:A:2171:SER:HA	1:A:2192:HIS:CE1	2.45	0.45
1:A:2183:GLN:CA	1:A:2184:GLU:C	2.85	0.45
1:A:2353:ILE:HG22	1:A:2354:ASP:H	1.79	0.45
2:B:137:LEU:N	2:B:154:THR:HG1	2.13	0.45
2:B:169:LEU:CD1	2:B:180:LEU:HD12	2.46	0.45
3:C:326:THR:HG22	3:C:326:THR:O	2.16	0.45
3:C:391:ILE:HG21	3:C:421:PHE:CE1	2.52	0.45
1:A:148:ARG:HA	1:A:153:LEU:HD22	1.99	0.45
1:A:484:ASP:OD2	1:A:498:ILE:HD11	2.17	0.45
1:A:716:ILE:HG23	1:A:720:LYS:HZ3	1.81	0.45
1:A:934:GLY:O	1:A:981:VAL:HG13	2.17	0.45
1:A:1184:ASN:ND2	1:A:1288:SER:HG	2.15	0.45
1:A:1307:ILE:CB	1:A:2306:THR:HG21	2.46	0.45
1:A:1486:GLU:OE1	1:A:1611:GLN:HB2	2.16	0.45
1:A:1711:LEU:HD22	1:A:1712:ILE:CD1	2.46	0.45

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2141:LEU:HD13	1:A:2151:PRO:HA	1.99	0.45
2:B:310:ARG:NH1	3:C:284:ASN:HD21	2.15	0.45
3:C:490:LEU:HD13	3:C:498:TYR:CG	2.52	0.45
1:A:207:LEU:N	1:A:207:LEU:HD12	2.31	0.45
1:A:903:ARG:N	1:A:903:ARG:HD2	2.31	0.45
1:A:1710:GLN:HA	1:A:1714:SER:HA	1.99	0.45
1:A:1796:LEU:HB2	1:A:1807:LEU:HD23	1.98	0.45
1:A:2325:SER:HB3	1:A:2374:ARG:HG3	1.98	0.45
1:A:2326:MET:HG3	1:A:2400:LEU:HD23	1.99	0.45
1:A:2410:LEU:H	1:A:2410:LEU:HD12	1.82	0.45
2:B:458:VAL:HG12	2:B:479:LEU:HD21	1.99	0.45
3:C:326:THR:HG21	3:C:390:MET:HE2	1.97	0.45
1:A:148:ARG:CA	1:A:153:LEU:HD22	2.47	0.45
1:A:148:ARG:CB	1:A:182:LYS:HG2	2.47	0.45
1:A:199:VAL:HG12	1:A:212:GLN:HE22	1.81	0.45
1:A:295:LYS:HB3	1:A:297:VAL:CG2	2.47	0.45
1:A:857:PHE:CZ	1:A:1190:ALA:HB2	2.52	0.45
1:A:1413:GLN:HE22	1:A:1460:GLN:HB2	1.82	0.45
1:A:1414:THR:CB	1:A:1415:VAL:HB	2.46	0.45
1:A:1462:LEU:CB	1:A:1470:SER:HB3	2.47	0.45
1:A:2023:HIS:HA	1:A:2026:SER:OG	2.17	0.45
2:B:225:ARG:HH22	3:C:519:LEU:HB3	1.80	0.45
2:B:237:VAL:CG2	2:B:482:ILE:HG21	2.47	0.45
2:B:521:MET:O	2:B:523:VAL:HG23	2.16	0.45
3:C:421:PHE:CE2	3:C:423:ASP:HB2	2.52	0.45
1:A:129:ALA:O	1:A:132:ASP:HB2	2.17	0.45
1:A:135:LYS:O	1:A:139:ARG:HG2	2.17	0.45
1:A:596:ALA:HA	1:A:597:PHE:HA	1.77	0.45
1:A:740:VAL:HG12	1:A:751:LEU:CD1	2.47	0.45
1:A:1352:LEU:HD12	1:A:1353:GLN:CA	2.43	0.45
1:A:2295:LEU:HB2	1:A:2379:ILE:HG21	1.99	0.45
3:C:335:GLN:NE2	3:C:394:LEU:O	2.50	0.45
1:A:274:GLN:CB	1:A:275:LEU:HA	2.47	0.45
1:A:275:LEU:H	1:A:276:VAL:HA	1.81	0.45
1:A:562:GLU:HG2	1:A:563:THR:N	2.32	0.45
1:A:809:SER:O	1:A:813:ILE:HG22	2.17	0.45
1:A:983:LEU:HD12	1:A:1015:PHE:CE1	2.50	0.45
1:A:1816:THR:HG23	1:A:1819:TRP:HE3	1.82	0.45
1:A:1835:VAL:HG22	1:A:1836:TYR:N	2.31	0.45
1:A:2089:ILE:HD11	1:A:2128:ILE:CD1	2.46	0.45
1:A:2137:PRO:HA	1:A:2154:PHE:O	2.16	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2162:LEU:O	1:A:2166:ILE:HG13	2.17	0.45
1:A:2317:TYR:HA	1:A:2348:GLY:O	2.17	0.45
2:B:315:SER:HB2	3:C:297:HIS:CD2	2.52	0.45
3:C:258:PHE:HZ	3:C:260:ILE:HD11	1.82	0.45
1:A:275:LEU:N	1:A:276:VAL:HA	2.32	0.45
1:A:294:CYS:C	1:A:295:LYS:HD3	2.37	0.45
1:A:481:TYR:O	1:A:485:GLN:HB2	2.17	0.45
1:A:556:LYS:O	1:A:569:LEU:HD13	2.16	0.45
1:A:1048:VAL:HG13	1:A:1052:PHE:CE2	2.42	0.45
1:A:1467:LYS:O	1:A:1471:THR:HG23	2.17	0.45
1:A:1610:VAL:HA	1:A:1611:GLN:HA	1.47	0.45
1:A:2169:PHE:CD1	1:A:2414:LEU:HD23	2.53	0.45
2:B:312:PHE:CB	2:B:318:LEU:HG	2.45	0.45
3:C:260:ILE:CG2	3:C:264:ARG:HA	2.46	0.45
1:A:134:ARG:HH22	1:A:155:ARG:HD3	1.82	0.44
1:A:365:LEU:HD22	1:A:401:LEU:CD1	2.47	0.44
1:A:1530:LYS:HZ1	1:A:1600:ILE:HD11	1.83	0.44
1:A:1645:LEU:HA	1:A:1648:ARG:HG2	1.99	0.44
1:A:2025:ARG:NH1	1:A:2053:GLU:HG2	2.32	0.44
3:C:311:LEU:O	3:C:315:CYS:HB2	2.17	0.44
1:A:471:MET:O	1:A:472:THR:OG1	2.30	0.44
1:A:656:HIS:CA	1:A:660:ILE:HD11	2.48	0.44
1:A:742:MET:HA	1:A:742:MET:HE2	2.00	0.44
1:A:820:LEU:HD13	1:A:885:ARG:CB	2.47	0.44
1:A:1054:LEU:HD13	1:A:1415:VAL:CG1	2.46	0.44
1:A:1077:VAL:O	1:A:1080:LEU:HD23	2.17	0.44
1:A:1334:PRO:HG2	1:A:1335:LEU:CD2	2.46	0.44
1:A:1856:ILE:O	1:A:1856:ILE:HG13	2.17	0.44
1:A:1958:VAL:O	1:A:1961:LEU:HD12	2.17	0.44
1:A:2276:PRO:HG2	1:A:2280:MET:HE2	2.00	0.44
2:B:152:LEU:HD12	2:B:152:LEU:O	2.17	0.44
2:B:205:SER:O	2:B:259:ARG:HA	2.17	0.44
2:B:296:PRO:HB3	3:C:246:LYS:CD	2.46	0.44
3:C:205:LEU:HB2	3:C:482:ARG:NH2	2.31	0.44
1:A:575:ALA:HA	3:C:453:LEU:HD12	1.99	0.44
1:A:638:VAL:H	1:A:639:PHE:HA	1.82	0.44
1:A:675:HIS:H	1:A:676:ASP:C	2.20	0.44
1:A:987:LEU:HG	1:A:988:GLU:N	2.27	0.44
1:A:1054:LEU:HB3	1:A:1415:VAL:HG11	1.98	0.44
1:A:1346:LEU:CD1	1:A:1349:LEU:HD11	2.45	0.44
1:A:1955:LEU:O	1:A:1958:VAL:HG22	2.18	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:48:CYS:SG	2:B:418:VAL:HG13	2.57	0.44
2:B:323:ILE:HG13	2:B:324:ASN:N	2.32	0.44
3:C:221:MET:HB3	3:C:238:PHE:CE2	2.52	0.44
3:C:413:VAL:HG12	3:C:413:VAL:O	2.17	0.44
1:A:276:VAL:CG1	1:A:280:LEU:HG	2.29	0.44
1:A:1318:GLU:O	1:A:1321:VAL:HG12	2.18	0.44
1:A:2212:THR:O	1:A:2343:ILE:HG22	2.16	0.44
1:A:2371:VAL:N	1:A:2372:PRO:CD	2.80	0.44
2:B:66:SER:O	2:B:70:THR:HG23	2.16	0.44
1:A:602:PHE:N	1:A:603:ASN:HA	2.32	0.44
1:A:770:VAL:HG11	1:A:814:ARG:HH12	1.82	0.44
1:A:822:LYS:HZ3	1:A:829:VAL:H	1.63	0.44
1:A:1521:VAL:HG13	1:A:1522:ALA:N	2.31	0.44
3:C:224:LEU:CD2	3:C:477:VAL:HG21	2.47	0.44
1:A:287:VAL:C	1:A:290:PRO:HD2	2.38	0.44
1:A:451:ALA:HB3	2:B:351:LEU:CD1	2.47	0.44
1:A:716:ILE:O	1:A:720:LYS:HG2	2.17	0.44
1:A:2055:LEU:HD13	1:A:2070:PRO:CG	2.48	0.44
1:A:2334:GLY:N	1:A:2357:VAL:O	2.47	0.44
1:A:2366:ARG:HA	1:A:2366:ARG:HE	1.81	0.44
2:B:49:VAL:HG22	2:B:149:LEU:HD23	2.00	0.44
2:B:541:GLY:N	3:C:339:MET:HG2	2.32	0.44
1:A:302:LEU:CD2	1:A:341:GLY:HA2	2.48	0.44
1:A:619:THR:HA	1:A:620:THR:HA	1.61	0.44
1:A:1664:GLU:O	1:A:1667:GLU:HG2	2.17	0.44
1:A:2423:VAL:HG22	1:A:2423:VAL:O	2.16	0.44
2:B:162:LEU:HD13	3:C:326:THR:CG2	2.47	0.44
3:C:241:GLN:O	4:C:601:GTP:O3'	2.30	0.44
3:C:301:GLU:O	3:C:305:LEU:HG	2.17	0.44
1:A:285:GLU:O	1:A:289:THR:HG23	2.18	0.44
1:A:1341:THR:HB	1:A:1405:GLN:HE22	1.83	0.44
1:A:1727:GLU:OE1	1:A:1731:LYS:N	2.51	0.44
1:A:1827:PHE:CE2	1:A:1859:PRO:HB2	2.52	0.44
2:B:264:ARG:CG	2:B:326:LEU:HD12	2.47	0.44
2:B:348:VAL:HG13	3:C:376:ARG:HH22	1.82	0.44
3:C:215:THR:HA	3:C:323:ASP:HB2	2.00	0.44
1:A:336:THR:HG23	1:A:336:THR:O	2.18	0.44
1:A:419:ILE:CG2	1:A:442:ALA:H	2.29	0.44
1:A:455:ALA:O	1:A:458:GLU:HG3	2.17	0.44
1:A:607:ALA:O	1:A:611:VAL:HG23	2.17	0.44
1:A:638:VAL:N	1:A:639:PHE:HA	2.33	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:671:HIS:CD2	1:A:672:CYS:H	2.35	0.44
1:A:734:TRP:HE3	3:C:201:GLN:HE22	1.64	0.44
1:A:866:ILE:CD1	1:A:1291:VAL:HG12	2.48	0.44
1:A:1207:GLN:HG2	1:A:1289:ILE:HG12	2.00	0.44
1:A:1610:VAL:HG23	1:A:1610:VAL:O	2.18	0.44
1:A:2170:LEU:HD11	1:A:2355:TYR:CE2	2.51	0.44
1:A:2376:THR:CG2	1:A:2388:VAL:HG11	2.48	0.44
2:B:7:LEU:O	2:B:11:LEU:HG	2.18	0.44
1:A:420:ARG:HA	1:A:423:PRO:CG	2.48	0.43
1:A:713:LEU:N	1:A:713:LEU:HD12	2.33	0.43
1:A:1292:GLN:CG	1:A:1322:LYS:HD3	2.48	0.43
1:A:1612:ALA:O	1:A:1619:TRP:NE1	2.44	0.43
1:A:1627:TYR:HD1	1:A:1791:ARG:HH11	1.66	0.43
1:A:2140:LEU:N	1:A:2140:LEU:HD23	2.33	0.43
2:B:63:GLU:HG3	2:B:270:GLN:HE22	1.83	0.43
2:B:260:PRO:O	2:B:441:GLU:HB3	2.18	0.43
1:A:729:LYS:CB	1:A:901:ILE:HD11	2.49	0.43
1:A:1092:ILE:H	1:A:1120:LYS:HZ3	1.65	0.43
1:A:1204:GLN:NE2	1:A:1322:LYS:HB2	2.32	0.43
1:A:1335:LEU:HG	1:A:1336:ARG:N	2.33	0.43
1:A:1793:LEU:O	1:A:1797:VAL:HG22	2.17	0.43
1:A:1844:LEU:HD23	1:A:1848:VAL:HG13	2.01	0.43
1:A:2023:HIS:CD2	1:A:2027:ILE:HG23	2.53	0.43
2:B:305:GLU:HG3	2:B:334:ALA:HB3	1.99	0.43
2:B:323:ILE:HG13	2:B:324:ASN:H	1.83	0.43
2:B:348:VAL:HG13	2:B:348:VAL:O	2.19	0.43
1:A:575:ALA:CA	3:C:453:LEU:HD12	2.48	0.43
1:A:649:VAL:HG11	1:A:667:THR:CB	2.29	0.43
1:A:895:LYS:HD3	1:A:907:LYS:HE2	2.00	0.43
1:A:1015:PHE:CZ	1:A:1080:LEU:HG	2.53	0.43
3:C:322:GLN:HG2	3:C:330:LEU:CD1	2.48	0.43
1:A:104:LEU:HD21	1:A:133:MET:HB3	1.99	0.43
1:A:262:THR:CG2	1:A:303:VAL:HG21	2.49	0.43
1:A:1521:VAL:HA	1:A:1522:ALA:HA	1.85	0.43
1:A:1713:SER:O	1:A:1714:SER:OG	2.27	0.43
1:A:1757:LEU:HB3	1:A:1816:THR:HG23	1.99	0.43
1:A:1816:THR:N	1:A:1817:ALA:HB2	2.32	0.43
1:A:1832:HIS:CD2	1:A:1834:GLU:H	2.36	0.43
1:A:1935:ASP:HA	1:A:1938:SER:HG	1.82	0.43
1:A:2055:LEU:CB	1:A:2070:PRO:HG2	2.48	0.43
1:A:2281:LYS:O	1:A:2285:GLU:HG2	2.18	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2388:VAL:CB	1:A:2393:ARG:HD3	2.47	0.43
1:A:2393:ARG:NH2	1:A:2397:GLU:OE2	2.51	0.43
1:A:295:LYS:HA	1:A:296:CYS:C	2.38	0.43
1:A:637:THR:HB	1:A:638:VAL:CA	2.49	0.43
1:A:1454:GLY:O	1:A:1458:THR:HG23	2.17	0.43
1:A:1827:PHE:HZ	1:A:1859:PRO:HB2	1.84	0.43
1:A:1838:ARG:HD3	1:A:1929:CYS:SG	2.58	0.43
1:A:2058:PRO:HG2	1:A:2059:LEU:CD1	2.49	0.43
1:A:2059:LEU:N	1:A:2059:LEU:HD12	2.33	0.43
1:A:2284:LEU:HD11	1:A:2288:MET:CE	2.47	0.43
2:B:57:ALA:HA	2:B:159:ASN:HD22	1.84	0.43
2:B:267:PHE:CE2	2:B:308:ILE:HG21	2.54	0.43
2:B:352:LEU:HD13	3:C:460:TYR:CD2	2.53	0.43
3:C:221:MET:HE2	3:C:221:MET:HA	2.01	0.43
3:C:295:LEU:HG	3:C:297:HIS:H	1.83	0.43
1:A:89:SER:O	1:A:126:ARG:NE	2.51	0.43
1:A:130:THR:O	1:A:133:MET:HB2	2.18	0.43
1:A:317:ASP:OD1	1:A:357:SER:HB2	2.18	0.43
1:A:365:LEU:HD11	1:A:401:LEU:HD21	1.99	0.43
1:A:420:ARG:NH2	1:A:446:VAL:HG12	2.33	0.43
1:A:489:CYS:CB	3:C:412:ASN:HD22	2.32	0.43
1:A:613:PHE:CD1	1:A:629:ILE:HD12	2.53	0.43
1:A:1027:LEU:HD22	1:A:1084:HIS:O	2.18	0.43
1:A:1305:ASN:HA	1:A:1306:PRO:HA	1.74	0.43
1:A:2067:SER:OG	1:A:2069:ILE:HG23	2.19	0.43
2:B:351:LEU:O	2:B:355:LEU:HG	2.19	0.43
3:C:213:GLN:HB2	3:C:276:PRO:HD2	2.00	0.43
1:A:379:ALA:HB3	1:A:382:GLU:CD	2.39	0.43
1:A:892:ARG:N	1:A:903:ARG:HE	2.16	0.43
1:A:1501:MET:O	1:A:1503:MET:HB2	2.19	0.43
1:A:1935:ASP:O	1:A:1939:SER:N	2.51	0.43
1:A:1959:THR:HA	1:A:1960:VAL:C	2.39	0.43
2:B:186:HIS:CD2	2:B:493:THR:HG22	2.53	0.43
2:B:328:THR:O	2:B:328:THR:HG22	2.19	0.43
3:C:207:VAL:HG21	3:C:477:VAL:HG13	2.01	0.43
1:A:81:GLN:HB3	1:A:113:VAL:HG22	2.01	0.43
1:A:285:GLU:OE1	1:A:285:GLU:N	2.51	0.43
1:A:463:LEU:HD21	1:A:509:GLU:OE1	2.19	0.43
1:A:554:SER:OG	1:A:608:LYS:HE3	2.17	0.43
1:A:1306:PRO:HB2	1:A:2306:THR:HG22	2.00	0.43
1:A:2166:ILE:O	1:A:2170:LEU:HG	2.18	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2273:ARG:H	1:A:2274:ASP:HB3	1.82	0.43
1:A:2342:LEU:CD1	1:A:2353:ILE:HD11	2.47	0.43
1:A:2385:VAL:HG22	1:A:2386:THR:HG23	2.00	0.43
2:B:46:GLU:HB3	2:B:442:LEU:HD21	2.00	0.43
2:B:154:THR:HB	2:B:161:GLN:HE21	1.82	0.43
2:B:240:LEU:HD11	2:B:478:ILE:HG22	2.00	0.43
2:B:271:LEU:HG	2:B:336:VAL:CG1	2.49	0.43
2:B:441:GLU:O	2:B:441:GLU:HG3	2.18	0.43
1:A:552:VAL:HG22	1:A:556:LYS:CD	2.49	0.43
1:A:739:ALA:CA	3:C:172:LEU:HD23	2.48	0.43
1:A:932:PRO:O	1:A:933:LEU:HD23	2.19	0.43
1:A:1523:LYS:HG3	1:A:1524:SER:N	2.33	0.43
1:A:1955:LEU:HA	1:A:1958:VAL:HG22	2.01	0.43
1:A:2055:LEU:HD13	1:A:2070:PRO:HG2	2.01	0.43
2:B:509:SER:HA	2:B:512:GLN:CD	2.39	0.43
3:C:456:LEU:HD12	3:C:456:LEU:N	2.34	0.43
1:A:206:LEU:HD12	1:A:206:LEU:N	2.34	0.43
1:A:429:VAL:O	1:A:430:THR:OG1	2.32	0.43
1:A:767:ASN:HD22	1:A:806:LEU:HD22	1.81	0.43
1:A:866:ILE:HD13	1:A:1291:VAL:CG1	2.49	0.43
1:A:881:ASN:HD22	1:A:1306:PRO:HB3	1.84	0.43
1:A:903:ARG:HD2	1:A:903:ARG:H	1.83	0.43
1:A:1478:LYS:NZ	1:A:1532:ILE:HG21	2.33	0.43
1:A:1981:ILE:CG1	1:A:2067:SER:HA	2.49	0.43
1:A:2388:VAL:CG1	1:A:2393:ARG:HD3	2.48	0.43
2:B:48:CYS:SG	2:B:422:LEU:HD21	2.59	0.43
3:C:205:LEU:CB	3:C:482:ARG:HH22	2.32	0.43
3:C:454:PHE:O	3:C:457:LEU:HG	2.19	0.43
1:A:122:GLN:HG2	1:A:126:ARG:HD2	2.00	0.42
1:A:1037:VAL:O	1:A:1037:VAL:HG12	2.19	0.42
1:A:1040:LEU:H	1:A:1040:LEU:CD2	2.32	0.42
1:A:1526:LEU:HD12	1:A:1526:LEU:N	2.34	0.42
1:A:1834:GLU:O	1:A:1837:VAL:HG22	2.18	0.42
1:A:2069:ILE:N	1:A:2070:PRO:CD	2.82	0.42
1:A:2215:PHE:HB2	1:A:2338:LEU:HB2	2.01	0.42
2:B:6:SER:HB3	2:B:138:LEU:O	2.19	0.42
2:B:238:LEU:CD1	2:B:258:CYS:HB2	2.49	0.42
1:A:389:PRO:N	1:A:390:PRO:CD	2.83	0.42
1:A:718:LEU:HD12	1:A:718:LEU:N	2.33	0.42
1:A:863:SER:HB3	1:A:869:ILE:CG1	2.41	0.42
1:A:1349:LEU:HD23	1:A:1355:TYR:CZ	2.54	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1483:LEU:HD23	1:A:1484:ASP:N	2.33	0.42
1:A:807:VAL:HA	1:A:808:HIS:HA	1.55	0.42
1:A:1086:PRO:HB3	1:A:1090:GLN:CB	2.49	0.42
1:A:1414:THR:HA	1:A:1415:VAL:CB	2.48	0.42
1:A:1844:LEU:O	1:A:1844:LEU:HD23	2.18	0.42
1:A:2120:THR:C	1:A:2144:GLY:HA3	2.40	0.42
1:A:2141:LEU:HD13	1:A:2151:PRO:HB3	2.01	0.42
1:A:2207:TRP:NE1	1:A:2208:VAL:HG12	2.34	0.42
1:A:2410:LEU:HD12	1:A:2410:LEU:N	2.34	0.42
2:B:49:VAL:HG13	2:B:149:LEU:O	2.19	0.42
3:C:178:LYS:O	3:C:179:HIS:ND1	2.49	0.42
3:C:204:VAL:O	3:C:204:VAL:HG13	2.20	0.42
3:C:213:GLN:HE21	3:C:276:PRO:HD2	1.84	0.42
1:A:332:LYS:N	1:A:333:PRO:CD	2.82	0.42
1:A:388:VAL:N	1:A:389:PRO:CD	2.82	0.42
1:A:422:PRO:HG3	1:A:428:TYR:OH	2.19	0.42
1:A:552:VAL:O	1:A:556:LYS:HG3	2.20	0.42
1:A:881:ASN:ND2	1:A:1306:PRO:HB3	2.35	0.42
1:A:1417:ILE:O	1:A:1421:LEU:HG	2.18	0.42
1:A:1650:LYS:O	1:A:1653:VAL:HG12	2.19	0.42
1:A:2055:LEU:CD2	1:A:2059:LEU:HB2	2.50	0.42
1:A:2153:LEU:C	1:A:2153:LEU:HD12	2.40	0.42
2:B:233:LEU:O	2:B:237:VAL:HB	2.18	0.42
2:B:479:LEU:HD12	2:B:479:LEU:N	2.33	0.42
1:A:202:GLU:HA	1:A:205:LYS:HE3	2.00	0.42
1:A:295:LYS:CA	1:A:296:CYS:CB	2.95	0.42
1:A:365:LEU:HD13	1:A:401:LEU:HD21	2.01	0.42
1:A:621:ILE:HG23	1:A:621:ILE:O	2.20	0.42
1:A:762:LYS:HD2	1:A:763:GLY:N	2.34	0.42
1:A:931:THR:HB	1:A:932:PRO:CD	2.49	0.42
1:A:1316:ILE:O	1:A:1320:VAL:HG23	2.20	0.42
1:A:1415:VAL:HG22	1:A:1415:VAL:O	2.18	0.42
1:A:1483:LEU:HD23	1:A:1485:ILE:HG13	2.01	0.42
1:A:1586:SER:HB3	1:A:1591:HIS:CD2	2.55	0.42
1:A:1807:LEU:N	1:A:1807:LEU:HD12	2.34	0.42
1:A:1832:HIS:CG	1:A:1837:VAL:HG21	2.54	0.42
1:A:2169:PHE:HZ	1:A:2411:LEU:HD13	1.84	0.42
1:A:2177:PHE:CZ	1:A:2400:LEU:HD11	2.54	0.42
1:A:2194:SER:H	1:A:2206:GLN:HE21	1.67	0.42
1:A:2277:LEU:CB	1:A:2278:HIS:CB	2.92	0.42
1:A:2284:LEU:HD11	1:A:2288:MET:HE2	2.01	0.42

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:272:ASN:O	3:C:428:LEU:HD11	2.19	0.42
2:B:482:ILE:HG22	2:B:482:ILE:O	2.19	0.42
3:C:188:MET:HB2	3:C:507:ARG:NH1	2.33	0.42
3:C:198:LEU:HD23	3:C:260:ILE:CD1	2.50	0.42
1:A:347:GLU:HB2	1:A:348:PRO:HD3	2.01	0.42
1:A:566:LYS:HZ1	1:A:620:THR:HG23	1.83	0.42
1:A:1293:LEU:HD22	1:A:1322:LYS:CD	2.50	0.42
1:A:1638:SER:HA	1:A:1676:ALA:HA	2.01	0.42
1:A:2167:MET:HG3	1:A:2193:TYR:O	2.19	0.42
1:A:2341:VAL:CG2	1:A:2375:MET:HE3	2.49	0.42
3:C:341:LYS:HE3	3:C:363:TYR:O	2.19	0.42
1:A:80:ILE:HG21	1:A:106:GLN:NE2	2.21	0.42
1:A:131:LYS:HE3	1:A:159:GLU:CB	2.50	0.42
1:A:410:ARG:NH1	1:A:471:MET:H	2.16	0.42
1:A:503:LEU:HD13	1:A:572:MET:CE	2.50	0.42
1:A:554:SER:CB	1:A:608:LYS:HE3	2.50	0.42
1:A:1832:HIS:CB	1:A:1837:VAL:HG21	2.49	0.42
1:A:2166:ILE:HD11	1:A:2358:CYS:SG	2.60	0.42
1:A:2177:PHE:O	1:A:2181:ASN:N	2.53	0.42
1:A:2356:ASN:OD1	1:A:2357:VAL:N	2.53	0.42
1:A:118:PHE:CE1	1:A:158:ARG:HG2	2.54	0.42
1:A:163:ASP:HB3	1:A:171:GLN:HG3	2.02	0.42
1:A:473:ILE:HA	1:A:476:ASP:CB	2.47	0.42
1:A:812:ARG:HA	1:A:812:ARG:HE	1.84	0.42
1:A:1324:LEU:HD22	1:A:1337:LEU:HB2	2.01	0.42
1:A:1489:LYS:O	1:A:1493:THR:HG23	2.20	0.42
1:A:1816:THR:HG1	1:A:1819:TRP:HE3	1.65	0.42
1:A:2099:LEU:HA	1:A:2102:MET:SD	2.59	0.42
1:A:2212:THR:HG22	1:A:2345:MET:HG2	2.00	0.42
2:B:268:LEU:HB3	2:B:337:TYR:CZ	2.53	0.42
2:B:520:THR:HG22	2:B:558:PHE:CD2	2.54	0.42
3:C:379:PHE:CD2	3:C:463:HIS:HB3	2.54	0.42
1:A:190:ASP:CA	1:A:193:LEU:HG	2.48	0.42
1:A:364:PHE:CD2	1:A:365:LEU:HD12	2.41	0.42
1:A:1462:LEU:HB2	1:A:1470:SER:HB3	2.02	0.42
1:A:1756:LYS:HZ2	1:A:1785:ILE:HG22	1.84	0.42
1:A:1961:LEU:HD12	1:A:1961:LEU:H	1.85	0.42
1:A:2340:ASN:O	1:A:2352:HIS:HA	2.19	0.42
3:C:270:THR:CG2	3:C:311:LEU:HD21	2.49	0.42
3:C:477:VAL:HA	3:C:480:MET:HG2	2.02	0.42
1:A:138:GLU:HG2	1:A:147:SER:HA	2.01	0.42

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:305:ARG:HA	1:A:332:LYS:NZ	2.33	0.42
1:A:329:HIS:NE2	1:A:348:PRO:HB3	2.35	0.42
1:A:386:GLU:O	1:A:390:PRO:HD3	2.20	0.42
1:A:387:ASP:O	1:A:390:PRO:HD2	2.20	0.42
1:A:1139:ILE:HD13	1:A:1207:GLN:NE2	2.32	0.42
1:A:1514:SER:O	1:A:1519:TYR:HB3	2.19	0.42
1:A:1750:ALA:O	1:A:1754:PHE:HD2	2.03	0.42
1:A:1816:THR:CG2	1:A:1819:TRP:HE3	2.33	0.42
1:A:2053:GLU:HB2	1:A:2057:THR:HG1	1.85	0.42
1:A:2153:LEU:CD1	1:A:2205:ILE:HG12	2.50	0.42
1:A:2195:VAL:HA	1:A:2205:ILE:CG2	2.36	0.42
1:A:2256:LYS:HD2	1:A:2287:LEU:HD21	2.00	0.42
1:A:2273:ARG:H	1:A:2274:ASP:HA	1.83	0.42
2:B:216:THR:O	2:B:217:CYS:HB2	2.19	0.42
3:C:220:VAL:O	3:C:224:LEU:HD13	2.20	0.42
3:C:427:ASN:HD21	3:C:466:PHE:HB2	1.85	0.42
3:C:464:PRO:HB2	3:C:469:LEU:HD21	2.01	0.42
1:A:153:LEU:HD23	1:A:187:LYS:HZ1	1.83	0.41
1:A:573:THR:HB	1:A:609:PHE:HZ	1.84	0.41
1:A:714:LEU:N	1:A:714:LEU:HD22	2.35	0.41
1:A:1021:GLN:NE2	1:A:1025:ASP:OD2	2.53	0.41
1:A:1934:VAL:O	1:A:1938:SER:OG	2.34	0.41
1:A:2089:ILE:HD11	1:A:2128:ILE:HD12	2.02	0.41
1:A:2180:ILE:HG21	1:A:2403:MET:HE2	2.02	0.41
1:A:2376:THR:O	1:A:2376:THR:HG22	2.20	0.41
2:B:496:SER:HG	2:B:543:ALA:HB2	1.85	0.41
2:B:524:HIS:O	2:B:527:GLN:HG3	2.19	0.41
1:A:292:LEU:HD11	1:A:327:ILE:CG1	2.50	0.41
1:A:542:VAL:O	1:A:542:VAL:HG13	2.19	0.41
1:A:566:LYS:HB2	1:A:625:LYS:CE	2.49	0.41
1:A:1083:LEU:HD12	1:A:1083:LEU:N	2.36	0.41
1:A:1339:THR:OG1	1:A:1340:LEU:N	2.53	0.41
1:A:1352:LEU:HA	1:A:1353:GLN:HA	1.50	0.41
1:A:2296:LEU:HD21	1:A:2343:ILE:HD12	2.02	0.41
2:B:313:ARG:HD3	2:B:327:PHE:CE2	2.55	0.41
1:A:409:VAL:HG13	1:A:453:LEU:CD2	2.40	0.41
1:A:712:ASN:O	1:A:716:ILE:HG13	2.19	0.41
1:A:893:LEU:HD23	1:A:910:ALA:O	2.20	0.41
1:A:1942:PRO:HA	1:A:1945:VAL:CG2	2.47	0.41
1:A:1989:LYS:HD2	1:A:1989:LYS:C	2.41	0.41
1:A:115:SER:HB2	1:A:116:PRO:HD3	2.02	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:338:GLN:NE2	2:B:145:GLU:OE2	2.54	0.41
1:A:376:SER:OG	1:A:386:GLU:OE1	2.24	0.41
1:A:389:PRO:HB2	1:A:390:PRO:HD3	2.03	0.41
1:A:492:CYS:O	3:C:460:TYR:OH	2.28	0.41
1:A:503:LEU:CD1	1:A:572:MET:HG3	2.48	0.41
1:A:866:ILE:HD13	1:A:1291:VAL:HG12	2.01	0.41
1:A:1133:THR:O	1:A:1133:THR:HG22	2.20	0.41
1:A:1459:ALA:HB1	1:A:1474:GLN:HG2	2.02	0.41
1:A:1943:THR:HG23	1:A:1944:MET:N	2.35	0.41
1:A:2055:LEU:HD23	1:A:2055:LEU:C	2.41	0.41
1:A:2057:THR:HB	1:A:2058:PRO:CD	2.51	0.41
1:A:2135:THR:HA	1:A:2136:LYS:HA	1.68	0.41
1:A:2330:ILE:HD12	1:A:2404:ARG:HD2	2.02	0.41
1:A:2365:LEU:HB3	1:A:2366:ARG:HB3	2.02	0.41
1:A:2371:VAL:N	1:A:2372:PRO:HD3	2.35	0.41
1:A:2374:ARG:NH1	1:A:3641:ILE:HA	2.35	0.41
2:B:170:GLN:OE1	3:C:389:LEU:HD22	2.20	0.41
2:B:350:MET:O	2:B:354:GLN:HG3	2.20	0.41
3:C:322:GLN:HG2	3:C:330:LEU:HD13	2.01	0.41
3:C:340:VAL:O	3:C:340:VAL:HG12	2.20	0.41
1:A:295:LYS:HB3	1:A:297:VAL:HB	2.02	0.41
1:A:771:GLU:OE1	1:A:773:VAL:HG22	2.21	0.41
1:A:822:LYS:NZ	1:A:830:LEU:HG	2.35	0.41
1:A:976:ASN:ND2	1:A:1077:VAL:HG11	2.36	0.41
1:A:1078:GLU:OE1	1:A:1078:GLU:HA	2.20	0.41
1:A:2365:LEU:CB	1:A:2367:VAL:HB	2.50	0.41
2:B:214:HIS:CE1	2:B:216:THR:HB	2.56	0.41
2:B:356:ARG:O	2:B:360:THR:HG23	2.21	0.41
3:C:405:THR:O	3:C:406:LEU:HG	2.20	0.41
1:A:130:THR:HG23	1:A:131:LYS:N	2.34	0.41
1:A:136:SER:HA	1:A:139:ARG:HD3	2.02	0.41
1:A:189:LEU:N	1:A:189:LEU:HD23	2.36	0.41
1:A:253:LEU:O	1:A:256:THR:HG22	2.21	0.41
1:A:1011:VAL:HG21	1:A:1074:MET:HE2	2.03	0.41
1:A:1453:LEU:HD22	1:A:1453:LEU:N	2.35	0.41
2:B:221:ILE:CD1	3:C:279:LEU:HD22	2.50	0.41
3:C:205:LEU:CA	3:C:482:ARG:HH22	2.33	0.41
3:C:279:LEU:HD21	3:C:297:HIS:ND1	2.35	0.41
1:A:85:LYS:CD	1:A:116:PRO:HG2	2.47	0.41
1:A:171:GLN:HA	1:A:175:PHE:HD1	1.86	0.41
1:A:275:LEU:HB2	1:A:277:MET:N	2.36	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:494:THR:O	1:A:497:ILE:HG22	2.21	0.41
1:A:510:GLN:OE1	1:A:510:GLN:HA	2.20	0.41
1:A:1040:LEU:HD23	1:A:1040:LEU:N	2.35	0.41
1:A:1341:THR:HB	1:A:1405:GLN:NE2	2.36	0.41
1:A:1511:PHE:CB	1:A:1526:LEU:HD23	2.51	0.41
2:B:183:ALA:O	2:B:187:GLU:HG3	2.21	0.41
2:B:539:ALA:O	2:B:540:ARG:HD3	2.21	0.41
1:A:203:SER:HB2	1:A:259:ALA:HB2	2.03	0.41
1:A:237:PHE:O	1:A:240:PHE:HB3	2.21	0.41
1:A:350:TRP:O	1:A:354:LEU:HG	2.20	0.41
1:A:566:LYS:HZ2	1:A:620:THR:HG23	1.84	0.41
1:A:1204:GLN:HE21	1:A:1322:LYS:HB2	1.86	0.41
1:A:1609:SER:HB2	1:A:1619:TRP:CH2	2.55	0.41
2:B:208:HIS:CB	2:B:209:ILE:HD12	2.50	0.41
2:B:305:GLU:CG	2:B:334:ALA:HB3	2.51	0.41
1:A:40:ASP:OD1	1:A:80:ILE:HG12	2.21	0.41
1:A:122:GLN:HG3	1:A:126:ARG:HH11	1.85	0.41
1:A:472:THR:OG1	1:A:475:CYS:HB2	2.20	0.41
1:A:510:GLN:NE2	1:A:576:LEU:HD13	2.35	0.41
1:A:559:PRO:O	1:A:560:VAL:C	2.59	0.41
1:A:826:LEU:HD22	1:A:909:ASP:CG	2.40	0.41
1:A:926:LEU:HD21	1:A:941:GLN:N	2.36	0.41
1:A:978:LEU:HD12	1:A:978:LEU:N	2.36	0.41
1:A:982:LEU:CD1	1:A:992:LYS:HG2	2.50	0.41
1:A:990:LEU:HB2	1:A:2392:PHE:HD1	1.81	0.41
1:A:1071:VAL:CG1	1:A:1074:MET:H	2.34	0.41
1:A:1529:ALA:HA	1:A:1532:ILE:HG22	2.03	0.41
1:A:1657:LEU:HD12	1:A:1658:PRO:HA	2.03	0.41
1:A:2275:TRP:CB	1:A:2277:LEU:HD23	2.51	0.41
1:A:2341:VAL:HG21	1:A:2375:MET:HE3	2.02	0.41
2:B:68:VAL:HG11	2:B:77:PHE:HE2	1.84	0.41
3:C:182:LYS:HA	3:C:257:ASP:HA	2.02	0.41
1:A:178:GLN:N	1:A:179:PRO:HD2	2.36	0.41
1:A:215:ALA:HA	1:A:218:LEU:CD1	2.34	0.41
1:A:343:LEU:HD12	1:A:343:LEU:N	2.36	0.41
1:A:361:LEU:CA	1:A:401:LEU:HD13	2.43	0.41
1:A:1526:LEU:HD12	1:A:1526:LEU:H	1.85	0.41
1:A:1529:ALA:O	1:A:1532:ILE:HG22	2.20	0.41
1:A:1945:VAL:HA	1:A:1948:VAL:HG22	2.03	0.41
1:A:2178:ALA:HA	1:A:2181:ASN:HB2	2.03	0.41
1:A:2273:ARG:H	1:A:2274:ASP:CA	2.34	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2294:ASN:HB2	1:A:2298:LYS:HG2	2.02	0.41
2:B:200:LEU:HG	2:B:204:PHE:CE2	2.56	0.41
1:A:184:VAL:HG23	1:A:185:LEU:N	2.37	0.40
1:A:338:GLN:OE1	2:B:74:ARG:NE	2.41	0.40
1:A:468:ASP:N	1:A:469:PRO:CD	2.84	0.40
1:A:495:ASP:HB3	1:A:565:TYR:HE1	1.85	0.40
1:A:888:TYR:HE1	1:A:2301:TRP:CE2	2.39	0.40
1:A:1818:PRO:HB3	1:A:1848:VAL:HG12	1.99	0.40
1:A:2042:ASP:HA	1:A:2046:ASP:HB2	2.02	0.40
1:A:262:THR:HG23	1:A:303:VAL:HG21	2.03	0.40
1:A:387:ASP:O	1:A:391:PRO:CD	2.70	0.40
1:A:510:GLN:HG2	1:A:579:LEU:CD1	2.48	0.40
1:A:770:VAL:HG11	1:A:814:ARG:NH1	2.36	0.40
1:A:978:LEU:HD23	1:A:995:TYR:OH	2.21	0.40
1:A:1071:VAL:HG12	1:A:1073:ILE:H	1.85	0.40
1:A:1086:PRO:HB3	1:A:1090:GLN:C	2.42	0.40
1:A:1794:ARG:HA	1:A:1797:VAL:HG22	2.03	0.40
1:A:2141:LEU:HD22	1:A:2141:LEU:N	2.35	0.40
1:A:2153:LEU:CD2	1:A:2207:TRP:HE3	2.34	0.40
1:A:2248:ARG:H	1:A:2251:GLU:CG	2.34	0.40
2:B:304:LEU:O	2:B:308:ILE:HG13	2.21	0.40
2:B:306:ASP:O	2:B:310:ARG:HG3	2.21	0.40
1:A:204:SER:O	1:A:206:LEU:HD12	2.21	0.40
1:A:275:LEU:CB	1:A:276:VAL:HA	2.31	0.40
1:A:378:VAL:H	2:B:79:LEU:HD21	1.85	0.40
1:A:1348:VAL:O	1:A:1349:LEU:C	2.60	0.40
1:A:1986:ASP:O	1:A:1990:ARG:HG3	2.20	0.40
1:A:2169:PHE:HE1	1:A:2411:LEU:HB3	1.85	0.40
1:A:2191:ARG:HB3	1:A:2351:VAL:HG12	2.04	0.40
1:A:2221:TRP:HA	1:A:2224:ARG:NH2	2.37	0.40
1:A:2376:THR:HG22	1:A:2381:THR:CG2	2.51	0.40
2:B:270:GLN:HA	2:B:337:TYR:HB2	2.02	0.40
2:B:511:TYR:CE2	2:B:530:GLN:HG3	2.56	0.40
2:B:540:ARG:HB3	3:C:339:MET:CB	2.52	0.40
1:A:200:LEU:HD12	1:A:200:LEU:N	2.35	0.40
1:A:295:LYS:N	1:A:296:CYS:HB3	2.37	0.40
1:A:554:SER:HB3	1:A:608:LYS:HE3	2.03	0.40
1:A:734:TRP:CB	1:A:737:GLU:HB3	2.51	0.40
1:A:739:ALA:HA	3:C:172:LEU:HD23	2.03	0.40
1:A:1114:ALA:CB	1:A:1117:ARG:HH21	2.34	0.40
1:A:1324:LEU:HD13	1:A:1339:THR:H	1.87	0.40

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1325:LYS:HE2	1:A:1325:LYS:CA	2.40	0.40
2:B:234:ARG:HH21	2:B:259:ARG:NH1	2.19	0.40
2:B:268:LEU:HD13	2:B:337:TYR:OH	2.22	0.40
3:C:192:ASP:OD1	3:C:195:ILE:HD13	2.22	0.40
1:A:189:LEU:HD23	1:A:189:LEU:H	1.86	0.40
1:A:361:LEU:HA	1:A:401:LEU:CD1	2.43	0.40
1:A:405:PHE:O	1:A:409:VAL:HG23	2.21	0.40
1:A:441:THR:HG1	1:A:446:VAL:HG22	1.87	0.40
1:A:576:LEU:O	1:A:580:LEU:HG	2.21	0.40
1:A:832:ASN:CB	1:A:836:THR:HG21	2.52	0.40
1:A:1027:LEU:O	1:A:1031:ARG:HG3	2.21	0.40
1:A:1655:ASN:HD22	1:A:1663:GLU:CD	2.24	0.40
1:A:1861:ILE:CD1	1:A:1948:VAL:HG23	2.51	0.40
1:A:2247:PRO:HB2	1:A:2248:ARG:C	2.42	0.40
1:A:2295:LEU:HB2	1:A:2379:ILE:CG2	2.52	0.40
2:B:158:ASP:OD2	2:B:160:SER:HB3	2.20	0.40
2:B:264:ARG:HG3	2:B:326:LEU:HD12	2.03	0.40
2:B:297:LYS:HD2	2:B:336:VAL:O	2.21	0.40
2:B:348:VAL:O	3:C:376:ARG:NH2	2.55	0.40
2:B:434:ASN:HB3	2:B:435:PRO:CD	2.52	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	1853/3661 (51%)	1684 (91%)	168 (9%)	1 (0%)	51	83
2	B	373/991 (38%)	345 (92%)	28 (8%)	0	100	100
3	C	300/520 (58%)	274 (91%)	26 (9%)	0	100	100
All	All	2526/5172 (49%)	2303 (91%)	222 (9%)	1 (0%)	100	100

All (1) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1086	PRO

### 5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	1398/3224 (43%)	1379 (99%)	19 (1%)	67	85
2	B	351/847 (41%)	348 (99%)	3 (1%)	78	90
3	C	279/450 (62%)	277 (99%)	2 (1%)	84	93
All	All	2028/4521 (45%)	2004 (99%)	24 (1%)	72	87

All (24) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	149	LEU
1	A	257	TYR
1	A	266	LYS
1	A	285	GLU
1	A	613	PHE
1	A	762	LYS
1	A	773	VAL
1	A	985	GLN
1	A	1464	GLN
1	A	1521	VAL
1	A	1727	GLU
1	A	1756	LYS
1	A	1816	THR
1	A	1964	GLU
1	A	1989	LYS
1	A	2193	TYR
1	A	2253	TYR
1	A	2279	VAL
1	A	2374	ARG
2	B	212	LEU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
2	B	234	ARG
2	B	408	PHE
3	C	234	ARG
3	C	248	ARG

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (56) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	71	HIS
1	A	171	GLN
1	A	197	HIS
1	A	212	GLN
1	A	314	ASN
1	A	600	HIS
1	A	645	ASN
1	A	671	HIS
1	A	677	HIS
1	A	767	ASN
1	A	858	HIS
1	A	881	ASN
1	A	891	GLN
1	A	898	GLN
1	A	976	ASN
1	A	1090	GLN
1	A	1103	ASN
1	A	1113	GLN
1	A	1184	ASN
1	A	1204	GLN
1	A	1211	HIS
1	A	1362	ASN
1	A	1405	GLN
1	A	1474	GLN
1	A	1499	HIS
1	A	1533	GLN
1	A	1591	HIS
1	A	1654	GLN
1	A	1825	GLN
1	A	1832	HIS
1	A	2168	GLN
1	A	2189	HIS
1	A	2192	HIS
1	A	2206	GLN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2229	GLN
2	B	139	GLN
2	B	159	ASN
2	B	192	GLN
2	B	196	GLN
2	B	257	ASN
2	B	307	GLN
2	B	321	GLN
2	B	354	GLN
2	B	436	GLN
2	B	527	GLN
2	B	530	GLN
2	B	538	HIS
3	C	271	GLN
3	C	281	HIS
3	C	284	ASN
3	C	303	GLN
3	C	322	GLN
3	C	371	GLN
3	C	393	GLN
3	C	412	ASN
3	C	463	HIS

### 5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

## 5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

## 5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 2 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 1 for Mogul analysis.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and



the number of bonds (or angles) that are defined in the Chemical Component Dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. 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  $|Z| > 2$  is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# $ Z  > 2$	Counts	RMSZ	# $ Z  > 2$
4	GTP	C	601	5	26,34,34	1.13	2 (7%)	32,54,54	1.65	7 (21%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the Chemical Component Dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
4	GTP	C	601	5	-	5/18/38/38	0/3/3/3

All (2) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
4	C	601	GTP	C5-C6	-4.01	1.39	1.47
4	C	601	GTP	C2-N3	2.21	1.38	1.33

All (7) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
4	C	601	GTP	PA-O3A-PB	-4.26	118.21	132.83
4	C	601	GTP	PB-O3B-PG	-3.54	120.67	132.83
4	C	601	GTP	C5-C6-N1	3.18	119.58	113.95
4	C	601	GTP	C8-N7-C5	2.98	108.66	102.99
4	C	601	GTP	C3'-C2'-C1'	2.86	105.29	100.98
4	C	601	GTP	C2-N1-C6	-2.80	119.94	125.10
4	C	601	GTP	O6-C6-C5	-2.13	120.21	124.37

There are no chirality outliers.

All (5) torsion outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
4	C	601	GTP	C5'-O5'-PA-O3A
4	C	601	GTP	C3'-C4'-C5'-O5'
4	C	601	GTP	O4'-C4'-C5'-O5'
4	C	601	GTP	C5'-O5'-PA-O1A

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

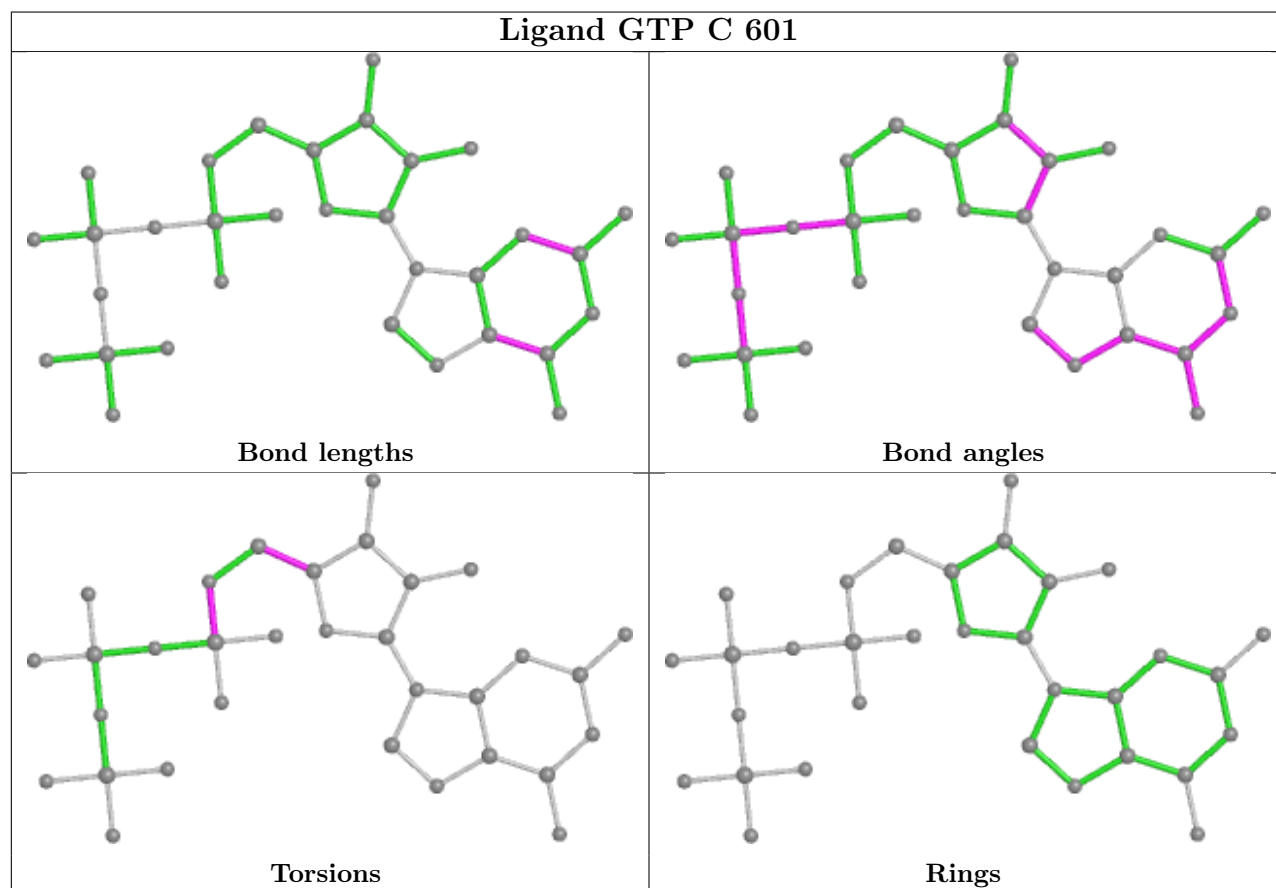
Mol	Chain	Res	Type	Atoms
4	C	601	GTP	C5'-O5'-PA-O2A

There are no ring outliers.

1 monomer is involved in 9 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
4	C	601	GTP	9	0

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less than 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient equivalents in the CSD to analyse the geometry.



## 5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

## 5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

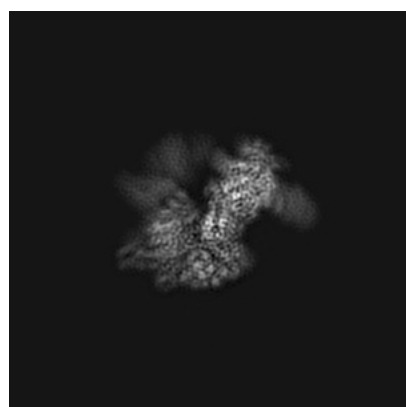
## 6 Map visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-0837. These allow visual inspection of the internal detail of the map and identification of artifacts.

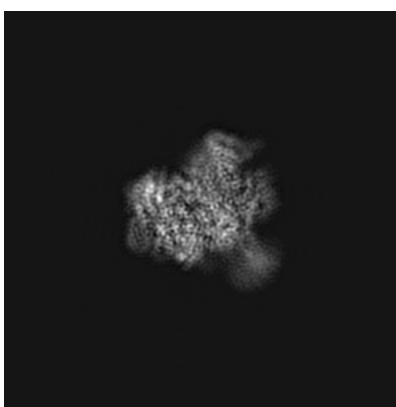
No raw map or half-maps were deposited for this entry and therefore no images, graphs, etc. pertaining to the raw map can be shown.

### 6.1 Orthogonal projections [i](#)

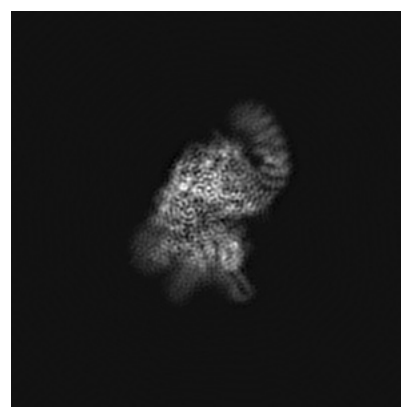
#### 6.1.1 Primary map



X



Y

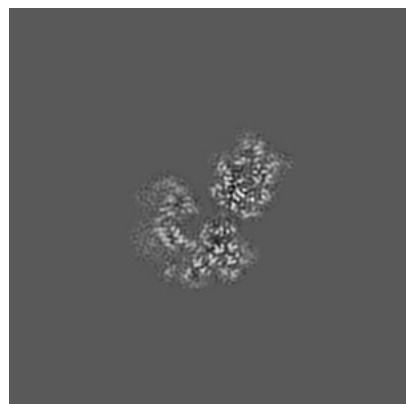


Z

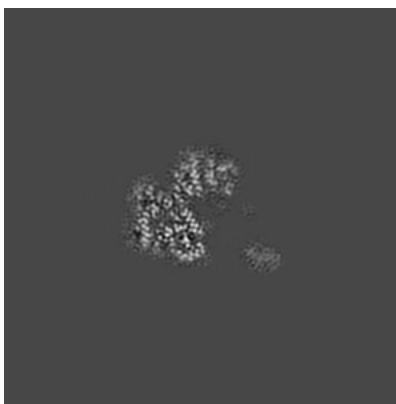
The images above show the map projected in three orthogonal directions.

### 6.2 Central slices [i](#)

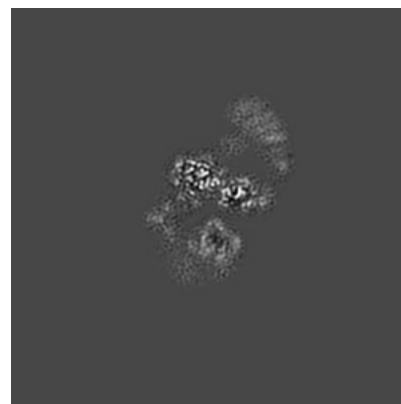
#### 6.2.1 Primary map



X Index: 160



Y Index: 160

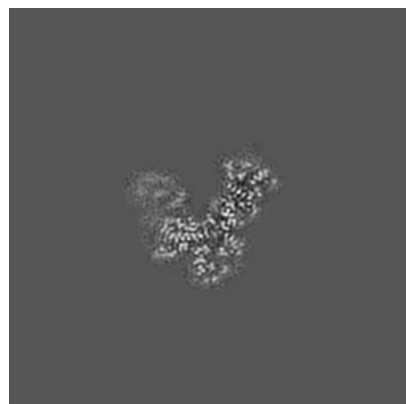


Z Index: 160

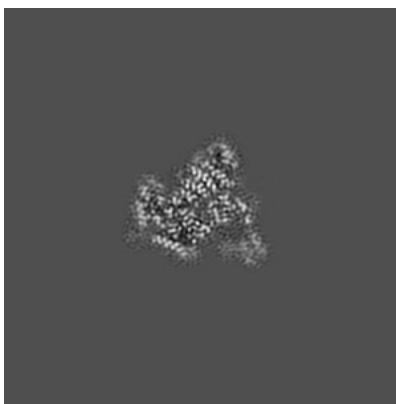
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

## 6.3 Largest variance slices [i](#)

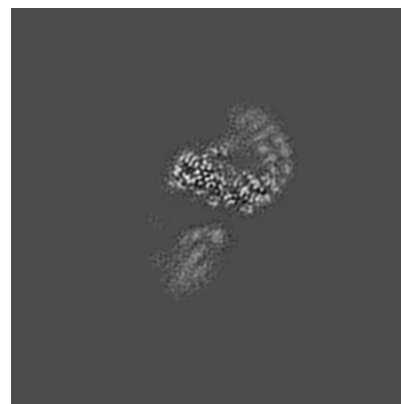
### 6.3.1 Primary map



X Index: 147



Y Index: 172



Z Index: 171

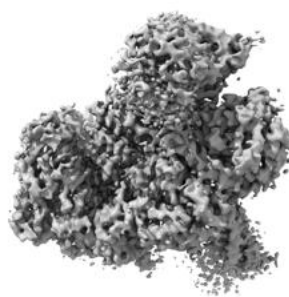
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

## 6.4 Orthogonal surface views [i](#)

### 6.4.1 Primary map



X



Y



Z

The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 6.5. These images, in conjunction with the slice images, may facilitate assessment of whether an appropriate contour level has been provided.

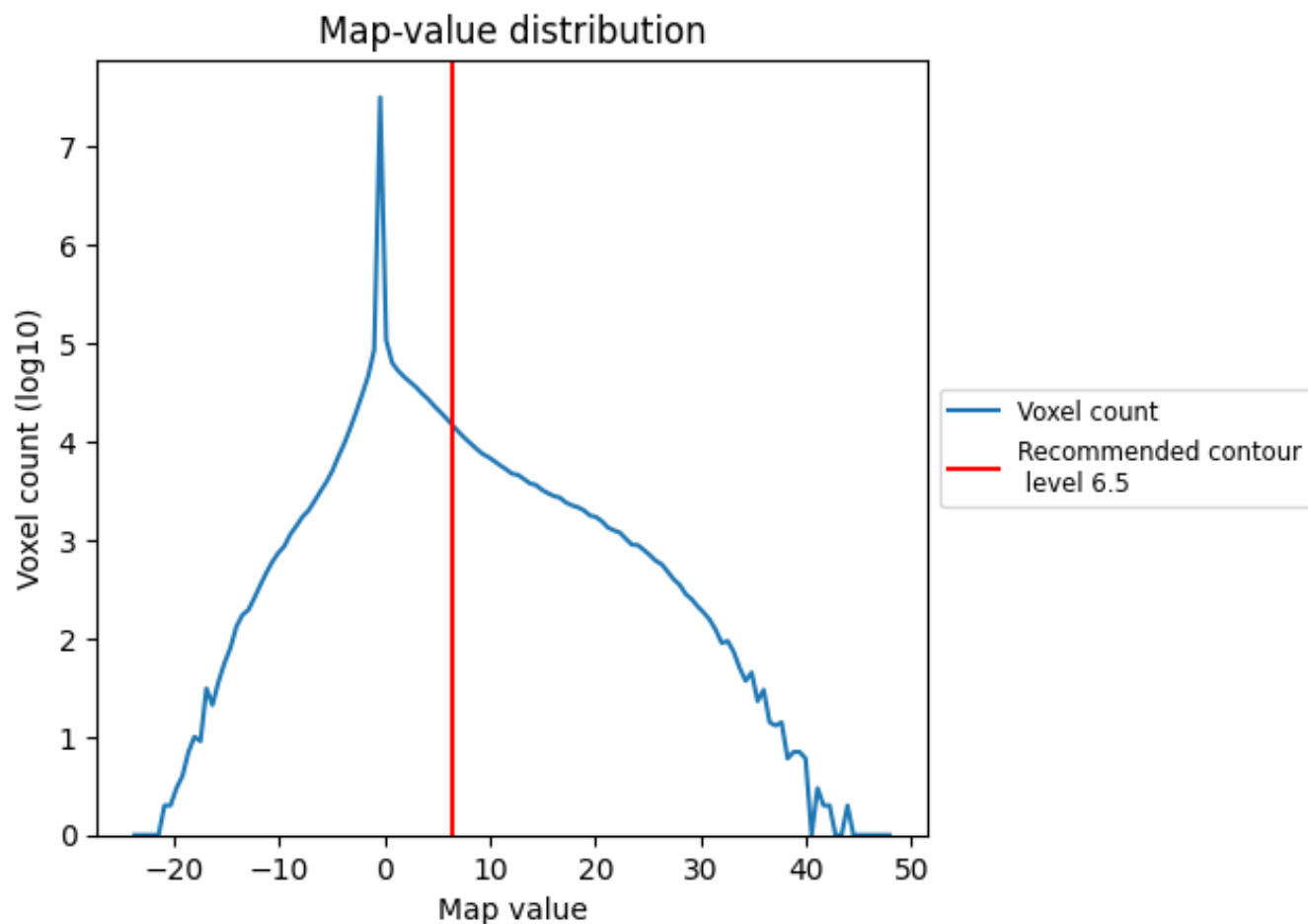
## 6.5 Mask visualisation

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

## 7 Map analysis [i](#)

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

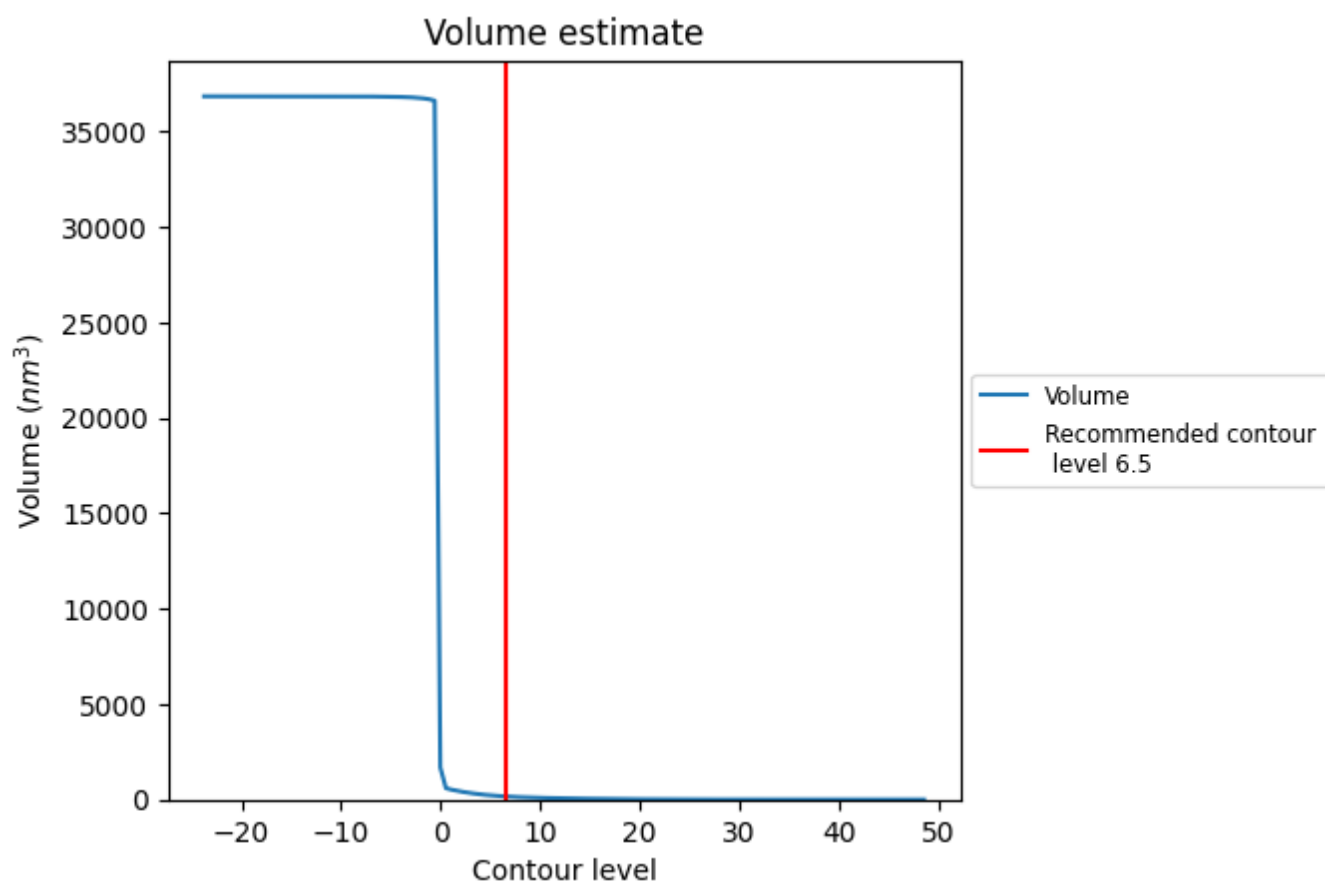
### 7.1 Map-value distribution [i](#)



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



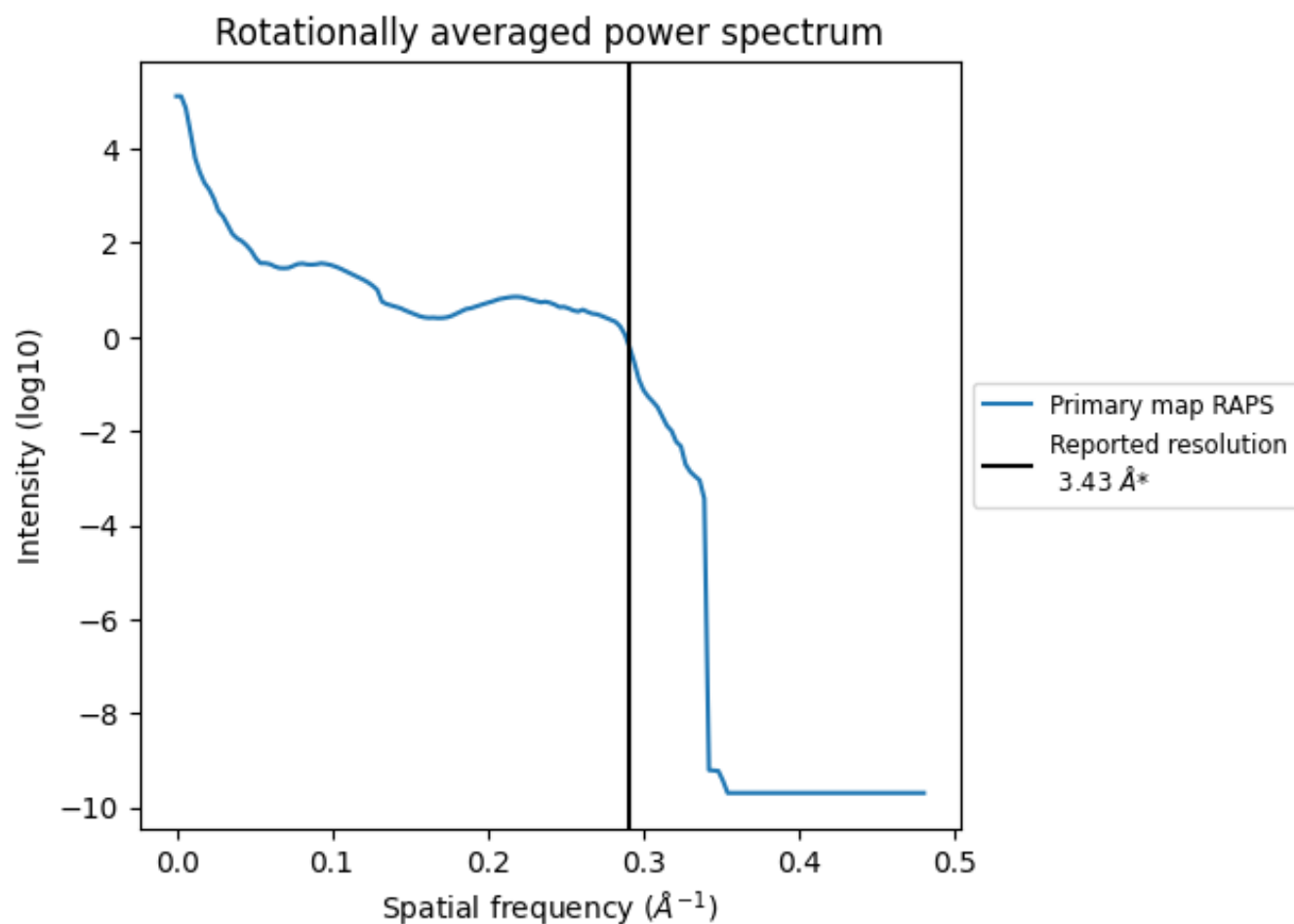
## 7.2 Volume estimate [i](#)



The volume at the recommended contour level is 163 nm<sup>3</sup>; this corresponds to an approximate mass of 148 kDa.

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

### 7.3 Rotationally averaged power spectrum ⓘ



\*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.292 Å<sup>-1</sup>

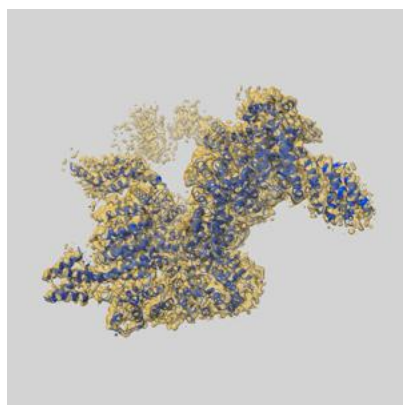
## 8 Fourier-Shell correlation

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

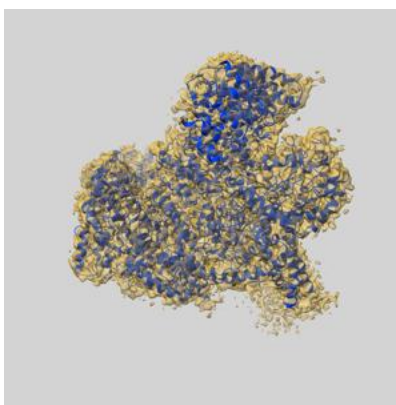
## 9 Map-model fit [i](#)

This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-0837 and PDB model 6L54. Per-residue inclusion information can be found in section 3 on page 5.

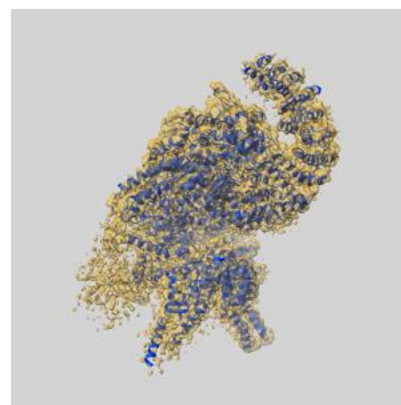
### 9.1 Map-model overlay [i](#)



X



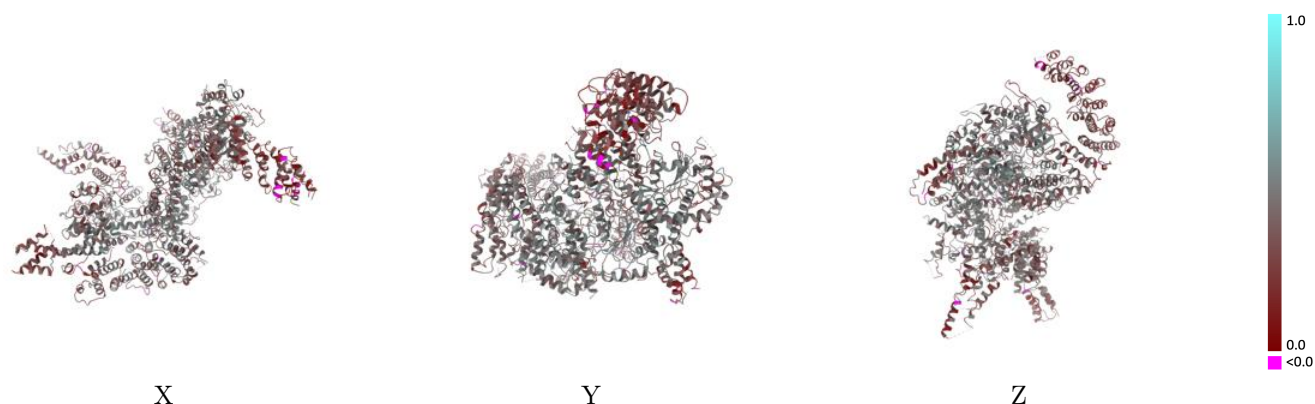
Y



Z

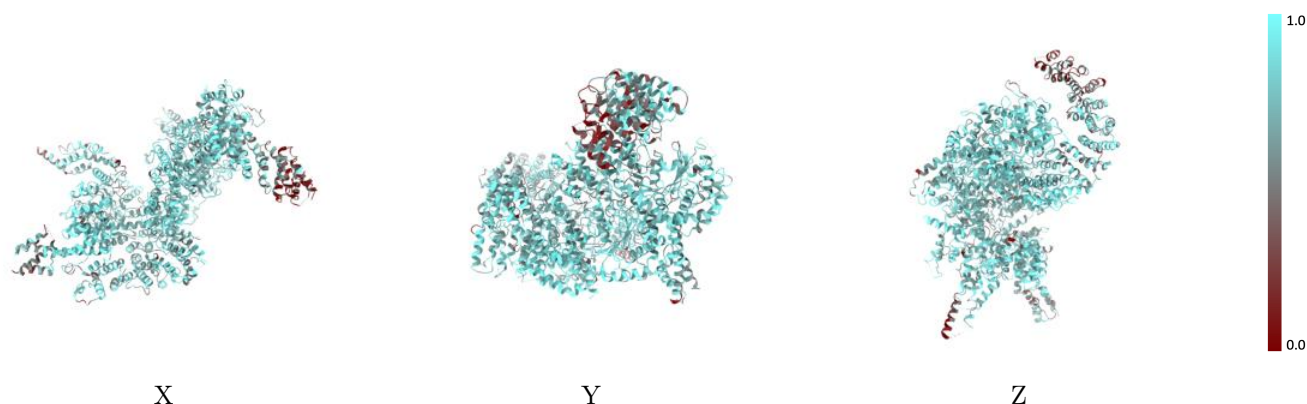
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 6.5 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

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



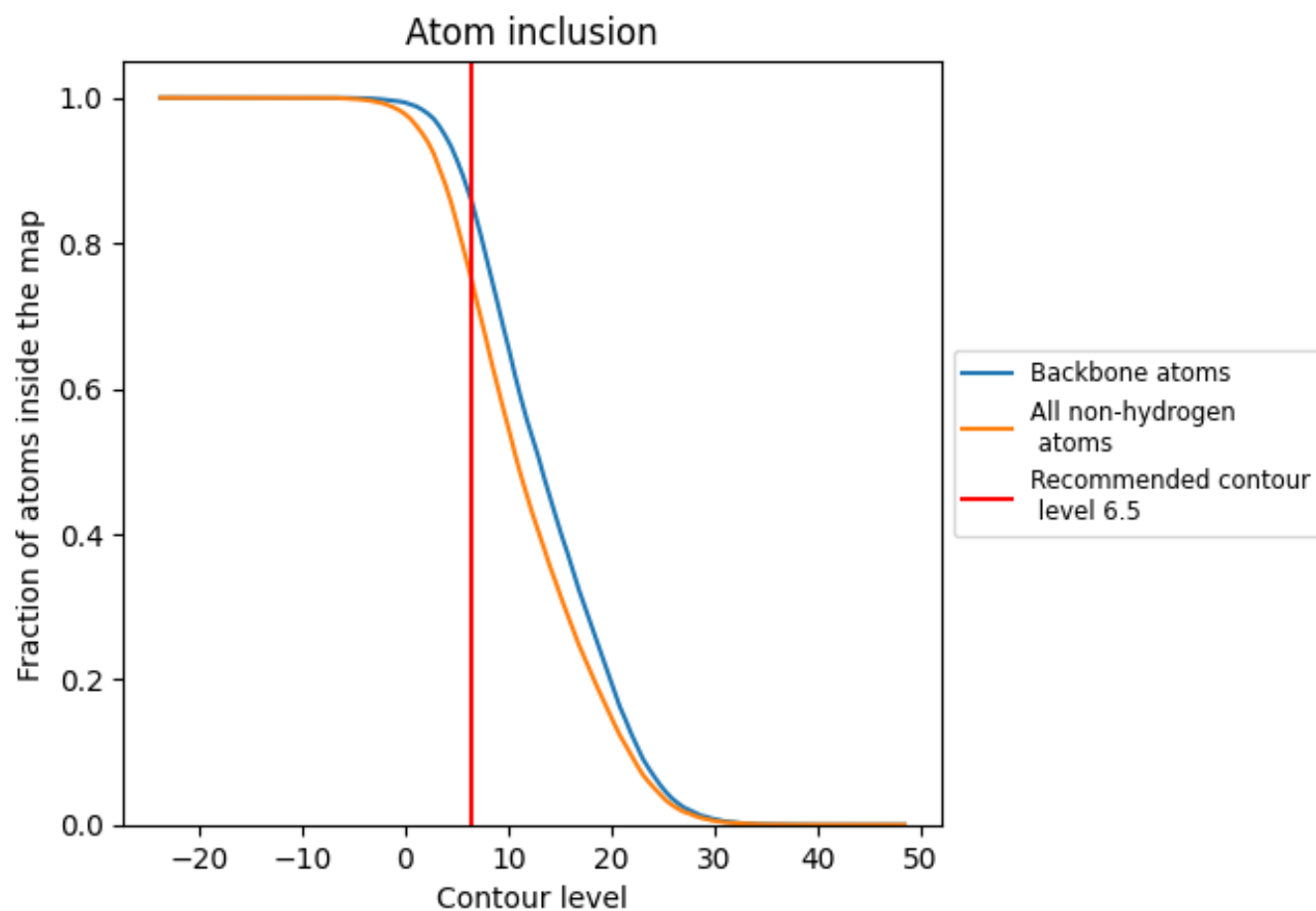
The images above show the model with each residue coloured according to its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions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

## 9.3 Atom inclusion mapped to coordinate model [i](#)



The images above show the model with each residue coloured according to its atom inclusion. This shows to what extent they are inside the map at the recommended contour level (6.5).

## 9.4 Atom inclusion ⓘ



At the recommended contour level, 86% of all backbone atoms, 75% of all non-hydrogen atoms, are inside the map.

9.5 Map-model fit summary ⓘ

The table lists the average atom inclusion at the recommended contour level (6.5) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	<div></div> 0.7471	<div></div> 0.3840
A	<div></div> 0.7330	<div></div> 0.3640
B	<div></div> 0.7737	<div></div> 0.4080
C	<div></div> 0.8350	<div></div> 0.4640

