



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 11:53 PM UTC

PDB ID : 4I2W / pdb\_00004i2w  
Title : Crystal structure of the myosin chaperone UNC-45 from C.elegans in complex with a Hsp70 peptide  
Authors : Clausen, T.; Gazda, L.; Hellerschmied, D.  
Deposited on : 2012-11-23  
Resolution : 3.60 Å(reported)

This is a Full wwPDB X-ray Structure 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/XrayValidationReportHelp>

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:

|                                |   |                                                                  |
|--------------------------------|---|------------------------------------------------------------------|
| MolProbity                     | : | 4-5-2 with Phenix2.0                                             |
| Mogul                          | : | 2022.3.0, CSD as543be (2022)                                     |
| Xtriage (Phenix)               | : | 2.0                                                              |
| EDS                            | : | 3.0                                                              |
| Percentile statistics          | : | 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025) |
| CCP4                           | : | 9.0.010 (Gargrove)                                               |
| Density-Fitness                | : | 1.0.12                                                           |
| Ideal geometry (proteins)      | : | Engh & Huber (2001)                                              |
| Ideal geometry (DNA, RNA)      | : | Parkinson et al. (1996)                                          |
| Validation Pipeline (wwPDB-VP) | : | 2.49                                                             |

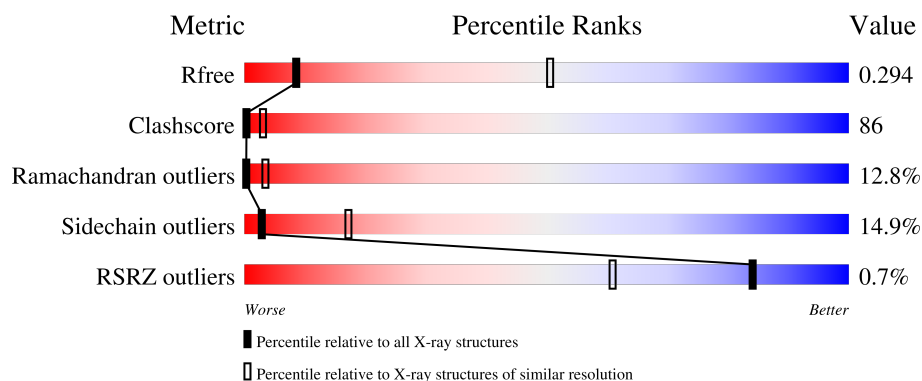
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*X-RAY DIFFRACTION*

The reported resolution of this entry is 3.60 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<br>(#Entries) | Similar resolution<br>(#Entries, resolution range(Å)) |
|-----------------------|-----------------------------|-------------------------------------------------------|
| $R_{free}$            | 180053                      | 1747 (3.70-3.50)                                      |
| Clashscore            | 190562                      | 1827 (3.70-3.50)                                      |
| Ramachandran outliers | 187476                      | 1773 (3.70-3.50)                                      |
| Sidechain outliers    | 187428                      | 1772 (3.70-3.50)                                      |
| RSRZ outliers         | 180081                      | 1745 (3.70-3.50)                                      |

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments of the lower 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 electron density. The numeric value is given above the bar.

| Mol | Chain | Length | Quality of chain                                    |
|-----|-------|--------|-----------------------------------------------------|
| 1   | A     | 961    | <div> <div></div> <div>14% 57% 21% 6%</div> </div>  |
| 2   | B     | 10     | <div> <div></div> <div>40% 30% 20% 10%</div> </div> |

## 2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 7052 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

In the tables below, the ZeroOcc column contains the number of atoms modelled with zero occupancy, 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.

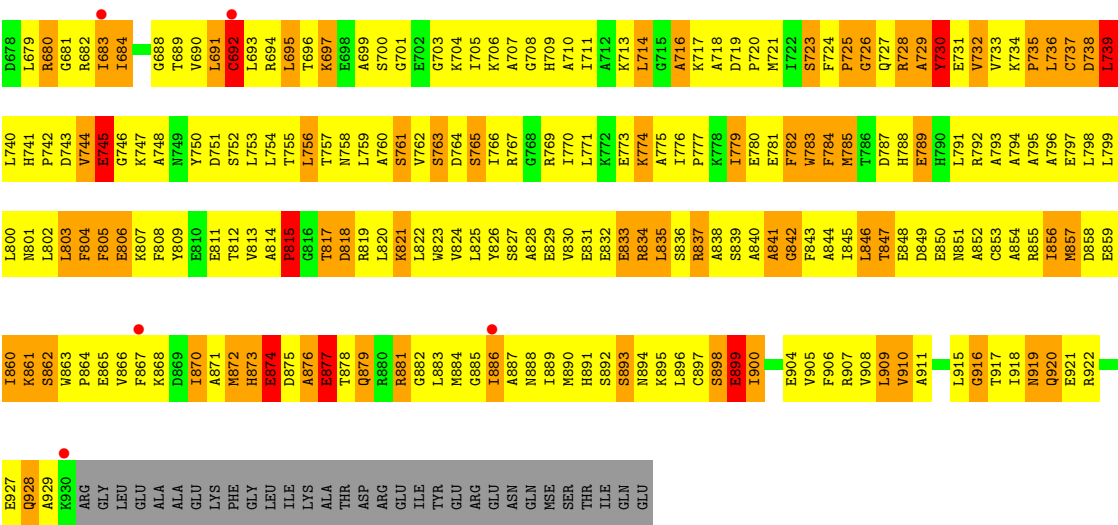
- Molecule 1 is a protein called Protein UNC-45.

| Mol | Chain | Residues | Atoms |      |      |      |    |    | ZeroOcc | AltConf | Trace |
|-----|-------|----------|-------|------|------|------|----|----|---------|---------|-------|
| 1   | A     | 904      | Total | C    | N    | O    | S  | Se | 0       | 0       | 0     |
|     |       |          | 6983  | 4403 | 1209 | 1327 | 19 | 25 |         |         |       |

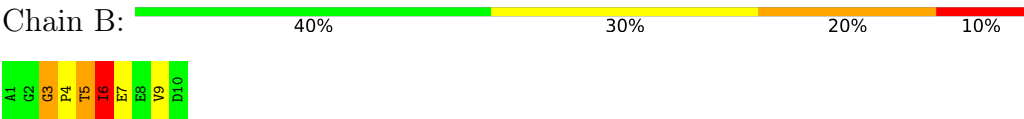
- Molecule 2 is a protein called Heat shock 70 kDa protein A.

| Mol | Chain | Residues | Atoms |    |    |    | ZeroOcc | AltConf | Trace |
|-----|-------|----------|-------|----|----|----|---------|---------|-------|
| 2   | B     | 10       | Total | C  | N  | O  | 0       | 0       | 0     |
|     |       |          | 69    | 41 | 10 | 18 |         |         |       |





● Molecule 2: Heat shock 70 kDa protein A



## 4 Data and refinement statistics

| Property                                                                | Value                                                       | Source           |
|-------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------|------------------|
| Space group                                                             | P 61 2 2                                                    | Depositor        |
| Cell constants<br>a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$                | 86.28Å 86.28Å 808.98Å<br>90.00° 90.00° 120.00°              | Depositor        |
| Resolution (Å)                                                          | 47.82 – 3.60<br>47.82 – 3.60                                | Depositor<br>EDS |
| % Data completeness<br>(in resolution range)                            | 99.7 (47.82-3.60)<br>99.8 (47.82-3.60)                      | Depositor<br>EDS |
| $R_{merge}$                                                             | (Not available)                                             | Depositor        |
| $R_{sym}$                                                               | 0.14                                                        | Depositor        |
| $\langle I/\sigma(I) \rangle$ <sup>1</sup>                              | 2.11 (at 3.57Å)                                             | Xtriage          |
| Refinement program                                                      | CNS                                                         | Depositor        |
| R, $R_{free}$                                                           | 0.234 , 0.284<br>0.246 , 0.294                              | Depositor<br>DCC |
| $R_{free}$ test set                                                     | 1114 reflections (4.99%)                                    | wwPDB-VP         |
| Wilson B-factor (Å <sup>2</sup> )                                       | 112.7                                                       | Xtriage          |
| Anisotropy                                                              | 0.261                                                       | Xtriage          |
| Bulk solvent $k_{sol}$ (e/Å <sup>3</sup> ), $B_{sol}$ (Å <sup>2</sup> ) | 0.31 , 89.8                                                 | EDS              |
| L-test for twinning <sup>2</sup>                                        | $\langle  L  \rangle = 0.41$ , $\langle L^2 \rangle = 0.23$ | Xtriage          |
| Estimated twinning fraction                                             | No twinning to report.                                      | Xtriage          |
| $F_o, F_c$ correlation                                                  | 0.93                                                        | EDS              |
| Total number of atoms                                                   | 7052                                                        | wwPDB-VP         |
| Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )                                  | 125.0                                                       | wwPDB-VP         |

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 2.73% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

<sup>1</sup>Intensities estimated from amplitudes.

<sup>2</sup>Theoretical values of  $\langle |L| \rangle$ ,  $\langle L^2 \rangle$  for acentric reflections are 0.5, 0.333 respectively for untwinned datasets, and 0.375, 0.2 for perfectly twinned datasets.

## 5 Model quality

### 5.1 Standard geometry

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

| Mol | Chain | Bond lengths |         | Bond angles |                |
|-----|-------|--------------|---------|-------------|----------------|
|     |       | RMSZ         | # Z  >5 | RMSZ        | # Z  >5        |
| 1   | A     | 0.47         | 0/7058  | 1.10        | 59/9490 (0.6%) |
| 2   | B     | 0.69         | 0/69    | 1.49        | 1/92 (1.1%)    |
| All | All   | 0.48         | 0/7127  | 1.11        | 60/9582 (0.6%) |

There are no bond length outliers.

All (60) bond angle outliers are listed below:

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms  | Z      | Observed(°) | Ideal(°) |
|-----|-------|-----|------|--------|--------|-------------|----------|
| 2   | B     | 7   | GLU  | N-CA-C | -10.24 | 97.08       | 112.54   |
| 1   | A     | 460 | ALA  | N-CA-C | -9.21  | 102.55      | 113.88   |
| 1   | A     | 728 | ARG  | N-CA-C | -8.93  | 101.55      | 111.28   |
| 1   | A     | 211 | ILE  | N-CA-C | -8.70  | 102.35      | 110.53   |
| 1   | A     | 782 | PHE  | N-CA-C | -8.67  | 102.87      | 113.19   |
| 1   | A     | 738 | ASP  | N-CA-C | -8.60  | 103.22      | 114.31   |
| 1   | A     | 634 | TYR  | N-CA-C | -8.38  | 103.07      | 113.38   |
| 1   | A     | 841 | ALA  | N-CA-C | -8.17  | 103.31      | 113.20   |
| 1   | A     | 25  | ILE  | N-CA-C | -8.11  | 102.63      | 110.42   |
| 1   | A     | 714 | LEU  | N-CA-C | -7.83  | 103.68      | 113.55   |
| 1   | A     | 505 | CYS  | N-CA-C | -7.69  | 104.42      | 113.88   |
| 1   | A     | 228 | MSE  | N-CA-C | 7.57   | 122.20      | 113.19   |
| 1   | A     | 217 | LYS  | N-CA-C | -7.42  | 104.22      | 113.20   |
| 1   | A     | 744 | VAL  | N-CA-C | -7.22  | 103.59      | 112.76   |
| 1   | A     | 803 | LEU  | N-CA-C | -6.95  | 104.79      | 113.20   |
| 1   | A     | 737 | CYS  | N-CA-C | -6.85  | 104.02      | 114.16   |
| 1   | A     | 376 | LEU  | N-CA-C | -6.73  | 103.97      | 111.71   |
| 1   | A     | 53  | ARG  | N-CA-C | -6.57  | 104.04      | 111.07   |
| 1   | A     | 301 | LEU  | N-CA-C | -6.40  | 105.33      | 113.01   |
| 1   | A     | 469 | SER  | N-CA-C | 6.29   | 118.72      | 108.08   |
| 1   | A     | 774 | LYS  | N-CA-C | -6.28  | 103.26      | 111.74   |
| 1   | A     | 886 | ILE  | N-CA-C | -6.25  | 106.18      | 111.56   |
| 1   | A     | 842 | GLY  | N-CA-C | -6.21  | 105.00      | 115.80   |
| 1   | A     | 440 | GLN  | N-CA-C | -6.20  | 105.44      | 112.87   |
| 1   | A     | 103 | ASP  | N-CA-C | -6.17  | 104.47      | 112.68   |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms   | Z     | Observed(°) | Ideal(°) |
|-----|-------|-----|------|---------|-------|-------------|----------|
| 1   | A     | 635 | VAL  | N-CA-C  | -6.17 | 104.49      | 110.72   |
| 1   | A     | 303 | ASP  | CA-C-N  | 6.15  | 125.84      | 119.82   |
| 1   | A     | 303 | ASP  | C-N-CA  | 6.15  | 125.84      | 119.82   |
| 1   | A     | 260 | VAL  | N-CA-C  | -6.13 | 104.36      | 110.62   |
| 1   | A     | 879 | GLN  | N-CA-C  | -6.12 | 106.48      | 112.97   |
| 1   | A     | 469 | SER  | CB-CA-C | -6.09 | 109.57      | 116.63   |
| 1   | A     | 831 | GLU  | N-CA-C  | -6.06 | 105.65      | 113.16   |
| 1   | A     | 249 | THR  | N-CA-C  | -5.89 | 101.28      | 110.42   |
| 1   | A     | 317 | LEU  | N-CA-C  | -5.88 | 104.86      | 111.28   |
| 1   | A     | 463 | LEU  | N-CA-C  | -5.83 | 106.12      | 113.18   |
| 1   | A     | 504 | LEU  | N-CA-C  | -5.76 | 106.33      | 113.19   |
| 1   | A     | 919 | ASN  | N-CA-C  | -5.75 | 106.11      | 113.01   |
| 1   | A     | 785 | MSE  | N-CA-C  | 5.75  | 118.93      | 109.85   |
| 1   | A     | 100 | ALA  | N-CA-C  | -5.65 | 105.21      | 111.71   |
| 1   | A     | 622 | HIS  | N-CA-C  | -5.64 | 106.75      | 113.97   |
| 1   | A     | 481 | GLY  | N-CA-C  | 5.56  | 119.40      | 112.73   |
| 1   | A     | 243 | LEU  | N-CA-C  | -5.55 | 104.86      | 111.69   |
| 1   | A     | 578 | VAL  | N-CA-C  | -5.55 | 105.69      | 110.74   |
| 1   | A     | 74  | LEU  | N-CA-C  | -5.51 | 105.37      | 111.71   |
| 1   | A     | 373 | LEU  | N-CA-C  | -5.50 | 105.70      | 112.90   |
| 1   | A     | 277 | LYS  | CA-C-N  | 5.49  | 126.70      | 119.84   |
| 1   | A     | 277 | LYS  | C-N-CA  | 5.49  | 126.70      | 119.84   |
| 1   | A     | 464 | ILE  | N-CA-C  | -5.47 | 106.47      | 111.67   |
| 1   | A     | 476 | ASN  | N-CA-C  | -5.47 | 104.19      | 111.24   |
| 1   | A     | 881 | ARG  | N-CA-C  | -5.45 | 106.48      | 113.23   |
| 1   | A     | 359 | TYR  | CA-C-N  | 5.35  | 126.52      | 119.84   |
| 1   | A     | 359 | TYR  | C-N-CA  | 5.35  | 126.52      | 119.84   |
| 1   | A     | 137 | SER  | N-CA-C  | -5.31 | 106.48      | 113.12   |
| 1   | A     | 346 | LEU  | N-CA-C  | -5.29 | 106.32      | 112.89   |
| 1   | A     | 153 | GLU  | N-CA-C  | 5.28  | 122.04      | 110.80   |
| 1   | A     | 895 | LYS  | N-CA-C  | -5.28 | 106.54      | 112.87   |
| 1   | A     | 739 | LEU  | N-CA-C  | -5.27 | 106.35      | 112.89   |
| 1   | A     | 383 | ASP  | N-CA-C  | -5.23 | 105.26      | 111.69   |
| 1   | A     | 267 | MSE  | N-CA-C  | 5.06  | 117.46      | 111.33   |
| 1   | A     | 8   | ALA  | N-CA-C  | -5.02 | 104.90      | 111.02   |

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

## 5.2 Too-close contacts ⓘ

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

| Mol | Chain | Non-H | H(model) | H(added) | Clashes | Symm-Clashes |
|-----|-------|-------|----------|----------|---------|--------------|
| 1   | A     | 6983  | 0        | 7015     | 1198    | 0            |
| 2   | B     | 69    | 0        | 63       | 18      | 0            |
| All | All   | 7052  | 0        | 7078     | 1210    | 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 86.

All (1210) 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:329:ILE:HG13 | 1:A:330:PRO:HD2  | 1.23                     | 1.19              |
| 1:A:448:MSE:HB3  | 1:A:456:MSE:HE2  | 1.32                     | 1.10              |
| 1:A:269:LYS:HB2  | 1:A:282:VAL:HG11 | 1.31                     | 1.10              |
| 1:A:25:ILE:HD12  | 1:A:25:ILE:H     | 1.15                     | 1.08              |
| 1:A:498:VAL:HB   | 1:A:535:PHE:CZ   | 1.89                     | 1.05              |
| 1:A:390:LYS:HG3  | 1:A:431:ILE:HD12 | 1.34                     | 1.05              |
| 1:A:572:LEU:HD22 | 1:A:572:LEU:H    | 1.23                     | 1.04              |
| 1:A:541:LYS:H    | 1:A:541:LYS:HD2  | 1.20                     | 1.03              |
| 1:A:82:LYS:HA    | 2:B:6:ILE:HD12   | 1.43                     | 1.00              |
| 1:A:353:ILE:HD11 | 1:A:356:LEU:HB3  | 1.40                     | 1.00              |
| 1:A:157:THR:HG23 | 1:A:158:GLU:H    | 1.26                     | 0.98              |
| 1:A:660:LYS:HG2  | 1:A:661:ASN:H    | 1.27                     | 0.98              |
| 1:A:470:LYS:HG3  | 1:A:471:HIS:H    | 1.29                     | 0.98              |
| 1:A:448:MSE:HB2  | 1:A:456:MSE:HB3  | 1.47                     | 0.96              |
| 1:A:736:LEU:HA   | 1:A:739:LEU:HG   | 1.46                     | 0.95              |
| 1:A:287:LYS:HG3  | 1:A:288:ILE:HD13 | 1.46                     | 0.95              |
| 1:A:677:GLU:HA   | 1:A:680:ARG:NH1  | 1.82                     | 0.94              |
| 1:A:11:ILE:HD12  | 1:A:34:ALA:HB2   | 1.49                     | 0.94              |
| 1:A:448:MSE:HE2  | 1:A:460:ALA:HB2  | 1.50                     | 0.93              |
| 1:A:53:ARG:HD2   | 1:A:57:ARG:HD2   | 1.51                     | 0.91              |
| 1:A:857:MSE:HG3  | 1:A:896:LEU:HG   | 1.52                     | 0.91              |
| 1:A:393:VAL:HG21 | 1:A:424:MSE:HE2  | 1.51                     | 0.91              |
| 1:A:526:ILE:HD13 | 1:A:526:ILE:H    | 1.33                     | 0.91              |
| 1:A:8:ALA:O      | 1:A:11:ILE:HG22  | 1.69                     | 0.91              |
| 1:A:853:CYS:HA   | 1:A:856:ILE:HD11 | 1.52                     | 0.90              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:188:VAL:HB   | 1:A:189:PRO:HD3  | 1.52                     | 0.90              |
| 1:A:6:GLN:HE21   | 1:A:6:GLN:HA     | 1.38                     | 0.89              |
| 1:A:501:LEU:O    | 1:A:505:CYS:HB2  | 1.73                     | 0.89              |
| 1:A:792:ARG:NH2  | 1:A:835:LEU:HD21 | 1.86                     | 0.89              |
| 1:A:479:LYS:HE2  | 1:A:479:LYS:HA   | 1.52                     | 0.89              |
| 1:A:351:SER:HB3  | 1:A:420:PHE:HB2  | 1.55                     | 0.88              |
| 1:A:660:LYS:H    | 1:A:663:LEU:HD23 | 1.38                     | 0.88              |
| 1:A:7:THR:HG22   | 1:A:10:GLU:HG2   | 1.55                     | 0.87              |
| 1:A:353:ILE:HG12 | 1:A:355:GLU:H    | 1.37                     | 0.87              |
| 1:A:26:LYS:HE2   | 1:A:30:LEU:HD11  | 1.56                     | 0.87              |
| 1:A:303:ASP:HB3  | 1:A:306:VAL:HG23 | 1.57                     | 0.86              |
| 1:A:232:ASP:OD1  | 1:A:234:PRO:HG2  | 1.76                     | 0.86              |
| 1:A:557:LEU:O    | 1:A:563:VAL:HG11 | 1.76                     | 0.86              |
| 1:A:716:ALA:HB1  | 1:A:754:LEU:HD23 | 1.56                     | 0.85              |
| 1:A:745:GLU:CD   | 1:A:746:GLY:H    | 1.85                     | 0.85              |
| 1:A:352:GLN:NE2  | 1:A:357:CYS:HA   | 1.91                     | 0.84              |
| 1:A:344:LEU:HD12 | 1:A:344:LEU:H    | 1.43                     | 0.84              |
| 1:A:626:THR:HG23 | 1:A:627:HIS:H    | 1.42                     | 0.84              |
| 1:A:767:ARG:O    | 1:A:771:LEU:HG   | 1.78                     | 0.83              |
| 1:A:39:THR:O     | 1:A:46:ARG:HD2   | 1.78                     | 0.83              |
| 1:A:205:THR:O    | 1:A:209:ILE:HG12 | 1.78                     | 0.83              |
| 1:A:860:ILE:HG23 | 1:A:863:TRP:HB3  | 1.61                     | 0.83              |
| 1:A:677:GLU:HA   | 1:A:680:ARG:HH12 | 1.43                     | 0.82              |
| 1:A:539:THR:HG23 | 1:A:540:GLU:H    | 1.43                     | 0.82              |
| 1:A:543:SER:OG   | 1:A:546:ILE:HG12 | 1.80                     | 0.82              |
| 1:A:744:VAL:O    | 1:A:745:GLU:HB2  | 1.77                     | 0.82              |
| 1:A:865:GLU:HA   | 1:A:868:LYS:HD2  | 1.61                     | 0.82              |
| 1:A:572:LEU:HA   | 1:A:575:LYS:HD3  | 1.61                     | 0.82              |
| 1:A:263:VAL:HG12 | 1:A:267:MSE:HE2  | 1.62                     | 0.81              |
| 1:A:864:PRO:O    | 1:A:868:LYS:HG3  | 1.81                     | 0.81              |
| 1:A:439:ASP:O    | 1:A:442:THR:HG22 | 1.81                     | 0.81              |
| 1:A:541:LYS:H    | 1:A:541:LYS:CD   | 1.94                     | 0.81              |
| 1:A:724:PHE:HE2  | 1:A:732:VAL:HG11 | 1.46                     | 0.81              |
| 1:A:382:PHE:O    | 1:A:386:ARG:HG3  | 1.81                     | 0.81              |
| 1:A:541:LYS:HG2  | 1:A:542:TYR:H    | 1.45                     | 0.80              |
| 1:A:329:ILE:HG13 | 1:A:330:PRO:CD   | 2.10                     | 0.80              |
| 1:A:468:VAL:HG11 | 1:A:506:LYS:HG2  | 1.63                     | 0.80              |
| 1:A:533:LYS:HG2  | 1:A:537:LEU:HD11 | 1.61                     | 0.80              |
| 1:A:730:TYR:H    | 1:A:730:TYR:HD2  | 1.30                     | 0.80              |
| 1:A:148:LEU:HA   | 1:A:154:ALA:HB2  | 1.63                     | 0.80              |
| 1:A:218:ASN:HB2  | 1:A:221:ARG:NH1  | 1.97                     | 0.80              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:670:LEU:HD11 | 1:A:691:LEU:HD23 | 1.63                     | 0.80              |
| 1:A:813:VAL:HG22 | 1:A:846:LEU:HD21 | 1.64                     | 0.80              |
| 1:A:873:HIS:NE2  | 1:A:875:ASP:HB2  | 1.98                     | 0.79              |
| 1:A:730:TYR:HB3  | 1:A:769:ARG:HE   | 1.48                     | 0.79              |
| 1:A:464:ILE:HD11 | 1:A:485:LEU:HG   | 1.65                     | 0.79              |
| 1:A:282:VAL:HG13 | 1:A:283:ALA:H    | 1.47                     | 0.79              |
| 1:A:225:PHE:HA   | 1:A:228:MSE:HE3  | 1.62                     | 0.79              |
| 1:A:595:ILE:O    | 1:A:599:LEU:HG   | 1.83                     | 0.79              |
| 1:A:226:LEU:HD12 | 1:A:240:VAL:HG21 | 1.65                     | 0.78              |
| 1:A:748:ALA:HB1  | 1:A:751:ASP:HB2  | 1.66                     | 0.78              |
| 1:A:753:LEU:HD11 | 1:A:782:PHE:CD2  | 2.19                     | 0.78              |
| 1:A:71:THR:O     | 1:A:75:GLU:HG2   | 1.84                     | 0.78              |
| 1:A:415:ILE:HG23 | 1:A:459:ILE:HD13 | 1.66                     | 0.78              |
| 1:A:415:ILE:HD13 | 1:A:455:LEU:HD23 | 1.66                     | 0.78              |
| 1:A:323:MSE:HG2  | 1:A:375:ARG:HG3  | 1.64                     | 0.77              |
| 1:A:282:VAL:HG13 | 1:A:283:ALA:N    | 1.99                     | 0.77              |
| 1:A:39:THR:HG22  | 1:A:40:ASP:H     | 1.50                     | 0.77              |
| 1:A:298:GLN:O    | 1:A:301:LEU:HB2  | 1.86                     | 0.77              |
| 1:A:741:HIS:HB3  | 1:A:742:PRO:HD3  | 1.67                     | 0.77              |
| 1:A:381:VAL:HG23 | 1:A:382:PHE:H    | 1.50                     | 0.76              |
| 1:A:425:LEU:HD23 | 1:A:466:ALA:O    | 1.84                     | 0.76              |
| 1:A:593:ALA:HB1  | 1:A:665:LEU:HB3  | 1.68                     | 0.76              |
| 1:A:202:GLU:O    | 1:A:206:VAL:HG23 | 1.86                     | 0.76              |
| 1:A:602:ALA:HB1  | 1:A:668:ARG:HB3  | 1.67                     | 0.76              |
| 1:A:833:GLU:O    | 1:A:835:LEU:N    | 2.19                     | 0.76              |
| 1:A:832:GLU:HG3  | 1:A:833:GLU:H    | 1.49                     | 0.76              |
| 1:A:11:ILE:HD13  | 1:A:11:ILE:O     | 1.85                     | 0.75              |
| 1:A:900:ILE:HD13 | 1:A:900:ILE:H    | 1.51                     | 0.75              |
| 1:A:375:ARG:HG2  | 1:A:375:ARG:HH11 | 1.49                     | 0.75              |
| 1:A:864:PRO:HB2  | 1:A:868:LYS:HE3  | 1.68                     | 0.75              |
| 1:A:188:VAL:HG21 | 1:A:228:MSE:HE1  | 1.68                     | 0.75              |
| 1:A:223:MSE:HE1  | 1:A:267:MSE:HG2  | 1.69                     | 0.75              |
| 1:A:377:GLU:HG3  | 1:A:378:GLU:N    | 1.98                     | 0.75              |
| 1:A:660:LYS:HG3  | 1:A:661:ASN:ND2  | 2.02                     | 0.75              |
| 1:A:660:LYS:CG   | 1:A:661:ASN:H    | 2.00                     | 0.74              |
| 1:A:142:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:N    | 2.01                     | 0.74              |
| 1:A:660:LYS:HG2  | 1:A:661:ASN:N    | 2.02                     | 0.74              |
| 1:A:249:THR:O    | 1:A:253:VAL:HG23 | 1.88                     | 0.74              |
| 1:A:533:LYS:HD2  | 1:A:566:TRP:CZ2  | 2.22                     | 0.74              |
| 1:A:680:ARG:HA   | 1:A:683:ILE:HG12 | 1.70                     | 0.74              |
| 1:A:792:ARG:HA   | 1:A:795:ALA:CB   | 2.17                     | 0.74              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:860:ILE:HG23 | 1:A:860:ILE:O    | 1.87                     | 0.74              |
| 1:A:480:VAL:O    | 1:A:484:VAL:HG23 | 1.89                     | 0.73              |
| 1:A:46:ARG:HB2   | 1:A:47:PRO:HD3   | 1.70                     | 0.73              |
| 1:A:67:GLN:O     | 1:A:71:THR:HG22  | 1.87                     | 0.73              |
| 1:A:371:ILE:HA   | 1:A:374:GLN:HE21 | 1.51                     | 0.73              |
| 1:A:541:LYS:HD2  | 1:A:541:LYS:N    | 2.02                     | 0.73              |
| 1:A:620:LYS:HG3  | 1:A:621:HIS:H    | 1.53                     | 0.73              |
| 1:A:393:VAL:HG11 | 1:A:431:ILE:HG21 | 1.69                     | 0.73              |
| 1:A:475:ILE:HG12 | 1:A:478:LEU:HD12 | 1.70                     | 0.73              |
| 1:A:533:LYS:HG2  | 1:A:537:LEU:CD1  | 2.18                     | 0.73              |
| 1:A:82:LYS:HZ3   | 2:B:6:ILE:HA     | 1.54                     | 0.72              |
| 1:A:472:GLU:C    | 1:A:474:ALA:H    | 1.97                     | 0.72              |
| 2:B:3:GLY:H      | 2:B:4:PRO:CD     | 2.02                     | 0.72              |
| 1:A:580:LEU:HD11 | 1:A:588:CYS:SG   | 2.29                     | 0.72              |
| 1:A:660:LYS:H    | 1:A:663:LEU:CD2  | 2.03                     | 0.72              |
| 1:A:792:ARG:CZ   | 1:A:835:LEU:HD21 | 2.19                     | 0.72              |
| 1:A:6:GLN:HA     | 1:A:6:GLN:NE2    | 2.04                     | 0.72              |
| 1:A:170:LEU:HD23 | 1:A:170:LEU:O    | 1.90                     | 0.72              |
| 1:A:716:ALA:C    | 1:A:718:ALA:H    | 1.98                     | 0.72              |
| 1:A:822:LEU:HD23 | 1:A:825:LEU:HD12 | 1.69                     | 0.72              |
| 1:A:867:PHE:CE1  | 1:A:886:ILE:HG13 | 2.25                     | 0.72              |
| 1:A:25:ILE:H     | 1:A:25:ILE:CD1   | 1.91                     | 0.71              |
| 1:A:847:THR:CG2  | 1:A:888:ASN:HB2  | 2.20                     | 0.71              |
| 1:A:11:ILE:HG21  | 1:A:37:LEU:HD12  | 1.73                     | 0.71              |
| 1:A:381:VAL:HG23 | 1:A:382:PHE:N    | 2.05                     | 0.71              |
| 1:A:415:ILE:HG23 | 1:A:459:ILE:CD1  | 2.20                     | 0.71              |
| 1:A:498:VAL:HG13 | 1:A:499:ARG:N    | 2.04                     | 0.71              |
| 1:A:732:VAL:O    | 1:A:736:LEU:HD11 | 1.90                     | 0.71              |
| 1:A:841:ALA:O    | 1:A:845:ILE:HD13 | 1.91                     | 0.71              |
| 1:A:526:ILE:HB   | 1:A:530:LYS:HE3  | 1.73                     | 0.71              |
| 1:A:21:ASP:O     | 1:A:22:GLN:HB2   | 1.91                     | 0.70              |
| 1:A:393:VAL:HG21 | 1:A:424:MSE:CE   | 2.21                     | 0.70              |
| 1:A:660:LYS:N    | 1:A:663:LEU:HD23 | 2.06                     | 0.70              |
| 1:A:142:VAL:HA   | 1:A:145:MSE:HE2  | 1.74                     | 0.70              |
| 1:A:581:ALA:HB2  | 1:A:592:LEU:HD23 | 1.73                     | 0.70              |
| 1:A:898:SER:O    | 1:A:900:ILE:HG23 | 1.91                     | 0.70              |
| 1:A:380:MSE:HG3  | 1:A:385:LYS:HB3  | 1.74                     | 0.70              |
| 1:A:691:LEU:O    | 1:A:695:LEU:HD23 | 1.91                     | 0.70              |
| 1:A:478:LEU:HB3  | 1:A:482:ILE:HD11 | 1.71                     | 0.70              |
| 1:A:830:VAL:HG22 | 1:A:836:SER:HB3  | 1.73                     | 0.70              |
| 1:A:779:ILE:HG12 | 1:A:798:LEU:HD23 | 1.73                     | 0.69              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:589:VAL:HG11 | 1:A:657:THR:HG21 | 1.74                     | 0.69              |
| 1:A:130:ASP:O    | 1:A:134:GLN:HB2  | 1.92                     | 0.69              |
| 1:A:472:GLU:O    | 1:A:473:ARG:HB3  | 1.91                     | 0.69              |
| 1:A:415:ILE:CD1  | 1:A:455:LEU:HD23 | 2.22                     | 0.69              |
| 1:A:533:LYS:HD2  | 1:A:566:TRP:CH2  | 2.28                     | 0.69              |
| 1:A:572:LEU:HD22 | 1:A:572:LEU:N    | 2.05                     | 0.69              |
| 1:A:71:THR:HA    | 1:A:74:LEU:HD23  | 1.74                     | 0.69              |
| 1:A:661:ASN:O    | 1:A:665:LEU:HD23 | 1.92                     | 0.69              |
| 1:A:475:ILE:HA   | 1:A:478:LEU:HB2  | 1.74                     | 0.69              |
| 1:A:352:GLN:HE22 | 1:A:357:CYS:HA   | 1.58                     | 0.69              |
| 1:A:353:ILE:CD1  | 1:A:356:LEU:HB3  | 2.19                     | 0.69              |
| 1:A:767:ARG:HA   | 1:A:770:ILE:HD12 | 1.75                     | 0.68              |
| 1:A:7:THR:CG2    | 1:A:10:GLU:HG2   | 2.24                     | 0.68              |
| 1:A:53:ARG:HH11  | 1:A:57:ARG:CZ    | 2.07                     | 0.68              |
| 1:A:833:GLU:HG2  | 1:A:834:ARG:H    | 1.59                     | 0.68              |
| 1:A:697:LYS:H    | 1:A:697:LYS:HD2  | 1.57                     | 0.68              |
| 1:A:390:LYS:HA   | 1:A:393:VAL:HG12 | 1.75                     | 0.68              |
| 1:A:390:LYS:C    | 1:A:392:LYS:H    | 2.00                     | 0.68              |
| 1:A:444:ILE:O    | 1:A:448:MSE:HG2  | 1.93                     | 0.68              |
| 1:A:47:PRO:HG3   | 1:A:76:PHE:CD1   | 2.28                     | 0.68              |
| 1:A:324:HIS:CD2  | 1:A:331:ARG:HA   | 2.28                     | 0.68              |
| 2:B:6:ILE:HG12   | 2:B:6:ILE:O      | 1.93                     | 0.68              |
| 1:A:625:GLU:O    | 1:A:625:GLU:HG2  | 1.94                     | 0.68              |
| 1:A:629:LYS:HA   | 1:A:634:TYR:CD2  | 2.28                     | 0.68              |
| 1:A:375:ARG:HH21 | 1:A:660:LYS:HZ1  | 1.42                     | 0.68              |
| 1:A:343:LEU:O    | 1:A:347:LEU:HD13 | 1.94                     | 0.67              |
| 1:A:629:LYS:HA   | 1:A:634:TYR:HD2  | 1.59                     | 0.67              |
| 1:A:866:VAL:O    | 1:A:870:ILE:HG22 | 1.93                     | 0.67              |
| 1:A:263:VAL:O    | 1:A:267:MSE:HG3  | 1.94                     | 0.67              |
| 1:A:443:PRO:HG2  | 1:A:444:ILE:H    | 1.57                     | 0.67              |
| 1:A:808:PHE:HA   | 1:A:811:GLU:HB3  | 1.76                     | 0.67              |
| 1:A:795:ALA:O    | 1:A:799:LEU:HD23 | 1.93                     | 0.67              |
| 1:A:406:ASN:HB2  | 1:A:414:ARG:HH22 | 1.60                     | 0.67              |
| 1:A:586:ALA:HA   | 1:A:589:VAL:HG22 | 1.77                     | 0.67              |
| 1:A:344:LEU:H    | 1:A:344:LEU:CD1  | 2.07                     | 0.67              |
| 1:A:601:ASN:HD21 | 1:A:638:ARG:NH2  | 1.93                     | 0.67              |
| 1:A:82:LYS:HD2   | 2:B:6:ILE:HB     | 1.76                     | 0.67              |
| 1:A:691:LEU:C    | 1:A:695:LEU:HD23 | 2.20                     | 0.67              |
| 1:A:728:ARG:O    | 1:A:732:VAL:HG23 | 1.94                     | 0.67              |
| 1:A:87:ARG:HE    | 1:A:91:ARG:CZ    | 2.08                     | 0.67              |
| 1:A:439:ASP:O    | 1:A:443:PRO:HD3  | 1.95                     | 0.67              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:872:MSE:HE2  | 1:A:873:HIS:N    | 2.10                     | 0.67              |
| 1:A:425:LEU:O    | 1:A:429:VAL:HG23 | 1.96                     | 0.66              |
| 1:A:433:ILE:C    | 1:A:435:LEU:H    | 2.00                     | 0.66              |
| 1:A:737:CYS:HB3  | 1:A:773:GLU:HG2  | 1.78                     | 0.66              |
| 1:A:93:GLN:C     | 1:A:95:GLY:H     | 2.03                     | 0.66              |
| 1:A:538:GLU:HB3  | 1:A:541:LYS:HD3  | 1.78                     | 0.66              |
| 1:A:889:ILE:HG22 | 1:A:896:LEU:HD23 | 1.77                     | 0.66              |
| 1:A:151:ARG:HB2  | 1:A:151:ARG:HH11 | 1.60                     | 0.66              |
| 1:A:468:VAL:HB   | 1:A:506:LYS:HE2  | 1.76                     | 0.66              |
| 1:A:739:LEU:O    | 1:A:742:PRO:HD2  | 1.95                     | 0.66              |
| 1:A:376:LEU:O    | 1:A:380:MSE:HE2  | 1.94                     | 0.66              |
| 1:A:472:GLU:HG2  | 1:A:475:ILE:HD12 | 1.77                     | 0.66              |
| 1:A:761:SER:HA   | 1:A:801:ASN:HB3  | 1.77                     | 0.66              |
| 1:A:827:SER:O    | 1:A:878:THR:HG21 | 1.96                     | 0.66              |
| 1:A:305:LYS:HE2  | 1:A:305:LYS:HA   | 1.78                     | 0.66              |
| 1:A:323:MSE:HA   | 1:A:379:ASP:OD1  | 1.95                     | 0.66              |
| 1:A:438:ASN:HD21 | 1:A:440:GLN:HE21 | 1.43                     | 0.66              |
| 1:A:188:VAL:HG21 | 1:A:228:MSE:CE   | 2.26                     | 0.65              |
| 1:A:660:LYS:CG   | 1:A:661:ASN:N    | 2.57                     | 0.65              |
| 1:A:187:LEU:CD2  | 1:A:215:THR:HG21 | 2.26                     | 0.65              |
| 1:A:432:GLY:O    | 1:A:435:LEU:HB2  | 1.97                     | 0.65              |
| 1:A:552:GLU:HG2  | 1:A:556:TYR:HE1  | 1.61                     | 0.65              |
| 1:A:560:ASP:O    | 1:A:564:LYS:HG3  | 1.96                     | 0.65              |
| 1:A:589:VAL:HG13 | 1:A:654:VAL:O    | 1.96                     | 0.65              |
| 1:A:503:GLY:HA2  | 1:A:506:LYS:HB3  | 1.78                     | 0.65              |
| 1:A:311:ARG:HB2  | 1:A:311:ARG:NH1  | 2.10                     | 0.65              |
| 1:A:623:VAL:N    | 1:A:624:PRO:HD2  | 2.12                     | 0.65              |
| 1:A:26:LYS:HB3   | 1:A:30:LEU:HD11  | 1.78                     | 0.65              |
| 1:A:441:LEU:C    | 1:A:443:PRO:HD2  | 2.22                     | 0.65              |
| 1:A:883:LEU:HA   | 1:A:886:ILE:CG2  | 2.26                     | 0.64              |
| 1:A:212:LEU:O    | 1:A:216:ILE:HG12 | 1.96                     | 0.64              |
| 1:A:279:ASP:O    | 1:A:282:VAL:HG12 | 1.98                     | 0.64              |
| 1:A:536:LEU:HD23 | 1:A:547:ARG:HB3  | 1.78                     | 0.64              |
| 1:A:776:ILE:N    | 1:A:777:PRO:HD2  | 2.12                     | 0.64              |
| 1:A:811:GLU:O    | 1:A:815:PRO:HG2  | 1.96                     | 0.64              |
| 1:A:35:LEU:O     | 1:A:38:THR:HG22  | 1.96                     | 0.64              |
| 1:A:338:VAL:HA   | 1:A:343:LEU:HB2  | 1.80                     | 0.64              |
| 1:A:646:GLY:C    | 1:A:648:VAL:H    | 2.05                     | 0.64              |
| 2:B:6:ILE:O      | 2:B:6:ILE:CG1    | 2.45                     | 0.64              |
| 1:A:82:LYS:NZ    | 2:B:6:ILE:HA     | 2.13                     | 0.64              |
| 1:A:826:TYR:CD2  | 1:A:835:LEU:HG   | 2.31                     | 0.64              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:760:ALA:HB2  | 1:A:770:ILE:CD1  | 2.28                     | 0.64              |
| 1:A:767:ARG:NH1  | 1:A:805:PHE:HB2  | 2.13                     | 0.64              |
| 1:A:803:LEU:HD21 | 1:A:812:THR:HG21 | 1.79                     | 0.64              |
| 1:A:820:LEU:O    | 1:A:824:VAL:HG22 | 1.98                     | 0.64              |
| 1:A:529:ALA:HB1  | 1:A:566:TRP:CZ3  | 2.33                     | 0.64              |
| 1:A:847:THR:HG22 | 1:A:888:ASN:HB2  | 1.80                     | 0.64              |
| 1:A:300:MSE:HB2  | 1:A:306:VAL:HG21 | 1.79                     | 0.63              |
| 1:A:475:ILE:HA   | 1:A:478:LEU:HD12 | 1.81                     | 0.63              |
| 1:A:648:VAL:HB   | 1:A:649:PRO:HD3  | 1.80                     | 0.63              |
| 1:A:745:GLU:OE1  | 1:A:746:GLY:N    | 2.31                     | 0.63              |
| 1:A:53:ARG:CD    | 1:A:57:ARG:HD2   | 2.25                     | 0.63              |
| 1:A:108:LEU:CA   | 1:A:117:ILE:HG21 | 2.29                     | 0.63              |
| 1:A:734:LYS:N    | 1:A:735:PRO:HD2  | 2.13                     | 0.63              |
| 1:A:900:ILE:HD13 | 1:A:900:ILE:N    | 2.13                     | 0.63              |
| 1:A:756:LEU:HB3  | 1:A:798:LEU:HD11 | 1.80                     | 0.63              |
| 1:A:202:GLU:OE1  | 1:A:251:ASP:HB2  | 1.99                     | 0.63              |
| 1:A:677:GLU:CA   | 1:A:680:ARG:HH12 | 2.12                     | 0.63              |
| 1:A:265:ASN:HD22 | 1:A:271:ASP:HA   | 1.62                     | 0.63              |
| 1:A:602:ALA:HB1  | 1:A:668:ARG:CB   | 2.27                     | 0.63              |
| 1:A:739:LEU:C    | 1:A:742:PRO:HD2  | 2.24                     | 0.63              |
| 1:A:792:ARG:HA   | 1:A:795:ALA:HB2  | 1.79                     | 0.63              |
| 1:A:55:MSE:HG2   | 1:A:86:ARG:CZ    | 2.29                     | 0.63              |
| 1:A:240:VAL:O    | 1:A:243:LEU:HB2  | 1.99                     | 0.63              |
| 1:A:697:LYS:HD2  | 1:A:697:LYS:N    | 2.14                     | 0.63              |
| 1:A:863:TRP:N    | 1:A:864:PRO:HD2  | 2.14                     | 0.62              |
| 1:A:483:PRO:HA   | 1:A:486:ARG:CD   | 2.28                     | 0.62              |
| 1:A:639:VAL:O    | 1:A:643:VAL:HG23 | 1.99                     | 0.62              |
| 1:A:245:CYS:O    | 1:A:246:LYS:C    | 2.42                     | 0.62              |
| 1:A:539:THR:HA   | 1:A:547:ARG:NH1  | 2.14                     | 0.62              |
| 1:A:684:ILE:HD11 | 1:A:723:SER:HA   | 1.81                     | 0.62              |
| 1:A:733:VAL:C    | 1:A:735:PRO:HD2  | 2.24                     | 0.62              |
| 1:A:46:ARG:O     | 1:A:49:LEU:N     | 2.33                     | 0.62              |
| 1:A:833:GLU:CG   | 1:A:834:ARG:H    | 2.10                     | 0.62              |
| 1:A:853:CYS:HB3  | 1:A:896:LEU:CD2  | 2.28                     | 0.62              |
| 1:A:11:ILE:O     | 1:A:14:GLU:HB3   | 1.99                     | 0.62              |
| 1:A:31:TYR:HD1   | 1:A:49:LEU:CD2   | 2.11                     | 0.62              |
| 1:A:475:ILE:O    | 1:A:475:ILE:HG22 | 1.99                     | 0.62              |
| 1:A:142:VAL:HA   | 1:A:145:MSE:CE   | 2.29                     | 0.62              |
| 1:A:393:VAL:HG11 | 1:A:431:ILE:CG2  | 2.29                     | 0.62              |
| 1:A:601:ASN:ND2  | 1:A:638:ARG:HH21 | 1.98                     | 0.62              |
| 1:A:883:LEU:HA   | 1:A:886:ILE:HG22 | 1.81                     | 0.62              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:232:ASP:OD1  | 1:A:235:LYS:HG3  | 1.99                     | 0.62              |
| 1:A:387:THR:HG22 | 1:A:388:ILE:N    | 2.15                     | 0.62              |
| 1:A:400:LEU:HD22 | 1:A:417:LEU:HB2  | 1.81                     | 0.62              |
| 1:A:375:ARG:HH21 | 1:A:660:LYS:NZ   | 1.96                     | 0.62              |
| 1:A:433:ILE:HA   | 1:A:436:ILE:CD1  | 2.29                     | 0.62              |
| 1:A:464:ILE:CD1  | 1:A:485:LEU:HG   | 2.30                     | 0.62              |
| 1:A:781:GLU:C    | 1:A:783:TRP:H    | 2.08                     | 0.62              |
| 1:A:855:ARG:O    | 1:A:859:GLU:HB3  | 2.00                     | 0.62              |
| 1:A:165:ASN:O    | 1:A:169:VAL:HG23 | 2.00                     | 0.62              |
| 1:A:303:ASP:HB3  | 1:A:306:VAL:CG2  | 2.30                     | 0.62              |
| 1:A:534:LYS:O    | 1:A:538:GLU:HG2  | 2.00                     | 0.62              |
| 1:A:806:GLU:O    | 1:A:808:PHE:N    | 2.32                     | 0.62              |
| 1:A:438:ASN:O    | 1:A:440:GLN:N    | 2.32                     | 0.61              |
| 1:A:187:LEU:HD23 | 1:A:215:THR:HG21 | 1.80                     | 0.61              |
| 1:A:287:LYS:CG   | 1:A:288:ILE:HD13 | 2.26                     | 0.61              |
| 1:A:323:MSE:HE3  | 1:A:334:SER:HB3  | 1.80                     | 0.61              |
| 1:A:684:ILE:HD13 | 1:A:684:ILE:O    | 2.00                     | 0.61              |
| 1:A:637:LYS:HD3  | 1:A:637:LYS:C    | 2.25                     | 0.61              |
| 1:A:48:VAL:HG13  | 1:A:49:LEU:N     | 2.16                     | 0.61              |
| 1:A:505:CYS:HA   | 1:A:528:LEU:HD13 | 1.83                     | 0.61              |
| 1:A:740:LEU:HD12 | 1:A:782:PHE:CZ   | 2.36                     | 0.61              |
| 1:A:799:LEU:HA   | 1:A:802:LEU:HB2  | 1.82                     | 0.61              |
| 1:A:502:VAL:HG12 | 1:A:503:GLY:N    | 2.15                     | 0.61              |
| 1:A:381:VAL:HG23 | 1:A:382:PHE:CD1  | 2.35                     | 0.61              |
| 1:A:792:ARG:HA   | 1:A:795:ALA:HB3  | 1.82                     | 0.61              |
| 1:A:577:LEU:HD22 | 1:A:592:LEU:HD13 | 1.83                     | 0.61              |
| 2:B:4:PRO:C      | 2:B:6:ILE:H      | 2.08                     | 0.61              |
| 1:A:270:MSE:HB3  | 1:A:278:PRO:HB3  | 1.83                     | 0.61              |
| 1:A:920:GLN:C    | 1:A:922:ARG:H    | 2.09                     | 0.60              |
| 1:A:262:ARG:HG3  | 1:A:262:ARG:HH11 | 1.66                     | 0.60              |
| 1:A:407:ASP:O    | 1:A:409:GLU:N    | 2.34                     | 0.60              |
| 1:A:691:LEU:HG   | 1:A:695:LEU:HD21 | 1.83                     | 0.60              |
| 1:A:817:THR:O    | 1:A:819:ARG:N    | 2.34                     | 0.60              |
| 1:A:557:LEU:O    | 1:A:563:VAL:HG21 | 2.02                     | 0.60              |
| 1:A:890:MSE:HB2  | 1:A:897:CYS:HA   | 1.82                     | 0.60              |
| 1:A:643:VAL:HA   | 1:A:647:ALA:HB3  | 1.82                     | 0.60              |
| 1:A:836:SER:OG   | 1:A:837:ARG:N    | 2.35                     | 0.60              |
| 1:A:380:MSE:HE3  | 1:A:389:PHE:CD2  | 2.37                     | 0.60              |
| 1:A:552:GLU:HG2  | 1:A:556:TYR:CE1  | 2.35                     | 0.60              |
| 1:A:762:VAL:O    | 1:A:763:SER:HB3  | 2.01                     | 0.60              |
| 1:A:806:GLU:HA   | 1:A:809:TYR:HB3  | 1.83                     | 0.60              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:172:ARG:HB3  | 1:A:214:GLU:CD   | 2.27                     | 0.60              |
| 1:A:448:MSE:HE2  | 1:A:460:ALA:CB   | 2.29                     | 0.60              |
| 1:A:308:ALA:O    | 1:A:311:ARG:HB3  | 2.02                     | 0.60              |
| 1:A:375:ARG:NH2  | 1:A:660:LYS:NZ   | 2.50                     | 0.60              |
| 1:A:657:THR:C    | 1:A:659:SER:H    | 2.09                     | 0.60              |
| 1:A:506:LYS:HG2  | 1:A:506:LYS:O    | 2.02                     | 0.60              |
| 1:A:371:ILE:HG13 | 1:A:372:CYS:N    | 2.16                     | 0.60              |
| 1:A:690:VAL:O    | 1:A:693:LEU:HB3  | 2.02                     | 0.60              |
| 1:A:867:PHE:CD1  | 1:A:886:ILE:HG13 | 2.36                     | 0.60              |
| 1:A:883:LEU:C    | 1:A:886:ILE:HG22 | 2.26                     | 0.59              |
| 1:A:70:CYS:SG    | 1:A:86:ARG:HB2   | 2.43                     | 0.59              |
| 1:A:304:PRO:HA   | 1:A:360:PRO:HD2  | 1.84                     | 0.59              |
| 1:A:422:ILE:O    | 1:A:426:GLN:HG3  | 2.01                     | 0.59              |
| 1:A:474:ALA:C    | 1:A:476:ASN:H    | 2.09                     | 0.59              |
| 1:A:833:GLU:HG2  | 1:A:834:ARG:N    | 2.17                     | 0.59              |
| 1:A:446:LEU:O    | 1:A:447:GLU:C    | 2.44                     | 0.59              |
| 1:A:697:LYS:H    | 1:A:697:LYS:CD   | 2.15                     | 0.59              |
| 1:A:853:CYS:HA   | 1:A:856:ILE:CD1  | 2.29                     | 0.59              |
| 1:A:256:THR:O    | 1:A:259:LEU:HB2  | 2.02                     | 0.59              |
| 1:A:826:TYR:HD2  | 1:A:835:LEU:HG   | 1.66                     | 0.59              |
| 1:A:830:VAL:HB   | 1:A:873:HIS:NE2  | 2.17                     | 0.59              |
| 1:A:48:VAL:O     | 1:A:52:ASN:ND2   | 2.36                     | 0.59              |
| 1:A:182:TRP:CE3  | 1:A:184:GLN:HA   | 2.38                     | 0.59              |
| 1:A:225:PHE:HA   | 1:A:228:MSE:CE   | 2.30                     | 0.59              |
| 1:A:539:THR:HG23 | 1:A:540:GLU:N    | 2.15                     | 0.59              |
| 1:A:828:ALA:O    | 1:A:830:VAL:HG23 | 2.01                     | 0.59              |
| 1:A:581:ALA:HB2  | 1:A:592:LEU:CD2  | 2.31                     | 0.59              |
| 1:A:856:ILE:HG13 | 1:A:857:MSE:H    | 1.67                     | 0.59              |
| 1:A:323:MSE:HG2  | 1:A:375:ARG:CG   | 2.30                     | 0.59              |
| 1:A:403:ARG:HD2  | 1:A:413:TYR:CE1  | 2.38                     | 0.59              |
| 1:A:406:ASN:HB2  | 1:A:414:ARG:NH2  | 2.17                     | 0.59              |
| 1:A:677:GLU:CA   | 1:A:680:ARG:NH1  | 2.62                     | 0.59              |
| 1:A:792:ARG:HH22 | 1:A:835:LEU:HD21 | 1.68                     | 0.59              |
| 1:A:847:THR:HG21 | 1:A:888:ASN:HB2  | 1.83                     | 0.59              |
| 1:A:192:LEU:HA   | 1:A:195:ILE:HD12 | 1.85                     | 0.59              |
| 1:A:226:LEU:HD22 | 1:A:263:VAL:HG13 | 1.85                     | 0.59              |
| 1:A:375:ARG:HH11 | 1:A:375:ARG:CG   | 2.15                     | 0.59              |
| 1:A:832:GLU:O    | 1:A:833:GLU:HB2  | 2.02                     | 0.59              |
| 1:A:883:LEU:HD13 | 1:A:922:ARG:HA   | 1.85                     | 0.59              |
| 1:A:470:LYS:HG3  | 1:A:471:HIS:N    | 2.09                     | 0.58              |
| 1:A:793:ALA:O    | 1:A:797:GLU:HG3  | 2.03                     | 0.58              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:11:ILE:HD13  | 1:A:11:ILE:C     | 2.28                     | 0.58              |
| 1:A:875:ASP:O    | 1:A:877:GLU:N    | 2.36                     | 0.58              |
| 2:B:3:GLY:N      | 2:B:4:PRO:CD     | 2.66                     | 0.58              |
| 1:A:56:ALA:O     | 1:A:59:LYS:HB2   | 2.03                     | 0.58              |
| 1:A:262:ARG:HH11 | 1:A:262:ARG:CG   | 2.15                     | 0.58              |
| 1:A:359:TYR:HD1  | 1:A:359:TYR:O    | 1.86                     | 0.58              |
| 1:A:657:THR:O    | 1:A:659:SER:N    | 2.35                     | 0.58              |
| 1:A:282:VAL:CG1  | 1:A:283:ALA:H    | 2.15                     | 0.58              |
| 1:A:448:MSE:HE1  | 1:A:459:ILE:HG13 | 1.85                     | 0.58              |
| 1:A:684:ILE:HD13 | 1:A:684:ILE:C    | 2.29                     | 0.58              |
| 1:A:726:GLY:O    | 1:A:727:GLN:HB3  | 2.02                     | 0.58              |
| 1:A:145:MSE:HE1  | 1:A:170:LEU:HD13 | 1.83                     | 0.58              |
| 1:A:323:MSE:CG   | 1:A:375:ARG:HG3  | 2.31                     | 0.58              |
| 1:A:662:ALA:O    | 1:A:665:LEU:HB2  | 2.03                     | 0.58              |
| 1:A:707:ALA:O    | 1:A:710:ALA:HB3  | 2.03                     | 0.58              |
| 1:A:845:ILE:HD12 | 1:A:845:ILE:N    | 2.19                     | 0.58              |
| 1:A:879:GLN:HG3  | 1:A:918:ILE:CB   | 2.34                     | 0.58              |
| 1:A:48:VAL:O     | 1:A:51:ARG:HB3   | 2.04                     | 0.58              |
| 1:A:366:ARG:HH12 | 1:A:419:CYS:HB3  | 1.68                     | 0.58              |
| 1:A:380:MSE:O    | 1:A:381:VAL:HG22 | 2.04                     | 0.58              |
| 1:A:65:GLY:O     | 1:A:66:ALA:C     | 2.47                     | 0.58              |
| 1:A:791:LEU:O    | 1:A:795:ALA:HB2  | 2.04                     | 0.58              |
| 1:A:873:HIS:O    | 1:A:875:ASP:N    | 2.36                     | 0.58              |
| 1:A:6:GLN:HE21   | 1:A:6:GLN:CA     | 2.07                     | 0.58              |
| 1:A:135:THR:C    | 1:A:137:SER:H    | 2.10                     | 0.58              |
| 1:A:150:PHE:CD2  | 1:A:190:PHE:HD1  | 2.21                     | 0.58              |
| 1:A:709:HIS:CE1  | 1:A:748:ALA:HB2  | 2.39                     | 0.58              |
| 1:A:483:PRO:HA   | 1:A:486:ARG:HD2  | 1.85                     | 0.58              |
| 1:A:651:CYS:O    | 1:A:655:SER:HB3  | 2.04                     | 0.58              |
| 1:A:82:LYS:O     | 1:A:86:ARG:HG3   | 2.03                     | 0.58              |
| 1:A:420:PHE:O    | 1:A:424:MSE:HG2  | 2.04                     | 0.58              |
| 1:A:752:SER:O    | 1:A:756:LEU:HD22 | 2.03                     | 0.57              |
| 1:A:401:ILE:HD12 | 1:A:417:LEU:HD21 | 1.86                     | 0.57              |
| 1:A:498:VAL:HG13 | 1:A:499:ARG:H    | 1.68                     | 0.57              |
| 1:A:573:LEU:O    | 1:A:577:LEU:HB2  | 2.03                     | 0.57              |
| 1:A:730:TYR:HD2  | 1:A:730:TYR:N    | 2.02                     | 0.57              |
| 1:A:158:GLU:O    | 1:A:162:THR:HG23 | 2.04                     | 0.57              |
| 1:A:167:LEU:O    | 1:A:171:CYS:HB2  | 2.03                     | 0.57              |
| 1:A:183:ASN:HB3  | 1:A:186:ALA:HB3  | 1.85                     | 0.57              |
| 1:A:365:THR:O    | 1:A:369:VAL:HG23 | 2.03                     | 0.57              |
| 1:A:53:ARG:HD2   | 1:A:57:ARG:CD    | 2.29                     | 0.57              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:142:VAL:CG1  | 1:A:143:THR:N    | 2.68                     | 0.57              |
| 1:A:244:MSE:CA   | 1:A:256:THR:HG21 | 2.35                     | 0.57              |
| 1:A:324:HIS:ND1  | 1:A:325:MSE:N    | 2.53                     | 0.57              |
| 1:A:699:ALA:O    | 1:A:704:LYS:HG2  | 2.05                     | 0.57              |
| 1:A:428:PRO:O    | 1:A:430:ASP:N    | 2.37                     | 0.57              |
| 1:A:480:VAL:O    | 1:A:483:PRO:HD2  | 2.05                     | 0.57              |
| 1:A:733:VAL:N    | 1:A:735:PRO:HD2  | 2.19                     | 0.57              |
| 1:A:774:LYS:O    | 1:A:774:LYS:HG2  | 2.05                     | 0.57              |
| 1:A:626:THR:HG23 | 1:A:627:HIS:N    | 2.14                     | 0.57              |
| 1:A:691:LEU:O    | 1:A:694:ARG:N    | 2.37                     | 0.57              |
| 1:A:384:THR:O    | 1:A:388:ILE:HG13 | 2.05                     | 0.57              |
| 1:A:114:ASP:O    | 1:A:116:GLY:N    | 2.38                     | 0.57              |
| 1:A:364:GLU:O    | 1:A:366:ARG:N    | 2.36                     | 0.57              |
| 1:A:574:LEU:O    | 1:A:578:VAL:HG23 | 2.04                     | 0.57              |
| 1:A:870:ILE:HD11 | 1:A:882:GLY:HA2  | 1.87                     | 0.57              |
| 1:A:258:ILE:HD13 | 1:A:258:ILE:N    | 2.20                     | 0.57              |
| 1:A:150:PHE:CG   | 1:A:190:PHE:HB3  | 2.40                     | 0.56              |
| 1:A:442:THR:N    | 1:A:443:PRO:HD2  | 2.20                     | 0.56              |
| 1:A:478:LEU:O    | 1:A:482:ILE:HG12 | 2.05                     | 0.56              |
| 1:A:541:LYS:HG2  | 1:A:542:TYR:HD1  | 1.69                     | 0.56              |
| 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:108:LEU:C    | 2.29                     | 0.56              |
| 1:A:479:LYS:HA   | 1:A:479:LYS:CE   | 2.30                     | 0.56              |
| 1:A:709:HIS:HE1  | 1:A:713:LYS:HD3  | 1.69                     | 0.56              |
| 1:A:723:SER:HG   | 1:A:724:PHE:HD1  | 1.51                     | 0.56              |
| 1:A:150:PHE:HD2  | 1:A:190:PHE:HD1  | 1.52                     | 0.56              |
| 1:A:536:LEU:HG   | 1:A:550:ALA:HB1  | 1.88                     | 0.56              |
| 1:A:309:VAL:HA   | 1:A:312:GLU:OE1  | 2.06                     | 0.56              |
| 1:A:642:LEU:HD22 | 1:A:647:ALA:HB2  | 1.87                     | 0.56              |
| 1:A:526:ILE:O    | 1:A:529:ALA:HB3  | 2.05                     | 0.56              |
| 1:A:659:SER:O    | 1:A:660:LYS:HB3  | 2.05                     | 0.56              |
| 1:A:745:GLU:CD   | 1:A:746:GLY:N    | 2.61                     | 0.56              |
| 1:A:782:PHE:O    | 1:A:792:ARG:HG2  | 2.06                     | 0.56              |
| 1:A:890:MSE:HE2  | 1:A:928:GLN:CB   | 2.36                     | 0.56              |
| 1:A:538:GLU:CB   | 1:A:541:LYS:HD3  | 2.36                     | 0.56              |
| 1:A:820:LEU:HD12 | 1:A:855:ARG:HB2  | 1.87                     | 0.56              |
| 1:A:572:LEU:CA   | 1:A:575:LYS:HD3  | 2.32                     | 0.56              |
| 1:A:602:ALA:O    | 1:A:668:ARG:HD3  | 2.06                     | 0.56              |
| 1:A:498:VAL:CG1  | 1:A:499:ARG:N    | 2.69                     | 0.56              |
| 1:A:548:ARG:HH12 | 1:A:587:LEU:HD22 | 1.70                     | 0.56              |
| 1:A:58:LEU:HD13  | 1:A:58:LEU:O     | 2.06                     | 0.56              |
| 1:A:400:LEU:HD13 | 1:A:417:LEU:HA   | 1.87                     | 0.56              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:743:ASP:C    | 1:A:745:GLU:N    | 2.61                     | 0.56              |
| 1:A:769:ARG:HG2  | 1:A:769:ARG:HH11 | 1.71                     | 0.56              |
| 1:A:807:LYS:HD2  | 1:A:807:LYS:N    | 2.21                     | 0.56              |
| 1:A:837:ARG:HB3  | 1:A:881:ARG:HH12 | 1.71                     | 0.56              |
| 1:A:552:GLU:O    | 1:A:555:SER:HB3  | 2.07                     | 0.55              |
| 1:A:736:LEU:HA   | 1:A:739:LEU:CG   | 2.26                     | 0.55              |
| 1:A:883:LEU:HD13 | 1:A:922:ARG:CA   | 2.35                     | 0.55              |
| 1:A:47:PRO:HG3   | 1:A:76:PHE:CG    | 2.42                     | 0.55              |
| 1:A:415:ILE:HD13 | 1:A:455:LEU:CD2  | 2.33                     | 0.55              |
| 1:A:663:LEU:HD22 | 1:A:663:LEU:H    | 1.70                     | 0.55              |
| 1:A:801:ASN:HA   | 1:A:804:PHE:HB2  | 1.89                     | 0.55              |
| 1:A:401:ILE:HG23 | 1:A:402:SER:N    | 2.21                     | 0.55              |
| 1:A:493:ASP:OD2  | 1:A:495:THR:HG22 | 2.05                     | 0.55              |
| 1:A:570:ASP:OD2  | 1:A:572:LEU:HD23 | 2.06                     | 0.55              |
| 1:A:601:ASN:ND2  | 1:A:638:ARG:NH2  | 2.53                     | 0.55              |
| 1:A:743:ASP:C    | 1:A:745:GLU:H    | 2.15                     | 0.55              |
| 1:A:282:VAL:CG1  | 1:A:283:ALA:N    | 2.68                     | 0.55              |
| 1:A:736:LEU:H    | 1:A:736:LEU:HD12 | 1.72                     | 0.55              |
| 1:A:830:VAL:HB   | 1:A:873:HIS:CE1  | 2.41                     | 0.55              |
| 1:A:883:LEU:CA   | 1:A:886:ILE:HG22 | 2.37                     | 0.55              |
| 1:A:128:ASN:HA   | 1:A:131:LYS:HE3  | 1.87                     | 0.55              |
| 1:A:238:ARG:HH21 | 1:A:242:ARG:NH2  | 2.05                     | 0.55              |
| 1:A:258:ILE:O    | 1:A:261:GLN:HB3  | 2.05                     | 0.55              |
| 1:A:601:ASN:ND2  | 1:A:635:VAL:HG22 | 2.22                     | 0.55              |
| 1:A:244:MSE:HA   | 1:A:256:THR:HG21 | 1.89                     | 0.55              |
| 1:A:601:ASN:HD22 | 1:A:635:VAL:HG22 | 1.72                     | 0.55              |
| 1:A:241:CYS:C    | 1:A:243:LEU:H    | 2.15                     | 0.55              |
| 1:A:390:LYS:CG   | 1:A:431:ILE:HD12 | 2.22                     | 0.55              |
| 1:A:433:ILE:O    | 1:A:436:ILE:HD13 | 2.07                     | 0.55              |
| 1:A:442:THR:O    | 1:A:445:MSE:HB3  | 2.07                     | 0.55              |
| 1:A:195:ILE:O    | 1:A:247:LYS:HE3  | 2.07                     | 0.55              |
| 1:A:650:ALA:O    | 1:A:653:ALA:HB3  | 2.07                     | 0.55              |
| 1:A:659:SER:O    | 1:A:660:LYS:HD2  | 2.06                     | 0.55              |
| 1:A:90:ALA:O     | 1:A:93:GLN:HB2   | 2.06                     | 0.55              |
| 1:A:157:THR:HG23 | 1:A:158:GLU:N    | 2.09                     | 0.55              |
| 1:A:470:LYS:CG   | 1:A:471:HIS:H    | 2.09                     | 0.55              |
| 1:A:660:LYS:CG   | 1:A:661:ASN:ND2  | 2.68                     | 0.55              |
| 1:A:779:ILE:HD12 | 1:A:779:ILE:O    | 2.06                     | 0.55              |
| 1:A:274:LYS:O    | 1:A:275:GLU:HB2  | 2.06                     | 0.54              |
| 1:A:145:MSE:C    | 1:A:147:LYS:N    | 2.64                     | 0.54              |
| 1:A:830:VAL:HG13 | 1:A:833:GLU:HA   | 1.88                     | 0.54              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:113:ASN:O    | 1:A:114:ASP:HB2  | 2.07                     | 0.54              |
| 1:A:486:ARG:NH1  | 1:A:523:GLU:OE1  | 2.40                     | 0.54              |
| 1:A:538:GLU:HB3  | 1:A:541:LYS:CG   | 2.37                     | 0.54              |
| 1:A:472:GLU:C    | 1:A:474:ALA:N    | 2.66                     | 0.54              |
| 1:A:503:GLY:O    | 1:A:507:ILE:HG13 | 2.06                     | 0.54              |
| 1:A:579:LEU:C    | 1:A:579:LEU:HD23 | 2.32                     | 0.54              |
| 1:A:870:ILE:HD11 | 1:A:882:GLY:CA   | 2.37                     | 0.54              |
| 1:A:393:VAL:CG2  | 1:A:424:MSE:HE2  | 2.33                     | 0.54              |
| 1:A:837:ARG:HB3  | 1:A:881:ARG:NH1  | 2.23                     | 0.54              |
| 1:A:35:LEU:CD2   | 1:A:46:ARG:HH21  | 2.20                     | 0.54              |
| 1:A:194:LEU:HD22 | 1:A:200:GLU:OE1  | 2.07                     | 0.54              |
| 1:A:194:LEU:HD12 | 1:A:208:ALA:CB   | 2.37                     | 0.54              |
| 1:A:344:LEU:HD12 | 1:A:344:LEU:N    | 2.20                     | 0.54              |
| 1:A:624:PRO:C    | 1:A:626:THR:H    | 2.15                     | 0.54              |
| 1:A:682:ARG:C    | 1:A:684:ILE:H    | 2.15                     | 0.54              |
| 1:A:782:PHE:HB3  | 1:A:795:ALA:HB2  | 1.89                     | 0.54              |
| 1:A:67:GLN:NE2   | 1:A:94:LEU:CD1   | 2.71                     | 0.54              |
| 1:A:88:SER:HB3   | 1:A:103:ASP:HB2  | 1.88                     | 0.54              |
| 1:A:260:VAL:HG11 | 1:A:317:LEU:HD11 | 1.89                     | 0.54              |
| 1:A:505:CYS:SG   | 1:A:557:LEU:HD13 | 2.48                     | 0.54              |
| 1:A:390:LYS:HG3  | 1:A:431:ILE:CD1  | 2.22                     | 0.54              |
| 1:A:7:THR:HG22   | 1:A:10:GLU:CG    | 2.32                     | 0.54              |
| 1:A:39:THR:HB    | 1:A:41:GLU:OE1   | 2.08                     | 0.54              |
| 1:A:461:ALA:HB2  | 1:A:488:LEU:HD13 | 1.89                     | 0.54              |
| 1:A:278:PRO:HG3  | 1:A:328:GLY:O    | 2.08                     | 0.53              |
| 1:A:324:HIS:ND1  | 1:A:324:HIS:C    | 2.66                     | 0.53              |
| 1:A:381:VAL:HG23 | 1:A:382:PHE:HD1  | 1.73                     | 0.53              |
| 1:A:441:LEU:C    | 1:A:441:LEU:HD13 | 2.32                     | 0.53              |
| 1:A:719:ASP:OD1  | 1:A:721:MSE:HB2  | 2.08                     | 0.53              |
| 1:A:781:GLU:C    | 1:A:783:TRP:N    | 2.65                     | 0.53              |
| 2:B:3:GLY:N      | 2:B:4:PRO:HD3    | 2.23                     | 0.53              |
| 1:A:213:ASP:CG   | 1:A:262:ARG:HH12 | 2.16                     | 0.53              |
| 1:A:344:LEU:O    | 1:A:347:LEU:HB2  | 2.08                     | 0.53              |
| 1:A:385:LYS:O    | 1:A:386:ARG:C    | 2.51                     | 0.53              |
| 1:A:462:GLU:OE2  | 1:A:549:TYR:CE1  | 2.61                     | 0.53              |
| 1:A:531:THR:O    | 1:A:535:PHE:HB2  | 2.07                     | 0.53              |
| 1:A:533:LYS:O    | 1:A:537:LEU:HG   | 2.07                     | 0.53              |
| 1:A:381:VAL:CG2  | 1:A:382:PHE:H    | 2.20                     | 0.53              |
| 1:A:818:ASP:HB3  | 1:A:821:LYS:HD3  | 1.90                     | 0.53              |
| 1:A:187:LEU:O    | 1:A:191:VAL:HG23 | 2.08                     | 0.53              |
| 1:A:361:VAL:CG1  | 1:A:362:SER:N    | 2.71                     | 0.53              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:423:THR:O    | 1:A:425:LEU:N    | 2.41                     | 0.53              |
| 1:A:489:TYR:HD1  | 1:A:489:TYR:O    | 1.92                     | 0.53              |
| 1:A:671:LEU:HD13 | 1:A:706:LYS:HE2  | 1.88                     | 0.53              |
| 1:A:818:ASP:CB   | 1:A:821:LYS:HD3  | 2.39                     | 0.53              |
| 1:A:168:LEU:HD13 | 1:A:211:ILE:HG13 | 1.91                     | 0.53              |
| 1:A:641:ALA:O    | 1:A:644:GLU:HB2  | 2.07                     | 0.53              |
| 1:A:646:GLY:C    | 1:A:649:PRO:HD2  | 2.33                     | 0.53              |
| 1:A:836:SER:O    | 1:A:838:ALA:N    | 2.41                     | 0.53              |
| 1:A:74:LEU:HD21  | 1:A:83:ALA:HB1   | 1.91                     | 0.53              |
| 1:A:752:SER:O    | 1:A:756:LEU:CD2  | 2.57                     | 0.53              |
| 1:A:773:GLU:O    | 1:A:774:LYS:HB3  | 2.09                     | 0.53              |
| 1:A:557:LEU:O    | 1:A:563:VAL:CG1  | 2.55                     | 0.53              |
| 1:A:696:THR:HB   | 1:A:697:LYS:HD2  | 1.89                     | 0.53              |
| 1:A:883:LEU:HB3  | 1:A:921:GLU:O    | 2.09                     | 0.53              |
| 1:A:906:PHE:O    | 1:A:909:LEU:CB   | 2.57                     | 0.53              |
| 1:A:920:GLN:C    | 1:A:922:ARG:N    | 2.66                     | 0.53              |
| 1:A:371:ILE:HA   | 1:A:374:GLN:NE2  | 2.23                     | 0.53              |
| 1:A:415:ILE:HA   | 1:A:459:ILE:HD11 | 1.91                     | 0.53              |
| 1:A:814:ALA:HB3  | 1:A:815:PRO:HD3  | 1.91                     | 0.53              |
| 1:A:856:ILE:O    | 1:A:859:GLU:N    | 2.41                     | 0.53              |
| 1:A:639:VAL:HG13 | 1:A:673:PHE:CD2  | 2.44                     | 0.53              |
| 1:A:736:LEU:HD12 | 1:A:736:LEU:N    | 2.24                     | 0.53              |
| 1:A:834:ARG:C    | 1:A:836:SER:N    | 2.66                     | 0.53              |
| 1:A:862:SER:C    | 1:A:864:PRO:HD2  | 2.34                     | 0.53              |
| 1:A:879:GLN:O    | 1:A:883:LEU:HD12 | 2.09                     | 0.53              |
| 1:A:886:ILE:CG2  | 1:A:887:ALA:N    | 2.72                     | 0.53              |
| 1:A:124:LEU:O    | 1:A:127:ALA:HB3  | 2.09                     | 0.52              |
| 1:A:526:ILE:HD13 | 1:A:526:ILE:N    | 2.14                     | 0.52              |
| 1:A:56:ALA:O     | 1:A:59:LYS:N     | 2.42                     | 0.52              |
| 1:A:109:ARG:HG3  | 1:A:109:ARG:HH11 | 1.74                     | 0.52              |
| 1:A:534:LYS:HG2  | 1:A:538:GLU:HG2  | 1.90                     | 0.52              |
| 1:A:538:GLU:OE2  | 1:A:541:LYS:HD3  | 2.09                     | 0.52              |
| 1:A:594:THR:O    | 1:A:598:ASN:HB2  | 2.09                     | 0.52              |
| 1:A:734:LYS:N    | 1:A:735:PRO:CD   | 2.72                     | 0.52              |
| 1:A:750:TYR:HB2  | 1:A:791:LEU:HD22 | 1.89                     | 0.52              |
| 1:A:57:ARG:HB3   | 1:A:62:ASP:HB3   | 1.91                     | 0.52              |
| 1:A:97:VAL:HG23  | 1:A:131:LYS:HE2  | 1.91                     | 0.52              |
| 1:A:265:ASN:ND2  | 1:A:271:ASP:HA   | 2.25                     | 0.52              |
| 1:A:659:SER:O    | 1:A:660:LYS:CB   | 2.57                     | 0.52              |
| 1:A:498:VAL:CG1  | 1:A:499:ARG:H    | 2.23                     | 0.52              |
| 1:A:502:VAL:O    | 1:A:504:LEU:N    | 2.41                     | 0.52              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:585:GLY:C    | 1:A:587:LEU:H    | 2.17                     | 0.52              |
| 1:A:663:LEU:HD22 | 1:A:663:LEU:N    | 2.25                     | 0.52              |
| 1:A:883:LEU:O    | 1:A:887:ALA:HB2  | 2.10                     | 0.52              |
| 1:A:586:ALA:HA   | 1:A:589:VAL:CG2  | 2.40                     | 0.52              |
| 1:A:671:LEU:HD12 | 1:A:706:LYS:O    | 2.09                     | 0.52              |
| 1:A:680:ARG:HA   | 1:A:683:ILE:CG1  | 2.39                     | 0.52              |
| 1:A:776:ILE:HA   | 1:A:779:ILE:CG2  | 2.39                     | 0.52              |
| 1:A:35:LEU:HD22  | 1:A:46:ARG:HH21  | 1.74                     | 0.52              |
| 1:A:188:VAL:CB   | 1:A:189:PRO:HD3  | 2.35                     | 0.52              |
| 1:A:238:ARG:HH21 | 1:A:242:ARG:HH21 | 1.56                     | 0.52              |
| 1:A:538:GLU:HB3  | 1:A:541:LYS:CD   | 2.39                     | 0.52              |
| 1:A:740:LEU:HD21 | 1:A:752:SER:OG   | 2.09                     | 0.52              |
| 1:A:863:TRP:HE3  | 1:A:867:PHE:HD2  | 1.57                     | 0.52              |
| 1:A:875:ASP:O    | 1:A:876:ALA:C    | 2.52                     | 0.52              |
| 1:A:108:LEU:HA   | 1:A:117:ILE:HG21 | 1.90                     | 0.52              |
| 1:A:161:MSE:O    | 1:A:164:LEU:HB2  | 2.10                     | 0.52              |
| 1:A:724:PHE:CD2  | 1:A:732:VAL:HG21 | 2.45                     | 0.52              |
| 1:A:853:CYS:HB3  | 1:A:896:LEU:HD21 | 1.91                     | 0.52              |
| 1:A:874:GLU:CD   | 1:A:874:GLU:H    | 2.17                     | 0.52              |
| 1:A:157:THR:CG2  | 1:A:158:GLU:H    | 2.05                     | 0.52              |
| 1:A:401:ILE:O    | 1:A:403:ARG:N    | 2.41                     | 0.52              |
| 1:A:909:LEU:O    | 1:A:910:VAL:C    | 2.52                     | 0.52              |
| 1:A:46:ARG:O     | 1:A:47:PRO:C     | 2.53                     | 0.52              |
| 1:A:465:VAL:HG22 | 1:A:503:GLY:N    | 2.24                     | 0.52              |
| 1:A:748:ALA:HB1  | 1:A:751:ASP:OD2  | 2.10                     | 0.52              |
| 1:A:840:ALA:O    | 1:A:843:PHE:HB3  | 2.09                     | 0.52              |
| 1:A:324:HIS:HE1  | 1:A:325:MSE:SE   | 2.43                     | 0.51              |
| 1:A:409:GLU:C    | 1:A:409:GLU:CD   | 2.78                     | 0.51              |
| 1:A:439:ASP:C    | 1:A:441:LEU:H    | 2.17                     | 0.51              |
| 1:A:571:SER:HB3  | 1:A:575:LYS:HD2  | 1.90                     | 0.51              |
| 1:A:544:VAL:HG23 | 1:A:545:ASP:N    | 2.25                     | 0.51              |
| 1:A:565:GLU:O    | 1:A:569:ASP:HB2  | 2.10                     | 0.51              |
| 1:A:646:GLY:O    | 1:A:648:VAL:N    | 2.39                     | 0.51              |
| 1:A:898:SER:O    | 1:A:899:GLU:C    | 2.52                     | 0.51              |
| 1:A:177:GLY:O    | 1:A:181:VAL:HG23 | 2.10                     | 0.51              |
| 1:A:330:PRO:HG2  | 1:A:333:TRP:CD1  | 2.46                     | 0.51              |
| 1:A:663:LEU:CD2  | 1:A:663:LEU:H    | 2.22                     | 0.51              |
| 1:A:812:THR:HG22 | 1:A:819:ARG:NE   | 2.24                     | 0.51              |
| 1:A:282:VAL:O    | 1:A:283:ALA:C    | 2.53                     | 0.51              |
| 1:A:378:GLU:O    | 1:A:380:MSE:N    | 2.39                     | 0.51              |
| 1:A:398:ASN:O    | 1:A:401:ILE:HG22 | 2.10                     | 0.51              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:892:SER:O    | 1:A:893:SER:HB3  | 2.11                     | 0.51              |
| 1:A:237:VAL:HG22 | 1:A:289:TRP:CZ3  | 2.46                     | 0.51              |
| 1:A:438:ASN:C    | 1:A:440:GLN:H    | 2.18                     | 0.51              |
| 1:A:581:ALA:C    | 1:A:583:LYS:H    | 2.18                     | 0.51              |
| 1:A:677:GLU:N    | 1:A:680:ARG:HH12 | 2.09                     | 0.51              |
| 1:A:692:CYS:O    | 1:A:695:LEU:HB2  | 2.10                     | 0.51              |
| 1:A:465:VAL:HG22 | 1:A:503:GLY:HA3  | 1.93                     | 0.51              |
| 1:A:677:GLU:HA   | 1:A:680:ARG:HH11 | 1.73                     | 0.51              |
| 1:A:677:GLU:H    | 1:A:680:ARG:HH12 | 1.58                     | 0.51              |
| 1:A:735:PRO:HG2  | 1:A:736:LEU:H    | 1.74                     | 0.51              |
| 1:A:740:LEU:O    | 1:A:741:HIS:C    | 2.54                     | 0.51              |
| 1:A:46:ARG:HB2   | 1:A:47:PRO:CD    | 2.38                     | 0.51              |
| 1:A:138:LEU:O    | 1:A:141:LYS:N    | 2.43                     | 0.51              |
| 1:A:530:LYS:H    | 1:A:530:LYS:HD2  | 1.76                     | 0.51              |
| 1:A:564:LYS:HB2  | 1:A:638:ARG:NH1  | 2.26                     | 0.51              |
| 1:A:632:GLU:C    | 1:A:634:TYR:H    | 2.18                     | 0.51              |
| 1:A:468:VAL:HG11 | 1:A:506:LYS:O    | 2.10                     | 0.51              |
| 1:A:538:GLU:CA   | 1:A:541:LYS:HD3  | 2.40                     | 0.51              |
| 1:A:544:VAL:HG12 | 1:A:547:ARG:HH21 | 1.76                     | 0.51              |
| 1:A:670:LEU:HD11 | 1:A:691:LEU:CD2  | 2.37                     | 0.51              |
| 1:A:877:GLU:OE1  | 1:A:877:GLU:HA   | 2.11                     | 0.51              |
| 2:B:3:GLY:C      | 2:B:5:THR:H      | 2.19                     | 0.51              |
| 1:A:623:VAL:N    | 1:A:624:PRO:CD   | 2.73                     | 0.51              |
| 1:A:794:ALA:C    | 1:A:796:ALA:N    | 2.67                     | 0.51              |
| 1:A:21:ASP:O     | 1:A:22:GLN:CB    | 2.59                     | 0.51              |
| 1:A:97:VAL:O     | 1:A:100:ALA:HB3  | 2.11                     | 0.51              |
| 1:A:579:LEU:HD23 | 1:A:579:LEU:O    | 2.11                     | 0.51              |
| 1:A:915:LEU:O    | 1:A:916:GLY:C    | 2.53                     | 0.51              |
| 1:A:148:LEU:H    | 1:A:148:LEU:CD1  | 2.24                     | 0.50              |
| 1:A:439:ASP:C    | 1:A:441:LEU:N    | 2.67                     | 0.50              |
| 1:A:696:THR:O    | 1:A:704:LYS:HD3  | 2.11                     | 0.50              |
| 1:A:734:LYS:O    | 1:A:738:ASP:OD2  | 2.28                     | 0.50              |
| 1:A:785:MSE:HB2  | 1:A:792:ARG:HD2  | 1.91                     | 0.50              |
| 1:A:47:PRO:HG2   | 1:A:76:PHE:CD2   | 2.46                     | 0.50              |
| 1:A:417:LEU:O    | 1:A:421:LEU:HG   | 2.11                     | 0.50              |
| 1:A:589:VAL:O    | 1:A:590:TYR:C    | 2.52                     | 0.50              |
| 1:A:863:TRP:N    | 1:A:864:PRO:CD   | 2.74                     | 0.50              |
| 1:A:216:ILE:HB   | 1:A:222:CYS:SG   | 2.52                     | 0.50              |
| 1:A:465:VAL:HG22 | 1:A:503:GLY:CA   | 2.42                     | 0.50              |
| 1:A:692:CYS:HA   | 1:A:695:LEU:HG   | 1.93                     | 0.50              |
| 1:A:26:LYS:O     | 1:A:30:LEU:HG    | 2.12                     | 0.50              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:109:ARG:HG3  | 1:A:109:ARG:NH1  | 2.26                     | 0.50              |
| 1:A:414:ARG:HD2  | 1:A:456:MSE:HE1  | 1.93                     | 0.50              |
| 1:A:501:LEU:HD11 | 1:A:531:THR:HG22 | 1.94                     | 0.50              |
| 1:A:592:LEU:HG   | 1:A:596:TYR:CE2  | 2.46                     | 0.50              |
| 1:A:769:ARG:O    | 1:A:770:ILE:C    | 2.54                     | 0.50              |
| 1:A:23:ASP:OD1   | 1:A:26:LYS:HG3   | 2.12                     | 0.50              |
| 1:A:145:MSE:C    | 1:A:147:LYS:H    | 2.18                     | 0.50              |
| 1:A:315:ILE:HD13 | 1:A:369:VAL:HG22 | 1.92                     | 0.50              |
| 1:A:498:VAL:HB   | 1:A:535:PHE:HZ   | 1.66                     | 0.50              |
| 1:A:501:LEU:HD11 | 1:A:531:THR:CG2  | 2.41                     | 0.50              |
| 1:A:539:THR:HA   | 1:A:547:ARG:HH11 | 1.75                     | 0.50              |
| 1:A:852:ALA:C    | 1:A:854:ALA:H    | 2.18                     | 0.50              |
| 1:A:882:GLY:O    | 1:A:886:ILE:HB   | 2.12                     | 0.50              |
| 1:A:170:LEU:HD23 | 1:A:170:LEU:C    | 2.36                     | 0.50              |
| 1:A:323:MSE:HA   | 1:A:323:MSE:HE3  | 1.94                     | 0.50              |
| 1:A:489:TYR:CD1  | 1:A:489:TYR:C    | 2.88                     | 0.50              |
| 1:A:498:VAL:C    | 1:A:500:ALA:N    | 2.69                     | 0.50              |
| 1:A:691:LEU:HG   | 1:A:695:LEU:CD2  | 2.41                     | 0.50              |
| 1:A:822:LEU:HD22 | 1:A:826:TYR:HE1  | 1.76                     | 0.50              |
| 1:A:423:THR:O    | 1:A:426:GLN:N    | 2.45                     | 0.50              |
| 1:A:868:LYS:O    | 1:A:871:ALA:HB3  | 2.12                     | 0.50              |
| 1:A:172:ARG:HB3  | 1:A:214:GLU:HG2  | 1.94                     | 0.50              |
| 1:A:280:PRO:O    | 1:A:284:GLU:HB2  | 2.11                     | 0.50              |
| 1:A:326:ASP:O    | 1:A:328:GLY:N    | 2.44                     | 0.50              |
| 1:A:498:VAL:C    | 1:A:500:ALA:H    | 2.18                     | 0.50              |
| 1:A:596:TYR:HE1  | 1:A:642:LEU:HD21 | 1.77                     | 0.50              |
| 1:A:863:TRP:CH2  | 1:A:899:GLU:HB3  | 2.46                     | 0.50              |
| 1:A:27:ALA:HA    | 1:A:30:LEU:HD12  | 1.93                     | 0.50              |
| 1:A:340:GLU:O    | 1:A:344:LEU:HD13 | 2.12                     | 0.50              |
| 1:A:498:VAL:CB   | 1:A:535:PHE:CZ   | 2.80                     | 0.50              |
| 1:A:25:ILE:HD12  | 1:A:25:ILE:N     | 2.00                     | 0.49              |
| 1:A:314:CYS:O    | 1:A:318:PHE:HB2  | 2.11                     | 0.49              |
| 1:A:721:MSE:HE1  | 1:A:762:VAL:HG21 | 1.94                     | 0.49              |
| 1:A:828:ALA:O    | 1:A:830:VAL:N    | 2.45                     | 0.49              |
| 1:A:238:ARG:HD2  | 1:A:296:GLU:OE1  | 2.12                     | 0.49              |
| 1:A:22:GLN:OE1   | 1:A:774:LYS:HE3  | 2.12                     | 0.49              |
| 1:A:861:LYS:O    | 1:A:862:SER:C    | 2.55                     | 0.49              |
| 1:A:201:ASN:HB3  | 1:A:204:VAL:HG23 | 1.94                     | 0.49              |
| 1:A:560:ASP:OD1  | 1:A:563:VAL:HG12 | 2.12                     | 0.49              |
| 1:A:632:GLU:HG2  | 1:A:633:GLU:H    | 1.78                     | 0.49              |
| 1:A:908:VAL:O    | 1:A:909:LEU:C    | 2.55                     | 0.49              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:148:LEU:HD12 | 1:A:148:LEU:N    | 2.28                     | 0.49              |
| 1:A:149:ALA:HB1  | 1:A:164:LEU:CD2  | 2.43                     | 0.49              |
| 1:A:201:ASN:O    | 1:A:204:VAL:HB   | 2.13                     | 0.49              |
| 1:A:226:LEU:HD22 | 1:A:263:VAL:CG1  | 2.43                     | 0.49              |
| 1:A:769:ARG:HG2  | 1:A:769:ARG:NH1  | 2.27                     | 0.49              |
| 1:A:887:ALA:O    | 1:A:890:MSE:HG2  | 2.12                     | 0.49              |
| 1:A:544:VAL:HG23 | 1:A:545:ASP:H    | 1.77                     | 0.49              |
| 1:A:762:VAL:O    | 1:A:763:SER:CB   | 2.60                     | 0.49              |
| 1:A:812:THR:HB   | 1:A:819:ARG:HD3  | 1.95                     | 0.49              |
| 1:A:170:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:CG2  | 2.42                     | 0.49              |
| 1:A:292:ARG:O    | 1:A:296:GLU:HG2  | 2.12                     | 0.49              |
| 1:A:429:VAL:CG1  | 1:A:430:ASP:N    | 2.76                     | 0.49              |
| 1:A:554:LEU:HD21 | 1:A:567:ILE:HD13 | 1.95                     | 0.49              |
| 1:A:740:LEU:HD12 | 1:A:782:PHE:HZ   | 1.78                     | 0.49              |
| 1:A:847:THR:HG23 | 1:A:889:ILE:HD13 | 1.95                     | 0.49              |
| 1:A:131:LYS:O    | 1:A:134:GLN:N    | 2.45                     | 0.49              |
| 1:A:173:GLU:O    | 1:A:173:GLU:HG2  | 2.10                     | 0.49              |
| 1:A:199:SER:O    | 1:A:200:GLU:C    | 2.55                     | 0.49              |
| 1:A:264:PHE:HE2  | 1:A:317:LEU:HD22 | 1.76                     | 0.49              |
| 1:A:313:THR:C    | 1:A:315:ILE:H    | 2.21                     | 0.49              |
| 1:A:353:ILE:HD13 | 1:A:356:LEU:O    | 2.13                     | 0.49              |
| 1:A:863:TRP:CD2  | 1:A:864:PRO:HD3  | 2.47                     | 0.49              |
| 1:A:29:GLU:CD    | 1:A:277:LYS:HD3  | 2.37                     | 0.49              |
| 1:A:143:THR:O    | 1:A:147:LYS:HG3  | 2.13                     | 0.49              |
| 1:A:323:MSE:HE3  | 1:A:379:ASP:OD1  | 2.13                     | 0.49              |
| 1:A:585:GLY:O    | 1:A:587:LEU:N    | 2.44                     | 0.49              |
| 1:A:596:TYR:CE1  | 1:A:642:LEU:HD21 | 2.47                     | 0.49              |
| 1:A:800:LEU:HD11 | 1:A:841:ALA:HB3  | 1.94                     | 0.49              |
| 1:A:554:LEU:O    | 1:A:554:LEU:HD23 | 2.13                     | 0.49              |
| 1:A:74:LEU:CD2   | 1:A:83:ALA:HB1   | 2.42                     | 0.48              |
| 1:A:144:ASP:O    | 1:A:148:LEU:HD13 | 2.13                     | 0.48              |
| 1:A:462:GLU:HB2  | 1:A:499:ARG:HG2  | 1.95                     | 0.48              |
| 1:A:883:LEU:HA   | 1:A:886:ILE:HG21 | 1.95                     | 0.48              |
| 1:A:407:ASP:O    | 1:A:408:ASP:C    | 2.56                     | 0.48              |
| 1:A:414:ARG:HH11 | 1:A:456:MSE:HE1  | 1.77                     | 0.48              |
| 1:A:837:ARG:O    | 1:A:881:ARG:NH1  | 2.46                     | 0.48              |
| 1:A:131:LYS:O    | 1:A:132:ILE:C    | 2.57                     | 0.48              |
| 1:A:414:ARG:NH1  | 1:A:447:GLU:HG2  | 2.29                     | 0.48              |
| 1:A:646:GLY:C    | 1:A:648:VAL:N    | 2.72                     | 0.48              |
| 1:A:784:PHE:N    | 1:A:784:PHE:CD2  | 2.82                     | 0.48              |
| 1:A:856:ILE:O    | 1:A:858:ASP:N    | 2.47                     | 0.48              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:873:HIS:CD2  | 1:A:875:ASP:HB2  | 2.49                     | 0.48              |
| 1:A:462:GLU:HA   | 1:A:465:VAL:HB   | 1.94                     | 0.48              |
| 1:A:536:LEU:CD2  | 1:A:547:ARG:HB3  | 2.44                     | 0.48              |
| 1:A:679:LEU:C    | 1:A:681:GLY:H    | 2.21                     | 0.48              |
| 1:A:859:GLU:O    | 1:A:859:GLU:HG3  | 2.14                     | 0.48              |
| 1:A:885:GLY:O    | 1:A:889:ILE:HG12 | 2.12                     | 0.48              |
| 1:A:135:THR:C    | 1:A:137:SER:N    | 2.72                     | 0.48              |
| 1:A:224:LYS:O    | 1:A:224:LYS:HD3  | 2.13                     | 0.48              |
| 1:A:259:LEU:O    | 1:A:263:VAL:HG23 | 2.13                     | 0.48              |
| 1:A:663:LEU:HB3  | 1:A:699:ALA:HB2  | 1.95                     | 0.48              |
| 1:A:679:LEU:C    | 1:A:681:GLY:N    | 2.71                     | 0.48              |
| 1:A:852:ALA:C    | 1:A:854:ALA:N    | 2.71                     | 0.48              |
| 1:A:900:ILE:HB   | 1:A:904:GLU:CB   | 2.43                     | 0.48              |
| 1:A:464:ILE:HG13 | 1:A:465:VAL:N    | 2.28                     | 0.48              |
| 1:A:604:GLU:HG2  | 1:A:668:ARG:NH1  | 2.29                     | 0.48              |
| 1:A:851:ASN:O    | 1:A:854:ALA:HB3  | 2.14                     | 0.48              |
| 1:A:138:LEU:O    | 1:A:139:ALA:C    | 2.57                     | 0.48              |
| 1:A:367:GLN:NE2  | 1:A:586:ALA:O    | 2.47                     | 0.48              |
| 1:A:464:ILE:O    | 1:A:467:THR:N    | 2.45                     | 0.48              |
| 1:A:148:LEU:CD1  | 1:A:148:LEU:N    | 2.77                     | 0.48              |
| 1:A:409:GLU:C    | 1:A:409:GLU:OE1  | 2.56                     | 0.48              |
| 1:A:843:PHE:HZ   | 1:A:867:PHE:HE1  | 1.60                     | 0.48              |
| 1:A:262:ARG:CG   | 1:A:262:ARG:NH1  | 2.76                     | 0.48              |
| 1:A:375:ARG:CG   | 1:A:375:ARG:NH1  | 2.75                     | 0.48              |
| 1:A:382:PHE:HB2  | 1:A:385:LYS:HB2  | 1.94                     | 0.48              |
| 1:A:567:ILE:HG23 | 1:A:573:LEU:HD23 | 1.96                     | 0.48              |
| 1:A:626:THR:CG2  | 1:A:627:HIS:H    | 2.11                     | 0.48              |
| 1:A:682:ARG:C    | 1:A:684:ILE:N    | 2.72                     | 0.48              |
| 1:A:691:LEU:C    | 1:A:693:LEU:N    | 2.71                     | 0.48              |
| 1:A:697:LYS:N    | 1:A:697:LYS:CD   | 2.75                     | 0.48              |
| 1:A:748:ALA:HB1  | 1:A:751:ASP:CB   | 2.42                     | 0.48              |
| 1:A:860:ILE:O    | 1:A:860:ILE:CG2  | 2.60                     | 0.48              |
| 1:A:311:ARG:HB2  | 1:A:311:ARG:CZ   | 2.43                     | 0.47              |
| 1:A:328:GLY:C    | 1:A:329:ILE:O    | 2.57                     | 0.47              |
| 1:A:385:LYS:C    | 1:A:387:THR:N    | 2.69                     | 0.47              |
| 1:A:760:ALA:HB1  | 1:A:767:ARG:HG2  | 1.96                     | 0.47              |
| 1:A:19:VAL:HG21  | 1:A:31:TYR:OH    | 2.13                     | 0.47              |
| 1:A:164:LEU:O    | 1:A:165:ASN:C    | 2.57                     | 0.47              |
| 1:A:182:TRP:CD2  | 1:A:221:ARG:HD3  | 2.50                     | 0.47              |
| 1:A:241:CYS:O    | 1:A:243:LEU:N    | 2.47                     | 0.47              |
| 1:A:291:ILE:HD13 | 1:A:333:TRP:HZ3  | 1.79                     | 0.47              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:329:ILE:CG1  | 1:A:330:PRO:HD2  | 2.17                     | 0.47              |
| 1:A:414:ARG:HD2  | 1:A:456:MSE:CE   | 2.44                     | 0.47              |
| 1:A:449:ALA:O    | 1:A:488:LEU:HD21 | 2.15                     | 0.47              |
| 1:A:538:GLU:HB3  | 1:A:541:LYS:HG2  | 1.96                     | 0.47              |
| 1:A:733:VAL:H    | 1:A:735:PRO:HD2  | 1.79                     | 0.47              |
| 1:A:767:ARG:HA   | 1:A:770:ILE:CD1  | 2.43                     | 0.47              |
| 1:A:779:ILE:CG1  | 1:A:798:LEU:HD23 | 2.43                     | 0.47              |
| 1:A:886:ILE:HG23 | 1:A:887:ALA:N    | 2.28                     | 0.47              |
| 1:A:150:PHE:CD2  | 1:A:190:PHE:CD1  | 3.02                     | 0.47              |
| 1:A:369:VAL:O    | 1:A:373:LEU:HD12 | 2.14                     | 0.47              |
| 1:A:474:ALA:C    | 1:A:476:ASN:N    | 2.72                     | 0.47              |
| 1:A:683:ILE:O    | 1:A:688:GLY:HA3  | 2.14                     | 0.47              |
| 1:A:679:LEU:O    | 1:A:683:ILE:HG23 | 2.15                     | 0.47              |
| 1:A:783:TRP:HE1  | 1:A:796:ALA:HB2  | 1.79                     | 0.47              |
| 1:A:572:LEU:CD1  | 1:A:575:LYS:HE2  | 2.45                     | 0.47              |
| 2:B:4:PRO:O      | 2:B:6:ILE:N      | 2.37                     | 0.47              |
| 1:A:42:ASP:O     | 1:A:43:LYS:C     | 2.57                     | 0.47              |
| 1:A:45:LEU:O     | 1:A:48:VAL:CG1   | 2.63                     | 0.47              |
| 1:A:85:PHE:C     | 1:A:85:PHE:CD2   | 2.92                     | 0.47              |
| 1:A:346:LEU:HG   | 1:A:373:LEU:HD21 | 1.97                     | 0.47              |
| 1:A:505:CYS:SG   | 1:A:557:LEU:CD1  | 3.02                     | 0.47              |
| 1:A:710:ALA:O    | 1:A:714:LEU:HB2  | 2.15                     | 0.47              |
| 1:A:852:ALA:O    | 1:A:856:ILE:HG12 | 2.15                     | 0.47              |
| 1:A:875:ASP:O    | 1:A:877:GLU:HB2  | 2.14                     | 0.47              |
| 1:A:16:ASN:HA    | 1:A:31:TYR:OH    | 2.14                     | 0.47              |
| 1:A:165:ASN:O    | 1:A:168:LEU:HB3  | 2.15                     | 0.47              |
| 1:A:210:ARG:HA   | 1:A:213:ASP:HB3  | 1.96                     | 0.47              |
| 1:A:218:ASN:CB   | 1:A:221:ARG:NH1  | 2.75                     | 0.47              |
| 1:A:260:VAL:CG1  | 1:A:317:LEU:HD11 | 2.45                     | 0.47              |
| 1:A:265:ASN:HA   | 1:A:270:MSE:O    | 2.14                     | 0.47              |
| 1:A:366:ARG:O    | 1:A:367:GLN:C    | 2.57                     | 0.47              |
| 1:A:482:ILE:O    | 1:A:485:LEU:HB2  | 2.15                     | 0.47              |
| 1:A:642:LEU:C    | 1:A:644:GLU:N    | 2.72                     | 0.47              |
| 1:A:720:PRO:HG3  | 1:A:758:ASN:O    | 2.14                     | 0.47              |
| 1:A:764:ASP:OD2  | 1:A:805:PHE:CD2  | 2.68                     | 0.47              |
| 1:A:883:LEU:HD13 | 1:A:922:ARG:CB   | 2.44                     | 0.47              |
| 2:B:3:GLY:C      | 2:B:5:THR:N      | 2.73                     | 0.47              |
| 1:A:53:ARG:HH11  | 1:A:57:ARG:NH1   | 2.13                     | 0.47              |
| 1:A:225:PHE:O    | 1:A:228:MSE:HG2  | 2.15                     | 0.47              |
| 1:A:291:ILE:HG22 | 1:A:292:ARG:N    | 2.29                     | 0.47              |
| 1:A:352:GLN:HG3  | 1:A:359:TYR:CE1  | 2.50                     | 0.47              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:97:VAL:O     | 1:A:98:GLY:O     | 2.33                     | 0.47              |
| 1:A:150:PHE:CD2  | 1:A:190:PHE:HB3  | 2.50                     | 0.47              |
| 1:A:302:GLN:O    | 1:A:303:ASP:C    | 2.57                     | 0.47              |
| 1:A:344:LEU:HD11 | 1:A:392:LYS:HE3  | 1.97                     | 0.47              |
| 1:A:359:TYR:O    | 1:A:359:TYR:CD1  | 2.68                     | 0.47              |
| 1:A:423:THR:C    | 1:A:425:LEU:N    | 2.72                     | 0.47              |
| 1:A:648:VAL:H    | 1:A:649:PRO:CD   | 2.28                     | 0.47              |
| 1:A:799:LEU:H    | 1:A:799:LEU:CD2  | 2.28                     | 0.47              |
| 1:A:834:ARG:O    | 1:A:836:SER:N    | 2.48                     | 0.47              |
| 1:A:724:PHE:N    | 1:A:725:PRO:CD   | 2.77                     | 0.47              |
| 1:A:830:VAL:CB   | 1:A:873:HIS:NE2  | 2.78                     | 0.47              |
| 1:A:664:GLU:OE1  | 1:A:668:ARG:NH2  | 2.48                     | 0.46              |
| 1:A:806:GLU:HB2  | 1:A:807:LYS:HD2  | 1.96                     | 0.46              |
| 1:A:335:TRP:CE3  | 1:A:385:LYS:HE2  | 2.50                     | 0.46              |
| 1:A:736:LEU:O    | 1:A:740:LEU:HD23 | 2.15                     | 0.46              |
| 1:A:764:ASP:O    | 1:A:765:SER:C    | 2.57                     | 0.46              |
| 1:A:813:VAL:HG11 | 1:A:849:ASP:OD2  | 2.15                     | 0.46              |
| 2:B:4:PRO:C      | 2:B:6:ILE:N      | 2.70                     | 0.46              |
| 1:A:267:MSE:HE1  | 1:A:293:VAL:HG21 | 1.96                     | 0.46              |
| 1:A:308:ALA:O    | 1:A:311:ARG:N    | 2.48                     | 0.46              |
| 1:A:503:GLY:CA   | 1:A:506:LYS:HB3  | 2.46                     | 0.46              |
| 1:A:767:ARG:HH12 | 1:A:805:PHE:HB2  | 1.80                     | 0.46              |
| 1:A:818:ASP:CA   | 1:A:821:LYS:HD3  | 2.46                     | 0.46              |
| 1:A:209:ILE:HG22 | 1:A:259:LEU:HD21 | 1.98                     | 0.46              |
| 1:A:270:MSE:HB3  | 1:A:278:PRO:CB   | 2.45                     | 0.46              |
| 1:A:398:ASN:O    | 1:A:399:ALA:C    | 2.59                     | 0.46              |
| 1:A:448:MSE:CE   | 1:A:460:ALA:HB2  | 2.35                     | 0.46              |
| 1:A:771:LEU:HD21 | 1:A:802:LEU:HD22 | 1.96                     | 0.46              |
| 1:A:468:VAL:HG21 | 1:A:506:LYS:HD3  | 1.96                     | 0.46              |
| 1:A:560:ASP:O    | 1:A:563:VAL:HG13 | 2.16                     | 0.46              |
| 1:A:849:ASP:O    | 1:A:852:ALA:HB3  | 2.16                     | 0.46              |
| 1:A:188:VAL:HB   | 1:A:189:PRO:CD   | 2.35                     | 0.46              |
| 1:A:313:THR:O    | 1:A:315:ILE:N    | 2.49                     | 0.46              |
| 1:A:389:PHE:CD1  | 1:A:389:PHE:C    | 2.94                     | 0.46              |
| 1:A:442:THR:N    | 1:A:443:PRO:CD   | 2.79                     | 0.46              |
| 1:A:472:GLU:HA   | 1:A:475:ILE:HG13 | 1.97                     | 0.46              |
| 1:A:739:LEU:C    | 1:A:739:LEU:HD12 | 2.41                     | 0.46              |
| 2:B:3:GLY:H      | 2:B:4:PRO:HD3    | 1.76                     | 0.46              |
| 1:A:818:ASP:HA   | 1:A:821:LYS:HD3  | 1.97                     | 0.46              |
| 1:A:12:ARG:O     | 1:A:15:GLY:N     | 2.49                     | 0.46              |
| 1:A:264:PHE:HA   | 1:A:267:MSE:HE3  | 1.96                     | 0.46              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:536:LEU:O    | 1:A:537:LEU:C    | 2.59                     | 0.46              |
| 1:A:660:LYS:CA   | 1:A:663:LEU:HD23 | 2.46                     | 0.46              |
| 1:A:730:TYR:N    | 1:A:730:TYR:CD2  | 2.71                     | 0.46              |
| 1:A:779:ILE:HD11 | 1:A:799:LEU:HD21 | 1.98                     | 0.46              |
| 1:A:53:ARG:CD    | 1:A:57:ARG:NH1   | 2.79                     | 0.46              |
| 1:A:501:LEU:HD12 | 1:A:535:PHE:CD2  | 2.51                     | 0.46              |
| 1:A:11:ILE:C     | 1:A:11:ILE:CD1   | 2.89                     | 0.46              |
| 1:A:238:ARG:NH2  | 1:A:242:ARG:NH2  | 2.64                     | 0.46              |
| 1:A:272:ARG:CZ   | 1:A:272:ARG:HB3  | 2.46                     | 0.46              |
| 1:A:313:THR:C    | 1:A:315:ILE:N    | 2.72                     | 0.46              |
| 1:A:577:LEU:HD22 | 1:A:592:LEU:CD1  | 2.46                     | 0.46              |
| 1:A:691:LEU:O    | 1:A:693:LEU:N    | 2.49                     | 0.46              |
| 1:A:799:LEU:N    | 1:A:799:LEU:HD22 | 2.31                     | 0.46              |
| 1:A:464:ILE:C    | 1:A:466:ALA:N    | 2.72                     | 0.45              |
| 1:A:560:ASP:OD1  | 1:A:562:ASP:HB2  | 2.16                     | 0.45              |
| 1:A:564:LYS:CB   | 1:A:638:ARG:NH1  | 2.79                     | 0.45              |
| 1:A:663:LEU:C    | 1:A:665:LEU:N    | 2.72                     | 0.45              |
| 1:A:666:ILE:O    | 1:A:670:LEU:HG   | 2.16                     | 0.45              |
| 1:A:761:SER:OG   | 1:A:762:VAL:N    | 2.48                     | 0.45              |
| 1:A:927:GLU:C    | 1:A:929:ALA:H    | 2.24                     | 0.45              |
| 1:A:201:ASN:OD1  | 1:A:203:GLU:N    | 2.49                     | 0.45              |
| 1:A:401:ILE:CG2  | 1:A:402:SER:N    | 2.78                     | 0.45              |
| 1:A:443:PRO:HG2  | 1:A:444:ILE:N    | 2.27                     | 0.45              |
| 1:A:894:ASN:HA   | 1:A:897:CYS:HB2  | 1.99                     | 0.45              |
| 1:A:528:LEU:HB2  | 1:A:557:LEU:HD21 | 1.99                     | 0.45              |
| 1:A:890:MSE:HG3  | 1:A:928:GLN:CB   | 2.47                     | 0.45              |
| 1:A:114:ASP:C    | 1:A:116:GLY:N    | 2.72                     | 0.45              |
| 1:A:324:HIS:CE1  | 1:A:325:MSE:SE   | 3.19                     | 0.45              |
| 1:A:347:LEU:C    | 1:A:349:VAL:N    | 2.72                     | 0.45              |
| 1:A:369:VAL:HG12 | 1:A:373:LEU:HD11 | 1.98                     | 0.45              |
| 1:A:396:PHE:CE1  | 1:A:400:LEU:HD12 | 2.51                     | 0.45              |
| 1:A:397:PHE:CE1  | 1:A:417:LEU:HD11 | 2.51                     | 0.45              |
| 1:A:437:THR:O    | 1:A:439:ASP:N    | 2.50                     | 0.45              |
| 1:A:539:THR:CG2  | 1:A:540:GLU:H    | 2.24                     | 0.45              |
| 1:A:554:LEU:HD23 | 1:A:554:LEU:C    | 2.42                     | 0.45              |
| 1:A:560:ASP:O    | 1:A:563:VAL:CG1  | 2.64                     | 0.45              |
| 1:A:788:HIS:O    | 1:A:789:GLU:C    | 2.59                     | 0.45              |
| 1:A:889:ILE:CG2  | 1:A:896:LEU:HD23 | 2.43                     | 0.45              |
| 1:A:120:VAL:HG22 | 1:A:123:ARG:NH2  | 2.31                     | 0.45              |
| 1:A:210:ARG:O    | 1:A:213:ASP:HB3  | 2.17                     | 0.45              |
| 1:A:700:SER:O    | 1:A:703:GLY:N    | 2.49                     | 0.45              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:729:ALA:O    | 1:A:732:VAL:N    | 2.50                     | 0.45              |
| 1:A:739:LEU:HD11 | 1:A:752:SER:HB2  | 1.99                     | 0.45              |
| 1:A:813:VAL:HG22 | 1:A:846:LEU:CD2  | 2.43                     | 0.45              |
| 1:A:888:ASN:HA   | 1:A:891:HIS:HB2  | 1.99                     | 0.45              |
| 1:A:85:PHE:HE2   | 1:A:120:VAL:HG21 | 1.82                     | 0.45              |
| 1:A:125:VAL:C    | 1:A:127:ALA:N    | 2.72                     | 0.45              |
| 1:A:135:THR:OG1  | 1:A:136:THR:N    | 2.49                     | 0.45              |
| 1:A:274:LYS:HD2  | 1:A:276:MSE:HE3  | 1.99                     | 0.45              |
| 1:A:642:LEU:C    | 1:A:644:GLU:H    | 2.24                     | 0.45              |
| 1:A:760:ALA:HB2  | 1:A:770:ILE:HD12 | 1.99                     | 0.45              |
| 1:A:818:ASP:OD2  | 1:A:821:LYS:HE3  | 2.17                     | 0.45              |
| 1:A:15:GLY:HA2   | 1:A:30:LEU:HD13  | 1.98                     | 0.45              |
| 1:A:483:PRO:O    | 1:A:486:ARG:N    | 2.48                     | 0.45              |
| 1:A:834:ARG:C    | 1:A:836:SER:H    | 2.25                     | 0.45              |
| 1:A:47:PRO:CG    | 1:A:76:PHE:CG    | 3.00                     | 0.45              |
| 1:A:48:VAL:HG13  | 1:A:49:LEU:H     | 1.81                     | 0.45              |
| 1:A:279:ASP:HB3  | 1:A:282:VAL:HG12 | 1.99                     | 0.45              |
| 1:A:385:LYS:N    | 1:A:385:LYS:HD2  | 2.32                     | 0.45              |
| 1:A:660:LYS:CG   | 1:A:661:ASN:HD22 | 2.29                     | 0.45              |
| 1:A:773:GLU:HG3  | 1:A:775:ALA:HB2  | 1.98                     | 0.45              |
| 1:A:872:MSE:O    | 1:A:873:HIS:C    | 2.60                     | 0.45              |
| 1:A:268:ALA:CB   | 1:A:283:ALA:HB2  | 2.47                     | 0.44              |
| 1:A:453:ASP:OD2  | 1:A:456:MSE:HG3  | 2.17                     | 0.44              |
| 1:A:840:ALA:C    | 1:A:842:GLY:H    | 2.22                     | 0.44              |
| 1:A:856:ILE:O    | 1:A:857:MSE:C    | 2.59                     | 0.44              |
| 1:A:31:TYR:HD1   | 1:A:49:LEU:HD23  | 1.81                     | 0.44              |
| 1:A:210:ARG:HA   | 1:A:213:ASP:CB   | 2.48                     | 0.44              |
| 1:A:288:ILE:HD13 | 1:A:288:ILE:N    | 2.33                     | 0.44              |
| 1:A:591:THR:OG1  | 1:A:592:LEU:N    | 2.50                     | 0.44              |
| 1:A:679:LEU:O    | 1:A:681:GLY:N    | 2.50                     | 0.44              |
| 1:A:884:MSE:O    | 1:A:888:ASN:ND2  | 2.49                     | 0.44              |
| 1:A:26:LYS:O     | 1:A:27:ALA:C     | 2.60                     | 0.44              |
| 1:A:290:ILE:O    | 1:A:294:LEU:HD12 | 2.16                     | 0.44              |
| 1:A:385:LYS:O    | 1:A:387:THR:N    | 2.51                     | 0.44              |
| 1:A:433:ILE:O    | 1:A:435:LEU:N    | 2.51                     | 0.44              |
| 1:A:502:VAL:CG1  | 1:A:503:GLY:N    | 2.80                     | 0.44              |
| 1:A:794:ALA:HA   | 1:A:797:GLU:OE1  | 2.17                     | 0.44              |
| 1:A:814:ALA:O    | 1:A:815:PRO:C    | 2.61                     | 0.44              |
| 1:A:864:PRO:HG2  | 1:A:865:GLU:H    | 1.81                     | 0.44              |
| 1:A:225:PHE:O    | 1:A:229:HIS:CE1  | 2.70                     | 0.44              |
| 1:A:258:ILE:HD13 | 1:A:258:ILE:H    | 1.82                     | 0.44              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:580:LEU:CD1  | 1:A:588:CYS:SG   | 3.04                     | 0.44              |
| 1:A:111:SER:O    | 1:A:112:PRO:C    | 2.60                     | 0.44              |
| 1:A:142:VAL:HG12 | 1:A:143:THR:H    | 1.79                     | 0.44              |
| 1:A:167:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 1.97                     | 0.44              |
| 1:A:419:CYS:C    | 1:A:421:LEU:N    | 2.75                     | 0.44              |
| 1:A:530:LYS:HD2  | 1:A:530:LYS:N    | 2.33                     | 0.44              |
| 1:A:729:ALA:HB1  | 1:A:766:ILE:HD12 | 2.00                     | 0.44              |
| 1:A:771:LEU:C    | 1:A:773:GLU:N    | 2.75                     | 0.44              |
| 1:A:832:GLU:CG   | 1:A:833:GLU:H    | 2.22                     | 0.44              |
| 1:A:218:ASN:HB2  | 1:A:221:ARG:HH12 | 1.81                     | 0.44              |
| 1:A:409:GLU:O    | 1:A:412:LYS:HG3  | 2.17                     | 0.44              |
| 1:A:806:GLU:O    | 1:A:807:LYS:HB2  | 2.16                     | 0.44              |
| 1:A:857:MSE:HE3  | 1:A:899:GLU:HG3  | 1.99                     | 0.44              |
| 1:A:905:VAL:O    | 1:A:906:PHE:C    | 2.59                     | 0.44              |
| 1:A:23:ASP:CG    | 1:A:26:LYS:HB2   | 2.43                     | 0.44              |
| 1:A:110:LEU:C    | 1:A:112:PRO:HD3  | 2.42                     | 0.44              |
| 1:A:121:LEU:O    | 1:A:125:VAL:HG23 | 2.18                     | 0.44              |
| 1:A:323:MSE:HE2  | 1:A:376:LEU:HA   | 1.99                     | 0.44              |
| 1:A:375:ARG:NH2  | 1:A:660:LYS:HZ2  | 2.14                     | 0.44              |
| 1:A:387:THR:C    | 1:A:389:PHE:N    | 2.75                     | 0.44              |
| 1:A:498:VAL:O    | 1:A:501:LEU:N    | 2.49                     | 0.44              |
| 1:A:531:THR:C    | 1:A:533:LYS:N    | 2.75                     | 0.44              |
| 1:A:716:ALA:O    | 1:A:718:ALA:N    | 2.47                     | 0.44              |
| 1:A:724:PHE:C    | 1:A:728:ARG:HB3  | 2.42                     | 0.44              |
| 1:A:824:VAL:HG12 | 1:A:843:PHE:CE2  | 2.53                     | 0.44              |
| 1:A:836:SER:C    | 1:A:838:ALA:N    | 2.76                     | 0.44              |
| 1:A:892:SER:O    | 1:A:893:SER:CB   | 2.66                     | 0.44              |
| 1:A:201:ASN:OD1  | 1:A:201:ASN:C    | 2.60                     | 0.44              |
| 1:A:455:LEU:O    | 1:A:456:MSE:C    | 2.60                     | 0.44              |
| 1:A:463:LEU:HD12 | 1:A:463:LEU:O    | 2.17                     | 0.44              |
| 1:A:657:THR:C    | 1:A:659:SER:N    | 2.74                     | 0.44              |
| 1:A:732:VAL:C    | 1:A:736:LEU:HD11 | 2.42                     | 0.44              |
| 1:A:167:LEU:O    | 1:A:181:VAL:HG21 | 2.17                     | 0.44              |
| 1:A:238:ARG:HD2  | 1:A:296:GLU:CD   | 2.42                     | 0.44              |
| 1:A:288:ILE:CD1  | 1:A:288:ILE:H    | 2.26                     | 0.44              |
| 1:A:572:LEU:HD12 | 1:A:575:LYS:HE2  | 1.99                     | 0.44              |
| 1:A:641:ALA:C    | 1:A:644:GLU:HB2  | 2.43                     | 0.44              |
| 1:A:674:ALA:O    | 1:A:680:ARG:NH2  | 2.51                     | 0.44              |
| 1:A:821:LYS:NZ   | 1:A:821:LYS:CB   | 2.80                     | 0.44              |
| 1:A:840:ALA:C    | 1:A:842:GLY:N    | 2.76                     | 0.44              |
| 1:A:214:GLU:O    | 1:A:215:THR:C    | 2.61                     | 0.43              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:568:VAL:HG23 | 1:A:599:LEU:HD13 | 1.99                     | 0.43              |
| 1:A:755:THR:O    | 1:A:759:LEU:HB2  | 2.18                     | 0.43              |
| 1:A:779:ILE:CD1  | 1:A:798:LEU:HD23 | 2.47                     | 0.43              |
| 1:A:7:THR:HG22   | 1:A:10:GLU:OE2   | 2.19                     | 0.43              |
| 1:A:74:LEU:H     | 1:A:74:LEU:HD22  | 1.83                     | 0.43              |
| 1:A:355:GLU:O    | 1:A:356:LEU:HB2  | 2.17                     | 0.43              |
| 1:A:427:GLY:C    | 1:A:429:VAL:H    | 2.25                     | 0.43              |
| 1:A:439:ASP:O    | 1:A:443:PRO:CD   | 2.63                     | 0.43              |
| 1:A:497:LYS:O    | 1:A:500:ALA:HB3  | 2.19                     | 0.43              |
| 1:A:699:ALA:HB1  | 1:A:703:GLY:HA3  | 1.99                     | 0.43              |
| 1:A:101:PHE:O    | 1:A:103:ASP:N    | 2.51                     | 0.43              |
| 1:A:201:ASN:HB3  | 1:A:204:VAL:CG2  | 2.49                     | 0.43              |
| 1:A:249:THR:O    | 1:A:250:LYS:C    | 2.62                     | 0.43              |
| 1:A:353:ILE:HG12 | 1:A:355:GLU:N    | 2.19                     | 0.43              |
| 1:A:504:LEU:O    | 1:A:504:LEU:HD23 | 2.19                     | 0.43              |
| 1:A:800:LEU:HD23 | 1:A:800:LEU:O    | 2.19                     | 0.43              |
| 1:A:42:ASP:O     | 1:A:45:LEU:HB3   | 2.18                     | 0.43              |
| 1:A:48:VAL:CG1   | 1:A:49:LEU:N     | 2.81                     | 0.43              |
| 1:A:155:LYS:HD2  | 1:A:156:ASP:H    | 1.82                     | 0.43              |
| 1:A:288:ILE:HD13 | 1:A:288:ILE:H    | 1.83                     | 0.43              |
| 1:A:335:TRP:O    | 1:A:338:VAL:HG22 | 2.18                     | 0.43              |
| 1:A:671:LEU:CD1  | 1:A:706:LYS:HE2  | 2.49                     | 0.43              |
| 1:A:12:ARG:O     | 1:A:16:ASN:OD1   | 2.37                     | 0.43              |
| 1:A:369:VAL:HG12 | 1:A:373:LEU:CD1  | 2.48                     | 0.43              |
| 1:A:377:GLU:O    | 1:A:380:MSE:HB2  | 2.18                     | 0.43              |
| 1:A:493:ASP:O    | 1:A:494:PRO:C    | 2.61                     | 0.43              |
| 1:A:670:LEU:HA   | 1:A:673:PHE:HB2  | 2.01                     | 0.43              |
| 1:A:182:TRP:CZ3  | 1:A:184:GLN:HA   | 2.53                     | 0.43              |
| 1:A:390:LYS:C    | 1:A:392:LYS:N    | 2.67                     | 0.43              |
| 1:A:451:SER:OG   | 1:A:452:GLN:N    | 2.50                     | 0.43              |
| 1:A:701:GLY:C    | 1:A:703:GLY:N    | 2.73                     | 0.43              |
| 1:A:16:ASN:HA    | 2:B:9:VAL:HG21   | 2.01                     | 0.43              |
| 1:A:85:PHE:CE2   | 1:A:120:VAL:HG21 | 2.54                     | 0.43              |
| 1:A:375:ARG:NH2  | 1:A:660:LYS:HZ1  | 2.09                     | 0.43              |
| 1:A:465:VAL:HG22 | 1:A:502:VAL:C    | 2.44                     | 0.43              |
| 2:B:5:THR:O      | 2:B:6:ILE:C      | 2.61                     | 0.43              |
| 1:A:74:LEU:O     | 1:A:75:GLU:C     | 2.62                     | 0.43              |
| 1:A:93:GLN:C     | 1:A:95:GLY:N     | 2.67                     | 0.43              |
| 1:A:188:VAL:HG11 | 1:A:228:MSE:SE   | 2.69                     | 0.43              |
| 1:A:323:MSE:CE   | 1:A:334:SER:HB3  | 2.47                     | 0.43              |
| 1:A:326:ASP:OD1  | 1:A:326:ASP:C    | 2.62                     | 0.43              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:382:PHE:HB3  | 1:A:384:THR:HG23 | 2.00                     | 0.43              |
| 1:A:423:THR:C    | 1:A:425:LEU:H    | 2.27                     | 0.43              |
| 1:A:536:LEU:CD2  | 1:A:550:ALA:HB3  | 2.48                     | 0.43              |
| 1:A:572:LEU:N    | 1:A:575:LYS:HD3  | 2.33                     | 0.43              |
| 1:A:45:LEU:O     | 1:A:48:VAL:HG12  | 2.19                     | 0.43              |
| 1:A:336:LYS:O    | 1:A:340:GLU:HG3  | 2.19                     | 0.43              |
| 1:A:375:ARG:HB2  | 1:A:375:ARG:CZ   | 2.48                     | 0.43              |
| 1:A:646:GLY:CA   | 1:A:649:PRO:HD2  | 2.49                     | 0.43              |
| 1:A:716:ALA:C    | 1:A:718:ALA:N    | 2.65                     | 0.43              |
| 1:A:725:PRO:O    | 1:A:726:GLY:C    | 2.62                     | 0.43              |
| 1:A:770:ILE:O    | 1:A:773:GLU:HB3  | 2.18                     | 0.43              |
| 1:A:812:THR:HA   | 1:A:819:ARG:HD2  | 1.99                     | 0.43              |
| 1:A:8:ALA:CB     | 1:A:45:LEU:HD21  | 2.48                     | 0.43              |
| 1:A:150:PHE:O    | 1:A:151:ARG:C    | 2.62                     | 0.43              |
| 1:A:475:ILE:O    | 1:A:475:ILE:CG2  | 2.66                     | 0.43              |
| 1:A:601:ASN:HD21 | 1:A:638:ARG:HH21 | 1.59                     | 0.43              |
| 1:A:7:THR:O      | 1:A:8:ALA:C      | 2.62                     | 0.42              |
| 1:A:97:VAL:HG11  | 1:A:127:ALA:HB1  | 2.00                     | 0.42              |
| 1:A:150:PHE:O    | 1:A:152:GLY:N    | 2.51                     | 0.42              |
| 1:A:214:GLU:CD   | 1:A:217:LYS:HD3  | 2.44                     | 0.42              |
| 1:A:261:GLN:HG3  | 1:A:265:ASN:OD1  | 2.19                     | 0.42              |
| 1:A:448:MSE:CB   | 1:A:456:MSE:HB3  | 2.34                     | 0.42              |
| 1:A:552:GLU:O    | 1:A:556:TYR:CD1  | 2.71                     | 0.42              |
| 1:A:553:GLY:O    | 1:A:554:LEU:C    | 2.60                     | 0.42              |
| 1:A:555:SER:HA   | 1:A:595:ILE:HG12 | 2.00                     | 0.42              |
| 1:A:776:ILE:O    | 1:A:780:GLU:HB2  | 2.19                     | 0.42              |
| 1:A:917:THR:C    | 1:A:919:ASN:H    | 2.27                     | 0.42              |
| 1:A:174:SER:C    | 1:A:176:SER:N    | 2.76                     | 0.42              |
| 1:A:268:ALA:HB1  | 1:A:283:ALA:HB2  | 2.00                     | 0.42              |
| 1:A:626:THR:OG1  | 1:A:628:PRO:HD3  | 2.19                     | 0.42              |
| 1:A:729:ALA:O    | 1:A:730:TYR:C    | 2.62                     | 0.42              |
| 1:A:736:LEU:CD2  | 1:A:755:THR:HG21 | 2.49                     | 0.42              |
| 1:A:808:PHE:O    | 1:A:812:THR:HG23 | 2.19                     | 0.42              |
| 1:A:870:ILE:HG13 | 1:A:878:THR:HG22 | 2.00                     | 0.42              |
| 1:A:172:ARG:HB3  | 1:A:214:GLU:CG   | 2.49                     | 0.42              |
| 1:A:349:VAL:C    | 1:A:351:SER:N    | 2.78                     | 0.42              |
| 1:A:593:ALA:O    | 1:A:597:ALA:N    | 2.40                     | 0.42              |
| 1:A:663:LEU:O    | 1:A:665:LEU:N    | 2.52                     | 0.42              |
| 1:A:689:THR:O    | 1:A:693:LEU:HB2  | 2.18                     | 0.42              |
| 1:A:724:PHE:O    | 1:A:725:PRO:O    | 2.37                     | 0.42              |
| 1:A:796:ALA:C    | 1:A:798:LEU:N    | 2.75                     | 0.42              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:872:MSE:HA   | 1:A:879:GLN:HB2  | 2.00                     | 0.42              |
| 1:A:893:SER:OG   | 1:A:896:LEU:HD13 | 2.19                     | 0.42              |
| 1:A:27:ALA:O     | 1:A:28:ASP:C     | 2.62                     | 0.42              |
| 1:A:108:LEU:HB2  | 1:A:121:LEU:HD11 | 2.00                     | 0.42              |
| 1:A:397:PHE:CD1  | 1:A:417:LEU:HD11 | 2.54                     | 0.42              |
| 1:A:429:VAL:HG13 | 1:A:430:ASP:N    | 2.33                     | 0.42              |
| 1:A:503:GLY:C    | 1:A:505:CYS:H    | 2.27                     | 0.42              |
| 1:A:548:ARG:NH1  | 1:A:587:LEU:HD22 | 2.33                     | 0.42              |
| 1:A:9:GLU:HB3    | 1:A:10:GLU:H     | 1.49                     | 0.42              |
| 1:A:11:ILE:HG23  | 1:A:12:ARG:N     | 2.34                     | 0.42              |
| 1:A:39:THR:HG22  | 1:A:40:ASP:N     | 2.27                     | 0.42              |
| 1:A:352:GLN:HG3  | 1:A:359:TYR:HE1  | 1.84                     | 0.42              |
| 1:A:536:LEU:O    | 1:A:538:GLU:N    | 2.53                     | 0.42              |
| 1:A:572:LEU:H    | 1:A:572:LEU:CD2  | 1.99                     | 0.42              |
| 1:A:757:THR:HA   | 1:A:798:LEU:HD12 | 2.00                     | 0.42              |
| 1:A:875:ASP:C    | 1:A:877:GLU:N    | 2.78                     | 0.42              |
| 1:A:896:LEU:HD12 | 1:A:896:LEU:N    | 2.34                     | 0.42              |
| 1:A:126:LYS:O    | 1:A:130:ASP:OD2  | 2.37                     | 0.42              |
| 1:A:371:ILE:CG1  | 1:A:372:CYS:N    | 2.83                     | 0.42              |
| 1:A:381:VAL:CG2  | 1:A:382:PHE:N    | 2.74                     | 0.42              |
| 1:A:621:HIS:C    | 1:A:624:PRO:HD2  | 2.44                     | 0.42              |
| 1:A:671:LEU:C    | 1:A:671:LEU:HD23 | 2.44                     | 0.42              |
| 1:A:776:ILE:HD11 | 1:A:802:LEU:HD13 | 2.01                     | 0.42              |
| 1:A:782:PHE:HB3  | 1:A:795:ALA:CB   | 2.49                     | 0.42              |
| 1:A:787:ASP:O    | 1:A:787:ASP:CG   | 2.63                     | 0.42              |
| 1:A:820:LEU:CD1  | 1:A:855:ARG:HB2  | 2.49                     | 0.42              |
| 1:A:856:ILE:HG13 | 1:A:857:MSE:N    | 2.34                     | 0.42              |
| 1:A:49:LEU:O     | 1:A:50:TYR:C     | 2.62                     | 0.42              |
| 1:A:83:ALA:O     | 1:A:84:LEU:C     | 2.62                     | 0.42              |
| 1:A:108:LEU:HB2  | 1:A:117:ILE:CG2  | 2.49                     | 0.42              |
| 1:A:126:LYS:HA   | 1:A:129:ASN:HD22 | 1.84                     | 0.42              |
| 1:A:143:THR:HA   | 1:A:146:GLU:HB3  | 2.01                     | 0.42              |
| 1:A:319:LEU:HG   | 1:A:320:LYS:N    | 2.34                     | 0.42              |
| 1:A:329:ILE:HG21 | 1:A:333:TRP:HB2  | 2.02                     | 0.42              |
| 1:A:394:ASP:C    | 1:A:396:PHE:N    | 2.76                     | 0.42              |
| 1:A:584:ALA:O    | 1:A:587:LEU:HD12 | 2.19                     | 0.42              |
| 1:A:828:ALA:HB2  | 1:A:870:ILE:HB   | 2.00                     | 0.42              |
| 1:A:12:ARG:CG    | 1:A:13:ASP:N     | 2.83                     | 0.42              |
| 1:A:187:LEU:HD21 | 1:A:211:ILE:HG22 | 2.02                     | 0.42              |
| 1:A:320:LYS:HZ1  | 1:A:658:GLU:HB3  | 1.85                     | 0.42              |
| 1:A:446:LEU:HD21 | 1:A:480:VAL:HG21 | 2.01                     | 0.42              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:785:MSE:HB3 | 1:A:788:HIS:CD2  | 2.55                     | 0.42              |
| 1:A:803:LEU:C   | 1:A:805:PHE:H    | 2.28                     | 0.42              |
| 1:A:844:ALA:HA  | 1:A:885:GLY:CA   | 2.49                     | 0.42              |
| 1:A:847:THR:C   | 1:A:849:ASP:N    | 2.78                     | 0.42              |
| 1:A:53:ARG:CG   | 1:A:57:ARG:HD2   | 2.50                     | 0.42              |
| 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:C     | 2.45                     | 0.42              |
| 1:A:431:ILE:O   | 1:A:435:LEU:HG   | 2.20                     | 0.42              |
| 1:A:570:ASP:OD1 | 1:A:573:LEU:N    | 2.53                     | 0.42              |
| 1:A:676:TYR:O   | 1:A:677:GLU:HB2  | 2.19                     | 0.42              |
| 1:A:707:ALA:O   | 1:A:711:ILE:HG13 | 2.20                     | 0.42              |
| 1:A:735:PRO:C   | 1:A:737:CYS:H    | 2.28                     | 0.42              |
| 1:A:776:ILE:N   | 1:A:777:PRO:CD   | 2.81                     | 0.42              |
| 1:A:125:VAL:C   | 1:A:127:ALA:H    | 2.28                     | 0.41              |
| 1:A:196:ASN:OD1 | 1:A:246:LYS:HD2  | 2.20                     | 0.41              |
| 1:A:393:VAL:O   | 1:A:396:PHE:HB3  | 2.19                     | 0.41              |
| 1:A:581:ALA:HB1 | 1:A:654:VAL:HG13 | 2.02                     | 0.41              |
| 1:A:764:ASP:O   | 1:A:766:ILE:N    | 2.53                     | 0.41              |
| 1:A:794:ALA:O   | 1:A:795:ALA:C    | 2.62                     | 0.41              |
| 1:A:812:THR:CB  | 1:A:819:ARG:HD3  | 2.50                     | 0.41              |
| 1:A:821:LYS:HZ2 | 1:A:821:LYS:HB2  | 1.85                     | 0.41              |
| 1:A:47:PRO:HG3  | 1:A:76:PHE:CE1   | 2.54                     | 0.41              |
| 1:A:312:GLU:O   | 1:A:315:ILE:HB   | 2.20                     | 0.41              |
| 1:A:326:ASP:C   | 1:A:328:GLY:N    | 2.78                     | 0.41              |
| 1:A:663:LEU:O   | 1:A:664:GLU:C    | 2.63                     | 0.41              |
| 1:A:850:GLU:C   | 1:A:852:ALA:N    | 2.78                     | 0.41              |
| 1:A:874:GLU:CD  | 1:A:874:GLU:N    | 2.78                     | 0.41              |
| 1:A:245:CYS:HA  | 1:A:310:GLN:NE2  | 2.35                     | 0.41              |
| 1:A:455:LEU:C   | 1:A:457:GLN:N    | 2.78                     | 0.41              |
| 1:A:480:VAL:C   | 1:A:483:PRO:HD2  | 2.44                     | 0.41              |
| 1:A:890:MSE:C   | 1:A:892:SER:N    | 2.78                     | 0.41              |
| 1:A:267:MSE:CE  | 1:A:293:VAL:HG21 | 2.50                     | 0.41              |
| 1:A:416:LYS:C   | 1:A:418:SER:N    | 2.79                     | 0.41              |
| 1:A:676:TYR:HB2 | 1:A:679:LEU:HD22 | 2.02                     | 0.41              |
| 1:A:821:LYS:O   | 1:A:825:LEU:HG   | 2.20                     | 0.41              |
| 1:A:830:VAL:CG1 | 1:A:833:GLU:HA   | 2.50                     | 0.41              |
| 1:A:10:GLU:O    | 1:A:11:ILE:C     | 2.61                     | 0.41              |
| 1:A:53:ARG:HD2  | 1:A:57:ARG:NH1   | 2.35                     | 0.41              |
| 1:A:116:GLY:O   | 1:A:117:ILE:C    | 2.64                     | 0.41              |
| 1:A:232:ASP:HB3 | 1:A:235:LYS:HD2  | 2.01                     | 0.41              |
| 1:A:303:ASP:OD2 | 1:A:305:LYS:HB2  | 2.19                     | 0.41              |
| 1:A:349:VAL:O   | 1:A:351:SER:N    | 2.53                     | 0.41              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:589:VAL:C    | 1:A:591:THR:N    | 2.77                     | 0.41              |
| 1:A:52:ASN:OD1   | 2:B:9:VAL:HB     | 2.21                     | 0.41              |
| 1:A:55:MSE:HE1   | 1:A:59:LYS:NZ    | 2.35                     | 0.41              |
| 1:A:90:ALA:O     | 1:A:93:GLN:N     | 2.50                     | 0.41              |
| 1:A:321:ASN:O    | 1:A:329:ILE:HB   | 2.21                     | 0.41              |
| 1:A:501:LEU:CD1  | 1:A:531:THR:HG22 | 2.51                     | 0.41              |
| 1:A:563:VAL:HG13 | 1:A:564:LYS:H    | 1.86                     | 0.41              |
| 1:A:834:ARG:HD3  | 1:A:834:ARG:HA   | 1.88                     | 0.41              |
| 1:A:894:ASN:C    | 1:A:896:LEU:N    | 2.78                     | 0.41              |
| 1:A:906:PHE:O    | 1:A:907:ARG:C    | 2.64                     | 0.41              |
| 1:A:70:CYS:SG    | 1:A:87:ARG:N     | 2.94                     | 0.41              |
| 1:A:87:ARG:HG2   | 1:A:103:ASP:OD1  | 2.21                     | 0.41              |
| 1:A:212:LEU:O    | 1:A:213:ASP:C    | 2.63                     | 0.41              |
| 1:A:296:GLU:O    | 1:A:300:MSE:HG2  | 2.20                     | 0.41              |
| 1:A:420:PHE:O    | 1:A:424:MSE:CG   | 2.69                     | 0.41              |
| 1:A:567:ILE:HG23 | 1:A:573:LEU:CD2  | 2.51                     | 0.41              |
| 1:A:857:MSE:HE2  | 1:A:896:LEU:HB3  | 2.01                     | 0.41              |
| 1:A:436:ILE:HD13 | 1:A:436:ILE:H    | 1.86                     | 0.41              |
| 1:A:472:GLU:HG2  | 1:A:475:ILE:CD1  | 2.48                     | 0.41              |
| 1:A:482:ILE:HD13 | 1:A:482:ILE:N    | 2.36                     | 0.41              |
| 1:A:626:THR:OG1  | 1:A:627:HIS:N    | 2.53                     | 0.41              |
| 1:A:632:GLU:O    | 1:A:634:TYR:N    | 2.48                     | 0.41              |
| 1:A:725:PRO:O    | 1:A:728:ARG:N    | 2.37                     | 0.41              |
| 1:A:766:ILE:O    | 1:A:770:ILE:HG13 | 2.20                     | 0.41              |
| 1:A:87:ARG:HG2   | 1:A:91:ARG:HD2   | 2.02                     | 0.41              |
| 1:A:157:THR:O    | 1:A:158:GLU:C    | 2.63                     | 0.41              |
| 1:A:202:GLU:C    | 1:A:206:VAL:HG23 | 2.45                     | 0.41              |
| 1:A:241:CYS:C    | 1:A:243:LEU:N    | 2.77                     | 0.41              |
| 1:A:349:VAL:C    | 1:A:351:SER:H    | 2.28                     | 0.41              |
| 1:A:364:GLU:HG2  | 1:A:368:HIS:HE1  | 1.85                     | 0.41              |
| 1:A:397:PHE:CE1  | 1:A:421:LEU:HD21 | 2.55                     | 0.41              |
| 1:A:489:TYR:O    | 1:A:489:TYR:CD1  | 2.72                     | 0.41              |
| 1:A:626:THR:O    | 1:A:627:HIS:C    | 2.64                     | 0.41              |
| 1:A:663:LEU:HG   | 1:A:699:ALA:HA   | 2.03                     | 0.41              |
| 1:A:671:LEU:HD12 | 1:A:706:LYS:HB3  | 2.03                     | 0.41              |
| 1:A:708:GLY:HA2  | 1:A:711:ILE:HD12 | 2.03                     | 0.41              |
| 1:A:750:TYR:CD1  | 1:A:750:TYR:C    | 2.97                     | 0.41              |
| 1:A:822:LEU:HD22 | 1:A:826:TYR:CE1  | 2.55                     | 0.41              |
| 1:A:839:SER:O    | 1:A:843:PHE:HB2  | 2.21                     | 0.41              |
| 1:A:879:GLN:HG3  | 1:A:879:GLN:O    | 2.21                     | 0.41              |
| 1:A:258:ILE:H    | 1:A:258:ILE:CD1  | 2.28                     | 0.41              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:467:THR:HG22 | 1:A:467:THR:O    | 2.21                     | 0.41              |
| 1:A:478:LEU:O    | 1:A:479:LYS:C    | 2.64                     | 0.41              |
| 1:A:670:LEU:O    | 1:A:671:LEU:C    | 2.64                     | 0.41              |
| 1:A:691:LEU:O    | 1:A:692:CYS:C    | 2.64                     | 0.41              |
| 1:A:729:ALA:O    | 1:A:731:GLU:N    | 2.54                     | 0.41              |
| 1:A:328:GLY:O    | 1:A:329:ILE:O    | 2.39                     | 0.40              |
| 1:A:561:ALA:O    | 1:A:562:ASP:C    | 2.64                     | 0.40              |
| 1:A:620:LYS:HG3  | 1:A:621:HIS:N    | 2.29                     | 0.40              |
| 1:A:733:VAL:C    | 1:A:735:PRO:CD   | 2.94                     | 0.40              |
| 1:A:247:LYS:HB2  | 1:A:252:PHE:CD2  | 2.56                     | 0.40              |
| 1:A:343:LEU:O    | 1:A:344:LEU:C    | 2.63                     | 0.40              |
| 1:A:446:LEU:HD21 | 1:A:480:VAL:CG2  | 2.51                     | 0.40              |
| 1:A:593:ALA:HB1  | 1:A:665:LEU:CB   | 2.46                     | 0.40              |
| 1:A:736:LEU:O    | 1:A:756:LEU:HD21 | 2.20                     | 0.40              |
| 1:A:838:ALA:C    | 1:A:840:ALA:H    | 2.28                     | 0.40              |
| 1:A:9:GLU:O      | 1:A:12:ARG:HG2   | 2.21                     | 0.40              |
| 1:A:80:ASP:O     | 1:A:81:VAL:C     | 2.64                     | 0.40              |
| 1:A:222:CYS:C    | 1:A:224:LYS:H    | 2.29                     | 0.40              |
| 1:A:225:PHE:HA   | 1:A:228:MSE:HG2  | 2.04                     | 0.40              |
| 1:A:251:ASP:OD2  | 1:A:251:ASP:N    | 2.54                     | 0.40              |
| 1:A:723:SER:OG   | 1:A:724:PHE:HD1  | 2.04                     | 0.40              |
| 1:A:803:LEU:O    | 1:A:805:PHE:N    | 2.54                     | 0.40              |
| 1:A:803:LEU:CD2  | 1:A:812:THR:HG21 | 2.47                     | 0.40              |
| 1:A:53:ARG:HD3   | 1:A:57:ARG:NH1   | 2.35                     | 0.40              |
| 1:A:223:MSE:CE   | 1:A:267:MSE:HG2  | 2.46                     | 0.40              |
| 1:A:240:VAL:O    | 1:A:241:CYS:C    | 2.63                     | 0.40              |
| 1:A:440:GLN:C    | 1:A:443:PRO:HD2  | 2.47                     | 0.40              |
| 1:A:448:MSE:CB   | 1:A:456:MSE:HE2  | 2.24                     | 0.40              |
| 1:A:493:ASP:HA   | 1:A:494:PRO:HD2  | 1.93                     | 0.40              |
| 1:A:541:LYS:O    | 1:A:542:TYR:C    | 2.64                     | 0.40              |
| 1:A:625:GLU:O    | 1:A:625:GLU:CG   | 2.66                     | 0.40              |
| 1:A:898:SER:HB2  | 1:A:899:GLU:OE1  | 2.21                     | 0.40              |
| 1:A:916:GLY:C    | 1:A:918:ILE:H    | 2.29                     | 0.40              |
| 1:A:197:ASP:OD1  | 1:A:199:SER:N    | 2.54                     | 0.40              |
| 1:A:438:ASN:C    | 1:A:440:GLN:N    | 2.78                     | 0.40              |
| 1:A:664:GLU:O    | 1:A:667:ALA:HB3  | 2.22                     | 0.40              |
| 1:A:773:GLU:CG   | 1:A:775:ALA:HB2  | 2.52                     | 0.40              |

There are no symmetry-related clashes.

## 5.3 Torsion angles

### 5.3.1 Protein backbone

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all X-ray entries followed by that with respect to entries of similar resolution.

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     | 898/961 (93%) | 558 (62%) | 227 (25%) | 113 (13%) | 0           | 4 |
| 2   | B     | 8/10 (80%)    | 3 (38%)   | 2 (25%)   | 3 (38%)   | 0           | 0 |
| All | All   | 906/971 (93%) | 561 (62%) | 229 (25%) | 116 (13%) | 0           | 3 |

All (116) Ramachandran outliers are listed below:

| Mol | Chain | Res | Type |
|-----|-------|-----|------|
| 1   | A     | 9   | GLU  |
| 1   | A     | 22  | GLN  |
| 1   | A     | 43  | LYS  |
| 1   | A     | 79  | ALA  |
| 1   | A     | 112 | PRO  |
| 1   | A     | 114 | ASP  |
| 1   | A     | 115 | LYS  |
| 1   | A     | 151 | ARG  |
| 1   | A     | 152 | GLY  |
| 1   | A     | 153 | GLU  |
| 1   | A     | 158 | GLU  |
| 1   | A     | 242 | ARG  |
| 1   | A     | 356 | LEU  |
| 1   | A     | 365 | THR  |
| 1   | A     | 403 | ARG  |
| 1   | A     | 408 | ASP  |
| 1   | A     | 429 | VAL  |
| 1   | A     | 439 | ASP  |
| 1   | A     | 451 | SER  |
| 1   | A     | 471 | HIS  |
| 1   | A     | 491 | SER  |
| 1   | A     | 567 | ILE  |
| 1   | A     | 586 | ALA  |
| 1   | A     | 660 | LYS  |
| 1   | A     | 716 | ALA  |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type |
|-----|-------|-----|------|
| 1   | A     | 745 | GLU  |
| 1   | A     | 747 | LYS  |
| 1   | A     | 761 | SER  |
| 1   | A     | 806 | GLU  |
| 1   | A     | 815 | PRO  |
| 1   | A     | 818 | ASP  |
| 1   | A     | 833 | GLU  |
| 1   | A     | 834 | ARG  |
| 1   | A     | 837 | ARG  |
| 1   | A     | 857 | MSE  |
| 1   | A     | 874 | GLU  |
| 1   | A     | 876 | ALA  |
| 1   | A     | 909 | LEU  |
| 1   | A     | 38  | THR  |
| 1   | A     | 98  | GLY  |
| 1   | A     | 102 | GLN  |
| 1   | A     | 156 | ASP  |
| 1   | A     | 157 | THR  |
| 1   | A     | 327 | GLY  |
| 1   | A     | 360 | PRO  |
| 1   | A     | 379 | ASP  |
| 1   | A     | 424 | MSE  |
| 1   | A     | 468 | VAL  |
| 1   | A     | 620 | LYS  |
| 1   | A     | 621 | HIS  |
| 1   | A     | 626 | THR  |
| 1   | A     | 658 | GLU  |
| 1   | A     | 659 | SER  |
| 1   | A     | 691 | LEU  |
| 1   | A     | 725 | PRO  |
| 1   | A     | 726 | GLY  |
| 1   | A     | 763 | SER  |
| 1   | A     | 804 | PHE  |
| 1   | A     | 829 | GLU  |
| 1   | A     | 856 | ILE  |
| 1   | A     | 862 | SER  |
| 1   | A     | 899 | GLU  |
| 1   | A     | 911 | ALA  |
| 1   | A     | 916 | GLY  |
| 1   | A     | 920 | GLN  |
| 1   | A     | 10  | GLU  |
| 1   | A     | 350 | ALA  |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type |
|-----|-------|-----|------|
| 1   | A     | 434 | ASN  |
| 1   | A     | 537 | LEU  |
| 1   | A     | 559 | LEU  |
| 1   | A     | 583 | LYS  |
| 1   | A     | 633 | GLU  |
| 1   | A     | 647 | ALA  |
| 1   | A     | 653 | ALA  |
| 1   | A     | 717 | LYS  |
| 1   | A     | 723 | SER  |
| 1   | A     | 730 | TYR  |
| 1   | A     | 735 | PRO  |
| 1   | A     | 765 | SER  |
| 1   | A     | 784 | PHE  |
| 1   | A     | 835 | LEU  |
| 1   | A     | 861 | LYS  |
| 1   | A     | 877 | GLU  |
| 1   | A     | 910 | VAL  |
| 2   | B     | 5   | THR  |
| 1   | A     | 44  | ALA  |
| 1   | A     | 136 | THR  |
| 1   | A     | 314 | CYS  |
| 1   | A     | 370 | ALA  |
| 1   | A     | 391 | GLU  |
| 1   | A     | 447 | GLU  |
| 1   | A     | 453 | ASP  |
| 1   | A     | 640 | ARG  |
| 1   | A     | 677 | GLU  |
| 1   | A     | 680 | ARG  |
| 1   | A     | 692 | CYS  |
| 1   | A     | 705 | ILE  |
| 1   | A     | 729 | ALA  |
| 1   | A     | 789 | GLU  |
| 1   | A     | 848 | GLU  |
| 1   | A     | 898 | SER  |
| 1   | A     | 928 | GLN  |
| 1   | A     | 329 | ILE  |
| 1   | A     | 381 | VAL  |
| 1   | A     | 541 | LYS  |
| 1   | A     | 664 | GLU  |
| 1   | A     | 893 | SER  |
| 1   | A     | 246 | LYS  |
| 1   | A     | 654 | VAL  |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type |
|-----|-------|-----|------|
| 1   | A     | 732 | VAL  |
| 1   | A     | 860 | ILE  |
| 2   | B     | 6   | ILE  |
| 1   | A     | 648 | VAL  |
| 1   | A     | 291 | ILE  |
| 1   | A     | 646 | GLY  |
| 2   | B     | 3   | GLY  |

### 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 X-ray entries followed by that with respect to entries of similar resolution.

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     | 736/783 (94%) | 626 (85%) | 110 (15%) | 3           | 17 |
| 2   | B     | 7/7 (100%)    | 6 (86%)   | 1 (14%)   | 3           | 19 |
| All | All   | 743/790 (94%) | 632 (85%) | 111 (15%) | 3           | 17 |

All (111) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

| Mol | Chain | Res | Type |
|-----|-------|-----|------|
| 1   | A     | 6   | GLN  |
| 1   | A     | 9   | GLU  |
| 1   | A     | 11  | ILE  |
| 1   | A     | 25  | ILE  |
| 1   | A     | 33  | GLU  |
| 1   | A     | 35  | LEU  |
| 1   | A     | 55  | MSE  |
| 1   | A     | 60  | ARG  |
| 1   | A     | 70  | CYS  |
| 1   | A     | 71  | THR  |
| 1   | A     | 82  | LYS  |
| 1   | A     | 89  | LEU  |
| 1   | A     | 102 | GLN  |
| 1   | A     | 112 | PRO  |
| 1   | A     | 134 | GLN  |
| 1   | A     | 138 | LEU  |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type |
|-----|-------|-----|------|
| 1   | A     | 142 | VAL  |
| 1   | A     | 151 | ARG  |
| 1   | A     | 157 | THR  |
| 1   | A     | 161 | MSE  |
| 1   | A     | 173 | GLU  |
| 1   | A     | 179 | THR  |
| 1   | A     | 212 | LEU  |
| 1   | A     | 213 | ASP  |
| 1   | A     | 220 | VAL  |
| 1   | A     | 224 | LYS  |
| 1   | A     | 236 | SER  |
| 1   | A     | 237 | VAL  |
| 1   | A     | 258 | ILE  |
| 1   | A     | 259 | LEU  |
| 1   | A     | 262 | ARG  |
| 1   | A     | 269 | LYS  |
| 1   | A     | 288 | ILE  |
| 1   | A     | 295 | LEU  |
| 1   | A     | 299 | GLU  |
| 1   | A     | 310 | GLN  |
| 1   | A     | 317 | LEU  |
| 1   | A     | 318 | PHE  |
| 1   | A     | 319 | LEU  |
| 1   | A     | 324 | HIS  |
| 1   | A     | 341 | ARG  |
| 1   | A     | 344 | LEU  |
| 1   | A     | 349 | VAL  |
| 1   | A     | 351 | SER  |
| 1   | A     | 353 | ILE  |
| 1   | A     | 359 | TYR  |
| 1   | A     | 376 | LEU  |
| 1   | A     | 377 | GLU  |
| 1   | A     | 384 | THR  |
| 1   | A     | 385 | LYS  |
| 1   | A     | 387 | THR  |
| 1   | A     | 400 | LEU  |
| 1   | A     | 409 | GLU  |
| 1   | A     | 425 | LEU  |
| 1   | A     | 429 | VAL  |
| 1   | A     | 430 | ASP  |
| 1   | A     | 433 | ILE  |
| 1   | A     | 436 | ILE  |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type |
|-----|-------|-----|------|
| 1   | A     | 457 | GLN  |
| 1   | A     | 465 | VAL  |
| 1   | A     | 479 | LYS  |
| 1   | A     | 480 | VAL  |
| 1   | A     | 482 | ILE  |
| 1   | A     | 485 | LEU  |
| 1   | A     | 495 | THR  |
| 1   | A     | 505 | CYS  |
| 1   | A     | 526 | ILE  |
| 1   | A     | 534 | LYS  |
| 1   | A     | 541 | LYS  |
| 1   | A     | 560 | ASP  |
| 1   | A     | 563 | VAL  |
| 1   | A     | 572 | LEU  |
| 1   | A     | 577 | LEU  |
| 1   | A     | 579 | LEU  |
| 1   | A     | 580 | LEU  |
| 1   | A     | 589 | VAL  |
| 1   | A     | 591 | THR  |
| 1   | A     | 630 | ASP  |
| 1   | A     | 642 | LEU  |
| 1   | A     | 656 | LYS  |
| 1   | A     | 657 | THR  |
| 1   | A     | 663 | LEU  |
| 1   | A     | 666 | ILE  |
| 1   | A     | 673 | PHE  |
| 1   | A     | 683 | ILE  |
| 1   | A     | 684 | ILE  |
| 1   | A     | 692 | CYS  |
| 1   | A     | 695 | LEU  |
| 1   | A     | 697 | LYS  |
| 1   | A     | 730 | TYR  |
| 1   | A     | 736 | LEU  |
| 1   | A     | 739 | LEU  |
| 1   | A     | 745 | GLU  |
| 1   | A     | 756 | LEU  |
| 1   | A     | 779 | ILE  |
| 1   | A     | 783 | TRP  |
| 1   | A     | 805 | PHE  |
| 1   | A     | 815 | PRO  |
| 1   | A     | 817 | THR  |
| 1   | A     | 821 | LYS  |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type |
|-----|-------|-----|------|
| 1   | A     | 823 | TRP  |
| 1   | A     | 846 | LEU  |
| 1   | A     | 847 | THR  |
| 1   | A     | 870 | ILE  |
| 1   | A     | 872 | MSE  |
| 1   | A     | 873 | HIS  |
| 1   | A     | 874 | GLU  |
| 1   | A     | 877 | GLU  |
| 1   | A     | 899 | GLU  |
| 1   | A     | 900 | ILE  |
| 2   | B     | 6   | ILE  |

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (32) such sidechains are listed below:

| Mol | Chain | Res | Type |
|-----|-------|-----|------|
| 1   | A     | 6   | GLN  |
| 1   | A     | 36  | GLN  |
| 1   | A     | 67  | GLN  |
| 1   | A     | 93  | GLN  |
| 1   | A     | 129 | ASN  |
| 1   | A     | 134 | GLN  |
| 1   | A     | 140 | ASN  |
| 1   | A     | 165 | ASN  |
| 1   | A     | 166 | ASN  |
| 1   | A     | 184 | GLN  |
| 1   | A     | 218 | ASN  |
| 1   | A     | 229 | HIS  |
| 1   | A     | 286 | ASN  |
| 1   | A     | 298 | GLN  |
| 1   | A     | 321 | ASN  |
| 1   | A     | 352 | GLN  |
| 1   | A     | 368 | HIS  |
| 1   | A     | 374 | GLN  |
| 1   | A     | 398 | ASN  |
| 1   | A     | 411 | HIS  |
| 1   | A     | 438 | ASN  |
| 1   | A     | 440 | GLN  |
| 1   | A     | 476 | ASN  |
| 1   | A     | 598 | ASN  |
| 1   | A     | 601 | ASN  |
| 1   | A     | 622 | HIS  |
| 1   | A     | 661 | ASN  |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res | Type |
|-----|-------|-----|------|
| 1   | A     | 741 | HIS  |
| 1   | A     | 788 | HIS  |
| 1   | A     | 801 | ASN  |
| 1   | A     | 888 | ASN  |
| 1   | A     | 894 | ASN  |

### 5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

## 5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

## 5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

## 5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

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

There are no chain breaks in this entry.

## 6 Fit of model and data [i](#)

### 6.1 Protein, DNA and RNA chains [i](#)

In the following table, the column labelled ‘#RSRZ> 2’ contains the number (and percentage) of RSRZ outliers, followed by percent RSRZ outliers for the chain as percentile scores relative to all X-ray entries and entries of similar resolution. The OWAB column contains the minimum, median, 95<sup>th</sup> percentile and maximum values of the occupancy-weighted average B-factor per residue. The column labelled ‘Q< 0.9’ lists the number of (and percentage) of residues with an average occupancy less than 0.9.

| Mol | Chain | Analysed      | <RSRZ> | #RSRZ>2      | OWAB(Å <sup>2</sup> ) | Q<0.9 |
|-----|-------|---------------|--------|--------------|-----------------------|-------|
| 1   | A     | 879/961 (91%) | -0.20  | 6 (0%) 84 61 | 56, 122, 181, 200     | 0     |
| 2   | B     | 10/10 (100%)  | 0.26   | 0 100 100    | 173, 187, 200, 200    | 0     |
| All | All   | 889/971 (91%) | -0.20  | 6 (0%) 84 61 | 56, 122, 182, 200     | 0     |

All (6) RSRZ outliers are listed below:

| Mol | Chain | Res | Type | RSRZ |
|-----|-------|-----|------|------|
| 1   | A     | 692 | CYS  | 2.8  |
| 1   | A     | 886 | ILE  | 2.7  |
| 1   | A     | 930 | LYS  | 2.7  |
| 1   | A     | 867 | PHE  | 2.2  |
| 1   | A     | 683 | ILE  | 2.1  |
| 1   | A     | 588 | CYS  | 2.1  |

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

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

### 6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

### 6.4 Ligands [i](#)

There are no ligands in this entry.

## 6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.