



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Mar 7, 2026 – 02:30 AM UTC

PDB ID : 4UX2 / pdb_00004ux2
EMDB ID : EMD-2760
Title : Cryo-EM structure of antagonist-bound E2P gastric H,K-ATPase (SCH.E2. MgF)
Authors : Abe, K.; Tani, K.; Fujiyoshi, Y.
Deposited on : 2014-08-18
Resolution : 7.00 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/EMValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

EMDB validation analysis : 0.0.1.dev132
MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
EM percentile statistics : 202505.v01 (Using data in the EMDB archive up until May 2025)
MapQ : 1.9.13
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.49

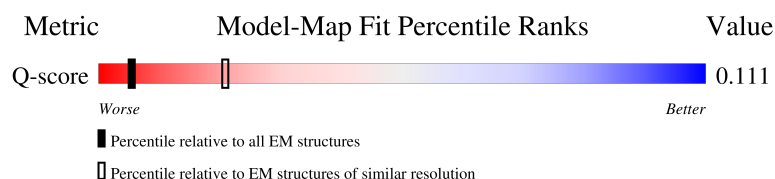
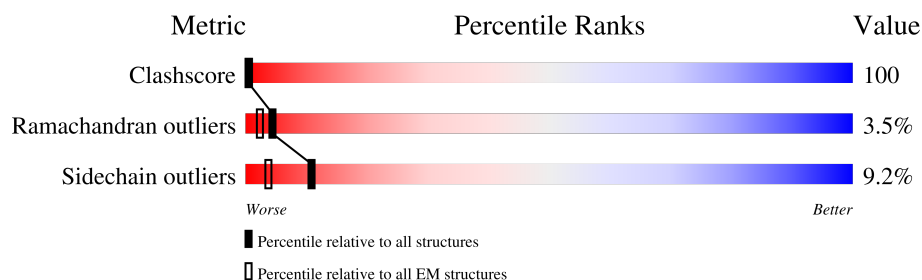
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON CRYSTALLOGRAPHY

The reported resolution of this entry is 7.00 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	EM structures (#Entries)	Similar EM resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	229148	23984	-
Ramachandran outliers	224038	23583	-
Sidechain outliers	223484	23102	-
Q-score	-	25397	483 (6.50 - 7.50)

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	1034	42% 18% 51% 23% 5% .
2	B	290	38% 8% 27% 19% 7% 40%

2 Entry composition

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

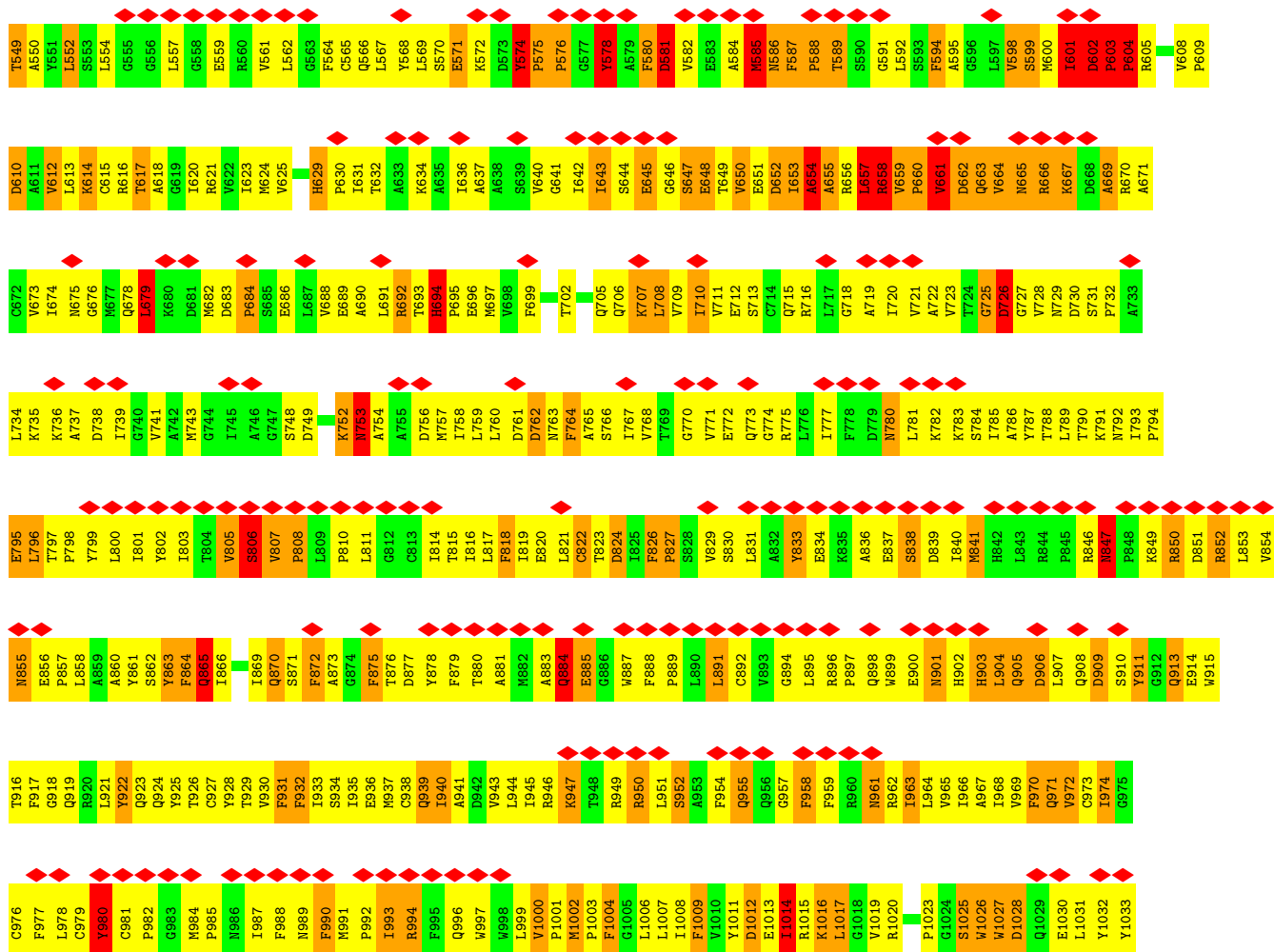
In the tables below, the AltConf column contains the number of residues with at least one atom in alternate conformation and the Trace column contains the number of residues modelled with at most 2 atoms.

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

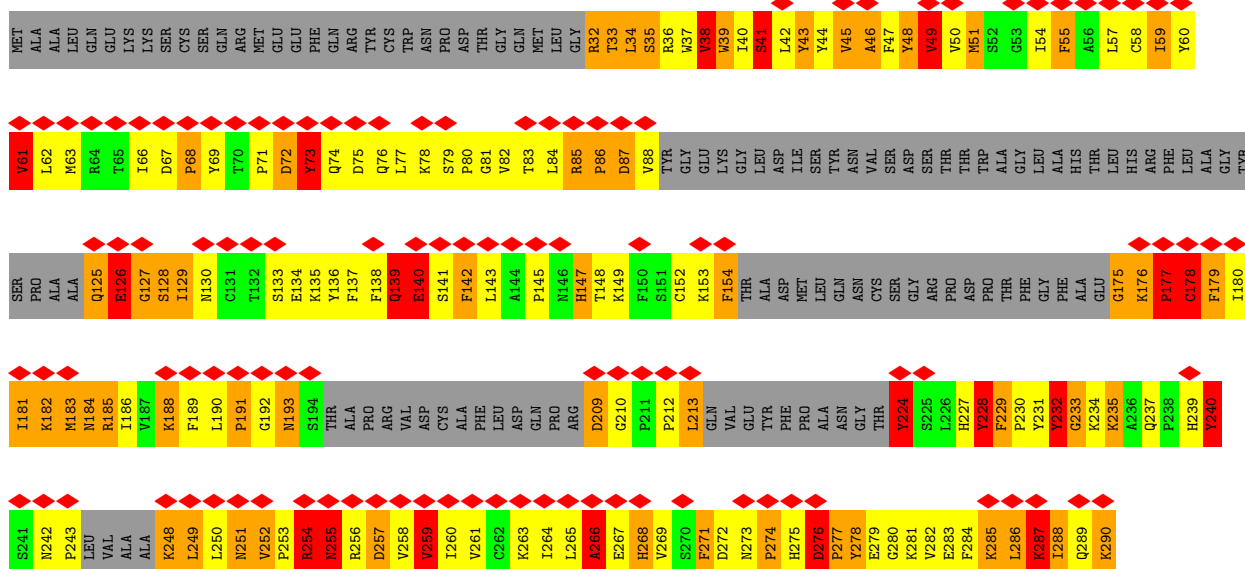
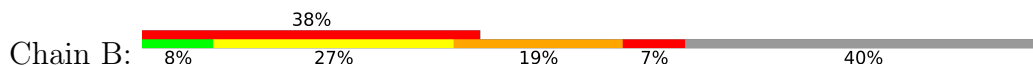
Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
1	A	993	Total	C	N	O	S	0	0
			7718	4927	1304	1434	53		

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

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



• Molecule 2: POTASSIUM-TRANSPORTING ATPASE SUBUNIT BETA



4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	CRYSTALLOGRAPHY	Depositor
Imposed symmetry	2D CRYSTAL, a =Not provided Å, b =Not provided Å, c =Not provided Å, γ =Not provided°, space group=Not provided	Depositor
Number of images used	Not provided	
Resolution determination method	DIFFRACTION PATTERN/LAYERLINES	Depositor
CTF correction method	Not provided	
Microscope	JEOL KYOTO-3000SFF	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{\AA}^2$)	20	Depositor
Minimum defocus (nm)	825	Depositor
Maximum defocus (nm)	3070	Depositor
Magnification	40000	Depositor
Image detector	KODAK SO-163 FILM	Depositor
Maximum map value	6.185	Depositor
Minimum map value	-5.140	Depositor
Average map value	-0.004	Depositor
Map value standard deviation	0.993	Depositor
Recommended contour level	1.75	Depositor
Map size (Å)	142.56, 111.8, 322.31	wwPDB
Map dimensions	65, 81, 193	wwPDB
Map angles (°)	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing (Å)	1.76, 1.72, 1.67	Depositor

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	1.58	21/7876 (0.3%)	1.94	203/10694 (1.9%)
2	B	1.49	4/1486 (0.3%)	1.99	39/2008 (1.9%)
All	All	1.57	25/9362 (0.3%)	1.95	242/12702 (1.9%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	160
2	B	0	52
All	All	0	212

All (25) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	451	VAL	CA-CB	-8.63	1.49	1.54
2	B	252	VAL	CA-CB	-8.18	1.48	1.53
1	A	1000	VAL	CA-CB	-7.62	1.50	1.54
1	A	196	VAL	CA-CB	-6.58	1.47	1.54
2	B	73	TYR	C-N	-6.19	1.24	1.33
1	A	959	PHE	N-CA	-5.99	1.39	1.46
1	A	511	ARG	NE-CZ	5.97	1.39	1.33
1	A	273	ARG	NE-CZ	5.94	1.39	1.33
1	A	242	HIS	ND1-CE1	5.89	1.38	1.32
1	A	850	ARG	NE-CZ	5.80	1.39	1.33
1	A	182	ARG	NE-CZ	5.55	1.39	1.33
1	A	428	ARG	NE-CZ	5.55	1.39	1.33
1	A	972	VAL	CA-CB	-5.54	1.48	1.54
1	A	616	ARG	NE-CZ	5.53	1.39	1.33
1	A	151	VAL	CA-CB	-5.48	1.48	1.54
1	A	486	VAL	CA-CB	-5.41	1.48	1.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	50	ILE	CA-CB	-5.41	1.47	1.54
1	A	807	VAL	CA-CB	-5.40	1.50	1.55
2	B	268	HIS	ND1-CE1	5.34	1.37	1.32
1	A	454	ARG	NE-CZ	5.24	1.38	1.33
1	A	806	SER	C-N	5.20	1.38	1.33
2	B	259	VAL	CA-CB	-5.20	1.47	1.54
1	A	827	PRO	N-CA	-5.17	1.41	1.47
1	A	65	GLN	CA-C	-5.03	1.46	1.53
1	A	207	ARG	NE-CZ	5.01	1.38	1.33

All (242) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	B	251	ASN	CA-C-N	15.97	130.30	120.24
2	B	251	ASN	C-N-CA	15.97	130.30	120.24
1	A	818	PHE	CA-CB-CG	-13.16	100.64	113.80
1	A	315	PHE	CA-CB-CG	-9.81	103.99	113.80
1	A	826	PHE	CA-CB-CG	-9.65	104.15	113.80
1	A	959	PHE	N-CA-C	9.51	121.65	111.28
1	A	51	ASN	CA-C-N	9.43	137.90	122.73
1	A	51	ASN	C-N-CA	9.43	137.90	122.73
2	B	68	PRO	CA-N-CD	-9.40	98.84	112.00
1	A	726	ASP	CA-C-N	-9.32	114.18	122.47
1	A	726	ASP	C-N-CA	-9.32	114.18	122.47
1	A	52	ASP	N-CA-C	9.23	123.24	112.72
1	A	451	VAL	N-CA-CB	8.93	116.50	110.52
1	A	595	ALA	N-CA-C	8.64	120.47	111.14
1	A	446	GLN	N-CA-C	8.22	121.41	110.88
2	B	73	TYR	O-C-N	-8.21	113.74	123.27
1	A	764	PHE	CA-CB-CG	-8.19	105.61	113.80
1	A	1004	PHE	CA-CB-CG	-8.10	105.70	113.80
1	A	64	TYR	CA-CB-CG	-7.92	99.64	113.90
1	A	970	PHE	CA-CB-CG	-7.54	106.26	113.80
1	A	905	GLN	CA-C-N	7.53	134.32	121.14
1	A	905	GLN	C-N-CA	7.53	134.32	121.14
2	B	252	VAL	N-CA-CB	7.52	115.24	110.50
1	A	222	VAL	CB-CA-C	-7.47	100.96	111.19
1	A	726	ASP	CB-CA-C	-7.44	97.06	109.55
1	A	329	ALA	CA-C-N	7.43	130.10	120.44
1	A	329	ALA	C-N-CA	7.43	130.10	120.44
2	B	154	PHE	CA-CB-CG	-7.41	106.39	113.80
1	A	337	VAL	N-CA-C	7.38	117.46	110.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1009	PHE	CA-CB-CG	-7.23	106.57	113.80
1	A	316	PHE	CA-CB-CG	-7.22	106.58	113.80
2	B	271	PHE	CA-CB-CG	-7.18	106.62	113.80
1	A	707	LYS	N-CA-C	-7.16	103.56	111.36
1	A	1025	SER	CA-C-N	7.14	130.17	120.54
1	A	1025	SER	C-N-CA	7.14	130.17	120.54
1	A	326	PHE	N-CA-C	-7.13	104.05	112.89
1	A	990	PHE	CA-CB-CG	-7.05	106.75	113.80
1	A	574	TYR	CA-CB-CG	-7.04	101.22	113.90
2	B	259	VAL	N-CA-CB	7.00	118.35	110.72
1	A	980	TYR	N-CA-C	6.99	118.98	111.36
1	A	98	TYR	N-CA-C	-6.98	104.64	113.01
1	A	525	GLU	CA-C-N	6.94	134.17	122.65
1	A	525	GLU	C-N-CA	6.94	134.17	122.65
1	A	64	TYR	N-CA-C	6.93	120.62	111.75
1	A	341	VAL	CB-CA-C	-6.89	102.92	110.85
1	A	594	PHE	CA-C-N	6.79	129.67	120.44
1	A	594	PHE	C-N-CA	6.79	129.67	120.44
1	A	308	ALA	CA-C-N	6.72	128.92	120.72
1	A	308	ALA	C-N-CA	6.72	128.92	120.72
1	A	316	PHE	CA-C-N	6.70	131.21	120.82
1	A	316	PHE	C-N-CA	6.70	131.21	120.82
1	A	410	ASP	CA-CB-CG	-6.69	105.91	112.60
1	A	902	HIS	ND1-CE1-NE2	6.67	115.07	108.40
1	A	340	TYR	CA-CB-CG	-6.66	101.91	113.90
1	A	229	GLY	N-CA-C	-6.64	106.16	115.32
1	A	424	SER	CA-C-N	6.63	129.16	120.28
1	A	424	SER	C-N-CA	6.63	129.16	120.28
1	A	420	PHE	CA-CB-CG	-6.62	107.18	113.80
1	A	106	ALA	N-CA-C	6.60	119.76	111.24
1	A	865	GLN	N-CA-C	6.60	121.55	112.04
1	A	533	LYS	CA-C-N	6.59	127.41	120.03
1	A	533	LYS	C-N-CA	6.59	127.41	120.03
1	A	1012	ASP	CA-CB-CG	-6.53	106.07	112.60
1	A	585	MET	CA-C-N	6.49	129.22	120.65
1	A	585	MET	C-N-CA	6.49	129.22	120.65
1	A	972	VAL	N-CA-CB	6.45	117.67	110.51
1	A	977	PHE	CA-CB-CG	-6.44	107.36	113.80
1	A	137	ASP	N-CA-C	6.42	124.47	110.80
1	A	594	PHE	CA-CB-CG	-6.41	107.39	113.80
1	A	335	ALA	CA-C-N	6.38	132.00	121.54
1	A	335	ALA	C-N-CA	6.38	132.00	121.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	B	229	PHE	CA-CB-CG	-6.30	107.50	113.80
1	A	629	HIS	CA-C-N	6.28	126.19	119.28
1	A	629	HIS	C-N-CA	6.28	126.19	119.28
1	A	302	ASP	N-CA-CB	6.27	119.10	110.01
1	A	906	ASP	N-CA-C	6.26	120.65	112.89
1	A	906	ASP	CA-CB-CG	-6.22	106.38	112.60
1	A	522	ARG	CD-NE-CZ	-6.16	115.78	124.40
1	A	253	PHE	CA-CB-CG	-6.16	107.64	113.80
2	B	277	PRO	CA-C-N	6.14	128.51	120.28
2	B	277	PRO	C-N-CA	6.14	128.51	120.28
1	A	780	ASN	CA-CB-CG	-6.12	106.48	112.60
1	A	824	ASP	CA-CB-CG	-6.09	106.51	112.60
2	B	232	TYR	CA-CB-CG	-6.07	102.97	113.90
1	A	932	PHE	CA-CB-CG	-6.07	107.73	113.80
1	A	178	ALA	CA-C-N	-6.05	114.72	122.77
1	A	178	ALA	C-N-CA	-6.05	114.72	122.77
1	A	512	HIS	CA-CB-CG	-6.05	107.75	113.80
2	B	142	PHE	CA-CB-CG	-6.04	107.76	113.80
1	A	901	ASN	CA-C-N	6.03	128.64	120.38
1	A	901	ASN	C-N-CA	6.03	128.64	120.38
1	A	403	ASP	N-CA-C	-6.03	105.88	113.23
1	A	198	ASP	N-CA-CB	6.02	118.97	110.36
1	A	208	VAL	CA-C-N	6.02	125.57	119.19
1	A	208	VAL	C-N-CA	6.02	125.57	119.19
1	A	587	PHE	CA-CB-CG	-5.99	107.81	113.80
2	B	126	GLU	O-C-N	-5.99	116.81	123.04
2	B	140	GLU	N-CA-CB	5.97	120.59	110.49
1	A	875	PHE	CA-CB-CG	-5.97	107.83	113.80
1	A	546	ALA	CA-C-N	5.95	128.18	120.44
1	A	546	ALA	C-N-CA	5.95	128.18	120.44
1	A	692	ARG	CD-NE-CZ	-5.92	116.10	124.40
1	A	207	ARG	CD-NE-CZ	-5.91	116.12	124.40
1	A	53	HIS	CA-CB-CG	-5.91	107.89	113.80
1	A	586	ASN	N-CA-C	-5.87	104.57	110.97
2	B	74	GLN	CA-C-N	5.87	128.42	120.38
2	B	74	GLN	C-N-CA	5.87	128.42	120.38
1	A	249	ARG	CD-NE-CZ	-5.86	116.19	124.40
1	A	495	ASN	CA-CB-CG	-5.85	106.75	112.60
1	A	902	HIS	CE1-NE2-CD2	-5.84	103.16	109.00
2	B	179	PHE	CA-C-N	-5.82	115.51	123.14
2	B	179	PHE	C-N-CA	-5.82	115.51	123.14
1	A	850	ARG	CD-NE-CZ	-5.79	116.30	124.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	891	LEU	CA-C-N	5.79	128.31	120.38
1	A	891	LEU	C-N-CA	5.79	128.31	120.38
1	A	795	GLU	CA-C-N	5.78	128.28	120.65
1	A	795	GLU	C-N-CA	5.78	128.28	120.65
1	A	586	ASN	CA-CB-CG	-5.78	106.82	112.60
1	A	232	GLU	CA-C-N	5.77	125.78	119.89
1	A	232	GLU	C-N-CA	5.77	125.78	119.89
2	B	249	LEU	CA-C-N	5.76	134.25	122.55
2	B	249	LEU	C-N-CA	5.76	134.25	122.55
1	A	738	ASP	N-CA-C	-5.76	105.08	111.36
1	A	957	GLY	N-CA-C	-5.75	99.56	113.18
1	A	287	GLU	O-C-N	-5.74	116.53	123.13
1	A	1026	TRP	N-CA-C	5.73	117.98	111.11
1	A	694	HIS	CE1-NE2-CD2	-5.72	103.28	109.00
1	A	612	VAL	CB-CA-C	-5.71	104.55	112.02
1	A	911	TYR	CA-CB-CG	-5.68	103.67	113.90
1	A	491	PHE	CA-CB-CG	-5.68	108.12	113.80
2	B	251	ASN	CA-CB-CG	-5.68	106.92	112.60
2	B	61	VAL	N-CA-CB	5.67	118.68	110.52
1	A	208	VAL	O-C-N	5.66	127.55	121.10
1	A	939	GLN	CA-C-N	-5.66	113.43	120.56
1	A	939	GLN	C-N-CA	-5.66	113.43	120.56
1	A	250	ASN	CA-C-N	-5.66	115.25	123.06
1	A	250	ASN	C-N-CA	-5.66	115.25	123.06
1	A	738	ASP	CA-CB-CG	-5.65	106.95	112.60
2	B	276	ASP	CA-C-N	5.65	125.32	119.56
2	B	276	ASP	C-N-CA	5.65	125.32	119.56
1	A	79	GLU	CB-CG-CD	-5.64	103.00	112.60
1	A	502	HIS	ND1-CE1-NE2	5.64	114.04	108.40
1	A	317	ILE	CB-CA-C	-5.64	103.70	111.65
2	B	185	ARG	N-CA-CB	5.61	118.28	109.69
1	A	629	HIS	CE1-NE2-CD2	-5.59	103.41	109.00
1	A	525	GLU	N-CA-C	-5.58	105.35	111.82
1	A	852	ARG	CA-C-N	5.57	127.74	120.28
1	A	852	ARG	C-N-CA	5.57	127.74	120.28
1	A	420	PHE	N-CA-C	5.57	117.03	111.07
1	A	899	TRP	CA-C-N	5.56	127.73	120.28
1	A	899	TRP	C-N-CA	5.56	127.73	120.28
2	B	274	PRO	N-CA-CB	5.56	109.42	103.52
1	A	588	PRO	CA-C-N	5.55	131.52	121.92
1	A	588	PRO	C-N-CA	5.55	131.52	121.92
2	B	233	GLY	CA-C-N	5.54	128.03	120.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	B	233	GLY	C-N-CA	5.54	128.03	120.54
1	A	1028	ASP	CA-CB-CG	-5.53	107.07	112.60
2	B	252	VAL	CB-CA-C	-5.53	108.49	114.35
1	A	190	ASN	CA-CB-CG	-5.52	107.08	112.60
1	A	587	PHE	CA-C-N	5.51	127.00	120.23
1	A	587	PHE	C-N-CA	5.51	127.00	120.23
1	A	473	LEU	N-CA-C	5.48	120.08	112.90
1	A	206	ASP	CB-CA-C	-5.47	100.16	110.51
1	A	438	ASN	CA-C-N	5.47	129.98	120.68
1	A	438	ASN	C-N-CA	5.47	129.98	120.68
1	A	850	ARG	CA-C-N	-5.45	115.07	123.14
1	A	850	ARG	C-N-CA	-5.45	115.07	123.14
1	A	931	PHE	N-CA-C	-5.45	105.25	111.14
1	A	41	LEU	CA-C-N	5.43	128.10	120.28
1	A	41	LEU	C-N-CA	5.43	128.10	120.28
1	A	135	THR	N-CA-C	-5.43	105.36	111.28
1	A	1032	TYR	CA-C-N	5.41	131.44	121.70
1	A	1032	TYR	C-N-CA	5.41	131.44	121.70
1	A	581	ASP	CA-CB-CG	-5.40	107.20	112.60
1	A	468	PHE	CA-CB-CG	-5.38	108.42	113.80
1	A	725	GLY	CA-C-N	5.34	130.75	122.26
1	A	725	GLY	C-N-CA	5.34	130.75	122.26
1	A	864	PHE	CA-CB-CG	-5.33	108.47	113.80
1	A	872	PHE	CA-CB-CG	-5.33	108.47	113.80
1	A	447	ASP	CA-CB-CG	-5.33	107.27	112.60
2	B	228	TYR	CA-CB-CG	-5.32	104.32	113.90
1	A	188	GLN	O-C-N	-5.32	117.02	123.29
1	A	676	GLY	N-CA-C	-5.31	105.89	113.86
1	A	931	PHE	CA-CB-CG	-5.31	108.49	113.80
1	A	127	GLN	CB-CG-CD	-5.31	103.57	112.60
1	A	629	HIS	ND1-CE1-NE2	5.31	113.71	108.40
1	A	331	VAL	CA-C-N	5.30	127.82	120.29
1	A	331	VAL	C-N-CA	5.30	127.82	120.29
1	A	108	GLY	CA-C-N	5.30	127.84	120.63
1	A	108	GLY	C-N-CA	5.30	127.84	120.63
1	A	342	PRO	N-CA-CB	5.30	105.89	102.92
1	A	974	ILE	CB-CA-C	-5.30	105.08	112.02
1	A	729	ASN	CA-CB-CG	-5.29	107.31	112.60
1	A	580	PHE	CA-CB-CG	-5.28	108.52	113.80
1	A	950	ARG	NE-CZ-NH2	5.27	123.95	119.20
1	A	833	TYR	CA-CB-CG	-5.27	104.41	113.90
1	A	894	GLY	CA-C-N	5.27	128.32	120.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	894	GLY	C-N-CA	5.27	128.32	120.31
1	A	863	TYR	CA-CB-CG	-5.25	104.45	113.90
1	A	506	ASP	CA-C-N	5.25	124.96	119.82
1	A	506	ASP	C-N-CA	5.25	124.96	119.82
1	A	486	VAL	N-CA-C	5.24	115.35	110.42
1	A	148	VAL	CB-CA-C	-5.24	105.22	112.24
1	A	309	ILE	CB-CA-C	-5.24	105.11	111.87
2	B	191	PRO	N-CA-C	-5.22	103.24	111.34
1	A	762	ASP	N-CA-C	-5.22	105.73	113.40
1	A	659	VAL	N-CA-C	-5.22	104.91	109.19
2	B	59	ILE	N-CA-CB	5.22	116.55	110.65
1	A	971	GLN	CB-CG-CD	-5.21	103.74	112.60
1	A	169	SER	N-CA-CB	5.20	117.77	110.12
1	A	710	ILE	CB-CA-C	-5.20	105.31	111.97
1	A	1027	TRP	CE2-CD2-CE3	5.20	124.00	118.80
1	A	756	ASP	CA-CB-CG	-5.20	107.40	112.60
1	A	334	MET	N-CA-C	-5.19	106.21	112.54
1	A	855	ASN	CA-CB-CG	-5.19	107.41	112.60
1	A	273	ARG	CD-NE-CZ	-5.18	117.15	124.40
2	B	58	CYS	N-CA-C	5.18	117.66	111.71
2	B	73	TYR	CA-C-N	5.17	130.75	121.66
2	B	73	TYR	C-N-CA	5.17	130.75	121.66
1	A	796	LEU	N-CA-C	5.15	116.58	110.97
1	A	662	ASP	CA-C-N	5.15	127.69	120.28
1	A	662	ASP	C-N-CA	5.15	127.69	120.28
2	B	267	GLU	CA-C-N	5.15	128.14	120.31
2	B	267	GLU	C-N-CA	5.15	128.14	120.31
2	B	224	TYR	N-CA-CB	5.12	119.20	110.50
1	A	753	ASN	N-CA-CB	5.12	117.56	109.94
1	A	211	ASP	CA-CB-CG	-5.11	107.49	112.60
1	A	364	ASN	CB-CA-C	-5.11	104.48	111.73
1	A	958	PHE	N-CA-C	-5.11	106.15	112.38
1	A	980	TYR	CA-CB-CG	-5.10	104.71	113.90
1	A	236	ARG	CD-NE-CZ	-5.10	117.26	124.40
1	A	961	ASN	CA-CB-CG	-5.10	107.50	112.60
1	A	940	ILE	N-CA-CB	5.09	116.51	110.55
1	A	748	SER	N-CA-C	-5.09	103.82	110.53
1	A	352	CYS	N-CA-C	-5.06	105.84	111.36
1	A	796	LEU	CB-CA-C	-5.04	103.20	110.96
1	A	808	PRO	N-CA-CB	5.04	108.03	103.34
1	A	884	GLN	CA-C-N	5.03	129.12	120.72
1	A	884	GLN	C-N-CA	5.03	129.12	120.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	480	ARG	N-CA-C	-5.02	105.50	110.97
1	A	541	GLU	N-CA-C	-5.01	106.67	112.89
1	A	661	VAL	CB-CA-C	-5.01	105.53	112.24

There are no chirality outliers.

All (212) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	1002	MET	Mainchain
1	A	1014	ILE	Mainchain
1	A	1016	LYS	Mainchain
1	A	1017	LEU	Mainchain
1	A	102	ALA	Mainchain
1	A	1023	PRO	Mainchain
1	A	1025	SER	Mainchain
1	A	103	ARG	Mainchain
1	A	111	CYS	Mainchain
1	A	112	LEU	Mainchain
1	A	116	ALA	Mainchain
1	A	123	ALA	Mainchain
1	A	127	GLN	Mainchain
1	A	130	GLU	Mainchain
1	A	131	GLY	Mainchain
1	A	136	ASP	Mainchain
1	A	145	LEU	Mainchain
1	A	147	ALA	Mainchain
1	A	148	VAL	Mainchain
1	A	153	GLY	Mainchain
1	A	154	CYS	Mainchain
1	A	156	GLY	Mainchain
1	A	173	LEU	Peptide
1	A	174	VAL	Mainchain,Peptide
1	A	177	GLN	Mainchain
1	A	178	ALA	Mainchain
1	A	187	PHE	Mainchain
1	A	188	GLN	Mainchain
1	A	189	ILE	Mainchain
1	A	197	GLY	Mainchain
1	A	203	LYS	Mainchain
1	A	206	ASP	Mainchain
1	A	217	ALA	Mainchain
1	A	218	GLN	Mainchain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	219	GLY	Mainchain
1	A	242	HIS	Mainchain
1	A	243	GLU	Mainchain
1	A	260	GLU	Mainchain
1	A	263	ALA	Mainchain
1	A	265	GLY	Mainchain
1	A	278	ARG	Mainchain
1	A	279	ILE	Mainchain
1	A	280	ALA	Mainchain
1	A	282	LEU	Mainchain
1	A	287	GLU	Mainchain
1	A	288	ASN	Mainchain
1	A	289	GLU	Mainchain
1	A	290	LYS	Mainchain
1	A	299	HIS	Mainchain
1	A	306	GLY	Mainchain
1	A	309	ILE	Mainchain
1	A	317	ILE	Mainchain
1	A	322	ILE	Mainchain
1	A	323	GLY	Mainchain
1	A	336	ILE	Mainchain
1	A	394	ARG	Mainchain
1	A	395	MET	Mainchain
1	A	396	THR	Mainchain
1	A	417	GLY	Mainchain
1	A	422	GLN	Mainchain
1	A	423	SER	Mainchain
1	A	426	THR	Mainchain
1	A	44	MET	Mainchain
1	A	445	GLY	Mainchain,Peptide
1	A	446	GLN	Mainchain
1	A	457	ILE	Mainchain
1	A	459	ASP	Mainchain
1	A	469	SER	Mainchain
1	A	477	MET	Mainchain
1	A	482	ARG	Mainchain
1	A	486	VAL	Mainchain
1	A	487	CYS	Mainchain
1	A	488	GLU	Mainchain
1	A	491	PHE	Mainchain
1	A	505	GLU	Mainchain
1	A	508	ARG	Mainchain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	509	ASP	Mainchain,Peptide
1	A	521	GLU	Mainchain
1	A	526	ARG	Mainchain
1	A	527	CYS	Mainchain
1	A	530	ILE	Mainchain
1	A	536	GLU	Mainchain
1	A	539	LEU	Mainchain
1	A	540	ASP	Mainchain
1	A	545	GLU	Mainchain
1	A	548	GLN	Mainchain
1	A	549	THR	Mainchain
1	A	566	GLN	Mainchain
1	A	571	GLU	Mainchain
1	A	574	TYR	Mainchain
1	A	575	PRO	Mainchain
1	A	576	PRO	Mainchain
1	A	578	TYR	Mainchain
1	A	581	ASP	Mainchain
1	A	585	MET	Mainchain
1	A	586	ASN	Mainchain
1	A	589	THR	Mainchain
1	A	598	VAL	Mainchain
1	A	602	ASP	Mainchain
1	A	603	PRO	Mainchain
1	A	604	PRO	Mainchain
1	A	610	ASP	Mainchain
1	A	614	LYS	Mainchain
1	A	62	GLN	Mainchain
1	A	63	LYS	Mainchain
1	A	641	GLY	Mainchain
1	A	643	ILE	Mainchain
1	A	644	SER	Mainchain
1	A	645	GLU	Mainchain
1	A	646	GLY	Mainchain
1	A	647	SER	Mainchain
1	A	648	GLU	Mainchain
1	A	652	ASP	Mainchain
1	A	653	ILE	Peptide
1	A	654	ALA	Mainchain,Peptide
1	A	655	ALA	Mainchain
1	A	656	ARG	Mainchain
1	A	657	LEU	Mainchain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	658	ARG	Mainchain
1	A	660	PRO	Mainchain
1	A	663	GLN	Mainchain
1	A	664	VAL	Mainchain
1	A	666	ARG	Mainchain
1	A	669	ALA	Mainchain
1	A	679	LEU	Mainchain
1	A	684	PRO	Mainchain
1	A	694	HIS	Mainchain
1	A	715	GLN	Mainchain
1	A	718	GLY	Mainchain
1	A	73	SER	Mainchain
1	A	75	SER	Mainchain
1	A	752	LYS	Mainchain
1	A	753	ASN	Mainchain
1	A	76	LEU	Mainchain
1	A	79	GLU	Mainchain
1	A	806	SER	Mainchain
1	A	82	LEU	Mainchain
1	A	822	CYS	Mainchain
1	A	83	ARG	Mainchain
1	A	838	SER	Mainchain
1	A	839	ASP	Mainchain
1	A	847	ASN	Mainchain
1	A	852	ARG	Mainchain
1	A	865	GLN	Mainchain
1	A	870	GLN	Mainchain
1	A	90	ARG	Sidechain
1	A	909	ASP	Mainchain
1	A	944	LEU	Mainchain
1	A	947	LYS	Mainchain
1	A	949	ARG	Mainchain
1	A	952	SER	Mainchain
1	A	955	GLN	Mainchain
1	A	96	PRO	Mainchain
1	A	980	TYR	Mainchain
1	A	99	VAL	Mainchain
1	A	994	ARG	Mainchain
2	B	125	GLN	Mainchain,Peptide
2	B	126	GLU	Mainchain,Peptide
2	B	127	GLY	Mainchain
2	B	128	SER	Mainchain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
2	B	133	SER	Mainchain
2	B	138	PHE	Mainchain
2	B	139	GLN	Mainchain
2	B	147	HIS	Mainchain
2	B	175	GLY	Mainchain
2	B	176	LYS	Mainchain
2	B	177	PRO	Mainchain
2	B	178	CYS	Mainchain
2	B	181	ILE	Mainchain
2	B	183	MET	Mainchain
2	B	191	PRO	Mainchain
2	B	209	ASP	Mainchain
2	B	210	GLY	Mainchain,Peptide
2	B	212	PRO	Mainchain
2	B	224	TYR	Mainchain
2	B	228	TYR	Mainchain
2	B	232	TYR	Mainchain
2	B	239	HIS	Mainchain
2	B	240	TYR	Sidechain
2	B	248	LYS	Mainchain
2	B	250	LEU	Mainchain
2	B	254	ARG	Mainchain
2	B	255	ASN	Mainchain
2	B	256	ARG	Mainchain
2	B	257	ASP	Mainchain
2	B	258	VAL	Mainchain
2	B	259	VAL	Mainchain
2	B	266	ALA	Mainchain
2	B	278	TYR	Mainchain
2	B	285	LYS	Mainchain
2	B	286	LEU	Mainchain
2	B	287	LYS	Mainchain
2	B	34	LEU	Mainchain
2	B	35	SER	Mainchain,Peptide
2	B	38	VAL	Mainchain
2	B	39	TRP	Mainchain
2	B	41	SER	Mainchain
2	B	46	ALA	Mainchain
2	B	51	MET	Mainchain
2	B	55	PHE	Mainchain
2	B	59	ILE	Mainchain
2	B	62	LEU	Mainchain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
2	B	63	MET	Mainchain
2	B	73	TYR	Mainchain

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	7718	0	7746	1614	0
2	B	1443	0	1431	364	0
All	All	9161	0	9177	1840	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 100.

All (1840) 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:901:ASN:HB3	1:A:904:LEU:CD1	1.26	1.65
1:A:398:SER:CB	1:A:600:MET:CA	1.78	1.56
1:A:994:ARG:NH1	2:B:73:TYR:CG	1.70	1.55
1:A:913:GLN:NE2	2:B:77:LEU:HD22	1.25	1.48
1:A:398:SER:HB2	1:A:600:MET:C	1.41	1.43
1:A:398:SER:HB2	1:A:600:MET:CA	0.96	1.42
1:A:901:ASN:CB	1:A:904:LEU:HD11	1.54	1.37
1:A:398:SER:CB	1:A:600:MET:N	1.89	1.34
1:A:398:SER:HB3	1:A:600:MET:N	1.41	1.33
1:A:286:VAL:HB	1:A:735:LYS:CE	1.58	1.32
1:A:1011:TYR:CE1	2:B:47:PHE:HE1	1.48	1.32
1:A:923:GLN:CG	2:B:76:GLN:HG2	1.59	1.32
1:A:65:GLN:NE2	1:A:65:GLN:N	1.78	1.30
1:A:398:SER:CB	1:A:600:MET:HA	1.43	1.30
1:A:398:SER:HB3	1:A:599:SER:C	1.53	1.30
1:A:548:GLN:O	1:A:552:LEU:HD23	1.27	1.28
1:A:775:ARG:HD2	1:A:840:ILE:CG2	1.63	1.28
1:A:913:GLN:HB3	2:B:185:ARG:O	1.17	1.28
1:A:651:GLU:O	1:A:654:ALA:HB3	1.22	1.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:775:ARG:NH1	1:A:840:ILE:O	1.66	1.26
1:A:906:ASP:OD1	2:B:83:THR:HB	1.07	1.23
1:A:548:GLN:O	1:A:552:LEU:CD2	1.85	1.23
1:A:906:ASP:OD1	2:B:83:THR:CB	1.88	1.22
2:B:240:TYR:CD1	2:B:240:TYR:O	1.92	1.21
1:A:399:HIS:C	1:A:400:LEU:HD12	1.64	1.21
1:A:1011:TYR:CE1	2:B:47:PHE:CE1	2.27	1.21
1:A:207:ARG:HG2	1:A:257:MET:HG3	1.23	1.20
1:A:45:LYS:NZ	1:A:281:SER:HB2	1.56	1.20
1:A:363:LYS:HE3	1:A:773:GLN:NE2	1.56	1.20
1:A:994:ARG:NH1	2:B:73:TYR:CD2	2.10	1.20
1:A:169:SER:HB3	1:A:753:ASN:ND2	1.57	1.19
1:A:207:ARG:HG2	1:A:257:MET:CG	1.74	1.17
1:A:394:ARG:NH1	1:A:452:PRO:HB2	1.57	1.17
1:A:72:LEU:HD13	1:A:198:ASP:HA	1.17	1.16
1:A:913:GLN:NE2	2:B:77:LEU:CD2	2.09	1.16
1:A:169:SER:CB	1:A:753:ASN:ND2	2.09	1.16
1:A:286:VAL:HB	1:A:735:LYS:HE2	1.25	1.16
1:A:901:ASN:CB	1:A:904:LEU:CD1	2.16	1.15
1:A:170:PHE:O	1:A:173:LEU:CD1	1.95	1.15
1:A:905:GLN:CG	2:B:278:TYR:HD2	1.59	1.14
1:A:119:ILE:HG23	1:A:334:MET:CE	1.77	1.14
1:A:119:ILE:CG2	1:A:334:MET:HE2	1.76	1.14
1:A:559:GLU:HG2	1:A:600:MET:O	1.45	1.14
1:A:905:GLN:CG	2:B:83:THR:HG22	1.77	1.13
1:A:166:ILE:HD12	1:A:753:ASN:HB2	1.30	1.13
1:A:163:SER:OG	1:A:368:LYS:HD3	1.48	1.13
1:A:884:GLN:HG2	2:B:73:TYR:CD2	1.85	1.12
1:A:169:SER:OG	1:A:749:ASP:HB3	1.47	1.11
1:A:170:PHE:O	1:A:173:LEU:HD11	1.46	1.11
1:A:396:THR:HG22	1:A:397:VAL:N	1.61	1.11
1:A:775:ARG:HD2	1:A:840:ILE:HG22	1.16	1.11
1:A:46:LYS:NZ	1:A:712:GLU:OE2	1.83	1.11
1:A:922:TYR:CE2	1:A:991:MET:SD	2.44	1.11
1:A:552:LEU:HD23	1:A:552:LEU:H	1.08	1.10
1:A:905:GLN:HG2	2:B:83:THR:HG22	1.18	1.10
2:B:288:ILE:O	2:B:288:ILE:HG22	1.46	1.10
1:A:914:GLU:O	2:B:184:ASN:HB3	1.52	1.10
1:A:679:LEU:HD23	1:A:679:LEU:O	1.51	1.10
1:A:901:ASN:HB3	1:A:904:LEU:HD12	1.12	1.09
1:A:146:ILE:O	1:A:146:ILE:HD13	1.53	1.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:786:ALA:HB2	1:A:858:LEU:HD21	1.33	1.09
1:A:97:GLU:HB3	1:A:99:VAL:HG22	1.33	1.08
1:A:903:HIS:HB2	2:B:88:VAL:O	1.53	1.08
1:A:1007:LEU:HD21	2:B:54:ILE:HG21	1.22	1.08
1:A:775:ARG:CD	1:A:840:ILE:CG2	2.32	1.07
1:A:905:GLN:HG3	2:B:278:TYR:CD2	1.89	1.07
1:A:978:LEU:HD21	1:A:990:PHE:CE2	1.88	1.07
1:A:189:ILE:HD11	1:A:194:LEU:HD23	1.34	1.07
1:A:994:ARG:NH1	2:B:73:TYR:CB	2.17	1.07
1:A:443:LYS:HG3	1:A:455:ILE:HG23	1.26	1.07
2:B:287:LYS:HE2	2:B:289:GLN:HE21	1.05	1.07
1:A:994:ARG:NH2	2:B:75:ASP:HB2	1.70	1.07
1:A:394:ARG:HH12	1:A:452:PRO:HB2	1.03	1.06
1:A:286:VAL:HB	1:A:735:LYS:HE3	1.31	1.06
1:A:396:THR:CG2	1:A:397:VAL:H	1.66	1.06
1:A:601:ILE:HG13	1:A:602:ASP:H	0.94	1.06
1:A:363:LYS:HE3	1:A:773:GLN:HE21	0.95	1.06
1:A:841:MET:HE2	1:A:841:MET:HA	1.37	1.06
1:A:283:ALA:O	1:A:286:VAL:HG23	1.55	1.06
1:A:723:VAL:HG23	1:A:737:ALA:HB2	1.38	1.06
1:A:884:GLN:HG2	2:B:73:TYR:HD2	1.15	1.06
1:A:114:TRP:CZ3	1:A:146:ILE:HG12	1.91	1.06
1:A:446:GLN:HB2	1:A:449:VAL:HG22	1.37	1.06
1:A:567:LEU:HD12	1:A:592:LEU:CD2	1.85	1.05
1:A:601:ILE:HG13	1:A:602:ASP:N	1.63	1.05
1:A:651:GLU:O	1:A:654:ALA:CB	2.04	1.05
1:A:386:LYS:HD2	1:A:636:ILE:HD12	1.37	1.05
1:A:752:LYS:HG3	1:A:758:ILE:CD1	1.86	1.05
1:A:923:GLN:HG2	2:B:76:GLN:HG2	1.09	1.05
1:A:905:GLN:O	2:B:83:THR:HG21	1.53	1.05
1:A:994:ARG:HD3	2:B:73:TYR:CE1	1.92	1.05
1:A:923:GLN:HG2	2:B:76:GLN:CG	1.85	1.04
1:A:601:ILE:CG1	1:A:602:ASP:H	1.67	1.04
1:A:905:GLN:CG	2:B:278:TYR:CD2	2.40	1.04
1:A:903:HIS:HB2	2:B:88:VAL:C	1.80	1.04
1:A:360:LEU:HD13	1:A:363:LYS:HD2	1.35	1.04
1:A:360:LEU:HD11	1:A:773:GLN:HG3	1.08	1.03
1:A:483:PHE:HE2	1:A:504:LEU:HD12	1.16	1.03
1:A:913:GLN:CB	2:B:185:ARG:O	2.06	1.03
2:B:126:GLU:HG3	2:B:127:GLY:H	1.19	1.02
2:B:254:ARG:HD3	2:B:255:ASN:HD22	1.22	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:397:VAL:CG1	1:A:398:SER:H	1.72	1.02
1:A:377:GLY:HA3	1:A:774:GLY:O	1.59	1.02
1:A:511:ARG:NH1	1:A:511:ARG:HB3	1.74	1.01
1:A:887:TRP:HH2	1:A:907:LEU:HG	1.22	1.01
1:A:922:TYR:CD2	1:A:991:MET:CE	2.44	1.01
1:A:339:ALA:HB1	1:A:796:LEU:HD12	1.39	1.00
1:A:360:LEU:HD11	1:A:773:GLN:CG	1.91	1.00
1:A:903:HIS:HD2	1:A:904:LEU:N	1.58	1.00
1:A:315:PHE:CE2	1:A:800:LEU:HD22	1.96	1.00
1:A:896:ARG:O	1:A:900:GLU:HG2	1.61	1.00
1:A:915:TRP:CZ2	2:B:77:LEU:HB2	1.96	1.00
1:A:922:TYR:OH	2:B:275:HIS:HE1	1.43	1.00
1:A:690:ALA:O	1:A:693:THR:HG22	1.60	1.00
1:A:905:GLN:C	2:B:83:THR:HG21	1.84	1.00
1:A:1011:TYR:CZ	2:B:47:PHE:CE1	2.48	0.99
1:A:923:GLN:CG	2:B:76:GLN:CG	2.39	0.99
1:A:657:LEU:O	1:A:658:ARG:HG3	1.60	0.99
1:A:901:ASN:HB3	1:A:904:LEU:HD11	1.00	0.99
1:A:564:PHE:HE1	1:A:598:VAL:HG12	1.26	0.99
1:A:602:ASP:OD2	1:A:636:ILE:HD11	1.63	0.99
1:A:693:THR:HG23	1:A:694:HIS:ND1	1.75	0.99
1:A:537:LEU:HD12	1:A:538:PRO:HD2	1.44	0.98
1:A:905:GLN:HG2	2:B:83:THR:CG2	1.94	0.98
1:A:905:GLN:O	2:B:83:THR:CG2	2.11	0.98
1:A:254:PHE:CE2	1:A:276:ILE:HD11	1.98	0.98
1:A:567:LEU:HD12	1:A:592:LEU:HD23	1.45	0.98
1:A:869:ILE:HG12	2:B:51:MET:HE2	1.47	0.97
1:A:752:LYS:HG3	1:A:758:ILE:HD11	1.45	0.97
1:A:376:LEU:HD22	1:A:770:GLY:C	1.89	0.97
1:A:905:GLN:C	2:B:83:THR:CG2	2.37	0.97
1:A:994:ARG:HD3	2:B:73:TYR:CZ	2.00	0.97
1:A:391:THR:HA	1:A:604:PRO:HA	1.43	0.97
1:A:994:ARG:CZ	2:B:73:TYR:CD1	2.47	0.97
1:A:399:HIS:HB3	1:A:407:HIS:O	1.64	0.96
1:A:69:THR:HG23	1:A:70:LYS:N	1.80	0.96
1:A:1007:LEU:CD2	2:B:54:ILE:HG21	1.96	0.96
1:A:994:ARG:CZ	2:B:73:TYR:CG	2.48	0.96
1:A:93:ARG:HH21	1:A:285:GLY:HA3	1.27	0.96
1:A:483:PHE:CE2	1:A:504:LEU:HD12	2.00	0.96
1:A:398:SER:CA	1:A:600:MET:HA	1.96	0.95
1:A:552:LEU:CD2	1:A:552:LEU:H	1.78	0.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:79:GLU:O	1:A:79:GLU:CD	2.09	0.95
1:A:487:CYS:SG	1:A:580:PHE:HB2	2.06	0.95
1:A:786:ALA:HB3	1:A:946:ARG:HD2	1.46	0.95
1:A:363:LYS:CE	1:A:773:GLN:NE2	2.29	0.95
1:A:286:VAL:CB	1:A:735:LYS:HE3	1.97	0.95
1:A:479:TYR:HA	1:A:482:ARG:HD3	1.49	0.95
1:A:57:VAL:CG2	1:A:215:LEU:HD23	1.95	0.94
1:A:479:TYR:HA	1:A:482:ARG:CD	1.97	0.94
1:A:924:GLN:HG2	1:A:928:TYR:CE2	2.02	0.94
1:A:45:LYS:NZ	1:A:281:SER:CB	2.30	0.94
1:A:903:HIS:C	1:A:903:HIS:CD2	2.45	0.94
1:A:109:LEU:HG	1:A:346:LEU:HD22	1.50	0.94
2:B:287:LYS:CE	2:B:289:GLN:HE21	1.79	0.94
1:A:1016:LYS:O	1:A:1019:VAL:HG22	1.66	0.94
1:A:397:VAL:HG12	1:A:398:SER:N	1.81	0.93
1:A:903:HIS:CD2	1:A:904:LEU:N	2.36	0.93
2:B:240:TYR:O	2:B:240:TYR:HD1	1.40	0.93
1:A:360:LEU:CD1	1:A:773:GLN:HG3	1.98	0.93
1:A:814:ILE:HD11	1:A:988:PHE:CD1	2.03	0.93
2:B:249:LEU:HD12	2:B:286:LEU:HD12	1.49	0.92
1:A:57:VAL:HG21	1:A:215:LEU:CD2	1.98	0.92
1:A:72:LEU:CD1	1:A:198:ASP:HA	1.99	0.92
1:A:397:VAL:CG1	1:A:398:SER:N	2.28	0.92
1:A:775:ARG:CD	1:A:840:ILE:HG22	1.99	0.92
1:A:914:GLU:O	2:B:184:ASN:CB	2.18	0.92
1:A:939:GLN:O	1:A:943:VAL:HG23	1.69	0.92
1:A:394:ARG:HH12	1:A:452:PRO:CB	1.83	0.92
1:A:679:LEU:O	1:A:679:LEU:CD2	2.17	0.92
1:A:339:ALA:HB1	1:A:796:LEU:CD1	1.98	0.92
1:A:925:TYR:HA	1:A:928:TYR:HD2	1.34	0.92
1:A:48:MET:HE1	1:A:246:LEU:CD1	1.99	0.91
1:A:363:LYS:CE	1:A:773:GLN:HE21	1.81	0.91
1:A:166:ILE:HD12	1:A:753:ASN:CB	2.01	0.91
1:A:381:VAL:CG1	1:A:721:VAL:HG12	2.00	0.91
1:A:433:VAL:HG23	1:A:515:VAL:HB	1.53	0.91
1:A:913:GLN:HE22	2:B:77:LEU:CD2	1.77	0.91
1:A:397:VAL:HG13	1:A:398:SER:H	1.36	0.90
1:A:864:PHE:HD1	1:A:865:GLN:HG3	1.35	0.90
1:A:189:ILE:HD11	1:A:194:LEU:CD2	2.01	0.90
1:A:994:ARG:HH21	2:B:75:ASP:HB2	1.36	0.90
1:A:922:TYR:CE2	1:A:991:MET:CE	2.55	0.90

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:421:ASP:C	1:A:421:ASP:OD1	2.15	0.90
1:A:254:PHE:CD2	1:A:276:ILE:HD11	2.07	0.89
1:A:286:VAL:CB	1:A:735:LYS:CE	2.47	0.89
1:A:618:ALA:HB3	1:A:620:ILE:HD12	1.54	0.89
1:A:814:ILE:HD11	1:A:988:PHE:HD1	1.37	0.89
1:A:169:SER:CB	1:A:753:ASN:HD21	1.77	0.89
1:A:171:LYS:O	1:A:173:LEU:N	2.03	0.89
1:A:398:SER:HB2	1:A:600:MET:HA	0.94	0.89
1:A:858:LEU:O	1:A:858:LEU:HD13	1.71	0.89
1:A:913:GLN:HE21	2:B:77:LEU:HD22	1.36	0.89
2:B:126:GLU:HG3	2:B:127:GLY:N	1.79	0.89
1:A:166:ILE:CD1	1:A:753:ASN:HB2	2.02	0.89
2:B:45:VAL:O	2:B:49:VAL:HB	1.71	0.89
1:A:166:ILE:HA	1:A:753:ASN:ND2	1.88	0.89
1:A:212:ILE:HD11	1:A:265:GLY:C	1.98	0.89
1:A:309:ILE:HG23	1:A:310:LEU:N	1.85	0.89
2:B:287:LYS:HE2	2:B:289:GLN:NE2	1.88	0.89
1:A:120:CYS:HB2	1:A:142:ALA:HB2	1.54	0.88
1:A:65:GLN:N	1:A:65:GLN:HE21	1.67	0.88
1:A:396:THR:CG2	1:A:397:VAL:N	2.24	0.88
1:A:994:ARG:NH1	2:B:73:TYR:CD1	2.40	0.88
1:A:905:GLN:HB2	2:B:278:TYR:CD2	2.08	0.88
2:B:88:VAL:HG21	2:B:284:PHE:CD1	2.09	0.88
1:A:905:GLN:CB	2:B:83:THR:HG22	2.03	0.88
1:A:324:TYR:CD1	1:A:328:ARG:HG2	2.07	0.88
1:A:169:SER:HB2	1:A:753:ASN:ND2	1.88	0.88
1:A:113:MET:HE1	1:A:148:VAL:HB	1.55	0.88
1:A:587:PHE:HB2	1:A:588:PRO:HD2	1.53	0.88
1:A:65:GLN:NE2	1:A:65:GLN:H	1.60	0.88
1:A:166:ILE:HA	1:A:753:ASN:CB	2.04	0.88
1:A:230:GLU:OE1	1:A:230:GLU:HA	1.74	0.88
1:A:1015:ARG:O	1:A:1019:VAL:HG13	1.73	0.88
1:A:169:SER:OG	1:A:749:ASP:CB	2.21	0.87
1:A:216:GLN:HG2	1:A:264:GLN:HB2	1.54	0.87
2:B:288:ILE:O	2:B:288:ILE:CG2	2.21	0.87
1:A:857:PRO:HB3	1:A:1030:GLU:O	1.74	0.87
1:A:286:VAL:CG1	1:A:735:LYS:HE3	2.05	0.87
1:A:791:LYS:HD2	1:A:819:ILE:CG2	2.04	0.87
1:A:905:GLN:CB	2:B:278:TYR:CD2	2.57	0.87
1:A:57:VAL:HG22	1:A:215:LEU:HD23	1.57	0.87
1:A:349:VAL:O	1:A:353:LEU:HD13	1.74	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:442:PHE:CD1	1:A:454:ARG:HD2	2.10	0.87
1:A:922:TYR:CE2	1:A:991:MET:HE1	2.10	0.87
1:A:396:THR:HG22	1:A:397:VAL:H	1.20	0.86
1:A:943:VAL:CG1	1:A:964:LEU:HD11	2.04	0.86
1:A:574:TYR:HD1	1:A:578:TYR:CE2	1.93	0.86
1:A:146:ILE:O	1:A:149:VAL:HG22	1.76	0.86
1:A:212:ILE:CG2	1:A:252:ALA:HB3	2.05	0.86
1:A:72:LEU:HD13	1:A:198:ASP:CA	2.04	0.86
1:A:398:SER:CB	1:A:600:MET:C	2.27	0.86
1:A:784:SER:HA	1:A:831:LEU:HD22	1.58	0.86
2:B:68:PRO:HD2	2:B:69:TYR:H	1.40	0.86
1:A:705:GLN:O	1:A:709:VAL:HG23	1.74	0.86
1:A:489:ILE:HG12	1:A:582:VAL:HG13	1.55	0.85
1:A:903:HIS:HD2	1:A:904:LEU:CA	1.88	0.85
1:A:922:TYR:CD2	1:A:991:MET:HE1	2.10	0.85
1:A:332:PHE:O	1:A:336:ILE:HG13	1.77	0.85
1:A:435:THR:HG23	1:A:436:LEU:CD1	2.07	0.85
1:A:166:ILE:HA	1:A:753:ASN:CG	2.00	0.85
1:A:282:LEU:HG	1:A:282:LEU:O	1.75	0.85
1:A:856:GLU:HG2	1:A:857:PRO:HD3	1.59	0.85
1:A:1019:VAL:HB	1:A:1028:ASP:OD1	1.77	0.85
1:A:112:LEU:HD21	1:A:341:VAL:HG12	1.56	0.85
1:A:446:GLN:CB	1:A:449:VAL:HG22	2.06	0.85
1:A:682:MET:SD	1:A:686:GLU:HG2	2.17	0.85
1:A:114:TRP:HZ3	1:A:146:ILE:HG12	1.38	0.84
1:A:119:ILE:HG23	1:A:334:MET:HE2	0.89	0.84
1:A:169:SER:HB2	1:A:753:ASN:HD21	1.40	0.84
2:B:84:LEU:HB3	2:B:86:PRO:HD2	1.58	0.84
1:A:48:MET:HE1	1:A:246:LEU:HG	1.59	0.84
1:A:765:ALA:O	1:A:768:VAL:HG12	1.77	0.84
1:A:315:PHE:CD2	1:A:800:LEU:HD22	2.11	0.84
2:B:186:ILE:HG23	2:B:189:PHE:HB3	1.59	0.84
1:A:574:TYR:HD1	1:A:578:TYR:CD2	1.96	0.84
1:A:752:LYS:HG3	1:A:758:ILE:HD12	1.60	0.84
1:A:212:ILE:HG22	1:A:252:ALA:HB3	1.58	0.84
1:A:1011:TYR:O	1:A:1014:ILE:HG22	1.76	0.84
2:B:240:TYR:CD1	2:B:240:TYR:C	2.55	0.84
1:A:552:LEU:HD23	1:A:552:LEU:N	1.91	0.84
1:A:117:ALA:HA	1:A:145:LEU:HD12	1.59	0.83
1:A:291:THR:O	1:A:295:ILE:HG13	1.76	0.83
1:A:463:THR:OG1	1:A:467:LYS:HE3	1.77	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:667:LYS:HZ3	1:A:667:LYS:HA	1.43	0.83
1:A:446:GLN:HB2	1:A:449:VAL:CG2	2.07	0.83
1:A:965:VAL:O	1:A:968:ILE:HG22	1.79	0.83
1:A:670:ARG:HE	1:A:695:PRO:HG2	1.44	0.83
1:A:723:VAL:CG2	1:A:737:ALA:HB2	2.08	0.83
1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLN:HE21	1.85	0.83
1:A:207:ARG:CG	1:A:257:MET:HG3	2.07	0.83
1:A:947:LYS:HD2	1:A:964:LEU:HD22	1.59	0.83
1:A:693:THR:CG2	1:A:694:HIS:ND1	2.41	0.83
2:B:249:LEU:HD12	2:B:286:LEU:CD1	2.08	0.83
1:A:124:PHE:HA	1:A:127:GLN:HG2	1.60	0.83
2:B:77:LEU:HG	2:B:186:ILE:HD12	1.58	0.83
2:B:83:THR:C	2:B:84:LEU:HD12	2.03	0.83
1:A:739:ILE:HD11	1:A:757:MET:SD	2.19	0.83
1:A:760:LEU:HD22	1:A:760:LEU:H	1.43	0.83
1:A:169:SER:HB3	1:A:753:ASN:HD22	1.40	0.82
1:A:386:LYS:HD2	1:A:636:ILE:CD1	2.09	0.82
1:A:841:MET:HE2	1:A:841:MET:CA	2.10	0.82
1:A:915:TRP:CH2	2:B:77:LEU:HB2	2.13	0.82
1:A:1002:MET:HB3	1:A:1003:PRO:HD3	1.61	0.82
2:B:32:ARG:HH11	2:B:32:ARG:CG	1.89	0.82
1:A:690:ALA:C	1:A:693:THR:HG22	2.04	0.82
1:A:1015:ARG:HD2	1:A:1031:LEU:CD2	2.08	0.82
1:A:648:GLU:HB3	1:A:652:ASP:OD1	1.79	0.82
1:A:564:PHE:HE1	1:A:598:VAL:CG1	1.92	0.82
1:A:90:ARG:NH1	1:A:272:ASP:OD2	2.12	0.81
1:A:795:GLU:HB3	1:A:816:ILE:HD12	1.61	0.81
1:A:913:GLN:HE22	2:B:77:LEU:HD22	0.91	0.81
1:A:170:PHE:O	1:A:173:LEU:HD12	1.76	0.81
1:A:166:ILE:CD1	1:A:753:ASN:CB	2.59	0.81
1:A:548:GLN:O	1:A:552:LEU:HD21	1.77	0.81
1:A:922:TYR:OH	2:B:275:HIS:CE1	2.33	0.81
1:A:495:ASN:HB3	1:A:497:PHE:CE2	2.14	0.81
1:A:48:MET:HE1	1:A:246:LEU:CG	2.11	0.81
1:A:45:LYS:HZ3	1:A:281:SER:HB2	1.43	0.81
1:A:97:GLU:HB3	1:A:99:VAL:CG2	2.10	0.81
1:A:661:VAL:CG2	1:A:662:ASP:N	2.43	0.81
1:A:905:GLN:HG3	2:B:278:TYR:HB3	1.61	0.81
1:A:79:GLU:OE1	1:A:79:GLU:HA	1.79	0.81
1:A:181:ILE:HG13	1:A:199:LEU:HD23	1.61	0.81
1:A:315:PHE:HA	1:A:318:VAL:HG22	1.62	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:905:GLN:CB	2:B:278:TYR:HD2	1.93	0.81
2:B:282:VAL:HG13	2:B:284:PHE:CE2	2.17	0.80
1:A:119:ILE:CG2	1:A:334:MET:HB3	2.11	0.80
1:A:623:ILE:HG12	1:A:697:MET:SD	2.20	0.80
1:A:53:HIS:HB3	1:A:251:ILE:HD11	1.63	0.80
1:A:381:VAL:HG23	1:A:621:ARG:O	1.82	0.80
1:A:610:ASP:OD1	1:A:614:LYS:HE3	1.80	0.80
1:A:759:LEU:CD1	1:A:766:SER:HB2	2.11	0.80
1:A:791:LYS:HD2	1:A:819:ILE:HG21	1.62	0.80
2:B:68:PRO:HG2	2:B:69:TYR:CZ	2.16	0.80
1:A:442:PHE:CZ	1:A:466:LEU:HD13	2.16	0.80
1:A:943:VAL:HG13	1:A:964:LEU:HD11	1.63	0.80
1:A:92:PRO:HD3	1:A:171:LYS:HE3	1.62	0.80
1:A:731:SER:HB2	1:A:732:PRO:HD3	1.64	0.80
1:A:398:SER:N	1:A:600:MET:HA	1.96	0.80
2:B:82:VAL:HG13	2:B:280:GLY:HA2	1.62	0.80
2:B:82:VAL:HG22	2:B:281:LYS:N	1.97	0.80
1:A:574:TYR:CD1	1:A:578:TYR:CE2	2.70	0.79
1:A:841:MET:HA	1:A:841:MET:CE	2.06	0.79
1:A:901:ASN:HB2	1:A:904:LEU:HD11	1.64	0.79
1:A:322:ILE:O	1:A:322:ILE:HG13	1.81	0.79
2:B:85:ARG:HB3	2:B:180:ILE:HG13	1.63	0.79
1:A:905:GLN:HB2	2:B:278:TYR:CE2	2.18	0.79
1:A:994:ARG:CD	2:B:73:TYR:CE1	2.66	0.79
1:A:491:PHE:HZ	1:A:496:LYS:HE2	1.48	0.79
1:A:826:PHE:HB2	1:A:827:PRO:HD3	1.64	0.79
1:A:255:SER:HB2	1:A:276:ILE:HG12	1.65	0.79
1:A:761:ASP:OD1	1:A:763:ASN:HB2	1.83	0.79
1:A:917:PHE:HB3	2:B:278:TYR:CE1	2.18	0.79
1:A:807:VAL:HG22	1:A:808:PRO:HD2	1.64	0.79
1:A:947:LYS:HD2	1:A:964:LEU:CD2	2.11	0.79
1:A:57:VAL:CG2	1:A:215:LEU:CD2	2.58	0.78
1:A:674:ILE:HG23	1:A:674:ILE:O	1.83	0.78
1:A:877:ASP:O	1:A:880:THR:HG22	1.84	0.78
1:A:991:MET:HG3	1:A:992:PRO:HD2	1.65	0.78
1:A:598:VAL:O	1:A:598:VAL:HG13	1.83	0.78
1:A:173:LEU:N	1:A:173:LEU:HD12	1.98	0.78
2:B:68:PRO:HG2	2:B:69:TYR:CE2	2.18	0.78
1:A:915:TRP:HZ3	2:B:76:GLN:HG3	1.49	0.78
1:A:441:ALA:O	1:A:456:VAL:HG13	1.84	0.78
1:A:511:ARG:HB3	1:A:511:ARG:HH11	1.47	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:479:TYR:O	1:A:482:ARG:HG2	1.83	0.78
1:A:266:LEU:HD23	1:A:267:VAL:N	1.99	0.78
1:A:860:ALA:O	1:A:864:PHE:HB3	1.84	0.78
1:A:481:GLU:O	1:A:484:PRO:HD3	1.84	0.78
1:A:887:TRP:CH2	1:A:907:LEU:HG	2.14	0.78
1:A:994:ARG:HH21	2:B:75:ASP:CB	1.95	0.78
1:A:45:LYS:HZ2	1:A:281:SER:HB2	1.47	0.77
1:A:674:ILE:HG13	1:A:678:GLN:CD	2.09	0.77
1:A:667:LYS:HA	1:A:667:LYS:NZ	1.98	0.77
1:A:962:ARG:O	1:A:965:VAL:HG12	1.84	0.77
2:B:77:LEU:HD23	2:B:186:ILE:HG13	1.66	0.77
1:A:657:LEU:O	1:A:658:ARG:CG	2.32	0.77
1:A:399:HIS:CD2	1:A:408:SER:HA	2.19	0.77
1:A:511:ARG:HG2	1:A:512:HIS:H	1.49	0.77
1:A:918:GLY:HA3	2:B:276:ASP:HB3	1.66	0.77
1:A:891:LEU:O	1:A:895:LEU:CD2	2.32	0.77
1:A:903:HIS:HD2	1:A:904:LEU:HA	1.49	0.77
1:A:891:LEU:HG	1:A:910:SER:OG	1.85	0.77
1:A:891:LEU:O	1:A:895:LEU:HD23	1.85	0.77
1:A:303:ILE:O	1:A:307:LEU:HD23	1.84	0.76
1:A:443:LYS:HE2	1:A:457:ILE:CG1	2.15	0.76
1:A:791:LYS:HG3	1:A:935:ILE:HG21	1.65	0.76
2:B:32:ARG:HH11	2:B:32:ARG:HG3	1.49	0.76
1:A:146:ILE:O	1:A:149:VAL:CG2	2.34	0.76
1:A:847:ASN:HD22	1:A:849:LYS:H	1.33	0.76
2:B:136:TYR:CE1	2:B:190:LEU:HB3	2.20	0.76
1:A:615:CYS:O	1:A:618:ALA:HB3	1.84	0.76
2:B:259:VAL:HG23	2:B:259:VAL:O	1.86	0.76
1:A:97:GLU:CB	1:A:99:VAL:HG22	2.14	0.76
1:A:934:SER:HA	1:A:1001:PRO:HG3	1.66	0.76
1:A:392:GLN:OE1	1:A:413:GLU:HB3	1.86	0.76
1:A:411:THR:HG21	1:A:601:ILE:CG2	2.16	0.76
1:A:625:VAL:HG11	1:A:707:LYS:HG3	1.66	0.76
1:A:786:ALA:HB1	1:A:946:ARG:NH1	2.01	0.76
1:A:978:LEU:HD21	1:A:990:PHE:CD2	2.20	0.76
1:A:45:LYS:HZ2	1:A:281:SER:CB	1.96	0.76
1:A:574:TYR:OH	1:A:588:PRO:HD3	1.85	0.76
1:A:650:VAL:CG1	1:A:651:GLU:N	2.48	0.76
1:A:905:GLN:HG3	2:B:278:TYR:CG	2.20	0.76
2:B:213:LEU:HD23	2:B:213:LEU:O	1.85	0.76
1:A:173:LEU:O	1:A:173:LEU:HD13	1.86	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:564:PHE:CE1	1:A:598:VAL:HG12	2.17	0.76
1:A:223:ASP:O	1:A:256:THR:HG23	1.86	0.76
1:A:397:VAL:HG21	1:A:468:PHE:HB2	1.66	0.76
1:A:380:SER:O	1:A:620:ILE:HG23	1.85	0.76
2:B:126:GLU:HA	2:B:153:LYS:HZ1	1.50	0.76
1:A:166:ILE:HA	1:A:753:ASN:HB3	1.67	0.76
2:B:189:PHE:HZ	2:B:268:HIS:HB3	1.48	0.76
1:A:56:SER:CB	1:A:59:GLU:OE2	2.35	0.75
1:A:524:LEU:O	1:A:524:LEU:HD13	1.85	0.75
1:A:916:THR:HG22	1:A:919:GLN:HG3	1.67	0.75
1:A:922:TYR:CZ	1:A:991:MET:HE1	2.20	0.75
1:A:242:HIS:HD2	1:A:244:SER:H	1.33	0.75
1:A:165:ASN:O	1:A:753:ASN:CG	2.29	0.75
1:A:250:ASN:C	1:A:251:ILE:HD12	2.11	0.75
1:A:377:GLY:O	1:A:378:SER:OG	2.03	0.75
1:A:427:TRP:HH2	1:A:468:PHE:HE2	1.35	0.75
1:A:503:THR:HG23	1:A:503:THR:O	1.86	0.75
2:B:148:THR:HG23	2:B:148:THR:O	1.84	0.75
1:A:430:LEU:O	1:A:433:VAL:HG12	1.86	0.75
1:A:286:VAL:CB	1:A:735:LYS:HE2	2.13	0.75
1:A:345:LEU:O	1:A:348:THR:HG22	1.85	0.75
1:A:443:LYS:HE2	1:A:457:ILE:HD11	1.67	0.75
1:A:916:THR:HG22	1:A:919:GLN:CG	2.17	0.75
1:A:481:GLU:HA	1:A:481:GLU:OE1	1.86	0.75
1:A:322:ILE:HG23	1:A:324:TYR:CD2	2.21	0.75
1:A:410:ASP:HB3	1:A:415:GLN:OE1	1.85	0.75
1:A:917:PHE:CZ	1:A:921:LEU:HD11	2.21	0.75
1:A:1015:ARG:HD2	1:A:1031:LEU:HD23	1.69	0.75
1:A:254:PHE:HE2	1:A:276:ILE:HD11	1.52	0.74
1:A:1012:ASP:OD2	1:A:1016:LYS:HE3	1.87	0.74
2:B:272:ASP:HB3	2:B:276:ASP:OD1	1.86	0.74
1:A:793:ILE:HB	1:A:794:PRO:HD3	1.69	0.74
1:A:947:LYS:CD	1:A:964:LEU:HD22	2.16	0.74
1:A:994:ARG:CD	2:B:73:TYR:CZ	2.71	0.74
2:B:143:LEU:HB3	2:B:145:PRO:HD2	1.69	0.74
1:A:181:ILE:CD1	1:A:186:LYS:HB3	2.17	0.74
1:A:70:LYS:HD3	1:A:184:GLY:CA	2.17	0.74
1:A:93:ARG:NH2	1:A:285:GLY:HA3	2.02	0.74
1:A:905:GLN:CD	2:B:278:TYR:HD2	1.95	0.74
1:A:495:ASN:HB3	1:A:497:PHE:CD2	2.22	0.74
1:A:535:GLN:HG2	1:A:536:GLU:O	1.87	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:309:ILE:HG23	1:A:310:LEU:H	1.52	0.74
1:A:381:VAL:HG13	1:A:721:VAL:HG12	1.70	0.74
1:A:791:LYS:HE3	1:A:939:GLN:NE2	2.01	0.74
1:A:940:ILE:HD13	1:A:968:ILE:HG13	1.70	0.74
1:A:69:THR:CG2	1:A:70:LYS:N	2.50	0.74
1:A:820:GLU:HG3	1:A:821:LEU:CD1	2.18	0.74
1:A:917:PHE:CE2	1:A:921:LEU:HD11	2.22	0.74
1:A:993:ILE:HD13	1:A:993:ILE:H	1.51	0.74
1:A:311:PHE:O	1:A:314:THR:HG22	1.86	0.74
1:A:552:LEU:CD2	1:A:552:LEU:N	2.44	0.74
1:A:905:GLN:C	2:B:83:THR:HG22	2.13	0.74
1:A:903:HIS:HD2	1:A:903:HIS:C	1.90	0.73
1:A:887:TRP:HH2	1:A:907:LEU:CG	1.98	0.73
2:B:68:PRO:HD2	2:B:69:TYR:CD2	2.24	0.73
1:A:435:THR:HG23	1:A:436:LEU:HD12	1.69	0.73
1:A:53:HIS:H	1:A:53:HIS:CD2	2.07	0.73
1:A:356:THR:HG21	1:A:777:ILE:HD12	1.69	0.73
1:A:618:ALA:CB	1:A:620:ILE:HD12	2.18	0.73
1:A:978:LEU:HD21	1:A:990:PHE:CZ	2.23	0.73
1:A:446:GLN:OE1	1:A:454:ARG:HB2	1.89	0.73
1:A:864:PHE:CD1	1:A:865:GLN:HG3	2.21	0.73
1:A:146:ILE:HD13	1:A:146:ILE:C	2.14	0.73
1:A:537:LEU:CD1	1:A:538:PRO:HD2	2.19	0.73
1:A:501:ILE:HD13	1:A:580:PHE:CD2	2.23	0.73
1:A:708:LEU:O	1:A:708:LEU:HD13	1.88	0.73
1:A:898:GLN:O	1:A:904:LEU:HD13	1.89	0.73
1:A:915:TRP:CH2	1:A:923:GLN:NE2	2.56	0.73
1:A:916:THR:HG23	1:A:919:GLN:H	1.53	0.73
1:A:507:PRO:C	1:A:510:PRO:HD3	2.14	0.72
2:B:261:VAL:HG22	2:B:283:GLU:OE1	1.89	0.72
1:A:567:LEU:HB2	1:A:592:LEU:HD22	1.71	0.72
1:A:994:ARG:NH1	2:B:73:TYR:HB3	2.04	0.72
2:B:139:GLN:HB2	2:B:232:TYR:CZ	2.24	0.72
1:A:202:MET:HE2	1:A:220:ARG:HH12	1.53	0.72
1:A:820:GLU:HG3	1:A:821:LEU:HD12	1.70	0.72
2:B:85:ARG:CB	2:B:180:ILE:HG13	2.19	0.72
1:A:147:ALA:O	1:A:150:VAL:HG12	1.87	0.72
1:A:394:ARG:NH1	1:A:452:PRO:CB	2.44	0.72
1:A:564:PHE:CE1	1:A:598:VAL:CG1	2.71	0.72
2:B:68:PRO:HD2	2:B:69:TYR:N	2.03	0.72
2:B:77:LEU:HD23	2:B:186:ILE:CG1	2.19	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:827:PRO:HG2	1:A:971:GLN:NE2	2.04	0.72
1:A:933:ILE:HD11	1:A:979:CYS:SG	2.29	0.72
1:A:316:PHE:CD1	1:A:329:ALA:HB1	2.24	0.72
1:A:442:PHE:CE2	1:A:466:LEU:HD11	2.25	0.72
1:A:818:PHE:O	1:A:822:CYS:HB2	1.89	0.72
1:A:994:ARG:NH2	2:B:75:ASP:CB	2.51	0.72
1:A:434:LEU:HD23	1:A:564:PHE:CE2	2.24	0.72
1:A:855:ASN:HD22	1:A:857:PRO:CD	2.02	0.72
1:A:905:GLN:O	1:A:916:THR:HA	1.89	0.72
1:A:927:CYS:O	1:A:930:VAL:HG22	1.88	0.72
1:A:69:THR:HG23	1:A:70:LYS:H	1.54	0.72
1:A:175:PRO:HA	1:A:207:ARG:HH21	1.54	0.72
1:A:171:LYS:C	1:A:173:LEU:H	1.98	0.71
1:A:760:LEU:HD22	1:A:760:LEU:N	2.05	0.71
1:A:815:THR:CG2	1:A:932:PHE:HB2	2.19	0.71
1:A:807:VAL:O	1:A:896:ARG:HG2	1.90	0.71
1:A:53:HIS:NE2	1:A:245:PRO:HG3	2.04	0.71
1:A:359:ARG:O	1:A:362:SER:HB2	1.91	0.71
1:A:486:VAL:HG22	1:A:501:ILE:O	1.90	0.71
1:A:922:TYR:CG	1:A:991:MET:HE1	2.25	0.71
1:A:652:ASP:O	1:A:655:ALA:N	2.18	0.71
1:A:175:PRO:HA	1:A:207:ARG:NH2	2.05	0.71
1:A:923:GLN:CD	2:B:76:GLN:HG2	2.14	0.71
1:A:65:GLN:NE2	1:A:65:GLN:CA	2.53	0.71
1:A:112:LEU:O	1:A:115:VAL:HG12	1.91	0.71
1:A:520:PRO:O	1:A:523:VAL:HG12	1.90	0.71
1:A:933:ILE:O	1:A:936:GLU:HG2	1.91	0.71
1:A:160:GLU:C	1:A:162:LYS:H	1.99	0.70
1:A:693:THR:HG23	1:A:694:HIS:CG	2.25	0.70
1:A:806:SER:HA	1:A:896:ARG:HD3	1.72	0.70
1:A:888:PHE:HB3	1:A:889:PRO:HD2	1.73	0.70
1:A:768:VAL:O	1:A:771:VAL:HG22	1.90	0.70
1:A:775:ARG:CD	1:A:840:ILE:HG23	2.19	0.70
1:A:916:THR:CG2	1:A:919:GLN:HG3	2.20	0.70
2:B:57:LEU:O	2:B:61:VAL:HG13	1.91	0.70
1:A:399:HIS:O	1:A:400:LEU:HD12	1.90	0.70
1:A:759:LEU:HD12	1:A:763:ASN:O	1.91	0.70
1:A:915:TRP:CZ3	2:B:76:GLN:HG3	2.27	0.70
1:A:97:GLU:CB	1:A:99:VAL:CG2	2.69	0.70
1:A:347:ALA:O	1:A:350:THR:HG22	1.91	0.70
1:A:905:GLN:HG3	2:B:278:TYR:CB	2.20	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:463:THR:O	1:A:467:LYS:HD3	1.91	0.70
2:B:41:SER:O	2:B:45:VAL:HG23	1.91	0.70
1:A:396:THR:HG23	1:A:397:VAL:H	1.55	0.70
1:A:315:PHE:HB2	1:A:336:ILE:CD1	2.21	0.70
1:A:869:ILE:HG12	2:B:51:MET:CE	2.20	0.70
1:A:1026:TRP:HE1	2:B:40:ILE:HD12	1.56	0.70
1:A:426:THR:HA	1:A:531:LEU:HD23	1.72	0.69
1:A:575:PRO:HB3	1:A:576:PRO:HD2	1.74	0.69
1:A:759:LEU:HD11	1:A:766:SER:HB2	1.74	0.69
1:A:775:ARG:HH11	1:A:840:ILE:C	1.96	0.69
1:A:791:LYS:CD	1:A:819:ILE:HG21	2.21	0.69
1:A:999:LEU:H	1:A:999:LEU:HD12	1.57	0.69
1:A:846:ARG:HB2	1:A:851:ASP:OD1	1.92	0.69
1:A:76:LEU:O	1:A:80:LEU:HD13	1.92	0.69
1:A:328:ARG:HG3	1:A:332:PHE:CE2	2.26	0.69
2:B:180:ILE:HD12	2:B:180:ILE:O	1.90	0.69
1:A:651:GLU:HA	1:A:654:ALA:HB2	1.74	0.69
1:A:817:LEU:HD23	1:A:820:GLU:OE2	1.91	0.69
1:A:435:THR:HG23	1:A:436:LEU:HD13	1.73	0.69
1:A:903:HIS:HE1	2:B:87:ASP:HB2	1.58	0.69
2:B:32:ARG:CG	2:B:32:ARG:NH1	2.51	0.69
1:A:167:ILE:O	1:A:171:LYS:HG2	1.92	0.69
1:A:614:LYS:O	1:A:617:THR:HG22	1.91	0.69
1:A:806:SER:HA	1:A:896:ARG:CD	2.23	0.69
1:A:216:GLN:CG	1:A:264:GLN:HB2	2.21	0.69
1:A:702:THR:HA	1:A:706:GLN:NE2	2.08	0.69
1:A:917:PHE:O	1:A:921:LEU:HG	1.93	0.69
1:A:940:ILE:HG12	1:A:968:ILE:HD12	1.74	0.69
1:A:109:LEU:CG	1:A:346:LEU:HD22	2.22	0.69
1:A:72:LEU:HD22	1:A:198:ASP:OD1	1.93	0.69
1:A:690:ALA:O	1:A:693:THR:CG2	2.38	0.69
1:A:937:MET:O	1:A:940:ILE:HG22	1.92	0.69
2:B:229:PHE:HB3	2:B:230:PRO:HA	1.74	0.69
1:A:309:ILE:O	1:A:309:ILE:HG12	1.93	0.69
1:A:442:PHE:CZ	1:A:466:LEU:CD1	2.76	0.69
1:A:811:LEU:HD23	1:A:816:ILE:HD11	1.73	0.69
1:A:443:LYS:HE2	1:A:457:ILE:CD1	2.23	0.68
1:A:460:ALA:O	1:A:463:THR:HG22	1.93	0.68
1:A:119:ILE:O	1:A:122:ILE:HG22	1.92	0.68
1:A:605:ARG:HB2	1:A:608:VAL:HG23	1.75	0.68
1:A:922:TYR:CD2	1:A:991:MET:HE3	2.28	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:312:GLY:C	1:A:333:PHE:HD1	2.02	0.68
1:A:761:ASP:O	1:A:762:ASP:HB2	1.93	0.68
1:A:791:LYS:CG	1:A:935:ILE:HG21	2.22	0.68
2:B:49:VAL:HG12	2:B:50:VAL:N	2.09	0.68
1:A:847:ASN:ND2	1:A:849:LYS:H	1.91	0.68
2:B:189:PHE:CZ	2:B:268:HIS:HB3	2.28	0.68
1:A:970:PHE:O	1:A:974:ILE:HG12	1.94	0.68
1:A:366:VAL:HG12	1:A:760:LEU:HD21	1.74	0.68
1:A:925:TYR:HA	1:A:928:TYR:CD2	2.25	0.68
1:A:253:PHE:CD1	1:A:275:ILE:HD13	2.28	0.68
1:A:833:TYR:CD1	1:A:963:ILE:HG21	2.29	0.68
1:A:122:ILE:HD13	1:A:126:ILE:HG12	1.75	0.68
1:A:315:PHE:HA	1:A:318:VAL:CG2	2.24	0.68
1:A:427:TRP:HH2	1:A:468:PHE:CE2	2.12	0.68
2:B:249:LEU:CD1	2:B:286:LEU:HD12	2.24	0.68
1:A:178:ALA:CB	1:A:194:LEU:HD11	2.24	0.67
1:A:723:VAL:HG23	1:A:737:ALA:CB	2.21	0.67
1:A:786:ALA:HB3	1:A:946:ARG:CD	2.23	0.67
1:A:309:ILE:CG2	1:A:310:LEU:N	2.55	0.67
1:A:915:TRP:CZ3	1:A:923:GLN:NE2	2.63	0.67
1:A:1003:PRO:O	1:A:1007:LEU:HD13	1.93	0.67
2:B:149:LYS:CD	2:B:232:TYR:CD2	2.78	0.67
1:A:53:HIS:HB3	1:A:251:ILE:CD1	2.25	0.67
2:B:139:GLN:HG2	2:B:149:LYS:HB3	1.75	0.67
1:A:87:ASN:ND2	1:A:271:GLY:H	1.91	0.67
1:A:661:VAL:HG23	1:A:662:ASP:N	2.08	0.67
1:A:923:GLN:NE2	2:B:76:GLN:HG2	2.08	0.67
1:A:531:LEU:HD11	1:A:534:GLY:O	1.93	0.67
1:A:693:THR:CG2	1:A:694:HIS:CE1	2.77	0.67
1:A:916:THR:CG2	1:A:919:GLN:H	2.08	0.67
1:A:64:TYR:C	1:A:65:GLN:NE2	2.45	0.67
1:A:294:ALA:O	1:A:297:ILE:HG12	1.93	0.67
1:A:487:CYS:SG	1:A:580:PHE:CB	2.81	0.67
1:A:793:ILE:H	1:A:793:ILE:HD12	1.59	0.67
1:A:887:TRP:CH2	1:A:907:LEU:CD2	2.78	0.67
1:A:896:ARG:HB2	1:A:897:PRO:HD3	1.76	0.67
1:A:994:ARG:NH2	2:B:73:TYR:HB3	2.09	0.67
2:B:149:LYS:HD3	2:B:232:TYR:CD2	2.30	0.67
2:B:176:LYS:HB3	2:B:249:LEU:O	1.94	0.67
2:B:178:CYS:SG	2:B:248:LYS:HE3	2.34	0.67
1:A:412:THR:HG22	1:A:413:GLU:N	2.10	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:903:HIS:CB	2:B:88:VAL:O	2.39	0.67
1:A:202:MET:HE1	1:A:212:ILE:HD13	1.76	0.67
2:B:49:VAL:HG12	2:B:50:VAL:H	1.59	0.67
1:A:56:SER:HB3	1:A:59:GLU:OE2	1.95	0.67
1:A:115:VAL:O	1:A:119:ILE:HG13	1.95	0.67
1:A:167:ILE:HG23	1:A:168:ALA:N	2.10	0.67
1:A:649:THR:HG23	1:A:652:ASP:H	1.59	0.67
2:B:283:GLU:O	2:B:284:PHE:CD1	2.47	0.67
1:A:48:MET:CE	1:A:246:LEU:HG	2.25	0.66
1:A:324:TYR:HD1	1:A:328:ARG:HG2	1.56	0.66
1:A:693:THR:HG21	1:A:694:HIS:CE1	2.31	0.66
1:A:877:ASP:OD1	1:A:930:VAL:HG23	1.95	0.66
1:A:81:LEU:HD23	1:A:81:LEU:O	1.93	0.66
1:A:785:ILE:O	1:A:788:THR:HG22	1.95	0.66
1:A:811:LEU:HD11	1:A:815:THR:HG21	1.78	0.66
1:A:901:ASN:CB	1:A:904:LEU:HD12	2.06	0.66
1:A:315:PHE:HB2	1:A:336:ILE:HD13	1.77	0.66
1:A:855:ASN:HD22	1:A:857:PRO:HD2	1.58	0.66
1:A:880:THR:HG23	1:A:997:TRP:CZ3	2.30	0.66
1:A:947:LYS:CE	1:A:964:LEU:HD22	2.24	0.66
1:A:312:GLY:C	1:A:333:PHE:CD1	2.74	0.66
1:A:443:LYS:HG3	1:A:455:ILE:CG2	2.16	0.66
1:A:657:LEU:O	1:A:658:ARG:CB	2.43	0.66
1:A:922:TYR:CZ	2:B:275:HIS:CE1	2.84	0.66
2:B:78:LYS:HG2	2:B:79:SER:N	2.09	0.66
1:A:353:LEU:C	1:A:370:LEU:HD11	2.20	0.66
1:A:726:ASP:OD1	1:A:743:MET:HG3	1.96	0.66
2:B:78:LYS:HD3	2:B:78:LYS:N	2.11	0.66
1:A:79:GLU:OE1	1:A:79:GLU:CA	2.37	0.66
1:A:399:HIS:CD2	1:A:408:SER:HB3	2.30	0.66
1:A:427:TRP:CH2	1:A:468:PHE:HE2	2.13	0.66
1:A:459:ASP:OD1	1:A:462:GLU:HB2	1.94	0.66
1:A:712:GLU:O	1:A:716:ARG:HG3	1.95	0.66
2:B:261:VAL:HG13	2:B:282:VAL:O	1.96	0.66
1:A:212:ILE:HD11	1:A:265:GLY:O	1.96	0.66
1:A:442:PHE:CE1	1:A:466:LEU:HD13	2.31	0.66
2:B:77:LEU:HD21	2:B:186:ILE:HB	1.78	0.66
1:A:315:PHE:CZ	1:A:800:LEU:HD13	2.31	0.65
1:A:316:PHE:CE1	1:A:329:ALA:HB3	2.31	0.65
1:A:623:ILE:HG12	1:A:697:MET:CG	2.26	0.65
1:A:786:ALA:HB1	1:A:946:ARG:CZ	2.27	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:791:LYS:CD	1:A:819:ILE:CG2	2.74	0.65
1:A:442:PHE:CE2	1:A:466:LEU:CD1	2.80	0.65
1:A:524:LEU:HD22	1:A:527:CYS:SG	2.36	0.65
1:A:212:ILE:CD1	1:A:265:GLY:C	2.69	0.65
1:A:360:LEU:HD13	1:A:363:LYS:CD	2.19	0.65
1:A:966:ILE:HG23	1:A:970:PHE:CE2	2.32	0.65
1:A:1014:ILE:HG23	1:A:1015:ARG:N	2.12	0.65
1:A:452:PRO:HG2	1:A:453:LYS:HD2	1.76	0.65
1:A:743:MET:HE3	1:A:762:ASP:HA	1.79	0.65
1:A:794:PRO:HG3	1:A:870:GLN:HB2	1.76	0.65
1:A:903:HIS:CD2	1:A:904:LEU:HA	2.32	0.65
1:A:522:ARG:O	1:A:526:ARG:HG3	1.96	0.65
1:A:752:LYS:NZ	1:A:758:ILE:HD12	2.10	0.65
1:A:491:PHE:CZ	1:A:496:LYS:HE2	2.30	0.65
1:A:1030:GLU:HB2	1:A:1031:LEU:HD12	1.78	0.65
1:A:122:ILE:HD13	1:A:122:ILE:O	1.96	0.65
1:A:200:VAL:HG12	1:A:202:MET:SD	2.36	0.65
1:A:181:ILE:CG1	1:A:199:LEU:HD23	2.26	0.65
1:A:791:LYS:CD	1:A:935:ILE:HG21	2.27	0.65
1:A:876:THR:HG21	1:A:1004:PHE:CZ	2.32	0.65
1:A:87:ASN:HA	1:A:270:THR:CG2	2.26	0.65
1:A:557:LEU:HD22	1:A:559:GLU:OE2	1.96	0.65
1:A:923:GLN:HG3	2:B:76:GLN:CG	2.24	0.65
1:A:443:LYS:CG	1:A:455:ILE:HG23	2.16	0.64
1:A:489:ILE:CG1	1:A:582:VAL:HG13	2.26	0.64
1:A:72:LEU:HD11	1:A:197:GLY:C	2.23	0.64
1:A:539:LEU:CD2	1:A:544:ARG:HG3	2.27	0.64
1:A:885:GLU:HG3	1:A:923:GLN:NE2	2.12	0.64
1:A:286:VAL:HG21	1:A:735:LYS:HG2	1.77	0.64
1:A:653:ILE:O	1:A:654:ALA:C	2.40	0.64
1:A:707:LYS:HZ3	1:A:730:ASP:HB3	1.61	0.64
1:A:207:ARG:HG2	1:A:257:MET:HG2	1.72	0.64
1:A:338:VAL:HG23	1:A:343:GLU:OE2	1.98	0.64
1:A:398:SER:CB	1:A:599:SER:C	2.45	0.64
1:A:1030:GLU:CD	2:B:40:ILE:HD11	2.22	0.64
2:B:213:LEU:HD21	2:B:249:LEU:HD22	1.80	0.64
1:A:116:ALA:HB3	1:A:145:LEU:HD13	1.79	0.64
1:A:124:PHE:CA	1:A:127:GLN:HG2	2.26	0.64
1:A:291:THR:HG22	1:A:292:PRO:N	2.11	0.64
1:A:775:ARG:HD3	1:A:840:ILE:HG23	1.77	0.64
1:A:869:ILE:CG1	2:B:51:MET:HE2	2.25	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:903:HIS:CE1	2:B:87:ASP:HB2	2.33	0.64
1:A:227:LEU:HD21	1:A:275:ILE:HD11	1.78	0.64
1:A:923:GLN:HE21	2:B:76:GLN:HG2	1.62	0.64
1:A:1014:ILE:CG2	1:A:1015:ARG:N	2.59	0.64
2:B:181:ILE:HG22	2:B:224:TYR:OH	1.97	0.64
1:A:284:SER:O	1:A:286:VAL:N	2.25	0.64
1:A:212:ILE:HD11	1:A:265:GLY:CA	2.27	0.64
1:A:381:VAL:HG22	1:A:382:ILE:N	2.10	0.64
1:A:559:GLU:CG	1:A:600:MET:O	2.34	0.64
2:B:54:ILE:O	2:B:57:LEU:HB3	1.97	0.64
1:A:752:LYS:HZ2	1:A:758:ILE:HD12	1.63	0.64
1:A:801:ILE:O	1:A:805:VAL:HG12	1.98	0.64
2:B:77:LEU:CG	2:B:186:ILE:HD12	2.26	0.64
1:A:308:ALA:HA	1:A:340:TYR:CD2	2.32	0.64
2:B:271:PHE:HB3	2:B:281:LYS:HE3	1.79	0.64
1:A:179:THR:HG23	1:A:179:THR:O	1.98	0.63
1:A:903:HIS:CD2	1:A:904:LEU:CA	2.78	0.63
2:B:130:ASN:OD1	2:B:153:LYS:HD2	1.97	0.63
1:A:442:PHE:CZ	1:A:466:LEU:HD22	2.34	0.63
1:A:858:LEU:HD13	1:A:858:LEU:C	2.24	0.63
1:A:994:ARG:HH22	2:B:73:TYR:HB3	1.62	0.63
1:A:286:VAL:HG21	1:A:735:LYS:CG	2.28	0.63
1:A:322:ILE:HG23	1:A:324:TYR:CE2	2.33	0.63
1:A:316:PHE:CE1	1:A:329:ALA:CB	2.82	0.63
1:A:483:PHE:CZ	1:A:505:GLU:HG2	2.34	0.63
1:A:791:LYS:HD2	1:A:819:ILE:HG23	1.80	0.63
2:B:85:ARG:HB2	2:B:180:ILE:HD11	1.81	0.63
2:B:148:THR:O	2:B:148:THR:CG2	2.46	0.63
1:A:346:LEU:HD23	1:A:346:LEU:H	1.62	0.63
1:A:473:LEU:HG	1:A:479:TYR:CE1	2.34	0.63
1:A:120:CYS:CB	1:A:142:ALA:HB2	2.29	0.63
1:A:786:ALA:CB	1:A:858:LEU:HD21	2.21	0.63
2:B:129:ILE:HG13	2:B:130:ASN:N	2.13	0.63
1:A:275:ILE:HG13	1:A:276:ILE:N	2.13	0.63
1:A:503:THR:O	1:A:503:THR:CG2	2.47	0.63
1:A:743:MET:CE	1:A:762:ASP:HA	2.29	0.63
2:B:137:PHE:HD1	2:B:139:GLN:NE2	1.97	0.63
1:A:87:ASN:CG	1:A:270:THR:HG23	2.23	0.63
1:A:922:TYR:CE1	1:A:991:MET:HE1	2.33	0.63
2:B:49:VAL:CG1	2:B:50:VAL:N	2.61	0.63
1:A:134:THR:OG1	1:A:138:ASN:HB2	1.98	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:232:GLU:HB2	1:A:233:PRO:HD2	1.80	0.62
1:A:300:PHE:CD1	1:A:854:VAL:HG21	2.34	0.62
1:A:328:ARG:O	1:A:331:VAL:HG22	1.99	0.62
1:A:994:ARG:HH21	2:B:75:ASP:CG	2.06	0.62
2:B:84:LEU:HD11	2:B:282:VAL:HG21	1.79	0.62
2:B:137:PHE:HD1	2:B:139:GLN:HE21	1.46	0.62
1:A:354:SER:N	1:A:370:LEU:HD11	2.14	0.62
1:A:991:MET:CG	1:A:992:PRO:HD2	2.29	0.62
1:A:212:ILE:CG1	1:A:265:GLY:C	2.72	0.62
1:A:298:GLU:O	1:A:301:VAL:HG22	2.00	0.62
1:A:650:VAL:HG13	1:A:651:GLU:N	2.13	0.62
1:A:787:TYR:CE1	1:A:943:VAL:HG22	2.35	0.62
1:A:830:SER:HB3	1:A:963:ILE:HG23	1.81	0.62
1:A:961:ASN:OD1	1:A:963:ILE:HG22	2.00	0.62
1:A:1015:ARG:CD	1:A:1031:LEU:CD2	2.78	0.62
1:A:66:THR:OG1	1:A:72:LEU:HD12	2.00	0.62
1:A:106:ALA:O	1:A:110:GLN:HB2	1.99	0.62
1:A:399:HIS:CD2	1:A:408:SER:CB	2.83	0.62
1:A:791:LYS:HG3	1:A:935:ILE:CG2	2.28	0.62
1:A:69:THR:CG2	1:A:70:LYS:H	2.11	0.62
1:A:398:SER:HB3	1:A:599:SER:O	1.98	0.62
1:A:801:ILE:HG21	1:A:875:PHE:HE2	1.63	0.62
1:A:56:SER:HB2	1:A:59:GLU:OE2	1.99	0.62
1:A:360:LEU:O	1:A:363:LYS:HB2	2.00	0.62
1:A:392:GLN:HG3	1:A:604:PRO:O	2.00	0.62
1:A:70:LYS:O	1:A:181:ILE:HG22	2.00	0.62
1:A:807:VAL:CG2	1:A:808:PRO:HD2	2.30	0.62
1:A:815:THR:HG23	1:A:932:PHE:HB2	1.81	0.62
1:A:858:LEU:HD23	1:A:1033:TYR:CD2	2.35	0.62
1:A:914:GLU:HB2	2:B:184:ASN:HA	1.82	0.62
1:A:162:LYS:O	1:A:163:SER:HB2	1.99	0.61
1:A:309:ILE:CG2	1:A:310:LEU:H	2.13	0.61
1:A:775:ARG:HD2	1:A:840:ILE:HG21	1.75	0.61
1:A:807:VAL:HG22	1:A:808:PRO:CD	2.30	0.61
1:A:880:THR:HG21	1:A:1000:VAL:HG21	1.81	0.61
1:A:885:GLU:OE2	2:B:76:GLN:HB2	2.00	0.61
1:A:922:TYR:CD1	1:A:991:MET:HE1	2.35	0.61
2:B:84:LEU:CD1	2:B:282:VAL:HG21	2.29	0.61
1:A:1015:ARG:HE	1:A:1031:LEU:HB3	1.64	0.61
1:A:901:ASN:O	1:A:904:LEU:HD12	2.01	0.61
2:B:213:LEU:HD23	2:B:213:LEU:C	2.25	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:213:LEU:O	2:B:213:LEU:CD2	2.48	0.61
1:A:87:ASN:HA	1:A:270:THR:HG22	1.82	0.61
1:A:537:LEU:HD12	1:A:538:PRO:CD	2.25	0.61
1:A:873:ALA:HB2	1:A:1004:PHE:CB	2.29	0.61
2:B:81:GLY:HA2	2:B:280:GLY:H	1.65	0.61
1:A:708:LEU:HD13	1:A:708:LEU:C	2.26	0.61
1:A:345:LEU:HD13	1:A:788:THR:HG21	1.80	0.61
2:B:142:PHE:HE2	2:B:232:TYR:HA	1.65	0.61
1:A:411:THR:HG21	1:A:601:ILE:HG21	1.82	0.61
1:A:546:ALA:O	1:A:549:THR:OG1	2.15	0.61
1:A:79:GLU:O	1:A:79:GLU:OE2	2.19	0.61
1:A:346:LEU:HD23	1:A:346:LEU:N	2.16	0.61
1:A:400:LEU:HD22	1:A:427:TRP:HZ3	1.65	0.61
1:A:532:ILE:HG23	1:A:532:ILE:O	1.99	0.61
1:A:908:GLN:HA	1:A:913:GLN:O	2.00	0.61
2:B:85:ARG:O	2:B:86:PRO:O	2.19	0.61
2:B:177:PRO:HD3	2:B:288:ILE:HG13	1.82	0.61
1:A:775:ARG:HB3	1:A:840:ILE:HG21	1.82	0.61
1:A:922:TYR:CG	1:A:991:MET:CE	2.81	0.61
1:A:923:GLN:HG2	2:B:76:GLN:CD	2.26	0.61
1:A:872:PHE:O	1:A:876:THR:HG23	2.01	0.61
1:A:939:GLN:OE1	1:A:939:GLN:HA	1.99	0.61
1:A:674:ILE:HG21	1:A:699:PHE:CD2	2.36	0.60
1:A:163:SER:CB	1:A:368:LYS:HD3	2.31	0.60
1:A:505:GLU:HG3	1:A:506:ASP:N	2.14	0.60
1:A:567:LEU:HD12	1:A:592:LEU:HD22	1.83	0.60
1:A:827:PRO:CG	1:A:967:ALA:HB1	2.31	0.60
1:A:65:GLN:N	1:A:65:GLN:CD	2.51	0.60
1:A:254:PHE:O	1:A:255:SER:HB3	2.00	0.60
1:A:500:SER:O	1:A:514:LEU:HD12	2.01	0.60
1:A:511:ARG:HB3	1:A:511:ARG:CZ	2.30	0.60
1:A:782:LYS:HG2	1:A:853:LEU:O	2.01	0.60
1:A:801:ILE:HG21	1:A:875:PHE:CE2	2.36	0.60
1:A:166:ILE:CD1	1:A:753:ASN:HB3	2.31	0.60
1:A:557:LEU:HB2	1:A:559:GLU:CD	2.25	0.60
1:A:794:PRO:HG3	1:A:870:GLN:CB	2.32	0.60
1:A:178:ALA:HB2	1:A:194:LEU:HD11	1.82	0.60
1:A:760:LEU:H	1:A:760:LEU:CD2	2.13	0.60
1:A:905:GLN:HG3	1:A:916:THR:OG1	2.02	0.60
1:A:1011:TYR:HE1	2:B:47:PHE:CE1	2.13	0.60
2:B:88:VAL:HG21	2:B:284:PHE:CE1	2.35	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:166:ILE:CA	1:A:753:ASN:ND2	2.64	0.60
1:A:324:TYR:HB3	1:A:328:ARG:HB3	1.82	0.60
1:A:539:LEU:HD22	1:A:544:ARG:HG3	1.84	0.60
1:A:811:LEU:HD13	1:A:931:PHE:HB3	1.84	0.60
1:A:208:VAL:HG21	1:A:253:PHE:O	2.01	0.60
1:A:313:ALA:O	1:A:316:PHE:HB3	2.02	0.60
1:A:442:PHE:CD1	1:A:456:VAL:HG22	2.37	0.60
1:A:446:GLN:NE2	1:A:455:ILE:HG22	2.17	0.60
1:A:608:VAL:HB	1:A:609:PRO:HD3	1.84	0.60
1:A:311:PHE:HA	1:A:314:THR:HG22	1.83	0.60
1:A:394:ARG:HH21	1:A:413:GLU:HB3	1.66	0.60
1:A:399:HIS:CB	1:A:407:HIS:O	2.46	0.60
1:A:202:MET:HE3	1:A:208:VAL:HG12	1.83	0.60
1:A:994:ARG:CZ	2:B:73:TYR:HB3	2.32	0.60
1:A:49:GLU:HG2	1:A:50:ILE:N	2.15	0.60
1:A:63:LYS:C	1:A:65:GLN:NE2	2.60	0.60
1:A:70:LYS:HD3	1:A:184:GLY:HA3	1.82	0.60
1:A:280:ALA:O	1:A:281:SER:C	2.45	0.60
1:A:307:LEU:HD22	1:A:307:LEU:N	2.16	0.60
1:A:336:ILE:CG2	1:A:340:TYR:CE1	2.84	0.60
1:A:545:GLU:HA	1:A:548:GLN:HB2	1.84	0.60
1:A:711:VAL:HG13	1:A:721:VAL:HG21	1.84	0.60
2:B:179:PHE:HE1	2:B:249:LEU:HG	1.67	0.60
1:A:163:SER:HB2	1:A:368:LYS:HB3	1.84	0.59
1:A:293:ILE:O	1:A:293:ILE:HD13	2.02	0.59
1:A:351:VAL:O	1:A:355:LEU:HG	2.01	0.59
2:B:68:PRO:CD	2:B:69:TYR:H	2.13	0.59
2:B:252:VAL:HB	2:B:253:PRO:HD3	1.81	0.59
1:A:78:ALA:O	1:A:79:GLU:C	2.45	0.59
1:A:254:PHE:CD2	1:A:276:ILE:CD1	2.84	0.59
1:A:528:SER:OG	1:A:591:GLY:HA2	2.02	0.59
1:A:640:VAL:HG23	1:A:642:ILE:HG13	1.84	0.59
2:B:83:THR:OG1	2:B:182:LYS:HD3	2.01	0.59
1:A:166:ILE:CA	1:A:753:ASN:HB3	2.32	0.59
1:A:255:SER:HB3	1:A:276:ILE:HG21	1.84	0.59
1:A:706:GLN:O	1:A:710:ILE:HG12	2.01	0.59
1:A:923:GLN:HE21	2:B:76:GLN:CG	2.16	0.59
1:A:117:ALA:CA	1:A:145:LEU:HD12	2.30	0.59
1:A:314:THR:HG23	1:A:315:PHE:CD1	2.37	0.59
1:A:827:PRO:HG3	1:A:967:ALA:HB1	1.84	0.59
2:B:87:ASP:CG	2:B:87:ASP:O	2.44	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:511:ARG:HD2	1:A:569:LEU:O	2.02	0.59
1:A:764:PHE:CE1	1:A:767:ILE:HD12	2.37	0.59
2:B:32:ARG:NH1	2:B:32:ARG:HG2	2.18	0.59
1:A:127:GLN:HB2	1:A:132:ASP:OD2	2.01	0.59
1:A:165:ASN:O	1:A:753:ASN:CB	2.51	0.59
1:A:160:GLU:O	1:A:162:LYS:N	2.36	0.59
1:A:197:GLY:HA2	1:A:266:LEU:HD21	1.85	0.59
1:A:353:LEU:HB3	1:A:370:LEU:CD1	2.32	0.59
1:A:53:HIS:HB2	1:A:250:ASN:HD21	1.68	0.59
1:A:147:ALA:O	1:A:150:VAL:CG1	2.51	0.59
1:A:427:TRP:CE2	1:A:431:CYS:SG	2.96	0.59
1:A:451:VAL:CG1	1:A:471:LEU:HD13	2.33	0.59
1:A:60:LEU:HD22	1:A:213:ARG:HG2	1.85	0.59
1:A:114:TRP:CZ2	1:A:149:VAL:HG21	2.38	0.59
1:A:242:HIS:O	1:A:248:THR:HG22	2.02	0.59
1:A:340:TYR:CZ	1:A:796:LEU:CD2	2.85	0.59
1:A:684:PRO:O	1:A:688:VAL:HG23	2.02	0.59
1:A:906:ASP:HA	2:B:83:THR:HG21	1.85	0.59
2:B:38:VAL:HG23	2:B:39:TRP:CD1	2.37	0.59
2:B:282:VAL:CG1	2:B:284:PHE:CE2	2.86	0.59
1:A:114:TRP:CH2	1:A:149:VAL:HG21	2.38	0.58
1:A:332:PHE:O	1:A:335:ALA:HB3	2.03	0.58
1:A:443:LYS:HE2	1:A:457:ILE:HG13	1.85	0.58
1:A:661:VAL:HG22	1:A:662:ASP:N	2.18	0.58
1:A:856:GLU:H	1:A:856:GLU:CD	2.11	0.58
1:A:124:PHE:CD1	1:A:134:THR:HG21	2.37	0.58
1:A:353:LEU:HB3	1:A:370:LEU:HG	1.83	0.58
1:A:423:SER:O	1:A:424:SER:O	2.22	0.58
1:A:477:MET:HG3	1:A:478:GLY:H	1.67	0.58
2:B:273:ASN:HB3	2:B:274:PRO:HD3	1.84	0.58
1:A:121:LEU:HD23	1:A:121:LEU:O	2.03	0.58
1:A:174:VAL:O	1:A:175:PRO:O	2.21	0.58
1:A:220:ARG:HA	1:A:261:GLY:HA3	1.84	0.58
1:A:793:ILE:HD12	1:A:793:ILE:N	2.18	0.58
1:A:64:TYR:CE1	1:A:196:VAL:CG2	2.87	0.58
1:A:146:ILE:C	1:A:146:ILE:CD1	2.76	0.58
1:A:227:LEU:HD21	1:A:275:ILE:CD1	2.33	0.58
1:A:244:SER:O	1:A:248:THR:HG23	2.04	0.58
1:A:864:PHE:HD1	1:A:865:GLN:CG	2.13	0.58
1:A:884:GLN:O	2:B:71:PRO:HB2	2.04	0.58
2:B:84:LEU:CG	2:B:181:ILE:HG12	2.33	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:209:ASP:OD1	2:B:209:ASP:O	2.20	0.58
1:A:60:LEU:HD23	1:A:266:LEU:HD13	1.85	0.58
1:A:664:VAL:HG12	1:A:665:ASN:O	2.02	0.58
1:A:906:ASP:OD1	2:B:83:THR:OG1	2.21	0.58
1:A:994:ARG:HH22	2:B:75:ASP:HB2	1.64	0.58
1:A:227:LEU:HD12	1:A:227:LEU:N	2.18	0.58
1:A:524:LEU:HD21	1:A:539:LEU:HD11	1.84	0.58
1:A:922:TYR:HB3	2:B:76:GLN:HE22	1.69	0.58
2:B:78:LYS:HG2	2:B:79:SER:H	1.67	0.58
1:A:567:LEU:HD23	1:A:568:TYR:N	2.19	0.58
1:A:826:PHE:CB	1:A:827:PRO:HD3	2.31	0.58
1:A:911:TYR:CE2	2:B:71:PRO:HD3	2.39	0.58
2:B:68:PRO:CD	2:B:69:TYR:N	2.66	0.58
2:B:154:PHE:HD1	2:B:228:TYR:OH	1.86	0.58
2:B:257:ASP:OD1	2:B:285:LYS:HB3	2.04	0.58
1:A:149:VAL:HG23	1:A:150:VAL:N	2.19	0.58
1:A:181:ILE:HB	1:A:199:LEU:HB3	1.85	0.58
1:A:864:PHE:CD1	1:A:864:PHE:C	2.82	0.58
1:A:482:ARG:C	1:A:484:PRO:HD3	2.28	0.58
1:A:679:LEU:CD2	1:A:679:LEU:C	2.77	0.58
1:A:791:LYS:HE2	1:A:935:ILE:HG22	1.84	0.58
1:A:160:GLU:C	1:A:162:LYS:N	2.62	0.58
2:B:186:ILE:HG23	2:B:189:PHE:CB	2.32	0.58
1:A:1015:ARG:HD2	1:A:1031:LEU:HD22	1.85	0.57
2:B:264:ILE:HG12	2:B:265:LEU:N	2.18	0.57
1:A:164:THR:O	1:A:165:ASN:HB2	2.04	0.57
1:A:253:PHE:O	1:A:256:THR:HB	2.04	0.57
1:A:707:LYS:NZ	1:A:730:ASP:HB3	2.18	0.57
1:A:807:VAL:HG23	1:A:892:CYS:HB3	1.85	0.57
1:A:950:ARG:NH2	1:A:1020:ARG:HG3	2.19	0.57
2:B:77:LEU:HG	2:B:77:LEU:O	2.04	0.57
1:A:109:LEU:HD13	1:A:301:VAL:HG12	1.85	0.57
1:A:499:LEU:HB3	1:A:516:MET:HB3	1.87	0.57
1:A:922:TYR:HE2	1:A:991:MET:SD	2.18	0.57
1:A:482:ARG:HG3	1:A:483:PHE:CD1	2.39	0.57
1:A:721:VAL:HG23	1:A:721:VAL:O	2.03	0.57
1:A:827:PRO:HG2	1:A:971:GLN:HE21	1.70	0.57
1:A:394:ARG:HD2	1:A:452:PRO:O	2.04	0.57
1:A:575:PRO:CB	1:A:576:PRO:HD2	2.34	0.57
1:A:741:VAL:CG1	1:A:759:LEU:HD23	2.35	0.57
1:A:772:GLU:O	1:A:772:GLU:HG2	2.04	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:237:SER:H	1:A:249:ARG:HB3	1.69	0.57
1:A:377:GLY:C	1:A:378:SER:OG	2.47	0.57
1:A:791:LYS:HE3	1:A:824:ASP:OD2	2.04	0.57
1:A:276:ILE:HD12	1:A:277:GLY:N	2.20	0.57
1:A:940:ILE:CD1	1:A:968:ILE:HD12	2.35	0.57
1:A:969:VAL:O	1:A:972:VAL:HG12	2.05	0.57
1:A:221:LYS:HB2	1:A:260:GLU:HG2	1.86	0.57
1:A:356:THR:O	1:A:360:LEU:HD23	2.04	0.57
1:A:723:VAL:CG1	1:A:734:LEU:HD23	2.34	0.57
1:A:966:ILE:HG23	1:A:970:PHE:CD2	2.40	0.57
1:A:968:ILE:HG23	1:A:969:VAL:N	2.19	0.57
1:A:293:ILE:HG23	1:A:294:ALA:N	2.19	0.57
1:A:400:LEU:HD12	1:A:400:LEU:N	2.15	0.57
1:A:915:TRP:CH2	2:B:77:LEU:CB	2.88	0.57
1:A:918:GLY:CA	2:B:276:ASP:HB3	2.35	0.57
1:A:483:PHE:HE2	1:A:504:LEU:CD1	2.04	0.56
1:A:929:THR:HG23	1:A:990:PHE:HD1	1.70	0.56
1:A:113:MET:SD	1:A:346:LEU:HD11	2.45	0.56
1:A:129:SER:O	1:A:130:GLU:HG3	2.04	0.56
2:B:259:VAL:O	2:B:259:VAL:CG2	2.51	0.56
1:A:434:LEU:HD22	1:A:465:LEU:HD22	1.87	0.56
1:A:821:LEU:HD12	1:A:821:LEU:N	2.20	0.56
2:B:276:ASP:OD1	2:B:276:ASP:N	2.36	0.56
1:A:87:ASN:CB	1:A:270:THR:HG23	2.36	0.56
1:A:235:THR:HG22	1:A:236:ARG:N	2.20	0.56
1:A:242:HIS:CD2	1:A:244:SER:H	2.19	0.56
1:A:336:ILE:HG22	1:A:340:TYR:CE1	2.41	0.56
1:A:376:LEU:HD22	1:A:770:GLY:CA	2.35	0.56
1:A:784:SER:CA	1:A:831:LEU:HD22	2.33	0.56
1:A:914:GLU:C	2:B:184:ASN:HB3	2.28	0.56
1:A:322:ILE:HG23	1:A:324:TYR:HD2	1.69	0.56
1:A:466:LEU:C	1:A:466:LEU:CD2	2.79	0.56
1:A:466:LEU:CD2	1:A:466:LEU:O	2.54	0.56
1:A:511:ARG:HH11	1:A:511:ARG:CB	2.18	0.56
1:A:613:LEU:O	1:A:613:LEU:HD13	2.05	0.56
1:A:792:ASN:O	1:A:796:LEU:HD13	2.05	0.56
1:A:805:VAL:CG1	1:A:807:VAL:HB	2.36	0.56
1:A:90:ARG:O	1:A:91:PRO:C	2.47	0.56
1:A:511:ARG:HG2	1:A:512:HIS:N	2.17	0.56
1:A:811:LEU:HD11	1:A:815:THR:CG2	2.35	0.56
1:A:836:ALA:HB1	1:A:838:SER:O	2.05	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:891:LEU:O	1:A:895:LEU:HD21	2.05	0.56
1:A:351:VAL:HG11	1:A:829:VAL:HG22	1.87	0.56
1:A:885:GLU:CG	1:A:923:GLN:NE2	2.68	0.56
1:A:795:GLU:OE1	1:A:816:ILE:HG23	2.05	0.56
1:A:798:PRO:O	1:A:801:ILE:HG22	2.06	0.56
1:A:1016:LYS:C	1:A:1019:VAL:HG22	2.29	0.56
1:A:90:ARG:HG3	1:A:272:ASP:OD2	2.05	0.56
1:A:311:PHE:O	1:A:315:PHE:HD1	1.88	0.56
1:A:399:HIS:CD2	1:A:408:SER:CA	2.88	0.56
1:A:442:PHE:CG	1:A:454:ARG:HD2	2.40	0.56
1:A:708:LEU:C	1:A:708:LEU:CD1	2.79	0.56
1:A:48:MET:HE1	1:A:246:LEU:HD12	1.86	0.56
1:A:376:LEU:HB3	1:A:771:VAL:HA	1.88	0.56
1:A:872:PHE:HB3	2:B:55:PHE:CD1	2.41	0.56
1:A:945:ILE:HB	1:A:1012:ASP:OD2	2.05	0.56
1:A:631:ILE:HG23	1:A:632:THR:N	2.21	0.55
1:A:690:ALA:CA	1:A:693:THR:HG22	2.36	0.55
1:A:911:TYR:CZ	2:B:71:PRO:HD3	2.41	0.55
1:A:922:TYR:CE1	2:B:275:HIS:CE1	2.94	0.55
1:A:189:ILE:HD12	1:A:193:GLN:HB2	1.87	0.55
1:A:215:LEU:C	1:A:215:LEU:HD13	2.31	0.55
1:A:599:SER:OG	1:A:600:MET:N	2.38	0.55
1:A:903:HIS:CE1	2:B:87:ASP:HA	2.41	0.55
1:A:940:ILE:HD13	1:A:968:ILE:CG1	2.35	0.55
1:A:947:LYS:HE3	1:A:958:PHE:O	2.06	0.55
1:A:45:LYS:HZ1	1:A:281:SER:HB2	1.64	0.55
1:A:124:PHE:HA	1:A:127:GLN:CG	2.35	0.55
1:A:207:ARG:HA	1:A:257:MET:HG3	1.89	0.55
1:A:442:PHE:CD2	1:A:466:LEU:HD11	2.42	0.55
1:A:708:LEU:CD1	1:A:712:GLU:HG3	2.37	0.55
1:A:925:TYR:HD1	1:A:989:ASN:HD21	1.53	0.55
1:A:1009:PHE:CD1	1:A:1009:PHE:C	2.84	0.55
2:B:77:LEU:CD2	2:B:186:ILE:HD12	2.37	0.55
1:A:901:ASN:CG	1:A:904:LEU:HD11	2.26	0.55
1:A:57:VAL:HG12	1:A:58:ALA:N	2.20	0.55
1:A:254:PHE:HD2	1:A:276:ILE:HD11	1.69	0.55
1:A:442:PHE:CE2	1:A:466:LEU:HD21	2.41	0.55
1:A:530:ILE:HD11	1:A:539:LEU:HG	1.88	0.55
2:B:84:LEU:HD11	2:B:181:ILE:HG12	1.87	0.55
1:A:169:SER:O	1:A:172:ASN:HB2	2.06	0.55
1:A:442:PHE:CE2	1:A:466:LEU:CD2	2.90	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:557:LEU:CD2	1:A:559:GLU:OE2	2.54	0.55
2:B:282:VAL:HG12	2:B:283:GLU:N	2.22	0.55
1:A:341:VAL:HG23	1:A:341:VAL:O	2.07	0.55
1:A:708:LEU:HD13	1:A:712:GLU:HG3	1.89	0.55
1:A:861:TYR:CE2	1:A:866:ILE:HG13	2.41	0.55
1:A:905:GLN:OE1	2:B:278:TYR:CD2	2.60	0.55
1:A:379:THR:O	1:A:620:ILE:HG12	2.07	0.55
1:A:790:THR:HA	1:A:862:SER:OG	2.06	0.55
1:A:914:GLU:O	2:B:184:ASN:CG	2.49	0.55
1:A:661:VAL:HG22	1:A:662:ASP:H	1.72	0.54
2:B:227:HIS:NE2	2:B:228:TYR:CE1	2.76	0.54
1:A:220:ARG:HH11	1:A:263:ALA:HB3	1.72	0.54
1:A:636:ILE:O	1:A:640:VAL:HG22	2.08	0.54
1:A:806:SER:O	1:A:896:ARG:HG3	2.07	0.54
1:A:109:LEU:CD2	1:A:346:LEU:HD22	2.37	0.54
1:A:143:LEU:O	1:A:146:ILE:HG22	2.07	0.54
1:A:158:TYR:C	1:A:160:GLU:H	2.16	0.54
1:A:623:ILE:HG12	1:A:697:MET:HG2	1.87	0.54
1:A:251:ILE:HD12	1:A:251:ILE:N	2.21	0.54
1:A:885:GLU:HG3	1:A:923:GLN:HE21	1.72	0.54
1:A:1015:ARG:CD	1:A:1031:LEU:HD22	2.37	0.54
1:A:119:ILE:HG22	1:A:334:MET:HB3	1.89	0.54
1:A:165:ASN:O	1:A:753:ASN:OD1	2.25	0.54
1:A:401:TRP:CZ2	1:A:404:ASN:HA	2.42	0.54
1:A:473:LEU:HD11	1:A:479:TYR:OH	2.08	0.54
1:A:784:SER:HA	1:A:831:LEU:CD2	2.35	0.54
2:B:47:PHE:O	2:B:51:MET:HG2	2.07	0.54
2:B:85:ARG:HE	2:B:86:PRO:N	2.05	0.54
2:B:134:GLU:HG2	2:B:135:LYS:H	1.73	0.54
1:A:146:ILE:C	1:A:149:VAL:HG22	2.32	0.54
1:A:446:GLN:O	1:A:448:ALA:N	2.40	0.54
1:A:637:ALA:HB1	1:A:643:ILE:HG12	1.89	0.54
1:A:923:GLN:CG	2:B:76:GLN:CD	2.81	0.54
1:A:1015:ARG:CD	1:A:1031:LEU:HD23	2.35	0.54
1:A:266:LEU:HD23	1:A:266:LEU:C	2.33	0.54
1:A:276:ILE:HD12	1:A:276:ILE:C	2.32	0.54
1:A:366:VAL:CG1	1:A:760:LEU:HD21	2.37	0.54
1:A:657:LEU:C	1:A:658:ARG:HG3	2.33	0.54
1:A:806:SER:HA	1:A:896:ARG:NE	2.23	0.54
1:A:887:TRP:CH2	1:A:907:LEU:HD21	2.43	0.54
1:A:112:LEU:CD2	1:A:341:VAL:HG12	2.35	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:113:MET:CE	1:A:148:VAL:HB	2.35	0.54
1:A:166:ILE:HG23	1:A:167:ILE:N	2.22	0.54
1:A:283:ALA:O	1:A:284:SER:C	2.50	0.54
1:A:587:PHE:HB2	1:A:588:PRO:CD	2.33	0.54
1:A:991:MET:HG3	1:A:992:PRO:CD	2.34	0.54
2:B:254:ARG:CD	2:B:255:ASN:HD22	2.08	0.54
1:A:548:GLN:C	1:A:552:LEU:HD21	2.32	0.54
1:A:788:THR:HG23	1:A:789:LEU:N	2.22	0.54
1:A:1013:GLU:O	1:A:1017:LEU:HD13	2.08	0.54
1:A:63:LYS:C	1:A:65:GLN:HE22	2.16	0.54
1:A:340:TYR:CZ	1:A:796:LEU:HD21	2.43	0.54
1:A:693:THR:HG23	1:A:694:HIS:CE1	2.40	0.54
1:A:994:ARG:H	1:A:997:TRP:CD1	2.25	0.54
1:A:999:LEU:HD12	1:A:999:LEU:N	2.23	0.54
1:A:44:MET:O	1:A:44:MET:HG2	2.08	0.53
1:A:113:MET:HB2	1:A:149:VAL:CG1	2.38	0.53
1:A:147:ALA:HA	1:A:150:VAL:HG12	1.89	0.53
1:A:660:PRO:O	1:A:663:GLN:HB2	2.08	0.53
1:A:158:TYR:C	1:A:160:GLU:N	2.66	0.53
1:A:282:LEU:O	1:A:282:LEU:CG	2.52	0.53
1:A:334:MET:O	1:A:337:VAL:HG23	2.08	0.53
1:A:925:TYR:CD1	1:A:989:ASN:ND2	2.75	0.53
1:A:940:ILE:CG1	1:A:968:ILE:HD12	2.36	0.53
1:A:180:VAL:CG1	1:A:194:LEU:CD2	2.86	0.53
1:A:332:PHE:HE1	1:A:799:TYR:HH	1.49	0.53
1:A:398:SER:OG	1:A:600:MET:O	2.27	0.53
1:A:412:THR:HG22	1:A:414:ASP:H	1.73	0.53
1:A:674:ILE:HG13	1:A:678:GLN:OE1	2.07	0.53
2:B:85:ARG:HB2	2:B:180:ILE:CG1	2.38	0.53
1:A:391:THR:HA	1:A:604:PRO:CA	2.28	0.53
1:A:786:ALA:HA	1:A:858:LEU:HD11	1.91	0.53
1:A:905:GLN:HB3	2:B:83:THR:HG22	1.90	0.53
1:A:45:LYS:HZ2	1:A:281:SER:HB3	1.71	0.53
1:A:325:THR:OG1	1:A:327:LEU:HB2	2.08	0.53
1:A:450:PRO:HB2	1:A:453:LYS:HD3	1.88	0.53
1:A:554:LEU:HA	1:A:557:LEU:HD13	1.91	0.53
1:A:805:VAL:HG13	1:A:807:VAL:N	2.24	0.53
1:A:856:GLU:CG	1:A:857:PRO:HD3	2.35	0.53
2:B:231:TYR:CE2	2:B:233:GLY:HA2	2.43	0.53
1:A:208:VAL:HG22	1:A:256:THR:O	2.08	0.53
1:A:837:GLU:HB3	1:A:951:LEU:HG	1.90	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1011:TYR:CZ	2:B:47:PHE:CZ	2.97	0.53
1:A:1015:ARG:HE	1:A:1031:LEU:CB	2.21	0.53
2:B:37:TRP:O	2:B:38:VAL:C	2.50	0.53
1:A:275:ILE:HG13	1:A:276:ILE:HG23	1.90	0.53
1:A:739:ILE:HG23	1:A:739:ILE:O	2.09	0.53
2:B:126:GLU:CG	2:B:127:GLY:N	2.61	0.53
1:A:187:PHE:CD2	1:A:188:GLN:O	2.62	0.53
1:A:469:SER:O	1:A:473:LEU:HB3	2.09	0.53
1:A:497:PHE:CD1	1:A:497:PHE:C	2.86	0.53
1:A:674:ILE:O	1:A:674:ILE:CG2	2.53	0.53
1:A:783:LYS:O	1:A:946:ARG:HG2	2.09	0.53
1:A:791:LYS:HD3	1:A:935:ILE:HG21	1.90	0.53
1:A:400:LEU:CD2	1:A:427:TRP:HZ3	2.21	0.53
1:A:524:LEU:HD13	1:A:524:LEU:C	2.33	0.53
1:A:922:TYR:CD2	1:A:991:MET:SD	2.94	0.53
2:B:84:LEU:CD1	2:B:282:VAL:CG2	2.86	0.53
1:A:64:TYR:CE1	1:A:196:VAL:HG22	2.44	0.53
1:A:79:GLU:O	1:A:79:GLU:CG	2.57	0.53
1:A:150:VAL:HG13	1:A:151:VAL:N	2.24	0.53
1:A:617:THR:CG2	1:A:618:ALA:N	2.72	0.53
1:A:850:ARG:O	1:A:850:ARG:HG2	2.08	0.53
1:A:877:ASP:OD2	1:A:934:SER:HB3	2.08	0.53
1:A:327:LEU:O	1:A:331:VAL:HG13	2.08	0.52
1:A:402:PHE:CZ	1:A:407:HIS:CE1	2.97	0.52
1:A:781:LEU:HD23	1:A:781:LEU:O	2.09	0.52
2:B:237:GLN:OE1	2:B:240:TYR:CD2	2.63	0.52
1:A:415:GLN:HE21	1:A:415:GLN:HA	1.75	0.52
1:A:482:ARG:O	1:A:484:PRO:HD3	2.08	0.52
1:A:650:VAL:HG12	1:A:651:GLU:N	2.21	0.52
1:A:90:ARG:NH1	1:A:272:ASP:CG	2.66	0.52
1:A:173:LEU:HD12	1:A:173:LEU:H	1.72	0.52
1:A:340:TYR:CZ	1:A:796:LEU:HD23	2.45	0.52
1:A:381:VAL:CG2	1:A:382:ILE:N	2.73	0.52
1:A:623:ILE:HG23	1:A:697:MET:HG2	1.91	0.52
1:A:847:ASN:HD22	1:A:849:LYS:N	2.05	0.52
1:A:45:LYS:HZ1	1:A:281:SER:CB	2.19	0.52
1:A:180:VAL:HG11	1:A:194:LEU:CD2	2.39	0.52
1:A:280:ALA:O	1:A:282:LEU:N	2.41	0.52
1:A:399:HIS:C	1:A:400:LEU:CD1	2.58	0.52
1:A:476:ALA:HB1	1:A:480:ARG:HH21	1.74	0.52
1:A:690:ALA:HA	1:A:693:THR:CG2	2.39	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:442:PHE:CZ	1:A:466:LEU:CD2	2.93	0.52
1:A:482:ARG:O	1:A:484:PRO:CD	2.58	0.52
1:A:491:PHE:HZ	1:A:496:LYS:CE	2.21	0.52
1:A:840:ILE:O	1:A:840:ILE:HG22	2.09	0.52
1:A:1030:GLU:CB	1:A:1031:LEU:HD12	2.39	0.52
2:B:84:LEU:HD23	2:B:179:PHE:CD2	2.44	0.52
2:B:261:VAL:HG22	2:B:283:GLU:CD	2.34	0.52
2:B:264:ILE:HG12	2:B:265:LEU:H	1.75	0.52
1:A:127:GLN:HG3	1:A:134:THR:HG21	1.91	0.52
1:A:905:GLN:CD	2:B:278:TYR:CD2	2.83	0.52
1:A:915:TRP:CH2	2:B:77:LEU:CA	2.93	0.52
1:A:166:ILE:HD13	1:A:753:ASN:CB	2.38	0.52
1:A:189:ILE:HB	1:A:193:GLN:OE1	2.10	0.52
1:A:605:ARG:HB2	1:A:608:VAL:CG2	2.39	0.52
1:A:141:LEU:HD23	1:A:141:LEU:O	2.10	0.52
1:A:699:PHE:CE2	1:A:710:ILE:HD12	2.45	0.52
1:A:984:MET:N	1:A:985:PRO:HD2	2.25	0.52
1:A:65:GLN:H	1:A:65:GLN:HE22	1.51	0.52
1:A:158:TYR:O	1:A:160:GLU:N	2.42	0.52
1:A:463:THR:HG1	1:A:467:LYS:HE3	1.74	0.52
1:A:527:CYS:SG	1:A:594:PHE:HB2	2.50	0.52
2:B:213:LEU:CD1	2:B:260:ILE:CD1	2.88	0.52
2:B:271:PHE:HB3	2:B:281:LYS:CE	2.40	0.52
2:B:287:LYS:CE	2:B:289:GLN:NE2	2.61	0.52
1:A:166:ILE:HA	1:A:753:ASN:HD22	1.70	0.52
1:A:254:PHE:HD2	1:A:276:ILE:CG1	2.23	0.52
1:A:255:SER:CB	1:A:276:ILE:HG12	2.37	0.52
1:A:311:PHE:C	1:A:314:THR:HG22	2.35	0.52
1:A:450:PRO:C	1:A:452:PRO:HD2	2.35	0.52
1:A:791:LYS:CE	1:A:935:ILE:HG22	2.40	0.52
1:A:808:PRO:O	1:A:810:PRO:HD3	2.10	0.52
2:B:84:LEU:HD23	2:B:179:PHE:HD2	1.74	0.52
2:B:85:ARG:HB2	2:B:180:ILE:CD1	2.39	0.52
1:A:115:VAL:CG1	1:A:116:ALA:N	2.71	0.51
1:A:486:VAL:HG23	1:A:487:CYS:N	2.25	0.51
1:A:648:GLU:HA	1:A:652:ASP:OD2	2.10	0.51
1:A:675:ASN:O	1:A:678:GLN:HG2	2.10	0.51
1:A:723:VAL:HG12	1:A:734:LEU:HD23	1.92	0.51
2:B:142:PHE:CE2	2:B:232:TYR:HA	2.44	0.51
1:A:166:ILE:HD13	1:A:754:ALA:N	2.25	0.51
1:A:167:ILE:CG2	1:A:168:ALA:N	2.72	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:485:LYS:HA	1:A:502:HIS:ND1	2.25	0.51
1:A:487:CYS:SG	1:A:501:ILE:HD12	2.50	0.51
1:A:905:GLN:CG	2:B:278:TYR:HB3	2.35	0.51
1:A:1000:VAL:HB	1:A:1001:PRO:HD3	1.91	0.51
1:A:53:HIS:CD2	1:A:245:PRO:HG3	2.45	0.51
1:A:350:THR:HG23	1:A:351:VAL:N	2.24	0.51
1:A:353:LEU:CB	1:A:370:LEU:HG	2.41	0.51
1:A:435:THR:HG23	1:A:436:LEU:N	2.25	0.51
1:A:905:GLN:O	2:B:83:THR:HG22	2.04	0.51
2:B:126:GLU:HA	2:B:153:LYS:NZ	2.24	0.51
1:A:212:ILE:CD1	1:A:265:GLY:CA	2.89	0.51
1:A:212:ILE:HG21	1:A:252:ALA:HB3	1.91	0.51
1:A:780:ASN:ND2	1:A:834:GLU:O	2.42	0.51
2:B:77:LEU:HD23	2:B:186:ILE:CD1	2.40	0.51
2:B:175:GLY:O	2:B:176:LYS:O	2.27	0.51
1:A:124:PHE:HD1	1:A:134:THR:HG21	1.74	0.51
1:A:222:VAL:O	1:A:233:PRO:HA	2.10	0.51
1:A:523:VAL:HG13	1:A:524:LEU:N	2.25	0.51
1:A:727:GLY:H	1:A:730:ASP:CG	2.18	0.51
1:A:987:ILE:HG22	1:A:988:PHE:CE2	2.45	0.51
1:A:181:ILE:HD13	1:A:186:LYS:HB3	1.90	0.51
1:A:348:THR:O	1:A:351:VAL:HG12	2.11	0.51
1:A:351:VAL:HG11	1:A:829:VAL:CG2	2.40	0.51
1:A:818:PHE:CE1	1:A:988:PHE:CD1	2.99	0.51
1:A:864:PHE:CD1	1:A:865:GLN:CG	2.92	0.51
1:A:434:LEU:CD2	1:A:564:PHE:CE2	2.94	0.51
1:A:443:LYS:CE	1:A:457:ILE:CG1	2.87	0.51
1:A:545:GLU:O	1:A:549:THR:N	2.44	0.51
1:A:797:THR:N	1:A:798:PRO:HD2	2.26	0.51
1:A:367:VAL:CG1	1:A:372:ALA:HB3	2.41	0.51
1:A:466:LEU:HD22	1:A:466:LEU:O	2.11	0.51
1:A:689:GLU:O	1:A:690:ALA:C	2.51	0.51
1:A:814:ILE:HG23	1:A:815:THR:N	2.24	0.51
1:A:978:LEU:CD2	1:A:990:PHE:CZ	2.92	0.51
2:B:227:HIS:CE1	2:B:228:TYR:CE1	3.00	0.51
1:A:97:GLU:HB2	1:A:99:VAL:CG2	2.40	0.50
1:A:181:ILE:HD13	1:A:186:LYS:CB	2.41	0.50
1:A:674:ILE:HG13	1:A:678:GLN:CG	2.41	0.50
2:B:185:ARG:NH1	2:B:231:TYR:CZ	2.78	0.50
1:A:353:LEU:HB3	1:A:370:LEU:CG	2.41	0.50
1:A:410:ASP:HB3	1:A:415:GLN:CD	2.36	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:425:GLU:HG2	1:A:534:GLY:HA2	1.93	0.50
1:A:917:PHE:CB	2:B:278:TYR:CE1	2.91	0.50
2:B:136:TYR:CG	2:B:190:LEU:HD23	2.46	0.50
1:A:46:LYS:HZ3	1:A:712:GLU:CD	2.05	0.50
1:A:64:TYR:HB3	1:A:197:GLY:HA2	1.92	0.50
1:A:394:ARG:NH2	1:A:413:GLU:HB3	2.25	0.50
1:A:422:GLN:HG3	1:A:423:SER:N	2.25	0.50
1:A:477:MET:HG3	1:A:478:GLY:N	2.26	0.50
1:A:598:VAL:CG1	1:A:598:VAL:O	2.55	0.50
1:A:314:THR:O	1:A:318:VAL:HG13	2.12	0.50
1:A:398:SER:CB	1:A:600:MET:O	2.57	0.50
1:A:674:ILE:CG1	1:A:678:GLN:HG3	2.42	0.50
1:A:92:PRO:C	1:A:94:GLY:H	2.20	0.50
1:A:122:ILE:O	1:A:126:ILE:HG12	2.11	0.50
1:A:674:ILE:CG2	1:A:699:PHE:CD2	2.95	0.50
1:A:799:TYR:O	1:A:802:TYR:HB3	2.11	0.50
1:A:924:GLN:HG2	1:A:928:TYR:HE2	1.65	0.50
2:B:84:LEU:HG	2:B:181:ILE:HG12	1.94	0.50
2:B:84:LEU:HD13	2:B:282:VAL:CG2	2.42	0.50
1:A:46:LYS:NZ	1:A:712:GLU:CD	2.66	0.50
1:A:64:TYR:CE1	1:A:196:VAL:HG21	2.47	0.50
1:A:116:ALA:CB	1:A:145:LEU:HD13	2.42	0.50
1:A:316:PHE:CD1	1:A:329:ALA:CB	2.92	0.50
1:A:463:THR:CG2	1:A:464:ALA:N	2.75	0.50
1:A:521:GLU:OE2	1:A:548:GLN:NE2	2.45	0.50
1:A:581:ASP:O	1:A:587:PHE:HE1	1.95	0.50
1:A:624:MET:HE3	1:A:642:ILE:HD12	1.92	0.50
1:A:906:ASP:N	2:B:83:THR:HG21	2.25	0.50
1:A:157:TYR:CD2	1:A:157:TYR:O	2.65	0.50
1:A:741:VAL:HG13	1:A:759:LEU:HD23	1.93	0.50
1:A:905:GLN:OE1	2:B:278:TYR:HD2	1.91	0.50
1:A:1011:TYR:OH	2:B:47:PHE:CE1	2.63	0.50
1:A:94:GLY:C	1:A:95:THR:HG23	2.37	0.50
1:A:114:TRP:CH2	1:A:146:ILE:HG12	2.42	0.50
1:A:377:GLY:HA3	1:A:774:GLY:C	2.34	0.50
1:A:653:ILE:C	1:A:655:ALA:N	2.69	0.50
1:A:914:GLU:O	2:B:184:ASN:ND2	2.45	0.50
1:A:916:THR:HG22	1:A:919:GLN:CB	2.42	0.50
1:A:976:CYS:O	1:A:980:TYR:HD2	1.95	0.50
2:B:68:PRO:CG	2:B:69:TYR:CE2	2.94	0.50
2:B:84:LEU:CD1	2:B:181:ILE:HG12	2.42	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:88:VAL:HG21	2:B:284:PHE:CG	2.47	0.50
1:A:208:VAL:CG2	1:A:253:PHE:O	2.59	0.49
1:A:602:ASP:OD1	1:A:603:PRO:N	2.45	0.49
1:A:811:LEU:HD23	1:A:816:ILE:CD1	2.39	0.49
2:B:68:PRO:CD	2:B:69:TYR:CD2	2.94	0.49
1:A:70:LYS:HD3	1:A:184:GLY:HA2	1.93	0.49
1:A:415:GLN:HA	1:A:415:GLN:NE2	2.27	0.49
1:A:507:PRO:O	1:A:510:PRO:HD3	2.12	0.49
1:A:594:PHE:CD1	1:A:594:PHE:C	2.90	0.49
1:A:105:LEU:O	1:A:110:GLN:HB3	2.12	0.49
1:A:300:PHE:HD1	1:A:854:VAL:HG21	1.77	0.49
1:A:353:LEU:CB	1:A:370:LEU:HD11	2.42	0.49
1:A:564:PHE:CE1	1:A:598:VAL:HG11	2.47	0.49
1:A:629:HIS:HB3	1:A:630:PRO:HD2	1.94	0.49
1:A:786:ALA:CB	1:A:946:ARG:CZ	2.90	0.49
1:A:979:CYS:SG	1:A:993:ILE:HD12	2.53	0.49
1:A:489:ILE:HG12	1:A:582:VAL:CG1	2.36	0.49
1:A:940:ILE:HG12	1:A:968:ILE:CD1	2.41	0.49
2:B:277:PRO:O	2:B:281:LYS:HG3	2.13	0.49
1:A:60:LEU:CD2	1:A:266:LEU:HD13	2.43	0.49
1:A:807:VAL:C	1:A:896:ARG:HG2	2.36	0.49
1:A:870:GLN:HG2	1:A:938:CYS:HB3	1.95	0.49
1:A:1000:VAL:HB	1:A:1001:PRO:CD	2.43	0.49
2:B:46:ALA:HA	2:B:49:VAL:CG1	2.42	0.49
2:B:78:LYS:CG	2:B:79:SER:N	2.76	0.49
1:A:208:VAL:CG2	1:A:256:THR:HB	2.43	0.49
1:A:215:LEU:HD13	1:A:215:LEU:O	2.13	0.49
1:A:423:SER:O	1:A:424:SER:C	2.54	0.49
1:A:659:VAL:HG12	1:A:660:PRO:O	2.13	0.49
1:A:90:ARG:O	1:A:91:PRO:O	2.30	0.49
1:A:699:PHE:CE2	1:A:710:ILE:CD1	2.96	0.49
1:A:805:VAL:HG13	1:A:807:VAL:HB	1.95	0.49
1:A:243:GLU:O	1:A:245:PRO:HD3	2.13	0.49
1:A:806:SER:C	1:A:896:ARG:HG3	2.38	0.49
2:B:85:ARG:CB	2:B:180:ILE:CG1	2.90	0.49
1:A:918:GLY:HA3	2:B:276:ASP:CB	2.39	0.49
1:A:940:ILE:HG23	1:A:941:ALA:N	2.25	0.49
1:A:549:THR:O	1:A:550:ALA:C	2.55	0.49
1:A:994:ARG:NE	2:B:73:TYR:CD1	2.81	0.49
1:A:601:ILE:CG1	1:A:602:ASP:N	2.40	0.48
1:A:785:ILE:HD13	1:A:854:VAL:CG2	2.43	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:787:TYR:OH	1:A:827:PRO:HB2	2.13	0.48
1:A:795:GLU:HB3	1:A:816:ILE:CD1	2.39	0.48
1:A:858:LEU:C	1:A:858:LEU:CD1	2.86	0.48
1:A:987:ILE:HG22	1:A:988:PHE:CD2	2.48	0.48
2:B:57:LEU:HD23	2:B:57:LEU:C	2.38	0.48
2:B:81:GLY:O	2:B:184:ASN:CG	2.56	0.48
2:B:242:ASN:CG	2:B:243:PRO:HD2	2.38	0.48
1:A:380:SER:HB2	1:A:719:ALA:HB1	1.95	0.48
1:A:382:ILE:HG12	1:A:722:ALA:HB3	1.94	0.48
1:A:451:VAL:N	1:A:452:PRO:HD2	2.28	0.48
1:A:997:TRP:HA	1:A:997:TRP:CE3	2.48	0.48
2:B:266:ALA:N	2:B:269:VAL:HG22	2.28	0.48
1:A:253:PHE:CD1	1:A:275:ILE:CD1	2.96	0.48
1:A:412:THR:CG2	1:A:413:GLU:N	2.75	0.48
1:A:651:GLU:C	1:A:654:ALA:CB	2.84	0.48
1:A:1002:MET:O	1:A:1003:PRO:C	2.56	0.48
1:A:61:GLU:OE2	1:A:68:ALA:HB2	2.13	0.48
1:A:207:ARG:O	1:A:209:PRO:HD3	2.13	0.48
1:A:303:ILE:O	1:A:307:LEU:CD2	2.59	0.48
1:A:752:LYS:CG	1:A:758:ILE:HD11	2.32	0.48
1:A:62:GLN:OE1	1:A:62:GLN:HA	2.12	0.48
1:A:220:ARG:HD2	1:A:263:ALA:HB2	1.95	0.48
1:A:481:GLU:O	1:A:484:PRO:CD	2.59	0.48
1:A:105:LEU:O	1:A:110:GLN:CB	2.62	0.48
1:A:109:LEU:HG	1:A:346:LEU:CD2	2.33	0.48
1:A:259:LEU:O	1:A:259:LEU:HD22	2.13	0.48
1:A:328:ARG:HG3	1:A:332:PHE:CZ	2.47	0.48
1:A:336:ILE:HG23	1:A:340:TYR:CE1	2.48	0.48
2:B:139:GLN:HB2	2:B:232:TYR:CE1	2.48	0.48
2:B:142:PHE:O	2:B:143:LEU:HD23	2.14	0.48
1:A:340:TYR:N	1:A:340:TYR:CD1	2.82	0.48
1:A:442:PHE:HZ	1:A:466:LEU:HD22	1.77	0.48
1:A:477:MET:CG	1:A:478:GLY:H	2.26	0.48
1:A:818:PHE:CE1	1:A:988:PHE:CE1	3.01	0.48
1:A:823:THR:HG21	1:A:932:PHE:CZ	2.48	0.48
1:A:94:GLY:O	1:A:95:THR:CG2	2.62	0.48
1:A:197:GLY:CA	1:A:266:LEU:HD21	2.44	0.48
1:A:336:ILE:O	1:A:340:TYR:CD1	2.67	0.48
1:A:394:ARG:HH22	1:A:413:GLU:HA	1.77	0.48
1:A:662:ASP:OD1	1:A:662:ASP:O	2.31	0.48
1:A:846:ARG:HB2	1:A:851:ASP:CG	2.39	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:861:TYR:CE2	1:A:866:ILE:CG1	2.97	0.48
1:A:922:TYR:HA	1:A:925:TYR:HD2	1.79	0.48
2:B:83:THR:O	2:B:84:LEU:HD12	2.11	0.48
1:A:49:GLU:CG	1:A:50:ILE:N	2.76	0.48
1:A:787:TYR:CE1	1:A:939:GLN:HG3	2.49	0.48
1:A:241:THR:OG1	1:A:249:ARG:HG3	2.14	0.48
1:A:492:ASN:HB2	1:A:495:ASN:OD1	2.14	0.48
1:A:791:LYS:CD	1:A:819:ILE:HG23	2.43	0.48
1:A:827:PRO:CD	1:A:967:ALA:HB1	2.43	0.48
1:A:981:CYS:HB3	1:A:984:MET:SD	2.54	0.48
1:A:316:PHE:CE1	1:A:329:ALA:HB1	2.48	0.47
1:A:360:LEU:HA	1:A:363:LYS:HD2	1.96	0.47
1:A:567:LEU:CD1	1:A:592:LEU:CD2	2.75	0.47
1:A:787:TYR:CZ	1:A:827:PRO:HB2	2.49	0.47
1:A:963:ILE:O	1:A:963:ILE:HD13	2.14	0.47
1:A:1027:TRP:O	1:A:1031:LEU:HB2	2.14	0.47
1:A:135:THR:HG23	1:A:136:ASP:N	2.29	0.47
1:A:208:VAL:HG21	1:A:256:THR:HB	1.96	0.47
1:A:427:TRP:CZ2	1:A:431:CYS:SG	3.07	0.47
1:A:649:THR:CG2	1:A:651:GLU:HG2	2.44	0.47
1:A:783:LYS:C	1:A:831:LEU:HD23	2.38	0.47
1:A:824:ASP:OD1	1:A:939:GLN:HG2	2.14	0.47
2:B:129:ILE:HG23	2:B:152:CYS:HA	1.96	0.47
2:B:180:ILE:HD12	2:B:180:ILE:C	2.39	0.47
1:A:110:GLN:NE2	1:A:110:GLN:H	2.11	0.47
1:A:270:THR:HB	1:A:273:ARG:HH21	1.79	0.47
1:A:827:PRO:O	1:A:831:LEU:HD13	2.14	0.47
2:B:186:ILE:CG2	2:B:189:PHE:HB3	2.39	0.47
1:A:90:ARG:CZ	1:A:272:ASP:OD2	2.63	0.47
1:A:148:VAL:HA	1:A:151:VAL:HG12	1.96	0.47
1:A:157:TYR:O	1:A:157:TYR:CG	2.67	0.47
1:A:367:VAL:HG12	1:A:369:ASN:O	2.14	0.47
1:A:399:HIS:HD2	1:A:408:SER:HB3	1.75	0.47
1:A:463:THR:HG23	1:A:464:ALA:N	2.29	0.47
1:A:587:PHE:CB	1:A:588:PRO:CD	2.91	0.47
2:B:228:TYR:CD2	2:B:243:PRO:HD3	2.49	0.47
1:A:73:SER:CB	1:A:76:LEU:HD12	2.45	0.47
1:A:466:LEU:HD22	1:A:466:LEU:C	2.38	0.47
1:A:670:ARG:O	1:A:694:HIS:HB3	2.14	0.47
1:A:767:ILE:O	1:A:771:VAL:HG13	2.14	0.47
1:A:115:VAL:HG13	1:A:116:ALA:N	2.29	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:307:LEU:N	1:A:307:LEU:CD2	2.76	0.47
1:A:348:THR:HG23	1:A:349:VAL:N	2.30	0.47
1:A:363:LYS:O	1:A:364:ASN:HB2	2.15	0.47
1:A:451:VAL:N	1:A:452:PRO:CD	2.78	0.47
1:A:483:PHE:HD2	1:A:504:LEU:HA	1.79	0.47
1:A:581:ASP:O	1:A:587:PHE:CE1	2.67	0.47
1:A:806:SER:HA	1:A:896:ARG:HE	1.80	0.47
1:A:823:THR:HG21	1:A:932:PHE:HZ	1.80	0.47
1:A:913:GLN:HA	2:B:185:ARG:HB2	1.97	0.47
1:A:930:VAL:HG23	1:A:931:PHE:N	2.28	0.47
1:A:965:VAL:O	1:A:968:ILE:CG2	2.57	0.47
2:B:213:LEU:HD11	2:B:260:ILE:HD13	1.96	0.47
1:A:163:SER:C	1:A:164:THR:OG1	2.58	0.47
1:A:501:ILE:HD13	1:A:580:PHE:CG	2.49	0.47
1:A:625:VAL:CG1	1:A:707:LYS:HG3	2.39	0.47
1:A:643:ILE:HD13	1:A:696:GLU:HB3	1.97	0.47
1:A:879:PHE:CD1	1:A:889:PRO:HB3	2.50	0.47
1:A:887:TRP:CH2	1:A:907:LEU:CG	2.85	0.47
1:A:915:TRP:CH2	2:B:77:LEU:N	2.82	0.47
1:A:165:ASN:O	1:A:753:ASN:HB3	2.14	0.47
1:A:254:PHE:CD2	1:A:276:ILE:CG1	2.98	0.47
1:A:580:PHE:HD2	1:A:587:PHE:CD1	2.33	0.47
2:B:147:HIS:CG	2:B:148:THR:H	2.33	0.47
1:A:124:PHE:O	1:A:127:GLN:HG2	2.14	0.47
1:A:179:THR:O	1:A:179:THR:CG2	2.62	0.47
1:A:194:LEU:CD1	1:A:209:PRO:HB2	2.45	0.47
1:A:401:TRP:CD1	1:A:406:ILE:HD13	2.50	0.47
1:A:814:ILE:CD1	1:A:988:PHE:HD1	2.19	0.47
2:B:136:TYR:CD2	2:B:190:LEU:HD23	2.50	0.47
1:A:524:LEU:CD2	1:A:539:LEU:HD11	2.44	0.46
2:B:77:LEU:CD2	2:B:186:ILE:HB	2.43	0.46
2:B:85:ARG:HB2	2:B:180:ILE:HG13	1.96	0.46
1:A:239:GLU:HG3	1:A:239:GLU:O	2.13	0.46
1:A:381:VAL:HG12	1:A:721:VAL:HG12	1.93	0.46
1:A:394:ARG:NH1	1:A:452:PRO:O	2.46	0.46
1:A:640:VAL:CG2	1:A:642:ILE:HG13	2.45	0.46
1:A:788:THR:CG2	1:A:789:LEU:N	2.78	0.46
1:A:794:PRO:CG	1:A:870:GLN:HB2	2.44	0.46
1:A:985:PRO:O	1:A:989:ASN:HA	2.14	0.46
2:B:83:THR:O	2:B:182:LYS:HD2	2.15	0.46
1:A:212:ILE:HG12	1:A:265:GLY:HA3	1.98	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:380:SER:C	1:A:620:ILE:HG23	2.41	0.46
1:A:570:SER:O	1:A:574:TYR:HD2	1.98	0.46
1:A:793:ILE:H	1:A:793:ILE:CD1	2.26	0.46
2:B:77:LEU:HD23	2:B:186:ILE:HD12	1.98	0.46
1:A:120:CYS:HB2	1:A:142:ALA:CB	2.34	0.46
1:A:962:ARG:O	1:A:966:ILE:HG13	2.15	0.46
2:B:188:LYS:HA	2:B:230:PRO:HB2	1.98	0.46
1:A:110:GLN:H	1:A:110:GLN:CD	2.22	0.46
1:A:117:ALA:HB2	1:A:145:LEU:HB2	1.98	0.46
1:A:215:LEU:HD12	1:A:216:GLN:HE21	1.81	0.46
1:A:340:TYR:CE1	1:A:796:LEU:CD2	2.99	0.46
1:A:415:GLN:HE21	1:A:415:GLN:CA	2.29	0.46
1:A:561:VAL:HG12	1:A:562:LEU:N	2.31	0.46
1:A:731:SER:HB2	1:A:732:PRO:CD	2.43	0.46
2:B:80:PRO:HB2	2:B:183:MET:SD	2.55	0.46
2:B:182:LYS:HD2	2:B:182:LYS:H	1.80	0.46
1:A:124:PHE:C	1:A:127:GLN:HG2	2.41	0.46
1:A:319:ALA:HA	1:A:322:ILE:HG22	1.98	0.46
1:A:585:MET:HE2	1:A:589:THR:HG21	1.97	0.46
2:B:141:SER:OG	2:B:142:PHE:N	2.49	0.46
1:A:540:ASP:OD2	1:A:542:GLN:HB3	2.16	0.46
1:A:914:GLU:HB2	2:B:184:ASN:CB	2.46	0.46
2:B:54:ILE:C	2:B:57:LEU:HB3	2.41	0.46
2:B:254:ARG:HD3	2:B:255:ASN:ND2	2.07	0.46
2:B:272:ASP:CG	2:B:275:HIS:HB2	2.41	0.46
1:A:166:ILE:CB	1:A:753:ASN:HB3	2.46	0.46
1:A:400:LEU:HD22	1:A:427:TRP:CZ3	2.49	0.46
1:A:496:LYS:HE2	1:A:496:LYS:HA	1.97	0.46
1:A:978:LEU:HG	1:A:990:PHE:CG	2.50	0.46
2:B:82:VAL:O	2:B:82:VAL:HG23	2.16	0.46
2:B:84:LEU:HG	2:B:181:ILE:CG1	2.46	0.46
2:B:265:LEU:O	2:B:266:ALA:HB2	2.16	0.46
1:A:48:MET:HE1	1:A:246:LEU:HD11	1.92	0.46
1:A:311:PHE:CA	1:A:314:THR:HG22	2.44	0.46
1:A:336:ILE:HG22	1:A:336:ILE:O	2.15	0.46
1:A:412:THR:HG22	1:A:414:ASP:N	2.31	0.46
1:A:446:GLN:C	1:A:448:ALA:N	2.74	0.46
1:A:981:CYS:SG	1:A:982:PRO:HD2	2.56	0.46
1:A:993:ILE:HD13	1:A:993:ILE:N	2.23	0.46
2:B:260:ILE:HG22	2:B:261:VAL:N	2.30	0.46
1:A:127:GLN:OE1	1:A:138:ASN:HB2	2.16	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:524:LEU:HA	1:A:527:CYS:SG	2.56	0.46
1:A:712:GLU:HG2	1:A:736:LYS:HE3	1.98	0.46
2:B:176:LYS:HE3	2:B:251:ASN:O	2.16	0.46
2:B:254:ARG:HD3	2:B:254:ARG:C	2.41	0.46
1:A:66:THR:HG21	1:A:266:LEU:HD11	1.98	0.45
1:A:291:THR:CG2	1:A:292:PRO:N	2.78	0.45
1:A:376:LEU:HD22	1:A:770:GLY:HA3	1.98	0.45
1:A:401:TRP:HD1	1:A:406:ILE:HD13	1.81	0.45
1:A:679:LEU:O	1:A:679:LEU:HD22	2.14	0.45
1:A:805:VAL:CG1	1:A:807:VAL:HG12	2.46	0.45
1:A:951:LEU:HD22	1:A:955:GLN:OE1	2.16	0.45
1:A:674:ILE:HA	1:A:678:GLN:OE1	2.17	0.45
1:A:690:ALA:HA	1:A:693:THR:HG21	1.99	0.45
1:A:898:GLN:O	1:A:904:LEU:CD1	2.63	0.45
1:A:363:LYS:HE2	1:A:773:GLN:NE2	2.24	0.45
1:A:376:LEU:HD22	1:A:771:VAL:N	2.31	0.45
1:A:869:ILE:HG21	1:A:1008:ILE:HG13	1.98	0.45
2:B:176:LYS:O	2:B:177:PRO:O	2.34	0.45
1:A:180:VAL:CG1	1:A:194:LEU:HD22	2.47	0.45
1:A:286:VAL:HG11	1:A:735:LYS:HE3	1.96	0.45
1:A:602:ASP:HA	1:A:603:PRO:HD3	1.69	0.45
1:A:657:LEU:O	1:A:658:ARG:HB2	2.17	0.45
1:A:880:THR:HG23	1:A:881:ALA:N	2.32	0.45
1:A:922:TYR:CE1	2:B:275:HIS:ND1	2.84	0.45
1:A:926:THR:O	1:A:930:VAL:HG13	2.17	0.45
1:A:151:VAL:HG13	1:A:152:THR:N	2.32	0.45
1:A:293:ILE:CG2	1:A:294:ALA:N	2.79	0.45
1:A:451:VAL:CG1	1:A:452:PRO:HD3	2.46	0.45
1:A:649:THR:HG23	1:A:651:GLU:HG2	1.97	0.45
1:A:741:VAL:CG1	1:A:759:LEU:CD2	2.94	0.45
1:A:811:LEU:CD1	1:A:815:THR:HG21	2.46	0.45
1:A:235:THR:CG2	1:A:236:ARG:N	2.80	0.45
1:A:456:VAL:HG21	1:A:467:LYS:HE3	1.98	0.45
1:A:965:VAL:HG13	1:A:966:ILE:N	2.32	0.45
2:B:140:GLU:HA	2:B:140:GLU:OE1	2.17	0.45
1:A:100:LYS:HD3	1:A:103:ARG:HG3	1.99	0.45
1:A:219:GLY:O	1:A:261:GLY:HA3	2.16	0.45
1:A:236:ARG:NH1	1:A:251:ILE:O	2.49	0.45
1:A:544:ARG:O	1:A:548:GLN:HG2	2.16	0.45
1:A:547:PHE:CD1	1:A:547:PHE:C	2.95	0.45
1:A:791:LYS:O	1:A:795:GLU:HG3	2.17	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:872:PHE:HD2	2:B:55:PHE:CE1	2.34	0.45
1:A:917:PHE:HB3	2:B:278:TYR:CD1	2.51	0.45
2:B:38:VAL:HG23	2:B:39:TRP:H	1.82	0.45
2:B:82:VAL:CG2	2:B:281:LYS:N	2.74	0.45
1:A:162:LYS:HE2	1:A:162:LYS:HB2	1.73	0.45
1:A:173:LEU:CD1	1:A:173:LEU:O	2.61	0.45
1:A:350:THR:CG2	1:A:351:VAL:N	2.79	0.45
1:A:392:GLN:O	1:A:393:ASN:HB3	2.17	0.45
1:A:407:HIS:HB3	1:A:420:PHE:CD2	2.52	0.45
1:A:881:ALA:HA	1:A:997:TRP:CH2	2.52	0.45
1:A:73:SER:HB3	1:A:76:LEU:HD12	1.98	0.45
1:A:318:VAL:HG23	1:A:319:ALA:N	2.31	0.45
1:A:339:ALA:C	1:A:796:LEU:HD11	2.41	0.45
1:A:763:ASN:ND2	1:A:765:ALA:H	2.15	0.45
1:A:913:GLN:HE21	2:B:77:LEU:CD2	2.07	0.45
1:A:924:GLN:HG2	1:A:928:TYR:CZ	2.51	0.45
2:B:192:GLY:O	2:B:193:ASN:CG	2.60	0.45
1:A:72:LEU:CD1	1:A:197:GLY:C	2.90	0.45
1:A:346:LEU:H	1:A:346:LEU:CD2	2.26	0.45
1:A:483:PHE:CD2	1:A:504:LEU:HA	2.52	0.45
1:A:786:ALA:CB	1:A:946:ARG:NH1	2.76	0.45
1:A:791:LYS:HD2	1:A:824:ASP:OD2	2.17	0.45
1:A:818:PHE:CZ	1:A:988:PHE:CE1	3.04	0.45
1:A:914:GLU:OE1	2:B:182:LYS:HD3	2.17	0.45
1:A:916:THR:HG21	2:B:278:TYR:HB2	1.93	0.45
2:B:84:LEU:HD13	2:B:282:VAL:HG22	1.98	0.45
1:A:92:PRO:CD	1:A:171:LYS:HE3	2.42	0.44
1:A:171:LYS:C	1:A:173:LEU:N	2.61	0.44
1:A:196:VAL:HG23	1:A:267:VAL:O	2.17	0.44
1:A:353:LEU:HB3	1:A:370:LEU:HD11	1.99	0.44
1:A:456:VAL:CG2	1:A:467:LYS:HE3	2.47	0.44
1:A:473:LEU:HG	1:A:479:TYR:CZ	2.51	0.44
1:A:509:ASP:C	1:A:511:ARG:N	2.74	0.44
1:A:823:THR:HB	1:A:971:GLN:HG3	1.99	0.44
1:A:764:PHE:CZ	1:A:767:ILE:HD12	2.53	0.44
1:A:830:SER:HB3	1:A:964:LEU:HA	1.98	0.44
1:A:915:TRP:HH2	2:B:76:GLN:HB3	1.83	0.44
1:A:915:TRP:CE2	2:B:77:LEU:HD13	2.52	0.44
1:A:947:LYS:HD2	1:A:964:LEU:HD21	1.98	0.44
1:A:124:PHE:CE1	1:A:134:THR:CG2	3.00	0.44
1:A:147:ALA:CA	1:A:150:VAL:HG12	2.47	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:473:LEU:CD1	1:A:479:TYR:OH	2.65	0.44
1:A:480:ARG:HE	1:A:480:ARG:HB2	1.63	0.44
1:A:790:THR:HG21	1:A:866:ILE:HG22	1.99	0.44
1:A:891:LEU:HD22	1:A:891:LEU:N	2.32	0.44
2:B:78:LYS:HD3	2:B:78:LYS:H	1.79	0.44
2:B:179:PHE:HE1	2:B:249:LEU:CG	2.30	0.44
1:A:161:PHE:O	1:A:161:PHE:CG	2.71	0.44
1:A:220:ARG:HD2	1:A:263:ALA:CB	2.46	0.44
1:A:339:ALA:O	1:A:796:LEU:HD11	2.18	0.44
1:A:442:PHE:HE2	1:A:466:LEU:HD21	1.82	0.44
1:A:466:LEU:O	1:A:466:LEU:HD23	2.18	0.44
1:A:643:ILE:HA	1:A:696:GLU:OE1	2.18	0.44
1:A:743:MET:HE3	1:A:762:ASP:CA	2.47	0.44
1:A:794:PRO:CG	1:A:870:GLN:CB	2.96	0.44
2:B:136:TYR:CD1	2:B:190:LEU:HD23	2.53	0.44
1:A:805:VAL:HG11	1:A:807:VAL:HB	1.99	0.44
1:A:940:ILE:CG2	1:A:941:ALA:N	2.80	0.44
1:A:278:ARG:O	1:A:279:ILE:C	2.60	0.44
1:A:300:PHE:CZ	1:A:304:ILE:HG13	2.52	0.44
1:A:381:VAL:O	1:A:721:VAL:HA	2.18	0.44
1:A:411:THR:HG21	1:A:601:ILE:HG23	1.99	0.44
1:A:446:GLN:O	1:A:449:VAL:HG22	2.17	0.44
1:A:775:ARG:HH11	1:A:840:ILE:HG22	1.82	0.44
1:A:1015:ARG:NE	1:A:1031:LEU:CD2	2.81	0.44
2:B:78:LYS:CG	2:B:79:SER:H	2.31	0.44
1:A:106:ALA:C	1:A:107:GLY:O	2.61	0.44
1:A:532:ILE:O	1:A:532:ILE:CG2	2.64	0.44
1:A:743:MET:CE	1:A:762:ASP:CA	2.94	0.44
1:A:760:LEU:N	1:A:760:LEU:CD2	2.77	0.44
1:A:807:VAL:CG2	1:A:808:PRO:CD	2.95	0.44
1:A:811:LEU:HA	1:A:928:TYR:HD1	1.83	0.44
1:A:433:VAL:HG11	1:A:564:PHE:HB3	1.99	0.44
1:A:443:LYS:HD2	1:A:455:ILE:HD13	2.00	0.44
1:A:531:LEU:HG	1:A:533:LYS:O	2.18	0.44
1:A:545:GLU:O	1:A:549:THR:HG23	2.18	0.44
1:A:864:PHE:CZ	2:B:44:TYR:CD1	3.05	0.44
1:A:940:ILE:HD11	1:A:968:ILE:HB	1.99	0.44
1:A:929:THR:O	1:A:932:PHE:HB3	2.18	0.44
2:B:84:LEU:HD11	2:B:282:VAL:CG2	2.45	0.44
1:A:472:THR:HG23	1:A:473:LEU:N	2.33	0.43
1:A:652:ASP:OD1	1:A:653:ILE:HG13	2.18	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:669:ALA:O	1:A:694:HIS:HD2	2.01	0.43
1:A:819:ILE:HG22	1:A:820:GLU:N	2.28	0.43
1:A:978:LEU:CD2	1:A:990:PHE:CD2	2.96	0.43
2:B:82:VAL:CG2	2:B:281:LYS:CA	2.96	0.43
2:B:185:ARG:NH1	2:B:231:TYR:OH	2.51	0.43
1:A:81:LEU:HD23	1:A:81:LEU:C	2.43	0.43
1:A:146:ILE:O	1:A:149:VAL:HG23	2.16	0.43
1:A:322:ILE:CG2	1:A:324:TYR:CE2	3.02	0.43
1:A:565:CYS:HB3	1:A:594:PHE:HA	2.00	0.43
1:A:693:THR:HG23	1:A:694:HIS:N	2.32	0.43
2:B:182:LYS:HD2	2:B:182:LYS:N	2.33	0.43
1:A:64:TYR:CD1	1:A:196:VAL:HG22	2.53	0.43
1:A:248:THR:OG1	1:A:251:ILE:HD13	2.19	0.43
1:A:254:PHE:O	1:A:255:SER:CB	2.63	0.43
1:A:315:PHE:CB	1:A:336:ILE:CD1	2.94	0.43
2:B:290:LYS:O	2:B:290:LYS:HG2	2.17	0.43
1:A:94:GLY:O	1:A:95:THR:HG23	2.18	0.43
1:A:96:PRO:HB2	1:A:100:LYS:HG3	2.00	0.43
1:A:250:ASN:OD1	1:A:251:ILE:CD1	2.66	0.43
1:A:634:LYS:HD2	1:A:673:VAL:HG21	2.00	0.43
1:A:640:VAL:HG23	1:A:642:ILE:H	1.84	0.43
1:A:791:LYS:CD	1:A:935:ILE:CG2	2.96	0.43
1:A:827:PRO:HA	1:A:967:ALA:CB	2.48	0.43
1:A:922:TYR:HA	1:A:925:TYR:CD2	2.54	0.43
1:A:378:SER:O	1:A:720:ILE:HB	2.19	0.43
2:B:85:ARG:O	2:B:86:PRO:C	2.61	0.43
2:B:149:LYS:HD3	2:B:232:TYR:CE2	2.53	0.43
2:B:282:VAL:HG13	2:B:284:PHE:CZ	2.53	0.43
1:A:48:MET:HG3	1:A:49:GLU:N	2.34	0.43
1:A:52:ASP:HB2	1:A:55:LEU:HD12	2.01	0.43
1:A:259:LEU:C	1:A:259:LEU:HD13	2.43	0.43
1:A:657:LEU:C	1:A:658:ARG:CG	2.92	0.43
1:A:790:THR:CA	1:A:862:SER:OG	2.67	0.43
2:B:69:TYR:HE1	2:B:235:LYS:NZ	2.16	0.43
2:B:85:ARG:C	2:B:86:PRO:O	2.61	0.43
2:B:185:ARG:HB3	2:B:231:TYR:CD2	2.53	0.43
1:A:178:ALA:O	1:A:188:GLN:HA	2.18	0.43
1:A:222:VAL:O	1:A:222:VAL:HG23	2.18	0.43
1:A:397:VAL:C	1:A:600:MET:HA	2.43	0.43
1:A:486:VAL:HG22	1:A:501:ILE:C	2.43	0.43
1:A:783:LYS:O	1:A:946:ARG:CG	2.66	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:69:THR:HG23	1:A:70:LYS:HG2	2.00	0.43
1:A:254:PHE:CE2	1:A:276:ILE:CD1	2.87	0.43
1:A:287:GLU:H	1:A:287:GLU:CD	2.26	0.43
1:A:475:ASN:HB3	1:A:477:MET:HG2	2.00	0.43
1:A:479:TYR:C	1:A:482:ARG:HG2	2.42	0.43
2:B:237:GLN:HB3	2:B:240:TYR:HB2	2.00	0.43
2:B:251:ASN:ND2	2:B:253:PRO:O	2.52	0.43
1:A:66:THR:OG1	1:A:72:LEU:CD1	2.64	0.43
1:A:147:ALA:C	1:A:150:VAL:HG12	2.41	0.43
1:A:216:GLN:OE1	1:A:264:GLN:CD	2.62	0.43
1:A:257:MET:HE2	1:A:257:MET:HB2	1.87	0.43
1:A:398:SER:OG	1:A:599:SER:OG	2.36	0.43
1:A:693:THR:CG2	1:A:694:HIS:HD1	2.29	0.43
1:A:909:ASP:C	1:A:909:ASP:OD1	2.61	0.43
1:A:1002:MET:HB3	1:A:1003:PRO:CD	2.43	0.43
1:A:230:GLU:OE1	1:A:230:GLU:CA	2.48	0.43
1:A:339:ALA:CB	1:A:796:LEU:CD1	2.85	0.43
1:A:451:VAL:HG11	1:A:471:LEU:HD13	2.00	0.43
1:A:582:VAL:O	1:A:582:VAL:HG12	2.18	0.43
1:A:699:PHE:CZ	1:A:710:ILE:HD12	2.53	0.43
1:A:60:LEU:CD2	1:A:266:LEU:HB3	2.48	0.42
1:A:87:ASN:HD22	1:A:271:GLY:H	1.64	0.42
1:A:188:GLN:HE21	1:A:188:GLN:HB3	1.58	0.42
1:A:391:THR:HG21	1:A:636:ILE:HD13	2.01	0.42
1:A:391:THR:CA	1:A:604:PRO:HA	2.32	0.42
1:A:434:LEU:CD2	1:A:564:PHE:CZ	3.02	0.42
1:A:764:PHE:CE1	1:A:767:ILE:CD1	3.02	0.42
1:A:925:TYR:CG	1:A:989:ASN:OD1	2.72	0.42
1:A:972:VAL:HG13	1:A:973:CYS:N	2.33	0.42
2:B:48:TYR:HD1	2:B:48:TYR:HA	1.61	0.42
2:B:176:LYS:C	2:B:177:PRO:O	2.61	0.42
2:B:185:ARG:HH11	2:B:185:ARG:HD2	1.74	0.42
1:A:122:ILE:CG2	1:A:123:ALA:N	2.82	0.42
1:A:163:SER:OG	1:A:164:THR:N	2.52	0.42
1:A:266:LEU:C	1:A:266:LEU:CD2	2.92	0.42
1:A:311:PHE:HA	1:A:314:THR:CG2	2.47	0.42
1:A:726:ASP:OD1	1:A:743:MET:CG	2.65	0.42
1:A:799:TYR:CE2	1:A:803:ILE:HD11	2.54	0.42
1:A:826:PHE:O	1:A:830:SER:OG	2.30	0.42
1:A:861:TYR:CD1	1:A:865:GLN:NE2	2.87	0.42
2:B:66:ILE:HG22	2:B:67:ASP:O	2.19	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:446:GLN:CB	1:A:449:VAL:CG2	2.83	0.42
1:A:796:LEU:C	1:A:798:PRO:HD2	2.44	0.42
1:A:811:LEU:CA	1:A:928:TYR:HD1	2.32	0.42
1:A:984:MET:N	1:A:985:PRO:CD	2.82	0.42
2:B:84:LEU:HG	2:B:181:ILE:HA	2.01	0.42
1:A:213:ARG:NH1	1:A:250:ASN:HB2	2.33	0.42
1:A:631:ILE:CG2	1:A:632:THR:N	2.82	0.42
1:A:651:GLU:CA	1:A:654:ALA:HB2	2.46	0.42
1:A:699:PHE:CD2	1:A:710:ILE:CD1	3.02	0.42
1:A:816:ILE:HG22	1:A:820:GLU:OE2	2.18	0.42
1:A:1007:LEU:HD21	2:B:54:ILE:HD13	2.01	0.42
2:B:82:VAL:HG13	2:B:280:GLY:CA	2.42	0.42
1:A:124:PHE:HE1	1:A:134:THR:HG23	1.83	0.42
1:A:135:THR:CG2	1:A:136:ASP:N	2.81	0.42
1:A:402:PHE:O	1:A:403:ASP:HB2	2.19	0.42
1:A:422:GLN:CG	1:A:423:SER:N	2.82	0.42
1:A:587:PHE:CB	1:A:588:PRO:HD2	2.30	0.42
1:A:787:TYR:HB2	1:A:946:ARG:HG2	2.02	0.42
1:A:805:VAL:O	1:A:806:SER:HB2	2.19	0.42
1:A:811:LEU:CD2	1:A:816:ILE:CD1	2.97	0.42
1:A:872:PHE:HD2	2:B:55:PHE:CZ	2.37	0.42
1:A:875:PHE:O	1:A:878:TYR:HB3	2.19	0.42
2:B:75:ASP:O	2:B:78:LYS:HB3	2.20	0.42
1:A:488:GLU:HB2	1:A:499:LEU:O	2.20	0.42
1:A:535:GLN:HG2	1:A:536:GLU:N	2.33	0.42
1:A:612:VAL:O	1:A:612:VAL:HG12	2.15	0.42
1:A:702:THR:HA	1:A:706:GLN:HE22	1.80	0.42
1:A:793:ILE:HG22	1:A:871:SER:OG	2.20	0.42
2:B:181:ILE:HG22	2:B:182:LYS:N	2.35	0.42
1:A:46:LYS:O	1:A:705:GLN:HB3	2.20	0.42
1:A:182:ARG:NH2	1:A:189:ILE:HD13	2.35	0.42
1:A:307:LEU:CD2	1:A:307:LEU:H	2.33	0.42
1:A:610:ASP:C	1:A:612:VAL:N	2.76	0.42
1:A:850:ARG:O	1:A:850:ARG:CG	2.67	0.42
1:A:994:ARG:H	1:A:997:TRP:HD1	1.65	0.42
1:A:286:VAL:HG21	1:A:735:LYS:HG3	2.01	0.42
1:A:316:PHE:CD2	1:A:316:PHE:C	2.96	0.42
1:A:360:LEU:HD21	1:A:773:GLN:CD	2.44	0.42
1:A:504:LEU:HD23	1:A:509:ASP:HB2	2.02	0.42
1:A:921:LEU:HB3	1:A:925:TYR:CE2	2.55	0.42
2:B:40:ILE:HG22	2:B:41:SER:N	2.34	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:82:VAL:HG22	2:B:281:LYS:CA	2.49	0.42
2:B:272:ASP:OD2	2:B:275:HIS:HB2	2.20	0.42
1:A:145:LEU:C	1:A:147:ALA:N	2.77	0.42
1:A:166:ILE:O	1:A:170:PHE:HD2	2.03	0.42
1:A:811:LEU:HD21	1:A:816:ILE:HD13	2.01	0.42
1:A:489:ILE:HA	1:A:490:PRO:HD3	1.88	0.42
1:A:532:ILE:O	1:A:533:LYS:CB	2.67	0.42
1:A:791:LYS:HE3	1:A:824:ASP:CG	2.45	0.42
1:A:952:SER:C	1:A:954:PHE:N	2.76	0.42
2:B:192:GLY:N	2:B:268:HIS:HD2	2.18	0.42
2:B:290:LYS:O	2:B:290:LYS:CG	2.68	0.42
1:A:56:SER:H	1:A:59:GLU:CD	2.26	0.41
1:A:196:VAL:O	1:A:196:VAL:HG13	2.19	0.41
1:A:801:ILE:HG23	1:A:802:TYR:N	2.35	0.41
1:A:823:THR:CG2	1:A:932:PHE:HZ	2.33	0.41
1:A:921:LEU:HB3	1:A:925:TYR:CZ	2.55	0.41
1:A:921:LEU:O	1:A:925:TYR:CD2	2.73	0.41
2:B:33:THR:O	2:B:34:LEU:HD23	2.20	0.41
1:A:148:VAL:O	1:A:149:VAL:C	2.62	0.41
1:A:821:LEU:CD1	1:A:821:LEU:N	2.83	0.41
1:A:916:THR:HG21	2:B:276:ASP:HB2	2.02	0.41
2:B:75:ASP:O	2:B:78:LYS:HD2	2.20	0.41
2:B:213:LEU:CD2	2:B:213:LEU:C	2.93	0.41
2:B:213:LEU:HD12	2:B:260:ILE:CD1	2.50	0.41
1:A:81:LEU:C	1:A:81:LEU:CD2	2.94	0.41
1:A:314:THR:CG2	1:A:315:PHE:CD1	3.01	0.41
1:A:571:GLU:O	1:A:572:LYS:C	2.63	0.41
1:A:574:TYR:OH	1:A:588:PRO:CD	2.61	0.41
1:A:880:THR:CG2	1:A:997:TRP:CZ3	3.01	0.41
1:A:922:TYR:HB3	2:B:76:GLN:NE2	2.33	0.41
1:A:966:ILE:CG2	1:A:970:PHE:CD2	3.02	0.41
2:B:85:ARG:HB3	2:B:86:PRO:HD3	2.01	0.41
1:A:122:ILE:HG23	1:A:123:ALA:N	2.35	0.41
1:A:124:PHE:CE1	1:A:134:THR:HG23	2.56	0.41
1:A:207:ARG:CB	1:A:257:MET:HG3	2.49	0.41
1:A:406:ILE:HD11	1:A:550:ALA:HB1	2.02	0.41
1:A:523:VAL:CG1	1:A:524:LEU:N	2.81	0.41
1:A:651:GLU:O	1:A:652:ASP:O	2.38	0.41
2:B:36:ARG:O	2:B:39:TRP:N	2.50	0.41
2:B:263:LYS:HD2	2:B:271:PHE:CZ	2.55	0.41
1:A:479:TYR:O	1:A:480:ARG:C	2.63	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:669:ALA:O	1:A:694:HIS:CD2	2.74	0.41
1:A:684:PRO:HB2	1:A:716:ARG:HH12	1.85	0.41
1:A:798:PRO:HA	1:A:875:PHE:HZ	1.85	0.41
1:A:927:CYS:HA	1:A:930:VAL:HG22	2.03	0.41
1:A:210:ALA:HB1	1:A:269:ASN:O	2.19	0.41
1:A:211:ASP:HB2	1:A:269:ASN:HB2	2.03	0.41
1:A:574:TYR:CE1	1:A:578:TYR:CE2	3.07	0.41
1:A:791:LYS:HE2	1:A:935:ILE:CG2	2.50	0.41
1:A:793:ILE:HD11	1:A:863:TYR:HA	2.01	0.41
1:A:967:ALA:O	1:A:971:GLN:HB2	2.21	0.41
1:A:1013:GLU:O	1:A:1014:ILE:C	2.61	0.41
1:A:1019:VAL:HG23	1:A:1020:ARG:N	2.36	0.41
2:B:213:LEU:CD1	2:B:260:ILE:HD13	2.50	0.41
2:B:282:VAL:CG1	2:B:283:GLU:N	2.83	0.41
1:A:220:ARG:HH21	1:A:222:VAL:HG12	1.85	0.41
1:A:227:LEU:N	1:A:227:LEU:CD1	2.82	0.41
1:A:251:ILE:CD1	1:A:251:ILE:N	2.83	0.41
1:A:353:LEU:CB	1:A:370:LEU:CD1	2.99	0.41
1:A:353:LEU:HB2	1:A:370:LEU:HD21	2.02	0.41
1:A:581:ASP:HB3	1:A:584:ALA:O	2.21	0.41
1:A:814:ILE:HD13	1:A:988:PHE:HA	2.01	0.41
1:A:885:GLU:HG3	2:B:76:GLN:HB3	2.03	0.41
1:A:940:ILE:CD1	1:A:968:ILE:CG1	2.97	0.41
1:A:1015:ARG:NE	1:A:1031:LEU:HB3	2.32	0.41
2:B:34:LEU:O	2:B:36:ARG:HG3	2.20	0.41
1:A:104:GLN:OE1	1:A:104:GLN:HA	2.21	0.41
1:A:315:PHE:CA	1:A:318:VAL:HG22	2.44	0.41
1:A:341:VAL:HG23	1:A:343:GLU:OE2	2.20	0.41
1:A:351:VAL:CG1	1:A:829:VAL:HG22	2.49	0.41
1:A:477:MET:O	1:A:478:GLY:C	2.62	0.41
1:A:479:TYR:HA	1:A:482:ARG:CG	2.48	0.41
1:A:479:TYR:HA	1:A:482:ARG:HD2	1.95	0.41
2:B:275:HIS:O	2:B:277:PRO:HD3	2.20	0.41
1:A:64:TYR:O	1:A:65:GLN:HB2	2.21	0.41
1:A:122:ILE:HG21	1:A:334:MET:HE1	2.03	0.41
1:A:200:VAL:CG1	1:A:202:MET:SD	3.06	0.41
1:A:208:VAL:HG11	1:A:220:ARG:HH22	1.84	0.41
1:A:251:ILE:CG2	1:A:252:ALA:N	2.80	0.41
1:A:353:LEU:CB	1:A:370:LEU:CG	2.98	0.41
1:A:393:ASN:OD1	1:A:393:ASN:O	2.38	0.41
1:A:446:GLN:OE1	1:A:454:ARG:CB	2.63	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:653:ILE:O	1:A:655:ALA:N	2.54	0.41
1:A:692:ARG:HH11	1:A:692:ARG:HD2	1.54	0.41
1:A:814:ILE:CD1	1:A:988:PHE:HA	2.51	0.41
1:A:841:MET:CA	1:A:841:MET:CE	2.84	0.41
1:A:965:VAL:CG1	1:A:966:ILE:N	2.84	0.41
2:B:190:LEU:N	2:B:190:LEU:HD12	2.36	0.41
1:A:60:LEU:HG	1:A:64:TYR:CD2	2.56	0.41
1:A:117:ALA:N	1:A:145:LEU:HD12	2.36	0.41
1:A:315:PHE:CB	1:A:336:ILE:HD11	2.51	0.41
1:A:356:THR:HG22	1:A:359:ARG:HH21	1.86	0.41
1:A:385:ASP:HB3	1:A:725:GLY:HA2	2.03	0.41
1:A:527:CYS:HB2	1:A:592:LEU:O	2.20	0.41
1:A:691:LEU:HD11	1:A:713:SER:HB2	2.03	0.41
1:A:787:TYR:CZ	1:A:939:GLN:HG3	2.56	0.41
1:A:915:TRP:CZ3	2:B:76:GLN:CG	3.02	0.41
1:A:916:THR:HG22	1:A:919:GLN:HB2	2.02	0.41
1:A:1016:LYS:HA	1:A:1019:VAL:HG22	2.02	0.41
1:A:72:LEU:HD13	1:A:198:ASP:N	2.36	0.40
1:A:254:PHE:HD2	1:A:276:ILE:CD1	2.29	0.40
1:A:527:CYS:CB	1:A:592:LEU:O	2.69	0.40
1:A:647:SER:OG	1:A:671:ALA:HB2	2.20	0.40
1:A:699:PHE:CD2	1:A:710:ILE:HD11	2.56	0.40
1:A:814:ILE:CG2	1:A:815:THR:N	2.83	0.40
1:A:817:LEU:HA	1:A:820:GLU:HG2	2.02	0.40
1:A:861:TYR:OH	1:A:866:ILE:HD11	2.20	0.40
2:B:85:ARG:N	2:B:86:PRO:CD	2.85	0.40
1:A:291:THR:CG2	1:A:292:PRO:HD2	2.52	0.40
1:A:473:LEU:HG	1:A:473:LEU:O	2.22	0.40
1:A:629:HIS:CB	1:A:630:PRO:HD2	2.51	0.40
1:A:691:LEU:HD12	1:A:713:SER:HB3	2.02	0.40
1:A:783:LYS:HB3	1:A:831:LEU:HD23	2.03	0.40
1:A:855:ASN:HD22	1:A:857:PRO:CG	2.32	0.40
1:A:1026:TRP:HH2	2:B:43:TYR:CD2	2.39	0.40
2:B:229:PHE:CD1	2:B:229:PHE:N	2.89	0.40
1:A:171:LYS:O	1:A:174:VAL:HB	2.20	0.40
1:A:322:ILE:CG2	1:A:324:TYR:CD2	2.99	0.40
1:A:340:TYR:CE1	1:A:796:LEU:HD21	2.57	0.40
1:A:421:ASP:OD1	1:A:421:ASP:O	2.37	0.40
1:A:428:ARG:HH11	1:A:428:ARG:HD3	1.70	0.40
1:A:741:VAL:HG13	1:A:759:LEU:CD2	2.51	0.40
1:A:877:ASP:HA	1:A:1000:VAL:HG11	2.02	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:883:ALA:HA	1:A:887:TRP:O	2.22	0.40
2:B:82:VAL:CG2	2:B:281:LYS:C	2.94	0.40
1:A:511:ARG:CZ	1:A:568:TYR:CE2	3.04	0.40
1:A:761:ASP:CG	1:A:763:ASN:HB2	2.45	0.40
1:A:787:TYR:HE1	1:A:943:VAL:CG2	2.35	0.40
1:A:834:GLU:OE2	1:A:947:LYS:HE2	2.22	0.40
1:A:884:GLN:HG3	2:B:72:ASP:HB3	2.04	0.40
1:A:947:LYS:HB3	1:A:947:LYS:NZ	2.37	0.40
1:A:996:GLN:HA	1:A:999:LEU:HD13	2.04	0.40
2:B:271:PHE:CD1	2:B:281:LYS:HE2	2.57	0.40
1:A:284:SER:C	1:A:286:VAL:N	2.78	0.40
1:A:307:LEU:HD12	1:A:311:PHE:HE1	1.87	0.40
1:A:322:ILE:O	1:A:322:ILE:CG1	2.60	0.40
1:A:539:LEU:CD2	1:A:539:LEU:C	2.93	0.40
1:A:790:THR:N	1:A:862:SER:OG	2.55	0.40
1:A:856:GLU:N	1:A:857:PRO:CD	2.85	0.40
2:B:213:LEU:HD12	2:B:260:ILE:HD11	2.02	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 PDB entries followed by that with respect to all EM entries.

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	991/1034 (96%)	904 (91%)	60 (6%)	27 (3%)	4	25
2	B	163/290 (56%)	133 (82%)	17 (10%)	13 (8%)	1	9
All	All	1154/1324 (87%)	1037 (90%)	77 (7%)	40 (4%)	4	20

All (40) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	163	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	172	ASN
1	A	175	PRO
1	A	283	ALA
1	A	378	SER
1	A	395	MET
1	A	423	SER
1	A	510	PRO
1	A	578	TYR
1	A	601	ILE
1	A	603	PRO
1	A	604	PRO
1	A	654	ALA
2	B	86	PRO
2	B	140	GLU
2	B	177	PRO
1	A	91	PRO
1	A	107	GLY
1	A	161	PHE
1	A	285	GLY
1	A	478	GLY
1	A	658	ARG
2	B	128	SER
2	B	255	ASN
2	B	279	GLU
1	A	159	GLN
1	A	424	SER
2	B	193	ASN
2	B	266	ALA
1	A	137	ASP
1	A	447	ASP
2	B	38	VAL
2	B	45	VAL
1	A	93	ARG
1	A	166	ILE
2	B	43	TYR
2	B	49	VAL
2	B	276	ASP
1	A	96	PRO
1	A	153	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 PDB entries followed by that with respect to all EM entries.

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	840/869 (97%)	778 (93%)	62 (7%)	13	33
2	B	162/254 (64%)	132 (82%)	30 (18%)	1	8
All	All	1002/1123 (89%)	910 (91%)	92 (9%)	11	26

All (92) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	50	ILE
1	A	57	VAL
1	A	65	GLN
1	A	83	ARG
1	A	93	ARG
1	A	99	VAL
1	A	109	LEU
1	A	122	ILE
1	A	146	ILE
1	A	154	CYS
1	A	164	THR
1	A	171	LYS
1	A	173	LEU
1	A	174	VAL
1	A	208	VAL
1	A	293	ILE
1	A	307	LEU
1	A	309	ILE
1	A	346	LEU
1	A	376	LEU
1	A	378	SER
1	A	395	MET
1	A	397	VAL
1	A	421	ASP
1	A	443	LYS
1	A	446	GLN
1	A	466	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	467	LYS
1	A	480	ARG
1	A	532	ILE
1	A	533	LYS
1	A	539	LEU
1	A	552	LEU
1	A	599	SER
1	A	601	ILE
1	A	602	ASP
1	A	617	THR
1	A	645	GLU
1	A	650	VAL
1	A	657	LEU
1	A	661	VAL
1	A	665	ASN
1	A	666	ARG
1	A	667	LYS
1	A	679	LEU
1	A	683	ASP
1	A	708	LEU
1	A	726	ASP
1	A	728	VAL
1	A	805	VAL
1	A	841	MET
1	A	847	ASN
1	A	884	GLN
1	A	885	GLU
1	A	903	HIS
1	A	904	LEU
1	A	913	GLN
1	A	922	TYR
1	A	963	ILE
1	A	993	ILE
1	A	1006	LEU
1	A	1014	ILE
2	B	32	ARG
2	B	33	THR
2	B	35	SER
2	B	38	VAL
2	B	41	SER
2	B	42	LEU
2	B	48	TYR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
2	B	49	VAL
2	B	60	TYR
2	B	61	VAL
2	B	72	ASP
2	B	85	ARG
2	B	87	ASP
2	B	125	GLN
2	B	126	GLU
2	B	129	ILE
2	B	139	GLN
2	B	178	CYS
2	B	182	LYS
2	B	184	ASN
2	B	188	LYS
2	B	213	LEU
2	B	234	LYS
2	B	235	LYS
2	B	240	TYR
2	B	254	ARG
2	B	276	ASP
2	B	287	LYS
2	B	288	ILE
2	B	290	LYS

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (34) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	51	ASN
1	A	65	GLN
1	A	87	ASN
1	A	110	GLN
1	A	177	GLN
1	A	188	GLN
1	A	216	GLN
1	A	218	GLN
1	A	242	HIS
1	A	415	GLN
1	A	629	HIS
1	A	663	GLN
1	A	694	HIS
1	A	706	GLN
1	A	753	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	763	ASN
1	A	773	GLN
1	A	847	ASN
1	A	855	ASN
1	A	884	GLN
1	A	898	GLN
1	A	901	ASN
1	A	903	HIS
1	A	913	GLN
1	A	923	GLN
1	A	971	GLN
1	A	989	ASN
1	A	996	GLN
2	B	76	GLN
2	B	125	GLN
2	B	255	ASN
2	B	268	HIS
2	B	275	HIS
2	B	289	GLN

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry ⓘ

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers ⓘ

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

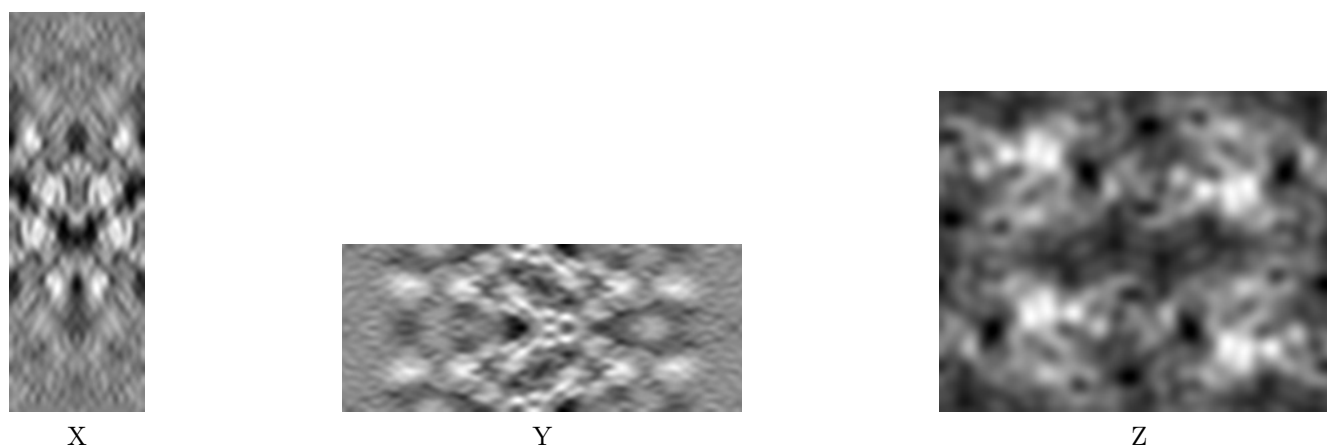
6 Map visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-2760. These allow visual inspection of the internal detail of the map and identification of artifacts.

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

6.1 Orthogonal projections [i](#)

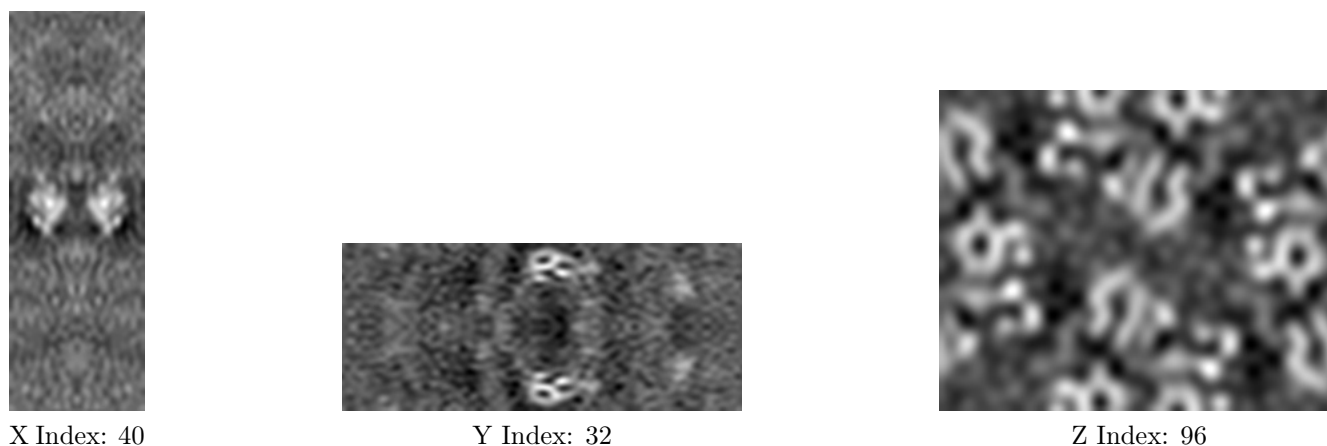
6.1.1 Primary map



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

6.2 Central slices [i](#)

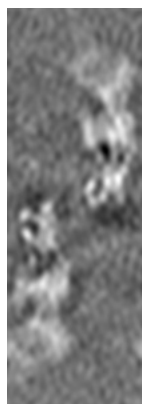
6.2.1 Primary map



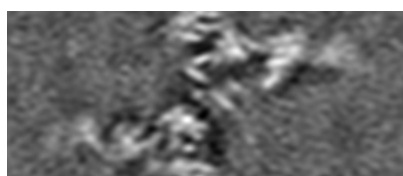
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

6.3 Largest variance slices [i](#)

6.3.1 Primary map



X Index: 19



Y Index: 12

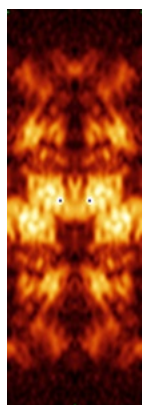


Z Index: 92

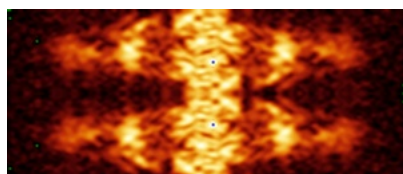
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

6.4 Orthogonal standard-deviation projections (False-color) [i](#)

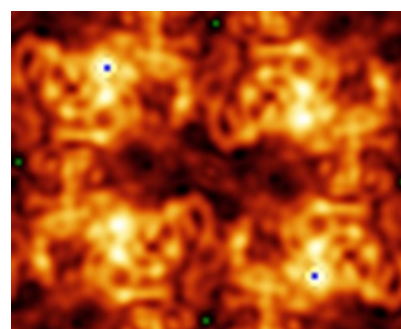
6.4.1 Primary map



X



Y

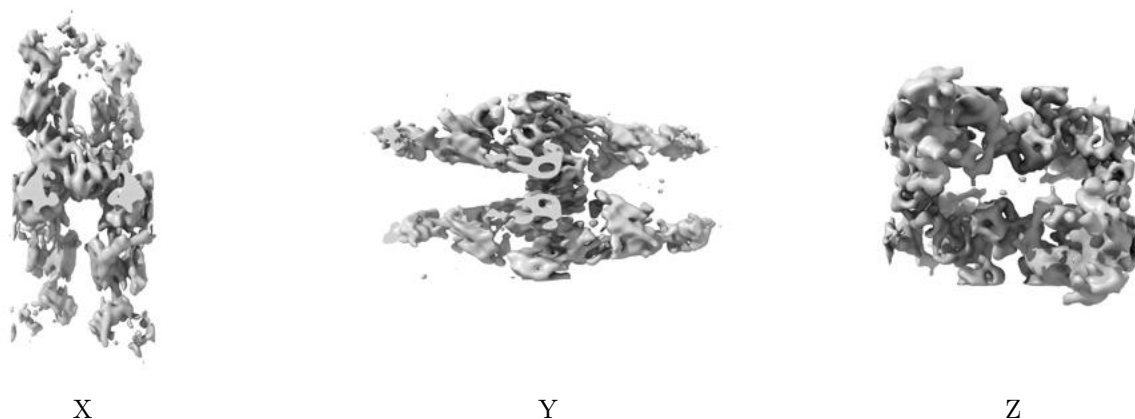


Z

The images above show the map standard deviation projections with false color in three orthogonal directions. Minimum values are shown in green, max in blue, and dark to light orange shades represent small to large values respectively.

6.5 Orthogonal surface views [i](#)

6.5.1 Primary map



The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 1.75. These images, in conjunction with the slice images, may facilitate assessment of whether an appropriate contour level has been provided.

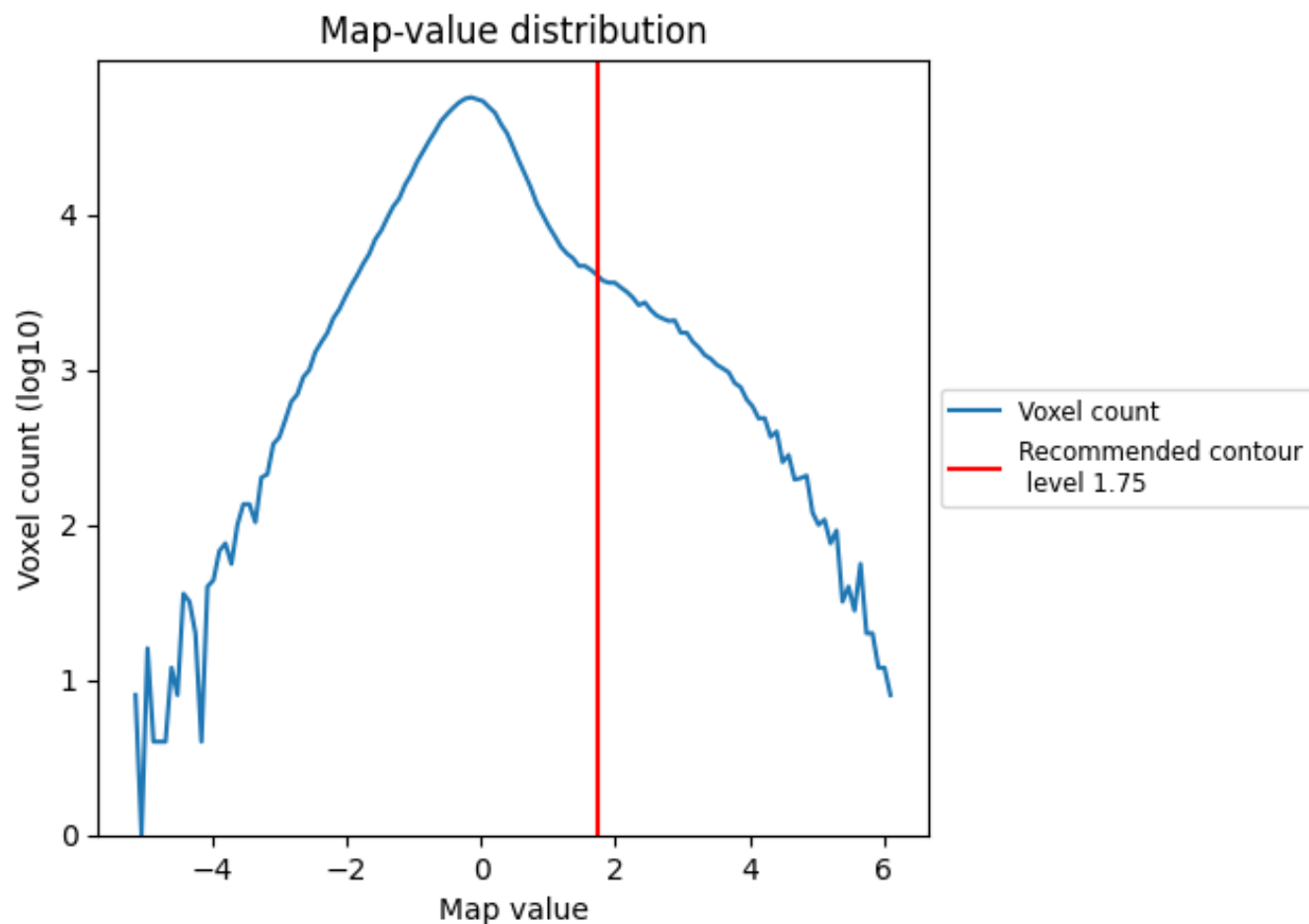
6.6 Mask visualisation [i](#)

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

7 Map analysis [i](#)

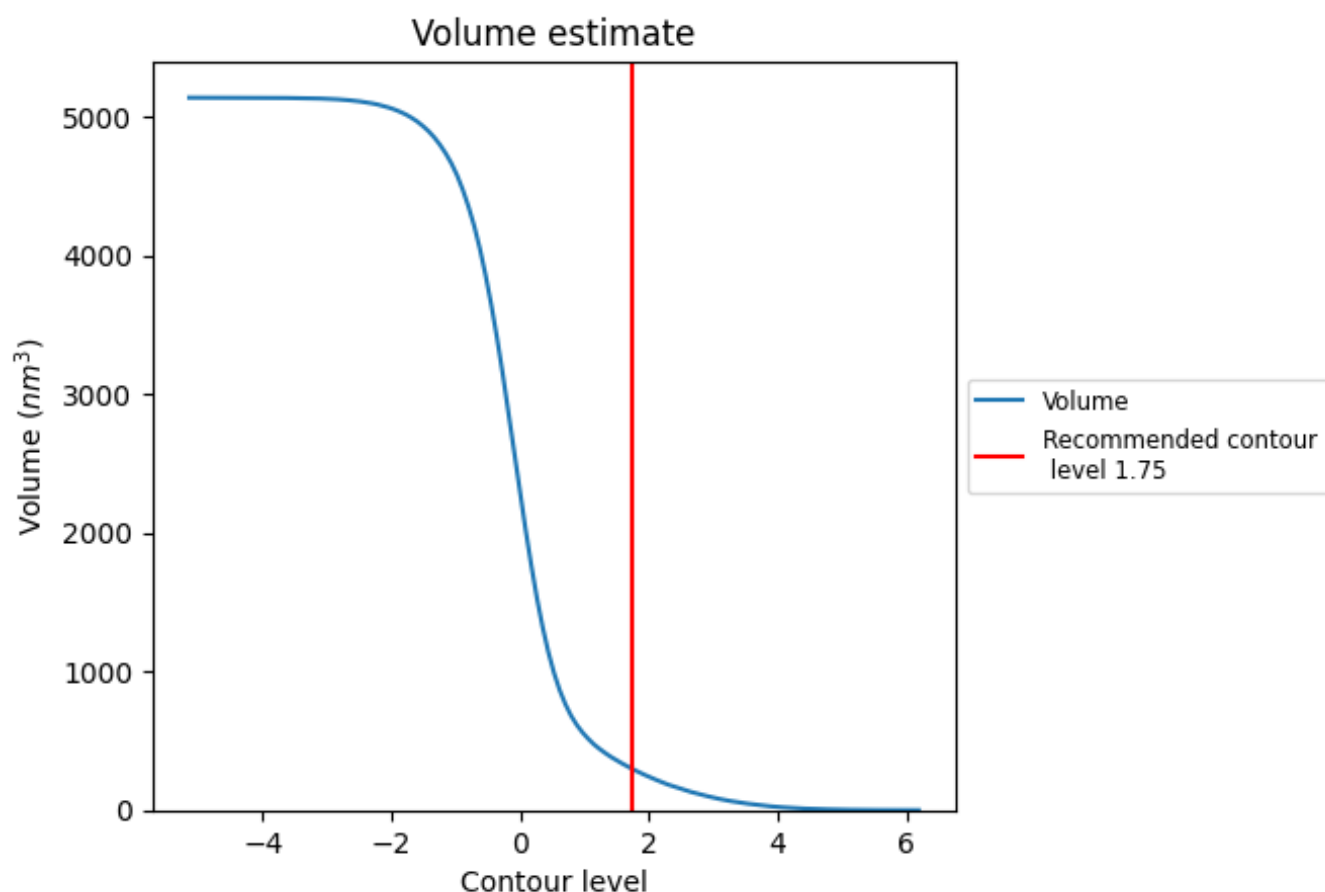
This section contains the results of statistical analysis of the map.

7.1 Map-value distribution [i](#)



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

7.2 Volume estimate [i](#)



The volume at the recommended contour level is 294 nm³; this corresponds to an approximate mass of 266 kDa.

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

7.3 Rotationally averaged power spectrum [i](#)

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

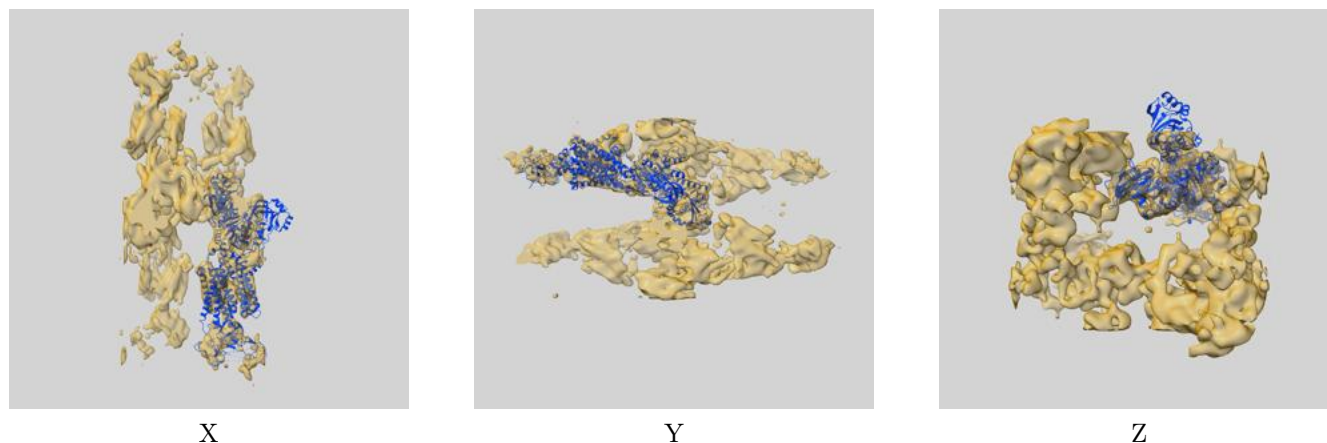
8 Fourier-Shell correlation ⓘ

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

9 Map-model fit [i](#)

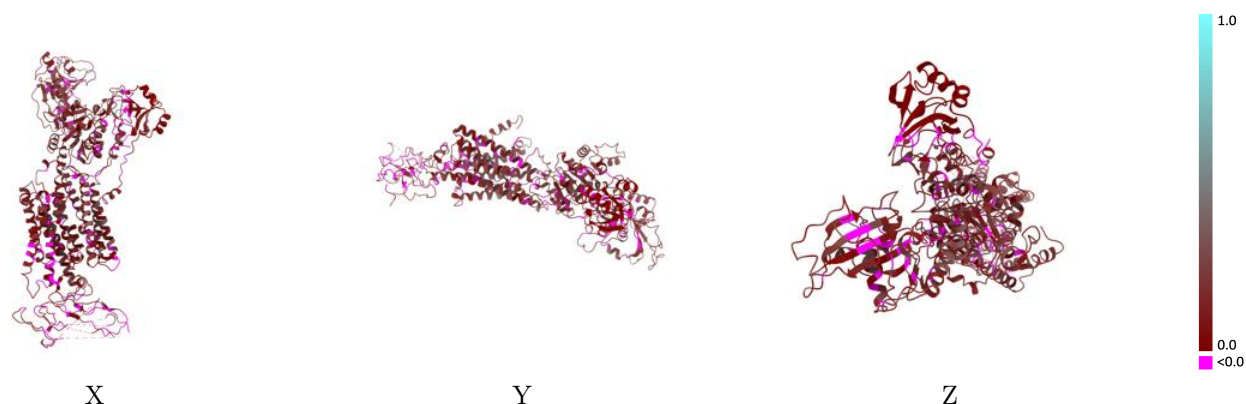
This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-2760 and PDB model 4UX2. Per-residue inclusion information can be found in [section 3](#) on [page 4](#).

9.1 Map-model overlay [i](#)



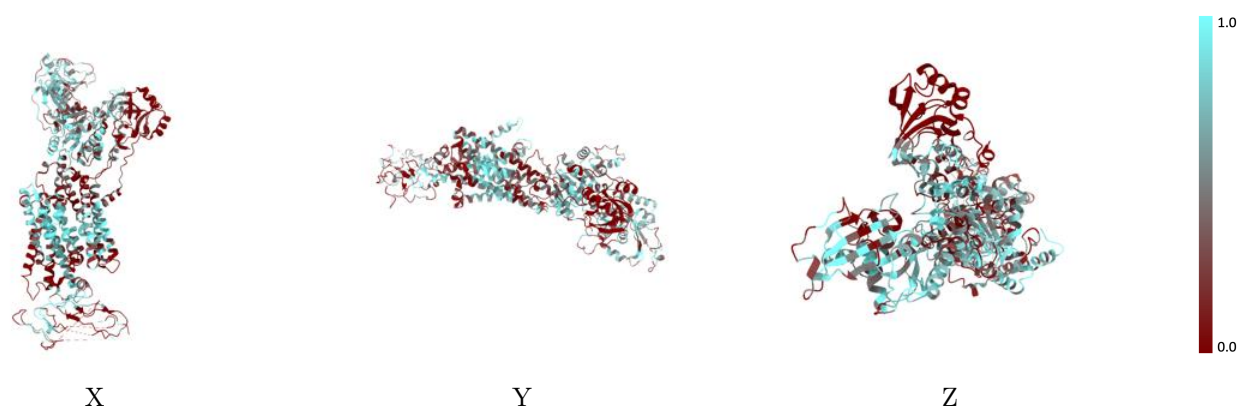
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 1.75 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

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



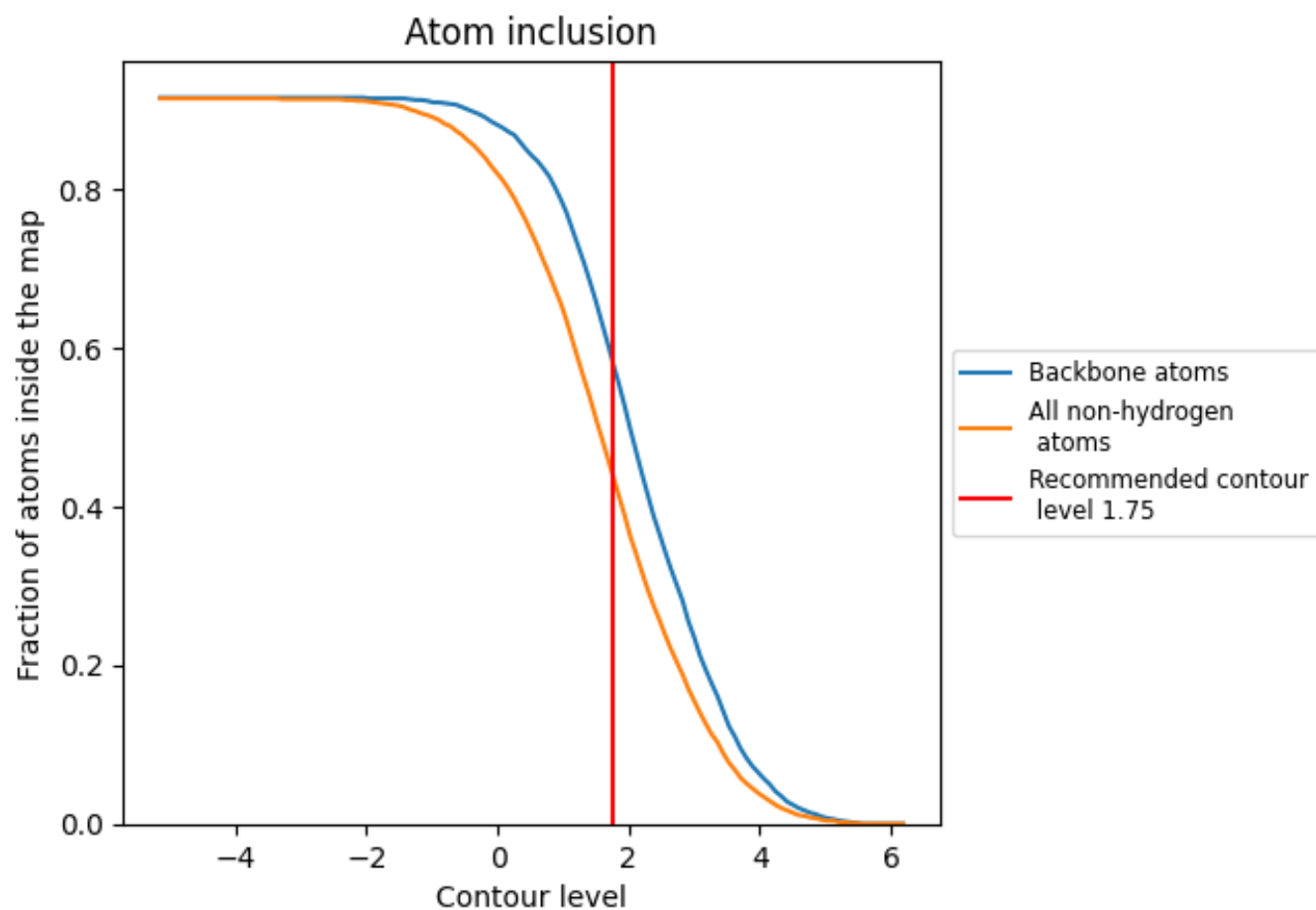
The images above show the model with each residue coloured according its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions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

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



The images above show the model with each residue coloured according to its atom inclusion. This shows to what extent they are inside the map at the recommended contour level (1.75).

9.4 Atom inclusion [i](#)



At the recommended contour level, 58% of all backbone atoms, 44% of all non-hydrogen atoms, are inside the map.

9.5 Map-model fit summary ⓘ

The table lists the average atom inclusion at the recommended contour level (1.75) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	0.4420	0.1110
A	0.4590	0.1190
B	0.3490	0.0700

