



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 09:19 PM UTC

PDB ID : 8VDQ / pdb_00008vdq
EMDB ID : EMD-43155
Title : Cryogenic electron microscopy model of full-length talin
Authors : Izard, T.; Rangarajan, E.S.
Deposited on : 2023-12-17
Resolution : 5.50 Å(reported)
Based on initial model : 6r9t

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

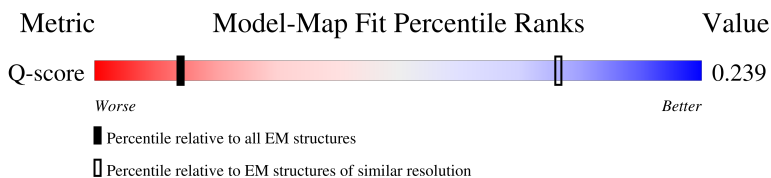
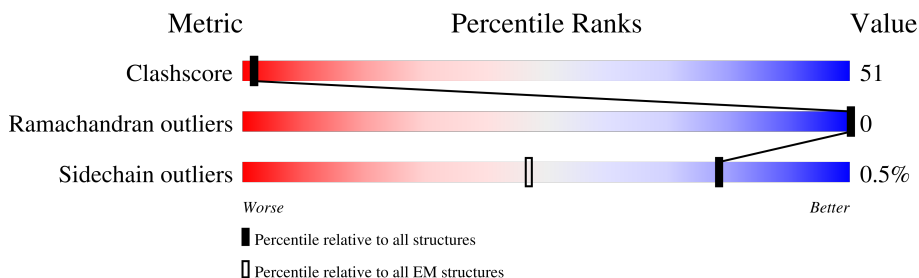
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 5.50 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	520 (5.00 - 6.00)

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	2804	

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 16077 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 Green fluorescent protein, Talin-1.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
1	A	2192	Total	C	N	O	S	0	0
			16077	9904	2874	3221	78		

There are 33 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-262	MET	-	expression tag	UNP P42212
A	-261	HIS	-	expression tag	UNP P42212
A	-260	HIS	-	expression tag	UNP P42212
A	-259	HIS	-	expression tag	UNP P42212
A	-258	HIS	-	expression tag	UNP P42212
A	-257	HIS	-	expression tag	UNP P42212
A	-256	HIS	-	expression tag	UNP P42212
A	-255	HIS	-	expression tag	UNP P42212
A	-254	HIS	-	expression tag	UNP P42212
A	-253	HIS	-	expression tag	UNP P42212
A	-252	HIS	-	expression tag	UNP P42212
A	-251	MET	-	expression tag	UNP P42212
A	-250	VAL	-	expression tag	UNP P42212
A	-187	LEU	PHE	conflict	UNP P42212
A	-186	THR	SER	conflict	UNP P42212
A	-20	LEU	HIS	conflict	UNP P42212
A	-12	GLY	-	linker	UNP P42212
A	-11	SER	-	linker	UNP P42212
A	-10	LEU	-	linker	UNP P42212
A	-9	GLU	-	linker	UNP P42212
A	-8	VAL	-	linker	UNP P42212
A	-7	LEU	-	linker	UNP P42212
A	-6	PHE	-	linker	UNP P42212
A	-5	GLN	-	linker	UNP P42212
A	-4	GLY	-	linker	UNP P42212
A	-3	PRO	-	linker	UNP P42212
A	-2	ALA	-	linker	UNP P42212
A	-1	ALA	-	linker	UNP P42212

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	0	ALA	-	linker	UNP P42212
A	639	LEU	GLN	conflict	UNP P26039
A	673	ASN	LYS	conflict	UNP P26039
A	1227	LEU	SER	conflict	UNP P26039
A	2349	VAL	ALA	conflict	UNP P26039

M1397	S1333	L1267	L1196	A1132	Q1065	A1004	A874	T804	Q735	D666	G603	S639	I1E
E1398	Q1394	A1268	M1197	Q1133	E1066	K1005	K875	I805	L736	V667	M604	K640	THR
M1399	L1335	R1269	R1198	A1134	I1087	A1006	G876	L806	E737	L668	G605	H541	SER
	A1336	C1199	C1199	A1135		S1007	A877	T807	V738	M669	R606	E542	GLY
V1402	R1340	R1273	V1200	G1136	D1073	V1008		T809	A739	G670	L608	I543	GLN
L1403	R1274	G1275	L1203	R1137	G1074	P1009	A944	E810	G740	L671	L609	H544	MET
G1404	A1341	Q1276	P1204	V1138	K1075	T1010	S945	E883	R741	A672	Q610	S545	HIS
E1405	V1342	D1277	G1205	L1141	L1076	Q1012	A946	E884	L742	M673	Q611	Q546	ARG
M1407	S1345	F1278	Q1206	L1142	K1077	D1013	G947	Q886	V743	A674	A611	V547	GLY
G1408			R1207	D1144	P1078	Q1014	Q948	Q887	A744	V675	A612	D548	MET
I1410	Q1348	F1281	D1208	P1145	E1082	A1015	Q949	Q888	V747	A679	K613	I550	P486
L1349	L1349	L1282	A1146	A1146	T1083	A1016	P950	R889	G748	A680	L614	T551	T489
S1411	I1350	E1283	V1147	V1147	T1083	A1017	L951	L890	G749	A681	L615	A552	S490
Q1412	T1351	A1284	Q1148	M1084	M1084	M1018	V953	R891	C750	L682	A616	G553	S491
M1413	L1352	G1285	A1149	E1085	E1085	Q1019	Q954	E892	V751	V683	A618	T554	A491
A1414	C1353	V1286	T1284	L1150	K1086	L1020	S955	A893	S752	L684	V619	A555	Q492
K1415	T1354	G1217	G1217	V1151	C1087	S1021	C956	A894	A753	K685	S620	S556	Q493
M1416	Q1355	M1288	D1218	L1152	T1088	Q1022	K957	E895	S754	V557	E621	V557	A494
G1417	A1356	A1289		D1153	Q1089	C1023	G896	A896	Q755	K687	L622	V558	L495
M1418	A1357	K1221	L1227	T1154	D1090	A1024	L897	A958	D760	S696	A626	A562	T496
	P1358	L1222	L1228	A1155	L1091	K1025	R898	L897	Q761	G697	G627	G563	Q497
F1422	G1359	L1223	L1223	S1156	G1092	N1026	M899	L829	L763	L698	S625	L560	T498
	Q1360	L1224		D1157	N1093	L1027	Q962	A900	T765	T700	L624	T561	I499
	K1361		L1227	V1158	S1094	G1028	Q963	A830	Q762	G697	A628	A562	N500
I1426	E1362	D1297	L1227	L1159	T1095	T1029	P964	A832	L763	L698	P628	D564	S501
A1427	C1363	A1298	P1229	D1160	K1096	A1030	A903	T833	L764	Q699	A629		S502
T1428	D1364	R1299	P1229	K1161	A1097	L1031	A904	D835	Q765	T700	S630	E567	M503
A1429	N1365	Q1300	Q1236	A1162	V1098	E1033	Q906	L836		Q701	A631	Q504	Q504
S1430	V1301	V1302	E1237	S1164	S1100	L1034	Q968	N907	A769	V702	E632	Y570	A505
K1431	L1367	S1303	A1238	L1165	A1101	R1035	Q969	N838		T703	P633	T571	V506
A1432	R1368	S1304	Q1239	L1166	V1102	T1036	V970	A839	T772	A704	R634	Q507	Q507
L1433	Q1369	L1370	S1240	E1167	A1103	A1037	K911	I840	Q708	A705	Q635	G574	C575
G1434	E1371	F1436	G1307	E1168	K1104	A1038	K912	I840	C709	V577	N636	A576	A509
F1436	T1372	I1308	L1242	A1169	L1106	Q1039	K913	K841	Q776	L638	L637	V577	Q510
T1437	V1373	N1309	E1244	K1170	L1106	K1040	L914		A777	L639	A511	T578	A511
E1438	E1375	M1310	A1245	K1171	G1107		Q974	E847	L778	L711	A640	T579	L513
	L1376		A1246	A1172	E1108	E1043	P977	S848		S712		I580	D514
Q1442	L1377	S1313	G1248	S1173	Q1111	A1044	D978	D849	Q779	S713	N643	S581	D514
A1443	E1378	K1314	L1249	H1175	G1112	C1045	S979	L850	E780	S714	V644	S582	F516
Y1445	N1379	L1315	N1250		N1113	G1046	P980	E851	L781	Q715	L781	N582	E517
L1446	P1380	L1316	Q1251	P1179	E1114	P1047	Q983	S853	L782	L716	Q646	T518	T518
V1447	V1381	A1252	A1252	E1180	N1115	E1049	L984	R854	Q783	V717	A647	T584	L519
G1448	Q1382	A1318	A1253	S1181	Y1116	M1050	A985	K855	V785	T720	S648	E586	P520
P1449	P1383	A1319	A1253	Q1182	A1117	D1051	L986	K922	Q786	K721	E650	M587	P521
I1450	L1384	K1320	T1254	Q1183	G1118	S1052	T987	Q923	A787	V722	L651	S588	L522
S1450	N1385	A1321	E1255	R1184	T1119	A1053	A988	A924	A788	V723	L652	R589	G523
D1451	D1386	L1322	L1256	L1185	A1120	L1054	A989	A925	A789	A724	Q653	G590	Q524
	S1323	S1323	V1257	A1186	A1121	S1055	S990	A926				V591	D525
S1454	T1324	Q1258	Q1258	Q1187	R1122	V1056	Q991	S927	A792	T725	Q654	K592	S528
Q1455	D1325	L1325	A1259	V1188	D1123	V1057	S992	A928	G796	T726	L655	L593	K529
A1456	P1326	S1260	S1260	V1189	V1124	Q1058	F933	T929	T727	S728	E656	L594	
	A1327	R1261	R1261	K1190	N1059	N1059	P996	T931	Q798	S729	E657	L597	R532
Q1459	G1391	S1328	G1262	A1191	G1127	L1060		I932	D799	P730	S658	K533	K533
G1460	L1392	P1329	T1263	V1192	L1128	E1061	Q936	I932	Q800	V731		E599	N534
L1461	L1393	M1330	P1264	T1193	R1129	A1062	M1000		V871	C732	H663	D600	N534
V1462	S1395	L1331	Q1265	Q1194	L1130	D1063	V1001		T802	C732	F664	E601	M536
E1463	V1396	K1332	D1266	A1195	L1131	L1064	A1002		D803	E734	Q665	G602	





4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	
Number of particles used	8318	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	PHASE FLIPPING AND AMPLITUDE CORRECTION	Depositor
Microscope	JEOL CRYO ARM 300	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{\AA}^2$)	48	Depositor
Minimum defocus (nm)	800	Depositor
Maximum defocus (nm)	2400	Depositor
Magnification	Not provided	
Image detector	GATAN K3 (6k x 4k)	Depositor
Maximum map value	0.816	Depositor
Minimum map value	-0.325	Depositor
Average map value	-0.000	Depositor
Map value standard deviation	0.022	Depositor
Recommended contour level	0.138	Depositor
Map size ($\text{\AA}$)	368.64, 368.64, 368.64	wwPDB
Map dimensions	256, 256, 256	wwPDB
Map angles ($^\circ$)	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing ($\text{\AA}$)	1.44, 1.44, 1.44	Depositor

5 Model quality [i](#)

5.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	0.39	0/16258	0.57	0/22030

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	16077	0	16278	1642	0
All	All	16077	0	16278	1642	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 51.

All (1642) 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:1067:ILE:HG22	1:A:1152:LEU:HD21	1.25	1.15
1:A:1213:LEU:HB2	1:A:1316:LEU:HD23	1.45	0.94
1:A:1392:CYS:HB3	1:A:1442:GLN:HE21	1.32	0.93
1:A:1695:GLN:HB3	1:A:1699:HIS:HE1	1.33	0.93
1:A:1850:PHE:HB3	1:A:1973:ARG:HD3	1.51	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:240:GLY:HA2	1:A:283:HIS:HD2	1.36	0.91
1:A:575:CYS:O	1:A:1019:GLN:NE2	2.03	0.91
1:A:1022:GLN:HA	1:A:1025:LYS:HD2	1.51	0.90
1:A:1838:LEU:HD12	1:A:1901:LYS:HE3	1.51	0.89
1:A:671:LEU:HD22	1:A:780:GLU:HB3	1.55	0.89
1:A:1243:ASN:HD21	1:A:1354:THR:HG21	1.38	0.89
1:A:2179:THR:HG22	1:A:2215:MET:HE1	1.56	0.87
1:A:339:ARG:O	1:A:348:ILE:N	2.06	0.87
1:A:1463:GLU:H	1:A:1467:PHE:HE1	1.18	0.87
1:A:388:ILE:HA	1:A:391:LEU:HD12	1.57	0.86
1:A:821:GLU:OE1	1:A:825:GLN:NE2	2.09	0.86
1:A:684:LEU:HD23	1:A:687:LYS:HZ1	1.41	0.86
1:A:720:THR:OG1	1:A:721:LYS:NZ	2.09	0.85
1:A:583:ASN:O	1:A:586:GLU:N	2.10	0.85
1:A:948:PRO:HG2	1:A:950:PRO:HG3	1.59	0.84
1:A:917:LEU:HD23	1:A:1037:ALA:HB1	1.58	0.84
1:A:368:LEU:HD11	1:A:380:VAL:HG22	1.60	0.84
1:A:1067:ILE:HG22	1:A:1152:LEU:CD2	2.06	0.83
1:A:386:GLU:HG3	1:A:390:GLN:HE22	1.43	0.83
1:A:1077:LYS:O	1:A:1136:ARG:NH1	2.08	0.83
1:A:1849:SER:OG	1:A:1973:ARG:NH2	2.13	0.82
1:A:1161:LYS:HB3	1:A:1192:VAL:HG12	1.62	0.81
1:A:1433:LEU:HA	1:A:1436:PHE:CE1	2.15	0.81
1:A:2097:ALA:O	1:A:2101:ALA:N	2.14	0.81
1:A:599:GLU:HA	1:A:603:GLY:HA2	1.63	0.81
1:A:2352:ILE:HG12	1:A:2466:ALA:HB1	1.63	0.81
1:A:362:SER:HB3	1:A:1683:VAL:HG13	1.62	0.81
1:A:1451:ASP:HB3	1:A:1454:SER:HB2	1.61	0.81
1:A:310:VAL:HG22	1:A:333:THR:HB	1.62	0.80
1:A:556:SER:HB3	1:A:735:GLN:HE22	1.46	0.80
1:A:1739:GLU:O	1:A:1742:THR:OG1	1.99	0.80
1:A:1785:ASN:HB3	1:A:1788:GLN:HG2	1.62	0.80
1:A:708:GLN:NE2	1:A:709:CYS:SG	2.55	0.80
1:A:1304:ASN:ND2	1:A:1353:CYS:SG	2.55	0.80
1:A:1430:SER:HA	1:A:1433:LEU:HD12	1.64	0.80
1:A:1218:ASP:OD1	1:A:1221:LYS:NZ	2.14	0.79
1:A:1387:MET:O	1:A:1442:GLN:NE2	2.15	0.79
1:A:920:ALA:HB1	1:A:1034:LEU:HD23	1.64	0.79
1:A:1067:ILE:CG2	1:A:1152:LEU:HD21	2.11	0.79
1:A:1078:PRO:HA	1:A:1136:ARG:HH22	1.48	0.78
1:A:1128:LEU:HD13	1:A:1131:LEU:HD12	1.65	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1726:GLN:HG3	1:A:1730:LYS:HD2	1.66	0.78
1:A:1261:ARG:NH2	1:A:1375:GLU:O	2.16	0.78
1:A:361:ALA:HA	1:A:366:PHE:HA	1.64	0.78
1:A:1057:VAL:HG11	1:A:1163:SER:HB3	1.65	0.78
1:A:1729:HIS:O	1:A:1732:SER:OG	2.02	0.78
1:A:517:GLU:HG2	1:A:592:LYS:HB3	1.64	0.78
1:A:2259:GLN:HB3	1:A:2260:LYS:HD2	1.66	0.78
1:A:2066:ALA:O	1:A:2077:GLN:NE2	2.17	0.77
1:A:860:ALA:HA	1:A:863:LEU:HD12	1.65	0.77
1:A:1697:ALA:O	1:A:1700:THR:OG1	2.03	0.77
1:A:251:ASN:OD1	1:A:255:HIS:NE2	2.18	0.77
1:A:906:GLN:HE21	1:A:910:LYS:HG2	1.49	0.77
1:A:1031:LEU:HA	1:A:1034:LEU:HD12	1.67	0.77
1:A:669:MET:HE1	1:A:721:LYS:HE3	1.68	0.77
1:A:1468:ALA:O	1:A:1472:GLN:NE2	2.18	0.77
1:A:773:ALA:HA	1:A:776:GLN:HE21	1.49	0.76
1:A:1434:CYS:O	1:A:1437:THR:OG1	2.04	0.76
1:A:932:ILE:O	1:A:936:GLN:NE2	2.19	0.75
1:A:1959:GLU:O	1:A:1963:HIS:ND1	2.18	0.75
1:A:316:LYS:NZ	1:A:325:LEU:O	2.19	0.75
1:A:696:SER:HA	1:A:699:GLN:HE22	1.50	0.75
1:A:1892:ASP:OD1	1:A:1895:ARG:NH2	2.19	0.75
1:A:1985:VAL:HA	1:A:1988:ILE:HD12	1.69	0.75
1:A:582:SER:O	1:A:585:THR:OG1	2.04	0.75
1:A:1510:ARG:HH21	1:A:1511:LEU:HD23	1.51	0.75
1:A:2160:PHE:CE1	1:A:2216:LEU:HB3	2.22	0.75
1:A:1797:GLU:O	1:A:1801:GLN:NE2	2.20	0.74
1:A:250:HIS:HD2	1:A:253:GLN:HB2	1.52	0.74
1:A:1292:ALA:O	1:A:1298:ARG:NH2	2.20	0.74
1:A:259:PHE:O	1:A:263:LYS:N	2.20	0.74
1:A:1264:PRO:HA	1:A:1267:LEU:HD12	1.69	0.74
1:A:869:LYS:O	1:A:889:ARG:NH1	2.21	0.74
1:A:1011:ILE:HG13	1:A:1013:ASP:H	1.52	0.74
1:A:1182:GLN:OE1	1:A:1183:GLN:NE2	2.19	0.74
1:A:1923:LEU:HD11	1:A:1964:VAL:HG11	1.69	0.74
1:A:866:ALA:HB1	1:A:897:LEU:HD22	1.69	0.74
1:A:608:LEU:HG	1:A:654:GLN:HG3	1.69	0.74
1:A:1681:ALA:O	1:A:1686:GLN:N	2.19	0.74
1:A:1114:GLU:HG3	1:A:1116:TYR:H	1.51	0.74
1:A:2021:LYS:HA	1:A:2024:LYS:HD2	1.70	0.74
1:A:259:PHE:HA	1:A:262:LEU:HB2	1.69	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:391:LEU:HB3	1:A:395:TYR:CZ	2.23	0.74
1:A:552:ALA:O	1:A:735:GLN:NE2	2.21	0.73
1:A:873:ALA:HB2	1:A:889:ARG:HH11	1.53	0.73
1:A:914:VAL:O	1:A:917:LEU:N	2.21	0.73
1:A:821:GLU:O	1:A:825:GLN:NE2	2.20	0.73
1:A:1690:ARG:H	1:A:1751:LYS:HZ2	1.36	0.73
1:A:585:THR:O	1:A:588:SER:OG	2.07	0.73
1:A:490:SER:O	1:A:493:GLN:NE2	2.21	0.72
1:A:612:ALA:HA	1:A:615:LEU:HD12	1.71	0.72
1:A:1879:PRO:HG3	1:A:1941:PRO:HB3	1.71	0.72
1:A:1360:GLN:HG2	1:A:1618:ARG:HD2	1.71	0.72
1:A:1900:ALA:O	1:A:1904:ALA:N	2.21	0.72
1:A:1778:THR:HB	1:A:1796:LEU:HD22	1.70	0.72
1:A:717:VAL:O	1:A:720:THR:OG1	2.08	0.72
1:A:834:SER:O	1:A:838:ASN:ND2	2.23	0.72
1:A:1893:TYR:OH	1:A:1920:VAL:O	2.06	0.72
1:A:317:GLU:O	1:A:326:VAL:N	2.18	0.72
1:A:322:LYS:HB3	1:A:324:LYS:HZ3	1.54	0.72
1:A:802:THR:HA	1:A:805:ILE:HD12	1.72	0.72
1:A:1551:THR:OG1	1:A:1554:ASN:OD1	2.07	0.72
1:A:1497:ILE:HA	1:A:1500:LYS:HE3	1.70	0.71
1:A:1101:ALA:HA	1:A:1104:LYS:HE2	1.72	0.71
1:A:1925:HIS:O	1:A:1928:SER:OG	2.05	0.71
1:A:1971:GLY:O	1:A:1976:GLN:NE2	2.23	0.71
1:A:339:ARG:HE	1:A:349:GLN:HB3	1.54	0.71
1:A:705:ALA:O	1:A:708:GLN:NE2	2.23	0.71
1:A:1350:ILE:HG21	1:A:1365:ASN:HD21	1.54	0.71
1:A:354:THR:O	1:A:357:LYS:NZ	2.21	0.71
1:A:2316:ILE:HD12	1:A:2360:VAL:HB	1.72	0.71
1:A:800:GLN:OE1	1:A:800:GLN:N	2.23	0.71
1:A:1113:ASN:ND2	1:A:1173:SER:O	2.24	0.71
1:A:906:GLN:HG3	1:A:910:LYS:HG2	1.73	0.71
1:A:1824:VAL:HB	1:A:1827:MET:HE1	1.72	0.71
1:A:575:CYS:HB2	1:A:1018:MET:HE3	1.74	0.70
1:A:645:GLY:O	1:A:648:SER:OG	2.09	0.70
1:A:971:ARG:HH12	1:A:974:GLN:HB2	1.56	0.70
1:A:1923:LEU:HD23	1:A:1960:LYS:HB3	1.73	0.70
1:A:2134:ALA:O	1:A:2141:LYS:NZ	2.21	0.70
1:A:1350:ILE:O	1:A:1354:THR:OG1	2.08	0.70
1:A:1853:TYR:O	1:A:1856:THR:OG1	2.07	0.70
1:A:2033:LEU:HA	1:A:2036:ASN:HB2	1.72	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:837:VAL:HG13	1:A:860:ALA:HB1	1.74	0.70
1:A:804:THR:O	1:A:807:THR:OG1	2.09	0.70
1:A:652:LEU:HD12	1:A:725:PRO:HB2	1.74	0.70
1:A:906:GLN:HA	1:A:909:ILE:HB	1.71	0.70
1:A:728:SER:O	1:A:788:HIS:NE2	2.25	0.70
1:A:942:PRO:HG2	1:A:945:SER:HA	1.73	0.70
1:A:727:ILE:O	1:A:733:GLN:NE2	2.15	0.69
1:A:1768:LEU:HD21	1:A:1810:LEU:HD11	1.73	0.69
1:A:1962:SER:HA	1:A:1965:LEU:HD12	1.73	0.69
1:A:904:ALA:O	1:A:907:ASN:ND2	2.25	0.69
1:A:1530:LYS:NZ	1:A:1534:ASN:OD1	2.24	0.69
1:A:1542:THR:HA	1:A:1557:GLN:HE22	1.57	0.69
1:A:1316:LEU:HD12	1:A:1319:ALA:HB3	1.73	0.69
1:A:1960:LYS:HA	1:A:1963:HIS:HD1	1.58	0.69
1:A:2176:ILE:HD11	1:A:2284:ILE:HG23	1.74	0.69
1:A:2172:PRO:HB2	1:A:2291:LYS:HE3	1.74	0.69
1:A:391:LEU:O	1:A:395:TYR:N	2.25	0.69
1:A:652:LEU:HB3	1:A:658:SER:HB3	1.73	0.69
1:A:362:SER:OG	1:A:365:SER:N	2.26	0.69
1:A:1242:LEU:HD22	1:A:1288:MET:HE3	1.73	0.69
1:A:2016:ARG:NE	1:A:2136:GLU:OE1	2.25	0.69
1:A:576:ALA:O	1:A:580:ILE:HG12	1.92	0.69
1:A:582:SER:HB3	1:A:937:HIS:NE2	2.08	0.69
1:A:372:ASP:OD1	1:A:1673:ARG:NH2	2.26	0.69
1:A:1785:ASN:ND2	1:A:1788:GLN:OE1	2.26	0.69
1:A:1829:ASP:OD2	1:A:1833:GLN:NE2	2.25	0.69
1:A:339:ARG:H	1:A:347:VAL:HG23	1.57	0.68
1:A:536:MET:HE1	1:A:594:LEU:HA	1.75	0.68
1:A:885:GLU:O	1:A:888:GLN:NE2	2.27	0.68
1:A:1603:ALA:O	1:A:1606:MET:HB2	1.93	0.68
1:A:330:LEU:HD21	1:A:380:VAL:HG11	1.74	0.68
1:A:224:LEU:O	1:A:268:LYS:NZ	2.26	0.68
1:A:582:SER:HB3	1:A:937:HIS:CD2	2.29	0.68
1:A:1239:GLN:HB2	1:A:1354:THR:HG22	1.76	0.68
1:A:1656:PRO:O	1:A:1658:GLN:NE2	2.27	0.68
1:A:1108:GLU:CD	1:A:1117:ALA:HA	2.19	0.68
1:A:1887:ASN:O	1:A:1890:THR:OG1	2.10	0.68
1:A:2306:GLU:HA	1:A:2367:GLN:HE22	1.59	0.68
1:A:543:ILE:HA	1:A:546:GLN:HE21	1.58	0.68
1:A:1944:VAL:HA	1:A:1947:LYS:HE3	1.76	0.68
1:A:2116:ASN:HA	1:A:2119:LYS:HE2	1.74	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1105:LEU:HD11	1:A:1124:VAL:HG11	1.74	0.68
1:A:1874:LYS:O	1:A:1878:SER:N	2.22	0.68
1:A:1282:LEU:HD23	1:A:1305:LEU:HD12	1.76	0.68
1:A:1760:ALA:O	1:A:1764:GLN:NE2	2.26	0.68
1:A:386:GLU:O	1:A:390:GLN:NE2	2.26	0.67
1:A:712:SER:HA	1:A:715:GLN:NE2	2.10	0.67
1:A:2104:LYS:NZ	1:A:2108:ASP:OD1	2.26	0.67
1:A:908:ALA:HA	1:A:911:LYS:HB2	1.76	0.67
1:A:1827:MET:O	1:A:1830:SER:OG	2.12	0.67
1:A:543:ILE:HG23	1:A:587:MET:HE1	1.77	0.67
1:A:1348:GLN:HB2	1:A:1352:MET:HE1	1.74	0.67
1:A:1223:LEU:HD11	1:A:1286:VAL:HG11	1.76	0.67
1:A:1455:GLN:HB3	1:A:1587:GLN:HB3	1.77	0.67
1:A:1098:VAL:O	1:A:1102:ILE:HG12	1.95	0.67
1:A:1165:LEU:HA	1:A:1168:GLU:CD	2.19	0.67
1:A:2344:GLN:HE22	1:A:2473:ALA:HB2	1.60	0.67
1:A:1251:GLN:O	1:A:1254:THR:OG1	2.09	0.67
1:A:1699:HIS:HB3	1:A:1814:LEU:HD22	1.77	0.67
1:A:1910:GLU:OE1	1:A:1910:GLU:N	2.24	0.67
1:A:1991:ASP:O	1:A:1994:THR:OG1	2.13	0.67
1:A:499:ILE:HG23	1:A:623:LEU:HD12	1.76	0.67
1:A:575:CYS:O	1:A:578:THR:OG1	2.12	0.67
1:A:1580:GLU:OE1	1:A:1580:GLU:N	2.26	0.67
1:A:577:VAL:HG21	1:A:623:LEU:HD11	1.76	0.67
1:A:1956:ARG:HB3	1:A:1960:LYS:HZ1	1.60	0.67
1:A:551:THR:HG21	1:A:726:THR:HG21	1.77	0.67
1:A:1238:ALA:C	1:A:1288:MET:HE1	2.19	0.67
1:A:1289:ALA:O	1:A:1298:ARG:NE	2.27	0.67
1:A:1956:ARG:HB3	1:A:1960:LYS:NZ	2.10	0.66
1:A:2040:SER:HB3	1:A:2043:LYS:HZ3	1.59	0.66
1:A:1100:SER:OG	1:A:1574:ALA:O	2.13	0.66
1:A:1461:LEU:O	1:A:1515:ARG:NH1	2.28	0.66
1:A:812:ILE:O	1:A:815:SER:N	2.29	0.66
1:A:1460:GLY:HA3	1:A:1583:SER:HA	1.77	0.66
1:A:1512:ALA:HA	1:A:1515:ARG:HG2	1.77	0.66
1:A:1705:ALA:HB3	1:A:1741:LEU:HD12	1.77	0.66
1:A:335:GLU:OE1	1:A:335:GLU:N	2.29	0.66
1:A:1880:GLU:OE1	1:A:1880:GLU:N	2.27	0.66
1:A:2324:GLU:OE1	1:A:2327:LYS:NZ	2.23	0.66
1:A:1082:GLU:HA	1:A:1086:LYS:HD3	1.78	0.66
1:A:1393:LEU:HD22	1:A:1651:MET:HE3	1.77	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1413:ASN:O	1:A:1417:GLY:N	2.26	0.66
1:A:1523:ARG:O	1:A:1527:GLN:NE2	2.29	0.65
1:A:1667:ALA:O	1:A:1670:SER:OG	2.12	0.65
1:A:258:GLY:O	1:A:262:LEU:N	2.26	0.65
1:A:1203:LEU:HD23	1:A:1206:GLN:HG3	1.77	0.65
1:A:1518:ASN:ND2	1:A:1520:THR:OG1	2.28	0.65
1:A:2326:LEU:O	1:A:2350:LYS:NZ	2.25	0.65
1:A:2428:ALA:HB1	1:A:2470:LEU:HD13	1.77	0.65
1:A:2256:LEU:O	1:A:2260:LYS:N	2.27	0.65
1:A:1578:ASN:O	1:A:1582:SER:OG	2.14	0.65
1:A:1660:GLU:OE1	1:A:1660:GLU:N	2.26	0.65
1:A:2205:ALA:C	1:A:2209:ARG:HE	2.05	0.65
1:A:2413:ALA:O	1:A:2417:GLY:N	2.30	0.65
1:A:1407:MET:HE1	1:A:1637:SER:O	1.97	0.65
1:A:1365:ASN:HA	1:A:1368:ARG:HD2	1.79	0.65
1:A:927:SER:HB2	1:A:1027:LEU:HD23	1.79	0.65
1:A:1190:LYS:O	1:A:1193:THR:OG1	2.11	0.65
1:A:1613:LEU:HB2	1:A:1636:HIS:HB3	1.77	0.65
1:A:1389:TYR:O	1:A:1393:LEU:HG	1.96	0.65
1:A:2281:THR:HA	1:A:2284:ILE:HD12	1.79	0.64
1:A:1758:GLN:HA	1:A:1761:LEU:HG	1.78	0.64
1:A:1447:VAL:HG21	1:A:1654:LYS:HD2	1.78	0.64
1:A:2087:VAL:HG21	1:A:2128:LEU:HD22	1.79	0.64
1:A:2412:ASN:OD1	1:A:2413:ALA:N	2.30	0.64
1:A:1035:ARG:NH1	1:A:1039:GLN:HB2	2.12	0.64
1:A:2249:GLU:OE2	1:A:2272:HIS:ND1	2.31	0.64
1:A:741:ARG:NE	1:A:1939:CYS:SG	2.71	0.64
1:A:1129:ARG:O	1:A:1133:GLN:NE2	2.23	0.64
1:A:1856:THR:HA	1:A:1859:ARG:HH21	1.63	0.64
1:A:882:ASP:O	1:A:887:GLN:NE2	2.30	0.64
1:A:1266:ASP:OD1	1:A:1269:ARG:NH2	2.28	0.64
1:A:1392:CYS:HB3	1:A:1442:GLN:NE2	2.10	0.64
1:A:1695:GLN:O	1:A:1699:HIS:ND1	2.30	0.64
1:A:1884:PRO:HA	1:A:1887:ASN:HD21	1.63	0.64
1:A:2128:LEU:O	1:A:2131:THR:OG1	2.15	0.64
1:A:321:GLY:H	1:A:1770:GLU:CD	2.06	0.64
1:A:1162:ALA:HA	1:A:1165:LEU:HG	1.79	0.64
1:A:1696:GLU:OE1	1:A:1696:GLU:N	2.18	0.64
1:A:1082:GLU:OE2	1:A:1136:ARG:NH2	2.31	0.64
1:A:1322:LEU:HD21	1:A:1331:LEU:HB3	1.79	0.64
1:A:1405:GLU:O	1:A:1408:THR:OG1	2.14	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1957:VAL:HA	1:A:1960:LYS:HE2	1.80	0.64
1:A:2323:LEU:HD21	1:A:2349:VAL:HG12	1.79	0.64
1:A:340:VAL:HG22	1:A:347:VAL:HA	1.79	0.64
1:A:928:ALA:O	1:A:931:THR:OG1	2.15	0.64
1:A:1672:LEU:HA	1:A:1675:LEU:HD12	1.80	0.64
1:A:1772:ALA:O	1:A:1775:LEU:HG	1.97	0.64
1:A:1011:ILE:HG21	1:A:1017:ALA:HB2	1.79	0.63
1:A:1866:VAL:HA	1:A:1869:GLN:HE21	1.63	0.63
1:A:1852:ASP:O	1:A:1855:THR:OG1	2.14	0.63
1:A:2073:ASP:OD2	1:A:2076:THR:OG1	2.16	0.63
1:A:1662:GLU:HA	1:A:1665:ILE:HD12	1.80	0.63
1:A:1461:LEU:HB2	1:A:1515:ARG:HH11	1.63	0.63
1:A:1800:VAL:HA	1:A:1803:MET:HE2	1.80	0.63
1:A:773:ALA:HA	1:A:776:GLN:NE2	2.12	0.63
1:A:1850:PHE:HA	1:A:1853:TYR:HD2	1.63	0.63
1:A:1096:LYS:HE2	1:A:1579:PRO:HB3	1.79	0.63
1:A:1626:ASP:HB2	1:A:1629:ARG:HB2	1.80	0.63
1:A:1695:GLN:HB3	1:A:1699:HIS:CE1	2.24	0.63
1:A:2195:SER:O	1:A:2197:ARG:NH2	2.32	0.63
1:A:977:PRO:O	1:A:983:GLN:NE2	2.31	0.63
1:A:1433:LEU:HA	1:A:1436:PHE:HE1	1.64	0.63
1:A:2040:SER:HB3	1:A:2043:LYS:NZ	2.14	0.63
1:A:315:VAL:HG21	1:A:330:LEU:HG	1.81	0.63
1:A:525:ASP:HB2	1:A:528:SER:HB3	1.81	0.63
1:A:2300:ASP:O	1:A:2304:ILE:HG12	1.99	0.63
1:A:2318:ALA:O	1:A:2321:LYS:HG2	1.99	0.63
1:A:712:SER:HB2	1:A:743:VAL:HG12	1.80	0.62
1:A:1035:ARG:HH21	1:A:1917:LYS:HD2	1.63	0.62
1:A:1092:GLY:O	1:A:1095:THR:OG1	2.16	0.62
1:A:1789:ALA:O	1:A:1792:THR:OG1	2.13	0.62
1:A:1947:LYS:HA	1:A:1950:LEU:HD12	1.81	0.62
1:A:542:GLU:O	1:A:546:GLN:HG2	1.98	0.62
1:A:586:GLU:HG2	1:A:589:ARG:HH12	1.63	0.62
1:A:1487:THR:OG1	1:A:1490:GLN:OE1	2.14	0.62
1:A:1184:ARG:O	1:A:1188:VAL:HG22	2.00	0.62
1:A:1729:HIS:O	1:A:1733:GLN:NE2	2.32	0.62
1:A:2124:ASN:O	1:A:2127:SER:OG	2.12	0.62
1:A:240:GLY:HA2	1:A:283:HIS:CD2	2.27	0.62
1:A:702:VAL:HG13	1:A:753:ALA:HB1	1.81	0.62
1:A:873:ALA:HB1	1:A:890:LEU:HD22	1.81	0.62
1:A:1433:LEU:HD23	1:A:1436:PHE:HE1	1.63	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1919:ARG:HB3	1:A:1964:VAL:HG12	1.81	0.62
1:A:2418:HIS:NE2	1:A:2423:LYS:HE3	2.14	0.62
1:A:312:PHE:HB3	1:A:329:LEU:HD11	1.82	0.62
1:A:797:ARG:NH2	1:A:904:ALA:O	2.30	0.62
1:A:1371:GLU:OE1	1:A:1374:ARG:NH1	2.32	0.62
1:A:1857:MET:SD	1:A:1899:GLN:NE2	2.69	0.62
1:A:1985:VAL:O	1:A:1989:ILE:HD12	2.00	0.62
1:A:2282:GLU:O	1:A:2285:GLN:HG2	2.00	0.62
1:A:2324:GLU:HA	1:A:2350:LYS:HZ3	1.64	0.62
1:A:1166:ILE:HG22	1:A:1170:LYS:HE3	1.81	0.62
1:A:339:ARG:HH21	1:A:349:GLN:HB2	1.63	0.62
1:A:910:LYS:O	1:A:914:VAL:HG23	2.00	0.62
1:A:1002:ALA:HA	1:A:1005:LYS:NZ	2.14	0.62
1:A:1067:ILE:CG2	1:A:1152:LEU:CD2	2.74	0.62
1:A:1165:LEU:HD11	1:A:1192:VAL:HG11	1.81	0.62
1:A:1168:GLU:HA	1:A:1171:LYS:HD3	1.82	0.62
1:A:2178:MET:O	1:A:2182:ILE:HG12	1.99	0.62
1:A:785:VAL:HG12	1:A:786:LYS:HD3	1.82	0.62
1:A:1455:GLN:NE2	1:A:1456:ALA:O	2.28	0.62
1:A:1213:LEU:HD11	1:A:1313:SER:HA	1.81	0.62
1:A:316:LYS:HG3	1:A:325:LEU:HB3	1.81	0.61
1:A:777:ALA:O	1:A:781:LEU:HG	2.00	0.61
1:A:815:SER:OG	1:A:821:GLU:OE2	2.09	0.61
1:A:1128:LEU:HA	1:A:1131:LEU:HD12	1.81	0.61
1:A:1381:VAL:O	1:A:1382:GLN:NE2	2.33	0.61
1:A:1641:SER:HA	1:A:1644:ILE:HD12	1.81	0.61
1:A:1364:ASP:HA	1:A:1367:LEU:HD12	1.80	0.61
1:A:1937:LEU:HD22	1:A:1950:LEU:HD11	1.81	0.61
1:A:2205:ALA:O	1:A:2208:SER:OG	2.15	0.61
1:A:2270:THR:HB	1:A:2274:LYS:HZ1	1.65	0.61
1:A:963:ILE:HA	1:A:993:PHE:HE1	1.65	0.61
1:A:627:GLN:O	1:A:630:SER:OG	2.16	0.61
1:A:840:ILE:HG23	1:A:856:LEU:HB3	1.83	0.61
1:A:1175:HIS:ND1	1:A:1175:HIS:O	2.34	0.61
1:A:1330:ASN:O	1:A:1333:SER:OG	2.16	0.61
1:A:1885:LEU:O	1:A:1888:GLN:HG2	2.00	0.61
1:A:2400:VAL:HG21	1:A:2438:LEU:HD22	1.83	0.61
1:A:1252:ALA:O	1:A:1256:LEU:HG	2.01	0.61
1:A:1945:TYR:HA	1:A:1948:LYS:HE2	1.82	0.61
1:A:606:ARG:HA	1:A:609:LEU:HD12	1.83	0.61
1:A:1884:PRO:HA	1:A:1887:ASN:ND2	2.15	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:576:ALA:O	1:A:579:THR:HG22	2.00	0.61
1:A:1223:LEU:HD12	1:A:1227:LEU:HD13	1.81	0.61
1:A:2385:ASP:OD1	1:A:2386:ASP:N	2.33	0.61
1:A:2421:GLN:HE22	1:A:2474:ALA:HA	1.66	0.61
1:A:495:LEU:HD13	1:A:570:TYR:HB3	1.82	0.61
1:A:360:ALA:O	1:A:367:THR:N	2.30	0.61
1:A:1538:ASN:O	1:A:1542:THR:HG23	2.00	0.61
1:A:1811:THR:O	1:A:1815:ASN:ND2	2.34	0.61
1:A:1813:THR:O	1:A:1816:GLU:HG2	2.00	0.61
1:A:322:LYS:HB3	1:A:324:LYS:NZ	2.16	0.60
1:A:697:GLY:O	1:A:700:THR:OG1	2.18	0.60
1:A:1049:GLU:O	1:A:1052:SER:OG	2.17	0.60
1:A:1882:LEU:O	1:A:1886:ALA:N	2.27	0.60
1:A:553:GLY:O	1:A:557:VAL:HG23	2.01	0.60
1:A:1365:ASN:OD1	1:A:1368:ARG:NH1	2.34	0.60
1:A:1658:GLN:HB3	1:A:1780:LYS:HE2	1.83	0.60
1:A:1856:THR:HA	1:A:1859:ARG:HE	1.67	0.60
1:A:1943:ASP:OD2	1:A:1946:THR:N	2.33	0.60
1:A:2308:GLU:HB2	1:A:2394:ILE:HG12	1.81	0.60
1:A:492:GLN:O	1:A:496:THR:HG23	2.01	0.60
1:A:734:GLU:O	1:A:737:VAL:HG12	2.00	0.60
1:A:805:ILE:O	1:A:809:THR:HG23	2.00	0.60
1:A:1108:GLU:O	1:A:1112:GLY:N	2.25	0.60
1:A:1255:GLU:HA	1:A:1258:GLN:CD	2.27	0.60
1:A:1735:ALA:HA	1:A:1738:PHE:CD1	2.36	0.60
1:A:492:GLN:HG2	1:A:628:PRO:HG3	1.83	0.60
1:A:499:ILE:HD13	1:A:627:GLN:HG3	1.82	0.60
1:A:954:GLN:OE1	1:A:954:GLN:N	2.25	0.60
1:A:1250:ASN:HD21	1:A:1368:ARG:HD3	1.66	0.60
1:A:2396:ALA:O	1:A:2400:VAL:HG13	2.01	0.60
1:A:710:ALA:O	1:A:713:THR:OG1	2.18	0.60
1:A:1613:LEU:O	1:A:1616:THR:OG1	2.17	0.60
1:A:1743:LEU:O	1:A:1746:VAL:HG22	2.02	0.60
1:A:2225:HIS:CD2	1:A:2227:GLU:HG3	2.37	0.60
1:A:599:GLU:OE1	1:A:606:ARG:NH2	2.34	0.60
1:A:1356:GLN:HA	1:A:1361:LYS:HE3	1.84	0.60
1:A:514:ASP:OD1	1:A:613:LYS:NZ	2.34	0.60
1:A:962:GLN:HG3	1:A:993:PHE:CD1	2.37	0.60
1:A:1683:VAL:O	1:A:1685:GLN:NE2	2.35	0.60
1:A:2075:GLU:HB3	1:A:2206:ASN:HD21	1.67	0.60
1:A:2389:TRP:NE1	1:A:2441:ALA:O	2.33	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:835:ASP:HA	1:A:838:ASN:HD21	1.66	0.60
1:A:908:ALA:HA	1:A:911:LYS:HD2	1.83	0.60
1:A:1693:ILE:HD11	1:A:1751:LYS:HE2	1.82	0.60
1:A:1738:PHE:O	1:A:1742:THR:HG23	2.02	0.60
1:A:1993:ASP:HA	1:A:1996:ILE:HG12	1.84	0.60
1:A:263:LYS:HA	1:A:271:VAL:HG11	1.83	0.60
1:A:525:ASP:O	1:A:528:SER:OG	2.13	0.60
1:A:1794:GLU:HA	1:A:1797:GLU:CD	2.27	0.60
1:A:1085:GLU:OE2	1:A:1085:GLU:N	2.33	0.59
1:A:1975:THR:O	1:A:1978:CYS:N	2.31	0.59
1:A:2098:THR:HG22	1:A:2114:LEU:HD21	1.84	0.59
1:A:2349:VAL:HA	1:A:2352:ILE:HD12	1.84	0.59
1:A:1187:GLN:NE2	1:A:1188:VAL:HG13	2.17	0.59
1:A:1300:GLN:NE2	1:A:1304:ASN:OD1	2.34	0.59
1:A:1604:LYS:O	1:A:1607:LEU:N	2.35	0.59
1:A:1716:LEU:HD22	1:A:1734:MET:HE1	1.84	0.59
1:A:2094:LEU:HD11	1:A:2118:ALA:HA	1.84	0.59
1:A:2366:ALA:HA	1:A:2452:ALA:HB1	1.84	0.59
1:A:1303:SER:HA	1:A:1306:LYS:HE3	1.83	0.59
1:A:529:LYS:HA	1:A:532:ARG:HD3	1.85	0.59
1:A:2169:THR:HG21	1:A:2225:HIS:HA	1.84	0.59
1:A:589:ARG:O	1:A:593:LEU:HG	2.02	0.59
1:A:1247:ALA:HB2	1:A:1368:ARG:HH21	1.67	0.59
1:A:1340:ARG:NH1	1:A:1372:THR:OG1	2.34	0.59
1:A:1676:ASP:OD2	1:A:1766:LYS:NZ	2.34	0.59
1:A:1856:THR:O	1:A:1860:THR:HG23	2.01	0.59
1:A:671:LEU:O	1:A:675:VAL:HG23	2.02	0.59
1:A:892:GLU:HA	1:A:895:GLU:OE2	2.02	0.59
1:A:1105:LEU:O	1:A:1108:GLU:HG2	2.02	0.59
1:A:1284:ALA:O	1:A:1288:MET:HG2	2.02	0.59
1:A:987:ILE:O	1:A:990:SER:OG	2.14	0.59
1:A:1624:PRO:O	1:A:1630:TRP:NE1	2.32	0.59
1:A:1974:GLY:O	1:A:2041:GLN:HG3	2.02	0.59
1:A:2108:ASP:HB3	1:A:2111:VAL:HG22	1.84	0.59
1:A:2324:GLU:O	1:A:2327:LYS:NZ	2.35	0.59
1:A:685:LYS:HD3	1:A:765:ARG:HG3	1.85	0.59
1:A:1591:GLU:OE1	1:A:1591:GLU:N	2.33	0.59
1:A:550:ILE:HG23	1:A:580:ILE:HG23	1.84	0.59
1:A:1800:VAL:O	1:A:1804:THR:HG23	2.02	0.59
1:A:2020:LEU:HB3	1:A:2024:LYS:HZ3	1.68	0.59
1:A:333:THR:HG23	1:A:336:CYS:H	1.67	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1599:ILE:HD12	1:A:1599:ILE:H	1.66	0.58
1:A:1690:ARG:HE	1:A:1693:ILE:HD13	1.67	0.58
1:A:1833:GLN:HA	1:A:1836:ASN:ND2	2.18	0.58
1:A:996:PRO:O	1:A:1000:MET:HG2	2.03	0.58
1:A:1410:ILE:HG12	1:A:1426:ILE:HB	1.85	0.58
1:A:727:ILE:HG12	1:A:784:HIS:HE1	1.67	0.58
1:A:1368:ARG:O	1:A:1372:THR:HG23	2.02	0.58
1:A:1747:GLY:O	1:A:1751:LYS:HD3	2.03	0.58
1:A:2389:TRP:CE2	1:A:2444:VAL:HB	2.39	0.58
1:A:359:TRP:HB2	1:A:366:PHE:CZ	2.39	0.58
1:A:658:SER:OG	1:A:659:ASP:N	2.36	0.58
1:A:1160:ASP:OD2	1:A:1161:LYS:N	2.37	0.58
1:A:1715:PRO:HB2	1:A:1730:LYS:HZ1	1.68	0.58
1:A:959:VAL:O	1:A:963:ILE:HG23	2.03	0.58
1:A:1412:GLN:HA	1:A:1415:LYS:HD2	1.86	0.58
1:A:1491:VAL:HG11	1:A:1546:LEU:HD23	1.86	0.58
1:A:1733:GLN:HA	1:A:1736:GLN:NE2	2.18	0.58
1:A:1809:ASP:O	1:A:1812:THR:OG1	2.20	0.58
1:A:646:GLN:O	1:A:649:GLY:N	2.36	0.58
1:A:1540:VAL:HG12	1:A:1544:LYS:HE2	1.84	0.58
1:A:1842:PRO:HG3	1:A:1901:LYS:HB3	1.85	0.58
1:A:383:THR:OG1	1:A:384:GLU:OE2	2.19	0.58
1:A:1410:ILE:HG23	1:A:1422:PHE:HD1	1.68	0.58
1:A:1764:GLN:O	1:A:1767:THR:OG1	2.20	0.58
1:A:1886:ALA:O	1:A:1890:THR:HG23	2.03	0.58
1:A:2014:ASP:OD1	1:A:2015:HIS:N	2.32	0.58
1:A:2123:THR:O	1:A:2126:THR:OG1	2.18	0.58
1:A:347:VAL:HG21	1:A:350:GLU:HG3	1.84	0.58
1:A:1251:GLN:NE2	1:A:1255:GLU:OE2	2.37	0.58
1:A:1447:VAL:HB	1:A:1596:MET:CE	2.34	0.58
1:A:1791:HIS:CE1	1:A:1792:THR:HG23	2.39	0.58
1:A:534:ASN:HB3	1:A:968:GLN:HE21	1.69	0.58
1:A:1014:GLN:H	1:A:1014:GLN:CD	2.11	0.58
1:A:1355:GLN:HG2	1:A:1358:PRO:HD2	1.86	0.58
1:A:1427:ALA:O	1:A:1430:SER:OG	2.18	0.58
1:A:1673:ARG:O	1:A:1677:GLN:NE2	2.37	0.58
1:A:1796:LEU:O	1:A:1800:VAL:HG23	2.03	0.58
1:A:2322:LYS:O	1:A:2325:GLN:NE2	2.37	0.58
1:A:2359:LEU:HA	1:A:2459:ALA:HB1	1.85	0.58
1:A:360:ALA:N	1:A:367:THR:OG1	2.37	0.57
1:A:384:GLU:OE2	1:A:384:GLU:N	2.29	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1203:LEU:HD12	1:A:1204:PRO:HD2	1.87	0.57
1:A:2101:ALA:HB3	1:A:2114:LEU:HD22	1.85	0.57
1:A:2148:ALA:O	1:A:2152:HIS:HB2	2.03	0.57
1:A:1237:GLU:O	1:A:1241:ARG:HG2	2.02	0.57
1:A:806:LEU:O	1:A:809:THR:N	2.37	0.57
1:A:1836:ASN:OD1	1:A:1837:GLN:N	2.37	0.57
1:A:1902:PRO:HA	1:A:1905:VAL:HG12	1.85	0.57
1:A:716:LEU:O	1:A:720:THR:HG23	2.05	0.57
1:A:1134:ALA:O	1:A:1138:VAL:HG13	2.05	0.57
1:A:1868:VAL:O	1:A:1872:VAL:HG23	2.04	0.57
1:A:2048:ALA:O	1:A:2051:SER:OG	2.18	0.57
1:A:2301:PRO:HB3	1:A:2387:GLY:HA2	1.85	0.57
1:A:2334:GLU:O	1:A:2417:GLY:HA3	2.05	0.57
1:A:1510:ARG:HH12	1:A:1514:ALA:HB2	1.68	0.57
1:A:1833:GLN:HA	1:A:1836:ASN:HD21	1.69	0.57
1:A:2005:ASN:HA	1:A:2070:GLY:HA2	1.87	0.57
1:A:242:GLN:HA	1:A:245:ILE:HG12	1.87	0.57
1:A:500:ASN:HA	1:A:503:MET:HE3	1.85	0.57
1:A:1016:SER:O	1:A:1019:GLN:HB2	2.04	0.57
1:A:1079:LEU:H	1:A:1082:GLU:CD	2.13	0.57
1:A:1611:GLY:O	1:A:1614:ILE:HG22	2.05	0.57
1:A:1860:THR:O	1:A:1864:ILE:HG23	2.04	0.57
1:A:696:SER:HA	1:A:699:GLN:NE2	2.19	0.57
1:A:2120:VAL:O	1:A:2123:THR:OG1	2.18	0.57
1:A:499:ILE:O	1:A:502:SER:OG	2.19	0.57
1:A:1850:PHE:HB3	1:A:1973:ARG:CD	2.31	0.57
1:A:2006:ARG:NH1	1:A:2010:GLU:O	2.38	0.57
1:A:502:SER:O	1:A:506:VAL:HG23	2.05	0.57
1:A:1165:LEU:O	1:A:1168:GLU:HG2	2.05	0.57
1:A:1253:ALA:HA	1:A:1256:LEU:HD12	1.87	0.57
1:A:1669:ASN:HA	1:A:1672:LEU:HG	1.87	0.57
1:A:1693:ILE:HD12	1:A:1698:LEU:HD21	1.87	0.57
1:A:1713:ILE:HG13	1:A:1714:GLU:N	2.19	0.57
1:A:1801:GLN:O	1:A:1804:THR:N	2.38	0.57
1:A:1888:GLN:O	1:A:1891:SER:OG	2.20	0.56
1:A:2161:CYS:HA	1:A:2241:ARG:HH22	1.70	0.56
1:A:938:ALA:O	1:A:942:PRO:HD3	2.05	0.56
1:A:1124:VAL:O	1:A:1128:LEU:HD23	2.04	0.56
1:A:1386:ASP:OD1	1:A:1387:MET:N	2.38	0.56
1:A:2182:ILE:HG13	1:A:2215:MET:HG2	1.86	0.56
1:A:2229:ALA:HB3	1:A:2232:VAL:HG23	1.87	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:499:ILE:HG21	1:A:627:GLN:HE21	1.70	0.56
1:A:623:LEU:O	1:A:627:GLN:NE2	2.38	0.56
1:A:813:PHE:O	1:A:1915:HIS:NE2	2.38	0.56
1:A:847:GLU:OE2	1:A:849:ASP:N	2.37	0.56
1:A:918:GLU:O	1:A:922:LYS:HG2	2.04	0.56
1:A:960:ALA:O	1:A:963:ILE:HG12	2.05	0.56
1:A:1680:LEU:O	1:A:1684:SER:OG	2.22	0.56
1:A:1919:ARG:O	1:A:1923:LEU:HG	2.05	0.56
1:A:550:ILE:O	1:A:554:THR:HG23	2.05	0.56
1:A:349:GLN:HG3	1:A:351:TRP:CZ2	2.41	0.56
1:A:539:SER:HB2	1:A:594:LEU:HD21	1.88	0.56
1:A:2143:THR:HG23	1:A:2258:LEU:HD23	1.86	0.56
1:A:223:ILE:O	1:A:267:PRO:HG3	2.06	0.56
1:A:1083:THR:O	1:A:1086:LYS:HG2	2.06	0.56
1:A:1084:MET:HA	1:A:1141:LEU:HD22	1.88	0.56
1:A:1163:SER:HA	1:A:1166:ILE:HD12	1.87	0.56
1:A:1398:GLU:O	1:A:1402:VAL:HG23	2.05	0.56
1:A:1410:ILE:HG23	1:A:1422:PHE:CD1	2.41	0.56
1:A:1714:GLU:H	1:A:1714:GLU:CD	2.12	0.56
1:A:604:ASN:HA	1:A:606:ARG:NH1	2.21	0.56
1:A:698:LEU:HG	1:A:756:ALA:HB1	1.88	0.56
1:A:812:ILE:HD12	1:A:822:MET:HG3	1.88	0.56
1:A:825:GLN:O	1:A:829:LEU:HB2	2.06	0.56
1:A:892:GLU:HA	1:A:895:GLU:CD	2.30	0.56
1:A:1329:PRO:HB2	1:A:1382:GLN:HG2	1.87	0.56
1:A:1519:PRO:O	1:A:1522:LYS:HG2	2.05	0.56
1:A:1702:MET:HB2	1:A:1814:LEU:HD11	1.88	0.56
1:A:1994:THR:O	1:A:1997:MET:HG3	2.06	0.56
1:A:608:LEU:H	1:A:608:LEU:HD12	1.71	0.56
1:A:2205:ALA:O	1:A:2209:ARG:NE	2.37	0.56
1:A:2473:ALA:HA	1:A:2476:LYS:HE2	1.87	0.56
1:A:1252:ALA:O	1:A:1255:GLU:HG2	2.06	0.56
1:A:1606:MET:HE1	1:A:1640:VAL:O	2.06	0.56
1:A:1850:PHE:CE2	1:A:1907:ALA:HB2	2.40	0.56
1:A:2235:ARG:HB3	1:A:2239:TYR:CZ	2.40	0.56
1:A:2375:LYS:O	1:A:2382:ASN:ND2	2.38	0.56
1:A:1846:PRO:HB3	1:A:1906:ALA:HA	1.88	0.55
1:A:1861:ALA:O	1:A:1864:ILE:HG12	2.06	0.55
1:A:311:SER:N	1:A:332:ILE:O	2.21	0.55
1:A:579:THR:HB	1:A:1019:GLN:HE22	1.70	0.55
1:A:669:MET:HG3	1:A:673:ASN:HD21	1.72	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1975:THR:H	1:A:2099:LYS:HZ2	1.52	0.55
1:A:2048:ALA:O	1:A:2052:VAL:HG23	2.06	0.55
1:A:914:VAL:HA	1:A:917:LEU:HD12	1.87	0.55
1:A:927:SER:O	1:A:931:THR:HG23	2.05	0.55
1:A:1184:ARG:HA	1:A:1187:GLN:HE21	1.70	0.55
1:A:1189:ALA:O	1:A:1192:VAL:HG22	2.06	0.55
1:A:1284:ALA:O	1:A:1287:GLU:HG2	2.06	0.55
1:A:2214:ASP:OD1	1:A:2217:ARG:NH2	2.35	0.55
1:A:2359:LEU:HD22	1:A:2463:VAL:HG21	1.87	0.55
1:A:498:THR:O	1:A:501:SER:OG	2.25	0.55
1:A:1300:GLN:OE1	1:A:1304:ASN:ND2	2.29	0.55
1:A:1363:CYS:SG	1:A:1618:ARG:HD3	2.47	0.55
1:A:1955:ARG:O	1:A:1958:SER:OG	2.07	0.55
1:A:548:ASP:O	1:A:551:THR:OG1	2.19	0.55
1:A:1668:LEU:O	1:A:1672:LEU:HG	2.06	0.55
1:A:1961:VAL:O	1:A:1965:LEU:HG	2.06	0.55
1:A:1969:GLN:NE2	1:A:1976:GLN:OE1	2.40	0.55
1:A:2031:LYS:O	1:A:2035:GLN:NE2	2.40	0.55
1:A:2418:HIS:HB3	1:A:2424:LEU:HD11	1.87	0.55
1:A:1222:ARG:NH2	1:A:1283:GLU:OE2	2.39	0.55
1:A:1383:PRO:HD3	1:A:1445:TYR:CZ	2.42	0.55
1:A:1684:SER:HB2	1:A:1686:GLN:HE22	1.72	0.55
1:A:1689:PRO:HB3	1:A:1751:LYS:HA	1.88	0.55
1:A:1731:VAL:HA	1:A:1734:MET:HG2	1.87	0.55
1:A:546:GLN:HG3	1:A:587:MET:HE3	1.88	0.55
1:A:813:PHE:HE2	1:A:894:ALA:HB3	1.71	0.55
1:A:829:LEU:HD22	1:A:870:MET:SD	2.47	0.55
1:A:267:PRO:HD2	1:A:270:TYR:CD2	2.42	0.55
1:A:579:THR:HB	1:A:1019:GLN:OE1	2.07	0.55
1:A:905:ALA:C	1:A:907:ASN:H	2.14	0.55
1:A:854:ARG:HA	1:A:857:LEU:HD12	1.89	0.55
1:A:1301:VAL:HG22	1:A:1353:CYS:SG	2.47	0.55
1:A:1307:GLY:HA2	1:A:1310:MET:HE3	1.89	0.55
1:A:1539:LEU:O	1:A:1542:THR:OG1	2.17	0.55
1:A:1892:ASP:HA	1:A:1895:ARG:HH21	1.72	0.55
1:A:1084:MET:N	1:A:1084:MET:SD	2.80	0.55
1:A:1415:LYS:HA	1:A:1625:ARG:HH11	1.72	0.55
1:A:1671:CYS:SG	1:A:1742:THR:HG21	2.47	0.55
1:A:1754:SER:HB3	1:A:1757:GLN:HB2	1.88	0.55
1:A:2127:SER:O	1:A:2131:THR:HG23	2.06	0.55
1:A:819:ALA:HA	1:A:822:MET:HE2	1.88	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1733:GLN:HA	1:A:1736:GLN:HE21	1.72	0.54
1:A:2323:LEU:HG	1:A:2350:LYS:HG2	1.89	0.54
1:A:1083:THR:H	1:A:1086:LYS:HG2	1.72	0.54
1:A:1768:LEU:O	1:A:1771:SER:OG	2.21	0.54
1:A:1944:VAL:O	1:A:1947:LYS:HG2	2.08	0.54
1:A:969:GLY:HA3	1:A:986:LEU:HD13	1.89	0.54
1:A:1755:HIS:HA	1:A:1758:GLN:HE21	1.72	0.54
1:A:1887:ASN:OD1	1:A:1888:GLN:N	2.40	0.54
1:A:1980:THR:O	1:A:1983:SER:OG	2.21	0.54
1:A:1997:MET:HE3	1:A:2436:ALA:O	2.06	0.54
1:A:670:GLN:HA	1:A:673:ASN:HD22	1.73	0.54
1:A:803:ASP:O	1:A:807:THR:HG23	2.07	0.54
1:A:951:LEU:HA	1:A:954:GLN:NE2	2.23	0.54
1:A:1351:THR:HA	1:A:1361:LYS:HZ1	1.72	0.54
1:A:1684:SER:O	1:A:1686:GLN:NE2	2.40	0.54
1:A:2087:VAL:O	1:A:2091:LEU:HG	2.06	0.54
1:A:2150:THR:HG23	1:A:2154:ARG:HH12	1.72	0.54
1:A:2427:SER:O	1:A:2431:VAL:HG23	2.08	0.54
1:A:341:ASP:HB3	1:A:344:THR:OG1	2.08	0.54
1:A:853:SER:O	1:A:857:LEU:HG	2.08	0.54
1:A:996:PRO:HA	1:A:999:LYS:NZ	2.21	0.54
1:A:1024:ALA:HA	1:A:1027:LEU:HD12	1.88	0.54
1:A:1349:LEU:O	1:A:1353:CYS:HB2	2.06	0.54
1:A:1377:LEU:HD13	1:A:1441:ALA:HB2	1.88	0.54
1:A:1644:ILE:O	1:A:1648:ILE:HG12	2.08	0.54
1:A:1762:LEU:O	1:A:1765:THR:OG1	2.18	0.54
1:A:2379:ILE:HG23	1:A:2382:ASN:H	1.72	0.54
1:A:785:VAL:HB	1:A:786:LYS:HZ3	1.73	0.54
1:A:971:ARG:NH1	1:A:971:ARG:HA	2.22	0.54
1:A:1717:ALA:O	1:A:1721:ARG:HG2	2.07	0.54
1:A:1782:ALA:HB2	1:A:1796:LEU:HD21	1.90	0.54
1:A:312:PHE:HA	1:A:330:LEU:O	2.08	0.54
1:A:913:LEU:O	1:A:917:LEU:HG	2.07	0.54
1:A:1959:GLU:C	1:A:1963:HIS:HD1	2.16	0.54
1:A:1965:LEU:O	1:A:1968:LEU:HG	2.07	0.54
1:A:915:GLN:HA	1:A:918:GLU:OE2	2.08	0.54
1:A:1672:LEU:O	1:A:1766:LYS:NZ	2.40	0.54
1:A:1960:LYS:HA	1:A:1963:HIS:ND1	2.23	0.54
1:A:2247:TYR:O	1:A:2251:LEU:HG	2.08	0.54
1:A:2348:ALA:O	1:A:2352:ILE:HG13	2.08	0.54
1:A:2425:ILE:C	1:A:2429:LYS:HZ3	2.16	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:286:CYS:SG	1:A:297:ARG:NH2	2.79	0.54
1:A:525:ASP:O	1:A:529:LYS:NZ	2.27	0.54
1:A:1459:GLN:CA	1:A:1584:VAL:H	2.21	0.54
1:A:1636:HIS:O	1:A:1639:THR:OG1	2.24	0.54
1:A:1754:SER:OG	1:A:1757:GLN:OE1	2.19	0.54
1:A:2006:ARG:HH12	1:A:2011:THR:HA	1.73	0.54
1:A:910:LYS:NZ	1:A:1044:ALA:O	2.41	0.54
1:A:1709:ILE:O	1:A:1713:ILE:HG23	2.08	0.54
1:A:2468:ASP:OD1	1:A:2472:LYS:NZ	2.40	0.54
1:A:1266:ASP:HA	1:A:1269:ARG:HE	1.72	0.53
1:A:1273:ARG:HA	1:A:1276:GLN:HE21	1.73	0.53
1:A:1881:GLU:OE1	1:A:1881:GLU:N	2.26	0.53
1:A:2390:SER:O	1:A:2394:ILE:HG13	2.07	0.53
1:A:2472:LYS:O	1:A:2475:GLN:NE2	2.41	0.53
1:A:547:VAL:HA	1:A:550:ILE:HD12	1.91	0.53
1:A:1032:ALA:O	1:A:1036:THR:HG23	2.08	0.53
1:A:1172:ALA:HA	1:A:1175:HIS:CE1	2.44	0.53
1:A:1850:PHE:HA	1:A:1853:TYR:CD2	2.44	0.53
1:A:2403:ALA:HB1	1:A:2431:VAL:HG22	1.89	0.53
1:A:2454:LYS:O	1:A:2457:GLN:HG2	2.08	0.53
1:A:332:ILE:HG13	1:A:337:VAL:HG23	1.91	0.53
1:A:1154:THR:HB	1:A:1199:CYS:SG	2.48	0.53
1:A:1188:VAL:O	1:A:1192:VAL:HG13	2.07	0.53
1:A:1863:ALA:O	1:A:1867:THR:HG23	2.08	0.53
1:A:1873:THR:O	1:A:1877:THR:HG23	2.08	0.53
1:A:364:LYS:O	1:A:382:THR:N	2.36	0.53
1:A:803:ASP:HA	1:A:806:LEU:HD12	1.89	0.53
1:A:510:GLN:O	1:A:513:LEU:HB3	2.08	0.53
1:A:798:TYR:CD1	1:A:836:LEU:HD13	2.44	0.53
1:A:802:THR:O	1:A:806:LEU:HG	2.08	0.53
1:A:1642:ASP:O	1:A:1645:LYS:HG2	2.09	0.53
1:A:1712:LEU:C	1:A:1715:PRO:HD2	2.34	0.53
1:A:1842:PRO:HD3	1:A:1901:LYS:HB3	1.91	0.53
1:A:2101:ALA:HB1	1:A:2111:VAL:HG12	1.90	0.53
1:A:2327:LYS:H	1:A:2329:ARG:NH2	2.07	0.53
1:A:314:LEU:HG	1:A:342:GLU:OE1	2.09	0.53
1:A:716:LEU:HD12	1:A:743:VAL:HG11	1.89	0.53
1:A:765:ARG:HH21	1:A:769:ALA:N	2.07	0.53
1:A:1013:ASP:OD2	1:A:1016:SER:N	2.36	0.53
1:A:1148:GLN:O	1:A:1151:VAL:HG22	2.09	0.53
1:A:1519:PRO:HA	1:A:1522:LYS:HE3	1.91	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:362:SER:N	1:A:365:SER:O	2.42	0.53
1:A:521:PRO:O	1:A:1077:LYS:HE2	2.08	0.53
1:A:615:LEU:HD11	1:A:651:LEU:HD22	1.91	0.53
1:A:808:VAL:HG13	1:A:825:GLN:HB3	1.91	0.53
1:A:1911:GLU:OE1	1:A:1911:GLU:N	2.22	0.53
1:A:1927:CYS:HA	1:A:1930:LEU:HD12	1.90	0.53
1:A:2223:ALA:HB1	1:A:2233:ARG:HB2	1.90	0.53
1:A:2337:GLU:HG3	1:A:2341:PHE:CE1	2.44	0.53
1:A:518:THR:HG23	1:A:520:PRO:HD3	1.89	0.53
1:A:599:GLU:HA	1:A:603:GLY:CA	2.36	0.53
1:A:1258:GLN:HG3	1:A:1375:GLU:OE1	2.09	0.53
1:A:1384:ILE:HG21	1:A:1438:GLU:HB2	1.90	0.53
1:A:1975:THR:HB	1:A:1978:CYS:SG	2.49	0.53
1:A:2082:ASN:HA	1:A:2085:LYS:HE2	1.91	0.53
1:A:1465:THR:OG1	1:A:1469:ARG:NH1	2.42	0.53
1:A:1810:LEU:O	1:A:1813:THR:OG1	2.23	0.53
1:A:1850:PHE:CZ	1:A:1907:ALA:HB2	2.44	0.53
1:A:1951:ILE:HG13	1:A:1955:ARG:NE	2.24	0.53
1:A:1992:LEU:HD22	1:A:2081:ILE:HG23	1.90	0.53
1:A:2019:ILE:HG13	1:A:2061:VAL:HG13	1.90	0.53
1:A:604:ASN:O	1:A:607:PRO:HD2	2.09	0.52
1:A:872:GLU:HG3	1:A:875:LYS:HZ1	1.74	0.52
1:A:1098:VAL:HG11	1:A:1131:LEU:HD11	1.91	0.52
1:A:1261:ARG:HH22	1:A:1378:GLU:HB2	1.73	0.52
1:A:1559:ARG:HA	1:A:1562:THR:HG22	1.91	0.52
1:A:1854:GLN:HA	1:A:1857:MET:HE2	1.90	0.52
1:A:2323:LEU:HD23	1:A:2353:ALA:HB2	1.91	0.52
1:A:554:THR:O	1:A:558:VAL:HG23	2.10	0.52
1:A:1602:SER:OG	1:A:1647:LEU:HG	2.09	0.52
1:A:1773:LEU:HA	1:A:1776:LEU:HD12	1.90	0.52
1:A:1805:GLU:HA	1:A:1808:GLU:OE2	2.10	0.52
1:A:1818:ALA:HB1	1:A:1824:VAL:HG11	1.90	0.52
1:A:804:THR:O	1:A:808:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:1497:ILE:O	1:A:1500:LYS:HG2	2.09	0.52
1:A:920:ALA:HA	1:A:923:GLN:NE2	2.25	0.52
1:A:1651:MET:HA	1:A:1654:LYS:HE2	1.91	0.52
1:A:1740:PRO:HA	1:A:1743:LEU:HD12	1.91	0.52
1:A:1762:LEU:HD13	1:A:1765:THR:HG21	1.90	0.52
1:A:1792:THR:O	1:A:1796:LEU:HD23	2.10	0.52
1:A:1084:MET:O	1:A:1088:THR:HG23	2.09	0.52
1:A:1789:ALA:HB3	1:A:1791:HIS:ND1	2.25	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1975:THR:HG22	1:A:1977:ALA:HB3	1.91	0.52
1:A:515:ASP:O	1:A:592:LYS:HE3	2.08	0.52
1:A:1367:LEU:O	1:A:1370:LEU:HB3	2.09	0.52
1:A:216:TYR:CE1	1:A:295:LYS:HA	2.44	0.52
1:A:220:ARG:HH11	1:A:242:GLN:NE2	2.07	0.52
1:A:524:GLN:C	1:A:529:LYS:HZ1	2.18	0.52
1:A:587:MET:O	1:A:588:SER:C	2.53	0.52
1:A:902:ASN:CB	1:A:906:GLN:HB2	2.40	0.52
1:A:902:ASN:CG	1:A:906:GLN:HB2	2.35	0.52
1:A:2160:PHE:HE1	1:A:2216:LEU:HB3	1.71	0.52
1:A:2327:LYS:HB2	1:A:2329:ARG:CZ	2.39	0.52
1:A:220:ARG:O	1:A:224:LEU:HG	2.10	0.52
1:A:615:LEU:O	1:A:619:VAL:HG23	2.10	0.52
1:A:679:ALA:O	1:A:683:VAL:HG23	2.09	0.52
1:A:723:VAL:HG21	1:A:736:LEU:HD21	1.91	0.52
1:A:950:PRO:HB2	1:A:952:LEU:HG	1.91	0.52
1:A:1036:THR:O	1:A:1040:LYS:HG2	2.09	0.52
1:A:1304:ASN:HB2	1:A:1349:LEU:HD13	1.91	0.52
1:A:208:ASP:OD1	1:A:211:GLN:N	2.42	0.52
1:A:342:GLU:O	1:A:345:LYS:NZ	2.28	0.52
1:A:988:ALA:O	1:A:991:GLN:NE2	2.42	0.52
1:A:1297:ASP:O	1:A:1301:VAL:HG23	2.10	0.52
1:A:1322:LEU:HD12	1:A:1335:LEU:HD13	1.92	0.52
1:A:1381:VAL:HG22	1:A:1593:ARG:NH1	2.25	0.52
1:A:2081:ILE:HA	1:A:2084:VAL:HG22	1.92	0.52
1:A:222:ASP:HA	1:A:225:ASN:OD1	2.09	0.52
1:A:234:LYS:HE2	1:A:301:LEU:HD12	1.92	0.52
1:A:914:VAL:HG12	1:A:918:GLU:OE1	2.11	0.52
1:A:1674:ASP:HA	1:A:1677:GLN:HE21	1.74	0.52
1:A:2282:GLU:HA	1:A:2285:GLN:CD	2.35	0.52
1:A:296:VAL:O	1:A:300:LYS:HG2	2.11	0.51
1:A:1190:LYS:O	1:A:1194:GLN:NE2	2.43	0.51
1:A:1257:VAL:HG12	1:A:1335:LEU:HD23	1.90	0.51
1:A:1702:MET:HE1	1:A:1745:ALA:HA	1.93	0.51
1:A:2081:ILE:HG22	1:A:2085:LYS:HZ3	1.75	0.51
1:A:500:ASN:O	1:A:503:MET:HG2	2.10	0.51
1:A:632:GLU:CD	1:A:633:PRO:HD2	2.35	0.51
1:A:743:VAL:O	1:A:747:VAL:HG23	2.11	0.51
1:A:810:GLU:O	1:A:814:SER:OG	2.14	0.51
1:A:902:ASN:HB3	1:A:906:GLN:HB2	1.91	0.51
1:A:1050:MET:HG2	1:A:1170:LYS:HE2	1.91	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1841:GLY:HA2	1:A:1901:LYS:HD3	1.93	0.51
1:A:2143:THR:OG1	1:A:2144:ARG:NH1	2.43	0.51
1:A:1035:ARG:HH12	1:A:1039:GLN:HB2	1.74	0.51
1:A:1259:ALA:C	1:A:1262:GLY:H	2.18	0.51
1:A:1384:ILE:HG22	1:A:1442:GLN:HB3	1.91	0.51
1:A:1659:LEU:O	1:A:1663:THR:HG23	2.10	0.51
1:A:1789:ALA:HB3	1:A:1791:HIS:CE1	2.45	0.51
1:A:1849:SER:OG	1:A:1851:VAL:HG12	2.11	0.51
1:A:267:PRO:HD2	1:A:270:TYR:HD2	1.76	0.51
1:A:1208:ASP:O	1:A:1212:ALA:N	2.35	0.51
1:A:1459:GLN:HA	1:A:1584:VAL:H	1.75	0.51
1:A:1565:LEU:O	1:A:1569:VAL:HG23	2.10	0.51
1:A:1943:ASP:OD2	1:A:1946:THR:HG23	2.10	0.51
1:A:1978:CYS:HB2	1:A:2099:LYS:HD3	1.93	0.51
1:A:786:LYS:HA	1:A:789:ALA:HB3	1.92	0.51
1:A:882:ASP:C	1:A:887:GLN:HE21	2.19	0.51
1:A:1345:SER:O	1:A:1348:GLN:NE2	2.43	0.51
1:A:1675:LEU:HD13	1:A:1766:LYS:HD3	1.91	0.51
1:A:2266:LYS:O	1:A:2270:THR:HG23	2.10	0.51
1:A:392:ILE:HD13	1:A:395:TYR:HD2	1.75	0.51
1:A:648:SER:O	1:A:652:LEU:HG	2.10	0.51
1:A:1891:SER:O	1:A:1895:ARG:NE	2.43	0.51
1:A:829:LEU:HD21	1:A:897:LEU:HG	1.92	0.51
1:A:1797:GLU:HG2	1:A:1798:GLU:N	2.24	0.51
1:A:1961:VAL:O	1:A:1964:VAL:HG22	2.11	0.51
1:A:2394:ILE:O	1:A:2398:ARG:HG3	2.10	0.51
1:A:727:ILE:HG12	1:A:784:HIS:CE1	2.46	0.51
1:A:983:GLN:O	1:A:987:ILE:HG13	2.11	0.51
1:A:1606:MET:CE	1:A:1643:SER:HB2	2.40	0.51
1:A:1728:GLY:HA2	1:A:1731:VAL:HG22	1.93	0.51
1:A:2425:ILE:O	1:A:2429:LYS:HG3	2.10	0.51
1:A:2475:GLN:NE2	1:A:2476:LYS:HG3	2.26	0.51
1:A:245:ILE:HG13	1:A:246:GLN:HG3	1.92	0.51
1:A:894:ALA:O	1:A:898:ARG:HG3	2.10	0.51
1:A:970:VAL:O	1:A:973:SER:OG	2.24	0.51
1:A:1161:LYS:O	1:A:1165:LEU:HG	2.11	0.51
1:A:1707:GLN:O	1:A:1710:SER:OG	2.26	0.51
1:A:1723:GLU:OE2	1:A:1725:SER:HB3	2.11	0.51
1:A:2439:LEU:O	1:A:2443:LYS:HG2	2.11	0.51
1:A:729:SER:HB2	1:A:731:VAL:HG12	1.92	0.51
1:A:761:GLY:HA2	1:A:764:LEU:HD12	1.93	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:867:THR:O	1:A:871:VAL:HG23	2.11	0.51
1:A:1101:ALA:O	1:A:1105:LEU:HG	2.11	0.51
1:A:1911:GLU:H	1:A:1911:GLU:CD	2.15	0.51
1:A:2012:PHE:CZ	1:A:2016:ARG:HB2	2.46	0.51
1:A:2217:ARG:HD2	1:A:2218:ALA:N	2.26	0.51
1:A:2349:VAL:HG13	1:A:2407:LEU:HD21	1.92	0.51
1:A:2432:ALA:O	1:A:2435:THR:OG1	2.27	0.51
1:A:241:PHE:HB2	1:A:298:TYR:HD1	1.76	0.50
1:A:242:GLN:HE21	1:A:246:GLN:HE22	1.59	0.50
1:A:621:GLU:OE1	1:A:624:ARG:NH2	2.44	0.50
1:A:2250:LEU:O	1:A:2254:VAL:HG23	2.11	0.50
1:A:2348:ALA:O	1:A:2351:SER:OG	2.23	0.50
1:A:571:THR:C	1:A:1018:MET:HE1	2.37	0.50
1:A:1193:THR:HA	1:A:1196:LEU:HD12	1.93	0.50
1:A:2014:ASP:OD1	1:A:2015:HIS:ND1	2.44	0.50
1:A:2125:VAL:O	1:A:2129:LEU:HG	2.10	0.50
1:A:2160:PHE:HA	1:A:2220:LYS:NZ	2.26	0.50
1:A:579:THR:HB	1:A:1019:GLN:NE2	2.26	0.50
1:A:778:LEU:HD22	1:A:1945:TYR:CD2	2.47	0.50
1:A:1546:LEU:HD13	1:A:1558:CYS:SG	2.52	0.50
1:A:1772:ALA:O	1:A:1776:LEU:HG	2.10	0.50
1:A:1793:GLN:NE2	1:A:1797:GLU:OE1	2.45	0.50
1:A:2088:ALA:HA	1:A:2091:LEU:HD12	1.93	0.50
1:A:305:LEU:C	1:A:307:THR:H	2.19	0.50
1:A:307:THR:HG23	1:A:308:TYR:CD1	2.45	0.50
1:A:317:GLU:OE2	1:A:381:GLN:N	2.44	0.50
1:A:883:SER:HB2	1:A:885:GLU:CD	2.36	0.50
1:A:1130:SER:HA	1:A:1133:GLN:HG2	1.93	0.50
1:A:1265:GLN:N	1:A:1265:GLN:OE1	2.43	0.50
1:A:1713:ILE:O	1:A:1716:LEU:HB3	2.12	0.50
1:A:1742:THR:O	1:A:1746:VAL:HG13	2.11	0.50
1:A:1976:GLN:NE2	1:A:2041:GLN:HE22	2.09	0.50
1:A:2147:GLU:HA	1:A:2150:THR:HG22	1.92	0.50
1:A:337:VAL:HG13	1:A:351:TRP:HB2	1.94	0.50
1:A:774:VAL:O	1:A:778:LEU:HG	2.11	0.50
1:A:929:THR:O	1:A:932:ILE:HG12	2.11	0.50
1:A:1105:LEU:HA	1:A:1108:GLU:OE2	2.12	0.50
1:A:2261:PRO:O	1:A:2266:LYS:NZ	2.45	0.50
1:A:2279:SER:HA	1:A:2282:GLU:HG2	1.93	0.50
1:A:250:HIS:O	1:A:254:LYS:HG2	2.12	0.50
1:A:1472:GLN:O	1:A:1476:MET:HG2	2.10	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2435:THR:O	1:A:2439:LEU:HD23	2.11	0.50
1:A:269:GLU:HA	1:A:272:LYS:HE2	1.94	0.50
1:A:336:CYS:HA	1:A:352:SER:HA	1.93	0.50
1:A:583:ASN:O	1:A:584:LEU:C	2.54	0.50
1:A:1168:GLU:OE2	1:A:1185:LEU:HD13	2.12	0.50
1:A:1447:VAL:HA	1:A:1450:SER:OG	2.11	0.50
1:A:2146:LEU:O	1:A:2149:THR:HB	2.12	0.50
1:A:2362:ALA:HB1	1:A:2456:LEU:HA	1.93	0.50
1:A:294:ALA:HA	1:A:297:ARG:HD3	1.93	0.50
1:A:501:SER:HA	1:A:504:GLN:NE2	2.26	0.50
1:A:827:ARG:NH2	1:A:828:ILE:HA	2.27	0.50
1:A:1157:ASP:HA	1:A:1160:ASP:OD1	2.12	0.50
1:A:1192:VAL:O	1:A:1196:LEU:HG	2.12	0.50
1:A:1674:ASP:HA	1:A:1677:GLN:NE2	2.26	0.50
1:A:1690:ARG:H	1:A:1751:LYS:NZ	2.06	0.50
1:A:1696:GLU:O	1:A:1700:THR:HG23	2.12	0.50
1:A:984:LEU:HA	1:A:987:ILE:HD12	1.94	0.50
1:A:1561:ALA:O	1:A:1564:PRO:HD2	2.12	0.50
1:A:1729:HIS:C	1:A:1733:GLN:HE22	2.20	0.50
1:A:2035:GLN:H	1:A:2035:GLN:CD	2.20	0.50
1:A:2169:THR:HG21	1:A:2226:PRO:HD3	1.94	0.50
1:A:322:LYS:HD3	1:A:323:ASN:N	2.27	0.49
1:A:578:THR:O	1:A:581:SER:OG	2.26	0.49
1:A:1236:GLN:HG2	1:A:1237:GLU:H	1.77	0.49
1:A:1404:GLY:O	1:A:1408:THR:HG23	2.12	0.49
1:A:1760:ALA:HA	1:A:1763:ASP:OD2	2.12	0.49
1:A:1849:SER:HB3	1:A:1852:ASP:OD2	2.12	0.49
1:A:1922:GLU:HA	1:A:1925:HIS:HD2	1.77	0.49
1:A:1991:ASP:O	1:A:1995:THR:HG23	2.12	0.49
1:A:2385:ASP:O	1:A:2388:GLN:HG3	2.11	0.49
1:A:727:ILE:HG23	1:A:784:HIS:CE1	2.47	0.49
1:A:1702:MET:O	1:A:1706:VAL:HG12	2.11	0.49
1:A:2018:GLY:O	1:A:2022:THR:HG23	2.12	0.49
1:A:2030:THR:O	1:A:2034:VAL:HG23	2.12	0.49
1:A:2131:THR:O	1:A:2135:VAL:HG23	2.12	0.49
1:A:541:HIS:CE1	1:A:925:ALA:HB3	2.47	0.49
1:A:618:ALA:O	1:A:622:LEU:HD23	2.12	0.49
1:A:1372:THR:OG1	1:A:1373:VAL:N	2.43	0.49
1:A:1605:THR:O	1:A:1609:SER:OG	2.15	0.49
1:A:1995:THR:HA	1:A:1998:PHE:HD2	1.77	0.49
1:A:2053:ALA:HB1	1:A:2057:ARG:HH12	1.77	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:663:HIS:CE1	1:A:664:PHE:HD1	2.30	0.49
1:A:1184:ARG:O	1:A:1187:GLN:NE2	2.45	0.49
1:A:1870:GLU:O	1:A:1873:THR:OG1	2.23	0.49
1:A:2264:ASP:O	1:A:2267:GLN:NE2	2.45	0.49
1:A:1373:VAL:O	1:A:1377:LEU:HD23	2.13	0.49
1:A:1705:ALA:O	1:A:1709:ILE:HG12	2.12	0.49
1:A:1878:SER:OG	1:A:1881:GLU:OE2	2.30	0.49
1:A:2094:LEU:HD21	1:A:2118:ALA:N	2.28	0.49
1:A:2328:PRO:HB2	1:A:2343:GLU:HG3	1.94	0.49
1:A:733:GLN:HG3	1:A:784:HIS:CD2	2.48	0.49
1:A:1771:SER:HB2	1:A:1803:MET:SD	2.51	0.49
1:A:2095:ILE:O	1:A:2098:THR:OG1	2.28	0.49
1:A:2235:ARG:NE	1:A:2235:ARG:HA	2.26	0.49
1:A:2334:GLU:HB3	1:A:2416:GLN:HA	1.94	0.49
1:A:353:LEU:HD21	1:A:399:ILE:HB	1.95	0.49
1:A:575:CYS:HA	1:A:1015:ALA:HB1	1.95	0.49
1:A:951:LEU:HD13	1:A:954:GLN:NE2	2.28	0.49
1:A:1976:GLN:HE22	1:A:2041:GLN:HE22	1.60	0.49
1:A:2246:GLY:O	1:A:2250:LEU:HD23	2.13	0.49
1:A:368:LEU:HD13	1:A:379:SER:HA	1.94	0.49
1:A:582:SER:HB3	1:A:937:HIS:HE2	1.76	0.49
1:A:1073:ASP:HB3	1:A:1075:LYS:NZ	2.28	0.49
1:A:1403:LEU:O	1:A:1407:MET:HG2	2.13	0.49
1:A:1415:LYS:HG3	1:A:1630:TRP:CH2	2.47	0.49
1:A:1483:GLU:HG2	1:A:1484:PRO:HD2	1.95	0.49
1:A:1665:ILE:HG13	1:A:1776:LEU:HD13	1.95	0.49
1:A:1761:LEU:O	1:A:1765:THR:HG23	2.12	0.49
1:A:2020:LEU:HB3	1:A:2024:LYS:NZ	2.27	0.49
1:A:551:THR:O	1:A:554:THR:OG1	2.23	0.49
1:A:806:LEU:O	1:A:807:THR:C	2.54	0.49
1:A:1404:GLY:O	1:A:1407:MET:HB2	2.12	0.49
1:A:1842:PRO:HD3	1:A:1901:LYS:HD3	1.95	0.49
1:A:2077:GLN:O	1:A:2081:ILE:HG12	2.13	0.49
1:A:699:GLN:O	1:A:703:ILE:HG12	2.13	0.49
1:A:1145:PRO:HA	1:A:1148:GLN:CD	2.38	0.49
1:A:2128:LEU:HD12	1:A:2131:THR:OG1	2.12	0.49
1:A:801:ALA:O	1:A:805:ILE:HG13	2.13	0.48
1:A:1052:SER:O	1:A:1055:SER:OG	2.25	0.48
1:A:1105:LEU:HA	1:A:1108:GLU:CD	2.38	0.48
1:A:1707:GLN:O	1:A:1711:HIS:ND1	2.45	0.48
1:A:1849:SER:HB3	1:A:1852:ASP:CG	2.38	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:339:ARG:HD3	1:A:378:TYR:CE1	2.48	0.48
1:A:1011:ILE:HG13	1:A:1013:ASP:N	2.25	0.48
1:A:1349:LEU:HD12	1:A:1353:CYS:SG	2.53	0.48
1:A:1698:LEU:HA	1:A:1701:GLN:OE1	2.13	0.48
1:A:1773:LEU:HD13	1:A:1776:LEU:HD12	1.95	0.48
1:A:1794:GLU:HA	1:A:1797:GLU:OE2	2.14	0.48
1:A:2036:ASN:HB3	1:A:2044:LEU:HA	1.95	0.48
1:A:2138:GLU:HA	1:A:2141:LYS:HE2	1.94	0.48
1:A:2169:THR:HA	1:A:2221:GLU:HB3	1.94	0.48
1:A:2238:HIS:HD2	1:A:2239:TYR:HD1	1.61	0.48
1:A:1127:GLY:O	1:A:1130:SER:OG	2.27	0.48
1:A:1477:ALA:O	1:A:1480:SER:OG	2.29	0.48
1:A:2116:ASN:O	1:A:2120:VAL:HG23	2.14	0.48
1:A:2397:ALA:HA	1:A:2400:VAL:HG22	1.95	0.48
1:A:522:LEU:HB2	1:A:532:ARG:HD2	1.96	0.48
1:A:1461:LEU:HD22	1:A:1516:THR:HG22	1.94	0.48
1:A:1559:ARG:O	1:A:1562:THR:HG22	2.13	0.48
1:A:1917:LYS:O	1:A:1921:GLN:NE2	2.46	0.48
1:A:622:LEU:O	1:A:625:SER:OG	2.18	0.48
1:A:811:ASN:O	1:A:814:SER:HB2	2.13	0.48
1:A:901:THR:O	1:A:905:ALA:HB3	2.13	0.48
1:A:1389:TYR:CE2	1:A:1393:LEU:HD11	2.48	0.48
1:A:1996:ILE:O	1:A:2000:THR:HG23	2.14	0.48
1:A:578:THR:O	1:A:937:HIS:NE2	2.47	0.48
1:A:670:GLN:HA	1:A:673:ASN:ND2	2.28	0.48
1:A:885:GLU:HA	1:A:888:GLN:HE21	1.78	0.48
1:A:1919:ARG:NE	1:A:1963:HIS:HB3	2.29	0.48
1:A:2202:ILE:O	1:A:2206:ASN:ND2	2.47	0.48
1:A:2337:GLU:HG3	1:A:2341:PHE:HE1	1.79	0.48
1:A:610:GLN:HA	1:A:613:LYS:HD2	1.95	0.48
1:A:1540:VAL:HA	1:A:1543:ILE:HD12	1.95	0.48
1:A:1675:LEU:HB2	1:A:1766:LYS:HZ3	1.78	0.48
1:A:1943:ASP:O	1:A:1946:THR:OG1	2.30	0.48
1:A:1969:GLN:NE2	1:A:1969:GLN:O	2.46	0.48
1:A:2339:LEU:HB2	1:A:2341:PHE:HD1	1.79	0.48
1:A:241:PHE:O	1:A:245:ILE:HG23	2.14	0.48
1:A:303:ARG:HD3	1:A:308:TYR:HD2	1.78	0.48
1:A:884:GLU:O	1:A:888:GLN:HG3	2.14	0.48
1:A:1100:SER:HB3	1:A:1104:LYS:NZ	2.29	0.48
1:A:1144:ASP:OD2	1:A:1147:VAL:HG23	2.14	0.48
1:A:1257:VAL:HG23	1:A:1375:GLU:CD	2.38	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1342:VAL:O	1:A:1345:SER:OG	2.29	0.48
1:A:1381:VAL:HG22	1:A:1593:ARG:HH12	1.79	0.48
1:A:1690:ARG:HB3	1:A:1751:LYS:HZ2	1.79	0.48
1:A:1882:LEU:HD13	1:A:1934:ALA:HB1	1.95	0.48
1:A:1885:LEU:O	1:A:1889:LEU:HG	2.13	0.48
1:A:2129:LEU:O	1:A:2133:LYS:HG2	2.13	0.48
1:A:2208:SER:O	1:A:2212:ILE:HG22	2.14	0.48
1:A:2418:HIS:CE1	1:A:2423:LYS:HB3	2.49	0.48
1:A:709:CYS:O	1:A:713:THR:HG23	2.13	0.48
1:A:1184:ARG:CA	1:A:1187:GLN:HE21	2.27	0.48
1:A:316:LYS:CG	1:A:325:LEU:HB3	2.44	0.48
1:A:500:ASN:HA	1:A:503:MET:HG2	1.95	0.48
1:A:587:MET:O	1:A:591:VAL:HG22	2.12	0.48
1:A:1388:SER:OG	1:A:1389:TYR:N	2.38	0.48
1:A:1429:ALA:O	1:A:1433:LEU:HG	2.14	0.48
1:A:1831:ILE:O	1:A:1835:ILE:HG12	2.14	0.48
1:A:2314:ALA:O	1:A:2317:GLU:HG3	2.13	0.48
1:A:2343:GLU:O	1:A:2347:GLU:HG2	2.14	0.48
1:A:337:VAL:CG1	1:A:351:TRP:HB2	2.44	0.47
1:A:605:GLY:HA2	1:A:608:LEU:HD13	1.96	0.47
1:A:713:THR:O	1:A:717:VAL:HG23	2.14	0.47
1:A:1536:THR:O	1:A:1539:LEU:HB3	2.14	0.47
1:A:1801:GLN:O	1:A:1805:GLU:OE1	2.32	0.47
1:A:2098:THR:O	1:A:2102:ALA:HB2	2.15	0.47
1:A:2182:ILE:HG13	1:A:2215:MET:CG	2.43	0.47
1:A:580:ILE:O	1:A:584:LEU:HG	2.14	0.47
1:A:597:LEU:O	1:A:600:ASP:HB2	2.14	0.47
1:A:971:ARG:HA	1:A:971:ARG:CZ	2.43	0.47
1:A:1002:ALA:HA	1:A:1005:LYS:HZ2	1.78	0.47
1:A:1091:LEU:O	1:A:1095:THR:HG23	2.14	0.47
1:A:1660:GLU:O	1:A:1663:THR:OG1	2.19	0.47
1:A:1695:GLN:O	1:A:1698:LEU:HB2	2.14	0.47
1:A:2019:ILE:HA	1:A:2022:THR:OG1	2.14	0.47
1:A:313:PHE:HD2	1:A:330:LEU:HB3	1.80	0.47
1:A:313:PHE:HB2	1:A:330:LEU:HB2	1.95	0.47
1:A:717:VAL:O	1:A:721:LYS:HG2	2.14	0.47
1:A:1002:ALA:HA	1:A:1005:LYS:HZ3	1.79	0.47
1:A:1029:THR:O	1:A:1032:ALA:HB3	2.13	0.47
1:A:1091:LEU:HD21	1:A:1200:VAL:HA	1.97	0.47
1:A:1285:GLY:O	1:A:1288:MET:HB2	2.15	0.47
1:A:1362:GLU:CD	1:A:1365:ASN:HD22	2.21	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1510:ARG:O	1:A:1513:SER:OG	2.23	0.47
1:A:1794:GLU:O	1:A:1795:ALA:C	2.57	0.47
1:A:1835:ILE:O	1:A:1838:LEU:HB3	2.14	0.47
1:A:2016:ARG:O	1:A:2020:LEU:HG	2.14	0.47
1:A:2161:CYS:HA	1:A:2241:ARG:NH2	2.29	0.47
1:A:2176:ILE:HA	1:A:2179:THR:HG23	1.96	0.47
1:A:243:CYS:HB2	1:A:265:PHE:HE2	1.80	0.47
1:A:500:ASN:O	1:A:501:SER:C	2.56	0.47
1:A:1252:ALA:HB3	1:A:1274:PHE:HD1	1.79	0.47
1:A:1441:ALA:O	1:A:1444:ALA:HB3	2.15	0.47
1:A:1636:HIS:O	1:A:1640:VAL:HG23	2.14	0.47
1:A:1997:MET:SD	1:A:1998:PHE:N	2.87	0.47
1:A:2006:ARG:NE	1:A:2010:GLU:OE2	2.48	0.47
1:A:2086:ASP:HA	1:A:2089:LYS:HG2	1.96	0.47
1:A:228:HIS:CE1	1:A:230:VAL:HB	2.48	0.47
1:A:496:THR:HA	1:A:499:ILE:HD12	1.97	0.47
1:A:781:LEU:O	1:A:785:VAL:HG23	2.14	0.47
1:A:963:ILE:O	1:A:967:VAL:HG23	2.14	0.47
1:A:1380:PRO:HD2	1:A:1593:ARG:NH2	2.30	0.47
1:A:2473:ALA:O	1:A:2477:ALA:N	2.36	0.47
1:A:989:ALA:O	1:A:993:PHE:HB2	2.14	0.47
1:A:1350:ILE:HG21	1:A:1365:ASN:ND2	2.27	0.47
1:A:1730:LYS:HA	1:A:1733:GLN:NE2	2.30	0.47
1:A:2062:VAL:HG21	1:A:2084:VAL:HG11	1.95	0.47
1:A:574:GLY:O	1:A:578:THR:HG23	2.15	0.47
1:A:597:LEU:HA	1:A:600:ASP:OD2	2.15	0.47
1:A:752:SER:HA	1:A:755:GLN:CD	2.40	0.47
1:A:996:PRO:HA	1:A:999:LYS:HG2	1.96	0.47
1:A:1189:ALA:O	1:A:1193:THR:HG23	2.15	0.47
1:A:1269:ARG:O	1:A:1273:ARG:HG3	2.14	0.47
1:A:1614:ILE:HD12	1:A:1617:ALA:HB3	1.97	0.47
1:A:1723:GLU:HG2	1:A:1724:ALA:N	2.29	0.47
1:A:1805:GLU:HA	1:A:1808:GLU:CD	2.39	0.47
1:A:1893:TYR:CE2	1:A:1923:LEU:HB2	2.50	0.47
1:A:2160:PHE:CZ	1:A:2216:LEU:HB3	2.50	0.47
1:A:2210:ARG:HG3	1:A:2211:ALA:N	2.29	0.47
1:A:318:LYS:NZ	1:A:319:MET:O	2.29	0.47
1:A:1138:VAL:HA	1:A:1141:LEU:HD21	1.97	0.47
1:A:1245:ALA:HB3	1:A:1281:PHE:HD1	1.79	0.47
1:A:1310:MET:O	1:A:1314:LYS:HD2	2.14	0.47
1:A:1329:PRO:HB2	1:A:1382:GLN:CG	2.44	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1451:ASP:O	1:A:1729:HIS:NE2	2.32	0.47
1:A:1459:GLN:C	1:A:1584:VAL:H	2.22	0.47
1:A:1668:LEU:HA	1:A:1671:CYS:SG	2.54	0.47
1:A:2075:GLU:OE2	1:A:2206:ASN:ND2	2.44	0.47
1:A:634:ARG:O	1:A:637:LEU:HB3	2.15	0.47
1:A:827:ARG:HH22	1:A:831:GLN:HG2	1.80	0.47
1:A:1144:ASP:HB3	1:A:1147:VAL:HG23	1.97	0.47
1:A:1459:GLN:N	1:A:1584:VAL:HB	2.30	0.47
1:A:1561:ALA:C	1:A:1564:PRO:HD2	2.39	0.47
1:A:2147:GLU:O	1:A:2148:ALA:C	2.57	0.47
1:A:611:ALA:O	1:A:615:LEU:HG	2.15	0.47
1:A:814:SER:OG	1:A:1919:ARG:NH2	2.49	0.47
1:A:827:ARG:HH21	1:A:828:ILE:HG22	1.79	0.47
1:A:1078:PRO:HA	1:A:1136:ARG:NH2	2.25	0.47
1:A:1181:SER:O	1:A:1185:LEU:HD23	2.14	0.47
1:A:1434:CYS:O	1:A:1438:GLU:OE1	2.32	0.47
1:A:2051:SER:O	1:A:2055:ILE:HG23	2.14	0.47
1:A:234:LYS:HA	1:A:237:GLU:OE1	2.15	0.46
1:A:317:GLU:O	1:A:326:VAL:HG12	2.15	0.46
1:A:489:THR:HB	1:A:492:GLN:HB2	1.96	0.46
1:A:1147:VAL:O	1:A:1151:VAL:HG13	2.14	0.46
1:A:1673:ARG:HG2	1:A:1677:GLN:HE22	1.79	0.46
1:A:1768:LEU:CD2	1:A:1810:LEU:HD11	2.44	0.46
1:A:1804:THR:O	1:A:1807:VAL:N	2.47	0.46
1:A:1960:LYS:CA	1:A:1963:HIS:HD1	2.27	0.46
1:A:2199:GLU:O	1:A:2202:ILE:HG12	2.15	0.46
1:A:2310:LEU:HD12	1:A:2311:GLY:N	2.30	0.46
1:A:267:PRO:HB2	1:A:269:GLU:OE1	2.15	0.46
1:A:584:LEU:O	1:A:587:MET:HB2	2.15	0.46
1:A:734:GLU:HA	1:A:737:VAL:HG12	1.97	0.46
1:A:1170:LYS:O	1:A:1173:SER:OG	2.27	0.46
1:A:1190:LYS:HD3	1:A:1194:GLN:HE22	1.80	0.46
1:A:1542:THR:HB	1:A:1558:CYS:SG	2.55	0.46
1:A:2173:GLU:HG2	1:A:2296:VAL:HG11	1.97	0.46
1:A:2405:ASN:O	1:A:2408:CYS:N	2.49	0.46
1:A:212:LEU:HD13	1:A:292:ILE:HD11	1.97	0.46
1:A:358:ARG:NH1	1:A:358:ARG:HB2	2.30	0.46
1:A:550:ILE:HG13	1:A:583:ASN:HD22	1.80	0.46
1:A:1227:LEU:HD22	1:A:1286:VAL:HG21	1.97	0.46
1:A:1252:ALA:HA	1:A:1255:GLU:CD	2.40	0.46
1:A:1714:GLU:HB2	1:A:1715:PRO:HD3	1.97	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2166:PRO:HG3	1:A:2224:PHE:HD2	1.81	0.46
1:A:216:TYR:CD1	1:A:295:LYS:HA	2.51	0.46
1:A:949:GLN:N	1:A:950:PRO:HD3	2.30	0.46
1:A:1135:ALA:HA	1:A:1138:VAL:HG22	1.98	0.46
1:A:1261:ARG:CZ	1:A:1375:GLU:HG3	2.46	0.46
1:A:1690:ARG:HB3	1:A:1751:LYS:NZ	2.30	0.46
1:A:1768:LEU:HD11	1:A:1810:LEU:HD11	1.98	0.46
1:A:274:LYS:HB3	1:A:274:LYS:HE3	1.66	0.46
1:A:954:GLN:H	1:A:954:GLN:CD	2.20	0.46
1:A:1162:ALA:O	1:A:1166:ILE:HG13	2.15	0.46
1:A:1654:LYS:HG2	1:A:1656:PRO:HD3	1.98	0.46
1:A:760:ASP:OD2	1:A:762:GLN:HB2	2.16	0.46
1:A:867:THR:O	1:A:870:MET:HB3	2.15	0.46
1:A:899:MET:HE2	1:A:902:ASN:ND2	2.31	0.46
1:A:950:PRO:CB	1:A:952:LEU:HG	2.46	0.46
1:A:1363:CYS:O	1:A:1367:LEU:HG	2.16	0.46
1:A:1372:THR:HG1	1:A:1373:VAL:H	1.63	0.46
1:A:1520:THR:HB	1:A:1524:GLN:HE22	1.81	0.46
1:A:1756:PRO:HB2	1:A:1757:GLN:NE2	2.31	0.46
1:A:1944:VAL:O	1:A:1948:LYS:HG3	2.16	0.46
1:A:2287:ALA:HA	1:A:2290:MET:HE3	1.97	0.46
1:A:503:MET:O	1:A:507:GLN:HG3	2.16	0.46
1:A:536:MET:CE	1:A:597:LEU:HB2	2.46	0.46
1:A:733:GLN:HG3	1:A:784:HIS:NE2	2.31	0.46
1:A:1454:SER:HA	1:A:1589:SER:HB2	1.98	0.46
1:A:1818:ALA:HB1	1:A:1824:VAL:HG21	1.98	0.46
1:A:1916:ILE:O	1:A:1920:VAL:HG22	2.16	0.46
1:A:2010:GLU:OE2	1:A:2068:SER:HA	2.15	0.46
1:A:2467:SER:O	1:A:2470:LEU:HG	2.16	0.46
1:A:228:HIS:ND1	1:A:230:VAL:HB	2.30	0.46
1:A:349:GLN:CD	1:A:350:GLU:H	2.22	0.46
1:A:509:ALA:O	1:A:512:THR:OG1	2.29	0.46
1:A:621:GLU:OE2	1:A:624:ARG:HD2	2.16	0.46
1:A:837:VAL:HA	1:A:840:ILE:HD12	1.98	0.46
1:A:1145:PRO:HA	1:A:1148:GLN:NE2	2.31	0.46
1:A:1313:SER:OG	1:A:1314:LYS:N	2.49	0.46
1:A:1369:GLN:O	1:A:1372:THR:OG1	2.22	0.46
1:A:1707:GLN:HB3	1:A:1711:HIS:CE1	2.50	0.46
1:A:1801:GLN:O	1:A:1802:MET:C	2.57	0.46
1:A:2160:PHE:CD1	1:A:2220:LYS:HD3	2.51	0.46
1:A:2318:ALA:HA	1:A:2321:LYS:HD3	1.98	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1413:ASN:HB3	1:A:1422:PHE:HB2	1.98	0.46
1:A:1418:ASN:OD1	1:A:1418:ASN:N	2.49	0.46
1:A:1651:MET:O	1:A:1654:LYS:HB3	2.15	0.46
1:A:1877:THR:OG1	1:A:1878:SER:N	2.48	0.46
1:A:2081:ILE:HG22	1:A:2085:LYS:NZ	2.31	0.46
1:A:2091:LEU:O	1:A:2095:ILE:HG13	2.16	0.46
1:A:2160:PHE:HA	1:A:2220:LYS:HZ1	1.80	0.46
1:A:536:MET:SD	1:A:594:LEU:HD23	2.55	0.46
1:A:906:GLN:CD	1:A:909:ILE:HB	2.41	0.46
1:A:1106:LEU:HD23	1:A:1571:ASN:ND2	2.31	0.46
1:A:1283:GLU:O	1:A:1286:VAL:HG12	2.14	0.46
1:A:1959:GLU:O	1:A:1962:SER:OG	2.21	0.46
1:A:1983:SER:O	1:A:1986:SER:OG	2.24	0.46
1:A:2112:TRP:HA	1:A:2115:LYS:HE2	1.98	0.46
1:A:2427:SER:O	1:A:2430:GLN:HG3	2.16	0.46
1:A:208:ASP:CG	1:A:211:GLN:H	2.23	0.45
1:A:557:VAL:O	1:A:561:THR:HG23	2.16	0.45
1:A:798:TYR:HE1	1:A:839:ALA:HB3	1.81	0.45
1:A:1054:LEU:O	1:A:1055:SER:C	2.59	0.45
1:A:1154:THR:O	1:A:1158:VAL:HG23	2.16	0.45
1:A:1535:SER:HA	1:A:1538:ASN:OD1	2.16	0.45
1:A:1535:SER:OG	1:A:1565:LEU:HD13	2.15	0.45
1:A:1642:ASP:O	1:A:1646:LYS:HG3	2.16	0.45
1:A:1951:ILE:HG13	1:A:1955:ARG:CZ	2.46	0.45
1:A:2021:LYS:O	1:A:2025:VAL:HG23	2.16	0.45
1:A:2090:ALA:HA	1:A:2093:ASP:OD2	2.16	0.45
1:A:2285:GLN:O	1:A:2288:GLU:HG3	2.17	0.45
1:A:303:ARG:HA	1:A:308:TYR:CE2	2.51	0.45
1:A:388:ILE:O	1:A:391:LEU:HB2	2.16	0.45
1:A:735:GLN:HA	1:A:738:GLU:CD	2.41	0.45
1:A:979:SER:O	1:A:979:SER:OG	2.33	0.45
1:A:1395:SER:HA	1:A:1398:GLU:OE2	2.16	0.45
1:A:1399:ASN:ND2	1:A:1432:ALA:O	2.40	0.45
1:A:1421:GLU:H	1:A:1421:GLU:CD	2.24	0.45
1:A:1619:ALA:HB1	1:A:1629:ARG:HD3	1.98	0.45
1:A:1662:GLU:OE2	1:A:1780:LYS:HD3	2.16	0.45
1:A:1757:GLN:CD	1:A:1757:GLN:N	2.74	0.45
1:A:1813:THR:HA	1:A:1816:GLU:OE2	2.16	0.45
1:A:539:SER:O	1:A:543:ILE:HG12	2.17	0.45
1:A:832:ALA:HA	1:A:835:ASP:OD2	2.16	0.45
1:A:906:GLN:NE2	1:A:910:LYS:HG2	2.25	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1882:LEU:HA	1:A:1885:LEU:HB2	1.97	0.45
1:A:2418:HIS:HE2	1:A:2423:LYS:HE3	1.80	0.45
1:A:290:SER:N	1:A:293:GLU:OE1	2.25	0.45
1:A:543:ILE:HD13	1:A:546:GLN:NE2	2.31	0.45
1:A:1086:LYS:HA	1:A:1089:GLN:OE1	2.16	0.45
1:A:1322:LEU:C	1:A:1324:THR:N	2.74	0.45
1:A:1332:LYS:O	1:A:1335:LEU:HB3	2.17	0.45
1:A:1827:MET:N	1:A:1827:MET:SD	2.90	0.45
1:A:2031:LYS:O	1:A:2034:VAL:HB	2.16	0.45
1:A:2418:HIS:NE2	1:A:2423:LYS:HB3	2.31	0.45
1:A:606:ARG:HG3	1:A:609:LEU:HD12	1.98	0.45
1:A:1120:ALA:HA	1:A:1123:ASP:OD2	2.16	0.45
1:A:1179:PRO:O	1:A:1183:GLN:NE2	2.49	0.45
1:A:1187:GLN:HE22	1:A:1188:VAL:HG13	1.80	0.45
1:A:1294:SER:HB3	1:A:1297:ASP:HB3	1.98	0.45
1:A:1315:LEU:HD13	1:A:1342:VAL:HG21	1.97	0.45
1:A:1367:LEU:O	1:A:1371:GLU:HG2	2.17	0.45
1:A:281:GLN:NE2	1:A:285:ASN:OD1	2.48	0.45
1:A:675:VAL:HA	1:A:776:GLN:CD	2.41	0.45
1:A:732:CYS:SG	1:A:733:GLN:N	2.89	0.45
1:A:919:HIS:O	1:A:923:GLN:OE1	2.35	0.45
1:A:1236:GLN:H	1:A:1236:GLN:CD	2.23	0.45
1:A:1602:SER:O	1:A:1605:THR:OG1	2.34	0.45
1:A:1614:ILE:O	1:A:1618:ARG:HG2	2.17	0.45
1:A:1682:ALA:HA	1:A:1687:LEU:HD22	1.98	0.45
1:A:1757:GLN:O	1:A:1761:LEU:HG	2.16	0.45
1:A:1824:VAL:HG12	1:A:1826:GLY:H	1.82	0.45
1:A:1838:LEU:O	1:A:1901:LYS:NZ	2.27	0.45
1:A:2264:ASP:HA	1:A:2267:GLN:HE21	1.82	0.45
1:A:564:ASP:HB3	1:A:567:GLU:OE2	2.17	0.45
1:A:723:VAL:HG21	1:A:736:LEU:HD11	1.99	0.45
1:A:730:PRO:HA	1:A:733:GLN:OE1	2.17	0.45
1:A:749:GLY:O	1:A:752:SER:OG	2.32	0.45
1:A:914:VAL:O	1:A:915:GLN:C	2.58	0.45
1:A:1029:THR:O	1:A:1033:GLU:OE1	2.35	0.45
1:A:1030:ALA:O	1:A:1034:LEU:HG	2.16	0.45
1:A:1375:GLU:HA	1:A:1378:GLU:CD	2.42	0.45
1:A:2060:ASP:HA	1:A:2063:LYS:HE2	1.99	0.45
1:A:2442:CYS:HB3	1:A:2456:LEU:HD21	1.97	0.45
1:A:534:ASN:HB3	1:A:968:GLN:NE2	2.31	0.45
1:A:980:PRO:O	1:A:984:LEU:HG	2.16	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1360:GLN:O	1:A:1363:CYS:HB3	2.16	0.45
1:A:1809:ASP:O	1:A:1813:THR:HG23	2.17	0.45
1:A:2065:GLY:O	1:A:2069:LEU:HG	2.17	0.45
1:A:519:LEU:HD11	1:A:600:ASP:OD1	2.16	0.45
1:A:685:LYS:NZ	1:A:769:ALA:HB2	2.32	0.45
1:A:727:ILE:O	1:A:788:HIS:HD2	1.99	0.45
1:A:962:GLN:HG3	1:A:993:PHE:CE1	2.52	0.45
1:A:1008:VAL:HB	1:A:1009:PRO:HD3	1.99	0.45
1:A:1111:GLN:OE1	1:A:1114:GLU:HB2	2.17	0.45
1:A:1325:ASP:CG	1:A:1327:ALA:H	2.25	0.45
1:A:1975:THR:N	1:A:2099:LYS:HZ2	2.13	0.45
1:A:2072:GLU:CD	1:A:2072:GLU:H	2.25	0.45
1:A:2152:HIS:O	1:A:2155:GLN:HG3	2.16	0.45
1:A:2418:HIS:CE1	1:A:2420:SER:O	2.70	0.45
1:A:266:LEU:HB3	1:A:270:TYR:HB2	1.99	0.45
1:A:868:ALA:O	1:A:871:VAL:N	2.50	0.45
1:A:1021:SER:OG	1:A:1022:GLN:N	2.50	0.45
1:A:1050:MET:N	1:A:1050:MET:SD	2.89	0.45
1:A:1303:SER:O	1:A:1306:LYS:HG2	2.17	0.45
1:A:1575:PHE:O	1:A:1578:ASN:HB2	2.17	0.45
1:A:2069:LEU:HD12	1:A:2077:GLN:HG2	1.99	0.45
1:A:2175:PHE:O	1:A:2178:MET:HB2	2.17	0.45
1:A:321:GLY:N	1:A:1770:GLU:OE1	2.42	0.44
1:A:554:THR:O	1:A:557:VAL:HB	2.17	0.44
1:A:636:ASN:HA	1:A:639:LEU:HD12	2.00	0.44
1:A:813:PHE:CZ	1:A:891:ARG:HG3	2.52	0.44
1:A:1360:GLN:HG2	1:A:1618:ARG:HH21	1.81	0.44
1:A:1407:MET:SD	1:A:1637:SER:HB2	2.56	0.44
1:A:1703:LEU:HG	1:A:1707:GLN:CD	2.42	0.44
1:A:2447:ASP:N	1:A:2447:ASP:OD1	2.48	0.44
1:A:220:ARG:O	1:A:223:ILE:HB	2.17	0.44
1:A:598:LEU:O	1:A:603:GLY:N	2.33	0.44
1:A:872:GLU:HG3	1:A:875:LYS:NZ	2.32	0.44
1:A:929:THR:HA	1:A:932:ILE:HG12	1.99	0.44
1:A:1797:GLU:C	1:A:1801:GLN:HE22	2.25	0.44
1:A:1808:GLU:O	1:A:1812:THR:HG23	2.17	0.44
1:A:1864:ILE:O	1:A:1868:VAL:HG13	2.17	0.44
1:A:2217:ARG:O	1:A:2221:GLU:OE1	2.35	0.44
1:A:522:LEU:HD22	1:A:532:ARG:NH2	2.33	0.44
1:A:708:GLN:O	1:A:711:LEU:HB3	2.17	0.44
1:A:812:ILE:HD11	1:A:825:GLN:HB2	1.98	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:907:ASN:C	1:A:911:LYS:HZ2	2.25	0.44
1:A:1243:ASN:ND2	1:A:1354:THR:HG21	2.20	0.44
1:A:1596:MET:O	1:A:1600:VAL:HG23	2.17	0.44
1:A:1691:GLU:OE1	1:A:1691:GLU:N	2.41	0.44
1:A:1755:HIS:HA	1:A:1758:GLN:NE2	2.32	0.44
1:A:2173:GLU:O	1:A:2176:ILE:HG22	2.18	0.44
1:A:2265:LEU:HD13	1:A:2268:GLN:OE1	2.17	0.44
1:A:2302:THR:O	1:A:2305:ALA:N	2.51	0.44
1:A:583:ASN:OD1	1:A:587:MET:HG2	2.18	0.44
1:A:1597:GLU:OE2	1:A:1601:ILE:HG13	2.17	0.44
1:A:1612:GLY:O	1:A:1616:THR:HG23	2.18	0.44
1:A:2237:LEU:O	1:A:2241:ARG:HG2	2.17	0.44
1:A:666:ASP:O	1:A:669:MET:HB3	2.17	0.44
1:A:744:ALA:O	1:A:747:VAL:HB	2.17	0.44
1:A:782:LEU:O	1:A:786:LYS:HE2	2.18	0.44
1:A:829:LEU:O	1:A:833:THR:OG1	2.22	0.44
1:A:837:VAL:O	1:A:840:ILE:HB	2.17	0.44
1:A:1345:SER:O	1:A:1348:GLN:HG3	2.18	0.44
1:A:1390:PHE:HB3	1:A:1787:LYS:HE2	2.00	0.44
1:A:1816:GLU:O	1:A:1819:SER:OG	2.29	0.44
1:A:1902:PRO:O	1:A:1906:ALA:HB2	2.17	0.44
1:A:1995:THR:HA	1:A:1998:PHE:CD2	2.52	0.44
1:A:268:LYS:HB3	1:A:272:LYS:NZ	2.32	0.44
1:A:635:GLN:HA	1:A:638:LEU:HG	1.98	0.44
1:A:1033:GLU:O	1:A:1036:THR:OG1	2.27	0.44
1:A:1390:PHE:HB3	1:A:1787:LYS:NZ	2.33	0.44
1:A:1851:VAL:O	1:A:1855:THR:HG23	2.18	0.44
1:A:682:LEU:HD13	1:A:769:ALA:HB3	1.99	0.44
1:A:1310:MET:HB2	1:A:1314:LYS:NZ	2.33	0.44
1:A:1426:ILE:HD12	1:A:1429:ALA:HB3	1.99	0.44
1:A:2105:VAL:HG22	1:A:2106:GLY:H	1.83	0.44
1:A:2327:LYS:HB2	1:A:2329:ARG:NH1	2.33	0.44
1:A:318:LYS:N	1:A:325:LEU:HD13	2.33	0.44
1:A:507:GLN:HA	1:A:510:GLN:OE1	2.18	0.44
1:A:1033:GLU:C	1:A:1036:THR:HG1	2.23	0.44
1:A:1730:LYS:HZ2	1:A:1730:LYS:HG2	1.72	0.44
1:A:2418:HIS:CD2	1:A:2423:LYS:HE3	2.53	0.44
1:A:238:PHE:HA	1:A:241:PHE:CD2	2.52	0.44
1:A:711:LEU:O	1:A:714:SER:N	2.51	0.44
1:A:1627:PRO:HB2	1:A:1628:PRO:HD3	2.00	0.44
1:A:1719:ALA:HB1	1:A:1727:LEU:HB2	2.00	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2206:ASN:OD1	1:A:2209:ARG:NH1	2.51	0.44
1:A:216:TYR:HD2	1:A:220:ARG:HE	1.65	0.43
1:A:733:GLN:HE21	1:A:784:HIS:CE1	2.36	0.43
1:A:871:VAL:HG12	1:A:875:LYS:NZ	2.32	0.43
1:A:1336:ALA:O	1:A:1340:ARG:HG2	2.18	0.43
1:A:1463:GLU:N	1:A:1463:GLU:OE1	2.51	0.43
1:A:1807:VAL:O	1:A:1810:LEU:HB2	2.18	0.43
1:A:1943:ASP:CG	1:A:1946:THR:H	2.25	0.43
1:A:2052:VAL:O	1:A:2056:THR:OG1	2.28	0.43
1:A:2053:ALA:O	1:A:2057:ARG:HG2	2.18	0.43
1:A:2069:LEU:HB2	1:A:2077:GLN:HE21	1.82	0.43
1:A:2242:GLU:HA	1:A:2245:ASN:OD1	2.18	0.43
1:A:330:LEU:HD23	1:A:330:LEU:HA	1.77	0.43
1:A:365:SER:HB2	1:A:381:GLN:OE1	2.18	0.43
1:A:540:LYS:NZ	1:A:655:ILE:HB	2.33	0.43
1:A:1257:VAL:O	1:A:1260:SER:OG	2.23	0.43
1:A:1263:THR:OG1	1:A:1266:ASP:OD2	2.36	0.43
1:A:1264:PRO:O	1:A:1267:LEU:HB2	2.17	0.43
1:A:1596:MET:O	1:A:1599:ILE:N	2.51	0.43
1:A:1896:LEU:HD12	1:A:1899:GLN:HE21	1.84	0.43
1:A:1899:GLN:C	1:A:1902:PRO:HD2	2.43	0.43
1:A:1946:THR:HA	1:A:1949:GLU:OE1	2.18	0.43
1:A:2175:PHE:O	1:A:2179:THR:HG23	2.17	0.43
1:A:2270:THR:O	1:A:2273:SER:OG	2.17	0.43
1:A:2377:GLY:HA3	1:A:2382:ASN:HD22	1.83	0.43
1:A:655:ILE:HG13	1:A:657:GLU:H	1.82	0.43
1:A:814:SER:CB	1:A:1963:HIS:HD2	2.31	0.43
1:A:955:SER:O	1:A:959:VAL:HG22	2.18	0.43
1:A:1390:PHE:HA	1:A:1393:LEU:HD12	2.00	0.43
1:A:1619:ALA:O	1:A:1622:VAL:HB	2.18	0.43
1:A:1710:SER:HB3	1:A:1807:VAL:HG11	2.00	0.43
1:A:212:LEU:HD11	1:A:296:VAL:HG22	1.99	0.43
1:A:583:ASN:HD21	1:A:587:MET:HE3	1.83	0.43
1:A:777:ALA:HA	1:A:780:GLU:OE2	2.18	0.43
1:A:1089:GLN:NE2	1:A:1325:ASP:OD1	2.50	0.43
1:A:1156:SER:O	1:A:1159:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:1702:MET:CB	1:A:1814:LEU:HD11	2.47	0.43
1:A:2425:ILE:HG12	1:A:2429:LYS:NZ	2.33	0.43
1:A:1229:PRO:HD3	1:A:1286:VAL:HG22	2.00	0.43
1:A:1602:SER:CB	1:A:1647:LEU:HG	2.49	0.43
1:A:1798:GLU:O	1:A:1802:MET:HG2	2.18	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1852:ASP:O	1:A:1856:THR:HG23	2.18	0.43
1:A:1917:LYS:HB2	1:A:1917:LYS:HE2	1.84	0.43
1:A:1920:VAL:HA	1:A:1923:LEU:HG	1.98	0.43
1:A:1920:VAL:HA	1:A:1923:LEU:HD12	2.00	0.43
1:A:1937:LEU:O	1:A:1940:SER:N	2.52	0.43
1:A:966:LEU:HD22	1:A:993:PHE:CG	2.53	0.43
1:A:1269:ARG:HD2	1:A:1273:ARG:HH22	1.84	0.43
1:A:1465:THR:HB	1:A:1469:ARG:HH22	1.83	0.43
1:A:1777:TYR:O	1:A:1778:THR:C	2.60	0.43
1:A:1951:ILE:O	1:A:1955:ARG:NE	2.34	0.43
1:A:2006:ARG:NH1	1:A:2011:THR:HA	2.33	0.43
1:A:556:SER:HA	1:A:559:ASN:ND2	2.33	0.43
1:A:1021:SER:CB	1:A:1025:LYS:HZ2	2.31	0.43
1:A:1317:LEU:HA	1:A:1320:LYS:HZ3	1.83	0.43
1:A:1415:LYS:HA	1:A:1625:ARG:NH1	2.33	0.43
1:A:2059:ALA:O	1:A:2063:LYS:HG3	2.19	0.43
1:A:627:GLN:CD	1:A:627:GLN:H	2.26	0.43
1:A:734:GLU:O	1:A:738:GLU:OE1	2.37	0.43
1:A:747:VAL:O	1:A:751:VAL:HG23	2.19	0.43
1:A:825:GLN:HA	1:A:828:ILE:HG12	1.99	0.43
1:A:905:ALA:C	1:A:907:ASN:N	2.77	0.43
1:A:1009:PRO:HG2	1:A:1737:TYR:CD1	2.54	0.43
1:A:1269:ARG:HG3	1:A:1273:ARG:HH12	1.84	0.43
1:A:1434:CYS:O	1:A:1435:GLY:C	2.61	0.43
1:A:1481:LEU:HD21	1:A:1558:CYS:C	2.44	0.43
1:A:1648:ILE:HA	1:A:1651:MET:HG2	2.01	0.43
1:A:1648:ILE:O	1:A:1651:MET:HG2	2.19	0.43
1:A:2024:LYS:O	1:A:2028:GLU:OE1	2.37	0.43
1:A:2033:LEU:HG	1:A:2047:ALA:HB1	2.01	0.43
1:A:2055:ILE:HG21	1:A:2091:LEU:HD13	2.01	0.43
1:A:2231:ASP:HA	1:A:2234:LEU:HD12	2.00	0.43
1:A:574:GLY:HA2	1:A:577:VAL:HG12	2.01	0.43
1:A:617:GLY:O	1:A:620:SER:OG	2.37	0.43
1:A:681:ALA:O	1:A:685:LYS:HG3	2.19	0.43
1:A:769:ALA:O	1:A:772:THR:OG1	2.30	0.43
1:A:798:TYR:O	1:A:802:THR:HG23	2.18	0.43
1:A:1115:ASN:O	1:A:1119:ILE:HG12	2.19	0.43
1:A:1383:PRO:HD3	1:A:1445:TYR:CE1	2.53	0.43
1:A:1394:ASP:HA	1:A:1397:MET:HE2	2.00	0.43
1:A:1444:ALA:HA	1:A:1596:MET:CE	2.48	0.43
1:A:1791:HIS:CG	1:A:1792:THR:N	2.86	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1872:VAL:O	1:A:1875:SER:OG	2.27	0.43
1:A:2270:THR:HB	1:A:2274:LYS:NZ	2.34	0.43
1:A:2418:HIS:CG	1:A:2424:LEU:HD21	2.54	0.43
1:A:2459:ALA:O	1:A:2463:VAL:HG23	2.19	0.43
1:A:958:ALA:O	1:A:961:GLU:HG3	2.19	0.43
1:A:1240:SER:OG	1:A:1241:ARG:NH2	2.52	0.43
1:A:1395:SER:O	1:A:1399:ASN:HB2	2.19	0.43
1:A:1672:LEU:HD21	1:A:1769:ALA:HB1	2.01	0.43
1:A:2132:VAL:O	1:A:2136:GLU:HG2	2.19	0.43
1:A:2308:GLU:HG3	1:A:2394:ILE:HA	2.01	0.43
1:A:2318:ALA:O	1:A:2322:LYS:HG2	2.19	0.43
1:A:579:THR:HB	1:A:1019:GLN:CD	2.44	0.42
1:A:608:LEU:HG	1:A:654:GLN:CG	2.43	0.42
1:A:640:ALA:HA	1:A:643:ASN:OD1	2.18	0.42
1:A:760:ASP:O	1:A:763:LEU:HG	2.19	0.42
1:A:821:GLU:HB2	1:A:825:GLN:NE2	2.34	0.42
1:A:963:ILE:HA	1:A:993:PHE:CE1	2.50	0.42
1:A:1023:CYS:O	1:A:1026:ASN:HB2	2.19	0.42
1:A:1148:GLN:HG2	1:A:1149:ALA:N	2.33	0.42
1:A:1203:LEU:HB3	1:A:1206:GLN:CD	2.44	0.42
1:A:1661:CYS:SG	1:A:1780:LYS:HB2	2.59	0.42
1:A:1752:THR:HB	1:A:1758:GLN:HB3	2.01	0.42
1:A:1850:PHE:HE2	1:A:1903:ALA:O	2.01	0.42
1:A:1977:ALA:HA	1:A:1980:THR:OG1	2.18	0.42
1:A:2118:ALA:O	1:A:2122:VAL:HG23	2.18	0.42
1:A:2177:ARG:HG2	1:A:2180:LYS:NZ	2.34	0.42
1:A:253:GLN:HE21	1:A:284:LYS:HE3	1.84	0.42
1:A:837:VAL:O	1:A:841:LYS:HG2	2.20	0.42
1:A:1026:ASN:O	1:A:1029:THR:OG1	2.37	0.42
1:A:1144:ASP:HB3	1:A:1147:VAL:CG2	2.49	0.42
1:A:1445:TYR:O	1:A:1449:VAL:HG23	2.18	0.42
1:A:339:ARG:N	1:A:349:GLN:O	2.53	0.42
1:A:851:GLU:O	1:A:854:ARG:HG3	2.19	0.42
1:A:895:GLU:HA	1:A:898:ARG:HD3	2.00	0.42
1:A:1014:GLN:O	1:A:1017:ALA:HB3	2.19	0.42
1:A:1501:HIS:O	1:A:1505:LEU:HG	2.19	0.42
1:A:1662:GLU:HA	1:A:1665:ILE:HB	1.99	0.42
1:A:1696:GLU:H	1:A:1696:GLU:CD	2.16	0.42
1:A:1730:LYS:HA	1:A:1733:GLN:HE21	1.84	0.42
1:A:1865:ALA:O	1:A:1869:GLN:HG2	2.20	0.42
1:A:311:SER:O	1:A:331:GLY:HA2	2.19	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:343:LYS:HD2	1:A:343:LYS:HA	1.81	0.42
1:A:652:LEU:HB3	1:A:658:SER:CB	2.46	0.42
1:A:840:ILE:CG2	1:A:856:LEU:HB3	2.48	0.42
1:A:1238:ALA:O	1:A:1288:MET:HE1	2.19	0.42
1:A:1563:ALA:HB3	1:A:1564:PRO:HD3	2.01	0.42
1:A:2040:SER:OG	1:A:2041:GLN:N	2.52	0.42
1:A:2146:LEU:HB3	1:A:2255:LEU:HD21	2.02	0.42
1:A:2225:HIS:HD2	1:A:2228:VAL:HG23	1.84	0.42
1:A:699:GLN:OE1	1:A:699:GLN:N	2.51	0.42
1:A:873:ALA:HB2	1:A:889:ARG:NH1	2.27	0.42
1:A:963:ILE:HG13	1:A:964:PRO:HD3	2.00	0.42
1:A:996:PRO:HA	1:A:999:LYS:HZ2	1.82	0.42
1:A:1054:LEU:HA	1:A:1166:ILE:HD13	2.01	0.42
1:A:1073:ASP:HB3	1:A:1075:LYS:HZ1	1.85	0.42
1:A:1437:THR:HG22	1:A:1607:LEU:HD11	2.00	0.42
1:A:1450:SER:OG	1:A:1725:SER:HB2	2.20	0.42
1:A:1596:MET:HA	1:A:1599:ILE:HD13	2.01	0.42
1:A:1728:GLY:O	1:A:1731:VAL:HG22	2.20	0.42
1:A:1915:HIS:CE1	1:A:1919:ARG:HH12	2.37	0.42
1:A:1998:PHE:O	1:A:2002:GLY:N	2.52	0.42
1:A:2168:LYS:HG3	1:A:2169:THR:N	2.34	0.42
1:A:2276:VAL:O	1:A:2280:VAL:HG23	2.20	0.42
1:A:500:ASN:O	1:A:503:MET:N	2.52	0.42
1:A:597:LEU:O	1:A:601:GLU:OE1	2.38	0.42
1:A:740:GLY:HA2	1:A:743:VAL:HG22	2.00	0.42
1:A:971:ARG:NH1	1:A:974:GLN:HB2	2.30	0.42
1:A:1194:GLN:HA	1:A:1197:ASN:OD1	2.20	0.42
1:A:1328:SER:HA	1:A:1329:PRO:HD3	1.89	0.42
1:A:1595:ALA:O	1:A:1598:PRO:HD2	2.19	0.42
1:A:2055:ILE:O	1:A:2058:LEU:HB3	2.18	0.42
1:A:230:VAL:O	1:A:345:LYS:HG2	2.19	0.42
1:A:320:LYS:HG3	1:A:1770:GLU:CD	2.44	0.42
1:A:341:ASP:OD1	1:A:344:THR:HG23	2.20	0.42
1:A:356:ILE:O	1:A:357:LYS:HD3	2.19	0.42
1:A:368:LEU:HB3	1:A:370:PHE:CE1	2.54	0.42
1:A:833:THR:O	1:A:837:VAL:HG23	2.19	0.42
1:A:912:LYS:O	1:A:916:ARG:HG3	2.20	0.42
1:A:1435:GLY:HA2	1:A:1438:GLU:OE2	2.19	0.42
1:A:1675:LEU:HB2	1:A:1766:LYS:NZ	2.34	0.42
1:A:1908:GLU:OE2	1:A:1909:ASN:HB2	2.18	0.42
1:A:1930:LEU:HD23	1:A:1953:CYS:HB3	2.01	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2017:GLU:O	1:A:2021:LYS:HG2	2.20	0.42
1:A:2032:VAL:HG22	1:A:2036:ASN:OD1	2.20	0.42
1:A:2054:THR:HA	1:A:2057:ARG:NE	2.35	0.42
1:A:318:LYS:HZ3	1:A:319:MET:C	2.18	0.42
1:A:536:MET:HE2	1:A:597:LEU:HB2	2.02	0.42
1:A:543:ILE:O	1:A:547:VAL:HG22	2.20	0.42
1:A:1040:LYS:O	1:A:1043:GLU:HG3	2.20	0.42
1:A:1138:VAL:HA	1:A:1141:LEU:CD2	2.49	0.42
1:A:1265:GLN:O	1:A:1269:ARG:HG2	2.20	0.42
1:A:1360:GLN:HG2	1:A:1618:ARG:NH2	2.35	0.42
1:A:1731:VAL:HA	1:A:1734:MET:HE3	2.02	0.42
1:A:2144:ARG:NH2	1:A:2147:GLU:OE2	2.38	0.42
1:A:212:LEU:CD2	1:A:295:LYS:HB3	2.49	0.42
1:A:854:ARG:HD2	1:A:855:LYS:N	2.34	0.42
1:A:955:SER:OG	1:A:956:CYS:N	2.52	0.42
1:A:1098:VAL:HG12	1:A:1127:GLY:HA3	2.00	0.42
1:A:1555:ARG:O	1:A:1559:ARG:HG2	2.18	0.42
1:A:1760:ALA:C	1:A:1764:GLN:HE22	2.28	0.42
1:A:2021:LYS:NZ	1:A:2024:LYS:HE2	2.35	0.42
1:A:2328:PRO:CB	1:A:2343:GLU:HG3	2.50	0.42
1:A:2451:GLU:HA	1:A:2454:LYS:HD2	2.02	0.42
1:A:528:SER:OG	1:A:529:LYS:N	2.52	0.42
1:A:528:SER:O	1:A:532:ARG:HG3	2.20	0.42
1:A:669:MET:O	1:A:673:ASN:ND2	2.53	0.42
1:A:712:SER:HA	1:A:715:GLN:CD	2.44	0.42
1:A:735:GLN:HA	1:A:738:GLU:OE2	2.20	0.42
1:A:1049:GLU:H	1:A:1049:GLU:CD	2.19	0.42
1:A:1269:ARG:HB2	1:A:1273:ARG:NH2	2.35	0.42
1:A:1494:ALA:O	1:A:1498:VAL:HG22	2.19	0.42
1:A:1563:ALA:HA	1:A:1566:LEU:HD12	2.02	0.42
1:A:1713:ILE:O	1:A:1717:ALA:N	2.47	0.42
1:A:1771:SER:HB2	1:A:1803:MET:HG3	2.01	0.42
1:A:2065:GLY:O	1:A:2068:SER:OG	2.21	0.42
1:A:2149:THR:HA	1:A:2209:ARG:HD2	2.01	0.42
1:A:2389:TRP:CD1	1:A:2389:TRP:C	2.97	0.42
1:A:341:ASP:HB3	1:A:344:THR:HG1	1.85	0.41
1:A:751:VAL:O	1:A:755:GLN:HG3	2.19	0.41
1:A:796:GLY:N	1:A:799:ASP:OD2	2.52	0.41
1:A:819:ALA:HB2	1:A:877:ALA:HB1	2.02	0.41
1:A:1249:LEU:HD21	1:A:1278:PHE:N	2.35	0.41
1:A:1433:LEU:O	1:A:1437:THR:HG23	2.20	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1613:LEU:HD11	1:A:1633:LEU:HG	2.02	0.41
1:A:2420:SER:O	1:A:2422:GLU:N	2.52	0.41
1:A:540:LYS:NZ	1:A:655:ILE:O	2.53	0.41
1:A:1051:ASP:O	1:A:1054:LEU:HB3	2.20	0.41
1:A:1148:GLN:HA	1:A:1151:VAL:HG22	2.02	0.41
1:A:1165:LEU:HA	1:A:1168:GLU:OE2	2.19	0.41
1:A:1236:GLN:OE1	1:A:1236:GLN:N	2.48	0.41
1:A:1283:GLU:HA	1:A:1286:VAL:HG12	2.01	0.41
1:A:1525:PHE:O	1:A:1528:SER:OG	2.36	0.41
1:A:1733:GLN:O	1:A:1736:GLN:HG2	2.20	0.41
1:A:1775:LEU:HD12	1:A:1776:LEU:N	2.35	0.41
1:A:1843:MET:N	1:A:1843:MET:SD	2.93	0.41
1:A:2087:VAL:HG13	1:A:2121:MET:HE1	2.02	0.41
1:A:2369:GLU:OE1	1:A:2452:ALA:HB2	2.20	0.41
1:A:303:ARG:HA	1:A:308:TYR:CD2	2.56	0.41
1:A:326:VAL:HG11	1:A:328:ARG:HE	1.85	0.41
1:A:340:VAL:HG22	1:A:347:VAL:CA	2.50	0.41
1:A:556:SER:HA	1:A:559:ASN:HD22	1.85	0.41
1:A:562:ALA:O	1:A:634:ARG:NH1	2.51	0.41
1:A:635:GLN:OE1	1:A:635:GLN:N	2.53	0.41
1:A:668:LEU:HG	1:A:783:GLN:HG3	2.02	0.41
1:A:711:LEU:O	1:A:714:SER:OG	2.28	0.41
1:A:802:THR:O	1:A:805:ILE:HB	2.21	0.41
1:A:1014:GLN:CD	1:A:1014:GLN:N	2.77	0.41
1:A:1601:ILE:HA	1:A:1604:LYS:HE2	2.02	0.41
1:A:1668:LEU:O	1:A:1671:CYS:HB2	2.20	0.41
1:A:1984:ALA:O	1:A:1988:ILE:HG13	2.20	0.41
1:A:2015:HIS:CE1	1:A:2068:SER:HB3	2.55	0.41
1:A:2218:ALA:HA	1:A:2221:GLU:OE1	2.20	0.41
1:A:2267:GLN:NE2	1:A:2268:GLN:HG3	2.34	0.41
1:A:1006:ALA:O	1:A:1009:PRO:HD2	2.20	0.41
1:A:1018:MET:O	1:A:1019:GLN:C	2.63	0.41
1:A:1214:ARG:HH11	1:A:1217:GLY:C	2.28	0.41
1:A:1250:ASN:O	1:A:1254:THR:HG23	2.20	0.41
1:A:1806:ALA:O	1:A:1810:LEU:HG	2.20	0.41
1:A:1830:SER:HA	1:A:1833:GLN:CD	2.45	0.41
1:A:2149:THR:O	1:A:2152:HIS:HB3	2.21	0.41
1:A:243:CYS:HB2	1:A:265:PHE:CE2	2.55	0.41
1:A:765:ARG:O	1:A:765:ARG:NE	2.49	0.41
1:A:1046:GLY:HA2	1:A:1047:PRO:HD3	1.90	0.41
1:A:1084:MET:O	1:A:1087:CYS:HB2	2.20	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1436:PHE:CZ	1:A:1606:MET:HB3	2.56	0.41
1:A:1444:ALA:HA	1:A:1596:MET:SD	2.60	0.41
1:A:1762:LEU:HD13	1:A:1762:LEU:HA	1.89	0.41
1:A:1774:GLN:O	1:A:1778:THR:HG23	2.19	0.41
1:A:1791:HIS:NE2	1:A:1792:THR:HG23	2.35	0.41
1:A:1811:THR:HG22	1:A:1815:ASN:ND2	2.35	0.41
1:A:2153:ILE:HA	1:A:2156:GLU:OE1	2.20	0.41
1:A:238:PHE:HA	1:A:241:PHE:HD2	1.86	0.41
1:A:387:GLN:OE1	1:A:388:ILE:HD13	2.20	0.41
1:A:574:GLY:O	1:A:577:VAL:HG12	2.20	0.41
1:A:924:ALA:O	1:A:927:SER:OG	2.33	0.41
1:A:1180:GLU:C	1:A:1184:ARG:HE	2.27	0.41
1:A:1223:LEU:HD22	1:A:1283:GLU:OE2	2.21	0.41
1:A:1427:ALA:O	1:A:1431:LYS:HG3	2.21	0.41
1:A:1790:ALA:O	1:A:1794:GLU:HG3	2.21	0.41
1:A:2152:HIS:O	1:A:2156:GLU:OE1	2.39	0.41
1:A:208:ASP:O	1:A:212:LEU:N	2.47	0.41
1:A:288:GLN:H	1:A:288:GLN:HG3	1.71	0.41
1:A:365:SER:HB2	1:A:381:GLN:CD	2.45	0.41
1:A:542:GLU:O	1:A:545:SER:OG	2.28	0.41
1:A:584:LEU:HD11	1:A:619:VAL:HG21	2.01	0.41
1:A:773:ALA:HA	1:A:776:GLN:HG2	2.03	0.41
1:A:927:SER:O	1:A:930:GLN:HB2	2.20	0.41
1:A:1094:SER:O	1:A:1098:VAL:HG22	2.20	0.41
1:A:1121:ALA:O	1:A:1124:VAL:HG22	2.21	0.41
1:A:1276:GLN:NE2	1:A:1277:ASP:OD1	2.54	0.41
1:A:1322:LEU:O	1:A:1325:ASP:N	2.49	0.41
1:A:1345:SER:HA	1:A:1348:GLN:HG3	2.02	0.41
1:A:1701:GLN:O	1:A:1704:THR:OG1	2.33	0.41
1:A:2043:LYS:HA	1:A:2046:GLN:OE1	2.20	0.41
1:A:238:PHE:HD1	1:A:241:PHE:CD2	2.38	0.41
1:A:356:ILE:HA	1:A:369:ASP:O	2.21	0.41
1:A:899:MET:HA	1:A:902:ASN:ND2	2.36	0.41
1:A:1460:GLY:HA3	1:A:1582:SER:O	2.20	0.41
1:A:1510:ARG:NH2	1:A:1511:LEU:HA	2.36	0.41
1:A:1703:LEU:HG	1:A:1707:GLN:OE1	2.20	0.41
1:A:1712:LEU:HD12	1:A:1730:LYS:NZ	2.35	0.41
1:A:1838:LEU:HD21	1:A:1920:VAL:HG23	2.03	0.41
1:A:1976:GLN:O	1:A:1980:THR:HG23	2.21	0.41
1:A:358:ARG:HE	1:A:1680:LEU:HD22	1.86	0.41
1:A:536:MET:SD	1:A:597:LEU:HD22	2.61	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:686:ALA:HA	1:A:689:VAL:HG22	2.03	0.41
1:A:724:ALA:N	1:A:725:PRO:HD2	2.35	0.41
1:A:1136:ARG:HD3	1:A:1136:ARG:C	2.45	0.41
1:A:1221:LYS:O	1:A:1224:LEU:HB3	2.21	0.41
1:A:1392:CYS:O	1:A:1396:VAL:HG23	2.21	0.41
1:A:1604:LYS:O	1:A:1608:GLU:OE1	2.38	0.41
1:A:1656:PRO:C	1:A:1658:GLN:HE21	2.27	0.41
1:A:1695:GLN:OE1	1:A:1752:THR:HA	2.21	0.41
1:A:1767:THR:HA	1:A:1770:GLU:OE1	2.21	0.41
1:A:1804:THR:OG1	1:A:1805:GLU:N	2.52	0.41
1:A:1850:PHE:HD2	1:A:1906:ALA:HB3	1.85	0.41
1:A:1856:THR:HA	1:A:1859:ARG:NH2	2.33	0.41
1:A:1976:GLN:O	1:A:1979:ILE:HG22	2.21	0.41
1:A:2043:LYS:HE2	1:A:2043:LYS:HB2	1.93	0.41
1:A:2059:ALA:O	1:A:2062:VAL:HG12	2.21	0.41
1:A:2152:HIS:CD2	1:A:2155:GLN:NE2	2.89	0.41
1:A:2207:LEU:HA	1:A:2210:ARG:NE	2.36	0.41
1:A:2249:GLU:OE2	1:A:2253:HIS:CE1	2.74	0.41
1:A:2287:ALA:O	1:A:2290:MET:HG2	2.20	0.41
1:A:2412:ASN:OD1	1:A:2412:ASN:C	2.64	0.41
1:A:556:SER:O	1:A:560:LEU:HG	2.21	0.41
1:A:711:LEU:HD23	1:A:715:GLN:HE22	1.85	0.41
1:A:1394:ASP:O	1:A:1395:SER:C	2.64	0.41
1:A:1555:ARG:HB3	1:A:1559:ARG:NH2	2.36	0.41
1:A:1775:LEU:HD23	1:A:1803:MET:SD	2.61	0.41
1:A:1804:THR:O	1:A:1808:GLU:OE1	2.39	0.41
1:A:2147:GLU:O	1:A:2150:THR:N	2.54	0.41
1:A:2361:LYS:HA	1:A:2361:LYS:HE2	2.02	0.41
1:A:227:SER:HB2	1:A:312:PHE:HB2	2.02	0.40
1:A:280:PHE:O	1:A:283:HIS:HB2	2.21	0.40
1:A:359:TRP:HB2	1:A:366:PHE:HZ	1.82	0.40
1:A:621:GLU:CD	1:A:624:ARG:HH21	2.29	0.40
1:A:916:ARG:O	1:A:919:HIS:HB2	2.21	0.40
1:A:1054:LEU:O	1:A:1057:VAL:N	2.54	0.40
1:A:1144:ASP:OD2	1:A:1146:ALA:HB3	2.22	0.40
1:A:1196:LEU:O	1:A:1200:VAL:HG23	2.21	0.40
1:A:1257:VAL:HG12	1:A:1335:LEU:CD2	2.51	0.40
1:A:1369:GLN:O	1:A:1373:VAL:HG22	2.21	0.40
1:A:1374:ARG:HG2	1:A:1378:GLU:OE2	2.20	0.40
1:A:1648:ILE:HA	1:A:1651:MET:SD	2.61	0.40
1:A:1798:GLU:HA	1:A:1801:GLN:HE21	1.86	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1830:SER:HA	1:A:1833:GLN:OE1	2.21	0.40
1:A:2176:ILE:O	1:A:2179:THR:OG1	2.21	0.40
1:A:318:LYS:HE2	1:A:322:LYS:C	2.46	0.40
1:A:1027:LEU:O	1:A:1031:LEU:HD23	2.21	0.40
1:A:1135:ALA:O	1:A:1138:VAL:HG22	2.21	0.40
1:A:1145:PRO:HA	1:A:1148:GLN:OE1	2.22	0.40
1:A:1305:LEU:HA	1:A:1308:ILE:HD12	2.03	0.40
1:A:1695:GLN:C	1:A:1699:HIS:HD1	2.28	0.40
1:A:1920:VAL:HA	1:A:1923:LEU:CD1	2.50	0.40
1:A:2436:ALA:O	1:A:2440:VAL:HG23	2.22	0.40
1:A:230:VAL:C	1:A:345:LYS:HG2	2.47	0.40
1:A:347:VAL:CG2	1:A:350:GLU:HG3	2.49	0.40
1:A:1260:SER:N	1:A:1267:LEU:HD21	2.37	0.40
1:A:1298:ARG:HB2	1:A:1298:ARG:HH11	1.87	0.40
1:A:1382:GLN:HA	1:A:1445:TYR:CE1	2.56	0.40
1:A:1449:VAL:O	1:A:1454:SER:HB3	2.22	0.40
1:A:1611:GLY:O	1:A:1615:GLN:OE1	2.39	0.40
1:A:1720:ALA:C	1:A:1784:GLY:HA2	2.46	0.40
1:A:1881:GLU:O	1:A:1884:PRO:HG2	2.21	0.40
1:A:2249:GLU:OE1	1:A:2250:LEU:HD22	2.21	0.40
1:A:2345:ILE:O	1:A:2349:VAL:HG23	2.22	0.40
1:A:279:ILE:HG22	1:A:283:HIS:CE1	2.57	0.40
1:A:281:GLN:NE2	1:A:281:GLN:O	2.53	0.40
1:A:391:LEU:HB3	1:A:395:TYR:CE2	2.56	0.40
1:A:885:GLU:CA	1:A:888:GLN:HE21	2.35	0.40
1:A:886:GLN:O	1:A:890:LEU:HD23	2.21	0.40
1:A:955:SER:HB2	1:A:1000:MET:CE	2.51	0.40
1:A:1128:LEU:HD13	1:A:1131:LEU:CD1	2.42	0.40
1:A:1390:PHE:HB3	1:A:1787:LYS:HZ3	1.87	0.40
1:A:2246:GLY:HA3	1:A:2276:VAL:HG22	2.02	0.40
1:A:2323:LEU:CD2	1:A:2349:VAL:HG12	2.50	0.40
1:A:2357:SER:O	1:A:2360:VAL:HG12	2.21	0.40
1:A:2369:GLU:HG3	1:A:2373:GLN:HE22	1.86	0.40
1:A:622:LEU:HD22	1:A:640:ALA:HB1	2.03	0.40
1:A:1004:ALA:O	1:A:1008:VAL:HG23	2.21	0.40
1:A:1874:LYS:HA	1:A:1874:LYS:HD2	1.85	0.40
1:A:1951:ILE:C	1:A:1955:ARG:HE	2.22	0.40
1:A:2075:GLU:HB3	1:A:2206:ASN:ND2	2.33	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	2188/2804 (78%)	2040 (93%)	148 (7%)	0	100	100

There are no Ramachandran outliers to report.

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	1677/2215 (76%)	1668 (100%)	9 (0%)	81	82

All (9) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	398	ILE
1	A	399	ILE
1	A	404	LYS
1	A	1057	VAL
1	A	1059	ASN
1	A	1061	GLU
1	A	1063	ASP
1	A	1064	LEU
1	A	1065	GLN

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (49) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	228	HIS
1	A	242	GLN
1	A	281	GLN
1	A	323	ASN
1	A	390	GLN
1	A	559	ASN
1	A	627	GLN
1	A	673	ASN
1	A	708	GLN
1	A	776	GLN
1	A	825	GLN
1	A	838	ASN
1	A	888	GLN
1	A	915	GLN
1	A	936	GLN
1	A	949	GLN
1	A	1019	GLN
1	A	1187	GLN
1	A	1194	GLN
1	A	1211	ASN
1	A	1243	ASN
1	A	1276	GLN
1	A	1300	GLN
1	A	1304	ASN
1	A	1356	GLN
1	A	1369	GLN
1	A	1382	GLN
1	A	1412	GLN
1	A	1442	GLN
1	A	1472	GLN
1	A	1527	GLN
1	A	1557	GLN
1	A	1669	ASN
1	A	1677	GLN
1	A	1695	GLN
1	A	1733	GLN
1	A	1736	GLN
1	A	1774	GLN
1	A	1801	GLN
1	A	1869	GLN
1	A	2041	GLN
1	A	2049	GLN
1	A	2077	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2155	GLN
1	A	2267	GLN
1	A	2307	ASN
1	A	2367	GLN
1	A	2421	GLN
1	A	2475	GLN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

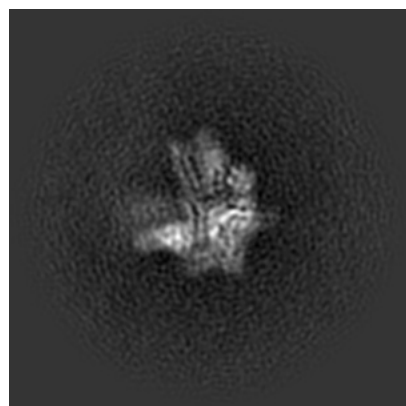
6 Map visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-43155. These allow visual inspection of the internal detail of the map and identification of artifacts.

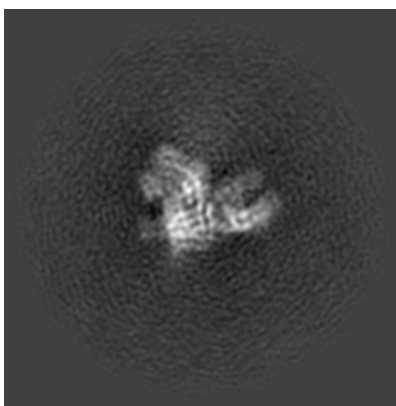
Images derived from a raw map, generated by summing the deposited half-maps, are presented below the corresponding image components of the primary map to allow further visual inspection and comparison with those of the primary map.

6.1 Orthogonal projections [i](#)

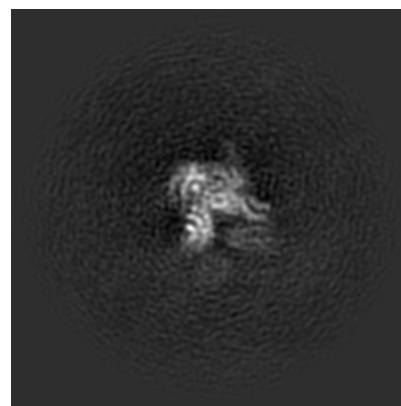
6.1.1 Primary map



X

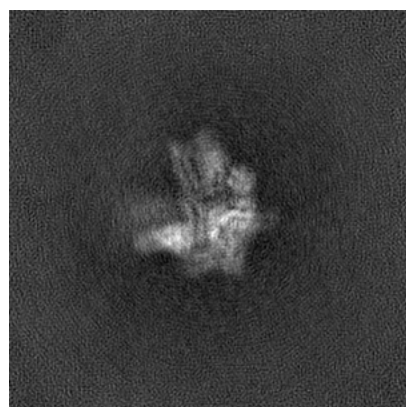


Y

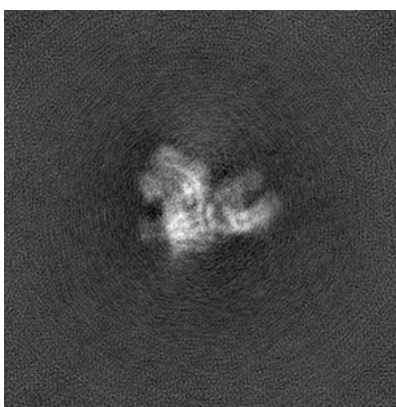


Z

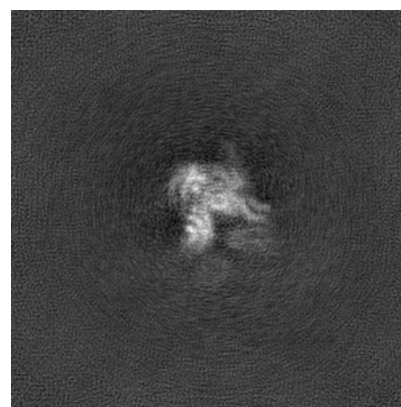
6.1.2 Raw map



X



Y

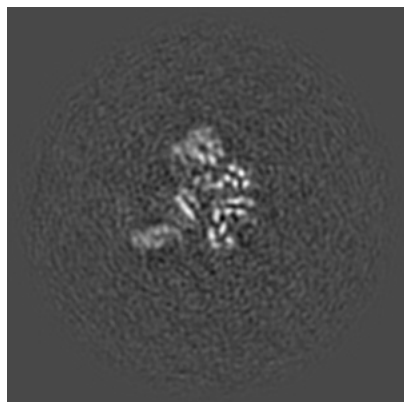


Z

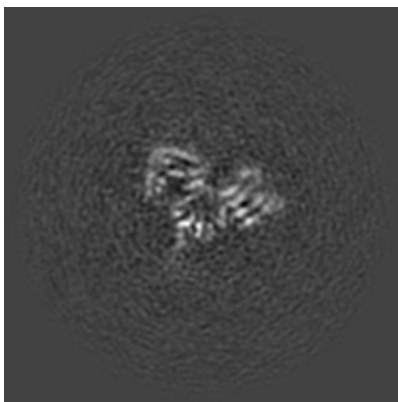
The images above show the map projected in three orthogonal directions.

6.2 Central slices [i](#)

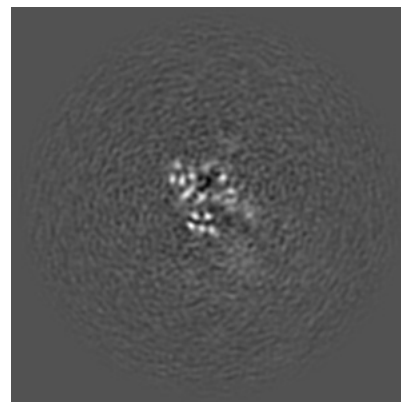
6.2.1 Primary map



X Index: 128

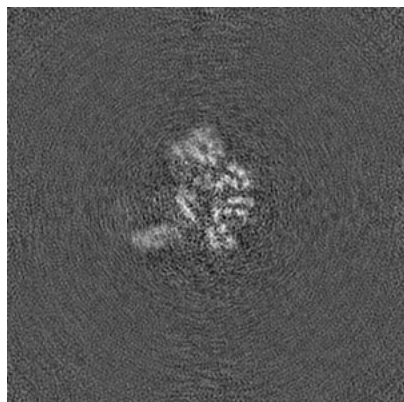


Y Index: 128

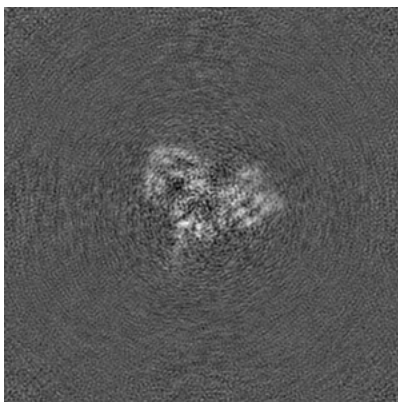


Z Index: 128

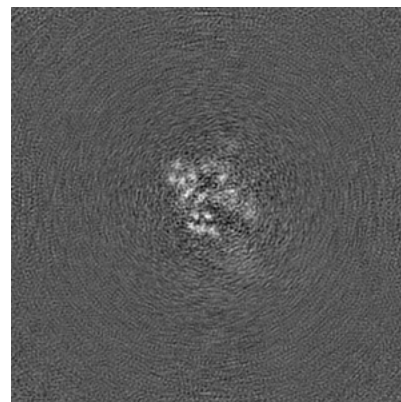
6.2.2 Raw map



X Index: 128



Y Index: 128

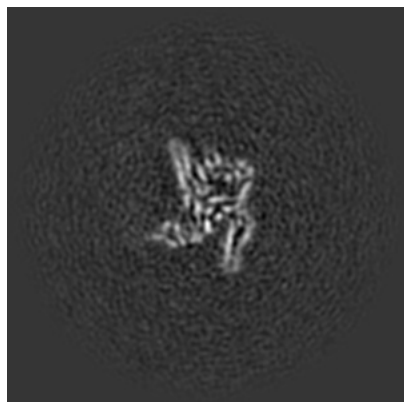


Z Index: 128

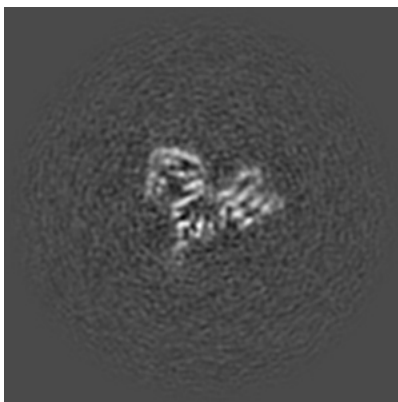
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

6.3 Largest variance slices [i](#)

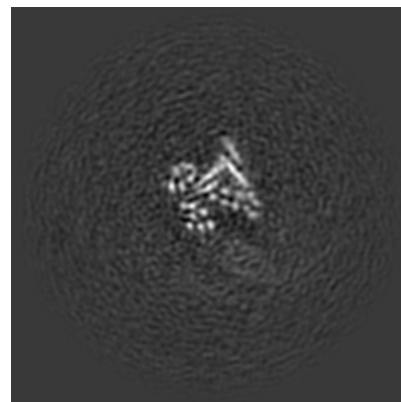
6.3.1 Primary map



X Index: 117

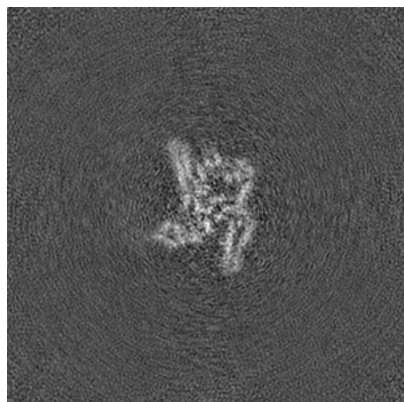


Y Index: 129

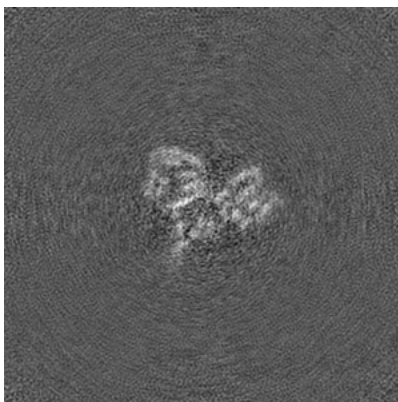


Z Index: 124

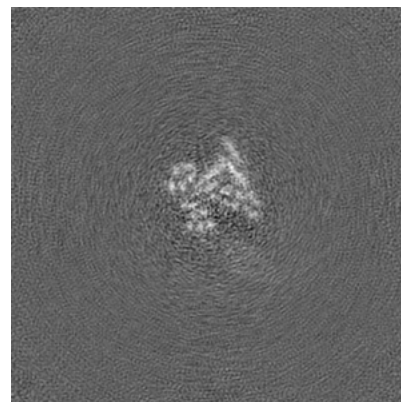
6.3.2 Raw map



X Index: 117



Y Index: 130

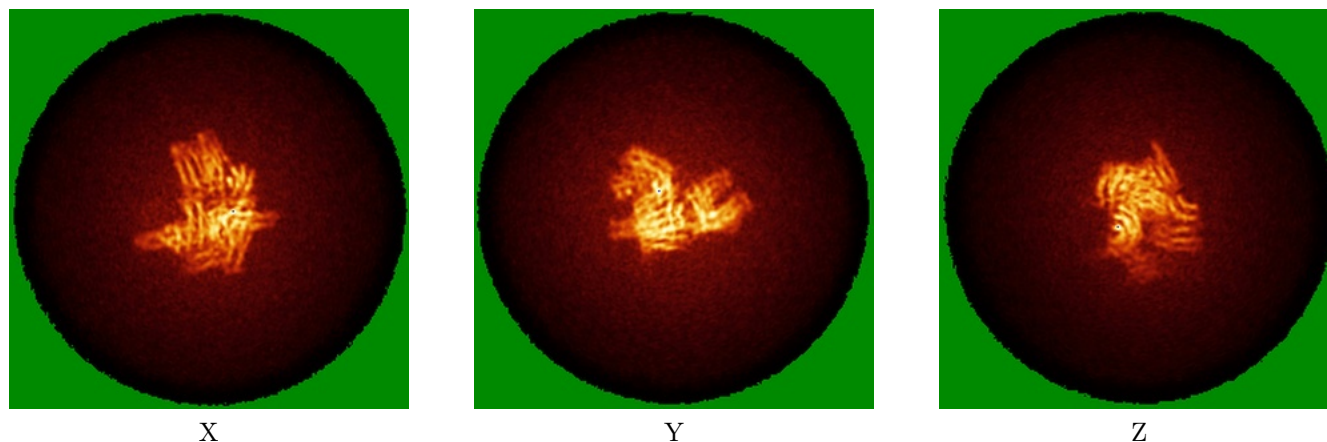


Z Index: 124

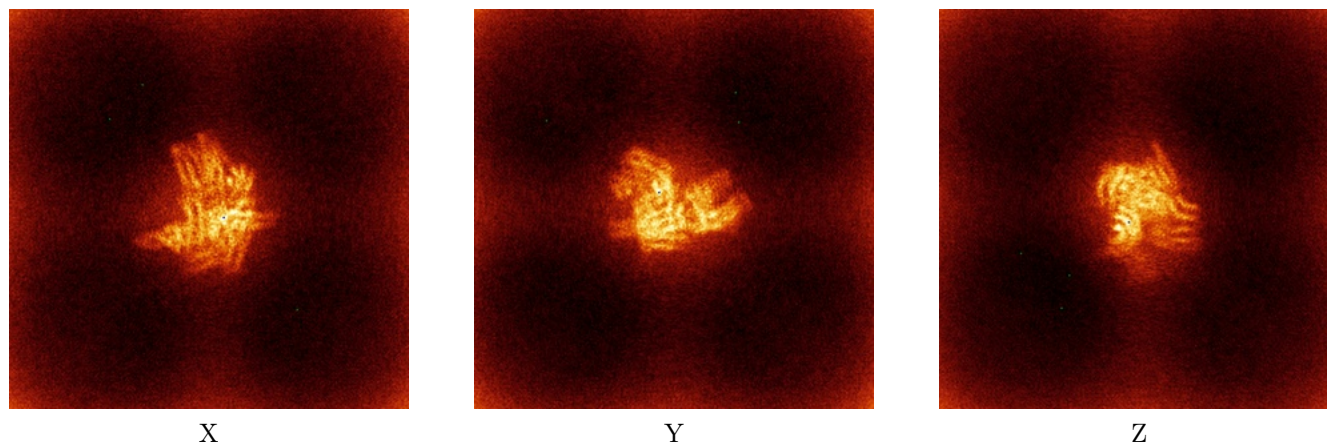
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

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

6.4.1 Primary map



6.4.2 Raw map



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](#)

This section was not generated.

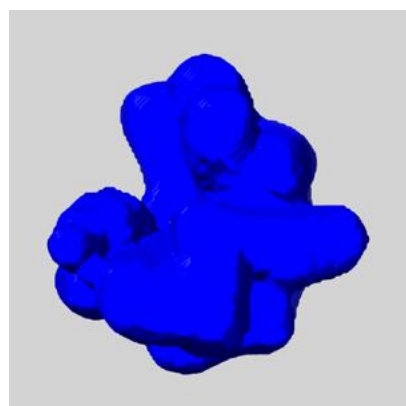
6.6 Mask visualisation [i](#)

This section shows the 3D surface view of the primary map at 50% transparency overlaid with the specified mask at 0% transparency

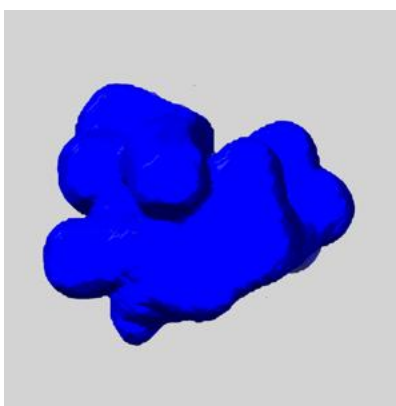
A mask typically either:

- Encompasses the whole structure
- Separates out a domain, a functional unit, a monomer or an area of interest from a larger structure

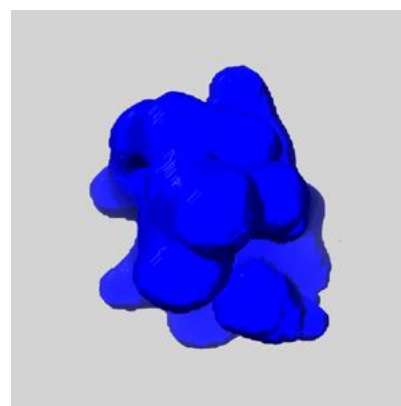
6.6.1 emd_43155_msk_1.map [i](#)



X



Y

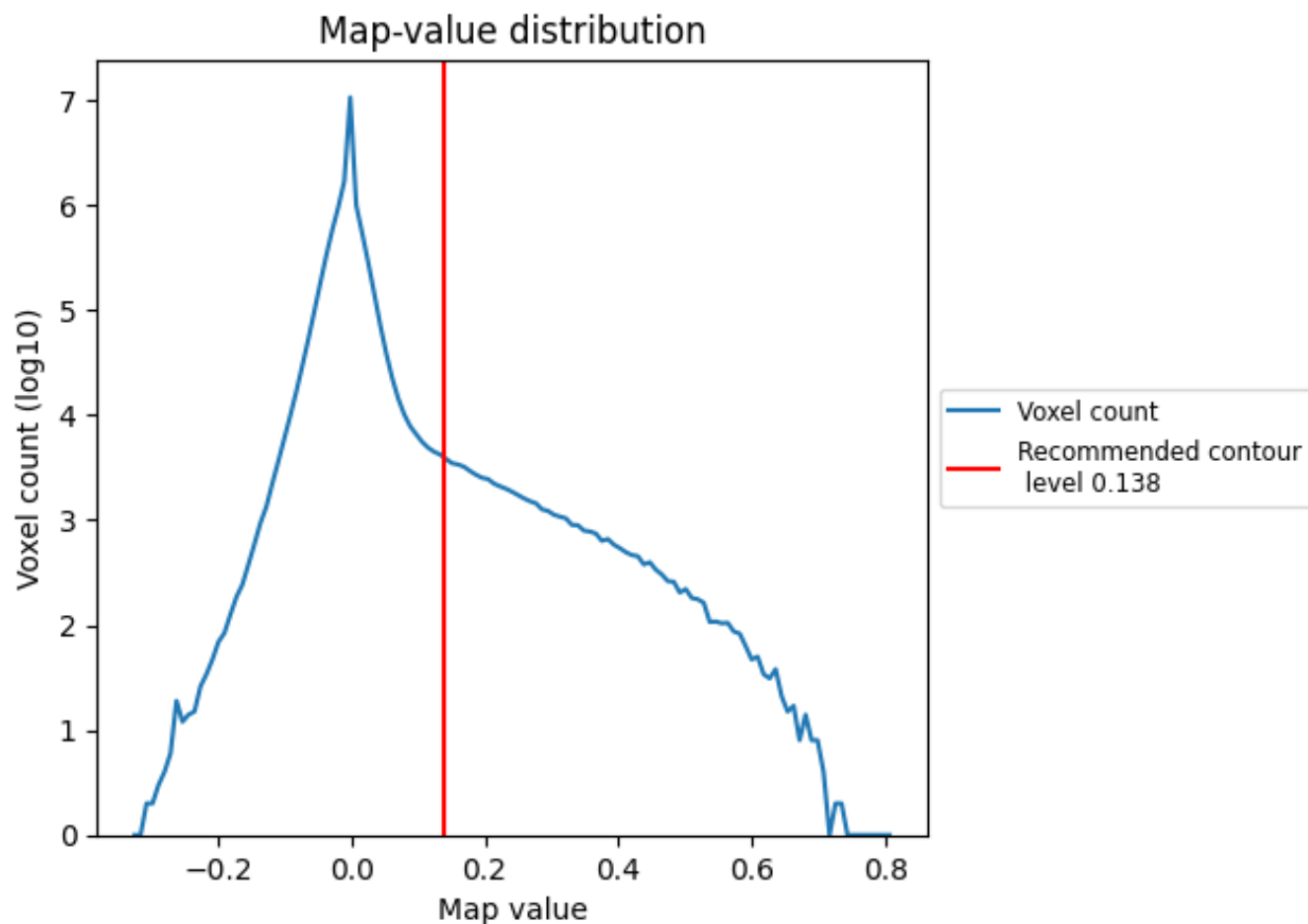


Z

7 Map analysis [i](#)

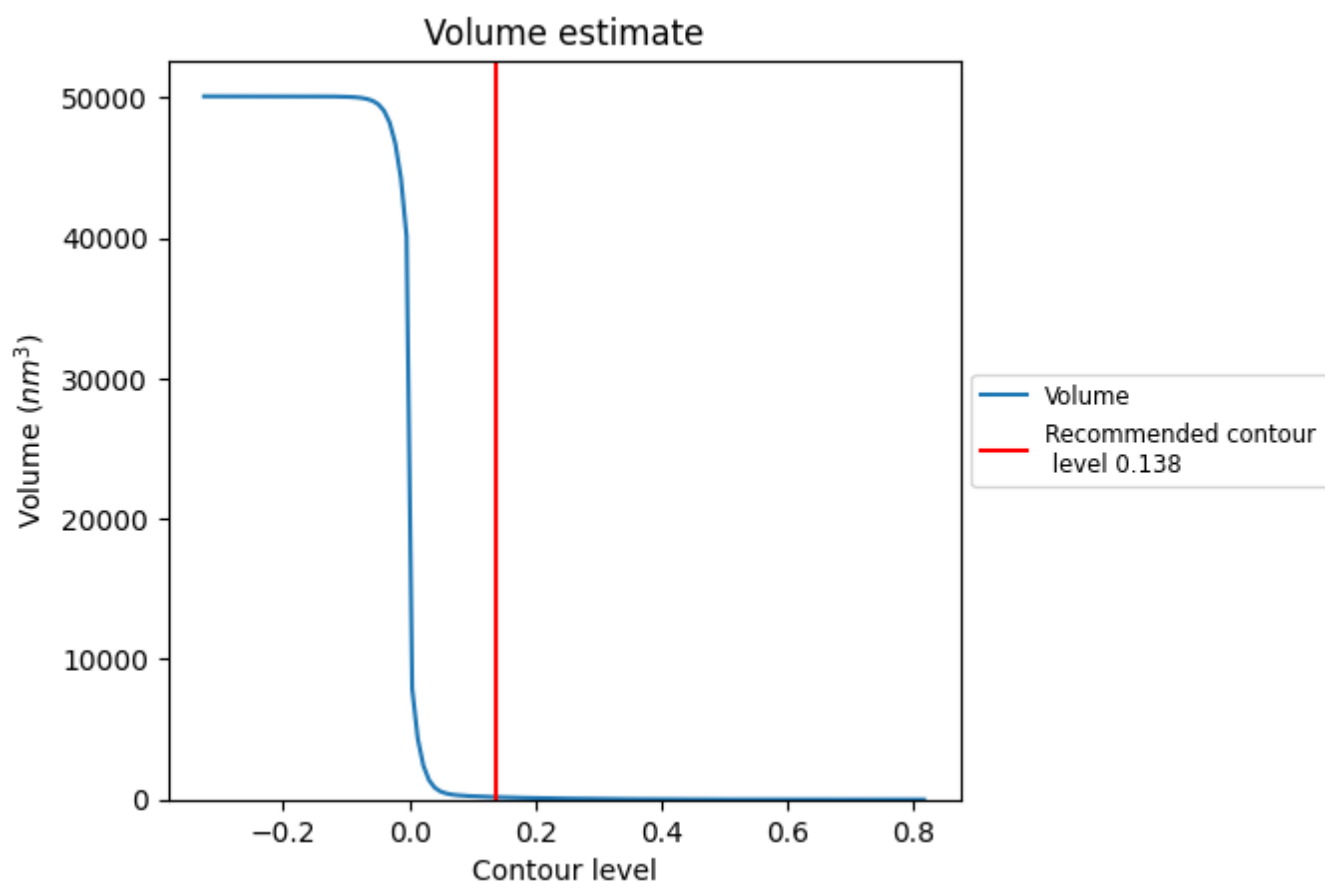
This section contains the results of statistical analysis of the map.

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.

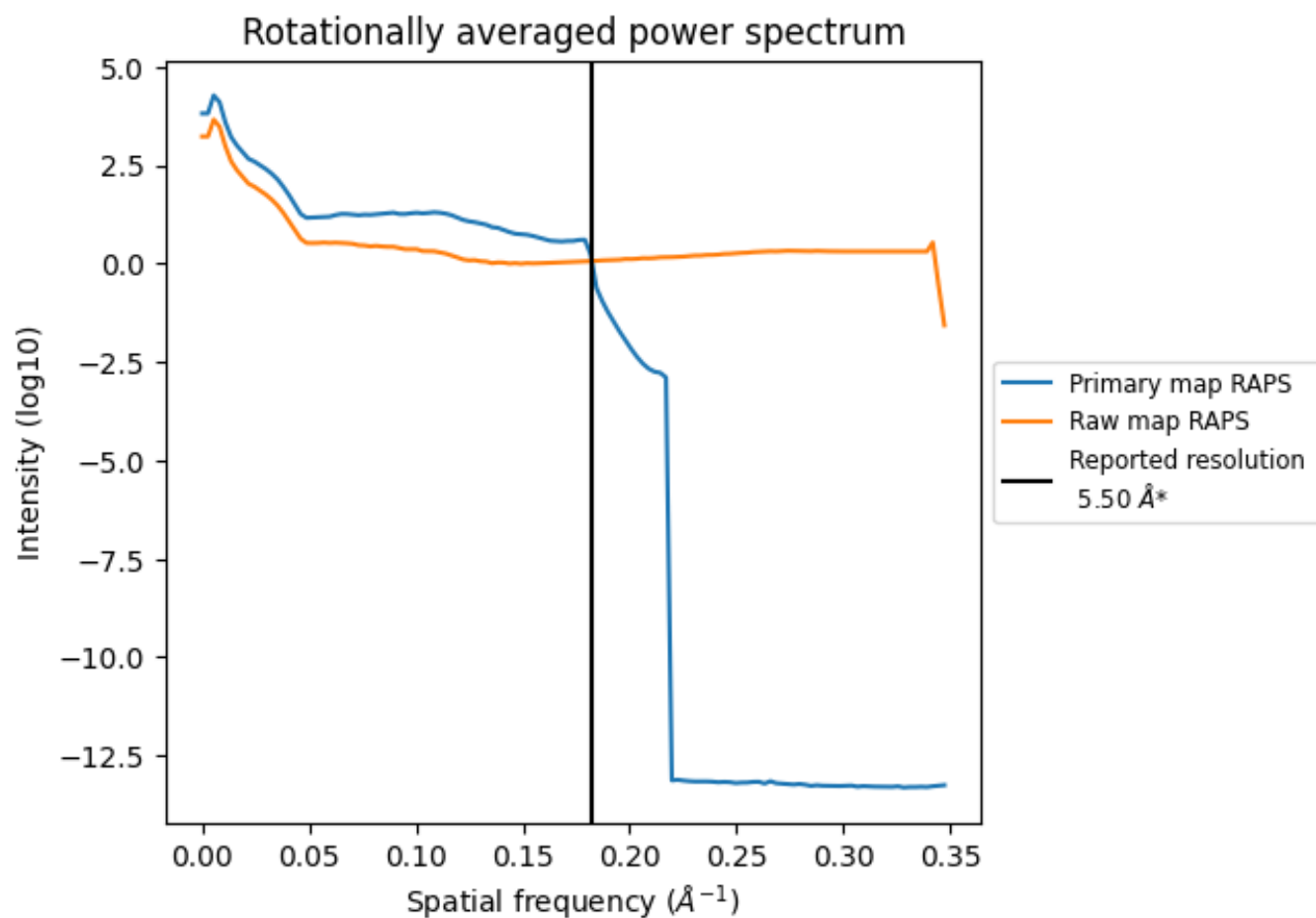
7.2 Volume estimate [i](#)



The volume at the recommended contour level is 174 nm³; this corresponds to an approximate mass of 157 kDa.

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

7.3 Rotationally averaged power spectrum ⓘ

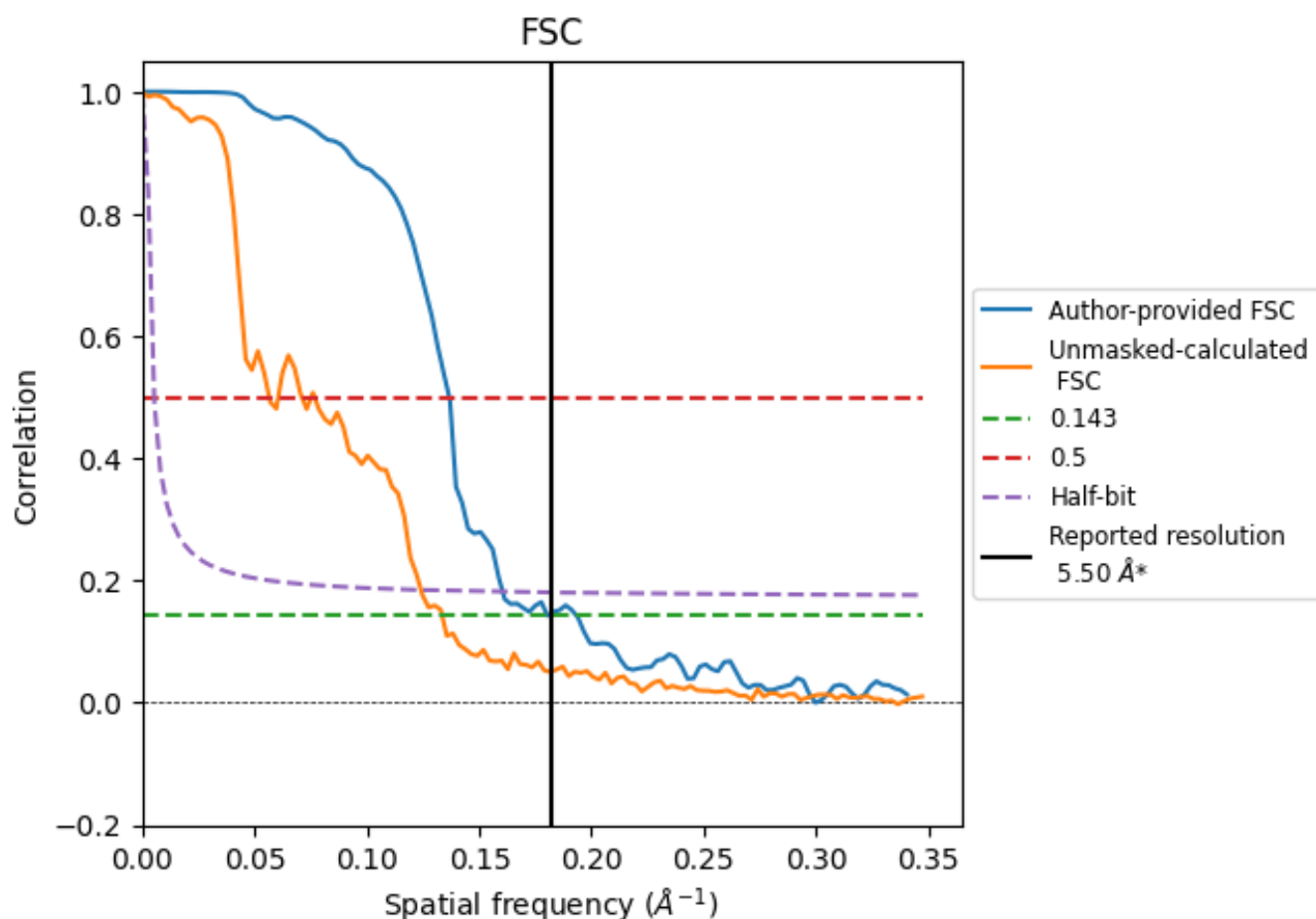


*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.182 Å⁻¹

8 Fourier-Shell correlation [i](#)

Fourier-Shell Correlation (FSC) is the most commonly used method to estimate the resolution of single-particle and subtomogram-averaged maps. The shape of the curve depends on the imposed symmetry, mask and whether or not the two 3D reconstructions used were processed from a common reference. The reported resolution is shown as a black line. A curve is displayed for the half-bit criterion in addition to lines showing the 0.143 gold standard cut-off and 0.5 cut-off.

8.1 FSC [i](#)



*Reported resolution corresponds to spatial frequency of $0.182 \text{ \AA}^{-1}$

8.2 Resolution estimates [i](#)

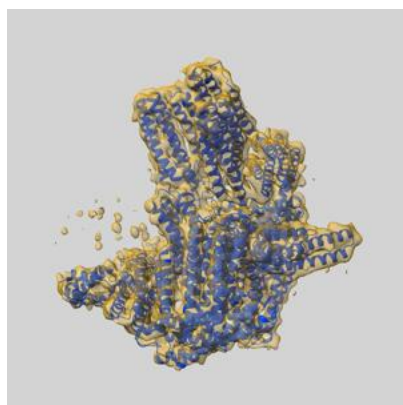
Resolution estimate (Å)	Estimation criterion (FSC cut-off)		
	0.143	0.5	Half-bit
Reported by author	5.50	-	-
Author-provided FSC curve	5.55	7.32	6.23
Unmasked-calculated*	7.49	17.70	8.06

*Resolution estimate based on FSC curve calculated by comparison of deposited half-maps. The value from deposited half-maps intersecting FSC 0.143 CUT-OFF 7.49 differs from the reported value 5.5 by more than 10 %

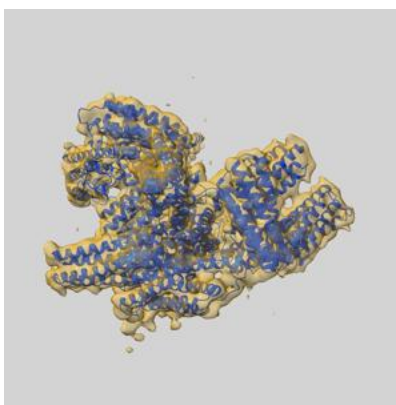
9 Map-model fit [i](#)

This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-43155 and PDB model 8VDQ. Per-residue inclusion information can be found in [section 3](#) on [page 5](#).

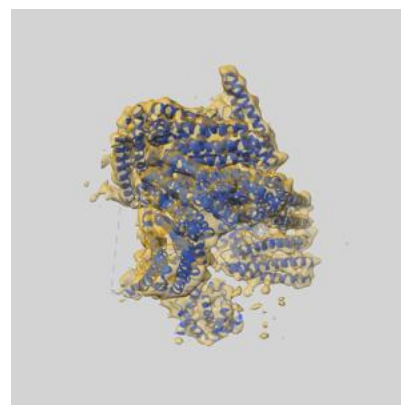
9.1 Map-model overlay [i](#)



X



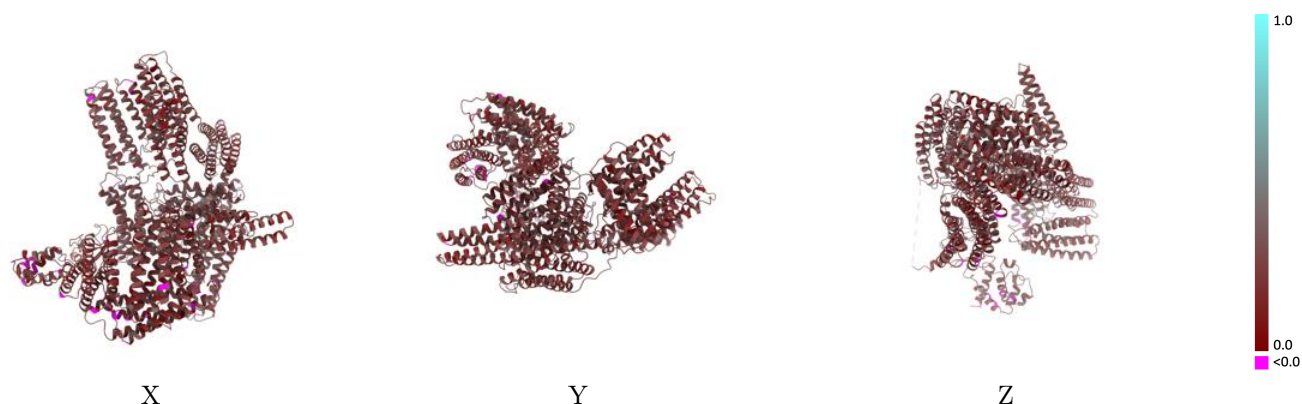
Y



Z

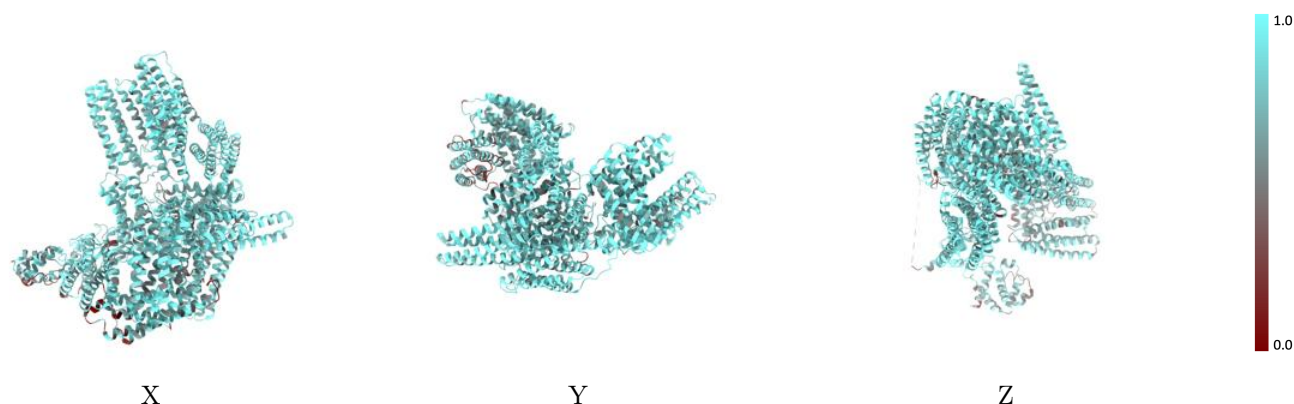
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.138 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

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



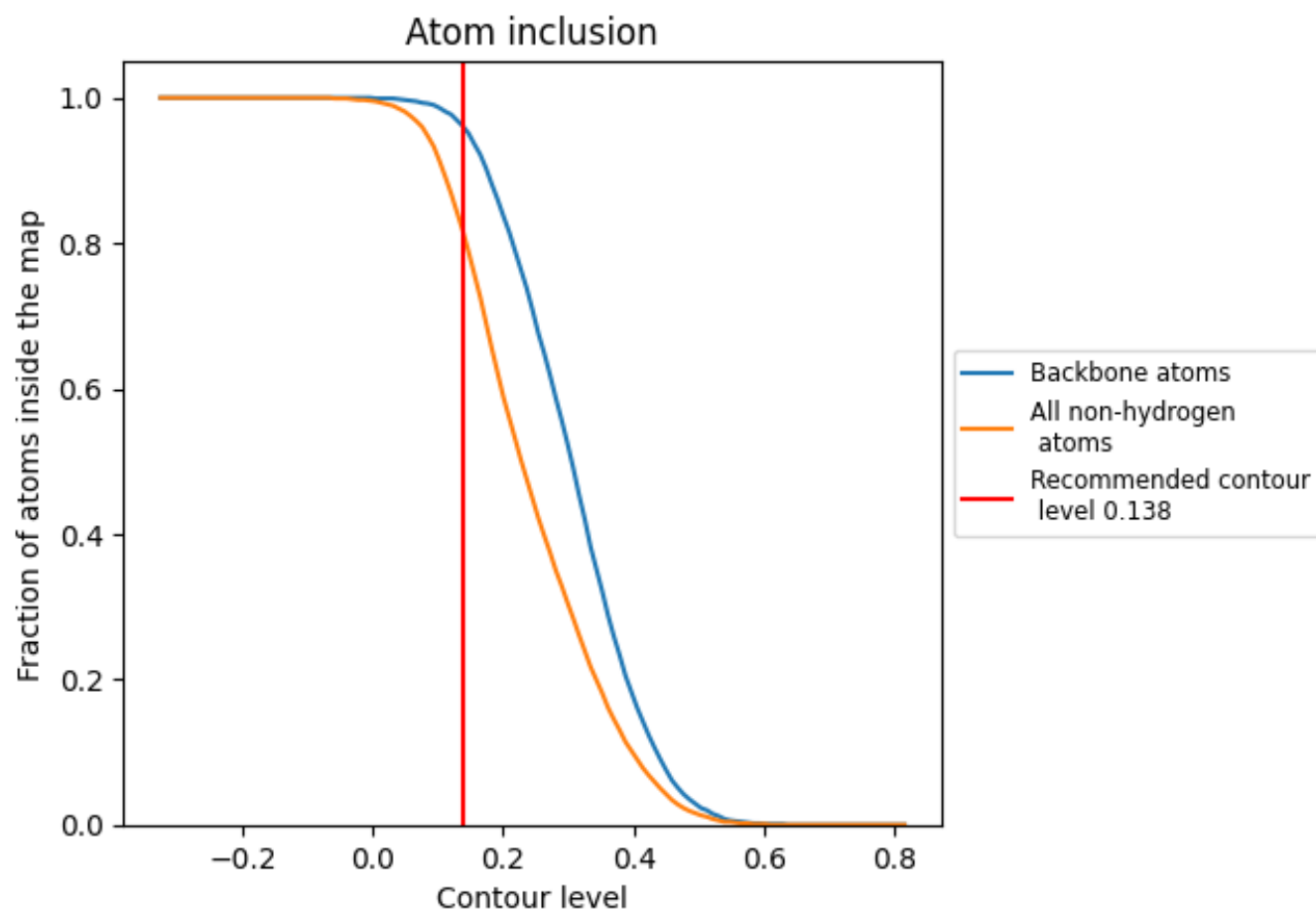
The images above show the model with each residue coloured according to its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions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

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



The images above show the model with each residue coloured according to its atom inclusion. This shows to what extent they are inside the map at the recommended contour level (0.138).

9.4 Atom inclusion [i](#)



At the recommended contour level, 96% of all backbone atoms, 82% 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 (0.138) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	0.8170	0.2390
A	0.8170	0.2390

